

時間二階微分項と変分導関数を含む偏微分方程式の差分スキーム

京都大学数理解析研究所 降旗 大介 (Daisuke Furihata)

1 Introduction

非線型波動方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\frac{\delta G}{\delta u} \\ \frac{\delta G}{\delta u} = \frac{\partial G}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial G}{\partial u_x} \right) \end{cases} \quad (1)$$

を考える。ただし、 $u = u(x, t), x \in [0, L], t \in (0, \infty), G = G(u, u_x)$ であり、 $\frac{\delta G}{\delta u}$ は G の u に対する変分導関数である。また、本稿では sine-Gordon 方程式での研究例などの慣例に従い、 $G(u, u_x)$ をエネルギー関数とよぶ。

この方程式のもつ重要な性質として、(後述するように適切な境界条件の下で) エネルギー保存則および運動量保存則とよばれる保存則がある。

本研究では、最終的に数値計算に用いることを念頭において、この保存則を有限領域で、離散的に、かつ「厳密に」(= 離散的に閉じている) 再現する差分スキームを 離散変分導関数を用いることにより理論的に構成することが可能であることを示し、この考え方の有効性をいくつかの数値実験を通して検証する。構成される差分スキームの中には、保存則を再現し、対称性を失わず、かつ、陽的というやや驚くべき性質をもつものもある。

なお、これまで sine-Gordon 方程式等に個々に見い出されてきたエネルギーないしは運動量を保存する差分スキームは、全て本研究で示す一般形の特殊な応用例に該当する。

2 保存則

対象とする非線型偏微分方程式 (1) の保存則および境界条件との関係は以下の通りである。まず、エネルギー保存則とよばれる保存則は以下の式で表わされる。

$$\frac{d}{dt} \int_0^L \left\{ \frac{1}{2}(u_t)^2 + G(u, u_x) \right\} dx = 0 \quad (2)$$

これは境界条件が次の式を満たすときに成立する。

$$\left[\frac{\partial G}{\partial u_x} u_t \right]_{x=0}^L = 0 \quad (3)$$

次に、運動量保存則とよばれるものは次の式で表わされる。

$$\frac{d}{dt} \int_0^L u_t u_x dx = 0 \quad (4)$$

これは境界条件が次の式を満たすときに成立する。

$$\left[\frac{\partial G}{\partial u_x} u_x + \frac{1}{2}(u_t)^2 - G \right]_{x=0}^L = 0 \quad (5)$$

ただし、 $[f(x)]_{x=0}^L \stackrel{\text{def}}{=} f(L) - f(0)$ である。

それぞれの保存則が示した条件の下で成り立つことは以下のように示される。この式自体は単純なものだが、後に離散化された保存則が同等の関係式によって示されるという意味で重要である。

(エネルギー保存則と境界条件の関係式)

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_0^L \left\{ \frac{1}{2} (u_t)^2 + G \right\} dx &= \int_0^L \left\{ u_t u_{tt} + \frac{\partial G}{\partial u} u_t + \frac{\partial G}{\partial u_x} u_{xt} \right\} dx \\
 &= \int_0^L \left\{ u_t u_{tt} + \frac{\partial G}{\partial u} u_t - u_t \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial u_x} \right\} dx + \left[\frac{\partial G}{\partial u_x} u_t \right]_{x=0}^L \\
 &= \int_0^L u_t \left\{ u_{tt} + \frac{\delta G}{\delta u} \right\} dx + \left[\frac{\partial G}{\partial u_x} u_t \right]_{x=0}^L \\
 &= \left[\frac{\partial G}{\partial u_x} u_t \right]_{x=0}^L
 \end{aligned}$$

(運動量保存則と境界条件の関係式)

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_0^L u_t u_x dx &= \int_0^L (u_{xt} u_t + u_x u_{tt}) dx \\
 &= \int_0^L \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u_t)^2 - u_x \frac{\delta G}{\delta u} \right\} dx \\
 &= \int_0^L \left\{ -u_x \frac{\partial G}{\partial u} - u_{xx} \frac{\partial G}{\partial u_x} \right\} dx + \left[\frac{1}{2} (u_t)^2 + \frac{\partial G}{\partial u_x} u_x \right]_{x=0}^L \\
 &= - \int_0^L \frac{\partial}{\partial x} G dx + \left[\frac{1}{2} (u_t)^2 + \frac{\partial G}{\partial u_x} u_x \right]_{x=0}^L \\
 &= \left[\frac{1}{2} (u_t)^2 - G + \frac{\partial G}{\partial u_x} u_x \right]_{x=0}^L
 \end{aligned}$$

なお、エネルギー関数 G の形によっては他にも保存則が成り立つ。たとえば、エネルギー関数が $G = f(u) + C_0(u_x)^2$, $C_0: \text{const}$ という形をしている場合は、 $\frac{d}{dt} \int_0^L (x\epsilon + tl) dx = 0$ という保存則が成り立ち、エネルギー関数が $G = C_0(u_x)^2$, $C_0: \text{const}$ という形をしている場合は、 $\frac{d}{dt} \int_0^L (xl + t\epsilon) dx = 0$ という保存則が成り立つ。ただし、 $\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (u_t)^2 + G$, $l \stackrel{\text{def}}{=} u_x u_t$ とする。

3 方程式例

本章では式(1)の具体的な例として何があるかを示す。以下に、表形式で各々の方程式の名称と形、および式(1)の変形としてみたときのエネルギー関数 G を示す。

名称	方程式	$G(u, u_x)$
(線形波動方程式)	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	$\frac{1}{2}(u_x)^2$
(sine-Gordon eq.)	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \sin u$	$\frac{1}{2}(u_x)^2 - \cos u$
Nonlinear Klein-Gordon eq. (NLKGE)	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \phi'(u)$	$\frac{1}{2}(u_x)^2 + \phi(u)$
下地-川合 方程式 [18] (SKE)	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	$\frac{1}{12}(u_x)^4$

