

Webster 方程式に対する離散勾配法と その力学的不変性について

石川歩惟¹, 谷口隆晴²

¹ 神戸大学 工学部 情報知能工学科.

² 神戸大学 大学院 システム情報学研究科 計算科学専攻.

1 研究の背景

本研究では, Webster 方程式

$$Sp_t = -\gamma u_x, \quad \frac{1}{S}u_t = -\gamma p_x \quad (1)$$

に対して離散勾配法を適用し, エネルギーを保存する数値解法を導出する. Webster 方程式は, 人間の声帯や楽器の管などの音声系の現象を扱ったモデルであり, 音声認識・合成の分野において話者認識や難聴者用補助器の研究などに応用されている. p は声道や管内の圧力, u は空気の体積流量を表す. S は声道や管の断面積を表し, 位置 x に依存する関数である. また, γ は空気の流速 c と声道や管の長さ L を用いて $\gamma = c/L$ と定義される. なお, この方程式は無次元化されており, 本研究では区間 $[0, 1]$ 上で考える.

Webster 方程式に対する数値解法としては, スタッガード格子を用いた方法が Bilbao によって既に提案されている [3]. Bilbao はスキームのエネルギー挙動などについても考察しているようであるが, その導出は技術的なもので, 力学的に自然な離散化は行われていない. しかし, 音波の数値計算は現象のスケールに比して長時間であるため, 構造保存型数値解法が必要不可欠である. そこで本研究では, 離散勾配法と呼ばれるエネルギー保存スキームの導出を目指した手法を用いて Webster 方程式の離散化を行う.

Webster 方程式の特徴は x の関数 $S(x)$ が用いられていることである. そこで, 離散勾配法を適用する際に必要となる内積に, この $S(x)$ や γ を重み関数として用いることを考える. 実際に Arnold [2] でも, 重み関数の選び方によっては, ハミルトン方程式が係数の少ない, シンプルな形で書けるということが言及されている. 一般に, 係数の少ないスキームは良い結果を与えやすいことが経験的に知られている.

本研究では, Webster 方程式に現れる関数 $S(x)$ を用いた重みつき内積を用いることによって, このような簡潔なスキームを導出し, 通常の内積を用いた場合のスキームとの比較を行った. その結果, 予想に反してスキームは内積によらずに一致することが分かった. このことは, ハミルトン方程式に対する離散勾配法がある種の幾何学的不変性をもつことを示唆する.

2 一般の内積空間における離散勾配法

本研究では内積が重要な役割を果たす。そこで、勾配や離散勾配と内積の関係についてまとめておく。

一般にハミルトン方程式は

$$u_t = M \nabla_G H \quad (2)$$

のように記述される。 H はハミルトニアンと呼ばれ、エネルギーを表す。 $\nabla_G H$ は計量 G で定められる H の勾配を表す。よく知られているように、ある関数の勾配は「その関数の等値面に垂直なベクトル」という特徴をもつ。つまり、勾配の定義には角度、従って内積が用いられる。実際、Hilbert 空間 X 上の滑らかな実数値関数 $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ の勾配 $\nabla_G f$ は、その Fréchet 微分 df から、Riesz の表現定理を用いて

$$df(\delta u) = \langle \nabla_G f, \delta u \rangle_G \quad \text{for all } \delta u \in X \quad (3)$$

を満たすように定義される [4]。ここで $\langle \cdot, \cdot \rangle_G$ は計量 G で定まる内積を表す。なお、本稿では、 G が定める内積を表す共変 2 価のテンソルや行列にも同じ記号 G を用いる。 M はこの内積に関する歪随伴作用素である：

$$\langle u_1, M u_2 \rangle_G = -\langle M u_1, u_2 \rangle_G. \quad (4)$$

注意 2.1. 以下に示すように、ハミルトン方程式を (2) の形に記述したいと思うとき、どのような内積を用いるかによって最終的に得られる形は異なる。より具体的には、勾配や M の形は用いた内積に依存する。その意味で、しばしば本稿では、内積や勾配、 M の選び方を「ハミルトン方程式の構造」と呼ぶ。

