常微分方程式の精度保証付き数値解法に関する考察

3D－9

三浦 徹　久保田 光一
中央大学大学院理工学研究科*

1 はじめに

近年，区間解析や自動微分などの技法の発達により数値計算の精度保証が実用的なものになっている．常微分方程式の初期値問題に関しては，その精度保証付き数値解法の原理が Moore，Lohner らの手によって確立された [2].

現在，これらの手法を問題に適用する際にはさまざまなパラメータを問題に応じて決定する必要がある．このようなパラメータを利用者が指定せずに指定された大域誤差で解を求めるためには，計算過程を感度解析し，最終結果に大きく影響する部分を抽出して，その部分で精度を上げて計算する必要がある．本稿では，その準備として Moore 法，Lohner 法を多倍長浮動小数点ライブラリ [1] と組み合わせて実装し，その性能を評価した．

2 Moore 法，Lohner 法の原理

自律系の連立常微分方程式

$$y'(t) = f(y), \quad y(t_0) = y_0 \tag{1}$$

を考える．実数 a, b により定められる領域 D を

$$D = \{(t, y) \mid 0 \le t - t_0 \le a, ||y - y_0|| \le b\} \tag{2}$$

とおく．この領域で式 (1) の f は連続かつ有界であるとし，その上界を M とおく．さらに f はリプシッツ条件

$$||f(t, y) - f(t, z)|| \le L||y - z|| \tag{3}$$

を満足するとする．このとき，式 (1) の解 $y(t)$ は

$$0 \le t - t_0 \le \min(a, b/M) \tag{4}$$

の範囲で存在し，一意的である．$t_0 \le t \le T$ において式 (1) が唯一の解を $y(t)$ を持つとする．$y(t)$ は初期値の関数でもあるので，これを $\eta(t; t_0, y_0)$ と表しておく．逐次近似公式

$$\hat{y}_{j+1} = \widetilde{\varphi}(t_{j+1}, t_j, \hat{y}_j) \tag{5}$$

を用いて真の解 $y_i (\equiv y(t_{j+1}))$ を近似する．そのときの局所誤差を

$$\varepsilon(t_{j+1}; t_j, y_j) = \widetilde{\varphi}(t_{j+1}, t_j, y_j) - \eta(t_{j+1}; t_j, y_j) \tag{6}$$

と示すことにする．逐次近似公式 (2) を用いたときの第 $j+1$ ステップにおける累積誤差を r_{j+1} として，その第 i 成分を表すと

$$\begin{aligned} (r_{j+1})_i &= (\hat{y}_{j+1} - y_{j+1})_i & (7) \\ &= \left(\widetilde{\varphi}(t_{j+1}, t_j, \hat{y}_j) - \eta(t; t_j, y_j)\right)_i & (8) \end{aligned}$$

となる．これを近似解の周りで展開すると

$$\left(\varepsilon(t_{j+1}; t_j, \hat{y}_j)\right)_i + \frac{\partial(\eta)_i}{\partial y}(t_{j+1}; t_j, \xi_i) \cdot r_j \tag{9}$$

$(\xi_i = \left((1-\theta_i)\hat{y}_j + \theta_i y_j\right)_i,\ 0 < \theta_i < 1)$．また，真の解の周りで展開すると

$$\frac{\partial(\widetilde{\varphi})_i}{\partial y}(t_{j+1}; t_j, \zeta_i) \cdot r_j + \left(\varepsilon(t_{j+1}; t_j, y_j)\right)_i \tag{10}$$

$(\zeta_i = \left((1-\theta_i)\hat{y}_j + \theta_i y_j\right)_i,\ 0 < \theta_i < 1)$ となる．局所誤差の上界が容易に評価できる近似解法であれば，この結果を用いて累積誤差を評価することが出来る．

3 アルゴリズム

前節の結果 (9) をべき級数展開法に対して適用したものが Moore 法，(10) を適用したものが Lohner 法とみなせる．具体的なアルゴリズムの概要を述べる．第 j ステップにおける解の保証区間を $[y_j]$，刻み幅を h とする．

第1ステップ 区間 $[t_j, t_{j+1}]$ 上の解の粗い包み込み $[\overline{Y}]$ を計算する．これは次のような方法で行う．

1. 適当な区間 X を $[y_j] \subset X$ となるようにとる．
2. $Y = [y_j] + [0, h] \cdot f(X)$ を計算する．
3. $Y \subset X$ が満たされていれば終了．
4. 満たされないときは，X の区間幅を適当に広げて反復する．

先の前提の下で十分小さな h に関しては必ず 2 は縮小写像になるから，h を適当に小さくして行けば，以上の手順は有限回で終了する．

第2ステップ $[\overline{Y}]$ を用いて，式 (6) あるいは式 (7) を評価する．

式 (6) を評価するためには，微分方程式の摂動方程式を解く．式 (7) を評価するためには，近似解法を自動微分する．

*On Numerical Methods with Guaranteed Accuracy for Solving Ordinary Differential Equations, Toru MIURA and Koichi KUBOTA, Graduate School of Science and Engineering, Chuo University 1-13-27 Kasuga, Bunkyo-ku, Tokyo 112-8551, Japan.

