

常微分方程式の区間解法について

中央大学理工学部 久保田光一 (Koichi Kubota)

1 はじめに

正規形の常微分方程式の初期値問題 (以下, ODEIP)

$$\frac{dy}{dt}(t) = f(t, y(t)), \quad (1)$$

$$y(t_0) = y_0 \quad (2)$$

を考える. 本稿で取り上げる区間解法とは, 近似解とそれを含む区間 — 「保証区間」 — を計算し, その区間内に解が含まれることを保証するというものである.

ODEIP の 1 段階法に基づく精度保証アルゴリズムは, R. E. Moore によって整理され [8, 9], その後, 区間演算を実行する本格的な処理系の開発 [2] を受けて, R. J. Lohner によって実用的な算法が提案され, 処理系も作成されている [7]. また, べき級数展開による ODEIP 解法について, その精度保証アルゴリズムを適用し, べき級数法における近似の次数やステップ幅の調節の改良方法などに関する数値実験も発表されている [5, 10].

アルゴリズムの大枠は, 解の存在定理の成立を確認できるような区間を定めておき, その区間内における近似解の打ち切り誤差の上界を厳密に評価すること, および, いわゆる随伴系 [11] を計算することにより, 保証区間の広がり方を抑えることである [7, 8, 9].

本稿では, 連続問題の随伴系と, 離散化された問題の随伴系 [11, 12, 13] との違いから R. E. Moore の算法 (以下, Moore 法) と R. J. Lohner の算法 (以下, Lohner 法) を区別し, 理論的にはすでに確立されたこれらの手法を実際に適用する際の計算時間と達成精度との間の得失関係を調べた. 提案されている手法を再考し, ある条件の下では, より狭い区間を計算しうる Moore 法の変種 (Point Moore 法と呼ぶ) を考えうることも指摘する.

2 用語

式 (1), 式 (2) の解は単に $y(t)$ と記すが, 初期条件 (式 (2)) を $y(\tau) = z$ に変更した場合の解を, 時刻 τ と初期値 z を明示して, $\eta(t; \tau, z)$ と記す. $y(t) \equiv \eta(t; t_0, y_0)$ である. 時刻 t を, t_0, t_1, \dots, t_N と指定したときの解の値 $y(t_i)$ ($i = 0, 1, \dots, N$) を y_0, y_1, \dots, y_N と書き, 後述する近似公式により計算したそれらの近似値を $\bar{y}_0, \bar{y}_1, \dots, \bar{y}_N$ と書く. 精度保証とは, 未知である y_k の値の存在範囲を \bar{y}_k の値から計算すること, すなわち, y_k (と \bar{y}_k) を含む区間 \bar{Y}_k ($k = 0, 1, \dots, N$) を計算することである. このように, 変数に上線をつけて近似値であることを明示し, 大文字の変数は実数区間を表すとする.

解 $\eta(t; \tau, z)$ の近似解の計算公式は 1 段階法であるとし, それを $\varphi(t; \tau, z)$ と記す. これにより, $t_{k+1} = t_k + h$ における (h は変更可) 近似解 \bar{y}_{k+1} を $\bar{y}_{k+1} = \varphi(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k)$ と表す. 通常は, 1 段階法は, $\bar{y}_{k+1} = \bar{y}_k + \psi(h, t_k, \bar{y}_k) \cdot h$ のように記すが (ψ を増分関数という [4]), ここでは, $\bar{y}_{k+1} = \varphi(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k) = \bar{y}_k + \psi(t_{k+1} - t_k, t_k, \bar{y}_k) \cdot (t_{k+1} - t_k)$ と記していることに注意されたい. たとえば, Euler 法の場合は, $\varphi(t; t_k, \bar{y}_k) \equiv \bar{y}_k + f(t_k, \bar{y}_k) \cdot (t - t_k)$ である.

以下の議論自身は、原理的には、一般の1段階法公式についても適用可能であるが、打ち切り誤差の計算のために、ここでは、べき級数展開法を近似公式として採用する (p 次の Runge-Kutta 公式を用いるとすると、その打ち切り誤差評価のために、 p 次のべき級数展開を用いることになり、公式の長所が半減する)。そこで、 $t = \tau$ における η の t に関する k 階微分係数を

$$\eta_{\tau,z}^{<k>} \left(= \frac{d^k \eta}{dt^k}(\tau; \tau, z) \right) \quad (3)$$

と記し、 η の p 次までのべき級数展開とそれに基づく近似解の計算公式 φ を、

$$\eta(\tau + h; \tau, z) = \eta_{\tau,z}^{<0>} + \eta_{\tau,z}^{<1>} h + \cdots + \frac{1}{p!} \eta_{\tau,z}^{<p>} h^p + \frac{1}{(p+1)!} \frac{d^{p+1}}{dt^{p+1}} \eta(\tau + \xi \cdot h; \tau, z) h^{p+1}, \quad (4)$$

$$\varphi(\tau + h; \tau, z) = \eta_{\tau,z}^{<0>} + \eta_{\tau,z}^{<1>} h + \cdots + \frac{1}{p!} \eta_{\tau,z}^{<p>} h^p \quad (5)$$

と表す ($0 < \xi < 1$)。

1段階法公式 φ の局所打ち切り誤差 $\varepsilon(t; \tau, z)$ は次式

$$\varepsilon(t; \tau, z) \equiv \varphi(t; \tau, z) - \eta(t; \tau, z) \quad (6)$$

