

## 非線形波動のモデリングのためのハミルトニアン密度の作用素学習

徐 百歌<sup>1</sup>, 田中 佑典<sup>2</sup>, 松原 崇<sup>3</sup>, 谷口 隆晴<sup>1</sup><sup>1</sup> 神戸大学大学院理学研究科, <sup>2</sup> NTT コミュニケーション科学基礎研究所, <sup>3</sup> 北海道大学大学院  
情報科学研究院

e-mail : baigexu@stu.kobe-u.ac.jp

## 1 はじめに

近年, ハミルトン方程式を学習する方法として, Hamiltonian Neural Networks やその変種など, 深層学習に基づく手法が盛んに提案されている [1]. しかし, 特に, ハミルトン偏微分方程式を学習する場合, これらの手法はデータの離散化に依存しており, 学習する際に, 用いる微分作用素とその離散化の決定が必要となる. ハミルトン偏微分方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}$$

のように表される方程式であり, 多くの非線形波動は, この方程式で記述される. ここで,  $u = u(t, x)$  はあるヒルベルト空間  $\mathcal{X}$  上の関数であり,  $\mathcal{D}$  は歪対称作用素である.  $\mathcal{H}$  は方程式のハミルトニアンに対応し,  $\mathcal{H} = \int H(u, u_x, u_{xx}, \dots) dx$  として定義される.  $H$  を方程式のハミルトニアン密度と呼び,  $\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}$  を  $\mathcal{H}$  の変分導関数と呼ぶ. このような方程式をニューラルネットワークによってモデリングする際には,  $H$  の学習に関して,  $(u, u_x, u_{xx}, \dots)$  などの変数とその離散化を決めなければならない. そのため, このような手法は望ましくない. そこで, 本研究では, 作用素学習を利用することで, 微分作用素が含まれている変数とその離散化の決定が必要のないハミルトニアン密度の学習法を提案する. 特に,  $\mathcal{H}$  の変分導関数が  $\mathcal{H}$  の自動微分による勾配から求められることを示す.

## 2 ハミルトン偏微分方程式の作用素学習

本研究では, ハミルトン偏微分方程式に対して, 作用素学習の代表的手法の一つである DeepONet を利用した学習法を提案する. 特に, 変分導関数の求め方を中心に説明する.

## 2.1 DeepONet を用いたハミルトン密度の学習

DeepONet は, 任意の非線形連続作用素を学習可能なニューラルネットワークモデルとして知られている [2]. 本研究で提案するハミルトニアン密度の学習では, DeepONet の入力として, branch network に関数  $u(t, x)$  の有限個の位置点集合  $\{x_i\}_{i=1}^N$  における値  $(u(x_1), \dots, u(x_N))^T$  を与え, trunk network に出力関数の領域内の点  $y$  を与える. そして, DeepONet の出力をハミルトニアン密度  $H_{NO}$  とする. これは, 二つのサブネットワークの出力  $(c_1, \dots, c_p)^T \in \mathbb{R}^p$  と  $(\psi_1, \dots, \psi_p)^T \in \mathbb{R}^p$  の内積

$$H_{NO} = \sum_{k=1}^p c_k \psi_k$$

で計算され, これを積分すると, ハミルトニアン  $\mathcal{H}_{NO}$  が得られる. その後, 学習にはハミルトニアンの変分導関数を求めることが必要となる.  $\mathcal{H}_{NO}$  の変分導関数は, 通常, 部分積分を用いて

$$\frac{\delta \mathcal{H}_{NO}}{\delta u} = \frac{\partial H_{NO}}{\partial u} - \partial_x \left( \frac{\partial H_{NO}}{\partial u_x} \right) + \partial_x^2 \left( \frac{\partial H_{NO}}{\partial u_{xx}} \right) - \dots$$

のように求められる。しかし、DeepONet で学習された  $H_{NO}$  は、このような形として与えられていない。そのため、上記の変分導関数の求め方は、別途に設計しなければならない。

