

物質移流スキームにおいて使用される 格子点データの内挿法

村橋 究理基

MURAHASHI Kuriki

学生番号 : 22100045

北海道大学理学部地球科学科
地球流体力学研究室

目次

第1章	はじめに	4
1.1	目的	4
1.2	本論文の構成	6
第2章	物質移流方程式	7
2.1	物質移流とは	7
2.2	移流方程式	7
2.3	移流方程式の解:1次元の場合	8
第3章	離散化	9
3.1	離散化とは	9
3.2	時間の離散化	9
3.3	空間の離散化	10
第4章	移流方程式の数値解法	11
4.1	オイラー法	11
4.2	ラグランジュ法	12
4.3	セミラグランジュ法	13
4.3.1	1次元の移流におけるセミラグランジュ法	13
4.3.2	強制項を含む多次元の移流におけるセミラグランジュ法	16

第5章	内挿法	19
5.1	内挿法とは	19
5.2	線形内挿	20
5.2.1	線形内挿とは	20
5.2.2	線形内挿式の導出	20
5.3	ラグランジュ内挿	21
5.3.1	ラグランジュ内挿とは	21
5.3.2	ラグランジュ内挿多項式の導出	22
5.3.3	2点の場合	22
5.3.4	3点の場合	23
5.3.5	誤差	23
5.4	エルミート内挿	24
5.4.1	エルミート内挿とは	24
5.4.2	エルミート内挿多項式の導出	25
5.4.3	ルンゲ現象	28
5.5	スプライン内挿	28
5.5.1	スプライン内挿とは	28
5.5.2	スプライン内挿多項式の導出	30
5.6	DCPAM における内挿法の実装	34
5.6.1	変則エルミート5次内挿	34
5.6.2	方向分離	34
5.6.3	変則エルミート5次内挿とは	36
5.6.4	変則エルミート5次内挿多項式の導出	36
第6章	まとめ	40

付録 A ラグランジュ内挿における誤差	41
付録 B 式 (5.60) の解の導出手順	43
付録 C 式 (5.67) の係数の導出手順	47

図目次

3.1 時間の離散化	9
3.2 空間の離散化	10
4.1 オイラー法の概念図	11
4.2 ラグランジュ法の概念図	12
4.3 ラグランジュ法で時間経過した場合の例	13
4.4 セミラグランジュ法の概念図	14
5.1 線形内挿の概要	20
5.2 ラグランジュ内挿の概要	21
5.3 エルミート内挿の概要	24
5.4 ルンゲ現象	28
5.5 スプライン内挿の概要	29
5.6 方向分離の概要	35
5.7 一般的な 5 次エルミート内挿	36
5.8 変則エルミート 5 次内挿	36
C.1 変則エルミート 5 次内挿における係数の導出	47

第1章 はじめに

1.1 目的

正確な天気予報を得るための方法や惑星大気がどのような構造となっているのかを知るための方法として大気モデルに数値計算を適用して、データをもとに計算し、大気の状態がどのように変わっていくのかを予想する方法がある。そのような数値計算を行うためには実際の物理現象を数式で表現し、時間と空間に関する微分方程式を解くことで、どのように大気が変化していくかシミュレーションすることが必要である。

そのための大気モデルの1つとして、地球流体電脳倶楽部による大気大循環モデル DCPAM (Dennou-Club Planetary Atmospheric Model) がある。このモデルにおいては惑星全球規模における大気の移流や熱放射、対流による大気の混合、地表面からの熱収支を数値モデル化し、それによって得られる微分方程式を解くことでシミュレーションを行う。

大気大循環モデル DCPAM におけるシミュレーションでは次のような基礎方程式が用いられている。

大気大循環モデル DCPAM で用いられている基礎方程式

- 連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0.$$

ρ : 密度, \mathbf{v} : 速度, ∇ : 二次元ナブラ.

- 静水圧の式

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g.$$

p : 圧力, g : 重力加速度.

- 運動方程式

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{F}.$$

\mathbf{F} : 外力項.(コリオリ力を含む)

- 熱力学の式

$$\frac{dC_p T}{dt} = \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dt} + Q.$$

C_p : 定圧比熱, T : 温度, Q : 加熱項.

- 水蒸気の移流方程式

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (q\mathbf{v}) = S.$$

S : 生成/消滅項.

本来 DCPAM において使用されているのは緯度経度を用いた座標系であるが、ここでは簡単のため、デカルト座標系で表した。 x, y 方向が水平方向, z 方向が鉛直方向を示す。また基準気圧として地表面気圧を用いている。

例えば地球における水蒸気や火星におけるダストなど、惑星大気における物質は大気の流れ場にしがたって輸送され、また潜熱や放射などの影響も受ける。これらの物質の分布を移流計算で正確に求めていくことは重要である。

この論文では、DCPAM でも行われている移流計算に注目し、どのような方法で数値的に移流計算が行われているのか調べ、さらにそのために必要な内挿計算につい

て紹介することとする。

1.2 本論文の構成

この論文では第 2 章において物質移流がどのようなものであるか解説し, 簡単な 1 次元の移流方程式の場合においてどのような解が得られるのか示す. 第 3 章及び第 4 章では移流方程式を数値的に解くために必要な離散化の方法について解説する. 第 3 章では時間的に離散化する方法について述べる. 続いて第 4 章では空間的に離散化する方法について述べる. まず代表的な離散化の考え方としてオイラー法とラグランジュ法について述べ, DCPAM において移流方程式を扱うのに実際に利用されているセミラグランジュ法について Staniforth & Côté (1991) の第 2 章及び第 3 章に沿って解説する. 第 5 章ではセミラグランジュ法において必要な内挿法がどのようなものか解説する. ここではその例として線形内挿, ラグランジュ内挿, エルミート内挿, スプライン内挿について紹介, 解説する. また DCPAM において使用されている変則エルミート 5 次内挿についても同様に解説する.

最後に第 6 章において全体のまとめを行う。

第2章 物質移流方程式

2.1 物質移流とは

物質移流とは大気や海洋などの流体の流れによって運ばれる水蒸気などの物質の移動のことである。物質移流によって物質の空間分布が変化し、例えば水蒸気の分布が変化すれば、雲の生成などに影響を及ぼしたりする。したがって物質移流を数値計算によってシミュレートすることは大気や海洋ので起こる現象の変化を見ていくために重要である。物質移流の動きを数値的に解くために時間、空間に関する方程式を用いて物質移流を表現する必要がある。

2.2 移流方程式

物質移流を方程式で表すことを考える。ある物質、または物質量を表すスカラー量を q とする。大気密度を ρ とするとき、単位体積中に含まれる q の時間変化は次のように表すことができる。

$$\frac{\partial \rho q}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \rho q) + S. \quad (2.1)$$

ただし t は時間、 \mathbf{v} は流速を表し、 S は生成・消滅項である。物質の生成・消滅を考えない場合、式 (2.1) と ρ の時間変化式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{v} \rho \quad (2.2)$$

から、 q の時間変化式が得られる。

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla q \quad (2.3)$$

ここでは簡単のため、速度 \mathbf{v} の時間変化はないものとした。これが q についての移流方程式である。

2.3 移流方程式の解:1次元の場合

式 (2.3) を 1次元の場合について考えると, 次のように表せる.

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -v \frac{\partial q}{\partial x}. \quad (2.4)$$

速度 v の時間変化はないものとしているのでこの式は解析的に解くことができる. まず独立変数 x, t を次のようにおく.

$$\begin{pmatrix} x - vt \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi \\ t \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

これを用いて $u = u(\xi, t) = q(\xi + vt, t) = q(x, t)$ とおくと式 (2.4) より

$$\frac{\partial}{\partial t} u(\xi, t) = \frac{\partial}{\partial t} q(\xi + vt, t) = -v \frac{\partial}{\partial x} q(\xi + vt, t).$$

したがって

$$\frac{\partial}{\partial t} u(\xi, t) = \frac{\partial}{\partial t} q(\xi + vt, t) + v \frac{\partial}{\partial x} q(\xi + vt, t) = 0 \quad (2.6)$$

となる. $\partial u / \partial t$ が 0 なので $u(\xi, t)$ は t に対し一定である. そのため任意の関数 p を用いて u は

$$u(\xi, t) = p(\xi) = p(x - vt) \quad (2.7)$$

と表される. 以上より

$$q(x, t) = p(x - vt) \quad (2.8)$$

という解が得られる. この任意の関数 $p(x - vt)$ は初期条件によって定義することができる.

$$q(x, 0) = q_0(x) \quad (2.9)$$

ならば,

$$q(x, t) = q_0(x - vt) \quad (2.10)$$

である.

一般的に式 (2.3) には式 (2.1) のように生成・消滅項が現れるため, このように解析的に解くことは難しい形となっている. そのため数値的に解くことが必要となってくる.

第3章 離散化

3.1 離散化とは

移流方程式について数値計算を行うにあたり, 計算機で式を扱うために連続した数値を有限の要素で表す必要がある. このことを離散化という. 移流方程式を離散化するためには式 (2.3) より, 空間と時間の両方について離散化した表現にする必要がある.

3.2 時間の離散化

時間については 図 3.1 のようにある等間隔のステップ Δt で区切ることとする.

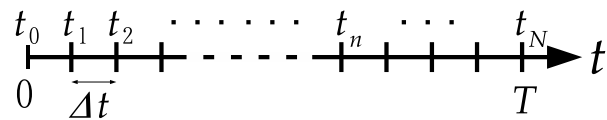


図 3.1: 時間 $[0, T]$ を $t_n = n\Delta t$ ($n = 0, 1, 2, \dots, N$) を用いて表した場合の概略図.

ここで Δt は N 等分された区間 $[0, T]$ であり, $\Delta t = T/N$ と表すことができる. すなわち

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t \quad (3.1)$$

と表すことができる. ここではこのように等間隔な時間 Δt に区切って時間を離散化することにする.

3.3 空間の離散化

デカルト座標系の縦, 横, 高さ方向に等間隔に空間を分割した場合の例を図 3.2 に示す.

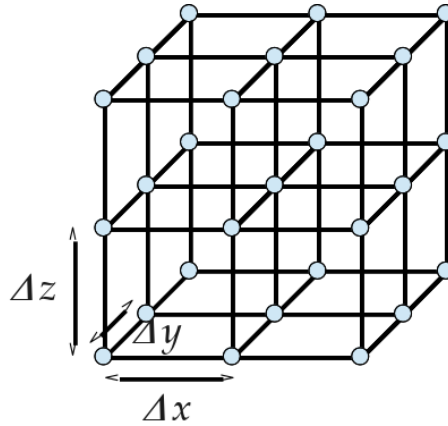


図 3.2: デカルト座標系において水平 2 次元, 鉛直 1 次元それぞれの方向に空間を離散化したものの概略図.

