

散逸系に対する陰的線形スキームの安定化について

Stablizing Linearly-Implicit Schemes for Dissipative Systems

松尾宇泰*

TAKAYASU MATSUO

東京大学大学院情報理工学系研究科

GRADUATE SCHOOL OF INFORMATION SCIENCE AND TECHNOLOGY, THE UNIVERSITY OF TOKYO

降旗大介

大阪大学サイバーメディアセンター

CYBERMEDIA CENTER, OSAKA UNIVERSITY

Abstract

何らかの「エネルギー」が散逸する系に対してはその性質を保つ解法が有利であり、常微分方程式に対しては離散勾配法、偏微分方程式に対しては離散変分導関数法が知られている。これらの手法を大規模問題に適用する際は、計算量削減のための線形化技法が必須であるが、この技法には同時に入り込む不安定性を回避しづらい欠点があった。本稿では、この問題の根本的な対策として最近考えられている安定化の概略について述べる。

1 はじめに

本稿では、散逸系に対する陰的線形スキームについて考える。ここで言う「散逸系」とは、たとえば常微分方程式で言えば

$$\frac{d}{dt}z(t) = -\nabla H(z), \quad \frac{d}{dt}H(z) = \nabla H \cdot z_t = -\nabla H \cdot \nabla H \leq 0 \quad (1)$$

の形の方程式のように、何らかの「散逸則」が付随している系を指す。ここで $z: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ は解ベクトル、 $H: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ はスカラー関数（物理的にしばしば「エネルギー」と呼ばれる関数）、 z_t は z の t に関する微分を表す。類似の系は偏微分方程式の文脈でも、

$$\frac{\partial}{\partial t}u(t) = -\frac{\delta G}{\delta u}, \quad \frac{d}{dt} \int_0^L G(z) dx = \int_0^L \frac{\delta G}{\delta u} u_t dx = - \int_0^L \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 dx \leq 0 \quad (2)$$

のような変分形としてしばしば現れる。ただし $G(u)$ は「局所エネルギー」と呼ばれるスカラー関数で、問題は $[0, L]$ 上で、適切な境界条件下で考えているものとする（空間次元は 2 次元、3 次元でもよいが、本稿では簡単のため 1 次元の場合のみ論ずる）。

*matsuo@mist.i.u-tokyo.ac.jp

式(1)は通常の常微分方程式の形をしているから、適応刻み幅制御付き Runge-Kutta 法など洗練された汎用解法を用いることも可能であるが、問題の勾配構造とその帰着としてのエネルギー散逸性という「構造」を知っているのだから、それを尊重した特別な数値解法を構成しようというのも自然な発想であり、その類の「構造保存数値解法」が1980年代から盛んに研究されてきた[3]。実際に、しばしば(1)の関数 $H(z)$ は系の Lyapunov 関数として機能し系の漸近挙動を支配するから、その機能を離散系でも担保するのは望ましいことである。

これを実現する一手法が、いわゆる離散勾配法である(→[3, 7]などを参照)。離散勾配法では、スカラー関数 $f(z)$ に関して成り立つ「離散連鎖律」:

$$f(x) - f(y) = \nabla_d f(x, y) \cdot (x - y) \quad (3)$$

(ただし $x, y \in \mathbb{R}^d$) を満たす「離散勾配」 $\nabla_d f: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ を考え、それを用いて式(1)を

$$\frac{z^{(m+1)} - z^{(m)}}{\Delta t} = -\nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}) \quad (4)$$

と離散化する。ただし Δt は時間離散化幅、 $z^{(m)} \simeq z(m\Delta t)$ は近似解である。記号「 \cdot 」は内積を表す。本来の勾配は引数はベクトル1つであるが、離散勾配は解ベクトル2つに依存している点に注意しよう。スキーム(4)が離散版の散逸則:

$$H(z^{(m+1)}) - H(z^{(m)}) = \nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}) \cdot (z^{(m+1)} - z^{(m)}) = -(\nabla_d H \cdot \nabla_d H) \Delta t \leq 0 \quad (5)$$

を満たすことは、離散連鎖律(3)から直ちに分かる。このとき離散エネルギーは連続版と同様に Lyapunov 関数として機能すると期待される。

スキーム(4)は、実際多くの場合に優れた性能を持つが、反面、求めるべき次段の解ベクトル $z^{(m+1)}$ を陰的に含んでおり、一般に陰的非線形となるのが大きな難点である。各時間ステップごとに、計算量をかけて非線形方程式ソルバを使わねばならない。次元の低い常微分方程式系ならばまだ我慢できるが、空間2, 3次元の偏微分方程式(2)になると、この計算量の重さはしばしば致命的である。この欠点を解消する決定的な手段はまだ知られていない(より正確に申せば、離散勾配法、あるいは離散変分導関数法の本質で、陽的、あるいは陰的線形な一段法を系統的に構成する方法は本稿執筆時点でまだ知られていない)。

一つの妥協案は、離散連鎖律(3)をゆるめ、それに応じて得られるスキームが陰的線形になるよう工夫することである(→例えば Furihata-Matsuo [2] の第6章を参照)。関数 $f(z)$ を緩和した多段関数 $f(x, y)$ を考え ($x, y \in \mathbb{R}^d$)、それに対して

$$f(x, y) - f(y, z) = \nabla_d f(x, y, z) \cdot (x - z) \quad (6)$$

の形の離散連鎖律を考える。ここで、 $\nabla_d f: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ は、先の(通常の)離散勾配と同じ記号を流用しているが、3つの解ベクトルに依存する「多段離散勾配」である。この $\nabla_d f(x, y, z)$ を用いて、スキームを

$$\frac{z^{(m+1)} - z^{(m-1)}}{2\Delta t} = -\nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}, z^{(m-1)}) \quad (7)$$

と定義する。もし $\nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}, z^{(m-1)})$ が $z^{(m+1)}$ に関して線形であれば、これは線形なスキームとなり、時間発展のための計算量はスキーム(4)と比べて各段に少ない。しかし、このような妥協には常に犠牲が伴うものであって、いまの場合、緩和された散逸性:

$$\begin{aligned} H(z^{(m+1)}, z^{(m)}) - H(z^{(m)}, z^{(m-1)}) &= \nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}, z^{(m-1)}) \cdot (z^{(m+1)} - z^{(m-1)}) \\ &= -(\nabla_d H \cdot \nabla_d H) \cdot 2\Delta t \leq 0 \end{aligned} \quad (8)$$

