システム数理 IV 第 4 回

牧野淳一郎

1998 年 5 月 10 日

1　陰的ルンゲ・クッタ公式の続き

ええと、先週には、次はガウス型公式の話をするといったが、他との関係もあるので数値積分の基礎的な話をもう少しやってからそっちにいこう。

1.1　数値積分に関する話の続き

ニュートン・コーツ型の公式の一般形についてはすでに説明したが、あれでは具体的なことが良くわからないと思うので例によって次数が低いものを構成してみる。

$$y = f(x) \tag{1}$$

を区間 $[x_0, x1]$（これは、すでに適当に分割したあとの狭い区間であると思って欲しい）で数値的に積分するのに、例えば関数を 1 度だけ計算するとすれば、以下のようにいろいろなものが考えられる

$$\begin{aligned} hf(x_0) &\quad \text{左端で関数を計算} \\ hf(x_1) &\quad \text{右端で関数を計算} \\ hf((x_0+x_1)/2) &\quad \text{中点で関数を計算} \end{aligned} \tag{2}$$

これらは、それぞれ、その区間で関数の値が定数であると近似して、その定数を積分したというふうに解釈できる。もちろん、中点以外の任意の点をとることも考えられる。

計算精度という観点からは、中点をとることには非常に特別な性質がある。つまり、この場合だけ局所誤差が $O(h^3)$ になるのである。これは、テイラー展開の 1 次の項が積分すると消えることから容易に示すことができる。というわけでこれには名前がついていて、中点公式という。

さて、それでは、2 度計算していいとすればどうであろうか？普通に考えつくのは先週も書いた台形公式である。つまり、関数を

$$f_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}(x - x_0) \tag{3}$$

で近似して、それを積分して求まる

$$s_i = \frac{h[f(x_i)+f(x_{i+1})]}{2} \tag{4}$$

台形公式の局所誤差は $O(h^3)$ であり、中点公式と同じである。 2 点も使って、 1 点しか使わない中点公式と同じでは意味がないと思う人もいるかもしれないが、実はそうでもない。 1 区間だけを考えるとたしかに台形公式は 2 点使うが、ある区間の左端はもちろんその左の区間の右端なので、関数の値は同じだからである。つまり、全体を n 個の区間に分けた時、中点公式では n 回関数を計算するが、台形公式ではそれより 1 多い $n+1$ 回計算するだけである。

区間の端ではない、一般的な位置に点をとるとすればどうであろうか？以下、面倒なので区間 $[-1,1]$ で C^∞ 級関数

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}}{k!} x^k \tag{5}$$

の積分をするということにする (適当な変数変換をすればいつでもこう置き換えられる)。

積分した結果は

$$S = 2 \sum_{k=0,2,4,\ldots} \frac{f^{(k)}}{(k+1)!} \tag{6}$$

となって、テイラー展開の偶数項しか現れないことに注意して欲しい。

2 点の x 座標を α と β としたとき、一般的には数値積分の近似式が

$$S' = w_\alpha f(\alpha) + w_\beta f(\beta) \tag{7}$$

の形になる。これで、上の積分を近似するわけだが、 0 次の項が消えるために $w_\alpha + w_\beta = 2$, また奇数次の項が出てこないために $w_\alpha = w_\beta$ かつ $\beta = -\alpha$ である必要があることはすぐにわかるであろう。

というわけで $w_\alpha = w_\beta = 1$ と決まってしまったので、あと出来ることは α の値を決めることだけである。式 7を書き直すと

$$S' = f^{(2)}\alpha^2 + \frac{f^{(4)}}{12}\alpha^4 + \ldots \tag{8}$$

となるので、

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}} \tag{9}$$

とすれば、 $f^{(3)}$ までの項を一致させられるということがわかる。

台形公式は $\alpha = 1$ に相当し、 f' までしか消えていないので、ずいぶん精度が上がっていることがわかるであろう。そのかわり、区間の端の点の再利用が出来ないので、中点公式に比べて計算量が 2 倍になっているということに注意しておく。

もうちょっと頑張って 3 点にしてみよう。等間隔に点をとるなら両端と中点であり、このときは 2 次曲線で近似して局所誤差は 3 次となる。これはいうまでもなくシンプソンの公式である。

不等間隔の時何が実現できるかだが、ここでは具体的に形を書かない。 2 点の場合と同様な考察から、区間の中点を 1 つ、両側に 1 点づつとると、こんどは $f^{(5)}$ までの項を一致させられるということがわかる。