4 計算機実験

多倍長浮動小数点ライブラリ mpfun[1] を組み込んだボトムアップ型自動微分，冪級数，区間演算のための C++ライブラリを作成し，それを用いて Moore 法，Lohner 法を実装した．

4.1 パラメータの制御

Moore 法，Lohner 法は 冪級数展開法を基にしているので，

- 刻み幅 h,
- 展開の次数 p

を変えると，計算量や精度が変化する．

自動微分を用いると，冪級数展開の各項を計算するためには，関数が和や差から構成されるときは p に比例する手間がかかり，積や標準関数から構成されるときは p^2 に比例する手間がかかる．したがって，t を単位時間進めるときの計算量は $O(p^2/h)$ である．本稿では，局所誤差が指定された値 ε 以下という条件の元で計算時間が最小になるように，以下の方法で次数と刻み幅を制御している．

1. 適当に決めた 次数 p_{max} まで剰余項を計算する．
2. p_{max} 以下の全ての次数 p に関して
$$h_p^{p+1} d\left(f^{(p)}([\overline{Y}])/(p+1)!\right) = \varepsilon h_p$$
を満たす h_p を計算する．ここで，$d([X])$ は $[X]$ の直径を表す．
3. h_p/p^2 が最大になる次数を選ぶ．
4. 第 1 ステップで変化した h と h_p の小さい方を刻み幅として採用する [4].

4.2 計算例: 軌道計算

惑星運動や人口衛星の軌道計算に現れる常微分方程式の 1 つ [3]

$$\left.\begin{array}{ll} \frac{dx}{dt} = u, & \frac{du}{dt} = -\frac{x}{(x^2+y^2)^{3/2}}, \\ \frac{dy}{dt} = v, & \frac{dv}{dt} = -\frac{y}{(x^2+y^2)^{3/2}}, \\ x(0) = 3, & u(0) = 0.3, \\ y(0) = 0, & v(0) = 0.2 \end{array}\right\} \quad (11)$$

の数値解 (図 1) を Lohner 法で $t = 20$ まで計算した．計算は Pentium2 (300MHz) 上で行った．局所誤差を $10^{-10}, 10^{-20}, 10^{-30}, 10^{-40}$ と指定したときの計算時間を表 1 に示す．また，局所誤差

表 1 計算時間

局所誤差	double[56]	mpfun[168]	mpfun[336]
10^{-10}	20.64	138.92	207.73
10^{-20}	76.12	530.77	810.01
10^{-40}	301.81	2145.59	3327.28
10^{-80}	1229.15	8785.93	13607.13

(単位は秒．[j] は仮数部長 j ビットを示す．)

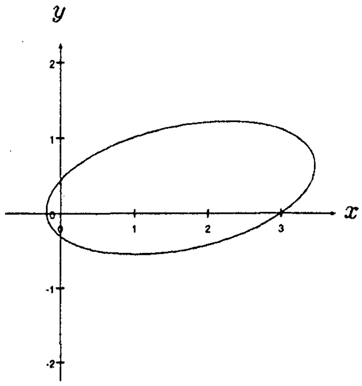

図 1 (8) の数値解

を $10^{-10}, 10^{-20}, 10^{-30}, 10^{-40}, 10^{-50}, 10^{-60}, 10^{-70}, 10^{-80}$ と指定したときの保証区間の幅の変化を図 2 に示す．x, y の保証区間の幅を．それぞれ 2 乗して加え平方根をとり，その常用対数をとった．

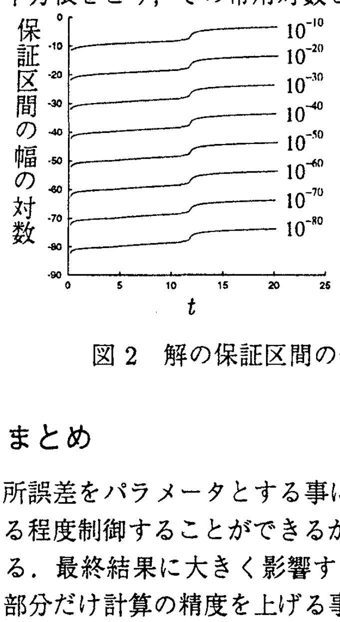

図 2 解の保証区間の変化

5 まとめ

局所誤差をパラメータとする事により，大域誤差をある程度制御することができるが，計算量は膨大になる．最終結果に大きく影響する部分を抽出し，その部分だけ計算の精度を上げる事が今後の課題である．

参考文献

[1] David H. Bailey: MPFUN: A portable high performance multiprecision package, RNR technical report RNR-90-022, NASA Ames Research Center (1993).

[2] Rudolf J. Loher: Enclosing the solution of ordinary initial and boundary value problems, *Computer Arithmetic, Scientific Computation and Programming Languages* (E. Kauche, U. Kulisch and C. Ullrich(eds.)), Wiley-Teubner Series in Computer Science, Stuttgart, pp. 255–286 (1987).

[3] 伊理正夫, 藤野和健: 数値計算の常識, 共立出版 (1985).

[4] 雨宮次郎: 自動微分法を用いた常微分方程式の精度保証付き数値解法の研究, 修士論文, 東京大学大学院工学系研究科 (1992).