勾配系に対する任意の段数で構成される 4次のエネルギー散逸保証差分スキーム

石森　勇次
(工学部一般教育等)

1変数の勾配系に対して，エネルギー散逸を保証する4次の差分スキームを考える。そのようなスキームは2以上の任意の段数でも構成できることを示す。

キーワード：差分法，4次の精度，任意の段数，勾配系，微分方程式

1．はじめに

微分方程式で記述される力学系の数値計算法として，系のエネルギー関数の性質を満たすような差分スキームを考える。散逸力学系の場合，それは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スキームである。すでに，そのような差分スキームを提案してきたが[1,2]，これらは4次の精度を持つ段数が2のスキームであった。

本研究では，任意の段数（s 段）でも4次の差分スキーム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

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

で記述される散逸力学系を考える。この力学系に対して，エネルギー不等式

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

が成り立つ。ここで，$V(x)$ はエネルギー関数である。不等式は，時間の経過とともに x が変化する限りエネルギーが減少することを示している。離散時間系でも同様のエネルギー不等式が成り立てば，差分スキームはエネルギー散逸を保証する計算法である。

2節では差分スキームを構成するための重要な鍵となる差分恒等式を導く。3節では2節で導いた差分恒等式を用いて s 段4次の差分スキームを構成する。4節では，簡単な線形の力学系への応用を試み，段数の違いによる特徴を調べる。

2．差分恒等式

エネルギー散逸を保証する差分スキームを構成するためには，ある差分恒等式が重要な役割を演ずる。ここでは，そのような差分恒等式を導く。

2.1　直行行列による差分恒等式の導出

2種類の s 個の変数 $a_0, a_1, \cdots, a_{s-1}$，$b_0, b_1, \cdots, b_{s-1}$ の2次式

$$a_{s-1}b_{s-1} + a_{s-2}b_{s-2} + \cdots + a_0 b_0 \tag{3}$$

の変形を考える。2次式 (3) はベクトル

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_{s-1} \\ a_{s-2} \\ \vdots \\ a_0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} b_{s-1} \\ b_{s-2} \\ \vdots \\ b_0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

の内積 $\vec{a}\cdot\vec{b}$ と同じである。以下で，内積の値はベクトルを適当な直交行列 A で1次変換しても変わらないこと，即ち

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = (A\vec{a})\cdot(A\vec{b}) \tag{5}$$

を用いて (3) の変形を行う。

直交行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \end{pmatrix} \tag{6}$$

を次のように定める。

(a) 第1行の行ベクトルは，成分が全て同じ単位ベクトルとする。

(b) 第 s 行の行ベクトルは，λ の $s-1$ 次の多項式

$$(\lambda-1)^{s-1}=\sum_{i=0}^{s-1}\binom{s-1}{i}\lambda^{(s-1-i)}(-1)^i \tag{7}$$

の係数を順に並べた成分を持つ行ベクトルのスカラー倍の単位ベクトルとする。この行ベクトルが (a) で定めた第1行の行ベクトルと直交することは，両者の内積が (7) で $\lambda=1$ と置いたものに比例し，等式

$$\sum_{i=0}^{s-1}\binom{s-1}{i}(-1)^i=0$$

が成り立つので明らかである。

(c) 第 $s-1$ 行の行ベクトルは，λ の $s-1$ 次の多項式

$$\begin{aligned}&(\lambda-1)^{s-2}(\lambda+c_{s-1,1})\\&=\sum_{i=0}^{s-2}\binom{s-2}{i}\lambda^{(s-2-i)}(-1)^i(\lambda+c_{s-1,1})\end{aligned} \tag{8}$$

の係数を順に並べた成分を持つ行ベクトルのスカラー倍の単位ベクトルとする。定数 $c_{s-1,1}$ は，この行ベクトルと (b) で定めた第 s 行の行ベクトルが直交するように定める。(a) の行ベクトルとも直交することは，両者の内積が (8) で $\lambda=1$ と置いたものに比例し，等式

$$\sum_{i=0}^{s-2}\binom{s-2}{i}(-1)^i(1+c_{s-1,1})=0$$

が成り立つので明らかである。

(d) 一般に，第 $s-j$ $(j=1,2,\cdots,s-2)$ 行の行ベクトルは，λ の $s-1$ 次の多項式

$$\begin{aligned}&(\lambda-1)^{s-j-1}(\lambda^j+c_{s-j,1}\lambda^{j-1}+\cdots+c_{s-j,j})\\&=\sum_{i=0}^{s-j-1}\binom{s-j-1}{i}\lambda^{(s-j-1-i)}(-1)^i\\&\quad\times(\lambda^j+c_{s-j,1}\lambda^{j-1}+\cdots+c_{s-j,j})\end{aligned} \tag{9}$$

