

補外計算における Møller 法について

室伏 誠 (職業能力開発大学校 電子工学科)

永坂 秀子 (日本大学理工学部 数学科)

§1. はじめ

我々は、常微分方程式の初期値問題に対する数値計算法として補外法を用いる。補外法は、色々な打ち切り誤差の次数とその刻み幅により計算桁数に対応した高精度の近似解が得られる解法である。数値計算法において、打ち切り誤差の各係数と用いる刻み幅によって、得られる近似解の精度は変化する。この係数は、与えられた問題とその計算法によって決まるものである。したがって、与えられた問題に対して、用いる打ち切り誤差の次数と刻み幅を決める事は難しい。一般に、補外法は色々な打ち切り誤差の次数と刻み幅 (内部刻み幅) に対する近似解を容易に得る事ができるものである。この内部刻み幅として、Romberg {2, 4, 8, 16, 32, ...}, Bauer[1] {2, 4, 6, 12, 18, ...}, Bulirsch[2] {2, 4, 6, 8, 12, ...}, Deuffhard[3] {2, 4, 6, 8, 10, ...} が与えられているが、本質的な補外計算式は変わらない。Shampine[6][7] は、数列間に対する効率を関数計算量を基にして比較している。これらの数列間には、関数計算量、近似解の精度に関して与えられた問題並びに積分区間に対し差異が見られる事が我々の数値実験で判った。この結果として、上に述べた数列の中では局所積分区間内の関数計算量としては一番多い Romberg 数列を用いた場合が積分区間全体に対する近似解の精度が一番良かった [4]。

我々の提案する補外法は [4], 計算桁数に対し補外表の大きさを制限し、その表内で我々の提案している停止条件を満たすまで局所積分区間を拡大または縮小し近似解を求めるものである。この解法によって得られる近似解の誤差は、丸め誤差が打ち切り誤差に優越

しているものである。我々は、この様にして得られた近似解の精度をさらに高めるために、丸め誤差を補正する Møller アルゴリズムを用いる事を考え、Møller アルゴリズムを用いた方法と丸め誤差補正を用いない補外計算のみ場合を比較し、各補外表の大きさに対する近似解の丸め誤差補正の状態を調べてみた。

§ 2. 我々の提案する補外計算法

初期値問題を以下の様に表すとき、我々の提案する補外計算法を説明する

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

補外計算に用いる補外表の第一列の近似値 $Y_0^n, (n = 0, 1, 2, \dots)$ を、以下の様に内部刻み幅に Romberg 数列を用いた中点法で計算する。

$$(1) \quad \begin{cases} \eta_1 := \eta_0 + h_n f(x_0, \eta_0) \text{ (陽的オイラ-法)} \\ \eta_{j+1} := \eta_{j-1} + 2h_n f(x_j, \eta_j) \text{ (陽的中点法)} \\ (j = 1, \dots, 2^{n+1} - 1) \\ Y_0^n := \eta_{2^{n+1}} \end{cases}$$

ここで、 $x_j := x_0 + jh_n$, $h_n := H/2^{n+1}$, $(n = 0, 1, 2, \dots)$ を表す。この H は前もって与える局所積分区間長を表す。次に、この $Y_0^n, (n = 0, 1, \dots)$ を基に以下の補外計算法を用い補外表を得る。

$$(2) \quad Y_k^n := Y_{k-1}^n + \frac{Y_{k-1}^n - Y_{k-1}^{n-1}}{4^k - 1} \quad (k = 1, 2, \dots, n).$$

補外表

$$\begin{array}{ccccccc}
 Y_0^0 & & & & & & \\
 Y_0^1 & Y_1^1 & & & & & \\
 Y_0^2 & Y_1^2 & Y_2^2 & & & & \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\
 Y_0^M & Y_1^M & Y_2^M & \dots & Y_k^M & \dots & Y_M^M
 \end{array}$$

ここに示されている添え字は各々補外表の行, 列に対応している. 我々は前もって補外表の最大行数 M を単精度計算では 4, 倍精度計算では 7 と与える. 最初に局所積分区間長 H の初期値を 1 と置き, この制限した補外表の中で我々が提案する停止条件 ($Y_k^n = Y_{k-1}^n$) を満たすまで, H を縮小, 拡大して最も大きな H を決定し, その時の補外値を近似解として採用し, その H を次の区間長の初期値として全区間を計算する.(図 1. 参照)[4].

