

最適制御理論の常微分方程式の数値解法への応用

内海正樹[†] 高木隆司^{††} 川合敏雄^{†††}

微分方程式を差分方程式に直して数値的に解く場合、その数値解の品質を保証することは重要である。差分間隔（刻み幅）を小さくすればそれに応じて計算精度は向上するが、そのために計算量（コスト）も増大してしまう。ルンゲ・クッタ・フェールベルク 45 公式のように、局所的に誤差を許容範囲内に抑えるように刻み幅を自動調節する方法はすでに存在するが、各ステップでの誤差評価の積み重ねによって、最終的に最適な結果が得られるかということが問題である。そこで、結果を評価するために評価関数を導入する。評価関数としては、終端時刻における誤差、中間時間での誤差の時間積分などが考えられる。この評価関数を最小とするように、刻み幅 h を決めることは、動的システムの最適制御問題に帰する。その際のシステム方程式としては、誤差の発生と、後の時刻への誤差の伝搬も考慮にいたれた誤差の発展方程式を採用する。この方法により、最適制御された刻み幅を与える方法を明らかにする。また、簡単な微分方程式の例によって、(古典的) ルンゲ・クッタ法とルンゲ・クッタ・フェールベルク 45 公式を用いた場合の数値実験の結果と、本論文で示す刻み幅最適制御法との数値実験の結果を比較する。その結果、刻み幅最適制御法による計算精度が他の方法の精度よりも優位であることを示すことができた。

Application of the Optimal Control Theory to Numerical Solution of Ordinary Differential Equations

MASAKI UTUMI,[†] RYUJI TAKAKI^{††} and TOSHIO KAWAI^{†††}

Discrete variable methods for ordinary differential equations often meet difficulties to make a useful error estimation at the final point based on their local error estimation. In order to obtain the error behavior on the whole interval of stepping, we derive a dynamical system equation which the error obeys. The equation make it possible to derive an optimization of error level at the final step by the application of the optimal control theory. Setting an appropriate cost function, we obtain an optimal step size control strategy for numerical solution. Some simple numerical examples show the following results. (1) The step size changing based on our theory gives the final error smaller than that by the fixed step size classical Runge-Kutta formula or the variable step size Runge-Kutta-Fehlberg formula of orders 4 and 5. (2) The estimated error by our theory agrees well with that actually generated in the numerical process.

1. はじめに

本論文は、“ステップ数一定の制約のもとで誤差を最小にするための最適な刻み幅とは何か”を解明することを目的としたものである。評価関数として、終端時刻における誤差、中間時間での誤差の時間積分などを考えた場合、こうして定義した評価関数を最小とするように刻み幅 h を決めることは、動的システムの最適制御問題に帰する。本論文は、原理的、理論的にこの最適制御問題について議論する。

微分方程式を数値的に解く場合、その数値解の大域

的な精度の保証が重要であるが、それが系統的に議論されることは余りなかった。しかし、計算機の高速化による数値実験の実用化にともなって、数値計算における精度保証、すなわち品質保証に対する関心が高まりつつある⁹⁾。

微分方程式を差分方程式として数値的に解く場合には、差分間隔（刻み幅） h を適応的に調節することは重要であり、その調節機構は数値解法の重要な一環をなしている。その代表的なものは、ルンゲ・クッタの 4 次と 5 次の公式による計算結果を比べて、その結果から h を変更するルンゲ・クッタ・フェールベルクの方法（以下、フェールベルク 45 公式と呼ぶ）である^{2), 8)}。また Gustafsson は、古典制御理論を用いて一般的に数値的に安定な制御方法を研究した³⁾。なお、ルンゲ・クッタ法をはじめとする微分方程式の数値解法の最近の研究に関しては、文献 10), 11), 12) が詳

[†] 東芝府中工場ミドルウェア設計第 3 担当
Toshiba Fuchu Works

^{††} 東京農工大学一般教育部物理流体研究室
Tokyo University of Agriculture and Technology

^{†††} 慶應義塾大学理工学部物理学科
Keio University

しい。

ところで、フェールベルク 45 公式をはじめ、現在までに開発されている主要な刻み幅の自動調節法は、局所的に発生する誤差を許容範囲内に抑えることによって、計算精度を保証することを目標としている。しかし、計算の品質保証の観点からみた場合、このような方法は“最適”なものであろうか。また、計算の品質保証の観点で、最適な刻みはどのように定義すればよいであろうか。仮に、無限の計算が可能であったとしても、現在のこの疑問に答える理論は存在するのだろうか。

最近、筆者らは (1.1) の形の微分方程式について、最適な刻み幅とは何かという問題についてひとつの結論に到達した。それは、数値計算の刻み幅を最適制御理論をもとに制御する方法である。

$$\frac{du(t)}{dt} = f(u, t). \quad (1.1)$$

本論ではその理論を紹介するとともに、それを簡単な微分方程式の例に応用し、その有効性を論じることにする。なお、本論文の理論は、刻み幅が十分に小さい範囲で有意である。また、数値積分に関しては 4 章に関しては 4 次精度の古典的 ルンゲ・クッタ法^{4), 5), 7)}を、5 章に関しては 5 次精度のフェールベルク型公式⁸⁾を用いている。

