

エネルギー不等式を満たす陽的差分法

富山県立大学工学部 石森 勇次 (Yuji Ishimori)

0 はじめに

常微分方程式を数値的に解くための差分法として、システムの個性を生かした計算法がいろいろ提案されているが、ここでは散逸力学系に対して、エネルギー不等式を満たしかつ陽解法となる差分法を提案する。

微分方程式として減衰項のある非線形力学系

$$\frac{d^2u}{dt^2} = -\frac{\partial V(u)}{\partial u} - \mu \frac{du}{dt} \quad (\mu > 0) \quad (1)$$

を考える。この系に対して、エネルギー不等式

$$\frac{dH}{dt} = -\mu \left(\frac{du}{dt} \right)^2 \leq 0, \quad H = \frac{1}{2} \left(\frac{du}{dt} \right)^2 + V(u) \quad (2)$$

が成り立つ。減衰係数 $\mu=0$ のとき、(2)式はエネルギー保存則になる。このときの差分法についてはエネルギー保存則を満たす陽的差分法として、すでに提案しており[1,2]、ここで提案する差分法はそれを拡張した方法である。

1 差分法

きざみ幅を Δt として

$$u_n = u(t_n), \quad t_n = n\Delta t \quad (n=0,1,2,\dots) \quad (3)$$

とおく。いま、ポテンシャルを

$$V(u) = \sum_{i=1}^k F_i(u) G_i(u) \quad (4)$$

のように分解したとすると、微分方程式(1)に対して、差分方程式

$$\frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{\Delta t^2}$$

$$\begin{aligned}
&= -\sum_{i=1}^k \left[\frac{F_i(u_{n+1}) - F_i(u_{n-1})}{u_{n+1} - u_{n-1}} G_i(u_n) + F_i(u_n) \frac{G_i(u_{n+1}) - G_i(u_{n-1})}{u_{n+1} - u_{n-1}} \right] \\
&\quad - \mu \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2\Delta t}
\end{aligned} \tag{5}$$

を考えると、(2)式に対応する差分系におけるエネルギー不等式

$$\begin{aligned}
\frac{H_{n+1} - H_n}{\Delta t} &= -\mu \left(\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2\Delta t} \right)^2 \geq 0, \quad H_n = K_n + V_n \\
K_n &= \frac{1}{2} \left(\frac{u_n - u_{n-1}}{\Delta t} \right)^2, \quad V_n = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k [F_i(u_n) G_i(u_{n-1}) + F_i(u_{n-1}) G_i(u_n)]
\end{aligned} \tag{6}$$

が成り立つ。もし、 $F_i(u), G_i(u)$ が高々 2 次の多項式、即ちポテンシャルが高々 4 次の多項式であれば、差分方程式は u_{n+1} の 1 次式となるので陽解法である。一般に $2r$ 次の多項式ポテンシャルに対して、 r 階の差分方程式（多段法）を考えれば、エネルギー不等式を満たす陽的差分法を構成できる[1]。また、非多項式ポテンシャルの場合、工夫しだいでエネルギー不等式を満たす陽的差分法を構成できることもある[1]。

2 数値計算例

ポテンシャルとして、一般的な 4 次の多項式

$$V(u) = \frac{a}{2}u^2 + \frac{b}{3}u^3 + \frac{c}{4}u^4 \tag{7}$$

を考え、次のようにポテンシャルを分解する。

$$V(u) = \frac{a}{2} [\lambda u \times u + (1-\lambda)u^2 \times 1] + \frac{b}{3}u^2 \times u + \frac{c}{4}u^2 \times u^2 \tag{8}$$

ここで λ は任意パラメータである。この分解に対して、差分方程式は

$$\frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{\Delta t^2}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{a}{2}[2\lambda u_n + (1-\lambda)(u_{n+1} + u_{n-1})] - \frac{b}{3}u_n(u_{n+1} + u_n + u_{n-1}) - \frac{c}{2}u_n^2(u_{n+1} + u_{n-1}) \\
&\quad - \mu \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2\Delta t}
\end{aligned} \tag{9}$$

