

1 多段法

1.1 アダムス型公式

$\mathbf{g}(t) := \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t))$ とし, 初期値問題を積分形で書けば

$$\mathbf{u}(t_{n+k}) = \mathbf{u}(t_{n+k-1}) + \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} \mathbf{g}(t) dt \quad (1)$$

である. 関数 $\mathbf{g}$ は求めるべき解 $u(t)$ を含む未知の関数であるが, 少なくとも時刻 $t_0, \dots, t_n$ での値 $\mathbf{u}_0, \dots, \mathbf{u}_n$ は既知である. $\mathbf{g}(t)$ を適当な多項式補間で置き換える事によって作られた差分方程式を使う多段法をアダムス型公式と言う.

1.2 アダムス・バッシュフォース公式

$\mathbf{g}$ の標本点 $t_n, \dots, t_{n+k-1}$ を用いたラグランジュの多項式補間公式を使えば

$$\tilde{\mathbf{g}}(t) := \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{g}(t_{n+i}) \prod_{j:j \neq i, 0 \leq j < k} \frac{t - t_{n+j}}{t_{n+i} - t_{n+j}}$$

で $\mathbf{g}$ が近似できる, よって (1) から

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t_{n+k}) - \mathbf{u}(t_{n+k-1}) &\doteq \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} \tilde{\mathbf{g}}(t) dt \\ &= \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{g}(t_{n+i}) \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} \prod_{j:j \neq i, 0 \leq j < k} \frac{t - t_{n+j}}{t_{n+i} - t_{n+j}} dt \\ &= h \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{g}(t_{n+i}) \int_{k-1}^k \prod_{j:j \neq i, 0 \leq j < k} \frac{s - j}{i - j} ds \\ &= h \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i^{(k)} \mathbf{g}(t_{n+i}) \end{aligned}$$

(但し $\beta_i^{(k)} := \int_{k-1}^k \prod_{j:j \neq i, 0 \leq j < k} \frac{s - j}{i - j} ds$ とする.)

更に $i < k$ で $\mathbf{u}_{n+i}$ が $\mathbf{u}(t_{n+i})$ の近似であるので, $\mathbf{f}$ が滑らかであれば $\mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i})$ が $\mathbf{g}(t_{n+i})$ の近似である事が期待でき,

$$\mathbf{u}(t_{n+k}) - \mathbf{u}(t_{n+k-1}) \doteq h \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i^{(k)} \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i})$$

この近似による差分方程式

$$\mathbf{u}_{n+k} = \mathbf{u}_{n+k-1} + h \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i^{(k)} \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i}) \quad (2)$$

を k 次のアダムス・バッシュフォース公式と言う.

例 1 (2 次アダムス・バシュフォース公式).

$$\mathbf{u}_{n+2} = \mathbf{u}_{n+1} + h \left\{ \frac{3}{2} \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) - \frac{1}{2} \mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n) \right\}$$

例 2 (3 次アダムス・バシュフォース公式).

$$\mathbf{u}_{n+3} = \mathbf{u}_{n+2} + h \left\{ \frac{23}{12} \mathbf{f}(t_{n+2}, \mathbf{u}_{n+2}) - \frac{4}{3} \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) + \frac{5}{12} \mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n) \right\}$$

例 3 (4 次アダムス・バシュフォース公式).

$$\mathbf{u}_{n+4} = \mathbf{u}_{n+3} + h \left\{ \frac{55}{24} \mathbf{f}(t_{n+3}, \mathbf{u}_{n+3}) - \frac{59}{24} \mathbf{f}(t_{n+2}, \mathbf{u}_{n+2}) + \frac{37}{24} \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) - \frac{3}{8} \mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n) \right\}$$

k 次アダムス・バシュフォース公式において特筆すべき事は、 $\mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n), \dots, \mathbf{f}(t_{n+k-2}, \mathbf{u}_{n+k-2})$ の値は前段の計算でもまったく同じ値を使用しているため、再利用する事ができると言う事である。再利用を行えば、実際に計算する値は $\mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{u}_{n+k})$ と k 回の積と和で済むにもかかわらず、次に示すように、 k 次アダムス・バシュフォース公式は k 次の精度を持っている。

命題 1. $\mathbf{f}$ が C^k -級である時、 k 次アダムス・バシュフォース公式の誤差は次で評価できる：

$$\|\mathbf{e}_{n+k}\| \leq \|\mathbf{e}_{n+k-1}\| + hL \sum_{i=0}^{k-1} |\beta_i^{(k)}| \|\mathbf{e}_{n+i}\| + h^{k+1} |A^k| \|\mathbf{g}^{(k)}\|_{\infty}$$

但し、 $\mathbf{e}_{n+i} := \mathbf{u}(t_{n+i}) - \mathbf{u}_{n+i}$ 、 L は $\mathbf{f}$ のリプシッツ連続性の定数、

$$A_k := \frac{1}{k!} \int_0^1 \prod_{j=0}^{k-1} (s+j) ds$$

とする。($|A_k| < 1$ である.)

