

ある半離散スキームによる ソリトンシミュレーションについて

Department of Mathematical Sciences, University of Bath Christopher Budd
神戸大学 システム情報学研究科 谷口隆晴
大阪大学 サイバーメディアセンター 降旗大介

1 構造保存型数値解法と離散変分法

近年、エネルギー保存則など、微分方程式の満たす様々な性質を離散化後にも保つような数値解法の研究が盛んである。このような研究は構造保存型数値解法と呼ばれる。例えば、KdV 方程式

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0$$

はノルム保存則

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2 dx = 0$$

やエネルギー保存則

$$\int_{-\infty}^{\infty} G dx = 0, \quad G(u, u_x) = -u^3 + \frac{u_x^2}{2}$$

などの保存則をもつ。特に、エネルギー保存則は、KdV 方程式の変分形

$$u_t = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u}, \quad \frac{\delta G}{\delta u} = \frac{\partial G}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial u_x} \quad (1)$$

に由来している。構造保存型数値解法では、このような性質を離散化後にも保つように数値解法を設計する。

偏微分方程式に対する構造保存型数値解法の代表的な研究としては、降旗・松尾らによる離散変分法 ([2, 6] など) が挙げられる。離散変分法では、方程式の変分形 (1) を巧妙に利用して方程式を離散化することでエネルギー保存則を保つ。この方法は、KdV 方程式をはじめとする様々な方程式に適用され、多くの場合、定性的に良いスキームを導出することが経験的に知られている [3, 4, 5, 14, 15, 16, 17, 18]。一方、常微分方程式に対してエネルギー保存則を保つ数値解法を導出する方法としては、離散勾配法がよく知られている [7, 8, 11, 12, 13]。これらの方法を偏微分方程式へ適用する研究も進んでおり、特に、AVF (average vector field) 法 [1, 19, 21] と呼ばれる離散勾配法を用いると、多くの方程式に対して離散変分法と同一のスキームが得られる。

一方、離散変分法が保証するのはエネルギー保存則のみであり、例えば、同時にノルム保存則を満たすことは保証されない。もちろん、エネルギーの保存則は物理学的に重要な性質であるし、ここから数値解法の安定性などが得られることもある。しかし、一般的には、たった一つの保存則が解の定性的な性質を大幅に改善するということは期待しづらい。つまり、このような観点から考えると、離散変分法は、ある意味で“不自然に”良い数値解法を導出しているとも言える。

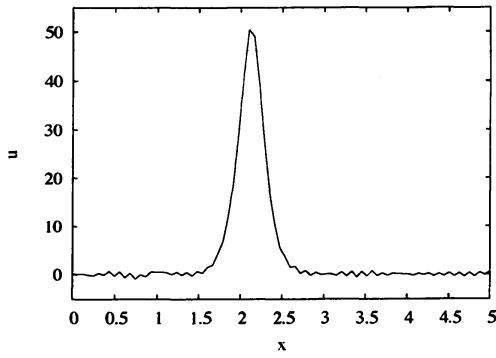


図 1: (3) に台形則を適用した場合の, $t = 0.1$ におけるソリトンの数値解. Δt は 10^{-4} , 格子点数は 81.

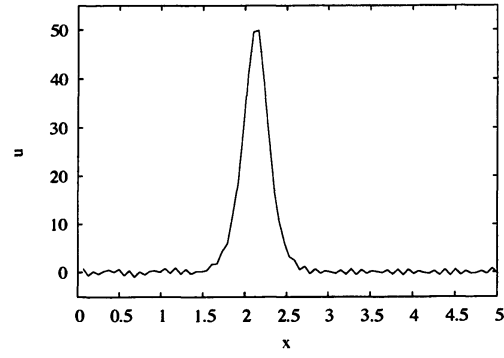


図 2: (3) に Runge-Kutta 法を適用した場合の, $t = 0.1$ におけるソリトンの数値解. Δt は 10^{-4} , 格子点数は 81.

