

微分方程式の局所的性質と大域的性質の関係性の差分作用素 の逆作用素による離散的再現

Inverse difference operators preserve structure between local
properties and global ones of differential equations

大阪大学・サイバーメディアセンター 降旗 大介 (Daisuke Furihata)
Cybermedia Center,
Osaka University

1 はじめに

エネルギー保存ないしは散逸構造をもつ系の時間発展方程式に対し Structure Preserving Method (以下, SPM) に属する方法論を用いてその性質を離散的に再現するスキームを構成するのは, 数値計算を行なうにあたり優れた方法である.

しかし, 微分方程式を離散化する方法論の場合, 再現されるのは「局所則」であり, 大域則ではない. 微分方程式の厳密解においては, 微分と積分の逆作用素としての性質から局所則の成立と大域則の成立はほぼ等価であるためこれは問題とならない. しかし, 数値計算スキームにおいては微分相当の局所演算と積分相当の大域演算の間の関係が自明でないため, 局所則の再現によって大域的な性質が再現される保証はない.

SPM の時間発展離散作用素を素直に高次なものにした場合, この非自明性が現れる. つまり, エネルギー保存ないしは散逸構造を離散的な意味で時間局所的に再現することに成功しても, 大域的な性質, すなわち時間 t_1 と時間 $t_0 (\neq t_1)$ 間でのエネルギーの値の関係がどうなっているか言えないということになってしまう¹. 例えば, 後退微分公式 (BDF) による 1 階時間差分の 3 次近似 $\delta_n^{(1)} u_n = (11/6 u_n - 3 u_{n-1} + 3/2 u_{n-2} - 1/3 u_{n-3}) / \Delta t$ を採用して SPM をもっとも素直に用いた場合, エネルギーが散逸する局所則は $\delta_n^{(1)} E_n \leq 0$ のように離散的に再現されるだろうが, この局所的な関係式から E_0 と $E_n (\neq E_0)$ との間に大域的な $E_n \leq E_0$ という関係が成り立つかどうか, すなわち「大域性の回復」が可能かどうかは自明ではない.

この可否は離散作用素に依存するため, 各作用素の逆作用素の大域的性質を知ることが肝要である. そこで本講演では, BDF や高次中心差分作用素などの差分作用素を時間方向の離散局所作用素に用いた場合の逆作用素を計算, 明示する方法を述べ, SPM の大域性の回復が可能かどうかを直感的に把握する方法について示す. なお, 著者により大域性回復判断に関する本方法の数学的な証明もなされているが, 本講演時に時間の都合などで触れられなかったため, それについては後日別の機会に発表等を行なう.

¹より詳しく書くと, 緩い逆作用素性があればエネルギー保存の場合は大域的な性質を示せることが多い. しかし, エネルギー散逸系は離散作用素の逆作用素性が本質的に示せないで大域性は言えない.

2 サンプル問題

話を平易に進めるために、以降は以下の問題を対象問題の例として扱う。

$$\text{対象問題例} \quad \frac{d\mathbf{u}}{dt} = A\mathbf{f} \quad (1)$$

where $\mathbf{u} : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^n$, $A : 0$ 値 or (半) 定値作用素, $f_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial J(\mathbf{u})}{\partial u_i}$, $J : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$.

このとき, t が時間で, 系そのものを示す従属変数 $\mathbf{u}(t)$ に対して $J(\mathbf{u})$ が注目している特徴量である. 具体的には A が 0 値 (二次形式が必ずゼロとなる) 場合は J は保存量であり, A が (半) 定値の場合は J は (広義の) 散逸量である. J の保存/散逸性は, まず

$$\frac{d}{dt} J(\mathbf{u}) = \mathbf{f}^\top \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}^\top A \mathbf{f} = \begin{cases} 0 & : A \text{ の二次形式が } 0, \\ \text{正 (負)} & : \quad \quad \quad \text{" 正 (負)} \end{cases} \quad (2)$$

という微分を用いた局所的な関係式が得られる. そして微積分の逆作用素性とあわせてただちに

$$J(\mathbf{u}(t)) - J(\mathbf{u}(0)) = \begin{cases} 0 & : A \text{ の二次形式が } 0, \\ \text{正 (負)} & : \quad \quad \quad \text{" 正 (負)} \end{cases} \quad (3)$$

という大域的性質を得ることができる.

3 二次の離散変分導関数法

SPM にも多くの種類があるので, 本稿では差分作用素を用いた離散変分導関数法 [1] を例に用いて話を進めよう. 比較のため, 問題となっている非自明性が無いケースをまず示す. これは二次の離散変分導関数法²を使うことに相当する.

3.1 離散微分, 離散変分

離散変分導関数法では, スキームの構成は特徴量の微分ないしは変分導関数を離散演算で求めることから始まる. ここでは, もっともシンプルな離散化法として $f_i = \partial J / \partial u_i$ を離散化したものとして ($f_d : \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ として),

$$(f_d(\mathbf{u}_a, \mathbf{u}_b))_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(DJ(\mathbf{u}_a, \mathbf{u}_b))_i}{(\mathbf{u}_a)_i - (\mathbf{u}_b)_i}, \quad (4)$$

²通常はこれを用いるため, 問題が顕在化しない.

