

ハミルトン偏微分方程式に対する 解析力学的空間離散化法とその応用

東京大学 大学院情報理工学系研究科 数理情報学専攻
谷口隆晴 (Takaharu Yaguchi), 松尾宇泰 (Takayasu Matsuo), 杉原正顕 (Masaaki Sugihara)¹
Graduate School of Information Science and Technology,
The University of Tokyo

1 はじめに

ハミルトン常微分方程式やハミルトン偏微分方程式は、ハミルトン力学によって導出することができる微分方程式である。その力学的背景のため、これらの方程式は様々な性質を持つが、特にシンプレクティック形式やエネルギーの保存則を離散化後にも保つように数値計算スキームを設計すると、そのようなスキームは現象の再現性などに優れたものとなりやすいことが知られている ([10] など)。ハミルトン偏微分方程式に対し、エネルギー保存解法を導出する方法としては、離散変分法 ([7] など) や離散勾配法 ([5, 9] など) が知られている。離散勾配法は常微分方程式に対する方法として開発されてきた方法であるが、空間方向を適切に離散化することで、偏微分方程式に対しても適用することが可能である。

本論文では、近年、提案された AVF 法 (Average Vector Field 法, [5]) という離散勾配法をハミルトン偏微分方程式に適用する際に有用となる、空間離散化方法を提案する。

AVF 法のハミルトン偏微分方程式への適用については、Celledoni らが具体的な離散化の手順を、具体例とともに報告している [4]。この方法は、降旗・松尾らの離散変分法と同様、ハミルトン偏微分方程式だけでなく、散逸的な偏微分方程式に対しても適用できる。しかし、メッシュは等間隔格子に限定されており、そのため、計算対象領域は矩形領域に限られている。また、境界条件の取扱いについても記述が曖昧である。本研究で提案する方法は、Celledoni らによる方法により精密化し、また、様々なメッシュへと拡張したものである。

離散勾配法を用いる際の空間離散化方法としては、McLachlan [12] は、偏微分方程式を歪対称テンソルを用いた形に書き直し、格子の対称性を利用することで保存量を壊さない空間離散化法を提案している。この方法では、基本的に任意の格子が利用できるとされ、実際、三角形格子上での扱いなども報告されている。McLachlan-Robidoux は、未完成のノート [13] の中で “dual composition discretization” という離散化法の構築を試みている。これは、部分和分法を拡張する試みのようである。また、Lubich [11] は擬スペクトル法とシンプレクティック射影を組み合わせた方法を提案している。

これらの既存研究に対し、本論文で提案する空間離散化法は、近年、急速に発展している差分幾何学の枠組みに基づいている。この方法は、すべてのハミルトン偏微分方程式に対して適用できるわけではなく、離散化できるハミルトニアンやシンプレクティック形式に制限を受けるものの、ほとんど任意のメッシュ上で利用することができ、さらに、Celledoni らの方法に比較してスキームの導出が容易であるという特徴をもつ。また、差分幾何学は微分幾何学の離散版であることから、将来的には、多様体上で定義された偏微分方程式の離散化への応用も期待される。

¹第 8 節の内容は降旗大介 (大阪大学), Christopher Budd (the University of Bath), Brynjulf Owren (Norwegian University of Science and Technology) らとの共同研究である。

応用として、KdV 方程式に対し、提案手法と AVF 法を組み合わせると、降旗・松尾らによる離散変分法によるスキーム [7] が得られることを説明する。さらに、このようにすることで後退誤差解析が容易になり、このスキームが、修正されたエネルギーとシンプレクティック形式を持つハミルトン偏微分方程式を近似していることを示すことができる。

2 Celledoni らによる AVF 法を用いた偏微分方程式の離散化法

まず、Celledoni らによって提案された AVF 法を用いた偏微分方程式の離散化法 [4] について、ハミルトン偏微分方程式に適用した場合について概観する。

AVF 法は、常微分方程式

$$\dot{u} = f(u)$$

を

$$\frac{u^{(n+1)} - u^{(n)}}{\Delta t} = \int_0^1 f(\xi u^{(n+1)} + (1 - \xi)u^{(n)}) d\xi, \quad u^{(n)} \simeq u(n\Delta t)$$

と離散化する方法である。もしも、 f がある歪対称作用素 S と u に依存する関数 $H(u)$ を用いて

$$f(u) = S\nabla_u H(u)$$

と表わされている場合、 H は元の方程式のハミルトニアンに対応するが、AVF 法は

$$H(u^{(n+1)}) = H(u^{(n)})$$

という意味で、離散化後もエネルギーを保つことが知られている。

Celledoni らはこの方法をハミルトン偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\delta H}{\delta u} \quad (1)$$

に応用した [4]。[4] では、偏微分方程式は領域 $(x, t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ 上で定義されるものとし、 u はある Banach 空間 $\mathcal{B}$ に属し、 $u(x, t) \in \mathbb{R}^m$ であると仮定されている²。 $\delta H / \delta u$ は変分導関数であるが、その定義は

$$\frac{d}{d\varepsilon} H(u + \varepsilon v) = \int_{\Omega} \frac{\delta H}{\delta u} v \, dx_1 \cdots dx_d, \quad \text{for all } u, v \in \mathcal{B}$$

