

多変数の勾配系に対する 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)

概要

n 変数の勾配系に対して、エネルギー関数の値が時間の経過とともに減少することを保証するような4次の差分法を構成する。3変数の可積分勾配系に対してこの差分法を応用した結果は、4次のRunge-Kutta法より誤差が小さく、比較的大きな刻み幅でも数値解が厳密解と大きく異なることを示している。

キーワード：差分法、4次の精度、勾配系、非線形微分方程式

1 はじめに

エネルギー関数の性質を満たす差分法を使った数値計算は、伝統的な4次のRunge-Kutta法[1]等で見られる打ち切り誤差による見かけの励起や減衰を引き起こさない点で優れている。勾配系のような散逸力学系では、エネルギー関数の性質とは、エネルギー関数の値が時間発展とともに減少することである。この性質を保証するような差分法、即ち、エネルギー不等式を満たす4次の差分法は、1変数の勾配系に対して既に著者が以前の論文[2]で提案している。

本研究では、多変数の勾配系でもエネルギー不等式を満たす4次の差分法が構成できることを示す。扱った系は n 変数の勾配系

$$\frac{dx_i}{dt} = -\frac{\partial V(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i} \quad (i=1, \dots, n) \quad (1)$$

である。ここで、 $V(x_1, \dots, x_n)$ はエネルギー関数である。この系に対して、不等式

$$\frac{dV}{dt} = \sum_{i=1}^n V_i \frac{dx_i}{dt} = -\sum_{i=1}^n \left(\frac{dx_i}{dt}\right)^2 \leq 0 \quad (2)$$

が成り立つ。ここで、

$$V_i = \frac{\partial V}{\partial x_i} \quad (3)$$

差分法を構成する際、普通は微分方程式(1)の差分化を行うことになるが、精度の面から議論するには、むしろ(1)式の積分表示

$$x_i(t^{k+1}) = x_i(t^k) - \int_{t^k}^{t^{k+1}} V_i(x_1(t), \dots, x_n(t)) dt \quad (4)$$

の差分化を考えた方がよい。このとき、(2)式の差分化も考えながら構成することになる。

2節では、まず2次の差分法を構成する。その際、多変数の平均化演算子が利用される。3節では、2次の差分法を使って4次の差分法を構成する。4節では、3変数の可積分な非線形勾配系への応用を試み、2次の差分法やRunge-Kutta法との違いをみる。

2 2次の差分法

2.1 差分演算子

ここでは、エネルギー不等式を満たす2次の差分法を構成する。刻み幅を h として、

$$t^k = kh, \quad x_i^k = x_i(t^k), \quad V^k = V(x_1^k, \dots, x_n^k) \quad (5)$$

とおく。後の議論のために、いくつかの差分に関する演算子を導入する。まず、シフト演算子 E_i^a を次のように定義する。

$$\begin{aligned} E_i^a F(x_1^k, \dots, x_{i-1}^k, x_i^k, x_{i+1}^k, \dots, x_n^k) \\ = F(x_1^k, \dots, x_{i-1}^k, x_i^{k+a}, x_{i+1}^k, \dots, x_n^k) \end{aligned} \quad (6)$$

このシフト演算子を使って、差分商演算子

$$\delta_i^{a,h} F(\dots, x_i^k, \dots) = \frac{(E_i^a - E_i^h)F}{(E_i^a - E_i^h)x_i^k} \quad (7)$$

および、平均化演算子

$$\begin{aligned} \overline{\mu_i^{a,b} F} &= \mu_1^{a,b}, \dots, \mu_{i-1}, \mu_{i+1}, \dots, \mu_n F \\ &= M^{a,b}(E_1, \dots, E_{i-1}, E_{i+1}, \dots, E_n) F \end{aligned} \quad (8)$$

を定義する。ここで、

$$M^{a,b}(E_1, \dots, E_{i-1}, E_{i+1}, \dots, E_n) = \frac{1}{n!} \sum_{j=1}^n \text{per} \begin{pmatrix} E_1^a & \dots & E_1^a & E_1^b & \dots & E_1^b \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ E_{i-1}^a & \dots & E_{i-1}^a & E_{i-1}^b & \dots & E_{i-1}^b \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ E_{i+1}^a & \dots & E_{i+1}^a & E_{i+1}^b & \dots & E_{i+1}^b \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ E_n^a & \dots & E_n^a & E_n^b & \dots & E_n^b \end{pmatrix} \quad (9)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{n-j} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{j-1}$