を用いよう (ただし, $\mathbf{u}_a = \mathbf{u}_b$ の場合は $f_d(\mathbf{u}_a, \mathbf{u}_b)_i = f_i(\mathbf{u}_a)$). このとき,

$$(DJ(\mathbf{u}_a, \mathbf{u}_b))_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\#[\mathbf{u}_a : \mathbf{u}_b : i]} \left(\sum_{\mathbf{u} \in [\mathbf{u}_a : \mathbf{u}_b : i]} J(\mathbf{u}) - \sum_{\mathbf{u}' \in [\mathbf{u}_b : \mathbf{u}_a : i]} J(\mathbf{u}') \right), \quad (5)$$

$$[\mathbf{u}_a : \mathbf{u}_b : i] \stackrel{\text{def}}{=} \{ \mathbf{u} \mid (\mathbf{u})_i = (\mathbf{u}_a)_i, (\mathbf{u})_j = (\mathbf{u}_a)_j \text{ or } (\mathbf{u}_b)_j \text{ for } j \neq i \}, \quad (6)$$

である³. ちなみに, このとき一般に

$$J(\mathbf{u}_a) - J(\mathbf{u}_b) = \sum_i (DJ(\mathbf{u}_a, \mathbf{u}_b))_i \quad (7)$$

が成り立つ⁴.

注: 1次元の場合は単に $f_d(u_a, u_b) = \frac{J(u_a) - J(u_b)}{u_a - u_b}$ である.

3.2 離散方程式

離散変分導関数法では次に, 全体の構造を保つように方程式を離散化する. この場合は, $\mathbf{u}_t = A\mathbf{f}$ に対して, 先に定義した $\mathbf{f}_d$ を用いて

$$\frac{\mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)}}{\Delta t} = A\mathbf{f}_d(\mathbf{u}^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)}) \quad (8)$$

とするのが素直である. これで差分スキームが導出されたことになる.

3.3 局所的構造の再現

上記スキームでは局所構造 (J の時間変化) がどのように再現されているかみてみよう. これは原理的には簡単で, 本来の局所構造を示す (不) 等式と同等の計算を離散的に行ってみればよい⁵. 具体的には以下ようになる.

$$\begin{aligned} \frac{J(\mathbf{u}^{(n+1)}) - J(\mathbf{u}^{(n)})}{\Delta t} &= \frac{\sum_i (DJ(\mathbf{u}^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)}))_i}{\Delta t} \\ &= \mathbf{f}_d(\mathbf{u}^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)})^\top \left(\frac{\mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)}}{\Delta t} \right) \\ &= \mathbf{f}_d(\mathbf{u}^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)})^\top A \mathbf{f}_d(\mathbf{u}^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)}) \\ &= \begin{cases} 0 & : A \text{ の二次形式が } 0, \\ \text{正 (負)} & : \quad \quad \quad \text{正 (負)} \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

これをみればわかるように, 離散化したにもかかわらず J の性質が行列 A の性質だけで決定され, (時間) 局所的に完全に構造が再現される.

³ $DJ(\mathbf{u}_a, \mathbf{u}_b)$ は J の微分の添字分の次元を自然に引き受ける役目をしている

⁴ この式は後で時々使われる

⁵ これが「できる」のが離散変分導関数法の本質である

3.4 大域的構造の再現 (Structure Preserving)

この場合は,

$$\begin{aligned}
 J(\mathbf{u}^{(n)}) - J(\mathbf{u}^{(0)}) &= (J(\mathbf{u}^{(n)}) - J(\mathbf{u}^{(n-1)})) + (J(\mathbf{u}^{(n-1)}) - J(\mathbf{u}^{(n-2)})) + \cdots + (J(\mathbf{u}^{(1)}) - J(\mathbf{u}^{(0)})) \quad (10) \\
 &= \begin{cases} 0 & : A \text{ の二次形式が } 0, \\ \text{正 (負)} & : \quad \quad \text{" 正 (負)} \end{cases}
 \end{aligned}$$

となり, 離散的局所構造の和によって離散的大域構造 $J(\mathbf{u}^{(n)}) - J(\mathbf{u}^{(0)})$ が直接表せるため, 先の局所構造の再現により大域的構造の再現に成功したことになる. つまり, この場合特に問題はない. このとき注意すべきは, 大域構造と局所構造の間に (10) のような単純な関係がいつも成り立つか, という点にある.

4 高次化: 通常の高次差分

さて次に問題が顕在化するケース, すなわち局所構造と大域構造の関係が非自明なケースについて見てみよう. 具体的には, 安定な3次の後退微分公式 (Backward Differentiation Formula 3, 以下 BDF3)[2] で以下の計算を行ってみよう.

