

補外法の微分方程式への応用

高澤 嘉光*

はじめに	2
第 1 章 Richardson 型補外法	5
§ 1.1 $\hat{T}_m(0)$ の計算	5
§ 1.2 $T_m^{(i)}$ の誤差評価	9
§ 1.3 数値例	13
第 2 章 補外法の常微分方程式への応用	15
§ 2.1 改良中点則	17
§ 2.2 自動区間巾調節	19
§ 2.3 数値例	23
参考文献	27

* 東京大学工学部

はじめに

積分や微分方程式などの連続的な問題を数値的に解くには、普通、分割法が使われる。分割法とは「一定区間を同じ値とする」という全く素朴な着想から出ているものであり、近似解としては原始的なものの一つであるが、実質的な発展は比較的に新しい。最近の高速電子計算機の発達は、分割法を適用範囲の広い有力な近似解法とせしめた。しかし、計算機といっても万能ではなく、分割法が有効適切に応用されるためには、その理論的考察が必要である。

さて、一般に、分割法の誤差には、「打ち切り誤差」と「丸め誤差」の2種類のものが含まれる。前者は分割の巾（刻み巾）が有限であることから生じ、後者は計算に使用する数値が有限の桁であることに起因している。しかも、この両者はお互いに関係を持ち、打ち切り誤差を小さくしようとして、分割の巾を小さくすると計算回数が多くなり、丸め誤差が大きくなると言った具合である。そこで、計算回数を増さずに精度を上げる試みがいろいろなされている。

本論文では、そのうちの一つである「補外法」について論ずる。この補外法の考え方は Richardson (1927) に基づいており、したがって Richardson 型補外法 と名付けられている。次に、この補外法の概略を述べる。

$T(h)$ を刻み巾 h のある分割法で求められた近似解とする。その時、真の解は、 $\lim_{h \rightarrow 0} T(h) = T(0)$ である。

今、 $T(h)$ が

$$(0.1) \quad T(h) = \gamma_0 + \gamma_1 h^{p_1} + \gamma_2 h^{p_2} + \dots + \gamma_k h^{p_k} + R_{k+1} h^{p_{k+1}}$$

なる漸近展開式を有することがわかっているとする。

ここで、 $\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_k$ は h に独立で未知、 $p_1, p_2, \dots, p_k$ は h に独立であるが既知であるとする。この時、相異なる $h_i (i=0, 1, \dots, m)$ に対して $T(h_i)$ を計算し、この $(m+1)$ 個の対 $\{h_i, T(h_i)\}$ から補間多項式（あるいは補間有理式） $\pi_m(h)$ を作り、この多項式（有理式）で $h=0$ とした時の値 $\pi_m(0)$ を、真の解 $T(0)$ の近似値とする。

しかし、補外法が数値的に使えるためには、(0.1) の展開式がわかっていなければならない。しかし、實際上、重要な分割法における (0.1) の漸近展開式は Stetter および Gragg によって、多く研究されている。〔6〕〔7〕 さらに、Neville および Aitken によって得られた補間式を作り出すアルゴリズムを利用すると、Richardson 型補外法の算法は非常に簡単になり、方法自体が普遍的であることにあわせ

て、労力の割りに良い数値結果が得られる。なお、補外法という名の謂は、有限の大きさを有するいくつかの刻み巾 h_i で得られた結果から、不可能状態である刻み巾が「0」の時のことを予測することにある。

第1章 Richardson 型補外法

§1.1 $\hat{T}_m(0)$ の計算

ギザみ巾 $h \neq 0$ の分割法に対して漸近展開式 (0.1) の存在を仮定する。

次に、数式

$$\hat{T}_m(h) = a_0 + a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + \dots + a_m h^{p_m} \quad (1.1)$$

を定義し、条件

$$\hat{T}_m(h_j) = T(h_j), \quad j = i, i+1, \dots, i+m \quad (1.2)$$

を満足するものとする。この時 $\hat{T}_m(0)$ を求める線型補外演算子 $\mathcal{L}_m^i$ を次のように定義する。

$$\begin{aligned} a) \quad \mathcal{L}_m^i T &= T_m^{(i)} = \sum_{j=i}^{i+m} C_{mj}^{(i)} T(h_j) \\ b) \quad \mathcal{L}_m^i 1 &= 1 \\ c) \quad \mathcal{L}_m^i h^{p_j} &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (1.3)$$

ここで、 $h_0 > h_1 > h_2 > \dots > 0$ とする。

そうすれば、 $\mathcal{L}_m^i T$ を求めることと、 $\hat{T}_m(0)$ を計算することとは同値になる。

なぜなら、 $\hat{T}_m(h)$ は (1.3) より

$$\mathcal{L}_m^i \hat{T}_m = \mathcal{L}_m^i T = a_0 = \hat{T}_m(0)$$

を満足する。したがって補間の理論を使えば、(1.1) における係数 $a_0, a_1, \dots, a_m$ を求めることなしに、 $\hat{T}_m(0)$ を求めることができる。

その求める公式は, 列 γ_j の形によって, 次の2つに分けられる。

i) $\gamma_i = j \cdot \gamma$ の場合 (ただし, γ は定数)

Neville の補間公式を, h^γ の多項式に適用すれば, 次々に次の式が得られる。

$$\begin{aligned} \bigwedge_0^i T &= T_0^{(i)} = T(h_i) \\ \bigwedge_m^i T &= T_m^{(i)} = \frac{h_i^\gamma T_{m-1}^{(i+1)} - h_{i+m}^\gamma T_{m-1}^{(i)}}{h_i^\gamma - h_{i+m}^\gamma} \quad (1.4) \\ &= T_{m-1}^{(i+1)} + \frac{T_{m-1}^{(i+1)} - T_{m-1}^{(i)}}{\left(\frac{h_i}{h_{i+m}}\right)^\gamma - 1} \quad (m \geq 1) \end{aligned}$$

