

1変数の勾配系に対する6次の エネルギー散逸保証差分スキーム

石森 勇次
(工学部教養教育)

1変数の勾配系に対して、エネルギー散逸を保証する精度が6次の差分スキームを提案する。このスキームは2次のスキームを組み合わせることで構成でき、段数4の計算法となっている。

キーワード：差分法，6次の精度，段数4，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 [1-3]、これらは4次の精度を持つスキームであった。

本研究では、さらに精度のよい6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

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

で記述される散逸力学系を考える。

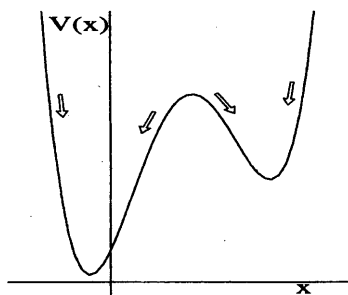


図1 エネルギー散逸

この力学系に対して、エネルギー不等式

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

が成り立つ。ここで、 $V(x)$ はエネルギー関数である。図1のように、不等式は時間の経過とともに $V'(x) = 0$ でない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となる。

2節ではまず2次の差分スキームについて述べる。次に3節では4次の差分スキームについて述べる。4節では、2次のスキームを組み合わせて6次の差分スキームを構成する。5節では、簡単な線形の力学系への応用を試み、次数の違いによる特徴や他の計算法特に Composition Scheme [5] との違いを調べる。

ここで、以下で使う記号を示しておく。時間 t の刻み幅を Δt として、 k ステップでの時間を

$$t^k = k\Delta t \quad (3)$$

と表し、 $t = t^k$ での関数 $f(t)$ の値を

$$f^k = f(t^k) \quad (4)$$

と表す。また、差分商演算子を

$$\delta_x^{a,b} V^k = \frac{V^{k+a} - V^{k+b}}{x^{k+a} - x^{k+b}} \quad (5)$$

のように定義する。

2. 2次の差分スキーム

この節では、2次のスキームについて説明する。

2.1 差分スキーム

2次の精度を持つエネルギー散逸保証差分スキームは

$$x^{k+1} = x^k - \Delta t \delta_x^{1,0} V^k \quad (6)$$

で与えられる [1]。この式は微分方程式 (1) の積分表示

$$x^{k+1} = x^k - \int_{t^k}^{t^{k+1}} V'(x(t)) dt \quad (7)$$

の差分化になっている。また、微分方程式 (1) そのものの差分化

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\Delta t} = -\delta_x^{1,0} V^k \quad (8)$$

とも同等である。

2.2 エネルギー不等式

差分恒等式

$$\begin{aligned} V^{k+1} - V^k &= \frac{V^{k+1} - V^k}{x^{k+1} - x^k} (x^{k+1} - x^k) \\ &= (\delta_x^{1,0} V^k) (x^{k+1} - x^k) \end{aligned} \quad (9)$$

に注意すると、差分スキーム (6) が

$$V^{k+1} - V^k = -\Delta t (\delta_x^{1,0} V^k)^2 \leq 0 \quad (10)$$

のように (2) を差分化した離散エネルギー不等式を満たすことが示される。即ち、差分スキーム (6) ではエネルギー散逸が保証される。

2.3 精度

x^k が与えられたときの x^{k+1} に対する差分方程式 (6) の級数解を求めると

$$x^{k+1} = x^k - \Delta t V_x^k + \frac{\Delta t^2}{2!} V_{xx}^k V_x^k + O[\Delta t^3] \quad (11)$$

となり、微分方程式 (1) の級数解の2次まで同じである。即ち、差分スキーム (6) は2次の精度を持つ計算法である。

3. 4次の差分スキーム

この節では、4次のスキームについて説明する。

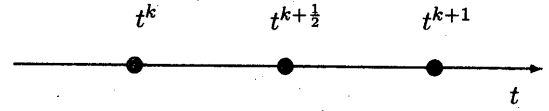


図2 4次のスキームと離散時間

3.1 差分スキーム

4次の精度を持つエネルギー散逸保証差分スキームは、図2のように3点で構成される計算法であり、

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\Delta t}{3} (2\delta_x^{1,1/2} + 2\delta_x^{1/2,0} - \delta_x^{1,0}) V^k \quad (12)$$

$$x^{k+1/2} = \frac{1}{2} (x^{k+1} + x^k) + \frac{\Delta t}{4} (\delta_x^{1,1/2} - \delta_x^{1/2,0}) V^k \quad (13)$$

で与えられる [1]。即ち、2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2段 (stage 数 = 2) の計算法である。

