

予測子-修正子法および常微分方程式

の数値解法における二三の経験

九州大学工学部 高 田 勝

常微分方程式の初期値問題の数値解法のうち、多点型の公式を用いる予測子-修正子法について述べ、また非線型常微分方程式の境界値問題等、筆者の二三の経験について述べたい。なお、工学者としての大抵みの話であることをお辞わりしておく。また、ここでとりあげる数値解法は、積分区間を小さく区切つて、各格子点 (mesh point) での値を求める差分法に限る。これが最もよく電子計算機に使われるからである。(参考書は文献 1, 2)。

1. 数値解に入る前に、物理的、工学的見地からの order estimation が肝要、その他以下に注意。
 - (1) 問題の簡単化。本質を失なわぬ範囲でなるべく簡易化し、無次元化してパラメータの数を少なくする。
 - (2) 解析解がないか。特異点がないか(あるときは、その特異性と同じ性質をもつ解析解を差引いたり、原点移動などで、特異性を取除かぬと数値解の誤差は極めて大となる)。特異性がとれぬときは、その近傍を級数展開などで求め、なるべく遠い所から数値計算に入る。
 - (3) 要求精度、導関数計算の複雑さできざみ幅や解法の選択を行なう。
2. 問題の型、解法の種類、必要なすべての境界条件が一点で与えられる初期値問題と、二点以上で与えられる境界値問題(特別の場合固有値問題となることもある)とに分けられる。

解法の大まかな分類は次の通り。

- (1) 解析的方法, Taylor 級数展開, Picard の方法など。

(2) 差分法, 積分区間を小さく区切つて格子点 (mesh point) での値を求める。機械計算に最もよく使われる。Euler法, Runge-Kutta法などの一点法 (one point method 点傾斜法 point slope method ともいう) と, 予測子修正子法で代表される多点法とがある。いずれも初期値問題に適する。なお境界値問題に差分法を用いるときは, 各格子点での値を変数としてそれについての連立方程式として解くことが多い。

(3) 近似解法, Galerkin 法, Ritz法, モーメント法など。境界値問題に適するが, まだあまり広く電子計算機には用いられていない。

ここでは主に(2)についてのべる。

3. 初期値問題の標準型, 一階 m 元連立常微分方程式は次の形をとる:

$$\frac{dy^i}{dx} = f^i(y^1, y^2, \dots, y^m, x) \quad i=1, 2, \dots, m \quad (1)$$

これを $x_0 = a \leq x \leq b = x_N$ の間積分する。すべての条件が, a または b で与えられている初期値問題を以下に考える。高階のものは, 各導函数をすべて新しい変数におきかえれば(1)の形になる。

また多元連立のものは一元のものの繰返しになるから, 結局初期値問題は次の形のものについてのべておけばよい。

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (2)$$

4. 予測子-修正子法 (Predictor-Corrector method)

x_n 点より前のいくつかの点での値 (前歴) を用いた多点型の外挿公式で x_{n+1} 点での値を予測し, 得られた値 y_{n+1} を用いて導函数を出し, これをふくむ多点型の内挿公式によつて修正する。予測値と修正値とが所望のケタ数一致しなければ修正をくりかえす。多点型公式は次の形をとる。

$$\text{外挿型: } y_{n+1} = \sum_{j=J}^{J_1} \alpha_j y_{n-j} + h \sum_{k=K}^{K_1} \beta_k f_{n-k} \quad (3)$$

$$\text{内挿型: } y_{n+1} = \sum_{j=J}^{J_1} \alpha_j y_{n-j} + h \sum_{k=0}^{K_1} \beta_k f_{n+1-k} \quad (4)$$

ここで $J_1 \geq J \geq 0$, $K_1 \geq K \geq 0$. (3)を予測子 (Predictor, 以下 P と略), (4)を修正子 (Corrector, 以下 C と略) という。これらの係数の値若干を表 2 および表 3 に示す。(3), (4)はまた一般的に次の形で示される。:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j} \quad (5)$$

つまり $y_n \sim y_{n+k}$ の値を適宜 (予測子なら $\beta_k=0$) 用いて y_{n+k} の値を出す形になる。あるいは h を一格子点だけ進める演算子として,

$$\left. \begin{aligned} \rho(\zeta) &= \alpha_k \zeta^k + \alpha_{k-1} \zeta^{k-1} + \dots + \alpha_1 \zeta + \alpha_0, \\ \sigma(\zeta) &= \beta_k \zeta^k + \beta_{k-1} \zeta^{k-1} + \dots + \beta_1 \zeta + \beta_0 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

なる演算子を考えると (5) は

$$\rho(\zeta) y_n = h \sigma(\zeta) f_n \quad (7)$$

これが微分方程式 (2) の近似式であるためには

$$\rho(1)=0, \quad \rho'(1)=\sigma(1) \neq 0 \quad (8)$$

が成立しなければならぬ (後述の Consistency の条件), (3)/(4) の係数は先づこれらの条件を満たした上に, x_n 点のまわりに夫々の両辺を Taylor 展開したとき, なるべく h の高い次数まで一致するように定める必要がある。残った h の最初の次数がその公式の打ち切り誤差を代表する。これら打ち切り誤差も前述の表にある。

表 1 予測子公式 (3) の係数

公式番号	J_1	K_1	α_j	β_k					打ち切り誤差
			$j=0 \ 1 \ 2 \ 3$	$k=0$	1	2	3	4	
(P ₃ -1)	1	0	1	2					$(1/3) h^3 y^{(3)} \Delta$
(P ₄ -1)	2	1	1 1 1	2	2				$(1/3) h^4 y^{(4)}$
(P ₄ -2)	0	2	1	5/12	16/12	23/12			$(3/8) h^4 y^{(4)}$
(P ₄ -3)	1	1	4 5	4	2				$(1/6) h^4 y^{(4)}$
(P ₅ -1)	3	2		8/3	4/3	8/3			$(28/90) h^5 y^{(5)}$
(P ₅ -2)	3	2	1 1 1	3		3			$(3/10) h^5 y^{(5)}$
(P ₅ -3)	0	3	1	55/24	59/24	37/24	9/24		$(251/120) h^5 y^{(5)}$
(P ₆ -1)	2	3	7 17 9	17/3	1	5/3	1/3		$(1/9) h^6 y^{(6)}$
(P ₆ -2)	3	1	8 18 8 1	6	6				$(7/80) h^6 y^{(6)}$
(P ₆ -3)	2	2	18 9 10	9	18	3			$(1/20) h^6 y^{(6)}$
(P ₆ -4)	0	4	1	1901/720	2774/720	1616/720	1274/720	251/720	$(475/1440) h^6 y^{(6)}$