で定義される。上記のべき級数展開公式については、

$$\varepsilon(t; \tau, z) = -\frac{1}{(p+1)!} \frac{d^{p+1}}{dt^{p+1}} \eta(\tau + \xi \cdot h; \tau, z) h^{p+1} \quad (7)$$

である。なお、式(7)の値を区間演算で評価すると、その結果の区間の中央値を式(5)に加えれば、実質的に $p+1$ 次の近似公式を得られることになる [7]。また、丸め誤差による影響についてはひとまず無視する。

以降では、区間演算 [1] を用いるが、それを明示する必要があるときには、区間に関する加減乗除演算を \oplus , \ominus , \otimes , \oslash と表す。また、ある関数 $f(x)$ について、 f の値を計算する式 e_f (一般には手続き) が与えられているとき、区間 $X = [x_l, x_h]$ における f の値域を $\{f(x) \mid x \in X\}$ ($\equiv W(f; X)$) と記す [1]。一方、 e_f 中の演算を全て区間演算に置き換えた式を e_F と表すとしたとき、 X を与えて、区間演算を用いて e_F を評価した結果を $f_{e_F}(X)$, あるいは、単に $f(X)$ と記す。 f に対して、 $W(f; X)$ は一意に定まるが、 $f_{e_F}(X)$ は計算手続き e_f の選び方により変化する。しかし、 e_f に関わらず、 $f(X) \supseteq W(f; X)$ は成立する。

3 Moore 法と Lohner 法

Moore 法 [8, 9], Lohner 法 [7] は、解の初期値に関する感度を計算することにより、保証区間を計算する。加えて、 y がベクトルである場合には、局所的な座標変換を用いて、いわゆる wrapping effect を解消するという方法である。

本稿では、その第1段階、すなわち、解の初期値に関する感度係数を用いて保証区間を計算する方法に絞って考察する。いくつかの改良算法も提案されているが [5, 6], ここでは、アルゴリズムの基本形について議論し、それらの違いを再認識することを目的とする。

まず、前提条件として、時刻 $t = t_k$ において近似解 $\bar{y}_0, \bar{y}_1, \dots, \bar{y}_k$, および、(真の) 解を含む区間 $\bar{Y}_0, \bar{Y}_1, \dots, \bar{Y}_k$ を計算済みとする。そして、時刻 $t = t_{k+1}$ における近似解 \bar{y}_{k+1} と保証区間 \bar{Y}_{k+1} の計算を考える。Moore 法と Lohner 法の違いを大域誤差の展開法の違いとして示し、アルゴリズムを次の4段階に細分して説明する: (1) $T_k = [t_k, t_{k+1}]$ での解の包含区間の計算; (2) 打ち切り誤差の評価; (3) 打ち切り誤差が次段に及ぼす影響 (初期値に関する解・近似解の感度) の計算; (4) $t = t_{k+1}$ における保証区間の計算。

3.1 大域誤差の展開

式 (1), (2) の数値近似解の $t = t_{k+1}$ における大域誤差とは, $\bar{y}_{k+1} - y_{k+1}$ である. これを, $t = t_k$ における大域誤差 $\bar{y}_k - y_k$ で展開するのに, 2 通りの方法がある. 数値近似解の周りでの展開と, 真の解の周りでの展開である.

結論を言うと, 数値近似解の周りでの展開

$$\begin{aligned}\bar{y}_{k+1} - y_{k+1} &= \varphi(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k) - \eta(t_{k+1}; t_k, y_k) \\ &= \varphi(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k) - \eta(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k) + \eta(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k) - \eta(t_{k+1}; t_k, y_k) \\ &= \varepsilon(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k) + \frac{\partial \eta}{\partial z}(t_{k+1}; t_k, \theta_k \bar{y}_k + (1 - \theta_k) y_k) \cdot (\bar{y}_k - y_k)\end{aligned}\quad (8)$$

が Moore 法に対応する ($0 < \exists \theta_k < 1$). 真の解の周りでの展開

$$\begin{aligned}\bar{y}_{k+1} - y_{k+1} &= \varphi(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k) - \eta(t_{k+1}; t_k, y_k) \\ &= \varphi(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k) - \varphi(t_{k+1}; t_k, y_k) + \varphi(t_{k+1}; t_k, y_k) - \eta(t_{k+1}; t_k, y_k) \\ &= \frac{\partial \varphi}{\partial z}(t_{k+1}; t_k, \zeta_k \bar{y}_k + (1 - \zeta_k) y_k) \cdot (\bar{y}_k - y_k) + \varepsilon(t_{k+1}; t_k, y_k)\end{aligned}\quad (9)$$

が Lohner 法に対応する ($0 < \exists \zeta_k < 1$). 上の展開が等号で成立している点に注意されたい.

Moore 法, Lohner 法の評価に必要な諸量を上式の順に列挙する:

$$\varepsilon(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k), \quad (10)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial z}(t_{k+1}; t_k, \theta_k \bar{y}_k + (1 - \theta_k) y_k), \quad (11)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z}(t_{k+1}; t_k, \zeta_k \bar{y}_k + (1 - \zeta_k) y_k), \quad (12)$$

$$\varepsilon(t_{k+1}; t_k, y_k). \quad (13)$$

このうち, 式 (11) が η (連続系) の微分係数, 式 (12) が φ (離散系) の微分係数であることに注意されたい.

