システム数理IV 第8回

牧野淳一郎

1999 年 6 月 20 日

1 硬い微分方程式

さて、硬い微分方程式とは何かということだが、例えば以下のような化学反応系を考えてみる

$$\begin{aligned} 2A &\rightarrow B \\ B &\rightarrow C \end{aligned} \tag{1}$$

各物質の濃度を y_1, y_2, y_3と書くことにすれば、それぞれの従う方程式は、例えば

$$\begin{aligned} dy_1/dt &= -2k_1 y_1^2 + 2k_2 y_2 \\ dy_2/dt &= k_1 y_1^2 - (k_2+k_3) y_2 + k_4 y_3 \\ dy_3/dt &= k_3 y_3 - k_4 y_3 \end{aligned} \tag{2}$$

というようなものになる。

係数がたくさんあって面倒なので、以下 $k_1 = k_2$, $k_3 = k_4$ とし、初期条件として

$$y_1 = 1, y_2 = y_3 = 0 \tag{3}$$

という場合だけを考えることにする。

図1 に、 $k_1 = 1, k_3 = 20$ として、前進オイラー法および後退オイラー法で解いた場合の数値解の例を示す。この時の定常解は $y_1 = 0.3904, y_2 = y_3 = 0.1524$ というところになる。グラフに示しているのは y_1 と y_2 である。

滑らかに収束しているのは、前進オイラー法で $\Delta t = 0.025$ ととったものと後退オイラー法で$\Delta t = 0.05$ ととったものである。これに対し、振動的に発散してしまっているのは前進で $\Delta t = 0.05$ の場合である。非常に点が荒く、途中での誤差が大きいが最終的には真の値にいっているのは、後退オイラー法で$\Delta t = 0.5$ と極端に刻みを大きくしたものである。

なお、この計算例では、保存則

$$\frac{y_1}{2} + y_2 + y_3 = \frac{1}{2} \tag{4}$$

を利用して、方程式から y_3 を消している。

化学反応系のような非線形の方程式系では、上の例のように速度定数が大きく違うということはそれほど珍しいことではない。上の例では $k_3 = 20$ であるが、これが何桁も大きい場合というのもある。こういった場合にどういう方法を使うべきかというのが今日考えていきたいことである。

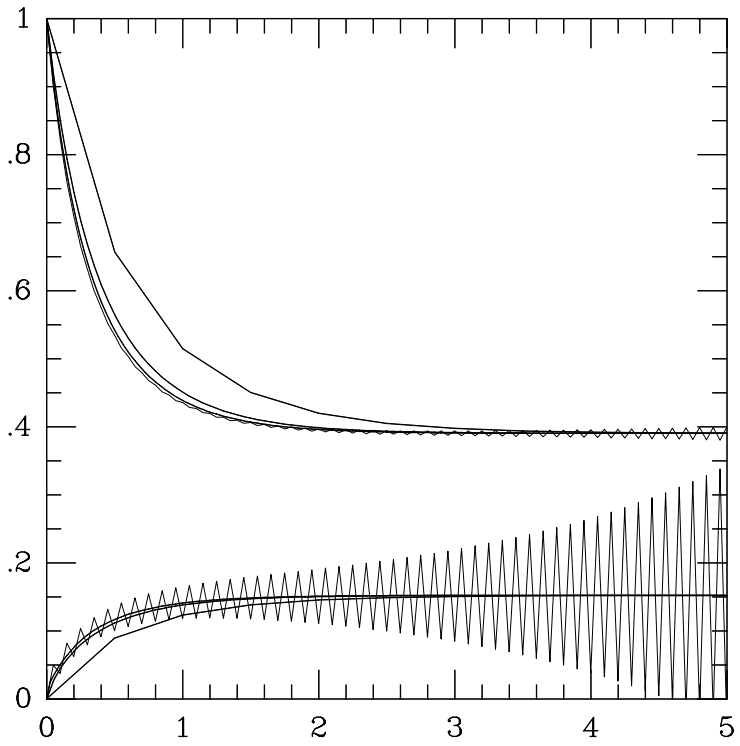

図 1: 化学反応系の数値計算

1.1 「硬さ」の定義

最初に見たように、例えば化学反応系などでタイムスケールが非常に違うと具合の悪いことが起きるわけであるが、この具合の悪さというのは具体的にはなにかというのが問題である。