## 2.2 自動微分アルゴリズムを用いた変分導関数の導出法

実際、DeepONet は、trunk network が目標関数空間の基底  $(\psi_1, \dots, \psi_p)$  を提供し、branch network がその係数  $(c_1, \dots, c_p)$  を提供してると見做せる。特に、 $(c_1, \dots, c_p)$  は入力関数空間の部分空間の双対空間の基底  $L_i$  を導入することで得られる。ここで  $L_i$  は  $L_i(u) = u(x_i)$  を満たす。そして、 $L_i \phi_j = \delta_{ij}$  を満たすような矛盾のない基底  $\phi_j$  を導入すると、入力関数  $u$  を

$$u = (L_1(u))\phi_1 + \dots + (L_N(u))\phi_N = u(x_1)\phi_1 + \dots + u(x_N)\phi_N \quad (1)$$

のように表せ、自動微分に用いられる離散値ベクトル  $(u(x_1), \dots, u(x_N))^T$  に結びつけられる。

一方、 $\mathcal{H} : (\mathcal{X}, \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2}) \rightarrow \mathbb{R}$  を十分滑らかなハミルトニアンとし、任意の  $u \in \mathcal{X}$  に対して、

$$v\mathcal{H} = d\mathcal{H}(v), \quad \forall v \in \mathcal{T}_u\mathcal{X}$$

が成り立つ。つまり、 $d\mathcal{H}$  は  $d\mathcal{H} : v \in \mathcal{T}_u\mathcal{X} \mapsto d\mathcal{H}(v) \in \mathbb{R}$  となる線形汎関数を定義し、 $d\mathcal{H} \in \mathcal{T}_u^*\mathcal{X}$  と考えられる。 $\mathcal{T}_u\mathcal{X}$  と  $\mathcal{T}_u^*\mathcal{X}$  はそれぞれ  $\mathcal{X}$  上の接空間と余接空間を表す。Riesz の表現定理により、ある  $v_{\mathcal{H}} \in \mathcal{T}_u\mathcal{X}$  が存在して、

$$d\mathcal{H}(w) = \langle v_{\mathcal{H}}, w \rangle, \quad \forall w \in \mathcal{T}_u\mathcal{X}$$

が成り立つ。また、 $\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}$  の定義より、

$$d\mathcal{H}(w) = \left\langle \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}, w \right\rangle_{L^2}, \quad \forall w \in \mathcal{T}_u\mathcal{X} \quad (2)$$

が成り立つ。つまり、任意の内積によって定義される勾配  $v_{\mathcal{H}}$  は、 $L^2$  内積を用いる変分導関数と関係している。以上の (1) と (2) を利用すると、DeepONet の学習における、 $\mathcal{H}_{NO}$  の変分導関数は、自動微分アルゴリズムで得られた勾配を用いて求めることができる。

**定理.**  $\tilde{\mathcal{X}} = \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_N\}$  をあるヒルベルト空間  $\mathcal{X}$  の部分空間とする。ただし、 $\phi_i = \phi_i(x) \in \mathcal{X}, i = 1, \dots, N$  である。 $\mathcal{H}_{NO} : (\tilde{\mathcal{X}}, \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2}) \rightarrow \mathbb{R}$  を DeepONet で学習された十分滑らかなハミルトニアンとする。 $\nabla_{AD} \mathcal{H}_{NO}$  が自動微分アルゴリズムを利用して得られた  $\mathcal{H}_{NO}$  の勾配であるとき、任意の  $u \in \mathcal{X}$  と  $\tilde{u} \in \tilde{\mathcal{X}}$  に対して、 $\mathcal{H}_{NO}$  の変分導関数  $\frac{\delta \mathcal{H}_{NO}}{\delta u}$  が  $\nabla_{AD} \mathcal{H}_{NO}$  から求まる。

証明の詳細と数値実験の結果については、講演の際に説明する。

**謝辞** 本研究は JST CREST JPMJCR1914, JST ASPIRE JPMJAP2329, JST さきがけ JPMJPR21C7 の助成を受けている。

## 参考文献

- [1] Samuel Greydanus, Misko Dzamba and Jason Yosinski, Hamiltonian neural networks, Advances in neural information processing systems, 32 (2019).
- [2] Lu Lu, Pengzhan Jin, Guofei Pang, Zhongqiang Zhang and George Em Karniadakis, Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators, Nature machine intelligence, 3(3) (2021) 218-229.

