

資料

異常問題の変換による数値解法*

平野 泰彦**

Abstract

The true solution of given problems are not always obtained by evaluation of regular numerical formulas. It is scarcely possible to evaluate such improper problems by means of improved stabilization.

The true solutions are obtained by using regular numerical formulas if abnormal problems are transformed normal ones. Suitable numerical methods on evaluation of abnormal problems are described for several examples, infinit integrals, ordinary differential equations and inverse matrix.

1. ま え が き

与えられた問題に通常の数値計算公式をそのまま適用しても、正解の得がたいことがある。このような異常問題に対して、異常性に耐える数値計算公式を適用することが考えられる。公式の安定性に関しては研究されているが、大きく改善することは困難で、特定の異常性に対しそれ用の公式が用いられることがある。このような問題に対し、発想を転換して異常問題を正常問題に変換することができれば、通常公式により容易に解を計算することができる。

異常問題の変換による数値解法として、数値積分、常微分方程式および逆行列を例にとり、その大要を述べる。

2. 収束のわるい数値積分

数値積分において、被積分関数が無限大となると、通常積分公式、例えば Simpson の公式を適用することは困難になり、解が存在するにもかかわらず求められない。与えられた問題の異常性を取り除くように、変数置換により被積分関数が変換できれば、通常公式を適用して解を得ることができる。例えば、定積分

$$I = \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx \quad (2)$$

の被積分関数は $x=0$ において無限大になる。いま、

* Numerical Methods Obtained by Transformation on Abnormal Problems, by Yasuhiko HIRANO (Yokosuka Electric Communication Laboratory, N. T. T.)

** 日本電信電話公社横須賀電気通信研究所応用プログラム研究室

$x=t^2$ により変数置換すると、

$$I = 2 \int_0^1 \cos t^2 dt \quad (2)$$

になり、この定積分は Simpson の公式により容易に計算することができる。

被積分関数が無限大にならない定積分において、数値積分を行うと意外に収束しないことがある。例えば、 $1/4$ 円の面積の計算において、

$$\int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx = \frac{\pi}{4} \quad (3)$$

に Simpson の公式を適用しても、分割数の倍々の増加に対し精度は $1/16$ ずつは向上しない。その理由は代数的特異点のためであって、 $x=1$ における 1 次導関数が無限大になり、また高次の導関数も無限大になる。この定積分は変数置換により容易に計算できる。

被積分関数が積分区間の端で無限大になるときは、無限区間積分に変換して計算できる。特殊な無限区間積分の計算には、Gauss-Laguerre 公式や Gauss-Hermite 公式がある。一般に、無限区間積分は台形公式により計算できるが、その収束を速め精度を向上するために変数置換が行われ、 $x = \sin ht$ や $x = \tan t$ などが用いられる。

つぎに、被積分関数が無限大にならないが、極めて大きな値になるために収束のわるい異常問題の例を示す。

$$I_1 = \int_0^\alpha \frac{\sin x \sinh x}{x + \beta} dx \quad (4)$$

$$I_2 = \int_0^\alpha \frac{\cos x \cosh x}{x + \beta} dx \quad (2)$$

$$I_3 = \int_0^\alpha \frac{\sin x \cosh x}{(x + \beta)^2} dx \quad (6)$$

$$I_4 = \int_0^\alpha \frac{\cos x \sinh x}{(x + \beta)^2} dx \quad (7)$$

ここに、 I_1 は異常ではないが比較参考のために示した。 β が非常に小さいとき、例えば $\beta = 0.0001$ であると、これらの被積分関数の値は $x=0$ 付近において非常に大きくなり、これらに Simpson の公式を適用して3けたの精度を得ようとすると、膨大な分割数をとらねばならない。被積分関数の分子はそれぞれ Fig. 1 に示す値をとり、 $\beta = 0.0001$ のときの被積分関数の値は $x=0$ の付近で Fig. 2 に示すようになる。 I_4 は I_3 にほぼ等しい値になり省略した。

