

差分スキームの構成法の再考 非線形偏微分方程式の安定な数値計算

東京大学工学部物理工学科 降旗 大介 (Daisuke Furihata)
東京大学工学部物理工学科 森 正武 (Masatake Mori)

1 はじめに

本研究の目的は、非線形偏微分方程式の安定な差分スキームを構成する際の一つの具体的な指針を与えることである。非線形偏微分方程式に対する差分スキームの構成に関しては様々な議論がある(シンプレクティック解法など[4])。我々は拡散型、波動型の方程式に対して、そのエネルギーの物理的性質を保存することを目的として差分スキームを構成する方法を提案する。具体的には、エネルギー保存、もしくはエネルギー拡散を保証する差分スキームの一般的な構成が我々の目的である。

なお、結果として、通常用いられる前進、後退、中心差分等、理論的解析の比較的行いやすい差分[3]ではなく、実際に数値計算の現場で経験的に用いられる特殊な差分が導出され、その意味でこのような実用的な差分に関する指針を与えることにもなった。

2 対象とする方程式

本論文では、差分スキームを構成する方程式として拡散型方程式、波動型方程式を考える。これは、物理的にエネルギーから方程式が演繹される代表的なものとして選んだものである。

本論文では、問題を空間1次元、時間1次元に限定する。空間を2次元、あるいは3次元に拡張することは、それほど困難ではない。なお、空間領域を $\Omega \equiv [a, b]$ と表す。

以降、空間変数 x 、時間変数 t に対し、注目する物理量を $u(x, t)$ として、各々

$$\text{波動型方程式: } \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \quad (2.1)$$

$$\text{拡散型方程式: } \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\delta G}{\delta u} \quad (2.2)$$

という形の式を考える。ただし、 $G(u, \frac{\partial u}{\partial x})$ は局所エネルギーで、 $\frac{\delta G}{\delta u}$ は G の u に関する変分である。なお、 G から $\frac{\delta G(u, \frac{\partial u}{\partial x})}{\delta u}$ を計算する際に

$$\int_a^b G(u) dx - \int_a^b G(v) dx = \int_a^b \frac{\delta G}{\delta(u; v)} (u - v) dx + [F]_a^b \quad (2.3)$$

$$\lim_{u \rightarrow v} \frac{\delta G}{\delta(u; v)} = \frac{\delta G}{\delta u} \quad (2.4)$$

となるが、境界条件として

$$[F]_a^b = 0 \quad (2.5)$$

を要求するものとする。

これらの方程式は、全エネルギー $\int_{\Omega} G dx$ に対して各々以下のような性質を持つ。
波動型方程式の場合、

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} G dx = \int_{\Omega} \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial u}{\partial t} dx = \int_{\Omega} \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} dx = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 \right]_{\partial \Omega} \quad (2.6)$$

が成り立つため、

$$\left[\left(\frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 \right]_{\partial \Omega} = 0 \quad (2.7)$$

という境界条件の下で全エネルギー $\int_{\Omega} G dx$ は保存量である。

拡散型方程式の場合、

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} G dx = \int_{\Omega} \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial u}{\partial t} dx = \int_{\Omega} \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\delta G}{\delta u} dx = \left[\frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right]_{\partial \Omega} - \int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 dx \quad (2.8)$$

が成り立つため、

$$\left[\frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right]_{\partial \Omega} = 0 \quad (2.9)$$

という境界条件の下で全エネルギー $\int_{\Omega} G dx$ は減少量である。

なお、これらの問題では、各々境界条件 (2.7), (2.9) も要求されているものとする。

3 差分作用素および和分作用素

ここで我々は新しい差分作用素を導入する。我々の指針は、新しく導入する差分作用素に対して、以下の条件を課すことである。

1. 対称性を保つ
2. n 次差分は $n+1$ 個の点の値を参照することによって得られる
3. 微分近似として 1, 2 の条件の下で最良の精度を持つ

ただし、これらの条件には、番号の若い順に優先順位がつけられているものとする。なお、離散化幅は空間、時間とも一定とする。これらの条件は、差分法を用いる際、暗黙のうちに仮定されていることが多く、それを明文化したものと見ることが出来る。

我々は、この条件を満たす差分を一意に求めることに成功した。

すなわち、 n 次差分作用素を δ_n と書くと、これは次のように与えられる。

$$\delta_n \equiv \left| \tilde{D}^n \right| \quad (3.1)$$

ただし、

$$\tilde{D} \equiv \begin{pmatrix} \delta_+ \\ \delta_- \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