とされている。 $\mathcal{D}$ は、 x, t, u に依らない線形微分作用素であるとされており、具体例では

$$\begin{pmatrix} 0 & \text{Id} \\ -\text{Id} & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial}{\partial x}, \quad \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -\nabla \times \\ \nabla \times & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

などが取り扱われている。

Celledoni らの枠組みでは、まず、空間を等間隔格子で離散化する。次に、歪対称行列で表されるような差分作用素をひとつ選び、それを x, y, z 方向それぞれについて適用することで、(2) の

²[4] には、複素数値でも構わない、という旨の注釈がつけられている。

作用素を離散化する．そのような差分作用素としては，中心差分や擬スペクトル法などといった方法が提示されている．この離散化後の作用素を $\mathcal{D}_d$ と書くことにする．また，ハミルトニアン H の離散版 H_d を， $H_d \Delta x_1 \cdots \Delta x_d$ が $\int H dx_1 \cdots dx_n$ の適合的な近似になるような，任意の差分近似として導入する．これらに加え，数値解を表すベクトルに関する勾配作用素 ∇_{u_d} を用いて，空間方向を

$$\dot{u}_d = \mathcal{D}_d \nabla_{u_d} H_d$$

のように離散化し，その後，AVF法を用いて時間方向を離散化する．この空間離散化法が意味をもつことは，Celledoni らによって示されている次の補題による：

補題 1 (Celledoni ら [4]). $\nabla_{u_d} H_d$ は $\delta H / \delta u$ の離散版となる．すなわち，

$$H'_d := H_d \Delta x_1 \cdots \Delta x_d$$

として， $\delta H'_d / \delta u_d$ を

$$\left(v_d \cdot \frac{\delta H'_d}{\delta u_d} \right) \Delta x_1 \cdots \Delta x_d = \frac{d}{d\varepsilon} H'_d(u_d + \varepsilon v_d)$$

となるように定めるとき，

$$\frac{\delta H'_d}{\delta u_d} = \nabla_{u_d} H_d$$

となる．

$\mathcal{D}_d$ が歪対称行列であることから，この離散化手順によって得られたスキームを用いると

$$H'_d(u_d^{(n+1)}) = H'_d(u_d^{(n)})$$

という意味でエネルギーが保存することが示される． $u_d^{(n)}$ は AVF 法を適用した後の，時間ステップ n での数値解を表す．

この離散化方法は強力な方法であるが，次の点において改良の余地がある：

- 一般のメッシュを利用する場合の議論が不完全である³．特に $\mathcal{D}_d$ を歪対称行列に離散化する方法は自明ではない．
- 解の属する空間が Banach 空間 $\mathcal{B}$ ，特に，線形空間であることが仮定されているため，質量保存や非斉次 Dirichlet 条件など，解の属する空間がアフィン空間となるような場合を扱うことができない．
- $\nabla_{u_d} H_d$ の具体的な形は，容易に求まるとは限らない．

本論文では，まず，Celledoni らの方法を解析力学的観点から見直すことで精密化し，それに基づいて，上記の点を改良する．

³[4] では，前述の未完成のノート [13] の方法を利用することで有限要素法などにも応用できるとされている．

3 ハミルトン偏微分方程式の解析力学的記述

まず、ハミルトン偏微分方程式 (1) について、より抽象的な枠組みから再確認する。よく知られているように、ハミルトン偏微分方程式は解析力学によって導出され、無限次元シンプレクティック多様体上のハミルトンフローとして記述される [6].

Ω を偏微分方程式の定義された空間領域とし、 (Q, ω) を適切な Hilbert 空間上でモデル化された、ある与えられたシンプレクティック多様体とする。Hilbert 空間としては、通常、 L^2 空間が用いられる。 $H: Q \rightarrow \mathbb{R}$ をハミルトニアンとする。これによって定まるハミルトンフローは、次の方程式を満たすものとして定義される：

$$u_t = X_H, \quad (3)$$

$$X_H = \omega^\# dH. \quad (4)$$

ここで、 X_H は Q 上のベクトル場であり、(4) は、任意の $u \in Q$ について

$$\omega(X_H, v) = dH(v) \quad \text{for all } v \in T_u Q \quad (5)$$

であることを意味する。 $T_u Q$ は u における接空間である。(4) は、Riesz の表現定理を用いると、座標系を用いた具体的な表記に変換できる：

$$X_H = \omega^\# \frac{\delta H}{\delta u}. \quad (6)$$

ここでの $\delta H / \delta u$ は dH の Riesz 表現である⁴。(1) に現れた変分導関数と同じ記号を用いているのは、これが、より一般的な変分導関数の定義となっているためである ([15] など)。実際、前節の定義も、 L^2 内積における Riesz 表現とみなせる。 $\omega^\#$ は $\mathcal{D}$ と対応しており、(6) は (1) の、より一般的な表記となっている。また、 H が線形作用素 $\mathcal{A}$ を用いて $H = H(\mathcal{A}u)$ と表されるときには

$$\frac{\delta H}{\delta u} = \mathcal{A}^* H'(\mathcal{A}u) \quad (7)$$

となることが知られている。ここで $\mathcal{A}^*$ は $\mathcal{A}$ の随伴作用素であり、 H' は H の微分である。

このような観点からみると、Celledoni らの枠組みでは

- Q は Banach 空間 $\mathcal{B}$ であると仮定したため、 Q と $T_u Q$ が区別されていない、
- Riesz の表現定理や随伴作用素といった、内積に由来する概念が陽に用いられていない