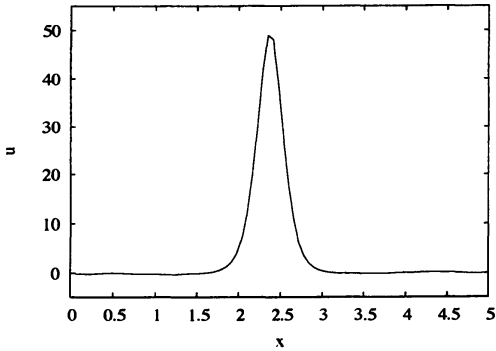


図 3: 離散変分法を適用した場合の, $t = 0.1$ におけるソリトンの数値解. Δt は 10^{-4} , 格子点数は 81.

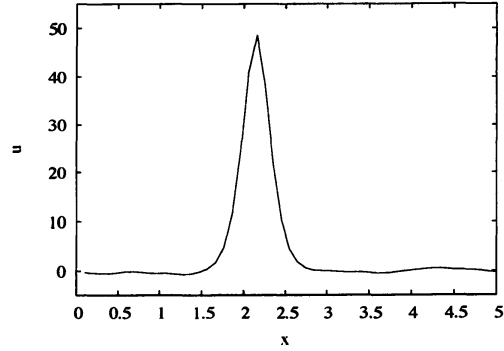


図 4: 離散変分法を適用した場合の, $t = 0.1$ におけるソリトンの数値解. Δt は 10^{-4} , 格子点数は 51.

例として, KdV 方程式のソリトンシミュレーションを考える. $\delta^{(1)}, \delta^{(2)}, \delta^{(3)}$ を $\partial_x, \partial_x^2, \partial_x^3$ を近似する, 2次精度の標準的な中心差分とする. KdV 方程式に離散変分法を適用すると, 次のような差分スキームが得られる:

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\Delta t} + \delta^{(1)} \left(\left(u_j^{(n)} \right)^2 + u_j^{(n)} u_j^{(n+1)} + \left(u_j^{(n+1)} \right)^2 + \frac{1}{2} \delta^{(2)} \left(u_j^{(n)} + u_j^{(n+1)} \right) \right) = 0. \quad (2)$$

$\Delta x, \Delta t$ は空間, 時間方向の刻み幅であり, $u_j^{(n)}$ は $u(n\Delta t, j\Delta x)$ の近似値を表す. 一方, KdV 方程式の素朴な離散化としては, 単純に, 微分を中心差分で置き換えた

$$\frac{du_j}{dt} + 6u_j \delta^{(1)} u_j + \delta^{(3)} u_j = 0 \quad (3)$$

に台形則や Runge-Kutta 法などを適用するものが考えられる. u_j は t の関数であり, $u(t, j\Delta x)$ の近似値である.

これら 3つの数値解法による数値計算結果例を図 1 から図 4 に示す. 空間方向の精度は全て 2 次精度, 時間方向は Runge-Kutta 法のみが 4 次精度, 他は 2 次精度である. 素朴な方法で台形則を利用した場合は, いわゆる Crank-Nicolson 型の方法となる. これらの結果をみると,

格子点数を 51 点に減らした場合ですら、離散変分法のほうが素朴な方法よりも良い数値解を与えていると言える。実際、素朴な方法で計算した場合には数値解に振動が現れているのに対し、離散変分法の解は非常に滑らかである。また、これ以上、格子点数を減らして素朴な解法を用いると、多くの場合、すぐに発散してしまった。例えば、Runge-Kutta 法で格子点数を 71 点に変更した場合、時間刻みを $\Delta t = 10^{-7}$ としても安定化されなかった。以上から、離散変分法によるスキームは、少なくとも KdV 方程式のソリトンシミュレーションについて、非常にうまく動いていることがわかる。

離散変分法は、少なくとも次の 2 つの利点をもつ：

- 得られるスキームはエネルギー保存則を保つ、
- 変分構造に着目した空間離散化を行う。

1 つ目は離散変分法がターゲットとしていた性質であり、これまでも強調されていた利点であるが、2 つ目については、あまり着目されてこなかった。しかし、実際、KdV 方程式に対するスキーム