この $T_m^{(i)}$ の各要素を次のように配列すると, それらの一つ一つは

$$\begin{aligned} T(h_0) &= T_0^{(0)} \begin{array}{c} \diagdown \\ T_1^{(0)} \end{array} \\ T(h_1) &= T_0^{(1)} \begin{array}{c} \diagdown \\ T_1^{(1)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_2^{(0)} \end{array} \\ T(h_2) &= T_0^{(2)} \begin{array}{c} \diagdown \\ T_1^{(2)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_2^{(1)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_3^{(0)} \end{array} \\ T(h_3) &= T_0^{(3)} \begin{array}{c} \diagdown \\ T_1^{(3)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_2^{(2)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_3^{(1)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_4^{(0)} \end{array} \\ T(h_4) &= T_0^{(4)} \begin{array}{c} \diagdown \\ T_1^{(4)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_2^{(3)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_3^{(2)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_4^{(1)} \end{array} \\ T(h_5) &= T_0^{(5)} \begin{array}{c} \diagdown \\ T_1^{(5)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_2^{(4)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_3^{(3)} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ T_4^{(2)} \end{array} \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.5)$$

その左側の2個の要素から得られるから、新しい $T(h_j)$ が、ある分割法で求められたら矢印のように計算を進めて、この表を作り出して行けばよい。

なお、(1.3)の $C_{mj}^{(i)}$ は次のようになる。

$$C_{mj}^{(i)} = \prod_{s=i}^{i+m} \frac{h_s}{h_j - h_s} \quad (1.6)$$

また、(1.4)と(1.6)は任意の列 $\{h_i\}$ に対して成立する。

ii) 列 $\{x_j\}$ が一般的の場合

この場合、Neville のアルゴリズムに対応する補間公式は知られていないが、

列 $\{h_i\}$ に対して、条件

$$h_i = h_0 b^i, \quad 0 < b < 1 \quad (1.7)$$

を付ければ、演算子 L_m^i が容易に作られる。

(1.3) a), c) より

$$\begin{aligned} L_m^i h^{(j)} &= \sum_{j=i}^{i+m} C_{mj}^{(i)} h_j^{(j)} = h_0^{(j)} b^{i(j)} \sum_{j=0}^m C_{m,j+i}^{(i)} \cdot (b^{(j)})^i \\ &= 0 \quad j = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (1.8)$$

が得られるから、 $b^{(j)}$ はまさに多項式

$$P_m^{(i)}(x) = \sum_{j=0}^m C_{m,j+i}^{(i)} x^j \quad (1.9)$$

の零点であり、(1.3) b) より $P_m^{(i)}(x)$ は次の形を有する。

$$P_m^{(0)}(x) = P_m^{(i)}(x) = \prod_{j=1}^m \frac{x - b_j^{(i)}}{1 - b_j^{(i)}} \quad (1.10)$$

さらに、すべての i に対して $C_{m,j+1}^{(i)} = C_{m,j}^{(i)}$ が成立し、 $C_{m,j}^{(i)}$ は $b_j^{(i)}$, $j=1, 2, \dots, m$ の基本対称式として表わされる。

(1.9) より $P_m^{(0)}(x)$ に関する漸近式

$$P_m^{(0)}(x) = \frac{x - b_m^{(0)}}{1 - b_m^{(0)}} \cdot P_{m-1}^{(0)}(x) \quad (1.11)$$

が得られるから、 $\mathcal{L}_m^i T$ に対して次のような簡単な漸化式を作ることができる。

$$\mathcal{L}_0^i T = T_0^{(i)} = T(h_i) \quad (1.12)$$

$$\mathcal{L}_m^i T = T_m^{(i)} = \frac{T_{m-1}^{(i+1)} - b_m^{(i)} T_{m-1}^{(i)}}{1 - b_m^{(i)}} \quad (m \geq 1)$$

この各要素も (1.5) の表の関係がある。なお (1.12) は $j_m = m$ の時 (1.4) に一致する。

§ 1.2 $T_m^{(i)}$ の誤差評価

$T(h)$ が (0.1) の型の展開式を持つ時, 一般に演算子 $\Lambda_m^{(i)}$ を適用することができるが, それによって得られる近似値 $T_m^{(i)}$ の誤差がどうなるのかを, これから考えてみよう。

(0.1) より $m \leq l$ ならば 直ちに

$$T(h) = \gamma_0 + \gamma_1 h^{p_1} + \gamma_2 h^{p_2} + \dots + \gamma_m h^{p_m} + R_{m+1}(h) h^{p_{m+1}} \quad (1.13)$$

が得られる。(実際には $l = \infty$ とするのが普通である。)

次に (1.13) の両辺に $C_{mj}^{(i)}$ をかけて, $\sum_{j=i}^{i+m}$ を作ると, (1.3) より

$$\sum_{j=i}^{i+m} C_{mj}^{(i)} T(h_j) = \gamma_0 + \sum_{j=i}^{i+m} R_{m+1}(h_j) \cdot C_{mj}^{(i)} \cdot h_j^{p_{m+1}}$$

となり, これに

$$\sum_{j=i}^{i+m} C_{mj}^{(i)} T(h_j) = T_m^{(i)}$$

$$\gamma_0 = T(0)$$

$$M_{m+1} = \sup_{h_i} \{ |R_{m+1}(h_j)| \}$$

を代入すると, 上式は次のようになる。

$$|T_m^{(i)} - T(0)| \leq M_{m+1} \cdot \sum_{j=i}^{i+m} |C_{mj}^{(i)}| h_j^{p_{m+1}} \quad (1.14)$$

これより誤差評価を与える次の不等式が得られる。

i) 補外公式 (1.4) に対して

$$\rho_j = j \cdot \rho, \quad \rho > 0 \quad \text{および} \quad \frac{h_{i+1}}{h_j} \leq b < 1 \quad \text{ならば}$$

$$|T_m^{(i)} - T(0)| \leq M_{m+1} \cdot C(b^\rho) \cdot h_i^\rho \cdot h_{i+1}^\rho \cdots h_{i+m}^\rho \quad (1.15)$$

ii) 補外公式 (1.5) に対して

$$\rho_{j+1} - \rho_j \geq \rho > 0 \quad \text{および} \quad \frac{h_{i+1}}{h_j} = b < 1 \quad \text{ならば}$$

$$|T_m^{(i)} - T(0)| \leq M_{m+1} \cdot C(b^\rho) \cdot h_i^{\rho_{m+1}} \cdot b^{\sum_{j=1}^m \rho_j} \quad (1.16)$$

