

論文

動的境界条件下の Cahn–Hilliard 方程式に対する
多段線形化構造保存スキーム

奥村真善美

甲南大学 知能情報学部 知能情報学科
神戸市東灘区岡本 8-9-1, 658-8501

(受理日 2023 年 11 月 27 日)

概要

動的 (あるいは力学的) 境界条件と呼ばれる, 未知関数の時間微分をその条件内に含む境界条件を課した Cahn–Hilliard 方程式に対し, 離散変分導関数法に基づく線形の構造保存スキームを提案する. 非線形問題に対する離散変分導関数法スキームは通常非線形となり, 計算コストが高いという欠点があるが, 本論文では, スキームの線形化手法である多段線形化を併用し, 線形の離散変分導関数法スキームを構成する. さらに, そのスキームの理論解析として, 提案スキームの安定性, 可解性を証明する. また, 数値例を通じ, 提案スキームの有効性を示す.

キーワード: Cahn–Hilliard 方程式, 動的境界条件, 構造保存数値解法, 離散変分導関数法, 多段線形化

1 はじめに

L を正定数とし, $\Omega := (0, L)$ とする. 以下の動的境界条件下の Cahn–Hilliard 方程式 [1] を考える:

$$\partial_t u = \partial_x^2 p \quad \text{in } \Omega \times (0, \infty), \quad (1)$$

$$p = -\gamma \partial_x^2 u + F'(u) \quad \text{in } \Omega \times (0, \infty), \quad (2)$$

$$\partial_t u(0, t) = \partial_x u(x, t)|_{x=0} \quad \text{in } (0, \infty), \quad (3)$$

$$\partial_t u(L, t) = -\partial_x u(x, t)|_{x=L} \quad \text{in } (0, \infty), \quad (4)$$

$$\partial_x p(x, t)|_{x=0} = \partial_x p(x, t)|_{x=L} = 0 \quad \text{in } (0, \infty). \quad (5)$$

ただし, $u : [0, L] \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ と $p : [0, L] \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ はそれぞれ, 秩序変数と化学ポテンシャルである. さらに, $\gamma > 0$ であり, F' はポテンシャル F の導関数である. 本研究では, ポテンシャル F をダブルウェルポテンシャル $F(s) := (q/4)s^4 - (r/2)s^2$ とする. ただし, $q > 0, r > 0$ である. ここで, (3), (4) は動的 (あるいは力学的) 境界条件と呼ばれる境界条件で, 未知関数の時間微分をその条件内に含む境界条件となっている. この動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. Dirichlet 境界条件, Neumann 境界条件, Robin 境界条件といった, 代表的な境界条件と異なり, 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動的境界条件は近年、純粋数学・数値計算・工学の様々な分野で注目を集めている。なお、(3), (4) は例えば、よくかき混ぜられた液体あるいは蒸気からの溶質の拡散を記述している (例えば, [2] を参照されたい)。

今、この方程式を特徴づける量として、質量 M 、局所エネルギー G 、全エネルギー J を以下のように定める。

$$M(u) := \int_0^L u dx, \quad (6)$$

$$G(u, \partial_x u) := \frac{\gamma}{2} |\partial_x u|^2 + F(u),$$

$$J(u) := \int_0^L G(u, \partial_x u) dx. \quad (7)$$

このとき、以下が成立する。

性質 1.1 (エネルギー散逸則). (1)–(5) の解 u に対し、以下の不等式が成り立つ。

$$\frac{d}{dt} J(u(t)) = -\gamma |\partial_t u(0, t)|^2 - \gamma |\partial_t u(L, t)|^2 - \int_0^L |\partial_x p(x, t)|^2 dx \leq 0. \quad (8)$$

性質 1.2 (質量保存則). (1)–(5) の解 u に対し、以下の等式が成り立つ。

$$\frac{d}{dt} M(u(t)) = 0. \quad (9)$$

本論文では、(1)–(5) に対し、構造保存数値解法の 1 つである、Furihata, Matsuo らによって提唱された離散変分導関数法 (DVDM)[3] に基づく、線形の有限差分構造保存スキームを提案する。本論文における“構造保存”とは、スキームが (8) のような散逸則、あるいは (9) のような保存則といった、元の方程式がもつ構造を引き継ぐ (保存する) ことを指す。[4], [5] において Yoshikawa が言及している通り、構造を保存することで、安定な計算が可能になる、エネルギー法などの元々の方程式に対して用いられる様々な手法をスキームに対しても同様に適用できるなどの利点がある。実際、Yoshikawa らはエネルギー法を離散変分導関数法スキームに適用し、そのスキームの可解性 (解の存在と一意性) や誤差評価といった理論解析の結果を得ている (例えば [4]–[10] を参照されたい)。一方で、非線形問題に対し、離散変分導関数法を適用すると、通常、非線形陰的の構造保存スキームが得られ、計算コストが高い。そこで、Furihata, Matsuo らは構造保存かつ高速なスキームを得るために、非動的境界条件下の問題に対してではあるが、離散変分導関数法スキームの非線形性を弱める手法として、多段化 (あるいは多段線形化) という手法を開発した (例えば [3], [11]–[16] を見よ)。本研究の目的は、動的境界条件下の問題へ多段線形化を拡張し、動的境界条件の場合でも高速な構造保存スキームを構成することである。まずはその一手目として、本論文では空間 1 次元の場合で、比較的シンプルな動的境界条件を課した問題 (1)–(5) に対し、多段線形化構造保存スキームを構成する。

ここで、(1)–(5) に対する先行研究を述べる。数学的な観点としては、(1)–(5) に適当な初期条件を付与した初期値境界値問題が幅広く研究されている [17]–[30]。まず、ポテンシャル F が $F(s) = (q/4)s^4 - (r/2)s^2$ の場合に、Racke と Zheng [29] が大域的可解性を、Prüss ら [28] が L^p -最大正則性やグローバル・アトラクタの存在に関する結果を得ている。また、Wu と Zheng [30] や Chill ら [18] によって、時刻無限大としたときの解の平衡点への収束が議論されている。そして、ポテンシャルがより一般の設

定の下で、可解性、解の正則性、グローバル・アトラクタの存在、定常状態への収束、最適制御の様々な結果が近年得られている [17], [19]–[22], [24]–[27]. ここで、これらの論文では、初期値境界値問題を空間多次元の場合で考えており、動的境界条件 (3)–(4) は、境界で拡散の役割を果たすラプラス–ベルトラミ作用素を含むことに注意したい (我々の問題設定は空間 1 次元のため、この項は現れない).

数値解析的な観点としては、動的境界条件下の Cahn–Hilliard 方程式 (1)–(5) に対する数値計算の研究はいくつかある (例えば, [6], [17], [31]–[34] を見よ). [31, 32] では、Cherfils らや Israel らが空間 2, 3 次元の場合に問題を有限要素空間で半離散近似し、その誤差評価の結果を得るとともに、時間方向の離散化に後退 Euler 法を用いた全離散スキームの無条件安定性と、その解の定常状態への収束を示した. その他の数値的な結果については [17] も参照されたい. また、Nabet は空間 2 次元の場合の問題に対し、有限体積法による興味深い解析の結果を得ており、[33] ではその有限体積スキームの数値解の収束を示している. さらに、Nabet は [34] において、 H^1 -ノルムの意味でその収束のオーダーが 1 次であるという誤差評価の結果も得ている. ここまで述べてきたように、動的境界条件を伴う Cahn–Hilliard 方程式の数値解析は近年注目を集めているが、有限差分法による結果はごくわずかしかない. ここで、前述の数値解析の先行研究におけるスキームはエネルギー散逸則を不等式 $(d/dt)J(u(t)) \leq 0$ の意味で離散的に再現しているものの、(8) の第 1 の等式のようなエネルギー等式まで厳密に再現しているものはほとんどない. 実際、[31, 32] のスキームから離散エネルギー等式を導出すると、連続の元の問題では生じない項がその等式内に現れてしまう. これに関連して、[33] では離散エネルギー等式が得られているが、このエネルギー等式においても連続の場合には現れない項が生じている (詳細は [33, Proposition 3.3] を見よ). これに対し、Fukao ら [6] は離散変分導関数法を用いて、空間 1 次元の問題 (1)–(5) に対して、(8) のエネルギー等式を離散的に再現する有限差分構造保存スキームを構成した. しかしながら、Fukao らのスキームは境界の外向き単位法線方向微分の近似に、前進差分を用いており、その結果、Fukao らのスキームは空間に関して 1 次の精度となっていた.