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\Delta t} + \delta^{(1)} \left(\left(u_j^{(n)} \right)^2 + u_j^{(n)} u_j^{(n+1)} + \left(u_j^{(n+1)} \right)^2 + \frac{1}{2} \delta^{(2)} \left(u_j^{(n)} + u_j^{(n+1)} \right) \right) = 0, \quad (4)$$

において

$$\left(u_j^{(n)} \right)^2 + u_j^{(n)} u_j^{(n+1)} + \left(u_j^{(n+1)} \right)^2 + \frac{1}{2} \delta^{(2)} \left(u_j^{(n)} + u_j^{(n+1)} \right) \quad (\simeq 3u^2 + u_{xx})$$

という項は変分導関数 $\delta G / \delta u = -3u^2 - u_{xx}$ の近似として導出されている。この意味で、離散変分法は方程式の変分構造を利用した離散化方法であると言える。本論文では、この点に着目し、特に、空間離散化法としての性質を調べるため、時間方向を連続にした半離散スキームを考え、その後退誤差解析を行う。後退誤差解析は、特に、修正方程式が

- 初期値問題として適切か、
- 変分構造をもつか、
- 保存則をもつか

について考える。なお、時間方向の離散化については、離散勾配法に関する既存の後退誤差解析の結果を適用することができる。例えば、前述のように、適切な空間離散化を行った後に AVF 法を適用するとしばしば離散変分法と同一のスキームが得られるが、AVF 法に関しては [21] に後退誤差解析の結果が報告されている。その他、構造保存型数値解法一般に関する Reich の後退誤差解析結果 [22] などでも適用できる。そのため、空間離散化のみを対象とした後退誤差解析も一定の意味をもつと考えられる。

2 離散変分法に基づく半離散スキームの後退誤差解析

時間刻みを小さくしたり、時間方向に高精度な方法を利用してみたりしても離散変分法のほうが優れている、ということは、離散変分法で採用されている空間離散化法が優れているということを示唆する。そこで、離散変分法の考え方に従って空間方向のみを半離散化したスキーム

$$\frac{d}{dt} u_j + \delta^{(1)} \left(3 \left(u_j \right)^2 + \delta^{(1)} \delta^{(2)} u_j \right) = 0 \quad (5)$$

について考察する。具体的には、このスキームに対して後退誤差解析を行い、その性質を調べる。

微分方程式の後退誤差解析は Taylor 展開に基づくものが一般的である。Taylor 展開を用いると、中心差分作用素は

$$\begin{aligned}\delta^{(1)}v &= v_x + \frac{(\Delta x)^2}{3!}v_{xxx} + \frac{(\Delta x)^4}{5!}v_{xxxxx} + \cdots, \\ \delta^{(2)}v &= v_{xx} + \frac{2(\Delta x)^2}{4!}v_{xxxx} + \frac{2(\Delta x)^4}{6!}v_{xxxxx} + \cdots.\end{aligned}$$

などと展開できるので、(5) に代入すると

$$\tilde{u}_t + \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \right) (3\tilde{u}^2 + \tilde{u}_{xx}) + \frac{(\Delta x)^2}{12} \tilde{u}_{xxxxx} = O(\Delta x^4)$$

となる。これを主要項で打ち切ると $O(\Delta x^4)$ の修正方程式

$$\tilde{u}_t + \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \right) (3\tilde{u}^2 + \tilde{u}_{xx}) + \frac{(\Delta x)^2}{12} \tilde{u}_{xxxxx} = 0$$

を得る。しかし、この修正方程式は KdV 方程式よりも高階の微分を含み、解に、より強い滑らかさを要求する。また、この修正方程式に対して変分構造を見つけることは難しく、この意味でも、あまり良い修正方程式とはなっていない。

