微分方程式の離散化 –極限操作を無くしたときにあらわれるもの–

降籏 大介
furihata@cmc.osaka-u.ac.jp

大阪大学

2019.10.23 for 授業「数学への道程」

1. イントロダクション

- 計算における「誤差」の階層
- 「構造保存」とは

2. 構造保存のおおまかな把握

- Newton の運動方程式を例にして
- 構造保存と離散勾配

3. 構造保存 for 偏微分方程式

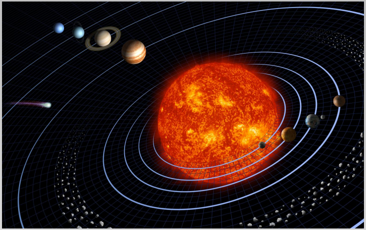
- 熱拡散方程式を例として
- 実装 (これを実現するのが難しい)
- Cahn–Hilliard 方程式など

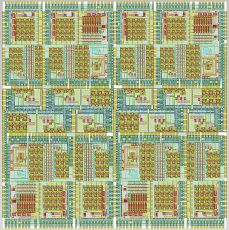
§

イントロダクション

We do not need exact classical trajectories to do this, but must lay great emphasis on energy conservation as begin of primary importance for this reason.
(M.P.Allen and D.J.Tildesley 1987)

現実問題の多くには、解に特別な性質がある





エネルギー保存性、シンプレクティック性、解の正値性, 電荷保存, etc...
といった性質があるはずで、これらが失われた近似解には意味がないことも多い.

シミュレーションや数値計算では、これらの性質をもちろん再現したい.

Physics is characterized by conservation laws and by symmetry.
(D.Greenspan 1984)

0492-J

計算の誤差の種類と「階層」

アルゴリズム依存性

構造誤差
（離散化の選択肢が無限なため発生する）

打ち切り誤差
（計算速度が有限なため発生する）

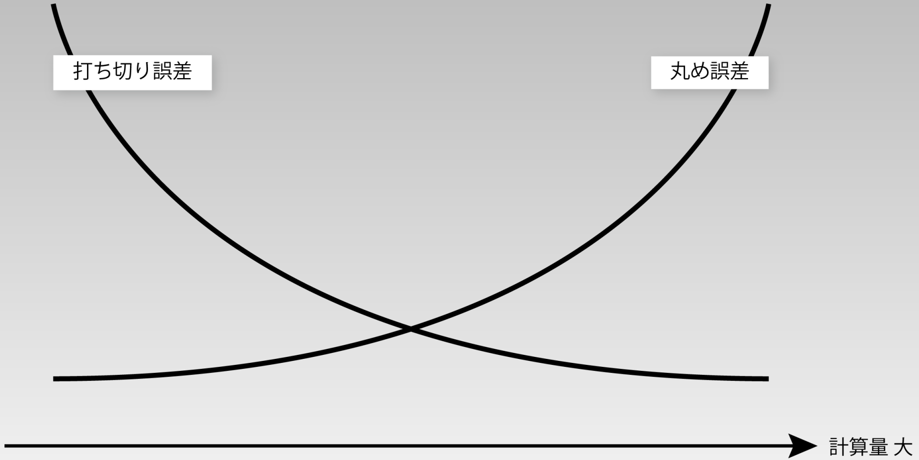
丸め誤差
（メモリが有限なため発生する）

ハードウェア依存性

* 構造誤差 … 厳密解の持つ数学的な性質が近似解で再現されないこと一般の謂

0492-J

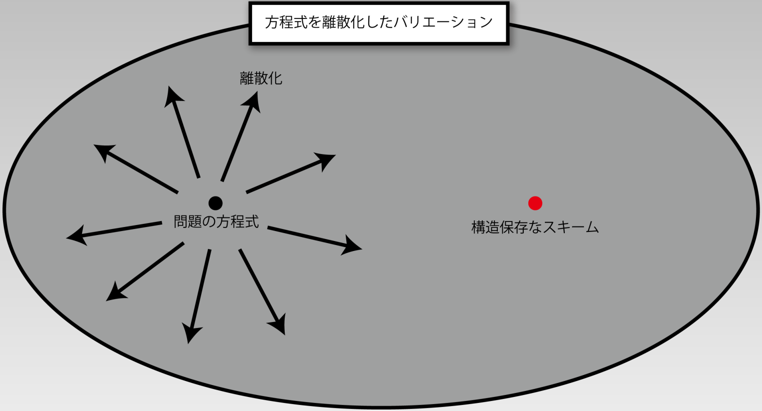
古典的誤差の描像



計算量を大きくすると打切り誤差は下がるが、丸め誤差が蓄積する.

構造誤差はどうなる？

構造保存 (structure preserving)



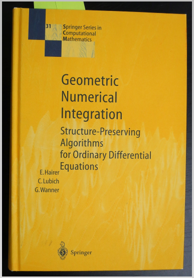
方程式を離散化 = 数値スキームは無限に多くのバリエーションをもつ.

その中から、構造保存なスキームを **“design”** ないしは **“選択”** できるか.

構造保存スキームのこれまでの研究

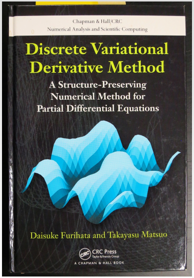
古典

- 常微分方程式, エネルギー保存
  John C. Butcher 1964, Donald Greenspan 1984 等
- 常微分方程式, Symplectic 性保存
  de Vogelaere 1956, Ruth 1983, Feng Kang 1985 等

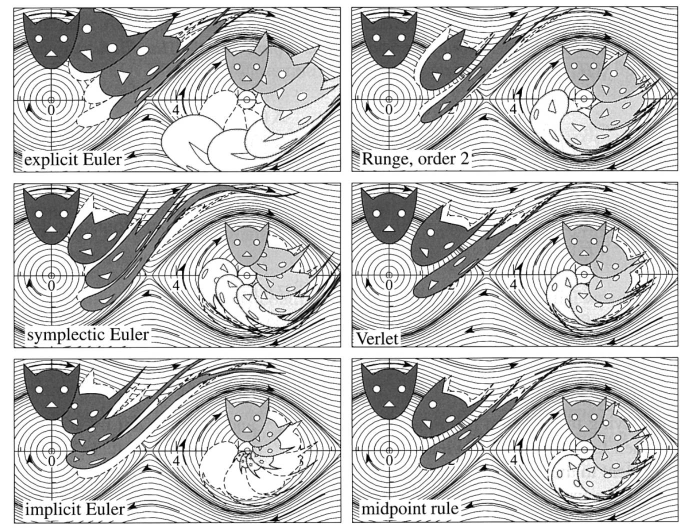


近代

- 偏微分方程式, エネルギー保存 / 散逸
  Daisuke Furihata 1999, Elena Celledoni et.al 2012 等
- 偏微分方程式, multi-symplectic 性保存
  Sebastian Reigh 2000 等
- 偏微分方程式, 解の正値性 etc.,
  Norikazu Saito 2007 等



構造保存スキーム研究例: 常微分方程式



各種スキームによる symplectic 性保存の有無 (図中の面積保存性)

構造保存の考え方

+

→

方程式 + 再構築した足場 → 構造保存スキーム

方程式を設計するのに用いた考え方, 謂わば「足場」があったはず.
足場を「再構築」して解の重要な性質を理解し、スキームを "design."

構造保存スキーム研究: おおまかな現状

- これまでの研究成果により、
  空間領域 $\Omega \in \boldsymbol{R}^1$ な問題についてはかなりうまくいく.