# 偏微分方程式に対するダイヤモンドスキームに関する諸検討

佐藤 海斗<sup>1</sup>, 佐藤 峻<sup>1</sup>, 松尾 宇泰<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 東京大学大学院

e-mail : ksato-27@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

## 1 概要

Multi-symplectic 偏微分方程式というクラスの偏微分方程式に対しては, multi-symplectic 法と呼ばれる構造保存解法が存在する. これらの解法は, symplectic 性から従う保存量を離散化後も保ち, 数値的に安定していると期待される.

2015 年に, McLachlan, Wilkins [1] によってダイヤモンドスキームという新たな multi-symplectic 法が提案された. 同手法は, 局所的にのみ陰的であるという著しい利点を持つ.

McLachlan らは, ダイヤモンドスキームを波動方程式  $u_{tt} - u_{xx} = f(u)$  について用いている. 発表者らは, 混合微分  $u_{tx}$  を含む multi-symplectic 偏微分方程式に対してもダイヤモンドスキームを用いることを試みた. 本発表では, その過程で観察した諸事実を報告する.

## 2 Multi-symplectic 偏微分方程式

$z$  をベクトルとし, 歪対称行列  $K, L$  および関数  $S(z)$  を用いて

$$Kz_t + Lz_x = \nabla S(z) \quad (1)$$

の形で書ける偏微分方程式を, multi-symplectic 偏微分方程式と呼ぶ. 例えば, 波動方程式  $u_{tt} - u_{xx} = f(x)$  は, 補助変数  $v = u_t, w = u_x$  を取って  $z = (u \ v \ w)^T$  とし,  $K, L, S(z)$  を適切に選ぶことで, multi-symplectic 偏微分方程式と見なせる. また, KdV 方程式  $u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0$  も multi-symplectic 偏微分方程式となることが知られている.

Multi-symplectic 偏微分方程式は, 以下のような保存則を満たす:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} dz \wedge (K dz) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2} dz \wedge (L dz) \right) = 0. \quad (2)$$

この保存則から, エネルギー保存則に類する大域的保存則も従うことが知られている. したがって, 式 (1) を離散化して解く手法として, 式 (2) の「離散版」を保つようなものは, 得られる解が定性的によくなることが期待できる. そのような手法は一般に multi-symplectic 法と呼ばれ, Preissmann ボックススキームなどが知られている [2].

## 3 ダイヤモンドスキーム

2015 年に, McLachlan, Wilkins [1] が新たな multi-symplectic 法であるダイヤモンドスキームを提案した. この手法は, 時間軸と空間軸からなるメッシュを 45 度回転させてダイヤモンド状のメッシュ (図 1) を構成し, その上で近似解を求めるものである.

McLachlan らは, 周期境界条件  $u(a, \cdot) = u(b, \cdot)$  および初期条件  $u(\cdot, 0)$  が与えられている波動方程式  $u_{tt} - u_{xx} = f(u)$  についてダイヤモンドスキームを提案している. ダイヤモンドスキームでは, まず図 1 のようにダイヤモンド状のメッシュを構成する. そして, 初期条件から  $t = 0$  における各頂点 (図 1 の青い四角形) での値を定める. 次に, 陽的 Euler 法によって  $t = \Delta t/2$  における各頂点

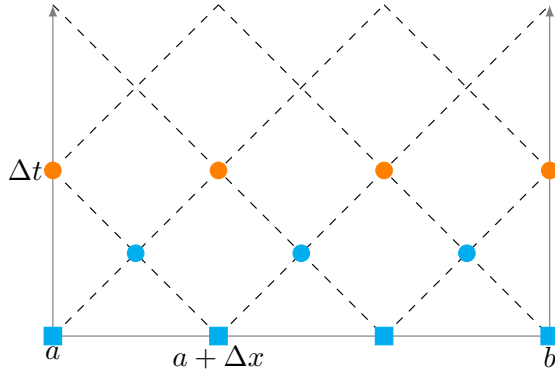


図 1. ダイヤモンドメッシュ

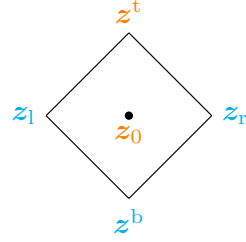


図 2. 各ダイヤモンド内の変数関係

(図 1 の青い円) の値を求める．以上により，初期反復で用いる各ダイヤモンドについて，下 ( $z^b$ )・左 ( $z_l$ )・右 ( $z_r$ ) の頂点での値が定まる．

