

構造保存差分スキームについて

Structure-Preserving Finite Difference Schemes

松尾宇泰*

TAKAYASU MATSUO

東京大学大学院情報理工学系研究科

GRADUATE SCHOOL OF INFORMATION SCIENCE AND TECHNOLOGY, THE UNIVERSITY OF TOKYO

Abstract

Structure-preserving numerical methods (in particular, finite difference schemes) are surveyed, including invariant-preserving methods and symplectic methods for ordinary differential equations, and the so-called discrete variational derivative method for partial differential equations.

1 はじめに

本稿では、微分方程式に対する「構造保存差分スキーム」について述べる。ここで「微分方程式」とは、常微分方程式 (ODE) の初期値問題、あるいは発展型偏微分方程式 (PDE) の初期値境界値問題を指す。

「構造保存数値解法」(“structure-preserving numerical methods”)とは、1980年代頃主に常微分方程式の数値解法分野で興った数値解析の一分野であり、解くべき方程式の何らかの構造を数値解法に取り込むことで、Runge-Kutta法などの汎用解法よりも優れた専用解法を作る試みのことである。解ける方程式群が限定されている分だけ、安定性、効率(計算速度)、解の定性的正しさなどの点で汎用解法よりも優れている(ことが期待されている)。しばしば方程式の背後にある、何らかの幾何学的構造(たとえばsymplectic構造; 第2.2節のsymplectic法を参照)に着目するため、「幾何学的数値解法」(“geometric numerical integration”)とも呼ばれる。

構造保存数値解法の代表的な一例が、いわゆる「保存解法」—方程式に付随する何らかの保存量を離散系でも保つ解法—であるが、これらの源流は力学系における力学的エネルギーの保存則を保とうとする古典的な試みに認められ、著者の知る限り少なくとも1960年代のGreenspanらの仕事まで遡れる[10] (実際には、後述するようにさらに古い仕事を構造保存数値解法の始祖に含めることができるが、「構造保存」的であることが、その機構まで含めて明確に意識されたのは1960年代のことであるように思われる)。

ここで、類似の仕事は「可積分系」と呼ばれる別の分野でも盛んに研究されてきたことに注意が必要である。上述の1960年代には、可積分系と構造保存数値解法の文脈(換言すれば可積分系研究者と数値解析学者の交わり)はかなりの程度に重なっていたと思われるが、その後、可積分系が引き続き盛んに研究されてきたのと比較して、数値解析の分野は汎用解法の研究へと大きく舵を切り、1980年代にそれがある程度成熟してから再び興味が戻ってきた感がある。現在では、例えばソリトン方程式の離散化は、可積分系と構造保存数値解法の両方の文脈で今なお研究が盛んであるが、両者における研究の手法と対象は、上の背景を反映して若干異なっている。本稿は、これらのうち数値解析における構造保存数値解法の立場から書かれた近年の研究成果のサーベイである。

*matsuo@mist.i.u-tokyo.ac.jp

本稿では、以下について論ずる。まず第2節で、常微分方程式系に対する構造保存差分スキームの概要を述べる。この分野では、大きく Hamilton 系と勾配系の2種類を対象として考え得るが、本稿では PDE 編への接続を念頭に、Hamilton 系に限定して話を進める。そこにおける大きな話題は、symplectic 解法と離散勾配法の2つである。続く第3節では、PDE に対する構造保存解法を非線形 Schrödinger 方程式を例に挙げて説明する。これは適切に離散化して ODE に落とせば第2節の手法が適用可能であるし、離散変分法と呼ばれる PDE 専用解法を直接適用することもできる。最後に第4節において本稿を簡単に振り返ったあと、その他の注意について述べる。

なお、本稿は2011年の京都大学数理解析研究所研究集会『可積分系数理論の進化』における、同じ表題の講演に関連して書かれたサーベイ論文である。同講演の主要な意図が「可積分系の研究者の方々に、数値解析分野における構造保存数値解法の概要をお伝えすること」であったことを反映し、本稿も情報の網羅性よりも、本質的なニュアンスが専門外の方々に伝わることを意図して書かれていることを予めお断りしておく。

2 常微分方程式に対する構造保存差分スキーム

以下の Hamilton 系の数値計算について考える。

$$\frac{d}{dt}z = J\nabla H(z). \quad (1)$$

ここで $z = (q, p)^\top$, $q, p: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ はそれぞれ一般化座標と運動量、また I を大きさ d の単位行列として

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

である。右辺の関数 $H(z): \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ は Hamiltonian であり、 ∇ は通常の (ベクトル解析の) 勾配を表す。

この Hamilton 系は、次の2つの著しい特徴を持つ。まず Hamiltonian は保存量である：

$$\frac{d}{dt}H(z) = \nabla H(z) \cdot z_t = \nabla H(z) \cdot J\nabla H(z) = 0. \quad (3)$$

ただし z_t の下付き添え字は変数 t に関する微分を表す (以降同様の表記を用いる)。2本のベクトル x, y に対して、 $x \cdot y = x^\top y$ は通常の内積である。次に、Hamilton 系 (1) を解いて得られる「フロー」(“flow”) : $\phi_{\Delta t}: \mathbb{R}^{2d} \ni z(t) \mapsto z(t + \Delta t) \in \mathbb{R}^{2d}$ は symplectic 写像である：

$$\left(\frac{\partial \phi_{\Delta t}}{\partial z} \right)^\top J^{-1} \left(\frac{\partial \phi_{\Delta t}}{\partial z} \right) = J^{-1}. \quad (4)$$

ただし $\Delta t \in \mathbb{R}$ は時間発展の幅を表す (「差分」の感じを出すために Δt と書いたが微量とは限らない)。

Hamilton 系は極めて高い対称性を持ち、上述の他にも体積保存など種々の性質を持つが、離散化を伴う数値計算でそれらすべてを再現するのは、残念ながら不可能である。実際、後に述べるように、Hamiltonian の保存性とフローの symplectic 性の2つに限っても、それらを同時に満たす数値解法は存在しないことが証明されている (→注意3)。そこで以下では、上の性質をそれぞれ単独で狙う数値計算法について概説する。

注意 1 本節で述べる Hamilton 系の構造保存数値解法については、Sanz-Serna-Calvo [18] と Leimkuhler-Reich [14] が教科書である。前者は直観的に書かれており初学者にも分かりやすく、後者は本稿後半で扱う Hamiltonian PDE についてもある程度記述があるのが特色である。Hamilton 系を含み、より広く ODE 全体を扱った構造保存数値解法の定番教科書には、Hairer-Lubich-Wanner [11] がある。□

2.1 Hamiltonian 保存性：離散勾配法

連続版の Hamiltonian 保存性 (3) では、その最初の等号における微分の連鎖律が本質的であり、それさえ満たされれば保存性は行列 J の歪対称性から自明に導かれる。この観察から、微分の連鎖律に対応する「差分の連鎖律」が成立するように、しかるべく差分化を行おうというのが「離散勾配法」(“discrete gradient method”) の要点である。これを数値解析学の文献で明示的に定義したのは Gonzalez [9] であるが、このアイデア自体は Greenspan らの仕事の時代から知られており、様々な仕事に見受けられる。

定義 1 (離散勾配 (discrete gradient) [9]) d' を自然数とし、ある関数 $f: \mathbb{R}^{d'} \rightarrow \mathbb{R}$ を考える。このとき任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{d'}$ に対して次を満たす離散量 $\nabla_d f: \mathbb{R}^{d'} \times \mathbb{R}^{d'} \rightarrow \mathbb{R}^{d'}$ が存在するとき、それを f の「離散勾配」(“discrete gradient”) と呼ぶ。

- $f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y}) = \nabla_d f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})$,
- $\nabla_d f(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})$.

