数理解析研究所講究録
990 巻 1997 年 115-124

常微分方程式離散変数法における最近の動向
Recent topics on the discrete variable methods for numerical ODEs

三井　斌友（名古屋大学・人間情報学研究科）
Taketomo MITSUI
Graduate School of Human Informatics, Nagoya University

常微分方程式系の初期値問題 (IVP of ODEs) に対する数値解法の意義は今更言うまでもないが，本稿はその現代的な課題の survey を試みるものである．

1　国際会議にみる 20 年間の変化

「温故知新」— この分野が新たな前進を始めた，約 20 年前にたまたま二つの会議が開かれて，様々な角度から survey がなされた．それぞれの内容は幸いその後出版されているので，これから当時の問題意識をうかがうことができる．

1975 年 7 月に，Liverpool 大学と Manchester 大学の Joint Summer School で行なわれた講演をもとに出版されたのが [11] である．ここで取り上げられているトピックと著者は

> 1. 離散変数法序論 (J. WILLIAMS) 2. 収束性と安定性 (J.D. LAMBERT) 3. 誤差評価 (J.M. WATT) 4. 実装化概論 (J.M. WATT) 5. Runge-Kutta 法 (J.C. BUTCHER) 6. 線型多段階法の実装 (G. HALL) 7. 補外法 (R. WAIT) 8. テスト問題と比較 (G. HALL) 9. stiff 系序論 (A. PROTHERO) 10. 陰的 Runge-Kutta 法 (J.C. BUTCHER) 11. stiff 系に対する多段階法 (A. PROTHERO) 12. stiff 系に対する補外法と，方法間の比較 (I. GLADWELL) 13. 特別な構造をもつ stiff 系 (H.H. ROBERTSON) 14. 放物型偏微分方程式 (R. WAIT)

となっている．一方，1978 年 12 月 IMA の主催で Manchester 大学で開かれた会議の招待講演は，会議録 [7] として出版された．その内容は

> 1. ODE を数値的に解く時なにを知るべきか (L.F. SHAMPINE) 2. Stiffness (J.D. LAMBERT) 3. stiff 問題に対する正確な解法 (A.R. CURTIS) 4. 可変次数 Runge-Kutta 法 (L.F. SHAMPINE) 5. 数値解の誤差評価 (A. PROTHERO) 6. アルゴリズムの比較 (T.E. HULL) 7. 実際的理論的発展 (C.W. GEAR) 8. Oxford 問題集概観 (J.R. OCKENDON) 9. 境界値問題の数値解法 (L. FOX) 10. multiple shooting 法の発展 (P. DEUFLHARD) 11. 境界値問題解法サブルーチン概観 (I. GLADWELL)

である．現代の基本的課題はすでに提示されているといえよう．

上のような 20 年前の状況に対して，たとえば来年 9 月 Grado, Italy で予定されている国際会議 SciCADE97 における minisymposa の計画は，現代の課題を知る一端となるであろう．そのリストは以下のようである．

> Boundary Value Problems (U. ASCHER), Differential Algebraic Equations (S. CAMPBELL), Delay Differential Equations (R. VERMIGLIO), Parallel ODE methods (P. VAN DER HOUWEN), Applications of ODEs 1 & 2 (B. LEIMKUHLER, S. REICH, R. SKEEL), Waveform Relaxation methods (S. VANDEWALLE), Partial Differential Equations (J. VERWER), ODE software (P. THOMSEN), Generalizations of Runge-Kutta methods (Z.JACKIEWICZ), Continuous ODE methods (B. OWREN), Nonlinear stability (A. OSTERMANN), Hamiltonians (M.P. CALVO), Numerical methods on manifolds (H. MUNTHE-KAAS), Krylov space methods for ODEs (C. LUBICH), Stochastic ODEs (K. BURRAGE)

これも考慮に入れて現代の課題を概括すると，下のようになるであろう．

並列アルゴリズム 様々なレベルでの並列化(parallelization)が導入されている．究極の目標は high-performance computing となるが，そのために waveform-relaxation のように規模の大きい手法から，陰的解法の反復解法まで，多くの研究が進行中である．

