

3 段数陰的 Runge-Kutta 法について

田中正次[†] 山下忠志^{††}
三村和正^{†††} 山下茂^{††††}

硬い常微分方程式の数値解を求める有効な方法の研究は、今花盛りといってもよいだろう。それらの模索の原点に位置しているのが、強い安定性と高い打ち切り精度を保証する陰的 Runge-Kutta 法である。ただ、この方法は陰的であるから、計算の手間がネックになっている。近年のこの分野における様々な研究は、前述のネック克服の課題に対する挑戦と、安定性の本質の究明に向けられているように思われる。本研究は、特に 3 段数法に限って、この原点となっている陰的 Runge-Kutta 法を見直そうとするものである。すなわち、3 段数 5 次陰的 Runge-Kutta 法の次数条件式の解がもつ自由パラメータを、実用的に有意義な領域で変動させ、それに伴って打ち切り誤差や安定性がどのように変化するかをグラフで表示し、その中に既知公式の自由パラメータの値を座標とする点を記入し、既知公式を表現する。また、1 つの自由パラメータを安定性を支配するパラメータと置き換え、安定性を支配するパラメータの任意の値に対して打ち切り精度最良の公式を導く。さらに、安定性を支配するパラメータを横軸にとって、安定性と最小打ち切り誤差の関係を図示する。この研究で作成したグラフの活用により、我々は既知公式の特性や優劣を直観的に知り、容易にその改良や、より好ましい特性をもつ新公式を導出することができる。

On 3-Stage Implicit Runge-Kutta Methods

MASATSUGU TANAKA,[†] TADASHI YAMASITA,^{††} KAZUMASA MIMURA^{†††}
and SHIGERU YAMASITA^{††††}

We research the relations among the truncation error, the stability and the free parameters of the solution for the equations of order conditions in the 3-stage 5th-order implicit Runge-Kutta method, and make tables and graphs from their relationship. By the observation them we can know the merits, demerits and the possibility of betterment in the known methods. We derive the method that has minimum truncation error in a sense for any stability.

1. まえがき^{3),6),7)}

硬い常微分方程式の数値解を求める有効な方法の研究は、今花盛りといってもよいだろう。それらの模索の原点に位置しているのが、強い安定性と高い打ち切り精度を保証する陰的 Runge-Kutta 法である。ただ、この方法は陰的であるから、計算の手間がネックになっている。近年のこの分野における様々な研究は、このネック克服の課題に対する挑戦と、より適合した方法を開発するための、安定性の本質を見極めようとする努

力に向けられているように思われる。

本研究は、特に 3 段数法に限って、この原点となっている陰的 Runge-Kutta 法を見直そうとするものである。すなわち、3 段数陰的 Runge-Kutta 法の次数条件式の解がもつ 2 つの自由パラメータを、実用的に有意義な領域で変動させ、それに伴って打ち切り誤差や安定性がどのように変化するかをグラフで表示し、その中に既知公式の自由パラメータの値を座標とする点を記入し、既知公式を表現させる。また、自由パラメータの 1 つを安定性を支配するパラメータと置き換え、安定性を支配するパラメータの任意の値に対して打ち切り精度最良の公式を導く。さらに、横軸に安定性を支配するパラメータをとり、その変動に伴って最小打ち切り精度や安定性がどのように変化するかをグラフで表示する。なお、この図に既知公式の安定性を支配するパラメータの値と打ち切り精度を両座標とする点を記入し、既知公式を表現させる。これらのグラフを活用することにより、我々は、既知公式の特性や優劣を直観

[†] 日本大学工学部情報工学科
Department of Computer Science, College of Engineering, Nihon University

^{††} シンク情報システム
SYNC Company Ltd.

^{†††} セイコー・エプソン株式会社
Seiko-Epson Co., Ltd.

^{††††} 山梨大学工学部電子情報工学科
Department of Electrical Engineering and Computer Science, Faculty of Engineering, Yamanashi University

的に知ることができる。また、既知公式の改良や、より特性のよい新公式が導出できるか否かを容易に判断することができ、直ちに所望の公式を導くことができる。

以下2章において3段数5次陰的Runge-Kutta法について述べ、3章において同法の次数条件式とその解について説明する。4章において3章で得られた3段数5次陰的Runge-Kutta法の打ち切り誤差とその大小の判定法について述べ、さらに5章において同法の安定性について考察し、任意の安定性に対して打ち切り精度最良の公式を導く。6章において3段数5次陰的Runge-Kutta法の打ち切り精度と安定性の関係を示すグラフを描き、既知公式を評価しまた改良する。7章において数値例を掲げ、8章において結論を述べる。

2. 3段数5次陰的Runge-Kutta法

m 元連立常微分方程式の初期値問題

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

において、 f は十分滑らかなものとしよう。

$x = x_n$ における数値解 y_n から、 $x = x_{n+1} = x_{n+h}$ における数値解 y_{n+1} を求める次の方法を、3段数陰的Runge-Kutta法という。

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n + a_1h, y_n + b_{11}k_1 + b_{12}k_2 + b_{13}k_3) \\ k_2 = hf(x_n + a_2h, y_n + b_{21}k_1 + b_{22}k_2 + b_{23}k_3) \\ k_3 = hf(x_n + a_3h, y_n + b_{31}k_1 + b_{32}k_2 + b_{33}k_3) \\ y_{n+1} = y_n + c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3 \end{cases} \quad (2.2)$$

