数理解析研究所講究録 1441 巻 2005 年 173-186

有界化法による微分方程式の数値計算

徳島大学・工学部　今井　仁司 (Hitoshi IMAI)
Faculty of Engineering, University of Tokushima

1. 序

方程式に現れる量が無限大を伴うとき，その数値計算は単純にいえば不可能だと思われてきた．この常識は計算機が無限大を扱えないことに由来する．計算機は，確かに，無限の情報量を扱うことはできないが，これと方程式に現れる無限大とは関係がない．方程式に現れる無限大は数学的に回避すればよい．ここでは，常微分方程式を例に無限大の回避方法を紹介するが，この方法は常微分方程式に限定されないことを注意しておく．

方程式に現れる無限大の量として最も実用的で簡単な例は定義域の大きさである．次の微分方程式の境界値問題を考える．

問題 1

$$\begin{cases} y'' + 2xy' = -2e^{-x^2}, & -\infty < x < \infty \\ y(-\infty) = y(\infty) = 1 \end{cases}$$

問題 1 の厳密解　　$y = 1 + e^{-x^2}$

問題 2

$$\begin{cases} y'' + \dfrac{4x}{1+x^2}y' = \dfrac{-2}{(1+x^2)^2}, & -\infty < x < \infty \\ y(-\infty) = y(\infty) = 0 \end{cases}$$

問題 2 の厳密解　　$y = \dfrac{1}{1+x^2}$

問題 1 では解は遠方で急速に (0 に) 減少し，問題 2 では解は遠方でゆっくりと (1 に) 減少する．

領域に関する無限大の最も簡単な回避方法は領域切断法である．これは無限領域を強引に有界領域におきかえる方法である．この領域切断法を問題 1，2 に適用した一例が次である．

<u>問題 $\tilde{1}$</u>

$$\begin{cases} y'' + 2xy' = -2e^{-x^2}, & -100 < x < 100 \\ y(-100) = y(100) = 1 \end{cases}$$

<u>問題 $\tilde{2}$</u>

$$\begin{cases} y'' + \dfrac{4x}{1+x^2}y' = \dfrac{-2}{(1+x^2)^2}, & -100 < x < 100 \\ \\ y(-100) = y(100) = 0 \end{cases}$$

これらの問題に対して 2 次の差分を適用した数値計算結果を次に示す.

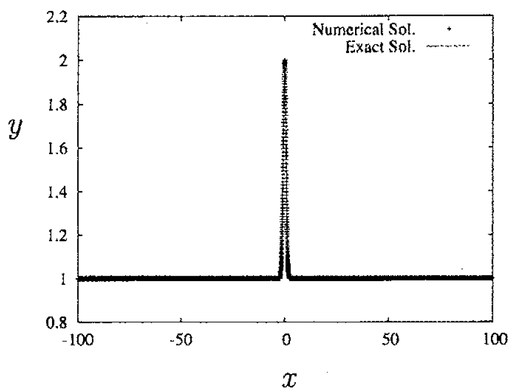


図 1. 問題 $\tilde{1}$ の解のグラフ
(倍精度, $\Delta x = 0.02$, 最大誤差 $\sim 10^{-4}$)

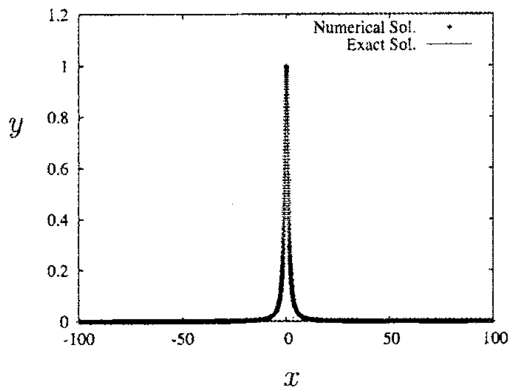


図 2. 問題 $\tilde{2}$ の解のグラフ
(倍精度, $\Delta x = 0.02$, 最大誤差 $\sim 10^{-4}$)

10^{-4} の誤差で満足する人にとってはこれ以上の考察は必要ないが, この誤差では大きいと不安になる人は他の方法を考えねばならない.

本論文では無限精度数値シミュレーション [4] に耐えられるような無限大の困難を回避する手法を提案する.

2. 有界化法

2.1 領域に対する有界化

先に紹介した領域切断法は非常に人工的である. 即ち, 無限領域の問題を有限領域の問題に変換したのであるがそれらは等価ではない. 無限領域の問題を有限領域の問題に等価

に変換する方法には，Dirichlet-to-Neumann 写像 [2] や変数変換を用いたものなどが考えられるが，汎用性の観点からは変数変換を用いるものが優れている．

変数変換によって無限を有限に変換することあるいはその逆は様々な分野で行われている．数値積分では二重指数型積分公式 [5] などでよく見かけるし，ニューラルネットワークではニューロンの非線形性を出すために用いられている Sigmoid 関数 [3] がそれを実現する．これらに見られる関数としては指数関数が多い．無限と有限を対応させる関数を大まかに分類すると次のようになる．

<u>分類</u>

(1) 指数関数型 (対数型)

(2) 有理関数型

(3) その他 $\left(\text{例．} t = \dfrac{2}{\pi} \tan^{-1} e^{x}\right)$

ただし，微分方程式などに適用するときには次の注意が必要である．

<u>注意</u>

(1) 指数関数の数値計算は容易でない．例えば，倍精度では $x = 100$ で $1 + e^{-x} = 1$.

