

常微分方程式の数値解法

沼田 龍介

University of Hyogo

平成 28 年 8 月 2 日

1 階常微分方程式の初期値問題

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(t, x(t)), \quad (1)$$

$$x(t_0) = x_0 \quad (2)$$

の数値解法についてのまとめ．離散化された時刻 $t_n = t_0 + n\Delta t$ における x の値を x_n と書く．数値解法では任意の n に対する x_n の近似値を x_0 から逐次的に構成していく．すでに得られている x_i ($i = 0, \dots, n-1$) から, x_n を求める方法として表記する．

ここでは, 求めるべき変数は $x(t)$ のみとしているが, 変数は複数あってもよい．

1 数値解法の収束性と誤差

1.1 1 段階法

常微分方程式の最も基本的な解法として 1 段階法を示す．1 段階法は $0 \leq \theta \leq 1$ なる θ に対して

$$\frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} = \theta f(t_{n-1}, x_{n-1}) + (1 - \theta)f(t_n, x_n) \quad (3)$$

のように書ける方法のクラスである．

陽的 Euler 法 (前進 Euler 法)

$\theta = 1$ の場合, 陽的 Euler 法という．一般に Euler 法といえば陽的 Euler 法を指す．

$$\frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \quad (4)$$

陰的 Euler 法 (後退 Euler 法)

$\theta = 1$ の場合, 陰的 Euler 法という．

$$\frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} = f(t_n, x_n) \quad (5)$$

右辺に x_n を含むため, 求めたい x_n について陽に書き下すことは一般にできない．このような方法を陰解法という．

台形公式 (Trapezoidal Rule)

$\theta = 1/2$ の場合, 台形公式という.

$$\frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} = \frac{1}{2}[f(t_{n-1}, x_{n-1}) + f(t_n, x_n)] \quad (6)$$

台形公式は陰解法である.

1.2 収束性

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad x(t_0) = x_0 \quad (7)$$

の $t \in [t_0, t_1]$ での解を考える. 関数 f が領域 $t \in [t_0, t_1], |x - x_0| \leq b$ で連続であり, 最大値, 最小値を持つとする. 絶対値が M で抑えられ, $t_1 - t_0 < b/M$ という関係が成り立つとする. さらに, 上の範囲の任意の t, x, x' について Lipschitz 条件

$$|f(t, x) - f(t, x')| \leq L|x - x'| \quad (8)$$

を満たすものとする. $N\Delta t = t_1 - t_0$ とする.

このとき, Euler 法は, 真の解 $(x(t))$ に様に 1 次収束する. すなわち, 定数 C が存在し,

$$|x(t_n) - x_n| \leq C\Delta t \quad (9)$$

Proof. Euler 法より

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(t_n, x_n). \quad (10)$$

(7) を時刻 t_n から t_{n+1} で積分すると

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, x) dt = x(t_n) + \Delta t f(t_n, x(t_n)) + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (11)$$

($f(t)$ の原始関数を $F(t)$ とすると $F(t + \Delta t) - F(t) = \Delta t f(t) + \mathcal{O}(\Delta t^2)$). よって

$$x(t_{n+1}) - x_{n+1} = x(t_n) - x_n + \Delta t [f(t_n, x(t_n)) - f(t_n, x_n)] + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (12)$$

絶対値をとると,

$$|x(t_{n+1}) - x_{n+1}| \leq |x(t_n) - x_n| + \Delta t |f(t_n, x(t_n)) - f(t_n, x_n)| + A\Delta t^2. \quad (13)$$

Lipschitz 条件より

$$|f(t_n, x(t_n)) - f(t_n, x_n)| \leq L|x(t_n) - x_n| \quad (14)$$

$e_n \equiv x(t_n) - x_n$ とすると

$$|e_{n+1}| \leq |e_n| + \Delta t L |e_n| + A\Delta t^2 = (1 + \Delta t L) |e_n| + A\Delta t^2 \quad (15)$$

$e_0 = 0$ より

$$|e_n| \leq A\Delta t^2 \sum_{i=0}^{n-1} (1 + \Delta t L)^i = \frac{A\Delta t}{L} [(1 + \Delta t L)^n - 1] \quad (16)$$

$$(1 + \Delta t L)^N = \exp(L(t_1 - t_0)) \quad (17)$$

より

$$|x(t_n) - x_n| \leq \frac{A\Delta t}{L} [\exp(L(t_1 - t_0)) - 1] \quad (18)$$

□

1.3 誤差, 精度

局所離散化誤差 (local truncation error) は, 時刻 t_{n-1} に $x_{n-1} = x(t_{n-1})$ から出発した数値解が, 次の時刻 t_n において, 真の解からどれだけずれたかを表す. 時刻 t_n における真の解を $x(t_n)$, 数値解を x_n であらわすと, 局所離散化誤差は

$$e = x(t_n) - x_n \quad (19)$$

となる. ある Scheme が

$$\mathcal{L}(x_{n-1}, \dots, x_{n-k})x_n = 0 \quad (20)$$

で表されるとすると,

$$e = \mathcal{L}x(t_n) \quad (21)$$

すなわち, 数値解を全て真の解に置き換えたものになっている.

ある Scheme の局所離散化誤差が

$$e = \mathcal{O}(\Delta t^m) \quad \text{or} \quad |e| \leq A\Delta t^m \quad (22)$$

で表される時, その Scheme は m 次であるという. 局所離散化誤差が m 次の時, 大域誤差 (ある時間間隔で積分した時の誤差) は $m - 1$ 次である. 精度とは, 数値解の真の解への収束性をいい, 大域誤差の次数と等しい.

陽的 Euler 法の局所離散化誤差は, 真の解 $x(t_{n+1})$ の Taylor 展開

$$x(t_{n+1}) = x(t_n + \Delta t) = x(t_n) + \Delta t \frac{dx}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2x}{dt^2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (23)$$

および, $dx/dt = f$ より

$$e_{\text{Euler}} = \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (24)$$

よって, Euler 法は 1 次精度である. 陰的 Euler 法についても同様に 1 次精度である. 台形公式は 2 次精度である.

2 部分段階法 (Fractional Step Method)

部分段階法は, 1 つ前の時間ステップ t_{n-1} における解 x_{n-1} のみを用いて, 複数回導関数 $f(t, x(t))$ を評価することにより, 高精度に x_n を計算する方法である.

2.1 Runge-Kutta 法

R -段 (stage) の Runge-Kutta 法は以下のように表される.

$$k^{(r)} = f(t_{n-1} + \Delta t a_r, x_{n-1} + \Delta t \sum_{s=1}^R b_{rs} k^{(s)}) \quad (r = 1, 2, \dots, R) \quad (25)$$

$$x_n = x_{n-1} + \Delta t \sum_{r=1}^R c_r k^{(r)}. \quad (26)$$

a_r, b_{rs}, c_r はパラメタであり, 一般に

$$a_r = \sum_{s=1}^R b_{rs}, \quad r = 1, 2, \dots, R \quad (27)$$

とする. また

$$X = \begin{pmatrix} t \\ x(t) \end{pmatrix}, \quad F(X) = \begin{pmatrix} 1 \\ f(t, x(t)) \end{pmatrix} \quad (28)$$

として (25),(26) を適用すると, 明らかに

$$\sum_{i=1}^R c_i = 1. \quad (29)$$

これを適合条件 (consistency condition) という.

(25),(26) からただちに分かることは,

1. $b_{rs}(s \geq r)$ がすべてゼロなら, 陽的公式になっている.
2. $b_{rs}(s > r)$ がすべてゼロなら, 半陰的公式になっている. つまり, $k^{(1)}, k^{(2)}, \dots$ と順に陽的に計算できる.
3. 上記以外は陰的公式になる.

R 段の陽公式の到達可能次数については以下の結果が知られている.

段数 R	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$R \geq 10$
次数 m	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7	$m \leq R - 2$

一般に R 段の公式で, 到達可能次数を達成する公式は一通りでなく, 自由パラメタを含んでいる. なるべく簡単で, 誤差の少ない公式が多数提案されている.

陽的 Euler 法は $a_1 = b_{11} = 0, c_1 = 1$ の, 陰的 Euler 法は $a_1 = b_{11} = 1, c_1 = 1$ の 1 段 Runge-Kutta 法と解釈できる.

2 段 2 次の公式としては以下のようなものがある.

1. $a_2 = b_{21} = 1/2, c_2 = 1$

$$k^{(1)} = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \quad (30)$$

$$k^{(2)} = f(t_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}, x_{n-1} + \frac{\Delta t}{2} k^{(1)}) \quad (31)$$

$$x_n = x_{n-1} + \Delta t k^{(2)} \quad (32)$$

2. $a_2 = b_{21} = 1, c_1 = c_2 = 1/2$

$$k^{(1)} = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \quad (33)$$

$$k^{(2)} = f(t_{n-1} + \Delta t, x_{n-1} + \Delta t k^{(1)}) \quad (34)$$

$$x_n = x_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}(k^{(1)} + k^{(2)}) \quad (35)$$

公式 1 の場合の誤差を確認する.

$$\begin{aligned} k^{(2)} &= f(t_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}, x_{n-1} + \frac{\Delta t}{2} f(t_{n-1}, x_{n-1})) \\ &= f + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} f \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + 2 \frac{\Delta t^2}{4} f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial t} + \frac{\Delta t^2}{4} f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\ &= f + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial x} \right) + \frac{\Delta t^2}{8} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + 2f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial t} + f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \end{aligned} \quad (36)$$

一方, 真の解 $x(t_n)$ は Taylor 展開より

$$x(t_n) = x(t_{n-1}) + \Delta t \frac{dx}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{d^3 x}{dt^3} + \mathcal{O}(\Delta t^4) \quad (37)$$

ここで,

$$\frac{dx}{dt} = f \quad (38)$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial x} \quad (39)$$

$$\frac{d^3 x}{dt^3} = \frac{d^2 f}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (40)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial x} \right) \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (41)$$

$$= \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + (f + 2) \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial^2 f}{\partial t \partial x} + 2f \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 + f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (42)$$

より, 局所離散化誤差は

$$|e_{rk2}| = |x(t_{n+1}) - x_{n+1}| = \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (43)$$

よって, 大域誤差は 2 次精度になっている. 公式 2 の場合

$$\frac{k^{(1)} + k^{(2)}}{2} = f + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial x} \right) + \frac{\Delta t^2}{4} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + 2f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial t} + f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (44)$$

で, 公式 1 と同様に大域誤差は $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ である.