において、多段化されたエネルギー関数 $H(z^{(m+1)}, z^{(m)})$ は、そのままでは先ほどと同じような Lyapunov 性の機能は（力学系の次元の観点から）持ち得ない。実際、結果としてスキームはかなり高い確率で不安定化し、上の緩和で許される自由度（緩和された多段エネルギー関数 $H(z^{(m+1)}, z^{(m)})$ の定義の仕方）を色々試して、試行錯誤の上で安定なものを見つけ出すしか手段がない、というのがこれまでの実状であった。例えば本稿著者らによる以前の結果、Furihata-Matsuo [1] では、上のアイデアにより Cahn-Hilliard 方程式に対して、緩和された散逸性を持つ安定な陰的線形スキームを提案しその安定性を理論的に示したが、その際も考えられる自由度を試してまず実験的に安定なものを見つけ、それに対して理論解析を行うという手順であった。この緩和に起因する自由度は方程式系が複雑になるほど組み合わせ的に増加し、上の手順は次第に実行不可能になる。

以上の観点から、実際にプログラムを書いて数値実験を行う前に、緩和されたエネルギー関数を書き下した時点で結果の安定・不安定が判定できる指導原理の発見が強く望まれていた。これに対し最近著者等のグループでは、多段化したエネルギー関数をより高次元の位相空間の Lyapunov 関数をみなし、安定なスキームを選択する技法を開発しつつある。本稿では、その概略について述べる。まず次節で常微分方程式の場合に、あるテスト方程式に対して、完全な安定性解析を行った例を示す。この例を通じて、安定なスキームを選択する指導原理を提唱する。この指導原理は現時点ではやや検証が難しいものであるが、将来的には、考える問題の性質をより多く取り込むことで、現実的な原理へと展開できると予想される。続く第3節では、より現実的な偏微分方程式の場合に、その予想される原理（現時点では数学的証明がないもの）で実際に安定なスキームが得られている例を、Cahn-Hilliard 方程式、Swift-Hohenberg 方程式、および Ginzburg-Landau 方程式の場合に示す。末尾の第4節はまとめである。

2 常微分方程式における解析例

本節では、論点をより明確にするために、次のテスト方程式を考える。

$$\frac{d}{dt}z(t) = -\nabla H(z) = z - z^3, \quad H(z) = \frac{(1 - z^2)^2}{4}. \quad (9)$$

これは式 (1) の一例であるが、このタイプの非線形項は Cahn-Hilliard 方程式や Ginzburg-Landau 方程式などの散逸型偏微分方程式でよく現れる。エネルギー関数 $H(z)$ は、底を2つ持つ4次関数であり二重井戸型ポテンシャルとも呼ばれる。そのポテンシャルの勾配流であることから、系がポテンシャルの底、すなわち $z = \pm 1$ に漸近するのは明らかであり、実際に解は図1のようになる。図1では、4つの異なる初期値から出発した解曲線4本が描いてある。

上の事実は直観的に明らかであるが、これを数学的により厳密に定式化するには、Lyapunov の理論を使うと便利である。以下読者の便のため、Robinson [8] に沿って概要をまとめておく（ただし本研究の目的に沿って若干定理を変形してある。また Lyapunov 理論の記述方法は、制御論や力学系など、学問分野により若干異なるので注意を要する）。Banach 空間 X 、および X 上の連続なフロー $S(t) : z_0 \mapsto z(t; z_0)$ を考える。このとき以下を満たすものを Lyapunov 関数と呼ぶ

定義 1 (Lyapunov 関数) $B \subset X$ とする。以下を満たすとき、連続関数 $\Phi : B \rightarrow \mathbb{R}$ は $S(t)$ の Lyapunov 関数であると言う。(i) 各 $z_0 \in B$ において、関数 $t \mapsto \Phi(S(t)z_0) \in B$ が非増加であり、(ii) ある $t > 0$ で $\Phi(S(t)z) = \Phi(z)$ であるとき z は $S(t)$ の不動点である。□

集合 $B \subset X$ は、任意の $t \geq 0$ で $S(t)B \subseteq B$ であるとき「正不変」(“positively invariant”) であると言う。初期状態が正不変な集合に入っており、かつ、その上で Lyapunov 関数が存在する系は、その漸近挙動

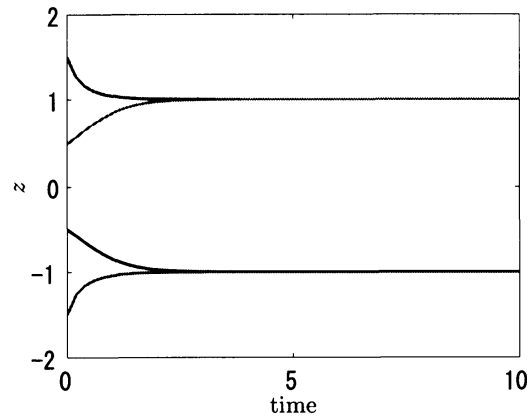


図 1: 問題 (9) の 4 本の解曲線.

が ω 極限集合で完全に記述されるという著しい特長を持つ (次の命題参照). 集合 B のフロー $S(t)$ による ω 極限集合とは, B が時間無限大で近づきうる点の集合を言う.

$$\omega(B) = \{z \mid \exists t_n \rightarrow \infty, z_n \in B \text{ with } S(t_n)z_n \rightarrow z\}.$$

以下, フロー $S(t)$ の不動点の集合を \mathcal{E} で表す.

命題 1 (極限集合) 集合 $B \in X$ がコンパクト, かつフロー $S(t)$ の正不変な集合であり, その上に Lyapunov 関数が存在するとする. このとき任意の $z_0 \in B$ に対して $\omega(z_0) \subset \mathcal{E}$ である. もし \mathcal{E} が離散的であれば, $\omega(z_0) \in \mathcal{E}$ である. \square

制御論における Lyapunov 理論は, 平衡点の安定性 (つまりその近傍だけの挙動) を記述するよう書かれているものが多いが, 上の流儀は力学系のものであり, ある程度大域的な挙動を捕まえられるよう設定されている. 命題 1 で, 初期値の集合に対する「コンパクトかつ正不変」が非常に強い仮定であることに注意しよう. この強い仮定により, 一旦解がこの中に入りさえすれば, その後の系の挙動は命題 1 により完全に記述される. この種類の命題は, 数値解の漸近挙動を完全に記述するのに便利である.