(2) 逆関数が直接計算できるのが望ましい．方程式に独立変数があらわに入っている場合などが特に該当する．逆関数が直接求まらなければ，ニュートン法などで数値計算すればよいかも知れないが煩雑になる．

(3) 関数は単調でないといけない．これは変換における 1 対 1 対応に必要となる．

これら注意事項をふまえて，ここでは次の単純な関数による無限と有限の変換を考える．このときの関数を有界化関数，有界化関数を用いて無限を有限に変換することを有界化とよぶことにする．

<u>有界化関数</u>

1. $t = \tanh x \quad \ominus \quad x \in (-\infty, \infty) \Leftrightarrow t \in (-1, 1)$

2. (a) $x = \dfrac{1+t}{1-t} \quad \ominus \quad x \in [0, \infty) \Leftrightarrow t \in [-1, 1)$

   (b) $x = \dfrac{t}{1-t^2} \quad \ominus \quad x \in (-\infty, \infty) \Leftrightarrow t \in (-1, 1)$

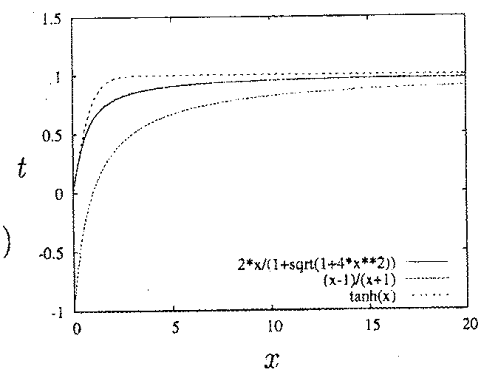


図 3.　有界化関数のグラフ

<u>注意</u>

(1) 有界化関数 1 は典型的な Sigmiod 関数 $S(x)$ と同値である．(有界化関数 1 を Sigmiod

関数ということもある．)

$\because\ S(x) = \dfrac{1}{1+e^{-x}} \ \Rightarrow\ 2S(x) - 1 = \tanh\dfrac{x}{2}.$

(2) 有界化関数 2(a) は Sigmiod 関数 $S(x)$ から作られる．

$\because\ t = 2S(z) - 1 = \tanh\dfrac{z}{2} = \dfrac{x-1}{x+1}$, ここで $x = e^z$.

(3) $t \sim 1$ で有界化関数 2(a) と (b) は定数倍の違いしかないので，有界化に関しては同値とみてよい．

(4) 有界化関数 2(b) の一般形は $x - x_0 = \dfrac{a(t-t_0)}{1-t^2}, \quad a > 0.$

これら有界化関数を微分方程式に適用するときに必要な逆変換や導関数は以下のようになる．(ここで，注意の (3) もあるし，有界化関数 2(a) の例は省略する．)

<u>有界化 1</u>　$(t = \tanh x)$

$$x = \frac{1}{2}\log\frac{1+t}{1-t}$$

$$\frac{dy}{dx} = (1-t^2)\frac{dy}{dt}, \quad \frac{d^2y}{dx^2} = (1-t^2)^2\frac{d^2y}{dt^2} - 2t(1-t^2)\frac{dy}{dt}, \quad \text{etc.}$$

<u>有界化 2(b)</u>　$(x = \dfrac{t}{1-t^2})$

$$t = \frac{2x}{1+\sqrt{1+4x^2}}$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{(1-t^2)^2}{1+t^2}\frac{dy}{dt}, \quad \frac{d^2y}{dx^2} = \frac{(1-t^2)^4}{(1+t^2)^2}\frac{d^2y}{dt^2} - \frac{2t(1-t^2)^3(3+t^2)}{(1+t^2)^3}\frac{dy}{dt}, \quad \text{etc.}$$

これらの有界化によって，問題 1，2 は次のように変換される．

<u>問題 1′</u> (問題 1 ⊕ 有界化 1)

$$\begin{cases} (1-t^2)\dfrac{d^2y}{dx^2} + \left(\log\dfrac{1+t}{1-t} - 2t\right)(1-t^2)\dfrac{dy}{dt} = -2e^{-\left(\frac{1}{2}\log\frac{1+t}{1-t}\right)^2}, \quad -1 < t < 1 \\ y(-1) = y(1) = 1 \end{cases}$$

<u>厳密解</u>　$y = 1 + e^{-(\frac{1}{2}\log\frac{1+t}{1-t})^2}, \quad -1 \leqq t \leqq 1$

問題 1″ (問題 1 ⊕ 有界化 2(b))

$$\begin{cases} \dfrac{(1-t^2)^4}{(1+t^2)^2}\dfrac{d^2y}{dx^2}+\left(\dfrac{2t(1-t^2)}{1+t^2}-\dfrac{2t(1-t^2)^3(3+t^2)}{(1+t^2)^3}\right)\dfrac{dy}{dt}=-2e^{\frac{-t^2}{(1-t^2)^2}}, \\ \hfill -1<t<1 \\ y(-1)=y(1)=1 \end{cases}$$

厳密解 $\quad y=1+e^{\frac{-t^2}{(1-t^2)^2}}, \quad -1 \leqq t \leqq 1$

問題 2′ (問題 2 ⊕ 有界化 1)

$$\begin{cases} (1-t^2)^2\dfrac{d^2y}{dx^2}+(1-t^2)\left(\dfrac{2\log\frac{1+t}{1-t}}{1+\left(\frac{1}{2}\log\frac{1+t}{1-t}\right)^2}-2t\right)\dfrac{dy}{dt}=-2e^{-\left(\frac{1}{2}\log\frac{1+t}{1-t}\right)^2}, \\ \hfill -1<t<1 \\ y(-1)=y(1)=0 \end{cases}$$