であり、per は行列のパーマネントを表す。例えば、

$$M^{a,b}(E_1) = \frac{1}{2}(E_1^a + E_1^b) \quad (10)$$

$$\begin{aligned} M^{a,b}(E_1, E_2) &= \frac{1}{6}(2E_1^a E_2^a + E_1^a E_2^b + E_1^b E_2^a + 2E_1^b E_2^b) \end{aligned} \quad (11)$$

等となる。

2.2 2次の差分スキーム

上記の演算子を使って、2次の差分法即ち積分表示(4)式を差分化した式は次のように与えられる。

$$x_i^{k+1} = x_i^k - h \delta_n^{1,0} \mu_i^{1,0} V^k \quad (i=1, \dots, n) \quad (12)$$

この差分スキームの精度が2次であることを確かめる。精度とは差分スキーム(12)の解 $x_i^k (i=1, \dots, n)$ と微分方程式の解 $x_i(t^k) (i=1, \dots, n)$ の違いがどの程度であるかということである。いま、 $x_i(t^k) = x_i^k$ として、 $x_i(t^{k+1})$ と x_i^{k+1} との違いを考える。この違いは、正確な展開式

$$\begin{aligned} x_i(t^{k+1}) &= x_i^k - h V_i^k \\ &\quad + \frac{h^2}{2} \sum_{j=1}^n V_{ij}^k V_j^k + O(h^3) \end{aligned} \quad (13)$$

を差分スキーム(12)の x_i^{k+1} に代入して、 h の何次のべきまで等式が成り立つのかを見ればよい。差分スキームは x_1, \dots, x_n を全て対等に扱っているので(12)式で $i=n$ の式を調べれば十分である。

先ず差分演算子

$$\Delta_i = E_i^1 - 1 \quad (14)$$

を導入し、

$$\begin{aligned} \Delta_i F(\dots, x_i^k, \dots) &= F(\dots, x_i^{k-1} - x_i^k + x_i^k, \dots) - F(\dots, x_i^k, \dots) \\ &= (x_i^{k+1} - x_i^k) F_i + O(h^2) \\ &= -h V_i^k F_i + O(h^2) \end{aligned} \quad (15)$$

に注意する。一方、差分商演算子 $\delta_n^{1,0}$ と平均化演算子 $\mu_n^{1,0}$ に対して、展開式

$$\begin{aligned} \delta_n^{1,0} F(\dots, x_n^k) &= \frac{F(\dots, \Delta_n x_n^k + x_n^k) - F(\dots, x_n^k)}{\Delta_n x_n^k} \\ &= F_n + \frac{1}{2} \Delta_n F_n + O(h^2) \end{aligned} \quad (16)$$

および

$$\begin{aligned} \mu_n^{1,0} &= \frac{1}{n!} \sum_{j=1}^n \text{per} \begin{pmatrix} 1 + \Delta_1 & \dots & 1 + \Delta_1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 + \Delta_{n-1} & \dots & 1 + \Delta_{n-1} & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix} \\ &= 1 + \frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2 + \dots + \Delta_{n-1}) + O(h^2) \end{aligned} \quad (17)$$

が成り立つので

$$\begin{aligned} x_n^{k+1} &= x_n^k - h \delta_n^{1,0} \mu_n^{1,0} V^k \\ &= x_n^k - h \left\{ 1 + \frac{1}{2} (\Delta_1 + \dots + \Delta_{n-1}) \right\} \\ &\quad \times \left(V_n^k + \frac{1}{2} \Delta_n V_n^k \right) + O(h^3) \\ &= x_n^k - h V_n^k - \frac{h}{2} (\Delta_1 + \dots + \Delta_n) V_n^k + O(h^3) \\ &= x_n^k - h V_n^k + \frac{h^2}{2} \sum_{i=1}^n V_{ni}^k V_i^k + O(h^3) \end{aligned} \quad (18)$$

となる。これは $i=n$ のときの正確な展開式(13)と2次のべきまで一致している。従って、差分スキーム(12)は2次の精度を持つ計算法である。

2.3 エネルギー不等式

エネルギー不等式を導くために、恒等式

$$V^{k+1} - V^k = \sum_{i=1}^n (\delta_i^{1,0} \mu_i^{1,0} V^k) (x_i^{k+1} - x_i^k) \quad (19)$$