ということがわかる。これらは改善の余地がある。実際、

- Q と $T_u Q$ を区別することで、相空間としてアフィン空間を利用できる。これによって、質量保存則や非斉次の境界条件などといった拘束条件を扱えるようになる。
- 内積を用いて随伴作用素を考えることで、
 - (7) 式を用いることができるようになり、変分導関数の計算が単純化される。
 - また、差分幾何学の枠組みが自然に導入され、様々なメッシュが利用可能となる。

以下では、これらを改善した枠組みを構築していく。

⁴(6) において $\omega^\#$ を $\omega^\#: T_u Q \rightarrow T_u Q$ なる作用素として用いているが、 $\omega^\#$ は (5) で定義されるように $\omega^\#: T_u^* Q \rightarrow T_u^* Q$ であるため、本来は記号を区別すべきである。しかし、ここでは、混乱の恐れはないと思われるので、記号の煩雑化を避けるため、同一の記号を用いた。

4 離散化のアイデアと本論文の方法で対象とする方程式のクラス

前節で述べたように、ハミルトン偏微分方程式は無限次元シンプレクティック多様体上のフローとして記述されるが、そのためには、次のような幾何学的構造が重要であった：

1. 相空間 Q とその上で定義されたハミルトニアン H .
2. 変分導関数 $\delta H/\delta u$.
3. Q 上のシンプレクティック形式 ω から定まる作用素 $\omega^\#$.

ただし、変分導関数の計算のためには随伴作用素の計算や Riesz 表現などが必要となるため

2. $T_u Q$ 上の内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{T_u Q}$

が重要である。このことから、

- 1'. Q の離散版となる、メッシュ上の関数からなる相空間 Q_d と Q_d 上のハミルトニアン H_d ,
- 2'. 各 $u_d \in Q_d$ における $T_{u_d} Q_d$ 上の内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{T_{u_d} Q_d}$,
- 3'. $\omega^\#$ に対応する Q_d 上の作用素 $\omega_d^\#$

が適切に用意できれば Q_d 上にフロー

$$\frac{\partial u_d}{\partial t} = \omega_d^\# \frac{\delta H_d}{\delta u_d} \quad (8)$$

を導入することにより、方程式を空間方向に離散化できる。ここで $\delta H_d/\delta u_d$ は dH_d の Riesz 表現である。上記の手順は、ちょうど、Celledoni らによる枠組みを、前節における考察に基づいて一般化したものとなっている。

以下では、これを実現するための枠組みを記述するが、それに先立ち、離散化の対象とするハミルトン偏微分方程式について、二つの仮定をおく。Celledoni らと比較し、ハミルトニアンとシンプレクティック形式に関する仮定はやや強くなっているが、境界条件を含む拘束条件は弱まっている。

- 一つ目の仮定は相空間 Q に関する仮定である。応用上、重要となるハミルトン偏微分方程式は、微分 0-形式や微分 1-形式の空間とみなすことができる場合が多い。そこで、本論文では、そのような場合を仮定する。また、質量保存や境界条件などといった拘束条件はアフィンであるとする。具体的には、外微分作用素 d , 余微分作用素 d^* , Hodge 作用素 $\star$, 内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Lambda^k}$ を用いて表される線形作用素 $\mathcal{A}$ によって

$$\mathcal{A}(d, d^*, \star, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\Lambda^k})u = b$$

の形に表されているとする。この仮定は、Celledoni らと比較して弱い仮定である。

- もう一つの仮定は、ハミルトニアンとシンプレクティック形式に関する仮定である。ハミルトニアンは表 1, 2 に示されているような項の線形和であると仮定する。これは、応用上、重要な方程式の多くを含んでいるが、Celledoni らは任意のハミルトニアンが扱えるとしてい

表 1: ハミルトニアン密度に現れる項と微分形式による表現 (u が 0-形式の場合) .

1 次元	ベクトル解析的な記述	$f(u)g(u_x)$
	微分形式による記述	$\langle f(u), g(\star du) \rangle_{\Lambda^0}$
	変分導関数 $\frac{\delta H}{\delta u}$	$f'(u)g(\star du) + d^\star \star (f(u)g'(\star du))$
2 次元	ベクトル解析的な記述	$f(u), \nabla u ^2$
	微分形式による記述	$\langle 1, f(u) \rangle_{\Lambda^0}, \langle du, du \rangle_{\Lambda^1}$
	変分導関数 $\frac{\delta H}{\delta u}$	$f'(u), 2d^\star du$
3 次元	ベクトル解析的な記述	$f(u), \nabla u ^2$
	微分形式による記述	$\langle 1, f(u) \rangle_{\Lambda^0}, \langle du, du \rangle_{\Lambda^1}$
	変分導関数 $\frac{\delta H}{\delta u}$	$f'(u), 2d^\star du$

表 2: ハミルトニアン密度に現れる項と微分形式による表現 (u が 1-形式の場合) .