上記の定積分においては、変数置換するよりも、 $x=0$ 付近において被積分関数の分子が零になるように分解法を適用すると都合よい。まず I_2 について、この関数は $x=0$ 付近で大きい値になるので、これを除くために分子から1を減算する。

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^\alpha \frac{\cos x \cosh x - 1}{x + \beta} dx + \int_0^\alpha \frac{dx}{x + \beta} \\ &= \int_0^\alpha \frac{\cos x \cosh x - 1}{x + \beta} dx + \log \frac{\alpha + \beta}{\beta} \end{aligned} \quad (8)$$

このように分解すれば、第1項の定積分は Simpson の

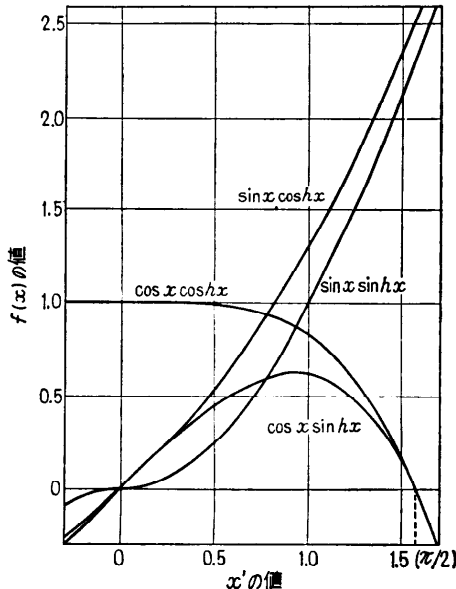


Fig. 1 The values for the numerators of the integrands

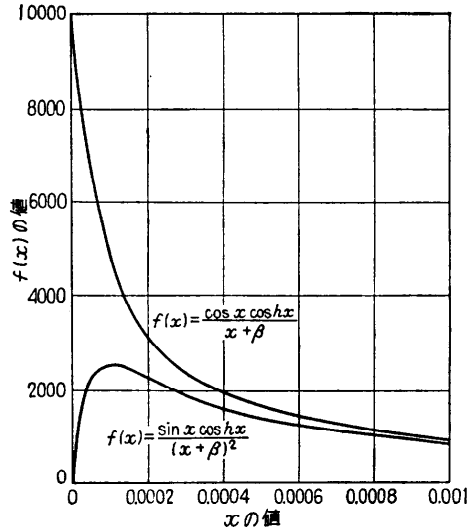


Fig. 2 The value near $n=0$ for the integrands ($\beta=0.0001$)

公式により容易に計算できる。

I_3 と I_4 の定積分についても、分子から x を引くことにより同様に計算することができる。

$$\begin{aligned} I_3 &= \int_0^\alpha \frac{\sin x \cosh x - x}{(x + \beta)^2} dx + \int_0^\alpha \frac{x}{(x + \beta)^2} dx \\ &= \int_0^\alpha \frac{\sin x \cosh x - x}{(x + \beta)^2} dx + \log \frac{\alpha + \beta}{\beta} - \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} I_4 &= \int_0^\alpha \frac{\cos x \sinh x - x}{(x + \beta)^2} dx + \int_0^\alpha \frac{x}{(x + \beta)^2} dx \\ &= \int_0^\alpha \frac{\cos x \sinh x - x}{(x + \beta)^2} dx + \log \frac{\alpha + \beta}{\beta} - \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \end{aligned} \quad (10)$$

上記の定積分を含む問題を種々の β について Simpson の公式を用いて計算したところ、計算時間は同一精度でそのまま計算したときの約 1/10 に減少した。その計算例を Table 1 (次頁参照) に示す。表では、分解法により4分割で得られた結果の精度は、そのままの4,096分割の結果よりもよい。