このとき点 (x_n, y_n, z_n) は空間の刻みステップ $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ を用いて, それぞれ次のように表される.

$$x_n = x_{n-1} + \Delta x, \quad (3.2a)$$

$$y_n = y_{n-1} + \Delta y, \quad (3.2b)$$

$$z_n = z_{n-1} + \Delta z. \quad (3.2c)$$

空間の離散化されたそれぞれの点のことを格子点と呼ぶ.

第4章 移流方程式の数値解法

離散化した移流方程式を解くのにあたって次のような方法が知られている。

- オイラー法
- ラグランジュ法
- セミラグランジュ法

4.1 オイラー法

オイラー法はある固定された空間上の点において、それぞれの点を通過する物理量を計算し、現象の時間発展をみる方法である。この方法は一般的なデカルト座標系において有効である。

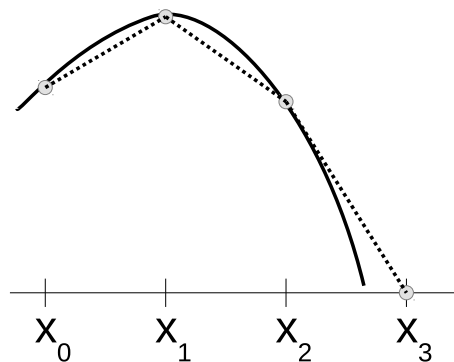


図 4.1: オイラー法の概念図. 実線が真の解, 点線が格子点の値を線形につなぐことで得られる解を示す.

図 4.1 では空間 1 次元におけるある物質のある時刻における分布について示した。ここからわかるように空間を離散化したことによって格子点上から得られる情報のみで推定した解 (点線) は真の解からズレが生じてしまっている。このズレを解消

するためには, 空間の刻みステップ Δx をもっと細かく設定する方法が考えられる. ただし空間の刻み幅を小さくするとそれに伴って, 時間の刻みステップ Δt も小さくしてはならない. そのため計算のための条件が厳しくなる場合がある.

4.2 ラグランジュ法

ラグランジュ法は各流体粒子に注目して, 各時刻における流体粒子の位置を計算し, 現象の時間発展をみる方法である.

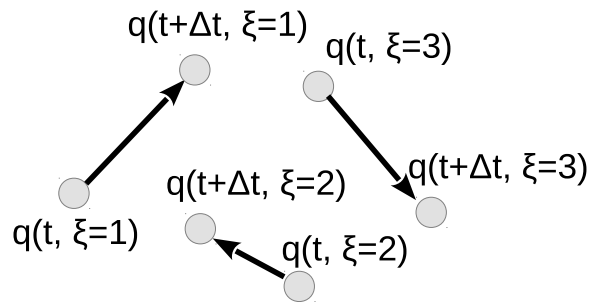


図 4.2: ラグランジュ法のご概念図. ある時刻 t において着目した粒子, ξ は粒子を区別するためのラベル, 粒子につけた矢印はその粒子の持つ速度ベクトル, 時間 Δt 経過後のそれぞれの粒子を示している.

この方法はオイラー法よりも時間ステップが大きくても使えることが利点として挙げられる. なぜならオイラー法と異なり, ラグランジュ法では単に流体粒子が流れ場にしがたってどのように移動するのが計算すればよく, 空間の刻み幅 Δx に時間の刻み幅 Δt が制限されることがないからである.

ラグランジュ法で着目する流体粒子はその粒子まわりの領域を平均的に表す代表値であると考えている. しかし粒子が移動することによってそれぞれの粒子が代表する領域がひどく不規則なものになってしまう場合がある. その様子を示したの例が図 4.3 である.

図 4.3 では各流体粒子は粒子間を等分する矩形領域をその粒子が代表する領域であると考えている. 左の初期値ではそれぞれの粒子が同じ大きさの領域を代表しているが, 時間経過後には粒子が代表とする領域が粒子によって大きく異なっている.

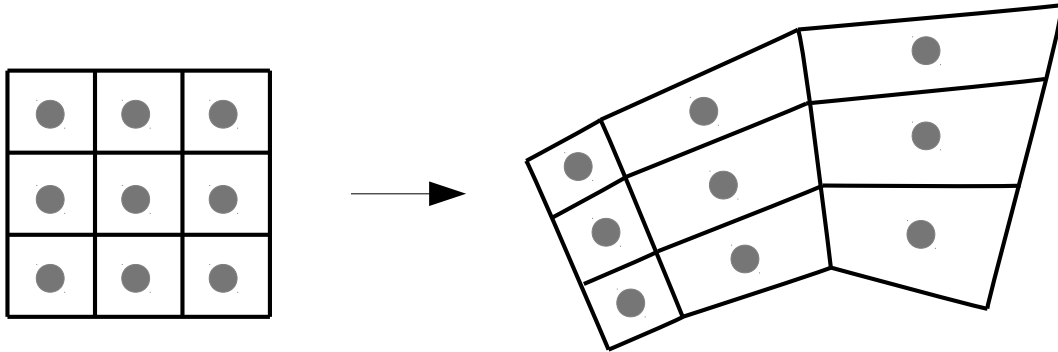


図 4.3: ラグランジュ法で時間が経過した後の例. 点が着目した粒子, 点を囲う矩形は着目した粒子が代表すると考えられる領域を示す.

4.3 セミラグランジュ法

セミラグランジュ法は上記 2 つの方法 (オイラー法, ラグランジュ法) におけるそれぞれの利点を得ようとするための方法である. ここでは Staniforth & Côté (1991) を参考にしてセミラグランジュ法について解説する.

時間ステップごとに異なる粒子の組み合わせを用い, その粒子の組み合わせが時間ステップの最後でオイラー法のように設定した格子点上に到達するようなものを選ぶことで時刻 $t + \Delta t$ における各格子点上の値を求める方法である.

4.3.1 1次元の移流におけるセミラグランジュ法

セミラグランジュ法について考えるにあたり, 簡単のためここでは式 (2.3) のような 1次元の移流方程式について考える.

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial q}{\partial x} = 0, \tag{4.1}$$

$$\frac{dx}{dt} = v(x, t). \tag{4.2}$$

ここで $v(x, t)$ は移流速度を表すある関数, スカラー q は流れ場によって移動するある流体粒子である.

図 4.4 において時空間 $(x - t)$ 平面における真の解は時刻 $t_n + \Delta t$ に格子点 x_m に到達する流体粒子の動く奇跡を示したものであり, 実線 AC で示される. $q(x, t)$ を全ての格子点 x_m において時刻 $t_n - \Delta t$ 及び t_n で知っているとする. このとき時刻 $t_n + \Delta t$ における格子点上での q の値を得ようとする場合を考える.

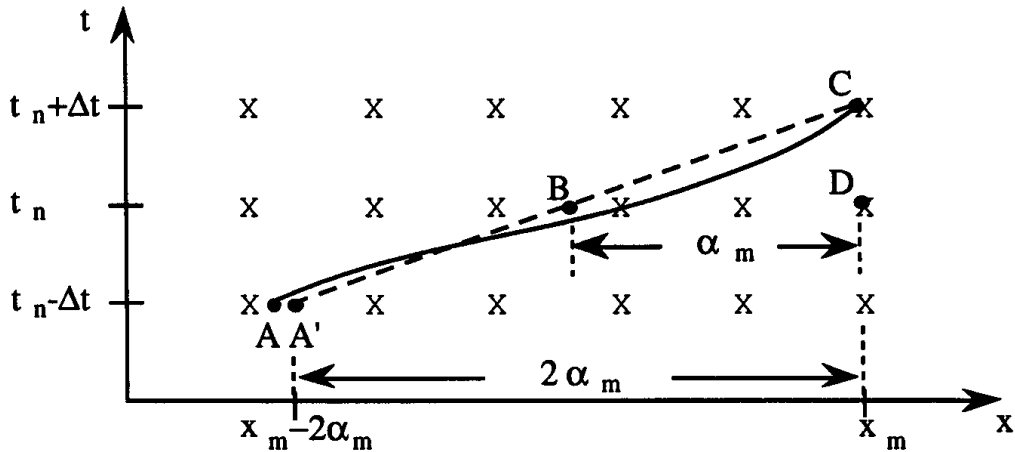


図 4.4: セミラグランジュ法概念図. \times は各時刻 $t_n - \Delta t, t_n, t_n + \Delta t$ における格子点を示す. 時刻 $t_m + \Delta t$ に格子点である x_m に到達するような粒子について実線が真の解の曲線を示し, 点線が近似した解の曲線を示す. 実線が格子点を通っているが, 真の解が格子点を通るかどうかはセミラグランジュ法を考えるにあたって一切関係ない. ここで α_m は時間 Δt で流体粒子粒子がずらされる距離である. (Staniforth & Côté (1991) 図 1 より引用.)

このためにセミラグランジュ法では次のように考える.

—— セミラグランジュ法の手順 ——

- 1). 時刻 $t_n + \Delta t_n$ において格子点 x_m に来る流体粒子 q の時刻 $t_n - \Delta t_n$ での位置を求める.
- 2). その位置での時刻 $t_n - \Delta t_n$ における q の値を求め, その値を求めたい時刻 $t_n + \Delta t_n$ の格子点 x_m における q の値とする.

図 4.4 において時刻 $t + \Delta t$ に格子点 x_m に到達する流体粒子 q の奇跡を近似したものが点線 $A'C$ で示されている. セミラグランジュ法は $A'C$ によって近似された線に沿って式 (4.1) を考えたものであり,

$$\frac{dq}{dt} = \frac{q(x_m, t_n + \Delta t) - q(x_m - 2\alpha_m, t_n - \Delta t)}{2\Delta t} = 0 \tag{4.3}$$

である. ここで α_m は x 軸において時間 Δt で近似した直線 $A'C$ にしたがった場合に粒子が移動する距離 (図 4.4 における BD) である. したがって α_m の値がわかっているとすれば, 時刻 $t_n + \Delta t$ における到達点 x_m での q の値はちょうど時刻 $t_n - \Delta t$ 及び上流点 $x_m - 2\alpha_m$ において計算できるということである. しかしながらここではまだ α_m は決定されていない. たとえ α_m が決定されたとしても, 今わ

かっているのは格子点上における q の値のみであり、一般的に格子点の間のどこかにおける q (図 4.4 において A' で示される点) は計算できないためである。

α_m を決定するためには、図 4.4 において点 B における v が直線 $A'C$ の傾きから逆算できることに注意しなければならない。すなわち $v = \alpha_m \Delta t$ であり、これは式 (4.1) からわかるように

$$\alpha_m = \Delta t v(x_m - \alpha_m, t_n). \quad (4.4)$$

である。式 (4.4) は α_m について繰り返し計算を行うと解ける場合がある。例えば以下のような式を用いる。

$$\alpha_m^{(k+1)} = \Delta t v(x_m - \alpha_m^{(k)}, t_n). \quad (4.5)$$

Δt で流体粒子が動く距離について適当な値 $\alpha_m^{(0)}$ を推測し、それを元にして $v(x_m - \alpha_m^{(0)})$ について解く。さらに式 (4.4) から $\alpha_m^{(1)}$ を求め、これを適当な回数繰り返すことで α_m を求める方法である¹⁾。このようにして図 4.4 の点 A', B の位置を求め、その格子点の間の位置における v や q を計算するために、内挿法が用いられている。

