数理解析研究所講究録
第1614巻 2008年 64-77

IMEX線形多段階スキームの安定性解析

Stability analysis of IMEX linear multistep schemes

小藤 俊幸， 平出 優佳
名古屋大学大学院情報科学研究科
TOSHIYUKI KOTO, YUKA HIRAIDE
Graduate School of Information Science, Nagoya University

概要

IMEX (implicit-explicit) 線形多段階スキームの常微分方程式や遅延微分方程式に対する数値的安定性を，スカラーのテスト方程式を用いて定義される安定性領域に基づいて解析する．線形多段階法の一般的な傾向として，近似精度（スキームの次数）を上げると，安定性が極端に悪くなる場合があり，そうした傾向を回避して，精度と安定性が，ともに，ある程度良いスキームを作ることが一つの課題となる．本論文では，線形多段階法の遅延微分方程式に対する安定性解析の手法を利用し，最も基本的な1次のIMEXスキームであるIMEXオイラースキームとほぼ同じ安定性領域をもつ2次スキームを構成する．さらに，数値実験により，構成されたスキームの有効性を検証する．

1 はじめに

反応拡散方程式や移流拡散方程式を空間離散化して得られる

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t)) + \boldsymbol{g}(t, \boldsymbol{u}(t)) \tag{1.1}$$

の形の常微分方程式系について考える．ここで，$\boldsymbol{f}$ は拡散項に対応するスティフな項，$\boldsymbol{g}$ は反応項や移流項に対応する非スティフ，あるいは弱スティフな項を表す．多くの応用例において，$\boldsymbol{f}$ は線形，$\boldsymbol{g}$ は非線形であり，こうした方程式を効率良く解くために，スティフな線形項に安定性の良い陰的公式を適用し，非線形項には実装が容易な陽的公式を適用するIMEXスキームと呼ばれる解法が，しばしば用いられる．最も簡単な例は，$\boldsymbol{f}$ の項に陰的オイラー公式，$\boldsymbol{g}$ の項に陽的オイラー公式を適用したIMEXオイラースキーム

$$\boldsymbol{u}_{n+1} = \boldsymbol{u}_n + \Delta t \boldsymbol{f}(t_{n+1}, \boldsymbol{u}_{n+1}) + \Delta t \boldsymbol{g}(t_n, \boldsymbol{u}_n) \tag{1.2}$$

である．ここで，Δt はステップ幅，$t_n = t_0 + n\Delta t$，$\boldsymbol{u}_n$ は $\boldsymbol{u}(t_n)$ の近似値を表す．このスキームの近似精度は1次であり，線形多段階法やルンゲ・クッタ法の考え方に基づいて，高精度化が図られている（Hundsdorfer & Verwer [9], IV.4，および，そこで参照されている文献参照）．ここでは，前者，IMEX線形多段階スキームについて考える．

方程式 (1.1) に対する IMEX 線形多段階スキームは，一般に

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \boldsymbol{u}_{n+j} = \Delta t \sum_{j=0}^{k} \beta_j \boldsymbol{f}(t_{n+j}, \boldsymbol{u}_{n+j}) + \Delta t \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^* \boldsymbol{g}(t_{n+j}, \boldsymbol{u}_{n+j}), \tag{1.3}$$

のように表される．ここで，α_j, β_j は k 段階線形多段階法の係数であり，係数 β_j^* は，適当な補外の係数 γ_j を用いて，係数 β_j から $\beta_j^* = \beta_j + \beta_k \gamma_j$ のように求められる．こうした IMEX スキームの安定性を調べるために，

$$\frac{du}{dt} = \lambda u(t) + \mu u(t) \quad (\lambda,\, \mu \in \mathbb{C}) \tag{1.4}$$

のテスト方程式が Frank, Hundsdorfer & Verwer [6] によって提案され，関連する研究が行われている [2, 8, 13, 16, 17]．右辺の $\lambda u(t)$ を $\boldsymbol{f}$，$\mu u(t)$ を $\boldsymbol{g}$ とみなして，スキーム (1.3) を適用すると，

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j u_{n+j} - z \sum_{j=0}^{k} \beta_j u_{n+j} - w \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^* u_{n+j} = 0 \quad (z = \Delta t\, \lambda,\ w = \Delta t\, \mu) \tag{1.5}$$

の差分方程式が得られる．このとき，スキームの安定性領域 S が，この差分方程式のゼロ解が漸近安定となるパラメータ $(z, w) = (\Delta t\, \lambda, \Delta t\, \mu)$ の領域で定義され，通常の線形多段階法の場合（例えば，Hairer & Wanner [7], Chapter V 参照）と同様，S の大小でスキームの安定性を比較することができる．具体的なスキームが与えられれば，いわゆる root locus method で S を数値的に描くことは可能である．ただし，通常の安定性領域とは異なり，S は $\mathbb{C}^2$ ($\simeq \mathbb{R}^4$) の領域となることから，S が広くなるようスキームの係数を調整して新たなスキームを作るのは容易ではない．

本論文では，テスト方程式 (1.4) に加えて，Barwell [3] によって提案された

$$\frac{du}{dt} = \lambda u(t) + \mu u(t-\tau) \quad (\lambda,\, \mu \in \mathbb{C}) \tag{1.6}$$

