

エネルギー保存・散逸を保証する 段数4または9で構成される6次の差分スキーム

石森 勇次

(工学部教養教育)

力学系に対する数値計算法として、エネルギー関数の性質であるエネルギー保存や散逸性を壊さないような方法で、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により構成でき、段数4または9の陰解法となっている。

キーワード：差分法，6次の精度，エネルギー保存・散逸，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保つような差分スキームを考える。保存力学系の場合それはエネルギー関数の値が一定であることを保証するような方法であり、散逸力学系の場合それ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ような方法である。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。また、1変数の勾配系に対してはすでに段数4の陰解法である6次のスキームを提案した[4]。

本研究では、散逸項をもつ2変数系に対して6次の差分スキームを提案する。段数4および9のスキームを考え、応用例を通じて段数の違いによる特徴も調べる。

扱う系として、微分方程式

$$\frac{dp}{dt} = -V'(q) - \alpha T'(p) \quad (1)$$

$$\frac{dq}{dt} = T'(p) \quad (2)$$

で記述される力学系を考える。ここで α は定数で $\alpha \geq 0$ とする。

この力学系に対して、エネルギー関数

$$H = T(p) + V(q) \quad (3)$$

の不等式

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= T' \frac{dp}{dt} + V' \frac{dq}{dt} \\ &= T'(-V' - \alpha T') + V' T' \\ &= -\alpha (T')^2 \leq 0 \end{aligned} \quad (4)$$

が成り立つ。 $\alpha = 0$ のとき、即ち保存力学系のときエネルギー H は保存される。一方、 $\alpha > 0$ のとき、即ち散逸力学系のとき $T'(p) = 0$ でない限りエネルギーは時間の経過とともに減少する。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保存または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る6次の差分スキームを構成する。5節では、調和振動子への応用を試み、次数や段数の違いによる特徴を調べる。

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

$$t^k = k\Delta t \quad (5)$$

と表し、 $t = t^k$ での関数 $p(t), q(t), T(p(t)), V(q(t))$ とその数値解 p^k, q^k, T^k, V^k を

$$p(t^k) \rightarrow p^k, q(t^k) \rightarrow q^k \quad (6)$$

$$T(p(t^k)) \rightarrow T^k, V(q(t^k)) \rightarrow V^k \quad (7)$$

のようにそれぞれ対応させる。また、差分商演算子を

$$\delta_x^{a,b} F^k = \frac{F^{k+a} - F^{k+b}}{x^{k+a} - x^{k+b}} \quad (8)$$

$$F = T, x = p \text{ または } F = V, x = q \quad (9)$$

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保存・散逸保証差分スキームは

$$p^{k+1} = p^k - \Delta t(\delta_q^{1,0} V^k + \alpha \delta_p^{1,0} T^k) \quad (10)$$

$$q^{k+1} = q^k - \Delta t \delta_p^{1,0} T^k \quad (11)$$

で与えられる。この式は逆写像 $(p^k, q^k) \rightarrow (p^{k+1}, q^{k+1})$ において $\Delta t \rightarrow -\Delta t$ としたスキームと同じ時間発展をする、即ち対称なスキームであるので精度が2次となる[5]。(10),(11)は微分方程式(1),(2)の積分表示

$$p(t^{k+1}) = p(t^k) - \int_{t^k}^{t^{k+1}} [V'(q(t)) + \alpha T'(p(t))] dt$$

$$q(t^{k+1}) = q(t^k) + \int_{t^k}^{t^{k+1}} T'(p(t)) dt$$

の差分化になっている。また、微分方程式(1),(2)そのものの差分化

$$\frac{p^{k+1} - p^k}{\Delta t} = -\delta_q^{1,0} V^k - \alpha \delta_p^{1,0} T^k$$

$$\frac{q^{k+1} - q^k}{\Delta t} = \delta_p^{1,0} T^k$$

とも同等である。

2.2 エネルギー不等式

差分恒等式

$$F^{k+1} - F^k = \frac{F^{k+1} - F^k}{x^{k+1} - x^k} (x^{k+1} - x^k)$$

$$= (\delta_x^{1,0} F^k)(x^{k+1} - x^k) \quad (12)$$

に注意すると、

$$H^{k+1} - H^k = (\Delta_p^{1,0} T^k)(p^{k+1} - p^k)$$

$$+ (\Delta_q^{1,0} V^k)(q^{k+1} - q^k)$$

$$= -\alpha \Delta t (\Delta_p^{1,0} T^k)^2 \leq 0 \quad (13)$$

のように連続時間系のエネルギー不等式(4)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(10),(11)ではエネルギー保存・散逸が保証される。

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。以下で議論するように図1のような段数2と3の2つのスキームを提案する。

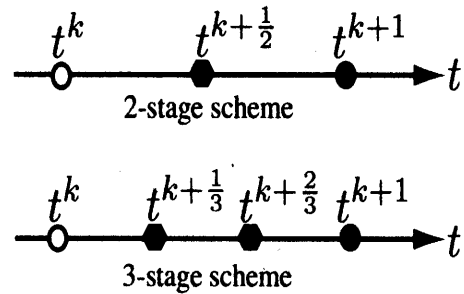


図1 4次のスキームと離散時間

3.1 段数2の差分スキーム

4次の精度を持つ段数2のエネルギー保存・散逸保証差分スキームは、図1のように3点間で構成される計算法であり、

$$p^{k+1} = p^k - \frac{\Delta t}{3} \left[\left(2 \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{1}{2}, \frac{i-1}{2}} - \delta_q^{1,0} \right) V^k + \alpha \left(2 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{1}{2}, \frac{i-1}{2}} - \delta_p^{1,0} \right) T^k \right] \quad (14)$$

$$q^{k+1} = q^k + \frac{\Delta t}{3} \left(2 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{1}{2}, \frac{i-1}{2}} - \delta_p^{1,0} \right) T^k \quad (15)$$

$$p^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (p^{k+1} + p^k) + \frac{\Delta t}{4} \left[(\delta_q^{1,\frac{1}{2}} - \delta_q^{\frac{1}{2},0}) V^k + \alpha (\delta_p^{1,\frac{1}{2}} - \delta_p^{\frac{1}{2},0}) T^k \right] \quad (16)$$

$$q^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (q^{k+1} + q^k) - \frac{\Delta t}{4} (\delta_p^{1,\frac{1}{2}} - \delta_p^{\frac{1}{2},0}) T^k \quad (17)$$