ここまでの話だと、

- 両端を含む n 点の等間隔補間で積分公式を作ると、 $n-1$ 次の多項式近似になって局所誤差は n 次
- 不等間隔で積分公式を作ると、なんだかよくわからないが $2n$ 次

となるような気がする。等間隔の場合はまあいいとして、不等間隔の場合にそううまくいくのであろう

1.2　ガウス型公式の次数

前回の資料の最後に書いたように、ガウス型 (あるいは、ガウス・ルジャンドル型) 積分公式は、ルジャンドル多項式の零点を点にとるものである。ルジャンドル多項式は有限区間 $[-1,1]$ で与えられる直交関数系である。その k 番目の項 P_k は k 次多項式であり以下の性質を持つ。

$$\int_{-1}^{1} P_k(x)P_l(x) = \delta_{kl}\frac{2}{2k+1} \tag{10}$$

定義はいろいろあるが、

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \tag{11}$$

と書かれることが多い。

P_n の零点とは、 $P_n(x) = 0$ の解のことである。 n 次ルジャンドル多項式の場合実区間 $[-1,1]$ に n 個必ず零点がある。これを以下 $x_1, x_2, ...x_n$ とする。

さて、以下でガウス型公式の次数について考える。 n 点使った時に $2n$ 次になる、いいかえれば $2n-1$ 次までの多項式については厳密な値を与えるということが予想されるので、これを示すという方針で考えていく。

任意の $2n-1$ 次多項式 $F_{2n-1}(x)$ に対して、 P_n の全ての零点で値が一致するような $n-1$ 次多項式 $L_{n-1}(x)$ を構成することができる。これを使うと、

$$F_{2n-1} = P_n q_{n-1} + L_{n-1} \tag{12}$$

と書ける。ここで、 q_{n-1} は $n-1$ 次の多項式である。これを区間 $[-1,1]$ で積分すると、もちろん

$$\int_{-1}^{1} F_{2n-1}dx = \int_{-1}^{1} P_n q_{n-1}dx + \int_{-1}^{1} L_{n-1}dx \tag{13}$$

であるが、右辺の第一項の q_{n-1} は $n-1$ 次多項式であり、 n 次ルジャンドル多項式 P_n は $n-1$ 次以下の任意の多項式と直交するので、この積分は 0 になる。つまり、

$$\int_{-1}^{1} F_{2n-1}dx = \int_{-1}^{1} L_{n-1}dx \tag{14}$$

となるわけである。というわけで F の積分を計算するには L の積分を求めればいい。ところが、 L は $n-1$ 次なので、 n 点での値が決まれば一意に決まり、積分出来てしまう。

結局、 P_n の零点での値を使えば、 F_{2n-1} の積分が計算できたことになる。

さらに厳密な話としては、 $2n-1$ 次よりも高次の項がある関数を近似して積分したときにどのような誤差項が入ってくるかという議論が必要になるが、これは省略する。

一般に、特異点を持たないような性質のよい関数の時には、ガウス型積分公式は非常に強力な方法であるといえる。

なお、一般の次数の場合、ガウス型公式は

$$S = \sum_{k=1}^{n} W_k f(x_k) \tag{15}$$

の形をとる。これらの定数の値については適当な参考書を見ること

1.3　微分方程式への積分公式の適用

さて、ここまで数値積分の話をしたわけだが、微分方程式の数値解法と数値積分はもちろん非常に良く似たものである。が、大きな違いは、数値積分では被積分関数が

$$y = f(x) \tag{16}$$

と、独立変数の陽な関数として与えられていたのに対し、微分方程式では

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \tag{17}$$

と積分された結果自体に被積分関数がよっていることである。このために、話がすこし複雑になる。

例えば、もっとも簡単な中点公式の場合を考えてみよう。数値積分の場合には、単に

$$S = hf((x_0 + x + 1)/2) \tag{18}$$

であった。微分方程式の場合、問題は $(t_0 + t_1)/2$ での x の値を我々はまだ知らないということである。

この困難は、数値積分が近似多項式の積分として与えられたということを思い出せば一応解決できる。中点公式の場合、数値積分ではこれは f を $f((x_0 + x + 1)/2)$ で近似するということに相当した。同様なアイディアを微分方程式に適用すれば、微分方程式の場合、 f を定数で近似し、その結果解である x を一次式で近似する、つまり

