構造保存型差分解法のエネルギー法

吉川　周二　(大分大学)*

概　要

偏微分方程式の構造保存型差分解法に対するエネルギー法について紹介する. ここでいうエネルギー法とは, 微分方程式の備え持つ保存量やその保存構造を利用して可解性などの諸性質を導く偏微分方程式論において古典的な方法を指す. 構造保存型差分解法はエネルギー保存などの構造を継承した数値計算スキームであるため, 本質的に同じ議論で解の存在などを示すことができる. また, 誤差評価などの諸性質についても差分方程式のエネルギー構造が効果的に利用できることについても紹介する.

1. はじめに

対象となる問題の備え持つ何らかの意味での構造を継承する数値解法を**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, [5], [10], [11]) 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, 継承する構造は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し, 例えば [3], [7], [9] など多くの研究業績が知られている. このような物理構造を引き継ぐ数値解法を統一的に導出する手法は [4] 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. ここでは, スキームの導出法ではなく，導出された数値解法の数学的な諸性質を導くことに焦点を絞って議論をする.

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はしばしば解析で重要や役割を果たす. 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 ([8]). 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. また非線形偏微分方程式において適切性 (well-posedness) と呼ばれる概念は, 解の存在・一意性・連続依存性 (・持続性) を意味する. 解の存在に縮小写像の原理を用いると一意性も満たされる. また縮小写像の計算の中で連続依存性といった性質もほぼ自動的に従うことが多い. 連続依存性とは, あらくいうと摂動に対する解の安定性を意味しており, これは数値解析における誤差評価とよく似ている. そのため, これらの構造を引き継いだ離散的な数値解法でも同様にこれらの構造が有用であることが期待される. ここでは, これらの構造を利用して数値解法の解の存在や誤差評価を示す. このエネルギー構造を何らかの意味で利用する一連の手続きを**エネルギー法**を呼ぶこととする. また差分商を定義しその性質を調べることで多項式ではない非線形項に対しても解析が可能になるだけでなく, 簡潔な議論で解の存在や誤差評価が証明可能になる.

本研究は科研費 (課題番号:JP16K05234) の助成を受けたものである。また本研究について多くの助言を下さった市川享祐氏 (アーク情報システム), 土屋卓也先生 (愛媛大学), 村川秀樹先生 (九州大学), 降旗大介先生 (大阪大学), 石渡哲哉先生 (芝浦工業大学) に改めてここで謝意を表します.
2010 Mathematics Subject Classification: 65M06, 65M12, 65M15
キーワード：差分法, 誤差評価, 解の存在, 非線形偏微分方程式
* 〒870-1192 大分市旦野原 700 大分大学 理工学部 数理科学コース
e-mail: yoshikawa@oita-u.ac.jp
web: http://lab.ms.oita-u.ac.jp/yoshikawa/

この要旨では, まず半線形熱方程式を例に挙げて, ここでエネルギー法と呼んだ方法と差分商の諸性質とその利用についての具体的な解説をする. これらをベースにして, 様々な方程式について偏微分方程式とほぼ同様の手続きでの解析が可能になる. そのことについては紙面の都合上本稿では箇条書きにとどめ, 発表で詳しく述べたい.

2. エネルギー法

2.1. 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;

$$\partial_t u - \partial_x^2 u + u = -u^3, \qquad (t,x) \in \mathbb{R}^+ \times [0,L], \tag{1}$$

$$\partial_x u(t,0) = \partial_x u(t,L) = 0, \qquad t \in \mathbb{R}^+, \tag{2}$$

$$u(0,\cdot) = u_0(\cdot), \qquad x \in [0,L]. \tag{3}$$

方程式 (1) に $\partial_t u$ をかけて空間変数について $[0,L]$ 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. ただし $\|f\|_{L^p} := (\int_0^L |f(x)|^p dx)^{1/p}$ $(p \in [1,\infty))$, $\|f\|_{H^1} := (\|\partial_x f\|_{L^2}^2 + \|f\|_{L^2}^2)^{1/2}$ とする. $E(f) := \frac{1}{2}\|f\|_{H^1}^2 + \frac{1}{4}\|f\|_{L^4}^4$ とかくと, エネルギー散逸則 $E(u(t)) \leq E(u_0)$ 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 $\sup_{t\in[0,\infty)} \|u(t)\|_{H^1} \leq \sqrt{2E(u_0)}$ 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 $M(\geq \|u_0\|_{H^1})$ 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, $\|u(T)\|_{H^1} \leq M$ 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.