□

定義中の 2 つの条件のうち、最初の条件が離散連鎖律であり本質的である。2 番目は単に「連続版の勾配の近似であること」を要請しているに過ぎない。なお記号 ∇_d は連続版の勾配 ∇ の近似のつもりではあるが、上の定義では $(\nabla_d f)$ のひとまとまりで、ひとつの「離散勾配」という関数を定義している点に注意が必要である (関数 f に作用する ∇_d という作用素があるわけではない)。

定義 1 を満たす離散勾配をどうやって作るかはひとまずさておき、このような離散勾配が存在したら、自明に保存解法が構成できることを次に見よう。以下では、数値解を $\mathbf{z}^{(m)} \simeq \mathbf{z}(m\Delta t)$ ($m = 0, 1, 2, \dots$) と書く。時刻 $t = 0$ (すなわち $m = 0$) では初期値が与えられているとする。

スキーム 1 (保存差分スキーム) $m = 0, 1, 2, \dots$ に対して、

$$\frac{\mathbf{z}^{(m+1)} - \mathbf{z}^{(m)}}{\Delta t} = J\nabla_d H(\mathbf{z}^{(m+1)}, \mathbf{z}^{(m)}). \quad (5)$$

□

定理 1 (保存性) 定義 1 で与えた差分スキームは、以下を満たすという意味で保存的である：

$$H(\mathbf{z}^{(m+1)}) = H(\mathbf{z}^{(m)}) \quad (m = 0, 1, \dots). \quad (6)$$

□

証明.

$$\begin{aligned} \frac{H(\mathbf{z}^{(m+1)}) - H(\mathbf{z}^{(m)})}{\Delta t} &= \nabla_d H(\mathbf{z}^{(m+1)}, \mathbf{z}^{(m)}) \cdot \left(\frac{\mathbf{z}^{(m+1)} - \mathbf{z}^{(m)}}{\Delta t} \right) \\ &= \nabla_d H(\mathbf{z}^{(m+1)}, \mathbf{z}^{(m)}) \cdot J\nabla_d H(\mathbf{z}^{(m+1)}, \mathbf{z}^{(m)}) = 0. \end{aligned}$$

なお第一の等号は離散連鎖律による。 □

前述のとおり、定理 1 をこの形で初めて書いたのは Gonzalez [9] だが、個々の例題やその周辺においては、古くから気づかれていたものである。

注意 2 Hamilton 系 (1) において、行列 J を何らかの半負定値行列で置き換えれば、時刻とともに $H(\mathbf{z}(t))$ が減少する、いわゆる散逸系が得られる。この系に対して、上と全く同じ要領で散逸解法を構成できる。本稿では保存系に限って論ずるため、これらの詳細については以下一切割愛する。 □

さて、離散勾配の具体的な構成に移ろう。定義 1 中の離散連鎖律の条件は、多変数関数 $\nabla_d f : \mathbb{R}^{d'} \times \mathbb{R}^{d'} \rightarrow \mathbb{R}^{d'}$ に対してたった 1 つの等式制約を加えるゆるいものであり、実は一般に、与えられた関数 f に対する離散勾配は無数に存在する。Gonzalez 自体は次の離散勾配を与えている： $\mathbf{z} = (\mathbf{x} + \mathbf{y})/2$ として、

$$\nabla_d f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \nabla f(\mathbf{z}) + \frac{f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y}) - \nabla f(\mathbf{z})^\top (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2} (\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (7)$$

これが離散勾配の 2 つの条件を満たすことは容易に確認できる。Gonzalez の離散勾配は理論的には明解だが、一方で任意の f に対して \mathbf{x}, \mathbf{y} のすべての成分が絡んだ非線形関数となる（したがってそれを用いた保存スキーム 1 は常にすべての変数が絡んだ非線形スキームとなる）ために実用性は必ずしも高いとは言えない（→例 1）。

より現実的な離散勾配としては、以下のものが知られている。Itoh–Abe は次の離散勾配を提唱した [13]：例えば $d = 1$ の場合に、 $\mathbf{z}_1 = (x_1, y_1)^\top$ 、 $\mathbf{z}_2 = (x_2, y_2)^\top$ に関して、

$$\begin{aligned} f(\mathbf{z}_1) - f(\mathbf{z}_2) &= \frac{f(x_1, y_1) - f(x_2, y_1)}{x_1 - x_2} (x_1 - x_2) + \frac{f(x_2, y_1) - f(x_2, y_2)}{y_1 - y_2} (y_1 - y_2) \\ &=: \nabla_d f(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \cdot (\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2). \end{aligned} \quad (8)$$

ただし便宜上 $f(\mathbf{z}_1) = f(x_1, y_1)$ などと表記した。最後の等式が離散勾配を定義している。Itoh–Abe の離散勾配は、要するにスカラー関数 f の各引数に関して順番に差分を構成していくのがアイデアであり、同様の操作によって任意の d に対して定義できる。引き算を考える順序で組み合わせの自由度が生じる。また定義から $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2$ に関する対称性はなく、Itoh–Abe の離散勾配に基づく保存解法は、一般に時間 1 次精度である（下の例題を参照）。この欠点を取り除くためには、例えば非対称な Itoh–Abe 離散勾配の何らかの平均をとり対称化を施せばよい。これを系統的に行った例が石森により与えられている（たとえば [12] とその参考文献を参照）。なお、関数 f が複数の項の線形結合で表されているときは、各項に対し作った離散勾配の線形結合を考えればよい。

上記とは違う考え方により、対称な離散勾配を構成する方法が降旗により与えられている。これは元々、後述の PDE に対する「離散変分法」の文脈で提案されたものであるが、離散変分法の空間離散化部分を切り離せば、実質的に ODE に対する離散勾配を提案しているものとみなせる。簡単のため $d = 1$ の場合を考え、さらに、関数 f が $f(\mathbf{z}) = g(x)h(y)$ （ただし $g, h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ）のように分離形であるときを考えよう。降旗は、任意の $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ に関し成立する等式（これは現在では、一部の研究者の間で「降旗分解」(Furihata decomposition) と呼ばれている)

$$ab - cd = \frac{1}{2}(a + c) \cdot (b - d) + (a - c) \cdot \frac{1}{2}(b + d) \quad (9)$$

に着目して、次の離散勾配を提案した：

$$\begin{aligned} f(\mathbf{z}_1) - f(\mathbf{z}_2) &= g(x_1)h(y_1) - g(x_2)h(y_2) \\ &= \frac{g(x_1) + g(x_2)}{2} \cdot \frac{h(y_1) - h(y_2)}{y_1 - y_2} (y_1 - y_2) + \frac{g(x_1) - g(x_2)}{x_1 - x_2} (x_1 - x_2) \cdot \frac{h(y_1) + h(y_2)}{2} \\ &=: \nabla_d f(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \cdot (\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2). \end{aligned} \quad (10)$$

第三の等式では、Itoh–Abe の場合同様、 $\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2 = (x_1 - x_2, y_1 - y_2)^\top$ に関して整理した残りを離散勾配と定義すると理解する。Itoh–Abe の場合同様、上のやり方は d が 2 以上の場合、さらに関数 f が複数項の線形結合の場合にも自然に延長できる。「降旗分解」をどの変数群に対して適用していくかで、得られる離散勾配には、やはり組み合わせの自由度があるが、人間の目で見ると自然な分割を繰り返すことで（たとえば

Hamilton 系の場合、まず \mathbf{q} と \mathbf{p} を分離する、など)、結果として自然な離散勾配が得られるのも大きな特徴である。

なお、Itoh–Abe 離散勾配と降旗離散勾配のどちらにおいても、 $1/(x_1 - x_2)$ 式の除算が現れるが、これらは関数 f が多項式であれば因数分解により消えることに注意しよう。特に f が 2 次式の場合、この除算消去により離散勾配は線形関数となる。これは Gonzalez の離散勾配とは極めて対照的であり、実用上優れた性質であると言えよう。

例 1 (調和振動子) いささか簡単すぎる例だが、 $d = 1$ の調和振動子問題： $H(\mathbf{z}) = \|\mathbf{z}\|^2/2 = (q^2 + p^2)/2$ を考えよう。この場合、 $\nabla H(\mathbf{z}) = \mathbf{z}$ であり、Hamilton 系 (1) は、もちろん線形な ODE である。

これに対して Gonzalez の離散勾配 (7) を用いると、次の差分スキームが得られる。

$$\frac{\mathbf{z}^{(m+1)} - \mathbf{z}^{(m)}}{\Delta t} = J \left\{ \frac{\mathbf{z}^{(m+1)} + \mathbf{z}^{(m)}}{2} + \frac{H(\mathbf{z}^{(m+1)}) - H(\mathbf{z}^{(m)}) - ((\mathbf{z}^{(m+1)} + \mathbf{z}^{(m)})/2)^\top (\mathbf{z}^{(m+1)} - \mathbf{z}^{(m)})}{\|\mathbf{z}^{(m+1)} - \mathbf{z}^{(m)}\|^2} (\mathbf{z}^{(m+1)} - \mathbf{z}^{(m)}) \right\}. \quad (11)$$

