微分方程式の構造を引き継ぐ離散化とその応用

吉川　周二　(広島大学)*

概　　要

差分についての評価から微分を含む関数不等式を導出したり，微分方程式の数値計算など導関数の離散化は様々な場面で現れる．微分方程式の離散化の際には，方程式の「構造」を引き継ぐように導関数を離散化すると見通しがよくなることが多い．例えば，対象とする微分方程式のエネルギー構造を引き継ぐように離散化した差分方程式には，微分方程式のエネルギー法が適用できる．ここではこの構造を引き継ぐような離散化とその解析について最近得られた結果について紹介したい．

1. はじめに

微分商の近似として最も単純で古典的なものは差分商であろう．関数不等式を導出する際に, 差分近似で離散の不等式をまず示してからその極限を考えて目的の不等式を導出したり, 微分方程式の数値解法として方程式の微分商を差分商におきかえる差分法など, 差分は古典的だが有用なツールとして知られている．

さて微分商 $f'(x)$ の近似を与える差分商といっても, x の増分 $\Delta x > 0$ に対して,

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}, \quad \frac{f(x)-f(x-\Delta x)}{\Delta x}, \quad \frac{f(x+\Delta x)-f(x-\Delta x)}{2\Delta x}, \dots$$

のように無限通りの差分商が考えられる．Taylor の定理より,

$$\left|\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}-f'(x)\right| \le \frac{\sup_x |f''(x)|}{2}\cdot\Delta x,$$
$$\left|\frac{f(x+\Delta x)-f(x-\Delta x)}{2\Delta x}-f'(x)\right| \le \frac{\sup_x |f^{(3)}(x)|}{6}\cdot(\Delta x)^2$$

がわかる．これにより, $\Delta x \to 0$ としたときの $f'(x)$ への収束は前者の前進差分より後者の中心差分の方が速いことがわかる．このようにうまく近似を選ぶことで, 知りたい情報がより精密にわかることがある．しかし「うまく」という表現は曖昧で, 実際その目的によって選ぶべき「うまい」差分商は異なる．数値解析の教科書の多くでは, (常)微分方程式の数値解法として, まず微分を前進差分で置き換えるオイラー法が紹介され, 次に微分を中心差分で置き換えた中点則が紹介される．解への収束の評価を比較すると, 中点則の方が速い収束となるが, 中点則は数値不安定化が生じるため解の長時間挙動を数値的に調べるのには適さないというような例が紹介される．これは数値安定性に着目すると, 中心差分でなく前進差分の方が適していることを意味している．

微分方程式の離散化としては様々な手法が知られているが, 微分方程式のもつ性質や構造を引き継ぐように離散化をするとうまい近似が得られることが多い．対象となる

本研究は科研費 (課題番号:JP24K06815) の助成を受けたものです．2018 年度日本数学会年会の応用数学分科会での特別講演でご紹介した内容と重複する部分があります．ご容赦ください．
キーワード：離散化, 差分, 関数不等式, 非線形偏微分方程式, 誤差評価, 解の存在

* 〒739-8527 東広島市鏡山 1-4-1 広島大学大学院先進理工系科学研究科 電気システム制御プログラム
e-mail: s-yoshikawa@hiroshima-u.ac.jp
web: https://home.hiroshima-u.ac.jp/s-yoshikawa/

問題の備え持つ何らかの意味での構造を引き継いだ数値解法を**構造保存型数値解法**という. 引き継ぐ構造にはシンプレクティック構造のような幾何学的不変量など様々なものが知られている (例えば, [4], [9]) が, ここでは特に時間発展のある非線形偏微分方程式を考察し, 引き継がれる構造は [2], [6] のようにエネルギー保存やエントロピー増大といった物理法則を指すものとする. このような構造を引き継ぐ数値解法を統一的に導出する手法は [3] にまとめられている**離散変分導関数法**などが知られている.

エネルギー保存やエントロピー増大といった微分方程式の備え持つ構造がその解析で重要や役割を果たすことはよく知られている. 例えば, **エネルギークラス**と呼ばれるエネルギーに対応する関数空間で時間局所的に解を構成することができれば, エネルギー保存則からその時間局所解を時間大域的につなぎ合わせることで, 時間大域解の構成が可能になる ([7]). またこれらの構造を導出する手続きが, 時間局所解の存在を示す上でヒントになることも多い. ここではこのエネルギー構造を何らかの意味で利用して解の性質を調べる手法を総称して**エネルギー法**を呼ぶこととする. エネルギー法は, エネルギー構造を引き継いだ構造保存型数値解法にも適用可能である.