実装化の問題 Continuous ODE method もそうであるが，数値解法に対する実際的要求に答えようとする．

Hamilton 系などの "保存的" 解法 適切な言葉がないので preserving な方法をそのように表現しておくが，Hamiltonian system に対する symplectic methods のように，なんらかの保存量を数値的にも再現する方法の研究も盛んである．

ODE に近い方程式系への拡張 偏微分方程式系の離散近似のみではなく，微分・代数方程式系 (DAEs)，差分微分方程式系 (DDEs)，確率微分方程式系 (SDEs) といった "近隣の" 問題にも，ODE における方法が応用・拡張されている．

以下これらの課題を順次概観しよう．

2 離散変数法

課題の解説に入る前に，常微分方程式系の初期値問題 (IVP of ODEs) とその離散変数解法のもっとも一般的な定式化を与えよう．IVP of ODEs とは

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{y}}{\mathrm{d}x} = \boldsymbol{f}(x,\boldsymbol{y}), \quad (x > a) \\ \boldsymbol{y}(a) = \boldsymbol{y}_0, \quad \boldsymbol{y},\boldsymbol{f},\boldsymbol{y}_0 \in I\!R^d \end{cases} \tag{2.1}$$

とし，その解析解（真の解）$\boldsymbol{y}(x)$ $(x > a)$ の存在は仮定する．

この (2.1) に対する離散変数法とは，step-points を

$$(a =)x_0 < x_1 < \cdots < x_n < x_{n+1} < \cdots$$

のように決め，$h_n = x_{n+1} - x_n$を stepsize とし，$\boldsymbol{y}_n \approx \boldsymbol{y}(x_n)$ となるベクトル列 $\{\boldsymbol{y}_n\}$ を組織的に生成する方法をいう．

代表的な離散変数法としてはまず線型多段階法 (linear multistep methods, LM) が上げられる．これは一定の stepsize h のもとで

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \sum_{j=1}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n+1-j} + h\sum_{j=0}^{k} \beta_j \boldsymbol{f}(x_{n+1-j}, \boldsymbol{y}_{n+1-j}) \tag{2.2}$$

と定式化される．LM の重要な subclass としては

Adams: $\alpha_1 = 1, \quad \alpha_j = 0,\ j = 2,\dots,k$

BDF: $\beta_0 \neq 0, \quad \beta_j = 9,\ j = 1,\dots,k$

をあげることができる．

一方 Runge-Kutta 法 (RK) は，次のように定式化される．

$$\begin{cases} \boldsymbol{Y}_i = \boldsymbol{y}_n + h_n \sum_{i=1}^{s} a_{ij} \boldsymbol{f}(x_n + c_j h_n, \boldsymbol{Y}_j) \quad (i = 1,2,\dots,s) \\ \boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n + h_n \sum_{i=1}^{s} b_i \boldsymbol{f}(x_n + c_i h_n, \boldsymbol{Y}_i) \end{cases} \tag{2.3}$$

RK (2.3) にはしばしば次の Butcher tableau を付随させ，その表現とする．

$$
\begin{array}{c|cccccc}
c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1s} \\
c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2s} \\
\vdots & \vdots & & \ddots & & \\
\vdots & \vdots & & & \ddots & \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} & a_{ss} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & \cdots & b_s
\end{array}
= \begin{array}{c|c} \boldsymbol{c} & A \\ \hline & \boldsymbol{b}^T \end{array}
$$

この 20 年間の進歩として，LM, RK とも $\boldsymbol{y}_j, \boldsymbol{f}$ に関して “線型” であるので，その意味で統一した解釈が与えられたことが上げられる．すなわちやはり定 stepsize h として

$$
(2.4) \qquad
\begin{cases}
\boldsymbol{Y}_i = \displaystyle\sum_{j=1}^{r} a_{ij}^{(1)} \boldsymbol{y}_j^{(n)} + h \sum_{j=1}^{s} b_{ij}^{(1)} \boldsymbol{f}(x_n + c_j h, \boldsymbol{Y}_j), \ i = 1, \dots, s \\
\boldsymbol{y}_i^{(r+1)} = \displaystyle\sum_{j=1}^{r} a_{ij}^{(2)} \boldsymbol{y}_j^{(n)} + h \sum_{j=1}^{s} b_{ij}^{(2)} \boldsymbol{f}(x_n + c_j h, \boldsymbol{Y}_j), \ i = 1, \dots, r
\end{cases}
$$

