多様な形状の領域・境界条件の拡散型偏微分方程式に対応する構造保存解法

数理情報学専攻 48186225 宮澤 晃平
指導教員 松尾 宇泰 教授

1 はじめに

拡散型偏微分方程式 (Dissipative PDE) はしばしば自由エネルギーの散逸則を持ち, 離散化の際にそうした散逸則をケアすることで安定な数値解が得られることが知られている [2,3]. D. Furihata [2] が提案した散逸解法 (離散変分導関数法, DVDM) には差分法に基づくため空間領域 Ω が矩形の場合しか取り扱うことができないという制約があるが, T. Matsuo [4] は有限要素法に基づく散逸解法 (離散微分導関数法) はそうした制約を回避できる.

ところで一般に PDE を解くにあたり有限要素法や有限体積法などの領域をメッシュに区切る手法はその実装の手間が問題視される. そこでメッシュ化を避けて離散化を行う手法 (総称してメッシュレス法と呼ばれる) も多く提案されている [1] . 特に, Z. Sun [5] は 1 次元領域上の Allen–Cahn 方程式に対して散逸解法を構成するメッシュレスな手法を提案した.

本研究は任意次元の一般の形状の領域上, 又は球表面上の Allen–Cahn 方程式, Cahn–Hilliard 方程式に対して散逸解法を構成するメッシュレスな手法を提案する.

2 離散変分導関数法の一般的な枠組み

提案手法は D. Furihata [2] による DVDM に基づく. そこでまず DVDM を [2] から拡張した形で導入する.

ある時刻での関数 $u:\Omega\to\mathbb{R}$ に対する自由エネルギー H が

$$H(u)=\int_\Omega G(u,\nabla u)\mathrm{d}x \tag{1}$$

の形で表されると仮定する. u の任意の変分 δu に対して

$$\delta H(u)=\int_\Omega \frac{\delta H}{\delta u}\delta u\mathrm{d}x \tag{2}$$

を満たす関数 $\frac{\delta H}{\delta u}$ は変分導関数と呼ばれる. PDE が変分導関数 $\frac{\delta H}{\delta u}$ と線形演算子 $\mathcal{L}$ を用いて

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\mathcal{L}\frac{\delta H}{\delta u} \tag{3}$$

として表されると仮定する. $\mathcal{L}$ が積分という計量に対し半負定値であるとき, すなわち任意の δv に対し

$$\int_\Omega \delta v(\mathcal{L}\delta v)\mathrm{d}x\le 0 \tag{4}$$

が成り立つとき, PDE(3) の解 u は H の散逸則

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}H(u)\le 0 \tag{5}$$

を満たす.

以降, PDE の散逸則を導出する以上の議論を離散化された世界に「翻訳」するというアイディアに基づき散逸解法を構成する. なお, 関数 u は領域 Ω 上の n 点 $\{x_i\}$ 上での値を以って表現し, その値はベクトル化して $U\in\mathbb{R}^n$ として表す.

まず自由エネルギー汎関数 H に対しその離散版 $H_\mathrm{d}:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ を用意する. また, n 次正方行列 W を固定する. このとき任意の U^+,U に対し

$$H_\mathrm{d}(U^+)-H_\mathrm{d}(U)=(U^+-U)W\frac{\delta H_\mathrm{d}}{\delta(U^+,U)} \tag{6}$$

を満たす $\frac{\delta H_\mathrm{d}}{\delta(U^+,U)}$ を離散変分導関数と呼ぶ. 離散変分導関数とある n 次正方行列 Q を用いて構成される $U^{(m+1)}$ に関する方程式

$$\frac{U^{(m+1)}-U^{(m)}}{t^{(m+1)}-t^{(m)}}=QW\frac{\delta H_\mathrm{d}}{\delta(U^{(m+1)},U^{(m)})} \tag{7}$$

を PDE(3) に対する離散スキームとする. 特に行列 Q が半負定値であるとき行列 QW が求積 W という計量に対し負定値になる, すなわち任意の δV に対し

$$(\delta v)^\top W(QW\delta v)\le 0 \tag{8}$$

となるため, (7) による数値解 $U^{(0)},U^{(1)},\ldots$ は離散版の散逸則

$$H_\mathrm{d}(U^{(m+1)})-H_\mathrm{d}(U^{(m)})\le 0 \tag{9}$$

を満たす.

以上の枠組みでは「与えられた PDE(3) に対しスキーム (7) が (3) の近似となる」という制約こそあれど, 離散エネルギー H_d, 正方行列 W, 半負定値行列 Q の選定に関する自由度を持つ. D. Furihata [2] は差分法に基づいて H_d,W,Q を定めたが, 提案手法ではメッシュレスな関数近似手法に基づきこれらの要素を構成する.

