数値計算のスクエア テイラー · オイラーとルンゲ · クッター (解説編)

Shimura Masato
JCD02773@nifty.ne.jp

2009 年 2 月 25 日

目次

1	**テーラー展開**	1
2	**離散化**	3
3	**差分と数値計算**	4
4	**積分と数値計算**	6
5	Reference	8

概要

関数の数値解法はコンピューターの出現よりもずっと早くから行われており、コンピューターは恩恵を受けたに過ぎない。それだけ数学は数値計算に頼らなければならなかったとも言える。
数学と数値計算の狭間を, 開発した人たちのバイオグラフィも振り返りながらレビューする。

1　テーラー展開

■イングランドでは　大英帝国の繁栄を築いた *Queen Elizabeth I* の治世 (1558-1603) でチューダ朝が終わり、メアリの子でスコットランドの王がスチュアート朝のジェームス I 世となった。王権神授説を掲げた次のチャールズ I 世はクロムウエル (1599-1658) により、斧で首を切られ、12 年間共和制になったが、1660 年に、長老派による王政復古があり、更に 1688 年に名誉革命を迎える。大陸ではルイ 14 世が登場し、スコットランドやアイルランドを巻き込み混乱が続いた。
この時代を *Isac Newton*（1642 – 1729) や *Brook Taylor*(1685 – 1731) は過ごした。

■*Brook Taylor*　(1685 – 1731 *Edmonton* 生まれ)
祖父はクロムウエル派の州の代表で地方の判事であり、名門であった。父の躾は厳格であったが、父から絵と音楽を愛好することを受け継いだ。家庭で教育を受け古典と数学に優れ、1703 年から Cambrige の St John’s College で学んだ。数学に優れ、1708 年には最初の重要な論文を著し、1712 年には Newton と Leipniz の論争に関する審査委員会のメンバーに任命されている。1714 年に Royal Society の Secretary (書記) に就任。
妻の出産では悲劇が続き、2 人の妻と最初の子を亡くし, 娘一人が生き延びた。
テーラー展開のアイデアは 1712 年 *Machin* への手紙に記され 1715 年

に出版された。類似のアイデアは *James Gragory, Newton, Leipnitz, Johann Bernoulli* も提示しているがテイラーも独自に発見したものである。1772 年に *Lagrange* が微分計算の重要な式であると発表し、'Taylor series' の呼び名は 1786 年に *Lhuilier* が用いた。

テイラーは弦の振動や透視法の研究も行っている。愛した音楽の弦楽器の調弦法から展開のスケールのアイデアを得たかも知れない。

1.1　Taylor 展開

Z　Taylor 展開も 200 年を迎えようとしている。

1709 年徳川綱吉逝去　生類哀れみの令廃止。お犬屋敷の 10 万匹は叩き殺された。

1716 年徳川吉宗将軍就任

この頃ですね

A　関孝和 (1642?-1706) はどうかね。弟子の建部賢弘 (1664-1739) は $arcsin^2$ の級数展開を 1722 年に著しているようだ。$Euler(1707-1783)$ よりも 15 年早い。

Z　和算の奥義は門外不出、師弟相伝で大金を払って弟子入りしなければ教えてもらえなかった。

A　$f(x) = e^x$

を $x = 0$ 付近で次のような 3 次多項式で近似したい

$g(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$

Z　建部さんに敬意を表してやってみましょう。近江一宮は日本武尊縁の建部神社。

$$g(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$$
$$g'(x) = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2$$
$$g''(x) = 2a_2 + 6a_3x$$
$$g'''(x) = 6a_3$$

$$a_0 = f(0)$$
$$a_1 = f'(0)$$
$$a_2 = \frac{f''(0)}{2}$$
$$a_3 = \frac{f'''(0)}{6}$$

$$g(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6}$$

A　$Taylor$ は音楽が好きで、弦の振動の研究もしている。1712 年に $H\ddot{o}ndel(1685-1759)$ はハノーファからイングランドに渡っている。ハノーファーで袖にした領主が数年後にイングランド国王ジョージ I 世となったから大変で、テムズ川の船遊びのための「水上の音楽」を作るなど懸命に機嫌を取っている。