の係数を順に並べた成分を持つ行ベクトルのスカラー倍の単位ベクトルとする。定数 $c_{s-j,1},c_{s-j,2},\cdots,c_{s-j,j}$ は，第 $s-j+1$ 行から第 s 行までの j 個の行ベクトルとこの行ベクトルが直交するように定める。この行ベクトルが (a) で定めた第1行の行ベクトルと直交することは，両者の内積が (9) で $\lambda=1$ と置いたものに比例し，等式

$$\sum_{i=0}^{s-j-1}\binom{s-j-1}{i}(-1)^i(1+c_{s-j,1}+\cdots+c_{s-j,j})=0$$

が成り立つので明らかである。

具体的にいくつかの s について直交行列を求め2次式 (3) の変形を行う。結果は以下の通りである。ただし，行列 A の第1列の成分は符号を全て＋とした。

$s=1$ の場合：

$$A=(1) \tag{10}$$

$$a_0b_0=a_0b_0 \tag{11}$$

$s=2$ の場合：

$$A=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix} \tag{12}$$

$$\begin{aligned}&a_1b_1+a_0b_0\\&=\frac{1}{2}(a_1+a_0)(b_1+b_0)\\&+\frac{1}{2}(a_1-a_0)(b_1-b_0)\end{aligned} \tag{13}$$

$s=3$ の場合：

$$A=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}\sqrt{2}&\sqrt{2}&\sqrt{2}\\\sqrt{3}&0&-\sqrt{3}\\1&-2&1\end{pmatrix} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}&a_2b_2+a_1b_1+a_0b_0\\&=\frac{1}{3}(a_2+a_1+a_0)(b_2+b_1+b_0)\\&+\frac{1}{2}(a_2-a_0)(b_2-b_0)\\&+\frac{1}{6}(a_2-2a_1+a_0)(b_2-2b_1+b_0)\end{aligned} \tag{15}$$

$s=4$ の場合：

$$A=\frac{1}{2\sqrt{5}}\begin{pmatrix}\sqrt{5}&\sqrt{5}&\sqrt{5}&\sqrt{5}\\3&1&-1&-3\\\sqrt{5}&-\sqrt{5}&-\sqrt{5}&\sqrt{5}\\1&-3&3&-1\end{pmatrix} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}&a_3b_3+a_2b_2+a_1b_1+a_0b_0\\&=\frac{1}{4}(a_3+a_2+a_1+a_0)(b_3+b_2+b_1+b_0)\\&+\frac{1}{20}(3a_3+a_2-a_1-3a_0)(3b_3+b_2-b_1-3b_0)\\&+\frac{1}{4}(a_3-a_2-a_1+a_0)(b_3-b_2-b_1+b_0)\\&+\frac{1}{20}(a_3-3a_2+3a_1-a_0)(b_3-3b_2+3b_1-b_0)\end{aligned} \tag{17}$$

$s=5$ の場合：

$$A=\frac{1}{\sqrt{70}}$$

$$\times \begin{pmatrix} \sqrt{14} & \sqrt{14} & \sqrt{14} & \sqrt{14} & \sqrt{14} \\ 2\sqrt{7} & \sqrt{7} & 0 & -\sqrt{7} & -2\sqrt{7} \\ 2\sqrt{5} & -\sqrt{5} & -2\sqrt{5} & -\sqrt{5} & 2\sqrt{5} \\ \sqrt{7} & -2\sqrt{7} & 0 & 2\sqrt{7} & -\sqrt{7} \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \end{pmatrix} \tag{18}$$

$$\begin{aligned} & a_4b_4 + a_3b_3 + a_2b_2 + a_1b_1 + a_0b_0 \\ = & \frac{1}{5}(a_4 + a_3 + a_2 + a_1 + a_0) \\ & \times(b_4 + b_3 + b_2 + b_1 + b_0) \\ + & \frac{1}{10}(2a_4 + a_3 - a_1 - 2a_0) \\ & \times(2a_4 + b_3 - b_1 - 2b_0) \\ + & \frac{1}{14}(2a_4 - a_3 - 2a_2 - a_1 + 2a_0) \\ & \times(2b_4 - b_3 - 2b_2 - b_1 + 2b_0) \\ + & \frac{1}{10}(a_4 - 2a_3 + 2a_1 - a_0) \\ & \times(b_4 - 2b_3 + 2b_1 - b_0) \\ + & \frac{1}{70}(a_4 - 4a_3 + 6a_2 - 4a_1 + a_0) \\ & \times(b_4 - 4b_3 + 6b_2 - 4b_1 + b_0) \end{aligned} \tag{19}$$

以上のように，一般に 0 階差分から $s-1$ 階差分までを用いて展開したような差分恒等式が得られる。

2.2 連鎖則としての差分恒等式の導出

2．1節で得られた恒等式を用いて，差分スキームを構成する上で重要な差分恒等式を導く。それは微分における連鎖則

$$dV(x) = \frac{\partial V(x)}{\partial x}dx \tag{20}$$

の差分化

$$V^{k+1} - V^k = \delta_x^{1,0}V^k(x^{k+1} - x^k) \tag{21}$$

を拡張したような差分恒等式である。ここで，

$$t^k = k\Delta t \ (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{22}$$

$$x^k = x(t^k),\ V^k = V(x^k) \tag{23}$$

$$\delta_x^{\alpha,\beta}V^k = \frac{V^{k+\alpha} - V^{k+\beta}}{x^{k+\alpha} - x^{k+\beta}} \tag{24}$$

