数理解析研究所講究録
1198 巻 2001 年 128-136

連立系に対する離散変分法について

松尾宇泰 * 杉原正顯 * 降旗大介 † 森正武 †
* 名古屋大学 † 京都大学数理解析研究所
(Takayasu Matsuo*, Masaaki Sugihara*, Daisuke Furihata†, Masatake Mori†)

1 はじめに

離散変分法は，何らかのエネルギーの変分導関数で形式的に定義される偏微分方程式に対し，離散的なエネルギーとその変分を考えることで，エネルギーの保存・散逸則を再現する差分スキームを導出する手法である．この手法は最初単一な (連立でない) 実偏微分方程式に対して提案され [5]，その後同じく単一な複素偏微分方程式 [9]，および時間 2 階の非線形波動方程式 [6] に拡張されている．また陰的線形なスキームを導出する技法 [9, 11] や，空間方向により高精度なスキームを導出する技法 [10] も指摘されている．

本稿では，さらに同手法が Zakharov 方程式など，連立系に対しても自然に拡張可能であることを示す．このとき変数が増えることにより，スキームの自由度も著しく増えることに注意が必要である．本稿は次のように構成される．第 2 節では，対象となる連立系を定義する．既存の結果はすべてこの連立系の特別な場合として含まれる．第 3 節では本稿で使用する離散的な道具を導入する．第 4 節で，定義した連立系に対する離散変分法の定式を与える．第 5 節では，Zakharov 方程式に対し実際にスキームを導出し，それが望ましい性質を再現することを示す．

2 対象とする連立系

簡単のため空間次元は 1 次元とし，区間 $[0,L]$ 上で，M 個の関数 $\boldsymbol{u}(t,x)=(u_1,u_2,\ldots,u_M)^T$ を解とする連立偏微分方程式を考える (具体形は下で定義する)．各成分 $u_i(t,x)\,(i=1,\ldots,M)$ には実関数と複素関数が混在してもよいが，複素関数についてはその複素共役も明示的に登録するものと約束する (たとえば u_j に対し $u_{j+1}=\overline{u_j}$ など)．解 $\boldsymbol{u}$ に対し「局所エネルギー」$G(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}_x)$ (ただし $\boldsymbol{u}_x=((u_1)_x,(u_2)_x,\ldots,(u_M)_x)^{\mathrm{T}}$) が実関数として定義され，さらにそれを用いて大域エネルギー $H=\int_0^L G(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}_x)\mathrm{d}x$ が定義されているとき，G の $\boldsymbol{u}$ による変分導関数 $\delta G/\delta\boldsymbol{u}$ は変分を通じて次のように導かれる．

$$
\begin{aligned}
H(\boldsymbol{u}+\delta\boldsymbol{u})-H(\boldsymbol{u}) &= \int_0^L\left\{\left(\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}}\right)^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{u}+\left(\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}_x}\right)^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{u}_x\right\}\mathrm{d}x+O(|\delta\boldsymbol{u}|^2)\\
&= \int_0^L\left\{\left(\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}}\right)-\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}_x}\right)\right\}^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}x+\left[\left(\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}_x}\right)^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{u}\right]_0^L+O(|\delta\boldsymbol{u}|^2)\\
&= \int_0^L\left(\frac{\delta G}{\delta\boldsymbol{u}}\right)^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}x+\left[\left(\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}_x}\right)^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{u}\right]_0^L+O(|\delta\boldsymbol{u}|^2).
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ただし

$$
\left(\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}}\right)=\left(\frac{\partial G}{\partial u_1},\ldots,\frac{\partial G}{\partial u_M}\right)^{\mathrm{T}},\quad \left(\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}_x}\right)=\left(\frac{\partial G}{\partial(u_1)_x},\ldots,\frac{\partial G}{\partial(u_M)_x}\right)^{\mathrm{T}},\quad \frac{\delta G}{\delta\boldsymbol{u}}=\left(\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}}\right)-\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{u}_x}\right)
$$

である．複素数による偏微分は形式的定義 $\partial/\partial z=((\partial/\partial(\mathrm{Re}z)-\mathrm{i}\partial/\partial(\mathrm{Im}z))/2$, $\partial/\partial\overline{z}=((\partial/\partial(\mathrm{Re}z)+\mathrm{i}\partial/\partial(\mathrm{Im}z))/2$ で与える．

この変分導関数を用いて，次のような連立偏微分方程式の初期値境界値問題を定義する．

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial t}=A\dfrac{\delta G}{\delta\boldsymbol{u}}, & x\in(0,L),t>0,\\
B\boldsymbol{u}=0, & x=0,L,\ t>0,\\
\boldsymbol{u}(0,x)=\boldsymbol{u}_0(x), & x\in(0,L).
\end{cases}
\tag{2}
$$

ただし A は定数，または $\partial_x \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \partial/\partial x$ とそのべき乗を成分とする $M \times M$ の行列で，これが特別な形の場合に系は保存系，あるいは散逸系となる．B は境界条件を表す作用素である．以下，対称な双一次形式 $(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{g}) = \int_0^L \boldsymbol{f}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g} \mathrm{d}x$ を導入する．

