解 説

3. 微分方程式に対する保証付き数値計算†

山口昌哉†† 吉原英昭††† 西田孝明†††

0. はじめに

力学系理論の最近の発展はめざましく，その解の挙動を調べるのみならず，解の構造，安定性，分岐現象を含む定性的な性質が，さかんに研究されている．定常解，周期解，それらの分岐，そしてストレンジアトラクタとよばれる chaotic な挙動まで，多彩である．たとえば 1)，7) 参照．しかし，それらの複雑な現象を示す系が，三方程式の自励系あるいは，外力の働く二方程式系というように，非常に簡単な常微分方程式系によって与えられている．しかもそれらの興味ある解の性質の多くは，コンピュータによって数値計算で示された結果であったり，それに示唆されて解析された結果である．このように，理論的研究にも，コンピュータを用いることは，必須になっているが，一般にはそれらの結果を厳密な解析的証明によって示すことは，非線形性ゆえに困難である．この解説では，力学系理論としても興味があり，解析的には示されていない結果を，厳密なものとして証明する計算機を利用した方法を，二つ紹介する．これらのほかにも関数方程式の解について，その数値的検証法はあるが，それらについては，たとえば，5) を参照されたい．

1. 微分方程式の数値解法

常微分方程式系

$$dx/dt=f(t,x),\quad t\in\boldsymbol{R},\quad x\in\boldsymbol{R}^n, \tag{1.1}$$

の解を調べる最も有力な方法は，適当に離散化して，コンピュータによって数値計算し結果を得ることであり，その結果を図形化すれば解が見えるわけで，画期的な楽しい研究方法である．しかし，その見える解が，正しいかどうかを判定するには，用いている数値解法の打切り誤差と計算機による丸め誤差をともに，大域的に評価しなければならない．前者は，数値解析学でよく行われている誤差評価を利用することになるが，たとえば，4次精度の Runge-Kutta 法を用いたときの誤差評価を陽に評価するのは，簡単ではない．後者の丸め誤差は，計算機に依存するわけで，その計算機の浮動小数点数演算とともに，その誤差を区間演算を用いて正確に評価するソフトウェアが，必要になる．そして，これらの誤差を考慮して，有限区間であるとしても大域的な誤差評価に導く理論の一つとして，たとえば，擬軌道の理論が必要となる．そして，それらを総合する解析の理論が，基礎になければならない．

2. 自 励 系

簡単な常微分方程式系であって，解の挙動が複雑な典型例として，Lorenz 方程式が有名である[3]．

$$\begin{cases} dx/dt=\sigma(y-x) \\ dy/dt=rx-y-xz \\ dz/dt=-bz+xy. \end{cases} \tag{2.1}$$

ストレンジアトラクタを含むその解の性質は，ほとんどが，数値計算によって知られているもの，あるいは，示唆されて解析されたものである．ここでは，厳密な結果を証明する計算機を利用した方法の一つとして，系 (2.1) の周期解の存在証明[6] を紹介する．考える方程式系は，$t\in\boldsymbol{R}$ として次で与えられている．

$$dx/dt=f(x),$$
$$x=(x_1,\cdots,x_n),\quad f=(f_1,\cdots,f_n). \tag{2.2}$$

この系の周期解を求めるのに，その軌道による Poincaré 写像を考え，その不動点を求める形に定式化する．すなわち，ある超平面 $\Gamma=\{x\,|\,x_n=a\}$ を考え，$x^{(0)}\in\Gamma$ の点から出た軌道 $x(t)=S_tx^{(0)}$ が，ある $T>0$ で $x^{(1)}=S_Tx^{(0)}\in\Gamma$ になっているとする．そのとき Γ 上 $x^{(0)}$ の十分小さい近傍 U の点 x から出た軌道：S_tx も，Γ を横切り，その交点を，$P(x)\in\Gamma$ として Poincaré 写像 P が定義できる．この Poincaré

† Validated Numerical Computations for Solving Ordinary Differential Equations by Masaya YAMAGUTI (Ryukoku University, Department of Applied Mathematics and Informatics, Faculty of Science and Technology), Hideaki YOSHIHARA and Takaaki NISHIDA (Kyoto University, Department of Mathematics, Faculty of Science).

†† 龍谷大学理工学部数理情報学科
††† 京都大学理学部数学科

写像を，$x^{(0)}$ の近傍Uで Taylor 展開して調べる．すなわち，$y=x-x^{(0)}$ に対して，写像：$Q(y)=P(x)-x^{(0)}$, $x\in U$, を考えると，次の形に書ける．

$$Q(y)=y^{(0)}+Ly+Q_2(y), \qquad (2.3)$$

ここで，$P(x^{(0)})=x^{(1)}$, $y^{(0)}=x^{(1)}-x^{(0)}$ であって，Lは，写像Qの $y=0$ での線形部分に当たる $n\times n$ 行列で，Q_2 は，非線形項である．Q_2 が，2次以上である特徴を次の形で仮定しよう．