である。Δt は時間 t の刻み幅，$\delta_x^{\alpha,\beta}$ は差分商演算子である。

$$\begin{aligned} & V^{k+1} - V^k \\ = & (V^{k+1} - V^{k+\frac{s-1}{s}}) \\ + & (V^{k+\frac{s-1}{s}} - V^{k+\frac{s-2}{s}}) \\ + & (V^{k+\frac{s-2}{s}} - V^{k+\frac{s-3}{s}}) \\ + & \cdots \\ + & (V^{k+\frac{1}{s}} - V^k) \\ = & \delta_x^{1,\frac{s-1}{s}}V^k(x^{k+1} - x^{k+\frac{s-1}{s}}) \\ + & \delta_x^{\frac{s-1}{s},\frac{s-2}{s}}V^k(x^{k+\frac{s-1}{s}} - x^{k+\frac{s-2}{s}}) \\ + & \delta_x^{\frac{s-2}{s},\frac{s-3}{s}}V^k(x^{k+\frac{s-2}{s}} - x^{k+\frac{s-3}{s}}) \\ + & \cdots \\ + & \delta_x^{\frac{1}{s},0}V^k(x^{k+\frac{1}{s}} - x^k) \end{aligned} \tag{25}$$

に注目すれば，

$$\begin{cases} a_{s-1} = \delta_x^{1,\frac{s-1}{s}}V^k \\ b_{s-1} = x^{k+1} - x^{k+\frac{s-1}{s}} \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{s-2} = \delta_x^{\frac{s-1}{s},\frac{s-2}{s}}V^k \\ b_{s-2} = x^{k+\frac{s-1}{s}} - x^{k+\frac{s-2}{s}} \end{cases}$$

$$\vdots$$

$$\begin{cases} a_0 = \delta_x^{\frac{1}{s},0}V^k \\ b_0 = x^{k+\frac{1}{s}} - x^k \end{cases}$$

と置いて

$$\begin{aligned} & V^{k+1} - V^k \\ & = a_{s-1}b_{s-1} + a_{s-2}b_{s-2} + \cdots + a_0b_0 \end{aligned} \tag{26}$$

従って，2．1節の恒等式から，以下のような差分恒等式が得られる。

$s=1$ の場合：(11) より (21) を得る。

$s=2$ の場合：(13) より

$$\begin{aligned} & V^{k+1} - V^k \\ = & \frac{1}{2}[(\delta_x^{1,\frac{1}{2}} + \delta_x^{\frac{1}{2},0})V^k](x^{k+1} - x^k) \\ + & \frac{1}{2}[(\delta_x^{1,\frac{1}{2}} - \delta_x^{\frac{1}{2},0})V^k](x^{k+1} - 2x^{k+\frac{1}{2}} - x^k) \end{aligned} \tag{27}$$

$s=3$ の場合：(15) より

$$\begin{aligned} & V^{k+1} - V^k \\ = & \frac{1}{3}[(\delta_x^{1,\frac{2}{3}} + \delta_x^{\frac{2}{3},\frac{1}{3}} + \delta_x^{\frac{1}{3},0})V^k](x^{k+1} - x^k) \\ + & \frac{1}{2}[(\delta_x^{1,\frac{2}{3}} - \delta_x^{\frac{1}{3},0})V^k](x^{k+1} - x^{k+\frac{2}{3}} - x^{k+\frac{1}{3}} + x^k) \\ + & \frac{1}{6}[(\delta_x^{1,\frac{2}{3}} - 2\delta_x^{\frac{2}{3},\frac{1}{3}} + \delta_x^{\frac{1}{3},0})V^k] \\ & \times(x^{k+1} - 3x^{k+\frac{2}{3}} + 3x^{k+\frac{1}{3}} - x^k) \end{aligned} \tag{28}$$

$s=4$ の場合：(17) より

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1}-V^{k}\\
&=\frac{1}{4}[(\delta_x^{1,\frac{3}{4}}+\delta_x^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}}+\delta_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}}+\delta_x^{\frac{1}{4},0})V^k](x^{k+1}-x^k)\\
&+\frac{1}{20}[(3\delta_x^{1,\frac{3}{4}}+\delta_x^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}}-\delta_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}}-3\delta_x^{\frac{1}{4},0})V^k]\\
&\quad\times(3x^{k+1}-2x^{k+\frac{3}{4}}-2\delta_x^{k+\frac{1}{2}}-2x^{k+\frac{1}{4}}+3x^k)\\
&+\frac{1}{4}[(\delta_x^{1,\frac{3}{4}}-\delta_x^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}}-\delta_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}}+\delta_x^{\frac{1}{4},0})V^k]\\
&\quad\times(x^{k+1}-2x^{k+\frac{3}{4}}+2x^{k+\frac{1}{4}}-x^k)\\
&+\frac{1}{20}[(\delta_x^{1,\frac{3}{4}}-3\delta_x^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}}+3\delta_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}}-\delta_x^{\frac{1}{4},0})V^k]\\
&\quad\times(x^{k+1}-4x^{k+\frac{3}{4}}+6\delta_x^{k+\frac{1}{2}}-4x^{k+\frac{1}{4}}+x^k)
\end{aligned}
\tag{29}
$$