4.1 離散微分, 離散変分

先と同じように関数微分を離散化しよう. 二次全微分近似の代わりに BDF3 を用いるには, BDF3 自身が

$$\delta_n^{(1, \text{BDF3})} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\frac{11}{6} - 3s_n^- + \frac{3}{2}(s_n^-)^2 - \frac{1}{3}(s_n^-)^3}{\Delta t} = \frac{\left\{ \frac{11}{6} - \frac{7}{6}s_n^- + \frac{1}{3}(s_n^-)^2 \right\} (1 - s_n^-)}{\Delta t} \quad (11)$$

と因数分解できることから⁶ 先の $DJ(\mathbf{u}_a, \mathbf{u}_b)$ を用いて

$$\left(\mathbf{f}_d(\mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n-1)}, \mathbf{u}^{(n-2)}, \mathbf{u}^{(n-3)}) \right)_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\left(\frac{11}{6} - \frac{7}{6}(s_n^-)^1 + \frac{1}{3}(s_n^-)^2 \right) (DJ(\mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n-1)}))_i}{\left\{ \frac{11}{6} - 3(s_n^-)^1 + \frac{3}{2}(s_n^-)^2 - \frac{1}{3}(s_n^-)^3 \right\} (\mathbf{u}^{(n)})_i} \quad (12)$$

とするのが自然である. また, 二次差分同様に一般に

$$\delta_n^{(1, \text{BDF3})} J(\mathbf{u}^{(n)}) = \frac{1}{\Delta t} \sum_i \left(\frac{11}{6} - \frac{7}{6}(s_n^-)^1 + \frac{1}{3}(s_n^-)^2 \right) (DJ(\mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n-1)}))_i \quad (13)$$

が成り立つ.

⁶一階差分は定数関数に作用させると0となるため, 必ずこの因数分解が可能である.

4.2 離散方程式

さて、この場合は、 $\mathbf{u}_t = A\mathbf{f}$ に対して、上で定義した $\mathbf{f}_d$ を用いて

$$\text{離散方程式} \quad \delta_n^{(1, \text{BDF3})} \mathbf{u}^{(n)} = A\mathbf{f}_d(\mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n-1)}, \mathbf{u}^{(n-2)}, \mathbf{u}^{(n-3)}) \quad (14)$$

とするのが自然であろう。

4.3 局所的構造の再現

スキーム (14) でもやはり局所構造が再現されている。それは以下のような式展開で容易に見ることができる。

$$\begin{aligned} \delta_n^{(1, \text{BDF3})} J(\mathbf{u}^{(n)}) &= \frac{1}{\Delta t} \sum_i \left(\frac{11}{6} - \frac{7}{6}(s_n^-)^1 + \frac{1}{3}(s_n^-)^2 \right) (DJ(\mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n-1)}))_i \\ &= \mathbf{f}_d^\top \delta_n^{(1, \text{BDF3})} \mathbf{u}^{(n)} = \mathbf{f}_d^\top A \mathbf{f}_d \\ &= \begin{cases} 0 & : A \text{ の二次形式が } 0, \\ \text{正 (負)} & : \quad \quad \quad \text{正 (負)} \end{cases} \end{aligned} \quad (15)$$

4.4 大域的構造の再現 (Structure Preserving) …問題

さて、大域的構造を考えるこの場面で問題が顕在化する。二次差分では、大域構造と局所構造の間に (10) のような単純な関係が存在したが、BDF3 の場合そのような関係は一般に知られていなかった。この状況下で、大域的な関係、例えば $J(\mathbf{u}^{(n)}) - J(\mathbf{u}^{(0)})$ がどうなっているかをどうやって知ったらよいか。これが本稿の対象とする問題である。

5 高次化:松尾の方法

BDF をはじめとする通常の高次差分をそのまま用いた関数微分離散化がよくないのでないか、という指摘もありうるので、他の関数微分の離散化による計算も行ってみよう。高次差分に対応する関数微分として一般的なものそう多くないが、次の松尾の方法 [3] によるものが知られているので、それを例にしてみよう。

5.1 離散微分

松尾の方法では、以下のように (一般の) m 次一階差分作用素 $\delta_n^{(1,*)}$ に対して一般的に離散 (m 次) 関数微分を定義する⁷.

$$\mathbf{f}_d(\mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n-1)}, \dots) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}}) + \left(\frac{\delta_n^{(1,*)} J(\mathbf{u}^{(n)}) - \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{u}})^\top \delta_n^{(1,*)} \mathbf{u}^{(n)}}{\|\delta_n^{(1,*)} \mathbf{u}^{(n)}\|^2} \right) \delta_n^{(1,*)} \mathbf{u}^{(n)} \quad (16)$$

他の記号の定義、詳細等については本稿では特に本質的ではないため文献 [3] をあたられたい.