で与えられる。即ち、 (p^{k+1}, q^{k+1}) と $(p^{k+\frac{1}{2}}, q^{k+\frac{1}{2}})$ に対する連立方程式という2組の計算式から (p^{k+1}, q^{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。また、 (p^k, q^k) が与

えられたときの (p^{k+1}, q^{k+1}) に対する連立差分方程式 (14-17) の級数解は微分方程式 (1), (2) の級数解の4次まで等しいので, この差分スキームは4次の精度をもつ計算法である。

3.2 段数2のときのエネルギー不等式

2点(1分割)の差分恒等式(12)とは異なる3点(2分割)の差分恒等式

$$\begin{aligned} F^{k+1} - F^k &= \sum_{i=1}^2 (F^{k+\frac{1}{2}} - F^{k+\frac{i-1}{2}}) \\ &= \sum_{i=1}^2 (\delta_x^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} F^k) (x^{k+\frac{1}{2}} - x^{k+\frac{i-1}{2}}) \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^2 \delta_x^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} F^k \right) (x^{k+1} - x^k) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{1, \frac{1}{2}} - \delta_x^{\frac{1}{2}, 0}) F^k] (x^{k+1} - 2x^{k+\frac{1}{2}} + x^k) \quad (18) \end{aligned}$$

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2分割系列のRomberg法[6]の比率(付録を参照)で(12)と(18)を混合した式 $\frac{4}{3} \times (18) - \frac{1}{3} \times (12)$ を用いて, 差分恒等式

$$\begin{aligned} H^{k+1} - H^k &= \frac{1}{3} [(2 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} - \delta_p^{1,0}) T^k] (p^{k+1} - p^k) \\ &\quad + \frac{1}{3} [(2 \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} - \delta_q^{1,0}) V^k] (q^{k+1} - q^k) \\ &\quad + \frac{2}{3} [(\delta_p^{1, \frac{1}{2}} - \delta_p^{\frac{1}{2}, 0}) T^k] (p^{k+1} - 2p^{k+\frac{1}{2}} + p^k) \\ &\quad + \frac{2}{3} [(\delta_q^{1, \frac{1}{2}} - \delta_q^{\frac{1}{2}, 0}) V^k] (q^{k+1} - 2q^{k+\frac{1}{2}} + q^k) \quad (19) \end{aligned}$$

を得る。(19)に差分スキーム(14-17)を代入すると, 離散エネルギー不等式

$$\begin{aligned} H^{k+1} - H^k &= -\alpha \frac{\Delta t}{9} [(2 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} - \delta_p^{1,0}) T^k]^2 \\ &\quad - \alpha \frac{\Delta t}{3} [(\delta_p^{1, \frac{1}{2}} - \delta_p^{\frac{1}{2}, 0}) T^k]^2 \leq 0 \quad (20) \end{aligned}$$

が導かれる。即ち, 差分スキーム(14-17)ではエネルギー保存・散逸が保証される。

3.3 段数3の差分スキーム

4次の精度を持つ段数3のエネルギー散逸保証差分スキームは, 図1のように4点間で構成される計算法であり,

$$\begin{aligned} p^{k+1} &= p^k \\ &\quad - \frac{\Delta t}{8} [(3 \sum_{i=1}^3 \delta_q^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - \delta_q^{1,0}) V^k \\ &\quad + \alpha (3 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - \delta_p^{1,0}) T^k] \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q^{k+1} &= q^k \\ &\quad + \frac{\Delta t}{8} (3 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - \delta_p^{1,0}) T^k \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p^{k+\frac{1}{3}} &= \frac{1}{3} (p^{k+1} + 2p^k) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{9} [(\sum_{i=2}^3 \delta_q^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - 2\delta_q^{\frac{1}{3}, 0}) V^k \\ &\quad + \alpha (\sum_{i=2}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - 2\delta_p^{\frac{1}{3}, 0}) T^k] \quad (23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q^{k+\frac{1}{3}} &= \frac{1}{3} (q^{k+1} + 2q^k) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{9} (\sum_{i=2}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - 2\delta_p^{\frac{1}{3}, 0}) T^k \quad (24) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p^{k+\frac{2}{3}} &= \frac{1}{3} (2p^{k+1} + p^k) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{9} [(2\delta_q^{1, \frac{2}{3}} - \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}}) V^k \\ &\quad + \alpha (2\delta_p^{1, \frac{2}{3}} - \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}}) T^k] \quad (25) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q^{k+\frac{2}{3}} &= \frac{1}{3} (2q^{k+1} + q^k) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{9} (2\delta_p^{1, \frac{2}{3}} - \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}}) T^k \quad (26) \end{aligned}$$

で与えられる。即ち, (p^{k+1}, q^{k+1}) , $(p^{k+\frac{1}{3}}, q^{k+\frac{1}{3}})$ および $(p^{k+\frac{2}{3}}, q^{k+\frac{2}{3}})$ に対する連立方程式という3組の計算式から (p^{k+1}, q^{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3段(stage数=3)の計算法である。また, (p^k, q^k) が与えられたときの (p^{k+1}, q^{k+1}) に対する連立差分方程式(21-26)の級数解は微分方程式(1), (2)の級数解の4次まで等しいので, この差分スキームは4次の精度をもつ計算法である。

3.4 段数3のときのエネルギー不等式

2点(1分割)および3点(2分割)の差分恒等式(12)

および (18) とは異なる 4 点 (3 分割) の差分恒等式

$$\begin{aligned}
 & F^{k+1} - F^k \\
 &= \sum_{i=1}^3 (F^{k+\frac{i}{3}} - F^{k+\frac{i-1}{3}}) \\
 &= \sum_{i=1}^3 (\delta_x^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} F^k) (x^{k+\frac{i}{3}} - x^{k+\frac{i-1}{3}}) \\
 &= \frac{1}{3} \left(\sum_{i=1}^3 \delta_x^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} F^k \right) (x^{k+1} - x^k) \\
 &+ \frac{1}{2} [(\delta_x^{1, \frac{2}{3}} - \delta_x^{\frac{1}{3}, 0}) F^k] (x^{k+1} - x^{k+\frac{2}{3}} - x^{k+\frac{1}{3}} + x^k) \\
 &+ \frac{1}{6} [(\delta_x^{1, \frac{2}{3}} - 2\delta_x^{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}} + \delta_x^{\frac{1}{3}, 0}) F^k] \\
 &\times (x^{k+1} - 3x^{k+\frac{2}{3}} + 3x^{k+\frac{1}{3}} - x^k) \tag{27}
 \end{aligned}$$