命題 1 (保存系) 行列 A，および境界条件 $Bu = 0$ が次の 2 つの条件を満たすとする：

(i) $\left[\left(\dfrac{\partial G}{\partial \boldsymbol{u}_x} \right)^{\mathrm{T}} \dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} \right]_0^L = 0, \quad t > 0,$

(ii) A が $(\cdot, \cdot)$ に関し歪対称．

このとき (2) は保存系をなす．実際，式 (1) 両辺を Δt で割り $\Delta t \to 0$ の極限を考えると，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} H(t) = \left(\frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}}, \boldsymbol{u}_t \right) = \left(\frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}}, A \frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}} \right) = 0. \qquad \blacksquare$$

条件 (ii) は，A の形だけでなく境界条件にも要請を与えることに注意する．次の表に保存系の A の例を挙げる．これらの定数倍を並べたブロック対角行列も保存系を生成する．表中，$s = 0, 1, 2, \ldots$，および $D_x \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \begin{pmatrix} 0 & \partial_x \\ \partial_x & 0 \end{pmatrix}$，$S \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ である．

表 1: 保存系の A の例

A	(ii) が要請する条件	説明
∂_x^{2s+1}	$\left[\partial_x^i \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \partial_x^{2s-i} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \right]_0^L = 0,\ 0 \le i \le s$	1 変数実保存系 [5]
$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	——	2 変数 Hamilton 系 [6, 9, 12]
D_x^{2s+1}	$\left[\left\{ D_x^i \left(\frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}} \right) \right\}^{\mathrm{T}} S D_x^{2s-i} \left(\frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}} \right) \right]_0^L = 0,\ 0 \le i \le s$	2 変数系， 後述の Boussinesq 方程式など

たとえば次の形の Zakharov 方程式 [14]：

$$\mathrm{i}E_t + E_{xx} = nE, \quad n_{tt} - n_{xx} = (|E|^2)_{xx} \tag{3}$$

は中間変数 $u : u_t = n + |E|^2$ を導入することで，局所エネルギー:

$$G = |E_x|^2 + n|E|^2 + \frac{1}{2}(n^2 + u_x^2) \tag{4}$$

に対して

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{pmatrix} E \\ \overline{E} \\ n \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\delta G}{\delta E} \\ \frac{\delta G}{\delta \overline{E}} \\ \frac{\delta G}{\delta n} \\ \frac{\delta G}{\delta u} \end{pmatrix} \tag{5}$$

と書ける [7]．また次の形の (いわゆる “good”) Boussinesq 方程式 (例えば [8])：

$$u_{tt} = \partial_x^2 (u + u^2 - u_{xx}) \tag{6}$$

は，中間変数 $v: v_x = u_t$ の導入により局所エネルギー $G = u^2/2 + u^3/3 + u_x^2/2 + v^2/2$ に対して

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \partial_x \\ \partial_x & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\delta G}{\delta u} \\ \frac{\delta G}{\delta v} \end{pmatrix}$$

と書ける．これは本質的に 1 変数系だが，これまでに離散変分法定式化が与えられていないタイプの方程式である ([6] と異なることに注意)．その他，Coupled Klein-Gordon-Schrödinger 方程式 (例えば [1])，Boussinesq-Schrödinger 方程式 (例えば [2])，短波長波相互作用方程式 (例えば [13]) なども保存連立系である．

命題 2 (散逸 (発散) 系) 作用素 A，および境界条件 $Bu = 0$ が次の 2 つの条件を満たすとする：

(i) $\displaystyle \left[\left(\frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{u}_x}\right)^{\mathrm{T}} \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}\right]_0^L = 0, \quad t > 0,$

(ii) A が $(\cdot,\cdot)$ に関し定値．

このとき (2) は散逸，または発散系をなす．実際，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}H(t) = \left(\frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}}, \boldsymbol{u}_t\right) = \left(\frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}}, A\frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}}\right) \lesseqgtr 0. \qquad \blacksquare$$

次の表に散逸系の A の例を挙げる．これらの正の定数倍を並べたブロック対角行列も保存系を生成し，また当然ながら発散系はこの符号反転である．表中，$s = 0, 1, 2, \ldots$ である．

表 2: 散逸系の A の例

A	(ii) が要請する条件	説明
$(-1)^{s+1}\partial_x^{2s}$	$\left[\partial_x^i \left(\frac{\delta G}{\delta u}\right) \partial_x^{2s-1-i}\left(\frac{\delta G}{\delta u}\right)\right]_0^L = 0,\ 0 \le i \le s-1$	単一の実散逸系 [5]
$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	——	複素散逸系 [9] 対応する u_1, u_2 が複素共役の組の場合に限る．

たとえば Eguchi-Oki-Matsumura 方程式 [4]，磁場付き Ginzburg-Landau 方程式 (例えば [3]) などは散逸連立系である．

