

スペクトル法を用いた数値計算
– 一次元線形移流方程式の場合 –

荻原 弘堯

学生番号 22070012

指導教官 石渡正樹, 小高正嗣

目次

第1章	はじめに	4
1.1	本論文の目的	4
1.2	本論文の構成	5
第2章	スペクトル法とは	6
2.1	差分による離散化	6
2.2	関数展開による離散化	7
2.2.1	選点法	8
2.2.2	重みつき残差法	8
2.2.3	ガラーキン法の分類	9
2.3	スペクトル法の長所と短所	11
第3章	スペクトル法による1次元移流方程式	13
3.1	1次元線形移流方程式	13
3.1.1	1次元線形移流方程式の解析解	13
3.1.2	スペクトル法による1次元線形移流方程式の解法	14
3.1.3	差分法による1次元線形移流方程式の解法	17
3.1.4	数値的分散性	19
3.2	1次元非線形移流方程式	19

3.2.1	1次元非線形移流方程式の解析解	20
3.2.2	スペクトル法による1次元非線形移流方程式の解法	21
3.2.3	変換法による非線形の計算	22
第4章	高速フーリエ変換 (FFT)	25
4.1	FFTの原理	25
4.1.1	FFTの算法の詳細	26
4.1.2	FFTの計算コスト	29
4.2	実FFT	30
4.2.1	正変換	30
4.2.2	逆変換	33
4.3	FFTを用いた変換法の実装	36
4.3.1	変換法でのIDFTへのFFTの適用	36
4.3.2	変換法でのDFTへのFFTの適用	38
4.3.3	非線形項での展開の自由度とFFTの分点の関係	39
第5章	常微分方程式の初期値問題の数値解法	40
5.1	ルンゲ-クッタ型公式	40
5.1.1	ルンゲ-クッタ型公式の1段1位公式	42
5.1.2	ルンゲ-クッタ型公式の2段2位公式	43
5.1.3	ルンゲ-クッタ型公式の3段3位公式	44
5.1.4	ルンゲ-クッタ型公式の4段4位公式	46
5.1.5	ルンゲ-クッタ型公式の5段以上の場合	52
5.2	数値解の公式の安定性	53

5.2.1	ルンゲ-クッタ型公式の安定性	53
第 6 章	一次元線形移流方程式の数値解法	61
6.1	ルンゲ-クッタ型公式の段数の違いによる振舞いの違い	62
6.1.1	1 段 1 位公式	62
6.1.2	2 段 2 位公式	65
6.1.3	3 段 3 位公式	70
6.1.4	4 段 4 位公式	78
第 7 章	まとめ	85
第 8 章	付録	86
第 9 章	謝辞	123
第 10 章	参考文献	124

第1章 はじめに

1.1 本論文の目的

金星の大気の循環は今までの観測事実より高度 70 km 付近での雲層上部では緯度 $-60^\circ \sim 60^\circ$ の広範囲に渡って約 100 m/s の東風が吹いていることがわかっている。この風は金星の自転速度 1.5 m/s の約 60 倍ほどで同方向に吹いている。この自転速度を超えて吹く風をスーパーローテーションと呼ぶ。風速が 100 m/s を超す惑星は金星以外にも存在する。例えば、木星の赤道域¹⁾では、100 m/s の東西風が吹いているし、土星の赤道のジェット気流²⁾は 500 m/s にもなっていることが観測されている。しかし、これらの惑星の自転速度はそれぞれ 13000 m/s, 9800 m/s である。木星や土星の自転速度と比較すると木星や土星で観測された風速はきわめて低速であり、自転速度の 60 倍で回転することなどはないのである。このことを見ても金星のスーパーローテーションは特異な現象であることが分かる。なぜこのような現象が起こるのかいまだ詳しく分かっていない。現在もこの現象の原因究明の研究は進んでいる。その中のアプローチの一つとして大気大循環モデルを用いたスーパーローテーションの再現がある。

大気大循環モデルとは全球の大気の流れを予測・再現する数値モデルである。空間的に連続な大気の流れを数値的に取り扱うためには物理量を有限個に離散化しなくてはならない。離散化の方法には主に 2 つあり、差分法とスペクトル法である。低解像度の場合スペクトル法は差分法に比べて高精度の数値解を得ることができる。よって、スペクトル法は大気大循環モデルの要素の一つと成り得る。

本論文では金星の大気大循環モデルを理解するために、その前段階としてスペクトル法による数値計算の原理について石岡 (2004) にそって解説し、単純な問題である 1 次元線形移流方程式を実際にスペクトル法で数値解法を行った。

移流方程式はある物理量の輸送を記述する式であり、移流方程式は大気の運動方程式の中に含まれている。大気大循環モデルの要素の一つと成り得るスペクトル法に

¹⁾緯度が約 0°

²⁾緯度が約 0°

よる数値計算の原理を学ぶ上でも1次元線形移流方程式を取り上げることは意義があることである。

1.2 本論文の構成

本論文ではスペクトル法の原理を理解することが目的である。そのために以下のような流れでスペクトル法で1次元移流方程式を解くことを考えていく。第2章でスペクトル法とは何かの説明をする。それとともに他の空間離散化の方法である差分法も紹介し、スペクトル法と差分法との特徴の違いを説明する。第3章でスペクトル法を実際に1次元線形移流方程式に適用することを考える。また、スペクトル法を用いた1次元線形移流方程式の特徴を理解するため差分法にも1次元線形移流方程式に適用してみて解の振舞いの違いを説明する。第4章でスペクトル法を1次元非線形移流方程式への適用することを考え、その際必要となる変換法について解説を行う。第5章で第4章で開設した変換法で用いられる高速フーリエ変換と呼ばれる変換技法を解説し、具体的にどのように変換法にFFTが用いられるかの手順を説明する。第6章で実際に移流を解くための準備として常微分方程式の初期値問題の解法の例をあげてその安定性を説明する。第7章で実際に1次元線形移流方程式をスペクトル法を用いて数値計算する。

最後に第8章で本論文のまとめを行う。

第2章 スペクトル法とは

スペクトル法による偏微分方程式の数値解法を扱うためにまず、差分法とスペクトル法との違いを考える。スペクトル法で扱うと簡単になるので2変数関数 $u = u(x, t)$ のとき、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1) \quad (2.0.1)$$

$$\begin{aligned} \text{初期条件: } & u(x, 0) = f(x), \\ \text{境界条件: } & u(0, t) = u(1, t) = 0. \end{aligned}$$

という偏微分方程式を考える。本論文では数値解法を理解が目的なのでこの式の物理的な意味は深くは考えないがすこしだけ解説すると、(2.0.1)式は熱伝導方程式とよばれる式である。(2.0.1)式の場合は両端の温度が零に固定されている有限長の棒があるとしてその棒上にある温度を与えたときにどう時間変化していくかを表している。

この式は空間で連続した関数である。数値解法で扱うためには有限な非連続の値に分割しなくてはならない。この分割することを離散化と呼ぶ。

2.1 差分による離散化

j を $j = 0, 1, \dots, J$ としたとき、 $[0, 1]$ 上に等間隔の分点 x_j を

$$\begin{aligned} x_j &= j\Delta x \quad (j = 0, 1, \dots, J), \\ \Delta x &= \frac{1}{J} \end{aligned}$$

とする。差分法では、 $u(x, t)$ を x の関数として扱わず、 x 方向については上で導入した分点上の値のみを扱い、従属変数を離散化する。つまり、

$$u_j(t) = u(x_j, t) \quad (j = 0, 1, \dots, J)$$

と定めて、この時間発展を何らかの数値解法で解いて求める。空間の差分近似には一般的に前方差分、中心差分、後方差分の三つがあるが今回は2次の中心差分近似をする¹⁾。2次の中心差分近似は

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{x=x_j} \approx \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{(\Delta x)^2} \quad (j = 1, 2, \dots, J-1) \quad (2.1.2)$$

となる。

この差分近似によって、(2.0.1)式は

$$\frac{du_j(t)}{dt} = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{(\Delta x)^2} \quad (j = 1, 2, \dots, J-1)$$

となる。ここで境界条件から $u_0 = u_J = 0$ となる。また、初期条件から、

$$u_j(0) = f(x_j) \quad (j = 1, 2, \dots, J-1)$$

となり、常微分方程式の初期値問題になった。これを適当な数値解法で解くことで $u_j(t)$ が求められる²⁾。

2.2 関数展開による離散化

2.1節では $J-1$ 個の分点を用いて、

$$u_j(t) = u(x_j, t)$$

として、空間方向を有限個数に離散化した。この節では $J-1$ 個の独立な関数 $\phi_j(x)$ ($j = 1, 2, \dots, J-1$) を用いて³⁾

$$u(x, t) = \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \phi_j(x) \quad (2.2.3)$$

¹⁾差分近似については付録Aを参照されたい。

²⁾この章では空間についての離散化に焦点置いているので、この常微分方程式の数値解法は解かない。常微分方程式の数値解法については第5章を参照されたい。

³⁾ ϕ_j は1次独立な関数である。つまり、

$$0 = \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \phi_j(x)$$

という式があったとき、この式を満たすのが

$$\alpha_j(t) = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, J-1)$$

のみである関数であるということである。

と離散化することを考える. ここで展開関数 $\phi_j(x)$ は境界条件に対応して, $\phi_j(0) = \phi_j(1) = 0$ ($j = 1, 2, \dots, J-1$) を満たすように選んでおく. この場合は, 展開係数 $\alpha_j(t)$ に対する常微分方程式を決めることになる. 展開係数を決めるためには2つの考え方がある. 以下でそれぞれの考え方について解説する.

2.2.1 選点法

差分法と同様に $J-1$ 個の分点 x_j を定め, 元の偏微分方程式がこの分点上で成立していることを求める. (2.0.1) 式の場合は,

$$\sum_{j=1}^{J-1} \frac{d\alpha_j(t)}{dt} \phi_j(x_i) = \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \left(\frac{\partial^2 \phi_j(x)}{\partial x^2} \right)_{x=x_i} \quad (i = 1, 2, \dots, J-1)$$

これは $\alpha_j(t)$ についての常微分方程式の初期値問題となっている. これを適当な数値解法で解くことになる. この方法は, 偏微分方程式の成立を有限の選ばれた点上で求めるため, 選点法と呼ばれる.

2.2.2 重みつき残差法

(2.0.1) 式で偏微分方程式の残差 R を

$$R(x, t) \equiv \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.2.4)$$

と定義する. ここで, $J-1$ 個の独立な重み関数 $W_m(x)$ ($m = 1, 2, \dots, J-1$) を導入する. 残差 R に重み関数を掛けて領域積分したものが0となることを求める.

$$\int W_m(x) R(x, t) dx = 0 \quad (m = 1, 2, \dots, J-1) \quad (2.2.5)$$

(2.0.1) 式に適用すると,

$$\sum_{j=1}^{J-1} \frac{d\alpha_j(t)}{dt} \int_0^1 \phi_j(x) W_m(x) dx = \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \int_0^1 \frac{\partial^2 \phi_j(x)}{\partial x^2} W_m(x) dx \quad (m = 1, 2, \dots, J-1) \quad (2.2.6)$$

となる. (2.2.6) 式も $\alpha_j(t)$ についての常微分方程式の初期値問題になっている. よって, これを適当な数値解法で解くことになる. この方法は, 偏微分方程式の残差に重み関数を掛けたものが0となるように求めることから, 重みつき残差法 (weighted residual method) と呼ばれる.

重みつき残差法は重み関数の選び方に任意性がある. W_m を ϕ_j と同じ系列にとつた重みつき残差法をガラーキン法と呼ぶ.

ガラーキン法として重み関数を展開関数と同じにしたとしても展開関数をどのように選ぶかという任意性が残っている. ガラーキン法は展開関数の選び方によって, 主に2種類に分類できる.

2.2.3 ガラーキン法の分類

ガラーキン有限要素法

差分法と同様に $J - 1$ 個の分点 x_j を定めて, $\phi_j(x)$ として次のような折れ線関数を使う.

$$\phi_j(x) = \begin{cases} 0 & (x < x_{j-1}) \\ \frac{x-x_{j-1}}{\Delta x} & (x_{j-1} \leq x < x_j) \\ \frac{x_{j+1}-x}{\Delta x} & (x_j \leq x < x_{j+1}) \\ 0 & (x_{j+1} \leq x) \end{cases} \quad (j = 1, 2, \dots, J - 1)$$

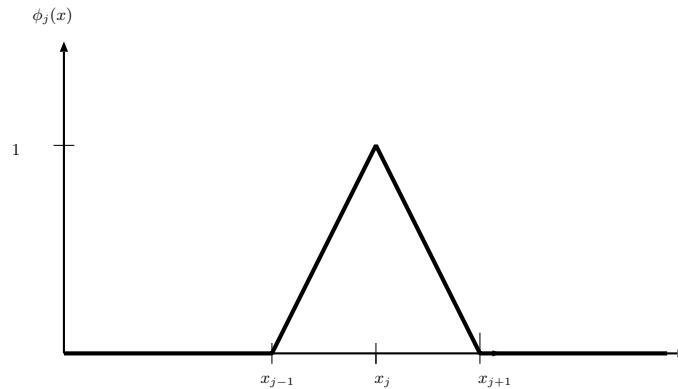


図 2.2.1: ガラーキン有限要素法で使われる折れ線関数.

このままでは $\phi_j(x)$ は区分的に微分可能な関数なので (2.2.6) 式にそのまま適用はできない. よって, (2.2.6) 式を変形して用いる. (2.2.6) 式の右辺を部分積分して,

$$\sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \int_0^1 \frac{\partial^2 \phi_j(x)}{\partial x^2} \phi_m(x) dx = \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \left[\frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x} \phi_m(x) \right]_0^1 - \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \int_0^1 \frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x} \frac{\partial \phi_m(x)}{\partial x} dx. \quad (m = 1, 2, \dots, J - 1)$$

境界条件 $\phi_j(0) = \phi_j(1) = 0$ なので, $\phi_m(0) = \phi_m(1) = 0$. よって,

$$\sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \int_0^1 \frac{\partial^2 \phi_j(x)}{\partial x^2} \phi_m(x) dx = - \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \int_0^1 \frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x} \frac{\partial \phi_m(x)}{\partial x} dx. \quad (m = 1, 2, \dots, J-1) \quad (2.2.7)$$

(2.2.7) 式を用いて (2.2.9) 式を書き換えた

$$\sum_{j=1}^{J-1} \frac{d\alpha_j(t)}{dt} \int_0^1 \phi_j(x) \phi_m(x) dx = - \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \int_0^1 \frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x} \frac{\partial \phi_m(x)}{\partial x} dx. \quad (m = 1, 2, \dots, J-1)$$

を解くことになる.

ガラーキンスペクトル法

$\phi_j(x)$ として, 境界条件を満たす滑らかな直交関数系を用いる方法をガラーキンスペクトル法という. (2.0.1) 式では, 展開関数は境界条件にあわせて $\sin(j\pi x)$ を用いる. よって,

$$u(x, t) = \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \sin(j\pi x) \quad (2.2.8)$$

と展開する. (2.2.8) 式を用いて (2.2.6) 式を考えると, 重み関数は展開係数と同じ系列の関数を用いるので,

$$W_m(x) = \sin(m\pi x) \quad (m = 1, 2, \dots, J-1)$$

となる. よって,

$$\sum_{j=1}^{J-1} \frac{d\alpha_j(t)}{dt} \int_0^1 \sin(j\pi x) \sin(m\pi x) dx = \sum_{j=1}^{J-1} \alpha_j(t) \int_0^1 (j\pi)^2 \sin(j\pi x) \sin(m\pi x) dx$$

となる. 三角関数の直交性より, $j = m$ となるので,

$$\frac{d\alpha_m(t)}{dt} = -(m\pi)^2 \alpha_m(t) \quad (m = 1, 2, \dots, J-1) \quad (2.2.9)$$

となる.

α_m に対する初期条件は, 初期分布をフーリエ変換することで求められる. (2.2.9) 式の場合 $u(x, 0) = f(x)$ の両辺に $W_m(x) = \sin(m\pi x)$ ($m = 1, 2, \dots, J-1$) を掛けて, $0 \leq x \leq 1$ の範囲で積分すると,

$$\alpha_m(0) = 2 \int_0^1 f(x) \sin(m\pi x) dx \quad (m = 1, 2, \dots, J-1)$$

となる.

(2.2.9) 式は展開関数 $\phi_j(x)$ として境界条件を満たす $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ の固有関数を用いたので, 得られた常微分方程式が簡単になっている. このガラーキンスペクトル法は単にスペクトル法とも呼ばれる. 以降はスペクトル法と呼ぶことにする.

2.3 スペクトル法の長所と短所

差分法と比べたスペクトル法の特徴をまとめておく

- 長所
- ・ 通常, 展開関数系として滑らかな関数系を使うので, 偏微分を差分近似することに伴う数値的分散性がないまた, 展開関数系として適切なものを使えば, 展開の収束が非常に速い⁴⁾. よって, 差分法に比べ高精度の解が得られる.
 - ・ 展開関数系として, 偏微分方程式に含まれる演算子の固有関数系を使うことができれば, 離散化して得られる常微分方程式が非常に簡単になる⁵⁾.
- 短所
- ・ 境界条件や領域の形が複雑な場合は展開関数系が簡単には構成できない.
 - ・ 展開係数と分点上の物理量が直接には対応していないので, 対応付けのために変換コストがかかる⁶⁾.
 - ・ 非線形問題を扱う場合には特別な工夫が必要になる.

⁴⁾収束が早いということは近似した式の解が解析解に近づくのが早いということである.

以上の長所・短所については以降の章で考えていく。

⁵⁾(2.2.9)式がこのいい例である。 L を何らかの演算子とする。このとき

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = L[u(x,t)]$$

という偏微分方程式を考える。今スペクトル法で解くため u を

$$u = \sum_j \alpha_j(t) \phi_j(x)$$

とする。この直交関数 $\phi_j(x)$ を演算子 L の固有関数、 β_j を固有値とすると、

$$L[\phi_j(x)] = \beta_j \phi_j(x)$$

となる。このとき元の偏微分方程式は (2.2.5) 式より

$$\sum_j \frac{d\alpha_j(t)}{dt} \int \phi_j(x) \phi_m(x) dx = \sum_j \alpha_j(t) \int \beta_j \phi_j(x) \phi_m(x) dx$$

となる。直交性より $j = m$ とすると、

$$\frac{d\alpha_m(t)}{dt} = \beta_m \alpha_m(t)$$

となる。よって展開関数として偏微分方程式に含まれる演算子の固有関数系を使うと常に簡単な式に帰着できる。

⁶⁾ $\sin(m\pi x)$ などの場合は、 x は物理量ではないので離散化しなくてはならずその分のコストが必要ということ。

第3章 スペクトル法による1次元移流方程式

この章では、スペクトル法の最も基本的な例として、周期境界条件の問題である1次元移流方程式にフーリエ級数を用いたスペクトル法を適用する。

3.1 1次元線形移流方程式

初期条件 $u(x, 0) = f(x)$, 境界条件 $u(x, t) = u(x + 2\pi, t)$ のとき、次のような x, t に対する1階の線形偏微分方程式を考える。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (3.1.1)$$

初期条件: $u(x, 0) = f(x)$,

境界条件: $u(x, t) = u(x + 2\pi, t)$.

この偏微分方程式は解析的に解くことができる。

3.1.1 1次元線形移流方程式の解析解

まず、偏微分方程式を完全に解析的に解く。解析解が分かると数値解法の持つ性質を理解するのに役立つ。

$\xi \equiv x - t$ として、独立変数を x, t から ξ と t に変換する。

$$u(x, t) = U(\xi, t).$$

u を t で偏微分すると

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial t} \quad (3.1.2)$$

$$= -\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial U}{\partial t}. \quad (3.1.3)$$

u を x で偏微分すると

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial U}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} \tag{3.1.4}$$

$$= \frac{\partial U}{\partial \xi}. \tag{3.1.5}$$

(3.1.3) と (3.1.5) を (3.1.1) に代入する.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial \xi} \\ &= \frac{\partial U}{\partial t} \\ &= 0 \end{aligned}$$

よって $\frac{\partial U(\xi, t)}{\partial t} = 0$ を解けば良い. F を任意の1変数の関数とすると

$$\begin{aligned} \frac{\partial U(\xi, t)}{\partial t} &= 0 \\ U(\xi, t) &= F(\xi) \\ u(x, t) &= F(x - t). \end{aligned}$$

初期条件をあてはめて

$$u(x, t) = f(x - t) \tag{3.1.6}$$

となる. これは初期に与えられた $f(x)$ という関数が一定の速度1で x の正方向に動いていく様子を記述していると思わせる. この偏微分方程式は, 解のパターンが流されていくというイメージから, 1次元線形移流方程式と呼ばれる. この式をスペクトル法で解いていく.

3.1.2 スペクトル法による1次元線形移流方程式の解法

展開関数は, 周期境界条件を考慮してフーリエ級数を使う. $u(x, t)$ が以下の様に展開できる.

$$u(x, t) = \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx}. \tag{3.1.7}$$

このとき, N は数値解の解像度を定める定数で, 切断波数 (cutting of the number of waves) と呼ばれる¹⁾. 複素数は実部と虚部の2つの自由度を持つと数えると展開の

¹⁾ $f(x)$ がフーリエ級数展開で展開できるとき,

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nx) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nx)$$

自由度は、展開係数の自由度 $(2N + 1) \times 2$ だけあるように見えるが、 $u(x, t)$ が実数だとすると、

$$\hat{u}_{-k}^* = \hat{u}_k \quad (3.1.8)$$

の制約が掛かるため²⁾、自由度は半分の $2N + 1$ になっている³⁾。

展開係数 $\hat{u}_k(t)$ に対する常微分方程式を導くために、(3.1.7) 式を (3.1.1) 式に当てはめて、残差 R を求める。

$$R = \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx} + \sum_{k=-N}^N ik\hat{u}_k(t) e^{ikx}. \quad (3.1.9)$$

となる。この式が有限のフーリエ級数で近似できたとき、

$$f(x) \approx \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^N a_n \cos(nx) + \sum_{n=1}^N b_n \sin(nx)$$

となる。この N が切断波数であり、 N の個数によって誤差が増減するので解像度が決まる。

²⁾ $u(x, t)$ を

$$u(x, t) = \sum_{m=-N}^N \hat{u}_m e^{imx}$$

とする。そのとき、 $u(x, t)$ の複素共役 $u^*(x, t)$ は、

$$\begin{aligned} u(x, t)^* &= \sum_{l=-N}^N \hat{u}_l^* (e^{ilx})^* \\ &= \sum_{l=-N}^N \hat{u}_l^* e^{-ilx} \end{aligned}$$

となる。 $u(x, t)$ が実数のときは $u(x, t) = u^*(x, t)$ となるので、

$$\begin{aligned} u(x, t) &= u^*(x, t) \\ \sum_{m=-N}^N \hat{u}_m e^{imx} &= \sum_{l=-N}^N \hat{u}_l^* e^{-ilx}. \end{aligned}$$

両辺に e^{-ikx} を掛けて $[0, 2\pi]$ で積分すると三角関数の直交性から、

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sum_{m=-N}^N \hat{u}_m e^{imx} e^{-ikx} dx &= \int_0^{2\pi} \sum_{l=-N}^N \hat{u}_l^* e^{-ilx} e^{-ikx} dx \\ \hat{u}_m \delta_{mk} &= \hat{u}_l^* \delta_{l,-k} \\ \hat{u}_{-k}^* &= \hat{u}_k \end{aligned}$$

となって実数の制約条件が出る。

³⁾ここで * は複素共役を表す。

この両辺に重み関数 e^{-ikx} を掛けて、 $[0, 2\pi]$ で積分し、残差の積分が0になることを課すと、

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} e^{-ikx} R dx &= \int_0^{2\pi} \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx} e^{-ikx} dx + \int_0^{2\pi} \sum_{k=-N}^N ik\hat{u}_k(t) e^{ikx} e^{-ikx} dx \\ &= \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} \int_0^{2\pi} e^{ikx} e^{-ikx} dx + \sum_{k=-N}^N ik\hat{u}_k(t) \int_0^{2\pi} e^{ikx} e^{-ikx} dx. \\ &= 0 \end{aligned}$$

三角関数の直交性より、

$$\frac{d\hat{u}_k}{dt} + ik\hat{u}_k = 0 \tag{3.1.10}$$

が得られる。 $\hat{u}_k(t)$ の初期条件は、初期分布をフーリエ変換することにより求められるので、

$$\hat{u}_k(0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-ikx} dx \quad (k = -N, \dots, N) \tag{3.1.11}$$

となる。実際は(3.1.11)式を数値解法で解いて求めるが、今回は解析的に求めることが可能なので以下に示す⁴⁾。

$$\hat{u}_k(t) = \hat{u}_k(0) e^{-ikt} \quad (k = -N, \dots, N). \tag{3.1.12}$$

(3.1.12) 式を (3.1.7) 式に代入すると、

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx} \\ &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(0) e^{-ikt} e^{ikx} \\ &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(0) e^{ik(x-t)} \end{aligned} \tag{3.1.13}$$

となる。

この解の x, t に対する依存性は、全て $(x - t)$ になっているので、各モードが位相速度1で x の正の方向に動いている。この性質は解析解と同じ性質になっている。

⁴⁾数値解法による計算は第6章を参照されたい

3.1.3 差分法による1次元線形移流方程式の解法

スペクトル法の「解析解と同じ性質が維持されている」という特長を理解するために、差分法で解析的に(3.1.1)を解く。

スペクトル法に使った自由度にあわせて、分点を等間隔に $2N + 1$ 個設定して、差分化すると、

$$\begin{aligned} u_j(t) &= u(x_j, t) \\ x_j &= \frac{2\pi}{2N+1}j \quad (j = 0, \dots, 2N) \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

となる。空間を中心差分近似すると x 偏微分は、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{x=x_j} &\simeq \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} \\ \Delta x &= \frac{2\pi}{2N+1} \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

となる。(3.1.14)式, (3.1.15)式を(3.1.1)式に代入すると、

$$\frac{du_j}{dt} + \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} = 0 \quad (j = 0, \dots, 2N) \quad (3.1.16)$$

と常微分方程式に変換される。 $j = 0, 2N$ のときには、周期境界条件から、

$$\begin{aligned} u_{2N+1} &= u_0 \\ u_{2N} &= u_{-1} \end{aligned}$$

となるので、閉じた方程式になる。ここで(3.1.16)式を解くために行列 (A_{kj}) を考える。 (A_{kj}) を

$$A_{kj} = e^{ikx_j} \quad (k = -N, \dots, N; j = 0, \dots, 2N) \quad (3.1.17)$$

とおく。この行列は正則行列である⁵⁾。

(b.1)式を使って、(3.1.14)式を

$$\begin{aligned} u_j(t) &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) A_{kj} \\ &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx_j} \quad (j = 0, \dots, 2N) \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

⁵⁾正則行列の証明は付録Bを参照されたい。

のように $\hat{u}_k(t)$ で表すことにする. (3.1.18) 式を (3.1.16) 式に代入すると,

$$\begin{aligned}
 \frac{du_j}{dt} + \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} &= \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx_j} + \frac{1}{2\Delta x} \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) (e^{ikx_{j+1}} - e^{ikx_{j-1}}) \\
 &= \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx_j} + \frac{1}{2\Delta x} \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) (e^{ik(x_j+\Delta x)} - e^{ik(x_j-\Delta x)}) \\
 &= \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx_j} + \frac{1}{2\Delta x} \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx_j} (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) = 0
 \end{aligned} \tag{3.1.19}$$

となる. $\frac{e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2i} = \sin(k\Delta x)$ なので, (3.1.19) 式は,

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx_j} + \frac{1}{2\Delta x} \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx_j} (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) &= 0 \\
 \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx_j} + \frac{1}{i\Delta x} \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx_j} (\sin(k\Delta x)) &= 0 \\
 \sum_{k=-N}^N e^{ikx_j} \left(\frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} + \frac{i}{\Delta x} \sin(k\Delta x) \hat{u}_k(t) \right) &= 0
 \end{aligned} \tag{3.1.20}$$

となる. ここで, 行列 $(A_{kj}) = (e^{ikx_j})$ の正則性より⁶⁾ (3.1.20) 式の () 内が 0 となっていなければならないので,

$$\begin{aligned}
 \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} + \frac{i}{\Delta x} \sin(k\Delta x) \hat{u}_k(t) &= 0, \\
 \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} &= -i \left(\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} \right) \hat{u}_k(t) \quad (k = -N, \dots, N)
 \end{aligned}$$

という常微分方程式が得られる. これを解析的に解くと,

$$\hat{u}_k(t) = \hat{u}_k(0) \exp \left(ik \left(\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} \right) t \right) \quad (k = -N, \dots, N)$$

となる. 各波数モードは,

$$\begin{aligned}
 \hat{u}_k(t) e^{ikx_j} &= \hat{u}_k(0) \exp \left(ik \left(\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} \right) t \right) \exp(ikx_j) \\
 &= \hat{u}_k(0) \exp \left(ik \left(x_j - \frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} t \right) \right)
 \end{aligned} \tag{3.1.21}$$

となる.

⁶⁾ 正則行列は逆行列を持つ正方行列のことであり, その必要十分条件は行列式が 0 になることである.

3.1.4 数値的分散性

位相速度が本来1であるべきものが(3.1.21)式だと $\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}$ となり波数依存してしまい分散性を持ってしまう。 $k \ll \frac{1}{\Delta x}$ のとき、つまり $k\Delta x \rightarrow 0$ では、 $\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} \rightarrow 1$ となり正しい位相速度に近づく。しかし、 $|k|$ が大きいときは分散してしまう。 k の最大値 N で考えてみると、

$$\begin{aligned} k\Delta x &= N \cdot \frac{2\pi}{2N+1} \\ &= \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{2N+1} - \frac{1}{2} \cdot \frac{2\pi}{2N+1} \\ &= \left(\frac{2N+1}{2\pi}\right) \frac{2\pi}{2N+1} - \frac{\pi}{2N+1} \\ &= \pi - \frac{\pi}{2N+1} \end{aligned}$$

となる。 $N \gg 1$ のとき、

$$\begin{aligned} \frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} &= \frac{\sin\left(\pi - \frac{\pi}{2N+1}\right)}{\pi - \frac{\pi}{2N+1}} \\ &= \frac{1}{2N} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2N+1}\right)}{\frac{\pi}{2N+1}} \\ &\approx \frac{1}{2N} \end{aligned}$$

となり、高波数のモードほど位相速度が遅くなり、もっとも高波数のモードはほとんど静止してしまう。

このような分散性は純粋に数値解法によって生じたものである。これを数値的分散性と呼ぶ。数値的分散性によって、初期に与えられたパターンは時間が進むにつれて崩れていくことになる。差分誤差による数値的分散性はある程度抑えられる。しかし、差分法を用いる限り数値的分散性は不可避なものである。一方、スペクトル法には数値的分散性が皆無である。よって、(3.1.1)式のような移流方程式を扱う上では非常に望ましい。

3.2 1次元非線形移流方程式

(3.1.1)式では流速を1に固定していたが、流速を u とした偏微分方程式を考える。すなわち、

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \tag{3.2.22}$$

$$\begin{aligned} \text{初期条件: } & u(x, 0) = f(x), \\ \text{境界条件: } & u(x, t) = u(x + 2\pi, t). \end{aligned}$$

この方程式は, (3.1.1) 式を非線形にしたものなので1次元非線形移流方程式と呼ばれる.