と表わされる離散変数法を，s-stage r-value multivalue method あるいは general linear method (GLM) という．やはり Butcher tableau

$$
\begin{array}{c|c} A_1 & B_1 \\ \hline A_2 & B_2 \end{array}
$$

を付随させる．GLM では
$\boldsymbol{Y}_i$ $(i = 1, \dots, s)$: 各 step での内部値，off-step point $x_n + c_i h$ での解の近似値を表わす
$\boldsymbol{y}_i$ $(i = 1, \dots, r)$: step から step へ伝達される，近似解に関する情報を表わす
という意味をもち，$r = 1$ ならば，s-stage RK に対応し，$s = 1, r = 2k$で，$\boldsymbol{y}_i$ $(i = 1, \dots, r)$ を

$$
(\boldsymbol{y}_n, h\boldsymbol{f}_n, \boldsymbol{y}_{n-1}, h\boldsymbol{f}_{n-1}, \dots, \boldsymbol{y}_{n-k+1}, h\boldsymbol{f}_{n-k+1})
$$

に対応させれば，k-step LM がえられる．

3 並列アルゴリズム

最近 [4, 18] が出版されているように，様々なレベルでの並列化が研究されている．

3.1 大規模 ODE 系の必然性

現実の数理モデルの simulation では，未知函数の次元が大きく ($d \approx 10^6$)，かつ stiff な問題が生ずる．例えば，大気圏の汚染問題の解析のためには，位置$\boldsymbol{x}$, 時刻 t での汚染物質の濃度 $c(\boldsymbol{x}, t)$ に関する移流拡散方程式

$$
(3.1) \qquad \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{K} \cdot \nabla c) - \nabla \cdot (c\boldsymbol{u}) + E(\boldsymbol{x}, t)
$$

を扱う．ここで$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)$ は風向ベクトル，$\boldsymbol{K} = (K_x, K_y, K_z)$ は拡散係数，$E(\boldsymbol{x}, t)$ は放射項をそれぞれ表わす．

その数値シミュレーションのため，$\boldsymbol{x} \in I\!R^3$ の領域に $32 \times 32 \times 32 = 32$K の格子点の有限差分法を用いると $d = 32$K の ODE がえられる．さらに汚染物質が m 種類あって，しかも互いに化学反応する（移流反応拡散方程式）と，問題の次元数が m 倍となるのみではなく，問題が stiff になる．しかも大気汚染の定常状態を知るためには，長い時間に渡る解が必要であって，計算の負荷は非常に大きい．

3.2 Parallelism

このように大規模問題は大抵の場合 stiff であるので，A 安定あるいはそれに匹敵する安定性を有する離散変数法でなければならない．そのため implicit RK や BDF が用いられるが，こんどは implicitness による非線型方程式解法が避けられない．これは，従来の sequential architecture machine では計算能力に限界があることを意味しており，parallelism の導入が必要となる．

Parallelism については，B. GEAR によって導入された次の分類がよく用いられる ([4])．

- Parallelism across the method : block predictor-corrector methods が例
- Parallelism across the system : subproblem への分割．Waveform relaxation (WR) もこの category．
- Parallelsim across the steps

Parallelsim across the steps の例としては，GLM あるいは RK の Butcher tableau における行列を，対角やそれに近いようにとる工夫が知られている．たとえば [16] では，その実現が述べられている．

3.3 Wavelform relaxation

電気工学者が最初に言いだしたので，やや奇妙な名前が使われているこの方法の initial idea は IVP of ODEs をその time-rate の違いによって二つに分割する．すなわち

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(x, y_1, y_2), \quad y_1(a) = y_{10}, \\ y_2' &= f_2(x, y_1, y_2), \quad y_2(a) = y_{20}, \qquad x > a \end{aligned}$$

これに対して，反復を行なう．

$$\begin{aligned} y_1'^{(k+1)} &= f_1(x, y_1^{(k+1)}, y_2^{(k)}), \quad y_1^{(k+1)}(a) = y_{10}, \\ y_2'^{(k+1)} &= f_2(x, y_1^{(k)}, y_2^{(k+1)}), \quad y_2^{(k+1)}(a) = y_{20}, \qquad x > a \end{aligned}$$

