

非負係数を持つ線形多段階法の存在条件

仙台電波高専 小沢 一文 (Kazufumi Ozawa)

1. まえがき

常微分方程式の初期値問題を解くための数値解法は、ルンゲ・クッタ法に代表される一段法およびAdams法に代表される線形多段階法とに大別される。線形多段階法は、計算の時間においては一段階法と比べ優れているため、よく用いられる解法である。しかし、高次のAdams法に見られるように、その係数に正と負のものが入り混じり、桁落ちに弱い公式が多く存在する。本報告では、解法をAdams型、Milne型、およびRadial法という3つの形に限定し、すべての係数が非負となるような陰解法の存在条件を考察する。また、そのような解法が存在するとき、丸め誤差を小さくするような公式を決定する。まず始めに非負係数を持つ公式と安定性の関係について議論する。

2. 非負条件を満たす線形多段階法と安定性

微分方程式

$$y' = f(x, y), \quad a \leq x \leq b \tag{2.1}$$

を解く線形多段階法を

$$\alpha_k y_{n+k} + \alpha_{k-1} y_{n+k-1} + \dots + \alpha_0 y_n = h (\beta_k f_{n+k} + \dots + \beta_0 f_n) \tag{2.2}$$

$$\alpha_k = 1,$$

$$f_j = f(x_j, y_j),$$

$$x_j = a + j h, \quad j = 0, 1, \dots, N$$

$$h = (b - a) / N$$

とする。ここで係数 α 、 β が 2 つの条件

$$-\alpha_j \geq 0, \quad j = 0, 1, \dots, k-1 \tag{2.3}$$

$$\beta_j \geq 0, \quad j = 0, 1, \dots, k \tag{2.4}$$

を満たすとき、線形多段階法 (2.2) を 強非負係数法 と呼ぶことにする。また、非負条件 (2.3) だけを満たすとき、弱非負係数法 と呼ぶことにする。

線形多段階法 (2.2) の性質は次の 2 つの特性多項式によって特徴づけられる：

$$\begin{aligned}\rho(\zeta) &= \zeta^k + \alpha_{k-1} \zeta^{k-1} + \dots + \alpha_0 \\ \sigma(\zeta) &= \beta_k \zeta^k + \beta_{k-1} \zeta^{k-1} + \dots + \beta_0\end{aligned}\quad (2.5)$$

ここで、第一多項式 ρ と第二多項式 σ の間に

$$\begin{aligned}\rho(1) &= 0, \\ \rho'(1) &= \sigma(1)\end{aligned}\quad (2.6)$$

なる関係が成立しているものとする。すなわち、解法(2.2)は適合性¹⁾を満たしているものとする。このとき次の定理を得る：

〔定理 1〕

線形多段階法(2.2)は適合性(2.6)を満たし、 ρ と σ は共通根を持たないとする。このとき、解法(2.2)が弱非負条件法ならば零安定になる。

〔証明〕

よく知られている代数方程式の定理²⁾より、 $\rho(\zeta) = 0$ の根は絶対値において、多項式

$$\tilde{\rho}(\zeta) = \zeta^k - |\alpha_{k-1}| \zeta^{k-1} - \dots - |\alpha_0| \quad (2.7)$$

の唯一の正実根を超えない。ところが、解法が弱非負係数法ならば、 ρ と $\tilde{\rho}$ は同一の多項式になり、 $\rho(\zeta)$ のすべての根は $\tilde{\rho}(\zeta)$ の唯一の正実根 $\zeta = 1$ を超えない。すなわち、

$$|\zeta| \leq 1 \quad (2.8)$$

を満たす。ここで、 $\rho(\zeta)$ は単位円上の根

$$\omega = \exp(i\theta) \quad (2.9)$$

$$i = \sqrt{-1}$$

を持っているとする。このとき、

$$\begin{aligned}0 = |\rho(\omega)| &= |\omega^k| |1 + \alpha_{k-1} \omega^{-1} + \alpha_{k-2} \omega^{-2} + \dots + \alpha_0 \omega^{-k}| \\ &\geq |1 + \alpha_{k-1} + \alpha_{k-2} + \dots + \alpha_0| \\ &= \rho(1) = 0\end{aligned}\quad (2.10)$$

となり、上式において等号が成立する。したがって、

$$\alpha_{k-j} \omega^{-j} = \alpha_{k-j}, \quad j = 1, 2, \dots, k \quad (2.11)$$

が成立しているはずである。上式より

$$\begin{aligned}\rho'(\omega) &= k \omega^{k-1} + (k-1) \alpha_{k-1} \omega^{k-2} + \dots + \alpha_1 \\ &= \omega^{k-1} (k + (k-1) \alpha_{k-1} + \dots + \alpha_1) \\ &= \omega^{k-1} \rho'(1)\end{aligned}$$

を得る。ここで、 ρ と σ は共通根を持たないことを考慮すれば

$$\rho'(1) = \sigma(1) \neq 0 \quad (2.12)$$

となり、

$$\rho'(\omega) \neq 0 \quad (2.13)$$

が得られる。これは、単位円上の根 ω は重根にならないことを意味している。すなわち解法は零安定になる。 Q.E.D.

次に強非負係数法の相対安定性について考察する。T.E.Hull & C.R.Newbery⁶⁾は次の定理を与えている：

〔定理 2〕

テスト方程式

$$y' = \lambda y, \quad \lambda > 0$$

を線形多段階公式を用いて解いたとき、

$$h \lambda \beta_n < 1$$

$$h \lambda \beta_i > \alpha_i, \quad i = 0, 1, \dots, k-1$$

ならば解法は相対安定になる。

この定理より、解法が強非負条件を満たし、すべての i ($i = 1, 2, \dots, k-1$) について $\beta_i = \alpha_i = 0$ でなければ、解法は相対安定になることがわかる。この結果と定理1の結果をあわせると、強非負係数法は数値計算をする上で非常に好ましい性質を有していることがわかる。

つぎに、弱非負条件を満たしているいくつかの形の陰解法について、その中から強非負係数条件を満たす公式群を見いだす。

3. Adams型

本節では k 段 k 次のAdams型陰解法が強非負係数法になるための条件を求める。ここでAdams型解法とは、 $\rho(\zeta)$ が

$$\rho(\zeta) = \zeta^k - \zeta^{k-1}, \quad k \geq 1 \quad (3.1)$$

となる解法のことを言うことにする。 $\rho(\zeta)$ が上に示した条件を満たしているとき、解法の次数を k にする $\sigma(\zeta)$ を求める。まず、

$$\begin{aligned} \rho(\zeta) &= \zeta^k R(t), \\ \sigma(\zeta) &= \zeta^k S(t) \\ t &= 1 - \zeta^{-1} \end{aligned} \quad (3.2)$$