この要旨では, 次節で離散版の関数不等式について, その次に微分方程式に対する構造保存型数値解法のエネルギー法について簡単な例を用いて紹介する. 最後に, 応用として発表者の得た結果を列挙する.

2. 離散版の関数不等式

離散版の関数不等式は, 補間関数を使えば連続の関数不等式から系統的に導出できる ([10]). 例えば, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ での, Sobolev の不等式 $\|f\|_{L^p(\Omega)} \leq C\|f\|_{H^1(\Omega)}$ $(p > 2)$ の離散版 $\|\boldsymbol{f}\|_{L^p_d} \leq C\|\boldsymbol{f}\|_{H^1_d}$ を示したければ, $\widetilde{f}(k\Delta x, m\Delta y) = f_{k,m}$ $(k = 0, 1, \ldots, K,\ m = 0, 1, \ldots, M)$ を満たす Ω で定義された関数 $\widetilde{f}(x, y)$ で $\|\boldsymbol{f}\|_{L^p_d} \leq C\|f\|_{L^p(\Omega)}$, $\|f\|_{H^1(\Omega)} \leq C\|\boldsymbol{f}\|_{H^1_d}$ を満たすものをうまく見つけることで求まる. この方法は便利だが, 離散版関数不等式の右辺の定数の評価には損失が多い. 直接離散版の関数不等式を導出することで, 具体的な定数が容易に求まったり不等式のメカニズムが明確になることがある. 空間一次元の離散 Sobolev の不等式を例として紹介する.

2.1. 準備

本発表では, 空間領域 Ω は一次元の連結区間 $\Omega = [0, L_x]$ か二次元の長方形領域 $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ の場合について考察する. K, M, N は任意の自然数で, 区間 $[0, L_x]$, $[0, L_y]$ をそれぞれ K-個, M-個に分割し, 時間区間 $[0, T]$ を N-個に分割する. 空間 x, y と時間 t についての刻み幅をそれぞれ Δx, Δy, Δt とかく. すなわち Δx, Δy, Δt は $L_x = K\Delta x$, $L_y = M\Delta y$, $T = N\Delta t$ を満たすものとする. 有限差分法では, $k = 0, 1, \ldots, K$, $m = 0, 1, \ldots, M$, $n = 0, 1, \ldots, N$ について格子点 $(k\Delta x, n\Delta t)$ の値を求める. 点 $(k\Delta x, m\Delta y, n\Delta t)$ での値を $f_{k,m}^{(n)}$ のように書くことにする. 離散では, (k, m, n) が変数 (x, y, t) の役割を果たす. 空間 (k, m) についてのノルムを考える時は, $\boldsymbol{f}^{(n)} := (f_{k,m}^{(n)})_{k=0,1,\ldots,K,\ m=0,1,\ldots,M}$ のように空間についての添え字を省きボールド体で記す. 特に時間変数 n に依存しない場合は $\boldsymbol{f} := (f_{k,m})_{k=0,1,\ldots,K,\ m=0,1,\ldots,M}$ のように書く. 微分と積分の近似として, 差分と和分を利用するが, 表記は [3] に従った, すなわち, (偏) 差分作用素 δ_ξ^+, δ_ξ^-, $\delta_\xi^{\langle 1\rangle}$, $\delta_\xi^{\langle 2\rangle}$ $(\xi = k, m, n)$ はそれぞれ ξ 変数についての前進差分, 後退差分, 中

心差分, 2階中心差分を表す作用素である. すなわち,

$$\delta_n^+ f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k,m}^{(n+1)} - f_{k,m}^{(n)}}{\Delta t}, \quad \delta_k^+ f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k+1,m}^{(n)} - f_{k,m}^{(n)}}{\Delta x}, \quad \delta_m^+ f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k,m+1}^{(n)} - f_{k,m}^{(n)}}{\Delta y},$$
$$\delta_n^- f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k,m}^{(n)} - f_{k,m}^{(n-1)}}{\Delta t}, \quad \delta_k^- f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k,m}^{(n)} - f_{k-1,m}^{(n)}}{\Delta x}, \quad \delta_m^- f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k,m}^{(n)} - f_{k,m-1}^{(n)}}{\Delta y},$$
$$\delta_k^{\langle 1\rangle} f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k+1,m}^{(n)} - f_{k-1,m}^{(n)}}{2\Delta x}, \quad \delta_m^{\langle 1\rangle} f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k,m+1}^{(n)} - f_{k,m-1}^{(n)}}{2\Delta y},$$
$$\delta_k^{\langle 2\rangle} f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k+1,m}^{(n)} - 2f_{k,m}^{(n)} + f_{k-1,m}^{(n)}}{\Delta x^2}, \quad \delta_k^{\langle 2\rangle} f_{k,m}^{(n)} := \frac{f_{k,m+1}^{(n)} - 2f_{k,m}^{(n)} + f_{k,m-1}^{(n)}}{\Delta y^2}$$

