エネルギー汎関数積分の高次の空間離散化について

石森　勇次
(工学部教養教育)

微分方程式に対して，エネルギー汎関数の性質を壊さないような高次の数値計算法を構成する場合，微分方程式自身の高次化ではなく汎関数積分の高次化を考慮する必要がある。本論文では，特に $\frac{1}{2}\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2$ 型の空間微分の高次化について議論し，その離散式を与える。

キーワード：偏微分方程式，差分法，高次の精度，エネルギー汎関数，空間の離散化

1．はじめに

偏微分方程式の数値計算法として，系のエネルギー汎関数の性質を保つような差分スキームがある。保存系の場合それはエネルギー汎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 [1-12]。偏微分方程式に対して，このような計算法を構成するときの１つの考え方は，時間と空間を同時に離散化するのではなく，まず空間の離散化を行い，次に時間の離散化を行う方法である。空間の離散化を行うと偏微分方程式は常微分方程式になり，時間の離散化を行うと常微分方程式は差分方程式になる。この過程の中で，特に空間の離散化について議論する。

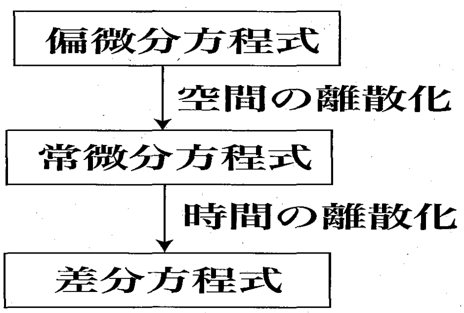

図１　空間時間変数の離散化の手順

空間の変数の離散化において，エネルギー汎関数の性質を保つような高次の精度への改良を行うとき，常微分方程式の高次化を直接考えるのではなく，エネルギー汎関数の高次化を考える必要がある。このとき，もしエネルギー汎関数 H が例えば

$$H=\int_0^L \mathcal{H}dx,\ \mathcal{H}=\frac{1}{2}p^2+V(q) \tag{1}$$

のような空間微分を含まない空間の各点で独立な変数で表されていると，微分方程式は精度の悪い離散化エネルギー

$$H=\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}_m\Delta x,\ \mathcal{H}_m=\frac{1}{2}p_m^2+V(q_m) \tag{2}$$

であっても，常微分方程式は

$$\frac{dp_m}{dt}=-\frac{\partial\mathcal{H}_m}{\partial q_m}=-V'(q_m),\ \frac{dq_m}{dt}=\frac{\partial\mathcal{H}_m}{\partial p_m}=p_m \tag{3}$$

となり，厳密な方程式

$$\frac{\partial p}{\partial t}=-\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta q}=-V'(q),\ \frac{\partial q}{\partial t}=\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta p}=p \tag{4}$$

と同じである。ここで，

$$\frac{\delta}{\delta u}=\sum_{j=0}^{\infty}(-1)^j\frac{\partial^j}{\partial x^j}\frac{\partial}{\partial\left(\frac{\partial^j u}{\partial x^j}\right)} \tag{5}$$

である。また Δx を空間の離散幅として，$x_m=m\Delta x$ であり $p_m(t)$, $q_m(t)$ は $p(x_m,t)$, $q(x_m,t)$ の近似解である。空間の大きさは L で

$$m=0,1,2,\cdots,N;L=N\Delta x \tag{6}$$

であり，境界条件を周期的境界条件

$$p(x+L,t)=p(x,t),\ q(x+L,t)=q(x,t) \tag{7}$$

とした。

本研究では，汎関数 H の密度関数 $\mathcal{H}$ に

$$\mathcal{H}=\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2+V(q) \tag{8}$$

のような

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2$$

型の微分項を持つ場合の，空間微分の高次の離散化を議論する。2節ではまず積分と離散和について，Euler-Maclaurin の公式をもとにしてその精度について議論する。次に3節では2次，4次，6次までの誤差を持つ空間変数の離散化を行う。4節では，具体的な関数として sine-Gordon 方程式

$$V(q)=1-\cos q \tag{9}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}=\frac{\partial^2 q}{\partial x^2}-\sin q \tag{10}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t}=p \tag{11}$$

の静的な Kink-Soliton 解

$$p(x,t)=0,\ q(x,t)=4\tan^{-1}e^{x-x_0} \tag{12}$$

について数値的な検証を行う。この解に対して

$$\mathcal{H}(x)=4\,\mathrm{sech}^2(x-x_0) \tag{13}$$

である。

2. 積分と離散和

関数 $\mathcal{H}(x)$ の積分

$$\int_0^L \mathcal{H}(x)dx \tag{14}$$

と離散和

$$\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x \tag{15}$$

に対して，Euler-Maclaurin の公式より（付録 A.1 を参照）

$$\begin{aligned}\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x&=\int_0^L \mathcal{H}(x)dx\\&-\frac{\Delta x}{2}[\mathcal{H}(L)-\mathcal{H}(0)]\\&-\sum_{j=1}^{r}(-1)^j\frac{B_j}{(2j)!}\Delta x^{2j}[\mathcal{H}^{(2j-1)}(L)-\mathcal{H}^{(2j-1)}(0)]\\&+O(\Delta x^{2r+2})\end{aligned} \tag{16}$$