と表せば、式(3.1)より直ちに

$$R(t) = t \quad (3.3)$$

が得られる。解法 (ρ, σ) の次数が k となるためには、 $S(t)$ を

$$-\frac{R(t)}{\log(1-t)} - S(t) = c_k t^k + \dots \quad (3.4)$$

となるように置けばよい³⁾。よく知られているように、

$$-\frac{t}{\log(1-t)} = r_0^* + r_1^* t + \dots \quad (3.5)$$

$$r_m^* = (-1)^m \int_{-1}^0 \binom{-s}{m} ds$$

なる展開式をもつので、 $S(t)$ を

$$S(t) = r_0^* + r_1^* t + \dots + r_{k-1}^* t^{k-1} + a t^k \quad (3.6)$$

と置けば、解法 (ρ, σ) の次数は k になることがわかる。式 (3.6) で $a = r_k^*$ とすれば、解法は k 段 $k+1$ 次 Adams-Moulton 法になる。しかしその場合は弱非負条件しか満たさない。以下、 r_m^* の性質をいくつか挙げておく：

$$r_0^* + r_1^* + \dots + r_m^* = r_m, \quad m=0,1,\dots \quad (3.7)$$

$$r_m = (-1)^m \int_0^1 \binom{-s}{m} ds$$

$$r_0^* = 1, \quad r_m^* < 0, \quad m=1,2,\dots$$

$$r_m > 0, \quad m=0,1,\dots$$

次に β の一般形を求める。式 (3.2), (3.6) より、

$$\sigma(\zeta) = \zeta^k \left(\sum_{i=0}^k r_i^* (1-1/\zeta)^i + (a - r_k^*) (1-1/\zeta)^k \right)$$

$$= \sigma^*(\zeta) + (a - r_k^*) (\zeta - 1)^k \quad (3.8)$$

となる。ここで、 $\sigma^*(\zeta)$ は k ステップ Adams-Moulton 法の第二多項式とする。上式より、解法 (2.2) の係数 β は

$$\beta_{k-i} = \beta_{k-i}^* + (-1)^i \binom{k}{i} (a - r_k^*), \quad i=0,1,\dots,k \quad (3.9)$$

として表される。ここで、 β_{k-i}^* は Adams-Moulton 法の係数であり、

$$\beta_{k-i}^* = (-1)^i \sum_{j=i}^k \binom{j}{i} r_j^* \quad (3.10)$$

として表される。各 β_{k-i}^* が非負となるためには、次の条件が成立しなければならない：

(i) $i = \text{even}$

式(3.9)より

$$\beta_{k-i} = \beta_{k-i}^* + \binom{k}{i} (a - r_k^*) \geq 0$$

であるから次の不等式が得られる。

$$a \geq r_k^* - \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^*, \quad 0 \leq i \leq k \quad (3.11)$$

(ii) $i = \text{odd}$

式(3.9)より

$$\beta_{k-i} = \beta_{k-i}^* - \binom{k}{i} (a - r_k^*) \geq 0$$

であるから次の不等式が得られる。

$$a \leq r_k^* + \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^*, \quad 1 \leq i \leq k \quad (3.12)$$

この2つをまとめると、Adams型解法を強非負係数法にするパラメータ a が存在するために条件

$$\max_{i=\text{even}} \left\{ r_k^* - \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^* \right\} \leq \min_{i=\text{odd}} \left\{ r_k^* + \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^* \right\} \quad (3.13)$$

が成立していなければならない。以下この可能性を探る。

ここで、

$$T_i^{(k)} = r_k^* + (-1)^{i+1} \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^*, \quad i = 0, 1, \dots, k \quad (3.14)$$

と表せば、条件(3.13)は

$$L \leq U$$

$$L = \max_{i=\text{even}} T_i^{(k)}, \quad U = \min_{i=\text{odd}} T_i^{(k)} \quad (3.15)$$

と書き直せる。 $T_i^{(k)}$ は次の性質を有している。

(補題 1)

(i) $T_0^{(k)} < 0,$

(ii) $T_i^{(k)} > 0, \quad i = 1, 2, \dots, k-1.$

$$(iii) T_k^{(k)} = 0,$$

(iv) $T_i^{(k)} (i > 0)$ は i に関して単調減少する。

〔証明〕

式(3.7), (3.10)より

$$\begin{aligned} T_0^{(k)} &= r_k^* - \beta_k^* = r_k^* - \sum_{j=0}^k r_j^* \\ &= -\sum_{j=0}^{k-1} r_j^* \\ &= -r_{k-1} < 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

を得る。

(ii) $T_i^{(k)} (i=1, 2, \dots, k-1)$ を式(3.10)を用いて書き直せば、

$$T_i^{(k)} = - \binom{k}{i}^{-1} \sum_{j=i}^{k-1} \binom{j}{i} r_j^* \quad (3.17)$$

となり、 $j > 0$ なるとき、 $r_j^* < 0$ であるから、

$$T_i^{(k)} > 0, \quad i=1, 2, \dots, k-1 \quad (3.18)$$

を得る。

(iii) やはり式(3.10)より

$$\begin{aligned} T_k^{(k)} &= r_k^* + (-1)^{k+1} \beta_0^* \\ &= r_k^* + (-1)^{2k+1} r_k^* \\ &= 0, \quad k=1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.19)$$

となる。

(iv) 式(3.14)より

$$\begin{aligned} T_{i+1}^{(k)} - T_i^{(k)} &= (-1)^{i+2} \binom{k}{i+1}^{-1} \beta_{k-i-1}^* - (-1)^{i+1} \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^* \\ &= (-1)^i \left[\binom{k}{i+1}^{-1} \beta_{k-i-1}^* + \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^* \right] \end{aligned}$$

となる。ここで、式(3.10)を用いると

$$\begin{aligned} T_{i+1}^{(k)} - T_i^{(k)} &= \sum_{j=i}^k \left[\binom{k}{i}^{-1} \binom{j}{i} - \binom{k}{i+1}^{-1} \binom{j}{i+1} \right] r_j^* \\ &= \sum_{j=i}^k \frac{j! (k-i-1)!}{k! (j-i)!} (k-j) r_j^* \end{aligned} \quad (3.20)$$

を得る。 r_j^* は $i > 0$ のとき負になるから

$$T_{i+1}^{(k)} < T_i^{(k)}$$

を得る。

Q. E. D.

この補題より、直ちに次の結果が得られる：

(i) $k = 1$ のとき、

$$L = T_0^{(1)} < 0, \quad U = T_1^{(1)} = 0 \quad (3.21)$$

(ii) $k > 1$ のとき、 $T_i^{(k)}$ の単調減少性より

$$L = \max_{i=\text{even}} T_i^{(k)} = \begin{cases} T_2^{(k)} = 0, & k = 2 \\ T_2^{(k)} > 0, & k > 2 \end{cases}$$

$$U = \min_{i=\text{odd}} T_i^{(k)} = \begin{cases} T_h^{(k)} = 0, & (k = \text{odd}) \\ T_{k-1}^{(k)} > 0, & (k = \text{even}) \end{cases}$$

したがって、 $L \leq U$ となるのは $k = 1, 2$ の場合に限ることがわかる。以上をまとめると次のようになる：

(定理 3)

強非負条件を満たす Adams 型陰解法は、 $k = 1, 2$ の場合に限って存在する。具体的には次の 2 つである：

$$A1: \quad y_{n+1} = y_n + h \left[(1+a) f_{n+1} - a f_n \right] \quad (3.23)$$

$$-1 \leq a \leq 0$$

$$\text{誤差定数: } C_2 = -a - 1/2$$

$$A2: \quad y_{n+2} = y_{n+1} + h \left[(1/2+a) f_{n+2} + (1/2-a) f_{n+1} + a f_n \right] \quad (3.24)$$

$$0 \leq a \leq 1/4$$

$$\text{誤差定数: } C_3 = -1/12 - a$$

なお、解法 A1 は $a \geq -1/2$ において、A2 は $a \geq 0$ において、それぞれ A-stable になることが知られている^{1), 4)}。

