

安定性のよい7段数6次陽的 Runge-Kutta 法について†

田中正次^{††} 山下茂^{††} 矢崎寛^{††}
 岩田亨^{†††} 三吉広美^{††††}

7段数6次陽的 Runge-Kutta 法については、1960年代に Butcher, Lawson, Luther らがいくつかの公式を提案し、その後1970年代に入って Sarafyan がやや異なったタイプの公式を提案している。しかし、公式の誘導それ自体がかなり困難なので、提案された公式は打ち切り誤差、安定性などの観点から十分最適化されているとはいえない。そこで著者たちは、近年同次の次数条件式の若干の自由度をもつ一解系を導き、その解系を打ち切り誤差および安定性の2つの観点から最適化し、好ましい二公式を得た。この2つの公式の難点は、一実用上ほとんど問題にならないと思うが一強いていえば、丸め誤差に関する性質である。この研究において、われわれは、安定多項式の絶対値が近似的に集積誤差の次のステップへの伝播率であることに着目し、著者たちによって得られた、前記の次数条件式の解系における自由度を活用し、誤差伝播特性がよく、しかも打ち切り誤差や丸め誤差についても好ましい特性をもつ公式を導出した。その結果、われわれは、既知公式に比べて安定性の面で極めて優れ、打ち切り誤差においてそれらを凌駕し、また、丸め誤差においてそれらに匹敵する3つの公式を得たので報告する。

1. はじめに

7段数6次陽的 Runge-Kutta 法については、1960年代に Butcher¹⁾, Lawson²⁾, Luther³⁾らがいいくつかの公式を提案し、その後1970年代に入って Sarafyan⁴⁾がやや異なったタイプの公式を提案している。しかし、公式の誘導それ自体がかなり困難なので、提案された公式は打ち切り誤差、安定性などの観点から十分最適化されているとはいえない。そこで著者たちは、近年同次の次数条件式の若干の自由度をもつ一解系を導き⁵⁾、その解系を打ち切り誤差および安定性の2つの観点から最適化し、好ましい二公式を得た⁶⁾。この二公式の難点は、一実用上ほとんど問題にならないと思うが一強いていえば、丸め誤差に関する性質である。

この研究において、われわれは、安定多項式の絶対値が、近似的に集積誤差の次のステップへの伝播率であることに着目し、著者たちによって得られた、前記の解系における自由度を活用し、誤差伝播特性がよく、しかも打ち切り誤差や丸め誤差についても好ましい特性をもつ公式を導出した。その結果、われわれ

は、既知公式に比べて安定性の面で極めて優れ、打ち切り誤差においてそれらを凌駕し、また、丸め誤差においてそれらに匹敵する、3つの公式を得たので報告する。

以下、2章において、7段数6次陽的 Runge-Kutta 法（以下7段数6次法または単に6次法と略称する）について述べ、3章において、打ち切り誤差とその大小の判定法、安定性とその優劣の判定法、および、丸め誤差特性の粗い判定基準について触れる。ついで、4章において、誤差伝播特性のよい3公式を導出する。5章において、公式誘導の考え方と、導出の過程に誤りがないことを立証するために、数値例が示され、結果について考察が述べられる。

2. 7段数6次陽的 Runge-Kutta 法

常微分方程式の初期値問題を、

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

とする。ここで y, y' および f はそれぞれ m 次元関数ベクトル、 y_0 は m 次元ベクトルである。また、 f は十分滑らかとしよう。

そのとき、 $x = x_n$ における解 y_n が与えられたとき、 $x = x_{n+1}$ における近似解 y_{n+1} を求める次の方法を、7段数陽的 Runge-Kutta 法という。

$$k_1 = h_n f(x_n, y_n)$$

$$k_i = h_n f\left(x_n + c_i h_n, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} h_{ij} k_j\right) \\ (i=2, 3, \dots, 7)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^7 a_i k_i \quad (2.2)$$

† On Sixth-Order Seven-Stage Explicit Runge-Kutta Methods with Extended Region of Stability by MASATSUGU TANAKA, SHIGERU YAMASHITA, HIROSHI YAZAKI (Department of Electrical Engineering and Computer Science, Faculty of Engineering, Yamanashi University), TORU IWATA (Fujifacomseigy Co. Ltd.) and HIROMI MIYOSHI (Nippondenso Co. Ltd.).

†† 山梨大学工学部電子情報工学科

††† 富士ファコム制御(株)

†††† 日本電装(株)

ここで、 a_i, b_{ij}, c_i は、公式を特徴づける係数で、 $h_n = x_{n+1} - x_n$ である。

ここでは、公式(2.2)が6次法になるように係数 a_i, b_{ij} および c_i が決定された場合、すなわち、公式(2.2)が7段数6次陽的 Ruge-Kutta 法になる場合について考察する。

7段数6次法には、いくつかの既知公式が知られているが、それについては文献6)に譲る。

7段数6次法(2.2)の表示は、簡単のために、慣用的に用いられる次の係数マトリックスによることにしよう。

$$\begin{array}{c|cccccc}
 c_2 & b_{21} & & & & \\
 c_3 & b_{31} & b_{32} & & & \\
 \vdots & \vdots & \vdots & & & \\
 c_7 & b_{71} & b_{72} & \cdots & b_{76} & \\
 \hline
 & a_1 & a_2 & \cdots & a_6 & a_7
 \end{array}$$

