数理解析研究所講究録
643巻 1988年 48-73

陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の特性について

山梨大学　工学部
田中　正次 (Masatsugu Tanaka)
三村　和正 (Kazumasa Mimura)
山下　茂　(Shigeru Yamashita)

１．　はじめに

常微分方程式の初期値問題 $y'=f(x,y), y(x_0)=y_0$ に対して

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n+a_1h, y_n+b_{11}k_1+b_{12}k_2+\cdots+b_{1s}k_s) \\ k_2 &= hf(x_n+a_2h, y_n+b_{21}k_1+b_{22}k_2+\cdots+b_{2s}k_s) \\ &\vdots \qquad\qquad \vdots \\ k_s &= hf(x_n+a_sh, y_n+b_{s1}k_1+b_{s2}k_2+\cdots+b_{ss}k_s) \\ y_{n+1} &= y_n+w_1k_1+w_2k_2+\cdots+w_sk_s \end{aligned} \tag{1.1}$$

によって、x_nにおける数値解y_nからx_{n+1}における数値解y_{n+1}を求める方法をＳ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法という。特に陰的で$b_{ij}=0$ $(i<j)$のとき半陰的(semi-implicit)であるという。

Ｓ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法は、k_iの値を決定するのに単一微分方程式の場合でｓ個、ｍ元連立微分方程式の場合ではｍ×ｓ個の連立非線形方程式を解かねばならないという短所があるが、２Ｓ次達成可能であり安定性が極めて良いために、特にStiff問題の解法としての将来が期待されている方法である。Stiff問題は、化学工学、物理学、制御工学などにおける現象を記述する方程式によく現れ、実用的にも重要で、その解法は、多くの研究者により提案されてきた。しかし、まだ研究は進行中という感があり、安定性その他について考慮しなければならない事柄は多い。また近年Stiff系を

含む非線形問題に対する安定性解析の研究がさかんになり、陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法についてもいろいろな安定特性が、明確になりつつある。そこで、まず我々は低段数の陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の安定特性について考察し、あわせて打ち切り精度との相互関係を調査し、既知公式を評価する。ついで、この調査を基にして、誤差評価が可能な半陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の安定性に関して優れた特性をもつうめ込み型公式(embedded formula)を提案する。

２．安定性に関する諸概念とその相互関係

Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法に関する従来の安定性の概念と理論は、線形のテスト方程式

$$y' = \lambda y \quad (\lambda:\ \text{複素定数}) \tag{2.1}$$

に対して展開された。これは微分方程式が(2.1)によってほぼ近似できることを根拠にしている。しかしStiff問題や非線形問題等に関し従来の理論では不十分であることが次第に明らかになり、近年安定性の理論をより一般的な微分方程式について再構築する試みがなされている。

まず陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法を対象にしてButcher, Burrage等により定義された安定性に関する諸概念と、その相互関係に関する結果を述べる。

Ｓ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法(1.1)をテスト方程式(2.1)に適用すると、

$$y_{n+1} = R(h\lambda)\, y_n \tag{2.2}$$

が得られる。ここでＲ(hλ)はhλの有理関数である。

［定義１］Ｒ(hλ)をＳ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法(1.1)（以下(1.1)を省略する）の安定関数という。

［定義２］$|R(h\lambda)| \leq 1$ であるときＳ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法は、そのhλに対して絶対安定であるという。

［定義３］ $s=\{h\lambda \mid |R(h\lambda)|\leqq 1, h\lambda$ は複素数$\}$ によって定義される複素平面上の領域 s を、Ｓ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の絶対安定領域という。

［定義４］ $s\supset\{h\lambda \mid Re(h\lambda)<0, h\lambda$ は複素数$\}$ であるとき、Ｓ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法はＡ安定であるという。

変係数の微分方程式

$$y'=\lambda(t)y \quad (\lambda(t)\text{は、}t\text{の複素関数}) \tag{2.3}$$

にＳ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法を適用すると

$$y_{n+1}=\{1+W1^{T}\xi(I-B\xi)^{-1}e^{T}\}y_n \tag{2.4}$$

が得られる。ここで

$$W1=\begin{bmatrix}w_1\\w_2\\\vdots\\w_s\end{bmatrix} \quad B=\begin{bmatrix}b_{11}&b_{12}&\cdots&\cdots&b_{1s}\\b_{21}&b_{22}&\cdots&\cdots&b_{2s}\\\vdots&&&&\\b_{s1}&b_{s2}&\cdots&\cdots&b_{ss}\end{bmatrix} \quad e=\begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix} \tag{2.5}$$

$$\xi=diag(\xi_1,\xi_2,\cdots\cdots\cdots,\xi_s)$$
$$=diag\{h\lambda(t_n+a_1h),h\lambda(t_n+a_2h),\cdots\cdots\cdots,h\lambda(t_n+ash)\}$$

である。

［定義５］Ｓ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法は、もし

$$K(\xi)=1+W1^{T}\xi(I-B\xi)^{-1}e^{T} \tag{2.6}$$

が、$Re(\xi_i)\leqq 0$ $(i=1,..s)$ であるようなすべての

$\xi=diag(\xi_1,\xi_2,\cdot\ \cdot\ \cdot\ \xi_s)$ $(a_i=a_j\rightarrow\xi_i=\xi_j)$

に対して

$$|K(\xi)|\leqq 1 \tag{2.7}$$

ならばＡＮ安定であるという。

［定理１］陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法がＡＮ安定ならばＡ安定である。

［定義６］$a_i=a_j$ であるようなi,j$(i\neq j)$が存在すれば、Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法はconfluent、そうでなければnonconfluentであるという

同一のＲｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の相異なる初期値から得られる

二つの数値解をy_n及び$\tilde{y}_n$としよう。

また

$$<f(t,\xi_1)-f(t,\xi_2),\xi_1-\xi_2>\leqq 0,\quad t\geqq 0,\xi_1,\xi_2\in R^m \qquad (2.8)$$

を満足する微分方程式を消散方程式と呼ぼう。そのとき

［定義７］(2.8)を満足する自励系とすべての$y_n,\tilde{y}_n,h>0$に対して

$$\| y_{n+1}-\tilde{y}_{n+1}\| \leqq \| y_n-\tilde{y}_n\| \qquad (2.9)$$

ならば、その陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法はＢ安定であるという。

［定義８］(2.8)を満足するすべての関数$f(t,y)$とすべての$y_n,\tilde{y}_n$ $h>0$に対して(2.9)が成立するならば、その陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法はＢＮ安定であるという。

［定理２］陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法がＢＮ安定ならばＢ安定である。

行列Ｍを次式によって定義する。

$$M=WB+B^TW-W1W1^T \qquad (2.10)$$

ここで、Ｂ及びＷ１は(2.5)で定義された行列及び列ベクトルであり、またＷは次のような行列である。

$$W=\begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_s \end{bmatrix}$$

［定義９］行列Ｗ及びＭが非負値行列である陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法を代数的安定であるという。

ある陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法が代数的安定であるか否かは、その方法のパラメータにより行列Ｍ及びＷを計算することにより簡単に確認できる。

［定理３］陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法が代数的安定ならばＢＮ安定である。

この定理により代数的安定性をもつ方法を用いて(2.8)を満足するStiff非線形問題等を解けば、その数値解がある値に収束することが理論的に保証される。

［定理４］Ｓ段数２Ｓ次陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法は代数的安定である。

［定理５］nonconfluentである陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法に対して

(1) 代数的安定 ↔ ＢＮ安定

(2) 代数的安定 ↔ ＡＮ安定

また任意の陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法に対して

(3) ＡＮ安定 → Ａ安定

(4) ＢＮ安定 → Ｂ安定

が成立する。

３．２段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法

２段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の一般形は、

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n + a_1 h,\ y_n + b_{11}k_1 + b_{12}k_2) \\ k_2 &= hf(x_n + a_2 h,\ y_n + b_{21}k_1 + b_{22}k_2) \\ y_{n+1} &= y_n + w_1 k_1 + w_2 k_2 \end{aligned} \qquad (3.1)$$