離散変分導関数法では、方程式を特徴づけるエネルギーをどのように離散化するかが重要となる. 我々はこれまでに、そのエネルギーの離散化を従来のものから改良し、部分積分の離散版に相当する、適切な部分積分公式を新たに導出し、それを用いて境界の外向き単位法線方向微分を (標準の) 1 階中心差分で近似した構造保存スキームを構成した [7]. この結果は空間 1 次元の結果ではあるが、その提案スキームは、深尾らのスキームと同様に、離散的な意味で (8) の第 1 の等式 (エネルギー等式) を厳密に再現しており、また、精度としては空間的にも時間的にも 2 次であることを厳密に証明した. さらに、我々は (8) のエネルギー等式を離散的に再現する、別の構造保存スキームも構成している [35]. また、[3, Scheme 4.1] にもあるように、空間領域が矩形領域で直交格子の場合、我々のスキーム構成法は比較的容易に空間多次元の場合に拡張できる. 実際、我々はこれまでに空間 2 次元の場合に、今回対象とする動的境界条件とは別の動的境界条件下の Cahn–Hilliard 方程式に対し、離散変分導関数法に基づく構造保存スキームを構成し、理論解析の結果として、そのスキームの可解性の結果を得ている [36].

ここで、前述の研究において構成した構造保存スキームは非線形スキームとなっている. そのため、実際の計算では非線形連立方程式を時間ステップを進めるごとに解く必要があり、Newton 法などの反復解法を用いる必要があることから、計算コストが高い. そこで、前述のように、Furihata, Matsuo らは非動的境界条件下の問題に対し、多段化 (あるいは多段線形化) という手法を開発した. まず、Matsuo と Furihata [15] は複素数値非線形偏微分方程式に対して、スキームの時間ステップを追加することで線形陰的な構造保存スキームを構築し、さらに、Furihata は [11] で非線形波動方程式に対して陽的な構造保存スキームを構成した. また、Matsuo [14] は、2 階の偏微分方程式を 1 階の偏微分方程式の系と

して捉え直し、離散変分導関数法を用いて離散化することにより、2階の偏微分方程式に対する陰的構造保存スキームと陽的構造保存スキームを構築している。さらに、[12]ではNeumann境界条件下のCahn–Hilliard方程式、[13]では周期境界条件下の正則化された長波方程式に対して、線形陰的構造保存スキームの結果が得られている。そして、FurihataやMatsuoらによる同様のフレームワークがDahlbyとOwrenによっても開発されている[37]。また、Matsuo, Furihata[16]やSatoら[38]が勾配系やDuffing方程式に対する散逸多段階線形陰的スキームの漸近挙動を解析した結果を得ている。ここで、我々はKosugiらと共同で、多段線形化を応用し、弾性体の伸縮運動を記述する、ある非線形常微分方程式系に対する陽的な構造保存スキームを構成している[39]。本論文ではこの多段線形化を応用し、(1)–(5)に対する新しい多段線形化構造保存スキームを提案する。

その他の関連する研究として、Cahn–Hilliard方程式に別の動的境界条件を課した問題に対する数値解析的研究としては[6], [40]–[47]がある。また、動的境界条件下の別の方程式に対する構造保存スキームの結果としては[8], [48]がある。

本論文の残りの構成は次の通りである。第2節では、(8)と(9)を離散的に再現する、(1)–(5)に対する線形の構造保存スキームを提案する。第3節では、提案スキームの安定性を示し、第4節では、提案スキームの可解性を示す。第5節では、提案スキームの有効性を実証する数値例を示す。

2 多段線形化構造保存スキーム

本節では多段線形化のアイデア[3, Chapter 6]と(1)–(5)に対する構造保存スキーム構成法[7]を組み合わせ、2つの性質(8), (9)を離散的に再現する、線形の構造保存スキームを提案する。

2.1 準備

$K \in \mathbb{N}$ とし、 $\Delta x := L/K$ とする。また、 Δt を時間分割幅とする。 $k = -1, 0, \dots, K, K+1, n = 0, 1, \dots$ に対し、 $u(k\Delta x, n\Delta t)$ に対応する数値解を $U_k^{(n)}$ とする。さらに、

$$\mathbf{U}^{(n)} := \left(U_{-1}^{(n)}, U_0^{(n)}, \dots, U_K^{(n)}, U_{K+1}^{(n)} \right)^\top$$

または

$$\mathbf{U}^{(n)} := \left(U_0^{(n)}, \dots, U_K^{(n)} \right)^\top$$

とする。 $\mathbf{U}^{(n)}$ がどちらを意味するかは文脈により判断せよ。なお、上付き添字の (n) は混乱がなければ省略する。

定義 2.1. 添え字 k に関する、前進差分作用素 δ_k^+ 、後退差分作用素 δ_k^- 、1階中心差分作用素 $\delta_k^{(1)}$ 、2階中心差分作用素 $\delta_k^{(2)}$ をそれぞれ以下の通り定義する：任意の $\{f_k\}_{k=-1}^{K+1} \in \mathbb{R}^{K+3}$ に対し、

$$\begin{aligned} \delta_k^+ f_k &:= \frac{f_{k+1} - f_k}{\Delta x}, & \delta_k^- f_k &:= \frac{f_k - f_{k-1}}{\Delta x}, \\ \delta_k^{(1)} f_k &:= \frac{f_{k+1} - f_{k-1}}{2\Delta x}, & \delta_k^{(2)} f_k &:= \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{(\Delta x)^2} \quad (k = 0, 1, \dots, K). \end{aligned}$$

定義 2.2. $s = 0, 1$ とする. 台形則に基づく和分作用素 $\sum_{k=0}^K {}'' f_k : \mathbb{R}^{K+1+2s} \rightarrow \mathbb{R}$ を以下によって定義する: 任意の $\{f_k\}_{k=-s}^{K+s} \in \mathbb{R}^{K+1+2s}$ に対し,

$$\sum_{k=0}^K {}'' f_k := \frac{1}{2} f_0 + \sum_{k=1}^{K-1} f_k + \frac{1}{2} f_K.$$

G の離散化 $G_d^\pm : \mathbb{R}^{K+3} \times \mathbb{R}^{K+3} \rightarrow \mathbb{R}$ を今回はそれぞれ以下のように採用する: 任意の $\mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{K+3}$ に対し,

$$G_{d,k}^+(\mathbf{U}, \mathbf{V}) := \frac{\gamma}{2} \frac{(\delta_k^+ U_k)^2 + (\delta_k^+ V_k)^2}{2} + \frac{q}{4} U_k^2 V_k^2 - \frac{r}{2} U_k V_k \quad (k = 0, \dots, K),$$

$$G_{d,k}^-(\mathbf{U}, \mathbf{V}) := \frac{\gamma}{2} \frac{(\delta_k^- U_k)^2 + (\delta_k^- V_k)^2}{2} + \frac{q}{4} U_k^2 V_k^2 - \frac{r}{2} U_k V_k \quad (k = 0, \dots, K).$$

