

非線形波動系に対するシンプレクティック法と運動量保存則

日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター 佐々 成正 (Narimasa SASA)

概要

非線形シュレーディンガー型波動方程式等の非線形偏微分方程式の時間発展問題に対し、空間差分法と陽的 symplectic 数値解法の適用した場合の保存則について考察を行った。この計算スキームではエネルギー保存則がある変動幅を持って成り立つ事が知られているが、これに加え(大域的な)運動量保存則も、適当な条件下では(ある変動幅を持って)成り立つ事がわかった。この事に対し理論的考察、および数値シミュレーションを行って結果の妥当性を検証した。

1. はじめに

微分方程式の時間発展問題を数値的に解く場合、その微分方程式が本来持っている第1積分や位相空間体積等の保存則を何らかの意味で反映した数値解法を用れば、計算結果に対する信頼性は大変向上する。近年そのような手法の重要性が認識され、保存則を(自動的に)満たす数値計算スキームを総称して Geometric Integrator と呼んで盛んに研究が行われている [1].

ここでは Geometric Integrator の中でも代表的なスキームである、symplectic 数値解法を Hamilton 系偏微分方程式に適用した場合について考察する。symplectic 数値解法は時間発展写像が正準変換で与えられるものとして定義されるが、その特徴としてエネルギーを(ある一定の範囲内で)保存する性質を持つことが知られている。これに加えて実用的な観点から重要な、

[A] (分離型ハミルトニアンの場合に) 陽解法を構成できる

[B] 時空間の近似精度を上げ易い

という性質も兼ね備えている。特に大規模な数値シミュレーション行う場合、PC クラスターのようなスカラー並列型計算機を用いねばならないため、[A] のような性質を持つ事は実用上望ましい。

これらの特徴に加え、本稿では Hamilton 系偏微分方程式に symplectic 数値解法を適用した場合、ある条件下で大域的運動量保存則が(ある一定の範囲内で)成り立つことを示す。エネルギー保存則と運動量保存則は普遍的な保存則であり、もしこの2つの量が実質的に保存する数値計算スキームであることが言えれば、さらに計算結果に対する信頼性が高まると言える。

2. 方程式の空間離散化

我々が考察の対象とするのは非線形波動方程式系で、具体例を挙げると、

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\nabla^2 \psi + U'(|\psi|^2) \psi, \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\nabla^2 u + U'(u), \quad (2)$$

の様に、「(分散性)波動方程式+非線形ポテンシャル項」の形の方程式で表される系である。特に、前節の [A] の性質である「ハミルトニアンが可解な部分積に分解できる」という性質を満たす系、すなわち陽的 Symplectic 数値解法が適用可能な系を考える。

そこで、本稿では(空間1次元)非線形シュレーディンガー型方程式、

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U'(|\psi|^2)\psi, \quad (3)$$

を例にとって時間発展問題を考察する。ここで、 $\psi = \psi(x, t)$ は(複素)従属変数、 U はポテンシャルを表す任意の実関数である。例えば、 $U(x) = ax$ ($U' = a$, 定数) と選べば(時間依存線形)シュレーディンガー方程式、 $U(x) = x^2$ ($U' = 2x$) と選べば非線形シュレーディンガー方程式となるため、方程式(3)はシュレーディンガー方程式および非線形シュレーディンガー方程式を含む一般的な非線形分散性波動方程式を表している。方程式(3)に対する境界条件は周期境界条件、

$$\psi(x + x_L, t) = \psi(x, t), \quad (4)$$

を課すとする。 x_L は系の大きさを表す。空間2,3次元の場合、すなわち方程式(1)に対する場合についても本稿と全く同様の議論が成り立つ。

以下では方程式(3)に対する数値計算手法を議論するが、まず本稿では空間微分を差分法で近似するスキームを用いる。 Δx を(空間)メッシュ間隔、 L を全(空間)メッシュ数($\Delta x = x_L/L, L \in \mathbb{N}$) とすると、方程式(3)の2階微分は3項間差分式を用いて、

$$\delta_1^2[\psi(x)] = [\psi(x + \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - \Delta x)]/\Delta x^2 \quad (5)$$

と近似できる。さらに差分の項数を増やせば、一般には(2N+1)項間($N = 1, 2, 3, \dots$)の差分式を用いて、

$$\begin{aligned} \delta_N^2[\psi(x)] &= \sum_{m=1}^N a_N(m)[\psi(x + m\Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - m\Delta x)] \\ & \left(= \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + o(\Delta x^{2N}) \right), \end{aligned} \quad (6)$$