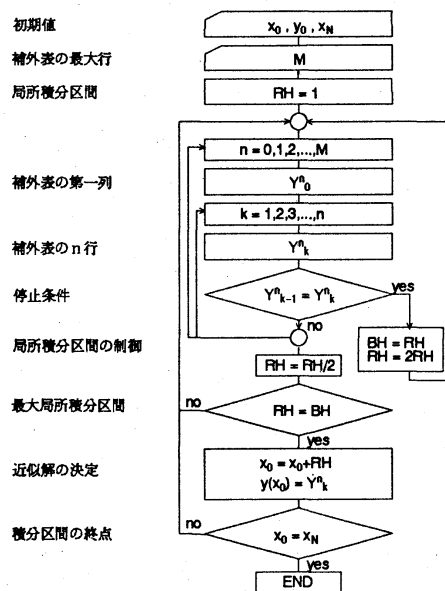


図1. 我々の提案する補外計算法

§ 3. Møller アルゴリズム [5]

丸め誤差を補正する, Møller アルゴリズムは次のように表す事ができる.

$$(3) \quad y_k := y_{k-1} + t_k$$

と表される計算式において, y_{k-1} の丸め誤差を q_{k-1} とし, y_k の丸め誤差 q_k を次の手順で求める. ここで, t_k を y_k の補正項と呼ぶ.

$$(4) \quad \begin{cases} s_k := t_k - q_{k-1} \\ y_k := y_{k-1} + s_k \\ r_k := y_k - y_{k-1} \\ q_k := r_k - s_k \end{cases}$$

この (4) 式の Møller アルゴリズムは, (3) 式の右辺の二つの項, y_{k-1} , t_k の数値の大小に依らず, q_k は y_k の丸め誤差となる事が以下の図 2. 図 3. から判る.

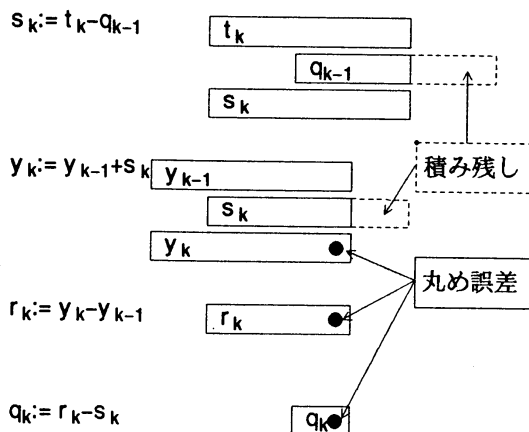


図2. (3)式の右辺; $y_{k-1} + t_k$ に対して
 $|y_{k-1}| \geq |t_k|$ の場合

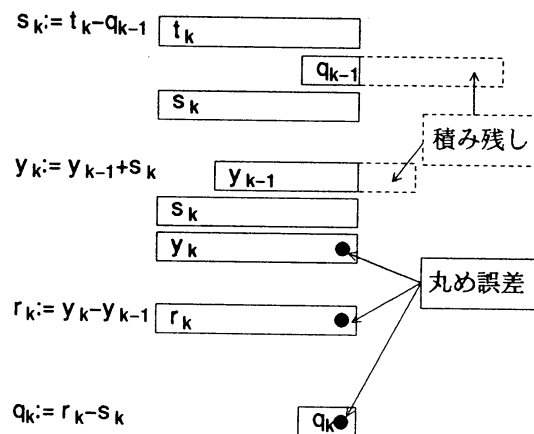


図3. (3)式の右辺; $y_{k-1} + t_k$ に対して
 $|y_{k-1}| < |t_k|$ の場合

我々は, §2. で述べた補外計算に対し, このアルゴリズムを以下の様に適用した.

Y_0^n の計算に対しては, (3) 式の右辺の補正項 t_k として

$$t_k := \begin{cases} h_n f(x_0, \eta_0) & (\text{陽的オイラー法}) \\ 2h_n f(x_k, \eta_k) & (\text{陽的中点法}) \end{cases}$$

を与え, (4) 式の Møller アルゴリズムの丸め誤差 q_0^n は, (4) 式を 2^{n+1} 回反復した $q_{2^{n+1}}$ となる.