次に, (7) の離散版 $J_d : \mathbb{R}^{K+3} \times \mathbb{R}^{K+3} \rightarrow \mathbb{R}$ を以下のように定義する: 任意の $\mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{K+3}$ に対し,

$$J_d(\mathbf{U}, \mathbf{V}) := \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k=0}^{K-1} G_{d,k}^+(\mathbf{U}, \mathbf{V}) \Delta x + \sum_{k=1}^K G_{d,k}^-(\mathbf{U}, \mathbf{V}) \Delta x \right\}.$$

注意 1. 多段線形化の基本的な考え方は, スキーム内に含まれる時間ステップ数を余剰に加えることで, 最新時間ステップの数値解に対する非線形性を弱めるというものである. 離散変分導関数法スキームの多段線形化のアイデアは, (多段化していない) 元々の離散エネルギー $G_d(\mathbf{U}^{(n)})$ に含まれる時間ステップ数を増やし, スキームに非線形性をもたらしている多項式を分解する形で, 上記のようにエネルギーを離散化することにある. あとは通常の離散変分導関数法と同様にして, $J_d(\mathbf{U}^{(n+1)}, \mathbf{U}^{(n)})$ の離散変分を計算することで, ほぼ自動的に線形の構造保存スキームが導出される.

そして, $s = 0, 1$ に対し, (6) の離散版 $M_d : \mathbb{R}^{K+1+2s} \rightarrow \mathbb{R}$ を以下のように定義する: 任意の $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{K+1+2s}$ に対し,

$$M_d(\mathbf{U}) := \sum_{k=0}^K {}'' U_k \Delta x.$$

ここで, 離散変分導関数法 [3] のアイデアに従って, (1)–(5) に対する構造保存スキームを導出するため, J_d の離散変分 $J_d(\mathbf{U}) - J_d(\mathbf{V})$ ($\mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{K+3}$) を計算する. そのために以下の補題を用いる. 下記の補題の証明は直接計算により得られるため省略する.

補題 2.3. 任意の $\{f_k\}_{k=0}^K \in \mathbb{R}^{K+1}$ に対し,

$$\frac{1}{2} \left(\sum_{k=0}^{K-1} f_k \Delta x + \sum_{k=1}^K f_k \Delta x \right) = \sum_{k=0}^K {}'' f_k \Delta x.$$

補題 2.4 (部分和分公式). 任意の $\{f_k\}_{k=-1}^{K+1}, \{g_k\}_{k=-1}^{K+1} \in \mathbb{R}^{K+3}$ に対し,

$$\sum_{k=0}^{K-1} (\delta_k^+ f_k) (\delta_k^+ g_k) \Delta x = - \sum_{k=0}^K {}'' (\delta_k^{(2)} f_k) g_k \Delta x + \left[(\delta_k^{(1)} f_k) g_k \right]_0^K.$$

先ほど定義した J_d に対して, 補題 2.3 を用いると, 以下が成り立つ:

補題 2.5. 任意の $U, V \in \mathbb{R}^{K+3}$ に対し,

$$J_d(U, V) = \sum_{k=0}^{K-1} \frac{\gamma}{2} \frac{(\delta_k^+ U_k)^2 + (\delta_k^+ V_k)^2}{2} \Delta x + \sum_{k=0}^K \left(\frac{q}{4} U_k^2 V_k^2 - \frac{r}{2} U_k V_k \right) \Delta x.$$

そして, 補題 2.4 (部分和分公式), 補題 2.5 により以下を得る:

補題 2.6. 任意の $U, V, W \in \mathbb{R}^{K+3}$ に対し,

$$\begin{aligned} J_d(U, V) - J_d(V, W) &= \sum_{k=0}^K \left\{ -\gamma \delta_k^{(2)} \left(\frac{U_k + W_k}{2} \right) + q \left(\frac{U_k + W_k}{2} \right) V_k^2 - r V_k \right\} \frac{U_k - W_k}{2} \Delta x \\ &\quad + \left[\left\{ \gamma \delta_k^{(1)} \left(\frac{U_k + W_k}{2} \right) \right\} \frac{U_k - W_k}{2} \right]_0^K. \end{aligned} \quad (10)$$

注意 2. この等式 (10) は性質 2.7 (離散エネルギー散逸則) に必要不可欠な等式である.

2.2 多段線形化構造保存スキーム

数値スキームを以下のように提案する: $n \in \mathbb{N}$ に対して,

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n-1)}}{2\Delta t} = \delta_k^{(2)} P_k^{(n+1)} \quad (k = 0, \dots, K), \quad (11)$$

$$P_k^{(n+1)} = -\gamma \delta_k^{(2)} \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n-1)}}{2} \right) + q \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n-1)}}{2} \right) \left(U_k^{(n)} \right)^2 - r U_k^{(n)} \quad (k = 0, \dots, K), \quad (12)$$

$$\frac{U_0^{(n+1)} - U_0^{(n-1)}}{2\Delta t} = (-1)^{\frac{k}{K}} \delta_k^{(1)} \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n-1)}}{2} \right) \quad (k = 0, K), \quad (13)$$

$$\delta_k^{(1)} P_k^{(n+1)} = 0 \quad (k = 0, K). \quad (14)$$

注意 3. 上記スキームは未知の時間ステップ $U^{(n+1)}$ に関して線形陰的なスキームとなっており, 従来の非線形構造保存スキーム [7] と比べて計算量が少ない. ただし, このスキームは多段スキームとなっており, $U^{(n+1)}$ を求めるのに $U^{(n)}$ と $U^{(n-1)}$ の 2 つの時間ステップが必要となる. そのため, 初期値として $U^{(0)}$ の他に $U^{(1)}$ も必要となり, 例えば別のスキームを使って $U^{(1)}$ を得るなど, $U^{(1)}$ の決定は別の方法が必要となることに注意.

[7, Theorem 2.5] と同様にして, (10), (11)–(14) と補題 2.4 (部分和分公式) を用いると, 上記スキームはエネルギー散逸則 (8) の離散版に対応する, 下記の性質を満たす:

性質 2.7 (離散エネルギー散逸則). (11)–(14) の解 $\mathbf{U}^{(n)} = \{U_k^{(n)}\}_{k=-1}^{K+1} \in \mathbb{R}^{K+3}$ ($n = 0, 1, \dots$) は以下の不等式を満たす:

$$\begin{aligned} \frac{J_d(\mathbf{U}^{(n+1)}, \mathbf{U}^{(n)}) - J_d(\mathbf{U}^{(n)}, \mathbf{U}^{(n-1)})}{\Delta t} &= -\gamma \left| \frac{U_0^{(n+1)} - U_0^{(n-1)}}{2\Delta t} \right|^2 - \gamma \left| \frac{U_K^{(n+1)} - U_K^{(n-1)}}{2\Delta t} \right|^2 \\ &\quad - \sum_{k=0}^{K-1} \left| \delta_k^+ P_k^{(n+1)} \right|^2 \Delta x \leq 0 \quad (n \in \mathbb{N}). \end{aligned}$$

さらに, [7, Theorem 2.6] と同様にして, (11), (14) と補題 2.4 (部分和分公式) を用いると, 上記スキームは質量保存則 (8) の離散版に対応する, 下記の性質も満たす:

性質 2.8 (離散質量保存則). (11)–(14) の解 $\mathbf{U}^{(n)} = \{U_k^{(n)}\}_{k=0}^K \in \mathbb{R}^{K+1}$ ($n = 0, 1, \dots$) は以下の等式を満たす: $n = 0, 1, \dots$ に対し,

$$M_d(\mathbf{U}^{(n)}) = \begin{cases} M_d(\mathbf{U}^{(0)}) & (n \text{ が偶数}), \\ M_d(\mathbf{U}^{(1)}) & (n \text{ が奇数}). \end{cases}$$

3 提案スキームの安定性

本節ではもし提案スキームが (数値) 解をもつならば, その (数値) 解が決して発散しないという意味での安定性を提案スキームがもつことを示す.

