数理解析研究所講究録
第 241 巻 1975 年 170-177



# 指数関数の連分数展開の有限要素法への応用

京大 数理研　森　正武

## §1. 指数関数の連分数展開

指数関数 $e^z$ が

$$
e^z = \cfrac{1}{1 - \cfrac{z}{1 + \cfrac{z}{2 - \cfrac{z}{3 + \cfrac{z}{2 - \cdots + \cfrac{z}{2 - \cfrac{z}{k-1 + \cdots}}}}}}} \qquad (1)
$$

の形の連分数展開を持ち，これが z-平面の任意の有界な閉領域で一様収束することは古くから知られている（例えば [1] p.348）．連分数 (1) の右辺を有限な $k$ 項目で打切った近似有理関数 $H_k(z)$ は，次のような同一の形を持つ漸化式によって定義される二つの列 $\{F_k\}$，$\{G_k\}$ の商によって表現することができる（例えば [2] p.214）．（展開 (1) の最後の $k-1$ までとれば $k$ 項目で打切ったことになる．その一つ手前の $z$ ま

でとればk−1項で打切ったことになる．）

$$F_0 = 1\ ,\ F_1 = 1,\ G_0 = 0,\ G_1 = 1 \tag{2}$$

$$F_j = \begin{cases} (j-1)F_{j-1} - z F_{j-2}\ ; & j = 2, 4, 6, \cdots \\ 2\ F_{j-1} + z F_{j-2}\ ; & j = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \tag{3}$$

$$G_j = \begin{cases} (j-1)G_{j-1} - z G_{j-2}\ ; & j = 2, 4, 6, \cdots \\ 2\ G_{j-1} + z G_{j-2}\ ; & j = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \tag{4}$$

$$H_k(z) = \frac{G_k(z)}{F_k(z)} \tag{5}$$

そして上述したように，z-平面の任意の有界閉領域で次の収束は一様である．

$$\lim_{k\to\infty} H_k(z) = e^z \tag{6}$$

近似有理関数 $H_k(z)$ は，$e^z$ と同様次の性質を持つことがわかっている [3]．

<u>定理１</u>　$\mathrm{Re}\, z \leq 0$ において　$H_k(z) = G_k(z)/F_k(z)$ は正則で，次の不等式を満たす．

$$|H_k(z)| \leq 1\ ,\quad k = 1, 2, 3, \cdots\cdots \tag{7}$$

## §2．$e^{tA}$ の連分数近似

$A$ を $N\times N$ 行列とするとき，$e^{tA}$ の近似行列を漸化式 (2),

(3), (4) を利用することによって生成することができる [3].

$$F_0 = I\ ,\ F_1 = I,\ G_0 = 0\ ,\ G_1 = I \qquad (8)$$

$$F_j = \begin{cases} (j-1)F_{j-1} - tA\,F_{j-2} & ;\ j = 2, 4, 6, \cdots \\ 2\,F_{j-1} + tA\,F_{j-2} & ;\ j = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \qquad (9)$$

$$G_j = \begin{cases} (j-1)\,G_{j-1} - tA\,G_{j-2} & ;\ j = 2, 4, 6, \cdots \\ 2\,G_{j-1} + tA\,G_{j-2} & ;\ j = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \qquad (10)$$

$$H_k(tA) \equiv F_k^{-1}(tA)\,G_k(tA) \qquad (11)$$

<u>定理 2</u>　A を N×N 行列とするとき

$$\lim_{k\to\infty} H_k(tA) = e^{tA} \qquad (12)$$

われわれの目的は，与えられた線形偏微分方程式の初期値問題において，空間変数の部分に有限要素法を適用してこれを連立常微分方程式系

$$\frac{du}{dt} = Au \quad ,\ u(0) = u_0 \qquad (13)$$

で近似し，その連分数近似解

$$u(t) \doteqdot H_k(tA)\,u_0 \qquad (14)$$

を求めることにある．任意の行列 tA に対し (14) の $k\to\infty$ の極限が (13) の厳密解を与えることは定理 2 によって保証され

ているが，Aの固有値$\lambda_j$がすべて

$$\mathrm{Re}\,\lambda_j \leq 0 \tag{15}$$

であるとき，定理1からわかるように$H_k(tA)$のスペクトル半径$\rho(H_k(tA))$が

$$\rho(H_k(tA)) \leq 1 \tag{16}$$

を満たすから，われわれの連分数近似解法はこのようなとき安定な解法にもなっている．また，$H_k(z)$は$\mathrm{Re}\,z \leq 0$で正則であるから，(15)を満たす限り$H_k(tA)$も正則であり，(11)における$F_k^{-1}(tA)$の計算で不都合は生じない．

なお近似(14)を(8)〜(11)に従って計算するとき，ベクトル

$$g_j \equiv G_j u_0 \tag{17}$$

を導入することにより(10)の逐次代入は行列$\{G_j\}$の代りにベクトル$\{g_j\}$で行うことができる．そのアルゴリズムは§3の(20)〜(23)のようになる．

## §3. 熱方程式と波動方程式への応用

熱方程式あるいは波動方程式のような初期値問題において，空間変数の部分を有限要素法あるいは差分法によって離散的

に近似すると，得られる方程式(13)の行列Aの固有値は(15)を満たす．したがってわれわれの方法はこのような問題に対して安定な解法を与える．次に例を挙げる．簡単のために境界条件として境界で0になるDirichlet条件をとる．

