マルチ・シンプレクティック法の計算音響への 適用

(Multi-symplectic Methods for Computational Acoustics)

岩津 玲磨 (Reima Iwatsu)*1

鶴 秀生 (Hideo Tsuru)²

*¹Tokyo Denki University

²Nittobo Acoustic Engineering Corporation Ltd.

1 はじめに

ハミルトンの常微分方程式に対するシンプレティック積分法は,標準的な方法と比べると長時間積分に対してより安定かつ正確で効率的な解法を与える⁽¹⁾.シンプレティック法を波の問題に適用した場合にも同様に,良好な結果を得ることができる(一般的な波の問題に対する議論については⁽²⁾を参照,分割されたルンゲ・クッタ法の応用例については⁽³⁻⁶⁾参照).しかし,ハミルトンの偏微分方程式に適用されたシンプレティック法においては,空間的に大局的に定義されたハミルトニアンの保存が保障される反面で,局所的な保存量が保存されるかどうかが定かではない.この問題点に関して最近,ハミルトンの偏微分方程式に対する「マルチ・シンプレティック法」が提案されている^(7,8).この定式化によれば,時間,空間の両方向にシンプレティック な構造を考えるために,適当な境界条件のもとでの大局的な保存則のほかに局所的な保存則も成立することになる.シンプレティック積分法の持っていた多くの長所がマルチ・シンプレティック法にもひきつがれている,と期待することにした.本稿ではおもに Bridges の文献⁽⁷⁾と, Schober & Wlodarczyk の解析⁽⁹⁾を紹介する.

2 シンプレティック法と波の方程式

はじめに, 波の方程式をハミルトンの常微分方程式の形で取りあつかう場合につい て考える. 簡単のために1次元の波を扱う. ハミルトンの運動方程式

$$Jz_t = \nabla_z H(z) \tag{1}$$

を,次のような形をした非線形の波の方程式に適用することにする.

$$u_{tt} - u_{xx} + V'(u) = 0 (2)$$

u_t とおいて, H を系の長さ L にふくまれる全エネルギーとして定義する.

$$\begin{cases} u_t = \frac{\delta H}{\delta v} = v \\ v_t = -\frac{\delta H}{\delta u} = u_{xx} - V'(u) \end{cases}$$
(3)

$$H(u,v) = \int_0^L \left(\frac{1}{2}v^2 + \frac{1}{2}u_x^2 + V(u)\right) dx$$
(4)

ハミルトニアンに対応するシンプレクティック性の空間平均を定義すると

$$\bar{\omega} = \int_0^L (dv \wedge du) dx \tag{5}$$

となる. 波の方程式に付随する変分方程式は

$$du_t = dv, \quad dv_t = du_{xx} - V''(u)du \tag{6}$$

となる. 変分方程式をもちいると

$$\frac{\partial}{\partial t}\omega = (du_{xx} - V^{"}(u)du) \wedge du + dv \wedge dv = du_{xx} \wedge du$$
(7)

となるので、

$$w = u_x, \quad \kappa = du \wedge dw \tag{8}$$

とおくことによって、シンプレティック性の保存則

$$\frac{\partial}{\partial t}\omega + \frac{\partial}{\partial x}\kappa = 0,\tag{9}$$

がみちびきだされる. κ は ω のフラックスに相当する. ω の大域的保存則は, たとえ ば周期境界条件のもとで

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^L \omega dx + \kappa |_{x=L} - \kappa |_{x=0} = 0 \quad \to \quad \bar{\omega}_t = 0 \tag{10}$$

のようにして導出される.

3 ハミルトンの偏微分方程式とマルチ・シンプレティック法

Bridges ⁽⁷⁾ により提案されたハミルトンの偏微分方程式に対するマルチ・シンプレ ティック法は, M, K を任意の歪対称行列, S(z) を適当に微分可能でなめらかな z の 関数として

$$Mz_t + Kz_x = \nabla_z S(z) \quad z \in \mathbf{R}^n \quad (n \ge 3)$$
(11)

と表わされる. 行列 M, K のランクをそれぞれ r, s とすると, $r \le n, s \le n$ である. プレ・シンプレクティック形式を

$$\omega(U,V) = \langle MU,V \rangle \quad \kappa(U,V) = \langle KU,V \rangle \tag{12}$$

のように定義する. U, V は以下に述べる変分方程式の任意の解である. ハミルトンの偏微分方程式に付随する変分方程式は

$$MZ_t + KZ_x = S''(z)Z \tag{13}$$

となる.変分方程式をもちいると

$$\frac{\partial}{\partial t}\omega(U,V) = \langle MU_t, V \rangle + \langle MU, V_t \rangle \tag{14}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\kappa(U,V) = \langle KU_x,V\rangle + \langle KU,V_x\rangle \tag{15}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\omega(U,V) + \frac{\partial}{\partial x}\kappa(U,V) = \langle MU_t + KU_x, V \rangle + \langle MU, V_t + KV_x \rangle$$
$$= \langle S^{"}(z)U, V \rangle - \langle U, S^{"}(z)V \rangle = 0$$
(16)

となるので、これよりシンプレティック性の局所的保存則

$$\frac{\partial}{\partial t}\omega + \frac{\partial}{\partial x}\kappa = 0 \tag{17}$$

が成立する.

