

陰的 Runge-Kutta 法およびスペクトル法による
非線形双曲型発展方程式の数値解法

岩田 順敬・武井 康浩

[研究論文]

陰的 Runge–Kutta 法およびスペクトル法による 非線形双曲型発展方程式の数値解法

岩田順敬¹・武井康浩²

1 関西大学、神奈川工科大学

2 みずほリサーチ&テクノロジーズ

Numerical scheme based on the implicit Runge–Kutta method and spectral method for calculating
nonlinear hyperbolic evolution equations

Yoritaka IWATA¹, Yasuhiro TAKEI²

Abstract

Numerical scheme for nonlinear hyperbolic evolution equations is made based on the implicit Runge–Kutta method and the Fourier spectral method. The detail discretization processes are discussed in case of one-dimensional Klein-Gordon equations. In conclusion, a numerical scheme with the third-order accuracy is presented. The order of total calculation cost is equal to $O(N \log_2 N)$. As benchmark results, the relation between the numerical precision and the discretization unit size is demonstrated.

Keywords: Implicit Runge–Kutta method, Fourier spectral method, High-precision numerical scheme

1 一次元 Klein-Gordon 方程式

方程式として表現する。

一次元半線形双曲型発展方程式（非線形 Klein-Gordon 方程式）の初期値境界値問題を考える。

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \beta F(u) = 0, \\ u(x, 0) = f(x), \\ u(0, t) = u(L, t), \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = g(x), \\ \frac{\partial u}{\partial t}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial t}(L, t), \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 α, β は実数、 $f(x), g(x)$ は初期関数、 $F(u)$ は u の線形または非線形関数で、 $x \in \Omega = [0, L]$ とし、周期境界条件が課されている。

数値計算スキームを構成するにあたり、 $v = \partial u / \partial t$ として方程式を下記の通り、時間について一階の連立発展

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \beta F(u) = 0, \\ u(x, 0) = f(x), \\ u(0, t) = u(L, t), \\ v(x, 0) = g(x), \\ v(0, t) = v(L, t). \end{cases} \quad (2)$$

過去の様々な研究において、非線形現象を記述する偏微分方程式の解を高精度かつ効率的に計算するために、様々な数値計算スキームが検討されてきた。特に、非線形双曲型発展方程式に関しては、放物型発展方程式のような平滑化効果が期待できないことから、特に高精度な数値計算スキームが求められ、また保存則が満たされる場合にはそれをより高い精度で再現する数値計算スキームが求められてきた。

方程式に含まれる空間変数の離散化に関しては、まずは有限差分法による離散化法が考えられるが、計算精度を高めるためには十分に小さな Δx を設定する必要があり、数値計算が大規模化するほど、それに伴う計算コストが増大する。また、有限差分法においては数値的分散性の問題が不可避であり、一般的に保存則を高精度で満たす数値解を得ることは難しい。

それに対し、方程式を座標空間ではなく波数空間で解くスペクトル法が考案されている。空間変数の高精度な離散化手法であるスペクトル法を用いれば、数値的分散性の問題を回避し保存則も精度高く満たすことができる。しかし、一般にスペクトル法は有限差分法と比べ計算コストが高いことから、計算の効率化手法（擬スペクトル法、選点法等 [1, 2, 3]）に関する研究も積極的に進められている。

他方、方程式に含まれる時間変数の離散化に関して、まず陽的な有限差分法による計算が考えられるが、より高精度な解を効率的に得るためのスキームの改良等が求められている。陽的な数値計算スキームは計算コストを抑えた適用が可能であるが、安定な数値計算結果を得るために時間刻み幅 Δt に対して CFL 条件 (Courant-Friedrichs-Lowy Condition) と呼ばれる制限があることも知られており、 Δx の大きさに依存して十分小さな Δt が結果として要求される。そこで、陽的な解法と陰的な解法を組み合わせた数値計算スキームにより Δt への制限を緩和し、比較的大きな Δt でも安定に計算することのできる方法や、無条件安定な完全陰的解法を適用して解を求める方法など様々な計算法が考えられている [4, 5, 6, 7]。ただし、完全陰的解法を用いる場合には、解くべき問題が連立方程式あるいは非線形連立方程式に帰着されることから、それを解く方法として反復法が用いられるなど、陽的解法とは別の複雑な手法が求められる。反復法についても、その収束性や効率的な実施方法が検討されている [7, 8, 9]。

非線形双曲型発展方程式は、基礎的な性質であっても十分に解明されていない点が多く、その性質の解明を理論的な解析だけで行うことは一般的に難しい。そのため数値計算によって解の性質を調べることが重要となる。まずは、境界条件や初期条件を汎用のものに設定し、周期境界条件を満たす連続な解を主要な対象として、非齊次項・非線形項 $F(u)$ や初期関数を様々に変えながら膨大な量の系統的数値計算を実践することで、解のより普遍的な数理的特性に関する理解を深めることが求められる。その際に、非齊次項・非線形項 $F(u)$ や初期関数の変更、解の長期的な時間発展の様子の把握等のためには、数値計算スキームの修正・変更に過度な手間やコストをかけることなく、高精度な計算結果が得られる数値計算スキームが必要となる。

そこで本稿では、上記の要求に資する数値計算スキームとして、2段3次の陰的 Runge-Kutta 法 [10] およびスペクトル法 [11] を基盤とした双曲型発展方程式に対する高精度計算スキームの構成法について解説する。実際、初期値境界値問題(2)を対象にして、空間変数をスペクトル法、時間変数を2段3次の陰的 Runge-Kutta 法で離散化することで数値計算スキームを構成する [12, 13, 14]。

2 空間変数の離散化

空間変数の離散化にスペクトル法 [11, 12, 13] を用いる。方程式(2)の解が高々 N 項のフーリエ級数として展開できると仮定する。

$$\left\{ \begin{array}{l} u(x, t) = a_0(t) + \sum_{k=1}^N a_k(t) \cos\left(\frac{2\pi}{L} kx\right) \\ \quad + \sum_{k=1}^N b_k(t) \sin\left(\frac{2\pi}{L} kx\right), \\ v(x, t) = c_0(t) + \sum_{k=1}^N c_k(t) \cos\left(\frac{2\pi}{L} kx\right) \\ \quad + \sum_{k=1}^N d_k(t) \sin\left(\frac{2\pi}{L} kx\right), \end{array} \right. \quad (3)$$

その上で、[12, 13] の方法に基づき、スペクトル法により空間変数を離散化した方程式は、 $l = 1, 2, \dots, N$ として、

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{da_0}{dt} = c_0, \\ \frac{da_l}{dt} = c_l, \\ \frac{db_l}{dt} = d_l, \\ \frac{dc_0}{dt} = -\frac{\beta}{J} \sum_{j=0}^{J-1} F(u_j), \\ \frac{dc_l}{dt} = \alpha\left(\frac{2\pi l}{L}\right)^2 a_l \\ \quad - \frac{2\beta}{J} \sum_{j=0}^{J-1} F(u_j) \cos\left(\frac{2\pi}{L} lx_j\right), \\ \frac{dd_l}{dt} = \alpha\left(\frac{2\pi l}{L}\right)^2 b_l \\ \quad - \frac{2\beta}{J} \sum_{j=0}^{J-1} F(u_j) \sin\left(\frac{2\pi}{L} lx_j\right) \end{array} \right. \quad (4)$$