例によって、方程式が線形の場合について考える。非線形の場合は、局所的に線形化することで硬さを定義することになる。非斉次の線形常微分方程式

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{\psi}(x) \tag{5}$$

の一般解は

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\phi}(x) + \sum_{j=1}^{N} c_j \exp \lambda_j x \tag{6}$$

で与えられる。ここで、$\boldsymbol{\phi}$ は方程式 (5) を満たす特殊解である。

さて、この方程式が安定であるとすれば、固有値 λ_j はすべて実部が負である。ところで、前回の安定性領域についての議論で見たように、大抵の数値解法は絶対安定性領域が左側に有界である。これは、言い替えると、時間刻み h を、適当な定数 M を使って

$$h < M \max |\Re \lambda_j| \tag{7}$$

という制限を満たすようにとらないといけないということを意味する。 M は実際には安定性領域の左側の限界値ということになる。

さて、こういった問題で、どのあたりまで計算しないといけないかというのを考えると、実部の絶対値が最小の固有値に対応する成分が十分小さくなるまでということになる。従って、必要なステップ数は、

$$s = \frac{\max|\Re\lambda_j|}{\min|\Re\lambda_j|} \tag{8}$$

に比例する程度ということになる。つまり、この値が大きいと、計算が非常に大変になるのである。この値のことを硬さ stiffness といい、これが 「非常に大きい」ときに方程式が硬いという。

どれくらい大きい時に硬いというかは曖昧であるが、10^4 を越えると硬いといって間違いない。実用上は、10^6 を越えることも珍しくない。

なぜ 「硬い」といわれるかという歴史的な事情を紹介しておくと、このような問題は、もともとは機械制御系、つまり、モーターで棒かなにかを回してその先の位置をセンサでフィードバックして制御するようなものの計算で問題になった。棒を振り回すとこれは変形するが、棒が 「硬い」ほどその変形の周期が短くなる、つまり固有値の絶対値が大きくなるわけである。

なお、この例からわかるように、本当は固有値の虚数部分も問題である。

非線形方程式

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) \tag{9}$$

の場合には、そのヤコビアン$\partial \boldsymbol{f}/\partial \boldsymbol{y}$ によって局所的に線形化した方程式について硬さを定義する、つまりはヤコビアンの固有値から決まるということになる。

1.2 A-安定性

さて、この硬さというが問題かどうかということであるが、仮にある公式の絶対安定領域が左半平面 $\Re z < 0$ 全体を含んでいれば、硬かろうがなんだろうが問題ではないということはすぐにわかるであろう。この、絶対安定領域が左半平面を含むという性質を、ダールキストは A-安定性と名付けた。

A-安定性については、ダールキスト自身による次の否定的な結果がある

- 陽的ルンゲ・クッタ法は A-安定でない。
- 陽的線形多段階法は A-安定でない。
- 陰的線形多段階法で A-安定であるものの次数は 2 以下である。
- A-安定である陰的線形多段階法のうち、局所誤差がもっとも小さいものは台形公式である。

証明は面倒なので省略する。

これに対し、陰的ルンゲ・クッタ公式については以下の素晴らしい結果が知られている

- 対称な p 段 $2p$ 次公式 (陰的ガウス公式) はすべて A-安定である。

さらに、Radau 公式、 Lobatto 公式など、端点を含む代わりに次数が低い公式についても同様な結果が得られている。

1.3 安定な公式を使う上での問題

前節で見たように陰的ガウス法は A-安定であり、基本的にはこれを使えば方程式が硬いということによる問題は起きないといっていい。が、実用上は、この方法にはあまり嬉しくない特性、つまり、大規模な非線形代数方程式を解かなければいけないという特性がある。