△中点則

表 2 修正子公式 (4) の係数

公式番号	J_1	K_1	α_j	β_k					打ち切り誤差
			$j=0 \ 1 \ 2$	$k=0$	1	2	3	4	
(C ₃ -1) *	0	1	1	1/2	1/2				$(1/12) h^3 y^{(3)}$
(C ₄ -1)	0	2	1	5/12	8/12	1/12			$(1/24) h^4 y^{(4)}$
× (C ₅ -1) **	1	2	1	1/3	4/3	1/3			$(1/90) h^5 y^{(5)}$
(C ₅ -2) △	2	2	9/8 1/8	3/8	6/8	3/8			$(1/40) h^5 y^{(5)}$
(C ₅ -3) △	0	3	1	9/24	19/24	5/24	1/24		$(19/240) h^5 y^{(5)}$
× (C ₆ -1)	2	3	1 1 1	1/3	1	1	1/3		$(1/90) h^6 y^{(6)}$
(C ₆ -2)	0	4	1	251/720	646/720	264/720	106/720	19/720	$(27/1440) h^6 y^{(6)}$
(C ₆ -3)	1	4	7/8 1/8	25/72	68/72	15/72	14/72	2/72	$(3/160) h^6 y^{(6)}$

* 梯形則, ** Simpson 則, △ Hamming の公式

△△ Modified Moulton 法, ×印のあるのは不安定要素をふくむもの

なお, このような多点型公式の係数を求めるには, 適当な格子点のまわりに (5) を展開し, 希望する精度の h の次数までの係数の間の方程式を作り, かつ係数の数を式の数を多くしておいて, 安定性等の余分の条件を附加して決める。³⁾あるいは別の方法による。⁴⁾

P, C の組合せとしては, h の同じ次数の打ち切り誤差をもつものをえらぶ (表 3)。

そのとき収束した修正値 $\tilde{y}_{n+1}$ と予測値 $\tilde{y}_{n+1}$ との差

$$C_0 = \tilde{y}_{n+1} - \tilde{y}_{n+1}$$

によつてその点における修正子の局所打ち切り誤差 T_0 を見積ることが出来るので、きざみ幅 h が大きい、小さいかを目安とする。(略、表 3 にその値を記入してある)。

表 3 予測子修正子法公式の組合わせ

組合わせ番号	使用公式		打ち切り誤差		備考
	予測子	修正子	次数	推定値	
(1)	(P ₃ -1)	(C ₃ -1)	$\bar{O}(h^3)$	(1/6) C ₀	梯形則 Milne Hamming Modified Moulton 法
(2)	(P ₄ -2)	(C ₄ -1)	$\bar{O}(h^4)$	(1/10) C ₀	
(3)	(P ₄ -3)	(C ₄ -1)	$\bar{O}(h^4)$	(1/18) C ₀	
(4)	(P ₅ -1)*	(C ₅ -1)	$\bar{O}(h^5)$	(1/60) C ₀	
(5)	(P ₅ -1)*	(C ₅ -2)	$\bar{O}(h^5)$	(0.075) C ₀	
(6)	(P ₅ -3)	(C ₅ -3)	$\bar{O}(h^5)$	(0.185) C ₀	
(7)	(P ₆ -4)	(C ₆ -2)	$\bar{O}(h^6)$	(0.054) C ₀	

* 予測子としては (P₅-2) の方がより簡単であるから (P₅-2) を用いた方がよいと考える。

代表的な例を 3 つあげておく。これらの手順図は図 1 に、少し詳しい流れ図は図 2 に示しておいた。

1) 梯形則 (表 3 の組合わせ番号 (1))

$$\left. \begin{aligned} P: y_{n+1} &= y_{n-1} + 2hf_n - T_p \\ C: y_{n+1} &= y_n + (h/2)(f_n + f_{n+1}) + T_c \\ T_p &= (1/3)h^3 y^{(3)}, \quad T_c = -(1/12)h^3 y^{(3)} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

工学的問題に向くたくましい方法である。y₁のみは Euler 法で予測する。

2) Milne 法 (組合わせ番号 (4))

$$\left. \begin{aligned} P: y_{n+1} &= y_{n-3} + (4/3)h(2f_{n-2} - f_{n-1} + 2f_n) + T_p, \\ C: y_{n+1} &= y_{n-1} + (h/3)(f_{n-1} + 4f_n - f_{n+1}) - T_c, \\ T_p &= (28/90)h^5 y^{(5)}, \quad T_c = -(1/90)h^5 y^{(5)}, \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

精度はよいが C が数値的不安定性を示すので平滑子の使用が必要。(これについては後述)

3) Modified Moulton 法 (組合せ番号(6))

$$\left. \begin{aligned} P^* y_{n+1} &= y_n + (h/24)(-9f_{n-3} + 37f_{n-2} - 59f_{n-1} + 55f_n) + T_P, \\ C^* y_{n+1} &= y_n + (h/24)(f_{n-2} - 5f_{n-1} + 19f_n + 9f_{n+1}) + T_C, \\ T_P &= (251/720)h^5 y^{(5)}, \quad T_C = -(19/240)h^5 y^{(5)}, \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