の（歴史的には，より古い）テスト方程式を考え合わせることを通じて，広い安定性領域 S をもつスキームの構成を試みる．ここで，$\tau > 0$ は定数遅延を表す．ステップ幅を

$$\Delta t = \frac{\tau}{m} \quad (m \geq 1 \text{ は整数}) \tag{1.7}$$

の形で与えるとき，IMEX スキームは

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t)) + \boldsymbol{g}(t, \boldsymbol{u}(t), \boldsymbol{u}(t-\tau)) \tag{1.8}$$

のような遅延微分方程式に適用することができる．特に，方程式 (1.4) に適用することにより，いわゆる P 安定性領域 $S_P \subset \mathbb{C}^2$ を $S_P \subset S$ となるように定義することができる．遅延微分方程式の数値解析の手法を用いて S_P を拡げることにより，結

果的に，広い安定性領域 S をもつスキームを構成しようというのが，本論文の基本的なアイディアである．

本論文の構成は以下の通りである．次の第2節では，安定性領域，P 安定性領域の定義を述べ，両者の基本的な関係を示す定理を述べる．第3節では，P 安定性領域の解析手法を示し，広い P 安定性領域をもつ2次スキームを具体的に構成する．最後の第4節で，構成されたスキームを用いた数値実験例を紹介する．なお，遅延微分方程式の数値解法に関する基礎事項については，Bellen & Zennaro [4] や，三井, 小藤 & 齊藤 [15] の第3章を参照されたい．また，IMEX ルンゲ・クッタスキームに関する同様な解析については，Koto [12, 13] を参照されたい．

2 安定性領域

係数 α_j, β_j から定まる多段階法の次数を p 次（$p \geq 1$）とし，γ_j は，十分滑らかな任意の関数 $\varphi(t)$ について，$\varphi(k\Delta t) = \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j \varphi(j\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^p)$ をみたすものとする．この条件は

$$\sum_{j=0}^{k-1} j^q \gamma_j = k^q \quad (q = 0, 1, \ldots, p-1) \tag{2.1}$$

のように書き直される．例えば，2段階2次法の場合は，条件 $\gamma_0 + \gamma_1 = 1$, $\gamma_1 = 2$ から，係数 γ_1, γ_0 が $\gamma_1 = 2$, $\gamma_0 = -1$（線形の補外に対応）のように一意に定まる．条件 (2.1) のもと，スキーム (1.3) は局所誤差が $\mathcal{O}(\Delta t^{p+1})$ となり（例えば，[9], p.387, Theorem 4.2 参照），ゼロ安定ならば，p 次の解法を定める．

また，

$$\rho(\zeta) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \zeta^j, \quad \sigma(\zeta) = \sum_{j=0}^{k} \beta_j \zeta^j, \quad \sigma^*(\zeta) = \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^* \zeta^j \tag{2.2}$$

とおくと，差分方程式 (1.5) の特性方程式は

$$\rho(\zeta) - z\,\sigma(\zeta) - w\,\sigma^*(\zeta) = 0 \tag{2.3}$$

となり，スキーム (1.3) の安定性領域 S は

$$S = \{(z, w) \in \mathbb{C}^2 : (2.3) \implies |\zeta| < 1\} \tag{2.4}$$

のように表すことができる．例えば，IMEX オイラースキーム (1.2) の場合，

$$\rho(\zeta) = \zeta - 1, \quad \sigma(\zeta) = \zeta, \quad \sigma^*(\zeta) = 1, \tag{2.5}$$

より，特性方程式は $\zeta - 1 - z\zeta - w = 0$ となる．これより，$\zeta = (1+w)/(1-z)$ が得られ，安定性領域は

$$S = \{(z, w) \in \mathbb{C}^2 : |1+w| < |1-z|\} \tag{2.6}$$

と表される．

安定性領域 S と z 平面 $\{(z,\, w) : z \in \mathbb{C}\}$ との共通集合は，複素平面内の領域

$$S_A = \{z \in \mathbb{C} : \rho(\zeta) - z\sigma(\zeta) = 0 \implies |\zeta| < 1\} \tag{2.7}$$

と同一視される．各 $z \in S_A$ に対して，(2.3) が $|\zeta| = 1$ の根をもつ w の集合を Γ_z とすると，Γ_z は

$$\Gamma_z : \frac{\rho(\zeta) - z\sigma(\zeta)}{\sigma^*(\zeta)}, \quad \zeta = e^{i\theta}, \quad \theta \in \mathbb{R} \tag{2.8}$$

と表される曲線となり，図形的には，安定性領域 S の z 断面 $S \cap \{(z,\, w) : w \in \mathbb{C}\}$ の境界の一部を与えるものと考えられる．IMEX オイラースキームの場合，(2.5) から $[\rho(\zeta) - z\sigma(\zeta)]/\sigma^*(\zeta) = -1 + (1-z)\zeta$ となり，Γ_z は -1 を中心とする半径 $|1-z|$ の円となる（図 2.1 左）．変数 z を実数に制限して，S を $\mathbb{R} \times \mathbb{C} \simeq \mathbb{R}^3$ 内の図形として描くと，図 2.1（右）のようになる．

通常の BDF2（2 段階後退微分公式, $\alpha_2 = 3/2$, $\alpha_1 = -2$, $\alpha_0 = 1/2$, $\beta_2 = 1$, $\beta_1 = \beta_0 = 0$）に補間の係数 $\gamma_1 = 2$, $\gamma_0 = -1$ から求められる $\beta_1^* = 2$, $\beta_0^* = -1$ を組み合わせた IMEX スキームを IMEX BDF2 スキームと呼ぶ．このスキームの場合，負の実数 z について Γ_z は，図 2.2（左）のような単一閉曲線となる．この曲線が安定性領域 S の境界を与え，負の実数 z に対して S は，図 2.2（右）のようになる．IMEX オイラースキームの安定性領域（図 2.1）と比べると，正の実軸以外のあらゆる方向で縮んでいる．