と表記できる。ここで、

$$a_N(m) = (-1)^{m+1} \frac{2(N!)^2}{m^2(N+m)!(N-m)!\Delta x^2} \quad (1 \leq m \leq N), \quad (7)$$

である。この差分法を方程式(3)に適用し、離散変数を $\psi_j = \psi(j\Delta x, t)$ と表せば空間離散系に対する時間発展方程式、

$$\frac{\partial\psi_j}{\partial t} = i\delta_N^2[\psi_j] - iU'(|\psi_j|^2)\psi_j \quad \left(= \frac{\partial H}{\partial \psi_j^*} \right), \quad (8)$$

を得る。従属変数 ψ_j に対し周期境界条件、

$$\psi_{j+L} = \psi_j, \quad (9)$$

を課すとする。また、ハミルトニアン H は、

$$H = H_{1N} + H_2 \quad (10)$$

$$H_{1N} = -i \sum_j \left\{ \sum_{m=1}^N a_N(m) |\psi_{j+m} - \psi_j|^2 \right\} \quad (11)$$

$$H_2 = -i \sum_j U(|\psi_j|^2) \quad (12)$$

で与えられる.

3. 陽的シンプレクティック数値解法

系に対するハミルトニアンが可解な部分和に分解できる時, 陽的 symplectic 数値解法の構成が可能である [2]. ハミルトニアン (11) あるいは (12) 単独での時間発展が可解であるとして, 陽的 symplectic 数値解法の構成法について考察する. H_{1N} , H_2 との Poisson 括弧を作る微分作用素を

$$\hat{A}_{1N} \equiv \{ \cdot, H_{1N} \}, \quad \hat{A}_2 \equiv \{ \cdot, H_2 \} \quad (13)$$

と定義すると, (時間) メッシュ間隔 Δt に対する 1 次の symplectic 数値解法は形式的に,

$$S_1(\Delta t) = \exp[\Delta t \hat{A}_{1N}] \exp[\Delta t \hat{A}_2] \quad (14)$$

で与えられる. ここで, $\{, \}$ Poisson 括弧式は,

$$\{A, B\} = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial \psi_j} \frac{\partial B}{\partial \psi_j^*} - \frac{\partial A}{\partial \psi_j^*} \frac{\partial B}{\partial \psi_j} \right) \quad (15)$$

を表すとする. 同様に, 時間反転対称な高次の symplectic 数値解法 $S_M(\Delta t)$ ($M = 2, 4, \dots$) は形式的に,

$$S_2(\Delta t) = \exp[\Delta t \hat{A}_2/2] \exp[\Delta t \hat{A}_{1N}] \exp[\Delta t \hat{A}_2/2] \quad (16)$$

$$S_4(\Delta t) = S_2(c_1 \Delta t) S_2(c_2 \Delta t) S_2(c_1 \Delta t) \quad (17)$$

.....

で与えられる [3]. ここで, $c_1 = 1/(2 - 2^{1/3})$, $c_2 = 1 - 2c_1$ である. この様に任意次数の symplectic 数値解法は時間発展 $\exp[\Delta t \hat{A}_{1N}]$ と $\exp[\Delta t \hat{A}_2]$ の組み合わせで構成される.

実際に数値計算を実行するために具体的に考えると, $\exp[\Delta t \hat{A}_{1N}]$ で与えられる時間発展は

$$\frac{\partial \psi_j}{\partial t} = i \delta_N^2[\psi_j], \quad (18)$$

を解いて得る事ができる. 但し, 可解ではあるものの, それを正確に実行するためには係数行列の対角化が必要となる. 例えば $N = 1$ の場合 3 項間差分式 (5) を用いた場合の時間発展 $\exp[\Delta t \hat{A}_{1N}]$ は

$$\partial_t \psi_j = i(\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1})/\Delta x^2, \quad (19)$$

で与えられるが, 実際にそれ解くためには Fourier 変換 $a_k(t) = \sum_{j=0}^{L-1} \psi_j(t) \exp[-i2\pi k j/L]$ を用いて対角化し, 各成分に対し $a_k(\Delta t) = a_k(0) \exp[-i4\Delta t \sin^2(\pi k/L)/\Delta x^2]$ と時間発展させる必要がある. 一方 $\exp[\Delta t \hat{A}_2]$ の時間発展は,

$$\frac{\partial \psi_j}{\partial t} = -iU'(|\psi_j|^2)\psi_j \quad (20)$$

を解いて得られるが, この解は $\psi_j(t) = \exp[-itU'(|\psi_j(0)|^2)]\psi_j(0)$ で与えられる.