3.2 エネルギー不等式

2点 (1分割) の差分恒等式 (9) とは異なる3点 (2分割) の差分恒等式

$$\begin{aligned} V^{k+1} - V^k &= (V^{k+1} - V^{k+1/2}) + (V^{k+1/2} - V^k) \\ &= (\delta_x^{1,1/2} V^k) (x^{k+1} - x^{k+1/2}) \\ &\quad + (\delta_x^{1/2,0} V^k) (x^{k+1/2} - x^k) \\ &= \frac{1}{2} [(\delta_x^{1,1/2} + \delta_x^{1/2,0}) V^k] (x^{k+1} - x^k) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{1,1/2} - \delta_x^{1/2,0}) V^k] (x^{k+1} - 2x^{k+1/2} + x^k) \end{aligned} \quad (14)$$

に注意する。ここで、2次の数値積分法から4次の数値積分法を構成する Romberg 法 [4] の比率 (付録を参照) で (9) と (14) を混合すると、 $\frac{4}{3} \times (14) - \frac{1}{3} \times (9)$ より差分恒等式

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

を得る。(15) に (12), (13) を代入すると、離散エネルギー不等式

$$\begin{aligned} V^{k+1} - V^k &= -\frac{\Delta t}{9} [(2\delta_x^{1,1/2} + 2\delta_x^{1/2,0} - \delta_x^{1,0}) V^k]^2 \end{aligned}$$

$$-\frac{\Delta t}{3}[(\delta_x^{1, \frac{1}{2}} - \delta_x^{\frac{1}{2}, 0})V^k]^2 \leq 0 \quad (16)$$

が導かれる。即ち、差分スキーム (12), (13) ではエネルギー散逸が保証される。

3.3 精度

x^k が与えられたときの x^{k+1} , $x^{k+\frac{1}{2}}$ に対する連立差分方程式 (12), (13) の級数解を求めると

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k - \Delta t V_x^k + \frac{\Delta t^2}{2!} V_x^k V_{xx}^k \\ &\quad - \frac{\Delta t^3}{3!} V_x (V_{xxx} V_x + V_{xx}^2) \\ &\quad + \frac{\Delta t^4}{4!} V_x (V_{xxxx} V_x^2 + 4V_{xxx} V_{xx} V_x + V_{xx}^3) \\ &\quad + O[\Delta t^5] \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} x^{k+\frac{1}{2}} &= x^k - (\Delta t/2)V_x^k + \frac{(\Delta t/2)^2}{2!} V_x^k V_{xx}^k \\ &\quad - \frac{(\Delta t/2)^3}{3!} V_x (V_{xxx} V_x + V_{xx}^2) \\ &\quad + \frac{(\Delta t/2)^4}{4!} V_x (V_{xxxx} V_x^2 + 2V_{xxx} V_{xx} V_x) \\ &\quad + O[\Delta t^5] \end{aligned} \quad (18)$$

となり、 x^{k+1} は微分方程式 (1) の級数解の4次まで同じである。即ち、差分スキーム (12), (13) は4次の精度を持つ計算法である。 $x^{k+\frac{1}{2}}$ の精度は3次であるが、補助変数なので問題はない。

4. 6次の差分スキーム

この節では、6次の差分スキームについて説明する。

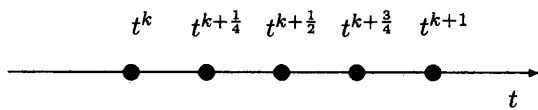


図3 6次のスキームと離散時間

4.1 差分スキーム

6次の精度を持つエネルギー散逸保証差分スキーム

は、図3のように5点で構成される計算法であり、

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k - \frac{\Delta t}{45} [16(\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} + \delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} + \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) \\ &\quad - 10(\delta_x^{1, \frac{1}{2}} + \delta_x^{\frac{1}{2}, 0}) + \delta_x^{1, 0}] V^k \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} x^{k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}(x^{k+1} + x^k) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{44} [(8\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + 8\delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} - 5\delta_x^{1, \frac{1}{2}}) \\ &\quad - (8\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} + 8\delta_x^{\frac{1}{4}, 0} - 5\delta_x^{\frac{1}{2}, 0})] V^k \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} x^{k+\frac{1}{4}} &= \frac{1}{2}(x^{k+\frac{1}{2}} + x^k) + \frac{\Delta t}{8} (\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) V^k \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} x^{k+\frac{3}{4}} &= \frac{1}{2}(x^{k+1} + x^{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{8} (\delta_x^{1, \frac{3}{4}} - \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) V^k \end{aligned} \quad (22)$$

与えられる。即ち、4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4段 (stage数 = 4) の計算法である。