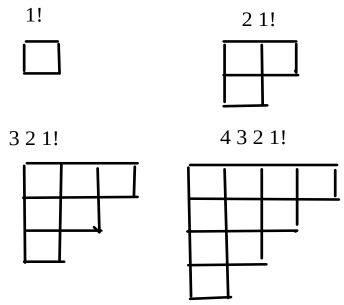
Z　調音はピタゴラスに始まるようだ。弦の振幅は $\frac{2}{3}$ の点を押さえると 5 度 $(C \rightarrow G)$ となり、$\frac{1}{2}$ では 1 オクターブ上がる。$\frac{1}{6}$ は $\sqrt[12]{2^{31}} = 5.99323$ の逆数付近で 4 オクターブ以上高い $E^\sharp$ に相当し弦楽器の音域を超える。$Taylor$ がチェロを覗き込んで収束を考えたかもしれない。

A　関数を分かりやすく計算しやすい多項式の形で表し、かつ、多項式を 1 項毎に微分や積分をすれば全体を微分したり積分しなくとも良いという発想は実に素晴らしい。

Z　高階の関数の微分はタマネギの皮を一枚づつはがしていくのに似ている。一枚づつ並べてみると。

A　3 次では丁度 $\frac{1}{2}\Delta x * h * \frac{1}{3}$ となり三角錐の体積となる。4 次では 4 次元 4 角錐を想像することになる。

Z　テーラー展開は収束が早いのでコンピュータ言語や電卓の無理数 π, e, etc の定義にも用いられている。恩恵は見た方が早いので



はないか。

1.2 テーラー展開

$$f(x) = f(a) + \frac{x-a}{1!}f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2!}f''(a) + \frac{(x-a)^3}{3!}f'''(a) + \frac{(x-a)^4}{4!}f''''(a) + \cdots$$

$set\ \ h = x - a$

$$f(x) = f(a)+\frac{h}{1!}f'(a)+\frac{h^2}{2!}f''(a)+\frac{h^3}{3!}f'''(a)+\cdots$$

$point\ \ x+h$ を用いると

$$f(x+h) = f(x)+f'(x)+f''(x)\frac{h^2}{2!}+f'''(x)\frac{h^3}{6!}+\cdots$$

$point\ \ x-h$ を用いると

$$f(x-h) = f(x)-f'(x)h+f''(x)\frac{h^2}{2!}-f'''(x)\frac{h^3}{6!}+\cdots$$

$f''''(x)\dfrac{h^4}{24!}$ の項はは十分小さいので捨てる

2 離散化

A 凡そ離散化、差分化には時間、空間を離散化するが、時間差分は変数が一つなので常微分方程式の差分、空間差分は変数が 2，3 個なので偏微分方程式の差分と言われる。ここでは主に時間差分を対象としよう。

2.1 一階差分

$first\ derivative$

$forward$

$$f'(x) = \frac{df}{dx} = \frac{1}{h}(f(x+h) - f(x))$$

$backward$

$$f'(x) = \frac{df}{dx} = \frac{1}{h}(f(x) - f(x-h))$$

$central$

$$f'(x) = \frac{df}{dx} = \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h))$$

2.2 2 階差分

$second\ derivative$

$central$

$$f''(x) = \frac{d^2f}{dx^2} = \frac{1}{h^2}(f(x+h) - 2f(x) + f(x-h))$$

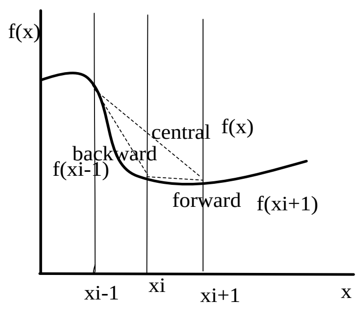


図 1

微分の公式は

$$f'(x) = lim_{h\to 0}\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

hは十分小さいので離散化すると

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

central は区間が 2 で精度もよいのでウエイトを置くと
$\frac{d^2y}{dx^2} = \frac{1}{h^2}(y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1})$
$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{2h}(y_{i+1} - y_{i-1})$

数値計算法は次数の取り方とウェイトにより次のような方法がある。

3　差分と数値計算

A　数値解法には陽解法 (Explicit scheme) と陰解法（inplicit schema) がある。陰解法は
$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t f(\phi^{n+1})$
のように ϕ^{n+1} が右側に出てくる方法で方程式を解かなければならない。陽解法は右に出てこないので、順次加算していけばよい。

