

Runge-Kutta 法に関する = 三 の 話 題

I 4 段数 7 次陰的 Runge-Kutta 法について

山梨大工 田中正次 (Masatsugu Tanaka)

山下 茂 (Shigeru Yamashita)

福井康人 (Yasuhito Fukui)

渡辺 博 (Hiroshi Watanabe)

1. まえがき

著者たちは、これまで 2 段数及び 3 段数陰的 Runge-Kutta 法の打ち切り誤差特性及び安定特性について研究し、可能で有効なすべての公式の特性が一見して直観的に把握できるグラフを作成し、その図を利用して既知公式の評価と改良・新公式の導出を試みた^{1), 2)}。この研究はこれらの姉妹編で、同様の目的と意図に基づいておされたものである。

2. 4 段数陰的 Runge-Kutta 法

初期値問題

$$y' = f(x, y) \quad y(x_0) = y_0 \quad (2.1)$$

において、 $f(x, y)$ は十分滑らかで必要な限りの導関数及び偏

導関数をもつものとする。

$x = x_n$ における数値解 y_n が与えられているとき, $x = x_{n+1}$ における数値解 y_{n+1} を, 次に示す (2.2) 及び (2.3) 式によって求める方法を, 4 段数陰的 ^{注1)} Runge-Kutta 法 という。

$$y_{n+1} = y_n + w_1 k_1 + w_2 k_2 + w_3 k_3 + w_4 k_4 \quad (2.2)$$

ここで

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n + a_1 h, y_n + b_{11} k_1 + b_{12} k_2 + b_{13} k_3 + b_{14} k_4) \\ k_2 &= hf(x_n + a_2 h, y_n + b_{21} k_1 + b_{22} k_2 + b_{23} k_3 + b_{24} k_4) \quad (2.3) \\ k_3 &= hf(x_n + a_3 h, y_n + b_{31} k_1 + b_{32} k_2 + b_{33} k_3 + b_{34} k_4) \\ k_4 &= hf(x_n + a_4 h, y_n + b_{41} k_1 + b_{42} k_2 + b_{43} k_3 + b_{44} k_4) \end{aligned}$$

である。

注1) 段数とはその公式の1回の実行における関数評価回数である。

一般に, S 段数陰的 Runge-Kutta 法の達成可能次数は $2S$ 次であることが知られている。しかしここでは, 解系の自由心ろくの一の選り方により特性が多様な変化を示す, 4 段数 7 次陰的 Runge-Kutta 法について考察する。

3. 次数条件式とその解

4 段数 7 次陰的 Runge-Kutta 法の次数条件式は, 24 個のバロメータに關する 89 個の方程式系になるが, Butcher の条件を用いてその中に含まれる多数の一次従属な方程式を降くと, 最

最終的には次に示す24個のパラメータに関する22個の方程式系に帰着される。

$$B(7) : \sum_{i=1}^4 w_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^4 w_i a_i = 1/2$$

$$\sum_{i=1}^4 w_i a_i^2 = 1/3$$

$$\sum_{i=1}^4 w_i a_i^3 = 1/4$$

$$\sum_{i=1}^4 w_i a_i^4 = 1/5$$

$$\sum_{i=1}^4 w_i a_i^5 = 1/6$$

$$\sum_{i=1}^4 w_i a_i^6 = 1/7$$

(3.1)

$$C(3) : \sum_{j=1}^4 b_{ij} = a_i \quad (i=1, 2, 3, 4)$$

$$\sum_{j=1}^4 b_{ij} a_j = a_i^2/2 \quad (i=1, 2, 3, 4)$$

$$\sum_{j=1}^4 b_{ij} a_j^2 = a_i^3/3 \quad (i=1, 2, 3, 4)$$

$$D(3) : \sum_{i=1}^4 w_i b_{ij} = w_j (1-a_j) \quad * \quad (j=1, 2, 3, 4)$$

$$\sum_{i=1}^4 w_i a_i b_{ij} = w_j (1-a_j^2)/2 \quad * \quad (j=1, 2, 3, 4)$$

$$\sum_{i=1}^4 w_i a_i^2 b_{ij} = w_j (1-a_j^3)/3 \quad * \quad (j=1, 2, 3, 4)$$

(ただし*の式において一次独立な式はそれぞれ1つしかない)

上の代数方程式(3.1)を a_4, b_{44} を自由パラメータとして解く

と、以下に示す解系(3.2)が得られる。

$$(700a_4^3 - 1050a_4^2 + 420a_4 - 35)a_3^3 + (-1050a_4^3 + 1620a_4^2 - 675a_4 + 60)a_3^2 + (420a_4^3 - 675a_4^2 + 300a_4 - 30)a_3 + (-35a_4^3 + 60a_4^2 - 30a_4 + 4) = 0$$

