

# Mクラスの2点境界値問題における 不動点近似法について

富士通(株)国際研 鈴木千里 (Chisato Suzuki)

## 1. 序 論

### 1.1 はじめに

1984年(11月29日~12月1日)に京都大学数理解析研究所で行われた「数値計算のアルゴリズムの研究」の研究集会において、「複数個の解を持つ不動点問題の数値解法について(数理解析研究所講究録 553, 21-40 頁(1985年2月))」と題して、非線形2点境界値問題の数値解法を提案した[1]。本資料では、この方法を不動点近似法、あるいは単に不動点法と呼ぶことにし、Mクラスの非線形2点境界値問題に対する不動点法の誤差解析を与える。

### 1.2 不動点法の概観

非線形2点境界値問題

$$y'' = f(x, y), \quad -1 \leq x \leq 1, \quad y(-1) = 0, \quad y(1) = 0, \quad (1.1)$$

を直接解く代わりに、これと等価な不動点問題

$$y(x) - T(y)(x) = 0 \quad \text{in } C^2 \quad (1.2)$$

を解く。ここで、 $C^2$  は  $y(-1)=y(1)=0$  を満たす区間  $I=[-1, 1]$  の上で定義された2階連続微分可能な関数からなる空間で、 $T$  は  $C^2$  の上で定義されたつぎの作用素である： $y \in C^2$  に対し

$$T(y)(x) = \int_{-1}^1 g(x, u) f(u, y(u)) du \quad (1.3)$$

$$g(x, u) = \begin{cases} \frac{1}{2}(x+1)(u-1), & \text{if } x \leq u \\ \frac{1}{2}(x-1)(u+1), & \text{if } x > u \end{cases}$$

方程式(1.3)の近似を与える積分作用素  $T_k$  ( $k \geq 0$ )をつぎのように定義する:

$$T_k(y)(x) = y(x) - \phi_k(y)(x) \quad \text{for } y \in C^2 \quad (1.4)$$

$$\phi_k(y)(x) = \sum_{i=0}^{k+1} s_i(x) y''(x_i) \quad (1.5)$$

ここで,  $\{x_i\}$  ( $x_0 = -1, x_{k+1} = 1$ ) は多項式  $(1-x^2) p_{k+1}'(x)$  の  $k+2$  個のゼロの点であり, 選点という. ここで,  $p_{k+1}'$  は  $k+1$  次のルジャンドル多項式の一次導関数である.  $s_i(x)$  は次式で定義される  $k+3$  次多項式である:

$$s_i(x) = \int_{-1}^1 g(x, u) \ell_i(u) du \quad (1.6)$$

なお  $\ell_i(u) = \pi(u) / [\pi'(x_i)(u-x_i)]$ ,  $\pi(u) = (u-x_0) \times \cdots \times (u-x_{k+1})$ .  $\phi_k$  (1.5) は関数  $y \in C^2$  に対する補間の性質を持ち,  $y(x)$  が  $k+3$  次以下の多項式なら, 正確に  $\phi_k(y) = y$  が成立する.

$T_k(y)(x)$  を  $\{x_1, x_2, \dots, x_k\}$  の  $k$  個の点で離散化し, そして  $y'' = f(x, y)$  の関係を用いることによって, 方程式(1.2)の近似解を規定する  $k$  個の代数方程式が得られる:

$$Y_j - \sum_{i=0}^{k+1} s_i(x_j) f(x_i, Y_i) = 0 \quad (1.7)$$

( $1 \leq j \leq k$ ). 上式を離散方程式という. 離散方程式の行列表現は

$$H_k(Y) \equiv Y - S_k F(Y) - W = 0 \quad (1.8)$$

で与えられる. ここで

$$Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_k)^T \in R^k = k\text{次元ユークリッド空間}$$

$$W = (W_i), \quad W_i = s_0(x_i) f(-1, 0) + s_{k+1}(x_i) f(1, 0)$$

$$F(Y) = (f_1, \dots, f_k)^T, \quad f_j = f(x_j, Y_j), \quad 1 \leq j \leq k$$

$$S_k = (s_{ij}), \quad s_{ij} = s_j(x_i), \quad 1 \leq i, j \leq k$$

方程式(1.1)が線形なら, 即ち  $f(x, y) = \lambda q(x)y$  ならば, 離散方程式も線形となる. そのとき  $\det(E - \lambda S_k Q) \neq 0$  ( $E$ : 恒等行列) なら  $Y = (E - \lambda S_k Q)^{-1} W$  と解くことができる. ここで,  $Q = \text{diag}(q(x_1), \dots, q(x_k))$ ,  $\lambda \in R^1 = (-\infty, +\infty)$ ,  $q$  は  $I$  の上で定義された関数である. また

$\det(E - \lambda S_k Q) = 0$ ならば、(1.8)は固有値問題に縮退する。しかし、 $f(x, y)$ が $y$ に関して非線形なら、適当な反復手続きにより離散方程式を解くことが必要となる。