の関係が成り立つ [13]。ここで，B_j は Bernoulli の数で

$$B_1=\frac{1}{6},\ B_2=\frac{1}{30},\ B_3=\frac{1}{42},\ B_4=\frac{1}{30},\ B_5=\frac{5}{66},\ \cdots \tag{17}$$

である。周期的境界条件のもとでは，

$$\mathcal{H}(L)=\mathcal{H}(0),\ \mathcal{H}^{(2j-1)}(L)=\mathcal{H}^{(2j-1)}(0) \tag{18}$$

となるので，Euler-Maclaurin の公式 (16) で $r\to\infty$ を考えれば

$$\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x=\int_0^L \mathcal{H}(x)dx$$

となるように思える。しかし，Euler-Maclaurin の公式において $r\to\infty$ での収束性が保証されているわけではないので，この等式は一般的に成り立たない。

積分 (14) と離散和 (15) の違い（誤差）を見るために，被積分関数 $\mathcal{H}(x)$ のフーリエ級数

$$\mathcal{H}(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{l=1}^{\infty}\left(a_l\cos\frac{2l\pi x}{L}+b_l\sin\frac{2l\pi x}{L}\right) \tag{19}$$

$$a_l=\frac{2}{L}\int_0^L\mathcal{H}(x)\cos\frac{2l\pi x}{L}dx \tag{20}$$

$$b_l=\frac{2}{L}\int_0^L\mathcal{H}(x)\sin\frac{2l\pi x}{L}dx \tag{21}$$

を考え，違いをフーリエ係数で見ることにする。まず

$$a_0=\frac{2}{L}\int_0^L\mathcal{H}(x)dx$$

であるから，

$$\int_0^L\mathcal{H}(x)dx=\frac{La_0}{2} \tag{22}$$

である。一方

$$\begin{aligned}\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x&=\sum_{m=1}^{N}\mathcal{H}(x_m)\Delta x\\&=\sum_{m=1}^{N}\left[\frac{a_0}{2}+\sum_{l=1}^{\infty}\left(a_l\cos\frac{2l\pi x_m}{L}+b_l\sin\frac{2l\pi x_m}{L}\right)\right]\Delta x\\&=\frac{a_0}{2}N\Delta x\\&+\sum_{l=1}^{\infty}\left(a_l\sum_{m=1}^{N}\cos\frac{2\pi lm}{N}+b_l\sum_{m=1}^{N}\sin\frac{2\pi lm}{N}\right)\Delta x\end{aligned}$$

に注意する。ここで, n を整数として (付録 A.2 を参照)

$$\sum_{m=1}^{N}\cos m\theta = \begin{cases} \cos\dfrac{(N+1)\theta}{2}\dfrac{\sin\dfrac{N\theta}{2}}{\sin\dfrac{\theta}{2}} & (\theta \neq 2\pi n) \\ N & (\theta = 2\pi n) \end{cases} \tag{23}$$

$$\sum_{m=1}^{N}\sin m\theta = \begin{cases} \sin\dfrac{(N+1)\theta}{2}\dfrac{\sin\dfrac{N\theta}{2}}{\sin\dfrac{\theta}{2}} & (\theta \neq 2\pi n) \\ 0 & (\theta = 2\pi n) \end{cases} \tag{24}$$

が成り立つ。$\theta = \dfrac{2\pi l}{N}$ とおくと

$$\sin\frac{N\theta}{2} = \sin\pi l = 0$$

であり,

$$\theta = \frac{2\pi l}{N} \neq 2\pi n \Leftrightarrow l \neq Nn$$
$$\theta = \frac{2\pi l}{N} = 2\pi n \Leftrightarrow l = Nn$$

であるので,

$$\sum_{m=1}^{N}\cos\frac{2\pi lm}{N} = \begin{cases} 0 & (l \neq Nn) \\ N & (l = Nn) \end{cases} \tag{25}$$

$$\sum_{m=1}^{N}\sin\frac{2\pi lm}{N} = 0 \tag{26}$$

が成り立つ。したがって

$$\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x = \sum_{m=1}^{N}\mathcal{H}(x_m)\Delta x$$
$$= \frac{La_0}{2} + L(a_N + a_{2N} + a_{3N} + \cdots) \tag{27}$$

すなわち,

$$\left|\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x - \int_0^L \mathcal{H}(x)dx\right| = L\left|\sum_{n=1}^{\infty}a_{nN}\right| \tag{28}$$