である. また, 積分の近似には台形則を採用する. 1変数関数の台形則は

$$\sum_{k=0}^{K}{}'' f_k \Delta x := \sum_{k=0}^{K-1} \frac{f_k + f_{k+1}}{2} \Delta x = \left(\frac{1}{2} f_0 + \sum_{k=1}^{K-1} f_k + \frac{1}{2} f_K \right) \Delta x \tag{1}$$

で定義され, 2変数関数の場合は各々の変数について台形則にしたがって和をとることで定義される. また, 2つのベクトルの各成分の積からなるベクトル $(f_{k,m} g_{k,m})_{k=0,1,\dots,K,\ m=0,1,\dots,M}$ を, $\boldsymbol{fg}$ と書くことにする. 離散 L^p ノルム $\|\cdot\|_{L_d^p}$ と離散 Dirichlet セミノルム $\|D\cdot\|$ を,

$$\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^p} := \begin{cases} \left(\displaystyle\sum_{m=0}^{M}{}'' \sum_{k=0}^{K}{}'' |f_{k,m}|^p \Delta x \Delta y \right)^{\frac{1}{p}}, & p \in [1, \infty), \\ \displaystyle\max_{\substack{k=0,1,\dots,K,\\ m=0,1,\dots,M}} |f_{k,m}|, & p = \infty, \end{cases}$$
$$\|D\boldsymbol{f}\| := \sqrt{\sum_{m=0}^{K-1} \sum_{k=0}^{K-1} (|\delta_k^+ f_{k,m}|^2 + |\delta_m^+ f_{k,m}|^2) \Delta x \Delta y}$$

で定義する. また離散 H^1 ノルムは $\|\boldsymbol{f}\|_{H_d^1} := \sqrt{\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2}^2 + \|D\boldsymbol{f}\|^2}$ で定義する.

2.2. 離散 Sobolev の不等式

命題 2.1. 任意の $\boldsymbol{f} = (f_k)_{k=0,1,\dots,K}$ に対して

$$\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^\infty} \le C_{L_x} \|\boldsymbol{f}\|_{H_d^1}, \qquad C_{L_x} := \sqrt{\frac{\sqrt{1 + 4L_x^2} + 1}{2L_x}}$$

が成り立つ.

Proof. 任意の $0 \le \ell, m \le K$ に対して,

$$|f_m|^2 - |f_\ell|^2 \le 2 \left(\sum_{k=0}^{K-1} |\delta_k^+ f_k|^2 \Delta x \right)^{1/2} \left(\sum_{k=0}^{K-1} \left| \frac{f_{k+1} + f_k}{2} \right|^2 \Delta x \right)^{1/2} \le 2\|D\boldsymbol{f}\| \|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2}$$

がわかる. m を固定して, $\ell = 1, 2, \dots, K-1$ について和をとり, さらに $\ell = 0, K$ の場合の $1/2$ 倍を足し合わせると,

$$K|f_m|^2 \le \sum_{\ell=1}^{K-1} |f_\ell|^2 + \frac{1}{2}(|f_0|^2 + |f_K|^2) + 2K\|D\boldsymbol{f}\| \|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2} = \sum_{k=0}^{K}{}'' |f_k|^2 + 2K\|D\boldsymbol{f}\| \|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2}$$

$K\Delta x = L_x$ だから, Gagliardo-Nirenberg 型の不等式

$$\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^\infty}^2 \le \frac{1}{L_x}\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2}^2 + 2\|D\boldsymbol{f}\|\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2}$$

が得られる. Young の不等式 $ab \le \frac{\varepsilon}{2}a^2 + \frac{1}{2\varepsilon}b^2$ $(\varepsilon > 0)$ より,

$$\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^\infty}^2 \le \left(\frac{1}{L_x} + \frac{2L_x}{\sqrt{1+4L_x^2}+1}\right)\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2}^2 + \frac{\sqrt{1+4L_x^2}+1}{2L_x}\|D\boldsymbol{f}\|^2 = \frac{\sqrt{1+4L_x^2}+1}{2L_x}\|\boldsymbol{f}\|_{H_d^1}^2$$

が得られる. □

この証明は単純な数列の計算のみで示され, さらに定数が具体的に求まっていることがわかる. 次節に例示するように, 定数の大きさは実際の数値実験において刻み幅のサイズの条件を明示的な形で与えることなどにつながり実用的である.

