

# 常微分方程式初期値問題に対する高速 Picard 反復法

2016SS038 前川 侑也

指導教員：杉浦洋

## 1 はじめに

Picard の反復法は常微分方程式の理論において、初期値問題の解の存在を証明する際に用いられる重要な手段である。Picard の反復法は常微分方程式の初期値問題と同値な積分方程式に基づき、単純反復により解関数に一樣収束する関数列を構成する。

澤田 [1] は Picard の反復法を数値的に近似計算することにより、一変数常微分方程式の数値解法を構成した。澤田は反復法を途中で打ち切ることにより近似解関数が得られ、それにより、任意の点で解の近似値を計算する方法を提案した。また、Picard の関数列の各項を数値 Taylor 展開で近似することにより積分方程式を離散化した。

本研究では澤田の方法を多変数常微分方程式の解法に拡張する。積分方程式の離散化にはベクトル関数の数値 Taylor 展開を用いる。また、数値 Taylor 展開には FFT(Fast Fourier Transform) を用い、高速化を図る。これにより、高精度の近似が、多変数でも高速に計算できることが期待できる。

## 2 澤田の第 2 種 $N$ 次公式

常微分方程式初期値問題

$$\mathbf{y}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)), \quad \mathbf{y}(a) = \mathbf{b} \quad (1)$$

を解く、澤田の数値 Taylor 展開法の第 2 種  $N$  次公式を紹介する。

解  $\mathbf{y}(x)$  の点  $x = a$  を中心とした近似 Taylor 展開の近似次数を、Picard 反復により 1 次から  $N$  次まで上げる。  $\mathbf{y}(x)$  の Taylor 展開の 0 次係数は  $\mathbf{y}(a)$ 、1 次係数は  $\mathbf{c}_1 = \mathbf{y}'(a) = \mathbf{f}(a, \mathbf{b})$  であるから、補助関数

$$\tilde{\mathbf{v}}_n(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}_n(x)) - \mathbf{f}(a, \mathbf{b}) \quad (2)$$

をとる。そして、初期 1 次近似を

$$\mathbf{y}_1(x) = \mathbf{b} + \mathbf{f}(a, \mathbf{b})(x - a) \quad (3)$$

として、  $2 \leq n \leq N - 1$  で Picard 反復

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{n+1}(x) &= \mathbf{b} + \int_a^x \mathbf{f}(x, \mathbf{y}_n(x)) dx \\ &= \mathbf{b} + \int_a^x \{\mathbf{f}(a, \mathbf{b}) + \tilde{\mathbf{v}}_n(x)\} dx \\ &= \mathbf{b} + \mathbf{f}(a, \mathbf{b})(x - a) + \int_a^x \tilde{\mathbf{v}}_n(x) dx \end{aligned} \quad (4)$$

により、  $n + 1$  次近似解

$$\mathbf{y}_{n+1}(x) = \sum_{k=0}^{n+1} \mathbf{c}_{n,k}(x - a)^k \cong \mathbf{y}(x) \quad (5)$$

を計算し、  $\mathbf{y}_N(x)$  を近似解として採用する。

このアルゴリズムで、

$$\tilde{\mathbf{v}}_n(x) = \sum_{k=1}^n \mathbf{d}_{n,k}(x - a)^k \quad (6)$$

の係数  $\mathbf{d}_{n,k}$  ( $1 \leq k \leq n$ ) は数値 Taylor 展開により

$$\mathbf{d}_{n,k} = \frac{1}{nR^k} \sum_{l=0}^{n-1} \{\mathbf{f}(\xi_l, \tilde{\mathbf{y}}_n(\xi_l)) - \mathbf{f}(a, \mathbf{b})\} e^{-ik\theta_l} \quad (7)$$

で計算する。ここで、

$$\xi_l = a + Re^{i\theta_l}, \quad \theta_l = \frac{2\pi l}{n} \quad (0 \leq l < n) \quad (8)$$

である。

これより、  $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}(x)$  の係数は項別積分により、

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{n+1,0} &= \mathbf{b}, \\ \mathbf{c}_{n+1,1} &= \mathbf{f}(a, \mathbf{b}), \\ \mathbf{c}_{n+1,k} &= \frac{\mathbf{d}_{n,k-1}}{k} \quad (2 \leq k \leq n+1) \end{aligned} \quad (9)$$

で計算する。

## 3 数値 Taylor 展開法

数値 Taylor 展開法は、点  $a$  の周りで正則な関数  $f(z)$  の近似 Taylor 多項式を求める方法である。複素平面上に点  $a \in \mathbb{C}$  を中心とする半径  $R$  の円  $C : |z - a| = R$  を考える。  $C$  を含む単連結領域  $D$  で正則な関数  $f(z)$  は

$$\begin{aligned} f(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} c_k(z - a)^k, \\ c_k &= \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(\zeta)}{(\zeta - a)^{k+1}} dz \end{aligned} \quad (10)$$

と Taylor 展開される。

第 2 式右辺の積分を等間隔標本点による台形則で近似すると、

$$\tilde{c}_k = \frac{1}{mR^k} \sum_{l=0}^{m-1} f(\xi_l) e^{-ik\theta_l} \cong c_k \quad (0 \leq k < m), \quad (11)$$

を得る。これを用いて、  $f(z)$  の近似 Taylor 多項式

$$\tilde{f}_{m-1}(z) = \sum_{k=0}^{m-1} \tilde{c}_k(z - a)^k \cong f(z) \quad (12)$$

を構成する。

この  $\tilde{f}_{m-1}(z)$  の標本点  $\xi_l$  ( $0 \leq l < m$ ) 上の値は

$$\tilde{f}_{m-1}(\xi_l) = \sum_{k=0}^{m-1} \tilde{c}_k R^k e^{ik\theta_l} \quad (13)$$

で計算される。

## 4 高速 Fourier 変換 (FFT)

式 (11), (13) の計算は, 高速 Fourier 変換 (FFT, Fast Fourier Transform) により, 高速化できる.