4.2 エネルギー不等式

2点 (1分割) の差分恒等式 (9) や3点 (2分割) の差分恒等式 (14) とは異なる5点 (4分割) の差分恒等式

$$\begin{aligned} V^{k+1} - V^k &= (V^{k+1} - V^{k+\frac{3}{4}}) + (V^{k+\frac{3}{4}} - V^{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + (V^{k+\frac{1}{2}} - V^{k+\frac{1}{4}}) + (V^{k+\frac{1}{4}} - V^k) \\ &= (\delta_x^{1, \frac{3}{4}} V^k)(x^{k+1} - x^{k+\frac{3}{4}}) \\ &\quad + (\delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} V^k)(x^{k+\frac{3}{4}} - x^{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + (\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} V^k)(x^{k+\frac{1}{2}} - x^{k+\frac{1}{4}}) \\ &\quad + (\delta_x^{\frac{1}{4}, 0} V^k)(x^{k+\frac{1}{4}} - x^k) \\ &= \frac{1}{2} [(\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) V^k] (x^{k+1} - x^{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{1, \frac{3}{4}} - \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) V^k] (x^{k+1} - 2x^{k+\frac{3}{4}} + x^{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} + \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) V^k] (x^{k+\frac{1}{2}} - x^k) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) V^k] (x^{k+\frac{1}{2}} - 2x^{k+\frac{1}{4}} + x^k) \\ &= \frac{1}{4} [(\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} + \delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} + \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) V^k] (x^{k+1} - x^k) \\ &\quad + \frac{1}{4} [(\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} - \delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) V^k] (x^{k+1} - 2x^{k+\frac{1}{2}} + x^k) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{1, \frac{3}{4}} - \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) V^k] (x^{k+1} - 2x^{k+\frac{3}{4}} + x^{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) V^k] (x^{k+\frac{1}{2}} - 2x^{k+\frac{1}{4}} + x^k) \end{aligned} \quad (23)$$

に注意する。ここで、2次の数値積分法から6次の数値

積分法を構成する Romberg 法の比率 (付録を参照) で

(9) と (14) と (23) を混合すると,

$$\frac{64}{45} \times (23) - \frac{20}{45} \times (14) + \frac{1}{45} \times (9)$$

より差分恒等式

$$\begin{aligned} & V^{k+1} - V^k \\ &= \frac{1}{45} \{ \{ 16(\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} + \delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} + \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) \\ & - 10(\delta_x^{1, \frac{1}{2}} + \delta_x^{\frac{1}{2}, 0}) + \delta_x^{1, 0} \} V^k \} (x^{k+1} - x^k) \\ & + \frac{2}{45} \{ \{ (8\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + 8\delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} - 5\delta_x^{1, \frac{1}{2}}) \\ & - (8\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} + 8\delta_x^{\frac{1}{4}, 0} - 5\delta_x^{\frac{1}{2}, 0}) \} V^k \} \\ & \times (x^{k+1} - 2x^{k+\frac{1}{2}} + x^k) \\ & + \frac{32}{45} \{ (\delta_x^{1, \frac{3}{4}} - \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) V^k \} \\ & \times (x^{k+1} - 2x^{k+\frac{3}{4}} + x^{k+\frac{1}{2}}) \\ & + \frac{32}{45} \{ (\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) V^k \} \\ & \times (x^{k+\frac{1}{2}} - 2x^{k+\frac{1}{4}} + x^k) \end{aligned} \quad (24)$$

を得る。(24) に差分スキーム (19-22) を代入すると, 離散エネルギー不等式

$$\begin{aligned} & V^{k+1} - V^k \\ &= -\frac{\Delta t}{2025} \{ \{ 16(\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} + \delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} + \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) \\ & - 10(\delta_x^{1, \frac{1}{2}} + \delta_x^{\frac{1}{2}, 0}) + \delta_x^{1, 0} \} V^k \}^2 \\ & - \frac{\Delta t}{495} \{ \{ (8\delta_x^{1, \frac{3}{4}} + 8\delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}} - 5\delta_x^{1, \frac{1}{2}}) \\ & - (8\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} + 8\delta_x^{\frac{1}{4}, 0} - 5\delta_x^{\frac{1}{2}, 0}) \} V^k \}^2 \\ & - \frac{8\Delta t}{45} \{ (\delta_x^{1, \frac{3}{4}} - \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) V^k \}^2 \\ & - \frac{8\Delta t}{45} \{ (\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) V^k \}^2 \\ & \leq 0 \end{aligned} \quad (25)$$