3 離散的な道具

本稿で使用する離散的な道具を定義，導入する．

3.1 離散記号

空間方向のメッシュ数を N，メッシュの大きさを $\Delta x = L/N$ とする．時間方向のメッシュの大きさを $\Delta t > 0$ とする．数値解を $U_{j,k}^{(m)} \simeq u_j(m\Delta t, k\Delta x)$ $(m = 0, 1, 2, \ldots,\ 0 \le k \le N)$ と書く．時間ステップ $^{(m)}$ は場合により省くことがある．数値解はベクトル表記で $\boldsymbol{U}_j = (U_{j,0}, U_{j,1}, \ldots, U_{j,N})^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{U}_1{}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{U}_2{}^{\mathrm{T}}, \ldots, \boldsymbol{U}_M{}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$ と書くこともある．微分に相当する差分作用素には，以下の表記を用いる：

$$\delta_k^+ U_{j,k} \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \frac{U_{j,k+1} - U_{j,k}}{\Delta x}, \quad \delta_k^- U_{j,k} \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \frac{U_{j,k} - U_{j,k-1}}{\Delta x}, \quad \delta_k^{\langle 1\rangle} U_{j,k} \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \frac{U_{j,k+1} - U_{j,k-1}}{2\Delta x},$$

$$\delta_k^{\langle 2\rangle} U_{j,k} \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \frac{U_{j,k+1} - 2U_{j,k} + U_{j,k-1}}{\Delta x^2}.$$

それぞれ 1 階微分に対する標準的な前進，後退，中心差分作用素，および 2 階微分に対する中心差分作用素である．同様にして高階微分に対する中心差分作用素を，

$$\delta_k^{\langle 2s+1\rangle}=\delta_k^{\langle 1\rangle}\delta_k^{\langle 2s\rangle},\ \delta_k^{\langle 2s+2\rangle}=\delta_k^{\langle 2\rangle}\delta_k^{\langle 2s\rangle},\quad (s=1,2,\ldots)$$

で定義する．

3.2 部分和分公式

離散系でも，部分積分公式に相当する「部分和分公式」が，たとえば次のような形で成立する：

$$\sum_{k=0}^{N-1}U_{j,k}(\delta_k^+V_{j,k})\Delta x+\sum_{k=0}^{N-1}\left(\delta_k^-U_{j,k}\right)V_{j,k}\Delta x=\left[U_{j,k-1}V_{j,k}\right]_{k=0}^N, \tag{7}$$

$$\sum_{k=0}^{N-1}\left(\delta_k^{\langle 1\rangle}U_{j,k}\right)V_{j,k}\Delta x+\sum_{k=0}^{N-1}U_{j,k}\left(\delta_k^{\langle 1\rangle}V_{j,k}\right)\Delta x=\frac{1}{2}\left[U_{j,k}V_{j,k-1}+U_{j,k-1}V_{j,k}\right]_{k=0}^N. \tag{8}$$

ただし $[U_{j,k}]_{k=0}^N=U_{j,N}-U_{j,0}$ である．また未定義点 ($U_{j,N}$ など) は実際に適用する際に離散境界条件や和の範囲を工夫して処理する．

3.3 離散変分導関数

局所エネルギー $G(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}_x)$ の離散版が，

$$(G_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}))_k=\sum_{l=1}^{P}\prod_{j=1}^{M}f_{l,j}(U_{j,k})g_{l,j}^+(\delta_k^+U_{j,k})g_{l,j}^-(\delta_k^-U_{j,k}),\quad (0\le k\le N-1) \tag{9}$$

と書けているとする ($(\cdot)_k$ はベクトルの第 k 要素を表す)．離散大域エネルギーを $H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U})=\sum_{k=0}^{N-1}G_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U})\Delta x$ で定義する．

連続版の式 (1) に倣って，次のように離散エネルギーの離散的な変分を行い，「離散偏導関数」，および「離散変分導関数」を導出する．

$$\begin{aligned}
&H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U})-H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{V})\\
&=\sum_{k=0}^{N-1}\left[\sum_{j=1}^{M}\left\{\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k(U_{j,k}-V_{j,k})+\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^+(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k(\delta_k^+U_{j,k}-\delta_k^+V_{j,k})\right.\right.\\
&\qquad\left.\left.+\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^-(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k(\delta_k^-U_{j,k}-\delta_k^-V_{j,k})\right\}\right]\Delta x\\
&=\sum_{k=0}^{N-1}\left[\sum_{j=1}^{M}\left\{\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k-\delta_k^-\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^+(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k-\delta_k^+\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^-(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k\right\}\right](U_{j,k}-V_{j,k})\Delta x\\
&\qquad+\left[\sum_{j=1}^{M}\left\{\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^+(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_{k-1}(U_{j,k}-V_{j,k})+\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^-(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k(U_{j,k-1}-V_{j,k-1})\right\}\right]_{k=0}^N\\
&=\sum_{k=0}^{N-1}\left[\sum_{j=1}^{M}\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k(U_{j,k}-V_{j,k})\right]\Delta x\\
&\qquad+\left[\sum_{j=1}^{M}\left\{\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^+(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_{k-1}(U_{j,k}-V_{j,k})+\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^-(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k(U_{j,k-1}-V_{j,k-1})\right\}\right]_{k=0}^N
\end{aligned} \tag{10}$$