Z　陰解法にはクランクニコルソン法がある。
$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{1}{2}\Delta t f(\phi^{n+1})$
オイラー法やルンゲクッタ法は陽解法である。

3.1　オイラー法

A　*Euler* はスイスのバーゼル生まれで *Bernouilli* に才能を見いだされた。永くペテルブルグで女帝エカテリーナ II 世に仕えた近代数学の A カードの一人。オイラー法は簡潔で美しく、コンピュータでは δ を小さく取れるので多くの教科書が言うほど精度は悪くない。

$$y(t) = y_i + (t - t_i)y'_i + \frac{1}{2}(t - t_i)^2 y''(\xi)$$

ここで
$y'(t_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \frac{h}{2}y''(\xi)$
次を得る
$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \frac{h}{2}y''(\xi) = f(t_i, y_i)$

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i) + \frac{1}{2}h^2 y''(\xi)$$

$$y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y)dt$$

となり積分で解けている

誤差項を落とし,y を w に置き換える。

$$w_0 = \alpha$$

$$w_{t+1} = w_t + hf(t_i, w_i)$$

Z　w_{i+1} の値を、点 (t_i, w_i) の傾きで決まる直線に沿って i 時間毎に移動させながら決定する。

3.2　修正オイラー法

A　オイラー法を用いて、更にもう一段から数段後ろに計算ブースターを付加した方法が用いられている。

Z　修正オイラー法とホイン法はウエイトが少し異なるが類似した方法だ。
修正オイラー法とホイン法のウエイト

Modified Euler

a	b	c
0		
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	
	0	$1 = weight$

Heun

a	b	c
0		
1	1	
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} = weight$

3.2.1　修正オイラー法

$$\tilde{w} = w_i + \frac{h}{2}f(t_i, w_i)$$

$NB.\ Euler\ mehodwith\ step\ \frac{h}{2}$
$w_{t+1} = w_i + hf(t_i + \frac{h}{2}, \tilde{w})$
$NB.\ midpoint\ integration$

3.2.2 ホイン法

改良オイラー法とも呼ばれる。

$\tilde{w} = w_i + hf(t_i, w_i)$ $NB.\ Euler\ method$
$w_{t+1} = w_i + \frac{h}{2} f(t_i, w_i) + f(t_i + h, \tilde{w})$ $NB.$ 台形

3.3 ルンゲ · クッター法

A ルンゲ · クッター法も 100 年以上使い込まれた堅牢な方法だ。

Z 芦屋の六甲登山道では登山靴やチロリアンシューズの人と、ヘルメットを被ってロープを持ったスニーカー（岩でクライムシューズに履き替える）の人の 2 通りを見かける。ルンゲ · クッタ法は岩登りに似ている。

A $Runge \cdot Kutter$ は通常、4 次を用いる。4 次は古典的ルンゲ · クッタ法とも言われる。

$k_1 = hf(x, y)$
$k_2 = hf(x + a_0 h, y + b_0 k_1)$
$k_3 = hf(x + a_1 h, y + b_1 k_1 + c_1 k_2)$
$k_4 = hf(x + a_2 h, y + b_2 k_1 + c_2 k_2 + d_2 k_3)$

k	a	b	c	d	
1	0				
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
3	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
4	1	0	0	1	
		$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6} = weight$

Z 次が良く見受けられる。こちらも初段 k_1 はオイラー法で、2 段目が $k_2.k_3$ の 2 本のブースターで構成され、更に最終段と 3 段構成になっている。

$w_{t+1} = w_i + \frac{1}{6}(k1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
$k_1 = hf(t_i, w_i)$
$k_2 = hf(t_i + \frac{h}{2}, w_i + \frac{k_1}{2})$
$k_3 = hf(t_i + \frac{h}{2}, w_i + \frac{k_2}{2})$
$k_4 = hf(t_i + h, w_i + k_3)$

A 佐藤 · 中村に導出過程が詳しく紹介されている。f'''' まで用いて、13 変数 11 次連立方程式を作成し、$\alpha = \alpha_1 = \frac{1}{2}$ と変数を 2 個潰して連立方程式を解き、$\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}$ を導出している。

Z $Runge \cdot Kutter \cdot Fehlberg(RKF45)$ は k_6 まで計算するが次数は 5 次である。通常は古典的 k_4 で十分である。[*1]