よく知られているように、ハミルトン方程式はエネルギー保存則をもつ。

定理 2.1. 方程式 (2) はエネルギー保存則

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad (5)$$

をもつ。

証明. 勾配の定義式 (3) により、 H の時間変化は

$$\frac{dH}{dt} = dH(u_t) = \langle \nabla_G H, u_t \rangle_G$$

と書ける。この式に (2) の右辺を代入すると、

$$\langle \nabla_G H, u_t \rangle_G = \langle \nabla_G H, M \nabla_G H \rangle_G$$

となる. M の歪随伴性と内積の性質から

$$\langle \nabla_G H, M \nabla_G H \rangle_G = - \langle M \nabla_G H, \nabla_G H \rangle_G = - \langle \nabla_G H, M \nabla_G H \rangle_G \quad (6)$$

であり, よってエネルギー保存則が示される:

$$\frac{dH}{dt} = \langle \nabla_G H, M \nabla_G H \rangle_G = 0. \quad (7)$$

□

注意 2.2. 上に示したエネルギー保存則の証明では, この性質が勾配の定義や M の歪随伴性を用いて示されている. そのため, 保存則の証明は, 注意 2.1 の意味でのハミルトン方程式の構造, すなわち, 勾配や M , またそれを定める内積の選び方に, 見かけ上は依存していると言える. しかし, 実は内積を用いずに証明することも可能である. これについては [1, 10]などを参照されたい.

離散勾配法では, 方程式 (2) の右辺に含まれる $\nabla_G H$ を離散勾配と呼ばれるものに置き換えることによって数値解法を導出する. まず, 必要に応じてハミルトニアン H や作用素 M , 計量 G を離散近似したものを H_d , M_d , G_d とする. ただし, M_d は非退化かつ歪随伴性を保つように離散化する. また, 離散化の必要がない場合は $H_d = H$, $M_d = M$, $G_d = G$ とする. このとき, 離散勾配法を適用すると (2) は

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = M_d \bar{\nabla}_{G_d} H_d \quad (8)$$

と離散化される. ここで u^n は $u(n\Delta t)$ の近似である. $\bar{\nabla}_{G_d} H_d$ は離散勾配と呼ばれ, 連続版の勾配の性質を保つように定義される.

定義 2.1. X を内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{G_d}$ をもつ内積空間とする. $H_d : X \rightarrow \mathbb{R}$ に対して, X 上のベクトル $\bar{\nabla}_{G_d} H_d$ が

$$\begin{cases} H_d(u) - H_d(v) = \langle \bar{\nabla}_{G_d} H_d(u, v), u - v \rangle_{G_d}, \\ \langle \bar{\nabla}_{G_d} H_d(u, u), u \rangle_{G_d} = \nabla_{G_d} H_d(u) \end{cases} \quad (9)$$

を満たすとき, $\bar{\nabla}_{G_d} H_d$ は H_d の離散勾配であるという.

注意 2.3. 通常は Hermite 内積および L^2 内積を暗に仮定して離散勾配を導出するため, 他の文献 ([7, 8] など) における離散勾配の定義は上の定義と異なる場合がある. 実際, 一般の内積空間における離散勾配法については, 詳細が記載されている文献がほとんど見当たらない. そのために, ここでは定義や性質をある程度詳細に記述しているが, この点については本研究で新規性を主張するものではない.

スキーム (8) は以下の意味でエネルギー保存則を保つ:

定理 2.2. 離散勾配法によって得られるスキーム (8) は離散エネルギー保存則

$$\frac{H_d(u^{n+1}) - H_d(u^n)}{\Delta t} = 0 \quad (10)$$

をもつ.

この定理の証明は、連続版と全く同様にして与えられる.

証明. 離散勾配の定義式 (9) により, H_d の時間変化は

$$\frac{H_d(u^{n+1}) - H_d(u^n)}{\Delta t} = \left\langle \bar{\nabla}_{G_d} H_d, \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} \right\rangle_{G_d}$$

と書ける. この式に (8) の右辺を代入すると,

$$\frac{H_d(u^{n+1}) - H_d(u^n)}{\Delta t} = \langle \bar{\nabla}_{G_d} H_d, M_d \bar{\nabla}_{G_d} H_d \rangle_{G_d}$$

