

Pseudo-Runge-Kutta 法 の 特 性 に つ い て

山梨大工 田中正次 (Masatugu Tanaka) 山下茂 (Shigeru Yamasita)

清田幸彦 (Yukihiko Kiyota) 岩寄美穂子 (Mihoko Iwasaki)

1. ま え が き 著者たちは、これまで低次法から高次法に及ぶ陰陽の Runge-Kutta 法の様々な解系について、まずそれに含まれる各自由パラメータが実用的に有意義な範囲で変動するとき、それについて打ち切り誤差特性や安定特性がどのように変動するかを調べグラフで表現した。ついで、その特性図の利用により既知公式や解系の評価が容易になり、また新公式導出の手がかりが得られることを示してきた。

この研究において、我々は Runge-Kutta 法に適用した前記の手法が、Pseudo-Runge-Kutta 法においてもまた極めて有効であることを、Costabile の方法^{5), 6), 7), 8)}を例にとりて示すだろう。
たとえば 5), 6), 7), 8), 9), 10), 11)

2. Pseudo-Runge-Kutta 法 Pseudo-Runge-Kutta 法は、一般階法である Runge-Kutta 法を多段階法に拡張することにより、ステップ当りの関数計算の減少をねらったもので、陰陽の様々な類型が考えられ研究されている。今回は特に Costabile, F. による 2, 3

段数法を対象に考察を進める。

3. Costabile の方法とその評価の観点 Costabile の研究した公式にはいろいろなタイプのものがあるが、ここでは次の一般式で表される公式の $r=2$ 及び $r=3$ の各場合について考察する。

$$\begin{cases} k_0 = f(x_{n-1}, y_{n-1}) & k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_i = f(x_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=0}^{i-1} b_{ij} k_j) & (i=2, 3, \dots, r) \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^r w_i k_i & (n=0, 1, 2, \dots) \end{cases} \quad (3.1)$$

(3.1) が p 次法であると仮定すると、その打ち切り誤差 T は次のように表される。

$$T = \gamma_p h^{p+1} + O(h^{p+2}) \quad (3.2)$$

ここで γ_p は主誤差関数とよばれるもので、一般に

$$\gamma_p = \sum_{j=1}^{m_p} a_{pj} g_j(x_n, y_n) \quad (3.3)$$

の形で表すことができる。ただし a_{pj} 及び $g_j(x, y)$ は、それぞれ公式の係数力かの関数及び微分方程式の右辺の関数系に依存して定まる関数系である。また m_p は次数によって定まる自然数である。

(3.1) の打ち切り誤差の大小は、打ち切り精度判定基準とよばれる次の数量 A_{p2} または A_{p3} を用いて判定する。

$$A_{p2} = \sum_{j=1}^{m_p} |a_{pj}| \quad (3.4)$$

$$A_{p3} = \sum_{j=1}^{m_p} a_{pj}^2 \quad (3.5)$$

この論文において (3.1) の特性をグラフで表現する際には、特に

判定基準 Ap_2 を使用する。

テスト方程式 $y' = \lambda y$ (λ は複素定数) (3.6) に (3.1) を適用し整理すると、漸化式

$$y_{n+1} = R_1(h\lambda)y_n + R_2(h\lambda)y_{n-1} \quad (3.7)$$

が得られる。ここで $R_1(h\lambda)$ 及び $R_2(h\lambda)$ は、後述するように $h\lambda$ の多項式で安定多項式とよばれるものである。 T_{n+1} を (3.1) の局所打ち切り誤差, $e_n = y(x_n) - y_n$ (3.8) とかくと, (3.7) から

$$e_{n+1} = R_1(h\lambda)e_n + R_2(h\lambda)e_{n-1} + T_{n+1} \quad (3.9)$$

いま任意の n に対して $|T_{n+1}| \leq E$ を満足するように実数 E を選べ, (3.9) から差分方程式

$$e_{n+1} - R_1(h\lambda)e_n - R_2(h\lambda)e_{n-1} = E \quad (3.10)$$

を作る。そのとき (3.10) の解 e_n が, n が増えても増大しないような複素平面上の $h\lambda$ の領域 S を, (3.1) の絶対安定領域という。特に原点を含む単連結な S の閉部分領域 S_e を, (3.1) の有効絶対安定領域と呼ぶ。そのとき S_e と実軸との交り $S_I (= S_e \cap \mathbb{R} = [-\alpha, 0.0])$, $\mathbb{R}$ は実数全体の集合) は絶対安定区間と呼ばれる。ここでは (3.1) の安定性の優劣が, 有効絶対安定領域の面積 $A(S_e)$ や, 絶対安定区間の長さ α によって評価される。

