

発展方程式の数値解法の能率の比較

京大 数理研 森 正武
高橋 知子

§ 1. アルゴリズム

指数関数 e^z は

$$e^z = \frac{1}{1 - \frac{z}{1 + \frac{z}{2 - \frac{z}{3 + \frac{z}{2 - \frac{z}{5 - \dots}}}}}}$$

の形の連分数展開をもち、右辺は z -平面全体で収束する。
右辺の連分数展開を定義する漸化式を利用して、 z を tA (t ; 実数, A ; n 次正方行列) でおきかえて e^{tA} を定義できる。

ところで行列の発展方程式

$$\frac{du}{dt} = A \cdot u \quad \text{ただし } u; n \text{ 次元ベクトル}$$

A ; n 次正方行列

u_0 ; 初期値ベクトル

の解は $u(t) = e^{tA} u_0$ であり、これは連分数展開を定義する式から、次のアルゴリズムで近似することができる。
([1])。

$$\{F_j\}; \begin{cases} F_0 = I, & F_1 = \frac{C}{2} I \\ F_j = \begin{cases} C F_{j-1} - \frac{C^2}{2(j-1)} t(A + \alpha I) F_{j-2} & : j=2, 4, 6, \dots \\ C F_{j-1} + \frac{C^2}{2(j-2)} t(A + \alpha I) F_{j-2} & : j=3, 5, 7, \dots \end{cases} \end{cases}$$

$$\{g_j\}; \begin{cases} g_0 = 0, & g_1 = \frac{C}{2} u_0 \\ g_j = \begin{cases} C g_{j-1} - \frac{C^2}{2(j-1)} t(A + \alpha I) g_{j-2} & : j=2, 4, 6, \dots \\ C g_{j-1} + \frac{C^2}{2(j-2)} t(A + \alpha I) g_{j-2} & : j=3, 5, 7, \dots \end{cases} \end{cases} \quad (1)$$

$$e^{-\alpha t} F_j^{-1} g_j \longrightarrow e^{tA} u_0 \quad (j \rightarrow \infty)$$

(F : n 次正方行列, g : n 次元ベクトル)

ここに C は overflow, underflow 予防のためのパラメータ、 α は収束を早めるためのパラメータである。

大きな t に対して $e^{tA} u_0$ を求めたいときは、区間 $[0, t]$ を l 等分して $l \cdot \Delta t = t$ とする。

$$e^{tA} = (e^{\Delta t \cdot A})^l \quad \text{ゆえ}$$

$$e^{tA} u_0 = [F_l^{-1}(\Delta t \cdot A) \cdot G_l(\Delta t \cdot A)]^l \cdot u_0 \quad (l \text{ は十分大})$$

従って l を固定して $F_l^{-1} G_l$ をあらかじめ計算しておけば、解は次のアルゴリズムで計算できる。

$$\begin{cases}
 u_1 = F_k^{-1} \cdot G_k \cdot u_0 \\
 u_2 = F_k^{-1} \cdot G_k \cdot u_1 = (F_k^{-1} \cdot G_k)^2 \cdot u_0 \\
 u_3 = F_k^{-1} \cdot G_k \cdot u_2 = (F_k^{-1} \cdot G_k)^3 \cdot u_0 \\
 \vdots \\
 u_l = F_k^{-1} \cdot G_k \cdot u_{l-1} = (F_k^{-1} \cdot G_k)^l \cdot u_0
 \end{cases} \quad (2)$$