ある正数 ρ_0, C があって，任意の ρ, y, z が，$\|y\|$, $\|z\|\leq\rho\leq\rho_0$ をみたすとき，次が成り立つとする．ここで，$\|y\|^2=\sum_{i=1}^{n}y_i^2$ である．

$$\|Q_2(y)-Q_2(z)\|\leq C\rho\|y-z\|. \qquad (2.4)$$

定理 (Sinai-Vul) この下で，次の判定条件が，成り立つと仮定する．$\|y^{(0)}\|=\varepsilon$ として，ある $\rho_1\leq\rho_0$ に対して，

$$\|(L-I)^{-1}\|(\varepsilon/\rho_1+C\rho_1)\leq 1. \qquad (2.5)$$

そのとき，$x^{(0)}$ の ρ_1 近傍に，Qの唯一の不動点が，存在する．式(2.5)の左辺のノルムは，行列のノルムである．

定理は，ニュートン法の一つであって，判定条件の下に，逐次近似：$y_0=0$,

$$y_{k+1}=y_k-(L-I)^{-1}(Q(y_k)-y_k), \qquad k=0,1,2,\cdots,$$

が，収束することから分かる．したがって，実際の系(2.2)に適用するには，コンピュータを用いて判定条件を検証しなければならない．その検証法を，系(2.2)の右辺が，x の高々2次の多項式のときに説明しよう．右辺が，次の形で書ける．

$$f(x)=Ax+(Bx,x), \qquad (2.6)$$

ここで，Aは $n\times n$ 行列，(Bx,x) は，要素が2次形式 (B_ix,x) となる n ヴェクトルである．このときには，もちろん

$$f_x(x)y=Ay+2(Bx,y),$$
$$(f_{xx}y,z)=(By,z),$$
$$\|f_{xx}\|=\|B\|\leq C_2$$

が，成り立っている．

差分法は，2次精度の Taylor 法を用いる．

$$Rx=x+\Delta tf(x)+\Delta t^2(Af(x)+2(Bx,f(x)))/2 \qquad (2.7)$$

と定めたとき，$\Delta t=10^{-5}$ 程度に選んで，

$$x_{k+1}=Rx_k, \quad k=0,1,2,\cdots,K, x_0=x^{(0)}, \qquad (2.8)$$

が，差分法である．$x^{(0)}\in\Gamma$ を適当に選んで，上の差分法で倍精度浮動小数点数演算で，$\bar{x}_1,\bar{x}_2,\cdots$ と計算し，$\bar{x}_{K-1}$ から $\bar{x}_K$ の間で，Γ を横切ったときにこの2点を線形補間して，$\bar{x}^{(1)}\in\Gamma$ の点を求める．その際 $\|\bar{x}^{(1)}-x^{(0)}\|$ が，10^{-9} 程度の近さであるように，$x^{(0)}$ を選ぶことが，以下の評価で要請される．$P(x^{(0)})=x^{(1)}$ として，ε の評価は次の形で行う．

$$\varepsilon=\|x^{(1)}-x^{(0)}\|\leq\|x^{(1)}-\bar{x}^{(1)}\|+\|\bar{x}^{(1)}-x^{(0)}\|.$$

第2項は，上記の数値計算の結果であり，第1項は，次の形に書いて評価する．

$$\|x^{(1)}-\bar{x}^{(1)}\|\leq\|x^{(1)}-S_{K\Delta t}x^{(0)}-(\bar{x}^{(1)}-\bar{x}_K)\|+\|S_{K\Delta t}x^{(0)}-\bar{x}_K\|,$$

この第1項は，$x^{(0)}$ の近傍での式なので直接評価できるが，第2項の評価には，擬軌道の理論（4.）を用いる必要がある．すなわち，差分法(2.8)の正確な解 $x_k, k=0,1,2,\cdots,K$, に対して，計算結果である $\bar{x}_k$ には丸め誤差αが含まれている．このように，

$$\|\bar{x}_{k+1}-R\bar{x}_k\|<\alpha, \qquad k=0,1,2,\cdots,K,$$

をみたす点列を，力学系(2.8)の擬軌道といい，その研究は重要である．

命題 $S_tx^{(0)}$ を系(2.2)の軌道とする．その軌道に沿って線形化した方程式

$$d\phi/dt=f_x(S_tx^{(0)})\phi, \qquad t\geq s$$
$$\phi(s,s)=I \qquad (2.9)$$

の基本解を，$\phi(t,s)$ として，そのノルムを次で決める．

$$C_1=\max_{0\leq s\leq t\leq T}\|\phi(t,s)\|. \qquad (2.10)$$

そのとき，次の誤差評価が成り立つ．

$$\|S_{k\Delta t}x^{(0)}-\bar{x}_k\|\leq C_1k\Delta t^2a,$$
$$k=1,2,\cdots,K, \quad K\Delta t=T, \qquad (2.11)$$

ここで，定数aは，2次式

$$a-(K\Delta t)^2C^2B_1(\Delta t)a^2=\alpha/\Delta t^2+\Delta tC_3 \qquad (2.12)$$

の小さいほうの実根である．C_3 は，系と差分法(2.8)の打切り誤差から決まる定数で，αは各 k-step での丸め誤差である．B_1 は，4. の補題に出てくる定数である．6) では，α について簡単に倍精度で計算しているから，$|\alpha|<10^{-15}$ であると述べているが，厳密には，区間演算が必要である．

