

勾配系に対するエネルギー不等式を満たす4次の差分法

石森 勇次

(工学部一般教育等)

1. はじめに

微分方程式を数値的に解くための差分法を考えると、系の性質を満たすような差分法が構成できれば望ましい。著者はこれまで特にエネルギー関数の性質を配慮した差分法の開発を行ってきた[1-7]。即ち、保存力学系に対しては、エネルギーの保存する差分法を、散逸力学系に対しては、エネルギー不等式を満たす差分法を開発してきた。しかし、これらの差分法は打ち切り誤差の面において、高々2次の精度の計算法であり、よく知られた4次のRunge-Kutta法[8]より低次の計算法である。そのため、定性的にはよくても定量的には十分な精度が得られない。

本研究では、これまでの差分法に比べてより高次の4次の差分法が構成できることを示す。扱う系は最も簡単な1変数の勾配系である。即ち、微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} = -V'(x) \quad (1)$$

で記述される散逸系を考える。この力学系に対して、不等式

$$\frac{dV(x)}{dt} = \frac{\partial V(x)}{\partial x} \frac{dx}{dt} = -\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 \leq 0 \quad (2)$$

が成り立つ。ここで、 $V(x)$ はエネルギー関数である。従って、この不等式を満たすような差分法は、時間の経過とともにエネルギーが減少することを保証する。

2節では、既に知られている2次の差分法を補間法と数値微分積分法の観点から分析し、4次の差分法を構成する手がかりを探る。3節では、2節の議論を踏まえて4次の差分法を実際に構成する。4節では、線形と非線形の力学系への応用を試み、標準的な計算法であるRunge-Kutta法との違いをみる。

2. 2次の差分法

ここでは、エネルギー不等式を満たす2次の差分法の分析を行う。刻み幅を h として、

$$t_n = nh, \quad x_n = x(t_n), \quad V_n = V(x_n) \quad (3)$$

とおく。このとき、微分方程式(1)に対する2次の差分法は次のような差分方程式で与えられる[9]。

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{h} = -\frac{V_{n+1} - V_n}{x_{n+1} - x_n} \quad (4)$$

この差分方程式で記述される離散時間系に対して、エネルギー不等式

$$\begin{aligned} \frac{V_{n+1} - V_n}{h} &= \frac{V_{n+1} - V_n}{x_{n+1} - x_n} \frac{x_{n+1} - x_n}{h} \\ &= -\left(\frac{x_{n+1} - x_n}{h}\right)^2 \leq 0 \end{aligned} \quad (5)$$

が成り立つ。即ち、連続時間系と同様に時間の経過とともにエネルギーは減少する。

打ち切り誤差を調べるために、 $n = 0$ のときの差分方程式(4)を次のように書く。

$$x_1 = x_0 - h \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} \quad (6)$$

この式は、(1)式の積分表示

$$x(t_1) = x(t_0) - \int_{t_0}^{t_1} V'(x(t)) dt \quad (7)$$

の差分化とみなすことができる。(7)式には、 x に関する微分と t に関する積分が含まれているので、両者の差分化により(6)式が導かれると考えられる。以下で、積分については台形公式(8)を考え、微分については1次関数によるLagrange補間[8]を考えることによって、2次の精度の差分法として(6)式が導かれることを示す。

台形公式によれば

$$\int_{t_0}^{t_1} V'(x(t))dt = \frac{h}{2} (V'_0 + V'_1) + O(h^3) \quad (8)$$

である。ここで、 $V'_n = V'(x_n)$ 。従って、微分係数の和 $V'_0 + V'_1$ は h について1次の精度で与えられればよい。そこで、関数 $V(x)$ に対して1次関数 $v(x)$ による Lagrange 補間を考える

$$v(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} V_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} V_1 \quad (9)$$

