論文の内容の要旨

論文題目　Discrete Variational Method: Its Various Extensions and Applications
(離散変分法の拡張と応用)

氏　　名　松尾 宇泰

物理現象を記述する偏微分方程式には，しばしば「エネルギー」と呼ばれる量が存在し，それが時間発展とともに保存，あるいは散逸される．このような方程式を数値計算により解析する際には，エネルギーの保存・散逸性を離散系でも再現するようなスキーム (以後，これを「保存・散逸スキーム」と呼ぶ) を用いる方が，安定性や解の定性的な正しさの意味で望ましい．そのため 1970 年代頃から，個別の問題に対して，保存・散逸スキームを構築する試みが精力的に行われてきた．例えば，Strauss らによる線形 Klein-Gordon 方程式 (保存型) に対する保存差分スキーム，Hughes らによる非線形弾性体問題 (保存型) に対する保存有限要素スキーム，Delfour らによる非線形 Schrödinger 方程式 (保存型) に対する保存差分スキーム，そして Du らによる Cahn-Hilliard 方程式 (散逸型) に対する散逸有限要素スキームなどである．

一方，1990 年代の終わりに，降旗・森により，「離散変分法 (discrete variational method)」と呼ばれる方法が提案された．これはあるクラスの実数値・単一偏微分方程式に対して，機械的かつ統一的に保存・散逸差分スキームを導出するための方法である．彼らが対象とした「散逸型偏微分方程式」は，以下の形のものである．

$$\frac{\partial u}{\partial t} = (-1)^{s+1}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{2s}\frac{\delta G}{\delta u}, \quad x\in(0,L),\ t>0,\ s=0,1,2,\ldots. \tag{1}$$

ここで $G(u,u_x)$ は実数値関数，$\delta G/\delta u$ は G の u に関する変分導関数である．関数 G を「エネルギー関数」，その空間積分，

$$\int_0^L G(u,u_x)\,\mathrm{d}x,$$

を「大域エネルギー」と呼ぶ．方程式 (1) は，しかるべき境界条件のもとで，以下のように大域エネルギー

の散逸性を持つ.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^L G(u,u_x)\mathrm{d}x \le 0.$$

また，もうひとつの対象は，以下の形の「保存型偏微分方程式」である.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{2s+1}\frac{\delta G}{\delta u}, \quad x\in(0,L),\ t>0,\ s=0,1,2,\dots. \tag{2}$$

この方程式は，以下のように大域エネルギーを保存する.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^L G(u,u_x)\mathrm{d}x = 0,$$

降旗・森は，連続版の変分導関数 $\delta G/\delta u$ に対応して，離散系において「離散変分導関数」という概念を定義し，連続版の方程式 (1)，(2) にならって「離散変分導関数」で形式的に差分スキームを構築することを提案した．そしてこのように構築された差分スキームが，常にもとの方程式と同様の保存性・散逸性を持つことを示した．彼らは実際に Korteweg–de Vries 方程式 (保存型) に対して，離散変分法により構築した保存差分スキームが極めて安定であることを数値実験で示した．また Cahn-Hilliard 方程式 (散逸型) に対して，得られた散逸差分スキームが安定で，その解が刻み幅 $\to 0$ の極限で真の解に収束することを，数値的・理論的に示した.

本論文は，この離散変分法をさらに拡張して，より広範囲の偏微分方程式に対して，より幅広いスキームが導出可能であることを示すものである．また種々の適用例もあわせて示す．具体的には以下のとおりである.

複素数値偏微分方程式への拡張 もともと実数値偏微分方程式 (1)，(2) に対して提案された離散変分法を，複素数値散逸型偏微分方程式：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta G}{\delta \overline{u}}, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^L G(u,u_x)\,\mathrm{d}x \le 0, \tag{3}$$

および複素数値保存型偏微分方程式：

$$\mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta G}{\delta \overline{u}}, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^L G(u,u_x)\,\mathrm{d}x = 0, \tag{4}$$

に適用可能となるよう拡張した．ここで $\mathrm{i}=\sqrt{-1}$，$u(x,t)$ は複素数値関数，$G(u,u_x)$ は実数値関数，そして $\delta G/\delta\overline{u}$ は G の $\overline{u}$ に関する複素変分導関数である．散逸型方程式 (3) の例には，たとえば複素 Ginzburg-Landau 方程式，Newell-Whitehead 方程式がある．また保存型偏微分方程式 (4) の例には，非線形 Schrödinger 方程式がある．この拡張を実現するために，我々は複素変分導関数に対応する新しい概念,「複素離散変分導関数」を提案した．この複素離散変分導関数を用いて，連続版の方程式(3) や (4) にならって形式的に差分スキームを定義することで，自動的に保存・散逸性を再現する差分スキームを構築できる．この拡張された離散変分法を実際に非線形 Schrödinger 方程式と複素 Ginzburg–Landau 方程式に適用し，得られた差分スキームが安定で，その解が真の解に収束することを理論的に示した．また Newell–Whitehead 方程式に適用した例も示した.

連立偏微分方程式への拡張 本来単一偏微分方程式に対して提案された離散変分法を，以下の形の連立偏微分方程式に拡張した．

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} = A\frac{\delta G}{\delta \boldsymbol{u}}, \quad x \in (0, L), t > 0,$$

ここで $G = G(u_1, u_2, \ldots, u_M)$ は実数値関数，$u_i(x,t)$ $(1 \leq i \leq M)$ はそれぞれ実数値，あるいは複素数値関数，そして A は $M \times M$ 行列である．行列 A と境界条件がしかるべき条件を満たすとき，この連立偏微分方程式は散逸性：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^L G\,\mathrm{d}x \leq 0,$$

または保存性：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^L G\,dx = 0,$$

をもつ．我々は，連続版の $\delta G/\delta \boldsymbol{u}$ に相当する離散変分導関数が定義でき，それにより保存・散逸差分スキームを構築できることを示した．例題として，Zakharov 方程式 (保存型) への適用例を示した．

陰的線形差分スキームの導出 一般に離散変分法で導かれる差分スキームは，もとの方程式の非線形性を引き継いで常に非線形である (時間発展の毎ステップで解くべき方程式が，非線形方程式になる)．しかしある場合には，離散変分法の枠組を修正して，陰的線形スキーム (未知数に関して陰的ではあるが線形なスキーム) を導出できることを示した．時間発展の毎ステップで，非線形スキームが重い反復解法を必要とするのに対して，陰的線形スキームは線型方程式を解くだけでよく，一般にはるかに高速である．また具体的に提案する手法を実際に非線形 Schroödinger 方程式，複素 Ginzburg-Landau 方程式，および Newell-Whitehead 方程式に適用した例を示した．

空間・時間高精度化手法の提案 以上の離散変分法で得られるスキームはすべて，空間・時間方向に高々 2 次精度である が，ある種の条件下では，離散変分法の枠組を拡張して，より高精度な差分スキームを導出できることを示した．具体的には，新しく「空間・時間方向に高精度な離散変分導関数」という概念を定義し，これを用いて離散変分法の枠組を書き直した．その結果，空間方向には，周期的境界条件下であれば任意の精度まで，時間方向には安定性の許す範囲で (実際的には 6 次まで) 高精度化できることを示した．

以上のように，本論文では離散変分法を，その基本的アイデアが適用可能な対象のほとんどにまで拡張し，また，同手法に，線形化 (高速化)，高次化といった実用上重要な強化を施した．また理論的収束証明を付けたいくつかの例題を含み，本論文で拡張された離散変分法の種々の適用例も示した．