この不等式を証明しよう。まず, Neville のアルゴリズムに基づく補外公式 (1.4) から考えよう。 $\rho_{m+1} = (m+1)\rho$ であるので, (1.14) の右辺は

$$\sum_{j=i}^{i+m} |C_{mj}^{(i)}| \cdot h_j^{\rho_{m+1}} = \sum_{j=i}^{i+m} |C_{mj}^{(i)}| \cdot h_j^{(m+1)\rho}$$

となり, これに (1.6) の $C_{mj}^{(i)}$ を代入して変形すると, 以下のようになる。

$$\begin{aligned} \sum_{j=i}^{i+m} |C_{mj}^{(i)}| \cdot h_j^{\rho_{m+1}} &= \sum_{j=i}^{i+m} h_j^{(m+1)\rho} \prod_{s=i}^{i+m} \frac{h_j^\rho}{|h_s^\rho - h_j^\rho|} \\ &= h_i^\rho \cdot h_{i+1}^\rho \cdots h_{i+m}^\rho \sum_{j=i}^{i+m} \prod_{s=i}^{i+m} \frac{1}{|(\frac{h_j}{h_s})^\rho - 1|} \\ &= h_i^\rho \cdot h_{i+1}^\rho \cdots h_{i+m}^\rho \sum_{j=i}^{i+m} \prod_{s=i}^{j-1} \frac{1}{(\frac{h_j}{h_s})^\rho - 1} \prod_{s=j+1}^{i+m} \frac{1}{1 - (\frac{h_j}{h_s})^\rho} \\ &\leq h_i^\rho \cdot h_{i+1}^\rho \cdots h_{i+m}^\rho \sum_{j=i}^{i+m} \prod_{s=i}^{j-1} \frac{1}{b^{(j-s)\rho} - 1} \prod_{s=j+1}^{i+m} \frac{1}{1 - b^{(s-j)\rho}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= h_i^p h_{i+1}^p \cdots h_{i+m}^p \sum_{j=0}^m \prod_{p=0}^{j-1} \frac{1}{b^{(i-p)p} - 1} \prod_{p=j+1}^m \frac{1}{1 - b^{(p-j)p}} \\
&= h_i^p h_{i+1}^p \cdots h_{i+m}^p C'(b^p, m) \leq h_i^p h_{i+1}^p \cdots h_{i+m}^p C(b^p) \\
&\quad (1.17)
\end{aligned}$$

ただし, $C'(b^p, m)$ は最後から2番目の式の $\sum_{j=0}^m$ 以下で定義する。
また $C(b^p) \equiv C'(b^p, \infty)$ とする。なお $C'(b^p, m) \leq C(b^p)$ の証明を省略する。こうして得られた不等式を (1.14) に代入すると (1.15) が得られる。

次に補外公式 (1.5) の誤差評価 (1.16) を証明しよう。

この場合, $C_{mj}^{(i)}$ は多項式 (1.8) の係数であるから

$$\begin{aligned}
\sum_{j=i}^{i+m} |C_{mj}^{(i)}| h_j^{p_{m+1}} &= h_i^{p_{m+1}} \sum_{j=i}^{i+m} |C_{mj}^{(i)}| (b^{p_{m+1}})^j \\
&= h_i^{p_{m+1}} \prod_{p=1}^m \frac{b^{p_{m+1}} + b^{p_p}}{1 - b^{p_p}} = h_i^{p_{m+1}} b^{\sum_{p=1}^m p_p} \prod_{p=1}^m \frac{1 + b^{p_{m+1}-p_p}}{1 - b^{p_p}}
\end{aligned}$$

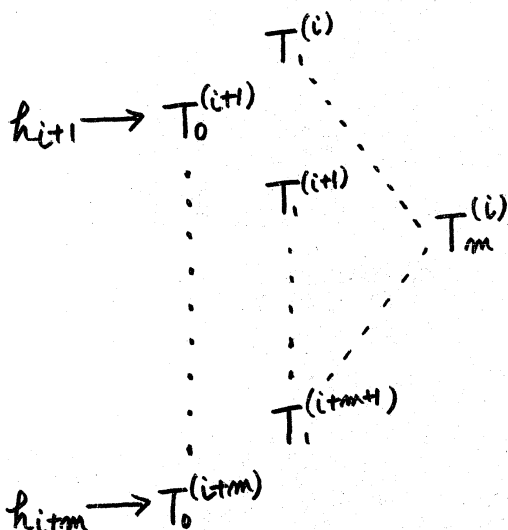
となる。一方, $b^{p_{i+1}-p_i} \leq q^2 < 1$, $b^{p_p} \leq q^{2p}$ を満足する定数 q が存在するから, これを使って上式を変形すると

$$\begin{aligned}
\sum_{j=i}^{i+m} |C_{mj}^{(i)}| h_j^{p_{m+1}} &\leq h_i^{p_{m+1}} b^{\sum_{p=1}^m p_p} \prod_{p=1}^m \frac{q^{2p}}{1 - q^{2p}} \\
&\leq h_i^{p_{m+1}} b^{\sum_{p=1}^m p_p} \prod_{p=1}^m \frac{1 + q^{2p}}{1 - q^{2p}} = C(b^p) \cdot h_i^{p_{m+1}} \cdot b^{\sum_{p=1}^m p_p} \\
&\quad (1.18)
\end{aligned}$$

ただし, $C(b^p)$ は $\prod_{j=1}^{\infty} \frac{1+q^{2j}}{1+q^{2j}}$ を置きかえたものである。この不等式を (1.14) に代入すれば (1.16) が得られる。

こうして得られた誤差評価式 (1.15) および (1.16) は, この Richardson 型補外法の有能さに対する理論的根拠を与えてくれる。簡単に言うならば

$$h_i \rightarrow T_0^{(i)}$$



$$h_{i+m} \rightarrow T_0^{(i+m)}$$

$T_m^{(i)}$ の誤差は, $T_m^{(i)}$ を計算する基礎になった $T_0^{(i+j)}$, $j=0,1,\dots,m$ を求めるのに使った刻み巾