3. エネルギー法

3.1. 偏微分方程式のエネルギー法

偏微分方程式に対するエネルギー法を用いた時間大域解の存在の証明を, 次の半線形熱方程式を例として紹介する;

$$\partial_t u - \partial_x^2 u + u = -u^3, \qquad (t,x) \in \mathbb{R}^+ \times [0, L_x], \tag{2}$$

$$\partial_x u(t,0) = \partial_x u(t, L_x) = 0, \qquad t \in \mathbb{R}^+, \tag{3}$$

$$u(0,\cdot) = u_0(\cdot), \qquad x \in [0, L_x]. \tag{4}$$

方程式 (2) に $\partial_t u$ をかけて空間変数について $[0, L_x]$ で積分すると,

$$\partial_t\left(\frac{1}{2}\|\partial_x u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2}\|u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{4}\|u\|_{L^4}^4\right) + \|\partial_t u\|_{L^2}^2 = 0$$

が得られる. $E(f) := \frac{1}{2}\|f\|_{H^1}^2 + \frac{1}{4}\|f\|_{L^4}^4$ とおくと, エネルギー散逸則 $E(u(t)) \le E(u_0)$ が得られる. 実際の物理的なエネルギーに対応していなくてもこのような方程式が持つ特有の量を総称してエネルギーと呼ぶことにする. エネルギー散逸則より $\sup_{t\in[0,\infty)}\|u(t)\|_{H^1} \le \sqrt{2E(u_0)}$ が成り立つ. この方程式のエネルギークラスはソボレフ空間 H^1 であり, 例えば任意の $M(\ge \|u_0\|_{H^1})$ に対して定まる $T = T(M)$ に対して $u \in C([0,T]; H^1)$ となる時間局所解を構成できたとする. M として $\sqrt{2E(u_0)}$ に選ぶとエネルギー散逸則より, $\|u(T)\|_{H^1} \le M$ なので, $u(T)$ を初期値として $[T, 2T]$ まで時間局所解を構成できる. これを繰り返せば時間大域解の存在が示される.

3.2. 構造保存型差分解法のエネルギー法

文献 [3] の離散変分導関数法を用いると, 問題 (2)–(4) のエネルギー構造を引き継ぐ構造保存型差分解法

$$\delta_n^+ U_k^{(n)} - \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2}\right) + \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} = -\frac{1}{4}\sum_{j=0}^{3}(U_k^{(n+1)})^j (U_k^{(n)})^{3-j}, \tag{5}$$

$$\delta_k^{\langle 1\rangle} U_k^{(n)}|_{k=0,K} = 0, \tag{6}$$

$$U_k^{(0)} = u_0(k\Delta x) \tag{7}$$

が導出される．この差分解法はエネルギー散逸則を満たす．実際，差分方程式 (5) に $\delta_n^+ U_k^{(n)}$ をかけて台形則 (1) に従って和をとると，

$$\delta_n^+ E_d(\boldsymbol{U}^{(n)}) + \|\delta_n^+ \boldsymbol{U}^{(n)}\|_{L_d^2}^2 = 0$$

が得られる．ただし，$E_d(\boldsymbol{f})$ は

$$E_d(\boldsymbol{f}) := \frac{1}{2}\|D\boldsymbol{f}\|^2 + \frac{1}{2}\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2}^2 + \frac{1}{4}\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^4}^4$$

で定義される離散版のエネルギーである．よって差分解法 (5)–(6) の解は，離散版のエネルギー減衰則を次の意味で満たすことがわかる，

$$E_d(\boldsymbol{U}^{(n+1)}) \le E_d(\boldsymbol{U}^{(n)}). \tag{8}$$

上記の計算では，部分積分公式に対応する以下の部分和分公式を用いた;

補題 3.1 (部分和分公式 ([3, Chapter 3]))**.** 斉次 *Neumann* 境界条件*:*

$$\delta_k^{\langle 1\rangle} f_k|_{k=0,K} = \delta_k^{\langle 1\rangle} g_k|_{k=0,K} = 0$$

をみたす任意の $\boldsymbol{f} := (f_k)_{k=0}^K$ と $\boldsymbol{g} := (g_k)_{k=0}^K$ に対して

$$\sum_{k=0}^{K}{}'' f_k \delta_k^{\langle 2\rangle} f_k \Delta x = -\|D\boldsymbol{f}\|^2, \qquad \sum_{k=0}^{K}{}'' f_k \delta_k^{\langle 2\rangle} g_k \Delta x \le \|D\boldsymbol{f}\|\|D\boldsymbol{g}\| \tag{9}$$

