非対称な並列型合成法による
常微分方程式の高次数値積分

石森　勇次
(工学部教養教育)

常微分方程式に対する高次の数値積分法として，２次の対称なスキームの非対称な並列合成によるスキームを考え，具体的な数値計算を通してその特徴，特に対称な並列合成との違いを調べる。

キーワード：非対称な並列型合成法，常微分方程式，数値積分法，高次の精度

１．はじめに

常微分方程式に対する高次の数値積分法として，対称な２次のスキームを対称な形で並列に連結する方法（対称な並列型合成法：図１）を最近提案した [1-3]。

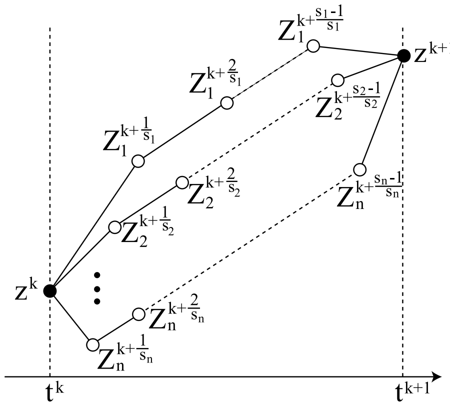

図１　対称な並列型合成法

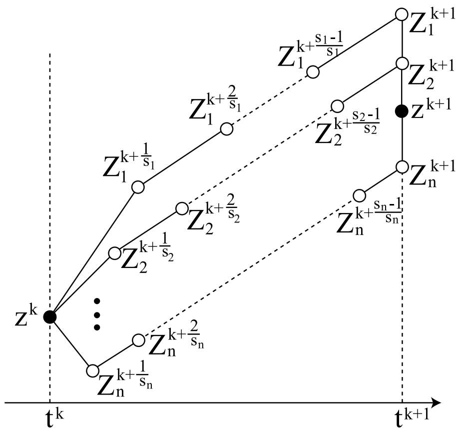

図２　非対称な並列型合成法

この並列型合成法はいわゆる幾何学的数値積分法 [1-2, 4-5] の研究の中で提案したものであるが，一般の常微分方程式を単に数値的に解くために使用することも可能である [3]。しかし，多くの変数に対する方程式を解かねばならないような陰解法となっているので，単に高精度に解くだけのものとしては計算コストが非常に高くなるという欠点をもっている [3]。本論文では，直列に合成したものを単純に並列合成する方法，すなわち対称ではない並列型合成法（図２）について考え，その特徴について議論する。