$h_i, h_{i+1}, \dots, h_{i+m}$ の積の逆乗に比例するというわけである。このことから刻み巾の列としてどんな $\{h_i\}$ を取れば誤差が小さくなるかがわかる。

すなわち, m 段進めた補外を行った時, 計算回数が

$$\frac{1}{h_0} + \frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} + \frac{1}{h_3} + \dots + \frac{1}{h_{m-1}} + \frac{1}{h_m}$$

に比例するならば, この数を一定にして積

$$h_0 \cdot h_1 \cdot h_2 \cdot h_3 \cdots h_{m-1} \cdot h_m$$

が最小になるように $\{h_i\}$ を決めればよい。一般に $\frac{1}{h_i}$ は整数であるから, これを N_i とすれば上の問題は $N_0 + N_1 + N_2 + N_3 + \dots$

$+N_{m-1}+N_m$ を一定にして積 $N_0 \cdot N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 \cdots N_{m-1} \cdot N_m$ を最大にする問題にかかわる。

§ 1.3 数値例

定積分 $\int_0^{\pi/2} \sin x dx$ を刻み巾 h の台形則で計算した値を $T(h)$ とすると

オイラー, マクローリン展開公式により

$$T(h) = \int_0^{\pi/2} \sin x dx + \gamma_1 h^2 + \gamma_2 h^4 + \gamma_3 h^6 + \cdots$$

となる。

刻み巾の列として, $h_0 = \frac{\pi}{2}$, $\{h_0, h_0/2, h_0/3, h_0/4, h_0/5, \dots\}$ を使った時

$T(h_0) = 0.78539$	81633				
	1.00227	98774			
$T(h_1) = 0.94805$	94489	0.99998	49599		
	1.00023	99508	1.00000	00582	
$T(h_2) = 0.97709$	81666	0.99999	11461	0.99999	99999
	1.00005	93236	1.00000	00015	
$T(h_3) = 0.98711$	58009	0.99999	99029		
	1.00001	47581			
$T(h_4) = 0.99428$	18882				

刻み巾の列として, $h_0 = \frac{\pi}{2}$, $h_i = h_0/2^i$ を使った時

$T(h_0) = 0.78539$	81633				
	1.00227	98774			
$T(h_1) = 0.94905$	94489	0.99999	15654		
	1.00013	45849	1.00000	00081	
$T(h_2) = 0.98711$	58009	0.99999	98762	0.99999	99999
	1.00000	82955	1.00000	00000	3
$T(h_3) = 0.99678$	51718	0.99999	99980		
	1.00000	05166			
$T(h_4) = 0.99919$	66804				

この例のように $T(h)$ が h^2 の巾級数に展開される時に $h_i = \frac{h}{2^i}$ を刻み巾の列として使って積分値を改良する方法がいわゆる Romberg 積分であり, 第1回目の改良値がシンソソン則で求めたことと同じになっている。

定積分 $\int_0^1 \sqrt{x} \sin \pi x dx$ を刻み巾 h の台形則で計算した結果を $T(h)$ とする。[12], [13], [14] より

$$T(h) = \int_0^1 \sqrt{x} \sin \pi x dx + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^{2.5} + \tau_3 h^4 + \tau_4 h^{4.5} + \dots$$

刻み巾の列として $h_i = 1/2^{i+1}$ を使った。

$T(h_0) = 0.35355$	33905			
		0.43892	64056	
$T(h_1) = 0.41825$	81581		0.43718	91562
		0.43765	53604	0.43735
$T(h_2) = 0.43280$	60583		0.43734	38167
		0.43739	88904	0.43735
$T(h_3) = 0.43262$	06824		0.43735	18357
		0.43736	01539	
$T(h_4) = 0.43708$	27860			

true value: 0.43735 23193

同様に $T(h) = \int_0^1 \frac{\sin \pi x}{\sqrt{x}} dx + \tau_1 h^{1.5} + \tau_2 h^2 + \tau_3 h^{3.5} + \tau_4 h^4 + \dots$

$T(h_0) = 0.70710$	67811			
		1.02287	01284	
$T(h_1) = 0.91123$	09264		1.00908	66814
		1.01253	25432	1.00971
$T(h_2) = 0.97671$	70131		1.00966	33321
		1.01038	06349	1.00970
$T(h_3) = 0.99847$	87472		1.00970	55712
		1.00987	43371	
$T(h_4) = 1.00584$	53877			

true value: 1.00970 91882

第2章 補外法の常微分方程式への応用

常微分方程式の初期値問題

$$y'_i = f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \quad i=1, \dots, n \quad (2.1)$$

を数値的に解くのに差分法が使われるが、その種類はオイラー法、中点則、ルンゲ・クッタ法、予測子・修正子法など、いろいろある。これらの刻み巾 h に関する漸近展開式はそれぞれ次のようになっている。

$$\text{オイラー法: } T(h, x) = y(x) + a_1(x)h + a_2(x)h^2 + a_3(x)h^3 + \dots$$

$$\text{中点則: } T(h, x) = y(x) + b_1(x)h^2 + b_2(x)h^4 + b_3(x)h^6 + \dots$$

$$\text{ルンゲ・クッタ法: } T(h, x) = y(x) + c_1(x)h^4 + c_2(x)h^5 + c_3(x)h^6 + \dots$$

Adams-Moulton-Bashforth 法:

$$T(h, x) = y(x) + d_1(x)h^6 + d_2(x)h^7 + d_3(x)h^8 + \dots$$

(2.2)

したがって、前章で述べた補外法の適用が容易に可能である。しかし、この差分法のうちで最も効率が良いものは中点則であるが、中点則を使うには初期値以外に、次の点における値もわかっていなければならぬ。そこで中点則を改良してこの欠点をなくしたものが、以下に述べる改良中点則である。ここでは、もっぱら、この方法に補外法を適用して理論を展開する。一方補外法を使うにも、全区間を中点で求めた結果に対して、行うのではなく、全区間をいくつかに分け、そ

