数理解析研究所講究録
第 215 巻 1974 年 1-11

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

指数函数 e^z は

$$e^z = \cfrac{1}{1 - \cfrac{z}{1 + \cfrac{z}{2 - \cfrac{z}{3 + \cfrac{z}{2 - \cfrac{z}{5 - \ddots}}}}}}$$

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

$$\frac{du}{dt} = A \cdot u$$

ただし　u；n 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 $u(t)=e^{tA}\cdot u_0$ 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])。

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

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

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

(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ー，α は収束をはやめるためのパラメーターである。

大きな t に対して $e^{tA}\cdot u_0$ 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。

$e^{tA}=(e^{\Delta t\cdot A})^l$ ゆえ

$e^{tA}u_0 \fallingdotseq [F_j^{-1}(\Delta t\cdot A)\cdot G_j(\Delta t\cdot A)]^l\cdot u_0$　(j は十分大)

従って k を固定して $F_k^{-1}G_k$ 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。

$$
\begin{cases}
\mathbb{U}_1 = F_k^{-1} \cdot G_k \cdot \mathbb{U}_0 \\
\mathbb{U}_2 = F_k^{-1} \cdot G_k \cdot \mathbb{U}_1 = (F_k^{-1} \cdot G_k)^2 \cdot \mathbb{U}_0 \\
\mathbb{U}_3 = F_k^{-1} \cdot G_k \ \mathbb{U}_2 = (F_k^{-1} G_k)^3 \cdot \mathbb{U}_0 \\
\vdots \\
\mathbb{U}_l = F_k^{-1} \cdot G_k \ \mathbb{U}_{l-1} = (F_k^{-1} \cdot G_k)^l \cdot \mathbb{U}_0
\end{cases}
\qquad (2)
$$

（ただし　$G_k \cdot \mathbb{U}_0 = g_k$）

［注意１］　e^{tA} の連分数近似は

「n 次元正方行列 A の任意の固有値を λ_j とするとき、

$Re(\lambda_j) \leqq 0$　ならば　$\lim_{k \to \infty} F_k^{-1}(tA) \cdot G_k(tA) = e^{tA}$　$, (t \geqq 0)$」