以上より 1 次元の移流方程式におけるセミラグランジュ法の計算手順は次のようにまとめることができる。

1 次元移流方程式のセミラグランジュ法における計算手順

- 1). 式 (4.5)

$$\alpha_m^{(k+1)} = \Delta t v(x_m - \alpha_m^{(k)}, t_n)$$

を繰り返し用い、全ての格子点 x_m において一つ前の時間ステップの値などの初期推定値や内挿法を用いることによって変位 α_m について解く。

- 2). 内挿法を用いることによって時刻 $t_n - \Delta t$ における上流点 $x_m - 2\alpha_m$ での値 $q(x_m - 2\alpha_m, t_n - \Delta t)$ を計算する。
- 3). 時刻 $t_n + \Delta t$ における到達点 x_m での $q(x_m, t_n + \Delta t)$ の値を計算する。

¹⁾Staniforth & Côté (1991) にはこの方法のみ紹介されていた。このような形で推測できない場合についてどのように考えればよいのかはわからない。

4.3.2 強制項を含む多次元の移流におけるセミラグランジュ法

ここでは以下のような強制項を含む移流方程式について考える.

$$\frac{dq}{dt} = R(\mathbf{x}, t), \tag{4.6}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial q}{\partial t} + \mathbf{V}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla q, \tag{4.7}$$

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{V}(\mathbf{x}, t). \tag{4.8}$$

ここで \mathbf{x} は 1-3 次元における位置ベクトルである. R は強制項を表す. 2 式 (4.6) (4.8) はセミラグランジュ法において強制項 R をどのように扱うかによって考え方が異なる.

中間点における強制項を用いる場合

中間点における強制項を用いてセミラグランジュ法を考えると式 (4.6), (4.8) はそれぞれ次のように表される.

$$\frac{dq}{dt} = \frac{q^+ - q^-}{2\Delta t} = R^0, \tag{4.9}$$

$$\alpha = \Delta t \mathbf{V}(\mathbf{x} - \alpha, t). \tag{4.10}$$

肩付の $+, -, 0$ はそれぞれ以下の状態における値を示す.

	位置	時刻
+	到達点 \mathbf{x}	$t + \Delta t$
-	中間点 $\mathbf{x} - \alpha$	t
0	出発点 $\mathbf{x} - 2\alpha$	$t - \Delta t$

ここで \mathbf{x} はある次元の格子点における任意な位置の格子点を表す. 式 (4.9) より求めたい $q^+ = q(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ は

$$q^+ = q^- + 2\Delta t R^0 \tag{4.11}$$

で表される. これで見られる曲線はベクトル α の変位を一次元の移流における方法 (4.5) を同じように考え, 式 (4.10) を繰り返し用いることによって求めることができる.

時間平均した強制項を用いる場合

時間平均した強制項を用いてセミラグランジュ法を考えると式 (4.6), (4.8) はそれぞれ次のように表される.

$$\frac{dq}{dt} = \frac{q^+ - q^-}{2\Delta t} = \frac{R^+ + R^-}{2}, \quad (4.12)$$

$$\alpha = \Delta t \mathbf{V}(\mathbf{x} - \alpha, t). \quad (4.13)$$

式 (4.12) より求めたい $q^+ = q(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ は

$$\begin{aligned} q^+ &= q^- + \Delta t(R^+ + R^-) \\ &= (q + \Delta t R)^- + \Delta t R^+ \end{aligned} \quad (4.14)$$

で表される.

上記2つの方法について, 状況に応じてどちらを利用しても構わない. 強制項 R について既知であるならば, 計算方法は1次元の移流と同じように考えることができる.

以上より多次元の強制的移流におけるセミラグランジュ法の計算手順は次のようにまとめることができる.

強制項を含む多次元移流方程式のセミラグランジュ法における計算方法

1). 式 (4.10)

$$\alpha = \Delta t \mathbf{V}(x - \alpha, t)$$

を繰り返し用い, 全ての格子点 x において一つ前の時間ステップの値などの初期値や内挿法を用いることによってベクトル変位 α について解く.

2). 中間点における強制項を用いる場合

a). 内挿法を用いることによって時刻 $t - \Delta t$ における上流点 $x - 2\alpha$ の値 q^- を計算する. また 時刻 t における中間点 $x - \alpha$ での強制項 R^0 を計算する.

b). 時刻 $t + \Delta t$ における到達点 x での q の値を以下の式

$$q(x, t + \Delta t) = q^- + 2\Delta t R^0$$

を用いて表す.

3). 時間平均した強制項を用いる場合

a). 内挿法を用いることによって時刻 $t - \Delta t$ における上流点 $x - 2\alpha$ の値 $(q - \Delta t R)^-$ を計算する. 同様に内挿法を用いることによって時刻 $t + \Delta t$ における粒子の到達点 x での強制項 R^+ を計算する.

b). 時刻 $t + \Delta t$ における到達点 x での値 q を以下の式

$$q(x, t + \Delta t) = (q + \Delta t R)^- + \Delta t R^+$$

を用いて表す.

第5章 内挿法

移流方程式 (4.2) を数値的に計算するのにあたって、セミラグランジュ法について紹介した。その中で格子点の間にある位置における物質量 q やその速度 v を評価するために、内挿法を用いて計算する必要がある。

5.1 内挿法とは

ある複数のデータからなるデータ列において、各データの間を埋めるデータを求める方法を内挿法と呼ぶ。これは言い換えると、ある未知関数 $f(x)$ が存在し、その未知関数の値が異なる $N + 1$ 個の x 座標の点 $x = x_j (j = 0, 1, \dots, N)$ に対してのみわかっているとす。つまり $y_j = f(x_j)$ とすると、 $f(x)$ のグラフについては $N + 1$ 個の点 (x_j, y_j) のみわかっているという場合に $x = x_j$ 以外の部分における関数 $f(x)$ の値を推定する方法である。

内挿法は以下のようなものが知られている。

- 線形内挿
- ラグランジュ内挿
- エルミート内挿
- スプライン内挿
- 変則エルミート5次内挿

5.2 線形内挿

5.2.1 線形内挿とは

単純に2点間が直線的に変化していると仮定して2点を直線を表す関数

$$y = ax + b \quad (5.1)$$

を用いて結ぶことで、2点の間の値を推定する方法である。概要を図5.1に示す。

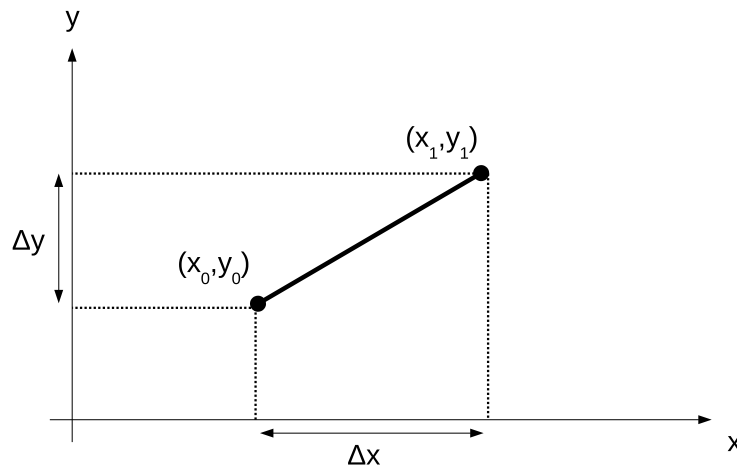


図 5.1: 線形内挿の概要を示す. 2点 $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ を単純に直線で結ぶ. $\Delta x, \Delta y$ はそれぞれ2点の x, y 座標における距離を示す.

5.2.2 線形内挿式の導出

図5.1より直線の傾き a は

$$a = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \quad (5.2)$$

で表すことができる. このとき b は $y = ax + b$ が点 (x_0, y_0) を通ることを用いて

$$b = y_0 - ax_0 = y_0 - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} x_0 \quad (5.3)$$

と表せる. 式 (5.2), (5.3) を式 (5.1) に代入して

$$\begin{aligned} y &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} x + y_0 - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} x_0 \\ &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} (x - x_0) + y_0 \end{aligned} \quad (5.4)$$

が得られる。

5.3 ラグランジュ内挿

5.3.1 ラグランジュ内挿とは

$x - y$ 平面内において $N + 1$ 個の点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$ が与えられているとする。ただし $i \neq j$ で $x_i \neq x_j$ である。このとき、これらの点を通る曲線を x の高々 N 次の多項式

$$p_N(x) = \sum_{j=0}^N a_j x^j = a_0 + a_1 x + \dots + a_N x^N \quad (5.5)$$

を用いて、曲線 $y = p_N(x)$ で表すとする。ここで $p_N(x)$ は与えられた $N + 1$ 個の点を通らなければならないので、

$$p_N(x_j) = y_j \quad (j = 0, 1, \dots, N) \quad (5.6)$$

を満たす必要がある。

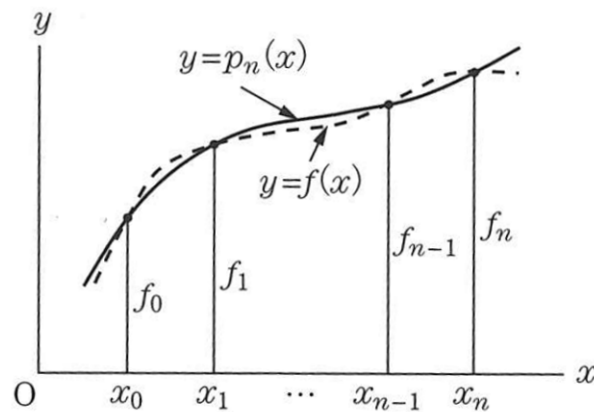


図 5.2: ラグランジュ内挿の概要. 破線が厳密解を示し、実線がラグランジュ内挿によるラグランジュの内挿多項式を示す。

5.3.2 ラグランジュ内挿多項式の導出

与えられた点が $N + 1$ 個の場合について考える. まず関数 $l_j(x)$ を

$$l_j(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{j-1})(x - x_{j+1})\dots(x - x_N)}{(x_j - x_0)(x_j - x_1)\dots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\dots(x_j - x_N)} \quad (j = 0, 1, \dots, N) \quad (5.7)$$

とする. 分子, 分母にそれぞれ $(x - x_j), (x_j - x_j)$ の項がないことに注意する. $l_j(x)$ は x の N 次多項式であり,

$$l_j(x_i) = \begin{cases} 1(i = j) \\ 0(i \neq j) \end{cases} \quad (5.8)$$

を満たす. ここで $p_N(x)$ を

$$p_N(x) = \sum_{j=0}^N y_j l_j(x) \quad (5.9)$$

と定義すると, $p_N(x)$ は高々 N 次の多項式であり, 同時に

$$p_N(x_j) = y_j \quad (j = 0, 1, \dots, N) \quad (5.10)$$

を満たす, この $p_N(x)$ をラグランジュの内挿多項式という.