3. 公式評価の観点と尺度

3.1 打ち切り誤差とその大小の判定

文献5)に示すように、われわれは、7段数6次 Runge-Kutta 法の c_2, c_3, c_5 および c_6 を自由パラメータとする一解系を得ているが、この解系に含まれる公式に対して、その $x = x_{n+1}$ における数値解 y_{n+1} の局所打ち切り誤差 T_{n+1} は、 h_n が十分小さければ次のように表すことができる。

$$T_{n+1} \approx h_n^{48} \sum_{i=1}^{48} a_{6i} q_i(x_n, y_n) \quad (3.1.1)$$

ここで、 a_{6i} は公式の係数のみの関数、 $q_i(x, y)$ は微分方程式(2.1)の右辺の関数系 f に依存して定まる関数ベクトルで、この両者は、根付き木 (rooted tree) の使用によって求めることができる⁷⁾。紙面の関係で、 a_{6i} の具体的な表現については文献6)に譲る。

われわれは、与えられた微分方程式に独立な、局所打ち切り誤差の大小を判定するための尺度として、次式によって定義される数量 A_{62} および A_{63} を使用する。

$$A_{62} = \sum_{i=1}^{48} |a_{6i}| \quad (3.1.2)$$

$$A_{63} = \sum_{i=1}^{48} a_{6i}^2 \quad (3.1.3)$$

[定義1]

A_{62} および A_{63} を、7段数6次陽的 Runge-Kutta 法(2.2)の、打ち切り精度判定基準という。

打ち切り精度判定基準(3.1.2)、(3.1.3)の有効性については、多くの実績がある^{8),9)}。

3.2 安定性とその優劣の判定

7段数6次法(2.2)を、テスト方程式

$$y' = \lambda y \quad (3.2.1)$$

(ここで λ は、 $Re(\lambda) < 0$ であるような複素定数である) に適用し、次数条件式を用いて整理すると、

$$y_{n+1} = P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7) y_n \quad (3.2.2)$$

が得られる。ただし、 $P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7)$ は、次式によって定義される $h_n \lambda$ の多項式である。

$$\begin{aligned}
 P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7) = & 1 + h_n \lambda + \frac{(h_n \lambda)^2}{2!} + \frac{(h_n \lambda)^3}{3!} + \frac{(h_n \lambda)^4}{4!} \\
 & + \frac{(h_n \lambda)^5}{5!} + \frac{(h_n \lambda)^6}{6!} + \gamma_7 \frac{(h_n \lambda)^7}{7!}
 \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

ここで γ_7 は、

$$\gamma_7 = c_2 b_{32} b_{43} b_{54} b_{65} b_{76} a_7 \cdot 7! \quad (3.2.4)$$

によって定義される、安定性を支配するパラメータである。

[定義2]

(3.2.3)によって定義される $h_n \lambda$ の多項式 $P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7)$ を、7段数6次陽的 Runge-Kutta 法(2.2)の、安定多項式という。

[定義3]

$|P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7)| < 1$ であるとき、7段数6次陽的 Runge-Kutta 法(2.2)は、その $h_n \lambda$ に対して絶対安定であるといわれる。

[定義4]

次式によって定義される、領域 S の内点の集合を、7段数6次陽的 Runge-Kutta 法(2.2)の、絶対安定領域という。

$$S = \{h_n \lambda \mid |P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7)| \leq 1, h_n \lambda \in \mathbb{C}\} \quad (3.2.5)$$

また、 S の原点を含む単連結な閉領域の内点の集合から、 $Re(h_n \lambda) \geq 0$ を満足する $h_n \lambda$ を除いた集合を、有効絶対安定領域とよび、 S_e で表すことにする。

有効絶対安定領域は、絶対安定領域の中で数値解の安定性にとって有効な領域である。

[定義5]

有効絶対安定領域 S_e と、実軸 R との交わり S_I 、すなわち、

$$S_I = S_e \cap R = (-\alpha, 0.0) \quad (3.2.6)$$

を、7段数6次陽的 Runge-Kutta 法(2.2)の、絶対安定区間という。ここで α は、絶対安定区間の長さを表す数量になっている。

いま、 $x = x_n$ において実際に得られる数値解 (丸め誤差を含む) を \tilde{y}_n としよう。そのとき、

$$\tilde{y}_{n+1} = P(h_n \lambda, \gamma_7) \tilde{y}_n + r_{n+1} \quad (3.2.7)$$

と表すことができる。ここで、 r_{n+1} は、(3.2.7)の右辺の第1項の計算の際に発生する丸め誤差である。次に、(3.2.2)の y_n および y_{n+1} に、それぞれ $y(x_n)$ および $y(x_{n+1})$ を代入すると、

$$y(x_{n+1}) = P(h_n \lambda, \gamma_7) y(x_n) - T_{n+1} \quad (3.2.8)$$

が得られる。ここで、 T_{n+1} は、 $f = \lambda y$ であるときの局所打ち切り誤差である。いま、(3.2.7)から(3.2.8)を辺々引き算し、

$$e_n = \bar{y}_n - y(x_n) \quad (3.2.9)$$

$$E_{n+1} = \gamma_{n+1} + T_{n+1} \quad (3.2.10)$$

とおけば、

$$e_{n+1} = P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7) e_n + E_{n+1} \quad (3.2.11)$$