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 3 分割系列の方法の比率 (付録を参照) で (12) と (27) を混合した式 $\frac{9}{8} \times (27) - \frac{1}{8} \times (12)$ を用いて、差分恒等式

$$\begin{aligned}
 & H^{k+1} - H^k \\
 &= \frac{1}{8} \left[\left(3 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - \delta_p^{1, 0} \right) T^k \right] (p^{k+1} - p^k) \\
 &+ \frac{1}{8} \left[\left(3 \sum_{i=1}^3 \delta_q^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - \delta_q^{1, 0} \right) V^k \right] (q^{k+1} - q^k) \\
 &+ \frac{9}{16} [(\delta_p^{1, \frac{2}{3}} - \delta_p^{\frac{1}{3}, 0}) T^k] (p^{k+1} - p^{k+\frac{2}{3}} - p^{k+\frac{1}{3}} + p^k) \\
 &+ \frac{9}{16} [(\delta_q^{1, \frac{2}{3}} - \delta_q^{\frac{1}{3}, 0}) V^k] (q^{k+1} - q^{k+\frac{2}{3}} - q^{k+\frac{1}{3}} + q^k) \\
 &+ \frac{3}{16} [(\delta_p^{1, \frac{2}{3}} - 2\delta_p^{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}} + \delta_p^{\frac{1}{3}, 0}) T^k] \\
 &\times (p^{k+1} - 3p^{k+\frac{2}{3}} + 3p^{k+\frac{1}{3}} - p^k) \\
 &+ \frac{3}{16} [(\delta_q^{1, \frac{2}{3}} - 2\delta_q^{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}} + \delta_q^{\frac{1}{3}, 0}) V^k] \\
 &\times (q^{k+1} - 3q^{k+\frac{2}{3}} + 3q^{k+\frac{1}{3}} - q^k) \tag{28}
 \end{aligned}$$

を得る。(28) に差分スキーム (21-26) を代入すると、離散エネルギー不等式

$$\begin{aligned}
 & H^{k+1} - H^k \\
 &= -\alpha \frac{\Delta t}{64} \left[\left(3 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - \delta_p^{1, 0} \right) T^k \right]^2 \\
 &- \alpha \frac{3\Delta t}{16} [(\delta_p^{1, \frac{2}{3}} - \delta_p^{\frac{1}{3}, 0}) T^k]^2 \\
 &- \alpha \frac{\Delta t}{16} [(\delta_p^{1, \frac{2}{3}} - 2\delta_p^{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}} + \delta_p^{\frac{1}{3}, 0}) T^k]^2 \leq 0 \tag{29}
 \end{aligned}$$

が導かれる。即ち、差分スキーム (21-26) ではエネルギー保存・散逸が保証される。

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。以下で議論するように図 2 のような段数 4 と 9 の 2 つのスキームを提案する。

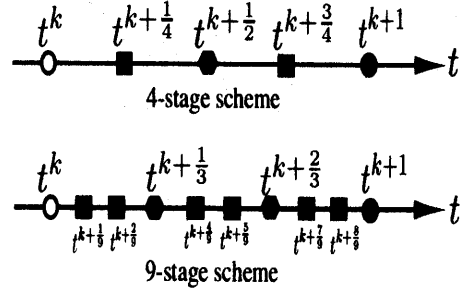


図 2 6 次のスキームと離散時間

4.1 段数 4 の差分スキーム

6 次の精度を持つエネルギー保存・散逸保証差分スキームとして、図 2 のように 2 分割点をさらに 2 分割した 5 点で構成される計算法を提案する。そのスキームは

$$\begin{aligned}
 & p^{k+1} = p^k \\
 & - \frac{\Delta t}{45} \left[\left(16 \sum_{i=1}^4 \delta_q^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} + \delta_q^{1, 0} \right) V^k \right. \\
 & \left. + \alpha \left(16 \sum_{i=1}^4 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} + \delta_p^{1, 0} \right) T^k \right] \tag{30}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & q^{k+1} = q^k \\
 & + \frac{\Delta t}{45} \left[\left(16 \sum_{i=1}^4 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} + \delta_p^{1, 0} \right) T^k \right] \tag{31}
 \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned}
 & p^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (p^{k+1} + p^k) \\
 & + \frac{\Delta t}{44} \left[\left\{ \left(8 \sum_{i=3}^4 \delta_q^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_q^{1, \frac{1}{2}} \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. - \left(8 \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_q^{\frac{1}{2}, 0} \right) \right\} V^k \right. \\
 & \left. + \alpha \left\{ \left(8 \sum_{i=3}^4 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_p^{1, \frac{1}{2}} \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. - \left(8 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_p^{\frac{1}{2}, 0} \right) \right\} T^k \right] \tag{32}
 \end{aligned}$$

$$q^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (q^{k+1} + q^k)$$

$$- \frac{\Delta t}{44} \left[\left(8 \sum_{i=3}^4 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_p^{1, \frac{1}{2}} \right) \right]$$

$$-(8 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_p^{\frac{1}{2}, 0})T^k \quad (33)$$

$$p^{k+\frac{1}{4}} = \frac{1}{2}(p^{k+\frac{1}{2}} + p^k) + \frac{\Delta t}{8} [(\delta_q^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_q^{\frac{1}{4}, 0})V^k + \alpha(\delta_p^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_p^{\frac{1}{4}, 0})T^k] \quad (34)$$

$$q^{k+\frac{1}{4}} = \frac{1}{2}(q^{k+\frac{1}{2}} + q^k) - \frac{\Delta t}{8} (\delta_p^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_p^{\frac{1}{4}, 0})T^k \quad (35)$$

$$p^{k+\frac{3}{4}} = \frac{1}{2}(p^{k+1} + p^{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{8} [(\delta_q^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_q^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}})V^k + \alpha(\delta_p^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_p^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}})T^k] \quad (36)$$

$$q^{k+\frac{3}{4}} = \frac{1}{2}(q^{k+1} + q^{k+\frac{1}{2}}) - \frac{\Delta t}{8} (\delta_p^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_p^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}})T^k \quad (37)$$

