いくつかの非線形波動方程式に対する エネルギーの保存する陽的差分法

石　森　勇　次

(工学部　電子情報工学科)

1. は じ め に

波動方程式を数値的に解く方法の一つは、差分化による解法、即ち微分方程式を差分方程式に近似して解く方法である。このとき、近似のよい数値解を得るにはどのような差分化を行なえばよいかが問題となる。一般には、時間および空間のきざみ幅をゼロに近づけたときに、差分方程式が解くべき微分方程式に一致すること（適合性）、数値解が有限の時間で発散しないこと（安定性）等が検討される。これらはよい差分法を考える上で重要であるが、実際に数値計算を行なうときには、解くべき微分方程式の解の特徴も考慮しなければいけない。例えば、時間および空間のきざみ幅は、解の特徴的な時間空間的変動幅より十分小さくとらなければいけない。また、解くべき微分方程式の解の特徴が予め正確にわかるものであれば、それを差分法の近似精度の評価に利用することができる。もし解が時間反転に対して対称であれば、ある時間計算した後、今度は時間の逆方向に同じ時間まで計算してもとの初期値にどれだけ正確に戻るかを調べ、精度を評価することができる。

ところで、波動方程式の解の特徴を単に差分法の近似精度の評価に利用するのではなく、数値解法へもっと積極的に取り入れた差分法が考えられている。その中に、エネルギー等の保存量を考慮した差分法がある。即ち、波動方程式が本来持っていた保存量に対応する離散化された保存量が存在するような差分方程式を見つける試みがある。[1] これは、線形の波動方程式の場合比較的簡単であるが、非線形の波動方程式の場合さほど簡単ではない。さらに非線形の場合、一般にこれらの差分法は陰的な差分法となり、解の精度の面ではよい差分法であるが、これまでの計算結果を使って次段の値を計算するとき、代数方程式等を数値的に解かなければならず、計算時間の効率の面で欠点を持っている。従って、次段の値が式を直接計算するだけで求められる陽的な差分法があれば、より望ましい。

本研究では、エネルギー保存則を許すいくつかの非線形波動方程式に対して、離散化されたエネルギー保存則をもつ陽的な差分法が存在することを示す。具体的には、時空２次元の[2]

① 多成分 ϕ^4 方程式
② 非線形シュレディンガー方程式
③ ダブル・サイン・ゴルドン方程式
④ ランダウ・リフシッツ方程式
⑤ 非線形シグマモデル方程式

を扱う。また、特に１成分 ϕ^4 方程式に対して、エネルギー保存以外の性質、変分原理（ハミルトンの原理）と保測性（リュービルの定理）を差分方程式が満たしているかどうかも調べ、他の差分法との違いを見る。

2. 陽的差分法とエネルギー保存則

波動方程式は連続な空間変数 x 及び時間変数 t の未知関数に対して成り立つ方程式とし、差分方程式は整数の添字 m 及び n の未知関数に対して成り立つ方程式とする。このとき、空間及び時間のきざみ幅をそれぞれ、h, k とおくと $x=hm$、$t=kn$ が成り立つ。保存測は一般に連続の方程式で表わされ、波動方程式に対しては、

$$T_t + X_x = 0 \tag{1}$$

と書かれ、差分方程式に対しては、

$$\frac{1}{k}(T_{mn} - T_{mn-1}) + \frac{1}{h}(X_{mn} - X_{m-1n}) = 0 \tag{2}$$

と書かれる。T, X は保存量及び流れの密度であり、T_{mn}, X_{mn} はその離散化された密度である。(1)式の添字は x や t に関する偏微分を表わす。以下において、前節で述べた５個の方程式に対して、具体的に波動方程式、エネルギー及び流れの密度を表示し、それらに対する差分表示を与える。

① 多成分 ϕ^4 方程式

$$\vec{\phi}_{tt} = \vec{\phi}_{xx} + (1-\vec{\phi}^2)\vec{\phi} \tag{3}$$

$$T = \frac{1}{2}\{\vec{\phi}_t^2 + \vec{\phi}_x^2 + \frac{1}{2}(\vec{\phi}^2 - 1)^2\} \tag{4}$$