なお, 梯形則による数値計算例を表 4 に示す

図 1 予測子修正子型解法の流れ図

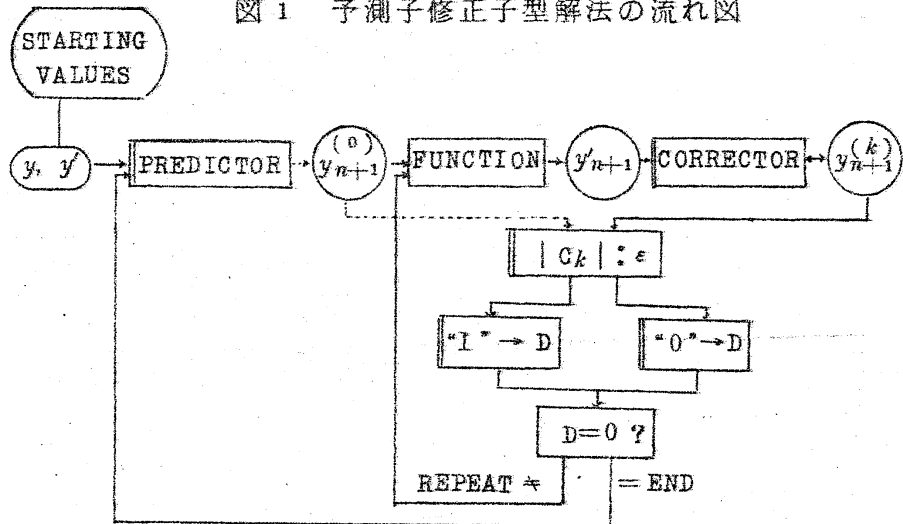
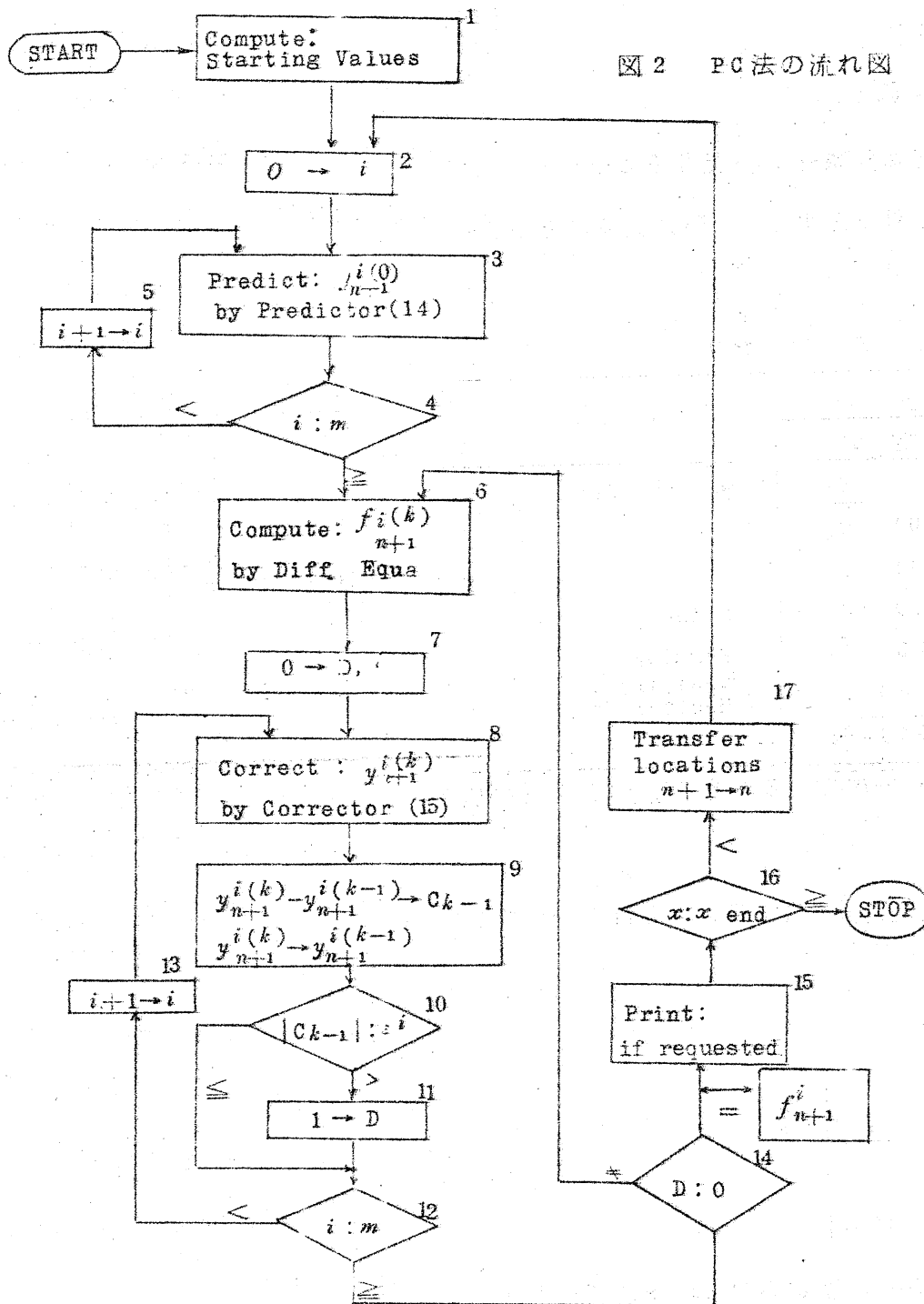


表 4 $y' = (y-x)/(y+x)$, $y(0)=1$, $x=(0 \sim 1.0)$, $h=0.1$
解析解: $x^2 + y^2 = e^{\pi - 2 \operatorname{tg}^{-1}(y/x)}$ (梯形則)

x	y	y'	C_0
0	1.000	1.0000	0
0.1	1.0912	0.8321	0
0.2	1.168	0.7076	2
0.3	1.234	0.6086	1
0.4	1.291	0.5269	1
0.5	1.340	0.4565	1
0.6	1.383	0.3949	1
0.7	1.420	0.3396	1
0.8	1.451	0.2892	0
0.9	1.478	0.2431	0
1.0	1.500	0.2000	0



5. 一点法と多点法の比較 代表的なものとしてRKG法とPC法(Milne法など)とを比べると表5のようになろう。しかし現在のように記憶容量の大きくなったことを考えると、(1)、(2)、(3)についてはあまり問題でないの、むしろ(4)~

(6)が重要視されよう。その点から PC法が好ましい。特に(6)について云えば工学問題では導函数計算が全体の計算の約90%以上を占めるといわれるので、計算時間の上からPC法が望ましい。最近に必要な前歴をRKG法等で出した後PC法を用いている。短い区間ならばRKG法が手軽でよいであろう。また(4)について云えば、RKG法ではその検出が出来ても修正が困難であるが、PC法では後述の平滑子で安定化できる。