離散方程式の解 $Y$ を得れば、問題(1.1) (あるいは(1.2))の一つの近似解 $y_k(x)$ が

$$y_k(x) = \sum_{i=0}^{k+1} s_i(x) f(x_i, y_k(x_i)) \quad (1.9)$$

で与えられる。ここで、 $y_k(x_i) = Y_i$  ( $1 \leq i \leq k$ )を満たす。

$y(-1)=y(1)=0$ を満たす十分滑らかな関数 $y(x)$ に対して、積分作用素は

$$T_k(y)(x) = - \sum_{i=0}^{\infty} c_i(x) y^{(i)}(x) \quad (1.10)$$

と展開することができる。これは積分作用素(1.4)式の中に

$$y''(x_i) = \sum_{p=0}^{\infty} y^{(p+2)}(x) (x_i - x)^p$$

を代入し、さらにゼロ項

$$0 = -\frac{1}{2}(1+x)y(1) - \frac{1}{2}(1-x)y(-1)$$

$$= -\frac{1}{2}(1+x) \sum_{i=0}^{\infty} y^{(i)}(x) (1-x)^i + \frac{1}{2}(-1)^i (1-x) \sum_{i=0}^{\infty} y^{(i)}(x) (1+x)^i$$

を付け加えて整理することにより得られる。ここで $c_0=0, c_1=0$ となり、 $i \geq 2$ に対して

$$c_i(x) = \frac{1}{i!} \left[ \frac{1}{2}(1-x^2) \left[ (1-x)^{i-1} + (-1)^i (1+x)^{i-1} \right] + i(i-1) \sum_{j=0}^{k+1} s_j(x) (x_j - x)^{i-2} \right]$$

積分作用素の次数をつぎのように定めれば、Henrici [3]の差分作用素の次数の概念と一致する：もし $c_0(x)=c_1(x)=\dots=c_{p+1}(x) \equiv 0$ ,  $c_{p+2}(x) \neq 0$ が成立すれば、積分作用素(1.4)は $p$ 次であるという。次数に関して次の定理が成立する：

**定理 1.**  $k+2$ 個の選点上で定義された積分作用素(1.4)に対し、(1.10)式の展開において

$$\begin{cases} c_i(x) \equiv 0 & (0 \leq i \leq k+3) \\ c_{k+4}(x) \neq 0 & \text{on } x \in I \end{cases}$$

が成立する。即ち、積分作用素(1.4)の次数 $p$ は $k+2$ である。

**【証明】**  $x$ の $i$ 次多項式

$$y_w(x) = (x-w)^i - \frac{1}{2}(1+x)(1-w)^i - \frac{1}{2}(-1)^i(1-x)(1+w)^i \in C^2$$

に  $\phi_k$  を作用させるとき,  $i \leq k+3$  であれば, 任意の  $w \in R^1$  に対して

$$\phi_k(y_w)(x) = i(i-1) \sum_{j=0}^{k+1} s_j(x) (x_j-w)^{i-2} = y_w(x) \quad (1.11)$$

が成立する. (1.11)式において,  $w=x$  と置くと

$$i(i-1) \sum_{j=0}^{k+1} s_j(x) (x_j-x)^{i-2} = -\frac{1}{2}(1+x^2) [(1-x)^{i-1} + (-1)^i(1+x)^{i-1}]$$

を得る. 従って, この関係により,  $2 \leq i \leq k+3$  に対しては,  $c_i \equiv 0$  となる.  $c_0=c_1=0$  は直接計算で確かめられる.  $i=k+4$  の場合,  $c_i \equiv 0$  が成立したとすれば, (1.11)式が成立することになる. これは  $\phi_k$  の補間の性質に反する.  $\square$

離散方程式 (1.7), または (1.8) に対しては, 選点  $x_j$  ( $1 \leq j \leq k$ ) 点上で次数を定義することが自然である. 従って, 積分作用素と比べて離散方程式の方が高い次数をもつことがある [2]. 混乱を避けるために本資料では, 積分作用素の次数を用いて議論する.

Henrici [3] は, Mクラスと呼ばれる条件, すなわち  $I \times (-\infty, \infty)$  の上で

$$\partial f(x, y) / \partial y \geq 0 \quad (1.12)$$

を満たし, かつこれが連続であるような条件を満たす  $f(x, y)$  の非線形 2 点境界値問題に対し, 差分法の誤差解析を与えている. この結果は, 差分近似から導かれる非線形方程式系を Newton 法の適用により解く際の収束性の解析に本質的な役割を果たしている [4]. 本資料では Mクラスの 2 点境界値問題に対する不動点法の誤差解析を行う. 第 2 章では, 問題を Mクラスに限定することなく, 一般的な立場から, 近似解の誤差と残差とを関係づける誤差方程式を導出する. そのあとで Mクラスの仮定を設け, 詳細な誤差解析を第 3 章と第 4 章を通して行う. 特に第 3 章では, 近似誤差の事前評価を与え, 第 4 章では事後の評価を与える. 第 5 章では, 本誤差解析の有効性を示すために数値例を与える. 本結果は, 不動点法による解法サブルーチンの利用に有効である共に, 不動点法における Newton 法の収束性を保証する十分条件の提供に寄与する.

## 2. 誤差方程式

最初に、不動点法における打切誤差、残差および近似誤差の3つの定義を陽的に与える。その後で若干の準備を行い、残差ノルムによる近似誤差の評価式を導出する。この章の議論においては、問題(1.1)は少なくとも一つの解を持つものと仮定する。