{·} 内の分数は明らかに約分不可能であり、従ってスキームは非線形であることに注意しよう。しかも、 $\mathbf{z}^{(m+1)} = (q^{(m+1)}, p^{(m+1)})^\top$ の両方の成分についてからんでしまっている。調和振動子問題に対しこの連立非線形スキームを解くのは明らかに非効率的である。

Itoh–Abe の離散勾配 (8)、および降旗による離散勾配 (10) による結果は、この問題の場合一致し、次の差分スキームが得られる。

$$\frac{\mathbf{z}^{(m+1)} - \mathbf{z}^{(m)}}{\Delta t} = J \left(\frac{\mathbf{z}^{(m+1)} + \mathbf{z}^{(m)}}{2} \right). \quad (12)$$

これは真の勾配 $\nabla H(\mathbf{z}) = \mathbf{z}$ を同じ線形関数で近似しており、より適切である。□

例 2 (Hénon–Heiles 系) 先の調和振動子のように単純な系では Itoh–Abe の離散勾配と降旗の離散勾配が一致することもあるが、一般には異なる結果を導く。その例として、 $d = 2$ で

$$H(\mathbf{z}) = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2} + \frac{q_1^2 + q_2^2 + 2q_1^2 q_2 - \frac{2}{3} q_2^3}{2}$$

の場合を考えよう。これは Hénon–Heiles 系と呼ばれる場合である。この中で特に $q_1^2 q_2$ の項に着目しよう。Itoh–Abe の離散勾配では、この項を

$$(q_1^{(m+1)})^2 q_2^{(m+1)} - (q_1^{(m)})^2 q_2^{(m)} = (q_1^{(m+1)} + q_1^{(m)})(q_1^{(m+1)} - q_1^{(m)}) \cdot q_2^{(m+1)} + (q_1^{(m)})^2 \cdot (q_2^{(m+1)} - q_2^{(m)}) \quad (13)$$

と分解し、従って、

$$\frac{\partial H}{\partial q_1} = 2q_1 q_2 \simeq (q_1^{(m+1)} + q_1^{(m)}) q_2^{(m+1)}, \quad \frac{\partial H}{\partial q_2} = q_1^2 \simeq (q_1^{(m)})^2$$

が離散勾配 (の要素) となる。これらは時間ステップ m と $m+1$ に関して対称ではないため、真の勾配の $O(\Delta t)$ の近似である。

一方、降旗の離散勾配では、

$$\begin{aligned} (q_1^{(m+1)})^2 q_2^{(m+1)} - (q_1^{(m)})^2 q_2^{(m)} &= (q_1^{(m+1)} + q_1^{(m)})(q_1^{(m+1)} - q_1^{(m)}) \cdot \frac{q_2^{(m+1)} + q_2^{(m)}}{2} \\ &\quad + \frac{(q_1^{(m+1)})^2 + (q_1^{(m)})^2}{2} \cdot (q_2^{(m+1)} - q_2^{(m)}) \end{aligned} \quad (14)$$

と分解するから,

$$\frac{\partial H}{\partial q_1} = 2q_1 q_2 \simeq (q_1^{(m+1)} + q_1^{(m)}) \left(\frac{q_2^{(m+1)} + q_2^{(m)}}{2} \right), \quad \frac{\partial H}{\partial q_2} = q_1^2 \simeq \frac{(q_1^{(m+1)})^2 + (q_1^{(m)})^2}{2}$$

が離散勾配となる. これは $O(\Delta t^2)$ の近似である. □

2.2 フローの symplectic 性 : symplectic 法

次に, Hamiltonian フローの symplectic 性 (4) を離散系でも再現する数値解法, すなわち symplectic 法について概観する.

ある数値解法 (厳密に言えば「一段法」) が symplectic であるとは, それが定義する (離散) 時間発展写像が symplectic であることを言う. 次に一例を挙げる.

スキーム 2 (Symplectic Euler 法) $m = 0, 1, 2, \dots$ において,

$$\frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} \mathbf{q}^{(m+1)} - \mathbf{q}^{(m)} \\ \mathbf{p}^{(m+1)} - \mathbf{p}^{(m)} \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m+1)}) \\ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m+1)}) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

□

定理 2 (例えば Hairer–Lubich–Wanner [11]) Symplectic Euler 法は symplectic 法である.

証明. Symplectic Euler 法の離散フロー写像 $\phi_{\Delta t} : (\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m)}) \mapsto (\mathbf{q}^{(m+1)}, \mathbf{p}^{(m+1)})$ を考えよう. 式 (15) の両辺を $(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m)})$ で微分すれば,

$$\begin{pmatrix} I & -\Delta t H_{\mathbf{p}\mathbf{p}} \\ 0 & I + \Delta t H_{\mathbf{q}\mathbf{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{q}^{(m+1)}}{\partial \mathbf{q}^{(m)}} & \frac{\partial \mathbf{q}^{(m+1)}}{\partial \mathbf{p}^{(m)}} \\ \frac{\partial \mathbf{p}^{(m+1)}}{\partial \mathbf{q}^{(m)}} & \frac{\partial \mathbf{p}^{(m+1)}}{\partial \mathbf{p}^{(m)}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I + \Delta t H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} & 0 \\ -\Delta t H_{\mathbf{q}\mathbf{q}} & I \end{pmatrix}.$$

なお $H_{\mathbf{p}\mathbf{p}}$ 等は H を微分して得られた行列であり, これらの値も $(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m+1)})$ で評価するとする. 左辺 2 つめの行列が, 離散フロー写像 $\phi_{\Delta t}$ の Jacobi 行列であるが, これが symplectic 写像の定義式 (4) を満たすことは直接計算により確認できる. □

Symplectic Euler 法の右辺ベクトルは, $m+1$ ステップ目の数値解 $\mathbf{p}^{(m+1)}$ に依存していることに注意しよう. すなわち, symplectic Euler 法は一般には陰的な (= 時間発展にあたり何らかの方程式を解かねばならない) 解法である. Symplectic Euler 法が有用となるのは, 主に Hamiltonian が「可分」(“separable”) な場合である¹⁾:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}). \quad (16)$$

この場合, symplectic Euler 法の右辺において

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m+1)}) = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{(m)}), \quad \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m+1)}) = \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}^{(m+1)})$$

であるが, symplectic Euler 法の 2 本の式を $\mathbf{p}^{(m+1)}$, $\mathbf{q}^{(m+1)}$ の順に計算することによって, 陽的に (= 方程式を解くことなく) 時間発展できる.

なお, 右辺において $(\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m+1)})$ の代わりに $(\mathbf{q}^{(m+1)}, \mathbf{p}^{(m)})$ としたのもやはり symplectic 法になり, これも symplectic Euler 法と呼ばれている (2 つの symplectic Euler 法を区別する名前は特に定義されていないので注意を要する).

Symplectic 法は, 歴史を振り返れば実は 20 世紀初頭にはすでに公式自体は発見されていた. 最古の symplectic 法 (あるいは最古の構造保存数値解法) としてしばしば紹介されるこの例を次に挙げておこう.

¹⁾ 関数解析における「可分」(separable) と同じ用語が充てられているが, 意味が異なるので注意.

例 3 (Störmer–Verlet 法) 自由質点の運動方程式, すなわち Hamiltonian が可分でありさらに $T(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^\top M^{-1}\mathbf{p}/2$ (ただし M は質点の質量を表す対角行列) と書ける場合を考えよう. これに symplectic Euler 法を適用すると次の計算式が得られる.

$$\frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} \mathbf{q}^{(m+1)} - \mathbf{q}^{(m)} \\ \mathbf{p}^{(m+1)} - \mathbf{p}^{(m)} \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{(m)}) \\ M^{-1}\mathbf{p}^{(m+1)} \end{pmatrix}. \quad (17)$$

右辺第二式にあらわに $\mathbf{p}^{(m+1)}$ が現れているから, これを使って $\mathbf{p}^{(m)}$ を消去すると,

$$\frac{\mathbf{q}^{(m+1)} - 2\mathbf{q}^{(m)} + \mathbf{q}^{(m-1)}}{\Delta t^2} = -M^{-1} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{(m)}). \quad (18)$$

この計算公式は, まず 1907 年に Störmer により天文学の文脈で発見され, それと独立に 1967 年に Verlet により分子動力学の文脈で再発見されたために, 現在では Störmer–Verlet 法と呼ばれている. \square

Störmer–Verlet 法が, 質点の運動方程式に対して優れた性能を持つことは, 当時から知られていたようである. しかし同程度の近似性能の他の計算公式と比べて, なぜこれだけが飛躍的に良い性能を示すのかは, 1980 年代に, これらが symplectic 法として解釈し直されて初めて理解された.