時間局所解の存在も同様に示すことができる. 方程式 (1) の線形化方程式

$$\partial_t \widetilde{u} - \partial_x^2 \widetilde{u} + \widetilde{u} = -u^3, \qquad \widetilde{u}(\cdot,0) = u_0$$

を考える. これを $\Phi : u \mapsto \widetilde{u}$ という写像とみて, Φ が閉球

$$X_M := \{u \in C([0,T];H^s) \mid \|u\|_{L^\infty(0,T;H^1)} \leq 2M\}, \qquad M \geq \|u_0\|_{H^1}$$

の中への縮小写像となっていることを示す. 方程式の両辺に $\partial_t \widetilde{u}$ をかけて積分すると,

$$\partial_t \left(\frac{1}{2}\|\partial_x \widetilde{u}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2}\|\widetilde{u}\|_{L^2}^2 \right) + \|\partial_t \widetilde{u}\|_{L^2}^2 = -\int_0^L \partial_t \widetilde{u} \cdot u^3 dx \leq \|\partial_t \widetilde{u}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{4}\|u\|_{L^6}^6.$$

最後の不等式では Young の不等式を用いた. Hölder の不等式と自明な不等式 $\|u\|_{L^2} \leq \|u\|_{H^1}$ と Sobolev の不等式: $\|u\|_{L^\infty} \leq C_S \|u\|_{H^1}$ より,

$$\|u\|_{L^6}^6 \leq \|u\|_{L^\infty}^4 \|u\|_{L^2}^2 \leq C_S^4 \|u\|_{H^1}^6$$

である, この評価を上の式に適用して, 時間についても積分すると,

$$\|\widetilde{u}\|_{L^\infty(0,T;H^1)} \leq \|u_0\|_{H^1} + \frac{1}{\sqrt{2}} C_S^2 T^{1/2} \|u\|_{L^\infty(0,T;H^1)}^3 \leq M + 4\sqrt{2} C_S^2 T^{1/2} M^3$$

次に, u_1, $u_2 \in X_M$ を任意に選び, $\widetilde{u}_1 := \Phi[u_1]$, $\widetilde{u}_2 := \Phi[u_2]$ として, 同様の計算をすると,

$$\begin{aligned}\|\widetilde{u}_1 - \widetilde{u}_2\|_{L^\infty(0,T;H^1)} &\leq C_S^2 T^{1/2}(\|u_1\|^2_{L^\infty(0,T;H^1)} + \|u_2\|^2_{L^\infty(0,T;H^1)})\|u_1 - u_2\|_{L^\infty(0,T;H^1)} \\ &\leq 8C_S^2 T^{1/2} M^2 \|u_1 - u_2\|_{L^\infty(0,T;H^1)}.\end{aligned}$$

以上より, $8C_S^2T^{1/2}M^2 < 1$ となるように T を小さく選べば非線形写像 Φ は X_M の中への縮小写像になっていることがわかるので, $\widetilde{u} = u$ となる不動点の一意存在, すなわち (1)–(3) の $[0,T]$ で時間局所解が一意的に存在することがわかる. 上記の議論は u に十分な滑らかさの仮定をした形式的な計算であるため, 実際にこの方法で証明を与えることはないが, 形式的に可解性をチェックする際などにこの議論が利用される. この時間局所解にアプリオリ評価を組み合わせることで時間大域解すなわち $[0,\infty)$ での解の存在が示される. この議論を離散の構造保存型差分解法に適用する.