2 次元	ベクトル解析的な記述	$ u ^2, f(\nabla \cdot u)$
	微分形式による記述	$\langle u, u \rangle_{\Lambda^1}, \langle 1, f(d^\star u) \rangle_{\Lambda^0}$
	変分導関数 $\frac{\delta H}{\delta u}$	$2u, df'(d^\star u)$
3 次元	ベクトル解析的な記述	$ u ^2, u \cdot (\nabla \times u), \nabla \times u ^2, f(\nabla \cdot u)$
	微分形式による記述	$\langle u, u \rangle_{\Lambda^1}, \langle u, \star du \rangle_{\Lambda^1}, \langle \star du, \star du \rangle_{\Lambda^1}, \langle 1, f(d^\star u) \rangle_{\Lambda^0}$
	変分導関数 $\frac{\delta H}{\delta u}$	$2u, (\star d + d^\star \star)u, 2d^\star \star \star du, df'(d^\star u)$

るため、それに比べると強い仮定となっている。また、シンプレクティック形式から定まる作用素 $\omega^\#$ は Celledoni らの具体例に挙げられている (2) のどれかであると仮定する。これらの作用素には $\partial/\partial x$, $\nabla \times$ という微分作用素が現れるが、それらは

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2}(\star d - d^\star \star), \quad \nabla \times = \frac{1}{2}(\star d + d^\star \star) \quad (9)$$

のように書き換えられる。 $\star d - d^\star \star$ は 1 次元空間における 0-形式の空間で歪随伴作用素となり、 $\star d + d^\star \star$ は 3 次元空間における 1-形式の空間で自己随伴作用素となる。

5 偏微分方程式の離散化のための差分幾何学

近年、“差分幾何学”とでも呼ぶべき、離散版の微分幾何学が急速に発展している。この理論を用いると、ほとんど任意のメッシュ上で、外微分解析に現れる作用素を離散化することができる。そのため、偏微分方程式の離散化のツールとして非常に強力である。微分形式の離散化には代数的位相幾何学の枠組みが用いられ、 k -形式は与えられたメッシュによって導入される k -コチェインに離散化される。本論文では、 $\Lambda^k(\Omega)$ で領域 Ω 上の k -形式の空間を表す。また、領域の単体分割から定義されるチェイン群を C_k で、コチェイン群を C^k で表す。

このような枠組みには様々なものが提案されているが、代表的なものとして Bochev-Hyman [2] と Bossavit [3] が挙げられる。Bossavit は“一般化された差分法”という枠組みを提唱している [3]。計算電磁気学では、70 年代ごろから辺要素有限要素法が成功を収めてきているが、その一方で、差分法的な方法で、非常に優れたものも存在している。Bossavit の一般化された差分法はその

ようなスキームに動機付けられており、幾何学的な視点から離散化方法を見直すことで、安定性や収束性の保証された離散化手順を与えようとするものである。Maxwell 方程式では、構成方程式に Hodge 作用素と解釈すべき作用素が現れる。そのため、Bossavit の枠組みでは、離散 Hodge 作用素の構築とねじれた微分形式の扱いが重要となる。一方、Bochev-Hyman のミメティック離散化法 [2] は、ミメティックスキーム ([14] など) を抽象化した枠組みである。この枠組みでは、Hodge 作用素の代わりに内積を導入し、それを用いて様々な作用素を離散化していく。その際、再構成写像と呼ばれる、コチェインを微分形式に対応付ける写像が重要となる。

上記のように Bochev-Hyman, Bossavit らによる手法の違いは計量の取扱いに顕著であるが、このことについて、もう少し詳しく考察する。 Ω には内積が定まっていると仮定する。このとき、接空間上に内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Lambda^k(T_x\Omega)}$ が定義され、さらに、この内積は $\Lambda^k(\Omega)$ 上に L^2 内積を定義する：

$$\langle \xi, \eta \rangle_{\Lambda^k} = \int_{\Omega} \langle \xi, \eta \rangle_{\Lambda^k(T_x\Omega)} \omega_n = \int_{\Omega} \xi \wedge \star \eta. \quad (10)$$

ω_n は体積要素である。この関係式を用いると、Hodge 作用素と内積について、どちらかの離散版を定めるともう片方も自然に定めることができる。実際、ミメティック離散化法では内積が、Bossavit の方法では Hodge 作用素が優先的に離散化されている。ところで、ミメティック離散化法と Bossavit の方法では楔積の離散化法も指定されていたが、もしも、楔積の離散化を行わなくてよい場合には、その自由度を犠牲にすることで、内積と Hodge 作用素の両方を自由に離散化できる枠組みを作ることができる。実際、本研究で仮定したハミルトニアンは楔積を含んでいないため、楔積を離散化する必要はない。そのため、楔積よりは内積や離散 Hodge 作用素を自由にデザインできたほうが都合が良い。また、変分導関数を求める際には (7) 式を利用できると計算が容易となるが、そのためには外微分作用素と余微分作用素や Hodge 作用素間の随伴関係を保っておくと都合がよい。そこで、以下では、内積と Hodge 作用素を先に離散化し、他の作用素を作用素間の随伴関係を保つように離散化するような、新たな離散化法を提案する。