5.2 離散方程式, 局所構造の再現

この場合も他と同様に $\mathbf{u}_t = A\mathbf{f}$ に対して, 上で定義した $\mathbf{f}_d$ を用いて

$$\text{離散方程式} \quad \delta_n^{(1,*)} \mathbf{u}^{(n)} = A\mathbf{f}_d(\mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n-1)}, \dots) \quad (17)$$

とし, これもまた同様に, 局所的構造を

$$\begin{aligned} \delta_n^{(1,*)} J(\mathbf{u}^{(n)}) &= \mathbf{f}_d^\top A \mathbf{f}_d \\ &= \begin{cases} 0 & : A \text{ の二次形式が } 0, \\ \text{正 (負)} & : \quad \quad \text{正 (負)} \end{cases} \end{aligned} \quad (18)$$

と, ごく素直に再現する. つまり, 局所構造の再現はやはり問題ないのである.

5.3 大域的構造の再現 (Structure Preserving) …問題

差分近似を松尾の方法に変えてみたが, 大域的構造を考えるこの場面でやはり先とまったく同じ問題, すなわち局所構造に出てくる $\delta_n^{(1,*)}$ と大域構造の関係性の非自明性に直面する.

5.4 問題補足

さて, これで高次差分作用素と大域構造の関係性の非自明性が理論的に問題になることが理解されたと思う. これに加え, この問題には実用的な意味もあることを指摘しておこう. これは, より高次の差分を用いる, すなわち時間方向の差分の近似オーダーを上げる

⁷これは全域に計算が渡ってしまうことや必ず非線型になることなどの問題をもつ方法ではあるものの, 一般に離散 n 次関数微分を実現できる数少ない方法であり, 貴重である.

ほど、一般に数値計算スキームの不安定性が増すという事実による。つまり、高精度計算においては計算がより不安定になりがちであるので、(安定性回復をもたらす可能性の強い)大域的性質の再現がより強く望まれるのである。よって、大域的性質の再現は理論上の要求だけでなく、実用上も重要な問題なのである。

6 問題解決へ向けて

これまでに述べた問題に対して解決の道筋を述べる⁸。

6.1 基本的アイデア

本稿で対象としている問題は「高次差分から大域的性質への繋がりが見えない」という問題であるので、これを高次差分の逆作用素を求めることで解決できると考えるのが出発点となる⁹。具体的には、 m 次一階差分作用素 $\delta_n^{(1,*)}$ の逆作用素 $(\delta_n^{(1,*)})^{-1}$ を $\mathcal{I}$ と表記すると¹⁰,

$$\begin{aligned} \text{大域的構造 } J(\mathbf{u}^{(m)}) - J(\mathbf{u}^{(0)}) &= ((s_n^+)^m - 1)J(\mathbf{u}^{(n)})\Big|_{n=0} \\ &= ((s_n^+)^m - 1)\mathcal{I}\delta_n^{(1,*)}J(\mathbf{u}^{(n)})\Big|_{n=0} \\ &= [((s_n^+)^m - 1)\mathcal{I}]\mathbf{f}_d^T A \mathbf{f}_d\Big|_{n=0} \\ &= \sum \text{定和分重み} \times \text{局所的構造} \end{aligned} \quad (19)$$

となり、形式的に「局所的構造と大域的構造が繋がる」ことになることに立脚するというものである。この展開式に沿えば、定和分 $((s_n^+)^m - 1)\mathcal{I}$ の性質がわかれば局所構造と大域構造の関係性が判明するということになり、問題の解決となるはずである。

6.2 差分逆作用素 $\mathcal{I}$ をどう求めるか

上記アイデアを形にするには、差分作用素の逆作用素 $\mathcal{I}$ が計算できればよい。本来は境界条件(初期条件)に依存するため厳密な議論はそれを用いたものになるが、実質的にはそこまでの議論は必要ない、と考えるのが本稿の立場である¹¹。

さて、ではどのように差分逆作用素 $\mathcal{I}$ を計算するかというと、これはごく簡単で、基本的に俗に言う演算子法と同じ計算技法を用いるのみである。よって、逆作用素は一般に級数の形で表され、その級数の収束半径の議論はやはり演算子法と同じく、作用素を数値解に作用させた結果に対する複素関数論での通常の議論となる。

⁸ただし、厳密な証明については残念ながら先に述べたように別の機会に譲る。

⁹厳密な証明は別の立場から議論をはじめが、はからずもこのアイデアの正当性を示すものとなった

¹⁰存在性は仮定しておく

¹¹くどいようだが、証明は別に用意してあるのでそちらを参照されたい

例として、最もシンプルな後退差分 $\delta_n^- = \frac{1 - (s_n^-)^1}{\Delta t}$ に対して逆作用素を求めてみよう。演算子法と同じく、形式的に

$$(\delta_n^-)^{-1} = \Delta t \frac{1}{1 - (s_n^-)^1} = \Delta t \frac{1 - (s_n^-)^\infty}{1 - (s_n^-)^1} \quad (20)$$

$$= \Delta t \sum_{k=0}^{\infty} (s_n^-)^k \quad (21)$$

と変形しておいて、

$$(\delta_n^-)^{-1} \stackrel{\text{def}}{=} \Delta t \sum_{k=0}^{\infty} (s_n^-)^k \quad (22)$$

