数理解析研究所講究録
第 250 巻 1975 年 1-12

補外法による加速について

電通大　　花田 孝郎

§1.　1パラメーターによる補外法

マルチパラメーターによる補外法の準備として、Bulirsch-Stoerによる1パラメーターの場合の結果を拡張して述べる。

離散化パラメーターτを用いたときの離散解を$T(\tau)$とするとき 次の様に漸近展開できるとする。

$$T(\tau) = d_0 + d_1\tau^{\gamma_1} + \cdots + d_M\tau^{\gamma_M} + R_{M+1}(\tau)\tau^{\gamma_{M+1}}$$

ただし、　d_j, $0 \leq j \leq M$, はτに依らない定数

γ_j, $0 \leq j \leq M+1$, は単調増加な非負実数 ($\gamma_0 = 0$)

$R_{M+1}(\tau)$ は区間$[0, \tau_0]$で有界とする。

このとき、展開における巾$\{\gamma_j\}$を既知としてパラメーター列$\{\tau_k\}$を与えたときに、離散解$\{T(\tau_k)\}$から真の解$T(0)$の近似値として非負整数pおよびmに対して補外値T_p^mを構成する。

$m+1$個のパラメーターをもつ補間式$\hat{T}_p^m(\tau)$を$m+1$条件

$$\hat{T}_p^m(\tau_{p+l}) = T(\tau_{p+l}) \quad , 0 \leq l \leq m$$

によって定めて補外値を

$$T_p^m = \hat{T}_p^m(0)$$

とおく。 次に補外作用素 Λ_p^m を導入する.

上の定義から補外値 T_p^m は $\{T(\tau_{p+\ell});\ 0\leq \ell\leq m\}$ にのみ依存して定まるから

$$T_p^m = \sum_{0\leq \ell\leq m} b_{p,\ell}^m\, T(\tau_{p+\ell})$$

と表わせる. 先づ shifting作用素 S^j を

$$S^j\{T(\tau)\} = T(\tau_j)$$

或いは

$$S^j\, T(\tau_i) = T(\tau_{i+j})$$

と定めておいて

$$\Lambda_p^m = \sum_{0\leq \ell\leq m} b_{p,\ell}^m\, S^{p+\ell}$$

とおく。従って

$$\Lambda_p^m\{T(\tau)\} = T_p^m$$

が成立つ.

補間式として多項式

$$\hat{T}_p^m(\tau) = C_{p,0}^m + C_{p,1}^m\tau^{\gamma_1} + \cdots + C_{p,m}^m\tau^{\gamma_m}$$

を用いるとき, 次の定理が成立つ。

Theorem 1 以上の仮定の他に, $\gamma_k = k$ とすると

$$\Lambda_p^m = \sum_{0\leq j\leq m}\ \prod_{\substack{0\leq k\leq m\\ k\neq j}} \frac{\tau_{p+k}}{\tau_{p+k}-\tau_{p+j}}\, S^{p+j}$$

が成立つ。 従って，次の漸化式

$$\Lambda_p^m = \frac{\tau_p \Lambda_{p+1}^{m-1} - \tau_{p+m} \Lambda_p^{m-1}}{\tau_p - \tau_{p+m}}$$

$$= \Lambda_p^{m-1} + \frac{\Lambda_{p+1}^{m-1} - \Lambda_p^{m-1}}{1 - \tau_{p+m}/\tau_p}$$

が得られて，補外値の計算には有効である。

誤差評価については，m変数のk次単項式の和を

$$\sigma^k(z_1, z_2, \cdots, z_m) = \sum_{l_1 \leq l_2 \leq \cdots \leq l_k} z_{l_1} z_{l_2} \cdots z_{l_k}$$

とおくと

$$T_p^m - T(0) = \begin{cases} \prod_{0 \leq j \leq m} \tau_{p+j} \cdot \left[(-1)^m \sum_{k=1}^{M-m} \sigma^{k-1}(\tau_p, \cdots, \tau_{p+m}) d_{m+k} + C_0 \tau_p^{M-m} \right], & m < M \\ C_1 \prod_{0 \leq j \leq M} \tau_{p+j}, & m \geq M \end{cases}$$