以上の設定のもとに, 陰的線形スキームの構成と解析に移ろう. なお以下で述べる解析の詳細は, Matsuo-Furihata [5] にある. 前節で述べたシナリオに沿って, まず多段エネルギー関数を定義する.

$$H(z^{(m+1)}, z^{(m)}) = \frac{1}{4} \left\{ 1 - 2 \left(az^{(m+1)}z^{(m)} + (1-a) \frac{(z^{(m+1)})^2 + (z^{(m)})^2}{2} \right) + (z^{(m+1)})^2(z^{(m)})^2 \right\}. \quad (10)$$

ただし $a \in \mathbb{R}$ はスキームパラメータである (後述). この多段エネルギーに対して多段離散勾配を求めると, 次のようになる (この手続きの詳細は, 例えば [2]).

$$\nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}, z^{(m-1)}) = -az^{(m)} - (1-a) \left(\frac{z^{(m+1)} + z^{(m-1)}}{2} \right) + (z^{(m)})^2 \left(\frac{z^{(m+1)} + z^{(m-1)}}{2} \right). \quad (11)$$

この多段離散勾配をスキーム (7) に代入すれば, テスト方程式に対する陰的線形スキームが 1 つ定まる. 実際, 多段離散勾配 (11) は $z^{(m+1)}$ を線形にしか含んでいないから, スキームは陰的線形である (いまはスカラーの常微分方程式を考えているから, 手計算でスキームを変形すれば実質的であるが, 本稿では一括して陰的線形と表現する).

ここで、スキームが線形になるからくりとスキームパラメータの意義について触れておこう。上のテスト問題に対して通常の離散勾配法を適用すると、離散勾配

$$\nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}) = -\frac{z^{(m+1)} + z^{(m)}}{2} + \left(\frac{z^{(m+1)} + z^{(m)}}{2} \right) \left(\frac{(z^{(m+1)})^2 + (z^{(m)})^2}{2} \right)$$

が得られ、従って離散勾配スキーム (4) は3次の非線形性を持つ非線形スキームとなる。考えてみればこれは当然のことであって、もとの方程式では、4次非線形のエネルギー関数からその勾配、つまり微分を通じて3次非線形な方程式が構成されている。離散勾配法における離散勾配も離散的な意味での微分であって、なおかつ本来の勾配をなるべくよく捕まえようと工夫されたものであるから、「4次の非線形エネルギー関数から出発すると、(それを1回微分して) 3次非線形なスキームが得られる」のは自然なことである。これは離散勾配法における根本的な問題であって、本稿執筆時点では、「エネルギー保存・散逸という欲しい性質だけは引き継ぐが、(多項式) 非線形性を微分して1次下げる、という性質は引き継がない」画期的な離散勾配が存在するかどうかはまだ知られていない(そのようなものが存在すれば、陰的線形、あるいは陽的線形な二段法保存・散逸スキームが存在しうることになる)。

いま知られている妥協案は、この観察を逆手にとって「離散エネルギー関数の時点で、未知数に関して最大2次にしておく」ことである [2]。2次関数を微分すれば線形関数になるから、得られるスキームは線形になる。上で用いた多段離散エネルギー関数 (10) では、4次非線形項が $(z^{(m+1)})^2(z^{(m)})^2$ と、 $z^{(m+1)}$ に関して2次に分解されている点に注意しよう。

問題は、このときもともと線形であった項、すなわちエネルギー関数でもともと2次であった項の措置である。線形性だけ考えるのならこれらはそのまま放置しても差し支えないが、その場合結果の二段法スキーム (7) は時間非対称になり、一次精度に精度が悪化してしまう。そのため、最高次の非線形項を分解すると同時に、結果が時間対称になるように、もともと線形項も適切に離散化するのが通常である。上のテスト方程式の場合、 z^2 を

$$z^2 \simeq z^{(m+1)}z^{(m)} \quad \text{あるいは} \quad \frac{(z^{(m+1)})^2 + (z^{(m)})^2}{2} \quad (12)$$

と近似する。ここで現れる自由度が重要であり、これらのうち(ほとんどの場合ただ1つの)「正しい」近似を選ばないと、陰的線形スキームは不安定になる。これが、冒頭で述べた線形化技法の難しさである。従来は、それらをすべて(あるいは職人の勘に従って)試して、実験的に安定なものを選び出すしかなかった。しかし、問題の次元が上がり、つまり変数の個数が増えて線形項が増えるとともに、この自由度は組み合わせ的に増加し、上の戦略は次第に実行不可能になる。何らかの指導原理により、多段エネルギー関数を書き下す段階で安定なものを選び出すことが強く望まれる。

そのために実は前述の Lyapunov 理論が役立つ。陰的線形スキームではエネルギーが多段化されており、そのままでは Lyapunov 関数としての意味を持ち得ないことは上述のとおりである。そこで新たに次のような写像を考えよう。

$$\begin{pmatrix} z^{(m-1)} \\ z^{(m)} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} z^{(m+1)} \\ z^{(m+2)} \end{pmatrix} : \begin{cases} \frac{z^{(m+1)} - z^{(m-1)}}{2\Delta t} = -\nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}, z^{(m-1)}), \\ \frac{z^{(m+2)} - z^{(m)}}{2\Delta t} = -\nabla_d H(z^{(m+2)}, z^{(m+1)}, z^{(m)}). \end{cases} \quad (13)$$

通常、二段法スキーム (7) は、写像 $(z^{(m-1)}, z^{(m)}) \mapsto z^{(m+1)}$ を定義するものとして理解するが、これを上のように $(z^{(m-1)}, z^{(m)}) \mapsto (z^{(m+1)}, z^{(m+2)})$ として解釈し直すのがポイントである。上の写像右辺は、単にスキーム (7) を時間ステップをずらして2本並べただけである。しかしこれらは実際、 $(z^{(m-1)}, z^{(m)})$ が与えられたとき、上の2式を(順番に)解いて $(z^{(m+1)}, z^{(m+2)})$ を求めるものと解釈できる。

以下, 近似解 $z^{(0)}, z^{(1)}, z^{(2)}, \dots$ を偶数番目と奇数番目の組 $(z^{(2n)}, z^{(2n+1)})$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) にグループ化し, 2次元の拡大位相空間を考える. 上の写像をこの空間上の写像と見なし, その定義する力学系をここでは「拡大力学系」と呼ぼう. この写像は以下の不動点を持つ.