Symplectic 法のさらなる理論的背景については, 本稿では紙面の都合上述べる余裕がないが, 同法を決定的に優位づける定理をひとつ紹介しておく.

定理 3 (陰の Hamiltonian ; 例えば [11]) 滑らかな Hamiltonian で定義された Hamilton 系に, ある symplectic 法を適用したとする. このとき, 解法により定まるある滑らかな関数列 $\{H_j\}$ ($j = 1, 2, \dots$) が存在して, symplectic 法による積分結果は, 「陰の Hamiltonian」 (“modified Hamiltonian”):

$$\tilde{H}(\mathbf{z}) = H(\mathbf{z}) + \Delta t H_1(\mathbf{z}) + \Delta t^2 H_2(\mathbf{z}) + \dots \quad (19)$$

で定まる Hamilton 系を厳密に積分したものと一致する. \square

要するに, symplectic 法は Hamilton 系を Hamilton 系で近似する. これが symplectic 法が「Hamilton 系に対する最強解法」とされる所以である.

注意 3 ここで次のような素朴な疑問を抱かれる読者もいるであろう: 離散勾配法と symplectic 法 (つまり Hamiltonian 保存と symplectic 性保存) はどちらがよいのか, 両方の性質を持つことはできないのか? しかし残念なことに, 実は Hamiltonian 保存と symplectic 性保存は (いくつかの単純な例外を除いて) ひとつの数値解法に共存しえないことが示されている (→ Zhong–Marsden の定理 [24]). 定理 3 の文脈で言えば, $\tilde{H} = H$ となることは実用上は決してない. そのためユーザーは, Hamiltonian 保存解法か symplectic 法か, どちらかを選ばねばならない. Symplectic 法が, 定理 3 の示すように Hamilton 系において非常に強い意味を持つのに対し, Hamiltonian 保存解法は, 解に対して自由度をたった 1 つ減らす拘束条件を課すに過ぎないから (Hamilton 系の運動する \mathbb{R}^{2d} 次元空間の中で, 解を \mathbb{R}^{2d-1} 次元の多様体上に縛るに過ぎない) 一般には Hamilton 系には symplectic 法が良いとされているが, 前述の離散勾配法はしばしば予想以上に良い性能を示すこともあり, この論争にはまだ完全な答えが得られていない. \square

注意 4 Symplectic 法は強力な手法だが, 一つ大きな欠点がある. 定理 3 中の影の Hamiltonian (19) が Δt に依存していることに注意しよう. これは, 時間発展の途中で Δt を変化させると (たとえば「適応刻み幅制御」を行う場合), その都度陰の Hamiltonian が変わってしまい, symplectic 法の良さであった「Hamilton 系を (ある定まった) Hamilton 系で近似する」という性質は失われる. 実際, 可変時間刻みで symplectic 法を動かすと, 固定刻みの場合より遙かに悪い結果になる. 一方, 前節で述べた離散勾配法では, 保存定理 1 はある時間ステップ一段に関するものであり, 次の時間ステップで Δt を変更しても構わない. \square

2.3 さらなる技法 : splitting と composition

ODE 編の最後に, “splitting method”, および “composition method” と呼ばれる特殊な技法について触れておく (これらについては適切な和名が定着していないので, 横文字のままとする). これらは必ずしも Hamilton 系 (1) に限った技法ではないが, 本稿では簡単のためにこの場合について説明する.

ある Hamilton 系の Hamiltonian が, $H = H_1 + H_2$ と 2 つの項の和で書けているとする. このとき H_1 , および H_2 は, 当然ながらそれ自体 Hamilton 系を生成する. もとの Hamiltonian H によるフロー写像を単に $\phi_{\Delta t}$, H_j ($j = 1, 2$) の生成するフロー写像をそれと区別して $\phi_{j, \Delta t}$ と書こう.

スキーム 3 (Splitting method) 時間離散化幅を Δt とするとき,

$$\phi_{\Delta t} \simeq \phi_{1, \Delta t} \circ \phi_{2, \Delta t}, \quad \text{または} \quad \phi_{\Delta t} \simeq \phi_{2, \Delta t} \circ \phi_{1, \Delta t} \quad (20)$$

を, $O(\Delta t)$ の “splitting” と呼ぶ. (“Trotter splitting” と呼ばれる.) □

これが実際 1 次の近似である, すなわち $(\phi_{1, \Delta t} \circ \phi_{2, \Delta t})(z) = \phi_{\Delta t}(z) + O(\Delta t^2)$ であることは, Taylor 展開により容易に確認できる. 上の技法は, ODE のベクトル場 (ODE の右辺ベクトルの定義する場) を 2 つに “split” して別々に時間発展に用いることに相当するため, この名が付いている. 合成をさらに複雑にすることにより, $O(\Delta t^2)$ 以上の近似も構成できる.

Splitting が具体的にもたらす御利益をいくつか挙げておこう.

- Splitting は, 「 H そのものについては解きにくい, が, H_1 と H_2 に分ければ解きやすくなる」場合に有用である. 各段は, 数値的に解いても厳密に解いても良い (→ 第 3.1 節を参照).
- Splitting で得られた合成フロー写像は, 個々のフロー写像の性質を自明に引き継ぐ. すなわち, $\phi_{j, \Delta t}$ を離散勾配法で近似すれば合成写像も Hamiltonian を保存し, symplectic 法で近似すれば結果も symplectic になる. 例えば可分な Hamiltonian に対する symplectic Euler 法 (スキーム 2) は, Hamiltonian を $T(\mathbf{p})$ と $V(\mathbf{q})$ に分離し, それに対して陽的/陰的 Euler 法に基づく splitting method を適用したと解釈できる (このとき $T(\mathbf{p})$ と $V(\mathbf{q})$ が, それぞれ Hamilton 系を生成していることに注意しよう).

次に, splitting とよく似た “composition” と呼ばれる技法を紹介する. これも写像の合成により新たな計算公式を構成する技法であるが, splitting がフローを分解することで「計算しやすく」するのが主目的であるのに対し, composition では同じフローを時間刻み幅を変えて繰り返し合成することで, 「近似精度を上げる」ことが主目的である.

ある数値解法が定義する離散フロー写像 $\phi_{\Delta t}$ が「対称」, すなわち $\phi_{\Delta t} = \phi_{-\Delta t}^{-1}$ であるとする (この表現は分かりにくい, が, 大雑把に言えばいわゆる Crank–Nicolson スキームのように, 計算公式の右辺が $\mathbf{z}^{(m+1)}$ と $\mathbf{z}^{(m)}$ に関して対称であるような解法のことである).

スキーム 4 (Composition method ; Suzuki [21], Yoshida [23] など) $\phi_{\Delta t}$ が, 近似次数 p (すなわち大域誤差が $O(\Delta t^p)$) の対称な一段法であるとする. このとき,

$$\gamma_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/(p+1)}}, \quad \gamma_2 = -\frac{2^{1/(p+1)}}{2 - 2^{1/(p+1)}}$$

を満たす実数 γ_1, γ_2 が存在し, それによる対称な合成:

$$\phi_{\gamma_1 \Delta t} \circ \phi_{\gamma_2 \Delta t} \circ \phi_{\gamma_1 \Delta t} \quad (21)$$

は, 近似次数が少なくとも $p + 2$ の近似解法を与える. □

証明は、再び Taylor 展開による。

上の composition (21) において、 $\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_1 = 1$ であり、時間刻み幅 Δt を 3つのステップに分けて進めることに相当していることに注意しよう。Composition method は、(対称な、という制限はつくが) ある一段法を手に入れたら、それを刻み幅を変えて 3回連続して用いるだけで近似次数が上がるという、魔法のような技法である。プログラム上も、「 \sim という計算公式で Δt だけ時間発展した解を返す」という手続きを作りさえすれば、あとはそれを 3回 Δt を変えて呼び出せば良く極めて使い勝手がよい。しかも splitting と同様、composition により得られた合成公式は、Hamiltonian 保存や symplectic 性保存など、もとの公式が持っていた性質をすべて引き継ぐ。