次の 4 段 4 次の Runge-Kutta 法は, 陽的 Runge-Kutta 法のなかでもっともよく用いられ, 「古典的」といわれ

る公式である． ($a_1 = 0, a_2 = b_{21} = 1/2, a_3 = b_{32} = 1/2, a_4 = b_{43} = 1, 2c_1 = c_2 = c_3 = 2c_4 = 1/3$)

$$k^{(1)} = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \quad (45)$$

$$k^{(2)} = f(t_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}, x_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}k^{(1)}) \quad (46)$$

$$k^{(3)} = f(t_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}, x_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}k^{(2)}) \quad (47)$$

$$k^{(4)} = f(t_{n-1} + \Delta t, x_{n-1} + \Delta tk^{(3)}) \quad (48)$$

$$x_n = x_{n-1} + \frac{\Delta t}{6}[k^{(1)} + 2k^{(2)} + 2k^{(3)} + k^{(4)}] \quad (49)$$

局所離散化誤差は

$$e_{rk4} = x(t_n) - x_n = \frac{\Delta t^5}{2880}(\cdots) \quad (50)$$

の形で表され，4 次精度であることが確認できる．

また，より効率のよい (メモリを節約できる)4 段 4 次の Runge-Kutta 法として，以下のアルゴリズムで表される Gill による方法 (Runge-Kutta-Gill 法) が知られている．

do $i = 1, 4$

$u = f(x)$

$x = x + \Delta t (P_i u + Q_i v)$

$v = R_i u + S_i v$

end do

(“=” はアルゴリズム的に代入を表していることに注意．等号ではない．)

作業変数 u, v が必要であるが，通常の Runge-Kutta 法のように中間ステップにおける傾き ((45)-(48) など) を全て保持しておく必要はない． Runge-Kutta 法との対応から

$$P_1 = b_{21} \quad (51)$$

$$P_2 = b_{32}, P_1 + Q_2 R_1 = b_{21} + Q_2 R_1 = b_{31} \quad (52)$$

$$P_3 = b_{43}, P_2 + Q_3 R_2 = b_{32} + Q_3 R_2 = b_{42}, \quad (53)$$

$$P_1 + Q_2 R_1 + Q_3 S_2 R_1 = b_{31} + Q_3 S_2 R_1 = b_{41} \quad (54)$$

$$P_4 = c_4, P_3 + Q_4 R_3 = b_{43} + Q_4 R_3 = c_3, \quad (55)$$

$$P_2 + Q_3 R_2 + Q_4 S_3 R_2 = b_{42} + Q_4 S_3 R_2 = c_2, \quad (56)$$

$$P_1 + Q_2 R_1 + Q_3 S_2 R_1 + Q_4 S_3 S_2 R_1 = b_{41} + Q_4 S_3 S_2 R_1 = c_1 \quad (57)$$

まず，このような関係を満たす Runge-Kutta 法を構成する． (51)-(57) より

$$(b_{41} - b_{31})(c_2 - b_{42}) = (b_{42} - b_{32})(c_1 - b_{41}). \quad (58)$$

このような関係を満たす a, b, c として

$$\begin{aligned}
a_1 &= 0, \\
a_2 &= \frac{1}{2}, \quad b_{21} = \frac{1}{2} \\
a_3 &= \frac{1}{2}, \quad b_{31} = \frac{3c_3-1}{6c_3}, \quad b_{32} = \frac{1}{6c_3} \\
a_4 &= 1, \quad b_{41} = 0, \quad b_{42} = 1 - 3c_3, \quad b_{43} = 3c_3 \\
c_1 &= \frac{1}{6}, \quad c_2 = \frac{2}{3} - c_3, \quad c_3, \quad c_4 = \frac{1}{6}
\end{aligned} \tag{59}$$

が有りうる。ただし、 c_3 はパラメタである。なお、一般に 4 次精度の Runge-Kutta 法において、 $a_4 = 1$ となることが証明されている。 $c_3 = \frac{2+\sqrt{2}}{6}$ と選ぶと、

$$\begin{aligned}
a_1 &= 0, \\
a_2 &= \frac{1}{2}, \quad b_{21} = \frac{1}{2} \\
a_3 &= \frac{1}{2}, \quad b_{31} = \frac{-1+\sqrt{2}}{2}, \quad b_{32} = \frac{2-\sqrt{2}}{2} \\
a_4 &= 1, \quad b_{41} = 0, \quad b_{42} = \frac{-\sqrt{2}}{2}, \quad b_{43} = \frac{2+\sqrt{2}}{2} \\
c_1 &= \frac{1}{6}, \quad c_2 = \frac{2-\sqrt{2}}{6}, \quad c_3 = \frac{2+\sqrt{2}}{6}, \quad c_4 = \frac{1}{6}
\end{aligned} \tag{60}$$

a, b, c が決まると、パラメタ 8 個 ($Q_2, Q_3, Q_4, R_1, R_2, R_3, S_2, S_3$) に対して、(51)-(57) から独立な関係は 5 本ある。 $R_1 = 1$ とすると $Q_2 = b_{31} - b_{21}$ 、 $Q_3 = -b_{43}$ 、 $Q_4 = -2c_4$ とすると

$$\begin{aligned}
P_1 &= \frac{1}{2} & P_2 &= \frac{2-\sqrt{2}}{2} & P_3 &= \frac{2+\sqrt{2}}{2} & P_4 &= \frac{1}{6} \\
Q_1 &= 0 & Q_2 &= -\frac{2-\sqrt{2}}{2} & Q_3 &= -\frac{2+\sqrt{2}}{2} & Q_4 &= -\frac{1}{3} \\
R_1 &= 1 & R_2 &= 2 - \sqrt{2} & R_3 &= 2 + \sqrt{2} & R_4 &= 0 \\
S_1 &= 0 & S_2 &= \frac{3\sqrt{2}-4}{2} & S_3 &= -\frac{3\sqrt{2}+4}{2} & S_4 &= 0
\end{aligned} \tag{61}$$

となる。なお、 $i = 1$ における v の値が不定なので、 $Q_1 = S_1 = 0$ 。または v が正しく初期化されていて $R_4 = S_4 = 0$ を満たしているなら、 Q_1, S_1 の値は問わない。

3 線形多段解法 (Linear Multistep Method)

線形多段階法は直前の時間ステップにおける情報 (解 x や導関数 $f(t, x(t))$) だけでなく、それ以前の時刻における情報も用いて解を計算する方法である。 x_n を求める k ステップの方法は一般に下記のように表される。

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i x_{n-i} = \Delta t \sum_{i=0}^k \beta_i f(t_{n-i}, x_{n-i}) \quad (\alpha_0 \neq 0) \tag{62}$$

$\beta_0 = 0$ ならば陽解法である。

(28) に (62) を適用すると

$$\sum_i \alpha_i t_{n-i} = \Delta t \sum_i \beta_i \tag{63}$$

$$\sum_i \alpha_i x_{n-i} = \Delta t \sum_i \beta_i f(t_{n-i}, x_{n-i}) \tag{64}$$

$t_n - t_{n-1} = \Delta t$ を用いると,

$$t_n \sum_i \alpha_i = \Delta t \sum_i (\beta_i + i\alpha_i) \quad (65)$$

任意の $t_n, \Delta t$ に対して成立するためには

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i = 0 \quad (66)$$

$$\sum_{i=0}^k i\alpha_i = -\sum_{i=0}^k \beta_i \quad (67)$$

(66),(67) を適合条件 (consistency condition) という.

定数係数 k 次線形差分方程式

$$\sum_{i=0}^k \gamma_i x_{n-i} = \phi_n, \quad n = n_0, n_0 + 1, \dots \quad (68)$$

を考える. γ は n に依存しない定数で, $\gamma_0 \neq 0, \gamma_k \neq 0$ とする. 解 $x_{n_0}, x_{n_0+1}, \dots$ を $\{x_n\}$ と書く. 対応する同次方程式

$$\sum_{i=0}^k \gamma_i x_{n-i} = 0, \quad n = n_0, n_0 + 1, \dots \quad (69)$$

の解を $\{\hat{x}_n\}$ とする. (68) の特解を $\{\psi_n\}$ とすると, 一般解は $x_n = \hat{x}_n + \psi_n$. ϕ を n に依存しない定数とすると, $\sum_{i=0}^k \gamma_i \neq 0$ であれば, 特解として

$$\psi_n = \phi / \sum_{i=0}^k \gamma_i \quad (70)$$

を選べる.

(69) 式の解のセット $\{x_{n,t}\}, t = 1, \dots, K$ が線形独立であるとは,

$$a_1 x_{n,1} + a_2 x_{n,2} + \dots + a_K x_{n,K} = 0, \quad n = n_0, n_0 + 1, \dots \quad (71)$$

を満たす a_i が全てゼロであることをいう. (69) の k 個の線形独立な解のセット $\{\hat{x}_{n,t}\}, t = 1, \dots, k$ を fundamental system といい, (69) の解は $\sum_{t=1}^k d_t x_{n,t}$ で表される. (69) の解として $x_{n,t} = r_t^n$ を仮定する. 与式に代入すると

$$\sum_{i=0}^k \gamma_i r_t^i = 0. \quad (72)$$

すなわち, r_t は多項式 $P(r) = \sum_{i=0}^k \gamma_i r^i = 0$ の根である. $P(r) = 0$ が相異なる k 個の根 r_t を持つ時, $\{r_t^n\}$ は同次方程式 (69) の fundamental system をなす. よって (68) の解は

$$x_n = \sum_{t=1}^k d_t r_t^n + \psi_n \quad (73)$$

で与えられる. 一般に $P(r) = 0$ の解が $r_j, j = 1, \dots, p$ で, それぞれ重複度 μ_j ($\sum_{j=1}^p \mu_j = k$) を持つ時, 一般解は

$$\begin{aligned} x_n &= [d_{1,1} + d_{1,2}n + d_{1,3}n(n-1) + \dots + d_{1,\mu_1}n(n-1)\dots(n-\mu_1+1)]r_1^n \\ &+ [d_{2,1} + d_{2,2}n + d_{2,3}n(n-1) + \dots + d_{2,\mu_2}n(n-1)\dots(n-\mu_2+1)]r_2^n \\ &+ \dots \\ &+ [d_{p,1} + d_{p,2}n + d_{p,3}n(n-1) + \dots + d_{p,\mu_p}n(n-1)\dots(n-\mu_p+1)]r_p^n + \psi_n \end{aligned} \quad (74)$$

となる。

線形多段解法を trivial な初期値問題 $dx/dt = 0$, $x(0) = 0$ に適用すると,

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i x_{n-i} = 0 \quad (75)$$

上記の一般の線形差分方程式の解の議論から, 多項式

$$\rho_\zeta \equiv \sum_{i=0}^k \alpha_i \zeta^{n-i} = 0 \quad (76)$$

の解 ζ を用いて,

$$\begin{aligned} x_n &= \Delta t [d_{1,1} + d_{1,2}n + d_{1,3}n(n-1) + \cdots + d_{1,\mu_1}n(n-1)\cdots(n-\mu_1-1)]\zeta_1^n \\ &+ \Delta t [d_{2,1} + d_{2,2}n + d_{2,3}n(n-1) + \cdots + d_{2,\mu_2}n(n-1)\cdots(n-\mu_2-1)]\zeta_2^n \\ &+ \cdots \\ &+ \Delta t [d_{p,1} + d_{p,2}n + d_{p,3}n(n-1) + \cdots + d_{p,\mu_p}n(n-1)\cdots(n-\mu_p-1)]\zeta_p^n \end{aligned} \quad (77)$$

$\Delta t \rightarrow 0$ の極限で真の解 $x(t) = 0$ に収束するためには,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0, n\Delta t = X} \Delta t n^q \zeta_i^n = X \lim_{n \rightarrow \infty} n^{q-1} \zeta_i^n = 0 \quad (78)$$