が成り立つ．

次に構造保存型差分解法に対しての解の存在定理を示す．

Step 1 (時間局所解の存在と一意性). n を固定する．非線形写像 $\Phi[\boldsymbol{U}]$ を

$$\frac{\Phi[\boldsymbol{U}] - \boldsymbol{U}^{(n)}}{\Delta t} - D_2\left(\frac{\Phi[\boldsymbol{U}] + \boldsymbol{U}^{(n)}}{2}\right) + \frac{\Phi[\boldsymbol{U}] + \boldsymbol{U}^{(n)}}{2} = -\frac{1}{4}\sum_{j=0}^{3}(\boldsymbol{U})^j(\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} \tag{10}$$

によって定義する．ただし D_2 は二階中心差分 $\delta_k^{\langle 2\rangle}$ に対する斉次ノイマン条件付き $(K+1)$-次元の行列表現とする．行列 D_2 の固有値は $\lambda_k := \frac{2}{\Delta x^2}\left(\cos\frac{k\pi}{K} - 1\right)$ $(k = 0, 1, \ldots, K)$ で与えられるので，任意の $\Delta t > 0$ に対して $\{(1 + \frac{\Delta t}{2})I_{K+1} - \frac{\Delta t}{2}D_2\}$ は正則になるので写像 Φ は well-defined である．ここで I_{K+1} は $(K+1)$-次元単位行列である．

$M := \|\boldsymbol{U}^{(n)}\|_{H_d^1}$ とするとき，この写像 Φ が H_d^1 内の閉球 $X := \left\{\boldsymbol{f} \mid \|\boldsymbol{f}\|_{H_d^1} \le 2M\right\}$ の中で縮小写像になることを示す．任意に $\boldsymbol{U} \in X$ を選ぶ．(10) の第 k 式に $(\Phi[\boldsymbol{U}] - \boldsymbol{U}^{(n)})/\Delta t$ の第 k 成分をかけて，$k = 0, 1, \ldots, K$ について台形則 (1) に従って和をとると，

$$\begin{aligned}\frac{\|\Phi[\boldsymbol{U}]\|_{H_d^1}^2 - \|\boldsymbol{U}^{(n)}\|_{H_d^1}^2}{2\Delta t} + \left\|\frac{\Phi[\boldsymbol{U}] - \boldsymbol{U}^{(n)}}{\Delta t}\right\|_{L_d^2}^2 &\le \left\|\frac{\Phi[\boldsymbol{U}] - \boldsymbol{U}^{(n)}}{\Delta t}\right\|_{L_d^2}\left\|\frac{1}{4}\sum_{j=0}^{3}(\boldsymbol{U})^j(\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j}\right\|_{L_d^2}\\ &\le \left\|\frac{\Phi[\boldsymbol{U}] - \boldsymbol{U}^{(n)}}{\Delta t}\right\|_{L_d^2}^2 + \frac{1}{4}\left\|\frac{1}{4}\sum_{j=0}^{3}(\boldsymbol{U})^j(\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j}\right\|_{L_d^2}^2\end{aligned}$$

が得られる．式の変形には Young の不等式を用いた．整理すると，

$$\|\Phi[\boldsymbol{U}]\|_{H_d^1} \leq \|\boldsymbol{U}^{(n)}\|_{H_d^1} + \sqrt{\frac{\Delta t}{32}} \left\| \sum_{j=0}^{3} (\boldsymbol{U})^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} \right\|_{L_d^2}$$

となる．自明な不等式 $\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^2} \leq \|\boldsymbol{f}\|_{H_d^1}$ と Hölder の不等式と Sobolev の不等式より，

$$\left\| \sum_{j=0}^{3} (\boldsymbol{U})^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} \right\|_{L_d^2} \leq \sum_{j=0}^{3} \left\| (\boldsymbol{U})^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} \right\|_{L_d^2} \leq \sum_{j=0}^{3} C_{L_x}^2 \|\boldsymbol{U}\|_{H_d^1}^j \|\boldsymbol{U}^{(n)}\|_{H_d^1}^{3-j}$$

がわかる．よって，上の評価は，

$$\|\Phi[\boldsymbol{U}]\|_{H_d^1} \leq M + \sqrt{\frac{\Delta t}{32}} C_{L_x}^2 M^3 \sum_{j=0}^{3} 2^j = M + 15\sqrt{\frac{\Delta t}{32}} C_{L_x}^2 M^3. \tag{11}$$

同様に，任意の $\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2 \in X$ に対しての (10) の差をとると次が得られる:

$$\begin{aligned}
&\frac{\Phi[\boldsymbol{U}_1] - \Phi[\boldsymbol{U}_2]}{\Delta t} - D_2 \left(\frac{\Phi[\boldsymbol{U}_1] - \Phi[\boldsymbol{U}_2]}{2} \right) + \frac{\Phi[\boldsymbol{U}_1] - \Phi[\boldsymbol{U}_2]}{2} \\
&\qquad = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^{3} \left\{ (\boldsymbol{U}_1)^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} - (\boldsymbol{U}_2)^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} \right\}.
\end{aligned}$$