表5 PKG法とPC法との比較

項目 \ 方法	RKG法	PC法
(1) 記憶装置	少なくすむ RKG法で $3m$ 個 + α RK法で $4m$ 個 + α (m : 元数)	多くなる Milne法で $7 \sim 8m$ 個 + α 梯形則でも $3 \sim 4m$ 個 + α
(2) プログラミング	容易で短い	判定が入るので少し複雑となる
(3) きざみ幅の変更	前歴(出発値)不要で、 変更は容易	少し複雑で、精度の高いもの程厄介となる。別の方法で前歴(出発値)の計算が必要
(4) 安定性	振動的不安定はないが、 増大一方の不安定を示すことがある。(きざみ幅 h が大きいこと)	公式により振動的な不安定性を示す。
(5) 誤差制御	困難。計算とは別途にやらねばならない。	容易。計算途中で判る。
(6) 導函数計算	4回/段	1~2回/段となるように h をえらぶ。
(7) 高精度公式	導出困難	比較的容易に出せる。

また初期値問題を解くに当って、我々のように工学をやるものにとつてはアナログ型計算機も捨て難いものがあるので、ここでデジタル型とアナログ型

との比較を試みておく、表6にこれを示す。

アナログ計算機の主な特徴は演算順序を考えずに、つながりをつけることだけであること、シミュレーションにおける物理的量の対応が容易なことである。これらの特徴を入れて、デジタル型の計算機のプログラムにより、アナコンをシミュレートすることが最近かなり話題になっている。

(文献 5, 6, 7, 8, 9, 10, および 11 等)

表6 デジタル型とアナログ型の比較

項 目	デジタル型	アナログ型
取 扱 う 量	不連続的。数値として出し入れするのが普通。これからグラフする。	連続的。電圧電流として扱う。物理的対応が付きやすい。
精 度	非線型のものに対しても、いくらでも上げられる。	非線型のものがあるとき、0.1%以上あげるのは容易でない。
プログラミング	一般に面倒。数値計算法に従って演算順序を決める必要あり。	割合に容易。数値計算法の知識を要せず、つながりをつけるだけ。
取扱いうる問題の複雑さ(容量)	融通性があり、判断を必要とする複雑な計算に向いている。	融通性少なく、解きうる問題の大きさが、演算装置の規模に直接左右される。判断の多い計算には不向き。初期値問題向き。
計 算 の 速 さ (操作)	現在ではまだ遅いものが多い。パラメータ変化の影響を見るのに時間がかかる。	早い。実時間計算、あるいはそれより早く出来る。パラメータ変化も容易。
プログラムの保存	紙テープ又はカードを保存しておけばよい。サブルーチン、ライブラリの使用が可能で便利。	バッチボードを保存せねばならず金がかかるのが普通。最近では紙テープの利用も行なわれるようになった。

6. 安定性と平滑化 多点型の公式ではそれを差分方程式と見た時の特性方程式の根の無縁成分により、振動的な不安定を起すものがある。例えば中点則

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2h f_n \quad (12)$$

のみで $\partial f / \partial y < 0$ となるような方程式を積分するとき起る。 $y' = 1 - y$, $y(0) = 0$ の解は $y = 1 - e^{-x}$ であつて、 $x \rightarrow \infty$ で $y \rightarrow 1$ となる筈であるが、振動的になつて遂には発散する。これは (12) の f_n に $1 - y_n$ を代入して差分式として解いてみると

$$\left. \begin{aligned} y_n &= 1 + A \lambda_1^n + B \lambda_2^n, \\ \lambda_1 &= \sqrt{1+h^2} - h, \quad \lambda_2 = -(\sqrt{1+h^2} + h) \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

となり、 λ_1 は真の解の性質を表わす有効成分、 λ_2 がもとの解とは縁のない無縁成分でこれが大きさが 1 より大きいため、たとえ B が如何に小さくとも n の大きい所で指数的に大となり、しかも $\lambda_2 < 0$ 故符号が交番する。従つて解は振動する。これが数値的不安定である。このときの模様を図 3 に示す。なお数値については表 7 参照。

図 3

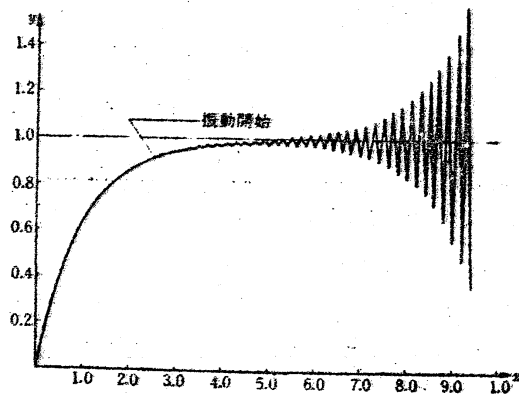


表 7. $y=1-y, \quad y(0)=0.$

真の解 $1-e^{-x}$		Euler 法 $y_{n+1}=y_n+hf_n$				中点則 $y_{n+1}=y_{n-1}+2hf_n$				梯形則 P: $y_{n+1}=y_{n-1}+2hf_n$ C: $y_{n+1}=y_n+(h/2)(f_n+f_{n+1})$			
x	y	Y	e	$\bar{Y}$	t	Y	e	$\bar{Y}$	t	Y	e	$\bar{Y}$	t
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.1	0.0952	0.1000 + 48	0.1000 + 48	0.0952	0	0.0952	0	0.0952	0	0.0952	0	0.0952	0
0.2	0.1813	0.1900 + 87	0.1900 + 87	0.1810	-3	0.1810	-3	0.1814	+1	0.1814	+1	0.1814	+1
0.3	0.2592	0.2710 +118	0.2710 +118	0.2590	-2	0.2590	-2	0.2594	+0	0.2594	+0	0.2594	+0
0.4	0.3297	0.3439 +142	0.3439 +142	0.3292	-5	0.3292	-5	0.3299	+2	0.3299	+2	0.3299	+2
0.5	0.3935	0.4095 +160	0.4095 +160	0.3932	-3	0.3931	-3	0.3937	+2	0.3937	+2	0.3937	+2
0.6	0.4512	0.4686 +174	0.4506 +174	0.4506	-6	0.4506	-7	0.4515	+3	0.4515	+3	0.4515	+3
0.7	0.5034	0.5217 +183	0.5217 +183	0.5031	-3	0.5030	-4	0.5037	+3	0.5037	+3	0.5037	+3
0.8	0.5507	0.5695 +188	0.5695 +188	0.5500	-7	0.5499	-8	0.5509	+2	0.5510	+3	0.5510	+3
0.9	0.5934	0.6126 +192	0.6126 +192	0.5931	-3	0.5930	-4	0.5937	+3	0.5937	+3	0.5937	+3
1.0	0.6321	0.6513 +192	0.6513 +192	0.6314	-7	0.6313	-8	0.6324	+3	0.6324	+3	0.6324	+3