となる。もとの関数 $V(x)$ との関係は

$$V(x) = v(x) + c(x)(x - x_0)(x - x_1) \quad (10)$$

である(付録を参照)。ここで、 $c(x)$ は $O(h^0)$ のある関数である。これより、関数 $V(x)$ と補間関数 $v(x)$ の微分係数は

$$V'_0 = v'_0 + c_0 \cdot (x_0 - x_1) \quad (11)$$

$$V'_1 = v'_1 + c_1 \cdot (x_1 - x_0) \quad (12)$$

$$v'_0 = v'_1 = \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} \quad (13)$$

となる。ここで、 $v'_n = v'(x_n)$ 、 $c_n = c(x_n)$ 。従って、

$$\begin{aligned} V'_0 + V'_1 &= v'_0 + v'_1 + (c_1 - c_0)(x_1 - x_0) \\ &= 2 \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} + \dot{c}_0 \dot{x}_0 h^2 + \dots \end{aligned} \quad (14)$$

となる。ここで、ドットは時間 t に関する微分を表す。結局、(7)式は

$$x(t_1) = x(t_0) - h \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} + O(h^3) \quad (15)$$

のように評価されるので、差分法(4)は2次の計算法である。

3. 4次の差分法

ここでは、前節の分析をもとに4次の差分法を構成する。2次の差分法では、2点 t_{n+1} 、 t_n で考えたが、4次の差分法は3点 t_{n+1} 、 $t_{n+\frac{1}{2}}$ 、 t_n で考える。

まず、(1)式の積分表示である(7)式の積分に Simpson の公式[8]を適用すると

$$\int_{t_0}^{t_1} V'(x(t))dt = \frac{h}{6} \left(V'_0 + 4V'_{\frac{1}{2}} + V'_1 \right) + O(h^5) \quad (16)$$

が成り立つ。従って、微分係数の和 $V'_0 + 4V'_{\frac{1}{2}} + V'_1$ は h について3次の精度で与える必要がある。そこで、次のような2次関数 $v(x)$ による $V(x)$ の Lagrange 補間[8]を考える(付録を参照)。

$$\begin{aligned} v(x) &= \frac{(x - x_{\frac{1}{2}})(x - x_1)}{(x_0 - x_{\frac{1}{2}})(x_0 - x_1)} V_0 \\ &\quad + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_{\frac{1}{2}} - x_0)(x_{\frac{1}{2}} - x_1)} V_{\frac{1}{2}} \\ &\quad + \frac{(x - x_0)(x - x_{\frac{1}{2}})}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_{\frac{1}{2}})} V_1 \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} V(x) &= v(x) \\ &\quad + c(x)(x - x_0)(x - x_{\frac{1}{2}})(x - x_1) \end{aligned} \quad (18)$$

ここで、 $c(x)$ は $O(h^0)$ のある関数である。これより、関数 $V(x)$ と補間関数 $v(x)$ の微分係数は

$$V'_0 = v'_0 + c_0(x_0 - x_{\frac{1}{2}})(x_0 - x_1) \quad (19)$$

$$V'_{\frac{1}{2}} = v'_{\frac{1}{2}} + c_{\frac{1}{2}}(x_{\frac{1}{2}} - x_0)(x_{\frac{1}{2}} - x_1) \quad (20)$$

$$V'_1 = v'_1 + c_1(x_1 - x_{\frac{1}{2}})(x_1 - x_0) \quad (21)$$

$$v'_0 = \frac{V_{\frac{1}{2}} - V_0}{x_{\frac{1}{2}} - x_0} + \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} - \frac{V_1 - V_{\frac{1}{2}}}{x_1 - x_{\frac{1}{2}}} \quad (22)$$

$$v'_{\frac{1}{2}} = \frac{V_{\frac{1}{2}} - V_0}{x_{\frac{1}{2}} - x_0} - \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} + \frac{V_1 - V_{\frac{1}{2}}}{x_1 - x_{\frac{1}{2}}} \quad (23)$$

$$v'_1 = -\frac{V_{\frac{1}{2}} - V_0}{x_{\frac{1}{2}} - x_0} + \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} + \frac{V_1 - V_{\frac{1}{2}}}{x_1 - x_{\frac{1}{2}}} \quad (24)$$

