

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

陣 簾 大 介

学位論文

---

偏微分方程式に対する差分スキームの  
離散的変分による統一的導出の研究

---

降旗 大介

東京大学大学院工学系研究科

1997

# 目次

1 はじめに	1
2 物理系の局所エネルギーと方程式の関係	3
2.1 散逸型方程式	3
2.2 散逸型方程式のもつ性質	4
2.3 保存型方程式	5
2.4 保存型方程式のもつ性質	6
3 離散変分の定義と差分スキームの導出	8
3.1 差分・和分の定義	8
3.2 離散変分による差分スキームの導出	14
3.2.1 離散変分導関数	14
3.2.2 差分スキームの導出	16
3.3 差分スキームが保存する性質	22
3.3.1 散逸型方程式の差分スキームが保存する性質	22
3.3.2 保存型方程式の差分スキームが保存する性質	24
4 Cahn-Hilliard 方程式への応用	25
4.1 Cahn-Hilliard 方程式	25
4.2 差分スキーム	28
4.3 差分スキームの性質	28
4.3.1 導出方法により保証される性質	28
4.3.2 安定性	28
4.3.3 差分スキームの解の存在と一意性	30
4.3.4 収束性	38
4.4 数値計算例	44
4.4.1 差分スキームを解くための反復アルゴリズム	47
4.4.2 2次元問題への応用	48
5 他の方程式への応用例	53
5.1 熱方程式 (散逸型)	53
5.1.1 差分スキーム	53
5.2 波動方程式 (保存型)	55
5.2.1 差分スキーム	55
5.3 KdV 方程式 (保存型)	56



5.3.1 差分スキーム .....	57
6 まとめ .....	60
Acknowledgement .....	62
Bibliography .....	63
Appendices .....	65
A 離散ソボレフの補題の証明 .....	65
B 行列 $Z$ の直交性 .....	67
C 和分の積分による評価 .....	68

## Chapter 1

### はじめに

物理現象を記述する偏微分方程式の多くは、系の局所自由エネルギーの変分導関数から導くことができる。したがって、数値計算においても、系の局所自由エネルギーを最初に適切に離散化し、さらに離散的変分導関数を計算できれば、物理現象を記述する元の偏微分方程式に対する整合性のある数値計算スキームが導出できると期待できる。この数値計算スキームの導出方法は偏微分方程式の代表的数値解法である有限要素法と差分法のどちらにも適用できる。本研究の目的は、基本的にこの考え方に従って、偏微分方程式に対して有効な差分スキームを導出する一般的な方法を提案することにある。

われわれがこのような導出方法を研究する発端は Cahn-Hilliard 方程式という方程式にある。4 章に詳しく述べているが、Cahn-Hilliard 方程式とは非線形性の強い偏微分方程式であり、現時点では厳密解は見出されていない。しかし、微小誤差に対する感受性が高いことと、強い非線形性のために線形安定性解析が行えないことから数値計算による近似解を求めることも容易ではない。この困難に対し、これまで様々な試みが行われてきた(4 章を参照されたい)。かつてわれわれとしては、この困難に対し、差分スキームに対する新しい安定性の概念を提案し、それに基づいて数値計算を行った [1]。この研究 [1] は安定した数値計算を行うという意味において成功したが、同時に通常の差分スキームを用いる限界を示していた。なぜならばこの研究 [1] によれば通常の差分スキームで Cahn-Hilliard 方程式の近似解を得るにはかなりの計算量が必要となるからである。そこでわれわれは、偏微分方程式ごとに対応する局所自由エネルギーから出発する新しい方法を採用し、それによって個別の差分スキームを導出することで上に述べた限界を越えようと考えたのである。

さて、局所自由エネルギーの定義から始まるスキームの導出方法は、系の全自由エネルギーが減少する、あるいは保存されるという性質を離散系で再現するものである。系の重要な性質を離散系で再現することを目的とする数値計算スキームの導出方法は数値計算の分野において古くから利用されている導出方法であり、他に良く知られた例としてシンプレクティック解法 [2, 3] などがあげられる。

実際、この導出方法と同系統の導出方法に基づいてデザインされたと考えられる多くの数値計算スキームが研究されている。たとえば、Strauss and Vazquez [4]、Hirota [5]、Greenspan [6]、Du and Nicolaides [7]、Ward [8]、Li and Vu-Quoc [9] などである。Strauss and Vazquez [4] は線形 Klein-Gordon 方程式に対してエネルギー保存則が離散化された形で保たれるスキームを用いて計算を行っている。Hirota [5] は Hamilton 形式を離散化し、Greenspan [6] は保存系の初期値問題  $\dot{x} = f(x)$ ,  $x(0) = \alpha$ ,  $\dot{x}(0) = \beta$  に対する差分スキームを研究した。Du and Nicolaides [7] はディリクレ境界条件 (本来要求される境界条件とは異なる) のもとで Cahn-Hilliard 方程式に対して全自由エネルギーが減少するという有限要素法スキームをデザインした。Ward [8] は可積分な偏微分方程式を離散化する方法について議論している。Li and Vu-Quoc [9] はこの指針を非線形 Klein-Gordon 方程式の保存量に相当する量を保存するような差分スキームを導出するのに用いている。Li and Vu-Quoc の差分スキームの導出方法は本論文のそれによく似ているが一般論ではなく、また、変分導関数を介した方程式には適用できない。

本論文でもこの導出方法に基づいて数値計算スキームをデザインする。この時、差分法を用いる。これは差分法

の方が有限要素法よりもある意味で自由度が高いため、注意深く議論を進めることにより、より多くの成果が得られると考えるからである。例えば、同一視点に立ちながらも、有限要素法を採用した Du and Nicolaides [7] は目的とする数値スキームを物理的に意味のある本来の境界条件下で得ることに成功していない。しかし差分法を採用したわれわれは目的の差分スキームを本来の境界条件下で得ており、この事実がわれわれの考えが正しいことを実証していると思われる。

さて、具体的には本論文でも対象とする物理系の局所自由エネルギーから出発する。なお本論文では、離散的分の数学的形式と手順に重点を置いているために、自由エネルギーと称しても厳密な意味で物理学でいう自由エネルギーと一致するとは限らない場合もあり得る。

まず、この自由エネルギーを適切に離散化し、次に適切な離散的分を導入する。その際、微分と積分は適切な差分と和分で近似しなければならない。適切な差分と和分とは、差分と和分が逆の演算になっていること、部分積分公式に対応する部分積分公式が自然な形で成立すること、などを意味する。こうした差分に関する研究は古くからある [10, 11]。その逆作用素まで含めてきちんと議論したものとしては Zeilberg の研究 [12] があり、数学的に厳密で強力な結果を与えている。われわれも差分や和分に関しては注意深く検討し、本研究では上述の意味でより適切であると考えられるものを定義し、採用した。

さて問題は次のステップである。すなわち、元の局所自由エネルギーに対する変分導関数の計算に相当する適切な離散的分の計算を実際に行うことである。ここでいう適切な離散的分の変分導関数の計算とは、その変分導関数によって導かれる差分スキームが考えている偏微分方程式の適切な近似になっていて、かつ元の物理系がもつ重要な物理的性質をそのまま保存するようなものであることを意味する。本論文の中心は、この新しい離散的分の変分導関数の提案およびその計算法を確立したことにある。

系の自由エネルギーを適切に離散化し、その離散化自由エネルギーから計算されるわれわれの離散的分の変分導関数から出発すると、広い範囲の散逸系の偏微分方程式および保存系の偏微分方程式に対して、それぞれ安定であると期待される差分スキームをいわば機械的に導くことができる。一般の非線形問題に対して導かれるこの差分スキームは陰的かつ非線形であるが、元の問題がもつ大域的性質を保存するために数値的安定性が十分に期待でき、結果として計算量が少なくてすむと期待できるのである。例えば、Cahn-Hilliard 方程式に対して本研究で導出した差分スキームは時間きざみ幅、空間きざみ幅に依存せず安定である。すなわち、絶対安定である。たしかに、陰的スキームであるため、時間ステップを一つ進めるための計算量は陽的差分スキームと比較して多くなる。しかし、絶対安定であるから、時間刻み幅を任意に大きくでき時間ステップ数が少なくて済むため、結果として計算量を非常に少なくできる。

また、本論文で示す概念と具体的な計算方法に従えば、本論文で対象としている偏微分方程式以外の広範囲の問題に対しても同様の結果が得られることが期待でき、実際にそのような一つの例が [13] に示されている。



## Chapter 2

# 物理系の局所エネルギーと方程式の関係

最初に述べたように、本研究の主たる目的は自由エネルギーの変分から導かれる偏微分方程式に対して機械的に適切な差分スキームを導出する方法を提案することにある。そのために、本来の自由エネルギーの変分と並行して、離散的自由エネルギーの離散変分を定義する必要がある。

そこで、最初に本来の自由エネルギーの変分から偏微分方程式を導出する過程について述べる。また、その偏微分方程式がもつ性質についても述べることにする。具体的には、自由エネルギーの変分から導かれる偏微分方程式として二つのタイプの方程式を考える。その二つのタイプを、各々「散逸型」「保存型」の方程式と呼ぶことにする。

なお、「自由エネルギーの変分より導かれる方程式に対して、離散変分を通じて差分スキームを導出する」という本論文の主張に対しては、この二つのタイプの方程式だけでなく、より広い範囲の方程式が適用できると考えられ、実際 [13] にその例が示されているが、一層の発展はこれからの研究課題である。

### 2.1 散逸型方程式

まず、自由エネルギーの変分から導出される典型的な方程式として、次の散逸型方程式を考える。なお、散逸方程式と呼んではいるが、自由エネルギーの定義が数学的な形式にもとづくものであり物理的なエネルギーを意味するとは限らないため、物理的な散逸現象を表す方程式ではないこともあり得る。

まず、簡単のために空間を 1 次元とする。 $u(x, t)$  を空間変数  $x \in [0, L]$  と時間変数  $t \in [0, T]$  の実数値関数として、この  $u(x, t)$  がみたす次の形の方程式を考える。

[ 散逸型方程式 ]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \frac{\delta G}{\delta u} \quad (2.1)$$

ただし、 $G(u, u_x)$  は局所自由エネルギーと呼ばれる量であり、微分可能な関数  $f_1, g_1$  によって  $G(u, u_x) = \sum_{l=1}^m f_l(u) g_l(u_x)$ 、 $u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$  と表されるような関数である。また、 $\frac{\delta G}{\delta u}$  は  $G$  の変分導関数である。  
ただし、境界条件として

$$\left[ \frac{\partial G}{\partial u_x} \delta u \right]_{x=0}^L = 0 \quad (2.2)$$

$$\left[ \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\delta G}{\delta u} \right) \right]_{x=0}^L = 0 \quad (2.3)$$

が成り立っているものとする。 $\delta u(x)$  は関数  $u(x)$  の仮想微小変化である。

**Remark:** 次節で詳しく述べるが、本論文における散逸型方程式とは、系の時間変化が (2.1) で記述され、かつ、全自由エネルギー  $\int_0^L G(u, u_x) dx$  が時間経過とともに増大しない系、すなわち

$$\frac{d}{dt} \int_0^L G(u, u_x) dx \leq 0 \quad (2.4)$$

を満たす系のことであると解釈することもできる。□

**Remark:** 局所自由エネルギー  $G$  の変分導関数  $\frac{\delta G}{\delta u}$  とは、

$$J[u] \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^L G(u, u_x) dx \quad (2.5)$$

で定義される汎関数  $J[u]$  (全自由エネルギー) に対し、

$$J[u + \delta u] - J[u] = \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u} \delta u dx + O(\delta u^2) \quad (2.6)$$

をみたす量である。この式のわかりやすい応用例として、全自由エネルギー  $J$  の時間微分  $\frac{d}{dt} J$  は次のように表される。

$$\frac{d}{dt} J[u] = \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial u}{\partial t} dx \quad (2.7)$$

この式は本研究でしばしば用いられる。変分導関数のより正確な定義は 3.2 章で与えられる。□

**Remark:** 上の境界条件 (2.2) は  $\frac{\delta G}{\delta u}$  が明示的に定義できるための必要十分条件である。また、この時

$$\frac{\delta G}{\delta u} = \frac{\partial G}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial u_x} \quad (2.8)$$

が成り立つ。□

## 2.2 散逸型方程式のもつ性質

散逸型方程式には、次に述べるような重要な性質がある。

### エネルギーの減少

散逸型方程式の場合、全自由エネルギーが時間経過とともに減少する (正確には、増大しない)。

具体的には、

$$\frac{d}{dt} \int_0^L G(u, u_x) dx \leq 0 \quad (2.9)$$

が成り立つ。

先にも述べたが、この性質は、「散逸型方程式」の定義そのものである。系の全自由エネルギーが散逸するという意味で物理的な「散逸系」のイメージと合致する。



証明は以下の通りである。

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_0^L G(u, u_x) dx &= \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial u}{\partial t} dx \\
 &= \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \frac{\delta G}{\delta u} dx \\
 &= \left[ \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\delta G}{\delta u} \right) \right]_{x=0}^L - \int_0^L \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 dx \\
 &= - \int_0^L \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 dx \\
 &\leq 0
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

最初の変形で境界条件 (2.2) を利用し, 途中の境界項を消去するところで境界条件 (2.3) を利用している。

### 質量の保存

散逸型方程式にはさらに次の性質がある。

境界条件として,

$$\left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\delta G}{\delta u} \right) \right]_{x=0}^L = 0 \tag{2.11}$$

が成り立っているならば, 質量保存則に相当する保存則が成り立つ。すなわち,

$$\frac{d}{dt} \int_0^L u(x, t) dx = 0 \tag{2.12}$$

が成り立つ。

証明は以下の通りである。

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_0^L u(x, t) dx &= \int_0^L \frac{\partial u}{\partial t} dx \\
 &= \int_0^L \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \frac{\delta G}{\delta u} dx \\
 &= \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\delta G}{\delta u} \right) \right]_{x=0}^L \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

## 2.3 保存型方程式

次に, 自由エネルギーの変分から導出されるもう一つの典型的な方程式として, 保存型方程式を考える。これは数学的な形式にもとづいて定義された全自由エネルギーが保存される方程式を意味するものである。

空間変数  $x \in [0, L]$  と時間変数  $t \in [0, T]$  の実数値関数として  $u(x, t)$  を考え, これを対象として方程式を考える。

[ 保存型方程式 ]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\delta G}{\delta u} \quad (2.14)$$

ただし、 $G(u, u_x)$  は 局所自由エネルギーと呼ばれる量であり、微分可能な関数  $f_i, g_i$  によって  $G(u, u_x) = \sum_{i=1}^m f_i(u)g_i(u_x)$ ,  $u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$  と表されるような関数である。また、 $\frac{\delta G}{\delta u}$  は  $G$  の変分導関数である。  
ただし、境界条件として

$$\left[ \frac{\partial G}{\partial u_x} \frac{\delta u}{\delta u} \right]_{x=0}^L = 0 \quad (2.15)$$

$$\left[ \left( \frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 \right]_{x=0}^L = 0 \quad (2.16)$$

が成り立っているものとする。 $\delta u(x)$  は関数  $u(x)$  の仮想微小変化である。

**Remark :** 次節で詳しく述べるが、本論文における散逸型方程式とは、系の時間変化が (2.14) で記述され、かつ、全自由エネルギー  $\int_0^L G(u, u_x) dx$  が時間経過とともに変化しない系、すなわち

$$\frac{d}{dt} \int_0^L G(u, u_x) dx = 0 \quad (2.17)$$

を満たす系のことであると解釈することができる。

□

## 2.4 保存型方程式のもつ性質

保存型方程式にも以下に述べるような重要な性質がある。

### エネルギーの保存

保存型方程式の場合、全自由エネルギーが時間経過とともに変化しない、つまり、全自由エネルギーは保存量である。

具体的には、次の式が成り立つ。

$$\frac{d}{dt} \int_0^L G(u, u_x) dx = 0 \quad (2.18)$$

先にも述べたが、この性質は、「保存型方程式」の定義そのものである。系の全自由エネルギーが保存されるという意味で、物理的な「波動系」のイメージと合致する。

証明は以下の通りである。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^L G(u, u_x) dx &= \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial u}{\partial t} dx \\ &= \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\delta G}{\delta u} \right) dx \\ &= \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 \right]_{x=0}^L \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

最初の変形で境界条件 (2.15) を利用し、最後の境界項を消去するところで境界条件 (2.16) を利用している。

## 質量の保存

保存型方程式にもさらに次の性質がある。

境界条件として、

$$\left[ \frac{\delta G}{\delta u} \right]_{x=0}^L = 0 \quad (2.20)$$

が成り立っているならば、質量保存則に相当する保存則が成り立つ。すなわち、

$$\frac{d}{dt} \int_0^L u(x, t) dx = 0 \quad (2.21)$$

が成り立つ。

証明は以下の通りである。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^L u(x, t) dx &= \int_0^L \frac{\partial u}{\partial t} dx \\ &= \int_0^L \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\delta G}{\delta u} \right) dx \\ &= \left[ \frac{\delta G}{\delta u} \right]_{x=0}^L \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.22)$$



## Chapter 3

# 離散的変分の定義と差分スキームの導出

前章でも述べたように、本論文の目的はある一定の形式をもつ偏微分方程式に対して機械的に有効な差分スキームを導出する方法について述べることにある。

本章では、まず、離散化で必要となる差分と和分を定義する。これらは、すでに述べたように、差分と和分が正しく逆の演算になっていること、部分和分公式が自然な形で成り立つことなど、整合性のあるものでなければならない。

次に、この差分スキームの具体的な導出方法について述べる。この導出方法を厳密かつ具体的に示したことが本論文の新しい点であると考えている。最後に、この方法によって導出された差分スキームが必ず保持する性質について述べる。特に本章の最後に述べる差分スキームが保持する性質は、差分スキームの安定性や近似解の収束に大きな役割を果たすものである。

### 3.1 差分・和分の定義

まず、微積分をどのような立場で離散化するのかを述べ、それからそれらの離散的な作用素間に成り立つ公式について述べる。

本論文では、特に断りのない場合は空間は 1 次元として扱う。空間に正方格子状にメッシュをきるのであれば、本論文の提案する方法を 2 次元、3 次元の空間の問題に適用することは容易である。しかし、説明を簡単にするために問題の空間を有限な 1 次元区間  $\Omega \stackrel{\text{def}}{=} [0, L]$  に限定する。なお、空間が 2 次元の問題に対して本論文の方法を適用した結果例を 4.4.2 章に示す。

刻み幅は、空間、時間ともに一定にし、各々  $\Delta x, \Delta t$  と表すものとする。また、問題領域の幅  $L$  は空間刻み幅  $\Delta x$  で  $N$  等分されているものとする：

$$N = \frac{L}{\Delta x}. \quad (3.1)$$

シフト作用素

以降の記号の定義を簡単にするため、まず関数  $f(x)$  に関するシフト作用素  $s^\pm$  を以下のように定義する。

$$s^+ f(x) \stackrel{\text{def}}{=} f(x + \Delta x) \quad (3.2)$$

$$s^- f(x) \stackrel{\text{def}}{=} f(x - \Delta x) \quad (3.3)$$

$$s^{(1)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{s^+ + s^-}{2} \quad (3.4)$$

**Remark :** 以降、シフト作用素の定義を拡張してベクトル  $\{f_k\}_{k=0}^N \in \mathbf{R}^{N+1}$  に対してシフト作用素を作用させることがある。このときは

$$s^+ f_k \stackrel{\text{def}}{=} f_{k+1} \quad (3.5)$$

$$s^- f_k \stackrel{\text{def}}{=} f_{k-1} \quad (3.6)$$

$$\delta^{(1)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{s^+ + s^-}{2} \quad (3.7)$$

を意味するものとする。これは本研究では関数  $f(x)$  の  $x = k\Delta x$  での値  $f(k\Delta x)$  をベクトルの成分  $f_k$  として表記することが多いためである。  $\square$

**Remark:** 厳密には上の定義では  $f_{-1}, f_{N+1}$  は未定義であるから、シフト作用素を  $f_0, f_N$  に対して作用させた時の結果は未定義である。こうした場合には、仮に  $f_{-1}, f_{N+1}$  を考え、その値を境界条件から定めることにすれば良い。実際、以降の詳しい議論では境界条件により  $f_{-1}, f_{N+1}$  の値が与えられている。  $\square$

### 前進・後退差分作用素

次に差分作用素を定義するが、最初に前進差分作用素  $\delta^+$  と後退差分作用素  $\delta^-$  を次のように定義する。

$$\delta^+ f(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Delta x} (f(x + \Delta x) - f(x)) \quad (3.8)$$

$$\delta^- f(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Delta x} (f(x) - f(x - \Delta x)) \quad (3.9)$$

**Remark:** シフト作用素の時と同様に、ベクトル  $\{f_k\}_{k=0}^N \in \mathbf{R}^{N+1}$  に対して作用させるときの定義は、

$$\delta^+ f_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Delta x} (f_{k+1} - f_k) \quad (3.10)$$

$$\delta^- f_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Delta x} (f_k - f_{k-1}) \quad (3.11)$$

である。  $\square$

### 1 階差分作用素

本論文では、1 階微分作用素の離散近似である 1 階差分作用素として、次の作用素を用いる。

$$\delta^{(1)} f(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (3.12)$$

この作用素はシフト作用素や前進・後退差分作用素を用いると次のように表すことができる。

$$\delta^{(1)} = \frac{s^+ - s^-}{2\Delta x} = \frac{\delta^+ + \delta^-}{2} \quad (3.13)$$

この形の作用素を用いる理由については 項目:差分作用素の性質 に示す。

**Remark:** シフト作用素の時と同様に、ベクトル  $\{f_k\}_{k=0}^N \in \mathbf{R}^{N+1}$  に対して作用させるときの定義は、

$$\delta^{(1)} f_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f_{k+1} - f_{k-1}}{2\Delta x} \quad (3.14)$$

である。  $\square$

## 2 階差分作用素

本論文では、2 階微分作用素の離散近似として用いる 2 階差分作用素として、次の作用素を用いる。

$$\delta^{(2)}f(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2} \quad (3.15)$$

この作用素はシフト作用素や前進・後退差分作用素を用いると次のように表すことができる。

$$\delta^{(2)} = \frac{\delta^+ - \delta^-}{\Delta x} = \frac{s^+ - 2 + s^-}{\Delta x^2} = \delta^+ \delta^- \quad (3.16)$$

**Remark** : シフト作用素の時と同様に、ベクトル  $\{f_k\}_{k=0}^N \in \mathbf{R}^{N+1}$  に対して作用させるときの定義は、

$$\delta^{(2)}f_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{\Delta x^2} \quad (3.17)$$

である。

□

## 高階差分作用素

これまで定義した 1 階差分作用素と 2 階差分作用素を用いて、さらに高階の差分作用素を以下のように定義する。

$$\delta^{(2m+1)} = \delta^{(1)}\delta^{(2m)}, \quad m \geq 1 \quad (3.18)$$

$$\delta^{(2m+2)} = \delta^{(2)}\delta^{(2m)}, \quad m \geq 1 \quad (3.19)$$

このような定義をする理由は 項目:差分作用素の性質 で示される。

このようにして構成される差分作用素を具体的に表すと次のようになる。

$$\delta^{(1)} = \frac{s^+ - s^-}{2\Delta x} \quad (3.20)$$

$$\delta^{(2)} = \frac{s^+ - 2 + s^-}{\Delta x^2} \quad (3.21)$$

$$\delta^{(3)} = \frac{(s^+)^2 - 2s^+ + 2s^- - (s^-)^2}{2\Delta x^3} \quad (3.22)$$

$$\delta^{(4)} = \frac{(s^+)^2 - 4s^+ + 6 - 4s^- + (s^-)^2}{\Delta x^4} \quad (3.23)$$

$$\delta^{(5)} = \frac{(s^+)^3 - 4(s^+)^2 + 5s^+ - 5s^- + 4(s^-)^2 - (s^-)^3}{2\Delta x^5} \quad (3.24)$$

$$\delta^{(6)} = \frac{(s^+)^3 - 6(s^+)^2 + 15s^+ - 20 + 15s^- - 6(s^-)^2 + (s^-)^3}{\Delta x^6} \quad (3.25)$$

...