線形部分の行列Lは，線形化した方程式(2.9)の基本解 $\phi(T,0)$ によって求められる．したがってL及び C_1 を求めるには，方程式(2.9)を，$S_tx^{(0)}$ のかわりに $\bar{x}_0,\bar{x}_1,\cdots,\bar{x}_K$ を用い Euler 法で，差分化し，

$$\phi_{k+1,m}=\phi_{k,m}(I+\Delta tf_x(\bar{x}_k)), \quad k=m,m+1,\cdots,$$
$$\phi_{m,m}=I, \qquad (m=0,1,\cdots,K-1) \qquad (2.13)$$

数値計算して $\bar{\phi}_{k,m}$ を求める．線形の場合の擬軌道の理論を用いて評価すれば，次が得られる．

$$\|\bar{\phi}_{k,m}-\phi(k\Delta t,m\Delta t)\|\leq C_4\Delta t, \qquad (2.14)$$

ここで，C_4 は系，T，打切り誤差，丸め誤差に依存する定数である．そこで $\bar{C}_1=\max_{m\le k}\|\bar{\phi}_{k,m}\|$ を用いれば，(2.14)から C_1 も評価できる．ただし，すべての m，k についてこの最大値 $\bar{C}_1$ を求めるのに，コンピュータの時間がかかりすぎる場合には，少し工夫がいる．

非線形項 Q_2 の評価に出てくる定数 C の評価は，軌道 $S_t x^{(0)}, 0\le t\le T$，の近傍での力学系(2.2)の性質に依存していて困難である．6) 参照．

検証例 Lorenz 方程式(2.1)は，線形変換すると次の形になる．

$$\begin{cases} dx/dt=a_1x+b_1yz+b_1xz \\ dy/dt=a_2y-b_1yz-b_1xz \\ dz/dt=-a_3z+(x+y)(b_2x+b_3y) \end{cases} \tag{2.15}$$

$\sigma=6$，$r=28$，$b=8/3$ に対応して定数は，

$a_1=9.700378782$，　$a_2=-16.700378782$，

$a_3=2.666666667$，　$b_1=-0.227266206$，

$b_2=2.616729797$，　$b_3=-1.783396463$

である．この定数の符号が，6) では落ちていることを国府寛司に指摘していただいた．さて，$\Gamma=\{z=27\}$ として，$\Delta t=10^{-5}$ で，

$x^{(0)}=(3.50078718468, 3.33033178466, 27)$

から計算すると

$\bar{x}_{K-1}$

$=(3.5007926423, 3.3303411800, 27.0000342849)$

$\bar{x}_K$

$=(3.5007846842, 3.330327479, 26.9999842901)$

が得られ，線形補間して，$\bar{x}^{(1)}$ が求まる．

$\|x^{(0)}-\bar{x}^{(1)}\|\le10^{-9}$ であり，$\rho_0=0.001$ と取る．$T\le 0.68993$，$C_2=6$，$\bar{C}_1=23$ が，分かり，これから $C_1=25$，したがって $\varepsilon\le10^{-8}$ であって $C\le5\times10^5$ も得られる．$\|(L-I)^{-1}\|\le21$ も得られるから，$\rho_1=10^{-6}/3$ と取れば，結局

$$\|(L-I)^{-1}\|(\varepsilon/\rho_1+C\rho_1)<1, \tag{2.16}$$

したがって，Lorenz 方程式(2.1)は，$\sigma=6$，$r=28$，$b=8/3$ のとき，閉軌道をもち，点 $x^{(0)}$ の $10^{-6}/3$ 近傍を通っている．

この例が，6) の主結果になっているが，途中いくつかの点で，議論，計算を追試できない箇所があった．$K\Delta t=T\le0.69$ であるが，たとえば，論文にある数値 C_1，C では，式(2.12)の a が，実根をもたない ($C_3\fallingdotseq29305$, $T^2C_1^2B_1(\Delta t)\fallingdotseq557$) し，式(2.16)も成り立っていない．検討が必要である．

3. 周期系

周期的外力が働くときの，最も簡単な非線形微分方程式の例は，Duffing 方程式と Van der Pol 方程式であって，以下の取扱いはいずれの場合も同様であるので，ここでは，Duffing 方程式について考える．