3. 常微分方程式における変数置換

解がある点で無限大になる常微分方程式では、そのままの形で数値計算公式を適用しても正しい解を求めることはできない。しかし、与えられた微分方程式を変数置換により変形すれば、解が容易に求められることがある。一例として、微分方程式

$$y' = 1 + x^2 y^2 \quad y(0) = 0 \quad (11)$$

の解はある点において $y = \infty$ になり、このままの形で数値計算公式を適用しても、その点の x の正確な値

Table 1 The computer results for infinite integral

$$\int_0^{\infty} \cos x \cos hx / (x + \beta) dx$$

分割数	原式より		分解法による	
	積分値	前回との差	積分値	前回との差
4	146.3760896		7.406939704	
8	74.94718532	-71.428	7.406937495	- .22097 × 10 ⁻⁸
16	32.57269253	-35.374	7.406937350	- .14483 × 10 ⁻⁸
32	22.21904128	-17.353	7.406937342	- .70576 × 10 ⁻⁸
64	13.86347100	-8.3555	7.406937343	.76033 × 10 ⁻⁸
128	9.984001762	-3.8794		
256	8.302772039	-1.6812		
512	7.659679271	-.64309		
1024	7.460092792	-.19958		
2048	7.414700433	-.45392 × 10 ⁻¹		
4096	7.407719576	-.69808 × 10 ⁻²		

$\alpha=1.04719755, \beta=0.6050257865 \times 10^{-3}$

は求め難い。いま、 $z=1/y$ とおくと $z(0)=\infty$ になるから、 $x=1.0$ までは式(11)により、それ以降は次式により計算することができ、 $x=1.455$ が求まる。

$$z' = -(x^2 + z^2) \quad z(1) = 1/y(1) \quad (12)$$

この常微分方程式の解は途中で変数置換による乗換えなしに求めることができる。

$$y = \tan z \quad (13)$$

とおくと、常微分方程式(11)は

$$z' = 1 + (x^2 - 1) \sin^2 z \quad z(0) = 0 \quad (14)$$

になり、この解は無限大にならない。上式の解 z は Runge-Kutta 法により計算され、式(13)から y の値が求まる。この計算結果は Fig. 3 に示すようになり、 $x=1.455$ 以上については初期値問題として意味がないが、ついでに示した。

上記微分方程式の計算には三角関数の計算を必要とし、つぎのように変数置換すればもっと有利である。

$$y = 0.25z / (1 - z) \quad (15)$$

より次式を得る。

$$z' = 4(1 - z) + 0.25x^2z^2 \quad z(0) = 0 \quad (16)$$

ここに、 $z = y / (0.25 + y)$ であって、0.25 は分母の値が零にならないように選んだ。この微分方程式の解は Runge-Kutta 法により容易に計算することができる。Fig. 3 からこれらの値がもとの解に比し、数値の占める範囲が非常に圧縮されていることがわかる。