補題 1 (不動点 ; [5]) $a > 1$, または $1/2 \leq a < 1$ のとき, 写像 (13) は「真の」不動点 :

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ および } \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (14)$$

のみを持つ. $a = 1$ のときは, 真の不動点に加えて無限個の偽の不動点 $(c, 1/c)$ ($c \in \mathbb{R}; c \neq 0, 1$) を持つ. 同様に $a < 1/2$ のときは, 真の不動点に加えて偽の不動点 $(\pm\sqrt{1-2a}, \pm\sqrt{1-2a})$ (複合同順) を持つ. \square

例えば $(z^{(2n)}, z^{(2n+1)}) = (1, 1)$ であるが, これは真の不動点 (もとの1次元力学系の不動点) $z = 1$ に対応する. 同様に, 他の不動点も真の不動点 $z = -1, 0$ に対応する. この意味で, スキームパラメータ a が所定の条件を満たすとき, 写像 (13) の定義する拡大力学系は「真の」不動点しか持たない.

他方, $a < 1/2$ のときは, スキームパラメータに応じて偽の不動点が2つ現れる. $a = 1$ の場合はさらに顕著で, 双曲線状に無限個の偽の不動点が生じる. 初期値に応じて, 拡大力学系はこれらの不動点, つまり「本来あり得ない定常状態」に漸近する恐れがあり, 一般に系は正しい漸近挙動にはならない.

漸近挙動を正確に理解するため, いよいよ Lyapunov の理論を適用しよう. 陰的線形スキーム (7) の構成方法から, 多段離散エネルギー (10) は時間方向に散逸的である. さらに一定の解析より, Lyapunov 関数の定義のもう一つの条件 (不動点に関する条件) も満たすことが確認できる. 以上より, 多段離散エネルギーは拡大位相空間で Lyapunov 関数となる. これは, 拡大位相空間とその上の写像 (13) を考えたことで初めて可能になる見方であることに注意しよう.

あとは命題 1 の仮定を確認すればよい. 初期値と開始値を選ぶごとに多段離散エネルギーの初期値 $H(z^{(0)}, z^{(1)})$ が定まる. その値で決まる等高線 (レベルセット) は, $a > 1$ の場合のみ有界になる.

補題 2 ([5]) $H(z^{(2n)}, z^{(2n+1)}) = \text{const.}$ で定まる等高線 (とそれの囲む領域) が有界であることの必要十分条件は $a > 1$ である. \square

またこれら等高線で定まる集合は, 今考えている拡大力学系の性質から明らかに正不変であるから, $a > 1$ の場合は, 初期値で定まる等高線 (の囲む領域) を集合 B として, 命題 1 が成立する.

他方 $a \leq 1$ の場合は, 補題 2 の示すように初期値等高線が有界領域を定義しないから, そのままでは Lyapunov の理論が使えない. 実際, a ごとに初期値をうまく (最悪なところに) 選ぶことで, 拡大力学系の点列が「真の」不動点以外に収束, あるいは発散することを示せる. よって次の定理が成り立つ.

定理 1 ([5]) テスト方程式 (9) に対して, 多段離散エネルギー関数 (10) に基づく陰的線形スキーム (7) を考える. これが正しい漸近挙動を持つことの必要十分条件は $a > 1$ である. \square

ただし, ここでいう「正しい漸近挙動」とは, もとの連続系の不動点集合のどれかに漸近する, ということである (数値誤差があるため, 初期値ごとに定まる「本来行くべき不動点」に行くとは限らない).

簡単な数学ではあるが, この定理は以下のように重大な意味を持つ.

- 多段化した離散エネルギー (10) では, 考え得る選択肢の線形結合を考えた. このとき, 通常は選択肢のどちらか ($a = 0$ か $a = 1$), あるいはその間 ($0 < a < 1$) の値が選ばれるのが自然であるが, 上の定理はむしろその区間にとってはならないと主張している. これは, 上のような解析を行って初めて分かる非自明な結果である.

- 上の解析は Lyapunov の理論に基づいており、時間離散化幅 Δt には一切関係がない。したがって、 $a > 1$ のとき、陰的線形スキーム (7) は Δt の値に関わらず常に正しい漸近挙動を持つ。 $\Delta t > 1$ のとき、スキームはすでに時間方向の精度はまったく持たないが、それでも漸近する点の正しさだけは保証される。

数値例を見てみよう。図 2 は、 $a = 0$ と $a = 1$ の場合の図である。上の解析より、 $a = 0$ の挙動は正しくないことが予想されるが、実際に系は振動発散する（この理由は、さらに詳しく等高線集合を見ることで分かる）。 $a = 1$ のときは偽の不動点が多数あり、それぞれが振動的定常状態を表している。図では、概ね正しい不動点 $z = \pm 1$ に収束しているが、僅かな振動が残っているのが観察される。 a を少しでも大きくして $a > 1$ を満たせば、数値解は完全に ± 1 に収束する（図は省く）。