3.2.1 1次元非線形移流方程式の解析解

まず, この偏微分方程式の解析解を求める.

(3.2.22) 式は, 速度分布 $u(x, t)$ が x, t に依存した流速 $u(x, t)$ で x の正の方向に流される様子を記述する方程式である. パラメータ s を

$$s = x - tF(s)$$

としたとき,

$$u(x, t) = U(s, t)$$

と表されたとする. このとき,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial U}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial t} \\ &= -F(s) \frac{\partial U}{\partial s} + \frac{\partial U}{\partial t}. \end{aligned}$$

また,

$$\begin{aligned} u \frac{\partial u}{\partial x} &= U \frac{\partial U}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x} \\ &= U \frac{\partial U}{\partial s}. \end{aligned}$$

よって (3.2.22) 式は,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} &= -F(s) \frac{\partial U}{\partial s} + \frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial s} \\ &= \frac{\partial U}{\partial t} + (U - F(s)) \frac{\partial U}{\partial s} \\ &= 0 \end{aligned}$$

となる. このとき $U = F(s)$ とすると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} + (U - F(s)) \frac{\partial U}{\partial s} &= 0 \\ \frac{\partial U}{\partial t} &= 0 \\ U(s, t) &= F(s) \end{aligned}$$

となって成り立つ. よって,

$$\begin{aligned} u(x, t) &= U(s, t) \\ &= F(s). \end{aligned}$$

初期条件 $u(x, 0) = f(x)$ なので,

$$\begin{aligned} u(x, t) &= F(s) \\ &= f(s) \end{aligned}$$

となる. 解析解をまとめて書くと,

$$\begin{aligned} x &= s + tf(s), \\ u(x, t) &= f(s) \end{aligned} \tag{3.2.23}$$

と記述できる.

3.2.2 スペクトル法による1次元非線形移流方程式の解法

(3.2.22) 式をスペクトル法を用いて解く. 線形の場合と同様に, (3.1.7) 式を (3.2.22) 式に代入すると, 残差 R は,

$$R(x, t) = \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx} + \left(\sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx} \right) \left(\sum_{k=-N}^N ik\hat{u}_k(t) e^{ikx} \right)$$

となる. 右辺第2項の総和をまとめるために2つめの総和の添字を l に変えると,

$$\begin{aligned} R(x, t) &= \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx} + \left(\sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx} \right) \left(\sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l(t) e^{ilx} \right) \\ &= \sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} e^{ikx} + \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l(t)\hat{u}_k(t) e^{ikx} e^{ilx} \end{aligned}$$

と整理できる. 常微分方程式を導くために, 両辺に重み関数 $W_m = e^{-imx}$ を掛けて, $[0, 2\pi]$ で0になるように積分すると,

$$\sum_{k=-N}^N \frac{d\hat{u}_k(t)}{dt} \int_0^{2\pi} e^{ikx} e^{-imx} dx + \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l(t)\hat{u}_k(t) \int_0^{2\pi} e^{i(k+l)x} e^{-imx} = 0$$

となる. 三角関数の直交性より,

$$\frac{d\hat{u}_m(t)}{dt} + \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l(t)\hat{u}_k(t)\delta_{k+l,m} = 0$$

となる。クロネッカーのデルタが含まれているので k に関する総和をはずすことができる。よって、

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{u}_m(t)}{dt} + \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l(t)\hat{u}_k(t)\delta_{k+l,m} &= 0 \\ \frac{d\hat{u}_m(t)}{dt} + \sum_{m-l=-N}^N \sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l(t)\hat{u}_{m-l}(t) &= 0 \\ \frac{d\hat{u}_m(t)}{dt} + \sum_{l=-N+m}^{N+m} \sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l(t)\hat{u}_{m-l}(t) &= 0 \\ \frac{d\hat{u}_m(t)}{dt} + \sum_{l=\max(-N+m)}^{\min(N,N+m)} il\hat{u}_l(t)\hat{u}_{m-l}(t) &= 0 \quad (m = -N, \dots, N) \end{aligned} \quad (3.2.24)$$

となる。後は、初期条件を (3.1.11) 式で与えれば数值的に解くことはできる。しかし、このまま数値解法で解くと、計算コストが高くなってしまふ。

変換法を用いないときの計算コスト

スペクトル法により得られた常微分方程式 (3.2.24) 式の計算コストを考えてみる。

$\sum_l il\hat{u}_{m-l}\hat{u}_l$ の部分の計算は、各 m について $2N + 1$ 個の総和が必要になるので、

l の総和 $2N + 1$ と合わせて $O((2N + 1)^2)$ の計算が必要になる⁷⁾。一方、(3.2.22) 式を中心差分法で差分化すると、(3.1.15) 式より、

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{du_j}{dt} + u_j \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} &= 0 \quad (j = 0, \dots, 2N) \end{aligned}$$

となるので差分法の非線形項の計算コストは、 $O(2N + 1)$ となっている。よって、このままの形でのスペクトル法による計算では差分法に比べて計算コストが高いので実用に向かない。

3.2.3 変換法による非線形の計算

計算コストが差分法に比べてかなり高いので計算コストを削減しなければ実用には向かない。この計算コストを削減する方法が変換法である。以下で実際に変換法

⁷⁾ここでは計算コストのオーダーに注目しているので、加算、乗算はひとまとめにして扱っている。

を考えてみる.

(3.2.24) 式 of 非線形項は u が (3.1.7) 式で表示されたものと考えたと

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} e^{-imx} dx \quad (k = -N, \dots, N) \quad (3.2.25)$$

と表される. (3.2.24) 式の総和部分はこの積分を解析的に実行したものである. したがって, (3.2.25) 式を正確に求めることができれば (3.2.24) 式も求めることができる

(3.2.25) 式を数値積分で正確に評価することを考える. (3.2.25) 式は $u = \sum_{l=-N}^N \hat{u}_l e^{ilx}$ なので,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} e^{-imx} dx &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} il \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k e^{ikx} \sum_{l=-N}^N \hat{u}_l e^{ilx} e^{-imx} dx \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} il \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N \hat{u}_k \hat{u}_l e^{ikx} e^{ilx} e^{-imx} dx \\ &= il \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N \hat{u}_k \hat{u}_l \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ikx} e^{ilx} e^{-imx} dx \right) \quad (m = -N, \dots, N) \end{aligned}$$

となる⁸⁾. よって積分中の波数の絶対値の最大は $3N$ になる. 積分を数値的に正確に評価するための条件が $J > k + l + m$ なので, $J \geq 3N + 1$ だけの分点をとっておけば数値積分として正確に評価できる.

変換法による非線形項の手順

非線形項を評価するためには実際の値を分点上での値に変換し, 分点上で非線形項を評価する. さらにその値で数値積分することで求められる. この計算手順を箇条書きで下記にまとめる.

1. 展開係数から分点上での値への変換 (離散フーリエ逆変換)

$$\begin{aligned} u_j &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k e^{ikx_j}, \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j &= \sum_{k=-N}^N ik \hat{u}_k e^{ikx_j} \quad (j = 0, \dots, J-1) \end{aligned} \quad (3.2.26)$$

⁸⁾ 離散フーリエ変換については付録 C を参照されたい

2. 分点上での非線形項の評価

$$\begin{aligned}
 F_j &= \left(u \frac{\partial u}{\partial x} \right)_j \\
 &= u_j \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j \quad (j = 0, \dots, J-1)
 \end{aligned}$$

3. 数値積分による非線形項の展開係数の計算 (離散フーリエ変換)

$$\hat{F}_k = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} F_j e^{-ikx_j} \quad (k = -N, \dots, N) \quad (3.2.27)$$

このステップでの非線形項の評価をする方法を変換法と呼ぶ。ステップ1およびステップ3が、それぞれ離散フーリエ逆変換 (Inverse Discrete Fourier Transform ; IDFT) , 離散フーリエ変換 (Discrete Fourier Transform ; DFT) と呼ばれる。

変換法の計算コスト

この変換法の計算コストを見積もってみる。ステップ1での計算コストは分点の数 J 個, 展開係数の数 $2N + 1$ 個, これらが $u_j, \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_j$ の二つ分なので2倍。よって, ステップ1の計算コストは,

$$J \times (2N + 1) \times 2 = 2J \times (2N + 1).$$

ステップ2での計算コストは, 分点 J 個分の乗算の評価のみなので,

$$J.$$

ステップ3での計算コストは, 分点の数 J 個, 展開係数の数 $2N + 1$ 個なので,

$$J \times (2N + 1).$$

全ステップの計算コストを合わせると,

$$2J \times (2N + 1) + J + J \times (2N + 1) = 3J \times (2N + 1) + J$$

となって, $O(6JN)$ となる。ここで積分を数値積分で正確に評価するための条件 $J \geq 3N + 1$ より, J をもっとも小さくとして $J = 3N + 1$ としたとしても, 計算コストは $O(18N^2)$ となってしまう。

変換法を用いない場合も考えてみる。 $m - l$ の展開係数の数 $2N + 1$ 個, l の展開係数の数 $2N + 1$ 個なので, 変換法を用いない場合の計算コストは $O(4N^2)$ になる。よって, このままでは変換法を用いた方が計算コストが高くなってしまふ。だが, この変換法の IDFT と DFT の部分に高速フーリエ変換 (Fast Fourier Transform ; FFT) というアルゴリズムを使うことによって変換コストを劇的に減らすことができる。

第4章 高速フーリエ変換(FFT)

変換法での DFT と IDFT の計算コストを減らすために FFT(IFFT) を考えてみる.

もっとも一般的な離散的複素フーリエ逆変換

$$x(\hat{k}) = \sum_{k=0}^{N-1} A(k) e^{2\pi i \frac{k\hat{k}}{N}} \quad (\hat{k} = 0, \dots, N-1) \quad (4.0.1)$$

を考えてみる. 逆変換の形が分かっていたらその両辺の複素共役をとれば,

$$x^*(\hat{k}) = \sum_{k=0}^{N-1} A(k)^* e^{-2\pi i \frac{k\hat{k}}{N}} \quad (4.0.2)$$

となるので, 正変換も求めることができる. よって, この先は簡単のため IDFT のみ考える.

4.1 FFT の原理

(4.0.1) 式を行列を使って表すと,

$$\begin{pmatrix} x(\hat{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\hat{k}, k) \text{成分が} \\ e^{2\pi i \frac{k\hat{k}}{N}} \text{なる} \\ N \times N \text{行列} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(k) \end{pmatrix}$$

となる. これは $N \times N$ 行列に N 次元のベクトルを掛ける演算なので, このまま計算すると必要な計算量は $O(N^2)$ である. しかし, FFT の算法によると, 実はこの $N \times N$ 行列が分解できて,

$$\begin{pmatrix} x(\hat{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \quad \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{非零要素が} \\ O(2N) \text{個の} \\ N \times N \text{行列} \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} \quad \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(k) \end{pmatrix}$$

と変形できる. この行列式は $N \times N$ 行列の部分全部で $O(\log_2 N)$ 個ある. よって, 必要な計算量は $O(2N \log_2 N)$ で済む. このアルゴリズムは N が大きければ大きいほど計算量が節約できる¹⁾.

4.1.1 FFTの算法の詳細

実際にFFTの算法の詳細を考えてみる. (4.0.1)式において, $N = PS$ (P, S は自然数)と表せるとき,

$$\begin{aligned} 0 \leq \hat{p} \leq P - 1, \\ 0 \leq \hat{s} \leq S - 1 \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

となる整数 \hat{p}, \hat{s} と任意の整数 s で k, \hat{k} をそれぞれ

$$\begin{aligned} \hat{k} &= S\hat{p} + \hat{s} \\ k &= Ps + \hat{p} \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

とおく. $0 \leq k \leq N - 1$ より,

$$\begin{aligned} 0 \leq k \leq N - 1 \\ 0 \leq Ps + \hat{p} \leq PS - 1. \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

また, $0 \leq \hat{p} \leq P - 1$ より,

$$\begin{aligned} 0 \leq \hat{p} \leq P - 1 \\ Ps \leq Ps + \hat{p} \leq P(1 + s) - 1 \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

(4.1.5)式と(4.1.6)式を比較すると

$$\begin{aligned} Ps &\geq 0 \\ s &\geq 0, \\ P(1 + s) - 1 &\leq PS - 1 \\ 1 + s &\leq S \end{aligned}$$

¹⁾ $N = 2^{10}$ の場合を考えると, FFT を用いない場合は $O(N^2)$ なので計算量は $N^2 = 1048576$ となる. しかし, FFT を用いると計算量が $O(2N \log_2 N)$ なので, $2N \log_2 N = 2 \times 1024 \times 10 = 20480$ と約 $\frac{1}{50}$ になる.

となる. よって, $0 \leq s \leq S-1$ の場合 (4.0.1) 式が常に成り立つ. (4.0.1) 式に $\hat{k} = S\hat{p} + \hat{s}, k = Ps + \hat{p}$ を代入すると,

$$\begin{aligned} x(S\hat{p} + \hat{s}) &= \sum_{s=0}^{S-1} A(Ps + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{(Ps + \hat{p})(S\hat{p} + \hat{s})}{PS}} \\ x(S\hat{p} + \hat{s}) &= \sum_{s=0}^{S-1} A(Ps + \hat{p}) e^{2\pi i \left(\hat{p}s + \frac{\hat{p}^2}{P} + \frac{\hat{p}\hat{s}}{PS} + \frac{\hat{s}s}{S} \right)} \\ x(S\hat{p} + \hat{s}) &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}^2}{P}} e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{s}}{PS}} \sum_{s=0}^{S-1} A(Ps + \hat{p}) e^{2\pi i \hat{p}s} e^{2\pi i \frac{\hat{s}s}{S}} \\ x(S\hat{p} + \hat{s}) e^{-2\pi i \frac{\hat{p}^2}{P}} &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{s}}{PS}} \sum_{s=0}^{S-1} A(Ps + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{\hat{s}s}{S}}. \end{aligned}$$

ここで $x(S\hat{p} + \hat{s}) e^{-2\pi i \frac{\hat{p}^2}{P}} = X_S(S\hat{p} + \hat{s})$ とおくと,

$$X_S(S\hat{p} + \hat{s}) = e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{s}}{PS}} \sum_{s=0}^{S-1} A(Ps + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{\hat{s}s}{S}} \quad (4.1.7)$$

(4.1.7) 式で $S = 1, P = N$ のとき $0 \leq \hat{s} \leq 0$ なので

$$\begin{aligned} X_1(\hat{p}) &= e^0 \sum_{s=0}^0 A(Ns + \hat{p}) e^0 \\ X_1(\hat{p}) &= A(\hat{p}). \end{aligned}$$

また, $S = N, P = 1$ のとき $0 \leq \hat{p} \leq 0$ なので

$$\begin{aligned} X_N(\hat{s}) &= e^0 \sum_{s=0}^{S-1} A(s) e^{2\pi i \frac{\hat{s}s}{S}} \\ &= x(\hat{s}) \end{aligned}$$

となる. よって, $A(\hat{p}) = X_1(\hat{p})$ から始めて, $x(\hat{s}) = X_N(\hat{s})$ を求める効率的な算法が得られるならば計算コストを低くすることができる. そこで, 効率的な算法を作るために X_S の S に対する漸化式を考える.

P, Q, R, S を自然数として N, S が

$$\begin{aligned} N &= PS, \\ S &= QR \end{aligned}$$

と分解されるとする. また, 整数 q, \hat{q}, r, \hat{r} は

$$\begin{aligned} 0 &\leq q, \hat{q} \leq Q - 1, \\ 0 &\leq r, \hat{r} \leq R - 1 \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

とする。このとき

$$\begin{aligned} 0 &\leq \hat{q} \leq Q - 1 \\ 0 &\leq R\hat{q} \leq RQ - R \\ 0 &\leq R\hat{q} + \hat{r} \leq RQ - 1. \end{aligned}$$

ここで $RQ = S$ より,

$$0 \leq R\hat{q} + \hat{r} \leq S - 1.$$

$0 \leq \hat{s} \leq S - 1$ より,

$$\hat{s} = R\hat{q} + \hat{r} \quad (4.1.9)$$

となる。また,

$$\begin{aligned} 0 &\leq r \leq R - 1 \\ 0 &\leq Qr \leq QR - Q \\ 0 &\leq Qr + q \leq QR - 1 \\ 0 &\leq Qr \leq S - 1. \end{aligned}$$

$0 \leq s \leq S - 1$ より,

$$s = Qr + q \quad (4.1.10)$$

となる。(4.1.9) 式と (4.1.10) 式を使って (4.1.7) 式を書きかえると,

$$\begin{aligned} X_S(S\hat{p} + \hat{s}) &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{s}}{PS}} \sum_{s=0}^{S-1} A(Ps + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{\hat{s}s}{S}} \\ &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}(R\hat{q} + \hat{r})}{PQR}} \sum_{q=0}^{Q-1} \sum_{r=0}^{R-1} A(P(Qr + q) + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{(R\hat{q} + \hat{r})(Qr + q)}{QR}} \\ &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{q}}{PQ}} e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{r}}{PQR}} \sum_{q=0}^{Q-1} \sum_{r=0}^{R-1} A(PQr + Pq + \hat{p}) e^{2\pi i (\hat{q}r + \frac{\hat{r}r}{R} + \frac{\hat{q}q}{Q} + \frac{\hat{q}\hat{r}}{QR})} \\ &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{q}}{PQ}} e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{r}}{PQR}} \sum_{q=0}^{Q-1} \sum_{r=0}^{R-1} A(PQr + Pq + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{\hat{r}r}{R}} e^{2\pi i \frac{\hat{q}q}{Q}} e^{2\pi i \frac{\hat{q}\hat{r}}{QR}} \\ &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{q}}{PQ}} \sum_{q=0}^{Q-1} e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{r}}{PQR}} e^{2\pi i \frac{\hat{q}q}{Q}} e^{2\pi i \frac{\hat{q}\hat{r}}{QR}} \sum_{r=0}^{R-1} A(PQr + Pq + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{\hat{r}r}{R}} \\ &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{q}}{PQ}} \sum_{q=0}^{Q-1} e^{2\pi i \frac{\hat{q}q}{Q}} e^{2\pi i \frac{P(q\hat{r}) + \hat{p}\hat{r}}{PQR}} \sum_{r=0}^{R-1} A(PQr + Pq + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{\hat{r}r}{R}} \\ &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{q}}{PQ}} \sum_{q=0}^{Q-1} e^{2\pi i \frac{\hat{q}q}{Q}} \left\{ e^{2\pi i \frac{(Pq + \hat{p})\hat{r}}{PQR}} \sum_{r=0}^{R-1} A(PQr + Pq + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{\hat{r}r}{R}} \right\} \quad (4.1.11) \end{aligned}$$

ここで, $Q = 1$ とおくと, (4.1.8) 式より $0 \leq q, \hat{q} \leq 0$ となるので,

$$\begin{aligned}\hat{p} &= (Pq + \hat{p}), \\ \hat{s} &= \hat{r}, \\ s &= Qr = r\end{aligned}$$

と書くことができる. また, $S = R$ なので, (4.1.7) 式は

$$X_R(R(Pq + \hat{p}) + \hat{r}) = e^{2\pi i \frac{(Pq + \hat{p})\hat{r}}{PQR}} \sum_{r=0}^{R-1} A(PQr + Pq + \hat{p}) e^{2\pi i \frac{\hat{r}r}{R}}$$

と変形できる. よって, (4.1.11) 式の右辺の $\{\}$ の中が X_R で書きかえられて,

$$\begin{aligned}X_S(S\hat{p} + \hat{s}) &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{q}}{PQ}} \sum_{q=0}^{Q-1} e^{2\pi i \frac{\hat{q}q}{Q}} X_R(R(Pq + \hat{p}) + \hat{r}) \\ &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{q}}{PQ}} \sum_{q=0}^{Q-1} e^{2\pi i \frac{\hat{q}q}{Q}} X_R(PRq + R\hat{p} + \hat{r}).\end{aligned}$$

また, 左辺を (4.1.9) 式と (4.1.10) 式で変形すると,

$$X_S(S\hat{p} + \hat{s}) = X_{QR}(QR\hat{p} + R\hat{q} + \hat{r})$$

となる. よって,

$$\begin{aligned}X_{QR}(QR\hat{p} + R\hat{q} + \hat{r}) &= e^{2\pi i \frac{\hat{p}\hat{q}}{PQ}} \sum_{q=0}^{Q-1} e^{2\pi i \frac{\hat{q}q}{Q}} X_R(PRq + R\hat{p} + \hat{r}) \\ (0 \leq \hat{p} \leq P-1, 0 \leq \hat{q} \leq Q-1, 0 \leq \hat{r} \leq R-1) &\quad (4.1.12)\end{aligned}$$

という X_S の S を R から QR に増す漸化式を得られた.

4.1.2 FFT の計算コスト

(4.1.12) 式の必要な計算量を考えてみる. \hat{q} の Q 回分, q の Q 回分, \hat{p} の P 回分, そして, \hat{r} の R 回分である. 合わせると,

$$\begin{aligned}Q \times Q \times P \times R &= Q^2 PR \\ &= PQR \times Q \\ &= NQ\end{aligned}$$

の計算量になる. ここで $N = Q_1 \cdot Q_2 \cdots Q_l$ と分解されるとすると, $X_1 \rightarrow X_{Q_1} \rightarrow X_{Q_1 Q_2} \rightarrow \cdots \rightarrow X_{Q_1 Q_2 \cdots Q_l} = X_N$ の変換に必要な計算量はそれぞれの変換での計算量 NQ_1, NQ_2, \dots, NQ_l の足し合わせになるので計算量を C_N とすると

$$\begin{aligned} C_N &= NQ_1 + NQ_2 + \cdots + NQ_l \\ &= N(Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_l) \end{aligned}$$

となる. 特に $N = 2^l$ と表されるときは

$$Q_1 \cdot Q_2 \cdots Q_l = 2^l.$$

ここで Q_N は整数なので $Q_1 = Q_2 = \cdots = Q_l = 2$ となる. よって,

$$\begin{aligned} Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_l &= 2 + 2 + \cdots + 2 \\ &= 2 \times l \end{aligned}$$

となる. また, $N = 2^l$ より,

$$\begin{aligned} N &= 2^l \\ l &= \log_2 N \end{aligned}$$

であるので計算量 C_N は

$$\begin{aligned} C_N &= N(Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_l) \\ &= N(2 \times l) \\ &= 2N \log_2 N \end{aligned}$$

となる.

4.2 実FFT

ここまでの一般的な離散フーリエ変換の式は複素数の $A(k)$ から複素数の $x(\hat{k})$ への変換を考えていたが, $x(\hat{k})$ が実数であることが課せられている場合には, 計算量が約半分になる. 実数の正変換と逆変換の場合を考えてみる. これから先の N は便宜上偶数の場合のみを扱う.

4.2.1 正変換

$x(j)$ ($j = 0, \dots, N-1$) を実数とした DFT

$$A(k) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} x(j) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{N}\right) \quad (k = 0, 1, \dots, N-1) \quad (4.2.13)$$

を考える。\$N\$ が偶数と仮定しているので長さ \$\frac{N}{2}\$ の複素 FFT に押し込むことができる。(4.2.13) 式の複素共役をとると、

$$\begin{aligned} A^*(k) &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} x(j)^* \exp^* \left(-2\pi i \frac{jk}{N} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} x(j)^* \exp \left(2\pi i \frac{jk}{N} \right) \end{aligned}$$

\$x(j)\$ は実数より

$$A^*(k) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} x(j) \exp \left(2\pi i \frac{jk}{N} \right).$$

また、\$A(N - k)\$ を考えると、

$$\begin{aligned} A(N - k) &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} x(j) \exp \left(2\pi i \frac{j(N - k)}{N} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} x(j) \exp \left(2\pi i \frac{jk}{N} \right) \\ &= A^*(k) \end{aligned}$$

が成り立つ。よって、\$A(k)\$ は \$\left(k = 0, \dots, \frac{N}{2} - 1 \right)\$ までの \$A(k)\$ と \$A^*(k)\$ で表すことができる。\$A(k)\$ の独立なものを考えると、\$A(0)\$ の実部、\$A(k)\$ \$\left(k = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1 \right)\$ の実部と虚部、\$A\left(\frac{N}{2}\right)\$ の実部、の計 \$N\$ 個となる。したがって、\$N\$ 個の入力 \$x(j)\$ から \$N\$ 個の出力が得られれば良いことになる。

\$x(j)\$ を偶数番目と奇数番目に分けると、

$$\begin{aligned} A(k) &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j) \exp \left(-2\pi i \frac{2jk}{N} \right) + \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j+1) \exp \left(-2\pi i \frac{(2j+1)k}{N} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j) \exp \left(-2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}} \right) + \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j+1) \exp \left(-2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}} \right) \exp \left(-2\pi i \frac{k}{N} \right). \end{aligned} \tag{4.2.14}$$

ここで,

$$B_0(k) \equiv \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right),$$

$$B_1(k) \equiv \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j+1) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right)$$

と定義するとこれらの複素共役を使って (4.2.14) 式は

$$A(k) = \frac{1}{N} \left\{ B_0^*(k) + B_1^*(k) \exp\left(-2\pi i \frac{k}{N}\right) \right\} \quad (4.2.15)$$

となる. よって, $x(j)$ から B_0, B_1 を求めるだけで良いことになる. ここで

$$y(j) = x(2j) + ix(2j+1) \quad \left(j = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1\right)$$

という $\frac{N}{2}$ の複素データをつくる. 長さ $\frac{N}{2}$ の $y(j)$ の複素フーリエ逆変換の結果を $C(k)$ とすると, $C(k)$ と B_0, B_1 との関係は

$$\begin{aligned} C(k) &= \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} y(j) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) \\ &= \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) + i \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j+1) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) \\ &= B_0(k) + iB_1(k) \quad \left(k = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1\right). \end{aligned} \quad (4.2.16)$$

また,

$$\begin{aligned} C\left(\frac{N}{2} - k\right) &= \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} y(j) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) \\ &= \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) + i \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j+1) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) \\ &= B_0^*(k) + iB_1^*(k) \quad \left(k = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1\right) \end{aligned} \quad (4.2.17)$$

となる. (4.2.16) 式と (4.2.17) 式を連立させて B_0, B_1 について解くと,

$$B_0^* = \frac{1}{2} \left\{ C\left(\frac{N}{2} - k\right) + C^*(k) \right\},$$

$$B_1^* = \frac{1}{2i} \left\{ C\left(\frac{N}{2} - k\right) - C^*(k) \right\}$$

と表せる. したがって $k = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$ である k について

$$A(k) = \frac{1}{2N} \left[\left\{ C\left(\frac{N}{2} - k\right) + C^*(k) \right\} + \frac{1}{i} \exp\left(-2\pi i \frac{k}{N}\right) \left\{ C\left(\frac{N}{2} - k\right) - C^*(k) \right\} \right] \quad (4.2.18)$$

となる. また, 定義から $B_0(0), B_1(0)$ は実数であり, (4.2.16) 式から,

$$\begin{aligned} B_0(0) &= \operatorname{Re}(C(0)) \\ B_1(0) &= \operatorname{Im}(C(0)) \end{aligned}$$

の関係があるので, $A(0)$ および $A\left(\frac{N}{2}\right)$ は

$$\begin{aligned} A(0) &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j) + \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j+1) \\ &= \frac{1}{N} \{B_0(0) + B_1(0)\} \\ &= \frac{1}{N} \{\operatorname{Re}(C(0)) + \operatorname{Im}(C(0))\}, \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

$$\begin{aligned} A\left(\frac{N}{2}\right) &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j) - \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} x(2j+1) \\ &= \frac{1}{N} \{B_0(0) - B_1(0)\} \\ &= \frac{1}{N} \{\operatorname{Re}(C(0)) - \operatorname{Im}(C(0))\} \end{aligned} \quad (4.2.20)$$

と $C(0)$ の実部と虚部によって求められる. (4.2.18) 式, (4.2.19) 式, そして (4.2.20) 式から, 実 DFT の独立な A の成分は, $y(j) = x(2j) + ix(2j+1)$ に対する長さ $\frac{N}{2}$ の複素 FFT を利用して計算することができる.

4.2.2 逆変換

逆変換の場合を考える. 変換式は

$$x(j) = \sum_{k=0}^{N-1} A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{N}\right) \quad (j = 0, 1, \dots, N-1). \quad (4.2.21)$$

$x(j)$ の複素共役は

$$x^*(j) = \sum_{k=0}^{N-1} A^*(k) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{N}\right).$$

正変換の場合と同じように, $x(j)$ を実数とすると, $x(j) = x^*(j)$ より,

$$\begin{aligned} x(j) &= x^*(j) \\ \sum_{m=0}^{N-1} A(m) \exp\left(2\pi i \frac{jm}{N}\right) &= \sum_{l=0}^{N-1} A^*(l) \exp\left(-2\pi i \frac{jl}{N}\right) \\ \sum_{m=0}^{N-1} A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jm}{N}\right) \exp\left(-2\pi i \frac{j(N-k)}{N}\right) &= \sum_{l=0}^{N-1} A^*(l) \exp\left(-2\pi i \frac{jl}{N}\right) \exp\left(-2\pi i \frac{j(N-k)}{N}\right) \\ \sum_{m=0}^{N-1} A(m) \exp\left(2\pi i \frac{j(m-N+k)}{N}\right) &= \sum_{l=0}^{N-1} A^*(l) \exp\left(-2\pi i \frac{j(l-k)}{N}\right) \end{aligned}$$

となる. 三角関数の直交性より, $m = N - k, l = k$ としたとき

$$A(N - k) = A^*(k)$$

となり, 正変換と同じ制約が課せられる. この逆変換を $\frac{N}{2}$ の長さの複素 FFT で計算することを考える.

