

微分方程式の電算誤差

(Runge-Kutta 法の誤差について)

研究部電算研究室 田 中 正 次

Errors of Numerical Solutions of Ordinary Differential Equations (Errors of Runge-Kutta Methods)

Masatsugu Tanaka

(Computer Research Sect., Research Dep't.)

Synopsis

Among many kinds of calculations that a computing center of a maker has to deal with, these of differential equations have a large percentage not only in point of their number, but the length of time they need on computer. Accordingly a programmer must have the ability to understand clearly both the characters and accuracy of the numerical solutions, and in each case to make as good election of the solution most appropriate for each concrete problem. This paper is a help to it.

Runge-kutta type methods have the merit of being self-starting, stable, and capable of changing the pitch anytime and with ease. But on the other hand, they say that with these methods it is unable to evaluate truncation errors at each step of the calculating process, and moreover in the cases of complicated functions, it takes too much time to go through. It is known that the truncation errors is the order of the pitch raised to fifth power and that the round-off errors are generally by far less than the truncation errors and accordingly out of question. But more than these are almost unknown to us. In the following study, I took the focus on this problem and tried to make a research what the learned circle of today has achieved concerning to these errors.

I. ま え が き

製造会社の計算センタが取り扱わなければならない諸計算のなかで、微分方程式の数値計算は、依頼件数の割合からいっても、計算機占有時間からいってもかなり著しいものがある。したがって、プログラマは、種々の数値解法の性質、精度などを十分に理解し、随時個々の具体的な問題に対して適当な解法の選定ができればならない。Runge-kutta 法は、Self-starting, stable, ピッチをいつでも容易にかえ得るなどの長所をもつが、反面、各ステップにおける打切り誤差が計算過程の中で評価されないし、関数が複雑な時には非常に時間がかかるなどの欠点があるといわれている。^{(1)~(4)}

また、打切り誤差はピッチの5乗のオーダーであり、普通丸めの誤差は打切り誤差に比べてはるかに小さく余り問題にならないことなどが知られている。しかし、それ以外には、この方法の誤差に関する研究はほとんど知られていない。以下、この問題に焦点をあわせて最近の動きを探ってみることにする。

II. Runge-kutta 法

$$y^{(i)}(t) = \frac{d^i y(t)}{dt^i} \quad \dots\dots\dots(1)$$

とする。ここで $y(t)$ は微分方程式

$$y^{(n)}(t) = f(t, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \quad \dots\dots\dots(2)$$

の解である。関数 $y^{(i)}(t)$ を t_m に関してテイラ級数に展開すると

$$y^{(i)}(t_m+h) = y^{(i)}(t_m) + h y^{(i+1)}(t_m) + \dots + \frac{h^{n-i}}{(n-i)!} y^{(n)}(t_m + \xi h) \quad \dots\dots\dots(3)$$

ただし $0 \leq \xi \leq 1$ である。Runge-kutta 法は $y^{(n)}(t_m+h)$ を $t_m \leq t \leq t_m+h$, $z_i \doteq y^{(i)}(t)$ を満足する $(n+1)$ 次元空間 R_m の点 $(t, z, z_1, \dots, z_{n-1})$ における f の値の一次結合—各点における f の値 f_i の一次同次式 $\sum_{i=1}^k \alpha_i f_i$ ここで α_i は定数である—によって近似する方法である。特殊な点と対応する一次結合は主に与えられた点数に対して、 h のできるだけ高次の項までテイラ級数と一致するように定められる。

$$t_{m+1} = t_m + h \quad \dots\dots\dots(4)$$

とし、 $y_n, y_m^{(i)}$ をそれぞれ微分方程式の解および第 i 次微係数 $y(t_m), y^{(i)}(t_m)$ に対する近似値とする ($i = 1, 2, \dots, n-1$)。

