

令和 5 年 5 月 22 日現在

機関番号：10101

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2021～2022

課題番号：21K20314

研究課題名（和文）領域内部と境界上で保存則を持つLiu-Wuモデルに対する構造保存数値解法の構成

研究課題名（英文）Design and analysis of a structure-preserving scheme for the Liu-Wu model with conservation laws both in bulk and on the boundary

研究代表者

奥村 真善美 (Okumura, Makoto)

北海道大学・電子科学研究所・特任助教

研究者番号：80913045

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,900,000円

研究成果の概要（和文）：相分離現象を記述するCahn-Hilliard方程式に対し、Liu-Wuによる力学的境界条件を課したモデルに対する数値アルゴリズムの結果を得た。Liu-Wuモデルは、領域内部と境界上の積分量がそれぞれで保存するという特徴的な保存則ならびに領域内部のエネルギーと境界のエネルギーの和が減衰するという総エネルギー散逸則を持つが、これらの構造を全て離散的に再現する構造保存数値スキームを構成し、また、その可解性について論じた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、構造保存数値解法の一つである、離散変分導関数法に基づいて、構造保存スキームを構成しているが、一般に離散変分導関数法では、その構造保存スキームが再現する構造は一つである。それに対し、本研究は、領域内部の構造と境界の構造の両方を厳密に再現する構造保存スキームを構成しており、より優れた数値スキームであることが期待される。また、離散変分導関数法は、同じ数理構造を持っていれば、個々の方程式に依らず幅広く適用可能であるという汎用性があり、今回開発した手法はそれに基づいているため、境界上で保存則を持つ他の問題に対しても適用可能であると考えられ、他の力学的境界条件下のモデルへの応用も期待される。

研究成果の概要（英文）：We obtained results of a numerical scheme for the Cahn-Hilliard equation describing phase separation phenomena with the dynamical boundary condition by Liu and Wu, which has a characteristic conservation law that the integrals inside the domain and on the boundary are conserved, and a total energy dissipation law that the sum of the energy inside the domain and the energy on the boundary decays. We constructed a structure-preserving numerical scheme that retained all these structures discretely and discussed the solvability of the scheme.

研究分野：数値解析

キーワード：数値解析 構造保存数値解法 Cahn-Hilliard方程式 力学的境界条件

1. 研究開始当初の背景

偏微分方程式の初期値境界値問題において、力学的境界条件を課した問題が注目されており、研究開始当初、ヨーロッパの研究チームを中心に、この境界条件下での様々な偏微分方程式についての研究が盛んに行われていた。力学的境界条件は領域内部と境界の相互作用を表現するために導入された境界条件で、境界上でも力学系を考慮している。従来の境界条件と異なり、領域内部の力学系と同時に境界上でも同種、あるいは異種の力学系を考えることができる力学的境界条件は、境界上の外力を制御し、直接制御不可能な領域内部の理想状態を実現する最適制御問題に応用されるなど、工学への応用に重要な意味を持つ。

Cahn-Hilliard方程式系では2019年にLiu-Wuにより、境界上でもCahn-Hilliard方程式を考慮する、新しい力学的境界条件下のモデルが導出された。このモデルでは、領域内部と境界のそれぞれで質量保存則が成り立つとともに、総エネルギー散逸則も成り立つ。このような構造は数値計算においても重要な意味を持ち、構造を離散的に再現することで、安定な計算が可能になるなどの恩恵がある。Liu-Wuモデルに対し、有限要素法による結果や線形陰的な差分スキームの結果が得られていたが、前者のスキームでは、領域内部の保存則と境界の保存則を離散的に再現しているが、連続系におけるエネルギー等式を不等式で再現することで、離散総エネルギー散逸則を実現していた。後者の線形陰的スキームも構造保存スキームとなっているが、そのスキームには元々の方程式には本来現れない項があり、その項の影響により、条件付きで離散総エネルギー散逸則を実現していた。また、そのスキームでは、時間に関して一次の精度しか得られておらず、改善の余地があった。

2. 研究の目的

本研究では、空間二次元のLiu-Wuモデルに対し、このモデルが持つ領域内部と境界の保存則および総エネルギー散逸則を保存する、離散変分導関数法に基づく構造保存スキームを構成し、可能であれば線形陰的な構造保存スキームも構成することを目的とする。離散変分導関数法は、同じ数理構造を持っていれば、個々の方程式に依らず幅広く適用可能であるという汎用性があり、今回構成するスキームはそれに基づいているため、境界上で保存則を持つ他の問題に対しても適用可能であると考えられ、他の力学的境界条件下の問題への応用もねらいとする。そして、構成した構造保存スキームの解の L^1 -有界性、可解性、誤差評価といった理論解析の結果を得ることも研究目的とする。