まず、微分形式と外微分作用素は、差分幾何学で一般的な方法によって離散化する。差分幾何学の枠組みでは、多くの場合、次で定義される de Rham 写像 $\mathcal{R} : \Lambda^k(\Omega) \rightarrow C^k$ を用いて k -形式を k -コチェインに対応付ける：

$$(\mathcal{R}\xi)(c) := \int_c \xi \quad \xi \in \Lambda^k(\Omega), c \in C_k.$$

離散外微分作用素 d_d は、通常、余境界作用素を用いて

$$(d_d \xi_d)(\sigma) := \xi_d(\partial \sigma) \quad \xi_d \in C^k, \sigma \in C_k.$$

のように定義される。これは Stokes の定理

$$\int_{\sigma} d\xi = \int_{\partial \sigma} \xi$$

の離散版に対応している。よく知られているように、偏微分方程式の解の持つ性質のうち、大域的な性質については Stokes の定理を用いて導出されることが多い [8]。そのため、構造保存型数値解法的设计において、離散版の Stokes の定理は非常に有用である。

その他の作用素は以下の手順によって離散化する。これは、基本的に Bochev-Hyman の方法に準じているが、Hodge 作用素の離散化方法が異なっている。

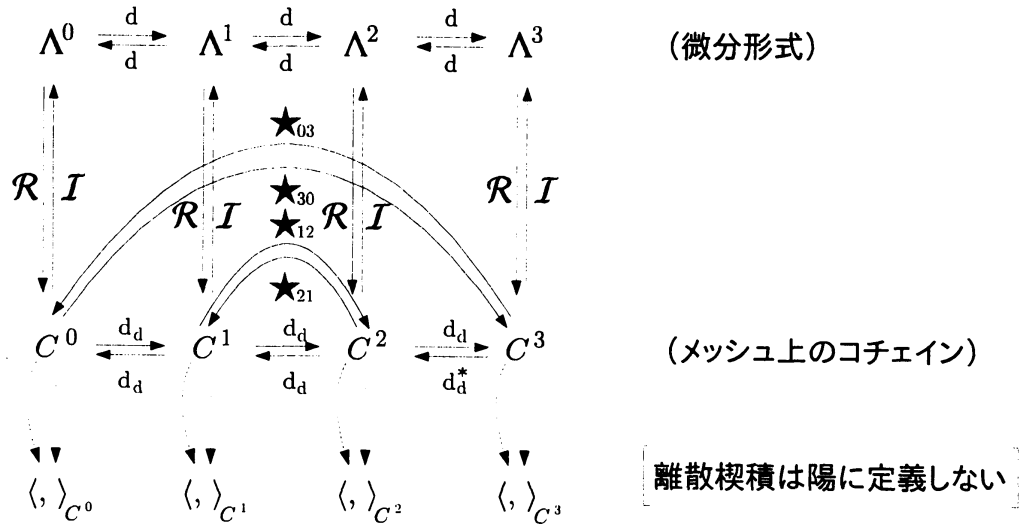


図 1: 提案する離散化の枠組み.

1. Bochev-Hyman の方法と同様にして再構成写像 $\mathcal{I}$ を導入.
2. コチェインの内積を

$$\langle a, b \rangle_{C^k} = \langle \mathcal{I}a, \mathcal{I}b \rangle_{\Lambda^k}$$

で定義.

3. 離散余微分 d_d^* を d_d の随伴作用素で定義.
4. 0 形式から 3 形式への離散 Hodge 作用素 $\star_{03}$ と, 1 形式から 2 形式への離散 Hodge 作用素 $\star_{12}$ を任意に (例えば Bossavit や Bochev-Hyman と同様の方法によって) 導入.
5. 3 形式から 0 形式への離散 Hodge 作用素 $\star_{30}$ と, 2 形式から 1 形式への離散 Hodge 作用素 $\star_{21}$ を, 既に導入されている作用素の随伴作用素を用いて定義.

離散化の様子を図示すると図 1 のようになる. このように離散化すると, 作用素間の随伴関係を保つことができる. 例えば, 離散外微分の随伴作用素は離散余微分になっている. そのため, AVF 法を適用する際に求めなくてはならない離散版の変分導関数は, 表 1, 2 に掲げられている変分導関数の作用素を離散版に置き換えるだけで求めることができる. 例えば $|\nabla u|^2 = \langle du, du \rangle_{\Lambda^1}$ の変分導関数は $2d^*du$ であるが, その離散版 $\langle d_d u_d, d_d u_d \rangle_{C^1}$ の離散版変分導関数は $2d_d^* d_d u_d$ となる.

6 解析力学的空間離散化法

提案する空間離散化方法をまとめると次のようになる.

