様　式　C－19、F－19、Z－19　(共通)

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 28 年　6 月　8 日現在

機関番号：34310
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2012～2015
課題番号：24540150

研究課題名（和文）常微分方程式に対する”先読み”線型多段階法の実装と拡張

研究課題名（英文）Implementation and extension of ``look-ahead'' linear multistep methods for ODEs

研究代表者
三井　斌友（Mitsui, Taketomo）

同志社大学・研究開発推進機構・嘱託研究員

研究者番号：50027380

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,400,000円

研究成果の概要（和文）：一般の常微分方程式の初期値問題に対する数値解法アルゴリズムである離散変数法に，新たなクラスである``先読み''線型多段階法（``look-ahead'' linear multistep methods, LALMM）を提起し，その収束次数・安定性の解析を行うとともに，２段階の LALMM を実際に構成して，プログラム実装し，その性能評価を行った。その結果，古典的 Runge-Kutta 法などの従来の離散変数法に匹敵する方法を作ることができ，段階数を更に大きくすることによって，さらに性能の向上と，常微分方程式に類似する函数方程式への離散変数法として拡張する見通しをえた。

研究成果の概要（英文）：We proposed the ``look-ahead'' linear multistep methods (LALMM), a new class of discrete variable methods solving initial-value problems of ordinary differential equations, gave analysis of their order of convergence as well as of stability and derived several LALMM of two steps, whose implementation and performance evaluation were carried out. Our results showed that the new schemes of LALMM are competitive with the conventional methods like as the classical Runge-Kutta method. Our study suggested more well-performing LALMM can be derived by increasing its number of steps can be introduced and extended to apply to other functional equations closely related to ordinary differential equations.

研究分野：数値解析

キーワード：数値解析　微分方程式　離散変数法　収束性　安定性　性能評価

１．研究開始当初の背景

一般の常微分方程式の初期値問題

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = f(t,x) \quad (t_0 < t < T), \quad x(t_0) = x_0 \qquad (1)$$

に対する離散変数法は，一段階法として古典的 Runge-Kutta 法，多段階で stiff 問題向きの方法として後退微分公式 (BDF) などが知られていて，その汎用性と柔軟性のゆえに，科学計算ソフトウェアの中心をなしている．しかし，方程式の規模が大きくなり，また数値的な困難さが増す問題に直面するなかで，さらに一層洗練され，性能のよい方法が期待されている．数値解析研究者はこうした期待に応えることを迫られている．

２．研究の目的

離散変数法の新たなクラスである "先読み" 線型多段階法（"look-ahead" linear multistep methods, LALMM）を研究し，その実装と拡張を目的とする．

LALMM の基本的な考え方では．ステップ幅 h を固定し，初期値 x_0 の他に，$(n+k-1)$ までの離散近似解（後方値 back-values）$x_n, x_{n+1}, \ldots, x_{n+k-1}$ と，これから求めたい近似値の初期推定値 $x_{n+k}^{[0]}$ があると仮定する．このとき，一つ "前方" の近似値 $x_{n+k+1}^{[1]}$ を $(k+1)$ 段階の陽的線型多段階法で求め，次いで，これを含む別の $(k+1)$ 段階陰的線型多段階法で修正値 $x_{n+k}^{[1]}$ を求め，この過程を内部反復が収束するまで繰り返す．すなわち，$\ell = 0,1,2,\ldots$ に対して次の "予測子・修正子" 過程を実行する．

予測子:

$$x_{n+k+1}^{[\ell]} + \alpha_k x_{n+k}^{[\ell]} + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i x_{n+i} = h\left(\beta_k f(t_{n+k}, x_{n+k}^{[\ell]}) + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i f(t_{n+i}, x_{n+i})\right) \qquad (2)$$

修正子:

$$x_{n+k}^{[\ell+1]} + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i^* x_{n+i} = h\left(\beta_{k+1}^* f(t_{n+k+1}, x_{n+k+1}^{[\ell]}) + \beta_k^* f(t_{n+k}, x_{n+k}^{[\ell]}) + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i^* f(t_{n+i}, x_{n+i})\right) \qquad (3)$$