いま，あるダイヤモンド内 (図 2) で，下・左・右の各頂点での値  $z^b$ ,  $z_l$ ,  $z_r$  が分かっているとき，以下の更新式によって上の頂点での値  $z^t$  を求める：

$$K \frac{z^t - z^b}{\Delta t} + L \frac{z_r - z_l}{\Delta x} = \nabla S(z_0). \text{ ここで, } z_0 = \frac{z^t + z^b + z_r + z_l}{4}. \quad (3)$$

各ダイヤモンドごとに式 (3) を計算し，時間方向に順次ダイヤモンドメッシュ上の値を定めることで，偏微分方程式 (1) の近似解を得る．こうして得た近似解は，式 (2) に類する離散的な保存則を満たす．すなわち，ダイヤモンドスキームは multi-symplectic 法である．

代表的な multi-symplectic 法である Preissmann ボックススキームが完全に陰的であるのに対し，ダイヤモンドスキームは更新式 (3) における変数の依存関係が各ダイヤモンド内で閉じており，局所的にのみ陰的である．したがって，計算コストが低く，並列化に向いている，という利点を持つ．

#### 4 混合微分を含む偏微分方程式へのダイヤモンドスキームの適用

本研究では，McLachlan らが扱った偏微分方程式  $u_{tt} - u_{xx} = f(u)$  の他に，混合微分を含む非線形 Klein-Gordon 方程式  $u_{tx} = f(u)$  についてもダイヤモンドスキームを用いることができないか検討した．そこで，sine-Gordon 方程式  $u_{tx} = \sin(u)$  にダイヤモンドスキームを適用したところ，補助変数に  $1/(\Delta t)^3$  程度の誤差が生じ，初期反復以降は更新式 (3) が可解でなくなった．

非線形 Klein-Gordon 方程式  $u_{tx} = f(u)$  の multi-symplectic 表示 (式 (1)) は  $u_{tt} - u_{xx} = f(u)$  のそれと若干異なっており， $u_{tx} = f(u)$  に対するダイヤモンドスキームは (局所陰的にとどまらず) 完全に陽的となる．これが原因となり，スキームの安定性が大きく損なわれる．発表では，以上の観察をもとに，ダイヤモンドスキームに対する検討結果を報告する．

#### 参考文献

- [1] R. I. McLachlan, M. C. Wilkins, The Multisymplectic Diamond Scheme, SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 37 (2015), No. 1, pp. A369 – A390.
- [2] B. Leimkuhler, S. Reich, Simulating Hamiltonian Dynamics, Cambridge University Press, Cambridge, 2005.

# 三重会合点を伴う多相 Mullins-Sekerka 問題に対する構造保存型パラメトリック有限要素スキーム

江藤 徳宏<sup>1</sup>, Harald Garcke<sup>2</sup>, Robert Nürnberg<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 東京大学大学院数理科学研究科, <sup>2</sup>University of Regensburg, <sup>3</sup>University of Trento  
e-mail : tokuhiro.eto@gmail.com