ここで $a_i, b_{ij}, c_i (i, j=1, 2, 3)$ は公式を特徴づける係数で、公式(2.2)が5次の打ち切り精度をもつように選ばれる。(2.2)は、特に $b_{12} = b_{13} = b_{23} = 0$ のとき半陰的(または半陽的)であるといわれる。我々は、それらをも特別な場合として含む3段数5次陰的Runge-Kutta法について研究した。我々が考察の対象とした、3段数陰的Runge-Kutta法の既知公式を付録に掲げる^{1)~6)}。

3. 次数条件式とその解^{1)~3),6)}

(2.2)が5次法になるために係数 $a_i, b_{ij}, c_i (i, j=1, 2, 3)$ が満たさなければならない条件式は、以下のようになる。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 c_i &= 1 & \sum_{i=1}^3 c_i a_i &= 1/2 & \sum_{i,j=1}^3 c_i b_{ij} a_j &= 1/6 \\ \sum_{i=1}^3 c_i a_i^2 &= 1/3 & \sum_{i,j,k=1}^3 c_i b_{ij} b_{jk} a_k &= 1/24 \\ \sum_{i=1}^3 c_i b_{ij} a_j^2 &= 1/12 & \sum_{i,j=1}^3 c_i a_i b_{ij} a_j &= 1/8 \\ \sum_{i=1}^3 c_i a_i^3 &= 1/4 & \sum_{i,j,k,l=1}^3 c_i b_{ij} b_{jk} b_{kl} a_l &= 1/120 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{i,j,k=1}^3 c_i b_{ij} b_{jk} a_k^2 &= 1/60 & \sum_{i,j,k=1}^3 c_i b_{ij} a_j b_{jk} a_k &= 1/40 \\ \sum_{i,j=1}^3 c_i b_{ij} a_j^3 &= 1/20 & \sum_{i,j,k=1}^3 c_i a_i b_{ij} b_{jk} a_k &= 1/30 \\ \sum_{i,j=1}^3 c_i a_i b_{ij} a_j^2 &= 1/15 & \sum_{i,j,k=1}^3 c_i b_{ij} a_j b_{jk} a_k &= 1/20 \\ \sum_{i,j=1}^3 c_i a_i^2 b_{ij} a_j &= 1/10 & \sum_{i=1}^3 c_i a_i^4 &= 1/5 \\ \sum_{j=1}^3 b_{ij} &= a_i \quad (i=1, 2, 3) \end{aligned} \quad (3.1)$$

これらの条件式を a_3, b_{33} を自由パラメータとして解くと、

$$\begin{aligned} a_2 &= \{2(15a_3^2 - 16a_3 + 3) \\ &\quad \pm \sqrt{6(50a_3^4 - 100a_3^3 + 64a_3^2 - 14a_3 + 1)}\} \\ &\quad / \{10(6a_3^2 - 6a_3 + 1)\} \\ a_1 &= \{6a_2a_3 - 4(a_2 + a_3) + 3\} \\ &\quad / \{2\{6a_2a_3 - 3(a_2 + a_3) + 2\}\} \\ c_1 &= \{6a_2a_3 - 3(a_2 + a_3) + 2\} / \{6(a_1 - a_2)(a_1 - a_3)\} \\ c_2 &= \{6a_1a_3 - 3(a_1 + a_3) + 2\} / \{6(a_2 - a_3)(a_2 - a_1)\} \\ c_3 &= \{6a_1a_2 - 3(a_1 + a_2) + 2\} / \{6(a_3 - a_2)(a_3 - a_1)\} \\ b_{13} &= \{c_3(a_3^2 - 2a_2a_3 + 2a_2 - 1) - 2c_3b_{33}(a_2 - a_3)\} \\ &\quad / \{2c_1(a_2 - a_1)\} \\ b_{23} &= \{c_3(a_3^2 - 2a_1a_3 + 2a_1 - 1) - 2c_3b_{33}(a_1 - a_3)\} \\ &\quad / \{2c_2(a_1 - a_2)\} \\ b_{11} &= \{a_1(2a_2 - a_1) - 2b_{13}(a_2 - a_3)\} / \{2(a_2 - a_1)\} \\ b_{12} &= \{a_1^2 - 2b_{13}(a_1 - a_3)\} / \{2(a_1 - a_2)\} \\ b_{21} &= \{a_2^2 - 2b_{23}(a_2 - a_3)\} / \{2(a_2 - a_1)\} \\ b_{22} &= \{a_2(2a_1 - a_2) - 2b_{23}(a_1 - a_3)\} / \{2(a_1 - a_2)\} \\ b_{31} &= \{a_3(2a_2 - a_3) - 2b_{33}(a_2 - a_1)\} / \{2(a_2 - a_1)\} \\ b_{32} &= \{a_3(2a_1 - a_3) - 2b_{33}(a_1 - a_3)\} / \{2(a_1 - a_2)\} \end{aligned} \quad (3.2)$$