そのとき公式は次の形であらわされる。

$$\left. \begin{aligned} y_{m+1} &= y_m + h y_m' + \frac{h^2}{2} y_m'' + \dots + \frac{h^n}{n!} \sum_{i=1}^k \alpha_i f_i \\ y_{m+1}' &= y_m' + h y_m'' + \dots + \frac{h^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{i=1}^k \alpha_i' f_i \end{aligned} \right\} (5)$$

$$y_{m+1} = y_m + h \sum_{i=1}^k \alpha_i f_i$$

ここで f_i は、領域 R_m の一点における f 力値 $f(t, z, z_1, \dots, z_{n-1})$ をあらわす。(5) 式(5)において $n=1$ の場合、すなわち一階微分方程式に関する方法は、19世紀末から20世紀初頭にかけて C. Runge, K. Heun, W. Kutta などによって開発された。今日、普通 Runge-kutta 法とよばれているものも当時の労作の所産であって、式(5)において $n=1, k=4$ とした場合であり、次式で与えられることはよく知られている。(6),(7)

$$\left. \begin{aligned} y_1' &= f(t, y) \\ y_{m+1} &= y_m + h(f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4)/6 \\ f_1 &= f(t_m, y_m) \\ f_2 &= f(t_m + h/2, y_m + hf_1/2) \\ f_3 &= f(t_m + h/2, y_m + hf_2/2) \\ f_4 &= f(t_m + h, y_m + hf_3) \end{aligned} \right\} \dots\dots(6)$$

特に $n=1$ の場合の研究は一結びの節でも指摘するが、一般に、任意の高階微分方程式は一階微分方程式系になおせるので一基本的に重要である。実際、解析の容易さと相まって、この種のものの研究が最も多い。 k については 2, 3, 4 などのものがあるが一それぞれ 2nd order 3rd order, fourth order method とよばれている一精度と計算時間の両方から考えて実際的な fourth order method が広く関心を集めている。

初頭の花々しさにひきかえ、20世紀の前半においては、この分野には特に目立った研究はみられなかったが、この間において人類は大形デジタルコンピュータを発明し、計算技術の革命をなしとげた。このような強力な計算機械の出現によって、数値解析研究は大きな方向転換を迫られた。端的にいうと、いかにして計算労力を軽減し数値計算の遂行を可能にするかであった従来の課題がいかに精度を改善するかに変わったのである。Runge-kutta 法の研究ももちろんこの例外ではあり得なかった。もともと Runge-kutta 公式は、各オーダーとも、係数を適当に選ぶことにより無限に作るができるものであるが、従来の研究の主眼はむしろ計算に便利な係数の決定にあった。しかし、大形自動計算機出現後は、打ち切り誤差や丸めの誤差を小さくすることが係数決定の目標になった。このような事情を背景にして、1951年頃 S. Gill が

- 1) 記憶レジスタを最小にする
- 2) 丸めの誤差をおさえる
- 3) 命令をなるべく少なくする

という条件を考慮して、上述の Runge-kutta 法と同様な方法によって高速デジタル計算機向きの新しい方法を作った。現在非常によく用いられている Runge-kuttg-gill法というのがこれである。(2),(8) また E.K. Blum は、1962年 Runge-kutta 法と同値で、しかも Gill 法の長所をすべてもち、係数としては有理数のみからなる新しい方法を発表している。(17) 同年 Anthony Ralston が打ち切り誤差の小さい fourth order method を発表しているが、これについては次節でふれる。二階微分方程式に対する一般公式は、1925年 Nyström E. J. によって示された。(9) その後、1948年に Zurmühl R は n 階微分方程式に対して、一階微分方程式における Runge-kutta 法のように t の4点 $t_m, t_m+1/2h, t_m+1/2h, t_m+h$ で f を評価する一般公式を考えた。(10)