### 2.1 定義と準備

積分作用素(1.4)の打切誤差  $\varepsilon_k$  を、問題(1.1)の解  $y$  に対し

$$\varepsilon_k(x) = y(x) - \sum_{i=0}^{k+1} s_i(x) f(x_i, y(x_i)) \quad (2.1)$$

(for  $x \in I$ ) と定義する。従って、 $f$  が十分滑らかなら、 $k+2$  次の積分作用素の打切誤差は

$$\varepsilon_k(x) = c_{k+4}(x) y^{(k+4)}(x) + \dots \quad (2.2)$$

となる。これは定理1から容易に分かる。近似解  $y_k$  に対する方程式(1.2)の残差  $r_k$  を

$$r_k(x) = y_k(x) - \int_{-1}^1 g(x, u) f(u, y_k(u)) du \quad (2.3)$$

(for  $x \in I$ ) と定義する。厳密解  $y$  に対する近似解  $y_k$  の誤差を

$$e_k(x) = y(x) - y_k(x) \quad (2.4)$$

(for  $x \in I$ ) と定義する。そのとき近似誤差  $e_k$  と打切誤差  $\varepsilon_k$  との間には、次の関係が成立する：

$$e_k = \varepsilon_k + \delta_k \quad (2.5)$$

ここで、 $\delta_k$  は、各  $x \in I$  に対し

$$\delta_k(x) = \sum_{i=0}^{k+1} s_i(x) [f(x_i, y(x_i)) - f(x_i, y_k(x_i))]$$

である。関数  $f(x, y)$  の問題(1.1)の解  $y$  とその近似解  $y_k$  および打切誤差  $\varepsilon_k$  を用いて線形積分方程式を次ぎのように定義することができる：

$$\eta(x) = \int_{-1}^1 g(x, u) h(u) \eta(u) du + \varepsilon_k(u) \quad (2.6)$$

ここで、 $h$  はつぎのような  $I$  上の連続関数である；

$$(a) \quad y(x) \neq y_k(x) \text{ なる点 } x \text{ において, } h(x)(y(x) - y_k(x)) = f(x, y(x)) - f(x, y_k(x))$$

$$(b) \quad y(x) = y_k(x) \text{ なる点 } x \text{ において, } h(x) = \partial f(x, y(x)) / \partial y(x).$$

(2.6) 式を  $C^2$  上で作用素表現すると便利である；

$$\eta = G\eta + \varepsilon_k \quad (2.7)$$

## 2.2 誤差方程式の導出

誤差方程式は、(2.5), (2.6) 式を用い、更に  $G$  の線形性を利用して導くことができる。実際

$$e_k - \eta = \delta_k - G\eta = \delta_k - G e_k + G(e_k - \eta)$$

が成立することから

$$(E - G)(e_k - \eta) = \delta_k - G e_k$$

を得る。ここで、 $E$  は  $C^2$  上での恒等作用素である。上式の右辺を整理すれば、右辺  $= -\varepsilon_k - r_k$  となる。従って、 $(E - G)$  が可逆的であれば、 $\eta = (E - G)^{-1} \varepsilon_k$  が成立することから近似解の誤差方程式

$$e_k = -(E - G)^{-1} r_k \quad (2.8)$$

を得る。これから、近似誤差  $e_k$  に対するつぎの評価が有効となる：

$$\|e_k\| \leq \|(E - G)^{-1}\| \|r_k\| \quad (2.9)$$

ここで  $\|\cdot\|$  はノルムを意味する。ノルムは特に限定されないが、本論文では最大ノルムを用いて議論する。(2.9) 式により誤差  $e_k$  の評価の問題は  $(E - G)^{-1}$  と残差  $r_k$  のノルムの評価を如何にして行うかということに帰着する。また、残差の評価を事前に行うか事後に行うかによって、(2.9) 式は事前評価式にも、事後評価式にもなる。つぎの章からは、問題を  $M$  クラスに制限して、これらのノルムを評価する。

## 3. $M$ クラスにおける誤差評価 (事前)

$M$  クラスの条件のもとで  $\|(E - G)^{-1}\|$  の具体的な評価を与え、更に残差  $r_k$  のノルム  $\|r_k\|$  を事前の意味で評価する。

### 3.1 $\|(E-G)^{-1}\|$ の評価

積分方程式 (2.6) の解  $\eta$  は線形 2 点境界値問題

$$\begin{cases} \eta''(x) = h(x) \eta(x) + D^2 \varepsilon_k(x) \\ \eta(-1) = \eta(1) = 0, \quad D^2 = d^2/dx^2 \end{cases} \quad (3.1)$$

の解でもある。このような非斉次の線形方程式の境界値問題の解はグリーン関数を用いて陽的に表すことができる [3] :

$$\eta(x) = \int_{-1}^1 G(x, u) D^2 \varepsilon_k(u) du \quad (3.2)$$

ここで、グリーン関数  $G(x, u)$  は常微分方程式の 2 つの初期値問題

$$s''(x) = h(x)s(x), \quad s(-1) = 0, \quad s'(-1) = 1,$$

$$v''(x) = h(x)v(x), \quad v(1) = 0, \quad v'(1) = -1.$$

の解  $s(x)$  ( $x \geq -1$ ) と  $v(x)$  ( $x \leq 1$ ) の組み合わせによって定義される :

$$G(x, u) = \begin{cases} -W^{-1}s(x)v(u), & \text{for } x \leq u \\ -W^{-1}s(u)v(x), & \text{for } x > u. \end{cases}$$

ここで、 $W$  ( $\geq 2$ ) は  $s(x)$  と  $v(x)$  のロンスキアンである。

グリーン関数  $G(x, u)$  は  $x = u$  の点で跳躍を伴う不連続な一次導関数を持つことに注意して、(3.2) 式の積分を部分積分法により直接積分すれば

$$\eta(x) = \varepsilon_k(x) - \int_{-1}^1 G(x, u) h(u) \varepsilon_k(u) du \quad (3.3)$$