と表すことができる。ここで周期境界条件のもとで Ω を等間隔に J 分割した分点を $\{x_j\}_{j=0}^J$ とし、各点の時刻 t での関数 u の値を $u_j = u(x_j, t)$ と表記している。また、 $a_0(t)$ および $\{a_l(t)\}_{l=1}^N$, $\{b_l(t)\}_{l=1}^N$ から離散フーリエ変換により u_j を求め、 $F(u_j)$ を算出するものとする。

上記の離散フーリエ変換、式(4)の第4式から第6式の右辺最終項の算出に、高速フーリエ変換(FFT)を適用することで、式(4)の右辺の計算量は $O(N \log_2 N)$ となる。

ここで式(4)を行列で表現する。まず $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$ を下

式で定める。

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= (a_0, a_1, \dots, a_N)^t, \\ \mathbf{b} &= (0, b_1, \dots, b_N)^t, \\ \mathbf{c} &= (c_0, c_1, \dots, c_N)^t, \\ \mathbf{d} &= (0, d_1, \dots, d_N)^t.\end{aligned}\quad (5)$$

また、 $g_0 = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} F(u_j)$, $h_0 = 0$ とした上で、 $g_l = \frac{2}{J} \sum_{j=0}^{J-1} F(u_j) \cos(\frac{2\pi l}{L} x_j)$, $h_l = \frac{2}{J} \sum_{j=0}^{J-1} F(u_j) \sin(\frac{2\pi l}{L} x_j)$ ($l = 1, \dots, N$)と表して、 \mathbf{g} , \mathbf{h} を下式で定める。

$$\begin{aligned}\mathbf{g} &= -\beta(g_0, g_1, \dots, g_l, \dots, g_N)^t, \\ \mathbf{h} &= -\beta(h_0, h_1, \dots, h_l, \dots, h_N)^t.\end{aligned}\quad (6)$$

さらに $\tilde{\alpha}_l = \alpha(\frac{2\pi l}{L})^2$ と表し、($N + 1$)次の正方行列 A , E , E' を下式で表す。

$$A = \begin{bmatrix} \tilde{\alpha}_0 & & & \\ & \tilde{\alpha}_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \tilde{\alpha}_N \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$E = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}, \quad (8)$$

$$E' = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}, \quad (9)$$

ここで(5)式から(9)式を用いて、(4)式を行列表示すると下式のようになる。なお、 $\mathbf{0} = (0, 0, \dots, 0)^t$ とする。

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \\ \mathbf{d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E' \\ A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \\ \mathbf{d} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{g} \\ \mathbf{h} \end{bmatrix} \quad (10)$$

さらに、 \mathbf{W} , \mathbf{F} , \mathbf{M} を下記で表すと、(10)式は13)式のように表すことができる。

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \\ \mathbf{d} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{g} \\ \mathbf{h} \end{bmatrix}. \quad (11)$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E' \\ A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{W} = \mathbf{M} \mathbf{W} + \mathbf{F}(\mathbf{W}) \quad (13)$$

なお、 \mathbf{g} , \mathbf{h} は式(6)から分かる通り、 $\{u_i\}_{i=0}^{J-1}$ により定まるものであり、非齊次項は $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{W})$ と表せる。実際、 $\{u_i\}_{i=0}^{J-1}$ は \mathbf{W} のフーリエ逆変換により求められる。

3 時間変数の離散化

3.1 陰的 Runge-Kutta 法

ここでは文献[10]に従って、時間変数の離散化の手法である2段3次の陰的Runge-Kutta法を示す。次の発展方程式の初期値問題の解を $u(t)$ とする。

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f(t, u), & \alpha < t < \beta, \\ u(a) = u_0 \end{cases}$$

ここで、区間 $[\alpha, \beta]$ を N 等分割し $\Delta t = \frac{\beta-\alpha}{N}$ とする。また離散点列 $\{t_n\}$ を

$$t_n = \alpha + n\Delta t \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

とし、 $u(t_n)$ の近似値を U_n とする。このとき、次のRunge-Kutta公式で与えられる離散変数法により $u(t_{n+1})$ の近似値 U_{n+1} を求める方法をRunge-Kutta法という。

$$\begin{cases} U_{n+1} = U_n + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i k_i, \\ k_i = f(t_n + c_i \Delta t, U_n + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j) \quad (i = 1, 2, \dots, s). \end{cases}$$

ここで、自然数 s は段数と呼ばれ、 a_{ij} , b_i , c_i は公式を定めるパラメータである。特に、 $a_{ij} \neq 0$ ($j > i$)であるときに陰的Runge-Kutta法という。パラメータ a_{ij} , c_i に対して、

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij} \quad (i = 1, 2, \dots, s)$$

なる条件を課す。さらに、 a_{ij} , b_i , c_i を次表のように並べた配列をButcher配列と呼ぶ。

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s \end{array}$$

ここで $U_n = u(t_n)$ と仮定したもとで

$$T_{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \left\{ u(t_{n+1}) - u(t_n) - \Delta t \sum_{i=1}^s b_i k_i \right\}$$

を局所離散化誤差と呼ぶ。局所離散化誤差が $T_{n+1} = O((\Delta t)^p)$ と評価されるとき、Runge-Kutta公式は p 次であるという。

段数と次数について任意性があるが、本稿では計算スキームの精度と計算コストの双方を考慮して、2段3次のRunge-Kutta法を採用する。2段3次の陰的Runge-Kutta公式のButcher配列は

$$\begin{array}{c|cc} 1/3 & 5/12 & -1/12 \\ 1 & 3/4 & 1/4 \\ \hline & 3/4 & 1/4 \end{array}$$

で与えられる。

3.2 陰的 Runge–Kutta 法の適用と反復式

(13) 式の時間変数を離散化するために、2段3次の陰的 Runge–Kutta 法を適用すると、結果は下式で表わすことができる。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{W}_{n+1} = \mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1 + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2, \\ \mathbf{k}_1 = M(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1 - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2) \\ \quad + F(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1 - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2), \\ \mathbf{k}_2 = M(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1 + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2) \\ \quad + F(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1 + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2). \end{array} \right. \quad (14)$$

ここで \mathbf{k}_1 および \mathbf{k}_2 は、 $(N+1)$ 次元ベクトルである。 $\mathbf{k}_i^a, \mathbf{k}_i^b, \mathbf{k}_i^c, \mathbf{k}_i^d$ ($i=1,2$) を用いて下記で表される。