定義 3.1. 任意の $\mathbf{f} = \{f_k\}_{k=0}^K \in \mathbb{R}^{K+1}$ に対し, \mathbf{f} の離散 L^∞ -ノルム $\|\mathbf{f}\|_{L_d^\infty}$ を

$$\|\mathbf{f}\|_{L_d^\infty} := \max_{0 \leq k \leq K} |f_k|$$

によって定義する.

定義 3.2. 任意の $\mathbf{f} = \{f_k\}_{k=0}^K \in \mathbb{R}^{K+1}$ に対し, \mathbf{f} の離散 *Dirichlet* セミノルム $\|D\mathbf{f}\|$ を

$$\|D\mathbf{f}\| := \sqrt{\sum_{k=0}^{K-1} |\delta_k^+ f_k|^2 \Delta x}$$

によって定義する. ただし, $D\mathbf{f} := \{\delta_k^+ f_k\}_{k=0}^{K-1} \in \mathbb{R}^K$ である.

補題 3.3. (11)–(14) の解 $\mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}^{K+1}$ ($n = 0, 1, \dots$) の解は以下の不等式を満たす.

$$\|D\mathbf{U}^{(n)}\|^2 \leq \frac{4}{\gamma} \left(J_d(\mathbf{U}^{(1)}, \mathbf{U}^{(0)}) + \frac{r^2 L}{4q} \right) \quad (n = 0, 1, \dots). \quad (15)$$

証明. 任意の $n = 0, 1, \dots$ に対し, 性質 2.7 (離散エネルギー散逸則) より,

$$\begin{aligned} J_d(\mathbf{U}^{(1)}, \mathbf{U}^{(0)}) &\geq J_d(\mathbf{U}^{(n+1)}, \mathbf{U}^{(n)}) \\ &= \sum_{k=0}^{K-1} \frac{\gamma}{2} \frac{|\delta_k^+ U_k^{(n+1)}|^2 + |\delta_k^+ U_k^{(n)}|^2}{2} \Delta x + \sum_{k=0}^K \left\{ \frac{q}{4} (U_k^{(n+1)})^2 (U_k^{(n)})^2 - \frac{r}{2} U^{(n+1)} U_k^{(n)} \right\} \Delta x \\ &\geq \frac{\gamma}{2} \sum_{k=0}^{K-1} \frac{|\delta_k^+ U_k^{(n)}|^2}{2} \Delta x + \sum_{k=0}^K \left\{ \frac{q}{4} (U_k^{(n+1)} U_k^{(n)})^2 - \frac{r}{2} U^{(n+1)} U_k^{(n)} \right\} \Delta x. \end{aligned} \quad (16)$$

ここで, $q > 0$ より,

$$\frac{q}{4} X^2 - \frac{r}{2} X = \frac{q}{4} \left(X^2 - \frac{2r}{q} X \right) = \frac{q}{4} \left\{ \left(X - \frac{r}{q} \right)^2 - \frac{r^2}{q^2} \right\} = \frac{q}{4} \left(X - \frac{r}{q} \right)^2 - \frac{r^2}{4q} \geq -\frac{r^2}{4q}. \quad (17)$$

よって, (16), (17) より,

$$J_d(\mathbf{U}^{(1)}, \mathbf{U}^{(0)}) \geq \frac{\gamma}{4} \sum_{k=0}^{K-1} |\delta_k^+ U_k^{(n)}|^2 \Delta x - \frac{r^2}{4q} \sum_{k=0}^K \Delta x = \frac{\gamma}{4} \|D\mathbf{U}^{(n)}\|^2 - \frac{r^2 L}{4q}.$$

ゆえに,

$$\|D\mathbf{U}^{(n)}\|^2 \leq \frac{4}{\gamma} \left(J_d(\mathbf{U}^{(1)}, \mathbf{U}^{(0)}) + \frac{r^2 L}{4q} \right)$$

となり, 求める不等式が成立. □

補題 3.4 (離散 Poincaré–Wirtinger 不等式 [3, Lemma 3.3]). 任意の $\mathbf{f} = \{f_k\}_{k=0}^K \in \mathbb{R}^{K+1}$ に対して,

$$\left| f_l - \frac{1}{L} \sum_{k=0}^K f_k \Delta x \right|^2 \leq L \|D\mathbf{f}\|^2 \quad (l = 0, \dots, K).$$

補題 3.4 を (15) に適用し, 性質 2.8 (離散質量保存則) を用いると, 以下を得る:

定理 3.5. (11)–(14) の解 $\mathbf{U}^{(n)} \in \mathbb{R}^{K+1}$ ($n = 0, 1, \dots$) の解は以下の不等式を満たす:

$$C^- - C_0 \leq U_k^{(n)} \leq C^+ + C_0 \quad (k = 0, \dots, K, n = 0, 1, \dots).$$

ただし,

$$\begin{aligned} C_0 &:= 2\sqrt{\frac{L}{\gamma} \left(J_d(\mathbf{U}^{(1)}, \mathbf{U}^{(0)}) + \frac{r^2 L}{4q} \right)}, \\ C^+ &:= \frac{1}{L} \max \left\{ M_d(\mathbf{U}^{(0)}), M_d(\mathbf{U}^{(1)}) \right\}, \quad C^- := \frac{1}{L} \min \left\{ M_d(\mathbf{U}^{(0)}), M_d(\mathbf{U}^{(1)}) \right\}. \end{aligned}$$

4 提案スキームの可解性

本節では提案スキームの可解性 (解の存在と一意性) を示す. $n \in \mathbb{N}$ とする. (14) より,

$$P_{-1}^{(n+1)} = P_1^{(n+1)}, \quad P_{K+1}^{(n+1)} = P_{K-1}^{(n+1)}. \quad (18)$$

次に (13) より,

$$U_{-1}^{(n+1)} + U_{-1}^{(n-1)} = U_1^{(n+1)} + U_1^{(n-1)} - \frac{2\Delta x}{\Delta t} \left(U_0^{(n+1)} - U_0^{(n-1)} \right), \quad (19)$$

$$U_{K+1}^{(n+1)} + U_{K+1}^{(n-1)} = U_{K-1}^{(n+1)} + U_{K-1}^{(n-1)} - \frac{2\Delta x}{\Delta t} \left(U_K^{(n+1)} - U_K^{(n-1)} \right). \quad (20)$$

ここで, (18)–(20) を用いて, (11), (12) における $k = -1, K + 1$ の項を消去すると以下を得る:

$$\frac{U_0^{(n+1)} - U_0^{(n-1)}}{2\Delta t} = \frac{2}{(\Delta x)^2} \left(P_1^{(n+1)} - P_0^{(n+1)} \right), \quad (21)$$