$$(ただし \quad G_k \cdot u_0 = g_k)$$

[注意 1] e^{tA} の連分教近似は

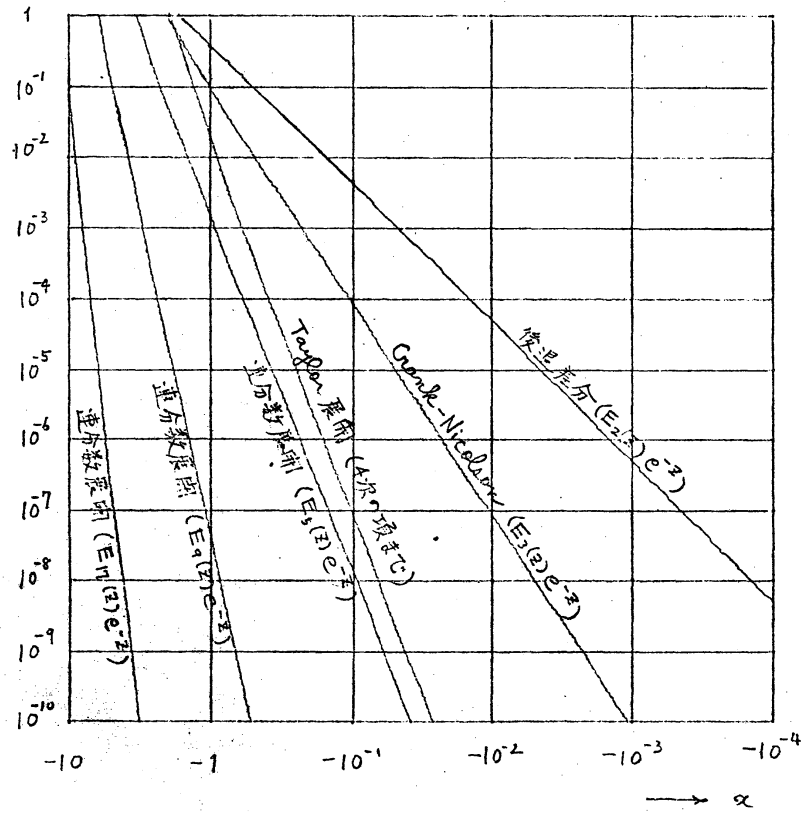
「 n 次元正方行列 A の任意の固有値を λ_j とするとき、
 $\operatorname{Re}(\lambda_j) \leq 0$ ならば $\lim_{k \rightarrow \infty} F_k^{-1}(tA) \cdot G_k(tA) = e^{tA}, (t \geq 0)$ 」
 といふことが証明されている。 ([1])。

[注意 2] 負の実軸 ($\sigma = \alpha < 0$) に沿う e^z の連分教展開の相対誤差を図 1 に示す。 e^z の連分教展開は式 (1), (2) において F, G をスカラーとしたものになる。

$$E_n = |e^z - F_n^{-1}(z) \cdot G_n(z)| \quad (3)$$

複素 z -平面の原点の近くでは、すべての偏角 $0 \leq \arg z < 2\pi$ において E_n の値は近似的に (3) であらわせるので、(1) のアルゴリズムを何回くり返せば ほぼ何桁の精度の答が得られるかが、 $(A + \alpha I)$ の固有値をもとに見当をつけることができる。

図 1

(負の実軸上 $z=x$ の値)

§ 2 実験

例 1 負の実軸上に固有値が存在する場合

$$\left. \begin{array}{l} \lambda_1 = -1 \\ \lambda_2 = -2 \\ \lambda_3 = -3 \\ \lambda_4 = -4 \end{array} \right\} \text{を固有値とする行列 } A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -24 \\ 1 & 0 & 0 & -50 \\ 0 & 1 & 0 & -35 \\ 0 & 0 & 1 & -10 \end{pmatrix}$$

ととって、 $\frac{dU}{dt} = AU$ を解く。

(イ) $\lambda = -1$ に対応する固有ベクトルを u_0 として、

$\alpha = 0, c = 1$ で計算したときの精度

$j \backslash t$	0.001	0.01	0.1	1	10	100
2	6.49	4	2	0	0	0
3	9	7	4	1	0	0
4	10	9	5	1	0	0
5		10	7	2	0	0
6			9~10	3	0	0
7			10	4	0	0
8			10~11	6	0	0
9				7	0	0
10				8	0	0
15				9~10	0	0
20					3	0

(1) のアルゴリズムによる。

$\Delta t = 1$ で $t = 100$ まで		
t	収束したときの n	精度
1 2 8	13	9.49
9 2 41	13	8.49
42 2 100	13	7.49

(2) のアルゴリズムによる

(ロ) $\lambda = -4$ に対応する固有ベクトルを u_0 として

$t = 0.01, c = 1$ に固定。 α の値をかえる。

$j \backslash \alpha$	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5
2	3.49	4	4	11	4	4	3
3	6	7	7		7	7	6
4	9	9	10		10	9	9
5	10	10				10	10