ここで$a_1, a_2, b_{11}, b_{12}, b_{21}, b_{22}, w_1, w_2$は、公式を特徴づける係数である。

３．１　２段数３次陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法

３．１．１　次数条件式とその解

３次の次数条件式より、a_1, b_{12}を自由パラメータにして解系を導いた。但し、$a_1 = 1/2$のときは、解を持たない。（(6)を見よ。）

３．１．２　安定性

テスト方程式$y' = \lambda y$（λは複素定数）を(3.1)に代入して整理すると(2.2)が得られる。いま、$\beta_0 = b_{11} + b_{22}$とおけば、

$$R(h\lambda)=\{1+(1-\beta_0)h\lambda-(\beta_0/2-1/3)h^2\lambda^2\}$$
$$/\{1-\beta_0 h\lambda+(\beta_0/2-1/6)h^2\lambda^2\} \quad (3.2)$$

である。ここでA安定になるためのβ_0の条件を求めると、

$$\beta_0 \geqq 1/2 \quad (3.3)$$

β_0を自由パラメータで表し整理すると、A安定になるために必要な自由パラメータ間の条件は、

$$b_{12} \leqq a_1-1/\{8(3a_1^2-3a_1+1)\} \quad (3.4)$$

である。また半陰的法の場合は、$b_{12}=0$から

$$a_1>1/2 \quad (3.5)$$

のときにA安定となる。また絶対安定領域の面積最大の公式群中打ち切り精度最良の公式が得られているので、公式名を"opt.st1"とし以下既知公式に加えて特性を評価する。

次に2段数3次法が、代数的安定であるための条件を求める。(2.10)で定義された行列M,Wを自由パラメータの形式で表し、それぞれが非負値行列になるために必要な自由パラメータの条件を求めた。その結果、

$$b_{12} \leqq a_1-1/\{8(3a_1^2-3a_1+1)\} \quad (3.6)$$

が得られた。また半陰的法の場合は、

$$a_1>1/2 \quad (3.7)$$

である。これらの条件は、2段数3次法がA安定であるための条件(3.4)と同一なものであるので、3次法ではA安定性と代数的安定性が等価であることがわかる。

3.1.3 打ち切り誤差とその大小判定

(3.1)による数値解y_{n+1}の局所打ち切り誤差T_{n+1}は、

$$T_{n+1}=t_n h^4+o(h^5) \quad (3.8)$$

と表すことができる。ここでt_nは与えられた微分方程式の右辺の関数系$f(x,y)$に依存する部分と公式を特徴づける係数のみの関数(この部分を$a_{3j}(j=1,..,4)$とおこう)の積和の形になっている。ここで

打ち切り誤差の大小の判定には次の判定基準を用いる。

$$A_{33} = \sum_{j=1}^{4} a_{3j}^2 \qquad (3.9)$$

3.2　2段数4次陰的Runge-Kutta法

2段数4次法としては、Butcherによる方法が唯一つ存在する。

3.2.1　安定性

定理4より、この方法は代数的安定である。

3.3　既知公式の特性

2段数3次法及び2段数4次法の安定特性及び打ち切り精度判定基準をTable.1に示す。なお既知公式中A安定性、代数的安定性をもたない公式については、絶対安定領域の面積及び絶対安定区間を示した。

Table.1　2段数法の既知公式の特性

公式名	安定性 面積	区間	A_{33}
Butcher	代数的安定		0.
Radau IA	代数的安定		6.00137d-4
Radau IIA	代数的安定		6.00137d-4
Norsett1	143.816	(-12.928,0.)	8.30981d-5
Norsett2	代数的安定		1.61206d-2
Norsett,Burrage1	代数的安定		2.50765d-2
Norsett,Burrage2	143.816	(-12.928,0.)	1.29264d-4
Jain1	37.926	(-6.000,0.)	6.00137d-4
Jain2	37.926	(-6.000,0.)	6.00137d-4
opt.st1	代数的安定		2.81250d-3

3.4　安定性と打ち切り精度の関係

Fig.1は、横軸にa_1、縦軸にb_{12}をとり、それぞれを[-1,1]の範囲で変動させたときのA_{33}の等高線図，方法(3.1)が代数的安定になるような領域、絶対安定領域の面積がほぼ最大、最小になる場合の曲線及び既知公式の(a_1, b_{12})を座標とする点を示したものである。（等高線の高さは、1E-1,5E-2,1E-2,5E-3,1E-3,5E-4,1E-4,5E-5,1E-5,5E-6,1E-6,5E-7）この図で$b_{12}=0$の直線上を見れば、2段数3次半陰的Runge－Kutta法に対するA_{33}の変動の模様と、代

数的安定であるためのa₁の範囲がわかる。

任意の公式が与えられたとき、その公式のa₁及びb₁₂の値を両座標とする点をFig.1上に記入することにより、その公式の特性が他の公式のそれと対比ができる上、その公式の改良の可能性も容易に知ることができる。