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= ((\mathbf{k}_1^a)^t, (\mathbf{k}_1^b)^t, (\mathbf{k}_1^c)^t, (\mathbf{k}_1^d)^t)^t, \\ \mathbf{k}_2 &= ((\mathbf{k}_2^a)^t, (\mathbf{k}_2^b)^t, (\mathbf{k}_2^c)^t, (\mathbf{k}_2^d)^t)^t. \end{aligned}$$

\mathbf{k}_1 および \mathbf{k}_2 を求めて、(14) の第一式に代入することで時間発展を計算することができる。ここで (14) の第二式を4つの式に分解すると次のようになる。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_1^a = \mathbf{c} + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^c - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^c, \\ \mathbf{k}_1^b = E' \mathbf{d} + \frac{5}{12}\Delta t E' \mathbf{k}_1^d - \frac{1}{12}\Delta t E' \mathbf{k}_2^d, \\ \mathbf{k}_1^c = A\mathbf{a} + \frac{5}{12}\Delta t A\mathbf{k}_1^a - \frac{1}{12}\Delta t A\mathbf{k}_2^a \\ \quad + g(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1 - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2), \\ \mathbf{k}_1^d = A\mathbf{b} + \frac{5}{12}\Delta t A\mathbf{k}_1^b - \frac{1}{12}\Delta t A\mathbf{k}_2^b \\ \quad + h(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1 - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2). \end{array} \right. \quad (15)$$

同様に、(14) の第三式を4つの式に分解すると次のようになる。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_2^a = \mathbf{c} + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^c + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^c, \\ \mathbf{k}_2^b = E' \mathbf{d} + \frac{3}{4}\Delta t E' \mathbf{k}_1^d + \frac{1}{4}\Delta t E' \mathbf{k}_2^d, \\ \mathbf{k}_2^c = A\mathbf{a} + \frac{3}{4}\Delta t A\mathbf{k}_1^a + \frac{1}{4}\Delta t A\mathbf{k}_2^a \\ \quad + g(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1 + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2), \\ \mathbf{k}_2^d = A\mathbf{b} + \frac{3}{4}\Delta t A\mathbf{k}_1^b + \frac{1}{4}\Delta t A\mathbf{k}_2^b \\ \quad + h(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1 + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2). \end{array} \right. \quad (16)$$

上記の(15)式及び(16)式から $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ を求めるために反復法を用いる。 v 回目の反復値を下式で表すこととする。

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1^v &= ((\mathbf{k}_1^{a,v})^t, (\mathbf{k}_1^{b,v})^t, (\mathbf{k}_1^{c,v})^t, (\mathbf{k}_1^{d,v})^t)^t, \\ \mathbf{k}_2^v &= ((\mathbf{k}_2^{a,v})^t, (\mathbf{k}_2^{b,v})^t, (\mathbf{k}_2^{c,v})^t, (\mathbf{k}_2^{d,v})^t)^t. \end{aligned}$$

(15) 式及び (16) 式を、 v 回目の反復値を用いて $v+1$ 回目の反復値を求める式に変換すると下式となる。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_1^{a,v+1} = \mathbf{c} + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^{c,v} - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^{c,v}, \\ \mathbf{k}_2^{a,v+1} = \mathbf{c} + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^{c,v} + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^{c,v}, \\ \mathbf{k}_1^{b,v+1} = E' \mathbf{d} + \frac{5}{12}\Delta t E' \mathbf{k}_1^{d,v} - \frac{1}{12}\Delta t E' \mathbf{k}_2^{d,v}, \\ \mathbf{k}_2^{b,v+1} = E' \mathbf{d} + \frac{3}{4}\Delta t E' \mathbf{k}_1^{d,v} + \frac{1}{4}\Delta t E' \mathbf{k}_2^{d,v}, \\ \mathbf{k}_1^{c,v+1} = A\mathbf{a} + \frac{5}{12}\Delta t A\mathbf{k}_1^{a,v} - \frac{1}{12}\Delta t A\mathbf{k}_2^{a,v} \\ \quad + g(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^v - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^v), \\ \mathbf{k}_2^{c,v+1} = A\mathbf{a} + \frac{3}{4}\Delta t A\mathbf{k}_1^{a,v} + \frac{1}{4}\Delta t A\mathbf{k}_2^{a,v} \\ \quad + g(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^v + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^v), \\ \mathbf{k}_1^{d,v+1} = A\mathbf{b} + \frac{5}{12}\Delta t A\mathbf{k}_1^{b,v} - \frac{1}{12}\Delta t A\mathbf{k}_2^{b,v} \\ \quad + h(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^v - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^v), \\ \mathbf{k}_2^{d,v+1} = A\mathbf{b} + \frac{3}{4}\Delta t A\mathbf{k}_1^{b,v} + \frac{1}{4}\Delta t A\mathbf{k}_2^{b,v} \\ \quad + h(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^v + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^v). \end{array} \right. \quad (17)$$

3.3 反復法による数値解の計算

式 (17) を解くために、 $\mathbf{k}_1^1 = \mathbf{W}_n, \mathbf{k}_2^1 = \mathbf{W}_n$ を初期値として、反復値 $\mathbf{k}_1^v, \mathbf{k}_2^v$ が収束するまで計算する。ここで $\mathbf{k}_1^v, \mathbf{k}_2^v$ を出来るだけ少ない反復数で収束させるための工夫として、 $\mathbf{k}_1^{v+1/2}, \mathbf{k}_2^{v+1/2}$ を下式で定める。

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1^{v+1/2} &= ((\mathbf{k}_1^{a,v+1})^t, (\mathbf{k}_1^{b,v+1})^t, (\mathbf{k}_1^{c,v})^t, (\mathbf{k}_1^{d,v})^t)^t, \\ \mathbf{k}_2^{v+1/2} &= ((\mathbf{k}_2^{a,v+1})^t, (\mathbf{k}_2^{b,v+1})^t, (\mathbf{k}_2^{c,v})^t, (\mathbf{k}_2^{d,v})^t)^t. \end{aligned}$$

