システム数理IV 第5回

牧野淳一郎

1998 年 5 月 18 日

1 線形多段階法

これまでの数回で、広く使われている公式の一つであるルンゲ・クッタ型公式についてその原理と実例を簡単に説明した。今日は、同様に広く使われている公式である線形多段階法についてその原理をまとめる。

1.1 線形多段階法の考え方

ルンゲ・クッタ法は「一段階法」と呼ばれるクラスに属する。一段階法とは、ここでは、t_i における解 x_i がわかっていれば、それだけから次の時刻 t_{i+1}での解 x_{i+1} が求まるものである。

これに対し、t_i での情報だけでなく、その前のステップでの情報 (導関数の値や解そのものの値) を記憶しておいて、それを使おうというのが多段階法である。これにより、余計な計算をしないで計算精度をあげようというわけである。

1.2 アダムス法

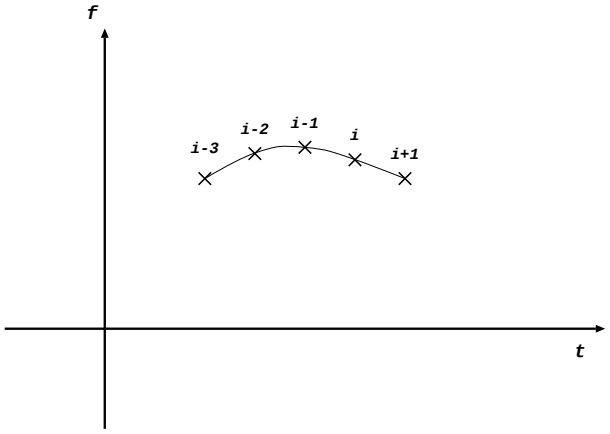
線形多段階法のなかでもっとも広く使われているのは、アダムス法といわれるクラスの公式である。この原理は、いくつかのステップでの導関数 (微分方程式の右辺) f の値を憶えておいて、それを通る補間多項式を作り、それを積分して解を求めようというものである。

上の図に概念を示す。ここでは、前回の積分公式と同様にラグランジュ補間 (ニュートン補間) をして多項式を作る。で、その作った多項式を積分する。例えば、点 i から $i+1$ まで積分するのに、点 $i-p$ から i までの関数値を使うとすれば、p 次の多項式で

$$P(t_j) = f_j = f(x_j, t_j) \quad (i-p \le j \le i) \tag{1}$$

を満たすものを作る。で、$i+1$ での解 x_{i+1}は

$$x_{i+1} = x_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} P(t)dt \tag{2}$$



で与えられる。刻み h が定数であるとすれば、p を決めれば上の式を

$$x_{i+1} = x_i + h \sum_{l=0}^{p} a_{pj} f_{i-l} \tag{3}$$

の形に書き直せる。

簡単な例として、$p = 1$ の場合を考えてみよう。この時、補間多項式は一次であって

$$P(t) = f_i - \frac{f_{i-1} - f_i}{h}(t - t_i) \tag{4}$$

となって、これを積分すれば、結局

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(3f_i - f_{i-1}) \tag{5}$$

となる。

一般に、アダムス法では任意段数の公式が構成でき、その次数は段数に等しいことがわかっている。これは、ルンゲ・クッタなどに比べればはるかによい性質をもっているということでもある。

1.3 出発公式

アダムス法はいくらでも高次の公式が作れ、計算量もあまり多くないということがわかっているが、必ずしも広く使われているというわけでもない。その理由はいろいろあるが、一つは、

「どうやって計算を始めるべきかよくわからない」

ということである。つまり、初期値問題としてはもちろん t_0 における x_0 しか知らないのに、多段階法ではその前の時刻での解が必要になるわけである。これに対する対応策はいくつかあるが、時間刻み一定の場合には、基本的にはルンゲ・クッタなどの別な方法で解を求めておくというやりかたが普通である。

というわけで結局プログラムを書く手間が 2 倍以上になるというのが、多段階法の実用上の問題である。

1.4 陰的アダムス法

さて、前に述べた公式では、補間多項式を陽的に求めた。すなわち、時刻 i とそれより以前の値だけを使っていた。これに対し、陰的な補間多項式、つまり t_{i+1}での関数の値を使った公式というものも考えられる。刻み h が定数であるとすれば、p を決めれば前と同様に

$$x_{i+1} = x_i + h \sum_{l=-1}^{p-1} b_{pj} f_{i-l} \tag{6}$$

の形に書けることになる。また手をぬいて $p = 1$ の場合を考えれば、これは単に台形公式

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \tag{7}$$

となる。

陰的公式の場合、例によってどうやって代数方程式を解くかが問題になる。通常の方法は、

- 初期値として同じ次数の陽的アダムス法の解を持ちいる。
- そのあとは直接代入法で反復する。

というものである。ただし、特に線形多段階法の場合、反復を繰り返さないことが多い。反復回数を 1 回とか 2 回に固定してしまうのである。以下で、なぜそれでいいか、また、そもそもなぜ陰的公式を使うかということを考えてみる。

