ハイパフォーマンス 73－8
コンピューティング
(1998. 10. 9)

べき級数による任意次数A安定な常微分方程式の数値計算法

平山　弘

神奈川工科大学　機械システム工学科

べき級数の四則演算や関数計算は、C++言語やFortran90によって容易に定義できる。四則演算、基本関数及び条件文からなる関数はこの定義を使うと容易にべき級数に展開できる。これは、また、ピカールの逐次近似法によって、常微分方程式解をべき級数に展開することを可能にする。解は任意の次数まで展開できる。このべき級数を使って解の誤差や最適な刻み幅を与えることができる。さらに、べき級数をPadé展開すると、任意次数のA安定な常微分方程式の計算法を与える。

Arbitrary order and A-Stable Numerical Method for the Ordinary Differential Equation by Power Series

Hiroshi Hirayama

Kanagawa Institute of Technology

The arithmetic operations and functions of power series can be defined by C++ language and Fortran90 easily. Using this, the functions which consist of arithmetic operations, pre-defined functions and conditional statements can be expanded in power series. This also makes it possible that the solution of an ordinary differential equation can be expanded in power series by Picard's method of successive approximation. The solution can be expanded up to arbitrary order. Power series can be used for the evaluations of the errors and the optimal step size within given error allowance easily. In addition, we can transform power series into Padé series, which give arbitrary order, high precision and A-stable formula for solving ordinary differential equation numerically.

1. はじめに

常微分方程式の解を、任意の次数までべき級数展開できることは、数学的には、常微分方程式の級数展開による解法と同じであり、その可能性については、久保田[4]などで述べられており、Corliss and Chang[1]によって、任意の次数のべき級数展開式を利用した常微分方程式を解くた

めのパッケージ・ソフトウエアが発表されている。

本論文では、プログラムで使われる演算子（+,-,*,/など）を、被演算の型が異なる場合、別の意味を与えることができる機能、C++言語[2]の機能（オペレータ・オーバロード、operator overload）を使い、有限項で打ち切ったべき級数間の四則演算、関数演算、微積分を定義する。この機能を使うと、プログラムの形で与えられた任意の関数をべき級数展開することができる。常微分方程式の初期値問題の解を任意次数のべき級数展開の形で、容易に得られる。得られたべき級数解を数値計算に利用すれば、任意の次数の数値解法が得られる。このべき級数展開式をPadé展開式に変形すると、任意次数のA安定な数値計算方法を与えることを示す。

ここで、提案する計算法は、現在最もよく使われる言語の一つであり、入手が容易なC++言語を使っている。このような計算方法は、数値計算でよく使われるFORTRANの新しい規格であるFORTRAN 90でも可能である。

2. べき級数展開

関数をべき級数展開するための基本的な考え方を説明し、その計算方法について簡単に論じる。

2.1 べき級数の四則演算

有限項で打ち切ったべき級数の四則計算のプログラムは、以下のように簡単に作ることができる。平行移動によって、展開位置を原点へ移すことができるので一般性を失うことなしに、原点で展開した式だけを扱うことができる。この級数を次のように定義する。

(2.1) $$\mathrm{f}(x) = \mathrm{f}_0 + \mathrm{f}_1 x + \mathrm{f}_2 x^2 + \mathrm{f}_3 x^3 + \mathrm{f}_4 x^4 + \cdots + f_m x^m$$

(2.2) $$\mathrm{g}(x) = \mathrm{g}_0 + \mathrm{g}_1 x + \mathrm{g}_2 x^2 + \mathrm{g}_3 x^3 + \mathrm{g}_4 x^4 + \cdots + g_m x^m$$

(2.3) $$\mathrm{h}(x) = \mathrm{h}_0 + \mathrm{h}_1 x + \mathrm{h}_2 x^2 + \mathrm{h}_3 x^3 + \mathrm{h}_4 x^4 + \cdots + h_m x^m$$

