誌 上 討 論

ある予測子·修正子法について*

小 林 光 夫**

1. まえがき

先に本誌に発表された常微分方程式の数値解法[1]で用いられた修正子

$$y_{n+2}=y_{n+1}-y_n+\frac{1}{2}h(f_{n+2}-f_n)$$

は，その後収束性などについて疑問がもたれ，これについて本会の大会やまた本誌上で論争があった[2,3]．著者はこの公式の性質について検討した結果，この公式は一般に梯形則より勝ることがないとの結論をえた．これが論争の一解決となりうれば幸いである（この公式はときに Hamming の公式とよばれることがあるようであるが[4]，Hamming 自身の提案した一連の公式群[5]の中にはこの公式は含まれないことに注意すべきである）．以下に述べる結果は著者の卒業論文[6]のための研究の一部として得られたものである．その際，懇切な御指導を賜った東京大学の森口繁一教授，伊理正夫助教授に，誌上を借り，心から感謝の意を表する次第である．

2. ここで問題とする公式とその性質

問題は一階常微分方程式

$$\frac{dy}{dx}=f(x,y) \tag{1}$$

を与えられた初期条件

$$y(a)=\eta \tag{2}$$

のもとで解くこととする．この問題の真の解を $y(x)$，$x=a$ からきざみ幅 h で解き進んでいったときの

$$x_n=a+nh \tag{3}$$

における数値解を y_n とする．

また $f_n=f(x_n,y_n)$ と書くことにすると，文献 1）で提案された公式（修正子の部分）は

$$y_{n+2}=2y_{n+1}-y_n+\frac{1}{2}h(f_{n+2}-f_n) \tag{4}$$

である．ところで

$$\varphi_n=y_{n+1}-y_n+\frac{1}{2}h(f_{n+1}+f_n) \tag{5}$$

とおくと（4）は次のように書ける．

$$\varphi_{n+1}-\varphi_n=0 \tag{6}$$

差分方程式（4）を与えられた初期条件

$$y_0=\eta,\ y_1=\eta_0 \tag{7}$$

のもとで解くことは，連立差分方程式（5），（6）を初期条件

$$y_0=\eta,\ \varphi_0=\eta_1-\eta+\frac{1}{2}h(f(a+h,\eta_1)+f(a,\eta)) \tag{8}$$

のもとで解くことと同値である．（6）より直ちに次の関係式（9）を得る．

$$\varphi_n=\varphi_0\ (一定) \tag{9}$$

（9）を用いると（5）は

$$y_{n+1}=y_n+\frac{1}{2}h(f_{n+1}+f_n)+\varphi_0$$

あるいは

$$y_{n+1}=y_n+\frac{1}{2}h\left\{\left(f_{n+1}+\frac{\varphi_0}{h}\right)+\left(f_n+\frac{\varphi_0}{h}\right)\right\} \tag{10}$$

と書きかえられる．(10) は微分方程式

$$\frac{dy}{dx}=f(x,y)+\frac{\varphi_0}{h} \tag{11}$$

を初期条件

$$y(a)=\eta$$

のもとで，梯形則によって解くことに相当している．一般には $\varphi_0\fallingdotseq 0$ であるから，公式（4）を用いて微分方程式（1）を解くことは，（1）とは異なる微分方程式 (11) を梯形則によって解くことになる．

ここで，数値解に含まれる誤差を

$$e_n=y_n-y(x_n) \tag{12}$$

とおき，梯形則による誤差と公式（4）による誤差を比較してみよう．以下，添字は T が梯形則によるもの，H が公式（4）によるものを表わす．Henrici[7] の漸近誤差理論によれば，これらの誤差は漸近的に

$$e_{Tn}\sim h^2e_T(x_n) \tag{13}$$

$$e_{Hn}\sim h^2e_H(x_n) \tag{14}$$

* On a Predictor-Corrector Method, by Mitsuo Kobayashi (Division of Research in Mathematical and Physical Sciences, Graduate School, University of Tokyo)