2. 誤差の発展方程式と刻み幅の最適制御

2.1 誤差の発展方程式

(1.1) 式で与えられた微分方程式を数値的に解く場合、大域的誤差はどのような振る舞いを示すかを考察する。なお、文献 13) に Heun 法を用いた場合について同種類の議論が紹介されている。

刻み幅 h の時間内に、 eh の大きさの誤差が発生したとする。 e は単位時間あたりに発生する誤差を表す。つまり、数値解を真の解 u と誤差 δu の重ね合わせと考えると、

$$\frac{d(u + \delta u)}{dt} = f(u + \delta u, t) + e(u, t; h) \quad (2.1.1)$$

という関係が成り立つものとする。なお、 e は一般に h にも依存する。(2.1.1) 式の右辺をテイラー展開して整理すると

$$\frac{d\delta u}{dt} = \delta u \frac{\partial f}{\partial u} + e(u, t; h) \quad (2.1.2)$$

を得る。この式より、方程式 (2.1.1) を解いた場合に発生する誤差 δu の挙動を調べることができる。今後、(2.1.2) 式を誤差の発展方程式と呼ぶことにする。

なお、初期状態 $t=0$ では誤差は発生していないので、誤差の初期条件は

$$\delta u(0) = 0 \quad (2.1.3)$$

である。

2.2 終端評価による刻み幅の最適制御理論

ルンゲ・クッタ法によって時刻 T まで計算した場合、ルンゲ・クッタ法の処理ステップ数（これを計算コストと考える）を N とする。 N を一定とする条件のもとで、時刻 T における誤差 $\delta u(T)$ を最小にするような刻み幅 h を求めることを問題にする。

最適化のための評価関数 J は、Lagrange の未定係数 λ を用いて

$$J = \delta u(T) + \lambda N \quad (2.2.1)$$

と表される。

古典的ルンゲ・クッタ法の単位時間あたりに発生する誤差は刻み幅 h の 4 乗に比例するから、誤差の発展方程式 (2.1.2) は、

$$\frac{d\delta u}{dt} = B(t, u)\delta u + E(t)h^4, \quad (2.2.2)$$

$$B(t, u) = \frac{\partial f}{\partial u}, \quad (2.2.3)$$

$$\delta u(0) = 0 \quad (2.2.4)$$

と表される。ここで、 $E(t)$ は解くべき微分方程式に依存する関数であり、以後これを誤差発生関数と呼ぶ。誤差発生関数は、(1.1) 式が与えられれば計算することができる⁶⁾。

ところで、解 u が求まったとし、 u は t の関数であり、刻み幅 h も t の関数と考え、(2.2.2) 式の右辺は t のみの関数となり、この式は

$$\frac{d\delta u}{dt} = A(t)\delta u + E(t)h^4 \quad (2.2.5)$$

と書くことができる。この $A(t)$ は、誤差 δu が将来の誤差の挙動にどの程度影響するかを表すものであり、今後、誤差伝搬関数と呼ぶ。

なお、 $h(t)^{-1}dt$ が時間間隔 dt の中のステップ数を表すので、ステップ数 N と刻み幅 $h(t)$ には

$$N = \int_0^T h(t)^{-1} dt, \quad (2.2.6)$$

$$\frac{dN}{dt} = h(t)^{-1} \quad (2.2.7)$$

という関係がある。

ここで、誤差 δu を x_1 、ステップ数 N を x_2 と書く (2.2.1) 式、(2.2.5) 式、(2.2.7) 式は

$$J = x_1(T) + \lambda x_2(T), \quad (2.2.8)$$

$$\frac{dx_1}{dt} = A(t)x_1 + E(t)h^4, \quad (2.2.9)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = h(t)^{-1} \quad (2.2.10)$$

となる。(2.2.9), (2.2.10)式はシステム方程式と呼ばれる。その方程式の解析は、最適制御理論によれば随伴ベクトル ϕ_1 , ϕ_2 を用いて次のように定義されたハミルトニアン

$$H = \phi_1(Ax_1 + Eh^4) + \phi_2 h^{-1} \quad (2.2.11)$$

を利用する¹⁾。

ϕ_1 , ϕ_2 に対する方程式は

$$\frac{d\phi_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = -A\phi_1, \quad (2.2.12)$$

$$\frac{d\phi_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = 0 \quad (2.2.13)$$