２．並列型合成法

2.1 微分方程式の積分表示

独立変数 t の N 個の未知関数

$$z = (z_1(t), z_2(t), \ldots, z_N(t)) \tag{1}$$

に対する一般的な形の連立微分方程式

$$\frac{dz}{dt} = f(z, t) \tag{2}$$

を考える。ここで，

$$f(z, t) = (f_1(z, t), f_2(z, t), \ldots, f_N(z, t)) \tag{3}$$

である。刻み幅を Δt とし，離散時間

$$t^k = k\Delta t \ (k = 0, 1, 2, \ldots) \tag{4}$$

での $z(t^k)$ の数値解を z^k と表す。微分方程式 (2) を区間 $[t^k,\ t^{k+1}]$ で積分すると，積分表示

$$z(t^{k+1}) = z(t^k) + \int_{t^k}^{t^{k+1}} f(z(t), t)dt \tag{5}$$

を得る。積分表示 (5) の右辺の積分をどのように近似するのかによって，さまざまな数値積分法を構成することができる。

本論文で議論する合成法では，積分

$$\int_{t^{k+a}}^{t^{k+b}} f(z(t),t)dt$$

の２次近似を

$$I^{b,a} = (b-a)\Delta t f^{b,a}(z^k,t^k) \tag{6}$$

と表す。ここで，$f^{b,a}(z^k,t^k)$ は対称性

$$f^{b,a}(z^k,t^k) = f^{a,b}(z^k,t^k) \tag{7}$$

を持つものとする。積分の２次近似 (6) の合成によって，高次の数値積分法が構成される。

2.2 対称な並列型合成法

対称な並列型合成法では，n 個の多段２次のスキームを並列に合成する [1,2]。それぞれ段数を

$$s_1 < s_2 < \cdots < s_n \tag{8}$$

となる任意の正の整数として, 中間変数を区間 $[t^k,\ t^{k+1}]$ を s_j $(j=1,\ldots,n)$ 等分した時間での値として

$$Z_j^{k+\frac{m}{s_j}} \tag{9}$$

$$(m=1,\ldots,s_j-1\,;j=1,\ldots,n) \tag{10}$$

で表す。s_j 段２次のスキームを重み c_j で並列に合成した計算スキーム

$$z^{k+1} = z^k + \sum_{j=1}^{n} c_j \sum_{m=1}^{s_j} I_j^{\frac{m}{s_j},\frac{m-1}{s_j}} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} Z_j^{k+\frac{m}{s_j}} &= \frac{s_j-m}{s_j}(z^k + \sum_{l=1}^{m} I_j^{\frac{l}{s_j},\frac{l-1}{s_j}}) \\ &\quad + \frac{m}{s_j}(z^{k+1} - \sum_{l=m+1}^{s_j} I_j^{\frac{l}{s_j},\frac{l-1}{s_j}}) \end{aligned} \tag{12}$$

$$Z_j^k = z^k,\ Z_j^{k+1} = z^{k+1} \tag{13}$$

$$(j=1,2,\cdots,n\,;m=1,2,\cdots,s_j-1) \tag{14}$$

を考える（図１）。ここで

$$I_j^{b,a} = (b-a)\Delta t f^{b,a}(Z_j^k,t^k) \tag{15}$$

である。重み $c_1,c_2,\cdots,c_n$ を

$$c_j = \frac{s_j^{2n-2}}{\displaystyle\prod_{l=1(\neq j)}^{n}(s_j^2-s_l^2)} \tag{16}$$

$$(j=1,2,\cdots,n\,;\ n \geqq 2) \tag{17}$$

のように選ぶと，数値積分の誤差は $O(\Delta t^{2n+1})$ となり，$2n$ 次のスキームとなる。

2.3 非対称な並列型合成法

非対称な並列型合成法では，n 個の多段２次のスキームを単純な形で並列に合成する。すなわち，s_j 段２次のスキームを重み c_j で並列に合成した計算スキーム

$$z^{k+1} = \sum_{j=1}^{n} c_j Z_j^{k+1} \tag{18}$$

$$Z_j^{k+\frac{m}{s_j}} = Z_j^{k+\frac{m-1}{s_j}} + I_j^{\frac{m}{s_j},\frac{m-1}{s_j}} \tag{19}$$

$$(j=1,2,\cdots,n\,;m=1,2,\cdots,s_j) \tag{20}$$

を考える（図２）。ここで

$$I_j^{b,a} = (b-a)\Delta t f^{b,a}(Z_j^k,t^k) \tag{21}$$

である。

重み $c_1,c_2,\cdots,c_n$ 対称な並列型合成法と同様に

$$c_j = \frac{s_j^{2n-2}}{\displaystyle\prod_{l=1(\neq j)}^{n}(s_j^2-s_l^2)} \tag{22}$$

$$(j=1,2,\cdots,n\,;\ n \geqq 2) \tag{23}$$

のように選ぶと，数値積分の誤差は $O(\Delta t^{2n+1})$ となり，$2n$ 次のスキームとなる。これを以下のように証明する。

区間 $[t^{k+\frac{m-1}{s_j}}, t^{k+\frac{m}{s_j}}]$ での厳密解の時間発展演算子を

$$\varphi_{\frac{\Delta t}{s_j}}\ :\ Z_j(t^{k+\frac{m}{s_j}}) = \varphi_{\frac{\Delta t}{s_j}} Z_j(t^{k+\frac{m-1}{s_j}}) \tag{24}$$

とし，数値解の時間発展演算子を

$$\Phi_{\frac{\Delta t}{s_j}}\ :\ Z_j^{k+\frac{m}{s_j}} = \Phi_{\frac{\Delta t}{s_j}} Z_j^{k+\frac{m-1}{s_j}} \tag{25}$$

