

非線形波動方程式に対するシンプレクティック数値解法

日本原子力研究所 佐々 成正 (Narimasa Sasa)

1 はじめに

Symplectic 数値解法は Hamilton 力学系に対して非常に有効な数値計算手法であることが知られており [1-4], 本研究では, この方法を非線形波動方程式系に適用しその有効性を確かめることを目的としている. ここでは実際の応用例として, (複素) 従属変数 u に対する次のクラスの非線形波動方程式,

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + L[u] - V'(|u|^2)u = 0, \tag{1}$$

について考察する. ここで $L[u]$ は線形分散項で,

$$L[u] = \alpha_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + i\alpha_3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \alpha_4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots \quad (\alpha_j \text{は実数}) \tag{2}$$

と与えられるとする. また $V'(|u|^2)$ は非線形項を表す関数で ' は微分を表す. 本稿では, 方程式 (1) のクラスとして (1+1)-次元系を考察するが, 一般に空間が 2, 3 次元系でも全く同様に Symplectic 数値解法が適用できるということを注意しておきたい. このクラスに属するもので一番よく知られている非線形方程式は非線形 Schrödinger 方程式,

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2|u|^2 u = 0, \tag{3}$$

である. また, 方程式 (1) に対応するハミルトニアンは

$$H = H_1 + H_2 \tag{4}$$

$$H_1 = (-i) \int [\alpha_2 \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|^2 + i \frac{\alpha_3}{2} \left(\frac{\partial u^*}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u^*}{\partial x^2} \right) - \alpha_4 \left| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|^2 + \dots] dx \tag{5}$$

$$H_2 = (-i) \int V(|u|^2) dx \tag{6}$$

で与えられるので, 方程式 (1) はハミルトニアン (4) に対する Hamilton 方程式,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta u^*}, \quad \frac{\partial u^*}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta u} \tag{7}$$

と等価である. ここで記号 $\delta/\delta u$ は汎関数微分で, 一般の汎関数 $I = \int f(u, u_x, u_{xx}, \dots) dx$ に対して

$$\frac{\delta}{\delta u} I = \frac{\partial f}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial u_x} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial f}{\partial u_{xx}} \right) \dots \tag{8}$$

で定義される.

本稿では Symplectic 数値解法についての概要を述べ, 高次の Symplectic 数値解法が簡単に構成できることを示す. これらはいずれも数値解法としては陽的解法である. その後で, 実際の数値計算の例について示すことにする. なお, 非線形 Schrödinger 方程式 (3) に対する Symplectic 数値解法については文献 [5] に詳しく書かれているので参考にして下さい.

2 Symplectic 数値解法

Symplectic 解法の一般論から, 任意の Hamilton 系に対して常に陰的な Symplectic 解法が構成できることが知られている [2,3]. 一方, ハミルトニアンが (4) の様に 2つの和で書かれている場合, H_1, H_2 が共に単独では可積分 (解が簡単に書ける) であるとき, この系に対して陽的な Symplectic 解法を構成することが可

能である。1次の陽的解法はまず H_1 をハミルトニアンとしてステップ τ だけ時間発展させ、次に H_2 をハミルトニアンとしてステップ τ だけ時間発展させたものの合成（あるいはその逆）として1ステップが定義される。これは互いに非可換な作用素 A, B の指数関数に関する関係式

$$\exp[\tau(A+B)] = \exp[\tau A] \exp[\tau B] + O(\tau^2) \quad (9)$$

がその基礎になっている。ここで A, B は特に H_1, H_2 との Poisson 括弧をつくる微分作用素

$$A := \{\cdot, H_1\}, \quad B := \{\cdot, H_2\}$$

を表す。(9)の左辺の $\exp[\tau(A+B)]$ は真の解の時間発展、右辺の $\exp[\tau A] \exp[\tau B]$ は H_1 と H_2 によるフローの合成を表し、その差が $O(\tau^2)$ であることから、

$$S_1(\tau) := \exp[\tau A] \exp[\tau B]$$

が1次の精度（解法）であることが保証される。またこの定義自身、任意のハミルトニアンの解、およびその合成は symplectic であることから、上に述べた1次の解法が Symplectic 解法となることの根拠も与えている。