(4.2.21) 式の k に関する総和を $\frac{N}{2}$ より小さい部分と大きい部分に分けて扱おうと,

$$\begin{aligned} x(j) &= A(0) + (-1)^j A\left(\frac{N}{2}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{N}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A(N-k) \exp\left(2\pi i \frac{j(N-k)}{N}\right) \\ &= A(0) + (-1)^j A\left(\frac{N}{2}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{N}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A^*(k) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{N}\right) \end{aligned} \tag{4.2.22}$$

と変形できる. 右辺第4項は,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A^*(k) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{N}\right) &= \sum_{k'=1}^{\frac{N}{2}-1} A^*\left(\frac{N}{2} - k'\right) \exp\left(-2\pi i \frac{j\left(\frac{N}{2} - k'\right)}{N}\right) \\ &= \sum_{k'=1}^{\frac{N}{2}-1} A^*\left(\frac{N}{2} - k'\right) (-1)^j \exp\left(2\pi i \frac{jk'}{N}\right) \end{aligned}$$

と書きかえられるので, $x(j)$ の偶数番目と奇数番目はそれぞれ,

$$\begin{aligned}
 x(2j) &= A(0) + A\left(\frac{N}{2}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A^*\left(\frac{N}{2} - k\right) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right), \\
 x(2j+1) &= A(0) + -A\left(\frac{N}{2}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) \exp\left(2\pi i \frac{k}{N}\right) \\
 &\quad - \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} A^*\left(\frac{N}{2} - k\right) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) \exp\left(2\pi i \frac{k}{N}\right)
 \end{aligned}$$

と表される. $x(2j) + ix(2j+1)$ を作ると,

$$\begin{aligned}
 x(2j) + ix(2j+1) &= A(0) + A\left(\frac{N}{2}\right) + i \left\{ A(0) + A\left(\frac{N}{2}\right) \right\} \\
 &\quad + \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}-1} \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) \left[\left\{ A(k) + A^*\left(\frac{N}{2} - k\right) \right\} \right. \\
 &\quad \left. + i \exp\left(2\pi i \frac{k}{N}\right) \left\{ A(k) - A^*\left(\frac{N}{2} - k\right) \right\} \right] \quad (4.2.23)
 \end{aligned}$$

となる. ここで $D(k)$ を

$$\begin{aligned}
 D(k) \equiv \left\{ A(k) + A\left(\frac{N}{2} - k\right) \right\} + i \exp\left(2\pi i \frac{k}{N}\right) \left\{ A(k) - A^*\left(\frac{N}{2} - k\right) \right\} \\
 \left(k = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1 \right) \quad (4.2.24)
 \end{aligned}$$

と定義する. $A\left(\frac{N}{2}\right)$ が実数なので

$$A\left(\frac{N}{2}\right) = A^*\left(\frac{N}{2}\right)$$

となることを考慮すると, (4.2.23) 式は

$$x(2j) + ix(2j+1) = \sum_{k=0}^{\frac{N}{2}-1} D(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{\frac{N}{2}}\right) \quad (4.2.25)$$

となる. (4.2.25) 式により, A からつくられる長さ $\frac{N}{2}$ の複素データ D の複素 FFT を計算して, その結果の実部と虚部をとることによって $x(j)$ が求められる.

4.3 FFT を用いた変換法の実装

前章で出た変換法に FFT を応用してみる.

4.3.1 変換法での IDFT への FFT の適用

最初に (3.2.26) 式を考える. 再記すると, $J \geq 3N + 1$ のとき

$$\begin{aligned}
 u_j &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k e^{ikx_j}, \\
 x_j &= \frac{2\pi}{J} j \quad (j = 0, \dots, J-1)
 \end{aligned}
 \tag{4.3.26}$$

である. この式を実 FFT の形に直すことを考える. u_j は実数なので $\hat{u}_{-k} = \hat{u}_k^*$ の制約がある. よって, \hat{u} の独立な成分は, \hat{u}_0 の実部, \hat{u}_k ($k = 1, \dots, N$) の実部と虚部の計 $2N + 1$ 個である. これらの独立な成分を

$$\begin{aligned}
 a_0 &= \hat{u}_0, \\
 a_k &= \text{Re}(\hat{u}_k), \\
 b_k &= \text{Im}(\hat{u}_k) \quad (k = 1, \dots, N)
 \end{aligned}$$

とおくと, (4.3.26) 式は,

$$\begin{aligned}
 u_j &= \hat{u}_0 + \sum_{k=1}^N [\hat{u}_k \exp(ikx_j) + \hat{u}_k^* \exp(-ikx_j)] \\
 &= a_0 + \sum_{k=1}^N [(a_k + ib_k) \exp(ikx_j) + (a_k - ib_k) \exp(-ikx_j)] \\
 &= a_0 + \sum_{k=1}^N [(a_k + ib_k)(\cos(kx_j) + i \sin(kx_j)) + (a_k - ib_k)(\cos(kx_j) - i \sin(kx_j))] \\
 &= a_0 + 2 \sum_{k=1}^N [a_k \cos(kx_j) - b_k \sin(kx_j)]
 \end{aligned}$$

と書きかえられる. 一方, J を偶数としたときの自由度 J の実 FFT のルーチンは

(4.2.22) 式より,

$$\begin{aligned}
 x(j) &= \sum_{k=0}^{J-1} A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{J}\right) \\
 &= A(0) + (-1)^j A\left(\frac{J}{2}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{J}{2}-1} A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{J}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{J}{2}-1} A^*(k) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{J}\right) \\
 &= A(0) + (-1)^j A\left(\frac{J}{2}\right) + \sum_{k=1}^{\frac{J}{2}-1} \left[A(k) \exp\left(2\pi i \frac{jk}{J}\right) + A^*(k) \exp\left(-2\pi i \frac{jk}{J}\right) \right] \\
 &= A(0) + (-1)^j A\left(\frac{J}{2}\right) + 2 \sum_{k=1}^{\frac{J}{2}-1} [\operatorname{Re}(A(k)) \cos(kx_j) - \operatorname{Im}(A(k)) \sin(kx_j)]
 \end{aligned}$$

の変換を計算するように実装されていることが一般的なので,

$$\begin{aligned}
 A(0) &= a_0, \\
 (\operatorname{Re}(A(k)), \operatorname{Im}(A(k))) &= (a_k, b_k) \quad (k = 1, \dots, N), \\
 A(k) &= 0 \quad \left(k = N + 1, \dots, \frac{J}{2}\right)
 \end{aligned}$$

として実 FFT 逆変換のルーチンを使って $x(j)$ を求め、それを u_j とすればよい。逆変換では $D(k)$ が求められれば良かったので,

$$A(k) = a_k + ib_k$$

として (4.2.24) 式から $0 \leq k \leq \frac{N-1}{2}$ のとき

$$D(k) = A(k) + i \exp\left(2\pi i \frac{k}{J}\right) (A(k)).$$

$\frac{N-1}{2} \leq k \leq N+1$ のとき

$$D(k) = \left\{ A(k) + A\left(\frac{J}{2} - k\right) \right\} + i \exp\left(2\pi i \frac{k}{J}\right) \left\{ A(k) - A^*\left(\frac{J}{2} - k\right) \right\}.$$

$N+1 \leq k \leq \frac{J}{2} - 1$ のとき

$$D(k) = A\left(\frac{J}{2} - k\right) + i \exp\left(2\pi i \frac{k}{J}\right) A^*\left(\frac{J}{2} - k\right)$$

として FFT ルーチンを呼び出せばよい。

同様に分点上での値が必要になる $\frac{\partial u}{\partial x}$ でも, 逆変換の式が

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j = 2 \sum_{k=1}^N [-(ka_k) \sin(kx_j) - (kb_k) \cos(kx_j)]$$

なので,

$$\begin{aligned} A(0) &= 0, \\ (\operatorname{Re}(A(k)), \operatorname{Im}(A(k))) &= (-kb_k, ka_k) \quad (k = 1, \dots, N), \\ A(k) &= 0 \quad \left(k = N + 1, \dots, \frac{J}{2}\right) \end{aligned}$$

として逆変換ルーチンと呼び, $D(k)$ を求めればよい.

4.3.2 変換法での DFT への FFT の適用

変換法で必要になる正変換 (3.2.27) 式を再記すると

$$\begin{aligned} \hat{F}_k &= \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} F_j \exp(-ikx_j), \\ F_j &= u_j \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j \quad (k = -N, \dots, N) \end{aligned}$$

である. この式の求めるべき独立な成分は, \hat{F}_0 の実部, \hat{F}_k ($k = 1, \dots, N$) の実部と虚部である. 一方, 一般的な実 FFT 正変換のルーチンは, (4.2.13) 式から

$$A(k) = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} x(j) \exp(-ikx_j)$$

であり, $x(j)$ を入力として, $A(0)$ の実部, $A\left(\frac{J}{2}\right)$ の実部, $A(k)$ ($k = 1, \dots, \frac{J}{2} - 1$) の実部と虚部を出力するように作られている. よって, F_j を $x(j)$ として実 FFT 正変換のルーチンに入力して出力 $A(k)$ を求め,

$$\hat{F}_k = A(k) \quad (k = 0, \dots, N)$$

として \hat{F}_k を求めればよい. このときに不要となる $k = N + 1, \dots, \frac{J}{2}$ の成分の情報を捨てることになる.

4.3.3 非線形項での展開の自由度とFFTの分点の関係

2次の非線形項を計算するためには展開の自由度 $2N + 1$ に対して $3N + 1$ 以上の分点に対するFFTを使うことになる. 分点の自由度が展開の自由度の約 $\frac{3}{2}$ 倍のため, この性質を $\frac{3}{2}$ ルールと呼ぶ.

第5章 常微分方程式の初期値問題の数値解法

$x(t)$, $f(x, t)$ が多次元のベクトル値関数としたとき, 解くべき常微分方程式としては, 最も一般的な形として,

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

$$\text{初期条件 : } x(t_0) = x_0$$

を考える. ただし簡単のためこの先ベクトル値関数であることが本質的に重要でない場合にはスカラー値関数 $x(t)$, $f(x, t)$ を扱う. この方程式を数値的に解くには独立変数 t をとびとびの離散値 t_0, t_1, \dots で代表させて, 節点 t_k における解の近似値 x_k によって解を近似的に求めることになる. これからは

$$t_{n+1} = t_n + h$$

として,

$$x_n = x(t_n)$$

とする. また, 本章で取り上げるのは1段階法であるルンゲ-クッタ型公式に止める. 他の多段階法については付録 H を参照されたい.

5.1 ルンゲ-クッタ型公式

$f(x, t)$ をいくつかの (x, t) で計算し, その重みつき平均をとり, 数値解法で得られる近似解のテイラー展開と高次の項まで一致させる解法をルンゲ-クッタ型公式と呼ぶ.

一般的な p 段のルンゲ-クッタ型公式は $(i = 1, 2, \dots, p)$ のとき,

$$k_i = hf \left(x_n + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} k_j, t_n + c_i h \right), \quad (5.1.1a)$$

$$c_i = \sum_{j=1}^p \alpha_{ij}, \quad (5.1.1b)$$

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^p \omega_i k_i \quad (5.1.2)$$

の形で表される. ここで α_{ij} は x の値をずらして計算するためのパラメータである. α_{ij} は重み ω_i とともに, できるだけ数値解法で得られる近似解のテイラー展開の高次の項まで一致するように決定される. この式の導出を考える.

精度を良くするため陰的な解法で考える. 求める式は

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

である. この式をテイラー展開の高次の項まで一致するように p 個の重み ω を使って差分化すると

$$x_{n+1} - x_n = \sum_{i=1}^p \omega_i h f_i(x_{n+1}, t_{n+1}) \quad (5.1.3)$$

となる. この $f_i(x_{n+1}, t_{n+1})$ を

$$k_i = h f_i(x_{n+1}, t_{n+1})$$

とおく. さらに (5.1.3) 式がテイラー展開の高次の項まで一致するように t_{n+1} のステップ幅をパラメータ α_{ij} で表すとき

$$t_{n+1} = t_n + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} h.$$

このとき $f_i(x_{n+1}, t_{n+1})$ は

$$\begin{aligned} f_i(x_{n+1}, t_{n+1}) &= f \left(x_n + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} h f_j(x_{n+1}, t_{n+1}), t_n + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} h \right) \\ &= f \left(x_n + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} h k_j, t_n + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} h \right) \end{aligned}$$

と表せるので,

$$c_{ij} = \sum_{j=1}^p \alpha_{ij}$$

と置けば

$$k_i = hf \left(x_n + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} k_j, t_n + c_i h \right)$$

が導けて (5.1.3) 式は

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^p \omega_i k_i$$

となる. よって, (5.1.1a) 式, (5.1.1b) 式, (5.1.2) 式が導ける.

(5.1.1a) 式のままだと陰的な連立方程式になっている. これは陽的ルンゲ-クッタ型公式より安定性などの点で優れている. しかし, これからは簡単のため陽的ルンゲ-クッタ型公式のみに限って考える. 陽的にするには (5.1.1a) 式の右辺に既知の k_i のみ現れるように

$$\alpha_{ij} = 0 \quad (i \leq j)$$

となる条件を課せば良い¹⁾. この一般形を元に, 具体的に各段数の公式について考える²⁾.

5.1.1 ルンゲ クッタ型公式の1段1位公式

$p = 1$ とする. そのとき (5.1.1b) 式および (5.1.2) はそれぞれ,

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, t_n), \\ x_{n+1} &= x_n + \omega_1 k_1 \\ &= x_n + \omega_1 hf(x_n, t_n) \end{aligned}$$

¹⁾ 実際に $i = (1, 2, 3)$ までで考えてみる.

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, t_n), \\ k_2 &= hf(x_n + \alpha_{21} k_1, t_n + c_2 h), \\ k_3 &= hf(x_n + \alpha_{31} k_1 + \alpha_{32} k_2, t_n + c_3 h), \end{aligned}$$

確かに順次既知の k_i で計算できている.

²⁾ 各段数の公式はその段数のパラメータの取り方でそれぞれの段数ごとに複数存在する. しかし, 本文では代表となる一つを取り上げて記述する. 他の公式については付録 G を参照されたい.

となる. この x_{n+1} と $x(t_{n+1})$ が h の 1 次項まで一致するには

$$\omega_1 h f(x_n, t_n) = h f(x_n, t_n)$$

となり,

$$\omega_1 = 1$$

が要請される. その結果

$$x_{n+1} = x_n + h f(x_n, t_n)$$

が得られる. この形をオイラー法と呼ぶ. これは 1 段 1 位の公式となる.

5.1.2 ルンゲ クッタ型公式の 2 段 2 位公式

$p = 2$ とする. そのとき (5.1.1b) 式の $i = 1$ は,

$$k_1 = h f(x_n, t_n).$$

$i = 2$ は,

$$k_2 = h f(x_n + \alpha_{21} k_1, t_n + c_2 h).$$

ここで $(\alpha_{21} k_1, c_2 h)$ の周りで f を 1 次までテイラー展開すると

$$\begin{aligned} k_2 &= h \left(f(x_n, t_n) + \alpha_{21} k_1 \left(\frac{\partial f(x_n, t_n)}{\partial x} \right) + c_2 h \left(\frac{\partial f(x_n, t_n)}{\partial t} \right) + O(h^2) \right) \\ &= h (f + \alpha_{21} k_1 f_x + \alpha_{21} h f_t + O(h^2)). \end{aligned}$$

ここで $f(x_n, t_n) = f$, $\left(\frac{\partial f(x_n, t_n)}{\partial x} \right) = f_x$, $\left(\frac{\partial f(x_n, t_n)}{\partial t} \right) = f_t$ とした.

これらを用いると (5.1.2) 式は,

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 \\ &= x_n + \omega_1 h f + \omega_2 h (f + \alpha_{21} h f f_x + \alpha_{21} h f_t + O(h^2)) \\ &= x_n + h(\omega_1 + \omega_2) f + h^2 \omega_2 \alpha_{21} (f f_x + f_t) + O(h^3) \end{aligned}$$

となる. また, 付録 F の (f.1) 式から

$$x'' = f f_x + f_t$$

となる. したがって, テイラー展開の 2 次の項まで一致するための条件式は,

$$\begin{aligned} \omega_1 + \omega_2 &= 1, \\ \omega_2 \alpha_{21} &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

となる. これは自由度が 1 つ余る. この式を満たすようにパラメータ $\omega_1, \omega_2, \alpha_{21}$ は次のように選ばれることが多い. この式は 2 段 2 位公式である.

改良オイラー法

条件式を

$$\begin{aligned}\omega_1 &= 0, \omega_2 = 1, \\ c_2 &= \alpha_{21} = \frac{1}{2}\end{aligned}$$

と選ぶ。この場合の対応する公式の形は,

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(x_n, t_n), \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}k_1, t + \frac{1}{2}h\right), \\ x_{n+1} &= x_n + k_2\end{aligned}$$

となる。この形を改良オイラー法と呼ぶ。

5.1.3 ルンゲ クッタ型公式の3段3位公式

$p = 3$ とする。そのとき (5.1.1b) 式の $i = 1$ は,

$$k_1 = hf(x_n, t_n).$$

$i = 2$ は,

$$k_2 = hf(x_n + \alpha_{21}k_1, t_n + c_2h).$$

ここで $(\alpha_{21}k_1, c_2h)$ の周りで f を 2 次項までテイラー展開すると

$$\begin{aligned}k_2 &= h\left(f + \alpha_{21}k_1f_x + c_2hf_t + \frac{1}{2}c_2^2h^2f^2f_{x^2} + \frac{1}{2}c_2^2h^2f^2f_{t^2} + O(h^3)\right) \\ &= hf + c_2h^2ff_x + c_2h^2ft + \frac{1}{2}c_2^2h^3f^2f_{x^2} + \frac{1}{2}c_2^2h^3f^2f_{t^2} + O(h^4).\end{aligned}$$

ここで $\left(\frac{\partial^2 f(x_n, t_n)}{x^2}\right) = f_{x^2}$, $\left(\frac{\partial^2 f(x_n, t_n)}{t^2}\right) = f_{t^2}$ とした。

$i = 3$ は,

$$k_3 = hf(x_n + \alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2, t_n + c_3h).$$

k_2 と同様に $(\alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2, c_3h)$ の周りで f を 3 次項までテイラー展開すると

$$\begin{aligned} k_3 &= h \left(f + (\alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2)f_x + \frac{(\alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2)^2}{2}f_{x^2} + c_3hf_t + \frac{c_3^2}{2}f_{t^2} + O(h^3) \right) \\ &= hf + h^2\alpha_{31}ff_x + \alpha_{32}h^2ff_x + c_3h^2f_t \\ &\quad + \alpha_{32}\alpha_{21}h^3(ff_x^2 + f_t f_x) + \frac{1}{2}c_3^2h^3f_{t^2} + \frac{h^3f^2f_{x^2}}{2}(\alpha_{31}^2 + \alpha_{32}^2 + 2\alpha_{31}\alpha_{32}) + \frac{1}{2}h^3c_3^2f_{t^2} + O(h^4) \\ &= hf + h^2c_3(ff_x + f_t) + \frac{c_3^2}{2}h^3(f^2f_{x^2} + f_{t^2}) + \alpha_{32}c_2h^3(ff_x + f_t f_x) + O(h^4). \end{aligned}$$

これらを用いると (5.1.2) 式は,

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \omega_1k_1 + \omega_2k_2 + \omega_3k_3 \\ &= x_n + \omega_1hf + \omega_2 \left(hf + c_2h^2ff_x + c_2h^2f_t + \frac{1}{2}c_2^2h^3f^2f_{x^2} + \frac{1}{2}c_2^2h^3f_{t^2} \right) \\ &\quad + \omega_3 \left(hf + h^2c_3(ff_x + f_t) + \frac{c_3^2}{2}h^3(f^2f_{x^2} + f_{t^2}) + \alpha_{32}c_2h^3(ff_x + f_t f_x) \right) + O(h^4) \\ &= x_n + h(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)f + h^2(\omega_2c_2 + \omega_3c_3)(ff_x + f_t) \\ &\quad + \frac{h^3(c_2^2\omega_2 + c_3^2\omega_3)}{2}(f^2f_{x^2} + f_{t^2}) + h^3\omega_3\alpha_{32}c_2(ff_x + f_t f_x) + O(h^4). \end{aligned}$$

となる. 付録 F の (f.2) 式から

$$x''' = f_{t^2} + f_t f_x + f f_x^2 + f^2 f_{x^2}$$

なので, x_{n+1} のテイラー展開の三次の項は

$$\frac{1}{6}(f^2f_{x^2} + f_{t^2}) + \frac{1}{6}(f_t f_x + f f_x^2)$$

である. したがって, テイラー展開の 3 次項まで一致するための条件を導くと,

$$\begin{aligned} \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 &= 1, \\ \omega_2c_2 + \omega_3c_3 &= \frac{1}{2}, \\ c_3^2\omega_3 + c_2^2\omega_2 &= \frac{1}{3}, \\ \omega_3\alpha_{32}c_2 &= \frac{1}{6} \end{aligned}$$

となる. これは 6 変数に対して 4 個の条件式となっている. よって自由度が 2 つ余る. この条件式の有名な解を 1 つ書く.

ホインの3次項式

条件式を

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{1}{4}, & \omega_2 &= 0, & \omega_3 &= \frac{3}{4}, \\ c_2 &= \frac{1}{3}, & c_3 &= \frac{2}{3}, \\ \alpha_{32} &= \frac{2}{3}, \\ \alpha_{21} &= c_2 = \frac{1}{3}, \\ \alpha_{31} &= c_3 - \alpha_{32} = 0 \end{aligned}$$

と選ぶ。このとき、

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, t_n), \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{3}k_1, t_n + \frac{1}{3}h\right), \\ k_3 &= hf\left(x_n + \frac{2}{3}k_2, t_n + \frac{2}{3}h\right), \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_3). \end{aligned}$$

この3段3位公式をホインの3次公式と呼ぶ。

5.1.4 ルンゲ クッタ型公式の4段4位公式

$p = 4$ とする。そのとき (5.1.1b) 式の $i = 1$ は、

$$k_1 = hf(x_n, t_n).$$

$i = 2$ は、

$$k_2 = hf(x_n + \alpha_{21}k_1, t_n + c_2h).$$

ここで $(\alpha_{21}k_1, c_2h)$ の周りで f を3次項までテイラー展開すると

$$\begin{aligned} k_2 &= h\left(f + \alpha_{21}k_1f_x + c_2hf_t + \frac{1}{2}c_2^2h^2f^2f_{x^2} + \frac{1}{2}c_2^2h^2f^2f_{t^2} + \frac{1}{6}c_2^3h^3f^3f_{x^3} + \frac{1}{6}c_2^3h^3f^3f_{t^3} + O(h^4)\right) \\ &= hf + c_2h^2ff_x + c_2h^2ft + \frac{1}{2}c_2^2h^3f^2f_{x^2} + \frac{1}{2}c_2^2h^3f^2f_{t^2} + \frac{1}{6}c_2^3h^4f^3f_{x^3} + \frac{1}{6}c_2^3h^4f^3f_{t^3} + O(h^5). \end{aligned}$$

ここで $\left(\frac{\partial^2 f(x_n, t_n)}{x^3}\right) = f_{x^2}$, $\left(\frac{\partial^2 f(x_n, t_n)}{t^2}\right) = f_{t^2}$ とした.

$i = 3$ は,

$$k_3 = hf(x_n + \alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2, t_n + c_3h).$$

k_2 と同様に $(\alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2, c_3h)$ の周りで f を 4 次項までテイラー展開すると

$$\begin{aligned} k_3 &= h \left(f + (\alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2)f_x + \frac{(\alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2)^2}{2}f_{x^2} + \frac{(\alpha_{31}k_1 + \alpha_{32}k_2)^3}{6}f_{x^3} \right. \\ &\quad \left. + c_3hf_t + \frac{c_3^2}{2}h^2f_{t^2} + \frac{c_3^3}{6}h^3f_{t^3} + O(h^4) \right) \\ &= hf + h^2\alpha_{31}ff_x + \alpha_{32}h^2ff_x + c_3h^2f_t \\ &\quad + \alpha_{32}\alpha_{21}h^3(ff_x^2 + f_t f_x) + \frac{h^3f^2f_{x^2}}{2}(\alpha_{31}^2 + \alpha_{32}^2 + 2\alpha_{31}\alpha_{32}) + \frac{1}{2}h^3c_3^2f_{t^2} \\ &\quad + h^4f^2f_{x^2}f_x \left(\frac{1}{2}\alpha_{32}c_2^2 + \alpha_{31}\alpha_{32}c_2 + \alpha_{32}^2c_2 \right) + \frac{\alpha_{32}}{2}h^4c_2^2f_x f_{t^2} + ff_{x^2}f_t(\alpha_{31}^2c_2 + \alpha_{31}\alpha_{32}c_2) \\ &\quad + \frac{h^4f^3}{6}(\alpha_{31}^3 + 3\alpha_{32}^2\alpha_{31} + 3\alpha_{31}\alpha_{32}^2 + \alpha_{32}^3)f_{x^3} + \frac{1}{6}h^4c_3^3f_{t^3} + O(h^5) \\ &= hf + h^2c_3(ff_x + f_t) + \frac{c_3^2}{2}h^3(f^2f_{x^2} + f_{t^2}) + \alpha_{32}c_2h^3(ff_x + f_t f_x) \\ &\quad + \frac{c_3^3}{6}h^4(f^3f_{x^3} + f_{t^3}) + \frac{\alpha_{32}c_2^2}{2}h^4f_x f_{t^2} + \alpha_{32}c_3c_2h^4ff_{x^2}f_t + \frac{c_2\alpha_{32}(c_2 + 2c_3)}{2}h^4f^2f_{x^2}f_x + O(h^5). \end{aligned}$$

$i = 4$ は,

$$k_4 = hf(x_n + \alpha_{41}k_1 + \alpha_{42}k_2 + \alpha_{43}k_3, t_n + c_4h).$$

今までと同じように $(\alpha_{41}k_1 + \alpha_{42}k_2 + \alpha_{43}k_3, c_4h)$ の周りで f を4次項までテイラー展開すると

$$\begin{aligned} k_4 &= h \left(f + (\alpha_{41}k_1 + \alpha_{42}k_2 + \alpha_{43}k_3)f_x + \frac{(\alpha_{41}k_1 + \alpha_{42}k_2 + \alpha_{43}k_3)^2}{2}f_{x^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(\alpha_{41}k_1 + \alpha_{42}k_2 + \alpha_{43}k_3)^3}{6}f_{x^3} + c_4hf_t + \frac{c_4^2}{2}f_{t^2} + \frac{c_4^3}{6}f_{t^3} + O(h^4) \right) \\ &= hf + h^2\alpha_{41}ff_x + \alpha_{42}h^2ff_x + \alpha_{43}h^2ff_x + c_4h^2f_t \\ &\quad + \alpha_{42}\alpha_{21}h^3(ff_x^2 + f_t f_x) + \alpha_{43}c_3h^3(ff_x^2 + f_t f_x) \\ &\quad + \frac{h^3f^2f_{x^2}}{2}(\alpha_{41}^2 + \alpha_{42}^2 + \alpha_{43}^2 + 2\alpha_{41}\alpha_{42} + 2\alpha_{42}\alpha_{43} + 2\alpha_{43}\alpha_{41}) + \frac{1}{2}h^3c_3^2f_{t^2} \\ &\quad + \frac{\alpha_{42}c_2^2h^4f^2f_{x^2}f_x}{2} + \frac{\alpha_{43}c_3^2h^4(f^2f_{x^2}f_x + f_xf_{t^2})}{2} + \frac{\alpha_{42}}{2}h^4c_2^2f_xf_{t^2} \\ &\quad + \frac{(\alpha_{42}^2c_2 + \alpha_{43}^2c_3 + \alpha_{41}\alpha_{42}c_2 + \alpha_{41}\alpha_{43}c_3 + \alpha_{42}\alpha_{43}c_3 + \alpha_{42}\alpha_{43}c_2)(f^2f_{x^2}f_x + ff_{x^2}f_t)}{2} \\ &\quad + \frac{h^4f^3}{6}(\alpha_{41}^3 + \alpha_{42}^3 + \alpha_{43}^3 \\ &\quad + 3\alpha_{41}^2\alpha_{42} + 3\alpha_{41}\alpha_{42}^2 + 3\alpha_{41}^2\alpha_{43} + 3\alpha_{41}\alpha_{43}^2 + 3\alpha_{42}^2\alpha_{43} + 3\alpha_{42}\alpha_{43}^2 + 6\alpha_{41}\alpha_{42}\alpha_{43})f_{x^3} \\ &\quad + \frac{1}{6}h^4c_4^3f_{t^3} + O(h^5) \\ &= hf + h^2c_4(ff_x + f_t) + \frac{c_4^2}{2}h^3(f^2f_{x^2} + f_{t^2}) + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)h^3(ff_x + f_t f_x) \\ &\quad + \frac{c_4^3}{6}h^4(f^3f_{x^3} + f_{t^3}) + \alpha_{43}\alpha_{32}c_2h^4(ff_x^3 + f_x^2f_t) + \frac{(\alpha_{42}c_2^2 + \alpha_{43}c_3^2)}{2}h^4f_xf_{t^2} \\ &\quad + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)c_4h^4ff_{x^2}f_t + \frac{(\alpha_{42}c_2^2 + \alpha_{43}c_3^2 + 2\alpha_{43}c_3c_4 + 2\alpha_{42}c_2c_4)}{2}h^4f^2f_{x^2}f_x + O(h^5). \end{aligned}$$

(5.1.2) 式は,

$$\begin{aligned}
 x_{n+1} &= x_n + \omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3 + \omega_4 k_4 \\
 &= x_n + \omega_1 h f \\
 &\quad + \omega_2 \left(h f + c_2 h^2 f f_x + c_2 h^2 f_t + \frac{1}{2} c_2^2 h^3 f^2 f_{x^2} + \frac{1}{2} c_2^2 h^3 f_t^2 + \frac{1}{6} c_2^3 h^4 f^3 f_{x^3} + \frac{1}{6} c_2^3 h^4 f_t^3 \right) \\
 &\quad + \omega_3 \left(h f + h^2 c_3 (f f_x + f_t) + \frac{c_3^2}{2} h^3 (f^2 f_{x^2} + f_t^2) + \alpha_{32} c_2 h^3 (f f_x + f_t f_x) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{c_3^3}{6} h^4 (f^3 f_{x^3} + f_t^3) + \frac{\alpha_{32} c_2^2}{2} h^4 f_x f_t^2 + \alpha_{32} c_3 c_2 h^4 f f_{x^2} f_t + \frac{\alpha_{32} c_2 (c_2 + 2c_3)}{2} h^4 f^2 f_{x^2} f_x \right) \\
 &\quad + \omega_4 \left(h f + h^2 c_4 (f f_x + f_t) + \frac{c_4^2}{2} h^3 (f^2 f_{x^2} + f_t^2) + (\alpha_{42} c_2 + \alpha_{43} c_3) h^3 (f f_x + f_t f_x) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{c_4^3}{6} h^4 (f^3 f_{x^3} + f_t^3) + \alpha_{43} \alpha_{32} c_2 h^4 (f f_x^3 + f_x^2 f_t) + \frac{(\alpha_{42} c_2^2 + \alpha_{43} c_3^2)}{2} h^4 f_x f_t^2 \right. \\
 &\quad \left. + (\alpha_{42} c_2 + \alpha_{43} c_3) c_4 h^4 f f_{x^2} f_t + \frac{(\alpha_{42} c_2^2 + \alpha_{43} c_3^2 + 2\alpha_{43} c_3 c_4 + 2\alpha_{42} c_2 c_4)}{2} h^4 f^2 f_{x^2} f_x \right) + O(h^5) \\
 &= x_n + h(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4) f + h^2(\omega_2 c_2 + \omega_3 c_3 + \omega_4 c_4) (f f_x + f_t) \\
 &\quad + \frac{h^3(c_2^2 \omega_2 + c_3^2 \omega_3 + c_4^2 \omega_4)}{2} (f^2 f_{x^2} + f_t^2) + h^3(\alpha_{32} c_2 \omega_3 + (\alpha_{42} c_2 + \alpha_{43} c_3) \omega_4) (f f_x^2 + f_t f_x) \\
 &\quad + \frac{h^4(c_2^3 \omega_2 + c_3^3 \omega_3 + c_4^3 \omega_4)}{6} (f^2 f_{x^2} + f_t^2) + h^4 \alpha_{32} \alpha_{43} c_2 \omega_4 (f f_x^3 + f_x^2 f_t) \\
 &\quad + \frac{h^4(\alpha_{32} c_2^2 \omega_3 + (\alpha_{42} c_2^2 + \alpha_{43} c_3^2) \omega_4)}{2} f_x f_t^2 + h^4(\alpha_{32} c_2 c_3 \omega_3 + (\alpha_{42} c_2 + \alpha_{43} c_3) c_4 \omega_4) f f_{x^2} f_t \\
 &\quad + \frac{h^4(\alpha_{32} c_2^2 + \alpha_{42} c_2^2 + \alpha_{43} c_3^2 + 2\alpha_{32} c_2 c_3 + 2\alpha_{42} c_2 c_4 + 2\alpha_{43} c_3 c_4)}{2} f^2 f_{x^2} f_x + O(h^5).
 \end{aligned}$$

となる. 付録 F の (f.3) 式から

$$x'''' = f^3 f_{x^3} + f_t^3 + f_x^2 f_t + f f_x^3 + f_x f_t^2 + 3f f_{x^2} f_t + 4f^2 f_{x^2} f_x.$$

となる. よって x_{n+1} のテイラー展開の4次の項は

$$\frac{1}{24}(f^3 f_{x^3} + f_t^3) + \frac{1}{24}(f_x^2 f_t + f f_x^3) + \frac{1}{24} f_x f_t^2 + \frac{1}{8} f f_{x^2} f_t + \frac{1}{6} f^2 f_{x^2} f_x$$

である. それぞれの項を見比べてみる.