この反復過程は，いわば Jacobi 反復にあたるが，当然 Gauss-Seidel, SOR 反復も考えられている．分割を成分毎まで進めれば

$$y_i'^{(k+1)} = f_i(x, y_1^{(k)}, \ldots, y_{i-1}^{(k)}, y_i^{(k+1)}, y_{i+1}^{(k)}, \ldots, y_d^{(k)}), \quad y_i^{(k+1)}(a) = y_{i0} \quad (i = 1, \ldots, d)$$

が考えられる．反復の収束の条件，初期値問題を解く離散変数法との組合せの問題が，並列化の context で論じられている．

4 実装化の問題

離散変数法の実装化 (implementation) のためには，基本アルゴリズムだけでは済まない問題が数多くある．離散変数法の詳細を必ずしも承知していない user がすぐに使いこなせる software とするためには，それを洗練されたものとして仕上げることもきわめて重要である．これに関連する代表的な問題をいくつか見てみよう．

4.1 誤差の制御

RK の場合，E. FEHLBERG に始まる埋込み型公式が事後誤差評価を提供し，これを制御するという方式がもっとも有力である．いままで多くの埋込み型公式が提案されたなかで，J.R. DORMAND & P.J. PRINCE による 7 段 5 次 (4 次) 公式 (DOPRI5) が優秀という評価をえている．その理由は次のことにある．

- 4 次の近似式の残差をできるだけ小さくする工夫をしている．
- $a_{7j} = b_j$ となるようにパラメータを選び (“first same as last”, FSAL)，実質的に 6 段で済む．

4.2 Defect control

step 毎に local error を制御する方法に対して，W. Enright らは defect control を提案した．それは，離散変数法の近似列 $\{y_n\}$ に対して，その連続版（たとえば多項式補間）を構成し，$p_n(x_n+\theta h)$, $\theta \in (0,1]$ とする．これを ODE に代入した

$$\delta_n(x) = \frac{\mathrm{d}p_n}{\mathrm{d}x} - f(x, p_n(x))$$

を defect という．いわば ODE における残差にあたるのが，δである．そして

$$\|\delta_n(x+\theta^* h)\| \approx \max_{(0,1]} \|\delta_n(x+\theta h)\|$$

となるθ^*を経験的に決定し，この量を制御するようにして，離散変数法を実装する．

defect control の特徴として，ODE に似た他の方程式の場合にも応用可能であることがあげられよう．(**6.2**参照)

4.3 Continuous interpolant

defect control とも関係するが，次数（order of accuracy）p の離散変数法の近似列 $\{y_n\}$ に対して，その連続版で $p_n(x_n+\theta h)$, $\theta \in (0,1]$ が

$$p_n(x_n+\theta h) - y(x_n+\theta h) = O(h^{p+1})$$

をみたすように構成した $p_n(x)$ を，離散変数法の continuous interpolant という．step-point のおける次数と同じ次数が，任意の off-step value でも達成されていることが特徴である．graphical output など，様々な応用が考えられている．

RK の場合, $\{y_n\}$ の他に，stage values $\{Y_i\}$ (at n-th step) があるので，continuous interpolant は比較的考えやすい．これは continuous RK interpolant あるいは scaled RK, dense-output RK などとも呼ばれて来た．基礎となる s-stage p-th order RK with a_{ij}, b_j, c_i に，s^*-s stages の計算を追加し，θの多項式であるパラメータ $b_i(\theta)$ を導入して

$$u(\theta) = y_n + h\sum_{i=1}^{s^*} b_i(\theta) f(x_n + c_i h, Y_i)$$

が

$$u(\theta) - y(x_n+\theta h) = O(h^{p^*+1})$$

を満たすように構成する．実際に $p=p^*$ となる組合せは可能であって，たとえば DOPRI5 にその機能を追加することが行なわれている．

LM の場合, 解函数の近似値である $\{y_{n+1}, y_n, \ldots, y_{n+1-k}\}$ と，その導函数の近似値である $\{f_{n+1}, f_n, \ldots, f_{n+1-k}\}$ を同時に計算しているという原理より，解函数の Hermite 補間が可能である．さらに，これらの値の線型変換によって

$$y(x_n), hy'(x_n), \frac{h^2}{2!}y''(x_n), \ldots, \frac{h^r}{r!}y^{(r)}(x_n)$$

を近似するベクトルを，x_n毎に付属させることも可能であって，Nordsieck device と呼ばれている．したがって continuous interpolant の構成にも，stepsize changing の際の後方値の廉価な再計算にも活用可能である．