もちろん、線形多段階法のところで考えたような逐次 (直接) 代入法で答が収束すれば、これはたいした問題ではない。しかし、実はこれはうまくいかない。つまり、前に見たように陰的ルンゲ・クッタに対する逐次代入が収束する条件はリプシッツ連続条件

$$|f(x,y) - f(x,y')| \leq L|y - y'| \tag{10}$$

が成り立っている時に、$h < C/L$ (C は公式によって決まる定数だが、1 に近い) で与えられた。ところが、 L は定義から固有値の絶対値の最大値に等しいので、結局陽的な公式と同じように最大固有値でタイムステップが決まってしまい、逐次代入法では A-安定性が失われてしまうのである。

それではいったいどうすればいいかということだが、要するに逐次代入なんていう手抜きな方法を使わないで、もうちょっとまっとうな方法を使えばいいのである。通常使われるのはニュートン法による反復、つまり、方程式を局所的に線形化し、その線形方程式の解を新しい近似解にする方法である。

原理を後退オイラー法の場合について説明しよう。もちろん、高次の陰的ルンゲクッタやあとに述べる陰的線形多段階法でも理屈は同じである。後退オイラー法の場合、解くべき方程式は

$$\boldsymbol{y}_{new} - h\boldsymbol{f}(x_{new}, \boldsymbol{y}_{new}) - \boldsymbol{y}_{old} = 0 \tag{11}$$

である。ニュートン法による i 回目の近似値を$\boldsymbol{y}^{(i)}$と書くことにすると、$\boldsymbol{f}$ が $\boldsymbol{y}^{(i)}$の回りで

$$\boldsymbol{f} \sim \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}^{(i)}) + \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{y}}(\boldsymbol{y}^{(i+1)} - \boldsymbol{y}^{(i)}) \tag{12}$$

と線形化されるから、 $\boldsymbol{y}^{(i+1)}$を求めるには以下の方程式

$$\left(I - h\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{y}}\right)(\boldsymbol{y}^{(i+1)} - \boldsymbol{y}^{(i)}) = h\boldsymbol{f}(x_{new}, \boldsymbol{y}^{(i)}) + \boldsymbol{y}_{old} - \boldsymbol{y}^{(i)} \tag{13}$$

を解けばいいわけである。

すぐにわかるように、ニュートン法は方程式が線形であれば硬さに無関係に一回で収束する。つまり、逐次代入法とは違って A-安定性を保てる。

方程式が非線形の場合にうまくいくか、また、どれくらいの反復回数でうまくいくかというのはなかなか難しい問題である。良く知られているように、ニュートン法は二次収束する、つまり、初期推定が十分に良ければ誤差が一回反復するとまえの誤差の 2 乗程度まで小さくなるという性質 (これは、2 次の項の大きさからすぐに証明できる) があるので、うまい初期値が得られれば反復回数は少ない。

が、うまい初期値をとる一般的な方法はない。例えば陽的ルンゲクッタや陽的な線形多段階法で初期値を作ることも考えられるが、これは系が硬い時には悪い推定値を出す可能性もあるからである。比較的うまくいくのは、なにも考えないで$\boldsymbol{y}^{(0)} = \boldsymbol{y}_{old}$ とする、また陰的ガウス公式であれば途中の値についてもそうする方法である。

なお、もともとのニュートン法ではヤコビアンを反復毎に計算し直すが、これらの方法を実装する時には、 収束しているうちはヤコビアンをそのまま使う」という方法で計算量を減らすのが普通である。

1.4 完全陰的ルンゲク ッタ以外の方法

ここまでで見たように、ガウス法などの陰的ルンゲク ッタは硬い方程式にたいして非常によい性質をもつが、一つ大きな問題がある。それは、ニュートン法で解く方程式の大きさが、元の方程式の本数 N と公式の段数 p の積 Np に比例するということである。

ニュートン法で方程式を解くときに、 LU 分解 (普通のガウスの消去法のことと思っていい) を使うとすれば、計算量が行列の次元の 3 乗で増える。つまり、公式の段数の 3 乗ということになる。これでは、せっかく高い次数の公式が作れるといっても実用性は低い。

ニュートン法でててくる線形化した方程式自体を、LU 分解ではなく適当な反復法、たとえば Gauss-Seidel 法、 SOR、共役勾配 (CG) 法といったもので解くことも考えられるが、これらを使うとまた A-安定性が失われたりすることになる。

これらの問題をあるていど回避するため、非常にさまざまな公式群が研究されている。以下にその例をあげる

1.4.1 ギアの後退差分公式 (BDF)

