指数関数を用いる数値積分公式の設計

On a class of numerical integration schemes utilizing exponential functions

戸川　隼人
TOGAWA Hayato

This paper discusses a new type of numerical integration method for solving initial value problems of nonlinear differential equations. Conventional methods, such as Runge-Kutta method, are consisted by basic arithmetic operations,-addition, subtraction, multiplication and division. Basic idea of the new method is to utilize exponential functions and trigonometric functions. So, in the case of linear homogeneous differential equation with constant coefficients, the proposed method will give exact solution. Three actual computational schemes are proposed. Theoretical error analysis and numerical examples are shown.

常微分方程式の初期値問題を数値的に解くためのアルゴリズムは、加減乗除だけで構成するのが普通であるが、三角関数や指数関数を併用すれば新しい一群の公式を作ることができるであろう。その可能性について検討し、いくつかの公式を作り、テストしたので報告する。

1．研究の背景

コンピュータ以前の時代には、常微分方程式を解くのに、もっぱら解析的方法が用いられてきた。コンピュータの時代になって数値解法が広く用いられるようになったが、線形常微分方程式に関しては解析的方法が有利になることも多く、回路設計や自動制御などの実務ではラプラス変換などが広く用いられている。

数値的な解法と解析的な解法を比較すると、前者が非常に一般的で強い非線形問題にも適用できるのに対し、後者は一般性に欠けるかわりに能率がよいというメリットがある。そこで両者を組合せることにより「解析的に解ける常微分方程式とよく似た形の問題に対する能率のよい解法」を作れるのではないか、ということが考えられる。

局所的に解析解を用いるというアイディアを具体化した公式としては、これまでに

無限級数を用いた公式（たとえば［1］）

積分表示を用いた公式（たとえば［2］）

がある。一般性を重視するならばそれが最もよいであろうが、対象を特別な形の問題に限定するならば、もっと能率のよい方法があるはずである。そこで本論文では、

与えられた微分方程式を局所的に「解析的に解ける微分方程式」で近似する

その解をもって近似解とする

という方法で計算を進める方法を提案する。

その解析解の計算に際し、指数関数や三角関数の値の計算が必要になるが、数値計算技術の進歩により、それらは十分短い時間で計算できるようになったので、実用上の支障にはならないと考えられる。

2．記号

指数関数は普通 e^x の形で表すが、本論文では指数部分の式が複雑になるのでこれを見やすくするため exp( ) の形で表すことにする。x は独立変数、$y(x)$ は未知関数、h は積分進行法の進み幅（step size）で、x_k, y_k は「第 k ステップにおける x, yの値」

$$x_k = x_0 + k \cdot h$$

$$y_k = y(x_k)$$

を表すものとする。また、式を簡単にするため $a(x_k, y_k)$ の値を a_k で表すことにする。

3．オイラー法に相当する公式

a を定数とするとき、微分方程式

$$y' = ay$$

を初期条件

$$y(x_0) = y_0$$

の下で解くと

$$y(x) = y_0 \exp(a \cdot (x - x_0))$$

になるから，

$$y' = y \tag{1}$$

の形をした微分方程式を初期条件

$$y(x_0) = y_0 \tag{2}$$

の下で解くには x_k の近傍において

$$a(x, y) \fallingdotseq a_k$$

とみなすと、局所的な解は

$$y(x)=y_k \exp(a_k(x-x_k))$$

となるから、これをオイラー法のかわりに用いて

$$y_{k+1}=y_k \exp(a_k h) \tag{3}$$

のように計算すれば近似解を得ることができるはずである．これを「公式１」と呼ぶことにする。

（例）微分方程式

$$y'=(x-y)y \tag{4}$$

を解く場合、第 k ステップの計算式は

$$y_{k+1}=y_k \exp((x_k-y_k)h)$$

となる。初期条件が

$$x_0=0,\ \ y_0=1 \tag{5}$$

で進み幅を h=0.1 とした場合の、最初の数ステップの計算結果は次のようになる。

$$y_1=1\exp((0-1)\cdot 0.1)=\exp(-0.1)\fallingdotseq 0.904837$$

$$y_2=0.904837\exp((0.1-0.904837)\cdot 0.1)\fallingdotseq 0.834866$$

以下同様にして近似解

$y(0.3)\fallingdotseq 0.783511$　　$y(0.4)\fallingdotseq 0.746529$　　$y(0.5)\fallingdotseq 0.721102$

が得られる。これを精密に計算した値と比較すると

x	近似解	精密な値	誤差
0.1	0.904837	0.913509	0.008672
0.2	0.834866	0.849219	0.014353
0.3	0.783511	0.801823	0.018312

