

# Error estimates for schemes by discrete variational derivative method for some evolution equations

愛媛大学 大学院理工学研究科 生産環境工学専攻 市川 享祐

自由エネルギーの変分から導かれる偏微分方程式に対する数値解析手法として, D. Furihata and M. Mori [4] によって離散変分導関数法という方法が提案されている. これはいわゆる構造保存数値解法の一つであり, 系が元々持っているエネルギー保存則や散逸則などの性質を, 離散系で再現するような差分スキームを構築するための方法である. この“連続系で元々持っていた性質を離散系で再現する”という事実は, 物理現象を数値シミュレーションする上で重要になるだけでなく, スキームの安定性の数学的証明に有効であることが知られている ([1]). また, その安定性の証明をもとに誤差の評価も行われている. しかしながら, その誤差の評価方法は一部の特殊な偏微分方程式の差分スキームに対してのみ適用できるものであり, 一般的な偏微分方程式の差分スキームへの適用は行われていない. そこで我々は, 離散化を行う際の刻み幅 (離散化幅) にある条件を与えることを仮定して, 誤差評価を行うことを提案する. これにより, より一般的な偏微分方程式の差分スキームの誤差評価が可能になり, スキームを評価する上での一つの指標になると考えている.

さて, 離散変分導関数法の概要を説明するために, 有限差分法との違いを図 1 に示す. ここで矢印 (a) は, 連続系において, 自由エネルギーの変分から偏微分方程式を導出し, エネルギー保存則などの性質を証明するまでの流れを表している. その偏微分方程式に対し, 有限差分法を適用したときの流れが矢印 (b) であり, 離散変分導関数法を適用したときの流れが矢印 (c) である. 有限差分法 (矢印 (b)) の場合は, 偏微分方程式を離散化して差分スキームを導く. ここで離散誤差が発生するため, 連続系で元々持っていたエネルギー保存則などの性質が, 離散系で再現されているとは限らない (一般的に証明できない). これに対し離散変分導関数法 (矢印 (c)) の場合は, まず自由エネルギーを離散化して離散自由エネルギーを求めることから始める. そして, 連続系の流れ (矢印 (a)) に対応するような式変形を離散系で行う. すなわち, 連続系で偏微分方程式の導出と保存則などの証明ができたように, 離散系でも差分スキームの導出と離散的な保存則などの証明を試みる方法が離散変分導関数法である. より具体的な理論は本発表や参考文献の [2], [3] を参考にされたい.

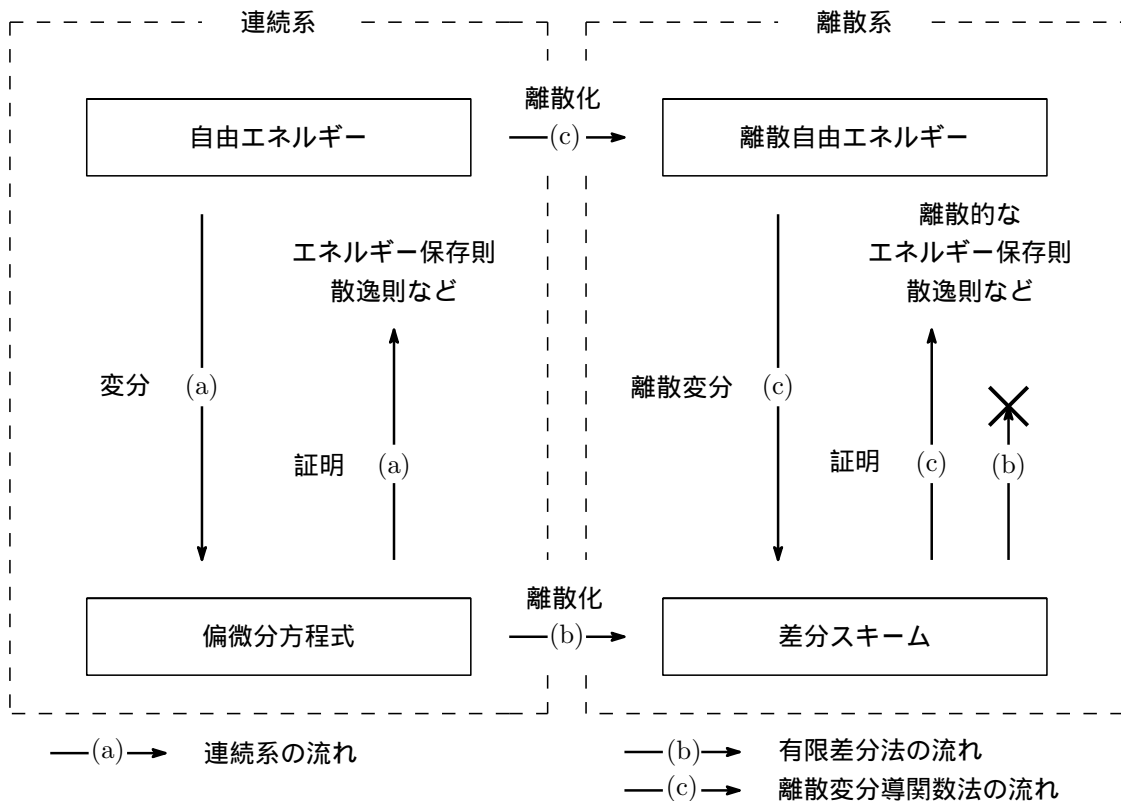


図 1: 有限差分法と離散変分導関数法の流れ

本稿の最後に、数式を見通しやすくするための演算子を定義する。離散条件として、空間変数  $x$  に対する分割数を  $N$ 、刻み幅を  $\Delta x$  で、時間変数  $t$  に対する刻み幅を  $\Delta t$  でそれぞれ表す。ただし、空間については 1 次元の区間  $(0, L)$  を考える。また、 $x = k\Delta x$ ,  $t = n\Delta t$ , ( $k = 0, 1, \dots, N$ ;  $n = 0, 1, \dots$ ) における  $f(x, t)$  の離散値を  $f_k^{(n)}$  と略記する。連続的な微分と積分を、差分と和分で近似することを考察する。まずは、 $f_k^{(n)}$  に対して作用する差分演算子  $\delta^+$ ,  $\delta^-$ ,  $\delta^{(1)}$ ,  $\delta^{(2)}$  を次のように定義する。

