

DE-Sinc 法に基づく微分代数方程式の数値解法

森 正武, アヒニヤズ ヌルメメット, マイヌル メメット
東京電機大学理工学部

Numerical Solution of Differential-Algebraic Equations Based on the DE-Sinc Method

Masatake Mori, Ahniyaz Nurmuhhammad, Mayinur Muhammad
Tokyo Denki University

Abstract A method of global numerical solution of differential-algebraic equations based on the DE transformation is proposed. The system of differential-algebraic equations is converted into a system of Volterra integral equations and it is solved by using the double exponential formula for indefinite integration proposed by Muhammad and Mori followed by the Sinc-collocation method. In every example a numerical solution with very high accuracy is obtained and an exponential convergence rate $\exp(-cN/\log N)$, $c > 0$ in the error is observed, where N is a parameter representing the number of the Sinc collocation points.

1 はじめに

解析関数の定積分

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

を計算するとき, これを $x = \psi(t)$ によって無限区間の積分に変換し, それに等間隔刻みの台形公式を適用する. そのとき, 変換後の被積分関数 $f(\psi(t))\psi'(t)$ が二重指数的に減衰するような変数変換

$$x = \psi(t) = \frac{b-a}{2} \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right) + \frac{b+a}{2}, \quad (1.1)$$

$$\psi'(t) = \frac{\frac{\pi(b-a)}{4} \cosh t}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right)} \quad (1.2)$$

を選ぶと, 次のような最適な数値積分公式が導かれる.

$$I = \int_a^b f(x) dx = h \sum_{k=-N}^N f(\psi(kh))\psi'(kh) + O\left(\exp\left(-\frac{2\pi dN}{\log(2\pi dN/\alpha)}\right)\right), \quad h = \frac{1}{N} \log(2\pi dN/\alpha) \quad (1.3)$$

ただし, d は関数 $f(z)$ が解析的である帯状領域の帯幅の半分で, α は変換後の被積分関数の無限遠点の近傍での減衰により定められるパラメータである. この公式が, 1974 年

に Takahasi-Mori [6] によって提案された二重指数公式 (略して DE 公式) である。その後、この公式は量子力学や流体力学から土木工学や金融工学にいたるまで広い分野で利用されるようになっていく。DE 公式は端点の特異性に強いだけでなく、公式の分点を増やすとき真の積分値への収束はきわめて速く、また任意多倍長精度のプログラムを作成することが簡単であるため、現在では真の意味で汎用数値積分公式に最も近い公式であるという評価も得ており、Maple や Mathematica など著名な数学ソフトウェアにも採り入れられている。

一方、Muhammad-Mori は DE 公式を導いた二重指数変換を不定積分

$$I(s) = \int_a^s f(x)dx \quad (1.4)$$

に適用し、次の二重指数不定積分公式を導いた [3]。

$$\begin{aligned} \int_a^s f(\xi)d\xi &= h \sum_{j=-N}^N f(\psi(jh))\psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si} \left(\pi \frac{\psi^{-1}(s)}{h} - j\pi \right) \right) \\ &+ O \left(\exp \left(-\frac{\pi dN}{\log(\pi dN/\alpha)} \right) \right), \quad h = \frac{1}{N} \log(\pi dN/\alpha). \end{aligned} \quad (1.5)$$

ただし、Si は次のように定義される積分正弦関数である。

$$\text{Si}(t) = \int_0^t \frac{\sin \tau}{\tau} d\tau. \quad (1.6)$$

公式 (1.5) は、その誤差項に見られるように、ひじょうに高い精度の結果を与える。

Muhammad et al. は、この不定積分公式を用いて Volterra 型第 2 種積分方程式

$$u(x) - \lambda \int_a^x K(x, \xi)u(\xi)d\xi = g(x), \quad a \leq x \leq b \quad (1.7)$$

の kernel 積分を近似し、Sinc 点 $x_k = \psi(kh)$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$ を collocation 点とする Sinc collocation 法を適用すれば精度の高い数値解を得ることができることを明らかにした。そして、真の解 $u(x)$ と近似解 $u_N(x)$ との誤差は

$$\sup_{x \in (a,b)} |u(x) - u_N(x)| \leq (C\sqrt{N}\mu_N + C') \frac{\log N}{N} \exp \left(-\frac{\pi dN}{\log(\pi dN/\alpha)} \right) \quad (1.8)$$