となる. M_d の歪随伴性と内積の性質から

$$\langle \bar{\nabla}_{G_d} H_d, M_d \bar{\nabla}_{G_d} H_d \rangle_{G_d} = - \langle M_d \bar{\nabla}_{G_d} H_d, \bar{\nabla}_{G_d} H_d \rangle_{G_d} = - \langle \bar{\nabla}_{G_d} H_d, M_d \bar{\nabla}_{G_d} H_d \rangle_{G_d}$$

であり, よって離散エネルギー保存則が示される:

$$\frac{H_d(u^{n+1}) - H_d(u^n)}{\Delta t} = \langle \bar{\nabla}_{G_d} H_d, M_d \bar{\nabla}_{G_d} H_d \rangle_{G_d} = 0.$$

□

3 Webster 方程式のハミルトン構造

離散勾配法の適用のために, まずは Webster 方程式をハミルトン方程式 (2) の形に書き換える. Bilbao [3] に示されている Webster 方程式のエネルギーをハミルトニアン H として使用すると, H は

$$H(p, u) = \frac{\gamma^2}{2} \int_0^1 (Sp^2 + \frac{1}{S}u^2) dx \quad (11)$$

と定義される. 勾配の導出のために用いる内積を, 重み関数 $S(x), \gamma$ を用いて

$$\left\langle \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_G = \gamma^2 \int_0^1 (Sp_1 p_2 + \frac{1}{S}u_1 u_2) dx \quad (12)$$

と定義する. 以降, この内積を重みつき内積とよぶ.

H の勾配を求めるために, まず H の Fréchet 微分を求めると

$$\begin{aligned} H(p + \delta p, u + \delta u) - H(p, u) &= \frac{\gamma^2}{2} \int_0^1 \{S(p + \delta p)^2 + \frac{1}{S}(u + \delta u)^2\} dx - \frac{\gamma^2}{2} \int_0^1 (Sp^2 + \frac{1}{S}u^2) dx \\ &= \gamma^2 \int_0^1 (Sp\delta p + \frac{1}{S}u\delta u) dx + O(\delta p^2) + O(\delta u^2) \end{aligned}$$

より

$$dH\left(\begin{pmatrix} \delta p \\ \delta u \end{pmatrix}\right) = \gamma^2 \int_0^1 (Sp\delta p + \frac{1}{S}u\delta u) dx$$

となる。従って

$$dH\left(\begin{pmatrix} \delta p \\ \delta u \end{pmatrix}\right) = \left\langle \begin{pmatrix} p \\ u \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \delta p \\ \delta u \end{pmatrix} \right\rangle_G \quad (13)$$

であるから、勾配の定義 (3) より

$$\nabla_G H = \begin{pmatrix} p \\ u \end{pmatrix} \quad (14)$$

となる。さらに M を

$$M = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\gamma}{S}\partial_x \\ -\gamma S\partial_x & 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

と定めると、Webster 方程式を (2) の形

$$\begin{pmatrix} p_t \\ u_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\gamma}{S}\partial_x \\ -\gamma S\partial_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ u \end{pmatrix} \quad (16)$$

に書き換えられる。

補題 3.1. 行列 M は、条件

$$[p_2 u_1 + u_2 p_1]_0^1 = 0$$

の下で内積 G に関して歪随伴である:

$$\left\langle M \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_G = - \left\langle \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, M \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_G. \quad (17)$$

証明. M の定義と部分積分公式を用いて

$$\begin{aligned} \left\langle M \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_G &= \left\langle \begin{pmatrix} -\frac{\gamma}{S}\partial_x u_1 \\ -\gamma S\partial_x p_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_G \\ &= \gamma^2 \int_0^1 \left\{ S \left(-\frac{\gamma}{S}\partial_x u_1 \right) p_2 + \frac{1}{S} (-\gamma S\partial_x p_1) u_2 \right\} dx \\ &= -\gamma^3 \int_0^1 (p_2 \partial_x u_1 + u_2 \partial_x p_1) dx \\ &= -\gamma^3 \left[[p_2 u_1 + u_2 p_1]_0^1 - \int_0^1 (u_1 \partial_x p_2 + p_1 \partial_x u_2) dx \right] \end{aligned}$$