となる。数値計算の結果を見るために、位相空間 (u, p) で考える。ポテンシャル(7)に対する微分方程式(1)は連立微分方程式

$$\begin{aligned}
\frac{du}{dt} &= p, \\
\frac{dp}{dt} &= -(au + bu^2 + cu^3) - \mu p
\end{aligned} \tag{10}$$

で表される。また、差分方程式(9)は連立差分方程式

$$\begin{aligned}
\frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} &= p_{n+1}, \\
\frac{p_{n+1} - p_n}{\Delta t} &= -\frac{au_n + bu_n^2 + cu_n^3 + \mu p_n}{1 + \frac{\Delta t \mu}{2} + \Delta t^2 \left[\frac{a}{2}(1-\lambda) + \frac{b}{3}u_n + \frac{c}{2}u_n^2 \right]}
\end{aligned} \tag{11}$$

で表される。この差分法の特徴を見るために、他の2種類の差分法と比較する。一つは面積縮小差分法

$$\begin{aligned}
\frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} &= p_{n+1}, \\
\frac{p_{n+1} - p_n}{\Delta t} &= -[au_n + bu_n^2 + cu_n^3 + \mu p_n]
\end{aligned} \tag{12}$$

である。この差分法では

$$\left| \frac{\partial(u_{n+1}, p_{n+1})}{\partial(u_n, p_n)} \right| = |1 - \Delta t \mu| < 1 \quad \left(\Delta t < \frac{2}{\mu} \right) \tag{13}$$

となるので、位相空間の面積要素が時間の経過とともに減少することを保証している。この性質はエネルギー不等式をみたす差分法(11)でも満たされる。比較するもう一つの差分法はオイラー法

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} = p_n,$$

(14)

$$\frac{p_{n+1} - p_n}{\Delta t} = -[au_n + bu_n^2 + cu_n^3 + \mu p_n]$$

である。

計算例(1)

このポテンシャルでは、微分方程式の解軌道は、どんな初期値から出発しても、十分時間が経過した後、ポテンシャルの唯一つの底に落ち込む。

$$V(u) = \frac{1}{2}u^2 + \frac{1}{3}u^3 + \frac{1}{4}u^4$$

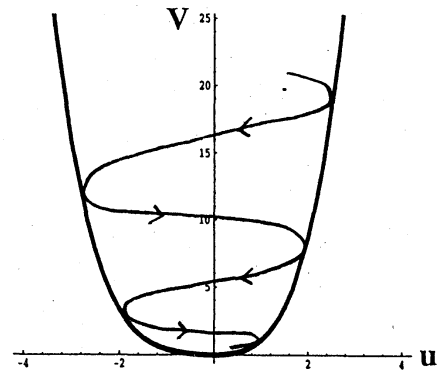


図 1

エネルギー不等式を満たす差分法では、図 2 のように、位相空間のどの点を初期値にとっても、差分方程式の解軌道は原点 $(0, 0)$ に吸い込まれる。このことはきざみ幅の大きさによらない。従って、定性的な性質は真の解軌道と同じである。