なお、最初の二方程式は Nonlinear Klein-Gordon 方程式に含まれるので、ここで真に独立な例は NLKGE と SKE の二例である。

4 既存研究例

本章では Sect. 3 で示した方程式に対して個別に行われたこれまでの研究のうち、「スキーム、保存量、境界条件の全てが離散的に閉じていて、空間が有限領域の問題にも厳密に適用できる」差分スキームについて研究したものを示す。空間が有限である問題への適用可能性は、境界条件を厳密に考えなければいけないことを意味する。

この章により、既存の研究と本研究との関係が良くわかり、また本研究の統一的な視点が方程式の離散化という問題に対して如何に見通しを良くするかが把握できる。

また、sine-Gordon 方程式や線形波動方程式は NLKGE に帰結できること、こうした研究が SKE に対しては未だ無いことから、本章では全て NLKGE を対象として差分スキームを表現する。また、既存研究例を見ると分かるように、エネルギー保存と運動量保存を両立させたスキームは存在せず、本研究によっても現段階では構成できない。

以下に表形式で既存研究の差分スキームを示す。なお、略称は

$$\begin{pmatrix} \text{E: エネルギー保存} \\ \text{L: 運動量保存} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{e: 陽的スキーム} \\ \text{i: 陰的スキーム} \end{pmatrix} - (\text{著者頭文字})(\text{発表年})\{-\text{modifier}\}$$

の形になっている。modifier はそれまでの指示子でスキームを区別できないときに用いる。

保存量は、保存量密度を一般に ρ_k と表すと $\Gamma \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^N \rho_k \Delta x$ と表される。これらのスキームは適切な境界条件の下でタイムステップ n によらずにこの保存量 Γ を保存することが明らかになっている。

また、この章中に出てくる各種の離散記号は Sect. 5 にて定義されている。

なお sine-Gordon 方程式のみに対する Hirota スキーム [2] は、保存量と境界条件の詳細が不明なことと $\Delta t = \Delta x$ でなければならない制約があるという 2 点から表には載せていないが、詳細が判明次第再検討する。

略称	スキーム / 保存量密度 / 性質	
Ei-S78	スキーム	$\delta_n^{(2)} U_k^{(n)} = \delta_k^{(2)} U_k^{(n)} - \frac{d\phi}{d(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n-1)})}$
	保存量密度	$\epsilon_k^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{1}{2}(\delta_n^+ U_k^{(n)})^2 + \frac{1}{2} \frac{\delta_k^+ U_k^{(n+1)} \delta_k^+ U_k^{(n)} + \delta_k^- U_k^{(n+1)} \delta_k^- U_k^{(n)}}{2} + \mu_n^+ \phi(U_k^{(n)})$
	性質	エネルギー保存 / 陰的 (→ [3])
Ei-B86	スキーム	$\delta_n^{(2)} U_k^{(n)} = \delta_k^{(2)} s_n^{(1)} U_k^{(n)} - \frac{d\phi}{d(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n-1)})}$
	保存量密度	$\epsilon_k^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{1}{2}(\delta_n^+ U_k^{(n)})^2 + \frac{1}{2} \mu_n^+ \frac{(\delta_k^+ U_k^{(n)})^2 + (\delta_k^- U_k^{(n)})^2}{2} + \mu_n^+ \phi(U_k^{(n)})$
	性質	エネルギー保存 / 陰的 (→ [5])
Ei-F91	スキーム	$\delta_n^{(2)} U_k^{(n)} = \delta_k^{(2)} U_k^{(n)} - \frac{d\phi}{d(\frac{1}{2}(U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}), \frac{1}{2}(U_k^{(n)} + U_k^{(n-1)}))}$
	保存量密度	$\epsilon_k^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{1}{2}(\delta_n^+ U_k^{(n)})^2 + \frac{1}{2}(\delta_k^+ U_k^{(n+1)})(\delta_k^+ U_k^{(n)}) + \phi(\mu_n^+ U_k^{(n)})$
	性質	エネルギー保存 / 陰的 (→ [6])
Ee-F91	スキーム	$\delta_n^{(2+)} U_k^{(n)} = \delta_k^{(2)} \mu_n^+ U_k^{(n)} - \frac{d\phi}{d(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})}$
	保存量密度	$\epsilon_k^{(n)} = \frac{1}{2}(\delta_n^+ U_k^{(n)})(\delta_n^- U_k^{(n)}) + \frac{1}{2}(\delta_k^+ U_k^{(n)})^2 + \phi(U_k^{(n)})$
	性質	エネルギー保存 / 陽的 (→ [6])
Ei-L95	スキーム	$\delta_n^{(2)} U_k^{(n)} = \delta_k^{(2)} \mu_n^{(1)} U_k^{(n)} - \frac{d\phi}{d(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n-1)})}$
	保存量密度	$\epsilon_k^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{1}{2}(\delta_n^+ U_k^{(n)})^2 + \frac{1}{2} \frac{(\delta_k^+ \mu_n^+ U_k^{(n)})^2 + (\delta_k^- \mu_n^+ U_k^{(n)})^2}{2} + \mu_n^+ \phi(U_k^{(n)})$
	性質	エネルギー保存 / 陰的 (→ [10])
Le-L95	スキーム	$\delta_n^{(2)} U_k^{(n)} = \delta_k^{(2)} U_k^{(n)} - \frac{d\phi}{d(s_k^+ U_k^{(n)}, \bar{s}_k^- U_k^{(n)})}$
	保存量密度	$l_k^{(n+\frac{1}{2})} = \delta_n^+ U_k^{(n)} \delta_k^{(1)} \mu_n^+ U_k^{(n)}$
	性質	運動量保存 / 陽的 (→ [10])