Y_k^n の補外計算に対して, (3) 式の右辺の補正項として

$$t_k := \frac{Y_{k-1}^n - Y_{k-1}^{n-1}}{4^k - 1}$$

を与え, Y_{k-1}^n の丸め誤差 q_{k-1}^n から (4) 式を 1 回計算した q_1 が Y_k^n の丸め誤差 q_k^n となる. この丸め誤差 q_k^n を次の局所積分区間の丸め誤差の初期値として用いる. すなわち, 局所積分区間の中の補外計算で生じた丸め誤差を次の区間に引き渡す.

§ 4. 数値実験結果

我々は Møller 法を適用した場合と通常の補外計算の場合を以下の数値例について調べた. この例題は, いずれも我々が与えた補外表の最大行数 $M := 7$ では最も良い精度は得られないものである. ここで, 通常の補外計算で最も精度の良い近似解が得られた補外表の大きさを M_{opt} とする. 計算はすべて倍精度計算 (2 進 56 桁計算) である.

例題 1.

$$\begin{cases} y' = -y \\ y(0) = 1, \quad I = [0.0, 80.0]; \end{cases}$$

厳密解 $y(x) = e^{-x}$

我々は, 標準的な問題としてこの例題を取り上げた. 補外計算で用いる補外表の大きさを $M := 4, 5, 8$, として, 通常の補外計算法による結果を図 4 に, Møller アルゴリズムを用いた補外計算法による結果を図 5 に示す.

$M := 4, 5, 8$ の通常の補外計算結果より, $M_{opt} := 5$ となる. 各 M の大きさに対して Møller 法を用いると $M_{opt} := 5$ の場合の精度まで補正される事が図 5. から判る.

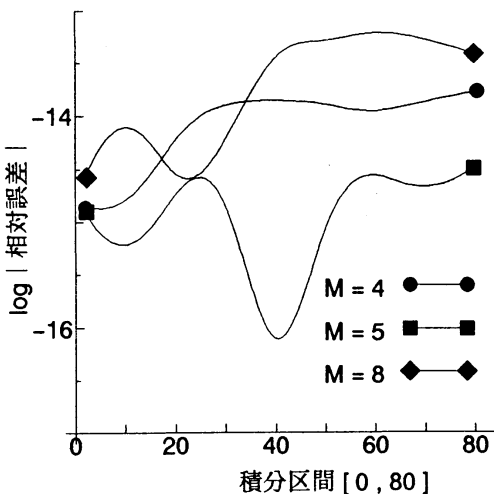


図4. 例題1.に対する通常の補外計算法の計算結果

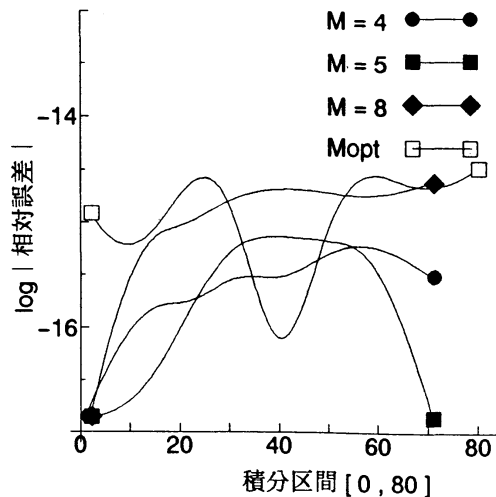


図5. 例題1.に対するMoptと各々のMøller法の計算結果

例題 2.[9]

$$\begin{cases} u' = v \\ v' = au(-u \sin(x) + 2v \cos(x)) \\ u(0) = 1, v(0) = a \\ a = 0.99999, \quad I = [0.0, 4\pi]; \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \text{厳密解} \quad u(x) &= \frac{1}{1 - a \sin(x)} \\ v(x) &= \frac{a \cos(x)}{(1 - a \sin(x))^2}. \end{aligned}$$

この例題は、共振問題と呼ばれるもので、この積分区間 I において $x = \pi/2$, $x = 5\pi/2$ が共振点となっている。この共振点で急激に解は大きくなり、共振点を過ぎると小さくなるものである (図 6. 参照)。 a の値が 1 に近くなればなるほど共振点での関数値は大きくなる。したがって、解が急激に変化する局所積分区間では H を小さくし、それ以外の区間では H を大きくするように制御する必要がある。

この例題で用いる補外表の大きさを $M := 3, 4, 8$, として、通常の補外計算法による u の結果を図 7. に、Møller アルゴリズム用いた補外計算法による u の結果を図 8. に示す。