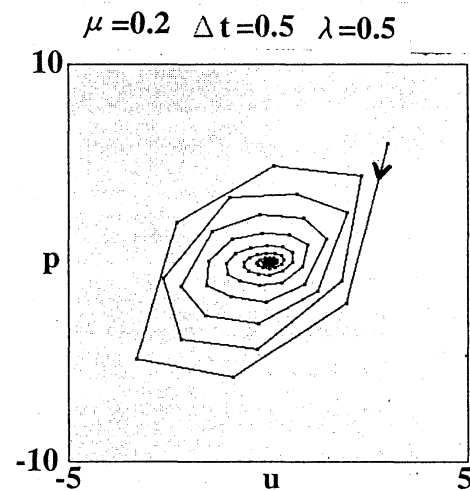


図 2 エネルギー不等式を満たす差分法

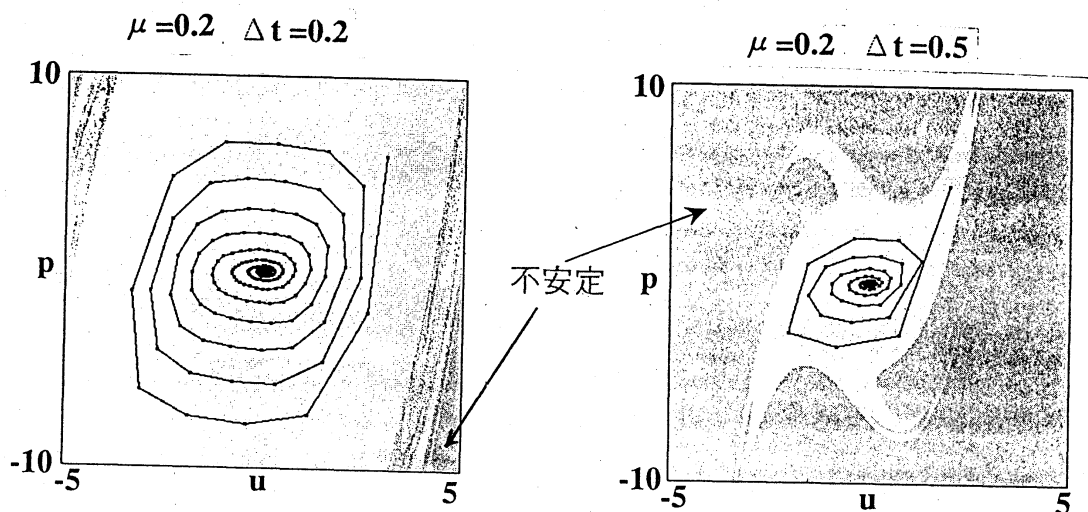


図3 面積縮小差分法

面積縮小差分法では、エネルギー不等式を満たす差分法と異なり、図3のように、きざみ幅を大きくするにつれて、時間の経過とともに無限遠に飛び去ってしまう初期値の領域、即ち不安定領域が現われそれが大きくなる。また、この不安定領域と原点に向かう吸引域の境界は複雑な形をしている。

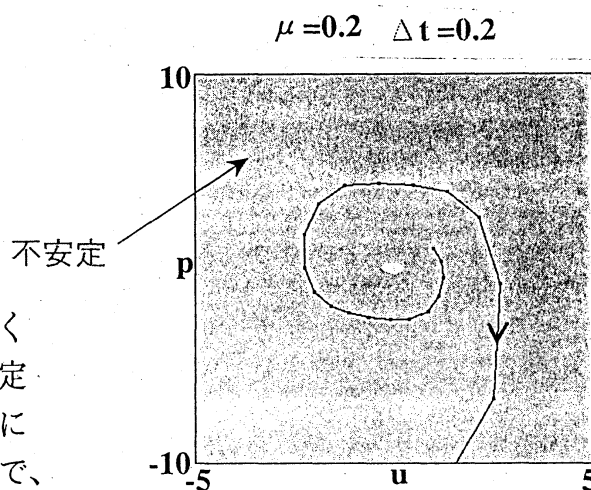


図4 オイラー法

オイラー法では、きざみ幅を十分に小さく取らなければ、位相空間のほとんどが不安定領域になってしまう。もともとオイラー法にはみかけの励起を引き起こす性質があるので、オイラー法では、この増加率が系本来の減衰率より十分小さくなるようなきざみ幅で計算しなければならない。

計算例(2)