であるが、ここで、 $[p_2 u_1 + u_2 p_1]_0^1 = 0$ であれば、

$$\begin{aligned}
 \left\langle M \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_G &= \gamma^3 \int_0^1 (u_1 \partial_x p_2 + p_1 \partial_x u_2) dx \\
 &= -\gamma^2 \int_0^1 \left\{ S p_1 \left(-\frac{\gamma}{S} \partial_x u_2 \right) + \frac{1}{S} u_1 (-\gamma S \partial_x p_2) \right\} dx \\
 &= -\left\langle \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{\gamma}{S} \partial_x u_2 \\ -\gamma S \partial_x p_2 \end{pmatrix} \right\rangle_G \\
 &= -\left\langle \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, M \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_G
 \end{aligned}$$

となる。 □

4 離散勾配法の適用

離散勾配法を Webster 方程式に適用する。離散化の際、空間および時間方向はそれぞれ $\Delta u, \Delta t$ の刻み幅で等間隔に分割し、空間方向の分割数を N とする。 $p(j\Delta x, n\Delta t)$ の近似値を p_j^n と表し、 u や S についても同様に近似する。また、簡単のため $\bar{p}^n = (p_1^n, \dots, p_N^n)^\top$, $\bar{S} = (S_1, \dots, S_N)^\top$ などと表記し、 $\frac{1}{\bar{S}}$ は $\frac{1}{\bar{S}} = \left(\frac{1}{S_1}, \dots, \frac{1}{S_N} \right)^\top$ を表すものとする。前進差分・後退差分作用素をそれぞれ δ_x^+ , δ_x^- と書く。

まずハミルトニアン (11) および内積 (12) を

$$H_d(\bar{p}^n, \bar{u}^n) = \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j=0}^N \{ S_j (p_j^n)^2 + \frac{1}{S_j} (u_j^n)^2 \} \Delta x, \quad (18)$$

$$\left\langle \begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d} = \gamma^2 \sum_{j=0}^N (S_j p_j^n q_j^n + \frac{1}{S_j} u_j^n v_j^n) \Delta x \quad (19)$$

と離散化する。前述のように、離散勾配の導出アルゴリズムは複数存在しているが、今回は降旗の離散勾配法 (偏微分方程式に特化した方法であるため、離散変分導関数法と呼ばれる [5, 6]) と同様に計算を行う。すると、

$$\begin{aligned}
 &H_d(\bar{p}^{n+1}, \bar{u}^{n+1}) - H_d(\bar{p}^n, \bar{u}^n) \quad (20) \\
 &= \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j=0}^N \{ S_j (p_j^{n+1})^2 + \frac{1}{S_j} (u_j^{n+1})^2 \} \Delta x - \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j=0}^N \{ S_j (p_j^n)^2 + \frac{1}{S_j} (u_j^n)^2 \} \Delta x \\
 &= \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j=0}^N \{ S_j (p_j^{n+1} + p_j^n) (p_j^{n+1} - p_j^n) + \frac{1}{S_j} (u_j^{n+1} + u_j^n) (u_j^{n+1} - u_j^n) \} \Delta x
 \end{aligned}$$

$$= \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{p}^{n+1} - \bar{p}^n \\ \bar{u}^{n+1} - \bar{u}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d} \quad (21)$$

となるため、定義 2.1 より

$$\bar{\nabla}_{G_d} H_d = \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix} \quad (22)$$

は離散勾配となる。\$M\$ は、微分作用素を中心差分で近似し、

$$M_d = \begin{pmatrix} & & \frac{\gamma}{S_1} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} & & \\ & O & & \ddots & \\ & & & & \frac{\gamma}{S_N} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} \\ -\gamma S_1 \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & -\gamma S_N \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} & & \\ & & & O & \end{pmatrix} \quad (23)$$

と定める。このように離散化すると、後に補題 4.1 で示すように、歪随伴性が保たれる。

以上から離散勾配法による Webster 方程式 (1) のスキームが

$$\begin{pmatrix} \frac{p_j^{n+1} - p_j^n}{\Delta t} \\ \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\gamma}{S_j} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} \\ -\gamma S_j \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{p_j^{n+1} + p_j^n}{2} \\ \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2} \end{pmatrix} \quad (24)$$

と導出される。このスキームは、係数が非常に少なくシンプルな形をしている。

補題 4.1. 行列 \$M_d\$ は、条件

$$u_0 q_{-1} + q_0 u_{-1} + p_0 v_{-1} + v_0 p_{-1} - u_N q_{N+1} - p_N v_{N+1} - q_N u_{N+1} - v_N p_{N+1} = 0 \quad (25)$$