2.2. 準備

簡単のためここでは問題を空間一次元の場合に制限する. 考える時空領域を $[0,L] \times [0,T] (\ni (x,t))$ もしくは $[0,L]\times[0,\infty)$ とする. $C^m(\Omega)$ は $\Omega \subset \mathbb{R}$ で m 階連続的微分可能な関数空間とする. 時空間で m 階連続的微分可能な関数空間を表すのにも同様に $C^m(\Omega\times[0,T])$ のように記述することにする. x 変数および t 変数に関する偏微分は, それぞれ ∂_x と ∂_t とかき, ξ, η, γ などについての偏微分も同様に ∂_ξ, ∂_η, ∂_γ などと書くことにする. 特に一変数関数の (常) 微分は, F', F'', $F''' \ldots$ などと書く. K, N は任意の自然数で, 空間区間 $[0,L]$ を K-個に分割し, 時間区間 $[0,T]$ を N-個に分割する. 空間と時間についての刻み幅を Δx, Δt とかき $L = K\Delta x$, $T = N\Delta t$ を満たすものとする. 有限差分法では, $k = 0,1,\ldots,K$, $n = 0,1,\ldots,N$ について点 $(k\Delta x, n\Delta t)$ の値を求める. 文献 [4] に従って, 点 $(k\Delta x, n\Delta t)$ での値を $f_k^{(n)}$ のように書くことにする. $\boldsymbol{f}^{(n)} := (f_k^{(n)})_{k=0}^K$ のようにボールド体で空間についてのベクトルを表すものとする. 特に時間変数 n に依存しない一変数の場合は $\boldsymbol{f} := (f_k)_{k=0}^K$ 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 [4] に従うものとする, すなわち, 差分作用素 δ_n^+, δ_k^+, δ_k^-, $\delta_k^{\langle 1\rangle}$, $\delta_k^{\langle 2\rangle}$ などはそれぞれ次で定義する,

$$\begin{aligned}&\delta_n^+ f_k^{(n)} := \frac{f_k^{(n+1)} - f_k^{(n)}}{\Delta t}, \quad \delta_k^+ f_k^{(n)} := \frac{f_{k+1}^{(n)} - f_k^{(n)}}{\Delta x}, \quad \delta_k^- f_k^{(n)} := \frac{f_k^{(n)} - f_{k-1}^{(n)}}{\Delta x}, \\ &\delta_k^{\langle 1\rangle} f_k^{(n)} := \frac{f_{k+1}^{(n)} - f_{k-1}^{(n)}}{2\Delta x}, \quad \delta_k^{\langle 2\rangle} f_k^{(n)} := \frac{f_{k+1}^{(n)} - 2f_k^{(n)} + f_{k-1}^{(n)}}{\Delta x^2}.\end{aligned}$$

また, 空間変数についての積分の近似としては台形則:

$$\sum_{k=0}^{K}{}'' f_k \Delta x := \sum_{k=0}^{K-1} \frac{f_k + f_{k+1}}{2}\Delta x, \tag{4}$$

を採用する. また, 2 つのベクトルの各成分の積からなるベクトル $\boldsymbol{fg} := (f_k g_k)_{k=0}^K$ 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,

$$\|\boldsymbol{f}\|_{L_d^p} := \begin{cases}\left(\sum_{k=0}^{K}{}''|f_k|^p\Delta x\right)^{\frac{1}{p}}, & p\in[1,\infty), \\ \max_{k=0,1,\ldots,K}|f_k|, & p = \infty,\end{cases} \qquad \|D\boldsymbol{f}\| := \sqrt{\sum_{k=0}^{K-1}|\delta_k^+ f_k|^2\Delta x}.$$

で定義する. また Sobolev 空間 H_d^1 はノルム：$\|\boldsymbol{f}\|_{H_d^1} := \sqrt{\|\boldsymbol{f}\|^2_{L_d^2} + \|D\boldsymbol{f}\|^2}$ から定義される空間とする. 以下に証明で用いる命題を列挙する.

補題 2.1. *1. (Leibnizの公式) 任意の $\boldsymbol{f}$ と $\boldsymbol{g}$ に対して,*

$$\|D(\boldsymbol{f}\boldsymbol{g})\| \le \|\boldsymbol{f}\|_{L_d^\infty}\|D\boldsymbol{g}\| + \|\boldsymbol{g}\|_{L_d^\infty}\|D\boldsymbol{f}\|.$$

2. (Sobolevの不等式) 任意の $\boldsymbol{f}$ に対して

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

が成り立つ.