即ち

$$|T_p^m - T(0)| = O\left(\prod_{j=0}^{\min(m,M)} \tau_{p+j} \right)$$

が得られる。ここで，C_0はMおよび$\varepsilon_p^m = \max_{p \leq k \leq p+m-1} (\tau_{k+1}/\tau_k) < 1$に，$C_1$は$M$，$\varepsilon_p^m$，および$m - M$に依存する定数でおさえられる量である。

<u>Theorem 2</u>　一般のr_kに対しては

$$\tau_k = \tau_0 \varepsilon^k \quad , \quad 0 < \varepsilon < 1$$

にとると

$$\Lambda_p^m = \prod_{1 \leq j \leq m} \frac{S - \varepsilon^{r_j}}{1 - \varepsilon^{r_j}} \cdot S^p$$

が成立つ. 従って，漸化式

$$
\begin{aligned}
\Lambda_p^m &= \frac{\Lambda_{p+1}^{m-1} - \varepsilon^{\gamma_m}\Lambda_p^{m-1}}{1-\varepsilon^{\gamma_m}} \\
&= \Lambda_p^{m-1} + \frac{\Lambda_{p+1}^{m-1} - \Lambda_p^{m-1}}{1-\varepsilon^{\gamma_m}}
\end{aligned}
$$

が得られる. 誤差評価については

$$
T_p^m - T(0) = \begin{cases} \tau_p^{\gamma_{m+1}} \prod\limits_{1\le j\le m} \dfrac{\varepsilon^{\gamma_j}-\varepsilon^{\gamma_{m+1}}}{1-\varepsilon^{\gamma_j}} \left[(-1)^m \sum\limits_{k=1}^{M-m} \tau_p^{\gamma_{m+k}-\gamma_{m+1}} \prod\limits_{1\le j\le m} \dfrac{1-\varepsilon^{\gamma_{m+k}-\gamma_j}}{1-\varepsilon^{\gamma_{m+1}-\gamma_j}} d_{m+k} + C_0 \tau_p^{\gamma_{M+1}-\gamma_{m+1}} \right], & m < M \\[2ex] C_1 \tau_p^{\gamma_{M+1}} \prod\limits_{1\le j\le M} \dfrac{\varepsilon^{\gamma_{M+1}}+\varepsilon^{\gamma_j}}{1-\varepsilon^{\gamma_j}}, & m \ge M \end{cases}
$$

が成立つ。 C_0, C_1 は定理1と同様. 即ち

$$
|T_p^m - T(0)| = O\Bigl(\tau_p^{\gamma_{\mu+1}} \prod_{1\le j\le \mu} \varepsilon^{\gamma_j}\Bigr), \qquad \mu = \min(m, M)
$$

が得られる。

証明は [10] 参照.

1パラメーターの場合には漸化式を用いると右のダイアグラムによって補外値が効率よく求められる. 即ち, 上から下へ, 左から右への順序ですぐ左と上の値を用いて計算される. さらに上下に並んでいる値には同一の記憶場所を割り当てることによって必要な記憶量を減少させることが可能である。

$$
\begin{array}{ccccccc}
 & & & & & & T_0^0 \\
 & & & & & & \downarrow \\
 & & & & T_1^0 & \rightarrow & T_0^1 \\
 & & & & \downarrow & & \downarrow \\
 & & T_2^0 & \rightarrow & T_1^1 & \rightarrow & T_0^2 \\
 & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 & & & & & & \\
 & \downarrow & & & & & \downarrow \\
T_m^0 & \rightarrow T_m^1 \rightarrow & & & & \rightarrow & T_0^m
\end{array}
$$

§2. 2パラメーターによる補外法

§1で述べた方法で多重積分や偏微分方程式の近似解の収束の加速を行なうためには、各変数についての離散化パラメーター（例えば細分格子の巾）の間に条件（各方向の細分の巾の比が一定など）をつければ1パラメーターとみなして補外を行なえる。 然し、この様にして補外を行なおうとするといろいろの欠点が生じる。