III. 累積誤差 (accumulated errors) その1 および局所誤差 (local errors) の評価

以下 Runge-kutta 公式 (6) について考えるものとする。式 (6) の作り方から1ステップの打ち切り誤差 (truncation errors) 一数値積分公式から真の解を引いた値、すなわち数値積分公式のもつ誤差一は h^5 のオーダーである。これは単に式(6)についていえるばかりでなく、一般に fourth order method とよばれるものについて常にいえることである。しかし一口に h^5 のオーダーといってもかなり幅があり、係数の選択によってはこの値を著しく減少させることが可能である。これが fourth order method のいろいろな変種が研究されている一因である。Anthony Ralston は1962年このような観点に立って、式(6)よりも打ち切り誤差が小さく、丸めの誤差の集積や安定性 (stability) が問題にならない場合、たとえば出発値の計算などにおいては式(6)よりもずっと高精度の方法を発表している。(18) 一般に第 i ステップにおける誤差は、上述の打ち切り誤差、有限のけた数で計算することから発生する丸めの誤差 (round-off errors) および第 i ステップの初期値 y_{i-1} が誤差をもつことによって生じる誤差 (propagated error) 一便宜上変わい誤差と名づける一によって合成される。この合成された誤差の限界については、式(6)について、ミシガン大学の Jhon W. Caar III の1958年の研究がある。(11) 翌59年、同大学 B.A. Galler および D.P. Rozenberg が同様な結果を一階微分方程式の一般化された Runge-kutta 公式に拡張している。(12) Caar は合成誤差の限界について次の定理を与える。

『定理、 f_y が (x, y) 平面の一つの領域 D において

連続, 上下に有界, すなわち $-M_2 < f_y < -M_1, M_2 > M_1 > 0$ とする. E を各ステップにおいて導入される誤差の最大値, すなわち局所誤差 (local error) の上限とする. D^* を差分方程式の解が D の y 境界に $Qh + |\varepsilon_i|$ より接近しない領域とする.

ここで $Q \geq \max_{x, y \in D} |f(x, y)| \geq \max(|k_1|/2, |k_2|/2, |k_3|)$ で, ε_i は第 i ステップにおける y_i のもつ誤差である. そのとき公式 (6) は, 領域 D^* において, 次式で与えられる第 i ステップにおける全誤差の上限をもつ.

$$|\varepsilon_i| \leq \frac{2E}{hM_1} \dots\dots\dots(7)$$

ただし, $h > \min(M_1/M_2^2, 4M_1^3/hM_2)$ となるように刻み幅 h を選ぶものとする. もし f_y が 0 または正であるが, 領域 D で有界 $0 \leq f_y \leq M$ ならば, D^* において, 第 $(i+1)$ 番目のステップにおける変わり誤差 η_{i+1} は,

$$|\eta_{i+1}| \leq |\varepsilon_i| e^{hM} \dots\dots\dots(8)$$

であらわされる. ここで,

$$|\varepsilon_i| \leq E \left(\frac{e^{ihM} - 1}{e^{hM} - 1} \right) \dots\dots\dots(9)$$

E, h は, $f_y < 0$ の時与えられるものと同様である.]

いま $f_y < 0$ の場合を考える. 第 $(i+1)$ ステップにおける全誤差は絶対値で次のように表現できる.

$$|\varepsilon_{i+1}| = |\rho_{i+1}| + |\eta_{i+1}| \leq E + |\varepsilon_i| \left(1 - \frac{hM_1}{2} \right) \dots\dots\dots(10)$$

ここで ρ_{i+1} は, そのステップにおける丸めの誤差と打ち切り誤差の和であり, η_{i+1} は変わり誤差である. 式 (10) より帰納法により, 式(7)が容易に演繹できる. 今 ρ_i が打ち切り誤差のみよりなるものとするれば,

$$|\varepsilon_{i+1}| \leq \frac{2ch^5}{hM_1} \dots\dots\dots(11)$$

ここで $f(x, y)$ については充分な有界性が, 仮定されているものとする. c は定数である. したがって

$$\lim_{h \rightarrow 0} |\varepsilon_{i+1}| = 0 \dots\dots\dots(12)$$

式 (12) は式 (6) が stable であることを示す. ところが ρ_i が $|\rho^*|$ よりも小さい丸めの誤差を含み, かつ $|\rho^*|$ がある一つの正数より小にはできない—一般に一定のけた数で計算する際に起こることであるが—ならば

$$\lim_{h \rightarrow 0} |\varepsilon_{i+1}| \leq \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{2(|\rho^*| + ch^5)}{hM_1} = \infty \dots\dots\dots(13)$$