Table 1: 離散的に閉じた差分スキームの既存研究

5 Discrete Calculus : Operators

この章では、本研究中で用いる離散記号についてその定義を示す。多くの記号は最初に紹介する一般的な性質を持っているので、理解は容易かと思われる。

5.1 General rule

まず、一般的な構成則を示す。本研究で用いる離散記号は、和分記号を除いて、その右上肩の添字について次に示すようなルールによって構成される。つまり、 o^+ , o^- という二つの演算子から、任意の次数 m に対する演算子 $o^{(m)}$ が次のように構成される。

$$o_j^{(1)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(o_j^+ + o_j^-), \quad (6)$$

$$o_j^{(2)} \stackrel{\text{def}}{=} o_j^+ o_j^-, \quad (7)$$

$$o_j^{(2m+1)} \stackrel{\text{def}}{=} o_j^{(1)} o_j^{(2m)}, \quad m \geq 1, \quad (8)$$

$$o_j^{(2m+2)} \stackrel{\text{def}}{=} o_j^{(2)} o_j^{(2m)}, \quad m \geq 1, \quad (9)$$

$$o_j^{(m\pm)} \stackrel{\text{def}}{=} \mu_j^\pm o_j^{(m)} \quad (\text{syntax sugar}) \quad (10)$$

5.2 operators

ここでは各種の演算子の定義の基となるもっとも低次の演算子および和分の定義を示す。より高次の演算子は Sect. 5.1 を用いて構成する。

Shift

$$s_j^\pm f(j) \stackrel{\text{def}}{=} f(j \pm 1)$$

Average

$$\mu_j^\pm \stackrel{\text{def}}{=} \frac{s_j^\pm + 1}{2}$$

Difference

$$\delta_j^\pm \stackrel{\text{def}}{=} \frac{s_j^\pm - 1}{\pm \Delta j}$$

ただし、添字 n と k とだけを特別扱いとし、 $\Delta n := \Delta t$ (=時間刻み幅), $\Delta k := \Delta x$ (=空間刻み幅) と定義する。

和分は次の式で定義される。台形則そのものを用いている。

$$\text{Summation} \quad \sum_{k=0}^N U_k \Delta x \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{1}{2} U_0 + \sum_{k=1}^{N-1} U_k + \frac{1}{2} U_N \right) \Delta x \quad (11)$$

6 Discrete Calculus : 変分導関数の離散化

本章では、本研究で用いる離散記号のうち特殊と思われる離散変分導関数について述べる。離散記号という意味では前章に含まれる内容だが、新しい記号であるため特に独立した章を設けている。

6.1 変分導関数の離散化概念

ここでは、変分導関数を離散化する方法を考える方針について述べる。本研究では変分導関数そのものの形を見て直接離散化するという方法をとっていないため、先にその理由について述べる。

本来、変分導関数とは、関数 $u(x)$ の汎関数 $J[u] = \int_0^L G(u, u_x) dx$ に対し

$$J[u + \delta u] - J[u] \cong \int_0^L \left\{ \left(\frac{\partial G}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial G}{\partial u_x} \right) \delta u \right\} dx + \left[\frac{\partial G}{\partial u_x} \delta u \right]_{x=0}^L \quad (12)$$

と δu の一次項まで展開した場合の被積分項部分の δu の係数部分として定義される。つまり、この場合 ($G = G(u, u_x)$ の場合) は

$$\frac{\delta G}{\delta u} = \frac{\partial G}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial G}{\partial u_x} \quad (13)$$

となる。

変分導関数という概念は、汎関数との関係式 (12) が意味を持つ時に用いられる概念であるので、変分導関数を直接離散化しても式 (12) に相当する関係式が離散的に成り立たなければ意味がない。

そこで本研究では、変分導関数の本来の定義に忠実に、関係式 (12) を離散化して離散変分導関数の定義を得ることにした。具体的には、 $U = \{U_k\}_{k=0}^N$ の汎関数 $J_d[U] = \sum_{k=0}^{N-1} G_d(U)_k \Delta x$ に対し、 $J_d[U] - J_d[V]$ を部分和分を用いて展開して、被和分項部分の $U - V$ の係数部分を離散変分導関数と定義するのである。そうして得られた定義式 (詳細は Sect. 6.2 で後述) を用いると、次の関係式が成り立つ。

$$J_d[U] - J_d[V] = \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \left(\frac{\delta G_d}{\delta(U, V)} \right)_k (U_k - V_k) \right\} \Delta x + \left[\frac{\partial G_d}{\partial \delta U}(U, V)_k \right]_{k=0}^N \quad (14)$$

Remark : 式 (12) の右辺は展開式だったために左辺と右辺はあくまで極限でしか等号が成り立たないのに対し、一切の極限操作ができないことから、式 (14) では最初から等号としている。□

これと同様の方法により、二関数 U, V に対する和分汎関数 $J_d[U, V]$ に対して定義される4点離散変分導関数も定義され、次のような関係式が成り立つ。

$$J_d[U, V] - J_d[W, X] = \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \left(\frac{\delta(G_d, \text{loc})}{\delta(U, V : W, X)} \right)_k (\text{loc}(U, V) - \text{loc}(W, X))_k \right\} \Delta x + \left[\frac{\partial(G_d, \text{loc})}{\partial \delta U}(U, V : W, X)_k \right]_{k=0}^N \quad (15)$$