第 1 の等号では自明な等式 $ab-cd=((a+c)(b-d)+(a-c)(b+d))/2$ $(*)$ を繰り返し用い，左辺から $\delta\boldsymbol{u}$ に相当する $(U_{j,k}-V_{j,k})$，および $\delta\boldsymbol{u}_x$ に相当する $(\delta_k^{\pm}U_{j,k}-\delta_k^{\pm}V_{j,k})$ を括り出して，その余った部分に $\partial G_{\mathrm{d}}/\partial(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)\in\mathbf{C}^N$ ($\partial G/\partial u_j$ に相当)，および $\partial G_{\mathrm{d}}/\partial\delta^{+}(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)$，$\partial G_{\mathrm{d}}/\partial\delta^{-}(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)\in\mathbf{C}^N$ ($\partial G/\partial(u_j)_x$ に相当) という記号を充てる．これは変形であると同時に，これら離散偏導関数の定義式でもある．具体形も書けるが，後述のように自由度があり，また表記が非常に煩雑であることからここでは省く．第 2 の等号では部分和分公式 (7) を用いた．第 3 の等号では，$\delta G/\delta\boldsymbol{u}$ に相当する離散変分導関数：

$$\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k=\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k-\delta_k^{-}\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^{+}(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k-\delta_k^{+}\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^{-}(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k,\quad \begin{array}{l}0\le k\le N-1,\\ 1\le j\le M,\end{array} \tag{11}$$

を定義している．

上式 (10) 第 1 等号の変形には，左辺に等式 $(*)$ を適用する順番により明らかに組み合わせ論的自由度があるが，どの場合でも次が成立し，連続極限で連続版偏導関数に適合する．

補題 3.1 (適合性) 局所エネルギー (9) から上の流儀で得られる偏導関数は，$\boldsymbol{U}\to\boldsymbol{V}$ の極限で，

$$\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k\to\frac{\partial}{\partial U_{j,k}}G_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U})_k,\quad\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^{\pm}(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)}\right)_k\to\frac{\partial}{\partial(\delta^{\pm}U_{j,k})}G_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U})_k.$$

ただし $\partial/\partial(\delta^{\pm}U_{j,k})$ は，$\delta_k^{+}U_{j,k}$，あるいは $\delta_k^{-}U_{j,k}$ をひとつの変数と見なして偏微分することを表す． ▮

注意 1 式 (10) を成立させるだけならば，分解は無数に考えられる (たとえば $A_k=(G_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U})_k-G_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{V})_k)/3M$ とし，$\partial G_{\mathrm{d}}/\partial(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)_k=A_k/(U_{j,k}-V_{j,k})$，$\partial G_{\mathrm{d}}/\partial\delta^{\pm}(\boldsymbol{U}_j,\boldsymbol{V}_j)_k=A_k/(\delta^{\pm}U_{j,k}-\delta^{\pm}V_{j,k})$ とするなど)．しかしその大多数では補題 3.1 が成立せず無意味である．上の定式では，等式 $(*)$ による分解に限定することで，得られる偏導関数の適合性を保証している．もちろん，これ以外に適合的な分解が存在する可能性もある．また命題 3.1 はあくまで最低限の要件を保証するに過ぎず，数ある分解 (10) の中で，どれが「最適」であるかは別の問題である．現在のところこれを判定する有効な原理はなく，次節の手続きに従って実際にスキームを構築してみて，その中から方程式ごとに「最適」なものを選び出すよりない． ▮

4 連立系に対する離散変分法スキーム

具体的に A が表 1，2 に示したものの場合に，連続版の方程式 (2) に対して，前節で与えられた離散変分導関数 (11) を用いて次のように差分スキームを定義する．

$$\begin{cases}\dfrac{\boldsymbol{U}^{(m+1)}-\boldsymbol{U}^{(m)}}{\Delta t}=A_{\mathrm{d}}\left(\dfrac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(m+1)},\boldsymbol{U}^{(m)})}\right), & m=1,2,\ldots,\\ B_{\mathrm{d}}\boldsymbol{U}^{(m)}=0, & k=0,N-1,\ m=1,2,\ldots,\\ U_{j,k}^{(0)}=u_j(0,k\Delta x), & 0\le k\le N-1.\end{cases} \tag{12}$$

ここで A_{d} は，連続版の A を，$1\to I$，$\partial_x^s\to\Delta_k^{\langle s\rangle}\overset{\mathrm{d}}{\equiv}\mathrm{diag}\{\delta_k^{\langle s\rangle}\}$，$(s=1,2,\ldots)$ と置換して得られる $MN\times MN$ の行列である (I は $N\times N$ の単位行列)．具体的な形を表 3 (離散保存系)，表 4 (離散散逸 (発散) 系) に示す．表中，$s=0,1,2,\ldots$，および $D_k^{\langle s\rangle}\overset{\mathrm{d}}{\equiv}\begin{pmatrix}0 & \Delta_k^{\langle s\rangle}\\ \Delta_k^{\langle s\rangle} & 0\end{pmatrix}$ である．また $P_{j,k}=(\delta G_{\mathrm{d}}/\delta(U_j^{(m+1)},U_j^{m)}))_k$ と略記する．