が成り立つことを示す。行列のパーマネントの性質に注意して、以下のように式の変形を行えばよい。列ベクトル

$$E^a = \begin{pmatrix} E_1^a \\ E_2^a \\ \vdots \\ E_n^a \end{pmatrix} \quad (20)$$

を導入すると,

$$\begin{aligned} V^{k+1} - V^k &= (E_1^1 \cdots E_n^1 - E_1^0 \cdots E_n^0) V^k \\ &= \frac{1}{n!} \left(\text{per} \underbrace{[E^1 \cdots E^1]}_n - \text{per} \underbrace{[E^0 \cdots E^0]}_n \right) V^k \\ &= \frac{1}{n!} \left(\text{per} \underbrace{[E^1 \cdots E^1]}_n - \text{per} \underbrace{[E^0 E^1 \cdots E^1]}_{n-1} \right. \\ &\quad \left. + \text{per} \underbrace{[E^0 E^1 \cdots E^1]}_{n-1} - \text{per} \underbrace{[E^0 E^0 E^1 \cdots E^1]}_{n-2} \right. \\ &\quad \left. + \cdots \right. \\ &\quad \left. + \text{per} \underbrace{[E^0 \cdots E^0 E^1]}_{n-1} - \text{per} \underbrace{[E^0 \cdots E^0]}_n \right) V^k \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{j=1}^n \text{per} \underbrace{[E^1 - E^0 E^1 \cdots E^1 E^0 \cdots E^0]}_{n-j} \underbrace{[E^0 \cdots E^0]}_{j-1} \\ &= \sum_{i=1}^n (E_i^1 - E_i^0) M^{1,0}(E_1, \dots, E_{i-1}, E_{i+1}, \dots, E_n) V^k \\ &= \sum_{i=1}^n (\delta_i^{1,0} \mu_i^{1,0} V^k) (x_i^{k+1} - x_i^k) \quad (21) \end{aligned}$$

となり, 恒等式(19)が成り立つ。従って, 差分スキーム(12)をこの恒等式に代入するとエネルギー不等式

$$V^{k+1} - V^k = -\frac{1}{h} \sum_{i=1}^n (x_i^{k+1} - x_i^k)^2 \leq 0 \quad (22)$$

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。

3 4 次 の 差 分 法

3.1 差分スキーム

ここでは, 前節で構成した 2 次 の 差 分 法 を も と に 4 次 の 差 分 法 を 構 成 す る。2 次 の 差 分 法 (12) は 結 局 勾 配 系 の 積 分 表 示 (4) の 積 分 を 2 次 の 精 度 の 数 値 積 分 法 で 近 似 し た も の に な っ て い る。4 次 の 精 度 の ス キ ー ム を 構 成 す る と い う こ と は, この 積 分 を 4 次 の 精 度 の 積 分 法 で 近 似 す る こ と に な る。と ころ で, 数 値 積 分 法 の 1 つ で あ る Romberg 法 [1] に よ れ ば, 2 次 の 精 度 の 数 値 積 分 法 で あ る 台 形 公 式 を 組 み 合 わ せ れ ば 高 次 の 精 度 の 計 算 法 を 構 成 で き る こ と が 知 ら れ て い る。4 次 の 精 度 の 場 合, 3 点 $t^k, t^{k+\frac{1}{2}}, t^{k+1}$ を 考 え, 各 2 点 間

$[t^{k+\frac{1}{2}}, t^{k+1}]$ の 2 次 の 数 値 積 分 を $I_2^{a,b}$ と す る と, 2 点 間 $[t^k, t^{k+1}]$ の 4 次 の 数 値 積 分 $I_4^{1,0}$ は

$$I_4^{1,0} = \frac{1}{3} \left\{ 4 \left(I_2^{1,\frac{1}{2}} + I_2^{\frac{1}{2},0} \right) - I_2^{1,0} \right\} \quad (23)$$

で 与 え ら れ る。証 明 は 後 で す る が, この 関 係 式 を そ の ま ま こ こ で も 成 り 立 つ と し て 採 用 す る こ と に す る。こ の と き, $x_i^{k+\frac{1}{2}} (i=1, \dots, n)$ が 未 定 と な る が, こ れ は

$$\begin{aligned} x_i(t^{k+\frac{1}{2}}) &= \frac{1}{2} \{ x_i(t^k) + x_i(t^{k+1}) \} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \int_{t^k}^{t^{k+\frac{1}{2}}} V_i(x_1(t), \dots, x_n(t)) dt \right. \\ &\quad \left. + \int_{t^{k+\frac{1}{2}}}^{t^{k+1}} V_i(x_1(t), \dots, x_n(t)) dt \right\} \quad (24) \end{aligned}$$