であり、これらの終端条件は

$$\phi_1(T) = \frac{\partial J(T)}{\partial x_1} = 1, \quad (2.2.14)$$

$$\phi_2(T) = \frac{\partial J(T)}{\partial x_2} = \lambda \quad (2.2.15)$$

である。(2.2.13), (2.2.15)式より、すべての時刻で

$$\phi_2(t) = \lambda \quad (2.2.16)$$

となることが分かる。

(2.2.1)式の右辺の δu と N は ϕ_1 と h を使って、

$$J = \delta u(T) + \lambda N \\ = \int_0^T (\phi_1 E h^4 + \lambda h^{-1}) dt$$

となる。最適な h はハミルトニアンを最小とするので

$$\phi_1 E 4h^3 - \lambda h^{-2} = 0, \\ h = \left(\frac{\lambda}{4\phi_1 E} \right)^{0.2}. \quad (2.2.17)$$

なお、この定数 λ は N が定まれば、(2.2.6)式から解くことができる。よって、 ϕ_1 と E が求められれば、最適制御された刻み幅 $h(t)$ は一意に決定することができる。

さて、(2.2.17)式の意義を検討してみよう。今、線形の微分方程式

$$\frac{du}{dt} = pu, \quad (p \text{ は定数})$$

について考察する。この時、 $E(t)$ は

$$E = p^5 u / 120$$

と求められる。最適制御された刻み幅 $h(t)$ の時間変化は、 $\phi_1 E$ の時間変化のみに依存している。そこで、 $\phi_1 E$ を時間 t で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{d(\phi_1 E)}{dt} &= \frac{d\phi_1}{dt} E + \phi_1 \frac{dE}{dt} \\ &= -\phi_1 p \cdot (p^5 u / 120) + \phi_1 \cdot (p^5 p u / 120) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となって、 $\phi_1 E$ は時間的に保存量であることが分かる。よって、線形問題を終端評価で解いた場合、最適制御された刻み幅 $h(t)$ とは、一定値であることが分かった。

ところで、随伴ベクトルはどのように求めればよいだろうか。最適制御理論によって、随伴ベクトルは終端条件が与えられている。よって、一般には終端条件を満たすまで、反復して計算をすることで随伴ベクトルを求めることになる。しかし、(1.1)式で与えられた微分方程式を、(2.2.8)式の評価で最適制御する場合は、以下のような方法によって随伴ベクトルを求める終端値問題を初期値問題に変換できる。(2.2.12)式の解は

$$\phi_1(t) = \text{Const} \cdot \exp\left(\int_0^T -A dt\right)$$

と書けるので、定数 Const は終端条件(2.2.14)から

$$\text{Const} = \exp\left(\int_0^T A dt\right)$$

となる。ここで、 $\phi_1(t)$ に $\exp\left(\int_0^T -A dt\right)$ を掛けたものを新たに $\phi_1(t)$ と定義すると、終端条件(2.2.14)の代わりに初期条件

$$\phi_1(0) = 1 \quad (2.2.18)$$

を採用しても、この最適問題を解く上で支障にならない。以上から、解くべき方程式は

$$\frac{d\phi_1}{dt} = -A\phi_1, \quad (2.2.12)$$

$$\phi_1(0) = 1, \quad (2.2.18)$$

$$h = C \left(\frac{1}{\phi_1 E} \right)^{0.2} \quad (2.2.19)$$

である。ただし、 C は比例定数である。

2.3 中間評価による刻み幅の最適制御理論

終端時刻だけでなく、時間 $0 \leq t \leq T$ で評価の重み $w(t)$ を与えた場合、刻み幅の最適制御はどのようなになるであろうか。このとき評価関数は

$$\begin{aligned} J &= \int_0^T w(t) \delta u(t) dt + \lambda N \\ &= \int_0^T \{w(t) \delta u(t) + \lambda h^{-1}(t)\} dt \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

である。誤差の発展方程式は、(2.2.5)式と同様に

$$\frac{d\delta u}{dt} = A(t) \delta u + E(t) h^4 \quad (2.3.2)$$

である。ここで、制御変数として評価関数を x_0 、誤差 δu を x_1 とする。すると (2.3.1), (2.3.2) 式からシステム方程式は

$$\frac{dx_0}{dt} = wx_1 + \lambda/h, \quad (2.3.3)$$

$$\frac{dx_1}{dt} = Ax_1 + Eh^4 \quad (2.3.4)$$

となる。また、ハミルトニアン H は随伴ベクトル ϕ_0 , ϕ_1 を用いて

$$H = \phi_0(wx_1 + \lambda/h) + \phi_1(Ax_1 + Eh^4) \quad (2.3.5)$$

となる。随伴ベクトルの方程式は次のようになる。

$$\frac{d\phi_0}{dt} = 0, \quad (2.3.6)$$

$$\frac{d\phi_1}{dt} = -(\phi_0 w + \phi_1 A). \quad (2.3.7)$$

で、これらの終端条件は

$$\phi_0(T) = 1, \quad (2.3.8)$$

$$\phi_1(T) = 0 \quad (2.3.9)$$

である。(2.3.6), (2.3.8) 式より、

$$\phi_0(t) = 1 \quad (2.3.10)$$

となることが分かる。よって、(2.3.7) 式は

$$\frac{d\phi_1}{dt} = -(w + \phi_1 A) \quad (2.3.11)$$

である。また、前節の終端評価の場合と同様に、最適な h は

$$h^5 \propto \left(\frac{\lambda}{\phi_1 E} \right). \quad (2.3.12)$$

で与えられる。

3. ルンゲ・クッタ法への適用

3.1 誤差発生関数, 伝搬関数の求め方

誤差の発展方程式を解く場合、誤差発生関数 $E(t)$ と誤差伝搬関数 $A(t)$ を求める必要がある。本論文では E , A は以下のようにして数値的に求める。