すなわち誤差の限界を与えることはできない. そのような場合について考える. 充分小さい h に対して,

$$|\eta_{i+1}| \geq K|\varepsilon_i|, K = (1 - hM_2) \dots\dots\dots(14)$$

である. 今, すべての k に対して, $\rho_k > R > 0$ とすれば

$$\begin{aligned} |\varepsilon_{i+1}| &= \rho_{i+1} + |\eta_{i+1}| \\ &\geq \rho_{i+1} + K[\rho_i + K(\rho_{i-1} + \dots + K^{i+1}\rho_0 \dots)] \\ &\geq R(1 + K + K^2 + \dots + K^{i+1}) \\ &\geq R(i+2)K^{i+1} \end{aligned}$$

ゆえに $\lim_{h \rightarrow 0} |\varepsilon_{i+1}| \geq (i+2)R$ (15) したがって, $(i+1)h$ が一定に保たれるとき誤差は際限もなく大きくなる. すなわち, はじめから明らかのように刻み幅を減少させることは, 概括的にいえば, 打ち切り誤差と丸めの誤差が同じ程度の大きさになる点まで変わり誤差を改善することである. したがって, 演算けた数が増えられるデジタル計算機の利用者は, h を減少させると同時に丸めの誤差によるこの下の限界を避けるように演算けた数を増すべきである. 演算けた数が一定な計算機の利用者は, 多重精度計算 (multi precision) を用いるべきである. 第 $(i+1)$ ステップにおける全誤差を B でおさえるような刻み幅 h の決定は, 次のようにすることができる. 単精度および n 重精度計算に対する丸めの誤差をそれぞれ $|\rho^{*(1)}(h)|$ および $|\rho^{*(n)}(h)|$ とする. そのとき,

$$|\varepsilon_{i+1}| \leq \frac{2(|\rho^{*(n)}(h)| + ch^5)}{hM_1} \dots\dots\dots(16)$$

ここで, $|\varepsilon_{i+1}| < B$ とするために,

$$\frac{2ch^5}{hM} < \frac{B}{2} \dots\dots\dots(17)$$

を満足するように h を選び, 次に, 得られた h に対して,

$$\frac{2|\rho^{*(n)}(h)|}{hM_1} < \frac{B}{2} \dots\dots\dots(18)$$

となるように n をきめればよい.

微分方程式が不安定な場合も同様に刻み幅を決定することができるが, ここでは省略する.

刻み幅の決定については, Collatz の“親指の法則”とよばれる提案がある. $|f_2 - f_3/f_1 - f_2|$ が与えられた刻み幅の 200~300 倍をこえるならば, 打ち切り誤差を減少させるように刻み幅を減らせる方法である.⁽¹⁹⁾

局所誤差としては, 打ち切り誤差が問題にされる. 実際には, 数値計算の過程で得られる情報のみを使って, 1 ステップの打ち切り誤差を次のように計算している. まず刻み幅 h を用いて, 次に刻み幅 $h/2$ を用いて数値積分を行なう. いま

$c_1 h^5$: 刻み幅 h を用いたときの打ち切り誤差

$c_2 (h/2)^5$: 刻み幅 $h/2$ を用いたときの打ち切り誤差

$y^{(1)}$: 刻み幅 h を用いたとき $x_0 + h$ において得られた値

$y^{(2)}$: 刻み幅 $h/2$ を用いたとき $x_0 + h$ におい

て得られた値

$Y: x_0+h$ における真値

とすると

$$\left. \begin{aligned} Y-y^{(1)} &= c_1 h^5 \\ Y-y^{(2)} &= 2c_2 (h/2)^5 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(19)$$

これより

$$Y-y^{(2)} \approx \frac{y^{(2)}-y^{(1)}}{15} \dots\dots\dots(20)$$

なぜなら充分小さい h に対して $c_1 \approx c_2$ であるから。

式(20)は、刻み幅 $h/2$ の場合における1ステップの打ち切り誤差をあらわす。この評価は、 h が非常に小さく丸めの誤差が打ち切り誤差にくらべて無視し得ないほどになると不適当になるが、一般的にいうて簡単で実際のなよい方法であると思う⁽²⁾⁽³⁾。もちろん、丸めの誤差が充分小さいときには、式(20)は、そのステップにおける全誤差のよい評価を与える。