ここで，$\alpha_i, \beta_i, \alpha_i^*, \beta_i^*$ は予測子，修正子方程式を定める定数である．従来の線型多段階法と異なるり，修正子方程式が，ステップ $(n+k+1)$ を含むにもかかわらず，その左辺に x_{n+k+1} を含まず，ステップ $(n+k)$ に対する離散近似解を求める．すなわち，一つ先のステップの近似解を使って，現在のステップの近似解を構成する．LALMM では，次のステップでの初期推定値 $x_{n+k+1}^{[0]}$ として，先読み値として反復計算された最後の値を使うことができるので，ステップの前進は容易である．

離散変数法の数値解析としてまず行うべき収束性・安定性の解析については，研究代表者はすでにその一般理論と基準を導いた．その指針に基づいて，2 段階法，すなわち $k=2$ とした "先読み" 線型２段階法 "look-ahead" linear two-step methods (LALTM) の予測子・修正子の組を複数導出してあった．これらは，4 次収束であり，さらにそのうちの一つのスキーム

$$\begin{aligned} x_{n+3}^{[\ell]} &= -4x_{n+2}^{[\ell]} + 5x_{n+1} \\ &\quad + h\left(4f(x_{n+2}, x_{n+2}^{[\ell]}) + 2f_{n+1}\right), \qquad (4) \\ x_{n+2}^{[\ell+1]} &= x_{n+1} + \frac{h}{24}\left(-f(x_{n+3}, x_{n+3}^{[\ell]})\right. \\ &\quad \left. + \; 13f(x_{n+2}, x_{n+2}^{[\ell]}) + 13f_{n+1} - f_n\right) \qquad (5) \end{aligned}$$

は，内部反復方程式が完全に解けたという条件のもとで A 安定であることも示されていた．他の 3 組も $A(\theta)$ 安定性は達成していた．($f_n = f(t_n, x_n)$ などの略記法を導入している.）

そこで本研究計画では次の課題を研究目的とした．

(1) LALTM の数値実験　上記の LALTM に対して，特に連立系であるテスト問題を課して，その性能評価を行う．"硬い問題" (stiff problem) は連立系において初めて意味をもつので，ODE-TEST として知られた問題群に対する実験を重ねて，4 種類の LALTM の性能特質を調べる．

(2) 局所誤差の振舞いと事後評価　LALMM の局所誤差の振舞いと，その事後評価は，この方法を従来の方法と比肩できるものとするためには必須である．LALTM を最初の材料として，実践的・理論的な解析を通じてその枠組みを追究する．

(3) ステップ幅の自動調節機能　良好な数値的安定性を活用して，LALMM を従来の方法と十分対抗しうる離散変数法とするためには，ステップ幅を大きくとり，少ないステップ数で前進できるようにしなければならない．したがってステップ幅の最適決定と，ステップ幅変更による後方値の効率的な再計算からなる，ステップ幅自動調節機能が重要であり，前項の成果を生かして，その確立をめざす．

(4) LALMM の適用範囲の拡大　LALMM に期待される良好な数値的安定性を考慮すると，それを微分方程式の初期値問題 (1) に限らず，関連する函数方程式への適用に拡張することが期待できる．その一つの例として，遅延微分方程式 (delay-differential equations) があげられ，その数値的安定性解析がまず課題となり，ついでステップ幅の自動調整機能を活用して遅延項への対処を研究する．別の例としては，確率微分方程式 (stochastic differential equations) の数値スキームが考えられる．drift term へ LALMM のアイディアを導入した semi-implicit scheme をまず検討する．

３．研究の方法

(1) LALTM の数値実験 2 段階法のスキームを，連立系常微分方程式の例題に適用し，その性能と特徴を把握する．

(2) 局所誤差の事後評価 まだ決定的な方法が確立しておらず，数種類のアプローチを併用する必要がある．

(3) ステップ幅の自動調節機能 信頼できるソフトウェアとして LALMM を確立するためには，この機能が重要である．すでにスキームを導出した LALTM の場合は２段階であるので，ステップ幅変更の必要が起こったとき，その対処のコストはまだ小さいと予測できるが，やはり連立系の場合に効率的な方法を導入しなければならない．

