TDPACK 使用の手引 (version 0.0)

石岡 圭一 (95/10/27)

1 概要

これは, 連立 1 階常微分方程式を数値的に解くサブルーチンパッケージであり, 数値モデルなどに現れる時間積分を求めるために使用できる.

連立 1 階常微分方程式は, 一般に

$$\boldsymbol{y'} \equiv \frac{d\boldsymbol{y}}{dx} = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) \tag{1}$$

$$\boldsymbol{y} \equiv (y_1, y_2, \cdots, y_n) \tag{2}$$

と表わされる.

本ライブラリは, 関数系 $\boldsymbol{f}$, 初期値 $x_0, \boldsymbol{y_0}$, および刻み幅 Δx が与えられた場合に, $x = x_0 + \Delta x$ における $\boldsymbol{y}$ の値を数値的に求めるものである.

2 サブルーチンのリスト

`TDRK4U`	Runge-Kutta 法 (4 次精度) による数値解の計算
`TDRK2U`	Runge-Kutta 法 (2 次精度) による数値解の計算
`TDADMU`	Adams 法による数値解の計算
`TDBSMU`	Bulirsch-Stoer 法による数値解の計算
`TDRKNU`	Runge-Kutta 法 (4 次精度) による数値解の計算 (演算子分割処理を含む)

3 サブルーチンの説明

3.1 TDRK4U

1. 機能

   Runge-Kutta 法 (4 次精度) による数値解の計算

2. 定義

   概要を参照.

3. 呼び出し方法

   `TDRK4U(N,M,H,X,Y,W,SUB)`

4. パラメーターの説明

N	(I)	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の次元
M	(I)	入力. ステップ分割数 (備考を参照)
H	(D)	入力. 積分区間の長さ (Δx)
X	(D)	入力. 独立変数 x の初期値 x_0
		出力. $x + \Delta x$
Y	(D(N))	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の初期値 $\boldsymbol{y_0}$
		出力. $x = x + \Delta x$ における$\boldsymbol{y}$の値
W	(D(N*3))	作業領域
SUB	(EXTERNAL)	関数系 $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ を計算する副プログラム名 (備考を参照)

5. 備考

(a) 副プログラム SUB の用意のし方

```
SUBROUTINE SUB(X,Y,DY)
```

X	(D)	入力. 独立変数 x の値
Y	(D(N))	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の値
DY	(D(N))	出力. $\boldsymbol{y}$の x-微分値 $\boldsymbol{y'}$

SUB は本サブルーチンを呼びだす側のプログラムで EXTERNAL 宣言をしておくこと.

(b) パラメーター M は内部で Runge-Kutta 法による積分が行われる回数を表わす. 従って, 数値積分の刻み幅は H/M となる.

(c) TDRK4U 一回あたりの, SUB を呼び出す回数は, 4*M である.

3.2 TDRK2U

1. 機能

Runge-Kutta 法 (2 次精度) による数値解の計算

2. 定義

概要を参照.

3. 呼び出し方法

```
TDRK2U(N,M,H,X,Y,W,SUB)
```

4. パラメーターの説明

N	(I)	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の次元
M	(I)	入力. ステップ分割数 (備考を参照)
H	(D)	入力. 積分区間の長さ (Δx)
X	(D)	入力. 独立変数 x の初期値 x_0
		出力. $x + \Delta x$
Y	(D(N))	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の初期値 $\boldsymbol{y_0}$
		出力. $x = x + \Delta x$ における$\boldsymbol{y}$の値
W	(D(N*2))	作業領域
SUB	(EXTERNAL)	関数系 $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ を計算する副プログラム名 (備考を参照)

5. 備考

   (a) 副プログラム `SUB` の用意のし方, および `M` の意味は `TDRK4U` の項を参照.

   (b) `TDRK2U` 一回あたりの, `SUB` を呼び出す回数は, `2*M` である.

3.3 TDADMU

1. 機能

   Adams 法による数値解の計算

2. 定義

   概要を参照.

3. 呼び出し方法

   `TDADMU(N,M,H,X,Y,W,SUB)`

4. パラメーターの説明

N	(I)	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の次元
M	(I)	入力. ステップ分割数 (備考を参照)
H	(D)	入力. 積分区間の長さ (Δx)
X	(D)	入力. 独立変数 x の初期値 x_0
		出力. $x + \Delta x$
Y	(D(N))	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の初期値 $\boldsymbol{y_0}$
		出力. $x = x + \Delta x$ における$\boldsymbol{y}$の値
W	(D(N*6))	作業領域
SUB	(EXTERNAL)	関数系 $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ を計算する副プログラム名 (備考を参照)

5. 備考

   (a) M≥ 3 であること.

   (b) 副プログラム `SUB` の用意のし方, および `M` の意味は `TDRK4U` の項を参照.

   (c) `TDADMU` 一回あたりの, `SUB` を呼び出す回数は, `6+2*M` である.

3.4 TDBSMU

1. 機能

   Bulirsch-Stoer 法による数値解の計算

2. 定義

   概要を参照.