例 2.2 放物型偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}; \quad \text{初期条件} \quad t=0; \quad 0 \leq x \leq 1 \quad \text{で} \quad u = \sin \pi x$$

$$\text{境界条件} \quad t > 0; \quad x=0, x=1 \quad \text{で} \quad u=0 \quad \text{を}$$

行列の発展方程式になおして解く。(解析解 $u = e^{-\pi^2 t} \sin \pi x$)

$[0, 1]$ 区間を 20 等分する。 $0 = x_0, x_1, x_2, \dots, x_{19}, x_{20} = 1$

方程式の右辺は中心差分をとり、 $u(t) = \begin{pmatrix} u(t, x_1) \\ u(t, x_2) \\ \vdots \\ u(t, x_{19}) \end{pmatrix}$ とおくと、

拡散方程式は $u|_0 = u(0)$ で $\frac{du}{dt} = A \cdot u$ とする。

ただし $A = -\frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$; 固有値は

$$\lambda_\delta = -\frac{1}{(\Delta x)^2} 4 \sin^2 \frac{\delta \pi}{2(N+1)}$$

($\delta = 1, 2, \dots, N=19$)

初期条件 $u = \sin \pi x$ は、 A の絶対値最小固有値に対応する固有ベクトルにちょうど対応している。

(イ) 発展方程式の解に対する連分數近似計算の精度

$t \setminus \delta$	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20
$1/800$	4.79	6	9	10	10						
$1/80$	2	3	5	7	8	8	7	7	7	6	
$1/8$	0	0	1	2	3	4	5	4	4	3	$F_{\delta \text{ singular}}$
$10/8$	0	0	0	0	0	0	$F_{\delta \text{ singular}}$				

(1) のプログラムによる

$$\Delta t = \frac{2}{800} \text{ として}$$

$t = \frac{1}{8}$ まで計算 →

t	$2/800$ ~ $6/800$	$8/800$ ~ $16/800$	$18/800$ ~ $30/800$	$32/800$ ~ $100/800$
収束した ところの 精度	6	6	6	6
精度	9~10 桁	9	8~9	8

(2) のプログラムによる

(ロ) 発展方程式の解と

微分方程式の解の比較

① $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ の解析解

② $\frac{du}{dt} = A u$ の真の解

③ $\frac{du}{dt} = A u$ の連分數近似解

として $t = \frac{1}{800}$ のときの

0.00001 程度の値を

右表に示す。

②の①に対する		絶対誤差	相対誤差	
		-5	-4	
δ	③の①に対する	③の②に対する		
	絶対誤差	相対誤差	絶対誤差	相対誤差
2	-4	-3	-4	-4
3	-4~-5	-4	-6~-7	-6
4	"	"	-9~-10	-9
5	"	"	-10~-11	-10
6	"	"	"	-9~-10

(ハ) Crank-Nicolson 法で解く。

$$r = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} = 1 \text{ の場合}$$

$$\left(\Delta t = \frac{1}{400}, \Delta x = \frac{1}{20} \right)$$

t	$\frac{1}{400}$	$\frac{3}{400}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$
	$\sim \frac{2}{400}$	$\sim \frac{10}{400}$	$\sim \frac{2}{4}$	~ 1
精度	4 _桁	3 _桁	2 _桁	1 _桁

(ニ) $t = 0.05$ のとき 3 桁の精度を得るのに必要な

演算回数

連分数 — 「アルゴリズム 1-iteration につき

行列 $\times$ 行列, 連立方程式を解くこと, 1 回ずつ

2 度くり返す。

Crank-Nicolson — 「1 時刻行につき 連立方程式を解く事 1 回」

20 時刻行必要。 ($\Delta t = \frac{1}{400}$)

陽解法 — 「1 時刻行につき 2N 回の乗算」

200 時刻行必要。 ($\Delta t = \frac{1}{4000}$)

(ホ) Varga により 次の式が示されている。 ([1], [2]).

$$F_j(tA) = \begin{cases} I + \dots + (-1)^k \frac{(k-1)!}{(2k-1)!} (tA)^k & ; j = 2k \\ I + \dots + (-1)^k \frac{k!}{2k!} (tA)^k & ; j = 2k+1 \end{cases}$$