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n-1)}}{2\Delta t} = \delta_k^{(2)} P_k^{(n+1)} \quad (k = 1, \dots, K-1), \quad (22)$$

$$\frac{U_K^{(n+1)} - U_K^{(n-1)}}{2\Delta t} = \frac{2}{(\Delta x)^2} \left(P_{K-1}^{(n+1)} - P_K^{(n+1)} \right), \quad (23)$$

$$\begin{aligned} P_0^{(n+1)} &= -\frac{\gamma}{(\Delta x)^2} \left\{ \left(U_1^{(n+1)} + U_1^{(n-1)} \right) - \left(U_0^{(n+1)} + U_0^{(n-1)} \right) \right\} + \frac{\gamma}{\Delta t \Delta x} \left(U_0^{(n+1)} - U_0^{(n-1)} \right) \\ &\quad + q \left(\frac{U_0^{(n+1)} + U_0^{(n-1)}}{2} \right) \left(U_0^{(n)} \right)^2 - r U_0^{(n)}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$P_k^{(n+1)} = -\gamma \delta_k^{(2)} \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n-1)}}{2} \right) + q \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n-1)}}{2} \right) \left(U_k^{(n)} \right)^2 - r U_k^{(n)} \quad (k = 1, \dots, K-1), \quad (25)$$

$$\begin{aligned} P_K^{(n+1)} &= -\frac{\gamma}{(\Delta x)^2} \left\{ \left(U_{K-1}^{(n+1)} + U_{K-1}^{(n-1)} \right) - \left(U_K^{(n+1)} + U_K^{(n-1)} \right) \right\} + \frac{\gamma}{\Delta t \Delta x} \left(U_K^{(n+1)} - U_K^{(n-1)} \right) \\ &\quad + q \left(\frac{U_K^{(n+1)} + U_K^{(n-1)}}{2} \right) \left(U_K^{(n)} \right)^2 - r U_K^{(n)}, \end{aligned} \quad (26)$$

ここで, (24)–(26) を用いて, (21)–(23) における $P_k^{(n+1)}$ を消去すると, (21)–(23) は $\mathbf{U}^{(n+1)}$ を未知とする $K + 1$ 元連立一次方程式となる. そこで, 行列を用いてその連立一次方程式を以下のように表現する:

$$A \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) \mathbf{U}^{(n+1)} = B \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) \mathbf{U}^{(n-1)} + v \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) \quad (27)$$

ただし, $A(\mathbf{U}^{(n)})$, $B(\mathbf{U}^{(n)})$ は $\mathbf{U}^{(n)}$ に依存する $K + 1$ 次正方行列で, 以下によって定義される:

$$\begin{aligned} A \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) &:= I + \gamma \Delta t D_2 \tilde{D}_2 + q \Delta t D_2 C \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) = I + \Delta t D_2 \left\{ \gamma \tilde{D}_2 + q C \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) \right\}, \\ B \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) &:= I - \gamma \Delta t D_2 \hat{D}_2 - q \Delta t D_2 C \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) = I - \Delta t D_2 \left\{ \gamma \hat{D}_2 + q C \left(\mathbf{U}^{(n)} \right) \right\}. \end{aligned}$$

ここで, I は $K + 1$ 次単位行列であり, $D_2, \tilde{D}_2, \hat{D}_2$ はそれぞれ以下で定義される $K + 1$ 次正方行列:

$$D_2 := \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} 2 & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -2 & 2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{D}_2 := \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} 2 + \frac{1}{\alpha} & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -2 & 2 + \frac{1}{\alpha} \end{pmatrix},$$

$$\hat{D}_2 := \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} 2 - \frac{1}{\alpha} & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -2 & 2 - \frac{1}{\alpha} \end{pmatrix}.$$

ただし, $\alpha := \Delta t / (2\Delta x)$. そして, $C(\mathbf{U}^{(n)})$ は $\mathbf{U}^{(n)}$ に依存する $K + 1$ 正方行列で,

$$C(\mathbf{U}^{(n)}) := \text{diag}_{0 \leq i \leq K} (U_i^{(n)})^2 = \begin{pmatrix} (U_0^{(n)})^2 & & & & \\ & (U_1^{(n)})^2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & (U_{K-1}^{(n)})^2 & \\ & & & & (U_K^{(n)})^2 \end{pmatrix}$$

と定義される. さらに, $v(\mathbf{U}^{(n)})$ は $\mathbf{U}^{(n)}$ に依存する $K + 1$ 次元ベクトルで以下によって定義される:

$$v(\mathbf{U}^{(n)}) := -2r\Delta t \begin{pmatrix} \frac{2}{(\Delta x)^2} (U_1^{(n)} - U_0^{(n)}) \\ \delta_k^{(2)} U_k^{(n)} \Big|_{k=1} \\ \vdots \\ \delta_k^{(2)} U_k^{(n)} \Big|_{k=K-1} \\ \frac{2}{(\Delta x)^2} (U_{K-1}^{(n)} - U_K^{(n)}) \end{pmatrix}.$$

すなわち, 行列 $A(\mathbf{U}^{(n)})$ が正則であれば, 連立一次方程式 (27) に解が一意的に存在し, 提案スキーム (11)–(14) の可解性が示される. そこで, $A(\mathbf{U}^{(n)})$ の正則性を示すため, 以下の補題を用意する.

補題 4.1 ([7, Lemma A.1]). A が半正定値対称行列, B が正定値対称行列ならば, AB の固有値は実数で, すべて非負である.

上記補題を用いることで, 提案スキームの解の存在を保証する以下の定理を得る.

定理 4.2. $n = 0, 1, \dots$ に対し, $A(\mathbf{U}^{(n)})$ は正則である. つまり, 提案スキーム (11)–(14) に解が一意的に存在する.

証明. D_2 と $\gamma\tilde{D}_2 + qC(\mathbf{U}^{(n)})$ は対称行列ではないため, 直接補題 4.1 を適用できない. そこで, [49, Lemma 0.1.1] の証明の手順に従い, $D_2\{\gamma\tilde{D}_2 + qC(\mathbf{U}^{(n)})\}$ が, ある対称三重対角行列に相似であることを示す. 今, $K+1$ 次正方行列 V を以下によって定義する:

$$V := \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \sqrt{2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{2} & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

このとき, V の逆行列は

$$V^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

よって,

$$\begin{aligned} VM(\mathbf{U}^{(n)})V^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \sqrt{2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{2} & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (U_0^{(n)})^2 & & & \\ & (U_1^{(n)})^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & (U_{K-1}^{(n)})^2 & \\ & & & & (U_K^{(n)})^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (U_0^{(n)})^2 & & & \\ & \sqrt{2}(U_1^{(n)})^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{2}(U_{K-1}^{(n)})^2 & \\ & & & & (U_K^{(n)})^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (U_0^{(n)})^2 & & & \\ & (U_1^{(n)})^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & (U_{K-1}^{(n)})^2 & \\ & & & & (U_K^{(n)})^2 \end{pmatrix} = C(\mathbf{U}^{(n)}). \end{aligned}$$

ここで, $X := VD_2V^{-1}$, $Y := V\tilde{D}_2V^{-1}$ とおくと,

$$\begin{aligned} X \left\{ \gamma Y + qM(\mathbf{U}^{(n)}) \right\} &= VD_2V^{-1} \left\{ \gamma V\tilde{D}_2V^{-1} + qVM(\mathbf{U}^{(n)})V^{-1} \right\} \\ &= VD_2V^{-1}V \left\{ \gamma\tilde{D}_2 + qM(\mathbf{U}^{(n)}) \right\} V^{-1} \\ &= VD_2 \left\{ \gamma\tilde{D}_2 + qM(\mathbf{U}^{(n)}) \right\} V^{-1} \end{aligned}$$