(a_3 を a_4 で表わすには、上の3次方程式を解く)

$$a_2 = \frac{\sqrt{5(28((40a_4^2-24a_4-3)a_3-20(3a_4-2)a_3^2a_4-3a_4+2)(105a_3^2a_4-70a_4^2+120a_4-48)+5(280a_3^2a_4^2-168a_3^2a_4-21a_3^2-168a_3a_4^2+54a_3a_4+50a_3-21a_4^2+50a_4-24)^2))}}{70((40a_4^2-24a_4-3)a_3-20(3a_4-2)a_3^2a_4-3a_4+2)}$$

$$a_1 = \frac{30a_2a_3a_4-20(a_2a_3+a_2a_4+a_3a_4)+15(a_2+a_3+a_4)-12}{60a_2a_3a_4-30(a_2a_3+a_2a_4+a_3a_4)+20(a_2+a_3+a_4)-15}$$

$$w_1 = -\frac{12a_2a_3a_4-6a_2a_3-6a_2a_4+4a_2-6a_3a_4+4a_3+4a_4-3}{12(a_1-a_2)(a_1-a_3)(a_1-a_4)}$$

$$w_2 = \frac{12a_1a_3a_4-6a_1a_3-6a_1a_4+4a_1-6a_3a_4+4a_3+4a_4-3}{12(a_1-a_2)(a_2-a_3)(a_2-a_4)}$$

$$w_3 = -\frac{12a_1a_2a_4-6a_1a_2-6a_1a_4+4a_1-6a_2a_4+4a_2+4a_4-3}{12(a_1-a_3)(a_2-a_3)(a_3-a_4)}$$

(3.2)

$$w_4 = \frac{12a_1a_2a_3-6a_1a_2-6a_1a_3+4a_1-6a_2a_3+4a_2+4a_3-3}{12(a_1-a_4)(a_2-a_4)(a_3-a_4)}$$

$$b_{41} = -\frac{6(a_4-a_2)(a_4-a_3)b_{44}+3(a_2+a_3)a_4^2-2a_4^3-6a_2a_3a_4}{6(a_1-a_2)(a_1-a_3)}$$

$$b_{42} = \frac{6(a_4-a_1)(a_4-a_3)b_{44}+3(a_1+a_3)a_4^2-2a_4^3-6a_1a_3a_4}{6(a_1-a_2)(a_2-a_3)}$$

$$b_{43} = -\frac{6(a_4-a_1)(a_4-a_2)b_{44}+3(a_1+a_2)a_4^2-2a_4^3-6a_1a_2a_4}{6(a_1-a_3)(a_2-a_3)}$$

$$b_{14} = \frac{(6(a_4-a_2)(a_4-a_3)b_{44}-3(a_2+a_3)a_4^2-3(2a_3-1)a_2+2a_4^3+6a_2a_3a_4+3a_3-2)w_4}{6(a_1-a_2)(a_1-a_3)w_1}$$

$$b_{24} = \frac{(6(a_4-a_1)(a_4-a_3)b_{44}-3(a_1+a_3)a_4^2-3(2a_3-1)a_1+2a_4^3+6a_1a_3a_4+3a_3-2)w_4}{6(a_1-a_2)(a_2-a_3)w_2}$$

$$b_{34} = \frac{(6(a_4-a_1)(a_4-a_2)b_{44}-3(a_1+a_2)a_4^2-3(2a_2-1)a_1+2a_4^3+6a_1a_2a_4+3a_2-2)w_4}{6(a_1-a_3)(a_2-a_3)w_3}$$

$$b_{11} = - \frac{3(a_2+a_3)a_1^2+6(a_2-a_4)(a_3-a_4)b_{14}-2a_1^3-6a_1a_2a_3}{6(a_1-a_2)(a_1-a_3)}$$

$$b_{12} = \frac{6(a_1-a_4)(a_3-a_4)b_{14}+a_1^3-3a_1^2a_3}{6(a_1-a_2)(a_2-a_3)}$$

$$b_{13} = - \frac{6(a_1-a_4)(a_2-a_4)b_{14}+a_1^3-3a_1^2a_2}{6(a_1-a_3)(a_2-a_3)}$$

$$b_{21} = \frac{6(a_2-a_4)(a_3-a_4)b_{24}+a_2^3-3a_2^2a_3}{6(a_2-a_1)(a_1-a_3)}$$

$$b_{22} = - \frac{3(a_1+a_3)a_2^2+6(a_1-a_4)(a_3-a_4)b_{24}-2a_2^3-6a_1a_2a_3}{6(a_2-a_1)(a_2-a_3)}$$

$$b_{23} = - \frac{6(a_2-a_4)(a_1-a_4)b_{24}+a_2^3-3a_1a_2^2}{6(a_2-a_3)(a_1-a_3)}$$

$$b_{32} = \frac{6(a_3-a_4)(a_2-a_4)b_{34}+a_3^3-3a_2a_3^2}{6(a_3-a_1)(a_1-a_2)}$$

$$b_{32} = - \frac{6(a_3-a_4)(a_1-a_4)b_{34}+a_3^3-3a_1a_3^2}{6(a_3-a_2)(a_1-a_2)}$$

$$b_{33} = - \frac{3(a_1+a_2)a_3^2+6(a_1-a_4)(a_2-a_4)b_{34}-2a_3^3-6a_1a_2a_3}{6(a_3-a_1)(a_3-a_2)}$$