$h(x)$ が $f(x)$ と $g(x)$ の和差積商のとき、f, g および h の係数は、次のような関係になる。

2.1.1 加減算

(2.4) $$\mathrm{h}(x) = \mathrm{f}(x) \pm \mathrm{g}(x) \qquad \mathrm{h}_i = \mathrm{f}_i \pm \mathrm{g}_i \qquad (n = 1, \cdots, m)$$

2.1.2 乗算

(2.5) $$\mathrm{h}(x) = \mathrm{f}(x)\,\mathrm{g}(x) \qquad \mathrm{h}_n = \sum_{k=0}^{n} \mathrm{f}_k\, g_{n-k} \qquad (n = 1, \cdots, m)$$

2.1.3 除算

(2.6) $$\mathrm{h}(x) = \frac{\mathrm{f}(x)}{\mathrm{g}(x)}$$

(2.7) $$h_0 = \frac{f_0}{g_0}\text{、} \qquad \mathrm{h}_n = \frac{1}{g_0}\left(\mathrm{f}_n - \sum_{k=0}^{n-1} \mathrm{h}_k g_{n-k}\right) \qquad (n \geq 1) \qquad (n = 1, \cdots, m)$$

(2.7)の式は、(2.6)において、両辺に $f(x)$ を掛け、(2.1)、(2.2)、および(2.3)を代入して、展開する。両辺の同じ次数の係数が等しいことを利用して得られる。

2.2 べき級数の関数

他の多くの初等関数でも同様に係数間の漸化式を導くことができる。ここでは、べき級数の指

数関数の計算方法を示す。この方法は後に述べる常微分方程式の解のべき級数展開の単純な例にもなっている。

$h(x)=e^{f(x)}$とおくと、

(2.8) $$\frac{dh}{dx}=h\frac{df}{dx}$$

である。(2.8)に(2.1)、(2.3)を代入して、両辺の係数を比較することによって、次のような関係が得られる。

(2.9) $$h_0=e^{f_0},\qquad h_n=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}k\,h_{n-k}f_k\quad(n\geq 1)\quad(n=1,\cdots,m)$$

このように簡単に計算することができる。対数関数や三角関数の場合も同様な公式を得ることができる。

式(2.9)のように、べき級数展開式の指数関数の計算には、指数関数の計算は、1回しか入らないので、べき級数展開の指数関数の計算量は、通常の四則演算とそれほど大きな違いにはならない。このことは、対数関数や三角関数などでも同様である。

2.3 べき級数の微積分

べき級数の微分積分の計算も容易に計算できる。この計算は、通常の数値計算には存在しないもので、べき級数特有の計算である。

2.3.1 微分 $h(x)=\dfrac{d\,f(x)}{dx}$

(2.10) $$f_m=0,\qquad h_n=(n+1)f_{n+1}\qquad(n=0,\cdots,m-1)$$

最高次数の係数f_mは、0とする。

2.3.2 積分 $h(x)=\int_0^x f(t)dt$

(2.11) $$h_0=0,\qquad h_n=\frac{1}{n}f_{n-1}\qquad(n=1,\cdots,m)$$

定数項は、積分定数なので、任意で良いが、ここでは、0としてある。

3. 常微分方程式の解のべき級数展開

この節では、べき級数展開の方法を利用して、常微分方程式の解を任意の次数までべき級数展開する方法を示す。べき級数展開された解は、任意次数の一段公式として、Runge-Kutta公式の代わりとして利用できる。また、解の許容誤差を与えたとき、その範囲で最良の刻み幅を決めることもできる。

3.1 解のべき級数展開

次のように$\dfrac{d\mathbf{y}}{dx}$について解かれた形になっている常微分方程式について考える。

(3.1) $$\frac{d\mathbf{y}}{dx}=\mathbf{f}(x,\mathbf{y})$$

ここで、$\mathbf{y}$および$\mathbf{f}$は、一般にベクトルである。解$\mathbf{y}$は以下のように、xについて、べき級数展

開できるものとする。

(3.2) $$\mathbf{y} = \mathbf{a}_0 + \mathbf{a}_1 x + \mathbf{a}_2 x^2 + \mathbf{a}_3 x^3 + \cdots$$

この計算は、Picardの逐次計算法[6]