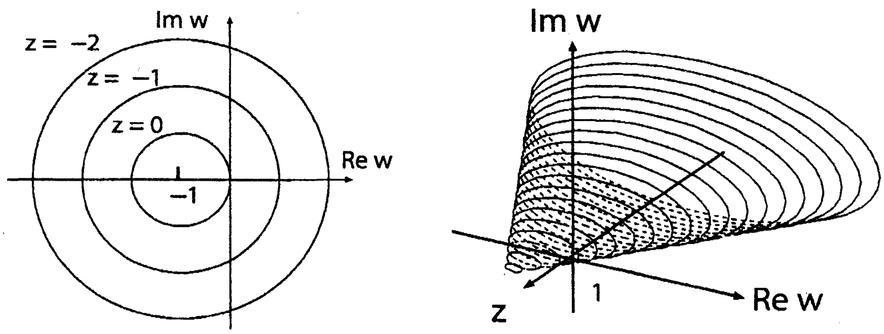

図 2.1: IMEX オイラースキームの安定性領域

ステップ幅の条件 (1.7) のもと，遅延微分方程式 (1.8) に対する IMEX 線形多段階スキームが

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \boldsymbol{u}_{n+j} = \Delta t \sum_{j=0}^{k} \beta_j f(t_{n+j},\, \boldsymbol{u}_{n+j}) + \Delta t \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^* g(t_{n+j},\, \boldsymbol{u}_{n+j},\, \boldsymbol{u}_{n-m+j}) \tag{2.9}$$

により定められる．このスキームをテスト方程式 (1.6) に適用すると，

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j u_{n+j} = z \sum_{j=0}^{k} \beta_j u_{n+j} + w \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^* u_{n-m+j} \quad (z = \Delta t\lambda,\ w = \Delta t\mu) \tag{2.10}$$

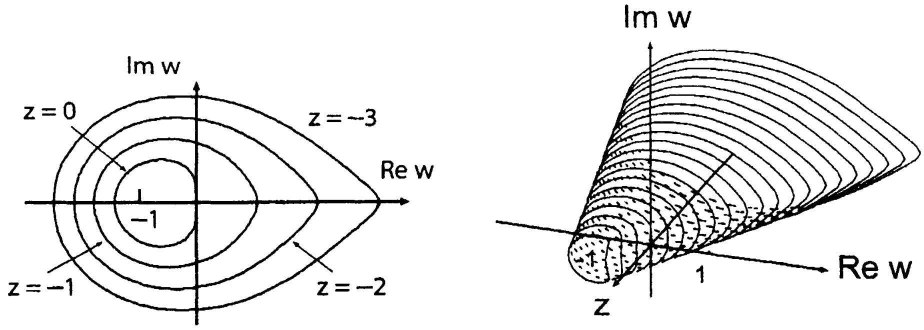

図 2.2: IMEX BDF2 スキームの安定性領域

が得られ，差分方程式 (2.10) の特性方程式は

$$\zeta^m \left[\rho(\zeta) - z\,\sigma(\zeta)\right] - w\,\sigma^*(\zeta) \;=\; 0 \tag{2.11}$$

と表される．この代数方程式を用いて，IMEX 線形多段階法の P 安定性領域 S_P を

$$S_P \;=\; \bigcap_{m\geq 0} S_P^{(m)}, \quad S_P^{(m)} \;=\; \{(z,\,w) \in \mathbb{C}^2 \,:\, (2.11) \;\Longrightarrow\; |\zeta| < 1\} \tag{2.12}$$

により定義する．定義により，$S_P \subset S$ であり，

$$\gamma_z \;=\; \inf\{|w| \,:\, w \in \Gamma_z\} \tag{2.13}$$

とおくとき，P 安定性領域は，次のように特徴付けられる．

定理 1. ベクトル $(\alpha_0, \ldots, \alpha_k)$, $(\beta_0, \ldots, \beta_k)$ は 1 次独立であるとする．以下の命題 (a), (b), (c) について，(a) $\Longrightarrow$ (b) $\Longrightarrow$ (c) が成り立つ．

(a) $z \in S_A$ かつ $|w| < \gamma_z$ (b) $(z,\,w) \in S_P$ (c) $z \in S_A$ かつ $|w| \leq \gamma_z$

証明 まず，(a) $\Longrightarrow$ (b) を示す．$|\zeta| \geq 1$, $z \in S_A$ とすると，方程式 (2.11) は

$$\zeta^m \;=\; w\,\frac{\sigma^*(\zeta)}{\rho(\zeta) - z\sigma(\zeta)} \tag{2.14}$$

と書き直される．任意の整数 $m \geq 0$ に対して，左辺の絶対値は 1 以上である．一方，$z \in S_A$ から，右辺の関数は $|\zeta| > 1$ で正則であって，最大値原理により，絶対値は

$$|w| \sup_{|\zeta|=1} \left|\frac{\sigma^*(\zeta)}{\rho(\zeta) - z\sigma(\zeta)}\right| \;=\; \frac{|w|}{\gamma_z} \tag{2.15}$$

以下となる．このとき，$|w| < \gamma_z$ ならば，この値は 1 よりも小となり，(2.15)、すなわち (2.11) は決して成り立たない．これは (a) $\Longrightarrow$ (b) を意味する．