が得られる。勿論、 E_{n+1} は局所誤差である。

(3.2.11)式から、[定義3]の絶対安定の意味がはっきりしてくる。テスト方程式(3.2.1)を、7段数6次法(2.2)を用いて積分するとき、安定多項式 $P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7)$ の絶対値は、集積誤差 e_n の、次のステップへの伝播率になっている。公式(2.2)が、ある $h_n \lambda$ に対して絶対安定であるとは、そのような刻み幅 h_n で積分するとき、集積誤差 e_n が、縮小されて次のステップに伝播されることを意味する。また、刻み幅 h_n が十分小さいとき、一般の関数 $f(x, y)$ に対する7段数6次法の安定性は、テスト方程式に対する安定法を調べることにより、ほぼ把握できることについては十分な根拠がある。

この研究において、われわれは、安定性の優劣を比較するために、次のような尺度を使用する。

- (i) 有効絶対安定領域の面積 $A(S_c)$
 $A(S_c)$ が大きいほど安定性がよいとする。
- (ii) 有効絶対安定領域 S_c の包含関係
- (iii) 絶対安定区間の長さ α
- (iv) 安定多項式の絶対値の大小

公式 A および B の安定多項式を、それぞれ $P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7^A)$ および $P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7^B)$ とするとき、

$$|P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7^A)| < |P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7^B)| \quad (3.2.12)$$

ならば、その $h_n \lambda$ に対して、公式 A は公式 B より安定性がよいとする。

3.3 丸め誤差に関する性質の評価

打ち切り精度、安定性などを極限まで追求しようとすると、しばしば、丸め誤差特性の著しい劣化という現象に遭遇する。したがって、打ち切り誤差や安定性について最適化を試みる際には、丸め誤差に関する性質の変化を顧慮しなければならない。このような目的のために、われわれは、次式で定義される数量 R を使

用する。

$$R = \sum_{i=1}^7 |a_i| + \sum_{i=2}^7 \sum_{j=1}^{i-1} |b_{ij}| \quad (3.3.1)$$

[定義6]

R を7段数陽的 Runge-Kutta 法(2.2)の、丸め誤差特性判定基準という。

一般に、 R は小さいほど好ましいのは勿論であるが、常微分方程式の数値解は倍精度で求めることが多いので、 R が著しく大きくない限り、その大小に余り神経質になる必要はないだろう。

4. 誤差伝播特性のよい公式

ここでは、(3.2.11)に着目し、 $h_n \lambda$ のできるだけ長い区間について、集積誤差 e_n の次のステップへの伝播率、 $|P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7)|$ が、1より小さい公式、いいかえれば、ほぼ最大の絶対安定区間をもつ公式、また、絶対安定区間の長さは前者に劣るが、誤差伝播率がかなり長い区間にわたって非常に小さい公式、および、両者の中間の安定特性をもつ公式を導出する。

この研究において、われわれは、姉妹編の“7段数6次陽的 Runge-Kutta 法の最適化(文献6)参照”の場合と同様に、われわれの導出した、4自由度をもつ7段数6次陽的 Runge-Kutta 法の解系(文献5)参照)を利用する。すなわち、7段数6次法の解系における4自由パラメータ c_2, c_3, c_5 および c_6 のうち、 c_3 を自由パラメータから外し、代りに安定性を支配するパラメータ γ_7 を自由パラメータに入れて、 c_2, γ_7, c_5 および c_6 を新しい自由パラメータとして、上記の解系を使用する。ここでは、 γ_7 を、公式が所望の安定性をもつように与え、残りの3自由度を、その公式の打ち切り誤差の観点からの最適化に利用する。

4章のはじめに述べた、安定性に特徴をもつ3つの公式の導出方法は、共通しているので、繰返しを避けるために、その概要を述べておこう。

われわれは、安定多項式 $P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7)$ を γ_7 を助変数とする $h_n \lambda$ の関数と考え、適当な c が、この関数の極値となるように γ_7 を決定する。このような γ_7 は、具体的には、連立方程式(4.1)、(4.2)を解くことにより決定される。

$$P_{76}(x, \gamma_7) = c \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial \gamma_7} P_{76}(x, \gamma_7) = 0 \quad (4.2)$$

ついで、残った3つの自由パラメータ c_2, c_5 および c_6 を(丸め誤差特性が劣化しないように R を監視しながら)、それぞれ変域 $0.0 \sim 1.0$ で変動させ、打ち切り精

度判定基準 A_{63} がほぼ最小になるように決定する。

4.1 ほぼ最大の絶対安定区間をもつ公式

図1に、7段数6次法の既知公式(文献6)付録参照) Butcher (1)~Butcher (5)¹⁾, Lawson²⁾, および、本研究でわれわれが導いた4つの公式, IM10, IM9, IM5 および IM1の、安定多項式のグラフを示す。また、参考までに、各公式の絶対安定領域を、その下方に画いた。

このグラフの観察から、最大絶対安定区間をもつ公式は、その安定多項式のグラフが、 $y=1.0$ に接する場合で、それに対応する γ_7 は、連立方程式(4.1), (4.2)において $c=1.0$ としたときの解 $\gamma_7^{(10)}$ で、

$$\gamma_7^{(10)} = 0.547309 \quad (4.3)$$

である。また、そのときの絶対安定区間の長さ α は、

$$P_{76}(-\alpha, \gamma_7^{(10)}) = -1 \quad (4.4)$$

の解 $\alpha^{(10)}$ として得られ、

$$\alpha^{(10)} = 6.51117 \quad (4.5)$$

である。($\gamma_7^{(10)}, \alpha^{(10)}$ は単精度計算によって得られたもので、必ずしも高精度であることを要しない。)

