2X-5

不動点法の数値計算アルゴリズムについて

鈴木千里
富士通(株) 国際情報社会科学研究所

1.はじめに　非線形二点境界値問題

$$(1.1)\quad \begin{cases} y''(x)=f(x,y(x)), & -1\leq x\leq 1 \\ y(-1)=y(1)=0 \end{cases}$$

の複数個の近似解を得るための方法を先に提案した[1]．本予稿では，この方法の数値計算のためのアルゴリズムを提案し，その適用に際して必要な簡単なコメントを与える．

2.方法の適用　k+2 個の実数 x_i $(0\leq i\leq k+1)$ は

$$-1=x_0<x_1<\cdot\cdot\cdot<x_{k+1}=1$$

を満たす選点（k-選点と云う）とする．問題(1.1) への方法の適用は

$$(2.1)\quad \boxed{Y=S_kF(Y)+b_k}$$

のような非線形方程式を導く．ここで，F: f に依存する k次元ベクトル値関数，S_k : k次の係数行列，b_k : 境界条件に依存する定数ベクトル；

$$(2.2)\quad \begin{cases} Y=(y_1,y_2,\ldots,y_k),\ y_i\in R^1 \\ F(Y)=(f_1,f_2,\ldots,f_k),\quad f_i=f(x_i,y_i), \end{cases}$$

$$(2.3)\quad \begin{cases} S_k=(s_{ij}),\quad s_{ij}=s_i(x_j) \\ b_k=(b_i),\qquad b_i=s_0(x_i)\ f(-1,0) \\ \qquad\qquad\qquad +s_{k+1}(x_i)\ f(1,0) \end{cases}$$

ここで，$s_i(x)$ $(0\leq i\leq k+1)$ は

$$(2.4)\quad s_i(x)=\int_{-1}^{1}g(x,u)L_i(u)du,$$

として定義されるk+3 次多項式である．ただし，

$$(2.5)\quad g(x,u)=\begin{cases} \frac{1}{2}(x+1)(u-1) & \text{if } x\leq u \\ \frac{1}{2}(x-1)(u+1) & \text{if } x>u \end{cases}$$

$$(2.6)\quad L_i(u)=\frac{\pi_k(u)}{(u-x_i)\pi_k'(x_i)},\quad \pi_k(u)=\prod_{p=0}^{k+1}(u-x_p)$$

Yが方程式(2.1) の解 ⇒ Yの各成分は問題(1.1) の k- 選点上の近似解; $y_i \fallingdotseq y(x_i)$ $(1\leq i\leq k)$

☆ (2.3)式のS_kとb_kの構成が本稿の一つの目的である．

3.行列S_k とベクトルb_k の構成　次多項式 $s_i(x)$ $(0\leq i\leq k+1)$を導出して，S_k 行列の成分 $s_{ij}=s_i(x_j)$ とb_kの構成に必要な$s_0(x_i)$ と$s_{k+1}(x_i)$ を構成する．

$s_i(\pm 1)=0$は(2.4) 式から明らか．従って$s_i(x)$ は

$$(3.1)\quad s_i(x)=(x^2-1)\sum_{p=0}^{k+1}\alpha_{p,i}x^p\equiv(x^2-1)v_{k+2}(x)^T\alpha_i$$

のように展開することができる．ここで，

$$v_{k+2}(x)^T\equiv(1,x^1,x^2,\ldots,x^{k+1}),$$
$$\alpha_i{}^T\equiv(\alpha_{0,i},\alpha_{1,i},\ldots,\alpha_{k+1,i}).$$

一方，$s_i(x)$ の２次導関数に対して

$$(3.2)\quad s_i''(x)=L_i(x)$$

が成立する．これは直接計算することにより検証できる．いま，$L_i(x)$ の展開を

$$(3.3)\quad L_i(x)=\sum_{p=0}^{k+1}\beta_{p,i}\ x^p$$

とすれば，(3.1) を２回微分して(3.2) 式に代入して，そして(3.3) 式を用いることにより，$\alpha_{i,p}$ と$\beta_{i,p}$ に関係するつぎの漸化式を得る：(p=k-1, k-2, ..., 1, 0)

$$(3.4)\quad \alpha_{p,i}-\alpha_{p+2,i}=[(p+2)(p+1)\beta_{p,i}]^{-1}$$

そして p=k+1とk については

$$(3.5)\quad \begin{cases} \alpha_{k+1,i}=[(k+3)(p+2)\beta_{k+1,i}]^{-1} \\ \alpha_{k,i}=[(k+2)(p+1)\beta_{k,i}]^{-1} \end{cases}$$