5.3.3 2点の場合

最も簡単な場合として $N = 1$ の場合を考える. このとき考える点は $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ の2点である. この場合, $p_1(x) = a_0 + a_1x$ であるので, $y = p_1(x)$ は直線である. またここで

$$a_0 + a_1x_0 = y_0 \quad (5.11a)$$

$$a_0 + a_1x_1 = y_1 \quad (5.11b)$$

より, a_0, a_1 について解くと,

$$a_0 = \frac{x_1y_0 - x_0y_1}{x_1 - x_0} \quad (5.12a)$$

$$a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \quad (5.12b)$$

となる. したがって

$$\begin{aligned} p_1(x) &= \frac{x_1 y_0 - x_0 y_1}{x_1 - x_0} + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} x \\ &= \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1 \end{aligned} \quad (5.13)$$

となる. この式をつかうと任意の x における値を求めることができる.

式 (5.13) は書き換えると

$$\begin{aligned} p_1(x) &= \frac{1}{x_0 - x_1} \{(y_0 - y_1)x - x_1 y_0 + x_0 y_1\} \\ &= \frac{y_0 - y_1}{x_0 - x_1} x + \frac{1}{x_0 - x_1} (-x_1 y_0 + x_0 y_1 + x_0 y_0 - x_0 y_0) \\ &= \frac{y_0 - y_1}{x_0 - x_1} x + \frac{1}{x_0 - x_1} \{(x_0 - x_1)y_0 + (y_1 - y_0)x_0\} \\ &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} (x - x_0) + y_0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

となり, これは線形内挿式 (5.4) と同じである.

5.3.4 3点の場合

次に3点の場合について考える. すなわち $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$ が与えられたとき, $p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ であり, 曲線 $y = p_2(x)$ は $a \neq 0$ であれば, 放物線となる. ここで

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 = y_0 & (5.15a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 = y_1 & (5.15b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 = y_2 & (5.15c) \end{cases}$$

が成り立つので, これを解くと $p_2(x)$ は

$$p_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2 \quad (5.16)$$

5.3.5 誤差

ラグランジュの内挿多項式 $p_N(x)$ と関数 $f(x)$ の誤差 $f(x) - p_N(x)$ について

$$f(x) - p_N(x) = \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_N) \quad (x_0 < x < x_N) \quad (5.17)$$

を満たす $x_0 < \xi < x_N$ が存在する. $f^{(N+1)}(x)$ は $f(x)$ の $N+1$ 階導関数であり, ξ は x, x_j に依存する. 付録 A において ξ の証明を行う.

5.4 エルミート内挿

5.4.1 エルミート内挿とは

関数値と微分値が与えられているときに内挿を考えることができる。これがエルミート内挿である。微分値が与えて解くという意味では後述のスプライン内挿と同じであるが、スプライン内挿は各点の間ごとに異なる形の内挿多項式を用いて定義するのに対し、エルミート内挿では全ての点を1つの多項式で内挿する点異なる。

$x - y$ 平面に $N + 1$ 個の点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$ が与えられているとする。ただし $x_0 < x_1 < \dots < x_N$ である。このとき関数 $y = f(x)$ で定められる関数値

$$y_i = f(x_i) \tag{5.18}$$

並びに微分値

$$y'_i = f'(x_i) \tag{5.19}$$

がわかっているとす。ここで $2N + 1$ 次の多項式 $p_{2N+1}(x)$ が次の条件

$$p_{2N+1}(x_i) = y_i \tag{5.20a}$$

$$p'_{2N+1}(x_i) = y'_i \tag{5.20b}$$

を満たすように定める。これを $2N + 1$ 次エルミート内挿多項式という。

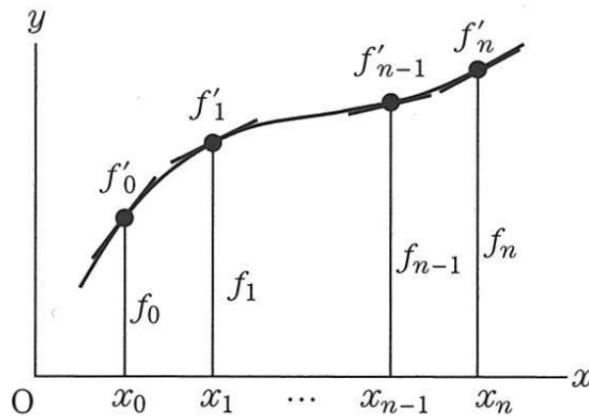


図 5.3: エルミート内挿の概要. 点 (x_i, y_i) における関数 $f_i(x_i)$ の 1 階微分値 f'_i からわかる接線を示している.

5.4.2 エルミート内挿多項式の導出

求める多項式 p_{2N+1} をラグランジュの内挿多項式を一般化した形で

$$p_{2N+1}(x) = \sum_{i=0}^N h_i(x)y_i + \sum_{i=0}^N g_i(x)y'_i \quad (5.21)$$

とおく. ここで $h_i(x), g_i(x)$ は未知多項式である.

多項式 (5.21) が式 (5.20a) を満たすため. 未知多項式 $h_i(x), g_i(x)$ が満たさなければならぬ条件は次のようになる.

まず未知多項式 $h_i(x), g_i(x)$ が式 (5.20a) を満たすための条件は

$$h_i(x_j) = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}, \quad (5.22a)$$

$$g_i(x_j) = 0 \text{ (すべての } j) \quad (5.22b)$$

である. また $h_i(x), g_i(x)$ が式 (5.20b) を満たすための条件は

$$h'_i(x_j) = 0 \text{ (すべての } j), \quad (5.23a)$$

$$g'_i(x_j) = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (5.23b)$$

である. 上の条件を満たすために関数

$$\phi_i(x) = (x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_N) \quad (5.24)$$

を導入する. 因数 $(x - x_i)$ が含まれないことに注意されたい. これを 2 乗して得られる $2N$ 次の多項式

$$q_i(x) = \{\phi_i(x)\}^2 = (x - x_0)^2 \dots (x - x_{i-1})^2 (x - x_{i+1})^2 \dots (x - x_N)^2 \quad (5.25)$$

を考える. この多項式は, $x = x_i$ を除く全ての $x = x_j$ について 0 となり,

$$\begin{aligned} q_i(x_j) &= 0 \quad (j \neq i), \\ q'_i(x_j) &= 0 \quad (j \neq i) \end{aligned} \quad (5.26)$$

を満たす. ここから未知多項式 $h_i(x), g_i(x)$ を求める.

まず $h_i(x)$ について, 式 (5.26) に注意して $h_i(x)$ を未知定数 a_i, b_i を含む $2N + 1$ 次の多項式

$$h_i(x) = q_i(x)\{a_i(x - x_i) + b_i\} \quad (5.27)$$

とおく. これは $x = x_i$ を除くすべての $x = x_j$ について条件を満たしている. したがってこれが求める多項式となるためには, $x = x_i$ に対する条件を満たせばよい. この条件は

$$\begin{aligned} h_i(x_i) &= 1, \\ h'_i(x_i) &= 0 \end{aligned} \tag{5.28}$$

である. 式 (5.27) がこの式を満たすための条件は

$$\begin{aligned} q_i(x_i)b_i &= 1, \\ q'_i(x_i)b_i + q_i(x_i)a_i &= 0 \end{aligned} \tag{5.29}$$

となる. この式から

$$a_i = -\frac{q'_i(x_i)}{\{q_i(x_i)\}^2}, \tag{5.30a}$$

$$b_i = \frac{1}{q_i(x_i)} \tag{5.30b}$$

が得られる. 未知定数 a_i, b_i が得られたので式 (5.27) に代入して

$$h_i(x) = \frac{q_i(x)}{q_i(x_i)} \left\{ 1 - (x - x_i) \frac{q'_i(x_i)}{q_i(x_i)} \right\} \tag{5.31}$$

となる. ここでラグランジュの内挿多項式における $l_j(x)$ (式 (5.7)) を思い出すと

$$l_j(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{j-1})(x - x_{j+1})\dots(x - x_N)}{(x_j - x_0)(x_j - x_1)\dots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\dots(x_j - x_N)} \quad (j = 0, 1, \dots, N)$$

である. これと式 (5.25) より

$$\frac{q_i(x)}{q_i(x_i)} = \{l_i(x)\}^2 \tag{5.32}$$

と表すことができる. これを微分して $x = x_i$ とおき, 式 (5.8)

$$l_j(x_i) = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

に注意すると

$$\frac{q'_i(x_i)}{q_i(x_i)} = 2l_i(x_i)l'_i(x_i) = 2l'_i(x_i) \tag{5.33}$$

が得られる. これらより式 (5.31) は

$$h_i(x) = \{l_i(x)\}^2 \{1 - 2l'_i(x_i)(x - x_i)\} \tag{5.34}$$

となる。

次に上記 $h_i(x)$ と同じように未知多項式 $g_i(x)$ を求める。式 (5.26) に注意して, $g_i(x)$ を未知定数 c_i, d_i を含む $2n+1$ 次の多項式

$$g_i(x) = q_i(x)\{c_i(x - x_i) + d_i\} \quad (5.35)$$

とおく。これは $x = x_i$ を除くすべての $x = x_j$ について条件を満たしている。したがってこれが求める多項式となるためには, $x = x_i$ に対する条件を満たせばよい。この条件は

$$\begin{aligned} g_i(x_i) &= 0, \\ g_i'(x_i) &= 1 \end{aligned} \quad (5.36)$$

である。式 (5.35) がこの式を満たすための条件は

$$\begin{aligned} q_i(x_i)d_i &= 0, \\ q_i'(x_i)d_i + q_i(x_i)c_i &= 1 \end{aligned} \quad (5.37)$$

となる。この式から

$$d_i = 0, \quad (5.38a)$$

$$c_i = \frac{1}{q_i(x_i)} \quad (5.38b)$$

が得られる。これを式 (5.35) に代入して

$$g_i(x) = \frac{q_i(x)}{q_i(x_i)}(x - x_i) \quad (5.39)$$

となる。式 (5.32) より (5.39) は

$$g_i(x) = \{l_i(x)\}^2(x - x_i) \quad (5.40)$$

となる。

以上で未知多項式 $h_i(x), g_i(x)$ が定まった。これらを式 (5.21) に代入すると, 求める多項式 $p_{2N+1}(x)$ は

$$p_{2N+1}(x) = \sum_{i=0}^n \{l_i(x)\}^2 \{1 - 2l_i'(x_i)(x - x_i)\}y_i + \sum_{i=0}^n \{l_i(x)\}^2(x - x_i)y_i' \quad (5.41)$$

