

演 題	刻み幅自動調節機能付きオイラー法	
発 表 者 (所 属)	○長嶋雲兵、Amih Sagan (産業技術総合研究所グリッド研究センター)	
連 絡 先	〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1 産業技術総合研究所グリッド研究センター	
キーワード	Differential equation, Euler method	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など	微分方程式の初期値問題の解法として一番単純な Euler 法は誤差の蓄積が大きいことが知られているが、時間刻み幅を自動調節して、多峰性関数などで精度の低下をおこさずに、微分計算回数を減少させる方法を開発した。	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	
	ソ ー ス 言 語	
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い)	<ul style="list-style-type: none"> ・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ○・未定 	具 体 的 方 法
		Program の問い合わせ先

1. はじめに

微分方程式の初期値問題の解法として一番単純な Euler 法は誤差の蓄積が大きいことが知られているが、時間刻み幅を自動調節して、多峰性関数などで精度の低下をおこさずに、微分計算回数を減少させる方法を開発した。オイラー法は通常以下のように定式化される。

$$t_{i+1}=t_i+\Delta t, \quad x_{i+1}=x_i+dx(t_i)*\Delta t \quad (1)$$

ここで Δt は時間刻み幅、 $dx(t_i)$ は、被積分関数の時間 t_i における微分値である。

オイラー法は、被積分関数が単調であることが必須であるが、各時間ステップでの微分の計算が 1 回であるため、計算コストが少なくすむ。(精度の高い 4 次のルンゲクッタ法は、各時間ステップで 4 回の微分計算が必要であり、そのため計算コストは高い。) 被積分関数が単調である必要性は、式をみてもわかるように、時間刻み幅が一定であり、その時間刻み幅の中で振動するような被積分関数は取り扱うことができないからである。一般の関数の振動の振る舞いは明らかではないので、通常は非常に狭い時間幅を用いて積分を実行する。そのため、本来計算コストが低いはずのオイラー法が逆に高コストになることがある。

計算コストを上げることなく、計算精度を向上させる方法として、時間刻み幅を自動調整することが上げられる。オイラー法の場合それは簡単で、以下のように Δt を変化させればよい。

$$\begin{aligned} \Delta t &= C_0 / |dx(t)| && \text{if } \min \Delta t < |dx(t)| < \max \Delta t && (2) \\ &= \min \Delta t && \text{if } |dx(t)| > \max \Delta t \\ &= \max \Delta t && \text{if } |dx(t)| < \min \Delta t \end{aligned}$$

ここで C_0 、 $\min \Delta t$ 、 $\max \Delta t$ は、それぞれユーザが定めるパラメータである。

2. 数値例

硫酸酸性、イオン触媒共存下で、マロン酸の臭素酸による酸化反応 (BZ 反応) の振動の振幅と周期は、光照射のタイミングと強度によって変動するが、以下の反応モデルがそれらを説明する。

$$\begin{aligned} dx/dt &= s(y \cdot xy + qx^2 + A \exp(-a(t_i-t)^2)(c-z)), \quad dy/dt = (fz - y - xy)/s, && (3) \\ dz/dt &= w(x - z + A \exp(-a(t_i-t)^2)(c-z)) \end{aligned}$$

ここで、 x , y , z はそれぞれ無次元化された HBrO_2 、 Br^- 、 Ce^{4+} の量であり、 c は光励起する Ce^{4+} の総量、 s , f , w は通常のアレゴネータで用いられるパラメータである。 dx/dt と dz/dt の式に現れるガウス型関数 $A \exp(-a(t_i-t)^2)(c-z)$ の項が光照射の影響を表現しており、強度 A 、と半値幅 a のガウス型の光が 反応開始後 t_i 秒に入射する。ガウス型の光の照射によって瞬間的に $\text{HBrO}_2(x)$ と $\text{Ce}^{4+}(z)$ が増加するというモデルである。このモデルでは、光照射は Br^- の変動に間接的にしか影響しない。式 (3) ような微分方程式の解は、微分の値がマイナス無限大から 0 を経て、無限大近くまで急激に変化する楕円形または鋸歯形の解を与える。このような場合に通常固定時間幅の方法を適用すると数値解が発散してしまい、数値的に解くことができない。そのため通常は時間幅自動調節機能を組み合わせて積分を実行するが、それらは計算コストが高い。

ある初期条件での性能評価の例として Table 1 に、式(3)のうち z の量の振動周期の変化に注目した場合の計算された第一ピークの位置、強度、その際の微分計算の回数およびその時点での時間刻み幅の例を示した。この計算例は、 $t=0$ から微係数が負から 0 となり、 $t=290$ あたりから急激に正の値をとり、 $t=297$ あたりのピーク位置でまた急激に微係数の符号が変わるプロセスを追っている。比較に用いた方法は、ルンゲ・クッタ 4 次法にフェールベルグ (RKF) とメルルツツィ (RKM) による自動時間調節刻み法を加えたもの、および本法 (NS) である。初期データとしての時間幅は 1.0×10^{-5} である。また SNM で、式(2)のパラメータ C_0 は 1.0 とした。Table 1 の数値は、初期条件その他によって変化するため大まかな性能評価を与えるにすぎないが、算法の性能を比較する目安にはなる。Table 1 から判るように、ピーク位置及び強度は RKF と RKM および NS で大きな差は見られない。

Table 1 Position and Value of the first Peak, No. of dx/dt calculation, and Δt at the Peak.

	RKF	RKM	NS	difference/retio*	
1st Peak				(RKF-NS)	(RKM-NS)
Position (sec.)	297.34	297.34	297.34	1.0×10^{-7}	1.0×10^{-7}
Value ($\times 10^4$)	4.009182	4.009183	4.009206	2.4×10^{-5}	2.3×10^{-5}
No. of dx/dt calc.	12010254	18350042	4030010	2.98*	4.55*
Δt at the Peak	1.3633×10^{-3}	1.8723×10^{-3}	7.34×10^{-7}		

RKF: Runge-Kutta- Fehlberg: 4th and 5th order, RKM: Runge-Kutta-Merluzzi-Brosilow: 4th order. NS: This work.