なお, y が (n 次元) ベクトル y の場合には, 各成分毎に θ_k や ζ_k が異なる. たとえば, 式 (11) に対応するものは, 第 i 行が $\partial \eta_i / \partial z(t_{k+1}; t_k, (\theta_k)_i \bar{y}_k + (1 - (\theta_k)_i) y_k)$ であるような $n \times n$ の行列である (η_i は η の第 i 成分とする). $(\theta_k)_1, \dots, (\theta_k)_n$ の値が未知であっても, 区間評価を行えば, それらを含む区間を一度に計算することができる [7].

3.2 包含区間の計算

時刻 $t \in T_k = [t_k, t_{k+1}]$ における解の (真の) 「変動区間」 $U_{\bar{Y}_k}$ とは, $\forall \bar{y} \in \bar{Y}_k$ について, $y(t_k) = \bar{y}$ を満たす式 (1) の解の T_k における区間である:¹

$$U_{\bar{Y}_k} \equiv \{\eta(t; t_k, \bar{y}) \mid t \in T_k, \bar{y} \in \bar{Y}_k\}. \quad (14)$$

この $U_{\bar{Y}_k}$ を直接計算することは一般には困難なので, 微分の平均値の定理 $y(t_k + \xi) = y(t_k) + y'(t_k + \theta \cdot \xi) \cdot \xi = y(t_k) + f(t_k + \theta \cdot \xi, y(t_k + \theta \cdot \xi)) \cdot \xi$ に注意して, $U_{\bar{Y}_k}$ を含むなるべく幅の狭い「包含区間」 $\bar{U}_{\bar{Y}_k}$ を計算する. そのために, 次に説明するやり方で定める (初期) 区間 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ について,

$$\bar{V}_{\bar{Y}_k} \supseteq \bar{Y}_k \oplus f(T_k, \bar{V}_{\bar{Y}_k}) \otimes (T_k - t_k) \quad (15)$$

¹高次の変動区間も提案されている [6]. これについても, 式 (10)~式 (13) を評価する立場からは, 以下と同様の議論を展開できる.

が成立することを確認し、その $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ を $\bar{U}_{\bar{Y}_k}$ として採用するというのが基本方針である。実際に数値計算を行なうには、初期区間 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ の定め方、式 (15) が成立する場合の $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ の反復改良、および、式 (15) が成立しない場合の処理が重要である。

3.2.1 初期区間の定め方

初期区間 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ の定め方として提案されている方法の一つは、 T_k における解の微分係数の近似値が $f(T_k, \bar{Y}_k)$ として与えられるので、解の変動を若干大きく見積もって、適当な定数 c_1, c_2 を選び、

$$\bar{V}_{\bar{Y}_k} := \bar{Y}_k \oplus [-c_1, c_2] \otimes f(T_k, \bar{Y}_k) \otimes (T_k - t_k) \quad (16)$$

と設定するものである (具体的には、 $c_1 = c_2 = 2$ とすることなどが提案されている [5])。一見これが上記の $\bar{U}_{\bar{Y}_k}$ そのもののように思われるが、右辺の f の引数として与えられる区間が \bar{Y}_k であるので、この状況では、 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ を解の包含区間 $\bar{U}_{\bar{Y}_k}$ として採用して良いかどうかは未定である。

3.2.2 解の存在の確認と反復改良

上で定めた $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ について、一旦式 (15) の右辺を評価し、それを $\bar{W}_{\bar{Y}_k}$ と置く：

$$\bar{W}_{\bar{Y}_k} := \bar{Y}_k \oplus f(T_k, \bar{V}_{\bar{Y}_k}) \otimes (T_k - t_k). \quad (17)$$

ここで、包含関係 $\bar{V}_{\bar{Y}_k} \supseteq \bar{W}_{\bar{Y}_k}$ が成立するか否かで処理が分かれる。

$\bar{V}_{\bar{Y}_k} \supseteq \bar{W}_{\bar{Y}_k}$ が成立するとき、 $\bar{U}_{\bar{Y}_k} := \bar{V}_{\bar{Y}_k}$ と設定してよい。しかし、区間演算の包含関係の単調性から、 $\bar{W}_{\bar{Y}_k}$ についても、 $\bar{V}_{\bar{Y}_k} := \bar{W}_{\bar{Y}_k}$ とすれば、式 (15) が成立する。つまり、一旦式 (17) を評価したら、その $\bar{W}_{\bar{Y}_k}$ を解の存在保証区間 $\bar{U}_{\bar{Y}_k}$ として採用できる。すなわち、 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ の反復改良が可能である。この反復の停止条件としては (一次収束であることを考えると厳し過ぎるが極端な例として)、

$$\bar{V}_{\bar{Y}_k} = \bar{W}_{\bar{Y}_k} \quad (18)$$

を採用する。あるいは、 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ が式 (15) を満たす範囲で時刻の間隔を変更することにして、なるべく大きな h を選ぶという変種も考えられる。反復改良の手間と保証区間幅の得失が実際上の問題となる。

式 (15) が成立しない場合 ($\bar{V}_{\bar{Y}_k} \not\supseteq \bar{W}_{\bar{Y}_k}$) には、初期区間 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ を修正しなければならない。このときは、適当に小さな ϵ ($\simeq 0.1$) について、 $\bar{V}_{\bar{Y}_k} := (1 + \epsilon)\bar{V}_{\bar{Y}_k} \ominus \epsilon\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ として、 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ の幅を広げて式 (15) を再評価することが提案されている [5, 7, 10]。最悪でも、 $f(T_k, \bar{V}_{\bar{Y}_k})$ の区間値から h を決定すれば、所与の区間 $\bar{V}_{\bar{Y}_k}$ の中に解の変動が収まるようにすることができる。