6.2 Discrete Calculus : (2点) 離散変分導関数

関数 $G_d(U)_k = \sum_{l=1}^m f_l(U_k) g_l^+(\delta_k^+ U_k) g_l^-(\delta_k^- U_k)$ に対して (2点) 離散変分導関数は次の式で定義される.

$$\frac{\delta G_d}{\delta(U, V)_k} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{l=1}^m \left(\frac{df_l}{d(U_k, V_k)} \frac{g_l^+(\delta_k^+ U_k) g_l^-(\delta_k^- U_k) + g_l^+(\delta_k^+ V_k) g_l^-(\delta_k^- V_k)}{2} - \delta_k^+ W_l^-(U, V)_k - \delta_k^- W_l^+(U, V)_k \right) \quad (16)$$

ただし, f_l, g_l^+, g_l^- は微分可能関数で,

$$W_l^+(U, V)_k \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{f_l(U_k) + f_l(V_k)}{2} \right) \left(\frac{g_l^-(\delta_k^- U_k) + g_l^-(\delta_k^- V_k)}{2} \right) \frac{dg_l^+}{d(\delta_k^+ U_k, \delta_k^+ V_k)} \quad (17)$$

$$\frac{df}{d(a, b)} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{f(a) - f(b)}{a - b} & : a \neq b \\ \frac{df}{da} & : a = b. \end{cases} \quad (18)$$

とする.

この時, 式 (14) 中の境界項は以下のように定義され, (前述したように) 関係式 (14) が成り立つ.

$$\frac{\partial G_d}{\partial \delta U}(U, V)_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \sum_{l=1}^m \left(W_l^+(U, V)_k s_k^+(U_k - V_k) + W_l^-(U, V)_k s_k^-(U_k - V_k) + (s_k^+ W_l^-(U, V)_k + s_k^- W_l^+(U, V)_k) (U_k - V_k) \right) \quad (19)$$

Remark : (16) の導出に用いたのは $\sum_{k=0}^N$ と δ_k^+ の間に成り立つ部分和分式であり, 部分和分としてはもっとも primitive である. よって, 関数 G の定義に用いる差分が δ_k^+ に帰結できるのであればこの定義式は有効である. 実際, 知られているほとんどの差分演算子が δ_k^+ に帰結可能である. \square

6.3 Discrete Calculus : 4点離散変分導関数

$G_d(U, V) = G_d(V, U)$ が成り立つ関数 $G_d(U, V)_k = \sum_{l=1}^m f_l(U, V) g_l^+(\delta_k^+ U, \delta_k^+ V) g_l^-(\delta_k^- U, \delta_k^- V)$ に対して4点離散変分導関数は次の式で定義される.

$$\frac{\delta(G_d, \text{loc})}{\delta(U, V : W, X)_k} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{l=1}^m \left(\frac{d(f_l, \text{loc})}{d(U, V : W, X)} \frac{g_l^+(\delta_k^+ U, \delta_k^+ V) g_l^-(\delta_k^- U, \delta_k^- V) + g_l^+(\delta_k^+ W, \delta_k^+ X) g_l^-(\delta_k^- W, \delta_k^- X)}{2} - \delta_k^+ W_l^-(U, V : W, X)_k - \delta_k^- W_l^+(U, V : W, X)_k \right) \quad (20)$$

ただし,

$$W_l^\pm(U, V : W, X)_k \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{f_l(U, V) + f_l(W, X)}{2} \right) \left(\frac{g_l^\mp(\delta_k^\mp U, \delta_k^\mp V) + g_l^\mp(\delta_k^\mp W, \delta_k^\mp X)}{2} \right) \frac{d(g_l^\pm, \text{loc})}{d(\delta_k^\pm U, \delta_k^\pm V : \delta_k^\pm W, \delta_k^\pm X)} \quad (21)$$

$$\frac{d(f, \text{loc})}{d(a, b : c, d)} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{f(a, b) - f(c, d)}{\text{loc}(a, b) - \text{loc}(c, d)} & : \text{loc}(a, b) \neq \text{loc}(c, d) \\ \left. \frac{df(x, x)}{dx} \right|_{x=\text{loc}(a, b)} & : \text{loc}(a, b) = \text{loc}(c, d). \end{cases} \quad (22)$$

であり, loc は次の条件を満たすとする.

$$\text{loc}(a, b) = \text{loc}(b, a) \quad (23)$$

$$\text{loc}(\delta_k^\pm a, \delta_k^\pm b) = \delta_k^\pm \text{loc}(a, b) \quad (24)$$

また, 式 (15) 中の境界項は以下のように定義される.

$$\frac{\partial G_d}{\partial \delta U}(U, V : W, X)_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \sum_{l=1}^m \left\{ W_l^+(U, V : W, X)_k s_k^+(\text{loc}(U, V) - \text{loc}(W, X)) + W_l^-(U, V : W, X)_k s_k^-(\text{loc}(U, V) - \text{loc}(W, X)) + (s_k^+ W_l^-(U, V : W, X)_k + s_k^- W_l^+(U, V : W, X)_k) (\text{loc}(U, V) - \text{loc}(W, X)) \right\} \quad (25)$$

7 New Schemes

本章では, (1) に対して, エネルギー保存ないしは運動量保存という性質を持つ差分スキームを提案する. ここで提案する (一般形の) スキームは, Sect. 4 に示した具体的な既存のスキームをすべて包含するという特徴を持つ.