パラメータ a は、丸め誤差を小さくするためには係数 β が「きれい」な値になるように定める必要がある。解法 A1 の場合は、 $a = -1, -1/2, 0$ 等が好ましい値と言えるだろう。パラメータ a をこれらの値に設定した場合、 $a = -1$ のときは Euler 法、 $a = -1/2$ のときは台形法、 $a = 0$ の場合は後退 Euler 法にそれぞれなる。次数および安定性の観点からは、 $a = -1/2$ の台形法が最適と言えるだろう。一方、A2 場合は係数 β の値を「きれい」にす

る値としてはいくつか考えられるが、安定性と精度の両面を考慮すると、やはり、 $a = 0$ 、すなわち台形法が最適となる。

4. Milne型

本章では k 段 k 次の Milne 型解法が強非負係数法になる可能性を探る。ここでは Milne 型解法とは、 $\rho(\zeta)$ が

$$\rho(\zeta) = \zeta^k - \zeta^{k-2}, \quad k \geq 2 \quad (4.1)$$

となる解法のことを言うものとする。Adams 型の場合と同様に係数 β は

$$\beta_{k-i} = \beta_{k-i}^* + (-1)^i \binom{k}{i} (a - \kappa_k^*) \quad (4.2)$$

$$i = 0, 1, \dots, k$$

となる。ここで、

$$\beta_{k-i}^* = (-1)^i \sum_{j=i}^k \binom{j}{i} \kappa_j^* \quad (4.3)$$

$$\kappa_j^* = (-1)^j \int_{-2}^0 \binom{-s}{j} ds, \quad j = 0, 1, \dots \quad (4.4)$$

である。各 β_j が非負となるためには、次の条件を満たす必要がある：

$$L \leq U$$

$$L = \max_{i=\text{even}} \left[\kappa_k^* - \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^* \right], \quad U = \min_{i=\text{odd}} \left[\kappa_k^* + \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^* \right] \quad (4.5)$$

以下、条件 (4.5) が成立する可能性を探る。ここで、前と同様に、

$$T_i^{(k)} = \kappa_k^* + (-1)^{i+1} \binom{k}{i}^{-1} \beta_{k-i}^*, \quad i = 0, 1, \dots, k \quad (4.6)$$

と置く。このとき次の補題が得られる：

[補題 2]

(i) $T_k^{(k)} = 0, \quad k = 2, 3, \dots$

(ii) $T_0^{(k)} = 0, \quad k = 2,$

$T_0^{(k)} < 0, \quad k > 2$

(iii) $k > 4$ のとき、

$k-1 \geq i \geq 4$ なる i に対して

$$T_{i+1}^{(k)} - T_i^{(k)} < 0$$

となる。すなわち、 $T_i^{(k)}$ は i に関して単調減少する。

(証明)

(i) 省略

(ii) $T_0^{(k)}$ は

$$T_0^{(k)} = \kappa_k^* - \beta_k^* = \kappa_k^* - \sum_{j=0}^{k-1} \kappa_j^* = - \sum_{j=0}^{k-1} \kappa_j^* \quad (4.7)$$

として表される。ここで、 κ_j^* が

$$\kappa_0^* + \kappa_1^* + \dots + \kappa_m^* = \kappa_m \quad (4.8)$$

$$\kappa_m = (-1)^m \int_{-1}^1 \binom{-s}{m} ds$$

なる関係式を満たし、さらに κ_m は

$$\begin{aligned} \kappa_m &= 0, & m &= 1 \\ \kappa_m &> 0, & m &\neq 1 \end{aligned} \quad (4.9)$$

なる性質を有してるから

$$\begin{aligned} T_0^{(k)} &= 0, & k &= 2, \\ T_0^{(k)} &< 0, & k &< 2 \end{aligned} \quad (4.10)$$

が得られる。

(iii) Adams型の場合と同様に、 $T_{i+1}^{(k)} - T_i^{(k)}$ を計算すると

$$T_{i+1}^{(k)} - T_i^{(k)} = \sum_{j=i}^{k-1} \frac{j! (k-i-1)!}{k! (j-i-1)!} (k-j) \kappa_j^* \quad (4.11)$$

を得る。 κ_j^* は $j \geq 4$ で負になるから、 $k > 4$, $i \geq 4$ のとき、

$$T_{i+1}^{(k)} - T_i^{(k)} < 0$$

となる。

Q.E.D

この補題(iii)より、 $k > 4$ のとき、 $j \geq 2$ なる j を選べば

$$L \geq T_{2j}^{(k)} > T_{2j+1}^{(k)} \geq U$$

となることがわかる。よって、 $k > 4$ のとき強非負条件を満たす k 段 k 次の Milne 型解法は存在しないことがわかる。以下、 $k=2, 3, 4$ について強非負条件を満たす解法の存在を調べる。

◇ $k=2$

$$\begin{aligned} L &= \max \{ T_0^{(2)}, T_2^{(2)} \} = 0 \\ U &= T_1^{(2)} = -\kappa_1^* / 2 = 1 \end{aligned} \quad (4.12)$$

よって強非負条件を満たす解法は存在する。関係式

$$\beta_{2-i} = \beta_{2-i}^* + (-1)^i \binom{2}{i} (a - \kappa_2^*) \quad (4.13)$$

より、係数 β を計算すると

$$\beta_2 = a, \quad \beta_1 = 2 - 2a, \quad \beta_0 = a$$

となる。よって、つぎの解法を得る：

$$M2: \quad y_{n+2} = y_n + h \{ a f_{n+2} + 2(1-a) f_{n+1} + a f_n \} \quad (4.14)$$

$$0 \leq a \leq 1$$

$$\text{誤差定数: } C_3 = 1/3 - a$$

ここで、 $a = \kappa_2^* = 1/3$ とすればSimpson法になる。

ところで、この解法は主要根 $\zeta = 1$ の他にも単位円上に根 $\zeta = -1$ を持っている。この根に対する成長係数³⁾を計算する。成長係数 λ は次式で与えられる：

$$\lambda = \frac{\sigma(\zeta)}{\zeta \rho'(\zeta)} \quad \Big| \quad |\zeta| = 1 \quad (4.15)$$

これに $\zeta = -1$ を代入すると、

$$\lambda = 2a - 1 \quad (4.16)$$

となる。数値解に含まれている無用な振動成分を抑制するためにはこれが正の値になる必要がある。そのためには、 $a > 1/2$ の範囲で a を選ばなければならない。結局、係数を「きれい」にすることと矛盾しないためには $a = 1$ が適当と思われる。

◇ $k = 3$

$$L = \max \{ T_0^{(3)}, T_2^{(3)} \} = T_2^{(3)} = -1/9$$

$$U = \min \{ T_1^{(3)}, T_3^{(3)} \} = T_3^{(3)} = 0 \quad (4.17)$$

よって、強非負条件を満たす解法は存在する。係数 β を、

$$\beta_{3-i} = \beta_{3-i}^* + (-1)^i \binom{3}{i} (a - \kappa_3^*) \quad (4.18)$$