IV. 累積誤差 その2

前節において全誤差の累積値の限界を示す Caar の方法を紹介したが、一般に多くのステップの間に累積された誤差の評価は非常にむずかしい。打ち切り誤差の累積値を解析的に求める方法は、1948年頃 H. Rademacher⁽¹³⁾ によって見出されたらしい。実際 British Colombia 大学の Charlotte Froese は、1961年、Rademacher の理論を用いてある微分方程式の打ち切り誤差の累積値を決定する式を導き出し、実験結果によく合っていることを報告している⁽⁵⁾。またこの問題については、乗松、泥堂両氏⁽¹⁶⁾が、1960年末に興味ある事実を公表している。すなわち、解析解の知られている一階連立微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = z, \quad \frac{dz}{dx} = -y \quad \dots\dots\dots(21)$$

初期条件 $x_0=0, y_0=0, z_0=0.1000000$ を、単精度演算二重精度演算、四捨五入、ランダム丸め、二重精度数などを適当に組み合わせて作られた数種類の計算手順および同値であるが若干演算の順序などをかえた二つの公式を用いて数値計算を行ない、あるステップ数の後における全誤差の集積状況を調べ、各手順の優劣を比較した。詳述は避けるが誤差研究の論文において、このように豊富に実験データが提供されることは珍しく、誤差の生態を知る上に貴重である。また、緒言において、“誤差の集積現象は複雑で解析的な方法で処理しがたいと思われるので、系統的にサンプルとなる適当な実験データを公表し、これらを整理した結果を見て誤差の見当をつける”ことを提案しているが、これは今後の誤差研究の

一つの方向を示すものである。上述の方法でよい推定をすることは一つの夢であるが、単に理論研究ではすまないこの分野の研究においては、このような Engineering 的な感覚が必要であろう。またこの実験は III でのべた刻み幅と累積誤差の関係をよく表して興味がある。

(参考文献(16) 第7図参照)

丸めの誤差の累積値については、1959年頃、カリホルニヤ大学の P.H. Henrici⁽¹⁴⁾ によってなされたすぐれた研究がある。紙面のつごうで、アイデアのみを示す。従来多くのステップの間に集積する丸めの誤差の評価に際しては、完全誤差限界 (strictly error bound) が用いられた。すなわち、あらゆる局所丸め誤差が不つごうな向きに働き、すべての誤差が強め合う場合を考慮した。しかし、この仮定は実際的ではなく、丸めの誤差の累積値のよい評価を与えない。

P.H. Henrici は、局所丸め誤差 ϵ_i がおのおのある分布をもつ独立な研究変数であることを仮定し、それらの一次結合の和 $\sum_{i=1}^n \alpha_i \epsilon_i$ の分布関数を求めて丸めの誤差の集積値を統計的に推定し、このような仮定が正しいことを多数の実験例をもって裏付けた。この統計的誤差限界 (statistical error bound) は、完全誤差限界よりもはるかによい推定値を与える。累積誤差の研究については、別に、三菱電機の馬場氏の研究もあるが紙面のつごうで省略する⁽¹⁵⁾。

V. その他

Runge-kutta 法の誤差に関係しているさまざまな問題の中から、二、三の話題を拾って結語としたい。微分方程式 $y'=f(x, y)$ を Runge-kutta 法を用いて解くとき、その誤差は、解そのものに関係すると同時に、関数 $f(x, y)$ の形に依存するものである。たとえば、方程式

$$y'=2(x+1), y(0)=1 \quad \text{および} \\ y'=2y/(x+1), y(0)=1$$

は、両方とも同じ関数 $y=(x+1)^2$ を定義する。もし丸めの誤差が生じないように計算が遂行されると、最初の式は正確な解を与えるが、第2の式はあまり精度のよい解を与えない。W.E. Milne⁽⁴⁾ も同様な事例をあげて注意を促している。一般に任意の n 階微分方程式は、はじめのものより低次の同値な微分方程式系によっておきかえることができる。たとえば、方程式

$$y^{(n)} = y \quad \dots\dots\dots(22)$$

は、二つの同値な方程式系

$$\left. \begin{aligned} y'' &= y_1 \\ y_1'' &= y \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(23)$$

$$\left. \begin{aligned} y' &= y_1 \\ y_1' &= y_2 \\ y_2' &= y_3 \\ y_3' &= y \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(24)$$