が得られる。

ところで解系は、(3.2)の a_2 が2つの場合に分かれるので2組存在するが、両者は同一の公式を与えることに注意しよう。

解系(3.2)は、Butcherによる6次法を特殊な場合として含んでいる。3段数6次法は、この公式以外には存在しない。

4. 打ち切り誤差とその大小の判定^{1)~3)}

3章で導いた3段数5次法(2.2)の数値解 y_{n+1} の局所打ち切り誤差 T_{n+1} は、

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= t_n h^6 + O(h^7) \\ t_n &= a_{51} f'(f'(f'(f'(f)))) \\ &\quad + a_{52} f'(f'(f''(f, f))) \\ &\quad + a_{53} f'(f'(f''(f'(f), f))) \\ &\quad + a_{54} f'(f'(f'''(f, f, f))) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &+ a_{55}f'''(f'(f'(f'(f))))(f) \\
 &+ a_{56}f'''(f''(f''(f, f)))(f) \\
 &+ a_{57}f'''(f'''(f'(f), f, f))(f) \\
 &+ a_{58}f'''(f'''(f, f, f, f))(f) \\
 &+ a_{59}f'(f''(f'(f'(f))), f)) \\
 &+ a_{510}f'(f'''(f''(f, f), f)) \\
 &+ a_{511}f'(f'''(f'(f), f'(f))) \\
 &+ a_{512}f'(f''''(f'(f), f, f)) \\
 &+ a_{513}f'(f'''(f, f, f, f)) \\
 &+ a_{514}f'''(f'(f'(f)), f, f) \\
 &+ a_{515}f'''(f''(f, f), f, f) \\
 &+ a_{516}f''''(f'(f), f, f, f) \\
 &+ a_{517}f''''(f, f, f, f, f) \\
 &+ a_{518}f''''(f'(f), f'(f), f) \\
 &+ a_{519}f''''(f'(f'(f)), f'(f)) \\
 &+ a_{520}f''''(f''(f, f), f'(f))\Big|_{\substack{x=x_n \\ y=y(x_n)}} \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

と表すことができる。ここで、

$$\begin{aligned}
 s_1 &= \sum_{i,j=1}^3 c_i a_i^2 b_{ij} a_j^2 - 1/18 \\
 s_2 &= \sum_{i=1}^3 c_i a_i^5 - 1/6 \quad (4.2)
 \end{aligned}$$

とおくと、 a_{5j} ($j=1, 2, \dots, 20$) は次のように表される。

$$\begin{aligned}
 a_{51} &= a_{52} = -a_{55} = -a_{56} = a_{514} = a_{515} = a_{519} = a_{520} \\
 &= -\frac{1}{2} a_{59} = -\frac{1}{2} a_{510} = s_1/4 \\
 a_{53} &= 3a_{54} = -a_{57} = -3a_{58} = -2a_{511} \\
 &= -a_{512} = -6a_{513} \\
 &= 3a_{516} = 30a_{517} = 2a_{518} = s_2/4 \quad (4.3)
 \end{aligned}$$

(4.2) の s_1, s_2 に (3.2) の結果を代入すると、

$$\begin{aligned}
 s_1 &= \{18b_{33}(20a_3^4 - 40a_3^3 + 28a_3^2 - 80a_3 + 1) - 1\} \\
 &\quad / \{1800(60a_3^2 - 6a_3 + 1)^2\} \\
 s_2 &= (2a_3 - 1)(10a_3^2 - 10a_3 + 1) / \{600(6a_3^2 - 6a_3 + 1)\} \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

が得られる。また、(4.1) の a_{5j} ($j=1, 2, \dots, 20$) の係数は、(2.1) の右辺の関数ベクトル $f(x, y)$ の関数である (詳しくは例えば文献 3) を見よ)。

3 段数 5 次陰的 Runge-Kutta 法の打切り誤差の大小を判定するために、次の数量が使用される。

$$A_{53} = \sum_{j=1}^{20} a_{5j}^2 \quad (4.5)$$

また、(4.3) と (4.5) より

$$\begin{aligned}
 A_{53} &= 8(s_1/4)^2 + 2(-s_1/2)^2 + 3(s_2/4)^2 \\
 &\quad + 2(s_2/8)^2 + 3(s_2/12)^2 + (s_2/24)^2 + (s_2/120)^2 \\
 &= s_1^2 + (269/225)s_2^2 \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

(4.5) または (4.6) によって定義された A_{53} を、3 段数 5 次陰的 Runge-Kutta 法 (2.2) の打切り精度判定基準という。

5. 安定性^{3),4)}

テスト方程式

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

に (2.2) を適用し、

$$\beta_0 = b_{11} + b_{22} + b_{33} \quad (5.2)$$

とおいて整理すると、

$$y_{n+1} = R(h\lambda, \beta_0) y_n \quad (5.3)$$

が得られる。ここで

$$\begin{aligned}
 R(h\lambda, \beta_0) &= \{1 + (1 - \beta_0)h\lambda - (\beta_0/2 - 7/20)h^2\lambda^2 \\
 &\quad - (\beta_0/12 - 1/20)h^3\lambda^3\} \\
 &\quad / \{1 - \beta_0 h\lambda + (\beta_0/2 - 3/20)h^2\lambda^2 \\
 &\quad - (\beta_0/12 - 1/30)h^3\lambda^3\} \quad (5.4)
 \end{aligned}$$

である。

(5.4) を (2.2) の安定関数といい、 $Re(h\lambda) < 0$ であるようなすべての $h\lambda$ に対して $|R(h\lambda, \beta_0)| < 1$ ならば、(2.2) は A 安定であるという。

$$\beta_0 \geq 1/2 \quad (5.5)$$

のとき (2.2) は A 安定である。(5.2) に (3.2) を代入して β_0 を自由パラメータで表すと、

$$\begin{aligned}
 \beta_0 &= \{9b_{33}(20a_3^4 - 40a_3^3 + 28a_3^2 - 8a_3 + 1) \\
 &\quad + 2(45a_3^4 - 90a_3^3 + 60a_3^2 - 15a_3 + 1)\} \\
 &\quad / \{5(6a_3^2 - 6a_3 + 1)^2\} \quad (5.6)
 \end{aligned}$$

である。

ここで B 安定、代数的安定などの安定性の新しい概念の定義を述べ、(2.2) が、A 安定な領域で B 安定でもまた代数的安定でもあることを示そう。ここでは (2.2) を一般の s 段数陰的 Runge-Kutta 法

$$k_i = hf \left(x_n + a_i h, y_n + \sum_{j=1}^s b_{ij} k_j \right) \quad (i=1, 2, \dots, s)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s c_i k_i \quad (5.7)$$

