5.3 加速法の適用

前進差分の場合　前進差分による 1 階微分の近似では，誤差の主要項が $O(h)$ であることがわかっている。このことを利用して，前進差分の結果からより精度の高い微分の近似値を求めることができる。

前進差分による $f'(x)$ の近似値を x と h の関数と見て $f_1(x,h)$ と書くと，

$$
\begin{aligned}
f_1(x,h) &= f'(x) + \frac{1}{2}hf''(x) + O(h^2) &\quad (5.14)\\
f_1(x,2h) &= f'(x) + \frac{1}{2}\cdot 2hf''(x) + O(h^2) &\quad (5.15)
\end{aligned}
$$

したがって，

$$f_1(x,h) - \frac{1}{2}f_1(x,2h) = \left(1-\frac{1}{2}\right)f'(x) + O(h^2) \quad (5.16)$$

であるから，

$$\frac{f_1(x,h) - \frac{1}{2}f_1(x,2h)}{1-\frac{1}{2}} = f'(x) + O(h^2) \quad (5.17)$$

となり，２つの前進差分の値から，より精度の高い微分の近似値を計算できる。

中心差分の場合　同様に，中心差分による $f'(x)$ の近似値を x と h の関数と見て $f_2(x,h)$ と書くと，

$$
\begin{aligned}
f_2(x,h) &= f'(x) + \frac{1}{3!}h^2f^{(3)}(x) + O(h^4) &\quad (5.18)\\
f_2(x,2h) &= f'(x) + \frac{1}{3!}\cdot (2h)^2f^{(3)}(x) + O(h^4) &\quad (5.19)
\end{aligned}
$$

となる（h^3 の項は現れないことに注意）。したがって，

$$f_2(x,h) - \frac{1}{4}f_2(x,2h) = \left(1-\frac{1}{4}\right)f'(x) + O(h^4) \quad (5.20)$$

であり，

$$\frac{f_2(x,h) - \frac{1}{4}f_2(x,2h)}{1-\frac{1}{4}} = f'(x) + O(h^4) \quad (5.21)$$

となる。この場合も，２つの中心差分の値から，より精度の高い微分の値を計算できることがわかる。

一般の場合の加速法　一般に，x と h の関数 $f_1(x,h)$ が

$$f_1(x,h) = c_0(x) + c_1(x)h^n + O(h^{n+1}) \quad (5.22)$$

と書け，$f_1(x,0) = c_0(x)$ が求めたい値であるとする。このとき，

$$f_1(x,2h) = c_0(x) + c_1(x)(2h)^n + O((2h)^{n+1}) \quad (5.23)$$

を計算し，これに 2^{-n} をかけて $f_1(x,h)$ から引くと，h^n の項が消えて

$$\frac{f_1(x,h)-f_1(x,2h)}{1-2^{-n}}=c_0(x)+O(h^{n+1}) \tag{5.24}$$

となり，これは $h\to 0$ のときに $f_1(x,h)$ より速く $c_0(x)$ に近づく。このようにして収束を速める方法を**リチャードソン加速法**と呼ぶ。リチャードソン加速法は，数値微分法に限らず，様々な数値計算法に対して適用できる。

数値積分の加速　積分 $I=\int_a^b f(x)\,dx$ を刻み幅 h の台形公式により計算した値を I_h とすると，(4.9) 式，(4.11) 式の証明と同様にして，

$$I_h=I+O(h^2) \tag{5.25}$$

であることが示せる。したがって，台形公式に対してリチャードソン加速を適用することにより，より高精度な数値積分公式が作れる。これについてはレポート課題を参照のこと。

第6章　常微分方程式の解法

本章では常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(0) = y_0, \quad a \le x \le b \tag{6.1}$$

の数値解法を学ぶ。まず，もっとも基本的な解法であるオイラー法について学び，誤差評価を行った後，より高精度な解法であるホイン法を学ぶ。最後に，これらの解法を高階常微分方程式，連立常微分方程式へ拡張する方法を紹介する。

