

離散変分法の新しい定式化による
偏微分方程式の構造保存型数値解法

松岡光

20140110

博士論文

離散変分法の新しい定式化による
偏微分方程式の構造保存型数値解法

金沢大学大学院自然科学研究科

数物科学専攻
数学講座

学籍番号 1123102008

氏名 松岡光

主任指導教員 中村健一

目次

1	はじめに	3
2	離散変分法の再定式化	4
2.1	内積の導入	4
2.2	ノイマン境界条件の作用素	6
2.3	周期境界条件	9
2.4	ノルムの性質	11
3	離散変分法の適用例	12
3.1	熱方程式	12
3.1.1	構造保存型スキームの導出	12
3.1.2	構造保存性の証明	13
3.1.3	計算例	14
3.2	FitzHugh-Nagumo 方程式	17
3.2.1	構造保存差分スキームの導出	17
3.2.2	構造保存性の証明	18
3.2.3	安定性及び一意可解性	19
3.2.4	誤差評価	21
3.2.5	計算例	25
3.3	Cahn-Hilliard-Oono 方程式	27
3.3.1	構造保存型スキームの導出	27
3.3.2	構造保存性の証明	28
3.3.3	安定性及び一意可解性	29
3.3.4	誤差評価	31
3.3.5	2次元スキーム	33
3.3.6	数値計算例	34
3.4	KdV 方程式	39
3.4.1	構造保存型差分スキームの導出	39
3.4.2	構造保存性の証明	40
4	まとめと今後	42
5	謝辞	43

1 はじめに

偏微分方程式の数値計算の際に、質量、エネルギー、確率等の重要な量に関する性質を離散系においても再現する試みはされてきた ([1,2,9]). 特に近年は、有限体積法、離散変分法、Finite element exterior calculus(FEEC) 法等によって、偏微分方程式を計算する際に系の重要な性質を再現する事に成功している ([2,3,9]). ところが、それぞれのやり方にはデメリットやメリットが少なからず存在した. 例えば有限体積法では、数学的な解析が容易に展開できないのに対して、有限要素法よりも計算がしやすいといったメリットも合わせもっている. また、離散変分法は、有限要素法にも応用できるだけでなく、差分法での数学的な解析が非常にしやすいというメリットがある. しかし多次元スキームの計算量が多くスキームの導出等において、部分和分等の計算が煩雑で見通しが悪い事が多い. また期待される2階の部分積分タイプの公式

$$\sum_{k=0}^N {}''(\delta^{(1)} f_k)(\delta^{(1)} g_k) \Delta x + \sum_{k=0}^N {}''(\delta^{(2)} f_k)(g_k) \Delta x = \text{境界項}$$

が成り立たない等の問題がある. ただし、 $f_k, g_k \in \mathbb{R}(k = 0, \dots, N), \Delta x > 0, \delta^{(1)}, \delta^{(2)}$ はそれぞれ1階の中心差分及び2階の中心差分である. しかし離散変分法は、非線形性が強い Cahn-Hilliard 方程式の数値計算にも成功している ([2,4]). Cahn-Hilliard 方程式とは、冶金学の分野において、2元流体のモデル方程式として提案された ([16,17]). 二成分の流体が、分離し、各成分において純粋な領域を形成するようなプロセスを表現している. 方程式は以下で与えられる:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta (W'(u) - \varepsilon^2 \Delta u),$$

ただし $u(x, t) \in [-1, 1]$ は2つの混合物質の濃度を表し、 $W(u)$ は2重井戸型ポテンシャル関数であり、 ε は微小な正のパラメーターである. 具体的に $W(u)$ は、

$$W(u) = \frac{1}{4}(u^2 - 1)^2$$

で与える. この時非線形項は、特に ε が小さく、 u が0の付近では、非線形項の部分が

$$-\varepsilon^2 \Delta^2 u + (3u^2 - 1) \Delta u + 6u |\nabla u|^2$$

となることから、逆放物型偏微分方程式に近い. ところが Cahn-Hilliard-Oono 方程式には、離散変分法は適用はされていなかった. そこで本研究の目的である離散変分法の再定式化の一つの例として、Cahn-Hilliard-Oono 方程式に離散変分法を適用する. Cahn-Hilliard-Oono 方程式は、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(W'(u) - \varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) - \sigma(u - \bar{u}) \quad (1)$$

という形の方程式である. ただし $\sigma > 0, \bar{u} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u(x, t) dx$ とする. この方程式は二元共重合体の挙動を表すモデル方程式である ([10]). 通常のマクロ相分離と比べると、ミクロ構造を持つというのが大きな特徴である. そして Cahn-Hilliard 方程式と比べると線形項が加わっただけの偏微分方程式であるが、Cahn-Hilliard 方程式よりも計算がしにくくなっている. まず厳密解が知られていないだけでなく、微小なパラメーターを含む方程式であり、強い非線形性を持ち、逆放物型偏微分方程式に近いとい

た Cahn-Hilliard 方程式の性質だけではなく、長距離相互作用に由来する非局所項 \bar{u} が式の中に入っているという点が多い ([4]). この違いは全エネルギーから理解できる. 両者の全エネルギーは,

$$I(u) := \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla u|^2 + W(u) dx \right), \quad (2)$$

$$J(u) := \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla u|^2 + W(u) + \frac{\sigma}{2} |(-\Delta)^{-\frac{1}{2}}(u - \bar{u})|^2 dx \right) \quad (3)$$

で与えられる. ただし $\bar{u} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u dx$ である. ここで全エネルギー (2) では、激しく振動する形状の解は第 1 項, 第 2 項が大きくなるためあまり激しい振動はしないことがわかる. しかし (3) では、第 3 項の $(-\Delta)^{-\frac{1}{2}}$ がコンパクト作用素であるため $u - \bar{u}$ が激しく振動するほど第 3 項は小さくなる. しかしあまり振動すると第 1, 2 項が大きくなるため、妥協点がどこかで存在する事が知られている ([4]).

我々は、この数値的不安定さを持つ Cahn-Hilliard-Oono 方程式に対して、離散変分法の枠組みを捉え直し、もとの方程式と同じく質量保全性、エネルギー散逸性を持つ数値スキームを得た. また新しい枠組みによって、安定性、一意性可解性、誤差評価を、従来よりも見通しよく導くことに成功した. 更に一意可解性については、降旗 [2,3] の評価よりも改良する事ができた. また Fitzhugh-Nagumo 方程式の特別なケース、

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \varepsilon^2 u_{xx} + f(u) - \sigma v \\ 0 &= v_{xx} + u - m - \gamma v, \end{aligned} \quad (4)$$

や KdV 方程式、

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \\ u(x + nL) &= u(x) \quad n \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

などの応用上重要な方程式や境界条件が異なるケースにも新しい定式化が適用できることを確認した. 本論文においては、再定式化した離散変分法により、有限差分スキームを導出する. 差分法はやや安定性が低いながらも、有限要素法やフーリエ変換法と比べて、事前計算や前処理が少なく、計算が単純であり、また自由度が高く、様々な手法が用いやすいからである.

2 離散変分法の再定式化

2.1 内積の導入

初めに述べたように、離散変分法の新しい定式化を行う. そして、今までの離散変分法の公式や定理がどのように記述されているかを見直し、従来の離散変分法との違いを見ていく. 以下では、ある $L > 0$ に対して 1 次元領域 $\Omega = (0, L)$ 上で考え、 Ω を均等に $N + 1$ 等分する. この時、空間方向の分割は $\Delta x = L/N$ となる. そして実 $(N + 1)$ 次元ベクトルを $\mathbf{U} = (U_0, \dots, U_N)^T \in \mathbb{R}^{N+1}$ 等と表す.

定義 1. 任意の $N + 1$ 次元ベクトル $\mathbf{U} = (U_0, \dots, U_N)^T, \mathbf{V} = (V_0, \dots, V_N)^T \in \mathbb{R}^{N+1}$ に対して、以下

の内積を定義する

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle &= \sum_{k=0}^N U_k V_k \Delta x \\ &= \frac{1}{2} U_0 \cdot V_0 \Delta x + \sum_{k=1}^{N-1} U_k \cdot V_k \Delta x + \frac{1}{2} U_N \cdot V_N \Delta x\end{aligned}$$

ただし, Δx は正の定数である.

この内積は, 関数空間 $L^2(\Omega)$ の内積を台形則に基づいて離散化したものとなっている.

注意 2. 上の内積は, $Q = \text{diag}(1/2, 1, \dots, 1, 1/2)$ を用いれば,

$$\langle \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle = (Q\mathbf{U}, \mathbf{V})\Delta x, \quad (5)$$

と表せる.

離散変分法において, 離散変分導関数は, 連続問題の第1変分

$$\delta J = \int_0^L \frac{\delta J}{\delta u} \delta u dx$$

を離散化して導出する. すなわち, 以下の離散全エネルギー,

定義 3. ベクトル \mathbf{U} に対して離散全エネルギーは,

$$J_d(\mathbf{U}) = \sum_{k=0}^N \{G_d(\mathbf{U})\}_k \Delta x = \langle G_d(\mathbf{U}), \mathbf{1} \rangle,$$

ただし Δx は正の定数であり, 離散局所エネルギー関数 $\{G_d(\mathbf{U})\}_k$ はベクトル $G_d(\mathbf{U})$ の k 番目の要素である.

を用いて,

$$J_d(\mathbf{U}) - J_d(\mathbf{V}) = \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})} \right)_k (U_k - V_k) \Delta x,$$

と求める事ができる. そこで我々は, この内積を用いて, 離散変分導関数を定義する.

公式 4. 任意の $N+1$ 次元ベクトル \mathbf{U}, \mathbf{V} に対して, 離散変分導関数 $\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})} : \mathbb{R}^{N+1} \times \mathbb{R}^{N+1} \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$ は, 以下を満たす.

$$\langle G_d(\mathbf{U}) - G_d(\mathbf{V}), \mathbf{1} \rangle = \left\langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})}, \mathbf{U} - \mathbf{V} \right\rangle,$$

この定義は, [2, P79] の定義と一致する. ただし境界項の部分は行列で表示する. これは, 連続問題では, 以下の変分導関数を求める事に対応している. 境界項については, 行列に含まれる.

$$\int_a^b G(u + \delta u) - G(u) dx = \int_a^b \left(\frac{\delta J}{\delta u} \right) \delta u dx + [G_{u_x} \delta u]_a^b$$

2.2 ノイマン境界条件の作用素

導入した内積を用いる事によって、離散変分法の諸事実を部分和分を用いることなく、導く事ができる。2階の中心差分の表現行列を D_2 とすると、実際には以下のように書ける。

$$D_2 = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 2 & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 2 & -2 \end{pmatrix}.$$

これは3重対角行列であり、ノイマン境界条件つまり中心差分による離散化、 $\frac{U_{k+1}-U_{k-1}}{2\Delta x} = 0, k=0, N$ を考慮している。また、前進差分や後進差分の表現行列は、それぞれ以下ようになる。

$$D^+ = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \cdots & & & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \cdots & & 0 & -1 & 1 \\ & & & & \cdots & 1 & -1 \end{pmatrix},$$

$$D^- = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} 1 & -1 & \cdots & & & & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & & \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & & \ddots & \\ 0 & & \cdots & \cdots & & -1 & 1 & 0 \\ & & & & & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

これらの行列の間には、 $A = -D_2$ とするとき、以下の関係式が成り立つ。簡単な計算により導けるので、証明は省略する。

公式 5.

$$\frac{(D^+)^* D^+ + (D^-)^* D^-}{2} = A$$

ただし $(D^+)^*$ は D^+ の $\langle \cdot, \cdot \rangle$ に関しての共役行列を表している。 $(D^-)^*$ も同様である。

行列 $A = -D_2$ の固有値、固有ベクトルは、

$$\lambda_k = \frac{2}{(\Delta x)^2} \left\{ 1 - \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right) \right\}, \phi_k = (\phi_{k,0}, \dots, \phi_{k,N})^\top$$

で与えられる ($\phi_{k,j} = \cos(kj\pi/N), k, j = 0, \dots, N$). 特に、 A は固有値 0 を持つため、正則ではない。

補題 6. 行列 A は、内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ に関して、対称である。すなわち $N + 1$ 次元ベクトル \mathbf{U}, \mathbf{V} に対して以下が成立する：

$$\langle A\mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle = \langle \mathbf{U}, A\mathbf{V} \rangle.$$

また A は半正定値行列である。

Proof. 関係式 (5) を用いると、

$$\begin{aligned} \langle A\mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle &= (QAU, \mathbf{V})\Delta x \\ &= (QAQ^{-1}Q\mathbf{U}, \mathbf{V})\Delta x \\ &= (Q\mathbf{U}, (QAQ^{-1})^T\mathbf{V})\Delta x \end{aligned}$$

となる。一方 $(QAQ^{-1})^T = A$ が成立するので、対称性が証明できる。また A の固有値は全て非負であるから、 A は半正定値行列である。 \square

この補題 5 から $\{\phi\}_{k=0}^N$ は内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ に関する \mathbf{R}^{N+1} の直交基底となることがわかる。実際に $\Phi_k = c_k\phi_k$ が $\langle \Phi_k, \Phi_k \rangle = 1$ を満たすように正規化定数 c_k を定めると、

$$c_k = \begin{cases} 1/\sqrt{L}, & k = 0, N, \\ \sqrt{2/L}, & k = 1, \dots, N-1 \end{cases}$$

となる。特に $\Phi_0 = (1/L)\mathbf{1}$ が、固有値 $\lambda_0 = 0$ に対する固有ベクトルである。また A は、

$$A = \sum_{k=0}^N \lambda_k \langle \cdot, \Phi_k \rangle \Phi_k,$$

とスペクトル分解ができる。

定義 7. 任意の $N + 1$ 次元ベクトル $\mathbf{U} = (U_0, \dots, U_N)^T \in \mathbf{R}^{N+1}$ に対して \mathbf{U} の平均を以下で定義する。

$$\bar{U} := \bar{U}\mathbf{1} = (\bar{U}, \dots, \bar{U})^T$$

ここで、

$$\bar{U} = \frac{1}{L} \sum_{k=0}^N U_k \Delta x = \frac{1}{L} \langle \mathbf{U}, \mathbf{1} \rangle.$$

補題 8. 方程式 $A\mathbf{U} = \mathbf{V}$ ($\mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbf{R}^{N+1}$) が解を持つ必要十分条件は、 $\langle \mathbf{V}, \mathbf{1} \rangle = 0$ である。

Proof. $\{\Phi\}_{k=0}^N$ を用いて \mathbf{U} と \mathbf{V} を分解する。すると、

$$\mathbf{U} = \sum_{k=0}^N U_k \Phi_k, \mathbf{V} = \sum_{k=0}^N V_k \Phi_k$$

$$\begin{aligned}
A\mathbf{U} &= \mathbf{V} \\
A \sum_{k=0}^N U_k \Phi_k &= \sum_{k=0}^N V_k \Phi_k \\
\sum_{k=0}^N U_k A \Phi_k &= \sum_{k=0}^N V_k \Phi_k \\
\sum_{k=0}^N U_k \lambda_k \Phi_k &= \sum_{k=0}^N V_k \Phi_k \\
U_k \lambda_k &= V_k \quad k = 0, \dots, N.
\end{aligned}$$

よって、 $k \neq 0$ のとき $U_k = V_k/\lambda_k$ となるが、 λ_0 は 0 であるので、 $k = 0$ のときの可解性は以下のようになる:

$$U_0 = \begin{cases} \text{No solution} & (V_0 \neq 0), \\ \text{any} & (V_0 = 0). \end{cases}$$

一方,

$$V_0 = 0 \Leftrightarrow 0 = \langle \mathbf{V}, \phi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \langle \mathbf{V}, \mathbf{1} \rangle.$$

よって補題が示された. □

補題 7 より,

$$M_0 = \{\mathbf{U} \in \mathbf{R}^{N+1} \mid \langle \mathbf{U}, \Phi_0 \rangle = 0\}.$$

とおくと、 A の M_0 での制限写像 $A_0 := A|_{M_0} : M_0 \rightarrow M_0$ は全単射であり、その逆写像は以下のように与えられる.

$$A_0^{-1} = \sum_{k=1}^N \frac{1}{\lambda_k} \langle \cdot, \Phi_k \rangle \Phi_k.$$

注意 9. 条件 $\langle \mathbf{V}, \mathbf{1} \rangle = 0$ は次の式と同値である,

$$\sum_{k=0}^N V_k \Delta x = 0.$$

この条件は、斉次 *Neumann* 境界条件を課した *Poisson* 方程式,

$$\begin{cases} -\frac{\partial^2}{\partial x^2} u = v & \text{in } \Omega \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial\Omega, \end{cases}$$

の可解条件 $\int_{\Omega} v dx = 0$ に対応している.