厳密解 $\quad y=\dfrac{1}{1+(\log\frac{1+t}{1-t})^2}, \quad -1 \leqq t \leqq 1$

問題 2″ (問題 2 ⊕ 有界化 2(b))

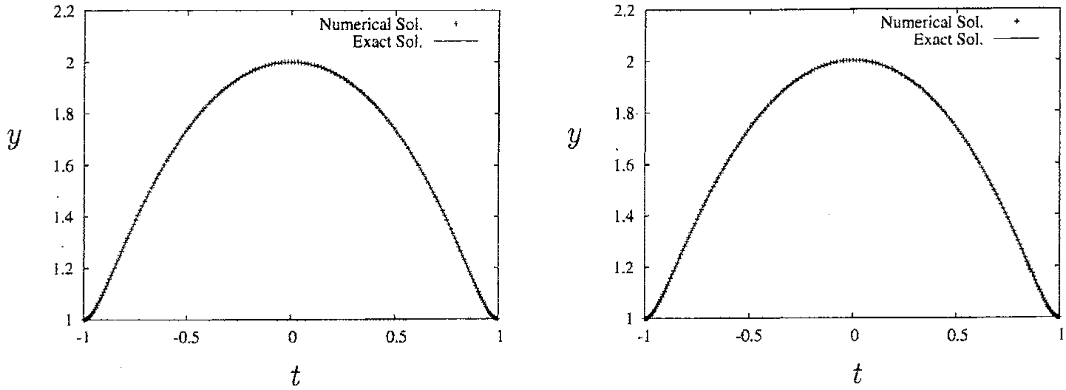
$$\begin{cases} \dfrac{(1-t^2)^4}{(1+t^2)^2}\dfrac{d^2y}{dx^2}+\left(\dfrac{4t(1-t^2)^3}{(1-t^2+t^4)(1+t^2)}-\dfrac{2t(1-t^2)^3(3+t^2)}{(1+t^2)^3}\right)\dfrac{dy}{dt} \\ \hfill =\dfrac{-2(1-t^2)^4}{(1-t^2+t^4)^2}, \quad -1<t<1 \\ y(-1)=y(1)=0 \end{cases}$$

厳密解 $\quad y=\dfrac{(1-t^2)^2}{1-t^2+t^4}, \quad -1 \leqq t \leqq 1$

問題 1′〜2″ に対する数値計算結果を図 4〜11 に示す．数値計算は Chebyshev - Gauss - Lobatto 選点法 [1] で行った．N は近似の次数を表す．(即ち，選点数は $(N+1)$ 個になる．) Err は次のように定義する．Dirichlet 条件なので max をとるとき $j=0,N$ は考慮していない．

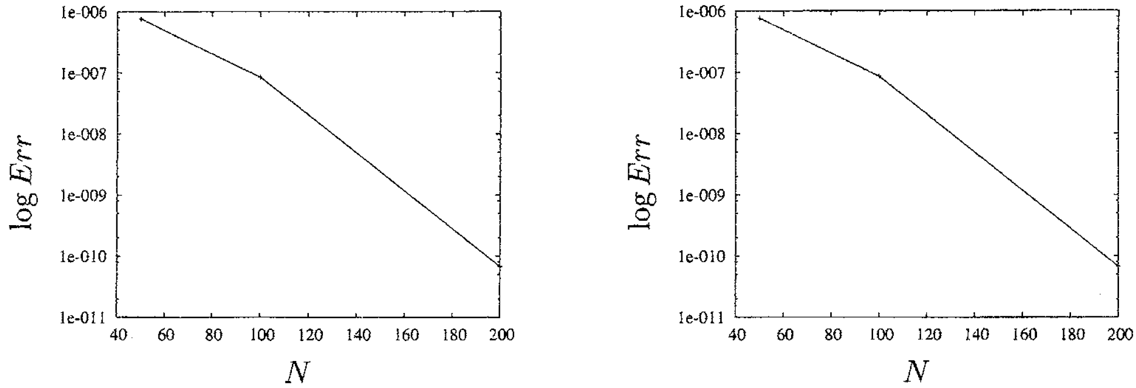
$$Err=\max_{j=1,2,\cdots,N-1}|y^N_{num,j}-y_{exac}(t_j)|$$

$y_{exac}(t)$: 厳密解, $\quad y^N_{num,j}$: 数値解, $\quad t_j=\cos\dfrac{j\pi}{N}, \quad j=0,1,2,\cdots,N$