$$d^2x/dt^2+\varepsilon dx/dt+bx+cx^3=P\cos t, \tag{3.1}$$

ここで，ε，c，P は正定数，b は非負の定数であって，パラメータとみなす．外力が働かない，すなわち，$P=0$ のときには，すべての軌道は時間がたつと $(x, dx/dt)=(0,0)$ に収束する．P が正のときには，少なくとも一つ外力と同じ周期 $T=2\pi$ の解をもつことが，簡単なエネルギ不等式から示せる．ところが，解がそれだけではないことが，機械振動あるいは電気回路による実験をはじめ，ディジタルコンピュータによる数値実験によって示されている．すなわち，パラメータの値によって，周期 T の解が複数個見つかったり，また周期が $2T$，$3T$，$4T$ などの解が，別のパラメータでは見つかり，あるいは共存し，さらに，ジャパニーズアトラクタとよばれるストレンジアトラクタもある領域のパラメータに対しては，数値計算で知られている．2)，8) 参照．しかしこれらの多様な解の存在を示すには，解析は不十分であって，ε，c あるいは P が小さいというような条件の下で，解析的に3倍周期の解の存在が示されているにすぎない．そこで素朴にコンピュータで見つかる数値周期解が，本当に Duffing 方程式の周期解の近似になっていないか？　すなわち，数値周期解の近傍に本当の周期解が存在することを証明できないか？　という発想が出てくる．ここで 10) に従って，存在証明を行う方法を紹介する．まずこの方向で，周期解が孤立しているときに有用な，占部の方法[9] から始めよう．最初に周期外力をもった線形微分方程式系を考える．

$$dx/dt=A(t)x+f(t),\quad t\in\boldsymbol{R}, \tag{3.2}$$

ここで，x，f は，n-ヴェクトル，$A(t)$ は，$n\times n$ 行列，$A(t)$ 及び $f(t)$ は，$T=2\pi$ 周期の連続な周期関数として次の命題が知られている．

命題　系(3.2)の斉次線形系の基本解 $\phi(t)$：

$$d\phi/dt=A(t)\phi,\quad t\in\boldsymbol{R},\quad \phi(0)=I, \tag{3.3}$$

ここで I は単位行列，を考えたとき，$\phi(T)$ の固有値は，いずれも1ではないとする．このとき系(3.2)は，ただ一つの周期 T の周期解 $x(t)$ をもち，次の形で表せる．

$$x(t)=\int_0^T H(t,s)f(s)ds, \tag{3.4}$$

ここで $H(t,s)$ は，T 周期の $n\times n$ 行列で次で与えられる．

$$H(t,s)=\begin{cases}\phi(t)(I-\phi(T))^{-1}\phi^{-1}(s), & 0\le s\le t\le T\\ \phi(t)(I-\phi(T))^{-1}\phi(T)\phi^{-1}(s), & 0\le t<s\le T.\end{cases} \tag{3.5}$$

以下では，ヴェクトル x，行列 A 及び $H(t,s)$ に対するノルムとして，次を用いる．

$$\|x\|=\max_i|x_i|,\quad \|A\|=\max_i\left\{\sum_{j=1}^n|A_{ij}|\right\}$$
$$\|H\|_T=\max_{0\le s,t\le T}T\|H(t,s)\| \tag{3.6}$$

さて非線形系

$$dx/dt=X(t,x),\quad t\in\boldsymbol{R} \tag{3.7}$$

が，t について周期 $T=2\pi$ をもっているときの，周期解について次の定理が成り立つ．

定理（占部） n-ヴェクトル $\bar{x}(t)$ 及び $n\times n$ 行列 $A(t)$ が，T 周期であって，次の条件をみたすとする．

（i） $\bar{x}(t)$ は，系(3.7)の近似解である．すなわち

$$\|d\bar{x}/dt-X(t,\bar{x}(t))\|<r,\quad {}^\forall t\in\boldsymbol{R} \tag{3.8}$$

が，ある小さい r について成立する．

（ii） 線 形 系

$$dy/dt=A(t)y+f(t) \tag{3.9}$$

は，命題の条件をみたし，その Green 関数 $H(t,s)$ のノルムを $M=\|H(t,s)\|_T$ とする．

（iii） $A(t)$ は，$X(t,x)$ の x に関する Jacobi 行列に近い．すなわち

$$\|X_x(t,x)-A(t)\|\le\kappa/M,$$

が，任意の t 及び $\bar{x}(t)$ の δ 近傍にある x，すなわち $\|x-\bar{x}(t)\|<\delta$ をみたすすべての x に対して成立．

（iv） M,r,κ $(0<\kappa<1)$ 及び δ が，次の不等式をみたす．

$$Mr/(1-\kappa)<\delta \tag{3.10}$$

このときに，次の結論が得られる．非線形系(3.7)は，$\bar{x}(t)$ の δ 近傍に，ただ一つの T 周期解 $\hat{x}(t)$ をもち，

$$\|\hat{x}(t)-\bar{x}(t)\|\le Mr/(1-\kappa) \tag{3.11}$$

が，任意の t で成り立っている．

この定理は，非線形方程式を解くときのニュートン法の一つである．T を $2T,3T,\cdots$ とする．すなわち，2倍周期，3倍周期等々としても，定理は正しい．

これを用いて，Duffing 方程式(3.1)を，$x=x(t)$，$y=dx(t)/dt$ の系と考えて，周期解の存在証明を行う方法を述べよう．差分法は，$\Delta t=T/K$，$10^3\le K\le 10^5$ 程度として，4次精度の Taylor 法を用いる．(x_0,y_0) が与えられたときに，$k=0,1,2,\cdots,K-1$ の (x_k,y_k) を次で定める．

$$\begin{cases}x_{k+1}=x_k+\Delta ty_k+\Delta t^2z_k/2+\Delta t^3w_k/6\\ \qquad +\Delta t^4v_k/24,\\ y_{k+1}=y_k+\Delta tz_k+\Delta t^2w_k/2+\Delta t^3v_k/6\\ \qquad +\Delta t^4u_k/24,\end{cases} \tag{3.12}$$