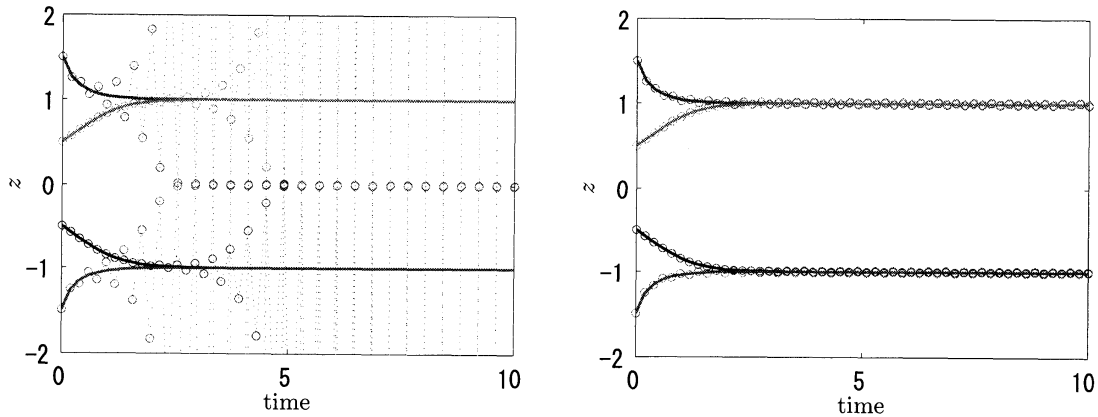


図 2: 4つの初期値による数値解: [左] 線形スキーム ($a = 0$) [右] 線形スキーム ($a = 1$) .

以上より、安定な陰的線形スキームを設計する手続きとして、以下の原理が考えられる。

[安定な線形化のための原理] 勾配系 (1) に対し正しい漸近挙動を持つ陰的線形スキームを作るには、以下の手順に従う。

1. 多段離散エネルギー関数 $H(z^{(m)}, z^{(m+1)})$ を、必要な個数のスキームパラメータ（上の例における a ）を導入して定義し、その多段離散勾配 $\nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}, z^{(m-1)})$ を求める。
2. 多段スキームの定義する 2次元の（より一般には、最高次数の非線形項を分解するに必要なだけの次元数の）写像 (13) を定義し、その不動点を解析する。そして偽の不動点が出ないように、スキームパラメータの範囲を定める（上の例では $a > 1$ と $1/2 \leq a < 1$ ）。
3. そのスキームパラメータの範囲内で、多段エネルギー関数 $H(z^{(m)}, z^{(m+1)})$ が Lyapunov の理論に照らして正しく系の漸近挙動を制御しうるかどうかをチェックする。多段エネルギー関数の Lyapunov 性は構成方法からほとんど自明であるから、ここにおける本質的な仕事は、多段エネルギー関数の等高線が定める集合のコンパクト性である。

上のテスト方程式では、実際にこの手順で適切な陰的線形スキームを選び出せた。より一般の場合もこの手順は有効であると思われるが、不動点の解析と等高線のコンパクト性の解析は、次元が上がるほど困難になる。この意味で、上の原理はこのままでは必ずしも実用的とは言えない。

著者らのグループは、本稿執筆時点でこの点の改良を目指しているが、経験的には、上の原理よりもかなり緩く、「多段エネルギー関数が下に有界であること」（しばしば Lyapunov 関数に課されている条件；上の

流儀の定義でも, Lyapunov 関数の有界性と集合のコンパクト性から, 事実上この条件を課したことになっている) をチェックすれば, 少なくとも安定性の意味では十分であることが多い. 次節では, 偏微分方程式の場合にその例をいくつか示す.

3 偏微分方程式の例

簡単のため, 境界条件はすべて周期的境界条件とする (この場合, 部分積分で現れる境界積分は常に消去されるため, 境界条件に注意する必要がほとんどなくなる).

3.1 Cahn–Hilliard 方程式

次の形の Cahn–Hilliard 方程式を考える.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right), \quad G(u, u_x) = -\frac{1}{2}pu^2 + \frac{1}{4}ru^4 + \frac{1}{2}q(u_x)^2 \quad (p, q, r > 0). \quad (15)$$

これに対し, 次の離散エネルギー関数から陰的線形版離散変分導関数法を用いてスキームを導出することを考える.

$$G_{d,k}(U^{(m+1)}, U^{(m)}) = -\frac{1}{2}pU_k^{(m+1)}U_k^{(m)} + \frac{1}{4}r(U_k^{(m+1)})^2(U_k^{(m)})^2 + \frac{1}{2}q \left(\frac{(\delta_k^+ U_k^{(m+1)})^2 + (\delta_k^+ U_k^{(m)})^2}{2} \right). \quad (16)$$

このとき, (多点) 離散変分導関数は

$$\frac{\delta G_d}{\delta(U^{(m+1)}, U^{(m)}, U^{(m-1)})_k} = -pU_k^{(m)} + r \left(\frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m-1)}}{2} \right) (U_k^{(m+1)})^2 - q\delta_k^{(2)} \left(\frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m-1)}}{2} \right) \quad (17)$$

となり, 従って陰的線形スキームは以下ようになる.

$$\delta_m^{(1)} U_k^{(m)} = \delta_k^{(2)} \frac{\delta G_d}{\delta(U^{(m+1)}, U^{(m)}, U^{(m-1)})_k}. \quad (18)$$

これら離散変分導関数法の詳細については, Furihata–Matsuo [2] を参照のこと. なお $U_k^{(m+1)} \simeq u(m\Delta t, k\Delta x)$ ($\Delta t, \Delta x$ はそれぞれ時間・空間離散化幅) は近似解, $\delta_k^+, \delta_k^{(2)}$ はそれぞれ空間方向に対する標準的な前進, および 2 階の中心差分作用素, $\delta_m^{(1)}$ は時間方向に対する 1 階の中心差分作用素である.

このスキームは, 安定であることがすでに Furihata–Matsuo [1] により理論的に示されている. そこでは本稿の視点からの指摘はないが, 実は次の性質が暗黙に示されている ([1] の Lem. 5.1 と Lem. 5.2 を組み合わせると, 実質次の補題と同じ主張が得られる).