より計算すると、

$$\beta_3 = 1/3 + a, \quad \beta_2 = 4/3 - 3a,$$

$$\beta_1 = 1/3 + 3a, \quad \beta_0 = -a$$

となる。よって次の解法を得る：

$$M3: \quad y_{n+3} = y_{n+1} + h \left\{ (1/3 + a) f_{n+3} + (4/3 - 3a) f_{n+2} \right. \\ \left. + (1/3 + 3a) f_{n+1} - a f_n \right\}$$

$$-1/9 \leq a \leq 0 \quad (4.19)$$

$$\text{誤差定数: } C_4 = -a$$

ここで、 $a = 0$ とするとこの場合も Simpson 法になる。この場合、 $\zeta = -1$ に対する成長係数は

$$\lambda = 4a - 1/3 \quad (4.20)$$

となり、式(4.19)の範囲では正の値にならないことがわかる。したがって、この場合強非負条件を満たす有効な解法は存在しないことになる。

◇ $k = 4$

$$L = \max \{ T_0^{(4)}, T_2^{(4)}, T_4^{(4)} \} = 0$$

$$U = \min \{ T_1^{(4)}, T_3^{(4)} \} = 0 \quad (4.21)$$

上式より $a = 0$ のみが許され、強非負条件を満たす解法は

$$y_{n+4} = y_{n+2} + (h/3) \{ f_{n+4} + 4f_{n+3} + f_{n+2} \} \quad (4.22)$$

である。この場合は、いっきに 2 段階法に退化し Simpson 法になる。

結局、 k 段 k 次 Milne 型解法について次の定理を得る：

[定理 4]

k 段 k 次 ($k \geq 2$) の Milne 型解法は、 $k = 2, 3$ の場合だけ、強非負条件を満たす。強非負条件を満たす公式群は M2, M3 の 2 つである。

5. Radial 法

Radial 法とは、解法の第一多項式の根 ζ を次のように半径 r で放射状に配置する解法である：

$$\zeta_1 = 1, \quad \zeta_m = r \cdot \exp(i \cdot 2\pi m/k), \quad m = 2, 3, \dots, k-1 \quad (5.1)$$

$$i = \sqrt{-1}$$

このとき、各 α_m は

$$\alpha_k = 1, \quad \alpha_m = -(1-r) \cdot r^{k-m-1}, \quad m = 1, 2, \dots, k-1, \quad (5.2)$$

$$\alpha_0 = -r^{k-1}$$

を満たす。したがって、半径 r を

$$0 \leq r \leq 1 \quad (5.3)$$

の範囲で選べば弱非負条件が満たされる。ここでは、解法の次数が $k+1$ になるように係数 β を定める。

一般に k 段 $k+1$ 次の解法は、 y の導関数 $f(x, y)$ を $k+1$ 点

$$(x_0, f_0), (x_1, f_1), \dots, (x_k, f_k) \quad (5.4)$$

$$f_j = f(x_j, y_j), \quad j=0, 1, \dots, k$$

を通る k 次多項式で補間して得られたものである。この多項式は

$$P_k(x) = \sum_{j=0}^k f_j L_j(s) \quad (5.5)$$

$$L_j(s) = \frac{(-1)^{k-j}}{j!(k-j)!} s(s-1)\dots(s-j+1)(s-j)\dots(s-k)$$

$$j=0, 1, \dots, k-1$$

である。これを用いると、 $\beta_j (j=0, 1, \dots, k)$ は

$$\beta_j = \sum_{m=0}^k \alpha_m \int_0^m L_j(s) ds \quad (5.6)$$

として表される。上式に式(5.2)を代入し、 β_j を $\beta_j(r)$ として r の関数として表せば

$$\beta_j(r) = \sum_{m=0}^{k-1} r^m \int_{k-m-1}^{k-m} L_j(s) ds, \quad j=0, 1, \dots, k \quad (5.7)$$

を得る。この式より計算した k 段 $k+1$ 次 Radial 法の係数の具体形を表1に示す。

ここで、すべての係数 β を非負とするような r の区間を求める。Radial法は、特別な場合として $r=0$ に対応するのが Adams法であり、 $r=1$ に対応するのが Newton-Cotes型解法である。したがって、 $r=1$ とした場合の $\beta_j(r)$ の値は、数値積分公式の Newton-Cotes法の重み係数と同じになる。Newton-Cotes型数値積分公式の重み係数は、 $k=1, 2, \dots, 7$ においてはすべて正になっている⁷⁾。このことは、 $\beta_j(r)$ の r に関する連続性を考慮すれば、 $k=1, 2, \dots, 7$ については、 $r=1$ の近傍で $\beta_j(r) \geq 0 (j=0, 1, \dots, k)$ となることを意味している。すなわち、強非負条件を満たす公式が在することになる。 $k=8, 9, \dots$ については、数値計算の結果すべての β_j を非負にするような r の区間はしなかった。 $k=1, 2, \dots, 7$ の各解法について、すべての β_j を非負とするような r の区間 $[u, v]$ を数値計算により求め表2に示す。

表 1. k 段 $k+1$ 次ラディアル陰解法の係数 β と誤差定数 ($k=1, 2, \dots, 5$)

k	1	r	r^2	r^3	r^4	
2	β_2	5/12	-1/			
	β_1	8/	8/			
	β_e	-1/	5/			
	C_4	-1/24	1/			
3	β_3	9/24	-1/	1/		
	β_2	19/	13/	-5/		
	β_1	-5/	13/	19/		
	β_e	1/	-1/	9/		
	C_5	-19/720	11/	-19/		
4	β_4	251/720	-19/	11/	-19/	
	β_3	646/	346/	-74/	106/	
	β_2	-264/	456/	456/	-264/	
	β_1	106/	-74/	346/	646/	
	β_e	-19/	11/	-19/	251/	
	C_6	-27/1440	11/	-11/	27/	
5	β_5	475/1440	-27/	11/	-11/	27/
	β_4	1427/	637/	-93/	77/	-173/
	β_3	-798/	1022/	802/	-258/	482/
	β_2	482/	-258/	802/	1022/	798/
	β_1	-173/	77/	-93/	637/	1427/
	β_e	27/	-11/	11/	-27/	475/
	C_7	-863/60480	271/	-191/	271/	-863/

表 1. k 段 $k + 1$ 次ラディアル陰解法の係数 β と誤差定数 ($k=6, 7$)

k	1	r	r^2	r^3	r^4	r^5	r^6
6	β_6	19087/60480	-863/	271/	-191/	271/	-863/
	β_5	65112/	25128/	-2760/	1608/	-2088/	6312/
	β_4	-46461/	46989/	30819/	-6771/	7299/	-20211/
	β_3	37504/	-16256/	37504/	37504/	-16256/	37504/
	β_2	-20211/	7299/	-6771/	30819/	46989/	-46461/
	β_1	6312/	-2088/	1608/	-2760/	25128/	65112/
	β_0	-863/	271/	-191/	271/	-863/	19087/
	C_6	-1375/120960	351/	-191/	191/	-351/	1375/
	7	β_7	36799/120960	-1375/	351/	-191/	191/
β_6		139849/	47799/	-4183/	1879/	-1719/	2999/
β_5		-121797/	101349/	57627/	-9531/	7227/	-11547/
β_4		123133/	-44797/	81693/	68323/	-20227/	26883/
β_3		-88547/	26883/	-20277/	68323/	81693/	-44797/
β_2		41499/	-11547/	7227/	-9531/	57627/	101349/
β_1		-11351/	2999/	-1719/	1879/	-4183/	47799/
β_0		1375/	-351/	191/	-191/	351/	-1375/
C_7		-33953/362800	7279/	-3233/	2497/	-3233/	7297/