Composition method は、Hamiltonian 保存解法を高精度化するのはもちろん、symplectic Euler 法を巧妙に対称化した symplectic 法に基づき、高精度な symplectic 法を構成するのにも使われている。

反面、Composition には以下の欠点もある。

- 次数を上げるために composition を繰り返すと、同じ Δt 時間発展するために大元の計算公式を呼び出す回数がべき乗で増えていく (2次→4次で3回, 4次→6次で $3^2 = 9$ 回, …)。
- 一般に composition には、絶対値が 1 を超える係数が含まれており (例えば上の例では $|\gamma_2| > 1$)、合成公式はもとの計算公式よりも安定性が悪化する。これは composition を繰り返すほど悪化する。
- 同様に、composition には負の係数が必ず含まれるため、本質的に時間対称でない問題 (たとえば摩擦の入った Hamilton 系などエネルギー散逸系) には向かない (エネルギーが散逸する順方向への時間発展の中に、物理的要請に逆行する逆方向の時間発展が入るため、定性的におかしな現象を生成することがある)。

これらの欠点を解消する努力はいまだに続けられているが、本稿執筆時点で決定的な解決にはいまだ至っていない。

3 偏微分方程式に対する構造保存差分スキーム

前節までで、ODE に対する構造保存差分スキームについて概観した。次に PDE の場合を考えよう。PDE の場合、前節のように一般的に論じようとすると記号が複雑になりすぎるため、ここでは例題として 3次非線形 Schrödinger 方程式 (NLS) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + i |u|^2 u \tag{22}$$

を考える。ただし $i = \sqrt{-1}$ は虚数単位で、通常 NLS を論じる際はこれを左辺に置いて $i u_t = \dots$ の形で考えるが、Hamilton 系 ODE との対応をより見やすくするため、ここでは敢えて右辺に入れてある。空間方向は区間 $[0, L]$ 上で考え、周期的境界条件を課すものとする。 $u(x, t)$ は複素関数である。以下では複素共役は \bar{u} で表記する。

この設定下で、NLS の解は次の保存量を持つ。

$$J(u) = \int_0^L G(u, u_x) dx, \quad G(u, u_x) = -i |u_x|^2 + i \frac{|u|^4}{2}. \tag{23}$$

これは、NLS が次のように抽象表現されることから直ちに導かれる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\delta G}{\delta \bar{u}}, \quad \frac{\delta G}{\delta \bar{u}} = \frac{\partial G}{\partial \bar{u}} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial u_x}, \tag{24a}$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = -\frac{\delta G}{\delta u}, \quad \frac{\delta G}{\delta u} = \frac{\partial G}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial u_x} = -\overline{\frac{\delta G}{\delta \bar{u}}}. \tag{24b}$$

なお、 $\delta G/\delta u$ 等は、 G の u に関する変分導関数である。これを用いると保存性はほぼ自明である。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} J(u) &= \int_0^L \left(\frac{\partial G}{\partial u} u_t + \frac{\partial G}{\partial u_x} u_{xt} \right) + (\text{c.c.}) dx = \int_0^L \left(\frac{\partial G}{\partial u} u_t - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial u_x} u_t \right) + (\text{c.c.}) dx \\ &= \int_0^L \left(\frac{\delta G}{\delta u} u_t + \frac{\delta G}{\delta \bar{u}} \bar{u}_t \right) dx = \int_0^L \left(\frac{\delta G}{\delta u} \cdot \frac{\delta G}{\delta \bar{u}} + \frac{\delta G}{\delta \bar{u}} \cdot \left(-\frac{\delta G}{\delta u} \right) \right) dx = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

ただし「(c.c.)」は、直前の項の複素共役を表す略号である。第二の等号では部分積分を行った。第3の等号では変分導関数の定義を用いている。このほか、3次 NLS は無限個の保存量を持つ可積分系であり、Hamiltonian PDE と呼ばれるクラスに入ることが知られている。実際、上の表現 (24a), (24b) は、ODE における勾配が変分導関数 (=無限次元空間における勾配) に変わっただけで、Hamilton 系の形をしている。

注意 5 ODE の場合と異なり、PDE に対する構造保存数値解法の研究はまだあまり進んでおらず書籍の形で参照できるものは少ない。前掲の Leimkuhler–Reich [14] に Hamiltonian PDE に関する記述があるほか、第 3.2 節で説明する離散変分法の成書が Furihata–Matsuo [8] にある。書籍ではないが、[2, 3] にある程度まとまったサーベイがある。NLS に関する文献はおびただしく、ここでは割愛する。□

3.1 ODE に帰着させる方法

NLS のような対称性の高い PDE に対して構造保存解法を考えるには、まず適切な空間離散化により、ある程度対称性を保ったまま ODE 化するのが第一の方法である。

いま時間・空間変数のうち、空間変数 x だけを、等間隔格子 (格子幅 $\Delta x = L/N$, N は離散化点数) で離散化することを考える。半離散化した解変数を $u_k(t)$ ($k = 0, \dots, N$) と置く。以下では、区間 $[0, L]$ ($0 \leq k \leq N$) の外の格子点を参照する際は、周期的境界条件で適宜区間内に折り返して解決するものとする。

さて、いま 2 階微分を標準的な中心差分作用素 $\delta_k^{(2)} u_k = (u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1})/\Delta x^2$ で近似した、次の差分スキームを考えよう。

スキーム 5 (NLS の半離散スキーム) $m = 0, 1, 2, \dots$ に対して、

$$\frac{d}{dt} u_k = i\delta_k^{(2)} u_k + i|u_k|^2 u_k \quad (k = 0, \dots, N-1). \quad (26)$$

□

これは、実は次の意味で Hamilton 系を成す。いま、

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \left(-i|\delta_k^+ u_k|^2 + i\frac{|u_k|^4}{2} \right) \Delta x \quad (27)$$

と置く。ただし $\delta_k^+ u_k = (u_{k+1} - u_k)/\Delta x$ は通常の前進差分作用素である。

定理 4 (半離散スキームの成す Hamilton 系) スキーム 5 は、式 (27) で定義される H を Hamiltonian として Hamilton 系を成す。すなわち、いま $\mathbf{u} = (u_0, \dots, u_{N-1})^\top$ と置くと、

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \bar{\mathbf{u}} \end{pmatrix} = J\nabla H. \quad (28)$$

ただしここにおける ∇ は、 \mathbf{u} , $\bar{\mathbf{u}}$ に関する勾配を表す。□

証明. H の第 2 項から $|u_k|^2 u_k$ が現れるのは自明だから、第 1 項だけを考える。このとき

$$\frac{\partial H}{\partial u_k} = \frac{\partial}{\partial u_k} \left(-i \left| \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} \right|^2 - i \left| \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x} \right|^2 \right) = -i \left(-\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x} + \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x} \right) = i \delta_k^{(2)} \overline{u_k}.$$

□

つまり、この離散化で NLS は標準的な Hamiltonian ODE に帰着しているから、あとは前節で説明した方法を用いればよい。

このように「適切に」離散化する方法は、あまり系統的に論じた文献がないが、専門家の間では事実としてよく知られている。上では簡単のため低次の差分作用素の場合を示したが、差分の高次極限の特別な場合に該当する、いわゆる「スペクトル差分」の場合にも同様の議論が成立する。スペクトル差分とは、 F を離散 Fourier 変換の行列、 D を対角に ik を並べた行列とするとき (k は整数で、 ik は解を $\exp(ikx)$ で Fourier 展開した際の微分を表す)、 p 階微分を $F^{-1} D^p F u$ で求める方法であり、一般の PDE に対するいわゆる Fourier スペクトル法で標準的に用いられている微分近似である (例えば Fornberg [6] を参照)。

この事実に注意すると、NLS の数値解法に関して、興味深いひとつの側面が浮かび上がる。NLS の代表的な数値解法として、「split step Fourier 法」というものがよく知られている。これは NLS 右辺の第 1 項、第 2 項を切り離した 2 つの方程式：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = i |u|^2 u$$