$s=5$ の場合：(19) より

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1}-V^{k}\\
&=\frac{1}{5}[(\delta_x^{1,\frac{4}{5}}+\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}+\delta_x^{\frac{3}{5},\frac{2}{5}}+\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}+\delta_x^{\frac{1}{5},0})V^k]\\
&\quad\times(x^{k+1}-x^k)\\
&+\frac{1}{10}[(2\delta_x^{1,\frac{4}{5}}+\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}-\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}-2\delta_x^{\frac{1}{5},0})V^k]\\
&\quad\times(2x^{k+1}-x^{k+\frac{4}{5}}-\delta_x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\qquad-x^{k+\frac{2}{5}}-x^{k+\frac{1}{5}}+2x^k)\\
&+\frac{1}{14}[(2\delta_x^{1,\frac{4}{5}}-\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}-2\delta_x^{\frac{3}{5},\frac{2}{5}}-\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}+2\delta_x^{\frac{1}{4},0})V^k]\\
&\quad\times(2x^{k+1}-3x^{k+\frac{4}{5}}-x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\qquad+x^{k+\frac{2}{5}}+3x^{k+\frac{1}{5}}-2x^k)\\
&+\frac{1}{10}[(\delta_x^{1,\frac{4}{5}}-2\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}+2\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}-\delta_x^{\frac{1}{5},0})V^k]\\
&\quad\times(x^{k+1}-3x^{k+\frac{4}{5}}+2\delta_x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\qquad+2x^{k+\frac{2}{5}}-3x^{k+\frac{1}{5}}+x^k)\\
&+\frac{1}{70}[(\delta_x^{1,\frac{4}{5}}-4\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}+6\delta_x^{\frac{3}{5},\frac{2}{5}}-4\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}+\delta_x^{\frac{1}{5},0})V^k]\\
&\quad\times(x^{k+1}-5x^{k+\frac{4}{5}}+10\delta_x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\qquad-10x^{k+\frac{2}{5}}+5x^{k+\frac{1}{5}}-x^k)
\end{aligned}
\tag{30}
$$

以上のように，1階差分をより高次の差分で展開する差分恒等式が得られたが，現時点でこれらは連続系に対応物が見当たらない等式である。

3．差分スキーム

差分スキームは，微分方程式 (1) の積分表示

$$x^{k+1}=x^k-\int_{t^k}^{t^{k+1}}V'(x(t))dt \tag{31}$$

の差分化を意味する。以下でそのスキームを導く。

3.1　s+1 点数値積分公式

積分

$$\int_0^{\Delta t}f(t)dt$$

を $s+1$ 点：

$$f_\alpha=f(t^\alpha)\quad(\alpha=0,\frac{1}{s},\frac{2}{s},\cdots,1) \tag{32}$$

で数値積分する4次の公式を導く。2次の精度を持つ台形公式の組み合わせとして

$$
\begin{aligned}
&c_1\frac{\Delta t}{s}\left(\frac{f_0+f_{\frac{1}{s}}}{2}+\frac{f_{\frac{1}{s}}+f_{\frac{2}{s}}}{2}+\cdots+\frac{f_{\frac{s-1}{s}}+f_1}{2}\right)\\
&+c_2\frac{\Delta t}{2}(f_0+f_1)\quad(c_1+c_2=1)
\end{aligned}
\tag{33}
$$

を考え，4次の精度を持つように c_1，c_2 を定めると

$$
\begin{aligned}
&\int_0^{\Delta t}f(t)dt\\
&=\frac{s^2}{s^2-1}\frac{\Delta t}{s}\left(\frac{f_0+f_{\frac{1}{s}}}{2}+\frac{f_{\frac{1}{s}}+f_{\frac{2}{s}}}{2}\right.\\
&\qquad\left.+\cdots+\frac{f_{\frac{s-1}{s}}+f_1}{2}\right)\\
&\quad+\frac{-1}{s^2-1}\frac{\Delta t}{2}(f_0+f_1)+O(\Delta t^5)
\end{aligned}
\tag{34}
$$

が成り立つ。$s=2$ のときは Simpson の公式，$s=3$ のときは Simpson の $\frac{3}{8}$ 公式に対応する。(34) より

$$
\begin{aligned}
&\int_{t^k}^{t^{k+1}}V'(x(t))dt=\frac{\Delta t}{2(s^2-1)}\\
&\times\left[(s-1)V'(x^{k+1})+2sV'(x^{k+\frac{s-1}{s}})\right.\\
&\quad\left.+\cdots+2sV'(x^{k+\frac{1}{s}})+(s-1)V'(x^k)\right]\\
&+O(\Delta t^5)
\end{aligned}
\tag{35}
$$

を得る。

3.2　s 段の差分スキーム

積分表示 (31) の積分の差分化を考える。数値積分公式 (35) の導出と同じ比率で，2次の精度を持つ差分化

$$\int_{t^{k+\alpha}}^{t^{k+\beta}}V'(x(t))dt=(\beta-\alpha)\Delta t\delta_x^{\alpha,\beta}V^k+O(\Delta t^3) \tag{36}$$

の組み合わせ

$$
\begin{aligned}
&\frac{s^2}{s^2-1}\frac{\Delta t}{s}(\delta_x^{1,\frac{s-1}{s}}+\cdots+\delta_x^{\frac{1}{s},0})V^k\\
&+\frac{-1}{s^2-1}\Delta t\delta_x^{1,0}V^k
\end{aligned}
\tag{37}
$$

を考える。(35) の右辺と (37) は $O(\Delta t^5)$ の違いしかないことが示せるので，(37) は4次の精度を持つ差分化である。結局，x^{k+1} を決定する差分スキームは

$$
\begin{aligned}
&x^{k+1}\\
&= x^k - \frac{\Delta t}{s^2-1}[s(\delta_x^{1,\frac{s-1}{s}} + \cdots + \delta_x^{\frac{1}{s},0}) - \delta_x^{1,0}]V^k \quad (38)
\end{aligned}
$$