関係 (b) $\Longrightarrow$ (c) は，例えば，in 't Hout & Spijker [10] の定理（in 't Hout & Spijker [11], Liu & Spijker [14] や [4], p.310, Lemma 10.2.24 も参照）を用いて示される．

ベクトル $(\alpha_0, \dots, \alpha_k)$, $(\beta_0, \dots, \beta_k)$ の 1 次独立性により，任意の $z \in \mathbb{C}$ について，$\rho(\zeta) - z\sigma(\zeta) \equiv 0$ とはならない．したがって，[10] の Corollary 3 により，$(z,\, w)$ が (b) をみたすならば，$z \in S_A$ かつ，任意の $|\zeta| = 1$ に対して $|w\,\sigma(\zeta)| \le |\rho(\zeta) - z\sigma(\zeta)|$ となって，(c) が成り立つ． □

IMEX BDF2 スキームの場合，γ_z は曲線 Γ_z に内接する円の半径であり（図 2.3 左），S_P は，S に含まれ，z 軸に関して回転対称な最大の“円錐”となる（図 2.3 右）．

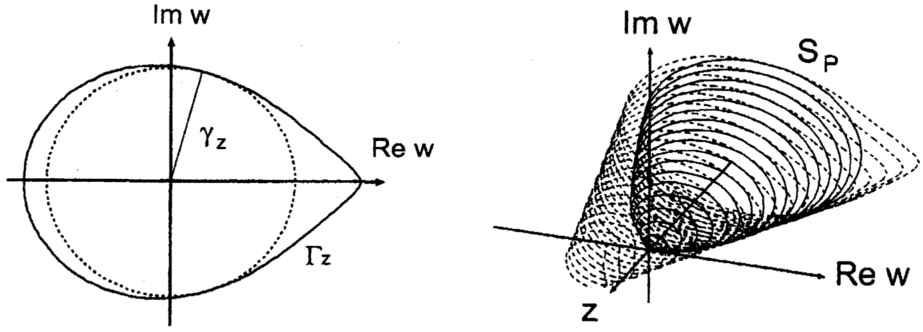

図 2.3: IMEX BDF2 スキームの P 安定性領域

3　P 安定性領域の解析

IMEX BDF2 スキームの安定性領域は，IMEX オイラースキームの安定性領域 (2.6) と比べると，かなり小さくなっている．以下では，より広い S_P をもつスキームを構成することを通じて，広い安定性領域をもつ 2 次スキームを見出すことを試みる．次の定理は，そのための道具であり，遅延微分方程式に対する通常の線形多段階法の解析手法 [5] に示唆されたものである．

定理 2. 陰的公式について，2 つの条件

(C_1)　$S_A \subset \mathbb{C}^- = \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} z < 0\}$　　(C_2)　$\sigma(\zeta) = 0 \Longrightarrow |\zeta| < 1$

を仮定する．さらに，複素平面内の曲線 Γ^* を

$$\Gamma^* : \frac{\sigma^*(\zeta)}{\sigma(\zeta)}, \quad \zeta = e^{i\theta}, \quad 0 \le \theta \le 2\pi \tag{3.1}$$

により定義し，$r = \sup\{|w| : w \in \Gamma^*\}$ とおく．このとき，$r \ge 1$ であって，

$$S_P \supset \{(z,\, w) \in \mathbb{C}^2 : r|w| < -\operatorname{Re} z\} \tag{3.2}$$

が成り立つ．

証明 条件 (2.1) により，係数 γ_j は $\sum_{j=0}^{k-1}\gamma_j = 1$ をみたすことから，

$$\sum_{j=0}^{k-1}\beta_j^* = \sum_{j=0}^{k-1}\beta_j + \beta_k\sum_{j=0}^{k-1}\gamma_j = \sum_{j=0}^{k}\beta_j$$

が成り立つ．したがって，$\sigma^*(1)/\sigma(1) = 1$ となり，上限は $r \geq 1$ である．

いま，$|\zeta| \geq 1$ を仮定する．条件 (C_2), (C_2) により，任意の $z \in \mathbb{C}^-$ に対して $\rho(\zeta)/\sigma(\zeta) - z \neq 0$ が成り立つことから，

$$\mathrm{Re}\,\frac{\rho(\zeta)}{\sigma(\zeta)} \geq 0 \tag{3.3}$$

である．特性方程式 (2.11) は

$$\frac{\rho(\zeta)}{\sigma(\zeta)} - z = \zeta^{-m}\,w\,\frac{\sigma^*(\zeta)}{\sigma(\zeta)} \tag{3.4}$$

と書き直され，さらに $r|w| < -\mathrm{Re}\,z$ を仮定すると，(3.3) により，左辺の実部は $-\mathrm{Re}\,z$ 以上であり，最大値原理により，右辺の絶対値は $-\mathrm{Re}\,z$ より小となって，この式は成り立たない．これは，(3.2) の右辺の集合が S_P に含まれることを意味する． □