で与えられる。即ち、 (p^{k+1}, q^{k+1}) , $(p^{k+\frac{1}{4}}, q^{k+\frac{1}{4}})$, $(p^{k+\frac{1}{2}}, q^{k+\frac{1}{2}})$ および $(p^{k+\frac{3}{4}}, q^{k+\frac{3}{4}})$ に対する連立方程式という4組の計算式から (p^{k+1}, q^{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。また、 (p^k, q^k) が与えられたときの (p^{k+1}, q^{k+1}) に対する連立差分方程式 (30-37) の級数解は微分方程式 (1), (2) の級数解の6次まで等しいので、この差分スキームは6次の精度をもつ計算法である。

4.2 段数4のときのエネルギー不等式

5点 (4分割) の差分恒等式

$$\begin{aligned} F^{k+1} - F^k &= \sum_{i=1}^4 (F^{k+\frac{i}{4}} - F^{k+\frac{i-1}{4}}) \\ &= \sum_{i=1}^4 (\delta_x^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} F^k)(x^{k+\frac{i}{4}} - x^{k+\frac{i-1}{4}}) \\ &= \frac{1}{4} (\sum_{i=1}^4 \delta_x^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} F^k)(x^{k+1} - x^k) \\ &\quad + \frac{1}{4} [(\sum_{i=3}^4 \delta_x^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - \sum_{i=1}^2 \delta_x^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}}) F^k] \\ &\quad \times (x^{k+1} - 2x^{k+\frac{1}{2}} + x^k) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_x^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) F^k] (x^{k+1} - 2x^{k+\frac{3}{4}} + x^{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + \frac{1}{2} [(\delta_x^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_x^{\frac{1}{4}, 0}) F^k] (x^{k+\frac{1}{2}} - 2x^{k+\frac{1}{4}} + x^k) \quad (38) \end{aligned}$$

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

(12) と (18) と (38) を混合した式

$$\frac{64}{45} \times (38) - \frac{20}{45} \times (18) + \frac{1}{45} \times (12)$$

を用いて、差分恒等式

$$\begin{aligned} H^{k+1} - H^k &= \frac{1}{45} [16 \sum_{i=1}^4 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} + \delta_p^{1,0}] T^k \\ &\quad \times (p^{k+1} - p^k) \\ &\quad + \frac{1}{45} [16 \sum_{i=1}^4 \delta_q^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} + \delta_q^{1,0}] V^k \\ &\quad \times (q^{k+1} - q^k) \\ &\quad + \frac{2}{45} [(\delta_p^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_p^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) \\ &\quad - (8 \sum_{i=3}^4 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_p^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}) \\ &\quad - (8 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_p^{\frac{1}{2}, 0})] T^k \\ &\quad \times (p^{k+1} - 2p^{k+\frac{1}{2}} + p^k) \\ &\quad + \frac{2}{45} [(\delta_q^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_q^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) \\ &\quad - (8 \sum_{i=3}^4 \delta_q^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_q^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}) \\ &\quad - (8 \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_q^{\frac{1}{2}, 0})] V^k \\ &\quad \times (q^{k+1} - 2q^{k+\frac{1}{2}} + q^k) \\ &\quad + \frac{32}{45} [(\delta_p^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_p^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) T^k] \\ &\quad \times (p^{k+1} - 2p^{k+\frac{3}{4}} + p^{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + \frac{32}{45} [(\delta_q^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_q^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) V^k] \\ &\quad \times (q^{k+1} - 2q^{k+\frac{3}{4}} + q^{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + \frac{32}{45} [(\delta_p^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_p^{\frac{1}{4}, 0}) T^k] \\ &\quad \times (p^{k+\frac{1}{2}} - 2p^{k+\frac{1}{4}} + p^k) \\ &\quad + \frac{32}{45} [(\delta_q^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_q^{\frac{1}{4}, 0}) V^k] \\ &\quad \times (q^{k+\frac{1}{2}} - 2q^{k+\frac{1}{4}} + q^k) \quad (39) \end{aligned}$$

を得る。(39) に差分スキーム (30-37) を代入すると、離散エネルギー不等式

$$\begin{aligned} H^{k+1} - H^k &= -\alpha \frac{\Delta t}{2025} [(16 \sum_{i=1}^4 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} + \delta_p^{1,0}) T^k]^2 \\ &\quad - \alpha \frac{\Delta t}{495} [(\delta_p^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_p^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) \\ &\quad - (8 \sum_{i=3}^4 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_p^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}) \\ &\quad - (8 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 5\delta_p^{\frac{1}{2}, 0})] T^k]^2 \\ &\quad - \alpha \frac{8\Delta t}{45} [(\delta_p^{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}} - \delta_p^{\frac{3}{4}, \frac{1}{2}}) T^k]^2 \end{aligned}$$

$$-\alpha \frac{8\Delta t}{45} [(\delta_p^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} - \delta_p^{\frac{1}{2}, 0})T^k]^2 \leq 0 \quad (40)$$

が導かれる。即ち、差分スキーム (30-37) ではエネルギー保存・散逸が保証される。

4.3 段数9の差分スキーム

6次の精度を持つエネルギー散逸保証差分スキームとして、図2のように3分割点をさらに3分割した10点で構成される計算法を提案する。そのスキームは

$$p^{k+1} = p^k - \frac{\Delta t}{640} [(81 \sum_{i=1}^9 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 30 \sum_{i=1}^3 \delta_q^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} + \delta_q^{1,0})V^k + \alpha(81 \sum_{i=1}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 30 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} + \delta_p^{1,0})T^k] \quad (41)$$

$$q^{k+1} = q^k + \frac{\Delta t}{640} (81 \sum_{i=1}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 30 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} + \delta_p^{1,0})T^k \quad (42)$$

の他に

$$p^{k+\frac{1}{3}} = \frac{1}{3}(p^{k+1} + 2p^k) + \frac{\Delta t}{639} [(27 \sum_{i=4}^9 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10 \sum_{i=2}^3 \delta_q^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}}) - 2(27 \sum_{i=1}^3 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_q^{\frac{1}{3}, 0})]V^k + \alpha\{(27 \sum_{i=4}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10 \sum_{i=2}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}}) - 2(27 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{\frac{1}{3}, 0})\}T^k \quad (43)$$

$$q^{k+\frac{1}{3}} = \frac{1}{3}(q^{k+1} + 2q^k) - \frac{\Delta t}{639} [(27 \sum_{i=4}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10 \sum_{i=2}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}}) - 2(27 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{\frac{1}{3}, 0})]T^k \quad (44)$$

$$p^{k+\frac{2}{3}} = \frac{1}{3}(2p^{k+1} + p^k) + \frac{\Delta t}{639} [(2(27 \sum_{i=7}^9 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_q^{1, \frac{2}{3}}) - (27 \sum_{i=1}^6 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}}))]V^k + \alpha\{2(27 \sum_{i=7}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{1, \frac{2}{3}}) - (27 \sum_{i=1}^6 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}})\}T^k$$

$$- (27 \sum_{i=1}^6 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}})T^k \quad (45)$$

$$q^{k+\frac{2}{3}} = \frac{1}{3}(2q^{k+1} + q^k) - \frac{\Delta t}{639} [2(27 \sum_{i=7}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{1, \frac{2}{3}}) - (27 \sum_{i=1}^6 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10 \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}})]T^k \quad (46)$$