7段数6次法の次数条件式の解系における4つの自由パラメータ c_2, γ_7, c_5 および c_6 のうち、まず、安定性を

支配するパラメータ γ_7 を(4.3)のように与え、残った3自由度を(丸め誤差特性の劣化に注意しながら)、その公式を打ち切り誤差の観点からほぼ最適化する目的に使用して、表1に示す公式 IM10 を得た。既知公式の特性値と共に、IM10 の特性値を表2に示す。

公式 IM10 は、上述のように、7段数6次法中最大の絶対安定区間をもつが、 $h_n \lambda$ が、 $y = P_{76}(h_n \lambda, \gamma_7^{(10)})$ と $y=1.0$ の接点の横座標と一致するような刻み幅 h_n が選ばれるとき、ステップが進んでも集積誤差が減衰していかない—すなわち絶対安定ではない—という欠点をもっている。

絶対安定区間中に不安定な点を含むという欠点を除去するために、Lawson は、IM10 の $\gamma_7^{(10)} = 0.547309$ を少し変え、 $\gamma_7 = 0.549750$ とすることにより、安定多

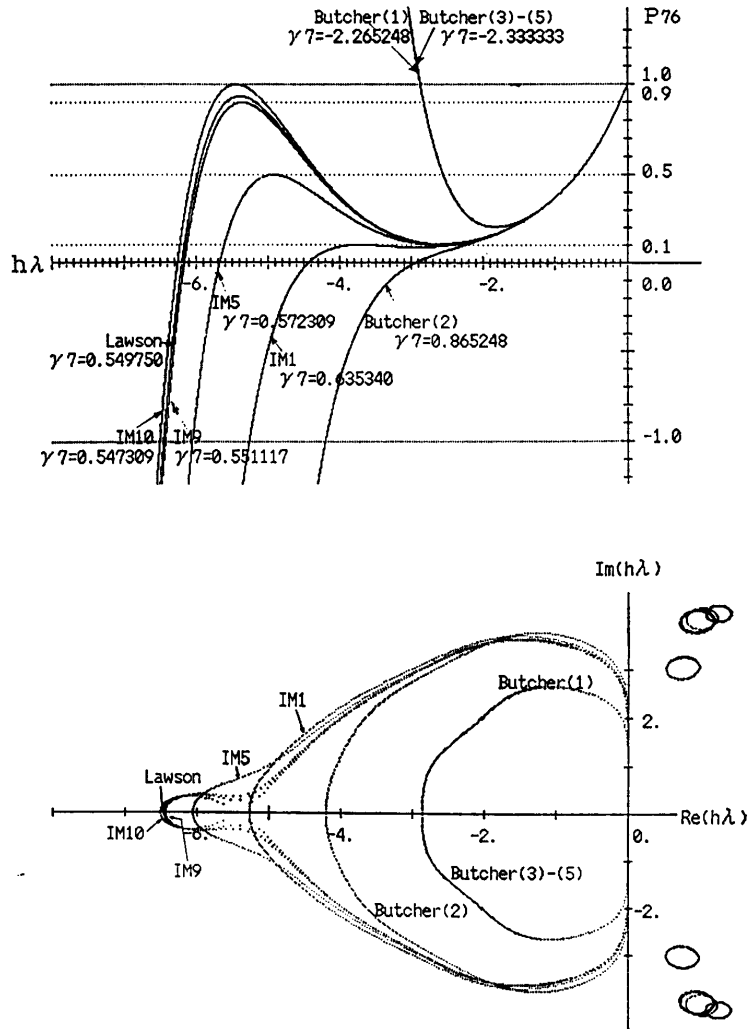


図1 7段数6次法の安定性
Fig. 1 The stability of seven-stage sixth-order methods.

項式のグラフの極大値を1より少し小さくした。著者たちは、まず、安定多項式のグラフが $y=0.9$ に接するように、 $c=0.9$ として連立方程式(4.1)および(4.2)を解き、安定性を支配するパラメータ γ_7 を決定した。このときの γ_7 を、 $\gamma_7^{(9)}$ によって表すと、 $\gamma_7^{(9)} = 0.551117$ となる(図1参照)。ついで、公式 IM10 の場合と同様、7段数6次法の次数条件式の解系における4自由パラメータのうち、安定性を支配するパラメータ γ_7 を $\gamma_7^{(9)}$ と定め、残りの3自由度を(丸め誤差特性の劣化に注意しながら)、その公式を打ち切り誤差の観点からほぼ最適化する目的に使用して、表3に示す公式 IM9 を得た。公式 IM9 の特性値を表2に示す。

図1の観察から知られるように、公式 Lawson も IM9 も、共に、公式 IM10 と異なり、絶対安定区間

表 1 公式 IM10 の係数
(4倍精度で計算し20桁に丸めたもの)
Table 1 Coefficients of formula IM10.

c_2	0.25551000000000000000D+00
c_3	0.30357594066879048314D+00
c_4	0.87582816393745246938D+00
c_5	0.66331000000000000000D+00
c_6	0.57092000000000000000D+00
c_7	0.10000000000000000000D+01
b_{21}	0.25551000000000000000D+00
b_{31}	0.12323397410595341294D+00
b_{32}	0.18034196656283707020D+00
b_{41}	0.27078676431669138811D+00
b_{42}	-0.41580685108564150008D+01
b_{43}	0.47631099104771760820D+01
b_{51}	0.41657076685584661196D-02
b_{52}	0.80516229119717162613D+00
b_{53}	-0.24840399232117508401D+00
b_{61}	0.10238599345544499177D+00
b_{62}	-0.73691951372152296858D-02
b_{63}	0.13358466599147523051D+01
b_{64}	-0.83866385966580321766D+00
b_{65}	0.10564805388314268586D+00
b_{66}	-0.24541658994876543607D-01
b_{71}	0.18321177307797170670D+00
b_{72}	-0.35121186507976078504D+00
b_{73}	0.90677821790660747371D+00
b_{74}	-0.32820061616931039363D+00
b_{75}	0.28725657331796272881D+01
b_{76}	-0.22831432429151352899D+01
a_1	0.88220268942386947696D-01
a_2	0.44198587590918010300D-35
a_3	0.49927776344300191192D+00
a_4	0.15898232668612632858D-01
a_5	0.76926639608227825627D+00
a_6	-0.45890680369796581673D+00
a_7	0.86244142561686067982D-01