以下に提案する差分スキームを示す. なお, 略称は

$$G - \left(\begin{array}{l} E: \text{エネルギー保存} \\ L: \text{運動量保存} \end{array} \right) \left(\begin{array}{l} e: \text{陽的スキーム} \\ i: \text{陰的スキーム} \end{array} \right) \{-\text{modifier}\}$$

の形になっている (最初の “G-” は General- の意). modifier の意味は Sect. 4 のそれと同じである.

保存量と保存量密度の関係も同じである. 保存則条件とは, 保存則を成り立たせるための必要十分条件である. 保存則条件の下で, 提案するスキームに従うと保存則が確かに成立することは容易に確認できる.

略称	スキーム / 保存量密度 / 保存則条件 / 性質 / 包含される既存スキーム	
G-Ei	スキーム	$\delta_n^{(2)} U_k^{(n)} = - \left(\frac{\delta(G_d, \text{loc})}{\delta(U^{(n+1)}, U^{(n)} : U^{(n)}, U^{(n-1)})} \right)_k$
	保存量密度	$\epsilon_k^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{1}{2} (\delta_n^+ U_k^{(n)})^2 + G_d(U^{(n+1)}, U^{(n)})_k$
	保存則条件	$\left[\frac{\partial(G_d, \text{loc})}{\partial \delta U} (U^{(n+1)}, U^{(n)} : U^{(n)}, U^{(n-1)})_k \right]_{k=0}^N = 0$
	性質	エネルギー保存 / 陰的
	包含	Ei-S78, Ei-B86, Ei-F91, Ei-L95
G-Ee	スキーム	$\delta_n^{(2+)} U_k^{(n)} = - \left(\frac{\delta G_d}{\delta(U^{(n+1)}, U^{(n)})} \right)_k$
	保存量密度	$\epsilon_k^{(n)} = \frac{1}{2} (\delta_n^+ U_k^{(n)}) (\delta_n^- U_k^{(n)}) + G_d(U^{(n)})_k$
	保存則条件	$\left[\frac{\partial G_d}{\partial \delta U} (U^{(n+1)}, U^{(n)})_k \right]_{k=0}^N = 0$
	性質	エネルギー保存 / 陽的
	包含	Ee-L95

Table 2: 提案するスキーム (エネルギー保存)

ただし, G-Ei に対しては $\text{loc}(a, b) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{a+b}{2}$ と特に定義する.

略称	スキーム / 保存量密度 / 保存則条件 / 性質 / 包含される既存スキーム	
G-Li	スキーム	$\delta_n^{(2)} U_k^{(n)} = - \left(\frac{\delta G_d}{\delta (s_k^+ \mu_n^{(1)} U^{(n)}, s_k^- \mu_n^{(1)} U^{(n)})} \right)_k$
	保存量密度	$l_k^{(n+\frac{1}{2})} = \delta_k^{(1)} \mu_n^+ U_k^{(n)} \delta_n^+ U_k^{(n)}$
	保存則条件	$\left[\frac{1}{2\Delta x} \frac{\partial G_d}{\partial \delta U} (s_k^+ \mu_n^{(1)} U^{(n)}, s_k^- \mu_n^{(1)} U^{(n)})_k + \frac{1}{2} \delta_n^{(1)} U_k^{(n)} s_k^{(1)} \delta_n^{(1)} U_k^{(n)} - \mu_k^{(1)} G_d(\mu_n^{(1)} U^{(n)})_k \right]_{k=0}^N = 0$
	性質	運動量保存 / 陰的
	包含	既存スキーム無し
G-Le-I	スキーム	$\delta_n^{(2)} U_k^{(n)} = - \left(\frac{\delta G_d}{\delta (s_k^+ U^{(n)}, s_k^- U^{(n)})} \right)_k$
	保存量密度	$l_k^{(n+\frac{1}{2})} = \delta_k^{(1)} \mu_n^+ U_k^{(n)} \delta_n^+ U_k^{(n)}$
	保存則条件	$\left[\frac{1}{2\Delta x} \frac{\partial G_d}{\partial \delta U} (s_k^+ U^{(n)}, s_k^- U^{(n)})_k + \frac{1}{2} \delta_n^{(1)} U_k^{(n)} s_k^{(1)} \delta_n^{(1)} U_k^{(n)} + \frac{\Delta t^2}{8} \delta_n^{(2)} U_k^{(n)} s_k^{(1)} \delta_n^{(2)} U_k^{(n)} - \mu_k^{(1)} G_d(U^{(n)})_k \right]_{k=0}^N = 0$
	性質	運動量保存 / 陽的
	包含	Le-L95
G-Le-II	スキーム	$\delta_n^{(2+)} U_k^{(n)} = - \left(\frac{\delta G_d}{\delta (s_k^+ \mu_n^+ U^{(n)}, s_k^- \mu_n^+ U^{(n)})} \right)_k$
	保存量密度	$l_k^{(n)} = \delta_k^{(1)} \mu_n^- U_k^{(n)} \delta_n^{(1)} U_k^{(n)}$
	保存則条件	$\left[\frac{1}{2\Delta x} \frac{\partial G_d}{\partial \delta U} (s_k^+ \mu_n^+ U^{(n)}, s_k^- \mu_n^+ U^{(n)})_k + \frac{1}{2} \delta_n^{(1)} U_k^{(n)} s_k^{(1)} \delta_n^{(1)} U_k^{(n)} - \mu_k^{(1)} G_d(\mu_n^+ U_k^{(n)}) \right]_{k=0}^N = 0$
	性質	運動量保存 / 陽的
	包含	既存スキーム無し

Table 3: 提案するスキーム (運動量保存)