4.4 Robust code

non-stiff にも stiff にも，問題に応じて適応的に対応する code の開発が目標である．この場合，容易に想像できるように，heuristics に負うところが大であって，とても個人的な研究のレベルにはないが，下にあげる code が現在推奨されるものとして知られている．

LSODE (A.C. HINDMARSH ほか)：BDF アルゴリズムによる．

STRIDE (J.C. BUTCHER ほか)：SIRK (singly-implicit RK) による

RADAU5 (E. HAIRER ほか)：Radau II A RK による

stiff か non-stiff かを code 自身が判別するためには，事後的な stiffness detection が必要である．これに関してはまだ諸説入り乱れていて，なかなか決定的なものがない．今後の研究が待たれる．

5 Hamilton 系などの "保存的" 解法

解析力学が大きな成功を収めたのは，物理学的な保存量があらわに表現できたからであるとも言えよう．一般の初期値問題 (2.1) よりは，そのような限定的な問題に適用したとき，保存量が離散変数法によってどのように取り扱われているか，その研究に関心が向けられている．

5.1 Hamiltonian systems and symplecticness

$\mathbb{R}^{2d}$の向き付けられた領域Ωを，state points $(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})=(p_1,\ldots,p_d;q_1,\ldots,q_d)$ の集合とする．$\boldsymbol{q}$は一般化座標 (generalized coordinates), $\boldsymbol{p}$は conjugated generalized momenta と呼ばれる．Ω 上の滑らかな函数 Hが，Hamilton 力学系を与え，その Hamiltonian が Hであるとは

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}},\qquad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{q}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} \tag{5.1}$$

をみたすことである．さらに$\varphi_t:\Omega\to\Omega$なる写像は，初期条件 $(\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{q}^0)\in\Omega$ のもとでの (5.1) の解の t での値を $(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})=\varphi_t(\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{q}^0)$ と与えるとき，この系の flow φ_t $(t\in\mathbb{R})$ という．

diffeomorphism の 1 パラメータ群となる φ_t は Ω の symplectic 構造を保存する．これを外微分形式

$$\omega^2\equiv\sum_i \mathrm{d}p_i\wedge\mathrm{d}q_i=\mathrm{d}\boldsymbol{p}\wedge\mathrm{d}\boldsymbol{q}$$

を使って

$$\varphi_t\text{が symplectic}\iff \mathrm{d}\boldsymbol{p}\wedge\mathrm{d}\boldsymbol{q}=\mathrm{d}\boldsymbol{p}^0\wedge\mathrm{d}\boldsymbol{q}^0 \text{ for } (\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})=\varphi_t(\boldsymbol{p}^0,\boldsymbol{q}^0)$$

と表わす．symplecticness は，幾何学的には $\mathbb{R}^{2d}$ の oriented volume の保存を意味する．

5.2 Symplectic integrators

離散変数法が与える数値解も，symplectic であることが期待される．RK に対しては，そのための（殆ど）必要十分条件がえられた ([17])．RK の Butcher tableau の行列 A に加えて

$$B=\mathrm{diag}(b_1,b_2,\ldots,b_s)$$

と，それらから構成される

$$\begin{aligned} M &\equiv BA+A^TB-\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^T\\ &= (b_ia_{ij}+b_ja_{ji}-b_ib_j)\end{aligned}$$

を定義すると

Theorem 1 $M=0$ ならば RK は symplectic である．すなわち

$$\mathrm{d}\boldsymbol{p}^{n+1}\wedge \mathrm{d}\boldsymbol{q}^{n+1}=\mathrm{d}\boldsymbol{p}^{n}\wedge \mathrm{d}\boldsymbol{q}^{n}$$