$$X = -\vec{\phi}_x \cdot \vec{\phi}_t \tag{5}$$

ここで、$\vec{\phi}$ は N 成分から成る変数で

$$\vec{\phi} = (\phi_1, \phi_2, \cdots\cdots, \phi_n) \tag{6}$$

と表わされる。これらの式に対する差分表示として、

$$\frac{1}{k^2}(\vec{\phi}_{mn+1}+\vec{\phi}_{mn-1}-2\vec{\phi}_{mn})$$
$$=\frac{1}{h^2}(\vec{\phi}_{m+1n}+\vec{\phi}_{m-1n}-2\vec{\phi}_{mn})$$
$$+\frac{1}{2}(1-\vec{\phi}_{mn}{}^2)(\vec{\phi}_{mn+1}+\vec{\phi}_{mn-1}) \tag{7}$$

$$T_{mn}=\frac{1}{2k^2}(\vec{\phi}_{mn+1}-\vec{\phi}_{mn})^2$$
$$+\frac{1}{2h^2}(\vec{\phi}_{m+1\,n+1}-\vec{\phi}_{mn+1})\cdot(\vec{\phi}_{m+1n}-\vec{\phi}_{mn})$$
$$+\frac{1}{4}(\vec{\phi}_{mn+1}{}^2-1)(\vec{\phi}_{mn}{}^2-1) \tag{8}$$

$$X_{mn}=-\frac{1}{2kh}(\vec{\phi}_{m+1\,n+1}-\vec{\phi}_{m+1\,n-1})\cdot(\vec{\phi}_{m+1n}-\vec{\phi}_{mn}) \tag{9}$$

を提案する。(7)式は簡単に$\vec{\phi}_{mn+1}=$……の形に書き替えることができるので、陽的差分公式である。

② 非線形シュレディンガー方程式

$$2iu_t+u_{xx}-2|u|^2u=0 \tag{10}$$

$$T=\frac{1}{2}(|u_x|^2+|u|^4) \tag{11}$$

$$X=-\frac{1}{2}(u_x{}^*u_t+\mathrm{c.c.}) \tag{12}$$

ここで、uは複素変数であり、c.c.は複素共役な量を表わす。これらの式に対する差分表示として、

$$\frac{i}{k}(u_{mn+1}-u_{mn-1})+\frac{1}{h^2}(u_{m+1n}+u_{m-1n}-2u_{mn})$$
$$-|u_{mn}|^2(u_{mn+1}+u_{mn-1})=0 \tag{13}$$

$$T_{mn}=\frac{1}{4h^2}\{(u_{m+1\,n+1}-u_{mn+1})^*(u_{m+1n}-u_{mn})$$
$$+\mathrm{c.c.}\}+\frac{1}{2}|u_{mn+1}|^2|u_{mn}|^2 \tag{14}$$

$$X_{mn}=-\frac{1}{4kh}(u_{m+1n}-u_{mn})^*(u_{m+1\,n+1}-u_{m+1\,n-1})$$
$$+\mathrm{c.c.} \tag{15}$$

を提案する。(13)式は(7)式と同様、明らかに陽的差分公式である。

③ ダブル・サイン・ゴルドン方程式

$$\vec{S}\times(\vec{S}_{tt}-\vec{S}_{xx}-\vec{e}-\vec{S}J)=0 \tag{16}$$

$$T=\frac{1}{2}(\vec{S}_t{}^2+\vec{S}_x{}^2)-\vec{S}\cdot(\vec{e}+\frac{1}{2}\vec{S}J) \tag{17}$$

$$X=-\vec{S}_x\cdot\vec{S}_t \tag{18}$$

ここで、

$$\vec{S}=(u,\ v,\ 0) \tag{19}$$

$$\vec{S}^2=1 \tag{20}$$

$$\vec{e}=(1,\ 0,\ 0) \tag{21}$$

$$\vec{J}=\begin{pmatrix}J_1&0&0\\0&J_2&0\\0&0&0\end{pmatrix} \tag{22}$$

である。これらの式に対する差分表示として、

$$\frac{1}{k^2}\vec{S}_{mn}\times(\vec{S}_{mn+1}+\vec{S}_{mn-1}-2\vec{S}_{mn})$$
$$-\frac{1}{2}(\vec{S}_{mn+1}+\vec{S}_{mn-1})\times\{\frac{1}{h^2}(\vec{S}_{m+1n}+\vec{S}_{m-1n}$$
$$-2\vec{S}_{mn})+\vec{e}+\vec{S}_{mn}J\}=0 \tag{23}$$

$$T_{mn}=\frac{1}{2k^2}(\vec{S}_{mn+1}-\vec{S}_{mn})^2$$
$$+\frac{1}{2h^2}(\vec{S}_{m+1\,n+1}-\vec{S}_{mn+1})\cdot(\vec{S}_{m+1n}-\vec{S}_{mn})$$
$$-\frac{1}{2}\vec{e}\cdot(\vec{S}_{mn+1}+\vec{S}_{mn})-\frac{1}{2}\vec{S}_{mn+1}\cdot(\vec{S}_{mn}J) \tag{24}$$

$$X_{mn}=-\frac{1}{2kh}(\vec{S}_{m+1n}-\vec{S}_{mn})\cdot(\vec{S}_{m+1\,n+1}-\vec{S}_{m+1\,n-1}) \tag{25}$$