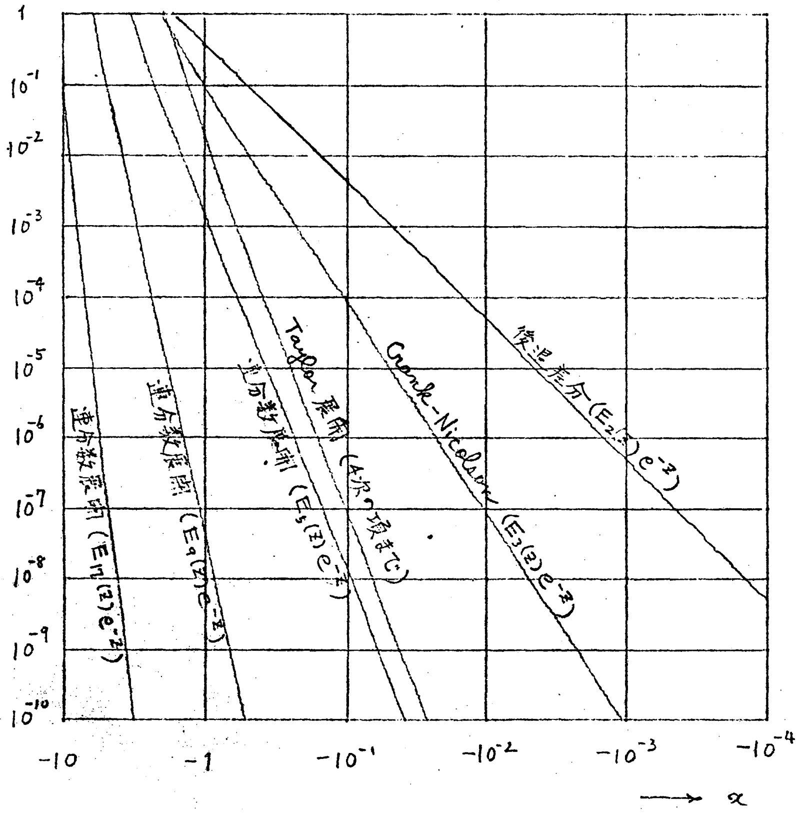
ということが証明されている．（［１］）。

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

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

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

$\boxed{ex.\ 1}$　負の実軸上に固有値が存在する場合

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

をとって、$\dfrac{du}{dt} = Au$ を解く。

（イ）$\lambda = -1$ に対応する固有ベクトルを $\mathbb{u}_0$ として、

$\alpha = 0$, $c = 1$ で計算したときの精度

j \ t	0.001	0.01	0.1	1	10	100
2	6ケタ	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j	精度
1 ~ 8	13	9ケタ
9 ~ 41	13	8ケタ
42 ~ 100	13	7ケタ

(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 $\mathbb{u}_0$ として

$t = 0.01$, $c = 1$ に固定。α の値をかえる.

j \ α	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	5.5
2	3ケタ	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

$\boxed{ex.2}$ 放物型偏微分方程式

$\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$; 初期条件 $t=0$; $0 \leqq x \leqq 1$ で $u = \sin \pi x$

境界条件 $t > 0$; $x=0$, $x=1$ で $u=0$ 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 $\Delta x = \frac{1}{20}$ x_{19} $x_{20}=1$

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

拡散方程式は　$\mathbf{u}_0=\mathbf{u}(0)$ で　$\dfrac{d\mathbf{u}}{dt}=A\cdot\mathbf{u}$　となる．

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

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

$(s=1,2,\cdots,N=19)$

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数近似計算の精度

t \ s	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20
1/800	4ケタ	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_s singul.
10/8	0	0	0	0	0	0	F_s singul.				

（(1) のアルゴリズムによる）

$\Delta t=\dfrac{2}{800}$ として

$t=\dfrac{1}{8}$ まで計算 ⟶

t	2/800 ~6/800	8/800 ~16/800	18/800 ~30/800	32/800 ~100/800
収束したときのs	6	6	6	6
精度	9~10ケタ	9	8~9	8

（(2) のアルゴリズムによる）

（ロ）発展方程式の解と

微分方程式の解の比較

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

② $\dfrac{d\mathbf{u}}{dt}=A\mathbf{u}$ の真の解

③ $\dfrac{d\mathbf{u}}{dt}=A\mathbf{u}$ の連分数近似解

として　$t=\dfrac{1}{800}$ のときの

0.XXXEk　のkの値を

右表に示す。

	絶対誤差	相対誤差
②の①に対する	−5	−4

s	③の①に対する 絶対誤差	③の①に対する 相対誤差	③の②に対する 絶対誤差	③の②に対する 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。

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

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

t	$\frac{1}{400}\sim\frac{2}{400}$	$\frac{3}{400}\sim\frac{10}{400}$	$\frac{1}{4}\sim\frac{2}{4}$	$\frac{3}{4}\sim 1$
精度	4ケタ	3ケタ	2ケタ	1ケタ

(ニ) $t=0.05$ のとき 3ケタ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×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。$\left(\Delta t=\frac{1}{400}\right)$

陽解法 ――「1時刻行につき $2n$ 回の乗算」200時刻行必要。$\left(\Delta t=\frac{1}{4000}\right)$

(ホ) Varga により 次の式が示されている。([1], [2]).