程度であることを示した [4]。ここで、 N は片側求解点数で、 μ_N は $u(x)$ の近似値 u_k , $k = -N, \dots, N$ を求めるための Sinc collocation 法で出てくる線形連立方程式の係数行列の逆行列のノルムである。

さらに Nurm Muhammad et al. は、常微分方程式の初期値問題を同値な Volterra 型第 2 種積分方程式に変形し、これを二重指数不定積分公式を用いて解くことにより高精度の数値解が得られ、その数値解の誤差は $\exp(-cN/\log N)$, $c > 0$ 程度で減衰することを明らかにした [5]。またとくに、この方法は stiff な初期値問題に対しても精度の高い計算結果を与えることを示した。

2 直接積分する方法

本研究の目的は、微分代数方程式

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = f(x, u_1, u_2), & u(a) = u_0, \\ 0 = g(x, u_1, u_2) \end{cases} \quad (2.1)$$

の高精度の数値解法を導くことにある。微分代数方程式 (2.1) を解く場合、数値解法は困難に直面することが多く、陰的な公式 (BDF 等) が必然的に要求されるが [1, 2], ここでわれわれは DE 変換に基づく Sinc-collocation 法を用いる方法を提案する。すなわち、微分代数方程式を Volterra 型第 2 種積分方程式に変形し、Muhammad et al. が提案した二重指数変換に基づく方法 [5] を適用して数値解を求めることを試みる。ここでは、一つの微分方程式と一つの代数方程式のみを含む (2.1) のような問題を議論の対象とするが、本研究で提案する方法は、例 2 のような微分方程式と代数方程式を任意数含む問題に対しても同様に適用することができる。

微分代数方程式 (2.1) を Volterra 型種積分方程式に書き直す一つの方法として、微分代数方程式 (2.1) を直接積分して

$$\begin{cases} u_1(x) = \int_a^x f(\xi, u_1(\xi), u_2(\xi)) d\xi + u_{10} \\ 0 = \int_a^x g(\xi, u_1(\xi), u_2(\xi)) d\xi \end{cases} \quad (2.2)$$

の形に直し、この連立積分方程式に二重指数不定積分公式 [3] を適用して数値解を求めることが考えられる。この積分方程式 (2.2) に現れる積分を二重指数変換に基づく不定積分公式を適用して近似すると

$$\begin{cases} u_1(x) \approx h \sum_{j=-N}^N f(\xi_j, u_1(\xi_j), u_2(\xi_j)) \psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si} \left(\pi \frac{\psi^{-1}(x)}{h} - j\pi \right) \right) + u_{10}, \\ 0 \approx h \sum_{j=-N}^N g(\xi_j, u_1(\xi_j), u_2(\xi_j)) \psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si} \left(\pi \frac{\psi^{-1}(x)}{h} - j\pi \right) \right), \\ \xi_j = \psi(jh) = \frac{(b-a)}{2} \tanh \left(\frac{\pi}{2} \sinh jh \right) + \frac{(b+a)}{2}, \quad j = -N, \dots, N. \end{cases} \quad (2.3)$$

となる。さらに (2.3) において、Sinc 点 $x_k = \psi(kh)$, $k = -N, \dots, N$ を collocation 点とする collocation 法を適用すると $4N + 2$ 個の未知数 $\{u_{1k}\}$, $\{u_{2k}\}$, $k = -N, \dots, N$ に対する次の連立方程式を得る：

$$\begin{cases} u_{1k} - h \sum_{j=-N}^N f(\xi_j, u_{1j}, u_{2j}) \psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si}(\pi(k-j)) \right) = u_{10} \\ h \sum_{j=-N}^N g(\xi_j, u_{1j}, u_{2j}) \psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si}(\pi(k-j)) \right) = 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

ただし, u_{1k}, u_{2k} は $u_1(x), u_2(x)$ の collocation 点 $x_k = \psi(kh)$ での近似値である.

この方法の手順に従って次の例の数値解を求めてみる.