手順1. まず、離散版の相空間を設定する。第4節で、相空間 Q は0形式または1形式のなすアフィン空間であることを仮定した。そこで、領域を単体分割⁵し、離散版相空間 Q_d として、離散0形式の空間 C^0 または離散1形式の空間 C^1 で、質量一定や境界条件に対応する拘束条件を満たすような関数の空間を導入する。自然な離散化を行えば、これらの条件をまとめて

$$Au_d = b \quad (11)$$

の形に書くことができる。ここで $u_d \in Q_d$ であり A, b は適切な大きさの行列、ベクトルである。

手順2. 次に作用素 $\omega^\# : TQ \rightarrow TQ$ の離散版 $\omega_d^\# : TQ_d \rightarrow TQ_d$ を定める。 $\omega^\#$ は(2)の形であることを仮定したので、これらの離散版は(9)の作用素を離散化すればよい。これは単純に作用素を離散版に置き換えればよく、

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2}(\star d - d^\star \star) \rightarrow \frac{1}{2}(\star_{10} d_d - d_d^\star \star_{01}), \quad \nabla \times = \frac{1}{2}(\star d + d^\star \star) \rightarrow \frac{1}{2}(\star_{21} d_d + d_d^\star \star_{12})$$

とすればよい。離散版の作用素は随伴関係を保つように定義したため、このようにするだけで、エネルギー保存に重要である歪対称性を確保することができる。

手順3. ハミルトニアンを記述する $d, d^\star, \star, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\Lambda^\star}$ といった各作用素を離散版に置き換え、離散ハミルトニアン H_d を定義する。同様に $\delta H_d / \delta u_d$ を表1, 2の作用素を離散版に置き換えることによって求める。

手順4. 離散版ハミルトンフローを(8)で定義する。

このようにすると、空間方向のみが離散化された、エネルギー保存則をはじめとするハミルトン系の性質を保った常微分方程式系が得られる。

定理1. 上記の手順で得られる常微分方程式系はエネルギー保存則

$$\frac{dH_d}{dt} = 0$$

をもつ。

証明. 証明は通常のハミルトン系に対するものと同様である。チェインルールを用いて

$$\frac{dH_d}{dt} = dH_d \cdot \frac{du_d}{dt}$$

であるが、変分導関数は dH の Riesz 表現で定義したので

$$= \left\langle \frac{\delta H_d}{\delta u_d}, \frac{du_d}{dt} \right\rangle_{T_{u_d} Q_d}$$

となる。フローの方程式を代入すれば $\omega_d^\#$ の歪対称性から

$$= \left\langle \frac{\delta H_d}{\delta u_d}, \omega_d^\# \frac{\delta H_d}{\delta u_d} \right\rangle_{T_{u_d} Q_d} = - \left\langle \omega_d^\# \frac{\delta H_d}{\delta u_d}, \frac{\delta H_d}{\delta u_d} \right\rangle_{T_{u_d} Q_d} = 0.$$

□

これに AVF 法を適用すれば、離散化後にもエネルギー保存則を保ったスキームが得られる。

注意1. 実際に数値計算をする際には、接空間の取り扱いのため、拘束条件を考慮する必要が生じる。これは、一見、拘束条件によっては困難であるように思えるが、零空間法 (null space method) を用いることで数値的な取扱いが可能である [1].

⁵胞体分割など、より一般のメッシュでも同様である。

7 KdV 方程式に対する具体例

この節では、具体例として L -周期境界条件を与えた KdV 方程式の離散化を考える。この方程式はアフィン空間 $Q := \{u \in \Lambda^0 \mid \int_0^L u dx = \int_0^L u_0 dx, u(0) = u(L)\}$ を相空間とし、作用素 $\omega^\#$ を

$$\omega^\# : \frac{\delta H}{\delta u} \mapsto -\frac{1}{2} (\star d - d^\star \star) \frac{\delta H}{\delta u} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta H}{\delta u}$$

とする、ハミルトニアン

$$H(u) = \int_0^L \left(\frac{1}{6} u^3 - \frac{1}{2} (u_x)^2 \right) dx = \frac{1}{6} \langle 1, u^3 \rangle_{\Lambda^0} - \frac{1}{2} \langle du, du \rangle_{\Lambda^1}$$

に対するハミルトンフロー (3), (4) となる。これを離散化する。

7.1 差分幾何学の導入

まず、区間 $[0, L]$ を N 点 $\langle 1 \rangle, \dots, \langle N \rangle$ で離散化し、周期境界条件 $\langle j + N \rangle = \langle j \rangle$ を課す。各点 $\langle j \rangle$ の位置を $x_{\langle j \rangle}$ で表すことにする。また、 C^0 , C^1 の基底を

$$e_i(\langle j \rangle) = \begin{cases} 1 & (i = j), \\ 0 & (\text{otherwise}), \end{cases} \quad e_{i,i+1}(\langle j, j+1 \rangle) = \begin{cases} 1 & (i = j), \\ 0 & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

などで表す。離散外微分作用素は $v = \sum_{j=1}^N V_{\langle j \rangle} e_j \in C^0$ について

$$d_d v = \sum_{j=1}^N (V_{\langle j+1 \rangle} - V_{\langle j \rangle}) e_{j,j+1}, \quad d_d^\star w = - \sum_{j=1}^N \frac{2}{x_{j+1} - x_{j-1}} \left(\frac{W_{\langle j,j+1 \rangle}}{x_{j+1} - x_j} - \frac{W_{\langle j-1,j \rangle}}{x_j - x_{j-1}} \right) e_j$$

のようになる。

次に、他の作用素も離散化するため、再構成作用素 $\mathcal{I}$ を導入する。ここでは、

$$\mathcal{I}(e_i) = f_i, \quad f_i(x) = \begin{cases} 1 & (x \in [\frac{x_{i-1}}{2}, \frac{x_{i+1}}{2})), \\ 0 & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

$$\mathcal{I}(e_{i,i+1}) = g_i dx, \quad g_i(x) = \begin{cases} \frac{1}{x_{i+1} - x_i} & (x \in [x_i, x_{i+1})), \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