(注) 分母は共通ですべて最初の行に示したものと一致する。

表 2. k 段 $k + 1$ 次のRadial法が強非負条件を満たす r の区間 (u, v)

k	u	v
1	0	1
2	0.200	1
3	0.274	1
4	0.437	1
5	0.546	1
6	0.781	1
7	0.795	1

最後に、丸め誤差を小さくするためには r の値としてどのようなものを選んだらよいかを考察する。丸め誤差を小さくするためには、おそらく係数 α 、 β として「きれい」な数を選ぶこと、すなわち、有理数で分母、分子ともに小さい数、特に 2 のべきで表されるような数を選ぶことが最善であろう。表 1 からわかるように、係数 β を表す式が複雑になるため、 r の値を適当に選ぶことによって、係数 β までを「きれい」にすることは期待できない。しかし、係数 α についてはそれがあ程度可能である。例えば、 $k=2,3,4$ については $r=1/2$ にすれば α はすべて 2 の負のべきで表される「きれい」な値となる。ここで最適な係数を見出すため、果たして係数 α を「きれい」にするのがよいか、また仮にそうであるとすれば、「きれい」な値のなかではどのようなものがよいか、を確認するための数値実験を行う。

〔数値例 1〕

微分方程式、

$$y' = -4y + \sin 4x, \quad 0 \leq x \leq 4.125$$

$$y(0) = 1$$

$$y(x) = \frac{\sqrt{2}}{8} \sin\left(4x - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{9}{8} \exp(-4x)$$

の $x=4.125$ における数値解を $k=2, 3, 4$ の各々の k 段 $k+1$ 次Radial法で求め、丸め誤差と打ち切り誤差を評価する。ここでは、 r の値としては

(i) 区間 $(0, 1)$ の一様乱数

(ii) $0, 1/16, 2/16, \dots, 15/16, 1$

という 2 通りの値を選んで計算を行う。なお、予測子の方は同じ次数のアダムス・バッシュホース法を用い、計算は P E C E モードで行う。結果を図 1 ~ 6 に示す。なおこの計算は

MELCOM-COSMO 700S の単精度 (16進6桁) で行った。また、キザミ幅 h は $k=2, 3$ の場合 2^{-6} で $k=4$ の場合が 2^{-5} であった。

図1~6の結果より、どの場合も打ち切り誤差と丸め誤差の両方を総合的に考慮すると、 $r=1/2$ がほぼ最適であることがわかる。 $r=1/2$ としたときのRadial法とAdams-Moulton法の絶対安定領域を図9~14に示す。

つぎに数値解のもつ丸め誤差の挙動を観察するための数値実験を行う。

(数値例2)

2階常微分方程式

$$y'' + 6y' + 25y = 0, \quad y(0) = 4, \quad y'(0) = 0$$

の数値解を、2つの解法、(i) 3段4次Adams-Moulton法、(ii) 3段4次Radial法 ($r=1/2$) で求める。ここでは、共に予測子は4次のAdams-Bashforth法とし、キザミ幅 h を $1/128$ とした。数値解 y_n のもつ相対丸め誤差を $x=0\sim 4$ の範囲で求め、図7, 8に示す。なお、この計算はMELCOM-COSMO 700Sの倍精度 (16進14桁) で行った。

図7, 8より、どちらの解法も数値解 y_n が符号を変えるあたりで、相対誤差が増大していることが見てとれる。この傾向は、Adams法では非常に顕著に現れているが、Radial法ではあまりめたない。これは、すべての係数を非負とし、さらに「きれい」な係数を選んだ効果が現れたといえる。

6. おわりに

本報告では、線形多段階法の第一多項式の形を限定したうえで、すべての係数を非負とするような陰解法 (強非負係数法) の存在について考察してきた。また、そのような解法が各次数について多く存在するときは、できるだけ係数を「きれい」にするようなパラメータを選択した。その結果 k 段 k 次のAdams型解法では、 $k=1, 2$ でのみ強非負条件を満たす公式群が存在することが判明した。このなかには特殊な場合として台形公式も含まれるのだが、精度および安定性を考慮すると、台形公式を超えるものは存在しなかった。一方 k 段 k 次Milne型解法では、 $k=2, 3$ でのみ強非負条件を満たす公式群が存在することが判明した。だが、3段階法では成長係数を正にしかつ強非負条件を満たすような解法は存在しなかった。したがって、この場合も係数の「きれい」さ、精度、安定性を総合的に評価すると、台形公式を超えるものは存在しないことになる。一方、第一多項式の根を放射状に配置する k 段 $k+1$ 次のRadial法では、7段8次まで強非負係数条件を満たす公式群が存在することが示された。しかし、この場合すべての係数を「きれい」にするようなパラメータを選ぶことはほとんど不可能であった。そのため係数 α だけ「きれい」にするようパラメータを選んだが、その効果は十分に現れた。

なお、Cowell法のように2階微分方程式 $y'' = f(x, y)$ を直接解く線形多段階法の弱非負条件については付録を参照されたい。最後に、本報告を発表することを薦めて下さった山梨大学の田中正次先生、名古屋大学の三井斌友先生に謝意を表します。

<参考文献>

- 1) J.D.Lambert, "Computational Methods in Ordinary Differential Equations", John Wiley & Sons, 1973.
- 2) 高木貞治, 「代数学講義」, 岩波書店, 1960.
- 3) P.Henrici, "Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations" John Wiley & Sons, 1962.
- 4) G.Hall & J.M.Watt eds., "Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations", Clarendon Press, Oxford, 1976.
- 5) T.Hull & A.Newbery, "Integration Procedures which Minimize Propagated Errors", SIAM 9(1961), pp.31-47.
- 6) T.Hull & A.Newbery, "Corrector Formulas for Mult-Step Integration Methods", SIAM 10(1962), pp.351-369.
- 7) F.B.Hildebrand, "Introduction to Numerical Analysis", McGraw-Hill, New York, 1974.