に置き換えて考察する。

(2.1) が

$$\langle f(x, \xi_1) - f(x, \xi_2), \xi_1 - \xi_2 \rangle \leq 0, \quad x \geq 0, \quad \xi_1, \xi_2 \in R^m \quad (5.8)$$

を満足するとき、(2.1) を消散方程式とよぶことにしよう。また、同一の Runge-Kutta 法の相異なる初期値から得られる 2 つの数値解を y_n, \hat{y}_n とする。そのとき、(5.8) を満足する自励系とすべての $y_n, \hat{y}_n, h > 0$ に対して $\|y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}\| \leq \|y_n - \hat{y}_n\|$ ならば、その陰的 Runge-Kutta 法は B 安定であるといわれる。

また、

$$C_1 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_s \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1s} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2s} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{s1} & b_{s2} & \dots & b_{ss} \end{pmatrix}$$

表 1 β_0 が与えられたとき打ち切り精度最良の公式

Table 1 The formula with the minimum truncation error for any β_0 .

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

$$C = \begin{pmatrix} c_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & c_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_s \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

$$M = CB + B^T C - C_1 C_1^T$$

であるとき、行列 C および M が非負値行列ならば、5 段数陰的 Runge-Kutta 法 (5.7) は代数的安定であるといわれる。詳述は避けるが⁴⁾、代数的安定は極めて強い安定性で、勿論代数的安定ならば A 安定でもあり、また B 安定でもある。

2 段数 3 次陰的 Runge-Kutta 法の場合とは異なり、3 段数 5 次陰的 Runge-Kutta 法においては、A 安定と代数的安定の条件が一致することを理論的に証明することが困難であったので、ここでは次の手順にしたがって、この方法が代数的安定である条件を推測した。

(1) 自由パラメータの範囲を適当に決めて、その範囲内で自由パラメータを等間隔に変動させ、それによって得られる各格子点に対して行列 M および C の成分を計算し、行列 M のすべての固有値を求める。

(2) 得られた行列 C の対角成分と行列 M の固有値がすべて非負であれば、その格子点は代数的安定な領域に入るとする。

(3) 以上の手順により、代数的安定な領域とそうでない領域の境界点にある格子点を求め、その結果から方法が代数的安定であるために必要な自由パラメータの条件を推測する。

自由パラメータの変域を $[-1.0, 1.0]$ として、上記の手順にしたがい、方法が代数的安定である領域とそうでない領域の境界に当たる自由パラメータの値を求めた。その結果得られた自由パラメータの値は、(5.5)、(5.6) から得られる

$$\begin{aligned} & \{9b_{33}(20a_3^3 - 40a_3^2 + 28a_3 - 80a_3 + 1) \\ & + 2(45a_3^4 - 90a_3^3 + 60a_3^2 - 15a_3 + 1)\} \\ & / \{5(6a_3^3 - 6a_3 + 1)^2\} \\ & = 1/2 \end{aligned} \quad (5.10)$$

を満足することが分かった。また、A 安定な領域内にとられたすべての格子点において代数的安定であるこ

とが確認された。これより 3 段数 5 次陰的 Runge-Kutta 法において、2 段数 3 次陰的 Runge-Kutta 法の場合と同様に A 安定と代数的安定とは等価な概念であると推測される。

次に安定性を支配するパラメータ β_0 が任意の値をとるとき、打ち切り精度最良の公式を導いておこう。(4.4) で表される s_1 は、(5.2) によって定義される安定性を支配するパラメータ β_0 の関数として次のように表される。

$$s_1 = (2\beta_0 - 1)/360 \quad (5.11)$$

一方、打ち切り精度判定基準 A_{53} は (4.6) によって表されるので、任意の β_0 に対して A_{53} を最小にするには、

$$\begin{aligned} s_2 &= (2a_3 - 1)(10a_3^2 - 10a_3 + 1) / \{600(6a_3^2 - 6a_3 + 1)\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5.12)$$

となるように自由パラメータ a_3 を選べばよい。これより

$$a_3 = 1/2 \quad \text{または} \quad a_3 = (5 \pm \sqrt{15})/10 \quad (5.13)$$

が得られ、求める公式は表 1 によって与えられる。

公式 (2.2) の簡潔な表示法としては、次に示すマトリックス表示がしばしば使用される。表 1 もこの慣行にしたがった。

a_1	b_{11}	b_{12}	b_{13}
a_2	b_{21}	b_{22}	b_{23}
a_3	b_{31}	b_{32}	b_{33}
	c_1	c_2	c_3

公式 (2.2) のマトリックス表示

(4.6) から表 1 に示す公式の打ち切り精度判定基準は、 $A_{53} = \{(2\beta_0 - 1)/360\}^2$ (5.14) となることが分かる。

6. 安定性と打ち切り精度の関係

図 1 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 (2.2) が代数的安定 (= A 安定) になるような領域、絶対安定領域の面積がほぼ最大、最小になる曲線および既知公式の (a_3, b_{33}) を座標とする点を示したもので