表 3: 保存系の A (表 1) に対する離散版 A_{d} と離散境界条件の満たすべき条件

A	離散境界条件の満たすべき条件
$\Delta_k^{\langle 2s+1\rangle}$	$\left[\delta_k^{\langle i\rangle}P_{1,k}\delta_k^{\langle 2s-i\rangle}P_{1,k-1}+\delta_k^{\langle i\rangle}P_{1,k-1}\delta_k^{\langle 2s-i\rangle}P_{1,k}\right]_0^N=0,\ 0\le i\le s.$
$\begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$	——
$D_k^{\langle 2s+1\rangle}$	$\boldsymbol{P}_k=(P_{1,k},P_{2,k})^{\mathrm{T}},\delta_k^{\langle i\rangle}\boldsymbol{P}_k=\left(\delta_k^{\langle i\rangle}P_{1,k},\delta_k^{\langle i\rangle}P_{2,k}\right)^{\mathrm{T}}$ として, $\left[\left(\delta_k^{\langle i\rangle}\boldsymbol{P}_k\right)^{\mathrm{T}}S\delta_k^{\langle 2s-i\rangle}\boldsymbol{P}_{k-1}+\left(\delta_k^{\langle i\rangle}\boldsymbol{P}_{k-1}\right)^{\mathrm{T}}S\delta_k^{\langle 2s-i\rangle}\boldsymbol{P}_k\right]_0^N=0,\ 0\le i\le s.$

表 4: 散逸 (発散) 系の A (表 2) に対する離散版 A_{d} と離散境界条件の満たすべき条件

A	離散境界条件の満たすべき条件
$(-1)^{s+1}\Delta_k^{\langle 2s\rangle}$	$\left[\delta_k^{\langle i\rangle}P_{1,k}\delta_k^{\langle 2s-1-i\rangle}P_{1,k-1}+\delta_k^{\langle i\rangle}P_{1,k-1}\delta_k^{\langle 2s-1-i\rangle}P_{1,k}\right]_0^N=0,\ 0\le i\le s-1.$
$\begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$	——

このとき $\boldsymbol{F},\boldsymbol{G}\in\mathbf{C}^{MN}$ に対して双一次形式 $(\boldsymbol{F},\boldsymbol{G})=\sum_{k=0}^{N-1}\sum_{j=1}^{M}f_{j,k}g_{j,k}\Delta x$ を導入すると，次が成立する．

定理 4.1 (離散保存系) 離散境界条件 $B_{\mathrm{d}}\boldsymbol{U}^{(m)}=0$ が条件：

$$\left[\sum_{j=1}^{M}\left\{\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^{+}(\boldsymbol{U}_j^{(m+1)},\boldsymbol{U}_j^{(m)})}\right)_{k-1}\left(U_{j,k}^{(m+1)}-U_{j,k}^{(m)}\right)+\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^{-}(\boldsymbol{U}_j^{(m+1)},\boldsymbol{U}_j^{(m)})}\right)_{k}\left(U_{j,k-1}^{(m+1)}-U_{j,k-1}^{(m)}\right)\right\}\right]_{k=0}^{N}=0$$

と，表 3 に示した条件を満たすとする．このとき対応する A_{d} は $(\cdot,\cdot)$ に関して歪対称で，スキーム (12) は離散大域エネルギー $H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(m)})$ を保存する．実際，式 (10) の両辺を Δt で割り，必要に応じて部分和分公式 (8) を繰り返し用いることで，

$$\frac{H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(m+1)})-H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(m)})}{\Delta t}=\left(\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(m+1)},\boldsymbol{U}^{(m)})}\right),A_{\mathrm{d}}\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(m+1)},\boldsymbol{U}^{(m)})}\right)\right)=0. \qquad \blacksquare$$

定理 4.2 (離散散逸 (発散) 系) 離散境界条件 $B_{\mathrm{d}}\boldsymbol{U}^{(m)}=0$ が条件：

$$\left[\sum_{j=1}^{M}\left\{\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^{+}(\boldsymbol{U}_j^{(m+1)},\boldsymbol{U}_j^{(m)})}\right)_{k-1}\left(U_{j,k}^{(m+1)}-U_{j,k}^{(m)}\right)+\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\delta^{-}(\boldsymbol{U}_j^{(m+1)},\boldsymbol{U}_j^{(m)})}\right)_{k}\left(U_{j,k-1}^{(m+1)}-U_{j,k-1}^{(m)}\right)\right\}\right]_{k=0}^{N}=0$$

と，表 4 に示した条件を満たすとする．このとき対応する A_{d} は $(\cdot,\cdot)$ に関して定値で，スキーム (12) は離散大域エネルギー $H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(m)})$ を散逸 (発散) する．実際，

$$\frac{H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(m+1)})-H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(m)})}{\Delta t}=\left(\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(m+1)},\boldsymbol{U}^{(m)})}\right),A_{\mathrm{d}}\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\boldsymbol{U}^{(m+1)},\boldsymbol{U}^{(m)})}\right)\right)\lesseqqgtr 0. \qquad \blacksquare$$