■*Runge Carl David Tolmé Runge*(1856 – 1927) ドイツ　ブレーメン生まれ。

父は商人でキューバのハバナに住み、時折ブレーメンに帰っていた。母はハバナに住むイギリス人の商人の娘で *tolmé* は母方の性である。*Carl* は 8 人兄弟姉妹の 3 番目の息子であり、ブレーメンで生まれたが、幼いときはハバナで過ごし、家族は日常は英語を用いた。父の引退で家族はドイツに戻り、*Carl* は文学と哲学を学ぶためミュンヘン大学に入ったが間もなく数学と物理のコースに換わった。*Max Planck* も在学中で終生の友人となった。1877 年に *Max Planck* と *Runge* はベルリンに行き、*Weierstrass* と *Kummer* 純粋数学を学び、*Friedrich Paulsen* の哲学も興味を持って聞いたが、*Kirhihoff* や *Helmholtz* の物理学の講義は受けられなかった。

[*1] *B.Bradie* 等にパラメータが紹介されている。J のスクリプトを発表している人もいた。

博士の学位はベルリンで微分幾何で得た。2 年ほど Gymnasium(高等学校) の教師をした後、ベルリンに戻り、*Kronecker* と共同研究をし、この間の *Newton, Bernouilli, Gräffe* を元とした数値解法の研究でベルリン大学で講義する資格を得た。

ベルリン大学教授の高名な生理、薬学者 *Emil du Bois − Reymond* と親しくなり、娘の *Aimée* と婚約したが、*Emil* から、教授就任を条件とされ、1886 年にハノーバーの *Technische Hochscule*(高等工業学校）の教授の職を得て結婚した。ハノーバーには 17 年住み、4 人の娘と 2 人の息子を得た。家族は多方面の科学と芸術を楽しみ、*Carl* はピアノを弾き、子等はマタイ受難曲を唱った。自転車で 8km の距離を学校まで通い、水泳や体操にも親しんだ。

ハノーバー時代に *Emil* とベルリンアカデミーの *Heinrich Kayser* とで水素原子のスペクトル波の研究を行い、出版した。1895 年にはイングランドへ赴き *Load Rayleigh* と親しくなり、アメリカへも行き、*A A Michelson* らと交友を持った。

1904 年に *Göttingen* 大学の応用数学の教授となり、引退まで過ごした。

■*Kutta* *Martin Wilhelm Kutta*(1867 − 1944) ドイツ *Pitschen* 生まれ。

1885-1890 *Breslau* 大学で学び、1894 までミュンヘン大学で数学、物理（*Bolzmann* の下で)、天文学を学ぶ。*von Dyck* のアシスタントを務め、*Cambridge* 大学にも 2 年程遊学。ミュンヘン、イエナ、アーヘンの大学の准教授を経て

1912 *Stuttogart* 大学の教授に就任。

1901 年にルンゲクッタ法を発表

空力学の *Zhukovsky − Kutta form* でも知られる。

3.4 2 階微分方程式のルンゲ · クッタ法

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(x_i, y_i, z_i)\\
l_1 &= g(x_i, y_i, z_i)\\
k_2 &= f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1, z_i + \frac{h}{2}l_1)\\
l_2 &= g(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1, z_i + \frac{h}{2}l_1)\\
k_3 &= f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2, z_i + \frac{h}{2}l_2)\\
l_3 &= g(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2, z_i + \frac{h}{2}l_2)\\
k_4 &= f(x_i + h, y_i + hk_3, z_i + hl_3)\\
l_4 &= g(x_i + h, y_i + hk_3, z_i + hl_3)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\\
z_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)
\end{aligned}
$$

4 積分と数値計算

A 数値積分と言えばシンプソン法が定番だ。シンプソンもテーラーと同時代のニュートン派だ。

Z やはりテーラー展開から積分公式を導いている。

$I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx = \int_{-h}^{h} f(x_i + z)dz$

$f(x_i + 1)$ の x_iの近傍でのテーラー展開

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2!}f''_i + \frac{h^3}{3!}f'''_i + \frac{h^4}{4!}f^{(4)} + \frac{h^5}{5!}f^{(5)} + \frac{h^6}{6!}f^{(6)} + \cdots$$