を交互に解き、さらに第一の方程式を解く際、微分にはスペクトル微分を用いる方法である。これは元来、物理学者により物理的イメージに基づいて考え出されたものであるが (NLS 右辺の第 1 項は波動の分散性を、第 2 項は非線形性による波の「自己収束」効果を現しているが、それらが単独で現れるような特殊な媒質を波が交互に通過していくイメージ)、上のようにすれば 2 本の微分方程式が簡単に解けるという実装上の利点も見逃せない。2 本目は単なる ODE だし、1 本目は有限項の Fourier 級数に展開してしまえば解析的に簡単に解ける。

本稿の視点から見れば、split step Fourier 法は実は式 (23) の Hamiltonian を

$$J_1(u) = \int_0^L (-i |u_x|^2) dx, \quad J_2(u) = \int_0^L i \frac{|u|^4}{2} dx$$

と 2 つに分離し、微分をスペクトル微分で置き換えて 2 つの Hamilton 系 ODE を得た上で、それに対して前節で述べた “splitting method” を適用したことに他ならない。各々の Hamilton 系 ODE は厳密に、つまり symplectic に解けるから、これは symplectic 法のひとつを与えていることが分かる。Split step Fourier 法は、その性能の高さから物理学者の間で盛んに用いられてきたが、Störmer–Verlet 法の場合と同様に、その優位性の数学的根拠は以上の構造保存数値解法としての解釈が確立されて初めて理解されたと言える。

以上の事情と、その観察に基づいてさらなる計算公式拡張が可能であることは、構造保存数値解法の専門家には (少なくとも現在は) 知られているが、例えば日本語では佐々・吉田 [19] に丁寧な解説と研究成果がある。

注意 6 本節で述べたことは、他の Hamiltonian PDE でも例がある。たとえば Maxwell 方程式に対する代表的な数値解法である FDTD 法 (Finite Difference Time Domain 法; Yee [22]) も、現在では symplectic 法の一種と見なせることが分かっており、その視点に基づく拡張の取り組みも始められている (例えば Saito–Suzuki–Takahashi [17]などを参照)。 □

3.2 PDE を直接取り扱う方法：離散変分法

前節で、NLS を Hamilton 系 ODE に帰着させて解く方法を概観した。一方我が国には、そもそも PDE を PDE として直接扱う方法が存在する。降旗・森による「離散変分法」(“discrete variational derivative method”) [7] がそれであり、元来は相分離を記述する、数値的に極めて不安定な Cahn–Hilliard 方程式を安定に解くために開発された技法であるが、その後盛んに研究が行われ、いまでは幅広いクラスの PDE に適用可能な、「PDE 専用の構造保存数値解法 (を構成する方法)」として、世界的にも定着している。本節では、この離散変分法の概要について述べる。より詳細については、同手法の全体をまとめた成書の参照を薦める [8]。

再び NLS (22) を考えよう。前節で、ある標準的差分スキームが、実は半離散版の保存量 $H(\mathbf{u})$ (式 (27)) を Hamiltonian としてその勾配系で得られることを指摘した。そこで導出の機構には深入りしなかったが、これは大雑把に言えば、元来無限次元の勾配である変分導関数を直接考える代わりに、一旦連続版の保存量 $J(u)$ (式 (23)) を差分化、つまり有限次元化し、その上で (有限次元版の通常の) 勾配を考えたことに相当している。この手続きを短縮し、最初から直接「有限次元版の変分導関数」を考えるのが、離散変分法の概略である。

NLS の変分形 (24a), (24b) から出発する。我々は保存量の証明 (25) を離散系で再現したいが、そのための鍵となるのは証明 (25) のうち、

$$\frac{d}{dt} J(u) = \int_0^L \left(\frac{\delta G}{\delta u} u_t + \frac{\delta G}{\delta \bar{u}} \bar{u}_t \right) dx$$

の部分である。いま時間・空間の両方を完全に離散化した近似解を $U_k^{(m)} \simeq u(k\Delta x, m\Delta t)$ と書くとき (これをベクトルとして $\mathbf{U}^{(m)}$ などとも書く)、上の式変形の真似をして、

$$\begin{aligned} \frac{J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - J_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \sum_{k=0}^{N-1} \left(\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \frac{\overline{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}}{\Delta t} \right) \Delta x \end{aligned} \quad (29)$$

を満たす離散量：

$$\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k}, \quad \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \quad (30)$$

が発見できたでしょう。ただし

$$J_d(\mathbf{U}^{(m)}) = \sum_{k=0}^{N-1} \left(-i|\delta_k^+ U_k^{(m)}|^2 + i \frac{|U_k^{(m)}|^4}{2} \right) \Delta x \quad (31)$$

は、連続版の保存量 $J(u)$ の近似のつもりであり、我々はこの量の保存を目指している。

式 (29) は、この離散保存量の時間方向の差分が、「 u_t のようなもの」= 「 $(U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)})/\Delta t$ 」と、「 u_t の前に現れる量」= 「式 (30) に挙げた離散量」の積に分解できることを要請していると考える。ここで u_t (あるいは $(U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)})/\Delta t$) は、時間方向への変分量 (離散の変分量) に相当しているから、その前に出現する量は変分導関数 (離散的な変分導関数) のはずである。この観察をもとに、式 (30) の量を「離散変分導関数」と呼ぶ。以上の説明は、数学的には曖昧であり、もっとはっきりした定義を与えることもできるが、一定の準備が必要となるため本稿では割愛する ([8]などを参照)。

前述の離散勾配法の場合と同様に、式 (30) を満たす離散変分導関数をどうやって見つけるかはひとまずさておき、そういうものが見つかったと仮定して、先に差分スキームを構成する。連続版の変分形の真似をして、次のようにスキームを構成するのは自然な一案であろう。

スキーム 6 (NLS に対する離散変分スキーム) $m = 0, 1, 2, \dots$ に対して, 式 (24a) に対応して

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \quad (k = 0, \dots, N-1). \quad (32)$$

(このとき同値な複素共役表現として, 式 (24b) に対応して

$$\frac{\overline{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}}{\Delta t} = -\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \quad (k = 0, \dots, N-1)$$

であるが, 計算公式としては (32) だけを考えれば十分である.) □

このように構成したスキームは, 自明に保存的となる.

定理 5 (NLS 離散変分スキームの保存性) スキーム 6 は, 次を満たす意味で保存的である.

$$J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) = J_d(\mathbf{U}^{(m)}) \quad (m = 0, 1, 2, \dots).$$

□

証明. 連続版 (25) と全く同様に示される. 実際式 (29) より直ちに

$$\begin{aligned} \frac{J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - J_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} &= \sum_{k=0}^{N-1} \left(\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \frac{\overline{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}}{\Delta t} \right) \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} \left(\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \cdot \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \cdot \left(-\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \right) \right) \Delta x \\ &= 0. \end{aligned} \quad (33)$$

□

上の流れは, Hamilton 系 ODE に対する離散勾配法と全く同じである. ODE の場合, Hamiltonian の保存性は Hamilton 系の形 (1) に本質的に起因していて, Hamiltonian の具体形には依らない. 同様に NLS における $J(u)$ の保存性は, 変分形 (24a) (および同値な (24b)) に起因していて, $J(u)$ の具体形は本質的に重要ではない. 離散勾配法や離散変分法は, 保存性を目指すための鍵としてこの事実に着目し, 勾配ないし変分という数学的操作そのものを離散化することで, 保存性を自動的に担保している. この離散化のやり方は, 方程式そのものを睨んで各項を離散化する通常やり方と対照的である. 後者の場合, その背後にある勾配構造ないし変分構造が離散版で再現される確率はほとんどゼロであり, 保存性は一般に失われる.

注意 7 上述のように, 離散勾配法と離散変分法は密接な関係にある. 離散変分法は元来 PDE に対して直接作用するものとして提案されたが, 現在ではこれは「空間方向の適切な離散化」と「時間方向の適切な離散化」の組み合わせであり, その時間方向の離散化は離散勾配法の一つと見なせることが理解されている. つまり本稿では, 便宜上「ODE に帰着させる方法」と「PDE を直接扱う方法」を分けて説明したが, 両者を関連づけてひとつの大きな枠組として理解することが可能である.