## 1 はじめに

この研究では方程式 (1) に対応する有限要素法に基づく構造保存型数値計算スキームを提案し、その性質と実行可能性、精度を明らかにする。  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  を有界領域とすると、以下の方程式を満たす様なベクトル値関数  $\mathbf{w} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$  と 開曲線の 1-パラメタ族  $\Gamma(t) = \cup_{i=1}^3 \Gamma_i(t)$  を近似する:

$$\begin{cases} \Delta \mathbf{w} = \mathbf{0} & \text{in } \Omega \setminus \Gamma(t), t \geq 0, \\ \mathbf{w} \cdot [\boldsymbol{\chi}] = \sigma \kappa & \text{on } \Gamma(t), t \geq 0, \\ [\nabla \mathbf{w}] \vec{\nu} = -V[\boldsymbol{\chi}] & \text{on } \Gamma(t), t \geq 0, \\ \partial_{\vec{\nu}_\Omega} \mathbf{w} = \mathbf{0} & \text{on } \partial\Omega, \\ \sum_{i=1}^3 \sigma_i \vec{\mu}_i = \vec{0} & \text{on } \partial\Gamma_1(t) \cap \partial\Gamma_2(t) \cap \partial\Gamma_3(t), t \geq 0, \\ \Gamma(0) = \Gamma_0. \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 $\boldsymbol{\chi} : \Omega \rightarrow \{0, 1\}^3$  は各相の特性関数のなすベクトル値関数、 $\vec{\nu}_\Omega$  は  $\Omega$  の外向き単位法ベクトル場、各開曲線  $\Gamma_i(t)$  は、単位法ベクトル場  $\vec{\nu}_i$  によって向きづけされていて、 $\sigma$  は開曲線の表面エネルギーを表す正定数、 $\kappa$  は曲率、 $\vec{\mu}$  は余法線ベクトル、 $[q]$  は  $\vec{\nu}$  方向への量  $q$  のジャンプ、 $V$  を法速度とする。(1) の 2 つ目の条件を Gibbs–Thomson 則、5 つ目の条件を Young の法則と呼ぶ。方程式 (1) は Bronsard, Garcke, Stoth [1] らによって考案され、これに対応する弱解の存在が、技術的な仮定のもとで証明された。本講演の内容は Garcke 氏, Nürnberg 氏らとの共同研究 [2] に基づく。

## 2 弱形式の導出

(1) の第 1 式を  $\boldsymbol{\varphi} \in T\tilde{\Sigma} \cap [H^1(\Omega)]^3$  でテストして部分積分し、第 3 式と組み合わせることで、以下の運動法則の弱形式を得る:

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{w} : \nabla \boldsymbol{\varphi} - \sum_{(i,j,k) \in \Lambda} \int_{\Gamma_i} V_i(\varphi_j - \varphi_k) d\mathcal{H}^1 = 0. \quad (2)$$

ここで、 $\Lambda := \{(1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 2, 1)\}$  である。次に、第 2 式を  $\xi \in L^2(\Gamma_i)$  でテストすることで、Gibbs–Thomson 則の弱形式を得る:

$$\int_{\Gamma_i} (w_k - w_j + \sigma_i \kappa_i) \xi d\mathcal{H}^1 = 0 \quad \forall (i, j, k) \in \Lambda. \quad (3)$$

最後に以下の曲率ベクトルに関する公式  $\Delta_s \vec{Id} = \kappa \vec{\nu}$  を  $\vec{\eta} = (\vec{\eta}_1, \vec{\eta}_2, \vec{\eta}_3) \in \bigotimes_{i=1}^3 H^1(\Gamma_i(t); \mathbb{R}^2)$  で特に  $\partial\Gamma_1(t) \cap \partial\Gamma_2(t) \cap \partial\Gamma_3(t)$  にて  $\vec{\eta}_1 = \vec{\eta}_2 = \vec{\eta}_3$  となるベクトル値関数でテストする。 $\Gamma(t)$  上での部分積分と第 5 式を使うことで、曲率ベクトルの弱形式を得る:

$$\int_{\Gamma} \kappa_\sigma \vec{\nu} \cdot \vec{\eta} d\mathcal{H}^1 = - \int_{\Gamma} \sigma \nabla_s \vec{Id} \cdot \nabla_s \vec{\eta} d\mathcal{H}^1. \quad (4)$$

### 3 有限要素近似

領域  $\Omega$  と開曲線  $\Gamma_i(t)$  ( $1 \leq i \leq 3$ ) はそれぞれ三角形からなるメッシュ  $\mathfrak{T}^m$  及び折れ線  $\Gamma_i^m$  で近似される。折れ線は、ある分点において連続で、かつ辺上で線形なベクトル値関数  $\vec{X}_i^m : [0, 1](= I) \rightarrow \mathbb{R}^2$  で表されているとする。