$|\zeta_i| < 1$ の時, 真の解に収束する。

Definition 1. 線形多段解法の第一特性多項式 $\rho(\zeta)$ の根が全て 1 より小さい時, 線形多段解法はゼロ安定 (*zero stable*) であるという。

線形多段解法の n ステップにおける局所離散化誤差は

$$e = \frac{1}{\alpha_0} \left[\sum_{i=0}^k \alpha_i x(t_{n-i}) - \Delta t \sum_{i=0}^k \beta_i f(x(t_{n-i})) \right] \quad (79)$$

$$= \frac{1}{\alpha_0} \left[\sum_{i=0}^k \alpha_i x(t_{n-i}) - \Delta t \sum_{i=0}^k \beta_i x'(t_{n-i}) \right] \quad (80)$$

である。 m 次の任意の多項式によって表される x に対して局所離散化誤差がゼロになる時, その解法は m 次であるという。

m 次の多項式 p_m を $p_m(t) = (t - t_n)^m$ で定義する。 $p_0, \dots, p_m$ は m 次の多項式の線形空間を張る基底なので, 多項式 p_j ($j = 1, \dots, m$) に対して $e = 0$ であれば, 解法は m 次である。(80) に $p_j(t - t_n)$ を代入する。 $j = 0$ の時

$$\alpha_0 e = \sum_{i=0}^k \alpha_i = 0 \quad (81)$$

$j \neq 0$ の時

$$\alpha_0 e = \sum_{i=0}^k [\alpha_i (t_{n-i} - t_n)^j - \Delta t \beta_i j (t_{n-i} - t_n)^{j-1}] \quad (82)$$

$$= \sum_{i=0}^k (-i \Delta t)^{j-1} [-i \Delta t \alpha_i - j \Delta t \beta_i] \quad (83)$$

$$= (-\Delta t)^j \sum_{j=0}^k [i^j \alpha_i + j i^{j-1} \beta_i] = 0 \quad (84)$$

以上より

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i = 0 \quad (85)$$

$$\sum_{i=0}^k i^j \alpha_i = -j \sum_{i=0}^k i^{j-1} \beta_i \quad (j \geq 1) \quad (86)$$

の関係を満たす線形多段解法は m 次である．パラメタ α_i, β_i ($i = 0, \dots, k$) $2k+2$ 個のうち 1 つは規格化パラメタであり一般性を失わずに固定することができる．よって自由パラメタ $2k+1$ に対して，関係式が $m+1$ ある．すなわち， k 段の線形多段解法に対して $m = 2k$ 次まで理論的に到達可能である．しかし，一般に $k > 2$ に対して $m = k+1$ 次より高い次数の方法は不安定であることが示されている [Dahlquist(1956)]．

線形多段解法が m 次であるとする． t_n のまわりでの Taylor 展開は

$$x(t) = \sum_{j=0}^m \frac{p_j(t) x^{(j)}(t_n)}{j!} + \frac{p_{m+1}(t) x^{(m+1)}(\xi(t))}{(m+1)!} \quad (87)$$

$$x'(t) = \sum_{j=1}^m \frac{p'_j(t) x^{(j)}(t_n)}{j!} + \frac{p'_{m+1}(t) x^{(m+1)}(\eta(t))}{(m+1)!} \quad (88)$$

ただし， $x^{(j)}(t)$ は x の t に関する j 階微分， $\xi(t), \eta(t)$ は区間 t_n, t の間のある値である．線形多段解法を与えるオペレータを形式的に $\mathcal{L}$ とすると，局所離散化誤差は $e = \mathcal{L}x$ である．定義より $\mathcal{L}p_0 = \mathcal{L}p_1 = \dots = \mathcal{L}p_m = 0$ ．

$$\mathcal{L}x = \sum_{i=1}^k \left[\alpha_i \frac{p_{m+1}(t_{n-i}) x^{(m+1)}(\xi_i(t_{n-i}))}{(m+1)!} - \Delta t \beta_i \frac{p'_{m+1}(t_{n-i}) x^{(m+1)}(\eta_i(t_{n-i}))}{(m+1)!} \right] \quad (89)$$

ただし， $t_{n-i} \leq \xi_i(t_{n-i}), \eta_i(t_{n-i}) \leq t_n$ ．第 1 項より

$$\left\| \sum_{i=1}^k \alpha_i \frac{p_{m+1}(t_{n-i}) x^{(m+1)}(\xi_i(t_{n-i}))}{(m+1)!} \right\| \leq \sum_{i=1}^k \left\| \alpha_i \frac{(-i \Delta t)^{m+1} x^{(m+1)}(\xi_i(t_{n-i}))}{(m+1)!} \right\| \quad (90)$$

$$\leq \frac{\Delta t^{m+1}}{(m+1)!} \sum_{i=1}^k |\alpha_i| i^{m+1} \|x^{(m+1)}(\xi_i(t_n - i))\| \quad (91)$$

第2項より

$$\left\| \sum_{i=1}^k \beta_i \frac{p'_{m+1}(t_{n-i})x^{(m+1)}(\eta_i(t_{n-i}))}{(m+1)!} \right\| \leq \sum_{i=1}^k \left\| \beta_i \frac{(-i\Delta t)^m x^{(m+1)}(\eta_i(t_{n-i}))}{m!} \right\| \quad (92)$$

$$\leq \frac{\Delta t^m}{m!} \sum_{i=1}^k |\beta_i| i^m \left\| x^{(m+1)}(\eta_i(t_n - i)) \right\| \quad (93)$$

よって $\|\mathcal{L}x\|$ は

$$\|\mathcal{L}x\| = \leq \sup_{t \in [t_{n-k}, t_n]} \|x^{(m+1)}(t)\| M \Delta t^{m+1} \quad (94)$$

$$M = \frac{1}{(m+1)!} \sum_{i=1}^k |\alpha_i| i^{m+1} + \frac{1}{m!} \sum_{i=1}^k |\beta_i| i^m \quad (95)$$

と書ける.

$$\therefore \|\mathcal{L}x\| = \mathcal{O}(\Delta t^{m+1}) \quad (96)$$

3.1 具体的な方法

3.1.1 1段解法 ($k=1$ の場合)

$k=1$ の場合, 自由に決定できるパラメタは $2k+1=3$ ある. パラメタ間の関係式は $m+1$ あるから, $m=2k=2$ まで到達可能である. (それ以上の m では関係式が多すぎる.) $m=1$ すなわち $j=1$ として関係式を書き下すと

$$\alpha_0 + \alpha_1 = 0, \quad (97)$$

$$\alpha_1 = -(\beta_0 + \beta_1) \quad (98)$$

$\alpha_0 = 1$ に固定すると, $\alpha_1 = -1$, $\beta_1 = 1 - \beta_0$ を得る. よって,

$$x_n - x_{n-1} = \Delta t (\beta_0 f_n + (1 - \beta_0) f_{n-1}). \quad (99)$$

(3) を得る.

$m=2$ とすると, $j=2$ から新たな関係式として

$$\alpha_1 = -2\beta_1 \quad (100)$$

が導かれる. よって, $\beta_1 = 1/2$, $\beta_0 = 1/2$ に固定される. 1段階法で特定のパラメタを選択すれば, 2次精度の解法まで得ることができる.

3.1.2 Adams 法

$\alpha_0 = 1$ で α_i ($i=1, \dots, k$) のうち1つ (α_l) だけゼロでない線形多段解法は安定である (その時 $\alpha_l = -\alpha_0 = -1$). その中で, $l=1$ の解法を Adams 法という. (1段解法も Adams 法の1種とみなすことができる.) 陽解法 (β_0) は

Adams-Bashforth 法と呼ばれ（必ずしも一意には決まらない），例えば，

$$(2 \text{ 段})2 \text{ 次} \quad x_n = x_{n-1} + \Delta t \left(\frac{3}{2}f(t_{n-1}, x_{n-1}) - \frac{1}{2}f(t_{n-2}, x_{n-2}) \right), \quad (101)$$

$$(3 \text{ 段})3 \text{ 次} \quad x_n = x_{n-1} + \Delta t \left(\frac{23}{12}f(t_{n-1}, x_{n-1}) - \frac{4}{3}f(t_{n-2}, x_{n-2}) + \frac{5}{12}f(t_{n-3}, x_{n-3}) \right). \quad (102)$$

k 段の Adams-Bashforth 法では， α について $i = 2, \dots, k$ までをゼロとし， β について $\beta_0 = 0$ としているので，結局最高到達次数は $2k - (k - 1) - 1 = k$ である．

陰解法は Adams-Moulton 法と呼ばれる．

$$(2 \text{ 段})3 \text{ 次} \quad x_n = x_{n-1} + \Delta t \left(\frac{5}{12}f(t_n, x_n) + \frac{2}{3}f(t_{n-1}, x_{n-1}) - \frac{1}{12}f(t_{n-2}, x_{n-2}) \right) \quad (103)$$

$$(3 \text{ 段})4 \text{ 次} \quad x_n = x_{n-1} + \Delta t \left(\frac{3}{8}f(t_n, x_n) + \frac{19}{24}f(t_{n-1}, x_{n-1}) - \right. \quad (104)$$

$$\left. \frac{5}{24}f(t_{n-2}, x_{n-2}) + \frac{1}{24}f(t_{n-3}, x_{n-3}) \right) \quad (105)$$

Adams-Moulton 法では β_0 の制約が無いので， $k + 1$ 次まで到達可能である．

その他，特別な名前がついているものとして，Nystöm: $l = 2$ の陽解法，generalized Milen-Simpson: $l = 2$ の陰解法，Cotes: $k = l$ などがある．

3.1.3 BDF (Backward Differentiation Formulae)

$\beta_i = 0$ ($i \neq 0$) なる方法を，Gear の後退差分式 (BDF) または硬安定法 (Stiffly-Stable Method) という [Gear]．

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i x_{n-i} = \beta_0 f(t_n, x_n) \quad (106)$$

規格化パラメタを $\beta_0 = 1$ に固定して， α について (85)(86) を解くと，例えば

$$2 \text{ 次} \quad \frac{3}{2}x_n - 2x_{n-1} + \frac{1}{2}x_{n-2} = f(t_n, x_n) \quad (107)$$

$$3 \text{ 次} \quad \frac{11}{6}x_n - 3x_{n-1} + \frac{3}{2}x_{n-2} - \frac{1}{3}x_{n-3} = f(t_n, x_n). \quad (108)$$

パラメタは $k + 1$ あるので， k 段階法で k 次まで到達可能である．6 段までの係数を表 1 に示す．

BDF 法は陰解法であり，毎時間ステップ代数方程式を解く必要がある．特に $f(t, x)$ が非線形の場合は非常に計算コストがかかる．そこで，計算コストを削減する方法として， f を線形項と非線形項に分け，非線形項は陽的に解く方法が提案されている [7](以下陽的 BDF[explicit BDF] と称する)．すなわち，先に求めた α_i ($i = 0, \dots, k$) に対して， β_0 として (85)(86) を満たす β_i ($i = 1, \dots, k'$) を求める． $k < i \leq k'$ なる i に対して $\alpha_i = 0$ としておけば，必ずしも $k' = k$ である必要はない．なお， $k = 1$ の方法は Adams-Bashforth 法に他ならない．表 2 に係数を挙げる．