4. 局所打ち切り誤差とその大小判定

4 段数 7 次陰的 Runge-Kutta 法の局所打ち切り誤差を T_{n+1} とすると,

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= y_{n+1} - y(x_{n+1}) \\ &= t_n h_n^8 + O(h_n^9) \end{aligned} \quad (4.1)$$

と書くことができる。ここで y_{n+1} 及び $y(x_{n+1})$ は、それぞれ $y_n = y(x_n)$ のときの 4 段数 7 次法 (2.2), (2.3) による数値解及び

$$\begin{aligned}
& +a_{771}f''(f'(f''(f'(f), f)), f'(f)) + a_{772}f''(f'(f''(f'(f), f)), f'(f)) \\
& +a_{773}f''(f''(f'(f'(f)), f, f'(f)) + a_{774}f''(f''(f''(f, f), f), f'(f)) \\
& +a_{775}f''(f''(f'(f), f'(f)), f'(f)) + a_{776}f''(f''(f'(f), f, f), f'(f)) \\
& +a_{777}f''(f''''(f, f, f, f), f'(f)) + a_{778}f''(f'(f'(f'(f))), f'(f'(f))) \\
& +a_{779}f''(f'(f'(f'(f))), f''(f, f)) + a_{780}f''(f'(f''(f, f)), f'(f'(f))) \\
& +a_{781}f''(f'(f''(f, f)), f''(f, f)) + a_{782}f''(f''(f'(f), f), f'(f'(f))) \\
& +a_{783}f''(f''(f'(f), f), f''(f, f)) + a_{784}f''(f''''(f, f, f), f'(f'(f))) \\
& +a_{785}f''(f''''(f, f, f), f''(f, f)) + a_{786}f''(f'(f'(f'(f'(f))))), f, f) \\
& +a_{787}f''(f'(f'(f''(f, f))), f, f) + a_{788}f''(f'(f''(f'(f), f)), f, f) \\
& +a_{789}f''(f'(f''''(f, f, f)), f, f) + a_{790}f''(f''(f'(f'(f)), f), f, f) \\
& +a_{791}f''(f''(f''(f, f), f), f, f) + a_{792}f''(f''(f'(f), f'(f)), f, f) \\
& +a_{793}f''(f''''(f'(f), f, f), f, f) + a_{794}f''(f''''(f, f, f, f), f, f) \\
& +a_{795}f''(f'(f'(f'(f))), f'(f), f) + a_{796}f''(f'(f''(f, f)), f'(f), f) \\
& +a_{797}f''(f''(f'(f), f), f'(f), f) + a_{798}f''(f''''(f, f, f), f'(f), f) \\
& +a_{799}f''(f'(f'(f)), f'(f'(f)), f) + a_{7100}f''(f'(f'(f)), f''(f, f), f) \\
& +a_{7101}f''(f''(f, f), f''(f, f), f) + a_{7102}f''(f'(f'(f)), f'(f), f'(f)) \\
& +a_{7103}f''(f''(f, f), f'(f), f'(f)) + a_{7104}f''(f'(f'(f'(f))), f, f, f) \\
& +a_{7105}f''(f'(f''(f, f)), f, f, f) + a_{7106}f''(f''(f'(f), f), f, f, f) \\
& +a_{7107}f''(f''''(f, f, f), f, f, f) + a_{7108}f''(f'(f'(f)), f'(f), f, f) \\
& +a_{7109}f''(f''(f, f), f'(f), f, f) + a_{7110}f''(f'(f), f'(f), f'(f), f) \\
& +a_{7111}f''(f'(f'(f)), f, f, f, f) + a_{7112}f''(f''(f, f), f, f, f, f) \\
& +a_{7113}f''(f'(f), f'(f), f, f, f) + a_{7114}f''(f'(f), f, f, f, f, f) \\
& +a_{7115}f''(f, f, f, f, f, f)
\end{aligned}$$

ただし, a_{7j} ($j=1, 2, \dots, 115$) は公式 (2.2), (2.3) のパラメータの関数で,

$$t_1 = \sum_{i,j=1}^4 w_i a_i^3 b_{ij} a_j^3 - 1/32 \quad t_2 = \sum_{i=1}^4 w_i a_i^7 - 1/8 \quad (4.3)$$