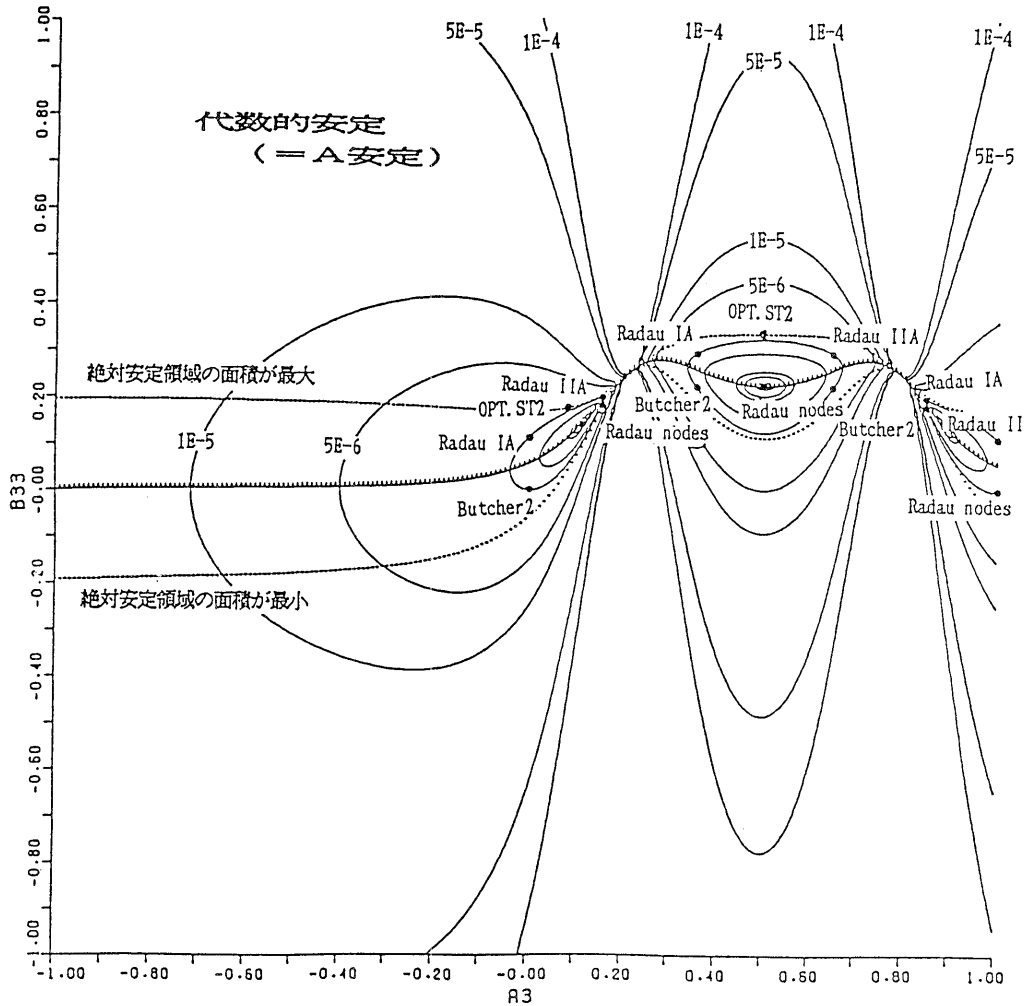


図 1 安定性と打ち切り精度の関係 I
Fig. 1 The relation between stability and truncation error I.

ある。(等高線の高さは $10^{-4}, 5 \times 10^{-5}, 10^{-5}, 5 \times 10^{-6}, 10^{-6}, 5 \times 10^{-7}, 10^{-7}, 5 \times 10^{-8}, 10^{-8}, 5 \times 10^{-9}, 10^{-9}, 10^{-10}$ である。

- ▬ の上側が代数的安定な領域
- ⋯⋯ は絶対安定領域がほぼ最大・最小となる曲線
- は既知公式)

また図 2 は、横軸に安定性を支配するパラメータ β_0 をとり、縦軸上方に $-\log_{10}(\min A_{53})$ と絶対安定領域の面積 ($\beta_0 < 1/2$ の場合)、縦軸下方に不安定領域の面積 ($\beta_0 > 1/2$) をとって、 β_0 とそれらの関係を示したものである。

図中の 5 個の既知公式の絶対安定領域の面積と、 A_{53} の値は表 2 のようになっており、各公式の絶対安定領域

表 2 3 段数 5 次法の既知公式の特性
Table 2 The characteristics of known formulas in the 3-stage 5th-order method.

公式名	β_0	安定性		A_{53}
		面積	区間	
Butcher 1	1/2		代数的安定	0.
Butcher 2	2/5	144.971	(-11.842)	9.79167 e-7
Radau nodes	2/5	144.971	(-11.842)	9.79167 e-7
Radau IA	3/5		代数的安定	9.79167 e-7
Radau IIA	3/5		代数的安定	9.79167 e-7
Opt. st 2	7/10		代数的安定	1.23457 e-6

域は図 3 に示される。(後出の Opt. st 2 の絶対安定領域は、図 3 中の $\beta_0 = 0.7041756$ に対する絶対安定領域と同一であるといってよい程の違いしかない。)

