数理解析研究所講究録
第791巻1992年89-99

非負係数を持つＡｄａｍｓ型線形多段階法の可到達次数

東北大学教養部 小澤 一文 (Kazufumi Ozawa)

1 はじめに

常微分方程式の初期値問題

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x,y), \quad y(0) = \eta \tag{1.1}$$

を解くための線形多段階 (LM) 法として

$$y_{n+k} = y_{n+k-1} + h(\beta_k f_{n+k} + \cdots + \beta_0 f_n), \tag{1.2}$$

$$f_i \equiv f(x_i, y_i), \quad x_i = ih, \ i = 0, 1, \cdots$$

という形の解法を考える．ここでは，式 (1.2) で表されるようなLM法，すなわち，計算に用いる y の後方値が一つ前だけでありその重みが 1 となるような公式を，Adams型と呼ぶことにする．Adams型のLM法は

1. 解法の第1特性多項式 $\rho(\zeta) = \zeta^k - \zeta^{k-1}$ の根が原点に集中しているため，他のLM法に比べより安定であり，
2. y_i の係数が極めて単純なため1ステップ当たりの局所丸め誤差が小さい，

という点で優れた解法である．

k 段のAdams型解法では，係数 $\beta_i, (i = 0, \cdots, k)$ の全てを未知数として，次数条件を満たすべく連立1次方程式を解けば，到達可能な最大次数の解法が得られる．この場合，解法がexplicitならばその到達可能次数は k であり，implicitならば $k+1$ になる．このようにして得られた解法は，それぞれAdams-Bashforth法とAdams-Moulton法である．しかしながら，両解法ともに $k=1$ の場合を除いて係数 β_i の符号が変化するため，桁落ちに弱い公式となっている．

これに対して，より高次で係数の全ての符号を（例えば非負に）統一した解法を得るには、次数を到達可能次数より1つ以上下げ，係数に自由度を持たせることが必要になってくる．著者は、このようにしていくつかのタイプのLM法で非負係数を持つ解法群を提案し、その精度の高さを数値実験より立証した [5],[6]．だが，非負係数を持つ解法の到達可能な次数は現在のところ未知である．

本論文では，係数 β_i が条件

$$\beta_i \geq 0, \quad i = 0, \cdots, k \tag{1.3}$$

を満たすような Adams 型解法の到達可能な最大次数を考察する．また，高階の導関数を評価する Adams 型解法についても同様の考察を行なう．

2　Adams 型解法の可到達次数

Adams 型解法の次数が p であるということは，p 次以下の多項式を解に持つような方程式 (1.1) に対して，解法 (1.2) によって与えられる数値解が刻み幅 h に無関係に正確であるということである [2]．したがって，解が

$$y(x) = (x-k)^r, \quad 1 \leq r \leq p$$

であるときは，h に無関係に

$$\begin{aligned} y_i &= y(ih) = (ih-k)^r, \\ f_i &= f(ih, y(ih)) = r(ih-k)^{r-1}, \end{aligned} \tag{2.1}$$

$$i = 0, 1, \cdots,$$

$$r = 1, \cdots, p$$

が成り立つ．ここで $n = 0$, $h = 1$ と定め，式 (2.1) を式 (1.2) に代入すると，関係式

$$\frac{1}{r} = B_r,\ \ r = 1, \cdots, p \tag{2.2}$$

が得られる．B_r は

$$B_r = \sum_{i=0}^{k} \beta_i (k-i)^{r-1},\ \ r = 1, \cdots, p \tag{2.3}$$

であり，$0^0 = 1$ と約束する．係数 β_i が非負条件 (1.3) を満たしているとき，B_r は以下の性質を持つ:

- explicit($\beta_k = 0$) のとき

$$0 \le B_1 \le B_2 \le B_3 \le \cdots \tag{2.4}$$

- implicit($\beta_k \neq 0$) のとき

$$0 \le B_2 \le B_3 \le \cdots \tag{2.5}$$

一方，式 (2.2) の左辺は r の減少関数であるから，上式の関係より式 (2.2) が成立するとしたら，explicit のときは $r = 1$ のみで，implicit のときは $r = 2$ までである．これより，可到達次数 p_{max} は，explicit のとき $p_{max} \le 1$, implicit のとき $p_{max} \le 2$ となる．ここで，Adams 型解法の一つである Euler 法および台形公式の次数がそれぞれ 1 と 2 であることを考慮すると，p_{max} はそれぞれの場合について