4 運動量保存則

方程式 (8) に対して (任意次数の) 陽的 symplectic 数値解法を適用した場合, 形式的な運動量,

$$P = \frac{1}{2i} \int (\psi^* \psi_x - \psi_x^* \psi) dx \quad (21)$$

が保存する事を示すことができる [4]. 但し, 方程式 (8) において ψ は (離散化) 独立変数 j に依存するのではなく, (連続) 独立変数 x に依存する $\psi(x)$ と解釈し直して,

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = i\delta_N^2[\psi(x)] - iU'(|\psi(x)|^2)\psi(x) \quad (22)$$

と考える事にする. すなわち, 方程式 (22) は離散点 $x = j\Delta x$ のみならず, x の定義域全体 $0 \leq x \leq x_L$ で定義されているため積分 (21) が実行できると解釈する. 差分項 $\delta_N^2[\psi(x)]$ の定義は方程式 (6) で与えられている.

ここで, 方程式 (22) に対し前説で述べた陽的 symplectic 数値解法の適用を考える. まず時間発展 $\exp[\Delta t \hat{A}_{1N}]$ は

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = i\delta_N^2[\psi(x)] \quad (23)$$

で与えられるが, この時間発展に対して方程式 (21) で与えられる P は, 境界条件 (4) を考慮すると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= -i \int (\psi_t^* \psi_x - \psi_x^* \psi_t) dx \\ &= - \sum_{m=1}^N a_N(m) \int \{ [\psi(x+m\Delta x)^* + \psi(x-m\Delta x)^*] \psi_x \\ &\quad - \psi_x^* [\psi(x+m\Delta x) + \psi(x-m\Delta x)] \} dx \\ &= 0, \end{aligned} \quad (24)$$

となって保存する. また, 時間発展 $\exp[\Delta t \hat{A}_2]$ は

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = -iU'(|\psi(x)|^2)\psi(x) \quad (25)$$

で与えられるが, この時間発展に際しても同様に P が保存する事が簡単に言える. 前説で述べたように, 任意次数の陽的 symplectic 数値解法は時間発展 $\exp[\Delta t \hat{A}_{1N}]$ と $\exp[\Delta t \hat{A}_2]$ の組み合わせから構成されるため, 任意次数の陽的 symplectic 数値解法に対して方程式 (21) で与えられる P は保存する事が言える.

これまでに (陽的ではなく) 陰的 symplectic 数値解法での時間発展における運動量保存則に関して議論している先駆的な論文では, 離散点から補完を行うことで空間連続系を構成し, 運動量保存に関する議論を行っている [5-8]. それに対し本稿では, 方程式 (22) が x の定義域全体で成り立つと解釈することで, 運動量 (21) の保存則を証明している事がある特徴である. また, 陰的 Runge-Kutta 法等の symplectic 数値解法では, 2 次式で書かれる元の微分方程式の保存則をそのまま保つという性質が知られている [1]. しかしながら, 陰的 Runge-Kutta 法に書き直せないタイプの陽的 symplectic 数値解法では 2 次式で書かれる元の保存則が成り立つ事は必ずしも自明ではない.

実際の数値計算においては、離散点に対する数値積分公式から (21) を見積る必要がある。今考えている系が周期系であることから、(21) に Euler-Maclaurin の公式を適用すると、

$$P = \frac{1}{2i} \sum_j [\psi^* \psi_x - \psi_x^* \psi]_j \Delta x + R_n \tag{26}$$

$$R_n = \frac{\Delta x^{2n+1}}{(2n)!} B_{2n} \sum_j [\partial_x^{2n} (\psi^* \psi_x - \psi_x^* \psi)]_{j+\theta} \tag{27}$$