とするのである。

6.3 差分逆作用素と大域的構造

上の後退差分逆作用素 $(\delta_n^-)^{-1}$ を例にとり、逆作用素と大域的構造の関係をみてみよう。この場合、 $((s_n^+)^m - 1)\mathcal{I}$ は式 (22) より、

$$((s_n^+)^m - 1)\mathcal{I} = \Delta t \sum_{k=1}^m C_k (s_n^+)^k, \quad \text{where } C_k = 1 \quad (23)$$

となる。これにより、

$$\begin{aligned} J(\mathbf{u}^{(m)}) - J(\mathbf{u}^{(0)}) &= [((s_n^+)^m - 1)\mathcal{I}] \mathbf{f}_d^\top A \mathbf{f}_d|_{n=0} \\ &= \Delta t \sum_{k=1}^m C_k (s_n^+)^k \mathbf{f}_d^\top A \mathbf{f}_d|_{n=0} \\ &= \Delta t \sum_{n=1}^m C_n \left(\mathbf{f}_d^{(n)\top} A \mathbf{f}_d^{(n)} \right), \quad \text{where } C_n = 1, \\ &= \begin{cases} 0 & : A \text{ の二次形式が } 0, \\ \text{正 (負)} & : \quad \quad \text{'' 正 (負)} \end{cases} \end{aligned} \quad (24)$$

となり、大域的構造が再現される¹²。このとき、重要なのは逆作用素の係数 C_n の性質であることに留意されたい（この場合は全て正であることと、その範囲が有限であることが重要）。

他の差分作用素においても同様に、差分の逆作用素の係数 C_n の性質を見ることで、詳しい解析を行わずとも大域的構造が再現されるかどうかはほぼ予測可能であるというのが本稿の主張である。

¹²ただし、これまでの議論よりわかるように $\mathbf{u}^{(n)}$ が無限の過去に向かって存在するなど、いくつかの仮定のもとでの話である。初期条件を持つ場合の厳密な議論は他に記す。

7 各差分逆作用素についての解析

各種差分作用素に対して, 6 章と同様の計算を行い, 逆作用素の係数 C_k を求めてみよう. それにより, 何が予測されるか調べてみよう.

7.1 後退微分公式 (BDF) 作用素

BDF3 に対して計算してみよう. 計算過程は単純なので省略し, 結果だけ記すと次のようになる.

$$\text{BDF3 の逆作用素 } (\delta_n^{(1, \text{BDF3})})^{-1} = \Delta t \sum_{k=0}^{\infty} \left[1 + \frac{r^k}{11} \left(\frac{9}{\sqrt{39}} \sin k\theta - 5 \cos k\theta \right) \right] (s_n^-)^k \quad (25)$$

ただし $r = \sqrt{\frac{2}{11}}$, $\theta = \text{Arcsin } \frac{7}{88}$ である.

これにより, 定和分 $((s_n^+)^m - 1)I$ も代入するだけでその係数が求まる. 以下に, 逆作用素と, 定和分のそれぞれの係数をグラフで示そう.

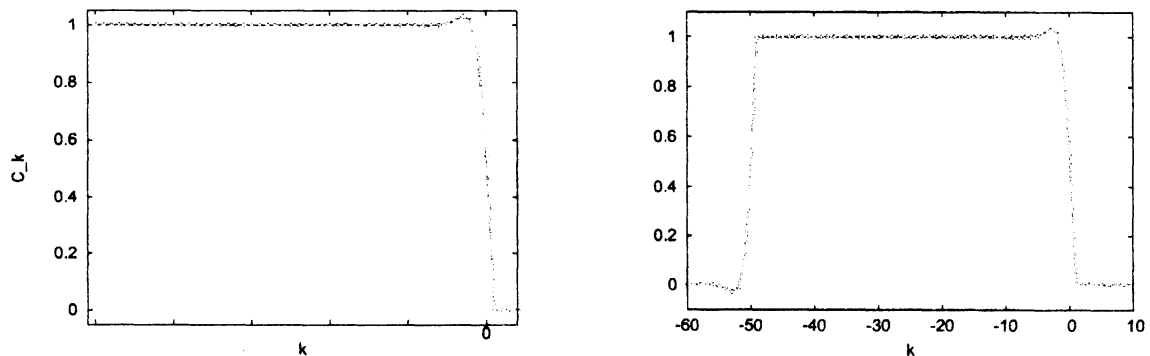


図 1: 左: BDF3 逆作用素の係数, 右: BDF3 逆作用素による定和分の係数 ($m = 50$ として)

上のグラフと式 (25) より, 逆作用素の係数は全て正であること, 逆作用素の係数範囲は半無限 (過去からしか影響をうけない) であること, 定和分作用素の係数はごく一部分 (初期状態付近) に負の値をもつこと, 定和分作用素の係数範囲は半無限 (過去からしか影響をうけない) であることなどが特徴として読み取れる.