$$\hat{x}(t) = x_0 + f(\hat{x}(t_0 + h/2), t_0 + h/2)(t - t_0) \tag{19}$$

という近似をする。これから、問題の中点での値を $x_{1/2}$ と書くと

$$x_{1/2} = x_0 + f(x_{1/2}, t_0 + h/2)h/2 \tag{20}$$

と書けるわけで、これは $x_{1/2}$ に対する代数方程式になっている。これを解けば数値解も求まるわけである。

一般には、 n 次のルジャンドル多項式から導かれる公式では、 f の $n-1$ 次近似多項式を構成することになる。これを前節と同様 L_{n-1} とし、零点を t_k とすれば、 t_k での「解」 x_k が

$$x_k = x_0 + \int_{t_s}^{t_k} L_{n-1}(t)dt, \quad k = 1, 2, ...n \tag{21}$$

がなり立ち、さらに

$$L_{n-1}(t_k) = f(x_k, t_k), \quad k = 1, 2, ...n \tag{22}$$

がなり立つように x_k と L を決め、それを積分して t_e での解が求まるということになる。

と書くと非常に大変そうだが、係数をあらかじめ計算しておけば上の手続きが陰的ルンゲクッタ公式として表現できる。これで、例えば 4 段で 8 次の公式が実現出来るわけである。

1.4　代数方程式の扱い

さて、上のようなわけで陰的公式というものが構成できるということはわかったが、これを実際に使う

代数方程式といっても、ここで扱うものはほとんど必ず

$$x = f(x) \tag{23}$$

の形、すなわち、ある関数の不動点を求めるという形になっている。この時は、以下のような反復を繰り返すことによって解くという方法が考えられる。

$$x_{new} = f(x_{old}) \tag{24}$$

これを直接代入法という。

これは容易にプログラム出来て、実際に広く使われる方法である。が、理論的にはいろいろ怪しい。つまり、

- 収束するかどうか
- 収束の速さ

というような観点からみて使いものになるのかどうかというのは明らかではない。

しかし、陰的ルンゲクッタから出てくる方程式の場合、これで結構うまくいくことが多い。それがなぜかということを示す前に、一般に直接代入の収束の速さを調べておこう。

方程式 (23) の解が x であるとき、 直接代入法での古い近似解と新しい近似解それぞれの真の解との差は

$$\begin{aligned} e_{old} &= x_{old} - x \\ e_{new} &= x_{new} - x \end{aligned} \tag{25}$$

$$\tag{26}$$

となる。下の方を変形し、 f を展開すれば

$$e_{new} = f(x_{old}) - f(x) \sim \frac{df}{dx}(x_{old} - x) \tag{27}$$

となる。従って、

- 収束するためには $|df/dx| < 1$ であればよい。
- $|df/dx|$ が小さいほど速く収束する。

ということがわかる。

話を陰的ルンゲクッタに戻そう。

また、もっとも簡単な中点公式 (陰的中点公式) で考えてみる。解くべき式は、 $\xi = h/2$ として

$$x = x_0 + f(x, t_0 + \xi)\xi \tag{28}$$

と書ける。例によってリプシッツ連続条件

$$|f(t,x) - f(t,x')| \leq L|x - x'| \tag{29}$$

がなり立つとしてよいので、中点公式 28の右辺の x による微分が $L\xi$ で押えられるということがわかる。つまり、刻み幅を $1/L$ に比べて小さくとればいいということになる。

なお、これでは済まないような場合もある。これについては後の「硬い」方程式のところで扱うことに

1.5　ガウス型以外の陰的公式

陰的ガウス公式は、段数に対して理論上可能な最大次数を達成する、ある意味で「最良」の公式である。が、実用上はいろいろ不便な点もある。例えば、

- 最小の段数で最高の次数（精度）を達成しているので、係数に自由度がなくいわゆる「埋め込み型」の公式が構成できない。
- 端の点を使わないので、前のステップでの計算結果の再利用が出来ない。
- 完全陰的法なので、計算が大変である

などの問題がある。それぞれの点について改良された沢山の方法が知られている。特に最初の 2 つについては $\mathrm{Lobatto\text{-}IIIa/b}$ ペアという方法が最近提案され、広く使われるようになりつつある。半陰的法については別に述べる。

2　次回

これでひとまずルンゲクッタは終りで、つぎは線形多段階法。