3. 呼び出し方法

   `TDBSMU(N,M,L,H,X,Y,W,SUB)`

4. パラメーターの説明

N	(I)	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の次元
M	(I)	入力. ステップ分割数 (備考を参照)
L	(I)	入力. 公式の次数の指定 (備考を参照)
H	(D)	入力. 積分区間の長さ (Δx)
X	(D)	入力. 独立変数 x の初期値 x_0
		出力. $x + \Delta x$
Y	(D(N))	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の初期値 $\boldsymbol{y_0}$
		出力. $x = x + \Delta x$ における$\boldsymbol{y}$の値
W	(D(N*(L+3)))	作業領域
SUB	(EXTERNAL)	関数系 $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ を計算する副プログラム名 (備考を参照)

5. 備考

(a) `L` は正の整数であり, `2*L` が公式の次数に対応する. 被積分関数$\boldsymbol{f}$が滑らかな場合は `L` を大きくとれば高精度の数値解が得られるが, あまり大きすぎると計算量が増えすぎるだけでなく, 丸め誤差の影響も大きくなる. 従って解くべき問題にもよるが, `L=4`〜`L=8` 程度が適当である.

(b) 副プログラム `SUB` の用意のし方は `TDRK4U` の項を参照.

(c) `M` は内部で Bulirsch-Stoer 法による積分が行われる回数を表しているが, 数値積分の刻み幅は `(H/M)/2`〜`(H/M)/(2*L)` まで変化している.

(d) `TDBSMU` 一回あたりの, `SUB` を呼び出す回数は, `M*(L*L+1)` である.

3.5 TDRKNU

1. 機能

Runge-Kutta 法 (4 次精度) による数値解の計算 (演算子分割処理を含む)

2. 定義

概要に述べたような一般の連立 1 階常微分方程式において, 右辺を従属変数 $\boldsymbol{y}$ に対する線形項と非線形項とに分離したもの:

$$\boldsymbol{y'} \equiv \frac{d\boldsymbol{y}}{dx} = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) + \boldsymbol{g}(x, \boldsymbol{y}) \tag{3}$$

$$\boldsymbol{y} \equiv (y_1, y_2, \cdots, y_n) \tag{4}$$

を考える. ここに, $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ は線形項, $\boldsymbol{g}(x, \boldsymbol{y})$ は非線形項である.

上の常微分方程式において, 線形項だけを残した方程式:

$$\boldsymbol{y'} \equiv \frac{d\boldsymbol{y}}{dx} = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) = A(x)\boldsymbol{y} + \boldsymbol{b}(x) \tag{5}$$

は ($A(x)$ および $\boldsymbol{b}(x)$ が x で解析的に積分できれば) 解析的に解くことができる. 従って, 線形項による影響は解析的に評価し, 非線形項のみを数値的に積分することにより, 数値的に解くべき問題の性質が良くなる場合がある (流体運動の方程式における粘性項や, 浅水方程式における重力波の伝播などの影響を線形項の方に繰り込む場合など).

本ライブラリは, 関数系 $\boldsymbol{f}$ による線形方程式の解, 関数系 $\boldsymbol{g}$, 初期値 $x_0, \boldsymbol{y_0}$, および刻み幅 Δx が与えられた場合に, $x = x_0 + \Delta x$ における $\boldsymbol{y}$ の値を数値的に求めるものである.

3. 呼び出し方法

`TDRKNU(N,M,H,X,Y,W,SUBL,SUBN)`

4. パラメーターの説明

N	(I)	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の次元
M	(I)	入力. ステップ分割数 (備考を参照)
H	(D)	入力. 積分区間の長さ (Δx)
X	(D)	入力. 独立変数 x の初期値 x_0
		出力. $x + \Delta x$
Y	(D(N))	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の初期値 $\boldsymbol{y_0}$
		出力. $x = x + \Delta x$ における$\boldsymbol{y}$の値
W	(D(N*3))	作業領域
SUBL	(EXTERNAL)	線形項$\boldsymbol{f}$(x,$\boldsymbol{y}$) による積分を計算する副プログラム名 (備考を参照)
SUBN	(EXTERNAL)	関数系$\boldsymbol{g}$(x,$\boldsymbol{y}$) を計算する副プログラム名 (備考を参照)

5. 備考

(a) 副プログラム SUBL, SUBN の用意のし方

SUBROUTINE SUBL(X,DX,Y)

X	(D)	入力. 独立変数 x の値
DX	(D)	入力. 独立変数 x の値の増分 Δx
Y	(D(N))	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の値
		出力. 線形項により積分した$\boldsymbol{y}$の $x = x + \Delta x$ での値

SUBROUTINE SUBN(X,Y,DY)

X	(D)	入力. 独立変数 x の値
Y	(D(N))	入力. 従属変数ベクトル$\boldsymbol{y}$の値
DY	(D(N))	出力. 非線形項$\boldsymbol{g}$の値

SUBL, SUBN は本サブルーチンを呼びだす側のプログラムで EXTERNAL 宣言をしておくこと.

(b) パラメーター M は内部で Runge-Kutta 法による積分が行われる回数を表わす. 従って, 数値積分の刻み幅は H/M となる.

(c) TDRKNU 一回あたりの, SUBL を呼び出す回数は, 5*M, SUBN を呼び出す回数は, 4*M である.

(d) TDRKNU の内部における SUBL の呼び出しでは, 常に DX = H/(2*M) である. 従って, SUBL が X に陽に依存しない場合などには, 計算をある程度簡略化できる.