となる。$x^{k+\frac{1}{s}}$, $\cdots$, $x^{k+\frac{s-1}{s}}$ については

$$
\begin{aligned}
&x^{k+\frac{j}{s}}\\
&= \frac{1}{s}[jx^{k+1} + (s-j)x^k]\\
&+ \frac{\Delta t}{s^2}[j(\delta_x^{1,\frac{s-1}{s}} + \cdots + \delta_x^{\frac{j+1}{s},\frac{j}{s}})\\
&\quad -(s-j)(\delta_x^{\frac{j}{s},\frac{j-1}{s}} + \cdots + \delta_x^{\frac{1}{s},0})]V^k\\
&\quad (j = 1, 2, \cdots, s-1) \qquad (39)
\end{aligned}
$$

により計算する。

$$
\begin{aligned}
&j(\delta_x^{1,\frac{s-1}{s}} + \cdots + \delta_x^{\frac{j+1}{s},\frac{j}{s}})\\
&-(s-j)(\delta_x^{\frac{j}{s},\frac{j-1}{s}} + \cdots + \delta_x^{\frac{1}{s},0})\\
&= [(\delta_x^{1,\frac{s-1}{s}} - \delta_x^{\frac{j}{s},\frac{j-1}{s}}) + \delta_x^{1,\frac{s-1}{s}} - \delta_x^{\frac{j-1}{s},\frac{j-2}{s}})\\
&\qquad + \cdots + (\delta_x^{1,\frac{s-1}{s}} - \delta_x^{\frac{1}{s},0})]\\
&+ [(\delta_x^{\frac{s-1}{s},\frac{s-2}{s}} - \delta_x^{\frac{j}{s},\frac{j-1}{s}}) + (\delta_x^{\frac{s-1}{s},\frac{s-2}{s}} - \delta_x^{\frac{j-1}{s},\frac{j-2}{s}})\\
&\qquad + \cdots + (\delta_x^{\frac{s-1}{s},\frac{s-2}{s}} - \delta_x^{\frac{1}{s},0})]\\
&\quad \vdots\\
&+ [(\delta_x^{\frac{j+1}{s},\frac{j}{s}} - \delta_x^{\frac{j}{s},\frac{j-1}{s}}) + (\delta_x^{\frac{j+1}{s},\frac{j}{s}} - \delta_x^{\frac{j-1}{s},\frac{j-2}{s}})\\
&\qquad + \cdots + (\delta_x^{\frac{j+1}{s},\frac{j}{s}} - \delta_x^{\frac{1}{s},0})]
\end{aligned}
$$

より，(39) の右辺は2次の精度を持つ式の1階差分になっているので3次の精度で $x^{k+\frac{1}{s}}$, $\cdots$, $x^{k+\frac{s-1}{s}}$ を決定することができる。(38) で x^{k+1} を4次の精度で計算するためには，$x^{k+\frac{1}{s}}$, $\cdots$, $x^{k+\frac{s-1}{s}}$ が高々3次の精度であればよいので問題はない。ちなみに (39) は，積分表示

$$
\begin{aligned}
&x^{k+\frac{j}{s}}\\
&= \frac{j}{s}\left(x^{k+1} + \int_{t^{k+\frac{j}{s}}}^{t^{k+1}} V'(x(t))dt\right)\\
&+ \frac{s-j}{s}\left(x^k - \int_{t^k}^{t^{k+\frac{j}{s}}} V'(x(t))dt\right) \qquad (40)
\end{aligned}
$$

の差分化である。

以上のように，s 個の計算式から x^{k+1} を決定するアルゴリズムなので，この差分スキームは s 段の計算法である。

3.3 エネルギー不等式

連続時間系のエネルギー不等式 (2) の差分化を考える。(37) 式と同じ比率の組み合わせ

$$
\begin{aligned}
V^{k+1} - V^k &= \frac{s^2}{s^2-1}(V^{k+1} - V^k)\\
&+ \frac{-1}{s^2-1}(V^{k+1} - V^k) \qquad (41)
\end{aligned}
$$

を考え，右辺第1項の $V^{k+1} - V^k$ には差分恒等式 (27)~(30) を代入し，右辺第2項の $V^{k+1} - V^k$ には差分恒等式 (21) を代入すると，以下のような差分恒等式が得られる。

$s = 2$ の場合：(21) と (27) より

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1} - V^k\\
&= \frac{1}{3}[(2\delta_x^{1,\frac{1}{2}} + 2\delta_x^{\frac{1}{2},0} - \delta_x^{1,0})V^k](x^{k+1} - x^k)\\
&+ \frac{2}{3}[(\delta_x^{1,\frac{1}{2}} - \delta_x^{\frac{1}{2},0})V^k](x^{k+1} - 2x^{k+\frac{1}{2}} - x^k)\\
&\qquad (42)
\end{aligned}
$$