が導かれる。即ち, 差分スキーム (19-22) ではエネルギー散逸が保証される。

4.3 精度

x^k が与えられたときの x^{k+1} , $x^{k+\frac{1}{2}}$, $x^{k+\frac{1}{4}}$, $x^{k+\frac{3}{4}}$ に

対する連立差分方程式 (19-22) の級数解を求めると

$$\begin{aligned} & x^{k+1} \\ &= x^k - \Delta t V_x^k + \frac{\Delta t^2}{2!} V_x^k V_{xx}^k \\ & - \frac{\Delta t^3}{3!} V_x (V_{xxx} V_x + V_{xx}^2) \\ & + \frac{\Delta t^4}{4!} V_x (V_{xxxx} V_x^2 + 4V_{xxx} V_{xx} V_x + V_{xx}^3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{\Delta t^5}{5!} V_x (V_{xxxxx} V_x^3 + 7V_{xxxx} V_{xx} V_x^2 \\ & + 11V_{xxx} V_{xx}^2 V_x + 4V_{xxx}^2 V_x^2 + V_{xx}^4) \\ & + \frac{\Delta t^6}{6!} V_x (V_{xxxxxx} V_x^4 + 11V_{xxxxx} V_{xx} V_x^3 \\ & + 15V_{xxxx} V_{xxx} V_x^3 + 32V_{xxxx} V_{xx}^2 V_x^2 \\ & + 26V_{xxx} V_{xx}^3 V_x + 34V_{xxx}^2 V_{xx} V_x^2 + V_{xx}^5) \\ & + O[\Delta t^7] \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} & x^{k+\frac{1}{2}} \\ &= x^k - (\Delta t/2) V_x^k + \frac{(\Delta t/2)^2}{2!} V_x^k V_{xx}^k \\ & - \frac{(\Delta t/2)^3}{3!} V_x (V_{xxx} V_x + V_{xx}^2) \\ & + \frac{(\Delta t/2)^4}{4!} V_x (V_{xxxx} V_x^2 + \frac{46}{11} V_{xxx} V_{xx} V_x + \frac{12}{11} V_{xx}^3) \\ & - \frac{(\Delta t/2)^5}{5!} V_x (V_{xxxxx} V_x^3 + \frac{87}{11} V_{xxxx} V_{xx} V_x^2 \\ & + \frac{156}{11} V_{xxx} V_{xx}^2 V_x + \frac{54}{11} V_{xxx}^2 V_x^2 + \frac{16}{11} V_{xx}^4) \\ & + \frac{(\Delta t/2)^6}{6!} V_x (V_{xxxxxx} V_x^4 + \frac{152}{11} V_{xxxxx} V_{xx} V_x^3 \\ & + \frac{250}{11} V_{xxxx} V_{xxx} V_x^3 + \frac{1141}{22} V_{xxxx} V_{xx}^2 V_x^2 \\ & + \frac{6804}{121} V_{xxx} V_{xx}^3 V_x + \frac{696}{11} V_{xxx}^2 V_{xx} V_x^2 + \frac{344}{121} V_{xx}^5) \\ & + O[\Delta t^7] \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} & x^{k+\frac{1}{4}} \\ &= x^k - (\Delta t/4) V_x^k + \frac{(\Delta t/4)^2}{2!} V_x^k V_{xx}^k \\ & - \frac{(\Delta t/4)^3}{3!} V_x (V_{xxx} V_x + V_{xx}^2) \\ & + \frac{(\Delta t/4)^4}{4!} V_x (V_{xxxx} V_x^2 + \frac{38}{11} V_{xxx} V_{xx} V_x + \frac{8}{11} V_{xx}^3) \\ & - \frac{(\Delta t/4)^5}{5!} V_x (V_{xxxxx} V_x^3 + \frac{127}{11} V_{xxxx} V_{xx} V_x^2 \\ & + \frac{256}{11} V_{xxx} V_{xx}^2 V_x + \frac{94}{11} V_{xxx}^2 V_x^2 + \frac{16}{11} V_{xx}^4) \\ & + \frac{(\Delta t/4)^6}{6!} V_x (V_{xxxxxx} V_x^4 + \frac{739}{11} V_{xxxxx} V_{xx} V_x^3 \\ & + \frac{1785}{11} V_{xxxx} V_{xxx} V_x^3 + \frac{805}{2} V_{xxxx} V_{xx}^2 V_x^2 \\ & + \frac{62540}{121} V_{xxx} V_{xx}^3 V_x + \frac{6110}{11} V_{xxx}^2 V_{xx} V_x^2 + \frac{2560}{121} V_{xx}^5) \\ & + O[\Delta t^7] \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} & x^{k+\frac{3}{4}} \\ &= x^k - (3\Delta t/4) V_x^k + \frac{(3\Delta t/4)^2}{2!} V_x^k V_{xx}^k \\ & - \frac{(3\Delta t/4)^3}{3!} V_x (V_{xxx} V_x + V_{xx}^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{(3\Delta t/4)^4}{4!} V_x (V_{xxxx} V_x^2 + \frac{1186}{297} V_{xxx} V_{xx} V_x + \frac{296}{297} V_{xx}^3) \\
& - \frac{(3\Delta t/4)^5}{5!} V_x (V_{xxxxx} V_x^3 + \frac{18541}{2673} V_{xxxx} V_{xx} V_x^2 \\
& + \frac{9616}{891} V_{xxx} V_{xx}^2 V_x + \frac{10522}{2673} V_{xxx}^2 V_x^2 + \frac{2608}{2673} V_{xx}^4) \\
& + \frac{(3\Delta t/4)^6}{6!} V_x (V_{xxxxxx} V_x^4 + \frac{28729}{2673} V_{xxxxx} V_{xx} V_x^3 \\
& + \frac{12665}{891} V_{xxxx} V_{xxx} V_x^3 + \frac{162989}{5346} V_{xxxx} V_{xx}^2 V_x^2 \\
& + \frac{711236}{29403} V_{xxx} V_{xx}^3 V_x + \frac{7694}{243} V_{xxx}^2 V_{xx} V_x^2 + \frac{27136}{29403} V_{xx}^5) \\
& + O[\Delta t^7] \quad (29)
\end{aligned}$$