$f(x_i - 1)$ の x_iの近傍でのテーラー展開

$$f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2!}f''_i - \frac{h^3}{3!}f'''_i + \frac{h^4}{4!}f^{(4)} - \frac{h^5}{5!}f^{(5)} + \frac{h^6}{6!}f^{(6)} + \cdots$$

$f(x_i + h)$ と $f(x_i - h$ のテーラー展開の差

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf'_i + \frac{h^3}{3!}f'''_i + \frac{h^5}{60}f^{(5)} + \cdots$$

整理すると
$\int_{x_i-1}^{x_i+1} f(x)dx = \int_{-h}^{h} f(x_i+z)dz$
$= 2hf_i + \frac{h^3}{3!}f_i'' + \frac{h^4}{60}f^{(4)} + \frac{h^7}{360}f^{(6)} + \cdots$

$f(x_i+h)$ と $f(x_i-h)$ のテーラー展開の和
$\frac{f_{i-1}-2f_i+f_{i+1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}f_i^{(4)} - \frac{h^4}{360}f^{(6)} + \cdots$

代入して整理すると
$I_i = \frac{h}{3}(f_{i-1}-4f_i+f_{i+1}) - \frac{h^5}{90}f_i^{(4)} + \frac{h^7}{540}f^{(6)} + \cdots$

初項のみ用いる。
$I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx \simeq \frac{h}{3}(f_{i-1}+4f_i+f_{i+1})$

書き直すと
$I \simeq \frac{h}{3}(f_0 + 4\sum_{i=1}^{n} f_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_{2i} + f_{2n})$

A シンプソン法は J の package に入っている。
packages/math/integrat.ijs [*2]

■*Thomas Simpson* *Thomas Simpson*(1710-1761 England) イングランドの Market Bosworth の織工の子として生まれ、初等教育を終え、織工となり、数学は独学で修得した。15 才から Nuneaton のパブリックスクールの教師を務める。20 才で下宿の娘と結婚した。星占術で魔の姿で[*3]少女を脅しダービーへ転出し、1736 年にはロンドンに出た。
ここの Coffee House（貧者の大学に相当）で数学を教え、技術と防衛の研究を始める。

1743 年に 2 年前に開設された Woolwich の士官学校の数学主任に研究が認められて任命され、Royal Society の会員にもなる。この頃積分学に関しニュートンを研究し著作を著す。

ニュートン・ラフソン法で知られる多項式の解法
$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
は 1740 年にシンプソンが出版して紹介した。確率ではド・モアブルを発展させた。18 世紀でのニュートン理論の紹介にも功績があり、天文での春分秋分の歳差にも言及している。。

A ラフソンがでてきたが。

z 次に紹介しよう。伝承は少ないようだ。今日ニュートン法またはニュートン・ラフソン法と呼ばれるものはラフソンが一般化したもので、ニュートン自身は 1736 年に出版された著書に個別計算に近いメモを一枚残したに過ぎない。

A イングランドはニュートンが偉大すぎて、後はぺんぺん草も生えないと言った人もいるがしっかりと発展している。

Z *Newton · Raphson* 法 も整理しておこう。
1690 年にラフソンが多項式の解法を発表している。
$f(z)$ が多項式の場合に
$f(x) \simeq f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0)$ で近似する
$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

漸化式で反復する
$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

1740 年にシンプソンは同じ式でラフソンの多項式から範囲を微分可能な一般関数に拡大した。1831 年にフーリエが根の収束と始点の問題を整理し、100 年ほど経て 1956 年にバルナが大域的収束の解析を進

[*2] かって `I.` に隠しコマンドとして入っていたこともあったが、最終的にはここに落ち着いたようだ。
[*3] 本人かアシスタントかは定かではない

めた。

A ラフソンの式にオイラー法が出てきていませんか。ラフソンは多項式しか視野に入っていなかったので大魚を逃がしたようだ。

■*Raphson* *Joseph Raphson*(1648-1715 England) [*4]ケンブリッジの Jesus College で学び、ハーレーの推挙で Roral Society の fellow となる。1690 年に出版された数学書に Newton·Raphson 法が載っている。ライプニッツに対抗したニュートン派の有力な戦士であった。

5 Reference

佐藤次男　中村理一郎「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社 2001

Brain Bradie [Numerical Analsis] Pearson 2006

越塚誠一「数値流体力学」 倍風館　1997

[*4] 生没の年は数学史の Florian Cajoli による推側