

# 微分方程式の高精度・汎用アルゴリズム HIDM

文部省 核融合科学研究所 渡辺二太 (Tsuguhiko WATANABE)

区間両端の微係数も用いる差分化技法を導入して、微分方程式に対する新しい数値計算手続きを構築した。この計算手続きで構築されたプログラム (HIDMDV) は、硬い微分方程式、微分・代数方程式も解くことができる。

非線型境界値問題値、非線型固有値問題を解くためにトーナメント式シューティング法とHIDMDVとを結合した新しい計算機プログラム (HIDMEG) も作成した。計算機プログラムHIDMDV, HIDMEGの高い性能は数値計算例によって示されている。

## 1 序

電子計算機とアルゴリズムの発達は数値解析の活躍の場を大きく広げている。とくに常微分方程式を初期値問題として解くことは広範な分野で日常的に行なわれ、研究・開発の現場では欠かすことの出来ない手段となっている。

常微分方程式で記述された初期値問題に対しては、多様な計算手続きが開発され、有効性の理論的裏付けと実証、および汎用プログラムの整備は極めて高いレベルにある[1]。しかしながら、具体的な問題に直面したときには、現在の流通プログラムでは様々な制約を受ける。例えば、数値計算の教科書、あるいは電子計算機のライブラリルーチンが標準形として取り上げている微分方程式は

$$\phi'(t) = F(\phi(t), t), \quad (1)$$

$$\left( \phi'(t) = \frac{d\phi(t)}{dt} \right)$$

の形式である。ところが、方程式(1)よりも、もっと一般的な関数関係式

$$L(\phi(t), \phi'(t), t) = 0, \quad (2)$$

が解けることを要求されことも多い。

一般工業製品で最も重要な項目は品質とされている。数値計算結果についても品質の重要性が指摘されるようになった。既知の現象の再現を目指すシミュレーション計算ならば数値計算結果の精度に対する要求はそれほどには厳しくないであろう。計算結果の妥当性は実際の現象と比較で評価できる。未知の現象に対する計算機解析には計算精度が本質的に重要となる。計算精度に不安が残れば数値計算の示す新しい結果を主張しにくくする。ただしここでは、より一層重要な概念はアルゴリズムの品質であることを指摘しよう。HIDM (Higher Order Implicit Difference Method)[2,3,4,5,6] は高品質アルゴリズムの実現を目標に開発を進めてきた。

高品質アルゴリズムが具えるべき第一の条件は高精度の数値計算結果を保証することである。HIDM は高次数差分表現の採用で数値計算結果の高精度を実現する。高品質アルゴリズムが具えるべき第二の条件

は広い適用可能性を持つことである。そのためには高い数値安定性が不可欠となる。HIDM は陰的差分表現の採用で A-安定性を確保する。また、広い適用可能性を実現するため HIDM は関数関係式 (2) が解けるように構築されている。さらに具体的問題の解析に当たっては非線形境界値問題、非線形固有値問題の解けることが要求されることも多い。HIDM はトーナメント式多分割シューティング法を開発しこの要求に応えた。高品質アルゴリズムが具えるべき第三の条件は利用法が簡便なことである。HIDM はサブルーチン呼出しで利用できるように設計されている。さらに、初期値問題を解くときには積分ステップ幅の自動調節機能が利用できる。高品質アルゴリズムが具えるべき第四の条件は必要とされる計算機資源が大きくなりすぎないことである。この条件は境界値問題を解くときに問題として浮かび上がる。HIDM は多分割シューティング法を採用しているので必要とれる主記憶量は少量ですみ、また並列計算による高速化の道も開けている。

関数関係式 (2) は標準的な微分方程式 (1) は勿論のこと、現代の数値解析の分野で活発な研究が進められている微分・代数方程式 (Differential Algebraic Equation) も包含する。微分・代数方程式を解くためには関数関係式 (2) を区間端点においても解くことが不可欠となる (通常微分方程式であるならば導関数値が自動調節されるので (2) 式を区間端点で解く必要はない)。そのため以下に述べる差分化技法には区間両端の微係数が組み込まれることになる。この点でこれまでに発表されてきた HIDM の差分化技法 [2,3,4] とは異なるが高次数の陰的差分技法を用いること、関数値の設定されている等間隔格子点上とは異なる地点で微

分方程式を解くことなど共通点も多いので HIDM の呼び名を踏襲しよう。

この論文では関数関係式 (2) で記述された初期値問題および固有値問題・境界値問題を解くことのできる計算手続きと、計算機プログラムとについて述べる。

## 2 HIDM の差分化技法

微分方程式を解くためには関数値から微分値を表現すること—微分の差分化表現—が必要である。簡単のためにまず最初は最低次の HIDM の差分化技法について述べる。

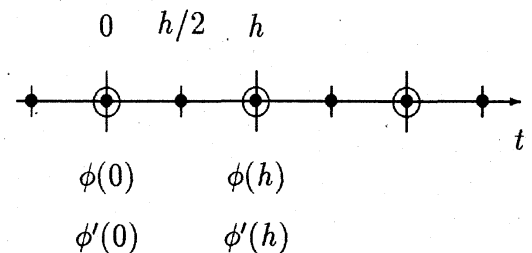


Fig.1 関数値の設定されている格子点 (○) と方程式 (2) を解く地点 (●) の関係。

Fig. 1 に示すように  $t$  軸に沿って等間隔 (区間幅を  $h$  とする) に設定された格子点を考える。区間端点における方程式 (2) も解かせるため、この格子点上の関数値と導関数値を  $\phi(j \cdot h)$ ,  $\phi'(j \cdot h)$ , ( $j = 0, 1$ ) を用いた差分化技法を導入する。微分方程式の場合は、 $\phi(0)$  は初期条件として値を指定できるので、残り 3 個の関数値  $\phi'(0)$ ,  $\phi(h)$ ,  $\phi'(h)$  を決定するためには (2) 式を  $t = 0, h/2, h$  の 3 地点で解けばよい。このとき必要となる関数値  $\phi(h/2)$ ,  $\phi'(h/2)$  を与える差分表現は

$$\phi\left(\frac{h}{2}\right) = \frac{1}{2}(\phi(0) + \phi(h))$$

$$+\frac{h}{8}(\phi'(0)-\phi'(h))+O(h^4) \quad (3)$$

$$\phi'\left(\frac{h}{2}\right)=-\frac{3}{2h}(\phi(0)-\phi(h))$$

$$-\frac{1}{4}(\phi'(0)+\phi'(h))+O(h^4) \quad (4)$$

となる。

関係式 (2) が代数方程式となっているとき ( $\phi(0)$  の値を初期条件として指定できないとき) をつぎに検討しよう。このときは方程式 (2) は関数値  $\phi(0)$  の決定のため使用され、 $\phi'(0)$  を決定する関係式が存在しなくなる。そのため、関係式 (2) とは独立でかつ (2) 式と矛盾しない方程式を追加して  $\phi'(0)$  を決定する。最も簡単な場合は、