4. Costabile の方法 (I) とその特性

4.1 Costabile の方法 (I) (Costabile (I))

$r=2$ の場合の Costabile の方法

$$k_0 = f(x_{n-1}, y_{n-1}), \quad k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + a_2 h, y_n + h(b_{20} k_0 + b_{21} k_1)) \quad (4.1)$$

$$y_{n+1} = y_n + w_0 k_0 + w_1 k_1 + w_2 k_2$$

を Costabile の方法 (I) とよび, Costabile (I) で表すことにする。

4.2 Costabile (I) の解系とその打ち切り誤差

(4.1) を 3 次法にするための次数条件式群の解の一つは, た

とえば,

$$\begin{aligned} w_0 &= -\frac{10a_2 - 7}{72} & w_1 &= \frac{9a_2 - 5}{6a_2} & w_2 &= \frac{5}{6a_2(a_2 + 1)} \\ b_{20} &= -\frac{a_2^2}{2} & b_{21} &= \frac{a_2(a_2 + 1)}{2} \end{aligned} \quad (4.2)$$

によって与えられる。

この解系 (4.2) に対して (4.1) の打ち切り誤差 T_{n+1} は,

$$T_{n+1} = \gamma_3 h^4 + O(h^5) \quad (4.3)$$

と表すことができる。ここで主誤差関数 γ_3 は,

$$\gamma_3 = -\frac{10a_2 - 7}{72} (D^3 f + 3Df Df_y) + \frac{12a_2 + 7}{72} (D^2 f f_y + Df f_y^2) \quad (4.4)$$

である。自由パラメータ a_2 が変動するにつれて (4.1) の打ち切

誤差 γ_3 がどのように変動するかの判定には, (3.4) 及び (3.5) の定義

に従う次の判定基準を用いる。

$$A_{32} = \frac{4|-10a_2 + 7|}{72} + \frac{2|12a_2 + 7|}{72} \quad (4.5)$$

$$A_{33} = 10 \left(\frac{-10a_2 + 7}{72} \right)^2 + 2 \left\{ \frac{12a_2 + 7}{72(a_2 + 1)} \right\}^2 \quad (4.6)$$

4.3 Costabile (I) の解系の安定性

Costabile (I) の安定性は, 安定多項式 $R_1(h\lambda)$ 及び $R_2(h\lambda)$ が,

$$R_1(h\lambda) = 1 + (w_1 + w_2)h\lambda + w_2 b_{21} h^2 \lambda^2 \quad (4.7)$$

$$R_2(h\lambda) = w_3 h\lambda + w_2 b_{20} h^2 \lambda^2 \quad (4.8)$$

のように与えられたときの集積誤差 e_n の差分方程式 (3.10) の考察から知られる。

4.4 Costabile (I) の特性図

Fig. 1 は、解系 (4.2) における自由パラメータ a_2 を横軸にとり、打ち切り精度判定基準 A_{32} 、有効絶対安定領域の面積 $A(se)$ 及び絶対安定区間の長さ α を縦軸にとり、自由パラメータ a_2 が -1.0 から 4.0 まで変動するにつれて、打ち切り精度や安定性がどのように変動するかを図示したものである。図中の $a_2 = 0.7$ 及び $a_2 = 1.0$ に対応する η 軸に平行な点線上で、Costabile 及び著者たちによる公式の特性値の概数を読み取ることもできる。

4.5 特性図の利用と考察 Fig. 1 の観察により、 $a_2 = 0.7$ に対応する Costabile の公式が最良の打ち切り精度をもち、また安定性の面でもかなりすぐれていることがわかる。また同図から絶対安定区間最長の公式は、有効絶対安定領域の面積もほぼ最大で、しかも打ち切り精度もかなりよいことが知られたので、我々は $a_2 = 1.0$ に対応する公式を導いた。この図はさらに次のようなことを我々に示唆している。

(i) 0.7 未満の a_2 に対応する公式は、打ち切り精度・安定性

両者とも $a_2 = 0.7$ に対応する Costabile の公式にある。したがって自由パラメータ a_2 を $a_2 < 0.7$ のように選んで公式を作ることのメリットは薄いと考えられる。

(ii) $0.7 \leq a_2 \leq 1.0$ または $0.7 \leq a_2 \leq (A(se) \text{ 最大を与える } a_2 \text{ の値})$ を満足する a_2 を自由パラメータに選ぶとき、打ち切り精度と安定性の両者が共に優れている公式が得られる。打ち切り精度を特に重視するときには a_2 として上の変域の最小値を、安定性に対する要求がより切実であるときには a_2 として同変域の最大値を選ぶべき。

