Richardson 様外挿の精度†

後 藤 文 昭*

Precision of Richardson-Like Extrapolations

Fumiaki Goto*

Two types of Richardson-Like extrapolations for finding accurate eigenvalues of the second order differential equation using finite-difference techniques is studied using the Mathieu type equation. Both symmetrical and asymmetrical finite-difference expressions are explored and the conclusion is that the Richardson's extrapolation is most efficient when used with the simplest symmetrical expression.

Key Words: Richardson-like extrapolations, finite-difference methods, accurate eigenvalues, symmetrical and asymmetrical matrices

1. はじめに

有限差分法によって多くの工学的問題が数値計算されていることは周知のとおりであり、参考図書としては、McCormick and Salvadori¹⁾によるものがある。

区間 $[a, b]$ 内で、境界条件 $f(a)=f(b)=0$ を課された波動方程式の基底状態の固有値を、小さい区分数で精度の良い解を求めるため、 d^2f/dx^2 の代りに、各区分点に偏らない 3 点差分公式を適用し、2 次の Richardson 外挿公式を用いた計算が、H. C. Bolton and H. I. Scoins²⁾ によって行われ、また、F. Goto and H. C. Bolton³⁾ によって 5 点差分公式と 6 点差分公式を併用し、ポテンシャル項が単調な関数形をしている場合が扱われ、厳密解と比較しながら、その精度についても検討されている。

ここでは、ポテンシャル項が単調でない関数項を含む、Mathieu 型振動方程式を例にとり、ポテンシャル項の波数が少ない場合と多い場合とで、その精度がどのように影響されてくるかについて記述する。

2. 差分公式

d^2f/dx^2 に対して、誤差の第一項が h^2 の項をもつ

偏らない 3 点差分公式と、誤差の第一項が h^4 の項をもつ偏らない 5 点差分公式は、以降の誤差項に h の偶数べきのみをもっている。

誤差の第一項が h^4 の項をもち、偏らない 5 点差分公式が適用できない区分点にのみ適用しようとしている右に偏った 6 点差分公式と、左に偏った 6 点差分公式は、それぞれ次式で与えられ、以降の誤差項には h の奇数べきと偶数べきをもっている。

$$f_i'' = \frac{1}{12h^2} \{10f_{i-1} - 15f_i - 4f_{i+1} + 14f_{i+2} - 6f_{i+3} + f_{i+4}\} - \dots \quad (1)$$

$$f_i'' = \frac{1}{12h^2} \{f_{i-4} - 6f_{i-3} + 14f_{i-2} - 4f_{i-1} - 15f_i + 10f_{i+1}\} - \dots \quad (2)$$

3. 外挿公式

d^2f/dx^2 を含む演算子の固有値を λ とし、近似固有値を A とすれば、偏らない 3 点差分公式に対して、次式のように展開することができる。

$$A = \lambda + \nu_2 h^2 + \nu_4 h^4 + \nu_6 h^6 + \nu_8 h^8 + \dots \quad (3)$$

順次、 $\nu_2, \nu_4, \nu_6, \nu_8, \dots$ を消去することにより、よく知られた 2 次の Richardson 外挿公式

$$\lambda = \lambda_{i,j \dots i,m} = \frac{\lambda_{i,j \dots i,m} h_m^2 - h_i^2 \lambda_{j \dots i,m}}{h_m^2 - h_i^2} = \lambda + \dots \quad (4)$$

が得られる。この公式を用いる場合を、対称な場合と呼ぶことにする。ただし、 λ_i は、区分数 N を i とした場合の近似固有値を示し、(4)式は、 λ_i から λ_m までの近似固有値から外挿された、より良い近似固有値を示す。