(3.3) $$\mathbf{y}_0 = \mathbf{a}_0$$

(3.4) $$\mathbf{y}_n = \mathbf{a}_0 + \int_0^x \mathbf{f}(x, \mathbf{y}_{n-1})dx$$

を繰り返し行うことによって求めることができる。この計算には、積分演算を含むが、上で定義した方法で計算可能である。一般に、(3.4)の計算をm回計算すれば、m次のべき級数解が得られる。

3.2 誤差評価

(3.2)のように得られたn次のべき級数展開式は、数値計算法の公式と見ると、n次のRunge-Kutta公式に相当するものが得られたことになる。nは任意であるから、任意の次数のRunge-Kuttaの公式に相当するものが得られたことになる。

常微分方程式の解がべき級数で得られるので、n次の展開式が得られた場合、n次まで計算した値と$n-1$次までの値とを比較することによって、誤差を推定することができる。

誤差評価が容易にできるので、要求精度にあわせて、刻み幅を調節することもできる。これまでのRunge-Kutta法では、不可能であった、計算の次数の調整も可能となる。

4 Padé展開

常微分方程式のべき級数展開式を、Padé展開することによって、A安定な計算法が得られる。

4.1 Padé展開の計算

べき級数展開は、容易にPadé展開することができる。 Padé展開とは、以下のようにべき級数展開式を、有理関数に変形したものである。

(4.1) $$a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots \;=\; \frac{p_0 + p_1 x + \cdots + p_M x^M}{1 + q_1 x + \cdots + q_L x^L}$$

(4.1)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得られる。この条件は、次の様な式で表される。

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

ただし、mは、lがL以下ならば、$m=l$とし、lがLを越えるならば、$m=L$とする。(4.2)と同じ関係式であるが、lがMを越えているいる場合、次の関係式が得られる。

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

(4.3)の連立方程式を解き、有理式の分母の係数$(q_0, q_1, \cdots, q_L)$を決定し、その係数を(4.2)式に代入して、分子の係数$(p_0, p_1, \cdots, p_M)$を求めることができる。

このとき、解かなければならない一次方程式(4.3)の係数は、Toeplitz行列と呼ばれる特別な行列になる。この場合、一次方程式は、通常の一次方程式が未知数の数をnとしたとき、n^3に比例するのに対し、n^2に比例する高速な計算法[5]が知られている。本プログラムでは、この方

法によって、計算を行った。ただし、nが2、3のように、かなり小さい場合、Gaussの消去法が効率的なので、 Gaussの消去法を使った。

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できる場合が多いので、常微分方程式の解のTaylor展開式をPadé展開することは、効率的な常微分方程式の計算法を与えると期待できる。

4.2 A安定性

ここでは、べき級数展開式を、Padé展開することによって、高精度で効率的な計算法が得られるだけでなく、A安定な計算法になることを述べる。テスト方程式

(4.4) $$\frac{dy}{dx} = \lambda y$$ $x = 0$のとき、$y = y_0$とする。λは一般に複素定数である。

を解くことを考える。この方程式の解のべき級数展開は、良く知られているように、

(4.5) $$y = y_0 e^{\lambda x} = y_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\lambda x)^k}{k!}$$

となる。A安定とは、$\mathrm{Re}\,\lambda x < 0$のとき、(4.5)の右辺の級数部分の絶対値が1より小さくなるときを言うから、無限級数(4.5)式を使う計算法は、A安定である。実際の計算では、有限項で打ち切った式を使うので、べき級数展開式を使う限りA安定な計算法は存在しない。多くの項をとれば、安定な領域は広くなり、A安定な式に近づくので、次数を上げることによって、安定性のよりよい公式を作れる。Corliss等は、30次などのかなり高次の公式を使うことによって、安定化を計っている。(4.5)の指数関数$e^{\lambda x}$のPadé展開については、良く研究されており、次のような結果が得られている。

定理 ： 指数関数$e^{\lambda x}$を(4.1)のように、分子M次、分母L次式にPadé展開したとき、$M \le L \le M+2$のとき、A安定である。