補題 3 初期値によらないある $c \in \mathbb{R}$ が存在して,

$$\sum_{k=0}^{N-1} G_{d,k}(U^{(m+1)}, U^{(m)}) \Delta x \geq c. \quad (19)$$

証明. いま $s = U_k^{(m+1)}U_k^{(m)}$ と略記する. 多段エネルギー関数において, 負の項 $-(1/2)ps$ だけが問題である (残りの項はもともと正である). ところが

$$-\frac{1}{2}ps + \frac{1}{4}rs^2 = \frac{r}{4} \left\{ \left(s - \frac{p}{r} \right)^2 - \frac{p^2}{r^2} \right\}$$

であり、多段エネルギー関数は下に有界。 \square

もとの方程式には、2つの線形項があることに注意しよう。エネルギー関数における u^2 および $(u_x)^2$ の項である。これらそれぞれについて近似 (12) の自由度があるから、上で定義した離散エネルギー関数 (16) は、 $2 \times 2 = 4$ 通りの可能性の中のひとつである。これらのうち、上の補題のように有界性が示せるのは、上で選んだものに限られる。実際、 $(u_x)^2$ の項を $(\delta_k^+ U_k^{(m+1)})(\delta_k^+ U_k^{(m)})$ などで近似すると、これは明らかに下に有界ではない。また、 u^2 の項を二乗平均 $((U_k^{(m+1)})^2 + (U_k^{(m)})^2)/2$ で近似すると、上の補題の証明のように、負の p の項を4次非線形項に吸収させて消すことができなくなり、やはり有界性は担保されない。

実際、残り3つのスキームは、数値計算すると不安定であることが確認される。ただし上で安定であると示した選択 (16) も、直ちには正しい漸近挙動を保証しているとは言えないことに注意しよう。前節の常微分方程式の解析でいえば、 $a = 1$ の場合のような、「境目」に当たっていて偽の不動点 (定常状態) に達しうる可能性を排除できない。やはり前節と同様に線形結合を作り、より適切なスキームパラメータ領域を探すべきかどうかは、現在研究中である。

3.2 Swift–Hohenberg 方程式

次の形の Swift–Hohenberg 方程式を考える (本節の内容は、本稿著者と田中・渡邊との共同研究 [9] としてすでに口頭発表済みである。学術論文は現在準備中である)。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta G}{\delta u}, \quad G(u, u_x) = \frac{1-\varepsilon}{2}u^2 + \frac{1}{4}u^4 - \frac{1}{2}(u_x)^2 + \frac{1}{2}(u_{xx})^2. \quad (20)$$

これに対し、次の離散エネルギー関数から陰的線形版離散変分導関数法を用いてスキームを導出することを考える。

$$G_{d,k}(U^{(m+1)}, U^{(m)}) = \frac{1}{2} \frac{(U_k^{(m+1)})^2 + (U_k^{(m)})^2}{2} - \frac{\varepsilon}{2} U_k^{(m+1)} U_k^{(m)} + \frac{1}{4} (U_k^{(m+1)})^2 (U_k^{(m)})^2 - \frac{1}{2} \frac{(\delta_k^+ U_k^{(m+1)})^2 + (\delta_k^+ U_k^{(m)})^2}{2} + \frac{1}{2} \frac{(\delta_k^{(2)} U_k^{(m+1)})^2 + (\delta_k^{(2)} U_k^{(m)})^2}{2}. \quad (21)$$

このとき、(多点) 離散変分導関数は

$$\frac{\delta G_d}{\delta(U^{(m+1)}, U^{(m)}, U^{(m-1)})_k} = - \left\{ \left(1 + (U_k^{(m)})^2 + 2\delta_k^{(2)} + \delta_k^{(4)} \right) \left(\frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m-1)}}{2} \right) - \varepsilon U_k^{(m)} \right\} \quad (22)$$

となり、従って陰的線形スキームは以下ようになる。

$$\delta_m^{(1)} U_k^{(m)} = - \frac{\delta G_d}{\delta(U^{(m+1)}, U^{(m)}, U^{(m-1)})_k}. \quad (23)$$

このスキームに対して、補題3と同じ意味の補題が成立する。証明は存外込み入るので、本稿では省く。

補題 4 初期値とパラメータ ε によらないある $c \in \mathbb{R}$ が存在して、

$$\sum_{k=0}^{N-1} G_{d,k}(U^{(m+1)}, U^{(m)}) \Delta x \geq c. \quad (24)$$

もとの方程式には線形項が3つあるから、前節で述べた「組み合わせ」を考えると、少なくとも $2 \times 2 \times 2 = 8$ 通りのパターンがある。ところが本問はさらに複雑であり、上で選んだのはそのいずれでもない。エネルギー関数中の線形項 $(1-\varepsilon)u^2/2$ が、 $u^2/2$ と $-\varepsilon u^2/2$ のそれぞれについて、別々のやり方で離散化されてい

る点に注意しよう。これはまったく非自明なことだが、補題 3 型の補題が成立するために必須であるように著者らには思われる。

なお補題 4 の成立は、パラメータ ε の範囲を $\varepsilon \leq 0$ に制限すればもう少し易くなる。しかし物理的にも面白いのは $\varepsilon > 0$ の場合であり、上のスキームはその場合にも通用するように工夫されたものである。

注意 1 本稿では紙面の都合上、1次元の場合のみ書いたが、上の議論は2次元の Swift-Hohenberg 方程式にも拡張可能である。この場合、上の $(1-\varepsilon)u^2/2$ の分離が変わり、単なる1次元の焼き直しではすまないのが、さらに非自明な点になる。詳細は現在準備中の学術論文において近い将来発表する予定である。□

3.3 Ginzburg-Landau 方程式

前項までは差分法に基づく離散変分関数法の話題であったが、本稿のアイデアは Galerkin 法に基づく離散偏導関数法 [4] でも有効である。Matsuo-Kuramae [7] に沿って、ひとつ例を示す。

次の時間依存 Ginzburg-Landau 方程式 (TDGL) を考えよう。

$$\eta \frac{\partial u}{\partial t} + \left(\frac{i}{\kappa} \nabla + \mathbf{A} \right)^2 u + (|u|^2 - 1)u = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad (25a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \Re \left[\bar{u} \left(\frac{i}{\kappa} \nabla + \mathbf{A} \right) u \right] + \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}) = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad (25b)$$

$$\left(\frac{i}{\kappa} \nabla + \mathbf{A} \right) u \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}) = 0 \quad \text{on } \partial\Omega. \quad (25c)$$

ここで $u : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$) は超伝導の秩序パラメータ ($|u| = 1$ が超伝導状態, $|u| = 0$ が常伝導状態に対応する), $\mathbf{A} : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ は磁場のベクトルポテンシャル, $\kappa, \eta \in \mathbb{R}$ は物質定数, そして \mathbf{H} は外部磁場である。記号 \Re は複素数の実部を表す。