定義 10. 任意の $\alpha > 0$ について、 A^α 及び $A_0^{-\alpha}$ を、次のように定義する.

$$\begin{aligned}
A^\alpha &= \sum_{k=1}^N \lambda_k^\alpha \langle \cdot, \Phi_k \rangle \Phi_k, \\
A_0^{-\alpha} &= \sum_{k=1}^N \frac{1}{\lambda_k^\alpha} \langle \cdot, \Phi_k \rangle \Phi_k.
\end{aligned}$$

このとき、次が成り立つ:

補題 11. 任意の $\mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N+1}, \alpha > 0, \beta > 0$ に対して以下が成立する:

$$\langle A^\alpha \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle = \langle \mathbf{U}, A^\alpha \mathbf{V} \rangle, \langle A_0^{-\alpha} \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle = \langle \mathbf{U}, A_0^{-\alpha} \mathbf{V} \rangle$$

$$A^{\alpha+\beta} = A^\alpha A^\beta, A_0^{-(\alpha+\beta)} = A_0^{-\alpha} A_0^{-\beta},$$

$$(A_0^{-\alpha})^{-1} = A^\alpha|_{M^0}.$$

Proof. スペクトル分解を用いて容易に、証明できる。 □

また、離散変分導関数を求める際に、以下の補題が有用である。

補題 12. 任意 $\alpha > 0$ について、以下の等号が成り立つ。

$$\langle A^\alpha \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle - \langle A^\alpha \mathbf{V}, \mathbf{V} \rangle = \langle A^\alpha (\mathbf{U} + \mathbf{V}), (\mathbf{U} - \mathbf{V}) \rangle \quad \mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N+1}$$

$$\langle A_0^{-\alpha} \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle - \langle A_0^{-\alpha} \mathbf{V}, \mathbf{V} \rangle = \langle A_0^{-\alpha} (\mathbf{U} + \mathbf{V}), (\mathbf{U} - \mathbf{V}) \rangle \quad \mathbf{U}, \mathbf{V} \in M_0$$

Proof. 式は、 $A^\alpha, A_0^{-\alpha}$ の対称性から示す事ができる。 □

2.3 周期境界条件

Neumann 境界条件の以外の場合も、2階の中心差分、1階の中心差分、前進差分、後進差分といった作用素について、同様の公式が成り立つ。本節では、1次元領域 $\Omega = (0, L)$ において、周期境界条件を課す場合を考察する。 A_{per} は周期境界条件の2階の中心差分のマイナスを表す $N \times N$ 行列とする。具体的には、次のように与えられる。

$$A_{per} = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & & & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & & & \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & 0 \\ & & & & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & \cdots & & 0 & -1 & 2 & \end{pmatrix}.$$

また前進差分、後進差分、1階の中心差分を表す行列をそれぞれ $D_{per}^+, D_{per}^-, D_{per}^{(1)}$ とすると、以下のよう
に書ける。

$$D_{per}^+ = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \cdots & & & & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & & & 0 & -1 & 1 \\ & & & & & \cdots & & -1 \end{pmatrix},$$

$$D_{per}^- = \frac{1}{\Delta x} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & & & & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & & & \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & \cdots & & & 0 & -1 & 1 \\ & & & & & -1 & & 1 \end{pmatrix},$$

$$D_{per}^{(1)} = \frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & & 0 & -1 & 1 \\ & & & & & & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

これらの差分作用素の行列については、以下が成り立つ。

補題 13. 行列 A_{per} は定義の内積で、対称である。すなわち $N + 1$ 次元ベクトル \mathbf{U}, \mathbf{V} に対して以下が成立する：

$$\langle A_{per} \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle = \langle \mathbf{U}, A_{per} \mathbf{V} \rangle.$$

Proof. 通常内積で考える。

$$\begin{aligned} \langle A_{per} \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle &= (Q A_{per} \mathbf{U}, \mathbf{V}) \Delta x \\ &= (Q A_{per} Q^{-1} Q \mathbf{U}, \mathbf{V}) \Delta x \\ &= (Q \mathbf{U}, (Q A_{per} Q^{-1})^T \mathbf{V}) \Delta x \\ &= \langle \mathbf{U}, A_{per} \mathbf{V} \rangle \end{aligned}$$

最後の式は、 $(Q A_{per} Q^{-1})^T = A_{per}$ が成立するからである。 □

補題 14. 行列 $D_{per}^{(1)}$ は、歪対称である。すなわち $N + 1$ 次元ベクトル \mathbf{U}, \mathbf{V} に対して以下が成立する:

$$\langle D_{per}^{(1)} \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle = -\langle \mathbf{U}, D_{per}^{(1)} \mathbf{V} \rangle.$$

Proof. これも通常内積に戻して、示す。

$$\begin{aligned} \langle D_{per}^{(1)} \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle &= (QD_{per}^{(1)} \mathbf{U}, \mathbf{V}) \Delta x \\ &= (QD_{per}^{(1)} Q^{-1} Q \mathbf{U}, \mathbf{V}) \Delta x \\ &= (Q \mathbf{U}, (QD_{per}^{(1)} Q^{-1})^T \mathbf{V}) \Delta x \\ &= (Q \mathbf{U}, (QD_{per}^{(1)} Q^{-1})^T \mathbf{V}) \Delta x \\ &= (Q \mathbf{U}, -D_{per}^{(1)} \mathbf{V}) \Delta x \\ &= -\langle \mathbf{U}, D_{per}^{(1)} \mathbf{V} \rangle \end{aligned}$$

最後から 2 つめの等式は、 $(QD_{per}^{(1)} Q^{-1})^T = -D_{per}^{(1)}$ が成り立つからである。 □

2.4 ノルムの性質

導入した内積から導かれるノルムの諸定理について見ていく。

定義 15. 内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ に基づく、 L_d^2, L_d^∞, H_d^1 ノルムをそれぞれ以下で定義する。

$$\begin{aligned} \|\mathbf{U}\|_{L_d^2} &:= \left(\sum_{k=0}^N |U_k|^2 \Delta x \right)^{1/2} = \langle \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle^{1/2}, \\ \|\mathbf{U}\|_{L_d^\infty} &:= \max_{0 \leq k \leq N} |U_k|, \\ \|\mathbf{U}\|_{H_d^1} &:= \left(\langle \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle + \frac{1}{2} (\langle D^+ \mathbf{U}, D^+ \mathbf{U} \rangle + \langle D^- \mathbf{U}, D^- \mathbf{U} \rangle) \right)^{1/2} \\ &= \left(\langle \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle + \langle A^{1/2} \mathbf{U}, A^{1/2} \mathbf{U} \rangle \right)^{1/2} \end{aligned}$$

すると、これらの内積には以下の関係式がある:

補題 16.

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \|\mathbf{U}\|_{L_d^2} \leq \|\mathbf{U}\|_{L_d^\infty} \leq \max \left\{ \sqrt{\frac{3}{L}}, \sqrt{\frac{3L}{2}} \right\} \|\mathbf{U}\|_{H_d^1}.$$

Proof. まず $N \Delta x = L$ から、

$$\|\mathbf{U}\|_{L_d^2} \leq \|\mathbf{U}\|_{L_d^\infty} \left(\sum_{k=0}^N \Delta x \right)^{1/2} = \sqrt{L} \|\mathbf{U}\|_{L_d^\infty}.$$

これによって左の不等式が証明できる。右の不等式については、 $K \in \{0, \dots, N\}$ を、 $|U_K| = \min_{0 \leq k \leq N} |U_k|$ となるようにとると、

$$|U_K| \leq \frac{1}{\sqrt{L}} \langle \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle^{1/2}.$$

ここで

$$U_j - U_K = \begin{cases} \sum_{k=K}^{j-1} (U_{k+1} - U_k), & j > K, \\ -\sum_{k=j}^{K-1} (U_{k+1} - U_k), & j < K, \end{cases}$$

より, 任意の $j = 0, \dots, N$ について以下の事がわかる:

$$\begin{aligned} |U_j| &\leq |U_K| + \sum_{k=0}^{N-1} \left| \frac{U_{k+1} - U_k}{\Delta x} \right| \Delta x \\ &\leq |U_K| + \left(\sum_{k=0}^{N-1} \left| \frac{U_{k+1} - U_k}{\Delta x} \right|^2 \Delta x \right)^{1/2} \left(\sum_{k=0}^{N-1} \Delta x \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{L}} \langle \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle^{1/2} + \sqrt{L} \langle D^+ \mathbf{U}, D^+ \mathbf{U} \rangle^{1/2}. \end{aligned}$$

また同様に,

$$|U_j| \leq \frac{1}{\sqrt{L}} \langle \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle^{1/2} + \sqrt{L} \langle D^- \mathbf{U}, D^- \mathbf{U} \rangle^{1/2}.$$

が成り立つので, あわせると,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{U}\|_{L^\infty} &\leq \frac{1}{\sqrt{L}} \langle \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle^{1/2} + \frac{\sqrt{L}}{2} \left(\langle D^+ \mathbf{U}, D^+ \mathbf{U} \rangle^{1/2} + \langle D^- \mathbf{U}, D^- \mathbf{U} \rangle^{1/2} \right) \\ &\leq C \langle A^{1/2} \mathbf{U}, A^{1/2} \mathbf{U} \rangle^{1/2}. \end{aligned}$$

ただし $C = \max \left\{ \sqrt{\frac{3}{L}}, \sqrt{\frac{3L}{2}} \right\}$ であり, 最後の不等式は, $\sqrt{a} + \sqrt{b} + \sqrt{c} \leq \sqrt{3(a+b+c)}$ を用いた. \square

3 離散変分法の適用例

この章では, 実際に再定式化した離散変分法の適用例をみていく. 原則断りが無い限り, 1次元空間 $\Omega = (0, L)$ の場合を取り扱う. 以下, ベクトルどうし $\mathbf{U} = (U_0, \dots, U_N)^\top, \mathbf{V} = (V_0, \dots, V_N)^\top \in \mathbf{R}^{N+1}$ の演算はそれぞれの成分の演算とする. 例えば積 \mathbf{UV} は成分ごとの積 $(U_0V_0, \dots, U_NV_N)^\top$ を表している. また, $\mathbf{U}^{(m)}$ を近似解の各分点を並べたベクトルつまり, $(U(0\Delta x, m\Delta t), \dots, U(N\Delta x, m\Delta t))^\top$ とする. ノルム $\|\cdot\|_{L^2_\Delta}$ を, 断りが無い限り $\|\cdot\|$ と略記する.

3.1 熱方程式

3.1.1 構造保存型スキームの導出

例 17. 熱方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad x \in (0, L)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{on } x = 0, L$$

$$u(x, 0) = f(x)$$

熱方程式というのは、ある空間上での気体や液体の熱の変化を表現した偏微分方程式である ([18]). 二つの物理的原理「質量保存」, 「フーリエの冷却法則」から導出される. この方程式の, 力学的全エネルギーは,

$$J(u) = \int_0^L G(u) dx = \langle G(u), \mathbf{1} \rangle_{L^2(0,L)} \quad , \quad G(u) = \frac{1}{2} u_x^2$$

離散エネルギーを

$$J_d(\mathbf{U}) = \langle G_d(\mathbf{U}), \mathbf{1} \rangle \quad , \quad G_d(\mathbf{U}) = \frac{1}{2} (A^{1/2} \mathbf{U})^{1/2}$$

と定める. このとき, 補題9より,

$$\begin{aligned} J_d(\mathbf{U}) - J_d(\mathbf{V}) &= \langle G_d(\mathbf{U}) - G_d(\mathbf{V}), \mathbf{1} \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \left((A^{1/2} \mathbf{U})^2 - (A^{1/2} \mathbf{V})^2 \right), \mathbf{1} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(\langle A^{1/2} \mathbf{U}, A^{1/2} \mathbf{U} \rangle - \langle A^{1/2} \mathbf{V}, A^{1/2} \mathbf{V} \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} (\langle A \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle - \langle A \mathbf{V}, \mathbf{V} \rangle) \\ &= \frac{1}{2} \langle A(\mathbf{U} + \mathbf{V}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle. \end{aligned}$$

したがって, J_d の離散変分導関数が, $\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})} = \frac{A}{2} (\mathbf{U} + \mathbf{V})$ と定まり,

$$\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} = - \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} = -A \left(\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} + \mathbf{U}^{(m)}}{2} \right)$$

という, 離散変分法に基づく数値スキームを得る. これは熱方程式の数値計算スキームとしてよく知られているクランク・ニコルソン法と一致する.

注意 18. 上記の, 離散エネルギーの取り方は, 通常 of 離散変分法で用いられる近似方法

$$u_x^2 \approx \frac{(D^+ \mathbf{U})^2 + (D^- \mathbf{U})^2}{2}$$

とは異なる. しかし, 公式4から, 上で用いた近似

$$u_x^2 \approx \frac{(A^{1/2} \mathbf{U})^2}{2}$$

により得られるスキームは従来の方法と変わらないことがわかる.

3.1.2 構造保存性の証明

熱方程式の特徴として, 質量保存性やエネルギー散逸性が挙げられる. 実際, 以下が成り立つ.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \int_0^L u_x^2(x, t) dx \right) &= \int_0^L u_x(x, t) u_{xt}(x, t) dx \\ &= - \int_0^L u_{xx}(x, t) u_t(x, t) dx + [u_x(x, t) u_t(x, t)]_0^L \\ &= - \int_0^L u_{xx}^2(x, t) dx \leq 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_0^L u(x,t) dx &= \int_0^L u_t(x,t) dx \\
&= \int_0^L u_{xx}(x,t) dx \\
&= [u_x(x,t)]_0^L = 0.
\end{aligned}$$

一方, 離散変分法による差分スキームにおいても同じ事が成立する事が言える.