ルンゲ・クッタ法によって $t=t_0$ での u の値から $t=t_0+2h$ での数値解を求める場合、厳密解を u_a 、刻み幅を h として 2 ステップ分計算した場合の数値解を u_2 とすると、 h が十分小さいときは、

$$u_2(t+2h) = u_a + 2Eh^5 \quad (3.1.1)$$

となる。また、刻み幅を $2h$ として 1 ステップ計算した場合の数値解を u_1 とすると

$$u_1(t+2h) = u_a + E(2h)^5. \quad (3.1.2)$$

(3.1.2), (3.1.1) 式の左辺の差を Δ で表すと、

$$\begin{aligned} \Delta &= u_1(t+2h) - u_2(t+2h) \\ &= 30Eh^5 \end{aligned}$$

となる。これから、

$$E = \Delta / (30h^5). \quad (3.1.3)$$

となる。この E が、この時刻での誤差発生関数の値となる。

誤差伝搬関数 A は、その定義から f を u で偏微分すれば得られる。すなわち、初期に Δu を与えるとしたとき A は

$$A = \frac{f(t, u + \Delta u) - f(t, u)}{\Delta u} \quad (3.1.4)$$

によって、数値的に求めることができる。

3.2 刻み幅の初期値の推定法

本論文で提案する刻み幅最適制御法は、 ϕ_1 と E が求まっていれば、任意の時間での刻み幅を計算することができる。

しかし 2 章で論じたように、本来 ϕ_1 は終端値問題として定義されているため、終端値 $\phi_1(T)$ が収束するまで反復計算を行う必要がある可能性がある。

そこで、2 章で説明した方法により ϕ_1 を初期値問題に変換する。本論文ではこの時刻刻み幅の初期値 h_0 は、以下のように初期状態で誤差の発生率をある許容値より小さくするという要請をおくことにより定める。

単位時間あたりに発生する誤差の許容限界量を ε とすると、ルンゲ・クッタ法により時間 h_0 の間に誤差 Eh_0^5 が発生するから、発生率は Eh_0^5/h_0 で与えられる。これから、

$$Eh_0^4 \leq \varepsilon \quad (3.2.1)$$

という関係が成り立つ。ここで、等号を採用した場合

$$h_0^4 = \varepsilon / E \quad (3.2.2)$$

となる。実際には、以下のように近似により h_0 を求める。刻み幅の初期値に仮の値 h_{0v} を用い、(3.1.3) 式から求めた E を (3.2.2) 式に代入すると、

$$h_0 = \left(\frac{\varepsilon}{(\Delta / 30h_{0v}^5)} \right)^{0.25} = \alpha h_{0v}, \quad (3.2.3)$$

$$\alpha = \left(\frac{30\varepsilon h_{0v}}{\Delta} \right)^{0.25} \quad (3.2.4)$$

という関係が成り立つ。そこで、

$$0.9 \leq \alpha \leq 1.1 \quad (3.2.5)$$

が成り立つまで、(3.2.3) 式で計算した h_0 を右辺の h_{0v} に代入して h_0 の更新を繰り返す。(3.2.5) 式が成り立ったときの h_{0v} を刻み幅の初期値 h_0 として採用する。なお、このとき h_{0v} と h_0 の値から (2.2.19) 式に表れる比例定数を求めることができる。なお、 ε を決定することは、結果として処理ステップ数 N を決定することになる。

