4D-3

A安定なブロック法の構成

小藤 俊幸, 鈴木 千里
富士通(株) 国際情報社会科学研究所

1．はじめに

常微分方程式の初期値問題

(1.1)　$\dfrac{dy}{dx}=f(x,y)\ \ (a<x<b),\ \ y(a)=y_0$

に対するA安定性な数値解法は，stiffな問題に対してその有効性が知られている．

本稿では，対称に分布した標本点上のLagrange補間多項式から構成されるブロック法に関するA安定性解析を通じて，A安定性な数値解法のクラスが存在することを示す．

2．準備

積分刻み幅$h>0$，分点$0=c_0<c_1<\cdots<c_m<c_{m+1}=1$を用いて，積分区間$(a,b)$を $x_n=a+nh\ (n=1,\ldots,N)$，$x_{n,i}=x_n+c_ih\ (i=0,1,\ldots,m,m+1)$ と分割し，

(2.1)　$y_{n,i}=y_{n,0}+h\Sigma_{j=1}^{m}a_{i,j}f(x_{n,j},y_{n,j})$
$(i=1,\ldots,m+1)$

と置く．ここで，$y_{n,i}$は$y(x_{n,i})$の近似値であり，結合係数$a_{i,j}$はLagrange基本多項式

(2.2)　$\ell_j(t)=\Pi_{k=1,\neq j}^{m}\dfrac{t-c_k}{c_j-c_k}$

の区間$(0,c_i)$上の積分で与えられるものとする：

(2.3)　$a_{i,j}=\displaystyle\int_0^{c_i}\ell_j(t)dt.$

$y_{n,m+1}=y_{n+1,0}$であることから(1.2)は$y_{n,0}$をもとに，$y_{n,1},\cdots,y_{n,m},\ y_{n+1,0}$を与える陰的公式となる．公式(1.2)を用いる数値解法は解の近似値をブロックごとに構成するところから，ブロック法と呼ばれる．実際の算法としては，Runge-Kutta 法，予測子－修正子法双方の形式で定式化される．

いま，分点の対称性的配置を考える上で，$c_1,\ldots,c_m$を$\xi_j=2c_j-1$と区間$(-1,1)$上の分点に変換しておく．$\{\xi_j\}$が$\xi_k=-\xi_{m+1-k}\ (k=1,\ldots,m)$を満たすとき，m次対称分点と呼ぶことにする．このとき，公式(1.2)の安定特性関数$R(z)$は次式で与えられる．

(2.4)　$R(z)=Q((2z)^{-1})/Q(-(2z)^{-1}),$

(2.5)　$Q(z)=\Sigma_{j=0}^{m}p^{(j)}(1)z^j,$

(2.6)　$p(x)=\Pi_{k=1}^{m}(x-\xi_k)$

さらに，公式(2.1)がA安定であるための必要十分条件は

(2.7)　$\mathrm{Spec}(Q)\subset\mathbf{C}^-$

で与えられる．ただし，Spec(Q)は多項式Q(z)のゼロ点全体の集合を，$\mathbf{C}^-$は左半平面を表す．したがって，対称分点$\{\xi_j\}$から構成されるブロック法(2.1)のA安定性の解析は(2.5)式で定義される多項式Q(z)のゼロ点の位置を調べることに帰着される．

3．対称分点の構成とA安定性の十分条件

$0\leqq s\leqq m$とし，対称分点

$-1<\eta_1<\eta_2<\cdots<\eta_{m-s}<1\ \ (\eta_k=-\eta_{m-s+1-k})$

に対し，m+s 次多項式$q_{m,s}(x)$を次式で定義する．

(3.1)　$q_{m,s}(x)=\dfrac{m!}{(m+s)!}(x^2-1)^s\Pi_{j=1}^{m-s}(x-\eta_j)$

さらに，分点$-1<\xi_1<\xi_2<\cdots<\xi_m<1$をm 次多項式

(3.2)　$\dfrac{d^s}{dx^s}q_{m,s}(x)$

のゼロ点として定義すると，$\{\eta_j\}$の対称性およびRolleの定理から$\{\xi_j\}$は区間$(-1,1)$に属する対称分点となる．

$m\geqq1,\ 0\leqq s\leqq m$に対して，以上のような手続きで構成される分点を$S_{m,s}(\{\eta_j\})$，あるいは，単に$S_{m,s}$で表すことにする．なお，$S_{m,m}$はm次Legendre多項式のゼロ点からなる集合である．