(iii) $a_2 > (A(se) \text{ 最大を与える } a_2 \text{ の値})$ を満足する a_2 を自由パラメータの値に選ぶとき、安定性はほぼ最良であるが打ち切り

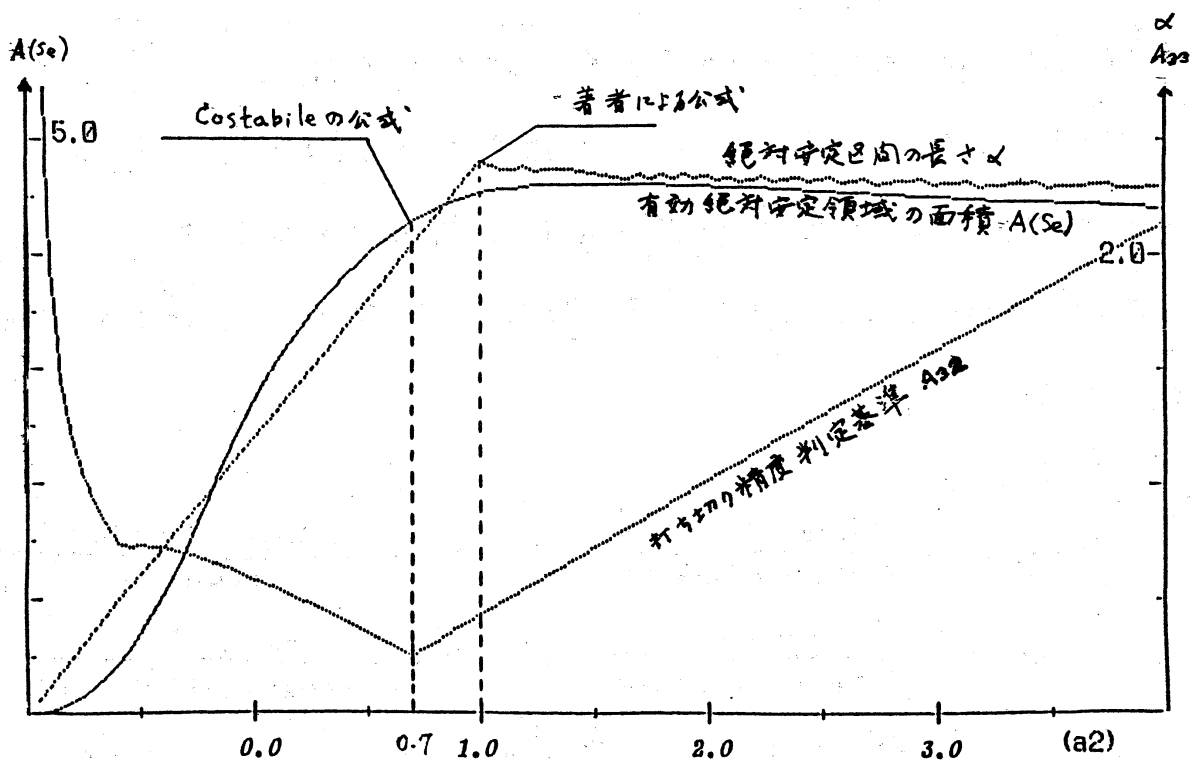


Fig.1 Costabile の方法 ($r=2$ の場合) の特性図

精度が不良になるので，このような選択は好ましいものとはいえないだろう。

5. Costabile の方法 (II) とその特性

5.1 Costabile の方法 (II) (Costabile (II))

$r=3$ の場合の Costabile の方法

$$k_0 = f(x_{n-1}, y_{n-1}) \quad k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + a_2 h, y_n + h(b_{20} k_0 + b_{21} k_1)) \quad (5.1)$$

$$k_3 = f(x_n + a_3 h, y_n + h(b_{30} k_0 + b_{31} k_1 + b_{32} k_2))$$

$$y_{n+1} = y_n + h(w_0 k_0 + w_1 k_1 + w_2 k_2 + w_3 k_3)$$

を Costabile の方法 (II) とよび，Costabile (II) で表すことにする。

5.2 Costabile (II) の解系とその打ち切り誤差

(5.1) を 4 次法にするための 次数条件式群の解として 次の 4 解系を考える。解系 2 ~ 解系 4 は，解系 1 の分母を () にしない条件 $a_2 \neq a_3$ ， $a_2, a_3 \neq 0$ ， $a_2, a_3 \neq -1$ を考慮して得られたものである。