** 東京大学大学院数物系研究部

で与えられる．ここに $e_T(x)$，$e_H(x)$ は拡大誤差函数と呼ばれ，それぞれ微分方程式

$$e_T'(x)=g(x)e_T(x)+\frac{1}{12}y'''(x),\ e_T(a)=0, \tag{15}$$

$$e_H'(x)=g(x)e_H(x)+\frac{1}{12}y'''(x)+\frac{\varphi_0}{h^3},$$
$$e_H(a)=0 \tag{16}$$

の解として定まり，$g(x)$ は

$$g(x)=\left.\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right|_{y=y(x)}$$

で定義される函数である．(15)，(16) を解くと次式を得る．

$$e_T(x)=e^{G(x)}\int_a^x \frac{1}{12}y'''(t)e^{-G(t)}dt \tag{17}$$

$$e_H(x)=e^{G(x)}\int_a^x \left[\frac{1}{12}y'''(t)+\frac{\varphi_0}{h^3}\right]e^{-G(t)}dt \tag{18}$$

ここに

$$G(x)=\int_a^x g(t)dt$$

である．(18) は (17) を用いれば，次のように書ける．

$$e_H(x)=e_T(x)+\frac{\varphi_0}{h^3}e^{G(x)}\int_a^x e^{-G(t)}dt \tag{19}$$

(19) は，公式（4）による数値解には，梯形則による数値解に含まれる打切り誤差の他に，さらに φ_0 で励起される誤差成分が加わることを示している（もちろん，φ_0 の符号によっては減ぜられることもある）．もし $\varphi_0=0$ となるように出発値を選んで公式（4）を用いれば，その解は梯形則による解と理論的には一致するはずである．そして，（8）から明らかなように，$\varphi_0=0$ にするためには $y_1=\eta_1$ を梯形則を満たすように選べばよい．しかし実際には，丸め誤差や，計算途中の函数近似などの影響があり，そのためどこかで $\varphi_n\neq 0$ となることが起りうる．そうするとそれ以後は，そのようにして励起される誤差成分が加わることになる．

出発値 y_1 として，梯形則を満足する値 η_1 から ε だけはずれた値 $\eta_1+\varepsilon$ を選んだとすると，φ_0 は次式のようになる．

$$\varphi_0=\eta_1+\varepsilon-\eta+\frac{1}{2}h(f(a+h,\eta_1,+\varepsilon)+f(a,\eta))$$
$$=\varepsilon+\frac{1}{2}h\varepsilon g(a)+\cdots\approx\varepsilon \tag{20}$$

ところで，(19) において，φ_0 系数は h^{-3} に比例するから $\varphi_0\approx\varepsilon$ がごく小さくても，h が小さいと誤差全体に及ぼす影響は，かなり大きくなるとみなければならない．

一般に，$y_1=\eta_1$ は真の値 $y(a+h)$ の近くに選ばれるのが普通である．$y_1=\eta_1$ を真の値とすれば，φ_0 は

$$\varphi_0=\eta_1-\eta+\frac{1}{2}h(f(a+h,\eta_1)+f(a,\eta))$$
$$=-\frac{1}{12}h^3y'''(a)+0(h^4) \tag{21}$$

と書ける．$0(h^4)$ を無視すれば，(18) は (21) を代入して次のように変形できる．

$$e_H(x)=e^{G(x)}\int_a^x \frac{1}{12}[y'''(t)-y'''(a)]e^{-G(t)}dt \tag{22}$$

(17) と (22) を比較すると，$y'''(x)$ と $y'''(x)-y'''(a)$ の大小関係によって $|e_T(x)|$ と $|e_H(x)|$ の大小関係がほぼ定まると考えられる．

（i） $y'''(x)\gtrless y'''(x)-y'''(a)\gtrless 0$ のとき．すなわち $y'''(x)\gtrless y'''(a)\gtrless 0$ のときは $e_T(x)\gtrless e_H(x)$（以上複号同順）．

（ii） $y'''(x)$ と $y'''(x)-y'''(a)$ の符号が異るときは，x の値によって $|e_T(x)|$ と $|e_H(x)|$ の大小関係が異る．