定義 19. 差分解 \mathbf{U} に対して質量は,

$$M_d(\mathbf{U}) = \sum_{k=0}^N U_k \Delta x = \langle \mathbf{U}, \mathbf{1} \rangle.$$

定理 20. 質量保存性 エネルギー散逸性

任意の m について, スキームの解 $\mathbf{U}^{(m)}$ は以下を満たす:

$$M_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) = M_d(\mathbf{U}^{(m)}) \quad (6)$$

$$J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) \leq J_d(\mathbf{U}^{(m)}) \quad (7)$$

Proof. 質量保存性である (6) については,

$$\begin{aligned}
\frac{M_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - M_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \left\langle \frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t}, \mathbf{1} \right\rangle \\
&= \left\langle -A \frac{\mathbf{U}^{(m+1)} + \mathbf{U}^{(m)}}{2}, \mathbf{1} \right\rangle \\
&= \left\langle -\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} + \mathbf{U}^{(m)}}{2}, A\mathbf{1} \right\rangle \quad (8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\langle -\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} + \mathbf{U}^{(m)}}{2}, \mathbf{0} \right\rangle \quad (9) \\
&= 0
\end{aligned}$$

より得られる. ただし, 式 (8) から (9) は $\mathbf{1}$ が A の固有値 0 に対する固有ベクトルである事実を用いた. またエネルギー散逸性 (7) は,

$$\begin{aligned}
\frac{I_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - I_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \left\langle \frac{G_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - G_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t}, \mathbf{1} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, \frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, -\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} \right\rangle \\
&= -\left\| \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} \right\|^2 \leq 0
\end{aligned}$$

より得られる. □

3.1.3 計算例

実際の計算では, 刻み幅は空間, 時間共に一定にし, 各々 $\Delta x, \Delta t$ と表し, 空間領域は $\Omega = [0, 1]$ とする. 以下では, $u(x, 0) = |\cos(4\pi x)|, \Delta x = 1/40, \Delta t = 1/1000$ として計算を行った. Figure1 が解の時

間発展である. また Figure2 と Figure3 がそれぞれ離散全エネルギーと質量の時間変化図である. ただし破線のグラフは上記と同じスキームではあるが, 以下の近似計算したものである.

$$M(u(x,t)) = \int_0^1 u(x,t) dx \simeq \sum_{k=0}^N u\left(\frac{k}{N}, m\Delta t\right) \Delta x J(u(x,t)) = \frac{1}{2} \int_0^1 u_x^2(x,t) dx \simeq \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \{(A^{1/2} \mathbf{U})\}_k \Delta x$$

エネルギー及び質量を計算したものである. 確かに通常の和でもエネルギー散逸性は反映されているが, 質量保存性までは再現できていないことがわかる.

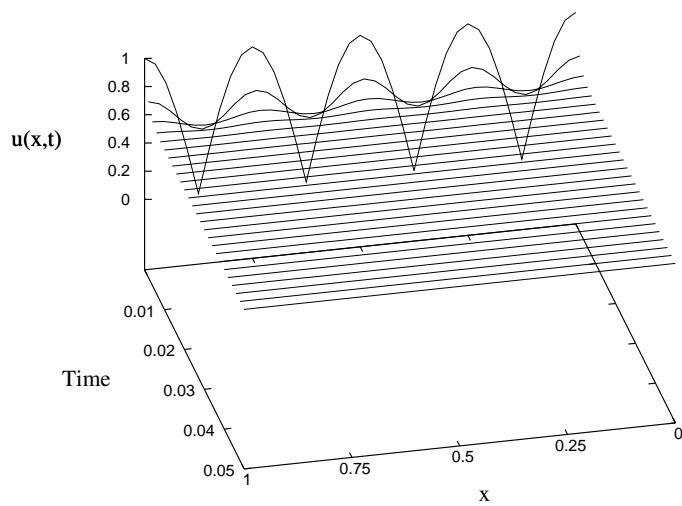


Figure1 $u(x,t)$

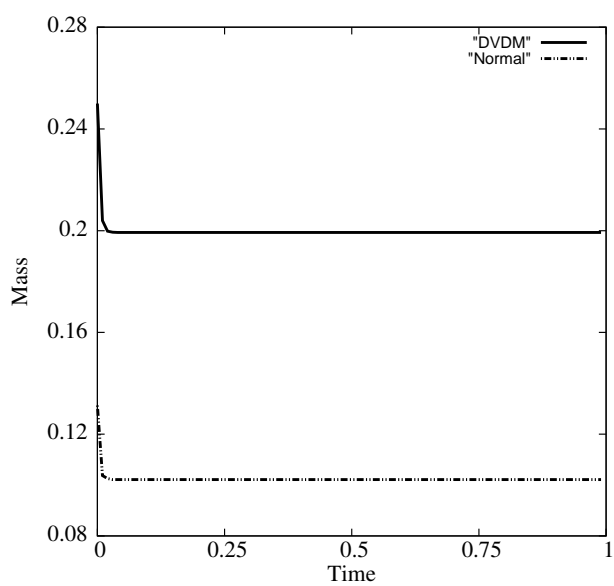


Figure2 エネルギー散逸性

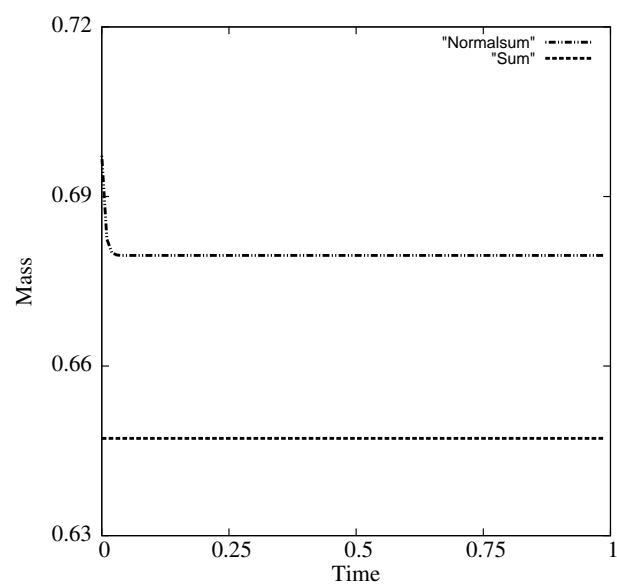


Figure3 質量保存性

3.2 FitzHugh-Nagumo 方程式

3.2.1 構造保存差分スキームの導出

例 21. *FitzHugh-Nagumo* 方程式

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u}{\partial t} &= \varepsilon^2 u_{xx} + f(u) - \sigma v & x \in (0, L) \\
 \delta \frac{\partial v}{\partial t} &= v_{xx} + u - m' - \gamma v \\
 \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 & x = 0, L \\
 \frac{\partial v}{\partial n} &= 0 & x = 0, L
 \end{aligned} \tag{10}$$

ただし $0 < \varepsilon \ll 1, \delta \geq 0, m' \in (-1, 1), \gamma > 0, f(u) = u - u^3$ とする. この方程式は, 神経細胞などの電氣的興奮性細胞の活動電位を表現したモデルである ([11,12]). これは $\tau = 0$ のとき, 以下の全エネルギーの L^2 勾配となっている [8]:

$$J(u) := \int_0^1 \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |u_x|^2 + F(u) + \frac{\sigma}{2} |(-\Delta + \gamma I)^{-\frac{1}{2}}(u - m')|^2 dx \right),$$

ただし, $F(u) = \frac{1}{4}(u^2 - 1)^2$ は 2 重井戸型ポテンシャル関数である. そして, $\frac{\delta J}{\delta u}$ は

$$\begin{aligned}
 J(u + \delta u) - J(u) &= \int_0^1 \frac{\varepsilon^2}{2} (|u_x + \delta u_x|^2 - |u_x|^2) + F(u + \delta u) - F(u) \\
 &\quad + \frac{\sigma}{2} \left(|(-\Delta + \gamma I)^{-\frac{1}{2}}(u + \delta u - m')|^2 - |(-\Delta + \gamma I)^{-\frac{1}{2}}(u - m')|^2 \right) dx \\
 &= \int_0^1 -\varepsilon^2 (u_{xx} \delta u + (\delta u_x)^2) + F'(u) \delta u + \frac{\sigma}{2} (-\Delta + \gamma I)^{-1} \delta u (2u + \delta u - 2m') dx \\
 &= \int_0^1 -\varepsilon^2 u_{xx} \delta u + F'(u) \delta u + \sigma (-\Delta + \gamma I)^{-1} (u - m') \delta u dx + O(\delta u^2)
 \end{aligned}$$

から $\frac{\delta J}{\delta u} = -\varepsilon^2 u_{xx} + F'(u) + \sigma (-\Delta + \gamma I)^{-1} (u - m')$ となり, $\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta J}{\delta u}$ となる. 離散の場合も同様に, $J_d(\mathbf{U})$ を以下のように定義する.

$$J_d(\mathbf{U}) = \sum_{k=0}^N \left(\frac{\varepsilon^2}{2} (A^{1/2} \mathbf{U})^2 + F(\mathbf{U}) + \frac{\sigma}{2} |(A + \gamma E)^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{U} - m' \mathbf{1})|^2 \right) \Delta x = \sum_{k=0}^N G_d(\mathbf{U}) \Delta x$$

$f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \frac{\mathbf{U}^3 + \mathbf{U}\mathbf{V}^2 + \mathbf{U}^2\mathbf{V} + \mathbf{V}^3}{4} - \frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2}$ とおくと,

$$\begin{aligned}
J_d(\mathbf{U}) - J_d(\mathbf{V}) &= \frac{\varepsilon^2}{4} \left(\langle A^{1/2}\mathbf{U}, A^{1/2}\mathbf{U} \rangle - \langle A^{1/2}\mathbf{V}, A^{1/2}\mathbf{V} \rangle \right) \\
&\quad + \langle F(\mathbf{U}) - F(\mathbf{V}), \mathbf{1} \rangle \\
&\quad + \frac{\sigma}{2} \left(\langle (A + \gamma E)^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{U} - m'\mathbf{1}), (A + \gamma E)^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{U} - m'\mathbf{1}) \rangle \right. \\
&\quad \left. - \langle (A + \gamma E)^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{V} - m'\mathbf{1}), (A + \gamma E)^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{V} - m'\mathbf{1}) \rangle \right) \\
&= \frac{\varepsilon^2}{2} (\langle A\mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle - \langle A\mathbf{V}, \mathbf{V} \rangle) + \langle f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle \\
&\quad + \frac{\sigma}{2} \left(\langle (A + \gamma E)^{-1}(\mathbf{U} - m'\mathbf{1}), (\mathbf{U} - m'\mathbf{1}) \rangle - \langle (A + \gamma E)^{-1}(\mathbf{V} - m'\mathbf{1}), (\mathbf{V} - m'\mathbf{1}) \rangle \right) \\
&= \frac{\varepsilon^2}{2} \langle A(\mathbf{U} + \mathbf{V}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle + \langle f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle \\
&\quad + \frac{\sigma}{2} \langle (A + \gamma E)^{-1}(\mathbf{U} + \mathbf{V} - 2m'\mathbf{1}), (\mathbf{U} - \mathbf{V}) \rangle \\
&= \varepsilon^2 \langle A\left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2}\right), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle + \langle f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle \\
&\quad + \sigma \langle (A + \gamma E)^{-1}\left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2} - m'\mathbf{1}\right), (\mathbf{U} - \mathbf{V}) \rangle.
\end{aligned}$$

よって, J_d の離散変分導関数を

$$\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})} = \varepsilon^2 A\left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2}\right) + f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}) + \sigma(A + \gamma E)^{-1}\left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2} - m'\mathbf{1}\right)$$

と求めることができる. したがって, 離散変分法に基づく数値スキームは, 以下で与えられる:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} &= -\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, \\
\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})} &= \varepsilon^2 A\left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2}\right) + f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}) + \sigma(A + \gamma E)^{-1}\left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2} - m'\mathbf{1}\right).
\end{aligned} \tag{11}$$

3.2.2 構造保存性の証明

定理 22. 任意の m について, スキーム (11) の解 $\mathbf{U}^{(m)}$ は以下の条件を満たす:

$$J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) \leq J_d(\mathbf{U}^{(m)}) \tag{12}$$

Proof.

$$\begin{aligned}
\frac{J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - J_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \left\langle \frac{G_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - G_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t}, \mathbf{1} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, \frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, -\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} \right\rangle \\
&= -\left\| \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} \right\|^2 \leq 0
\end{aligned}$$

となるので確かに成立する. □

3.2.3 安定性及び一意可解性

次に、このスキーム (11) の安定性及び一意可解性を調べる。

定理 23. 任意の $m = 0, 1, \dots$ に対して、このスキーム (11) の解 $\mathbf{U}^{(m)}$ は以下を満たす:

$$\|\mathbf{U}^{(m)}\|_{L_d^2} \leq \{I_d(\mathbf{U}^{(0)}) + 2L\}^{1/2}, \quad (13)$$

$$\|\mathbf{U}^{(m)}\|_{L_\infty^d} \leq C \left\{ \frac{2}{\varepsilon^2} I_d(\mathbf{U}^{(0)}) + \frac{L}{2} (\varepsilon^2 + 2) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

ただし、 C は補題 11 の定数であり、 $C = \max\{\sqrt{\frac{3}{L}}, \sqrt{\frac{3L}{2}}\}$ である。

Proof. 非線形項については、

$$F(u) = \frac{1}{4}(u^2 - 1)^2 \geq au^2 - a(a+1) \quad (15)$$

が $a > 0$ に対して、成り立つので、

$$\langle F(\mathbf{U}^{(m)}), \mathbf{1} \rangle \geq \langle a(\mathbf{U}^{(m)})^2 - a(a+1)\mathbf{1}, \mathbf{1} \rangle = a\langle \mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{U}^{(m)} \rangle - a(a+1)L.$$

ここで、(12) 及び不等式 (15) (ただし $a = 1$ とする) により、(13) を得る。また、(15) において $a = \varepsilon^2/2$ とすると、 $m \geq 0$ に対して、

$$\begin{aligned} J_d(\mathbf{U}^{(0)}) &\geq J_d(\mathbf{U}^{(m)}) \geq \frac{\varepsilon^2}{2} \langle A^{1/2} \mathbf{U}^{(m)}, A^{1/2} \mathbf{U}^{(m)} \rangle + \langle F(\mathbf{U}^{(m)}), \mathbf{1} \rangle \\ &\geq \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\langle A^{1/2} \mathbf{U}^{(m)}, A^{1/2} \mathbf{U}^{(m)} \rangle + \langle \mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{U}^{(m)} \rangle \right) - \frac{\varepsilon^2}{4} (\varepsilon^2 + 2) \langle \mathbf{1}, \mathbf{1} \rangle \\ &= \frac{\varepsilon^2}{2} \|\mathbf{U}\|_{H_d^1}^2 - \frac{\varepsilon^2}{4} (\varepsilon^2 + 2)L \end{aligned}$$