小数第 5 位で四捨五入, y : 真の解, $\bar{Y}$: 差分方程式の解, Y : 数値解,
 e : 数値解の誤差, t : 差分方程式の解の誤差 (打ち切り誤差),

このように, 多点型の公式では, 無縁成分が時により不安定の因をなす。

Milne 法の場合にもその修正子公式は同様の性質を持つことが示される。

一般的に (5) の多点型の公式で, 今 $y' = Ay$ なる特別な微分方程式を積分する場合について考えてみよう。

このとき (5) は

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j y_{n+j} \quad (14)$$

となる。この差分方程式の解は

$$y_n = C_1 \lambda_1^n + C_2 \lambda_2^n + \dots + C_k \lambda_k^n, \quad (15)$$

ただし $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ は

$$\alpha_k \lambda^k + \alpha_{k-1} \lambda^{k-1} + \dots + \alpha_0 = h \Lambda (\beta_k \lambda^k + \dots + \beta_0) \quad (16)$$

の根である。(簡単のためすべて単根とした)。あるいは,

$$\rho(\lambda) - h\sigma(\lambda) = 0 \quad (17)$$

となる。今 $h=0$ のとき, つまり $\rho(\zeta)=0$ の根を $\zeta_j (j=1, \dots, k)$ とすると,

$h \neq 0$ のときはこの ζ_j より少しずれた根 λ_j がえられる筈である:

$$\lambda_j = \zeta_j (1 + m_j h \Lambda + O(h^2)) \quad (18)$$

これを(17)に代入してTaylor展開し、 h の1乗の項を集めて0に等しいとする
と次の関係が得られる：

$$m_j = \sigma(\zeta_j) / \{\zeta_j \rho'(\zeta_j)\}. \quad (19)$$

従つて $x = nh$ を固定して $h \rightarrow 0$ としたときの解 y_n の漸近的性質は次のような
形で示される：

$$y_n \sim \sum_{j=1}^k C_j \zeta_j^n (1 + m_j h A)^n \sim \sum_{j=1}^k C_j^n e^{m_j A x_n} \quad (20)$$

故にもし ζ_j 中に絶対値が1を超えるものがあれば、たとえ C_j が如何に小さく
とも、 n の増大とともに ζ_j^n が大きくなり 真の解とは程遠いものとなる。 ζ_j
に重根があるときも同様、この現象が不安定である。

$\zeta_1 = 1$ は $\rho(\zeta) = 0$ の根である。もし $m_1 = \sigma(1) / \rho'(1) = 1$ ならば $j=1$ の項は
 $C_1 e^{Ax}$ となる故 C_1 が $y(x_0)$ に近い限りそれが真の解に近い成分となる。この
条件 $\rho(1) = 0, \quad \rho'(1) = \sigma(1) \quad (21)$

は多点型の公式がすべて満足しておらねばならぬもので、Henriciはこれを
Consistencyの条件と呼んでいる。²⁾ また、もし $|\zeta_j| \leq 1$ がすべての ζ_j について
成立てば(かつ $|\zeta_j| = 1$ となる根が単根ならば)先にのべたような不安定はない
筈である。その意味で安定といえる。しかし、もし $|\zeta_j| = 1$ で $m_j A > 0$ のときは、
第 j 成分は振幅増大の振動を起す因となる。このような不安定を数値的不安定
(Numerical instability)ともよんでいる。 $|\zeta_j| > 1$ がないという意味では安
定だが、このような不安定があると“弱い安定性”をもつといえる。中点則も、
Milne法の修正子公式もともにそういう弱い安定性を持つている為に、 $f_y < 0$
($y' = Ay$ の $A < 0$ もこれに入る)のとき、無縁成分がじやまをするわけである。

一方、RK法や、RKG法のような一点法ではもちろんこのような不安定振動
の心配はない。しかし、一点法では、もしきざみ幅 h が充分小さく、 $|Ah|$ が1
に比し相当に小さくないと増分 Ay が充分の精度で得られないばかりか、 $Ah < 0$
のとき減少すべきものが増大の一途をたどることがある。

例えば $y' = -xy, y(0) = 10$ (22)

で $h=0.25$ で積分をすすめて行くと, $x=11.5$ あたりから増大に転ずる。(もともとの真の解は $10e^{-x^2/2}$ で減少一途の函数)そして $x=20$ あたりは 8×10^7 の程度になる。¹²⁾これは x の大きい所で f_y (上記の A に相当する) が大きくなり, $h=0.25$ ではきざみ幅が大きすぎたためである。このように RK 法や, RKG 法では増大一方の不安定性を示す。もちろん同じ精度の Milne 法では $x=4$ あたりより振動をはじめる。この RK 法の不安定対策は h を小さくする他ない。

さて, 多点型公式に対する上記のような不安定対策をして, Milne は先ず己れの方式に対する方法を考え出した。¹³⁾これは何段か進行した後, (例えば k ステップ) Newton の $3/8$ 則で再計算し, これと通常の Milne 法で求めた値との平均値を新し y_k として次の k 回まで進み, 再び同じような平均をとるという方法である。しかしそれはかなり繁雑なものであつて, 不安定性のない公式を用いるにこしたことはないが, もつと簡単なものはないものだろうか。