とし、このような二つの成分を持つ量の間次のような積

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} ad \\ bc \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

を定義して \tilde{D}^n を定義する。この積に対して、交換則、分配則が成立しないことには注意が必要である。和、差演算は普通に成分同士に対して演算を施せば良いものとする。

そして、この量をスカラー量に直す操作を以下のように定義する。

$$\left| \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \right| \equiv \frac{1}{2}(a+b) \quad (3.4)$$

$$\text{なお、 } \delta_+ \equiv \frac{1}{h}(s_+ - 1), \quad \delta_- \equiv \frac{1}{h}(1 - s_-), \quad s_+ \equiv \exp(h \frac{\partial}{\partial x}), \quad s_- \equiv s_+^{-1} \quad (3.5)$$

である。このとき、 h は差分における離散化幅である。 s_{\pm} はシフト作用素であり、 δ_+ 、 δ_- は各々前進、後退差分作用素である。

この新しい差分作用素 δ_n は、これまでも現場では各々の次数に応じて具体的な形で用いられることはあったが [1]、このように指針に従って統一的に導出されたものではなかった。差分の逆演算に相当する和分を以下のように定義する。

$$S_a^b f(x) \equiv \sum_{n=0}^N \gamma_n f(a + nh) \quad (3.6)$$

$$\text{ただし、 } b \equiv a + Nh, \quad N \in \mathcal{N}, \quad \gamma_n \equiv \begin{cases} \frac{1}{2} & : n = 0 \text{ or } N \\ 1 & : \text{otherwise} \end{cases}$$

であるとする。これは一見して分かるように、台形則そのものである。なお、和分も差分のように本来は行列表現を持つものであるが、本論文では省略する。

4 差分、和分の演算則

3章で示した作用素に対して、成立する演算則は多いが、本論文で使用するもの、すなわち、部分積分を離散化したものに相当する演算則だけに限定してここに示す。

\tilde{f} 、 \tilde{g} を 2 成分を持つ量とすると、

$$S_a^b(\tilde{f} \tilde{D} \tilde{g}) + S_a^b(\tilde{g} \tilde{D}^\dagger \tilde{f}) = \frac{1}{2} [\tilde{f} \tilde{A} \tilde{g} + \tilde{g} \tilde{A}^\dagger \tilde{f}] \quad (4.1)$$

が成り立つ。

$$\text{ただし、 } \tilde{A} \equiv \begin{pmatrix} s_+ \\ s_- \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

部分和分の式は本論文で離散的な変分の計算を可能にするという意味で非常に重要な式である。

5 安定な差分スキームの構成

我々の方法は、概念的には、最初に局所エネルギーの離散化を行った後、方程式の導出を行う過程の微積分演算の代わりに離散演算を用いて差分スキームの導出を行うものである。概念図を図1に示す。

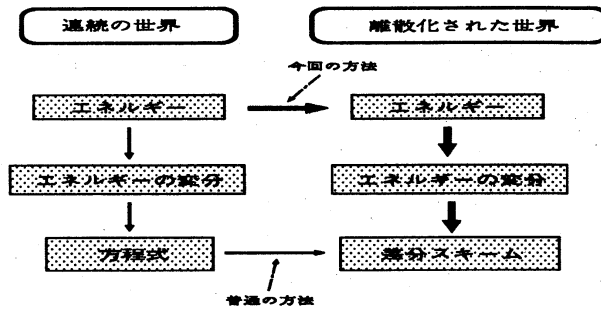


図1: 本論文の差分スキームの構成法概念図。

以下、具体的な差分スキームの構成の手順を示す。

局所エネルギーの離散化

局所エネルギー $G(u, \frac{\partial u}{\partial x})$ を離散化して、 $G_d(U)$ とする。なお、 $u(x, t)$ を離散近似した量を U_k^n ($x = kh + a, t = n\Delta t$) と記す。 Δt は時間方向の離散化幅である。離散化の際、3章で定義した差分を用いて微分を置き換える。

離散化全エネルギーの導出

離散化された局所エネルギーの和分をとり、全エネルギーの離散化表式を導く。これは上の量に S_a^b を作用させるだけである。

離散化変分 $\frac{\delta G}{\delta u}$ の導出

U^n とタイムステップを一つ進めた U^{n+1} を用いて、 $S_a^b G_d(U^{n+1}) - S_a^b G_d(U^n)$ を4章で示した離散演算を使って以下のように変形する。

$$S_a^b G_d(U^{n+1}) - S_a^b G_d(U^n) = S_a^b \left[\left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} (U^{n+1} - U^n) \right] + [F_d]_a^b \quad (5.1)$$