ただし離散変分法は, 欧米における構造保存数値解法研究と独立して, あくまで日本で独自に発見されたものであり, この点は (特に日本人研究者の我々により) 明確に主張されなくてはならない. □

さて、それではいよいよ式 (29) を満たす離散変分導関数の構成に移ろう。離散勾配法の場合と同様に、これには任意性がある。離散変分法の一般的手続きでは、比較的良好とされる選択が公式として与えられているが、ここではより素朴に発見的に見つける方法について述べよう（公式と、ここで述べる発見的な方法の両方は、[8] に詳述されている）。

NLS の場合で、上に挙げた離散保存量 (31) から出発して、式 (29) を満たす離散変分導関数を見つけたいとする。そのためには式 (29) 左辺を素朴に計算してみればよい。

$$\frac{J_d(\mathbf{U}^{(m+1)}) - J_d(\mathbf{U}^{(m)})}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \left(-i|\delta_k^+ U_k^{(m+1)}|^2 + i\frac{|U_k^{(m+1)}|^4}{2} \right) - \left(-i|\delta_k^+ U_k^{(m)}|^2 + i\frac{|U_k^{(m)}|^4}{2} \right) \right\} \Delta x. \quad (34)$$

ここで、前節ですでに用いた「降旗分解」(9) を用いると、まず 4 乗の項について

$$\begin{aligned} \frac{|U_k^{(m+1)}|^4}{2} - \frac{|U_k^{(m)}|^4}{2} &= \frac{|U_k^{(m+1)}|^2 + |U_k^{(m)}|^2}{2} \times \\ &\quad \frac{1}{2} \left\{ (U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}) \overline{(U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)})} + (U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}) \overline{(U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)})} \right\} \end{aligned} \quad (35)$$

である。\$|U_k^{(m+1)}|^2 - |U_k^{(m)}|^2 = U_k^{(m+1)} \overline{U_k^{(m+1)}} - U_k^{(m)} \overline{U_k^{(m)}}\$ に対して降旗分解を用いたことに注意しよう。次に差分項 \$|\delta_k^+ U_k^{(m)}|^2\$ について考える。それにあたり微積分における部分積分公式に対応する、次の形の「部分積分」公式：離散周期的境界条件を満たす任意の数列 \$\{f_k\}, \{g_k\}\$ に対して、

$$\sum_{k=0}^{N-1} f_k (\delta_k^+ g_k) \Delta x = - \sum_{k=0}^{N-1} (\delta_k^- f_k) g_k \Delta x, \quad (36)$$

に注意しよう。ただし \$\delta_k^- f_k = (f_k - f_{k-1})/\Delta x\$ は通常の交代差分作用素であり、その他の差分作用素とは、\$\delta_k^+ \delta_k^- = \delta_k^- \delta_k^+ = \delta_k^{(2)}\$ の関係がある（これらの証明は [8] などにあるが、差分作用素を展開して確かめるのは容易である）。この準備のもと、和分記号 \$\sum_{k=0}^{N-1}\$ 下で、

$$\begin{aligned} &\sum_{k=0}^{N-1} \left\{ |\delta_k^+ U_k^{(m+1)}|^2 - |\delta_k^+ U_k^{(m)}|^2 \right\} \Delta x \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \delta_k^+ (U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}) \cdot \overline{\delta_k^+ (U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)})} + \delta_k^+ (U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}) \cdot \overline{\delta_k^+ (U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)})} \right\} \Delta x \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \delta_k^{(2)} (U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}) \cdot \overline{(U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)})} + \delta_k^{(2)} (U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}) \cdot \overline{(U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)})} \right\} \Delta x. \end{aligned} \quad (37)$$

以上で、\$(U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)})\$ の項を括り出せた。係数を合わせて整理すれば、結局、

$$\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} = i\delta_k^{(2)} \left(\frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}}{2} \right) + i \left(\frac{|U_k^{(m+1)}|^2 + |U_k^{(m)}|^2}{2} \right) \left(\frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}}{2} \right), \quad (38a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} &= -i\delta_k^{(2)} \left(\frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}}{2} \right) - i \left(\frac{|U_k^{(m+1)}|^2 + |U_k^{(m)}|^2}{2} \right) \left(\frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}}{2} \right) \\ &= -\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})_k} \end{aligned} \quad (38b)$$

となる。これらが、実際連続版の変分導関数の適切な近似となっていることに注意しよう。

スキーム 6 に上記の離散変分導関数を代入すれば、具体的な計算公式がひとつ定まる。実はこの公式は、Delfour–Fortin–Payre [5] による著名なスキーム (NLS の数値解析研究者の間では DFP スキームとして名前が通っている) と結果として一致する。ただし DFP スキームではスキームの導出は与えられておらず、また境界条件を無視して無限区間の設定下で議論が行われたに過ぎない。離散変分法では、現実的な境界条件下でスキームを導出し、保存性を厳密に議論できる。本稿では簡単のため周期的境界条件の場合に限って述べたが、Dirichlet 境界条件などより一般的な場合にも上の手続きは拡張可能である [8]。

いくつか注意を述べておく。

- 式 (37) の変形は、あくまで和分記号下でなければ行えない (許されない) 点に注意が必要である。これは、本来変分計算には部分積分が含まれている (→式 (25) の 2 番目の等号を参照) ことに対応している。
- スキーム 6 に式 (38a) (ないし (38b)) の離散変分導関数を組み合わせた差分スキームは、時間方向には対称なスキームになっている (右辺が $U_k^{(m+1)}$ と $U_k^{(m)}$ に関し対称であることに注意)。ゆえにこのスキームの次数は自明に $O(\Delta t^2)$ である。また空間方向には中心差分作用素をとっており、やはり次数は $O(\Delta x^2)$ である。
- 上と関連して、この差分スキームは前述の composition method によって簡単に次数を上げられる。その場合の保存性も自明である。また空間方向の次数は、周期的境界条件下という特殊な状況下に限られるが、スペクトル微分と組み合わせて高精度化することが可能である。以上 2 点の性質は、(保存系に対する) 離散変分法が共通して持つ性質である。
- 一方で、この差分スキームは明らかに陰的非線形である。すなわち、空間方向の離散化点数を N とすると、時間発展の一段にあたり N 本の連立非線形方程式を解かねばならない。これは計算量的に喜ばしくないことだが、さらに Newton 法によるのであれば、ヤコビアンを解析的に与えるのか、数値的に与えるのかといった二次的な問題でも頭が痛い。本稿著者の経験によれば、しばしばいわゆる数値 Newton 法 (Powell の hybrid アルゴリズムなど、解くべき方程式 $f(x) = 0$ の関数 $f(x)$ を与えるだけで、適宜数値ヤコビアンなどを用いながらとにかく解を探してくれる方法) でも十分であるものの、科学・工学の最先端で超大規模な問題を解いている方々からは、この 1 点だけをもってしても、離散変分法は今なお実用的とは言えないと思われるようである。

ひとつの緩和策として、保存量 (31) を多段に ($U_k^{(m)}$ だけでなく $U_k^{(m+1)}$ も参照して良いというふうに) 緩和することで、そこから離散の変分で得られる保存スキームを陰的線形化する (線形方程式をひとつ解くだけで良いようにする) 方法も開発されている。ただしそれにより一般的に安定性は失われ、何のために保存スキームを構成しているのか分からなくなることもある。この点についてはいままなお研究が続いている。

4 まとめとその他の話題

本稿では、Hamilton 系を成す常微分方程式 (ODE) と偏微分方程式 (PDE) に対する「構造保存数値解法」について概観した。ODE に関しては Hamiltonian を保存する「離散勾配法」とフロー写像の symplectic 性を保存する「symplectic 法」を述べた。PDE に関しては、Hamiltonian PDE である非線形 Schrödinger 方程式 (NLS) を例に取り、ODE に帰着させて上述の手法を用いる方法と、PDE を直接取り扱う「離散変分法」について述べた。これらいずれの方法においても、Runge–Kutta 法などの汎用解法とは異なり、対

象とする問題の構造を何らかの意味で離散系でも保存して、それにより優れた数値解法を作ろうというのが基本的な思想である。

冒頭に述べたように、類似の研究は可積分系の文脈でも数多く成されている。ただ、本稿著者の私見を述べるならば、可積分系の分野では「問題の特殊性をどんなにたくさん使っても良いからとにかくベストなものを作ること」に興味があり（むしろ個別の問題の特殊性をどこまで完全に拾えるか、ということであろうか）、一方数値解析における構造保存数値解法の分野では、「汎用解法よりは問題の特殊性を使うが、ある程度広い問題クラスに適用可能な一般原理を見つけること」に興味があるというふうに、目的意識が若干異なっているように思われる。