図 3 で考えつくことは相続く 3 ステップで移動平均

$$\bar{y}_n = \frac{1}{2} \left(\frac{y_{n-1} + y_n}{2} + \frac{y_n + y_{n+1}}{2} \right) \quad (23)$$

$$\text{又は } \bar{y}_n = \frac{1}{4} (y_{n-1} + 2y_n + y_{n+1}) \quad (23')$$

をとつてはどうかということである。このような考えで図 3 のように激しい振動をするものも平滑化することができることが示される。¹⁴⁾Milne 法についても同様で, (23') が

$$\bar{y}_n = y_n + \delta^2 y_n / 4 \quad (23'')$$

と書けるので判るように 2 階の中心差分であるのに対し,

$$\bar{y}_n = y_n - \delta^4 y_n / 16 \quad (24)$$

なる 4 階の中心差分で平滑出来ることが示された。これは東京大学森口教授によるが, 要は, 有効成分の精度は落さずに, 無線成分の次数をあげて小さくす

ることである。この考えは伊理助教授によつて一般化され、平滑子 filter と名付けられて効力を発揮している。¹⁵⁾ 二三の例をあげるとつぎのようである。

中点則に対するもの：

$$Y(\zeta) = (1/4)(\zeta + 2 + \zeta^{-1}) = 1 + \delta^2/4,$$

$$Y(\zeta) = (1/4)(3 + 2\zeta^{-1} - \zeta^{-2}) = 1 - \nabla^2/4,$$

Milne 法に対するもの：

$$Y(\zeta) = (1/16)(-\zeta^2 + 4\zeta + 10 + 4\zeta^{-1} - \zeta^{-2}) = 1 - \delta^4/16,$$

$$Y(\zeta) = (1/16)(11 + 12\zeta^{-1} - 6\zeta^{-2} - 4\zeta^{-3} + 3\zeta^{-4}) \\ = 1 - \nabla^2/2 + (3/16)\nabla^4$$

(25)

これらを各公式で数値計算したものに対して作用子として用い平滑化する。例えば 2 番目のものは、 y_{n-1} , y_n より y_{n+1} が得られたら、この 3 つに対しそれぞれ、-1, 2, 3 の重みをつけて $1/4$ を乗じ、これを y_{n+1} とする。なお、この平滑化は一点求める毎に行なうのではなく、ある適当な区間は公式そのもので計算する。その区間は f_y の性質で異なるが、例えば $1/h$ ステップおき位に平滑化するようにする。

PC 法では、安定な公式を用いるのが一番無難で、その時は平滑子も不要であるが、もしきざみ幅が適正に撰択できるならば、Predictor と Filter を組せた PF 法なども考えられよう。

7. 誤差について。 $y(x)$ を x での真の解、 y_n を $x=x_n$ での丸め誤差を無視した無限桁演算による理想的数値解、 $\tilde{y}_n$ を丸め誤差をふくむ数値解つまり実際に得られる値とすると、 $x=x_n$ での数値解のもつ誤差 Δ_n には

$$\Delta_n = \tilde{y}_n - y(x_n), \quad (26)$$

$$\Delta_n = (\tilde{y}_n - y_n) + (y_n - y(x_n)) \equiv r_n + t_n \quad (27)$$

となる。 t_n は丸めのない場合の誤差で離散化誤差 (discretization error) あるいは打切り誤差 (truncation error), r_n は有限桁演算による (四捨五入、

切捨て、切上げのための)誤差で、丸め誤差 (round-off error) である。いずれも各格子点で局所的に発生したものの累積したものである。打ち切り誤差は局所打ち切り誤差が $O(h^2)$ なら累積したものは $O(h^{2-1})$ となり、 h とともに増大する。丸め誤差は演算の回数が多い程大きくなるわけであるから、 h が小さい程大きいと予測される。局所丸め誤差の絶対値の上限を抑えて見積る場合には $1/h$ に比例し、統計的に論じて局所丸め誤差が各段で無作為に発生するものとし、切捨て、切上げが平均して打消し合うとすると考えて r_n の期待値および標準偏差を出すと $E(r_n) \cong 0$ となり、標準偏差は r_n のまわりに $1/\sqrt{n}$ のオーダーでばらつくことが判る。後者の傾向は数値実験でもたしかめられている。²⁾

以上から最適のきざみ幅 h がある筈であるが、それをはじめから見つけることは實際上不可能である。ふつう丸めは計算機の語長一杯で演算を行ない、きざみ幅を h と $h/2$ の2つで計算して見当ずけることが出来る。なお誤差解析の詳細は Henrici の書 2) 16) を参照されたい。

8. 自動的にきざみ幅を変更する PC 法。PC 法では誤差制御が可能であるので、きざみ幅を自動的に変へて各格子点でおこる打ち切り誤差を所望の値に入れながら出来るだけ大きなきざみ幅で積分を進めることが出来る。ただ精度が高いものは前歴が多いので、低次のものを用いる。

1) 梯形則による方法

$$\left. \begin{array}{l} \bar{P}: y_1 = y_0 + hf_0, \\ P: y_{n+1} = y_n + 2hf_n, \\ C: y_{n+1} = y_n + (h/2)(f_n + f_{n+1}). \end{array} \right\} \quad (28)$$

出発に際し、適当なきざみ幅 h_0 で $\bar{P}$, C を用いて $y_1(h_0)$ を出す。 h_0 を半分にして $\bar{P}$, P , C を用いて2ステップ求めて $y_2(h_0/2)$ を出し前の $y_1(h_0)$ と比べる。所望のケタ数一致しておれば、きざみ幅を h_0 として以下 P , C を用い、積分を進める。一致していなければさらにきざみ幅を半分にして同様のことを

くり返す。こうして出発時のきざみ幅 h を定める。また積分進行中先にのべた C_0 が大きいとき、あるいは反復回数が多いときには、きざみ幅を半分にして、(あるいは場合により適宜小さくして) $\bar{P}, \bar{C}$ で計算する。もし C_0 が小さくきざみ幅が大きくなった方が有利のときは、新しく得た y_{n+1} を y_n とし、 y_{n-1} をそのまま新しい y_{n-1} としてきざみを倍にするか、適宜大きい h で $\bar{P}$ を用いて次の点を予測し、 C を修正する。このようにすれば自動的にきざみ幅を調整しながら積分を進めることが出来る。

2) $\bar{O}(h^4)$ の公式による場合

出発時：

$$\left. \begin{aligned} \bar{P}: y_1 &= y_0 + hf_0, \\ \bar{C}: y_{1/2} &= (y_0 + y_1)/2 + (h/8)(f_0 - f_1), \\ \bar{C}: y_1 &= y_0 + (h/6)(f_0 + 4f_{1/2} + f_1), \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