$$\left.\frac{dL(\phi, t)}{dt}\right|_{t=h}=0 \quad (5)$$

が追加方程式となる。

つぎに (3), (4) で導入された HIDM の差分化技法の安定性と精度とを調べる。そのために方程式、

$$\frac{d\phi}{dt}=\mu\phi \quad (6)$$

に対して上記の差分化技法を適用しよう。つぎの関係式が導かれる。

$$\phi(h)=\frac{12+6\mu h+(\mu h)^2}{12-6\mu h+(\mu h)^2}\phi(0) \quad (7)$$

この関係式は  $\operatorname{Re}[\mu h] < 0$  のときは常に

$$\left|\frac{\phi(h)}{\phi(0)}\right|<1 \quad (8)$$

の関係を保証しているので (3), (4) で導入された差分化技法は A-安定といえる。さらに  $\mu$  が純虚数のときは全ての実数  $h$  に対して

$$\left|\frac{\phi(h)}{\phi(0)}\right|=1 \quad (9)$$

を成立させているので (3), (4) で導入された差分化技法はシンプレクティック積分法となっていることも確かめられる。差分化技法の精度を調べるため (7) 式で与えられた表式を解析解  $\exp(-\mu h)$  と比較するとつぎのようになる ( $\phi(0)=1$  とする)。

$$\exp(-\mu h)-\phi(h)=-\frac{(\mu h)^5}{720}+\cdots(10)$$

すなわち、差分化技法 (3), (4) の下で得られる解に含まれる誤差は  $h^5$  のオーダーとなる。

差分化技法 (3), (4) は A-安定なシンプレクティック積分法となっている点で極めて興味深いものとなっているが、この方式にさらに一層の改善—計算の高速化と、差分化技法の高精度化—を加えよう。

物理学あるいは工学的問題の多くは、2 階微分方程式で記述される。

$$L(\phi(t), \phi'(t), \phi''(t), t)=0, \quad (11)$$

通常の数値計算の手続きにおいては新しい変数  $\psi$  を導入し (11) 式を、

$$L(\phi(t), \phi'(t), \psi'(t), t)=0, \quad (12)$$

$$\psi=\phi'(t) \quad (13)$$

と置き換えて数値計算させている。このため殆ど自明ともいえる関係式 (13) までは数値的に解かせるという無駄を繰り返すことになる。よって以下では (12) 式のような置き換えをせずに、直接 (11) 式が解けるようにプログラムを設計することで計算速度の向上を実現することにしよう。差分の高精度化も同時に達成させるため、プログラム HIDMDV, HIDMEG は Fig.2 に示す差分化技法を採用して構築された。

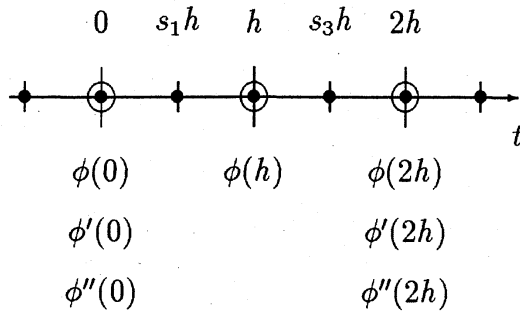


Fig.2 プログラムH I D M D V, H I D M E Gが採用している差分化技法. 関数値の設定されている格子点 (○) と方程式 (2) を解く地点 (●) の関係.

差分化公式はつぎのようになる.

$$\begin{aligned} \phi(s \cdot h) = & \sum_{j=0}^2 C_j(s) \phi(j \cdot h) \\ & + h(\alpha_0(s) \phi'(0) + \alpha_2(s) \phi'(2h)) \\ & + h^2(\beta_0(s) \phi''(0) + \beta_2(s) \phi''(2h)) \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi'(s \cdot h) = & \frac{1}{h} \sum_{j=0}^2 D_j(s) \phi(j \cdot h) \\ & + (\gamma_0(s) \phi'(0) + \gamma_2(s) \phi'(2h)) \\ & + h(\delta_0(s) \phi''(0) + \delta_2(s) \phi''(2h)) \quad (15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi''(s \cdot h) = & \frac{1}{h^2} \sum_{j=0}^2 E_j(s) \phi(j \cdot h) \\ & + \frac{1}{h}(\epsilon_0(s) \phi'(0) + \epsilon_2(s) \phi'(2h)) \\ & + (\eta_0(s) \phi''(0) + \eta_2(s) \phi''(2h)) \quad (16) \end{aligned}$$

微分方程式を解く地点の座標値  $s = s_1, s_3$  (Fig. 2 参照) は次のようになる.

$$s_1 = 1 - \sqrt{\frac{3}{7}}, \quad s_3 = 1 + \sqrt{\frac{3}{7}} \quad (17)$$

差分化のための係数  $C_j(s)$ ,  $D_j(s)$ ,  $E_j(s)$ ,  $\alpha_i(s)$ ,  $\beta_i(s)$ ,  $\gamma_i(s)$ ,  $\delta_i(s)$ ,  $\eta_i(s)$ , ( $j = 0, 1, 2$ ), ( $i = 0, 2$ ) は (14), (15), (16) の右辺の  $\phi$  の値を  $t = s \cdot h$  の周りでテーラー展開した関係式から一意に決定することができる. 微分方程式を解く地点の座標値  $s = s_1, s_3$  の値は 2 階微係数の表現 (16) 式の打切誤差が  $h^6$  のオーダーとなる条件から定まる. これらの係数の具体的な値は付録に示す.

つぎに方程式 (6) を解くことで, この差分化技法の安定性と精度とを検定しよう. 方程式 (6) は 2 階微係数が含まれていないので, 追加方程式を導入しなければならない. 追加方程式の具体的な表式は,

$$\left[ \frac{d^2 \phi}{dt^2} - \mu \frac{d\phi}{dt} \right]_{t=2h} = 0 \quad (18)$$

で与えられる. この方程式 (18) と  $t = 0, s_1h, h, s_3h, 2h$  における方程式 (6) を用いることによりつぎの関係式が導かれる ( $\phi(0) = 1$  とする).

$$\begin{aligned} \phi(2h) = & \frac{630 + 525\xi + 180\xi^2 + 30\xi^3 + 2\xi^4}{630 - 735\xi + 390\xi^2 - 120\xi^3 + 22\xi^4 - 2\xi^5} \quad (19) \end{aligned}$$

ただし,  $\xi \equiv \mu h$  である.  $|\phi(2h)|$  の複素  $\xi$  面における等高線図を Fig. 3 に示す ( $\phi(2h)$  は差分化技法の安定性因子と呼ばれる事もある).