$s = 3$ の場合：(21) と (28) より

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1} - V^k\\
&= \frac{1}{8}[(3\delta_x^{1,\frac{2}{3}} + 3\delta_x^{\frac{2}{3},\frac{1}{3}} + 3\delta_x^{\frac{1}{3},0} - \delta_x^{1,0})V^k](x^{k+1} - x^k)\\
&+ \frac{9}{16}[(\delta_x^{1,\frac{2}{3}} - \delta_x^{\frac{1}{3},0})V^k](x^{k+1} - x^{k+\frac{2}{3}} - x^{k+\frac{1}{3}} + x^k)\\
&+ \frac{3}{16}[(\delta_x^{1,\frac{2}{3}} - 2\delta_x^{\frac{2}{3},\frac{1}{3}} + \delta_x^{\frac{1}{3},0})V^k]\\
&\quad \times(x^{k+1} - 3x^{k+\frac{2}{3}} + 3x^{k+\frac{1}{3}} - x^k) \qquad (43)
\end{aligned}
$$

$s = 4$ の場合：(21) と (29) より

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1} - V^k\\
&= \frac{1}{15}[(4\delta_x^{1,\frac{3}{4}} + 4\delta_x^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}} + 4\delta_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}} + 4\delta_x^{\frac{1}{4},0} - \delta_x^{1,0})V^k]\\
&\quad \times(x^{k+1} - x^k)\\
&+ \frac{4}{75}[(3\delta_x^{1,\frac{3}{4}} + \delta_x^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}} - \delta_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}} - 3\delta_x^{\frac{1}{4},0})V^k]\\
&\quad \times(3x^{k+1} - 2x^{k+\frac{3}{4}} - 2x^{k+\frac{1}{2}} - 2x^{k+\frac{1}{4}} + 3x^k)\\
&+ \frac{4}{15}[(\delta_x^{1,\frac{3}{4}} - \delta_x^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}} - \delta_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}} + \delta_x^{\frac{1}{4},0})V^k]\\
&\quad \times(x^{k+1} - 2x^{k+\frac{3}{4}} + 2x^{k+\frac{1}{4}} - x^k)\\
&+ \frac{4}{75}[(\delta_x^{1,\frac{3}{4}} - 3\delta_x^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}} + 3\delta_x^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}} - \delta_x^{\frac{1}{4},0})V^k]\\
&\quad \times(x^{k+1} - 4x^{k+\frac{3}{4}} + 6x^{k+\frac{1}{2}} - 4x^{k+\frac{1}{4}} + x^k)\\
&\qquad (44)
\end{aligned}
$$

$s = 5$ の場合：(21) と (30) より

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1} - V^k\\
&= \frac{1}{24}[(5\delta_x^{1,\frac{4}{5}} + 5\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}} + 5\delta_x^{\frac{3}{5},\frac{2}{5}}\\
&\quad +5\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}} + 5\delta_x^{\frac{1}{5},0} - \delta_x^{1,0})V^k]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\times(x^{k+1}-x^k)\\
&+\frac{5}{48}[(2\delta_x^{1,\frac{4}{5}}+\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}-\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}-2\delta_x^{\frac{1}{5},0})V^k]\\
&\times(2x^{k+1}-x^{k+\frac{4}{5}}-x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\quad -x^{k+\frac{2}{5}}-x^{k+\frac{1}{5}}+2x^k)\\
&+\frac{25}{336}[(2\delta_x^{1,\frac{4}{5}}-\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}-2\delta_x^{\frac{3}{5},\frac{2}{5}}-\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}+2\delta_x^{\frac{1}{5},0})V^k]\\
&\times(2x^{k+1}-3x^{k+\frac{4}{5}}-x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\quad +x^{k+\frac{2}{5}}+3x^{k+\frac{1}{5}}-2x^k)\\
&+\frac{5}{48}[(\delta_x^{1,\frac{4}{5}}-2\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}+2\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}-\delta_x^{\frac{1}{5},0})V^k]\\
&\times(x^{k+1}-3x^{k+\frac{4}{5}}+2x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\quad +2x^{k+\frac{2}{5}}-3x^{k+\frac{1}{5}}+x^k)\\
&+\frac{5}{336}[(\delta_x^{1,\frac{4}{5}}-4\delta_x^{\frac{4}{5},\frac{3}{5}}+6\delta_x^{\frac{3}{5},\frac{2}{5}}-4\delta_x^{\frac{2}{5},\frac{1}{5}}+\delta_x^{\frac{1}{5},0})V^k]\\
&\times(x^{k+1}-5x^{k+\frac{4}{5}}+10x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\quad -10x^{k+\frac{2}{5}}+5x^{k+\frac{1}{5}}-x^k)
\end{aligned}
\tag{45}
$$

ここで，(38)，(39) を用いると

$s=2$ の場合：

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1}-V^k\\
&=-\frac{1}{\Delta t}(x^{k+1}-x^k)^2\\
&\quad -\frac{4}{3\Delta t}(x^{k+1}-2x^{k+\frac{1}{2}}+x^k)^2\\
&\le 0
\end{aligned}
\tag{46}
$$

$s=3$ の場合：

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1}-V^k\\
&=-\frac{1}{\Delta t}(x^{k+1}-x^k)^2\\
&\quad -\frac{27}{16\Delta t}(x^{k+1}-x^{k+\frac{2}{3}}-x^{k+\frac{1}{3}}+x^k)^2\\
&\quad -\frac{9}{16\Delta t}(x^{k+1}-3x^{k+\frac{2}{3}}+3x^{k+\frac{1}{3}}-x^k)^2\\
&\le 0
\end{aligned}
\tag{47}
$$