を得る。この式から、 $\eta$  に対するつぎの評価を得る :

$$\|\eta\| \leq (1 + \|h\| \|v\| \|s\|) \|\varepsilon_k\| \quad (3.4)$$

$\|v\|$  と  $\|s\|$  の評価のために簡単な補題を準備する。M クラスの問題においては、関数  $h$  に対して  $h(x) \geq 0$  (for  $x \in I$ ) が成立する。いま

$$H = \max_I h(x) \quad (3.5)$$

とおく。そのとき、つぎの補題が成立する。

#### 補題 2.

(1) 初期値問題  $S''(x) = HS(x)$ ,  $S(-1) = 0$ ,  $S'(-1) = 1$  の解は  $S(x) = H^{-1/2} \sinh(H^{1/2}(1+x))$  で

与えられ、つぎを満たす：

$$S(x) \geq s(x) \geq 0, \text{ for } x \in I.$$

(2)初期値問題  $V''(x) = HV(x)$ ,  $V(1)=0$ ,  $V'(1)=-1$ の解は  $V(x) = H^{-1/2} \sinh(H^{1/2}(1-x))$  で与

えられ、つぎを満たす：

$$V(x) \geq v(x) \geq 0, \text{ for } x \in I.$$

(証明は簡単である).  $\square$

この補題から

$$\begin{aligned} \|s\| &\leq S(1) = H^{-1/2} \sinh(2H^{1/2}) \\ \|v\| &\leq V(1) = H^{-1/2} \sinh(2H^{1/2}) \end{aligned} \quad (3.6)$$

が有効である.

以上の準備のもとで  $\|(E-G)^{-1}\|$  に対するつぎの評価を得る：

$$\|(E-G)^{-1}\| = \sup_{\|\varepsilon_k\| \neq 0} \frac{\|\eta\|}{\|\varepsilon_k\|} \leq 1 + \sinh^2(2H^{1/2}). \quad (3.7)$$

実際の計算においては、 $H$ の具体的な評価が必要となる。これは $h$ の性質により

$$H = \max_{x \in I} \left\{ \max_{y(x)} \frac{\partial f(x, y(x))}{\partial y(x)}, \max_{y_k(x)} \frac{\partial f(x, y_k(x))}{\partial y_k(x)} \right\} \quad (3.8)$$

で評価できる。従って、もし、 $\|y\|$ と $\|y_k\|$ を評価できれば、 $H$ を評価することができる。

$\|y\|$ はLees & Schultzの定理[5]から

$$\|y\| \leq \frac{1}{2} \max_I |f(x, 0)| \equiv \kappa \quad (3.9)$$

と評価できる。 $\|y_k\|$ の評価の仕方はあとの3.3で述べる。

### 3.2 残差 $r_k$ の評価

残差ノルムを事前に評価するためには、問題(1.1)における $f(x, y)$ の滑らかさに関する性質を仮定することが必要である。実際的なことを考慮するときは、 $f$ は $x$ と $y$ に関して十分滑らかであることも多い。しかし理論的な詰めとしては、 $M$ クラスの条件だけを用いることが望ましい。従って、ここでは $f$ は $y$ に関して一階連続微分可能である場合と無限階連続微分可能である場合の両者について考察する。

### 3.2.1. $f$ が一階連続微分可能な場合:

残差の定義 (2.3) に近似解  $y_k(x)$  (1.9) を代入し,  $s_i(x)$  を (1.6) 式により展開すれば, 残差  $r_k$  は

$$r_k(x) = \int_{-1}^1 g(x, u) \left[ \sum_{i=0}^{k+1} \ell_i(u) f(x_i, y_k(x_i)) - f(u, y_k(u)) \right] du \quad (3.10)$$

と展開できる. いま,  $B_k(x)$  を

$$B_k(x) = \frac{1}{2^{k+1}} \sum_{i=0}^{k+1} f(\xi_i, y_k(\xi_i)) p_i(x)$$

と置けば,  $B_k(x)$  は  $f(x, y_k(x))$  を近似する  $k+1$  次の Bernstein 多項式である. ここで

$$p_i(x) = \binom{k+1}{i} (1+x)^i (1-x)^{k-i+1}, \quad \xi_i = (2i-k-1)/(k+1).$$

いま, (3.10) 式の  $[\cdot]$  の中に  $B_k$  を加え, そして  $k+1$  次の Lagrange 補間式によって表現した  $B_k$  を差し引くことによって, つぎを得る:

$$r_k(x) = \sum_{i=0}^{k+1} s_i(x) [f(x_i, y_k(x_i)) - B_k(x_i)] + \int_{-1}^1 g(x, u) [B_k(u) - f(u, y_k(u))] du$$

この式から  $r_k$  を評価することができる. 右辺の第1項に文献1の補題1を適用し, 第2項に対しては,

$|B_k(u) - f(u, y_k(u))|$  の最大を取り,  $|g(x, u)|$  だけを積分した後で  $x$  に関する最大をとることにより評価できる;

$$\|r_k\| \leq L_k \|f - B_k\| + \frac{1}{2} \|B_k - f\| = (L_k + \frac{1}{2}) \|f - B_k\|$$

ここで  $L_k = [(k+1)/(2k+3)]^{1/2}$ . 従って, 残差の事前評価は  $f$  に対する Bernstein 多項式  $B_k$  の近似度に依存する. Weierstrass の定理によれば, 近似度は  $f$  の滑らかさに依存する. 即ち