上記３課題は，多分に発見的に (heuristics) 研究すべき課題であり，既存の数値解析ソフトウェア（たとえば Matlab）の標準ルーチンや bench-mark tests を通じて，比較検証しながら確立する．

(4) 適用範囲の拡大 遅延微分方程式あるいは確率微分方程式に対する LALMM の適用の定式化と，予備的実装を試みる．

４．研究成果

上記研究目的に沿って，主として Free Pascal コンパイラを用いたプログラミングを行い，検証と解析を進めた．

LALTM の数値実験について，特に重点的に研究し，その特徴を明らかにすることができた．まず，線型系の ODEs に関して，当然のことであるが，他の４次法と同じ性能を示すことが確認できた．そこで，Non-stiff から stiff に近い系まで，パラメータを調節して性質を変えることができる，制限二体問題の方程式

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = x_3,\ \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = x_4,\ \frac{\mathrm{d}x_3}{\mathrm{d}t} = -\frac{x_1}{r^3},\ \frac{\mathrm{d}x_4}{\mathrm{d}t} = -\frac{x_2}{r^3}$$
$$\left(r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2},\quad 0 < t < 10\right) \tag{6}$$

と初期条件

$$x_1(0) = 1 - e,\ x_2(0) = x_3(0) = 0,\ x_4(0) = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}} \tag{7}$$

について詳しい計算と解析を行った．この問題の解析解は知られており，離心率を示すパラメータ e $(0 \leq e < 1)$ は 1 に近いほど，数値的困難さが増す．

たとえば (4), (5) にあげたスキームによって，上の例題を解いた数値実験結果は，次の表にまとめることができる．ここで，h, err, log, diff, no. はそれぞれ，用いたステップ幅，得られた絶対誤差の最大値，その 2 底の対数 $\times(-1)$，隣り合うステップ幅に対する log の差（数値的収束次数を示す），函数値計算の総数を表わす．

$e = 1/10$ の場合

h	err	log	diff	no.
10/80	6.32e-04	10.63		1229
10/160	3.94e-05	14.63	4.00	1665
10/320	2.45e-06	18.64	4.01	2281
10/640	1.51e-07	22.66	4.02	3383
10/1280	9.35e-09	26.67	4.01	5125
10/2560	9.06e-10	30.04	3.37	7973
10/5120	5.09e-10	30.87	0.83	12831

$e = 9/10$ の場合

h	err	log	diff	no.
10/5120	5.87e-02	4.09		15071
10/10240	3.79e-03	8.04	3.95	27115
10/20480	2.38e-04	12.04	4.00	50733
10/40960	1.50e-05	16.02	3.98	97433
10/81920	9.31e-07	20.03	4.01	190617
10/163840	1.07e-07	23.15	3.12	374153
10/327680	3.03e-08	24.98	1.83	740557

他の３通りの LALTM スキーム（Adams type, Average type などと名前を付している）および古典的 Runge-Kutta 法と Hamming 予測子・修正子法（いずれも収束次数は 4）との性能比較を，横軸に $-\log_2(\mathrm{err})$，縦軸に $\log_{10}(\mathrm{no.})$ を表示して図示すると，図 1 がえられる．

この比較において LALTM のなかで最も効率のよかった Average type-B と，RK4, Hamming とを特に取り出して比較したのが，次の図 2 である．