となり, x^{k+1} は微分方程式 (1) の級数解の6次まで同じである。即ち, 差分スキーム (19-22) は6次の精度を持つ計算法である。 $x^{k+\frac{1}{2}}$, $x^{k+\frac{1}{4}}$, $x^{k+\frac{3}{4}}$ の精度は3次であるが, 補助変数なので問題はない。

5. 応用例

応用例として

$$V(x) = \frac{1}{2} x^2 \quad (30)$$

$$\frac{dx}{dt} = -x \quad (31)$$

$$x(t) = e^{-t} x(0) \quad (32)$$

を考える。(32) より, x^{k+1} と x^k の厳密な関係は

$$x^{k+1} = e^{-\Delta t} x^k \quad (33)$$

で与えられる。

5.1 次数と精度の比較

各次数の差分スキームを比較する。2次の差分スキーム (6) をこの系に应用すると

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\Delta t}{2} (x^{k+1} + x^k) \quad (34)$$

となる。陽的な式に書き直すと

$$x^{k+1} = \frac{1 - \frac{\Delta t}{2}}{1 + \frac{\Delta t}{2}} x^k \quad (35)$$

4次の差分スキーム (12), (13) をこの系に应用すると

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\Delta t}{6} (x^{k+1} + 4x^{k+\frac{1}{2}} + x^k) \quad (36)$$

$$x^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (x^{k+1} + x^k) + \frac{\Delta t}{8} (x^{k+1} - x^k) \quad (37)$$

となる。陽的な式に書き直すと

$$x^{k+1} = \frac{1 - \frac{\Delta t}{2} + \frac{\Delta t^2}{12}}{1 + \frac{\Delta t}{2} + \frac{\Delta t^2}{12}} x^k \quad (38)$$

6次の差分スキーム (19-22) をこの系に应用すると

$$\begin{aligned}
& x^{k+1} \\
& = x^k - \frac{\Delta t}{90} (7x^{k+1} + 32x^{k+\frac{3}{4}} + 12x^{k+\frac{1}{2}} \\
& \quad + 32x^{k+\frac{1}{4}} + 7x^k) \quad (39)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& x^{k+\frac{1}{2}} \\
& = \frac{1}{2} (x^{k+1} + x^k) \\
& + \frac{\Delta t}{88} (3x^{k+1} + 16x^{k+\frac{3}{4}} - 16x^{k+\frac{1}{4}} - 3x^k) \quad (40)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& x^{k+\frac{1}{4}} \\
& = \frac{1}{2} (x^{k+\frac{1}{2}} + x^k) + \frac{\Delta t}{16} (x^{k+\frac{1}{2}} - x^k) \quad (41)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& x^{k+\frac{3}{4}} \\
& = \frac{1}{2} (x^{k+1} + x^{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{16} (x^{k+1} - x^{k+\frac{1}{2}}) \quad (42)
\end{aligned}$$

陽的な式に書き直すと

$$x^{k+1} = \frac{1 - \frac{\Delta t}{2} + \frac{7\Delta t^2}{66} - \frac{\Delta t^3}{88} + \frac{\Delta t^4}{1980}}{1 + \frac{\Delta t}{2} + \frac{7\Delta t^2}{66} + \frac{\Delta t^3}{88} + \frac{\Delta t^4}{1980}} x^k \quad (43)$$