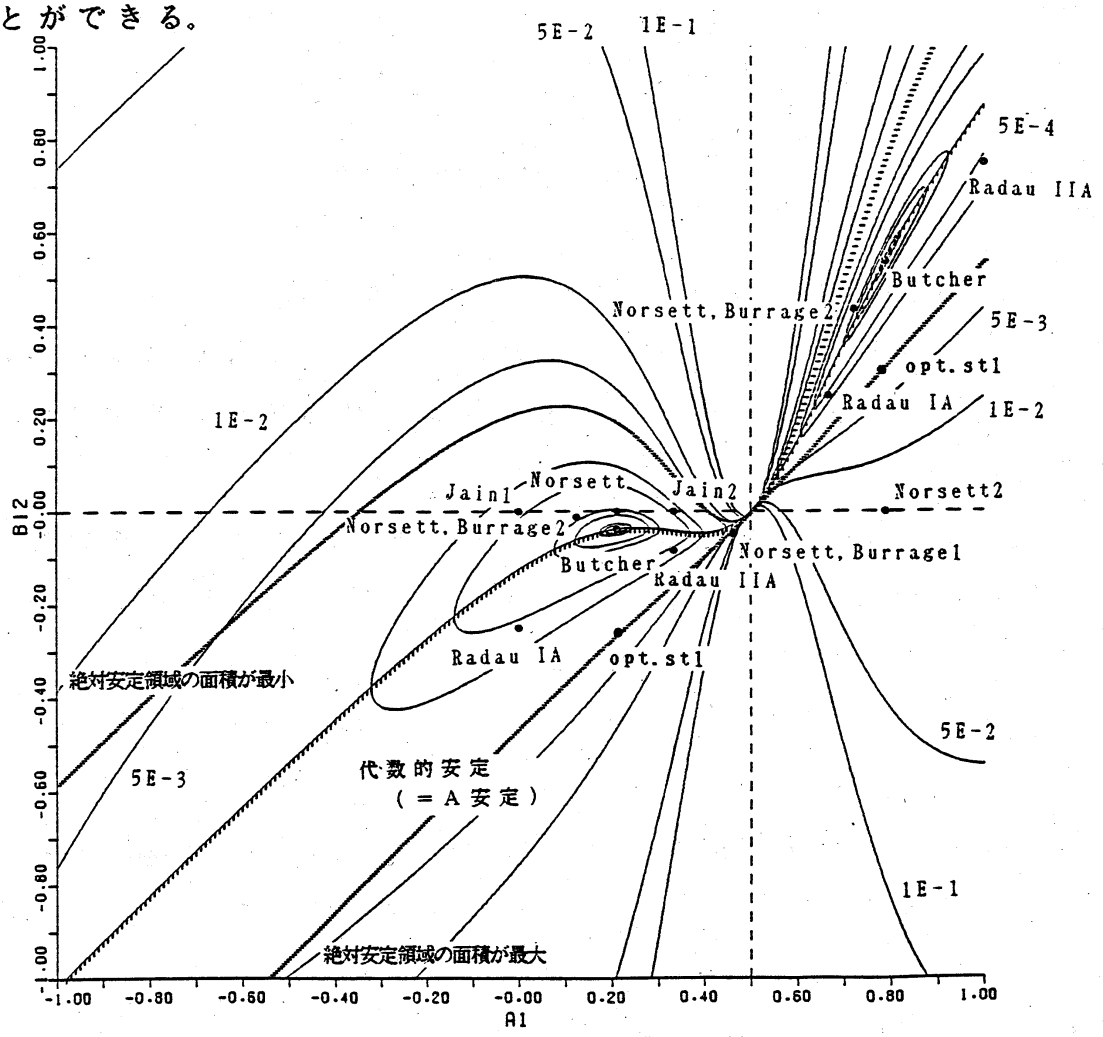


Fig.1　2段数3次陰的Runge-Kutta法の安定性と打ち切り精度の関係図

4. 3段数陰的Runge-Kutta法

3段数陰的Runge-Kutta法の一般形は、

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_n + a_1 h,\ y_n + b_{11}k_1 + b_{12}k_2 + b_{13}k_3) \\
k_2 &= hf(x_n + a_2 h,\ y_n + b_{21}k_1 + b_{22}k_2 + b_{23}k_3) \\
k_3 &= hf(x_n + a_3 h,\ y_n + b_{31}k_1 + b_{32}k_2 + b_{33}k_3) \\
y_{n+1} &= y_n + w_1 k_1 + w_2 k_2 + w_3 k_3
\end{aligned}
\qquad (4.1)
$$

ここで$a_1, a_2, a_3, b_{11}, b_{12}, b_{13}, b_{21}, b_{22}, b_{23}, b_{31}, b_{32}, b_{33}, w_1, w_2, w_3$は、公式を特徴づける係数であり、公式は通常Table.2のような係数マトリックスで表す。

Table.2　係数マトリックス表示

a_1	b_{11}	b_{12}	b_{13}
a_2	b_{21}	b_{22}	b_{23}
a_3	b_{31}	b_{32}	b_{33}
	w_1	w_2	w_3

４．１　３段数４次陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法

ここでは３段数４次半陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の安定性について考察し、３段数４次法及び３段数４次半陰的法の既知公式の特性値を示す。

４．１．１　３段数４次半陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の安定性

３段数４次半陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法がＡ安定になるための条件は、

$$\beta_1 \geqq 1/2 \ , \ \beta_2 - \beta_1 + 1/6 \geqq 0.0 \qquad (4.2)$$

ここで　$\beta_1 = b_{11}+b_{22}+b_{33}, \beta_2 = b_{11}b_{22}+b_{22}b_{33}+b_{33}b_{11}$ である。

次に３段数４次半陰的法が、代数的安定であるための条件を求める。(2.10)で定義された行列Ｍ及びＷが、非負値行列になるために自由パラメータに課せられるべき条件を数値的に求めた。

その結果、自由パラメータの範囲が、

$$-1.0 \leqq a_1 \leqq 1.5 \quad -1.0 \leqq a_2 \leqq 1.0$$

であるとき、そのような条件は、

$$a_1 \geqq 0.789 \qquad a_2 = 0.5 \qquad (4.3)$$

であることがわかった。

４．１．２　既知公式の特性

３段数４次法陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法及び３段数４次半陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の既知公式の安定特性及び打ち切り精度判定基準をTable.3に示す。なお、既知公式中Ａ安定性または代数的安定性をもたない公式については、絶対安定領域の面積及び絶対安定区間を示した。

Table.3　３段数４次法の既知公式の特性

公式名	安定性 面積　区間	A_{43}
Lobatto IIIA	Ａ安定	3.25521d-5
Lobatto IIIB	Ａ安定	2.47154d-5
Lobatto IIIC	代数的安定	4.21971d-5
Hundsdorfer	代数的安定	8.97334d-3
Norsett 1	代数的安定	6.60673d-2
Norsett 2	969.897　(-34.760,0.)	1.70196d-5
Norsett 3	118.509　(-11.057,0.)	7.49304d-7
Cooper&Sayfy	代数的安定	6.77505d-2

４．２　３段数５次陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法

４．２．１　次数条件式とその解

Butcherによる簡単化の条件(simplifying condition)を用いて、５次の次数条件式よりa_3, b_{33}を自由パラメータにもつ解系を導いた。

４．２．２　安定性

テスト方程式$y'=\lambda y$(λは複素定数)を(4.1)に代入して整理すると、(2.2)が得られる。いま$\beta_0=b_{11}+b_{22}+b_{33}$とおけば、

$$R(h\lambda)=\{1+(1-\beta_0)h\lambda-(\beta_0/2-7/20)h^2\lambda^2+(\beta_0/12-1/20)h^3\lambda^3\}$$
$$/\{1-\beta_0 h\lambda+(\beta_0/2-3/20)h^2\lambda^2-(\beta_0/12-1/30)h^3\lambda^3\} \quad (4.4)$$

である。ここで、方法がＡ安定になるための条件を求めると、

$$\beta_0 \geqq 1/2 \quad (4.5)$$

β_0を自由パラメータで表すと、Ａ安定になるために必要な自由パ

ラメータの条件は、

$$9b_{33}(20a_3^4-40a_3^3+28a_3^2-8a_3+1)+2(45a_3^4-90a_3^3+60a_3^2-15a_3+1)\}$$
$$/\{5(6a_3^2-6a_3+1)^2\}\geqq 1/2 \qquad (4.6)$$

である。また絶対安定領域の面積最大の公式群中で打ち切り精度が最良の公式が得られているので公式名を"opt.st2"とし以下既知公式に加えてその特性を評価する。

次に３段数５次法が、代数的安定であるための条件を求める。(2.10)で定義された行列Ｍ及びＷが、非負値行列になるために必要な自由パラメータ間の条件を、数値的に求めた。

その結果自由パラメータの範囲が、

$$-1.0\leqq a_3\leqq 1.0 \quad -1.0\leqq b_{33}\leqq 1.0$$

であるとき、そのような条件は方法がＡ安定になるために必要な自由パラメータ間の条件(4.6)とほぼ一致することがわかった。

よって２段数３次法の場合と同様に、３段数５次法の場合についてもＡ安定性と代数的安定性は、等価な概念であると推測される。

４．２．３　打ち切り誤差とその大小判定

(4.1)による数値解y_{n+1}の局所打ち切り誤差T_{n+1}は、

$$T_{n+1}=t_n h^6+o(h^7) \qquad (4.7)$$

と表すことができる。ここでt_nは、与えられた微分方程式の右辺の関数系$f(x,y)$に依存する部分と公式を特徴づける係数のみの関数（これを$a_{5j}(j=1,..,20)$とおこう）の積和の形になっている。そこで、打ち切り誤差の大小の判定には次の判定基準を用いる。

$$A_{53}=\sum_{j=1}^{20} a_{5j}^2 \qquad (4.8)$$

β_0が与えられたとき打ち切り精度判定基準A_{53}を最小にする公式が得られているので、これをTable.4に示す。

Table.4　β_0が与えられたときの最適公式

$\frac{5+\sqrt{5}}{10}$	$\frac{1+8\beta_0}{36}$	$\frac{5+6\sqrt{15}+40\beta_0}{180}$	$\frac{20+3\sqrt{15}-20\beta_0}{45}$
$\frac{5-\sqrt{5}}{10}$	$\frac{5-6\sqrt{15}+40\beta_0}{180}$	$\frac{1+8\beta_0}{36}$	$\frac{20-3\sqrt{15}-20\beta_0}{45}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{20-3\sqrt{15}-20\beta_0}{72}$	$\frac{20+3\sqrt{15}-20\beta_0}{72}$	$\frac{10\beta_0-1}{18}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$