と表くと次のように表される。

$a_{71} = -t_1/36$	$a_{72} = -t_1/36$	$a_{73} = -t_1/12$	$a_{74} = -t_1/36$	$a_{75} = -t_2/36$
$a_{76} = -t_2/36$	$a_{77} = -t_2/48$	$a_{78} = -t_2/24$	$a_{79} = -t_2/144$	$a_{710} = t_1/12$
$a_{711} = t_1/12$	$a_{712} = t_1/4$	$a_{713} = t_1/12$	$a_{714} = t_2/24$	$a_{715} = t_2/24$
$a_{716} = t_2/24$	$a_{717} = t_2/24$	$a_{718} = t_2/16$	$a_{719} = t_2/24$	$a_{720} = t_2/240$
$a_{721} = t_1/18$	$a_{722} = t_1/18$	$a_{723} = t_1/6$	$a_{724} = t_1/18$	$a_{725} = t_2/18$
$a_{726} = t_2/18$	$a_{727} = t_2/24$	$a_{728} = t_2/12$	$a_{729} = t_2/72$	$a_{730} = -t_1/12$
$a_{731} = -t_1/12$	$a_{732} = -t_1/4$	$a_{733} = -t_1/12$	$a_{734} = -t_2/72$	$a_{735} = -t_2/36$
$a_{736} = -t_2/72$	$a_{737} = -t_1/12$	$a_{738} = -t_1/12$	$a_{739} = -t_1/4$	$a_{740} = -t_1/12$
$a_{741} = -t_2/12$	$a_{742} = -t_2/12$	$a_{743} = -t_2/48$	$a_{744} = -t_2/36$	$a_{745} = -t_2/36$
$a_{746} = -t_2/16$	$a_{747} = -t_2/48$	$a_{748} = -t_2/720$	$a_{749} = 1/36$	$a_{750} = 1/36$
$a_{751} = t_1/12$	$a_{752} = t_1/36$	$a_{753} = t_2/36$	$a_{754} = t_2/36$	$a_{755} = t_2/48$

$a_{756}=t_2/24$	$a_{757}=t_2/144$	$a_{758}=-t_1/12$	$a_{759}=-t_1/12$	$a_{760}=-t_1/4$
$a_{761}=-t_1/12$	$a_{762}=-t_2/24$	$a_{763}=-t_2/24$	$a_{764}=-t_2/24$	$a_{765}=-t_2/24$
$a_{766}=-t_2/16$	$a_{767}=-t_2/24$	$a_{768}=-t_2/240$	$a_{769}=-t_1/36$	$a_{770}=-t_1/36$
$a_{771}=-t_1/12$	$a_{772}=-t_1/36$	$a_{773}=-t_2/36$	$a_{774}=-t_2/36$	$a_{775}=-t_2/48$
$a_{776}=-t_2/24$	$a_{777}=-t_2/144$	$a_{778}=t_1/36$	$a_{779}=t_1/36$	$a_{780}=t_1/36$
$a_{781}=t_1/36$	$a_{782}=t_1/12$	$a_{783}=t_1/12$	$a_{784}=t_1/36$	$a_{785}=t_1/36$
$a_{786}=-t_1/36$	$a_{787}=-t_1/36$	$a_{788}=-t_1/12$	$a_{789}=-t_1/36$	$a_{790}=-t_2/36$
$a_{791}=-t_2/36$	$a_{792}=-t_2/48$	$a_{793}=-t_2/24$	$a_{794}=-t_2/144$	$a_{795}=t_1/12$
$a_{796}=t_1/12$	$a_{797}=t_1/4$	$a_{798}=t_1/12$	$a_{799}=t_2/72$	$a_{800}=t_2/36$
$a_{801}=t_2/36$	$a_{802}=t_2/48$	$a_{803}=t_2/48$	$a_{804}=t_1/36$	$a_{805}=t_1/36$
$a_{806}=t_1/12$	$a_{807}=t_1/36$	$a_{808}=t_2/24$	$a_{809}=t_2/24$	$a_{810}=t_2/48$
$a_{811}=t_2/144$	$a_{812}=t_2/144$	$a_{813}=t_2/48$	$a_{814}=t_2/240$	$a_{815}=t_2/5040$

また, (4.2) における a_{7j} ($j=1, 2, \dots, 115$) の因数は, 微分方程式の右辺の関数に依存して定まる関数である。(くわしくは文献 [3] または [4] を見よ)

4 段数 7 次陰的 Runge-Kutta 法の局所打ち切り誤差の大小を判定するため, 問題 (2.1) に独立で, 公式 (2.2), (2.3) の係数のみに依存する次の判定基準を用いる。

$$A_{72} = \sum_{j=1}^{115} |a_{7j}| \quad (4.5) \quad A_{73} = \sum_{j=1}^{115} a_{7j}^2 \quad (4.6)$$

(4.5) 及び (4.6) によって定義される判定基準を, 公式 (2.2), (2.3) の打ち切り精度判定基準という。これらの判定基準は, 低次法において打ち切り誤差の観点からの最適化に使用され, その有効性が実証されているものである。