が成り立つ。

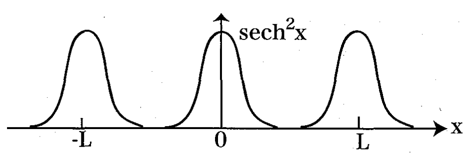

図 2　積分と離散和の例

関数 $\mathcal{H}(x)$ の例として, 1 節の関数 (13) で $x_0 = 0$ とした関数の $\dfrac{1}{4}$ 倍である図 2 のような原点付近に孤立した形をもつ関数 $\mathrm{sech}^2 x$ のグラフが周期 L で並んでいる関数を考える。$L >> 1$ であれば

$$a_l = \frac{2}{L}\int_0^L \mathcal{H}(x)\cos\frac{2l\pi x}{L}dx$$
$$= \frac{2}{L}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{sech}^2 x\cos\frac{2l\pi x}{L}dx$$
$$\approx \frac{2}{L}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{sech}^2 x\cos\frac{2l\pi x}{L}dx$$
$$= \frac{4}{L}\int_0^{\infty} \mathrm{sech}^2 x\ \cos\frac{2l\pi x}{L}dx$$

である。ここで積分公式 (付録 A.3 を参照)

$$\int_0^{\infty}\mathrm{sech}^2 x\cos ax\ dx = \frac{\pi a}{2}\mathrm{cosech}\frac{\pi a}{2}$$

を用いると

$$a_l \approx \frac{4\pi^2 l}{L^2}\mathrm{cosech}\frac{\pi^2 l}{L}$$

を得る。$l = nN$ では,

$$a_{nN} \approx \frac{4\pi^2 nN}{L^2}\mathrm{cosech}\frac{\pi^2 nN}{L} = \frac{4\pi^2 nN}{L^2}\mathrm{cosech}\frac{\pi^2 n}{\Delta x}$$

したがって, Δx を小さくとれば

$$a_{nN} \approx \frac{8\pi^2 nN}{L^2}e^{-\frac{\pi^2 n}{\Delta x}}$$

となるので

$$\left|\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x - \int_0^L \mathcal{H}(x)dx\right|$$
$$= L\left|\sum_{n=1}^{\infty}a_{nN}\right| \approx \frac{8\pi^2}{\Delta x}e^{-\frac{\pi^2}{\Delta x}} \tag{29}$$

を得る。表 1 に示すように, 誤差は, Δx が小さくなるにつれ急速に 0 に近づく。

Δx	$\frac{8\pi^2}{\Delta x}e^{-\frac{\pi^2}{\Delta x}}$
1	4.1×10^{-3}
0.5	4.3×10^{-7}
0.2	1.5×10^{-19}
0.1	1.2×10^{-40}

表 1　離散和の誤差

以上のことから, 関数 (13) に対してある程度小さい Δx を選べば離散和の誤差はなくなるので, 空間微分の

誤差を離散和の誤差から分離することができる。

3．空間変数の離散化と空間微分

この節では，エネルギー関数の微分項

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2$$

の離散化を考える。

3.1　誤差２次の離散化

微分 $\dfrac{\partial q}{\partial x}$ を

$$\frac{r_1 q_{m+1} + r_0 q_m}{\Delta x}$$

で近似することを考える。Taylor 展開すると

$$\begin{aligned}&\frac{r_1 q_{m+1} + r_0 q_m}{\Delta x}\\ &= (r_1 + r_0)\frac{q_m}{\Delta x} + r_1 \frac{\partial q_m}{\partial x}\\ &+ r_1 \frac{\Delta x}{2!}\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2} + O(\Delta x^2)\end{aligned} \tag{30}$$

したがって，r_0, r_1 を連立方程式

$$r_1 + r_0 = 0,\ r_1 = 1 \tag{31}$$

の解

$$r_0 = -1,\ r_1 = 1 \tag{32}$$

にとれば，

$$\begin{aligned}&\frac{r_1 q_{m+1} + r_0 q_m}{\Delta x}\\ &= \frac{\partial q_m}{\partial x} + \frac{\Delta x}{2!}\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2} + O(\Delta x^2)\end{aligned} \tag{33}$$

となり，誤差は１次である。しかし，エネルギー密度は

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\left(\frac{r_1 q_{m+1} + r_0 q_m}{\Delta x}\right)^2\\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2 + \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial q_m}{\partial x}\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2} + O(\Delta x^2)\\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2 + \frac{\Delta x}{4}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2 + O(\Delta x^2)\end{aligned} \tag{34}$$

となるので，２節で議論したように離散和と積分が等しいとすれば

$$\int_0^L \frac{\Delta x}{4}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2 dx = \left[\frac{\Delta x}{4}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2\right]_0^L = 0$$