の小区間内で中点則によって得られた値に補外法を適用し、精度の高い解を求め、この値を次の区間の初期値としながら積分を進めて行けばよい。

Richardson型補外法では打切誤差は(1.15)や(1.16)のようになるから刻み巾 h_j の数を多くすれば、誤差は任意に小さくすることができる。誤差を所望のところまで小さくするために使った刻み巾 h_j の個数はその区間内における函数 $y(x)$ の解析的な滑らかさの指標になっている。この情報を使って次の区間の中を決める、いわゆる自動区間巾調節を行うことができこれによって

$$y' = x \cdot y \quad y(0) = 1 \quad (2.3)$$

$$y' = \frac{y}{1-x} \quad y(0) = 1 \quad (2.4)$$

などの初期値問題でも、少しの心配もなく解くことができる。

ええ、不安定な差分法である中点則に補外法を適用することによって次のような利点が得られる。

1. 任意の精度が得られ、これを求める計算回数も他の方法より極めて少ない。
2. 初期値以外の情報が全く必要としないことなどからプログラムが簡単になる。
3. 解が安定であり(2.3)(2.4)などの問題も自動区間巾

調節を行えば全く安定な解が得られる。

§ 2.1 改良中点則

初期値問題(2.1)を簡単のため、次のようにベクトル表現する。

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ x_0, y_0 = y(x) \end{cases} \quad x: \text{スカラー} \quad y: \text{ベクトル} \quad (2.5)$$

これを数値的に解く差分法を次のように定義する。

$$x = x_0 + l h$$

$$x_{i+1} = x_i + h \quad i = 0, 1, \dots, l-1$$

$$\eta(x_1, h) = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0)$$

$$\eta(x_{i+1}, h) = \eta(x_{i-1}, h) + 2h f(x_i, \eta(x_i, h)) \quad i = 1, 2, \dots, l-1$$

$$S(h, x) = \frac{1}{2} [\eta(x_l, h) + \eta(x_{l-1}, h) + h f(x_l, \eta(x_l, h))] \quad (2.6)$$

この $S(h, x)$ を刻み巾 $h \neq 0$ で求めた改良中点則の値とする。

(2.6) からわかるように最初と最後に改良を加えてある。

実際に、補外法を適用する時には、 $S(h, x)$ をそのまま使うのではなく

$$T(h, x) = S\left(\frac{h}{2}, x\right) \quad (2.7)$$

を使用する。これは改良中点則において、1区間の刻み数が最低2でなければならず、一方、補外法で使用する h_j の列

$\{h_0, h_0/2, h_0/3, h_0/4, h_0/6, \dots\}$ の h_0 として, 1 区間の全巾を使うから, その時, 矛盾が起きないように形式的に定めた。
この改良中点則の漸近展開式は H.J. Stetter [7] によれば, 次の形を有する。

$$T(h, x) = y(x) + \gamma_1(x)h^2 + \gamma_2(x)h^4 + \gamma_3(x)h^6 + \dots \quad (2.8)$$

したがって, 前章の補外公式 (1.4) が使え, $\gamma=2$ となる。

次に数値例によって他の方法と比較してみよう。なお A は (2.5) の右辺の計算回数を示す。

$$y' = -y, \quad y(0) = 1$$

x	Runge-Kutta $h=10^{-2}$		Adams-Moulton* Bashforth $h=2 \cdot 10^{-2}$		改良中点則の補外法			
	A	E_{rel}	A	E_{rel}	多項式 $h_0=0.5$	A	E_{rel}	有理式** $h_0=0.5$
0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	2000	$2.6 \cdot 10^{-10}$	500	$2.1 \cdot 10^{-11}$	490	$2.2 \cdot 10^{-11}$	330	$4.0 \cdot 10^{-11}$
10	4000	$5.2 \cdot 10^{-8}$	1000	$1.7 \cdot 10^{-10}$	980	$9.7 \cdot 10^{-11}$	660	$8.2 \cdot 10^{-11}$
15	6000	$2.1 \cdot 10^{-5}$	1500	$3.0 \cdot 10^{-10}$	1470	$1.5 \cdot 10^{-10}$	990	$1.2 \cdot 10^{-10}$
20	8000	$1.6 \cdot 10^{-3}$	2000	$3.4 \cdot 10^{-9}$	1960	$2.1 \cdot 10^{-10}$	1320	$1.6 \cdot 10^{-10}$

E_{rel} は相対誤差である。

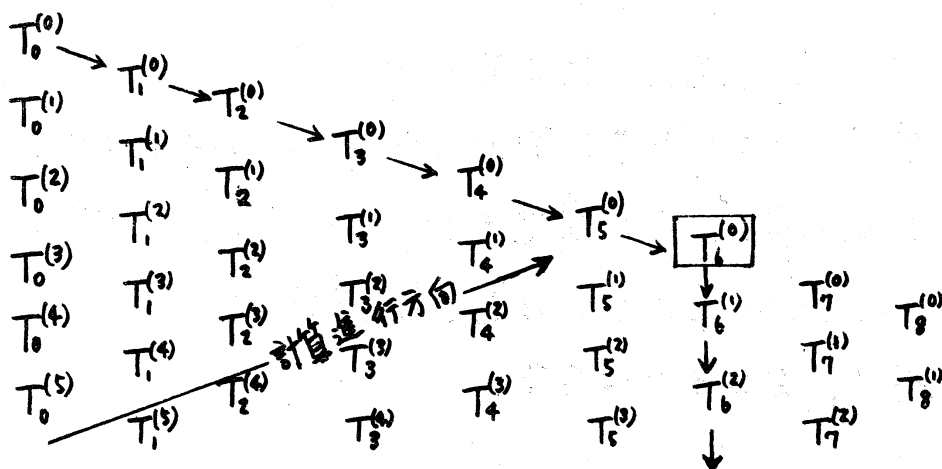
* この方法では最初の 6 点における値を必要とするが, ここでは正しい値を使った。

** 漸近展開式(0.1)を近似するのに, 多項式(1.1)の代りに有理式を使って補外公式を作る。

§ 2.2 自動区間巾調節

次の2つの理由から, 補外法の近似の次数を余り高くすることは無意味である。その1つは, 丸め誤差のためであり, $T_n^{(i)}$ の各要素を求めるのに(1.4), (1.5)を使うので, n を大きくすればする程この公式による丸め誤差が大きくなる。