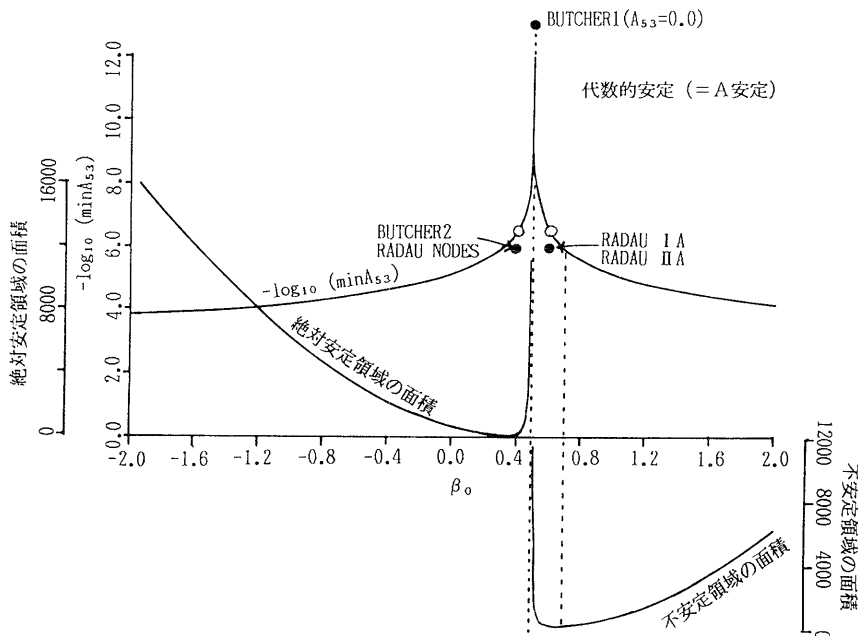


図 2 安定性と打ち切り誤差の関係 II
Fig. 2 The relation between stability and truncation error II.

表 2 および図 1～図 3 の観察から次のような結論を引き出すことができる(付録参照).

1. Butcher 1 の公式は, かくうじて代数的安定 (A 安定) で, 最良の打ち切り精度 6 次をもつ.
2. 既知公式は, ほぼ打ち切り精度のよいところに集まっている.
3. Radau I A と Radau II A, Butcher 2 と Radau nodes はそれぞれ安定性, 打ち切り精度の両面で全く同じ特性をもち, 安定性を変えずに打ち切り精度の面で改良が可能である. 改良した公式とその特性値を表 3 および表 4 に示す. また Butcher 2 と Radau nodes の公式は, 打ち切り精度を変えずに代数的安定な公式に改良することができる.(ただし, この 2 公式がもっている特徴は失われてしまう.)
4. 好ましい公式は, $\beta_0 \geq 1/2$ の側で作られる.
5. $\beta_0 = 0.7041756$ の曲線上でほぼ最良の安定性を持った公式が作られる. この曲線上で打ち切り精度が最良になるのは, 表 1 の公式に上の β_0 の値を代入すること

表 3 改良された公式
Table 3 Improved formulas.

M. Radau IA & IIA			
$\frac{5+\sqrt{15}}{10}$	$\frac{29}{180}$	$\frac{29+6\sqrt{15}}{180}$	$\frac{8+3\sqrt{15}}{45}$
$\frac{5-\sqrt{15}}{10}$	$\frac{29-6\sqrt{15}}{180}$	$\frac{29}{180}$	$\frac{8-3\sqrt{15}}{45}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{8-3\sqrt{15}}{72}$	$\frac{8+3\sqrt{15}}{72}$	$\frac{5}{18}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$
M. Butcher 2 & Radau nodes			
$\frac{5+\sqrt{15}}{10}$	$\frac{7}{60}$	$\frac{7+2\sqrt{15}}{60}$	$\frac{4+\sqrt{15}}{15}$
$\frac{5-\sqrt{15}}{10}$	$\frac{7-2\sqrt{15}}{60}$	$\frac{7}{60}$	$\frac{4-\sqrt{15}}{15}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{4-\sqrt{15}}{24}$	$\frac{4+\sqrt{15}}{24}$	$\frac{1}{6}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$

表 4 改良された公式の特性
Table 4 The characteristics of improved formulas.

公式名	β_0	面積	区間	A_{ss}
M. Radau IA & IIA	3/5		代数的安定	3.08642×10^{-7}
M. Butcher 2 & Radau nodes	2/5	144.971	(-11.842)	3.08642×10^{-7}

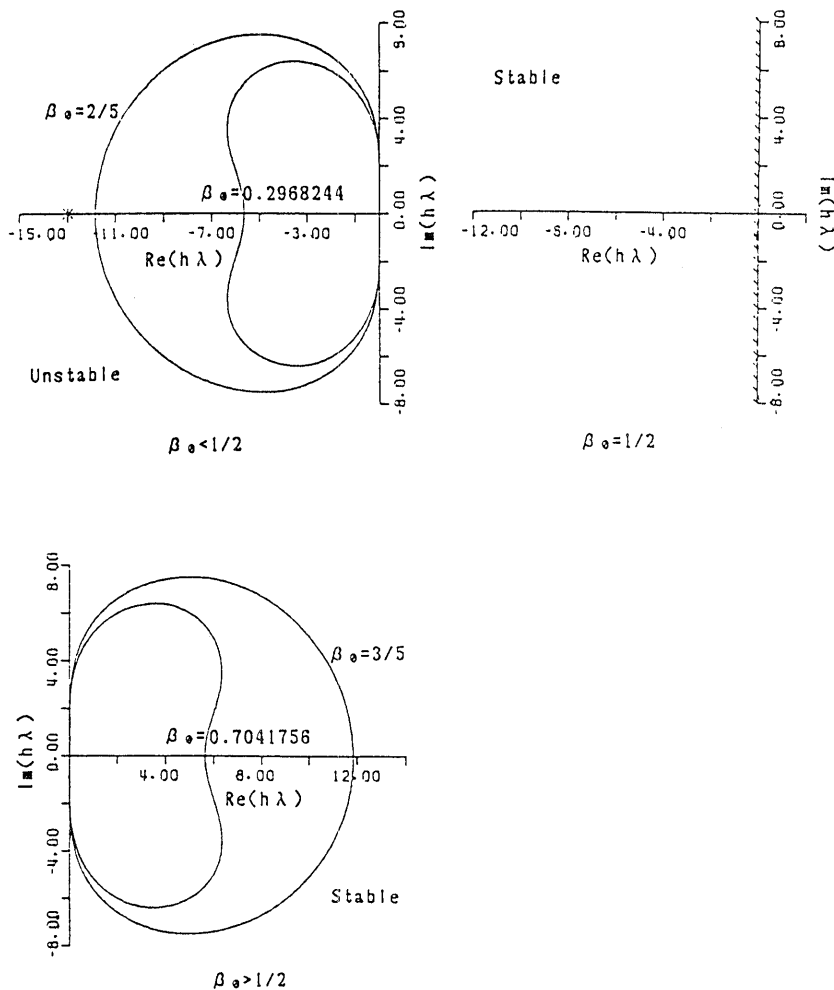


図 3 3 段数陰的 Runge-Kutta 法の絶対安定領域
Fig. 3 Stability domains for 3-stage implicit Runge-Kutta methods.