および $j = 0, 1, 2$ として

$$p^{k+\frac{j}{3}+\frac{1}{9}} = \frac{1}{3}(p^{k+\frac{j+1}{3}} + 2p^{k+\frac{j}{3}}) + \frac{\Delta t}{27} [(\sum_{i=2}^3 \delta_q^{\frac{j}{3}+\frac{i}{9}, \frac{j}{3}+\frac{i-1}{9}} - 2\delta_q^{\frac{j}{3}+\frac{1}{9}, \frac{j}{3}})V^k + \alpha(\sum_{i=2}^3 \delta_p^{\frac{j}{3}+\frac{i}{9}, \frac{j}{3}+\frac{i-1}{9}} - 2\delta_p^{\frac{j}{3}+\frac{1}{9}, \frac{j}{3}})T^k] \quad (47)$$

$$q^{k+\frac{j}{3}+\frac{1}{9}} = \frac{1}{3}(q^{k+\frac{j+1}{3}} + 2q^{k+\frac{j}{3}}) - \frac{\Delta t}{27} (\sum_{i=2}^3 \delta_p^{\frac{j}{3}+\frac{i}{9}, \frac{j}{3}+\frac{i-1}{9}} - 2\delta_p^{\frac{j}{3}+\frac{1}{9}, \frac{j}{3}})T^k \quad (48)$$

$$p^{k+\frac{j}{3}+\frac{2}{9}} = \frac{1}{3}(2p^{k+\frac{j+1}{3}} + p^{k+\frac{j}{3}}) + \frac{\Delta t}{27} [2\delta_q^{\frac{j+1}{3}, \frac{j}{3}+\frac{2}{9}} - \sum_{i=1}^2 \delta_q^{\frac{j}{3}+\frac{i}{9}, \frac{j}{3}+\frac{i-1}{9}}]V^k + \alpha(2\delta_p^{\frac{j+1}{3}, \frac{j}{3}+\frac{2}{9}} - \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{j}{3}+\frac{i}{9}, \frac{j}{3}+\frac{i-1}{9}})T^k \quad (49)$$

$$q^{k+\frac{j}{3}+\frac{2}{9}} = \frac{1}{3}(2q^{k+\frac{j+1}{3}} + q^{k+\frac{j}{3}}) - \frac{\Delta t}{27} (2\delta_p^{\frac{j+1}{3}, \frac{j}{3}+\frac{2}{9}} - \sum_{i=1}^2 \delta_p^{\frac{j}{3}+\frac{i}{9}, \frac{j}{3}+\frac{i-1}{9}})T^k \quad (50)$$

で与えられる。即ち、 $(p^{k+\frac{1}{9}}, q^{k+\frac{1}{9}})$, $(p^{k+\frac{2}{9}}, q^{k+\frac{2}{9}})$, ..., (p^{k+1}, q^{k+1}) に対する連立方程式という9組の計算式から (p^{k+1}, q^{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9段 (stage 数 = 9) の計算法である。また、 (p^k, q^k) が与えられたときの (p^{k+1}, q^{k+1}) に対する連立差分方程式 (41-50) の級数解は微分方程式 (1), (2) の級数解の6次まで等しいので、この差分スキームは6次の精度をもつ計算法である。

4.4 段数9のときのエネルギー不等式

10点 (9分割) の差分恒等式

$$F^{k+1} - F^k = \sum_{i=1}^9 (F^{k+\frac{i}{9}} - F^{k+\frac{i-1}{9}})$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^9 (\delta_x^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} F^k) (x^{k+\frac{i}{9}} - x^{k+\frac{i-1}{9}}) \\
&= \frac{1}{9} \left(\sum_{i=1}^9 \delta_x^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} F^k \right) (x^{k+1} - x^k) \\
&+ \frac{1}{6} \left[\left(\sum_{i=7}^9 \delta_x^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - \sum_{i=1}^3 \delta_x^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} \right) F^k \right] \\
&\times (x^{k+1} - x^{k+\frac{2}{3}} - x^{k+\frac{1}{3}} + x^k) \\
&+ \frac{1}{18} \left[\left(\sum_{i=7}^9 \delta_x^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 2 \sum_{i=4}^6 \delta_x^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} + \sum_{i=1}^3 \delta_x^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} \right) F^k \right] \\
&\times (x^{k+1} - 3x^{k+\frac{2}{3}} + 3x^{k+\frac{1}{3}} - x^k) \\
&+ \frac{1}{2} \left[(\delta_x^{1, \frac{8}{9}} - \delta_x^{\frac{7}{9}, \frac{2}{3}}) F^k \right] \\
&\times (x^{k+1} - x^{k+\frac{8}{9}} - x^{k+\frac{7}{9}} + x^{k+\frac{2}{3}}) \\
&+ \frac{1}{6} \left[(\delta_x^{1, \frac{8}{9}} - 2\delta_x^{\frac{8}{9}, \frac{7}{9}} + \delta_x^{\frac{7}{9}, \frac{2}{3}}) F^k \right] \\
&\times (x^{k+1} - 3x^{k+\frac{8}{9}} + 3x^{k+\frac{7}{9}} - x^{k+\frac{2}{3}}) \\
&+ \frac{1}{2} \left[(\delta_x^{\frac{2}{3}, \frac{5}{9}} - \delta_x^{\frac{4}{9}, \frac{1}{3}}) F^k \right] \\
&\times (x^{k+\frac{2}{3}} - x^{k+\frac{5}{9}} - x^{k+\frac{4}{9}} + x^{k+\frac{1}{3}}) \\
&+ \frac{1}{6} \left[(\delta_x^{\frac{2}{3}, \frac{5}{9}} - 2\delta_x^{\frac{5}{9}, \frac{4}{9}} + \delta_x^{\frac{4}{9}, \frac{1}{3}}) F^k \right] \\
&\times (x^{k+\frac{2}{3}} - 3x^{k+\frac{5}{9}} + 3x^{k+\frac{4}{9}} - x^{k+\frac{1}{3}}) \\
&+ \frac{1}{2} \left[(\delta_x^{\frac{1}{3}, \frac{2}{9}} - \delta_x^{\frac{1}{9}, 0}) F^k \right] \\
&\times (x^{k+\frac{1}{3}} - x^{k+\frac{2}{9}} - x^{k+\frac{1}{9}} + x^k) \\
&+ \frac{1}{6} \left[(\delta_x^{\frac{1}{3}, \frac{2}{9}} - 2\delta_x^{\frac{2}{9}, \frac{1}{9}} + \delta_x^{\frac{1}{9}, 0}) F^k \right] \\
&\times (x^{k+\frac{1}{3}} - 3x^{k+\frac{2}{9}} + 3x^{k+\frac{1}{9}} - x^k) \tag{51}
\end{aligned}$$