このポテンシャルには、2つの底があるため、位相空間の吸引域は2つに分れる。

$$V(u) = -u^2 + \frac{1}{3}u^3 + \frac{1}{4}u^4$$

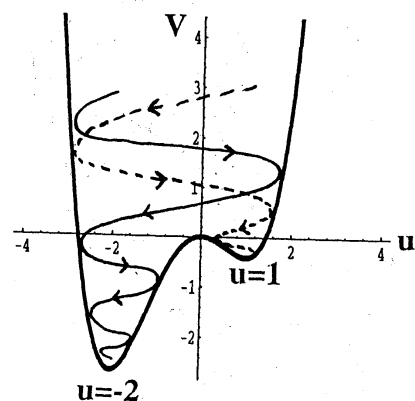


図 5

$$\square (u_n, p_n) \rightarrow (-2, 0)$$

$$\blacksquare (u_n, p_n) \rightarrow (1, 0)$$

$$(n \rightarrow \infty)$$

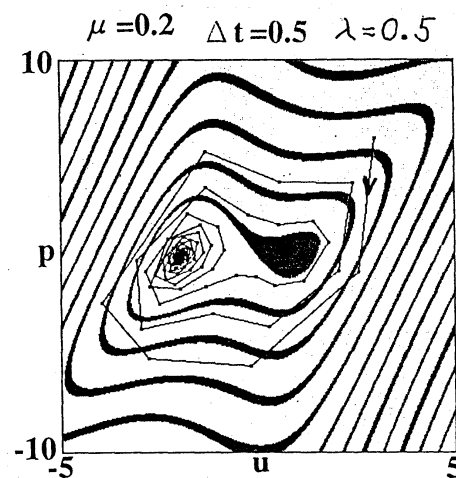
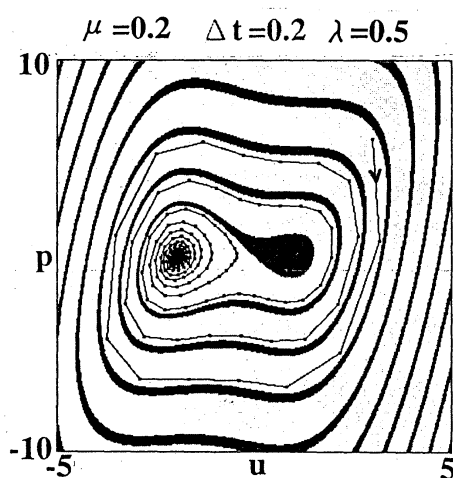


図 6 エネルギー不等式を満たす差分法

エネルギー不等式を満たす差分法では、位相空間の吸引域が2つに分れる性質は、きざみ幅の大きさによらず保たれている。ただその形がきざみ幅が大きくなるにつれて歪んでいくだけである。また、計算例(1)のときと同様に不安定領域はない。

