

# Taylor 展開法による常微分方程式の数値計算の性能

\*平山 弘、\*西川 瞬、\*\*白石 文秀

\*神奈川工科大学工学部

\*\*九州大学バイオアーキテクチャーセンター

最近大きなシステムの長時間高精度計算法は非常に重要である。任意次数可変ステップの Taylor 展開法はこのような問題解決に適する数値計算法である。

本論文では Taylor 展開法を天文学に現れるピタゴラス 3 体問題に適用し、計算精度、計算時間を調べ、この方法の有効性を調べた。

## Performance of Numerical Computation of the Differential Equations by Taylor Series

\*Hiroshi HIRAYAMA, \*Shun NISHIKAWA, \*\*Fumihide SHIRAIISHI  
\*Faculty of Engineering, Kanagawa Institute of Technology  
\*\*Bio-Architecture Center, Kyushu University

Recently, the highly-reliable calculation method for the time courses of the dependent variables in large-scale network systems is important. The arbitrary-order and variable-step Taylor series method is a good numerical calculation method for these problems.

In the present paper, we apply the Taylor series method to the Pythagorean problem of three bodies, and examine the calculation accuracy and the computation time to elucidate the performance of the present method.

### 1 はじめに

最近、常微分方程式で記述された大規模なシステムを長時間に渡り高精度で計算することが求められている。これまで常微分方程式の数値解法は Euler 法や Runge-Kutta 法による差分近似を利用した計算法を利用することが一般的とされてきた。これらの方法では計算次数が限定され長時間高精度の計算は非常に難しくなる。このような問題に対し、任意次数、可変ステップの計算方法である Taylor 展開法が

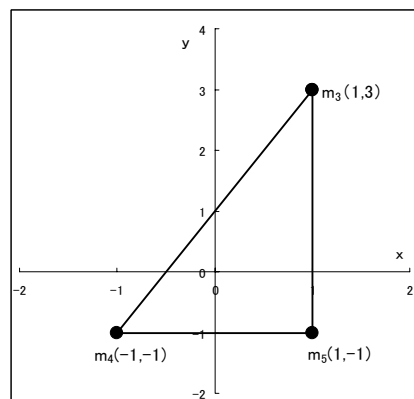


図 1. ピタゴラスの三体問題の初期状態

最も適していると思われる。本論文では、ひとつの例として、天文学上の三体問題を従来の Runge-Kutta 法と Taylor 展開法を使って解き、計算精度、計算時間を調べ、Taylor 展開法の性能を調べた。

計算する常微分方程式として、解くのが難しいとされるピタゴラスの三体問題[5]を選択した。ピタゴラスの三体問題とは、辺長 3,4,5 の直角三角形の頂点の位置に、それぞれの対辺長に比例する質量 3,4,5 の質点を図 1 のように静止状態で配置し、その状態を初期条件として、これらの質点が相互の引力によって、この後どう運動するかを追及する問題である。

質点  $m_3$ 、 $m_4$  間の距離を  $r_{34}$  というように定義すると、

$$\begin{aligned} r_{34} &= \sqrt{(x_3 - x_4)^2 + (y_3 - y_4)^2} \\ r_{35} &= \sqrt{(x_3 - x_5)^2 + (y_3 - y_5)^2} \\ r_{45} &= \sqrt{(x_4 - x_5)^2 + (y_4 - y_5)^2} \end{aligned} \quad (1.1)$$

これらを用いて運動方程式を書くと、

$$\begin{aligned} x_3'' &= -\frac{4(x_3 - x_4)}{r_{34}^3} - \frac{5(x_3 - x_5)}{r_{35}^3} \\ y_3'' &= -\frac{4(y_3 - y_4)}{r_{34}^3} - \frac{5(y_3 - y_5)}{r_{35}^3} \\ x_4'' &= \frac{3(x_3 - x_4)}{r_{34}^3} - \frac{5(x_4 - x_5)}{r_{45}^3} \\ y_4'' &= \frac{3(y_3 - y_4)}{r_{34}^3} - \frac{5(y_4 - y_5)}{r_{45}^3} \\ x_5'' &= \frac{3(x_3 - x_5)}{r_{35}^3} + \frac{4(x_4 - x_5)}{r_{45}^3} \\ y_5'' &= \frac{3(y_3 - y_5)}{r_{35}^3} + \frac{4(y_4 - y_5)}{r_{45}^3} \end{aligned} \quad (1.2)$$