となる。従って、

$$\begin{aligned} V'_0 + 4V'_{\frac{1}{2}} + V'_1 &= v'_0 + 4v'_{\frac{1}{2}} + v'_1 \\ &\quad + c_0(x_0 - x_{\frac{1}{2}})(x_0 - x_1) \\ &\quad + 4c_{\frac{1}{2}}(x_{\frac{1}{2}} - x_0)(x_{\frac{1}{2}} - x_1) \\ &\quad + c_1(x_1 - x_0)(x_1 - x_{\frac{1}{2}}) \\ &= 4 \frac{V_1 - V_{\frac{1}{2}}}{x_1 - x_{\frac{1}{2}}} + 4 \frac{V_{\frac{1}{2}} - V_0}{x_{\frac{1}{2}} - x_0} - 2 \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} \\ &\quad + \frac{1}{16} (c_0 \dot{x}_0^2 + 2\dot{c}_0 \dot{x}_0 \dot{x}_0 + 2\ddot{c}_0 \dot{x}_0^2) h^4 + \dots \end{aligned} \quad (25)$$

となる。従って、(7)式は

$$\begin{aligned} x(t_1) &= x(t_0) \\ &\quad - \frac{h}{3} \left(2 \frac{V_1 - V_{\frac{1}{2}}}{x_1 - x_{\frac{1}{2}}} + 2 \frac{V_{\frac{1}{2}} - V_0}{x_{\frac{1}{2}} - x_0} - \frac{V_1 - V_0}{x_1 - x_0} \right) \\ &\quad + O(h^5) \end{aligned} \quad (26)$$

のように評価される。(26)式より, x_n と $x_{n+\frac{1}{2}}$ が与えられたとき, 打ち切り誤差が 5 次, 即ち 4 次の精度で x_{n+1} を計算する差分方程式は

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{h} = -\frac{1}{3} \left(2 \frac{V_{n+1} - V_{n+\frac{1}{2}}}{x_{n+1} - x_{n+\frac{1}{2}}} + 2 \frac{V_{n+\frac{1}{2}} - V_n}{x_{n+\frac{1}{2}} - x_n} - \frac{V_{n+1} - V_n}{x_{n+1} - x_n} \right) \quad (27)$$

である。

(27)式を使うには, $x_{n+\frac{1}{2}}$ を知る必要があるが, いったいどのように計算したらよいのだろうか。また, エネルギー不等式は満たすことが出来るのだろうか。

2 次の差分法では恒等式

$$\frac{V_{n+1} - V_n}{h} = \frac{V_{n+1} - V_n}{x_{n+1} - x_n} \frac{x_{n+1} - x_n}{h} \quad (28)$$

を使ってエネルギー不等式を満たすことを示したが, ここでは次の恒等式にも注目する。

$$\begin{aligned} & \frac{V_{n+1} - V_n}{h} \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{V_{n+1} - V_{n+\frac{1}{2}}}{x_{n+1} - x_{n+\frac{1}{2}}} + \frac{V_{n+\frac{1}{2}} - V_n}{x_{n+\frac{1}{2}} - x_n} \right) \\ & \quad \times \frac{x_{n+1} - x_n}{h} \\ & + \frac{h}{2} \left(\frac{V_{n+1} - V_{n+\frac{1}{2}}}{x_{n+1} - x_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{V_{n+\frac{1}{2}} - V_n}{x_{n+\frac{1}{2}} - x_n} \right) \\ & \quad \times \frac{x_{n+1} - 2x_{n+\frac{1}{2}} + x_n}{h^2} \end{aligned} \quad (29)$$