(iii) $y'''(x)-y'''(a)=0$ のとき，すなわち y が x の3次以下の式のときは，$e_H(x)\equiv 0$ である．$e_T(x)$ は y が x の3次式のときは $e_T(x)\neq 0$，2次以下の式のときは $e_T(x)\equiv 0$ である．

次に，具体的な例について数値行算を計ない，上記の所論を確かめてみる．

3. 数 値 例

はじめに，以下で用いられる添字の説明をする．添字 T は梯形則を用いた場合，$H1$ は梯形則を満足する値を初期値として公式（4）を用いた場合，$H2$ は真の値を初期値として公式（4）を用いた場合である．

例 1. $y'=f(x,y)=y$，$y(0)=1$ の場合．

真の解は $y(x)=e^x$ である．e_T，e_{H1}，e_{H2} を求めると次式を得る．

$$e_{H1}(x)=e_T(x)=\frac{1}{12}xe^x \tag{23}$$

$$e_{H2}(x)=\frac{1}{12}\{1+(x-1)e^x\} \tag{24}$$

(23)，(24) から，$x>0$ では $e_T(x)>e_{H2}(x)$ であるが，x が大きくなれば，$e_T(x)$ と $e_H(x)$ はほとんど同じ程度の大きさになることがわかる．この例は前節（i）の場合に相当している．

例 2. $y'=f(x, y)=-y$, $y(0)=1$ の場合.

真の解は $y(x)=e^{-x}$ である. e_T, e_{H1}, e_{H2} を求めると次式を得る.

$$e_{H1}(x)=e_T(x)=-\frac{1}{12}xe^{-x} \tag{25}$$

$$e_{H2}(x)=\frac{1}{12}\{1-(x+1)e^{-x}\} \tag{26}$$

この例では, $x>0$ では $e_T(x)$ と $e_{H2}(x)$ の符号が異なり, $x \gtrless 1.25\cdots$ のとき $|e_{H2}(x)| \gtrless |e_T(x)|$ (複号同順) であるから, 前節 (ii) の場合に相当している. $x\to\infty$ のとき $e_T(x)\to 0$ であるのに, $e_{H2}(x)\to 1/12$ であるから, 梯形則を用いれば誤差は0に収束するが, 公式 (4) を正しい出発値とともに用いると一定の誤差が残ることになる.

例 3. $y'=f(x, y)=3y/(x+1)$, $y(0)=1$ の場合.

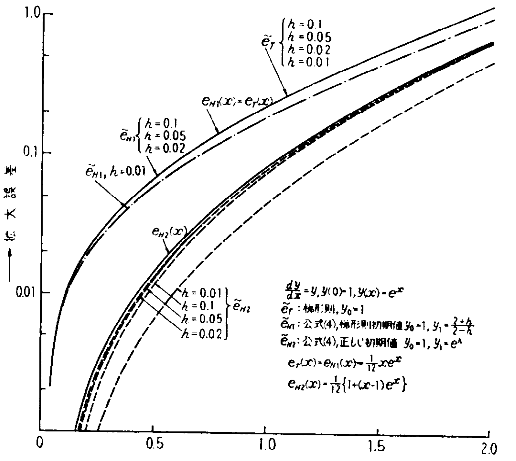
真の解は $y(x)=(x+1)^3$ である. この例は前節 (iii) に相当している. e_T, e_{H1}, e_{H2} を求めると次式を得る.

$$e_T(x)=e_{H1}(x)=\frac{1}{4}x(x+1)(x+2) \tag{27}$$

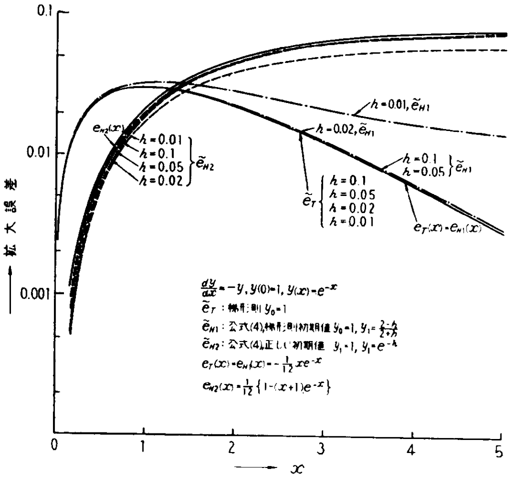
$$e_{H2}(x)=0 \tag{28}$$

この場合は, 公式 (4) の方が梯形則よりもよい.