より良い修正方程式は、以下のようにして得られる。まず、差分作用素 $\delta^{(1)}$ を Fourier 変換し、そのシンボルを Padé 近似すると

$$\delta^{(1)}v = \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} v_x + O(\Delta x^4)$$

という近似が得られる。ただし、表記の簡略化のため

$$\mathcal{A}_{(\Delta x^2/q)} = 1 - \frac{(\Delta x)^2}{q} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

という記法を用いた。同様に $\delta^{(3)}$ も Padé 近似により

$$\delta^{(3)}v = \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1} v_{xxx} + O(\Delta x^4)$$

と近似できる。これらを代入すると、やはり $O(\Delta x^4)$ の近似として

$$\tilde{u}_t + 3\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} \partial_x(\tilde{u}^2) + \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1} \tilde{u}_{xxx} = 0 \quad (6)$$

という修正方程式が得られる。この方程式は、もとの方程式と同程度の階数の微分作用素しか含まない。また、次節で示すような、様々な良い性質をもっている。

3 修正方程式の性質

この節では、前節で導いた修正方程式 (6) の性質について調べる。まず、(6) は $\mathbb{R}$ 上の初期値問題として局所的に適切である。

定理 1. W を $H^2(\mathbb{R})$ 中の半径 $R > 0$ の球とする。初期条件が $u(0, \cdot) = \phi(\cdot) \in W$ を満たすならば、ある定数 T, T' が存在し、(6) は $\tilde{u} \in C[0, T; W] \cap C^1[0, T'; L^2]$ に唯一解をもつ。

証明には加藤の定理 [9] を用いる.

定理 2 (加藤, [9]). X を反射的 Banach 空間とし, Y を $Y \subset X$ を満たす, 別の反射的 Banach 空間とする. W を Y の, 0 を中心とする開球とする. また, 同型写像 $S: Y \rightarrow X$ が存在すると仮定する. このとき, 以下に示す条件 (a1)–(a3) が成り立つならば, ある定数 $T, T' > 0$ が存在し, 準線形偏微分方程式

$$\frac{du}{dt} + A(u) = 0, \quad u(0) = \phi$$

は

$$u \in C[0, T; W] \cap C^1[0, T'; X]$$

なる一意解をもつ.

(a1) 任意の $y \in W$ に対して, A は X で C^0 -半群を生成し, $\beta > 0$ に対して

$$\|e^{-sA(y)}\|_X \leq e^{\beta s}, \quad s \in [0, \infty), \quad y \in W$$

を満たす.

(a2) 任意の $y \in W$ に対し

$$SA(y)S^{-1} = A(y) + B(y)$$

で定まる作用素 $B(y)$ が, ある定数 $\lambda_1 > 0$ について $B(y) \in B(X)$, $\|B(y)\|_X \leq \lambda_1$ となる.

(a3) 任意の $y \in W$ について, $A(y) \in B(Y, X)$ かつ $y \rightarrow A(y)$ は Lipschitz 連続:

$$\|A(y) - A(z)\|_{Y, X} \leq \mu_1 \|y - z\|_X,$$

ただし μ_1 は適当な定数である.

定理 1 の証明. 証明には

- $X = L^2(\mathbb{R})$, $Y = H^2(\mathbb{R})$,
- $S = (1 - \partial_x^2)^{-1}$,
- W を Y の半径 R の開球

として定理 2 を用いる. 表記の簡略化のため, R のみに依存する一般の定数を c_R や c'_R などと表す.

任意の $y \in W$ を固定し, (6) を線形化した方程式

$$\tilde{u}_t + A(y)\tilde{u} = 0, \quad A(y) = 6\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x + \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1}\partial_x^3$$

を考え, 定理 2 の条件 (a1)–(a3) が満たされることを示す.

注意 1. 以下では作用素 $\mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1}\partial_x^3$ を, 作用素の積 $\mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1} \cdot \partial_x^3: H^3(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ ではなく, 一度に作用するものとみなし, $(\mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1}\partial_x^3): H^1(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ なる作用素と考える.