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

tA の絶対値最大固有値を λ_{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。

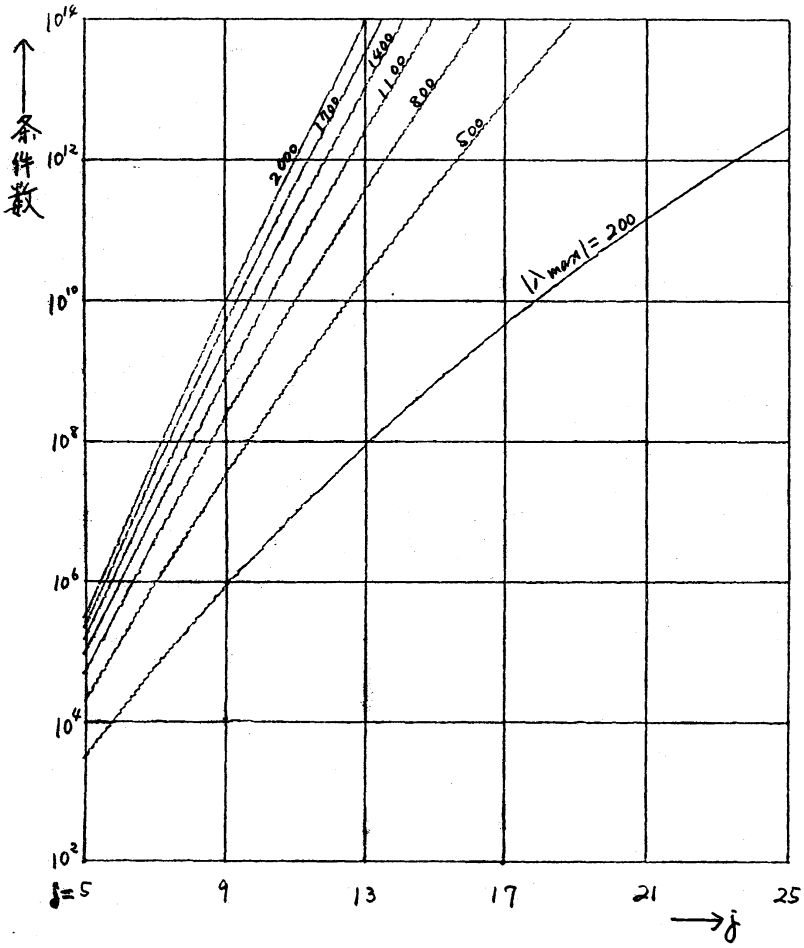
$$\frac{k!}{(2k)!}\approx\frac{1}{\sqrt{2}\,4^k e^{k(\log k-1)}}\ \text{ゆえ}\ \mathrm{cond}(F_j(tA))\fallingdotseq\frac{|\lambda_{max}|^k}{\sqrt{2}\,4^k e^{k(\log k-1)}}$$

(イ)に即して計算してみると

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

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

図 2　　$cond(F_j(tA))$



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を大きくしていっ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　$k \fallingdotseq e^5 \fallingdotseq 10^{2.15}$　ゆえ $j = 300$　($t=\frac{1}{8}$のとき)

$\lambda_{max} = -2000$ のとき　$k \fallingdotseq e^{7.2} \fallingdotseq 10^{3.1}$ ゆえ $j \fallingdotseq 2000$ （$t = \frac{10}{8}$ 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。

$\boxed{ex. 3}$　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 $A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \end{pmatrix}$ に対し

$\dfrac{d\mathbf{u}}{dt} = A\mathbf{u}$,　$\mathbf{u}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 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。）

$\boxed{ex. 4}$　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　$t = 0$,　$0 \leqq x \leqq 1$ のとき

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

境界条件　$t \geqq 0$,　$x = 0$,　$x = 1$　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。

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

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

(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、発展方程式の連分数近似解の精度、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 \ j	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、連分数近似解の精度.

① $\frac{du}{dt} = Au$ 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

とするとき、②の①に対する精度を次表に示す。

t \ δ	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；拡散方程式の連分数展開による数値解法 —行列の指数関数の連分数近似—，日本数学会応用数学分科会講演予稿 (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