1) 近似値を求めるための計算量が急激に増加する。(n重積分の数値計算において細分の巾を1/2にすると計算量はほぼ2^n倍となる)

2) 展開に現われる巾指数が不規則なときには無駄が多い。

以上の点を解消するために、各パラメーターを独立に動かして少ない計算量で有効に補外を行なうことが考えられる。ここでは、2パラメーターとして議論してnパラメーターの場合については[10]を参照。

離散化パラメーター(x, η)を用いたときの離散解を$T(x,\eta)$とするとき、漸近展開可能であるとする。 即ち

$$
\begin{aligned}
T(x,\eta) = {} & d_{0,0} + d_{1,0}x^{\gamma_1} + \cdots \qquad + d_{M,0}x^{\gamma_M} \\
(1) \qquad & + d_{0,1}\eta^{\delta_1} + d_{1,1}x^{\gamma_1}\eta^{\delta_1} + \cdots \qquad + d_{0,N}\eta^{\delta_N} + \cdots \\
& + R_{M+1,0}(x,\eta)\,x^{\gamma_{M+1}} + \cdots + R_{0,N+1}(x,\eta)\,\eta^{\delta_{N+1}}
\end{aligned}
$$

ただし、$d_{j,k}$ は x, η に依らない定数

$\{\gamma_j\}, \{\delta_k\}$ は単調増加な非負実数列

$R_{j,k}(x, \eta)$ は領域 $[0, x_0] \times [0, \eta_0]$ で有界 とする.

この展開をより正確に表現するために非負インデックスの集合を考える。先づ インデックスの間の大小関係を

$$(j, k) \leq (m, n) \iff j \leq m \text{ かつ } k \leq n$$

従って

$$(j, k) = (m, n) \iff j = m \text{ かつ } k = n$$

と定める。インデックス集合Bを

(2) Bの任意の要素 μ に対して

$0 = (0, 0) \leq \kappa \leq \mu$ ならば κ はBに属する。

様にとる。そして(2)を満足しているBに対して

$$\varphi(B) = \{\mu \in B \,;\ \kappa \gneq \mu \text{ ならば } \kappa \notin B\}$$

$$\psi(B) = \{\mu \notin B \,;\ 0 \leq \kappa \lneq \mu \text{ ならば } \kappa \in B\}$$

と定義する。次に一つのインデックス μ に対して

$$\omega(\mu) = \{\kappa \,;\ 0 \leq \kappa \leq \mu\}$$

とおく。このとき次の命題が成立つ

Proposition　非負インデックス集合Bが(2)を満足するならば、ℓ 個のインデックス $\{\mu_j\}_{j=1}^{\ell}$ が在って

$$B = \bigcup_{1 \leq j \leq \ell} \omega(\mu_j)$$

と表わされる。さらに $\mu_j=(m_j,n_j)$ とすると

$$m_1<m_2<\cdots<m_\ell \quad \text{かつ} \quad n_1>n_2>\cdots>n_\ell$$

となる様にとれる。

以上の準備のもとで漸近展開を

$$T(x,\eta)=\sum_{(j,k)\in B} d_{j,k}\,x^{\gamma_j}\eta^{\delta_k}+\sum_{(j,k)\in\psi(B)} R_{j,k}(x,\eta)\,x^{\gamma_j}\eta^{\delta_k}$$

と表わす。そして一つのインデックス $\pi=(p,q)$ とインデックス集合 $A=\bigcup_{1\le\ell\le L}\omega(\mu_\ell)$, $\mu_\ell=(m_\ell,n_\ell)$ とに対して補外値 T_π^A を定める。先づパラメーター x,η に対して補外作用素 $\Lambda_{p,1}^m$, $\Lambda_{q,2}^n$ を §1 に従って構成する。即ち η を固定したときの展開

$$\begin{aligned}T_1(x)&=T(x,\eta)\\&=d_0'+d_1'x^{\gamma_1}+\cdots+d_M'x^{\gamma_M}+R_{M+1}'(x)\,x^{\gamma_{M+1}}\end{aligned}$$