の内部に不安定な点を含まない. Lawson と IM9 の違いは, Lawson の絶対安定区間がわずかに大きいことと, 表2に見られるように, 打ち切り精度と丸め誤差特性において, IM9 が勝っていることである. 特に丸め誤差特性が著しく勝っていることである.

4.2 誤差伝播特性が非常によく, 絶対安定区間もかなり長い公式 (安定多項式 P_{76} の極小値が十分小さくなるように構成した公式)

図1の観察から, 所望のような安定性をもつ公式の, 安定性を支配するパラメータ γ_7 は, 連立方程式(4.1)および(4.2)において, $c(>0)$ を小さくすることによって得られることがわかる. ここでは, 図1に示すように, $c=0.1$ として, 安定多項式のグラフが, $y=0.1$ に接するように γ_7 を決定した. その γ_7 を $\gamma_7^{(1)}$ で表すと, $\gamma_7^{(1)}=0.635340$ となる. 7段数6次法の解系において, 安定性を支配するパラメータ γ_7 を $\gamma_7^{(1)}$ と定め, 他の3自由度を(丸め誤差特性の劣化に注意しながら), 打ち切り誤差の観点から公式をほぼ最適化する目的に使用し, 公式 IM1 を得た. 公式 IM1 の係数を表4に, その特性値を表2に示す.

4.3 IM9 と IM1 の中間の安定特性をもつ公式

公式 IM9 と, 公式 IM1 の中間の安定特性をもつ公式として, われわれは, 安定多項式の接線が, $y=0.5$ となる公式を選んだ(図1参照). すなわち, 連立方程式(4.1)および(4.2)において, $c=0.5$ とおき, その解として得られた γ_7 を $\gamma_7^{(5)}$ とおくと, $\gamma_7^{(5)}=0.572309$ となる. 7段数6次法の解系において, まず, 安定性を支配するパラメータ γ_7 を $\gamma_7^{(5)}$ と定め, 残りの3自由度を(丸め誤差特性の劣化に注意しながら), 打ち切り誤差の観点から公式をほぼ最適化する

表 2 7段数6次法の特性

Table 2 The characteristics of seven-stage sixth-order methods.

公 式	A_{22}	A_{33}	r_7	α	$A(S_e)$	R
Butcher (1)	8.883973d-03	5.626540d-06	-2.265248	2.8655822	12.294648	0.119095d+02
Butcher (2)	5.323707d-03	3.087794d-06	0.865248	4.2060975	25.109786	0.317284d+02
Butcher (3)	6.751209d-03	2.255901d-06	-2.333333	2.8560718	12.216634	0.135204d+02
Butcher (4)	1.619681d-01	4.448444d-03	-2.333333	2.8560718	12.216634	0.805262d+02
Butcher (5)	1.513051d-02	2.444330d-05	-2.333333	2.8560718	12.216634	0.153767d+02
Lawson	1.966941d-02	1.936299d-04	0.549750	6.4628437	28.032788	0.208125d+03
IM 10	3.488546d-03	6.583826d-07	0.547309	6.5110782	27.824323	0.219779d+02
IM 9	3.471552d-03	6.537000d-07	0.551117	6.4366951	28.192284	0.222458d+02
IM 5	3.393962d-03	6.262851d-07	0.572309	6.0610610	29.552929	0.223831d+02
IM 1	3.079618d-03	4.891644d-07	0.635340	5.2736005	29.358623	0.499998d+02
STAB ^{opt}	1.792681d-03	2.446728d-07	0.58000	5.9398450	29.794539	0.441741d+03

表 3 公式 IM9 の係数
(4倍精度で計算し20桁に丸めたもの)
Table 3 Coefficients of formula IM9.

$c_2 =$	0.25000000000000000000D+00
$c_3 =$	0.30332456780100474998D+00
$c_4 =$	0.87453436120075110223D+00
$c_5 =$	0.66344000000000000000D+00
$c_6 =$	0.57154000000000000000D+00
$c_7 =$	0.10000000000000000000D+01
$b_{21} =$	0.25000000000000000000D+00
$b_{31} =$	0.11931298093767209489D+00
$b_{32} =$	0.18401158686333265510D+00
$b_{41} =$	0.35770869284827793311D+00
$b_{42} =$	-0.42314314261478557001D+01
$b_{43} =$	0.47482570945003288692D+01
$b_{61} =$	-0.13481614416021969832D-01
$b_{52} =$	0.82805695484239373665D+00
$b_{53} =$	-0.25425881727205895072D+00
$b_{54} =$	0.10312347684568718390D+00
$b_{61} =$	-0.36861707197151540163D-01
$b_{62} =$	0.13748562336635249966D+01
$b_{63} =$	-0.84852113507092759655D+00
$b_{64} =$	0.10680514159011187143D+00
$b_{65} =$	-0.24738532985557731355D-01
$b_{71} =$	0.19137297249581593109D+00
$b_{72} =$	-0.36419397485908692270D+00
$b_{73} =$	0.90684837511659528476D+00
$b_{74} =$	-0.32936286407769765771D+00
$b_{75} =$	0.28700783188182134502D+01
$b_{76} =$	-0.22747428274938400857D+01
$a_1 =$	0.88184824445509818049D-01
$a_2 =$	0.40342966120220907273D-34
$a_3 =$	0.49825781330009160898D+00
$a_4 =$	0.15981666949280061165D-01
$a_5 =$	0.76929790907546664442D+00
$a_6 =$	-0.45798640760907609476D+00
$a_7 =$	0.86264193838727962140D-01

表 4 公式 IM1 の係数
(4倍精度で計算し20桁に丸めたもの)
Table 4 Coefficients of formula IM1.