#### 【Weierstrassの定理とその変形 [6]】

(1)  $f$  が連続で, その連続度が  $\omega$  ならば, つぎが成立する:

$$\|f - B_k\| \leq 2\omega((k+1)^{-1/2}).$$

(2)  $f$  が一階連続微分可能ならば, つぎが成立する:

$$\|f - B_k\| \leq 2 \max_i |f'(x_i, y_k(x_i))| (k+1)^{-1/2}. \quad \square$$

(1)はMクラスの条件下で成立するが,  $f(x, y_k(x))$  の連続度を事前に求めることは必ずしも容

易ではない。少し条件を緩めたのが(2)である。すなわち、Mクラスであってかつ更に  $x$  に関して  $f(x, y)$  が一階連続微分可能であれば(2)の条件は満たされ、実用性を持つことになる。

### 3.2.2. $f$ が十分滑らかな場合

打切誤差の定義(2.1)の右辺から厳密解  $y$  を差し引き、そして不変性を保つために(1.2)式で表現された  $y$  を加える操作を行って

$$r_k(x) = -e_k(x) + \int_{-1}^1 g(x, u) h(u) \eta(u) du$$

を得る。さらに、(2.6)式を用いて上式の積分項を消去すれば

$$r_k = -e_k + (\eta - \varepsilon_k)$$

を得る。従って  $e_k = -(E - G)^{-1} r_k$ ,  $\eta = (E - G)^{-1} \varepsilon_k$  の関係を用いて上式を整理すれば

$$G(r_k + \varepsilon_k) = 0$$

が得られる。これは、任意の  $x \in I$  に対し

$$\int_{-1}^1 g(x, u) h(u) [r_k(u) + \varepsilon_k(u)] du = 0 \quad (3.11)$$

であることを意味する。Mクラスの問題においては、 $h(u) \geq 0$

(for  $u \in I$ ) であることから、任意の  $x \in I$  に対して

$$g(x, u) h(u) \leq 0, \quad (\text{for } u \in I)$$

が成立する。この事実から、至ところで

$$r_k(u) = -\varepsilon_k(u) \quad (\text{for } u \in I)$$

が成立する。従って  $f$  が十分滑らかなら、この関係と(2.2)式から、次式を得る。

$$r_k(x) = -c_{k+4}(x) y^{(k+4)}(x) - \dots \quad (3.12)$$

上式より、残差  $r_k(x)$  に対して (for  $x \in I$ )

$$|r_k(x)| \leq C_k(x) \|y^{(k+4)}\| \quad (3.13)$$

(for  $x \in I$ ) が成立する。ここで  $C_k(x) = |c_{k+4}(x)|$ 。即ち

| k  | 次数 | $\ C_k\ $ |
|----|----|-----------|
| 1  | 3  | —         |
| 2  | 4  | 7.1110-4  |
| 3  | 5  | 2.4240-5  |
| 4  | 6  | 8.3870-7  |
| 5  | 7  | 3.2460-8  |
| 6  | 8  | 1.3640-9  |
| 7  | 9  | 4.9810-11 |
| 8  | 10 | 1.6560-12 |
| 9  | 11 | 5.6640-14 |
| 10 | 12 | 1.7990-15 |
| 11 | 13 | 5.2530-17 |
| 12 | 14 | 1.4550-18 |
| 13 | 15 | 3.9760-20 |

表1. 選点上での  $C_k(x)$  の最大値

$$C_k(x) = \frac{1}{(k+4)!} \left| \frac{1}{2}(1-x^2) \left[ (1-x)^{k+3} + (-1)^k (1+x)^{k+3} \right] \right. \\ \left. + (k+4)(k+3) \sum_{p=0}^{k+1} s_p(x) (x_p-x)^{k+2} \right| \quad (3.14)$$

従って

$$\|r_k\| \leq \|C_k\| \|y^{(k+4)}\| \quad (3.15)$$

の評価を得る。ここで  $C_k(x)$  は  $x \in I$  の各点で事前に計算できる。また、 $\|y^{(k+1)}\|$  の評価については直ぐあとの3.3.2で議論する。なお、 $\|C_k\|$  のラフな限界を下記に与える：

$$\|C_k\| \leq 2^{k+2} [1 + (k+3)(k+4)L_k] / (k+4)!$$

### 3.3 $\|y_k\|$ , $\|y^{(n+2)}\|$ の事前評価

$\|(E-G)^{-1}\|$  の実際の評価に際しては、 $H$  の評価を必要とし、 $H$  の評価には近似解のノルム  $\|y_k\|$  の評価を必要とする。また、(3.15)式による残差の評価では  $\|y^{(k+4)}\|$  の値を必要とする。従って、ここではこれらの評価の方法について述べる。

#### 3.3.1. $\|y_k\|$ の事前評価

文献1に従えば、不動点法による近似解  $y_k(x)$  は  $k$  の増加に伴って厳密解  $y(x)$  へ収束することが保証されている。従って、 $k$  が  $m$  と比べ十分に大きければ

$$\|y_k - y\| \leq \|y_m - y\| \quad (= \|e_m\|)$$

が有効である。この不等式から、つぎの評価を得る：

$$\|y_k\| \leq \|y\| + \|e_m\| \leq \kappa + \|e_m\| \quad (3.16)$$

ここで  $\kappa$  は(3.8)式で定義されている。 $e_m$  は  $y_m$  の近似誤差で事後的に評価する。しかし、 $m=1$  にとれば  $y_1(x)$  は初期近似解に相当し、その解析は容易である。

| k | $\ y^{(k+4)}\ $ |
|---|-----------------|
| 1 | 0.09757         |
| 2 | 0.16389         |
| 3 | 0.26748         |
| 4 | 0.57839         |
| 5 | 1.32300         |
| 6 | 3.56707         |
| 7 | 10.38872        |
| 8 | 33.85469        |
| 9 | 119.11653       |