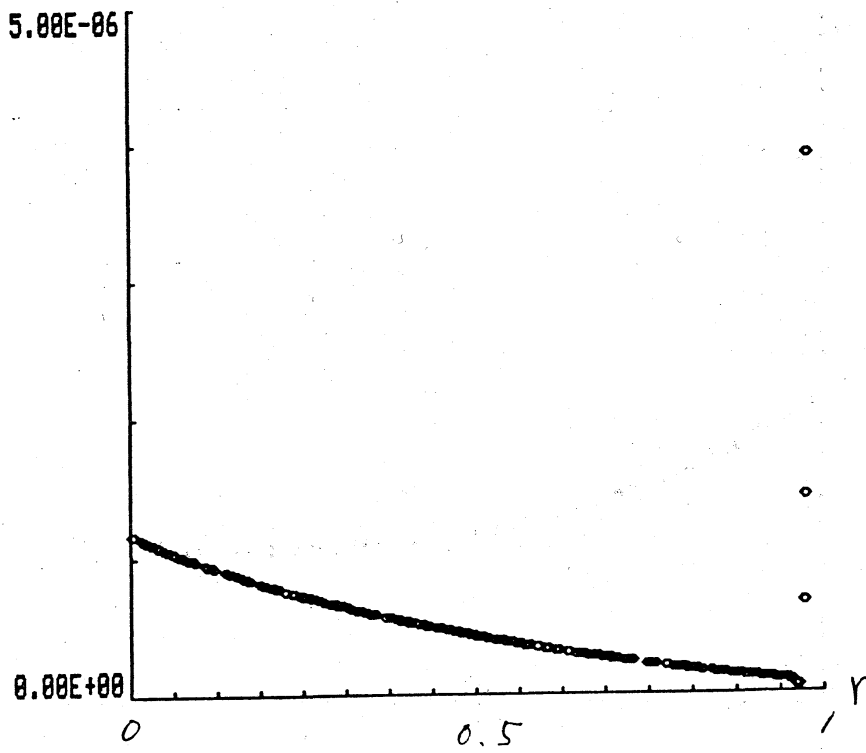


図1. 2段3次Radial法の根の半径 r と打ち切り誤差の関係

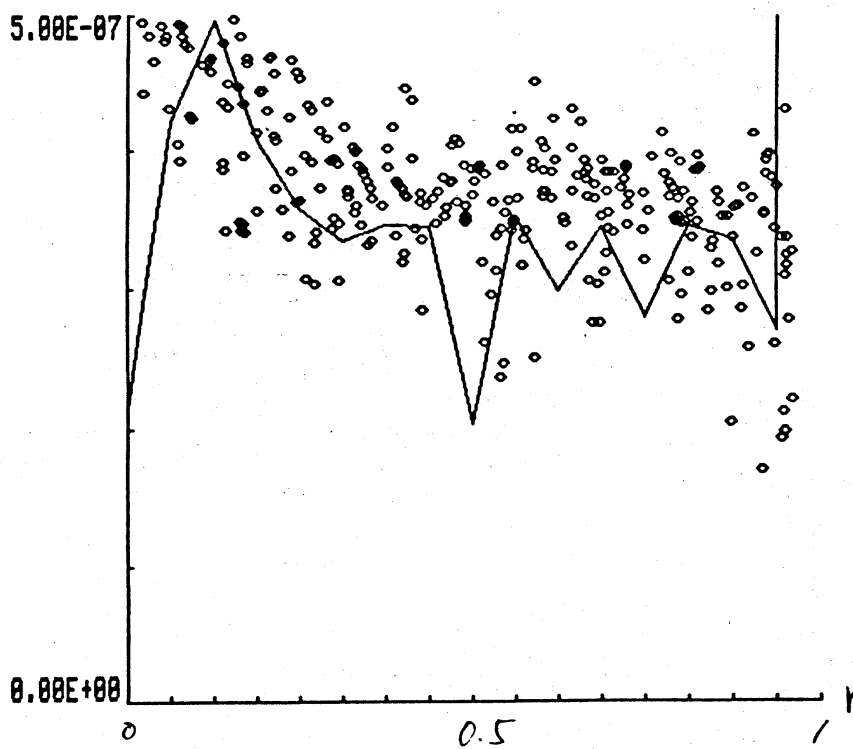


図2. 2段3次Radial法の根の半径 r と丸め誤差の関係

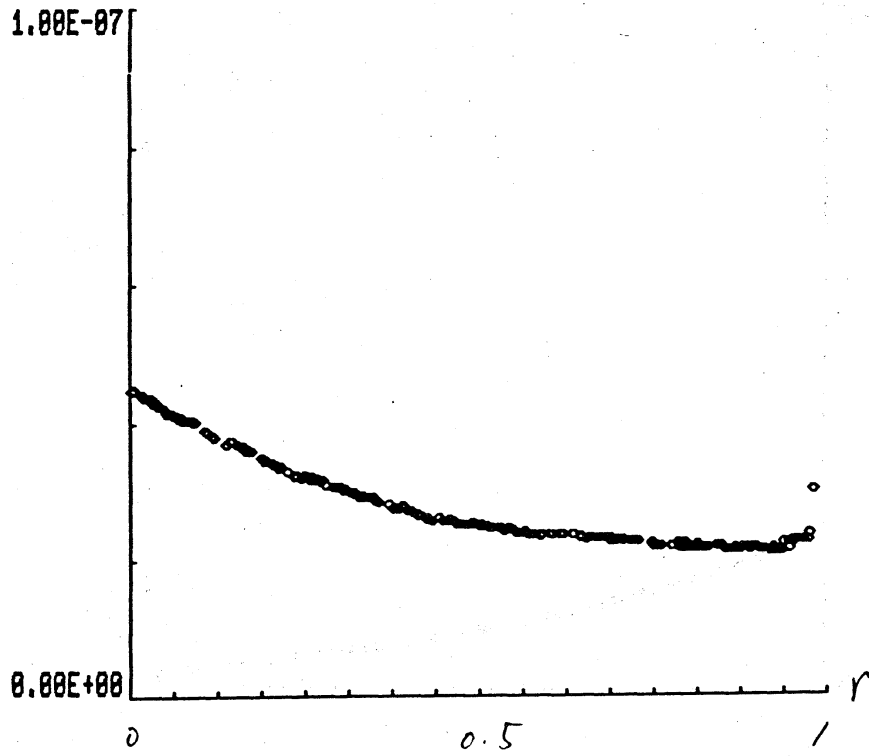


図3. 3段4次Radial法の根の半径 r と打ち切り誤差の関係

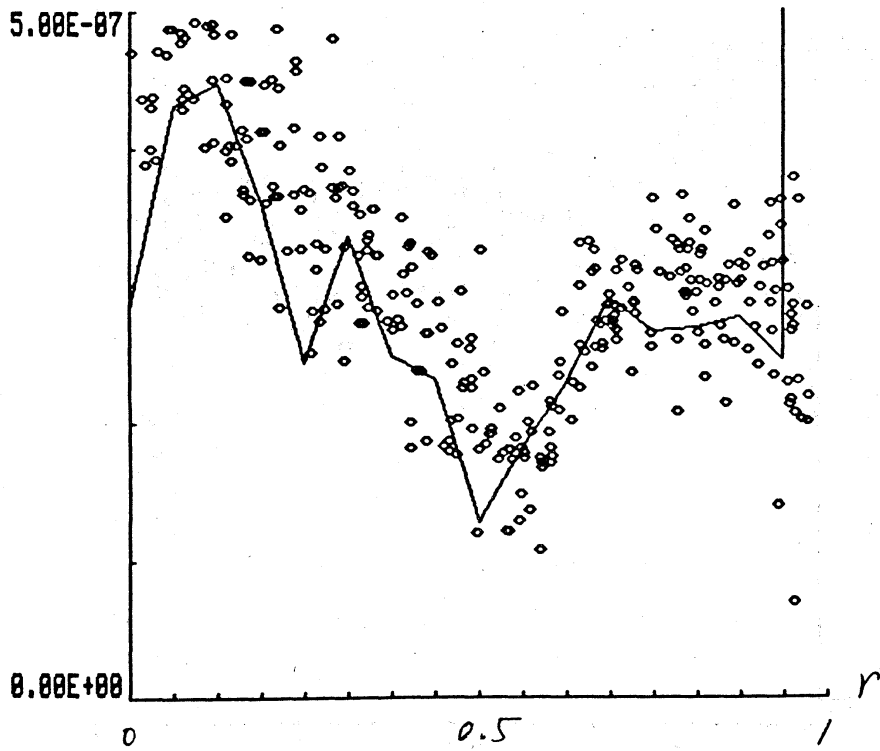


図4. 3段4次Radial法の根の半径 r と丸め誤差の関係

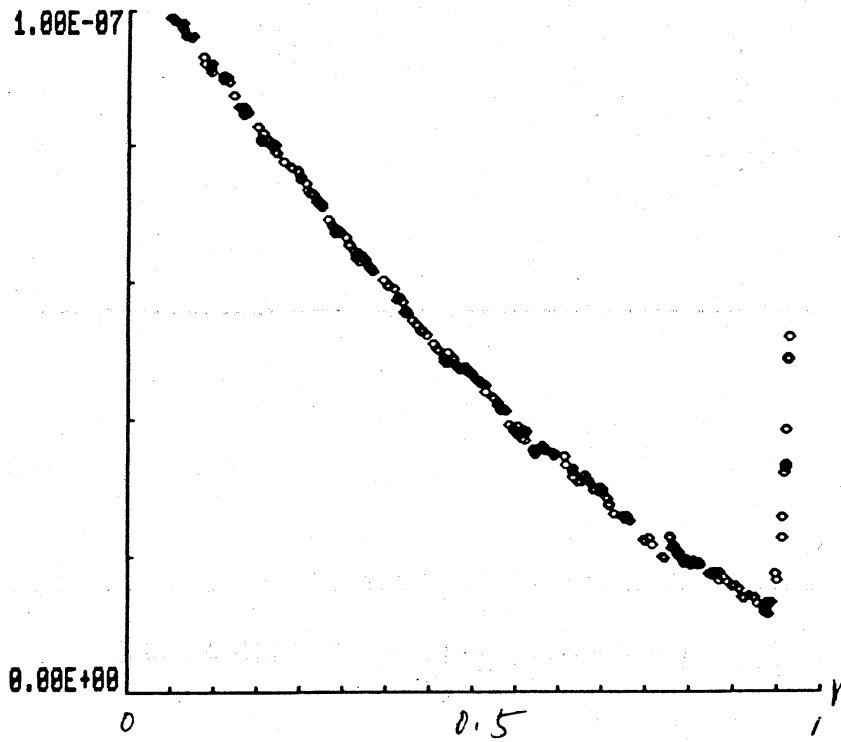


図5. 4段5次Radial法の根の半径 r と打ち切り誤差の関係

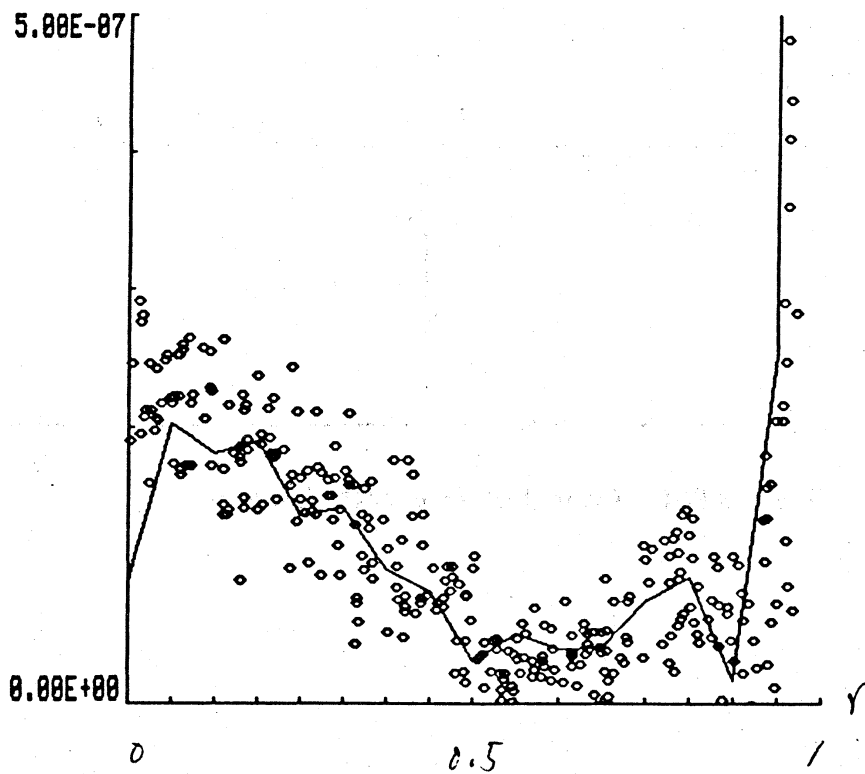


図6. 4段5次Radial法の根の半径 r と丸め誤差の関係

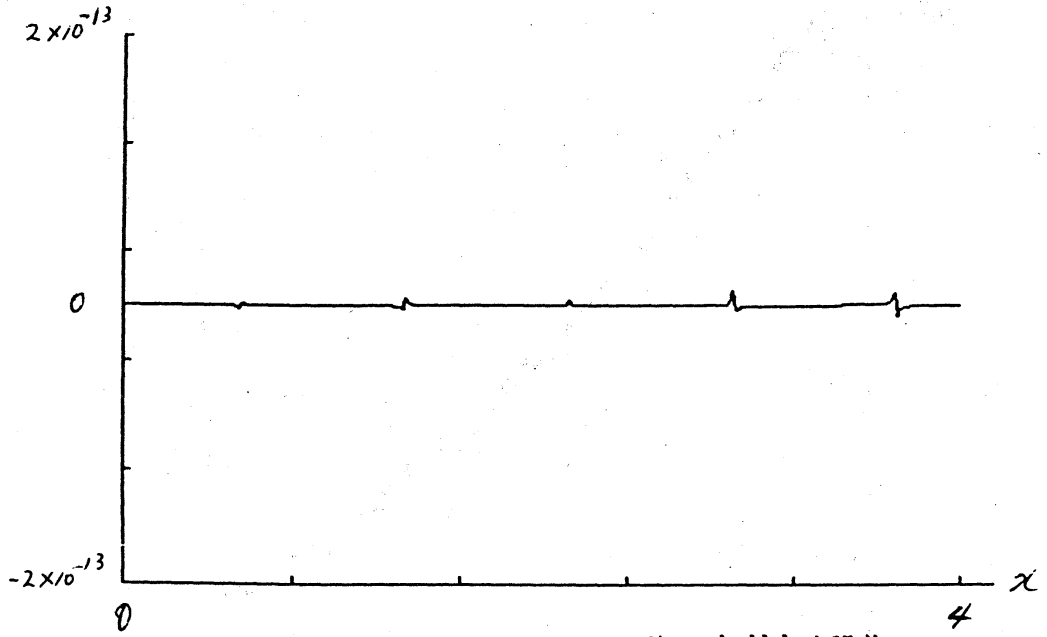


図7. 3段4次Radial法 ($r = 1/2$) の相対丸め誤差

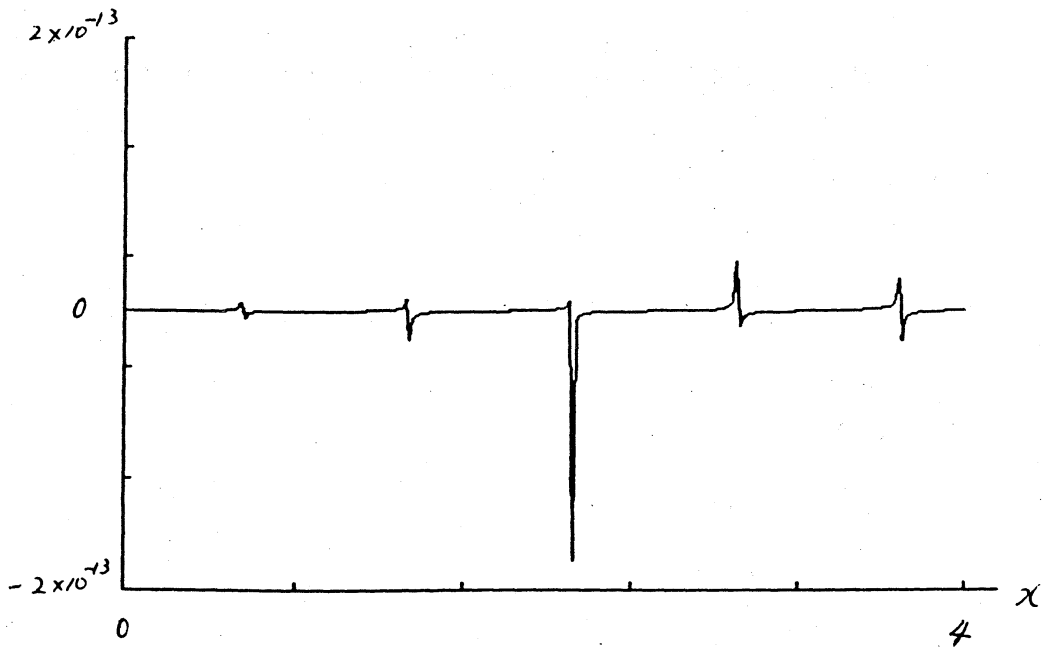


図8. 3段4次Adams-Moulton法の相対丸め誤差

绝对安定领域

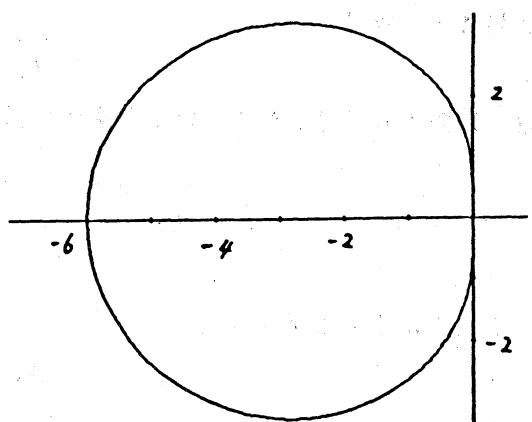


图9. 2段3次Adams-Moulton法

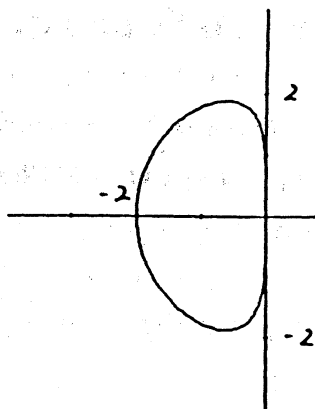


图10. 2段3次Radial法($r=1/2$)

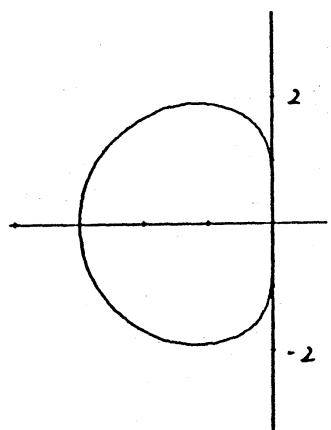