- explicit($\beta_k = 0$) のとき

$$p_{max} = 1$$

- implicit($\beta_k \neq 0$) のとき

$$p_{max} = 2$$

となる．この最大次数を持つ非負係数法の 1 例としては，explicit な解法には Euler 法

$$y_{n+1} = y_n + hf_n, \tag{2.6}$$

があり，implicit な解法には台形公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n) \tag{2.7}$$

がある．なお，台形公式は次に示す解法群 [6] の特殊な場合である：

$$y_{n+2} = y_{n+1} + h\left\{(\frac{1}{2}+\theta)f_{n+2} + (\frac{1}{2}-2\theta)f_{n+1} + \theta f_n\right\}, \tag{2.8}$$

$$0 \le \theta \le \frac{1}{4},$$

$$\text{誤差定数:} \qquad C_3 = \tfrac{1}{12} - \theta.$$

式 (2.8) に示された解法群は，$0 \le \theta$ のとき A_0- 安定であることが知られている [8]．この中で，特に $\theta = 0$ に対応する公式，すなわち，台形公式が A- 安定で，しかも係数が単純になるため，各ステップでの局所丸め誤差を最小化するという点でベストな解法である．

3　高階の導関数を評価する Adams 型 LM 法の可到達次数

次に，$l(l \ge 2)$ 次の導関数を評価する Adams 型 LM 法

$$y_{n+k} = y_{n+k-1} + \sum_{i=0}^{k} \sum_{j=1}^{l} h^j\ \beta_{ij}\ f_{n+i}^{(j-1)}, \tag{3.1}$$

$$\begin{aligned} f_i^{(j)} &= f^{(j)}(x_i, y_i),\ \ j = 0, \cdots, l-1, \\ f^{(j)}(x, y) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f^{(j-1)}(x, y),\ \ j = 1, \cdots, l-1, \\ f^{(0)}(x, y) &= f(x, y) \end{aligned}$$

の可到達次数 p_{max} について考察する．まずその前に，Adams 型解法 (3.1) の安定性について若干の考察を行なう．

3.1 Adams 型 LM 法 (3.1) の安定性

安定性を解析するために，良く行なわれているようにテスト方程式

$$y' = \lambda y, \ \ \mathrm{Re}(\lambda) < 0 \tag{3.2}$$

を考える．この方程式を解法 (3.1) で解くとき，その数値解の振舞いは次の特性多項式 (絶対安定多項式) の根によって支配される:

$$\pi(\zeta; z) = \eta_k(z)\zeta^k + \eta_{k-1}(z)\zeta^{k-1} + \cdots + \eta_0(z). \tag{3.3}$$

ここで， $z = h\lambda$ であり，各 $\eta_i(z)$ は次式によって与えられる最大 l 次の z の多項式である:

$$\begin{aligned}
\eta_i(z) &= -\sum_{j=1}^{l} \beta_{ij} z^j, \ \ 0 \le i < k-1, \\
\eta_{k-1}(z) &= -1 - \sum_{j=1}^{l} \beta_{k-1j} z^j, \\
\eta_k(z) &= 1 - \sum_{j=1}^{l} \beta_{kj} z^j
\end{aligned}$$

本解法が $\mathrm{Re}(z) < 0$ において安定領域を広く持つためには，ζ の最高次の係数 $\eta_k(z)$ が左半面 $\mathrm{Re}(z) < 0$ において 0 にならないことが望ましい．すなわち， $\eta_k(z) = 0$ の根が全て右半面にあることが望ましい．そのような性質を持つためには，多項式 $\eta_k(-z)$ に Routh-Hurwitz の定理 [4] を適用することによって，次の条件が必要であることがわかる:

$$(-1)^{j-1}\beta_{kj} > 0, \ \ j = 1, \cdots, l \tag{3.4}$$

ここでは，係数の非負条件の他に上記の条件も考慮し， Adams 型 LM 法 (3.1) の可到達次数を求める．

3.2 Adams 型 LM 法 (3.1) の可到達次数

係数の非負条件は，この場合，式 (3.4) を考慮すると

$$(-1)^{j-1}\beta_{ij} \geq 0,\ \ i=0,\cdots,k,\ \ j=1,\cdots,l \tag{3.5}$$

となる．直ちに分かることは，ＢＤＦ型解法

$$y_{n+k} = y_{n+k-1} + \sum_{j=1}^{l} h^j \, \frac{(-1)^{j-1}}{j!} \, f_{n+k}^{(j-1)} \tag{3.6}$$

は条件 (3.5) を満たしていて，しかも l 次の Taylor 展開そのものであるから，解法の次数は l 次となる．これより $l \leq p_{max}$ という結果を得る．