4. 数値実験

前節までに述べた方法を、次のような簡単な問題に適用し、この方法の有効性を検証する。

4.1 問題

微分方程式、および初期条件を

$$\frac{du(t)}{dt} = u^2, \quad (4.1.1)$$

$$u(0) = 1 \quad (4.1.2)$$

とし、 $t=0$ から 0.99 まで解くことを試みる。

この方程式の厳密解は

$$u(t) = (1-t)^{-1} \quad (4.1.3)$$

であり、 $t=1$ は特異点である。また、

$$u(0.99) = 10^2. \quad (4.1.4)$$

4.2 誤差の理論解析

この問題について終端評価を採用することにする。

(4.1.1) 式の誤差伝搬関数 A 、誤差発生関数の大きさ E は、厳密解が分かっているので

$$A(t) = 2u \quad (4.2.1)$$

$$E(t) = u^6/24 \quad (4.2.2)$$

と求められる。(4.2.1) 式を (2.2.12) 式に代入することにより、 ψ_1 が次のように求められる。

$$\psi_1 = (1-t)^2. \quad (4.2.3)$$

また、最適な刻み幅 h は (2.2.20) 式から

$$h = C_1 \cdot C_2 \cdot u^{-4/5}, \quad (4.2.4)$$

$$C_1 = (+\lambda/4)^{1/5}, \quad (4.2.5)$$

$$C_2 = (24)^{1/5}. \quad (4.2.6)$$

ここで定数 C_1 は、ステップ数 N が与えられれば、(2.2.5) 式に (4.2.4) 式を代入して積分することにより

$$C_1 = (C_2 N)^{-1} \cdot (-5)((1-t)^{1/5} - 1) \quad (4.2.7)$$

と決定される。

次に、(4.1.1) をルンゲ・クッタ法で解いたときに発生する誤差について考察する。

(1) h 一定法で計算する場合の誤差の挙動

ルンゲ・クッタ法の刻み幅を h_i とすると、誤差の発展方程式は

$$\frac{d\delta u}{dt} = \frac{2}{1-t} \delta u + \frac{1}{24} (1-t)^{-6} h_i^4. \quad (4.2.8)$$

これを初期条件 (2.1.5) とともに解くと、

$$\delta u(t) = \frac{h_i^4 ((1-t)^{-3} - 1)}{72(1-t)^2} \quad (4.2.9)$$

となる。

(2) h 最適制御法で計算する場合の誤差の挙動

刻み幅を $h(t)$ とすると、(4.2.8) 式と同様に誤差の発展方程式は

$$\frac{d\delta u}{dt} = \frac{2}{1-t} \delta u + \frac{1}{24} (1-t)^{-6} h^4. \quad (4.2.10)$$

ところで、最適な刻み幅 $h(t)$ は (4.2.4) ~ (4.2.7) 式から

$$h = D(1-t)^{4/5}, \quad (4.2.11)$$

$$D = 5N^{-1}(1-(1-T)^{1/5}) \quad (4.2.12)$$

と書くことができる。(4.2.11) 式を (4.2.10) 式に代入し、初期条件 (2.1.5) とともに解くと

$$\delta u(t) = \frac{5D^4(-(1-t)^{1/5} + 1)}{24(1-t)^2} \quad (4.2.13)$$

となる。

4.3 数値計算の結果

微分方程式 (4.1.1) をルンゲ・クッタの公式を用いて、 h 一定法と h 最適制御法で $t=0.99$ まで倍精度で計算した場合に発生する誤差を表 1 に示す。その中で、 $(\delta u_{fix,i})$ は h 一定法での誤差の発展方程式の解、 $(\delta u_{fix,c})$ は実際にルンゲ・クッタ法で数値計算した場合に発生した誤差を表す。また、 h 最適制御法については、 $(\delta u_{opt,i})$ は誤差の発展方程式の解、 $(\delta u_{opt,c})$ は 3 章で述べた (3.2.3) 式を用いて求めた h_0 から出発し、(3.1.3) 式から求めた誤差発生関数値を用いて (2.2.19) から $h(t)$ を計算したときに実際に発生した誤差である。なお、この時に使用した Δu の値は 10^{-5} である。

h 一定法と h 最適制御法における数値計算の誤差の比 $(\delta u_{fix,c}/\delta u_{opt,c})$ を表 2 に示す。

これらの結果を以下にまとめる。

(1) 誤差の大きさは、いずれの評価においても、処理ステップ数 N を 2 倍にすると誤差は 1/16 に近い値をとる。これは (4.2.9) 式、(4.2.13) 式から理

表 1 h 一定法と h 最適法で発生する誤差

Table 1 Comparison of in both methods, with constant h and optimal time step. Suffices i and c refer to the theoretical and computational estimations of errors, respectively.

N	h 一定法の誤差		h 最適法の誤差	
	$\delta u_{fix,i}$	$\delta u_{fix,c}$	$\delta u_{opt,i}$	$\delta u_{opt,c}$
100	1.334×10^0	6.883×10^{-1}	1.029×10^{-3}	1.097×10^{-3}
200	8.338×10^{-2}	6.568×10^{-2}	6.429×10^{-5}	6.474×10^{-5}
400	5.212×10^{-3}	4.835×10^{-3}	4.018×10^{-6}	4.062×10^{-6}
800	3.257×10^{-4}	3.188×10^{-4}	2.511×10^{-7}	2.519×10^{-7}
1600	2.036×10^{-5}	2.024×10^{-5}	1.569×10^{-8}	1.571×10^{-8}

$N: 0 \leq t \leq T$ の間のステップ数

$\delta u_{fix,i}$: h 一定法での誤差の発展方程式の解

$\delta u_{fix,c}$: h 一定法での数値計算の誤差

$\delta u_{opt,i}$: h 最適制御法での誤差の発展方程式の解

$\delta u_{opt,c}$: h 最適制御法での数値計算の誤差

表 2 h 一定法と h 最適法との誤差の比 ($\delta u_{fix,c}/\delta u_{opt,c}$)
 Table 2 Ratio of error of the constant time step method to that of the optimal time step method.