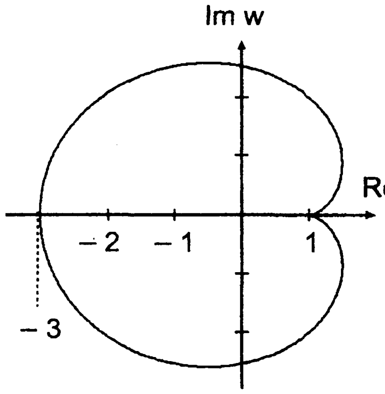

図 3.1: IMEX BDF2 スキームの Γ^*

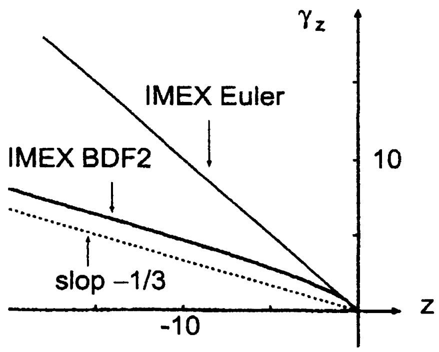

図 3.2: IMEX オイラー，IMEX BDF2 スキームの γ_z

IMEX オイラースキームの場合，$\sigma(\zeta) = \zeta$, $\sigma^*(\zeta) = 1$ より，Γ^* は単位円となり，$r = 1$ である．IMEX BDF2 スキームの場合，Γ^* は図 3.1 のような単一閉曲線となり，上限 r は $w = -3$ における絶対値 3 で与えられる．陰的オイラー公式，BDF2 ともに，条件 (C_1), (C_2) をみたし，定理 2 により，IMEX オイラースキームの P 安定性領域は $\{|w| < -\mathrm{Re}\,z\}$ の領域，IMEX BDF2 スキームの P 安定性領域は $\{3|w| < -\mathrm{Re}\,z\}$ の領域を含むことが言える．両スキームについて，P 安定性領

域を定める関数γ_zは，負の実数zに対して，図 3.2のようになる．IMEXオイラースキームのγ_zは直線$-z$そのものであり，IMEX BDF2スキームのγ_zも，確かに$-z/3$（点線で示された直線）の上部に位置している．なお，一般に，P安定性領域が$\{|w|<-\mathrm{Re}\,z\}$の領域を含むとき，数値解法はP安定であると言う．

より広いP安定性領域をもつ2次スキームを見出すため，2段階2次の線形多段階法を一般的に考える．このような方法は，実パラメータa, bを用いて

$$\begin{cases} \alpha_2 = a, \quad \alpha_1 = 1-2a, \quad \alpha_0 = a-1 \\ \beta_2 = b, \quad \beta_1 = \dfrac{1}{2}+a-2b, \quad \beta_0 = \dfrac{1}{2}-a+b \end{cases} \tag{3.5}$$

のように表され，定理 2の条件 (C_1), (C_2) は，a, bに関する条件

$$a > \frac{1}{2}, \quad b > \frac{a}{2} \tag{3.6}$$

と同値である (Hairer & Wanner [7], p.249, Exercise V.1.5)．特に，$(a, b)=(3/2,\ 1)$は，BDF2に対応し，この条件をみたしている．さらに，(3.6) の条件のもと，上限rは

$$r = \begin{cases} \dfrac{a}{2b-a} & \left(b < \dfrac{a(4a^2-2a+1)}{4a^2+1}\right) \\ \dfrac{4a^2-1}{\sqrt{16b\sqrt{\xi}+\eta}} & \left(b \geq \dfrac{a(4a^2-2a+1)}{4a^2+1}\right) \end{cases} \tag{3.7}$$

と表されることが，単純だが，やや面倒な計算（類似の計算については，[1] 参照）により示される．ここで，

$$\begin{aligned} \xi &= 2(2b-2a+1)(b+2a^2-a) \\ \eta &= (4a^2-1)^2-8(2a-1)^2b-32b^2 \end{aligned}$$

である．なお，$\gamma_1=2$, $\gamma_0=-1$から$\beta_1^*=1/2+a$, $\beta_0^*=1/2-a$である．特に，$a=b$の場合，上限rは

$$r = \frac{2a+1}{2a-1} \tag{3.8}$$

のようになる．したがって，例えば，$a=b$とし，a, bを大きく取ることにより，条件 (C_1), (C_2) をみたし，rが限りなく1に近いスキームを作ることができる．ただし，(3.5) から定まるスキームで，$r=1$とすることはできない．実際，曲線Γ^*上の点は，$w=1$の近傍（$w\neq 1$）で$|w|>1$となる（図 3.1参照）ことが，一般のa, bについて示される．

例えば，$a=b=20$とすると，$r=1.0513$ $(1/r=0.95122)$ となり，対応するスキームのΓ_zを負の実数zについて描くと，図 3.3（右）のようになる．IMEX BDF2スキーム（図 3.3 左）と比べると，安定性領域が格段に広がっていて，IMEXオイラースキームの安定性領域（図 2.1）に近くなっていることが分かる．このスキームを安定化2段階2次スキームと呼ぶことにする．