証明：E. Hairer and G. Wanner[3]のⅣ章（60頁）を参照のこと。

したがって、分母の次数が分子の次数と同じか1または2次高い式に変形すれば、A安定な公式となる。常微分方程式の初期値問題に対する任意次数のA安定な解法が得られたことになる。従来のA安定な計算法は、非線型の方程式を解く計算が必要がある[7]のに対し、本方法では、連立一次方程式を解く程度の計算できる。このため、計算方法としても、かなり簡単である。

5 弱stiffな問題

ここで導いた公式を使って、弱stiffな常微分方程式を解き、A安定およびA安定でない陰的Runge-Kutta法との比較を行う。比較のため、問題は、田中等[7]によって、いろいろテストされている例題を使う。

(5.1) 方程式：$$\frac{dy}{dx} = 100(\sin x - y)$$

(5.2) 初期条件： $y(0) = 0$ 理論解：$$y = \frac{\sin x - 0.01\cos x + 0.01e^{-100x}}{1.001}$$

この問題を分子2次、分母2次のPadé展開法[2/2]で解いた結果をTable 1.に示す。このときのステップサイズhは、0.15である。前の例題と同様に、100ステップ計算し、最初のステップと最後のステップの誤差および最大誤差を示した。分子9次、分母11次のPadé展開法[9/11]による結

果もTable 1.に示す。この２つの方法以外の計算法による結果は、田中等[7]から引用したもので、２段数陰的Rung-Kutta法による結果である。Table 2.に示した方法は、Jain2を除いて、すべてA安定な計算方法である。

Table 1. Absolute errors in numerical solutions of $y'=100(\sin x-y)$、$y(0)=0$

H	Abs. Error	[2/2]	[9/11]	Butcher	Radau IIA	Jain2	Norsett 2
0.15	First-step	4.13d-02	1.34d-04	5.56d-03	8.44d-04	4.60d-02	5.45d-03
	Last-step	3.13d-02	5.34d-04	7.09d-05	1.29d-05	4.37d+65	1.19d-03
	Maximum	2.15d-01	2.23d-03	4.56d-03	8.44d-04	4.37d+65	5.45d-03

この結果を見ると、陰的Runge-Kutta方法と同じ次数のPadé展開法[2/2]は、あまり良い結果とはいえない。しかしながら、この方法はA安定な計算方法なので、A安定でないJain2の方法のように発散することはない。前の例題で使ったPadé展開法[9/11]は、他のA安定な陰的Runge-Kutta法と同じ程度の誤差で、前の例題のように、高精度の結果は得られない。このため、次数をさらに上げて[15/15]程度の計算も行ってみたが、ほぼ同じような結果であった。これは、Padé展開を構成している分子、分母の展開式の収束が非常に遅く、かなり高次までの項まで計算する必要があるためであると考えられる。

6 まとめ

１変数の関数を、数値的にべき級数展開する方法を述べた。この方法は、C++言語を使うと、その関数の数値計算用プログラムの宣言部分の変更程度で、容易にべき級数展開できる。さらに、微分積分を計算することができる。

これを利用すれば、常微分方程式の解を任意の次数まで、べき級数展開できる。解がべき級数展開であるため、その扱いは非常に容易であり、計算結果の誤差評価、許容誤差を与えたときの最良の刻み幅の決定などに利用できる。さらに、このべき級数展開をPadé展開することによって、常微分方程式の初期値問題を解く、任意次数のA安定な公式を得ることができる。

参考文献

[1] Corliss G. and Chang Y. F., ACM Trans. Math. Soft., 8(1982), 114-144

[2] Ellis M. A. and Stroustrup B., The Annotated C++ Reference Manual, Addison-Wesley, 1990

[3] Hairer E., Wanner G., Solving Ordinary Differential Equations II, Springer-Verlag, 1991

[4] 久保田光一, bit, 22(1991), 860-861

[5] Press W.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 1988, Cambridge (邦訳：丹慶、奥村、佐藤、小林訳、技術評論社、1993)

[6] 佐野理, キーポイント微分方程式, 岩波書店, 東京, 1993

[7] 田中,高山, 36(1995), 226-234