- (a1) 作用素 $A(y) = 6\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x + \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1}\partial_x^3$ は X で C^0 -半群を生成することを示す. $A(y)$ の定義域は $H^1(\mathbb{R})$ であるため, X で稠密である. $A(y)$ を対称部分と歪対称部分に分けて考える. 任意の $\psi, \phi \in H^1(\mathbb{R})$ について

$$\begin{aligned}\langle A(y)\phi, \psi \rangle_X &= \left\langle 6\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x + \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1}\partial_x^3\phi, \psi \right\rangle_X \\ &= \left\langle \phi, \left(-6\partial_x \left(y\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} \right) - \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1}\partial_x^3 \right) \psi \right\rangle_X,\end{aligned}$$

であるから $A(y)$ の随伴作用素は

$$A^*(y) = -6\partial_x \left(y\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} \right) - \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1}\partial_x^3$$

である. 歪対称部分 $(A(y) - A^*(y))/2$ は C^0 -半群を生成する [20] ので, 対称部分

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(A(y) + A^*(y)) &= \frac{1}{2} \left(6\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x - 6\partial_x(y\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}) \right) \\ &= 3 \left(\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x - (\partial_x y)\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} - y\partial_x\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} \right)\end{aligned}$$

が X で有界ならば, 摂動理論 [10] から (a1) が従う. $y \in W \subset H^2(\mathbb{R})$ であるため Sobolev の不等式から $\|y\|_\infty, \|y_x\|_\infty < c_R$ なる定数 c_R が存在する. $\partial_x\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}$ は X で有界であるから $(\partial_x y)\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}$ および $y\partial_x\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}$ も有界である. 作用素 $\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}$ は陽に

$$\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}v = \frac{\sqrt{6}}{2\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sqrt{6}}{2\Delta x}|x-\xi|} v(\xi) d\xi \quad (7)$$

と書けるため

$$\begin{aligned}\|\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x\phi\|_X &= \left\| \frac{\sqrt{6}}{2\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sqrt{6}}{2\Delta x}|x-\xi|} (y\phi_\xi)(\xi) d\xi \right\|_X \\ &= \left\| \frac{\sqrt{6}}{2\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-y_\xi + \frac{\sqrt{6}}{\Delta x} \operatorname{sgn}(x-\xi)y \right) e^{-\frac{\sqrt{6}}{2\Delta x}|x-\xi|} \phi(\xi) d\xi \right\|_X \\ &\leq c_R \left\| \frac{\sqrt{6}}{2\Delta x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sqrt{6}}{2\Delta x}|x-\xi|} |\phi(\xi)| d\xi \right\|_X \\ &= c_R \left\| \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}|\phi(\xi)| \right\|_X \leq c'_R \|\phi(\xi)\|_X\end{aligned}$$

が成り立つ. 従って対称部分は有界であり (a1) が成り立つ.

- (a2) S と $\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}$ は可換なので, 交換子 $[S, A(y)]$ は

$$\begin{aligned}[S, A(y)] &= S\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x - \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x S = \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}Sy\partial_x - \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}y\partial_x S \\ &= \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}[S, y\partial_x]\end{aligned}$$

となる. 加藤 [9] により, $[S, y\partial_x]$ については, ある定数 $\lambda > 0$ が存在して $\|[S, y\partial_x]\|_X \leq \lambda$ であることが示されている. $\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}$ は有界であるから, これにより (a2) が従う.