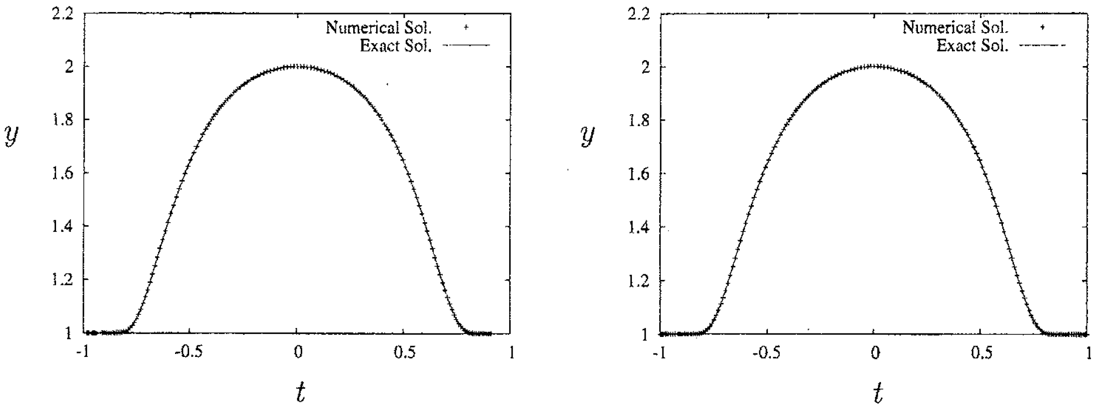
(a) $N = 200$，倍精度　　(b) $N = 200$，4 倍精度

図 4. 問題 1′ の解のグラフ



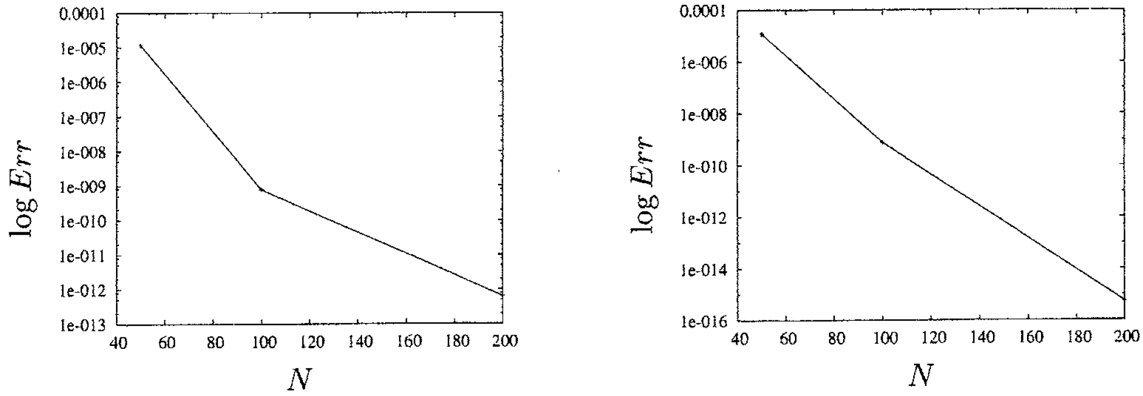
(a) 倍精度　　(b) 4 倍精度

図 5. 問題 1′ の計算誤差



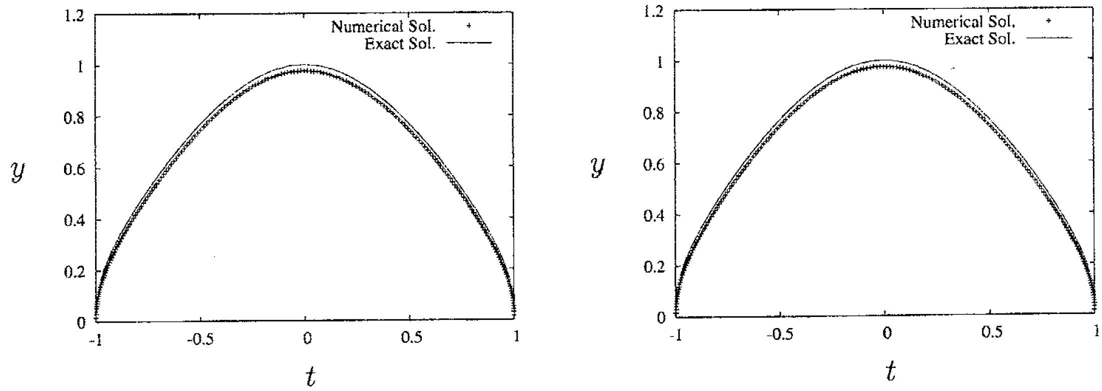
(a) $N = 200$，倍精度　　(b) $N = 200$，4 倍精度

図 6. 問題 1″ の解のグラフ



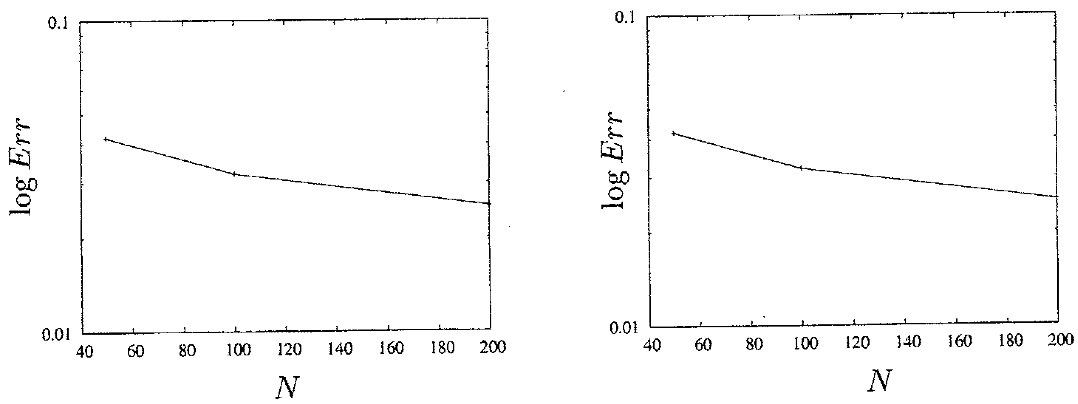
(a) 倍精度　　(b) 4 倍精度

図 7. 問題 $1''$ の計算誤差



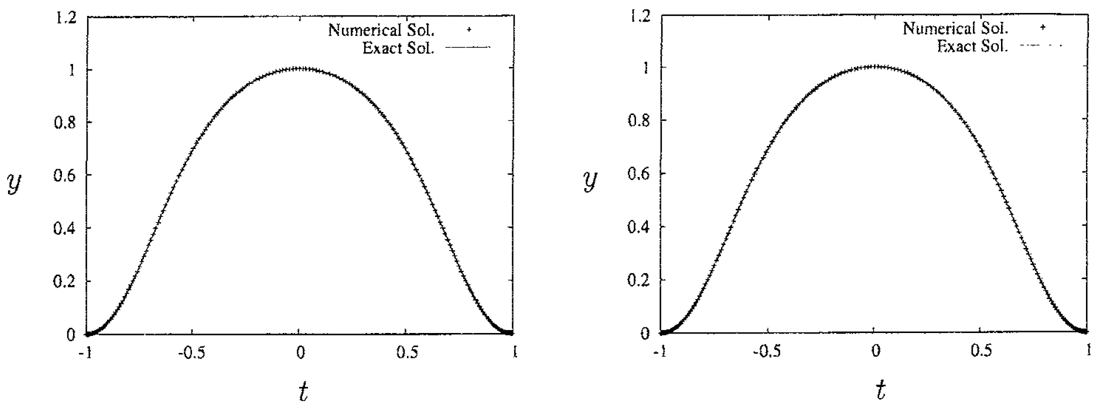
(a) $N = 200$，倍精度　　(b) $N = 200$，4 倍精度

図 8. 問題 $2'$ の解のグラフ



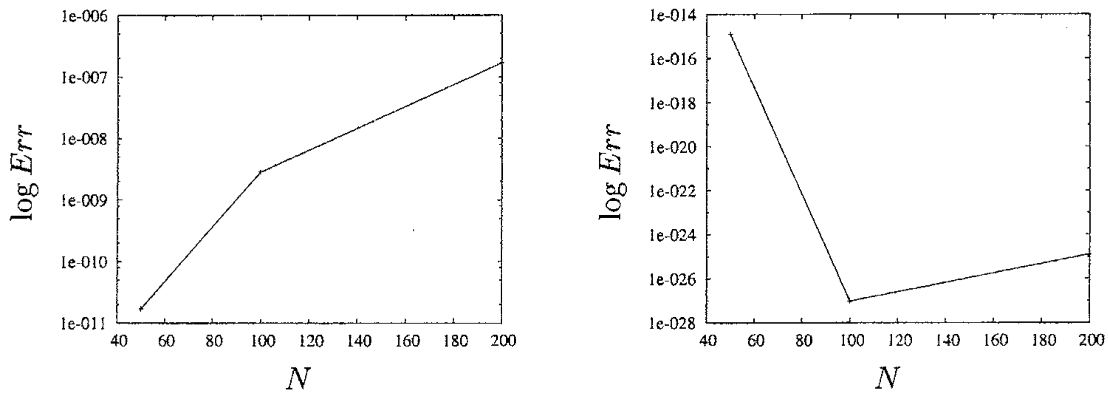
(a) 倍精度　　(b) 4 倍精度

図 9. 問題 $2'$ の計算誤差



(a) $N=200$，倍精度　　(b) $N=200$，4 倍精度

図 10. 問題 2′ の解のグラフ



(a) 倍精度　　(b) 4 倍精度

図 11. 問題 2″ の計算誤差

図 4〜11 をみると有理関数による有界化 2(b) が優れていることがわかる．図 11(a) は小さい N で誤差がすでに丸め誤差に達しているのでグラフが右上がりになっていることに注意する．

2.2 関数値の有界化