图11. 3段4次Adams-Moulton法

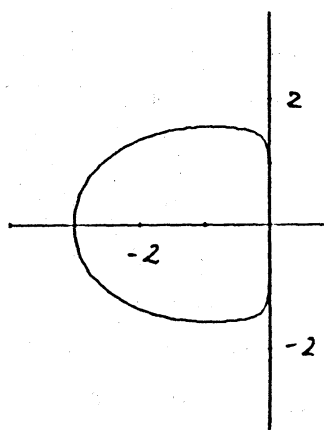


图12. 3段4次Radial法($r=1/2$)

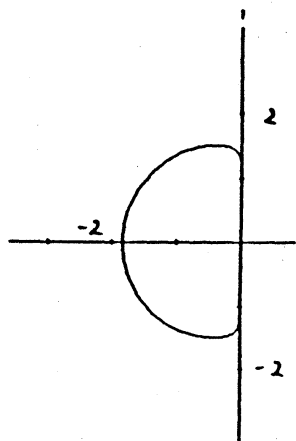


图13. 4段5次Adams-Moulton法

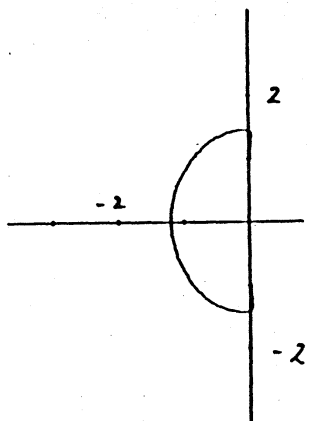


图14. 4段5次Radial法($r=1/2$)

〔付録〕

ここでは、1階の導関数を陽に含まない2階微分方程式

$$y'' = f(x, y) \quad (\text{A.1})$$

を直接解く適合条件を満たす線形多段階法は、弱非負条件を満たさないことを示す。

方程式(A.1)を解く線形多段階法を

$$y_{n+k} + \alpha_{k-1} y_{n+k-1} + \dots + \alpha_0 y_n = h^2 (\beta_k f_{n+k} + \dots + \beta_0 f_n) \quad (\text{A.2})$$

$$f_j = f(x_j, y_j)$$

とする。前と同様に第一多項式と第二多項式を次のように定義する：

$$\rho(\zeta) = \zeta^k + \alpha_{k-1} \zeta^{k-1} + \dots + \alpha_0 \quad (\text{A.3})$$

$$\sigma(\zeta) = \beta_k \zeta^k + \beta_{k-1} \zeta^{k-1} + \dots + \beta_0$$

このとき、解法(A.2)の適合条件は、次の2つの条件式

$$\rho(1) = \rho'(1) = 0 \quad (\text{A.4})$$