に お い て, 積 分 を 2 次 の 差 分 法 で 近 似 し た 差 分 ス キ ー ム を 使 う こ と に す る。以 上 の 点 を 考 慮 し て 差 分 ス キ ー ム は 次 式 の よ う に な る。

$$\begin{aligned} x_i^{k+1} &= x_i^k \\ &= \frac{h}{3} \left(2\delta_i^{1,\frac{1}{2}} \mu_i^{1,\frac{1}{2}} + 2\delta_i^{\frac{1}{2},0} \mu_i^{\frac{1}{2},0} - \delta_i^{1,0} \mu_i^{1,0} \right) V^k \quad (25) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_i^{k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} (x_i^k + x_i^{k+1}) \\ &= \frac{h}{4} \left(\delta_i^{1,\frac{1}{2}} \mu_i^{1,\frac{1}{2}} - \delta_i^{\frac{1}{2},0} \mu_i^{\frac{1}{2},0} \right) V^k \quad (26) \end{aligned}$$

3.2 精 度

こ の 差 分 ス キ ー ム の 精 度 が 4 次 で あ る こ と を 確 か め る。正 確 な 展 開 式 は

$$\begin{aligned} x_i(t^{k+a}) &= x_i^k - ahV_i^k + \frac{a^2 h^2}{2} \sum_{j=1}^n V_{ij}^k V_j^k \\ &\quad - \frac{a^3 h^3}{6} \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \left(V_{ij}^k V_j^k V_l^k + V_{ij}^k V_{jl}^k V_l^k \right) \\ &\quad + \frac{a^4 h^4}{24} \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \sum_{m=1}^n \left(V_{ijm}^k V_j^k V_l^k V_m^k \right. \\ &\quad \left. + 3V_{ijl}^k V_{jm}^k V_l^k V_m^k + V_{ilm}^k V_{ij}^k V_l^k V_m^k + \right. \\ &\quad \left. V_{ij}^k V_{jl}^k V_{lm}^k V_m^k \right) + O(h^5) \quad (27) \end{aligned}$$

で あ る。2 次 の 差 分 法 と 同 様 に 差 分 ス キ ー ム (25) 式, (26) 式 で $i=n$ の と き を 確 か め る。

先 ず, 差 分 演 算 子

$$\Delta_i^a = E_i^a - 1 \quad (28)$$

に 対 し て

$$\begin{aligned}\Delta_i^a F &= (\Delta_i^a x_i^k) F_i + \frac{1}{2} (\Delta_i^a x_i^k)^2 F_{ii} \\ &+ \frac{1}{6} (\Delta_i^a x_i^k)^3 F_{iii} \\ &+ \frac{1}{24} (\Delta_i^a x_i^k)^4 F_{iiii} + O(h^5)\end{aligned}\quad (29)$$

が成り立つことに注意する。

一方、差分商演算子 $\delta_n^{a,b}$ に対して

$$\begin{aligned}\delta_n^{a,b} \mu_n^{a,b} V^k &= \frac{\Delta_n^a \mu_n^{a,b} V^k - \Delta_n^b \mu_n^{a,b} V^k}{\Delta_n^a x_n^k - \Delta_n^b x_n^k} \\ &= \mu_n^{a,b} V_n^k + \frac{1}{2} (\Delta_n^a x_n^k + \Delta_n^b x_n^k) \mu_n^{a,b} V_{nn}^k \\ &+ \frac{1}{6} \{ (\Delta_n^a x_n^k)^2 + (\Delta_n^a x_n^k) (\Delta_n^b x_n^k) \\ &\quad + (\Delta_n^b x_n^k)^2 \} \mu_n^{a,b} V_{nnn}^k \\ &+ \frac{1}{24} (\Delta_n^a x_n^k + \Delta_n^b x_n^k) \{ (\Delta_n^a x_n^k)^2 + (\Delta_n^b x_n^k)^2 \} \\ &\quad \times \mu_n^{a,b} V_{nnnn}^k + O(h^4)\end{aligned}\quad (30)$$