TDGL には Ginzburg-Landau 自由エネルギー:

$$\int_{\Omega} G(u, \mathbf{A}) dx, \quad G(u, \mathbf{A}) = \left| \left(\frac{i}{\kappa} \nabla + \mathbf{A} \right) u \right|^2 + \frac{1}{2} (|u|^2 - 1)^2 + |\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{H}|^2 \quad (26)$$

が付随しており、適切な境界条件 (周期的境界条件を含む) ではこの量は時間と共に散逸する。この散逸を確認するため、また後に Galerkin 法スキームを考えるために、ここで次の弱形式に移っておくと便利である: 以下を満たす $u(t, \cdot) \in H^1(\Omega)$ と $\mathbf{A}(t, \cdot) \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ を見つけよ。

$$\eta \left(\frac{\partial u}{\partial t}, u \right) + \left(\frac{\partial G}{\partial \bar{u}}, u \right) + \left(\frac{\partial G}{\partial \nabla u}, \nabla u \right) = 0, \quad \forall u \in H^1(\Omega), \quad (27a)$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \mathbf{v} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial G}{\partial \mathbf{A}}, \mathbf{v} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial G}{\partial (\nabla \times \mathbf{A})}, \nabla \times \mathbf{v} \right) = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\Omega). \quad (27b)$$

ただし $H^1(\Omega)$ は通常の複素関数の Sobolev 空間, そして $\mathbf{H}^1(\Omega)$ はベクトル値関数の Sobolev 空間で, そのノルムは $\|u\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)} = \|u\|_2 + \|\nabla \cdot u\|_2 + \|\nabla \times u\|_2$ で定義されるとする。以下ではベクトル \mathbf{A} のノルムを $\|\mathbf{A}\|_2$ と表記する。上の弱形式は, もし $u_t(t, \cdot) \in H^1(\Omega)$ かつ $\mathbf{A}_t(t, \cdot) \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ であれば, 次の不等式を満たし散逸的である。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} G dx &= \left(\frac{\partial G}{\partial \bar{u}}, u_t \right) + \left(\frac{\partial G}{\partial \nabla \bar{u}}, \nabla u_t \right) + (\text{c.c.}) + \left(\frac{\partial G}{\partial \mathbf{A}}, \mathbf{A}_t \right) + \left(\frac{\partial G}{\partial (\nabla \times \mathbf{A})}, (\nabla \times \mathbf{A})_t \right) \\ &= -2\eta \|u_t\|_2^2 - 2\|\mathbf{A}_t\|_2^2 \leq 0. \end{aligned} \quad (28)$$

ここで (c.c.) は直前の項の複素共役を表す。

さて, $S_d \in H^1(\Omega)$ と $W_d \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ を, 適切な有限次元近似空間としよう. たとえば通常の, 区分的線形関数の空間とすればよい. このとき, Matsuo-Kuramae [7] で提案されたスキームは以下のとおりである: 次式を $m = 1, 2, \dots$ で満たす $u^{(m)} \in S_d$ および $\mathbf{A}^{(m)} \in W_d (m = 2, 3, \dots)$ を見つけよ.

$$\eta \left(\frac{u^{(m+1)} - u^{(m-1)}}{2\Delta t}, u \right) + \left(\frac{\partial G_{\text{AL}}}{\partial \bar{u}}, u \right) + \left(\frac{\partial G_{\text{AL}}}{\partial \nabla \bar{u}}, \nabla u \right) = 0, \quad \forall u \in S_d, \quad (29a)$$

$$\left(\frac{\mathbf{A}^{(m+1)} - \mathbf{A}^{(m)}}{\Delta t}, \mathbf{v} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial G_{\text{AL}}}{\partial \mathbf{A}}, \mathbf{v} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial G_{\text{AL}}}{\partial (\nabla \times \mathbf{A})}, \nabla \times \mathbf{v} \right) = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in W_d. \quad (29b)$$

このとき初期値 $u^{(0)}, \mathbf{A}^{(0)}$ は $u(0), \mathbf{A}(0)$ を適切に離散化することで, そして出発値 $u^{(1)}, \mathbf{A}^{(1)}$ は, 何らかの別のスキームなどにより適宜与えられているものと仮定する. 記号

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_{\text{AL}}}{\partial \bar{u}} = & - \left[2(1 - u^{(m\pm 1)} \overline{u^{(m)}}) u^{(m)} - (1 - |u^{(m)}|^2) u^{(m\pm 1)} \right] + \frac{i}{\kappa} \mathbf{A}^{(m)} \nabla \left(\frac{u^{(m+1)} + 2u^{(m)} + u^{(m-1)}}{4} \right) \\ & + |\mathbf{A}^{(m)}|_2^2 u^{(m\pm 1)}, \end{aligned} \quad (30a)$$

$$\frac{\partial G_{\text{AL}}}{\partial \nabla \bar{u}} = \frac{1}{\kappa^2} \nabla u^{(m\pm 1)} - \frac{i}{\kappa} \mathbf{A}^{(m)} \left(\frac{u^{(m+1)} + 2u^{(m)} + u^{(m-1)}}{4} \right), \quad (30b)$$

$$\frac{\partial G_{\text{AL}}}{\partial \mathbf{A}} = \frac{i}{\kappa} \Im \left[\nabla u^{(m+\frac{1}{2})} \overline{u^{(m+\frac{1}{2})}} \right] + 2\mathbf{A}^{(m+\frac{1}{2})} \left(\frac{|u^{(m+1)}|^2 + |u^{(m)}|^2}{2} \right), \quad (30c)$$

$$\frac{\partial G_{\text{AL}}}{\partial (\nabla \times \mathbf{A})} = 2\nabla \times \left(\frac{\mathbf{A}^{(m+1)} + \mathbf{A}^{(m)}}{2} \right) - 2\mathbf{H} \quad (30d)$$

は, 離散偏導関数法における離散偏導関数を表す. 記号 \Im は, 複素数の虚数部分を表す. 紙面の都合上, 次の略号を用いた.

$$u^{(m\pm 1)} = \frac{u^{(m+1)} + u^{(m-1)}}{2}, \quad u^{(m+\frac{1}{2})} = \frac{u^{(m+1)} + u^{(m)}}{2}, \quad \mathbf{A}^{(m+\frac{1}{2})} = \frac{\mathbf{A}^{(m+1)} + \mathbf{A}^{(m)}}{2}.$$