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 法と類似の比率（付録を参照）で (12) と (27) と (51) を混合した式

$$\frac{729}{640} \times (51) - \frac{90}{640} \times (27) + \frac{1}{640} \times (12)$$

を用いて、差分恒等式

$$\begin{aligned}
&H^{k+1} - H^k \\
&= \frac{1}{640} \left[81 \sum_{i=1}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 30 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} + \delta_p^{1,0} \right] T^k \\
&\times (p^{k+1} - p^k) \\
&+ \frac{1}{640} \left[81 \sum_{i=1}^9 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 30 \sum_{i=1}^3 \delta_q^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} + \delta_q^{1,0} \right] V^k \\
&\times (q^{k+1} - q^k) \\
&+ \frac{1}{1280} \left[9 \left\{ \left(27 \sum_{i=7}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{1, \frac{2}{3}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \left(27 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{\frac{1}{3}, 0} \right) \right\} T^k \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\times (p^{k+1} - p^{k+\frac{2}{3}} - p^{k+\frac{1}{3}} + p^k) \\
&+ \frac{1}{1280} \left[9 \left\{ \left(27 \sum_{i=7}^9 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_q^{1, \frac{2}{3}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \left(27 \sum_{i=1}^3 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_q^{\frac{1}{3}, 0} \right) \right\} V^k \right] \\
&\times (q^{k+1} - q^{k+\frac{2}{3}} - q^{k+\frac{1}{3}} + q^k) \\
&+ \frac{1}{1280} \left[3 \left\{ \left(27 \sum_{i=7}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{1, \frac{2}{3}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2 \left(27 \sum_{i=4}^6 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(27 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{\frac{1}{3}, 0} \right) \right\} T^k \right] \\
&\times (p^{k+1} - 3p^{k+\frac{2}{3}} + 3p^{k+\frac{1}{3}} - p^k) \\
&+ \frac{1}{1280} \left[3 \left\{ \left(27 \sum_{i=7}^9 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_q^{1, \frac{2}{3}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2 \left(27 \sum_{i=4}^6 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_q^{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(27 \sum_{i=1}^3 \delta_q^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_q^{\frac{1}{3}, 0} \right) \right\} V^k \right] \\
&\times (q^{k+1} - 3q^{k+\frac{2}{3}} + 3q^{k+\frac{1}{3}} - q^k) \\
&+ \frac{729}{1280} \left[(\delta_p^{1, \frac{8}{9}} - \delta_p^{\frac{7}{9}, \frac{2}{3}}) T^k \right] \\
&\times (p^{k+1} - p^{k+\frac{8}{9}} - p^{k+\frac{7}{9}} + p^{k+\frac{2}{3}}) \\
&+ \frac{243}{1280} \left[(\delta_p^{1, \frac{8}{9}} - 2\delta_p^{\frac{8}{9}, \frac{7}{9}} + \delta_p^{\frac{7}{9}, \frac{2}{3}}) T^k \right] \\
&\times (p^{k+1} - 3p^{k+\frac{8}{9}} + 3p^{k+\frac{7}{9}} - p^{k+\frac{2}{3}}) \\
&+ \frac{729}{1280} \left[(\delta_p^{\frac{2}{3}, \frac{5}{9}} - \delta_p^{\frac{4}{9}, \frac{1}{3}}) T^k \right] \\
&\times (p^{k+\frac{2}{3}} - p^{k+\frac{5}{9}} - p^{k+\frac{4}{9}} + p^{k+\frac{1}{3}}) \\
&+ \frac{243}{1280} \left[(\delta_p^{\frac{2}{3}, \frac{5}{9}} - 2\delta_p^{\frac{5}{9}, \frac{4}{9}} + \delta_p^{\frac{4}{9}, \frac{1}{3}}) T^k \right] \\
&\times (p^{k+\frac{2}{3}} - 3p^{k+\frac{5}{9}} + 3p^{k+\frac{4}{9}} - p^{k+\frac{1}{3}}) \\
&+ \frac{729}{1280} \left[(\delta_p^{\frac{1}{3}, \frac{2}{9}} - \delta_p^{\frac{1}{9}, 0}) T^k \right] \\
&\times (p^{k+\frac{1}{3}} - p^{k+\frac{2}{9}} - p^{k+\frac{1}{9}} + p^k) \\
&+ \frac{243}{1280} \left[(\delta_p^{\frac{1}{3}, \frac{2}{9}} - 2\delta_p^{\frac{2}{9}, \frac{1}{9}} + \delta_p^{\frac{1}{9}, 0}) T^k \right] \\
&\times (p^{k+\frac{1}{3}} - 3p^{k+\frac{2}{9}} + 3p^{k+\frac{1}{9}} - p^k) \\
&+ \frac{729}{1280} \left[(\delta_q^{1, \frac{8}{9}} - \delta_q^{\frac{7}{9}, \frac{2}{3}}) V^k \right] \\
&\times (q^{k+1} - q^{k+\frac{8}{9}} - q^{k+\frac{7}{9}} + q^{k+\frac{2}{3}}) \\
&+ \frac{243}{1280} \left[(\delta_q^{1, \frac{8}{9}} - 2\delta_q^{\frac{8}{9}, \frac{7}{9}} + \delta_q^{\frac{7}{9}, \frac{2}{3}}) V^k \right] \\
&\times (q^{k+1} - 3q^{k+\frac{8}{9}} + 3q^{k+\frac{7}{9}} - q^{k+\frac{2}{3}}) \\
&+ \frac{729}{1280} \left[(\delta_q^{\frac{2}{3}, \frac{5}{9}} - \delta_q^{\frac{4}{9}, \frac{1}{3}}) V^k \right] \\
&\times (q^{k+\frac{2}{3}} - q^{k+\frac{5}{9}} - q^{k+\frac{4}{9}} + q^{k+\frac{1}{3}})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{243}{1280} [(\delta_q^{\frac{2}{3}, \frac{5}{9}} - 2\delta_q^{\frac{5}{9}, \frac{4}{9}} + \delta_q^{\frac{4}{9}, \frac{1}{3}}) V^k] \\
 & \times (q^{k+\frac{2}{3}} - 3q^{k+\frac{5}{9}} + 3q^{k+\frac{4}{9}} - q^{k+\frac{1}{3}}) \\
 & + \frac{729}{1280} [(\delta_q^{\frac{1}{3}, \frac{2}{9}} - \delta_q^{\frac{1}{9}, 0}) V^k] \\
 & \times (q^{k+\frac{1}{3}} - q^{k+\frac{2}{9}} - q^{k+\frac{1}{9}} + q^k) \\
 & + \frac{243}{1280} [(\delta_q^{\frac{1}{3}, \frac{2}{9}} - 2\delta_q^{\frac{2}{9}, \frac{1}{9}} + \delta_q^{\frac{1}{9}, 0}) V^k] \\
 & \times (q^{k+\frac{1}{3}} - 3q^{k+\frac{2}{9}} + 3q^{k+\frac{1}{9}} - q^k) \tag{52}
 \end{aligned}$$