初期条件を無視した議論であることから初期状態付近の問題は無視しうること¹³ なども考慮にいれ, (議論を省略して) 結論だけ述べるならば, これにより

「定和分作用素の係数は正」($\Rightarrow$ 大域構造の再現)

「定和分作用素の係数範囲は限定的」($\Rightarrow$ 逆作用素が正当である収束半径がそこそこ大き

¹³もし無視できないとしても, 負である範囲が固定されているうえ有限なのでやはり問題とならない.

い)

であると言えよう。これらの情報より「BDF3 差分作用素を用いた場合、大域的構造は再現される」と予測される。

7.2 中心差分作用素

さて、次に 4 次中心差分

$$\delta_n^{(1,4)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Delta t} \left\{ -\frac{1}{24}(s_n^+)^2 + \frac{9}{8}(s_n^+)^1 - \frac{9}{8} + \frac{1}{24}(s_n^-)^1 \right\} \quad (26)$$

についても同様に調べてみよう。やはり計算過程は単純なので省略して結果を記すと、

$$\text{Center4 の逆作用素 } (\delta_n^{(1,4)})^{-1} = \Delta t \left(\sum_{k=-\infty}^{-1} (1 - c_k) (s_n^+)^k + \sum_{k=0}^{\infty} d_k (s_n^+)^k \right) \quad (27)$$

ただし $c_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(1+\sqrt{\frac{6}{7}})}{2} (13 - 2\sqrt{42})^{-k-1}$, $d_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(1-\sqrt{\frac{6}{7}})}{2} (13 + 2\sqrt{42})^{-k-1}$ である。

さて、以下に逆作用素とこれにより求まる定和分のそれぞれの係数をグラフで示そう。

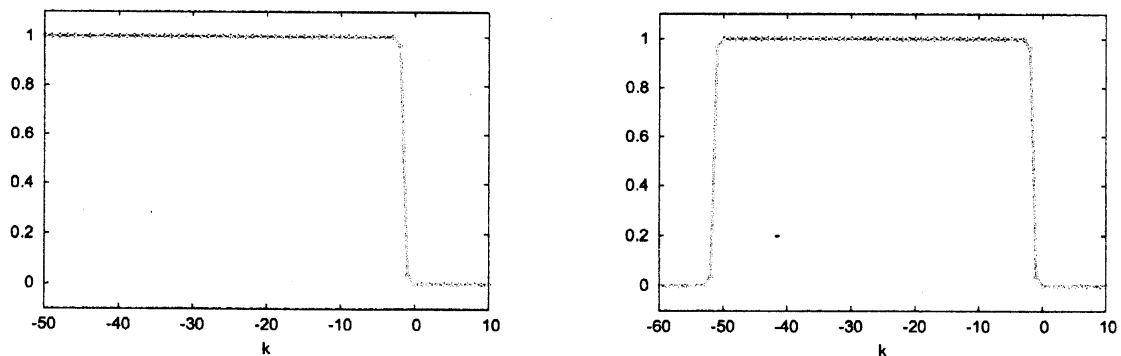


図 2: 左: 中心差分逆作用素の係数, 右: 中心差分逆作用素による定和分の係数 ($m = 50$ として)

先と同様に考えると、時間対称性をもつこと、逆作用素の係数は全て正であること、逆作用素の係数範囲は無限 (未来からも影響をうける) であること、定和分作用素の係数も全て正であること、定和分作用素の係数範囲も無限 (未来からも影響をうける) であること、などが特徴として読み取れる。これにより言えることは、

「定和分作用素の係数は正」($\Rightarrow$ 大域構造の形式的な再現)

「定和分作用素の係数範囲が無限」($\Rightarrow$ 逆作用素が正当である収束半径が非常に小さいもしくはゼロ)

である。このうち、二番目の考察結果は問題である(大域構造再現の議論がの前提条件がそもそも成り立たない恐れがある)。詳細な議論は他稿に譲るとして、これらから「4次中心差分作用素を用いた場合、非常に限定的な状況下で大域構造は再現されるか、もしくはそもそも解が存在しないなどの特異な状態になる」ということが予測される。

8 数値実験

実際に数値計算を行い、これまでの予測と比較してみよう。

8.1 保存系:後退微分公式(BDF)

まず、大域的構造の再現性のための条件がより緩やかである保存系に対して数値実験を行ってみよう。対象となる具体的な問題を

$$\frac{d}{dt}z(t) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} f(z(t)), \quad f(z)_i = \frac{\partial J(z)}{\partial z_i}, \quad (i = 1, 2), \quad J(z) = (z_1)^2 + (z_2)^2 \quad (28)$$