この指数関数表記を使えば2次の陽的解法は

$$\begin{aligned} & \exp[\tau(A+B)] \\ &= \exp\left[\frac{\tau}{2}A\right] \exp[\tau B] \exp\left[\frac{\tau}{2}A\right] + O(\tau^3) \\ &= S_2(\tau) + O(\tau^3) \end{aligned}$$

でできる。この意味は H_1 で $(\tau/2)$ 、 H_2 で (τ) 、そして H_1 で $(\tau/2)$ 時間発展させて1ステップを構成するという意味である。この2次の陽的解法は Symplectic 解法となるのみならず、時間反転対称性を持つ解法

$$S_2(\tau)S_2(-\tau) = S_2(-\tau)S_2(\tau) = \text{identity}$$

となることも注意しておく。

4次以上の時間反転対称な Symplectic 解法は上の2次の解法の対称的な合成で得られることが知られている [6]。例えば4次の解法は3つの2次の解法の合成

$$S_4(\tau) := S_2(x\tau)S_2((1-2x)\tau)S_2(x\tau)$$

で得られる。ここで $x = 1/(2-2^{1/3})$ である。同様に6次の解法は

$$\begin{aligned} S_6(\tau) &:= S_2(y_3\tau)S_2(y_2\tau)S_2(y_1\tau)S_2(y_0\tau) \\ &\quad \times S_2(y_1\tau)S_2(y_2\tau)S_2(y_3\tau) \end{aligned}$$

で良い。ここで数値定数 y_0, y_1, y_2, y_3 は

$$\begin{aligned} y_1 &= -1.1776\ 79984\ 17887 \\ y_2 &= 0.23557\ 32133\ 59357 \\ y_3 &= 0.78451\ 36104\ 77560 \\ y_0 &= 1 - 2(y_1 + y_2 + y_3) \end{aligned}$$

で与えられる。

3 非線形波動方程式への応用

ここで前節の結果を用いて、非線形波動方程式 (1) に対する陽的な Symplectic 解法を構成する。まず、ハミルトニアン (5), (6) から導かれる Hamilton 方程式はそれぞれ

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \alpha_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + i\alpha_3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \alpha_4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots = 0 \quad (10)$$

$$i \frac{\partial u}{\partial t} - V'(|u|^2)u = 0, \quad (11)$$

で与えられるから、それぞれの方程式単独での時間発展を組み合わせて陽的な Symplectic 解法を構成することができる。

ただし、実際の数値計算では空間変数を離散化しなければならないので、方程式 (10) の空間微分を差分法やスペクトル法等で置き換えて計算しなければならない。いま空間変数 x を離散化して、その上での従属変数を

$$u(x, t) \rightarrow \mathbf{u}(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_N(t)) \quad (12)$$

$$u^*(x, t) \rightarrow \mathbf{u}^*(t) = (u_1^*(t), u_2^*(t), \dots, u_N^*(t)) \quad (13)$$

とする。Symplectic 解法を構成するためには時間発展の各ステップが正準変数の組 (u_j, u_j^*) に対する正準変換になっていなければならない。この条件を満たすために、例えば (離散)Fourier 変換を使って解く方法が考えられる。離散 Fourier 変換 F を

$$u_j = F(\hat{u}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m \hat{u}_m \exp\left(\frac{2\pi i j m}{N}\right) \quad (14)$$

$$\hat{u}_m = F^{-1}(u) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j u_j \exp\left(-\frac{2\pi i j m}{N}\right) \quad (15)$$

で定義すると、方程式 (10) による時間発展は

$$u_j(t + \Delta t) = F[\exp\{-i(\alpha_2 k_m^2 - \alpha_3 k_m^3 - \alpha_4 k_m^4 + \dots)\Delta t\}F^{-1}(u(t))] \quad (16)$$

と書け ($k_m = 2\pi m/L, x_j = Lj/N$)、方程式 (11) による時間発展は、

$$u_j(t + \Delta t) = u_j(t) \exp[-iV'(|u_j(t)|^2)\Delta t] \quad (17)$$

となることがわかる。離散 Fourier 変換 (14), (15) による変数変換 $(u_j, u_j^*) \leftrightarrow (\hat{u}_m, \hat{u}_m^*)$ は正準変換であることから、方程式 (16) による時間発展 $(u_j(t), u_j^*(t)) \rightarrow (u_j(t + \Delta t), u_j^*(t + \Delta t))$ は正準変換を与えることがわかる。また、方程式 (17) が正準変換であることは明らかである。前節で与えた結果を元に、この H_1 と H_2 による時間発展によって非線形波動方程式 (1) に対する陽的な Symplectic 数値解法を構成することができる。