数値実験結果より次の結論が得られる．

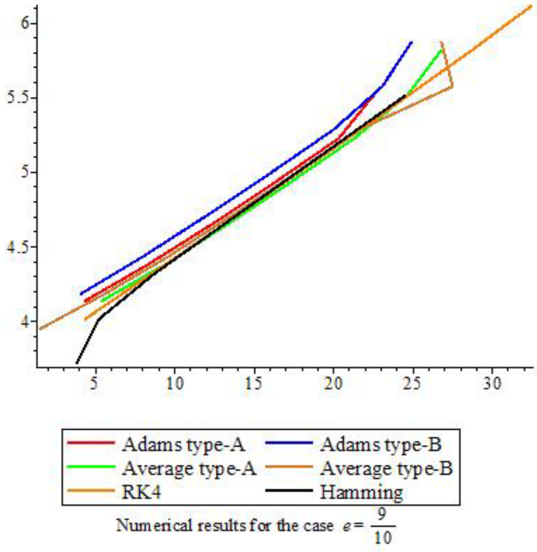

図 1: $e = 9/10$ のときの数値計算結果 （全 6 スキームの比較）

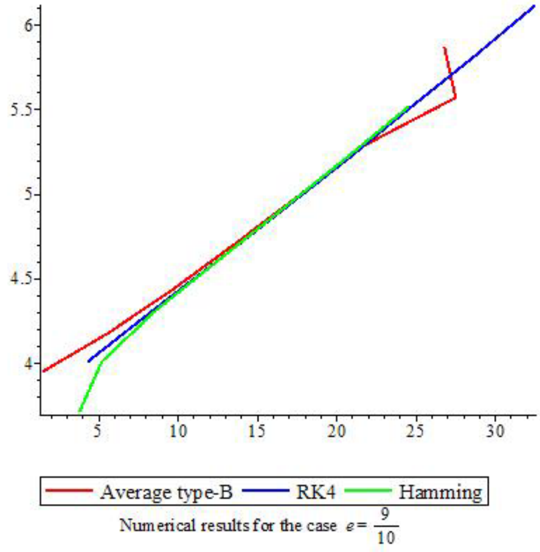

図 2: $e = 9/10$ のときの数値計算結果 （3 スキームの比較

- この例題に対して，6 スキームはどれも 4 次収束を達成している．
- LALTM は，他の 2 方法と同様の計算効率を示すが，決定的に優位とはまだいいがたい．

Stiff 系への対応について考察し，次の結果をえた．d 次元非斉次線型系

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = A\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}(t) \quad (a < t < b), \quad \boldsymbol{x}_0(a) = \boldsymbol{x}_I \quad (8)$$

を stiff 系のモデルと考え，d 次正方行列を係数とする線型方程式解法アルゴリズムが入手可能とするとき，(4), (5) にあげた LALTM は，次の前進公式と等価である（やはり $\boldsymbol{f}_n = A\boldsymbol{x}_n + \boldsymbol{g}(t_n), \boldsymbol{g}_n = \boldsymbol{g}(t_n)$ などの略記法を用いている）．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_{n+2} = &\\ &\left(I - \frac{17h}{24}A + \frac{h^2}{6}A^2\right)^{-1} \times \\ &\left(\boldsymbol{x}_{n+1} + \frac{h}{3}\boldsymbol{f}_{n+1} - \frac{h^2}{12}A\boldsymbol{f}_{n+1} - \frac{h}{24}\boldsymbol{f}_n + \frac{5h}{24}\boldsymbol{g}_{n+1}\right. \\ &\left. + \frac{13h}{24}\boldsymbol{g}_{n+2} - \frac{h^2}{6}A\boldsymbol{g}_{n+2} - \frac{h}{24}\boldsymbol{g}_{n+3}\right) \qquad (9)\end{aligned}$$

赤で示した項は，このステップにおいて新たに計算 (evaluation) を要する項であり，他の項はそれまでのステップ前進ですでに計算されている．他の 3 スキームについても，同様の等価公式が導出できる．行列 $I - \frac{17h}{24}A + \frac{h^2}{6}A^2$ の正則性を保証するため，新たにステップ幅 h への制限を導入しなければならないという問題が生じるが，計算効率の向上がそれを補って余りあるという見込みのもとで，さらなる数値実験を実施している．