一般進行過程：

$$\left. \begin{aligned} P: y_{n+1} &= 4(y_{n-1} - y_n) + y_{n-1} + 2h(2f_n + f_{n-1}), \\ C: y_{n+1} &= y_n + (h/12)(-f_{n-1} + 8f_n + 5f_{n+1}), \\ T_2 &\cong C_0/10. \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

方法は同様である。なお一般進行過程でのきざみ幅を半分にするのは $\bar{C}$ で行なう。(詳しくは文献 17 参照)。

以上の方法は立上りが急峻で、以後なだらかな曲線などの微分方程式を解くに適する。

9. 境界値問題の解法。(1)が線型の場合は重ね合わせが可能なので、初期値問題として解くことも出来るが、非線型の場合にはこれが出来ない。

1) 試行錯誤法 不充分の条件を補って初期値問題として、今までのべた方法のいずれかを用いて他の点の条件を満足するまでくりかえす。他点での条件からの離れ具合を見て適宜内挿法により初期条件を修正する。

2) Kahne の方法 (1)において条件が次のようになっているものとする。

$$\left. \begin{aligned} y^i(x_N) &= y_N^i, & i=1, 2, \dots, k: \\ y^i(x_0) &= y_0^i, & i=k+1, \dots, m. \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

従つて $y^i(x_0)$ ($i=1, 2, \dots, k$) を定めることが必要。($k < m/2$ とする。もし $k > m/2$ なら逆に $x=x_N$ から積分して以下の手順をふむ)。未知の y_0^i ($i=1, 2, \dots, k$) を y_N^i の関数と考えて

$$y_0^i = y_0^i(y_N^1, y_N^2, \dots, y_N^k), \quad (32)$$

この y_0^i の最初の推定値を $\eta^{i(1)}$ とする。初期値問題として解き, $x=x_N$ で y_N^i の代りに得たこのときの y の値を $y_N^{i(1)}$ とする。

$$\delta^{i(1)} = y_N^{i(1)} - y_N^i \quad (33)$$

があまり大きくないと仮定し, (32) を推定値 $\eta^{i(1)}$ のまわりに展開したと考えると

$$y_0^i = \eta^{i(1)} - \sum_{j=1}^k (\partial y_0^i / \partial y_N^j) \delta^{j(1)} + O((\delta^{j(1)})^2) \quad (34)$$

高次の項を省略して

$$\eta^{i(1)} = y_0^i + \sum_{j=1}^k (\partial y_0^i / \partial y_N^j) \delta^{j(1)} \quad (35)$$

以下他の $\eta^{i(1)}$ をいくつか仮定して積分した場合を考えると一般に次の式が得られる。

$$\eta^{i(l)} = y_0^i + \sum_{j=1}^k (\partial y_0^i / \partial y_N^j) \delta^{j(l)} \quad (36)$$

$l=1 \sim k+1$ の $k+1$ 個の推定値により初期値問題として積分したものとすると次

式を得る：

$$\begin{pmatrix} \eta^{1(1)} & \eta^{2(1)} & \dots & \eta^{k(1)} \\ \eta^{1(2)} & \eta^{2(2)} & \dots & \eta^{k(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \eta^{1(k+1)} & \eta^{2(k+1)} & \dots & \eta^{k(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \delta^{1(1)} & \delta^{2(1)} & \dots & \delta^{k(1)} \\ 1 & \delta^{1(2)} & \delta^{2(2)} & \dots & \delta^{k(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \delta^{1(k+1)} & \delta^{2(k+1)} & \dots & \delta^{k(k+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0^1 & y_0^2 & \dots & y_0^k \\ \frac{\partial y_0^1}{\partial y_N^1} & \frac{\partial y_0^2}{\partial y_N^1} & \dots & \frac{\partial y_0^k}{\partial y_N^1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial y_0^1}{\partial y_N^k} & \frac{\partial y_0^2}{\partial y_N^k} & \dots & \frac{\partial y_0^k}{\partial y_N^k} \end{pmatrix} \quad (37)$$

行列表示をとると

$$\underline{\eta} = \underline{\delta} \cdot \underline{y_0} \quad (38)$$

y_0 の第一行のみを求めればよいから、正方行列 δ を一回逆転して δ^{-1} なる行列積を求めれば y_0^2 の第2近似が得られる。この計算中最も大きい $\delta^2(l)$ を生じた推定値の行を今求めた y_0^2 の第2近似を用いて数値積分した結果でおきかえて、更に行列の逆転を行ない次の近似値を出す。これをくりかえして $\sum_{i=1}^k (\delta^2(l))^2$ または $\sum_{i=1}^k |\delta^2(l)|$ が所望の近似内の小さな値になるまでくりかえす。

この方法では初期推定値が収束の速さに影響するであろう。また行列の逆転時に誤差の拡大がないように注意が必要と考えられるが、簡単な数値例ではよい結果が得られている。

3) 差分近似による方法。微分を差分でおきかえ、各格子点における値を未知数とする連立一次方程式として解く方法で、線型の場合には一回で答が出るが、非線型の場合は反復することになる。order estimation をうまくすれば極めて有効である。特に2階(3階の時は1階の導函数の式について、一般に偶数階として解くのがよい)の場合に威力を発揮するが、連立でもかまわない。簡単のため2階で考える。

$$\left. \begin{aligned} y'' + b(x)y' + c(x)y &= f(x), \\ y(0) &= y_0, \quad y(x_N) = y_N. \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dx} &\equiv D = \frac{1}{h} \left(\mu^\delta - \frac{\mu^{\delta^2}}{3!} + \frac{2^2 \cdot \mu^{\delta^5}}{5!} - \dots \right), \\ \frac{d^2}{dx^2} &\equiv D^2 = \frac{1}{h^2} \left(\delta^2 - \frac{2}{4!} \delta^4 + \frac{2 \cdot 2^2 \cdot \delta^6}{6!} - \dots \right). \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