$(f^3 f_{x^3} + f_t^3)$ の項は

$$\begin{aligned}
 \frac{c_2^3 \omega_2 + c_3^3 \omega_3 + c_4^3 \omega_4}{6} &= \frac{1}{24} \\
 c_2^3 \omega_2 + c_3^3 \omega_3 + c_4^3 \omega_4 &= \frac{1}{4}.
 \end{aligned}$$

$f_x^2 f_t + f f_x^3$ の項は

$$\alpha_{32}\alpha_{43}c_2\omega_4 = \frac{1}{24}.$$

$f_x f_{t^2}$ の項は

$$\frac{\alpha_{32}c_2c_3\omega_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)c_4\omega_4}{2} = \frac{1}{24}$$

$$\alpha_{32}c_2c_3\omega_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)c_4\omega_4 = \frac{1}{12}.$$

$f f_{x^2} f_t$ の項は

$$\alpha_{32}c_2c_3\omega_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)c_4\omega_4 = \frac{1}{8}.$$

$f^2 f_{x^2} f_x$ の項は

$$\alpha_{32}c_2^2 + \alpha_{42}c_2^2 + \alpha_{43}c_3^2 + 2\alpha_{32}c_2c_3 + 2\alpha_{42}c_2c_4 + 2\alpha_{43}c_3c_4 = \frac{1}{6}$$

$$\alpha_{32}c_2^2 + \alpha_{42}c_2^2 + \alpha_{43}c_3^2 + 2\alpha_{32}c_2c_3 + 2\alpha_{42}c_2c_4 + 2\alpha_{43}c_3c_4 = \frac{1}{3}.$$

しかし, $\alpha_{32}c_2c_3\omega_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)c_4\omega_4 = \frac{1}{12}$ なので

$$\alpha_{32}c_2^2 + \alpha_{42}c_2^2 + \alpha_{43}c_3^2 + 2\alpha_{32}c_2c_3 + 2\alpha_{42}c_2c_4 + 2\alpha_{43}c_3c_4 = \frac{1}{3}$$

$$2\alpha_{32}c_2c_3 + 2\alpha_{42}c_2c_4 + 2\alpha_{43}c_3c_4 + \frac{1}{12} = \frac{1}{3}$$

$$\alpha_{32}c_2c_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)c_4 = \frac{1}{8}$$

となって $f f_{x^2} f_t$ の項と同じになる. したがって, テイラー展開の4次項まで一致す

るための条件を導くと,

$$\begin{aligned}
 \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 &= 1, \\
 c_2\omega_2 + c_3\omega_3 + c_4\omega_4 &= \frac{1}{2}, \\
 c_2^2\omega_2 + c_3^2\omega_3 + c_4^2\omega_4 &= \frac{1}{3}, \\
 \alpha_{32}c_2\omega_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)\omega_4 &= \frac{1}{6}, \\
 c_2^3\omega_2 + c_3^3\omega_3 + c_4^3\omega_4 &= \frac{1}{4}, \\
 \alpha_{32}\alpha_{43}c_2\omega_4 &= \frac{1}{24}, \\
 \alpha_{32}c_2c_3\omega_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)c_4\omega_4 &= \frac{1}{8}, \\
 \alpha_{32}c_2^2\omega_3 + (\alpha_{42}c_2^2 + \alpha_{43}c_3^2)\omega_4 &= \frac{1}{12}
 \end{aligned} \tag{5.1.4}$$

となる. この式は 10 変数に対する 8 個の条件式である. よって, 自由度が 2 つ余っている. これはクッタの条件式と呼ばれている. クッタの条件式の選び方の代表例を一つ見てみる.

古典的ルンゲ クッタ公式

ω_3 を非零の任意パラメータとして次の条件式を考える.

$$\begin{aligned}
 \omega_1 &= \frac{1}{6}, \omega_2 = \frac{2}{3} - \omega_3, \omega_4 = \frac{1}{6} \\
 c_2 &= \frac{1}{2}, c_3 = \frac{1}{2}, c_4 = 1, \\
 \alpha_{21} &= c_2 = \frac{1}{2}, \\
 \alpha_{32} &= \frac{1}{6\omega_3}, \\
 \alpha_{31} &= c_3 - \alpha_{32} = \frac{1}{2} - \frac{1}{6\omega_3}, \\
 \alpha_{42} &= 1 - 3\omega_3, \alpha_{43} = 3\omega_3, \\
 \alpha_{41} &= c_4 - \alpha_{42} - \alpha_{43} = 0.
 \end{aligned} \tag{5.1.5}$$

ここで, $\omega_3 = \frac{1}{3}$ と定めると, (5.1.5) 式は

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{1}{6}, \omega_2 = \frac{1}{3}, \omega_3 = \frac{1}{3}, \omega_4 = \frac{1}{6} \\ c_2 &= \frac{1}{2}, c_3 = \frac{1}{2}, c_4 = 1, \\ \alpha_{21} &= \frac{1}{2}, \\ \alpha_{31} &= 0, \alpha_{32} = \frac{1}{2}, \\ \alpha_{42} &= 0, \alpha_{43} = 1, \alpha_{41} = 0 \end{aligned}$$

となつて, 具体的な公式の形は

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, t_n), \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}k_1, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\ k_3 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}k_2, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\ k_4 &= hf(x_n + k_3, t_n + h), \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned} \tag{5.1.6}$$

となる. この式は古典的ルンゲ-クッタ公式と呼ばれ, 4段4位の公式である.

5.1.5 ルンゲ-クッタ型公式の5段以上の場合

$p \geq 5$ のときには, p 段では p 位公式は作れない. p 段公式の到達可能位数³⁾を q とすると, p と q の間には以下の表 5.1.1 のような関係がある.

表から分かるように5段以上では到達可能位数が段数よりも低くなってしまう. さらに, 4段までの場合に比べて係数も急に複雑になってしまう. また, 無理やり位数を増やしたとしても滑らかでない関数に対してはかえって精度が低下してしまう⁴⁾. 以上の理由から4段4位公式が好んで使われる.

³⁾ p 段公式で実現できる最高位数のこと

⁴⁾ 高位公式は f の高階微分可能性を仮定して作られているためである.

段数 p	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
到達可能位数 q	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7

表 5.1.1: 段数 p と到達可能位数 q の関係 (石岡圭一, 2004:スペクトル法による数値計算入門より)

5.2 数値解の公式の安定性

今まで出た数値解法のための公式の安定性を考える. 初期値 $x(0) = x_0$ のとき

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) = \lambda x \tag{5.2.7}$$

ただし, λ は複素数とする. (5.2.7) 式にそれぞれの公式を適用した場合の $t \rightarrow \infty$ での数値解の様子が, 厳密解の様子と一致するかを考察する⁵⁾. この方程式の厳密解は $x(t) = x_0 e^{\lambda t}$ である.

5.2.1 ルンゲ-クッタ型公式の安定性

ルンゲ-クッタ型公式はその性質から安定条件の式がその公式の段数と同じ次数の h までしか含み得ない. また, その公式の位数と同じ次数の厳密解のテイラー展開と一致する. よって, 段数と位数が同じ公式だと同じ安定条件になる.

1 段 1 位公式の安定性

(5.2.7) 式を 1 段 1 位公式のオイラー法で解いてみる.

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x, t) \\ &= \lambda hx \\ \tilde{x}(t+h) &= x + k_1 \\ &= (1 + \lambda h)x \end{aligned}$$

⁵⁾この安定性の判断法は非線形な方程式には使えないように思えるが, 元の非線形の方程式をある点の近傍で線形近似し, さらにその線形微分方程式の固有ベクトルを 1 つ選べば, 固有値を λ として (5.2.7) 式と同等の式が導ける. つまり, 数値解の局所的な振舞いを調べるために有効な方法である.

となる. ここで \tilde{x} は数値解である. 厳密解は,

$$\begin{aligned} x(t+h) &= x_0 e^{\lambda(t+h)} \\ &= x_0 e^{\lambda t} e^{\lambda h} \\ &= x(t) e^{\lambda h} \\ &= (1 + \lambda h + \dots) x(t) \end{aligned}$$

となる. 見て分かるように厳密解 $x(t+h)$ と数値解 $\tilde{x}(t+h)$ は1次の項まで一致している. これは, 1段公式なので h の1次の項までしか含み得ないためであり, また, 1位公式なので厳密解のテイラー展開と1次まで一致してなければならないからである. ここで $\lambda h = z$ とおくと,

$$\frac{\tilde{x}(t+h)}{x} = 1 + z$$

となる. このまま積分を続けると, 1ステップごとに振幅が $|1+z|$ 倍される. よって, この数値解が発散しないためには

$$|1+z| \leq 1$$

なければならない⁶⁾. 今 a と b が実数のとき $z = a + bi$ と書きなおすと,

$$\begin{aligned} |1+z| &= |1+a+bi| \\ &= \sqrt{(1+a)^2 + b^2} \\ &= \sqrt{a^2 + 2a + b^2 + 1} \end{aligned} \tag{5.2.8}$$

となるので,

$$a^2 + 2a + b^2 + 1 \leq 1 \tag{5.2.9}$$

となる. この不等式を満たす (a, b) の領域は公式の安定領域と呼ばれる.

2段2位公式の安定性

2段2位公式でも1段1位公式と同様に安定性を導ける. 2段公式なので $z = \lambda h$ の2次の項までを含む. また, 2位公式なので厳密解とテイラー展開の2次の項まで一致しているので, 1ステップあたりの増幅値率は,

$$\frac{\tilde{x}(t+h)}{x} = 1 + z + \frac{1}{2}z^2$$

⁶⁾この条件を安定条件と呼び, $\frac{\tilde{x}(t+h)}{x}$ を増幅率と呼ぶ.

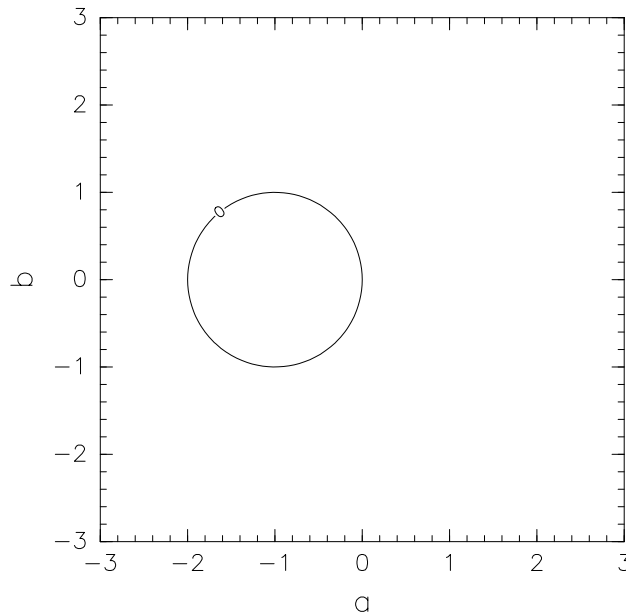


図 5.2.1: 1 段 1 位ルンゲ-クッタ型公式の安定領域.

となり, $z = a + bi$ としての安定領域は,

$$\left| 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 \right| \leq 1$$

を満たす (a, b) の領域である. よって,

$$\begin{aligned} \left| 1 + z + \frac{1}{2}z^2 \right| &= \left| 1 + a + bi + \frac{1}{2}(a + bi)^2 \right| \\ &= \left| 1 + \frac{1}{2}(a^2 + 2a - b^2) + b(a + 1)i \right| \\ &= \sqrt{\left(1 + \frac{1}{2}(a^2 + 2a - b^2) \right)^2 + b^2(a + 1)^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{4}(a^4 + 2a^2b^2 + b^4) + a^3 + a^2 + 2a^2 + 2a + 1} \quad (5.2.10) \end{aligned}$$

となるので,

$$\frac{1}{4}(a^4 + 2a^2b^2 + b^4) + a^3 + ab^2 + 2a^2 + 2a + 1 \leq 1 \quad (5.2.11)$$

となる. この不等式を満たす (a, b) の領域は公式の安定領域と呼ばれる.

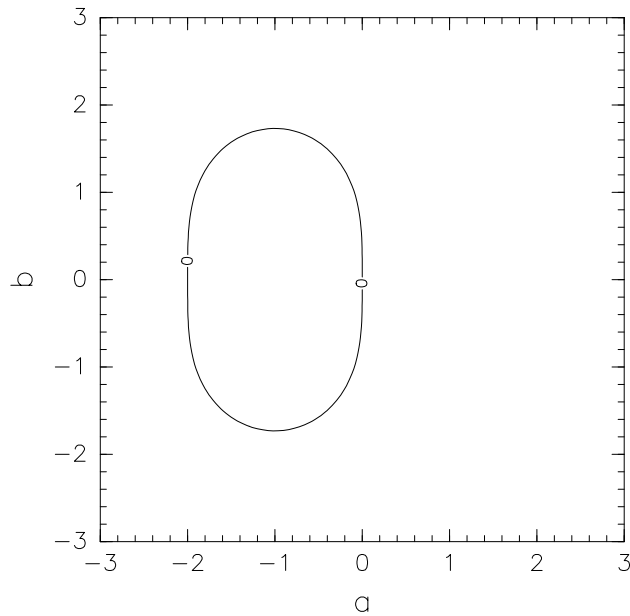


図 5.2.2: 2 段 2 位ルンゲ-クッタ型公式の安定領域.

3 段 3 位公式の安定性

3 段 3 位公式でも 2 段 2 位公式と同様に安定性を導ける. 3 段公式なので $z = \lambda h$ の 3 次の項までを含む. また, 3 位公式なので厳密解とテイラー展開の 3 次の項まで一致しているので, 1 ステップあたりの増幅率は,

$$\frac{\tilde{x}(t+h)}{x} = 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \frac{1}{3!}z^3$$

となり, $z = a + bi$ としての安定領域は,

$$\left| 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 \right| \leq 1$$

を満たす (a, b) の領域である. よって,

$$\begin{aligned}
 \left| 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 \right| &= \left| 1 + a + bi + \frac{1}{2}(a^2 + 2abi + b^2) + \frac{1}{6}(a^3 + 3a^2bi - 3a^2 - b^3i) \right| \\
 &= \left| 1 + \frac{1}{6}(a^3 + 3a^2 + 6a - 3b^2 - 3ab^2) + \frac{1}{6}b(3a^2 + 6a - b^2)i \right| \\
 &= \sqrt{\left(1 + \frac{1}{6}(a^3 + 3a^2 + 6a - 3b^2 - 3ab^2) \right)^2 + \left(\frac{1}{6}b(3a^2 + 6a - b^2) \right)^2} \\
 &= \left[1 + \left(\frac{1}{36}a^6 + \frac{1}{6}a^5 + \frac{7}{12}a^4 + \frac{4}{3}a^3 + 2a^2 + 2a + \frac{1}{12}a^4b^2 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{1}{3}a^3b^2 + \frac{1}{2}a^2b^2 + \frac{1}{12}a^2b^4 + \frac{1}{6}ab^4 + \frac{1}{36}b^6 - \frac{1}{12}b^4 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.2.12)
 \end{aligned}$$

となるので, 安定領域は

$$\begin{aligned}
 &1 + \left(\frac{1}{36}a^6 + \frac{1}{6}a^5 + \frac{7}{12}a^4 + \frac{4}{3}a^3 + 2a^2 + 2a + \frac{1}{12}a^4b^2 \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{3}a^3b^2 + \frac{1}{2}a^2b^2 + \frac{1}{12}a^2b^4 + \frac{1}{6}ab^4 + \frac{1}{36}b^6 - \frac{1}{12}b^4 \right) \\
 &\leq 1 \quad (5.2.13)
 \end{aligned}$$

となる.

4段4位公式の安定性

4段4位公式も同様に求められる. 4段公式なので $z = \lambda h$ の4次の項までしか含まない. また, 4位公式なので厳密解のテイラー展開の4次の項まで一致している. これらのことより増幅率は,

$$\frac{\tilde{x}(t+h)}{x} = 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 + \frac{1}{4!}z^4$$

となり, $z = a + bi$ としての安定領域は,

$$\left| 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 + \frac{1}{4!}z^4 \right| \leq 1 \quad (5.2.14)$$

を満たす (a, b) の領域である. よって,

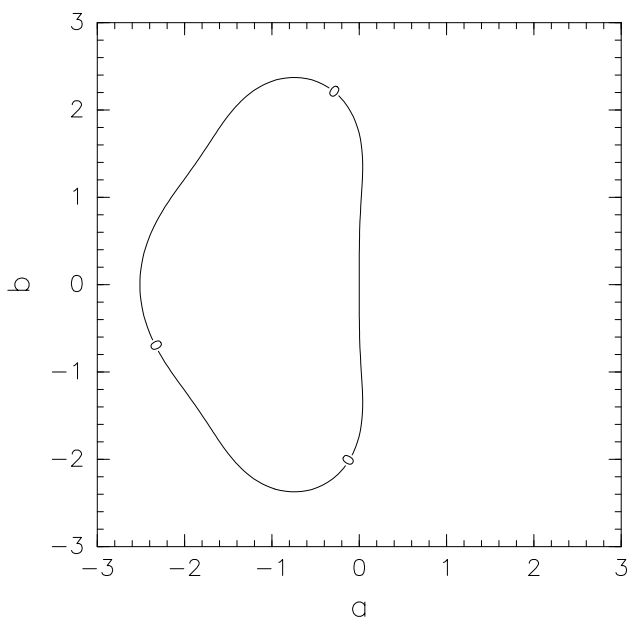


図 5.2.3: 3 段 3 位ルンゲ-クッタ型公式の安定領域.

$$\begin{aligned}
 \left| 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 + \frac{1}{4!}z^4 \right| &= \left| 1 + a + bi + \frac{1}{2}(a^2 + 2abi + b^2) + \frac{1}{6}(a^3 + 3a^2bi - 3a^2 - b^3i) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{24}(a^4 + 4a^3bi - 6a^2b^2 - 4ab^3i + b^4) \right| \\
 &= \left| 1 + \frac{1}{24}(a^4 + 4a^3 + 12a^2 + 24a - 12b^2 + b^4 - 6a^2b^2 - 12ab^2) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{24}b(12a^2 + 24a - 4b^2 + 4a^3b - 4ab^3)i \right| \\
 &= \left[\left(1 + \frac{1}{24}(a^4 + 4a^3 + 12a^2 + 24a - 12b^2 + b^4 - 6a^2b^2 - 12ab^2) \right)^2 \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{1}{24}b(12a^2 + 24a - 4b^2 + 4a^3b - 4ab^3) \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &= \left[1 + \left(\frac{1}{576}a^8 + \frac{1}{72}a^7 + \frac{5}{72}a^6 + \frac{1}{4}a^5 + \frac{2}{3}a^4 + \frac{4}{3}a^3 + 2a^2 + 2a \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{1}{144}a^6b^2 + \frac{1}{24}a^5b^2 + \frac{1}{8}a^4b^2 + \frac{1}{96}a^4b^4 + \frac{1}{6}a^3b^2 + \frac{1}{24}a^3b^4 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{1}{24}a^2b^4 + \frac{1}{144}a^2b^6 - \frac{1}{12}ab^4 + \frac{1}{72}ab^6 + \frac{1}{576}b^8 - \frac{1}{72}b^6 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.2.15)
 \end{aligned}$$

となるので, 安定領域は

$$\begin{aligned}
 & 1 + \left(\frac{1}{576}a^8 + \frac{1}{72}a^7 + \frac{5}{72}a^6 + \frac{1}{4}a^5 + \frac{2}{3}a^4 + \frac{4}{3}a^3 + 2a^2 + 2a \right. \\
 & + \frac{1}{144}a^6b^2 + \frac{1}{24}a^5b^2 + \frac{1}{8}a^4b^2 + \frac{1}{96}a^4b^4 + \frac{1}{6}a^3b^2 + \frac{1}{24}a^3b^4 \\
 & \left. + \frac{1}{24}a^2b^4 + \frac{1}{144}a^2b^6 - \frac{1}{12}ab^4 + \frac{1}{72}ab^6 + \frac{1}{576}b^8 - \frac{1}{72}b^6 \right) \\
 & \leq 1
 \end{aligned} \tag{5.2.16}$$

となる.

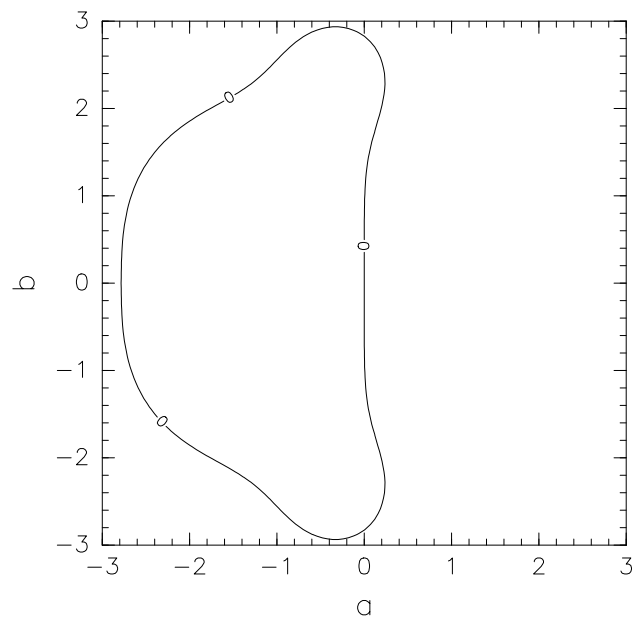


図 5.2.4: 4 段 4 位ルンゲ-クッタ型公式の安定領域.

第6章 一次元線形移流方程式の数値解法

実際に初期値 $f(x)$ として $x = \pi$ に鋭いピークを持つ関数

$$\begin{aligned} f(x) &= \left(\frac{1 - \cos x}{2} \right)^N \\ &= \left(\sin \frac{x}{2} \right)^{2N} \end{aligned} \quad (6.0.1)$$

を与えて, (3.1.1) 式をスペクトル法で数値的に解いてみる¹⁾. 初期値を (6.0.1) 式としたときの (3.1.1) 式の解析解 $f(x-t)$ の $t=0$ のときの図が図 6.0.1 である. (3.1.1)

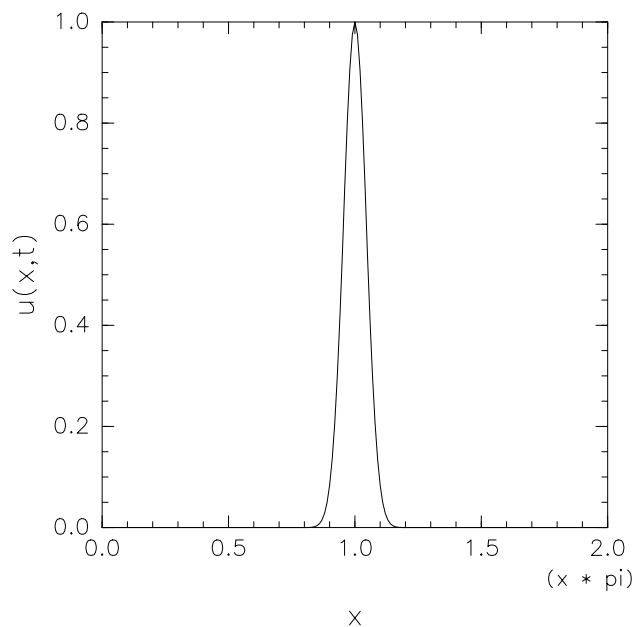


図 6.0.1: 初期値を (6.0.1) 式として, $t=0$ としたときの $f(x-t)$ の図.

¹⁾この初期条件の解析解の説明は付録 I を参照されたい.

式をスペクトル法で数値的に解くということは(3.1.10)式という常微分方程式を解くことである。よって、

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{u}_k}{dt} &= f(t) \\ &= -ik\hat{u}_k\end{aligned}\quad (6.0.2)$$

という常微分方程式の初期値問題を何らかの数値解法で解くことになる。この式は振動方程式の形になっている。今回は第5章で扱った4段までのルンゲ-クッタ型公式で解く

6.1 ルンゲ-クッタ型公式の段数の違いによる振舞いの違い

まず、時間をある程度固定してルンゲ-クッタ型公式の段数の違いによる振舞いの違いを見ていく。

6.1.1 1段1位公式

1段1位公式の安定条件は(5.2.9)式である。(6.0.2)式の場合は $a = 0, b = -kh$ となる。よって、1段1位公式の安定条件は

$$\begin{aligned}b^2 &= (-kh)^2 \\ &\leq 0.\end{aligned}$$

よって、必ず増幅してしまう。その増幅率は(5.2.8)式より

$$\begin{aligned}\sqrt{1+b^2} &= \sqrt{1+(-kh)^2} \\ &= \sqrt{1+(kh)^2}\end{aligned}$$

である。実際にオイラー法で試みる。(6.0.2)式をルンゲ-クッタ型公式の1段1位公式であるオイラー法にあてはめると、

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(\hat{u}_k) \\ &= -ikh\hat{u}_k \\ \tilde{u}_k &= \hat{u}_k + k_1\end{aligned}$$

となる。ここで \tilde{u}_k は t_{n+1} のときの \hat{u}_k の値である。

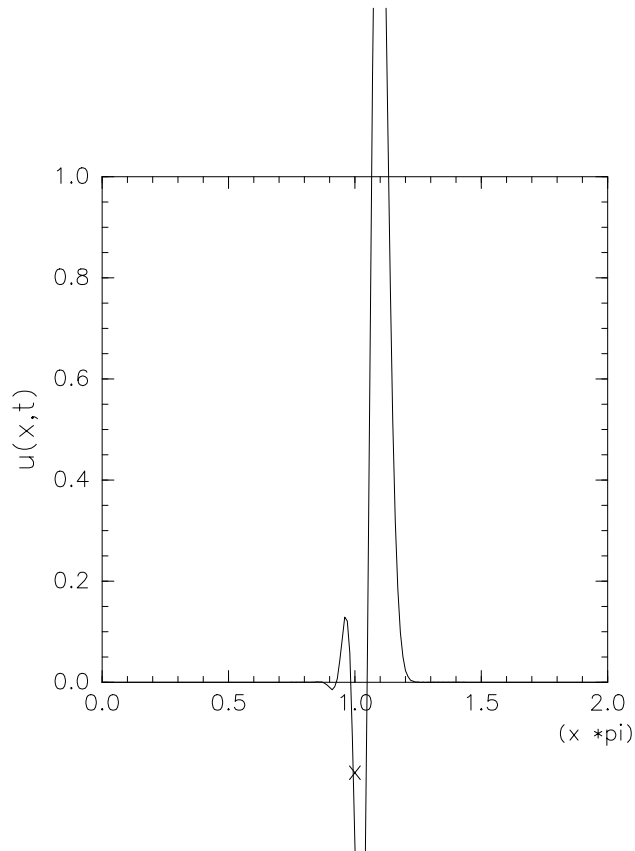


図 6.1.2: (6.0.2) 式をオイラー法で $N = 100, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 0.12\pi$ のときの図.

$N = 100, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 0.12\pi$ のときの図が図 6.1.2 である. 図 6.1.2 を見て分かる通り増幅してしまっている. $k = N$ とすると増幅率は,

$$\begin{aligned} \sqrt{1 + (kh)^2} &= \sqrt{1 + (2\pi)^2} \\ &\sim 6.3623 \end{aligned}$$

となっている.