Adams 型 LM 法 (3.1) の可到達次数を考察するに当たって，前と同様に方程式 (1.1) の解として $y(x)=(x-k)^r$ を考える．このとき，解とその導関数は

$$f^{(j-1)}(x,y) = y^{(j)}(x) = (r)_j \ (x-k)^{r-j},\ \ j=1,\cdots,l \tag{3.7}$$

となる．ここで，

$$(r)_j = \begin{cases} r(r-1)\cdots(r-j+1), & r \geq j, \\ \qquad 0, & r < j \end{cases}$$

である． Adams 型 LM 法 (3.1) の次数が p ならば， h に無関係に方程式 (1.1) の解 $y(x)=(x-k)^r$ と数値解は一致する．すなわち，

$$\begin{aligned} y_i &= y(ih) = (ih-k)^r, \\ f_i^{(j-1)} &= f^{(j-1)}(ih, y(ih)) = (r)_j \ (ih-k)^{r-j}, \end{aligned} \tag{3.8}$$

$$i=0,1,\cdots,\ \ j=1,\cdots,l,$$

$$r=1,\cdots,p$$

となる．ここで，$n=0, h=1$ として式 (3.8) を式 (3.1) に代入すると，関係式

$$1=\sum_{j=1}^{l}(r)_j \ \sum_{i=0}^{k}(-1)^{j-1}\beta_{ij}(k-i)^{r-j}, \ \ r=1,\cdots,p \tag{3.9}$$

を得る．ただし，ここでも前と同様に $0^0=1$ と約束する．上式は $r>l$ のとき，

$$1=\sum_{i=0}^{k-1}(k-i)^{r-l}\sum_{j=1}^{l}(r)_j \ (-1)^{j-1}\beta_{ij}(k-i)^{l-j}, \ \ r=l+1,\cdots,p \tag{3.10}$$

という形に変形できる．この式の右辺は，非負条件 (3.5) が成り立っているとき，全ての β_{ij} が 0 の場合を除いて，r の増加関数になる．したがって，上式が $r\geq l+2$ で成立することはあり得ない．これより，$p_{max}\leq l+1$ を得る．ところで，implicit な 1 段階法

$$y_{n+1}=y_n+h\ \left(\frac{l}{l+1}\ f_{n+1}+\frac{1}{l+1}\ f_n\right)+\sum_{j=2}^{l}h^j(-1)^{j-1}\ \frac{l+1-j}{(l+1)j!}\ f_{n+1}^{(j-1)} \tag{3.11}$$

の次数は簡単な計算より l+1 であることがわかる．したがって非負条件 (3.5) を満たす Adams 型解法 (3.1) の可到達次数 p_{max} は $l+1$ となる．

4 数値例

非負係数を持つ Adams 型解法の効果を調べるため，解法群 [5]

$$y_{n+2}=y_{n+1}+h\left\{\left(\frac{5}{12}-\frac{3}{2}\theta\right)f_{n+2}+\left(\frac{2}{3}+2\theta\right)f_{n+1}-\left(\frac{1}{12}+\frac{\theta}{2}\right)f_n\right\}+h^2\theta f'_{n+2}, \tag{4.12}$$

の中の幾つかの公式を用いて実際に方程式を解いてみる．なお，この解法は

$$-\frac{1}{3}\leq\theta\leq-\frac{1}{6}$$

において係数の全てが非負になり，A- 安定になる [7]．ここで $\theta=-1/8$ とすると Enright[1] によって導出された公式になり，これは非負条件は満たさ

ないが，次数が1次増加して4次の解法となる．

解くべき問題は次の初期値問題である [3]:

$$\mathbf{y}' = A\mathbf{y},\quad \mathbf{y}(0) = (1, 0, -1)^T, \tag{4.13}$$

$$A = \begin{pmatrix} -21 & 19 & -20 \\ 19 & -21 & 20 \\ 40 & -40 & -40 \end{pmatrix}$$

本問題は Stiff な問題であり，その厳密解 $\mathbf{y}(x) = (y_1(x), y_2(x), y_3(x))^T$ は次式で与えられる:

$$\begin{aligned} y_1(x) &= 0.5\mathrm{e}^{-2x} + 0.5\mathrm{e}^{-40x}(\cos 40x + \sin 40x), \\ y_2(x) &= 0.5\mathrm{e}^{-2x} - 0.5\mathrm{e}^{-40x}(\cos 40x + \sin 40x), \\ y_3(x) &= -\mathrm{e}^{-40x}(\cos 40x - \sin 40x). \end{aligned} \tag{4.14}$$

ここでは，1つの成分 $y_1(x)$ に注目し，その数値解の丸め誤差および全誤差を計算する．キザミ幅は $h = 2^{-10}$ とし $\theta = -1/5, -1/4, -5, -1/8$ について実験をする．これらの θ の値のうち，初めの2つは非負条件を満たすものであり，残りの2つは満たさないものである．ここで用いた計算機は Sparc Station 1(IEEE 標準採用) であり，言語は FORTRAN 77 の単精度を用いた．結果を表1,2に示す．

これらの表より，非負条件を満たす解法はより高精度であることがわかる．

表 1. 方程式 (4.13) の数値解法 (4.12) による誤差.