表 5 安定性ほぼ最良な公式の中で打ち切り精度最良の公式
Table 5 The one with the minimum truncation error among the formulas which have the largest stability domain.

《Opt. st 2》

$\frac{5+\sqrt{15}}{10}$	$\frac{11}{60}$	$\frac{11+2\sqrt{15}}{60}$	$\frac{2+\sqrt{15}}{15}$
$\frac{5-\sqrt{15}}{10}$	$\frac{11-2\sqrt{15}}{60}$	$\frac{11}{60}$	$\frac{2-\sqrt{15}}{15}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{2-\sqrt{15}}{24}$	$\frac{2+\sqrt{15}}{24}$	$\frac{1}{3}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$

で得られる。係数の簡単さや、上の β_0 の付近では絶対安定領域の面積の変化が少ないことを考慮して、表 5 に $\beta_0=0.7$ のときの公式を示す。この公式を Opt. st 2

として引用する。この公式の特性値は表 2 に示される。

7. 数 値 例

既知公式と改良された公式を用いて、次の 2 問題について数値実験を行った。

I. $y' = -\frac{1}{3}x^2y^2 \quad y(2)=1$

理論解 $y(x)=9/(x^3+1)$

$h=0.01$ 100 ステップ

II. $y' = 100(\sin x - y) \quad y(0)=0$

理論解 $y(x)=(\sin x - 0.01 \cos x + 0.01e^{-100x})/1.001$

$h=0.13$ 100 ステップ

数値実験は倍精度で行われ、 k_i を求めるには Newton 法を用いた。それぞれについて、第 1 ステップ

表 6 数値実験結果
Table 6 Results of numerical experiments.

I $y' = -x^2y^2/3$ $y(2)=1$ $h=0.01$ 100 ステップ	第一ステップ		最終ステップ		
	真値	誤差	真値	誤差	最大誤差
	Butcher 1	9.86777077519 D-01	1.80 D-16	3.21428571429 D-01	4.33 D-15
Butcher 2		7.73 D-15		6.59 D-14	1.10 D-13
Radau nodes		6.40 D-15		4.81 D-14	8.49 D-14
M. Butcher 2 & Radau nodes		7.06 D-15		5.70 D-14	9.74 D-14
Radau IA		-6.04 D-15		-3.91 D-14	-7.48 D-14
Radau IIA		-7.37 D-15		-5.71 D-14	-9.99 D-14
M. Radau IA & IIA		-6.70 D-15		-4.81 D-14	-8.73 D-14

II $y=100(\sin x-y)$ $y(0)=0$ $h=0.13$ 100 ステップ	第一ステップ		最終ステップ		
	真値	誤差	真値	誤差	最大誤差
	Butcher 1	1.19706575628 D-1	1.62 D-03	4.11051463866 D-01	8.20 D-08
Butcher 2		1.23 D-02		-1.27 D+07	-1.27 D+07
Radau nodes		1.24 D-02		-1.28 D+07	-1.28 D+07
M. Butcher 2 & Radau nodes		1.24 D-02		-1.27 D+07	-1.27 D+07
Radau IA		-6.19 D-04		-1.88 D-05	-6.19 D-04
Radau IIA		-6.00 D-04		-5.35 D-08	-6.00 D-04
M. Radau IA & IIA		-6.10 D-04		-9.40 D-06	-6.10 D-04

の誤差, 最終ステップの誤差, 最大誤差を表 6 に示す。I の結果は, 判定基準で測られた各公式の打ち切り精度をよく反映している。また II の結果からは, $h\lambda$ がその安定領域を越えてしまった Butcher 2, Radau nodes の公式に対する計算結果の発散が観察される。なお, Opt. st 2 の数値実験結果は示されていないが, 表 2, 表 4 と他の公式の数値例から, それがどのようなようになるか容易に推測されるであろう。

8. むすび

本研究は, 3 段数 6 次法を特別な場合として含む 3 段数 5 次陰的 Runge-Kutta 法について, 打ち切り精度と安定性の関係を研究し, それに基づき既知公式の比較および改良の可能性について考察することを目的として進められてきた。これらの結果は既に本文中に述べられているので, ここでは簡単にまとめておく。

1. 任意の公式が与えられたとき, その公式の自由パラメータの対や, β_0 と打ち切り精度判定基準を座標とする点を打ち切り精度と安定性の関係を示した図上に記入することにより, その公式の特性を既知公式との対比において位置づけることができ, またその公式の改良の可能性をも容易に知ることができる。

2. 代数的安定でない公式は, 打ち切り精度を一定に保ちながら代数的安定な公式に改良可能であるから, 何がほかに長所がなければ, $\beta_0 < 1/2$ の公式はあえて採