ただし、 $(\frac{\delta G_d}{\delta U})^{n+\frac{1}{2}}$ はこの式をもって定義される量である。こうして、 $\frac{\delta G}{\delta u}$ の離散化したものに相当する量 $(\frac{\delta G_d}{\delta U})^{n+\frac{1}{2}}$ を得る。なお、 $[F_d]_a^b$ はこの変形の際に部分和分を用いた時に出てくる項である。これは境界条件として $[F_d]_a^b = 0$ を要求することで消える。この離散化された境界条件は、本来の境界条件(2.5)を離散化したものに相当する。この過程により、離散変分に時間方向が入っている。変分に方向が存在するのは離散演算の特徴の一つである。本論文でこの方向を時間方向にとるのは、時間方向に関するエネルギーの性質を保存するという目的のためである。

差分スキームの導出

最後に、(5.1) で定義した $(\frac{\delta G_d}{\delta U})^{n+\frac{1}{2}}$ によって、はじめに与えられた (2.1), (2.2) に対応する差分スキームが得られる。

$$\text{波動型方程式の場合: } \delta_t U^n = \delta_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.2)$$

$$\text{拡散型方程式の場合: } \delta_t U^n = \delta_2 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.3)$$

δ_t は時間方向の差分作用素で、 $\delta_t U^n = \frac{1}{\Delta t}(U^{n+1} - U^n)$ と定義される。

上に示した式が元の方程式の差分近似になっていることは容易に確かめられる。なお、エネルギー保存、拡散という性質が保たれていることは、以下の式で示される。波動型方程式の場合は、離散演算により式を変形すると、

$$\delta_t S_a^b G_d(U^n) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} s_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \right]_a^b \quad (5.4)$$

より、離散化された境界条件として

$$\left[\left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} s_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \right]_a^b = 0 \quad (5.5)$$

を満足すれば、 $\delta_t S_a^b G_d(U^n) = 0$ が成立し、離散化された全エネルギー $S_a^b G_d(U)$ は保存量である。ただし、 $s_1 \equiv \frac{1}{2}(s_+ + s_-)$ である。このとき要求される離散化された境界条件 (5.5) は、本来の波動型方程式で要求される境界条件 (2.7) を我々の指針に従って正しく離散化したものになっている。拡散型方程式の場合も同様に簡単な計算により

$$\delta_t S_a^b G_d(U^n) = \left[\left\{ s_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \right\} \left\{ \delta_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \right\} \right]_a^b - \left| S_a^b \left[\tilde{D}^\dagger \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \tilde{D} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \right] \right| \quad (5.6)$$

となり、一般のスカラー量 f に対して $\tilde{D}^\dagger f \tilde{D} f = \begin{pmatrix} (\delta_- f)^2 \\ (\delta_+ f)^2 \end{pmatrix}$ が成り立つため、離散化された境界条件として

$$\left[\left\{ s_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \right\} \left\{ \delta_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)^{n+\frac{1}{2}} \right\} \right]_a^b = 0 \quad (5.7)$$

が満足されれば、 $\delta_t S_a^b G_d(U^n) \leq 0$ が成立し、離散化された全エネルギー $S_a^b G_d(U)$ は減衰することがわかる。この境界条件も波動型のもの同様、本来の拡散型方程式で要求される境界条件 (2.9) を正しく離散化したものになっている。

6 応用例

波動型、拡散型方程式各々1例に対して差分スキームを構成し、実用になるということを確認した。

6.1 KdV 方程式 (波動型方程式)

波動型方程式の具体例として KdV 方程式を選んだ。KdV 方程式は本来 $\Omega = (-\infty, \infty)$ を空間領域として、境界条件を $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial^n u}{\partial x^n} = 0 (n = 0, 1, 2, \dots)$ とするものであるが、これ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、境界条件として周期的境界条件を課した。こうしても $\lim_{x \rightarrow \partial\Omega} \frac{\partial^n u}{\partial x^n} = 0 (n = 0, 1, 2, \dots)$ 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る。

今回選んだ KdV 方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \quad (6.1)$$

である。これは、局所エネルギー G を

$$G = \frac{1}{6}u^3 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \quad (6.2)$$