ここで，z_k，w_k，v_k，u_k は，

$$z_k=-\varepsilon y_k-bx_k-cx_k^3+P_k$$
$$w_k=-\varepsilon z_k-(b+3cx_k^2)y_k+dP(k\Delta t)/dt,$$

などによって与えられる．これは，数値実験でよく用いられている Runge-Kutta 法より，精度は悪くなく誤差評価も陽にしやすいからである．この差分法を用いて，倍精度の浮動小数点数演算によって，コンピュータで計算する．各 $t=k\Delta t$ での計算値を $(\bar{x}_k,\bar{y}_k)$，$k=0,1,2,\cdots,K$，とすると，周期 T での周期誤差は，$\|(\bar{x}_K-\bar{x}_0,\bar{y}_K-\bar{y}_0)\|$ である．これが，0.9×10^{-13} 以下になるまで，計算を繰り返す．この周期誤差が達成されたときの値 $\bar{x}_k,\bar{y}_k,\cdots,\bar{u}_k$，$k=0,1,\cdots,K$，を保存する．これを用いて，連続で区分的に4次多項式である関数 $\bar{x}(t)$，$\bar{y}(t)$ を Taylor 展開の形で構成する．

$$\begin{aligned}\bar{x}(t)=\bar{x}_k&+(t-k\Delta t)\bar{y}_k+(t-k\Delta t)^2\bar{z}_k/2\\&+(t-k\Delta t)^3\bar{w}_k/6+(t-k\Delta t)^4\bar{v}_k/24\\&+(t-k\Delta t)^4\alpha_k/\Delta t^4,\end{aligned} \tag{3.13}$$

$\bar{y}(t)$ も同様．

この際 $\bar{x}((k+1)\Delta t)=\bar{x}_{k+1}$，$k=0,1,2,\cdots,K-1$，になるように，丸め誤差の項 $(t-k\Delta t)^4\alpha_k/\Delta t^4$ を加えておくことが，後の誤差評価に重要である．すなわち，α_k は，上の差分法による第 k ステップ目での丸め誤差そのものであり，区間演算ソフトウェアにかけることにより，正確に評価できる．計算例ではすべて $|\alpha_k|<10^{-14}$ が成り立っている．最後の第 $K-1$ ステップから第 K ステップへは，$\bar{x}(K\Delta t)=\bar{x}(0)$ として連続に結ぶために，丸め誤差に周期誤差が加わるが，合わせて

$$|\alpha_K|<0.9\times10^{-13}+10^{-14}=10^{-13}$$

より小さい．結局 $\alpha=\max|\alpha_k|<10^{-13}$．この誤差評価を出すのが，区間演算を用いる最も重要な点である．これによって，周期近似解 $\bar{x}(t)$，$\bar{y}(t)$ の近似度は，(3.8)で $r=10^{-8}\sim10^{-9}$ 程度になる．

さて $A(t)=X_x(t,\bar{x}(t))$ と取って，線形系 $d\phi/dt=A(t)\phi$ を3次精度 Taylor 法に差分化して，再び倍精度で，基本解の近似 $\phi_{k,m}$，$k=m,m+1,\cdots,n$，$(m=0,1,\cdots,K)$，を求める．それを用いたノルム M の評価には，4. の擬軌道の理論が要る．

命題 $\phi_{k,m}$，$k=m,m+1,\cdots,n$，を，$\phi_{m,m}=I$ に対す

る上記差分法による数値解としたとき，次の誤差評価が，成立する．

$$\|\phi_{k,m}-\phi(k\Delta t, m\Delta t)\|\le CC_1\Delta t^2, \qquad (3.14)$$

ここで $C=T(\alpha/\Delta t^3+C_1C_4\Delta t/24)$,

$$C_1=\max_{0\le s\le t\le T}\|\phi(t,s)\|,$$

$$\|d^4\phi(t)/dt^4\|\le C_4\|\phi(t)\|,$$

であって，α は丸め誤差である．

$\bar{C}_1=\max_{m\le k}\|\phi_{k,m}\|$ を求めて，命題を用いれば，$A(t)$ に対する条件(ⅱ)(ⅲ)が，チェックできる．その際 $\delta=10^{-4}$ 程度に取っておけば，評価定数に対する条件(3.10)も成立する．したがって結論として，周期解の存在が示されたことになる．

検証例 Duffing 方程式(3.1)で，$\varepsilon=0.01$, $b=0$, $c=1$, $P=0.8$．このパラメータのときには，周期 T の周期解と，周期 $2T$ の周期解が，計算機で容易に見つかる．前者より興味のある後者のほうの存在証明も，次のようにできる．