しかし, 数値実験から失われる桁は, 次数を10($n=10$)に取った場合に最後の1桁か2桁であるから, 2倍精度計算をすればこの危険を防ぐことができる。近似の次数をある大きさに限るもう1つの理由は, 無意味な情報を取り除くことにある。定積分や微分方程式を分割法(差分法)でその解を求める場合, 刻み巾 h はもとの函数のテーラー展開級数の収束半径よりも小さくなければ(0.1)の漸近展開式が成り立たないから補外法も適用することができない。今, h_0 が収束半径よ



りも大きかったとすると $T_k^{(0)}$, $k=1, 2, \dots$ の行す列は全く意味がなくなる。誤差の理論から言えば, $T_k^{(0)}$ の列は一番近似の高いものになっているが, いつまでもこれを使うことができない。そこで, 前ページの図のように $k=6$ として計算の進行を止める線を引いて置けば自動的に間違っただ情報が落とされて行く。一方, このように近似の次数を限定することは, 正しい情報を捨てることにもなっている。今, 所望の結果を得るのに $T_6^{(0)}$ が必要であった場合, 刻み巾 h_0 で計算された $T_6^{(0)}$ と刻み巾 h_1 で計算された $T_6^{(0)}$ が使われなかったことになる。たとえ, $T_6^{(0)}$ と $T_1^{(0)}$ が意味のある情報であったとしても。このような無駄をなくするために補外法を適用する区間巾を調節してやればよい。上のように $T_6^{(0)}$ と $T_1^{(0)}$ を使われなかったのは区間巾が大きすぎたのである。また逆に $T_k^{(0)}$ の $k < 6$ で求める精度が得られたということは, この区間内では $T(k)$ の打ち切り誤差が小さいということになるから区間巾をもっと大きくしてもよかったわけである。以上のことから

「 $T_6^{(0)}$ で求める精度を出す 」

ことが望ましいが, ある区間でこのことが実現されなかった場合, 次の区間でこれが実現するように区間巾を調節すればよい。この方針に基づいて自動区間巾調節を行うと, その調節の規則は, 次の3つになる。

1. ある区間で所望の精度を得るのに $T_6^{(i)}$ $i \geq 1$ まで計算する必要があった場合、次の区間巾を $\bar{h}_0$ として $T_6^{(i)}$ で計算を終らせるには

$$\bar{h}_0 = h_0 \cdot 0.9 \cdot (0.7)^i \quad (2.9)$$

とすればよい。ただし、 h_0 は現在の区間巾であり $\{h_i\} \{\bar{h}_i\}$ として $\{1, 1/2, 1/3, 1/4, 1/6, 1/8, 1/12, \dots\}$ を使う。

2. ある区間で $T_6^{(i)}$ $h_0 < \epsilon$ で求める精度が得られた場合、次の区間巾を大きくしても良いわけであるが、急に大きくすることは危険である。前の理論からすれば、 h_0 が小さければ小さい程 $\bar{h}_0$ を大きくしてもよいが、ここでは一様に

$$\bar{h}_0 = 1.5 \cdot h_0 \quad (2.10)$$

とした。

3. ある区間で、微分方程式 (2.5) の解が解析的でない場合、(0.1) の漸近展開式がない。例えば、

$y = \frac{x}{x-1}$ で, $x=1$ を中に含む区間では, いくら刻み巾を小さくしても, 漸近展開式は正しくない。この時, $T_6^{(i)}$ の i をいくら増しても収束しないから $T_6^{(10)}$ でも, まだ, 求める精度が得られなければ, 現在の区間を半分に縮めて最初から計算をやり直す。

§ 2.3 数値例

$$y' = \frac{2-y}{10-x} \quad y(0) = 0.01$$

真の解: $y = \frac{1}{(x-10)^2}$ 局所打ち切り誤差: 10^{-12}

A は右辺の計算回数を示す。

step	x	interval	y(x)	relative error	A local	total
1	0.2	0.2	1.04E-2	2.50E-16	21	21
2	0.5	0.3	1.11E-2	6.26E-16	21	42
3	0.95	0.45	1.22E-2	1.20E-15	33	75
4	1.625	0.675	1.42E-2	1.58E-15	33	108
5	2.6375	1.0125	1.84E-2	2.25E-15	49	157
6	4.1562	1.5187	2.92E-2	2.78E-15	73	230
7	6.4343	2.2781	7.86E-2	1.05E-14	105	335
8	8.4846	2.0503	4.35E-1	3.10E-14	217	552
9	9.1489	0.6643	1.38E 0	3.24E-14	153	705
10	9.5077	0.3587	4.12E 0	3.50E-14	153	858
11	9.7014	0.1937	1.12E 1	4.35E-14	105	963
12	9.7886	0.0871	2.23E 1	4.57E-14	224	1187
13	9.8539	0.0653	4.69E 1	4.75E-14	225	1412
14	9.9128	0.0588	1.31E 2	6.00E-14	105	1517
15	9.9393	0.0265	2.71E 2	6.39E-14	224	1741
16	9.9591	0.0198	5.99E 2	5.97E -14	225	1966
17	9.9770	0.0178	1.89E 3	6.02E-14	153	2119
18	9.9866	0.0096	5.62E 3	4.12E-14	153	2272
19	9.9918	0.0052	1.51E 4	5.55E-14	105	2377
20	9.9942	0.0023	2.99E 4	4.39E-14	224	2601
21	9.9959	0.0017	6.19E 4	6.58E-15	224	2825
22	9.9973	0.0013	1.37E 5	5.32E-14	225	3050
23	9.9984	0.0011	4.38E 5	1.34E-13	153	3203
24	9.9991	0.0006	1.32E 6	1.40E-13	153	3356
25	9.9994	0.0003	3.66E 6	3.39E-13	105	3461
26	9.9996	0.0001	7.42E 6	1.37E-12	224	3685
27	9.9997	0.0001	1.59E 7	2.46E-12	225	3910
28	9.9998	0.0001	4.76E 7	3.30E-12	153	4063
29	9.99991	0.00005	1.2E 8	6.22E-12	105	4168
30	9.99994	0.00002	2.55E 8	8.94E-12	273	4441