のように定義することにする。これを用いると、離散余微分作用素や離散 Hodge 作用素を局所的な作用素として定義することができる。実際、 $w = \sum_{j=1}^N W_{\langle j,j+1 \rangle} e_{j,j+1} \in C^1$ に対し、離散余微分作用素は

$$d_d v = \sum_{j=1}^N (V_{\langle j+1 \rangle} - V_{\langle j \rangle}) e_{j,j+1}, \quad d_d^\star w = - \sum_{j=1}^N \frac{2}{x_{j+1} - x_{j-1}} \left(\frac{W_{\langle j,j+1 \rangle}}{x_{j+1} - x_j} - \frac{W_{\langle j-1,j \rangle}}{x_j - x_{j-1}} \right) e_j$$

となる。また、0 形式から 1 形式への離散 Hodge 作用素 $\star_{01}$ を、Bossavit [3] などと同様の標準的な方法

$$\star_{01} e_j = \frac{x_{j+1} - x_j}{2} e_{j,j+1} + \frac{x_j - x_{j-1}}{2} e_{j-1,j}$$

によって定義する. $\star_{10}$ は

$$\star_{10} e_{j,j+1} = -\frac{1}{x_{j+2} - x_j} e_{j+1} - \frac{1}{x_{j+1} - x_{j-1}} e_j$$

となる.

7.2 離散版の相空間の導入

近似解 $u(t) \in C^0$ を $u_d(t) = \sum_{j=1}^N U_{\langle j \rangle}(t) e_{\langle j \rangle}$ と表すことにする. 相空間 Q に課された拘束条件を $\langle 1, u_d(t) \rangle_{C^0} = \langle 1, u_d(0) \rangle_{C^0}$ と離散化し, 離散版の相空間を

$$Q_d = \{v \in C^0 \mid \langle 1, v \rangle_{C^0} = \langle 1, u_d(0) \rangle_{C^0}\}$$

と設定する. 接空間 $T_v Q_d$ は

$$T_v Q_d = \{\delta v \in C^0 \mid \langle 1, \delta v \rangle_{C^0} = 0\}$$

となる. この空間上のシンプレクティック形式を, 連続版の作用素をすべて離散版に置き換えることによって定めると

$$\omega_d^\# \delta v := -\frac{1}{2} (\star_{10} d_d - d_d^\star \star_{01}) \delta v = \sum_j \frac{1}{x_{j+1} - x_{j-1}} (\delta V_{j+1} - \delta V_{j-1}) e_j$$

となる. ただし $\delta v = \sum_j \delta V_j e_j \in T_v Q_d$ である.

7.3 離散ハミルトニアンを導入と離散版フロー

離散ハミルトニアンも連続版の作用素をすべて離散版で置き換え,

$$H_d(u_d) = \frac{1}{6} \langle 1, u_d^3 \rangle_{C^0} - \frac{1}{2} \langle d_d u_d, d_d u_d \rangle_{C^1}$$

と定める. ただし $u_d^p = \sum_{j=1}^N U_{\langle j \rangle}^p e_{\langle j \rangle}$ とする. このとき, 変分導関数は

$$\frac{\delta H_d}{\delta u_d} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{2} u_d^2 - d_d^\star d_d u_d \right)$$

となる. ただし $\mathcal{P}$ は $T_{u_d} Q_d$ への射影を表す. 以上を用いると

$$\frac{d}{dt} u_d = \omega_d^\# \mathcal{P} \left(\frac{1}{2} u_d^2 - d_d^\star d_d u_d \right) = \omega_d^\# \left(\frac{1}{2} u_d^2 - d_d^\star d_d u_d \right)$$

のように半離散スキームが得られた. ただし, 二つ目の等式では, ここで用いた $\omega^\#$ が $\omega_d^\# \mathcal{P} = \omega_d^\#$ を満たすことを用いた. スキームを具体的に書き下すと

$$\begin{aligned} \frac{dU_{\langle j \rangle}}{dt} &= \frac{1}{x_{j+1} - x_{j-1}} \left(\left(\frac{\delta H_d}{\delta u_d} \right)_{\langle j+1 \rangle} - \left(\frac{\delta H_d}{\delta u_d} \right)_{\langle j-1 \rangle} \right), \\ \left(\frac{\delta H_d}{\delta u_d} \right)_{\langle j \rangle} &= \frac{1}{2} U_{\langle j \rangle}^2 + \frac{2}{x_{j+1} - x_{j-1}} \left(\frac{U_{\langle j+1 \rangle} - U_{\langle j \rangle}}{x_{j+1} - x_j} - \frac{U_{\langle j \rangle} - U_{\langle j-1 \rangle}}{x_j - x_{j-1}} \right) \end{aligned}$$

となる.