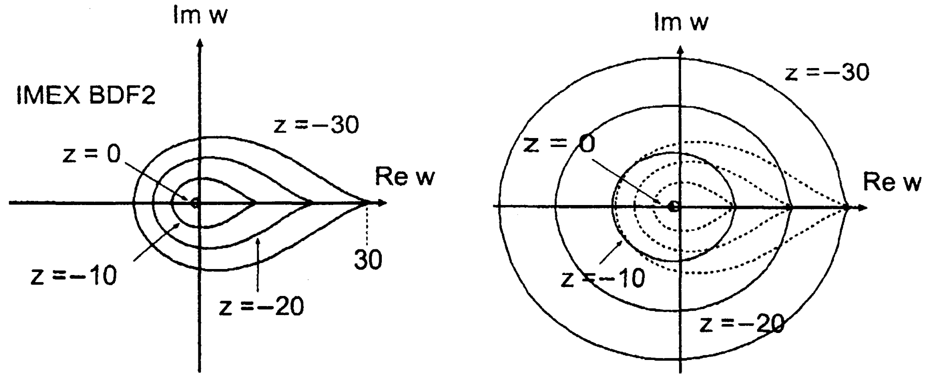

図 3.3: IMEX BDF2 スキームの Γ_z（左）と安定化スキームの Γ_z（右）

4 数値例

ここでは，前節で構成したスキームの有効性を示す数値例を 2 例紹介する．まず，D, A を正の定数として，移流拡散方程式の初期値・境界値問題

$$\begin{cases} \dfrac{\partial U}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2} - A\dfrac{\partial U}{\partial x} \quad (t \geq 0,\ 0 \leq x \leq 1) \\ U(t,\,0) = 1,\ U(t,\,1) = 0 \quad (t \geq 0) \\ U(0,\,x) = \phi(x) \quad (0 \leq x \leq 1) \end{cases} \tag{4.1}$$

を考える．この問題は

$$U(t,\,x) = (e^{\frac{A}{D}} - e^{\frac{A}{D}x})/(e^{\frac{A}{D}} - 1) \tag{4.2}$$

のような定常解をもつことが知られていて（例えば，[9], p. 84），厳密解の挙動は，図 4.1 のようになる．

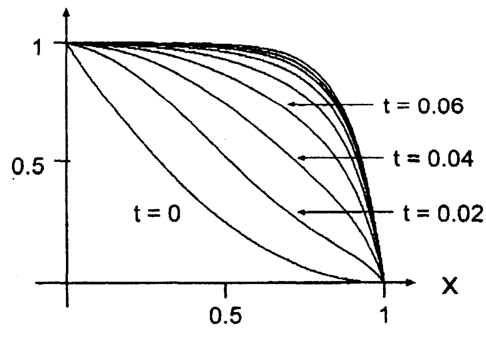

図 4.1: 方程式 (4.1) の厳密解（$D = 1,\ A = 10,\ \phi(x) = (1-x)^2$）

区間 $0 \leq x \leq 1$ を $0 = x_0 < \cdots < x_j = jh < \cdots < x_M = 1$ $(h = 1/M)$ のように分割し，x に関する 2 階微分，1 階微分を，それぞれ，2 次の中心差分を用いて近似

することにより，

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = \Big(\boldsymbol{L}\boldsymbol{u}(t) + \boldsymbol{b}\Big) - \boldsymbol{M}\boldsymbol{u}(t) \tag{4.3}$$

の常微分方程式系が得られる．ここで，$\boldsymbol{u}(t) = [u^1(t), \ldots, u^{M-1}(t)]^T$, $u^j(t) \approx U(t, x_j)$, $\boldsymbol{b} = [D/h^2 + A/(2h), 0, \ldots, 0]^T$,

$$\boldsymbol{L} = \frac{D}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{M} = \frac{A}{2h}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

である．ステップ幅Δtが十分小さければ，IMEX BDF2スキームを用いても，安定な数値解を得ることができる．安定となる限界の Δt の概算値を見出すために，パラメータ値を $D = 1$, $A = 10$，空間変数の分割数を $M = 1000$ とし，ステップ幅を $\Delta t = 1/m$（mは正整数）の形に取って数値解を計算すると，IMEX BDF2スキームの場合，$m = 53$ と $m = 54$ の間で，数値解の定性的性質が変わる（図 4.2）．図 4.2は，区間 $0 \le x \le 1$ の中点 $x = 1/2$ における近似値 $u_n^{M/2} \approx U(t_n, 1/2)$ を時系列的に表示したものである．初期関数は $\phi(x) = (1-x)^2$ とし，2段階スキーム（IMEX BDF2スキーム，安定化スキーム）の出発値はIMEXオイラー公式で与えている．図 4.3は，横軸に m を取り，縦軸に $\log_{10} \Lambda_m$, $\Lambda_m = \max_{5 \le t_n \le 10} |u_n^{M/2}|$ の値をプロットしたものである．同じグラフをIMEXオイラースキーム，安定化2段階2次スキームについて描くと，図 4.4 のようになる．これらのスキームのほうが，より小さな m，すなわち，より大きなステップ幅 Δt で安定な数値解が得られることが分かる．

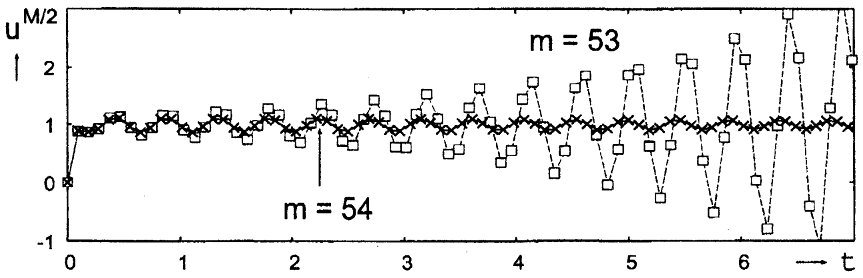

図 4.2: IMEX BDF2スキームによる (4.3) の数値解

もう一つの例として，遅延反応拡散方程式（Wu [18], p. 220 参照）の初期値・境界値問題

$$\begin{cases} \dfrac{\partial U}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \mu\, U(t-\tau, x)[1 + U(t, x)^2\,] \\ U(t, 0) = U(t, 1) = 0 \quad (t \ge 0) \\ U(t, x) = \phi(t, x) \quad (-\tau \le t \le 0,\ 0 \le x \le 1) \end{cases} \tag{4.4}$$