(a3) (a1) を示す際、既に $\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} y \partial_x$ が X で有界であることは示した。これより $A(y) \in B(Y, X)$ である。また、任意の $y, z \in W$ と $\phi \in Y$ について、ある $c > 0$ を用いて

$$\begin{aligned} & \|(\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} y \partial_x + \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1} \partial_x^3) \phi - (\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} z \partial_x + \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1} \partial_x^3) \phi\|_X \\ &= \|\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} y \phi_x - \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} z \phi_x\|_X \leq \|\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}\|_X \|y - z\|_X \|\phi_x\|_\infty \leq c \|\phi\|_Y \|y - z\|_X \end{aligned}$$

であるから、 $\|A(y) - A(z)\|_{Y, X} \leq c \|y - z\|_X$ となり、Lipschitz 連続性を得る。

以上より、定理 1 が示された。 $\square$

また、容易に確認できるように、修正方程式 (6) は以下のような変分構造をもつ。

定理 3. (6) は変分構造をもつ。すなわち (6) は以下の方程式と等価である：

$$\tilde{u}_t = \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} \frac{\delta \tilde{G}}{\delta \tilde{u}}, \quad \tilde{G} = -\tilde{u}^3 + \frac{1}{2} \left(\left(\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)} \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1} \right)^{\frac{1}{2}} \tilde{u}_x \right)^2.$$

定理 4. (6) は質量・ノルム・エネルギー保存則をもつ。

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u} dx = 0, \quad \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \left(\tilde{u}^2 + \frac{\Delta x^2}{6} \tilde{u}_x^2 \right) dx = 0, \quad \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G} dx = 0.$$

証明. 質量保存則は方程式を積分することで直ちに得られる。ノルム保存則については $\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2 \tilde{u}_x dx = -2 \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2 \tilde{u}_x dx = 0$ と $\mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)} \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1} \partial_x^3$ が歪対称であることから

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \left(\tilde{u}^2 + \frac{\Delta x^2}{6} \tilde{u}_x^2 \right) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\tilde{u} \tilde{u}_t + \frac{\Delta x^2}{6} \tilde{u}_x \tilde{u}_{xt} \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u} \left(\tilde{u}_t - \frac{\Delta x^2}{6} \tilde{u}_{xxt} \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u} \left(-6 \tilde{u} \partial_x - \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)} \mathcal{A}_{(\Delta x^2/4)}^{-1} \partial_x^3 \right) \tilde{u} dx = 0 \end{aligned}$$

のようにして示せる。エネルギー保存則は $\frac{\partial}{\partial x} \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1}$ の歪対称性から

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G} dx &= \int_{-\infty}^{\infty} u_t \frac{\delta \tilde{G}}{\delta u} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} \frac{\delta \tilde{G}}{\delta \tilde{u}} \right) \frac{\delta \tilde{G}}{\delta u} dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta \tilde{G}}{\delta u} \left(\frac{\partial}{\partial x} \mathcal{A}_{(\Delta x^2/6)}^{-1} \frac{\delta \tilde{G}}{\delta \tilde{u}} \right) dx = 0 \end{aligned}$$

のように示せる。 $\square$

4 まとめと今後の課題

離散変分法はエネルギー保存則を満たす方程式に対し、その性質を保つ差分スキームを導出するための方法である。この方法によって得られたスキームは非常に良い性能をもつことが多

いということが経験的に知られていたが、これは、エネルギー保存則という性質から来るものと考えられていた。しかし、エネルギー保存則は確かに重要な性質ではあるものの、それだけでスキームの性能を保証するほど強い性質とはいいきれない。そこで、本論文では、これ以外の離散変分法の性質として、変分構造を利用した空間離散化法に着目し、KdV 方程式に対する半離散スキームの後退誤差解析を行うことでスキームの性質を調べた。その結果、4 次精度の修正方程式が、修正された変分構造とノルムやエネルギー保存則をもつことを示した。特に、離散変分法で得られるスキームは、離散版ノルム保存則は満たさないため、修正方程式が修正されたノルム保存則を満たすことは興味深い。また、通常、微分方程式の後退誤差解析は差分作用素の Taylor 展開に基づくことが多いが、これを偏微分方程式に適用した場合、高階の微分作用素が現れてしまうため、いろいろと不都合が生じる。これに対し、本論文では、Padé 近似を用いて修正方程式を求めた。これによって、いわば差分作用素を積分作用素で展開することができ、より性質の良い修正方程式が得られた。