この第 k 式に $(\Phi[\boldsymbol{U}_1] - \Phi[\boldsymbol{U}_2])/\Delta t$ の第 k 成分をかけて，$k = 0, 1, \ldots, K$ について台形則 (1) に従って和をとると，

$$\frac{\|\Phi[\boldsymbol{U}_1] - \Phi[\boldsymbol{U}_2]\|_{H_d^1}^2}{\Delta t} \leq \frac{1}{32} \left\| \sum_{j=1}^{3} \left\{ (\boldsymbol{U}_1)^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} - (\boldsymbol{U}_2)^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} \right\} \right\|_{L_d^2}^2$$

となる．右辺は，

$$\begin{aligned}
&\left\| \sum_{j=1}^{3} \left\{ (\boldsymbol{U}_1)^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} - (\boldsymbol{U}_2)^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} \right\} \right\|_{L_d^2} \\
&\leq C_L^2 \Big\{ \|\boldsymbol{U}^{(n)}\|_{H_d^1}^2 \|\boldsymbol{U}_1 - \boldsymbol{U}_2\|_{H_d^1} + \|\boldsymbol{U}^{(n)}\|_{H_d^1} (\|\boldsymbol{U}_1\|_{H_d^1} + \|\boldsymbol{U}_2\|_{H_d^1}) \|\boldsymbol{U}_1 - \boldsymbol{U}_2\|_{H_d^1} \qquad (12) \\
&\qquad + (\|\boldsymbol{U}_1\|_{H_d^1}^2 + \|\boldsymbol{U}_1\|_{H_d^1} \|\boldsymbol{U}_2\|_{H_d^1} + \|\boldsymbol{U}_2\|_{H_d^1}^2) \|\boldsymbol{U}_1 - \boldsymbol{U}_2\|_{H_d^1} \Big\} \\
&\leq 17 C_{L_x}^2 M^2 \|\boldsymbol{U}_1 - \boldsymbol{U}_2\|_{H_d^1}
\end{aligned}$$

と評価できるので，

$$\|\Phi[\boldsymbol{U}_1] - \Phi[\boldsymbol{U}_2]\|_{H_d^1} \leq 17\sqrt{\frac{\Delta t}{32}} C_{L_x}^2 M^2 \|\boldsymbol{U}_1 - \boldsymbol{U}_2\|_{H_d^1} \tag{13}$$

が得られる．以上の (11) と (13) から，Δt を

$$\frac{17}{4\sqrt{2}} C_{L_x}^2 M^2 \sqrt{\Delta t} < 1 \tag{14}$$

満たすように小さくとると, 縮小写像の原理より, $\Phi[\boldsymbol{U}]=\boldsymbol{U}$ を満たす $\boldsymbol{U}$ が X の中にただ一つ存在する. この不動点 $\boldsymbol{U}$ が (5)–(6) を満たす $\boldsymbol{U}^{(n+1)}$ である.

Step 2 (時間大域解の構成). エネルギー散逸側 (8) から $\|\boldsymbol{U}^{(n)}\|_{H^1_d} \le (2E_d(\boldsymbol{U}^{(n)}))^{1/2} \le (2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2}$ が成り立つ. したがって, 条件 (14) の M を $(2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2}$ に交換した

$$\frac{17}{2\sqrt{2}} C_{L_x}^2 E_d(\boldsymbol{U}^{(0)})\sqrt{\Delta t} < 1 \tag{15}$$

を満たすように Δt を小さくとると, 任意の n に対して (14) が満たされる. 以上より次の定理が得られる.

定理 3.2 (解の存在)**.** 任意の初期値に対して, Δt を (15) を満たすように選べば, 差分方程式 (5)–(7) の解 $\{\boldsymbol{U}^{(n)}\}_{n=0}^{\infty}$ がただ一つ存在する.

これを構造保存型差分解法に対する**エネルギー法**と呼ぶことにする. またこの方法で示した解の存在では, n はいくらでも大きくとれる. 実際の計算では n の上限 N を定めるため注目されないことが多いが, 偏微分方程式の理論との比較という観点からは意味があると思われる.

次に誤差 $e_{u,k}^{(n)} := U_k^{(n)} - u_k^{(n)}$ の評価も同様にして示されることについても言及したい.