3. 研究の方法

多次元空間の任意格子での離散微積分は一般に、離散変分導関数法において重要な Gauss-Green 則を満たさないという難しさがある。直交格子の場合、空間方向の作用素を一次元の作用素に分解できるため、我々がこれまでに開発した空間一次元の構造保存スキーム構成法を容易に空間多次元の場合に拡張できる。そこで、そのスキーム構成法を用い、Liu-Wu モデルに対する構造保存スキームを構成する。

空間一次元の場合、離散変分導関数法スキームの解の L^1 -有界性は、離散 L^1 -ノルムを離散 H^1 -ノルムで評価する形式の離散 Sobolev の不等式を通じて得られるが、この不等式には空間次元数が陽に含まれるため、空間多次元の場合には同様の手法で証明することが困難である。そこで、2016年のGuoらによる、ある差分スキームに対する解の L^1 -有界性の証明と同様にして、離散 L^1 -ノルムを離散 H^2 -ノルムで評価する形式の離散 Sobolev の不等式を用い、解の L^1 -有界性を証明する。そして、その性質を用いて、エネルギー法に基づいて可解性や誤差評価の証明

も与える。

4 . 研究成果

本研究では、Liu-Wu による力学的境界条件を課した Cahn-Hilliard 方程式に対して、境界での変分計算も行うことで適切な離散境界条件を導出し、離散変分導関数法に基づく構造保存スキームを空間二次元で直交格子の場合に構成した。なお、Liu-Wu モデルが持つ特徴的な保存則ならびに総エネルギー散逸則の両方を、構成した構造保存スキームは離散的に再現している。スキームの解の有界性について、領域内部における離散 H1- ノルムの評価および境界での解の L^2 - 有界性は得られたものの、非線形項の評価が難しく、領域内部における離散 H2- ノルムの評価を得るまでには至らなかった。そこで、スキームの可解性については、離散ソボレフ空間 H1 での議論を行うことにした。可解性について、Banach の不動点定理による証明アプローチでは、その不動点定理を適用する、スキームから構成される写像が well-defined であることとその写像の縮小性の証明が必要となる。本研究では、時間分割幅と空間分割幅の両方に依存する条件ではあるが、不動点定理を適用する写像が縮小写像であるための十分条件を与えることができた。well-defined であることの証明は今後の課題となる。また、本研究では数値計算の計算コストの削減に向けて、空間一次元の比較的単純な、線形の力学的境界条件下の Cahn-Hilliard 方程式に対し、線形の構造保存スキームや、スタッガード格子を用いて空間の分点の数を減らした構造保存スキームも構成し、その可解性について論じた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Makoto Okumura, Takeshi Fukao, Daisuke, Furihata, Shuji Yoshikawa	4. 巻 21
2. 論文標題 A second-order accurate structure-preserving scheme for the Cahn-Hilliard equation with a dynamic boundary condition	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Communications on Pure & Applied Analysis	6. 最初と最後の頁 355-392
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3934/cpaa.2021181	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Makoto Okumura, Takeshi Fukao	4. 巻 30
2. 論文標題 A new structure-preserving scheme with the staggered space mesh for the Cahn-Hilliard equation under a dynamic boundary condition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advances in Mathematical Sciences and Applications	6. 最初と最後の頁 347-346
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chiharu Kosugi, Toyohiko Aiki, Martijn Anthonissen, Makoto Okumura	4. 巻 30
2. 論文標題 Numerical results for ordinary and partial differential equations describing motions of elastic materials	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advances in Mathematical Sciences and Applications	6. 最初と最後の頁 387-414
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 2件／うち国際学会 2件）

1. 発表者名 奥村 真善美
2. 発表標題 特徴的な保存則を持つ動的境界条件下の問題に対する構造保存スキーム
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 奥村 真善美
2. 発表標題 離散変分導関数法に基づく構造保存スキームと動的境界条件下の問題への応用
3. 学会等名 第8回数理学夏季若手研究会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Makoto Okumura
2. 発表標題 The solvability of a discrete variational derivative scheme for the equation and boundary condition of the Cahn-Hilliard type
3. 学会等名 The 15th International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications 2021（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 奥村 真善美
2. 発表標題 相分離現象を記述するCahn-Hilliard方程式ならびに動的境界条件に対する構造保存数値解法とその解析
3. 学会等名 第7回 北大・部局横断シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 奥村 真善美
2. 発表標題 動的境界条件下のCahn-Hilliard方程式に対する線形多段階化構造保存スキームの解析と計算時間の削減
3. 学会等名 第175回神楽坂解析セミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Makoto Okumura
2. 発表標題 Nonlinear and linear structure-Preserving schemes for the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions of the Cahn-Hilliard type
3. 学会等名 The 22nd RIES-HOKUDAI International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------