$M := 3, 4, 8$ の通常の補外計算結果より、 $M_{opt} := 4$ となるが、 M が変わっても精度は殆ど変わらない。各 M に対して、第一番目の共振点 $\pi/2$ で局所積分区間 H が小さくなり、集積丸め誤差が増大してくる、したがって Møller 法を用いる事により丸め誤差補正が有効に作用して、以後の精度が通常の補外計算の結果より良くなっている事が図 8. より判る。

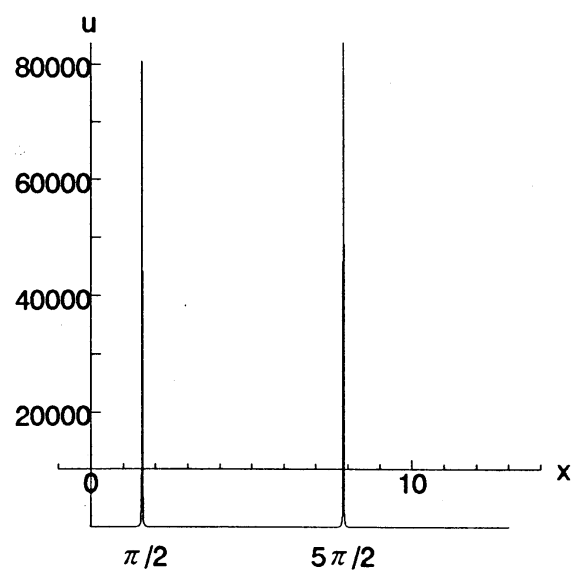


図6. 例題2の解 u の図

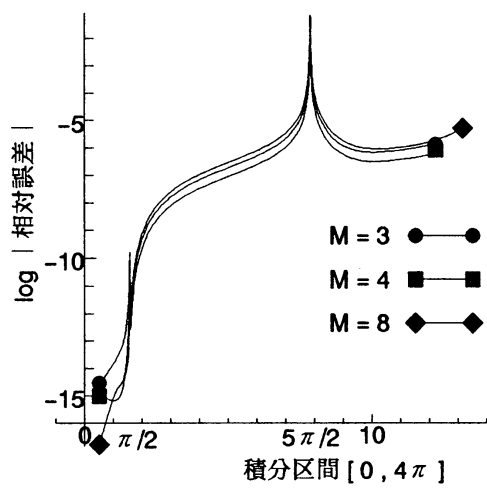


図7. 例題2の u に対する通常の補外計算法の計算結果

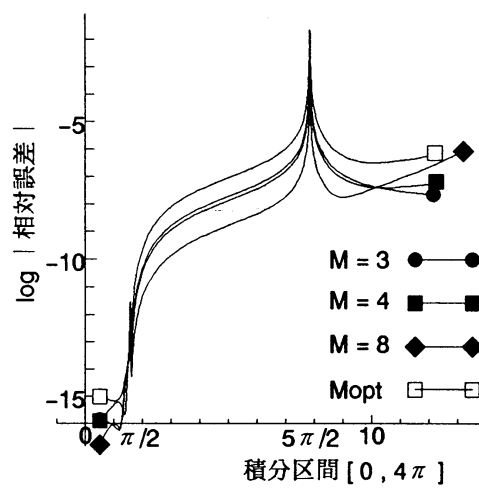


図8. 例題2の u に対するMoptと各々のM ϕ ller法の計算結果

例題 3.[8]

$$\begin{cases} u' = 998u + 1998v \\ v' = -999u - 1999v \\ u(0) = 1, v(0) = 0, \quad I = [0.0, 5.0] \end{cases};$$

$$\text{厳密解} \quad u(x) = 2e^{-x} - e^{-1000x}$$

$$v(x) = -e^{-x} + e^{-1000x}.$$

この例題は、良く知られた stiff 問題で、系の時定数の差が 3 桁の問題である。この例題で用いる補外表の大きさを $M := 4, 5, 7$, として、通常の補外計算法による u の結果を図 9. に、Møller アルゴリズムを用いた補外計算法による u の結果を図 10. に示す。

$M := 4, 5, 7$ に対する通常の補外計算結果より、 $M_{opt} := 5$ となる。 $M := 4$ の場合は Møller 法が有効で、 $M_{opt} := 5$ の精度まで補正される。しかし M_{opt} より大きい $M := 7$ では Møller 法による補正がきかない事が図 10. から判る。