6.1　オイラー法

原理　オイラー法では区間 $[a, b]$ を n 等分して $h = \frac{b-a}{n}$ とし，$x_i = a + ih$（$i = 0, 1, \ldots, n$）における解を順々に求めていく。

いま，$x = x_i$ で正しい解 $y(x_i)$ が得られているとして，常微分方程式の両辺を x_i から x_{i+1} まで積分すると，

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))\, dx \tag{6.2}$$

したがって，右辺の積分 $I = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))\, dx$ を数値積分で近似すれば，$y(x_i)$ から $y(x_{i+1})$ を求めることができる。

ここで，I の計算にたとえば台形公式を使うとすると，$f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))$ の値が必要であるが，この式は未知の量 $y(x_{i+1})$ の関数となっているので，直接には求められない。そこで，より単純な近似として，$x = x_i$ での値のみを使って $I \simeq hf(x_i, y(x_i))$ と近似する。これにより，$y(x_{i+1})$ の近似値 y_{i+1} は次のように計算できる。

$$y_{i+1} = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) \tag{6.3}$$

これを**オイラー法**と呼ぶ。

局所離散化誤差　$f(x, y(x))$ を $x = x_i$ の周りで展開すると，$x_i \le x \le x_{i+1}$ において

$$\begin{aligned} f(x, y(x)) &= f(x_i, y(x_i)) + \frac{\partial f}{\partial x}(x - x_i) + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx}(x - x_i) + O((x - x_i)^2) \\ &= f(x_i, y(x_i)) + O(h) \end{aligned} \tag{6.4}$$

これを (6.2) 式に代入し，(6.9) 式との差を作ると，

$$y_{i+1} - y(x_{i+1}) = O(h^2) \tag{6.5}$$

左辺は，$x = x_i$ での正しい解から出発したとき，$x = x_{i+1}$ における数値解と真の解との差であり，**局所離散化誤差**と呼ばれる。オイラー法の局所離散化誤差は $O(h^2)$ である。

大域離散化誤差　実際にオイラー法を適用する場合には，$x = x_i$ での真の解はわからないため，$Y_0 = y_0$ から出発して，

$$Y_{i+1} = Y_i + hf(x_i, Y_i) \tag{6.6}$$

により近似解 $Y_1, Y_2, \ldots,$ を計算してゆく。このとき，Y_i と真の解 $y(x_i)$ との差を**大域離散化誤差**と呼ぶ。オイラー法の大域離散化誤差については，次の定理が成り立つことが知られている[1]。

定理　$f(x, y)$ がリプシッツ条件

$$|f(x, y) - f(x, z)| \le K|y - z| \quad （K：正の定数） \tag{6.7}$$

を満たせば，ある $C > 0$ に対して

$$\max_{1 \le i \le n} |Y_i - y(x_i)| \le Ch \tag{6.8}$$

が成り立つ。

したがって，オイラー法の大域離散化誤差は $O(h)$ である。

6.2　ホイン法

原理　(6.2) 式の積分 I を近似するに当たっては，$y(x_{i+1})$ の値がわからないため，台形公式を使うことはできなかった。しかし，まず $y(x_i)$ から出発してオイラー法を 1 ステップ実行して

$$\tilde{y}_{i+1} = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) \tag{6.9}$$

を求め，これを $y(x_{i+1})$ の代用として

$$I \simeq \frac{h}{2} \{f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1})\} \tag{6.10}$$

とすれば，台形公式で I を求めることが可能となる。この I を (6.2) 式に代入して $x = x_{i+1}$ での近似解を求める方法を**ホイン法**と呼ぶ。

[1] 山本哲朗：「数値解析入門」参照

局所離散化誤差 I の計算に真の解 $y(x_{i+1})$ を使った場合，台形公式による数値積分の誤差は (4.9) 式より

$$\frac{h}{2}\left\{f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))\right\} = I + O(h^3) \tag{6.11}$$