$s=4$ の場合：

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1}-V^k\\
&=-\frac{1}{\Delta t}(x^{k+1}-x^k)^2\\
&\quad -\frac{16}{75\Delta t}(3x^{k+1}-2x^{k+\frac{3}{4}}-2x^{k+\frac{1}{2}}\\
&\qquad -2x^{k+\frac{1}{4}}+3x^k)^2\\
&\quad -\frac{16}{15\Delta t}(x^{k+1}-2x^{k+\frac{3}{4}}+2x^{k+\frac{1}{4}}-x^k)^2\\
&\quad -\frac{16}{75\Delta t}(x^{k+1}-4x^{k+\frac{3}{4}}+6x^{k+\frac{1}{2}}\\
&\qquad -4x^{k+\frac{1}{4}}+3x^k)^2\\
&\le 0
\end{aligned}
\tag{48}
$$

$s=5$ の場合：

$$
\begin{aligned}
&V^{k+1}-V^k\\
&=-\frac{1}{\Delta t}(x^{k+1}-x^k)^2\\
&\quad -\frac{25}{48\Delta t}(2x^{k+1}-x^{k+\frac{4}{5}}-x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\qquad -x^{k+\frac{2}{5}}-x^{k+\frac{1}{5}}+2x^k)^2\\
&\quad -\frac{125}{336\Delta t}(2x^{k+1}-3x^{k+\frac{4}{5}}-x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\qquad +x^{k+\frac{2}{5}}+3x^{k+\frac{1}{5}}-2x^k)^2\\
&\quad -\frac{25}{48\Delta t}(x^{k+1}-3x^{k+\frac{4}{5}}+2x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\qquad +2x^{k+\frac{2}{5}}-3x^{k+\frac{1}{5}}+x^k)^2\\
&\quad -\frac{25}{336\Delta t}(x^{k+1}-5x^{k+\frac{4}{5}}+10x^{k+\frac{3}{5}}\\
&\qquad -10x^{k+\frac{2}{5}}+5x^{k+\frac{1}{5}}-x^k)^2\\
&\le 0
\end{aligned}
\tag{49}
$$

このように，差分化されたエネルギー不等式が得られ，エネルギー散逸が保証される。

4．応用例

応用例として

$$V(x)=\frac{1}{2}x^2 \tag{50}$$

$$\frac{dx}{dt}=-x \tag{51}$$

$$x(t)=e^{-t}x(0) \tag{52}$$

を考える。(52) より，x^{k+1} と x^k の厳密な関係は

$$x^{k+1}=e^{-\Delta t}x^k \tag{53}$$

で与えられる。

比較のため，1段2次の差分スキーム [1] を記す。

$$x^{k+1}=x^k-\frac{\Delta t}{2}(x^{k+1}+x^k) \tag{54}$$

陽的な式に書き直すと

$$x^{k+1}=\frac{1-\frac{\Delta t}{2}}{1+\frac{\Delta t}{2}}x^k \tag{55}$$

$s=2$～4 について s 段4次の差分スキームを求めると以下のようになる。

$s=2$ の場合：

$$x^{k+1}=x^k-\frac{\Delta t}{6}(x^{k+1}+4x^{k+\frac{1}{2}}+x^k) \tag{56}$$

$$x^{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(x^{k+1}+x^k)+\frac{\Delta t}{8}(x^{k+1}-x^k) \tag{57}$$

陽的スキームに書き直すと

$$x^{k+1}=\frac{1-\frac{\Delta t}{2}+\frac{\Delta t^2}{12}}{1+\frac{\Delta t}{2}+\frac{\Delta t^2}{12}}x^k \tag{58}$$

$s=3$ の場合：

$$\begin{aligned} &x^{k+1}\\ &=x^k-\frac{\Delta t}{8}(x^{k+1}+3x^{k+\frac{2}{3}}+3x^{k+\frac{1}{3}}+x^k) \end{aligned}\tag{59}$$

$$\begin{aligned} &x^{k+\frac{1}{3}}\\ &=\frac{1}{3}(x^{k+1}+2x^k)\\ &+\frac{\Delta t}{18}(x^{k+1}+2x^{k+\frac{2}{3}}-x^{k+\frac{1}{3}}-2x^k) \end{aligned}\tag{60}$$

$$\begin{aligned} &x^{k+\frac{2}{3}}\\ &=\frac{1}{3}(2x^{k+1}+x^k)\\ &+\frac{\Delta t}{18}(2x^{k+1}+x^{k+\frac{2}{3}}-2x^{k+\frac{1}{3}}-x^k) \end{aligned}\tag{61}$$

陽的スキームに書き直すと

$$x^{k+1}=\frac{1-\frac{\Delta t}{2}+\frac{5\Delta t^2}{54}-\frac{\Delta t^3}{216}}{1+\frac{\Delta t}{2}+\frac{5\Delta t^2}{54}+\frac{\Delta t^3}{216}}x^k \tag{62}$$