の下で内積 \$G_d\$ に関して歪随伴である:

$$\left\langle M_d \begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d} = - \left\langle \begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, M_d \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d}.$$

証明. \$M_d\$ の定義と部分和分公式 ([6] など) を用いて

$$\left\langle M_d \begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d} = \left\langle \begin{pmatrix} -\frac{\gamma}{\bar{S}} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} \bar{u}^n \\ -\gamma \bar{S} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} \bar{p}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d}$$

$$\begin{aligned}
&= \gamma^2 \sum_{j=0}^N \left\{ S_j \left(-\frac{\gamma}{S_j} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} u_j^n \right) q_j^n + \frac{1}{S_j} \left(-\gamma S_j \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} p_j^n \right) v_j^n \right\} \Delta x \\
&= -\frac{\gamma^3}{2} \sum_{j=0}^N \{ q_j^n (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + v_j^n (p_{j+1}^n - p_{j-1}^n) \} \\
&= \frac{\gamma^3}{2} \left[\sum_{j=0}^N \{ u_j^n (q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) + p_j^n (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) \} \right. \\
&\quad \left. + u_0 q_{-1} + q_0 u_{-1} + p_0 v_{-1} + v_0 p_{-1} - u_N q_{N+1} - p_N v_{N+1} - q_N u_{N+1} - v_N p_{N+1} \right]
\end{aligned}$$

であるが、ここで、(25) が成り立つとき、

$$\begin{aligned}
\left(M_d \begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right)_{G_d} &= \frac{\gamma^3}{2} \sum_{j=0}^N \{ u_j^n (q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) + p_j^n (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) \} \\
&= \gamma^3 \sum_{j=0}^N \left(p_j^n \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} v_j^n + u_j^n \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} q_j^n \right) \Delta x \\
&= -\gamma^2 \sum_{j=0}^N \left\{ S_j p_j^n \left(-\frac{\gamma}{S_j} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} v_j^n \right) + \frac{1}{S_j} u_j^n \left(-\gamma S_j \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} q_j^n \right) \right\} \Delta x \\
&= - \left(\begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{\gamma}{\bar{S}} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} \bar{v}^n \\ -\gamma \bar{S} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} \bar{q}^n \end{pmatrix} \right)_{G_d} \\
&= - \left(\begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, M_d \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right)_{G_d}
\end{aligned}$$

となる。 □

補題 4.1 と離散勾配法に関する一般論から次の定理が直ちに従う。

定理 4.1. 境界条件が

$$u_0^n p_{-1}^n + p_0^n u_{-1}^n - u_N^n p_{N+1}^n - p_N^n u_{N+1}^n = 0 \quad (26)$$

を満たすように与えられているとき、スキーム (24) は離散エネルギーを保つ：

$$\frac{1}{\Delta t} (H_d(\bar{p}^{n+1}, \bar{u}^{n+1}) - H_d(\bar{p}^n, \bar{u}^n)) = 0.$$

証明. 離散勾配の性質から

$$\frac{1}{\Delta t} (H_d(\bar{p}^{n+1}, \bar{u}^{n+1}) - H_d(\bar{p}^n, \bar{u}^n)) = \left(\begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} - \bar{p}^n}{\Delta t} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} - \bar{u}^n}{\Delta t} \end{pmatrix} \right)_{G_d}$$

$$= \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix}, M_d \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d}$$

となるが、境界条件は (26) を満たすため、ベクトル

$$\begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix}$$

は M_d が歪随伴になるための条件を満たす。従って

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} (H_d(\bar{p}^{n+1}, \bar{u}^{n+1}) - H_d(\bar{p}^n, \bar{u}^n)) &= \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix}, M_d \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d} \\ &= - \left\langle M_d \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{2} \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d} = 0 \end{aligned}$$

となる。 □

注意 4.1. 本稿では数値実験を省くが、このスキームによる数値実験は [9] に報告されており、数値振動が少ないなど、汎用的な数値解法に比べて優れた性質をもつことが示されている。

5 標準的な内積を用いたスキームとの比較

スキーム (24) を標準的な内積

$$\left\langle \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{G'} = \int_0^1 (p_1 p_2 + u_1 u_2) dx \quad (27)$$