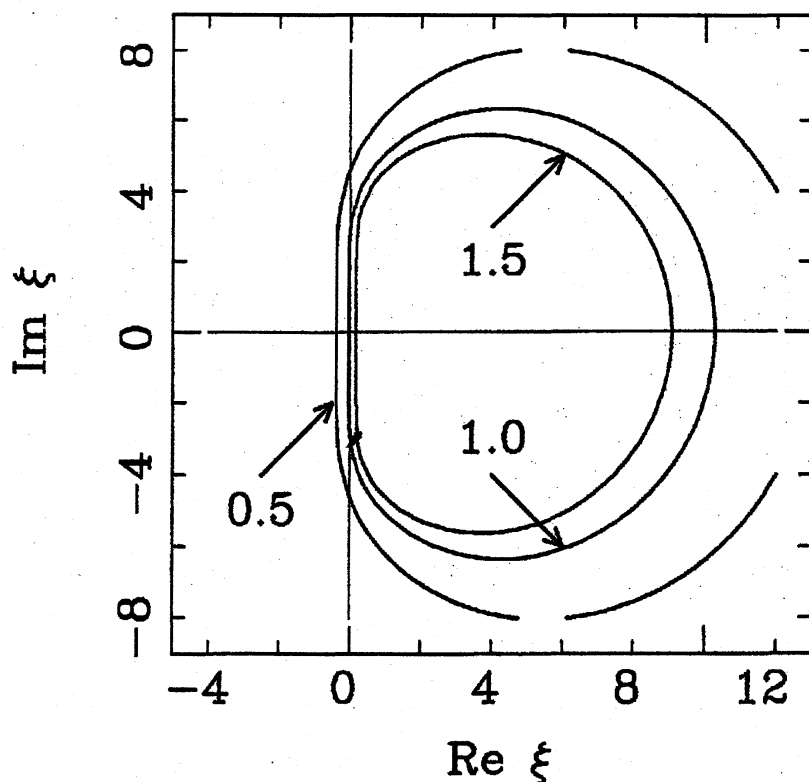


Fig.3 差分化技法(14)~(16)の安定性因子 $|\phi(2h)|$ の複素 $\xi(=\mu h)$ 面における等高線図。差分化技法(14)~(16)はA-安定であることが示されている。

この図より(14)~(16)に示した差分化技法はA-安定であることが確かめられる(シンプレクティック積分法の特質は存在しない)。数値積分に含まれる誤差は、

$$\exp(2\mu h) - \phi(2h) = -\frac{(\mu h)^9}{99,225} + \dots \quad (20)$$

の関係式より $h^9$ のオーダーであることが示される。

解くべき方程式が2階微係数を含むときの解の精度を念のため検査しておこう。モデル方程式としては単振動を記述する方程式

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} + \omega^2\phi = 0 \quad (21)$$

を取り上げよう。この方程式を初期条件

$$\phi(0) = \cos \theta_0, \quad \phi'(0) = -\omega \sin \theta_0$$

の下で解く。この方程式を(14)~(17)の差分化技法の下で解くと $\phi(2h)$ の値が求まり、この結果を解析解 $\cos(\theta_0 + 2\omega h)$ と比べると次のようになる。

$$\begin{aligned} \cos(\theta_0 + 2\omega h) - \phi(2h) = & \\ & -2 \sin \theta_0 \frac{(h\omega)^9}{99,255} \\ & - \cos \theta_0 \frac{(h\omega)^{10}}{99,255} + \dots, \end{aligned} \quad (22)$$

すなわち、2階微係数を含む微分方程式の数値解に含まれる誤差は $h^9$  ( $\phi'(t) \neq 0$ のとき)、または $h^{10}$  ( $\phi'(t) = 0$ 近傍のとき)となる。

Table 1 変数  $\phi_i$  を決定する方程式と  $JVR(i)$  の値および追加方程式の関係

| $\phi_i$ を決定する方程式 | $JVR(i)$ | 追加方程式の個数 | 追加方程式の例                                                                                                             |
|-------------------|----------|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 代数方程式             | 0        | 2        | $\left. \frac{dL_i(\phi, t)}{dt} \right _{t=2h} = 0, \quad \left. \frac{d^2 L_i(\phi, t)}{dt^2} \right _{t=2h} = 0$ |
| 1 階微分方程式          | 1        | 1        | $\left. \frac{dL_i(\phi, \phi', t)}{dt} \right _{t=2h} = 0$                                                         |
| 2 階微分方程式          | 2        | 0        | 不要                                                                                                                  |

次に (11) 式に示されているように、2 階微係数が含まれていることを前提に構築された計算手続き **HIDM** が、他の形式の微分方程式、あるいは微分・代数方程式を解く方法について記そう。2 階を越える微係数が含まれているときは通常の手続きと同じように、新しい変数を導入することで最高階の微係数を 2 階（またはそれ以下）に限定する。つぎに、各変数の特質をユーザーは配列  $JVR(i)$ 、( $i = 1, N : N$  は変数の総数) を使ってプログラムに通知する。すなわ  $i$  番目の変数が、代数方程式で決定されるときは  $JVR(i) = 0$  と指定し、1 階微分方程式で決定されるときは  $JVR(i) = 1$  と指定し、2 階微分方程式で決定されるときは  $JVR(i) = 2$  と指定する。その上で、1 階微分方程式で決定される変数が存在するときは  $t = 2h$  で解く方程式を一つ追加する。最も簡単な場合の追加方程式は

$$\left. \frac{dL_i(\phi, \phi', t)}{dt} \right|_{t=2h} = 0 \quad (23)$$

で与えられる。代数方程式で決定される変数が存在するときは  $t = 2h$  で解く方程式を二つ追加する。最も簡単な場合の追加方程式は

$$\left. \frac{dL_i(\phi, t)}{dt} \right|_{t=2h} = 0 \quad (24)$$

$$\left. \frac{d^2 L_i(\phi, t)}{dt^2} \right|_{t=2h} = 0 \quad (25)$$

で与えられる。 $t = 2h$  の地点に追加される方程式の総数は、

$$\sum_{i=0}^N (2 - JVR(i))$$

となる。以上をまとめると Table 1 のようになる。

初期値問題を解く汎用プログラムH I D M D Vは積分ステップ幅自動調節機能が組み込まれている。直前の計算結果(1ステップ分:時刻 $t-2h$ ,  $t-h$ ,  $t$ における関数値と微係数等)を主記憶上に保持しておき, この値と計算結果(1ステップ分:時刻 $t$ ,  $t+h$ ,  $t+2h$ における関数値と微係数等)とを用いて計算結果に含まれる差分化誤差を計算する。この差分化誤差を用いて解に含まれる誤差を推定し, 誤差が基準を越えているときはステップ幅を縮小して再計算し, 誤差が要求精度より小さいことが2度連続すれば, ステップ幅を増加させる。

非線形境界値問題, あるいは非線形固有値問題をH I D Mの手続きで解くためにはシューティング法を利用する。シューティング法は少ない計算機主記憶量のもとで, 高い空間分解能を持つ解を効率的に求めることができるのが特徴である。ただし, 単純なシューティング法は強い数値的不安定に遭遇し計算不能に陥る場合が少なくない。この数値不安定はトーナメント式多分割シューティング法[3]で完全に克服できる。よってここでもH I D Mとトーナメント式多分割シューティング法とを組み合わせ, 非線形境界値問題, あるいは非線形固有値問題を解く汎用プログラムH I D M E Gを作成した。

以下では初期値問題を解く汎用プログラムH I D M D Vと非線形境界値問題・非線形固有値問題を解く汎用プログラムH I D M E Gの数値計算例を示そう。

### 3 H I D M D VとH I D M E Gの数値計算例

ここでは前節に述べた手続きで構築されたプログラムの高い性能を数値計算例で実証しよう。使用した計算機は核融合科学研究所に設置されている大型汎用機F U J I T S U M-380であり, 計算は全て倍精度(64ビット)で行う。

#### 3.1 微分・代数方程式の数値計算例

微分・代数方程式の例としては, つぎの方程式を取り上げる。

$$\frac{dx}{dt} + z \frac{dy}{dt} - (y+1) \frac{dz}{dt} + x = 1 + \sin(t), \quad (26)$$

$$(z+1) \frac{dx}{dt} + x \frac{dy}{dt} = \exp(-t), \quad (27)$$

$$x y z = \frac{\exp(-t) \sin(2t + \gamma)}{2}, \quad (28)$$

初期条件は次式で指定しよう。

$$x(0) = 1, \quad z(0) = 1$$

$\gamma = 0$  のときは, 方程式(26), (27), (28)には解析解の存在することが知られている[7]。

$$x(t) = \exp(-t),$$

$$y(t) = \sin(t),$$

$$z(t) = \cos(t),$$

$x$ ,  $z$ は1階微分方程式で決定され $y$ は代数方程式で決定されるとみなすことができるので, 追加方程式は合計4個となる。 $\gamma = 0$ ,  $-0.1$ の場合の数値計算結果をFig.4, Fig.5に示す。

Fig.4

微分・代数方程式 (26)~(28) ( $\gamma = 0$  の場合) の数値計算例. 数値計算で求められた  $x, y, z$  (図 a,b,c) とそれに含まれる誤差 (図 d,e,f) が示されている.