$c_2 =$	0.26000000000000000000D+00
$c_3 =$	0.29746919059398092299D+00
$c_4 =$	0.84358057708080945002D+00
$c_6 =$	0.89499000000000000000D+00
$c_8 =$	0.93322000000000000000D+00
$c_7 =$	0.10000000000000000000D+01
$b_{21} =$	0.26000000000000000000D+00
$b_{31} =$	0.12730011491583063755D+00
$b_{32} =$	0.17016907567815028544D+00
$b_{41} =$	0.10798852300575427481D+00
$b_{42} =$	-0.36562872031437132728D+01
$b_{43} =$	0.43918792572187684480D+01
$b_{61} =$	0.16648572176854051065D+00
$b_{62} =$	-0.60435892367299513472D+01
$b_{63} =$	0.68501955761488120049D+01
$b_{64} =$	-0.78102061187401168267D-01
$b_{61} =$	0.24097569488666207120D+00
$b_{62} =$	-0.81837879725928053218D+01
$b_{63} =$	0.90032804326576143503D+01
$b_{64} =$	0.20970080151161916662D-01
$b_{65} =$	-0.14821823510263301638D+00
$b_{71} =$	0.76904410503040394724D-01
$b_{72} =$	-0.10228076892189388451D+01
$b_{73} =$	0.15980896370339463277D+01
$b_{74} =$	0.86340970393459319940D+00
$b_{75} =$	-0.11340954560528921365D+01
$b_{76} =$	0.61849939380025105974D+00
$a_1 =$	0.89311200561983057193D-01
$a_2 =$	-0.10412058761843493831D-32
$a_3 =$	0.45125543464813881201D+00
$a_4 =$	0.16926840212043824678D+01
$a_5 =$	-0.21630500348154793644D+01
$a_6 =$	0.83919107607733033783D+00
$a_7 =$	0.90608302323644689502D-01

目的に使用し、公式 IM5 を得た。公式 IM5 の係数と、その特性値が、それぞれ、表 5 と表 2 に示される。

図 1 と表 2 の観察から、既知公式と、われわれが新規に導出した公式の特性について、次のような結論を引き出すことができる。

(1) 既知公式 Butcher (1)~Butcher (5) は、われわれの導出した公式 IM10, IM9, IM5 および IM1 に比べて、安定性の面で劣っている。Butcher の 5 公式中では、Butcher (2) の安定性が目立ってよく、他の 4 公式は、ほぼ同一の安定性を持っている。

(2) Lawson の公式の安定性は、既知公式中最良で、われわれの導出した公式 IM9 よりもわずかに長い絶対安定区間をもつ。しかし、既述のように

Lawson の公式は、IM9 に比べて、打ち切り精度と丸め誤差特性においてかなり劣っている。

(3) 公式 IM1 は、Lawson を除くすべての既知公式に比べて、絶対安定区間が長く、そのほとんど全区間において、ほぼ集積誤差の伝播率を表す安定多項式の絶対値が、非常に小さいという特徴を持っている。したがって、 $h_n \lambda$ が絶対安定区間の十分内部に入るような刻み幅 h_n が選ばれるとき、他の公式に比べて高精度である。

(4) 公式 IM5 は、Lawson を除くすべての既知公式に比べて、絶対安定区間が長く、そのほとんど全区間において、安定多項式の絶対値が比較的小さいという特徴を持っている。いいかえれば、IM5 は、既述のように IM9 と IM1 の中間の安定特性をもって

表 5 公式 IM5 の係数
(4倍精度で計算し20桁に丸めたもの)
Table 5 Coefficients of formula IM5.

$c_2 =$	0.25000000000000000000000000000000+00
$c_3 =$	0.30190625320259716971D+00
$c_4 =$	0.86717727259299634374D+00
$c_5 =$	0.66264000000000000000000000000000+00
$c_6 =$	0.57639000000000000000000000000000+00
$c_7 =$	0.10000000000000000000000000000000+01
$b_{21} =$	0.25000000000000000000000000000000+00
$b_{31} =$	0.11961148175693574213D+00
$b_{32} =$	0.18229477144566142759D+00
$b_{41} =$	0.33148000998165829402D+00
$b_{42} =$	-0.41279777372626092373D+01
$b_{43} =$	0.46636749998739472870D+01
$b_{51} =$	-0.13687897073649569947D-01
$b_{52} =$	0.87573250629793487554D+00
$b_{53} =$	-0.30698885568597681295D+00
$b_{61} =$	0.10758424646169150736D+00
$b_{62} =$	-0.36911942375994874697D-01
$b_{63} =$	0.14286504063170479921D+01
$b_{64} =$	-0.90384546993784680669D+00
$b_{65} =$	0.11335370529866216883D+00
$b_{66} =$	-0.24856699301868479511D-01
$b_{71} =$	0.19145500910979875621D+00
$b_{72} =$	-0.36674806956124799927D+00
$b_{73} =$	0.88338279467716834403D+00
$b_{74} =$	-0.33473544188062488917D+00
$b_{75} =$	0.29457492846461390537D+01
$b_{76} =$	-0.23191035769912332655D+01
$a_1 =$	0.87973605987063759894D-01
$a_2 =$	0.10344350287236130070D-35
$a_3 =$	0.49269948583503648526D+00
$a_4 =$	0.17831896089677451288D-01
$a_5 =$	0.78697515025982585167D+00
$a_6 =$	-0.47162827568735953892D+00
$a_7 =$	0.86148137515755990803D-01