また、上記のやり方は、 \bar{Y}_k のどの点を通る解についても、それら全体の変動区間を包含するものであるが、その特殊な場合として、 \bar{y}_k あるいは y_k の 1 点だけを通る解の包含区間 $\bar{U}_{\bar{y}_k}$ (式 (19)) や \bar{U}_{y_k} も考えられる。特に、 $\bar{U}_{\bar{y}_k}$ は、後述する Point Moore 法の打ち切り誤差評価で利用される。

3.3 打ち切り誤差の評価

上の大域誤差の展開で示したように、Moore 法では $\epsilon(t_{k+1}; t_k, \bar{y}_k)$ 、Lohner 法では $\epsilon(t_{k+1}; t_k, y_k)$ が打ち切り誤差を与える。

式 (5) の p 次べき級数公式については、式 (6) を区間で評価すればよい。そのために十分なものは、 $\bar{U}_{\bar{Y}_k}$ である。しかし、Moore 法の打ち切り誤差評価のために必要なものは、自然に考えれば、近似解 \bar{y}_k だけを通る解に関する打ち切り誤差であるから、 $\bar{U}_{\bar{Y}_k}$ よりもさらに狭い区間

$$\bar{U}_{\bar{y}_k} \supseteq U_{\bar{y}_k} \equiv \{\eta(t; t_k, \bar{y}_k) \mid t \in T_k\} \quad (19)$$

を用いて式(6)を評価することができる。このやり方を Point Moore 法と呼ぶことにする (§4)。 y_k は未知であるので、 \bar{U}_{y_k} は一般には計算不可能である。

具体的な計算は、自動微分 ([3, 14] とその参考文献を参照) と区間演算を組み合わせれば、 $\bar{U}_{\bar{Y}_k}$ あるいは $\bar{U}_{\bar{y}_k}$ からのべき級数展開を計算するだけである [10]。これらを $\bar{E}_k(\bar{U}_{\bar{Y}_k})$, $\bar{E}_k(\bar{U}_{\bar{y}_k})$ と記す。

3.4 打ち切り誤差の次段への影響の計算

打ち切り誤差の次段への影響は、式(11)に現れる解 η の初期値 z に関する微分係数 $\partial\eta/\partial z$, および、式(12)に現れる近似公式 φ の初期値 z に関する微分係数 $\partial\varphi/\partial z$ で与えられる。これらは一般には行列であり、それらの各成分をそれぞれ包含する区間を成分を持つ (区間) 行列を、それぞれ、 \bar{C}_k , \bar{A}_k と記す。打ち切り誤差評価とは異なり、Moore 法の \bar{C}_k と Lohner 法の \bar{A}_k とで大きな違いがある [10]。

まず、比較的単純な方から説明すると、 φ の陽な表式が与えられているので、Lohner 法に対応する式(12)を含む区間は、 \bar{Y}_k を与えて区間演算を用いて高階偏導関数 (これは自動微分により簡単に計算可能) を計算すればよい [7, 10]。これを $\bar{A}_k(\bar{Y}_k)$ と記す。

一方、Moore 法では、 η 自身が式(1)で与えられるので、 $\partial\eta/\partial z$ も常微分方程式の解として与えられる。 $\partial\eta/\partial z(t)$ を表す行列を $C(t)$ (これは区間ではないが、一般には行列なので大文字で記す) とすると、 \bar{C}_k は

$$\frac{dy}{dt}(t) = f(t, y(t)), \frac{dC}{dt}(t) = \frac{\partial f}{\partial y}(t, y(t)) \cdot C(t), \quad y(t_k) = \theta_k \bar{y}_k + (1 - \theta_k) y_k, C(t_k) = I \quad (20)$$

という ODEIP の $t = t_{k+1}$ における解 $C(t_{k+1})$ を包含する区間行列である (I は単位行列)[10]。一般に、 θ_k , y_k は未知で、しかも、式(20)は $y(t)$ を含むので、 C に関する ODEIP の精度保証計算が必要になる。すなわち、適当な初期区間を元にして、包含区間を計算し、それを精密化しなければならない。このようにして計算した行列を $\bar{C}_k(\bar{U}_{\bar{Y}_k})$ と記す。 \bar{C}_k と \bar{y}_k は異なる積分公式を用いてもよい [10] (§5.1.4).²

3.5 保証区間の計算

最後に、 $t = t_{k+1}$ における保証区間を計算する。単純には、大域誤差の展開に対して、直接区間演算を施して、

$$\bar{Y}_{k+1} = \bar{C}_k \otimes \bar{Y}_k \oplus \bar{E}_k \quad \text{or} \quad \bar{Y}_{k+1} = \bar{A}_k \otimes \bar{Y}_k \oplus \bar{E}_k \quad (21)$$