オイラー法は、常に増幅してしまうが kh を極力小さく取ると波形の形をすこしは残すことができる。図 6.1.3 は $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ として計算した $t = 0.1\pi$ のときのもの。振幅は増幅してしまって波がかなり崩れている。しかし、一応ピークが一つ大きくあるという波形の形は残っている。 $k = N$ とすると増幅率は、

$$\sqrt{1 + (kh)^2} = \sqrt{1 + \left(\frac{3\pi}{10}\right)^2} \sim 1.3741$$

となっている。

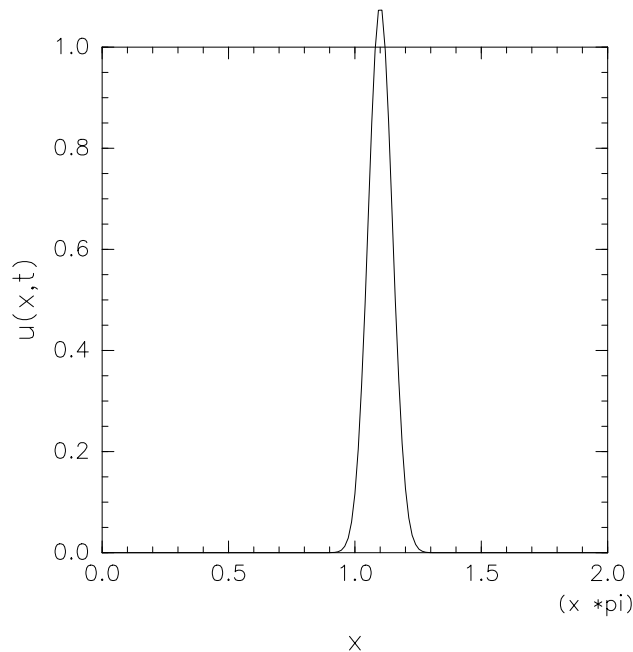


図 6.1.3: (6.0.2) 式をオイラー法で $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ として計算した $t = 0.1\pi$ のときの図。

1次元線形移流方程式での1段1位の公式

今回のような1次元線形移流方程式では $kh \gg 1$ のときは他のルンゲ-クッタ型公式よりいくらか良い結果を得ることができる。また、 kh をごく小さく取るとある程度の波形を保った結果が得られる。しかし、どんな kh をとっても最後には必ず発散してしまうので1次元線形移流方程式には向かない。

6.1.2 2段2位公式

2段2位公式の安定条件は(5.2.11)式である。(6.0.2)式の場合は $a = 0, b = -kh$ なので2段2位公式の安定条件は

$$\begin{aligned}\frac{1}{4}b^2 &= \frac{1}{4}(-kh)^2 \\ &\leq 0.\end{aligned}$$

よって、必ず増幅する。その増幅率は(5.2.10)式より

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{1}{4}b^4 + 1} &= \sqrt{\frac{1}{4}(-kh)^4 + 1} \\ &= \sqrt{\frac{1}{4}(kh)^4 + 1}\end{aligned}$$

となる。実際に2段2位公式である改良オイラー法で見てみる。(6.0.2)式をルンゲ-クッタ型公式の2段2位公式である改良オイラー法にあてはめると、

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(\hat{u}_k) \\ &= -ikh\hat{u}_k \\ k_2 &= hf\left(\hat{u}_k + \frac{1}{2}k_1\right) \\ &= -ikh\left(\hat{u}_k + \frac{1}{2}k_1\right) \\ \tilde{u}_k &= \hat{u}_k + k_2\end{aligned}$$

となる。

まず、2段2位公式の数値解の振舞いを調べるために1段1位公式と比べてみる。 $N = 100, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 0.12\pi$ のときの図が図6.1.4である。図6.1.4からわかるように1段1位公式よりも増幅してしまっている。 $k = N$ とすると増幅率は

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{1}{4}(kh)^4 + 1} &= \sqrt{\frac{1}{4}(2\pi)^4 + 1} \\ &\sim 19.7645\end{aligned}$$

である。よって同条件の1段1位公式よりも増幅率が大きくなっているのにより早く発散してしまっている。

2段2位公式では $kh \gg 1$ のとき1段1位公式よりも早く発散してしまうが kh を小さく取ることによって1段1位公式に比べてより安定する。図6.1.5は $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ として $t = 0.1\pi$ のときの図である。

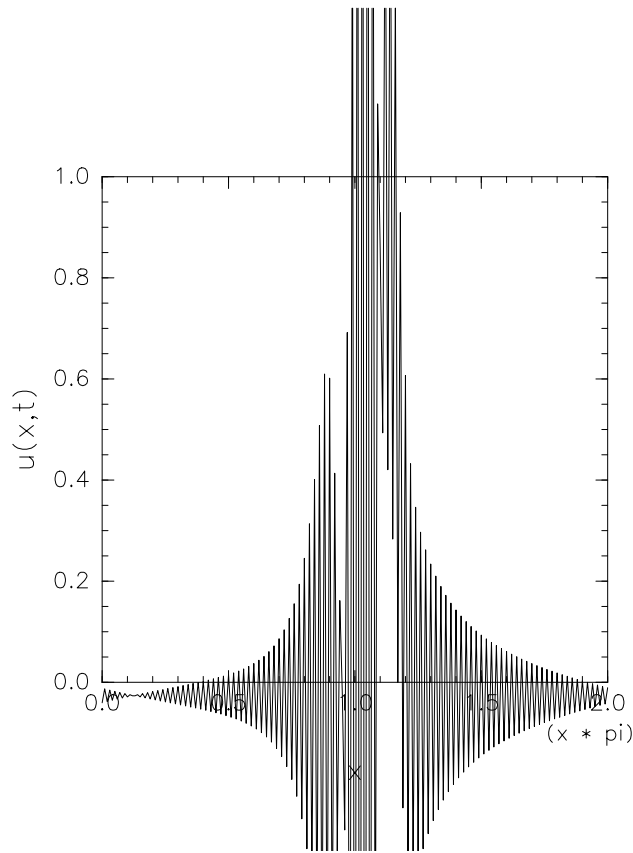


図 6.1.4: (6.0.2) 式を改良オイラー法で $N = 100, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 0.12\pi$ のときの図.

図 6.1.5 から 1 段 1 位公式の結果である図 6.1.3 に比べても安定していることが分かる. $k = N$ とすると増幅率は

$$\sqrt{\frac{1}{4}(kh)^4 + 1} = \sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{3\pi}{10}\right)^2 + 1} \sim 1.0942$$

となっている. 同条件の 1 段 1 位公式に比べて増幅率が小さくなっているのにより安定した. しかし, 増幅率は 1 より大きいので t が進むにつれて増幅してしまう.

次に 2 段 2 位公式の時間を経過させたときにどうなるか確かめる. 図 6.1.5 と同条件で時間をさらに $t = 0.6\pi$ になるまで計算した. その図が図 6.1.6 である.

ピークの両側に波が現れて増幅してしまっている.

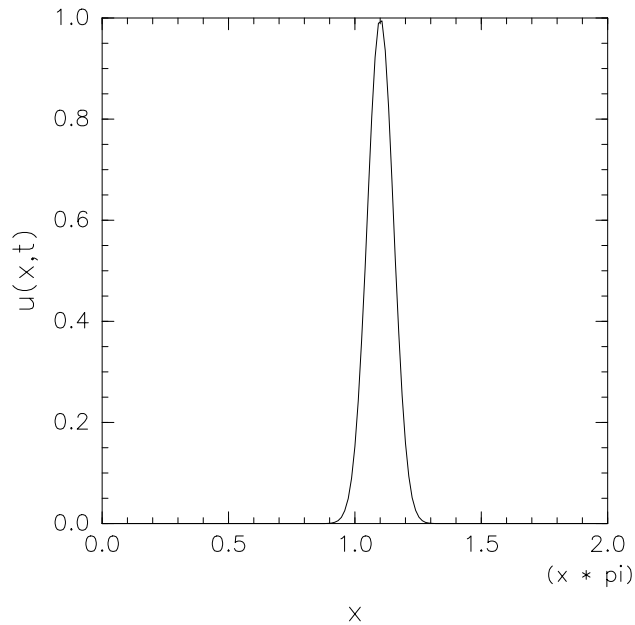


図 6.1.5: (6.0.2) 式を改良オイラー法で $N = 75$, $h = \frac{2\pi}{500}$ として計算した $t = 0.1\pi$ のときの図.

同条件で $t = \pi$ のときの図が図 6.1.7 である. 完全に発散してしまった.

1次元線形移流方程式での2段2位公式

今回のような1次元線形移流方程式では切断波数を小さく取るか, 時間ステップを多く取ることである程度安定することはできる. しかし, 時間が経過するにつれ必ず増幅してしまい, 長時間の積分では最終的には発散してしまう. よって, 2段2位公式は1次元線形移流方程式に向かない.

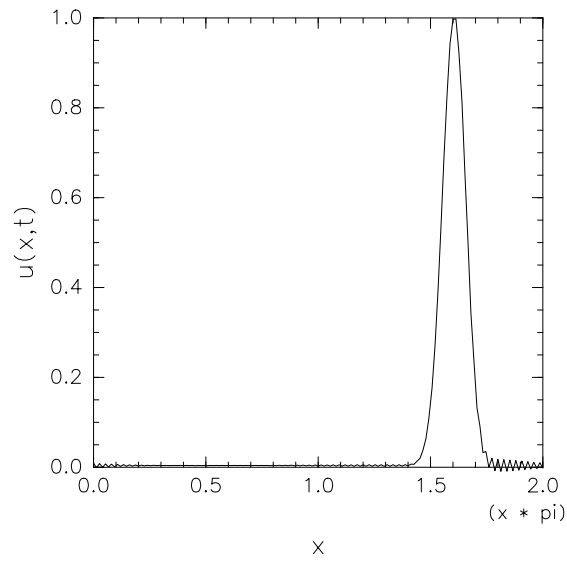


図 6.1.6: (6.0.2) 式を改良オイラー法で $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ として計算した $t = 0.6\pi$ のときの図.

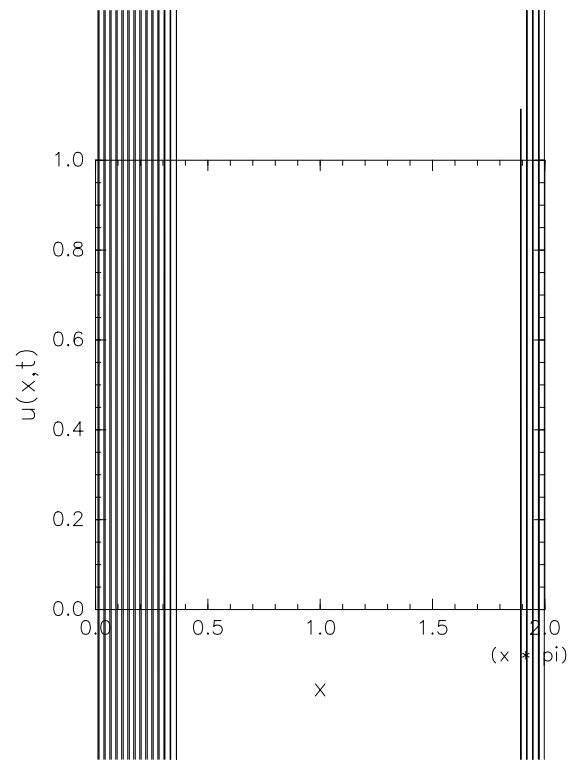


図 6.1.7: (6.0.2) 式を改良オイラー法で $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ として計算した $t = \pi$ のときの図.

6.1.3 3 段 3 位公式

3 段 3 位公式の安定条件は (5.2.13) 式である. (6.0.2) 式の場合は $a = 0, b = -kh$ なので

$$\begin{aligned} \frac{1}{36}b^6 - \frac{1}{12}b^4 &= \frac{1}{36}(-kh)^6 - \frac{1}{12}(-kh)^4 \\ &= \frac{1}{36}(-kh)^4((-kh)^2 - 3) \leq 0. \end{aligned}$$

なので $-\sqrt{3} \leq kh \leq \sqrt{3}$ のとき安定している. 増幅率は (5.2.12) 式より

$$\begin{aligned} \sqrt{1 + \frac{1}{36}b^6 - \frac{1}{12}b^4} &= \sqrt{1 + \frac{1}{36}(-kh)^6 - \frac{1}{12}(-kh)^4} \\ &= \sqrt{1 + \frac{1}{36}(kh)^6 - \frac{1}{12}(kh)^4} \end{aligned}$$

である.

実際に 3 段 3 位公式であるホインの 3 次公式で見てみる. (6.0.2) 式をルンゲ-クッタ型公式の 3 段 3 位公式であるホインの 3 次公式にあてはめると,

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(\hat{u}_k) \\ &= -ikh\hat{u}_k \\ k_2 &= hf\left(\hat{u}_k + \frac{1}{3}k_1\right) \\ &= -ikh\left(\hat{u}_k + \frac{1}{3}k_1\right) \\ k_3 &= hf\left(\hat{u}_k + \frac{2}{3}k_2\right) \\ &= -ikh\left(\hat{u}_k + \frac{2}{3}k_2\right) \\ \tilde{u}_k &= \hat{u}_k + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_3) \end{aligned}$$

となる.

3 段 3 位公式には今回の振動方程式において波数と時間ステップの関数に安定な領域が存在する²⁾. 3 段 3 位公式の特徴を調べるにあたりまず, 2 段 2 位公式と比較してみる. そして, 時間経過によってどう変化するかを見る. 1 段公式や 2 段公式と同じくまず, $N = 100, h = \frac{2\pi}{100}$ を計算する. この条件の $t = 0.12\pi$ のときの図が図 6.1.8 である.

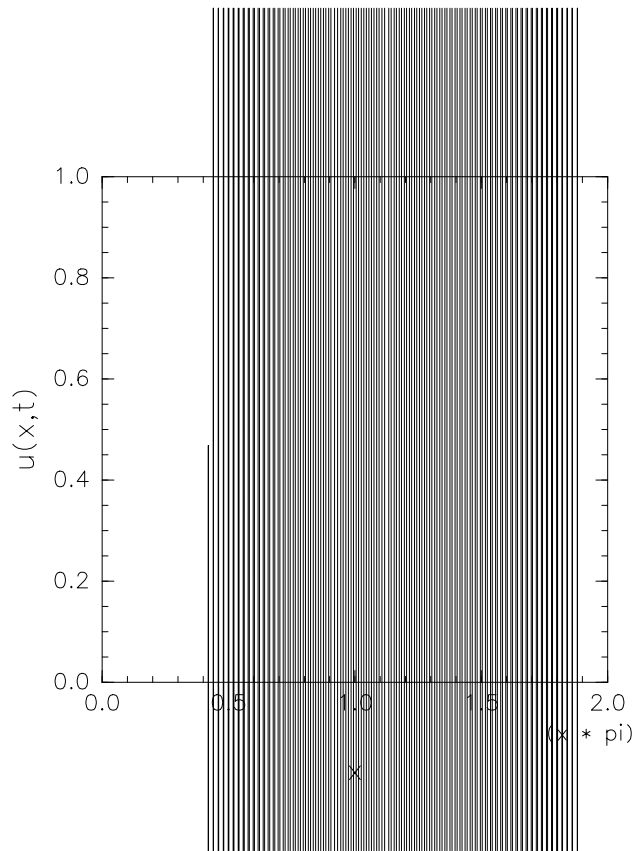


図 6.1.8: (6.0.2) 式をホインの 3 次公式で $N = 100, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 0.12\pi$ のときの図.

図 6.1.8 から 1 段 1 位公式や 2 段 2 位公式に比べてより増幅しているのがわかる.

$k = N$ とすると増幅率は

$$\sqrt{1 + \frac{1}{36}(kh)^6 - \frac{1}{12}(kh)^4} = \sqrt{1 + \frac{1}{36}(2\pi)^6 - \frac{1}{12}(2\pi)^4} \sim 39.7525$$

である. 増幅率が 2 段 2 位公式に比べてより大きくなっているため早く発散してしまっている.

次に $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ の条件の比較をする. 図 6.1.9 は $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ として計算した $t = 0.1\pi$ のときの図である. 2 段 2 位公式では安定した解を得られていた. 3 段 3 位公式も安定領域に含まれるので安定している.

²⁾第 5 章を参照されたい

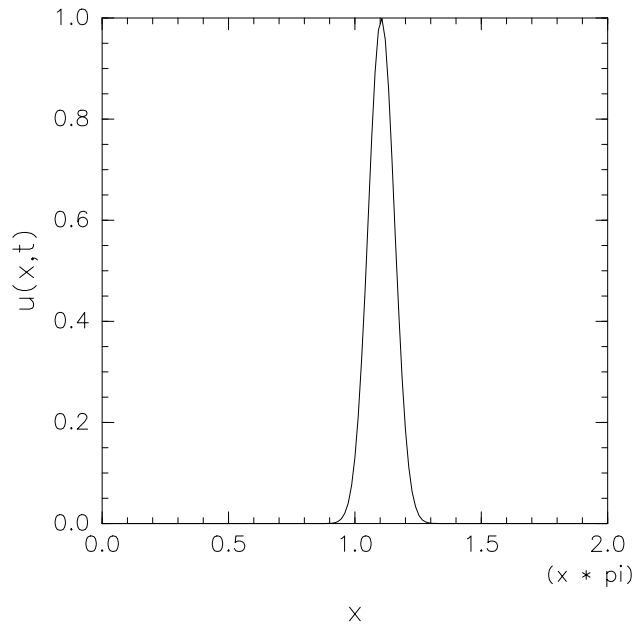


図 6.1.9: (6.0.2) 式をホインの3次公式で $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ として計算した $t = 0.1\pi$ のときの図.

$k = N$ のとすると増幅率は

$$\sqrt{1 + \frac{1}{36}(kh)^6 - \frac{1}{12}(kh)^4} = \sqrt{1 + \frac{1}{36} \left(\frac{2\pi}{5}\right)^6 - \frac{1}{12} \left(\frac{2\pi}{5}\right)^4} \sim 0.9943$$

である. 増幅率が1より小さいので振幅が増幅することはない.

次に $t = 0.6\pi$ のときを計算する. その図が図 6.1.10 である. 2段2位公式では増幅を始めてしまうが3段3位公式は安定領域に含まれるので安定する.

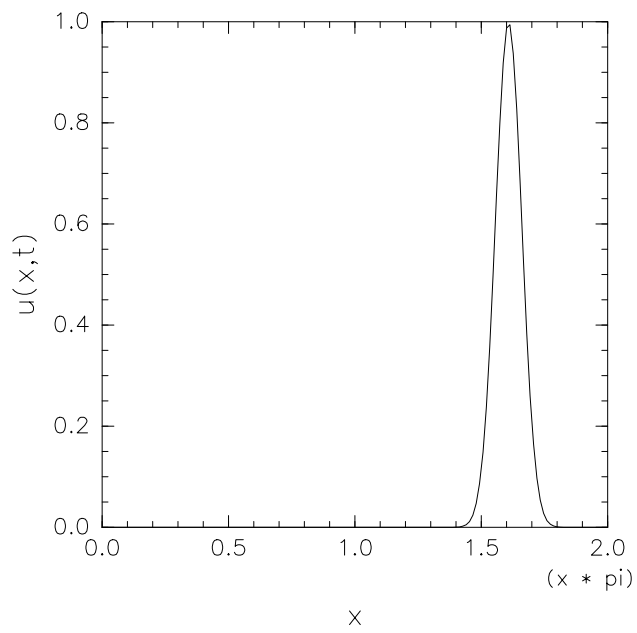


図 6.1.10: (6.0.2) 式をホインの 3 次公式で $N = 75, h = \frac{2\pi}{500}$ として計算した $t = 0.6\pi$ のときの図.

図 6.1.8 と同じ時間ステップ幅で切断波数を安定領域になるようにとった図が図 6.1.11 である. 増幅せず安定した波になっている. また, 切断数が減っているのが角ばった波になっている.

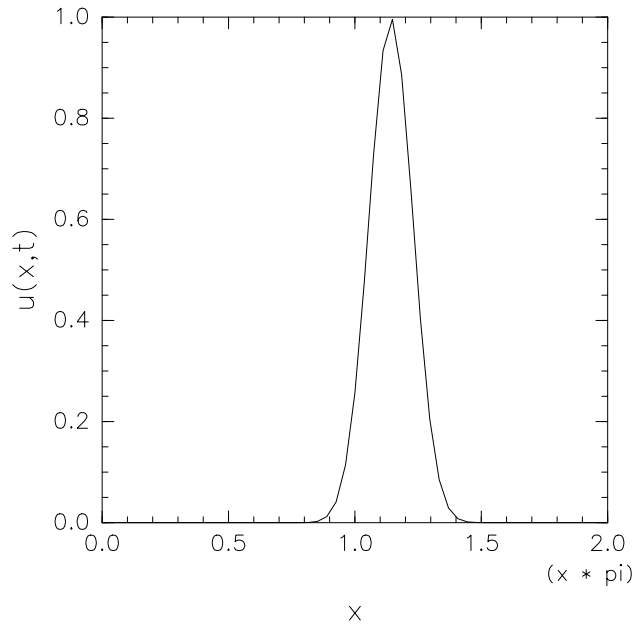


図 6.1.11: (6.0.2) 式をホインの 3 次公式で $N = 27, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 0.12\pi$ のときの図.

$k = N$ とすると増幅率は

$$\sqrt{1 + \frac{1}{36}(kh)^6 - \frac{1}{12}(kh)^4} = \sqrt{1 + \frac{1}{36} \left(\frac{27\pi}{50}\right)^6 - \frac{1}{12} \left(\frac{27\pi}{50}\right)^4} \\ \sim 0.9859$$

となっている. 同じ条件で $t = 2\pi$ まで積分を行った図が図 6.1.12 である. 波形は安定しているが, 振幅自体が減衰してしまっている.

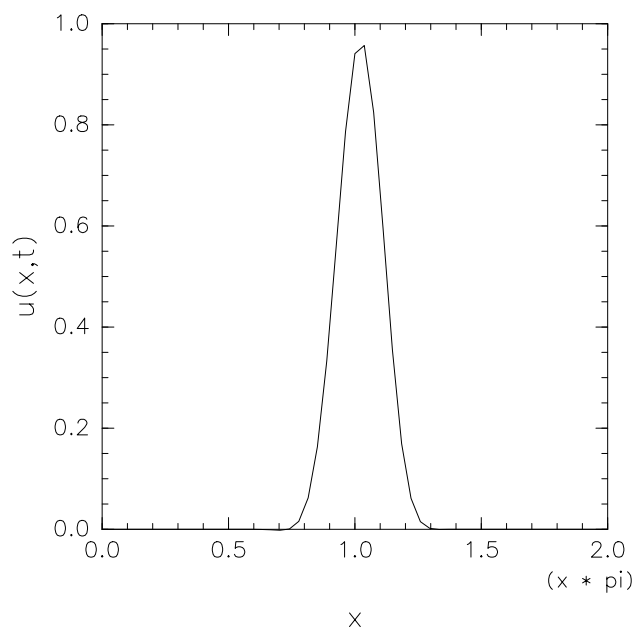


図 6.1.12: (6.0.2) 式をホインの 3 次公式で $N = 27, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 2\pi$ のときの図.

最後に安定領域から外れてしまったときの時間経過を見る. $N = 100, h = \frac{2\pi}{340}$ と
 して計算してみる. この条件で $t = 0.1\pi$ まで計算した図が図 6.1.13 である.

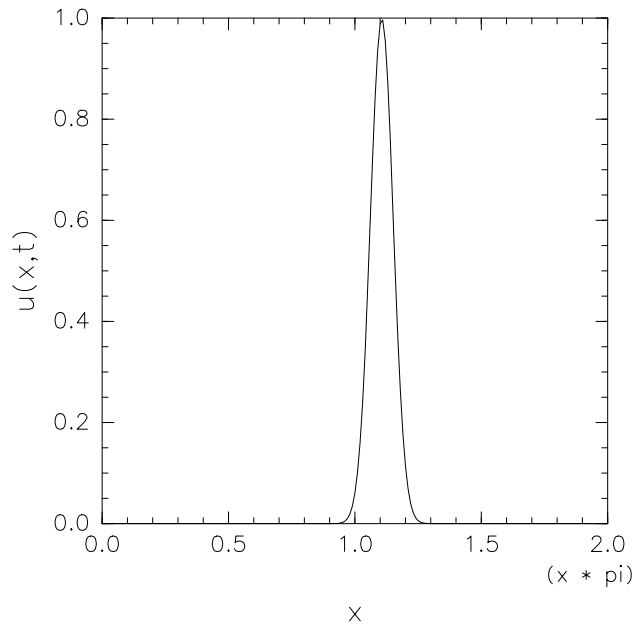


図 6.1.13: (6.0.2) 式をホインの 3 次公式で $N = 100, h = \frac{2\pi}{340}$ として計算した $t = 0.1\pi$ のときの図.

$k = N$ とすると増幅率は

$$\sqrt{1 + \frac{1}{36}(kh)^6 - \frac{1}{12}(kh)^4} = \sqrt{1 + \frac{1}{36} \left(\frac{10\pi}{17}\right)^6 - \frac{1}{12} \left(\frac{10\pi}{17}\right)^4}$$

$$\sim 1.0651$$

である. 増幅率が 1 より大きいので増幅してしまう. しかし, 1 との差があまり大きくないのであまり時間が経過していないと安定しているように見える. 同条件で $t = 2\pi$ まで計算した図が図 6.1.14 である. 図 6.1.14 は増幅しているのがよくわかる.

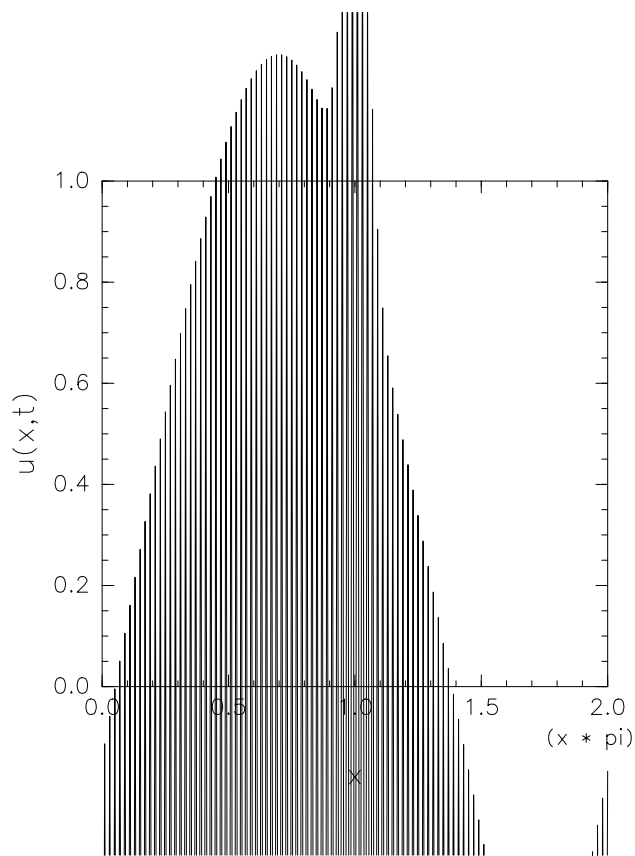


図 6.1.14: (6.0.2) 式をホインの 3 次公式で $N = 100, h = \frac{2\pi}{340}$ として計算した $t = 2\pi$ のときの図.

1 次元線形移流方程式での 3 段 3 位公式

今回のような 1 次元線形移流方程式では $-\sqrt{3} \leq kh \leq \sqrt{3}$ の範囲では安定な値が得られる. しかし, 長い積分を行うと振幅が減衰してってしまう.

6.1.4 4 段 4 位公式

4 段 4 位公式の安定条件は (5.2.16) 式である. (6.0.2) 式の場合は $a = 0, b = -kh$ なので

$$\begin{aligned} \frac{1}{576}b^8 - \frac{1}{72}b^6 &= \frac{1}{576}(-kh)^8 - \frac{1}{72}(-kh)^6 \\ &= \frac{1}{576}(-kh)^6((-kh)^2 - 8) \leq 0. \end{aligned}$$

なので $-2\sqrt{2} \leq kh \leq 2\sqrt{2}$ のとき安定している. 増幅率は (5.2.15) 式より

$$\begin{aligned} \sqrt{1 + \frac{1}{576}b^8 - \frac{1}{72}b^6} &= \sqrt{1 + \frac{1}{576}(-kh)^8 - \frac{1}{72}(-kh)^6} \\ &= \sqrt{1 + \frac{1}{576}(kh)^8 - \frac{1}{72}(kh)^6} \end{aligned}$$

である. 実際に 4 段 4 位公式である古典的ルンゲ-クッタ公式で見てみる. (6.0.2) 式をルンゲ-クッタ型公式の 4 段 4 位公式である古典的ルンゲ-クッタ公式にあてはめると,

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(\hat{u}_k) \\ &= -ikh\hat{u}_k \\ k_2 &= hf\left(\hat{u}_k + \frac{1}{2}k_1\right) \\ &= -ikh\left(\hat{u}_k + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 &= hf\left(\hat{u}_k + \frac{1}{2}k_2\right) \\ &= -ikh\left(\hat{u}_k + \frac{1}{2}k_2\right) \\ k_4 &= hf(\hat{u}_k + k_3) \\ &= -ikh(\hat{u}_k + k_3) \\ \tilde{u}_k &= \hat{u}_k + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned}$$

となる.

3 段 3 位公式のときと同様にまず 3 段 3 位公式と比べてみる. まず, $N = 100, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算する. この条件で $t = 0.12\pi$ のときの図が図 6.1.15 である.

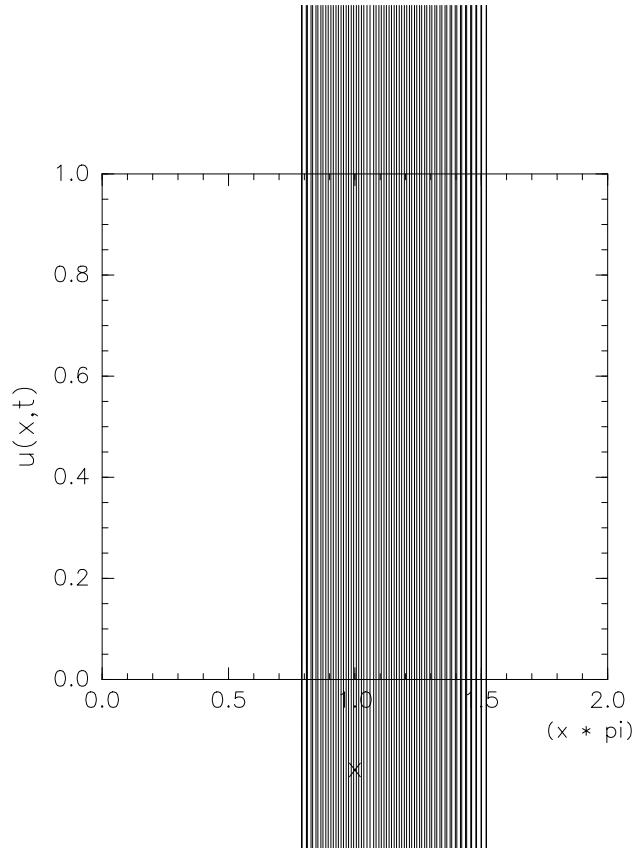


図 6.1.15: (6.0.2) 式を古典的ルンゲ-クッタ公式で $N = 100, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 0.12\pi$ のときの図.