ここで、化学ポテンシャル  $w$ 、曲率  $\kappa$ 、頂点ベクトル  $\vec{X}$  が属するべき有限次元の関数空間をそれぞれ  $S^m := \{v \in C(\bar{\Omega}) \mid v|_o \text{ は線形 } \forall o \in \mathfrak{T}^m\}$ ,  $\mathbf{S}^m := [S^m]^3$ ,  $\mathbf{S}_\Sigma^m := \mathbf{S}^m \cap T\tilde{\Sigma}$ ,  $V(\Gamma_i^m) := \{f : I \rightarrow \mathbb{R}^2 \mid f \text{ は } I \text{ の各小区間上で線形関数.}\}$  ( $1 \leq i \leq 3$ ),  $\underline{V}(\Gamma^m) := \{(\vec{X}_1^m, \vec{X}_2^m, \vec{X}_3^m) \in \bigotimes_{i=1}^3 V(\Gamma_i^m) \mid \vec{X}_1^m = \vec{X}_2^m = \vec{X}_3^m \text{ on } \partial I\}$  と定義する。時間刻み幅を  $\tau_m > 0$  として、各頂点における法速度  $V$  を  $(\vec{X}^{m+1} - \vec{X}^m)/\tau_m$  という量で一次近似して置き換える。この時、我々が解くべき問題は、頂点の位置ベクトル  $\vec{X}^m \in \underline{V}(\Gamma^m)$  が与えられた時、(2), (3), (4) を満たす様な有限要素関数  $(\mathbf{W}^{m+1}, \vec{X}^{m+1}, \kappa^{m+1}) \in \mathbf{S}_\Sigma^m \times \underline{V}(\Gamma^m) \times V(\Gamma^m)$  を求める事になる。

### 4 主結果

以上の問題設定のもと、我々は以下の結果を得た。

**定理 1** 有限要素空間で近似された線形システム (2), (3), (4) は、 $\vec{X}^m$  に関する一定の仮定の下で一意的な解  $(\mathbf{W}^{m+1}, \vec{X}^{m+1}, \kappa^{m+1})$  を持つ。

**定理 2** 提案されたスキームは、以下の意味で、無条件安定である。

$$|\Gamma^{m+1}|_\sigma + \tau_m \|\nabla \mathbf{W}^{m+1}\|_2^2 \leq |\Gamma^m|_\sigma,$$

定理 2 は、各開曲線の長さが非増大であることも主張しており、元の問題 (1) の解が持つ曲線短縮の性質が全離散スキームでも保存されていることがわかる。一方、元の問題の厳密解は各相の面積も保存するが、ここまでで提案されたスキームを使って各相  $\Omega_j^m$  ( $1 \leq j \leq 3$ ) を時間発展させると、一般に  $|\Omega_j^{m+1}| \neq |\Omega_j^m|$  となる。そのため、我々は数値スキームで使われる近似法ベクトル場を修正することで以下の定理を証明した。

**定理 3** 提案されたスキームは、近似法ベクトル場を適切に変更することにより、以下の意味で面積を保存することが可能である：

$$|\Omega_j^{m+1}| = |\Omega_j^m| \quad \forall 1 \leq j \leq 3, \quad \forall m \in \mathbb{N} \cup \{0\}.$$

ここまで 3 相 Mullins–Sekerka 問題に対する有限要素スキームの概要を述べてきたが、本研究の成果によって、より一般に 4 相以上の問題を扱うことも可能になっている。この点については [2] の §7 に詳細な説明がある。

### 参考文献

- [1] Bronsard, L., Garcke, H., Stoth, B., A multi-phase Mullins-Sekerka system: matched asymptotic expansions and an implicit time discretisation for the geometric evolution problem, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A, 128 (1998), p. 481–506.
- [2] Eto, T., Garcke, H., Nürnberg, R., A structure-preserving parametric finite element method for the multi-phase Mullins–Sekerka problem with triple junctions, Numer. Math. (2024)