$\Downarrow$

本講演 第二部にて
(構造保存と離散勾配)

- 空間領域 $\Omega \in \boldsymbol{R}^2$ 以上の問題については？

$\Downarrow$

本講演 第三部にて
(Voronoi 格子 + 離散変分導関数法)

§

構造保存のおおまかな把握

Discrete gradients are used to guarantee preservation of a first integral in a numerical approximation of a differential system.
E. L. Mansfield and G. R. W. Quispel 2009)

簡単な例 (ODE) で:
Newton の運動方程式

by Greenspan 1984.

Newton の運動方程式 (ODE)

質点の質量を 1, 時間 t での質点の位置を $x(t)$ として，位置 x で働く外力を $f(x)$ とすると,

$$\text{加速度 } \ddot{x} = \text{ 外力 } f(x).$$

このとき，速度 $v = \dot{x}$, 位置ポテンシャル $\phi(x)$ (ただし, $d\phi/dx = -f(x)$) を用いて表される

$$\text{エネルギー} \quad J \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}v^2 + \phi(x)$$

は保存量.

0493-J

エネルギー保存性

以下のように，ポテンシャルを用いた形で Newton 運動方程式を (連立) 一階常微分方程式に書き直す.

$$\begin{cases} \dot{x} &= v, \\ \dot{v} &= -\dfrac{d\phi}{dx}. \end{cases}$$

すると，以下のようにしてエネルギー保存性が理解できる.

$$\begin{aligned} \frac{dJ}{dt} &= v \cdot \dot{v} + \frac{d\phi}{dx} \cdot \dot{x} \\ &= v\left(\dot{v} + \frac{d\phi}{dx}\right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

(参考) $J = \dfrac{1}{2}v^2 + \phi(x)$.

Greenspan スキーム

時間 $t = n\Delta t$ のときの x の数値解を x_n, v の数値解を v_n として,

$$\begin{cases} \dfrac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} & = & \dfrac{v_{n+1} + v_n}{2}, \\ \dfrac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t} & = & -\dfrac{\phi(x_{n+1}) - \phi(x_n)}{x_{n+1} - x_n}. \end{cases}$$

0493-J

Greenspan スキームのエネルギー保存性

$J_n \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(v_n)^2 + \phi(x_n)$ として,

$$
\begin{aligned}
&\frac{J_{n+1} - J_n}{\Delta t} \\
&= \frac{1}{2\Delta t}\left\{(v_{n+1})^2 - (v_n)^2\right\} + \frac{1}{\Delta t}\left\{\phi(x_{n+1}) - \phi(x_n)\right\} \\
&= \left(\frac{v_{n+1} + v_n}{2}\right)\left(\frac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t}\right) + \left(\frac{\phi(x_{n+1}) - \phi(x_n)}{x_{n+1} - x_n}\right)\left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t}\right) \\
&= \left(\frac{v_{n+1} + v_n}{2}\right)\left\{\left(\frac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t}\right) + \left(\frac{\phi(x_{n+1}) - \phi(x_n)}{x_{n+1} - x_n}\right)\right\} \\
&= 0.
\end{aligned}
$$

0493-J

Greenspan スキームから言えそうなこと

- Newton 運動方程式のエネルギー保存性は，その一階の形式から自然に理解できる．
- Greenspan は，エネルギー保存性を示す変形を，離散演算で素直に真似 (mimic) したことに相当する．
- ということは，保存性，散逸性を離散系で再現するには，
  1. その**保存性，散逸性から方程式を導出する**数学的表現を求める
  2. その数学的表現を，素直に離散化する．

  というステップを踏めれば良いのでは？

0493-J

構造保存と離散勾配:
多くの問題はこれで理解できる

discrete gradient (離散勾配) と構造保存

Discrete gradients are used to guarantee preservation of a first integral in a numerical approximation of a differential system.

E. L. Mansfield and G. R. W. Quispel (2009)

系の積分で表される保存量や散逸量のその性質を再現するような構造保存数値解法では、広い意味での discrete gradient (離散勾配) をどう離散的に構成するか、という点が本質的.

0494-J

discrete gradient (離散勾配) の一般的な定義

内積が $\langle , \rangle$ が定義されている解集合 U と写像 $V : U \to$ **R** or **C** に対し、

$$\begin{cases} V(\boldsymbol{x}') - V(\boldsymbol{x}) &= \left\langle \overline{\nabla V}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}), (\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}) \right\rangle, \quad \text{(勾配性)} \\ \overline{\nabla V}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) &= \nabla V(\boldsymbol{x}). \quad \text{(近似性)} \end{cases}$$

を満たす $\overline{\nabla V} : U^2 \to U$ を、通常は V の離散勾配と定義する.

この制限を満たす $\overline{\nabla V}$ は**唯一ではない**ことに留意.

さて、ともかくも、この概念で長らく皆は満足してきた. しかし、この式の 1 つ目には隠れた前提があり、これを緩和することでわれわれはさらに得ることがある.

注: 離散勾配の概念に、内積が真に必要かどうかは議論がある (石川 and 谷口, 2016).

0494-J

discrete gradient (離散勾配) と構造保存: ODE での例

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = S(\boldsymbol{x})\,\nabla V(\boldsymbol{x}),$$ where S is skew, では $V(\boldsymbol{x})$ が保存量.

なぜならば $$\frac{dV(\boldsymbol{x})}{dt} = \left\langle \nabla V(\boldsymbol{x}), \frac{d\boldsymbol{x}}{dt} \right\rangle = \langle \nabla V(\boldsymbol{x}), S(\boldsymbol{x})\,\nabla V(\boldsymbol{x})\rangle = 0.$$

上の問題に対する保存スキームの例

$$\frac{\boldsymbol{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{x}^{(n)}}{\Delta t} = \overline{S}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}, \boldsymbol{x}^{(n)})\,\overline{\nabla V}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}, \boldsymbol{x}^{(n)}),$$ where $\overline{S}$ is skew.

$$\begin{aligned}
\frac{V(\boldsymbol{x}^{(n+1)}) - V(\boldsymbol{x}^{(n)})}{\Delta t} &= \left\langle \overline{\nabla V}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}, \boldsymbol{x}^{(n+1)}), \frac{\boldsymbol{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{x}^{(n)}}{\Delta t} \right\rangle \\
&= \left\langle \overline{\nabla V}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}, \boldsymbol{x}^{(n+1)}), \overline{S}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}, \boldsymbol{x}^{(n)})\overline{\nabla V}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}, \boldsymbol{x}^{(n+1)}) \right\rangle \\
&= 0.
\end{aligned}$$

discrete gradient (離散勾配) と構造保存: PDE での例

$$\frac{\partial u}{\partial t} = S\frac{\delta G}{\delta u}, \text{ where } S \text{ is skew,}$$

では内積を $\langle f, g\rangle \overset{\mathsf{def}}{=} \int f(x)g(x)\,\mathsf{d}x$ として $I = \int G(u)\,\mathsf{d}x$ が保存量．なぜなら、

$$\frac{d}{dt}\int G(u)\,\mathsf{d}x = \left\langle \frac{\delta G}{\delta u}, \frac{\partial u}{\partial t}\right\rangle = \left\langle \frac{\delta G}{\delta u}, S\frac{\delta G}{\delta u}\right\rangle = 0.$$

上の問題に対する保存スキームの例 (通常の離散変分導関数法など)