なので h=0.1 とした場合の精度はあまりよくないが、普通のオイラー法による結果は

x	近似解	精密な値	誤差
0.1	.991351	0.913509	0.077842
0.2	.983717	0.849219	0.070242
0.3	.977078	0.801823	0.175255

であるから、公式１の方が精度がかなり良いことがわかる。

４．台形法および２次のルンゲクッタ法に相当する公式

公式１では、区間 (x_k,x_{k+1}) において、関数 $a(x,y)$ を一定値 $a(x_k,y_k)$ で近似している。したがって $a(x,y)$ の値が急変するようであれば近似精度が悪くなる。そこで精度を上げるため、区間 (x_k,x_{k+1}) における関数 $a(x,y)$ の変化を近似計算に反映させることを考える。

そこで、ひとまず式(3)によって y_{k+1} の仮の値（これを u_{k+1} で表すことにする）を求めた後、

$$a(x,y) \fallingdotseq (a(x_k,y_k)+a(x_{k+1},u_{k+1}))/2$$

で近似して計算することを考える。その具体的な手順は

$$a_L=a(x_k,y_k)$$
$$u_{k+1}=y_k \exp(a_L h)$$
$$a_R=a(x_{k+1},u_{k+1})$$
$$y_{k+1}=y_k \exp\left(\frac{a_L+a_R}{2}h\right) \qquad \text{以上まとめて(6)}$$

となる。これを公式 2 と呼ぶことにする。

また，式(3)によって区間 (x_k,x_{k+1}) の中点 $x_{k+1/2}$ における関数値 $y_{k+1/2}$ の仮の値（これを $u_{k+1/2}$ で表すことにする）を求めた後、

$$a(x,y) \fallingdotseq a(x_{k+1/2},u_{k+1/2})$$

で近似して計算することを考える。その具体的な手順は

$$u_{k+1/2}=y_k \exp(a(x_k,y_k)h/2)$$
$$y_{k+1}=y_k \exp(a(x_{k+1/2},u_{k+1/2})h) \qquad \text{以上まとめて(7)}$$

となる．これを公式 3 と呼ぶことにする。

（例）前と同じ微分方程式(4)に適用してみると、公式 2 による計算式は

$$a_L=(x_k-y_k)$$
$$u_{k+1}=y_k exp(a_L h)$$
$$a_R=a(x_{k+1},u_{k+1})$$
$$y_{k+1}=y_k \exp\left(\frac{a_L+a_R}{2}h\right)$$

となるから、初期条件が(5)の場合、h=0.1 で計算すると、最初の数ステップは次のようになる。

x	近似解	精密な値	誤差
0.1	0.913710	0.913509	0.000201
0.2	0.849555	0.849219	0.000336
0.3	0.802257	0.801823	0.000434

となり、公式 1 よりも誤差が格段に小さくなることがわかる。

一方、公式 3 を適用する場合の計算式は

$$y_{k+1/2}=y_k exp(a(x_k,y_k)h/2)$$
$$y_{k+1}=y_k exp(a(x_{k+1/2},y_{k+1/2})h)$$

となり、同じ問題に適用した場合の最初の数ステップは次のようになる。

x	近似解	精密な値	誤差
0.1	0.913819	0.913509	0.000310
0.2	0.849709	0.849219	0.000490
0.3	0.802426	0.801823	0.000603

次に、ホイン法にならって

$$u_{k+1}=y_k \exp(a(x_k,y_k)h)$$

$$v_{k+1}=y_k \exp(a(x_{k+1},u_{k+1})h)$$

$$y_{k+1}=(u_{k+1}+v_{k+1})/2 \qquad \text{以上まとめて}(8)$$

という公式を作ってみる。これを公式4と呼ぶことにする。

（例）前と同じ微分方程式(4)に適用してみると、公式4による計算式は

$$u_{k+1}=y_k \exp((x_k-y_k)h)$$

$$v_{k+1}=y_k \exp((x_{k+1}-u_{k+1})h)$$

$$y_{k+1}=(u_{k+1}+v_{k+1})/2$$

となるから、初期条件が(5)の場合、h=0.1 で計算すると、最初の数ステップは次のようになる。

x	近似解	精密な値	誤差
0.1	0.913754	0.913509	0.000245
0.2	0.849623	0.849219	0.000404
0.3	0.802340	0.801823	0.000517

この結果でみると、精度は公式2や公式3とほぼ同程度であることがわかる。

ちなみに2次のルンゲ・クッタ法（の一種）

$$d=a(x_k,y_k)y_k h$$

$$y_{k+1}=y_k+a(x_k+h/2,y_k+d/2)(y_k+d/2)h$$

による結果は

x	近似解	精密な値	誤差
0.1	0.914500	0.913509	0.000991
0.2	0.850701	0.849219	0.001482
0.3	0.803540	0.801823	0.001717