を得る。(52) に差分スキーム (41-50) を代入すると、離散エネルギー不等式

$$\begin{aligned}
 H^{k+1} - H^k = & -\alpha \frac{\Delta t}{409600} [(81 \sum_{i=1}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 30 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} + \delta_p^{1,0}) T^k]^2 \\
 & -\alpha \frac{3\Delta t}{90880} [(27 \sum_{i=7}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{1, \frac{2}{3}}) \\
 & \quad - (27 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{\frac{1}{3}, 0})] T^k]^2 \\
 & -\alpha \frac{\Delta t}{90880} [(27 \sum_{i=7}^9 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{1, \frac{2}{3}}) \\
 & \quad - 2(27 \sum_{i=4}^6 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}}) \\
 & \quad + (27 \sum_{i=1}^3 \delta_p^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 10\delta_p^{\frac{1}{3}, 0})] T^k]^2 \\
 & -\alpha \frac{81\Delta t}{1280} [(\delta_p^{1, \frac{8}{9}} - \delta_p^{\frac{7}{9}, \frac{2}{3}}) T^k]^2 \\
 & -\alpha \frac{27\Delta t}{1280} [(\delta_p^{1, \frac{8}{9}} - 2\delta_p^{\frac{8}{9}, \frac{7}{9}} + \delta_p^{\frac{7}{9}, \frac{2}{3}}) T^k]^2 \\
 & -\alpha \frac{81\Delta t}{1280} [(\delta_p^{\frac{2}{3}, \frac{5}{9}} - \delta_p^{\frac{4}{9}, \frac{1}{3}}) T^k]^2 \\
 & -\alpha \frac{27\Delta t}{1280} [(\delta_p^{\frac{2}{3}, \frac{5}{9}} - 2\delta_p^{\frac{5}{9}, \frac{4}{9}} + \delta_p^{\frac{4}{9}, \frac{1}{3}}) T^k]^2 \\
 & -\alpha \frac{81\Delta t}{1280} [(\delta_p^{\frac{1}{3}, \frac{2}{9}} - \delta_p^{\frac{1}{9}, 0}) T^k]^2 \\
 & -\alpha \frac{27\Delta t}{1280} [(\delta_p^{\frac{1}{3}, \frac{2}{9}} - 2\delta_p^{\frac{2}{9}, \frac{1}{9}} + \delta_p^{\frac{1}{9}, 0}) T^k]^2 \\
 \leq & 0 \tag{53}
 \end{aligned}$$

が導かれる。即ち、差分スキーム (41-50) ではエネルギー保存・散逸が保証される。

5. 応用例

応用例として、調和振動子

$$H = T + V \tag{54}$$

$$T = \frac{1}{2} p^2, V = \frac{1}{2} q^2 \tag{55}$$

$$\frac{dp}{dt} = -q - \alpha p, \frac{dq}{dt} = p \tag{56}$$

を考える。 $\alpha < 2$ のときの厳密解は

$$\beta = \sqrt{1 - \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}$$

として

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} \\
 & = e^{-\frac{\alpha}{2}t} \begin{pmatrix} \cos \beta t - \frac{\alpha}{2\beta} \sin \beta t & -\frac{1}{\beta} \sin \beta t \\ \frac{1}{\beta} \sin \beta t & \cos \beta t + \frac{\alpha}{2\beta} \sin \beta t \end{pmatrix} \\
 & \times \begin{pmatrix} p(0) \\ q(0) \end{pmatrix} \tag{57}
 \end{aligned}$$

で与えられる。

$$\alpha = 0.3, \Delta t = 1$$

$$p^0 = 1, q^0 = 1$$

としたときの、数値解の様子を調べる。

図3に2次のスキームを用いて計算した数値解を示した。数値解の軌道が厳密な軌道からずれている様子がわかる。

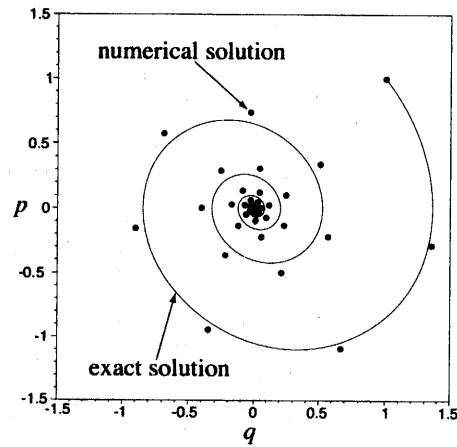


図3 2次のスキームと数値解

図4と図5にそれぞれ2段4次と3段4次のスキームを用いて計算した数値解を示した。2次の場合と異なり、数値解の軌道がほぼ厳密な軌道上にあることがみてとれる。

図6と図7にそれぞれ4段6次と9段6次のスキームを用いて計算した数値解を示した。4次の場合と同様に、数値解の軌道がほぼ厳密な軌道上にあることがみてとれる。しかし、4次と6次の違いや段数の違いによる数値解の違いについてはこれらの図からは読み取れない。