上式を用いて式 (17) を修正したものが式 (18) となる。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_1^{a,v+1} = \mathbf{c} + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^{c,v} - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^{c,v}, \\ \mathbf{k}_2^{a,v+1} = \mathbf{c} + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^{c,v} + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^{c,v}, \\ \mathbf{k}_1^{b,v+1} = E' \mathbf{d} + \frac{5}{12}\Delta t E' \mathbf{k}_1^{d,v} - \frac{1}{12}\Delta t E' \mathbf{k}_2^{d,v}, \\ \mathbf{k}_2^{b,v+1} = E' \mathbf{d} + \frac{3}{4}\Delta t E' \mathbf{k}_1^{d,v} + \frac{1}{4}\Delta t E' \mathbf{k}_2^{d,v}, \\ \mathbf{k}_1^{c,v+1} = A\mathbf{a} + \frac{5}{12}\Delta t A\mathbf{k}_1^{a,v+1} - \frac{1}{12}\Delta t A\mathbf{k}_2^{a,v+1} \\ \quad + g(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^{v+1/2} - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^{v+1/2}), \\ \mathbf{k}_2^{c,v+1} = A\mathbf{a} + \frac{3}{4}\Delta t A\mathbf{k}_1^{a,v+1} + \frac{1}{4}\Delta t A\mathbf{k}_2^{a,v+1} \\ \quad + g(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^{v+1/2} + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^{v+1/2}), \\ \mathbf{k}_1^{d,v+1} = A\mathbf{b} + \frac{5}{12}\Delta t A\mathbf{k}_1^{b,v+1} - \frac{1}{12}\Delta t A\mathbf{k}_2^{b,v+1} \\ \quad + h(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^{v+1/2} - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^{v+1/2}), \\ \mathbf{k}_2^{d,v+1} = A\mathbf{b} + \frac{3}{4}\Delta t A\mathbf{k}_1^{b,v+1} + \frac{1}{4}\Delta t A\mathbf{k}_2^{b,v+1} \\ \quad + h(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^{v+1/2} + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^{v+1/2}). \end{array} \right. \quad (18)$$

以下では、式 (18) を具体的に計算するための手順を記す。まず、時刻 $n\Delta t$ の数値解 $\mathbf{W}_n = (\mathbf{a}^t, \mathbf{b}^t, \mathbf{c}^t, \mathbf{d}^t)^t$ を用いて、 $\mathbf{k}_1^1 = \mathbf{W}_n, \mathbf{k}_2^1 = \mathbf{W}_n$ とする。

第一段の計算

ベクトル $\mathbf{k}_x^{X,v}$ ($X = a, b, c, d; x = 1, 2$) の第 l 要素を $k_{x,l}^{X,v}$ ($l = 0, 1, \dots, N$)、ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$ の第 l 要素を

a_l, b_l, c_l, d_l ($l = 0, 1, \dots, N$) で表し、下式を計算する。

$$\begin{cases} k_{1,l}^{a,\nu+1} = c_l + \frac{5}{12}\Delta t k_{1,l}^{c,\nu} - \frac{1}{12}\Delta t k_{2,l}^{c,\nu}, \\ k_{1,l}^{b,\nu+1} = d_l + \frac{5}{12}\Delta t k_{1,l}^{d,\nu} - \frac{1}{12}\Delta t k_{2,l}^{d,\nu}. \end{cases} \quad (19)$$

$$\begin{cases} k_{2,l}^{a,\nu+1} = c_l + \frac{3}{4}\Delta t k_{1,l}^{c,\nu} + \frac{1}{4}\Delta t k_{2,l}^{c,\nu}, \\ k_{2,l}^{b,\nu+1} = d_l + \frac{3}{4}\Delta t k_{1,l}^{d,\nu} + \frac{1}{4}\Delta t k_{2,l}^{d,\nu}. \end{cases} \quad (20)$$

式 (19) 及び (20) の計算結果を用いて下記の $\mathbf{k}_1^{\nu+1/2}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+1/2}$ を算出する。

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1^{\nu+1/2} &= ((k_1^{a,\nu+1})^t, (k_1^{b,\nu+1})^t, (k_1^{c,\nu})^t, (k_1^{d,\nu})^t)^t, \\ \mathbf{k}_2^{\nu+1/2} &= ((k_2^{a,\nu+1})^t, (k_2^{b,\nu+1})^t, (k_2^{c,\nu})^t, (k_2^{d,\nu})^t)^t. \end{aligned} \quad (21)$$

第二段の計算

ベクトル \mathbf{g} , \mathbf{h} の第 l 要素を \tilde{g}_l , \tilde{h}_l ($l = 0, 1, \dots, N$) で表し、それぞれの値を $\mathbf{k}_1^{\nu+1/2}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+1/2}$, \mathbf{W}_n を用いてフーリエ逆変換により計算する。その上で、 $\mathbf{k}_1^{\nu+1/2}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+1/2}$, \mathbf{W}_n , \tilde{g}_l , \tilde{h}_l ($l = 0, 1, \dots, N$) を用いて下式を計算する。

$$\begin{cases} k_{1,l}^{c,\nu+1} = \tilde{a}_l a_l + \frac{5}{12}\Delta t \tilde{a}_l k_{1,l}^{a,\nu+1} - \frac{1}{12}\Delta t \tilde{a}_l k_{2,l}^{a,\nu+1} \\ \quad + \tilde{g}_l(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^{\nu+1/2} - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^{\nu+1/2}), \\ k_{1,l}^{d,\nu+1} = \tilde{a}_l b_l + \frac{5}{12}\Delta t \tilde{a}_l k_{1,l}^{b,\nu+1} - \frac{1}{12}\Delta t \tilde{a}_l k_{2,l}^{b,\nu+1} \\ \quad + \tilde{h}_l(\mathbf{W}_n + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{k}_1^{\nu+1/2} - \frac{1}{12}\Delta t \mathbf{k}_2^{\nu+1/2}). \end{cases} \quad (22)$$

$$\begin{cases} k_{2,l}^{c,\nu+1} = \tilde{a}_l a_l + \frac{3}{4}\Delta t \tilde{a}_l k_{1,l}^{a,\nu+1} + \frac{1}{4}\Delta t \tilde{a}_l k_{2,l}^{a,\nu+1} \\ \quad + \tilde{g}_l(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^{\nu+1/2} + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^{\nu+1/2}), \\ k_{2,l}^{d,\nu+1} = \tilde{a}_l b_l + \frac{3}{4}\Delta t \tilde{a}_l k_{1,l}^{b,\nu+1} + \frac{1}{4}\Delta t \tilde{a}_l k_{2,l}^{b,\nu+1} \\ \quad + \tilde{h}_l(\mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^{\nu+1/2} + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^{\nu+1/2}). \end{cases} \quad (23)$$

式 (22) 及び (23) の計算結果と $\mathbf{k}_1^{\nu+1/2}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+1/2}$ を用いて $\mathbf{k}_1^{\nu+1}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+1}$ を算出する。

収束判定

$\mathbf{k}_1^{\nu+1}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+1}$ が収束していない場合、第一段の計算に戻り、 $\mathbf{k}_1^{\nu+1}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+1}$ を用いて $\mathbf{k}_1^{\nu+2}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+2}$ を計算する。もし $\mathbf{k}_1^{\nu+1}$, $\mathbf{k}_2^{\nu+1}$ が収束している場合、下式を用いて \mathbf{W}_{n+1} を求める。

$$\mathbf{W}_{n+1} = \mathbf{W}_n + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{k}_1^{\nu+1} + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{k}_2^{\nu+1} \quad (24)$$

上記反復法を繰り返し解くことで数値解が得られる。なお、この陰的 Runge-Kutta 法およびスペクトル法を適用した数値計算スキームの計算量は $O(N \log_2 N)$ 、時間変数の局所離散化誤差は 3 次になると見積もられる。