8 数値計算例

本章ではごく簡単な数値計算をいくつか行うことで、本研究で提案した一般形の差分スキームを応用する例を示す。

8.1 数値計算例：sine-Gordon 方程式

ここでは、Sect. 3 で示した方程式の中でもっとも形が単純で見やすい非線型方程式である sine-Gordon 方程式の数値計算例を示す。判明している厳密解と数値解を比較することで、誤差等が容易に見積もれるという点もこの方程式を対象にする利点である。本章で対象とした厳密解は

$$u(x, t) = 4 \arctan \left(\exp \left(\frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \right) \right) \quad (26)$$

で、速度 $v = 0.2$, エネルギー = $-11.83503\dots$, 運動量 = $-1.632993\dots$ である。まず、エネルギー保存スキームのいくつかで数値計算を行った例を示す。

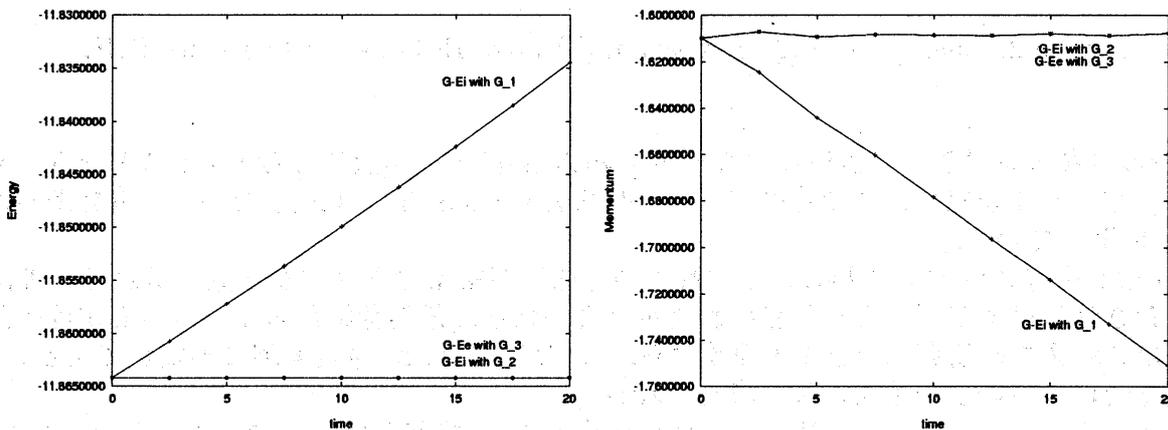


Figure 1: Energy (a) and Momentum (b) through G-E* schemes for SGE

図中のスキームは各々、G-Ei スキーム (with $G_d(U, V) = G_1(U, V)$), G-Ei スキーム (with $G_d(U, V) = G_2(U, V)$), G-Ee スキーム (with $G_d(U) = G_3(U)$) を指す。ただし、

$$G_1(U, V)_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \left\{ \frac{\delta_k^+ U_k \delta_k^+ V_k + \delta_k^- U_k \delta_k^- V_k}{2} \right\} - \left(\frac{\cos(U_k) + \cos(V_k)}{2} \right) \quad (27)$$

$$G_2(U, V)_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \left\{ \frac{\delta_k^+ U_k \delta_k^+ V_k + \delta_k^- U_k \delta_k^- V_k}{2} \right\} - \cos \left(\frac{U_k + V_k}{2} \right) \quad (28)$$

$$G_3(U)_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \left\{ \frac{(\delta_k^+ U_k)^2 + (\delta_k^- U_k)^2}{2} \right\} - \cos(U_k) \quad (29)$$

である。ちなみに、G-Ei with G_1 は Ei-S78 に、G-Ei with G_2 は Ei-F91 に、G-Ee with G_3 は Ee-F91 に各々等しい。計算時のパラメータは $\Delta x = 0.5, \Delta t = 0.025$ であり、境界条件は

$$U_{-1}^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} U_1^{(n)}, U_{N+1}^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} U_{N-1}^{(n)} \quad (30)$$

としている。

結果を見ると、G-Ei スキーム with G_1 は誤差が蓄積していき、残りの二つは保存量をきちんと保存しているように見える。実際、G-Ei with $G_1 = \text{Ei-S78}$ は安定性が確保できないと [10] で言及されており、それが目に見えた形になっている。

次に、運動量保存スキームのいくつかで数値計算を行った例を示す。

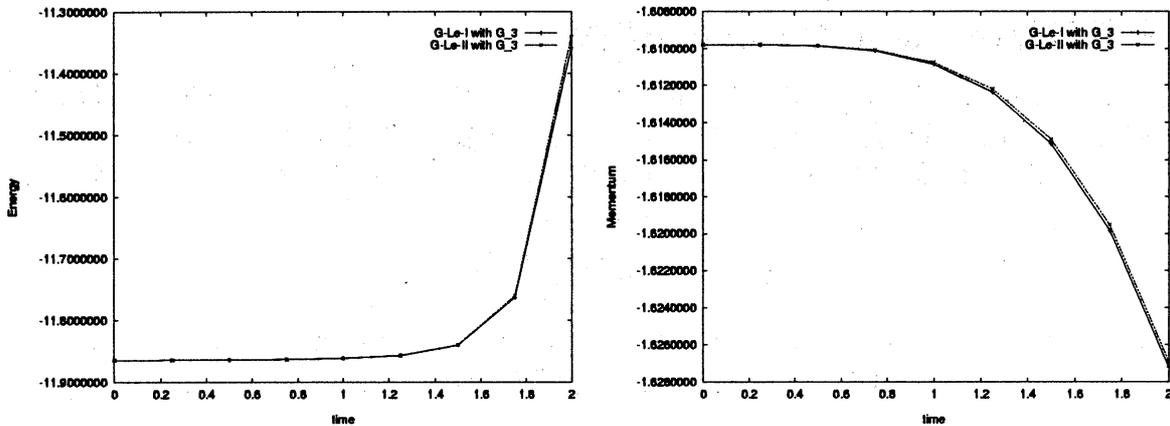


Figure 2: Energy (a) and Momentum (b) through G-Le-* schemes for SGE

図中のスキームは各々、G-Le-I スキーム (with $G_d(U) = G_3(U)$), G-Le-II スキーム (with $G_d(U) = G_3(U)$) を指す。この時のパラメータは $\Delta x = 0.5, \Delta t = 0.005$ であり、境界条件は同じ (30) を用いている。