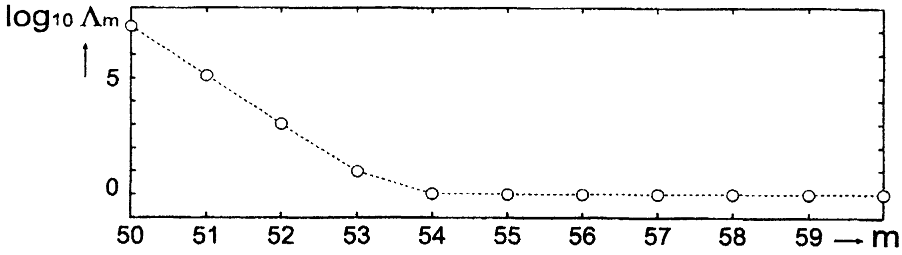

図 4.3: IMEX BDF2 スキームの数値結果

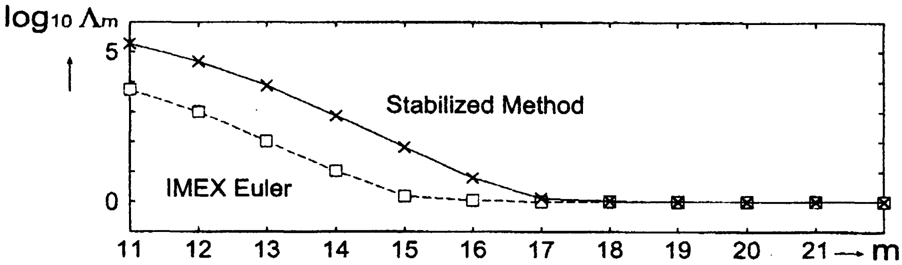

図 4.4: IMEX オイラースキームと安定化スキームの数値結果

を考える．ここで，D は正の定数，μ は実数パラメータである．前と同じ空間離散化により，

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{u}(t) + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{u}(t), \boldsymbol{u}(t-\tau)), \tag{4.5}$$

の遅延微分方程式系が得られる．ここで，$\boldsymbol{L}$ は前の例と同じ行列，$\boldsymbol{g}$ は第 j 成分が $\mu\, u^j(t-\tau)[1+u^j(t)^2]$ となるベクトル値関数である．

分割数 $M \geq 3$ ならば，$\boldsymbol{L}$ の固有値はすべて $-8D$ よりも小となり，パラメータ μ が $|\mu| < 8D$ をみたすならば，(4.5) のゼロ解は，任意の $\tau > 0$ について漸近安定となる（詳細については，Koto [12]，Section 4 を参照されたい）．厳密解の典型的な挙動は減衰振動である（図 4.5）．

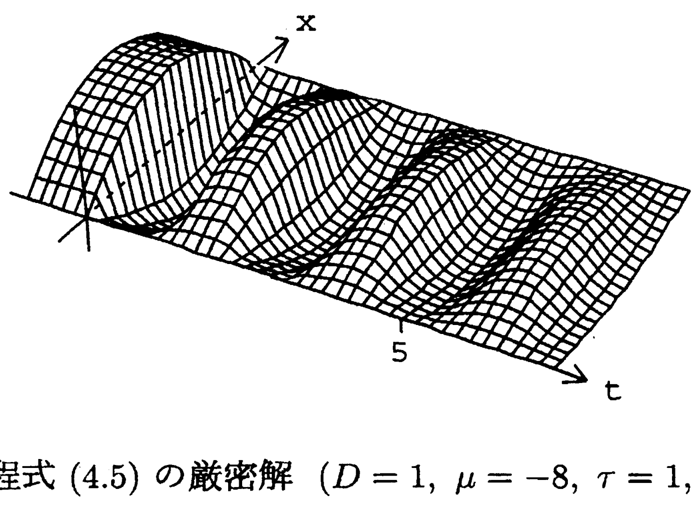

図 4.5: 方程式 (4.5) の厳密解 $(D=1,\ \mu=-8,\ \tau=1,\ M=100)$

この場合も，ステップ幅 $\Delta t = \tau/m$ が十分小さければ，IMEX BDF2 スキームを用いても，安定な数値解を得ることができる．パラメータ値を $D = 10$, $\mu = -80$, $\tau = 1$, 空間変数の分割数を $M = 1000$ とし，実際に計算すると，IMEX BDF2 スキームの場合，$m = 61$ と $m = 62$ の間で，数値解の定性的性質が変わる（図 4.6）．なお，初期関数は $\phi(t, x) = x(1 - x)$ とし，前の例と同じく，出発値を IMEX オイラー公式で与えている．

他方，IMEX オイラースキームや安定化スキームの場合，このパラメータ値については，任意の正整数 m に対して，安定な数値解が得られる．図 4.7 は安定化スキームによる数値解を示している．IMEX オイラースキームの場合も同様である．