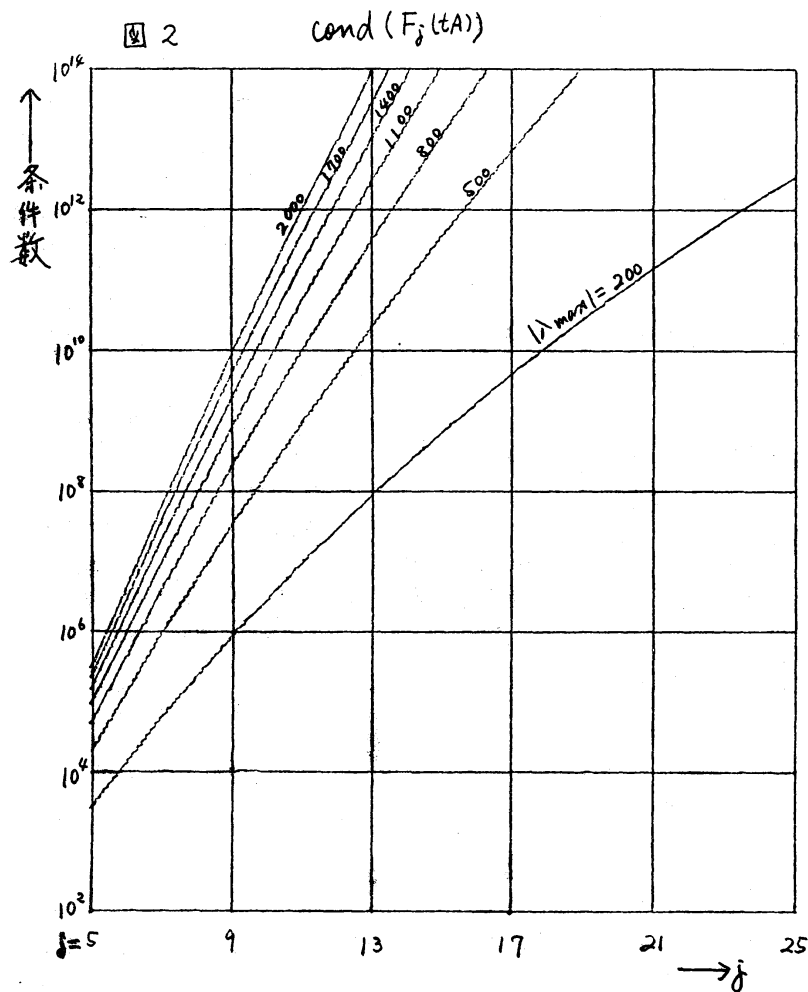
tA の絶対値最大固有値を $\lambda_{\max}$ とすると, 上の式は $F_j(tA)$ の最大固有値が $\frac{(-1)^k k!}{2k!} (\lambda_{\max})^k$ に近づくことを示す。

$$\frac{k!}{(2k)!} \approx \frac{1}{\sqrt{2} 4^k e^{k(\log k - 1)}} \quad \text{ゆえ} \quad \text{cond}(F_j(tA)) \approx \frac{|\lambda_{\max}|^k}{\sqrt{2} 4^k e^{k(\log k - 1)}}$$

(イ) に即して計算してみると

$$\lambda_{\max} = -\frac{t}{(\Delta x)^2} 4 \sin^2 \frac{N}{2(N+1)} \pi \approx -1600 \cdot t \quad (N=19, \Delta x = \frac{1}{10})$$

ゆえに $\text{cond}(F_j(tA)) \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-k(\log k - \log t - 7)}$



連立方程式を解くとき、大まかにいって、条件数の指数の分くらい精度が落ちるので、上の図でわかるように j を大きくしていても意味のなくなることがある。

また、 $\log k = \log t + 7$ をみたす k を境に、 e の肩は負となるため条件数は急激に小さくなる筈であるが、

$\lambda_{\max} = -200$ のとき $k \doteq e^5 \doteq 10^{2.15}$ ゆえ $j = 300$ ($t = \frac{1}{8}$ のとき)