となり、補題 11 より (14) が成り立つ。 \square

このスキームについては、一意可解性も証明できる。そのために、写像 $\mathcal{T} : \mathbb{R}^{N+1} \times \mathbb{R}^{N+1} \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$ を以下のように定義する。

$$\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) := \mathbf{U} - \frac{\Delta t}{2} \{ \varepsilon^2 A \mathbf{V} + g(\mathbf{U}, \mathbf{V}) + \mathbf{V} \} + \frac{\sigma \Delta t}{2} (A + \gamma E)^{-1} (\mathbf{V} - m' \mathbf{1}), \quad (16)$$

ここで、 $g(u, v) := -u^2 v + 2uv^2 - 2v^3$ である。このとき $\mathcal{T}(\mathbf{U}^{(m)}, \cdot) : \mathbb{R}^{N+1} \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$ が不動点 V^* を持つならば、 $\mathbf{U}^{(m+1)} := 2\mathbf{V}^* - \mathbf{U}^{(m)}$ はスキーム (11) の解になっている。

補題 24. $R > 0$ を $\|\mathbf{U}\| \leq R$ を満たす定数とする。このとき、 $\mathcal{T}(\mathbf{U}, \cdot) : \mathbb{R}^{N+1} \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$ は

$$\Delta t \left\{ \frac{4\varepsilon^2}{(\Delta x)^2} + \frac{33R^2}{\Delta x} + 1 + \frac{\sigma}{\gamma} + \frac{\sigma\sqrt{L}m'}{\gamma R} \right\} < 1. \quad (17)$$

$B := \{\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N+1} \mid \|\mathbf{V}\| \leq 2R\}$ に一意な不動点を持つ。

Proof. A のスペクトル分解によって,

$$\begin{aligned}\|A\mathbf{U}\|^2 &= \sum_{k=0}^N \lambda_k^2 \langle \mathbf{U}, \boldsymbol{\Phi}_k \rangle^2 \leq \lambda_N^2 \|\mathbf{U}\|^2, \\ \|(A + \gamma E)^{-1}(\mathbf{U} - m'\mathbf{1})\|^2 &= \sum_{k=0}^N \frac{1}{(\lambda_k + \gamma)^2} \langle \mathbf{U} - m'\mathbf{1}, \boldsymbol{\Phi}_k \rangle^2 \leq \frac{1}{\gamma^2} \|\mathbf{U} - m'\mathbf{1}\|^2.\end{aligned}$$

ここで, $\lambda_N = 4/(\Delta x)^2$ が A の最大固有値であることより,

$$\begin{aligned}\|\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| &\leq \|\mathbf{U}\| + \frac{\Delta t}{2} \{ \varepsilon^2 \|A\mathbf{V}\| + \|g(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| + \|\mathbf{V}\| + \sigma \|(A + \gamma E)^{-1}(\mathbf{V} - m'\mathbf{1})\| \} \\ &\leq \|\mathbf{U}\| + \frac{\Delta t}{2} \{ \varepsilon^2 \lambda_N \|\mathbf{V}\| + \|g(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| + \|\mathbf{V}\| + \frac{\sigma}{\gamma} (\|\mathbf{V}\| + \sqrt{L}m') \}.\end{aligned}$$

ただし, $\|m'\mathbf{1}\| = \sqrt{L}m'$ を用いた. また,

$$\|\mathbf{U}\mathbf{V}\| \leq \sqrt{\frac{2}{\Delta x}} \|\mathbf{U}\| \|\mathbf{V}\|,$$

より,

$$\|g(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| \leq \frac{2}{\Delta x} (\|\mathbf{U}\|^2 \|\mathbf{V}\| + 2\|\mathbf{U}\| \|\mathbf{V}\|^2 + 2\|\mathbf{V}\|^3),$$

が成立する. したがって, $\|\mathbf{U}\| \leq R$ かつ $\|\mathbf{V}\| \leq 2R$ を用いてまとめると,

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| \leq R \left[1 + \Delta t \left\{ \frac{4\varepsilon^2}{(\Delta x)^2} + \frac{26R^2}{\Delta x} + 1 + \frac{\sigma}{\gamma} + \frac{\sigma\sqrt{L}m'}{\gamma R} \right\} \right].$$

ところで $\mathcal{T}(\mathbf{U}, \cdot)$ が B から B の写像になるための条件は,

$$\Delta t \left\{ \frac{4\varepsilon^2}{(\Delta x)^2} + \frac{26R^2}{\Delta x} + 1 + \frac{\sigma}{\gamma} + \frac{\sigma\sqrt{L}m'}{\gamma R} \right\} \leq 1. \quad (18)$$

次に, $\mathcal{T}(\mathbf{U}, \cdot)$ が縮小写像であるための条件を求める. 上の議論と同様にして,

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - \mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}')\| \leq \frac{\Delta t}{2} \left\{ (\varepsilon^2 \lambda_N + 1 + \frac{\sigma}{\gamma}) \|\mathbf{V} - \mathbf{V}'\| + \|g(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - g(\mathbf{U}, \mathbf{V}')\| \right\}.$$

非線形項の評価は,

$$\|g(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - g(\mathbf{U}, \mathbf{V}')\| \leq \frac{66R^2}{\Delta x} \|\mathbf{V} - \mathbf{V}'\|,$$

となるので, 結局以下のようになる:

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - \mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}')\| \leq \Delta t \left\{ \frac{2\varepsilon^2}{(\Delta x)^2} + \frac{33R^2}{\Delta x} + 1 + \frac{\sigma}{\gamma} \right\} \|\mathbf{V} - \mathbf{V}'\|.$$

したがって, $\mathcal{T}(\mathbf{U}, \cdot)$ が縮小写像になるためには,

$$\Delta t \left\{ \frac{2\varepsilon^2}{(\Delta x)^2} + \frac{33R^2}{\Delta x} + 1 + \frac{\sigma}{\gamma} \right\} < 1$$

が必要である. これと (18) の条件をあわせると, 縮小写像の原理より補題の主張が成り立つ. \square

定理 25. スキーム (11) は, Δt が (17) を満たしているならば, 一意な解をもち $\|\mathbf{U}^{(m+1)}\|_{L_d^2} \leq R$ が任意の $m \geq 0$ で成り立つ. ただし $R = \{J_d(\mathbf{U}^{(0)} + 2L)\}^{1/2}$ である.

Proof. 補題 24 より, $\|\mathbf{U}^{(0)}\| \leq R$ ならば, 写像 $\mathcal{T}(\mathbf{U}^{(0)}, \cdot)$ は一意な解 $\mathbf{V}^{(0)}$ をもつ. そして $\mathbf{U}^{(1)} := 2\mathbf{V}^{(0)} - \mathbf{U}^{(0)}$ が, (11) の解になる. また定理 23 から, $\|\mathbf{U}^{(1)}\| \leq R$ より, 補題 24 を再び適用できることがわかる. このように帰納的に証明をすればよい. \square

注意 26. 補題 24 及び定理 25 から, $\varepsilon \approx \Delta x$ で計算すると良い事がわかる.

3.2.4 誤差評価

スキーム (11) の誤差評価を行う. 誤差は $e_k^{(m)} = u(k\Delta x, m\Delta t) - U_k^m$ とする. また一回当たりの処理誤差 $\mathbf{F}^{(m)}$ を以下の式で定義する:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{u}^{(m+1)} - \mathbf{u}^{(m)}}{\Delta t} &= -\varepsilon^2 A \left(\frac{\mathbf{u}^{(m+1)} + \mathbf{u}^{(m)}}{2} \right) - f_d(\mathbf{u}^{(m)}, \mathbf{u}^{(m+1)}) \\ &\quad + \sigma(A + \gamma E)^{-1} \left(\frac{\mathbf{u}^{(m+1)} + \mathbf{u}^{(m)}}{2} - m'\mathbf{1} \right) + \mathbf{F}^{(m)} \end{aligned} \quad (19)$$

ただし $\mathbf{u}^{(m)} = (u(0 \cdot \Delta x, m\Delta t), u(1 \cdot \Delta x, m\Delta t), \dots, u(N \cdot \Delta x, m\Delta t))^T$ とする. 証明の流れとしては, 以下のようにして $\|\mathbf{e}^{(m)}\|$ を求める,

STEP1. 処理誤差 $\mathbf{F}^{(m)}$ を評価する.

STEP2. $\frac{\|\mathbf{e}^{(m+1)}\| - \|\mathbf{e}^{(m)}\|}{\Delta t}$ を評価する

STEP3. 上の評価した式を $m = 0, \dots, M$ まで和をとり, 離散版グロウンウォールの不等式を用いる. まず STEP1 を行うために必要な補題を示す.

補題 27. 非局所項に対し, 以下の評価が成立する:

$$\|(A + \gamma E)^{-1} \mathbf{u}^{(m)} - (-\Delta + \gamma I)^{-1} \mathbf{u}^{(m)}\| \leq c(\Delta x)^2.$$

ただし $c > 0$ は定数であり, $u, (-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^5)$ とする. また $u, (-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^3)$ のときは,

$$\|(A + \gamma E)^{-1} \mathbf{u}^{(m)} - (-\Delta + \gamma I)^{-1} \mathbf{u}^{(m)}\| \leq c'(\Delta x),$$

ただし $c' > 0$ は定数である.

Proof. 以下では, $\mathbf{u}^{(m)}$ を \mathbf{u} と略記する. 条件 $u, (-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^5)$ のときのみを示す. $\mathbf{v} = (A + \gamma E)^{-1} \mathbf{u}, \mathbf{w} = (-\Delta + \gamma E)^{-1} \mathbf{u}$ とおく,

$$\begin{aligned} (A + \gamma E)(\mathbf{v} - \mathbf{w}) &= (A + \gamma E)\mathbf{v} - (-\Delta + \gamma I)\mathbf{w} \\ &\quad + (-\Delta + A)\mathbf{w} + (\gamma I - \gamma E)\mathbf{w} \\ &= (-\Delta + A)\mathbf{w}. \end{aligned}$$

また, $\|(A + \gamma E)\mathbf{u}\|^2$ は, スペクトル分解を用いて評価をおこなうと,

$$\begin{aligned}\|(A + \gamma E)\mathbf{u}\|^2 &= \sum_{k=0}^N (\lambda_k + \gamma)^2 u_k^2 \\ &\geq \gamma^2 \sum_{k=0}^N u_k^2 \\ &= \gamma^2 \|\mathbf{u}\|^2.\end{aligned}$$

また, $-\Delta + A$ は2回微分と中心差分との差である. これは関数 $f \in C^4$ をテイラー展開をすると,

$$\begin{aligned}f(x_0 + \Delta x) &= f(x_0) + \Delta x f'(x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x_0) + \frac{\Delta x^3}{3!} f'''(x_0) + O(\Delta x^4) \\ f(x_0 - \Delta x) &= f(x_0) - \Delta x f'(x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x_0) - \frac{\Delta x^3}{3!} f'''(x_0) + O(\Delta x^4)\end{aligned}$$

から中心差分の誤差,

$$\frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2} - f''(x_0) = O(\Delta x^2)$$

を考えると, 補題が成立する. また, $u, (-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^3)$ の場合は, テイラー展開の部分が,

$$\frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2} - f''(x_0) = O(\Delta x)$$

となるので同様に示される. □

この補題を用いて, STEP1 の評価を行う.

補題 28. 滑らかさが $(-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^5)$ ならば, 任意の $m \geq 0$ に対して, 以下の評価が成り立つ,

$$\|\mathbf{F}^{(m)}\|^2 \leq C_0((\Delta x)^4 + (\Delta t)^4).$$

ただし, C_0 は $\Delta x, \Delta t$ に依存しない正定数である. また, $u, (-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^3)$ の場合は,

$$\|\mathbf{F}^{(m)}\|^2 \leq C'_0((\Delta x)^2 + (\Delta t)^4).$$

ただし, C'_0 は $\Delta x, \Delta t$ に依存しない正定数である.

Proof. $(-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^5)$ の場合を示す. まず $t = (m + \frac{1}{2})\Delta t$ でテイラー展開を行なうと,

$$\begin{aligned}\mathbf{u}^{(m+1)} &= \mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} + \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{u}_t^{(m+\frac{1}{2})} + O((\Delta t)^2) \\ \mathbf{u}^{(m)} &= \mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} - \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{u}_t^{(m+\frac{1}{2})} + O((\Delta t)^2)\end{aligned}$$

を得る. これらを式 (19) の左辺に代入すると,

$$(\text{左辺}) = \mathbf{u}_t^{(m+\frac{1}{2})} + O(\Delta t).$$

ところで, (4) から,

$$\mathbf{u}_t^{(m+\frac{1}{2})} = \varepsilon^2 \mathbf{u}_{xx}^{(m+\frac{1}{2})} + f(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})}) - \sigma(-\Delta + \gamma I)^{-1}(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} - m' \mathbf{1})$$

が成り立つので (19) に代入すると, 以下の式をそれぞれ評価すればよいことがわかる.

$$A\left(\frac{\mathbf{u}^{(m+1)} + \mathbf{u}^{(m)}}{2}\right) - \mathbf{u}_{xx}^{(m+\frac{1}{2})} \quad (20)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{(m+1)^3} + \mathbf{u}^{(m+1)^2} \mathbf{u}^{(m)} + \mathbf{u}^{(m+1)} \mathbf{u}^{(m)^2} + \mathbf{u}^{(m)^3}}{4} - \mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})^3} \quad (21)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{(m+1)} + \mathbf{u}^{(m)}}{2} - \mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} \quad (22)$$

$$(-\Delta + \gamma I)^{-1}(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} - m' \mathbf{1}) - (A + \gamma E)^{-1}\left(\frac{\mathbf{u}^{(m+1)} + \mathbf{u}^{(m)}}{2} - m' \mathbf{1}\right) \quad (23)$$

まず (20) 式については,

$$\begin{aligned} A(\mathbf{u}^{(m+1)} + \mathbf{u}^{(m)}) - \mathbf{u}_{xx}^{(m+\frac{1}{2})} &= A(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} + O(\Delta x^2)) - \mathbf{u}_{xx}^{(m+\frac{1}{2})} \\ &= O(\Delta x^2). \end{aligned}$$

(21) 式についても, $t = (m + \frac{1}{2})\Delta t$ でのテイラー展開から,

$$\begin{aligned} &\mathbf{u}^{(m+1)^3} + \mathbf{u}^{(m+1)^2} \mathbf{u}^{(m)} + \mathbf{u}^{(m+1)} \mathbf{u}^{(m)^2} + \mathbf{u}^{(m)^3} \\ &= \left(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} + \frac{\Delta x}{2} \mathbf{u}_x^{(m+\frac{1}{2})} + O(\Delta x^2)\right)^3 \\ &+ \left(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} + \frac{\Delta x}{2} \mathbf{u}_x^{(m+\frac{1}{2})} + O(\Delta x^2)\right)^2 \left(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta x}{2} \mathbf{u}_x^{(m+\frac{1}{2})} + O(\Delta x^2)\right) \\ &+ \left(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} + \frac{\Delta x}{2} \mathbf{u}_x^{(m+\frac{1}{2})} + O(\Delta x^2)\right) \left(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta x}{2} \mathbf{u}_x^{(m+\frac{1}{2})} + O(\Delta x^2)\right)^2 \\ &+ \left(\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta x}{2} \mathbf{u}_x^{(m+\frac{1}{2})} + O(\Delta x^2)\right)^3 \end{aligned}$$

となる. この式は, 対称性から Δx の項が消え, まとめると $4\mathbf{u}^{(m+\frac{1}{2})^3} + O(\Delta x^2)$ であり, したがって式 (21) は $O(\Delta x^2)$ となる. 式 (22) もテイラー展開から誤差は $O(\Delta x^2)$ である. 式 (23) に関しては補題 27 から誤差が $O(\Delta x^2)$ となることがわかる. これらをまとめると補題が, 成立することがわかる. \square

これにより, 以下の誤差評価が得られる.