定理 3.3 (誤差評価)**.** 問題 (2)–(4) に滑らかな解 $u \in C^4([0,L_x]\times[0,T])$ が存在するとする. $C_1 := \max_{0\le n\le N}\left\{\max_{0\le k\le K}|U_k^{(n)}|,\ \max_{0\le k\le K}|u_k^{(n)}|\right\}$ とする. このとき, $\Delta t < \frac{8}{9C_1^4}$ ならば,

$$\max_{n=0,1,\ldots,N}\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{L_d^2} \le C((\Delta x)^2+(\Delta t)^2)$$

が成り立つ.

Proof. (5) から点 $(k\Delta x,(n+1/2)\Delta t)$ での (2) を引くと誤差 $e_{u,k}^{(n)}$ についての方程式

$$\begin{aligned}\delta_n^+ e_{u,k}^{(n)} - \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{e_{u,k}^{(n+1)}+e_{u,k}^{(n)}}{2}\right) + \frac{e_{u,k}^{(n+1)}+e_{u,k}^{(n)}}{2}& \\ = -\left(\frac{1}{4}\sum_{j=0}^{3}\left\{(U_k^{(n+1)})^j(U_k^{(n)})^{3-j} - (u_k^{(n+1)})^j(u_k^{(n+1)})^{3-j}\right\}\right) + \zeta_k^{(n)}&\end{aligned} \tag{16}$$

が得られる. ただし,

$$\begin{aligned}\zeta_k^{(n)} :=& \left(\partial_t u_k^{(n+1/2)} - \delta_n^+ u_k^{(n)}\right) + \left(\partial_x^2 u_k^{(n+1/2)} - \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{u_k^{(n+1)}+u_k^{(n)}}{2}\right)\right)\\ &+ \frac{1}{4}\sum_{j=0}^{3}(u_k^{(n+1)})^j(u_k^{(n+1)})^{3-j} - (u_k^{(n+1/2)})^3\end{aligned}$$

で, Taylor の定理より $u\in C^4([0,L_x]\times[0,T])$ なら $|\zeta_k^{(n)}| \le C\Delta x^2 + C\Delta t^2$ となる. 解の存在証明のときと同様に, (16) の両辺に $(e_{u,k}^{(n+1)}+e_{u,k}^{(n)})/2$ をかけて台形則に従って和を

とり Young の不等式と (12) と同じ議論を用いると

$$\frac{\|\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}\|_{L_d^2}^2-\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{L_d^2}^2}{2\Delta t}+\left\|D\left(\frac{\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}+\boldsymbol{e}_u^{(n)}}{2}\right)\right\|^2+\left\|\frac{\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}+\boldsymbol{e}_u^{(n)}}{2}\right\|_{L_d^2}^2\leq\left\|\frac{\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}+\boldsymbol{e}_u^{(n)}}{2}\right\|_{L_d^2}^2$$
$$+\frac{1}{64(1-\epsilon)}\left\|\sum_{j=0}^{3}\left\{(\boldsymbol{U}^{(n+1)})^j(\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j}-(\boldsymbol{u}^{(n+1)})^j(\boldsymbol{u}^{(n)})^{3-j}\right\}\right\|_{L_d^2}^2+\frac{C}{\epsilon}\|\boldsymbol{\zeta}^{(n)}\|_{L_d^2}^2$$
$$\leq\left\|\frac{\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}+\boldsymbol{e}_u^{(n)}}{2}\right\|_{L_d^2}^2+\frac{9}{8(1-\epsilon)}C_1^4\left(\|\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}\|_{L_d^2}^2+\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{L_d^2}^2\right)+\frac{C}{\epsilon}\|\boldsymbol{\zeta}^{(n)}\|_{L_d^2}^2.$$

以上を整理すると,

$$\|\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}\|_{L_d^2}^2\leq\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{L_d^2}^2+\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4\left(\|\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}\|_{L_d^2}^2+\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{L_d^2}^2\right)+\frac{C\Delta t}{\epsilon}\|\boldsymbol{\zeta}^{(n)}\|_{L_d^2}^2.$$

Δt の仮定のもとで, $1-\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4>0$ となるように ϵ を選べば

$$\|\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}\|_{L_d^2}^2\leq\left(\frac{1+\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4}{1-\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4}\right)\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{L_d^2}^2+\frac{C\Delta t}{(1-\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4)\epsilon}\|\boldsymbol{\zeta}^{(n)}\|_{L_d^2}^2$$
$$\leq\left(\frac{1+\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4}{1-\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4}\right)^{n+1}\|\boldsymbol{e}_u^{(0)}\|_{L_d^2}^2+\frac{C\Delta t}{(1-\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4)\epsilon}\sum_{\ell=0}^{n}\left(\frac{1+\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4}{1-\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4}\right)^{\ell}\|\boldsymbol{\zeta}^{(n)}\|_{L_d^2}^2.$$