領域に関する有界化という考え方自体は新しいものではない．次に紹介するのは有界化を問題の解にも適用するという新しい考え方である．前節で考えた有界化関数は 1 対 1 対応を保証するので問題の解 (未知関数) にも適用できることに着目する．解の値が非有界かも知れないときには解の有界化も行う必要がある．次の簡単な常微分方程式の初期値問題を例に，領域と解の両方に対する有界化を見ていく．ここで，有界化は常微分方程式や

スカラー関数に限定されるものではなく，偏微分方程式やベクトル値関数にも適用できる一般的な手法であることに注意しておく．

問題 3　次をみたす $y = y(t)$ $(t \geqq 0)$ を求めよ．

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dt} = y, & t > 0 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

厳密解　$y(t) = e^t, \quad t \geqq 0$

この問題に対して，まず，前節で行ったような領域に対する有界化を適用する．

領域 (独立変数) に対する有界化

$$t = \frac{x}{1-x^2} \quad \Longrightarrow \quad \frac{dx}{dt} = \frac{(1-x^2)^2}{1+x^2}$$

ここでも，有理関数型の有界化関数を用いた．この有界界によって問題 3 は次の問題に変換される．

問題 3′　次をみたす $y = y(x)$ $(0 \leqq x < 1)$ を求めよ．

$$\begin{cases} \dfrac{(1-x^2)^2}{1+x^2}\dfrac{dy}{dx} = y, & 0 < x < 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