を用いたスキームと比較する。まず、この内積を用いた場合の、離散勾配法によるスキームを導出する。ただし、証明は重みつき内積の場合と同様に本質的に同様であるため、簡略化する。重みつき内積の場合と同様に、初めに (2) の形に書き換えるために勾配を導出すると

$$\nabla_{G'} H = \begin{pmatrix} \gamma^2 S p \\ \gamma^2 \frac{1}{S} u \end{pmatrix} \quad (28)$$

となる。方程式の形を保つように M' を

$$M' = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\gamma S} \partial_x S \\ -\frac{S}{\gamma} \partial_x \frac{1}{S} & 0 \end{pmatrix} \quad (29)$$

と定めると, Webster 方程式 (1) を (2) の形

$$\begin{pmatrix} p_t \\ u_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\gamma S} \partial_x S \\ -\frac{S}{\gamma} \partial_x \frac{1}{S} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma^2 S p \\ \gamma^2 \frac{1}{S} u \end{pmatrix} \quad (30)$$

に書き換えられる.

補題 5.1. 行列 M' は, 条件

$$[p_2 u_1 + u_2 p_1]_0^1 = 0 \quad (31)$$

の下で内積 G' に関して歪随伴である:

$$\left\langle M' \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{G'} = - \left\langle \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, M' \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{G'}. \quad (32)$$

証明. M' の定義と部分積分公式を用いて

$$\left\langle M' \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{G'} = -\frac{1}{\gamma} \left[\left[\frac{1}{S} p_2 S u_1 + S u_2 \frac{1}{S} p_1 \right]_0^1 - \int_0^1 \left\{ S u_1 \left(\partial_x \frac{1}{S} p_2 \right) + \frac{1}{S} p_1 (\partial_x S u_2) \right\} dx \right]$$

であるが, ここで, $[p_2 u_1 + u_2 p_1]_0^1 = 0$ であれば,

$$\left\langle M' \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{G'} = \frac{1}{\gamma} \int_0^1 \left\{ S u_1 \left(\partial_x \frac{1}{S} p_2 \right) + \frac{1}{S} p_1 (\partial_x S u_2) \right\} dx = - \left\langle \begin{pmatrix} p_1 \\ u_1 \end{pmatrix}, M' \begin{pmatrix} p_2 \\ u_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{G'}$$

となる. □

次に内積 (27) を

$$\left\langle \begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G'_d} = \sum_{j=0}^N (p_j^n q_j^n + u_j^n v_j^n) \Delta x \quad (33)$$

と離散化し, スキームの導出を行う. 重みつき内積の場合と同様にして

$$\begin{aligned} H_d(\bar{p}^{n+1}, \bar{u}^{n+1}) - H_d(\bar{p}^n, \bar{u}^n) &= \frac{\gamma^2}{2} \sum_{j=0}^N \{ S_j (p_j^{n+1} + p_j^n) (p_j^{n+1} - p_j^n) + \frac{1}{S_j} (u_j^{n+1} + u_j^n) (u_j^{n+1} - u_j^n) \} \Delta x \\ &= \left\langle \begin{pmatrix} \gamma^2 \bar{S} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\gamma^2 \bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{\bar{S}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{p}^{n+1} - \bar{p}^n \\ \bar{u}^{n+1} - \bar{u}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G'_d} \end{aligned} \quad (34)$$

と計算できるので

$$\nabla_{G'_d} H_d = \begin{pmatrix} \gamma^2 \bar{S} \frac{\bar{p}^{n+1} + \bar{p}^n}{2} \\ \frac{\gamma^2 \bar{u}^{n+1} + \bar{u}^n}{\bar{S}} \end{pmatrix} \quad (35)$$

は離散勾配となる. M' は (23) と同様に微分作用素を中心差分で近似し,

$$M'_d = \begin{pmatrix} & & -\frac{1}{\gamma S_1} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} S_1 & & \\ & O & & \ddots & \\ & & & & -\frac{1}{\gamma S_N} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} S_N \\ \frac{S_1 \delta_x^+ + \delta_x^-}{\gamma} \frac{1}{2} \frac{1}{S_1} & & & & \\ & \ddots & & & O \\ & & \frac{S_N \delta_x^+ + \delta_x^-}{\gamma} \frac{1}{2} \frac{1}{S_N} & & \end{pmatrix} \quad (36)$$