**Remark** :  $s^+$  と  $s^-$  とが交換可能であるため、これまで定義した作用素はすべて互いに交換可能である。 □

**Remark** : 本論文では全ての作用素が次の規則に基づいて定義される。

ある作用素  $\phi$ , およびそれと対になる作用素  $\phi^*$  が定義されているとする。



そして,

$$o^{(1)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{o^+ + o^-}{2} \quad (3.26)$$

で 1 階の作用素が定義され,

$$o^{(2)} \stackrel{\text{def}}{=} o^+ o^- \quad (3.27)$$

で 2 階の作用素が定義される. そして, それ以上の高階の作用素は

$$o^{(2m+1)} = o^{(1)} o^{(2m)}, \quad m \geq 1 \quad (3.28)$$

$$o^{(2m+2)} = o^{(2)} o^{(2m)}, \quad m \geq 1 \quad (3.29)$$

で定義される.  $\square$

**Remark:** この差分作用素は次のような式で表すことも可能である.

$$\delta^{(m)} = e^T \begin{pmatrix} 0 & \delta^+ \\ \delta^- & 0 \end{pmatrix}^m e \quad (3.30)$$

$$e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

こうすることで差分を含めた計算を, (3.28) と (3.29) とのように階数の偶奇で分けることなく, 統一的に扱うことが可能になる.  $\square$

### 差分作用素の性質

本論文で定義した差分作用素は次の性質をすべて満たしている.

- 差分作用素は「対称」である ( $x \rightarrow -x$  と変換した時, 符号だけが変化する).
- $n$  階差分作用素は  $n+1$  個の点を参照する.
- $f^{(n)}(k\Delta x)$  と  $\delta^{(n)}f(k\Delta x)$  の差のオーダーは  $\Delta x^2$  である.

(実際にこれらの性質を満たしていることは容易に確認できる)

より正確には, これらの性質を満たすように差分作用素を定義したのである.

なお, この差分作用素はすでに古くから知られている [10].

**Remark:** これらの性質は, 近似のための参照点数をなるべく少なくした上で近似精度と対称性を確保しようとした結果として導かれるものである. もちろん, より多くの参照点を使えばより近似精度を上げることができる.  $\square$

### 和分作用素

次に, 積分作用素を離散化する. その際, 微分と積分が逆作用素の関係にあることから, 差分と和分 (以降, 積分作用素を離散化したものを和分作用素と呼ぶことにする) も逆作用素の関係を合理的に満たしていること

が望ましい。そこで、これまでに定義した差分作用素と整合性のある和分作用素を、積分の離散化に台形則を適用することで次のように定義することにする。

$$\sum_{k=0}^N {}'' f(k\Delta x)\Delta x \stackrel{\text{def}}{=} \left( \frac{1}{2}f(0) + \sum_{k=1}^{N-1} f(k\Delta x) + \frac{1}{2}f(N\Delta x) \right) \Delta x \quad (3.32)$$

**Remark :** 和の記号  $\sum_{k=0}^N {}''$  の  $''$  は最初の項と最後の項にそれぞれ  $\frac{1}{2}$  を乗ずることを意味する。また、これまで同様にベクトル  $\{f_k\}_{k=0}^N \in \mathbf{R}^{N+1}$  に対して作用させた場合は

$$\sum_{k=0}^N {}'' f_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}f_0 + \sum_{k=1}^{N-1} f_k + \frac{1}{2}f_N \quad (3.33)$$

と定義される。 □

### 平均作用素

離れた点における値を平均化する作用素をシフト作用素を用いて次のように定義する。

$$\mu^+ \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1+s^+}{2} \quad (3.34)$$

$$\mu^- \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1+s^-}{2} \quad (3.35)$$

$$\mu^{(1)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mu^+ + \mu^-}{2} = \frac{1+s^{(1)}}{2} \quad (3.36)$$

この作用素は差分作用素と和分作用素の関係式にしばしば現れる。

### 差分作用素と和分作用素の関係

これまでに定義した差分作用素と和分作用素は、微分と積分の関係

$$\int_0^L \frac{d}{dx} f(x) dx = f(x) \Big|_0^L \quad (3.37)$$

に対応して次の関係を満たす。

$$\sum_{k=0}^N {}'' \delta^+ f_k \Delta x = [\mu^+ f_k]_0^N \quad (3.38)$$

$$\sum_{k=0}^N {}'' \delta^- f_k \Delta x = [\mu^- f_k]_0^N \quad (3.39)$$

$$\sum_{k=0}^N {}'' \delta^{(1)} f_k \Delta x = [\mu^{(1)} f_k]_0^N \quad (3.40)$$

ここで、境界項に関して

$$[p_k]_0^N \stackrel{\text{def}}{=} p_N - p_0 \quad (3.41)$$

なる記号を用いた。

微分と積分のもう一つの関係

$$\frac{d}{dx} \left( \int_0^x f(t) dt \right) = f(x) \quad (3.42)$$

に対応して、定義した差分作用素と和分作用素は次の関係式を満たす。

$$\delta^+ \left( \sum_{l=0}^k {}'' f_l \Delta x \right) = \mu^+ f_k \quad (3.43)$$

$$\delta^- \left( \sum_{l=0}^k {}'' f_l \Delta x \right) = \mu^- f_k \quad (3.44)$$

$$\delta^{(1)} \left( \sum_{l=0}^k {}'' f_l \Delta x \right) = \mu^{(1)} f_k \quad (3.45)$$

### 部分積分公式

エネルギーの変分導関数を導くとき部分積分が必要になる。そこで、部分積分公式を離散化したものに対応する部分積分公式を示しておく。これらの公式は、これまでに定義した差分作用素および和分作用素から自然に導かれるものである。

まず、基本的な部分積分公式

$$\int_0^L f(x) \left( \frac{d}{dx} g(x) \right) dx + \int_0^L \left( \frac{d}{dx} f(x) \right) g(x) dx = f(x)g(x) \Big|_0^L \quad (3.46)$$

に対応して

$$\sum_{k=0}^N {}'' f_k \left( \delta^{(1)} g_k \right) \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' \left( \delta^{(1)} f_k \right) g_k \Delta x = \left[ \frac{f_k \left( \delta^{(1)} g_k \right) + \left( \delta^{(1)} f_k \right) g_k}{2} \right]_0^N \quad (3.47)$$

が成立する。この式の確認は容易であるが、次のより簡単な公式

$$\sum_{k=0}^N {}'' f_k \left( \delta^+ g_k \right) \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' \left( \delta^- f_k \right) g_k \Delta x = \left[ \frac{f_k \left( \delta^+ g_k \right) + \left( \delta^- f_k \right) g_k}{2} \right]_0^N \quad (3.48)$$

から導出することもできる。

さらに高階の微分、差分を含む場合、例えば

$$\int_0^L \left( \frac{d}{dx} f(x) \right) \left( \frac{d}{dx} g(x) \right) dx + \int_0^L \left( \frac{d^2}{dx^2} f(x) \right) g(x) dx = \left( \frac{d}{dx} f(x) \right) g(x) \Big|_0^L \quad (3.49)$$

に対応する部分積分公式を考える。このとき、期待される

$$\sum_{k=0}^N {}'' \left( \delta^{(1)} f_k \right) \left( \delta^{(1)} g_k \right) \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' \left( \delta^{(2)} f_k \right) g_k \Delta x = \text{境界項} \quad (3.50)$$

という形の部分積分公式は残念ながら成立しない。代わりに、次の公式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N {}'' \frac{(\delta^+ f_k)(\delta^+ g_k) + (\delta^- f_k)(\delta^- g_k)}{2} \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' \left( \delta^{(2)} f_k \right) g_k \Delta x \\ = \left[ \frac{(\delta^+ f_k)(\mu^+ g_k) + (\delta^- f_k)(\mu^- g_k)}{2} \right]_0^N \end{aligned} \quad (3.51)$$

ここで、 $f_k = g_k$  とおくと、

$$\sum_{k=0}^N {}'' \frac{(\delta^+ f_k)^2 + (\delta^- f_k)^2}{2} \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' \left( \delta^{(2)} f_k \right) f_k \Delta x = \left[ (\delta^{(1)} f_k)(\delta^{(1)} f_k) \right]_0^N \quad (3.52)$$

を得る。



### 3.2 離散の変分による差分スキームの導出

本論文で導出しようとしている差分スキームに対しては、次のことを要請する。すなわち、散逸型方程式を離散化した差分スキームに対しては散逸型方程式としての性質をもつこと。すなわち全自由エネルギーが時間経過とともに減少すること。保存型方程式を離散化した差分スキームに対しては、全自由エネルギーが時間経過に対して保存されるという性質をもつこと。

そこで、この節で離散の変分を用いてそのような差分スキームを導出する方法について述べる。すなわち、前章で述べた散逸型・保存型方程式の重要な性質、すなわち、全自由エネルギーが時間経過にともない減少する・保存されるという性質を、そのままそっくり離散化して再現するという考え方に従って、差分スキームを導出する。

また、導出された差分スキームが、数値計算の手法として良い性質、すなわち、安定である、近似解が真の解に収束する、などをもつことも期待できる。これは、局所自由エネルギーの関数形がしかるべき形であれば、全自由エネルギーの時間経過にともなう変化から差分スキームの安定性などが導けることによる。

そこで、まずこれらの計算を行う上で必要な単語、記号、公式等について簡単に示す。次に、それらを用いて具体的にどのような導出方法をとるのか、またなぜその計算が可能なのかなどを示す。

本論文では、変分導関数を用いて定義された微分方程式を合理的に離散化する方法を具体的に提案する。

後に詳しく述べるが、ごく簡単にいえば、局所エネルギー  $G$  を離散化した後、計算によりその離散の変分導関数を求める。そして、(2.1) もしくは (2.14) の両辺の微分作用素を差分作用素で置き替え、その式に求めた離散の変分導関数を代入する、というのが提案する手法である。

この手法において、局所自由エネルギー関数  $G$  を離散化するときには特別な問題はない。最初の大きな問題は、変分導関数をいかに離散化するかである。そして次の問題は、離散化された変分導関数を用いて具体的にどのような微分方程式を離散化するかである。

#### 3.2.1 離散の変分導関数

そこで、まず離散の変分導関数について述べる。以前にも少々述べたが、そもそも変分導関数は本研究においては全自由エネルギーの時間変化と局所自由エネルギーとを関係付ける式 (2.7) で用いられる関数であり、次のように定義される。まず、関数  $u(x)$  の汎関数

$$J[u] = \int_a^b G(x, u, u_x) dx \quad (3.53)$$

を通じた停留値問題を考える。(本研究では  $G$  は局所自由エネルギー、 $J$  は全自由エネルギーである) このとき、関数  $u(x)$  (変関数と呼ばれる) の微小変化を  $\delta u(x)$  において、境界条件によって次の式が満たされているとする。

$$\left. \frac{\partial G}{\partial u_x} \delta u \right|_a^b = 0 \quad (3.54)$$

そして、

$$J[u + \delta u] - J[u] = \delta J + O(\delta u^2) \quad (3.55)$$

という性質をもつ汎関数  $J[u]$  (全自由エネルギー) の第一変分  $\delta J$  を考える。

すると、この第一変分に対して次の式が成り立つはずである。

$$\delta J = \int_a^b \delta u \left( \frac{\partial G}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial G}{\partial u_x} \right) dx = 0 \quad (3.56)$$

このとき、この式に現れた量

$$\frac{\delta G}{\delta u} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial G}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial G}{\partial u_x} \quad (3.57)$$

を  $u$  に関する  $G$  の変分導関数と呼ぶのである。(汎関数の第一変分の定義としては、正確にはもう少し面倒な定義を行う。)

これに対し、離散の変分導関数の定義は具体的に以下になる。

まず、ある関数  $U(x)$  の  $x = k\Delta x$  における値  $U(k\Delta x)$  の近似値を  $U_k$  とする。そして、ベクトル  $\mathbf{U} = \{U_k\}_{k=0}^N \in R^{N+1}$  の各々の値に対してスカラー関数 (局所自由エネルギーを離散化したものに相当)

$$G_d(U_k, \delta^+ U_k, \delta^- U_k) = \sum_{l=1}^m f_l(U_k) g_l^+(\delta^+ U_k) g_l^-(\delta^- U_k) \quad (3.58)$$

が定義されているとする。ただし、 $f_l, g_l^+, g_l^-$  は微分可能な関数である。そして、次のような  $\mathbf{U}$  の離散汎関数  $J_d$  (全自由エネルギーを離散化したものに相当) を考える。

$$J_d[\mathbf{U}] \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^N G_d(U_k, \delta^+ U_k, \delta^- U_k) \Delta x \quad (3.59)$$

そして、(3.57) に相当する離散計算、すなわち部分和分を行ない、離散の変分導関数を定義する。すると、

$$\begin{aligned} J_d[\mathbf{U}] - J_d[\mathbf{V}] &= \sum_{k=0}^N \left\{ \sum_{l=1}^m \left( \frac{df_l}{d(U_k, V_k)} \frac{g_l^+(\delta^+ U_k) g_l^-(\delta^- U_k) + g_l^+(\delta^+ V_k) g_l^-(\delta^- V_k)}{2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \delta^+ W^-(U_k, V_k) - \delta^- W^+(U_k, V_k) \right) \right\} (U_k - V_k) \Delta x \\ &\quad + \left[ \frac{1}{2} \sum_{l=1}^m \left( W^+(U_k, V_k) s^+(U_k - V_k) + W^-(U_k, V_k) s^-(U_k - V_k) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (s^+ W^-(U_k, V_k) + s^- W^+(U_k, V_k)) (U_k - V_k) \right) \right]_0^N \quad (3.60) \end{aligned}$$

と変形できる。ただし

$$\frac{df}{d(a, b)} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{f(a) - f(b)}{a - b} & : a \neq b, \\ \frac{df}{da} & : a = b, \end{cases} \quad (3.61)$$

$$W^+(U_k, V_k) = \left( \frac{f_1(U_k) + f_1(V_k)}{2} \right) \left( \frac{g_1^-(\delta^- U_k) + g_1^-(\delta^- V_k)}{2} \right) \frac{dg_1^+}{d(\delta^+ U_k, \delta^+ V_k)}, \quad (3.62)$$

$$W^-(U_k, V_k) = \left( \frac{f_1(U_k) + f_1(V_k)}{2} \right) \left( \frac{g_1^+(\delta^+ U_k) + g_1^+(\delta^+ V_k)}{2} \right) \frac{dg_1^-}{d(\delta^- U_k, \delta^- V_k)}, \quad (3.63)$$

である。そこで、離散的な境界条件により

$$\begin{aligned} &\left[ \sum_{l=1}^m \left( W^+(U_k, V_k) s^+(U_k - V_k) + W^-(U_k, V_k) s^-(U_k - V_k) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (s^+ W^-(U_k, V_k) + s^- W^+(U_k, V_k)) (U_k - V_k) \right) \right]_0^N = 0 \quad (3.64) \end{aligned}$$

が満たされるならば

$$\frac{\delta G_d}{\delta(U_k, V_k)} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{l=1}^m \left( \frac{df_l}{d(U_k, V_k)} \frac{g_l^+(\delta^+ U_k) g_l^-(\delta^- U_k) + g_l^+(\delta^+ V_k) g_l^-(\delta^- V_k)}{2} - \delta^+ W^-(U_k, V_k) - \delta^- W^+(U_k, V_k) \right) \quad (3.65)$$

を  $(U, V)$  に関する  $G_d$  の離散変分導関数と呼ぶことにする。このとき、次の等式を満足されている。

$$J_d[U] - J_d[V] = \sum_{k=0}^N u \frac{\delta G_d}{\delta(U_k, V_k)} (U_k - V_k) \Delta x \quad (3.66)$$

**Remark:** 離散変分導関数のことをわれわれは変分差分と呼んでいる。 □

**Remark:** 簡単にいえば、変分導関数を表した式 (2.6) において  $u + \delta u \rightarrow U, u \rightarrow V$  と離散化し、他の作用素も離散化したものが離散変分導関数の定義式 (3.66) である。 □

**Remark:**  $U - V$  は本来の変分の話では  $\delta u(x)$  に相当する。これを微小量として処理しないのは、離散的な数学の中で計算を完全に閉じたものにするためである。 □

**Remark:** この定義は、第一変分だけではなく、すべての次数の変分を一挙にとり入れて離散汎関数の離散変分を

$$\delta J_d(U, V) \stackrel{\text{def}}{=} J_d[U] - J_d[V] \quad (3.67)$$

と定義し、それを通じて変分導関数を定義したものであると考えることができる。 □

**Remark:** 全ての演算が厳密に等式で行われているため、離散変分導関数の概念はすべて離散化された世界で閉じている。この事実が本論文の以降の議論に本質的に重要な役割を果たす。 □

### 3.2.2 差分スキームの導出

散逸型・保存型方程式に対して差分スキームを導出する手順を以下のように提案する。

この方法の狙いは、方程式の重要と思われる性質が離散系においても厳密に再現されることである。つまり、方程式を直接離散化するのではなく、方程式の重要な性質が離散系で再現されていることによって、方程式の他の様々な性質が適切に離散化されることを期待するのである。

具体的には、以下ようになる。なお、抽象的に手順を述べても分かりにくいため、手順の各段階において Cahn-Hilliard 方程式 (4 章に後述) に対して導出される差分スキームを例として挙げることにする。

#### 局所自由エネルギー $G(u, u_x)$ の離散化

微分方程式を定義する上で本質的な役割をもつ局所自由エネルギー関数  $G(u, u_x)$  を適切に離散化する。

ここでいう適切な離散化とは、離散変分導関数が具体的かつ厳密に計算できるような離散化であり、以下に具体的に示す。

まず、 $x = k\Delta x, t = n\Delta t$  における  $u$  に対応する離散値を  $U_k^{(n)}$  と表記することにする。また、誤解のおそれのない場合、時間ステップの表示を省略して  $U_k$  とのみ表すこともある。



さて、簡単のために局所自由エネルギー  $G(u, u_x)$  が  $u$  と  $u_x$  の多項式として次のように表されているとする。

$$G(u, u_x) = \sum_{\lambda, \mu} C_{\lambda, \mu} u^\lambda u_x^\mu \quad C_{\lambda, \mu} : \text{const.} \quad (3.68)$$

ここで、次のような離散化を行う。

$$u^m \longrightarrow U_k^m \quad (3.69)$$

$$(u_x)^m \longrightarrow \frac{(\delta^+ U_k)^m + (\delta^- U_k)^m}{2} \quad (3.70)$$

したがって、 $G(u, u_x)$  は次の形に離散化される。

$$G_d(U_k) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\lambda, \mu} C_{\lambda, \mu} U_k^\lambda \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu}{2} \right\} \quad (3.71)$$

$G_d(U_k)$  を離散化された局所自由エネルギーと呼ぶ。

**Remark:** われわれの部分積分公式が正しく成立するような  $(u_x)^m$  の離散化は他にも考えられるが、変分導関数を計算するのが容易で、かつ単純な形をしているものという基準でこの形を採用した。□

**Remark:** 本来  $G$  は微分可能な関数  $f_l, g_l$  によって  $G(u, u_x) = \sum_{l=1}^m f_l(u) g_l(u_x)$  と表されるような関数であると考えているが、 $u, u_x$  の多項式であるとしても本質的な変化はない。□

**Example:** Cahn-Hilliard 方程式の場合

局所自由エネルギー  $G(u, u_x)$  が  $u$  と  $u_x$  の多項式として (4.3), すなわち

$$G(u) = \frac{1}{2} p u^2 + \frac{1}{4} r u^4 - \frac{1}{2} q \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \quad (4.3)$$

で定義されている。そこで、(3.69) と (3.70) の規則にしたがってこれを離散化すると

$$G_d(U_k) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} p U_k^2 + \frac{1}{4} r U_k^4 - \frac{1}{2} q \left( \frac{(\delta^+ U_k)^2 + (\delta^- U_k)^2}{2} \right) \quad (3.72)$$

を得る。□

#### 局所自由エネルギーの離散変分導関数の計算

さて、局所自由エネルギーの離散形  $G_d(U_k)$  が得られたので、次にこれから離散変分導関数を求める。そのためには、離散変分導関数の定義 (3.66) に基づいて次のような計算を行えばよい。

まず、(3.59) で離散汎関数を定義し、次の式

$$J_d[U^{(n+1)}] - J_d[U^{(n)}] = \sum_{k=0}^N \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} (U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}) \Delta x \quad (3.73)$$

を満たす  $\frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})}$  を局所自由エネルギー  $G_d$  の時間ステップ  $n + \frac{1}{2}$  での離散変分導関数と定義する。時間ステップ  $n + \frac{1}{2}$  は仮想的なものである。この仮想的な時間ステップを考えることで、後の誤差解析などが分かりやすくなる。

ここで、離散の変分導関数の定義を時間ステップをまったく形で行うのは、偏微分方程式そのものに時間微分項があり、差分スキーム全体が時間ステップをまったく形になるはずだからである。また、こうすることで、時間方向に対しても対称性を保つことができる。

さて、 $\frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})}$  の定義から問題になるのは、実際に  $\frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})}$  を計算できるのかということである。結論からいえば、これは計算可能であり、答えは明示的に表せる。本論文の主張が、従来からの提案と大きく異なるのはこの部分である。つまり、本論文では提案された全ての手順が実際に計算可能であり、 $G(u, u_x)$  が (3.68) の形であるならば必ず差分スキームを導出できるのである。

さて、実際に  $\frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})}$  を計算するために、まず離散汎関数  $J_d$  の差を計算する。

$$\begin{aligned} J_d[U] - J_d[V] &= \sum_{k=0}^N \{G_d(U_k) - G_d(V_k)\} \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^N \left\{ \sum_{\lambda, \mu} C_{\lambda, \mu} U_k^\lambda \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu}{2} \right\} - \sum_{\lambda, \mu} C_{\lambda, \mu} V_k^\lambda \left\{ \frac{(\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{2} \right\} \right\} \Delta x \\ &= \sum_{\lambda, \mu} C_{\lambda, \mu} \sum_{k=0}^N \left[ U_k^\lambda \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu}{2} \right\} - V_k^\lambda \left\{ \frac{(\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{2} \right\} \right] \Delta x. \end{aligned} \quad (3.74)$$