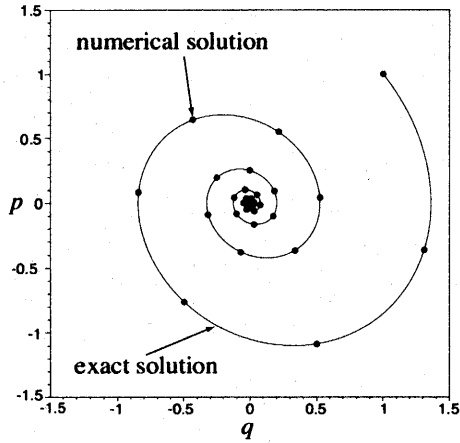


図4 2段4次のスキームと数値解

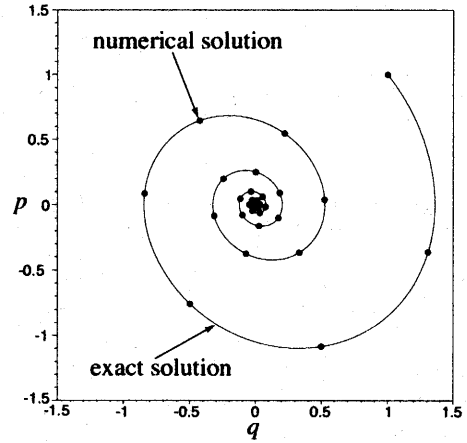


図7 9段6次のスキームと数値解

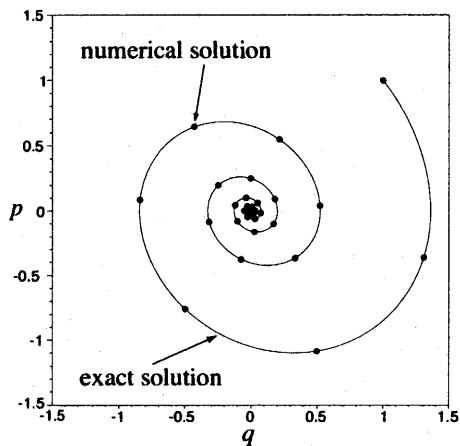


図5 3段4次のスキームと数値解

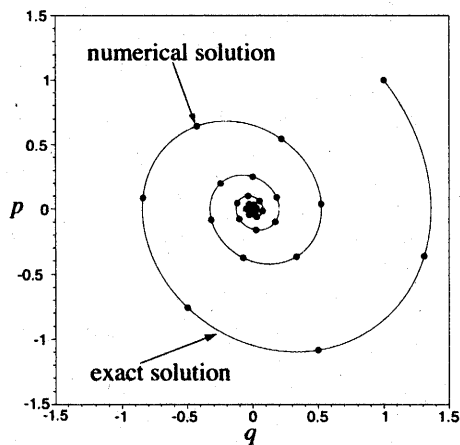


図6 4段6次のスキームと数値解

図8にいろいろな刻み幅 Δt に対して、1ステップ $t^1 = \Delta t$ 後のエネルギー H の値がどのように変化するかを示した。 Δt が大きいところで、2次、4次、6次とスキームの次数が大きいほど精度がよくなる様子がわかる。また、同じ次数でも段数の大きいスキームの方が精度がよいこともわかる。

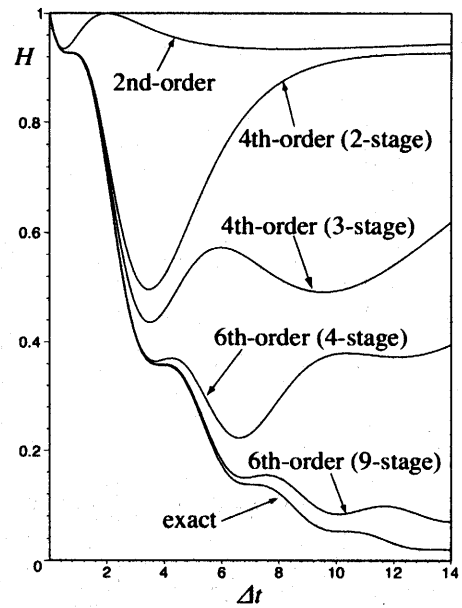


図8 刻み幅 Δt とエネルギー H

6. おわりに

本研究では、2変数の力学系に対して6次のエネルギー保存・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次数や段数の違いによる特徴を調べた。偏微分方程式などの多変数の系や6次を超えるような高次の差分スキームは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.
- [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] 石森勇次 (2005) : 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, 富山県立大学紀要, Vol.15, pp.1-9.
- [5] E.Hairer,C.Lubich,G.Wanner (2002) : *Geometric Numerical Integration*, Springer.
- [6] 長嶋秀世 (2000) : 数値計算法, 槇書店, p.90.

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 [6]。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2分割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4分割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

$$I_6^{1,0} = \frac{1}{45}(64 \sum_{i=1}^4 I_2^{\frac{i}{4}, \frac{i-1}{4}} - 20 \sum_{i=1}^2 I_2^{\frac{i}{2}, \frac{i-1}{2}} + I_2^{1,0})$$

となる。

上記のスキームは分割数が1, 2, 4という系列であったが, 1, 3, 9という系列のスキームも可能である。区間 $[t^{k+1}, t^k]$ における3分割4次のスキームは2次のスキームを用いて

$$I_4^{1,0} = \frac{9}{8} \sum_{i=1}^3 I_2^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - \frac{1}{8}I_2^{1,0}$$

となる。また, 区間 $[t^{k+1}, t^k]$ における9分割6次のスキームは4次のスキームを用いて

$$I_6^{1,0} = \frac{81}{80} \sum_{i=1}^3 I_4^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} - \frac{1}{80}I_4^{1,0}$$

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

$$I_6^{1,0} = \frac{1}{640}(729 \sum_{i=1}^9 I_2^{\frac{i}{9}, \frac{i-1}{9}} - 90 \sum_{i=1}^3 I_2^{\frac{i}{3}, \frac{i-1}{3}} + I_2^{1,0})$$

となる。

Energy Conservative or Dissipative Difference Schemes of Order 6

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

Sixth order difference schemes are constructed for the two-dimensional system. The numerical methods guarantee the energy conservation or dissipation of the system.

Key Words: difference method, sixth order scheme, energy conservation or dissipation