用する価値がないと思われる。

3. 最適次数の s 段数 $2s$ 次法において $\beta_0 = 1/2$ であり, かりうじて代数的安定である。

4. β_0 が与えられたとき, 打ち切り精度を最小にする公式が導かれた。

この研究は, 陽的 Runge-Kutta 法で試みられた既知公式の評価法の, 陰的 Runge-Kutta 法への拡張版である。この研究により, 既知公式の優劣, 位置づけ, 評価が一層明確になる。なお, 本文中の数式は, ほとんどが数式処理システム REDUCE 3.0 を用いて誘導, あるいは誘導が誤りなくなされていたかどうかの確認が行われていることを付記する⁸⁾。

謝辞 有益な助言をいただいた中央大学田口東教授に感謝する。

参考文献

- 1) Butcher, J. C.: Coefficients for the Study of Runge-Kutta Integration Processes, *J. Austral. Math. Soc.*, Vol. 3, pp. 185-201 (1963).
- 2) Butcher, J. C.: Implicit Runge-Kutta Processes, *Math. Comp.*, Vol. 18, pp. 50-64 (1964).
- 3) Hall, G. and Watt, J. M. (eds.): *Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*, Clarendon Press (1976).
- 4) Dekker, K. and Verwer, J. G.: *Stability of Runge-Kutta Methods for Stiff Nonlinear*

Differential Equations, North-Holland (1984).

- 5) Jain, M. K.: *Numerical Solution of Differential Equations* (second ed.), John Wiley & Sons (1984).
- 6) Butcher, J. C.: *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, Runge-Kutta and General Linear Methods*, John Wiley & Sons (1987).
- 7) 三井斌友: 数値解析入門, 朝倉書店(1985).
- 8) Hearn, A. C.: *REDUCE 3 User's Manual*, Univ. of Utah (1983).

付録 3 段数 5 次法の既知公式

(公式 1) Butcher 1^{2)~4),6)}

$\frac{5-\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{10-3\sqrt{15}}{45}$	$\frac{25-6\sqrt{15}}{180}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{10+3\sqrt{15}}{72}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{10-3\sqrt{15}}{72}$
$\frac{5+\sqrt{15}}{10}$	$\frac{25+6\sqrt{15}}{180}$	$\frac{10+3\sqrt{15}}{45}$	$\frac{5}{36}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{5}{18}$

(公式 2) Butcher 2¹⁾

0	0	0	0
$\frac{6-\sqrt{6}}{10}$	$\frac{9+\sqrt{6}}{75}$	$\frac{24+\sqrt{6}}{120}$	$\frac{168-73\sqrt{6}}{600}$
$\frac{6+\sqrt{6}}{10}$	$\frac{9-\sqrt{6}}{75}$	$\frac{168+73\sqrt{6}}{600}$	$\frac{24-\sqrt{6}}{120}$
	$\frac{1}{9}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$

(公式 3) Radau nodes^{5),6)}

$\frac{4-\sqrt{6}}{10}$	$\frac{24-\sqrt{6}}{120}$	$\frac{24-11\sqrt{6}}{120}$	0
$\frac{4+\sqrt{6}}{10}$	$\frac{24+11\sqrt{6}}{120}$	$\frac{24-\sqrt{6}}{120}$	
1	$\frac{6-\sqrt{6}}{12}$	$\frac{6+\sqrt{6}}{12}$	0
	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$

(公式 4) Radau IA^{4),6)}

0	$\frac{1}{9}$	$\frac{-1-\sqrt{6}}{18}$	$\frac{-1+\sqrt{6}}{18}$
$\frac{6-\sqrt{6}}{10}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{88+7\sqrt{6}}{360}$	$\frac{88-43\sqrt{6}}{360}$
$\frac{6+\sqrt{6}}{10}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{88+43\sqrt{6}}{360}$	$\frac{88-7\sqrt{6}}{360}$
	$\frac{1}{9}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$

(公式 5) Radau IIA^{4),6)}

$\frac{4-\sqrt{6}}{10}$	$\frac{88-7\sqrt{6}}{360}$	$\frac{296-169\sqrt{6}}{1800}$	$\frac{-2+3\sqrt{6}}{225}$
$\frac{4+\sqrt{6}}{10}$	$\frac{296+169\sqrt{6}}{1800}$	$\frac{88-7\sqrt{6}}{360}$	$\frac{-2-3\sqrt{6}}{225}$
1	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$
	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$

(平成 6 年 10 月 7 日受付)

(平成 6 年 12 月 5 日採録)



田中 正次 (正会員)

昭和 2 年生, 昭和 32 年東北大学理学部数学科卒業. 昭和 36 年同大学院理学研究科修士課程修了. 同年富士電機(株)研究部に入社. 昭和 37 年同社を退職し, 山梨大学講師となる. ついで同大学計算機科学科教授, 電子情報工学科教授を経て, 現在は日本大学工学部情報工学科教授, 専門は数値解析, 主として常微分方程式の数値解法とその応用に関する研究に携わる. 日本数学会, 日本応用数理学会各会員.



山下 忠志 (正会員)

1962 年生. 1984 年山梨大学計算機科学科卒業. 1986 年同大学院工学研究科修士課程修了. 同年(株)サンニチ印刷入社. 現在, (有)シンク情報システム取締役. 数値解析, オペレーションズリサーチ, POS 情報分析, 応用ソフトウェアの研究開発に従事.

**三村 和正 (正会員)**

1962年生. 1985年山梨大学工学部
計算機科学科卒業. 1988年同大学院
工学研究科修士課程修了. 同年セイ
コーエプソン(株)入社. 現在は, 液
晶表示体事業所 LD 設計部に所属

し, カラー液晶の駆動回路の開発, 設計等に従事.

**山下 茂**

昭和18年生. 昭和37年山梨工業
高等学校デザイン科卒業. 現在は文
部技官として山梨大学工学部電子情
報工学科に勤務. 日本体育学会会員.