漸化式は 0≦ i ≦k+1 についての k+2個ある．

一方$\beta_{p,i}$ (p=k+1,k,...,1,0) は，L_iの一つの性質 $L_i(x_j)=\delta_{ij}$ (0≦i, j≦k+1) を用いて (3.3)式を展開することにより次のように書くことができる：

$$(3.6)\quad I=V(x_0,x_1,\ldots,x_{k+1})^T\begin{bmatrix} \beta_{0,0} & \beta_{0,1} & \cdots & \beta_{0,k+1} \\ \beta_{0,1} & \ddots & & \beta_{1,k+1} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \beta_{k+1,0} & \cdots & \cdots & \beta_{k+1,k+1} \end{bmatrix}$$

ここで，I は k+2次の単位行列，$V(x_0,x_1,\ldots,x_{k+1})$は $V(x_0,x_1,\ldots,x_{k+1})=(v_{k+2}(x_0),v_{k+2}(x_1),\ldots,v_{k+2}(x_{k+1}))$ のように定義されている．従って

$$(3.7)\quad V(x_0,x_1,\ldots,x_{k+1})=\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ (x_0)^1 & (x_1)^1 & \cdots & (x_{k+1})^1 \\ \vdots & & & \vdots \\ (x_0)^{k+1} & (x_1)^{k+1} & \cdots & (x_{k+1})^{k+1} \end{bmatrix}$$

On Numerical Computational Argorithms for Solving Fixed Point Problems

Chisato SUZUKI
International Institute for Advanced Study of Social Information Science, FUJITSU, Ltd.

(3.7) 式はファンデルモンドの行列となることから，x_i が全て異なれば正則である．またその逆は知られている．一般に，$V(u_1,u_2,\ldots,u_{k+2})$ の逆は

(3.8) $\quad V^{-1}(u_1,u_2,\ldots,u_{k+2}) = u_i \ b_{ij}$

で与えられる［2］．ここで

(3.9) $$b_{ij}=\frac{(-1)^{k+2-j}\ \sigma^{i}_{k+2-j,\,k+1}}{\prod^{k+1}_{p=0,\ p\neq i}(x_i-x_p)}$$

$\sigma^{i}_{m,k+1}$ は$u_1,u_2,\ldots,u_{i-1},\ u_{i+1},\ldots,u_{k+2}$からの異なるm個の可能な全ての積の総和である．但し$\sigma^{i}_{0,k+1}=1$，$u_0=0$．しかし大きなkにおいては，(3.8)，(3.9) 式を用いて(β_{ij})を求めることは一般に得策ではない．実際 (3.9) 式における全ての$\sigma^{i}_{k+2-j,k+1}$の計算には約2^{k+2}回程の乗法演算を必要とする．これは例えばガウス・ジョルダン法により (3.6)式から直接(β_{ij})を得る手法(高々 $3k^3$回の演算)と比べても最悪であることが分かる．

いま (β_{ij})は既知と仮定し，

$$\beta_i^T=(\ \beta_{0,i}\quad \beta_{1,i}\ \cdot\cdot\ \beta_{k+1,i}\ )$$

と置く．そのとき (3.4)，(3.5)式から

$$\alpha_i^T=(\ \alpha_{0,i}\quad \alpha_{1,i}\ \cdot\cdot\ \alpha_{k+1,i}\ )$$

に対するつぎの方程式が得られる：

(3.10) $\quad U_{k+2}\,\alpha_i = C_{k+2}\ \beta_i$

ここで

$$U_{k+2}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\ & 1 & 0 & -1 & 0 & \ldots \\ & & \cdot & & & \\ & & & \cdot & & \\ & & & & 1 & 0\ -1 \\ & & & & & 1\ \ 0 \\ 0 & & & & & 1 \end{bmatrix}\quad C_{k+2}=\begin{bmatrix} 2^{-1} & & & & 0 \\ & 6^{-1} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & ((p+2)(p+1))^{-1} & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & ((k+2)(k+1))^{-1} \end{bmatrix}$$