なお、このやり方を、予測子 ・修正子法と呼ぶ。線形多段階法はほとんどこの形で使われるため、線形多段階法のことをさして予測子 ・修正子法と呼ぶ人もいる。

1.5 誤差

線形多段階法の誤差の問題を考えるには、補間多項式の主要誤差が陽的公式と陰的公式でどう違うかということを考える必要がある。線形多段階法の、特に大域誤差の理論は難しいので、以下局所誤差について考える。局所誤差を考える時に、x_{i+1} 以外の値には数値誤差を含まないとして考える。この扱いでとりあえず大体のことはわかる。

一般に、厳密解は独立変数 t によるテイラー展開を持つとしてよいので、p 次の補間多項式で近似したときの主な誤差は $p + 1$ 次の成分から出てくる。

補間多項式自体の誤差については、以下のような定理が知られている。証明はそれほど難しくないので、やってみること。

定理 :$(p+1)$ 個の標本点 $x_0, ...x_p$ での、関数 $f(x)$ の値 $f_i = f(x_i)$ を標本値とする最小次数補間多項式 $P(x)$ は以下の性質を持つ :

任意の x に対して、 $x_0, ...x_p$ および x を含む最小の閉区間にξ が存在し、

$$f(x) - P(x) = \frac{\omega(x)}{(p+1)!} f^{(p+1)}(\xi) \tag{8}$$

ここで、

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_p) \tag{9}$$

である。

ここで、 $f^{(p+1)}(\xi)$ が問題の区間で一定であると思えば、誤差は$\omega(x)$ を積分したもので与えられる。

h での等間隔補間の場合について、 $[x_{p-1}, x_p]$ での積分誤差 (陰的アダムス公式の誤差) と $[x_{p-1}, x_p]$ での誤差 (陽的アダムス公式の誤差) の係数を、いくつかの p の場合について下の表にまとめておく (実際の誤差は $A_p h^{p+2} f^{(p+1)}$と書ける)。

表 1: アダムス法の誤差

公式	$p=1$	$p=2$	$p=3$
陽的	$5/12$	$3/8$	$251/720$
陰的	$-1/12$	$-1/24$	$-19/720$

すぐにわかるように、陰的公式の誤差は圧倒的に小さい。このために、同じ刻み幅であれば陰的公式のほうがそれだけ精度がいいことになる。

が、初期推定として陽的公式を使った場合、精度という観点からは、一回だけ導関数を評価して直接代入したもの (Predict-Evaluate-Correct, PEC) 、あるいは反復をもう一回だけするもの $[\mathrm{P(EC)^2}]$ で十分であり、完全に収束させてもあまり意味がない。これは、精度の向上が、圧倒的とはいえせいぜい 1-2 桁であるからである。

つまり、反復を繰り返しても、陰的公式の値に近付くが別に真の解には近付かないのである。

1.6 ニュートン補間とアダムス公式の実用的導出

さて、補間公式の構成について、まえに説明したのはラグランジュ補間の公式をそのまま使う方法であ った。これはこれで別にいけないわけではないのだが、もう少しスマートな方法があるので、それを紹介しておく。

補間したい関数 $f(x)$ が、標本点 $(x_0, x_1, ...x_n)$ で、関数値 $(f_0, f_1, ...f_n)$ をとるとする。これを、以下のような形の多項式

$$P(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1)... + a_n(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) \tag{10}$$

という形に書くことを考える。これを、 a_pまでをとったものは $x_0 \cdots x_p$ までを通る最低次補間多項式になっているように構成することにする。で、低い次数から順に作っていく。付け加える新しい項は、それまでに使った点すべてで 0 になるので、新しい点で標本と一致するように a_i の値を決めればいい。

まず、$n = 0$ については、 $a_0 = f_0$ とすればいいのは明らかであろう。次に $n = 1$ であるが、

$$P(x_1) = f_0 + a_1(x_1 - x_0) = f_1 \tag{11}$$

から

$$a_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} \tag{12}$$

となる。同様に、 a_2を求めると、

$$a_2 = \frac{f[0,2] - f[0,1]}{x_2 - x_1} \tag{13}$$

ただし、

$$f[i,j] = \frac{f_i - f_j}{x_i - x_j} \tag{14}$$

である。

さて、段々式が繁雑になるが、もうちょっとの辛抱である。上の形は、

$$a_2 = \frac{f[2,1] - f[1,0]}{x_2 - x_0} \tag{15}$$

というふうにも書き直せることに注意しよう。これは、$(1,2)$ を通る補間式の一次の係数と、 $(0,1)$ を通る補間式の係数の差みたいなものになっている。

ここで、天下りに、 k 階差商 (divided difference) $D_{k,l} \quad (0 \leq l \leq n-k)$ というものを導入する。これは以下のように定義される。