となる。ホイン法では，左辺の $\frac{h}{2}f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))$ を $\frac{h}{2}f(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1})$ で代用するから，ここでさらに $O(h^3)$ の誤差が生じる（(6.5) 式参照)。したがって，I の近似における誤差，すなわち局所離散化誤差は $O(h^3)$ となる。

大域離散化誤差 実際のホイン法では，$x = x_i$ における近似解 Y_i から出発して $x = x_{i+1}$ における近似解 Y_{i+1} を求める。このときの式は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\tilde{Y}_{i+1} &= Y_i + hf(x_i, Y_i) \\
\tilde{f}_{i+1} &= f(x_{i+1}, \tilde{Y}_{i+1}) \\
Y_{i+1} &= Y_i + \frac{h}{2}\left\{f(x_i, Y_i) + \tilde{f}_{i+1}\right\}
\end{aligned} \tag{6.12}$$

このとき，大域離散化誤差は $Y_i - y(x_i) = O(h^2)$ であることが知られている。

6.3 高階常微分方程式と連立常微分方程式

以上では 1 階常微分方程式の場合のみを考えたが，高階常微分方程式や連立常微分方程式の場合にも同様にしてオイラー法やホイン法を適用できる。

高階常微分方程式 まず高階方程式の例として 3 階の常微分方程式

$$\begin{aligned}
\frac{d^3y}{dx^3} &= f(x, y, y'y'') \\
y(x_0) &= y_0^1 \\
y'(x_0) &= y_0^2 \\
y''(x_0) &= y_0^3
\end{aligned} \tag{6.13}$$

を考える。ただし，本節では y の右肩の数字はべき乗ではなく添字とする。このとき，

$$y^1 = y, \quad y^2 = y', \quad y^3 = y'' \tag{6.14}$$

として新しい従属変数 y^1，y^2，y^3 を代入すると，方程式 (6.13) は次のような 3 元連立常微分方程式に書き直せる。

$$\begin{aligned}
\frac{dy^1}{dx} &= y^2 \\
\frac{dy^2}{dx} &= y^3 \\
\frac{dy^3}{dx} &= f(x, y^1, y^2, y^3) \\
y^1(x_0) &= y_0^1, \quad y^2(x_0) = y_0^2, \quad y^3(x_0) = y_0^3
\end{aligned} \tag{6.15}$$

一般の場合も同様にして，高階常微分方程式は連立常微分方程式に変換できる。したがって，ここでは後者の数値解法のみを考える。

連立常微分方程式　連立常微分方程式の一般形として，次の m 元連立常微分方程式を考える。

$$\begin{aligned} \frac{dy^1}{dx} &= f^1(x, y^1, y^2, \ldots, y^m) \\ \frac{dy^2}{dx} &= f^2(x, y^1, y^2, \ldots, y^m) \\ &\vdots \\ \frac{dy^m}{dx} &= f^m(x, y^1, y^2, \ldots, y^m) \end{aligned} \tag{6.16}$$

この連立常微分方程式に対し，オイラー法やホイン法の考え方はそのまま適用できる。たとえばオイラー法では，次のようにして $x = x_i$ での近似解から $x = x_{i+1}$ での近似解を求めればよい。

$$\begin{aligned} Y^1_{i+1} &= Y^1_i + hf^1(x, Y^1_i, Y^2_i, \ldots, Y^m_i) \\ Y^2_{i+1} &= Y^2_i + hf^2(x, Y^1_i, Y^2_i, \ldots, Y^m_i) \\ &\vdots \\ Y^m_{i+1} &= Y^m_i + hf^m(x, Y^1_i, Y^2_i, \ldots, Y^m_i) \end{aligned} \tag{6.17}$$

同様にしてホイン法を連立常微分方程式に対して拡張することは，レポート課題とする。