表 1: Coefficients of Gear's BDF Method

Coefficient	$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$	$k = 5$	$k = 6$
α_0	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{11}{6}$	$\frac{25}{12}$	$\frac{137}{60}$	$\frac{49}{30}$
α_1	-1	-2	-3	-4	-5	-6
α_2	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	3	5	$\frac{15}{2}$
α_3	0	0	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{4}{3}$	$-\frac{10}{3}$	$-\frac{20}{3}$
α_4	0	0	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{5}{4}$	$\frac{15}{4}$
α_5	0	0	0	0	$-\frac{1}{5}$	$-\frac{6}{5}$
α_6	0	0	0	0	0	$\frac{1}{6}$

表 2: Coefficients of explicit BDF Method

Coefficient	$k = 1$	$k = 2$	$k = 2$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$
	$k' = 1$	$k' = 2$	$k' = 3$	$k' = 4$	$k' = 3$	$k' = 4$
α_0	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{11}{6}$	$\frac{25}{12}$
α_1	-1	-2	-2	-2	-3	-4
α_2	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	3
α_3	0	0	0	0	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{4}{3}$
α_4	0	0	0	0	0	$\frac{1}{4}$
β_0	0	0	0	0	0	0
β_1	1	2	$\frac{8}{3}$	$\frac{13}{4}$	3	4
β_2	0	-1	$-\frac{7}{3}$	$-\frac{49}{12}$	-3	-6
β_3	0	0	$\frac{2}{3}$	$\frac{29}{12}$	1	4
β_4	0	0	0	$-\frac{7}{12}$	0	-1

3.1.4 予測子-修正子法 (Predictor-Corrector)

陰解法は通常、反復解法により解を求めるが、反復回数を 1 回や 2 回に固定して多数回繰り返さないことが多い。つまり、1) 初期値として同じ次数の陽的解法の解を用い (P), 2) $f(x_n)$ を評価する (E). その後、3) 陰的解法に直接代入して解を求める (C). 4) 最後に、あらたに計算した x_n を用いて $f(x_n)$ を計算しておき (E) 次のステップに備える。

$$\sum_{i=0}^k \bar{\alpha}_i x_{n-i} = \Delta t \sum_{i=1}^k \bar{\beta}_i f(t_{n-i}, x_{n-i}) \quad (109)$$

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i x_{n-i} = \Delta t \sum_{i=0}^k \beta_i f(t_{n-i}, x_{n-i}) \quad (110)$$

また、4 ステップ目を省いた PEC モードでの予測子-修正子法もありえる。この場合、

$$\alpha_0 x_n^{(0)} + \sum_{i=1}^k \bar{\alpha}_i x_i = \Delta t \sum_{i=1}^k \bar{\beta}_i f(t_i, x_i^{(0)}) \quad (111)$$

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i x_i = \Delta t \sum_{i=0}^k \beta_i f(t_i, x_i^{(0)}) \quad (112)$$

となる。初期推定に、陽解法を用いた場合、精度の観点から、1 回 PEC(E) もしくは 2 回 P(EC)²(E) で十分である。

3.1.5 Lagrange Polynomial Interpolation

線形多段解法は、 x または f をラグランジュ多項式によって補間することに他ならない。 $N+1$ 個の点 $(x_j, f(x_j))$, $j = 0, \dots, N$ を通る関数 $f(x)$ を補間する N 次のラグランジュ多項式 P_N は以下で与えられる。

$$P_N(x) = \sum_{j=0}^N f(x_j) \ell_j^N(x) \quad (113)$$

$$\ell_0^0(x) = 1, \quad (114)$$

$$\ell_j^N(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_N)}{(x_j-x_0)(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_N)} \quad (N \geq 1). \quad (115)$$

点 $(t_{n-i}, f(t_{n-i}, x_{n-i}))$ ($i = 1, \dots, N$) を通るラグランジュ多項式を P_N^e とする。(点 $(t_n, f(t_n, x_n))$ を含まないことに注意。添字 e は explicit を意味する。) 例えば、点 $(t_{n-1}, f(t_{n-1}, x_{n-1}))$ を通る P_1^e で f を近似すれば

$$x_n \approx x_{n-1} + \int_{t_{n-1}}^{t_n} P_1^e(t) dt = x_{n-1} + \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t_{n-1}, x_{n-1}) dt = x_{n-1} + (t_n - t_{n-1}) f(t_{n-1}, x_{n-1}) \quad (116)$$

となり、ただちに陽的 Euler 法を得る。同様に P_2^e, P_3^e による近似によりそれぞれ 2 次、3 次の Adams-Bashforth 法を得ることができる。

$$P_2^e(t) = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{t - t_{n-2}}{t_{n-1} - t_{n-2}} + f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{t - t_{n-1}}{t_{n-2} - t_{n-1}} \quad (117)$$

$$P_3^e(t) = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{(t - t_{n-2})(t - t_{n-3})}{(t_{n-1} - t_{n-2})(t_{n-1} - t_{n-3})} + f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{(t - t_{n-1})(t - t_{n-3})}{(t_{n-2} - t_{n-1})(t_{n-2} - t_{n-3})} \\ + f(t_{n-3}, x_{n-3}) \frac{(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})}{(t_{n-3} - t_{n-1})(t_{n-3} - t_{n-2})}. \quad (118)$$

よって

$$\begin{aligned}
x_n - x_{n-1} &\approx \int_{t_{n-1}}^{t_n} P_2^e(t) dt \\
&= \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{t - t_{n-2}}{t_{n-1} - t_{n-2}} + f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{t - t_{n-1}}{t_{n-2} - t_{n-1}} \right) dt \\
&= \left[\frac{f(t_{n-1}, x_{n-1})}{t_{n-1} - t_{n-2}} \left(\frac{t^2}{2} - t_{n-2}t \right) - \frac{f(t_{n-2}, x_{n-2})}{t_{n-1} - t_{n-2}} \left(\frac{t^2}{2} - t_{n-1}t \right) \right]_{t_{n-1}}^{t_n} \\
&= \frac{f(t_{n-1}, x_{n-1})}{\Delta t_1} \left(\frac{\Delta t_0(t_n + t_{n-1})}{2} - t_{n-2}\Delta t_0 \right) - \frac{f(t_{n-2}, x_{n-2})}{\Delta t_1} \left(\frac{\Delta t_0(t_n + t_{n-1})}{2} - t_{n-1}\Delta t_0 \right) \\
&= f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{\Delta t_0}{2\Delta t_1} ((t_n - t_{n-1}) + 2(t_{n-1} - t_{n-2})) - f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{\Delta t_0}{2\Delta t_1} ((t_n - t_{n-1})) \\
&= f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{\Delta t_0(\Delta t_0 + 2\Delta t_1)}{2\Delta t_1} - f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{\Delta t_0^2}{2\Delta t_1}. \tag{119}
\end{aligned}$$

ここで $\Delta t_i = t_{n-i} - t_{n-i-1}$. 任意の i に対して $\Delta t = \Delta t_i$ を用いれば

$$x_n - x_{n-1} \approx \Delta t \left(\frac{3}{2} f(t_{n-1}, x_{n-1}) - \frac{1}{2} f(t_{n-2}, x_{n-2}) \right) \tag{120}$$

を得る．同様にして

$$\begin{aligned}
x_n - x_{n-1} &\approx \int_{t_{n-1}}^{t_n} P_3^e(t) dt \\
&= \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{(t - t_{n-2})(t - t_{n-3})}{(t_{n-1} - t_{n-2})(t_{n-1} - t_{n-3})} + f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{(t - t_{n-1})(t - t_{n-3})}{(t_{n-2} - t_{n-1})(t_{n-2} - t_{n-3})} \right. \\
&\quad \left. + f(t_{n-3}, x_{n-3}) \frac{(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})}{(t_{n-3} - t_{n-1})(t_{n-3} - t_{n-2})} \right) dt \\
&= \left[\frac{f(t_{n-1}, x_{n-1})}{(t_{n-1} - t_{n-2})(t_{n-1} - t_{n-3})} \left(\frac{t^3}{3} - (t_{n-2} + t_{n-3}) \frac{t^2}{2} + t_{n-2} t_{n-3} t \right) \right]_{t_{n-1}}^{t_n} \\
&\quad + \left[\frac{f(t_{n-2}, x_{n-2})}{(t_{n-2} - t_{n-1})(t_{n-2} - t_{n-3})} \left(\frac{t^3}{3} - (t_{n-1} + t_{n-3}) \frac{t^2}{2} + t_{n-1} t_{n-3} t \right) \right]_{t_{n-1}}^{t_n} \\
&\quad + \left[\frac{f(t_{n-3}, x_{n-3})}{(t_{n-3} - t_{n-1})(t_{n-3} - t_{n-2})} \left(\frac{t^3}{3} - (t_{n-1} + t_{n-2}) \frac{t^2}{2} + t_{n-1} t_{n-2} t \right) \right]_{t_{n-1}}^{t_n} \\
&= \frac{f(t_{n-1}, x_{n-1})}{\Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} \left(\frac{\Delta t_0 (t_n^2 + t_n t_{n-1} + t_{n-1}^2)}{3} - (t_{n-2} + t_{n-3}) \frac{\Delta t_0 (t_n + t_{n-1})}{2} + t_{n-2} t_{n-3} \Delta t_0 \right) \\
&\quad + \frac{f(t_{n-2}, x_{n-2})}{-\Delta t_1 \Delta t_2} \left(\frac{\Delta t_0 (t_n^2 + t_n t_{n-1} + t_{n-1}^2)}{3} - (t_{n-1} + t_{n-3}) \frac{\Delta t_0 (t_n + t_{n-1})}{2} + t_{n-1} t_{n-3} \Delta t_0 \right) \\
&\quad + \frac{f(t_{n-3}, x_{n-3})}{(\Delta t_1 + \Delta t_2) \Delta t_2} \left(\frac{\Delta t_0 (t_n^2 + t_n t_{n-1} + t_{n-1}^2)}{3} - (t_{n-1} + t_{n-2}) \frac{\Delta t_0 (t_n + t_{n-1})}{2} + t_{n-1} t_{n-2} \Delta t_0 \right) \\
&= \frac{f(t_{n-1}, x_{n-1}) \Delta t_0}{6 \Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} (2(t_n^2 + t_n t_{n-1} + t_{n-1}^2) - 3(t_{n-2} + t_{n-3})(t_n + t_{n-1}) + 6t_{n-2} t_{n-3}) \\
&\quad - \frac{f(t_{n-2}, x_{n-2}) \Delta t_0}{6 \Delta t_1 \Delta t_2} (2(t_n^2 + t_n t_{n-1} + t_{n-1}^2) - 3(t_{n-1} + t_{n-3})(t_n + t_{n-1}) + 6t_{n-1} t_{n-3}) \\
&\quad + \frac{f(t_{n-3}, x_{n-3}) \Delta t_0}{6 \Delta t_2 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} (2(t_n^2 + t_n t_{n-1} + t_{n-1}^2) - 3(t_{n-1} + t_{n-2})(t_n + t_{n-1}) + 6t_{n-1} t_{n-2}). \quad (121)
\end{aligned}$$