とすると、今まで述べてきた波動型方程式として扱える。全エネルギーが保存されることも、周期的境界条件の下で (2.7) が成立することより分かる。

このように、KdV 方程式は典型的な波動型方程式であるため、5章の手順をそのまま用いて差分スキームを構成できる。

先に結果を示すと、この KdV 方程式に対する差分スキームとして以下のものが得られる。

$$\delta_t U_k^n = \delta_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)_k^{n+\frac{1}{2}} \quad (6.3)$$

$$\text{ただし、} \quad \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)_k^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{6} \frac{\delta(U^3)}{\delta(U_k^{n+1}; U_k^n)} + \delta_2 U_k^{n+\frac{1}{2}} \quad (6.4)$$

$$\text{なお、} \quad \frac{\delta F(U)}{\delta(u; v)} \equiv \begin{cases} \frac{F(u) - F(v)}{u - v} & : u \neq v \\ \frac{\delta F(u)}{\delta u} & : u = v \end{cases} \quad (6.5)$$

$$U_k^{n+\frac{1}{2}} \equiv \frac{1}{2}(U_k^{n+1} + U_k^n) \quad (6.6)$$

境界条件は、周期的境界条件をそのまま離散化したものを用いている。

この差分スキームの構成過程を具体的には以下のようなものである。局所エネルギーの離散化は、(6.2) より、以下のようにする。

$$G_d(U) \equiv \frac{1}{6}U^3 - \frac{1}{2}|\tilde{D}^\dagger U \tilde{D} U| \quad (6.7)$$

離散化全エネルギーの導出は、単純に $S_a^b G_d(U)$ のことである。

離散化変分 $\frac{\delta G}{\delta u}$ の導出は次の計算により求められる。

$$\begin{aligned} S_a^b G_d(U) - S_a^b G_d(V) &= S_a^b \left[\left\{ \frac{1}{6}(U^2 + UV + V^2) + |\tilde{D}^2| \left(\frac{U+V}{2} \right) \right\} (U - V) \right] \\ &\quad - \frac{1}{4} \left| \left[\tilde{D}^\dagger (U+V) \tilde{A} (U-V) + (U-V) \tilde{D} (U+V) \right]_a^b \right| \quad (6.8) \end{aligned}$$

周期的境界条件の下では

$$[\tilde{D}^\dagger(U+V)\tilde{A}(U-V) + (U-V)\tilde{D}(U+V)]_a^b = 0 \quad (6.9)$$

が満たされるため、結局以下の式が満たされ、

$$S_a^b G_a(U) - S_a^b G_a(V) = S_a^b \left[\left\{ \frac{1}{6}(U^2 + UV + V^2) + \delta_2 \left(\frac{U+V}{2} \right) \right\} (U-V) \right] \quad (6.10)$$

$$U \equiv U^{n+1} \quad V \equiv U^n \quad (6.11)$$

とおくことで (6.4) が得られる。

差分スキームの導出は、今求めた $\frac{\delta G}{\delta U}$ を (5.2) に代入することで行なえる。

さて、この差分スキームを用いた実際の簡単な数値実験例を図 2 に示す。 u の絶対値が

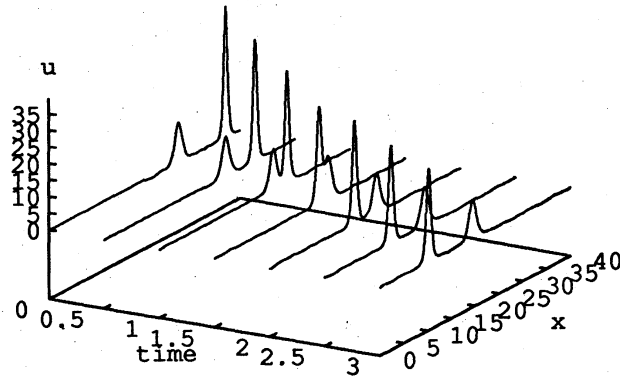


図 2: 数値実験結果の例。2 ソリトンの伝搬の様子が見える。

30 を越える大きな値でも発散せずに数値解が求められていることが図 2 からわかる。これは差分スキームとしては安定な部類に入るものと思われる。

6.2 Cahn-Hilliard 方程式 (拡散型方程式)

次に拡散型方程式として、Cahn-Hilliard 方程式を選んだ [2]。これは非線形性が非常に強く、安易な数値計算をすると発散してしまうことから数値解を求めること自体が困難な偏微分方程式の一つとしてよく知られているものである。なお、この方程式に関しては我々は以前に異なる方法で数値解を求めているため [5],[6]、およそ解の性質もわかっており、求められた数値解が信用できるものかどうか判断できる。