変数置換によらねばならないもう一つの簡単な例を示しておく。

$$y' = \frac{1}{2} x e^{2y} \quad y(0) = 0 \quad (17)$$

この初期値問題の解析解は

$$y = -\frac{1}{2} \log_e \left(1 - \frac{x^2}{2} \right) \quad (18)$$

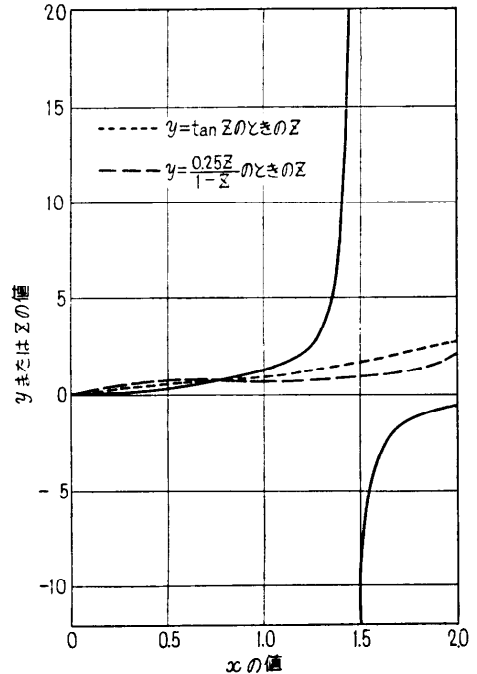


Fig. 3 The computer results for differential equation $y' = 1 + x^2 y^2$

であって、 $x = \sqrt{2}$ で $y = -\infty$ になる。いま、

$$z = e^{-2y} \quad (19)$$

とおくと、

$$z' = -x \quad z(0) = 1 \quad (20)$$

になり、この微分方程式の解は容易に計算できる。

微分方程式の解が無限大にならなくとも、1ステップの解の変動が大きいと誤差が混入してくる。Runge-Kutta 法を適用して計算するとき、このような誤差がステップとともに増大して、真の解と著しく異なった値になることがある。

この現象は次式を用いて次のように説明せられる。

$$y' = Ay \quad y(0) = 1 \quad (21)$$

この微分方程式の正解は

$$y = e^{Ax}$$

であるが、4次の Runge-Kutta 法では Taylor 級数展開の h の4次の項まで一致する。すなわち、

$$\begin{aligned} y_n &= y_{n-1} \left\{ 1 + Ah + \frac{(Ah)^2}{2} + \frac{(Ah)^3}{6} + \frac{(Ah)^4}{24} \right\} \\ &= y_0 \left\{ 1 + Ah + \frac{(Ah)^2}{2} + \frac{(Ah)^3}{6} + \frac{(Ah)^4}{24} \right\}^n \end{aligned} \quad (22)$$

いま、 $|Ah| < 1$ となるように h をとると、この級数は収束して h^5 以下の項が打ち切り誤差になる。しかし、 $|Ah| > 1$ になるときは、ステップ数の増加とともに真

の解から離れてゆく。 e^{Ah} と h^4 の項までの値の計算した結果を **Table 2** に示す。この結果から、 Ah が負値で大きくなると、絶対誤差は小さいにもかかわらず相対誤差が1以上になる。したがって、このような微分方程式の解はステップ数の増加とともに真の解から離れてゆくわけである。

このような解をもつ例として、つぎの微分方程式がよく知られている。

$$y' = -xy \quad y(0) = 15 \quad (23)$$

この解析解は

$$y = 15e^{-x^2/2} \quad (24)$$

である。いま、 $z = 1/y$ とおくと、

$$z' = xz \quad z(0) = 1/15 \quad (25)$$

になり、丁度負符号が除かれた形である。したがって、この微分方程式に Runge-Kutta 法を適用して解を求めると、右辺が正であるからその誤差が多少大きい程度である。それらの計算結果を **Fig. 4** に示す。

微分方程式(23)の解は変数置換により容易に求められ、この場合には独立変数と従属変数に関し種々の変数置換方法が考えられる。まず、独立変数に関しては、 x の増加にしたがって刻み幅を減少するように置換すればよいことは明らかである。したがって、

$$t = x^2 \quad (26)$$

とおくと、

$$y' = -y/2 \quad y(0) = 15 \quad (27)$$

となる。しかし、 $x = 0 \sim 15$ に対し $t = 0 \sim 225$ になり、 $h = 0.5$ でも 450 ステップを要する。

つぎに、従属変数については、それが相対的に大きく変化することを避けるために、

$$y = e^z \quad (28)$$

とおくと、

$$z' = -x \quad z(0) = \log 15 \quad (29)$$

となる。この微分方程式の解は容易に計算できるが、

Table 2 The errors of 4 order Taylor's expansion for e^{Ah}

Ah	0.25	0.5	1.0	2.0	4.0
e^{Ah}	1.284025	1.648721	2.708282	7.389056	54.59815
h^4 項まで	1.284016	1.648437	2.718332	6.999999	34.33333
絶対誤差	0.000009	0.000284	0.009950	0.389057	20.26481
相対誤差	0.000007	0.000172	0.003660	0.052652	0.371163