$K=8192$ として，$2T$ 周期関数 $(\bar{x}(t), d\bar{x}(t)/dt)$ が，

$$(\bar{x}(0), d\bar{x}(0)/dt)$$
$$=(0.7853759602\cdots, -0.8736356283\cdots)$$

として求まる．そのとき $\alpha\le 0.5\times10^{-13}+10^{-14}$,

$r\le 0.9\times10^{-9}$, $\bar{C}_1=8.29682\cdots$, $\bar{C}_4=714.02438\cdots$,

$\overline{M}=11.02\times 2T$, $\delta=10^{-4}$, $\kappa=0.5$, $\phi(2T)$の固有値

$\lambda=0.49337\cdots\pm i\times 0.79905\cdots$,

$|\lambda|=0.93910\cdots$,

したがって(ⅰ)〜(ⅲ)，そして

$$Mr/(1-\kappa)\le 12.2\times 2T\times 0.9\times 10^{-9}/0.5$$
$$<0.2760\times10^{-6}<10^{-4}=\delta$$

をみたし，上記の $2T$ 周期解 $(\bar{x}(t), d\bar{x}(t)/dt)$ の δ 近傍に真の $2T$ 周期解が存在する．

4. 擬軌道の理論

微分方程式系

$$dx/dt=f(t,x), \quad t\in\boldsymbol{R}, \quad x\in\boldsymbol{R}^n, \qquad (4.1)$$

の解の挙動を調べるのに，差分法によって数値計算を実行し，数値解を求めたときの，重要な懸念の一つは，真の解と数値解との，時間について大域的な誤差の大きさである．それを評価する一つの有力な方法として擬軌道の理論[4]が，使える．

説明を簡単にするために，系(4.1)の右辺は，t に依存せず，x の高々2次の多項式であって，用いる差分法も2次精度の Taylor 法(2.7)，(2.8)を用いるものとする．

$$x_{k+1}=Rx_k, \qquad k=0,1,2,\cdots,K-1. \qquad (4.2)$$

コンピュータによる数値解 $\bar{x}_0=x_0, \bar{x}_1,\cdots,\bar{x}_K$ は，次の式をみたしている．

$$\|\bar{x}_{k+1}-R\bar{x}_k\|<\alpha, \qquad k=0,1,\cdots,K-1. \quad (4.3)$$

ここで α は，各ステップでの丸め誤差であって，累積するわけではない．倍精度浮動小数点数演算で実行し，区間演算ソフトウェアを用いて検証すると，10^{-14}〜10^{-15} 程度である．この列(4.3)を，力学系(4.2)の擬軌道という．系(4.1)の真の解 S_tx_0 との誤差 $S_{k\Delta t}x_0-\bar{x}_k$ を，$0\le k\Delta t\le T$（有限時間）で，評価するのが主題である．そのため，系(4.1)を S_tx_0 で線形化した系

$$dy/dt=f_x(S_tx_0)y \qquad (4.4)$$

に対する，区間 (s,t) での基本解を $\phi(t,s)$ と書いて，そのノルムを，次で定める．

$$C_1=\max_{0\le s\le t\le T}\|\phi(t,s)\| \qquad (4.5)$$

補題 $y(0)=x-x_0$, $\|y(0)\|\le\rho_0=(2TC_1^2C_2)^{-1}$ とする．そのとき非線形解と線形解との誤差は，次で与えられる．$0\le t\le T$ に対して，

$$\|S_tx-S_tx_0-y(t)\|\le B_1(t)\|y(0)\|^2. \qquad (4.6)$$

ここで

$$y(t)=\phi(t,0)y(0), \quad B_1(t)=2C_1^3C_2t,$$

$$C_2=\|f_{xx}\|=\|B\|.$$

実際 $\delta_2x(t)=S_tx-S_tx_0-y(t)$ は，次をみたしていることから得られる．

$$\delta_2x(t)=\int_0^t\phi(t,s)\frac{1}{2}(f_{xx}(y(s)+\delta_2x(s)),y(s)+\delta_2x(s))ds.$$

さて，求める差 $z_k=\bar{x}_k-S_{k\Delta t}x_0$, $k=0,1,\cdots,K$, を考えよう．今

$$z_k=\sum_{j=0}^{k}\phi(k\Delta t, j\Delta t)V_j \qquad (4.7)$$

と書けていると考えて，V_j の形を求めると，

$$\begin{aligned}z_{k+1}&=\bar{x}_{k+1}-S_{\Delta t}\bar{x}_k+S_{\Delta t}\bar{x}_k-S_{(k+1)\Delta t}x_0\\&=\bar{x}_{k+1}-S_{\Delta t}\bar{x}_k+S_{\Delta t}(z_k+S_{k\Delta t}x_0)-S_{\Delta t}S_{k\Delta t}x_0\\&=\bar{x}_{k+1}-S_{\Delta t}\bar{x}_k+\phi((k+1)\Delta t, k\Delta t)z_k+\delta_2z_k\\&=\bar{x}_{k+1}-S_{\Delta t}\bar{x}_k+\sum_{j=0}^{k}\phi((k+1)\Delta t, j\Delta t)V_j\\&\quad+\delta_2z_k,\end{aligned}$$

だから，

$$V_{k+1}=\bar{x}_{k+1}-S_{\Delta t}\bar{x}_k+\delta_2z_k$$

と取れば，(4.7)の形になっている．ここで，

$$\delta_2z_k=S_{\Delta t}(z_k+S_{k\Delta t}x_0)-S_{\Delta t}S_{k\Delta t}x_0$$
$$-\phi((k+1)\Delta t, k\Delta t)z_k$$