注意: RK が *irreducible* であるときは，上の条件は必要でもある．

実は，$M\geq 0$ (non-negative definite M) は，RK の algebraic stability の条件であることが，すでに知られていた．すなわち，symplectic RK は非常に強い線型安定性を有するとみなすことができる．

5.3 Other symplectic integrators

可分な Hamiltonian をもつ場合，すなわち

$$H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})=T(\boldsymbol{p})+U(\boldsymbol{q}) \tag{5.2}$$

と表現される場合には，Hamilton 正準方程式 (5.1) は

$$\dot{\boldsymbol{p}}=-\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{q}},\qquad \dot{\boldsymbol{q}}=\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{p}} \tag{5.3}$$

であるので，作用素の指数函数に対する Lie algebra の理論に基づく Lie bracket の適用による symplectic な数値解法アルゴリズムが可能である．これに関しては吉田　春夫（国立天文台）や鈴木　増雄（東京大・理）ら日本人研究者の貢献が大きい．

可分な Hamiltonian による正準方程式 (5.3) は，1 階導函数があらわには現われない 2 階常微分方程式となるので，RKN (Runge-Kutta-Nyström) scheme を適用できる．この場合の symplecticness の条件もまた明らかにされている ([17])．

5.4 Lie theory and RK

さらにごく最近(1995 年) になって，H. Munthe-Kaas は RK scheme に対する Lie-Butcher theory を展開した ([15])．それは，symplectic な系，isospectral な系や，Lie 群的変換によって不変である解をもつ系など，さまざまな対称性と保存則を有する特別な RK scheme を構成する理論である．重要なことは，この展開によって manifold の上の数値解法，すなわち座標表現依存性のない数値解法が見えてきたことである．国際会議 SciCADE97 では，そのようなトピックで Munthe-Kaas が組織する minisympsoium が予定されている．

6 ODE に近い方程式系への拡張

離散変数法を ODE に近い方程式系へ拡張する研究も盛んである．

6.1 微分・代数方程式系 (DAEs)

微分・代数方程式系 (differential-algebriac equations) とは一口に言って，未知函数が微分方程式と代数方程式の連立系によって規定されているもので，応用問題ではしばしば登場する．

DAEs は ODE の特異摂動問題 (SPP)

$$y'=f(y,z),\qquad \varepsilon z'=g(y,z) \tag{6.1}$$

の極限 ($\varepsilon\to 0$) として解釈することができる．すなわち

$$y'=f(y,z),\qquad 0=g(y,z) \tag{6.2}$$

となり，前半は微分方程式であるが，後半は代数方程式であって，未知量 (y,z) が結合している．したがって，初期条件 y_0,z_0 は consistent $(0=g(y_0,z_0))$ であるべきである．

より一般的には，一般形式の ODE

$$F(x, y, y') = 0$$

で Jacobian matrix $\partial F/\partial y'$ が特異な場合のことをいう．このときは正準形式 $y' = f(x, y)$ には帰着させられない．すなわち，DAEs は stiff ODE system の極限とも理解できるのである．
その意味で，離散変数法の classical order (order of accuracy) は，そのままでは DAEs に適用したとき著しく低下する可能性があるのである．これを次数低下 (order reduction) といっている．そこで DAEs に対する離散変数法の要点は，行列 $\partial F/\partial y'$ を scheme に含ませることなしに，なお order を維持することにある．詳細はたとえば [3, 8] を見られたい．
$g(y, z) = 0$ を，(y, z) に対する拘束条件として，manifold 上への制約と解釈することも可能であり，その方向で前節に述べた努力が適用される可能性があることにも注意したい．

6.2 Delay-differential equations

独立変数に遅延 (delay) のある微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x, y(x), y(x-\tau)) \tag{6.3}$$

あるいは

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x, y(x), y(x-\tau_1), y(x-\tau_2)) \tag{6.4}$$

に対する離散変数法の研究も盛んである．この場合解析解の期待は一層薄く，しかも応用上多方面でこのタイプは現われる．
離散変数法を適用してすぐに気付くことは，continuous interpolant が必要なことである．たとえば RK を (6.3) に適用した場合

$$\begin{aligned} Y_i^{(n)} &= y_n + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(x_n + c_j h, Y_j^{(n)}, y(x_n + c_j h - \tau) \quad (i = 1, 2, \ldots, s) \\ y_{n+1} &= y_n + h\sum_{i=1}^{s} b_i f(x_n + c_i h, Y_i^{(n)}, y(x_n + c_i h - \tau)) \end{aligned}$$