また，指数関数e^zに対する(m, s)次Padé近似の分子多項式を$N_{m,s}(z)$で表すことにする：

(3.3)　$N_{m,s}(z)=\Sigma_{j=0}^{m}\dfrac{m!(m+s-j)!}{j!(m-j)!}z^j$

このとき，対称分点$S_{m,s}$から構成されるブロック法(2.1)のA安定性に関する次の条件を述べることができる．

定理1　$m\geqq1,\ 0\leqq s\leqq m$は整数とする．そのとき，任意のm-s次対称分点に対して，対称分点$S_{m,s}$から構成されるブロック法がA安定であるための十分条件は

$\mathrm{Spec}(N_{m,s})\subset\mathbf{C}^-$

により与えられる．□

証明は多項式の根の位置に関する古典的なGrace-Szegöによる定理（［4］，Part V, Chap. 2, No. 151, p. 60）を用いて行われる．

Construction of A-stable block methods
Toshiyuki KOTO, Chisato SUZUKI
International Institute for Advanced Study of Social Information Science, FUJITSU LIMTED

定理１により，ブロック法(1.2) のＡ安定性の判定は，指数関数に対するPadé近似の分子多項式$N_{m,s}(z)$ のゼロ点の位置を調べることに帰着される．以下に，幾つか簡単な例を挙げる．

例　$\mathrm{Spec}(N_{m,0})\subset \mathbf{C}^-$（ $m\leqq 4$ ）となることが，Routh-Hurwitz の判定法（［２］，162 頁）を用いて確かめられる．したがって，$m\leqq 4$ のときは対称分点から構成されるブロック法(2.1) は常にＡ安定である．しかし，$m=5$のときは $\mathrm{Spec}(N_{5,0})\not\subset \mathbf{C}^-$ となり，対称分点であってもＡ安定ではない公式の存在が予想される．実際，

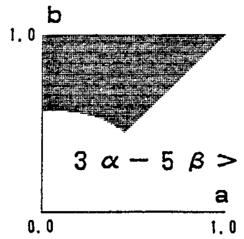
$$\xi_1=-b,\ \xi_2=-a,\ \xi_3=0,\ \xi_4=a,\ \xi_5=-b,\quad (0<a<b<1)$$

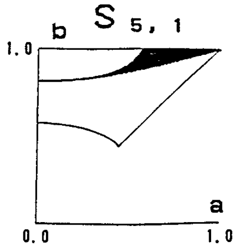
と置くと，簡単な考察から，ブロック法(2.1) がＡ安定であるための必要十分条件は

(3.4)　　$3\alpha-5\beta>1$ （$\alpha=a^2+b^2$，$\beta=a^2b^2$ ）

で与えられる．（ 下図参照．例えば，a=0.2，b=0.4はこの条件を満たさない．）

ただし，$m\geqq 5$ の場合でも，$S_{5,1}$，$S_{6,1}$，$S_{7,2}$，$S_{8,3}$，$S_{9,3}$ に対するブロック法(1.2) はＡ安定である．（ 対応する$N_{m,s}(z)$ に対して$\mathrm{Spec}(N_{m,s})\subset \mathbf{C}^-$ となることがRouth-Hurwitz の判定法を用いて示される．）





以上の例からも，$N_{m,s}(z)$ のゼロ点の位置を数学的な意味で一般的に見極めることは難しいと思われる．しかし，適当な制限を付加することによって特定なＡ安定なクラスを示すことはできる．実際，Saff-Vargaによって証明されている定理[5] ($0\leqq m\leqq s+4$ ならば$\mathrm{Spec}(N_{m,s})\subset \mathbf{C}^-$)と定理１とから，ひとつのＡ安定なクラスの存在を示す次の定理を得る．