	$\theta = -1/5$		$\theta = -1/4$	
	round-off	total	round-off	total
x	$\times 10^6$	$\times 10^6$	$\times 10^6$	$\times 10^6$
0	0	0	0	0
0.0625	-0.57660	-0.70232	-0.10682	-0.31489
0.1250	-0.72756	-0.79382	-0.08696	-0.19777
0.1875	-0.70387	-0.68823	-0.02890	-0.00277
0.2500	-0.75535	-0.75723	-0.00903	-0.01217
0.3125	-0.88944	-0.88934	-0.11464	-0.11448
0.3750	-0.79345	-0.79349	-0.09308	-0.09313
0.4375	-0.81440	-0.81443	-0.08422	-0.08427
0.5000	-0.84612	-0.84615	-0.05633	-0.05639
0.5625	-0.79169	-0.79173	-0.06151	-0.06157
0.6250	-0.72602	-0.72605	-0.01074	-0.01079
0.6875	-0.73049	-0.73052	-0.00031	-0.00036
0.7500	-0.68223	-0.68226	0.02559	0.02554
0.8125	-0.66181	-0.66184	0.04601	0.04596
0.8750	-0.63281	-0.63284	0.02286	0.02282
0.9375	-0.62294	-0.62297	0.05508	0.05503
1.0000	-0.61180	-0.61182	0.06622	0.06618

Table 2. 方程式 (4.13) の数値解法 (4.12) による誤差.

	$\theta = -5$		$\theta = -1/8$	
	round-off	total	round-off	total
x	$\times 10^6$	$\times 10^6$	$\times 10^6$	$\times 10^6$
0	0	0	0	0
0.0625	-0.75240	-13.96435	-0.16036	-0.16588
0.1250	-1.38047	-4.01247	-0.55686	-0.55540
0.1875	-1.89458	-1.10546	-0.86687	-0.86704
0.2500	-2.20188	-2.30695	-1.02546	-1.02545
0.3125	-2.32594	-2.31985	-1.03835	-1.03835
0.3750	-2.53457	-2.53692	-1.15112	-1.15112
0.4375	-2.67485	-2.67708	-1.23166	-1.23166
0.5000	-2.67680	-2.67900	-1.29319	-1.29319
0.5625	-2.62238	-2.62457	-1.32817	-1.32817
0.6250	-2.61635	-2.61850	-1.32210	-1.32210
0.6875	-2.47187	-2.47396	-1.38617	-1.38617
0.7500	-2.43859	-2.44060	-1.34536	-1.34536
0.8125	-2.32141	-2.32332	-1.25044	-1.25044
0.8750	-2.24034	-2.24216	-1.17673	-1.17673
0.9375	-2.14117	-2.14289	-1.09236	-1.09236
1.0000	-2.00346	-2.00508	-1.02160	-1.02160

参考文献

[1] W. H. Enright, Second derivative multistep methods for stiff ordinary differential equations, SIAM J. Numer. Anal. **11**(1974), 321-331.

[2] J. D. Lambert, Numerical methods for ordinary differential systems, John Wiley and Sons, New York, 1991, 48-51.

[3] J. D. Lambert, Computational methods in ordinary differential equations, John Wiley and Sons, New York, 1973, 228-230.

[4] 三井斌友, 数値解析入門 — 常微分方程式を中心に, 朝倉書店, 160-163.

[5] K. Ozawa, On the existence theorems of some linear multistep methods with nonnegative coefficients (in Japanese), RIMS Kokyuroku **643**(1988), 94-116.

[6] K. Ozawa, Implicit linear multistep methods with nonnegative coefficients for solving initial value problems, JIP **12**(1988), 42-50.

[7] K. Ozawa, Backward Differential Formulae with Nonnegative Coefficients for Solving Initial Value Problems, JJIAM to appear.

[8] J. D. Rodabough and S. Thompson, Low-order A_0-stable Adams-type correctors, J.Comput.Appl.Math. **5**(1979),225-233.