図 6.1.15 から他の段数の公式のときよりさらに振幅が増幅しているのが分かる. $k = N$ とすると増幅率は

$$\sqrt{1 + \frac{1}{576}(kh)^8 - \frac{1}{72}(kh)^6} = \sqrt{1 + \frac{1}{576}(2\pi)^8 - \frac{1}{72}(2\pi)^6} \\ \sim 57.9962$$

である. 増幅率がとても大きくなっているので 3 段 3 位公式より早く発散する.

次に 3 段 3 位公式で行った $N = 100, h = \frac{2\pi}{340}$ の計算を行う. まず, 3 段 3 位公式と同様に $t = 0.1\pi$ のまで計算してみる. 計算した図は図 6.1.16 である.

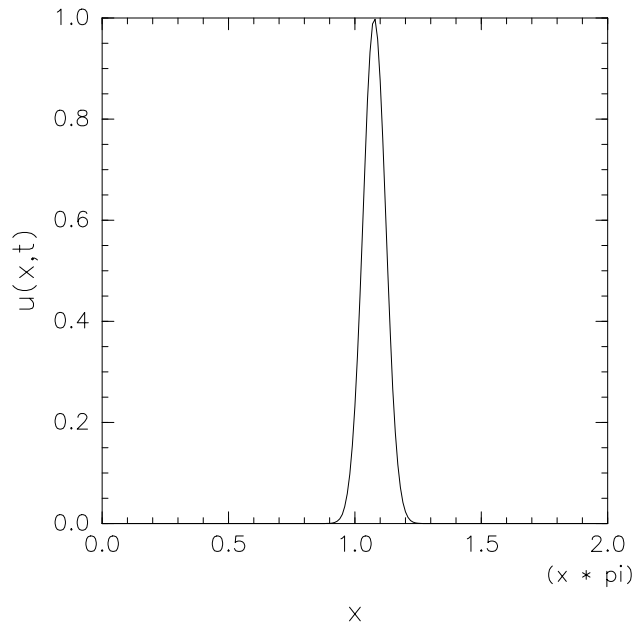


図 6.1.16: (6.0.2) 式を古典的ルンゲ-クッタ公式で $N = 100$, $h = \frac{2\pi}{340}$ として計算した $t = 0.1\pi$ のときの図.

$k = N$ とすると増幅率は

$$\sqrt{1 + \frac{1}{576}(kh)^8 - \frac{1}{72}(kh)^6} = \sqrt{1 + \frac{1}{576} \left(\frac{10\pi}{17}\right)^8 - \frac{1}{72} \left(\frac{10\pi}{17}\right)^6} \\ \sim 0.8264$$

である. 同条件の 3 段 3 位公式同様に安定している.

次に $t = 2\pi$ まで計算した. 計算した図は図 6.1.17 である. 同条件の 3 段 3 位公式は増幅してしまったが図 6.1.17 は安定していることが分かる.

3 段 3 位公式のときと同様に図 6.1.15 の時間ステップ幅を変えずに切断波数を安定領域に含まれるようにとった図が図 6.1.18 である. 図 6.1.15 では発散してしまっていたが図 6.1.18 で安定していることが分かる.

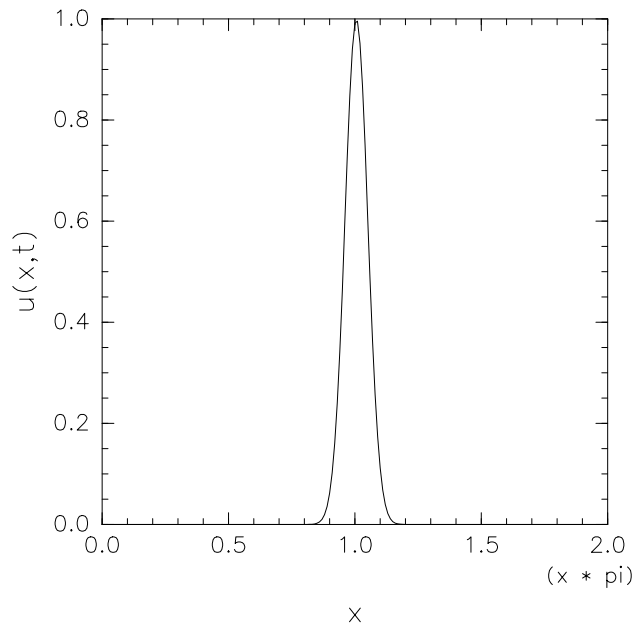


図 6.1.17: (6.0.2) 式を古典的ルンゲ-クッタ公式で $N = 100, h = \frac{2\pi}{340}$ とし計算した $t = 2\pi$ のときの図.

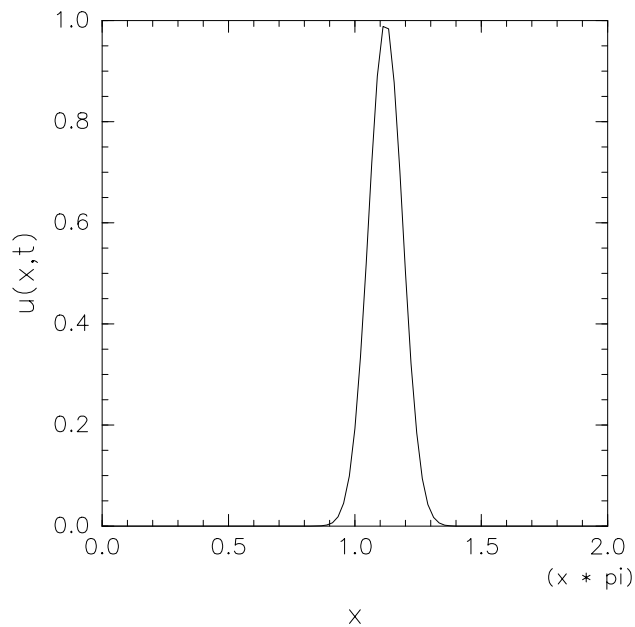


図 6.1.18: (6.0.2) 式を古典的ルンゲ-クッタ公式で $N = 45, h = \frac{2\pi}{100}$ とし計算した $t = 0.12\pi$ のときの図.

$k = N$ とすると増幅率は

$$\sqrt{1 + \frac{1}{576}(kh)^8 - \frac{1}{72}(kh)^6} = \sqrt{1 + \frac{1}{576} \left(\frac{9\pi}{10}\right)^8 - \frac{1}{72} \left(\frac{9\pi}{10}\right)^6} \\ \sim 0.9975$$

である. この条件を変えずに $t = 2\pi$ まで計算してみる. 計算した結果が図 6.1.19 である.

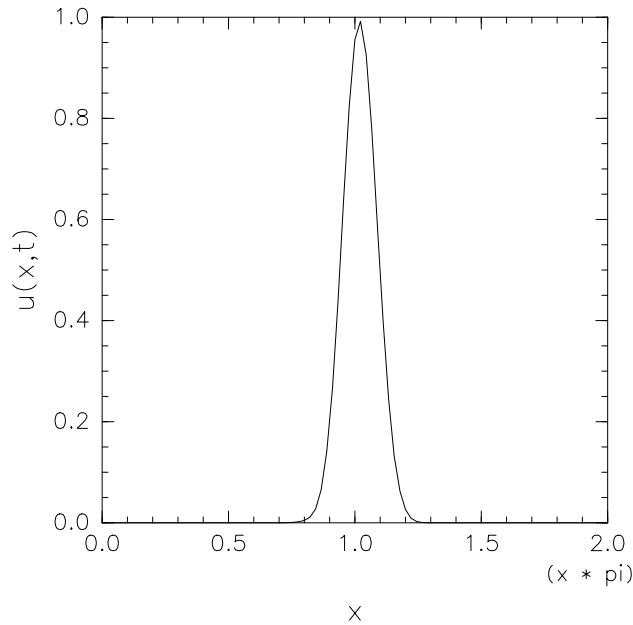


図 6.1.19: (6.0.2) 式を古典的ルンゲ-クッタ公式で $N = 45, h = \frac{2\pi}{100}$ として計算した $t = 2\pi$ のときの図.

図 6.1.19 から最後まで安定していることが分かる.

1 次元線形移流方程式の 4 段 4 位公式

今回のような 1 次元線形移流方程式では $-2\sqrt{2} \leq kh \leq 2\sqrt{2}$ の範囲で安定な値が得られる. よって, 1 次元線形移流方程式に他のルンゲ-クッタ型公式の中では最も相応しい公式である.

スペクトル法による 1 次元線形移流方程式の特徴

4 段 4 位公式である古典的ルンゲ-クッタ公式は 1 次元線形移流方程式に相応しいことがわかったので切断数と時間ステップ幅を固定して解の時間発展を解析解と比較しながら見ていく. これから $N = 100, h = \frac{2\pi}{500}$ として $t = 0, t = \pi, t = 2\pi$ の図を書く. 図の青線が解析解であり, 赤線がスペクトル法による数値解である. それぞれ, 図 6.1.20, 図 6.1.21, 図 6.1.22 である. これらの図から数値的分散も起こっておらず, 数値解と解析解がほぼ一致することが分かる. スペクトル法を用いて離散化した式は式が安定条件である限り数値的分散も起こらず解析解とほぼ一致する.

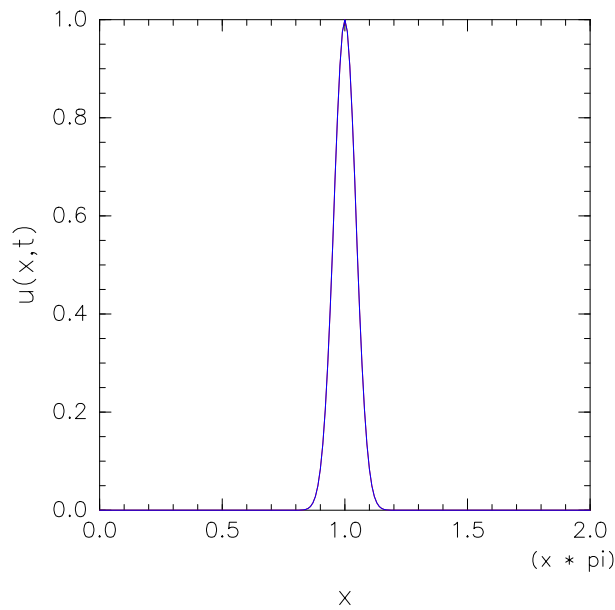


図 6.1.20: $t = 0$ のとき, 赤線: $N = 100, h = \frac{2\pi}{500}$ として古典的ルンゲ-クッタ公式で計算したスペクトル法による数値解, 青線: 解析解.

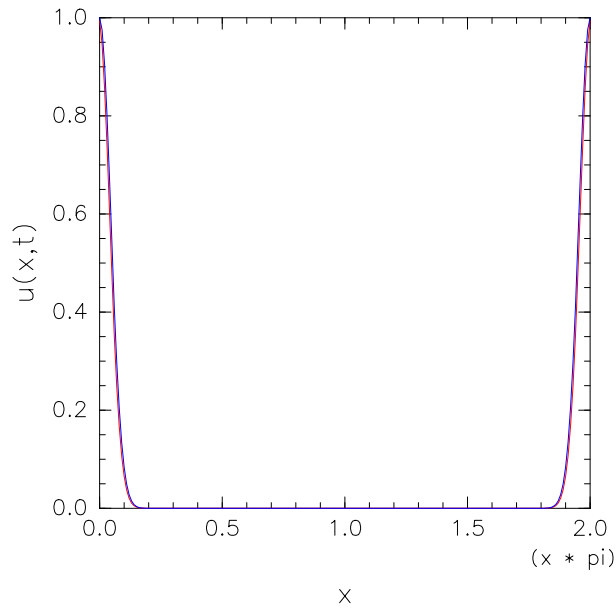


図 6.1.21: $t = \pi$ のとき, 赤線: $N = 100, h = \frac{2\pi}{500}$ として古典的ルンゲ-クッタ公式で計算したスペクトル法による数値解, 青線: 解析解.

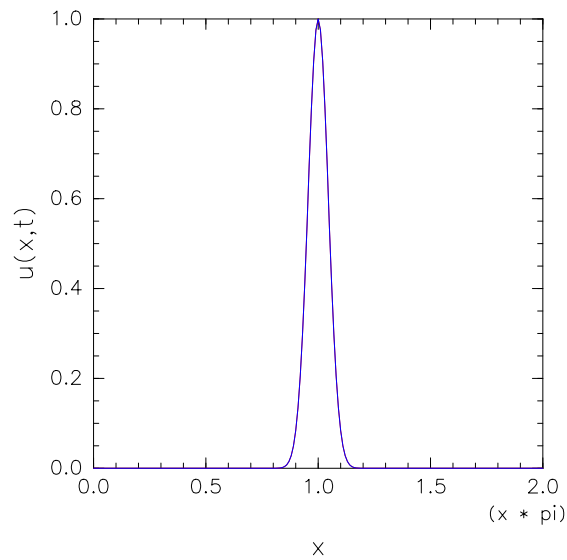


図 6.1.22: $t = 2\pi$ のとき, 赤線: $N = 100, h = \frac{2\pi}{500}$ として古典的ルンゲ-クッタ公式で計算したスペクトル法による数値解, 青線: 解析解.

第7章 まとめ

スペクトル法は空間を有限個の波数で展開する。物理量の展開には滑らかな直交関数系を用いておこなう。滑らかな関数系を用いているので空間の離散化のときの数値的分散性が起こらず、差分法に比べて高精度な解が得られる。

1次元線形移流方程式を解くときはフーリエ級数を用いて展開し、波数空間で時間積分することで非常に簡単な振動方程式に帰着できる。1次元非線形移流方程式を解くときは非線形項の評価に注意が必要だった。1次元線形移流方程式と同じように非線形項を波数空間で評価してしまうと計算コストがかかってしまう。そこで変換法と高速フーリエ変換を用いることで非線形項のみ実空間で評価することである程度低コストで計算することができる。

実際に1次元線形移流方程式をスペクトル法を用いて数値的に解いてみると図6.1.20, 図6.1.21, 図6.1.22のように厳密解とほぼ一致した。よって、スペクトル法がかなり良い精度なことが分かった。この結果には常微分方程式の安定性が大きく作用する。1次元線形移流問題での常微分方程式, 特にルンゲ-クッタ型公式の場合の安定性は段数と切断数と時間ステップ幅によってきまる。段数が1あるいは2の場合はどんな切断数や時間ステップ幅でも最後には発散してしまう。段数が3の場合は切断数を N , 時間ステップ幅を h とすると

$$0 \leq Nh \leq \sqrt{3}$$

で安定する。しかし、振幅の減衰性が見られるので長時間の積分だと振幅が厳密解より低くなってしまふ。段数が4の場合は

$$0 \leq Nh \leq 2\sqrt{2}$$

のとき安定し、厳密解と一致する。段数が5段以上は位数がそれに合わせて増えてくれない。位数が増えないと精度が良くならない。よって、スペクトル法による1次元線形移流方程式の場合はルンゲ-クッタ型公式の中では4段4位公式を用いるのが良い。

第8章 付録

A: 差分近似

$x = x_j = j\Delta x$ における $u(x)$ の微分 $\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=x_j}$ を考える. これを差分近似で表すと第2章で紹介した中心差分に加えて前方差分と後方差分がある. それぞれ

・前方差分

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=x_j} \approx \frac{u_{j+2} - 2u_{j+1} + u_j}{(\Delta x)^2}, \quad (\text{a.f1})$$

・後方差分

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=x_j} \approx \frac{u_j - 2u_{j-1} + u_{j-2}}{(\Delta x)^2} \quad (\text{a.f2})$$

となる. 中心差分, 前方差分, 後方差分の精度をそれぞれ求める..

前方差分の場合の精度

$u((j+1)\Delta x)$ の $x = x_j$ の周りのテイラー展開は,

$$u((j+1)\Delta x) = u(j\Delta x) + \left(\frac{du}{dx}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x) + \left(\frac{1}{2} \frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 + \left(\frac{1}{6} \frac{d^3u}{dx^3}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^3 + \dots \quad (\text{a.f3})$$

$u((j+2)\Delta x)$ の $\Delta x = 0$ の周りのテイラー展開は

$$u((j+2)\Delta x) = u(j\Delta x) + 2 \left(\frac{du}{dx}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x) + 2 \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 + \left(\frac{4}{3} \frac{d^3u}{dx^3}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^3 + \dots \quad (\text{a.f4})$$

(a.f3) 式を 2 倍し, (a.f4) 式から引くと,

$$\begin{aligned}
 u((j+2)\Delta x) - 2u((j+1)\Delta x) &= -u(j\Delta x) + \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 + \left(\frac{d^3u}{dx^3}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^3 \\
 &\quad + \dots \\
 u((j+2)\Delta x) - 2u((j+1)\Delta x) + u(j\Delta x) &= \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 + O((\Delta x)^3) \\
 \frac{u((j+2)\Delta x) - 2u((j+1)\Delta x) + u(j\Delta x)}{(\Delta x)^2} &= \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} + O((\Delta x)) \quad (\text{a.f5})
 \end{aligned}$$

となる. (a.f5) 式は真の解であり, (a.f1) 式は数値解である. 誤差は真の解から数値解を引くことで求められる. この誤差を R と表すと,

$$\begin{aligned}
 \epsilon &= \frac{u((j+2)\Delta x) - 2u((j+1)\Delta x) + u(j\Delta x)}{(\Delta x)^2} - \frac{u_{j+2} - 2u_{j+1} + u_j}{(\Delta x)^2} \\
 &\approx \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right) + O((\Delta x)) - \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=x_j} \\
 &= O(\Delta x)
 \end{aligned}$$

となる. よって, 前方差分の精度は Δx .

後方差分の場合の精度

$u((j-1)\Delta x)$ の $x = x_j$ の周りのテイラー展開は,

$$u((j-1)\Delta x) = u(j\Delta x) - \left(\frac{du}{dx}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x) + \left(\frac{1}{2}\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 - \left(\frac{1}{6}\frac{d^3u}{dx^3}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^3 + \dots \quad (\text{a.f6})$$

$u((j-2)\Delta x)$ の $\Delta x = 0$ の周りのテイラー展開は

$$u((j-2)\Delta x) = u(j\Delta x) - 2\left(\frac{du}{dx}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x) + 2\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 - \left(\frac{4}{3}\frac{d^3u}{dx^3}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^3 + \dots \quad (\text{a.f7})$$

(a.f6) 式を 2 倍し, (a.f7) 式から引くと,

$$\begin{aligned}
 u((j-2)\Delta x) - 2u((j-1)\Delta x) &= -u(j\Delta x) + \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right) (\Delta x)^2 - \left(\frac{d^3u}{dx^3}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^3 + \dots \\
 u(j\Delta x) - 2u((j-1)\Delta x) + u((j-2)\Delta x) &= \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 + O((\Delta x)^3) \\
 \frac{u(j\Delta x) - 2u((j-1)\Delta x) + u((j-2)\Delta x)}{(\Delta x)^2} &= \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x=j\Delta x} + O((\Delta x)) \quad (\text{a.f8})
 \end{aligned}$$

となる. R を求めると,

$$\begin{aligned} R &= \frac{u(j\Delta x) - 2u((j-1)\Delta x) + u((j-2)\Delta x)}{(\Delta x)^2} - \frac{u_j - 2u_{j-1} + u_{j-2}}{(\Delta x)^2} \\ &\approx \left(\frac{d^2u}{dx^2} \right)_{x=j\Delta x} + O((\Delta x)) - \left(\frac{d^2u}{dx^2} \right)_{x=x_j} \\ &= O(\Delta x) \end{aligned}$$

となる. よって, 後方差分の精度は Δx となる.

中心差分の場合の精度

$u((j+1)\Delta x)$ の $x = x_j$ の周りでのテイラー展開は

$$\begin{aligned} u((j+1)\Delta x) &= u(j\Delta x) + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x) + \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 \\ &\quad + \left(\frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^3 + \left(\frac{1}{24} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^4 + \dots \quad (\text{a.f9}) \end{aligned}$$

$u((j-1)\Delta x)$ の $x = x_j$ の周りのテイラー展開は,

$$\begin{aligned} u((j-1)\Delta x) &= u(j\Delta x) - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x) + \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 \\ &\quad - \left(\frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^3 + \left(\frac{1}{24} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^4 + \dots \quad (\text{a.f10}) \end{aligned}$$

(a.f9) 式と (a.f10) 式を足して,

$$\begin{aligned} u((j+1)\Delta x) + u((j-1)\Delta x) &= 2u(j\Delta x) + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 \\ &\quad + \left(\frac{1}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^4 + \dots \\ u((j+1)\Delta x) - 2u(j\Delta x) + u((j-1)\Delta x) &= \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^2 \\ &\quad + \left(\frac{1}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{x=j\Delta x} (\Delta x)^4 + O((\Delta x)^6) \\ \frac{u((j+1)\Delta x) - 2u(j\Delta x) + u((j-1)\Delta x)}{(\Delta x)^2} &= \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x=j\Delta x} + O((\Delta x)^2) \quad (\text{a.f11}) \end{aligned}$$

残差 R を求めると

$$\begin{aligned} R &= \frac{u((j+1)\Delta x) - 2u(j\Delta x) + u((j-1)\Delta x)}{(\Delta x)^2} - \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{(\Delta x)^2} \\ &\approx \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x=j\Delta x} + O((\Delta x)^2) - \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{x=x_j} \\ &= O((\Delta x)^2) \end{aligned}$$

となり、2次の中心差分近似は2次のオーダーの精度である。前方差分も後方差分も精度は1次になるので中心差分の方がより良い近似となっている。

B: e^{ikx_j} の正則性

第2章と同じように正方行列 A_{kj} を

$$A_{kj} = e^{ikx_j} \quad (k = -N, \dots, N; j = 0, \dots, 2N) \quad (\text{b.1})$$

とおく。このとき (A_{kj}) の逆行列の (j, k) 成分を A_{jk}^{-1} とすると、定義から、

$$\sum_{j=0}^{2N} A_{kj} A_{jl}^{-1} = \delta_{kl} \quad (k = -N, \dots, N; j = -N, \dots, N) \quad (\text{b.2})$$

となる。ここで δ_{kl} はクロネッカーのデルタである。 A_{jl}^{-1} を

$$\begin{aligned} A_{jl}^{-1} &= \frac{1}{2N+1} e^{-ijx_l} \\ &= \frac{1}{2N+1} e^{-ij\Delta x l} \\ &= \frac{1}{2N+1} e^{-il\Delta x j} \\ &= \frac{1}{2N+1} e^{-ilx_j} \end{aligned}$$

とすると,

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=0}^{2N} A_{kj} A_{jl}^{-1} &= \frac{1}{2N+1} \sum_{j=0}^{2N} e^{ikx_j} e^{-ilx_j} \\
 &= \frac{1}{2N+1} \sum_{j=0}^{2N} e^{i(k-l)j\Delta x} \\
 &= \frac{1}{2N+1} \sum_{j=0}^{2N} \left(e^{\frac{2\pi i(k-l)}{2N+1}} \right)^j \\
 &= \begin{cases} 1 & (k-l \equiv 0 \pmod{2N+1}) \\ \frac{e^{2\pi i(k-l)} - 1}{e^{\frac{2\pi i(k-l)}{2N+1}} - 1} & (k-l \not\equiv 0 \pmod{2N+1}) \end{cases} \quad (\text{b.3})
 \end{aligned}$$

となる^{1) 2)}. $k \neq l$ で $(k-l)$ は常に整数である. よって, 常に $e^{-2\pi i(k-l)} = 1$ となる. そのため, (b.3) 式は δ_{kl} ($k = -N, \dots, N; l = -N, \dots, N$) となり, (b.2) 式を満たす. k, l は $-N \sim N$ の任意の整数なので, (A_{kj}) は逆行列 (A_{kj}^{-1}) が存在し, (A_{kj}) は, 正則行列である.

C:離散フーリエ変換

フーリエ変換を離散化することを考える. まず, 一般的な積分

$$S = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g(x) dx \quad (\text{c.1})$$

を考える. この積分を等間隔に分点をとったリーマン和で近似してみる. J 個の分点 $x_j = \frac{2\pi j}{J}$ ($j = 0, 1, \dots, J-1$) 上での関数値 $g(x_j)$ を用いて, S を近似すると,

$$\hat{S} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} g(x_j) \quad (\text{c.2})$$

¹⁾ $a \equiv b \pmod{n}$ とは, $a-b$ が n で割り切れることを意味している.

²⁾ 途中で等比数列の和の公式 $a_n = r^{n-1}$ のとき

$$S = \frac{r^n - 1}{r - 1}$$

となることを用いている.

となる. 今, $g(x)$ として三角関数 e^{ikx} ($k = -N, \dots, N$) をとってみると (c.1) 式は三角関数の直交性より,

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g(x) dx \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ikx} dx \\ &= \begin{cases} 1 & (k = 0) \\ 0 & (k \neq 0) \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{c.3})$$

となるが, 一方, (c.2) 式の方は,

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} g(x_j) \\ &= \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} e^{ikx_j} \\ &= \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} e^{ik \frac{2\pi}{J} j} \\ &= \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \left(e^{ik \frac{2\pi}{J}} \right)^j \end{aligned}$$

と変形したとき, $r = e^{ik \frac{2\pi}{J}}$ とすると, 等比級数の和の公式により,

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \left(e^{ik \frac{2\pi}{J}} \right)^j \\ &= \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} r^j \\ &= \begin{cases} 1 & (r = 1) \\ \frac{1}{J} \frac{r^J - 1}{r - 1} & (r \neq 1) \end{cases} \end{aligned}$$

となる. $r^J = e^{ik \frac{2\pi}{J} \cdot J} = e^{i2\pi k} = 1$ より,

$$\hat{S} = \begin{cases} 1 & (r = 1) \\ \frac{1}{J} \frac{r^J - 1}{r - 1} & (r \neq 1) \end{cases} = \begin{cases} 1 & (r = 1) \\ 0 & (r \neq 1) \end{cases}. \quad (\text{c.4})$$

S と \hat{S} が一致するには (c.3) 式と (c.4) 式より,

$$r = \begin{cases} = 1 & (k = 0) \\ \neq 1 & (k \neq 0) \end{cases} \quad (\text{c.5})$$

が成立していればよいということになる. $k = 0$ のときは,

$$\begin{aligned} r &= e^{ik\frac{2\pi}{J}} \\ &= e^0 \\ &= 1 \end{aligned}$$

となって常に成立している. 一方, $k \neq 0$ のときは, $-N \leq k \leq N$ としているので, この範囲にあるすべての k について成立するためには $J > k$ となるように J をとってやればよい³⁾. J は整数なので $J \geq N + 1$ となる. まとめると, $(-N, \dots, N)$ のとき三角関数 e^{ikx} の積分は,

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ikx} dx = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} e^{ikx_j} \quad (N + 1 \leq J)$$

となる.

D: スペクトル法による1次元非線形移流方程式の保存性

(3.2.24) 式の保存量の変化をしてみる.

保存則の成立の維持

元の偏微分方程式には時間的に不変な保存量が無限にある. 保存量を求める. $F(u)$ を u の任意関数としたとき (3.2.22) 式の両辺に $\frac{\partial F(u)}{\partial u}$ を掛けると,

$$\frac{\partial F(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{dF(u)}{du} \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (\text{d.1})$$

となるが, u の関数 $G(u)$ を

$$G(u) \equiv \int^u \eta \frac{dF(\eta)}{d\eta} d\eta \quad (\text{d.2})$$

と導入する. (d.2) 式を部分積分法で積分すると,

$$\begin{aligned} G(u) &= \int^u \eta \frac{\partial F(\eta)}{\partial \eta} d\eta \\ &= [\eta F(\eta)]_0^u - \int^u F(\eta) d\eta \\ &= uF(u) - \int^u F(\eta) d\eta \end{aligned}$$

³⁾ $J \leq k$ では, $k = \pm J$ となる場合が含まれてしまう. このとき $k \neq 0$ だが $r = 1$ となってしまう (c.5) 式が成立しなくなる.

となる. $G(u)$ を x で微分すると,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial G(u)}{\partial x} &= \frac{\partial (uF(u) - \int^u F(\eta)d\eta)}{\partial x} \\
 &= \frac{\partial u}{\partial x} F(u) + u \frac{\partial F(u)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \int^u F(\eta)d\eta \\
 &= \frac{\partial u}{\partial x} F(u) + u \frac{\partial F(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial u} \int^u F(\eta)d\eta \frac{\partial u}{\partial x} \\
 &= \frac{\partial u}{\partial x} F(u) + u \frac{\partial F(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} - F(u) \frac{\partial u}{\partial x} \\
 &= u \frac{\partial F(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x}
 \end{aligned} \tag{d.3}$$

となる. (d.1) 式を変形して, (d.3) 式を代入すると,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial F(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial F(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial F(u)}{\partial t} + u \frac{\partial F(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial F(u)}{\partial t} + \frac{\partial G(u)}{\partial x} &= 0
 \end{aligned} \tag{d.4}$$

となる. (d.4) 式を $[0, 2\pi]$ で積分して u に対する周期境界条件を用いれば,

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\pi} \frac{\partial F(u)}{\partial t} dx + \int_0^{2\pi} \frac{\partial G(u)}{\partial x} dx &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{2\pi} F(u) dx + [G(u)]_{u(x,t)}^{u(x+2\pi,t)} &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{2\pi} F(u) dx + \int_{u(x,t)}^{u(x+2\pi,t)} \eta \frac{\partial F(\eta)}{\partial \eta} d\eta &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{2\pi} F(u) dx &= 0
 \end{aligned} \tag{d.5}$$

ここで, C_F を

$$C_F = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(u) dx \tag{d.6}$$

と置くと, (d.5) 式は,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{2\pi} F(u) dx &= 0 \\
 2\pi \frac{\partial C_F}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial C_F}{\partial t} &= 0
 \end{aligned}$$

となって, C_F が時刻 t に依存せず保存量であることがわかる.

特に, u を流速と見なせば, $F(u) = u$ の場合は C_F は平均運動量と見なせるし, $F(u) = \frac{1}{2}u^2$ の場合は平均エネルギーと見なせる. 平均運動量を M , 平均エネルギーを E と書くと,

$$M = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u dx, \quad (\text{d.7})$$

$$E = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} u^2 dx \quad (\text{d.8})$$

となる. よって, これらは保存量である.