ステップ数 N	100	200	400	800	1600
誤差の比	627.4	1014.5	1190.3	1265.5	1287.6

解できる.

- (2) h 一定法, h 最適制御法のいずれも, 誤差の理論値 (添字 1) は N が大きいと数値計算の結果 (添字 c) とよく一致している. 特に後者の不一致は $N=100$ でも 7% 以下である.

- (3) 表 2 から分かるように, h 一定法に比べて h 最適制御法による数値計算の誤差は, この問題の場合には 1000 倍近く小さい. (もちろん, どの程度計算精度が向上するかは, それぞれの問題固有の性質による.)

一方, (4.2.9), (4.2.13) 式から

$$\text{誤差比} \approx 1297.09$$

となる. したがって, N を大きくするに従って数値計算の結果がこの理論値に近づいていることが分かる.

5. 議 論

本論文で提案した, 刻み幅最適制御法とすでに開発されているフェールベルク 45 公式を比較することは, 最適制御法の特徴を見る上で興味深い. そこで, 以下の 2 つの問題について両者を比較する. なお, 両者を比較する際に

- (1) フェールベルク 45 公式を用いたときの, 1 ステップ当たりの許容誤差 ε としては

$$\varepsilon = 10^{-6}, 10^{-9}$$

の 2 通りを用いて, 絶対誤差判定を行った.

- (2) フェールベルク 45 公式での初期の刻み幅は, 文献 8) に従い次のように行った.

まず, 次の不等式を満たす h を求める.

$$h^5 |f(u_0, t_0)| \leq \varepsilon$$

そして, この h と解のほしい区間の長さの 1% を比較して, 小さい方の値を初期刻み幅とする.

- (3) 刻み幅最適制御法での積分処理回数は, 上記 (1) の条件で, フェールベルク 45 公式を用いて計算した場合に必要なとした処理ステップ数と同じものを用いた.

- (4) フェールベルク 45 公式は 5 次精度であるため, 刻み幅最適制御法で用いる数値積分の公式は 5 次

精度のフェールベルク型公式を用いた.

として計算を実施した.

5.1 問 題

- (1) 線形問題として

$$\frac{du}{dt} = u, \quad u(0) = 1$$

終端時刻: $T=10$.

なお, この微分方程式の厳密解は

$$u(t) = \exp(t)$$

である.

- (2) 非線形問題として

$$\frac{du}{dt} = u^2, \quad u(0) = 1.$$

終端時刻: $T=0.99$.

これは, 前章で取り扱った問題であり, 厳密解は

$$u(t) = (1-t)^{-1}$$

である.

5.2 計算結果

線形問題についての刻み幅 h の時間的な変化を, 図

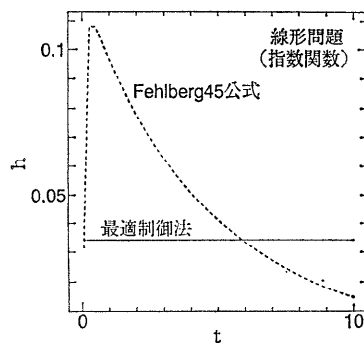


図 1 刻み幅の時間的な変化 ($\varepsilon=10^{-6}$)

Fig. 1 Variation of the Time Step (Linear Pro.).

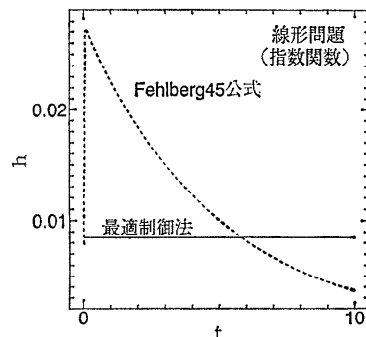


図 2 刻み幅の時間的な変化 ($\varepsilon=10^{-9}$)

Fig. 2 Variation of the Time Step (Linear Pro.).

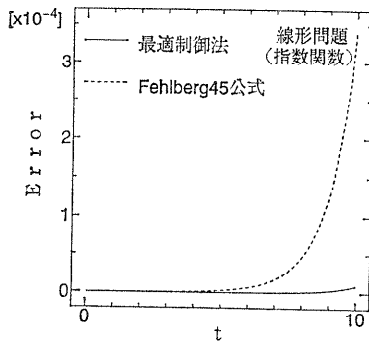


図3 誤差の時間的変化 ($\epsilon=10^{-6}$)
Fig. 3 Variation of the Error (Linear Pro.).