$$\rho''(1) = 2\sigma(1)$$

で与えられる¹⁾。ここで、 $\rho'(1)$ を計算すると

$$\begin{aligned} \rho'(1) &= k + (k-1)\alpha_{k-1} + (k-2)\alpha_{k-2} + \dots + \alpha_1 \\ &= k(1 + \alpha_{k-1} + \alpha_{k-2} + \dots + \alpha_0) \\ &\quad - (\alpha_{k-1} + 2\alpha_{k-2} + \dots + (k-1)\alpha_1 + k\alpha_0) \\ &= k\rho(1) - (\alpha_{k-1} + 2\alpha_{k-2} + \dots + (k-1)\alpha_1 + k\alpha_0) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

となるから、 $\rho(1) = 0$ のとき、

$$\rho'(1) = -\alpha_{k-1} - 2\alpha_{k-2} + \dots - (k-1)\alpha_1 - k\alpha_0 \quad (\text{A.6})$$

である。これより弱非負条件

$$-\alpha_j \geq 0, \quad j = 0, 1, \dots, k-1 \quad (\text{A.7})$$

を満たし、かつ $\rho'(1) = 0$ となるためには、 $\alpha_j = 0$ ($j = 0, 1, \dots, k-1$) を満たさねばならないことがわかる。しかしこれは明らかに $\rho(1) = 0$ と矛盾する。したがって、適合性の最初の条件と弱非負条件は矛盾することになる。