となる。この得られた多項式 $p_{2N+1}(x)$ をエルミートの内挿多項式という。

5.4.3 ルンゲ現象

ラグランジュ内挿やエルミート内挿など、内挿計算を全区間に対して行う場合、特に多次元多項式を用いるときに望ましくない結果が得られてしまう場合がある。この例を図 5.4 に示す。これは実線で示された関数

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2} \tag{5.42}$$

に対して、区間 $[-5, 5]$ を 10 等分した点で関数 $f(x)$ をラグランジュ内挿した結果を破線で示したものである。この図より、区間の境界付近において内挿多項式は大きく振動していることがわかる。これはルンゲ現象と呼ばれている。これはエルミー

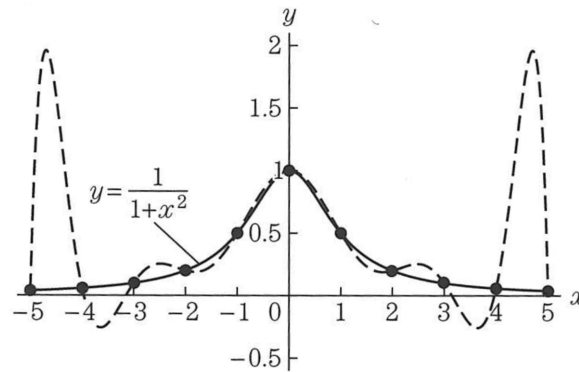


図 5.4: ルンゲ現象の例. 実線が真の解, 破線がラグランジュ内挿多項式による内挿した解を示す。

ト内挿も 1 つの多項式で内挿するため、同じようなことが生じる可能性がある。

5.5 スプライン内挿

5.5.1 スプライン内挿とは

スプライン内挿は滑らかな曲線関数同士をその境界において滑らかに接続するような方法である。ここでは 3 次スプライン内挿について述べる。

$x - y$ 平面に $N + 1$ 個の点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$ が与えられているとする。ただし $x_0 < x_1 < \dots < x_N$ である。3 次スプライン内挿によって得られる曲線を $y = S(x)$ とする。 $S(x)$ を 3 次のスプラインと呼ぶ。 $S(x)$ は各区間 $[x_j, x_{j+1}]$ ($j =$

$0, 1, \dots, N-1$) で区分的に定義されているとする. $x_j \leq x \leq x_{j+1}$ の区間で $S(x) = S_j(x)$ とする. $S_j(x)$ は

$$S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.43)$$

で与えられているとする. ここでスプライン $S(x)$ に対して以下の条件を与える.

- (1) 曲線 $y = S(x)$ は連続であり, 点 (x_j, y_j) ($j = 0, 1, \dots, N$) を全て通る.
- (2) 区間の境目, $x = x_j$ ($j = 1, 2, \dots, N-1$) で, $y = S(x)$ の 1 階微分係数及び, 2 階微分係数が連続である.

この 2 つの条件が区間の境界における曲線の滑らかさを与えている.

各区間ごとに多項式を定義するため, 精度のよい多項式が各々の区間で得られ, また各区間の境界において多項式の微分値を一致させるような条件が課されているため, 非常に滑らかな内挿多項式が得られる.

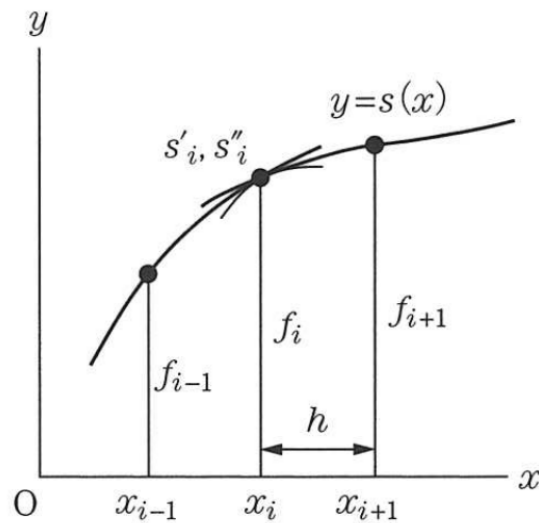


図 5.5: スプライン内挿の概要. 点 (x_i, y_i) における関数 $f_i(x_i)$ の 1 階微分及び 2 階微分値 S'_i, S''_i を示している.

5.5.2 スプライン内挿多項式の導出

(1) 及び (2) の条件から

$$S_j(x_j) = y_j \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.44a)$$

$$S_j(x_{j+1}) = y_{j+1} \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.44b)$$

$$S'_j(x_{j+1}) = S'_{j+1}(x_{j+1}) \quad (j = 0, 1, \dots, N-2) \quad (5.44c)$$

$$S''_j(x_{j+1}) = S''_{j+1}(x_{j+1}) \quad (j = 0, 1, \dots, N-2) \quad (5.44d)$$

が導かれる. これら 4 つの条件から式 (5.43) の定数 a_j, b_j, c_j, d_j を決定する.

まず $x = x_j$ における $S(x)$ の 2 階微分係数を

$$u_j = S''(x_j) \quad (j = 0, 1, \dots, N) \quad (5.45)$$

と u_j で表す. このとき式 (5.43) から

$$S''_j(x_j) = 2b_j = u_j \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.46)$$

となるので,

$$b_j = \frac{u_j}{2} \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.47)$$

となる. さらに

$$S''_j(x_{j+1}) = 6a_j(x_{j+1} - x_j) + 2b_j = u_{j+1} \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.48)$$

であるので,

$$a_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{6(x_{j+1} - x_j)} \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.49)$$

となる. $S''(x_j)$ の値を一意に u_j と定義したので, 式 (5.46), (5.48) から式 (5.44b) が自動的に満足される. 式 (5.44a), (5.43) から

$$d_j = y_j \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.50)$$

は明らかである. また式 (5.44b) から

$$a_j(x_{j+1} - x_j)^3 + b_j(x_{j+1} - x_j)^2 + c_j(x_{j+1} - x_j) + d_j = y_{j+1} \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.51)$$

であるので, 式 (5.47), (5.49), (5.50) を代入して,

$$c_j = \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{1}{6}(x_{j+1} - x_j)(2u_j + u_{j+1}) \quad (j = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5.52)$$

となる. 次に式 (5.44c) の条件は式 (5.43) から

$$3a_j(x_{j+1} - x_j)^2 + 2b_j(x_{j+1} - x_j) + c_j = c_{j+1} \quad (5.53)$$

と表される. これに式 (5.47), (5.49), (5.52) を代入すると,

$$\begin{aligned} & (x_{j+1} - x_j)u_j + 2(x_{j+2} - x_j)u_{j+1} + (x_{j+2} - x_{j+1})u_{j+2} \\ &= 6 \left(\frac{y_{j+2} - y_{j+1}}{x_{j+2} - x_{j+1}} - \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} \right) \quad (j = 0, 1, \dots, N - 2) \end{aligned} \quad (5.54)$$

という u_j に対する条件式が得られる. 式 (5.54) を $j = 0, 1, \dots, N - 2$ の順に並べると

$$\begin{cases} h_0 u_0 + 2(h_0 + h_1)u_1 + h_1 u_2 = v_1 \\ h_1 u_1 + 2(h_1 + h_2)u_2 + h_2 u_3 = v_2 \\ \dots\dots\dots \\ h_{N-2} u_{N-2} + 2(h_{N-2} + h_{N-1})u_{N-1} + h_{N-1} u_N = v_{N-1} \end{cases} \quad (5.55)$$

という u_0, u_1, \dots, u_N に関する連立 1 次方程式の形をしていることがわかる. ただし

$$h_j = x_{j+1} - x_j \quad (j = 0, 1, \dots, N - 1) \quad (5.56)$$

$$v_j = 6 \left(\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}} \right) \quad (j = 0, 1, \dots, N - 1) \quad (5.57)$$

とする. h_j, v_j は最初に与えられている x_j, y_j だけで定義されているので, 式 (5.55) では既知の定数である.

スプラインの境界条件

未知変数 u_j は全部で u_0 から u_N の $N + 1$ 個ある. 式 (5.55) の方程式の数は $N - 1$ 個であり, これだけでは u_j を一意に決定することはできない. そこで曲線の両端の点 $(x_0, y_0), (x_N, y_N)$ でそれぞれの境界条件を新たにひとつずつ考える. 境界条件にはいくつか考えられ, 曲線の形を端点においてどのように設定するかによって変わってくる.

ここでは曲線の傾きの変化率が両端で 0 であるという条件を採用する. つまり 2 階微分が 0 であるということであり, 式で表すと

$$S''(x_0) = S''(x_N) = 0, \quad (5.58)$$

$$S''(x_0) = S''_{N-1}(x_N) = 0 \quad (5.59)$$

となる. この条件を課して定まるスプラインを自然スプライン曲線という.

このとき式 (5.45) から $u_0 = u_N = 0$ となる. この境界条件を考慮して式 (5.55) を行列で表現すると

$$\begin{pmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & & & 0 \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ 0 & h_{N-3} & 2(h_{N-3} + h_{N-2}) & h_{N-2} & \\ & & h_{N-2} & 2(h_{N-2} + h_{N-1}) & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{N-2} \\ v_{N-1} \end{pmatrix} \quad (5.60)$$

というように, u_1 から u_{N-1} に関する連立 1 次方程式になる. この連立 1 次方程式の左辺に現れる行列は係数行列であり, 3 重対角 (tridiagonal) とよばれる特別な形をしている. この連立 1 次方程式を解いて¹⁾ u_j について求まると u_j, x_j, y_j から式 (5.47), (5.49), (5.50), (5.52) を用いて a_j, b_j, c_j, d_j について解くことができ, 以上から式 (5.43) からスプライン $S_j(x)$ が求まる.

以上の手続きについてまとめると以下のようなになる.

(1) $N + 1$ 個の点 $(x_j, y_j), (j = 0, 1, \dots, N)$ が与えられる.

(2) 3 次スプライン $S(x)$ は区分的に

$$\begin{aligned} S(x) &= S_j(x) \\ &= a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j \quad (x_j \leq x \leq x_{j+1}) \end{aligned}$$

であるとする.

(3) $S''(x_j) = u_j \quad (j = 0, 1, \dots, N)$ とする.

(4) 曲線の両端での境界条件を $S''(x_0) = S''(x_N) = 0$ とする. ここから $u_0 = u_N = 0$ となる.

(5) 式 (5.57)

$$\begin{aligned} h_j &= x_{j+1} - x_j & (j = 0, 1, \dots, N - 1) \\ v_j &= 6 \left(\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}} \right) & (j = 0, 1, \dots, N - 1) \end{aligned}$$

¹⁾付録 B 参照.