となるので，１次の項

$$\frac{\Delta x}{4}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2$$

はエネルギー汎関数 H に寄与せず，誤差は２次ということになる。

このことは，微分方程式の空間微分項にも反映される。

$$\begin{aligned}&-\frac{\partial}{\partial q_m}\sum_{m=0}^{N-1}\frac{1}{2}\left(\frac{r_1 q_{m+1} + r_0 q_m}{\Delta x}\right)^2\\ &= -\frac{r_0(r_1 q_{m+1} + r_0 q_m) + r_1(r_1 q_m + r_0 q_{m-1})}{\Delta x^2}\\ &= \frac{q_{m+1} - 2q_m + q_{m-1}}{\Delta x^2} \qquad (35)\\ &= \frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2} + O(\Delta x^2) \qquad (36)\end{aligned}$$

であり，微分方程式の空間微分項も誤差が２次となる。

3.2　誤差４次の離散化

微分 $\dfrac{\partial q}{\partial x}$ を

$$\frac{r_2 q_{m+2} + r_1 q_{m+1} + r_0 q_m}{\Delta x}$$

で近似することを考える。Taylor 展開すると

$$\begin{aligned}&\frac{r_2 q_{m+2} + r_1 q_{m+1} + r_0 q_m}{\Delta x}\\ &= (r_2 + r_1 + r_0)\frac{q_m}{\Delta x} + (2r_2 + r_1)\frac{\partial q_m}{\partial x}\\ &+ (4r_2 + r_1)\frac{\Delta x}{2!}\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2} + (8r_2 + r_1)\frac{\Delta x^2}{3!}\frac{\partial^3 q_m}{\partial x^3}\\ &+ (16r_2 + r_1)\frac{\Delta x^3}{4!}\frac{\partial^4 q_m}{\partial x^4} + O(\Delta x^4)\end{aligned} \tag{37}$$

まず，r_0, r_1, r_2 に対して，連立方程式

$$\begin{cases} r_2 + r_1 + r_0 = 0 \\ 2r_2 + r_1 = 1 \end{cases} \tag{38}$$

が成り立つとする。また，エネルギー密度は

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\left(\frac{r_2 q_{m+2} + r_1 q_{m+1} + r_0 q_m}{\Delta x}\right)^2\\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2 + \frac{\Delta x}{4}(4r_2 + r_1)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2\\ &+ \frac{\Delta x^2}{6}(8r_2 + r_1)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2}\right)\\ &+ \frac{\Delta x^2}{24}\{3(4r_2 + r_1)^2 - 4(8r_2 + r_1)\}\left(\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2}\right)^2\\ &+ \frac{\Delta x^3}{48}\frac{\partial}{\partial x}\Bigg[2(16r_2 + r_1)\frac{\partial q_m}{\partial x}\frac{\partial^3 q_m}{\partial x^3}\end{aligned}$$

$$+\left\{2(4r_2+r_1)(8r_2+r_1)-(16r_2+r_1)\right\}\left(\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2}\right)^2\Bigg]$$
$$+O(\Delta x^4) \tag{39}$$

となるので，2 次の場合と同様に $\dfrac{\partial F}{\partial x}$ の形の項はエネルギー汎関数 H に寄与せず，連立方程式の残った 1 つを

$$3(4r_2+r_1)^2-4(8r_2+r_1)=0 \tag{40}$$

とおけば，誤差は 4 次ということになる。これらの連立方程式 (38)，(40) の解は

$$r_0=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{\sqrt{3}} \tag{41}$$
$$r_1=\mp\frac{2}{\sqrt{3}} \tag{42}$$
$$r_2=\frac{1}{2}\pm\frac{1}{\sqrt{3}} \tag{43}$$

である。

一方，

$$-\frac{\partial}{\partial q_m}\sum_{m=0}^{N-1}\frac{1}{2}\left(\frac{r_2q_{m+2}+r_1q_{m+1}+r_0q_m}{\Delta x}\right)^2$$
$$=-\frac{1}{\Delta x^2}\{r_0(r_2q_{m+2}+r_1q_{m+1}+r_0q_m)$$
$$+r_1(r_2q_{m+1}+r_1q_m+r_0q_{m-1})$$
$$+r_2(r_2q_m+r_1q_{m-1}+r_0q_{m-2})\}$$
$$=\frac{-q_{m+2}+16q_{m+1}-30q_m+16q_{m-1}-q_{m-2}}{12\Delta x^2} \tag{44}$$
$$=\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2}+O(\Delta x^4) \tag{45}$$