例 1

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = u_1(x) + u_2(x), \\ 0 = u_1(x) - (1+x)u_2(x), \quad 0 < x < 1. \end{cases} \quad (2.5)$$

この方程式の真の解は $u_1(x) = (1+x)e^x$, $u_2(x) = e^x$ である. 片側求解点数 N を定め, Sinc 点 $x = \psi(kh)$, $k = -N, \dots, N$ における誤差を計算した. $N = 2, 4, 8, 16, 32, 64, 112$ のときの最大誤差を図 1 に示す. 図 1 の u_1 は $u_1(x)$ の誤差の減衰を示し, u_2 は $u_2(x)$ の誤差の挙動を示す. 図 1 に見るように, $u_1(x)$ に対しては正確な数値解が得られたのに対して, N の増大に伴い $u_2(x)$ における正確な数値解が得られていない. これは N の増大とともに μ_N (collocation 法によって現れる行列の逆のノルム) が急激に増大することによる. 一方, この方法で得られた $u_1(x)$ の数値解を (2.5) の 2 番目の代数方程式に代入し, その代数方程式から $u_2(x)$ を解くと, $u_2(x)$ に対してひじょうに良い数値解が得られた. しかし, 例 1 以外の問題に対してはこの方法は有効ではなかった.

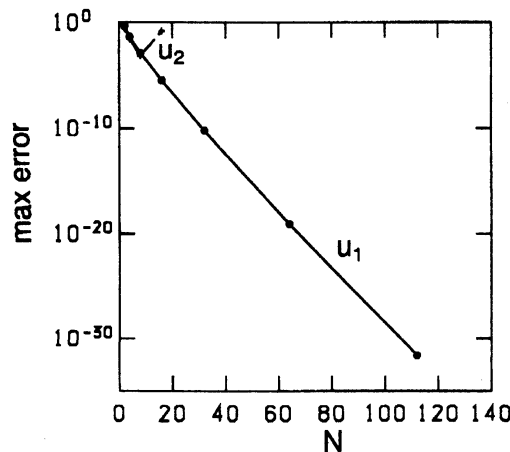


図 1: 例 1 における (2.2) による最大誤差

3 微分方程式を経由する方法

一般に, 微分代数方程式 (2.1) において $\partial g / \partial u_2$ に特異性がなければ, (2.1) の代数方程式を 1 回微分し, そこに現れる du_1/dx の代わりに $f(x, u_1, u_2)$ を代入すれば, (2.1) を次

の連立常微分方程式の初期値問題に書き直すことができる.

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = f(x, u_1(x), u_2(x)), & u_1(a) = u_{10}, \\ \frac{du_2}{dx} = -\{g_x(x, u_1, u_2) + g_{u_1}(x, u_1, u_2)f(x, u_1, u_2)\}/g_{u_2}, & u_2(a) = u_{20}. \end{cases} \quad (3.1)$$

この方程式での $u_2(x)$ の初期値 $u_2(a) = u_{20}$ は, 初期値 $u_1(a) = u_{10}$ を用いて (2.1) の代数方程式から得られる.

ここでは, 微分代数方程式 (2.1) の代数方程式を 1 回微分することで微分代数方程式を陽な形をもつ連立常微分方程式 (3.1) に直すことができた. そこで, 連立常微分方程式 (3.1) のように各未知関数における微分に対して陽的である方程式を陽的常微分方程式と呼ぶことにする. 一般に, すべての未知関数に関して陽的常微分方程式を導出するために必要となる微分の回数を微分代数方程式の index と呼ぶ. したがって, 陽的常微分方程式自身の index は 0 である. また, 解の近傍で $\partial g / \partial u_2 \neq 0$ であるならば, 微分代数方程式 (2.1) の index は 1 である. 代数方程式に u_2 が含まれない微分代数方程式

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = f(x, u_1, u_2), & u_1(a) = u_{10}, \\ 0 = g(x, u_1) \end{cases} \quad (3.2)$$

の場合には, (3.2) の代数方程式を x に対して 1 回微分すれば

$$0 = g_{u_1}(x, u_1)f(x, u_1, u_2). \quad (3.3)$$

を得る. 微分代数方程式 (3.2) の解の近傍で $g_{u_1}f_{u_2} \neq 0$ であれば, (3.2) の微分方程式と (3.3) をあわせて次の連立方程式を構成することができる.

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = f(x, u_1, u_2), & u_1(a) = u_{10}, \\ 0 = g_{u_1}(x, u_1)f(x, u_1, u_2). \end{cases} \quad (3.4)$$

ここで, (3.4) の代数方程式をもう 1 回微分すれば, u_2 に対する微分方程式が得られ, (3.1) と同じく陽的な微分方程式の初期値問題が導かれる. この場合, 初期値が (3.2) の代数方程式 $0 = g(a, u_{10})$ と新しく構成された (3.4) の代数方程式 $0 = g_{u_1}(a, u_{10})f(a, u_{10}, u_{20})$ を同時に満たせば, この場合に限って微分代数方程式 (3.2) が一意的解をもつ. したがって, その場合微分代数方程式 (3.2) の index は 2 である.