(29) $\times \frac{4}{3} -$ (28) $\times \frac{1}{3}$ より(27)式と関係する恒等式

$$\begin{aligned} & \frac{V_{n+1} - V_n}{h} \\ &= \frac{1}{3} \left(2 \frac{V_{n+1} - V_{n+\frac{1}{2}}}{x_{n+1} - x_{n+\frac{1}{2}}} + 2 \frac{V_{n+\frac{1}{2}} - V_n}{x_{n+\frac{1}{2}} - x_n} \right. \\ & \quad \left. - \frac{V_{n+1} - V_n}{x_{n+1} - x_n} \right) \frac{x_{n+1} - x_n}{h} \\ & + \frac{2h}{3} \left(\frac{V_{n+1} - V_{n+\frac{1}{2}}}{x_{n+1} - x_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{V_{n+\frac{1}{2}} - V_n}{x_{n+\frac{1}{2}} - x_n} \right) \\ & \quad \times \frac{x_{n+1} - 2x_{n+\frac{1}{2}} + x_n}{h^2} \end{aligned} \quad (30)$$

を得る。もし, $x_{n+\frac{1}{2}}$ の計算を

$$\begin{aligned} & \frac{x_{n+1} - 2x_{n+\frac{1}{2}} + x_n}{h^2} \\ &= -\frac{1}{2h} \left(\frac{V_{n+1} - V_{n+\frac{1}{2}}}{x_{n+1} - x_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{V_{n+\frac{1}{2}} - V_n}{x_{n+\frac{1}{2}} - x_n} \right) \end{aligned} \quad (31)$$

によって行なうならば, (27), (30)および(31)より, エネルギー不等式

$$\begin{aligned} & \frac{V_{n+1} - V_n}{h} = -\left(\frac{x_{n+1} - x_n}{h} \right)^2 \\ & - \frac{4h^2}{3} \left(\frac{x_{n+1} - 2x_{n+\frac{1}{2}} + x_n}{h^2} \right)^2 \leq 0 \end{aligned} \quad (32)$$

が満たされる。

ところで, (16)式と(25)式によれば, $x_{n+\frac{1}{2}}$ は 4 次の誤差, 即ち 3 次の精度である必要がある。このことを確かめるために, $n = 0$ のときの(31)式を次のように書く。

$$\begin{aligned} x_{\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}(x_0 + x_1) \\ & - \frac{h}{4} \left(\frac{V_{\frac{1}{2}} - V_0}{x_{\frac{1}{2}} - x_0} - \frac{V_1 - V_{\frac{1}{2}}}{x_1 - x_{\frac{1}{2}}} \right) \end{aligned} \quad (33)$$

これは,

$$\begin{aligned} x(t_{\frac{1}{2}}) &= \frac{1}{2}[x(t_0) + x(t_1)] \\ & - \frac{1}{2} \left[\int_{t_0}^{t_{\frac{1}{2}}} V'(x(t)) dt - \int_{t_{\frac{1}{2}}}^{t_1} V'(x(t)) dt \right] \end{aligned} \quad (34)$$

の差分化と見なせる。Simpson の公式(16)と同様に, 関数 $V'(x(t))$ を 3 点を通る 2 次曲線で近似すると

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^{t_{\frac{1}{2}}} V'(x(t)) dt - \int_{t_{\frac{1}{2}}}^{t_1} V'(x(t)) dt \\ &= \frac{h}{4}(V'_0 - V'_1) + O(h^4) \end{aligned} \quad (35)$$

となる。さらに, 補間公式(17), (18)より

$$\begin{aligned} V'_0 - V'_1 &= v'_0 - v'_1 \\ & \quad + c_0(x_0 - x_{\frac{1}{2}})(x_0 - x_1) \\ & \quad - c_1(x_1 - x_0)(x_1 - x_{\frac{1}{2}}) \\ &= 2 \frac{V_{\frac{1}{2}} - V_0}{x_{\frac{1}{2}} - x_0} - 2 \frac{V_1 - V_{\frac{1}{2}}}{x_1 - x_{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} c_0 x_0^2 h^3 + \dots \end{aligned} \quad (36)$$

となるので, $x_{n+\frac{1}{2}}$ は 3 次の精度で計算されることがわかる。

このように, 差分方程式(27), (31)はエネルギー不等式を満たす 4 次法の差分法であることが示された。これらの式を見てわかるように, 1 変数の勾配系であっても数値計算を行うには連立方程式を解く必要がある。