5. 安定性とその他の評価

5.1 安定性の諸概念とその他の相互関係

テスト方程式

$$y' = \lambda y \quad (\lambda \text{ は複素定数}) \quad (5.1)$$

に S 段数陰的 Runge-Kutta 法を適用すると、

$$y_{n+1} = R(h\lambda) y_n \quad (5.2)$$

が得られる。ここで $R(h\lambda)$ は $h\lambda$ の有理関数である。

[定義 1] $R(h\lambda)$ を S 段数陰的 Runge-Kutta 法の安定関数という。

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

[定義 3] $s = \{h\lambda \mid |R(h\lambda)| \leq 1, h\lambda \text{ は複素数}\}$ 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] $s \supset \{h\lambda \mid \operatorname{Re}(h\lambda) < 0, h\lambda \text{ は複素数}\}$ 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

$$y' = \lambda(t)y \quad (\lambda(t) \text{ は } t \text{ の複素関数}) \quad (5.3)$$

に S 段数陰的 Runge-Kutta 法を適用すると

$$y_{n+1} = \{1 + W 1' \xi (I - B \xi)^{-1} e'\} y_n \quad (5.4)$$

が得られる。ここで

$$W 1 = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_s \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & \cdots & b_{1s} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & \cdots & b_{2s} \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ b_{s1} & b_{s2} & \cdots & \cdots & b_{ss} \end{bmatrix} \quad e = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \xi &= \operatorname{diag}(\xi_1, \xi_2, \cdots \cdots \cdots, \xi_s) \\ &= \operatorname{diag}\{h\lambda(t_n + a_1 h), h\lambda(t_n + a_2 h), \cdots \cdots \cdots, h\lambda(t_n + a_s h)\} \end{aligned}$$

である。

[定義 5] S 段数陰的 Runge-Kutta 法は、もし

$$K(\xi) = 1 + W 1' \xi (I - B \xi)^{-1} e' \quad (5.6)$$

が、 $\operatorname{Re}(\xi_i) \leq 0$ ($i=1, \dots, s$)であるようなすべての

$$\xi = \operatorname{diag}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_s) \quad (a_i = a_j \rightarrow \xi_i = \xi_j)$$

に対して

$$|K(\xi)| \leq 1 \quad (5.7)$$

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

$$\langle f(t, \xi_1) - f(t, \xi_2), \xi_1 - \xi_2 \rangle \leq 0, \quad t \geq 0, \xi_1, \xi_2 \in \mathbb{R}^n \quad (5.8)$$

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

$$\|y_{n+1} - \tilde{y}_{n+1}\| \leq \|y_n - \tilde{y}_n\| \quad (5.9)$$

ならば、その陰的Runge-Kutta法はB安定であるという。

[定義8] (5.8)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 (5.9) 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。

$$M = WB + B^T W - W1W1^T \quad (5.10)$$

ここで、 B 及び $W1$ は (5.5) 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。

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

[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 (5.8) 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 $\leftrightarrow$ BN 安定

(2) 代数的安定 $\leftrightarrow$ AN 安定

また任意の陰的 Runge - Kutta 法に対して

(3) AN 安定 $\rightarrow$ A 安定

(4) BN 安定 $\rightarrow$ B 安定

が成立する。

5.2 安定性の優劣の評価

陰的 Runge - Kutta 法の安定性の優劣は、その方法が有限の絶対安定領域をもつ場合には、その絶対安定領域の原点を含む単

連結な閉部分領域 (1の閉部分領域を有効絶対安定領域とよび S_e で表すことにしよう。) の面積 $A(S_e)$ または, S_e と実軸との交り $S_I = S_e \cap R = [-\alpha, 0.0]$ (この S_I を絶対安定区間という) の長さによって測る。絶対安定領域が有限でないときは, 包含関係または定理5による。

5.3 4段数7次陰的 Runge-Kutta 法の安定性

4段数7次陰的 Runge-Kutta 法の安定関数は,

$$\beta_0 = b_{11} + b_{22} + b_{33} + b_{44} \quad (5.11)$$

とかく β_0 の関数にたゞ, 次のように表される。したがって, β_0 が決まれば安定性は一意に定まることになる。

$$R(h\lambda, \beta_0) = \frac{1 + (1 - \beta_0)h\lambda - (\beta_0/2 - 5/14)h^2\lambda^2 - (\beta_0/10 - 13/210)h^3\lambda^3 - (\beta_0/120 - 1/210)h^4\lambda^4}{1 - \beta_0 h\lambda + (\beta_0/2 - 1/7)h^2\lambda^2 - (\beta_0/10 - 4/105)h^3\lambda^3 + (\beta_0/120 - 1/280)h^4\lambda^4} \quad (5.12)$$

この場合安定性について次の事がいえる。

- (i) $\beta_0 = \frac{1}{2}$ ならば, 絶対安定領域の境界は虚軸となり, 左半平面が絶対安定領域となる。(Fig. 1を見よ)
- (ii) $\beta_0 < \frac{1}{2}$ ならば, $|R(h\lambda, \beta_0)| = 1$ の境界で囲まれた左半平面上の領域内が絶対安定領域になる。
- (iii) $\beta_0 > \frac{1}{2}$ ならば, $|R(h\lambda, \beta_0)| = 1$ の境界で囲まれた右半平面上の領域外で絶対安定になる。
- (iv) $\beta_0' + \beta_0'' = 1$ ($\beta_0' > \frac{1}{2}$) であるとき, $\beta_0 = \beta_0'$ と $\beta_0 = \beta_0''$ のおののおのに対する絶対安定領域の境界は, 原点に関して対称であること