ここで, $\Delta t'_i = t_n - t_{n-i} = \sum_{j=0}^{i-1} \Delta t_j$ において各項の係数を一般的に計算すると

$$\begin{aligned}
&2(t_n^2 + t_n t_{n-1} + t_{n-1}^2) - 3(t_{n-i} + t_{n-j})(t_n + t_{n-1}) + 6t_{n-i} t_{n-j} \\
&= 2(t_n^2 + t_n(t_n - \Delta t_0) + (t_n - \Delta t_0)^2) - 3(2t_n - \Delta t'_i - \Delta t'_j)(2t_n - \Delta t_0) + 6(t_n - \Delta t'_i)(t_n - \Delta t'_j) \\
&= 2\Delta t_0^2 - 3\Delta t_0(\Delta t'_i + \Delta t'_j) + 6\Delta t'_i \Delta t'_j \quad (122)
\end{aligned}$$

(t_n に関する項は明らかにキャンセルする.) よって,

$$\begin{aligned}
x_n - x_{n-1} &\approx \frac{\Delta t_0 (2\Delta t_0^2 - 3\Delta t_0 (2\Delta t_0 + 2\Delta t_1 + \Delta t_2) + 6(\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2))}{6\Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} f(t_{n-1}, x_{n-1}) \\
&\quad - \frac{\Delta t_0 (2\Delta t_0^2 - 3\Delta t_0 (2\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2) + 6\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2))}{6\Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} f(t_{n-2}, x_{n-2}) \\
&\quad + \frac{\Delta t_0 (2\Delta t_0^2 - 3\Delta t_0 (2\Delta t_0 + \Delta t_1) + 6\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1))}{6\Delta t_2 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} f(t_{n-3}, x_{n-3}) \\
&= \frac{2\Delta t_0^3 + 3\Delta t_0^2 (2\Delta t_1 + \Delta t_2) + 6\Delta t_0 \Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)}{6\Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} f(t_{n-1}, x_{n-1}) \\
&\quad - \frac{2\Delta t_0^3 + 3\Delta t_0^2 (\Delta t_1 + \Delta t_2)}{6\Delta t_1 \Delta t_2} f(t_{n-2}, x_{n-2}) + \frac{2\Delta t_0^3 + 3\Delta t_0^2 \Delta t_1}{6\Delta t_2 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} f(t_{n-3}, x_{n-3})
\end{aligned} \tag{123}$$

を得る. 一様時間ステップにおいては

$$x_n - x_{n-1} \approx \frac{23}{12} f(t_{n-1}, x_{n-1}) - \frac{4}{3} f(t_{n-2}, x_{n-2}) + \frac{5}{12} f(t_{n-3}, x_{n-3}) \tag{124}$$

となり, 3 次の Adams-Bashforth 法を得る.

さらに, 点 $(t_n, f(t_n, x_n))$ を含む $N+1$ 個の点でラグランジュ多項式 P_N^i を定義すれば陰的な方法が得られる.

$$P_0^i = f(t_n, x_n), \tag{125}$$

$$P_1^i = f(t_n, x_n) \frac{t - t_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} + f(t_{n-1}) \frac{t - t_n}{t_{n-1} - t_n}, \tag{126}$$

$$\begin{aligned}
P_2^i &= f(t_n, x_n) \frac{(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})}{(t_n - t_{n-1})(t_n - t_{n-2})} + f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{(t - t_n)(t - t_{n-2})}{(t_{n-1} - t_n)(t_{n-1} - t_{n-2})} \\
&\quad + f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{(t - t_n)(t - t_{n-1})}{(t_{n-2} - t_n)(t_{n-2} - t_{n-1})}
\end{aligned} \tag{127}$$

より

$$x_n - x_{n-1} \approx \Delta t_0 f(t_n, x_n), \tag{128}$$

$$x_n - x_{n-1} \approx \frac{\Delta t_0}{2} (f(t_n, x_n) + f(t_{n-1}, x_{n-1})), \tag{129}$$

$$x_n - x_{n-1} \approx \frac{2\Delta t_0^2 + 3\Delta t_0 \Delta t_1}{6(\Delta t_0 + \Delta t_1)} f(t_n, x_n) + \frac{\Delta t_0^2 + 3\Delta t_0 \Delta t_1}{6\Delta t_1} f(t_{n-1}, x_{n-1}) - \frac{\Delta t_0^3}{6(\Delta t_0 + \Delta t_1) \Delta t_1} f(t_{n-2}, x_{n-2}). \tag{130}$$

それぞれ, 陰的 Euler 法, 台形公式, 3 次の Adams-Moulton 法である.

一方, 右辺を $f(t_n, x_n)$ とし x を多項式近似することにより, BDF 法を求めることができる. 点 (t_{n-i}, x_{n-i}) ($i = 0, \dots, N$) を通る近似多項式を $x \approx Q_N(t)$ をおくと,

$$Q_1(t) = x_n \frac{t - t_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} + x_{n-1} \frac{t - t_n}{t_{n-1} - t_n} \tag{131}$$

より

$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{dQ_1}{dt} = \frac{x_n}{t_n - t_{n-1}} + \frac{x_{n-1}}{t_{n-1} - t_n} = \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t_0} = f(t_n, x_n). \tag{132}$$

また

$$Q_2(t) = x_n \frac{(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})}{(t_n - t_{n-1})(t_n - t_{n-2})} + x_{n-1} \frac{(t - t_n)(t - t_{n-2})}{(t_{n-1} - t_n)(t_{n-1} - t_{n-2})} + x_{n-2} \frac{(t - t_n)(t - t_{n-1})}{(t_{n-2} - t_n)(t_{n-2} - t_{n-1})} \quad (133)$$

より

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &\approx \frac{dQ_2}{dt} \\ &= x_n \frac{2t - (t_{n-1} + t_{n-2})}{(t_n - t_{n-1})(t_n - t_{n-2})} + x_{n-1} \frac{2t - (t_n + t_{n-2})}{(t_{n-1} - t_n)(t_{n-1} - t_{n-2})} + x_{n-2} \frac{2t - (t_n + t_{n-1})}{(t_{n-2} - t_n)(t_{n-2} - t_{n-1})}. \end{aligned} \quad (134)$$

$t = t_n$ を代入すると

$$\begin{aligned} \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=t_n} &\approx x_n \frac{2t_n - t_{n-1} - t_{n-2}}{(t_n - t_{n-1})(t_n - t_{n-2})} + x_{n-1} \frac{2t_n - t_n - t_{n-2}}{(t_{n-1} - t_n)(t_{n-1} - t_{n-2})} + x_{n-2} \frac{2t_n - t_n - t_{n-1}}{(t_{n-2} - t_n)(t_{n-2} - t_{n-1})} \\ &= x_n \frac{2\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)} - x_{n-1} \frac{\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_0 \Delta t_1} + x_{n-2} \frac{\Delta t_0}{(\Delta t_0 + \Delta t_1)\Delta t_1} = f(t_n, x_n). \end{aligned} \quad (135)$$

$\Delta t_0 = \Delta t_1$ の時,

$$\frac{3}{2}x_n - 2x_{n-1} + \frac{1}{2}x_{n-2} = f(t_n, x_n). \quad (136)$$

4 次の多項式 (Q_3) の場合,

$$\begin{aligned} Q_3(t) &= x_n \frac{(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})(t - t_{n-3})}{(t_n - t_{n-1})(t_n - t_{n-2})(t_n - t_{n-3})} + x_{n-1} \frac{(t - t_n)(t - t_{n-2})(t - t_{n-3})}{(t_{n-1} - t_n)(t_{n-1} - t_{n-2})(t_{n-1} - t_{n-3})} \\ &\quad + x_{n-2} \frac{(t - t_n)(t - t_{n-1})(t - t_{n-3})}{(t_{n-2} - t_n)(t_{n-2} - t_{n-1})(t_{n-2} - t_{n-3})} + x_{n-3} \frac{(t - t_n)(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})}{(t_{n-3} - t_n)(t_{n-3} - t_{n-1})(t_{n-3} - t_{n-2})}. \end{aligned} \quad (137)$$

$x \approx Q_3$ を微分して $t = t_n$ を代入すると,

$$\begin{aligned} \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=t_n} &\approx \frac{x_n}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)} (3t_n^2 - 2t_n(t_{n-1} + t_{n-2} + t_{n-3}) + (t_{n-1}t_{n-2} + t_{n-2}t_{n-3} + t_{n-3}t_{n-1})) \\ &\quad - \frac{x_{n-1}}{\Delta t_0 \Delta t_1(\Delta t_1 + \Delta t_2)} (3t_n^2 - 2t_n(t_n + t_{n-2} + t_{n-3}) + (t_n t_{n-2} + t_{n-2}t_{n-3} + t_{n-3}t_n)) \\ &\quad + \frac{x_{n-2}}{(\Delta t_0 + \Delta t_1)\Delta t_1 \Delta t_2} (3t_n^2 - 2t_n(t_n + t_{n-1} + t_{n-3}) + (t_n t_{n-1} + t_{n-1}t_{n-3} + t_{n-3}t_n)) \\ &\quad - \frac{x_{n-3}}{(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)(\Delta t_1 + \Delta t_2)\Delta t_2} (3t_n^2 - 2t_n(t_n + t_{n-1} + t_{n-2}) + (t_n t_{n-1} + t_{n-1}t_{n-2} + t_{n-2}t_n)) \\ &= \frac{x_n}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)} (\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1) + (\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2) + \Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)) \\ &\quad - \frac{x_{n-1}}{\Delta t_0 \Delta t_1(\Delta t_1 + \Delta t_2)} (\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2) \\ &\quad + \frac{x_{n-2}}{(\Delta t_0 + \Delta t_1)\Delta t_1 \Delta t_2} \Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2) \\ &\quad - \frac{x_{n-3}}{(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)(\Delta t_1 + \Delta t_2)\Delta t_2} \Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1) \\ &= x_n \frac{3\Delta t_0^2 + (4\Delta t_1 + 2\Delta t_2)\Delta t_0 + \Delta t_1(\Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)} - x_{n-1} \frac{(\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_0 \Delta t_1(\Delta t_1 + \Delta t_2)} \\ &\quad + x_{n-2} \frac{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{(\Delta t_0 + \Delta t_1)\Delta t_1 \Delta t_2} - x_{n-3} \frac{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)}{(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)(\Delta t_1 + \Delta t_2)\Delta t_2} \\ &= f(t_n, x_n). \end{aligned} \quad (138)$$

$\Delta t_0 = \Delta t_1 = \Delta t_2$ の場合,

$$\frac{11}{6}x_n - 3x_{n-1} + \frac{3}{2}x_{n-2} - \frac{1}{3}x_{n-3} = f(t_n, x_n) \quad (139)$$