とする。$\varphi_{t+s} = \varphi_t\varphi_s$ であるから，適当な演算子 L を用いて

$$\varphi_t = e^{tL} \tag{26}$$

のように表せる。一方，一般に $\Phi_{t+s} \neq \Phi_t\Phi_s$ であるから Φ_t は (26) のようには表せず，t の適当な展開式となる。これを Φ_t の対数を t で展開したもので表す [6]：

$$\Phi_t = e^{tL+t^2R_2+t^3R_3+\cdots} \tag{27}$$

Φ_t は対称な２次の時間発展演算子であるから

$$\begin{aligned} \Phi_{-t}^{-1} =& e^{-(-tL+t^2R_2-t^3R_3+\cdots)} \\ =& e^{tL-t^2R_2+t^3R_3-t^4R_4+\cdots} \\ =& \Phi_t \\ =& e^{tL+t^2R_2+t^3R_3+t^4R_4+\cdots} \end{aligned} \tag{28}$$

より

$$R_2 = R_4 = \cdots = 0 \tag{29}$$

となるので

$$\Phi_t = e^{tL + t^3 R_3 + t^5 R_5 + \cdots} \tag{30}$$

である。したがって

$$\begin{aligned} Z_j^{k+1} &= (\Phi_{\frac{\Delta t}{s_j}})^{s_j} z^k \\ &= e^{s_j(\frac{\Delta t}{s_j}L + \frac{\Delta t^3}{s_j^3}R_3 + \frac{\Delta t^5}{s_j^5}R_5 + \cdots)} z^k \\ &= e^{\Delta t(L + \frac{\Delta t^2}{s_j^2}R_3 + \frac{\Delta t^4}{s_j^4}R_5 + \cdots)} z^k \end{aligned} \tag{31}$$

となる。指数演算子を展開すると

$$\begin{aligned} & e^{\Delta t(L + \frac{\Delta t^2}{s_j^2}R_3 + \frac{\Delta t^4}{s_j^4}R_5 + \cdots)} \\ &= 1 + \Delta t(L + \frac{\Delta t^2}{s_j^2}R_3 + \frac{\Delta t^4}{s_j^4}R_5 + \cdots) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2!}(L + \frac{\Delta t^2}{s_j^2}R_3 + \frac{\Delta t^4}{s_j^4}R_5 + \cdots)^2 \\ &\quad + \frac{\Delta t^3}{3!}(L + \frac{\Delta t^2}{s_j^2}R_3 + \frac{\Delta t^4}{s_j^4}R_5 + \cdots)^3 + \cdots \\ &= 1 + \Delta t L + \frac{\Delta t^2 L^2}{2!} + \frac{\Delta t^3 L^3}{3!} + \cdots \\ &\quad + \Delta t^3 \frac{1}{s_j^2}R_3 + \Delta t^4 \frac{1}{2!}(LR_3 + R_3 L)\frac{1}{s_j^2} \\ &\quad + \Delta t^5 \{\frac{1}{s_j^4}R_5 + \frac{1}{3!}(L^2 R_3 + L R_3 L + R_3 L^2)\frac{1}{s_j^2}\} \\ &\quad + \cdots \end{aligned} \tag{32}$$

となる。ここで, $A_3, A_4, \cdots, B_5, B_6, \cdots, C_7, C_8, \cdots$ を適当な演算子として導入すると

$$\begin{aligned} & e^{\Delta t(L + \frac{\Delta t^2}{s_j^2}R_3 + \frac{\Delta t^4}{s_j^4}R_5 + \cdots)} \\ &= e^{\Delta t L} \\ &\quad + \Delta t^3 \frac{A_3}{s_j^2} + \Delta t^4 \frac{A_4}{s_j^2} \\ &\quad + \Delta t^5 (\frac{A_5}{s_j^2} + \frac{B_5}{s_j^4}) \\ &\quad + \Delta t^6 (\frac{A_6}{s_j^2} + \frac{B_6}{s_j^4}) \\ &\quad + \Delta t^7 (\frac{A_7}{s_j^2} + \frac{B_7}{s_j^4} + \frac{C_7}{s_j^6}) \\ &\quad + \Delta t^8 (\frac{A_8}{s_j^2} + \frac{B_8}{s_j^4} + \frac{C_8}{s_j^6}) \\ &\quad + \cdots \end{aligned} \tag{33}$$