４．３　３段数６次陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法

３段数６次法としては、Butcherによる方法が唯一つ存在する。

４．３．１　安定性

定理４よりこの方法は、代数的安定である。

４．４　既知公式の特性

３段数５次法及び３段数６次法の既知公式の安定特性及び打ち切り精度判定基準をTable.5に示す。なお既知公式中Ａ安定性または代数的安定性を持たない公式については、絶対安定領域の面積及び絶対安定区間を示した。

Table.5　３段数５次法の既知公式の特性

公式名	安定性 面積　区間	A_{53}
Butcher1	代数的安定	0.
Butcher2	144.971　(-11.842,0.)	9.79167d-7
Radau nodes	144.971　(-11.842,0.)	9.79167d-7
Radau IA	代数的安定	9.79167d-7
Radau IIA	代数的安定	9.79167d-7
opt.st2	代数的安定	1.23457d-6

４．５　３段数５次法の安定性と打ち切り精度の関係

Fig.2は、横軸にa_3,縦軸にb_{33}をとり、それぞれを[-1,1]の範囲で変動させたときのA_{53}の等高線図、方法(4.1)がＡ安定（＝代数的安定）になるような領域、絶対安定領域の面積がほぼ最大、最小になる曲線及び既知公式の(a_3, b_{33})を座標とする点を示したものである。

（等高線の高さは、1E-4, 5E-5, 1E-5, 5E-6, 1E-6, 5E-7, 1E-7, 5E-8, 1E-8, 5E-9, 1E-9, 1E-10）

任意の公式が与えられたとき、その公式のa_3及びb_{33}の値を両座標とする点をFig.2上に記入することにより、その公式の特性が他の公式のそれと対比ができる上、その公式の改良の可能性も容易に知ることができる。

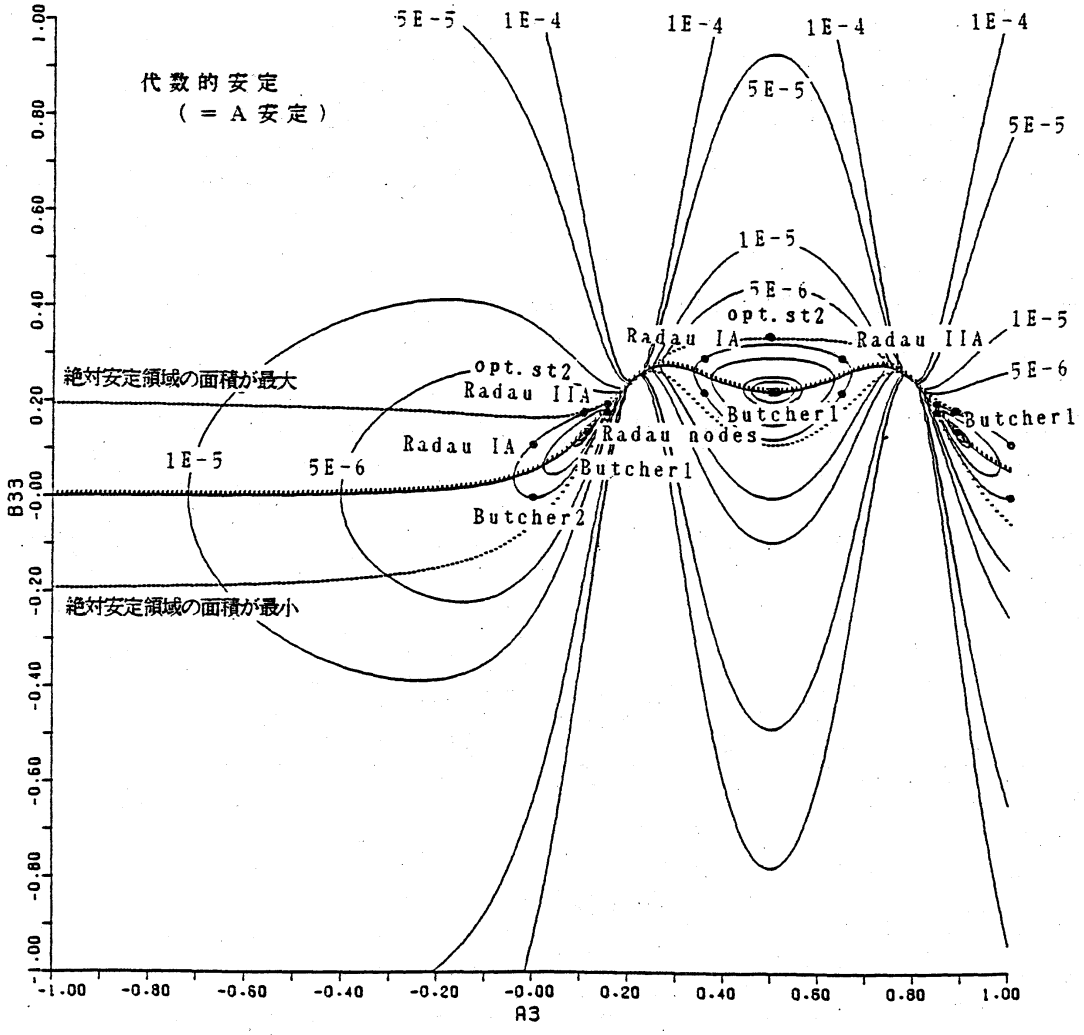


Fig.2　3段数5次陰的Runge-Kutta法の安定性と打ち切り精度の関係図

5.　うめ込み型半陰的Runge-Kutta法

Runge-Kutta法は、その計算過程に誤差評価の手段を含んでいない。この欠点を補うために提案された方法として、R.H. Mersonによる「うめ込み法」があるが、これは高次法公式に低次法

公式をうめ込み、低次法公式の数値解と高次法の数値解の差をとることにより、低次法公式の局所打ち切り誤差を推定する方法である。

この研究では、一般の陰的法より計算が容易で、しかも安定特性に関しても同程度の特性を持つことができる半陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法に対して、うめ込み型公式を提案する。その一般形は、1段数ｐ次法とｍ段数ｑ次法($l \leqq m, p < q$)を用いるうめ込み法の場合

$$k_i = hf\left(x_n + a_i h,\ y_n^* + \sum_{j=1}^{m} b_{ij} k_j\right) \qquad (i = 1, 2, \ldots m)$$

$$y_{n+1} = y_n^* + \sum_{j=1}^{l} c_j k_j \qquad (5.1)$$

$$y_{n+1}^* = y_n^* + \sum_{j=1}^{m} w_j k_j$$

$$T_{n+1} = y_{n+1} - y_{n+1}^*$$

と表わすことができる。ここでT_{n-1}はｐ次法の局所打ち切り誤差の推定値である。またこの公式はTable.6の係数マトリックスで表す。

Table.6　係数マトリックス表示

a_1	b_{11}						
a_2	b_{21}	b_{22}					
:	:	:					
a_l	b_{l1}	b_{l2}	‥ ‥ ‥	b_{ll}			
a_{l+1}	$b_{l+1,1}$	$b_{l+1,2}$	‥ ‥ ‥	$b_{l+1,l}$	$b_{l+1,l+1}$		
:	:	:		:	:		
a_m	b_{m1}	b_{m2}	‥ ‥ ‥	b_{ml}	$b_{m,l+1}$ ‥ ‥		b_{mm}
	c_1	c_2	‥ ‥ ‥	c_l	0 ‥ ‥ ‥		0
	w_1	w_2	‥ ‥ ‥	w_l	w_{l+1} ‥ ‥		w_m