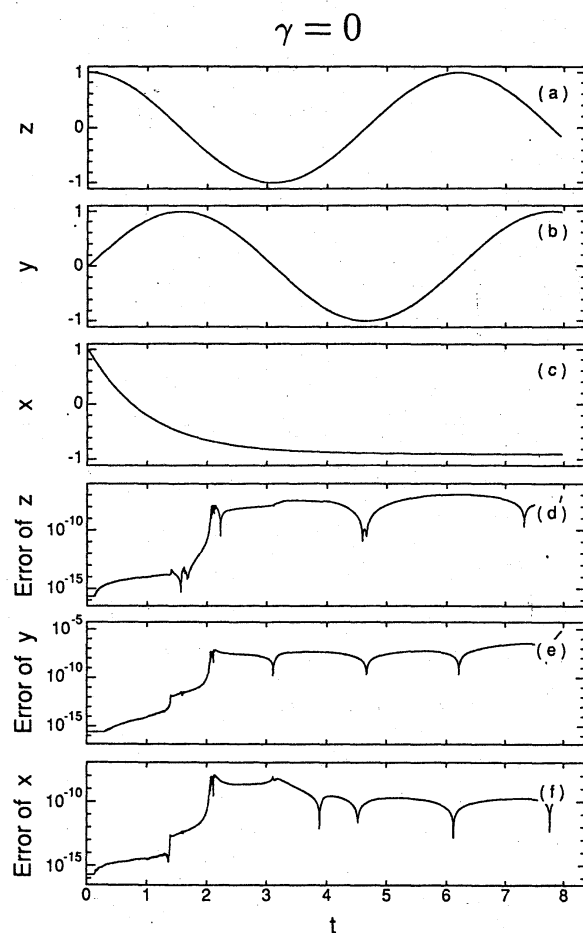
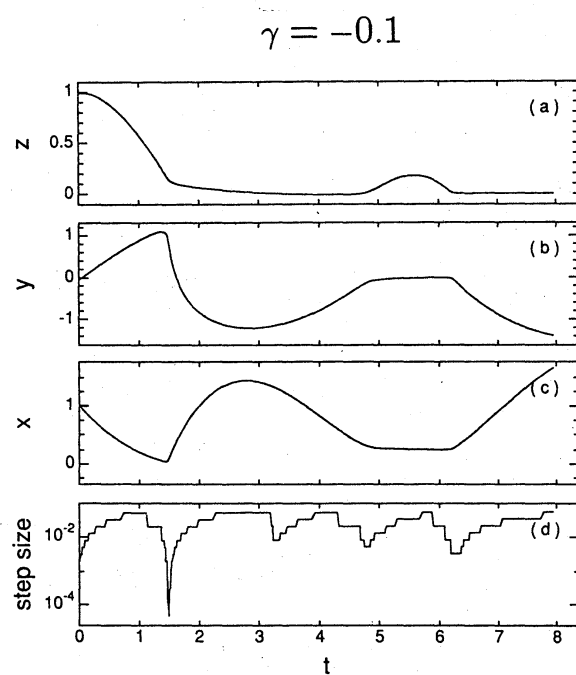


Fig.5

微分・代数方程式 (26)~(28) ( $\gamma = -0.1$  の場合) の数値計算例. 数値計算で求められた  $x, y, z$  (図 a,b,c) と, 自動調節されているステップ幅 (図 d) の変動が示されている.



### 3.2 Van der Pole 方程式の数値計算例

つぎに硬い微分方程式の一例として Van der Pole 方程式

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} - \epsilon(1 - \phi^2)\frac{d\phi}{dt} + \phi = 0, \quad (29)$$

$$1,000 \leq \epsilon \leq 5,000, \quad 0 \leq t \leq 10^4,$$

を初期条件

$$\phi(0) = 1, \quad \frac{d\phi(0)}{dt} = 0$$

の下で解こう.  $\epsilon \gg 1$  のときは方程式 (30) の解は急速にリミットサイクル解に漸近するので, 解の周期  $T$  を解析解 (漸近解) [8]

$$T \simeq c_1 + c_2\epsilon^{-1/3} + c_3\frac{\ln \epsilon}{\epsilon} + c_4\epsilon^{-1} + \dots \quad (30)$$

$$c_1 = 1.613706 \dots$$

$$c_2 = 7.01432 \dots$$

$$c_3 = -22/9$$

$$c_4 = 0.0087 \dots$$

と比較することで解の正確さを検定しよう. また, この方程式を利用して H I D M D V と D O D G E [9] との性能比較を行おう. D O D G E は硬い微分方程式を解くことのできるライブラリルーチンとして計算機メーカーから提供されているもので, 後退微分法を用いて構築されている. 計算結果を Fig.6, Fig.7 に示す. H I D M D V は D O D G E に比べて約 10 倍の高速化を実現し更に D O D G E の限界を越えて計算可能領域を拡大していることが確かめられた.

### 3.3 非線型固有値問題の数値計算例

ここでは H I D M E G を用いて非線型固有値問題を解く. つぎの方程式

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \left( \frac{\lambda \cos^2(x)}{1 - \lambda \sin(x)} - \sin(x) \right) \lambda \phi^2, \quad (31)$$

を境界条件

$$\phi(0) = \phi(6\pi) = 1, \quad \frac{d\phi(6\pi)}{dx} = 0.99$$

のもとで解こう. 未定の定数  $\lambda$  が固有値として扱われる. この方程式の解析解は

$$\lambda = 0.99, \quad \phi(x) = \frac{1}{1 - \lambda \sin(x)} \quad (32)$$

で与えられる. 相対誤差の最大値が積分ステップ幅  $h$  によってどのように変化するのかを Fig.8 に示そう. 相対誤差が最大となるのは関数値が極大となる地点  $x = \pi/2, 5\pi/2, 9\pi/2$  近傍なのでこの地点では解の導関数が 0 となる. このため (22) 式に示されているように解の相対誤差のステップ幅依存性はほぼ  $h^{10}$  に比例した.