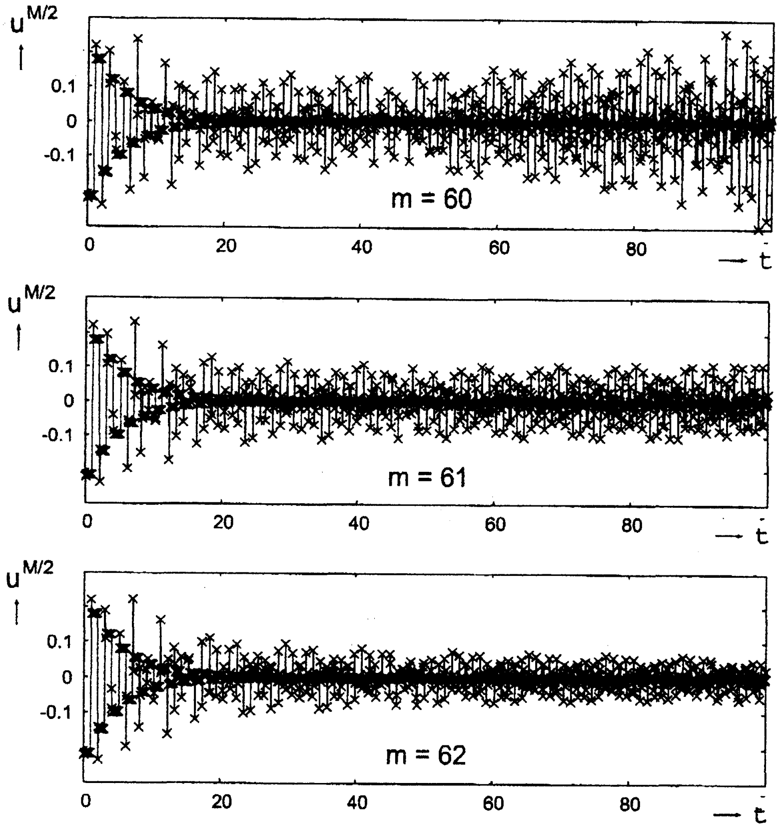

図 4.6: IMEX BDF2 スキームによる (4.5) の数値解

参考文献

[1] G. Akrivis, F. Karakatsani, Modified implicit-explicit BDF methods for nonlinear parabolic equations, BIT, **43** (2003), 467–483.

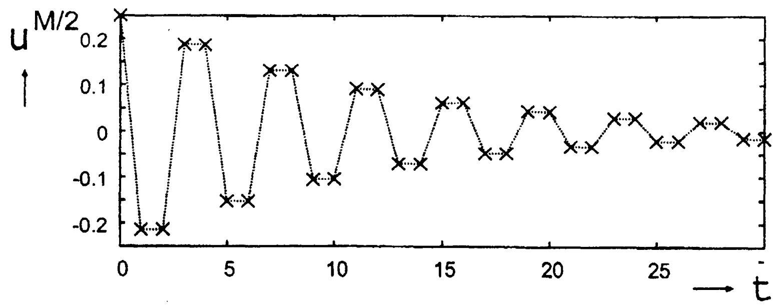

図 4.7: 安定化スキームによる (4.5) の数値解 ($m = 1$)

[2] U. M. Ascher, S. J. Ruuth, B. T. R. Wetton, Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations, SIAM J. Numer. Anal., **32** (1995), 797–823.

[3] V. K. Barwell, Special stability problems for functional differential equations, BIT **15** (1975), 130–135.

[4] A. Bellen, M. Zennaro, Numerical Methods for Delay Differential Equations, The Clarendon Press Oxford University Press, New York, 2003.

[5] T. A. Bickart, P-stable and $P[\alpha, \beta]$-stable integration/interpolation methods in the solution of retarded differential-difference equations, BIT, **22** (1982), 464–476.

[6] J. Frank, W. Hundsdorfer, J. G. Verwer, On the stability of implicit-explicit multistep methods, Appl. Numer. Math., **25** (1997), 193–205.

[7] E. Hairer, G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations II, Stiff and Differential-Algebraic Problems, second revised ed., Springer-Verlag, Berlin, 1996（邦訳：常微分方程式の数値解法 II，発展編，シュプリンガー・ジャパン近刊）.

[8] W. Hundsdorfer, S. J. Ruuth, IMEX extensions of linear multistep methods with general monotonicity and boundedness properties, J. Comput. Phys., **225** (2007), 2016–2042.

[9] W. Hundsdorfer, J. Verwer, Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations, Springer-Verlag, Berlin, 2003.

[10] K. J. in 't Hout, M. N. Spijker, The θ-methods in the numerical solution of delay differential equations, in: K. Strehmel (ed.), Numerical Treatment of Differential Equations, pp. 61–67, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft mbH, Stuttgart, 1991.

[11] K. J. in 't Hout, M. N. Spijker, Stability analysis of numerical methods for delay differential equations, Numer. Math. **59** (1991), 807–814.

[12] T. Koto, Stability of IMEX Runge-Kutta methods for delay differential equations, J. Comput. Appl. Math., **211** (2008), 201–212.

[13] T. Koto, IMEX Runge-Kutta schemes for reaction-diffusion equations, J. Comput. Appl. Math. **215** (2008), 182–195.

[14] M. Z. Liu, M. N.Spijker, The stability of the θ-methods in the numerical solution of delay differential equations, IMA J. Numer. Anal., **10** (1990), 31–48.

[15] 三井斌友，小藤俊幸，齊藤善弘，微分方程式による計算科学入門，共立出版，2004.

[16] L. Pareschi, G. Russo, Implicit-explicit Runge-Kutta schemes for stiff systems of differential equations, in: D. Trigiante, ed., Recent Trends in Numerical Analysis, pp. 269–288, Nova Science Publishers Inc., Huntington, NY, 2001.

[17] J. M. Varah, Stability restrictions on second order, three level finite difference schemes for parabolic equations, SIAM J. Numer. Anal., **17** (1980), 300–309.

[18] J. Wu, Theory and Applications of Partial Functional-Differential Equations, Springer-Verlag, New York, 1996.