4. 応用例

ここでは、前節で提案した差分法を線形と非線形の2種類の系に応用し、Runge-Kutta法との比較も行う。

4.1 線形の力学系

まず、次のような線形の力学系への応用を考える。

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 \quad (37)$$

$$\frac{dx}{dt} = -x, \quad x(t) = x(0)e^{-t} \quad (38)$$

厳密解から、 x_n と x_{n+1} の厳密な関係は

$$x_{n+1} = \lambda(h)x_n, \quad \lambda(h) = e^{-h} \quad (39)$$

で与えられる。 $h > 0$ に対して、

$$0 < \lambda(h) < 1 \quad (40)$$

なので、数列 $\{x_n\}$ は等比数列として、任意の初期値に対して $n \rightarrow \infty$ でエネルギーが最小となる点 $x = 0$ に収束する。この系に対して、比較のため2次の差分法と4次の差分法、両方について考える。

エネルギー不等式を満たす2次の差分法(4)は

$$x_{n+1} = x_n - \frac{h}{2}(x_n + x_{n+1}) \quad (41)$$

で与えられる。これは、次のように書ける。

$$x_{n+1} = \lambda(h)x_n, \quad \lambda(h) = \frac{1 - \frac{h}{2}}{1 + \frac{h}{2}} \quad (42)$$

この場合、

$$\left. \begin{aligned} 0 < \lambda(h) < 1 & \quad (0 < h < 2) \\ \lambda(h) = 0 & \quad (h = 2) \\ -1 < \lambda(h) < 0 & \quad (2 < h) \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

なので、どのような h に対しても、数値解はエネルギーが最小となる点 $x = 0$ に向かっていくが、 $h > 2$ のときには振動しながら減衰し単調には減衰しない。一方、2次のRunge-Kutta法は

$$\left. \begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 &= -hx_n, \quad k_2 = -h(x_n + k_1) \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

で与えられる。この式は

$$x_{n+1} = \lambda(h)x_n, \quad \lambda(h) = 1 - h + \frac{h^2}{2} \quad (45)$$

のように書けるが、

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} < \lambda(h) < 1 & \quad (0 < h < 2) \\ \lambda(h) = 1 & \quad (h = 2) \\ 1 < \lambda(h) & \quad (2 < h) \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

なので、 $h > 2$ のときには、収束せず発散してしまう。

エネルギー不等式を満たす4次の差分法(27)、(31)は

$$x_{n+1} = x_n - \frac{h}{6}(x_n + 4x_{n+\frac{1}{2}} + x_{n+1}) \quad (47)$$

$$x_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_n + x_{n+1}) - \frac{h}{8}(x_n - x_{n+1}) \quad (48)$$

で与えられる。これらは次のように書ける。

$$x_{n+1} = \lambda(h)x_n, \quad \lambda(h) = \frac{1 - \frac{h}{2} + \frac{h^2}{12}}{1 + \frac{h}{2} + \frac{h^2}{12}} \quad (49)$$

この場合、 $h > 0$ に対して、

$$\frac{2 - \sqrt{3}}{2 + \sqrt{3}} = 0.07179 \dots \leq \lambda(h) < 1 \quad (50)$$

なので、 h の大きさによらず単調に数値解はエネルギーが最小となる点 $x = 0$ に収束する。一方、4次のRunge-Kutta法は

$$\left. \begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 &= -hx_n, \quad k_2 = -h(x_n + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 &= -h(x_n + \frac{k_2}{2}), \quad k_4 = -h(x_n + k_3) \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

で与えられる。この式は

$$\left. \begin{aligned} x_{n+1} &= \lambda(h)x_n \\ \lambda(h) &= 1 - h + \frac{h^2}{2} - \frac{h^3}{6} + \frac{h^4}{24} \end{aligned} \right\} \quad (52)$$

のように書けるが、

$$\left. \begin{aligned} 0.27039 \dots \leq \lambda(h) < 1 & \quad (0 < h < h^*) \\ \lambda(h) = 1 & \quad (h = h^*) \\ 1 < \lambda(h) & \quad (h^* < h) \\ h^* &= 2.7852 \dots \end{aligned} \right\} \quad (53)$$

なので、 $h > 2.7852 \dots$ のときには、収束せず発散してしまう。

このように、エネルギー不等式を満たす4次の差分法はRunge-Kutta法のように解の発散(不安定)を引き起こすこともなく、またエネルギー不等式を満たす2次の差分法のように振動を引き起こすこともない優れた計算法であることがわかる。

4.2 非線形の力学系

の場合の結果を図1 および図2 に示す.