注意 4.1 差分スキーム (12) で Δt を可変としても，定理 4.1, 4.2 は成立する．すなわち差分スキーム (12) は，エネルギー保存・散逸 (発散) 則を保ったまま，適応的に時間発展できる． $\blacksquare$

注意 4.2 冒頭に述べた [6] は非線形波動方程式 $u_{tt} = -\delta G/\delta u$ に対して定式化を与えたものだが，これは補助変数 $v = u_t$ の導入により $\widetilde{G} = G + v^2/2$ に関する Hamilton 形式に書き直せ，上述の連立形に対する定式化も適用できる (表 1 参照)．両定式化は一般に異なる保存スキームを導くが，連立形を経由した場合，時間ステップを可変にとれる利点が生まれる． ∎

5 Zakharov 方程式に対する保存スキームの導出とその性質

本節では例題として，Zakharov 方程式 (3) の Cauchy 問題：

$$\begin{cases} \mathrm{i}E_t + E_{xx} = nE, \quad t > 0, x \in [0, L], \\ n_{tt} - n_{xx} = (|E|^2)_{xx}, \quad t > 0, x \in [0, L], \\ E(0, x) = E_0(x), n(0, x) = n_0(x), n_t(0, x) = n_1(x), \quad x \in [0, L], \end{cases} \tag{13}$$

を考える．空間方向には周期的境界条件を課す．Zakharov 方程式は，局所エネルギー G (4) に関して Hamilton 系 (5) に分解でき，このとき $M = 4$，つまり $(u_1, u_2, u_3, u_4) = (E, \overline{E}, n, u)$ である．また (5) は大域エネルギー $H = \int_0^L G_{\mathrm{d}} \mathrm{d}x$ のほか，「Plasmon 数」$\int_0^L |E|^2 \mathrm{d}x$ も保存し，これらから次の補題が導かれる．ただし $\|\cdot\|_p$ は通常の L_p ノルムとする．

補題 5.1 $\|E\|_\infty < \infty, \quad t > 0.$
(証明) 周期関数 $f(x)$ に対して成立する不等式

$$\forall \varepsilon > 0, \exists C_\varepsilon > 0, \quad \|f\|_\infty^2 \le C_\varepsilon \|f\|_2^2 + \varepsilon \|f_x\|_2^2 \tag{14}$$

から，すべての $\varepsilon, \eta > 0$ に対して，

$$\left| \int_0^L n|E|^2 \mathrm{d}x \right| \le \frac{\eta}{2}\|n\|_2^2 + \frac{1}{2\eta}\|E\|_4^4 \le \frac{\eta}{2}\|n\|_2^2 + \frac{1}{2\eta}\left(\|E\|_2^2 (C_\varepsilon \|E\|_2^2 + \varepsilon \|E_x\|_2^2) \right).$$

これと大域エネルギー保存則，および Plasmon 数保存則から，

$$\left(1 - \frac{\varepsilon}{2\eta}\right) \|E_x\|_2^2 + \left(\frac{1}{2} - \frac{\eta}{2}\right) \|n\|_2^2 \le C.$$

よって $0 < \eta < 1, 0 < \varepsilon < 2\eta$ と選んで，$\|E_x\|_2 < \infty$．ここで再び不等式 (14) から，$\|E\|_\infty < \infty$． ∎

問題 (5) に対して，差分スキームを導出する．数値解は，見やすさを考慮して ($U_{j,k}^{(m)}$ ではなく) ${E_k}^{(m)}$，${n_k}^{(m)}$，$u_k^{(m)}$ で表記する．離散エネルギーを

$$H_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{E}^{(m)}, \boldsymbol{n}^{(m)}, \boldsymbol{u}^{(m)}) = \sum_{k=0}^{N-1} G_{\mathrm{d}} \Delta x, \quad G_{\mathrm{d}} = |\delta^+ {E_k}^{(m)}|^2 + {n_k}^{(m)} |{E_k}^{(m)}|^2 + \frac{1}{2}\left({n_k}^{(m)2} + (\delta^+ u_k^{(m)})^2 \right), \tag{15}$$

と定義する．これは前節で仮定した形，式 (9) に沿っている．
式 (10) に沿って離散変分を行うと，次を得る．

$$\begin{aligned} &H_{\mathrm{d}}({E_k}^{(m+1)}, {n_k}^{(m+1)}, u_k^{(m+1)}) - H_{\mathrm{d}}({E_k}^{(m)}, {n_k}^{(m)}, u_k^{(m)}) \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta({E_k}^{(m+1)}, {E_k}^{(m)})} ({E_k}^{(m+1)} - {E_k}^{(m)}) + \frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\overline{{E_k}^{(m+1)}}, \overline{{E_k}^{(m)}})} (\overline{{E_k}^{(m+1)} - {E_k}^{(m)}}) \right. \\ &\left. + \frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta({n_k}^{(m+1)}, {n_k}^{(m)})} ({n_k}^{(m+1)} - {n_k}^{(m)}) + \frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(u_k^{(m+1)}, u_k^{(m)})} (u_k^{(m+1)} - u_k^{(m)}) \right\} \Delta x. \end{aligned} \tag{16}$$