から h_j, v_j ($j = 0, 1, \dots, N - 1$) を計算し, 連立 1 次方程式 (5.60) を解いて, u_1 から u_{N-1} を求める.

(6) 式 (5.47), (5.49), (5.50), (5.52)

$$\begin{aligned} b_j &= \frac{u_j}{2}, \\ a_j &= \frac{u_{j+1} - u_j}{6(x_{j+1} - x_j)}, \\ d_j &= y_j, \\ c_j &= \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{1}{6}(x_{j+1} - x_j)(2u_j + u_{j+1}) \\ &\quad (j = 0, 1, \dots, N - 1) \end{aligned}$$

を用いて a_j, b_j, c_j, d_j ($j = 0, 1, \dots, N - 1$) を計算する. ここから $S(x)$ が求まる.

上記手順において, 曲線の両端での境界条件を 0 であるとして考えたが境界条件は他にも考えられる. 例えば両端で曲線の傾きを指定するという条件である. α, β をそれぞれ $x = x_0, x = x_N$ における曲線の傾きの値であるとして,

$$S'(x_0) = \alpha, \quad S'(x_N) = \beta \tag{5.61}$$

とする. この場合は式 (5.60) の連立 1 次方程式を修正する必要がある. このとき式 (5.43) より

$$S'_0(x_0) = c_0 = \frac{1}{h_0}(y_1 - y_0) - \frac{h_0}{6}(2u_0 + u_1) = \alpha \tag{5.62}$$

$$\begin{aligned} S'_{N-1}(x_N) &= 3a_{N-1}h_{N-1}^2 + b_{N-1}h_{N-1} + c_{N-1} \\ &= \frac{1}{h_{N-1}}(y_N - y_{N-1}) + \frac{h_{N-1}}{6}(u_{N-1} + 2u_N) = \beta \end{aligned} \tag{5.63}$$

となる. したがってこの式を書き換えて

$$2h_0u_0 + h_0u_1 = \frac{6}{h_0}(y_1 - y_0) - 6\alpha, \tag{5.64}$$

$$h_{N-1}u_{N-1} + 2h_{N-1}u_N = 6\beta - \frac{6}{h_{N-1}}(y_N - y_{N-1}) \tag{5.65}$$

空間微分値を示す.

- 1). (x_i, y_j) と (x_{i+1}, y_j) 上の f, f_x を用いて, x 方向の 1 次元エルミート 3 次内挿により座標 (x_B, y_j) での f を求める.
- 2). (x_i, y_j) と (x_{i+1}, y_j) 上の f_y, f_{xy} を用いて, x 方向の内挿により座標 (x_B, y_j) での f_y を求める.
- 3). (x_i, y_{j+1}) と (x_{i+1}, y_{j+1}) 上の f, f_x を用いて, x 方向の内挿により座標 (x_B, y_{j+1}) での f を求める.
- 4). (x_i, y_{j+1}) と (x_{i+1}, y_{j+1}) 上の f_y, f_{xy} を用いて, x 方向の内挿により座標 (x_B, y_{j+1}) での f_y を求める.
- 5). 上記手順 1-4 で求めた $f(x_B, y_j), f_y(x_B, y_j), f(x_B, y_{j+1}), f_y(x_B, y_{j+1})$ を用いて y 方向にエルミート 3 次内挿を行うことで, 求めたい値 $f(x_B, y_B)$ が得られる.

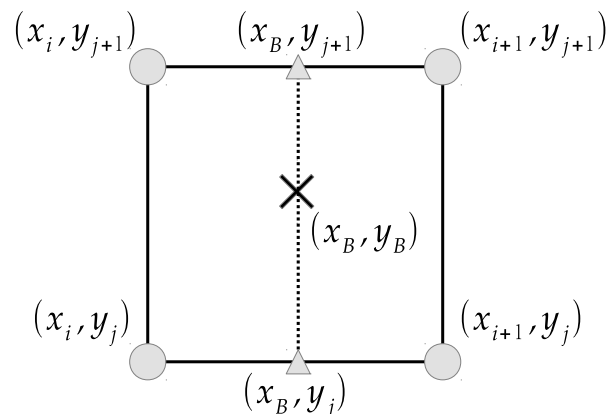


図 5.6: 方向分離法の考え方の概要. \times 印が内挿したい座標 (x_B, y_B) である. 内挿計算に用いる周囲 4 点の格子点と, 計算過程でてくる補助的な点を示している.

図 5.6 に方向分離の概要を示す. この方法は求めたい座標の周囲にある格子点 4 点における値とその 1 階微分値, 2 階微分値を用いて計算する. したがって全部で 16 個の値を用いて内挿計算を行うことになる.

変則エルミート 5 次内挿法はこの方法を発展させたものである.

5.6.3 変則エルミート5次内挿とは

DCPAMにおける物質移流計算では内挿多項式を5次の多項式として、内挿精度を上げて計算している。通常の空間1次元におけるエルミート5次内挿は値を内挿したい場合、周囲2点の f, f_x, f_{xx} と、空間2階微分まで必要となる(図5.7参照)。これを2次元空間に拡張すると、計算するのに必要な要素が $f, f_x, f_y, f_{xx}, f_{xy}, f_{yy}, f_{xxy}, f_{xyy}, f_{xxyy}$ となり、計算すべき微分値が大幅に増えてしまう。そのため変則エルミート5次内挿法を利用する。変則エルミート5次内挿法は内挿したい座標の周囲2つの格子点における f, f_x に加えて、それぞれもうひとつ外側の格子点における f を利用することによって、計算に必要な要素のうち微分が必要な要素の数を減らしている。

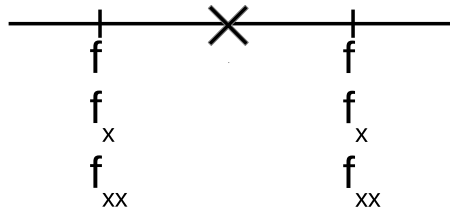


図 5.7: 一般的なエルミート5次内挿に必要な要素。

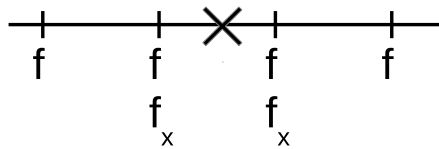


図 5.8: 変則エルミート5次内挿に必要な要素。

図 5.7, 図 5.8 は一般的なエルミート5次内挿と変則エルミート5次内挿を空間1次元の場合において比較したものである。×印が内挿したい座標を表し、 f, f_x, f_{xx} で内挿に必要な周りの座標における値, 1階微分値, 2階微分値を表す。

5.6.4 変則エルミート5次内挿多項式の導出

等間隔格子の場合

内挿したい座標のすぐ左側(座標が減少する側)の点の座標を原点として、座標をとりなおすと、周囲4点の座標はそれぞれ $-\Delta x, 0, \Delta x, 2\Delta x$ である。内挿多項式 $f(x)$

を

$$f(x) = a_5x^5 + a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0 \quad (5.67)$$

とする. この導関数 $g(x)$ は

$$g(x) = 5a_5x^4 + 4a_4x^3 + 3a_3x^2 + 2a_2x + a_1 \quad (5.68)$$

となる. 既知の値は $f(-\Delta x), f(0), f(\Delta x), f(2\Delta x), g(0), g(\Delta x)$ なので以下の連立方程式が成り立つ.

$$f(-\Delta x) = -a_5\Delta x^5 + a_4\Delta x^4 - a_3\Delta x^3 + a_2\Delta x^2 + a_1\Delta x + a_0, \quad (5.69)$$

$$f(0) = a_0, \quad (5.70)$$

$$f(\Delta x) = a_5\Delta x^5 + a_4\Delta x^4 + a_3\Delta x^3 + a_2\Delta x^2 + a_1\Delta x + a_0, \quad (5.71)$$

$$f(2\Delta x) = 32a_5\Delta x^5 + 16a_4\Delta x^4 + 8a_3\Delta x^3 + 4a_2\Delta x^2 + 2a_1\Delta x + a_0, \quad (5.72)$$

$$g(0) = a_1, \quad (5.73)$$

$$g(\Delta x) = 5a_5\Delta x^4 + 4a_4\Delta x^3 + 3a_3\Delta x^2 + 2a_2\Delta x + a_1. \quad (5.74)$$

式 (5.70), (5.73) より, a_0, a_1 は自明である. したがって上記の連立方程式は実質的には 4 元連立方程式である. これをとりて $f(x)$ を決定する.

この連立方程式を解くと係数 a_0 から a_5 は次のように表すことができる.

$$a_0 = f(0), \quad (5.75a)$$

$$a_1 = g(0), \quad (5.75b)$$

$$a_2 = \frac{1}{2\Delta x^4}[\Delta x g(\Delta x) - 2f(\Delta x) - 3a_5\Delta x^5 - a_3\Delta x^3 + a_1\Delta x + 2a_0], \quad (5.75c)$$

$$a_3 = \frac{1}{2\Delta x^3}[f(\Delta x) - f(-\Delta x) - 2a_5\Delta x^5 - 2a_1\Delta x], \quad (5.75d)$$

$$a_4 = \frac{1}{2\Delta x^4}[\Delta x g(\Delta x) - 2f(\Delta x) - 3a_5\Delta x^5 - a_3\Delta x^3 + a_1\Delta x + 2a_0], \quad (5.75e)$$

$$a_5 = \frac{1}{12\Delta^5}[f(2\Delta x) + 9f(\Delta x) - f(-\Delta x) - 6\Delta x g(\Delta x) - 6a_1\Delta x + 9a_0] \quad (5.75f)$$

この係数は全て既知の値から求めることができる. これを用いて, 内挿したい値は

$$f(\xi) = a_5\xi^5 + a_4\xi^4 + a_3\xi^3 + a_2\xi^2 + a_1\xi + a_0 \quad (5.76)$$

このように表される. ここで ξ は求めたい場所の座標である.

不等間隔格子の場合

内挿したい座標のすぐ左側 (座標が減少する側) の店の座標を原点として, 座標をとりなおす. このとき周囲 4 点の座標をそれぞれ $\Delta x_{21}, 0, \Delta x_{23}, \Delta x_{24}$ と表す. こ

ここで $\Delta x_{21} < 0$ であることに注意する. 不等間隔格子の場合でも, 原理的には等間隔格子のときと同様に 4 元連立方程式を解けばよいが, そのまま解こうとすると式が煩雑になってしまう. そこで Δx_{23} が大きき 1 となるように座標変換を行なって考えることにする. 変換後の座標を X で表すと, $X = r, 0, 1, t$ である. ただし $r \equiv \Delta x_{21}/\Delta x_{23}$, $t \equiv \Delta x_{24}/\Delta x_{23}$ とする.