さらに, 両辺多項式近似を用いると, 例えば

$$\left. \frac{dQ_2}{dt} \right|_{t_n} \approx P_2^e(t_n) \quad (140)$$

より

$$\begin{aligned} x_n \frac{2\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)} - x_{n-1} \frac{\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_0 \Delta t_1} + x_{n-2} \frac{\Delta t_0}{(\Delta t_0 + \Delta t_1)\Delta t_1} \\ = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{t_n - t_{n-2}}{t_{n-1} - t_{n-2}} + f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{t_n - t_{n-1}}{t_{n-2} - t_{n-1}} \\ = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_1} - f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{\Delta t_0}{\Delta t_1}, \end{aligned} \quad (141)$$

$$\left. \frac{dQ_3}{dt} \right|_{t=t_n} \approx P_3^e(t_n) \quad (142)$$

より

$$\begin{aligned} x_n \frac{3\Delta t_0^2 + (4\Delta t_1 + 2\Delta t_2) \Delta t_0 + \Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1) (\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)} - x_{n-1} \frac{(\Delta t_0 + \Delta t_1) (\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_0 \Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} \\ + x_{n-2} \frac{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{(\Delta t_0 + \Delta t_1) \Delta t_1 \Delta t_2} - x_{n-3} \frac{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1)}{(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2) (\Delta t_1 + \Delta t_2) \Delta t_2} \\ = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{(t_n - t_{n-2})(t_n - t_{n-3})}{(t_{n-1} - t_{n-2})(t_{n-1} - t_{n-3})} + f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{(t_n - t_{n-1})(t_n - t_{n-3})}{(t_{n-2} - t_{n-1})(t_{n-2} - t_{n-3})} \\ + f(t_{n-3}, x_{n-3}) \frac{(t_n - t_{n-1})(t_n - t_{n-2})}{(t_{n-3} - t_{n-1})(t_{n-3} - t_{n-2})} \\ = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{(\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} - f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_1 \Delta t_2} \\ + f(t_{n-3}, x_{n-3}) \frac{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1)}{(\Delta t_1 + \Delta t_2) \Delta t_2} \end{aligned} \quad (143)$$

を得る. $\Delta t_0 = \Delta t_1 = \Delta t_2$ の場合,

$$\frac{11}{6}x_n - 3x_{n-1} + \frac{3}{2}x_{n-2} - \frac{1}{3}x_{n-3} = 3f(t_{n-1}, x_{n-1}) - 3f(t_{n-2}, x_{n-2}) + f(t_{n-3}, x_{n-3}). \quad (144)$$

両辺で次数の異なる場合, 例えば

$$\left. \frac{dQ_2}{dt} \right|_{t=t_n} \approx P_3^e(t_n) \quad (145)$$

を考えると,

$$\begin{aligned} x_n \frac{2\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)} - x_{n-1} \frac{\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_0 \Delta t_1} + x_{n-2} \frac{\Delta t_0}{(\Delta t_0 + \Delta t_1)\Delta t_1} \\ = f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{(\Delta t_0 + \Delta t_1)(\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_1 (\Delta t_1 + \Delta t_2)} - f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_1 \Delta t_2} \\ + f(t_{n-3}, x_{n-3}) \frac{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t_1)}{(\Delta t_1 + \Delta t_2) \Delta t_2} \end{aligned} \quad (146)$$

を得るが、これは、(85), (86) の関係式を満たしておらず、不適当である。

$$\left. \frac{dQ_2}{dt} \right|_{t=t_n} \approx c_1 P_2^e(t_n) + c_2 P_3^e(t_n) \quad (147)$$

$(c_1 + c_2 = 1)$ とすれば、

$$\begin{aligned} & x_n \frac{2\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)} - x_{n-1} \frac{\Delta t_0 + \Delta t_1}{\Delta t_0 \Delta t_1} + x_{n-2} \frac{\Delta t_0}{(\Delta t_0 + \Delta t_1)\Delta t_1} \\ &= f(t_{n-1}, x_{n-1}) \frac{(\Delta t_0 + \Delta t_1)(c_2 \Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2)}{\Delta t_1(\Delta t_1 + \Delta t_2)} - f(t_{n-2}, x_{n-2}) \frac{\Delta t_0(c_2(\Delta t_0 + \Delta t_1) + \Delta t_2)}{\Delta t_1 \Delta t_2} \\ & \quad + f(t_{n-3}, x_{n-3}) \frac{c_2 \Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)}{(\Delta t_1 + \Delta t_2)\Delta t_2}. \end{aligned} \quad (148)$$

$c_2 = 2/3$, $\Delta t_0 = \Delta t_1 = \Delta t_2$ とすれば

$$\frac{3}{2}x_n - 2x_{n-1} + \frac{1}{2}x_{n-2} = \frac{8}{3}f(t_{n-1}, x_{n-1}) - \frac{7}{3}f(t_{n-2}, x_{n-2}) - \frac{2}{3}f(t_{n-3}, x_{n-3}) \quad (149)$$

となる。(なぜ $c_2 = 2/3$ となるかは、可変時間ステップの場合に対する係数の関係と誤差について調べる必要があると思われる。)

以上のようにして、線形多段解法は可変時間ステップに対して自然に拡張することができる。

3.2 その他

より高階の微分を用いる Taylor 展開法や、外挿法、Hamilton 系 (保存系) のための Symplectic(leap-frog) 法などがある。

4 数値解法の安定性

常微分方程式の数値解法の安定性を考える。数値解法の安定性とは、もとの常微分方程式が bound されている、または安定な定常解を持つ時に、数値解も同様に bound されているまたは、安定な定常解をもつことをいう。数値解法の安定性を解析するために、以下の常微分方程式を考える (標準テスト問題 (standard test problem) とよぶ)。

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x, \quad \lambda \in \mathbb{C}. \quad (150)$$

解 x は $\Re \lambda \leq 0$ の時、bound されている ($\Re \lambda < 0$ のときゼロに収束する)。前進 Euler 法により積分すると解は $x_n = x_0(1 + \lambda \Delta t)^n$ である。この数値解が解析解と同様の性質を持つためには $|\lambda \Delta t| \leq 1$ [bounded] ($|\lambda \Delta t| < 1$ [convergent]) でなければならない。ここでは、数値解が解析解と同様の安定性をもつ $\lambda \Delta t$ の条件を考察する。数値解が bound される $\lambda \Delta t$ の領域を安定領域 (stability region) という (数値解が収束する領域は strict stability region)。

Definition 2 (A-stability (Dahlquist)). ある数値解法の絶対安定領域が左半平面 $\mathbb{C}^- \equiv \{\lambda : \Re \lambda < 0\}$ を全て含む時、その解法は A 安定であるという。

A 安定性に関して以下の結果が知られている。

- 陽的 Runge-Kutta 法は A 安定ではない
- 陽的線形多段解法は A 安定ではない
- 陰的線形多段解法で A 安定であるものの次数は 2 以下である。
- A 安定である陰的線形多段解法のうち、局所誤差がもっとも小さいものは台形公式である。
- 対称な R 段 $2R$ 次陰的 Runge-Kutta 法はすべて A 安定である。

A 安定性を若干緩めたものとして、安定領域が $\mathbb{C}(\alpha) = \{\lambda \in \mathbb{C} : |\arg(\lambda)| \leq \alpha\}$ を含む $A(\alpha)$ 安定性 [Widlund] や、原点付近虚部の大きいところでは不安定でもよい硬安定性 (Stiff Stability) [Gear] などがある。

Definition 3 (Widlund). ある数値解法の絶対安定領域が、ある角度 $\alpha \in (0, \pi/2)$ に対して $W_\alpha = \{\lambda \Delta t : |\pi - \arg(\lambda \Delta t)| < \alpha\}$ を含む時 $A(\alpha)$ 安定であるという。 α が十分小さい時 $A(0)$ 安定という。

- 陽的線形多段解法は $A(0)$ 安定にはなりえない。
- k 段線形多段解法で次数が $k+1$ を越えるものは、ただ一つ台形則のみである。
- 全ての $\alpha \in [0, \pi/2]$ に対して、 $k = m = 3$, $k = m = 4$ なる k 段 m 次の $A(\alpha)$ 安定な線形多段解法が存在する。

Definition 4 (Gear). ある数値解法の絶対安定領域が以下で定義される領域 $\mathcal{R}_1$, $\mathcal{R}_2$ を含む時、硬安定 [*stiffly stable*] であるという。

$$\mathcal{R}_1 = \{\lambda \Delta t : \Re \lambda \Delta t < -a\} \quad (151)$$

$$\mathcal{R}_2 = \{\lambda \Delta t : -a \leq \Re \lambda \Delta t \leq b, |\Im \lambda \Delta t| \leq c\} \quad (152)$$

a, b, c は正の定数。 $\lambda \Delta t$ が領域 $\mathcal{R}_1$ にあるような、急速に減少するモードに対しては、安定であることだけを要求し、その他のモードについては安定かつ正確であることを要求する。

4.1 Runge-Kutta 法の安定性

$x_0 = 1$ とすると Runge-Kutta 法による数値解は一般に $x_n = \xi(\lambda \Delta t)^n$ の形で表される。

$\mathbf{K} = (k^{(1)}, k^{(2)}, \dots, k^{(R)})^T$, $\mathbf{B} = (b_{rs})$, $\mathbf{C} = (c_r)$, $\mathbf{E} = (1, 1, \dots)$ と書くと

$$\mathbf{K} = \lambda(x_{n-1} \mathbf{E} + \Delta t \mathbf{B} \mathbf{K}) \quad (153)$$

$$x_n = x_{n-1} + \Delta t \mathbf{C}^T \mathbf{K} \quad (154)$$

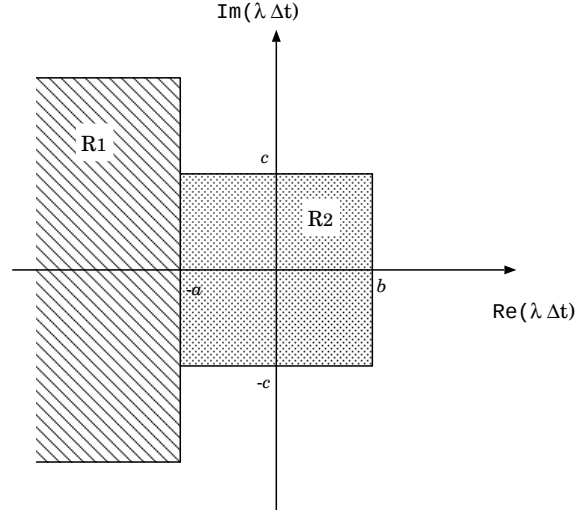
$\mathbf{K}$ を消去すると

$$x_n = x_{n-1} + \Delta t \mathbf{C}^T (\mathbf{I} - \lambda \Delta t \mathbf{B})^{-1} \lambda x_{n-1} \mathbf{E}. \quad (155)$$

よって

$$\xi(\lambda \Delta t) = 1 + \lambda \Delta t \mathbf{C}^T (\mathbf{I} - \lambda \Delta t \mathbf{B})^{-1} \mathbf{E}. \quad (156)$$