を提案する。(23)式は2個の未知数u_{mn+1}, v_{mn+1}に対する1個の一次方程式であり、

$$\vec{S}_{mn+1}{}^2=u_{mn+1}{}^2+v_{mn+1}{}^2=1 \tag{26}$$

と連立させて解かなければいけない。(u, v) 平面上において、(23)式で表わされる直線と(26)式で表わされる円の交点は、点(u_{mn}, v_{mn})に非常に近い点と円の反対側に大きく離れた点の2点であるので、簡単にu_{mn+1}, v_{mn+1}を求めることができる。従って、この差分公式は陽的である。

通常、ダブル・サイン・ゴルドン方程式は、

$u=\cos\theta$, $v=\sin\theta$

とおいて、

$$\theta_{tt}-\theta_{xx}+\sin\theta+\frac{1}{2}(J_1-J_2)\sin 2\theta=0 \tag{27}$$

と表わされる。しかし、この形式ではエネルギーの保存する陽的差分法を見い出すことは困難である。

④ ランダウ・リフシッツ方程式

$$\vec{S}_t=\vec{S}\times(\vec{S}_{xx}+\vec{S}J) \tag{28}$$

$$T=\frac{1}{2}\{\vec{S}_x{}^2-\vec{S}\cdot(\vec{S}J)\} \tag{29}$$

$$X=-\vec{S}_x\cdot\{\vec{S}\times(\vec{S}_{xx}+\vec{S}J)\} \tag{30}$$

ここで、

$$\vec{S}=(u,\ v,\ w) \tag{31}$$

$$\vec{S}^2=1 \tag{32}$$

$$J=\begin{pmatrix}J_1&0&0\\0&J_2&0\\0&0&J_3\end{pmatrix} \tag{33}$$

である。これらの式に対する差分表示として、

$$\frac{1}{2k}(\vec{S}_{mn+1}-\vec{S}_{mn-1})=\frac{1}{2}(\vec{S}_{mn+1}+\vec{S}_{mn-1})$$
$$\times\{\frac{1}{h^2}(\vec{S}_{m+1n}+\vec{S}_{m-1n}-2\vec{S}_{mn})+\vec{S}_{mn}J\} \tag{34}$$

$$T_{mn}=\frac{1}{2h^2}(\vec{S}_{m+1\,n+1}-\vec{S}_{mn+1})\cdot(\vec{S}_{m+1n}-\vec{S}_{mn})$$
$$-\frac{1}{2}\vec{S}_{mn+1}\cdot(\vec{S}_{mn}J) \tag{35}$$

$$X_{mn} = -\frac{1}{2h}(\vec{S}_{m+1\,n} - \vec{S}_{mn})\cdot\Big[(\vec{S}_{m+1\,n+1} + \vec{S}_{m+1\,n-1})$$
$$\times\Big\{\frac{1}{h^2}(\vec{S}_{m+2n} - \vec{S}_{m+1\,n}) + \vec{S}_{m+1\,n}J\Big\}\Big] \tag{36}$$

を提案する。(34)式は $u_{m\,n+1}$, $v_{m\,n+1}$, $w_{m\,n+1}$ を未知数とする連立一次方程式であるが、簡単に解けるので、実際上陽的な差分公式である。また、$\vec{S}_{m\,n+1}{}^2 = \vec{S}_{m\,n-1}{}^2$ が証明されるので、$\vec{S}_{m0}{}^2 = \vec{S}_{m1}{}^2 = 1$ にとれば、任意の離散時刻nにおいて $\vec{S}_{mn}{}^2 = 1$ となる。