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \overline{S}\left(\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(U^{(n+1)}, U^{(n)})}\right)_k, \text{ where } \overline{S} \text{ is skew.}$$

$$\begin{aligned}\frac{\left\langle G_{\mathsf{d}}(U^{(n+1)}), 1\right\rangle - \left\langle G_{\mathsf{d}}(U^{(n)}), 1\right\rangle}{\Delta t} &= \left\langle \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(U^{(n+1)}, U^{(n)})}, \frac{U^{(n+1)} - U^{(n)}}{\Delta t}\right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(U^{(n+1)}, U^{(n)})}, S\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(U^{(n+1)}, U^{(n)})}\right\rangle = 0,\end{aligned}$$

where $\langle f, g\rangle = \sum'' f_k g_k \Delta x.$

discrete gradient の定義例: Harten, Lax and van Leer 1983

$(\nabla V)_i = \dfrac{\partial}{\partial x_i} V$ に対し、以下のようにする.

$$\left(\overline{\nabla V}\right)_i (\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \overset{\mathsf{def}}{=} \int_0^1 (\nabla V)_i (\gamma \boldsymbol{x}' + (1-\gamma)\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\gamma.$$

すると以下の式が成り立つので、これは確かに discrete gradient.

$$\begin{aligned}
\left\langle \overline{\nabla V}, \boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x} \right\rangle &= \sum_i \left(\overline{\nabla V}\right)_i (x_i' - x_i) \\
&= \int_0^1 \sum_i (\nabla V)_i (\gamma \boldsymbol{x}' + (1-\gamma)\boldsymbol{x})(x_i' - x_i) \mathrm{d}\gamma \\
&= \int_0^1 \frac{d}{d\gamma} V(\gamma \boldsymbol{x}' + (1-\gamma)\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\gamma \\
&= V(\boldsymbol{x}') - V(\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

* Celleconi and et.al.(2012) らの “Average Vector Field (AVF)” と本質的に同じ.

discrete gradient の定義例: Ito and Abe 1988

$\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{x}'$ まで各軸に順番に沿う経路での差分近似 (対称性は捨てる).
例えば $\mathbf{R}^3$ では

$$\overline{\nabla} V(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \frac{V(x',y,z)-V(x,y,z)}{x'-x} \\ \frac{V(x',y',z)-V(x',y,z)}{y'-y} \\ \frac{V(x',y',z')-V(x',y',z)}{z'-z} \end{pmatrix}$$

とする．これも明らかに discrete gradient である．

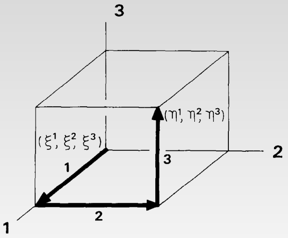


FIG 1. Illustration of $\Delta_{\xi'}G(\xi)|_\eta$ when $\mu = 3$

Ito and Abe 1988．より

* この経路平均をとれば対称性は回復するが、次元数が大きくなると…

discrete gradient の定義例: Gonzalez 1996

真の gradient からズレる分を強引に補正する.

必ず非線形になってしまうし、結果も美しくないが、拡張はし易い.

$\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{x}' + \boldsymbol{x})/2$ として、以下のようにする.

$$\overline{\nabla V}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \overset{\text{def}}{=} \nabla V(\boldsymbol{z}) + \frac{V(\boldsymbol{x}') - V(\boldsymbol{x}) - \langle \nabla V(\boldsymbol{z}), \boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x} \rangle}{\|\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}\|^2} (\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}).$$

すると以下の式が成り立つので、確かにこれも discrete gradident である.

$$\begin{aligned} \left\langle \overline{\nabla V}, \boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x} \right\rangle &= \left\langle \nabla V(\boldsymbol{z}), \boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x} \right\rangle + \frac{V(\boldsymbol{x}') - V(\boldsymbol{x}) - \langle \nabla V(\boldsymbol{z}), \boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x} \rangle}{\|\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}\|^2} \|\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}\|^2 \\ &= V(\boldsymbol{x}') - V(\boldsymbol{x}). \end{aligned}$$

* 拡張例として、Furihata and Matsuo 2011 (p.251) にこの高精度版が定義されている.

discrete gradient の例: 離散変分導関数 (F. 1996 以降)

細かいことは省略するが、変分計算を丁寧に離散化することで、連続な計算相当を行うことで導出するもの.

$$\left\langle G_{\mathsf{d}}(U^{(n+1)}), 1 \right\rangle - \left\langle G_{\mathsf{d}}(U^{(n)}), 1 \right\rangle = \left\langle \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(U^{(n+1)}, U^{(n)})}, U^{(n+1)} - U^{(n)} \right\rangle$$

$$\text{where } \langle f, g \rangle = \sum_k{}'' f_k g_k \Delta x.$$

が成立する.

0494-J

§

構造保存を偏微分方程式に

The other option—which *is* the basic concept throughout
this book—is to use some special scheme designed for
stable integration of the equation.
D. Furihata and T. Matsuo 2010)

簡単な例で：
熱拡散方程式

簡単な例で： 熱拡散方程式

“離散変分導関数法は，変分導関数に基づく性質をもつ偏微分方程式に対して，その性質を引き継ぐように数値スキームを導出する方法である”.

このフレーズだけでは理解は無理なので，簡単な例などを通じて実際に試すことで理解しよう.

- **対象:**
  熱拡散方程式 $\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

  for $u = u(x, t)$.
- **性質:**
  $\int u^2 \, \mathrm{d}x$ および $\int (\partial u / \partial x)^2 \, \mathrm{d}x$ の両方が散逸性を持つ (重要).
- **主たる目的:**
  上記の性質を離散的に再現すること (= 構造保存)
- **隠れた目的:**
  得られた数値スキームが安定で，精度が良くて，etc.⋯

0430-J

熱拡散方程式の散逸性 (1)

先に述べた 2 つの散逸性を，熱拡散方程式の「抽象形，構造」を用いて理解する．

熱拡散方程式 $u_t = u_{xx}$ は次のように解釈できる．

- u^2 **散逸性をもたらす構造:**

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\delta G_1}{\delta u} \Longrightarrow \frac{dJ_1}{dt} = \int\left(\frac{\delta G_1}{\delta u}\frac{\partial u}{\partial t}\right)\mathrm{d}x = \int\left(\frac{\delta G_1}{\delta u}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\delta G_1}{\delta u}\right)\mathrm{d}x \leq 0$$

ただし，$J_1 \stackrel{\mathrm{def}}{=} \int G_1(u,u_x)dx, \quad G_1(u,u_x) = u^2/2.$

- $(u_x)^2$ **散逸性をもたらす構造:**

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta G_2}{\delta u} \Longrightarrow \frac{dJ_2}{dt} = \int\left(\frac{\delta G_2}{\delta u}\frac{\partial u}{\partial t}\right)\mathrm{d}x = -\int\left(\frac{\delta G_2}{\delta u}\frac{\delta G_2}{\delta u}\right)\mathrm{d}x \leq 0$$

ただし，$J_2 \stackrel{\mathrm{def}}{=} \int G_2(u,u_x)dx, \quad G_2(u,u_x) = (u_x)^2/2.$

熱拡散方程式の散逸性 (2)

構造が簡単な $(u_x)^2$ 散逸性から調べてみよう．局所エネルギー関数を $G(u,u_x)=(\partial u/\partial x)^2/2$, と定義し，熱拡散方程式を次の形で解釈する．

$$\frac{\partial u}{\partial t}=-\left(\frac{\delta G}{\delta u}\right) \qquad \text{ただし，}\quad \frac{\delta G}{\delta u}\stackrel{\text{def}}{=}\frac{\partial G}{\partial u}-\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial G}{\partial u_x}=-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

変分導関数 $\delta G/\delta u$ は，次の関係式を満たすように定義される概念である．

$$\begin{aligned}
J[u+\delta u]-J[u] &= \int_0^L\left\{\frac{\partial G}{\partial u}\delta u+\frac{\partial G}{\partial u_x}\delta u_x\right\}dx+\mathrm{O}(\delta u^2)\\
&= \int_0^L\left\{\left(\frac{\partial G}{\partial u}-\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial G}{\partial u_x}\right)\delta u\right\}dx+(\mathrm{b.t.})+\mathrm{O}(\delta u^2)\\
&= \int_0^L\left\{\frac{\delta G}{\delta u}\delta u\right\}dx+(\mathrm{b.t.})+\mathrm{O}(\delta u^2)
\end{aligned}$$

ただし，$J[u]=\int_0^L G(u,u_x)\,dx$.