4 数値計算例

この節では数値計算の例として、

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \alpha_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + i\alpha_3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \beta_1 |u|^2 u + \beta_2 |u|^4 u = 0, \quad (18)$$

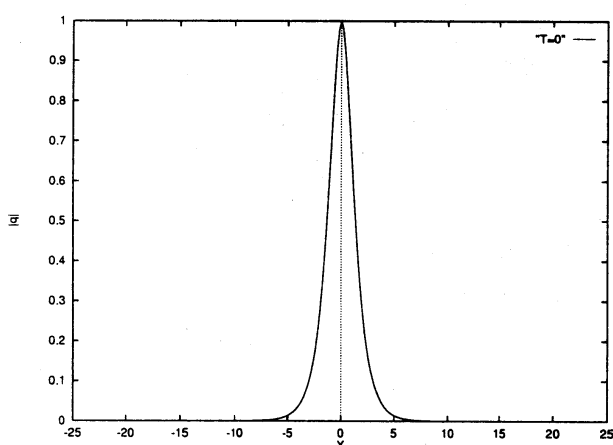
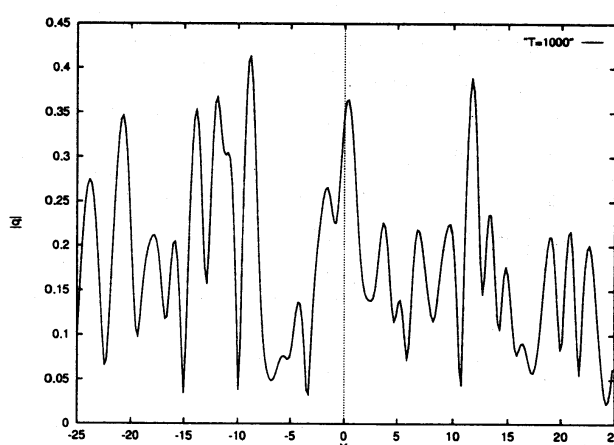
に対する初期値問題を考える。実際の計算において各係数は $\alpha_2 = 1.0, \alpha_3 = 0.7, \beta_1 = 2.0, \beta_2 = 1.0$ とした。数値計算スキームとしては比較のため 4 次の symplectic 数値解法 (SI4) と 4 次の Runge-Kutta 法 (RK4) の 2 つで計算をおこなった。ここでの「4 次の Runge-Kutta 法」は擬スペクトル法によるもの、すなわち空間微分は FFT を使って計算し、時間発展を 4 次の Runge-Kutta 法で計算する方法を用いている。またその他の条件は以下の様に与えられるとする。

- 空間 : $-25 \leq x \leq 25$, ($L = 50$) を $N = 256$ 分割する (周期境界条件)
- 時間 : $0 \leq t \leq 1000$ に対して時間刻みを $\Delta t = 0.00025$ (SI4) と $\Delta t = 0.00005$ (RK4) にとる.
- 初期波形 : $u(x, 0) = \exp(i0.8x)\text{sech}(x)$
- 精度を比較するための保存量 : $C_j = [I_j(t) - I_j(0)]/I_j(0)$

$$I_1(t) = \int |u|^2 dx \quad (19)$$

$$I_2(t) = \int \text{Im}\left[u \frac{\partial u^*}{\partial x}\right] dx \quad (20)$$