のような展開式が成り立つ。また、平均化演算子 $\mu_n^{a,b}$ に対しては次のような展開式が成り立つ。

$$\begin{aligned}\mu_n^{a,b} &= \frac{1}{n!} \sum_{i=0}^n \\ &\times \text{per} \left\{ \begin{array}{c} 1 + \Delta_1^a \cdots 1 + \Delta_{n-1}^a \\ \vdots \\ 1 + \Delta_1^a \cdots 1 + \Delta_{n-1}^a \\ 1 + \Delta_1^b \cdots 1 + \Delta_{n-1}^b \\ \vdots \\ 1 + \Delta_1^b \cdots 1 + \Delta_{n-1}^b \end{array} \right\} \begin{array}{l} i \\ \\ \\ n-1-i \end{array} \\ &= 1 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n-1} (\Delta_j^a + \Delta_j^b) \\ &+ \frac{1}{6} \sum_{j=1}^{n-2} \sum_{l=j+1}^{n-1} (2\Delta_j^a \Delta_l^a + \Delta_j^a \Delta_l^b \\ &\quad + \Delta_j^b \Delta_l^a + 2\Delta_j^b \Delta_l^b) \\ &+ \frac{1}{12} \sum_{j=1}^{n-3} \sum_{l=j+1}^{n-2} \sum_{m=l+1}^{n-1} (3\Delta_j^a \Delta_l^a \Delta_m^a + \Delta_j^a \Delta_l^a \Delta_m^b \\ &\quad + \Delta_j^a \Delta_l^b \Delta_m^a + \Delta_j^b \Delta_l^a \Delta_m^a + \Delta_j^a \Delta_l^b \Delta_m^b \\ &\quad + \Delta_j^b \Delta_l^a \Delta_m^b + \Delta_j^b \Delta_l^a \Delta_m^a + 3\Delta_j^b \Delta_l^b \Delta_m^b) \\ &+ O(h^4)\end{aligned}\quad (31)$$

これらの展開式(27), (29), (30), (31)を $i=n$ のときの差分スキーム(25)式, (26)式の右辺に代入して整理すると, x_n^{k+1} を決定する式(25)については h^4 の項まで正確な展開式と一致する。一方, $x_n^{k+\frac{1}{2}}$ を決定する式(26)については h^3 の項までである。 $x_n^{k+\frac{1}{2}}$ は補助

変数であり, x_n^{k+1} を決めるとき3次の精度を持つばよいので結局このスキームは4次の精度を持つ計算法である。

3.3 エネルギー不等式

2次の差分法では, エネルギー不等式が成り立つことを示すのに恒等式(19)を使った。2点間 $[t^k, t^{k+1}]$ を2つの区間 $[t^k, t^{k+\frac{1}{2}}]$, $[t^{k+\frac{1}{2}}, t^k]$ に分けて変形すると

$$\begin{aligned}V^{k+1} - V^k &= (V^{k+1} - V^{k+\frac{1}{2}}) + (V^{k+\frac{1}{2}} - V^k) \\ &= \sum_{i=1}^n \left\{ (\delta_i^{1,\frac{1}{2}} \mu_i^{1,\frac{1}{2}} V^k) (x_i^{k+1} - x_i^{k+\frac{1}{2}}) \right. \\ &\quad \left. + (\delta_i^{\frac{1}{2},0} \mu_i^{\frac{1}{2},0} V^k) (x_i^{k+\frac{1}{2}} - x_i^k) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left\{ (\delta_i^{1,\frac{1}{2}} \mu_i^{1,\frac{1}{2}} + \delta_i^{\frac{1}{2},0} \mu_i^{\frac{1}{2},0}) V^k \right\} \\ &\quad \times (x_i^{k+1} - x_i^k) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left\{ (\delta_i^{1,\frac{1}{2}} \mu_i^{1,\frac{1}{2}} - \delta_i^{\frac{1}{2},0} \mu_i^{\frac{1}{2},0}) V^k \right\} \\ &\quad \times (x_i^{k+1} - 2x_i^{k+\frac{1}{2}} + x_i^k)\end{aligned}\quad (32)$$