となる。初期値は  $t = 0$  のとき、

$$\begin{aligned} x_3 &= 1, \quad x_3' = 0, \quad y_3 = 3, \quad y_3' = 0, \\ x_4 &= -2, \quad x_4' = 0, \quad y_4 = -1, \quad y_4' = 0, \\ x_5 &= 1, \quad x_5' = 0, \quad y_5 = -1, \quad y_5' = 0, \end{aligned}$$

である。

使用した計算方法は、通常よく使われる 4 次の Runge-Kutta 法 [6]、8 段 6 次の Runge-Kutta 法[2]および Taylor 展開法[4]である。これらを使用して求めた計算結果を比較検討した。

## 2 計算方法

### 2.1 Runge-Kutta 法

4 次の Runge-Kutta 法 (以降 RK 法と略す) ではどの程度ステップ幅を取るべきかを事前に判断することが難しいので、いくつかのステップ幅を用意しそれぞれ計算し、その精度を確認した。

使用したステップ幅  $\Delta t$  は、

$$\Delta t = 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}$$

である。

8 段 6 次の RK 法でも 4 次の場合と同じステップ幅を使用した。

### 2.2 Taylor 展開法

Taylor 展開法では何次まで展開してもよいが、ここでは 20 次の Taylor 展開式を使った。任意次数の数値計算法を使っても倍精度の計算では 20 次程度の公式とほぼ同じ結果が得られることが多いので、本計算では 20 次の Taylor 展開式を利用することにした。

$$f(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + \cdots + a_{20} t^{20} \quad (2.1)$$

計算ステップ幅  $\Delta t$  は、Taylor 展開式の最後の項が倍精度の計算で無視できるほど小さいとして、ステップ幅の大きさを決定する。このとき成り立つ式は

$$\left| \frac{a_{20} (\Delta t)^{20}}{a_0} \right| < 10^{-17} \quad (2.2)$$

となる。この式からステップ幅  $\Delta t$  の値は

$$\Delta t = \sqrt[20]{10^{-17} \cdot \frac{a_0}{a_{20}}} \quad (2.3)$$

と得られる。(2.2)式は相対評価式であるが、(2.2)の分母の $a_0$ を1に変えたものが絶対値評価式になる。倍精度で計算しているので、計算精度の限界より少し小さい値 $10^{-17}$ を使った。Taylor展開の計算では(2.1)の展開式をA安定化[3]し、高精度化を計るためにPadé展開を使って計算することができる。

Padé展開とは、Taylor展開式を、有理関数に変形したものである。

$$a_0 + a_1x + \dots = \frac{p_0 + p_1x + \dots + p_Mx^M}{1 + q_1x + \dots + q_Lx^L} \quad (2.4)$$

(2.4)式の両辺に右辺の分母を掛け、 $M+L$ 次の係数まで一致するように、有理関数の係数を決定することによってPadé展開式が得られる。このときの条件は、次のように表される。

$$a_l + \sum_{k=1}^m a_{l-k}q_k = p_l \quad (l=0, \dots, M) \quad (2.5)$$

ただし、 $m$ は、 $l$ が $L$ 以下ならば、 $m=l$ とし、 $l$ が $L$ を越えるなら、 $m=L$ とする。(2.5)と同じ関係式であるが、 $l$ が $M$ を越えている場合には、次の関係式が得られる。

$$a_l + \sum_{k=1}^l a_{l-k}q_k = 0 \quad (l=M+1, \dots, M+L) \quad (2.6)$$

(2.6)の連立一次方程式を解き、有理式の分母の係数( $q_1, q_2, \dots, q_L$ )を決定し、その係数を(2.5)式代入して、分子の係数( $p_0, p_1, p_2, \dots, p_M$ )を求めることができる。

Padé展開は、一般に同じ次数のTaylor展開式より高精度で、収束の良い式を与えることが多いので、常微分方程式の解のTaylor展開式をPadé展開することは、常微分方程式を高精度で安定的に計算できると期待できる。