であり，上の補題を用いて評価できる．さらに，z_k の評価は，次のように行える．

$$\|\bar{x}_{k+1}-S_{\Delta t}\bar{x}_k\|=\|\bar{x}_{k+1}-R\bar{x}_k\|+\|R\bar{x}_k-S_{\Delta t}\bar{x}_k\|$$
$$\leq\alpha+C_3\Delta t^3,$$

ここで α は，丸め誤差，$C_3\Delta t^3$ は，差分法(4.2)の打切り誤差である．

定理　a を次の2次式の小さいほうの実根とする．

$$a-T^2C_1^2B_1(\Delta t)a^2=\alpha/\Delta t^2+C_3\Delta t. \tag{4.8}$$

そのとき，次の評価が成り立つ．

$$\|V_k\|\leq a\Delta t^2,$$
$$\|z_k\|\leq C_1(k\Delta t)a\Delta t,\qquad k=0,1,2,\cdots,K. \tag{4.9}$$

証明　帰納的に示す．$j=0,1,\cdots,k$ に対して $\|V_j\|\leq a\Delta t^2$ が，成り立つとすると，補題を用いて，次の変形ができる．

$$\begin{aligned}\|V_{k+1}\|&\leq\|\delta_2 z_k\|+\|\bar{x}_{k+1}-S_{\Delta t}\bar{x}_k\|\\&\leq B_1(\Delta t)\|z_k\|^2+\Delta t^2(\alpha/\Delta t^2+C_3\Delta t)\\&\leq B_1(\Delta t)C_1^2\left(\sum_{j=0}^{k}\|V_j\|\right)^2\\&\quad+\Delta t^2(\alpha/\Delta t^2+C_3\Delta t)\\&=\Delta t^2\{\alpha/\Delta t^2+C_3\Delta t+B_1(\Delta t)C_1^2T^2a^2\}\end{aligned}$$

したがって，(4.8)が成り立てば，$\|V_{k+1}\|\leq a\Delta t^2$．ゆえに $\|z_{k+1}\|\leq C_1((k+1)\Delta t)a\Delta t$ も得られる．

5. 区間演算ソフトウェアの作成

ここでは，加算，減算，乗算，除算をそれぞれ記号 +，−，*，／であらわす．実数の全体を $\boldsymbol{R}$ であらわし，$\boldsymbol{R}$ の部分集合で，

$$\{x\,|\,a\leqq x\leqq b\}$$

の形のものを，区間とよび，記号 $[a,b]$ であらわす．$I=[a,b]$，$J=[c,d]$ を区間とする．このとき，I と J の和・差・積・商を次のように決める．

記号 $\circ$ は，+，−，*，／のいずれか一つとする．このとき，

$$I\circ J=\{x\circ y\,|\,x\in I,y\in J\}$$

と決めると，

$$I+J=[a+c,b+d],$$
$$I-J=[a-d,b-c],$$
$$I*J=[p,q],$$
$$I/J\ =[r,s],$$

となり，$I\circ J$ は区間になる．ここで，$a*c$，$a*d$，$b*c$，$b*d$ の中の最小数を p，最大数を q とした．また，a/c，a/d，b/c，b/d の中の最小数を r，最大数を s とした．I/J については，J が0を含まないときのみを考える．

これらの演算をディジタルコンピュータで実行する場合について，説明しよう．

使用している言語 (Fortran，C など)，コンピュータによって，決められている実数の全体（たとえば，Fortran ならば，単精度実数の全体または倍精度実数の全体）を $\boldsymbol{Rm}$ であらわす．$\boldsymbol{Rm}$ は，その個数は大きいが，有限集合である．したがって，これらの言語で書かれたプログラムの実数計算では，計算した値を正確には保持できない場合，すなわち，値が $\boldsymbol{Rm}$ に属さない場合，丸められた値が計算結果として返される．丸めとは，値 $x\circ y$ が，$\boldsymbol{Rm}$ の二つの隣り合った元 u，v の間にあるとき，すなわち，$u<x\circ y<v$ のとき，値を修正して，u，v のどちらか一方を結果とすることをいう．結果を u とすることを，負の無限大の向きへの丸めといい，結果を v とすることを，正の無限大の向きへの丸めという．たとえば，

$$1.0+10^{-50},\quad 1.0/3.0,$$

などは，$\boldsymbol{Rm}$ に属さず，計算の結果は丸められた値である．

区間どうしの演算では，区間の幅を拡げるように，丸める．すなわち，区間 I，J の端点 a，b，c，d が $\boldsymbol{Rm}$ の元であるとき，

$$I\circ J\subsetneqq K=[u,v],\quad u\in\boldsymbol{Rm},\ v\in\boldsymbol{Rm},$$

となる区間 K の中で，幅 $v-u$ が最小となる区間を，演算 $I\circ J$ の結果とする．$I\circ J$ の端点は，I と J の端点で決まるから，K の端点を決めるには，$x\in\boldsymbol{Rm}$，$y\in\boldsymbol{Rm}$ のとき，

$$A\leqq(x\circ y)\leqq B,\quad A\in\boldsymbol{Rm},\ B\in\boldsymbol{Rm},$$

となる最大の A，最小の B を求めればよい．それには，$x\circ y\in\boldsymbol{Rm}$ のときは，$A=x\circ y$，$B=x\circ y$，とし，$x\circ y\notin\boldsymbol{Rm}$ のときは，$x\circ y$ を負の無限大の向きへ丸めた値を A，正の無限大の向きへ丸めた値を B とすればよい．