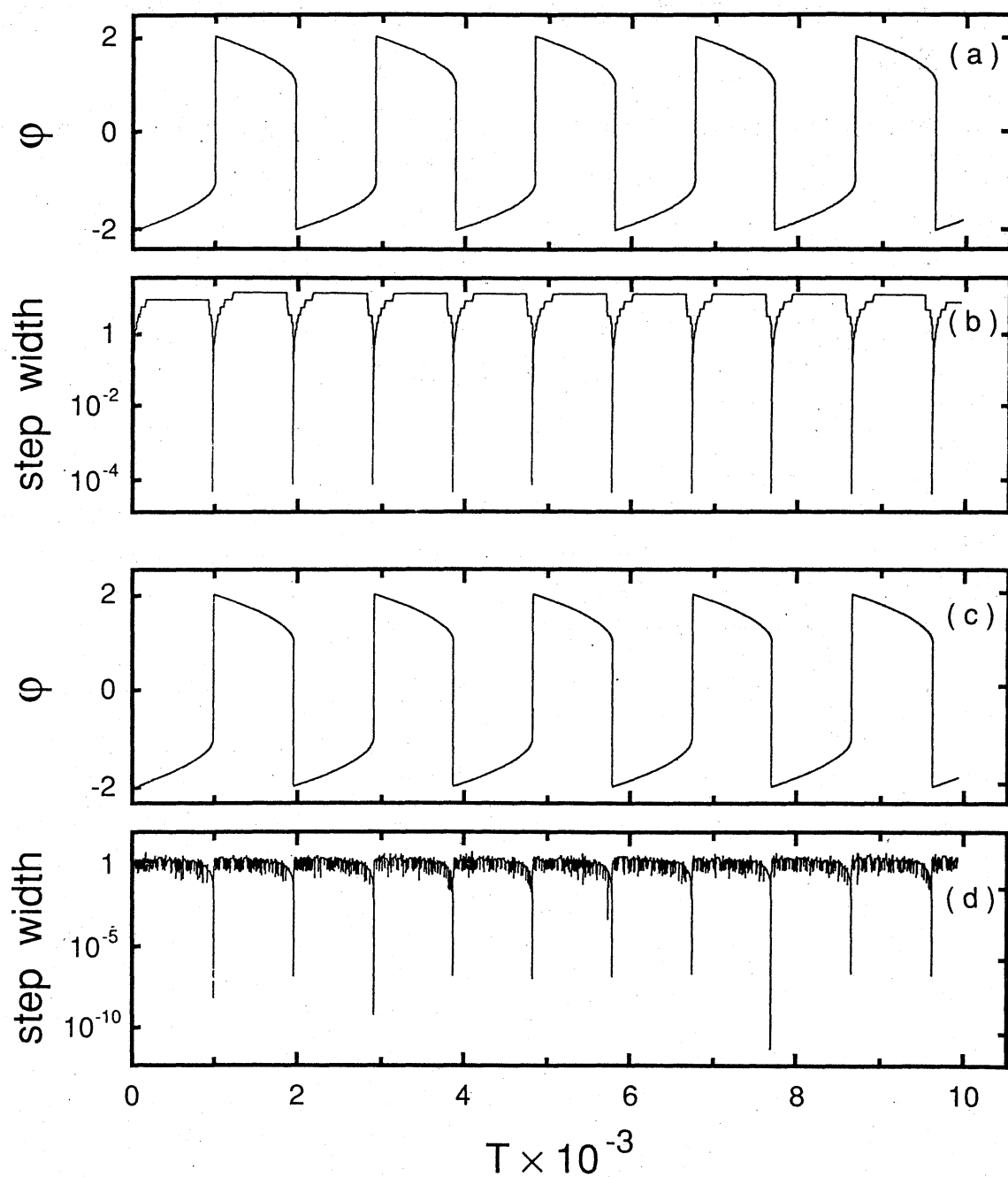
つぎに硬い微分方程式で記述された非線型固有値問題の一例として Van der Pole 方程式 (29) の周期解 (リミットサイクル解) を求めよう. 時刻を周期  $T$  で規格化した量をあらためて  $t$  と表そう. 解くべき方程式は次のようになる.

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} - T\epsilon(1 - \phi^2)\frac{d\phi}{dt} + T^2\phi = 0, \quad (33)$$

境界条件は次式で与えられる.

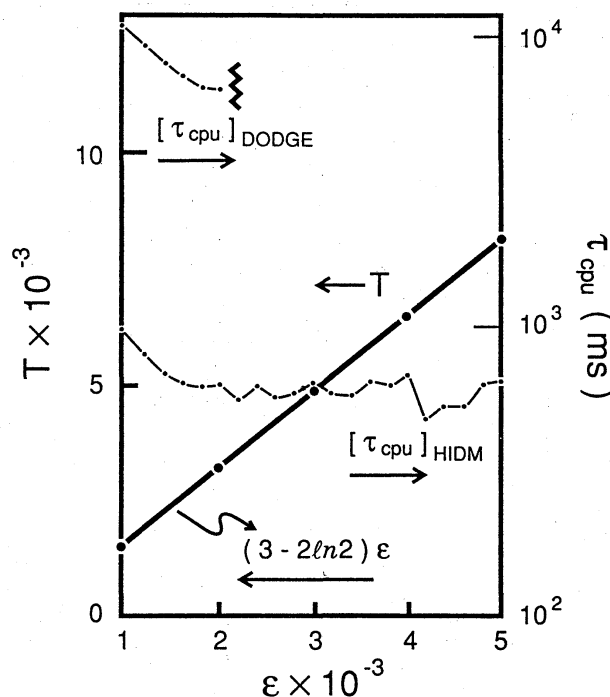
$$\phi(0) = \phi(1) = \frac{1}{2}, \quad \frac{d\phi(0)}{dt} = \frac{d\phi(1)}{dt}$$

周期  $T$  は固有値として扱われる. 計算結果を Fig.9 に示す.

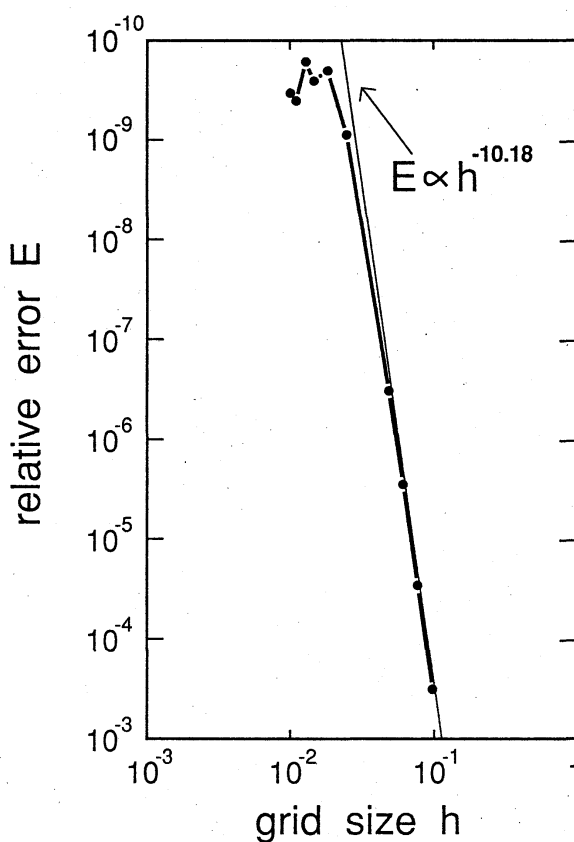


**Fig.6** Van der Pole 方程式 ( $\epsilon = 1, 200$  の場合) のH I DMDV (図 a,b) と DODGE (図 c,d) 数値計算結果が示されている. 関数 $\phi$ の挙動 (図 a,c) については両者の間に差を見出すことは出来ない. しかしながらステップ幅の変動状況 (図 b,d) はH I DMDVのステップ幅調節方法がはるかに合理的であることを示している.