さて, 常微分方程式の初期値問題 (3.1) に戻ると, この初期値問題は次の Volterra 型第 2 種連立積分方程式と同値である.

$$\begin{cases} u_1(x) = \int_a^x f(\xi, u_1(\xi), u_2(\xi))d\xi + u_{10}, \\ u_2(x) = -\int_a^x \{g_x(\xi, u_1(\xi), u_2(\xi)) + g_{u_1}(\xi, u_1(\xi), u_2(\xi))f(\xi, u_1(\xi), u_2(\xi))\}/g_{u_2}d\xi + u_{20}. \end{cases} \quad (3.5)$$

この積分方程式の積分の部分に二重指数不定積分公式 [3] を適用してこれを次のように近似する：

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1(x) \approx h \sum_{j=-N}^N f(\xi_j, u_1(\xi_j), u_2(\xi_j)) \psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si} \left(\pi \frac{\psi^{-1}(x)}{h} - j\pi \right) \right) + u_{10}, \\ u_2(x) \approx -h \sum_{j=-N}^N \left\{ \frac{g_x(\xi_j, u_1(\xi_j), u_2(\xi_j)) + g_{u_1}(\xi_j, u_1(\xi_j), u_2(\xi_j)) f(\xi_j, u_1(\xi_j), u_2(\xi_j))}{g_{u_2}} \right\} \\ \quad \times \psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si} \left(\pi \frac{\psi^{-1}(x)}{h} - j\pi \right) \right) + u_{20}, \\ \xi_j = \psi(jh) = \frac{(b-a)}{2} \tanh \left(\frac{\pi}{2} \sinh jh \right) + \frac{(b+a)}{2}, \quad j = -N, \dots, N. \end{array} \right. \quad (3.6)$$

この近似式 (3.6) において Sinc 点 $x_k = \psi(kh)$, $k = -N, \dots, N$ を collocation 点とする Sinc-collocation 法を適用すると, $4N+2$ 個の未知数 u_{ij} , $i = 1, 2$, $j = -N, -N+1, \dots, N$ に関する次の連立代数方程式を得る.

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{1k} - h \sum_{j=-N}^N f(\xi_j, u_{1j}, u_{2j}) \psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si}(\pi(k-j)) \right) + u_{10}, \\ u_{2k} - h \sum_{j=-N}^N \left\{ \frac{g_x(\xi_j, u_{1j}, u_{2j}) + g_{u_1}(\xi_j, u_{1j}, u_{2j}) f(\xi_j, u_{1j}, u_{2j})}{g_{u_2}} \right\} \\ \quad \times \psi'(jh) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{Si}(\pi(k-j)) \right) + u_{20}, \\ \xi_j = \psi(jh) = \frac{(b-a)}{2} \tanh \left(\frac{\pi}{2} \sinh jh \right) + \frac{(b+a)}{2}, \quad j = -N, \dots, N. \end{array} \right. \quad (3.7)$$

ただし, u_{1k} と u_{2k} は未知関数 $u_1(x)$ と $u_2(x)$ それぞれの Sinc 点 $x_k = \psi(kh)$ における近似値を表す. 与えられた微分代数方程式 (2.1) は線形の場合には連立方程式 (3.7) を解くために係数行列の逆行列のノルム μ_N を監視しながら Gauss 法などを適用することができるが, 微分代数方程式 (2.1) が非線形の場合には Newton 法などを適用して連立方程式 (3.7) を解く必要がある. 微分代数方程式 (2.1) の真の解 $u_i(x)$, $i = 1, 2$ の Sinc 点 $x_k = \psi(kh)$ での近似値であるという意味で連立方程式 (3.7) の解 u_{ij} , $i = 1, 2$, $j = -N, -N+1, \dots, N$ は重要な役割を果たしている. また, (3.6) の右辺の $u_1(\xi_j)$, $u_2(\xi_j)$ に u_{1j} , u_{2j} を代入すれば微分代数方程式 (2.1) の真の解 $u_i(x)$, $i = 1, 2$ の任意の点 x での近似値を得ることができる.