とパラメーター列 $\{x_j\}$ に対する補外作用素を $\Lambda_{p,1}^m$ とおく。従って §1 の結果から

$$T_{p,1}^m-T(0)\sim\sum_j \rho_{p,1}^{m,j+m}\,d_{j+m}'$$

とおくと

$$|\rho_{p,1}^{m,j+m}|=O(|x_p|^{\gamma_{\min(j+m,M)}})$$

なる評価が得られる。$\Lambda_{q,2}^m$ に対しても全く同様である。

先づ $L=1$, 即ち $A=\omega(\mu)$ のとき

Theorem 3

$$\Lambda_{(p,q)}^{\omega(m,n)}=\Lambda_{p,1}^m\cdot\Lambda_{q,2}^n$$

が成立つ。誤差については

$$T_{(p,q)}^{\omega(m,n)} - T(0) = \sum_{\substack{(j,0)\in B \\ m+1\leq j}} \rho_{p,1}^{m,j} d_{j,0} + \sum_{\substack{(0,k)\in B \\ n+1\leq k}} \rho_{q,2}^{n,k} d_{0,k}$$
$$+ \sum_{(m+1,n+1)\leq(j,k)\in B} \rho_{p,1}^{m,j} \rho_{q,2}^{n,k} d_{j,k} + O\Big(\sum_{(j,k)\in\psi(B)} x_p^{\gamma_j} \eta_q^{\delta_k}\Big)$$

即ち

$$|T_{(p,q)}^{\omega(m,n)} - T(0)| = O(\rho_{p,1}^{m,m+1} + \rho_{q,2}^{n,n+1})$$

なる評価が得られる。

Theorem 4

$$A = \bigcup_{1\leq l\leq L} \omega(\mu_l), \qquad \mu_l = (m_l, n_l)$$

ただし，　$m_i < m_j$　かつ　$n_i > n_j$　if　$i<j$．

とすると

$$\Lambda_\pi^A = \Lambda_\pi^{\omega(\mu_1)} + \Lambda_\pi^{\omega(\mu_2)} + \cdots + \Lambda_\pi^{\omega(\mu_L)}$$
$$- \left(\Lambda_\pi^{\omega(m_1,n_2)} + \Lambda_\pi^{\omega(m_2,n_3)} + \cdots + \Lambda_\pi^{\omega(m_{L-1},n_L)}\right)$$

が成立つ.

誤差については，$\gamma_k = \delta_k = k$ の場合には

$$|T_\pi^A - T(0)| = O(x_p x_{p+1} \cdots x_{p+m_L} + x_p \cdots x_{p+m_{L-1}} \eta_q + \cdots + \eta_q \eta_{q+1} \cdots \eta_{q+n_L})$$

なる評価が得られる。

§3　数値例

$$I = \int_0^1\int_0^1 f(x,y)\,dx\,dy$$

の台形則での近似解に対する補外法の適用を考える．

近似解を自然数M，Nに対して

$$\Psi\left(\frac{1}{M},\frac{1}{N}\right)=\frac{1}{MN}\sum_{\substack{0\le m\le M\\0\le n\le N}} w_{m,n}\, f\left(\frac{m}{M},\frac{n}{N}\right)$$

とする。　ただし

$$w_{m,n}=\begin{cases}1/4 & m=0,M \text{ and } n=0,N\\ 1/2 & m=0,M \text{ or } n=0,N\\ 1 & \text{otherwise}\end{cases}.$$

このとき　被積分函数fが十分滑らかならば

$$\Psi(\xi,\eta)\sim\sum_{\substack{0\le m\\0\le n}}\int_0^1\!\!\int_0^1\left(\frac{d}{dx}\right)^{2m}\left(\frac{d}{dy}\right)^{2n} f(x,y)\,dx\,dy\cdot d_{m,n}\,\xi^{2m}\eta^{2n}$$

なる漸近展開が得られる.

補外の方法としてはいろいろあるが　$\xi_k=\eta_k=2^{-k-1}$　として

1°.　Aとして

$$w(0,0),\ w(1,1),\ w(2,1)\cup w(1,2),\ \cdots,$$
$$w(2j-1,j)\cup w(j,2j-1),\ w(2j,j)\cup w(j,2j),\ \cdots$$

なる列をとる場合.