**Fig.7**  $\epsilon$ が極端に大きい時の Van der Pole 方程式に対する H I DMDV と D O D G E の数値計算結果. H I DMDV の数値計算結果が与えたりミットサイクルの周期が解析解と比較されている. H I DMDV は全領域 ( $\epsilon \leq 5,000$ ) で正しい結果を与えているのに対して, D O D G E は  $\epsilon > 2,000$  の領域で正しい解を与えることに失敗している. 計算に用いた c p u 時間も両者について比較がなされ, H I DMDV は D O D G E に比べて約 10 倍の高速性能を有していることが示された.



**Fig.8** 非線型固有値問題 (31) 式の H I D M E G による数値計算結果. 相対誤差の最大値と積分ステップ幅  $h$  との関係が示されている.



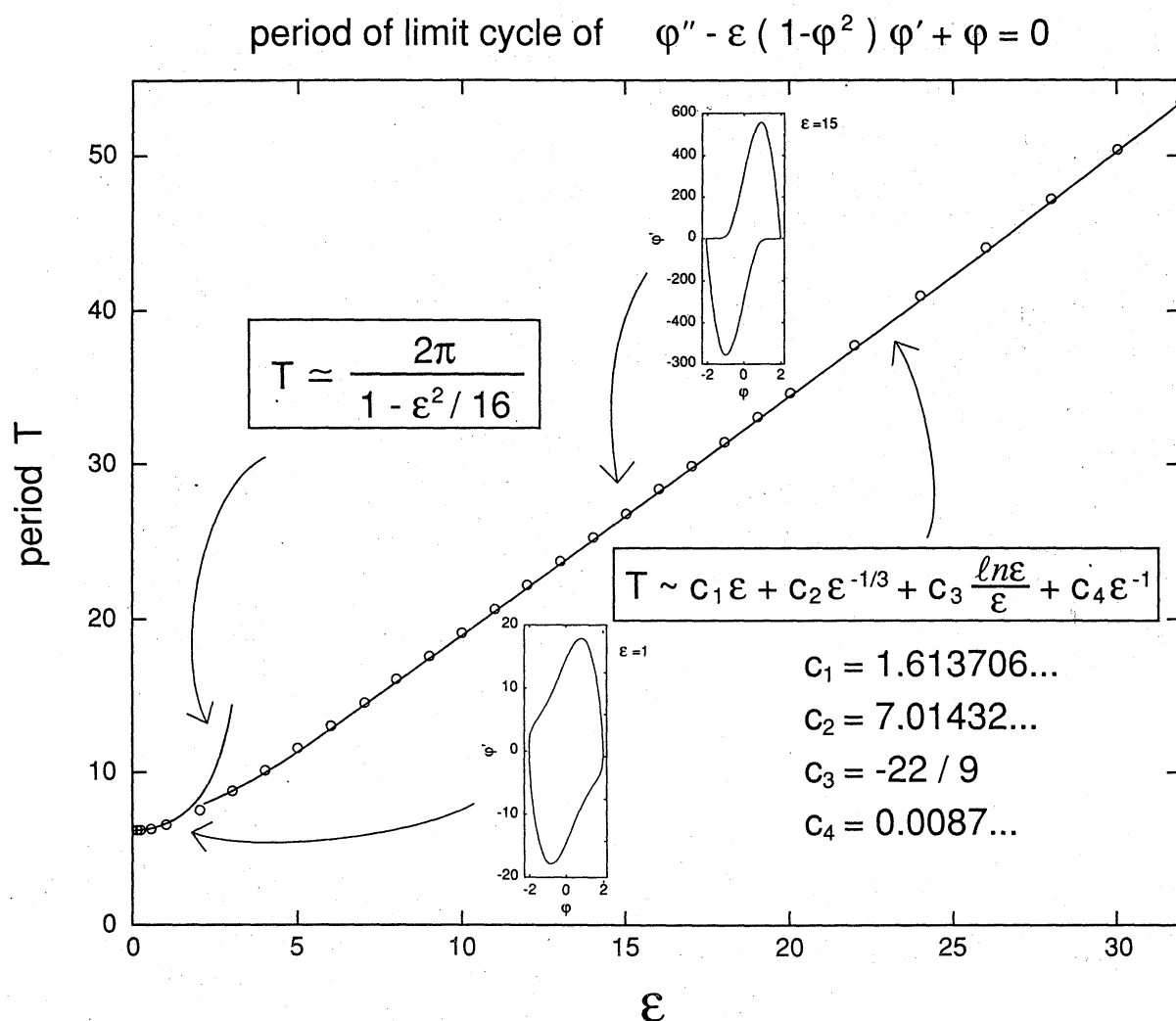


Fig.9 Van der Pole 方程式のリミットサイクルを固有値問題としてH I D M E Gで解いた結果. リミットサイクルの周期が解析解と比較されている.

### 3.4 微分・代数方程式で記述された境界値問題の数値解析例

H I D M E Gの数値計算例として次に制約条件付きの軌道解析例を示そう. 水平距離 1,000m, 垂直下降距離 100m だけ離れた地点を放物線型のスロープで結び, 60kg の物体を自由落下させたときの運動を解析しよう. 動摩擦と空気抵抗に相当する外力も取り入れると解くべき方程式は次のようになる.

$$M\mathbf{x}'' = \mathbf{F} - \mu|\mathbf{F}|\frac{\mathbf{x}'}{|\mathbf{x}'|} - \nu\mathbf{x}' - M\mathbf{g} \quad (34)$$

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{pmatrix} 0 \\ g \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \end{pmatrix}$$

$$y = x \left[ a \left( \frac{x}{100} - 10 \right) - \frac{1}{10} \right] \quad (35)$$

$$F_x + F_y \cdot \left[ a \left( \frac{2x}{100} - 10 \right) - \frac{1}{10} \right] = 0 \quad (36)$$

到達時刻  $T$  で時刻を規格化することで, 方程式 (34)~(36) は固有値問題に帰着される.