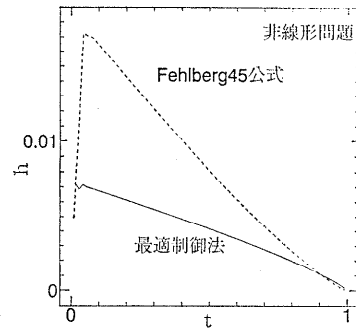


図6 刻み幅の時間的変化 ($\epsilon=10^{-9}$)
Fig. 6 Variation of the Time Step (Non Linear Pro.).

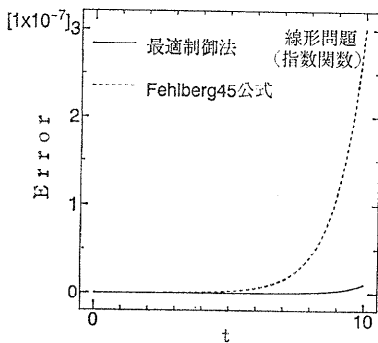


図4 誤差の時間的変化 ($\epsilon=10^{-9}$)
Fig. 4 Variation of the Error (Linear Pro.).

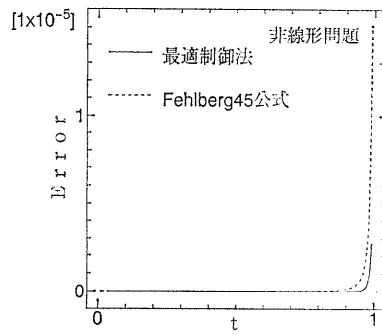


図7 誤差の時間的変化 ($\epsilon=10^{-6}$)
Fig. 7 Variation of the Error (Non Linear Pro.).

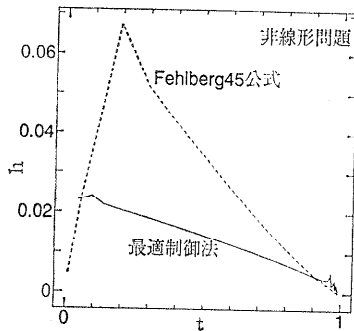


図5 刻み幅の時間的変化 ($\epsilon=10^{-6}$)
Fig. 5 Variation of the Time Step (Non Linear Pro.).

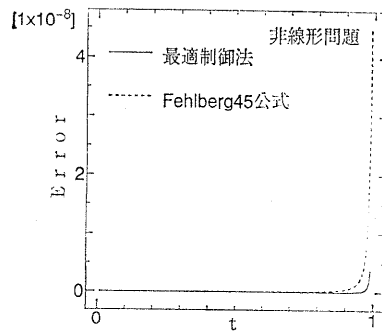


図8 誤差の時間的変化 ($\epsilon=10^{-9}$)
Fig. 8 Variation of the Error (Non Linear Pro.).

1, 図2に示す。フェルベルク45公式を用いて刻み幅を自動調節した場合、数値解の増加にともなって時間が経過すると刻み幅 h は小さくなっている。(これに対して、刻み幅最適制御法では刻み幅 h は一定値である。これは、2章で述べた理論通りである。)これらの刻み幅を用いて、数値的に微分方程式を解いたときに発生する大域的誤差を図3, 図4に示す。これ

らから、時間経過にともなってフェルベルク45公式によって発生する誤差よりも、刻み幅最適制御法によって発生する誤差が小さいことが分かる。

次に、非線形問題についての刻み幅 h の時間的な変化を、図5, 図6に示す。この時、フェルベルク45公式での h の変化よりも、刻み幅最適制御法での h の変化の方が変動が小さいことが分かる。これら

の刻み幅で計算したとき、大域的誤差の時間変化を図7、図8に示す。これらから、非線形問題においても、時間経過にともなってフェールベルク45公式によって発生する誤差よりも、刻み幅最適制御法によって発生する誤差が小さいことが分かる。

以上の結果から、線形問題においても非線形問題においても、フェールベルク45公式で発生する大域的誤差よりも、刻み幅最適制御法で発生する大域的誤差の方が小さいことが示された。

6. 結 論

以上の結果から、本論文で紹介した誤差の発展方程式の解は、刻み幅が適当な範囲で実際の数値計算による誤差の挙動をよく表していることが分かる。また、最適制御法による数値計算は、一般に h 一定法に比べてはるかに誤差の少ない方法であることが分かる。なお、3章で説明したように A や E を数値的に推定すると、最適制御を実施せずに一定の刻み幅で計算したときに比べて、多くの計算コストが必要となる。しかし、単位時間当たりには発生する誤差が大きい問題では、刻み幅を最適化することによって、それを補ってあまりある効果をあげることができるわけである。なお実際の計算では、この E は埋め込み法を用いた方式から計算することも可能であり、その場合にはよい手法を用いた場合は積分の処理回数の節約も可能であると考えられる。