とすればよい。

一方、大域誤差の展開を t_ℓ まで再帰的に続ければ、

$$\bar{y}_{k+1} - y_{k+1} = \left(\prod_{j=\ell}^k \frac{\partial \psi}{\partial z}(t_{j+1}; t_j, \xi_j \bar{y}_j + (1 - \xi_j) y_j) \right) \cdot (\bar{y}_\ell - y_\ell) \quad (22)$$

$$+ \sum_{i=\ell+1}^k \left(\prod_{j=i}^k \frac{\partial \psi}{\partial z}(t_{j+1}; t_j, \xi_j \bar{y}_j + (1 - \xi_j) y_j) \right) \cdot \varepsilon(t_i; t_{i-1}, z_{i-1}) \quad (23)$$

$$+ \varepsilon(t_{k+1}; t_k, z_k) \quad (24)$$

²逆に近似の仕方に一貫性が無いとも言える。

表 1. Lohner 法, Moore 法, Point Moore 法

解法	Lohner 法	Moore 法	Point Moore 法
包含区間	$\overline{U}_{\overline{Y}_k}$	$\overline{U}_{\overline{Y}_k}$	$\overline{U}_{\overline{Y}_k}, \overline{U}_{\overline{y}_k}$
打ち切り誤差評価	$\overline{E}_k := \overline{E}_k(\overline{U}_{\overline{Y}_k})$	$\overline{E}_k := \overline{E}_k(\overline{U}_{\overline{Y}_k})$	$\overline{E}_k := \overline{E}_k(\overline{U}_{\overline{y}_k})$
誤差の影響係数評価	$\overline{A}_k := \overline{A}_k(\overline{Y}_k)$	$\overline{C}_k := \overline{C}_k(\overline{U}_{\overline{Y}_k})$	$\overline{C}_k := \overline{C}_k(\overline{U}_{\overline{Y}_k})$
精度保証区間計算	$\overline{Y}_{k+1} := \overline{A}_k \overline{Y}_k + \overline{E}_k$	$\overline{Y}_{k+1} := \overline{C}_k \overline{Y}_k + \overline{E}_k$	$\overline{Y}_{k+1} := \overline{C}_k \overline{Y}_k + \overline{E}_k$

を得る.³ ただし, Moore 法を採用するときは, $\psi = \eta$, $z_j = \overline{y}_j$, $\xi_j = \theta_j$ であり, Lohner 法を採用するときは, $\psi = \varphi$, $z_j = y_j$, $\xi_j = \zeta_j$ である. これを区間演算で評価すれば, \overline{Y}_{k+1} を得る [5, 10].

これに基づく区間演算での計算式は, 次のようになる (\overline{C}_j の代わりに \overline{A}_j でもよい):

$$\overline{Y}_{k+1} = \left(\prod_{j=\ell}^k \overline{C}_j \right) \otimes \overline{Y}_\ell \oplus \sum_{i=\ell+1}^k \left(\prod_{j=i}^k \overline{C}_j \right) \overline{E}_{i-1} \oplus \overline{E}_k. \quad (25)$$

場合によっては, 各時間刻みごとに Moore 法, Lohner 法 のどちらか一方を選ぶという両者の混合算法も考え得る. 各 k について $\ell = 0$ として式 (25) と同等の計算を行なうと, $\overline{Y}_0, \overline{Y}_1, \dots, \overline{Y}_N$ を計算するには, $O(N^2)$ の手間を要するが, 保証区間幅が狭められる可能性もある. 展開する段数と保証区間の関係についても調べられている [5, 10].

4 算法

Moore 法の計算のために必要な量は, 式 (10), 式 (11) であり, Lohner 法の計算のために必要な量は式 (12), 式 (13) である. これらを含む区間を計算する方法には, 通常の Moore 法, Lohner 法の他に, $\overline{U}_{\overline{y}_k}$ を用いて打ち切り誤差評価を若干精密にした Moore 法 (Point Moore 法) の 3 種が考えられる (表 1). 一般に解 y_k は未知なので, $\overline{U}_{\overline{y}_k}$ に対応する (Point Lohner 法とでもいうべき) Lohner 法の変種は除外する. 以下, 表に沿って, 各算法を簡単にまとめる.

Lohner 法は $T_k = [t_k, t_{k+1}]$ における包含区間として, \overline{Y}_k を通る解を包含する区間 $\overline{U}_{\overline{Y}_k}$ を採用する. ここでは, 反復停止条件は式 (18) とする. この $\overline{U}_{\overline{Y}_k}$ を用いて, 打ち切り誤差を評価し, 区間 $\overline{E}_k(\overline{U}_{\overline{Y}_k})$ を計算する. 打ち切り誤差の次段への影響は, \overline{Y}_k を与えて, 単に区間演算を用いて高階偏導関数を計算すればよい. その区間行列を $\overline{A}_k(\overline{Y}_k)$ とする. 最終的に $t = t_{k+1}$ における保証区間 \overline{Y}_{k+1} を $\overline{Y}_{k+1} := \overline{A}_k \overline{Y}_k + \overline{E}_k$ と計算する. (ここでは, 式 (25) は採用しない.)

Moore 法は Lohner 法と同様で, 相違点は, \overline{A}_k の代わりに \overline{C}_k を用いるという点である. 前述したように, \overline{C}_k 自身の保証区間も計算しなければならない.

Point Moore 法は 打ち切り誤差評価のための包含区間として, $\overline{U}_{\overline{y}_k}$ を用いる以外は, Moore 法と同じである. 打ち切り誤差の評価区間が Moore 法 (や Lohner 法) よりも狭くなることが期待できるので, 近似の次数を固定したとすれば, 結果としてより狭い保証区間を与え得る. \overline{C}_k の計算は Moore 法と同じであるので, まず, $\overline{U}_{\overline{y}_k}$ を求める必要がある. そして, $\overline{U}_{\overline{y}_k}$ の計算には, その $\overline{U}_{\overline{Y}_k}$ を初期値として反復改良を施す. (新たに \overline{y}_k に関して初期区間を計算し, その包含区間を計算する方法も可能である.)