エネルギーと運動量の保存則

エネルギー E と運動量 I の保存則は

.

$$\partial_t E(z) + \partial_x F(z) = 0 \tag{18}$$

$$\partial_t I(z) + \partial_x G(z) = 0 \tag{19}$$

$$E(z) = S(z) - \frac{1}{2}\kappa(z_x, z) \quad F(z) = \frac{1}{2}\kappa(z_t, z)$$
(20)

$$G(z) = S(z) - \frac{1}{2}\omega(z_t, z) \quad I(z) = \frac{1}{2}\omega(z_x, z)$$
(21)

のようになる.

大域的保存則

そこで, 適当な境界条件 (遠方でゼロまたは周期境界条件) のもとで, 大域的保存則 が成立する.

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{E}(z) = 0 \quad \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{I}(z) = 0 \tag{22}$$

$$\mathcal{E}(z) = \int_0^L E(z)dx \quad \mathcal{I}(z) = \int_0^L I(z)dx \tag{23}$$

4 ふたつの2次の MS 法の比較

サイン・ゴルトン方程式

$$u_{tt} - u_{xx} + \chi \sin u = 0 \tag{24}$$

を例にとって、ふたつのマルチ・シンプレティック (MS) 法の比較をおこなう ⁽⁹⁾.

$$Lz_t + Kz_x = \nabla_z S \tag{25}$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad z = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$$
(26)

$$S = \frac{1}{2}(w^2 - v^2) + \chi \cos u \tag{27}$$

ただし, $v = u_t$, $w = -u_x$ とおいた. このとき、エネルギーと運動量の保存則は以下のようになる.

$$\partial_t E + \partial_x F = 0, \tag{28}$$

$$E = \frac{1}{2}(w^2 + v^2) - \chi \cos u, \quad F = vw$$
⁽²⁹⁾

$$\partial_t I + \partial_x G = 0, \tag{30}$$

$$I = vw, \quad G = \frac{1}{2}(v^2 + w^2) + \chi \cos u \tag{31}$$

以下に MS となる 2 次のふたつのスキームを取りあつかう.

4.1 マルチ・シンプレティック・蛙飛び法 (MSLF)

$$D_{x}z_{j}^{n} = \frac{z_{j+1}^{n} - z_{j}^{n}}{\Delta x}, D_{t}z_{j}^{n} = \frac{z_{j}^{n+1} - z_{j}^{n}}{\Delta t}, M_{x}z_{j}^{n} = \frac{z_{j+1}^{n} + z_{j}^{n}}{2}, M_{t}z_{j}^{n} = \frac{z_{j}^{n+1} + z_{j}^{n}}{2}$$

$$L^{+}D_{t}z_{j}^{n} + L^{-}D_{t}z_{j}^{n-1} + K^{+}D_{x}z_{j}^{n} + K^{-}D_{x}z_{j-1}^{n} = \nabla_{z}S(z_{j}^{n}) \quad (32)$$

$$L^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, L^{-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, K^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, K^{-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, (33)$$

$$z = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}, S = \frac{1}{2}(w^{2} - v^{2}) + \chi \cos u \quad (34)$$

以上の離散式をまとめると,

$$D_t^2 u_j^{n-1} - D_x^2 u_{j-1}^n + \chi \sin u_j^n = 0$$
(35)

と同等になる.

4.2 マルチ・シンプレティック離散化の証明

上記の MSLF がマルチ・シンプレティック離散化になっている証明を与える. 変分 方程式と dz_j^n , 以下の式の変形のなかでは, ハミルトニアンのヘッセ行列 S_{zz} が対称 であることをもちいている.

$$z_{j}^{n} \wedge (L^{+}D_{t}z_{j}^{n} + L^{-}D_{t}z_{j}^{n-1} + K^{+}D_{x}z_{j}^{n} + K^{-}D_{x}z_{j-1}^{n}) = z_{j}^{n} \wedge S_{zz}dz_{j}^{n}$$
$$z_{j}^{n} \wedge (L^{+}D_{t}z_{j}^{n} + L^{-}D_{t}z_{j}^{n-1}) = \frac{1}{2}D_{t} \left(dz_{j}^{n-1} \wedge L^{+}dz_{j}^{n} + dz_{j}^{n} \wedge L^{-}dz_{j}^{n-1} \right)$$
$$z_{j}^{n} \wedge (K^{+}D_{x}z_{j}^{n} + K^{-}D_{x}z_{j-1}^{n}) = \frac{1}{2}D_{x} \left(dz_{j-1}^{n} \wedge \tilde{K}^{+}dz_{j}^{n} + dz_{j}^{n} \wedge K^{-}dz_{j-1}^{n} \right)$$