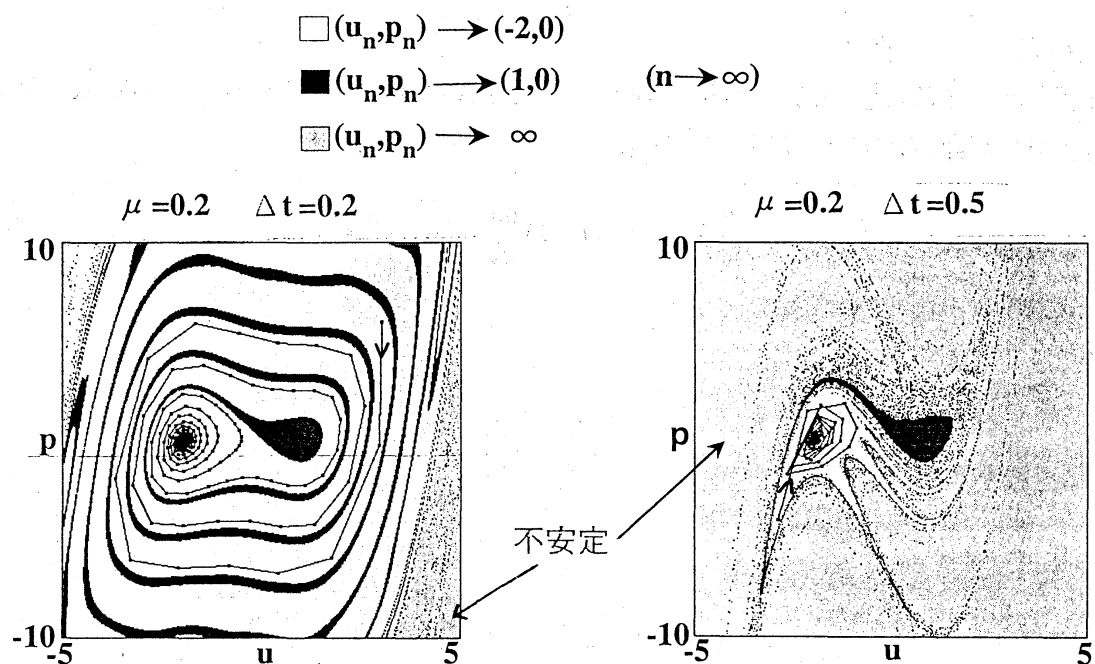


図7 面積縮小差分法

面積縮小差分法では、計算例(1)のときと同様に、きざみ幅が大きくなるにつれて不安定領域が大きくなる。また、2つの吸引域はアトラクター付近を除いて、互いに複雑に入り組んでいる。

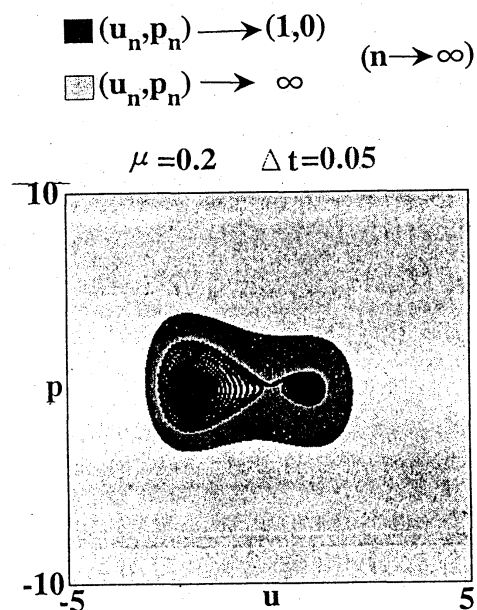


図8で見られるように、オイラー法では、きざみ幅が十分小さくないと一方のアトラクターが不安定になって吸引域が1つしかないこともありうる。

図8 オイラー法

計算例(3) Stiff 問題

Stiff とは非常に堅いあるいは、粘っこいことを意味する。ここでは、バネ定数と減衰係数(粘性率)が非常に大きい線形の方程式

$$\frac{d^2u}{dt^2} = -\mu u - (\mu+1) \frac{du}{dt} \quad (\mu=10^6 \gg 1) \quad (15)$$

を考える。もし初期条件を

$$u(0)=0, \quad \frac{du(0)}{dt}=\mu \quad (16)$$

とすると、解は

$$u(t) = \frac{\mu}{\mu-1} (e^{-t} - e^{-\mu t}) \sim e^{-t} - e^{-\mu t} \quad (17)$$

となる。この解には極端に異なる2つの時間スケールがある。速いスケールの方はすぐに0になってしまうので、長時間の挙動の理解には遅いスケールの方だけを考えればよい。しかし、この遅いスケールの部分を、例えばオイラー法などを用いて数値計算しようとする、きざみ幅は安定条件

$$\Delta t < \frac{2}{\mu} = \frac{2}{10^6}$$

より、きわめて小さく取らなければならず、非常に多くの計算ステップを必要とする。これが、この系のStiff 問題である。面積縮小差分法でもやはりオイラー法と同様のことがいえる。