[解系 1]

$$\begin{aligned} w_0 &= \frac{-6a_2a_3 + 4(a_2 + a_3) - 3}{12(a_2 + 1)(a_3 + 1)} & w_1 &= \frac{18a_2a_3 - 10(a_2 + a_3) + 7}{12a_2a_3} \\ w_2 &= \frac{10a_3 - 7}{12a_2(a_2 + 1)(a_3 - a_2)} & w_3 &= \frac{-10a_2 + 7}{12a_3(a_3 + 1)(a_3 - a_2)} \\ b_{20} &= -\frac{a_2^2}{2} & b_{21} &= \frac{a_2(a_2 + 2)}{2} \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$b_{30} = \frac{w_2 a_2^2 (2a_2 + 3)}{6 w_3 (1 + a_2)} + \frac{a_3^2 (2a_3 - 3a_2)}{6 (1 + a_2)}$$

$$b_{32} = \frac{a_3^2}{2a_2} + \frac{b_{30}}{a_2} \quad b_{31} = a_3 - b_{30} - b_{32}$$

[解系 2]

$$a_2 = a_3 = \frac{7}{10} \quad w_0 = -\frac{1}{102} \quad w_1 = \frac{221}{714}$$

$$w_2 = \frac{250}{357} - w_3 \quad b_{20} = -\frac{49}{200} \quad b_{21} = \frac{189}{200}$$

$$b_{30} = \frac{-7(18207w_3 - 11000)}{520200w_3} \quad (5.3)$$

$$b_{32} = \frac{550}{2601w_3}$$

$$b_{31} = a_3 - b_{30} - b_{32} \quad (w_3 \neq 0)$$

[解系 3]

$$a_2 = -1 \quad a_3 = \frac{7}{10} \quad w_0 = \frac{3}{2} \quad w_1 = \frac{221}{714}$$

$$w_2 = -\frac{77}{51} \quad w_3 = \frac{250}{357} \quad (5.4)$$

$$b_{20} = b_{21} = -\frac{1}{2} \quad b_{31} = \frac{189}{200} \quad b_{32} = -\frac{49}{200} - b_{30}$$

[解系 4]

$$a_2 = \frac{7}{10} \quad a_3 = -1 \quad w_1 = \frac{221}{714} \quad w_2 = \frac{250}{357}$$

$$w_0 = -\frac{1}{102} - w_3 \quad b_{20} = -\frac{49}{200} \quad (5.5)$$

$$b_{21} = \frac{189}{200} \quad b_{30} = \frac{770 - 2091w_3}{5202w_3}$$

$$b_{32} = \frac{5}{7} \left(\frac{510w_3 + 770}{2601w_3} \right)$$

$$b_{31} = a_3 - b_{30} - b_{32} \quad (w_3 \neq 0)$$

[解系 1] ~ [解系 4] の打ち切り誤差の主誤差関数 $\gamma_4^1 \sim \gamma_4^4$ は,

以下のよう表される。

$$\begin{aligned}
x_4' = & \left\{ \frac{5a_3^2(10a_2-7) + a_3(15a_2-8) - 35a_2 + 27}{4320(a_3+1)} \right\} (3D^2f + 18DfD^2fy \\
& + 9(Df)^2fy) \left\{ \frac{2a_3(93a_2^2 + 126a_2 + 58) + 186a_2^2 + 302a_2 + 81}{4320(a_3+1)(a_2+1)^2} \right\} \cdot \\
& (D^2ff_y^2 + Dff_y^3) \\
- & 6 \left\{ \frac{10a_3^2(12a_2+7) + a_3(31a_2+16) - 89a_2 - 54}{4320(a_3+1)(a_2+1)} \right\} D^2fDfy \\
- & \left\{ \frac{2a_3(120a_2^2 + 37a_2 - 58) + 140a_2^2 + 94a_2 - 81}{4320(a_3+1)(a_2+1)} \right\} D^3ff_y \\
- & 3 \left\{ \frac{20a_3^2(12a_2+7) + 4a_3(60a_2^2 + 34a_2 - 21) + 140a_2^2 - 84a_2 - 189}{4320(a_3+1)(a_2+1)} \right\} \cdot \\
& f_y DfDfy \quad (5.6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_4^2 = & \frac{1}{576} D^4f + \frac{1}{96} DfD^2fy + \frac{1}{144} D^2fDfy + \frac{1}{192} (Df)^2fy \\
& - \frac{89}{12240} D^3ff_y - \frac{91}{6120} f_y DfDfy + \frac{19177}{624240} (D^2ff_y^2 + Dff_y^3) \quad (5.7)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_4^3 = & \frac{1}{576} D^4f + \frac{1}{96} DfD^2fy + \frac{1}{192} (Df)^2fy + \frac{53}{240} D^2fDfy \\
& + \frac{31}{720} D^3ff_y + \frac{7}{20} f_y DfDfy - \frac{625630 - 308}{10710} (D^2ff_y^2 + Dff_y^3) \quad (5.8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_4^4 = & \frac{1}{576} D^4f + \frac{1}{96} DfD^2fy + \frac{53}{240} D^2fDfy + \frac{1}{192} (Df)^2fy \\
& - \frac{5100w_3 - 19177}{624240} (D^2ff_y^2 + Dff_y^3) - \frac{408w_3 + 89}{12240} D^3ff_y \\
& - \frac{102w_3 - 203}{1020} f_y DfDfy \quad (5.9)
\end{aligned}$$