二重和の内部の和は

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N & \left[ U_k^\lambda \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu}{2} \right\} - V_k^\lambda \left\{ \frac{(\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{2} \right\} \right] \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^N \left( \frac{U_k^\lambda - V_k^\lambda}{2} \right) \left[ \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu}{2} \right\} + \left\{ \frac{(\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{2} \right\} \right] \Delta x \\ & \quad + \sum_{k=0}^N \left( \frac{U_k^\lambda + V_k^\lambda}{2} \right) \left[ \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu}{2} \right\} - \left\{ \frac{(\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{2} \right\} \right] \Delta x \end{aligned} \quad (3.75)$$

と変形できる。(3.75) の右辺の第 1 項は、

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N & \left( \frac{U_k^\lambda - V_k^\lambda}{2} \right) \left[ \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu}{2} \right\} + \left\{ \frac{(\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{2} \right\} \right] \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^N \left( \sum_{l=0}^{\lambda-1} U_k^l V_k^{\lambda-1-l} \right) \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu + (\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{4} \right\} (U_k - V_k) \Delta x \end{aligned} \quad (3.76)$$

と容易に変形できる。離散の変分導関数を計算するために必要なのは、 $(U_k - V_k)$  という項を和分項の中で因数としてくり出すことであるから、この項に関してはこれ以上変形する必要はない。

次に、(3.75) の右辺の第 2 項からも  $(U_k - V_k)$  という項を和分項の中で因数としてくり出せることは、次のようにして示される。いま

$$R_{(\pm)k}^{(\lambda, \mu)} \triangleq \left( \frac{U_k^\lambda + V_k^\lambda}{2} \right) \left( \sum_{l=0}^{\mu-1} (\delta^\pm U_k)^l (\delta^\pm V_k)^{\mu-1-l} \right) \quad (3.77)$$

とおくと、(3.75) の右辺の第 2 項は (3.48) より次のように変形できる。

$$\sum_{k=0}^N \left( \frac{U_k^\lambda + V_k^\lambda}{2} \right) \left[ \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu}{2} \right\} - \left\{ \frac{(\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{2} \right\} \right] \Delta x$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k=0}^N u'' \left( \frac{U_k^\lambda + V_k^\lambda}{2} \right) \left[ \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu - (\delta^+ V_k)^\mu}{2} \right\} + \left\{ \frac{(\delta^- U_k)^\mu - (\delta^- V_k)^\mu}{2} \right\} \right] \Delta x \\
&= \sum_{k=0}^N u'' \left( \frac{U_k^\lambda + V_k^\lambda}{2} \right) \left[ \left( \sum_{l=0}^{\mu-1} \frac{(\delta^+ U_k)^l (\delta^+ V_k)^{\mu-1-l}}{2} \right) \delta^+ (U_k - V_k) \right] \Delta x \\
&\quad + \sum_{k=0}^N u'' \left( \frac{U_k^\lambda + V_k^\lambda}{2} \right) \left[ \left( \sum_{l=0}^{\mu-1} \frac{(\delta^- U_k)^l (\delta^- V_k)^{\mu-1-l}}{2} \right) \delta^- (U_k - V_k) \right] \Delta x \\
&= \sum_{k=0}^N u'' \frac{R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} \delta^+ (U_k - V_k) + R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)} \delta^- (U_k - V_k)}{2} \Delta x \\
&= - \sum_{k=0}^N u'' \left( \frac{\delta^- R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} + \delta^+ R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)}}{2} \right) (U_k - V_k) \Delta x \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[ \frac{R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} \delta^+ (U_k - V_k) + (U_k - V_k) \delta^- R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)}}{2} + \frac{R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)} \delta^- (U_k - V_k) + (U_k - V_k) \delta^+ R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)}}{2} \right]_0^N \\
&= - \sum_{k=0}^N u'' \left( \frac{\delta^- R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} + \delta^+ R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)}}{2} \right) (U_k - V_k) \Delta x \\
&\quad + \frac{1}{4} \left[ R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} \delta^+ (U_k - V_k) + (U_k - V_k) (\delta^- R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} + \delta^+ R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)}) + R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)} \delta^- (U_k - V_k) \right]_0^N \quad (3.78)
\end{aligned}$$

以上から、境界項 = 0, すなわち,

$$\left[ R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} \delta^+ (U_k - V_k) + (U_k - V_k) (\delta^- R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} + \delta^+ R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)}) + R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)} \delta^- (U_k - V_k) \right]_0^N = 0 \quad (3.79)$$

を満たすような条件を境界条件として採用すれば, (3.76) および (3.78) より, 局所自由エネルギー  $G(u, u_x)$  が (3.68) の形に表される場合, すなわち  $G_d(U_k)$  が (3.71) で表される場合の離散の変分導関数  $\frac{\delta G_d}{\delta(U_k, V_k)}$  は, 次式で与えられることが結論される.

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta G_d}{\delta(U_k, V_k)} \\
&= \sum_{\lambda, \mu} C_{\lambda, \mu} \left[ \left( \sum_{l=0}^{\lambda-1} U_k^l V_k^{\lambda-1-l} \right) \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^\mu + (\delta^- U_k)^\mu + (\delta^+ V_k)^\mu + (\delta^- V_k)^\mu}{4} \right\} \right. \\
&\quad \left. - \left( \frac{\delta^- R_{(+k)}^{(\lambda, \mu)} + \delta^+ R_{(-k)}^{(\lambda, \mu)}}{2} \right) \right] \quad (3.80)
\end{aligned}$$

よって, 求めるべき離散の変分導関数  $\frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, V_k^{(n)})}$  は, (3.80) において  $U_k = U_k^{(n+1)}, V_k = V_k^{(n)}$  を代入すれば, 具体的に書き下せる.

なお,  $\lambda = 0$  もしくは  $\mu = 0$  のときは, これらの式中にある  $\sum_{l=0}^{\lambda-1}$  および  $\sum_{l=0}^{\mu-1}$  はすべて 0 とおくものとする.

**Remark:** 途中で要請される境界条件 (3.79) は, まさに (2.2) もしくは (2.15) を離散化したものに相当するものであることは容易に確かめられる.  $\square$



Example : Cahn-Hilliard 方程式の場合

$G_d$  は (3.72) で与えられているので,  $\sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n+1)})\Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)})\Delta x$  を計算すればよい. すると,

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=0}^N G_d(U_k)\Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(V_k)\Delta x \\
 &= \frac{1}{2}p \sum_{k=0}^N (U_k^2 - V_k^2)\Delta x + \frac{1}{4}r \sum_{k=0}^N (U_k^4 - V_k^4)\Delta x \\
 & \quad - \frac{1}{2}q \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^2 - (\delta^+ V_k)^2}{2} + \frac{(\delta^- U_k)^2 - (\delta^- V_k)^2}{2} \right\} \Delta x \\
 &= \frac{1}{2}p \sum_{k=0}^N (U_k + V_k)(U_k - V_k)\Delta x \\
 & \quad + \frac{1}{4}r \sum_{k=0}^N (U_k^3 + U_k^2 V_k + U_k V_k^2 + V_k^3)(U_k - V_k)\Delta x \\
 & \quad - \frac{1}{2}q \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{\delta^+(U_k + V_k)\delta^+(U_k - V_k)}{2} + \frac{\delta^-(U_k + V_k)\delta^-(U_k - V_k)}{2} \right\} \Delta x \\
 &= \sum_{k=0}^N \left\{ p \left( \frac{U_k + V_k}{2} \right) + r \left( \frac{U_k^3 + U_k^2 V_k + U_k V_k^2 + V_k^3}{4} \right) \right\} (U_k - V_k)\Delta x \\
 & \quad + \frac{1}{2}q \sum_{k=0}^N \left\{ \delta^{(2)}(U_k + V_k) \right\} (U_k - V_k)\Delta x \\
 & \quad - \frac{1}{2}q \left[ \frac{\delta^+(U_k + V_k)\mu^+(U_k - V_k)}{2} + \frac{\delta^-(U_k + V_k)\mu^-(U_k - V_k)}{2} \right]_0^N
 \end{aligned} \tag{3.81}$$

となる. よって, もしも

$$\left[ \frac{\delta^+(U_k + V_k)\mu^+(U_k - V_k)}{2} + \frac{\delta^-(U_k + V_k)\mu^-(U_k - V_k)}{2} \right]_0^N = 0 \tag{3.82}$$

が成り立つならば境界項が消えて

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=0}^N G_d(U_k)\Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(V_k)\Delta x \\
 &= \sum_{k=0}^N \left\{ p \left( \frac{U_k + V_k}{2} \right) + r \left( \frac{U_k^3 + U_k^2 V_k + U_k V_k^2 + V_k^3}{4} \right) + q\delta^{(2)} \left( \frac{U_k + V_k}{2} \right) \right\} (U_k - V_k)\Delta x
 \end{aligned} \tag{3.83}$$

となる. したがって

$$\frac{\delta G_d}{\delta(U_k, V_k)} = p \left( \frac{U_k + V_k}{2} \right) + r \left( \frac{U_k^3 + U_k^2 V_k + U_k V_k^2 + V_k^3}{4} \right) + q\delta^{(2)} \left( \frac{U_k + V_k}{2} \right) \tag{3.84}$$

となる.

あとは境界項が消える式 (3.82) が成り立つかどうかであるが, Cahn-Hilliard 方程式の離散自然境界条件 (4.10), すなわち

$$\delta^{(1)} U_k^{(n)} \Big|_{k=0, N} = 0 \tag{4.10}$$

より,

$$\delta^+ U_k^{(n)} = -\delta^- U_k^{(n)} \quad \text{for } k=0, N \quad (3.85)$$

$$\mu^+ U_k^{(n)} = \mu^- U_k^{(n)} \quad \text{for } k=0, N \quad (3.86)$$

であるから, (3.82) で  $U_k = U_k^{(n+1)}, V_k = U_k^{(n)}$  とおいた式, すなわち

$$\left[ \frac{\delta^+(U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)})}{2} \mu^+(U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}) + \frac{\delta^-(U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)})}{2} \mu^-(U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}) \right]_0^N = 0 \quad (3.87)$$

が成り立つ.

よって,

$$\begin{aligned} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} &= p \left( \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) + r \left( \frac{(U_k^{(n+1)})^3 + (U_k^{(n+1)})^2 U_k^{(n)} + U_k^{(n+1)} (U_k^{(n)})^2 + (U_k^{(n)})^3}{4} \right) \\ &\quad + q \delta^{(2)} \left( \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.88)$$

である.

なお, これらの式は (3.78)–(3.80) において  $\lambda=0, \mu=2$  とし,

$$R_{(\pm)} \stackrel{\text{def}}{=} \delta^{\pm} (U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}) \quad (3.89)$$

とにおいて計算したことと相当する.

□

### 偏微分方程式の差分方程式への変換

もとの偏微分方程式を離散化するという本論文の目的のうち, (2.1) もしくは (2.14) の右辺の被微分項, すなわち変分導関数がこれまでの手順で離散化されたことになる.

そこで次に, (2.1) および (2.14) の離散化されていない部分を離散化する. この離散化によって, 元の偏微分方程式から差分方程式, つまり差分スキームが導かれ, われわれの目的が達せられる.

さて, (2.1) および (2.14) の離散化されていない部分として, まず左辺の時間微分項  $\frac{\partial u}{\partial t}$  を, 時間ステップをまたいだ形の差分

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta x} \quad (3.90)$$

によって離散化する. 時間をまたいだ形になっているのは, 時間をまたいだ形になっている離散変分導関数との整合性をとるためである. いわば, 時間ステップ  $n + \frac{1}{2}$  における時間差分をとっているのである. 次に, 散逸型方程式 (2.1) の場合は空間の 2 階微分  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  を, 保存型方程式 (2.14) の場合は空間の 1 階微分  $\frac{\partial}{\partial x}$  をそれぞれその階数の差分に置き換える. こうして方程式の全ての部分が離散化される. わかりやすく示せば,

$$\frac{\partial u}{\partial t} \longrightarrow \frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta x} \quad (3.91)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \longrightarrow \delta^{(1)} \quad (3.92)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \longrightarrow \delta^{(2)} \quad (3.93)$$

$$\frac{\delta G}{\delta u} \longrightarrow \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \quad (3.94)$$

ということになる。

これで全てが離散化され、差分スキームが完成する。具体的には、次のようになる。

散逸型方程式に対する差分スキーム

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta^{(2)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \quad (3.95)$$

保存型方程式に対する差分スキーム

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})}. \quad (3.96)$$

最後に各々の場合について、(3.79)に加えて境界条件として次の条件を課す。

散逸型方程式の差分スキームに対する境界条件

$$\left[ \left( \delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right) \left( \delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right) \right]_0^N = 0 \quad (3.97)$$

保存型方程式の差分スキームに対する境界条件

$$\left[ \left( \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right) \left( \delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right) \right]_0^N = 0 \quad (3.98)$$

(3.97) は (2.3) に、(3.98) は (2.16) に各々相当するものである。以上で境界条件と方程式のすべてが離散化されたことになる。

**Remark :** 境界条件をこのように離散化する理由については 3.3 章で述べる。 □

**Example :** Cahn-Hilliard 方程式の場合

(3.95) に (3.88) を代入すれば差分スキームを得る。境界条件については 4 章で詳しく述べている。 □

### 3.3 差分スキームが保存する性質

本論文で提案している差分スキームの導出方法の最大の目的は、もとの微分方程式がもつ性質に対応する性質を差分スキームをもつようにするということである。そして、実際にその目的はある範囲で達成されている。すなわち、2.2 章および 2.4 章で示されている各々の方程式のもつ性質が、本論文で提案される差分スキームにおいて離散化された形で満たされている。この節ではそれについて述べる。

#### 3.3.1 散逸型方程式の差分スキームが保存する性質

ここでは 2.2 章で散逸型方程式がもつと示されている性質、つまり、全エネルギーの減少および質量保存という性質がいかに離散化されているかについて述べる。

エネルギーの減少 (3.95) に従う系は、境界条件 (3.79) および (3.97) のもとで系の全自由エネルギーが時間経過とともに減少する (より正確には“増大しない”)。すなわち、

$$\frac{1}{\Delta t} \left\{ \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n+1)}) \Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)}) \Delta x \right\} \leq 0 \quad (3.99)$$



が成り立つ。

境界条件 (3.97) は境界条件 (2.3) を離散化したものである。(2.3) の離散化としては他の形も考えられるが、(3.97) の形を採用すれば、この差分スキームに従う系が散逸系としての性質をもつ、ということである。

この不等式 (3.99) は、たとえば Cahn-Hilliard 方程式の場合、われわれの差分スキームの安定性や収束性をもつことがこの不等式から導かれるという意味でも重要である。

**Proof:** 不等式 (3.99) が成り立つことは以下のようにして示される。

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\Delta t} \left\{ \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n+1)}) \Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)}) \Delta x \right\} \\
 &= \sum_{k=0}^N \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \left( \frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} \right) \Delta x \\
 &= \sum_{k=0}^N \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \cdot \delta^{(2)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \Delta x \\
 &= - \sum_{k=0}^N \frac{1}{2} \left\{ \left( \delta^+ \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right)^2 + \left( \delta^- \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right)^2 \right\} \Delta x \\
 &\quad + \left[ \delta^{(1)} \left( \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right) \delta^{(1)} \left( \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right) \right]_0^N \\
 &= - \sum_{k=0}^N \frac{1}{2} \left\{ \left( \delta^+ \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right)^2 + \left( \delta^- \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right)^2 \right\} \Delta x \leq 0 \quad (3.100)
 \end{aligned}$$

境界条件 (3.97) により、最後の式で境界項は 0 になる。  $\square$

**質量の保存** さらに、境界条件 (2.11) に対応して、次の境界条件

$$\left[ \delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right]_0^N = 0 \quad (3.101)$$

が満たされるならば、質量保存則に相当する次の式が成立する。

$$\frac{1}{\Delta t} \left\{ \sum_{k=0}^N U_k^{(n+1)} \Delta x - \sum_{k=0}^N U_k^{(n)} \Delta x \right\} = 0 \quad (3.102)$$

**Proof:**

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\Delta t} \left\{ \sum_{k=0}^N U_k^{(n+1)} \Delta x - \sum_{k=0}^N U_k^{(n)} \Delta x \right\} \\
 &= \sum_{k=0}^N \delta^{(2)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \Delta x \\
 &= \left[ \delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right]_0^N = 0 \quad (3.103)
 \end{aligned}$$

$\square$

## 3.3.2 保存型方程式の差分スキームが保存する性質

エネルギーの保存 (3.96) に従う系は、境界条件 (3.79) および (3.98) のもとで系の全自由エネルギーが時間経過に対し保存される。すなわち、

$$\frac{1}{\Delta t} \left\{ \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n+1)}) \Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)}) \Delta x \right\} = 0 \quad (3.104)$$

が成り立つ。

境界条件 (3.98) は境界条件 (2.16) を離散化したものである。(2.16) の離散化としては他の形も考えられるが、(3.98) の形を採用すれば、この差分スキームに従う系が波動系としての性質をもつ、ということである。

**Proof :**

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \left\{ \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n+1)}) \Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)}) \Delta x \right\} \\ &= \sum_{k=0}^N \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \left( \frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} \right) \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^N \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \cdot \delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \Delta x \\ &= \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right) \delta^{(1)} \left( \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right) \right]_0^N = 0 \end{aligned} \quad (3.105)$$

境界条件 (3.98) により、最後の式で境界項は 0 になる。  $\square$

**質量の保存** さらに、境界条件 (2.20) に対応して、次の境界条件

$$\left[ \mu^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right]_0^N = 0 \quad (3.106)$$

が満たされるならば、質量保存則に相当する次の式が成立する。

$$\frac{1}{\Delta t} \left\{ \sum_{k=0}^N U_k^{(n+1)} \Delta x - \sum_{k=0}^N U_k^{(n)} \Delta x \right\} = 0 \quad (3.107)$$

**Proof :**

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \left\{ \sum_{k=0}^N U_k^{(n+1)} \Delta x - \sum_{k=0}^N U_k^{(n)} \Delta x \right\} \\ &= \sum_{k=0}^N \delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \Delta x \\ &= \left[ \mu^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \right]_0^N = 0 \end{aligned} \quad (3.108)$$

$\square$

## Chapter 4

# Cahn-Hilliard 方程式への応用

この章では、Cahn-Hilliard 方程式と呼ばれる偏微分方程式について述べる。この方程式は散逸型方程式の典型例であり、本論文の主張の有効性を裏付ける良い例になる。また、本論文で主張する方法により導出される差分スキームについてさらにいくつかの重要な性質が見い出されているので、それについても述べる。

### 4.1 Cahn-Hilliard 方程式

Cahn-Hilliard 方程式 [14]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\delta G}{\delta u} \quad x \in (0, L) \subset \mathbf{R}, 0 < t \quad (4.1)$$

$$\frac{\delta G}{\delta u} = pu + ru^3 + q \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.2)$$

(ただし  $p, q, r$  は  $p < 0, q < 0, 0 < r$  を満たす定数である) は、スピノーダル分解と呼ばれる相分離現象を記述するモデル方程式である。

この相分離現象は、二種類の金属の合金や二種類の高分子の混合溶液 [15] が急冷された時に発生する。ここで、 $u(x, t)$  は混合されている物質のうちの片方の密度の分布関数である。

この現象における系の自由エネルギーは

$$G(u) = \frac{1}{2}pu^2 + \frac{1}{4}ru^4 - \frac{1}{2}q\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \quad (4.3)$$

で与えられ、これは Ginzburg-Landau 局所自由エネルギーと呼ばれている。

Cahn-Hilliard 方程式に課されるべき境界条件は

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0, L} = 0, \quad (4.4)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right|_{x=0, L} = 0. \quad (4.5)$$

で与えられる。ちなみに境界条件 (4.4) は 組成  $u(x, t)$  の汎関数である全自由エネルギー  $\int_0^L G(u)dx$  に対する変分問題の自然境界条件である。

この境界条件の組合せは、いまの場合

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0, L} = 0, \quad (4.6)$$

$$\left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_{x=0, L} = 0 \quad (4.7)$$



という組合せと同値であり [16], 形としてはこちらの方が扱いやすい. 実際の数値計算の際にはこちらの方を採用する.

方程式が (2.1) の形をしており, 境界条件 (4.4) によって (2.2) が満たされ, 境界条件 (4.5) によって (2.3) が満たされるため, Cahn-Hilliard 方程式は本論文で定義する散逸型方程式である.

Cahn-Hilliard 方程式の解  $u(x, t)$  については, 全自由エネルギー  $\int_0^L G(u) dx$  が時間経過とともに減少すること, および全質量に相当する量  $\int_0^L u(x, t) dx$  が保存されるという性質をもつことは容易に確かめることができる. これは散逸型方程式の性質と合致する.

Cahn-Hilliard 方程式の定常状態解に対しては, Carr, Gurtin and Slemrod [17] および Novick-Cohen and Segel [18] などの研究がある. Elliott and Zheng [16] はもしも初期状態  $u(x, 0)$  が  $H^2_B(\Omega) \equiv \{f \in H^2(\Omega); \frac{\partial f}{\partial \nu} = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$  に属するならば, Cahn-Hilliard 方程式は一意な解  $u(x, t) \in H^{3,1}(\Omega \times (0, T))$  をもつことを証明した. ただし,  $\Omega$  は  $\mathbb{R}^n$  ( $n \leq 3$ ) の有界な領域であり,  $\frac{\partial}{\partial \nu}$  は  $\Omega$  の境界部分  $\partial\Omega$  の外向き (単位法線) 微分である.

また, これらの研究にもかかわらず, 初期状態から定常状態へ移行するまでの時間がどれくらいなのか, 初期状態から最終的な定常状態がどうなるかを調べる方法があるのかなど, 調べるべきことが多く残ったままである.

そこで, 解析解が得られるという望みがなないため, Cahn-Hilliard 方程式の解を得るためにはわれわれは数値計算に頼ることになる. しかし, 数値計算による近似解でさえも容易に得られるものではない. たとえば, 通常使われる一般的な差分スキームを用いる場合, 諸パラメータを注意深く設定しなければスキームが不安定になり, 解が得られない. 数値計算を困難なものにしている原因は, いくつかある. 初期状態  $u(x, 0)$  の微小変化に対し Cahn-Hilliard 方程式の解がひどく敏感であることがまずあげられる. また, 非線形性が本質的な役割をもつために, 線形安定性解析の手段が利用できないことも原因の一つである.

このような困難のなかでも, この方程式に対する数値計算法の研究は多くなされている. Langer, Bar-on and Milners [19] の先駆的研究は二点分布関数に対する簡単な仮定に基づくものである. また, 数学的に厳密な形で有限要素法に基づいて研究を行ったのが, Elliott and Songmu [16], Elliott and French [20], Elliott, French and Milner [21], Elliott and French [22], Elliott and Larsson [23] などである. Du and Nicolaides [7] はディリクレ境界条件 (Cahn-Hilliard 方程式本来の境界条件 (4.4), (4.5) とは異なる) のもとで, 全自由エネルギーが減少するという性質を受け継いだ有限要素スキームと差分スキームを提案した. 降旗, 恩田, 森 [24] は通常使われる差分スキームに対して新しい実用的な非線形安定解析法を提案し, それを Cahn-Hilliard 方程式に適用し, 満足いく結果を得た. Sun [25] は, 離散  $L_2$  ノルムの意味で 2 次収束し一意解をもつという, 興味深い線形化された差分スキームを提案した.