なる差分近似の第一項を用い、他の項を補正項として、

$$\delta^2 y + h b(x) \mu^\delta y + h^2 c(x) y = h^2 f(x) + k(y). \quad (41)$$

ここに h は格子点間隔(ここでは一定とするが、不等間隔も可能)、 $k(y)$ は補正項。 $x=x_n$ で書くと

$$\left(1 - \frac{h b_n}{2}\right) y_{n-1} - (2 - h^2 c) y_n + \left(1 + \frac{h b_n}{2}\right) y_{n+1} = h^2 f_n + k(y_n). \quad (42)$$

これが $x_1, x_2, \dots, x_{N-1}$ の各点で成立つ故、 $N-1$ 個の連立方程式が出来る。

y_0, y_N が与えられるか、あるいは他の条件（例えば導関数をふくむとき）から両端附近の変数についての関係式が 2 つ与えられるので、未知数の数と一致する。今 y_0, y_N が与えられるものとするとき次の形になる：

$$A \underline{y} = \underline{g} + K(\underline{y}). \quad (43)$$

$$A = \begin{pmatrix} q_1 & \tau_1 & 0 & \cdots & 0 \\ p_2 & q_2 & \tau_2 & \cdots & \\ 0 & p_3 & q_3 & \tau_3 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & p_{N-2} & q_{N-2} & \tau_{N-2} \\ \cdots & \cdots & 0 & p_{N-1} & q_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (44)$$

$$\left. \begin{aligned} q_1 &= -(2-h^2 C_1), \quad \tau_1 = (-hb_1/2), \\ p_2 &= (1-hb_2/2), \quad q_2 = -(2-h^2 C_2), \quad \tau_2 = (1+hb_2/2), \\ &\cdots \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

A は所謂幅 3 の band matrix、つまり(43)は三項方程式である。これは消去法の計算が Thomas の方法という漸化式の形になる。

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= q_1, \quad \beta_1 = \tau_1/u_1, \quad h_1 = g_1/u_1, \\ u_n &= q_n - p_n \beta_{n-1}, \quad \beta_n = \tau_n/u_n, \\ h_n &= (g_n - p_n h_{n-1})/u_n, \quad (n=2, 3, \dots, N-1) \\ y_{N-1} &= h_{N-1}, \quad y_n = h_n - \beta_n y_{n+1}, \quad (n=N-2, \dots, 2, 1) \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

(46)が消去法の前進部分、(4)が逆行部分になる。

先ず K なる補正項は省略して計算するが、線型の場合はこれで得た値に適当に境界外の値を外挿し、補正項 K を右辺として補正量のみ求めればかなりよい精度のものが得られる。非線型の場合には、右辺の g あるいは係数 b, c 中に y の値が入るが、これらは h あるいは h^2 なる微少量が乗ぜられるので、1 あるいは 2 に対し一般に小さな値となる。従つて、はじめその中の y の値を仮定して

解き，得られた値をもとの値と比べ，収束するまでくりかえす。この考えでいくつかの例に成功した。例えば

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{Pe} y'' - y' - Ry^2 &= 0 & 0 < x < 1.0 \\ x=0: & \quad 1 = y_0 - \frac{1}{Pe} y'_0, \\ x=1.0: & \quad y' = 0 \end{aligned} \right\} \quad (48)$$

なる形のものについて，物理的に $y < 1.0$ ， Pe ， R 等もほぼ 1 ～ 10 程度であることが判っていたので，上記の方法を用い成功した。この例を差分近似したとき，2 項の連立代数方程式として解けば， h を小さくすると数千回の反復をしても収束しないが，¹⁹⁾ 上記の方法によるときは $h=0.005$ としても ²⁰⁾ 20 回位で収束する。

order estimation が肝要である。

10. 結 び

ここでは常微分方程式の数値解法のうち，初期値問題では予測子—修正子法についてのべ，また，境界値問題の解法についてのべた。大変大まかな話で物足りなさを感じられる方も多いであろうが，我々工学者にとつては，要するに問題が解ければよい，そういつた観点から手法のみのべた。なお，計算の経験例として，文献 21) は初期値問題を，同じく 20) は境界値問題を取扱っている。何等かの御参考になれば幸いである。

文 献

- 1) Milne, W. E. : Numerical Solution of Differential Equations (John Wiley, 1953), §8 & §28.
- 2) Henrici, P. : Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations (John Wiley & Sons, 1962) 407PP.
- 3) Taketa, M. : Proc. of the 9th Japan National Congress for Appl. Mech. (1959), PP 463-468.

- 4) 1) § 5. 1.
- 5) 高田勝：情報処理，1, 1 (1960), PP. 27-33
- 6) Hurley, J. R. and J. J. Skilas : DYSAC(1963, June 私信)，1963 Spring
Joint Computer Conference 予稿。
- 7) 外山，松浦：第6回自動制御連合講演会予稿集(1963) PP. 313-314
- 8) Brennan, R. D. : PACTOLUS, Simulation, 3, 2 (1965), PP. 13-19.
- 9) Brennan, R. D. and R. N. Linebarger: Simulation, 3, 5(1964), PP. 22-36
- 10) Ocker, W. and S. Teger: HYTRAN, Proc. Fall Joint Computer Conference
1964, PP. 291-298.
- 11) Harnett, R. T., F. J. Sansom and L. M. Warshawsky: HIDAS, Technical
Documentary Report No. SEG-TDR-64-1(1964), 104P.
- 12) 宇野利雄：計算機のための数値計算（朝倉書店，昭和38），§22.
- 13) Milne, W. E. and R. R. Reynolds: Journ. of ACM, 6(1959), PP. 196-203.
- 14) 森口繁一：数値計算の理論と実際 I - IV，科学 32, 12~33, 5(岩波，1962
~1963), の W P. 158.
- 15) 伊理正夫：情報処理，4, 5(1963), PP. 249-260.
- 16) Henrich, P. : Error Propagation for Difference Methods(John Wiley,
1963) 73PP.
- 17) 高田：情報処理，3, 5(1962), PP. 278-282 および 4, 4(1963), PP. 222-223
- 18) Kahne, S. J. : IEEE Trans. On Automatic Control, AC-8(1963), PP. 257-
258.
- 19) Lapidus, L. : Digital Computation for Chemical Engineers(McGraw-
Hill 1962), PP. 318-321.
- 20) 高田勝：情報処理，6, 1(1965), PP. 21-29.
- 21) 高田勝：東京天文台報，12, 3(1960), PP. 345-357.