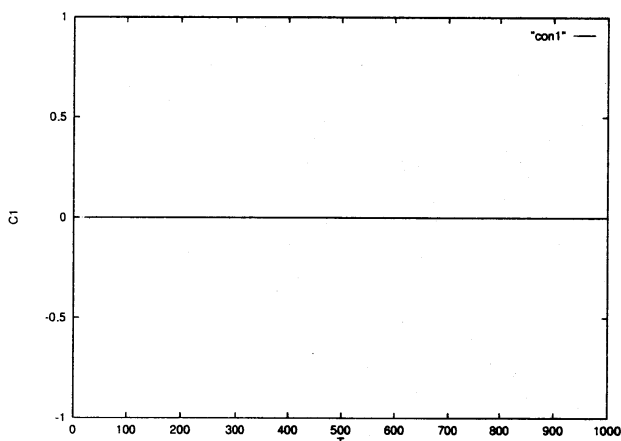
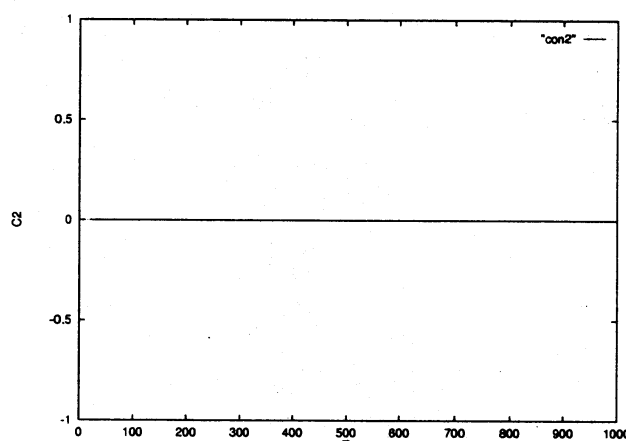
$$I_3(t) = \int \left\{ \alpha_2 \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|^2 - \alpha_3 \text{Im}\left[\frac{\partial u^*}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right] - \frac{\beta_1}{2} |u|^4 - \frac{\beta_2}{3} |u|^6 \right\} dx \quad (21)$$

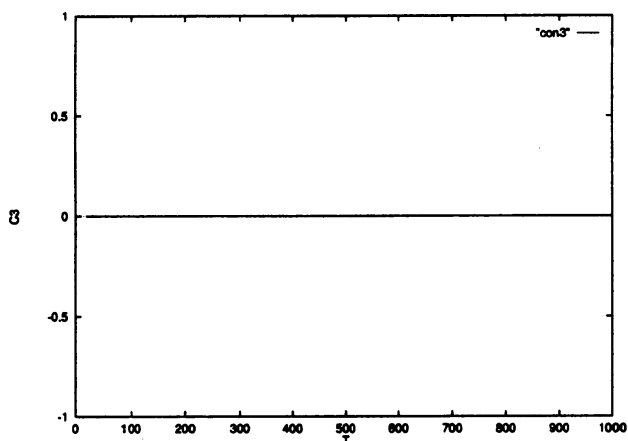
Fig.1 $T = 0$ での(初期)波形Fig.2 $T = 1000$ での波形

SI4 と RK4 で Δt の値が異なっているが、これは SI4 では $\Delta t = 0.00025$ 程度で安定して計算できるのに対して、RK4 ではその 1/5 倍の $\Delta t = 0.00005$ にしなければあまり安定でないことを示している。

Fig.1 は上で与えた初期波形 $u(x, 0) = \exp(i0.8x)\text{sech}(x)$ の絶対値 $|u|$ を描いたものである。この初期値から時間発展させて $T = 1000$ での $|u|$ の値を描いたものが Fig.2 である。Fig.2 の波形に対しては SI4 と RK4 での差は見られない。