５．１　うめ込み型半陰的公式の導出と最適化

うめ込み型半陰的公式の導出にあたり、第一に考慮すべき点は、非線形Stiff問題に対して有効であるように、それらの問題に適した安定性をもたせることである。これは高次法公式とそれにうめ込まれた低次法公式の両公式に対して同時に優れた安定特性をもたせる

ことである。そして第二に考慮すべき点は、その様なうめ込み型公式の打ち切り精度である。すなわち与えられた問題に対する数値解を得るためには、うめ込み型公式のうち高次法公式を用いるので、高次法公式の打ち切り精度をできるだけ上げる必要がある。但しその際計算能率の観点から低次法公式も評価の精度を損なわない範囲で高精度であることが好ましい。

一般的にＲｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の次数条件式はある自由度をもっているので、適当に自由パラメータを選んで解系を導き、望ましい特性が得られるように自由パラメータの値を定めて公式を作成するが、うめ込み型半陰的法についても同様である。すなわち公式の低次法及び高次法が所望の次数をもつ解系を求め共に優れた安定特性を保持させ、さらに高次法については打ち切り精度最良であるような公式を導出する。ここで打ち切り精度最良点の探索には田辺国士によるサブルーチンパッケージＮＯＬＬＳ１を使用した。

具体的な手順を示せば次のようになる。

(1)低次法、高次法の次数条件式群から、適当に自由パラメータを決めて解系を導く。

(2)両方法が代数的安定性をもつ場合の自由パラメータの条件を求め、その条件の範囲内において自由パラメータを等間隔に変動させ、そのとき得られるすべて格子点に対する打ち切り精度判定基準の値を求める。しかし代数的安定性をもつ場合の自由パラメーターの条件が求められない場合には、自由パラメータを適当な範囲で等間隔に変動させ、代数的安定性をもつときの自由パラメータ及びそのときの打ち切り精度判定基準の値を求める。また両方法に同時に代数的安定性を保持させることができない場合には、低次法の安定性をＡ安定性まで緩め、上記の方法によりそのときの自由パラメータ及び判定基準の値を求める。

(3)高次法の判定基準の値が小さい点の周辺で、最小二乗法、また

はメッシュ法により、低次法の判定基準が余り悪くならない範囲で高次法の判定基準の値が最小となる自由パラメータの値を求める。また両方法の打ち切り精度が共に優れている自由パラメータの値を求める。

(4) 以上のようにして得られた自由パラメータの値を用い、解系より公式の係数を決める。

上記の手順に従って、うめ込み型半陰的2段数法及び3段数法のそれぞれに対して、基本的に次の二つのタイプの公式を図などを利用して導出する。

(i) 高次法の判定基準の値が最良な場合

(ii) 両方法の判定基準の値が共に良好な場合

5.2 うめ込み型2段数半陰的法

うめ込み型2段数半陰的法の一般形は、

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_n + a_1 h,\ y_n^{\cdot} + b_{11} k_1) \\
k_2 &= hf(x_n + a_2 h,\ y_n^{\cdot} + b_{21} k_1 + b_{22} k_2) \\
y_{n+1} &= y_n^{\cdot} + c_1 k_1 \qquad (5.2) \\
y_{n+1}^{\cdot} &= y_n^{\cdot} + w_1 k_1 + w_2 k_2 \\
T_{n+1} &= y_{n+1} - y_{n+1}^{\cdot}
\end{aligned}
$$

低次法と高次法との差を2次まで許すものとしたとき、そのうめ込み法の組合せとうめ込みの可能性、安定性はTable.7の様になる。

ここでは、両方法の次数条件式を満足する解系中に含まれる自由パラメータ数が少ない、1次法と3次法から構成されるうめ込み法の公式の導出について説明する。

Table.7 2段数法のうめ込みの可能性と安定性

低次法	高次法	うめ込み	安定性
1段数1次	2段数2次	○	両方法が同時に代数的安定であることが可能
1段数1次	2段数3次	○	両方法が同時に代数的安定であることが可能
1段数2次	2段数3次	×	

５．２．１　１次法と３次法から構成されるうめ込み型公式

この２段数うめ込み法の解系の自由パラメータは、a_1のみであり、すべての特性値はa_1の値によって決定される。そこで更に計算効率が高い$b_{22}=a_1$とするsingly-diagonally半陰的法（$b_{11}=b_{22}=\ldots=b_{ss}$である半陰的法）の場合について考察する。

１次法と３次法が同時に代数的安定になるための条件は、

$$a_1>1/2 \qquad (5.3)$$

である。うめ込み型公式の既知公式として(5.3)の範囲で打ち切り精度判定基準A_{33}の値が最小となる公式が存在する。（この公式のa_1の値は、２段数３次半陰的法の既知公式"Norsett2"のものと同じであるが、文献には公式名が載っていないのでここでは"Norsett2"としておく。）

Fig.3は横軸にa_1、縦軸に打ち切り精度判定基準の逆数の常用対数をとり、a_1を[-1.0,1.0]の範囲で変動させたときの１次法の判定基準A_{13}と３次法の判定基準A_{33}の値の変化、うめ込み法が代数的安定になる領域、うめ込み法の既知公式"Norsett2"の(a_1.A_{33})を座標とする点を示したものである。