となる。したがって

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{n} c_j e^{\Delta t(L + \frac{\Delta t^2}{s_j^2}R_3 + \frac{\Delta t^4}{s_j^4}R_5 + \cdots)} \\ &= \sum_{j=1}^{n} c_j \{ e^{\Delta t L} \\ &\quad + \Delta t^3 \frac{A_3}{s_j^2} + \Delta t^4 \frac{A_4}{s_j^2} \\ &\quad + \Delta t^5 (\frac{A_5}{s_j^2} + \frac{B_5}{s_j^4}) \\ &\quad + \Delta t^6 (\frac{A_6}{s_j^2} + \frac{B_6}{s_j^4}) \\ &\quad + \Delta t^7 (\frac{A_7}{s_j^2} + \frac{B_7}{s_j^4} + \frac{C_7}{s_j^6}) \\ &\quad + \Delta t^8 (\frac{A_8}{s_j^2} + \frac{B_8}{s_j^4} + \frac{C_8}{s_j^6}) \\ &\quad + \cdots \} \end{aligned} \tag{34}$$

ゆえに (18) より重み c_j に対して連立方程式

$$\sum_{j=1}^{n} c_j = 1 \tag{35}$$

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{c_j}{s_j^2} = 0 \tag{36}$$

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{c_j}{s_j^4} = 0 \tag{37}$$

$$\vdots \tag{38}$$

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{c_j}{s_j^{2n-2}} = 0 \tag{39}$$

が成り立つように選べば，数値積分の誤差は $O(\Delta t^{2n+1})$ となり，$2n$ 次のスキームとなる。上記の連立方程式の解は (22) である [1]。

3．数値計算例

以下の計算例では，特に指摘しない限り並列型合成法の段数を

$$s_j = j \ (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{40}$$

とした。また，計算時間を T_c で表した。このとき，計算回数 K_c は $K_c = T_c/\Delta t$ で定まる。省略記号として，$2n$ 次の対称な並列型合成法を SP_{2n}，非対称な並列型合成法を NSP_{2n} と表した。なお，数値解の誤差 $e(t^k)$ は

$$e(t^k) = |z(t^k) - z^k| \tag{41}$$

で与えられる。

3.1 例1

1次元の勾配系（$N=1,\ z_1=x$）の微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = -V'(x) = -x \tag{42}$$

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 \tag{43}$$

$$x(0) = 1 \tag{44}$$

を考える。厳密解は

$$x(t) = x(0)e^{-t} = e^{-t} \tag{45}$$

である。なお

$$I_j^{b,a} = -(b-a)\frac{V(X_j^{k+a}) - V(X_j^{k+b})}{X_j^{k+a} - X_j^{k+b}}$$

$$= -(b-a)\Delta t \frac{X_j^{k+a} + X_j^{k+b}}{2} \tag{46}$$

とした。このとき，SP_2（$=NSP_2$）および SP_4 では

$$V(x^{k+1}) - V(x^k) \leqq 0 \tag{47}$$

でありエネルギー散逸性が保証されている [7]。

表1に $\Delta t = 0.1,\ T_c = 1,\ K_c = 10$ の計算例を示す。SP_{2n} および NSP_{2n} どちらの並列型合成法も同じような精度であるが，誤差は SP_{2n} の方が若干小さい。

表1　$\Delta t = 0.1$ のときの x^{10} の計算値

スキーム	数値 x^{10}	誤差 $e(1)$
正確な値	0.367879441171442	0
SP_2=NSP_2	0.367572542382869	3.07×10^{-4}
SP_4	0.367879492296226	5.11×10^{-8}
NSP_4	0.367879553185627	1.12×10^{-7}
SP_6	0.367879441164004	7.44×10^{-12}
NSP_6	0.367879441149630	2.18×10^{-11}
SP_8	0.367879441171443	7.53×10^{-16}
NSP_8	0.367879441171445	2.61×10^{-15}