いる。

(5) IM 10, IM 9, IM 5 および IM 1 の各公式は、打ち切り精度において既知公式に勝っている。また、(2)で述べたように、IM 9 は、Lawson とほぼ同等の安定特性をもち、打ち切り精度と丸め誤差特性において勝っているので、Lawson の公式の代りに用いて有利である。公式 IM 9, IM 5 および IM 1 は、Butcher の 5 公式中、打ち切り精度や安定性について最良である Butcher (2) に比べて、打ち切り精度や安定性において優れ、丸め誤差特性についても遜色がないので、Butcher (2) の代りに用いて有利である。

5. 数値例と結果の考察

公式の誘導が正しく行われたかどうか、特性値に誤りがないかどうかをチェックするため、多数の例題について数値実験を行った。実験には、Butcher の 5 公式中最良の特性をもつ Butcher (2), Lawson, IM 10, IM 9, IM 5 および IM 1 が用いられた。

実験は、non-stiff 問題 (単一系 10 例, 連立系 4 例) については、前記の各公式を用いて、刻み幅 0.1 と 0.05 で各 100 ステップ積分し、第一ステップおよび最終ステップの誤差、最大誤差を調査することによって行われた。使用計算機は VAX 11/785 で、計算は倍精度で実行された。

前記例題の数値解の精度を全般的に眺めると、各公式の打ち切り精度判定基準から予想されるように、Lawson の公式が最も低精度で、Butcher (2) がそれにつき、IM 10~IM 1 が最も高精度であった。特に、この精度の差は、刻み幅が 0.05 のとき顕著であった。参考までに、上記の数値例の中で、数値解の誤差について平均的な傾向を示す一例を、表 6 に掲げる。

表 6 $y'=(y-1)(xy-y-x) y(0)=3/2$ の数値解における誤差の絶対値
刻み幅 $h=0.05$ の場合 (理論解 $y=(2e^x+x+1)/(2e^x+x)$)
Table 6 Absolute values of errors in numerical solutions of $y'=(y-1)(xy-y-x)$, $y(0)=3/2$.
(theoretical solution $y=(2e^x+x+1)/(2e^x+x)$.)

公式名	第1ステップにおける誤差	最終ステップにおける誤差	最大誤差
Butcher (2)	0.1046290832d-10	0.2662869925d-12	0.2033870294d-10
Lawson	0.6691320026d-08	0.2739565200d-07	0.1059136380d-06
IM 10	0.3287203842d-11	0.5784261958d-13	0.6100564498d-11
IM 9	0.3310518526d-11	0.5842548667d-13	0.6146028131d-11
IM 5	0.3195166354d-11	0.563810753 d-13	0.5928618707d-11
IM 1	0.8806289031d-12	0.1507127756d-13	0.1132510752d-11

次に、既知公式や、われわれが新規に導出した公式の、安定性に関する特性値が正しく得られているかどうか、ひいては、それらの公式の安定性に関するわれわれの把握が妥当なものであるかどうかを検討するために、弱 stiff 問題（単一系 4 問、連立系 2 問）を、いろいろな刻み幅を用いて解き、最終ステップにおける数値解の相対誤差を調べた。いずれの問題についても、安定性に関する特性値が正しいことを裏付ける結果が得られているので、ここでは、参考までに、次の例題に関する数値計算結果を示そう。

【例題】弱 stiff 問題

$$\begin{aligned} y' &= -200\{y - \log(x+1)\} + 1/(1+x) \\ y(0) &= 1 \end{aligned} \quad (5.1)$$

を、いろいろな刻み幅 h を用いて $x=3.0$

まで積分し、 $x=3.0$ における数値解の相対誤差 E を求める。ついで、図 2 に、横軸に $h\lambda = -200h$ をとり、縦軸に $\log_{10}|E|$ をとって両者の関係を示す。

図 2 の観察から、 $-200h$ が各公式の絶対安定区間 $(-\alpha, 0.0)$ 内にあるように刻み幅 h が選ばれると数値解は収束し、さもなければ発散することが知られるであろう。

既知公式の中で、Luther の 7 段数 6 次法⁹⁾に関するデータが欠けているのは、著者の不注意による。しかし、その後、Butcher (2) に比べて、打ち切り精度と安定性において劣り、丸め誤差特性が同等であることが、その特性値から知られた。したがって、仮に前記のような数値実験を行って見ても、このような場合、Butcher (2) に比べて計算結果が劣ることは、われわれの度重なる経験から明白である。

他にもう 1 つ、通常 7 段数 6 次法と考えられている Shanks の公式¹⁰⁾を、既知公式から除外した。その理由は、Shanks の公式が厳密に言えば 5 次法で、ここでの規格に合わなかったことと、丸め誤差に関する性質が他の公式に比べて著しく不良であった ($R=2355$) ことによる。このような公式は、累積する丸め誤差のために、長区間の積分には耐え得ないと思われる。