各解系の打ち切り誤差の大小は, (3.4) 及び (3.5) で定義した A_{42} 及び $w A_{43}$ を用いて判定する。

5.3 Costabile (II) の解系の安定性

Costabile (II) の各解系の安定性は, 安定多項式 $R_1(h\lambda)$ 及び $w R_2(h\lambda)$

$$\begin{aligned}
R_1(h\lambda) = & 1 + (w_1 + w_2 + w_3) h\lambda + (w_2b_{21} + w_3b_{31} + w_3b_{32}) h^2\lambda^2 \\
& + w_3b_{21}b_{32} h^3\lambda^3 \quad (5.10)
\end{aligned}$$

$$R_2(h\lambda) = w_0 h\lambda + (w_2 b_{20} + w_3 b_{30}) h^2 \lambda^2 + w_3 b_{20} b_{32} h^3 \lambda^3 \quad (5.11)$$

のように与えられたときの，累積誤差 e_n の差分方程式 (3-10) の考察から知られる。

5.4 Costabile (II) の特性図

Fig. 2 は，[解系1] の自由パラメータ a_2 及び a_3 を両軸にとり，両者が共に 0.0 から 1.0 まで変動したときの A_{q2} と $A(se)$ の等高線図である。また，同図中の Costabile 1 ~ Costabile 4 及び FS1-2, FS1-3 は，それぞれ Costabile 及び著者たちによって得られた公式の， a_2 及び a_3 を両座標とする点を記入したものである。

Fig. 3 は，[解系3] の自由パラメータ b_{30} を横軸にとり， A_{q2} ， $A(se)$ 及び α を縦軸にとり， b_{30} が 0.0 ~ 2.0 まで変動したときの上記諸量の変動の様態を明示したものである。図中の FS1-5, FS1-6 及び FS1-7 は，著者たちによって得られた公式である。

Fig. 4 は，[解系4] の自由パラメータ w_3 を横軸にとり， A_{q2} ， $A(se)$ 及び α を縦軸にとり， w_3 が -2.0 から 3.0 まで変動するにつれて，前記諸量がどのように変動するかを明示したものである。図中の FS1-8 及び FS1-9 は，著者たちによって得られた公式である。

[解系2] の場合， A_{q2} 及び $A(se)$ は自由パラメータ w_3 の値に関係ない
(※ 13頁へ続く)