であり，微分方程式の空間微分項も誤差が 4 次となる。

3.3 誤差 6 次の離散化

微分 $\dfrac{\partial q}{\partial x}$ を

$$\frac{r_3q_{m+3}+r_2q_{m+2}+r_1q_{m+1}+r_0q_m}{\Delta x}$$

で近似することを考える。Taylor 展開すると

$$\frac{r_3q_{m+3}+r_2q_{m+2}+r_1q_{m+1}+r_0q_m}{\Delta x}$$
$$=(r_3+r_2+r_1+r_0)\frac{q_m}{\Delta x}+(3r_3+2r_2+r_1)\frac{\partial q_m}{\partial x}$$
$$+(9r_3+4r_2+r_1)\frac{\Delta x}{2!}\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2}$$
$$+(27r_3+8r_2+r_1)\frac{\Delta x^2}{3!}\frac{\partial^3 q_m}{\partial x^3}$$
$$+(81r_3+16r_2+r_1)\frac{\Delta x^3}{4!}\frac{\partial^4 q_m}{\partial x^4}$$
$$+(243r_3+32r_2+r_1)\frac{\Delta x^4}{5!}\frac{\partial^5 q_m}{\partial x^5}$$
$$+(729r_3+64r_2+r_1)\frac{\Delta x^5}{6!}\frac{\partial^6 q_m}{\partial x^6}$$
$$+O(\Delta x^6) \tag{46}$$

まず，r_0，r_1，r_2，r_3 に対して，連立方程式

$$\begin{cases} r_3+r_2+r_1+r_0=0 \\ 3r_3+2r_2+r_1=1 \end{cases} \tag{47}$$

が成り立つとする。また，エネルギー密度は微分公式（付録 A.4 を参照）

$$\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\frac{\partial^j q}{\partial x^j}=\frac{\partial F}{\partial x}\ \text{の形に変形可能}$$
$$(i<j,\ i+j=\text{奇数}=1,3,5,\cdots)$$

に注意すると，F を適当な関数として

$$\frac{1}{2}\left(\frac{r_3q_{m+3}+r_2q_{m+2}+r_1q_{m+1}+r_0q_m}{\Delta x}\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial q_m}{\partial x}\right)^2$$
$$+\frac{\Delta x^2}{2}\left[\left(\frac{9r_3+4r_2+r_1}{2!}\right)^2-\frac{2(27r_3+8r_2+r_1)}{3!}\right]$$
$$\times\left(\frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2}\right)^2$$
$$+\frac{\Delta x^4}{2}\left[\left(\frac{27r_3+8r_2+r_1}{3!}\right)^2+\frac{2(243r_3+32r_2+r_1)}{5!}\right.$$
$$\left.-\frac{(9r_3+4r_2+r_1)(81r_3+16r_2+r_1)}{4!}\right]$$
$$\times\left(\frac{\partial^3 q_m}{\partial x^3}\right)^2$$
$$+\frac{\partial F}{\partial x}+O(\Delta x^4) \tag{48}$$

となる。$\dfrac{\partial F}{\partial x}$ の形の項はエネルギー汎関数 H に寄与しないので，連立方程式の残った 2 つを

$$\left(\frac{9r_3+4r_2+r_1}{2!}\right)^2-\frac{2(27r_3+8r_2+r_1)}{3!}=0 \tag{49}$$

および

$$\left(\frac{27r_3+8r_2+r_1}{3!}\right)^2+\frac{2(243r_3+32r_2+r_1)}{5!}$$
$$-\frac{(9r_3+4r_2+r_1)(81r_3+16r_2+r_1)}{4!}=0 \tag{50}$$

とおけば，誤差は 6 次ということになる。これらの連立方程式 (47)，(49)，(50) の解は

$$r_0=-\frac{1}{4}-\frac{\sqrt{85}}{30}\pm\frac{1}{60}\sqrt{525+60\sqrt{85}} \tag{51}$$

$$r_1 = -\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{85}}{10} \mp \frac{1}{60}\sqrt{525+60\sqrt{85}} \quad (52)$$

$$r_2 = \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{85}}{10} \mp \frac{1}{60}\sqrt{525+60\sqrt{85}} \quad (53)$$

$$r_3 = \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{85}}{30} \pm \frac{1}{60}\sqrt{525+60\sqrt{85}} \quad (54)$$

である。

一方，

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\partial}{\partial q_m}\sum_{m=0}^{N-1}\frac{1}{2}\left(\frac{r_3q_{m+3}+r_2q_{m+2}+r_1q_{m+1}+r_0q_m}{\Delta x}\right)^2 \\
&= -\frac{1}{\Delta x^2}\{r_0(r_3q_{m+3}+r_2q_{m+2}+r_1q_{m+1}+r_0q_m) \\
&\qquad +r_1(r_3q_{m+2}+r_2q_{m+1}+r_1q_m+r_0q_{m-1}) \\
&\qquad +r_2(r_3q_{m+1}+r_2q_m+r_1q_{m-1}+r_0q_{m-2})\} \\
&\qquad +r_3(r_3q_m+r_2q_{m-1}+r_1q_{m-2}+r_0q_{m-3})\} \\
&= \frac{1}{180\Delta x^2}(2q_{m+3}-27q_{m+2}+270q_{m+1}-490q_m \\
&\qquad +270q_{m-1}-27q_{m-2}+2q_{m-3}) \quad (55) \\
&= \frac{\partial^2 q_m}{\partial x^2}+O(\Delta x^6) \quad (56)
\end{aligned}
$$