さて, 差分法によって適切な近似解を得るための指針には二つある. 一つは, 差分スキームを先に作り, それが安定になるように  $\Delta t$  や  $\Delta x$  といったパラメータを適切に選ぶ方法である. 通常はこの方法がとられる. しかし, Cahn-Hilliard 方程式に対しては, 非線形性が強いためにこの方針は必ずしも有効ではない. Cahn-Hilliard 方程式に対する差分法の研究があまり多くないのは一つにはこれが理由である.

本論文で採用したわれわれの方法は, 第二の指針に基づくものである. すなわち, 元の方程式がもつ性質を保存するように差分スキームの形そのものをデザインするというものである. こうすることによって, 差分スキームは数値的にも良い性質を保持すると期待するのである. この方法が有効であることは経験的に知られており, 実際の指針に基づいたと思われる数値計算スキームが多くデザインされ, 研究されてきていることは 1 章で指摘した通りである.

この第二の指針に基づいてデザインしたわれわれの新しい差分スキームは, Cahn-Hilliard 方程式のもつ次の二つの性質を保持する.

#### I. 全自由エネルギーの減少

#### II. 質量保存

さて, ここで  $U_k^{(n)}$  ( $k = -2, -1, 0, \dots, N, N+1, N+2; n = 0, 1, 2, \dots$ ) を  $u(x, t)$  の  $x = k\Delta x, t = n\Delta t$  におけ

る近似であるとする。ただし、 $\Delta x$  は空間方向のメッシュサイズであり、 $\Delta t$  は時間方向のメッシュサイズである。Cahn-Hilliard 方程式 (4.1)–(4.2) に対し、われわれのデザインした差分スキームは具体的には、(3.95) より

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta x} = \delta^{(2)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \quad k=0, 1, \dots, N; \quad N = \frac{L}{\Delta x}; \quad n=0, 1, \dots \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} = & p \left\{ \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right\} \\ & + r \left\{ \frac{(U_k^{(n+1)})^3 + (U_k^{(n+1)})^2 U_k^{(n)} + U_k^{(n+1)} (U_k^{(n)})^2 + (U_k^{(n)})^3}{4} \right\} \\ & + q \delta^{(2)} \left\{ \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right\} \end{aligned} \quad (4.9)$$

と表される。

さて、この差分スキームに対する境界条件は本来は (4.4) と (4.5) にならって

$$\delta^{(1)} U_k^{(n)} \Big|_{k=0, N} = 0, \quad (4.10)$$

$$\delta^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \Big|_{k=0, N} = 0, \quad (4.11)$$

とすべきであろう。境界条件 (4.10) は問題ない。しかし、境界条件 (4.11) には  $U_k^{(n+1)}$  と  $U_k^{(n)}$  が非線形形で含まれている。実際の計算では境界条件は各々の時間ステップの近似解に対して、すなわち  $U_k^{(n)}$  なら  $U_k^{(n)}$  だけに対して与えられるべきもので、(4.11) は具体的に計算の対象とする形になっていない。そこでここでは、条件 (4.11) の代わりに (4.7) を離散化した

$$\delta^{(3)} U_k^{(n)} \Big|_{k=0, N} = 0 \quad (4.12)$$

を採用する。この形の境界条件は多くの研究者が採用している。全ての時間ステップ  $n$  に対して (4.10) と (4.12) が成り立っていれば (4.11) が成り立つことは容易に確認できる。

また、(4.10) と (4.12) が成り立っていれば、散逸型方程式に対する差分スキームが満たすべき境界条件 (3.79) および (3.97) が満たされる。(3.79) が満たされることは (3.87) によって示される。(3.97) が満たされることは、(4.11) が成り立つため、容易に理解できる。

境界条件 (4.10) と (4.12) は具体的には

$$U_{-j} = U_j, \quad U_{N+j} = U_{N-j}, \quad j=1, 2 \quad (4.13)$$

と表すことができる。この関係によって、和分  $\sum_{k=0}^N$  の中に現れる  $U_{-1}$  や  $U_{N+1}$  などは、すべて内部の点に置ける近似解の値  $U_k$ ,  $0 \leq k \leq N$  で置きかえることができる。

われわれのデザインしたこの差分スキームは、I と II の性質を満たしているだけでなく、任意の  $\Delta x$  および  $\Delta t$  に対して安定であること、つまり  $\Delta x, \Delta t$  が有限であるならば、任意の  $n$  に対して  $\max_{0 \leq k \leq N} |U_k^{(n)}|$  が  $n$  に依存しない定数でおさえられることを 4.3.2 章に示す。

さらに、 $\Delta x$  および  $\Delta t$  を小さくするに従い、この差分スキームによる数値解は Cahn-Hilliard 方程式の真の解に収束すること、つまり、 $\Delta t$  がある量よりも小さく、解  $u(x, t)$  がある程度の滑らかさを持っていれば、近似解は離散  $L_2$  ノルムの意味で真の解に 2 次収束することを 4.3.4 章に示す。

最後にわれわれのデザインした差分スキームが実用的であることを示すためにいくつかの数値計算例を 4.4 章に示してこの章の終りとする。

なお、この数値計算例では、通常使われる差分スキームについてわれわれの提案した、安定であるための  $\Delta t$  の上限値 [24] の 100 倍もの大きな値の  $\Delta t$  を用いても、われわれが本論文で示す差分スキームは安定であった。

## 4.2 差分スキーム

Cahn-Hilliard 方程式の差分スキームの導出はすでに 3 章にて例として示してあるのでここでは省略する。差分スキームそのものは前節で (4.8), (4.9) として具体的に記してある。なお、すでに述べたように、Cahn-Hilliard 方程式は散逸型方程式の一例である。

## 4.3 差分スキームの性質

### 4.3.1 導出方法により保証される性質

Cahn-Hilliard 方程式に対してわれわれが導出した差分スキームは、以前にも述べたように方程式がもつ性質を受け継いでいる。つまり、方程式のもつ性質 (2.9) および (2.12) を受け継いでいるのである。

**Remark :** (2.9) から全自由エネルギーが系の Lyapunov 関数としての性質をもつことがわかる。詳しくは Du and Nicolaides [7] を参照されたい。□

さて、われわれの導出した差分スキーム (4.8) が (2.9) および (2.12) に相当する性質、つまり、次の二つの性質を満たすことは、すでに (3.100) および (3.103) で示した通りである。

エネルギーの減少

$$\sum_{k=0}^N {}'' G_d \left( U_k^{(n+1)} \right) \Delta x - \sum_{k=0}^N {}'' G_d \left( U_k^{(n)} \right) \Delta x \leq 0 \quad (4.14)$$

質量の保存

$$\sum_{k=0}^N {}'' U_k^{(n)} \Delta x = \sum_{k=0}^N {}'' U_k^{(0)} \Delta x, \quad (4.15)$$

離散全自由エネルギーが減少するこの性質からわれわれのデザインした差分スキームの安定性が導かれることが、次のようにして示される。

### 4.3.2 安定性

この章の目的はわれわれのデザインした差分スキームが最大値ノルムのもとで安定であることを示すことである。この証明は二つの補題からなる。最初の補題は、この差分スキームの数値解は離散ソボレフノルムのもとで上からおさえられることを示す。二つ目の補題 (離散ソボレフの補題) は、離散ソボレフノルムが上からおさえられるならば最大値ノルムも上からおさえられることを示す。

**LEMMA 1** 差分スキーム (4.8), (4.9) の解  $U_k^{(n)}$  に対して、

$$\|U^{(n)}\|_{d(1,2)}^2 \leq \frac{1}{\min(-p, -\frac{1}{2}q)} \left\{ \sum_{k=0}^N {}'' G_d \left( U_k^{(0)} \right) \Delta x + \frac{9}{4} \frac{p^2}{r} L \right\} \quad (4.16)$$

が成り立つ。



ただし,  $\|\bullet\|_{d-(1,2)}$  は

$$\|f\|_{d-(1,2)}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^N (f_k)^2 \Delta x + \sum_{k=0}^N \frac{(\delta^+ f_k)^2 + (\delta^- f_k)^2}{2} \Delta x, \quad f = (f_k)_{k=-l}^{N+l} \in R^{N+1+2l}; 0 \leq l \quad (4.17)$$

で定義されるノルムであり, 1 次の離散ソボレフ-ヒルベルトノルムと呼ぶ.

**Proof:** (4.14) (離散全自由エネルギーの減少) より, 次のことがいえる.

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(0)}) \Delta x &\geq \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)}) \Delta x \\ &\geq \sum_{k=0}^N \left\{ -p(U_k^{(n)})^2 - \frac{9}{4} \frac{p^2}{r} - \frac{1}{2} q \frac{(\delta^+ U_k^{(n)})^2 + (\delta^- U_k^{(n)})^2}{2} \right\} \Delta x \\ &\quad \left( \text{since } \frac{1}{2} p X^2 + \frac{1}{4} r X^4 \geq -p X^2 - \frac{9}{4} \frac{p^2}{r} \right) \\ &\geq \min(-p, -\frac{1}{2} q) \sum_{k=0}^N \left\{ (U_k^{(n)})^2 + \frac{(\delta^+ U_k^{(n)})^2 + (\delta^- U_k^{(n)})^2}{2} \right\} \Delta x - \frac{9}{4} \frac{p^2}{r} L \\ &= \min(-p, -\frac{1}{2} q) \|U^{(n)}\|_{d-(1,2)}^2 - \frac{9}{4} \frac{p^2}{r} L, \end{aligned} \quad (4.18)$$

ただし, 最後の等式変形には境界条件 (4.10) を用いている.  $\square$

**LEMMA 2 (離散ソボレフ)** もし  $\|f\|_{d-(1,2)} \leq C$  ならば

$$\max_{0 \leq k \leq N} |f_k| \leq 2 \max \left( \frac{1}{\sqrt{L}}, \sqrt{L} \right) C. \quad (4.19)$$

が成り立つ.

**Proof:** 付録 A 章に示す.  $\square$

Lemma 2 を (4.16) に適用することにより, 次の定理を得る.

**THEOREM 3** 差分スキーム (4.8), (4.9) の解  $U_k^{(n)}$  に対して次の式が成り立つ.

$$\max_{0 \leq k \leq N} |U_k^{(n)}| \leq 2 \sqrt{\frac{\max(\frac{1}{L}, L)}{\min(-p, -\frac{1}{2} q)} \left\{ \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(0)}) \Delta x + \frac{9}{4} \frac{p^2}{r} L \right\}} \quad (4.20)$$

この不等式は, われわれのデザインした差分スキーム (4.8), (4.9) が任意の時間ステップ  $n$  に対して安定であることを意味する.

このとき, 初期値  $U_k^{(0)}$  が  $u(x)^{(0)} \in C^3[0, L]$  なる関数の離散点  $x = k \Delta x$  における値として与えられているならば,

$$\sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(0)}) \Delta x \leq \int_0^L G(u^{(0)}) dx + C_0 \Delta x^2 \quad (4.21)$$

が成り立つ (証明は付録 C 章にある). ただし

$$C_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{8} \int_0^L \left| \frac{\partial^2 G(u^{(0)})}{\partial x^2} \right| dx + \frac{-q}{6} L A_2 (A_1 + \frac{\Delta x^2}{12} A_2) \quad (4.22)$$

$$A_1 \stackrel{\text{def}}{=} \max_{x \in [0, L]} \left| \frac{\partial}{\partial x} u^{(0)} \right| \quad (4.23)$$

$$A_2 \stackrel{\text{def}}{=} \max_{x \in [0, L]} \left| \frac{\partial^3}{\partial x^3} u^{(0)} \right| \quad (4.24)$$

である。さらに  $\Delta x \leq L$  より次の式が成り立つ。

$$\sum_{k=0}^N G_d \left( U_k^{(0)} \right) \Delta x \leq \int_0^L G(u^{(0)}) dx + C_0' L^2 \quad (4.25)$$

ただし

$$C_0' = C_0 \left|_{\Delta x=L} = \frac{1}{8} \int_0^L \left| \frac{\partial^2 G(u^{(0)})}{\partial x^2} \right| dx + \frac{-q}{6} L A_2 (A_1 + \frac{L^2}{12} A_2) \quad (4.26)$$

である。これより次の系が成り立つ。

**COROLLARY 4** 初期値  $U_k^{(0)}$  が  $u(x)^{(0)} \in C^3[0, L]$  なる関数の離散点  $x = k\Delta x$  における値として与えられているならば、差分スキーム (4.8), (4.9) の解  $U_k^{(n)}$  に対して次の式が成り立つ。

$$\max_{0 \leq k \leq N} |U_k^{(n)}| \leq 2 \sqrt{\frac{\max(\frac{1}{L}, L)}{\min(-p, -\frac{1}{2}q)} \left\{ \int_0^L G(u^{(0)}) dx + C_0' L^2 + \frac{9}{4} \frac{p^2}{r} L \right\}} \quad (4.27)$$

**Remark:** つまり、 $\Delta x, \Delta t$  がいかなる値であるとしてもわれわれのデザインした差分スキームは安定である。

われわれのデザインした差分スキームが無条件で安定であることは非常に大きな特徴である。通常使われる一般的な差分スキームでは注意深く ( $\Delta x, \Delta t$ ) の値を設定してもしばしば不安定になることと比較するとその意味が良く分かる。□

### 4.3.3 差分スキームの解の存在と一意性

#### 4.3.3.1 方針

差分スキーム (4.8), (4.9) の解が存在するということは、与えられた初期値  $\{U_k^{(0)}, k = 0, 1, \dots, N\}$  に対して  $\{U_k^{(m)}, k = 0, 1, \dots, N\}, m = 1, 2, \dots$  が有限の値として次々と確定していくことを意味する。これには  $\{U_k^{(m)}, k = 0, 1, \dots, N\}$  が与えられた時に  $\{U_k^{(m+1)}, k = 0, 1, \dots, N\}$  が有限な値として確定すること、すなわち 1 ステップ分の解の存在を示せば良い。これは陽的な差分スキームであれば容易に判断できることであるが、われわれのデザインした差分スキーム (4.8), (4.9) は陰的であるために解が存在することを示すには次のような手順を踏まねばならない。

まず、差分スキーム (4.8), (4.9) に解が存在するということは数学的に書けば以下の通りである。

$v_k \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n)}$  と書くとして、スキームを

$$\frac{1}{\Delta t} (U_k^{(n+1)} - v_k) = \delta^{(2)} \left\{ \mu \frac{U_k^{(n+1)} + v_k}{2} + Q_d \left( U_k^{(n+1)}, v_k \right) + q \delta^{(2)} \frac{U_k^{(n+1)} + v_k}{2} \right\} \quad (4.28)$$

と表す。さらに後の証明に都合が良いように変形すると

$$\left( \frac{1}{\Delta t} - \frac{q}{2} \delta^{(4)} \right) U_k^{(n+1)} = \left( \frac{1}{\Delta t} + \frac{q}{2} \delta^{(4)} + \frac{p}{2} \delta^{(2)} \right) v_k + \delta^{(2)} \left\{ \frac{p}{2} U_k^{(n+1)} + Q_d \left( U_k^{(n+1)}, v_k \right) \right\} \quad (4.29)$$

となる。  $v_k$  が与えられたときに、この等式を満たす  $U_k^{(n+1)}$  が存在することがすなわち差分スキームに解が存在するというのである。(以降、スキームはこの形でのみ出現する)

そこで、「上の等式に解が存在する」と同値な次の命題を考えることにする。

**命題 1 (差分スキーム (4.29) の解の存在と同値な命題)**

以下の形で定義される写像  $T_v: R^{N+1} \ni u \mapsto U \in R^{N+1}$  は不動点をもつ。

$$\left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{q}{2}\delta^{(4)}\right)U_k = \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{q}{2}\delta^{(4)} + \frac{p}{2}\delta^{(2)}\right)v_k + \delta^{(2)}\left\{\frac{p}{2}u_k + Q_d(u_k, v_k)\right\} \quad (4.30)$$

これは単に  $U_k^{(n+1)}$  を写像の定義域と値域に分けたただけなので当然である。

さて、この命題 1 を証明するには、詳しく分けて以下の 2 つのことを証明する必要がある。

**命題 2 (写像の正当性)**

写像  $T_v: u \mapsto T_v u$  は任意の  $u, v$  に対して定義される。(well-defined である)

**命題 3 (不動点定理)**

写像  $T_v$  に不動点定理が成り立つ。

写像  $T_v$  の定義 (4.30) そのものが陰の表現であるために、その写像が真に定義可能かどうかは必ずしも自明ではない。命題 2 はそれが可能であることを保証するためのものである。

不動点定理については 4.3.3.4 章に後述する。

#### 4.3.3.2 写像の行列表現

境界条件をきちんと考慮に入れて、写像  $T_v$  の定義式 (4.30) を行列で表現する。

$U, v, u, Q_d(u, v) \in R^{N+1}$  として、写像  $T_v$  の定義式 (4.30) は以下ようになる。

$$\left(\frac{1}{\Delta t}I - \frac{q}{2}D_2^2\right)U = \left(\frac{1}{\Delta t}I + \frac{q}{2}D_2^2 + \frac{p}{2}D_2\right)v + D_2\left\{\frac{p}{2}u + Q_d(u, v)\right\} \quad (4.31)$$

$$D_2 = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 2 & & & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & 1 & -2 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ 0 & & & & & 2 & -2 \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

ただし、 $I \in R^{N+1}$  は単位行列。

行列  $D_2$  は差分作用素  $\delta^{(2)}$  を境界条件 (4.10), (4.12) の下で行列で表現したものである。

この行列  $D_2$  の固有値、固有ベクトルは全て次のように計算できる。



$$\mathbf{x}_k \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \cos(\frac{k}{N}\pi \cdot 0) \\ \cos(\frac{k}{N}\pi \cdot 1) \\ \cos(\frac{k}{N}\pi \cdot 2) \\ \vdots \\ \cos(\frac{k}{N}\pi \cdot (N-1)) \\ \cos(\frac{k}{N}\pi \cdot N) \end{pmatrix} \quad (0 \leq k \leq N) \quad (4.33)$$

$$\lambda_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{\Delta x^2} \left\{ \cos\left(\frac{k}{N}\pi\right) - 1 \right\} \quad (4.34)$$

と定義すると,  $\mathbf{x}_k$  は行列  $D_2$  の固有ベクトルになっていて,

$$D_2 \mathbf{x}_k = \lambda_k \mathbf{x}_k \quad (4.35)$$

が成り立つ.

この固有ベクトルを用いることで, 方程式中にある係数行列を対角化することを考える. つまり, 対角行列  $\Lambda$  を用いて,

$$D_2 = X \Lambda X^{-1} \quad (4.36)$$

と表現する. ただし,

$$X \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (4.37)$$

$$\Lambda \stackrel{\text{def}}{=} \text{diag}(\lambda_k) \quad (4.38)$$

である (行列  $X$  の逆行列は (4.64) で示される).

すると, スキームの行列表現 (4.31) は次のように変形される.

$$X \left( \frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} \Lambda^2 \right) X^{-1} \mathbf{U} = X \left( \frac{1}{\Delta t} I + \frac{q}{2} \Lambda^2 + \frac{p}{2} \Lambda \right) X^{-1} \mathbf{v} + X \Lambda X^{-1} \left\{ \frac{p}{2} \mathbf{u} + Q_d(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right\} \quad (4.39)$$

ここで, 行列  $\left( \frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} \Lambda^2 \right)$  の逆行列が存在すること (これは定義した写像の正当性を意味する. 4.3.3.3 章で証明する) より, これは以下のように変形できる.

$$\mathbf{U} = X \left( \frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} \Lambda^2 \right)^{-1} \left( \frac{1}{\Delta t} I + \frac{q}{2} \Lambda^2 + \frac{p}{2} \Lambda \right) X^{-1} \mathbf{v} + X \left( \frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} \Lambda^2 \right)^{-1} \Lambda X^{-1} \left\{ \frac{p}{2} \mathbf{u} + Q_d(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right\} \quad (4.40)$$

#### 4.3.3.3 写像の正当性

この時, 写像  $T_\tau$  が well-defined であることを示すには, 行列  $\frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} D_2^2$  が正則であることを示せば良い.

前節で示したことから, 行列  $D_2$  の固有ベクトル, 固有値が分かっているので, 行列  $\frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} D_2^2$  の固有値は

$$\frac{1}{\Delta t} - \frac{q}{2} \lambda_k^2 = \frac{1}{\Delta t} - \frac{q}{\Delta x^2} \left\{ \cos\left(\frac{k}{N}\pi\right) - 1 \right\}^2 \quad (0 \leq k \leq N) \quad (4.41)$$

となるので, 最小固有値は  $\frac{1}{\Delta t}$  であることがわかる. よって, 次のことがいえる.

##### COROLLARY 5

行列  $\frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} D_2^2$  は正則である. つまり, 写像  $T_\tau$  は well-defined である.

## 4.3.3.4 不動点の存在

対象とする量が  $\mathbf{R}^{N+1}$  (有限次元) に属するため, 不動点定理としては次のどちらかを使えば良い.

## THEOREM 6 (Brouwer の不動点定理)

$\mathbf{R}^n$  の有界な凸閉集合  $X$  から自分自身への連続写像  $f$  は  $X$  に不動点をもつ (唯一とは限らない).

## THEOREM 7 (縮小写像の原理)

完備な距離空間  $X$  から自分自身の中への縮小写像  $f$  は  $X$  にただ一つの不動点をもつ.

(注) 縮小写像であるとは, 距離  $d(\bullet, \bullet)$  に対し,  $d(f(x), f(y)) < d(x, y)$   $x, y \in X$  が成り立つことである.

## 4.3.3.5 解の存在

解の存在を示すには, 前節で述べた Brouwer の不動点定理が成立する条件を探せば良いわけだが, 具体的には以下の通りにした.

$$M \stackrel{\text{def}}{=} \|\mathbf{v}\|_{L_2} \quad (4.42)$$

ただし,

$$\|\mathbf{v}\|_{L_2} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\sum_{k=0}^N (v_k)^2} \quad (4.43)$$

として,  $\mathbf{R}^{N+1}$  中に閉球

$$K \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \mathbf{u} \in \mathbf{R}^{N+1} \mid \|\mathbf{u}\|_{L_2} \leq 4M \right\} \quad (4.44)$$

を考える. (これが不動点定理の中の  $X$  となる)

(注) 上の  $4M$  の  $4$  は別に意味はなくて,  $2$  よりも大きければ何でも良い.

すると, 以下の結果が導かれる.

## THEOREM 8

次の条件式

$$\Delta t \leq \frac{-2q}{\left(-\frac{5}{2}p + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{4913}{2}} r M^2\right)^2} \quad (4.45)$$

が満たされれば, 写像  $T_\tau$  は  $K$  に不動点をもつ. (唯一とは限らない)

Remark:  $\mathbf{v}$  がこのスキームの解であれば, 初期値  $U_k^{(0)}$  が  $u(x)^{(0)} \in C^3[0, L]$  である関数  $u^{(0)}$  の離散点  $x = k\Delta x$  での値として与えられているならば

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|\mathbf{v}\|_{L_2}^2 \Delta x &\leq \sum_{k=0}^N (v_k)^2 \Delta x + \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^* v_k)^2 \Delta x \\ &= \|\mathbf{v}\|_{d-(1,2)}^2 \\ &\leq \frac{1}{\min(-p, -\frac{q}{2})} \left\{ \sum_{k=0}^N G_d(u_k^{(0)}) \Delta x + \frac{9p^2 L}{4r} \right\} \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\leq \frac{1}{\min(-p, -\frac{q}{2})} \left\{ \int_0^L G(u^{(0)}) dx + C_0^* L^2 + \frac{9p^2 L}{4r} \right\} \quad (4.47)$$

が成り立つ. ただし,  $C_0^*$  は (4.26) で定義される量である. ( (4.46) は (4.16) による. (4.46) と (4.47) の関係は (4.25) による. )

よって

$$M^2 \leq \frac{2}{\Delta x \min(-p, -\frac{p}{2})} \left\{ \int_0^L G(u^{(0)}) dx + C_0' L^2 + \frac{9p^2 L}{4r} \right\} \quad (4.48)$$

が成り立つ.