4 数値計算例

4.1 $F(u)$ が線形の場合

ここでは初期値境界値問題 (2)において、 $F(u) = u$, $\alpha = -1$, $\beta = 1$, $\Omega = [0, L]$ とした場合の問題を扱う。

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial t} = v, \\ u(x, 0) = 0, \\ u(0, t) = u(L, t), \\ v(x, 0) = \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right), \\ v(0, t) = v(L, t). \end{cases} \quad (25)$$

なお、この問題の厳密解は式 (26) で与えられる。

$$\begin{cases} u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1+\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}} \sin\left(\sqrt{1+\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} t\right) \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right), \\ v(x, t) = \cos\left(\sqrt{1+\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} t\right) \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right). \end{cases} \quad (26)$$

方程式 (25) について、本稿で構成した数値計算スキーム（ただし、 $J \geq 2N+1$, $L = 8$ とする）により時刻 $t = 1$ での数値解を求めた。その上で、厳密解は (26) 式で表されることから、時刻 $t = 1$ の数値解と厳密解を比較した結果を図 1 及び図 2 に示す。

図 1 には、時刻 $t = 1$ の数値解（ただし、 $N = 2^5$ または $N = 2^{10}$ と固定し、 $\Delta t = 2^{-2}, 2^{-3}, \dots, 2^{-15}$ と条件を変えて複数回の計算を実施）について、 x 軸上の分点 x_j ($j = 0, \dots, J$) の数値解の値と厳密解の値の誤差（相対誤差と絶対誤差のうち小さいもの）を求め、その最大値を各 Δt でプロットした。

図 2 には、時刻 $t = 1$ の数値解（ただし、 $\Delta t = 2^{-6}$ または $\Delta t = 2^{-13}$ と固定し、 $N = 2^2, 2^3, \dots, 2^{15}$ と条件を変えて複数回の計算を実施）について、 x 軸上の分点 x_j ($j = 0, \dots, J$) の数値解の値と厳密解の値の誤差（相対誤差と絶対誤差のうち小さいもの）を求め、その最大値を各 N でプロットした。

なお、本稿で構成した数値計算スキームについて、誤差の時空間離散化刻みに対する依存性を明らかにするために、比較対象として時間変数の離散化に θ 法（特に、 $\theta = 1/2$ の場合）を適用した計算スキームの数値解の値と厳密解の値の誤差の様子も図 1 及び図 2 に併記した [12]。

時間変数に関する離散化の精度

図 1 を見ると、2 段 3 次の陰的 Runge-Kutta 法を適用した数値計算スキーム（本稿で構成した数値計算スキーム）

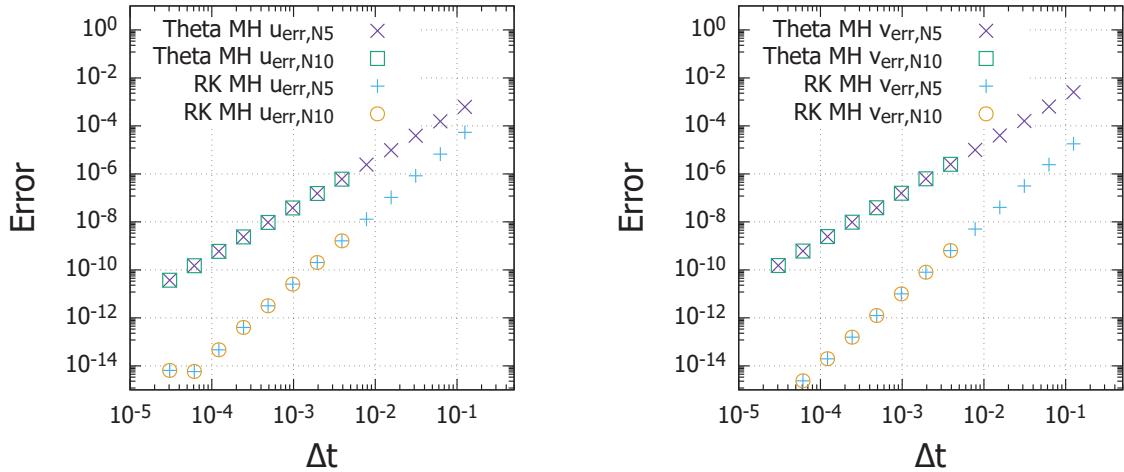


図1 u と v に関する誤差と Δt の関係。図中の Theta MH $u(v)_{err,N5}$ および Theta MH $u(v)_{err,N10}$ は、それぞれフーリエ級数の項数を $N = 2^5, 2^{10}$ として θ 法を適用した際の $u(v)$ の誤差を示す。同様に、RK MH $u(v)_{err,N5}$ および RK MH $u(v)_{err,N10}$ は、それぞれフーリエ級数の項数を $N = 2^5, 2^{10}$ として陰的 Runge-Kutta 法を適用した際の $u(v)$ の誤差を示す。

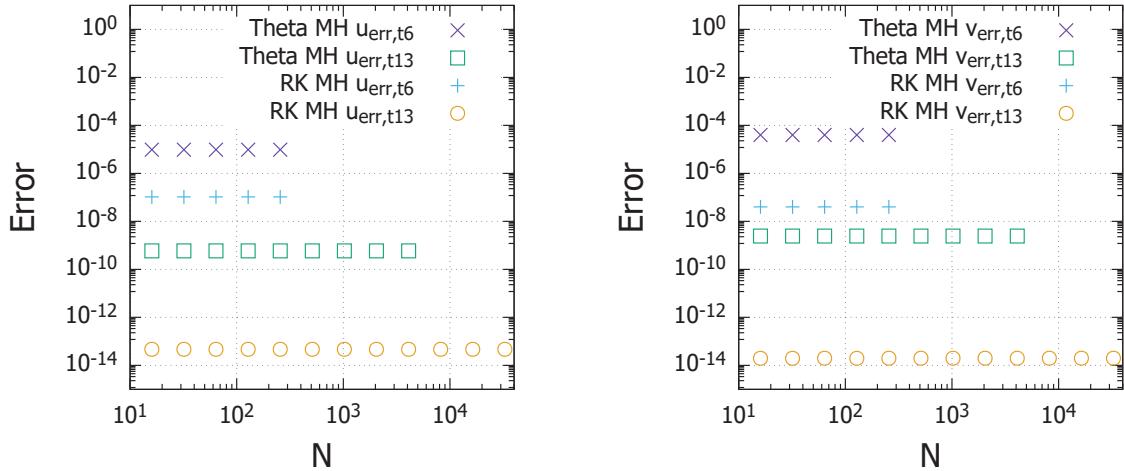


図2 u と v に関する誤差と N の関係。図中の Theta MH $u(v)_{err,t6}$ および Theta MH $u(v)_{err,t13}$ は、それぞれ時間刻みを $\Delta t = 2^{-6}, 2^{-13}$ として θ 法を適用した際の $u(v)$ の誤差を示す。同様に、RK MH $u(v)_{err,t6}$ および RK MH $u(v)_{err,t13}$ は、それぞれ時間刻みを $\Delta t = 2^{-6}, 2^{-13}$ として陰的 Runge-Kutta 法を適用した際の $u(v)$ の誤差を示す。