であり、指数関数を利用したことによって精度が改善されることがわかる。

5．誤差解析

公式1の局所離散化誤差を評価するため、計算式(3)を展開すると

$$y_{k+1}=y_k\left(\frac{a_k+a_{k+1}}{2}h\right) \tag{9}$$

一方、微分方程式(1)に初期条件

$y=y_k$

を与え、それに対する厳密解 $y(x)$ の $x=x_{k+1}$ における値 y_{k+1} を求めるため、$x=x_k$ を中心とするテイラー展開式に進み幅 h を代入すると、

$$y_{k+1}=y_0+hy'_k+\frac{h^2}{2}y''_k+O(h^3) \tag{10}$$

式(1)より

$$y'_k=a_k y_k$$

$$y''_k=\left(\frac{\partial a}{\partial x}+\frac{\partial a}{\partial y}a_k y_k\right)y_k+a_k^2 y_k$$

これを(10)に入れると

$$y_{k+1}=y_k\left(1+ha_k+\frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial a}{\partial x}+\frac{\partial a}{\partial y}a_k y_k+a_k^2\right)+O(h^3)\right) \tag{11}$$

これを式(9)と比較すると、公式1の局所離散化誤差が

$$e_k=\left(\frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial a}{\partial x}+\frac{\partial a}{\partial y}a_k y_k\right)+O(h^3)\right) \tag{12}$$

となることがわかる。これをオイラー法の局所離散化誤差と比較すると、近似次数は同じであるが、誤差の主要項（*principal term*）が $a_k^2y_kh^2/2$ だけ小さいことがわかる。

次に公式(2)の局所離散化誤差を評価するため、式(6)における u_{k+1} と y_k の差をdと置けば

$$d=y_{k+1}-y_k=y_kh\left(a_k+\frac{a_k^2h}{2}+\frac{a_k^3h^2}{6}+O(h^3)\right)$$

$$u_{k+1}=y_k+d$$

$$a_L=a_k$$

$$a_R=a(x_k+h,\ y_k+d)$$

$$=a_k+\left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)_k h+\left(\frac{\partial a}{\partial y}\right)_k d+\left(\frac{\partial a}{\partial x^2}\right)_k\frac{h^2}{2}+\left(\frac{\partial^2 a}{\partial x\partial y}\right)_k hd+\left(\frac{\partial^2 a}{\partial y^2}\right)_k\frac{d^2}{2}+O(h^3)$$

これらを

$$y_{k+1}=y_k\,exp\left(\frac{a_L+a_R}{2}h\right)$$

に代入して展開し、式(11)と比較すると h^2 までの項が完全に一致する（いいかれば

局所離散化誤差が O(h^3) になる）ことを確認することができる。主要項の比較は非常に長い式になって見通しが良くないので省略する。公式3、公式4についても同様な結果になる。

6．別の面からの意味づけ

線形同次微分方程式

$$y'=a(x)y \tag{13}$$

の、初期条件

$$y(x_k)=y_k$$

の下での厳密解は

$$y(x)=y_k\exp(\int_{x_k}^{x} a(x)dx) \tag{14}$$

となることが知られているから、

$$y_{k+1}=y_k\exp\left(\int_{x_k}^{x_{k+1}} a(x)dx\right)$$

である。特に a(x) が1次式の場合には

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} a(x)dx =(a_k+a_{k+1})h/2$$

であるから、

$$y_{k+1}=y_k\exp\left(\frac{a_k+a_{k+1}}{2}h\right)$$

となる。公式2は上記のように解釈することが可能であり、微分方程式が(13)の形、またはそれに近い場合に有利になることがわかる。

7．まとめ

アルゴリズムの構成要素に指数関数を採り入れることによって計算の効率を向上させる可能性を論じ、その第1歩として1階常微分方程式の初期値問題のための具体的な計算方法を4種類提案し、計算例を示し、誤差評価を行い、有効性を立証した。

定数係数線形同次微分方程式の場合には、指数関数や三角関数を用いれば一般解そのものを表現できるわけであるから、有利になるのは当然であり、それに多少の摂動項が加わった程度の問題には、提案した方法がかなり有利になることが期待できる。

より一般的な問題への適用方法に関しても研究を進めており、高階および連立の常微分方程式に対する適用方法を次の機会に報告する予定である。

本論文のアイディアは1998年の数値解析シンポジウムで発表したが、今回、論文としてまとめるに際し、解析的な誤差評価を行い、公式２を付け加え、数値例を改めた。

8．引用文献

[1] E.Fehlberg: New high-order Runge-Kutta formulas with an arbitrarily small truncation error. ZAMM vol.46 pp.1-16(1966)

[2] W.E.Milne: Numerical solution of differential equations. Wiley, (1953)