3 提案手法

本節ではメッシュレスな関数近似手法に基づき H_d, W, Q を与える．なお本稿では境界条件として周期境界条件, Neumann 境界条件が課された場合のみを考える．これらの境界条件により定まる関数空間

$$\mathcal{U} := \{u \in C^v(\Omega) \mid u \text{ が境界条件を満たす}\} \quad (10)$$

が線形となることに注意する．

まず点列 $\{x_i\}$ をサンプル点とする求積公式を用意する:

$$\int_\Omega g(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^n w_i g(x_i). \quad (11)$$

ただし $w_i > 0, i = 1, \ldots, n$ を仮定する．$\{w_i\}$ を用いて

$$W = \mathrm{diag}(\{w_i\}) \quad (12)$$

として正方行列 W を定める．

続いて H_d を定義するためにまずある二変数関数 $\varphi : \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}$ を用いて写像 $\chi : \mathbb{R}^n \to \mathcal{U}$ を定義する:

$$\chi(U) := \sum_{i=1}^n \varphi(\cdot, x_i) w_i U_i. \quad (13)$$

ここで φ には以下の 2 つの仮定を課す:

(C1) 任意の $\xi \in \Omega$ に対し $\varphi(\cdot, \xi) \in \mathcal{U}$ が成り立つ．

(C2) $u \in \mathcal{U}$ が低周波であれば $\chi(\{u(x_i)\})$ が u を近似する．

(C1) は χ の値域が確かに $\mathcal{U}$ となるために必要な仮定である．

写像 χ を用いて離散エネルギー H_d を

$$H_\mathrm{d}(U) := H(\chi(U)) \quad (14)$$

として定義する．ただし, $H(\cdot)$ は元の PDE のエネルギー汎関数を表す．

最後に Q に関しては

$$Q := \begin{cases} -W^{-1} & \text{(Allen–Cahn 方程式)} \\ \Phi^\Delta := \begin{pmatrix} \Delta_1\varphi(x_1, x_1) & \ldots & \Delta_1\varphi(x_1, x_n) \\ \vdots & & \vdots \\ \Delta_1\varphi(x_n, x_1) & \ldots & \Delta_1\varphi(x_n, x_n) \end{pmatrix} \\ \quad \text{(Cahn–Hilliard 方程式)} \end{cases} \quad (15)$$

として定めることにする．このとき実は (7) が (3) を近似することが示される．

$-W^{-1}$ が明らかに半負定値である一方で, Φ^Δ が半負定値になるかは $\varphi, \{x_i\}$ に依存する．特に φ が

(C3) 任意の点列 $\{x_i\}$ から (15) により定まる行列 Φ^Δ が半負定値になる

という条件を満たしていれば十分である．

ここまでの議論をまとめると, 条件 (C1)〜(C3) を満たす二変数関数 φ さえ構成できれば散逸的な解法が得られることが分かる．各々の条件が領域形状・境界条件に依存するため, 結局それぞれの場合に合わせ φ を構成する必要がある．

- 領域が矩形の場合 (周期境界条件・Neumann 境界条件), あるいは球表面の場合には (C1)〜(C3) を満たす φ がそれぞれの場合に対し構成できる．
- 領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ が矩形以外の一般の形状の場合にも, (C1)(C2) を満たす φ を構成することができる．その φ は (C3) を満足しないが, 実践上でのサンプル点列 $\{x_i\}$ と φ に対して構成される行列 Φ^Δ は「おおよそ負定値」となる．すなわち Φ^Δ の多くの固有値が負であり, また, 正の固有値が負の固有値に比べ数オーダー小さくなる．

参考文献

[1] J.-S. Chen, M. Hillman, and S.-W. Chi. Meshfree methods: progress made after 20 years. *Journal of Engineering Mechanics*, 143(4):04017001, 2017.

[2] D. Furihata. Finite difference schemes for $\partial u/\partial t = (\partial/\partial x)^\alpha \, \delta G/\delta u$ that inherit energy conservation or dissipation property. *Journal of Computational Physics*, 156(1):181–205, 1999.

[3] D. Furihata and T. Matsuo. *Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations.* CRC Press, Boca Raton, 2010.

[4] T. Matsuo. Dissipative/conservative Galerkin method using discrete partial derivatives for nonlinear evolution equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 218(2):506–521, 2008.

[5] Z. Sun. Conservative or dissipative quasi-interpolation method for evolutionary partial differential equations. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 96:78–83, 2018.