2°.　$w(0,0),\ w(1,1),\ \cdots,\ w(j,j),\ \cdots$

なる列をとる場合などが考えられる。

例　$f(x,y)=(xy+\frac{1}{2})^{\frac{1}{2}}$

に対する補外の誤差は以下のようになった．計算量の目安として被積分函数の評価回数を記しておく（右端は2パラメーターで1°の場合のときの値）．真の値は

$$.857\ 420\ 204\ 894\ 596\ 961\ 084$$

である．

評価回数	1パラメーター補外	2パラメーター補外 2°	2パラメーター補外 1°	評価回数
9	.50−2	.50−2	.50−2	9
25	.24−4	.18−4	.18−4	25
81	.13−6	.13−6	.14−6	65
289	.29−9	.67−9	.67−9	225
1089	.56−12	.18−11	.28−11	513
4225	.44−15		.19−14	1921
16641			.26−16	4029

1パラメーター補外は $\xi=\eta$ とおいて補外した結果である。

例　$f(x,y)=\{xy(xy+1)\}^{\frac{1}{2}}$

は $x=0$，$y=0$ 上で微分が滑らかでないから，漸近展開(1)は $\{\gamma_j\}=\{\delta_j\}=\{1.5, 2, 2.5, 3.5, 4, \cdots\}$ で成立つ．このときは真の値が不明なので近似値を以下に表にする．

評価回数は上の例と同じなので省略する

1パラメーター補外	2パラメーター補外 2°.	2パラメーター補外 1°
.444 648 947 188		
.511 740 491 312	.513 153 248 051	
.516 612 083 468	.516 399 118 919	.516 394 761 340
.516 445 788 355	.516 455 065 390	.516 455 059 501
.516 453 841 962	.516 454 269 146	.516 454 269 587
.516 454 270 257		.516 454 271 287
.516 454 271 436		

1パラメーター補外のときは $\{r_i\}$ として

$$\{1.5,\ 2,\ 2.5,\ 3,\ 3.5,\ 4,\ \cdots\}$$

をとる必要がある。

REFERENCES

[1]BULIRSCH,R.-STOER,J.: "FEHLERABSCHATZUNGEN UND EXTRAPOLATION MIT RATIONALEN FUNCTIONEN BEI VERFAHREN VOM RICHARDSON-TYPUS" Num.Math.6('64)

[2]--: "NUMERICAL TREATMENT OF ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS BY EXTRAPOLATION METHODS" Num.Math.8('66)

[3]--: "ASYMPTOTIC UPPER AND LOWER BOUNDS FOR RESULT OF EXTRAPOLATION METHODS" Num.Math. 8('66)

[4]GRAGG,W.B.: "ON EXTRAPOLATION ALGORITHM FOR ORDINARY INITIAL VALUE PROBLEM" J.SIAM.Num.Anal. 2('65)

[5]HOFFMANN,P.: "ASYMPTOTIC EXPANSIONS OF THE DISCRETIZATION ERROR OF BOUNDARY VALUE PROBLEM OF THE LAPLACE EQUATION IN RECTANGULAR DOMAINS" Num.Math. 9('67)

[6]STETTER,H.J.: "ASYMPTOTIC EXPANSION FOR THE ERROR OF DISCRETIZATION ALGORITHMS FOR NONLINEAR FUNCTIONAL EQUATIONS" Num.Math. 7('65)

[7]JOYCE,D.C.: "SURVEY OF EXTRAPOLATION PROCESSES IN NUMERICAL ANALYSIS" SIAM review 13('71)

[8]LYNESS,J.N.-NINHAM,B.W.: "NUMERICAL QUADRATURE AND ASYMPTOTIC EXPANSIONS" MATH.COMP. 21('67)

[9]LIGHTHILL,M.J.: "INTRODUCTION TO FORIER ANALYSIS AND GENERALIZED FUNCTIONS" Cambridge Univ. Press '58

[10] 花田孝郎: "EXTRAPOLATION METHODS WITH MULTIPARAMETER" C. & A. 6('74)