部分積分が重要であることに注目！

熱拡散方程式の散逸性 (3)

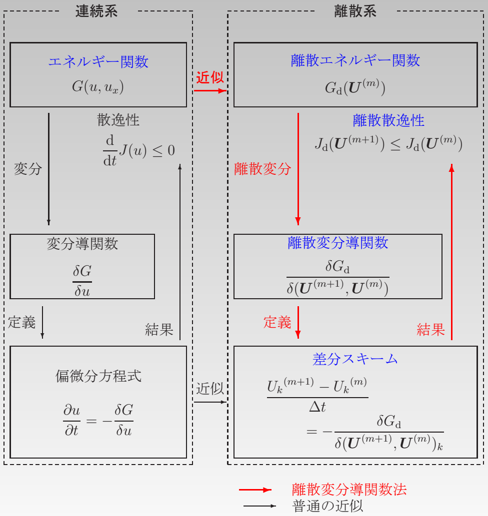
時間微分を行って，エネルギー散逸性は以下のように理解できる．

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\int_0^L G(u,u_x)dx \\
&\quad = \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u}\frac{\partial u}{\partial t}dx + (\mathsf{b.t.}) \\
&\quad = \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u}\left(-\frac{\delta G}{\delta u}\right)dx + (\mathsf{b.t.}) \\
&\quad = (-1)\int_0^L \left(\frac{\delta G}{\delta u}\right)^2 dx + (\mathsf{b.t.}) = \text{負}\ (= \text{散逸}).
\end{aligned}
$$

(前ページ記載の) 熱拡散方程式の抽象形が散逸性をもたらすことに注目.

0430-J

方程式と変分導関数の関係



離散変分導関数法の基本コンセプトは，連続系の議論を離散化することにある．
この場合は，左図の**離散変分導関数法**の流れに沿うことを指す．
この流れに沿うことが出来れば，散逸性を持つ数値スキームをほぼ自動的に得られるはずである．

必要事項: (詳細は次ページ)

- 微積分を離散化した演算,
- 部分和分,
- 離散変分導関数

0430-J

離散演算

先に述べたコンセプトを実現するためには，微積分などの演算の離散版が必要である．それらは互いの演算に矛盾がなく，整合している必要がある．ここでは，そうした一例として，単純な差分演算を紹介する．

1. 微積分の離散版に相当する差分，和分 ...
$$\delta_k^+ f_k \stackrel{\text{def}}{=} (f_{k+1} - f_k)/\Delta x, \qquad \delta_k^- f_k \stackrel{\text{def}}{=} (f_k - f_{k-1})/\Delta x,$$
$$\delta_k^{\langle 1 \rangle} \stackrel{\text{def}}{=} (\delta_k^+ + \delta_k^-)/2, \qquad \delta_k^{\langle 2 \rangle} \stackrel{\text{def}}{=} \delta_k^+ \delta_k^-,$$
$$\sum_{k=0}^{N}{}'' f_k \stackrel{\text{def}}{=} f_0/2 + \sum_{k=1}^{N-1} f_k + f_N/2, \ldots$$
2. **部分和分**. 既に述べたように，散逸性を自然にもたらす数学的なキーは部分積分である．以下にその離散版である「部分和分」を記す．
$$\sum_{k=0}^{N}{}'' (\delta_k^+ f_k) g_k \Delta x = -\sum_{k=0}^{N}{}'' f_k (\delta_k^- g_k) \Delta x + (\text{b.t.})$$

0430-J

離散変分導関数法の実装 (1)

$u(k\Delta x, n\Delta t)$ に対応する数値解を $U_k^{(n)}$ とし，先の図に沿って離散変分導関数法を実装する．

- **離散エネルギー関数を定義する:**

$$G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U}) \stackrel{\mathsf{def}}{=} \frac{1}{2}\left(\frac{(\delta_k^+ U_k)^2 + (\delta_k^- U_k)^2}{2}\right).$$

- **離散変分導関数を導出する:**
  理解を助けるため，ここでは離散全エネルギーの変分を通じて計算を行なってみる (厳密には，離散関数に対して数学的には陽な形で定義される).

0430-J

離散変分導関数法の実装 (2)

和分の変分に対して，部分和分を通じて以下のように計算される．

$$\sum_{k=0}^{N}{}'' G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U})\Delta x - \sum_{k=0}^{N}{}'' G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{V})\Delta x$$
$$= \frac{1}{4}\sum_{k=0}^{N}{}'' \left((\delta_k^+ U_k)^2 + (\delta_k^- U_k)^2 - (\delta_k^+ V_k)^2 - (\delta_k^- V_k)^2\right)\Delta x$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N}{}'' \left\{\delta_k^+\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)\delta_k^+(U_k - V_k) + \delta_k^-\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)\delta_k^-(U_k - V_k)\right\}\Delta x$$
$$= \sum_{k=0}^{N}{}'' -\delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)(U_k - V_k)\Delta x + (\mathsf{b.t.})$$

この変形は，連続系では次の式に相当する．

$$\delta\left\{\int \frac{1}{2}(u_x)^2\,\mathsf{d}x\right\} \cong \int u_x \delta u_x\,\mathsf{d}x = \int -u_{xx}\delta u\,\mathsf{d}x + (\mathsf{b.t.}).$$

0430-J

離散変分導関数法の実装 (3)

これで全体の変分計算が出来たので，エネルギー関数 G_{d} の離散変分導関数が得られる．

$$\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})_k} \stackrel{\text{def}}{=} -\delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)$$

導出過程から明らかだが，次の関係式が成り立つ．

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{N}{}'' \, G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U})\Delta x - \sum_{k=0}^{N}{}'' \, G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{V})\Delta x \\ = \sum_{k=0}^{N}{}'' \, \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})_k}(U_k - V_k)\Delta x + (\text{b.t.})\end{aligned}$$

注意： 極限計算を含んでいないため，差分計算などと整合する！

0430-J

離散変分導関数法の実装 (4)

- **離散変分導関数法スキームの導出:**

  この離散変分導関数を用いて，散逸性を保存する数値スキームを以下のように構成できる．

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = -\left(\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)}, \boldsymbol{U}^{(n)})_k} \right)$$

このスキームの性質については…

1. このスキームは完全陰的であり，数値解を実際に得るためには毎ステップで連立非線形方程式を解く必要がある．
2. $(u_x)^2$ 散逸性をもつ．
3. u^2 散逸性はどうか? (答え: Yes)
4. このスキームは，実は Crank–Nicolson スキームそのものである!