偏らない 5 点差分公式に、(1)式と(2)式とを合せ用いる場合には、次式のように展開しなければならない。

$$A = \lambda + \nu_4 h^4 + \nu_6 h^6 + \nu_8 h^8 + \dots \quad (5)$$

順次、 ν_4, ν_6 および ν_8 を消去することにより、(6)式、(7)式および 8 (式) の Richardson 様外挿式を得る。

† 計測自動制御学会東北支部第 105 回研究会で発表 (昭 62・5)

* 岩手大学工学部 盛岡市上田 4-3-5

* Faculty of Engineering, Iwate University, Morioka
(Received September 21, 1987)

$$\lambda_{ij} = \frac{\lambda_i h_j^4 - h_i^4 \lambda_j}{h_j^4 - h_i^4}$$

$$= \lambda - \nu_5 \frac{h_i^4 h_j^4}{(h_i + h_j)(h_i^2 + h_j^2)} - \nu_6 \frac{h_i^4 h_j^4}{(h_i^2 + h_j^2)} + \dots$$
(6)

$$\lambda_{ijk} = \frac{\lambda_{ij}(h_i + h_j)(h_i^2 + h_j^2)h_k^4 - h_i^4(h_j^2 + h_k^2)(h_j + h_k)\lambda_{jk}}{(h_i + h_j)(h_i^2 + h_j^2)h_k^4 - h_i^4(h_j^2 + h_k^2)(h_j + h_k)}$$

$$= \lambda - \nu_6 \frac{h_i^4 h_j^4 h_k^4 (h_i - h_k)}{(h_i + h_j)(h_i^2 + h_j^2) - h_i^4 h_k^4 (h_j^2 + h_k^2)(h_j + h_k)} + \dots$$
(7)

$$\lambda_{ijkl} = \frac{\lambda_{ijk}F - G\lambda_{klij}}{F - G} = \lambda + \dots, \quad (8)$$

ただし,

$$F = \{(h_i + h_j)(h_i^2 + h_j^2)h_k^4 - h_i^4(h_j^2 + h_k^2)(h_j + h_k)\} \cdot (h_j - h_i)h_i^4, \quad (9)$$

$$G = h_i^4(h_i - h_j)\{(h_j + h_k)(h_j^2 + h_k^2)h_i^4 - h_i^4(h_k^2 + h_j^2)(h_k + h_i)\}. \quad (10)$$

(6), (7)式および(8)式を用いる場合を, 非対称な場合と呼ぶことにする.

4. 数値計算

適用例として, Mathieu 型振動方程式

$$-\frac{d^2 f}{d\xi^2} - q \cos(2\xi)f = af. \quad (11)$$

で $q=1$ とし, $x=\xi/Q$ で変換した式

$$-\frac{d^2 f}{dx^2} - Q^2 \cos(2xQ)f = Q^2 af = \lambda f. \quad (12)$$

を用い, 区間 $[-1, 1]$ で, 境界条件 $f(-1)=f(1)=0$ を課す. ただし, Q は定数であり, 差分 h は, 区間の $1/2N$ とする.

以上の設定から, 対称な場合および非対称な場合では, それぞれ, $(2N-1)$ 行・ $(2N-1)$ 列の対称行列および実行列からなる永年方程式を得る. それゆえ, 対称行列については Jacobi の方法を, 実行列については Double QR 法を用いて計算した.

5. 結果と考察

$Q=\pi/2$ および $Q=\pi$ とした場合の結果を N とともにそれぞれ, Table 1(a)と(b)および Table 2(a)と(b)に示す.

各表の中の外挿値を示す見出しとして, $\lambda_{i\dots m}$ の代りに, $A(i, \dots, m; 3s)$ と $A(i, \dots, l; 6a)$ に書き換えてある.