3. (部分和分公式など ([4, Chapter 3])) 斉次 Neumann境界条件:

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

や周期境界条件：

$$f_k = f_{k \bmod K}, \qquad g_k = g_{k \bmod K}$$

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

$$\sum_{k=0}^{K}{}'' f_k \delta_k^{\langle 2\rangle} f_k \Delta x = -\|D\boldsymbol{f}\|^2, \qquad \sum_{k=0}^{K}{}'' f_k \delta_k^{\langle 2\rangle} g_k \Delta x \le \|D\boldsymbol{f}\|\|D\boldsymbol{g}\| \tag{5}$$

が成り立つ.

2.3. 構造保存型差分解法のエネルギー法

構造保存型差分解法に対しての解の存在定理を偏微分方程式の場合と同様に示す. まず, 文献 [4] に従って離散変分導関数法を用いて問題 (1)–(3) の構造保存型差分解法を導出すると, 次が得られる.

$$\delta_n^+ U_k^{(n)} - \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2}\right) + \frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} = -\frac{1}{4}\sum_{j=0}^{3}(U_k^{(n+1)})^j (U_k^{(n)})^{3-j}, \tag{6}$$

$$\delta_k^{\langle 1\rangle} U_k^{(n)}|_{k=0,K} = 0, \tag{7}$$

$$U_k^{(0)} = u_0(k\Delta x). \tag{8}$$

差分方程式 (6) に $\delta_n^+ U_k^{(n)}$ をかけて台形則 (4) に従って和をとると, (5) により,

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

が得られる. ただし, $E_d(\boldsymbol{f})$ は

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

で定義される量で, 離散版のエネルギーに相当する. よって差分解法 (6)–(7) 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,

$$E_d(\boldsymbol{U}^{(n+1)}) \le E_d(\boldsymbol{U}^{(n)}). \tag{9}$$

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 ([3] の (49) 式参照). よって任意の $\Delta t>0$ に対して $\{(1+\frac{\Delta t}{2})I_{K+1}-\frac{\Delta t}{2}D_2\}$ は正則になり, それゆえ写像 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 (4) 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,

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

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

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

がわかる. よって, 上の評価は,

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

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 (4) に従って和をとると,

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

となる. 右辺は,

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

と評価できるので,

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

が得られる. 以上の (11) と (13) から, Δt を

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

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 (6)–(7) を満たす $\boldsymbol{U}^{(n+1)}$ である.

Step 2 (時間大域解の構成). E_d の定義から $\|\boldsymbol{U}^{(0)}\|_{H_d^1} \le (2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2}$ が成り立つ. 条件 (14) の M を $(2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2}$ に交換することで, すなわち

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

の仮定の下で, $\|\boldsymbol{U}^{(1)}\|_{H_d^1} \le 2(2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2}$ を満たす (6)–(7) の解 $\boldsymbol{U}^{(1)}$ の一意存在が Step 1 よりわかる. 一方で, アプリオリ評価 (9) は, もし $\boldsymbol{U}^{(1)}$ が存在するならばそれは $\|\boldsymbol{U}^{(1)}\|_{H_d^1} \le (2E_d(\boldsymbol{U}^{(1)}))^{1/2} \le (2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2}$ を満たさなくてはいけないということを主張する. 気になるのは, 構成した解が $(2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2} < \|\boldsymbol{U}^{(1)}\|_{H_d^1} \le 2(2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2}$ にある場合がないかということだが, これは一意性からあり得ない. そのため, 我々の構成した解が $\|\boldsymbol{U}^{(1)}\|_{H_d^1} \le (2E_d(\boldsymbol{U}^{(0)}))^{1/2}$ を満たすことが保証される. この手続きを繰り返すことで, 任意の n に対しての解の存在がわかる.

定理 2.2. 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 (6)–(8) 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. 偏微分方程式での時間局所解の存在の例では, あくまで形式的な議論であると述べた (例えば, [1, Chapter 7] も参照) が, 今回のような離散の問題の場合, 有限次元の議論のため正式な証明として利用できる. 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ていないように思われるが, 偏微分方程式の理論との比較という観点からは「n を任意にとれる」ことは興味深い.