となり, $D_2\{\gamma\tilde{D}_2 + qC(\mathbf{U}^{(n)})\}$ は $X\{\gamma Y + qC(\mathbf{U}^{(n)})\}$ に相似である. ゆえに, $D_2\{\gamma\tilde{D}_2 + qC(\mathbf{U}^{(n)})\}$ と $X\{\gamma Y + qC(\mathbf{U}^{(n)})\}$ の固有値は一致する. そして, [7, Lemma A.2] より, X は半正定値対称行列, Y は正定値対称行列である. さらに, U は半正定値対称行列である. 実際, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{K+1})^\top \in \mathbb{R}^{K+1}$ とし, $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ とすると,

$$\mathbf{x}^\top U \mathbf{x} = \left(U_0^{(n)} \right)^2 x_1^2 + \left(U_1^{(n)} \right)^2 x_2^2 + \dots + \left(U_{K-1}^{(n)} \right)^2 x_K^2 + \left(U_K^{(n)} \right)^2 x_{K+1}^2 \geq 0$$

となり, U は半正定値対称行列. さらに, $\gamma > 0$, $q > 0$ より,

$$\mathbf{x}^\top \left\{ \gamma Y + qM(\mathbf{U}^{(n)}) \right\} \mathbf{x} = \gamma \mathbf{x}^\top Y \mathbf{x} + q \mathbf{x}^\top M(\mathbf{U}^{(n)}) \mathbf{x} > 0$$

であるので, $\gamma Y + qC(\mathbf{U}^{(n)})$ は正定値対称行列. ゆえに, 補題 4.1 より, $X\{\gamma Y + qC(\mathbf{U}^{(n)})\}$ の固有値は実数で, すべて非負. すなわち, $D_2\{\gamma\tilde{D}_2 + qC(\mathbf{U}^{(n)})\}$ の固有値は実数で, すべて非負. したがって, $A(\mathbf{U}^{(n)}) = I + \Delta t D_2\{\gamma\tilde{D}_2 + qC(\mathbf{U}^{(n)})\}$ の固有値はすべて正である. つまり, $A(\mathbf{U}^{(n)})$ は正則. \square

5 数値例

本節では数値例を通じ, 提案スキームの有効性を示す. 特に, これまでに構成した非線形の構造保存スキーム [7](以後非線形スキームと呼ぶこととする) との比較を通じ, 今回提案する線形の構造保存スキーム (以後線形スキームと呼ぶこととする) でも同等の数値解が得られること, 並びに線形スキームの方が非線形スキームに比べて計算時間が速いこと, そして, 線形スキームが散逸則や保存則を数値的にも満たしていることを示す.

本数値例では, 初期条件として以下を採用した:

$$u(x, 0) = u_0(x) = 0.01 \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right).$$

そして, 空間分割幅が $\Delta x = 1/40$ となるように L を $L = 20$ と固定し, 空間分割数を $K = 400$ とした. また, 時間分割幅を $\Delta t = 1/50$ とし, 時間ステップ数 N を $N = 20000$ とした. さらに, $\gamma = 2.0$, $q = r = 1.0$ と係数を固定した. ここで, 注意 3 でも述べた通り, 線形スキーム (11)–(14) は初期値として $\mathbf{U}^{(0)}$ に加えて $\mathbf{U}^{(1)}$ も必要となるが, 本論文では, $\mathbf{U}^{(1)}$ はこれまでに構成した非線形スキーム [7] によって決定することとする. 今, 非線形スキームに対して成り立つ離散質量保存則 [7, Theorem 2.6] より, $M_d(\mathbf{U}^{(1)}) = M_d(\mathbf{U}^{(0)})$ であるので, 線形スキームに対して成り立つ離散質量保存則 (定理 2.8) を以下のように書き直せることに注意:

$$M_d(\mathbf{U}^{(n)}) = M_d(\mathbf{U}^{(0)}) \quad (n = 0, 1, \dots).$$

図1は線形スキーム, 図2は非線形スキームで求めた数値解の時間発展のグラフである.

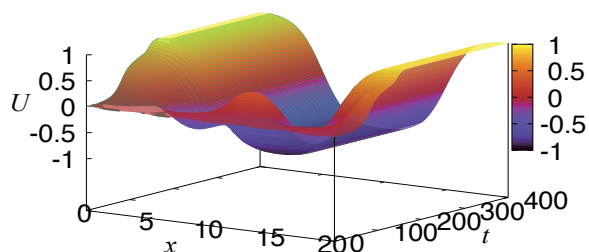


図1: 今回提案する線形スキームの数値解

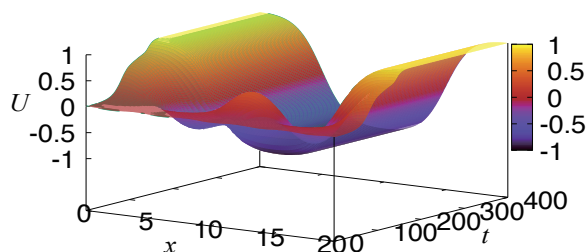


図2: 既存の非線形スキーム [7] の数値解

グラフから, 線形スキームでも非線形スキームと同等の数値解が得られていることが見て取れる. ここで, 非線形スキームの計算時間は約1時間22分50秒であるが, 線形スキームの計算時間は約15分10秒で, 概ね5倍程度計算時間が速いという結果を得た.

次に, 図3は線形スキーム, 図4は非線形スキームによって得られた離散エネルギーの時間発展のグラフである. グラフから, 線形スキームでも非線形スキームと同様に離散エネルギーが時間とともに減衰しており, 数値的に離散エネルギー散逸則が再現できていることが見て取れる.

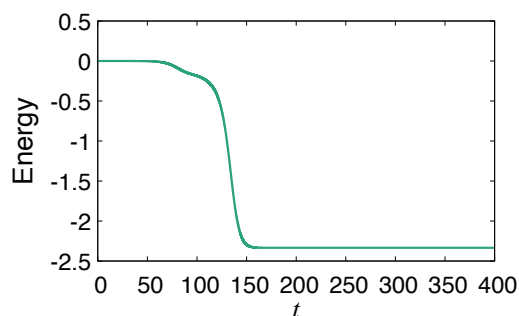


図3: 線形スキームによる離散エネルギー $J_d(\mathbf{U}^{(n+1)}, \mathbf{U}^{(n)})$ の時間発展

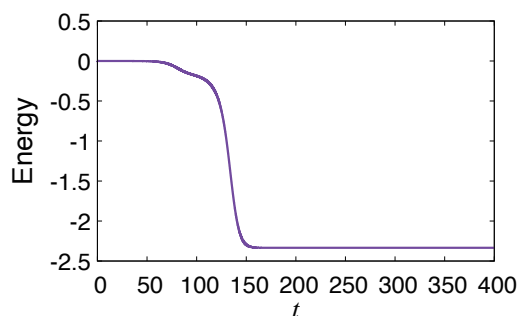


図4: 非線形スキームによる離散エネルギー $J_d(\mathbf{U}^{(n)})$ (定義は [7] を見よ) の時間発展

ここで, 性質 2.7 (離散エネルギー散逸則) より, 以下の等式を得る:

$$E_d(\mathbf{U}^{(n)}, \mathbf{U}^{(n-1)}) - J_d(\mathbf{U}^{(1)}, \mathbf{U}^{(0)}) = 0 \quad (n \in \mathbb{N}). \quad (28)$$

ただし,

$$E_d(\mathbf{U}^{(n)}, \mathbf{U}^{(n-1)}) := J_d(\mathbf{U}^{(n)}, \mathbf{U}^{(n-1)}) + \sum_{l=1}^{n-1} \left\{ \gamma \left| \frac{U_0^{(l+1)} - U_0^{(l-1)}}{2\Delta t} \right|^2 + \gamma \left| \frac{U_K^{(l+1)} - U_K^{(l-1)}}{2\Delta t} \right|^2 + \sum_{k=0}^{K-1} \left| \delta_k^+ P_k^{(l+1)} \right|^2 \Delta x \right\} \Delta t \quad (n \in \mathbb{N}).$$

注意 4. 上記の等式 (28) は, 提案スキームが (8) のエネルギー等式を離散的に再現しているからこそ得られる等式である.