Fig.3を利用して公式の導出を次の方法で行う。

(1)判定基準A_{13}及びA_{33}の値が共にほぼ良好な場合、すなわち両曲線が交差するときのa_1の値を用いる。公式名を"Formula1"とする。

(2)判定基準A_{13}の値がほぼ最小になるような場合、すなわちa_1の値として、1/2に近い値を選ぶ。公式名を"Formula2"とする。

Table.8に各公式の係数マトリックスを示し、Table.9に各公式の特性値を示す。

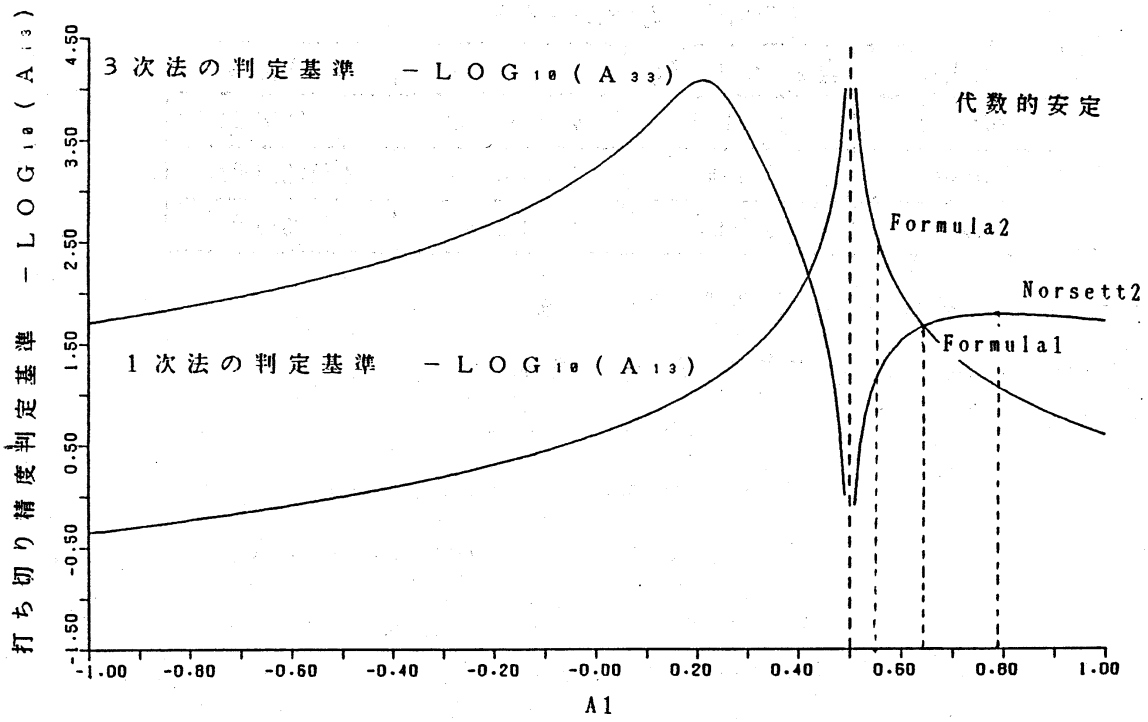


Fig.3　2段数うめ込み法の打ち切り精度の変化

Table.8　各公式の係数マトリックス

Norsett2

$(3+\sqrt{3})/6$	$(3+\sqrt{3})/6$	0
$(3-\sqrt{3})/6$	$-\sqrt{3}/3$	$(3+\sqrt{3})/3$
	1	0
	1/2	1/2

Formula1

13/20	13/20	0
-1/18	-127/180	13/20
	1	0
	100/127	27/127

Formula2

11/20	11/20	0
-7/6	-103/60	11/20
	1	0
	100/103	3/103

Table. 9　各公式の特性値

公式名	自由パラメータa_1	A_{13}	A_{33}
Norsett2	$(3+\sqrt{3})/3$	8.33333d-02	1.61206d-02
Formula1	0.6500	2.25000d-02	2.05029d-02
Formula2	0.5500	2.50000d-03	7.32863d-02

5.3　うめ込み型3段数半陰的法

うめ込み型3段数半陰的法の一般形は、

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_n + a_1 h,\ y_n^* + b_{11}k_1) \\
k_2 &= hf(x_n + a_2 h,\ y_n^* + b_{21}k_1 + b_{22}k_2) \\
k_3 &= hf(x_n + a_3 h,\ y_n^* + b_{31}k_1 + b_{32}k_2 + b_{33}k_3) \qquad (5.4) \\
y_{n+1} &= y_n^* + c_1 k_1\ (+ c_2 k_2) \\
y_{n+1}^* &= y_n^* + w_1 k_1 + w_2 k_2 + w_3 k_3 \\
T_{n+1} &= y_{n+1} - y_{n+1}^*
\end{aligned}
$$

低次法と高次法との差を2次まで許すものとしたとき、うめ込み法の組合せとその可能性及び安定性はTable. 10の様になる。

ここでは、両方法の次数条件式を満足する解系中に含まれる自由パラメータ数が少ない、2段数2次法と3段数4次法から構成されるうめ込み法の公式の導出について説明する。

Table. 10　3段数法のうめ込みの可能性と安定性

低次法	高次法	うめ込み	安定性
1段数1次	3段数3次	○	両方法が同時に代数的安定であることが可能
1段数2次	3段数3次	○	両方法が同時に代数的安定であることが可能
1段数2次	3段数4次	○	4次法がA安定または代数的安定であることは不可能
2段数2次	3段数3次	○	3次法が代数的安定であるとき、2次法はA安定であることが可能
2段数2次	3段数4次	○	4次法が代数的安定であるとき、2次法はA安定であることが可能
2段数3次	3段数4次	×	

5.3.1　2段数2次法と3段数4次法から構成されるうめ込み型公式

この3段数うめ込み法の自由パラメータはa_1, a_2であり、(4.3)より3段数4次法が代数的安定になるための自由パラメータの条件は、[-1.0, 1.5]の範囲では

$$a_1 \geqq 0.789 \quad a_2 = 0.5 \tag{5.5}$$

であり、このときのa_1, a_2で2段数2次法はA安定になる。

まず(5.6)の範囲で4次法の打ち切り精度判定基準A_{43}が最小の値をとるときのa_1, a_2の値を求め、これを用いて公式（公式名を"Formula1"とする）を導出し、また3段数4次半陰的法の既知公式中で代数的安定である"Cooper&Sayfy"と、singly-diagonally半陰的法の既知公式中で代数的安定である"Norsett1"のそれぞれを基にして、公式（公式名は前記既知公式名と同じ）を作成した。また次に述べる図を用い上記以外の特性をもつ公式の導出の可能性を探る。

Fig.4は横軸にa_1, 縦軸にa_2をとり、それぞれ[0.5, 1.5], [0.0, 1.0]の範囲で変動させたときの4次法の打ち切り精度判定基準A_{43}の等高線図、うめ込み法が代数的安定になるような領域、上記の公式の(a_1, a_2)を座標とする点を示している。（等高線の高さは、5.0, 1.0, 2.0E-1, 1.0E-1, 9.0E-2, 8.0E-2, 7.0E-2, 6.7E-2, 6.5E-2）

Fig.5は横軸にa_1, 縦軸にa_2をとり、それぞれ[0.5, 1.5], [0.0, 1.0]の範囲で変動させたときの2次法の打ち切り精度判定基準A_{23}の等高線図、うめ込み法が代数的安定になるような領域、上記の公式の(a_1, a_2)を座標とする点を示している。（等高線の高さは、3.0, 2.0, 1.0, 8.0E-1, 6.0E-1, 4.0E-1, 3.0E-1, 2.0E-1, 1.0E-2, 6.0E-2, 4.0E-2, 2.0E-2, 9.0E-3）

Fig.4, Fig.5より、A_{43}の値が余り悪くならない範囲でA_{33}がある程度良好な値をとるような公式（公式名を"Formula2"とする）を導出した。Table.11に各公式の係数マトリックスを示し、Table.12に

各公式の特性値を示す。

Table.11　各公式の係数マトリックス

Formula1

1.04770591	1.04770591	0.	0.
0.5	-0.61367157	1.11367157	0.
-0.04770591	2.09541182	-3.19082364	1.04770591
	0.	1.0	0.
	0.13889733	0.72220533	0.13889733

Formula2

133/100	133/100	0	0
1/2	-5400/18167	28967/36334	0
-33/100	133/50	-108/25	133/100
	0	1	0
	1250/20667	18167/20667	1250/20667

Cooper&Sayfy

1	1	0	0
1/2	-3/4	5/4	0
0	2	-3	1
	0	1	0
	1/6	2/3	1/6

Norsett1

r	r	0	0
1/2	(1-2r)/2	r	0
1-r	2r	1-4r	r
	0	1	0
	(2r(r-1))/(2r-1)	(6r-1)/(6r(2r-1))	(2r(r-1))/(2r-1)