4 数値例

微分代数方程式を常微分方程式経由で Volterra 型積分方程式に書き直し, それに DE 変換に基づく Sinc-collocation 法を適用する前節で述べた方法に従って, いくつかの微分

代数方程式の数値解を求めてみる. 刻み幅 h と片側求解点数 N はパラメータ d と α に依存するため, 実際の数値計算を行う際にはこれらのパラメータの値を把握することが望ましい. 高精度の数値解を得るためにはとくに積分方程式 (3.5) の積分核の解析的性質を慎重に調べる必要がある. もしも与えられた微分代数方程式に端点以外に特異性がなければ $d = \pi/2$ とすることができる. しかし, これらのパラメータの正確な値を事前に知ることが困難な場合も多く, そのような場合には実際の問題の性質なども考慮に入れた上で適当な推測値を使わざるをえないであろう.

誤差が N の増大に従って $O(\exp(-CN/\log N))$ のように減衰すること明確に示すために, 全ての例において実際の数値計算は Pentium IV パソコン環境において Fujitsu Fortran Compiler を使って 4 倍精度で行った.

例 1

まず, 前出の例 1 を前節で述べた微分方程式を経由する手順に従って再度解いてみる. 得られた結果のうち u_2 の誤差の挙動を図 2 に示す. この図に見るように u_2 に対しても非常に精度の高い数値解が得られている. u_1 の誤差は u_2 とほとんど同じであるため表示は省略した.

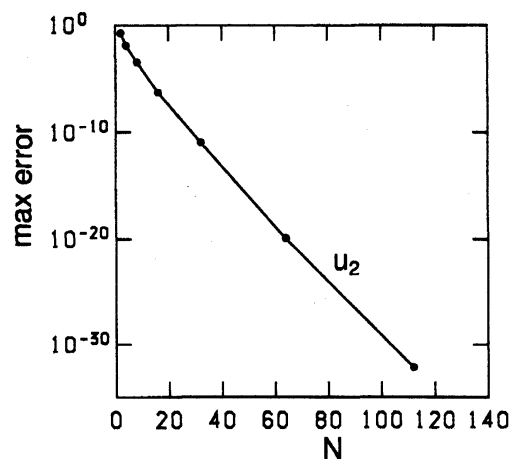


図 2: 例 1 における (3.5) による u_2 の最大誤差

次の例 2 は未知数関数の数が 3, index が 2 の線形微分代数方程式である.

例 2 (Ascher and Petzold[1])

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = \left(\beta - \frac{1}{2-x} \right) u_1(x) + (2-x)\beta u_3(x) + \frac{3-x}{2-x} e^x, \\ \frac{du_2}{dx} = \frac{1-\beta}{2-x} u_1(x) - u_2(x) + (\beta-1)u_3(x) + 2e^x, \\ 0 = (x+2)u_1(x) + (x^2-4)u_2(x) - (x^2+x-2)e^x, \quad 0 < x < 1. \end{cases} \quad (4.1)$$

β はパラメータである. この方程式は初期値 $u_1(0) = u_2(0) = 1$ に対して次の真の解を

もつ.

$$u_1(x) = u_2(x) = e^x, \quad u_3(x) = -\frac{e^x}{2-x}$$

この方程式で $\beta = 10$ として, 前節で述べた手順で Sinc 点 $\xi = x_k = \psi(kh)$ での数値解 u_{1k}, u_{2k}, u_{3k} を求め, その数値解の各 Sinc 点 $\xi = x_k = \psi(kh)$ における最大誤差

$$\max_{-N \leq k \leq N} |u_1(x_k) - u_{1k}|, \quad \max_{-N \leq k \leq N} |u_2(x_k) - u_{2k}|, \quad \max_{-N \leq k \leq N} |u_3(x_k) - u_{3k}|$$

を調べた. $d = \pi/2, \alpha = \pi/2$ として片側求解点数 N を 16, 32, 64, 128 ととり, 対応する刻み幅 h を $h = \frac{1}{N} \log(\pi d N / \alpha)$ のように定めた. 二重指数変換として

$$x = \psi(t) = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right) + \frac{1}{2}$$

を適用した. 計算結果の u_{3k} の誤差 $\max_{-N \leq k \leq N} |u_3(x_k) - u_{3k}|$ の挙動を図 3 に示す. 横軸は片側求解点数 N の値で, 縦軸は Sinc 点における u_{3k} の誤差の最大値を示す. u_{1k} と u_{2k} の誤差の最大値も u_{3k} の誤差の最大値とほとんど同じである.