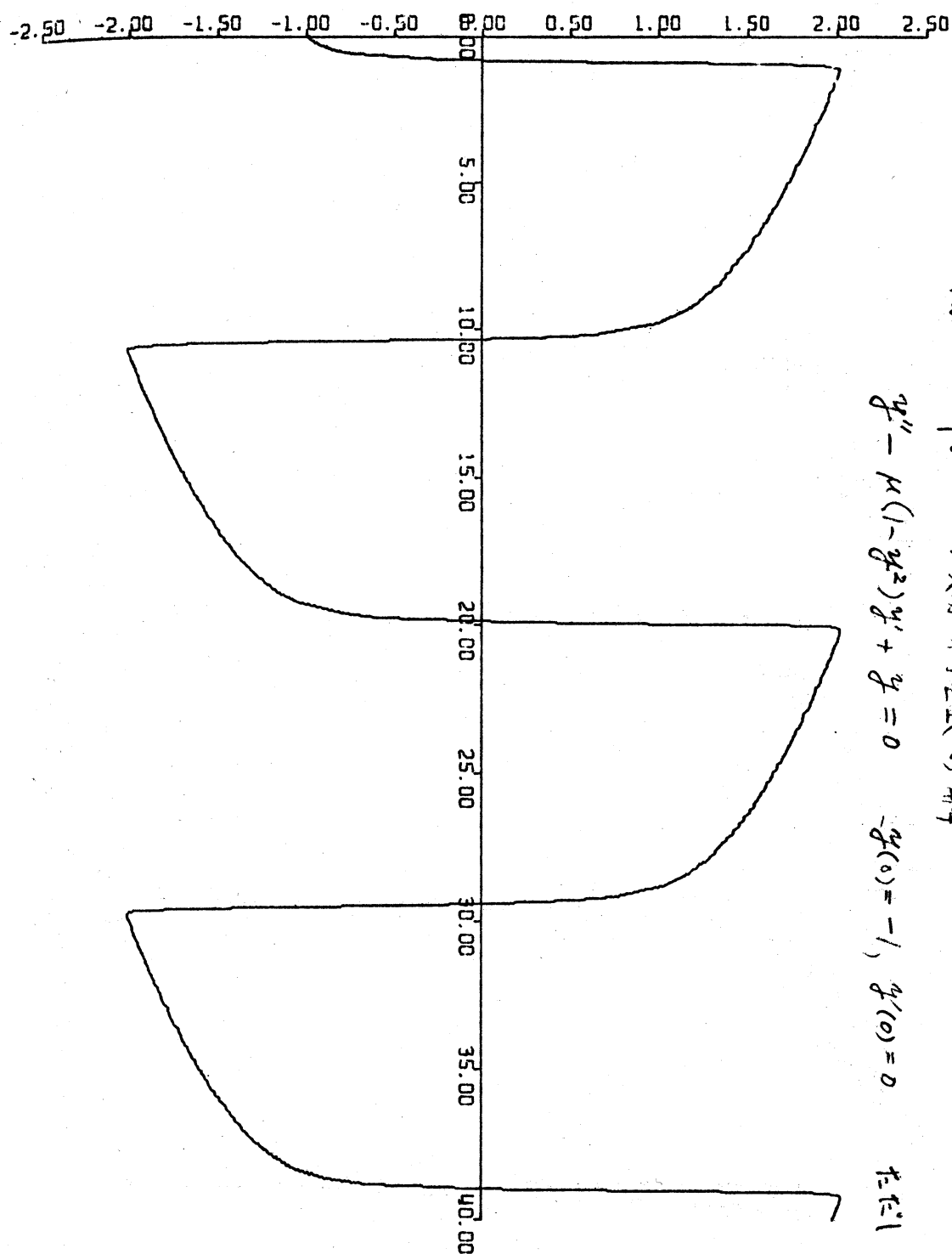
$$y' = -x \cdot y \quad y(0) = 10.0$$

真の解: $y = 10 \exp(0.5x^2)$ 局所打ち切り誤差: 10^{-6}

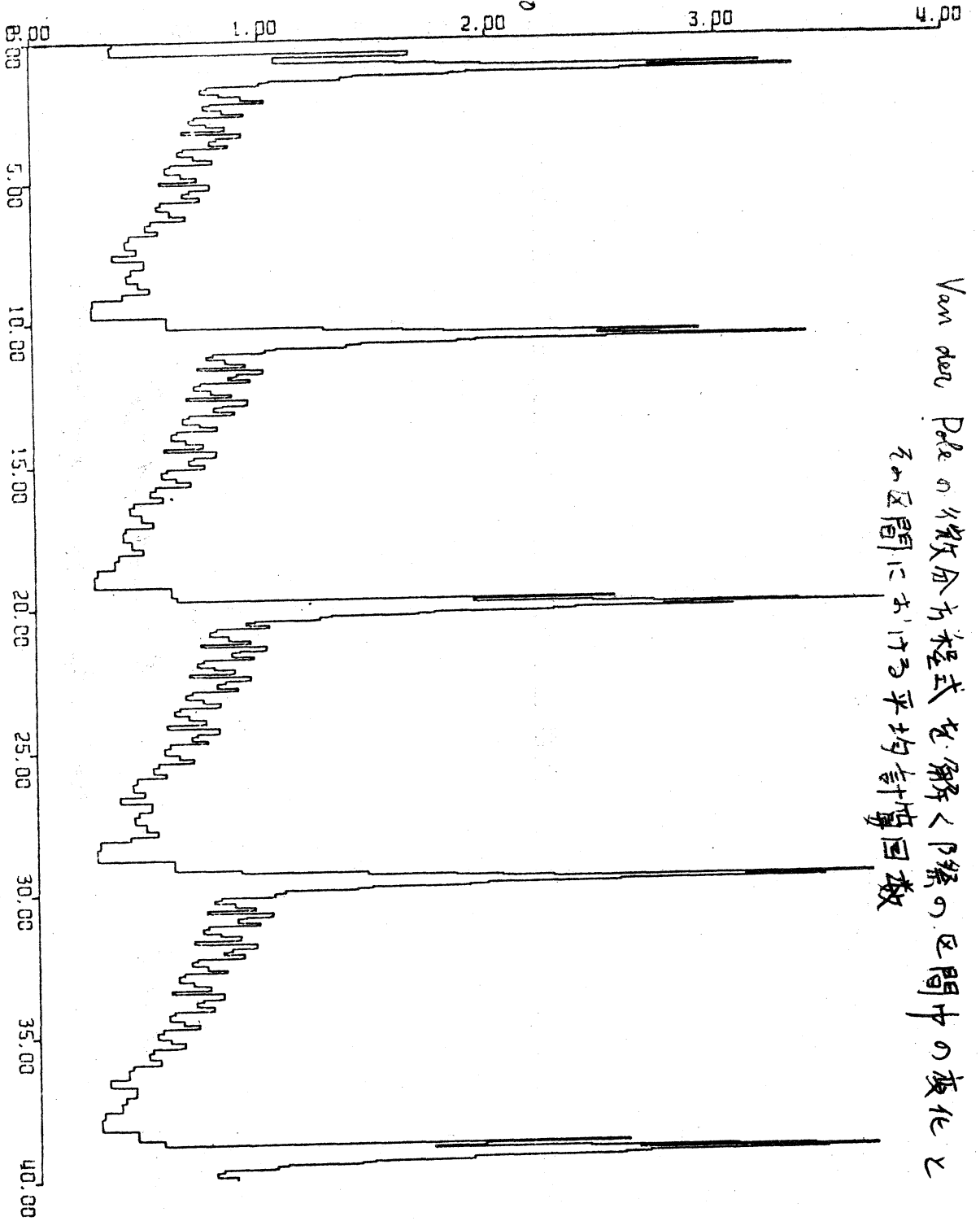
step	x	interval	y(x)		relative error	local	A total
1	0.2	0.2	9.80E 0	0	1.90E-13	21	21
2	0.5	0.3	8.82E 0	0	2.84E-11	21	42
3	0.95	0.43	6.36E 0	0	3.40E-11	33	75
4	1.625	0.675	2.67E 0	0	4.56E-11	49	124
5	2.6375	1.0125	3.06E -1	-1	3.04E -9	73	197
6	3.3968	0.7593	3.12E -2	-2	2.41E -9	224	421
7	4.5359	1.1390	3.40E -4	-4	1.93E -9	217	638
8	4.9050	0.3690	5.96E -5	-5	1.67E -9	49	687
9	5.4585	0.5535	3.38E -6	-6	1.51E -9	105	792
10	5.9568	0.4982	1.97E -7	-7	1.44E -9	105	897
11	6.4052	0.4484	1.23E -8	-8	1.41E -9	105	1002
12	6.8087	0.4035	8.57E-10	-10	1.52E -9	73	1075
13	7.4141	0.6053	1.15E-11	-11	7.69E-10	153	1228
14	7.7410	0.3268	9.72E-13	-13	9.44E-10	73	1301
15	8.2313	0.4903	1.93E-14	-14	9.56E-10	153	1454
16	8.4961	0.2647	2.11E-15	-15	9.84E-10	73	1523
17	8.8932	0.3971	6.69E-17	-17	1.85E -9	105	1632
18	9.2507	0.3574	2.61E-18	-18	2.14E -9	105	1737
19	9.5724	0.3217	1.26E-19	-19	2.23E -9	105	1842
20	9.8619	0.2895	7.59E-21	-21	2.25E -9	105	1947
21	10.1225	0.2605	5.62E-22	-22	3.14E -9	73	2020

Van der Pol の微分方程式の解

$$y'' - \mu(1 - y^2)y' + y = 0 \quad y(0) = -1, \quad y'(0) = 0 \quad t \in [1, \mu = 10.0]$$



計算回数
X 1000



Van der Pol の微分方程式を解く際の区間中の変化とその区間における平均計算回数

1. R. Bulirsch und J. Stoer:
Fehlerabschätzungen und Extrapolation mit rationalen
Funktionen bei Verfahren Richardson-Typus.
Numer. Math., 6, 413-427 (1964).
2. R. Bulirsch:
Bemerkungen zur Romberg-Integration.
Numer. Math., 6, 6-16 (1964).
3. H. Rutishauser:
Ausdehnung des Rombergschen Prinzips.