定理 29. 誤差評価

連続問題の解 u が, $u, (-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^5), 1 - \Delta t(7K^2 + 5) > 0$ の条件を満たしており, 補題 28 に依存するような定数 C_0 に対して,

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{TC_0(\Delta t^4 + \Delta x^4)}{(1 - \Delta t(7K^2 + 5))} \exp\left(\frac{(7K^2 + 5)}{(1 - \Delta t(7K^2 + 5))}T\right)$$

が成立する. ただし $K = \max_{m \geq 0, k \geq 0} (|u(k\Delta x, m\Delta t)|, |U(k\Delta x, m\Delta t)|)$ とする. また $u, (-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^3), 1 - \Delta t(7K^2 + 5) > 0$ の時は, 補題 28 の定数 C'_0 に対して,

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{TC'_0(\Delta t^4 + \Delta x^2)}{(1 - \Delta t(7K^2 + 5))} \exp\left(\frac{(7K^2 + 5)}{(1 - \Delta t(7K^2 + 6))}T\right),$$

が成立する.

Proof. $u, (-\Delta + \gamma I)^{-1}u \in C^2([0, T], C^5)$ の場合を示す. 式 (19) から式 (11) をひくと,

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{e}^{(m+1)} - \mathbf{e}^{(m)}}{\Delta t} &= -A\varepsilon^2(\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}) - \left(\xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \xi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)}) \right) \\ &\quad + \frac{\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}}{2} - \sigma(A + \gamma E)^{-1} \left(\frac{\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}}{2} + \mathbf{F}^{(m)} \right) \end{aligned}$$

ただし,

$$\xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) = \frac{(\mathbf{u}^{(m+1)})^3 + (\mathbf{u}^{(m+1)})^2 \mathbf{u}^{(m)} + \mathbf{u}^{(m+1)} (\mathbf{u}^{(m)})^2 + (\mathbf{u}^{(m)})^3}{4},$$

とおく. このとき,

$$\begin{aligned} \frac{\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 - \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2}{\Delta t} &= \left\langle \frac{\mathbf{e}^{(m+1)} - \mathbf{e}^{(m)}}{\Delta t}, \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \right\rangle \\ &= \langle -A\varepsilon^2(\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}), \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \end{aligned} \quad (24)$$

$$- \langle \xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \xi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)}), \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \quad (25)$$

$$+ \left\langle \frac{\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}}{2}, \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \right\rangle \quad (26)$$

$$- \sigma \left\langle (A + \gamma E)^{-1} \left(\frac{\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}}{2} \right), \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \right\rangle \quad (27)$$

$$+ \langle \mathbf{F}^{(m)}, \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \quad (28)$$

となる. 各項 (24)~(28) を順に評価していく, まず式 (24) は,

$$(24) = -\varepsilon^2 \|A^{\frac{1}{2}}(\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)})\|^2 \leq 0$$

となる. また式 (25) は, シュワルツの不等式より

$$\begin{aligned} (25) &= -\langle \xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \xi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)}), \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \\ &\leq \|\xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \xi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})\| \cdot \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}\| \\ &\leq \frac{1}{2} \left(\|\xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \xi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}\|^2 \right) \end{aligned}$$

さらに, $K = \max_{m \geq 0, k \geq 0} (|u(k\Delta x, m\Delta t)|, |U(k\Delta x, m\Delta t)|)$ より,

$$\begin{aligned} \|\xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \xi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})\| &\leq \|\xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})\| \\ &\quad + \|\xi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)}) - \xi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})\| \\ &\leq 7K^2 (\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2). \end{aligned}$$

まとめると, 式 (25) は $\frac{7K^2+1}{2} (\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2)$ と評価できる. 式 (26) は,

$$\begin{aligned} (26) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 \\ &\leq \|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2. \end{aligned}$$

式 (27) は,

$$\begin{aligned}
(27) &= -\sigma \langle (A + \gamma E)^{-1} \left(\frac{\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}}{2} \right), \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \\
&= -\frac{\sigma}{2} \langle (A + \gamma E)^{-\frac{1}{2}} \left(\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \right), (A + \gamma E)^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}) \rangle \\
&= -\frac{\sigma}{2} \|(A + \gamma E)^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)})\|^2 \\
&\leq 0.
\end{aligned}$$

式 (28) は,

$$\begin{aligned}
(28) &\leq \|\mathbf{F}^{(m)}\| \cdot \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}\| \\
&\leq \frac{1}{2} \left(\|\mathbf{F}^{(m)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}\|^2 \right) \\
&\leq \frac{1}{2} \|\mathbf{F}^{(m)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2.
\end{aligned}$$

以上をまとめると,

$$\frac{\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 - \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2}{\Delta t} \leq \frac{7K^2 + 5}{2} (\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2) + \frac{1}{2} \|\mathbf{F}^{(m)}\|^2. \quad (29)$$

ここで, 式 (29) を $m = 0, 1, \dots, M-1$ まで和をとると, 補題 28 より

$$\begin{aligned}
\frac{\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2}{\Delta t} &\leq (7K^2 + 5) \sum_{k=0}^{M-1} \|\mathbf{e}^{(k)}\|^2 + \sum_{k=0}^{M-1} \frac{1}{2} \|\mathbf{F}^{(k)}\|^2 \\
&\leq (7K^2 + 5) \sum_{k=0}^{M-1} \|\mathbf{e}^{(k)}\|^2 + MC_0((\Delta t)^4 + (\Delta x)^4).
\end{aligned}$$

したがって, $M\Delta t = T$ および $1 - \Delta t(7K^2 + 5) > 0$ が成り立つとすると,

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{1}{1 - \Delta t(7K^2 + 5)} \left(\sum_{k=0}^{M-1} (7K^2 + 5) \|\mathbf{e}^{(k)}\|^2 + TC_0((\Delta t)^4 + (\Delta x)^4) \right).$$

ここで離散版 Gronwall の補題 [2, P126] を用いると,

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{TC_0(\Delta t^4 + \Delta x^4)}{(1 - \Delta t(7K^2 + 5))} \exp \left(\frac{(7K^2 + 5)}{(1 - \Delta t(7K^2 + 5))} T \right),$$

が得られる. また $(-\Delta + \gamma I)^{-1} u \in C^2[0, T], C^3$ の場合も同様に証明することができる. \square

3.2.5 計算例

実際の計算例を示す. ただし, $\Delta x = 1/200, \Delta t = 1/10000, \varepsilon = 0.03, m = 0.1$ とした. Figure5 は離散変分法による構造保存スキームのエネルギーと陽解法で計算した時のエネルギー図である. エネルギー散逸性が成立しているのは, 離散変分法による構造保存解法のみであることがわかる.

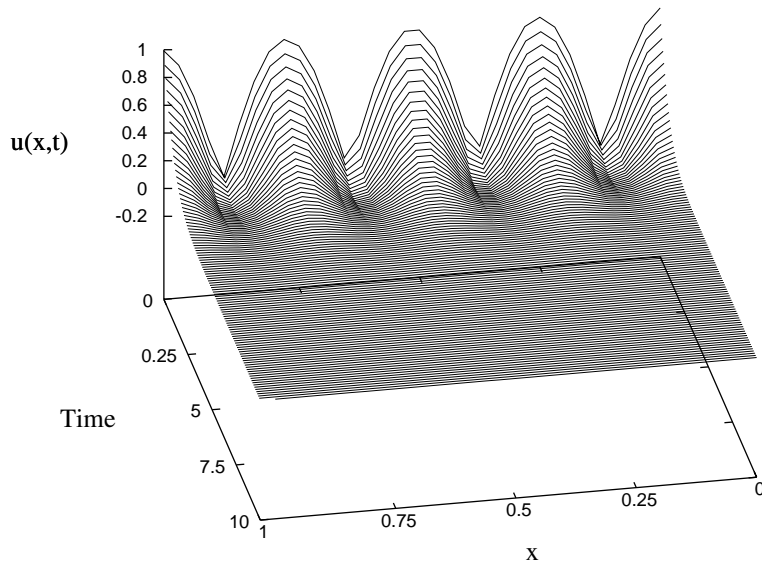


Figure4 $u(x,t)$ のグラフ

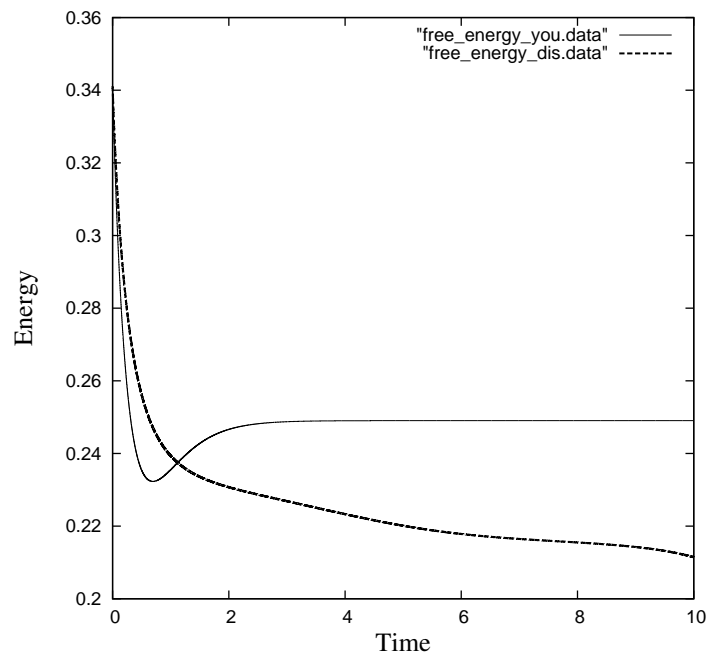


Figure5 エネルギーの時間変化

3.3 Cahn-Hilliard-Oono 方程式

例 30. Cahn-Hilliard-Oono 方程式

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(W'(u) - \varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) - \sigma(u - \bar{u}) \quad x \in (0, L) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad x = 0, L \\ u(x, 0) &= f(x)\end{aligned}$$

ただし $0 < \varepsilon \ll 1, \sigma > 0, \bar{u} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u(x, t) dx, W(u) = \frac{1}{4}(u^2 - 1)^2$ とする.

3.3.1 構造保存型スキームの導出

この方程式は,

$$I(u) := \int_0^1 \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |u_x|^2 + W(u) + \frac{\sigma}{2} |(-\Delta)^{-\frac{1}{2}}(u - \bar{u})|^2 dx \right)$$

の $H^{-1}(\Omega)$ 勾配系として導かれる. そして許容関数に要求される制限条件 $\int_0^1 \delta u \, dx = 0$ により, $\Delta \phi = \delta u$ を満たす ϕ が存在するので, I の変分は,

$$\begin{aligned}I(u + \delta u) - I(u) &\simeq \int_{\Omega} (-\varepsilon^2 u_{xx} + W'(u)) \delta u + \sigma \left((-\Delta)^{-\frac{1}{2}} \delta u \cdot (-\Delta)^{-\frac{1}{2}}(u - \bar{u}) \right) dx \\ &= \int_{\Omega} (-\varepsilon^2 u_{xx} + W'(u) + \sigma(-\Delta)^{-1}(u - \bar{u})) \delta u \, dx \\ &= \int_{\Omega} (-\varepsilon^2 u_{xx} + W'(u) + \sigma(-\Delta)^{-1}(u - \bar{u})) \Delta \phi \, dx \\ &= \int_{\Omega} -\frac{\partial}{\partial x} (-\varepsilon^2 u_{xx} + W'(u) + \sigma(-\Delta)^{-1}(u - \bar{u})) \frac{\partial \phi}{\partial x} \, dx \\ &= \left\langle -\frac{\partial^2}{\partial x^2} (-\varepsilon^2 u_{xx} + W'(u) + \sigma(-\Delta)^{-1}(u - \bar{u})), \delta u \right\rangle_{H^{-1}}\end{aligned}$$

となり, 変分導関数は, $\frac{\delta I}{\delta u} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} (-\varepsilon^2 u_{xx} + W'(u) + \sigma(-\Delta)^{-1}(u - \bar{u}))$ と求める事ができる ([18,19]). この I の離散化として,

$$I_d(\mathbf{U}) = \sum_{k=0}^N \frac{\varepsilon^2}{2} (A^{1/2} \mathbf{U})^2 + W_d(\mathbf{U}) + \frac{\sigma}{2} |A_0^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})|^2 \Delta x$$

と定義すると, I_d の離散変分は,

$$\begin{aligned}I_d(\mathbf{U}) - I_d(\mathbf{V}) &= \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\langle A^{1/2} \mathbf{U}, A^{1/2} \mathbf{U} \rangle - \langle A^{1/2} \mathbf{V}, A^{1/2} \mathbf{V} \rangle \right) + \langle (f_d(\mathbf{U}) - f_d(\mathbf{V})) \mathbf{U} - \mathbf{V}, \mathbf{1} \rangle \\ &\quad + \frac{\sigma}{2} \left(\langle A_0^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}), A_0^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \rangle - \langle A_0^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{V} - \bar{\mathbf{V}}), A_0^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{V} - \bar{\mathbf{V}}) \rangle \right) \\ &= \frac{\varepsilon^2}{2} (\langle A \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle - \langle A \mathbf{V}, \mathbf{V} \rangle) + \langle f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle \\ &\quad + \frac{\sigma}{2} \langle A_0^{-1}(\mathbf{U} + \mathbf{V} - \bar{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{V}}), \mathbf{U} - \mathbf{V} - (\bar{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{V}}) \rangle \\ &= \varepsilon^2 \langle A \frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2}, \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle + \langle f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle + \frac{\sigma}{2} \langle A_0^{-1}(\mathbf{U} + \mathbf{V} - \bar{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{V}}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle.\end{aligned}$$

ただし, $\langle A_0^{-1}(\mathbf{U} + \mathbf{V} - \bar{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{V}}), \bar{\mathbf{U}} - \bar{\mathbf{V}} \rangle = 0$ 及び $f_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \frac{\mathbf{U}^3 + \mathbf{U}^2\mathbf{V} + \mathbf{U}\mathbf{V}^2 + \mathbf{V}^3}{4} - \frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2}$ である. よって, I_d の離散変分導関数を, 以下のように導く事ができる.

$$\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})} = \varepsilon^2 A \left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2} \right) + \frac{\mathbf{U}^3 + \mathbf{U}^2\mathbf{V} + \mathbf{U}\mathbf{V}^2 + \mathbf{V}^3}{4} - \frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2} + \sigma A_0^{-1} \left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2} - \frac{\bar{\mathbf{U}} + \bar{\mathbf{V}}}{2} \right).$$

これにより得られるスキームは,

$$\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} = -A \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} \quad (30)$$

となる.