となるが，$\{y(x_n + c_i h - \tau)\}$ $(i = 1, \ldots, s)$(back-values) は step-point の値でも，RK scheme が構成してきた off-step point の値でもないので，これを既存の量からいかにして計算するかが，まず問題となる．そのために，**4.3**節で述べた continuous interpolant が活用できる．そこで，DDEs に適用したとき，back-values を continuous interpolant で構成するようにした Runge-Kutta 法を，“natural” RK for DDEs といっている．
DDEs に対する離散変数法を software とするためには，variable stepsize implementaion であるべきであるが，そのためには工夫が必要である．defect correction を応用して，それを実現したものとしてたとえば林 [12] を見られたい．
DDEs に対する離散変数法でも当然安定性に関する考察は欠かせない．方程式 (6.3,6.4) のように一定の遅延 $\tau, \tau_1, \tau_2, \ldots$ を仮定した場合の，線型安定性解析は最近相当進んだが，遅延が独立変数 x や，さらには解 y に依存する場合（varying delays の場合）

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x, y(x), y(x - \tau(x, y)))$$

の解析はまだ多くの問題を残している．しかも応用上重要な問題がこのクラスに属しているので，解決が待たれる．DDEs に対する離散変数法に関しては，M. Zennaro による最近の survey([2], p291 – 333) を参照されたい．

6.3 確率微分方程式 (SDEs)

確率過程 $X(t,\cdot)$ の evolution を記述する "微分" 方程式

(6.5) $$\mathrm{d}X(t)=f(t,X(t))\mathrm{d}t+g(t,X(t))\mathrm{d}W(t)\quad(t>0),\qquad X(t)=X_0$$

を考える．ここで $W(t)$ は標準 Wiener 過程であって，当然通常の意味で微分可能であるはずがないので，微分方程式として正当ではない．それは確率解析学 (stochastic calculus) によって，確率積分方程式

(6.6) $$X(t)=X(t_0)+\int_{t_0}^{t}f(X(s))\mathrm{d}s+\int_{t_0}^{t}g(X(s))\mathrm{d}W(s),\quad t\geq t_0$$

の微分形式表現と理解される．ここで第2の積分は伊藤 (K. Itô) の確率積分と解釈する．方程式 (6.5) あるいは (6.6) の解 $X(t)$ (伊藤の意味での) もまた確率過程である．

確率微分方程式は理工学あるいは社会科学での応用上重視されており，その解を求める必要性がある．しかし一般的な場合は解析的な解表現はむずかしく，近似数値解法が必要である．しかし，理論および実際上（コンピュータの能力不足）から，それが考察されるようになったのは最近である．近似数値解法としてはやはり時間離散変数法が考えられる．たとえば，もっとも簡単なのは h を stepsize として，時間変数の離散点 $t_n=nh,\quad n=1,2,\cdots$ をとり，(6.5) に対して

(6.7) $$X_{n+1}=X_n+f(X_n)h+g(X_n)\Delta W_n$$

は Euler-丸山 scheme と呼ばれる．ただし ΔW_n は Wiener 過程の増分

$$\Delta W_n=W(t_{n+1})-W(t_n)$$

である．

ΔW_n を，$\sqrt{h}\xi(0,1)$ ($\xi(0,1)$ は平均 0, 分散 1 の標準正規乱数) として実現すれば，(6.7) はコンピュータで計算可能である．ただし，標準正規乱数は擬似乱数によって "近似" しなければならない．Euler-丸山 scheme のほかにも様々な scheme が考案されているが，離散変数法であるからまず**近似の度合**すなわち**収束性**が解析されなければならない．SDEs の場合，収束性概念は二とおりある．方程式の解に対して pathwize に近似する強い意味と，真の解のモーメントを近似解のモーメントで近似する弱い意味である．それに応じて scheme も strong あるいは weak と呼ばれる．