ム) では、 Δt を $1/2$ 倍すると、誤差は $(1/2)^3 = 1/8$ 倍になる（図中の \times 印及び \square 印）。つまり、時間変数に関して 3 次の精度の数値計算スキームとなっていることが、数値計算結果からも確認できる。一方、比較対象である θ 法を適用した計算スキームの誤差は、 Δt を $1/2$ 倍すると、誤差は $(1/2)^2 = 1/4$ 倍になる（図中の $+$ 印及び \circ 印）。時間変数に関して 2 次の精度の数値計算スキームとなっていることが、数値計算結果からも確認できる。

また、上記の二つの数値計算スキームそれについて、 $N = 2^5$ と $N = 2^{10}$ の場合の誤差を比較すると、 Δt の大きさが同じであれば、誤差の値はほぼ変化しない（なお、 $N = 2^{10}$ の場合、 Δt が大きいと反復法による数値計算が収束せず、数値解は得られない）。つまり、 N が一

定以上であれば、誤差は Δt の大きさのみ依存して決まり、 N の大きさによらない。

いずれにしても上記の 2 つの数値計算スキームでの計算結果から、双方ともに誤差は Δt のみに依存し、 Δt を小さくするほど誤差が小さくなる。ただし、2 つの計算スキームの精度の次数の違いから、同じ Δt であった場合、本稿で構成した数値計算スキームの方が θ 法より誤差を小さくすることが出来ることが確認できる。

空間変数に関する離散化の精度

図 2 を見ると、本稿で構成した数値計算スキームでは、 $\Delta t = 2^{-6}$ または $\Delta t = 2^{-13}$ のどちらの場合でも、 $N = 2^2, 2^3, \dots, 2^{15}$ と変化させても誤差は変わら

ないことが分かる(図中の+印及び○印)。同様に、比較対象であるθ法を適用した計算スキームでも、 $N = 2^2, 2^3, \dots, 2^{15}$ と変化させても誤差は変わらないことが分かる(図中の×印及び□印)。一方、上記の二つの数値計算スキームそれぞれについて、 $\Delta t = 2^{-6}$ と $\Delta t = 2^{-13}$ の場合の誤差を比較すると、 N の大きさによらず、 $\Delta t = 2^{-13}$ の場合の方が誤差が小さくなる(なお、 $\Delta t = 2^{-6}$ の場合、 N が大きいと反復法による数値計算が収束せず、数値解は得られない)。つまり、誤差は Δt の大きさのみ依存して決まり、 N の大きさによらないことが分かる。

このことから、一定以上の N であれば、空間変数の離散化に伴う打切り誤差が十分に小さくなり、数値計算例の計算誤差の大半は Δt に伴う計算誤差となる。したがって、数値計算スキームとして、θ法より精度の次数が高い、本稿で構成した数値計算スキームを適用することで、より高い精度の数値解を効果的に求めることができることがわかる。

4.2 $F(u)$ が非線形の場合

初期値境界値問題(2)において、 $F(u) = \sin u$, $\alpha = -1$, $\beta = 1$, $\Omega = [0, L]$ とした場合の問題を扱う。この場合の方程式は、Sine-Gordon方程式として知られているものとなる。

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial t} = v, \\ v(x, 0) = -\sqrt{2} \frac{\text{cn}(x, \frac{1}{2}) \text{dn}(x, \frac{1}{2})}{\sqrt{1 - \frac{1}{4} \text{sn}(x, \frac{1}{2})}}, \\ v(0, t) = v(L, t), \\ u(x, 0) = 2 \sin^{-1} \left[\frac{1}{2} \text{sn}(x, \frac{1}{2}) \right], \\ u(0, t) = u(L, t). \end{cases} \quad (27)$$

なお、上式の厳密解は式(28)となる。

$$\begin{cases} u(x, t) = 2 \sin^{-1} \left[\frac{1}{2} \text{sn}(x - \sqrt{2}t, \frac{1}{2}) \right], \\ v(x, t) = -\sqrt{2} \frac{\text{cn}(x - \sqrt{2}t, \frac{1}{2}) \text{dn}(x - \sqrt{2}t, \frac{1}{2})}{\sqrt{1 - \frac{1}{4} \text{sn}^2(x - \sqrt{2}t, \frac{1}{2})}} \end{cases} \quad (28)$$

ここで $\text{sn}, \text{cn}, \text{dn}$ はヤコビの楕円関数であり、 L は第一種完全楕円積分を用いて表すことができる[15]。

$$\begin{cases} L = 4F \left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{2} \right) \\ = 4 \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{1}{2} \right)^2 \sin^2 \theta}} d\theta \\ = 6.743001419250385098\dots \end{cases} \quad (29)$$

まず方程式(27)について、本稿で構成した数値計算スキーム(ただし、 $J \geq 2N + 1$, $L = 6.743001419250385098\dots$ とする)により時刻 $t = 1$ の数値解を求めた。その上で、厳密解は(28)式で表されることから、時刻 $t = 1$ の数値解と厳密解の誤差を求めた結果を図3及び図4に示す。

図3には、時刻 $t = 1$ の数値解(ただし、 $N = 2^5$ または $N = 2^{10}$ と固定し、 $\Delta t = 2^{-2}, 2^{-3}, \dots, 2^{-15}$ と条件を変えて複数回の計算を実施)について、 x 軸上の分点 x_j ($j = 0, \dots, J$)の数値解の値と厳密解の値の誤差(相対誤差と絶対誤差のうち小さいもの)を求め、その最大値を各 Δt でプロットした。

図4には、時刻 $t = 1$ の数値解(ただし、 $\Delta t = 2^{-6}$ または $\Delta t = 2^{-13}$ と固定し、 $N = 2^2, 2^3, \dots, 2^{15}$ と条件を変えて複数回の計算を実施)について、 x 軸上の分点 x_j ($j = 0, \dots, J$)の数値解の値と厳密解の値の誤差(相対誤差と絶対誤差のうち小さいもの)を求め、その最大値を各 N でプロットした。

$F(u)$ が非線形の場合についても、誤差の時空間離散化刻みに対する依存性を明らかにするために、比較対象として、時間変数の離散化にθ法を適用した計算スキームの数値解の値と厳密解の値の誤差についても図3及び図4に併記した[12]。

時間変数に関する離散化の精度

図3をみると、本稿で構成した数値計算スキームでは、 Δt を1/2倍すると、誤差は $(1/2)^3 = 1/8$ 倍となる(図中の+印及び○印)。つまり、 $F(u)$ が非線形となる問題においても、時間変数に関して3次の精度の数値計算スキームとなっていることが、数値計算結果からも確認できる。