ただし，

$$\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta({E_k}^{(m+1)},{E_k}^{(m)})} = -\delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{{E_k}^{(m+1)}+{E_k}^{(m)}}{2}\right)+\left(\frac{{E_k}^{(m)}+{E_k}^{(m)}}{2}\right)\left(\frac{{n_k}^{(m+1)}+{n_k}^{(m)}}{2}\right), \tag{17}$$

$$\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\overline{{E_k}^{(m+1)}},\overline{{E_k}^{(m)}})} = \overline{\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta({E_k}^{(m+1)},{E_k}^{(m)})}\right)}, \tag{18}$$

$$\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta({n_k}^{(m+1)},{n_k}^{(m)})} = \frac{{n_k}^{(m+1)}+{n_k}^{(m)}}{2}+\frac{|{E_k}^{(m+1)}|^2+|{E_k}^{(m)}|^2}{2}, \tag{19}$$

$$\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(u_k^{(m+1)},u_k^{(m)})} = \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{u_k^{(m+1)}+u_k^{(m)}}{2}\right), \tag{20}$$

である．

得られた離散変分導関数を用いて，式 (12) に従って，差分スキームを次のように定義する．

Zakharov 方程式の保存差分スキーム

$$\mathrm{i}\left(\frac{{E_k}^{(m+1)}-{E_k}^{(m)}}{\Delta t}\right)=\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(\overline{{E_k}^{(m+1)}},\overline{{E_k}^{(m)}})},$$
$$\frac{{n_k}^{(m+1)}-{n_k}^{(m)}}{\Delta t}=-\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(u_k^{(m+1)},u_k^{(m)})},\quad \frac{u_k^{(m+1)}-u_k^{(m)}}{\Delta t}=\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta({n_k}^{(m+1)},{n_k}^{(m)})}. \tag{21}$$

ただし離散的周期境界条件 ${E_k}^{(m)}=E_{k\pm N}^{(m)}, {n_k}^{(m)}=n_{k\pm N}^{(m)}, u_k^{(m)}=u_{k\pm N}^{(m)}\ (m=0,1,2\ldots)$ を課す．

このスキームは定理 4.1 の仮定を満たしているから，数値解は離散大域エネルギー (15) を保存する．さらに次の定理が成立する．

定理 5.2 (離散 Plasmon 数保存) $\displaystyle\sum_{k=0}^{N-1}|{E_k}^{(m)}|^2\Delta x=\sum_{k=0}^{N-1}|E_k^{(0)}|^2\Delta x,\quad m=1,2,\ldots$

(証明)

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=0}^{N-1}\frac{|{E_k}^{(m+1)}|^2-|{E_k}^{(m)}|^2}{\Delta t}\\
&=\sum_{k=0}^{N-1}\left\{\left(\frac{{E_k}^{(m+1)}+{E_k}^{(m)}}{2}\right)\left(\overline{\frac{{E_k}^{(m+1)}-{E_k}^{(m)}}{\Delta t}}\right)+\left(\overline{\frac{{E_k}^{(m+1)}+{E_k}^{(m)}}{2}}\right)\left(\frac{{E_k}^{(m+1)}-{E_k}^{(m)}}{\Delta t}\right)\right\}\Delta x\\
&=2\mathrm{Re}\sum_{k=0}^{N-1}\mathrm{i}\left(\overline{\frac{{E_k}^{(m+1)}+{E_k}^{(m)}}{2}}\right)\left\{\delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{{E_k}^{(m+1)}+{E_k}^{(m)}}{2}\right)-\left(\frac{{E_k}^{(m+1)}+{E_k}^{(m)}}{2}\right)\left(\frac{{n_k}^{(m+1)}+{n_k}^{(m)}}{2}\right)\right\}\Delta x\\
&=-2\mathrm{Re}\sum_{k=0}^{N-1}\mathrm{i}\left\{\left|\frac{\delta^{+}({E_k}^{(m+1)}+{E_k}^{(m)})}{2}\right|^2+\left|\frac{{E_k}^{(m+1)}+{E_k}^{(m)}}{2}\right|^2\left(\frac{{n_k}^{(m+1)}+{n_k}^{(m)}}{2}\right)\right\}\Delta x\\
&=0.
\end{aligned}$$

ただし 2 番目の等号では差分スキームの定義 (21) を，3 番目の等号では部分和分則 (7) を用い，周期的境界条件から境界項を消去した． ∎

さらに $\|\cdot\|_p$ に相当する離散ノルムを $\|\boldsymbol{U}\|_p^p=\sum_{k=0}^{N-1}|U_k|^p\Delta x$，$\|\boldsymbol{U}_x\|_2^2=\sum_{k=0}^{N-1}|\delta_k^{+}U_k|^2\Delta x$ で導入するとき，数値解 $\boldsymbol{E}^{(m)}$ に関して，補題 5.1 に相当して次が成立する．

定理 5.3 $\|\boldsymbol{E}^{(m)}\|_\infty<\infty,\quad m=0,1,2,\ldots$

(証明) 任意の $N-$ 周期列 $\boldsymbol{F}=\{f_k\}_{k=0}^{N-1}$ に対して，式 (14) に相当する不等式：

$$\forall\varepsilon>0,\exists C_\varepsilon>0,\quad \|\boldsymbol{F}\|_\infty^2\le C_\varepsilon\|\boldsymbol{F}\|_2^2+\varepsilon\|\boldsymbol{F}_x\|_2^2$$