よって, 少し変形して

$$\Delta t \leq \frac{-2q}{\left\{ -\frac{5}{2}p + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3913}{2}} r \frac{2}{\Delta x \min(-p, -\frac{p}{2})} \left( \int_0^L G(u^{(0)}) dx + C_0' L^2 + \frac{9p^2 L}{4r} \right) \right\}^2} \quad (4.49)$$

が成り立てば写像  $T_\varepsilon$  は  $K$  に不動点をもつ といいかえても良い.  $\square$

**Proof:** 条件 (4.45) の下で Brouwer の不動点定理が成立することを示す. それには次の3つのことを示す必要がある.

B1.  $K$  は  $R^{N+1}$  の有界凸閉集合である.

B2. 写像  $T_\varepsilon$  は  $K$  からそれ自身への写像である.

B3. 写像  $T_\varepsilon$  は  $K$  において 連続である.

まず B1 であるが, はほぼ自明である.

次の B2 は, (4.40) の両辺の  $L_2$  ノルムをとると,

$$\begin{aligned} \|U\|_{L_2} &\leq \|X\|_{L_2} \left\| \left( \frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} \Lambda^2 \right)^{-1} \left( \frac{1}{\Delta t} I + \frac{q}{2} \Lambda^2 + \frac{p}{2} \Lambda \right) \right\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} \|v\|_{L_2} \\ &\quad + \|X\|_{L_2} \left\| \left( \frac{1}{\Delta t} I - \frac{q}{2} \Lambda^2 \right)^{-1} \Lambda \right\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} \left\{ -\frac{p}{2} \|u\|_{L_2} + \|Q_d(u, v)\|_{L_2} \right\} \end{aligned} \quad (4.50)$$

が成り立つ.

この不等式の右辺の評価だが, まず対角行列  $\text{diag}(d_k)$  に対しては

$$\|\text{diag}(d_k)\|_{L_2} = \max_k |d_k| \quad (4.51)$$

が成り立つ. なぜなら,

$$\|\text{diag}(d_k)\|_{L_2}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \sup_u \frac{\sum_k d_k^2 u_k^2}{\sum_k u_k^2} = \max_k d_k^2 \quad (4.52)$$

であるからである.

よって, (4.50) は,

$$\begin{aligned} \|U\|_{L_2} &\leq \|X\|_{L_2} \max_k \left| \frac{\frac{1}{\Delta t} + \frac{q}{2} \lambda_k^2 + \frac{p}{2} \lambda_k}{\frac{1}{\Delta t} - \frac{q}{2} \lambda_k^2} \right| \|X^{-1}\|_{L_2} \|v\|_{L_2} \\ &\quad + \|X\|_{L_2} \max_k \left| \frac{\lambda_k}{\frac{1}{\Delta t} - \frac{q}{2} \lambda_k^2} \right| \|X^{-1}\|_{L_2} \left\{ -\frac{p}{2} \|u\|_{L_2} + \|Q_d(u, v)\|_{L_2} \right\} \end{aligned} \quad (4.53)$$

と書き換えられる.



さらに,

$$\max_k \left| \frac{\frac{1}{\Delta t} + \frac{\lambda_k^2}{2}}{\frac{1}{\Delta t} - \frac{\lambda_k^2}{2}} \right| \leq 1 \quad (4.54)$$

$$\max_k \left| \frac{\lambda_k}{\frac{1}{\Delta t} - \frac{\lambda_k^2}{2}} \right| \leq \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \quad (4.55)$$

であるため, この不等式は以下のように書き換えられる.

$$\begin{aligned} \|U\|_{L_2} &\leq \left(1 + \frac{-p}{2} \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}}\right) \|X\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} \|v\|_{L_2} \\ &\quad + \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \|X\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} \left\{ -\frac{p}{2} \|u\|_{L_2} + \|Q_d(u, v)\|_{L_2} \right\} \end{aligned} \quad (4.56)$$

さらに, 仮定より  $\|v\|_{L_2} = M$ ,  $\|u\|_{L_2} \leq 4M$  であるから,

$$\begin{aligned} \|U\|_{L_2} &\leq \left(1 + \frac{-p}{2} \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}}\right) \|X\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} M \\ &\quad + \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \|X\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} \left\{ -2pM + \|Q_d(u, v)\|_{L_2} \right\} \end{aligned} \quad (4.57)$$

となる.

さて  $\|Q_d(u, v)\|_{L_2}$  の評価であるが,

$$\begin{aligned} \|Q_d(u, v)\|_{L_2}^2 &= \sum_{k=0}^N \left(\frac{r}{4}\right)^2 (u_k^3 + u_k^2 v_k + u_k v_k^2 + v_k^3)^2 \\ &= \left(\frac{r}{4}\right)^2 \sum_{k=0}^N \{(u_k^2 + v_k^2)(u_k + v_k)\}^2 \\ &\leq \left(\frac{r}{4}\right)^2 \sum_{k=0}^N (u_k^2 + v_k^2) \cdot \sum_{l=0}^N (u_l^2 + v_l^2) \cdot \sum_{m=0}^N (u_m + v_m)^2 \\ &\leq \left(\frac{r}{4}\right)^2 \sum_{k=0}^N (u_k^2 + v_k^2) \cdot \sum_{l=0}^N (u_l^2 + v_l^2) \cdot 2 \sum_{m=0}^N (u_m^2 + v_m^2) \\ &\leq \left(\frac{r}{4}\right)^2 \{(4M)^2 + M^2\}^3 2 \\ &= 2 \cdot 17^3 \left(\frac{r}{4}\right)^2 M^6 \end{aligned} \quad (4.58)$$

より,

$$\|Q_d(u, v)\|_{L_2} \leq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4913}{2}} r M^3 \quad (4.59)$$

が成り立つ.

この評価も不等式に代入すると,

$$\begin{aligned} \|U\|_{L_2} &\leq \left(1 + \frac{-p}{2} \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}}\right) \|X\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} M \\ &\quad + \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \|X\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} \left\{ -2pM + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4913}{2}} r M^3 \right\} \\ &\leq M \|X\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \left\{ \frac{-5p}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4913}{2}} r M^2 \right\} \right] \end{aligned} \quad (4.60)$$

を得る。

さて、最後に残ったのは  $\|X\|_{L_2}$ ,  $\|X^{-1}\|_{L_2}$  の評価である。これに対しては、

$$Z \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{2}{N}} J X J \quad (4.61)$$

$$J \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \\ 0 & & & & & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

とすると、この行列  $Z$  は直交行列 ( $Z^{-1} = Z^T$ ) であること (証明は 付録 B 章) を利用する。

具体的には、(4.61) により、

$$X = \sqrt{\frac{N}{2}} J^{-1} Z J^{-1} \quad (4.63)$$

$$X^{-1} = \sqrt{\frac{2}{N}} J Z^T J \quad (4.64)$$

であることと  $\|Z\|_{L_2} = 1$  である ( $Z$  の直交性より) ことを用いて、

$$\begin{aligned} \|X\|_{L_2} &\leq \sqrt{\frac{N}{2}} \|J^{-1}\|_{L_2} \|Z\|_{L_2} \|J^{-1}\|_{L_2} \\ &= \sqrt{\frac{N}{2}} \|J^{-1}\|_{L_2}^2 \\ &= \sqrt{2N} \end{aligned} \quad (4.65)$$

と計算する。ただし、途中で行列  $J^{-1}$  が対角行列であることより  $\|J^{-1}\|_{L_2} = \sqrt{2}$  であることを用いている。

同様に

$$\begin{aligned} \|X^{-1}\|_{L_2} &\leq \sqrt{\frac{2}{N}} \|J\|_{L_2} \|Z^T\|_{L_2} \|J\|_{L_2} \\ &= \sqrt{\frac{2}{N}} \|J\|_{L_2}^2 \\ &= \sqrt{\frac{2}{N}} \end{aligned} \quad (4.66)$$

と計算できる。これも同様に  $\|Z^T\|_{L_2} = 1$ ,  $\|J\|_{L_2} = 1$  であることを用いている。

よって結局

$$\|X\|_{L_2} \|X^{-1}\|_{L_2} \leq 2 \quad (4.67)$$

であるので、これを代入して

$$\|U\|_{L_2} \leq 2M \left[ 1 + \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \left\{ \frac{-5p}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4913}{2}} r M^2 \right\} \right] \quad (4.68)$$

を得る。

あとは,

$$2M \left[ 1 + \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \left\{ \frac{-5p}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4913}{2}} rM^2 \right\} \right] \leq 4M \quad (4.69)$$

$$\Leftrightarrow 1 + \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \left\{ \frac{-5p}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4913}{2}} rM^2 \right\} \leq 2$$

$$\Leftrightarrow \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \left\{ \frac{-5p}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4913}{2}} rM^2 \right\} \leq 1$$

$$\Leftrightarrow \Delta t \leq \frac{-2q}{\left( \frac{-5p}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4913}{2}} rM^2 \right)^2} \quad (4.70)$$

$$\Rightarrow \|U\|_{L_2} \leq 4M \quad (4.71)$$

より, 条件式 (4.45) が満たされれば B2 が成立することが分かる.

最後に B3 は, まず二つのベクトル  $u, u'$  に対し,  $U \stackrel{def}{=} T_v u, U' \stackrel{def}{=} T_v u'$  とする. この差に対し, B2 の不等式評価と同様にして

$$\|U - U'\|_{L_2} \leq 2 \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \left\{ \frac{-p}{2} \|u - u'\|_{L_2} + \|Q_d(u, v) - Q_d(u', v)\|_{L_2} \right\} \quad (4.72)$$

が得られる.

そして,

$$\|Q_d(u, v) - Q_d(u', v)\|_{L_2}^2 = \sum_{k=0}^N \left[ \frac{r}{4} (u_k - u'_k) \{ u_k^2 + u_k u'_k + (u'_k)^2 + v_k (u_k + u'_k) + v_k^2 \} \right]^2 \quad (4.73)$$

であるから,  $\max_k |u_k| \leq 4M, \max_k |u'_k| \leq 4M, \max_k |v_k| \leq M$  であることを用いて,

$$\begin{aligned} \|Q_d(u, v) - Q_d(u', v)\|_{L_2}^2 &\leq \sum_{k=0}^N \left[ \frac{r}{4} (u_k - u'_k) \{ 65M^2 \} \right]^2 \\ &= \left( \frac{65rM^2}{4} \right)^2 \|u - u'\|_{L_2}^2 \end{aligned} \quad (4.74)$$

より

$$\|Q_d(u, v) - Q_d(u', v)\|_{L_2} \leq \frac{65rM^2}{4} \|u - u'\|_{L_2} \quad (4.75)$$

を得る.

よって, 次の式が成り立つ.

$$\|U - U'\|_{L_2} \leq 2 \sqrt{\frac{\Delta t}{-2q}} \left\{ \frac{-p}{2} + \frac{65rM^2}{4} \right\} \|u - u'\|_{L_2} \quad (4.76)$$

よって, 写像  $T_v$  は連続である. □

#### 4.3.3.6 解の一意性

前節よりさらに強い結果が, 縮小写像の原理より次のように得られる.



## THEOREM 9

条件 (4.45) 及び

$$\Delta t < \frac{-2\eta}{(-p + \frac{6\pi r M^2}{2})^3} \quad (4.77)$$

が満たされれば、写像  $T_0$  は  $K$  にただ一つの不動点をもつ。

Proof: 条件 (4.45), (4.77) の下で 縮小写像の原理が成立することを示す。それには次の3つのことを示す必要がある。

- C1.  $K$  は 完備な距離空間になっている。  
 C2. 写像  $T_0$  は  $K$  からそれ自身への写像である。  
 C3. 写像  $T_0$  は縮小写像である。

まず C1 であるが、 $K$  における距離関数を  $d(x, y) \stackrel{\text{def}}{=} \|x, y\|_{L_2}$   $x, y \in K$  とすればほぼ自明である。(完備性は結局  $R$  の完備性に置き換えられる)

次の C2 は、前の証明と同じなので省略する。

最後に C3 は、前の証明より (4.76) という評価式が得られているため、この式の右辺の係数  $< 1$  なる条件を求めれば良い。実際その条件式が (4.77) である。□

## 4.3.4 収束性

この章の目的はわれわれのデザインした差分スキームの数値解の誤差評価を行い、それによって数値解が真の解に収束することを示すことにある。

まず、数値解  $U$  の誤差を

$$e_k^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n)} - u(k\Delta x, n\Delta t), \quad k = -1, 0, 1, \dots, N, N+1. \quad (4.78)$$

と定義する。ただし、 $u(x, t)$  は Cahn-Hilliard 方程式の真の解である。上の誤差の定義で Cahn-Hilliard 方程式の定義域をはみでている部分は以下のように定義する。

$$u(-\Delta x, t) \stackrel{\text{def}}{=} u(\Delta x, t) \quad (4.79)$$

$$u((N+1)\Delta x, t) \stackrel{\text{def}}{=} u((N-1)\Delta x, t) \quad (4.80)$$

誤差評価のために次の離散  $L_2$  ノルムを定義する。

$$\|f\|_{d,(0,2)} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^N (f_k)^2 \Delta x \quad f = (f_k)_{k=-l}^{N+l} \in R^{N+1+2l}; \quad 0 \leq l, \quad (4.81)$$

また次のように時間差分作用素と時間平均作用素を定義する。

$$\delta_n^{(1)} f^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f^{(n+\frac{1}{2})} - f^{(n-\frac{1}{2})}}{\Delta t} \quad (4.82)$$

$$\delta_n^{(2)} f^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f^{(n+\frac{1}{2})} - 2f^{(n)} + f^{(n-\frac{1}{2})}}{(\frac{1}{2}\Delta t)^2} \quad (4.83)$$

$$s_n^{(1)} f^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f^{(n+\frac{1}{2})} + f^{(n-\frac{1}{2})}}{2} \quad (4.84)$$

また、便宜上、次のような定義を行う。

$$\frac{\partial^2 u(-\Delta x, t)}{\partial x^2} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2 u(\Delta x, t)}{\partial x^2} \quad (4.85)$$

$$\frac{\partial^2 u((N+1)\Delta x, t)}{\partial x^2} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2 u((N-1)\Delta x, t)}{\partial x^2}. \quad (4.86)$$

これらの値は定義域の外の関数値なので本来は参照できないが、上のように定義して参照すると、式変形が非常に奇麗になるためである。

LEMMA 10 差分スキーム (4.8), (4.9) の解の誤差  $e$  に対して次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \left\{ \left\| e^{(n+1)} \right\|_{d-(0,2)}^2 - \left\| e^{(n)} \right\|_{d-(0,2)}^2 \right\} \\ & \leq \frac{1}{2} \left\{ \left\| e^{(n+1)} \right\|_{d-(0,2)}^2 + \left\| e^{(n)} \right\|_{d-(0,2)}^2 \right\} - \frac{1}{q} \left\| \tilde{\phi}(U^{(n+1)}; U^{(n)}) - \phi^{(n+\frac{1}{2})} \right\|_{d-(0,2)}^2 \\ & \quad + \left\| \zeta_1^{(n+\frac{1}{2})} \right\|_{d-(0,2)}^2 + \left\| \zeta_2^{(n+\frac{1}{2})} \right\|_{d-(0,2)}^2 \end{aligned} \quad (4.87)$$

ただし,

$$\tilde{\phi}(f_k; g_k) \stackrel{\text{def}}{=} p \left\{ \frac{f_k + g_k}{2} \right\} + r \left\{ \frac{(f_k)^3 + (f_k)^2 g_k + f_k (g_k)^2 + (g_k)^3}{4} \right\}, \quad (4.88)$$

$$\phi_k^{(n+\frac{1}{2})} \stackrel{\text{def}}{=} \{ pu + ru^3 \} \Big|_{(x,t)=(k\Delta x, (n+\frac{1}{2})\Delta t)}, k=0, 1, \dots, N, \quad (4.89)$$

$$\zeta_{1,k}^{(n+\frac{1}{2})} = \left\{ \left( \frac{\partial}{\partial t} - \delta_n^{(1)} \right) u - \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \delta^{(2)} \right) \frac{\delta G}{\delta u} \right\} \Big|_{(x,t)=(k\Delta x, (n+\frac{1}{2})\Delta t)}, k=0, 1, \dots, N, \quad (4.90)$$

$$\zeta_{2,k}^{(n+\frac{1}{2})} = \sqrt{-q} \left\{ \left( \delta_n^{(1)} \delta^{(2)} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u \right\} \Big|_{(x,t)=(k\Delta x, (n+\frac{1}{2})\Delta t)}, k=0, 1, \dots, N \quad (4.91)$$

(4.90) の  $\delta_n^{(1)} u \Big|_{(x,t)=(k\Delta x, (n+\frac{1}{2})\Delta t)}$  などの項は次のように定義される。

$$\delta_n^{(1)} u \Big|_{(x,t)=(k\Delta x, (n+\frac{1}{2})\Delta t)} \stackrel{\text{def}}{=} \delta_n^{(1)} u(k\Delta x, (n+\frac{1}{2})\Delta t) = \frac{u(k\Delta x, (n+1)\Delta t) - u(k\Delta x, n\Delta t)}{\Delta t} \quad (4.92)$$

(4.91) の中の項も同様である。

Proof: 便宜のため

$$F_k^{(n+\frac{1}{2})} \stackrel{\text{def}}{=} \left( \frac{\delta G_d}{\delta U} \right)_k^{(n+\frac{1}{2})} - \frac{\delta G}{\delta u} \Big|_{(x,t)=(k\Delta x, (n+\frac{1}{2})\Delta t)}, k=-1, 0, 1, \dots, N, N+1. \quad (4.93)$$

と定義する。(4.1), (4.8), (4.78) および (4.93) から

$$\frac{e_k^{(n+1)} - e_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta^{(2)} F_k^{(n+\frac{1}{2})} + \zeta_{1,k}^{(n+\frac{1}{2})}, k=0, 1, \dots, N. \quad (4.94)$$

という式が得られる。同様に、(4.2), (4.9) および (4.93) から次の式が得られる。

$$F_k^{(n+\frac{1}{2})} = \tilde{\phi}(U_k^{(n+1)}; U_k^{(n)}) - \phi_k^{(n+\frac{1}{2})} + q \delta^{(2)} \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} - \sqrt{-q} \zeta_{2,k}^{(n+\frac{1}{2})}, k=0, 1, \dots, N. \quad (4.95)$$

こうして得られた (4.94) と (4.95) から次のように変形が行える。

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \times (4.94) \right\} \Delta x - \frac{1}{q} \sum_{k=0}^N \left\{ F_k^{(n+\frac{1}{2})} \times (4.95) \right\} \Delta x \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{(e_k^{(n+1)})^2 - (e_k^{(n)})^2}{\Delta t} \right\} \Delta x - \frac{1}{q} \sum_{k=0}^N \left( F_k^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 \Delta x \\
 &= \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \delta^{(2)} F_k^{(n+\frac{1}{2})} - F_k^{(n+\frac{1}{2})} \delta^{(2)} \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \right\} \Delta x \\
 &\quad - \frac{1}{q} \sum_{k=0}^N \left\{ \left( \tilde{\phi}(U_k^{(n+1)}; U_k^{(n)}) - \phi_k^{(n+\frac{1}{2})} \right) F_k^{(n+\frac{1}{2})} \right\} \Delta x \\
 &\quad + \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \zeta_{1,k}^{(n+\frac{1}{2})} \right\} \Delta x - \frac{1}{q} \sum_{k=0}^N \left\{ F_k^{(n+\frac{1}{2})} (-\sqrt{-q}) \zeta_{2,k}^{(n+\frac{1}{2})} \right\} \Delta x \quad (4.96)
 \end{aligned}$$

ここで最初の項

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \delta^{(2)} F_k^{(n+\frac{1}{2})} - F_k^{(n+\frac{1}{2})} \delta^{(2)} \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \right\} \Delta x \\
 &= \left[ \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \delta^{(1)} F_k^{(n+\frac{1}{2})} - F_k^{(n+\frac{1}{2})} \delta^{(1)} \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \right]_{k=0}^N \quad (4.97)
 \end{aligned}$$

は消えてしまう。なぜなら、境界条件 (4.10) と  $u$  に関する定義 (4.79), (4.80), (4.85) および (4.86) のもとでは

$$\delta^{(1)} F_k^{(n+\frac{1}{2})} \Big|_{k=0, N} = 0 \quad (4.98)$$

$$\delta^{(1)} e_k^{(n)} \Big|_{k=0, N} = 0 \quad (4.99)$$

が成り立つからである。

この式で残った項も不等式  $ab \leq \frac{1}{2}(a^2 + b^2)$  および  $(a+b)^2 \leq 2(a^2 + b^2)$  を用いると、さらに次のように変形できる。

$$\begin{aligned}
 \text{RHS}(4.96) &\leq -\frac{1}{2q} \sum_{k=0}^N \left\{ \left( \tilde{\phi}(U_k^{(n+1)}; U_k^{(n)}) - \phi_k^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 + \left( F_k^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 \right\} \Delta x \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \left\{ \left( \frac{e_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}}{2} \right)^2 + \left( \zeta_{1,k}^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 \right\} \Delta x \\
 &\quad - \frac{1}{2q} \sum_{k=0}^N \left\{ \left( F_k^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 + \left( -\sqrt{-q} \zeta_{2,k}^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 \right\} \Delta x \\
 &\leq -\frac{1}{2q} \sum_{k=0}^N \left\{ \left( \tilde{\phi}(U_k^{(n+1)}; U_k^{(n)}) - \phi_k^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 + \left( F_k^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 \right\} \Delta x \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{1}{2} \left\{ \left( e_k^{(n+1)} \right)^2 + \left( e_k^{(n)} \right)^2 \right\} + \left( \zeta_{1,k}^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 \right\} \Delta x \\
 &\quad - \frac{1}{2q} \sum_{k=0}^N \left\{ \left( F_k^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 - q \left( \zeta_{2,k}^{(n+\frac{1}{2})} \right)^2 \right\} \Delta x \\
 &= -\frac{1}{2q} \left\| \tilde{\phi}(U^{(n+1)}; U^{(n)}) - \phi^{(n+\frac{1}{2})} \right\|_{d-(0,2)}^2 - \frac{1}{q} \left\| F^{(n+\frac{1}{2})} \right\|_{d-(0,2)}^2
 \end{aligned}$$



$$+ \frac{1}{4} \left( \|e^{(n+1)}\|_{d,(0,2)}^2 + \|e^{(n)}\|_{d,(0,2)}^2 \right) + \frac{1}{2} \|\zeta_1^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d,(0,2)}^2 + \frac{1}{2} \|\zeta_2^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d,(0,2)}^2 \quad (4.100)$$