が容易に知られる。

(v) $\beta_0 = 0.3735730$ 付近で絶対安定領域の面積が最小になることが実験的に確かめられる。(Fig. 2 を見よ) (iv) について述べたことから、絶対不安定領域の面積は $\beta_0 = 1 - 0.3735730 = 0.626427$ において最小になり、その最小面積は $\beta_0 = 0.3735730$ に対応する最小絶対安定領域の面積と一致する。またこれらの領域は虚軸に対して対称である。

(vi) 4 段数 7 次陰的 Runge-Kutta 法の解系について、代数的安定と A 安定が等価であることが実験的に確かめられた。

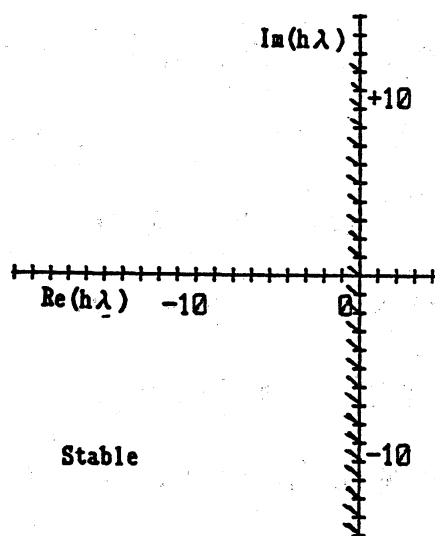
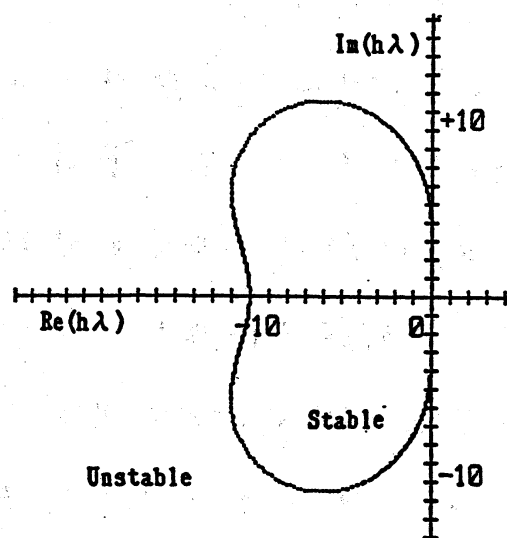


Fig. 1 $\beta_0 = 1/2$ の場合



$\beta_0 = 0.3735730$ $s = 198.5217872$ (面積)

Fig. 2 絶対安定領域の面積が最小になる場合

6. 特性図とその観察から得られる結論

Fig. 3 は、自由パラメータの a_4 と b_{44} をそれぞれ両軸にとり、4 段数 7 次陰的 Runge-Kutta 法 (2.2), (2.3) の打ち切り誤差特性

と安定特性が、自由パラメータの変動に伴ってどのように変動するかを図示したものである。すなわち、打ち切り誤差特性の変動の様子は、判定基準 A_{73} の等高線図によつて平し、安定特性は、同平面に絶対安定領域最小及び最大の曲線と、最も強い安定である代数的安定（この解軍にかつては A 安定と等価である）の範囲を図示することによつてなされた。

Fig. 3 の観察から次のようなことがわかる。

- (1) Butcher の 4 段数公式は 確かに 8 次で、これ以上高精度な公式は存在しないこと。またこれが唯一の 8 次公式であることがわかる。
- (2) Butcher の公式は、 a_4-b_{44} 平面上で代数的安定（または A 安定）とそうでない範囲の境界線上に存在していること。
- (3) 代数的に安定な領域の内部深く絶対安定領域の面積最大の公式群が存在し、Fig. 3 の利用によつてその中で打ち切り精度最良の公式がどの辺に存在するか予想できること。
- (4) このタイプの公式中実用的に有意義な公式は、 a_4-b_{44} 平面のどのような範囲に現れるか知ることができる。また、既知公式をはじめとするこのタイプの任意の公式は、Fig. 3 のグラフ上の一点として表すことができ、その特性値の近似値を容易に図上で読みとることができること。