$$D_{0,l} = f_l \quad (0 \leq l \leq n) \tag{16}$$

$$D_{k,l} = \frac{D_{k-1,l} - D_{k-1,l+1}}{x_l - x_{l+k}} \tag{17}$$

実は、このように定義された D が、

$$D_{k,0} = a_k \tag{18}$$

を満たす、求める係数であることを示すことが出来る。

証明には、$D_{k,l}$が、 x_lから始まる $k+1$ 点を通る補間多項式の係数であるということを用いる。定義により

$$D_{k,0} = \frac{D_{k-1,0} - D_{k-1,1}}{x_0 - x_k} \tag{19}$$

であるの。ここで、帰納法を使って証明することにすると、

$$P_{k-1}(x) = D_{0,0} + D_{1,0}(x - x_0) + \cdots + D_{k-1,0}(x - x_0)\cdots(x - x_{k-2}) \tag{20}$$

は、 $x_0, \cdots x_{k-1}$ を通る $k-1$ 次補間多項式であり、また、

$$P'_{k-1}(x) = D_{0,1} + D_{1,1}(x - x_1) + \cdots + D_{k-1,1}(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1}) \tag{21}$$

は、 $x_1, \cdots x_k$ を通る $k-1$ 次補間多項式であるとしてよい。この 2 つの線形結合によって、$x_0, \cdots x_k$ を通る補間多項式を作るには、

$$P_k = \frac{(x - x_0)P'_{k-1} - (x - x_k)P_k}{x_k - x_0} \tag{22}$$

とすればよい。ここで、$D_{k-1,0}$と $D_{k-1,1}$は、それぞれ P_{k-1}と P'_{k-1} の最高次の係数であることに注意すると、 P_kの最高次の係数 (これは a_kに等しい) は、$D_{k,0}$で与えられることがわかる。

さて、

$$Q_k(x) = D_{0,0} + D_{1,0}(x - x_0) + \cdots + D_{k,0}(x - x_0)\cdots(x - x_{k-1}) \tag{23}$$

という多項式を考えると、これは $x_0, \cdots x_{k-1}$ で P_kと一致し、さらに最高次の係数も一致しているので、結局 $Q_k = P_k$ であることがわかる。つまり、 $Q_k(x)$ が求める補間多項式であり、 $D_{k,0}$がその最高次の係数ということになる。

1.7 時間刻みを変える時

さて、なぜ上のような面倒な話をしたかというと、アダムス法において時間刻みを変える方法の概念を説明するためである。

時間刻み一定であれば、すでに述べたようにあらかじめ係数を求めておいて、前の関数値の線形結合で変化を計算できる。しかし、刻みを変えたい場合にはそうはいかない。この時の、もっとも一般的で強力な方法は、上の差商を使って補間多項式を計算し、さらにそれを現在の時間刻みで積分した形の係数を求める、すなわち、毎回積分公式を作り直すという方法である。差商の形でデータをとっておくと、上の漸化式を使って D を順番に更新することができる。これは Krogh 型の公式と呼ばれ、かなり広い範囲の問題について、もっとも効率が良い公式であることがわかっている。(特別に高い精度を要求する場合は、次回に述べる外挿法のほうがよいこともある)

上の方法で時間刻みを変えられるなら、出発公式は不必要になることに注意しておく。つまり、最初は 1 次の予測子、2 次の修正子から出発して、ステップ毎に次数をあげていけばいい。ステップサイズは次数を考慮して決めておく。

1.8 計算中の誤差評価

ステップを変えるのは上のような理由で大変だが、そのかわり誤差評価はルンゲ・クッタに比べて容易である。予測子・修正子型の公式の場合、この 2 つの間の差がかなり良い誤差の推定値 (もちろん大きめだが) になっているので、これを使ってやればいい。

1.9 ルンゲ・クッタとの比較

必要な精度を決めた時、ほとんどどんな場合でも、線形多段階法のほうがルンゲ・クッタ法よりも少ない計算量で答を得ることが出来るということが実験的にも、また誤差の係数をつかった理論的な解析からもわかっている。

ルンゲ・クッタ公式が優れているのは、基本的にはその使いやすさにおいてのみであるといってよい。が、まあ、使いやすさというのは実際的になかなか重要であることも確かである。

2 次回

次回は、現在知られている積分公式のなかではもっとも高い精度を実現できる補外法についてまとめる。それで公式の紹介はおしまいにして、その次からは微分方程式の解と数値解の安定性の問題に入る。