本計算を、Padé展開を使って計算すると計算時間は約2倍になる。計算精度は良くなるが

それほど大きな精度改善は見られなかった。今回の問題では、Padé展開を使わないでも同程度の精度で計算できるので、Padé展開を今回の計算では使わなかった。

### 3 数値計算結果

#### 3.1 Runge-Kutta 法

RK法での解析は4次、8段6次ともにステップ幅を大きい方から順におこなった。

ステップ幅を大きく取った場合、計算途中で質点 $m_4$ 、 $m_5$ の座標値が急激に増加し続けるという不自然な結果を示した。もっとも大きいステップ幅 $\Delta t = 10^{-4}$ の場合の4次のRK法で時間 $t = (0 \sim 10)$ の計算した結果をグラフで表すと図2のようになる。

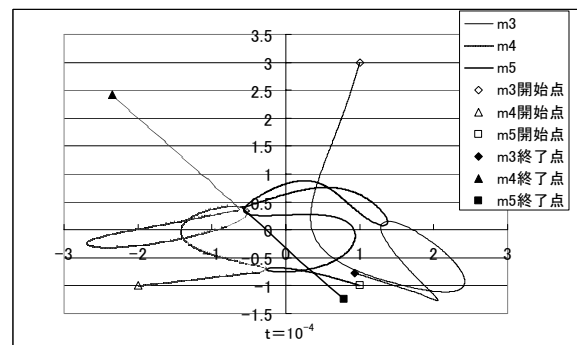


図2. 質点の運動

図2が示すように、質点 $m_4$ 、 $m_5$ が接近した時点を境に、それぞれの質点の運動が不自然に変化している。この三体問題においても重心、運動量、運動エネルギーは保存され、一定値のはずであるが、質点 $m_4$ 、 $m_5$ の数値が不自然に変化し始めた点 $t = 8.6$ 付近において、一定であるはずの運動エネルギーの値が、 $t = 1.88$ 付近で $E = -12.817$ から $E = -13.181$ に変化し、ここまで $E = -13.181$ で一定で保たれていたものがこの時点を境に $E = 77763$ になるという不自然な値に大きく変化していた。ことから事実上数値計算に失敗していると判断し、 $\Delta t = 10^{-4}$ の数値計算はここで打ち切った。このように大きくエネルギーが変化したにもかかわらず、重

心や運動量はほぼ一定の値を保っていた。

同様に 8 段 6 次の RK 法においても、 $\Delta t = 10^{-4}$  の場合では  $t = 1.88$  付近で  $E = -12.817$  から  $E = -12.783$  に変化し、 $t = 15.8$  付近まで  $E = -12.783$  でほぼ一定に保たれていたものが、この時点で  $E = 100073$  まで増加し、明らかに計算に失敗していた。これらのことから RK 法でピタゴラスの三体問題を計算する場合、ステップ幅を大きくした場合、正確な値を得ることが困難であることがわかる。このような場合でも重心、運動量はほぼ一定に保っていた。

図 2 からわかるように、エネルギーが大きく変化するのは、2 つの物体 (天体) が接近する時である。

$t = 10^{-5}, 10^{-6}$  のときもエネルギーが保存されず明らかに計算が破綻していると考えられる数値が見られ、最終的に 4 次の RK 法では  $\Delta t = 10^{-7}$  の場合でも  $t = 41$  付近からエネルギーが大きく変化して正確に計算を終了することができなかつた。8 段 6 次の RK 法においては、 $\Delta t = 10^{-7}$  のステップ幅であれば  $t = 80$  まで、重心、運動量、エネルギーをほぼ一定に保ったまま計算を完了することができた。

### 3.2 Taylor 展開法

20 次の Taylor 展開法を用いて計算した場合は問題なく  $t = 80$  まで計算を完了することができた。エネルギー、運動量、重心は 8 段 6 次の RK 法より少しだけ精度よい結果を得ることができた。このとき (2.3) 式によって導かれたステップ幅の最大値は  $\Delta t = 0.35528$ 、最小値は  $\Delta t = 6.7728 \times 10^{-7}$  であった。