の成立に注意すると，補題 5.1 とまったく同じ式変形により明らか． ∎

定理 5.3 は，数値解 $\boldsymbol{E}^{(m)}$ が (それが可解である限りにおいて) $\Delta x, \Delta t$ によらず有界である，つまり丸め誤差の影響を除いては安定であることを意味する．$\boldsymbol{n}^{(m)}$ に対する評価は，そもそももともとの問題 (13) で評価 $\|n\|_\infty < \infty$ が成立しないため，離散系でも得られない．スキーム (21) に関して，可解性，解の単一性，および厳密解への収束性は，まだ未調査である．

なおスキーム (21) は $\boldsymbol{E}^{(m+1)}, \boldsymbol{U}^{(m+1)}, \boldsymbol{n}^{(m+1)}$ に関して連立非線形方程式であり，時間発展の各ステップで反復解法に頼らねばならない．しかし前節で与えた定式化と陰的線形なスキームを導出する技法 [9, 11] を組み合わせ，適切な離散エネルギーを定義することで (スペースの都合で具体形は省略する)，たとえば次のような陰的線形スキームも導出できる．

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\left(\frac{E_k{}^{(m+1)} - E_k{}^{(m-1)}}{2\Delta t}\right) &= -\delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{E_k{}^{(m+1)} + E_k{}^{(m-1)}}{2}\right) + n_k{}^{(m)}\left(\frac{E_k{}^{(m+1)} + E_k{}^{(m-1)}}{2}\right),\\
\frac{n_k{}^{(m+1)} - n_k{}^{(m-1)}}{2\Delta t} &= \delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\frac{u_k^{(m+1)} + u_k^{(m-1)}}{2}\right),\\
\frac{u_k^{(m+1)} - u_k^{(m-1)}}{2\Delta t} &= \frac{n_k{}^{(m+1)} + n_k{}^{(m-1)}}{2} + |E_k{}^{(m)}|^2.
\end{aligned}$$

このスキームもやはりある離散 Plasmon 数を保存し (具体形略，同上)，それらから同様にして評価 $\|\boldsymbol{E}^{(m)}\|_\infty < \infty$ も得られる．

参考文献

[1] Baillon, J.B., and Chadam, J.M., The Cauchy problem for the coupled Schrödinger-Klein-Gordon equations, in "Contemporary Developments in Continuum Mechanics and Partial Differential Equations", edited by G.M. de la Penha and L.A. Medeiros, North Holland, Amsterdam, 1978.

[2] Boling, G., The global solution of the system of equations for complex Schrödinger field coupled with Boussinesq type self-consistent field, *Acta Math. Sinica*, **26**(1983), 295–306.

[3] Du,Q., Global Existence and Uniqueness of Solutions of The Time-Dependent Ginzburg-Landau Model for Superconductivity, *Appl. Anal.*, **53**(1994), 1–17.

[4] Eguchi,T., Oki, K., and Matsumura,S., Kinetics of ordering with phase separation, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **21**(1984), 589–594.

[5] Furihata, D., Finite Difference Schemes for $\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\alpha \frac{\delta G}{\delta u}$ That Inherit Energy Conservation or Dissipation Property, *J. Comput. Phys.*, **156**(1999), 181–205.

[6] Furihata, D., Finite difference schemes for nonlinear wave equation that inherit energy conservation property, *J. Comput. Appl. Math.*, to appear.

[7] Gibbons, J., Thornhill, S.G., Wardrop, M.J., and Ter Haar, D., On the theory of Langmuir solitons, *J. Plasma Phys.*, **17**(1977), 153–170.

[8] Manoranjan V.S., Ortega, T., and Sanz-Serna, J.M., Soliton and antisoliton interactions in the "good" Boussinesq equation, J. Math. Phys., **29**(1988), 1964–1968.

[9] Matsuo, T., and Furihata, D., Dissipative or Conservative Finite Difference Schemes for Complex-Valued Nonlinear Partial Differential Equations, preprint RIMS-1280, `http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/kenkyubu/paper/all.html`.

[10] Matsuo, T., Sugihara, M., Furihata, D., and Mori, M., Spatially Accurate Conservative or Dissipative Finite Difference Schemes Derived by the Discrete Variational Method, preprint RIMS-1301.

[11] Matsuo, T., Sugihara, M., Furihata, D., and Mori, M., Linearly Implicit Finite Difference Schemes Derived by the Discrete Variational Method, 数理解析研究所講究録 1145 (2000), 121–129.

[12] 松尾, 降旗, 見澤, 杉原, 離散変分法の Hamilton 系に対する適用について, 日本応用数理学会平成 12 年度年会講演予稿集, 376–377.

[13] 吉永, 長波–短波相互作用による水波のカオス現象, 日本物理学会誌, **47**(1992), 300–303.

[14] Zakharov,V.E., Collapse of Langmuir waves, *Sov. Phys. JETP*, **35**(1972), 908–914.