以下，区間演算ルーチンを書くときの要点だけを述べる．エラー処理，例外処理，実行時間を縮小させる方法については，省略する．

パソコンの場合，数値演算コプロセッサ 8087，80287，80387 が使えるパソコンでは，これらのコプロセッサは，丸めのしかたを，指定できるので，次のようにすればよい．

まず，コプロセッサのコントロールレジスタの丸めコントロールフィールドに負の無限大の向きへの丸め（または正の無限大の向きへの丸め）を設定する．次

に，メモリにある 64 ビットの倍精度実数をレジスタに置き（コプロセッサは，丸め誤差なしで，倍精度実数をレジスタの保持できる 80 ビットの内部実数に変換する），計算を実行し（コプロセッサは，結果を，内部実数であらわせなければ丸めて，レジスタに置く），レジスタにある値をメモリに格納する（コプロセッサは，内部実数を，倍精度実数であらわせなければ丸めて，倍精度実数に変換する）．このとき，丸めは，いずれも，丸めコントロールフィールドの設定（負の無限大の向きへの丸めまたは正の無限大の向きへの丸め）にしたがって，行われる．このようにして，A，Bが求まる．

次に，大型計算機の場合であるが，大型計算機では，たいてい，実数の加減乗除算命令を実行するときの丸めかたを指定できず，丸めは切り捨て（0に近いほうへの修正）のみである．よって，実数計算をソフトウェアで（整数の計算のみをつかって）行うか，または，計算の前後に実数に適当な処理をほどこしてから，実数計算を行うかして，AとBを求めなければならない．

今まで，$\boldsymbol{Rm}$ は，言語，コンピュータによって，決められている実数の全体としたが，もちろん，これらとは別の集合を独自に決めて $\boldsymbol{Rm}$ としてもよい．

言語，コンピュータで決まっている実数の全体を使うことの利点は，プログラムのなかに，普通の実数計算と区間演算があるとき，区間演算の部分のみサブルーチンを呼び出して実行すればよいから，計算量の大きいプログラムの実行が容易になることなどにある．

また，大型計算機では，$\boldsymbol{Rm}$ を倍精度実数の全体とすれば，初等関数などを四倍精度実数で計算し，その値を含む区間をつくれば，種々の関数を含むプログラムの実行が容易になる．

6. おわりに

常微分方程式系の研究で，興味深い場合も扱える手法が，数値的検証法として利用できるようになってきた．その際，計算機は不可欠であるが，そのソフトウェア（区間演算を含む）の使用も必要である．もちろん，解析学からは，関数空間におけるニュートン法や，不動点定理，そして，擬軌道の理論などの，理論的準備も必須である．ここで解説した周期軌道の次は，その分岐現象の取扱い，構造の再現性の問題，あるいは，無限区間上の問題になるホモクリニック軌道，ヘテロクリニック軌道などの取扱いなどが，興味ある問題の例である．

参 考 文 献

1) Guckenheimer, J. and Holmes, P.: Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields, Springer-Verlag, New York (1983).
2) Kawakami, H.: Bifurcation of Periodic Responses in Forced Dynamic Nonlinear Circuits: Computation of Bifurcation Values of the System Parameters, IEEE Trans. Circuits and Systems, **31**, pp. 248-260 (1984).
3) Lorenz, E. N.: Deterministic Non-Periodic Flow, J. Atmos, Sci. **20**, pp. 130-141 (1963).
4) Losinsky, S. M., Izvestia Vusov Math. Ser. **5**, 52.
5) 中尾充宏：関数方程式の解の存在に対する数値的検証法，数学 **42**, pp. 16-31, 日本数学会編集，岩波．
6) Sinai, J. G. and Vul, E. B.: Discovery of Closed Orbits of Dynamical Systems with the Use of Computers, J. Stati. Phys., **23**, pp. 27-47 (1980).
7) Thompson, J. M. T. and Stewart, H. B.: Nonlinear Dynamics and Chaos, John Wiley and Sons, Chichester (1986).
8) Ueda, Y.: Steady Motions Exhibited by Duffing's Equation: A Picture Book of Regular and Chaotic Motion, in New Approaches to Nonlinear Problems in Dynamics, ed. by Holmes, P. J., pp. 311-322, SIAM, Philadelphia (1980).
9) Urabe, M.: Galerkin's Procedure for Nonlinear Periodic Systems, Arch. Rat. Mech. Anal. **20** pp. 120-152 (1965).
10) Yamaguti, M., Yoshihara, H. and Nishida, T.: Periodic Solutions of Duffing Equation, Kokyuroku RIMS Kyoto Univ, **673**, pp. 80-95 (1988).

（平成2年7月4日受付）