これで望む結果を得た。  $\square$

LEMMA 11 次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} & \|\tilde{\phi}(I^{(n+1)}; I^{(n)}) - \phi^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d,(0,2)}^2 \\ & \leq \{-p + 3r(C_3)^2\}^2 \left\{ \|e^{(n+1)}\|_{d,(0,2)}^2 + \|e^{(n)}\|_{d,(0,2)}^2 \right\} \\ & \quad - q \left\{ \|\zeta_3^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d,(0,2)}^2 + \|\zeta_4^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d,(0,2)}^2 \right\} \end{aligned} \quad (4.101)$$

ただし,

$$C_3 \stackrel{\text{def}}{=} \max_{0 \leq l \leq n+1} \left\{ \max_{0 \leq k \leq N} |I_k^{(l)}|, \sup_{x \in [0, L]} |u(x, l\Delta t)| \right\} \quad (4.102)$$

であり,

$$\zeta_{3,k}^{(n+\frac{1}{2})} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{r}{2\sqrt{-q}} (C_3)^2 \{u(k\Delta x, (n+1)\Delta t) - u(k\Delta x, n\Delta t)\}, \quad k = 0, 1, \dots, N \quad (4.103)$$

$$\zeta_{4,k}^{(n+\frac{1}{2})} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{\sqrt{-q}} \{-p + 3r(C_3)^2\} (s_n^{(1)} - 1) u(k\Delta x, (n + \frac{1}{2})\Delta t), \quad k = 0, 1, \dots, N. \quad (4.104)$$

(4.105)

とする。

Remark: われわれのデザインした差分スキームが安定であること, および, 解  $u$  について  $u \in C^0[0, L]$  がいえることより,  $C_3$  は有限である。  $\square$

Proof: まず,  $\tilde{\phi} - \phi$  を分解して  $\tilde{\phi} - \phi = \sum_{l=m}^4 I_m$  と表す。ただし,

$$I_{1,k} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\phi}(I_k^{(n+1)}; I_k^{(n)}) - \tilde{\phi}(u(k\Delta x, (n+1)\Delta t); I_k^{(n)}), \quad (4.106)$$

$$I_{2,k} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\phi}(u(k\Delta x, (n+1)\Delta t); I_k^{(n)}) - \tilde{\phi}(u(k\Delta x, (n+1)\Delta t); u(k\Delta x, n\Delta t)), \quad (4.107)$$

$$\begin{aligned} I_{3,k} \stackrel{\text{def}}{=} & \tilde{\phi}(u(k\Delta x, (n+1)\Delta t); u(k\Delta x, n\Delta t)) \\ & - \phi\left(\frac{u(k\Delta x, (n+1)\Delta t) + u(k\Delta x, n\Delta t)}{2}\right), \end{aligned} \quad (4.108)$$

$$I_{4,k} \stackrel{\text{def}}{=} \phi\left(\frac{u(k\Delta x, (n+1)\Delta t) + u(k\Delta x, (n+1)\Delta t)}{2}\right) - \phi(u(k\Delta x, (n + \frac{1}{2})\Delta t)). \quad (4.109)$$

である。まず, 次の評価は容易に行える。

$$|I_{1,k}| \leq \frac{1}{2} \{-p + 3r(C_3)^2\} |e_k^{(n+1)}|, \quad (4.110)$$

$$|I_{2,k}| \leq \frac{1}{2} \{-p + 3r(C_3)^2\} |e_k^{(n)}|, \quad (4.111)$$

$$|I_{4,k}| \leq \{-p + 3r(C_3)^2\} (s_n^{(1)} - 1) u(k\Delta x, (n + \frac{1}{2})\Delta t) \quad (4.112)$$

$I_3$  の評価は次のようになる。

$$|I_{3,k}| \leq \frac{r}{4} (C_3)^2 |u(k\Delta x, (n+1)\Delta t) - u(k\Delta x, n\Delta t)| \quad (4.113)$$

ただし、この評価には次の関係式を用いている。

$$\begin{aligned} \frac{u^3 + u^2v + uv^2 + v^3}{4} - \left(\frac{u+v}{2}\right)^3 &= \frac{1}{8}(u^2 - v^2)(u - v) \\ &\leq \frac{1}{8}(u^2 + v^2)|u - v| \end{aligned} \quad (4.114)$$

得られたこれらの評価式から次のノルムの評価を得る。

$$\|I_1\|_{d-(0,2)}^2 \leq \frac{1}{4}(-p + 3r(C_3)^2)^2 \|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}^2, \quad (4.115)$$

$$\|I_2\|_{d-(0,2)}^2 \leq \frac{1}{4}(-p + 3r(C_3)^2)^2 \|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2, \quad (4.116)$$

$$\|I_3\|_{d-(0,2)}^2 \leq \frac{1}{16}r^2(C_3)^4 \|u(\cdot, (n+1)\Delta t) - u(\cdot, n\Delta t)\|_{d-(0,2)}^2 \quad (4.117)$$

$$\|I_4\|_{d-(0,2)}^2 \leq (-p + 3r(C_3)^2)^2 \left\| (s_n^{(1)} - 1)u(\cdot, (n + \frac{1}{2})\Delta t) \right\|_{d-(0,2)}^2 \quad (4.118)$$

そして、(4.115)–(4.118) を次の式に代入することで (4.101) を得る。

$$\left\| \phi(U^{(n+1)}, U^{(n)}) - \phi^{(n+\frac{1}{2})} \right\|_{d-(0,2)}^2 \leq 4 \sum_{m=1}^4 \|I_m\|_{d-(0,2)}^2. \quad (4.119)$$

□

#### LEMMA 12

$$\begin{aligned} &\left\{ 1 - 2\Delta t \left( \frac{1}{2} + \frac{\{-p + 3r(C_3)^2\}^2}{-q} \right) \right\} \|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}^2 \\ &\leq \|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2 + \Delta t \sum_{m=1}^4 \|\zeta_m^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d-(0,2)}^2 \end{aligned} \quad (4.120)$$

**Proof:** Lemma 10 および Lemma 11 から次の式を得る。

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\Delta t} \left\{ \|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}^2 - \|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2 \right\} \\ &\leq \frac{1}{2} \left\{ \|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}^2 + \|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2 \right\} \\ &\quad - \frac{1}{q} \left[ \{-p + 3r(C_3)^2\}^2 \left\{ \|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}^2 + \|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2 \right\} - q \left\{ \|\zeta_3^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d-(0,2)}^2 + \|\zeta_4^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d-(0,2)}^2 \right\} \right] \\ &\quad + \|\zeta_1^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d-(0,2)}^2 + \|\zeta_2^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d-(0,2)}^2 \\ &= \left( \frac{1}{2} + \frac{\{-p + 3r(C_3)^2\}^2}{-q} \right) \left\{ \|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}^2 + \|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2 \right\} + \sum_{m=1}^4 \|\zeta_m^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d-(0,2)}^2 \end{aligned} \quad (4.121)$$

よって、 $\|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}$  が  $\|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}$  よりも大きいかどうかに関わらず次の不等式が成り立つ。

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\Delta t} \left\{ \|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}^2 - \|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2 \right\} \\ &\leq \left( \frac{1}{2} + \frac{\{-p + 3r(C_3)^2\}^2}{-q} \right) 2 \|e^{(n+1)}\|_{d-(0,2)}^2 + \sum_{m=1}^4 \|\zeta_m^{(n+\frac{1}{2})}\|_{d-(0,2)}^2 \end{aligned} \quad (4.122)$$

□

COROLLARY 13 もしも

$$\Delta t < \frac{1}{1 + 2 \frac{(-p + 3r(C_3)^2)^2}{-q}} \quad (4.123)$$

ならば次の式が成り立つ,

$$\|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2 \leq \Delta t \sum_{l=1}^n (C_4)^l \sum_{m=1}^4 \left\| \zeta_m^{(n+\frac{1}{2}-l)} \right\|_{d-(0,2)}^2 \quad (4.124)$$

ただし,

$$C_4 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{1 - \Delta t \left( 1 + 2 \frac{(-p + 3r(C_3)^2)^2}{-q} \right)} \quad (4.125)$$

である.

Proof: もし不等式 (4.123) が成り立つならば, Lemma 12 より次の評価を得る.

$$\begin{aligned} \|e^{(n)}\|_{d-(0,2)}^2 &\leq C_4 \left[ \|e^{(n-1)}\|_{d-(0,2)}^2 + \Delta t \sum_{m=1}^4 \left\| \zeta_m^{(n-\frac{1}{2})} \right\|_{d-(0,2)}^2 \right] \\ &\leq (C_4)^n \|e^{(0)}\|_{d-(0,2)}^2 + \Delta t \sum_{l=1}^n (C_4)^l \sum_{m=1}^4 \left\| \zeta_m^{(n+\frac{1}{2}-l)} \right\|_{d-(0,2)}^2 \end{aligned} \quad (4.126)$$

そして, この式の右辺の最初の項は, 初期状態の誤差が 0 であることより消えるため, 題意を得る. □

そしてさらに (4.124) より次の系が得られる.

COROLLARY 14 まず (4.123) が満たされていると仮定する.

もしも (4.1) および (4.2) がある程度滑らかな解, すなわち, 固定した  $\forall t \in [0, T]$  に対して  $u(\cdot, t) \in C^5[0, L]$  であり, かつ, 固定した  $\forall x \in [0, L]$  に対して  $u(x, \cdot) \in C^2[0, T]$  であるような解をもつとすると, 無条件安定な差分スキーム (4.8), (4.9) の解は (4.1) および (4.2) の解に離散  $L_2$  ノルム (4.81) の意味で収束する. また, その収束のオーダーは  $O(\Delta x^2 + \Delta t^2)$  である.

Proof: まず次の不等式が成り立つ.

$$\text{RHS}(4.124) \leq \Delta t (C_4)^n \sum_{l=1}^n \sum_{m=1}^4 \left\| \zeta_m^{(n+\frac{1}{2}-l)} \right\|_{d-(0,2)}^2 \quad (4.127)$$

さて, もしも (4.1) および (4.2) が固定した  $\forall t \in [0, T]$  に対して  $u(\cdot, t) \in C^5[0, L]$  であり, かつ, 固定した  $\forall x \in [0, L]$  に対して  $u(x, \cdot) \in C^2[0, T]$  であるような解をもつとすると,

$$\begin{aligned} &\lim_{\substack{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0 \\ N, \Delta t \approx L \\ n, \Delta t \approx T}} \text{RHS}(4.127) \\ &= \exp \left\{ \left( 1 + 2 \frac{(-p + 3r(C_3)^2)^2}{-q} \right) T \right\} \lim_{\substack{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0 \\ N, \Delta t \approx L \\ n, \Delta t \approx T}} \left[ \Delta x^2 \left\{ 2 \left\| \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} u \right\|_{\hat{\Omega}}^2 - 2q \left\| \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right\|_{\hat{\Omega}}^2 \right\} + \right. \\ &\quad \left. \Delta t^2 \left\{ \frac{1}{2} \left\| \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\delta G}{\delta u} \right\|_{\hat{\Omega}}^2 + \frac{-2}{q} \left\| \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u \right\|_{\hat{\Omega}}^2 + \frac{r^2 C_3^2 + 4(-p + 3r(C_3)^2)^2}{-4q} \left\| \frac{\partial u}{\partial t} \right\|_{\hat{\Omega}}^2 \right\} \right] \\ &\quad + o(\Delta x^2 + \Delta t^2) \end{aligned} \quad (4.128)$$

が成り立つ. ただし,

$$\|u\|_{\hat{\Omega}}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^T dt \int_0^L dx \, u^2 \quad (4.129)$$



とする。

(4.128) を得る途中でテイラーの定理を用いた、(4.128) 中の  $\|\cdot\|_{\Omega}$  という項は有限であるため、有限な二つの定数  $C_5, C_6$  が存在して次の不等式が成り立つということがいえる。

$$\|e^{(n)}\|_{d,(0,2)}^2 \leq \exp \left\{ \left( 1 + 2 \frac{\{-p + 3r(C_3)^2\}^2}{-q} \right) T \right\} (C_5 \Delta x^2 + C_6 \Delta t^2) + o(\Delta x^2 + \Delta t^2) \quad (4.130)$$

□

## 4.4 数値計算例

この章の目的は数値実験を通してわれわれのデザインした差分スキームが安定であり、かつその解が本来の問題の解の近似解として納得のいくものであることを示すことである。

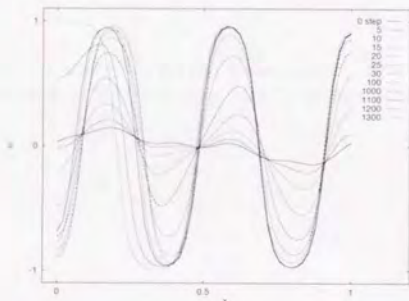


Figure 4.1:  $p = -1.0$ ,  $q = -0.001$ ,  $r = 1.0$  に対する Cahn-Hilliard 方程式に対する数値解。差分スキーム (4.8), (4.9) によって計算。パラメータは  $\Delta x = 1/50$  および  $\Delta t = 1/1200$ 。

Figure 4.1 は、本論文で提案したスキームによる、 $p = -1.0$ ,  $q = -0.001$ ,  $r = 1.0$  での Cahn-Hilliard 方程式に対する数値解である。空間、時間のメッシュサイズは  $\Delta x = 1/50$  および  $\Delta t = 1/1200$  である。初期状態は

$$u(x, 0) = 0.1 \sin(2\pi x) + 0.01 \cos(4\pi x) + 0.06 \sin(4\pi x) + 0.02 \cos(10\pi x) \quad (4.131)$$

である。

Figure 4.2 は、Figure 4.1 の時間ステップをさらにあとの結果である、大きな変化のある時間ステップ 2000 ~ 3100 での結果を抜粋している。なお、さらに 10000 ステップまで計算しても時間ステップが 3100 の時の結果とグラフ上認識できるだけの変化はなかった。

また、Figure 4.3 に時間ステップ 4000 までの  $U_k$  を並べた図を示した。底面部分に示されている等高線図を見ると、変化がほとんどない状態が長時間続き、そのあと短い時間で波形が変化するという時間発展の様子がよくわかる。

Figure 4.4 は離散的な全自由エネルギー (3.72) が時間ステップがすすむにつれてどう変化するかを示したものである。単調減少しており、理論的に示されている性質 (4.14) が確認できる。これまでの図と比較すると、全自由エネルギーが急激に減少する部分は波形が大きく変化している部分であることがわかる。

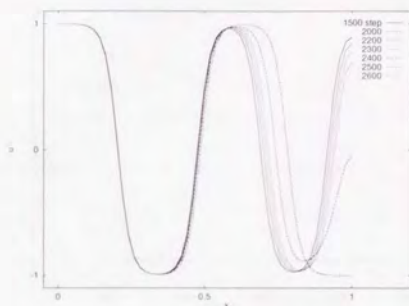


Figure 4.2:  $p = -1.0$ ,  $q = -0.001$ ,  $r = 1.0$  に対する Cahn-Hilliard 方程式に対する数値解. Figure 4.1 の続き. 差分スキーム (4.8), (4.9) によって計算. パラメータは  $\Delta x = 1/50$  および  $\Delta t = 1/1200$ .

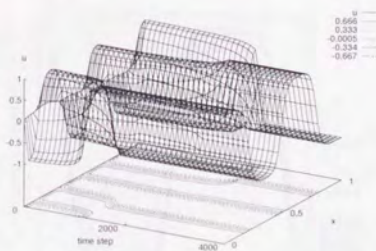


Figure 4.3:  $p = -1.0$ ,  $q = -0.001$ ,  $r = 1.0$  に対する Cahn-Hilliard 方程式に対する数値解. 時間ステップ 4000 までの様子並べたもの. 底面は等高線図. 差分スキーム (4.8), (4.9) によって計算. パラメータは  $\Delta x = 1/50$  および  $\Delta t = 1/1200$ .

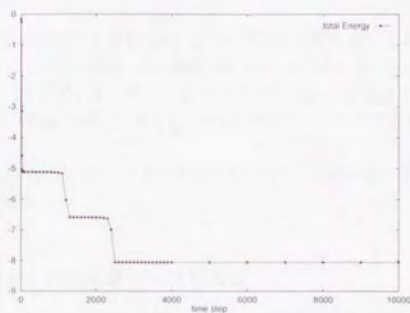


Figure 4.4:  $p = -1.0$ ,  $q = -0.001$ ,  $r = 1.0$  での Cahn-Hilliard 方程式に対する数値解から、離散的な全自由エネルギー (3.72) を計算したもの、差分スキーム (4.8), (4.9) によって計算. パラメータは  $\Delta x = 1/50$  および  $\Delta t = 1/1200$ .

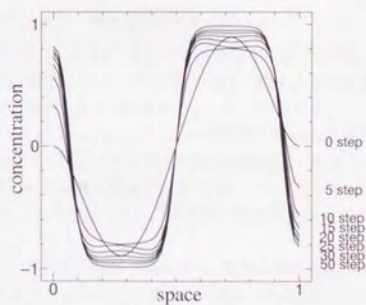


Figure 4.5:  $p = -1.0$ ,  $q = -0.001$ ,  $r = 1.0$  に対する Cahn-Hilliard 方程式に対する数値解. 差分スキーム (4.8), (4.9) によって計算. パラメータは  $\Delta x = 1/50$  および  $\Delta t = 1/1200$ .



Figure 4.5 も同じパラメータでの数値解であり、初期状態を

$$u(x, 0) = 100x^2(x-1)^2(x-\frac{1}{2}) \quad (4.132)$$

としたものの結果である。

本論文の数値実験の結果は、別の陽的差分スキームによって得られた結果 [26] と本質的に同一である。しかし、パラメータ  $p, q, r$  および  $\Delta x$  を同じにした場合、その陽的差分スキームを用いるならば、 $\Delta t$  を  $1/120512$  よりも小さくしなければならないことが分かっている [26]。一方、われわれは  $\Delta t = 1/1200$  という 100 倍もの大きなメッシュサイズでも安定な結果を得ている。このことからわれわれのデザインした差分スキームが安定性の立場からは強力であることが分かる。

**Remark:** もちろん、より大きな  $\Delta t$  に対してもわれわれの差分スキームは安定であるが、 $\Delta t$  を大きくすると誤差が増大することを忘れてはならない。□

#### 4.4.1 差分スキームを解くための反復アルゴリズム

ここでの目的は、われわれがデザインした差分スキームを用いて数値計算を行う際に、具体的にはどのようにそれを実効するかを示すことにある。差分スキームが陰的であるため、非線形方程式を各時間ステップ毎に解く必要があり、その方法にはいくつか選択肢がある。具体的には次の通りである。

陰的差分スキームの時間ステップを進めるためには、普通は Newton 法を用いる。具体的には、解くべき非線形連立方程式の左辺から右辺を引いたベクトル値が  $\mathbf{o}$  になるように Newton 法を用いる。われわれの差分スキーム (4.8), (4.9) を例にあげて示す。実際に必要なことは、既に計算されている時間ステップ  $n$  での値  $U_k^{(n)}$  を  $\mathbf{v}$  として固定して、求めるべき  $U_k^{(n+1)}$  を  $\mathbf{U}$  としてそのベクトル関数

$$f_k(\mathbf{U}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{U_k - v_k}{\Delta t} - \delta^{(2)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_k, v_k)} \quad (4.133)$$

に対し、これを  $\mathbf{o}$  とするような  $\mathbf{U}$  を求めることである。アルゴリズムは、以下ようになる [27, §4.3]。  $\mathbf{U}$  に対して得られている近似値を  $\mathbf{a}$  として、関数  $f$  の線形近似から

$$\mathbf{o} = f(\mathbf{a}) + J(\mathbf{a})(\mathbf{b} - \mathbf{a}) \quad (4.134)$$

という連立一次方程式を解いて得られる  $\mathbf{b}$  を  $\mathbf{U}$  の新たな近似値とする。ただし、 $J(\mathbf{a})$  は  $f(\mathbf{a})$  の Jacobi 行列であり、その存在と正則性は仮定せねばならない。これを繰り返し、 $f = \mathbf{o}$  が許容範囲内で満たされていると判断したところでその時の  $U_k^{(n+1)}$  の近似値を解とし、時間ステップを一つ進める。

しかし、以上から分かるように、この Newton 法では、一つ時間ステップを進めるために連立一次方程式を何度も解かねばならないという欠点がある。連立一次方程式の数値的解法は、現在でもなお研究が盛んな分野であることから分かるように、数値計算の中では難しいものに属する。アルゴリズムの選択肢は多く、行列の形や行列の大きさ、求める精度、許容できる計算量などによりどの選択肢を選ぶべきかが変わる。また、プログラミングも比較的難しいものとなる。

われわれの目的は差分スキームの正当性の検証であるから、数値実験自身はなるべく簡単なアルゴリズムで行う。これは連立一次方程式の解法のインプリメントにより結果が異なったり、その正当性に疑問が生じるような事態を避けるためである。

そこでわれわれは、連立一次方程式を解く必要がなく、プログラミングが容易な別の形の Newton 法を用いることにした。具体的には、ベクトル値関数を  $\mathbf{o}$  にする命題のために連立一次方程式を解く必要が生ずるのであるから、スカラー値関数を 0 にするような命題に問題を置き換えてしまうのである。つまり、次のように考える。まず、

$$g(\mathbf{a}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^N f_k(\mathbf{a})^2 \Delta x \quad (4.135)$$

なるスカラー値関数を考え、 $g(\mathbf{a}) = 0$  を目指す。そして、アルゴリズムは、 $\mathbf{b}$  を新たな近似値として、関数  $g(\mathbf{a})$  の線形近似式

$$0 = g(\mathbf{a}) + \nabla g \cdot (\mathbf{b} - \mathbf{a}) \quad (4.136)$$

および変化量の方向に対する仮定

$$\mathbf{b} - \mathbf{a} \propto -\nabla g \quad (4.137)$$

から

$$\mathbf{b} = \mathbf{a} - \frac{g(\mathbf{a})}{|\nabla g(\mathbf{a})|^2} \nabla g(\mathbf{a}) \quad (4.138)$$

とする。つまり、

$$\mathbf{b}_k = \mathbf{a}_k - \frac{g(\mathbf{a}_k)}{\sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial g}{\partial a_i}\right)^2} \left(\frac{\partial g}{\partial a_k}\right) \quad (4.139)$$

として  $\mathbf{b}$  を新たな近似値とするのである。

この方法の利点は、新たな近似値を求めるための計算量が明らかに少なくすむことである。また、連立一次方程式を解く必要がないことから、プログラムのにも非常に容易なものとなる。問題は、 $g$  の定義で自乗和を用いているために  $\frac{\partial g}{\partial a_k}$  の計算が Jacobi 行列  $J$  の計算よりも複雑になることである。つまり、プログラム以前の手間が少々増える。また、対象関数  $g$  が自乗和であるため、その零点は多重根であると考えられ、収束次数が低くなることがありうる。よって、収束次数の低さと計算量の少なさのバランスによって普通の Newton 法とどちらが計算速度が速いかは一概にいいない。

そこで、プログラミングの工数(手間)の少なさとそれから来る数値計算の結果の信頼度に重きをおいて、われわれはこの後者の方法を採用することにした。Cahn-Hilliard 方程式と KdV 方程式に対する差分スキームの実際の数値実験にはこの方法を採用したが、結果として両方の方程式ともに計算速度、誤差の点でなんら問題はなかった。