⑤ 非線形シグマ・モデル方式

$$\vec{S}\times\vec{S}_{tt} = \vec{S}\times\vec{S}_{xx} \tag{37}$$

$$T = \frac{1}{2}(\vec{S}_t{}^2 + \vec{S}_x{}^2) \tag{38}$$

$$S = -\vec{S}_x\cdot\vec{S}_t \tag{39}$$

ここで、

$$\vec{S} = (u,\ v,\ w) \tag{40}$$

$$\vec{S} = 1 \tag{41}$$

である。これらの式に対する差分表示として、

$$\frac{1}{k^2}\vec{S}_{mn}\times(\vec{S}_{m\,n+1} + \vec{S}_{m\,n-1} - 2\vec{S}_{mn})$$
$$= \frac{1}{2h^2}(\vec{S}_{m\,n+1} + \vec{S}_{m\,n-1})$$
$$\times(\vec{S}_{m+1n} + \vec{S}_{m-1n} - 2\vec{S}_{mn}) \tag{42}$$

$$T_{mn} = \frac{1}{2k^2}(\vec{S}_{m\,n+1} - \vec{S}_{mn})^2$$
$$+ \frac{1}{2h^2}(\vec{S}_{m+1\,n+1} - \vec{S}_{m\,n+1})\cdot(\vec{S}_{m+1n} - \vec{S}_{mn}) \tag{43}$$

$$X_{mn} = -\frac{1}{2kh}(\vec{S}_{m+1n} - \vec{S}_{mn})\cdot(\vec{S}_{m+1\,n+1} - \vec{S}_{m+1\,n-1}) \tag{44}$$

を提案する。(42)式は3個の未知数 $u_{m\,n+1}$, $v_{m\,n+1}$, $w_{m\,n+1}$ に対する2個の一次方程式であり、

$$\vec{S}_{m\,n+1}{}^2 = u_{m\,n+1}{}^2 + v_{m\,n+1}{}^2 + w_{m\,n+1}{}^2 = 1 \tag{45}$$

と連立させて解かなければいけないが、ダブル・サイン・ゴルドン方程式の場合と同様に簡単に解けるのでこの差分公式は陽的である。

3. 変分原理と保測性

1成分 ϕ^4 方程式は、一般的な非線形クライン・ゴルドン方程式

$$\phi_{tt} - \phi_{xx} = -\frac{dV(\phi)}{d\phi} = -V'(\phi) \tag{46}$$

において、ポテンシャル $V(\phi)$ を

$$V(\phi) = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2 \tag{47}$$

とおいた場合に対応する。差分表示を考える際、特に問題となるのは(46)式の右辺をどのように離散化するかということである。ここでは、3種類の差分表示

$$\frac{1}{k^2}(\phi_{m\,n+1} + \phi_{m\,n-1} - 2\phi_{mn})$$
$$-\frac{1}{h^2}(\phi_{m+1n} + \phi_{m-1n} - 2\phi_{mn})$$

$$= \begin{cases} \dfrac{1}{2}(1-\phi_{mn}{}^2)(\phi_{m\,n+1} + \phi_{m\,n-1}) & (48) \\ -V'(\phi_{mn}) & (49) \\ -\dfrac{V(\phi_{m\,n+1}) - V(\phi_{m\,n-1})}{\phi_{m\,n+1} - \phi_{m\,n-1}} & (50) \end{cases}$$

を考える。(48)式は前節で提案したエネルギーの保存する陽的な差分法である。(49)式は考えられる最も単純な差分法であるが、適当な条件のもとで数値計算を行なってみれば分かるが、エネルギー保存則が厳密には成り立たない差分法である。(50)式は Strauss と Vazquez[3] によって提案された差分法である。これはエネルギーの保存する差分法であり、エネルギー及び流れの密度は、

$$T_{mn} = \frac{1}{2k^2}(\phi_{m\,n+1} - \phi_{mn})^2$$
$$+ \frac{1}{2h^2}(\phi_{m+1\,m+1} - \phi_{m\,n+1})(\phi_{m+1n} - \phi_{mn})$$
$$+ \frac{1}{2}\{V(\phi_{m\,n+1}) + V(\phi_{mn})\} \tag{51}$$

$$X_{mn} = -\frac{1}{2kh}(\phi_{m+1\,n+1} - \phi_{m+1\,n-1})(\phi_{m+1n} - \phi_{mn}) \tag{52}$$

で与えられる。また、どのようなポテンシャル $V(\phi)$ に対しても使える長所を持っているが、非線形の場合、本研究の差分法と異なり陰的である。

これら3種類の差分法が変分原理を満たすかどうかを考える。即ち、適当な離散化されたラグランジアン L_{mn} が存在して、その作用

$$I = \sum_m \sum_n L_{mn} \tag{53}$$

の極値を求める条件式

$$\frac{\partial I}{\partial\phi_{mn}} = 0 \tag{54}$$

が差分方程式に一致するかどうかを検討する。差分法(48)の場合、もし作用 I が存在すれば

$$\frac{\partial^2 I}{\partial\phi_{m\,n+1}\partial\phi_{mn}} = \frac{\partial^2 I}{\partial\phi_{mn}\partial\phi_{m\,n+1}} \tag{55}$$