同様に、比較対象であるθ法を適用した計算スキームの誤差は、 Δt を1/2倍すると、誤差は $(1/2)^2 = 1/4$ 倍になる(図中の×印及び□印)。時間変数に関して2次の精度の数値計算スキームとなっていることが、数値計算結果からも確認できる。

また、 $F(u)$ が線形の問題の場合と同様に、上記の二つの数値計算スキームそれぞれについて、誤差は Δt の大きさのみ依存して決まり、 N の大きさによらないことも分かる。つまり、2つの数値計算スキーム双方ともに誤差は Δt に依存し、 Δt を小さくするほど誤差が小さくなる。

空間変数に関する離散化の精度

図4を見ると、 $\Delta t = 2^{-6}$ の場合には、本稿で構成した数値計算スキーム及びθ法の双方で、 $N = 2^2, 2^3, \dots, 2^{15}$ と変化させても誤差は変わらないことが分かる(図中の+印及び×印)。これは、空間変数の離散化に伴う打切

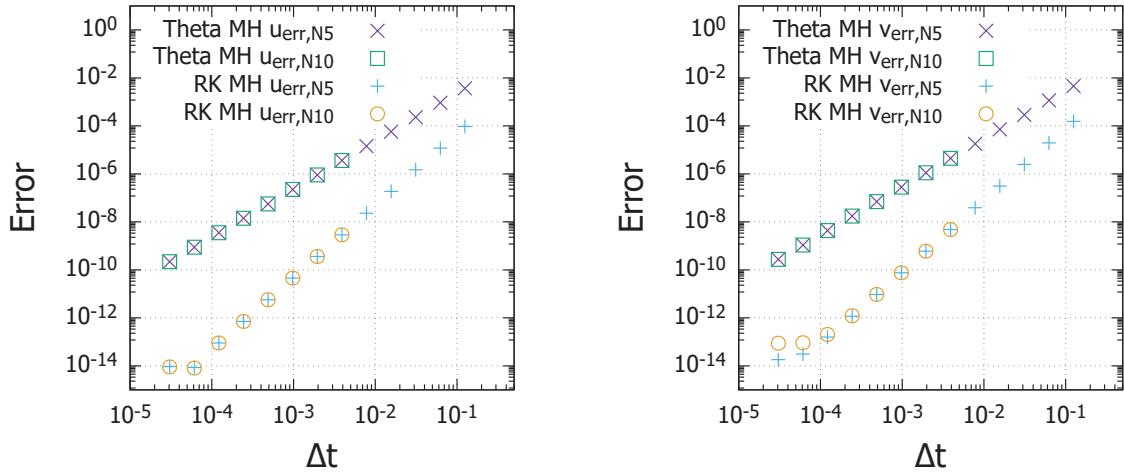


図3 u と v に関する誤差と Δt の関係。図中の Theta MH $u(v)_{err,N5}$ および Theta MH $u(v)_{err,N10}$ は、それぞれフーリエ級数の項数を $N = 2^5, 2^{10}$ として θ 法を適用した際の $u(v)$ の誤差を示す。同様に、RK MH $u(v)_{err,N5}$ および RK MH $u(v)_{err,N10}$ は、それぞれフーリエ級数の項数を $N = 2^5, 2^{10}$ として陰的 Runge-Kutta 法を適用した際の $u(v)$ の誤差を示す。

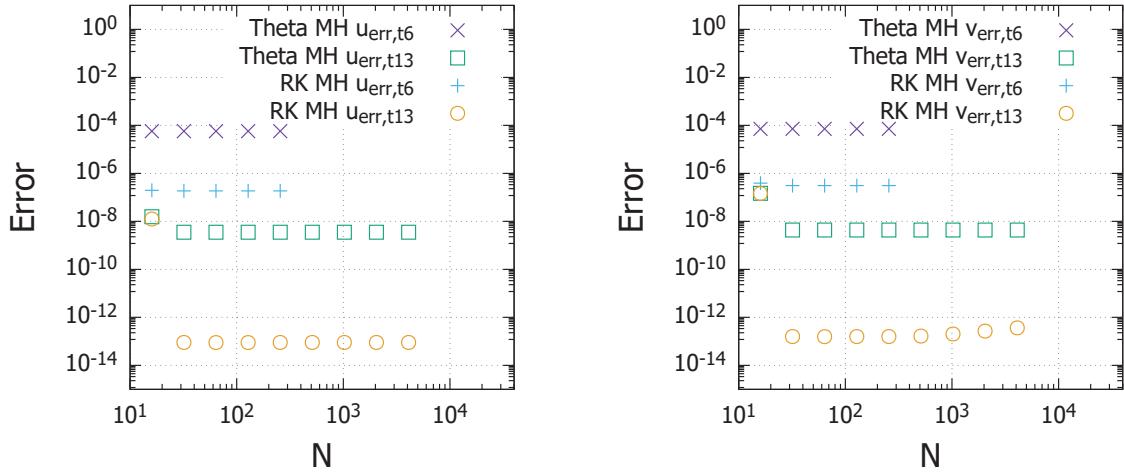


図4 u と v に関する誤差と N の関係。図中の Theta MH $u(v)_{err,t6}$ および Theta MH $u(v)_{err,t13}$ は、それぞれ時間刻みを $\Delta t = 2^{-6}, 2^{-13}$ として θ 法を適用した際の $u(v)$ の誤差を示す。同様に、RK MH $u(v)_{err,t6}$ および RK MH $u(v)_{err,t13}$ は、それぞれ時間刻みを $\Delta t = 2^{-6}, 2^{-13}$ として陰的 Runge-Kutta 法を適用した際の $u(v)$ の誤差を示す。

り誤差と比較して、 Δt に伴う計算誤差の方が大きく、誤差は N の大きさに依存しないことを示している。なお、 N が大きくなると反復法による数値計算が収束せず、数値解は得られない。一方で、 $\Delta t = 2^{-13}$ とした場合には、 N の大きさにより誤差の大きさが異なる（図中の○印及び□印）。 N が小さい場合には誤差が大きくなり、 N が一定以上大きくなると一定の大きさに誤差は落ち着き、 N の大きさに依存しなくなる。

これは $\Delta t = 2^{-13}$ と十分に小さいことから、 Δt に伴う計算誤差と比較して、 N が小さい場合には空間変数の離散化に伴う打切り誤差が大きくなることを示している。実際、 N を大きくして打切り誤差を小さくすると、誤差は N に依存しない一定の大きさに落ち着く。つまり、 N

を大きくすると誤差は、 Δt に伴う計算誤差が主となる。

5 まとめ

本稿では、一次元の非線形 Klein-Gordon 方程式を取り上げ、陰的 Runge-Kutta 法およびスペクトル法を用いた数値計算スキームを構成した。また具体的に、線形 Klein-Gordon 方程式と非線形 Sine-Gordon 方程式について、本稿で構成した数値計算スキームの数値解と θ 法による数値解とを比較し、それぞれの誤差の出方を定量的に示した。