とすると内積 (33) による Webster 方程式のスキームは次のようになる:

$$\begin{pmatrix} \frac{p_j^{n+1} - p_j^n}{\Delta t} \\ \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\gamma S_j} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} S_j \\ -\frac{S_j \delta_x^+ + \delta_x^-}{\gamma} \frac{1}{2} \frac{1}{S_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma^2 S_j \frac{p_j^{n+1} + p_j^n}{2} \\ \frac{\gamma^2 u_j^{n+1} + u_j^n}{S_j} \end{pmatrix}. \quad (37)$$

補題 5.2. 行列 M'_d は

$$\begin{aligned} & \frac{S_0}{S_{-1}} u_0 q_{-1} + \frac{S_{-1}}{S_0} q_0 u_{-1} + \frac{S_{-1}}{S_0} p_0 v_{-1} + \frac{S_0}{S_{-1}} v_0 p_{-1} \\ & - \frac{S_N}{S_{N+1}} u_N q_{N+1} - \frac{S_{N+1}}{S_N} p_N v_{N+1} - \frac{S_{N+1}}{S_N} q_N u_{N+1} - \frac{S_N}{S_{N+1}} v_N p_{N+1} = 0 \end{aligned} \quad (38)$$

を満たすとき歪随伴である.

証明. M'_d の定義と部分和分公式を用いて

$$\begin{aligned} \left\langle M'_d \begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G'_d} &= -\frac{1}{2\gamma} \sum_{j=0}^N \left\{ \frac{q_j^n}{S_j} (S_{j+1} u_{j+1}^n - S_{j-1} u_{j-1}^n) + S_j v_j^n \left(\frac{p_{j+1}^n}{S_{j+1}} - \frac{p_{j-1}^n}{S_{j-1}} \right) \right\} \\ &= \frac{1}{2\gamma} \left[\sum_{j=0}^N \left\{ S_j u_j^n \left(\frac{q_{j+1}^n}{S_{j+1}} - \frac{q_{j-1}^n}{S_{j-1}} \right) + \frac{p_j^n}{S_j} (S_{j+1} v_{j+1}^n - S_{j-1} v_{j-1}^n) \right\} \right. \\ & \quad + \frac{S_0}{S_{-1}} u_0 q_{-1} + \frac{S_{-1}}{S_0} q_0 u_{-1} + \frac{S_{-1}}{S_0} p_0 v_{-1} + \frac{S_0}{S_{-1}} v_0 p_{-1} \\ & \quad \left. - \frac{S_N}{S_{N+1}} u_N q_{N+1} - \frac{S_{N+1}}{S_N} p_N v_{N+1} - \frac{S_{N+1}}{S_N} q_N u_{N+1} - \frac{S_N}{S_{N+1}} v_N p_{N+1} \right] \end{aligned}$$

であるが, ここで, (38) が成り立つとき,

$$\left\langle M_d \begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right\rangle_{G_d} = \frac{1}{2\gamma} \sum_{j=0}^N \left\{ S_j u_j^n \left(\frac{q_{j+1}^n}{S_{j+1}} - \frac{q_{j-1}^n}{S_{j-1}} \right) + \frac{p_j^n}{S_j} (S_{j+1} v_{j+1}^n - S_{j-1} v_{j-1}^n) \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= - \left(\begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{\gamma \bar{S}} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} \bar{S} \bar{v}^n \\ \frac{\bar{S} \delta_x^+ + \delta_x^-}{\gamma} \frac{1}{2 \bar{S}} \bar{q}^n \end{pmatrix} \right)_{G'_d} \\
&= - \left(\begin{pmatrix} \bar{p}^n \\ \bar{u}^n \end{pmatrix}, M'_d \begin{pmatrix} \bar{q}^n \\ \bar{v}^n \end{pmatrix} \right)_{G'_d}
\end{aligned}$$

となる。 □

定理 5.1. 境界条件が

$$u_0^n p_{-1}^n + p_0^n u_{-1}^n - u_N^n p_{N+1}^n - p_N^n u_{N+1}^n = 0 \quad (39)$$

を満たすように与えられているとき、スキーム (24) は離散エネルギーを保つ：

$$\frac{1}{\Delta t} (H_d(\bar{p}^{n+1}, \bar{u}^{n+1}) - H_d(\bar{p}^n, \bar{u}^n)) = 0.$$