が得られ、 R_n が小さくなる条件下では高精度の近似が可能になる。ここで、 $[]_j$ は $[f(x)]_j = f(j\Delta x)$ 、 B_{2n} はベルヌイ数、 θ は $0 < \theta < 1$ のある実数を表すとす。また、 n はある自然数で被積分関数は $2n$ 階微分可能であるとする。式 (26) は最終的に、 ψ_x を離散変数で近似した式で評価される。例えば、 2ℓ 次の精度の差分式で ψ_x を置き換えた P を P_ℓ ($\ell = 1, 2, 3, \dots$) とすると、

$$P_\ell = \frac{1}{2i} \sum_j \sum_{k=1}^{\ell} b_{\ell k} (\psi_j^* \psi_{j+k} - \psi_{j+k}^* \psi_j) \tag{28}$$

で与えられることがわかる。ここで、係数 $b_{\ell k}$ は

$$b_{\ell k} = (\ell!)^2 / [k^3 \prod_{m=1(m \neq k)}^{\ell} (m^2 - k^2)], \tag{29}$$

で与えられる。

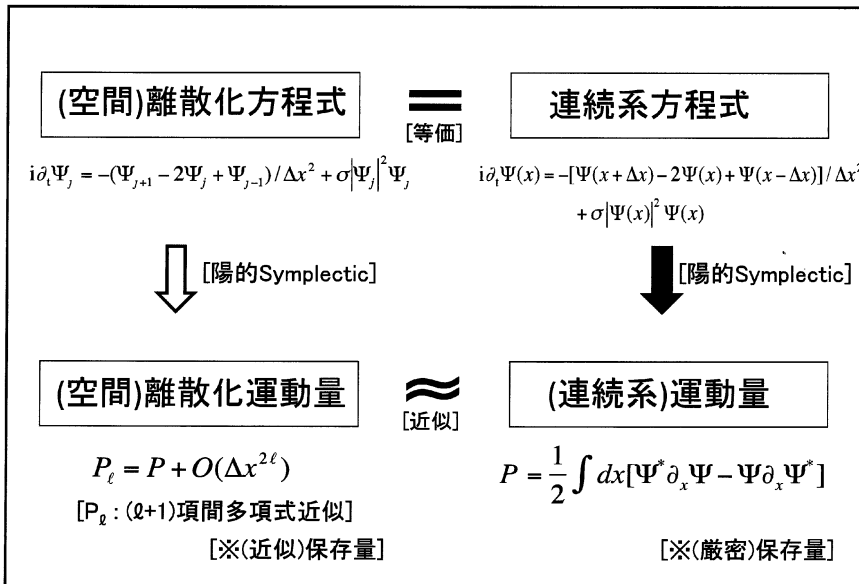


図 1: 連続系、離散系方程式と運動量保存則の関係

P_ℓ を具体的に書き下せば,

$$P_1 = \frac{1}{2i} \sum_j (\psi_j^* \psi_{j+1} - \psi_{j+1}^* \psi_j) \quad (30)$$

$$P_2 = \frac{1}{2i} \sum_j \left\{ \frac{8}{6} (\psi_j^* \psi_{j+1} - \psi_{j+1}^* \psi_j) - \frac{1}{6} (\psi_j^* \psi_{j+2} - \psi_{j+2}^* \psi_j) \right\} \quad (31)$$

$$P_3 = \frac{1}{2i} \sum_j \left\{ \frac{3}{2} (\psi_j^* \psi_{j+1} - \psi_{j+1}^* \psi_j) - \frac{3}{10} (\psi_j^* \psi_{j+2} - \psi_{j+2}^* \psi_j) \right. \\ \left. + \frac{1}{30} (\psi_j^* \psi_{j+3} - \psi_{j+3}^* \psi_j) \right\} \quad (32)$$

.....

で与えられる. この時 Δx が十分小さく, 式 (27) で与えられる誤差の見積もりが $O(\Delta x^{2n})$ で与えられるならば,

$$P_\ell = P + O(\Delta x^{2\min[\ell, n]}) \quad (33)$$

が成り立つ. すなわち, 時間発展 (23) と (25) の組み合わせで得られる (任意次数の) 陽的 symplectic 数値解法を用いて時間発展させた $\psi(x)$ が十分滑らか, かつ高階微分の値が十分小さければ ($n \gg 1$), 式 (33) の誤差は $O(\Delta x^{2\ell})$ で与えられることになり, 近似精度 (ℓ) を上げると数値計算において十分な精度で運動量保存が成り立つ. 図 1 に離散化方程式, 連続系方程式, 厳密な運動量保存則, 近似的な運動量保存則の関係性を簡単な図式にまとめた.