他の研究課題については，残念ながら顕著な前進をはかることができず，引き続き検討すべき課題として残った．その大きな理由は，上に示した計算結果より，2 段階の LALMM を発展させ 3 段階以上の LALMM を実際に構成し，その性能評価を行うべき課題が明らかとなったからである．3 段階以上の LALMM は収束次数を引き上げることができ，一方では良好な安定性を保つ見通しがあるので，計算効率全体が向上すると強く期待されるからである．それに伴って，**局所誤差の事後評価**，**ステップ幅の自動調節機能**の課題も再構成し，離散変数法として趣旨が似通っていると指摘されている J. Cash の EBDF (Extended BDF) と比較することが求められている．

一方，研究代表者は，やはり微分方程式の数値解析の研究課題の関連主題について Guang-Da Hu, Qian Guo とそれぞれ共同研究を進め，講演発表・論文発表を行うとともに，数値解析の研究展望を示す講演を

国際会議において行った.

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計３件）

[1] Qian Guo, Mingming Qiu and Taketomo Mitsui, Asymptotic mean-square stability of explicit Runge-Kutta Maruyama methods for stochastic delay differential equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **296** (2016), 427 - 442 （査読有）.

[2] Qian Guo, Wenwen Xie and Taketomo Mitsui, Convergence and stability of the split-step-Milstein method for stochastic delay Hopfield neural networks, *Abstract and Applied Analysis,* **2013** (2013), Article ID 169214, 12 pages（査読有）.

[3] Guang-Da Hu and Taketomo Mitsui, Bounds of the matrix eigenvalues and its exponential by Lyapunov equation, *Kybernetika,* **48** (2012), 865-878（査読有）.

〔学会発表〕（計１０件）

[1] T. Mitsui, Performance of “Look-Ahead” Linear Multistep Methods, 13th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2015), Rodos Palace Hotel, Rhodes, Greece, Sep 24, 2015.

[2] Qian Guo, Mingming Qiu, T. Mitsui, Stability analysis of explicit Runge-Kutta Maruyama methods for Itô SDDEs, 2015 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE 2015), Potsdam, Germany, Sep 17, 2015.

[3] 三井 斌友, “先読み” 線型多段階法の性能（続）, 第４４回数値解析シンポジウム，甲州市・ぶどうの丘, 2015.6.10.

[4] T. Mitsui, Study of numerical analysis in Japan – A private view –, Kyoto Conference on Numerical Analysis and Differential Equations 2014, 京都大学楽友会館, 2014.9.17.

[5] 三井斌友, “先読み” 線型多段階法の性能，第４３回数値解析シンポジウム，石垣島・ホテル日航八重山, 2014.6.11.

[6] Q. Guo, W. Xie, T. Mitsui and X. Tao, Convergence and stability analysis of stochastic delay differential equations, 2013 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE 2013), Valladolid, Spain, Sep 17, 2013.

[7] S. Nakamuraa, K. Ozawaa and T. Mitsui, A prefetched BiCGSTAB method in the solution of the trapezoidal rule of large ODEs, 2013 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE 2013), Valladolid, Spain, Sep 17, 2013.

[8] Qian Guo, Wenwen Xie and Taketomo Mitsui, Convergence and stability of the split-step θ-Milstein method for stochastic delay differential equations, 2013 SIAM Annual Meeting, Town and Country Resort & Convention Center, San Diego, Cal., USA, July 11, 2013.

[9] T. Mitsui, D.G. Yakubu, Performance of “look-ahead” linear multistep methods, 13th International Seminar “NUMDIFF” on Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations, Halle, Germany, Sep 10, 2012.

[10] 江崎信行・近江佑梨・三井斌友，Van der Pol 方程式による睡眠覚醒モデルの数値解析，日本応用数理学会 2012 年度年会，2012.8.30，稚内全日空ホテル

〔図書〕（計０件）

〔産業財産権〕○出願状況（計０件）

○取得状況（計０件）

〔その他〕なし

６．研究組織

(1) 研究代表者
三井 斌友（MITSUI, Taketomo）
同志社大学・ 研究開発推進機構・嘱託研究員
研究者番号：５００２７３８０

(2) 研究分担者　なし

(3) 連携研究者
江崎 信行（ESAKI, Nobuyuki）
豊田工業高等専門学校・准教授
研究者番号：８０３１１０３３