厳密解　$y(x) = e^{\frac{x}{1-x^2}}, \quad 0 \leqq x < 1 \quad (\ y(1) = +\infty\ )$

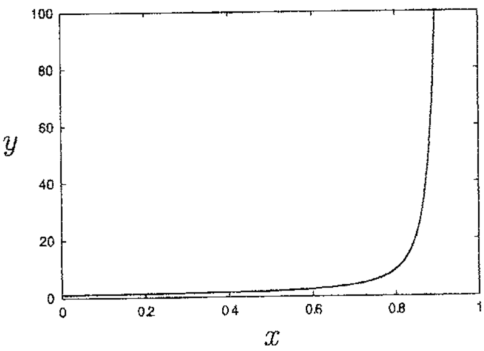


図 12.　問題 3′ の厳密解のグラフ

この有界化によって計算領域は有界になったが，これだけでは問題の解の有界性は保証されない．実際，厳密解は $x = 1$ で $+\infty$ となる．そこで，次に，解に対する有界化を考える．領域に対して行ったのと同様の有界化を解に対しても行う．それを次に示す．

解の有界化

$$y = \frac{f}{1-f^2} \quad \Longrightarrow \quad \frac{dy}{dx} = \frac{df}{dx}\frac{1+f^2}{(1-f^2)^2}$$

問題 3″　次をみたす $f = f(x)$ $(0 \leqq x < 1)$ を求めよ．

$$\begin{cases} \dfrac{(1-x^2)^2}{1+x^2}\dfrac{df}{dx} = \dfrac{(1-f^2)f}{1+f^2}, & 0 < x < 1 \\ f(0) = \dfrac{-1+\sqrt{5}}{2} \end{cases}$$

厳密解　$f(x) = \dfrac{2e^{\frac{x}{1-x^2}}}{1+\sqrt{1+4e^{\frac{2x}{1-x^2}}}}, \quad 0 \leqq x < 1 \quad (f(1) = 1)$

厳密解のグラフを次に示すが，以上の有界化によって領域も解も有界になったことがわかる．

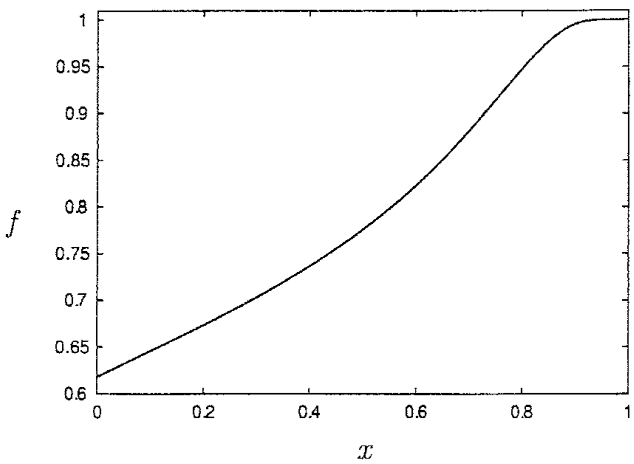
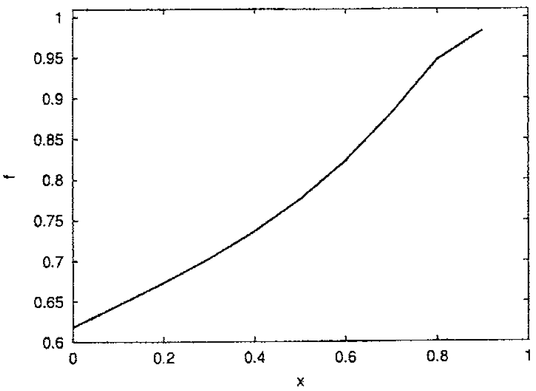


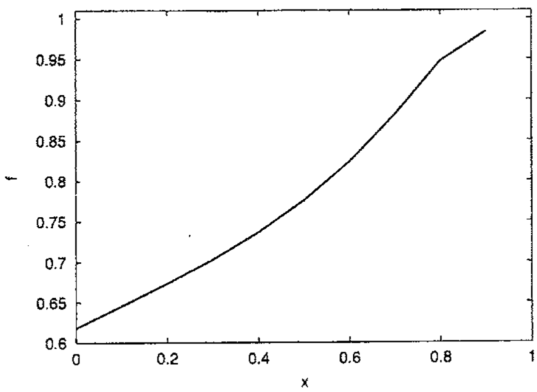
図 13.　問題 3″ の厳密解のグラフ

次に数値計算例を紹介する．解の有界化をほどこすことによって，残念ながら，方程式は線形であったものが非線形になってしまった．スペクトル法の利用者は，問題がいつも陰的になるので非線形を特別視することはないが，そうでない人には非線形は扱いにくいものである．従って，問題 3″ の数値解法としては陽的解法を選ぶのが標準的である．そこで 4 次の陽的 Runge-Kutta 法を適用した数値計算結果を図 14,15 に示す．図 14 から，Δx が小さくなると，最終ステップに近い $(x \sim 1)$ のときに Runge-Kutta 法が破綻していることがわかる．最終ステップに近づくまでのグラフからは想像できないような振る舞いである．Δx が小さくなると格段に精度が上がる，即ち数値解は収束するという常識からはほど遠い計算結果となっている．$\Delta x = 0.001$ のときの誤差を図 15 に示す．最終ステップに近い $(x \sim 1)$ のときの振る舞いがいかに想像を絶するか見てとれる．この数値計算法

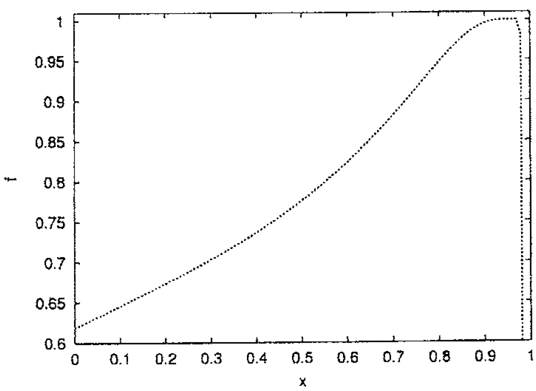
では，応用上非常に興味がある，$x \to 1 (t \to +\infty)$ での解の様子を知るうえで不安が残る．ただし，それまでの解の様子はかなり正確に再現されている．