3.3.2 構造保存性の証明

導出したスキームが, もとの方程式と同じく質量保存性, エネルギー散逸性を有することを示す.

定理 31. 質量保存性 エネルギー散逸性

任意の m について, スキーム () の解 $\mathbf{U}^{(m)}$ は以下を満たす:

$$M_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) = M_d(\mathbf{U}^{(m)}) \quad (31)$$

$$I_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) \leq I_d(\mathbf{U}^{(m)}) \quad (32)$$

Proof. 質量保存である (31) については,

$$\begin{aligned} \frac{M_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - M_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \left\langle \frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t}, \mathbf{1} \right\rangle \\ &= \left\langle -A \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, \mathbf{1} \right\rangle \\ &= \left\langle -\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, A\mathbf{1} \right\rangle \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} &= \left\langle -\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, 0 \right\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (34)$$

ただし, 式 (33) から (34) を導くときに, $\mathbf{1}$ が A の固有値 0 に対する固有ベクトルであるからであることを用いた. また, エネルギー散逸性の (32) は

$$\begin{aligned} \frac{I_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - I_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \left\langle \frac{G_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - G_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t}, \mathbf{1} \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, \frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, -A \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} \right\rangle \\ &= -\|A^{\frac{1}{2}} \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}\|^2 \leq 0 \end{aligned}$$

より成立することがわかる. □

3.3.3 安定性及び一意可解性

次に、このスキームの安定性及び一意可解性を調べていく。

定理 32. 任意の $m \geq 0$ に対して、スキーム (31) の解 $\mathbf{U}^{(m)}$ は以下を満たす:

$$\|\mathbf{U}^{(m)}\|_{L_d^2} \leq \{I_d(\mathbf{U}^{(0)}) + 2L\}^{1/2}, \quad (35)$$

$$\|\mathbf{U}^{(m)}\|_{L_\infty} \leq C \left\{ \frac{2}{\varepsilon^2} I_d(\mathbf{U}^{(0)}) + \frac{L}{2}(\varepsilon^2 + 2) \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (36)$$

ただし C は補題 16 の定数であり、 $C = \max\{\sqrt{\frac{3}{L}}, \sqrt{\frac{3L}{2}}\}$ である。

Proof. 非線形項については、

$$W(u) = \frac{1}{4}(u^2 - 1)^2 \geq au^2 - a(a+1) \quad (37)$$

が $a > 0$ に対して成り立つので、

$$\langle W(\mathbf{U}^{(m)}), \mathbf{1} \rangle \geq \langle a(\mathbf{U}^{(m)})^2 - a(a+1)\mathbf{1}, \mathbf{1} \rangle = a\langle \mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{U}^{(m)} \rangle - a(a+1)L.$$

よって、(32) と式 (37)(ただし、 $a = 1$) から、(35) を示す事ができる。また、(37) において $a = \varepsilon^2/2$ とすると、 $m \geq 0$ に対して、

$$\begin{aligned} J_d(\mathbf{U}^{(0)}) &\geq J_d(\mathbf{U}^{(m)}) \geq \frac{\varepsilon^2}{2} \langle A^{1/2}\mathbf{U}^{(m)}, A^{1/2}\mathbf{U}^{(m)} \rangle + \langle W(\mathbf{U}^{(m)}), \mathbf{1} \rangle \\ &\geq \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\langle A^{1/2}\mathbf{U}^{(m)}, A^{1/2}\mathbf{U}^{(m)} \rangle + \langle \mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{U}^{(m)} \rangle \right) - \frac{\varepsilon^2}{4}(\varepsilon^2 + 2)\langle \mathbf{1}, \mathbf{1} \rangle \\ &= \frac{\varepsilon^2}{2} \|\mathbf{U}\|_{H_d^1}^2 - \frac{\varepsilon^2}{4}(\varepsilon^2 + 2)L \end{aligned}$$

となり、補題 11 から、(36) が成り立つ。 \square

次にスキーム (31) の一意可解性を示す。そのために、写像 $\mathcal{T} : \mathbb{R}^{N+1} \times \mathbb{R}^{N+1} \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$ を以下のように定義する。

$$\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) := \mathbf{U} - \frac{\Delta t}{2} A \{ \varepsilon^2 A \mathbf{V} + g(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - \mathbf{V} \} - \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{V} - \bar{\mathbf{V}}),$$

ここで、 $g(u, v) := u^2 v - 2uv^2 + 2v^3$ である。このとき、 $\mathcal{T}(\mathbf{U}^{(m)}, \cdot) : \mathbb{R}^{N+1} \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$ が不動点 \mathbf{V}^* を持つならば、 $\mathbf{U}^{(m+1)} := 2\mathbf{V}^* - \mathbf{U}^{(m)}$ はスキーム (31) の解になっている。

補題 33. $R > 0$ を $\|\mathbf{U}\|_{L_d^2} \leq R$ を満たす定数とする。このとき、

$$\Delta t \left\{ \frac{16\varepsilon^2}{(\Delta x)^4} + \frac{132R^2}{(\Delta x)^3} + \frac{4}{(\Delta x)^2} + \frac{\sigma}{2} \right\} < 1. \quad (38)$$

ならば、 $\mathcal{T}(\mathbf{U}, \cdot) : \mathbb{R}^{N+1} \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$ は $B := \{\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N+1} \mid \|\mathbf{V}\|_{L_d^2} \leq 2R\}$ に一意な不動点を持つ。

Proof. 以下の証明では $\|\cdot\|_{L_d^2}$ を $\|\cdot\|$ と略記する。 A のスペクトル分解により、

$$\|A\mathbf{U}\|^2 = \sum_{k=0}^N \lambda_k^2 \lambda_k^2 \langle \mathbf{U}, \Phi_k \rangle^2 \leq \lambda_N^2 \|\mathbf{U}\|^2.$$

ここで, $\lambda_N = 4/(\Delta x)^2$ が A の最大固有値であることより,

$$\begin{aligned}\|\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| &\leq \|\mathbf{U}\| + \frac{\Delta t}{2} \{\varepsilon^2 \|A^2 \mathbf{V}\| + \|Ag(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| + \|A\mathbf{V}\| + \sigma \|\mathbf{V} - \bar{\mathbf{V}}\|\} \\ &\leq \|\mathbf{U}\| + \frac{\Delta t}{2} \{\varepsilon^2 \lambda_N^2 \|\mathbf{V}\| + \lambda_N \|g(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| + \lambda_N \|\mathbf{V}\| + \sigma \|\mathbf{V}\|\}.\end{aligned}$$

ここで, $\mathbf{V} - \bar{\mathbf{V}}$ が \mathbf{V} の M_0 への直交射影であるから, $\|\mathbf{V} - \bar{\mathbf{V}}\| \leq \|\mathbf{V}\|$ が成立することをを用いた. また,

$$\|\mathbf{U}\mathbf{V}\| \leq \sqrt{\frac{2}{\Delta x}} \|\mathbf{U}\| \|\mathbf{V}\|,$$

より,

$$g(\mathbf{U}, \mathbf{V}) \leq \frac{2}{\Delta x} (\|\mathbf{U}\|^2 \|\mathbf{V}\| + 2\|\mathbf{U}\| \|\mathbf{V}\|^2 + 2\|\mathbf{V}\|^3),$$

が成立する. よって, $\|\mathbf{U}\| \leq R$ かつ $\|\mathbf{V}\| \leq 2R$ のとき,

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V})\| \leq R \left[1 + \Delta t \left\{ \frac{16\varepsilon^2}{(\Delta x)^4} + \frac{104R^2}{(\Delta x)^3} + \frac{4}{(\Delta x)^2} + \frac{\sigma}{2} \right\} \right].$$

したがって, $\mathcal{T}(\mathbf{U}, \cdot)$ が B から B への写像になるためには,

$$\Delta t \left\{ \frac{16\varepsilon^2}{(\Delta x)^4} + \frac{132R^2}{(\Delta x)^3} + \frac{4}{(\Delta x)^2} + \frac{\sigma}{2} \right\} \leq 1 \quad (39)$$

が必要となる. 次に, $\mathcal{T}(\mathbf{U}, \cdot)$ が縮小写像であるための条件を求める. 同様の議論により,

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - \mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}')\| \leq \frac{\Delta t}{2} \{(\varepsilon^2 \lambda_N^2 + \lambda_N + \sigma) \|\mathbf{V} - \mathbf{V}'\| + \lambda_N \|g(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - g(\mathbf{U}, \mathbf{V}')\|\}.$$

非線形項の評価は,

$$\|g(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - g(\mathbf{U}, \mathbf{V}')\| \leq \frac{66R^2}{\Delta x} \|\mathbf{V} - \mathbf{V}'\|$$

となるので,

$$\|\mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) - \mathcal{T}(\mathbf{U}, \mathbf{V}')\| \leq \Delta t \left\{ \frac{8\varepsilon^2}{(\Delta x)^4} + \frac{132R^2}{(\Delta x)^3} + \frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{\sigma}{2} \right\}.$$

よって, $\mathcal{T}(\mathbf{U}, \cdot)$ が縮小写像になるための条件は,

$$\Delta t \left\{ \frac{8\varepsilon^2}{(\Delta x)^4} + \frac{132R^2}{(\Delta x)^3} + \frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{\sigma}{2} \right\} < 1 \quad (40)$$

が成り立つことである. したがって, (38) が成り立てば (39), (40) が成り立つので, 縮小写像の原理より, 補題の主張が示される. \square

定理 34. スキーム (31) は, Δt が (38) を満たしているとき, 任意の $m \geq 0$ に対し, 一意な解をもち, $\|\mathbf{U}^{(m+1)}\|_{L^2} \leq R$ が成り立つ. ただし $R = \{J_d(\mathbf{U}^{(0)} + 2L)\}^{1/2}$ である.

Proof. 補題 33 より, $\|\mathbf{U}^{(0)}\| \leq R$ ならば, 写像 $\mathcal{T}(\mathbf{U}^{(0)}, \cdot)$ は Δt の条件から一意的な解 $\mathbf{V}^{(0)}$ をもつ. よって, $\mathbf{U}^{(1)} := 2\mathbf{V}^{(0)} - \mathbf{U}^{(0)}$ が, (31) の解になる. また定理 32 から, $\|\mathbf{U}^{(1)}\| \leq R$ となるので, 補題 33 を再び適用できることがわかる. 以下, 帰納的に議論することで定理の主張が得られる. \square

3.3.4 誤差評価

次に、このスキーム (31) の誤差評価を行う。 $m = 0, 1, \dots, M, k = -1, \dots, N + 1$ に対して $\mathbf{e}^{(m)}, \mathbf{F}^{(m)}$ を以下で定義する。

$$\mathbf{e}^{(m)} = \mathbf{u}^{(m)} - \mathbf{U}^{(m)},$$

$$\frac{\mathbf{u}^{(m+1)} - \mathbf{u}^{(m)}}{\Delta t} = -A \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)})} + \mathbf{F}^{(m)}. \quad (41)$$

最初の $\mathbf{e}^{(m)}$ は誤差だが、 $\mathbf{F}^{(m)}$ は処理誤差である。まずこの処理誤差について評価を行う。差分スキームの最終時刻を T とするとき、以下が成立する。

補題 35. 解 $u \in C^3([0, T], C^5)$ を満たすならば、

$$\Delta t \sum_{m=0}^M \|\mathbf{F}^{(m)}\| \leq C_0 T ((\Delta t)^4 + (\Delta x)^2).$$

さらに、解が $u \in C^3([0, T], C^6)$ の滑らかさをもつならば、

$$\Delta t \sum_{m=0}^M \|\mathbf{F}^{(m)}\| \leq C'_0 T ((\Delta t)^4 + (\Delta x)^4)$$

と評価を改善できる。ただし、 C_0 と C' は $\Delta t, \Delta x$ によらない定数である。

Proof. 後者 $u \in C^3([0, T], C^6)$ の証明のみ行なう。式 (41) の両辺のテイラー展開を $t = (m + 1/2)\Delta t$ において行う。左辺については、

$$\frac{u(k\Delta x, (m+1)\Delta t) - u(k\Delta x, (m)\Delta t)}{\Delta t} = u_t(k\Delta x, (m+1/2)\Delta t) + O(\Delta t^2)$$

が成り立つ。これは (1) から以下のように評価できる、

$$|F_k^{(m)}| \leq c_1 ((\Delta t)^2 + (\Delta x)^2).$$

ここで、 c_1 は $\Delta t, \Delta x$ に依存しない定数である。さらに、 $|F_k^{(m)}|$ の和を $m = 0, \dots, M$ までとり、補題 28 の証明と同様の議論により、議論が示される。 \square

この一回当たりの処理誤差を $m = 0, \dots, M$ まで和をとってあわせていくことで、 $\mathbf{e}^{(M)}$ が評価される。

定理 36. $u \in C^3([0, T], C^5)$ と仮定し、 C_0 を補題 35 の定数とする。このとき、以下が成立する：

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{TC_0((\Delta t)^4 + (\Delta x)^2)}{2\sigma(1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2)} \exp \frac{2T(1 + 3K^2)^2}{\varepsilon^2(1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2)},$$

ただし、 $K = \max_{0 \leq k \leq N, 0 \leq m \leq M} (|u_k^{(m)}|, |U_k^{(m)}|)$ とし、 Δt は $1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2 > 0$ を満たしているとする。さらに、 $u \in C^3([0, T], C^6)$ ならば、評価が改善できて、

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{TC'_0((\Delta t)^4 + (\Delta x)^4)}{2\sigma(1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2)} \exp \frac{2T(1 + 3K^2)^2}{\varepsilon^2(1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2)}$$

が成立する。ただし、 C'_0 は補題 35 の定数である。

Proof. 後者の $u \in C^3([0, T], C^6)$ の場合に, 証明を行う. 式 (31) から (41) をひくと,

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{e}^{(m+1)} - \mathbf{e}^{(m)}}{\Delta t} &= -A \left(\phi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \phi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)}) \right) - A^2 \varepsilon^2 \left(\frac{\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}}{2} \right) \\ &\quad - \sigma \left(\frac{\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}}{2} \right) + \mathbf{F}^{(m)} \end{aligned} \quad (42)$$

が成り立つ. ただし $\phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \frac{\mathbf{u}^3 + \mathbf{u}^2 \mathbf{v} + \mathbf{u} \mathbf{v}^2 + \mathbf{v}^3}{4} - \frac{\mathbf{u} + \mathbf{v}}{2}$ とおいた. このとき,

$$\begin{aligned} \frac{\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 - \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2}{\Delta t} &= \left\langle \frac{\mathbf{e}^{(m+1)} - \mathbf{e}^{(m)}}{\Delta t}, \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \right\rangle \\ &= -\langle A \left(\phi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \phi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)}) \right), \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \end{aligned} \quad (43)$$

$$- \langle A^2 \varepsilon^2 \left(\frac{\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}}{2} \right), \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \quad (44)$$

$$- \frac{\sigma}{2} \langle \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}, \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \quad (45)$$

$$+ \langle \mathbf{F}^{(m)}, \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle. \quad (46)$$