ただし　$r = 1/2 + (\sqrt{3}\cos(\pi/18)/3)$である。

Table. 12 各公式の特性値

公式名	a_1	a_2	A_{23}	A_{43}
Formula1	1.0477	0.5000	6.56329d-02	6.57892d-02
Formula2	1.3300	0.5000	2.84284d-02	9.96854d-02
Cooper&Sayfy	1.0000	0.5000	8.68055d-02	6.77505d-02
Norsett1	1.0686	0.5000	5.93115d-02	6.60673d-02

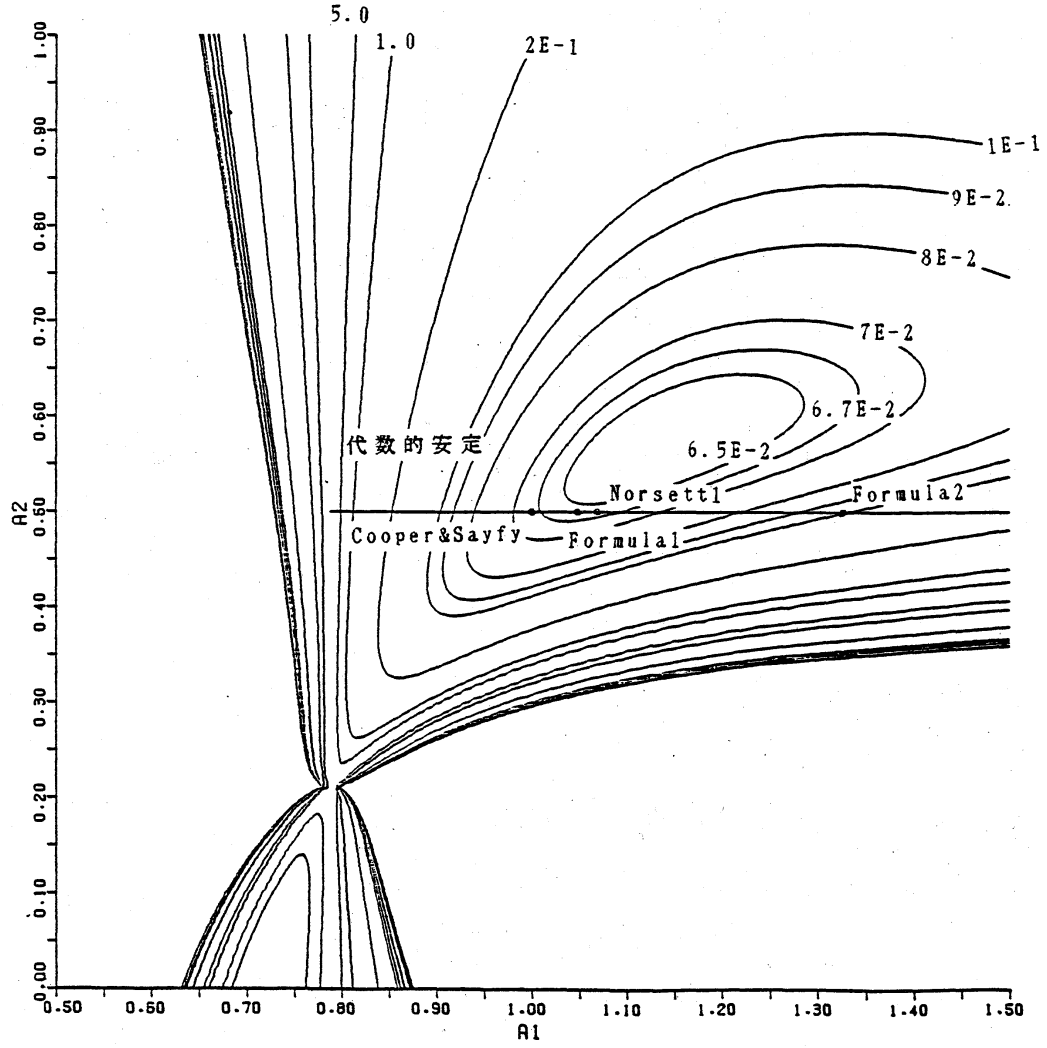
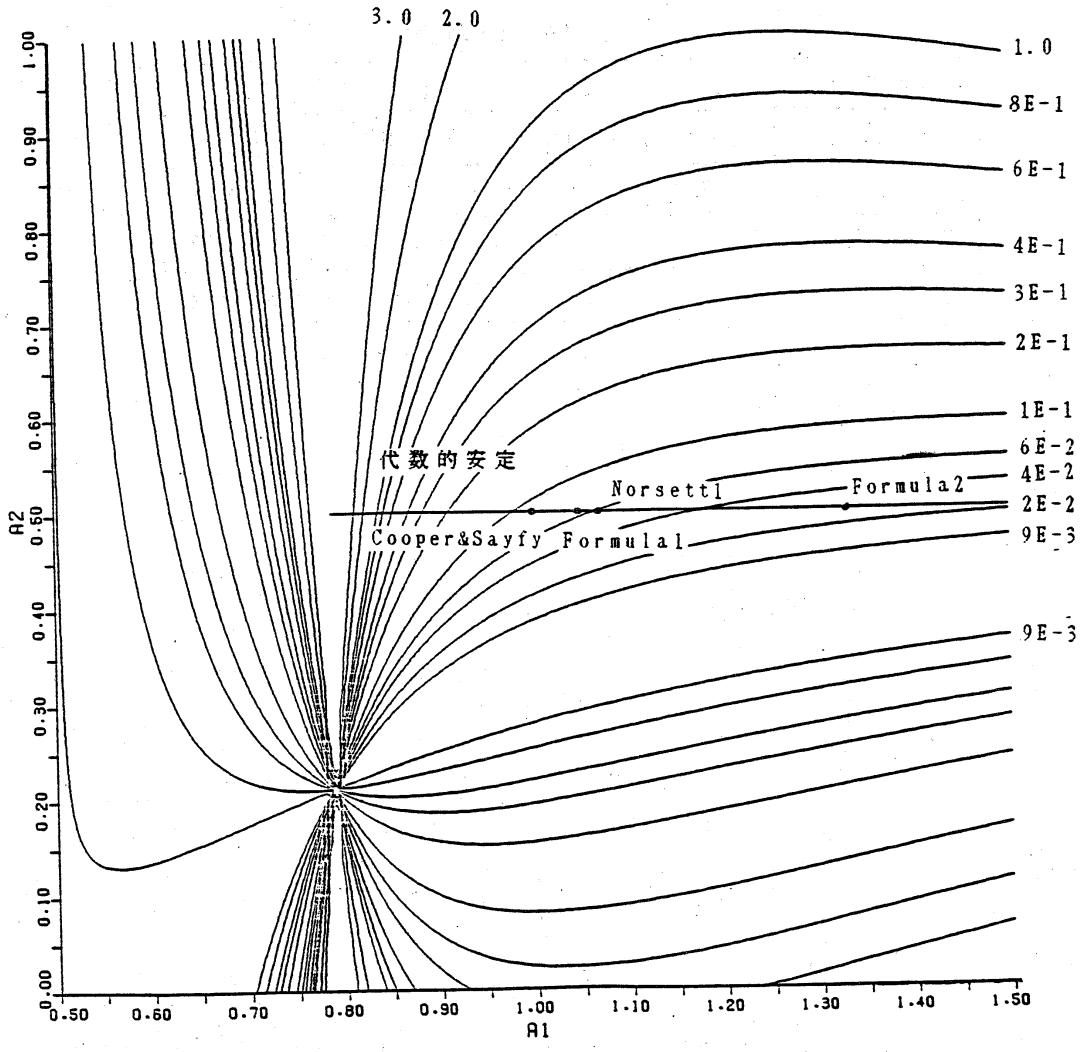