としよう。この問題はサンプル問題(1)に含まれ、係数行列の二次形式が0であることから $J(z(t))$ が保存量となることがわかる。

この問題に対し、差分作用素として BDF3 を用いた通常の離散変分導関数法による数値スキーム(14)を用いて数値計算を行ってみよう。結果は図3,4の通りである。

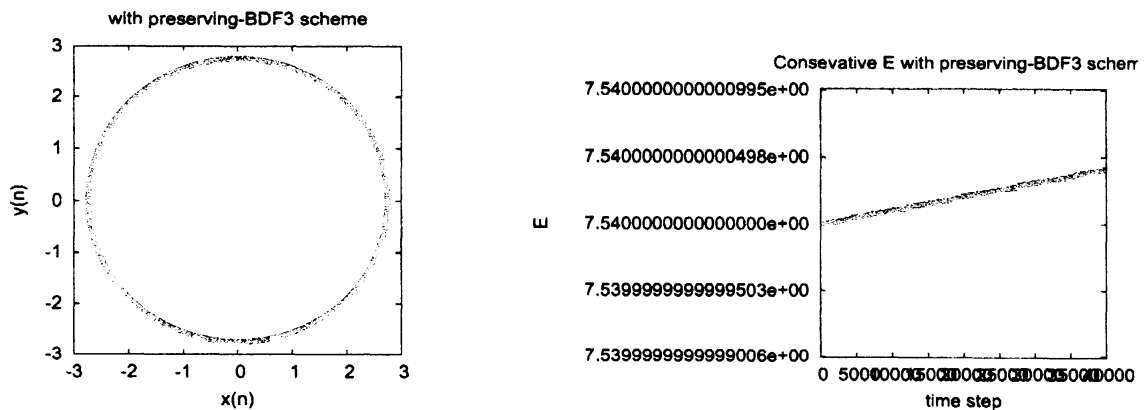


図3: BDF3離散変分導関数法スキーム(14)による数値実験結果。左: 数値解($\Delta t = 0.0001$), 右: 数値解による $J(z(t))$ ($\Delta t = 0.0001$)

計算が無理なく進んでいること、丸め誤差の範囲で J が保存されている(大域的構造が再現されている)こと、誤差の精度が確かに3次であることなどが確認できる。つまり、この保存系に対しては予測通り BDF3 スキームによって確かに大域的構造が離散的に再現されていると言って良さそうである。

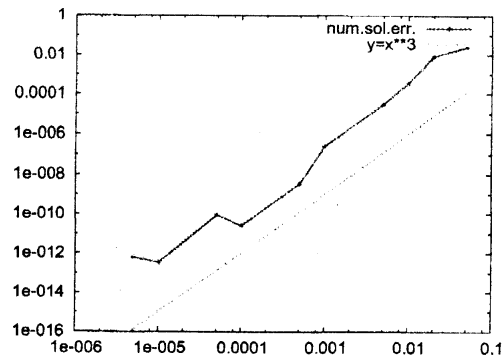


図 4: BDF3 離散変分導関数法スキーム (14) による数値実験の誤差 (Euclid ノルム)

8.2 保存系:四次中心差分

次に, 同じ問題 (28) に対して同様に四次中心差分作用素を用いた離散変分導関数法スキームによる数値計算を行ってみる. 結果は 図 5 である.

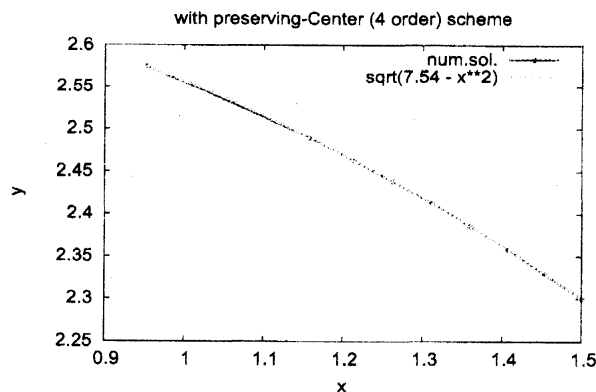


図 5: 四次中心差分スキームによる数値解 ($\Delta t = 0.01$). 右端側が初期値.

さてこの結果について述べよう. まず, ここで用いた数値スキームについての 7.2 章の解析および予測は, 中心差分の意味で局所的に J の保存性を再現しており, かつ, 形式的には大域的にも保存性を再現するがその前提条件が非常に厳しく, 数値解が存在しないなどの特異な状態の発生もありうるというものであった.

実際の数値解をみると, しばらくは順調に計算が進み, しかも J 保存のラインにぴったりと数値解がのっている. つまり, 大域的構造が再現されていることがわかる. しかし, 計算が進むと, 数値解が J 保存ラインの上のってはいらぬもののかかなりおかしいところへ飛んだ後, 数値解が求まらなくなっている¹⁴. これは, 「形式的に大域的保存性を再現し

¹⁴プログラムに工夫を加え, J 保存ラインに限定せずに随分離れたところまで次のステップの数値解を探索したが見つからなかった. おそらく $\mathbf{R}^2$ の範囲には解が無くなっており, $\mathbf{C}^2$ に入ってしまった.