0430-J

確認: 主目的は達成されたか? (1)

主たる目的は「元の偏微分方程式の性質を再現すること (構造保存)」．熱拡散方程式の場合は，

- $(u_x)^2$ **散逸性:**
  離散変分導関数法で，そもそもそのようにスキームをデザインしたはず．実際，以下のようにして確認できる．

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\Delta t}\left\{ {\sum_{k=0}^{N}}'' G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n+1)})\Delta x - {\sum_{k=0}^{N}}'' G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n)})\Delta x \right\} \\
&= {\sum_{k=0}^{N}}'' \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\left(\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t}\right)\Delta x + (\mathsf{b.t.}) \\
&= -{\sum_{k=0}^{N}}'' \left(\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right)\left(\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right)\Delta x + (\mathsf{b.t.})
\end{aligned}
$$

0430-J

確認: 主目的は達成されたか? (2)

- u^2 散逸性:
  先のスキーム導出過程では，この性質について考慮していない．しかし，この (Crank–Nicolson) スキームは u^2 散逸性を再現する．これについては，以下のようにして確認できる．

方程式: $\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\dfrac{\delta G}{\delta u},\quad G(u,u_x) = \dfrac{1}{2}u^2,\quad \dfrac{\delta G}{\delta u} = u$

$$\Longrightarrow \frac{d}{dt}\int G\,\mathrm{d}x = \int \frac{\delta G}{\delta u}u_t\,\mathrm{d}x = \int \frac{\delta G}{\delta u}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\delta G}{\delta u}\,\mathrm{d}x = -\int \left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\delta G}{\delta u}\right)^2\mathrm{d}x + (\mathrm{b.t.})$$

数値スキーム: $\dfrac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\dfrac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right),$

$$G_d(\boldsymbol{U})_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}U_k^2,\quad \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})_k} = \frac{U_k + V_k}{2}$$

$\Longrightarrow$ (先と同様にして，散逸性が示される)

確認: われわれは何を得たのか? (1)

次に，離散変分導関数法の隠れた目的である，数値解法の古典的基準「安定性，数値解の存在性，精度，等々…」が良いものであること，がどうなっているかを調べよう．Crank–Nicolson スキームの数値安定性は既に知られていることであるが，ここでは散逸性から確認してみる．

- **安定性:**
  数値安定性を調べる前に，元の方程式の厳密解についての性質を列挙しておく．
  1. 散逸性により，厳密解のソボレフノルムは減少する．
  2. 空間次元が 1 の場合，sup ノルムはソボレフノルムで上からおさえられる (ソボレフの補題).
  3. 上 2 つから，(空間 1 次元の場合) 厳密解の sup ノルムは時間に依存しない定数で上からおさえられる．

  これらの性質を参考に，数値安定性を調べよう．

0430-J

確認: われわれは何を得たのか? (2)

前ページの元の方程式の厳密解についての性質が，数値解についても以下のように成り立つ．

1. 散逸性によって，離散ソボレフノルムが減少する．

$$\left\| \boldsymbol{U}^{(n)} \right\|^2_{\text{d-}(1,2)} = \sum_{k=0}^{N}{}'' \left\{ (U_k^{(n)})^2 + \frac{1}{2} \left((\delta_k^+ U_k^{(n)})^2 + (\delta_k^- U_k^{(n)})^2 \right) \right\} \Delta x$$

2. 空間次元が 1 のとき，以下の形の離散ソボレフの補題が成り立つ．

$$\max_{0 \le k \le N} |f_k| \le 2 \sqrt{\max(\frac{|\Omega|}{2}, \frac{1}{|\Omega|})} \, \|f\|_{\text{d-}(1,2)}$$

3. この 2 つから，以下の不等式が成り立つ．これは，離散変分導関数法スキーム (= Crank–Nicolson スキーム) が，無条件安定であることを意味する．

$$\max_{0 \le k \le N} \left| U_k^{(n)} \right| \le 2 \sqrt{\max(\frac{|\Omega|}{2}, \frac{1}{|\Omega|})} \left\| \boldsymbol{U}^{(0)} \right\|_{\text{d-}(1,2)}$$

0430-J

まとめ：簡単な例

- 離散変分導関数法スキームは，元の PDE の「抽象形」の離散化である．
- 熱拡散方程式 $u_t = u_{xx}$ の散逸性は以下のように示される．
  - $\int u^2 dx$ は減少する．なぜなら $\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\dfrac{\delta G_1}{\delta u}$，ただし，$G_1(u,u_x) = u^2/2$.
  - $\int (u_x)^2 dx$ は減少する．なぜなら $\dfrac{\partial u}{\partial t} = -\dfrac{\delta G_2}{\delta u}$，ただし，$G_2(u,u_x) = (u_x)^2/2$.
- この構造を離散変分導関数法はそのまま引き継ぐ．
  - $\sum{}'' (U_k)^2 \Delta x$ は減少する．なぜなら
    $$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right) \cdots$$
  - $\sum{}'' \left\{(\delta_k^+ U_k)^2 + (\delta_k^- U_k)^2\right\}\Delta x$ は減少する．なぜなら
    $$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = -\left(\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right) \cdots$$
- 散逸性が数値安定性をもたらす．

少し複雑な例:
Cahn-Hilliard 方程式

少し複雑な例: Cahn–Hilliard 方程式

少し複雑な例に取り組んでみよう.

- **対象:**

  Cahn–Hilliard 方程式 $\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\left(pu + ru^3 + q\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)$

  ただし, $u = u(x,t)$ で, $p, q < 0 < r$ は定数.

  この偏微分方程式は数値解を得るのに苦労することで有名 (かつては).

- **性質:**

  エネルギー散逸性と, 質量保存性が重要.

- **主な目的:**

  上記の性質の保存 (= 構造保存)

- **隠れた目的:**

  導出する数値スキームが安定であること. また, 古典的な基準 (解の存在, 誤差解析…) からもも良いものであること.

Cahn–Hilliard 方程式の散逸性

エネルギー関数を $G(u, u_x) = (1/2)pu^2 + (1/4)ru^4 - q\left(\partial u/\partial x\right)^2$, と定義することで，以下の抽象形で扱える：

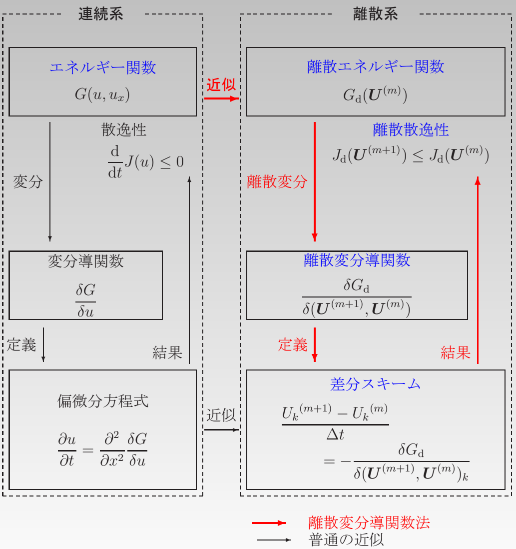
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\delta G}{\delta u}\right) \qquad \text{ただし,} \quad \frac{\delta G}{\delta u} = pu + ru^3 + q\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

エネルギー散逸性は以下の通り．

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\int_0^L G(u, u_x)dx \\ &= \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u}\frac{\partial u}{\partial t}dx + (\text{b.t.}) = \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \frac{\delta G}{\delta u}dx + (\text{b.t.}) \\ &= (-1)\int_0^L \left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\delta G}{\delta u}\right)\right\}^2 dx + (\text{b.t.}) = \text{負}\ (= \text{散逸}). \end{aligned}$$