図 5 は線形スキームによって得られた不変量 $E_d(\mathbf{U}^n, \mathbf{U}^{n-1}) - J_d(\mathbf{U}^1, \mathbf{U}^0)$ ((28) の左辺) の時間発展のグラフである. なお, 非線形スキームでも (28) と同種の等式が成立する (詳細は [7, Section 6] を参照されたい). 図 6 は非線形スキームによって得られた不変量の時間発展のグラフである. グラフから, 線形スキームでは大きく見積もっても 10^{-10} の精度で保存しており, 非線形スキームでは 10^{-5} の精度で保存していることが読み取れ, この不変量 (すなわち, エネルギー等式) に関しては線形スキームの方が精度が良いことが確認できる.

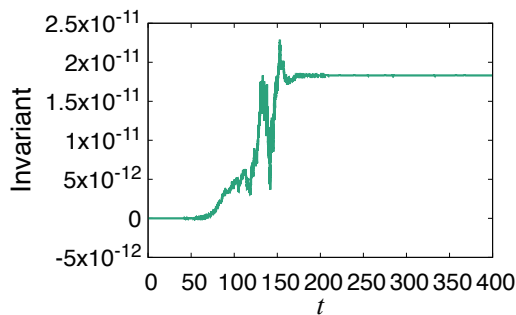


図 5: 線形スキームによる不変量の時間発展

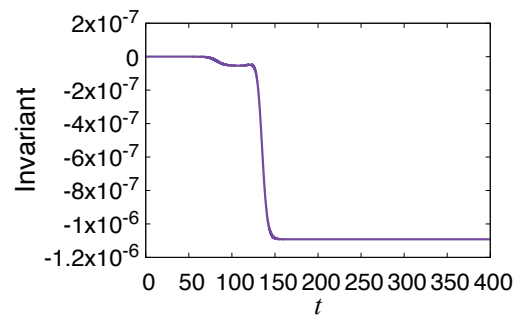


図 6: 非線形スキームによる不変量の時間発展

最後に, 図 7 は線形スキーム, 図 8 は非線形スキームによって得られた離散質量の時間発展のグラフである. グラフから, 線形スキームでも非線形スキームと同様に離散質量が保存されており, 数値的に離散質量保存則が再現できていることが確認できる. また, 精度としては, 線形スキームでは大きく見積もっても 10^{-8} の精度, 非線形スキームでは 10^{-11} の精度で保存していることが読み取れ, 離散質量に関しては非線形スキームの方が精度が良いことが見て取れる.

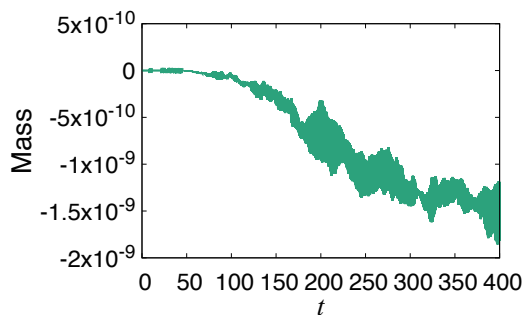


図 7: 線形スキームによる離散質量 $M_d(\mathbf{U}^n)$ の時間発展

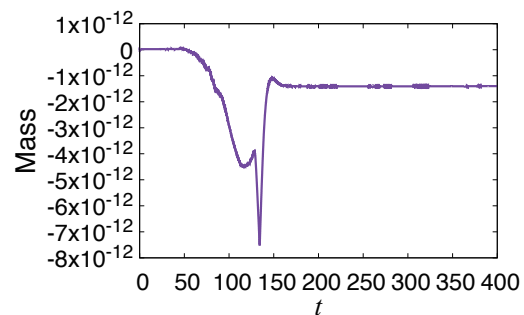


図 8: 非線形スキームによる離散質量 $M_d(\mathbf{U}^n)$ の時間発展

以上より, 期待される結果が得られており, エネルギー等式に関しては今回提案する線形スキーム, 質量保存則に関してはこれまでに構成した非線形スキームの方が精度が良いという結果を得た.

6 まとめ

空間 1 次元の動的境界条件下の Cahn–Hilliard 方程式に対し, 多段線形化を応用し, 元の方程式がもつ散逸則や保存則を離散的に再現する, 線形の構造保存スキームを構成した. また, 理論解析の結果として, 提案スキームの安定性, 可解性の結果を得た. そして, 数値例を通じ, 提案する線形スキームでも, これまでに構成した非線形構造保存スキームと同等の数値解が得られていること, 散逸則や保存則を数値的にも再現していること, 非線形スキームに比べ, 計算時間が非常に速いことを確認し, 提案スキームの有効性を示した.

謝辞

本研究は科研費 (課題番号:23K13009) の助成を受けたものである.

参考文献

- [1] J. W. Cahn and J. E. Hilliard, “Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy,” *J. Chem. Phys.*, vol. 28, pp. 258–267, 1958.
- [2] J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*. Clarendon Press, Oxford, second edition, 1975.
- [3] D. Furihata and T. Matsuo, *Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations*. Chapman & Hall/CRC Numerical Analysis and Scientific Computing, CRC Press, Boca Raton, FL, 2011.
- [4] S. Yoshikawa, “Energy method for structure-preserving finite difference schemes and some properties of difference quotient,” *J. Comput. Appl. Math.*, vol. 311, pp. 394–413, 2017.
- [5] S. Yoshikawa, “Remarks on energy methods for structure-preserving finite difference schemes – Small data global existence and unconditional error estimate,” *Appl. Math. Comput.*, vol. 341, pp. 80–92, 2019.
- [6] 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.*, vol. 16, pp. 1915–1938, 2017.
- [7] M. Okumura, T. Fukao, D. Furihata, and S. Yoshikawa, “A second-order accurate structure-preserving scheme for the Cahn–Hilliard equation with a dynamic boundary condition,” *Commun. Pure Appl. Anal.*, vol. 21, pp. 355–392, 2022.
- [8] A. Umeda, Y. Wakasugi, and S. Yoshikawa, “Energy-conserving finite difference schemes for non-linear wave equations with dynamic boundary conditions,” *Appl. Numer. Math.*, vol. 171, pp. 1–22, 2022.