表2.  $f = 1/4 \exp y$  の  $x$  に関する導関数のノルム

#### 3.3.2. $\|y^{(n+2)}\|$ の事前評価

$y^{(n+2)}(x)$  は  $f(x, y(x))$  の  $x$  に関する  $n$  次導関数である。従って合成関数の微分則を用いて  $f$  を  $x$  に関し  $n$  回微分

すればよい。しかし、2次導関数  $y''$  は  $f(x, y(x))$  により置き換えることが可能であることに注意すれば、 $y^{(n+2)}$  は  $D_x^i D_y^j f(x, y)$  ( $0 \leq i+j \leq n$ ) と  $y$  および  $y'$  の適当な積の (正の係数を持つ) 線形和からなる関数によって表されることが分かる。これを

$$y^{(n+2)}(x) = F(x, y, y', D_x^i D_y^j f(x, y))$$

で表す。ここで、 $D_x = \partial / \partial x$ ,  $D_y = \partial / \partial y$ 。従って、 $\|y^{(n+2)}(x)\|$  の評価は区間  $[-1, 1]$  上での  $y(x)$  と  $y'(x)$  の変域を知れば十分である。(3.9) 式により  $|y(x)| \leq \kappa$  である。 $|y'(x)|$  の変域はつぎのようにして評価できる。 $y(x)$  に平均値の定理を適用すれば

$$0 = y(-1) - y(x) = -y'(x)(1+x) + \frac{1}{2}y''(\xi_1)(1+x)^2$$

$$0 = y(1) - y(x) = y'(x)(1-x) + \frac{1}{2}y''(\xi_2)(1-x)^2$$

が得られる。ここで、 $\xi_1$  は  $-1$  ( $\xi_2$  は  $+1$ ) と  $x$  を両端とする开区間に属す適当な点である。上の2つの式の差から

$$y'(x) = \frac{1}{4} [y''(\xi_1)(x+1)^2 - y''(\xi_2)(x-1)^2].$$

従って、この式から、任意の  $x \in I$  に対し

$$|y'(x)| \leq \frac{1}{2}(x^2+1) \max_{R_2} |f(x, y)| \equiv \kappa' \quad (3.17)$$

が成立する。ここで、 $R_2 = \{(x, y) : |x| \leq 1, |y| \leq \kappa\}$ 。従って

$$\|y^{(n+2)}\| \leq \max_{R_3} F(|x|, |y|, |z|, |D_x^i D_y^j f(x, y)|) \quad (3.18)$$

の評価を得る。ここで、 $R_3 = \{(x, y, z) : |x| \leq 1, |y| \leq \kappa, |z| \leq \kappa'\}$ 。

#### 4. Mクラスにおける誤差評価 (事後)

離散方程式 (1.8) を満たす解を用いて、(1.9) 式により構成される近似解  $y_k$  を元にして残差  $r_k$  を評価する。この評価の方法を2つ述べる。

##### 4.1 数値積分による方法

$y_k$  を残差の定義 (2.3) に代入して、適当な数値積分法を用いて計算する方法である。この場

合、被積分関数の中にあるグリーン関数  $g(x, u)$  は  $x = u$  の点で不連続となる導関数を持つ。従って、 $f$  が滑らかであっても、ガウス型の数値積分法の直接の適用では良い精度を得ることは一般に難しい。しかし不動点法がロバット分点に準拠して構成されていることを考えるとき、ガウス型であるロバット数値積分法の選択を放棄し難い。そこで、 $g$  の導関数の不連続性を解消する方策として、変数変換を用いてロバット数値積分法を適用する： $g(x, u)$  の一次導関数は  $x = u$  の点において不連続性を生ずることから積分を

$$\int_{-1}^1 g(x, u) q(u) du = \frac{1}{2}(x-1) \int_{-1}^1 (u+1) q(u) du + \int_x^1 (u-x) q(u) du$$

のように変形する。ここで、 $q(u) = f(u, y_k(u))$ 。そして  $u$  と  $v$  の変数変換  $u = \frac{1}{2}[(1-x)v + (1+x)]$  を施すことにより、右辺の第2項の積分区間を-1から1にする。そのとき

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 g(x, u) q(u) du &= \frac{1}{2}(x-1) \int_{-1}^1 (u+1) q(u) du \\ &\quad + \frac{1}{4}(1-x)^2 \int_{-1}^1 (v+1) f\left(\frac{1}{2}[(1-x)v + (1+x)], y_k\right) dv \end{aligned}$$

を得る。これによって  $f$  が十分に滑らかであれば、精度の良い数値結果を得ることができる。この例証として  $f(x, y) = \frac{1}{4} \exp y$  であるような問題(1.1)に対し上記の方法で計算した残差のノルムを表2に示す。また表4.には、同じ問題に対してロバット数値積分法を直接適用した場合の残差ノルムの計算結果が与えられる。なお実行条件については第5章を参照のこと。

$f$  が必ずしも滑らかでない場合には、上記の方法ではあまり良い精度は得られない。しかし被

| k | 次数 | 残差ノルム $\  r_k \ $ |
|---|----|-------------------|
| 1 | 3  | 1.26840-4         |
| 2 | 4  | 3.72860-5         |
| 3 | 5  | 8.12980-7         |
| 4 | 6  | 8.25040-8         |
| 5 | 7  | 1.80630-9         |
| 6 | 8  | 4.11400-10        |
| 7 | 9  | 9.87600-12        |
| 8 | 10 | 2.63070-12        |
| 9 | 11 | 6.47080-14        |