### 3.3 精度の確認と比較

それぞれ方法での数値計算の結果を 10 毎の  $t$  について付録 1 の表 1 に示した。計算を正常に終了できなかった RK 法の結果は除外してあるため、表の Runge の項目は 8 段 6 次の

$\Delta t = 10^{-7}$  の場合の結果である。40 次の Taylor 展開式を使い、4 倍精度 (10 進数で約 35 桁) で計算したものを真の値として使っている。

この結果を見る限りでは、 $t = 40$  までは RK 法、Taylor 展開法ともに真値との有効桁数が 5 桁以上を保っているがその後  $t$  が 10 増加するごとに有効桁数が 1 つ減るといった結果が見られ、 $t = 80$  の時点ではその誤差は RK 法、Taylor 展開法どちらの場合で計算した結果も真値とはかなり誤差がある。RK 法による結果と Taylor 展開法による結果を比べてみると RK 法によって計算した結果のほうが真値との誤差が大きいことがわかる。

計算時間は表 2 のようになった。RK 法の場合、ステップ幅を  $10^{-7}$  と非常に小さくとってあるため、計算回数が多くなり計算時間も非常に多くなる。RK 法でもステップ幅を可変にできるように作成すればもう少し時間短縮を行うことができると思われる。

Taylor 展開法では、1 回のステップを進めるのに計算次数が高いこともあり、かなりの時間を必要とする。計算次数が高いため、ステップ幅を大きく取れるため計算回数が少なくなり、全体として計算時間の短縮になる場合が多い。この計算例でも大幅に計算時間を短縮することができた。

RK 法では、計算ステップの位置の計算値は容易にわかるが、ステップ途中の点の関数値は補完法を利用しなければならないが、Taylor 展開法は展開式が得られるので、その式に計算したい位置の座標を代入することによって容易に計算できる。

表 2. 計算時間

計算方法	実行時間 (秒)
Runge-Kutta (8 段 6 次)	1347.5
Taylor	3.078

この数値計算を行った環境は OS として

Windows XP、CPUとして Pentium4 3.0GHz である。コンパイラとして Visual Studio .NET2003 の C++言語[1]を使用した。共通言語ランタイム (CLR) を使わないネイティブコードを出すようにしてコンパイルしたものを使用した。

#### 4 おわりに

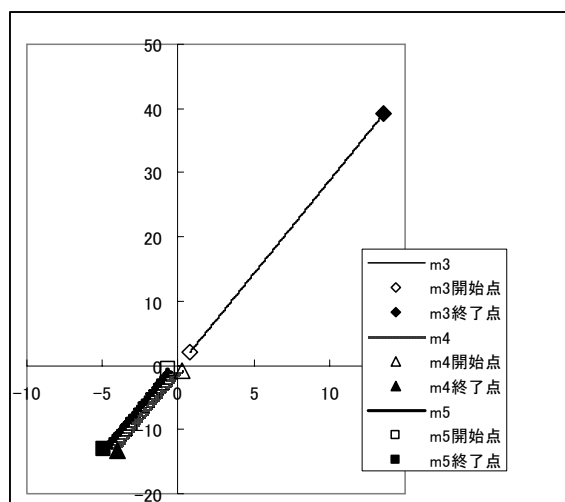


図3. 三体の最終運動 (  $t = 60 \sim 80$  )

RK法、Taylor展開法どちらの方法で計算しても最終的に約3桁の精度の結果しか得られなかった。予想より、かなり大きな誤差がでる結果となった。どちらも質点  $m_3$  が  $xy$  平面上の第1象限方向へはじきだされ、 $m_4$ 、 $m_5$  が相互に回転しあう対を作り、第3象限方向へ遠ざかっていくというピタゴラスの三体問題の最終運動(図3)に達している。ステップ幅を  $\Delta t = 10^{-7}$  にとった8段6次のRK法、ステップ幅を(2.2)式の精度でとった20次のTaylor展開法での計算結果は一応正しいと考えられる。

ピタゴラスの三体問題を Taylor 展開法で解くことで Taylor 展開法による常微分方程式の数値計算の性能を調べた結果、RK法を用いた場合よりも少しであるが計算精度がよく、プログラムでの計算速度は非常に速いといえる。RK法の計算のステップ幅は固定長で、Taylor