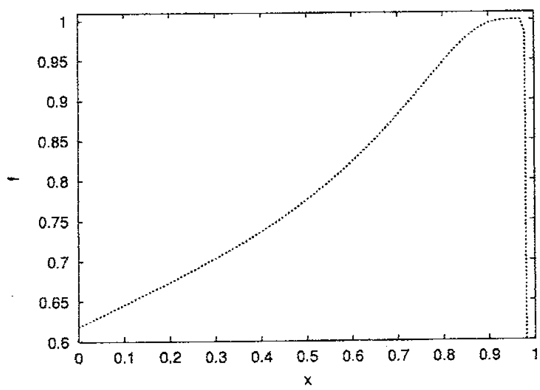
(a) $\Delta x = 0.1$，倍精度



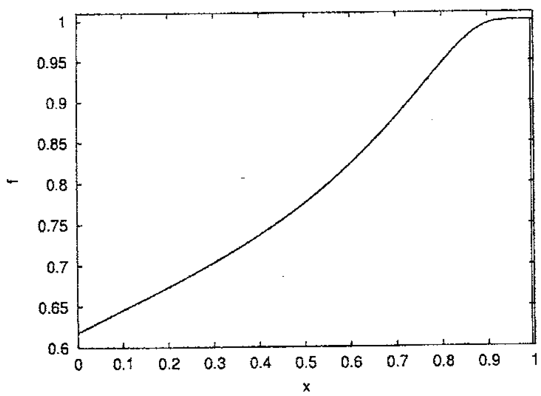
(b) $\Delta x = 0.1$，4 倍精度



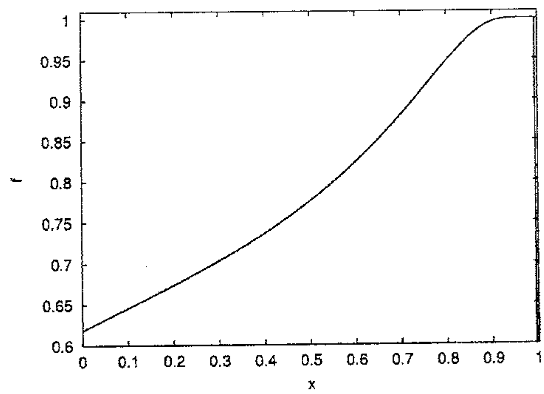
(c) $\Delta x = 0.01$，倍精度



(d) $\Delta x = 0.01$，4 倍精度

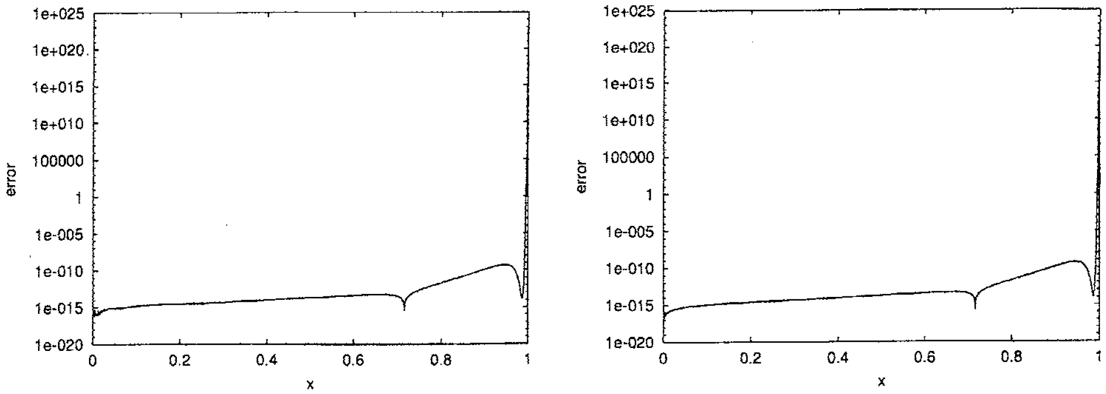


(e) $\Delta x = 0.001$，倍精度



(f) $\Delta x = 0.001$，4 倍精度

図 14．問題 $3''$ の数値解のグラフ (4 次の陽的 Runge-Kutta 法)



(a) $\Delta x = 0.001$，倍精度　　(b) $\Delta x = 0.001$，4 倍精度

図 15. 問題 3″ の計算誤差

次に Chebyshev スペクトル選点法を適用した数値例を示す．そのために $x \to 2x - 1$ として問題を次のように変換する．

問題 $3'''$　次をみたす $f = f(x)$ $(-1 \leqq x < 1)$ を求めよ．

$$\begin{cases} \dfrac{\{4-(1+x)^2\}^2}{2\{4+(1+x)^2\}} \dfrac{df}{dx} = \dfrac{(1-f^2)f}{1+f^2}, & -1 < x < 1 \\ f(-1) = \dfrac{-1+\sqrt{5}}{2} \end{cases}$$

厳密解　$$f(x) = \frac{2e^{\frac{2(1+x)}{4-(1+x)^2}}}{1+\sqrt{1+4e^{\frac{4(1+x)}{4-(1+x)^2}}}}, \qquad -1 \leqq x < 1 \qquad (f(1) = 1)$$