表3. 変数変換に基づく数値積分法による残差ノルムの評価：  
( $f = \frac{1}{4} \exp y$  の境界値問題)

| k           | 1      | 2      | 3      | 4      | 5      |
|-------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $\  r_k \ $ | 0.0350 | 0.0198 | 0.0097 | 0.0059 | 0.0054 |

表4. ロバット数値積分を直接適用して計算した残差ノルム

積分関数はすべて既知であることから、NUMPAC [7] のような完備されたライブラリの中から、関数に適した数値積分法を見つけることはさ程困難ではない。

#### 4.2 解析的な方法

$f$  は滑らかであると仮定する。残差の定義 (2.3) に  $q(x) = f(x, y_k(x))$  に対するLagrange補間展開

$$q(x) = \sum_{i=0}^{k+1} \ell_i(x) q(x_i) + \frac{\pi(x)}{(k+2)!} q^{(k+2)}(\xi) \quad (4.1)$$

を代入し、整理することにより次式が得られる：

$$\int_{-1}^1 g(x, u) \frac{\pi(u)}{(k+2)!} q^{(k+2)}(\xi) du = r_k(x) \quad (4.2)$$

ここで、 $\min T < \xi < \max T$ ,  $T = \{x, x_0, x_1, \dots, x_{k+1}\}$  . シュワルツの不等式を用いれば、上式よりつぎの評価の有効性が分かる：各  $x \in I$  に対し

$$|r(x)| \leq \frac{1}{(k+2)!} \left[ \int_{-1}^1 (1-x^2) \prod_{p=1}^k (x-x_p)^2 dx \right]^{1/2} \times \left[ \int_{-1}^1 g(x, u)^2 (1-u^2) (q^{(k+2)}(\xi))^2 du \right]^{1/2}. \quad (4.3)$$

積  $\prod_p (x-x_p)$  とLegendre多項式の一次導関数  $p_{k+1}'$  との間には

$$p_{k+1}'(x) = \frac{(k+1) [(2k+2)!]}{2^{k+1} [(k+1)!]^2} \prod_{p=1}^k (x-x_p) \quad (4.4)$$

の関係がある。そして  $(p_{k+1}')^2$  の関数に対する重み関数  $(1-x^2)$  のもとでの積分は

$$\int_{-1}^1 (1-x^2) p_{k+1}'(x)^2 dx = \frac{2(k+2)(k+1)}{2k+3} \quad (4.5)$$

となる。これから (4.3) 式の第1項は簡単に評価できる。また、第2項の  $[\cdot]$  の中は、 $x \in I$  に対し

$$0 \leq \|q^{(k+2)}\|^2 \int_{-1}^1 g(x, u)^2 (1-u^2) du = \frac{(1-x^2)^2 (3-x^2)}{20} \|q^{(k+2)}\|^2 \leq \frac{3}{20} \|q^{(k+2)}\|^2$$

と評価できる。従って、残差ノルムに対するつぎの評価を得る：

$$\|r_k\| \leq \frac{2^{k+1} k!}{(2k+2)!} \left[ \frac{3(k+1)}{10(k+2)(2k+3)} \right]^{1/2} \|q^{(k+2)}\| \quad (4.6)$$

## 5. 数 値 例

### 非線形 2 点境界値問題

$$y'' = \frac{1}{4} \exp y, \quad y(-1) = y(1) = 0$$

は典型的な M クラスの問題である。本問題の厳密解は

$$y(x) = -\ln 2 + 2 \ln [a \sec(\frac{1}{4}ax)]$$

$a = 1.3360556949061\dots$  である。この問題に対して、これまでに述べてきた誤差解析の理論の適用の仕方を順を追って説明する。なお計算の簡単化のために、関数のノルム（最大ノルム）は選点上で評価した。

【初期手続き： $\|e_1\|$  の事後評価】

初期近似解  $y_1(x)$  を得るために、離散方程式

$$H_1(Y_1) = Y_1 + 5 \exp(Y_1) / 48 + 1/48 = 0$$

を解く（数値結果： $Y_1 = -0.113795847$ ）。 $Y_1$  から、近似解  $y_1(x)$  を構成することができる（(1.9) 式）。そして  $y_1$  のノルムと  $\kappa$ （(3.9) 式）を計算する（ $\|y_1\| = 0.1138$ ,  $\kappa = 0.1250$ ）。そのとき  $\|(E-G)^{-1}\|$  の評価に必要な  $H (= 0.2833)$  は (3.8) 式により計算できる。以上の準備のもとで (3.7) 式から

$$\|(E-G)^{-1}\| \leq 1 + 1.631 = 2.631$$

を得る。 $\|e_1\|$  の評価を得るために、この値を表 2 の  $k=1$  の残差の評価値（ $1.268 \times 10^{-4}$ ）に乘じる（(2.9) 式）； $\|e_1\| = 3.336 \times 10^{-4}$ 。