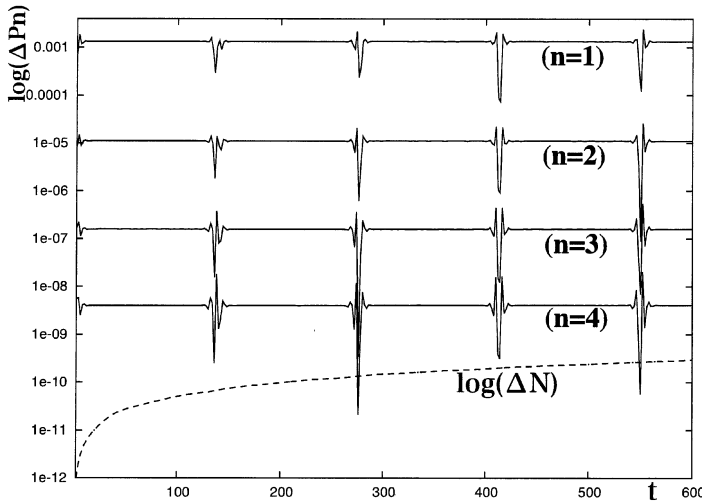


図 2: 運動量 ΔP_n と粒子数 ΔN の時間発展

5 数値シミュレーション

実際に, 方程式 (8) に対する数値シミュレーションを行って, 式 (28) で与えられる運動量 P_ℓ が保存しているか否かを検証する. 方程式は (8) において $U(x) = x^2 (U' = 2x)$ と選び, さ

らに $N = 1$ とした 3 項間差分 (5) を実際の計算に用いる. 空間メッシュ間隔とメッシュ総数は $\Delta x = 0.125$, $L = 1024$ とそれぞれ取って, 系の大きさを $x_L = 1024\Delta x$ とする. 時間発展は 2 次の陽的 symplectic 数値積分法 (16) を用いて計算し, $\Delta t = 0.01$ と選んでいる. 初期値は 2-soliton とし, 文献 [9] において $P_1 = 1 - 0.25i$, $P_2 = 0.5 + 0.2i$, $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = 1$, $\delta = 2$ と選んでいる. その計算結果を図 2 に示す. 図 2 では実線で $\Delta P_n(t) [\equiv P_n(t) - P_n(0)]$ ($n = 1, \dots, 4$) の時間発展と, 破線で $\Delta N(t) [\equiv N(t) - N(0)]$ の時間発展を図示している. 但し, $N(t) = \sum_j |\psi_j|^2$ である. 図 2 から, 式 (33) の見積もりの通り $\Delta P_n(t)$ が n の増大と共に減少していること, ある振動幅を持って保存していることがわかる. また, $N(t)$ はこの系に対する厳密な保存量である事が知られているので [2], 本来 $\Delta N(t)$ は 0 になるはずであるが, 丸め誤差等が累積して図 2 に表示されている値になっていると考えられる. 従って, $\Delta P_n(t)$ も仮に n を大きく取ったとしても, $\Delta N(t)$ のレベルよりは小さくはならない.

6 まとめと今後の課題

本稿では, ハミルトン系に属する非線形偏微分方程式の時間発展問題において陽的 symplectic 数値積分法を用いると全運動量が近似的に保存することを理論的に考察し, 数値シミュレーションを用いて実際に検証した. 陽的解法を含む一般の symplectic 数値積分法に対し運動量保存に関する理論的考察を行うことが今後の課題である.

参考文献

- [1] E. Hairer, Ch. Lubich and G. Wanner: *Geometric Numerical Integration* (Springer Verlag, Berlin, 2002).
- [2] 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: Vol.10, No.2, (2000) 119–131
- [3] H. Yoshida, Construction of higher order symplectic integrators, *Phys. Lett.***A150** (1990) 262–268.
- [4] N. Sasa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 053001(2013).
- [5] M. Oliver, M. West and C. Wulff: *Numer. Math.* **97** (2004) 493.
- [6] B. Cano: *Numer. Math.* **103** (2006) 197.
- [7] D. Cohen, E. Hairer and C. Lubich: *Numer. Math.* **110** (2008) 113
- [8] D. Cohen and C. Lubich: *BIT Numer. Math.* **52** (2012) 877
- [9] R. Hirota, Exact envelope-soliton solutions of a nonlinear wave equation, *J. Math. Phys.*, **14** (1973) 805–809