安定性条件は $|\xi(\lambda \Delta t)| \leq 1$ である。図 4.1 に安定境界を示す。段数と次数の等しい Runge-Kutta 法 ($R \leq 4$) の安定領域は、係数の詳細によらないことが分かっている。 $R > 4$ のときは、係数のとりかたによって安定領域が変化する。図中 6 段 5 次の Runge-Kutta 法は、Lawson[9] による広い安定領域をもつ方法である。



4.2 線形多段解法の安定性

標準テスト問題 (150) に線形多段解法を適用すると,

$$\sum_{i=0}^k (\alpha_i - \lambda \Delta t \beta_i) x_{n-i} = 0. \quad (157)$$

線形多段解法の第 1, 第 2 特性多項式を以下のように定義する.

$$\rho(\zeta) = \sum_{i=0}^k \alpha_i \zeta^i \quad (158)$$

$$\sigma(\zeta) = \sum_{i=0}^k \beta_i \zeta^i \quad (159)$$

安定性多項式を

$$\pi(\zeta, \lambda \Delta t) = \rho(\zeta) - \lambda \Delta t \sigma(\zeta) = 0 \quad (160)$$

で定義する. ゼロ安定性での議論と同様に, 安定性多項式の根を ζ_i とすると, (157) の解は

$$\begin{aligned} x_n &= \Delta t [d_{1,1} + d_{1,2}n + d_{1,3}n(n-1) + \cdots + d_{1,\mu_1}n(n-1)\cdots(n-\mu_1+1)] \zeta_1^n \\ &+ \Delta t [d_{2,1} + d_{2,2}n + d_{2,3}n(n-1) + \cdots + d_{2,\mu_2}n(n-1)\cdots(n-\mu_2+1)] \zeta_2^n \\ &+ \cdots \\ &+ \Delta t [d_{p,1} + d_{p,2}n + d_{p,3}n(n-1) + \cdots + d_{p,\mu_p}n(n-1)\cdots(n-\mu_p+1)] \zeta_p^n \end{aligned} \quad (161)$$

と表せ, $|\zeta_i| < 1$ の時収束する.

図 4.2 4.2 に主な線形多段解法の安定性境界を示す.

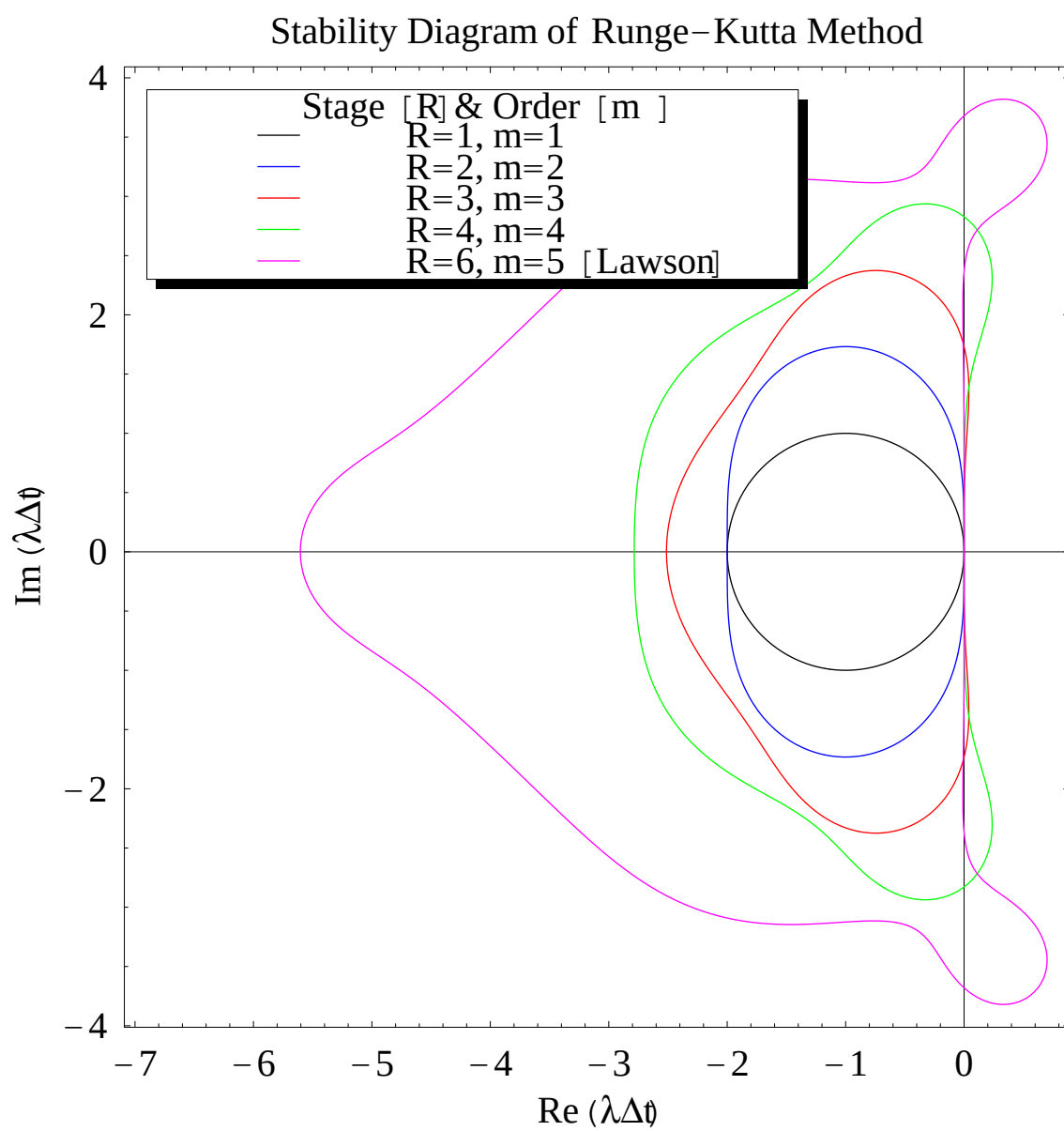


图 1: Stability diagram of Runge-Kutta method.

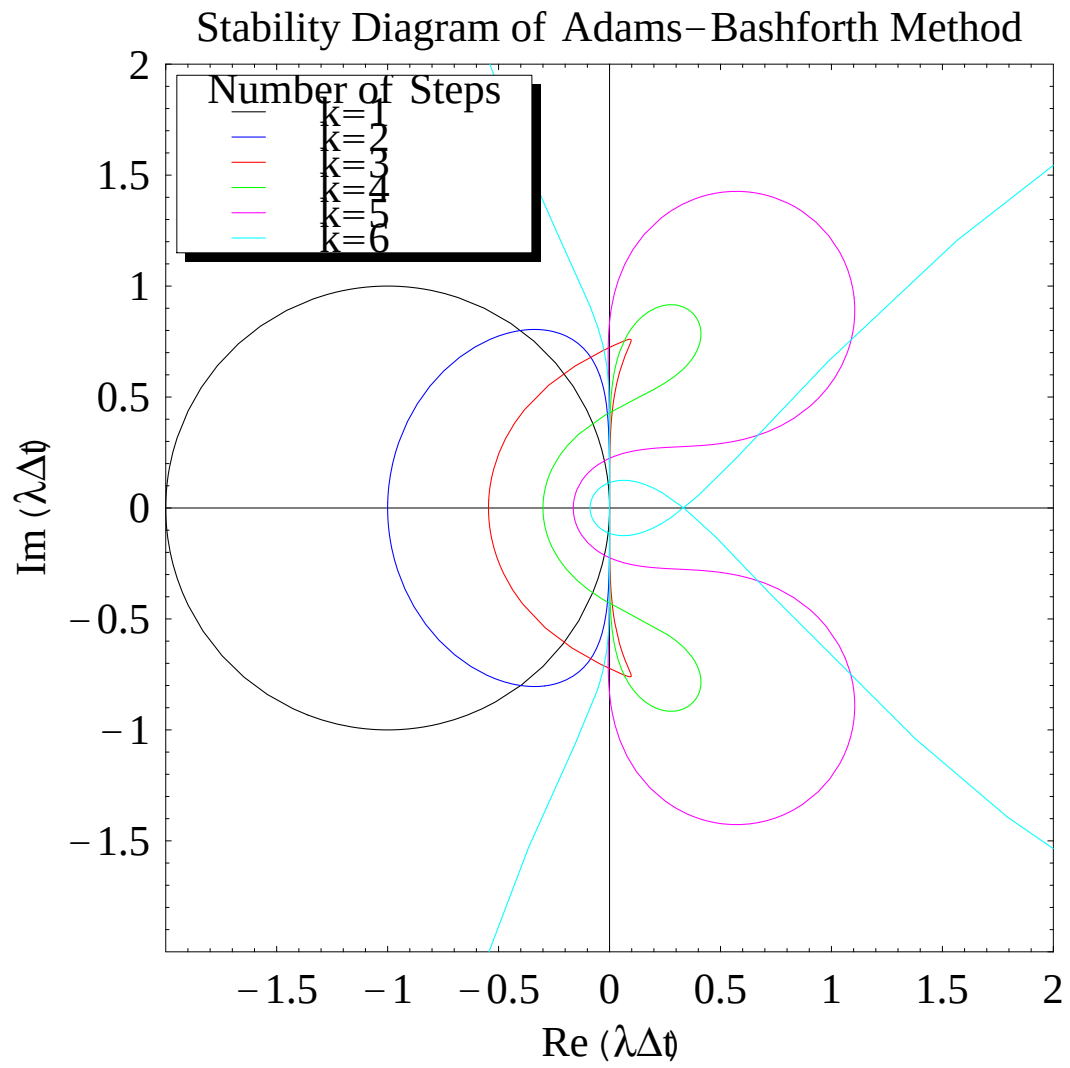


Fig. 2: Stability diagram of Adams-Bashforth method.