Proof. 積分型の方程式 (1) とその近似たる差分方程式 (2) の差をとれば

$$\begin{aligned} & \mathbf{u}(t_{n+k}) - \mathbf{u}_{n+k} \\ &= \mathbf{u}(t_{n+k-1}) - \mathbf{u}_{n+k-1} + \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} \mathbf{g}(t) dt - h \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i^{(k)} \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i}) \\ &= \mathbf{e}_{n+k-1} + \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} \mathbf{g}(t) - \tilde{\mathbf{g}}(t) dt + h \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i^{(k)} (\mathbf{g}(t_{n+i}) - \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i})) \end{aligned}$$

である。右辺第 3 項はリプシッツ連続性より

$$\begin{aligned} \|\mathbf{g}(t_{n+i}) - \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i})\| &= \|\mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}(t_{n+i})) - \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i})\| \\ &\leq L \|\mathbf{u}(t_{n+i}) - \mathbf{u}_{n+i}\| \\ &\leq L \|\mathbf{e}_{n+i}\| \end{aligned}$$

で抑えられる. 右辺第 2 項はラグランジュの多項式補間の誤差の評価により $t_{n+k-1} < t < t_{n+k}$ において

$$\begin{aligned}
\left\| \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} \mathbf{g}(t) - \tilde{\mathbf{g}}(t) dt \right\| &= \left\| \frac{1}{k!} \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} \mathbf{g}^{(k)}(\tau_t) \prod_{i=0}^{k-1} (t - t_{n+i}) dt \right\| \\
&\leq \frac{1}{k!} \|\mathbf{g}^{(k)}\|_{\infty} \left| \int_{t_{n+k-1}}^{t_{n+k}} \prod_{i=0}^{k-1} (t - t_{n+i}) dt \right| \\
&= \frac{1}{k!} \|\mathbf{g}^{(k)}\|_{\infty} \left| \int_0^1 h^{k+1} \prod_{i=0}^{k-1} (s + i) ds \right| \\
&= h^{k+1} |A_k| \|\mathbf{g}^{(k)}\|_{\infty}
\end{aligned}$$

□

1.3 アダムス・ムルトン公式

$\mathbf{g}$ の標本点 $t_{n+1}, \dots, t_{n+k}$ を用いたラグランジュの補間公式を使えば先とほぼ同様の議論で差分方程式

$$\mathbf{u}_{n+k} = \mathbf{u}_{n+k-1} + h \sum_{i=1}^k \bar{\beta}_i^{(k)} \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i}) \quad (3)$$

を得る. (但し $\bar{\beta}_i^{(k)} := \int_{k-1}^k \prod_{j:j \neq i, 0 \leq j \leq k} \frac{s-j}{i-j} ds$) これを**アダムス・ムルトン公式**と言う.

アダムス・バシュフォース公式と異なり, アダムス・ムルトン公式は右辺にも $\mathbf{u}_{n+k}$ が現れている為に単純に計算する事はできない. この様な性質を陰的という. アダムス・ムルトン公式は陰的なアダムス型公式であり, それに対しアダムス・バシュフォース公式は陽的なアダムス型公式である.

アダムス・ムルトン公式の次段の値 $\mathbf{u}_{n+k}$ は

$$\mathbf{x} = \mathbf{u}_{n+k-1} + h \sum_{i=1}^{k-1} \bar{\beta}_i^{(k)} \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i}) + h \bar{\beta}_k^{(k)} \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{x})$$

の解であるが, これは h が十分に小さければ反復法によって求める事ができる. 実際 $\Phi(\mathbf{x}) := \mathbf{u}_{n+k-1} + h \sum_{i=1}^{k-1} \bar{\beta}_i^{(k)} \mathbf{f}(t_{n+i}, \mathbf{u}_{n+i}) + h \beta_k^{(k)} \bar{\mathbf{f}}(t_{n+k}, \mathbf{x})$ と置けば, $\mathbf{f}$ のリプシッツ連続性より

$$\begin{aligned}
\|\Phi(\mathbf{x}) - \Phi(\mathbf{y})\| &= \|h \bar{\beta}_k^{(k)} (\mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{x}) - \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{y}))\| \\
&\leq h \bar{\beta}_k^{(k)} L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|
\end{aligned}$$

であるから $h < (\bar{\beta}_k^{(k)} L)^{-1}$ であれば良い.

アダムス・ムルトン公式の誤差はアダムス・バシュフォース公式と同じ次数を持つ。アダムス・ムルトン公式を反復法を用いて計算する時の初期値としてアダムス・バシュフォース公式の結果を使う方法を、**予測子修正子法**と言う。この時、反復法の初期値として使うアダムス・バシュフォース公式の結果を**予測子**、その結果のアダムス・ムルトン公式の値を**修正子**と言う。

前述の様にアダムス・バシュフォース公式の結果もアダムス・ムルトン公式と同じ次数を持つので、反復法の初期値としては解にかなり近く、実際の反復法は1段か2段で十分である。