陽的な式でみると, 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に示した。下線は厳密な値と異なる部分である。2次, 4次, 6次と次数が高くなるにつれて精度が良くなっている。

表1 次数と精度の比較

Δt	$\exp(-\Delta t)$	2次	4次	6次
0.2	0.8187307	0.818 <u>1818</u>	0.8187311	0.8187307
0.4	0.6703200	0.6666666	0.6703296	0.6703200
0.6	0.5488116	0.5384615	0.5488721	0.5488116
0.8	0.4493289	0.4285714	0.4495412	0.4493288
1.0	0.3678794	0.3333333	0.3684210	0.3678788
1.2	0.3011942	0.2500000	0.3023255	0.3011925
1.4	0.2465969	0.1764705	0.2486583	0.2465929
1.6	0.2018965	0.1111111	0.2052980	0.2018881
1.8	0.1652988	0.0526315	0.1705069	0.1652831
2.0	0.1353352	0.0000000	0.1428571	0.1353082

Δt の広い範囲で, どのような様子になっているのかを図4に示した。2次のスキームは Δt が2を超えると

x^{k+1}/x^k の値が負になってしまう。一方4次や6次のスキームではそのようなことはない。また、6次は4次に比べて広い範囲で厳密解に近いことがわかる。

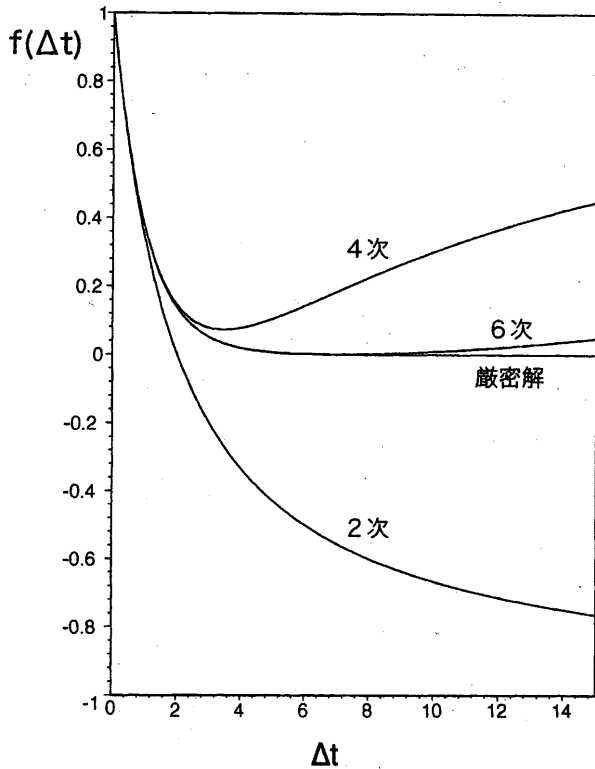


図4 次数と $f(\Delta t) = x^{k+1}/x^k$

5.2 Composition Scheme との比較

ここでは、他のスキームとの比較を行う。2次のスキームを利用して高次のスキームを構成する方法として Composition Scheme [5] が知られている。これは、 x^k から x^{k+c_1} を2次のスキームで計算し、次にこの x^{k+c_1} から $x^{k+c_1+c_2}$ を再び2次のスキームで計算するというふうに次々に2次のスキームを連結して最後に $x^{k+1} = x^{k+c_1+c_2+\dots+c_s}$ ($c_1 + c_2 + \dots + c_s = 1$) を求める方法である。もし、 c_1, c_2, \dots, c_s をうまく選べば x^{k+1} は高次の精度で求まる。ここでは、Yoshida の方法 [5]:

4次 ($s = 3$)

$$c_1 = c_3 = \frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{3}}}, c_2 = -\frac{2^{\frac{1}{3}}}{2 - 2^{\frac{1}{3}}} \tag{44}$$

6次 ($s = 9$)

$$c_1 = c_3 = c_7 = c_9 = \frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{3}}}, \frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{3}}} \tag{45}$$

$$c_2 = c_8 = -\frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{3}}}, \frac{2^{\frac{1}{3}}}{2 - 2^{\frac{1}{3}}} \tag{46}$$

$$c_4 = c_6 = -\frac{2^{\frac{1}{3}}}{2 - 2^{\frac{1}{3}}}, \frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{3}}} \tag{47}$$

$$c_5 = \frac{2^{\frac{1}{3}}}{2 - 2^{\frac{1}{3}}}, \frac{2^{\frac{1}{3}}}{2 - 2^{\frac{1}{3}}} \tag{48}$$