上のスキームは, 離散エネルギー

$$\begin{aligned} G_{\text{AL}}(u^{(m)}, u^{(m+1)}, \mathbf{A}^{(m+1)}) = & \frac{1}{\kappa^2} \left[\frac{|\nabla u^{(m+1)}|_2^2 + |\nabla u^{(m)}|_2^2}{2} \right] + \frac{i}{\kappa} \mathbf{A}^{(m+1)} \cdot \Im \left[\nabla u^{(m+\frac{1}{2})} \overline{u^{(m+\frac{1}{2})}} \right] \\ & + |\mathbf{A}^{(m+1)}|_2^2 \left[\frac{|u^{(m+1)}|^2 + |u^{(m)}|^2}{2} \right] \\ & + \frac{1}{2} \left[2(1 - u^{(m+1)} \overline{u^{(m)}})(1 - u^{(m)} \overline{u^{(m+1)}}) - (1 - |u^{(m+1)}|^2)(1 - |u^{(m)}|^2) \right] \\ & + |\nabla \times \mathbf{A}^{(m+1)} - \mathbf{H}|_2^2 \end{aligned} \quad (31)$$

に関して散逸的である.

定理 2 (離散散逸則) $m = 1, 2, \dots$ において,

$$\int_{\Omega} \left(G_{\text{AL}}(u^{(m)}, u^{(m+1)}, \mathbf{A}^{(m+1)}) - G_{\text{AL}}(u^{(m-1)}, u^{(m)}, \mathbf{A}^{(m)}) \right) dx \leq 0. \quad (32)$$

さらに, この離散エネルギー関数は下に有界である.

このスキームは、以下の2点で非自明である。

- まず、このスキームは「交代的」に計算できる。スキームの1本目 (27a) は $u^{(m-1)}, u^{(m)}, \mathbf{A}^{(m)}$ から $u^{(m+1)}$ を計算する式であり、離散偏導関数 (30) をよく眺めれば、 $u^{(m+1)}$ に関して陰的線形である。スキームの2本目 (27b) は $\mathbf{A}^{(m)}, u^{(m)}, u^{(m+1)}$ から $\mathbf{A}^{(m+1)}$ を計算する式であり、これも陰的線形である。これらそれぞれで解くべき線形方程式の次元は半分であり、全体を一気に解く陰的線形スキームよりも高速である。
- 本稿では詳細は省くが、TDGLには合計3つの線形項があり、単純な組み合わせは $2^3 = 8$ 通りある。上で示したスキームは、その中から定理2が成立するよう選んだものである。実際このスキームも、数値実験により安定であることが確かめられている。

4 おわりに

本稿では、散逸系に対する散逸的陰的線形スキームの安定化について、研究の現状を概観した。

冒頭に述べたように、散逸性を保つ構造保存数値解法は、定性的挙動が良い代償として非線形スキームとなり、規模の大きな問題ではそのままでは役に立たない。その妥協策として陰的線形化技法が編み出されているが、それにはさらに不安定化というペナルティが待っている。それを回避するには、線形化にあたって生まれる自由度を風潰しに調べて、安定になる場合を抽出するしかなかった。

それに対し、Matsuo-Furihata [5] および本稿では、線形化された多段スキームを拡大力学系として解釈することにより、安定性を解析する手段を与えた。これはまだテスト方程式 (9) のレベルで解析が終わった段階であり、枠組として確立されるにはまだ努力が要するが、「スキームを実装する前に安定性が分かる」手法として幅広く有効であると期待される。特に、第2節末尾、および第3節で述べた「多段離散エネルギー関数の有界性だけを調べればよい」という指導原理に根拠が与えられれば、散逸的陰的線形スキームは各段に実用化に向けて進むと言って良いであろう。

最後に、現在進行中の研究とその未来について簡単に触れておく。

- 上で触れた実用的指導原理の数学的枠組は、著者らには概ね掴めたように思われる。この詳細については、近い将来別の場で述べたい。
- テスト方程式 (9) の例が示すように、自由度がある線形スキームは、その自由度を非自明な形で組み合わせなければ（つまりただ単に選択肢の一つを選ぶだけでは）、正しい漸近挙動に結びつかない可能性がある。これは著者らが開発してきた離散変分導関数法の文脈のみならず、歴史上の類似の散逸的多段線形スキームすべてに言えることであり、今後、それらを精査する必要がある。（図2の $a=1$ のものが示すように、安定であり概ね良いように見えても、厳密には狂いの生じた偽の定常解に至る場合がある。）
- 以上の議論はLyapunovの理論をベースにしているため、構造保存数値解法で同じく対象となる保存系（エネルギーが保存される系）に対してはまったく無力である。この場合にどんな指導原理がありうるかは将来の課題である。

[1] Furihata, D. and Matsuo, T., A stable, convergent, conservative and linear finite difference scheme for the Cahn–Hilliard equation, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **20** (2003), 65–85.

- [2] Furihata, D. and Matsuo, T., *Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations*, CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [3] Hairer, E., Lubich, C., and Wanner, G., *Geometric Numerical Integration*, Springer, Heidelberg, 2006.
- [4] Matsuo, T., Dissipative/conservative Galerkin method using discrete partial derivatives for nonlinear evolution equations, *J. Comput. Appl. Math.*, **218** (2008), 506–521.
- [5] Matsuo, T. and Furihata, D., A stabilization of multistep linearly-implicit schemes for dissipative systems, submitted.
- [6] Matsuo, T. and Kuramae, H., An alternating discrete variational derivative method, *AIP Conf. Proc.*, **1479** (2012), 1260–1263.
- [7] 松尾宇泰, 宮武勇登, 微分方程式に対する構造保存数値解法, *日本応用数理学会論文誌*, **22** (2012), 213–251.
- [8] Robinson, J. C., *Infinite-Dimensional Dynamical Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [9] 渡邊光徳, 田中元太, 松尾宇泰, 降旗大介, Swift-Hohenberg 型偏微分方程式の離散変分法による差分スキーム, 日本応用数理学会研究部会 2012 年合同研究集会.