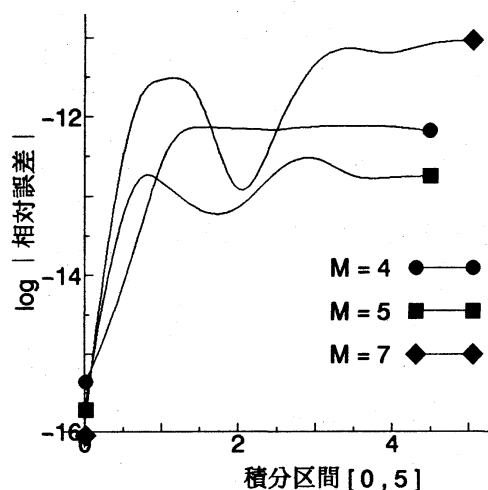


図9. 例題3の u に対する通常の補外計算法の計算結果

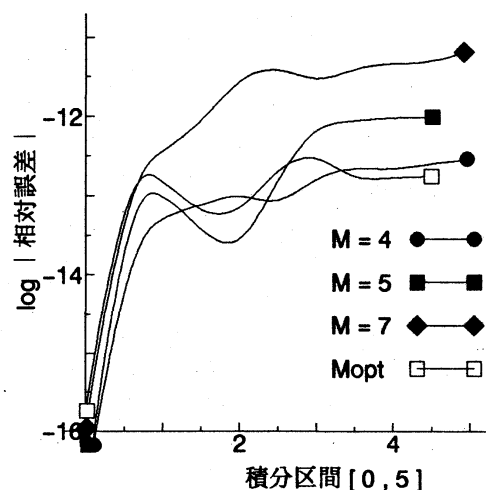


図10. 例題3の u に対するMoptと各々のMøller法の計算結果

§ 5. 結論

§ 4. の数値実験例から以下の事が判る. 丸め補正を用いない通常の補外計算で最も精度の良い近似解が得られた補外表の大きさを M_{opt} とする.

1] stiff 性のない問題 (例題 1.) では, $M > M_{opt}$ または $M < M_{opt}$ のとき, Møller アルゴリズムを用いた場合は通常の補外計算より精度が良くなり, そのときの精度は M_{opt} の通常の補外計算における精度と同程度になる.(図 4., 図 5. 参照)

2] 共振問題 (例題 2.) では, M がいずれの場合も, 共振点で局所積分区間 H が小さくなり計算回数が増大し集積丸め誤差が大きくなるので, Møller アルゴリズムを用いた場合は M_{opt} の補外計算値より精度が良くなる.(図 7., 図 8. 参照)

3] stiff 性の強い問題 (例題 3.) では, $M > M_{opt}$ のとき Møller アルゴリズムを用いても精度はそれ程良くない. しかし, $M < M_{opt}$ ならば, Møller アルゴリズムを用いた場合は M_{opt} の通常の補外計算と同程度の精度が得られる.(図 9., 図 10. 参照)

今回の数値実験から次の事がいえる. 一般に, 予め補外表の大きさを M_{opt} と取る事は不可能である. したがって, 補外表の大きさ M を小さ目にとり Møller アルゴリズムを適用する事により精度良い数値解が得られる.

REFERENCES

- [1] F.L.Bauer, H.Rutishauser and E.Stiefel, *New Aspects in Numerical Quadrature*, Symp. AMS 15 (1963).
- [2] R.Bulirsch and J.Stoer, *Numerical Treatment of Ordinary Differential Equation by Extrapolation Methods*, Numer. Math. 8 (1966).
- [3] P.Deuffhard, *Order and Step size Control in Extrapolation Method*, Numer. Math. 41 (1983).
- [4] M.Murofushi and H.Nagasaka, *On the internal stepsize of an extrapolation algorithm for IVP in ODE*, Numerical Algorithms 3 (1992).

- [5] O.Møller, *Quasi double precision in floating point addition*, BIT 5 (1965).
- [6] L.F.Shampine, *Efficient Extrapolation Methods for ODEs*, IMA Journal of Numerical Analysis 3 (1983).
- [7] L.F.Shampine, *Efficient Extrapolation Methods for ODEs,II*, IMA Journal of Numerical Analysis 5 (1985).
- [8] C.William Gear, "NUMERICAL INITIAL VALUE PROBLEMS IN ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS," Printice-Hall , U.S.A., 1971.
- [9] 渡辺 阿部 石田 金田 西川, 「 *HIDM* 」による固有値問題, 境界値問題の数値解析法-「トーナメント式多分割シューティング法」-, 核融合研究 58 (1987).