³ $\prod_{j=i}^k \partial\psi/\partial z$ の部分がいわゆる随伴系に対応する [11].

表 2. [数値実験 1] φ_8 に関する保証区間

包含区間の反復改良回数制限なし, $t = 1.73919$ (188 ステップ)			
解法	Lohner 法	Moore 法	Point Moore 法
保証区間幅 (半径)	x	6.744×10^{-2}	6.668×10^{-2}
	y	6.205×10^{-2}	6.133×10^{-2}
	u	1.134×10^{-1}	1.102×10^{-1}
	v	1.423×10^{-1}	1.377×10^{-1}
時間 (秒)	150	258	288

5 数値実験

上記の 3 種の算法について、いわゆる軌道計算

$$\frac{dx}{dt} = u, \frac{dy}{dt} = v, \frac{du}{dt} = \frac{-x}{(x^2 + y^2)^{3/2}}, \frac{dv}{dt} = \frac{-y}{(x^2 + y^2)^{3/2}}, \quad (26)$$

$$(x(0), y(0), u(0), v(0)) = (0.01, 0.4, -0.9, -1.4) \quad (27)$$

を例として、べき級数展開公式 φ の次数として、8 次 (実質 9 次) のもの (φ_8) および 16 次 (実質 17 次) のもの (φ_{16}) について、保証区間を計算した。近似解を計算する過程で、べき級数展開の次数は固定であるが、時間刻み幅 h は、包含区間計算の際に縮小するか、あるいは、2 ステップ連続して同じ値である場合には、 $h := 2 \cdot h$ と更新する。

使用した計算機は、Sun Microsystems 社の Sparc Station 10 model 41、コンパイラは同社の C++2.1 を用い、自動微分および区間演算のクラスライブラリを構成して実験を行なった。

実行時間に関しては、プログラム実現法に大きく依存し、しかも、ファイルの入出力等に要した時間も含んでいるので、比較のための目安と考えられたい。

5.1 3 手法の比較

まず、式 (26) の中で、分母にきている $(x^2 + y^2)^{3/2}$ を評価したときの区間が 0 を含むと、いわゆる「ゼロ割り」を起こし、計算続行が不可能になることに注意する。

この例では、式 (16) で $c_1 = c_2 = 2$ として初期区間を定めると、比較的早い段階で、計算続行不能になった。そこで手作業で c_1, c_2 を調整し、 $c_1 = 0.0, c_2 = 1.1$ と設定した。(この例のように、符号が確定している区間であれば、それが 0 を含んでも、 $\infty (-\infty)$ を端点に持つ区間として処理可能である。ただし、このような場合には初期区間を膨らませることは式 (15) を成立させるためには逆効果となることもある。このような処理に関する議論は今後の課題としたい。)

5.1.1 数値実験 1

公式 φ_8 を用いて、計算続行不可能になるまで、上記区間解法を実行し、 $x(t), y(t), u(t), v(t)$ の最終時刻での保証区間幅と計算時間を表 2 に示す。なお、Moore 法、Point Moore 法については、 \bar{C}_k の計算も 8 次のべき級数展開を用いて計算した。続行不能になる t の値はどれも同じで、 h の大きさの変更等も含めて、途中経過は 3 手法ともほぼ同じであった。

5.1.2 数値実験 2

公式 φ_{16} について、数値実験 1 と同様の実験を行なった (表 3)。

表 3. [数値実験 2] φ_{16} に関する保証区間

包含区間の反復改良回数制限なし, $t = 2.06351$, \overline{C}_k は 9 次の公式で計算 (273 ステップ)			
解法	Lohner 法	Moore 法	Point Moore 法
保証区間幅 (半径)	x	6.101×10^{-4}	6.099×10^{-4}
	y	6.508×10^{-4}	6.505×10^{-4}
	u	9.823×10^{-4}	9.818×10^{-4}
	v	1.405×10^{-3}	1.404×10^{-3}
時間 (秒)	568	612	630

5.1.3 数値実験 3

次に、包含区間の反復改良の回数の上界を設定して、反復改良の回数が最終的な保証区間へ与える影響を調べた。数値実験 1 において、1 段階法の適用は 188 ステップを費やしており、ここでは、延べ 1870 回 (最小 3 回, 最大 37 回 (最後)), 平均 1 ステップあたり約 10 回の反復改良を行っている。

反復改良の回数の最終保証区間への影響を見るために、反復改良を 11 回まで行なうもの、6 回まで、1 回までと変更して計算した。ただし、これらの回数は上界であるので、それ以下で反復停止条件式 (18) を満たす場合もある。結果を表 4 に示す。ここでの最終時刻は、 $t = 0.70605$ を越えた時点とした。これは反復 1 回以下の Lohner 法と Moore 法がゼロ割りで計算続行不能となる時刻である。

5.1.4 数値実験 4

ここでは、Moore 法と Point Moore 法の両算法について、 \overline{C}_k の計算のためのべき級数展開の次数を変更した。 \overline{y}_k の近似公式 φ と同じ次数である必要は無いので、 \overline{C}_k の計算のための次数を減らし、計算時間の短縮を試みる。結果を表 5 に示す。