以上によって,離散的マルチ・シンプレティック保存則

$$D_t \omega_j^n + D_x \kappa_j^n = 0 \tag{36}$$

$$\omega_{j}^{n} = \frac{1}{2} \left(dz_{j}^{n-1} \wedge L^{+} dz_{j}^{n} + dz_{j}^{n} \wedge L^{-} dz_{j}^{n-1} \right)$$
(37)

$$\kappa_{j}^{n} = \frac{1}{2} \left(dz_{j-1}^{n} \wedge K^{+} dz_{j}^{n} + dz_{j}^{n} \wedge K^{-} dz_{j-1}^{n} \right)$$
(38)

の成立が示せた.

4.3 マルチ・シンプレティック・ボックス・スキーム (MSBS) プレイスマン・ボックス・スキームまたは, マルチ・シンプレティック・ボックス・

フレイスマン・ホックス・スキームまたは、マルク・シンフレノィック・ホックス スキームは以下のように定式化できる.

$$LD_t M_x z_j^n + KD_x M_t z_j^n = \nabla_z S(M_t M_x z_j^n) \tag{39}$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad z = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$$
(40)

$$S = \frac{1}{2}(w^2 - v^2) + \chi \cos u \tag{41}$$

上のような形に書かれた MSBS は, まとめると

 $D_t^2 M_x^2 u_j^n - D_x^2 M_t^2 u_j^n + \chi \sin(M_t M_x u_j^n) = 0$

と同等である.ただし、2階の導関数は

$$D_x^2 u_{j-1}^n = D_x \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = \frac{u_{j+1}^n + 2u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$
$$D_t^2 u_j^{n-1} = D_t \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t} = \frac{u_j^{n+1} + 2u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t^2}$$

のように近似した.

4.4 MSLFとMSBSの分散関係

Schober & Wlodarczyk ⁽⁷⁾ にしたがって, MSLF と MSBS の数値的な分散関係を解 析する. $\omega \equiv \omega(k)$ と表わされるときに, 解が

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$
(42)

のように表わされるものとする.線形化されたサイン・ゴルトン方程式

$$u_{tt} - u_{xx} + \chi u = 0 \tag{43}$$

に代入して, 波数 k の成分を考えると, 波の分散関係

$$D(\omega,k) = \omega^2 - k^2 - \chi = 0 \tag{44}$$

が得られる.

4.5 MSLF と MSBS の数値的な分散関係

類似の方法をもちいて差分方程式より数値的な分散関係を求めることができる. こ こで, $\bar{\omega} = \omega \Delta t$, $\bar{k} = k \Delta x$, $\sigma = c \Delta t / \Delta x$ のように置くと, MSLFの数値的分散関係は

$$\left(2\sin\frac{\bar{\omega}}{2}\right)^2 - \sigma^2 \left(2\sin\frac{\bar{k}}{2}\right)^2 - \chi \Delta t^2 = 0 \tag{45}$$

となる. 一方で MSBS の分散関係は

$$\left(2\tan\frac{\bar{\omega}}{2}\right)^2 - \sigma^2 \left(2\tan\frac{\bar{k}}{2}\right)^2 - \chi \Delta t^2 = 0 \tag{46}$$

のように求められる.

線形波 ($\chi = 0$) についてクーラン数を変えて数値的分散関係を求めたものを図1に 示す. 図中横軸は $k = \bar{k}$, 縦軸は $\nu = \bar{\omega}$ をプロットしている. 図より, σ によらず MSBS の $\bar{\omega}$ は MSLF のそれより大きく, 厳密値からのずれは k が大きくなるほど 大きいことがわかる.

4.6 MSLFとMSBSの群速度

線形波の群速度は

$$\bar{\omega} = \sigma \bar{k} \tag{47}$$



Figure 1: Numerical dispersion relation for linear wave equation, MSLF and MSBS, $\sigma = 0.1, 0.7$

である.数値的な群速度は、上の数値的分散関係式より

$$\begin{split} \text{MSLF}: \quad \bar{\omega}(\bar{k})' &= \sigma \left(\frac{1 - \sin^2(\bar{k}/2)}{1 - \sigma^2 \sin^2(\bar{k}/2)} \right) < \sigma \\ \text{MSBS}: \quad \bar{\omega}(\bar{k})' &= \sigma \left(\frac{1 + \tan^2(\bar{k}/2)}{1 + \sigma^2 \tan^2(\bar{k}/2)} \right) > \sigma \end{split}$$

となることが示せる. また, 数値的な群速度分散関係は

 $MSLF: \quad \bar{\omega}(\bar{k})'' < 0 \quad MSBS: \quad \bar{\omega}(\bar{k})'' > 0$

のようになる.