M を (3.1.7) 式の展開係数で表すと,

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u dx \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k e^{ikx} dx. \end{aligned}$$

三角関数の直交性より,

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k e^{ikx} dx \\ &= \hat{u}_0 \end{aligned} \quad (\text{d.9})$$

となる. また, 同様に E を (3.1.7) 式の展開係数で表すと,

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} u^2 dx \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N \hat{u}_k \hat{u}_l e^{ikx} e^{ilx} dx. \end{aligned}$$

三角関数の直交性より,

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N \hat{u}_k \hat{u}_l e^{ikx} e^{ilx} dx \\ &= \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N \frac{1}{2} \hat{u}_k \hat{u}_l \delta_{k+l,0} \\ &= \sum_{k=-N}^N \frac{1}{2} \hat{u}_k \hat{u}_{-k} \end{aligned} \quad (\text{d.10})$$

u は実数なので,

$$\begin{aligned} E &= \sum_{k=-N}^N \frac{1}{2} \hat{u}_k \hat{u}_{-k} \\ &= \sum_{k=-N}^N \frac{1}{2} \hat{u}_k \hat{u}_k^* \\ &= \sum_{k=-N}^N \frac{1}{2} |\hat{u}_k|^2 \end{aligned}$$

となる. この M と, E は, 常微分方程式 (3.2.24) 式においても保存量である. 以下にそのことを証明する.

M の保存

(d.9) 式の時間微分をつくって (3.2.24) 式に代入すると,

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} &= \frac{d\hat{u}_0}{dt} \\ &= - \sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l\hat{u}_{-l}. \end{aligned}$$

ここで, 右辺を同じものを2つつくり, 2で割り, さらに第2項を $l = -l'$ とすると,

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} &= - \sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l\hat{u}_{-l} \\ &= -\frac{1}{2} \left(\sum_{l=-N}^N il\hat{u}_l\hat{u}_{-l} + \sum_{l'=-N}^N (-il')\hat{u}_{-l'}\hat{u}_{l'} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となるので, M が保存していることが分かる. また, (3.2.24) 式を導く前の過程に戻り, u は展開 (3.1.7) 式で表示されたとすると,

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial u}{\partial t} e^{-ikx} dx + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} e^{-ikx} dx = 0.$$

左辺第1項のみ展開すると,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial u}{\partial t} e^{-ikx} dx + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} e^{-ikx} dx &= 0 \\ \frac{d\hat{u}_k}{dt} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} e^{-ikx} dx &= 0. \end{aligned} \quad (\text{d.11})$$

(d.11) 式で $k = 0$ のとき,

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{u}_k}{dt} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} e^{-ikx} dx &= 0 \\ \frac{d\hat{u}_0}{dt} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} dx &= 0 \\ \frac{d\hat{u}_0}{dt} &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} dx\end{aligned}$$

なので,

$$\begin{aligned}\frac{dM}{dt} &= \frac{d\hat{u}_0}{dt} \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u \frac{\partial u}{\partial x} dx \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} dx \\ &= u^2(2\pi, t) - u^2(0, t) \\ &= 0\end{aligned}$$

となり, この方法でも M が保存されていることが分かる.

E の保存

M と同様に E が (3.2.24) 式でも保存していることを 2 つの方法で導く.

(d.10) 式の時間微分を作って (3.2.24) 式を代入すると,

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dt} &= \sum_{k=-N}^N \frac{1}{2} \frac{d(\hat{u}_k \hat{u}_{-k})}{dt} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=-N}^N \left(\frac{d\hat{u}_k}{dt} \hat{u}_{-k} + \frac{d\hat{u}_{-k}}{dt} \hat{u}_k \right) \\ &= -\frac{1}{2} i \sum_{k=-N}^N \left\{ \left(\sum_{l=\max(-N, -N+k)}^{\min(N, N+k)} l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \right) \hat{u}_{-k} + \left(\sum_{l=\max(-N, -N-k)}^{\min(N, N-k)} l \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_l \right) \hat{u}_k \right\}.\end{aligned}\tag{d.12}$$

ここで、右辺第1項を考えてみる。右辺第一項を変形して、

$$\sum_{k=-N}^N \sum_{l=\max(-N, -N+k)}^{\min(N, N+k)} l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k} = \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k} \quad (-N \leq k-l \leq N) \quad (\text{d.13})$$

とする。 $l = -k', k = -l'$ と置き換えたとき、

$$\sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k} \quad (-N \leq k-l \leq N) = \sum_{l'=-N}^N \sum_{k'=-N}^N -k' \hat{u}_{-l'+k'} \hat{u}_{-k'} \hat{u}_{l'} \quad (-N \leq -l'+k' \leq N)$$

となる。さらに、 $k' = k, l' = l$ と置き換えたら、

$$\sum_{l'=-N}^N \sum_{k'=-N}^N -k' \hat{u}_{-l'+k'} \hat{u}_{-k'} \hat{u}_{l'} \quad (-N \leq -l'+k' \leq N) = \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N -k \hat{u}_{k-l} \hat{u}_{-k} \hat{u}_l \quad (-N \leq k-l \leq N) \quad (\text{d.14})$$

となる。また、(d.13)式で $k-l = l'$ と置き換えたとき、

$$\sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k} \quad (-N \leq k-l \leq N) = \sum_{k=-N}^N \sum_{k-l'=-N}^N (k-l') \hat{u}_{l'} \hat{u}_{k-l'} \hat{u}_{-k} \quad (-N \leq k-(k-l') \leq N)$$

さらに、 $l' = l$ と置き換えたとき、

$$\sum_{k=-N}^N \sum_{k-l'=-N}^N (k-l') \hat{u}_{l'} \hat{u}_{k-l'} \hat{u}_{-k} \quad (-N \leq k-(k-l') \leq N) = \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N (k-l) \hat{u}_l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_{-k} \quad (-N \leq k-l \leq N) \quad (\text{d.15})$$

となる。 M の保存を示したときと同様に $\sum_{k=-N}^N \sum_{l=\max(-N, -N+k)}^{\min(N, N+k)} l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k}$ を (d.14) 式

と (d.15) 式の2つと足し合わせて3で割ると、

$$\begin{aligned} \sum_{k=-N}^N \sum_{l=\max(-N, -N+k)}^{\min(N, N+k)} l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k} &= \frac{1}{3} \sum_{k=-N}^N \sum_{l=\max(-N, -N+k)}^{\min(N, N+k)} \{l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k} + (-k) \hat{u}_{k-l} \hat{u}_{-k} \hat{u}_l \\ &\quad + (k-l) \hat{u}_l \hat{u}_{-k} \hat{u}_{k-l}\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{d.16})$$

となる. 同様にして (d.12) 式の右辺第2項を計算する. 右辺第2項を変形し,

$$\sum_{k=-N}^N \sum_{l=\max(-N, -N+k)}^{\min(N, N+k)} l \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_l \hat{u}_k = \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N l \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_l \hat{u}_k \quad (-N \leq k-l \leq N) \quad (\text{d.17})$$

とする. (d.17) 式で $l = -k - l'$, $k = -l'$ と置き換えたとき,

$$\sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N l \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_l \hat{u}_k \quad (-N \leq k-l \leq N) = \sum_{l'=-N}^N \sum_{k'=-N}^N -k' \hat{u}_{k'+l'} \hat{u}_{-k'} \hat{u}_{-l'} \quad (-N \leq l' + k' \leq N)$$

となる. さらに, $k' = -k$, $l' = -l$ と置き換えたら,

$$\sum_{l'=-N}^N \sum_{k'=-N}^N -k' \hat{u}_{k'+l'} \hat{u}_{-k'} \hat{u}_{-l'} \quad (-N \leq l' + k' \leq N) = \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N k \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_k \hat{u}_l \quad (-N \leq k-l \leq N) \quad (\text{d.18})$$

となる. また, (d.17) 式で $-k-l = l'$ と置き換えたとき,

$$\sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N l \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_l \hat{u}_k \quad (-N \leq k-l \leq N) = \sum_{k=-N}^N \sum_{k-l'=-N}^N (k+l') \hat{u}_{l'} \hat{u}_{-k-l'} \hat{u}_k \quad (-N \leq -k + (k+l') \leq N)$$

さらに, $l' = l$ と置き換えたとき,

$$\sum_{k=-N}^N \sum_{k-l'=-N}^N (-k-l') \hat{u}_{l'} \hat{u}_{-k-l'} \hat{u}_k \quad (-N \leq -k + (k+l') \leq N) = \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N (-k-l) \hat{u}_l \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_k \quad (-N \leq -k-l \leq N) \quad (\text{d.19})$$

となる. $\sum_{k=-N}^N \sum_{l=\max(-N, -N-k)}^{\min(N, N-k)} l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k}$ を (d.18) 式と (d.19) 式と足し合わせて, 3 で割ると,

$$\begin{aligned} \sum_{k=-N}^N \sum_{l=\max(-N, -N+k)}^{\min(N, N+k)} l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k} &= \frac{1}{3} \sum_{k=-N}^N \sum_{l=\max(-N, -N-k)}^{\min(N, N-k)} \{ l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \hat{u}_{-k} + k \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_k \hat{u}_l \\ &\quad + (-k-l) \hat{u}_l \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_k \} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{d.20})$$

となる. (d.12) 式に (d.15) 式と (d.20) 式を代入すると,

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= -\frac{1}{2}i \sum_{k=-N}^N \left\{ \left(\sum_{l=\max(-N, -N+k)}^{\min(N, N+k)} l \hat{u}_{k-l} \hat{u}_l \right) \hat{u}_{-k} + \left(\sum_{l=\max(-N, -N-k)}^{\min(N, N-k)} l \hat{u}_{-k-l} \hat{u}_l \right) \hat{u}_k \right\} \\ &= 0 \end{aligned}$$

となり, エネルギーも保存している. E にも別の方法で保存性が証明できる. E の時間微分の途中式に (d.11) 式を適用すると,

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{k=-N}^N \left(\frac{d\hat{u}_k}{dt} \hat{u}_{-k} + \frac{d\hat{u}_{-k}}{dt} \hat{u}_k \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=-N}^N \left(\hat{u}_{-k} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (-u) \frac{\partial u}{\partial x} e^{-ikx} dx + \hat{u}_k \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (-u) \frac{\partial u}{\partial x} e^{ikx} dx \right). \end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned} \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k e^{ikx} &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_{-k} e^{-ikx} \\ &= u \end{aligned}$$

なので,

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{k=-N}^N \left(\hat{u}_{-k} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (-u) \frac{\partial u}{\partial x} e^{-ikx} dx + \hat{u}_k \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (-u) \frac{\partial u}{\partial x} e^{ikx} dx \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{k=-N}^N (-u) \frac{\partial u}{\partial x} \hat{u}_{-k} e^{-ikx} dx + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{k=-N}^N (-u) \frac{\partial u}{\partial x} \hat{u}_k e^{ikx} dx \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (-u) \frac{\partial u}{\partial x} u dx + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (-u) \frac{\partial u}{\partial x} u dx \right) \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u^2 \frac{\partial u}{\partial x} dx \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{3} \frac{\partial u^3}{\partial x} dx \\ &= -\frac{1}{6\pi} (u^3(2\pi, t) - u^3(0, t)) = 0 \end{aligned}$$

となり, E の保存性を証明できる.

E の保存が成立していることは, スペクトル法による数値解が発散しないことの保証になる. しかし, M についても E についても 3 次以上の保存量については今までの様な証明ができないので, スペクトル法による離散化でも保存性が崩れてしまう.

E: 数値解法の分類のための用語

・ 段階数 (step)

次の時刻における近似値 x_{n+1} を求めるために, 過去の時刻で計算された値 $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-m+1}$ (m 個) を利用する場合, 利用する個数 m を段階数という. $m = 1$ の場合を1段階法 (ルンゲ-クッタ型公式など), $m \geq 2$ の場合を多段階法 (アダムズ-バッシュフォース公式など) と大別されている.

・ 段数 (stage)

x_n から x_{n+1} を計算するのに必要な $f(x, t)$ の評価回数を段数という. 通常の問題ではこの段数が計算量の目安になる⁴⁾.

・ 位数 (order)

真の解と数値解で展開した時何次の項まで一致するかということ. そのときの次数を位数という. 位数は計算精度の目安になる. 例えば $t_{n+1} = t_n + h$ のとき, 真の解のテイラー展開は,

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2}x''(t_n) + \dots$$

となるが, 数値解法で得られた近似解のテイラー展開は

$$x_{n+1} = x_n + hx'_n + \frac{h^2}{2}x''_n + \dots$$

となり, 両者の展開の形が q 次の項まで一致するとき, この数値計算法は q 位の算法であると呼ぶ. このときの q が位数である. よって, q 位の算法の1ステップあたりの打ち切り誤差は h^{q+1} のオーダーになる. t_0 からスタートして, ある t での x を求めたい場合, ある t での x を x_t として, テイラー展開を1次まで求めると,

$$\begin{aligned} x_t &\approx x_{t-1} + hx'_{t-1} \\ &\approx x_{t-2} + hx'_{t-2} + hx'_{t-1}. \end{aligned}$$

この展開を x_0 まで行くと,

$$x_t \approx x_0 + hx'_0 + hx'_1 + \dots + hx'_{t-2} + hx'_{t-1}$$

⁴⁾ $f(x, t)$ の評価にもっとも計算コストがかかるため

となってステップは t 個 ($0 \sim t-1$). さらに $t = t_t$ とすると,

$$\begin{aligned} t_t &= t_{t-1} + h \\ &= t_{t-2} + 2h. \end{aligned}$$

この展開を t_0 まで行くと,

$$t_t = t_0 + th$$

となって

$$\frac{t_t - t_0}{h} = t$$

となりステップ数と同じになる. よって, ステップ数は $\frac{t - t_0}{h}$ となってステップ幅 h に反比例するので, t における累積の打切り誤差は, $h^{q+1} \times h^{-1} = h^q$ のオーダーになる⁵⁾.

陽的/陰的 (explicit/implicit)

計算法の「計算しやすさ」を表す一つのキーワードであり, 「計算しやすい」計算法は陽的解法であり, 「計算しづらい」計算法は陰的解法である.

陽的

陽的解法は求めるべき値を既知の値のみで求める解法.

$$x_{n+1} = F(x_n, x_{n-1}, \dots)$$

のような形で表せる. 次のステップの x の値が既知の x の値のみの関数として計算できるので直ちに計算できる.

陰的

陰的解法は求めるべき値が右辺にも入っているような解法である.

$$x_{n+1} = F(x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, \dots)$$

のような形で表せる. x_{n+1} を求めるには方程式を解く必要があり, 何らかの工夫が必要になる

⁵⁾例えば h を半分にすれば, 時刻 t での累積打切り誤差は $\left(\frac{1}{2}\right)^q$ となる.

F: x の高階微分

x の q 階微分は

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{\partial}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial}{\partial x} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}\end{aligned}$$

を用いて,

$$x_n^{(q)} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial}{\partial x} \right)^{q-1} f$$

となる. ここでは x の n 階微分 ($n = 2, 3, 4$) を求める.

x の 2 階微分

$n = 2$ のときは

$$\begin{aligned}x'' &= \frac{dx'}{dt} \\ &= \frac{df}{dt} \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial}{\partial x} \right) f\end{aligned}\tag{f.1}$$

となる.

x の3階微分 $n = 3$ のときは

$$\begin{aligned}
x''' &= \frac{dx''}{dt} \\
&= \frac{d\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial}{\partial x}\right) f}{dt} \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 f \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}\right) f \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial}{\partial t}\right) + f \frac{\partial}{\partial x} \left(f \frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(f \frac{\partial}{\partial x}\right) + f \frac{\partial}{\partial x} \left(f \frac{\partial}{\partial x}\right)\right) f \\
&= \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + f \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} + f \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} + f \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + f^2 \frac{\partial}{\partial x^2}\right) f \\
&= f_t^2 + f_t f_x + f f_x^2 + f^2 f_{x^2}. \tag{f.2}
\end{aligned}$$

途中で x と t は独立なので $f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial t} = f \frac{\partial^2 f}{\partial t \partial x} = 0$ となることを用いた.

 x の4階微分 $n = 4$ のときは

$$\begin{aligned}
x'''' &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}\right)^3 f \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 f \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + f \frac{\partial}{\partial x \partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial t \partial x} + f \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + f^2 \frac{\partial}{\partial x^2}\right) f \\
&= \left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^3 + f \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(f_t \frac{\partial}{\partial x}\right) + f \frac{\partial}{\partial x} \left(f_t \frac{\partial}{\partial x}\right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial}{\partial t} \left(f f_x \frac{\partial}{\partial x}\right) + f \frac{\partial}{\partial x} \left(f f_x \frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(f^2 \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right) + f \frac{\partial}{\partial x} \left(f^2 \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right)\right) f \\
&= \frac{\partial^3 f}{\partial t^3} + f_t^2 \frac{\partial f}{\partial x} + f f_t \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + f_x f_t \frac{\partial f}{\partial x} + f f_x^2 \frac{\partial f}{\partial x} + f^2 f_x \frac{\partial f}{\partial x} + f^2 f_x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \\
&\quad + 2f f_t \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f^2 f_x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + f^3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \\
&= f^3 f_{x^3} + f_t^3 + f_x^2 f_t + f f_x^3 + f_x f_t^2 + 3f f_{x^2} f_t + 4f^2 f_{x^2} f_x. \tag{f.3}
\end{aligned}$$

途中で x と t は独立なので $\frac{\partial f}{\partial x \partial t} = \frac{\partial f}{\partial t \partial x} = 0$ となることを用いた.

G:他のルンゲ-クッタ型公式

ルンゲ-クッタ型公式は本文で取り上げた以外にもそれぞれの段数で別の公式が存在する.

2段2位公式

ルンゲ-クッタ型公式の2段2位公式の条件式は本文より

$$\begin{aligned}\omega_1 + \omega_2 &= 1, \\ \omega_2 \alpha_{21} &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

である. この条件式を

$$\begin{aligned}\omega_1 &= \frac{1}{2}, \omega_2 = \frac{1}{2}, \\ c_2 &= \alpha_{21} = 1\end{aligned}$$

と選ぶ. この場合の対応する公式の形は,

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(x_n, t_n), \\ k_2 &= hf(x_n + k_1, t + h), \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2)\end{aligned}$$

となる. この形をホイン法または, 修正オイラー法と呼ぶ.

3段3位公式

ルンゲ-クッタ型公式の3段3位公式の条件式は本文より

$$\begin{aligned}\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 &= 1, \\ \omega_2 c_2 + \omega_3 c_3 &= \frac{1}{2}, \\ c_3^2 \omega_3 + c_2^2 \omega_2 &= \frac{1}{3}, \\ \omega_3 \alpha_{32} c_2 &= \frac{1}{6}\end{aligned}$$

である. この条件式を

$$\begin{aligned}\omega_1 &= \frac{1}{6}, & \omega_2 &= \frac{2}{3}, & \omega_3 &= \frac{1}{6}, \\ c_2 &= \frac{1}{2}, & c_3 &= 1, \\ \alpha_{32} &= 2, \\ \alpha_{21} &= c_2 = \frac{1}{2}, \\ \alpha_{31} &= c_3 - \alpha_{32} = -1\end{aligned}$$

と選ぶ. このとき,

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(x_n, t_n), \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}k_1, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\ k_3 &= hf(x_n - k_1 + 2k_2, t_n + h), \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3).\end{aligned}$$

この3段3位の公式をクッタの3次公式と呼ぶ.

4段4位公式

ルンゲ-クッタ型公式の3段3位公式の条件式は本文より

$$\begin{aligned}\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 &= 1, \\ c_2\omega_2 + c_3\omega_3 + c_4\omega_4 &= \frac{1}{2}, \\ c_2^2\omega_2 + c_3^2\omega_3 + c_4^2\omega_4 &= \frac{1}{3}, \\ \alpha_{32}c_2\omega_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)\omega_4 &= \frac{1}{6}, \\ c_2^3\omega_2 + c_3^3\omega_3 + c_4^3\omega_4 &= \frac{1}{4}, \\ \alpha_{32}\alpha_{43}c_2\omega_4 &= \frac{1}{24}, \\ \alpha_{32}c_2c_3\omega_3 + (\alpha_{42}c_2 + \alpha_{43}c_3)c_4\omega_4 &= \frac{1}{8}, \\ \alpha_{32}c_2^2\omega_3 + (\alpha_{42}c_2^2 + \alpha_{43}c_3^2)\omega_4 &= \frac{1}{12}\end{aligned}$$

である.

クッタの $\frac{3}{8}$ 公式

クッタの条件式を

$$\begin{aligned}\omega_1 &= \frac{1}{8}, \omega_2 = \frac{3}{8}, \omega_3 = \frac{3}{8}, \omega_4 = \frac{1}{8} \\ c_2 &= \frac{1}{3}, c_3 = \frac{2}{3}, c_4 = 1, \\ \alpha_{21} &= \frac{1}{3}, \\ \alpha_{31} &= -\frac{1}{3}, \alpha_{32} = 1, \\ \alpha_{41} &= 1, \alpha_{42} = -1, \alpha_{43} = 1,\end{aligned}$$

の様にする。このとき、具体的な公式の形は

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(x_n, t_n), \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{3}k_1, t_n + \frac{1}{3}h\right), \\ k_3 &= hf\left(x_n - \frac{1}{3}k_1 + k_2, t_n + \frac{2}{3}h\right), \\ k_4 &= hf(x_n + k_1 - k_2 + k_3, t_n + h), \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4)\end{aligned}$$

となる。この式はクッタの $\frac{3}{8}$ 公式と呼ばれる。

ルンゲ クッタ ギル公式

x, f が N 次元のベクトルである場合, (5.1.6) 式を計算機プログラムとして実装するには $O(4N)$ の記憶領域が必要になる⁶⁾. 4 段公式の一般形を書きかえると

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_n, t_n), \\
\tilde{x}_1 &= x_n + \alpha_{21}k_1, \\
k_2 &= hf(\tilde{x}_1, t_n + c_2h), \\
\tilde{x}_2 &= \tilde{x}_1 + (\alpha_{31} - \alpha_{21})k_1 + \alpha_{32}k_2, \\
k_3 &= hf(\tilde{x}_2, t_n + c_3h), \\
\tilde{x}_3 &= \tilde{x}_2 + (\alpha_{41} - \alpha_{31})k_1 + (\alpha_{42} - \alpha_{32})k_2 + \alpha_{43}k_3, \\
k_4 &= hf(\tilde{x}_3, t_n + c_4h), \\
x_{n+1} &= \tilde{x}_3 + (\omega_1 - \alpha_{41})k_1 + (\omega_2 - \alpha_{42})k_2 + (\omega_3 - \alpha_{43})k_3 + \omega_4k_4
\end{aligned} \tag{g.1}$$

となる. ここで, もし2つの行ベクトル $(\omega_1 - \alpha_{41}, \omega_2 - \alpha_{42})$ と $(\alpha_{41} - \alpha_{31}, \alpha_{42} - \alpha_{32})$ とが平行で,

$$(\omega_1 - \alpha_{41}, \omega_2 - \alpha_{42}) = \beta(\alpha_{41} - \alpha_{31}, \alpha_{42} - \alpha_{32}) \tag{g.2}$$

と書けるとした場合, (g.1) 式の計算は,

$$\begin{aligned}
r_1 &= hf(x_n, t_n), \\
\tilde{x}_1 &= x_n + \alpha_{21}r_1, \\
k_2 &= hf(\tilde{x}_1, t_n + c_2h), \\
\tilde{x}_2 &= \tilde{x}_1 + (\alpha_{31} - \alpha_{21})r_1 + \alpha_{32}k_2, \\
r_2 &= (\alpha_{41} - \alpha_{31})r_1 + (\alpha_{42} - \alpha_{32})k_2, \\
k_3 &= hf(\tilde{x}_2, t_n + c_3h), \\
\tilde{x}_3 &= \tilde{x}_2 + r_2 + \alpha_{43}k_3, \\
r_3 &= \beta r_2 + (\omega_3 - \alpha_{43})k_3, \\
k_4 &= hf(\tilde{x}_3, t_n + c_4h), \\
x_{n+1} &= \tilde{x}_3 + r_3 + \omega_4k_4
\end{aligned} \tag{g.3}$$

⁶⁾ x_n を格納する領域が N 個, 毎回 $k_i (i = 1, \dots, 4)$ を格納する領域が N 個 毎回 $x_n + \frac{k_1}{2}$ などの f の引数を格納する領域 N 個, 毎回 k_i が求まるたびに $x_{n+1} = x_n + \frac{k_1}{6}$ などとして x_{n+1} を更新していく為の領域 N 個で合計 $O(4N)$ になる. これは k で先に x_{n+1} を計算することで k の領域を節約することでできる. つまり x_n で引数の領域に k_1 を計算し, k_1 を k の領域に書く. 次に k_1 を x_{n+1} の式に先に代入し, k_1 で引数の領域に k_2 を計算し, k_2 を k_1 の記憶領域に重ねる. それを繰り返すことで節約するということ.

の手順で実行できる. この場合, 各 $r_i, \tilde{x}_i (i = 1, 2, 3)$, および $k_j (j = 2, 3, 4)$ は, 添字の成分を捨てることのできるのと同じ記憶領域を使いまわすことができる. そのため記憶領域が $O(3N)$ で済む. クッタの条件式 (5.1.5) 式 of the form (g.2) 式 of the conditions to be satisfied as ω_3 is determined, 2 次方程式

$$18\omega_3^2 - 12\omega_3 + 1 = 0$$

が得られ, $\omega_3 = \frac{(1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}})}{3}$ となる⁷⁾. 以下すべて複号同順として書くと,

$$\omega_2 = \frac{1}{3} \left(1 \mp \sqrt{\frac{1}{2}} \right),$$

$$\alpha_{31} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{2}},$$

$$\alpha_{32} = 1 \mp \sqrt{\frac{1}{2}},$$

$$\alpha_{41} = 0,$$

$$\alpha_{42} = \mp \sqrt{\frac{1}{2}},$$

$$\alpha_{32} = 1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}}$$

⁷⁾(g.2) 式より

$$(\omega_1 - \alpha_{41}) = \beta(\alpha_{41} - \alpha_{31}), \quad (1)$$

$$(\omega_2 - \alpha_{42}) = \beta(\alpha_{42} - \alpha_{32}). \quad (2)$$

(5.1.5) 式より, $\omega_1 = \frac{1}{6}$, $\alpha_{41} = 0$, $\alpha_{31} = \frac{3\omega_3 - 1}{6\omega_3}$ なので, (1) は,

$$\begin{aligned} \frac{1}{6} &= -\beta \frac{3\omega_3 - 1}{6\omega_3} \\ \beta &= \frac{\omega_3}{1 - 3\omega_3}. \end{aligned} \quad (3)$$

(5.1.5) 式より, $\omega_2 = \frac{2}{3} - \omega_3$, $\alpha_{42} = 1 - 3\omega_3$, $\frac{1}{6\omega_3}$ であり, さらに (3) も用いると (2) は,

$$-\frac{1}{3} + 2\omega_3 = (1 - 3\omega_3)\beta - \frac{\beta}{6\omega_3}$$

$$-\frac{1}{3} + 2\omega_3 = \omega_3 + \frac{1}{6(3\omega_3 - 1)}$$

$$2(3\omega_3 - 1)^2 = 1$$

$$18\omega_3^2 + 12\omega_3 + 1 = 0$$

となる.

となつて, (g.2) 式の中の β は

$$\beta = \mp \frac{\sqrt{2}}{3} \left(1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}} \right)$$

となる. よつて, (g.3) 式は

$$\begin{aligned} r_1 &= hf(x_n, t_n), \\ \tilde{x}_1 &= x_n + \frac{r_1}{2}, \\ k_2 &= hf\left(\tilde{x}_1, t_n + \frac{h}{2}\right), \\ \tilde{x}_2 &= \tilde{x}_1 + \left(-1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}}\right) r_1 + \left(1 \mp \sqrt{\frac{1}{2}}\right) k_2, \\ r_2 &= \left(\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{2}}\right) r_1 - k_2, \\ k_3 &= hf\left(\tilde{x}_2, t_n + \frac{h}{2}\right), \\ \tilde{x}_3 &= \tilde{x}_2 + r_2 + \left(1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}}\right) k_3, \\ r_3 &= \mp \frac{\sqrt{2}}{3} \left(1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}}\right) r_2 + \frac{2}{3} \left(-1 \mp \sqrt{\frac{1}{2}}\right) k_3, \\ k_4 &= hf(\tilde{x}_3, t_n + h), \\ x_{n+1} &= \tilde{x}_3 + r_3 + \frac{k_4}{6} \end{aligned}$$

と書ける. これを

$$r_1 = q_1, \quad r_2 = - \left(1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}}\right) q_2, \quad r_3 = - \frac{q_3}{3}$$

と書きかえると,

$$\begin{aligned}
 q_1 &= hf(x_n, t_n), \\
 \tilde{x}_1 &= x_n + \frac{q_1}{2}, \\
 k_2 &= hf\left(\tilde{x}_1, t_n + \frac{h}{2}\right), \\
 \tilde{x}_2 &= \tilde{x}_1 + \left(1 \mp \sqrt{\frac{1}{2}}\right)(k_2 - q_1), \\
 q_2 &= q_1 + \left(1 \mp \sqrt{\frac{1}{2}}\right)(2k_2 - 3q_1), \\
 k_3 &= hf\left(\tilde{x}_2, t_n + \frac{h}{2}\right), \\
 \tilde{x}_3 &= \tilde{x}_2 + \left(1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}}\right)(k_3 - q_2), \\
 q_3 &= q_2 + \left(1 \pm \sqrt{\frac{1}{2}}\right)(2k_3 - 3q_2), \\
 k_4 &= hf(\tilde{x}_3, t_n + h), \\
 x_{n+1} &= \tilde{x}_3 + \frac{k_4 - 2q_3}{6}
 \end{aligned} \tag{g.3}$$

と対称性が見やすい形に変形できる。(g.3)式の複号の内上側を選んだもの⁸⁾をルンゲ-クッタ-ギル公式と呼ばれる。これは記憶領域が $O(3N)$ 個なので記憶領域が潤沢に取れなかった時代に重宝されていた。しかし、公式自体は4位で古典的ルンゲ-クッタ公式と同じであり、精度が特に優れているわけではないので記憶領域が比較的潤沢に利用できるようになった現在ではそれほど大きな存在意義はない。ただ、現在でも非常に大規模な数値計算においては利用されている。

H: 多段階法

アダムズ バッシュフォース公式

多段階法について考えてみる。 $x(t)$ の $t = t_n$ のまわりでのテイラー展開は、 $x_n = x(t_n)$ として

$$x(t_n + h) = x_n + hf(x_n, t_n) + \frac{1}{2}h^2 f'(x_n, t_n) + \dots$$

⁸⁾複号の片方だけを積極的に選択する理由はない

と表される. ここで $\dot{f} = \frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial f}{\partial x} \right)$ としている. ルンゲ-クッタ公式では \dot{f}, \ddot{f}, \dots を (x_n, t_n) の値をずらして f を評価することで求めたが, 過去に計算された f の値を用いて求める.