6 結論

以上の数値計算結果に関するコメントを列挙する。

- 全般的に見て、Lohner 法の方が計算時間が短いことが明らかである。同一の次数の近似公式で保証区間の幅を最小にするものは、Point Moore 法であるが、その保証区間幅の違いはごく僅かである。しかし、計算時間は 8 次の公式については約 2 倍、16 次では 1.1 倍となっている。時間刻み幅も含めて近似公式の次数も適応的に変化させるような ODEIP の実用解法を考えると、わざわざ Point Moore 法を実行する利点は少ない。それ以上に、単なる Moore 法の実行は Lohner 法に比べて利点は無いように見える。
- 表 4 の最下段の包含区間の反復改良回数が少ないときには、Point Moore 法の区間幅は、Lohner 法の 1/4 になっている。これは、包含区間が過大な区間であるときには、反復改良 1 回の効果が大きいということと解釈できる。
- Taylor 展開の計算は履歴を残していない関係で、式 (5) を次数の低い順に計算するのに、 $O(p^3)$ の手間をかけている。それにも関わらず、表 2 と表 3 における実行時間の違いが 4 倍弱であることから、包含区間計算とその改良の手間も計算時間の大きな割合を占めることが確認できる。

表 4. [数値実験 3] 反復改良の回数を制限 (近似公式は φ_8 , $t = 0.70605$ を越えた時点での区間幅)

	解法	Lohner 法	Moore 法	Point Moore 法
反復回数制限なし, $t = 0.739192$, \bar{C}_k は 9 次の公式で計 算	x	9.075×10^{-3}	9.075×10^{-3}	9.026×10^{-3}
	y	6.000×10^{-3}	6.000×10^{-3}	5.975×10^{-3}
	u	2.863×10^{-2}	2.863×10^{-2}	2.843×10^{-2}
	v	1.892×10^{-2}	1.892×10^{-2}	1.882×10^{-2}
	時間 (秒)	143	249	263
反復回数 11 回以 下, $t = 0.739192$, \bar{C}_k は 9 次の公式 で計算	x	9.075×10^{-3}	9.075×10^{-3}	9.026×10^{-3}
	y	6.000×10^{-3}	6.000×10^{-3}	5.975×10^{-3}
	u	2.863×10^{-2}	2.863×10^{-2}	2.843×10^{-2}
	v	1.892×10^{-2}	1.892×10^{-2}	1.882×10^{-2}
	時間 (秒)	138	234	242
反復回数 6 回以下, $t = 0.739192$, \bar{C}_k は 9 次の公式で計 算	x	9.086×10^{-3}	9.086×10^{-3}	9.026×10^{-3}
	y	6.006×10^{-3}	6.006×10^{-3}	5.975×10^{-3}
	u	2.866×10^{-2}	2.866×10^{-2}	2.843×10^{-2}
	v	1.895×10^{-2}	1.895×10^{-2}	1.882×10^{-2}
	時間 (秒)	137	221	234
反復回数 1 回以下, $t = 0.70605$ (Point Moore 法 は $t = 0.730525$), \bar{C}_k は 9 次の公式 で計算	x	5.609×10^{-2}	5.609×10^{-2}	1.386×10^{-2}
	y	3.505×10^{-2}	3.505×10^{-2}	9.155×10^{-3}
	u	2.144×10^{-1}	2.144×10^{-1}	4.483×10^{-2}
	v	1.378×10^{-1}	1.378×10^{-1}	2.962×10^{-2}
	時間 (秒)	117	195	212

- 表 4からは, 反復改良の計算時間自体は, 式 (18) という厳しい停止条件を課すと, 2 割強の時間がかかることが分かる. ただし, 反復の上限を 6 回と限っても, 最終的な保証区間幅はほとんど変化しないことから, 式 (18) という条件は実際無意味に近い (逆に 2 割しか増えていないという見方もできる). ただし, もともと一次収束であるから, 適切な停止条件の設定は難しいということも事実である.
- 表 5から, \bar{C}_k の保証区間計算の次数を下げると, Moore 法, Point Moore 法の計算時間は減るが, それでも Lohner 法ほど速くはならないことがわかる. 実際, \bar{C}_k の計算を 4 次のべき級数展開で計算すると, Point Moore 法は, Lohner 法よりも狭い保証区間を与えるが, 計算時間は 1.5 倍である. これは, $C(t)$ の囲い込みが $y(t)$ の囲い込み以上に困難であることが原因ではなからうか. 実際, 初期区間から $C(t)$ の最初の包含区間を見出すまでの試行回数は $y(t)$ よりも多い. 表 2について, 188 ステップ中, 式 (15) を満たす包含区間を見出すまでの試行回数は, $y(t)$ については最小 0 回, 最大 37 回, 1 ステップあたり平均 5.9 回であったのに対し, $C(t)$ については最小 4 回, 最大 28 回, 平均 12 回の再試行を行なっている. これらの回数は初期区間の設定法にも依存するので一概に比較検討はできないが, 成分数が $y(t)$ の 4 に対して, $C(t)$ は 16 であることも, Moore 法や Point Moore 法にとって時間的に不利に働いているように見える.
- 丸め誤差を考慮する場合には, 原理的には, 単純な区間演算の代わりに, 両端点を浮動小数点数に限定した区間演算 — 機械区間演算を実行すればよい.