定理２　任意のm に対して，$S_{m,m-4}$ から構成されるブロック法(2.1) はＡ安定である．□

４．Gauss-Gegenbauer型の公式

ここでは，対称分点の特別な場合として，Gegenbauer多項式$C_m^{\alpha}(x)$ のゼロ点を分点にとりあげて考察する．$C_m^{\alpha}(x)$ はゼロ点の対称性が保証されるJacobi多項式の一種である．実際，$C_m^{\alpha}(x)$ は重み$(1-x^2)^{\alpha-(1/2)}$に関する区間(-1,1)上の直交多項式系として定義され，特に，$\alpha=0$，1/2，1のとき，それぞれ第１種Chebyshev 多項式，Legendre多項式，第２種Chebyshev 多項式を与える．

$C_m^{\alpha}(x)$ のm 個のゼロ点からなる分点を$\overline{S}_{m,\alpha}$ で表すことにする．このとき，Legendre多項式のゼロ点を分点に用いるGauss-Legendre型の公式[1]やChebyshev 多項式のゼロ点を用いる公式[6]を包含する，Ａ安定なブロック法のクラスに関する次の定理が得られる．なお，Gauss-Legendre型の公式は任意のm に対してＡ安定であり，Chebyshev 多項式のゼロ点を用いる公式については，$m\leqq 20$に対するＡ安定性が，Wrightによって数値的に確かめられている．

定理３　$-1/2<\alpha\leqq 3/2$ とする．任意のm に対して，$\overline{S}_{m,\alpha}$ から構成されるブロック法(2.1)はＡ安定である．□

この定理は分点$\overline{S}_{m,\alpha}$ に基づく（ 定積分に対する）Gauss型数値積分公式の係数の正値性をひとつの論拠として証明される．しかし，$\alpha>3/2$ に対しては，一般に定理３のような結果は得られない．下の表は幾つかのα，m に対して$\overline{S}_{m,\alpha}$ に対するブロック法(2.1) のＡ安定性をRouth-Hurwitz の判定法を用いて調べたものである．○印がブロック法(2.1) がＡ安定であることを意味する．

Gauss-Gegenbauer型の公式のＡ安定性

α \ m	5	6	7	8	9	10
2	○	○	○	○	×	×
2.5	○	○	○	×	×	×
3	○	○	×	×	×	×
3.5	○	○	×	×	×	×
4	○	×	×	×	×	×

例えば，$C_m^2(x)$ に対する公式は$m\leqq 8$のときＡ安定である．

５．おわりに

本稿で示した方法を実際に用いるためには，解決しなければならない幾つかの問題がある．

最も本質的な問題は，ブロック法(2.1) が陰的であることから，常微分方程式が非線形の場合，非線形代数方程式を解かねばならないことである．一般に高段の方法では収束性が悪くなる．このような問題を如何に解決するかは今後の重要な課題である．

参考文献

１）J.C.Butcher: The numerical analysis of ordinary differential eqations: Runge-Kutta and general linear methods, John Wiley & Sons (1987).

２）三井斌友：数値解析入門，朝倉書店（1985).

３）T.Mitsui, H.Sugiura: A series of collocation Runge-Kutta methods,数理解析研究所講究録 **643**, pp.203-225.

４）G.Pólya, G.Szegö: Problems and Theorems in Analysis, Volume II, Springer-Verlag (1976).

５）E.G.Saff, R.S.Varga: On the zeros and poles of Padé approximants to e^z, Numer. Math., **25**, pp.1-14 (1975).

６）K.Wright: Some relationships between implicit Runge-Kutta, collocation, Lanczos τ method and their stability properties, BIT, **10** , pp.217-227.

７）H.Watts, L.Shampine: A-stable block implicit one-step method, BIT **12** , pp.256-266 (1972).