可積分系と構造保存数値解法分野の興味の違いを端的に示す例として、印象的な次のものを挙げておこう。初等的な力学問題である Kepler 問題は、数値解法のベンチマーク問題としてよく使われる。これも Hamilton 系であるので、Hamiltonian を保存する差分スキームを、本稿で説明した方法で構成することができる。実はこのとき、Kepler 問題の残りの保存量：角運動量と Runge-Lenz ベクトルのうち、角運動量も保存することが示せるが（これは角運動量がほぼ自明な線形保存量であることに起因する）、Runge-Lenz ベクトルは保存されず、実際に数値計算してみると Kepler 運動の楕円軸が回転してしまう現象が観察される。このように複数の保存量を持つ系に対して、複数の保存量を再現する数値解法を構成できるかどうかは、数値解析の構造保存数値解法分野でも盛んに議論されてきたトピックであり、いくつかの研究成果があるが（たとえば Dahlby-Owren-Yaguchi [4] とその中の参考文献を参照）、自然なものが発見されているとは言い難いように本稿著者には感じられる。その意味で、上述の Kepler 問題に対する自然な全保存スキームが存在するかどうかについては、数値解析では長らく未解決であって、本稿著者などは肯定的解決法の存在に懐疑的であったところに、峯崎・中村によりその存在が示されたのは衝撃的であった [15, 16]。ただし峯崎・中村の結果は Kepler 問題の特殊性を駆使しており、その結果が直ちに任意の保存系に拡張できるわけではない（本稿執筆時点までに、Kepler 問題より若干一般的な系までは拡張できているようである）。この意味で、数値解析で言うところの「構造保存数値解法」に峯崎・中村の特殊なスキームが入るかどうかは議論の余地がある。

以上のように可積分系と構造保存数値解法分野では立場の差があるが、しかし今後は、可積分系と構造保存数値解法間で、分野の垣根を越えてより密接に相互発展していくことが望まれる。本稿がその一助となれば望外の幸せである。

最後に、再び数値解析における構造保存数値解法に戻って、本稿で述べられなかった話題について簡単に触れておく。

まず ODE については、本稿で述べた保存系以外にも構造保存数値解法を考え得る。例えば注意 2 で述べた散逸系や、高周波の振動成分を含む系（“highly-oscillatory systems”）などで、やはり特殊な数値解法が有利となる場合がある。これらについては、[11] が詳しい。

PDE に対しては、前述のとおり ODE の場合よりも遙かに研究は未開拓である。個別の問題に対して構造保存数値解法が研究された例は多いが、ある程度広いクラスに適用できる手法は数少ない。現時点でまとまっているものは前述の離散変分法が一例である。Hamiltonian PDE に対しては、Hamilton 系 ODE における symplectic 性を自然に無限次元に拡張した “multi-symplecticity” という概念が知られており、それを離散版でもある程度再現する multi-symplectic 法と呼ばれる数値解法群が盛んに研究されている。同法については Leimkuhler-Reich [14] に解説と参考文献がある。なお本稿で説明した「Hamiltonian PDE を Hamilton 系 ODE に落として symplectic 法を適用する方法」で得た symplectic スキームと、この multi-symplectic スキームは、似た概念に基づいてはいるが一致しない。Hamiltonian PDE に対して、Hamiltonian 保存スキームを含めてどの手法が一番適しているかも未解決問題である。

また本稿では差分スキームについてのみ述べたが、離散変分法は有限要素法版を考えることも可能である。これについても Furihata-Matsuo [8] にある程度の解説と参考文献がある。ただし離散変分法は、本文

で述べたとおり一般に非線形スキームを導き計算量が大きい難点があり、通常有限要素法で解かれている大規模問題に対して、有限要素法版離散変分法がどこまで実用的かはこれからの検証を待たねばならない。現在、本稿著者らのチームでは、この点を集中的に研究中である。その他、構造保存的な空間離散化を外積代数に基づいて研究する試みもあり（たとえば [1, 20] などを参照）、離散変分法にこれらを組み込む研究（換言すれば離散勾配法と組み合わせる研究）も一部で始まっている。

以上の研究を除けば（と言っても本稿は必ずしも完全に網羅的であることは意図していないが）、PDEにはいまだ莫大に未踏領域が残されている。ひとつの理由は、比較的問題群が単純な ODE と比べて、PDE は範囲が広すぎて、構造保存数値解法を考えるのに適切な問題クラスを設定するのが難しいことにある。今後は、そもそも「どのような問題クラスを設定しうるか」を見つけること自体が重要な研究となる。

参 考 文 献

- [1] Arnold, D. N., Bochev, P. B., Lehoucq, R. B., Nicolaidis, R. A. and Shashkov, M. (eds.), *Compatible Spatial Discretizations*, in *The IMA Volumes in Mathematics and Its Applications*, Springer, New York, 2006.
- [2] Budd, C. and Piggott, M. D., *Geometric integration and its applications*, in *Handbook of Numerical Analysis*, XI, North-Holland, Amsterdam, 2003, 35–139.
- [3] Christiansen, S. H., Munthe-Kaas, H. Z. and Owren, B., *Topics in structure-preserving discretization*, *Acta Numerica*, **20** (2011), 1–119.
- [4] Dahlby, M., Owren, B. and Yaguchi, T., *Preserving multiple first integrals by discrete gradients*, *J. Phys. A*, **44** (2011), 3052005.
- [5] Delfour, M., Fortin, M. and Payre, G., *Finite-difference solutions of a non-linear Schrödinger equation*, *J. Comput. Phys.*, **44** (1981), 277–288.
- [6] Fornberg, B., *A Practical Guide to Pseudospectral Methods*, in *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [7] 降旗 大介, 森 正武, *偏微分方程式に対する差分スキームの離散的変分による統一的導出*, *日本応用数理学会論文誌*, **8** (1998), 317–340.
- [8] Furihata, D. and Matsuo, T., *Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations*, CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [9] Gonzalez, O., *Time integration and discrete Hamiltonian systems*, *J. Nonlinear Sci.*, **6** (1996), 449–467.
- [10] Greenspan, D., *Discrete Models*, in *Applied Mathematics and Computation*, Addison-Wesley Publishing Co., Reading, 1973.
- [11] Hairer, E., Lubich, C. and Wanner, G., *Geometric Numerical Integration*, Springer-Verlag, Heidelberg, 2002.
- [12] Ishimori, Y., *A high-order energy-conserving integration scheme for Hamiltonian systems*, *Phys. Lett. A*, **372** (2008), 1562–1573.
- [13] Itoh, T. and Abe, K., *Hamiltonian-conserving discrete canonical equations based on variational difference quotients*, *J. Comput. Phys.*, **76** (1988), 161–183.

- [14] Leimkuhler, B. and Reich, S., *Simulating Hamiltonian Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [15] Minesaki, Y. and Nakamura, Y., A new discretization of the Kepler motion which conserves the Runge–Lenz vector, *Phys. Lett. A*, **306** (2002), 127–133.
- [16] Minesaki, Y. and Nakamura, Y., A new conservative numerical integration algorithm for the three-dimensional Kepler motion based on the Kustaanheimo–Stiefel regularization theory, *Phys. Lett. A*, **324** (2004), 282–292.
- [17] Saito, I., Suzuki, Y. and Takahashi, N., The symplectic finite difference time domain method, *IEEE Trans. Magn.*, **37** (2001), 3251–3254.
- [18] Sanz-Serna, J. M. and Calvo, M. P., *Numerical Hamiltonian Problems*, Applied Mathematics and Mathematical Computation 7, Chapman & Hall, London, 1994.
- [19] 佐々成正, 吉田春夫, 非線形 Schrödinger 方程式に対する symplectic 数値解法, 日本応用数学会論文誌, **10** (2000), 119–131.
- [20] Shashkov, M., *Conservative Finite-Difference Methods on General Grids*, CRC Press, Boca Raton, 1996.
- [21] Suzuki, M., Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations, *Phys. Lett. A*, **146** (1990), 319–323.
- [22] Yee, K., Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media, *IEEE Trans. Ant. Prop.*, **14** (1966), 302–307.
- [23] Yoshida, H., Construction of higher order symplectic integrators, *Phys. Lett. A*, **150** (1990), 262–268.
- [24] Zhong, G. and Marsden, J. E., Lie–Poisson Hamilton–Jacobi theory and Lie–Poisson integrators, *Phys. Lett. A*, **133** (1988), 134–139.