内挿多項式 $F(X)$ を

$$F(X) = a_5 X^5 + a_4 X^4 + a_3 X^3 + a_2 X^2 + a_1 X + a_0 \quad (5.77)$$

とする. この導関数 $G(x)$ は

$$G(x) = 5a_5 X^4 + 4a_4 X^3 + 3a_3 X^2 + 2a_2 X + a_1 \quad (5.78)$$

となる. 既知の値は $F(r) = f(\Delta x_{21})$, $F(0) = f(0)$, $F(1) = f(\Delta x_{23})$, $F(t) = f(\Delta x_{24})$, $G(0) = g(0)\Delta x_{23}$, $G(1) = g(\Delta x_{23})\Delta x_{23}$ である. 変換により座標が伸縮したため, 元々の空間微分値に Δx_{23} をかけている. (5.70), (5.73) に対応する自明な式は次のように書かれる.

$$a_0 = f(0) \quad (5.79)$$

$$a_1 = g(0)\Delta x_{23} \quad (5.80)$$

さらに

$$F_1 \equiv F(r) - a_0 - a_1 r \quad (5.81)$$

$$F_3 \equiv F(1) - a_0 - a_1 \quad (5.82)$$

$$F_4 \equiv F(t) - a_0 - a_1 t \quad (5.83)$$

$$F_3 \equiv G(r) - a_1 \quad (5.84)$$

と置くと, 解くべき連立方程式は

$$a_5 + a_4 + a_3 + a_2 = F_3 \quad (5.85)$$

$$a_5 r^5 + a_4 r^4 + a_3 r^3 + a_2 r^2 = F_1 \quad (5.86)$$

$$a_5 t^5 + a_4 t^4 + a_3 t^3 + a_2 t^2 = F_4 \quad (5.87)$$

$$5a_5 + 4a_4 + 3a_3 + 2a_2 = G_3 \quad (5.88)$$

となる. この連立方程式の数値解は

$$a_5 = \frac{F_1}{(r-1)^2 r^2 (r-t)} - \frac{G_3}{(t-1)^2 t^2 (r-t)} - \frac{[4 + 2rt - 3(r+t)]F_4}{(r-1)^2 (t-1)^2} + \frac{G_3}{(r-1)(t-1)} \quad (5.89)$$

$$a_4 = -\frac{(t+2)F_3}{(r-1)^2 r^2 (r-t)} + \frac{(t+2)F_4}{(t-1)^2 t^2 (r-t)} + \frac{[5 - 3(r^2 + rt + t^2) + 2rt(r+t)]F_3}{(r-1)^2 (t-1)^2} - \frac{(r+t+1)G_3}{(r-1)(t-1)} \quad (5.90)$$

$$a_3 = -2F_3 + 1 - 3a_5 - 2a_4 \quad (5.91)$$

$$a_2 = F_3 - a_5 - a_4 - a_3 \quad (5.92)$$

で計算できる. したがって内挿したい場所の座標を $X = \Theta = \xi/\Delta x_{23}$ とすると内挿多項式 F は次のように表される.

$$F(\Theta) = a_5 \Theta^5 + a_4 \Theta^4 + a_3 \Theta^3 + a_2 \Theta^2 + a_1 \Theta + a_0 \quad (5.93)$$

第6章 まとめ

物質移流について数値計算を行うために空間を離散化する方法として空間を分割して考えるオイラー法, 粒子に着目して考えるラグランジュ法, オイラー法とラグランジュ法を組み合わせるセミラグランジュ法があることがわかった. セミラグランジュ法ではオイラー法とラグランジュ法の両方の利点を得られる一方, 物質の各時刻における位置やその状態について内挿法を用いて求める必要がある.

内挿法にはいくつか考え方があり, 2点間が線形に変化したと考え, 単純に直線で2点を結ぶ線形内挿. 与えられた点 $(x_j, f(x_j))$ を全て通るような多項式を求めるラグランジュ内挿. 与えられた点とその位置における微分値を用いることで全ての点を通り, 且つそれぞれの点における微分値が一致するような多項式を求めるエルミート内挿. 与えられた各点において $[x_j, x_{j+1}]$ ごとに内挿多項式を定義し, さらにそれぞれの多項式が境界である各点においてその微分値が一致するような条件を考える. これによって各区間において適当な多項式が得られ, 且つ多項式間が滑らかに接続するように工夫されたものを求めるスプライン内挿などがあることがわかった.

特に大気大循環モデルの1つ DCPAM においては, エルミート内挿を利用した変則エルミート5次内挿という方法が用いられている. 方向分離という考え方とこの方法を用いることによって, 3次元空間において精度の高い内挿方法を実現していることがわかった.

以上より物質移流スキームはどのような方法で数値計算が行われているのかその原理を知ることができた. 今後は実際に調べた方法が移流計算において計算精度や計算コストにどのように関係していくか調べ, 適切な方法を知ることによって, 効率よく, 精度のよいシミュレーションができるようにしていきたい.

付録 A ラグランジュ内挿における誤差

ラグランジュの内挿多項式 $p_N(x)$ と関数 $f(x)$ の誤差 $f(x) - p_N(x)$ について

$$f(x) - p_N(x) = \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_N) \quad (x_0 < x < x_N) \quad (\text{A.1})$$

を満たす $x_0 < \xi < x_N$ が存在することを示す. $f^{(N+1)}(x)$ は $f(x)$ の $N + 1$ 階導関数である.

まず $\Pi(x), G(x)$ を次のように定める.

$$\Pi(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_N), \quad (\text{A.2})$$

$$G(x) = \frac{f^{(N+1)}(x)}{(N+1)!}. \quad (\text{A.3})$$

このとき $f(x) - p_N(x)$ は

$$f(x) - p_N(x) = \Pi(x)G(x) \quad (\text{A.4})$$

と表される. ここで右辺を移項して $F(x)$ を以下のようにおく.

$$F(x) = f(x) - p_N(x) - \Pi(x)G(x) = 0. \quad (\text{A.5})$$

これは $N + 1$ 個の点 $x = x_0, x_1, \dots, x_N$ において $F(x) = 0$ を満たす. 区間 $[x_0, x_N]$ 内に新たに x_k を選び, $G(x)$ を次のように定義する.

$$G(x_k) = \frac{f(x_k) - p_N(x_k)}{\Pi(x_k)}. \quad (\text{A.6})$$

このとき $F(x_k) = 0$ となり, $F(x) = 0$ を満たす点は $N + 2$ 個存在する.

$F(x_0) = F(x_1) = 0$ にロルの定理を適用すると, $F'(\xi_0) = 0$ となる ξ_0 が区間 (x_0, x_1) に少なくとも 1 つ存在する. 同様にして $F(x) = 0$ となる x が $N + 2$ 個存在する場合, $F'(x) = 0$ となる x が区間 (x_0, x_N) に少なくとも $N + 1$ 個存在する. した

がって $F''(x) = 0$ となる N 個の x が区間 (x_0, x_N) に存在し、これを繰り返して、 $F^{(N+1)}(x) = 0$ となる少なくとも 1 つの $x = \xi$ が区間 (x_0, x_k) に存在する。

次に $F^{N+1}(x)$ を求める。 $p_N(x)$ は N 次の多項式であるので $P_N^{(N+1)}(x) = 0$ である。また $\Pi^{(N+1)}(x) = (N+1)!$ である。したがって

$$\begin{aligned} F(x) &= f(x) - p_N(x) - \Pi(x)G(x) \\ F^{(N+1)}(x) &= f^{(N+1)}(x) - (N+1)!G(x). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$x = \xi$ のとき、 $F^{(N+1)}(\xi) = 0$ なので、

$$0 = f^{(N+1)}(\xi) - (N+1)!G(\xi). \quad (\text{A.8})$$

これより $G(\xi)$ は

$$G(\xi) = \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} \quad (\text{A.9})$$

と表される。この $G(\xi)$ を式 (A.4) に代入すると

$$\begin{aligned} f(x) - p_N(x) &= \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} \Pi(x) \\ &= \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_N) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

これは式 (A.1) と一致する。以上より、区間 (x_0, x_N) において式 (A.1) を満たす ξ が存在することが証明された。

付録 B 式 (5.60) の解の導出手順

式 (5.60) は以下である.

$$\begin{pmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & & & 0 \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ 0 & h_{N-3} & 2(h_{N-3} + h_{N-2}) & h_{N-2} & \\ & & h_{N-2} & 2(h_{N-2} + h_{N-1}) & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{N-2} \\ v_{N-1} \end{pmatrix}$$

これを一般化した行列

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & 0 \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & b_N & a_N \end{pmatrix}}_{\text{係数行列 } A} \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix}}_{\text{ベクトル } x} = \underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}}_{\text{ベクトル } y} \quad (\text{B.1})$$

について考える. 係数行列 A は 0 でない成分が対角に 3 重の帯状に並んでいるので, 3 重対角行列 (tridiagonal) と呼ばれる. 式 (5.60) の各 u_j ($j = 1, 2, \dots, N-1$) を求めることはベクトル x の各成分を求めることを同じである.

まず行列 A を次のように 2 つの行列 L, U の積で表す.

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & 0 \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & & & b_N & a_N \end{pmatrix}}_A \\
 = & \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & l_{N-1} & 1 \\ & & & & l_N & 1 \end{pmatrix}}_L \underbrace{\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & 0 \\ d_2 & c_2 & & & \\ & d_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & d_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & d_N \end{pmatrix}}_U \quad (B.2)
 \end{aligned}$$

L は対角成分より上の成分が全て 0 であるので下三角行列 (lower triangular matrix) と呼ばれる. ただし, 式 (B.2) は対角成分より下の成分も 0 が多いので下三角行列の中でも特別な形である. また U は上三角行列 (upper triangular matrix) と呼ばれる.

L, U が式 (B.2) から一意に定まることは, 実際に 2 つの行列の積を書き下してみればわかる. L, U の積をとり, A と比較すると

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & 0 \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & b_N & a_N \end{pmatrix} \\
 = & \begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & 0 \\ l_2 d_1 & d_2 + l_2 c_1 & c_1 & & \\ & l_3 d_2 & d_3 + l_3 c_2 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & l_{N-1} d_{N-2} & d_{N-1} + l_{N-1} c_{N-2} & c_{N-1} \\ & & & l_N d_{N-1} & d_N + l_N c_{N-1} \end{pmatrix} \quad (B.3)
 \end{aligned}$$

となる. 左辺と右辺を比較すると, c_1 から c_{N-1} の部分と成分が 0 の部分は両辺で

矛盾がないことがわかる. またその他の成分については

$$d_1 = a_1, \quad (\text{B.4a})$$

$$l_i = \frac{b_i}{d_{i-1}}, \quad (\text{B.4b})$$

$$d_i = a_i - l_i c_{i-1} \quad (i = 2, 3, \dots, N) \quad (\text{B.4c})$$

を満たさなければならない. この式を用いていると a_i, b_i, c_i の値から $d_1, l_2, d_2, l_3, d_3, \dots, l_N, d_N$ の順に値を計算することができる. したがって行列 A から L, U を一意に定めることができる. このように行列 A を L, U の積で表す過程を LU 分解 (LU decomposition) という.