と本研究で提案したスキームとの比較を行う。

表2に4次の場合について、散逸保証スキームと Composition Scheme の比較を示した。 Δt が小さいとどちらも同じような精度であるが、少し大きくなると精度に大きな差が出てくる。

表2 Composition Scheme との比較 (4次)

Δt	$\exp(-\Delta t)$	散逸保証	Composition
0.1	0.9048374	0.9048374	0.9048380
0.2	0.8187307	0.8187311	0.8187486
0.3	0.7408182	0.7408207	0.7409469
0.4	0.6703200	0.6703296	0.6708432
0.5	0.6065306	0.6065573	0.6081063
0.6	0.5488116	0.5488721	0.5527899
0.7	0.4965853	0.4967046	0.5056289
0.8	0.4493289	0.4495412	0.4688254
0.9	0.4065696	0.4069192	0.4485775
1.0	0.3678794	0.3684210	0.4663184

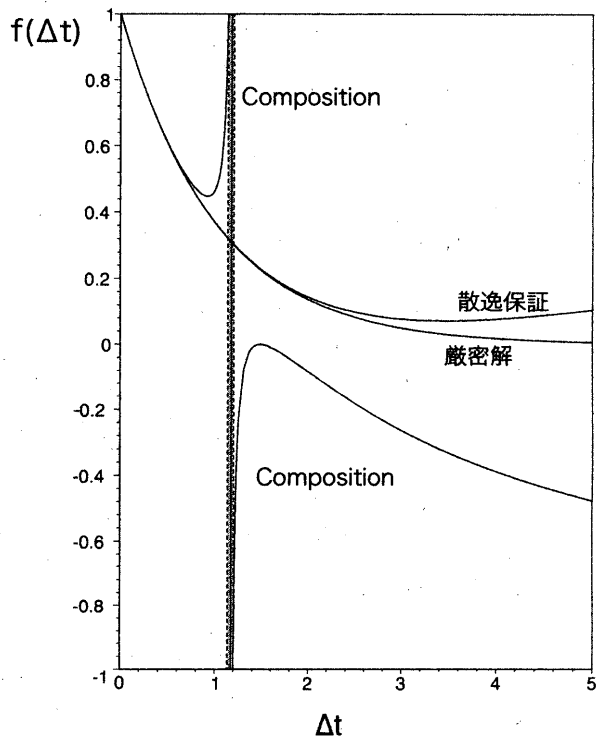


図5 Composition Scheme との比較 (4次)

Δt の広い範囲で、どのような様子になっているのか

を図5に示した。Composition Schemeでは Δt が1の付近で $f(\Delta t)$ が非常に大きくなって $|f(\Delta t)| > 1$ となる部分が存在する。即ち、エネルギーが増大するような Δt が存在しエネルギーの散逸性を破っている。これは、Composition Schemeでは(44)式からわかるように時間の逆向きの計算が途中に入っているため、エネルギー増大が途中で起き、正味のエネルギー関数の値は増大するためである。その意味で、Composition Schemeは散逸系には不向きなスキームであるといえる。

表3 Composition scheme との比較 (6次)

Δt	$\exp(-\Delta t)$	散逸保証	Composition
0.1	0.9048374	0.9048374	0.9048374
0.2	0.8187307	0.8187307	0.8187294
0.3	0.7408182	0.7408182	0.7407961
0.4	0.6703200	0.6703200	0.6701414
0.5	0.6065306	0.6065306	0.6055381
0.6	0.5488116	0.5488116	0.5442248
0.7	0.4965853	0.4965852	0.4762992
0.8	0.4493289	0.4493283	0.3473449
0.9	0.4065696	0.4065693	-0.4740105

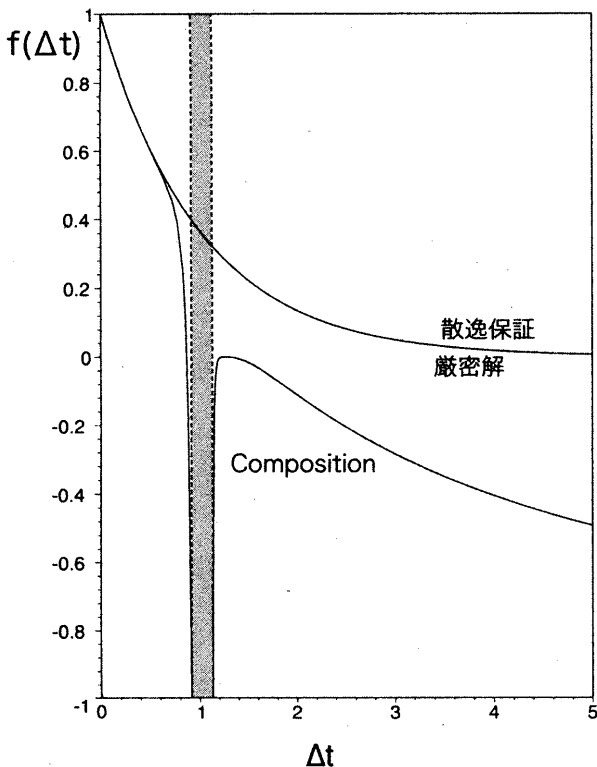


図6 Composition Scheme との比較 (6次)