#### 4.4.2 2次元問題への応用

ここでの目的は、空間を2次元にしたときに Cahn-Hilliard 方程式に対してわれわれの方法で差分スキームをデザインしたらどうなるかを示すことにある。これによって、われわれの方法をさらに高次元の問題に適用する可能性を示す。

空間が高次元になっても、メッシュを直交させて切るならば、空間に関する作用素が1次元の作用素に分解できるため、われわれの定義した差分、和分作用素を、直積の形でそのまま応用することができる。これは、例えば2次元空間において2軸( $x, y$ 軸とする)を直交させておけば、ラプラシアン  $\Delta$  が  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$  の形に分解できることに相当する。そこで、ここでは2次元空間において直交メッシュを採用する。したがって、領域も当然長方形領域となる。

さて、空間が2次元の場合の Cahn-Hilliard 方程式は以下の通りである。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta \frac{\delta G}{\delta u} \quad (x, y) \in (0, L) \times (0, L) \subset \mathbf{R}^2, 0 < t \quad (4.140)$$

$$\frac{\delta G}{\delta u} = pu + ru^3 + q \Delta u \quad (4.141)$$

ただし、空間領域は以降の議論を簡単にするために正方領域としている。なお、局所自由エネルギー  $G(u, \nabla u)$  は

$$G(u, \nabla u) = \frac{1}{2}pu^2 + \frac{1}{4}ru^4 - \frac{1}{2}q|\nabla u|^2 \quad (4.142)$$

である。

境界条件は

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \nu} \right|_{\partial \Omega} = 0 \quad (4.143)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial \nu} \frac{\delta G}{\delta u} \right|_{\partial \Omega} = 0 \quad (4.144)$$

で与えられる。ただし、 $\frac{\partial}{\partial \nu}$  は  $\Omega$  の境界部分  $\partial \Omega$  の外向き (単位法線) 微分である。

$\Omega$  が正方領域であるので、1 次元の場合同様にこの境界条件の組合せは (4.143) および

$$\left. \frac{\partial^3 u}{\partial \nu^3} \right|_{\partial \Omega} = 0 \quad (4.145)$$

という組合せと同値であり、形としてはこちらの方がわかりやすい。実際の数値計算ではこちらの形の方を採用する。

さらに以降の議論を簡潔にするため、 $x, y$  軸方向のメッシュサイズを同じ  $\Delta x$  であるとする。この値は異なっても以降の議論に何ら問題はないが、議論が複雑になり、本質が分かりにくくなるため、このようにした。

さて、ここで  $U_{k,l}^{(n)} (k, l = -2, -1, 0, \dots, N-1, N, N+1, N+2; n = 0, 1, 2, \dots)$  を  $u(x, y, t)$  の  $x = k\Delta x, y = l\Delta x, t = n\Delta t$  における近似値であるとしよう。すると、われわれの方法で導出される差分スキームは以下のようになる。

$$\frac{U_{k,l}^{(n+1)} - U_{k,l}^{(n)}}{\Delta x} = \delta_{k,l}^{(2)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_{k,l}^{(n+1)}, U_{k,l}^{(n)})} \quad k, l = 0, 1, \dots, N; N = \frac{L}{\Delta x}; n = 0, 1, \dots \quad (4.146)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta G_d}{\delta(U_{k,l}^{(n+1)}, U_{k,l}^{(n)})} &= p \left\{ \frac{U_{k,l}^{(n+1)} + U_{k,l}^{(n)}}{2} \right\} \\ &\quad + r \left\{ \frac{(U_{k,l}^{(n+1)})^3 + (U_{k,l}^{(n+1)})^2 U_{k,l}^{(n)} + U_{k,l}^{(n+1)} (U_{k,l}^{(n)})^2 + (U_{k,l}^{(n)})^3}{4} \right\} \\ &\quad + q \delta_{k,l}^{(2)} \left\{ \frac{U_{k,l}^{(n+1)} + U_{k,l}^{(n)}}{2} \right\} \end{aligned} \quad (4.147)$$

ただし、 $\delta_{k,l}^{(2)}$  はラプラシアンを離散化した作用素であり、

$$\delta_{k,l}^{(2)} \stackrel{\text{def}}{=} \delta_k^{(2)} + \delta_l^{(2)} \quad (4.148)$$

で定義される。ただし、 $\delta_k^{(2)}$  あるいは次に現れる  $\delta_k^{(1)}$  の下つき添字  $k$  は、これらの作用素が添字  $k$  に影響を与えるものであることを意味する。

離散境界条件は 1 次元の時と全く同様の理由により、

$$\delta_k^{(1)} U_{k,l}^{(n)} \Big|_{k=0,N} = 0 \quad (4.149)$$

$$\delta_l^{(1)} U_{k,l}^{(n)} \Big|_{l=0,N} = 0 \quad (4.150)$$

$$\delta_k^{(3)} U_{k,l}^{(n)} \Big|_{k=0,N} = 0 \quad (4.151)$$

$$\delta_l^{(3)} U_{k,l}^{(n)} \Big|_{l=0,N} = 0 \quad (4.152)$$

とする。



1次元の場合の2つめの境界条件(4.11)を2次元化したものに相当する条件

$$\delta_k^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_{k,l}^{(n+1)}, U_{k,l}^{(n)})} \Big|_{k=0,N} = 0 \quad (4.153)$$

$$\delta_l^{(1)} \frac{\delta G_d}{\delta(U_{k,l}^{(n+1)}, U_{k,l}^{(n)})} \Big|_{l=0,N} = 0 \quad (4.154)$$

が(4.149)–(4.152)によって満たされるのも1次元の場合と同様である。

差分スキームの導出過程も1次元の場合と全く同様であるため、本論文では省略する。なお、離散局所自由エネルギー  $G_d(U_{k,l})$  は

$$G_d(U_{k,l}) \triangleq \frac{1}{2} p U_{k,l}^2 + \frac{1}{4} r U_{k,l}^4 - \frac{1}{2} q \left( \frac{(\delta_k^+ U_{k,l})^2 + (\delta_k^- U_{k,l})^2}{2} + \frac{(\delta_l^+ U_{k,l})^2 + (\delta_l^- U_{k,l})^2}{2} \right) \quad (4.155)$$

となる。ただし、 $\delta_k^+, \delta_k^-$  は添字  $k$  に対する前進、後退差分作用素である。

さて、この差分スキームに対しては、1次元の時同様に次のような性質が成り立つ。証明は1次元の場合と同様なので省略する。

エネルギーの減少

$$\sum_{l=0}^N \sum_{k=0}^N G_d(U_{k,l}^{(n+1)}) \Delta x^2 - \sum_{l=0}^N \sum_{k=0}^N G_d(U_{k,l}^{(n)}) \Delta x^2 \leq 0 \quad (4.156)$$

質量の保存

$$\sum_{l=0}^N \sum_{k=0}^N U_{k,l}^{(n)} \Delta x^2 = \sum_{l=0}^N \sum_{k=0}^N U_{k,l}^{(0)} \Delta x^2 \quad (4.157)$$

これらの性質が満たされることから、この差分スキームも数値計算上性質の良いスキームであることが期待できる。安定性や収束については現時点では理論的な解析は行われていないが、以下に示す数値実験によって傍証が得られていると考えることができる。2次元、3次元の場合の安定性や収束性の理論的解析はこれからの研究課題である。

**Remark:** 安定性については、そもそもソボレフの補題に空間の次元数が陽に含まれるため、本論文の手法をそのまま用いて証明することはできない。収束についても、途中に出てくる定数  $C_3$  (4.102) をおさえるために安定性が必要であるため、証明はできていない。□

さて、Cahn-Hilliard 方程式に対して、この差分スキームを使って計算した結果を以下に示す。以下の Figure 4.6 は、 $p = -1.0, q = -0.001, r = 1.0$  の場合の結果で、 $\Delta x = \Delta y = 1/30, \Delta t = 1/666$  として数値計算を行ったものである。初期状態は

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) = & 0.05 \sin\{2\pi(x+y)+0.2\} + 0.04 \sin\{2\pi(x-y)\} \\ & + 0.05 \sin\{4\pi x + 0.05\} + 0.03 \sin\{4\pi y + 0.2\} \\ & + 0.01 \sin\{2\pi(x+4y)\} + 0.01 \sin\{2\pi(5x+y)\} \end{aligned} \quad (4.158)$$

である。

本論文の数値実験の結果は、1次元のものと同様に、異なる陽的差分スキームによって得られた結果 [26] と本質的に同一である。また、パラメータ  $p, q, r$  および  $\Delta x, \Delta y$  を同じにした場合、その陽的差分スキームを用いるなら

ば  $\Delta t$  を  $1/66584$  よりも小さくしなければならないことが分かっている [26]。しかし、われわれは  $\Delta t = 1/666$  という 100 倍もの大きなメッシュサイズでも安定な結果を得ている。このことから、われわれのデザインした差分スキームが安定であることが十分に期待できる。

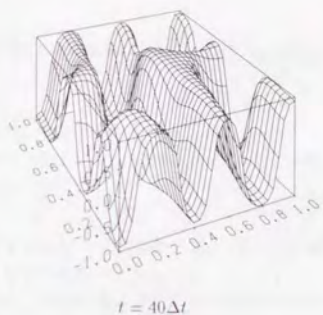
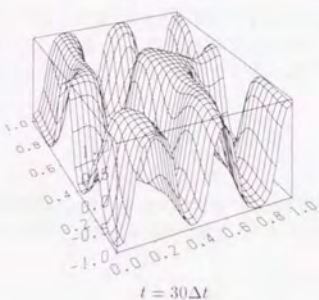
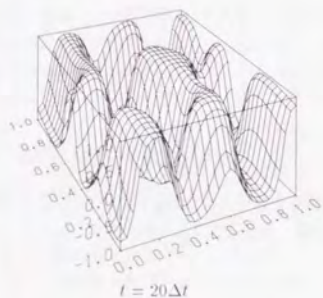
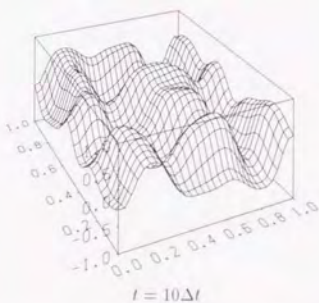
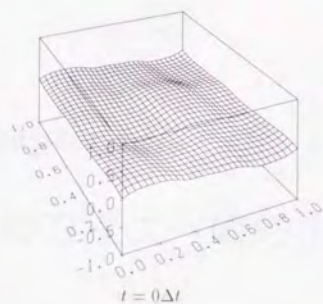


Figure 4.6:  $p = -1.0, q = -0.001, r = 1.0$  の場合の空間 2 次元の Cahn-Hilliard 方程式に対する数値解.  $\Delta x = \Delta y = 1/30$  かつ  $\Delta t = 1/666$ .



## Chapter 5

### 他の方程式への応用例

本論文の提案している方法は、局所自由エネルギーの変分から導出される方程式、すなわち散逸型方程式と保存型方程式に対して、その性質を保った差分スキームを具体的に構成する法である。この章で、本論文の提案している方法がCahn-Hilliard方程式だけでなく、他の方程式にも応用できることを示す。そのために、それぞれの型の方程式に対して幾つかの例を示す。

#### 5.1 熱方程式 (散逸型)

ここでの目的は、散逸型方程式として最も単純な形をもつ熱拡散方程式について、本論文で提案する方法で差分スキームをデザインしてみせることにある。後で述べるが、われわれの方法でデザインされた差分スキームは、良く知られた性質の良い差分スキームになる。

ここでいう熱拡散方程式とは次のものである。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (5.1)$$

この場合、局所自由エネルギー  $G(u, u_x)$  が

$$G(u, u_x) = \frac{1}{2} u^2 \quad (5.2)$$

となるのは明白である。

散逸型方程式としての境界条件 (2.2) はこの場合自明に成り立っている。もう一つの境界条件 (2.3) を満たすには、 $x \in [0, L]$  として

$$[u u_x]_{x=0}^L = 0 \quad (5.3)$$

が成り立てば良い。この条件を満たす具体的な条件としては、 $u(0) = u(L) = 0$  や  $u_x(0) = u_x(L) = 0$  や周期的境界条件などがある。

さらに、質量保存則を満足するための境界条件 (2.11) を満足させるためには

$$[u_x]_{x=0}^L = 0 \quad (5.4)$$

が成り立てば良い。

##### 5.1.1 差分スキーム

この章の目的は熱拡散方程式の差分スキームを実際に導出して見せること、およびその差分スキームがどのようなものになるかについて述べることにある。スキームの導出の手順は3章の手順に従う。

局所エネルギー  $G(u, u_x)$  の離散化

(3.69) および (3.70) に従い, (5.2) を離散化する. すると, 次のように離散化された局所エネルギーを得る.

$$G_d(U_k) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(U_k)^2 \quad (5.5)$$

## 局所自由エネルギーの離散的分変導関数の計算

局所自由エネルギーの離散形  $G_d(U_k)$  が得られたので, これに対して離散的分変導関数を求める. 離散的分変導関数の定義 (3.66) に基づいて次のように計算するだけである.

まず, (3.59) で離散汎関数を定義し, 次の式を計算する.

$$\begin{aligned} J_d[U^{(n+1)}] - J_d[U^{(n)}] &= \sum_{k=0}^N \frac{1}{2} \left\{ (U_k^{(n+1)})^2 - (U_k^{(n)})^2 \right\} \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^N \left( \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) (U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}) \Delta x \end{aligned} \quad (5.6)$$

よって, 離散的分変導関数の定義式 (3.73) により, 離散的分変導関数が次のように求まる.

$$\frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} = \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \quad (5.7)$$

## 微分方程式の差分方程式への変換

まず, 方程式の中で離散化されていない部分を離散化する. 具体的には (3.91)–(3.93) に示されている通り, 結果として, 次のような差分スキームを得る.

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta^{(2)} \left( \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \quad (5.8)$$

境界条件としては, (3.79) は既に満たされており, (3.97), つまり

$$\left[ \left( s^{(1)} \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \left( \delta^{(1)} \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \right]_0^N = 0 \quad (5.9)$$

を課すだけでよい. このとき, 散逸型方程式としての性質, すなわち全エネルギーの時間経過にともなう減少, が受け継がれることになる. この式が (5.3) を離散化したものに相当していることに注意されたい.

さて, こうしてできあがった差分スキーム (5.8) であるが, これは Crank-Nicolson スキームそのものである.

散逸型方程式を離散化したこのスキームの性質として, 当然次のものが成り立つ.

全エネルギーの減少 (3.99) が成り立つ.

質量の保存 さらに, 境界条件として

$$\left[ \delta^{(1)} \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right]_0^N = 0 \quad (5.10)$$

が成り立つならば, 質量保存則, すなわち (3.102) が成り立つ.

なお, このスキームに関して次のことが知られている [28, §8.2], [29, p.335].

安定性 任意の  $\Delta x, \Delta t$  に対して安定である (無条件安定) である.

収束 差分スキームの解は熱方程式の真の解に  $\Delta x^2 + \Delta t^2$  オーダーで収束する。

また、系がそもそも線形であることを反映して差分スキームも線形であるため、数値計算において解の存在問題に悩む必要もない。つまり、この問題に関してはおそらく最も良い差分スキームが導出されていると考えて良いと思われる。

無条件安定な差分スキームが導出されたという事実は Cahn-Hilliard 方程式の場合と同じである。このことは、本論文で提案する差分スキームの導出方法が実用的であることの一端を示していると考えられる。

## 5.2 波動方程式 (保存型)

ここでの目的は、保存型方程式として最も単純な形をもつ波動方程式について、本論文で提案する方法で差分スキームをデザインしてみせることにある。

ここでいう波動方程式とは次のものである。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (5.11)$$

この場合、局所自由エネルギー  $G(u, u_x)$  が

$$G(u, u_x) = \frac{1}{2} u^2 \quad (5.12)$$

となるのは明白である。

保存型方程式としての境界条件 (2.15) はこの場合自明に成り立っている。もう一つの境界条件 (2.16) を満たすには、 $x \in [0, L]$  として

$$[u^2]_{x=0}^L = 0 \quad (5.13)$$

が成り立てば良い。この条件を満たす具体的な条件としては、 $u(0) = u(L) = \text{const.}$  や 周期的境界条件などがある。

さらに、質量保存則を満足するための境界条件 (2.20) を満足させるためには

$$[u]_{x=0}^L = 0 \quad (5.14)$$

が成り立てば良い。が、この条件は (5.13) によりすでに成立している。

### 5.2.1 差分スキーム

この章の目的は波動方程式の差分スキームを実際に導出して見せること、およびその差分スキームがどのようなものになるかについて述べることにある。スキームの導出の手順は 3 章 の手順に従う。

局所エネルギー  $G(u, u_x)$  の離散化

(3.69) および (3.70) に従い、(5.12) を離散化する。すると、次のように離散化された局所エネルギーを得る。

$$G_d(U_k) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (U_k)^2 \quad (5.15)$$

局所自由エネルギーの離散変分導関数の計算

局所自由エネルギーの離散形  $G_d(U_k)$  が得られたので、これに対して離散変分導関数を求める。離散変分導関数の定義 (3.66) に基づいて次のように計算するだけである。

まず、(3.59) で離散汎関数を定義し、次の式を計算する。

$$\begin{aligned} J_d[U^{(n+1)}] - J_d[U^{(n)}] &= \sum_{k=0}^N \frac{1}{2} \left\{ (U_k^{(n+1)})^2 - (U_k^{(n)})^2 \right\} \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^N \left( \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) (U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}) \Delta x \end{aligned} \quad (5.16)$$



よって、離散変分導関数の定義式 (3.73) により、離散変分導関数が次のように求まる、

$$\frac{\delta G_d}{\delta(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} = \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \quad (5.17)$$

#### 微分方程式の差分方程式への変換

まず、方程式の中で離散化されていない部分を離散化する。具体的には (3.91)–(3.93) に示されている通りで、結果として次のような差分スキームを得る、

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta^{(1)} \left( \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \quad (5.18)$$

境界条件としては、(3.79) は既に満たされており、(3.98)、つまり

$$\left[ \left( \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \left( s^{(1)} \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \right]_0^N = 0 \quad (5.19)$$

を課すだけでよい。このとき、保存型方程式としての性質、すなわち全エネルギーが時間経過にともない変化しない、が受け継がれることになる。この式が (5.13) を離散化したものに相当していることに注意されたい。

さて、こうしてできあがった差分スキーム (5.18) であるが、これは典型的な陰的スキームである。

保存型方程式を離散化したこのスキームの性質として、当然次のものが成り立つ、

全エネルギーの保存 (3.104) が成り立つ、

質量の保存 さらに、境界条件として

$$\left[ \mu^{(1)} \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right]_0^N = 0 \quad (5.20)$$

が成り立つならば、質量保存則、すなわち (3.107) が成り立つ、

### 5.3 KdV 方程式 (保存型)

ここでの目的は、保存型方程式の中で非線形性が本質的な役割を果たしていると考えられる KdV 方程式について、本論文で提案する方法で差分スキームをデザインしてみせることにある。KdV 方程式は厳密解が知られていること、数値計算を行うと発散が起りやすく数値解が比較的計算しにくいということから、われわれがデザインする差分スキームが数値計算のツールとして優れたものかどうかを検証する対象として好ましい、

さて、ここでいう KdV 方程式とは次のものである、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{2} u^2 + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} \quad (5.21)$$

境界条件であるが、本来 KdV 方程式は  $\Omega = (-\infty, \infty)$  を空間領域として、その境界条件を

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial^{(n)} u}{\partial x^{(n)}} = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (5.22)$$

とするものである。しかし、この条件は数値計算の対象としては扱いにくいので、十分大きな空間領域をとり、つまり、 $L$  を非常に大きくして  $\Omega = [0, L]$  として、境界条件として周期的境界条件、つまり

$$u(x + nL) = u(x), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (5.23)$$

を課すことにした。こうしても

$$\lim_{x \rightarrow \partial\Omega} \frac{\partial^{(n)} u}{\partial x^{(n)}} = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (5.24)$$

に十分近い初期状態から計算すれば、本来のものと事実上同じ解が得られるはずであり、本論文の目的にかなうと判断した。また、周期的境界条件を仮定すると、保存型方程式としての境界条件 (2.15), (2.16) を満たす。さらに質量保存則を満たすための条件 (2.20) も満たす。

さて、周期的境界条件のもとでは、局所自由エネルギー  $G(u, u_x)$  が

$$G(u, u_x) = \frac{1}{6} u^3 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \quad (5.25)$$

であれば、

$$\frac{\delta G}{\delta u} = \frac{1}{2} u^2 + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (5.26)$$

となり、KdV 方程式が本論文でいう保存型方程式としての条件を全て満たしていることが分かる。

### 5.3.1 差分スキーム

この章の目的は KdV 方程式の差分スキームを実際に導出して見せること、およびその差分スキームがどのようなものになるかについて述べることにある。スキームの導出の手順は 3 章の手順に従う。

局所エネルギー  $G(u, u_x)$  の離散化

(3.69) および (3.70) に従い、(5.25) を離散化する。すると、次のように離散化された局所エネルギーを得る。

$$G_d(U_k) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{6} (U_k)^3 - \frac{1}{2} \frac{(\delta^+ U_k)^2 + (\delta^- U_k)^2}{2} \quad (5.27)$$

局所自由エネルギーの離散的分導関数の計算

局所自由エネルギーの離散形  $G_d(U_k)$  が得られたので、これに対して離散的分導関数を求める。離散的分導関数の定義 (3.66) に基づいて次のように計算するだけである。

いままでと同様にして、 $\sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n+1)}) \Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)}) \Delta x$  を計算すれば良い。式が複雑になるので、 $U_k = U_k^{(n+1)}$ ,  $V_k = U_k^{(n)}$  とおいてから、次のように計算する。

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^N G_d(U_k) \Delta x - \sum_{k=0}^N G_d(V_k) \Delta x \\ &= \frac{1}{6} \sum_{k=0}^N \{ (U_k)^3 - (V_k)^3 \} \Delta x \\ & \quad - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^2 - (\delta^+ V_k)^2}{2} + \frac{(\delta^- U_k)^2 - (\delta^- V_k)^2}{2} \right\} \Delta x \\ &= \frac{1}{6} \sum_{k=0}^N \{ (U_k)^2 + U_k V_k + (V_k)^2 \} (U_k - V_k) \Delta x \\ & \quad - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{\delta^+ (U_k + V_k) \delta^+ (U_k - V_k)}{2} + \frac{\delta^- (U_k + V_k) \delta^- (U_k - V_k)}{2} \right\} \Delta x \\ &= \frac{1}{6} \sum_{k=0}^N \{ (U_k)^2 + U_k V_k + (V_k)^2 \} (U_k - V_k) \Delta x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \left\{ \delta^{(2)}(U_k + V_k) \right\} (U_k - V_k) \Delta x \\
& - \frac{1}{2} \left[ \frac{\delta^+(U_k + V_k) \mu^+(U_k - V_k)}{2} + \frac{\delta^-(U_k + V_k) \mu^-(U_k - V_k)}{2} \right]_0^N
\end{aligned} \quad (5.28)$$

離散化した周期的境界条件を設定することにより、最後の項が 0 になる。

よって、離散の変分導関数の定義式 (3.73) により、離散の変分導関数が次のように求まる。

$$\frac{\delta G_d}{\delta(U_k, V_k)} = \frac{1}{2} \frac{(U_k)^2 + U_k V_k + (V_k)^2}{3} + \delta^{(2)} \frac{U_k + V_k}{2} \quad (5.29)$$

#### 微分方程式の差分方程式への変換

まず、方程式の中で離散化されていない部分を離散化する。具体的には (3.91)–(3.93) に示されている通りである。結果として、次のような差分スキームを得る。

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta^{(1)} \left\{ \frac{1}{2} \frac{(U_k^{(n+1)})^2 + U_k^{(n+1)} U_k^{(n)} + (U_k^{(n)})^2}{3} + \delta^{(2)} \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right\} \quad (5.30)$$

さて、こうしてできあがった差分スキーム (5.30) であるが、これは典型的な陰的スキームである。境界条件は周期的境界条件 (5.23) を素直に離散化し、

$$U_{k+mN} = U_k, \quad m \in \mathbb{Z} \quad (5.31)$$

とするだけである。

保存型方程式を離散化したこのスキームは、当然次の性質をもつ。

全エネルギーの保存 (3.104) が成り立つ。

質量の保存 (3.107) が成り立つ。

さらに、この差分スキームが実際にどのように働くかを見るために、われわれのデザインした差分スキームで計算した数値実験例を示す。Figure 5.1 は 領域  $\Omega = [0, 40]$  において、周期的境界条件のもとで  $\Delta x = 1/20$  および  $\Delta t = 1/1000$  としたものである。

初期値は

$$u(x, 0) = 48 \operatorname{sech}^2(2(x - 36)) + 12 \operatorname{sech}^2(x - 24) \quad (5.32)$$

である。この初期値は、この KdV 方程式の孤立解 (1-ソリトン解) がパラメータ  $\alpha$  によって

$$6\alpha \operatorname{sech}^2 \left\{ \sqrt{\frac{\alpha}{2}} (x + 2\alpha t - x_0) \right\} \quad (x_0 \text{ は初期中心点}) \quad (5.33)$$

と表されることを利用し、二つの孤立解を重ね合わせたものである。もちろんこれは 2-ソリトン厳密解ではないが、ソリトン同士が十分にはなれている場合は十分に良い近似解になるため、ほぼ厳密解として利用できるのである。

数値計算の実際の方法は 4.4.1 章 に述べた変形 Newton 法である。



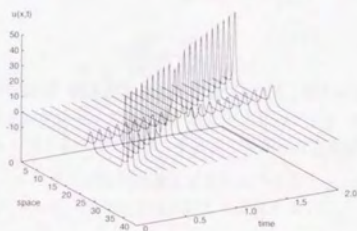


Figure 5.1: KdV 方程式に対する数値解. 差分スキーム (5.30) によって計算. パラメータは  $\Delta x = 1/20$  および  $\Delta t = 1/1000$ .