という恒等式が得られるが, 恒等式(32)と(19)をRomberg法と同じ比率で結びつける, 即ち(32) $\times \frac{4}{3} - (19) \times \frac{1}{3}$ より恒等式

$$\begin{aligned}V^{k+1} - V^k &= \frac{1}{3} \sum_{i=1}^n \left\{ (2\delta_i^{1,\frac{1}{2}} \mu_i^{1,\frac{1}{2}} + 2\delta_i^{\frac{1}{2},0} \mu_i^{\frac{1}{2},0} - \delta_i^{1,0} \mu_i^{1,0}) V^k \right\} \\ &\quad \times (x_i^{k+1} - x_i^k) \\ &+ \frac{2}{3} \sum_{i=1}^n \left\{ (\delta_i^{1,\frac{1}{2}} \mu_i^{1,\frac{1}{2}} - \delta_i^{\frac{1}{2},0} \mu_i^{\frac{1}{2},0}) V^k \right\} \\ &\quad \times (x_i^{k+1} - 2x_i^{k+\frac{1}{2}} + x_i^k)\end{aligned}\quad (33)$$

が得られる。この恒等式に差分スキーム(25)式, (26)式を代入するとエネルギー不等式

$$\begin{aligned}V^{k+1} - V^k &= -\frac{1}{h} \sum_{i=1}^n (x_i^{k+1} - x_i^k)^2 \\ &- \frac{4}{3h} \sum_{i=1}^n (x_i^{k+1} - 2x_i^{k+\frac{1}{2}} + x_i^k)^2 \leq 0\end{aligned}\quad (34)$$

が成り立つことがわかる。

4 数値計算例

計算例として, エネルギー関数が

$$V(x, y, z) = x^2 y^2 z^2 \quad (35)$$

で与えられる 3 変数の勾配系

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -2xy^2z^2 \\ \frac{dy}{dt} &= -2yx^2z^2 \\ \frac{dz}{dt} &= -2zx^2y^2 \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

を考える。エネルギー関数の極小値 (最小値) は 3 個の平面 $x=0, y=0, z=0$ 上の任意の点にあるので、時間の経過とともに軌道がどこに向かうのか関数の形からはわからない。しかし、この系は 2 個の独立な保存量

$$I = x^2 - y^2, \quad J = x^2 - z^2 \quad (37)$$

を持つので可積分系であり、予め最終値を予測することができる。いま、初期値が

$$x(0) \geq y(0) \geq z(0) \geq 0 \quad (38)$$

を満たしていたとすると

$$I(\infty) = I(0) \geq 0, \quad J(\infty) = J(0) \geq 0 \quad (39)$$

となるので

$$x(\infty) \geq y(\infty) \geq z(\infty) = 0 \quad (40)$$

従って、

$$x(\infty) = \sqrt{J}, \quad y(\infty) = \sqrt{J - I}, \quad z(\infty) = 0 \quad (41)$$

となる。

初期値を、

$$x(0) = 1, \quad y(0) = 0.9, \quad z(0) = 0.8$$

にとり、数値計算を行った。このとき、正確な最終値は

$$x(\infty) = 0.6, \quad y(\infty) = \sqrt{0.17}, \quad z(\infty) = 0$$

となる。図 1 は刻み幅を $h=0.01$ に取りエネルギー不等式を満たす 4 次の差分法を用いて計算したときの数値解である。3 個の変数はそれぞれ最終値に向かって時間の経過とともに減衰している。図 2 は同じ刻み幅でエネルギー不等式を満たす 4 次の差分法 (ED4) と他の計算法、エネルギー不等式を満たす 2 次の差分法 (ED2) および 4 次の Runge-Kutta 法 (RK4) の誤差がどのように変化するかをみたものである。なお誤差は保存量の変動

$$\epsilon(t) = |I(t) - I(0)| + |J(t) - J(0)| \quad (42)$$

で調べた。どの差分法でも誤差は初期段階のときにだけ少し変動し、その後は一定の値をとっており誤差の増大は見られない。2 次より 4 次の計算法の誤差が小さいのは当然であるが、4 次の方法では ED4 の方が RK4 より少し小さいようである。これは h^3 の誤差の係数が小さいためと思われる。表 1 には最終値の値を示した。アンダーラインは厳密な値と異なる部分であり、誤差を表している。最終値の誤差は、保存量の誤差とほぼ同じであることがわかる。