今回の解析の結果により、KdV 方程式に対する離散変分法のスキームは、エネルギー保存則以外にも良い性質をもつことが示唆されたが、ソリトンのシミュレーションとの関係では「修正方程式はソリトン解をもつか」という問題は興味深い。この問題については、今後の課題として、別の機会に報告したい。

謝辞

東京大学の松尾宇泰准教授および Norwegian University of Science and Technology の Prof. Brynjulf Owren には有用なアドバイスを頂いた。また、本研究は科学研究費補助金 若手研究 (B) および基盤研究 (B) の補助を受けている。

参考文献

- [1] E. Celledoni, V. Grimm, R. I. McLachlan, D. I. McLaren, D. R. J. O’Neale, B. Owren, and G. R. W. Quispel, Preserving energy resp. dissipation in numerical PDEs, using the average vector field method, NTNU reports, Numerics No 7/09.
- [2] 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.
- [3] D. Furihata, A stable and conservative finite difference scheme for the Cahn–Hilliard equation, Numer. Math., 87 (2001) 675–699.
- [4] D. Furihata, Finite difference schemes for nonlinear wave equation that inherit energy conservation property, J. Comput. Appl. Math., 134 (2001) 35–57.
- [5] D. Furihata and T. Matsuo, A Stable, convergent, conservative and linear finite difference scheme for the Cahn–Hilliard equation, Japan J. Indust. Appl. Math., 20 (2003) 65–85.
- [6] D. Furihata and T. Matsuo, Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Method for Partial Differential Equations, CRC Press, to be published.

- [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] T. Kato, Quasi-linear equations of evolution, with applications to partial differential equations, *Lect. Notes Math.*, 448 (1975) 25–70.
- [10] T. Kato, *Perturbation Theory for Linear Operators*, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, 1976.
- [11] R. A. LaBudde and D. Greenspan, Discrete mechanics—a general treatment, *J. Comput. Phys.*, 15 (1974) 134–167.
- [12] R. A. LaBudde and D. Greenspan, Energy and momentum conserving methods of arbitrary order of the numerical integration of equations of motion. I. Motion of a single particle, *Numer. Math.*, 25 (1976) 323–346.
- [13] R. A. LaBudde and D. Greenspan, Energy and momentum conserving methods of arbitrary order for the numerical integration of equations of motion. II. Motion of a system of particles, *Numer. Math.*, 26 (1976) 1–16.
- [14] T. Matsuo, New conservative schemes with discrete variational derivatives for nonlinear wave equations, *J. Comput. Appl. Math.*, 203 (2007) 32–56.
- [15] T. Matsuo, Dissipative/conservative Galerkin method using discrete partial derivative for nonlinear evolution equations, *J. Comput. Appl. Math.*, 218 (2008) 506–521.
- [16] T. Matsuo and D. Furihata, Dissipative or conservative finite difference schemes for complex-valued nonlinear partial differential equations, *J. Comput. Phys.*, 171 (2001) 425–447.
- [17] T. Matsuo, M. Sugihara, D. Furihata and M. Mori, Linearly implicit finite difference schemes derived by the discrete variational method, *RIMS Kokyuroku*, 1145 (2000) 121–129.
- [18] T. Matsuo, M. Sugihara, D. Furihata and M. Mori, Spatially accurate dissipative or conservative finite difference schemes derived by the discrete variational method, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, 19 (2002) 311–330.
- [19] R. I. McLachlan, G. R. W. Quispel and N. Robidoux, Geometric integration using discrete gradients, *Phil. Trans. Roy. Soc. A*, 357 (1999) 1021–1046.
- [20] A. Pazy, *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*, Applied Mathematical Sciences, 44, Springer-Verlag, New York, 1983.

- [21] G. R. W. Quispel and D. I. McLaren, A new class of energy-preserving numerical integration methods. *J. Phys. A*, 41 (2008) 045206.
- [22] S. Reich, Backward error analysis for numerical integrators, *SIAM J. Numer. Anal.*, 36 (1996) 1549–1570.