Ah	-0.25	-0.5	-1.0	-2.0	-4.0
e^{Ah}	0.778801	0.606530	0.367897	0.135335	0.0183156
h^4 項まで	0.778808	0.606770	0.375000	0.333333	5.0000000
絶対誤差	-0.000007	-0.000240	-0.007121	-0.197998	-0.498168
相対誤差	-0.000010	-0.000397	-0.019356	-1.463021	-271.999

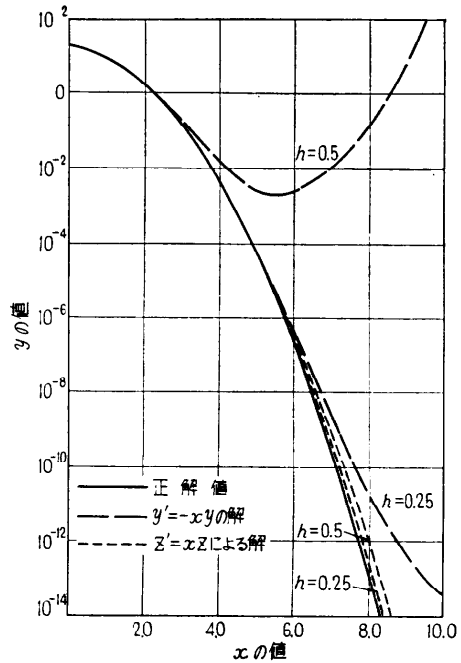


Fig. 4 The computer results for differential equation $y' = -xy$

z の値から式(28)により y の値を計算せねばならない。

指数関数は解析的には便利であるが、数値計算上は一般に有利でなく、もっと計算の簡単な関数で変数置換できれば好都合である。いま、

$$y = z^{-n} \quad (30)$$

とおくと、式(23)は負符号のないつぎの微分方程式になる。

$$z' = xz/n \quad z(0) = 15^{-1/n} \quad (31)$$

ここで、 n の値を2のべき数にとると、あとで式(30)により y の値を計算するのに都合よい。 $y(15)$ は 10^{-47} 程度であるから、 $n = 32$ でよい。このように変数置換すれば、Runge-Kutta 法により解 z を容易に計算することができ、それから5回の乗算により y の値が求まる。

このような微分方程式は、誤差評価による自動刻み幅制御の積分手法を用いて解を求めることができる。その方法は種々考えられているが、一般に誤差評価にかなりの計算時間を要し、変数置換が可能ならばこの方が有利である。

4. 悪条件逆行列の計算

与えられた行列が悪条件であると、数値計算による

逆行列の値は精度が落ち、極端になると真値とかけはなれた値になる。このような悪条件の逆行列を少しでも精度よく求めたいわけで、前記の異常であるが存在する解をどのように数値計算するかという、積分や、微分方程式の場合とは問題の性質が異なっている。

悪条件行列とは、ベクトル空間において行列の表す二つのベクトルが完全に重なってはいないが、接近していることを意味している。逆行列の計算精度を向上するには、この接近の度合を拡げればよいわけで、与えられた行列の前後に対角行列を乗算する尺度変換により多少拡げることができるが、それによる逆行列の実用的計算方法はみつかっていない。原点を移動すると接近の度合を拡げることができるが、しかし原点の移動は行列の減算になり、前後の逆行列の関係が成立しなくなる。