上記の (2) に示すように Butcher の公式は最も強い安定性、すなわち

代数的安定性をもつが、その安定は臨界的なので、なお十分その意味を検討する必要があると思われる。

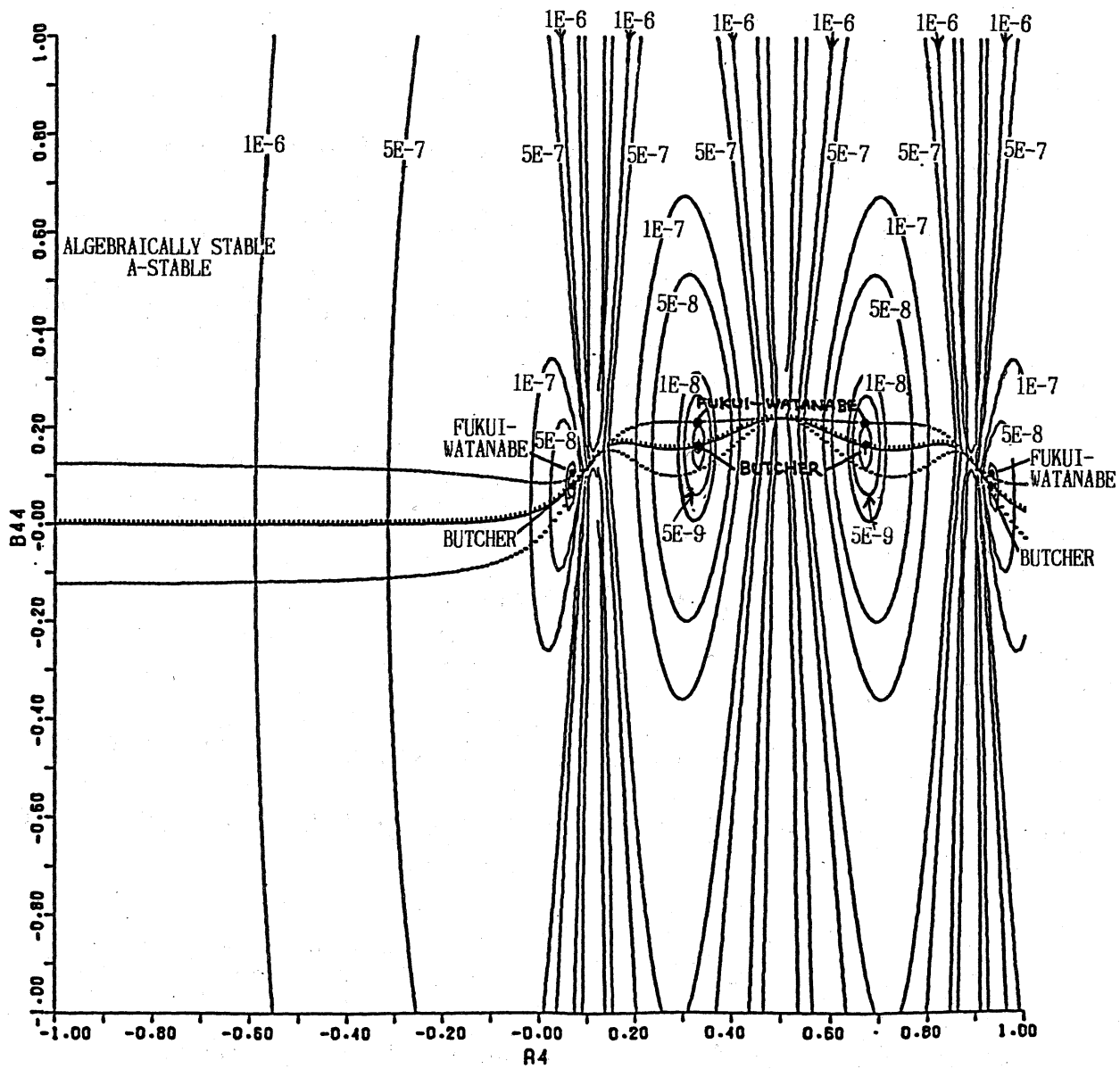


Fig.3 安定性と打ち切り精度の関係

7. 任意の安定特性をもつ打ち切り精度最良な公式

4. の記述と若干の考察から、4段数7次陰的 Runge-Kutta法 (2.2), (2.3)

の打ち切り精度判定基準 A_{72} , A_{73} 及び t_1 , t_2 は, 定数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \zeta$ 及び $g(x, y)$ を適当に選ぶと次のように表されることがわかる。

$$A_{72} = \alpha |t_1| + \beta |t_2| \quad A_{73} = \gamma t_1^2 + \delta t_2^2$$

$$t_1 = \zeta(2\beta_0 - 1) \quad t_2 = g(a_4, b_{44})$$

これより β_0 を適当に定めるとき (安定性を適当に定めるとき) 打ち切り精度最良な公式は, t_2 を最小にするものであることが知られる。表2に示すのは, β_0 を固定したとき打ち切り精度判定基準 A_{73} を最小にする公式である。また, 表3に示すのは, β_0 が絶対安定領域の面積を最大にするように選ばれたときの打ち切り精度最良の公式である。表4に, Butcherの公式及び我々によって導かれた表3の公式の特性値を示す。

8. 数値例

公式の誘導に誤りがないことを立証するため, non-stiff の非線形問題及び stiff 問題各一例の計算結果を, 表5及び表6に掲げる。

公式名	β_0	面積 区間	A_{73}
Butcher 注2) FUKUI-WATANABE	1/2 0.6292570	代数的安定 代数的安定	0 1.0819644046995D-9