つまり，Cahn–Hilliard 方程式の抽象形そのものが，これまで同様，散逸性をもたらしている．

方程式と変分導関数の関係



離散変分導関数法の基本コンセプトは，連続系の議論を離散化することにある．
この場合は，左図の**離散変分導関数法**の流れに沿うことを指す．
この流れに沿うことが出来れば，散逸性を持つ数値スキームをほぼ自動的に得られるはずである．

必要事項: (詳細は次ページ)

- 微積分を離散化した演算，
- 部分和分，
- 離散変分導関数

0390-J

離散変分導関数法の実装 (1)

$u(k\Delta x, n\Delta t)$ に対応する数値解を $U_k^{(n)}$ とし，先の図に沿って離散変分導関数法を実装する．

- **離散エネルギー関数を定義する:**

$$G_{\mathrm{d},k}(\boldsymbol{U}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2}p(U_k)^2 + \frac{1}{4}r(U_k)^4 - \frac{1}{2}q\left(\frac{(\delta_k^+ U_k)^2 + (\delta_k^- U_k)^2}{2}\right).$$

- **離散変分導関数を導出する:**
離散全エネルギーの変分を通じて計算する．話を見やすくするため，$G_{\mathrm{d},k}(\boldsymbol{U}) = P_k(\boldsymbol{U}) + N_k(\boldsymbol{U})$ と，多項式部分にと非多項式部分に分けて計算する．

まず，多項式部分 P の変分は，式を以下のように簡単に分解できる．

$$\sum_{k=0}^{N}{}'' P_k(\boldsymbol{U})\Delta x - \sum_{k=0}^{N}{}'' P_k(\boldsymbol{V})\Delta x$$
$$= \sum_{k=0}^{N}{}'' \left\{ p\left(\frac{U_k + V_k}{2}\right) + r\left(\frac{(U_k)^3 + (U_k)^2 V_k + U_k (V_k)^2 + (V_k)^3}{4}\right)\right\}$$
$$\times (U_k - V_k)\Delta x$$

離散変分導関数法の実装 (2)

非多項式部分の変分は，部分和分を通じて以下のように計算される．

$$\sum_{k=0}^{N}{}'' N_k(\boldsymbol{U})\Delta x - \sum_{k=0}^{N}{}'' N_k(\boldsymbol{V})\Delta x$$

$$= -\frac{1}{4}q\sum_{k=0}^{N}{}'' \left((\delta_k^+U_k)^2 + (\delta_k^-U_k)^2 - (\delta_k^+V_k)^2 - (\delta_k^-V_k)^2\right)\Delta x$$

$$= -\frac{1}{2}q\sum_{k=0}^{N}{}'' \left\{\delta_k^+\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)\delta_k^+(U_k - V_k) + \delta_k^-\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)\delta_k^-(U_k - V_k)\right\}\Delta x$$

$$= \sum_{k=0}^{N}{}'' q\delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)(U_k - V_k)\Delta x + (\mathsf{b.t.})$$

この変形は，連続系では次の式に相当する．

$$\delta\left\{\int (\frac{-1}{2})q(u_x)^2\,\mathrm{d}x\right\} \cong -q\int u_x\delta u_x\,\mathrm{d}x = \int qu_{xx}\delta u\,\mathrm{d}x + (\mathsf{b.t.}).$$

0390-J

離散変分導関数法の実装 (3)

これで全体の変分計算が出来たので，エネルギー関数 G_{d} の離散変分導関数 が得られる.

$$\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})_k} \stackrel{\mathsf{def}}{=} p\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)+r\left(\frac{(U_k)^3+(U_k)^2V_k+U_k(V_k)^2+(V_k)^3}{4}\right) + q\ \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{U_k+V_k}{2}\right)$$

0390-J

離散変分導関数法の実装 (4)

- **離散変分導関数法スキームの導出:**

この離散変分導関数を用いて，散逸性を保存する数値スキームを以下のように構成できる．

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left(\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)}, \boldsymbol{U}^{(n)})_k} \right)$$

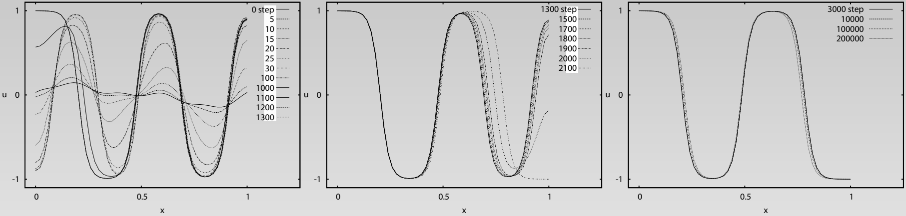
このスキームの性質については…

1. エネルギー散逸性をもつ．
2. 質量保存性はどうか?
3. このスキームは完全陰的であり，数値解を実際に得るためには毎ステップで連立非線形方程式を解く必要がある．
4. すべての演算が対称であるので，数値解の精度は Δx と Δt に対して二次であると思われる．

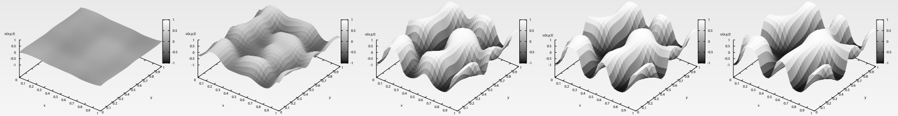
0390-J

離散変分導関数法スキームによる計算結果例

導出した離散変分導関数法スキームによる数値解の例を見てみよう.



離散変分導関数法スキームによる数値計算結果 (1 次元問題)



離散変分導関数法スキームによる数値計算結果 (2 次元問題)

0390-J

確認: 主目的は達成されたか? (1)

主たる目的は「元の偏微分方程式の性質を再現すること (構造保存)」.
Cahn–Hilliard 方程式の場合は,

- **全エネルギー散逸性:**
  離散変分導関数法で，そもそもそのようにスキームをデザインしたはず．実際，以下のようにして確認できる．

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\Delta t}\left\{\sum_{k=0}^{N}{}'' G_{\mathrm{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n+1)})\Delta x - \sum_{k=0}^{N}{}'' G_{\mathrm{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n)})\Delta x\right\} \\
&= \sum_{k=0}^{N}{}'' \frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\left(\frac{U_k^{(n+1)}-U_k^{(n)}}{\Delta t}\right)\Delta x + (\mathrm{b.t.}) \\
&= \sum_{k=0}^{N}{}'' \left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right)\delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right)\Delta x + (\mathrm{b.t.}) = \\
&-\frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N}{}'' \left\{\left(\delta_k^{+}\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right)^2 + \left(\delta_k^{-}\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)})_k}\right)^2\right\}\Delta x + (\mathrm{b.t.})
\end{aligned}
$$

0390-J

確認: 主目的は達成されたか? (2)

- **質量保存性:**
  離散変分導関数法の過程では，この性質について考慮していない．よって，得られた数値スキームではどうなのか，以下のようにして確認してみよう．

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\Delta t}\left\{ {\sum_{k=0}^{N}}'' U_k^{(n+1)}\Delta x - {\sum_{k=0}^{N}}'' U_k^{(n)}\Delta x \right\} \\
&= {\sum_{k=0}^{N}}'' \left(\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} \right) \Delta x \\
&= {\sum_{k=0}^{N}}'' \delta_k^{\langle 2\rangle} \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)}, \boldsymbol{U}^{(n)})_k} \Delta x \\
&= (\text{b.t.}) = 0
\end{aligned}
$$