前に述べたように、計算量と精度の関係を見た時に線形多段階法はルンゲク ッタに比べてかなり良いのが普通である。従って、線形多段階法で比較的よい性質をもつものはないかということを考える。

ダールキストの結果によって、A-安定では 2 次以上にならないということがわかってしまっているので、A-安定の条件のほうをちょっと緩めてみる。緩め方にはいろいろあるが、ギア (C. W. Gear) の提案は、図 2 のように原点近くで虚部が大きいところでは不安定でもいいということにしようというものである。

ギアはこのような領域で安定であることを硬安定ということにした。さらに、以下の形の公式

$$\alpha_0 y_i + \alpha_1 y_{i+1} + \cdot \alpha_n y_{i+p} = h\beta f_{i+p} \tag{14}$$

であれば、 $p \leq 6$ の場合には硬安定な公式が存在することを示した。

係数の表は適当な参考書をみること。

実際のプログラムの例は例えば `http://www.netlib.org/ode/cvode.tar.gz` といったものを見てみること。

ただし、次数が高くなると段々絶対安定領域が妙な形になっていくので、結構使う上では注意が必要である。

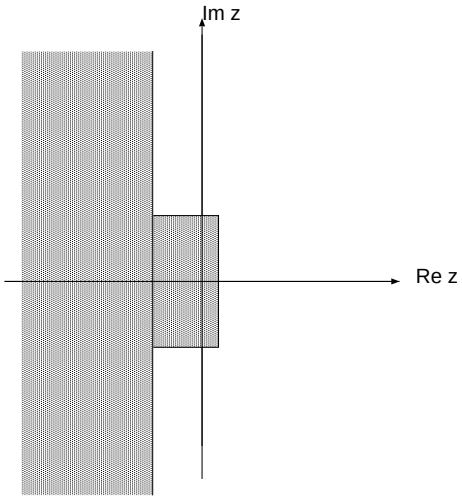

図 2: 硬安定の定義

1.4.2 半陰的ルンゲクッタ

これは無数にある。名前だけをあげると、ローゼンブロック法、 DIRK, MIRK, SIRK, SDIRK といったものがあり、現在盛んに研究されている。

まあ、実用上は、完全陰的なガウスや Radau 公式では問題があるという場合でなければ、わざわざこれらの方法を使う意味はあまりないように思う。

2 次週予告

次回は、実用上非常に重要であるハミルトン力学系とそのための数値解法を扱う。

3 課題

だいぶいろんなことをやったので、いくつか課題を出しておく。レポートとしては、出した課題のなかから 4 題以上を選んでやってもらうというようなつもりでいる。それ以上どこまでやるかは各人の自由であるが、採点基準にはどれだけやったかが入ることはいうまでもないであろう。

1. 4 次まで (まあ、出来なければ 3 次とか 2 次でもいいけど) の陽的ルンゲクッタ公式に対して、安定性を決める多項式 (いわゆる安定性因子) を求め、さらに複素平面上での絶対安定領域を図に示せ。
2. 陰的中点公式の安定性について議論せよ。
3. 2 段 4 次の陰的ガウス公式について
   (a) ルジャンドル多項式の 0 点をとるということから公式を導け。

(b) 実際に線形系に適用して、4 次精度であることと A-安定であることを確かめよ。
(c) 2 変数以上の場合に適用出来るプログラムを作り、適当な非線形方程式を解いてみよ。例えば van der Pol 方程式で極度に非線形性の強い場合について、4 次の古典的ルンゲク ッタと解の精度、信頼性等を比較してみよ。

4. 単振動の方程式をいくつかの方法で数値積分し、求まった数値解の精度と計算量 (微分方程式の右辺を評価した回数) の関係について議論せよ。数値解法としては、
(a) 陽的オイラー法
(b) 陰的オイラー法
(c) 古典的ルンゲク ッタ法
(d) 陰的中点公式
(e) 2 段 4 次の陰的ガウス公式
(f) 4 次ないしそれ以上の陽的アダムス法
(g) 4 次ないしそれ以上の陰的アダムス法
等 (これら以外のものでも構わないが) のなかから、3 種類以上試してみること。