Cahn-Hilliard 方程式は、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (pu + ru^3 + q \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}) \quad (6.12)$$

であり、これは局所エネルギー G を

$$G = \frac{1}{2}pu^2 + \frac{1}{4}ru^4 - \frac{1}{2}q \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \quad (6.13)$$

とすることにより、今まで述べてきた拡散型方程式として扱える。この方程式に対する境界条件は

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \quad (6.14)$$

である。全エネルギーが時間経過にともない減少することは、境界条件(6.14)によって(2.9)が満たされることより確認できる。よって、この場合も5章の手順をそのまま用いて差分スキームを構成できる。

結果を示すと、この Cahn-Hilliard 方程式に対する差分スキームとして以下の式が得られる。

$$\delta_t U_k^n = \delta_2 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)_k^{n+\frac{1}{2}} \quad (6.15)$$

$$\text{ただし、} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right)_k^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\delta(\frac{1}{2}pU^2 + \frac{1}{4}rU^4)}{\delta(U_k^{n+1}; U_k^n)} + q\delta_2 U_k^{n+\frac{1}{2}} \quad (6.16)$$

境界条件は以下ようになる。

$$\delta_1 U = \delta_1 \left(\frac{\delta G_d}{\delta U} \right) = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \quad (6.17)$$

この差分スキームの構成過程は波動型の場合と同様に示せるため省略する。なお、この差分スキームの下で全エネルギー $S_a^b G_d$ が減少することは、境界条件(6.17)によって、(5.7)が満たされることより確認できる。

実際の簡単な数値実験例を図3に示す。

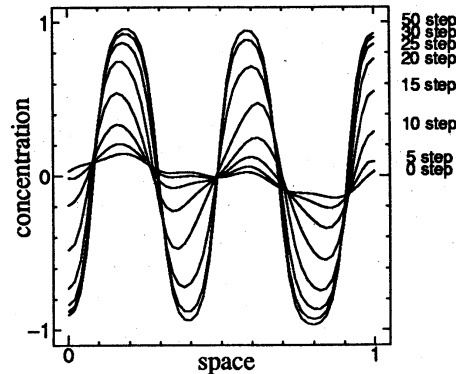


図3: 数値実験結果の例。相分離の様子が見える。 $p = -1.0$, $q = -0.001$, $r = 1.0$, $\Delta x = 1/50$, $\Delta t = 1/1200$

この結果は、我々が以前に異なる方法で得た数値解と実質的に同一である。なお、この計算で用いた時間離散化幅は、通常の差分スキームが発散しないですむ離散化幅に対し、100倍以上大きいものであり、この差分スキームが良好な性質を持つことを示している。

7 まとめおよび今後の課題

非線形の波動型、及び拡散型の方程式に対し、時間経過に対して対応するエネルギーが持つべき性質を保った差分スキームを作る方法を示した。その際、差分として応用の現場で

しばしば用いられる実用的な差分が導かれたため、本論文の指針にしたがって得られる差分スキームは十分に実用に耐えうるものであると思われる。実際、構成した差分スキームを用いて行った数値実験において、この差分スキームが良好な性質を示すことが示された。

微分方程式の理論的な離散化を我々の物理的指針に従って忠実にやっているため、差分スキームは時間方向に対して対称であり、結果として陰的なものとなる。そのためプログラムの内部に反復過程を含むことになり、計算量の点で、通常用いられる陽的な差分スキームに劣るように思われるが、時間方向の離散化幅を任意に選べるため、結果的に計算量が少なくて済む。

現在、何らかの意味で精度を見積もることが出来ないか検討中である。本論文で用いた差分は誤差の少なさを期待して現場で使われているものだけに、それを定量的に示すことが出来れば大きな意味があると思われる。

参考文献

- [1] William 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.
- [2] 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.
- [3] Ryogo Hirota. Difference analogue of nonlinear evolution equations in Hamiltonian form. *RIMS*, Vol.472, pp.128-135, Nov. 1982.
- [4] 吉田春男. ハミルトン力学系のためのシンプレクティック数値解法. 日本応用数理学会平成5年度年会講演予稿集, pp.55-56. 日本応用数理学会, Sep. 1993.
- [5] 降旗大介. スピノーダル分解の数値解析的研究. Master's thesis, 東京大学工学部物理工学科, 文京区本郷7-3-1, Feb. 1992.
- [6] 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解法. 応用数理学会平成3年度年会口頭発表, Oct. 1991.