$\lambda_{\max} = -2000$ のとき $k \approx e^{\tau^2} \approx 10^{3.1}$ ゆえ $j \approx 2000$ ($t = \frac{10}{8}$ のとき)
 であって、(1) のアルゴリズムを 300 回もくりかえすのは
 時間がかかりすぎる。

ex. 3 虚軸上に固有値が存在する場合

$\pm i, \pm 2i$ を固有値とする行列 $A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \end{pmatrix}$ に対し

$$\frac{dU}{dt} = AU, \quad U_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ を解く。 解は } \begin{pmatrix} \sin t \\ \cos t \\ \sin 2t \\ \cos 2t \end{pmatrix}$$

$\Delta t = 0.1$ で $t = 1.6$ まで		
t	収束したとき の j	精度
0.1 ~ 0.5	9	10 ~ 11 桁
0.6 ~ 1.0	9	9 ~ 10
1.0 ~ 1.4	9	9
1.5 ~ 1.6	9	8 ~ 9

$\Delta t = 1$ で $t = 2$ まで		
t	収束したとき の j	精度
1.0	16	10 桁
2.0	16	9 ~ 10

(いずれも (2) の
アルゴリズムに
よる。)

ex. 4 双曲型偏微分方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

初期条件 $t=0, 0 \leq x \leq 1$ のとき

$$u = \frac{1}{8} \sin \pi x, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = 0$$

境界条件 $t \geq 0, x=0, x=1$ のとき

$$u = 0$$

(解析解は $u(t, x) = \frac{1}{8} \sin \pi x \cdot \cos \pi t$) を解く。

$\frac{\partial u}{\partial t} = p$, $\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ とすると 方程式は $\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ p \end{pmatrix}$ となる。

$[0, 1]$ 区間を 10 等分して、2 階微分に対して中心差分をとると、波動方程式は 次のような行列の発展方程式になる。

$$\frac{dU}{dt} = AU \quad \text{ただし} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & I \\ S & 0 \end{pmatrix}_{18 \times 18}, \quad S = \frac{1}{4\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & \ddots & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}_{9 \times 9}$$

$$U(t) = \begin{pmatrix} u(t, x_1) \\ \vdots \\ u(t, x_9) \\ u_t(t, x_1) \\ \vdots \\ u_t(t, x_9) \end{pmatrix}, \quad U_0 = U(0)$$

(A の固有値は S の固有値の平方根)
(ゆえ純虚数である。)

(イ) 波動方程式の解析解に対する、発展方程式の連分數近似解の精度、および 差分近似による陽解法の精度

方法	連分数近似解の精度										陽解法の精度
$t \backslash \delta$	2	3	4	5	6	7	8	9	10		
0.001	5桁	7	7	7						7桁	
0.005	3	5	5	5						5	
0.01	3	5	5	5						5	
0.1	1	2	3	3	3	3	3	3		10~11	
1.0	0	0	0	1	1	3	2	4	3		

(ロ) 波動方程式の解析解に対する、発展方程式の真の解の精度

t	0.001	0.01	0.1	1.0
精度	7 桁	5	3	4

(ハ) 発展方程式の真の解に対する、連分教近似解の精度.

① $\frac{dw}{dt} = Aw$ の真の解 $\exp(tA) \cdot u_0$.

② $\exp(tA) \cdot u_0$ に対する (1) のアルゴリズムによる近似解とすると、②の①に対する精度を次表に示す。

$t \backslash \delta$	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20
0.001	5桁	10	10	10							
0.01	3	7	7	10	11						
0.1	1	3	3	5	6	9	10	10			
1.0	0	0	0	1	1	3	2	4	3	7	7

参考文献

- [1] 森 正武; 拡散方程式の連分教展開による数値解法
— 行列の指数関数の連分教近似 —, 日本数学会応用
数学科分科会講演予稿 (1973. 10) P. 130-135
- [2] R. S. Varga; On higher order stable implicit
method for solving parabolic partial differential
equations, J. Math. and Phys. 40 (1961) P. 220-231
- [3] 森 正武; Approximation of exponential function
of a matrix by continued fraction expansion,
数理解析研究所講究録 199 (1973) P. 98-114