表3に6次の場合について、散逸保証スキームと

Composition Schemeの比較を示した。4次の場合と同様に、 Δt が小さいとどちらも同じような精度であるが、少し大きくなると精度に大きな差が出てくる。

Δt の広い範囲で、どのような様子になっているのかを図6に示した。4次の場合と同様に、Composition Schemeでは Δt が1の付近で $f(\Delta t)$ が非常に大きくなって $|f(\Delta t)| > 1$ となる部分が存在する。しかも、その範囲は4次の場合よりも広がっている。即ち、次数の高い方が散逸性を壊す範囲が広がっていて、高次スキームはかえって危険なスキームとなっている。なお、図6では、厳密解と散逸保証スキームとの違いはみえていない。

6. おわりに

本研究では、1変数の勾配系に対して6次のエネルギー散逸保証差分スキームを提案し、簡単な線形系への応用を試み精度のよいスキームであることを確認した。また、散逸を保証するわけではないが高次のスキームであるComposition Schemeとの比較も行った。Composition Schemeでは、時間の逆方向の計算を含むので散逸性を破壊する現象がみられたが、本研究で提案した散逸保証差分スキームではそのようなことは起こらなかった。

本研究では1変数の勾配系を扱ったが、多変数の勾配系についてはまだ研究が進んでいない。これは、差分スキームの級数解を求めるのに数式処理システム (Maple 9) を使っているため一般の n 変数のときの級数解を扱うことができないからである。また、6次を超えるような高次の差分スキームも今後の課題として残されている。

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.

[3] 石森勇次 (2002) : 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, 富山県立大学紀要, Vol.12, pp.13-20.

[4] 長嶋秀世 (2000) : 数値計算法, 槇書店, p.90.

[5] E.Hairer, C.Lubich, G.Wanner (2002) : *Geometric Numerical Integration*, Springer.

付録 Romberg 法における2次スキームの混合比率

ここでは, 高次スキームが2次スキームをどのように組み合わせて構成されるのかを説明する [4]。区間 $[t^{k+a}, t^{k+b}]$ における n 次の数値積分法を $I_n^{a,b}$ とする。区間 $[t^{k+1}, t^k]$ における4次のスキームは2次のスキームを用いて

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

となる。また, 区間 $[t^{k+1}, t^k]$ における6次のスキームは4次のスキームを用いて

$$I_6^{1,0} = \frac{16}{15}(I_4^{1,\frac{1}{2}} + I_4^{\frac{1}{2},0}) - \frac{1}{15}I_4^{1,0}$$

となる。この式で, 4次のスキームを2次のスキームを用いて表すと

$$\begin{aligned} & I_6^{1,0} \\ &= \frac{16}{15} \left[\frac{4}{3}(I_2^{1,\frac{3}{4}} + I_2^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}}) - \frac{1}{3}I_2^{1,\frac{1}{2}} \right] \\ &+ \frac{16}{15} \left[\frac{4}{3}(I_2^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}} + I_2^{\frac{1}{4},0}) - \frac{1}{3}I_2^{\frac{1}{2},0} \right] \\ &- \frac{1}{15} \left[\frac{4}{3}(I_2^{1,\frac{1}{2}} + I_2^{\frac{1}{2},0}) - \frac{1}{3}I_2^{1,0} \right] \\ &= \frac{64}{45}(I_2^{1,\frac{3}{4}} + I_2^{\frac{3}{4},\frac{1}{2}} + I_2^{\frac{1}{2},\frac{1}{4}} + I_2^{\frac{1}{4},0}) \\ &- \frac{20}{45}(I_2^{1,\frac{1}{2}} + I_2^{\frac{1}{2},0}) + \frac{1}{45}I_2^{1,0} \end{aligned}$$

となる。

An Energy-Decreasing Difference Scheme of Order 6 for the One-Dimensional Gradient System

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

A sixth order difference scheme is constructed for the one-dimensional gradient system. The numerical method guarantees the energy dissipation of the system.

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