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 2.3 (誤差評価)**.** 問題 (1)–(3) に滑らかな解 $u \in C^4([0, L] \times [0, T])$ が存在するとする. u と $\boldsymbol{U}^{(n)}$ の上界を C_1 とかく, すなわち

$$
C_1 := \max_{0 \le n \le N} \left\{ \max_{0 \le k \le K} |U_k^{(n)}|, \ \max_{0 \le k \le K} |u_k^{(n)}| \right\}.
$$

$F \in C^4(\{\xi \mid |\xi| \le C_1\})$, $\|\boldsymbol{e}_u^{(0)}\|_{L_d^2} \le C(\Delta x)^2$ と仮定する．$\Delta t < \frac{8}{9C_1^2}$ ならば，

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

が成り立つ．

Proof. (6) から点 $(k\Delta x, (n+1/2)\Delta t)$ での (1) 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 $u \in C^3([0,L]\times[0,T])$ 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 $\delta_n^+ e_{u,k}^{(n)}$ をかけて台形則に従って和をとり Young の不等式を用いると

$$\begin{aligned}\frac{\|\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}\|_{H_d^1}^2 - \|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{H_d^1}^2}{2\Delta t} + \left\|\delta_n^+ \boldsymbol{e}_u^{(n)}\right\|_{L_d^2}^2 \le \left\|\delta_n^+ \boldsymbol{e}_u^{(n)}\right\|_{L_d^2}^2 \\ + \frac{1}{64(1-\epsilon)}\left\|\sum_{j=0}^{3}\left\{(\boldsymbol{U}^{(n+1)})^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} - (\boldsymbol{u}^{(n+1)})^j (\boldsymbol{u}^{(n)})^{3-j}\right\}\right\|_{L_d^2}^2 + \frac{C}{\epsilon}\|\boldsymbol{\zeta}^{(n)}\|_{L_d^2}^2.\end{aligned}$$

右辺第二項は，(12) と同じ議論で，

$$\left\|\sum_{j=0}^{3}\left\{(\boldsymbol{U}^{(n+1)})^j (\boldsymbol{U}^{(n)})^{3-j} - (\boldsymbol{u}^{(n+1)})^j (\boldsymbol{u}^{(n)})^{3-j}\right\}\right\|_{L_d^2} \le 6C_1^2\left(\|\boldsymbol{e}_u^{(n+1)}\|_{H_d^1} + \|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{H_d^1}\right). \tag{17}$$

以上を整理すると，

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

Δt の仮定のもとで，$1 - \frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^2 > 0$ となるように ϵ を選べば

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

$\frac{1+\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^2}{1-\frac{9\Delta t}{8(1-\epsilon)}C_1^2} \le \exp(\frac{9\Delta t}{4(1-\epsilon)}C_1^2)$, $n \le N$ と $\boldsymbol{e}_u^{(0)} = O(\Delta x^2)$ に注意すると,

$$\|\boldsymbol{e}_u^{(n)}\|_{H_d^1}^2 \le CT\exp(CT)\|\boldsymbol{\zeta}^{(n)}\|_{L_d^2}^2.$$

□

上の証明において (17) 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 2.4 (無条件誤差評価)**.** 問題 (1)–(3) に滑らかな解 $u \in C^4([0,L]\times[0,T])$ が存在するとする. u と $\boldsymbol{U}^{(n)}$ の上界 C_1 に対して, $F \in C^4(\{\xi \mid |\xi| \le C_1\})$, $\|\boldsymbol{e}_u^{(0)}\|_{L_d^2} \le C(\Delta x)^2$ と仮定する. このとき次が成り立つ;

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

3. 差分商に関する考察

ここでは差分商に関するいくつかの考察を与える. まず差分商を定義する. Ω を $\mathbb{R}$ 上の領域とする. 関数 $F \in C^1(\Omega)$ と Ω の中に値をとる ξ, η に対して, (ξ,η) での F の**差分商** $\frac{\partial F}{\partial(\xi,\eta)}$ を

$$\frac{\partial F}{\partial(\xi,\eta)} := \begin{cases} \frac{F(\xi)-F(\eta)}{\xi-\eta}, & \xi \ne \eta, \\ F'(\eta), & \xi = \eta \end{cases}$$