であり，微分方程式の空間微分項も誤差が6次となる。

4．数値例

数値例として，1節 (12) の関数で $x_0 = \frac{L}{2}$ とした

$$q = 4\tan^{-1} e^{x-\frac{L}{2}} \quad (57)$$

を考える。エネルギー汎関数で空間微分の項を

$$H_{\text{space}} = \int_0^L \mathcal{H}_{\text{space}}dx,\ \mathcal{H}_{\text{space}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2 \quad (58)$$

とおく。厳密な値は L が十分に大きいとして

$$\mathcal{H}_{\text{space}} = 2\text{sech}^2\left(x-\frac{L}{2}\right)$$

より

$$H_{\text{space}} = 4$$

である。

L	H_{space}
10	$3.999636817050380\cdots$
20	$3.999999983510771\cdots$
30	$3.999999999999251\cdots$
40	$3.999999999999999\cdots$

表2　系の大きさの影響

表2に系の大きさとエネルギー H_{space} の値を示した。

$$L = 40$$

とすれば，大きさの影響はないといえる。2節より $\Delta x = 0.2$ に選べば，離散和と積分は十分な精度で等しいといえるので

$$N = L/\Delta x = 40/0.2 = 200$$

として，離散和

$$\sum_{m=0}^{N-1}\frac{1}{2\Delta x^2}\left(\sum_{j=0}^{n} r_j q_{m+j}\right)^2 \quad (2n\text{ 次の誤差})$$

を求める。表3に誤差の次数と離散和の値を示す。2次，4次，6次と順に2桁づつ精度が向上していることがわかる。

次数	離散和
2	$3.9955638331\cdots$
4	$3.9999671857\cdots$
6	$3.9999993485\cdots$

表3　誤差の次数と離散和

5．おわりに

本研究では，エネルギー関数の性質を満たす差分スキームを偏微分方程式に応用するときの空間変数の高次の離散化について議論し，エネルギー汎関数の中で

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2$$

のような形の空間微分項の離散化の式を与えた。他の形の空間微分項でも同様に考えれば，離散化は可能である。

境界条件として周期的境界条件のみを考えた。固定端条件や自由端条件など他の条件の場合，積分と空間微分は分離ができず互いに絡むが，これについては今後の課題としたい。

参考文献

[1] 石森勇次（1991）：いくつかの非線形波動方程式に対するエネルギーの保存する陽的差分法，富山県立大学紀要，Vol.1，pp.47-50.

[2] 石森勇次（1996）：シフト演算子の対称式とエネルギーの保存する差分法，富山県立大学紀要，Vol.6，pp.8-14.

[3] 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.

[4] 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.

[5] 石森勇次（1999）：Korteweg-de Vries 方程式に対するエネルギーの保存する 4 次の差分スキーム，富山県立大学紀要，Vol.9，pp.15-20.

[6] 石森勇次（2000）：非自励ハミルトン力学系に対するエネルギー関数の性質を満たす差分法，富山県立大学紀要，Vol.10，pp.15-20.

[7] 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.

[8] 石森勇次（2003）：確率ハミルトン力学系に対するエネルギー保存差分法，富山県立大学紀要，Vol.13，pp.1-8.

[9] 石森勇次（2004）：確率 KdV 方程式に対するエネルギー保存差分法，富山県立大学紀要，Vol.14，pp.11-17.

[10] 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.

[11] 石森勇次（2006）：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，富山県立大学紀要，Vol.16，pp.1-10.

[12] E.Hairer,C.Lubich,G.Wanner（2006）：*Geometric Numerical Integration*, 2nd ed., Springer.

[13] 長嶋秀世（2000）：数値計算法，槇書店

付　録

A.1　Euler-Maclaurin の公式

シフト演算子を E，微分演算子を D として

$$E = e^{\Delta x D},\ D = \frac{d}{dx}$$
$$E\mathcal{H}(x) = \mathcal{H}(x+\Delta x)$$

であるから

$$\begin{aligned}
&\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x = \sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(m\Delta x)\Delta x \\
&= \left(\sum_{m=0}^{N-1}E^m\right)\mathcal{H}(0)\Delta x = \frac{E^N-1}{E-1}\mathcal{H}(0)\Delta x \\
&= \frac{1}{D}\frac{\Delta x D}{e^{\Delta x D}-1}(E^N-1)\mathcal{H}(0) \\
&= \frac{1}{D}\frac{\Delta x D}{e^{\Delta x D}-1}[\mathcal{H}(L)-\mathcal{H}(0)]
\end{aligned}$$