非線形の力学系として, logistic 方程式[10]

$$V(x) = \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{2}x^2 \quad (54)$$

$$\frac{dx}{dt} = x(1-x) \quad (55)$$

$$x(t) = \frac{x(0)}{x(0) + (1-x(0))e^{-t}} \quad (56)$$

を考える. 厳密解(56)は, $0 < x(0) < 1$ に対して, $t \rightarrow \infty$ でエネルギーの極小となる点 $x=1$ に向かういわゆる S 字状曲線を描く. この系に対して, エネルギー不等式を満たす 4 次の差分法と 4 次の Runge-Kutta 法を実際の数值計算を通じて比較する.

エネルギー不等式を満たす 4 次の差分法(27), (31) は次のようになる.

$$\begin{aligned} x_{n+1} = x_n - \frac{h}{18} [& 2(x_n^2 + 4x_{n+\frac{1}{2}}^2 + x_{n+1}^2) \\ & + 2x_{n+1}x_{n+\frac{1}{2}} + 2x_{n+\frac{1}{2}}x_n - x_{n+1}x_n) \\ & - 3(x_n + 4x_{n+\frac{1}{2}} + x_{n+1})] \end{aligned} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} x_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_n + x_{n+1}) \\ - \frac{h}{24}(x_n - x_{n+1}) \\ \times [2(x_n + x_{n+\frac{1}{2}} + x_{n+1}) - 3] \end{aligned} \quad (58)$$

これらは $x_{n+\frac{1}{2}}$ および x_{n+1} に関する連立 2 次方程式になっているが, 数值計算では Newton 法[8]を用いて解いた. 一方, 4 次の Runge Kutta 法は

$$\left. \begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 &= hx_n(1-x_n) \\ k_2 &= h(x_n + \frac{k_1}{2})(1-x_n - \frac{k_1}{2}) \\ k_3 &= h(x_n + \frac{k_2}{2})(1-x_n - \frac{k_2}{2}) \\ k_4 &= h(x_n + k_3)(1-x_n - k_3) \end{aligned} \right\} \quad (59)$$

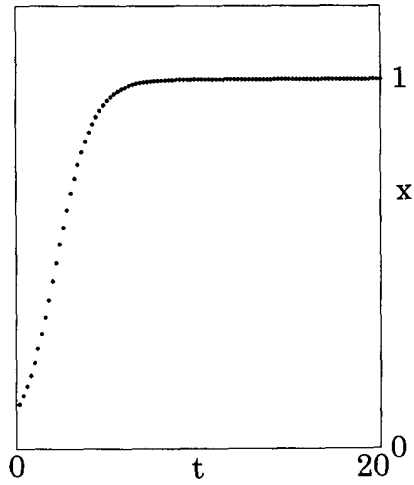
で与えられる.