不正確な逆行列からもっと精度のよい逆行列を得るには、つぎの反復計算による方法がある。行列 A の逆行列 A^{-1} を求めようとするとき、 A^{-1} の近似行列が求まっていると、これを用いて精度を向上しようというわけである。 $AB - I = E$ とすると、

$$A^{-1} = B(I + E)^{-1} = B(I - E + E^2 \dots) \tag{32}$$

である。 $I - E$ 項までなら、

$$A^{-1} \approx B(2I - AB) \tag{33}$$

であるから、

$$B_{s+1} = B_s(2I - AB_s) \tag{34}$$

を繰り返してもよい。この級数が収束するときは、通常 1 回の計算でも大きな精度改善が得られるといわれる。

悪条件行列として Hilbert 行列がよく知られており、最初に Cholesky 法を用いて求めた精度のわるい逆行列を B_0 として、上記の反復計算を行った。計算の結果、各要素の相対誤差の平均値は、Table 3 に示すように精度が改善されたとはいえない。また、一例として $n=4$ の場合を示すが、個々の要素の精度は Table 4 に示すように改善されているものとそうでな

Table 3 The means of relative errors of each elements evaluated by iterative method.

	B_0	B_1	B_2
$n=2$	0.186×10^{-7}	0.186×10^{-7}	0.186×10^{-7}
$n=3$	0.521×10^{-6}	0.325×10^{-6}	0.115×10^{-6}
$n=4$	0.143×10^{-4}	0.222×10^{-4}	0.579×10^{-4}
$n=5$	0.643×10^{-3}	0.920×10^{-3}	0.151×10^{-3}
$n=6$	0.425×10^{-2}	0.753×10^{-2}	0.197×10^{-2}
$n=7$	0.220	0.197	0.331

Table 4 The computer results of each elements using iterative method ($n=4$)

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 16 & -120 & 240 & 140 \\ -120 & 1200 & -2700 & 1680 \\ 240 & -2700 & 6480 & -4200 \\ -140 & 1680 & -4200 & 2800 \end{bmatrix}$$

$$B_0 = \begin{bmatrix} 16.00011 & -120.0013 & 240.0034 & -140.0022 \\ -120.0013 & 1200.016 & -2700.041 & 1680.027 \\ 240.0034 & -2700.041 & 6480.101 & -4200.067 \\ -140.0022 & 1680.027 & -4200.067 & 2800.044 \end{bmatrix}$$

$$B_1 = \begin{bmatrix} 16.00016 & -120.0018 & 240.0043 & -140.0028 \\ -119.9981 & 1199.981 & -2699.958 & 1679.974 \\ 240.0114 & -2700.129 & 6480.308 & -4200.200 \\ -140.0015 & 1680.017 & -4200.041 & 2800.027 \end{bmatrix}$$

$$B_2 = \begin{bmatrix} 16.00023 & -120.0023 & 240.0054 & -140.0035 \\ -119.9953 & 1199.952 & -2699.890 & 1679.931 \\ 240.0318 & -2700.354 & 6480.844 & -4200.545 \\ -140.0061 & 1680.068 & -4200.163 & 2800.106 \end{bmatrix}$$

いものがある。計算における丸め誤差の累積は倍精度演算を用いて十分考慮しており、その理由はこの級数が収束しないからでもない。

それでは、次式による方法を考えてみよう。

$$A^{-1} = B(AB)^{-1} \tag{35}$$

において、 B は A^{-1} の近似行列であるから、 AB は単位行列に近似しており、その逆行列はよい精度で計算できる。したがって、式(35)による A^{-1} はよい精度でなければならぬはずである。ところが、先と同様に Hilbert 行列を用いて計算してみると、Table 5 に示すように精度はやはり改善されていない。

いま、Hilbert 行列とその正確な逆行列を乗算して正確な単位行列になるか検算してみると、単精度演算により Table 6 (次頁参照) の結果を得た。この表から、行列の次数とともに悪条件の度合が大きくなり、けた落ちによる誤差の混入することがわかる。したがって、式(34)や式(35)の乗算において誤差が生じ、精度が改善されないわけである。ただし、Table 3 において、 $n=2$ では B_0 の精度がよいから、反復計算により精度は変化しないが、 $n=3$ のときは乗算の誤差がなく、 B_1, B_2 と改善されている。

入力データが誤差を含むとき、悪条件行列の逆行列を精度よく計算する方法はみあたらないので、逆行列

Table 5 The means of relative errors of each elements computed by $A^{-1} = B(AB)^{-1}$