保存量が保存されずにじわじわとずれてゆく様子が結果のグラフから見て取れる。理論的には保存されるはずだが、丸め誤差の影響かと思われる。運動量保存スキームの安定性に関する議論はこれまでの研究にほとんど見受けられないが、これはこの(実際に不安定である)という事実を受けたものという可能性が考えられる。

Remark : G-Le-* スキームに対して、境界条件 (30) は保存則条件になっていない。しかし、解の波形の中心に対して境界は十分に遠いため、G-Le-* スキームでエネルギーおよび運動量がきちんと保存されていない主な原因は境界条件にはないと思われる。□

8.2 数値計算例 : Shimochi-Kawai 方程式

ここでは既存の研究例が少ない Shimochi-Kawai 方程式の数値計算例を示す。この方程式に対して知られている厳密解は多価性をもつ。

用いたスキームは、

$$G_d(U)_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{12} \left\{ \frac{(\delta_k^+ U_k)^4 + (\delta_k^- U_k)^4}{2} \right\} \quad (31)$$

とした G-Ee スキームである。パラメータは $\Delta x = 0.05, \Delta t = 0.0001$ とし、境界条件は (30) を用いた。

まず、多価性の影響が出るのが比較的遅い厳密解に対して行った数値計算例を示す。この時の厳密解は、

$$u(x, 0) = e^{-(x-3)^2} \quad (32)$$

$$u_t(x, 0) = 2(x-3)^2 e^{-(x-3)^2} \quad (33)$$

であり、エネルギー = 0.1384729571... である。点が数値解を、実線が厳密解を表わしているが、グラフ上ではほとんど差異がない。グラフ下に示されている E はその時点での数値解によるエネルギー値である。

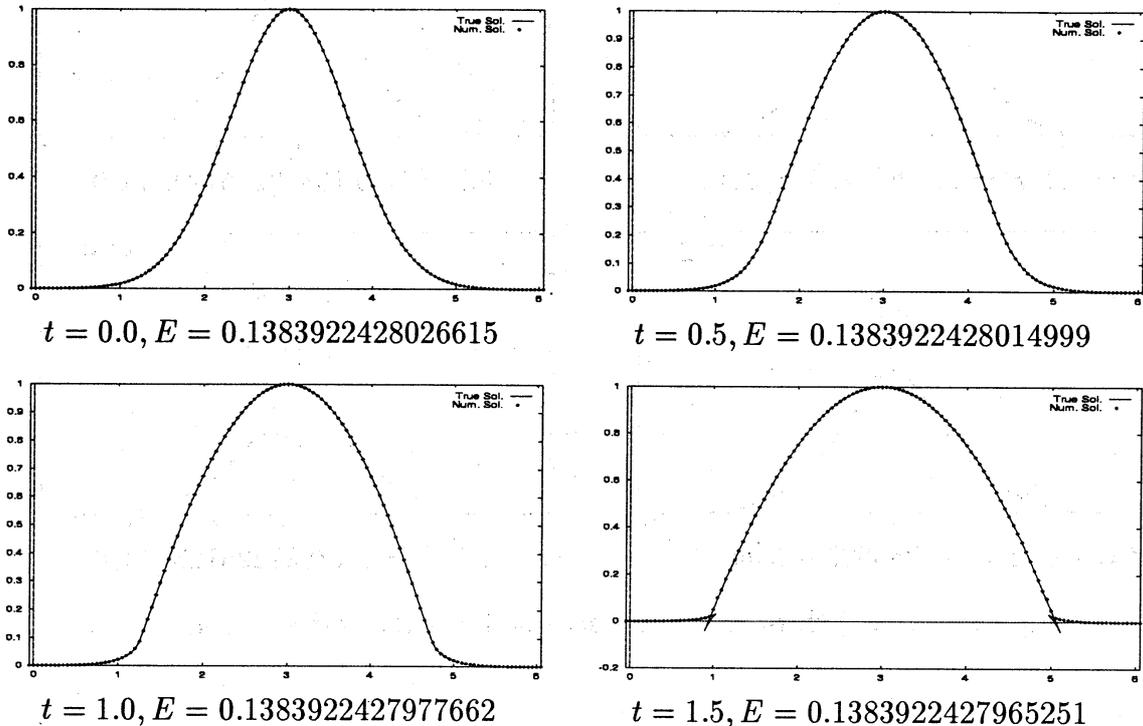


Figure 3: $u(x,t)$ through a G-Ee scheme for SKE (slow solution)

次に、多価性の影響が出るのが比較的早い厳密解に対して行った数値計算例を示す。この時の厳密解は、

$$u(x,0) = e^{-(x-3)^2} \quad (34)$$

$$u_t(x,0) = -2(x-3)^2 e^{-(x-3)^2} \quad (35)$$

であり、エネルギー = 0.1384729571... である。点が数値解を、実線が厳密解を表わしているが、 $t = 0.5$ 辺りからグラフ上で数値解と厳密解が大きく離れていくのが分かる。数値解のエネルギーがきちんと保存されているのは見て取れるので、数値計算そのものは破綻していないとみられ、この現象にはさらなる考察が必要なことが分かる。