ているが、数値解が存在しなくなってしまった」といえ、7.2 章の予測通りであったと言えよう。

8.3 散逸系:後退微分公式 (BDF)

次に、大域的構造の再現性のための条件がより厳しい散逸系に対して数値実験を行ってみよう。対象となる具体的な問題を

$$\frac{d}{dt}z(t) = \begin{pmatrix} -\alpha & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} f(z(t)), \quad f(z)_i = \frac{\partial J(z)}{\partial z_i}, \quad (i = 1, 2), \quad J(z) = (z_1)^2 + (z_2)^2 \quad (29)$$

としよう。ただし $\alpha > 0$ は散逸係数である。この問題もサンプル問題 (1) に含まれ、係数行列の二次形式が (半) 負定値 $(-\alpha(f_1)^2)$ であることから $J(z(t))$ が散逸量となることがわかる。

この問題に対し、差分作用素として BDF3 を用いた通常の離散変分導関数法による数値スキーム (14) を用いて数値計算を行ってみよう。結果は図 6,7 の通りである。

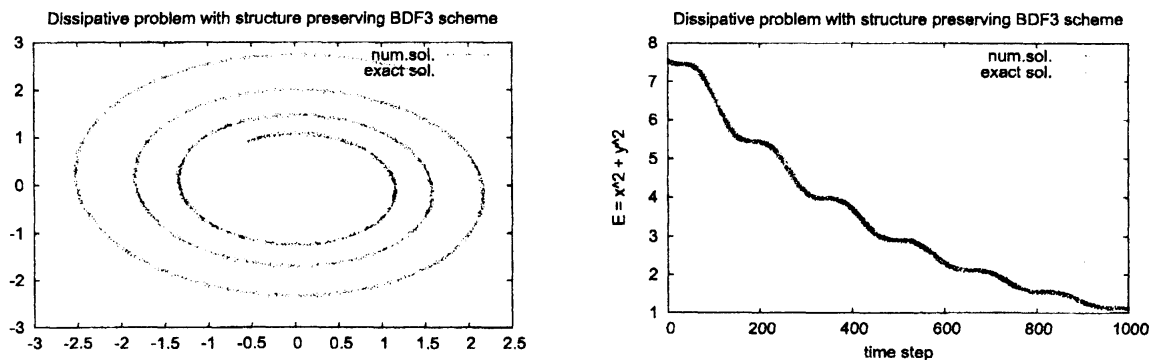


図 6: BDF3 離散変分導関数法スキーム (14) による数値実験結果. 左: 数値解 ($\Delta t = 0.01$), 右: 数値解による $J(z(t))$ ($\Delta t = 0.01$)

この場合も計算が無理なく進んでいること、 J が確かに散逸する上、その時間発展が厳密解とぴったり重なること (大域的構造が再現されている)、誤差の精度が確かに 3 次であることなどが確認できる。つまり、この散逸系に対しても予測通り BDF3 スキームによって確かに大域的構造が離散的に再現されていると言って良さそうである。

9 まとめ

差分作用素の逆作用素を計算することにより、局所構造と大域構造の関係性を示し、数値スキームによって大域構造が再現されるかどうかを予測することを考えた。数値実験結果はその予測が正しいであろうことを示している。

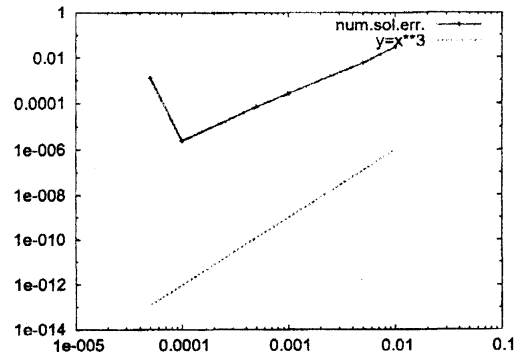


図 7: BDF3 離散変分導関数法スキーム (14) による数値実験の誤差 (Euclid ノルム)

なお、全体としては常微分方程式の枠組みで本稿を構成したが、偏微分方程式でも議論は変わらないため、偏微分方程式での数値実験が望まれる。

また、純粋な BDF のみでなく、GBDF や Block BDF などといったより高度な高次差分についても議論を行う必要があるだろう。

参考文献

- [1] Daisuke Furihata. Finite difference schemes for $\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\alpha \frac{\delta G}{\delta u}$ that inherit energy conservation or dissipation property. *Journal of Computational Physics*, Vol. 156, No. 1, pp. 181–205, Nov. 1999.
- [2] 三井斌友. 常微分方程式の数値解法. 岩波書店, 東京, Jul. 2003.
- [3] Takayasu Matsuo. High-order schemes for conservative or dissipative systems. *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 152, pp. 305–317, . 2003.