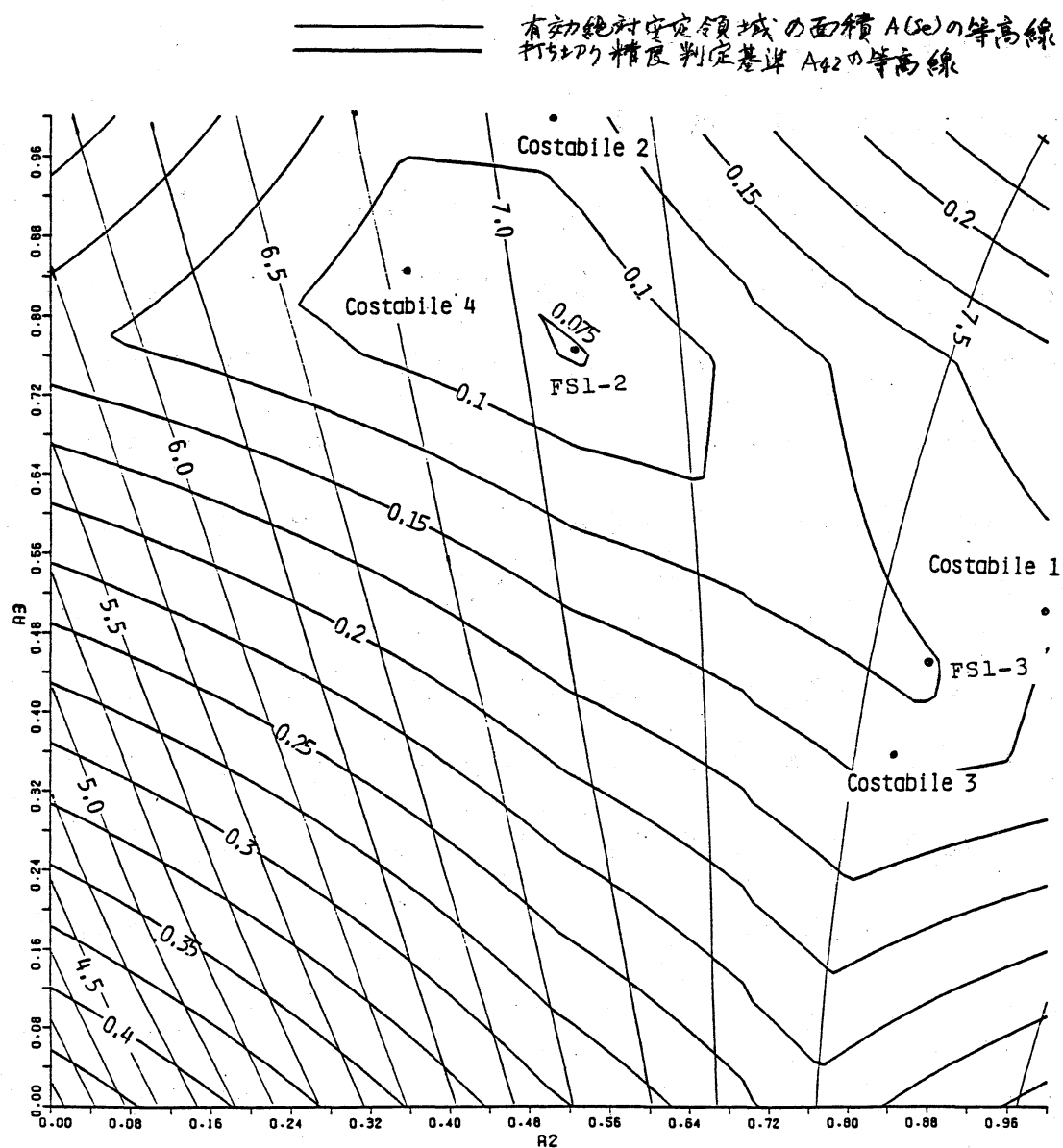


Fig. 2 Costabile (II) の [解至 1] の特性

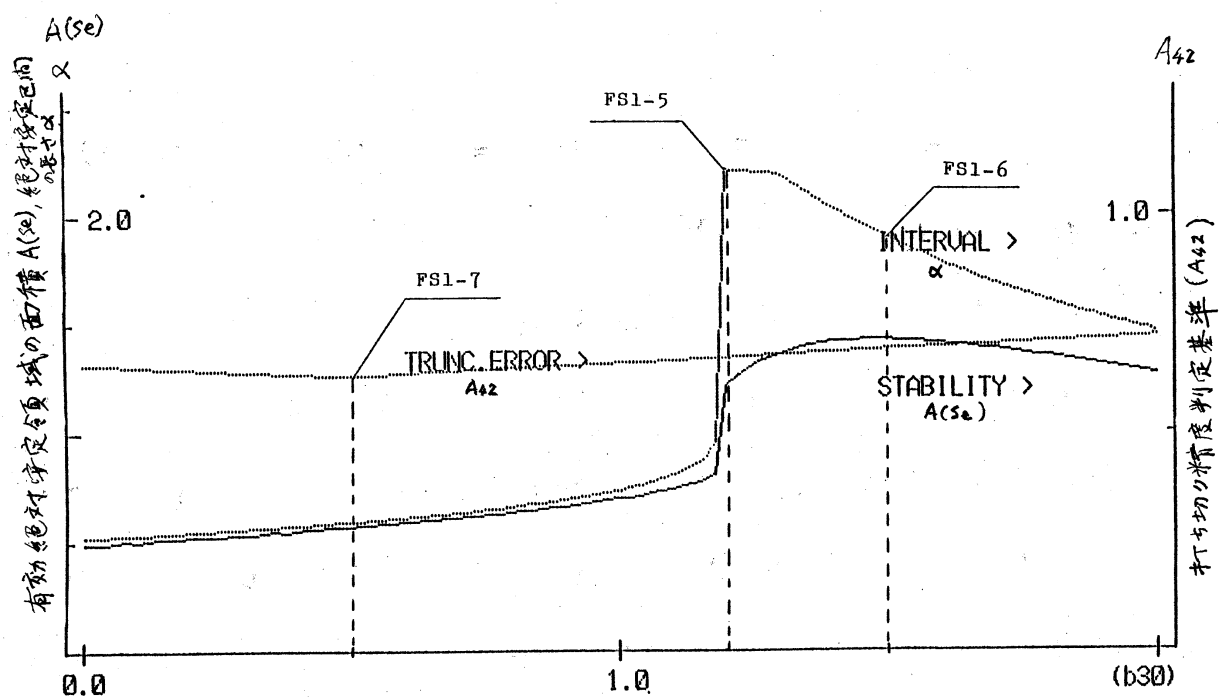


Fig. 3 Costabile (II) の[解系3]の特性

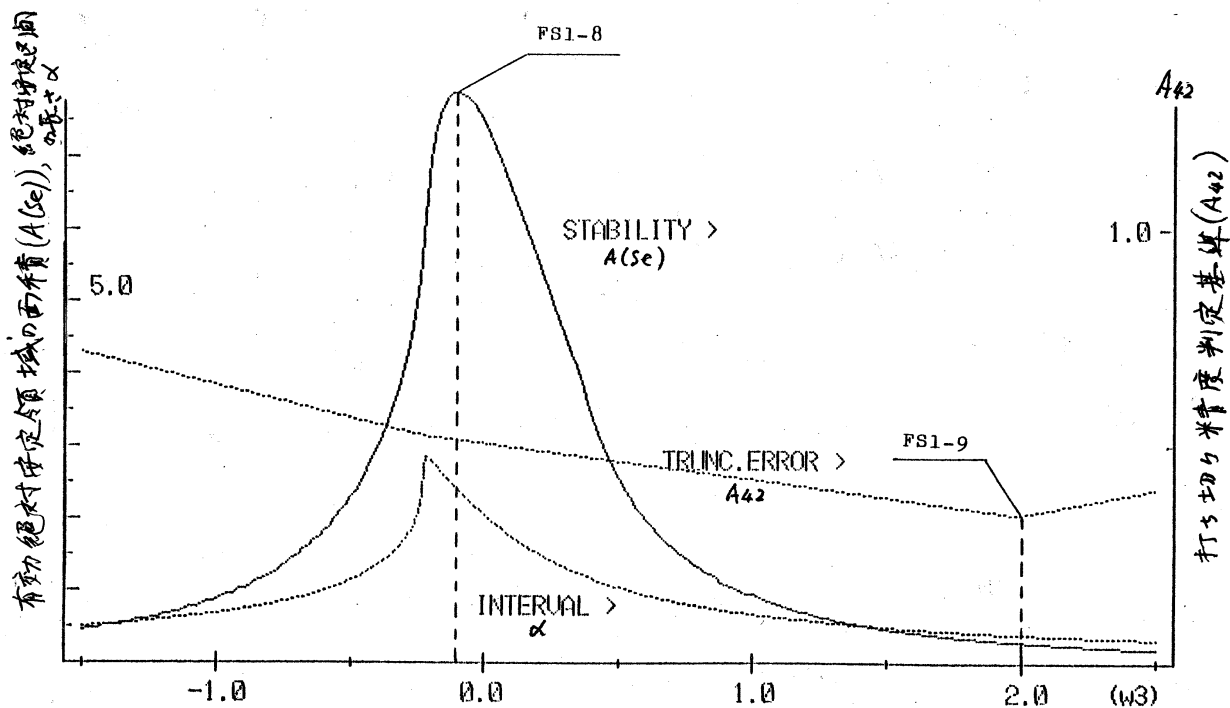


Fig. 4 Costabile (II) の[解系4]の特性

く一定で、次のようになる。

$$A_{42} = 0.107887 \quad A(se) = 7.453524 \quad (5.12)$$

5.5 特性図の利用と考察

Fig. 2 の観察から次のような知見が得られる。

(1) Costabile による Costabile (II) の既知公式の自由パラメータは、安定性と打ち切り精度の両特性がすぐれている領域で選ばれている。特に Costabile 1 は、このタイプの既知公式中安定性が最良である。Costabile 3 も安定性に長所をもつ公式である。Costabile 4 は、Costabile による 4 公式中安定性は最も劣っているが、打ち切り精度は最良である。Costabile 2 は、安定性も打ち切り精度もかなりよい公式である。

(2) FS1-2 及び FS1-3 は、著者たちによって得られた公式で、それぞれ Costabile 2 及び Costabile 3 の安定特性をほとんど変えずに打ち切り精度を改良したものである。