表4 公式の特性

注2) Fukui-Watanabe が我々によって得られた公式である。

謝辞 公式の誘導に誤りがないかどうかチェックしてくれた 杉田佳代、田中久恵の両君に感謝致します。

表 2 β_0 が与えられたとき打ち切り誤差が最小となる公式

0.069431844202973	0.0028529369424496	-0.00061883223487302	0.0015972081985714	-0.00052901541040850
	+0.001601052536769 β_0	+0.0053076625863941 β_0	+0.0035033518188928 β_0	+0.0011290291459389 β_0
	0.0093757075111167	-0.0053076625863941	0.012232680046207	-0.0099852792985735
	-0.0026319274771117	-0.00017141029408379	-0.0021497491931033	-0.00073807311713554
	+0.0015200764923038 β_0	+0.0021796255932516 β_0	+0.0050234283111965 β_0	+0.0016189059132713 β_0
0.33000947820757	-0.009950605793651	0.0056331170794977	-0.012982761766538	0.01059755222244
	0.0020825978912374	-0.0071070017094842	-0.00091048651979413	-0.0015189637328277
	+0.0035033518188928 β_0	+0.0050234283111965 β_0	+0.011577599417011 β_0	+0.0037311260351639 β_0
0.6699052179243	0.022933367565903	-0.012982761766538	0.029921640311744	-0.024424405318838
	-0.013435073049718	0.0055331853653993	-0.037143286963060	0.0018605290041467
	+0.0064913808832687 β_0	+0.0093079394230175 β_0	+0.021452201039140 β_0	+0.0069134250482967 β_0
0.93056815579703	-0.057410609270816	0.032500602490799	-0.074904812637873	0.061143222267830

表 3 安定性、打ち切り精度が最良の公式 (FUKUI-MATANABEの公式)

0.069431844202973	0.17392742256873	0.32607257743127	0.32607257743127	0.17392742256873
0.33000947820757	0.16837253304728	0.21304978236951	-0.077893922256341	0.026481085047122
0.6699052179243	0.18693750642677	0.30393951237988	0.21304978236951	-0.033936279383725
0.93056815579703	0.16286756590839	0.35046339236738	0.31565847989077	0.10157871763050
	0.17392742256873	0.32607257743127	0.32607257743127	0.17392742256873

表 6 数値実験結果(2)

$$\text{II } y' = 100(\sin x - y) \quad y(0) = 0 \quad h=0.13 \quad 100\text{ステップ}$$

	第一ステップ	最終ステップ
FUKUI-MATANABE	真値 1.19706575628D-01	真値 4.11051463866D-01
BUTCHER	誤差 5.80D-04 -5.02D-04	誤差 2.56D-08 1.08D-09
		最大誤差 5.80D-04 -5.02D-04

《参考》3段数5次法の数値実験結果(1)

	第一ステップ	最終ステップ
BUTCHER1	真値 1.19706575628D-01	真値 4.11051463866D-01
BUTCHER2	誤差 1.62D-03 1.23D-02	誤差 8.20D-08 -1.27D+07
RADAU NODES	1.24D-02	-1.28D+07
M. BUTCHER2 & RADAU NODES	1.24D-02	-1.27D+07
RADAU 1A	-6.19D-04	-1.88D-05
RADAU 11A	-6.00D-04	-5.35D-08
RADAU 1A & 11A	-6.10D-04	-9.40D-06
		最大誤差 1.62D-03 -1.27D+07 -1.28D+07 -1.27D+07 -6.19D-04 -6.00D-04 -6.10D-04

表 5 数値実験結果(1)

$$\text{I } y' = -x^2 y^2 / 3 \quad y(2) = 1 \quad h=0.01 \quad 100\text{ステップ}$$

	第一ステップ	最終ステップ
FUKUI-MATANABE	真値 9.86777077519D-01	真値 3.21428571429D-01
BUTCHER	誤差 -1.39D-17	誤差 -2.50D-16 -1.39D-16
		最大誤差 -3.05D-16 -2.22D-16

《参考》3段数5次法の数値実験結果(1)

	第一ステップ	最終ステップ
BUTCHER1	真値 9.86777077519D-01	真値 3.21428571429D-01
BUTCHER2	誤差 1.80D-16 7.73D-15	誤差 4.33D-15 6.59D-14
RADAU NODES	6.40D-15	4.81D-14
M. BUTCHER2 & RADAU NODES	7.06D-15	5.70D-14
RADAU 1A	-6.04D-15	-3.91D-14
RADAU 11A	-7.37D-15	-5.71D-14
RADAU 1A & 11A	-6.70D-15	-4.81D-14
		最大誤差 5.19D-15 1.10D-13 8.49D-14 9.74D-14 -7.48D-14 -9.99D-14 -8.73D-14

[文 献]

1. 田中, 山下, 高山, 山下(共), Runge-Kutta法に關する = 三の話題について,
II 2段お3次陰的 Runge-Kutta法の打ち切り精度と安定性の關係,
数理解析研究所講究録 585, p.54~p.62 (1986)
2. 田中, 三村, 山下, 陰的 Runge-Kutta法の特性について, 数理解析
研究所講究録 643, p.48~p.73 (1988)
3. Butcher, J. C., The Numerical Analysis of Ordinary Differential
Equations (Runge-Kutta and general Linear Methods), John
Wiley & Sons (1987)
4. Hall, G. and Watt, J. M., Modern numerical methods for
(Eds.)
ordinary differential equations, Clarendon Press. Oxford
(1976)