その結果、本稿で構成した数値計算スキームは、時間変数に関して 3 次の精度であり、空間変数に関しては、

N を一定の大きさにすることで、時間変数の離散化に伴う計算誤差と比べて非常に小さい打切り誤差となることが確認できた。これによって、十分大きな N の場合、計算誤差の大半は時間刻み Δt に伴う誤差であり、時間変数に関してより精度の高い陰的Runge-Kutta法およびスペクトル法を用いた数値計算スキームが有効性であることを示すことが出来た。

一般に、非線形 Klein-Gordon 方程式のような非線形双曲型方程式では、数値計算を通じ、解の時間発展の様子を把握することが有用なアプローチとなる。しかし、差分法等による空間変数の離散化では、離散化に伴う誤差が大きく影響し、適切な数値計算が実現できないことも多い。また、 θ 法のような時間変数の離散化では、適切な精度の数値計算結果を得るために Δt を非常に小さくする必要があるなど、計算量の面から扱いが難しくなることが多い。そのため、非線形 Klein-Gordon 方程式のような非線形双曲型方程式の解の時間発展の様子を把握するために、可能な限り精度が高く、かつ計算量の面でも扱いやすい計算スキームが求められる中で、陰的Runge-Kutta法およびスペクトル法を用いた数値計算スキームはその手段として有用なものとなると考えられる。

特に、本稿で構成した数値計算スキームは、時間変数に関して3次の精度でありつつも、計算量は $O(N \log_2 N)$ で計算可能であり、比較的計算量を抑えつつ高精度に数値解を計算可能な方法となる。このことから本数値計算スキームは、今後、解の時間発展の様子を詳細に把握するために活用されることが期待される。

付録 A θ 法

次の発展方程式の初期値問題の解を $u(t)$ とする。

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f(t, u), & \alpha < t < \beta, \\ u(a) = u_0 \end{cases}$$

ここで、区間 $[\alpha, \beta]$ を N 等分割し $\Delta t = \frac{\beta-\alpha}{N}$ とする。また離散点列 $\{t_n\}$ を

$$t_n = \alpha + n\Delta t \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

とし、 $u(t_n)$ の近似値を U_n とする。このとき、次の公式で与えられる離散変数法により $u(t_{n+1})$ の近似値 U_{n+1} を求める方法を θ 法[16]といいう。

$$U_{n+1} = U_n + \Delta t \theta f(t_{n+1}, U_{n+1}) + \Delta t (1 - \theta) f(t_n, U_n).$$

ここで、 θ は $0 \leq \theta \leq 1$ の範囲で選ぶものとする。特に、 $\theta = 0$ の場合は前進差分法、 $\theta = 1$ の場合は後退差分法であり、 $\theta = 1/2$ の場合をクランク・ニコルソン法と呼ぶ。

参考文献

- [1] J. P. Boyd, "Chebyshev and Fourier Spectral Methods Second Edition (Revised)", Dover, 2001.
- [2] S. Abbasbandy and E. Shivanian, "Multiple solutions of mixed convection in a porous medium on semi-infinite interval using pseudo-spectral collocation method", Commun Nonlinear Sci Numer Simulat 16 (2011) 2745–2752.
- [3] Tanya L. Chantawansri, Su-Mi Hur, Carlos J. García-Cervera, et al., "Spectral collocation methods for polymer brushes", J. Chem. Phys. 134, 244905 (2011).
- [4] Isabel Cordero-Carrión and Pablo Cerdá-Durán, "Partially implicit Runge-Kutta methods for wave-like equations", F. Casas, V. Martínez (eds.), Advances in Differential Equations and Applications, SEMA SIMAI Springer Series 4.
- [5] Haijin Wang, Qiang Zhang and Chi-WangShu, "Third order implicit-explicit Runge-Kutta local discontinuous Galerkin methods with suitable boundary treatment for convection-diffusion problems with Dirichlet boundary conditions", Journal of Computational and Applied Mathematics, Volume 342, November 2018, Pages 164-179.
- [6] Weifeng Zhao and Juntao Huang, "Boundary treatment of implicit-explicit Runge-Kutta method for hyperbolic systems with source terms", Journal of Computational Physics, Volume 423, 15 December 2020.
- [7] Md. Masud Rana, Victoria E. Howle, Katharine Long, Ashley Meek, and William Milestone, "A New Block Preconditioner for Implicit Runge-Kutta Methods for Parabolic PDE Problems", SIAM J. Sci. Comput., 43(5), S475–S495. (21 pages), Special Section: 2020 Copper Mountain Conference.
- [8] K. A. Mardal, T. K. Nilssen and G. A. Staff, "Order-optimal preconditioners for implicit Runge-Kutta schemes applied to parabolic PDEs", SIAM J Sci Comput, 29 (2007), pp. 361–375.
- [9] G. A. Staff, K. A. Mardal and T. K. Nilssen, "Preconditioning of fully implicit Runge-Kutta schemes for parabolic PDEs", Modeling, Identification and Control, 27 (2006), pp. 109–123.
- [10] 三井斌友 (1998)「微分方程式の数値解法 I」岩波講座応用数学 13, 岩波書店.
- [11] 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.
- [12] 岩田順敬、武井康浩 (2020)「スペクトル法による非線形双曲型発展方程式の数値解法」神奈川工科大学研究報告理工学編 (44) 1 - 8 2020 年.

- [13] Yoritaka Iwata, Yasuhiro Takei, "Numerical scheme based on the spectral method for calculating nonlinear hyperbolic evolution equations", ICCMS '20: Proceedings of the 12th International Conference on Computer Modeling and Simulation, Pages 25–30, ACM Digital Library (ISBN: 978-1-4503-7703-4) 2020,
- [14] Yoritaka Iwata, Yasuhiro Takei, "Numerical scheme based on the implicit Runge-Kutta method and spectral method for calculating nonlinear hyperbolic evolution equations ", Axioms 2022, 11(1), 28.
- [15] 大宮真弓 (2008)「非線形波動の古典解析」森北出版.
- [16] R. Dautray and J.-L Lions, “Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology: Volume 5: Evolution Problems I (English Edition)”, Springer-Verlag, 2000.

工学教育研究推進機構運営会議

議長 上平 員丈

構成委員	木村 茂雄	河原崎徳之	栗原 誠	納富 一宏	馬嶋 正隆
	黄 啓新	高村 岳樹	山口 淳一	小池あゆみ	岡崎 美蘭
	高橋 勝美	一色 正男	井上 秀雄	兵頭 和人	山家 敏彦
	塩川 茂樹	工藤 翔友	脇田 敏裕	野田 豪	吉満 俊拓
	高橋 正雄	三井 和博	星野 潤	井藤 晴久	

神奈川工科大学研究報告

B-46 理工学編 通巻 46 号

令和 4 年 3 月 1 日 発行

編集兼発行者 神奈川工科大学
〒 243-0292 神奈川県厚木市下荻野1030
電話 046-241-6221

印 刷 者 株式会社スクールパートナーズ

当該研究報告に掲載された論文の著作権は本学に帰属する。