エネルギー不等式を満たす差分法では、図9でみられるように、極端に小さなきざみ幅を考えなくても、遅いスケールの部分を数値計算できる。ここで、速いスケールの部分はすぐに0になったとして、あらためて初期条件を

$$u(0)=1, \quad \frac{du(0)}{dt}=0$$

として計算した。

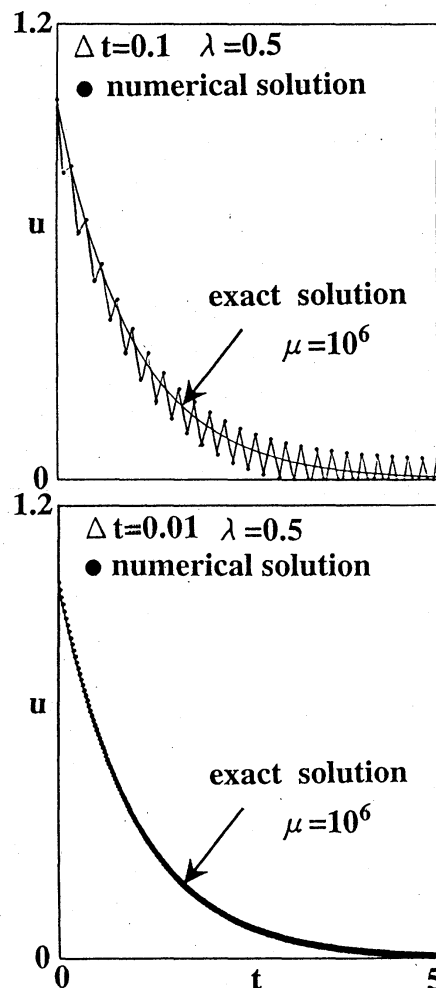


図9

計算例(4) 不等式の向きが一定でない場合

上記の3つの計算例はいずれもエネルギー不等式の向きが一定、即ち常にエネルギーが減少する場合であった。ここでは、不等式の向きが u の大きさによって異なる系、具体的には微分方程式

$$\frac{du}{dt} = p, \quad (18)$$

$$\frac{dp}{dt} = -u - \mu p(u^2 - 1)$$

で記述される van der Pol 振動子を考える。この系では、減衰項は非線形であり、

$$\mu \Rightarrow \mu(u^2 - 1) \quad (19)$$

の対応を考えればこれまでと同じように議論できる。即ち、エネルギー不等式は

$$\frac{dH}{dt} = -\mu p^2(u^2 - 1) \begin{cases} > 0 & (u^2 < 1) \\ < 0 & (u^2 > 1) \end{cases}, \quad H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}u^2 \quad (20)$$

となる。振幅が大きいと減衰し小さいと増大するので、この系の解はどのような初期値から出発してもリミットサイクルに近づいていく。差分法も(19)式の対応をとればよい。即ち、エネルギー不等式を満たす差分法：

$$\begin{aligned} \frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} &= p_{n+1} \\ \frac{p_{n+1} - p_n}{\Delta t} &= -\frac{u_n + \mu p_n(u_n^2 - 1)}{1 + \frac{\Delta t \mu}{2}(u_n^2 - 1) + \frac{\Delta t^2}{2}(1 - \lambda)} \\ \frac{H_{n+1} - H_n}{\Delta t} &= -\mu \left(\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2\Delta t} \right)^2 (u_n^2 - 1) \end{aligned} \quad (21)$$

面積不等式を満たす差分法：

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} = p_{n+1}$$

$$\frac{p_{n+1}-p_n}{\Delta t} = -u_n - \mu p_n(u_n^2 - 1)$$

(22)

$$\left| \frac{\partial(u_{n+1}, p_{n+1})}{\partial(u_n, p_n)} \right| = |1 - \Delta t \mu(u_n^2 - 1)|$$