計算結果を図16,17に示す．ただし，$x = 1$ で条件式がないので，Chebyshev-Gauss-Lobatto 選点法は適用できない．そこで，Chebyshev-Gauss-Radau 選点法 [1] を適用する．図の N は近似の次数を表す．(即ち，選点数は $(N+1)$ 個になる．) この選点法では $x = 0$ に関して選点の分布が非対称であるため，初期値問題に適用するために $x \to -x$ として計算している．誤差 Err と Err_1 の定義式ではこのことが反映されていることを注意しておく．即ち，下の定義式の $x = 1$ は問題 $3'''$ の $x = -1$(初期条件)，$x = -1$ は問題 $3'''$ の $x = 1$(問題 3 の $t = \infty$) に対応する．また，初期条件があるので Err の max をとるとき $j = 0$ は考慮していない．計算結果は非常に満足のいくものである．

$$Err = \max_{j=1,2,\cdots,N} |f^N_{num,j} - f_{exac}(x_j)|, \quad Err_1 = |f^N_{num}(-1) - f_{exac}(-1)|$$

$$f_{exac}(x) : \text{厳密解}, \quad f^N_{num,j} : \text{数値解}, \quad x_j = \cos\frac{2j\pi}{2N+1}, \quad j = 0, 1, 2, \cdots, N$$

$f_{num}^{N}(x)$: $\{f_{num,j}\}$ と反転公式から作られる補間関数

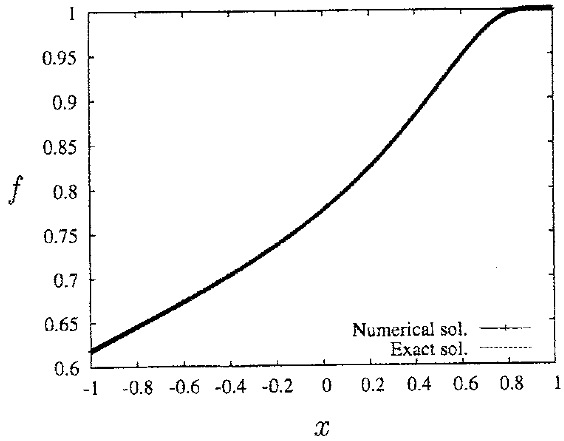


図 16. 問題 3‴ の解のグラフ ($N = 500$，4 倍精度)

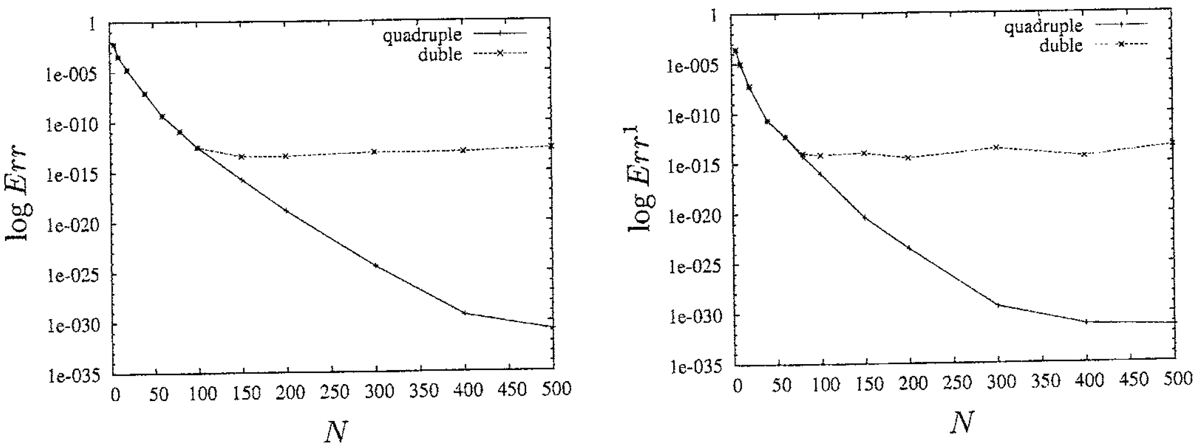


図 17. 問題 3‴ の計算誤差

3. 結論

本論文では，微分方程式に現れる無限大を回避する有界化法を提案し，数値計算によってその有効性を確認した．また，有界化法には有理関数型が適していることも数値的に確かめた．この有界化法は数値積分にも応用できるが，もちろん万能ではない．しかし，本手法によって大域的な数値計算のみならず，時間無限大の解の様子や爆発現象 (特に爆発した後の現象) の数値解析等が可能になる．今後の様々な応用が期待される手法である．

謝辞

本論文中に紹介した数値計算結果は，徳島大学工学部の竹内敏己教授，坂口秀雄助手のご厚意による．以上の方々に感謝申しあげる．なお，この研究は科学研究費(課題番号15204007,16340024,16340029)の支援を受けて行ったものである．

参考文献

[1] C. Canuto et al., Spectral Methods in Fluid Dynamics, Springer, 1998.

[2] D. Givoli. Numerical methods for problems in infinite domains. Elsevier,1992.

[3] R. Hecht-Nielsen, Neurocomputing, Addison-Wesley, 1989.

[4] H. Imai, T. Takeuchi and M. Kushida, On Numerical Simulation of Partial Differential Equations in Infinite Precision, Adv. Math. Sci. Appl., **9**(2)(1999), 1007-1016.

[5] H. Takahasi and M. Mori, Double Exponential Formulas for Numerical Integration, Pub. RIMS Kyoto Univ., 9, 721-741, 1974.