	B	$B(AB)^{-1}$
$n=2$	0.186×10^{-7}	0.186×10^{-7}
$n=3$	0.521×10^{-6}	0.604×10^{-6}
$n=4$	0.139×10^{-4}	0.201×10^{-4}
$n=5$	0.618×10^{-3}	0.547×10^{-3}
$n=6$	0.371×10^{-2}	0.529×10^{-2}
$n=7$	0.216	0.203

Table 6 The products of Hilbert matrices and their inverse matrices

$n=2$	$n=3$	$n=4$
$\begin{bmatrix} 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 1.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.0 & 0.0 & -0.12 \times 10^{-3} & 0.0 \\ 0.0 & 1.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.48 \times 10^{-3} & 1.0 \end{bmatrix}$
$n=6$		
$\begin{bmatrix} 1.0 & 0.0 & -0.24 \times 10^{-3} & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 1.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.32 \times 10^{-3} & 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \end{bmatrix}$		
$n=6$		
$\begin{bmatrix} 1.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.30 \times 10^{-3} & -0.38 \times 10^{-3} \\ 0.0 & 1.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.12 \times 10^{-3} \\ 0.0 & 0.0 & 1.0 & 0.0 & 0.0 & -0.98 \times 10^{-3} \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.40 \times 10^{-3} & 1.00098 \end{bmatrix}$		
$n=7$		
$\begin{bmatrix} 1.0 & 0.0 & 0.21 \times 10^{-4} & -0.19 \times 10^{-4} & 0.12 \times 10^{-4} & 0.81 \times 10^{-4} & -0.15 \times 10^{-4} \\ 0.0 & 1.0 & 0.0 & 0.11 \times 10^{-3} & -0.78 \times 10^{-3} & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1.0 & 0.0 & 0.71 \times 10^{-3} & 0.0 & 0.23 \times 10^{-1} \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 & -0.31 \times 10^{-1} & 0.0 & 0.31 \times 10^{-1} \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.06250 & 0.0 & -0.63 \times 10^{-1} \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.23 \times 10^{-1} & -0.99 \times 10^{-1} & 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.18 \times 10^{-1} & 0.41 \times 10^{-1} & 0.0 & 1.04688 \end{bmatrix}$		

の精度を向上するには入力データから演算まですべて倍精度演算という結論になる。しかしながら、入力データの精度が単精度で十分間にあうとき、倍精度演算の必要があるかどうかは別問題として考慮せねばならない。また、行列とその逆行列の乗算を逆行列計算の精度判定に用いることがあるが、これは必ずしも正確な

情報を示していない。なお、以上の計算にはFACOM 230-60 を用いた。

5. あとがき

異常問題を正常問題に置換するには解析学の考え方が利用できるが、三角関数や指数関数を用いることは計算時間の点で一般に有利でなく、これが数値計算と解析学の異なる点である。最後に、教科書の例題を用いて異常問題の数値解法に対する指針を示したが、数値計算にたずさわる諸氏によってこの方法がさらに発展され、また実際に活用されるならば幸である。

参考文献

- 1) 平野泰彦: コンピュータによる数値計算, pp. 121~127. (日刊工業新聞社)
- 2) C.-E. Fröberg: Introduction to Numerical Analysis, ADDISON-WESLEY P.C. INC, pp. 99~100.
- 3) 森口繁一: 数値計算の理論と実験Ⅲ, 科学, Vol. 33, No. 2, (1963).
- 4) 平野泰彦: たちのわるい常微分方程式の変数置換による解法, 情報処理学会第14回大会, (1973).
- 5) Gear C.W.: Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations, Prentice-Hall, (1971).
- 6) Forsythe G.E. & Moler C.B.: Computer Solution of Linear Algebraic Systems, Prentice-Hall, (1967).

(昭和49年9月18日受付)
(昭和50年12月5日再受付)