## Chapter 6

### まとめ

本論文では、局所自由エネルギー  $G(u, u_x)$  の変分導関数  $\frac{\delta G}{\delta u}$  を用いて系の時間発展の方程式が

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \quad (6.1)$$

もしくは

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\delta G}{\delta u} \quad (6.2)$$

で表されるような系(上から各々保存型、散逸型方程式と呼ぶ)に対し、新しい差分スキームの構成方法を提案した。本論文で提案した方法はシンプレクティック法[2, 3]などをはじめとする、いわば系の重要な性質を離散的に再現する方法に属するものであると考えるべきである。本論文で提案した方法は、

散逸型方程式系の場合: 全自由エネルギーが時間経過とともに減少する

保存型方程式系の場合: 全自由エネルギーが時間経過に対して変化しない

という性質を、各々の系の重要な性質であると考え、その性質を(離散化された形で)差分スキームに従う離散系で再現する方法を具体的かつ厳密に示すものである。

提案された方法によってデザインされた差分スキームは、一般に次のような性質を厳密に満たすことが3.3章において証明された。

- 上で示した系の重要な性質を離散化した性質をもつ。
- 本来の系で質量保存則が成り立つならば、離散化された質量保存則を満たす。

さらに、4章において非線形偏微分方程式のCahn-Hilliard方程式が散逸型方程式の一種であることを利用し、提案した方法によって新しい差分スキームをデザインし、次のような性質を満たすことを証明した。

- 離散化された全自由エネルギーが時間経過とともに減少する。
- 離散化された全質量が時間経過に対して変化しない。
- 差分スキームは絶対安定である。
- 差分スキームはある条件下で一解をもつ。
- 差分スキームの解はCahn-Hilliard方程式の真の解に  $\Delta x^2 + \Delta t^2$  オーダーで収束する。

また、数値実験も行い、解の存在と絶対安定性を数値的に確認することができた。ただし、解の収束については、厳密解がわかっていないので数値的に確認できたとはいえない。さらに、4.4.2 章において 2 次元問題の差分スキームをデザインし、1 次元の時同様に全エネルギーと全質量に対する性質が満たされることを見出した。またこの 2 次元問題に対する差分スキームに対しての数値実験も行い、その有効性を確認した。

さらに 5 章において散逸型方程式である熱方程式、保存型方程式である波動方程式、保存型方程式である KdV 方程式に対して新しい差分スキームをデザインした。熱方程式に対する差分スキームは Crank-Nicolson スキームそのものであり、

- 離散化された全自由エネルギーが時間経過とともに減少する。
- 離散化された全質量が時間経過に対し変化しない。

ことが散逸型方程式の差分スキームであることから示され、さらに Crank-Nicolson スキームについて既知のこと、すなわち

- 差分スキームは絶対安定である。
- 差分スキームは一意解をもつ。
- 差分スキームの解は熱方程式の真の解に  $\Delta x^2 + \Delta t^2$  オーダーで収束する。

ことがわかる。また、波動方程式と KdV 方程式に対する差分スキームに対しては、われわれの提案する方法で導出されていることから

- 離散化された全自由エネルギーが時間経過に対し変化しない
- 離散化された全質量が時間経過に対し変化しない

ことがいえる。なお、KdV 方程式に対する差分スキームを用いて数値実験を行い、この差分スキームが実用性をもつことを示した。

本論文の提案した方法が有効であることは数々の応用例から十分に示されたと考える。すると、今後の課題は次の二つの方向に大きく分けて考えられる。

- 対象とする方程式の「枠」を広げる。
- 離散計算(差分、和分、変分など)のさらなる一般化。

松尾 [13] は、非線形 Schrödinger 方程式に本論文で示した手法を応用する研究を行っている。この研究は、保存型方程式の定義を少し広げたものと解釈できる。このように、現在の形式をあまり崩さずに方程式の定義を広げていくというのがまず最初の課題であると思われる。

また、本論文では連立方程式は扱っていないが、連立方程式で記述される物理的に重要な問題は数多い。こうした問題は、非線形性が強いことが多いこともあって、解の性質が数学的に予言できないことが多い。そのため数値計算に頼ることになるが、Cahn-Hilliard 方程式など同様の理由で数値計算の結果そのものが得られにくいことがあり、そういった場合に差分スキームをデザインする新たな戦略が必要とされる。こうした要求に応えるため、本論文の方法を発展させて連立方程式に対してもなんらかの指針を示すことが次の課題であろう。

離散計算のさらなる一般化においては、まず計算の全てを複素化する必要があると考える。これは松尾 [13] の研究において一部がなされている。こうすることで量子力学をはじめとする物理的問題から生ずる偏微分方程式に対してもなんらかの解決方法を示すことができるようになると思われる。

また、差分の階数により公式の形が異なる現状は決して理想的であるとは言えない。これに対しては、(3.30) で示されるようなより抽象化した形での作用素の表現を導入することにより、階数などによらない一般的な表式が可能になることも期待される。ただし、こうすることで計算や表式がやや複雑になるおそれがあるため、そうならないように十分に注意深く表式を選ぶ必要があるものと思われる。



## Acknowledgement

研究室に大学院修士課程学生として入学して以来、森 正武教授には本研究を含め長期間にわたり、ともすれば安きになられる筆者に対し終始懇切丁寧な、また我慢強い指導をしていただきました。ここに心からの感謝の意を捧げます。杉原 正顯助教授には数学の基礎から教えていただいたばかりでなくこれまでの研究における突破口となる様々な指導をいただきました。ここに感謝の意を捧げます。また、研究室の先輩である恩田 智彦博士には物理的な視点の重要性と Cahn-Hilliard 方程式についての知識を教えていただき、本研究の動機をつくっていただきました。ここに深く感謝いたします。同僚である緒方 秀教氏には、セミナー等を通じて数学をはじめとする幅広い分野にわたり議論、指導をいただき、浅学非才の筆者を助けていただきました。ここに深く感謝いたします。

また、力学講座の方々には数学的な知識や物理的な問題について多くのことを教えていただきました。特に、当時薩摩研の博士課程学生であった寛 三郎博士には離散系における可積分系に関して様々な教えをいただき本研究を進めるにあたり非常に有益でありました。ここに深く感謝いたします。また、研究室の後輩に当たる大浦 拓哉氏、岡野 大氏、松尾 宇泰氏には様々な計算の助力をはじめ多くの助力をいただきました。特に松尾 宇泰氏の非線形 Schrödinger 方程式に対する差分スキームの研究は本研究の発展する方向を指示するものであります。ここに感謝の意を捧げます。

本研究を進めるにあたっては多くの方々と有益な議論をさせていただき、また多くの有益な御指導をいただきました。特に京都大学数理解析研究所の室田 一雄教授には数週間にわたり特別に御指導いただき、本研究を大きく進める力になっていただきました。ここに心からの感謝の意を捧げます。

他にも記しきれないほどの多くの方から恩恵をいただきました。ここに感謝の意を表わさせていただきます。

最後に、筆者の生活をあたたかく見守ってくれた両親と友人に心より感謝し本論文を捧げます。

## Bibliography

- [1] 降旗大介, 恩田智彦, 森正武. Cahn-Hilliard 方程式の差分法による数値的解析. 日本応用数学会論文誌, Vol. 3, No. 3, pp. 217-228, 1993.
- [2] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo. Symplectic Numerical Methods for Hamiltonian Problems. In Robert A. de Groot and Jaroslav Nadrechal, editors, *Physics Computing '92*, pp. 153-160, 1992, World Scientific.
- [3] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman and Hall, 1994.
- [4] W. Strauss and L. Vazquez. Numerical Solution of a Nonlinear Klein-Gordon Equation. *J. Comp. Phys.*, Vol. 28, pp. 271-278, 1978.
- [5] R. Hirota. Difference Analogues of Nonlinear Evolution Equations in Hamiltonian Form. Tech. Rep. A-12, Hiroshima University, Faculty of Engineering, Department of Applied Mathematics, Hiroshima, 730, Japan, Aug. 1982.
- [6] D. Greenspan. Conservative Numerical Methods for  $\ddot{x} = f(x)$ . *J. Comput. Phys.*, Vol. 56, pp. 28-41, 1984.
- [7] Q. Du and R. A. Nicolaides. Numerical Analysis of a Continuum Model of Phase Transition. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 28, No. 5, pp. 1310-1322, Oct. 1991.
- [8] R. S. Ward. Discretization of Integrable Systems. *Physics Letters A*, Vol. 165, pp. 325-329, 1992.
- [9] S. Li and Vu-Quoc. Finite Difference Calculus Invariant Structure of a Class of Algorithms for the Nonlinear Klein-Gordon Equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 32, No. 6, pp. 1839-1875, Dec. 1995.
- [10] 森口繁一, 高田 勝. 数値計算法 I, II. 岩波講座 現代応用数学. 岩波書店, 東京, 1958.
- [11] 石川広美. 差分方程式入門. コロナ社, 東京都文京区千石 4-46-10, 第1版, 1976.
- [12] D. Zeilberger. The Algebra of Linear Partial Difference Operators and Its Applications. *SIAM J. Math. Anal.*, Vol. 11, No. 6, pp. 919-932, Nov. 1980.
- [13] 松尾宇泰, 杉原正顕. 非線形 Schrödinger 方程式のある差分スキームについて. 応用数学会平成8年度年会口頭発表, Sep. 1996.
- [14] J. W. Cahn and J. E. Hilliard. Free Energy of a Non-Uniform System. I. Interfacial Free Energy. *J. Chem. Phys.*, Vol. 28, pp. 258-267, 1958.
- [15] H. Tanaka and T. Nishi. Direct Determination of the Probability Distribution Function of Concentration in Polymer Mixtures Undergoing Phase Separation. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 59, No. 6, pp. 692-695, 1987.

- [16] C. M. Elliott and Z. Songmu. On the Cahn-Hilliard Equation. *Arch.Rational Mech.Anal.*, Vol. 96, pp. 339-357, 1986.
- [17] J. Carr, M. E. Gurtin, and M. Slemrod. Structured Phase Transitions on a Finite Interval. *Arch.rat.Mech.Anal.*, Vol. 86, pp. 317-351, 1984.
- [18] A. Novick-Cohen and L. A. Segel. Nonlinear Aspects of the Cahn-Hilliard Equation. *Physica D*, Vol. 10, pp. 277-298, 1984.
- [19] J. S. Langer, M. Bar-on, and H. D. Miller. New Computational Method in the Theory of Spinodal Decomposition. *Phys.Rev.A*, Vol. 11, No. 4, pp. 1417-1429, Apr. 1975.
- [20] C. M. Elliott and D. A. French. Numerical Studies of the Cahn-Hilliard Equation for Phase Separation. *IMA J.Appl.Math.*, Vol. 38, pp. 97-128, 1987.
- [21] C. M. Elliott, D. A. French, and F. A. Milner. A Second Order Splitting Method for the Cahn-Hilliard Equation. *Numer.Math.*, Vol. 54, pp. 575-590, 1989.
- [22] C. M. Elliott and D. A. French. A Nonconforming Finite-Element Method for the Two-Dimensional Cahn-Hilliard Equation. *SIAM J.Numer.Anal.*, Vol. 26, pp. 884-903, 1989.
- [23] C. M. Elliott and S. Larsson. Error Estimates with Smooth and Nonsmooth Data for a Finite Element Method for the Cahn-Hilliard Equation. *Math. Comp.*, Vol. 58, No. 198, pp. 603-630, Apr. 1992.
- [24] D. Furihata, T. Onda, and M. Mori. A Numerical Analysis of the Cahn-Hilliard Equation by the Finite Difference Scheme (in Japanese). *Transactions of the Japan Society for Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 3, No. 3, pp. 217-228, 1993.
- [25] Z. Z. Sun. A Second-Order Accurate Linearized Difference Scheme for the Two-Dimensional Cahn-Hilliard Equation. *Math. Comput.*, Vol. 64, No. 212, pp. 1463-1471, Oct. 1995.
- [26] D. Furihata, T. Onda, and M. Mori. A Numerical Analysis of Some Phase Separation Problem. In Zhong-Ci Shi and Teruo Ushijima, editors, *Proceedings of the First China-Japan Seminar of NUMERICAL MATHEMATICS*, pp. 29-44, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, Aug. 1992. World Scientific.
- [27] 杉原正顕, 室田一雄. 数値計算法の数理. 岩波書店, 東京, Nov. 1994.
- [28] R. D. Richtmyer and K. W. Morton. *Difference Methods for Initial-Value Problems*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 2 edition, 1967.
- [29] W. F. Ames. 工学における非線形偏微分方程式 I 下, 数理解析とその周辺, 第 24 巻. 産業図書, 東京都千代田区外神田 1-4-21, 第 2 版, 1979.
- [30] F. John. *Lectures on Advanced Numerical Analysis*. Gordon and Breach, New York, 1967.



## Appendix A

### 離散ソボレフの補題の証明

これから示す証明は F. John [30, §8.6] に示されている証明に基づくものである。ただし、離散ソボレフノルムの定義が (4.17) と異なるため、証明を少し変えてある。

**Proof:** まず、 $0 \leq l < m \leq N$  と仮定し、点  $m$  および  $l$  における  $u$  を引き算する。

$$\begin{aligned} u_m - u_l &= (u_m - u_{m-1}) + (u_{m-1} - u_{m-2}) + \cdots + (u_{l+1} - u_l) \\ &= \delta^+ u_{m-1} \Delta x + \delta^+ u_{m-2} \Delta x + \cdots + \delta^+ u_l \Delta x \\ &= \Delta x \sum_{k=l}^{m-1} \delta^+ u_k, \quad 0 \leq l < m \leq N. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

(A.1) とシュワルツの不等式から次の式を得る。

$$(u_m - u_l)^2 \leq \Delta x^2 N \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2, \quad 0 \leq l, m \leq N. \quad (\text{A.2})$$

**Remark:**  $l < m$  を仮定しなくても (A.2) は成立する。  $\square$

(A.2) および  $\frac{1}{2}a^2 - b^2 \leq (a-b)^2$  から次の不等式を得る。

$$(u_m)^2 \leq 2(u_l)^2 + 2\Delta x^2 N \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2, \quad 0 \leq l, m \leq N \quad (\text{A.3})$$

(A.3) から次の二つの不等式が得られる。

$$(u_m)^2 \leq 2(u_l)^2 + 4\Delta x^2 N \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2, \quad 0 \leq l, m \leq N \quad (\text{A.4})$$

$$(u_m)^2 \leq 4(u_l)^2 + 4\Delta x^2 N \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2, \quad 0 \leq l, m \leq N \quad (\text{A.5})$$

この二つの不等式 (A.4) および (A.5) より次の式が得られる。

$$(N+1)(u_m)^2 \leq 4 \sum_{k=0}^N (u_k)^2 + 4(N+1)N\Delta x^2 \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2, \quad 0 \leq m \leq N \quad (\text{A.6})$$

よって, 次の不等式が成り立ち, 題意を得る.

$$\begin{aligned}
 (u_m)^2 &\leq 4 \left\{ \frac{1}{N+1} \sum_{k=0}^N {}'' (u_k)^2 + N \Delta x^2 \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2 \right\} \\
 &\leq 4 \left\{ \frac{1}{N} \sum_{k=0}^N {}'' (u_k)^2 + N \Delta x^2 \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2 \right\} \\
 &= 4 \left\{ \frac{\Delta x}{L} \sum_{k=0}^N {}'' (u_k)^2 + L \Delta x \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2 \right\} \\
 &\leq 4 \max \left( \frac{1}{L}, L \right) \left\{ \sum_{k=0}^N {}'' (u_k)^2 \Delta x + \sum_{k=0}^{N-1} (\delta^+ u_k)^2 \Delta x \right\} \\
 &= 4 \max \left( \frac{1}{L}, L \right) \|u\|_{d-(1,2)}^2.
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

□

## Appendix B

### 行列 $Z$ の直交性

Proof: 行列  $Z$  (4.61) の直交性を証明する.

$$Z = (z_0, z_1, \dots, z_N) \quad (\text{B.1})$$

とすると, 各ベクトル  $z_k$  はベクトル  $y_k$  を用いて次のように表される.

$$z_k = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N}} y_k & (k=0 \text{ or } k=N) \\ \sqrt{\frac{2}{N}} y_k & (1 \leq k \leq N-1) \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

ただし,

$$y_k \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\frac{k}{N} \pi \cdot 0) \\ \cos(\frac{k}{N} \pi \cdot 1) \\ \cos(\frac{k}{N} \pi \cdot 2) \\ \vdots \\ \cos(\frac{k}{N} \pi \cdot (N-2)) \\ \cos(\frac{k}{N} \pi \cdot (N-1)) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\frac{k}{N} \pi \cdot N) \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

である.

このベクトル  $y_k$  に対し,

$$\begin{aligned} y_m^T \cdot y_n &= \sum_{k=0}^N \cos(\frac{m}{N} \pi \cdot k) \cos(\frac{n}{N} \pi \cdot k) \\ &= \begin{cases} N & (m=n=0 \text{ or } m=n=N) \\ \frac{1}{2}N & (1 \leq m=n \leq N) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

が成立するため,  $\{y_k\}_{k=0}^N$  は  $R^{N+1}$  の完全直交系である.

$\{z_k\}_{k=0}^N$  はこれを正規化したものだから,  $R^{N+1}$  の正規完全直交系であり, それを並べた行列  $Z$  は直交行列となる.  $\square$



## Appendix C

### 和分の積分による評価

ここで, 不等式 (4.25), すなわち

$$\sum_{k=0}^N G_d(u_k^{(0)}) \Delta x \leq \int_0^L G(u^{(0)}) dx + C_0 \Delta x^2 \quad (4.25)$$

を証明する.

**Proof:**

次の式を利用して評価を行う.

$$\begin{aligned} \left| \int_0^L G(u^{(0)}) dx - \sum_{k=0}^N G_d(u_k^{(0)}) \Delta x \right| &\leq \left| \int_0^L G(u^{(0)}) dx - \sum_{k=0}^N G(u_k^{(0)}) \Delta x \right| \\ &\quad + \left| \sum_{k=0}^N \{G(u^{(0)}) - G_d(u_k^{(0)})\} \Delta x \right| \end{aligned} \quad (C.1)$$

まずこの不等式の第1項であるが, 良く知られた台形則の近似誤差 [27](p.262) により,  $G(u^{(0)}) \in C^2[0, L]$ , すなわち  $u^{(0)} \in C^3[0, L]$  ならば

$$\begin{aligned} \left| \int_0^L G(u^{(0)}) dx - \sum_{k=0}^N G(u_k^{(0)}) \Delta x \right| &\leq \Delta x^2 \frac{2^2 - 1}{2^{2-1}} \frac{|B_2|}{2!} \int_0^L \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} G(u^{(0)}) \right| dx \\ &= \frac{1}{8} \Delta x^2 \int_0^L \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} G(u^{(0)}) \right| dx \end{aligned} \quad (C.2)$$

という評価が得られる.

次に第2項の評価は,  $u^{(0)} \in C^3[0, L]$  ならば

$$\delta^{(1)} u_k^{(0)} = \frac{\partial}{\partial x} u^{(0)}(k \Delta x) - \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} u^{(0)}(\alpha_k) \quad (C.3)$$

(ただし  $|\alpha_k - k \Delta x| < \Delta x$ ) であることを利用する. ただし, 境界条件 (4.4) および (4.10) として

$$\delta^{(1)} u_k^{(0)} = \frac{\partial}{\partial x} u^{(0)}(k \Delta x) = 0 \quad \text{for } k=0 \text{ or } k=N \quad (C.4)$$

は成立しているものとする.

すると,

$$\sum_{k=0}^N \{G(u^{(0)}) - G_d(u_k^{(0)})\} \Delta x$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-q}{2} \sum_{k=0}^N \nu \left\{ \left( \frac{\partial u^{(0)}}{\partial x}(k\Delta x) \right)^2 - \left( \frac{\partial u^{(0)}}{\partial x}(k\Delta x) - \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 u^{(0)}}{\partial x^3}(\alpha_k) \right)^2 \right\} \Delta x \\
&= \frac{-q}{2} \sum_{k=0}^N \nu \left\{ \frac{\Delta x^2}{3} \frac{\partial u^{(0)}}{\partial x}(k\Delta x) \frac{\partial^3 u^{(0)}}{\partial x^3}(\alpha_k) - \frac{\Delta x^4}{36} \left( \frac{\partial^3 u^{(0)}}{\partial x^3}(\alpha_k) \right)^2 \right\} \Delta x \quad (\text{C.5})
\end{aligned}$$

と評価できる。

後は符号に注意しつつ  $\frac{\partial u^{(0)}}{\partial x}$  と  $\frac{\partial^3 u^{(0)}}{\partial x^3}$  を上から評価するだけである。  
 こうして得られた 2 項の評価を代入すれば目的の不等式が得られる。

□