注意 5.1. 定理 4.1 および定理 5.1 において、 M_d , M'_d が歪随伴となるための条件は異なるにも関わらず、エネルギーが保存するために境界条件が満たすべき条件は一致している。これは、内積が変化したことにより、勾配が変化したためである。

導出した二つのスキーム (24) と (37) を比較する。まず (37) の右辺を整理してみる。すると、

$$\begin{pmatrix} \frac{p_j^{n+1} - p_j^n}{\Delta t} \\ \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\gamma}{S_j} \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} \\ -\gamma S_j \frac{\delta_x^+ + \delta_x^-}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{p_j^{n+1} + p_j^n}{2} \\ \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2} \end{pmatrix} \quad (40)$$

となり、このスキームは予想に反して (24) と一致することが分かる。したがって、重みつき内積を用いた場合も通常の内積を用いた場合も得られるスキームに差はない、という結果が得られた。差はないということから、内積を変更することで優れたスキームを導出するという事は難しそうであるが、同時にこの結果は離散勾配法が内積の選び方に関する不変性をもっていることを意味する。

この不変性はハミルトン方程式に本質的に備わっているものである。実際、ハミルトン方程式は (2) の形に書かれることが多いものの、

$$u_t = X, \quad X \lrcorner \omega = dH \quad (41)$$

という内積を必要としない形に書くこともできる [1, 10]。 ω はシンプレクティック形式と呼ばれる微分 2 形式である。(2) は内積を使った (41) の一つの表現であると言える。本質的にハミルトン方程式は内積を用いない形 (41) で定まっているため、内積を変えたとしても、その解は変化しない。本研究では、内積を変えることによって良いスキームを導出することを目標としていたが、もしも、内積の選び方によって良いスキームが導出されたとするならば、その自由度は離散化によつ

て生まれた自由度ということになる。このような自由度は力学に現れる方程式を近似する方法にとっては好ましいことではない。ここで得られた離散勾配法によるスキームの不変性は、離散勾配法がそのような自由度をもたない、あるいは、同じことであるが、ハミルトン方程式に内在されている幾何学的な不変性を保っていることを意味している。つまり、今回の結果は内積を変更することで良いスキームを導出するという工学的な目標の達成には失敗したものの、それは実は自然なことであり、離散勾配法が力学的に自然な離散化法となっていることを示唆する結果と言える。

この結果を踏まえると、離散勾配法を、より力学的に本質的であると言える (41) の形に再構築できると思われる。実際、そのような再構築は可能であるが、詳細については別の機会に報告する。

謝辞

本研究は科学研究費補助金（課題番号 26400200 および 23340023）の助成を受けた。

参考文献

- [1] R. Abraham and J. E. Marsden, *Foundations of Mechanics*, 2nd ed., Addison-Wesley, Massachusetts, 1978.
- [2] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer Graduate Text in Mathematics 60, Springer-Verlag, New York, 1978.
- [3] S. Bilbao, *Numerical Sound Synthesis: Finite Difference Schemes and Simulation in Musical Acoustics*, John Wiley and Sons, Chichester, UK, 2009.
- [4] O. Calin and D. C. Chang, *Geometric Mechanics on Riemannian Manifolds*, Birkhäuser, Boston, 2004.
- [5] D. Furihata, Finite Difference Schemes for Equation $\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\alpha \frac{\delta G}{\delta u}$ That Inherit Energy Conservation or Dissipation Property, *J. Comput. Phys.*, 156 (1999) 181–205.
- [6] D. Furihata and T. Matsuo, *Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Method for Partial Differential Equations*, CRC Press, Boca Raton, FL, 2011.
- [7] O. Gonzalez, Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems, *J. Nonlinear Sci.*, 6 (1996) 449–467.
- [8] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, 2006.
- [9] A. Ishikawa and T. Yaguchi, Geometric Investigation of the Discrete Gradient Method for the Webster Equation with a Weighted Inner Product, *JSIAM Lett.*, 7 (2015) 17–20.
- [10] J. E. Marsden, and T. S. Ratiu, *Introduction to Mechanics and Symmetry: A Basic Exposition of Classical Mechanical Systems*, Springer-Verlag, New York, 1999.