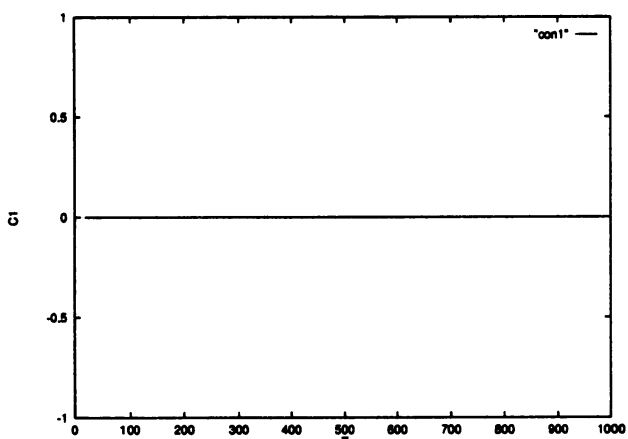
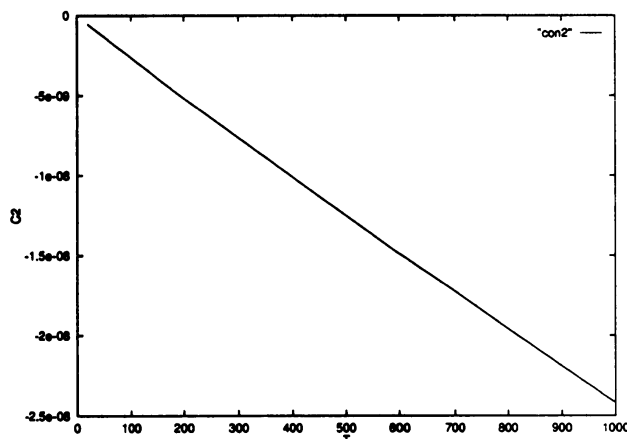
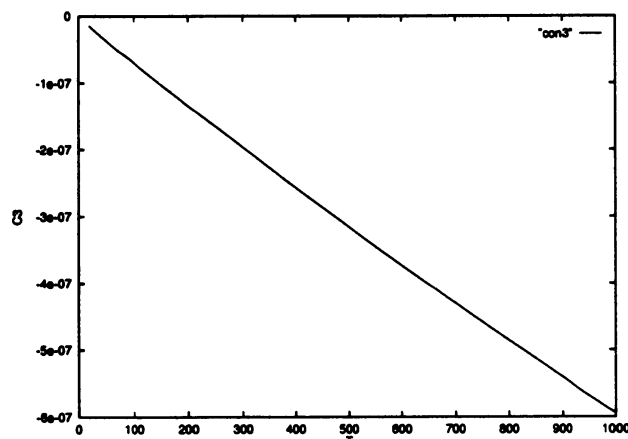
次に SI4 に対して、上で定義した C_j ($j = 1, 2, 3$) の時間変化を描かせたものが Fig.3~Fig.5 である。Symplectic 数値解法では一般にエネルギー (C_3) がある幅を持って保存することが知られている [4]。さらに、

Fig.3 保存量 C_1 の時間変化 (SI4)Fig.4 保存量 C_2 の時間変化 (SI4)

Fig.5 保存量 C_3 の時間変化 (SI4)

この場合は C_1 が厳密に保存していることがわかっている [5]. 従って C_1, C_3 が保存しているように見えるのはきちんとした理由があるが、さらにこの計算では C_2 についても良く保存していることが確認できる。

一方、RK4に対して $C_j (j = 1, 2, 3)$ の時間変化を描かせたものが Fig.6~Fig.8 である。RK4の場合、 C_j が保存する保証は何もないので、 C_1 は保存している様に見えるが、 C_2, C_3 はわずかながら値がずれていくのが読み取れる。SI4の方が Δt を大きく取っているにもかかわらず、このように保存量で差が出るということは Symplectic 数値解法の優位性が現れていると考えられる。

Fig.6 保存量 C_1 の時間変化 (RK4)Fig.7 保存量 C_2 の時間変化 (RK4)Fig.8 保存量 C_3 の時間変化 (RK4)

5 まとめ

本稿では, 非線形波動方程式 (1) に対する Symplectic 数値解法について考察を行い, また, 実際に数値計算を行なってその計算精度の高さを実証した. 特に, 4 次の (古典)Runge-Kutta 法との比較をおこない Symplectic 数値解法の安定性, また保存量に対する正確性の上で非常に優れていることが実証できた. 今後は, 様々な非線形偏微分方程式系に Symplectic 数値解法を応用し, その有効性を実証してゆきたい.

参考文献

- [1] E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations (2nd revised edition)*, Springer (1993).
- [2] J.M. Sanz-Serna, and M.P. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman and Hall (1994).
- [3] H. Yoshida, Recent progress in the theory and application of symplectic integrators, *Celest. Mech.* **56** (1993) 27–43.
- [4] 吉田春夫, シンプレクティック数値解法, *数理科学* **384** (1995) 37–46.
- [5] 佐々 成正, 吉田春夫, 非線形 Schrödinger 方程式に対する symplectic 数値解法応用数理 **10** No.2 (2000) 119–131.
- [6] H. Yoshida, Construction of higher order symplectic integrators, *Phys. Lett.***A150** (1990) 262–268.