右辺の4つの項をそれぞれ評価していく.

$$(43) \leq \frac{1}{2\varepsilon^2} \|\phi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \phi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})\|^2 + \frac{\varepsilon^2}{2} \|A(\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)})\|^2$$

$$(44) = -\frac{\varepsilon^2}{2} \|A(\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)})\|^2$$

$$(45) = -\frac{\sigma}{2} \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}\|^2$$

$$(46) \leq \frac{1}{2\sigma} \|\mathbf{F}^{(m)}\|^2 + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}\|^2$$

より, これらの和をとると,

$$\frac{\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 - \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2}{\Delta t} \leq \frac{1}{2\varepsilon^2} \|\phi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \phi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})\|^2 + \frac{1}{2\sigma} \|\mathbf{F}^{(m)}\|^2.$$

不等式 (43) の右辺の最初の項については,

$$\begin{aligned} |\phi(u_k^{(m+1)}, u_k^{(m)}) - \phi(U_k^{(m+1)}, U_k^{(m)})| &\leq |\phi(u_k^{(m+1)}, u_k^{(m)}) - \phi(u_k^{(m+1)}, U_k^{(m)})| \\ &\quad + |\phi(u_k^{(m+1)}, U_k^{(m)}) - \phi(U_k^{(m+1)}, U_k^{(m)})| \\ &\leq \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{2} K^2 \right) (|e_k^{(m+1)}| + |e_k^{(m)}|) \end{aligned}$$

のように評価できる (ただし $K = \max_{k,m} (|u_k^{(m)}|, |U_k^{(m)}|)$ である). よって,

$$\|\phi(\mathbf{u}^{(m+1)}, \mathbf{u}^{(m)}) - \phi(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})\|^2 \leq \frac{1}{2} (1 + 3K^2)^2 (\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2).$$

$m = 0, \dots, M-1$ の和をとると,

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{1}{4\varepsilon^2} \Delta t (1 + 3K^2)^2 \sum_{m=0}^{M-1} (\|\mathbf{e}^{(m+1)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2) + \frac{\Delta t}{2\sigma} \sum_{m=0}^{M-1} \|\mathbf{F}^{(m)}\|^2.$$

さらに, Δt が $1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2 > 0$ が成り立つ事から,

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{1}{1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2} \left(\frac{\Delta t}{2\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2 \sum_{m=0}^{M-1} \|\mathbf{e}^{(m)}\|^2 + \frac{\Delta t}{2\sigma} \sum_{m=0}^{M-1} \|\mathbf{F}^{(m)}\|^2 \right).$$

ここで, 離散 Gronwall の補題 [1, P126] を適用すると,

$$\|\mathbf{e}^{(M)}\|^2 \leq \frac{TC'((\Delta t)^4 + (\Delta x)^4)}{2\sigma(1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2)} \exp \frac{2T(1 + 3K^2)^2}{\varepsilon^2(1 - \frac{\Delta t}{4\varepsilon^2}(1 + 3K^2)^2)}$$

が得られる. この方法では $\sigma = 0$ の場合が証明できないが, しかし (46) の評価を

$$\langle \mathbf{F}^{(m)}, \mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)} \rangle \leq \|\mathbf{F}^{(m)}\| \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}\| \leq \frac{1}{2} (\|\mathbf{F}^{(m)}\|^2 + \|\mathbf{e}^{(m+1)} + \mathbf{e}^{(m)}\|^2)$$

とすれば同様に証明できる. □

3.3.5 2次元スキーム

1次元スキームと同様に, 2次元スキームを構築することができる. 領域を $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ とし, x, y の空間方向の分割についてはそれぞれ $\Delta x = L_x/N_x, \Delta y = L_y/N_y$ とする. このとき $\mathbf{U} = (U_{i,j})_{0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y} \in \mathbb{R}^{N_x+1} \times \mathbb{R}^{N_y+1}$ を Ω 上の近似解とする. さらに, $D_2^{(2)}$ を $\mathbb{R}^{N_x+1} \times \mathbb{R}^{N_y+1}$ 上の2階の中心差分とする. すなわち

$$(D_2\mathbf{U})_{i,j} = \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{\Delta y^2}$$

ただし, 境界では, 斉次ノイマン条件の離散化として次の条件を課す:

$$\begin{aligned} U_{-1,j} &= U_{1,j}, \quad U_{N_x+1,j} = U_{N_x-1,j} \quad (j = 0, \dots, N_y), \\ U_{i,-1} &= U_{i,1}, \quad U_{i,N_y+1} = U_{i,N_y-1} \quad (i = 0, \dots, N_x). \end{aligned}$$

このとき, Ω 上の L^2 内積の台形則による離散化は, 以下のようになる:

$$\langle\langle \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle\rangle = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \alpha_{i,j} U_{i,j} V_{i,j} \Delta x \Delta y. \quad (47)$$

ただし,

$$\alpha_{i,j} = \begin{cases} 1/4, & \text{if } (i,j) = (0,0), (N_x,0), (0,N_y), (N_x,N_y) \\ 1, & \text{if } 1 \leq i \leq N_x - 1, 1 \leq j \leq N_y - 1, \\ 1/2, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

1次元の時と同様に, $A^{(2)} = -D_2^{(2)}$ とおくと, $A^{(2)}$ は (47) の内積に関して対称である. $A_0^{(2)}$ は, $A^{(2)}$ の $\{\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N_x+1} \times \mathbb{R}^{N_y+1}; \langle\langle \mathbf{U}, \mathbf{1} \rangle\rangle = 0\}$ の制限とする. また, 離散エネルギーの定義を1次元の場合と同様に,

$$J_d(\mathbf{U}) = \langle\langle G_d(\mathbf{U}), \mathbf{1} \rangle\rangle$$

とする. このとき得られるスキームは,

$$\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} = -A^{(2)} \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, \quad m = 0, 1, \dots$$

となる.

注意 37. 質量保存性やエネルギー散逸性についても同様に示す事ができる. ただし安定性等については, 1次元の場合の証明は適用できない. なぜならば, ソボレフの埋め込み定理 ([15])

$$H^1 \subset L^\infty$$

の成立が空間1次元のみだからである.

3.3.6 数値計算例

上で提案したスキームを適用して計算した結果が Figure 6 ~ 8 である. Figure 6 は, $\sigma = 0$ つまり Cahn-Hilliard 方程式の場合と Cahn-Hilliard-Oono 方程式を比較した図である. パラメーターは, $\Omega = (0, 1), \varepsilon = 10^{-2/3} \approx 0.036, \Delta x = 0.005, \Delta t = 10^{-8}$ とした. この図より, Cahn-Hilliard-Oono 方程式は, Cahn-Hilliard 方程式の場合と比べて解の形状がより振動していることがわかる. また Figure 7 は, 陽解法と離散変分法で解いた時の解の様子である. パラメーターは, $\Omega = (0, 1), \sigma = 5, \varepsilon = 10^{-2/3} \approx 0.036, \Delta x = 0.01, \Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ 実際に陽解法では, 解の形状が崩れてしまい, 計算がうまくいってないことがわかる. また Figure 8 は, 陽解法とのエネルギー比較, 質量比較および離散変分法の質量のグラフを拡大したものである. これから陽解法は, 確かにエネルギーは減っているが, 質量は保存していないことがわかる. また, 離散変分法の質量保存性が, 非常に厳密に成り立っていることがわかる. 1次元な場合と同様に, 解構造として微細なパターンをもつことが読み取れる. Figure 9 は, 2次元スキームの解である.

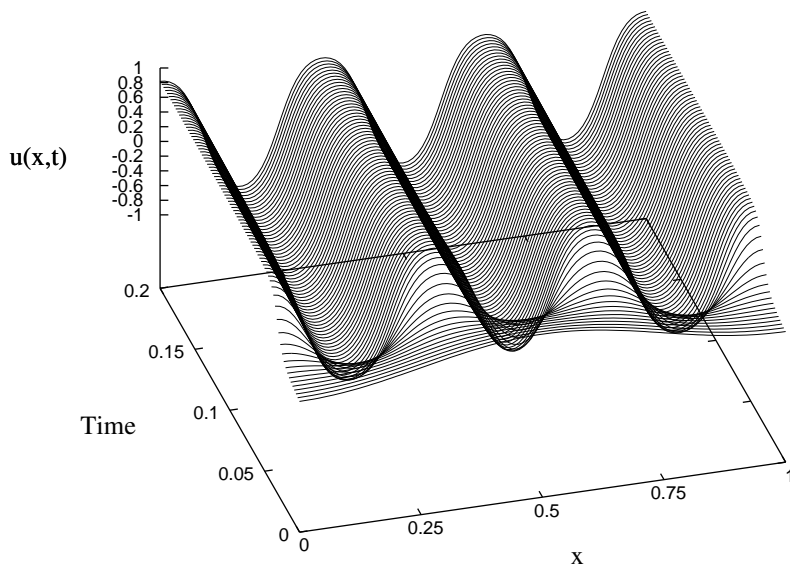
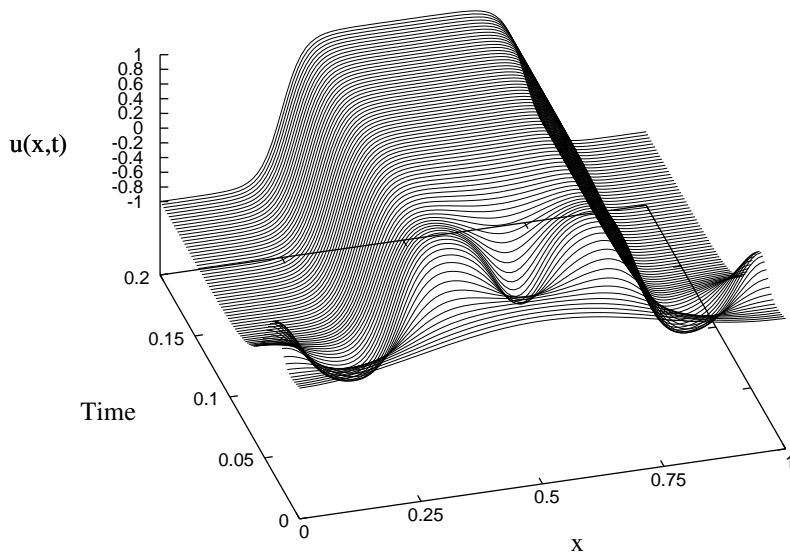


Figure6 上が Cahn-Hilliard 方程式の解 : $\sigma = 0$, 下が Cahn-Hilliard-Oono 方程式の解 $\sigma = 50$.

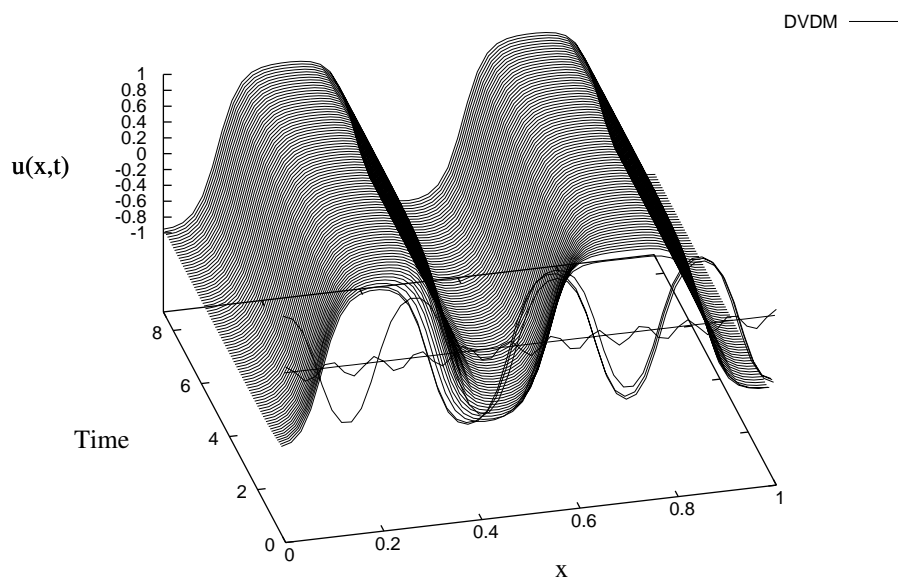
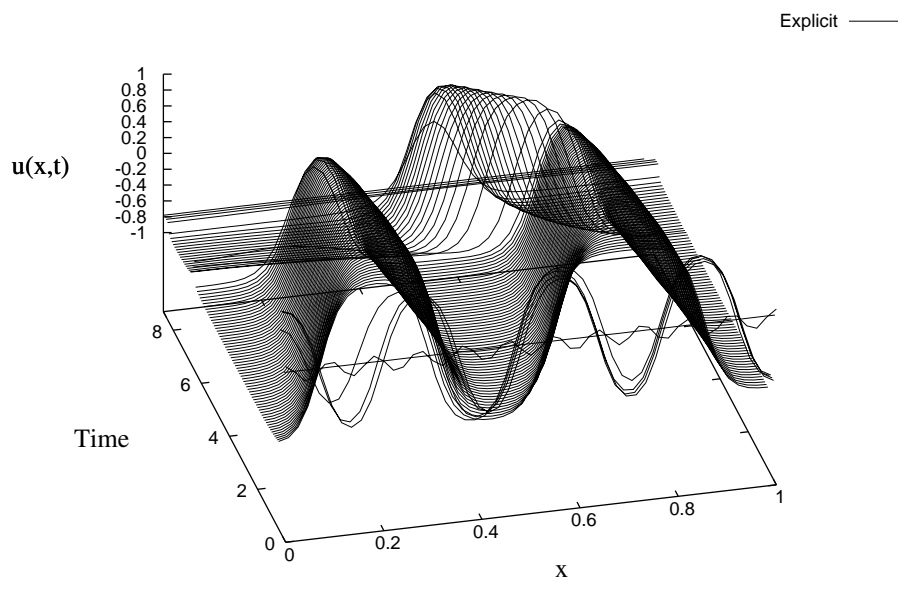


Figure7 上が陽解法での解:下が離散変分法での解.