各表の最終外挿値とその直前の外挿値が一致している桁のつぎに”印を挿入して, 固有値の収束状況を知る手掛かりとした. また, Table 1(a)と(b)および Table 2(a)と(b)において互いに対応する最終外挿値が, 四捨五入の範囲で一致する位置を示すため下線

Table 1 (a) Extrapolants for $Q=\pi/2$ with $N=6, 7, 8, 9$ and 10

Symmetrical case.				h^2	h^4	h^6	h^8	h^{10}
N	h			$A(N; 3s)$	$A(i, j; 3s)$	$A(i, j, k; 3s)$	$A(i, j, k, l; 3s)$	$A(i, j, k, l, m; 3s)$
6	0.166	666	6667	1.143 217 8994	1.161 368 2887	1.161 291 4974	1.161 293 0943	1.161 293 07"18
7	0.142	857	1429	1.148 033 3088	1.161 334 6925	1.161 292 3846	1.161 293 07"99	
8	0.125	000	0000	1.151 150 8206	1.161 317 9782	1.161 292 7392		
9	0.111	111	1111	1.153 284 6685	1.161 308 8922			
10	0.100	000	0000	1.154 809 2710				

Asymmetrical case.				h^4	h^6	h^8	h^{10}
N	h			$A(N; 6a)$	$A(i, j; 6a)$	$A(i, j, k; 6a)$	$A(i, j, k, l; 6a)$
6	0.166	666	6667	1.048 450 5047	1.142 020 9180	1.154 884 9968	1.158 608 0613
7	0.142	857	1429	1.091 513 9394	1.148 595 2592	1.156 941 3406	1.15"9 474 5579
8	0.125	000	0000	1.115 135 2375	1.152 477 6824	1.15"8 227 1167	
9	0.111	111	1111	1.129 164 9779	1.154 930 2617		
10	0.100	000	0000	1.138 025 6590			

(b) Extrapolants for $Q=\pi/2$ with $N=11, 12, 13, 14$ and 15

Symmetrical case.				h^2	h^4	h^6	h^8	h^{10}
N	h			$A(N; 3s)$	$A(i, j; 3s)$	$A(i, j, k; 3s)$	$A(i, j, k, l; 3s)$	$A(i, j, k, l, m; 3s)$
11	0.090	909	0909	1.155 936 3368	1.161 300 3567	1.161 293 0160	1.161 293 0669	1.160 293" 1009
12	0.083	333	3333	1.156 793 1320	1.161 298 2718	1.161 293 0355	1.161 293" 0826	
13	0.076	923	0769	1.157 459 5728	1.161 296 8826	1.161 293 0524		
14	0.071	428	5714	1.157 988 1818	1.161 295 9293			
15	0.066	666	6667	1.158 414 5137				

Asymmetrical case.				h^4	h^6	h^8	h^{10}
N	h			$A(N; 6a)$	$A(i, j; 6a)$	$A(i, j, k; 6a)$	$A(i, j, k, l; 6a)$
11	0.090	909	0909	1.143 899 0970	1.157 671 7713	1.159 997 0967	1.160 720 5494
12	0.083	333	3333	1.147 947 3440	1.158 464 5193	1.160 273 2372	1.160" 838 0724
13	0.076	923	0769	1.150 828 7871	1.159 042 2550	1.160" 476 1344	
14	0.071	428	5714	1.152 935 8187	1.159 473 0412		
15	0.066	666	6667	1.154 512 3708			

Table 2 (a) Extrapolants for $Q=\pi$ with $N=6, 7, 8, 9$ and 10

Symmetrical case.				h^2	h^4	h^6	h^8	h^{10}
N	h			$A(N; 3s)$	$A(i, j; 3s)$	$A(i, j, k; 3s)$	$A(i, j, k, l; 3s)$	$A(i, j, k, l, m; 3s)$
6	0.166	666	6667	0.773	526	7833		
7	0.142	857	1429	0.811	620	0996	0.917	109
8	0.125	000	0000	0.835	719	2384	0.911	015
9	0.111	111	1111	0.851	974	1463	0.911	218
10	0.100	000	0000	0.863	471	6597	0.911	275
							0.911	380
							0.911	3"30
								8061
								3347
								0.911
								3"01
								9445