！ 一種の偶然だが，質量保存性が離散的に再現されている．

0390-J

確認: 隠れた目的は達成されたか? (1)

次に，離散変分導関数法の隠れた目的である，数値解法の古典的基準「安定性，数値解の存在性，精度，等々…」が良いものであること，がどうなっているかを調べよう．特に Cahn–Hillard 方程式については「数値安定性」は無視できない重要な事項である．

- **安定性:**
  数値安定性を調べる前に，元の方程式の厳密解についての性質を列挙しておく．
  1. 厳密解のソボレフノルムは上に有界で，上界は初期値で決定される．エネルギー散逸性がこの性質を導出する．
  2. 空間次元が 1 の場合，sup ノルムはソボレフノルムで上からおさえられる (ソボレフの補題).
  3. 上 2 つから，(空間 1 次元の場合) 厳密解の sup ノルムは時間に依存しない定数で上からおさえられる．

  これらの性質を参考に，数値安定性を調べよう．

0390-J

確認: 隠れた目的は達成されたか? (2)

前ページの元の方程式の厳密解についての性質が，数値解についても以下のように成り立つ．

1. 離散エネルギー散逸性によって，離散ソボレフノルムが上からおさえられる．

$$\left\| U^{(n)} \right\|_{\mathsf{d}\text{-}(1,2)}^2 \leq \frac{1}{\min(-p, -\frac{q}{2})} \left\{ \sum_{k=0}^{N}{}'' G_{\mathsf{d}}(\boldsymbol{U}^{(0)}) \Delta x + \frac{9p^2 |\Omega|}{4r} \right\}$$

2. 熱拡散方程式の例のところで述べたように，離散ソボレフの補題が成り立つ．
3. この 2 つから，以下の不等式が成り立つ．これは，離散変分導関数法スキームが，無条件安定であることを意味する．

$$\max_{0 \leq k \leq N} \left| U_k^{(n)} \right| \leq 2 \left[\frac{\max(1/|\Omega|, |\Omega|/2)}{\min(-p, -q/2)} \left\{ \sum_{k=0}^{N}{}'' G_{\mathsf{d}}(\boldsymbol{U}^{(0)}) \Delta x + \frac{9p^2 |\Omega|}{4r} \right\} \right]^{1/2}$$

0390-J

確認: 隠れた目的は達成されたか? (3)

- **数値解の存在:**

  得られた数値スキームは完全陰的なため，数値解が存在しない可能性がある．そこで，数値解が存在するか否か調べる，もしくは存在する条件を求める必要がある．
  幸い，数値解の max ノルムが上からおさえられることが先の結果からわかっているので，やや煩雑な Taylor 展開を通じて以下のような評価を得られる．

  [定理] 以下の不等式が満たされるならば，先の離散変分導関数法スキームには次ステップの数値解が存在し，かつ，唯一である．

$$\Delta t < \min\left(\frac{-q(\Delta x)^2}{2\left(-p\Delta x + 82rM^2\right)^2}, \frac{-2q(\Delta x)^2}{\left(-p\Delta x + 226rM^2\right)^2}\right),$$

ただし，$M \overset{\mathsf{def}}{=} \|\boldsymbol{U}^{(n)}\|_2$.

0390-J

確認: 隠れた目的は達成されたか? (4)

- **精度:**

先に述べたように，演算の対称性により数値解が Δx と Δt に対して二次精度であろうことは推測できる．
実際，数値解の max ノルムの上界評価と煩雑な Taylor 展開により，次のような評価を得る．

$$
\begin{aligned}
&\|u(\bullet, T) - U_k^{(n)}\| \\
&\le \sqrt{C|\Omega|T} \exp\left[\left(1 + \frac{2\left\{-p + 3r(C_2)^2\right\}^2}{-q}\right)T\right](\Delta x^2 + \Delta t^2),
\end{aligned}
$$

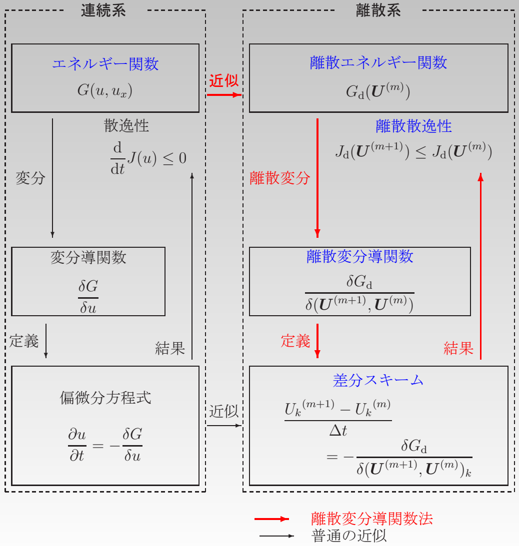
ただし，C,C_2 は数値解の max ノルム上界と厳密解によって定まる定数で，$T = n\Delta t$ である．

0390-J

離散変分導関数法 一般

離散変分導関数法 (差分法 ver.)

離散変分導関数法の基本的なアイディアは下図の通り.



先ほどまでの例を一般化するには,

1. 「離散」変分導関数とは何かを数学的に定義するべし.
2. 対象とする偏微分方程式を分類すべし.

離散変分導関数の定義

離散変分導関数を数学的，かつ，陽的に定義するために，離散エネルギー関数が，以下のような U, $\delta_k^+ U$, $\delta_k^- U$ の多項式であると仮定．

$$G_{\mathrm{d},k}(\boldsymbol{U}) = \sum_{l=1}^{m} f_l(U_k)\ g_l^+(\delta_k^+ U_k)\ g_l^-(\delta_k^- U_k)$$

すると，この関数 G_{d} に対し，次のように離散変分導関数を定義できる．

$$\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})_k} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{l=1}^{m} \left(\frac{df_l}{d(U_k,V_k)} \frac{g_l^+(\delta_k^+ U_k) g_l^-(\delta_k^- U_k) + g_l^+(\delta_k^+ V_k) g_l^-(\delta_k^- V_k)}{2} \right.$$
$$\left. -\delta_k^+ W_l^-(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})_k - \delta_k^- W_l^+(\boldsymbol{U},\boldsymbol{U})_k \right),$$

ただし，

$$W_l^{\pm}(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})_k \stackrel{\mathrm{def}}{=} \left(\frac{f_l(U_k)+f_l(V_k)}{2} \right) \left(\frac{g_l^{\mp}(\delta_k^{\mp} U_k) + g_l^{\mp}(\delta_k^{\mp} V_k)}{2} \right) \frac{dg_l^{\pm}}{d(\delta_k^{\pm} U_k, \delta_k^{\pm} V_k)}.$$

一見複雑だが，この定義はかっちりしていて陽的．どうやって離散変分導関数を導出するかが曖昧にならずに済む．

離散変分導関数法の対象となる偏微分方程式は?