（A） 熱方程式

適当な初期条件の下での熱方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u \tag{18}$$

の空間変数の部分に有限要素法を適用すると，問題は次の連立常微分方程式を解くことに帰着される．

$$M\frac{du}{dt} = -Ku \ , \quad u(0) = u_0 \tag{19}$$

Mはmass matrix， Kはstiffness matrixである．したがって $A = -M^{-1}K$ として(8)～(11)を計算すれば連分数近似解が得られる．連分数展開の恒等変換（例えば [2] p.215）を利用すればアルゴリズムは次のようになる．

$$F_0 = I \ , \quad F_1 = \frac{1}{2} I \ , \quad g_0 = 0 , \quad g_1 = \frac{1}{2} u_0 \tag{20}$$

$$F_j = \begin{cases} F_{j-1} - \dfrac{1}{2(j-1)} tAF_{j-2} & ; j = 2, 4, 6, \cdots \\ F_{j-1} + \dfrac{1}{2(j-2)} tAF_{j-2} & ; j = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \tag{21}$$

$$g_j = \begin{cases} g_{j-1} - \dfrac{1}{2(j-1)} tAg_{j-2} & ; j = 2, 4, 6, \cdots \\ g_{j-1} + \dfrac{1}{2(j-2)} tAg_{j-2} & ; j = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \tag{22}$$

$$u(t) \doteqdot F_k^{-1} g_k \tag{23}$$

Mがconsistent mass型のとき，もしMとKが交換可能であれば，再び連分数展開の恒等変換を利用して，次のアルゴリズムにより$M^{-1}$を計算することなしに近似解を計算することができる.

$$F_0 = I, \quad F_1 = \frac{1}{2}M, \quad g_0 = 0, \quad g_1 = \frac{1}{2}u_0 \tag{24}$$

$$F_j = \begin{cases} F_{j-1} + \dfrac{1}{2(j-1)} tK F_{j-2} & ; \; j = 2, 4, 6, \cdots \\ M F_{j-1} - \dfrac{1}{2(j-2)} tK F_{j-2} & ; \; j = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \tag{25}$$

$$g_j = \begin{cases} g_{j-1} + \dfrac{1}{2(j-1)} tK g_{j-2} & ; \; j = 2, 4, 6, \cdots \\ M g_{j-1} - \dfrac{1}{2(j-2)} tK g_{j-2} & ; \; j = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \tag{26}$$

$$u(t) \fallingdotseq F_k^{-1} g_k \tag{27}$$

（B）　波動方程式

適当な初期条件の下での波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Delta u \tag{28}$$

の空間変数の部分に有限要素法を適用すると問題は次の方程式を解くことに帰着される.

$$\begin{cases} M \dfrac{d^2 q}{dt^2} = -Kq \\ q(0) = q_0 \quad , \quad \dfrac{dq}{dt}(0) = p_0 \end{cases} \tag{29}$$

ここで

$$\mathbf{p} = \frac{d\mathbf{q}}{dt} \tag{30}$$

$$\mathbf{u}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \tag{31}$$

と置くと，(29) は

$$\hat{M} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\hat{K}\mathbf{u} \ , \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_0 \\ \mathbf{p}_0 \end{pmatrix} \tag{32}$$

となる．ただし $\hat{M}$，$\hat{K}$ は次式で与えられる．

$$\hat{M} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & M \end{bmatrix} \ , \quad \hat{K} = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ K & 0 \end{bmatrix} \tag{33}$$

したがって $A = -\hat{M}^{-1}\hat{K}$ として (20)～(23) を計算すれば連分数近似解が得られる．また，M が consistent mass 型のとき，M と K が交換可能であれば (24)～(27) において M を $\hat{M}$ で，K を $\hat{K}$ で置換えれば $M^{-1}$ を計算することなしに近似解を計算することができる．

$e^z$ の近似関数を考えるとき，一般の z に対しては連分数展開 (1) の収束が最も速いと考えられるから，線型常微分方程式系 (13) の解をある t に対して求めるときアルゴリズム (20)～(23) が原理的には最も能率が良いことになる．収束の速さに関しては [3] または [4] を参照されたい．また，この方法においては，A の固有値 $\lambda_j$ の実部がすべて負または 0 のとき，

比較的小さな time mesh $\Delta t$で幾段かに分けて計算を進めるときも定理1によって安定性が保証されているのでその点からも都合が良い．しかし一度にあまり大きなt（あるいは$\Delta t$）をとって計算すると，(21)の反復において$F_j(tA)$の条件数が大きくなり，(23)を計算するとき大きな誤差を生ずる可能性が出てくる．このような不都合の生ずる$\Delta t$の下限などについては[4]を参照されたい．

参考文献

[1] H. S. Wall, Analytic theory of continued fractions, van Nostrand, 1948, 2nd ed. Chelsea, 1967.

[2] リュステルニク他，解析学1，宮本他訳，総合図書，1972.

[3] M. Mori, Approximation of exponential function of a matrix by continued fraction expansion, 数理解析研究所講究録 199, 数値計算のアルゴリズムの研究, 1974, p.98.

[4] 森，高橋，発展方程式の数値解法の能率の比較，数理解析研究所講究録，計算の手間と能率化（近刊）.