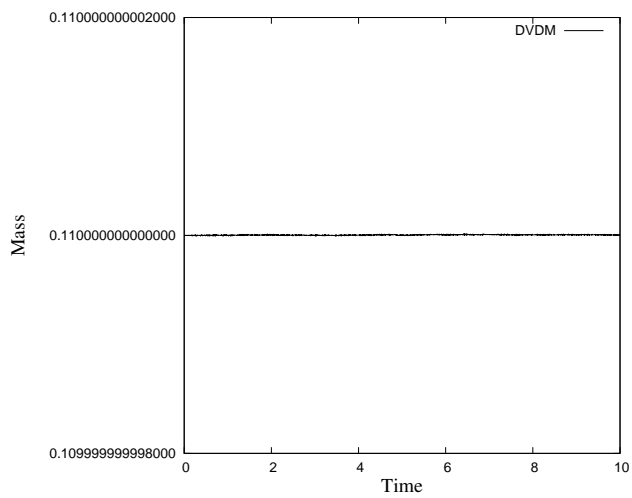
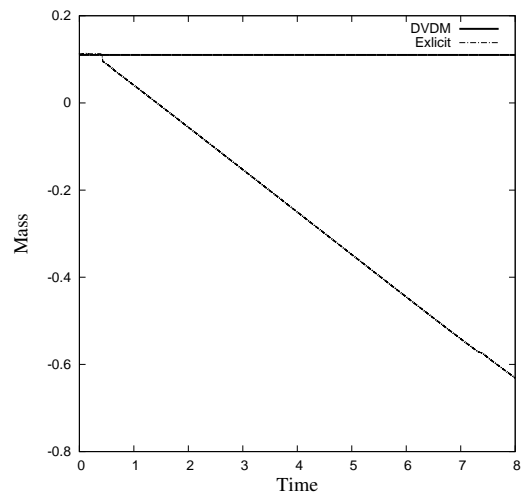
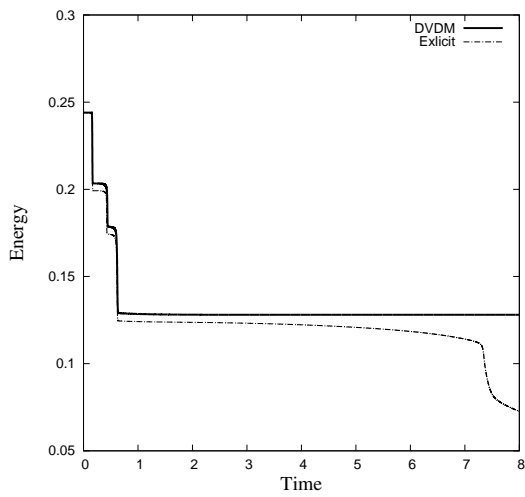
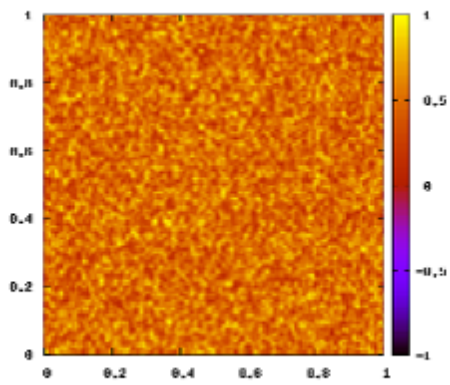
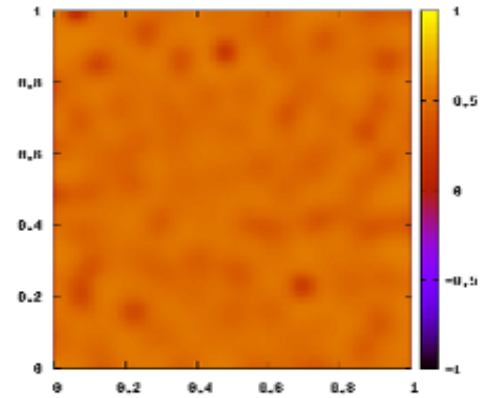


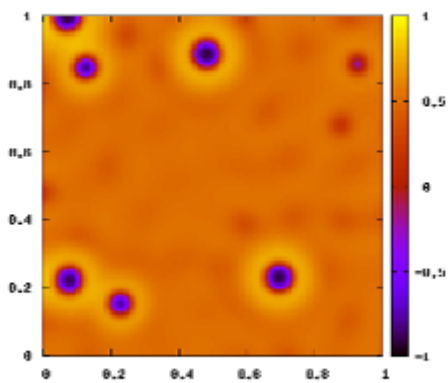
Figure8 上が離散変分法と陽解法のエネルギー比較図, 真ん中が質量比較図, 下は離散変分法の場合の質量保存の詳細.



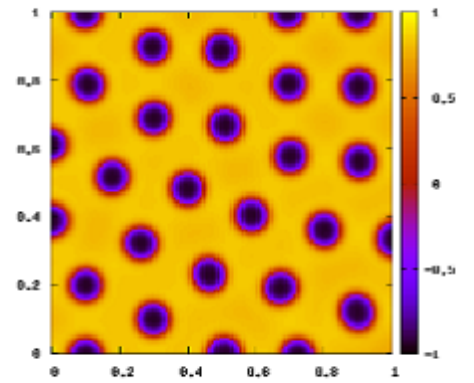
$t=0$



$t=0.00002$



$t=0.0004$



$t=2.8$

Figure9 2次元スキームの解.

3.4 KdV 方程式

3.4.1 構造保存型差分スキームの導出

今までは、エネルギー散逸性を持つ方程式でノイマン境界条件の場合に限っていたが、再定式化した離散変分法が他の例でも有効な事をみるために、保存系の方程式である KdV 方程式を周期境界条件の場合に取り扱う。

例 38. *KdV* 方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right), \\ u(x+nL) &= u(x) \quad (n \in \mathbb{Z}), \\ u(x, 0) &= f(x). \end{aligned} \tag{48}$$

上記の方程式は、運河など広くて浅い川の水面において観察され、形を変えることなく進行していく波の波形が満たす非線形偏微分方程式であり、非線形格子の振舞いも近似しているといわれている ([13,14]). 境界条件は、本来は、空間領域 $\Omega = (-\infty, \infty)$ とし、その境界条件を

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial^{(n)} u}{\partial x^{(n)}} = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

とするが、数値計算上は L を大きくとり、(48) を課す事で十分である ([2,13,14]). 全エネルギーは

$$\begin{aligned} J(u) &= \int_0^L G(u, u_x) dx, \\ G(u, u_x) &= \frac{u^3}{6} - \frac{(u_x)^2}{2} \end{aligned}$$

となる。対応する離散全エネルギーは、

$$\begin{aligned} J_d(\mathbf{U}) &= \langle G_d(\mathbf{U}), \mathbf{1} \rangle \\ G_d(\mathbf{U}) &= \frac{\mathbf{U}^3}{6} - \frac{(A_{per}^{1/2} \mathbf{U})^2}{2} \end{aligned}$$

で定義する。ただし内積は、

定義 39. 任意の $N+1$ 次元ベクトル $\mathbf{U} = (U_0, \dots, U_N)^T, \mathbf{V} = (V_0, \dots, V_N)^T \in \mathbb{R}^{N+1}$ に対して、以下の内積を定義する

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle &= \sum_{k=0}^N U_k V_k \Delta x \\ &= \sum_{k=1}^N U_k \cdot V_k \Delta x \end{aligned}$$

ただし、 Δx は正の定数である。

とおいた. 離散変分導関数は,

$$\begin{aligned}
J_d(\mathbf{U}) - J_d(\mathbf{V}) &= \left\langle \frac{1}{6}(\mathbf{U}^3 - \mathbf{V}^3), \mathbf{1} \right\rangle - \left(\left\langle \frac{(A_{per}^{1/2}\mathbf{U})^2}{2}, \mathbf{1} \right\rangle - \left\langle \frac{(A_{per}^{1/2}\mathbf{V})^2}{2}, \mathbf{1} \right\rangle \right) \\
&= \frac{1}{6} \langle \mathbf{U}^2 + \mathbf{UV} + \mathbf{V}^2, \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle - \frac{1}{2} \left(\langle (A_{per}\mathbf{U})^2, \mathbf{1} \rangle - \langle (A_{per}\mathbf{V})^2, \mathbf{1} \rangle \right) \\
&= \frac{1}{6} \langle \mathbf{U}^2 + \mathbf{UV} + \mathbf{V}^2, \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle - \frac{1}{2} \langle A_{per}(\mathbf{U} + \mathbf{V}), \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle
\end{aligned}$$

より,

$$\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})} = \frac{\mathbf{U}^2 + \mathbf{UV} + \mathbf{V}^2}{6} - \frac{A_{per}(\mathbf{U} + \mathbf{V})}{2}$$

が成立する. このとき, 計算スキームは,

$$\begin{aligned}
\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} &= D^{(1)} \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} \\
\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} &= \frac{(\mathbf{U}^{(m+1)})^2 + \mathbf{U}^{(m+1)}\mathbf{U}^{(m)} + \mathbf{U}^{(m)2}}{6} - \frac{A_{per}(\mathbf{U}^{(m)} + \mathbf{U}^{(m+1)})}{2}
\end{aligned}$$

で与えられる.

3.4.2 構造保存性の証明

このスキームは, もとの KdV 方程式の持つ構造, すなわち質量保存性, エネルギー保存性を有している. 以下これを示す.

定理 40. 任意の $m \geq 0$ に対して,

$$\begin{aligned}
M_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) &= M_d(\mathbf{U}^{(m)}), \\
J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) &= J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}).
\end{aligned}$$

Proof. 質量保存については,

$$\begin{aligned}
\frac{M_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - M_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \left\langle \frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t}, \mathbf{1} \right\rangle \\
&= \left\langle D_{per}^{(1)} \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, \mathbf{1} \right\rangle \\
&= - \left\langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, D_{per}^{(1)} \mathbf{1} \right\rangle.
\end{aligned}$$

において, $D_{per}^{(1)} \mathbf{1} = 0$ より確かに成立する. エネルギー保存については,

$$\begin{aligned}
\frac{J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - J_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \left\langle \frac{G_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - G_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t}, \mathbf{1} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, \frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\Delta t} \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}, D_{per}^{(1)} \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})} \right\rangle
\end{aligned}$$

において, $D_{per}^{(1)}$ が歪対称行列なので最後の式は 0 になることで示される. \square

注意 41. 一般に KdV 方程式は, 無限個の保存量をもつ. しかし上記のスキームでは, そのうち2つの保存量が保存されていることを示したが, 残りの保存量については保存されていることを証明できていない. 例えば

$$\frac{1}{2} \int u^2(x, t) dx$$

が保存されていることは証明されていない.

4 まとめと今後

本研究では、離散変分法に対し、 L^2 内積の離散化と、離散エネルギーの定義にラプラス作用素の離散化行列の分数べきを用いることによる再定式化を提案した。この方法により連続問題と離散問題との数学的対応が明確となり、また従来の方法よりも部分和分などの離散特有の方法を用いた従来の方法よりも離散変分導関数等の計算に必要な計算量を減らすことができた。今まで離散変分法が適用されていなかった問題に対して適用した。今回は、熱方程式、FitzHugh-Nagumo 方程式、Cahn-Hilliard-Oono 方程式、KdV 方程式への適用例を紹介したが、他の方程式にも同様に適用でき、境界条件も上にあげた例以外の場合にも適用が可能である。しかし、離散変分法には、まだ多次元の場合に数値計算量が多いという課題が残っている。今回、数値計算は、Newton-Raphson 法を用いるよりも FitzHugh-Nagumo 方程式、Cahn-Hilliard-Oono 方程式の可解性の証明の置き換え、

$$\mathbf{V}^* = \frac{\mathbf{U}^{(m)} + \mathbf{U}^{(m+1)}}{2}$$

を用いて、縮小写像法で、数値計算を実装した。そしてこの場合の方が、試した限り数値計算量は少なかった。しかし2次元のケースだと、結局行列のサイズが、空間方向の分割数 N に対して、 N^2 となってしまう。3次元では、 N^3 が行列のサイズである。したがって、計算量が、次元が高くなるにつれて、冪乗で増える。この点が今後の解決を図るべき課題として残っている。

5 謝辞

本論文をまとめるにあたり、終始暖かい激励と懇切丁寧なご指導、ご鞭撻を頂いた金沢大学理工研究域数物科学系中村健一准教授に心より感謝申し上げます。また中村准教授には、筆者の金沢大学自然科学研究科在学中より、研究を進めるための環境を整備いただき、心より感謝申し上げます、学位論文審査において、貴重なご指導とご助言を頂いた金沢大学理工学域数物科学類伊藤秀一教授、大塚 浩史教授、木村 正人教授、カレル・シュワドレンカ准教授に心より感謝申し上げます。また本研究を進めるにあたっては、他にも多くの方々と有益なご指導をいただきました。特に、この研究の分野の面白さを伝えてくださった故宮川 鉄朗教授、中村健一准教授、一橋大学商学研究科小林健太准教授に感謝を捧げます。

参考文献

- [1] J. M. Sanz-Serna, M. P. Calvo, Numerical Hamiltonian problems. In Robert A.deGroot and Jaroslav. Nadrchal, editors Physics Computing, 1992, World Scientific
- [2] Furihata D, Matsuo T, Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for partial Differential Equations, Chapman and Hall, (2010).
- [3] Furihata, D., Mori, M. General Derivation of Finite Difference Schemes by Means of a Discrete Variation (in Japanese). Trans. Japan Soc. Indust. Appl. Math. 8(1998), 317—340
- [4] Ohnishi, Y, Nishiura, Y, On Global Minimizers for a Variational Problem with non-local effect related to micro-phase separation, RIMS, 973 (1996), 171-176.
- [5] Elliott, C.M., Sonqmu, Z. On the Cahn-Hilliard Equation. Arch. Rat. Mech. Anal. 96, (1986) 339—357
- [6] Nishiura Y, Sakamoto K, Far-From-Equilibrium Dynamics (Translations of Mathematical Monographs) , Amer Mathematical Society ,(2002)
- [7] Q. Du and R. A. Nicolaides Numerical Analysis of a Continuum Model of Phase Transition . SIAM J. Numer. Anal. Vol 28, No 5, (1991), pp 1310-1322
- [8] Ohnishi, I, Imai M, and Yasumasa Nishiura. "On the most stable steady states of Activator-Inhibitor system in view of minimizing an free energy (Qualitative theory of functional equations and its application to mathematical science)." 数理解析研究所講究録 1216 (2001), 45-50.
- [9] D.N. Arnold, R.S. Falk, R. Winther, Finite element exterior calculus, homological techniques, and applications, Acta Numer. 15 (2006) 1—155.
- [10] Ohta T, Kawasaki K, Equilibrium morphology of block copolymer melts, Macromolecules, (1986), 2621–2632.
- [11] FitzHugh, R., 1960, Thresholds and plateaus in the Hodgkin-Huxley nerve equations, J. Gen. Physiol., 43, 867.
- [12] Nagumo, J. S., S. Arimoto, and S. Yoshizawa, 1962, An active pulse transmission line simulating nerve axon, Proc. IRE 50, 2061.
- [13] 戸田盛和, 非線形波動とソリトン, 日本評論社 (2000).
- [14] 大宮眞弓, 非線形波動の古典解析 - ソリトン, それに続く非線形の世界, 森北出版 (2008).
- [15] A.N. Kolmogorov, S.V. Fomin. Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis , Dover Books on Mathematics (1999).
- [16] 太田隆夫, 界面ダイナミクスの数理, 日本評論社 (1997).
- [17] Cahn, John W., and John E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. The Journal of Chemical Physics 28 (1958).
- [18] Keener, James P. Principles of applied mathematics: transformation and approximation. Addison Wesley, Advanced Book Program, (1988).
- [19] Choksi, R. Scaling laws in microphase separation of diblock copolymers. Journal of Nonlinear Science 11.3 (2001): 223-236.
- [20] Matsuoka, H, Nakamura, Ken-Ichi Nakamura, A stable finite difference method for a Cahn-

Hilliard type equation with long-range interaction, The Science Reports of Kanazawa University 57,(2014) 15-37

[21] 降旗大介. 偏微分方程式に対する差分スキームの離散の変分による統一的導出の研究. Diss. 1997.