8 離散変分法の後退誤差解析

前節で得られた半離散スキームに AVF (average vector field) 法と呼ばれる離散勾配法を適用すると降旗・松尾らによる離散変分法によるスキーム

$$\frac{u_{(j)}^{(n+1)} - U_{(j)}^{(n)}}{\Delta t} + \delta^{(1)} \left(\left(U_{(j)}^{(n)} \right)^2 + U_{(j)}^{(n)} U_{(j)}^{(n+1)} + \left(U_{(j)}^{(n+1)} \right)^2 + \frac{1}{2} \delta^{(2)} \left(U_{(j)}^{(n)} + U_{(j)}^{(n+1)} \right) \right) = 0$$

が得られる。 $\delta^{(1)}$, $\delta^{(2)}$ は 1 階および 2 階の中心差分作用素である。すなわち、本論文の方法を応用することで、離散変分法によるスキームの別導出が得られたことになる。さらに、AVF 法に対しては後退誤差解析が既に行われている [5] ので、それを形式的に適用することにより、離散変分法についても後退誤差解析が可能である。簡単のために等間隔格子を仮定して、実際に、これを適用してみると

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{u}}{dt} &= \left(\tilde{J}_{\Delta x} + \frac{(\Delta t)^2}{12} \tilde{J}_{\Delta x} \left(\frac{\delta \tilde{H}}{\delta \tilde{u}} \right)' \tilde{J}_{\Delta x} \left(\frac{\delta \tilde{H}}{\delta \tilde{u}} \right)' \tilde{J}_{\Delta x} \right) \frac{\delta \tilde{H}}{\delta \tilde{u}} + O((\Delta t)^4), \\ \tilde{J}_{\Delta x} &= \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{(\Delta x)^4}{5!} \frac{\partial^5}{\partial x^5} + \dots \right), \\ \tilde{H}(\tilde{u}, \tilde{u}_x, \tilde{u}_{xx}, \dots) &= -\tilde{u}^3 + \frac{1}{2} \tilde{u}_x^2 - \frac{(\Delta x)^2}{4!} \tilde{u}_{xx}^2 + \frac{(\Delta x)^4}{6!} \tilde{u}_{xxx}^2 - + \dots \\ \left(\frac{\delta \tilde{H}}{\delta \tilde{u}} \right)' &= 6\tilde{u} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2(\Delta x)^2}{4!} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \frac{2(\Delta x)^4}{6!} \frac{\partial^6}{\partial x^6} + \dots \end{aligned}$$

のような修正フローが得られる。これは、修正されたハミルトニアン $\tilde{H}$ を用いて記述されるハミルトン系の形となっている。

9 まとめと今後の課題

ハミルトン偏微分方程式に対し、解析力学的な方法によって空間方向に半離散化する方法を提案した。この方法は、Celledoni らによる方法の拡張であり、AVF 法と組み合わせることで様々なメッシュ上でエネルギー保存スキームを導出できる。また、応用として、離散変分法による KdV 方程式に対するスキームの別導出を示し、後退誤差解析を行った。本論文で示した具体例は、KdV 方程式の例を取り扱ったために 1 次元の不等間隔格子上での離散化であったが、他の方程式についてや、多次元の場合についても、ほぼ任意のメッシュ上で同様の取り扱いが可能である。実際に、様々な方程式へと適用し、性能を評価していくことは、今後の課題である。

参考文献

- [1] P. Betsch, A Unified Approach to the Energy-Consistent Numerical Integration of Non-holonomic Mechanical Systems and Flexible Multibody Dynamics., GAMM Mitt., vol. 27, 2004, pp. 66–87.

- [2] P. B. Bochev and J. M. Hyman, Principles of Mimetic Discretizations of Differential Operators, IMA Vol. Math. Appl., vol. 142, 2006, pp. 89–119.
- [3] A. Bossavit, ‘Generalized Finite Differences’ in Computational Electromagnetics, PIER, vol. 32, 2001, pp. 45–64.
- [4] 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.
- [5] E. Celledoni, R. I. McLachlan, D. I. McLaren, B. Owren, G. R. W. Quispel and W. M. Wright, Energy-Preserving Runge-Kutta Methods, ESAIM: M2AN, vol. 43, 2009, pp. 645–649.
- [6] P. R. Chernoff and J. E. Marsden, Properties of Infinite Dimensional Hamiltonian Systems, Springer-Verlag, Berlin, 1974.
- [7] 降旗 大介, 森 正武, 偏微分方程式に対する差分スキームの離散的分変による統一的導出, 日本応用数理学会論文誌, 8 巻, 1998, pp. 317–340.
- [8] H. Flanders, Differential forms with applications to the physical sciences. 2nd ed., Dover Books Adv. Math., Dover, NY, 1989.
- [9] O. Gonzalez, Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems. J. Nonlinear Sci., vol. 6, 1996, pp. 449–467.
- [10] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- [11] C. Lubich, From Quantum to Classical Molecular Dynamics: Reduced Models and Numerical Analysis, Zur. Lect. Adv. Math., Eur. Math. Soc., Zürich, 2008.
- [12] R. I. McLachlan, Spatial Discretization of PDEs with Integrals, IMA J. Numer. Anal., vol. 23, 2003, pp. 645–664.
- [13] R. I. McLachlan and N. Robidoux, Antisymmetry, Pseudospectral Methods, Weighted Residual Discretizations, and Energy Conserving Partial Differential Equations, preprint.
- [14] M. Shashkov, Conservative Finite-Difference Schemes on General Grids, CRC Press, Boca Raton, FL, 1995.
- [15] 田中和永, 変分問題入門, 岩波書店, 2008.