図3に SP_{2n} に対する初期値から1ステップ後のエネルギー $V(x^1)$ の値と刻み幅 Δt との関係を示す。次数 $2n$ の値によってエネルギー散逸性は保持されるとき（$2n = 4, 8, 12, \cdots$）と保持されないとき（$n = 6, 10, 14, \cdots$）がある。

図4に NSP_{2n} に対する初期値から1ステップ後のエネルギー $V(x^1)$ の値と刻み幅 Δt との関係を示す。刻み幅 Δt が大きな値のときエネルギー散逸性は壊され，逆にエネルギーが増大している。

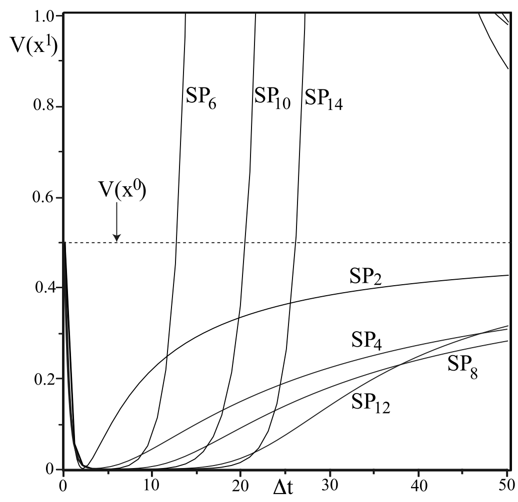

図3　エネルギー散逸性と Δt (SP_{2n})

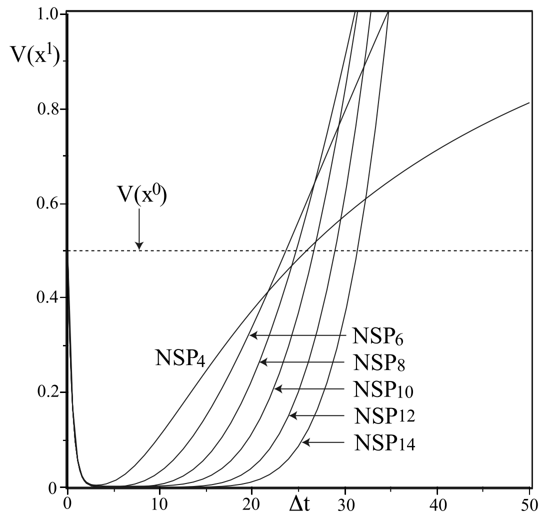

図4　エネルギー散逸性と Δt (NSP_{2n})

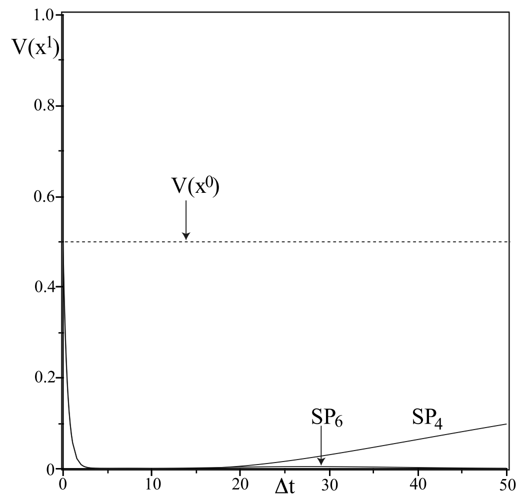

図5　エネルギー散逸性と Δt (SP_{2n},s_j = 奇数)

段数を

$$s_j = 2j - 1\ (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{48}$$

のように奇数に限定した整数とすると，図５および図６のように SP_{2n}，NSP_{2n} どちらの場合もエネルギー散逸性は保持される。なお，図には $2n=8$ 以上のグラフはほとんど $2n=6$ のグラフと重なるので省略した。