アダムズ-バッシュフォース公式の2位公式

$t_{n-1} = t_n - h$ での x の値が $O(h^2)$ の誤差で x_{n-1} と求まっているとき, f の値を $f_{n-1} = f(x_{n-1}, t_{n-1})$ として, 2位までのテイラー展開をしたら

$$\begin{aligned} f_{n-1} &= f(x_{n-1}, t_{n-1}) \\ &= f(x(t_n - h), t_n - h) \\ &= f(x_n - hf_n + O(h^2), t_n - h) \\ &= f_n - hf_n \frac{\partial f_n}{\partial x_n} - h \frac{\partial f_n}{\partial t_n} + O(h^2) \\ &= f_n - hf_n' + O(h^2) \\ hf_n' &= f_n - f_{n-1} + O(h^2) \end{aligned}$$

が得られる. ここで $f_n = f(x_n, t_n)$ としている. これを $x(t)$ のテイラー展開に代入すると,

$$\begin{aligned} x(t_n + h) &= x(t_n) + hf_n + \frac{1}{2}h^2 \dot{f}_n + O(h^3) \\ &= x(t_n) + hf_n + \frac{h}{2}hf_n' + O(h^3) \\ &= x(t_n) + hf_n + \frac{h}{2}(f_n - f_{n-1} + O(h^2)) + O(h^3) \\ &= x(t_n) + h \left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1} \right) + O(h^3) \end{aligned}$$

となる. よって,

$$x_{n+1} = x_n + h \left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1} \right).$$

これが2位のアダムズ-バッシュフォース公式である.

アダムズ-バッシュフォース公式の3位公式

2位と同様にして3位公式を求める.

f_{n-1} を 2 位までテイラー展開すると,

$$\begin{aligned}
 f_{n-1} &= f(x_{n-1}, t_{n-1}) \\
 &= f(x(t_n - h), t_n - h) \\
 &= f\left(x_n - hf_n + \frac{h^2}{2}\dot{f}_n + O(h^3), t_n - h\right) \\
 &= f_n - hf_n \frac{\partial f_n}{\partial x_n} - h \frac{\partial f_n}{\partial t_n} + \frac{h^2}{2}\dot{f}_n \frac{\partial f_n}{\partial x_n} + \frac{\left(-hf_n + \frac{h^2}{2}\dot{f}_n\right)^2}{2} \frac{\partial^2 f_n}{\partial x_n^2} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 f_n}{\partial t_n^2} + O(h^3) \\
 &= f_n - hf_n + \frac{h^2}{2}\left(\dot{f}f_x + f^2 f_{x^2} + f_{t^2}\right) + O(h^3) \\
 &= f_n - hf_n + \frac{h^2}{2}\left(f f_x^2 + f_x f_t + f^2 f_{x^2} + f_{t^2}\right) + O(h^3) \\
 &= f_n - hf_n + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n + O(h^3) \\
 hf_n &= f_n - f_{n-1} + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n + O(h^3). \tag{h.1}
 \end{aligned}$$

途中で簡単のために $f(x_n, t_n) = f$, $\frac{\partial f(x_n, t_n)}{\partial x_n} = f_x$, $\frac{\partial f(x_n, t_n)}{\partial t_n} = f_t$, $\frac{\partial^2 f_n}{\partial x_n^2} = f_{x^2}$, $\frac{\partial^2 f_n}{\partial t_n^2} = f_{t^2}$ とした. さらに f_{n-2} に対して同様にテイラー展開すると (h.1) 式の h を $2h$ に変えるだけなので,

$$\begin{aligned}
 f_{n-2} &= f(x_{n-2}, t_{n-2}) \\
 &= f(x(t_n - 2h), t_n - 2h) \\
 &= f\left(x_n - hf_n + \frac{4h^2}{2}\dot{f}_n + O(h^3), t_n - 2h\right) \\
 &= f_n - 2hf_n + \frac{4h^2}{2}\ddot{f}_n + O(h^3) \\
 h^2\ddot{f}_n &= -\frac{f_n}{2} + \frac{f_{n-2}}{2} + hf_n + O(h^3) \tag{h.2}
 \end{aligned}$$

となる. (h.2) 式に (h.1) 式を代入すると,

$$\begin{aligned}
 h^2\ddot{f}_n &= -\frac{f_n}{2} + \frac{f_{n-2}}{2} + hf_n + O(h^3) \\
 &= f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2} + O(h^3). \tag{h.3}
 \end{aligned}$$

(h.1) 式に (h.3) 式を代入すると,

$$\begin{aligned}
 hf_n &= f_n - f_{n-1} + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n + O(h^3) \\
 &= \frac{3}{2}f_n - 2f_{n-1} + \frac{1}{2}f_{n-2} + O(h^3). \tag{h.4}
 \end{aligned}$$

$x(t)$ の3位までのテイラー展開に代入すると,

$$\begin{aligned}x(t_n + h) &= x(t_n) + hf_n + \frac{1}{2}h^2 \dot{f}_n + \frac{1}{6}h^3 \ddot{f}_n + O(h^4) \\&= x(t_n) + hf_n + \frac{h}{2}hf_n + \frac{h}{6}h^2 \ddot{f}_n + O(h^4) \\&= x(t_n) + hf_n + \frac{h}{2} \left(\frac{3}{2}f_n - 2f_{n-1} + \frac{1}{2}f_{n-2} + O(h^3) \right) \\&\quad + \frac{h}{6} (f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2} + O(h^3)) + O(h^4) \\&= x(t_n) + \frac{h}{12} (23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}) + O(h^4)\end{aligned}$$

となる. よって,

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{12} (23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}).$$

これが3位のアダムズ バッシュフォース公式である.

アダムズ バッシュフォース公式の 4 位公式

同様に 4 位公式を求める.

f_{n-1} を 3 位までテイラー展開すると,

$$\begin{aligned}
 f_{n-1} &= f(x_{n-1}, t_{n-1}) \\
 &= f(x(t_n - h), t_n - h) \\
 &= f\left(x_n - hf_n + \frac{h^2}{2}\dot{f}_n + \frac{h^3}{6}\ddot{f}_n + O(h^4), t_n - h\right) \\
 &= f_n - hf_n \frac{\partial f_n}{\partial x_n} - h \frac{\partial f_n}{\partial t_n} + \frac{h^2}{2}\dot{f}_n \frac{\partial f_n}{\partial x_n} + \frac{h^3}{6}\ddot{f}_n \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \\
 &\quad + \frac{\left(-hf_n + \frac{h^2}{2}\dot{f}_n - \frac{h^3}{6}\ddot{f}_n\right)^2}{2} \frac{\partial^2 f_n}{\partial x_n^2} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 f_n}{\partial t_n^2} \\
 &\quad + \frac{\left(-hf_n + \frac{h^2}{2}\dot{f}_n - \frac{h^3}{6}\ddot{f}_n\right)^3}{6} \frac{\partial^3 f_n}{\partial x_n^3} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^3 f_n}{\partial t_n^3} + O(h^4) \\
 &= f_n - hf_n + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n - \frac{h^3}{6}\left(\ddot{f}f_x + 3f\dot{f}f_{x^2} + f^3f_{x^3} + f_{t^3}\right) + O(h^4) \\
 &= f_n - hf_n + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n - \frac{h^3}{6}\left(f^3f_{x^3} + f_{t^3} + f_x^2f_t + ff_x^3 + f_xf_{t^2} + 3ff_{x^2}f_t + 4f^2f_{x^2}f_x\right) + O(h^4) \\
 &= f_n - hf_n + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n - \frac{h^3}{6}\ddot{f}_n + O(h^4) \\
 hf_n &= f_n - f_{n-1} + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n - \frac{h^3}{6}\ddot{f}_n + O(h^4). \tag{h.5}
 \end{aligned}$$

途中で簡単のために $\frac{\partial^3 f_n}{\partial x_n^3} = f_{x^3}$, $\frac{\partial^3 f_n}{\partial t_n^3} = f_{t^3}$ とした. さらに f_{n-2} に対して同様にテイラー展開すると (h.5) 式の h を $2h$ に変えるだけなので,

$$\begin{aligned}
 f_{n-2} &= f(x_{n-2}, t_{n-2}) \\
 &= f(x(t_n - 2h), t_n - 2h) \\
 &= f_n - 2hf_n + \frac{4h^2}{2}\ddot{f}_n - \frac{8h^3}{6}\ddot{f}_n + O(h^4) \\
 h^2\ddot{f}_n &= \frac{1}{2}f_n - hf_n - \frac{2h^3}{3}\ddot{f}_n + O(h^4) \tag{h.6}
 \end{aligned}$$

となる. (h.6) 式に (h.5) 式を代入すると,

$$\begin{aligned}
 h^2\ddot{f}_n &= \frac{1}{2}f_n - hf_n - \frac{2h^3}{3}\ddot{f}_n + O(h^4) \\
 &= f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2} + h^3\ddot{f}_n + O(h^4) \tag{h.7}
 \end{aligned}$$

(h.5) 式に (h.7) 式を代入すると,

$$\begin{aligned} hf_n &= f_n - f_{n-1} + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n - \frac{h^3}{6}\dddot{f}_n + O(h^4) \\ &= \frac{3}{2}f_n - 2f_{n-1} + \frac{1}{2}f_{n-2} + \frac{h^3}{3}\ddot{f}_n + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{h.8})$$

f_{n-3} に対して同様にテイラー展開すると (h.5) 式の h を $3h$ に変えるだけなので,

$$\begin{aligned} f_{n-3} &= f(x_{n-3}, t_{n-3}) \\ &= f(x(t_n - 3h), t_n - 3h) \\ &= f_n - 3hf_n + \frac{9h^2}{2}\ddot{f}_n - \frac{27h^3}{6}\ddot{f}_n + O(h^4) \\ h^3\ddot{f}_n &= \frac{2}{9}f_n - \frac{2}{9}f_{n-3} - \frac{2}{3}hf_n + \ddot{f}_n + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{h.9})$$

(h.9) 式に (h.7) 式と (h.8) 式を代入すると,

$$\begin{aligned} h^3\ddot{f}_n &= \frac{2}{9}f_n - \frac{2}{9}f_{n-3} - \frac{2}{3}hf_n + \ddot{f}_n + O(h^4) \\ &= f_n - 3f_{n-1} + 3f_{n-2} - f_{n-3} + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{h.10})$$

(h.10) 式を (h.8) 式に代入すると,

$$\begin{aligned} hf_n &= f_n - f_{n-1} + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n - \frac{h^3}{6}\ddot{f}_n + O(h^4) \\ &= \frac{4}{3}f_n - 3f_{n-1} + \frac{3}{2}f_{n-2} + \frac{1}{3}f_{n-3} + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{h.11})$$

(h.10) 式を (h.7) 式に代入すると,

$$\begin{aligned} h^2\ddot{f}_n &= \frac{1}{2}f_n - hf_n - \frac{2h^3}{3}\ddot{f}_n + O(h^4) \\ &= 2f_n - 5f_{n-1} + 4f_{n-2} + f_{n-3} + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{h.12})$$

(h.10) 式, (h.11) 式そして, (h.12) 式を $x(t)$ の4位までのテイラー展開に代入すると,

$$\begin{aligned} x(t_n + h) &= x(t_n) + hf_n + \frac{1}{2}h^2\dot{f}_n + \frac{1}{6}h^3\ddot{f}_n + \frac{1}{27}h^4\ddot{f}_n + O(h^5) \\ &= x(t_n) + hf_n + \frac{h}{2}hf_n + \frac{h}{6}h^2\ddot{f}_n + \frac{h}{27}h^3\ddot{f}_n + O(h^5) \\ &= x(t_n) + hf_n + \frac{h}{2} \left(\frac{4}{3}f_n - 3f_{n-1} + \frac{3}{2}f_{n-2} + \frac{1}{3}f_{n-3} + O(h^4) \right) \\ &\quad + \frac{h}{6} (2f_n - 5f_{n-1} + 4f_{n-2} + f_{n-3} + O(h^4)) \\ &\quad + \frac{h}{27} (f_n - 3f_{n-1} + 3f_{n-2} - f_{n-3} + O(h^4)) + O(h^5) \\ &= x(t_n) + \frac{h}{27} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) + O(h^5) \end{aligned}$$

となる. よって,

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{27} (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}).$$

これが4位のアダムズ バッシュ フォース公式である.

予測子・修正子法

*アダムズ ムルトン公式の2位の公式

$t_{n+1} = t_n + h$ での x の値が $O(h^2)$ の誤差で x_{n+1} と求まっており, $f_{n+1} = f(x_{n+1}, t_{n+1})$ として求めると, アダムズ バッシュフォース公式の h に $-h$ を代入するだけで良いので,

$$\begin{aligned} f_n &= f(x_n, t_n), \\ f_{n+1} &= f(x_n, t_n) + hf'(x_n, t_n) + O(h^2). \end{aligned}$$

よって,

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$$

が得られる. これがアダムズ ムルトン公式の2位の公式である.

アダムズ ムルトン公式の3位の公式

(h.1)式から,

$$hf'_n = f_n - f_{n-1} + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n + O(h^3).$$

アダムズ ムルトン公式の3位の公式もアダムズ バッシュフォース公式の3位の公式の $-h$ を $+h$ に変えることと同じなので, (h.1)の h に $h = -h$ を代入すると,

$$\begin{aligned} f_{n+1} &= f_n + hf'_n + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n + O(h^3) \\ h^2\ddot{f}_n &= 2f_{n+1} - 2f_n - hf'_n + O(h^3). \end{aligned} \tag{h.13}$$

(h.1)式に (h.13)式を代入すると,

$$\begin{aligned} hf'_n &= f_n - f_{n-1} + \frac{h^2}{2}\ddot{f}_n + O(h^3) \\ hf'_n &= \frac{1}{2}f_{n+1} - \frac{1}{2}f_{n-1} + O(h^3). \end{aligned} \tag{h.14}$$

(h.14) 式を (h.13) 式に代入すると,

$$\begin{aligned} h^2 \ddot{f}_n &= 2f_{n+1} - 2f_n - hf_n + O(h^3) \\ h^2 \ddot{f}_n &= f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1} + O(h^3). \end{aligned} \quad (\text{h.15})$$

よって, 3位の公式は,

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + hf_n + \frac{1}{2}h^2 \dot{f}_n + \frac{1}{6}h^3 \ddot{f}_n \\ &= x_n + hf_n + \frac{h}{2}hf_n + \frac{h}{6}h^2 \ddot{f}_n \\ &= x_n + hf_n + \frac{h}{2} \left(\frac{1}{2}f_{n+1} - \frac{1}{2}f_{n-1} \right) + \frac{h}{6} (f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}) \\ &= x_n + \frac{h}{12} (5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}) \end{aligned}$$

となる.

アダムズ ムルトン公式の4位の公式

(h.5) 式から,

$$f_{n-1} = f_n - hf_n + \frac{h^2}{2} \ddot{f}_n - \frac{h^3}{6} \dddot{f}_n + O(h^4).$$

(h.7) 式から,

$$f_{n-2} = -f_n - 2hf_{n+1} + h^2 \ddot{f}_n - \ddot{f}_n + O(h^4). \quad (\text{h.16})$$

3位と同様に (h.5) 式の h に $h = -h$ を代入すると,

$$f_{n+1} = f_n + hf_n + \frac{h^2}{2} \ddot{f}_n + \frac{h^3}{6} \dddot{f}_n + O(h^4). \quad (\text{h.17})$$

(h.5) 式と (h.17) 式を足し合わせると,

$$\begin{aligned} f_{n+1} + f_{n-1} &= 2f_n + h^2 \ddot{f}_n + O(h^4) \\ h^2 \ddot{f}_n &= f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1} + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{h.18})$$

(h.16) 式から (h.18) 式を引くと,

$$\begin{aligned} -f_{n+1} - f_{n-1} + f_{n-2} &= -3f_n + 2f_{n-1} - h^3 \dddot{f}_n + O(h^4) \\ h^3 \dddot{f}_n &= f_{n+1} - 3f_n + 3f_{n-1} + f_{n-2} + O(h^4). \end{aligned} \quad (\text{h.19})$$

(h.5) 式から (h.17) 式を引いて, さらに (h.19) 式を代入すると,

$$\begin{aligned}
 -f_{n+1} + f_{n-1} &= -2hf_n - \frac{h^3}{3}\ddot{f}_n + O(h^4) \\
 hf_n &= \frac{1}{3}f_{n+1} + \frac{1}{2}f_n - f_{n-1} + \frac{1}{6}f_{n-2} + O(h^4).
 \end{aligned}$$

よって, 4 位の公式は,

$$\begin{aligned}
 x_{n+1} &= x_n + hf_n + \frac{1}{2}h^2\dot{f}_n + \frac{1}{6}h^3\ddot{f}_n + \frac{1}{24}h^4\ddot{\dot{f}}_n \\
 &= x_n + hf_n + \frac{h}{2}hf_n + \frac{h}{6}h^2\ddot{f}_n + \frac{h}{24}h^3\ddot{\dot{f}}_n \\
 &= x_n + hf_n + \frac{h}{2}\left(\frac{1}{3}f_{n+1} + \frac{1}{2}f_n - f_{n-1} + \frac{1}{6}f_{n-2}\right) + \frac{h}{6}(f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}) \\
 &\quad + \frac{h}{24}(f_{n+1} - 3f_n + 3f_{n-1} + f_{n-2}) \\
 &= x_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})
 \end{aligned}$$

となる.

予測子・修正子法 (predicor-corrector mehod)

アダムズ ムルトン公式は右辺に未知の x_{n+1} から計算されるべき f_{n+1} を含んでいるため, 陰的公式となっている. そのため, 右辺の f_{n+1} の評価に使う x_{n+1} にはアダムズ バッシュフォース公式で一度予測した値を用いる. そして, アダムズ ムルトン公式によって x_{n+1} を修正する. このように, 予測した x_{n+1} の値を用いて再計算を行って x_{n+1} の値を修正する方法を予測子・修正子法と呼ぶ. 特に, 予測にアダムズ バッシュフォース公式, 修正にアダムズ ムルトン公式を用いたものはアダムズ法と呼ぶ. 例えば, 4 位の場合, 予測子は

$$\tilde{x}_{n+1} = x_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}), \quad (\text{h.20})$$

修正子は

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{24}(9\tilde{f}_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n+2}) \quad (\text{h.21})$$

という 2 段階の計算を行う. ここで, $\tilde{f}_{n+1} = f(\tilde{x}_{n+1}, t_{n+1})$ としている.

予測子の後に修正子を用いて 4 位の公式になるためには予測子による予測値 \tilde{x}_{n+1} の誤差が $O(h^4)$ であれば良いので, 予測子に 3 位のアダムズ バッシュフォース公式を用いて, 予測子は

$$\tilde{x}_{n+1} = x_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}), \quad (\text{h.22})$$

修正子は

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{24} (9\tilde{f}_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n+2}) \quad (\text{h.23})$$

という組み合わせでも 4 位公式が得られる⁹⁾。

I:初期条件 $f(x)$ の解析

初期値 $f(x)$ として $x = \pi$ に鋭いピークを持つ関数

$$\begin{aligned} f(x) &= \left(\frac{1 - \cos x}{2} \right)^N \\ &= \left(\sin \frac{x}{2} \right)^{2N} \end{aligned}$$

を与える。 $\hat{u}_k(0)$ を求めるため $f(x)$ のフーリエ級数展開を求める。 $f(x)$ は、

$$\begin{aligned} f(x) &= \left(\sin \frac{x}{2} \right)^{2N} \\ &= \left(\frac{1}{2i} (e^{i\frac{x}{2}} - e^{-i\frac{x}{2}}) \right)^{2N}. \end{aligned}$$

ここで、2 項定理を用いると¹⁰⁾、

$$\begin{aligned} f(x) &= \left(\frac{1}{2i} (e^{i\frac{x}{2}} - e^{-i\frac{x}{2}}) \right)^{2N} \\ &= \frac{(i^2)^N}{2^{2N}} \sum_{l=0}^{2N} {}_{2N}C_l (e^{i\frac{x}{2}})^l (-e^{-i\frac{x}{2}})^{2N-l} \\ &= \frac{(-1)^N}{2^{2N}} \sum_{l=0}^{2N} (-1)^{2N-l} {}_{2N}C_l e^{i\frac{x}{2}l} e^{-i\frac{x}{2}(2N-l)} + e^{-i\frac{x}{2}2N} \\ &= \frac{(-1)^N}{2^{2N}} \sum_{l=0}^{2N} (-1)^l {}_{2N}C_l e^{ix(l-N)} \end{aligned}$$

⁹⁾ 予測子 \tilde{x}_{n+1} は修正子の中で h が掛けられるので 1 位下でもできる。また、予測子のみを反復するわけではないので、予測子の打ち切り誤差の累積は心配しなくてよい。

¹⁰⁾ 2 項定理とは、 $(a + b)^n$ の展開を表す公式である。 $(a + b)^n$ のとき、

$$(a + b)^n = \sum_{k=0}^n {}_n C_k a^k b^{n-k}$$

となる。このとき ${}_n C_k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$ である。

となる. $l - N = m$ とおくと,

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \frac{(-1)^N}{2^{2N}} \sum_{l=0}^{2N} (-1)^l {}_{2N}C_l e^{ix(l-N)} \\
 &= \frac{1}{2^{2N}} \sum_{m=-N}^N (-1)^{m+2N} {}_{2N}C_{m+N} e^{imx} \\
 &= \frac{1}{2^{2N}} \sum_{m=-N}^N (-1)^k \frac{(2N)!}{(N+m)!(N-m)!} e^{imx} \\
 &= \sum_{m=-N}^N (-1)^m \frac{\frac{(2N)!}{2^{2N}}}{(N+m)!(N-m)!} e^{imx}. \tag{i.1}
 \end{aligned}$$

ここで $\frac{(2N)!}{2^{2N}}$ は,

$$\begin{aligned}
 \frac{(2N)!}{2^{2N}} &= \frac{2N \cdot 2N - 1 \cdot 2N - 2 \cdots 1}{2 \cdot 2 \cdot 2 \cdots 2} \\
 &= \left(\frac{2N}{2}\right) \cdot \left(\frac{2N+1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2N+2}{2}\right) \cdot \left(\frac{2N+3}{2}\right) \cdots \left(\frac{1}{2}\right) \\
 &= N \left(\frac{2N+1}{2}\right) (N-1) \left(\frac{2N+3}{2}\right) \cdots \left(\frac{1}{2}\right) \\
 &= (N \cdot (N-1) \cdots 1) \left(\left(\frac{2N+1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2N+3}{2}\right) \cdots \left(\frac{1}{2}\right) \right) \\
 &= N! \cdot \left(\frac{(2N+1)(2N+3) \cdots}{2^N} \right) \\
 &= (N!)^2 \left(\frac{(2N+1)(2N+3) \cdots}{2^N N!} \right) \\
 &= (N!)^2 \left(\frac{(2N+1)(2N+3) \cdots 1}{2N \cdot 2(N-1) \cdots 2} \right)
 \end{aligned}$$

となるので, (i.1) 式は,

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \sum_{m=-N}^N (-1)^m \frac{\frac{(2N)!}{2^{2N}}}{(N+m)!(N-m)!} e^{imx} \\
 &= \sum_{m=-N}^N (-1)^m \frac{(N!)^2 \frac{(2N+1)(2N+3) \cdots 1}{2N \cdot 2N-2} \cdots \frac{1}{2}}{(N+m)!(N-m)!} e^{imx} \\
 &= \sum_{m=-N}^N (-1)^m \frac{(N!)(N!)}{(N+m)!(N-m)!} \frac{(2N+1)(2N+3) \cdots 1}{2N \cdot 2N-2} \cdots \frac{1}{2} e^{imx}
 \end{aligned}$$

となる. この式を $t = 2\pi$ までフーリエ級数展開すると, 三角関数の直交性より,

$$\begin{aligned}
 \hat{u}_k(0) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) e^{-ikx} dx \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{m=-N}^N (-1)^m \frac{(N!)(N!)}{(N+m)!(N-m)!} \frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} e^{imx} e^{-ikx} dx \\
 &= (-1)^k \frac{(N!)(N!)}{(N+k)!(N-k)!} \frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} \quad (i.2)
 \end{aligned}$$

となり, (3.1.13) 式より,

$$\begin{aligned}
 u(x, t) &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(0) e^{ik(x-t)} \\
 &= \sum_{k=-N}^N (-1)^k \frac{(N!)(N!)}{(N+k)!(N-k)!} \frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} e^{ik(x-t)} \quad (i.3)
 \end{aligned}$$

また, $\sum_{k=-N}^N \frac{(N!)(N!)}{(N+k)!(N-k)!}$ は,

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=-N}^N \frac{(N!)(N!)}{(N+k)!(N-k)!} &= \frac{(N!)(N!)}{0!(2N)!} + \frac{(N!)(N!)}{1!(2N-1)!} + \cdots + \frac{(N!)(N!)}{(N-2)!(N+2)!} \\
 &\quad + \frac{(N!)(N!)}{(N-1)!(N+1)!} + \frac{(N!)(N!)}{(N!)(N!)} + \frac{(N!)(N!)}{(N+1)!(N-1)!} \\
 &\quad + \frac{(N!)(N!)}{(N+2)!(N-2)!} + \cdots + \frac{(N!)(N!)}{(2N-1)!1!} + \frac{(N!)(N!)}{(2N)!0!} \\
 &= 1 + 2 \frac{(N!)(N!)}{(N+1)!(N-1)!} + 2 \frac{(N!)(N!)}{(N+2)!(N-2)!} + \cdots + 2 \frac{(N!)(N!)}{(2N)!} \\
 &= 1 + 2 \frac{N}{(N+1)} + 2 \frac{N(N-1)}{(N+1)(N+2)} + \cdots + 2 \frac{N(N-1) \cdots 1}{(N+1)(N+2) \cdots 2N} \\
 &= 1 + 2 \frac{N}{(N+1)} + 2 \frac{N}{(N+1)} \frac{(N-1)}{(N+2)} + \cdots + 2 \frac{N}{(N+1)} \frac{(N-1)}{(N+2)} \cdots \frac{1}{2N} \\
 &= 1 + 2 \sum_{k=1}^N \frac{N}{(N+1)} \cdot \frac{N(N-1)}{(N+1)} \cdots \frac{(N-k+1)}{(N+k)}
 \end{aligned}$$

となるので, 式は,

$$\begin{aligned}
 u(x, t) &= \sum_{k=-N}^N (-1)^k \frac{(N!)(N!)}{(N+k)!(N-k)!} \frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} e^{ik(x-t)} \\
 &= \left(\frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} \right) \left(1 + 2 \sum_{m=1}^N \frac{N}{(N+1)} \cdot \frac{N(N-1)}{(N+1)} \cdots \frac{(N-m+1)}{(N+m)} \right) e^{ik(x-t)}
 \end{aligned}$$

となる. 今 $u(x, t)$ は実数なので,

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \left(\frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} \right) \left(1 \cdot e^0 + 2 \sum_{k=1}^N \frac{N}{N+1} \cdot \frac{N(N-1)}{(N+1)} \cdots \frac{(N-m+1)}{(N+m)} e^{ik(x-t)} \right) \\ &= \left(\frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} \right) \left(1 + 2 \sum_{k=1}^N \frac{N}{(N+1)} \frac{N(N-1)}{(N+1)} \cdots \frac{(N-m+1)}{(N+m)} \cos k(x-t) \right) \end{aligned}$$

となる. この解は初期条件 $f(x)$ が波数 N までのフーリエ級数で厳密に書けるので厳密解に一致し,

$$u(x, 2\pi) = f(x).$$

一方, 差分法の場合を考える. $t = 2\pi$ まで中心差分で時間発展すると, (3.1.21) 式から,

$$\begin{aligned} u_j(t) &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(t) e^{ikx_j} \\ &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(0) \exp \left(ik \left(x_j - \frac{\sin(k\Delta x)k\Delta x}{t} \right) \right) \end{aligned}$$

なので, (i.2) から,

$$\begin{aligned} u_j(t) &= \sum_{k=-N}^N \hat{u}_k(0) \exp \left(ik \left(x_j - \frac{\sin(k\Delta x)k\Delta x}{t} \right) \right) \\ &= \sum_{k=-N}^N (-1)^k \frac{(N!)(N!)}{(N+k)!(N-k)!} \frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} e^{ik(x_j - c_k t)} \\ &= \left(\frac{(2N+1)(2N+3)}{2N(2N-2)} \cdots \frac{1}{2} \right) \left(1 + 2 \sum_{k=1}^N \frac{N}{N+1} \frac{N(N-1)}{N+1} \cdots \frac{N-m+1}{N+m} \cos k(x_j - c_k t) \right) \end{aligned}$$

と表せる. ここで,

$$c_k \equiv \begin{cases} \frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} & (k \neq 0) \\ 1 & (k = 0) \end{cases} \quad (\text{i.4})$$

としている.

第9章 謝辞

本論文を作成するに当たり、指導教官の石渡正樹準教授、同じく小高正嗣助教授、さらに杉山耕一郎特任助教にはさまざまな助言および指導をしていただきました。また、博士課程の山下達也氏、修士課程の馬場健聡氏には多くの時間を割いて頂き、論文の確認、校正、助言をして頂きました。多くの御迷惑をおかけしたことともに、皆様に心より感謝いたします。

第10章 参考文献

- 石岡圭一, 2004: スペクトル法による数値計算入門, 東京大学出版会 232pp.
- 時岡達志, 山岬正紀, 佐藤信夫, 1993: 気象の数値シミュレーション, 気象の教室 5, 東京大学出版会 239pp
- 松田佳久, 2000: 惑星気象学, 東京大学出版会 192pp
- 三宅敏恒, 1991: 入門線形代数, 倍風館 143pp
- Stanley J. Farlow 著, 伊理正夫, 伊理由美訳, 1983: 偏微分方程式科学者・技術者のための使い方と解き方, 朝倉書店 405pp
- Yamamoto, M., Takahashi, M., 2003: The Fully Developed Superrotation Simulated by a General Circulation Model of a Venus-like Atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 60, 561-574
- Rossow, W. B., A.D. Del Genio and T. Eichler, 1990: Cloud-tracked winds from Pioneer Venus OCPP images. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 47, 2053-2084