References

- [1] A. E. KUDRYAVTSEV, JETP Letter, 22(1975), 82-83.
- [2] R. HIROTA, J. Phys. Soc. Jpn., 43(1977), 2079-2086.
- [3] W. STRAUSS AND L. VÁZQUEZ, J. Comp. Phys., 28(1978), 271-278.
- [4] R. HIROTA, Tech. Rep. A-12, Dept. of Applied Math. Fac. of Eng. Hiroshima Univ., (1982).
- [5] G. BEN-YU, ET AL., Appl. Math. Comput., 18(1986), 1-14.
- [6] Z. FEI AND L. VÁZQUEZ, Appl. Math. Comput., 45(1991), 17-30.
- [7] L. VU-QUOC AND S. LI, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 107(1993), 341-349.

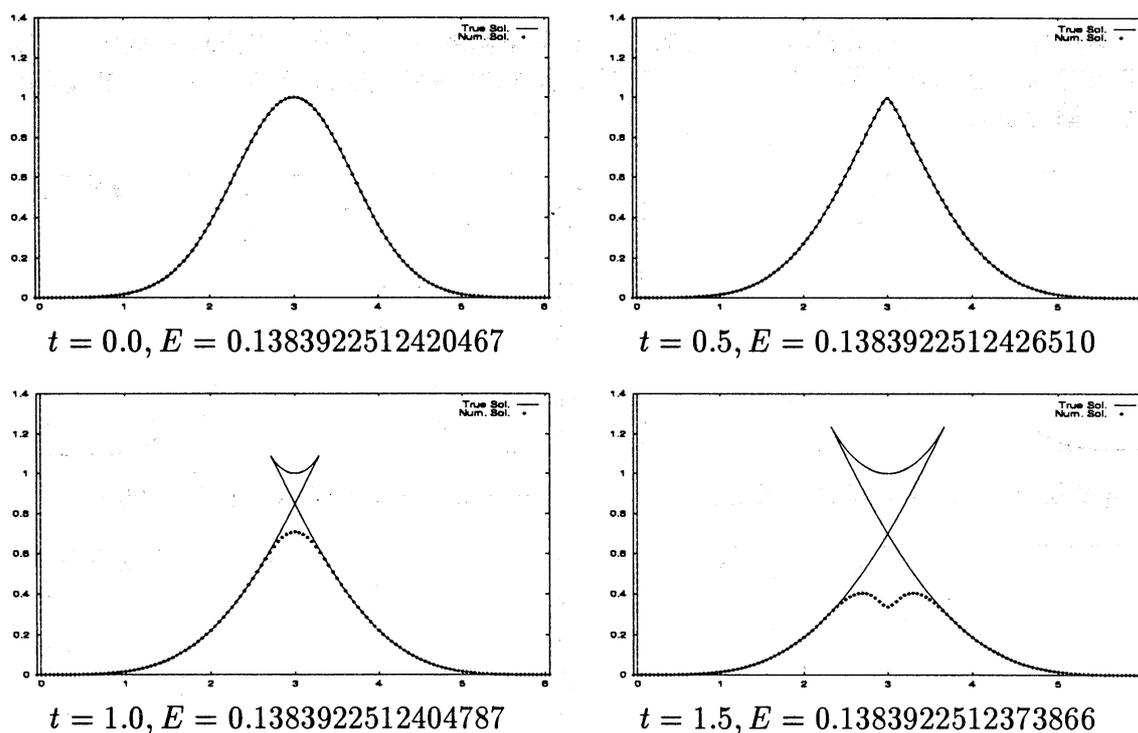


Figure 4: $u(x,t)$ through a G-Ee scheme for SKE (fast solution)

- [8] M. J. ABLOWITZ, B. M. HERBST AND C. M. SCHOBBER, *Physica D*, 87(1995), 37-47.
- [9] K. DJIDJELI, W. G. PRICE AND E. H. TWIZELL, *J. Eng. Math.*, 29(1995), 347-369.
- [10] S. LI AND L. VU-QUOC, *SIAM J. Numer. Anal.*, 32(1995), 1839-1875.
- [11] Z. FEI, V. M. PÉREZ-GARCÍA AND L. VÁZQUEZ, *Appl. Math. Comput.*, 71(1995), 165-177.
- [12] M. J. ABLOWITZ, B. M. HERBST AND C. M. SCHOBBER, *J. Comput. Phys.*, 126(1996), 299-314.
- [13] W. A. B. EVANS, M. D. CUNHA, V. V. KONOTOP AND L. VÁZQUEZ, in *Nonlinear Klein-Gordon and Schrödinger systems: theory and applications* (Madrid, 1995), World Sci.(1996), 293-302.
- [14] M. J. ABLOWITZ, B. M. HERBST AND C. M. SCHOBBER, *J. Comput. Phys.*, 131(1997), 354-367.
- [15] D. B. DUNCAN, *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(1997), 1742-1760.
- [16] M. ELGAMAL AND S. NAKAGIRI, in *Kohkyuuroku*, RIMS Kyoto Univ.(1997), 123-137.
- [17] S. I. ZAKI, L. R. T. GARDNER AND G. A. GARDNER, *Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. B*(12), 112(1997), 1027-1036.
- [18] 下地 貞夫 AND 川合 敏雄, 数值解析シンポジウム予稿集, 第 26 回 (1997), 39-42.
- [19] A. G. BRATSOS AND E. H. TWIZELL, *Appl. Math. Comput.*, 93(1998), 117-137.
- [20] 降旗 大介 AND 森 正武, 日本応用数理学会論文誌, 8(1998), 317-340.