Fig. 4　3段数うめ込み法の安定性と打ち切り精度の関係図 I
（4次法の判定基準 A_{43} に関する等高線図）



Ｆｉｇ．５　　３段数うめ込み法の安定性と打ち切り精度の関係図Ⅱ
（２次法の判定基準A_{23}に関する等高線図）

６．　数値実験

前章までに導出したうめ込み型公式に対して、導出に誤りがないこと及び誤差推定が効果的におこなわれているかどうかを確認するために次の数値実験をおこなった。

$$y_1' = -\{200.8y_1 - 399.6y_2 + 4e^{0.2x}(2y_1+y_2)^2\}/5$$

$$y_2' = -\{-399.6y_1 + 800.2y_2 + 2e^{0.2x}(2y_1+y_2)^2\}/5$$

$$y_1(0)=2 \quad y_2(0)=1$$

刻み幅　H = 0.01　　積分区間 [0.0, 2.0]

Table.13に２段数うめ込み型公式による数値実験結果を示し、Table.14に同公式による数値解の第一ステップにおける誤差と低次法の数値解の推定誤差を示す。またTable.15に３段数うめ込み型公式による数値実験結果を示し、Table.16に同公式による数値解の第一ステップにおける誤差と低次法の数値解の推定誤差を示す。

Table.13　２段数うめ込み型公式による数値実験結果

公式名		第一ステップの誤差	最終ステップの誤差	最大誤差
NORSETT2	y_1	0.48996494029d-04	0.56659470332d-06	0.86314716271d-04
	y_2	0.24498247014d-04	0.28329735166d-06	0.43157358136d-04
FORMULA1	y_1	0.48420557230d-04	0.55582122875d-06	0.85066755261d-04
	y_2	0.24210278615d-04	0.27791061438d-06	0.42533377631d-04
FORMULA2	y_1	0.75334821948d-04	0.86306075351d-06	0.13237561846d-03
	y_2	0.37667410974d-04	0.43153037676d-06	0.66187809228d-04

Table.14 第一ステップにおける誤差推定（２段数うめ込み型公式の場合）

公式名		高次法の誤差	低次法の誤差	推定誤差
NORSETT2	y_1	0.4899649d-04	0.8408041d-02	0.8457037d-02
	y_2	0.2449825d-04	0.4204020d-02	0.4228519d-02
FORMULA1	y_1	0.4842056d-04	0.4310998d-02	0.4359418d-02
	y_2	0.2421028d-04	0.2155499d-02	0.2179709d-02
FORMULA2	y_1	0.7533482d-04	0.1208446d-02	0.1283781d-02
	y_2	0.3766741d-04	0.6042232d-03	0.6418906d-03

Table.15　３段数うめ込み型公式による数値実験結果

公式名		第一ステップの誤差	最終ステップの誤差	最大誤差
FORMULA1	y_1	0.13365001600d-04	0.11543137758d-06	0.22060181724d-04
	y_2	0.66825008000d-05	0.57715688788d-07	0.11030090862d-04
FORMULA2	y_1	0.13520464274d-04	0.11756535687d-06	0.22345026468d-04
	y_2	0.67602321371d-05	0.58782678437d-07	0.11172513234d-04
COOPER&SAYFY	y_1	0.13952451078d-04	0.12066371429d-06	0.23042814849d-04
	y_2	0.69762255389d-05	0.60331857145d-07	0.11521407424d-04
NORSETT1	y_1	0.13205349622d-04	0.11403753290d-06	0.21794407816d-04
	y_2	0.66026748110d-05	0.57018766451d-07	0.10897203908d-04

Table.16 第一ステップにおける誤差推定（３段数うめ込み型公式の場合）

公式名		高次法の誤差	低次法の誤差	推定誤差
FORMULA1	y_1	0.1336500d-04	0.1152213d-02	0.1165578d-02
	y_2	0.6682501d-05	0.5761063d-03	0.5827888d-03
FORMULA2	y_1	0.1352046d-04	0.7265380d-03	0.7400585d-03
	y_2	0.6760232d-05	0.3632690d-03	0.3700293d-03
COOPER&SAYFY	y_1	0.1395245d-04	0.1309476d-02	0.1323428d-02
	y_2	0.6976226d-05	0.6547379d-03	0.6617141d-03
NORSETT1	y_1	0.1320535d-04	0.1098188d-02	0.1111394d-02
	y_2	0.6602675d-05	0.5490941d-03	0.5556968d-03

７．　おわりに

「Ｓ段数２Ｓ－１次法」である２段数３次法と３段数５次法においては、Ａ安定性と代数的安定性は等価な概念であると推測される。従って両方法共に非常に強い安定特性をもつといえるだろう。

Ａ安定である公式で問題を解く場合、その問題が線形問題によってほぼ近似できるということを前提としているが、非線形性が強い問題では刻み幅がある程度大きくなると、線形問題による近似の精度が悪くなるということが考えられる。一方、代数的安定である公式で問題を解く場合には、Ａ安定である公式の場合のような線形問題への近似のための刻み幅の制限を考える必要はないであろう。しかし先に述べたように陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法では、１ステップごとにk_iを求めるために反復法を用いてその連立非線形方程式を解かねばならず、その反復が収束するためには刻み幅の選び方にある程度の制限がいることに注意しなければならない。

この研究で導出したうめ込み型公式は安定性を優先させたので、打ち切り精度に関して特に優れている公式は得られなかった。また自由パラメータが多い場合のうめ込み型公式の導出においては、打ち切り精度の観点からの最適化が行いにくいが、実際には自由パラメータの値をかなり変化させても、打ち切り精度判定基準の値はあまり変動しない。

数値実験の結果からどの方法も誤差推定に関してはかなり良い結果を示しているが、Stiff問題に関しては余り刻み幅を大きくとると通常の問題より誤差推定がわるくなることがある。

現在我々は今回導出した公式を用いて非線形Stiff問題に対して有効な実用的な数学ソフトウエアの開発を試みているが、今後はこの研究と同様な目的で作成されたと思われる積分パッケージであるK.Burrage, J.C.Butcher, F.H.ChipmanによるＳＴＲＩＤＥ(1979)やS.P.Norsett, P.G.ThomsenによるＳＩＭＰＬＥ(1984)等との比較実験

などを行いたいと思っている。

参考文献

1) Butcher, J.C.: Implicit Runge-Kutta processes, Math. Comp. 18 pp. 50-64 (1964)

2) Dekker, K. and Verner, J.G.: Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonliner differential equations, North-Holland (1984)

3) 三井斌友：数値解析入門，朝倉書店(1985)

4) Hall, J.O. and Watt, J.M.: Modern numerical methods for ordinary differential equations, Clarendon Press (1976)

5) 一松信：数値解析，朝倉書店 (1982)

6) 田中正次，山下忠志，高山尚文，三村和正，山下茂：Runge-Kutta法に関する２つの話題について，数値解析研究所講究録，No.585, pp.42-62(1986)

7) Butcher, J.C.: Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, John Wiley & Sons(1986)

8) Lambert, J.D.: Stiffness in Computational techniques for ordinary differential equations, I.Gladwell and D.K.Sayers(eds.), Academic Press, London(1978)

9) Bui, T.D.: Some A-stable and L-stable Methods for the Numerical Integration of Stiff Ordinary Differential Equations, Journal of ACM.26 pp. 483-493(1979)

10) Burrage, K.: A special family of Runge-Kutta methods for solving stiff differential equations, BIT 18 pp. 22-41 (1978)

11) Burrage, K.: Efficiently implementable algebraically stable Runge-Kutta methods, SIAM J.Numer.Anal.19 pp. 245-258(1982)