が成り立つので $\phi_{m\,n+1}{}^2 = \phi_{mn}{}^2$ でなければならない。これはすべての解に対して成り立つわけではないので、この差分法は変分原理を満たさない。差分法(49)の場合、

$$L_{mn} = \frac{1}{2k^2}(\phi_{m\,n+1} - \phi_{mn})^2$$
$$-\frac{1}{2h^2}(\phi_{m+1\,n} - \phi_{mn})^2 - V(\phi_{mn}) \tag{56}$$

とおけば、(54)式と差分方程式が一致するので変分原理は満たされる。差分法(50)の場合、(55)式よりポテンシャル $V(\phi)$ が、

$$V'(a) - \frac{V(a) - V(b)}{a - b} = \lambda(a - b) \tag{57}$$

を満たす必要がある。ここで、λは適当な定数である。この式を満たす$V(\phi)$は二次関数であり、従って非線形の場合、変分原理は満たされない。

差分法が保測性を満たすときには、ϕ_{mn}を離散化された一般化座標と見なし、

$$\pi_{m\,n+1} = \frac{1}{k}(\phi_{m\,n+1} - \phi_{mn}) \tag{58}$$

によって共役な運動量を定義し、ϕ_{mn}, π_{mn}で張られる$2M$次元の位相空間の体積要素が、時間によらず一定でなければいけない。即ち、

$$\frac{\partial(\phi_{1\,n+1}, \cdots, \phi_{M\,n+1}, \pi_{1\,n+1}, \cdots, \pi_{M\,n+1})}{\partial(\phi_{1n}, \cdots, \phi_{Mn}, \pi_{1n}, \cdots, \pi_{Mn})} = 1 \tag{59}$$

が成り立つ必要がある。ここでは、境界条件

$$\left.\begin{aligned} &\phi_{0n} = \phi_{1n} \\ &\phi_{M+1\,n} = \phi_{Mn} \\ &\pi_{0n} = \pi_{1n} \\ &\pi_{M+1\,n} = \pi_{Mn} \end{aligned}\right| \tag{60}$$

を仮定して保測性を検討する。差分法(48)と(49)の場合、ヤコビアンに対する条件式(59)を満たすことがわかるので、位相空間の体積要素は時間によって変わらない。しかし、差分法(50)の場合、ポテンシャル$V(\phi)$が、

$$\frac{1}{2}[V'(a) + V'(b)] = \frac{V(a) - V(b)}{a - b} \tag{61}$$

を満たす必要がある。従って、変分原理のときと同様に、一般の非線形の場合には保測性は満たされない。

4. むすび

本研究では、いくつかの非線形波動方程式に対してエネルギーの保存する陽的な差分法を提案したが、これをもっと一般的な非線形の波動方程式に対して示すことができれば、数値計算を行なう上でたいへん望ましい。しかし、3節の非線形クライン・ゴルドン方程式に関する議論の中で述べたように、任意の非線形項を持つ波動方程式に対するエネルギーを保存する差分法は陰的である。最近、低自由度の一般的な非線形の常微分方程式に対して、エネルギーの保存する陽的な差分法が提案されたが、[4] これは波動方程式に対しても拡張可能かもしれない。本研究では、エネルギー保存以外の性質についても議論したが、エネルギー保存と変分原理との相性はあまりよくないようである。変分原理は、有限要素法等の数値計算法で利用され、たいへん重要であり、両者とも満足する差分法があれば有用である。これらの問題点に関しては、今後の課題としたい。

引用文献

(1) R. Hirota (1982) Difference Analogues of Nonlinear Evolution Equations in Hamiltonian Form, Technical Report No. A-12, Dept. of Appl. Math., Hiroshima University, Higashi-Hiroshima.

(2) R. K. Dodd, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon and H. C. Morris (1982) Solitons and Nonlinear Wave Equations, Academic Press, London.

(3) W. Strauss and L. Vazquez (1978) *J. Comput. Phys.* **28** : 271−278.

(4) C. Qin (1988) *J. Comput. Phys.* **79** : 473−476.

Explicit Energy-Conserving Difference Schemes for Nonlinear Wave Equations

Yuji Ishimori

Finite difference schemes are proposed for the multi-componet ϕ^4, nonlinear Schrödinger, double sine-Gordon, Landau-Lifshitz and nonlinear sigma model equations. The schemes are explicit and guarantee conservation of total energy. Furthermore, variational principle and measure preservation are discussed.