- [9] K. Yano and S. Yoshikawa, “Structure-preserving finite difference schemes for a semilinear thermoelastic system with second order time derivative,” *Jpn. J. Ind. Appl. Math.*, vol. 35, pp. 1213–1244, 2018.
- [10] S. Yoshikawa, “An error estimate for structure-preserving finite difference scheme for the Falk model system of shape memory alloys,” *IMA J. Numer. Anal.*, vol. 37, pp. 477–504, 2017.
- [11] D. Furihata, “Finite-difference schemes for nonlinear wave equation that inherit energy conservation property,” *J. Comput. Appl. Math.*, vol. 134, pp. 37–57, 2001.
- [12] D. Furihata and T. Matsuo, “A stable, convergent, conservative and linear finite difference scheme for the Cahn–Hilliard equation,” *Japan J. Indust. Appl. Math.*, vol. 20, pp. 65–85, 2003.
- [13] S. Koide and D. Furihata, “Nonlinear and linear conservative finite difference schemes for regularized long wave equation,” *Japan J. Indust. Appl. Math.*, vol. 26, pp. 15–40, 2009.
- [14] T. Matsuo, “New conservative schemes with discrete variational derivatives for nonlinear wave equations,” *J. Comput. Appl. Math.*, vol. 203, pp. 32–56, 2007.
- [15] T. Matsuo and D. Furihata, “Dissipative or conservative finite-difference schemes for complex-valued nonlinear partial differential equations,” *J. Comput. Phys.*, vol. 171, pp. 425–447, 2001.
- [16] T. Matsuo and D. Furihata, “A stabilization of multistep linearly implicit schemes for dissipative systems,” *J. Comput. Appl. Math.*, vol. 264, pp. 38–48, 2014.
- [17] L. Cherfils, A. Miranville, and S. Zelik, “The Cahn–Hilliard equation with logarithmic potentials,” *Milan J. Math.*, vol. 79, pp. 561–596, 2011.
- [18] R. Chill, E. Fařangová, and J. Prüss, “Convergence to steady states of solutions of the Cahn–Hilliard and Caginalp equations with dynamic boundary conditions,” *Math. Nachr.*, vol. 279, pp. 1448–1462, 2006.
- [19] P. Colli and T. Fukao, “Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions and mass constraint on the boundary,” *J. Math. Anal. Appl.*, vol. 429, pp. 1190–1213, 2015.
- [20] P. Colli, G. Gilardi, and J. Sprekels, “On the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions and a dominating boundary potential,” *J. Math. Anal. Appl.*, vol. 419, pp. 972–994, 2014.
- [21] P. Colli, G. Gilardi, and J. Sprekels, “A boundary control problem for the pure Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Adv. Nonlinear Anal.*, vol. 4, pp. 311–325, 2015.
- [22] P. Colli, G. Gilardi, and J. Sprekels, “A boundary control problem for the viscous Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Appl. Math. Optim.*, vol. 73, pp. 195–225, 2016.
- [23] C. G. Gal, “A Cahn–Hilliard model in bounded domains with permeable walls,” *Math. Methods Appl. Sci.*, vol. 29, pp. 2009–2036, 2006.

- [24] G. Gilardi, A. Miranville, and G. Schimperna, “On the Cahn–Hilliard equation with irregular potentials and dynamic boundary conditions,” *Commun. Pure Appl. Anal.*, vol. 8, pp. 881–912, 2009.
- [25] G. Gilardi, A. Miranville, and G. Schimperna, “Long time behavior of the Cahn–Hilliard equation with irregular potentials and dynamic boundary conditions,” *Chin. Ann. Math.*, vol. 31, pp. 679–712, 2010.
- [26] A. Miranville and S. Zelik, “Exponential attractors for the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Math. Methods Appl. Sci.*, vol. 28, pp. 709–735, 2005.
- [27] A. Miranville and S. Zelik, “The Cahn–Hilliard equation with singular potentials and dynamic boundary conditions,” *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, vol. 28, pp. 275–310, 2010.
- [28] J. Prüss, R. Racke, and S. Zheng, “Maximal regularity and asymptotic behavior of solutions for the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Ann. Mat. Pura Appl.*, vol. 185, pp. 627–648, 2006.
- [29] R. Racke and S. Zheng, “The Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Adv. Differential Equ.*, vol. 8, pp. 83–110, 2003.
- [30] H. Wu and S. Zheng, “Convergence to equilibrium for the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *J. Differential Equations*, vol. 204, pp. 511–531, 2004.
- [31] L. Cherfilis, M. Petcu, and M. Pierre, “A numerical analysis of the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, vol. 27, pp. 1511–1533, 2010.
- [32] H. Israel, A. Miranville, and M. Petcu, “Numerical analysis of a Cahn–Hilliard type equation with dynamic boundary conditions,” *Ricerche Mat.*, vol. 64, pp. 25–50, 2015.
- [33] F. Nabet, “Convergence of a finite-volume scheme for the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *IMA J. Numer. Anal.*, vol. 36, pp. 1898–1942, 2016.
- [34] F. Nabet, “An error estimate for a finite-volume scheme for the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Numer. Math.*, vol. 149, pp. 185–226, 2021.
- [35] M. Okumura and T. Fukao, “A new structure-preserving scheme with the staggered space mesh for the Cahn–Hilliard equation under a dynamic boundary condition,” *Adv. Math. Sci. Appl.*, vol. 30, pp. 347–376, 2021.
- [36] M. Okumura and T. Fukao, “Structure-preserving schemes for Cahn–Hilliard equations with dynamic boundary conditions,” *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S*, vol. 17, pp. 362–394, 2024.
- [37] M. Dahlby and B. Owren, “A general framework for deriving integral preserving numerical methods for PDEs,” *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 33, pp. 2318–2340, 2011.
- [38] S. Sato, T. Matsuo, and D. Furihata, “An analysis on the asymptotic behavior of multistep linearly implicit schemes for the Duffing equation,” *JSIAM Lett.*, vol. 7, pp. 45–48, 2015.

- [39] C. Kosugi, T. Aiki, M. Anthonissen, and M. Okumura, “Numerical results for ordinary and partial differential equations describing motions of elastic materials,” *Adv. Math. Sci. Appl.*, vol. 30, pp. 387–414, 2021.
- [40] R. Altmann and C. Zimme, “Dissipation-preserving discretization of the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Appl. Numer. Math.*, vol. 190, pp. 1254–269, 2023.
- [41] X. Bao and H. Zhang, “Numerical approximations and error analysis of the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions,” *Commun. Math. Sci.*, vol. 19, pp. 663–685, 2021.
- [42] X. Bao and H. Zhang, “Numerical approximations and error analysis of the Cahn–Hilliard equation with reaction rate dependent dynamic boundary conditions,” *J. Sci. Comput.*, vol. 87, pp. 1–32, 2021.
- [43] L. Cherfils and M. Petcu, “A numerical analysis of the Cahn–Hilliard equation with non-permeable walls,” *Numer. Math.*, vol. 128, pp. 517–549, 2014.
- [44] P. Knopf, K. F. Lam, C. Liu, and S. Metzger, “Phase-field dynamics with transfer of materials: The Cahn–Hilliard equation with reaction rate dependent dynamic boundary conditions,” *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*, vol. 55, pp. 229–282, 2021.
- [45] X. Meng, X. Bao, and Z. Zhang, “Second order stabilized semi-implicit scheme for the Cahn–Hilliard model with dynamic boundary conditions,” *J. Comput. Appl. Math.*, vol. 428, pp. 115145, 2023.
- [46] S. Metzger, “An efficient and convergent finite element scheme for Cahn–Hilliard equations with dynamic boundary conditions,” *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 59, pp. 219–248, 2021.
- [47] S. Metzger, “A convergent SAV scheme for Cahn–Hilliard equations with dynamic boundary conditions,” *IMA J. Numer. Anal.* vol. 43, pp. 3593–3627, 2023.
- [48] M. Okumura and D. Furihata, “A structure-preserving scheme for the Allen–Cahn equation with a dynamic boundary condition,” *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, vol. 40, pp. 4927–4960, 2020.
- [49] S. M. Fallat and C. R. Johnson, *Totally Nonnegative Matrices*. Princeton University Press, Princeton, 2011.