システム数理IV 第4回

牧野淳一郎

1999 年 5 月 10 日

1 陰的公式

陰的公式については、以下の強力な結果が知られている ：

「s 段陰的公式の到達可能次数は $2s$ である。」

これのため、いくらでも次数の高い公式をつくることができる。陽的な場合には 8 次よりも高次のものはほとんど知られていないのとは対照的である。

これは単なる存在証明ではなく、実際に $2s$ 次の公式が構築されている。これは実はユニークに決まり、「陰的ガウス公式」と呼ばれるものがそれである。以下、陰的ガウス公式と、それに関係したいくつかの公式についてその導出の原理と計算法を簡単に説明しよう。

陰的ガウス公式以外にも陰的な公式はいろいろあるが、それらについては後で触れる。

1.1 ガウス型数値積分

ガウス型公式について述べる前に、まずそれと非常に関係の深い数値積分公式について説明しておく。

数値積分とは、一変数であれば

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

と、微分方程式ではなく単に関数として与えられたものに対して、ある固定区間 (t_s, t_e) での定積分を数値的に求めることである。一般に、解析的に積分ができないようなものを計算しないといけないことはよくあるので、そういうものが必要になることは多い。

数値積分法として、すでに皆さんが知っているであろうものは、たとえば

- 台形公式
- シンプソン公式
- ロンバーグ加速

といったものであろう (知らない人は、、、まあ、以下で簡単に説明します)。なお、ロンバーグ加速については後でもう少し詳しく説明する。

例えば台形公式は、等間隔に区間を分けたとして、ある部分区間での積分を

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

と、両端を結んだ台形の面積で近似するということに相当する。これに対して、もっとましな方法というのを理論的に考えられないであろうか ？

一つの方法は、区間の中の点をいくつかとって、それらを通る補間多項式を作り、それを積分することである。中の点を等間隔にとったものをニュートン ・コーツ型の公式という。 シンプソン公式はこのやりかたのもっとも簡単な場合に相当する。

一般に補間するための点を p 個とった時、 $p-1$ 次の多項式を持ってくればそのすべての点を通るように出来る。ニュートン ・コーツ型の公式はそのような最小次数多項式を使うものである。例えばもとの関数が実際に $p-1$ 次以下の多項式ならば、厳密に正しいものが求まる。

この補間の原理を説明しておく。例えば補間に使う点が $(x_1, ...x_i, ...x_n)$ とあるとすれば、以下のような多項式を考える

$$p_i(t) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)...(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})...(x_i-x_n)}{(x_i-x_1)(x_i-x_2)...(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})...(x_i-x_n)} \tag{3}$$

この多項式は、 $x = x_i$ で 1、それ以外のすべての x_j で 0 になる。従って、補間多項式は

$$f_n(x) = \sum p_i(x) y_i \tag{4}$$

とすればいい。

数値積分に使うには、あらかじめ $p_i(t)$ の積分を求めておいて、それと y_iを掛けて和をとるだけである。

等間隔でなく点をとることで精度をあげることはできないかというのが、ここでの問題である。

ここで、一般的に、不等間隔に点をとってなんとかするという観点から考えることもできるが、なかなか難しいので答のほうから考えていく。

答は、 ゙ガウス ・ルジャンドルの多項式の零点を点にとると、次数を最大にできる」というものである。ガウス ・ルジャンドルの多項式は、有限区間で帰納的に定義できる直交関数系である。つまり、最初の項を定数として、k 番目の項は k 次多項式であって、それまでの項すべてと直交するようにとるのである。つまり、関数基底 $(1, x, x^2, ...x^k..)$ にグラム ・シュミットの直交化を適用したものがガウス ・ルジャンドルの多項式である。

1.2 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。

$$y = f(x) \tag{5}$$

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

$$\begin{aligned} hf(x_0) &\quad \text{左端で関数を計算} \\ hf(x_1) &\quad \text{右端で関数を計算} \\ hf((x_0+x_1)/2) &\quad \text{中点で関数を計算} \end{aligned} \tag{6}$$

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

$$f_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}(x-x_0) \tag{7}$$

で近似して、それを積分して求まる

$$s_i = \frac{h[f(x_i)+f(x_{i+1})]}{2} \tag{8}$$

を積分の値として使うわけである。

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

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}}{k!}x^k \tag{9}$$

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

$$S = 2\sum_{k=0,2,4,\ldots} \frac{f^{(k)}}{(k+1)!} \tag{10}$$

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

$$S' = w_\alpha f(\alpha) + w_\beta f(\beta) \tag{11}$$

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 11 を書き直すと

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

となるので、

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}} \tag{13}$$

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か ？

1.3 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。

$$\int_{-1}^{1} P_k(x)P_l(x) = \delta_{kl}\frac{2}{2k+1} \tag{14}$$

定義はいろいろあるが、

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \tag{15}$$

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、

$$F_{2n-1} = P_n q_{n-1} + L_{n-1} \tag{16}$$

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

$$\int_{-1}^{1} F_{2n-1} dx = \int_{-1}^{1} P_n q_{n-1} dx + \int_{-1}^{1} L_{n-1} dx \tag{17}$$

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、

$$\int_{-1}^{1} F_{2n-1} dx = \int_{-1}^{1} L_{n-1} dx \tag{18}$$

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

$$S = \sum_{k=1}^{n} W_k f(x_k) \tag{19}$$

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

1.4 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

$$y = f(x) \tag{20}$$

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

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \tag{21}$$

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

$$S = hf((x_0 + x + 1)/2) \tag{22}$$

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

$$\hat{x}(t) = x_0 + f(\hat{x}(t_0+h/2), t_0+h/2)(t-t_0) \tag{23}$$

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

$$x_{1/2} = x_0 + f(x_{1/2}, t_0+h/2)h/2 \tag{24}$$

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

$$x_k = x_0 + \int_{t_s}^{t_k} L_{n-1}(t)dt, \quad k = 1, 2, ...n \tag{25}$$

がなり立ち、さらに

$$L_{n-1}(t_k) = f(x_k, t_k), \quad k = 1, 2, ...n \tag{26}$$

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。

1.5 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、これを実際に使うには、 x_k に対する代数方程式をとかないといけない。この解き方について簡単に説明しておこう。

代数方程式といっても、ここで扱うものはほとんど必ず

$$x = f(x) \tag{27}$$

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。

$$x_{new} = f(x_{old}) \tag{28}$$

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 (27) 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

$$\begin{aligned} e_{old} &= x_{old} - x \\ e_{new} &= x_{new} - x \end{aligned} \tag{29}$$

$$\tag{30}$$

となる。下の方を変形し、f を展開すれば

$$e_{new} = f(x_{old}) - f(x) \sim \frac{df}{dx}(x_{old} - x) \tag{31}$$

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

$$x = x_0 + f(x, t_0 + \xi)\xi \tag{32}$$

と書ける。例によってリプシッツ連続条件

$$|f(t, x) - f(t, x')| \leq L|x - x'| \tag{33}$$

がなり立つとしてよいので、中点公式 32 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する。

1.6 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。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。