【近似解  $y_k$  のノルムの評価】

(3.16) 式から、各  $k \geq 2$  に対し、 $\|y_k\| \leq 0.1253$  が近似的に（ $k$  が十分大きければ正確に）成立する。従って、(3.7) 式と (3.8) 式により、任意の  $k (\geq 2)$  に対して、つぎを得る：

$$\|(E-G)^{-1}\| \leq 1 + 1.632 = 2.632. \quad (5.1)$$

【誤差  $e_k$  の事前評価】

各  $k$  に対し  $\max_I |C_k(x)|$  と  $\|y^{(k+4)}\|$  を評価する。前者は式 (3.14) により事前に計算できる (表 1 参照)。  $\|y^{(k+4)}\|$  の評価は次のようにできる。  $y$  の領域  $\{y : |y| \leq 0.1253\}$  において  $|f|, |f_y|, |f_{yy}|, \dots$  等の最大値は 0.2834。 また  $|f_x|, |f_{xy}|, \dots$  等はゼロである。  $\kappa'$  は (3.17) 式により、  $\kappa' = 0.2834$ 。 従って  $|y'| \leq 0.2834$ 。 以上の準備によって、 (3.18) 式により  $\|y^{(k+2)}\|$  は評価できる。 従って、この評価値と式 (5.1) の評価値の積により、  $\|e_k\|$  の事前評価を得る。 この結果は表 5 に示される。 なお、  $f$  は十分滑らかではあるが、 3.2.1 に基づき評価した結果を参考として表 6 に与える。

| k | 次数 | 事前評価      | 事後評価      | 実際の誤差      |
|---|----|-----------|-----------|------------|
| 1 | 3  | —         | 3.336E-4  | 9.2191E-5  |
| 2 | 4  | 3.067E-4  | 9.8.4E-5  | 3.0593E-5  |
| 3 | 5  | 1.707E-5  | 2.140E-6  | 6.9687E-7  |
| 4 | 6  | 1.277E-6  | 2.172E-7  | 8.1608E-8  |
| 5 | 7  | 1.130E-7  | 4.754E-9  | 1.7609E-9  |
| 6 | 8  | 1.281E-8  | 1.083E-9  | 4.0654E-10 |
| 7 | 9  | 1.362E-9  | 2.599E-11 | 9.7841E-12 |
| 8 | 10 | 1.467E-10 | 6.924E-12 | 2.6200E-12 |
| 9 | 11 | 1.776E-11 | 1.703E-13 | 6.4518E-14 |

表 5. 近似解  $y_k$  に対する近似誤差  $e_k$  の事前評価と事後評価および実際の誤差 ( $f = \frac{1}{4} \exp y$  の境界値問題)

| k    | 1 | 2      | 3      | 4      | 5      |
|------|---|--------|--------|--------|--------|
| 事前誤差 | — | 0.1815 | 0.1571 | 0.1403 | 0.1283 |

表 6. 3.2.1 に基づく事前誤差評価 ( $f = \frac{1}{4} \exp y$  の境界値問題)

【誤差  $e_k$  の事後評価】

数値積分による方法に基づく。本例題における残差ノルムはすでに 4.1 (表 2) で示した。従って、表 1 の評価値に (5.1) で得られた値を掛けることにより、  $\|e_k\|$  の事後評価を得る。評価の結果を表 5 に示す。

なお、表 1 の  $\|C_k\|$  の計算、表 3 の残差ノルムおよび表 5 の実際の誤差ノルムの計算は FACM M380 計算機を利用し、使用言語は FORTRAN77、そして実数計算はすべて 4 倍精度演算を用いた。

## 6. ま と め

不動点法のように新たに提案された解法は、古典的な問題に対しても試されねばならない。この要請に答えるものが本資料の展開である。事実、本資料では、差分法の立場から詳細な誤差解析が行われているMクラスの非線形2点境界値問題に対して、不動点法の誤差解析を行った。

講演では、不動点法におけるNewton法の収束性を保証するための十分条件の提供に必要なレベル( $f$ の十分な滑らかさを仮定しない)で誤差の評価を与えた(表4及び表6)。しかし、ディスカッションにおいて、数値例に対し現実に則した評価を行うべきであるとの指摘を受けた。この指摘はもっともなことである。本資料では、(十分な滑らかさをもつ $f$ に対する)数値例にも適合するような誤差の評価法も追加した。この結果、表3及び表5に示されるように現実に則した評価が得られている。

本解析は2つの特徴を持つ：

- (1) 誤差解析の理論は差分法のそれと比べ決して複雑ではなく、事前も事後も同一の誤差評価式から展開されるという観点からむしろ簡潔な体系を成している。
- (2) 事前も事後に対しても本誤差評価は十分に実用性を持つ。

特に(2)の結果は、不動点法による解法サブルーチンの利用に有効であるとともに、さらに、事前誤差評価の結果は不動点法におけるNewton法の収束性を保証する十分条件の提供に寄与する。

謝辞：本研究の機会を下さった当研究所北川敏男会長に感謝します。

## 参考文献

- 1) 鈴木：不動点近似による非線形2点境界値問題の数値解法，情報処理学会論文誌第26巻，第5号，24-35頁(1985)。
- 2) 鈴木：非線形2点境界値問題の初期近似について，情報処理第31回全国大会予稿論文集，1L-4(1985)。
- 3) Henrici, P.: Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations, John Wiley & Sons, Inc., New York, London, Sydney (1962)。

- 4) Chawla, M. M. and Shivakumra N. P.: Numerov's Method for Nonlinear Two-point Boundary Value Problems, Intern. J. Computer Math., Vol.17, No.2, PP.167-176(1985).
- 5) Lees, M and Schultz, H. M.: A Leray-Schauder Principle for A-Compact Mappings and the Numerical Solution of Non-Linear Two-Point Boundary Value Problems, NUMERICAL SOLUTIONS of NONLINEAR DIFFERENTIAL EQUATIONS, by ed. Greenspan D., John Wiley & Sons, Inc., New York, London, Sydney, PP.167-179 (1966).
- 6) Wendroff, B.: Theoretical numerical analysis, Academic Press (1966)
- 7) 二宮, 奏野: 数学ライブラリNUMPAC, 情報処理, 第26巻, 第9号, 1033-1042頁 (1985).