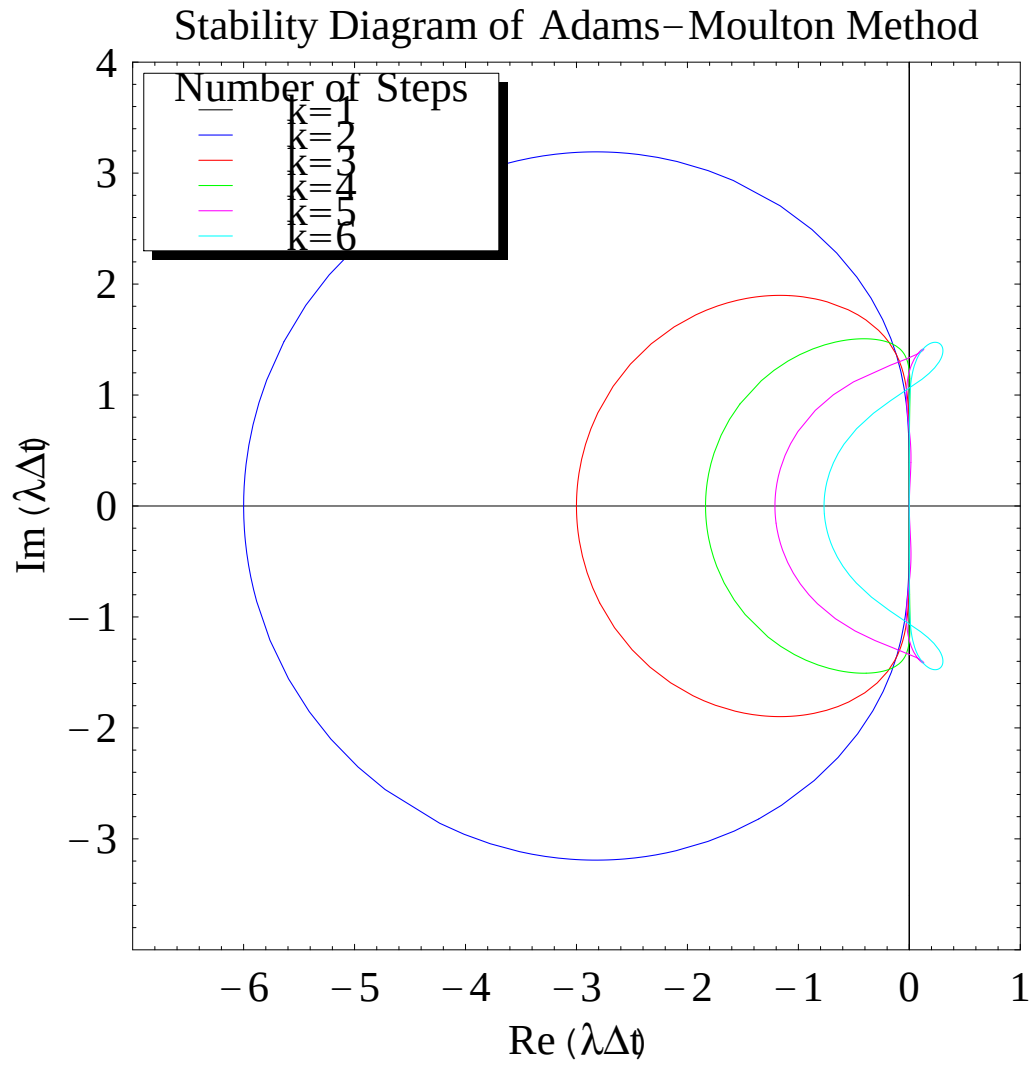


图 3: Stability diagram of Adams-Moulton method.

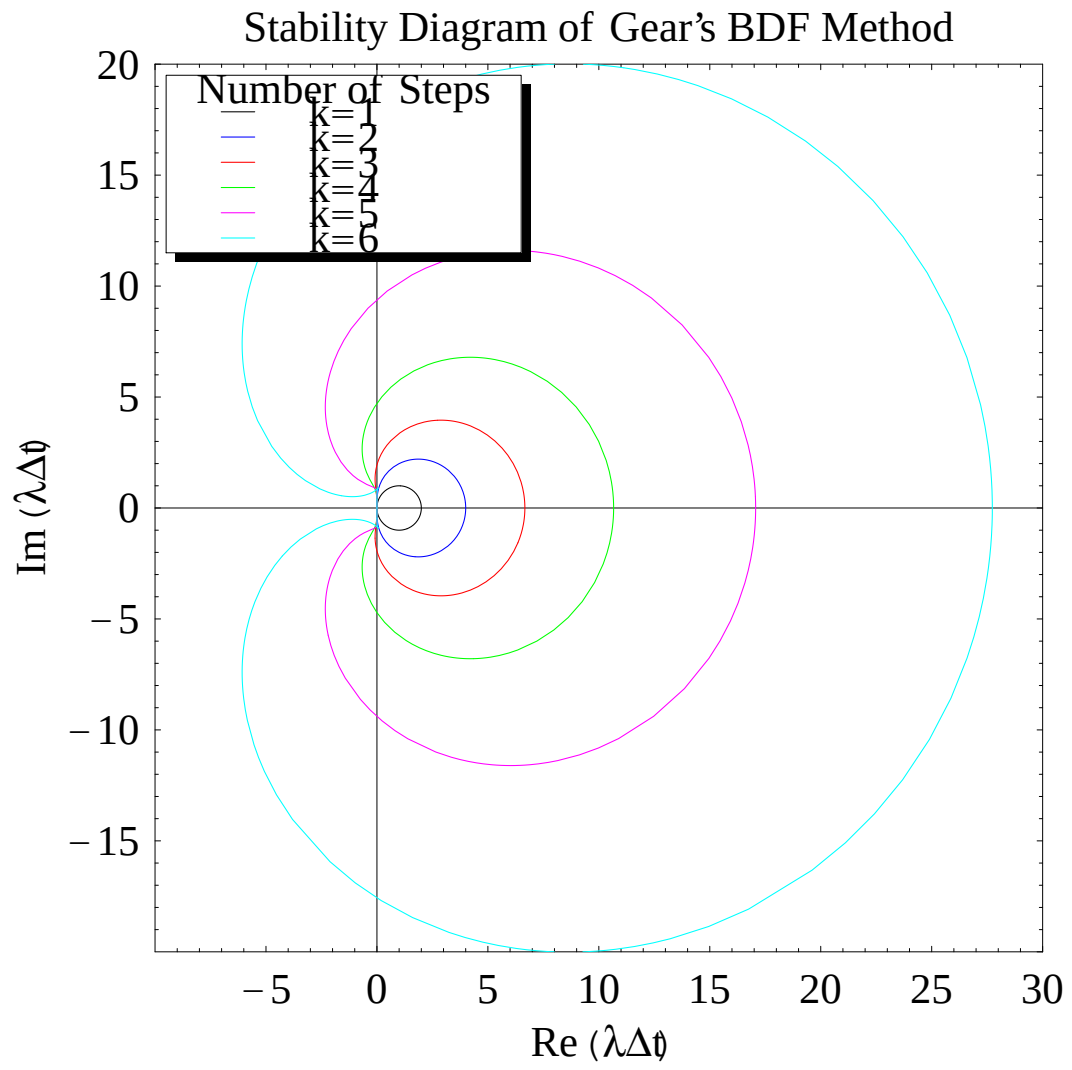


图 4: Stability diagram of BDF method.

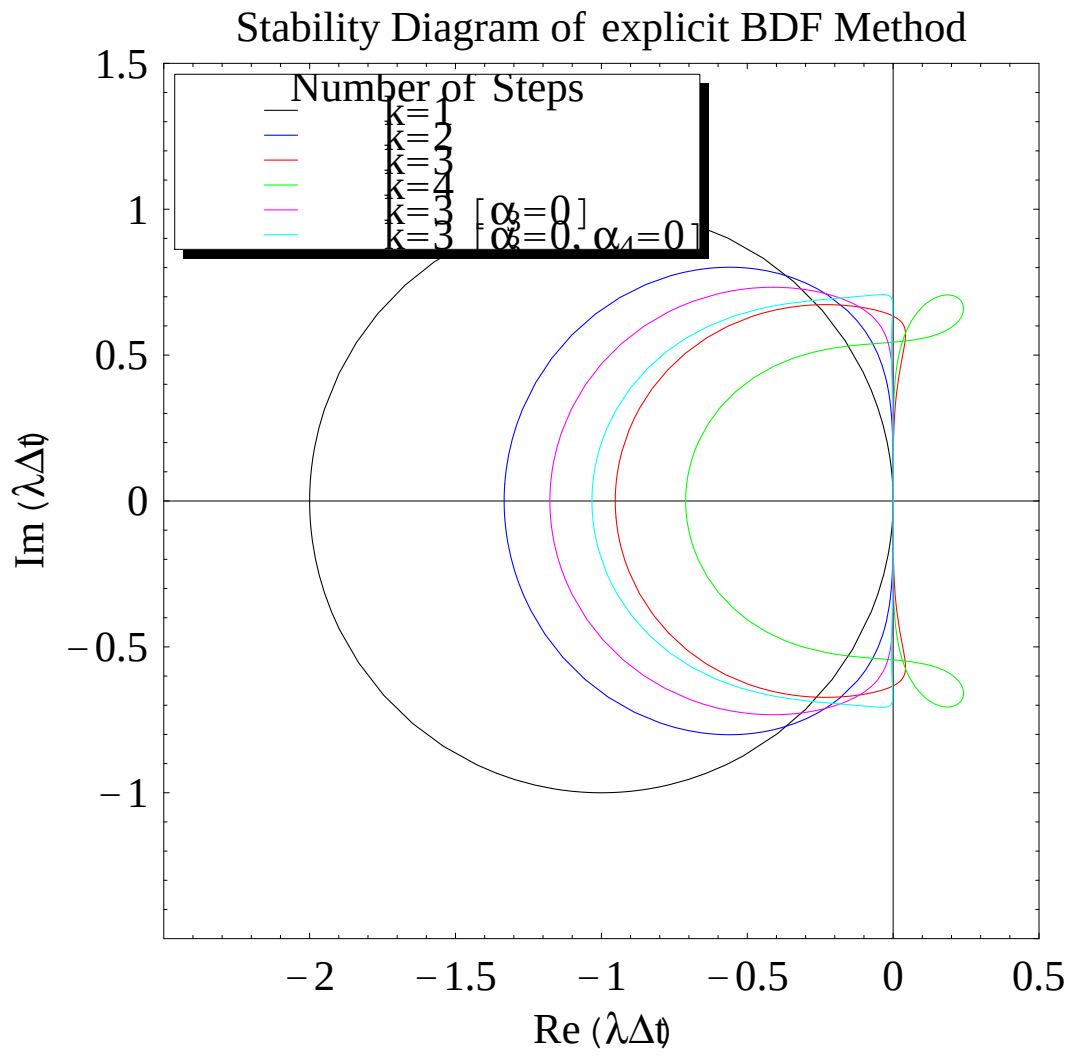


图 5: Stability diagram of explicit BDF method.

4.3 stiffness

Definition 5. 線形システム

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = A\mathbf{x} + \Phi(t) \quad (162)$$

の固有値 λ_t , $t = 1, 2, \dots, m$ が

- $\Re\lambda_t < 0$, $t = 1, 2, \dots, m$
- $\max_{t=1,2,\dots,m} |\Re\lambda_t| \gg \min_{t=1,2,\dots,m} |\Re\lambda_t|$

であるとき, 線形システムは硬い (*stiff*) という. 最大固有値と最小固有値の比を *stiffness ratio* という.

参考文献

- [1] J.C. Butcher, *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations* (John Wiley & Sons, Chichester/New York, 1987).
- [2] J.D. Lambert, *Computational Methods in Ordinary Differential Equations* (John Wiley & Sons, London, 1973).
- [3] C.W. Gear, *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1973).
- [4] R.D. Richtmyer, K.W. Morton, *Difference Methods for Initial Value Problems* (Interscience, New York, 1957).
- [5] P. Hartman, *Ordinary Differential Equations* (John Wiley & Sons, New York, 1964).
- [6] C.A.J. Fletcher, *Computational Techniques for Fluid Dynamics* (Springer, Berlin, 1991).
- [7] G.E. Karniadakis *et al*, J. Comput. Phys **97**, 414 (1991); M.A. Hulsen, MEAH-138 (1996).
- [8] S. Gill, Proc. Cambridge Philos. Soc. **47**, 95 (1951).
- [9] J.D. Lawson, SIAM J. Numer. Anal. **9** ??(1972).