$$\begin{aligned}\delta_k^+ f_k^{(n)} &\equiv \frac{f_{k+1}^{(n)} - f_k^{(n)}}{\Delta x}, & \delta_k^- f_k^{(n)} &\equiv \frac{f_k^{(n)} - f_{k-1}^{(n)}}{\Delta x}, \\ \delta_k^{(1)} f_k^{(n)} &\equiv \frac{f_{k+1}^{(n)} - f_{k-1}^{(n)}}{2\Delta x}, & \delta_k^{(2)} f_k^{(n)} &\equiv \frac{f_{k+1}^{(n)} - 2f_k^{(n)} + f_{k-1}^{(n)}}{\Delta x^2}.\end{aligned}$$

更に、高階の差分演算子を次のように与える。

$$\delta_k^{(2m+1)} \equiv \delta_k^{(1)} \delta_k^{(2m)}, \quad \delta_k^{(2m+2)} \equiv \delta_k^{(2)} \delta_k^{(2m)}. \quad (m = 1, 2, \dots)$$

和分には台形公式を採用する。そこで、台形公式を表す和分演算子  $\sum''$  を次のように定義する。

$$\sum_{k=0}^N {}'' f_k^{(n)} \Delta x \equiv \left( \frac{1}{2} f_0^{(n)} + \sum_{k=1}^{N-1} f_k^{(n)} + \frac{1}{2} f_N^{(n)} \right) \Delta x \approx \int_0^L f(x, t) dx.$$

関数値を平均する平均演算子  $s^{(1)}$ ,  $\mu^{(1)}$  を次のように定義する。

$$s_k^{(1)} f_k^{(n)} \equiv \frac{f_{k+1}^{(n)} + f_{k-1}^{(n)}}{2}, \quad \mu_k^{(1)} f_k^{(n)} \equiv \frac{f_{k+1}^{(n)} + 2f_k^{(n)} + f_{k-1}^{(n)}}{4}.$$

以上のように定義したとき、差分と和分は次の関係を満たす。

$$(1) \quad \sum_{k=0}^N {}'' \delta_k^{(1)} f_k^{(n)} \Delta x = \left[ \mu_k^{(1)} f_k^{(n)} \right]_0^N, \quad \sum_{k=0}^N {}'' \delta_k^{(2)} f_k^{(n)} \Delta x = \left[ \delta_k^{(1)} f_k^{(n)} \right]_0^N.$$

すなわち、微分と積分が逆演算の関係であるように、差分と和分も逆の関係をもつことが分かる。また、部分積分公式に対応するような、次の部分積分公式が成立する。

$$(2) \quad \sum_{k=0}^N {}'' f_k^{(n)} \left( \delta_k^{(1)} g_k^{(n)} \right) \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' \left( \delta_k^{(1)} f_k^{(n)} \right) g_k^{(n)} \Delta x = \frac{1}{2} \left[ f_k^{(n)} \left( s_k^{(1)} g_k^{(n)} \right) + \left( s_k^{(1)} f_k^{(n)} \right) g_k^{(n)} \right]_{k=0}^N,$$

$$(3) \quad \sum_{k=0}^N {}'' \frac{\left( \delta_k^+ f_k^{(n)} \right) \left( \delta_k^+ g_k^{(n)} \right) + \left( \delta_k^- f_k^{(n)} \right) \left( \delta_k^- g_k^{(n)} \right)}{2} \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' \left( \delta_k^{(2)} f_k^{(n)} \right) g_k^{(n)} \Delta x \\ = \frac{1}{2} \left[ \left( \delta_k^{(1)} f_k^{(n)} \right) \left\{ \left( s_k^{(1)} + 1 \right) g_k^{(n)} \right\} + \left\{ \left( s_k^{(1)} - 1 \right) f_k^{(n)} \right\} \left( \delta_k^{(1)} g_k^{(n)} \right) \right]_{k=0}^N.$$

上述の離散変分導関数法の説明において“連続系の流れ（矢印 (a)）に対応するような式変形を離散系で行う”と記述したが、実際、微分積分の関係に対応する差分和分の関係 (1) や、部分積分公式に対応する部分積分公式 (2), (3) を用いる。

## 参考文献

- [1] D. Furihata, “A stable and conservative finite difference scheme for the Cahn-Hilliard equation,” *Numer. Math.*, **87** (2001), 675-699.
- [2] D. Furihata, M. Matsuo, *Discrete Variational Derivative Method*, Numerical Analysis and Scientific Computing series, CRC Press/Taylor & Francis, 2010.
- [3] S. Koide, D. Furihata, “Nonlinear and linear conservative finite difference schemes for regularized long wave equation,” *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **26** (2009), 15-40.
- [4] 降旗大介, 森正武, 「偏微分方程式に対する差分スキームの離散変分による統一的導出」, 『日本応用数理学会論文誌』, **8** (1998), 317-340.