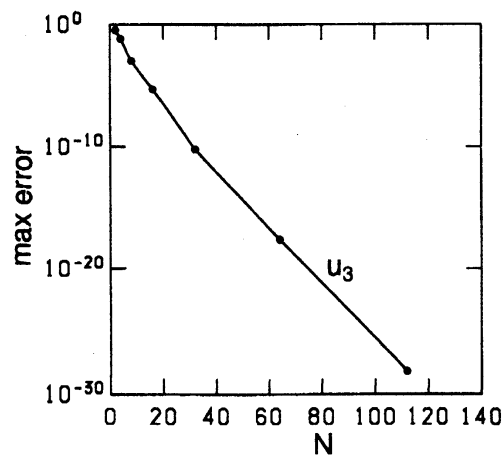


図 3: 例 2 における u_3 の最大誤差

次の例 3 は非線形問題である. この計算結果から, ここで提案した方法は線形微分代数方程式だけではなく非線形微分代数方程式に対しても高精度の数値解を与えることがわかる.

例 3

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = -u_1^2(x) + 2u_2^2(x), & u(0) = 1 \\ 0 = -u_1(x) + (1+x)u_2(x), & 0 < x < 5. \end{cases} \quad (4.2)$$

この問題は index が 1 の非線形微分代数方程式であり，代数方程式を 1 回微分することで次の非線形連立常微分方程式の初期値問題が得られる．

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = -u_1^2(x) + 2u_2^2(x), & u(0) = 1 \\ \frac{du_2}{dx} = -\frac{1}{1+x}u_1^2(x) + \frac{1}{1+x}(2u_2^2(x) - u_2(x)), & u_2(0) = 1 \end{cases} \quad (4.3)$$

非線形微分代数方程式 (4.2) は次の真の解をもつ．

$$u_1(x) = \frac{1+x}{1+x^2}, \quad u_2(x) = \frac{1}{1+x^2}$$

例 2 と同様これを連立積方程式に変形し，Sinc 点 $\xi = \psi(kh)$ での数値解 u_{1k}, u_{2k} を Newton 法（初期値は $u_1(x), u_2(x)$ とともに定数 = 0.1）で求め，その数値解の各 Sinc 点 $\xi = \psi(kh)$ における最大誤差を調べた．計算結果の u_{2k} の誤差の挙動を図 4 に示す．添えた数字は Newton 法の反復回数である． u_{1k} の最大誤差もほとんど同じである．

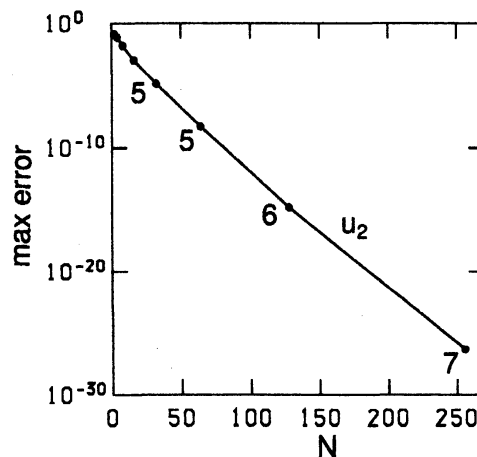


図 4: 例 3 における u_2 の最大誤差

以上の例から，ここで提案された二重指数変換に基づく数値解法は微分代数方程式に対して精度の高い数値解を与え，計算誤差の減衰はほぼ $\exp(-cN/\log N)$, $c > 0$ に沿って 0 に収束しているのを見てとることができる．

参考文献

- [1] U.M. Ascher, L.R. Petzold, Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations, SIAM, Philadelphia, 1998.
- [2] K. E. Brenan, S. L. Campbell, L. R. Petzold, Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations, North-Holland, 1989.

- [3] M. Muhammad, M. Mori, Double exponential formulas for numerical indefinite integration, *J. Comput. Appl. Math.* 161 (2003) 431–448.
- [4] M. Muhammad, A. Nurmuhhammad, M. Mori, M. Sugihara, Numerical solution of integral equations by means of the Sinc collocation method based on the double exponential transformation, *J. Comput. Appl. Math.* 177 (2005) 269–286.
- [5] A. Nurmuhhammad, M. Muhammad, M. Mori, Numerical Solution of Initial Value Problems Based on the Double Exponential Transformation, *Publ. RIMS, Kyoto Univ.* 41 (2005) 937–948.
- [6] H. Takahasi, M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, *Publ. RIMS Kyoto Univ.* 9 (1974) 721–741.