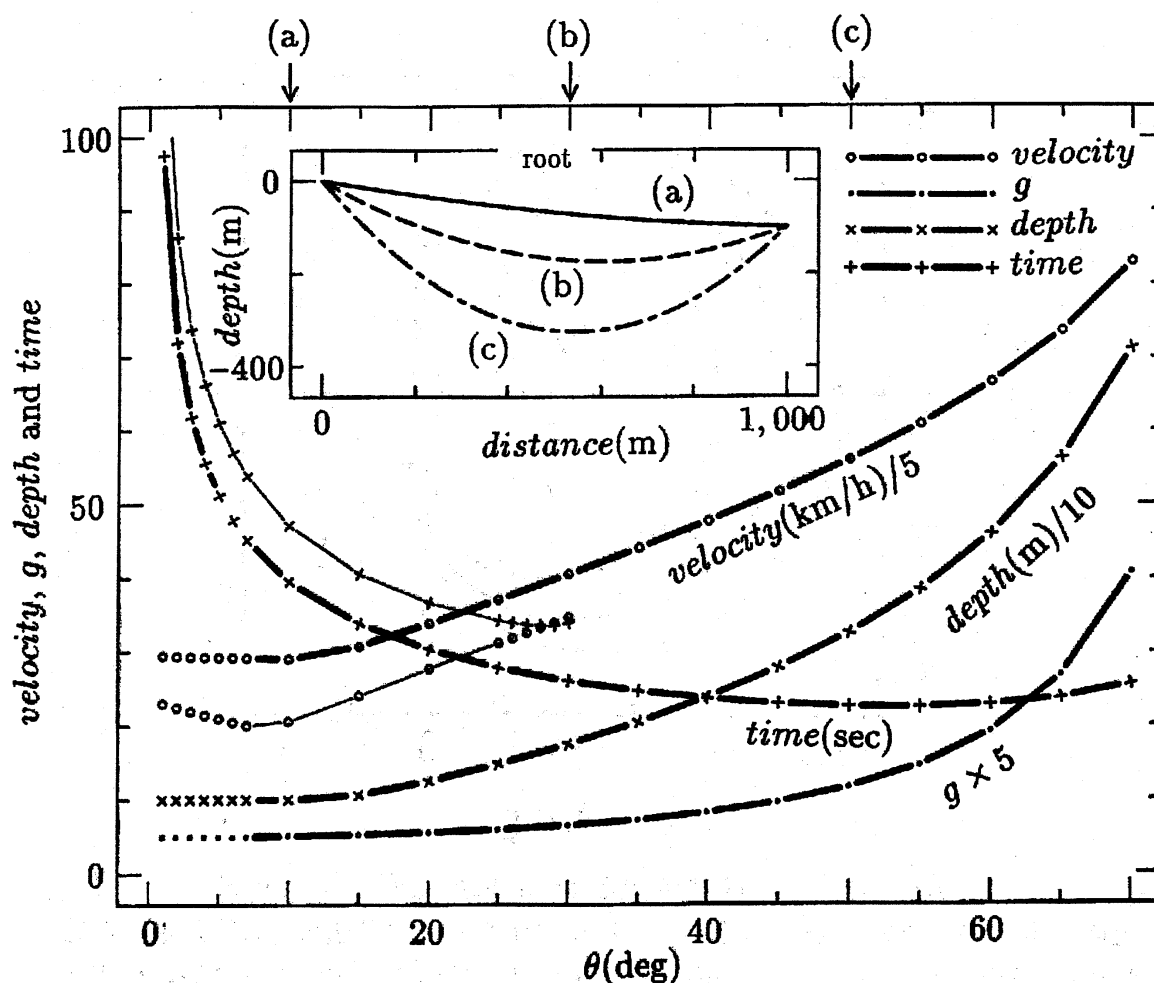


Fig.10 微分・代数方程式で記述された非線型固有値問題 (34)~(36) の数値計算結果. 横軸は初期のスロープの傾斜角度を示し縦軸には物体が経験する鉛直方向最大加速度, 最大速度, 到達最深部位置, 目的地に到達するまでの時間を示す. 空気抵抗係数が異なる場合について解の比較がなされている.

ここで  $M$ ,  $\mu$ ,  $\nu$ ,  $g$ ,  $a$  はそれぞれ, 物体の質量, 動摩擦係数, 空気抵抗係数, 重力加速度, スロープ形状因子を表す定数である. 斜面から物体が受ける垂直抗力が  $F$  で表されている. スロープの形状因子を変化させたときの解の挙動の変化を Fig.10 に示す. 空気抵抗係数が大きいと急勾配のスロープでは目的地に到達できなくなることが示されている.

## 4 まとめと討論

高品質アルゴリズムの実現を目指して開発された HIDM は数値計算例によってその

性能が検証された. 硬い微分方程式を解くことができること, 微分・代数方程式が解けること, 非線型固有値問題・非線型境界値問題を解く汎用プログラムが構築できたことなどが実証され, HIDM に対しては当初の期待に叶う性能が確認された. 今後の課題は多次元空間において記述されている偏微分方程式の高品質汎用プログラムを HIDM のアルゴリズムで構築することである. この目標に対しては, すでに空間変数が 1 次元のときの時間発展境界値問題を解く (偏微分方程式に対する) 汎用プログラムの作成に成功しているので [5,6] この目標も実現可能と思われる.

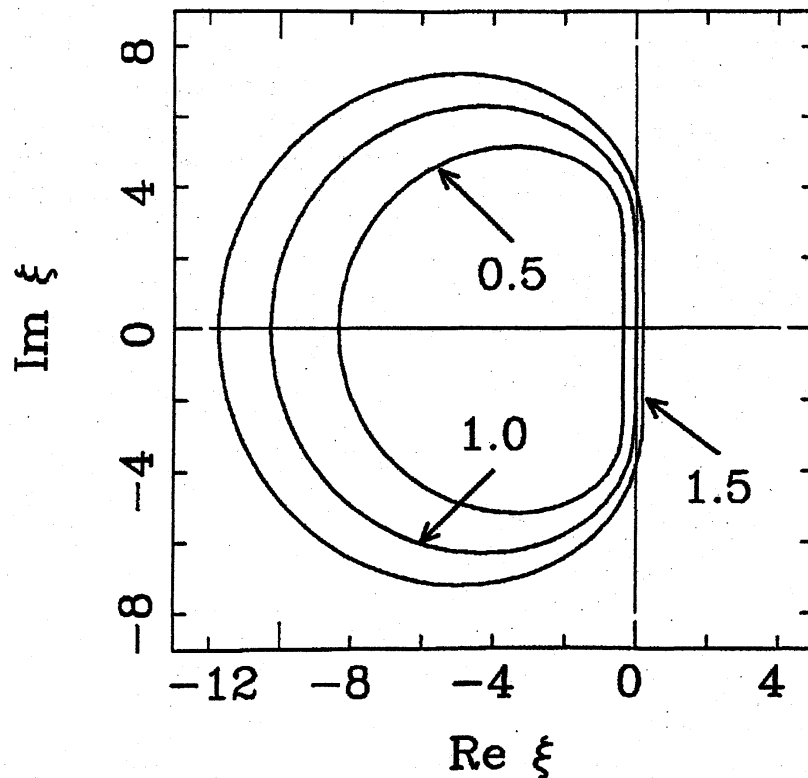


Fig.11 方程式 (6) を解く時の追加方程式を区間先頭 ( $t = 0$  の地点) に設定した時の解法の安定性. 安定性因子 ((38) 式に示されている  $\phi(2h)$  の絶対値) の複素  $\xi (\equiv h\mu)$  面の等高線図を示す. 絶対安定領域は通常のルンゲ・クッタ法に比較すれば十分に広いが, A-安定の特質は存在しない.

当論文で詳しく述べた HIDM の手続きは 2 階微係数を含む微分方程式を (11) を前提として構築されている. 解くべき方程式が 1 階の微分方程式, あるいは代数方程式で決定されるときは Table 1 に記されているように区間終端 ( $t = 2h$  の時刻) に方程式を追加することが指定されている. しかしながら解を一意に決定するためならば区間先頭 ( $t = 2h$  の時刻) に方程式を追加することも考えられる. すなわち方程式 (6) を解くときの追加方程式として (18) の替わりに,

$$\left[ \frac{d^2\phi}{dt^2} - \mu \frac{d\phi}{dt} \right]_{t=0} = 0 \quad (37)$$

を利用する方法である. このときには安定性因子  $\phi(2h)$  は (19) 式の替わりに

$$\phi(2h) = \frac{630 + 735\xi + 390\xi^2 + 120\xi^3 + 22\xi^4 + 2\xi^5}{630 - 525\xi + 180\xi^2 - 30\xi^3 + 2\xi^4} \quad (38)$$

で与えられるようになる. この安定性因子の等高線図 (Fig.11 参照) をみると絶対安定領域は十分に広いが, A-安定の特質は存在しなくなることが示されている. すなわち追加方程式は本文で述べたように区間終端に設定するのが望ましい.