で定義する. 構造保存型の差分解法を導出する際には自然に差分商があらわれることが多い. 例えば, $F(\xi) = \frac{1}{4}\xi^4$ の時は, $\frac{\partial F}{\partial(\xi,\eta)} = \frac{1}{4}\sum_{j=0}^{3}\xi^j\eta^{3-j}$ となる. よって (6) は差分商を用いて,

$$\delta_n^+ U_k^{(n)} - \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{U_k^{(n+1)}+U_k^{(n)}}{2}\right) + \frac{U_k^{(n+1)}+U_k^{(n)}}{2} = \frac{\partial F}{\partial(U_k^{(n+1)},U_k^{(n)})}$$

と書き直すことができる. 差分商を用いると例えば, sine-Gordon 方程式: $\partial_t^2 u - \partial_x^2 u = \sin u$ の構造保存型解法なども容易に定式化できる. 以後, 差分商からなるベクトル $\left\{\frac{\partial F}{\partial(f_k,g_k)}\right\}_{k=0}^{K}$ を $\frac{\partial F}{\partial(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})}$ と書く, また同様に $\{F(f_k)\}_{k=0}^{K}$ を $F(\boldsymbol{f})$ のように書くことにする.

前節で紹介したとおり, 解の存在でも誤差評価でも (12) と (17) で差分商同士の差の計算があらわれる. この計算を系統的に取り扱う方法を考えたい. 今新たに $\overline{F}''(\xi,\widetilde{\xi};\eta,\widetilde{\eta})$ を,

$$\begin{aligned}\overline{F}''(\xi,\widetilde{\xi};\eta,\widetilde{\eta}) &:= \frac{\partial}{\partial(\xi,\widetilde{\xi})}\left(\frac{\partial F}{\partial(\cdot,\eta)} + \frac{\partial F}{\partial(\cdot,\widetilde{\eta})}\right) \\ &:= \begin{cases} \frac{1}{\xi-\widetilde{\xi}}\left\{\left(\frac{\partial F}{\partial(\xi,\eta)} + \frac{\partial F}{\partial(\xi,\widetilde{\eta})}\right) - \left(\frac{\partial F}{\partial(\widetilde{\xi},\eta)} + \frac{\partial F}{\partial(\widetilde{\xi},\widetilde{\eta})}\right)\right\}, & \xi \ne \widetilde{\xi}, \\ \partial_\xi\left(\frac{\partial F}{\partial(\xi,\eta)} + \frac{\partial F}{\partial(\xi,\widetilde{\eta})}\right)\Big|_{\xi=\widetilde{\xi}}, & \xi = \widetilde{\xi} \end{cases}\end{aligned}$$

で定義する. $\overline{F}''$ は二階差分の一種で, 例えば具体的に $F(\xi) = \frac{\xi^{p+1}}{p+1}$ の時は,

$$\overline{F}''(\xi,\widetilde{\xi};\eta,\widetilde{\eta}) = \frac{1}{p+1}\sum_{j=1}^{p}\left\{\left(\eta^{p-j} + \widetilde{\eta}^{p-j}\right)\sum_{k=0}^{j-1}\xi^k\widetilde{\xi}^{j-1-k}\right\}$$

となる. $\overline{F}''$ を定義した主たる理由は次の性質ゆえである.

命題 3.1. $F \in C^2(\Omega)$ とする．任意の $\xi,\,\widetilde{\xi},\,\eta,\,\widetilde{\eta} \in \Omega$ に対して, 次が成り立つ,

$$\frac{\partial F}{\partial(\xi,\eta)} - \frac{\partial F}{\partial(\widetilde{\xi},\widetilde{\eta})} = \frac{1}{2}\overline{F}''(\xi,\widetilde{\xi};\eta,\widetilde{\eta}) \cdot (\xi - \widetilde{\xi}) + \frac{1}{2}\overline{F}''(\eta,\widetilde{\eta};\xi,\widetilde{\xi}) \cdot (\eta - \widetilde{\eta}). \tag{18}$$

補題 3.2. $F \in C^2(\Omega)$ ならば $\overline{F}'' \in C(\Omega)$．その上, $|\overline{F}''(\xi,\widetilde{\xi};\eta,\widetilde{\eta})| \le \sup_{\xi\in\Omega}|F''(\xi)|$ が成り立つ．