# 偏微分方程式の重度演算子分解解法について

石井 直樹<sup>1</sup>, 麻生 豊大, 佐藤 峻<sup>1</sup>, 松尾 宇泰<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 東京大学

e-mail : ishii-naoki@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

## 1 概要

数値計算における演算子分解解法あるいは分解解法とは、微分方程式の右辺が和の形で書かれているときに使える近似解法であり、右辺を各項のみに置き換えた各微分方程式の時間発展を順に適用することで元の方程式の時間発展を近似する手法である [1].

従来の分解解法は右辺が高々数項程度の和であるときに使われる手法であるが、最近では偏微分方程式の有限差分法において右辺を各空間刻み点に関与する成分へ分解する解法が試みられている [2]. 特に筆者らは、偏微分方程式のエネルギー保存・散逸解法である離散変分導関数法 [3] において、右辺を空間刻み点数と同数の項による非自明な和の形に分解することにより、エネルギー保存・散逸性を維持した分解解法を構成している [4].

一方で、こうした手法は空間刻み幅を小さくすることで精度が悪化する可能性があり、時間刻み幅と空間刻み幅に対する精度のオーダーがどのようになるか明らかではない。本研究では、右辺の分解の項数が多いこうした偏微分方程式の分解解法の精度を、理論と数値実験の両面から明らかにする。

## 2 離散変分導関数法

離散変分導関数法 [3] を適用できる例として、 $u : (\mathbb{R}/L\mathbb{Z}) \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  についての以下の偏微分方程式を考える (KdV 方程式) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2} u^2 + 0.022^2 u_{xx} \right). \quad (1)$$

偏微分方程式 (1) において  $H(u) = \int_0^L \left( \frac{1}{6} u^3 - \frac{0.022^2}{2} u_x^2 \right) dx$  は保存量、つまり  $t$  によらない値である。  $L = M\Delta x$  とすると、離散変分導関数法では、方程式 (1) の解  $u(n\Delta t, i\Delta x)$  の近似  $U_i^{(n)}$  ( $i = 1, \dots, M$ ) を以下のスキームで求める :

$$\frac{U^{(n+1)} - U^{(n)}}{\Delta t} = D^{(1)} \frac{\delta H_d}{\delta(U^{(n+1)}, U^{(n)})}. \quad (2)$$

ただし、 $U^{(n)} = (U_1^{(n)}, \dots, U_M^{(n)})^\top$  とし、 $D^{(1)}$  を 1 階中心差分演算子を表す  $M \times M$  行列とし、 $\frac{\delta H_d}{\delta(\cdot, \cdot)} : \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^M$  を以下のように定める ( $\delta^{(2)}$  は 2 階中心差分とする) :

$$\left( \frac{\delta H_d}{\delta(U, V)} \right)_i = \frac{1}{6} (U_i^2 + U_i V_i + V_i^2) + \frac{0.022^2}{2} \delta^{(2)} (U_i + V_i).$$

スキーム (2) による数値解において、 $H_d(U) = \sum_{i=1}^M \frac{1}{6} \left( U_i^3 - \frac{0.022^2}{2} (\delta^+ U_i)^2 \right) \Delta x$  は保存量となる ( $\delta^+$  は 1 階前進差分とする)。

## 3 分解された離散変分導関数法

エネルギー保存性を保つように、この解法に演算子分解を適用する。  $i \in 1, \dots, M$  に対し、 $i^+ \in 1, \dots, M$  を  $i^+ \equiv i + 1 \pmod{M}$  で定め、 $E_i^{(1)}$  を  $(i, i^+)$ -成分が  $1/(2\Delta x)$ ,  $(i^+, i)$ -成分が

$-1/(2\Delta x)$ , 他の成分が 0 の  $M \times M$  行列とする. このとき  $\sum_{i=1}^M E_i^{(1)} = D^{(1)}$  である.  $E_i^{(1)}$  を用いて  $\Phi_{\Delta t/2}^{[i]}$  を以下のように定義する:

$$U^+ = \Phi_{\Delta t/2}^{[i]}(U) \iff \frac{U^+ - U}{\Delta t/2} = E_i^{(1)} \frac{\delta H_d}{\delta(U^+, U)}.$$