この報告では, 今までになされている精度保証の算法を再考し, Lohner 法と Moore 法の導出を行なうとともに, Point Moore 法を考え得ることを指摘した.

表 5. [数値実験 4] \overline{C}_k の計算のための積分公式の次数を変更 (近似公式は φ_8 , $t = 0.70605$ を越えた時点での区間幅)

	解法	Lohner 法	Moore 法	Point Moore 法
反復回数制限なし, $t = 0.739192$, \overline{C}_k は 9 次の公式で計算	x	9.075×10^{-3}	9.075×10^{-3}	9.026×10^{-3}
	y	6.000×10^{-3}	6.000×10^{-3}	5.975×10^{-3}
	u	2.863×10^{-2}	2.863×10^{-2}	2.843×10^{-2}
	v	1.892×10^{-2}	1.892×10^{-2}	1.882×10^{-2}
	時間 (秒)	142	249	263
反復回数制限なし, $t = 0.739192$, \overline{C}_k は 4 次の公式で計算	x	—	9.079×10^{-3}	9.030×10^{-3}
	y	—	6.002×10^{-3}	5.977×10^{-3}
	u	—	2.864×10^{-2}	2.845×10^{-2}
	v	—	1.893×10^{-2}	1.882×10^{-2}
	時間 (秒)	—	209	214
反復回数制限なし, $t = 0.739192$, \overline{C}_k は 2 次の公式で計算	x	—	1.031×10^{-2}	1.026×10^{-2}
	y	—	6.836×10^{-3}	6.807×10^{-3}
	u	—	3.253×10^{-2}	3.230×10^{-2}
	v	—	2.158×10^{-2}	2.146×10^{-2}
	時間 (秒)	—	192	199
反復回数制限なし, $t = 0.723079$, \overline{C}_k は 1 次の公式で計算	x	—	3.139×10^{-2}	3.103×10^{-2}
	y	—	2.003×10^{-2}	1.984×10^{-2}
	u	—	1.116×10^{-1}	1.099×10^{-1}
	v	—	7.524×10^{-2}	7.422×10^{-2}
	時間 (秒)	—	181	192

実用的には $y(t)$ はベクトルであるので、矩形区間による包含の効果 (wrapping effect) などの影響も大きいと考えられる。同じ近似公式を用いる限り、僅かだが Point Moore 法が最狭の区間を与えることを確認した。しかし、計算時間の点からは、Lohner 法が最良であった。一旦離散化したならば、その離散化された系を主体に考えるべきだという意見のひとつの証拠とも考えられる [11, 12, 13]。今後、数値実験を重ね、理論的な解析と実用的な計算時間との関係を明らかにしていくことが課題である。

参考文献

- [1] G. Alefeld and J. Herzberger: *Introduction to Interval Computations*. Academic Press, New York, 1983.
- [2] G. Bohlender, C. U. J. W. Gudenberg, and L. B. Rall: *PASCAL-SC — A Computer Language for Scientific Computation*. Academic Press, Orlando, 1987.
- [3] A. Griewank and G. F. Corliss (eds.): *Automatic Differentiation of Algorithms: Theory, Implementation, and Application*. SIAM, 1991.
- [4] P. Henrici: *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons, Inc., 1962. (邦訳: 清水留三郎, 小林光夫訳: 計算機による常微分方程式の解法 I, II. サイエンス社, 1973.)

- [5] M. Iri and J. Amemiya: *Experimental studies on guaranteed-accuracy solutions of the initial-value problem of nonlinear ordinary differential equations*. In T. Mitsui and Y. Shinohara (eds.): Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations and its Applications, World Scientific, 1995, pp. 195–212.
- [6] M. Kashiwagi: *Numerical validation for ordinary differential equations using power series arithmetic*. In T. Mitsui and Y. Shinohara (eds.): Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations and its Applications, World Scientific, 1995, pp. 213–218.
- [7] R. J. Lohner: *Enclosing the solutions of ordinary initial and boundary value problems*. In E. Kaucher, U. Kulisch, and C. Ullrich (eds.): Computer Arithmetic, Scientific Computation and Programming Languages, Wiley-Teubner Series in Computer Science, Stuttgart, 1987, pp. 255–286.
- [8] R. E. Moore: *Automatic analysis and control of error in digital computation based on the use of interval numbers*. In L. B. Rall (ed.): Error in Digital Computation, Vol. 1, John Wiley & Sons, 1965, pp. 61–131.
- [9] R. E. Moore: *Automatic local coordinate transformations to reduce the growth of error bounds in interval computation of solutions of ordinary differential equations*. In L. B. Rall (ed.): Error in Digital Computation, Vol. 2, John Wiley & Sons, 1965, pp. 103–140.
- [10] 雨宮治郎: 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.
- [11] 伊理正夫: 高速自動微分法の立場から見た線形系の感度解析および随伴系の役割の再考. 第22回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp. 102–106 (平成5年6月9～11日 於 蔵王ハイツ).
- [12] 伊理正夫: 非線形素子を含むシステムの感度解析. 第23回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp. 47–49 (平成6年6月8～10日 於 仙台 ホテルクレセント).
- [13] 伊理正夫: 随伴系の概念への数値計算論的アプローチ. 第24回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp. 36–40 (平成7年6月14～16日 於 伊豆熱川ハイツ).
- [14] 伊理正夫, 久保田光一: 高速自動微分法 (1), (2). 応用数理, Vol. 1 (1991), pp. 17–35, 153–163.