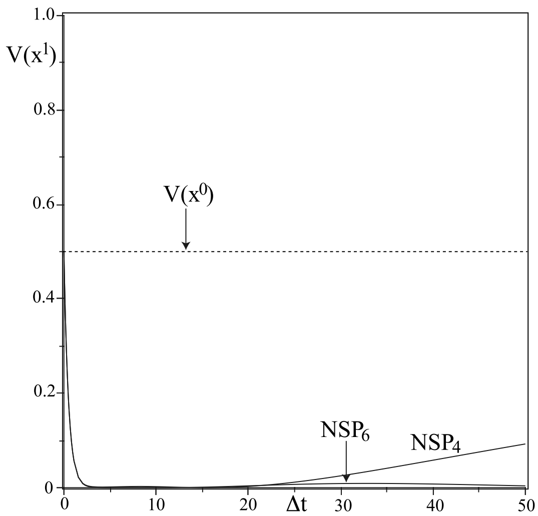

図６　エネルギー散逸性と Δt ($\mathbf{NSP}_{2n}$,$s_j=$ 奇数)

3.2 例２

２次元のハミルトン系（$N=2,\ z_1=p,\ z_2=q$）の微分方程式

$$\frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H(p,q)}{\partial q}=-q \tag{49}$$

$$\frac{dq}{dt}=\frac{\partial H(p,q)}{\partial p}=p \tag{50}$$

$$H(p,q)=\frac{1}{2}(p^2+q^2) \tag{51}$$

$$p(0)=1,\ q(0)=0 \tag{52}$$

を考える。厳密解は

$$p(t)=p(0)\cos t-q(0)\sin t=\cos t \tag{53}$$

$$q(t)=p(0)\sin t+q(0)\cos t=\sin t \tag{54}$$

である。なお

$$I_j^{b,a}=(b-a)\Delta t \tag{55}$$

$$\times\left(-\frac{Q_j^{k+a}+Q_j^{k+b}}{2},\frac{P_j^{k+a}+P_j^{k+b}}{2}\right) \tag{56}$$

とした。このとき，SP_{2n} では

$$H(p^{k+1},q^{k+1})-H(p^k,q^k)=0 \tag{57}$$

でありエネルギー保存性が保証されている [1]。

表２および表３に $\Delta t=0.1,\ T_c=1,\ K_c=10$ の計算例を示す。例１と同様に，SP_{2n} および NSP_{2n} どちらの並列型合成法も同じような精度であるが，誤差は SP_{2n} の方が若干小さい。

表２　$\Delta t=0.1$ のときの p^{10} の計算値

スキーム	数値 p^{10}	誤差 $e(1)$
正確な値	0.540302305868139	0
SP_2=NSP_2	0.541002294600359	8.32×10^{-5}
SP_4	0.540302422669539	1.39×10^{-7}
NSP_4	0.540302572914869	3.12×10^{-7}
SP_6	0.540302305885137	2.02×10^{-11}
NSP_6	0.540302305921712	6.19×10^{-11}
SP_8	0.540302305868141	2.05×10^{-15}
NSP_8	0.540302305868146	7.52×10^{-15}

表３　$\Delta t=0.1$ のときの q^{10} の計算値

スキーム	数値 q^{10}
正確な値	0.841470984807896
SP_2=NSP_2	0.841021115809316
SP_4	0.841470909810569
NSP_4	0.841470823616460
SP_6	0.841470984796983
NSP_6	0.841470984776925
SP_8	0.841470984807895
NSP_8	0.841470984807893

図７に NSP_{2n} に対する初期値から１ステップ後のエネルギー $H(p^1,q^1)$ の値と刻み幅 Δt との関係を示す。刻み幅 Δt がどの値でもエネルギーは大きくなり，エネルギー保存性は壊れている。