$\frac{1+\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^4}{1-\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^2}\leq\exp(\frac{9\Delta t}{4(1-\epsilon)}C_1^4)$, $n\leq N$ と $\boldsymbol{e}_u^{(0)}=0$ なので,

$$\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{L_d^2}^2\leq CT\exp(CT)\|\boldsymbol{\zeta}^{(n)}\|_{L_d^2}^2.$$

□

この証明は, 元の方程式と差分方程式の差をとった誤差の方程式の線形部分のエネルギー構造を利用したという意味でエネルギー法の一種といえる. 上の証明を更に精密化することで次の無条件誤差評価も得られる.

定理 3.4 (無条件誤差評価 ([14]))**.** 問題 (2)–(4) に滑らかな解 $u\in C^4([0,L_x]\times[0,T])$ が存在するとする. このとき次が成り立つ;

$$\max_{n=0,1,\ldots}\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{L_d^2}\leq C((\Delta x)^2+\Delta t).$$

4. 応用例

以上では簡単な例を用いてきたが, 以下ではこの応用例を列挙する. 発表ではこれらの話題についても紹介したい.

1. 半線形熱弾性方程式 ([13]): 振動の方程式と放物型方程式が連立した熱弾性方程式に対しても同様の解析が可能である. 更に塑性のような複雑な非線形項を含んだ系にもエネルギー法は適用可能である ([8]).

2. 動的境界条件付き問題 ([1]): 境界条件自身も時間についての発展方程式になっているような場合 (動的境界条件) についても, 同様の解析が可能である.

3. 準線形問題 ([15]): 準線形の問題も離散の設定で考察可能である.

4. Brezis-Gallouet の不等式 ([5]): 離散の枠組みで Brezis-Gallouet の不等式を導出し, 非線形シュレディンガー方程式の構造保存型数値解法の解の存在を示した.

参考文献

[1] T. Fukao, S. Yoshikawa and S. Wada, Structure-preserving finite difference schemes for the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions in the one-dimensional case, Commun. Pure Appl. Anal., **16** (2017), 1915–1938.

[2] D. Furihata, A stable and conservative finite difference scheme for the Cahn-Hilliard equation, Numer. Math., **87** (2001), 675–699.

[3] D. Furihata and T. Matsuo, *Discrete Variational Derivative Method*, Numerical Analysis and Scientific Computing series, CRC Press/Taylor & Francis, 2010.

[4] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, *Geometric numerical integration. Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations,* Springer Series in Computational Mathematics, 31. Springer-Verlag, Berlin, 2006.

[5] N. Ioku and S. Yoshikawa, The discrete Brezis-Gallouet inequality and finite difference analysis for the two-dimensional nonlinear Schrödinger equation, in preparation.

[6] S. Li and L. Vu-Quoc, Finite difference calculus invariant structure of a class of algorithms for the nonlinear Klein-Gordon equation, SIAM J. Numer. Anal., **32** (1995) 1839–1875.

[7] 松村昭孝, 西原健二, [改訂版] 非線形微分方程式の大域解 –圧縮性粘性流の数学解析, 日本評論社, 2015.

[8] T. Nagata and S. Yoshikawa, Structure-preserving finite difference scheme for 1D thermoviscoelastoplastic equations under uniformly distributed temperature, Math. Comput. Simul., **210** (2023), 147–168.

[9] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems*, Applied Mathematics and Mathematical Computation, 7. Chapman & Hall, London, 1994.

[10] 殿岡 達也, 離散微積分不等式の統一的解析に関する研究, 東京大学大学院情報理工学系研究科数理情報専攻 修士論文, 2021.

[11] A. Umeda, Y. Wakasugi and S. Yoshikawa, Energy-conserving finite difference schemes for nonlinear wave equations with dynamic boundary conditions, Appl. Numer. Math., **171** (2022), 1–22.

[12] S. Yoshikawa, Energy method for structure-preserving finite difference schemes and some properties of difference quotient, J. Comput. Appl. Math., **311** (2017), 394–413.

[13] S. Yoshikawa, An error estimate for structure-preserving finite difference scheme for the Falk model system of shape memory alloys, IMA J. Numer. Anal., **37** (2017), 477–504.

[14] S. Yoshikawa, Remarks on energy methods for structure-preserving finite difference schemes – small data global existence and unconditional error estimate, Appl. Math. Comput., **341** (2019), 80–92.

[15] S. Yoshikawa and S. Kawashima, Global existence for a semi-discrete scheme of some quasilinear hyperbolic balance laws, J. Math. Anal. Appl., **498** (2021), 124929(18p).