と表せる。ここで，等比数列の和の公式を形式的に用いた。Bernoulli の数 B_j の定義

$$\frac{t}{e^t-1} = 1-\frac{t}{2}-\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^j\frac{B_j}{(2j)!}t^{2j}$$

を用いて変形すると，

$$\begin{aligned}
&\sum_{m=0}^{N-1}\mathcal{H}(x_m)\Delta x \\
&= \frac{1}{D}\left[1-\frac{\Delta x D}{2}-\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^j\frac{B_j}{(2j)!}(\Delta x D)^{2j}\right] \\
&\quad \times[\mathcal{H}(L)-\mathcal{H}(0)] \\
&= \int_0^L\mathcal{H}(x)dx-\frac{\Delta x}{2}[\mathcal{H}(L)-\mathcal{H}(0)] \\
&\quad -\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^j\frac{B_j}{(2j)!}(\Delta x)^{2j}[\mathcal{H}^{(2j-1)}(L)-\mathcal{H}^{(2j-1)}(0)]
\end{aligned}$$

を得る。

A.2　三角関数の総和公式

複素数 z の数列の和

$$\sum_{m=1}^{N}z^m = \begin{cases}\dfrac{z^{N+1}-z}{z-1} & (z\neq 1)\\[2ex] N & (z=1)\end{cases}$$

において $z=e^{i\theta}$ とおくと，n を整数として

$$z\neq 1 \Leftrightarrow \theta\neq 2\pi n$$
$$z=1 \Leftrightarrow \theta = 2\pi n$$

であり，

$$\sum_{m=1}^{N} z^m = \sum_{m=1}^{N} e^{im\theta} = \sum_{m=1}^{N}(\cos m\theta + i\sin m\theta)$$
$$= \sum_{m=1}^{N}\cos m\theta + i\sum_{m=1}^{N}\sin m\theta$$
$$\frac{z^{N+1}-z}{z-1} = \frac{e^{i(N+1)\theta}-e^{i\theta}}{e^{i\theta}-1}$$
$$= \frac{e^{\frac{1}{2}i(N+1)\theta}[e^{\frac{1}{2}i(N+1)\theta}-e^{-\frac{1}{2}i(N+1)\theta+i\theta}]}{e^{\frac{1}{2}i\theta}(e^{\frac{1}{2}i\theta}-e^{-\frac{1}{2}i\theta})}$$
$$= \frac{e^{\frac{1}{2}i(N+1)\theta}[e^{\frac{1}{2}iN\theta}-e^{-\frac{1}{2}iN\theta}]}{(e^{\frac{1}{2}i\theta}-e^{-\frac{1}{2}i\theta})} = e^{\frac{1}{2}i(N+1)\theta}\frac{\sin\frac{N\theta}{2}}{\sin\frac{\theta}{2}}$$
$$= \left[\cos\frac{(N+1)\theta}{2} + i\sin\frac{(N+1)\theta}{2}\right]\frac{\sin\frac{N\theta}{2}}{\sin\frac{\theta}{2}}$$

であるから，

$$\sum_{m=1}^{N}\cos m\theta = \begin{cases} \cos\dfrac{(N+1)\theta}{2}\dfrac{\sin\dfrac{N\theta}{2}}{\sin\dfrac{\theta}{2}} & (\theta \neq 2\pi n) \\ N & (\theta = 2\pi n) \end{cases}$$

および

$$\sum_{m=1}^{N}\sin m\theta = \begin{cases} \sin\dfrac{(N+1)\theta}{2}\dfrac{\sin\dfrac{N\theta}{2}}{\sin\dfrac{\theta}{2}} & (\theta \neq 2\pi n) \\ 0 & (\theta = 2\pi n) \end{cases}$$

を得る。

A.3　積分公式

公式

$$\int_0^\infty \mathrm{sech}^2 x\cos ax\,dx = \frac{\pi a}{2}\mathrm{cosech}\frac{\pi a}{2}$$

を導く。まず

$$\int_0^\infty \mathrm{sech}^2 x\cos ax\,dx$$
$$= \lim_{\epsilon\to+0}\int_0^\infty \mathrm{sech}^2 x\, e^{-\epsilon x}\cos ax\,dx$$
$$= \lim_{\epsilon\to+0}\left[\tanh x\, e^{-\epsilon x}\cos ax\right]_0^\infty$$
$$+ \lim_{\epsilon\to+0}\int_0^\infty \tanh x\, e^{-\epsilon x}(\epsilon\cos ax + a\sin ax)dx$$
$$= a\lim_{\epsilon\to+0}\int_0^\infty \tanh x\, e^{-\epsilon x}\sin ax\,dx$$