数值計算例として, 初期値を

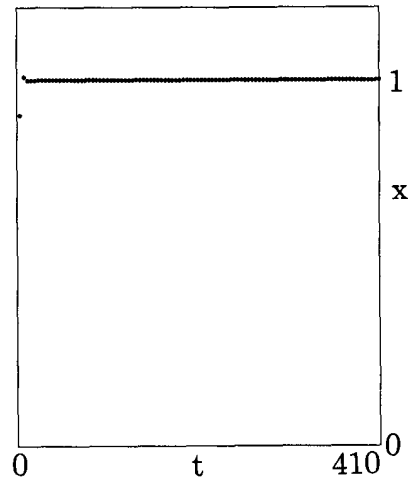
$$x_0 = 0.1 \quad (60)$$

にとり, 刻み幅が

$$h = 0.2 \sim 4.1 \quad (61)$$

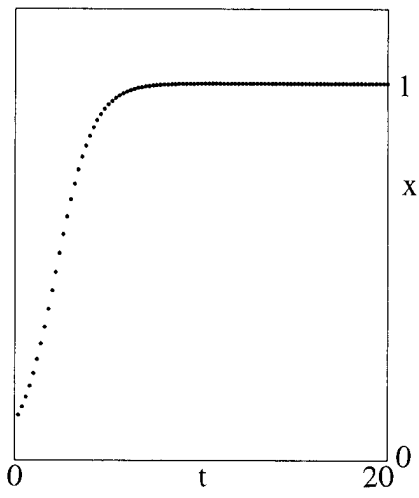


(a) $x_0 = 0.1, h = 0.2$

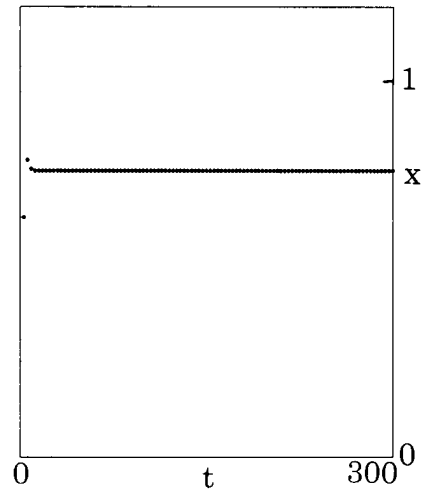


(b) $x_0 = 0.1, h = 4.1$

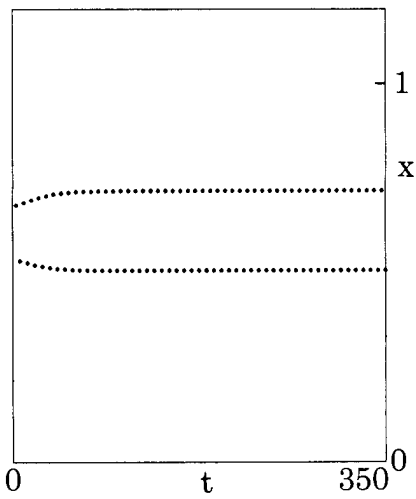
図1 エネルギー不等式を満たす 4 次の差分法



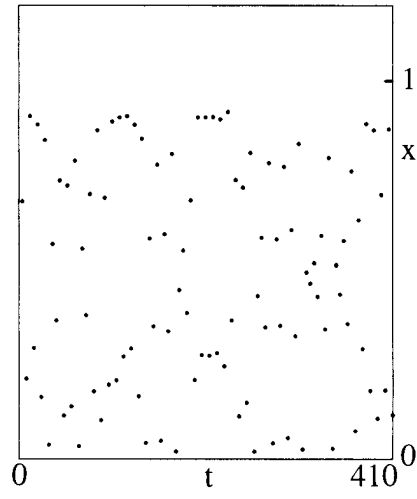
(a) $x_0 = 0.1, h = 0.2$



(b) $x_0 = 0.1, h = 3.0$



(c) $x_0 = 0.1, h = 3.5$



(d) $x_0 = 0.1, h = 4.1$

図2 4次のRunge-Kutta法

$h=0.2$ のような刻み幅が小さいとき, エネルギー不等式を満たす差分法も Runge-Kutta 法も数値解はほとんど同じで, S 字曲線を描いてエネルギー関数が極小となる点 $x=1$ に達する. 一方, 刻み幅が大きいと両者には大きな違いが見られる. 図 1 (b) のように, エネルギー不等式を満たす差分法では, ほぼ平衡に達する時間, 即ち 2 ステップぐらいで $x=1$ 付近に達する. しかし, Runge-Kutta 法では, 図 2 (b) のように, $x=1$ が不安定化し, 別の平衡点が現われその点に収束するような数値解がある. 図 2 (c) では, 固定点ではなく, 2 周期解に収束するような数値解も見られる. また, 図 2 (d) では, 固定点にも周期解にも収束せず, いろいろな値を取り続けるいわゆるカオス解となる数値解が見られる. このように, 本来の力学系の解軌道とはまったく異なる数値解が現われてしまう.