展開法を用いたほうは可変長であるため公平な比較とはいえないが、これを考慮しても、Taylor 展開法がかなり速く計算できると思われる。

RK法において4次では計算を正常に実行出来ないが、8段6次でようやく実行出来たことから見ても、次数の高い計算法が計算精度が欲なり、ステップ幅も大きく取れる。次数を上げることが容易な Taylor 展開法は、常微分方程式を解く上で有用であるといえる。

計算結果を見るとエネルギーが保存されるので、エネルギーが保存されるという Symplectic 法[3]を利用しなかった。これは今後の課題としたい。

#### 参考文献

- [1] Ellis M.A. and Stroustrup B : The Annotated C++ Reference Manual, Addison-Wesley, 1990
- [2] Gisela Engeln-Müllges Frank Uhlig : Numerical Algorithms with Fortran, Springer(1996)
- [3] Hairer E., Wanner G., Solving Ordinary Differential Equations II, Springer-Verlag, 1991
- [4] 平山 弘, 小宮聖司, 佐藤創太郎、Taylor 級数法による常微分方程式の解法, 日本応用数理学会、Vol 12. No.1, pp.1-8,(2002)
- [5] 長沢 工, 桧山 澄子 : パソコンで見る天体の動き、地人書館(1992)
- [6] 山本 哲郎 : 数値解析入門、サイエンス社(1959)

付録1. t に対する三対の座標計算結果表

	t	x3	y3	x4	y4	x5	y5
0.0	Runge	1.00000	3.00000	-2.00000	-1.00000	1.00000	-1.00000
	Taylor	1.00000	3.00000	-2.00000	-1.00000	1.00000	-1.00000
	真値	1.00000	3.00000	-2.00000	-1.00000	1.00000	-1.00000
10.0	Runge	0.77848	0.14139	-2.02509	0.09722	1.15299	-0.16261
	Taylor	0.77848	0.14139	-2.02509	0.09722	1.15299	-0.16261
	真値	0.77848	0.14139	-2.02509	0.09722	1.15299	-0.16261
20.0	Runge	3.00429	0.51193	-1.38863	-0.47048	-0.69167	0.06923
	Taylor	3.00429	0.51193	-1.38863	-0.47048	-0.69167	0.06923
	真値	3.00429	0.51193	-1.38863	-0.47048	-0.69167	0.06923
30.0	Runge	0.85634	2.28709	-0.88798	-0.86596	0.18858	-0.67949
	Taylor	0.85634	2.28709	-0.88798	-0.86596	0.18858	-0.67949
	真値	0.85634	2.28709	-0.88798	-0.86596	0.18858	-0.67949
40.0	Runge	-0.62201	1.85831	0.17355	-2.36842	0.23437	0.77974
	Taylor	-0.62200	1.85831	0.17354	-2.36841	0.23437	0.77974
	真値	-0.62200	1.85831	0.17354	-2.36841	0.23437	0.77974
50.0	Runge	-2.70102	-3.79575	1.50436	0.96132	0.41712	1.50840
	Taylor	-2.70145	-3.79717	1.50588	0.96083	0.41616	1.50964
	真値	-2.70146	-3.79722	1.50594	0.96081	0.41613	1.50968
60.0	Runge	0.77353	2.01724	0.26684	-0.76305	-0.67759	-0.59990
	Taylor	0.74483	1.94267	0.26436	-0.73282	-0.65838	-0.57935
	真値	0.74381	1.93995	0.26401	-0.73163	-0.65749	-0.57867
70.0	Runge	7.48949	21.4635	-2.43528	-7.14237	-2.54547	-7.16423
	Taylor	7.10026	20.6254	-1.89601	-6.94495	-2.74334	-6.94495
	真値	6.93346	20.2618	-2.00301	-6.87246	-2.55767	-6.65911
80.0	Runge	13.5850	39.1561	-4.01787	-13.1847	-4.93671	-12.9460
	Taylor	12.7897	37.4056	-3.86475	-12.5161	-4.58199	-12.5161
	真値	12.4474	36.6423	-3.55587	-12.3548	-4.62377	-12.1016