これを用いて以下のスキームで方程式 (1) の解  $u(n\Delta t, i\Delta x)$  の近似  $U_i^{(n)}$  ( $i = 1, \dots, M$ ) を求める:

$$U^{(n+1)} = \Phi_{\Delta t/2}^{[1]} \circ \dots \circ \Phi_{\Delta t/2}^{[M-1]} \circ \Phi_{\Delta t/2}^{[M]} \circ \Phi_{\Delta t/2}^{[M]} \circ \Phi_{\Delta t/2}^{[M-1]} \circ \dots \circ \Phi_{\Delta t/2}^{[1]}(U^{(n)}). \quad (3)$$

スキーム (3) による数値解においても,  $H_d(U)$  は保存量となる. この解法は対称解法なので  $\Delta x$  を固定すると時間 2 次精度となるはずだが, 誤差のオーダーに  $\Delta x$  と  $\Delta t$  の交差項が含まれる可能性があり,  $\Delta x$  と  $\Delta t$  の両方に対する誤差解析を行う必要がある.

## 4 数値実験

様々な  $\Delta t, \Delta x$  について数値実験を行い精度を調べた. 領域の大きさは  $L = 1$  とし, 初期解は母数  $\sqrt{m}$  の楕円関数を用いて  $u(x, 0) = 12m\omega^2 \text{cn}^2(\frac{\omega}{0.022}x, \sqrt{m}) - 8m\omega^2 + 4\omega^2 + 1$  とした. ただし  $m = 0.999999$ ,  $K$  を第一種楕円積分として  $\omega = 2 \cdot 0.022K(m)$  である. この初期解のもとで厳密解は速度 1 の進行波となる. 各数値解の厳密解からの差の  $L_2$ -ノルムは表 1 のようになった.

表 1. 数値解と厳密解の差のノルムの 2 底の対数 (四捨五入, \* は解が Newton 法で求まらなかったケース)

| $\Delta t \setminus \Delta x$ | $2^{-3}$ | $2^{-4}$ | $2^{-5}$ | $2^{-6}$ | $2^{-7}$ | $2^{-8}$ |
|-------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $2^{-7}$                      | -6.6     | -7.5     | -9.7     | -7.3     | *        | -4.3     |
| $2^{-8}$                      | -6.6     | -7.5     | -9.6     | -9.6     | -2.0     | -4.5     |
| $2^{-9}$                      | -6.6     | -7.5     | -9.6     | -11.8    | -5.3     | -4.8     |
| $2^{-10}$                     | -6.6     | -7.5     | -9.6     | -11.8    | -7.6     | *        |
| $2^{-11}$                     | -6.6     | -7.5     | -9.6     | -11.7    | -9.7     | -3.2     |
| $2^{-12}$                     | -6.6     | -7.5     | -9.6     | -11.6    | -11.9    | -5.5     |

この表から, 精度は  $O(\Delta x^2 + \Delta x^{-6}\Delta t^2)$  となっていることが予想される.

この例は非線形であるが, 講演ではまず線形な系について数理的な状況を詳しく観察し, 一般的な精度評価の理論の展望を示す.

## 参考文献

- [1] Ernst Hairer, Christian Lubich, Gerhard Wanner, Geometric Numerical Integration, Springer, 2010.
- [2] Toyohiro Aso, Shun Sato, Takayasu Matsuo, 発展方程式に対する乱択化分解解法, in: 第 4 9 回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp. 73–76, 2023.
- [3] Daisuke Furihata, Masatake Mori, A stable finite difference scheme for the Cahn–Hilliard equation based on the lyapunov functional, ZAMM Z. angew. Math. Mech., Vol. 76 (1996), 405–406.
- [4] Naoki Ishii, Toyohiro Aso, Shun Sato, Takayasu Matsuo, 構造保存数値解法と両立する重度の演算子分解, in: 第 5 0 回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp. 1–4, 2024.