をもつ。一方 2. で注意したように, Runge-kutta 法にもいろいろな次数のものがある。したがって Runge-kutta 法でこの方程式を解くとき, 精度をよくするには式 (22), (23), (24) のいずれを選ぶべきかという問題がおこる。この問題は, 1948 年頃 Zurmühl R. によって提起されたが, 後に 1961 年 Charlotte Froese がふたたびとりあげた。彼は, Zurmühl R. が特殊な事例に関する一部の計算結果から結論づけていた“ $n \geq 3$ ならば, n 階微分方程式は, 同値な系を解くより直接解く方がまざっている”という命題を, Rademacher の理論を根拠にして強く肯定している⁽⁵⁾。

参考文献

- (1) 森口繁一, 高田勝: 岩波応用数学講座 数値計算法 II
- (2) Michael J. Romanelli: Runge-Kutta methods for the solution of ordinary differential equations, Mathematical Methods for digital computer, Jhon Wiley & Sons New York 1959 pp. 110~120
- (3) F.B. Hildebrand: Introduction to Numerical Analysis, New York McGraw-Hill Book Co. 1956 pp. 232~249
- (4) W.E. Milne: Numerical Solution of Differential Equations Jhon Wiley & Sons, New York 1953
- (5) Charlotte Froese: An Evaluation of Runge-Kutta Type Methods for Higher Order Differential Equations A.C.M. 1961 vol. 4
- (6) C. Runge: Über Die Nümerische Auflösung Diffeo-ntialgleichungen Math. Ann. vol. 46 1895 pp. 167~178
- (7) W. Kutta: Beitrag zur näherungsweise Integration tefaleo Differentialgleichungen Z. Math. Phys. vol. 46 1901 pp. 435~453
- (8) S. Gill: A process for the step-by-step Integration of Diffeoential Equations in an Automatic Digital Computing Machine Proc. Cambridge Philrs. Soc. vol. 47 1951 pp 96~108
- (9) Nyström E.J.: Über die numerische Integration von Differential gleichungen. Acta Soc. Sci. Fenicae, Helsingfors 50 No. 13 (1925)
- (10) Zurmühl R.: Runge-Kutta Verfahren zur numerischen Integration von Differentialgleichungen m-ter Ordnung. Z. angew. Math. Mech. 28 (1948) 173~182
- (11) Jhon W. Caar III: Error bounds for the Rungø-Kutta Single Step Integratirn Process, J. Assoc. Comp. Mach. 5 39~44 (1958)
- (12) B.A. Galler and D.P. Rogenberg: A Generalization of a Theorem of Caar Error Bounds for Runge-Kutta Procedures
- (13) H. Rademacher - On the Accumulation of Errors in Process of Integration on High-speed Calculating Machines, Proceedings of a Symposium on Large-scale Calculating Machinery (Harvard University Poess, Cambridge, Mass., 1943)
- (14) P. Henrici: Theoretical and expeoimental studies on the accumulation of error in the numerical solution of initial value problems for systems of ordinary differential equations, Intereaitrnal Conference of Information Processing A 1 • 18 (1959)
- (15) 馬場準一, 林重雄: 数値計算の誤差 三菱電機 vol. 35 No. 5
- (16) 乗松立木, 泥均多積: 円試験による Runge-Kutta 法の集積誤差研究情報処理 vol. 1 No. 4
- (17) E.K. Blum: A Modification of the Rungø-Kutta Fourth-Order Method Mathematics of Computation 1562 vol. 16 No. 78
- (18) Anthony Ralston: Runge-Kutta Methods with Minimum Error Bounds. Mathematics of Cimputation 1962 vol. 16, No. 80
- (19) L. Collatz: Numerische Behandlung von Differentialgleichungen, Springer Verlag, Berlin 1951, p. 34



*本誌に記載されている会社名および製品名は、それぞれの会社が所有する
商標または登録商標である場合があります。