(3.10)式のα_i の係数行列U_{k+2} の逆は

(3.11) $$U_{k+2}^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & .. \\ & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & .. \\ & & & : & : & : & : \\ & & & & & 1 & 0 \\ \mathbf{O} & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

となる．従って，(3.10)から次が得られる：

(3.12) $\quad \alpha_i = U_{k+2}^{-1} C_{k+2}\ \beta_i$

とのとき， (3.1)と(3.12)式から

(3.13) $\boxed{s_i(x)=(x^2-1)\,v_{k+2}(x)^T U_{k+2}^{-1} C_{k+2}\beta_i}$

($0 \leqq i \leqq k+1$)を得る．

(3.13)式を元にして，S_k と$s_0(x_i)$，$s_{k+1}(x_i)$ は

(3.14) $$\left[\begin{array}{c:c:c} s_0(x_1) & & s_{k+1}(x_1) \\ s_0(x_2) & & s_{k+1}(x_2) \\ \vdots & S_k & \vdots \\ s_0(x_k) & & s_{k+1}(x_k) \end{array}\right]$$

$$=W_k V(x_1,\ldots,x_k)^T U_{k+2}^{-1} C_{k+2}(\beta_0,\beta_1,\ldots,\beta_{k+1})$$

のような構造を持つ．ここで，$^{-T}$は逆の転置，そして

$$W_k=\mathrm{diag}((x_1^2-1),\ \ldots,(x_k^2-1)).$$

4. 非線形方程式の解法と選点計算　方程式(2.1) をニュートン法で解く．ニュートン法の適用は反復式

(4.1) $$Y^{(n+1)}=Y^{(n)}-(I-S_k D(Y^{(n)}))^{-1}[\,Y^{(n)}-S_k(Y^{(n)})-b_k$$

(n=0, 1, 2, ...) を導く．ここで，D はFのヤコビアンである．反復計算を実行するためには，出発値$Y^{(0)}$ 必要である．この出発値はm-選点(<k) 上での近似解を用いて構成する．Y^* をm-選点上の解とすれば，$Y^{(0)}$ は

(4.2) $$Y^{(0)} = W_k V(x_1,\ldots,x_k)^T U_{m+2}^{-1} C_{m+2} \times V(x_0,x_1,\ldots,x_{m+1})^{-1}\begin{bmatrix} f(-1,0) \\ \hdashline F(Y^*) \\ \hdashline f(1,0) \end{bmatrix}$$

で与えられる．これは k=mとする(3.13)式から簡単に導かれる．このとき，(4.1) 式から，方程式(1.2) を満たす解Yに漸近する列 {$Y^{(n)}$} が得られる．この展開はm-選点上の近似解ありきに，よって始まる．実際，最初の m=1に対しては上記の展開を実行することができない．

k=1 の(2.1) 式はスカラー方程式である．従って，既存の代数方程式の解法ルーチンが適用できる．この場合，方程式の根が複数個見つかれば，その個数だけ一般に近似解が得られる．また根が重複的なら，近似解の個数N_a と境界値問題の解の個数N_t との間に$N_a < N_t$ の関係を持つことがある．そのとき，k=2 の方程式 (1.2)を別途解析することを推奨する．

k-選点 {x_i } としてk+1 次のルジャンドル多項式の 1 次導関数 $P_{k+1}'(x)$ の零点を用いる．この零点の計算法は幾つか知られているが，本稿は文献２のアルゴリズムを推奨す程度に留める．

5.おわりに　本予稿では，文献１で提案された非線形２点境界値問題の複数個の解を得る手法に対する実際的なアルゴリズムを構成し，二三の適用上の注意を与えた．具体的な境界値問題に対する適用結果については文献１を参照して欲しい．

謝辞：日頃より御指導頂く当研究所北川敏男会長ならびに榎本肇所長に感謝致します．

参考文献

1)鈴木：不動点近似による非線形２点境界値の数値解法，情処学論誌，Vol.26，No.5，1985.

2)山下：電子計算機のための数値計算法Ⅲ，第12章 Gauss型数値積分公式，一松・宇野・山内編，培風館，1972.