これらを用いると, (12) や (17) で必要な差分商同士の差の評価は,

$$\left\| \frac{\partial F}{\partial(\boldsymbol{U},\boldsymbol{V})} - \frac{\partial F}{\partial(\widetilde{\boldsymbol{U}},\widetilde{\boldsymbol{V}})} \right\|_{L^2_d} \le \sup|F''| \frac{\|\boldsymbol{U} - \widetilde{\boldsymbol{U}}\|_{L^2_d} + \|\boldsymbol{V} - \widetilde{\boldsymbol{V}}\|_{L^2_d}}{2}$$

と簡単に評価できる．また三階差分の評価:

$$\|D\overline{F}''(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g};\widetilde{\boldsymbol{f}},\widetilde{\boldsymbol{g}})\| \le \frac{1}{6}\sup_{\xi\in\Omega}|F'''(\xi)| \left(2\|D\boldsymbol{f}\| + 2\|D\boldsymbol{g}\| + \|D\widetilde{\boldsymbol{f}}\| + \|D\widetilde{\boldsymbol{g}}\|\right)$$

や凸性の評価: $\inf_{\xi\in\Omega} F''(\xi) \le \overline{F}''(\xi,\widetilde{\xi};\eta,\widetilde{\eta})$ なども成り立つ．これらは方程式や考える問題によって重要な役割を果たす．例えば三階差分の評価は次節で紹介する Cahn-Hilliard 方程式や熱弾性などの非線形項に微分が含まれるような方程式に対しては必要になる．凸性の評価は, 強圧性評価に相当する評価として無条件誤差評価や準線形問題で有用である．

4. 応用例

エネルギー法の応用例について列挙する．この要旨では箇条書きにとどめるが, 発表ではこれらの話題にも触れたい．

1. Cahn-Hilliard 方程式 ([12]): オリジナルの結果 [3] では, $\Delta t/(\Delta x)^2$ が十分小さいという仮定が必要であった．しかし本方法では Δt のみ小さいと仮定すればよい．

2. Boussinesq 方程式 ([12]): 放物型でなく双曲型や分散型のような方程式に対しても同様の解析が可能である．ただし, 縮小写像を構成する空間は半径 $2M$ の球でなく, $3M$ など少し大きめにとることになる．

3. 半線形熱弾性方程式 ([13]): 熱弾性のように振動の方程式と放物型方程式が連立した系に対しても同様の解析が可能である．最大値原理を組み合わせたりエネルギークラスより少し狭い空間で局所解を示すなど, アプリオリ評価の導出に工夫が必要になる．

4. 力学的境界条件付き問題 ([2]): 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 (力学的境界条件) についても, 力学的境界条件が線形方程式であれば同様の解析が可能である．

5. 小さい初期値に対する問題 ([14]): 上記の結果はすべてエネルギーが下から有界な問題について考察したものである．下からの有界性がいえない問題についても初期値を十分小さくとることで時間大域解の存在は示されることがある ([8] 参照) が, 同様の結果を導くことが可能である．

6. 準線形問題 ([6]): 準線形の場合は非線形性の強さから縮小写像で議論が閉じないことが多い. この場合は, ガレルキンの方法で時間局所解を構成し, 小さい初期値に対するアプリオリ評価を導出すればよい.

参考文献

[1] L.C. Evans, *Partial differential equations,* Second ed., Graduate Studies in Mathematics, **19**. American Mathematical Society, Providence, RI, 2010.

[2] 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.

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

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

[5] 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.

[6] S. Kawashima and S. Yoshikawa, Global existence for semi-discrete model of quasilinear system related with thermoelasticity, in preparation.

[7] 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.

[8] 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.

[9] T. Matsuo, New conservative schemes with discrete variational derivatives for nonlinear wave equations, J. Comput. Appl. Math., **203** (2007), 32–56.

[10] Y. Miyatake, T. Yaguchi and T. Matsuo Numerical integration of the Ostrovsky equation based on its geometric structures, J. Comput. Phys., **231** (2012), 4542–4559.

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

[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, Applications to energy method for structure-preserving finite difference schemes –small data global existence and unconditional error estimate–, in preparation.