離散変分導関数法の対象となる偏微分方程式を分類してみよう．

- **一階の実偏微分方程式:**
  時間に関して一階微分で，解関数 $u = u(x,t)$ が実関数である場合．

  この状況では，次のような偏微分方程式が対象である．

  1. 実数値，散逸系 偏微分方程式:
  $$\frac{\partial u}{\partial t} = (-1)^{s+1}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{2s}\frac{\delta G}{\delta u},\ s = 0, 1, \ldots$$
  2. 実数値，保存系 偏微分方程式:
  $$\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{2s+1}\frac{\delta G}{\delta u},\ s = 0, 1, \ldots$$

0442-J

実数値，散逸系の数値スキーム等

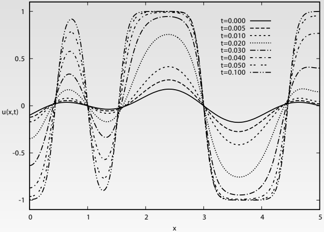
- **離散変分導関数法スキーム:**

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = (-1)^{s+1} \delta_k^{\langle 2s \rangle} \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)}, \boldsymbol{U}^{(n)})_k}$$

- **保存する性質:**

$$\sum_{k=0}^{N}{}'' \, G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n)})\Delta x \text{ が時間ステップ } n \text{ に沿って減る.}$$

- **対象例:**
  - $(s = 0)$ 熱拡散方程式
  - $(s = 0)$ Swift–Hohenberg 方程式
  - $(s = 0)$ 藤田 (爆発) 方程式
  - $(s = 0)$ Allen–Cahn 方程式
  - $(s = 0)$ 拡張 Fisher–Kolmogorov 方程式
  - $(s = 1)$ プロミネンス温度方程式
  - $(s = 1)$ Cahn–Hilliard 方程式



0442-J

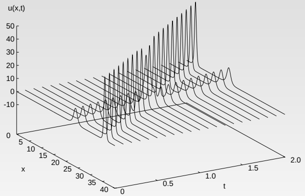
実数値，保存系の数値スキーム等

- 離散変分導関数法スキーム:

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2s+1 \rangle} \frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(n+1)}, \boldsymbol{U}^{(n)})_k}$$

- 保存する性質:

$$\sum_{k=0}^{N}{}'' G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n)})\Delta x \text{ を時間ステップ } n \text{ に対し保存.}$$



- 対象例:
  - $(s = 0)$　線形波動方程式
  - $(s = 0)$　Korteweg-de Vries 方程式
  - $(s = 0)$　Zakharov–Kuznetsov 方程式

0442-J

一階の複素偏微分方程式

複素関数を扱う偏微分方程式も，離散変分導関数法の対象となる．

- **一階の複素数値偏微分方程式:** 次のような方程式が主として対象．
  1. 複素数値，散逸系 偏微分方程式: $$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta G}{\delta \overline{u}}$$
  2. 複素数値，保存系 偏微分方程式: $$i\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta G}{\delta \overline{u}}$$

複素数値関数 $G(u, u_x)$ に対し，その変分導関数を次のように定義しておく．

$$\frac{\delta G}{\delta u} \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial G}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial G}{\partial u_x}, \qquad \frac{\delta G}{\delta \overline{u}} \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial G}{\partial \overline{u}} - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial G}{\partial \overline{u_x}} = \overline{\frac{\delta G}{\delta u}}.$$

これらは次のような関係になっている．

$$\delta\left(\int G(u, u_x)\,\mathrm{d}x\right) = \int\left(\frac{\delta G}{\delta u}\delta u + \frac{\delta G}{\delta \overline{u}}\delta\overline{u}\right)\mathrm{d}x + (\text{b.t.}).$$

0442-J

複素散逸系の数値スキーム等

- 離散変分導関数法スキーム:

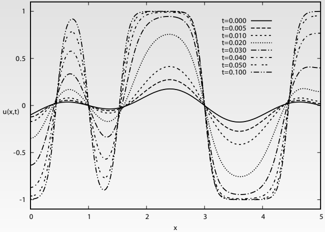
$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = -\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\overline{\boldsymbol{U}^{(n+1)}}, \overline{\boldsymbol{U}^{(n)}})_k}$$

… 離散変分導関数の定義は煩雑なので省略.

- 保存する性質:

$\displaystyle\sum_{k=0}^{N}{}'' \, G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n)})\Delta x$ が時間ステップ n に沿って減る.

- 対象例:
  - Ginzburg–Landau 方程式 (の変種)
  - Newell–Whitehead 方程式



複素保存系の数値スキーム等

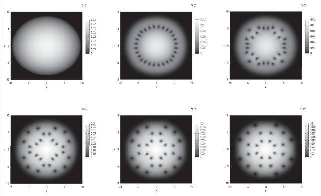
- 離散変分導関数法スキーム:

$$i\left(\frac{U_k^{(n+1)}-U_k^{(n)}}{\Delta t}\right)=-\frac{\delta G_{\mathsf{d}}}{\delta(\overline{\boldsymbol{U}^{(n+1)}},\overline{\boldsymbol{U}^{(n)}})_k}$$

- 保存する性質:

$$\sum_{k=0}^{N}{}'' G_{\mathsf{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n)})\Delta x \text{ を時間ステップ } n \text{ に対し保存.}$$

- 対象例:
  - 非線形 Schrödinger 方程式
  - Gross–Pitaevskii 方程式



0442-J

一階偏微分方程式の連立系

連立一階偏微分方程式も離散変分導関数法の対象になるものがあるが，その一般形等の記載は煩雑なので省略.

- 対象例:
  - Zakharov 方程式
  - good Boussinesq 方程式
  - 江口–沖–松村 方程式

… 数値スキームも省略.

0442-J

二階偏微分方程式

時間微分が二階の偏微分方程式. 以下は保存系

- **二階偏微分方程式:**

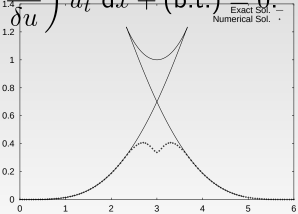
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\frac{\delta G}{\delta u}$$

- **保存する性質:**

積分値 $\int \left\{ \frac{1}{2} (u_t)^2 + G(u, u_x) \right\} \mathrm{d}x$ が保存量. なぜなら,

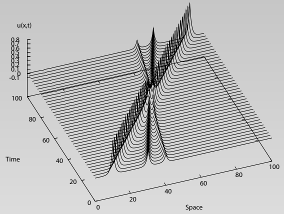
$$\frac{d}{dt} \int \left\{ \frac{1}{2} (u_t)^2 + G(u, u_x) \right\} \mathrm{d}x = \int \left(u_{tt} + \frac{\delta G}{\delta u} \right) u_t \, \mathrm{d}x + (\mathrm{b.t.}) = 0.$$

- **対象例:**
  - 線形 (二階) 波動方程式
  - Fermi–Pasta–Ulam 方程式 I および II.
  - 非線形弦振動方程式
  - 非線形 Klein–Gordon 方程式
  - 下地–川合 方程式
  - 蛯原方程式



その他の方程式

その他，分類しにくいが対象となる偏微分方程式がある．



- **対象例:**
  - Feng 波動方程式
  - Keller–Segel 方程式
  - Camassa–Holm 方程式

Camassa–Holm 方程式 $u_t - u_{txx} = 2u_x u_{xx} + uu_{xxx} - 3uu_x$ は，保存系の変種ともみなせる．なぜなら，この方程式は次のように書ける．

$$(1-\partial_x^2)u_t = -\partial_x \frac{\delta G}{\delta u}, \quad ただし，G(u,u_x) = \frac{1}{2}u\left(u^2 + (u_x)^2\right).$$

この視点にたてば，全エネルギー $\int G(u,u_x)\,\mathrm{d}x$ は確かに保存量であり，離散変分導関数法によって数値スキームを導出できる．