4.7 MSLFとMSBSの数値的な群速度

以上の解析により求まった数値的な群速度を, 線形波 ($\chi = 0$) についてクーラン数 を変えてプロットしたのが図 2 である.



Figure 2: Numerical group velocity for linear wave equation, MSLF and MSBS, $\sigma=0.1, 0.7$

MSBS の数値的な群速度は, 厳密値よりも速く, その傾向は *k* の増加とともに単調 に増幅される. 一方で MSLF 数値的な群速度は, 厳密値よりも遅く, やはり *k* の増 加とともにその傾向が単調に強まる.

4.8 MSLFとMSBSの比較

つぎに、MSLF と MSBS の数値解を線形波について比較した. 初期値は

$$u(x,0) = f(x) = \exp(-3200x^2), \ u_t(x,0) = 0$$
(48)

で, 周期境界条件を与えた. 解析領域の長さは L = 2, 格子点数は N = 256 とした. 数値解のなかにみられる高波数の数値振動は, MSLF の場合, 厳密解よりも遅れて波 のピークのあとからついてくる. 一方で, MSBS の場合には逆のことが観察される. これは, 離散化方程式の数値群速度の解析結果と一致するふるまいを示しているこ とが確認できる.



Figure 3: Linear wave equation, MSLF and MSBS, t = 0.6, N = 256, $\sigma = 0.1$

以上, 数値的分散関係, 数値的群速度 (および数値的群速度分散関係) の解析によって, MS スキームのふるまいを理解できることが示された.

5 おわりに

ハミルトンの PDE に対するマルチ・シンプレクティック (MS) 法を波の式に対して 適用することを考えた.理論的な枠組みの概要⁽⁷⁾と, MS になる証明済みの方法のう ちで最低次数のふたつ (MSLF, MSBS) についてそれらの数値的位相を調べた結果 ⁽⁹⁾ を紹介した. MSLF と MSBS はかなり単純な数値的な分散関係をもっていて, 数 値解のふるまいを完全に理解することができる. ここで⁽⁹⁾ に準じて調べたことの他 に, 保存量にふくまれる誤差評価などが, スキームの数値的な性質の理解に必要な事 項である.最近の文献では MS と非 MS の比較, ω (シンプレック性), 運動量, エネル ギーの局所, 大域的保存, MS とエネルギー保存スキームの比較, 保存性と位相空間 の構造保存の関係などが議論されている. こうした点を逆誤差解析の立場から調べ ることによって, MS の範疇から高次で効率的な方法を探索, 構築することが今後の 目標である.音響の計算に MS 法を応用する際には, 保存性の良好さには信頼がおけ るので, 位相誤差の大小, 計算の効率が問題点となることが現時点では予想される.

参考文献

(1) Hairer, E., Lubich, C. and Wanner, G., Geometric Numerical Integration, Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations, second ed., Springer 2006.

(2) McLachlan, R., Symplectic integration of Hamiltonian wave equations, Numer. Math. **66**, 465-492, 1994.

(3) Tsuru, H. and Iwatsu, R., Accurate numerical prediction of acoustic wave propagation, to appear in Int. J. Adapt. Control Signal Processing, 2010 (DOI: 10.1002/acs.1118).

(4) Iwatsu, R., Two new solutions to the third-order symplectic integration method, Physics Letters A 373 3056-3060, 2009 (DOI:10.1016/j.physleta.2009.06.048).

(5) Iwatsu, R. and Hideo Tsuru, Trigonometrically fitted symplectic integration methods of two-stage, second-order and three-stage, third-order, Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vo.58, pp.295-300, 2010.

(6) 鶴秀生, 岩津玲磨, "音響設計のための時間領域差分法の高精度化,"非線形波動 現象の数理と応用, 数理解析研究所講究録 1645, pp.177-188, 2009.

(7) Bridges, T. J., Multi-symplectic structures and wave propagation, Math. proc. Cambridge Philos. Soc. **121** 147-190, 1997.

(8) Marsden, J.E., Patrick, G.W. and Shkoller, S., Multisymplectic Geometry, Variational Integrators, and Nonlinear PDEs, Commun. Math. Phys. **199**, 351-395, 1998.

(9) Schober, C.M. and Wlodarczyk, T.H., Dispersive properties of multisymplectic integrators, J. Comput. Phys. 227, 5090-5104, 2008.