5章において、フェールベルク45公式と刻み幅最適制御法とを比較した。この結果から、同じ処理回数で比較したときに刻み幅最適制御法で発生する大域的誤差は、フェールベルク45公式で発生する大域的誤差よりも小さいことを二つの方程式を解くことで確認した。

本論で扱った具体的な例では、終端時刻での誤差を評価関数に選んだ。しかし、2.3節で述べた中間評価の方法も、評価の重み関数 $w(t)$ が与えられれば同様に扱うことができる。

本論文では、“ステップ数一定の制約のもとで誤差を最小にするための最適刻み幅とは何か”を原理的・理論的に解明した。その結果、最適な刻み幅とはこのようにあるべきであるということを理論的に定式化することができた。また、局所的に発生する誤差を許容範囲内に抑えることで最終的な計算の精度を確保しようとする刻み幅の自動調節法は、数値計算の品質という視点で必ずしも“最適”ではないことを示

した。

なお、本論文での“最適”とは、オイラー法、ルンゲ・クッタ法などの手法を一つに定めたときの最適性である。よって、本論文で紹介した刻み幅最適制御法と、(最適化をしていない)従来の手法とでどちらがよいかという手法間の比較は別問題である。これについては“よい”ということの意味にいろいろ論議の余地があり、問題により、条件により一義的に結論を得るのは困難であるが、適切な評価関数を与えれば計算精度という観点でみた場合には刻み幅最適制御法は他の方法よりも優れた方法であることが例証できた。

ところで、本論文では、スカラー量の単純な形の微分方程式を例題として取り上げた。本論文で提案した方法の有効性を実践的に示すためには、非線形連立系を含む多くの問題に対して数値実験を行う必要がある。したがって、今後の課題として、より一般的な問題に対して応用していく予定である。

参 考 文 献

- 1) D.G. ルーエンバーガー：動的システム入門，pp. 425-442，ホルト・サウンダース・ジャパン (1985)。
- 2) Fehlberg, E.: Klassische Runge-Kutta-Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mit Schrittweiten-Kontroll und ihre Anwendung auf Wärmeleitungs Probleme, Computing, 6, pp. 61-71 (1970)。
- 3) Gustafsson, K.: Control Theoretic Techniques for Stepsize Selection in Explicit Runge-Kutta Methods, ACM Trans. Math. Software, Vol. 17, No. 4. pp. 533-534 (1990)。
- 4) 服部雄一：PADによる数値計算，pp. 141-144，啓学社 (1990)。
- 5) 一松 信：電子計算機のための数値計算法 I，pp. 123-131，培風館 (1965)。
- 6) 小島辰一：常微分方程式の数値解法について，群馬大学教育学部紀要 自然科学編，Vol. 39, pp. 57-77 (1990)。
- 7) 洲之内治男：数値計算，p. 36，サイエンス社 (1978)。
- 8) 渡部 力ほか：Fortran 77による数値計算ソフトウェア，pp. 167-182，丸善 (1989)。
- 9) 山本哲朗ほか：特集“精度保証付き数値計算とその応用”，情報処理，Vol. 31, No. 9, pp. 1176-1234 (1990)。
- 10) Butcher, J. C.: The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods, pp. 275-311, John Wiley (1987)。
- 11) Lambert, J.D.: Numerical Methods for Ordinary Differential Systems, pp. 149-205,

John Wiley (1991).

- 12) 三井斌友: 数値解析入門, pp. 66-94, 朝倉書店 (1985).
- 13) 森口繁一: 数値計算工学, pp. 198-203, 岩波書店 (1989).

(平成 4 年 12 月 15 日受付)

(平成 5 年 4 月 8 日採録)



内海 正樹 (正会員)

1962 年生. 1986 年東京農工大学工学部応用物理学卒業. 1988 年東京農工大学大学院工学研究科修士課程修了. 同年, (株)東芝入社. 現在, 東芝府中工場勤務. 高度産業用電算機の基本ソフトウェア, CASE ツールの開発/製品化に従事. ほかに, 数値計算の品質保証ほかに関心を持つ. 日本物理学会会員.



高木 隆司

1940 年生. 1963 年東京大学理学部物理学卒業. 1969 年東京大学大学院博士課程修了. 理学博士. 東京農工大学一般教育部専任講師, 助教授を経て, 現在, 同教授. 流体物理学, 形の科学の研究に従事. 著書に「かたちの不思議」(講談社), 「流れの物理」「形の数理」(朝倉書店), 「ベクトル解析」(岩波書店) ほか. 日本物理学会, 日本流体力学会, 形の科学会, 日本バイオレオロジー学会各会員.



川合 敏雄

1932 年生. 1955 年東京大学理学部物理学卒業. 工学博士. (株)日立製作所原子力研究所, 中央研究所を経て, 現在, 慶應義塾大学理工学部物理学教授. 並列計算機, 計算物理学の研究に従事. 著書に「スーパーコンピュータへの挑戦」(岩波書店), 「PAD プログラミング」(岩波書店) ほか. 日本物理学会会員.