離散 Fourier 変換 (DFT), および離散 Fourier 逆変換はそれぞれ,

$$c_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{-ik\theta_j} \quad (14)$$

$$f_j = \sum_{k=0}^{N-1} c_k e^{ik\theta_j} \quad (15)$$

と定義される. 素朴に計算すれば, 計算量は双方とも  $O(N^2)$  である.

これに対し, Cooley-Tukey[2] は計算量  $O(N \log_2 N)$  の高速アルゴリズムを提案した. これが高速 Fourier 変換 (Fast Fourier transform, FFT) である.

## 5 高速 Picard 反復法とその計算量

第 2 節の澤田の第 2 種  $N$  次公式に高速 Fourier 変換を用いたものを,  $N$  次高速 Picard 反復法と呼ぶ.

式 (7) に高速 Fourier 変換を適用すれば,  $\tilde{\mathbf{y}}_n(\xi_l)$ , ( $0 \leq l \leq n-1$ ) の計算量は  $O(n \log_2 n)$ ,  $\mathbf{d}_{n,k}$ , ( $1 \leq k \leq n$ ) の計算量も  $O(n \log_2 n)$  に減少する. 項別積分の計算量  $O(n)$  である.

$n$  は 2 から  $N$  まで動くので,  $N$  次高速 Picard 反復法の計算量は  $O(N^2 \log_2 N)$  である.

高速化以前の計算量  $O(N^3)$  と比べると, 計算量の減少は顕著である.

## 6 数値実験

高速 Picard 反復法を, Mathematica 上に実装し, FFT を用いないプログラムと, 実行速度を比較する.

### 6.1 問題 2. 2 体単振動

$x$  軸上に置かれた 2 つの質点  $m_1(x_1)$ ,  $m_2(x_2)$  をバネ定数  $k$  のバネで継いだ系の運動を考える. 運動方程式は

$$\dot{x}_1 = 100(x_2 - x_1), \quad (16)$$

$$2\dot{x}_2 = 100(x_1 - x_2) \quad (17)$$

である. 初期条件を

$$x_1(0) = 0, \dot{x}_1(0) = 1, \quad x_2(0) = 0, \dot{x}_2(0) = -1 \quad (18)$$

とした. これを, 4 変数の 1 階常微分方程式に変換して  $0 \leq t \leq 1$  で解いた.

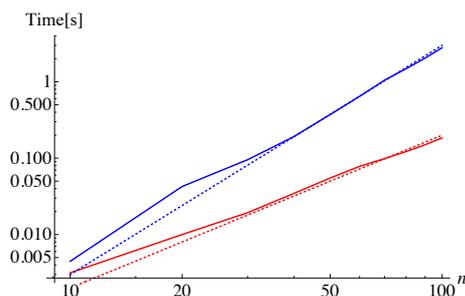


図 1 問題 1 : 次数と実行時間

図 1 は, 次数  $n$  と計算時間  $T[s]$  の関係両対数グラフに描いたものである. 青い点線は,  $\text{Time} \propto n^3$  のグラフ, 赤い点線は,  $\text{Time} \propto n^2$  のグラフである. 非 FFT 版の実行時間は  $n^3$ , FFT 版の実行時間は  $n^2$  に比例することが読み取れる.  $n$  が大きいほど FFT 版は効率的である.

### 6.2 問題 4. 2 体問題

$xy$  平面上の 2 点  $m_1(\mathbf{r}_1)$ ,  $m_2(\mathbf{r}_2)$  が万有引力で引かれ合う運動を計算する. 運動方程式は,

$$m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1 = \frac{m_1 m_2 (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3}, \quad (19)$$

$$m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2 = \frac{m_1 m_2 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3} \quad (20)$$

であり, 1 階方程式に変換すると, 非線形 8 変数の問題となる.

初期値を

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1(0) &= (1, 0), \dot{\mathbf{r}}_1(0) = (-1, 0), \\ \mathbf{r}_2(0) &= (0, 1), \dot{\mathbf{r}}_2(0) = (0, -1) \end{aligned} \quad (21)$$

とし,  $R = 0.5$  で解いた.

図 2 は, 次数  $n$  と計算時間  $T[s]$  の関係両対数グラフに描いたものであり, 図 1 と同じ傾向が見てとれる.

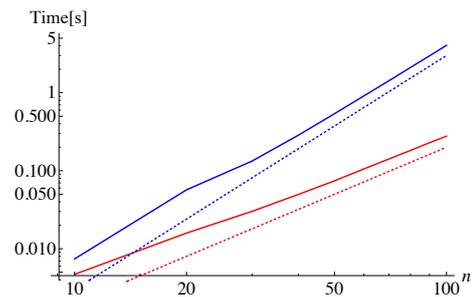


図 2 問題 2 : 次数と実行時間

## 7 終わりに

澤田 [2] は, 一変数常微分方程式の初期値問題に対する数値 Picard 反復法を提案した. 本研究では, 澤田のアルゴリズムを, 多変数常微分方程式の数値 Picard 反復法に拡張した. また, 数値 Taylor 展開に FFT を用いることによりアルゴリズムを高速化し,  $N$  次公式の計算量を  $N^3$  から  $N^2 \log_2 N$  に減少させた.

## 8 参考文献

- [1] Cooley, James W., Tukey, John W. : An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series, Mathematics of Computation, vol.19, pp.297-301(1965).
- [2] 澤田耕輔 : Picard 反復法による常微分方程式の数値解法, 南山大学理工学部卒業論文 (2017).