そして，強い scheme の収束性には本質的限界があることが知られており，また応用上は弱い scheme も十分な意義をもつことから，いっそう多様な離散変数法が考えられているが，その系統的な考察は ODEs 以上に複雑である．しかし，著者らの最近の研究で，ODEs における Butcher tree analysis が SDEs にも適用可能であり，構造はずっと複雑にはなるが scheme の組織的な導出が可能になってきた．

やはり**数値的な安定性**も検討する必要があるが，それは他のタイプの方程式に比べても未発達である．そもそも基礎となる SDEs の解析的な安定性の基準が十分明らかになっていないし，確率解析が絡んだなかでどのような枠組みのもとで安定性を考えるべきか，手探りの状態である．それだけに魅力のある分野といえよう．SDEs に対する離散変数法全般については，[13] を参照されたい．

7 おわりに

以上概観してきたように，常微分方程式離散変数法は古い歴史（出発点は I. Newton にあるといってもよいだろう）をもちながら，コンピュータ時代にあって科学技術の進展の基礎を支えながら，最近一層の発展を見せている．その歴史的な過程そのものも研究対象となりうるので，数学史としての研究論文 ([19]) も現われているが，理論・応用の両面で今後も健全な発展を続けるものと期待される．**1** 節で述べた Grado, Italy での国際会議はそうした最新の研究の国際交流の場となると考えられる．興味をお持ちの方は home page

`http://www.univ.trieste.it/~nirdsm/scicade97`

をご覧いただきたい．

参考文献

[1] R.C. Aiken. *Stiff Computation.* Oxford University Press, Great Britain, 1985.

[2] M. Ainsworth, J. Levesley, W.A. Light and M. Maretta (ed.). *Theory and Numerics of Ordinary and Partial Differential Equations.* Advances in Numerical Analysis vol. 9. Oxford University Press, 1995.

[3] K.E. Brenan, S.L. Campbell and L.R. Petzold. *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations.* SIAM, Philadelphia, 1996.

[4] Kevin Burrage. *Parallel and Sequential Methods for Ordinary Differential Equations.* Oxford University Press, Oxford, 1995.

[5] J.C. Butcher. *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations,Runge-Kutta and General Linear Methods.* John Wiley and Sons, Chichester, 1987.

[6] K. Dekker and J.G. Verwer. *Stability of Runge-Kutta Methods for Stiff Nonlinear Differential Equations.* North-Holland, Amsterdam, 1984.

[7] I. Gladwell and D.K. Sayers (ed.). *Computational Techniques for Ordinary Differential Equations.* Academic Press, London, 1980.

[8] E. Hairer, C. Lubich and M. Roche. *The Numerical Solution of Differential-Algebraic Systems by Runge-Kutta Methods.* Springer-Verlag, Berlin, 1989.

[9] E. Hairer, S.P. Nørsett and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I, Nonstiff Problems, Second Revised Edition.* Springer-Verlag, Berlin, 1993.

[10] E. Hairer and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations II, Stiff and Differential-Algebraic Systems, 2nd revised ed.* Springer-Verlag, Berlin, 1996.

[11] G. Hall and J.M. Watt (ed.). *Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations.* Clarendon Press, Oxford, 1976.

[12] Hiroshi Hayashi. *Numerical solution of retarded and neutral delay differential equations using continuous Runge-Kutta methods.* PhD thesis, University of Toronto, April 1996.

[13] Peter E. Kloeden and Eckhard Platen. *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations.* Springer-Verlag, 1992.

[14] J.D. Lambert. *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem.* John Wiley and Sons, Chichester, England, 1991.

[15] Hans Munthe-Kaas. Lie-Butcher theory for Runge-Kutta methods. *BIT*, 35:572–587, 1995.

[16] B.P. Sommeijer P.J. van der Houwen and W. Couzy. Embedded diagonally implicit Runge-Kutta algorithms on parallel computers. *Math. Computat.*, 58(197):135–159, 1992.

[17] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Problems.* Chapman & Hall, London, 1994.

[18] B. P. Sommeijer. *Parallelism in the Numerical Integration of Initial Value Problems.* CWI Tract 99. CWI, Amsterdam, 1993.

[19] Dominique Tournés. *L'integration approchée des équations différentielles ordinaires (1671 – 1914)* (in French). PhD thesis, Université Paris 7 – Denis Diderot, June 1996.