Asymmetrical case.				h^4	h^6	h^8	h^{10}
N	h			$A(N; 6a)$	$A(i, j; 6a)$	$A(i, j, k; 6a)$	$A(i, j, k, l; 6a)$
6	0.166	666	6667	0.845	474	4170	
7	0.142	857	1429	0.880	692	6362	0.921
8	0.125	000	0000	0.895	100	4678	0.915
9	0.111	111	1111	0.901	973	8903	0.913
10	0.100	000	0000	0.905	562	2455	0.912
							408
							1886
							0.909
							301
							4318
							0.910
							964
							4503
							0.912
							312
							3706
							0.911"
							194
							8688

(b) Extrapolants for $Q=\pi$ with $N=11, 12, 13, 14$ and 15

Symmetrical case.				h^2	h^4	h^6	h^8	h^{10}
N	h			$A(N; 3s)$	$A(i, j; 3s)$	$A(i, j, k; 3s)$	$A(i, j, k, l; 3s)$	$A(i, j, k, l, m; 3s)$
11	0.090	909	0909	0.871	910	3670		
12	0.083	333	3333	0.878	290	4441	0.911	855
13	0.076	923	0769	0.883	233	0209	0.911	702
14	0.071	428	5714	0.887	140	8307	0.911	600
15	0.066	666	6667	0.890	284	4995	0.911	531
								3645
								0.911
								316
								7415
								0.911
								319
								9204
								0.911
								324"
								9789
								0.911
								325
								0492
								0.911
								324"
								8971

Asymmetrical case.				h^4	h^6	h^8	h^{10}
N	h			$A(N; 6a)$	$A(i, j; 6a)$	$A(i, j, k; 6a)$	$A(i, j, k, l; 6a)$
11	0.090	909	0909	0.907	575	4198	
12	0.083	333	3333	0.908	775	9555	0.911
13	0.076	923	0769	0.909	529	5625	0.911
14	0.071	428	5714	0.910	023	2078	0.911
15	0.066	666	6667	0.910	358	1800	0.911
							659
							8018
							0.911
							269
							0792
							0.911
							298
							8557
							0.911
							347
							0900
							0.911
							3"44
							2069

を引いてある。

Table 1(a)および(b)における最終外挿値は、 $N=6$ から 15 までを用いた外挿値 1.161 293 3934 と、かなり良い一致を示しており、 N を大きくすることによって解くべき永年方程式の次数が高くなり、計算精度の劣化や演算時間の増大を考え合せると、区分数をあまり大きく取る必要がないことを示しているものと考えられる。

Q を大きくした場合、(12)式の $\cos$ 項による波数が多くなり、Table 2(a)および(b)から、すべての外挿値の精度が悪くなっていることがわかり、また、 $N=6$ から 15 までを用いた外挿値 0.911 324 9100 と、必ずしも良い一致とは考えられない。すなわち、ポテンシャル項が複雑になると、精度が悪化することを示しており、幾分多めの区分数を必要とすることが示唆されているものと考えられる。

6. おわりに

全表の見出し h^6 の列にある外挿値を見てゆくと、非対称な場合の結果は、対称な場合の結果より劣っていることがわかる。また、非対称な場合では、外挿の次数が高くなるにつれて、外挿式がどんどん複雑になることを考え合せると、結局、最も簡単な偏らない 3 点差分公式と 2 次の Richardson 外挿公式を利用することが、最良であるように思われる。

参考文献

- 1) J. M. McCormick and M. G. Salvadori: Numerical Methods in FORTRAN, Prentice-Hall, Englewood Cliffs (1964)
- 2) H. C. Bolton and H. I. Scoins: Eigenvalues of Differential Equations by Finite-Difference Methods, Proc. Camb. Phil. Soc., **52**, 215/229 (1956)
- 3) F. Goto and H. C. Bolton: Use and Accuracy of the Richardson Deferred Approach to the Limit, Computer Physics Communications, **46**, 7/11 (1987)