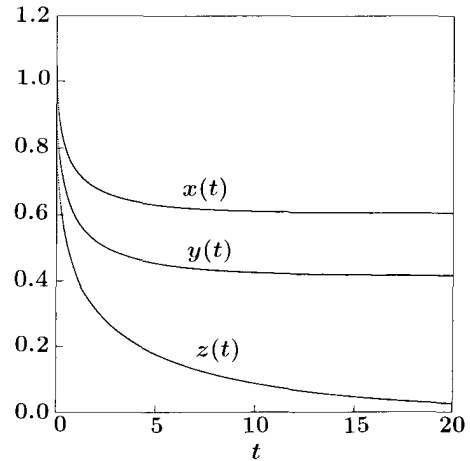


図 1 数値解

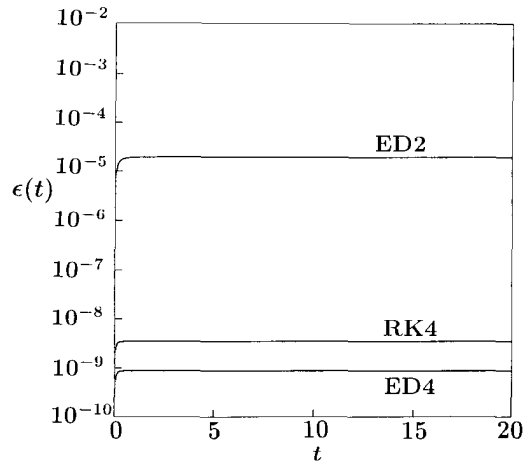


図 2 誤差

表1 最終値

| | ED 2 | ED 4 | RK 4 |
|-----|----------------|----------------|----------------|
| x | 0.599989419959 | 0.599999999514 | 0.599999998117 |
| y | 0.412301261779 | 0.412310562172 | 0.412310561075 |
| z | 0.000000000000 | 0.000000000000 | 0.000000000000 |
| I | 0.189994973598 | 0.189999999737 | 0.18999998966 |
| J | 0.359987304063 | 0.359999999416 | 0.359999997740 |

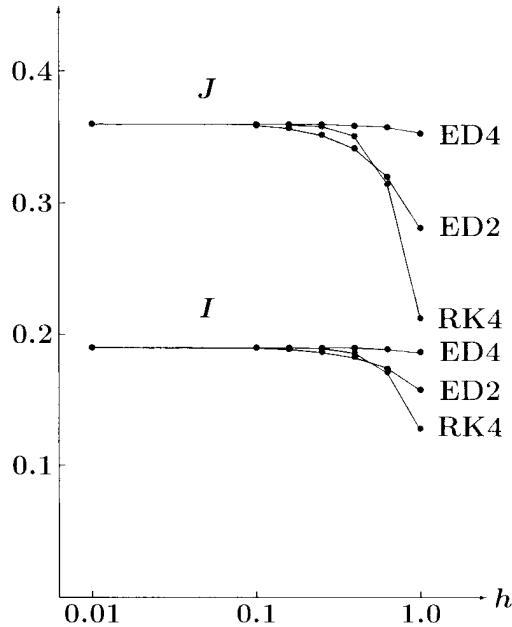


図3 保存量の最終値と刻み幅

図3は保存量の最終値が刻み幅によってどのように変わるかを示したものである。刻み幅が小さいときは、表1でみたようにED4, RK4, ED2の順に正確ではあるが、どの差分法でもほとんど厳密な値と同じである。

しかし、刻み幅を大きくすると厳密な値とずれてくる。このとき、途中でED2とRK4の誤差の大きさは逆転してしまう。一方、ED4は刻み幅が1程度でも他の2つの計算法と違って大きく値がずれてしまうことはない。これは、 h^5 以上の誤差の係数が全て他の方法に比べて小さい値であるためと思われる。従って、値が1程度の刻み幅で計算しても最終値が大きく違ってしまわない。

なお、エネルギー不等式を満たす差分法はこの系では陰解法となっているが、ここでは単純な逐次代入法で解いた。そのため、刻み幅が1より大きいときには、繰り返し計算が収束せず、計算することはできなかった。Newton法などの非線形方程式を解く数値計算法を使えばもっと大きな刻み幅まで計算できるかもしれない。この点は将来の課題として残されている。

参考文献

- [1] 長嶋秀世(1994年): 数値計算法, 槇書店, p. 92, p. 180.
- [2] 石森勇次(1997年): 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, 富山県立大学紀要, 第7巻 pp. 26-33.

An Energy-Decreasing Difference Method of Fourth Order for Multidimensional Gradient Systems

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

An energy decreasing difference scheme for n -dimensional gradient systems is constructed that gives the fourth order of accuracy. Comparisons are made with the fourth order Runge-Kutta method.

Key Words : difference method, fourth order scheme, gradient systems, nonlinear differential equations, energy inequality