LU 分解によって式 (B.1) を L, U に置き換えて

$$LU\mathbf{x} = \mathbf{y} \quad (\text{B.5})$$

と表せる. ここで新たに次のようなベクトル \mathbf{z} を考える.

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_N \end{pmatrix} = U\mathbf{x}$$

この \mathbf{z} を用いて式 (B.5) は $L\mathbf{z} = \mathbf{y}$ と書き換えることができる. したがって式

(B.5) は

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & l_{N-1} & 1 \\ & & & & l_N & 1 \end{pmatrix}}_L \underbrace{\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_{N-1} \\ z_N \end{pmatrix}}_z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 + l_2 z_1 \\ z_3 + l_3 z_2 \\ \vdots \\ z_{N-1} + l_{N-1} z_{N-2} \\ z_N + l_N z_{N-1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}}_y, \quad (\text{B.6a})$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & 0 \\ & d_2 & c_2 & & \\ & & d_3 & c_3 & \\ & & & \ddots & \ddots \\ 0 & & & & d_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & & d_N \end{pmatrix}}_U \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix}}_x = \begin{pmatrix} d_1 x_1 + c_1 x_2 \\ d_2 x_2 + c_2 x_3 \\ d_3 x_3 + c_3 x_4 \\ \vdots \\ d_{N-1} x_{N-1} + c_{N-1} x_N \\ d_N + x_N \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_{N-1} \\ z_N \end{pmatrix}}_z \quad (\text{B.6b})$$

という連立の式に置き換わる. このとき式 (B.6a) から

$$z_1 = y_1, \quad z_i = y_i - l_i z_{i-1} \quad (i = 2, 3, \dots, N) \quad (\text{B.7})$$

となるので, z_1, z_2, \dots, z_N の順に z_i が決まる. この手続きを前進代入という. また式 (B.6b) から

$$x_i = \frac{z_i - c_i x_{i+1}}{d_i} \quad (i = 1, 2, \dots, N-1) \quad (\text{B.8})$$

$$x_N = \frac{z_N}{d_N} \quad (\text{B.9})$$

となるので, x_N, x_{N-1}, \dots, x_1 の順に x_i が決まる. この手続きを後退代入という. 以上のようにして求めるベクトル x の各要素が求まる.

これを式 (5.60) に適用して解く.

付録 C 式 (5.67) の係数の導出手順

変則エルミート 5 次内挿多項式 (5.67) の係数について導出手順をのせる。

$$\begin{array}{ccccccc}
 & + & & + & \times & + & + \\
 & | & & | & | & | & | \\
 f(-\Delta x) & & f(0) & & f(\Delta x) & & f(2\Delta x) \\
 & & g(0) & & g(\Delta x) & &
 \end{array}$$

図 C.1: 変則エルミート 5 次内挿の導出に利用する値. \times 印が内挿したい位置の座標.

内挿したい座標のすぐ左側 (座標が減少する側) の点の座標を原点として, 座標をとりなおすと, 周囲 4 点の座標はそれぞれ $-\Delta x, 0, \Delta x, 2\Delta x$ である. それぞれの点について $f(-\Delta x), f(0), f(\Delta x), f(2\Delta x), g(0), g(\Delta x)$ がわかっているとす. このとき内挿多項式 $f(x)$ を

$$f(x) = a_5x^5 + a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0 \quad (\text{C.1})$$

とする. この導関数 $g(x)$ は

$$g(x) = 5a_5x^4 + 4a_4x^3 + 3a_3x^2 + 2a_2x + a_1 \quad (\text{C.2})$$

となる. これらは次を満たす.

$$f(-\Delta x) = -a_5\Delta x^5 + a_4\Delta x^4 - a_3\Delta x^3 + a_2\Delta x^2 + a_1\Delta x + a_0, \quad (\text{C.3a})$$

$$f(0) = a_0, \quad (\text{C.3b})$$

$$f(\Delta x) = a_5\Delta x^5 + a_4\Delta x^4 + a_3\Delta x^3 + a_2\Delta x^2 + a_1\Delta x + a_0, \quad (\text{C.3c})$$

$$f(2\Delta x) = 32a_5\Delta x^5 + 16a_4\Delta x^4 + 8a_3\Delta x^3 + 4a_2\Delta x^2 + 2a_1\Delta x + a_0, \quad (\text{C.3d})$$

$$g(0) = a_1, \quad (\text{C.3e})$$

$$g(\Delta x) = 5a_5\Delta x^4 + 4a_4\Delta x^3 + 3a_3\Delta x^2 + 2a_2\Delta x + a_1. \quad (\text{C.3f})$$

これを満たす a_0 から a_5 を求める.

式 (C.3b), (C.3e) より, a_0, a_1 は自明である. したがって上記の連立方程式は実質的には 4 元連立方程式である. これをとりて $f(x)$ を決定する.

まず (C.3c) – (C.3a) より

$$f(\Delta x) - f(-\Delta x) = 2a_5\Delta x^5 + 2a_3\Delta x^3 + 2a_1\Delta x. \quad (\text{C.4})$$

(C.3d) – 4 × (C.3c) より

$$f(2\Delta x) - 4f(-\Delta x) = 28a_5\Delta x^5 + 12a_4\Delta x^4 + 4a_3\Delta x^3 - 2a_1\Delta x - 3a_0 \quad (\text{C.5})$$

$\Delta x \times$ (C.3f) – 2 × (C.3c) より

$$\Delta x g(\Delta x) - 2f(\Delta x) = 28a_5\Delta x^5 + 12a_4\Delta x^4 + 4a_3\Delta x^3 - 2a_1\Delta x - 3a_0. \quad (\text{C.6})$$

(C.5) – 6 × (C.6) より

$$f(2\Delta x) - 8f(\Delta x) - 6\Delta x g(\Delta x) = 10a_5\Delta x^5 - 2a_3\Delta x^3 + 4a_1\Delta x + 9a_0 \quad (\text{C.7})$$

(C.4) + (C.7) より

$$f(2\Delta x) + 9f(\Delta x) - f(-\Delta x) - 6\Delta x g(\Delta x) = 12a_5\Delta x^5 + 6a_1\Delta x + 9a_0 \quad (\text{C.8})$$

以上より

$$a_5 = \frac{1}{12\Delta^5} [f(2\Delta x) + 9f(\Delta x) - f(-\Delta x) - 6\Delta x g(\Delta x) - 6a_1\Delta x + 9a_0] \quad (\text{C.9})$$

となり, a_5 が求まる. これを既知の値として, 他の係数についても求める. 式 (C.4) より

$$a_3 = \frac{1}{2\Delta x^3} [f(\Delta x) - f(-\Delta x) - 2a_5\Delta x^5 - 2a_1\Delta x] \quad (\text{C.10})$$

となる. 同様に式 (C.6) より

$$a_4 = \frac{1}{2\Delta x^4} [\Delta x g(\Delta x) - 2f(\Delta x) - 3a_5\Delta x^5 - a_3\Delta x^3 + a_1\Delta x + 2a_0] \quad (\text{C.11})$$

また (C.3c) + (C.3a) で得られる式より

$$a_2 = \frac{1}{2\Delta x^4} [\Delta x g(\Delta x) - 2f(\Delta x) - 3a_5\Delta x^5 - a_3\Delta x^3 + a_1\Delta x + 2a_0] \quad (\text{C.12})$$

したがって a_0 から a_5 までまとめると次のようになる.

$$a_0 = f(0), \quad (\text{C.13a})$$

$$a_1 = g(0), \quad (\text{C.13b})$$

$$a_2 = \frac{1}{2\Delta x^4} [\Delta x g(\Delta x) - 2f(\Delta x) - 3a_5\Delta x^5 - a_3\Delta x^3 + a_1\Delta x + 2a_0], \quad (\text{C.13c})$$

$$a_3 = \frac{1}{2\Delta x^3} [f(\Delta x) - f(-\Delta x) - 2a_5\Delta x^5 - 2a_1\Delta x], \quad (\text{C.13d})$$

$$a_4 = \frac{1}{2\Delta x^4} [\Delta x g(\Delta x) - 2f(\Delta x) - 3a_5\Delta x^5 - a_3\Delta x^3 + a_1\Delta x + 2a_0], \quad (\text{C.13e})$$

$$a_5 = \frac{1}{12\Delta^5} [f(2\Delta x) + 9f(\Delta x) - f(-\Delta x) - 6\Delta x g(\Delta x) - 6a_1\Delta x + 9a_0] \quad (\text{C.13f})$$

これらは全て既知の値 $f(-\Delta x), f(0), f(\Delta x), f(2\Delta x), g(0), g(\Delta x)$ から求めることができる. 以上のようにして a_0 から a_5 を求めることができる.

謝辞

この論文を作成するにあたり、指導教員の石渡正樹准教授、小高正嗣助教授には多くの助言をいただき、指導していただきました。また、博士過程の荻原弘堯氏には初歩的な部分から丁寧に指導していただき、大変お世話になりました。同じく博士課程の山下達也氏、修士課程の増田和孝氏にも忙しい中、たくさんの助言をいただきました。その他、惑星宇宙グループの皆さまからも助言や励ましの言葉をいただきました。ご迷惑おかけしたことと共に、協力をしていただいた皆様へ心から感謝の意を表します。

参考文献

- [1] Hachisuka, T., 2006: Advection Equation Solver using Mapping Functions – Thesis for Bachelor of Engineering, The University of Tokyo, 45pp.
- [2] Kashimura, H., Enomoto, T., and Takahashi, Y., 2013: Non-negative filter using arcsine transformation for tracer advection with semi-Lagrangian scheme, SOLA. 9, 125-128
- [3] Staniforth, A., and J. Côté, 1991: Semi-Lagrangian integration scheme for atmospheric models - A review, Mon. Wea. Rev. 119, 2206-2203
- [4] 高橋 芳幸, 竹広 真一, 石渡 正樹, 納多 哲史, 小高 正嗣, 堀之内 武, 森川 靖大, 林 祥介, DCPAM 開発グループ, 2011: 惑星大気モデル DCPAM, <http://www.gfd-dennou.org/library/dcpam/>, 地球流体電脳倶楽部.
- [5] 高橋大輔, 1996: 数値計算 理工系の基礎数学 8, 岩波書店, 194pp.
- [6] 安田仁彦, 2008: 数値解析基礎, コロナ社, 197pp.
- [7] 矢部孝, 内海隆行, 尾形陽一, 2003: CIP 法 原子から宇宙までを解くマルチスケール解法, 森北出版, 222pp.