Numer. Math., 5, 48-54 (1963).
4. J. Stoer:
Über zwei Algorithmen zur Interpolation mit rationalen
Funktionen.
Numer. Math., 3, 285-304 (1964).
5. R. Bulirsch and J. Stoer:
Asymptotic upper and lower bounds for results of
extrapolation methods.
Numer. Math., 8, 93-104 (1966).
6. William B. Gragg:
On extrapolation algorithms for ordinary initial value
problems.
J. SIAM Numer. Anal., Ser. B, 2, No. 3. 384-403 (1965)
7. Hans J. Stteter:
Asymptotic expansion for the error of discretization
algorithms for non-linear functional equations.
Numer. Math., 7, 18-31 (1965).
8. R. Bulirsch and J. Stoer:
Numerical treatment of ordinary differential equations
by extrapolation methods.
Numer. Math., 8, 1-13 (1966).
9. Peter Hofmann:
Asymptotic expansion of the discretization errors of
boundary value problems of the Laplace equation
in rectangular domains.
Numer. Math., 8, 1-13 (1966).
10. H. B. Phillips and N. Wiener:
Nets and the Dirichlet problem.
J. Math. Phys., 2, 105-124 (1923).

11. P. C. Waterman, J. M. Yos and R. J. Abodeely:
Numerical integration of non-analytic functions.
J. Math. Phys., 43, 45-60 (1964).
12. Israer Navot:
The Euler-Maclaurin functional for functions with
a complex singularity near the range of integration.
J. SIAM Numer. Anal., Ser. B, 2, No.2, 259-264 (1965).
13. Israel Navot:
An expansion of the Euler-Maclaurin summation formula
to functions with a branch singularity.
J. Math. and Phys., 40, 271-276 (1961).
14. Israel Navot:
A further extension of the Euler-Maclaurin summation
fomula.
Ibid., 41, 337-345 (1962).
15. P. Henrici:
Discrete variable methods for ordinary differential
equations.
Wiley, New York (1962).