$s=4$ の場合：

$$\begin{aligned} &x^{k+1}\\ &=x^k-\frac{\Delta t}{30}(3x^{k+1}+8x^{k+\frac{3}{4}}+8x^{k+\frac{1}{2}}\\ &\qquad +8x^{k+\frac{1}{4}}+3x^k) \end{aligned}\tag{63}$$

$$\begin{aligned} &x^{k+\frac{1}{4}}\\ &=\frac{1}{4}(x^{k+1}+3x^k)\\ &+\frac{\Delta t}{32}(x^{k+1}+2x^{k+\frac{3}{4}}+2x^{k+\frac{1}{2}}\\ &\qquad -2x^{k+\frac{1}{4}}-3x^k) \end{aligned}\tag{64}$$

$$\begin{aligned} &x^{k+\frac{1}{2}}\\ &=\frac{1}{2}(x^{k+1}+x^k)\\ &+\frac{\Delta t}{16}(x^{k+1}+2x^{k+\frac{3}{4}}-2x^{k+\frac{1}{4}}-x^k) \end{aligned}\tag{65}$$

$$\begin{aligned} &x^{k+\frac{3}{4}}\\ &=\frac{1}{4}(3x^{k+1}+x^k)\\ &+\frac{\Delta t}{32}(3x^{k+1}+2x^{k+\frac{3}{4}}-2x^{k+\frac{1}{2}}\\ &\qquad -2x^{k+\frac{1}{4}}-x^k) \end{aligned}\tag{66}$$

陽的スキームに書き直すと

$$x^{k+1}=\frac{1-\frac{\Delta t}{2}+\frac{19\Delta t^2}{192}-\frac{\Delta t^3}{128}+\frac{\Delta t^4}{3840}}{1+\frac{\Delta t}{2}+\frac{19\Delta t^2}{192}+\frac{\Delta t^3}{128}+\frac{\Delta t^4}{3840}}x^k \tag{67}$$

陽的スキームでみると，全て指数関数 $\exp(-\Delta t)$ の有理関数近似になっている。各スキームで数値的にどのくらい良い近似になっているのかを表1と表2に示した。下線は厳密な値と異なる部分である。4次のスキームが2次のスキームより精度が良いのは当然であるが，段数の異なる4次のスキームでは段数を増やすことによって若干の精度改善が見られる。

表1　厳密解との比較

Δt	$\exp(-\Delta t)$	1段2次	2段4次
0.2	0.8187308	0.8181818	0.8187311
0.4	0.6703200	0.6666666	0.6703296
0.6	0.5488116	0.5384616	0.5488722
0.8	0.4493290	0.4285715	0.4495413
1.0	0.3678795	0.3333333	0.3684210
1.2	0.3011942	0.2500000	0.3023256
1.4	0.2465970	0.1764706	0.2486583
1.6	0.2018965	0.1111111	0.2052980
1.8	0.1652989	0.0526316	0.1705069
2.0	0.1353353	0.0000000	0.1428571

表2　厳密解との比較

Δt	$\exp(-\Delta t)$	3段4次	4段4次
0.2	0.8187308	0.8187309	0.8187308
0.4	0.6703200	0.6703242	0.6703224
0.6	0.5488116	0.588384	0.5488266
0.8	0.4493290	0.4494223	0.4493813
1.0	0.3678795	0.3682260	0.3680116
1.2	0.3011942	0.3016845	0.3014677
1.4	0.2465970	0.2474826	0.2470894
1.6	0.2018965	0.2033435	0.2026985
1.8	0.1652989	0.1674899	0.1665092
2.0	0.1353353	0.1384615	0.1370558

5．おわりに

本研究では，1変数の勾配系に対して任意の段数で構成される4次のエネルギー散逸保証差分スキームを提案した。そのような差分スキームを構成するには，連続時間系には対応するものがない離散時間系特有の差分恒等式が重要な鍵となる。この差分恒等式として，ここで導いたものとは異なる式を考えることもできる。例えば，差分恒等式 (17) の代わりに

$$
\begin{aligned}
&a_3b_3 + a_2b_2 + a_1b_1 + a_0b_0 \\
&= \frac{1}{4}(a_3 + a_2 + a_1 + a_0)(b_3 + b_2 + b_1 + b_0) \\
&+ \frac{1}{4}(a_3 - a_2 + a_1 - a_0)(b_3 - b_2 + b_1 - b_0) \\
&+ \frac{1}{4}(a_3 + a_2 - a_1 - a_0)(b_3 + b_2 - b_1 - b_0) \\
&+ \frac{1}{4}(a_3 - a_2 - a_1 + a_0)(b_3 - b_2 - b_1 + b_0)
\end{aligned}
$$

を用いても，4次の差分スキームを構成できる。差分恒等式には，このような不定性の問題が存在する。

簡単な応用例を考えたが，段数が多くなると若干の精度改善が見られた。しかし，段数の増加は計算コストの増加を意味する。段数を増やすことで精度の次数を上げることができれば良いのであるが，エネルギー不等式と関連づけて差分スキームを構成しなければいけないので難しい問題である。多段階法の研究も必要かもしれない。今後の課題としたい。

参考文献

[1] 石森勇次（1997）：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，Vol.7, pp.26-33.

[2] 石森勇次（1998）：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，富山県立大学紀要，Vol.8, pp.10-16.

Energy-Decreasing Difference Schemes of Order 4 with Any Number of Stages for the One-Dimensional Gradient System

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

The fourth order difference schemes with s stages are constructed for the one-dimensional gradient system. The numerical methods guarantee the energy dissipation of the system.

Key Words: difference method, fourth order scheme, dissipative system, gradient system, differential equation