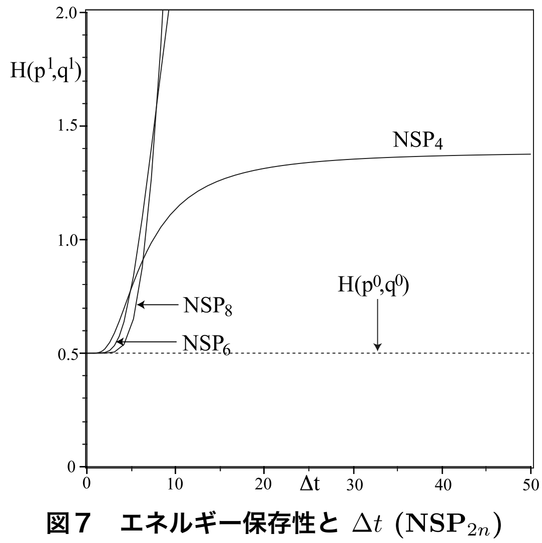

図７　エネルギー保存性と Δt ($\mathbf{NSP}_{2n}$)

図８に，段数が奇数 $s_j=2j-1$ のときの NSP_{2n} に対する初期値から１ステップ後のエネルギー $H(p^1,q^1)$ の値と刻み幅 Δt との関係を示す。図７と同様に，刻み幅 Δt がどの値でもエネルギーは大きくなり，エネルギー保存性は壊れている。

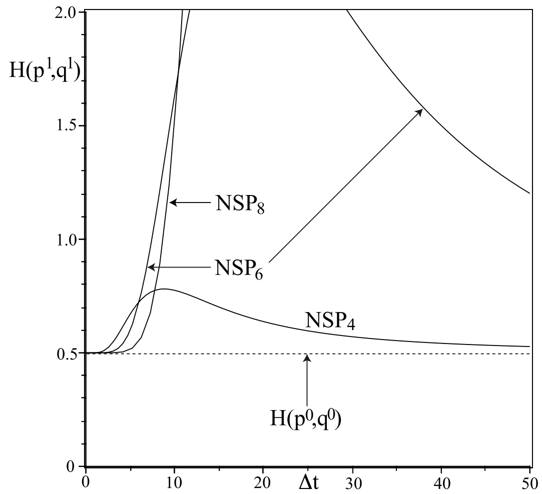

図８　エネルギー保存性と Δt ($\mathbf{NSP}_{2n}$,s_j = 奇数)

４．おわりに

本研究では，常微分方程式に対する高次の数値積分法として，非対称な並列型合成法（NSP）について対称な並列型合成法（SP）との比較を交えた議論をした。２つの線形の力学系に対する数値計算例の結果は，精度については概ね SP の方が NSP より精度がよかった。エネルギー散逸性については，SP も NSP も段数を奇数にすると散逸性を保持したが，エネルギー保存性については NSP ではエネルギーが増大し保存性を保持することはなかった。散逸性を保つ高次の数値積分法の構成は難しい問題であるが，上記の数値計算例はその問題解決の糸口を与えているかもしれない。

参考文献

[1] Y. Ishimori：A high-order energy-conserving integration scheme for Hamiltonian systems, Phys. Lett. A, **372** (2008) 1562-1573.

[2] 石森勇次：非自励ハミルトン系のエネルギーの変化を高次の精度で計算する数値積分法, 日本応用数理学会論文誌, Vol.19, No.2 (2009) 183-203.

[3] 石森勇次：並列型合成法による常微分方程式の高次数値積分, 富山県立大学紀要, Vlo.19 (2009) 1-7.

[4] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner : *Geometric Numerical Integration, Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations* (Springer, Berlin, 2006)2nd ed..

[5] B. Leimkuler and S. Reich : *Simulating Hamiltonian Dynamics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).

[6] 大貫義郎，鈴木増雄，柏太郎：経路積分の方法，岩波講座　現代の物理学　第 12 巻 (岩波書店, 1992).

[7] 石森勇次：勾配系に対するエネルギー不等式を満たす４次の差分法, 富山県立大学紀要, Vlo.7 (1997) 26-33.

A Non-symmetric Parallel Composition Method for Numerical Integrations of ODEs

Yuji ISHIMORI
Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

We consider a non-symmetric parallel composition scheme as a high-order numerical integration method for ordinary differential equations and study its properties by doing numerical experiments.

Key Words: non-symmetic parallel composition, ordinary differential equations, numerical integration, high-order scheme