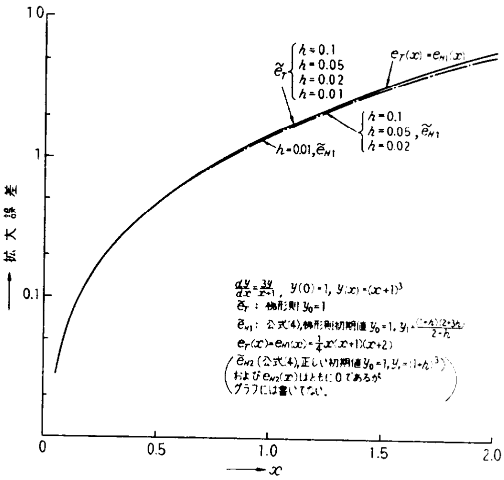
以上三つの例について, 公式 (4) および梯形則による数値計算を行なった結果を, **第 1〜3 図**に示す. 図中 $\tilde{e}_T$, $\tilde{e}_{H1}$, $\tilde{e}_{H2}$ は数値計算の結果に h^{-2} を乗じた拡大誤差である. 出発値はいずれも8桁目までは正確な値を用いた. これらの結果は上記の所論をよく実証しているといえよう. $h=0.01$ の場合を除けば, 数値解に含まれる誤差は誤差の漸近公式とかなりよい一致



第 1 図



第 2 図



第 3 図

をみせている. また $\tilde{e}_T$ と $\tilde{e}_{H1}$ もほとんど一致している. $h=0.01$ の場合のくいちがいは, 出発値の9桁目のくいちがいや, 丸め誤差の影階であろう. 特に, 第2図の $h=0.01$ の場合, $\tilde{e}_T(\approx e_T)$ と $\tilde{e}_{H1}$ とが大きくくいちがっているのは, これらの影響が誤差全体に微妙にきいてくることを表わしている. 第3図では, 当然のことながら公式 (4) の誤差は0となっている.

4. ま と め

公式 (4) は, y が x の3次式であるという特別の場合を除いては, 一般に梯形則と同程度の誤差を持つ

のみならず，誤差は出発値によって定まる φ_0 によってかなり敏感に影響を受け，また梯形則に比して出発値を1個余計に必要とすることなどから，梯形則より勝ることはないと結論できる．

参考文献

1) 高田　勝：常微分方程式の数値積分法（自動的にきざみ幅を変化させる PC 法）．情報処理，Vol. 3, No. 5 (1962), pp. 278-282.
2) 津田剛志，小林徳也：ある一つの Predictor-Corrector 法について．昭和37年度情報処理学会講演予稿集，3～4.
3) 高田　勝：きざみ幅変更を行なう予測子修正子法について．昭和38年度情報処理学会講演予稿集，37～38.；常微分方程式の数値積分法（自動的にきざみ幅を変化させる PC 法）のたしかめおよび修正．情報処理，Vol. 4, No. 4 (1963), pp. 222-223.
4) 森口繁一(編)：アルゴル入門．JUSE 出版社，1962，223頁．
5) Hamming, R.W.: Stable Predictor-Corrector Methods for Ordinary Differential Equations. Jour. of A.C.M., Vol. 6, No. 1 (Jan. 1959), pp. 37-47.
6) 小林光夫：On the Stability in Numerical Integration of Ordinary Differential Equations. 東京大学工学部
7) Henrici, P.: Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations. John Wiley & Sons, New York-London, 1962.

（昭和39年5月1日受付）