本論文で述べた最低次の HIDM の差分化技法 (3), (4) はシンプレクティック積分法の特質と A-安定の特質を兼ね備えていた. この二つの特質を兼ね備えた高次数差分化技法の構築も可能である. これについては別の機会に詳述することにしよう.

## References

- [1] 三井斌友, 数値解析入門, 朝倉書店, 数  
理科学ライブラリー 7, (1985).
- [2] 阿部賢二, 石田亨, 渡辺二太, 金田康  
正, 西川恭治: 微分方程式の新しい数  
値計算法「H I D M」—常微分方程式  
への適用—, 核融合研究, **57** (1987)  
85-100.
- [3] 渡辺二太, 阿部賢二, 石田亨, 金田康  
正, 西川恭治: 「H I D M」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) 265-  
278.
- [4] 渡辺二太, 高木益雄, 常微分方程式初  
期値問題の数値計算プログラム H I D  
M A S, 日本応用数理学論文誌, **1**  
(1991) 135-163.
- [5] T.Watanabe, HIDM, A New Numeri-  
cal Scheme to Solve Partial Differential  
Equations, Proceedings of the Inter-  
national Symposium on Supercomput-  
ing, Kyushu University Press, (1991)  
229-235.
- [6] 渡辺二太, 時間刻み幅自動調節方式  
の微分方程式汎用ソルバーの試みと  
Cahn-Hilliard 方程式への応用, 日本応  
用数理学論文誌, **2** (1992) 93-99.
- [7] A.Kværnø, Runge-Kutta Methods  
Applied to Fully Implicit Differential-  
Algebraic Equations of Index 1, Math.  
Comp. **54** (1990) 583-625.
- [8] ボゴリューボフ, ミトロポリスキー (益  
子正教訳), 非線型振動論—漸近的方法  
— (増補版), 共立出版, (1968), 169.
- [9] FACOM FORTRAN SSL  
使用手引書 (富士通, 昭和 55 年,  
434.1-434.10 頁).

## 付録

ここでは差分化技法 (14)~(16) を指定す  
る係数について述べる. これらの係数は計  
算機の数式処理言語を用いれば簡単に求め  
られる. プログラムを具体的に作成すると  
きは数式処理言語の出力を直接利用する方  
が誤りの混入を防ぐ点で有利である. 以下  
では定数  $Q$  は,

$$Q \equiv \sqrt{3/7}$$

を表す.

$$C_0(s_1) = \frac{279}{686} + \frac{69}{98}Q$$

$$C_1(s_1) = \frac{64}{343}$$

$$C_2(s_1) = \frac{279}{686} - \frac{69}{98}Q$$

$$\alpha_0(s_1) = \frac{36}{343} + \frac{10}{49}Q$$

$$\alpha_2(s_1) = -\frac{36}{343} + \frac{10}{49}Q$$

$$\beta_0(s_1) = \frac{3}{343} + \frac{1}{49}Q$$

$$\beta_2(s_1) = \frac{3}{343} - \frac{1}{49}Q$$

$$C_0(2) = 0, \quad C_1(2) = 1, \quad C_2(2) = 0$$

$$\alpha_0(2) = 0, \quad \alpha_2(2) = 0$$

$$\beta_0(2) = 0, \quad \beta_2(2) = 0$$

$$C_0(s_3) = \frac{279}{686} - \frac{69}{98}Q$$

$$C_1(s_3) = \frac{64}{343}$$

$$C_2(s_3) = \frac{279}{686} + \frac{69}{98}Q$$

$$\alpha_0(s_3) = \frac{36}{343} - \frac{10}{49}Q$$

$$\alpha_2(s_3) = -\frac{36}{343} - \frac{10}{49}Q$$

$$\beta_0(s_3) = \frac{3}{343} - \frac{1}{49}Q$$

$$\beta_2(s_3) = \frac{3}{343} + \frac{1}{49}Q$$

$$D_0(s_1) = -\frac{15}{49} - \frac{48}{49}Q$$

$$D_1(s_1) = \frac{96}{49}Q$$

$$D_2(s_1) = \frac{15}{49} - \frac{48}{49}Q$$

$$\gamma_0(s_1) = \frac{19}{98} + \frac{3}{98}Q$$

$$\gamma_2(s_1) = \frac{19}{98} - \frac{3}{98}Q$$

$$\delta_0(s_1) = \frac{2}{49} + \frac{1}{49}Q$$

$$\delta_2(s_1) = -\frac{2}{49} + \frac{1}{49}Q$$

$$D_0(2) = -\frac{15}{16}, \quad D_2(1) = 0, \quad D_2(2) = \frac{15}{16}$$

$$\gamma_0(2) = -\frac{7}{16}, \quad \gamma_2(2) = -\frac{7}{16}$$

$$\delta_0(2) = -\frac{1}{16}, \quad \delta_2(2) = \frac{1}{16}$$

$$D_0(s_3) = -\frac{15}{49} + \frac{48}{49}Q$$

$$D_1(s_3) = -\frac{96}{49}Q$$

$$D_2(s_3) = \frac{15}{49} + \frac{48}{49}Q$$

$$\gamma_0(s_3) = \frac{19}{98} - \frac{3}{98}Q$$

$$\gamma_2(s_3) = \frac{19}{98} + \frac{3}{98}Q$$

$$\delta_0(s_3) = \frac{2}{49} - \frac{1}{49}Q$$

$$\delta_2(s_3) = -\frac{2}{49} - \frac{1}{49}Q$$

$$E_0(s_1) = -\frac{96}{49} - \frac{15}{7}Q$$

$$E_1(s_1) = \frac{192}{49}$$

$$E_2(s_1) = -\frac{96}{49} + \frac{15}{7}Q$$

$$\epsilon_0(s_1) = -\frac{81}{49} - \frac{15}{7}Q$$

$$\epsilon_2(s_1) = \frac{81}{49} - \frac{15}{7}Q$$

$$\eta_0(s_1) = -\frac{17}{98} - \frac{3}{14}Q$$

$$\eta_2(s_1) = -\frac{17}{98} + \frac{3}{14}Q$$

$$E_0(2) = 3, \quad E_1(2) = -6, \quad E_2(2) = 3$$

$$\epsilon_0(2) = \frac{9}{8}, \quad \epsilon_2(2) = -\frac{9}{8}$$

$$\eta_0(2) = \frac{1}{8}, \quad \eta_2(2) = \frac{1}{8}$$

$$E_0(s_3) = -\frac{96}{49} + \frac{15}{7}Q$$

$$E_1(s_3) = \frac{192}{49}$$

$$E_2(s_3) = -\frac{96}{49} - \frac{15}{7}Q$$

$$\epsilon_0(s_3) = -\frac{81}{49} + \frac{15}{7}Q$$

$$\epsilon_2(s_3) = \frac{81}{49} + \frac{15}{7}Q$$

$$\eta_0(s_3) = -\frac{17}{98} + \frac{3}{14}Q$$

$$\eta_2(s_3) = -\frac{17}{98} - \frac{3}{14}Q$$

係数の間には対称性の関係が存在していることが示されている.