5. おわりに

本研究では, 1 変数の勾配系に対してエネルギー不等式を満たす 4 次の差分法を構成し, その応用を試みることににより, よく使われている Runge-Kutta 法に比べて優れている点を示した. 刻み幅を十分小さくすればどちらの方法でも数値解に差はないが, 大きく取った場合, Runge-Kutta 法ではカオス解のような見かけの解が現われるといった顕著な違いが見られ, 定性的にはエネルギー関数を考慮することが重要であるといえる.

エネルギー不等式を満たす差分法は, 非線形の系では陰解法となるので, 刻み幅が大きく取れるからといっても必ずしも効率のよい方法とは言えない. 従って, 陽解法があれば望ましい. 定量的にももっと精度のよい差分法, 即ち 4 次より高次の差分法があれば, 長時間の計算にはより望ましい. これらの問題は今後の課題である. 尚, 多変数の力学系や保存力学系に対しても 4 次の差分法を構成できるが, これらの問題については別のところで議論することにする.

付録

ここでは, 関数 $V(x)$ を互いに異なる $m+1$ 個の点 x_0, x_1, \dots, x_m で関数値が一致する m 次多項式 $v(x)$ で補間したときの誤差を議論する [8]. $\{x_0, x_1, \dots, x_m\}$ の最小値および最大値をそれぞれ α および β とし, $V(x)$ は区間 $[\alpha, \beta]$ で $m+1$ 回連続微分可能とすると,

$$V(x) = v(x) + \frac{V^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!} \pi(x) \quad (62)$$

$$(\alpha < \xi < \beta)$$

である. ここで,

$$\pi(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_m) \quad (63)$$

ξ は x の陰関数と見なせるので

$$c(x) = \frac{V^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!} \quad (64)$$

と置く. いま,

$$x_j = x(h \frac{j}{m}) \quad (j = 0, 1, \dots, m) \quad (65)$$

とすると

$$x_j, \alpha, \beta, \xi \rightarrow x_0 \quad (h \rightarrow 0) \quad (66)$$

なので

$$c(x) \rightarrow \frac{V^{(m+1)}(x_0)}{(m+1)!} \quad (h \rightarrow 0) \quad (67)$$

従って, 一般には

$$c(x) = O(h^0) \quad (68)$$

となる.

References

- [1] 石森勇次: 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, 富山県立大学紀要, 第 1 卷 (平成 3 年) pp.47-50.
- [2] 石森勇次: 4 次の非線形力学系に対するエネルギーの保存する陽的差分近似法, 日本応用数理学会論文誌, Vol.3, No.3, 1993年, pp.177-197.
- [3] 石森勇次: エネルギー保存則を満たす陽的差分法, 京大数理解析研究所講究録, 868 (1994) 39-51.
- [4] Y. Ishimori: Explicit energy conservative difference schemes for nonlinear dynamical systems with at most quartic potentials, Phys. Lett. A, 191 (1994) 373-378.

- [5] 石森勇次：エネルギー不等式を満たす陽的差分法, 京大数理解析研究所講究録, 889 (1994) 37-48.
- [6] Y. Ishimori : Explicit Energy-Conserving Difference Methods for Hamiltonian Dynamics with Certain Types of Potential, Bull. Toyama Pref. Univ., Vol.5 (1995) 93-97.
- [7] 石森勇次：シフト演算子の対称式とエネルギーの保存する差分法, 富山県立大学紀要, 第6巻 (平成8年) pp.8-14.
- [8] 長嶋秀世：数値計算法, 槇書店, 1994年.
- [9] D. A. French and J. W. Schaeffer: Continuous Finite Element Methods Which Preserve Energy Properties for Nonlinear Problems, Appl. Math. Comput., 39 (1990) 271-295.
- [10] 山口昌哉：非線形現象の数学, 朝倉書店, 1975年.