(3) Fig. 2 の観察から、好ましい特性をもつ公式は、打ち切り精度判定基 A_{42} の等高線 $A_{42} = 0.175$ の内側で、かつ有効絶対安定領域 $A(se)$ の等高線 $A(se) = 6.75$ の右側の領域に於いて得られることがわかる。

Fig. 3 の観察から次のような知見が得られる。

(1) b_{30} の大域的領域において打ち切り誤差の変動幅は小さい。我々は打ち切り精度最良の公式 FS1-7 ($b_{30} = 0.5$ に対応する

公式)を導いたが, この公式の安定性は余々良くないことがわかる。

(2) 著者たちが導いた^(公式)FS1-5 ($b_{30} = 1.2$ に対応する公式)及びFS1-6 ($b_{30} = 1.5$ に対応する公式)は, それぞれ最大の α 及び最大の $A(se)$ をもつ公式である。しかし, 打ち切り精度は両者ともFS1-7に比べてやや劣る。

(3) $b_{30} < 0.5$ に対応する公式は, 打ち切り精度・安定性両者とも不良である。また $b_{30} > 1.5$ に対応する公式は, 打ち切り精度が不良である。したがって公式は $b_{30} \in [0.5, 1.5]$ であるように選ぶべきである。

Fig. 4の観察から次のような知見が得られる。

(1) 自由パラメータ w_3 が, $w_3 \in [-0.3, 0.1]$ のとき対応する公式の安定性は非常によい。特に, $w_3 = -0.1$ で $A(se)$ が最大になるので, 我々はこれに対応する公式FS1-8を導いた。しかし, この公式の打ち切り精度は余々よくない。

(2) $w_3 = 2.0$ で A_{42} が最小になるので, 我々はこれに対応する公式FS1-9を導いた。しかし, この公式の安定性は不良である。

(3) $w_3 < -0.3$ に対応する公式は, 打ち切り精度・安定性両者共不良である。 $w_3 > 2.0$ に対応する公式は安定性が著しく劣っている。したがって, 公式は $w_3 \in [-0.3, 2.0]$ であるように選ぶべきである。

Fig.1 ~ Fig.4 の安定性に関するグラフの正当性を確認したり、導かれた公式の特性を一層詳細に調査し、特性図から引き出された結論をより確かで信頼のおけるものにするために、関心の強い点及び特性図の変化が正確であるかどうか疑わしい点で絶対安定領域のグラフを描き点検した。また、多くの数値実験結果が特性図と符合していたことを指摘しておく。

6. あとがき ここに提案したような手法を、いろいろなタイプの Pseudo-Runge-Kutta 法に適用して Pseudo-Runge-Kutta 法全体を見わたす作業が、現在スローに本へはあがっているが我々の手によって進められている。文献を提供して下さった中島先生、有益な助言をいただいた一松先生（^{いかり}）の他の皆さんに感謝申し上げます。

文 献

1. Tanaka, M., Arakawa, T. and Yamasita, S., On the Characteristics of Runge-Kutta Methods, Information Processing in Japan, Vol. 17, 1977
2. 田中, 山下, 田名後, 若林, 5 段数及び 6 段数陽的 Runge-Kutta 法の特性について, Vol. 27, No.1, 1986
3. 田中, 山下 (忠志), 高山, 山下, Runge-Kutta 法に関する二つの話題について, 数理解析研究所講究録 585, 並列数値計算アルゴリズムと周辺, 1986
4. 山下 (忠), 田中, 山下, 陰的 Runge-Kutta 法の打ち切り精度と安定性の関係 (3 段数公式の場合), 情報処理学会第 32 回全国大会 (昭和 61 年)
5. Costabile, F., Metodi pseudo Runge-Kutta di seconda specie, calcolo, 7, 1970
6. Costabile, F., Un metodo del terzo ordine per l'integrazione

numerica dell'equazione differenziale ordinaria, Calcolo Val. ?

7. Costabile, F., Sulla stabilità dei metodi Pseudo Runge-Kutta,
Calcolo, 1972

8. Costabile, F., Metodi pseudo Runge-Kutta optimali, Calcolo, 7,
1972

9. Byrne, G. D. and Lambert, R. J., Pseudo-Runge-Kutta methods
involving two points, J. ACM, Val. 13, No. 1, 1966

10. Nakashima, M., On Pseudo-Runge-Kutta methods with 2 and 3
stages, Publ. RIMS, Kyoto Univ., 18, 1982

11. 田中五水, Pseudo-Runge-Kutta 法とその 2nd および 3rd order
Runge-Kutta 法の打ち切り誤差評価への応用について, 情報処理,
Val. 10, No. 6, 1969