オイラー法:

$$\frac{u_{n+1}-u_n}{\Delta t} = p_n$$

(23)

$$\frac{p_{n+1}-p_n}{\Delta t} = -u_n - \mu p_n(u_n^2 - 1)$$

となる。

図10にエネルギー不等式を満たす差分法による計算例を、図11に面積不等式を満たす差分法による計算例を、図12にオイラー法による計算例を示した。どの方法でも不安定領域は存在することがわかる。従って、エネルギー不等式を満たす方法がよい方法とはいえないが、他の方法よりきざみ幅は比較的大きく取れる。また、オイラー法ではアトラクターがリミットサイクルではなく複雑なアトラクターになることがあり、本来のアトラクターとは異なってしまう。

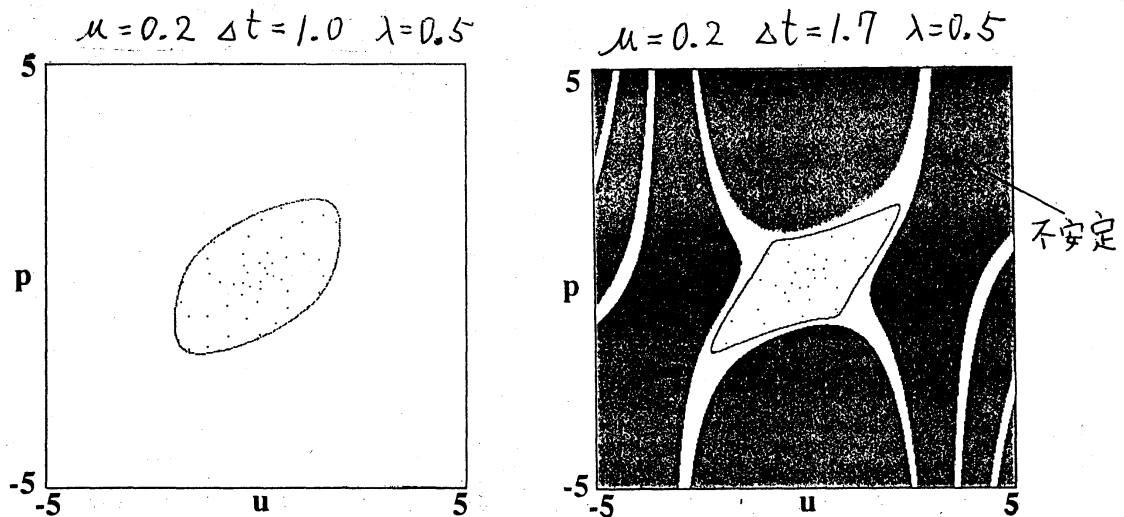


図10 エネルギー不等式を満たす差分法

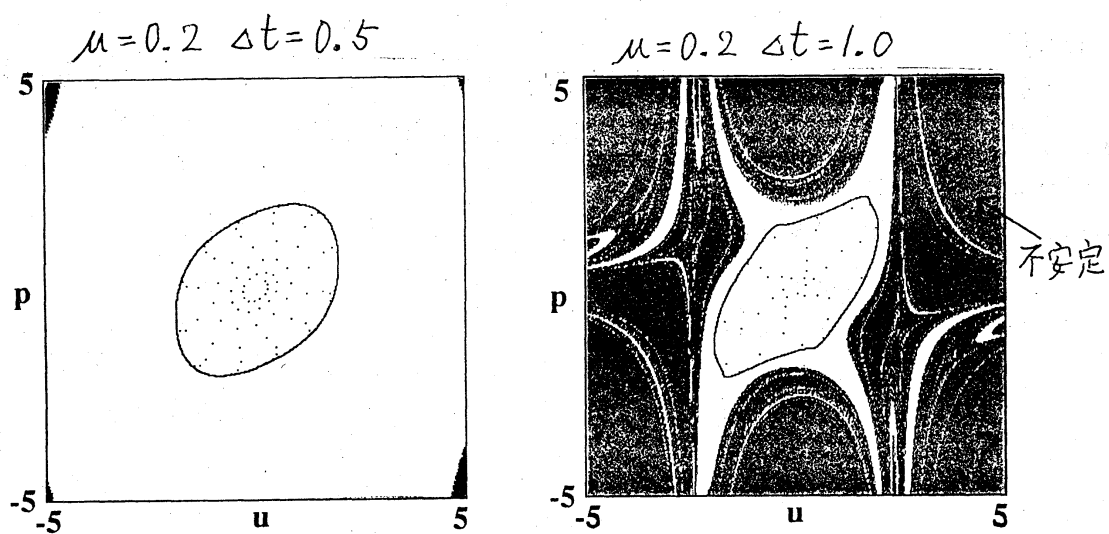


図1.1 面積不等式を満たす差分法

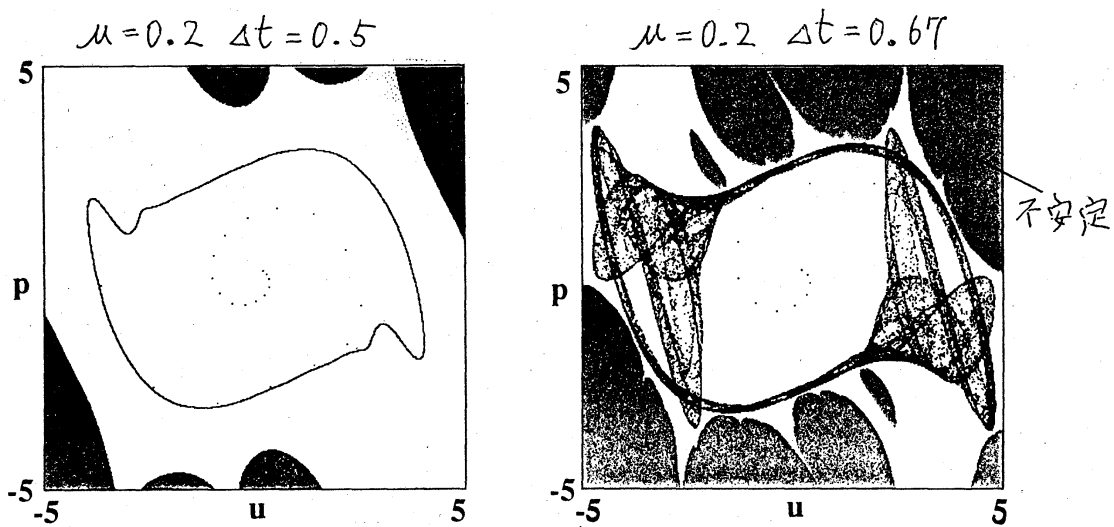


図1.2 オイラー法

3 おわりに

システムの個性を生かした差分法として、非線形散逸力学系に対するエネルギー不等式を満たす陽的差分法を提案しその数値計算例を他の差分法との比較も交えて示した。エネルギー不等式を満たす差分法には、

- (1)位相空間の定性的性質を壊さない
- (2)束縛系では数値不安定を起こさない
- (3)Stiff問題に対して有効な計算法である

といった長所があり、様々な非線形散逸力学系に応用されることが期待されるが、陽解法という制限をつけると適用できる系が限られてしまう。この点の改善は今後の課題である。

参考文献

- [1]石森勇次：エネルギー保存則を満たす陽的差分法、数理解析研究所講究録868(1994), 39-51.
- [2]Y. Ishimori : Explicit energy conservative difference schemes for nonlinear dynamical systems, Phys. Lett. A 191(1994)373-378.