と変形する。

$$\tanh x = \frac{e^x-e^{-x}}{e^x+e^{-x}} = \frac{1-e^{-2x}}{1+e^{-2x}}$$
$$= (1-e^{-2x})(1-e^{-2x}+e^{-4x}-e^{-6x}+\cdots)$$
$$= (1-e^{-2x}+e^{-4x}-e^{-6x}+\cdots)$$
$$+ (-e^{-2x}+e^{-4x}-e^{-6x}+\cdots)$$
$$= 1-2(e^{-2x}-e^{-4x}+e^{-6x}-\cdots)$$

および

$$\int_0^\infty e^{-\lambda x}\sin ax dx = \frac{a}{\lambda^2+a^2}\quad(\lambda>0)$$

に注意すると

$$\int_0^\infty \mathrm{sech}^2 x\cos ax\,dx$$
$$= a\lim_{\epsilon\to+0}\left[\frac{a}{\epsilon^2+a^2}\right.$$
$$\left.-2\left\{\frac{a}{(2+\epsilon)^2+a^2}-\frac{a}{(4+\epsilon)^2+a^2}+\cdots\right\}\right]$$
$$= 1+2\left(\frac{a}{2}\right)^2\left[\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-1)^l}{l^2+(a/2)^2}\right]$$

となる。

一方，$e^{\alpha x}$ $(-\pi\le x\le\pi)$ の Fourier 級数

$$e^{\alpha x} = \frac{a_0}{2}+\sum_{l=1}^{\infty}(a_l\cos lx + b_l\sin lx)$$
$$a_l = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}e^{\alpha x}\cos lx\,dx$$
$$= \left[\frac{e^{\alpha x}}{\pi(\alpha^2+l^2)}(\alpha\cos lx + l\sin lx)\right]_{-\pi}^{\pi}$$
$$= \frac{\alpha(-1)^l(e^{\pi\alpha}-e^{-\pi\alpha})}{\pi(\alpha^2+l^2)}$$

で，$x=0$ とおいた式

$$1 = (e^{\pi\alpha}-e^{-\pi\alpha})\left[\frac{1}{2\pi\alpha}+\frac{\alpha}{\pi}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-1)^l}{\alpha^2+l^2}\right]$$
$$= \frac{\sinh\pi\alpha}{\pi\alpha}\left[1+2\alpha^2\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-1)^l}{\alpha^2+l^2}\right]$$

を用いれば，$\alpha=a/2$ として

$$\int_0^\infty \mathrm{sech}^2 x\cos ax\,dx = \frac{\pi a}{2}\mathrm{cosech}\frac{\pi a}{2}$$

を得る。

A.4 微分公式

公式

$$\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\frac{\partial^j q}{\partial x^j} = \frac{\partial F}{\partial x} \text{ の形に変形可能}$$
$$(i < j,\ i + j = \text{奇数} = 1, 3, 5, \cdots)$$

を証明する。$j = i+$ 奇数 である。

<u>$j = i + 1$ のとき</u>

$i + j = 2i + 1$ は奇数であり

$$\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\frac{\partial^{i+1} q}{\partial x^{i+1}} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\right)^2$$

となるので成り立つ。

<u>$j = i + 2k - 1$ のとき</u>

$i + j = 2(i + k) - 1$ は奇数であり

$$\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\frac{\partial^{i+2k-1} q}{\partial x^{i+2k-1}} = \frac{\partial F}{\partial x} \cdots (1)$$

と仮定する。

<u>$j = i + 2k + 1$ のとき</u>

$i + j = 2(i + k) + 1$ は奇数であり

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\frac{\partial^{i+2k+1} q}{\partial x^{i+2k+1}} \\
&= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\frac{\partial^{i+2k} q}{\partial x^{i+2k}}\right) - \frac{\partial^{i+1} q}{\partial x^{i+1}}\frac{\partial^{i+2k} q}{\partial x^{i+2k}} \\
&= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\frac{\partial^{i+2k} q}{\partial x^{i+2k}}\right) - \frac{\partial^i Q}{\partial x^i}\frac{\partial^{i+2k-1} Q}{\partial x^{i+2k-1}} \\
&(Q = \frac{\partial q}{\partial x})
\end{aligned}$$

ここで (1) より，適当な関数 G を用いて

$$\frac{\partial^i Q}{\partial x^i}\frac{\partial^{i+2k-1} Q}{\partial x^{i+2k-1}} = \frac{\partial G}{\partial x}$$

と表せるので

$$\frac{\partial^i q}{\partial x^i}\frac{\partial^{i+2k+1} q}{\partial x^{i+2k+1}} = \frac{\partial F}{\partial x}$$

の形に変形できる。

ゆえに数学的帰納法より，任意の $j = i+$ 奇数 に対して公式が成り立つ。

On a Higher-Order Space-Discretization of the Energy Functional

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

We consider the derivative term of the energy functional integral and propose its discretization with accuracy of higher order .

Key Words: partial differential equations, difference method, higher order scheme, space-discretization