以上の数値実験結果は、図 1 や表 2 (特性値の表) を熟視することによって得られた、4 章末尾の主張 (1)~(5) を裏付ける。

ここで、再び、われわれの研究成果を簡潔に述べておく。

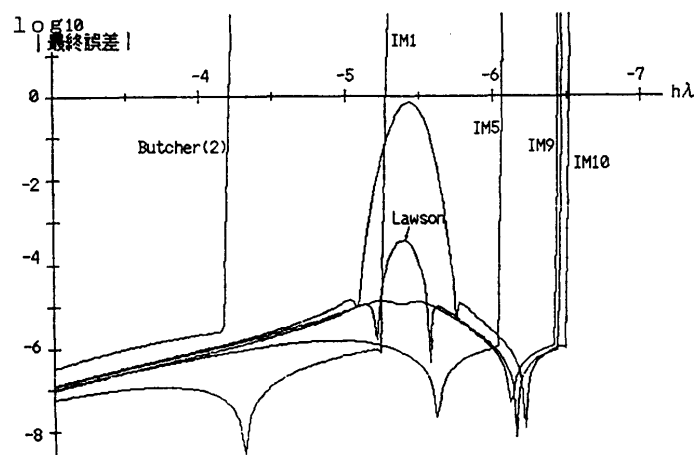


図 2 問題 $y' = -200\{y - \log(x+1)\} + 1/(x+1)$, $y(0) = 1$ の数値解の最終ステップ ($x=3.0$) における相対誤差 (理論解 $y = e^{-200x} + \log(x+1)$)

Fig. 2 Relative errors in final step ($x=3.0$) of numerical solutions of the following problem $y' = -200\{y - \log(x+1)\} + 1/(x+1)$, $y(0) = 1$. (theoretical solution: $y = e^{-200x} + \log(x+1)$.)

(1) 既知公式の中で、最良の打ち切り精度をもち、安定性も、また、丸め誤差特性もよい Butcher (2) と比較して、IM 9, IM 5 および IM 1 は、打ち切り精度と安定性において勝り、丸め誤差に関する性質がほぼ同等である。したがって、Butcher (2) は、IM 9, IM 5, IM 1 のいずれかと不利なく置きかえることができる。

(2) 既知公式の中で、安定性最良の Lawson の公式と比較して、IM 9 は、安定性がほぼ同等で、打ち切り精度と丸め誤差特性において勝っている。したがって、Lawson の公式は、IM 9 と不利なく置きかえることができる。

6. おわりに

われわれは、公式の導出において、7 段数 6 次法の安定性が、安定多項式 $y = P_{76}(h\lambda, \gamma_7)$ の、接線 $y=c$ を指定することにより決定されることに注目し、まず、公式が所望の安定性をもつように定数 $c (>0)$ を決定する。第 2 に、 c に対応する安定性を支配するパラメータ γ_7 を求める。ついで、われわれは、7 段数 6 次法の 4 自由パラメータ c_2, γ_7, c_5 および c_6 のうち、 γ_7 を前記のように定め、残りの 3 つの自由パラメータを、丸め誤差特性を劣化させないように注意しながら、公式が打ち切り誤差の観点からほぼ最良になるように決定し、公式を導出した。

この方法が、予想されるよりはるかに有効であることは、既知公式と、新規に導出した公式を比較するこ

とにより, 容易に知ることができる.

最後に, 前著“7段数6次陽的 Runge-Kutta 法の最適化について”⁶⁾において導出した, 有効絶対安定領域の面積ほぼ最大の公式 STAB^{opt} と, 同等な安定性をもつ IM5 とを比較して見よう (表2参照). STAB^{opt} は, IM5 と比べて打ち切り精度において勝るが, 丸め誤差特性において著しく劣っている. われわれは, 両者のうち, むしろ丸め誤差について好ましい性質をもつ IM5 を選びたい.

われわれは, 8段数6次法および9段数7次法についても同様な研究を行い, 好ましい結果を得ているが, それについては紙面を改めて論じたい.

謝辞 いろいろと有益な助言をいただいた中央大学田口東教授ならびにレフェリーの皆様感謝する.

参 考 文 献

- 1) Butcher, J. C.: On Runge-Kutta Processes of High Order, *J. Austral. Math. Soc.*, Vol. 4, pp. 179-194 (1964).
- 2) Lawson, J. D.: An Order Six Runge-Kutta Process with Extended Region of Stability, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 4, pp. 620-625 (1967).
- 3) Luther, H. A.: An Explicit Sixth-Order Runge-Kutta Formula, *Math. Comp.*, Vol. 22, No. 102, pp. 434-436 (1968).
- 4) Sarafyan, D.: Improved Sixth-Order Runge-Kutta Formulas and Approximate Continuous Solution of Ordinary Differential Equations, *J. Math. Anal. Appl.*, Vol. 40, pp. 436-445 (1972).
- 5) 田中正次, 高山尚文: 7段数6次陽的 Runge-Kutta 法の次数条件の解について, 情報処理学会論文誌, Vol. 33, No. 6, pp. 812-816 (1992).
- 6) 田中正次, 高山尚文, 山下 茂: 7段数6次陽的 Runge-Kutta 法の最適化について, 情報処理学会論文誌, Vol. 33, No. 8, pp. 993-1005 (1992).
- 7) Butcher, J. C.: *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, Runge-Kutta and General Linear Method*, John Wiley & Sons (1987).
- 8) Hull, T. E. and Johnston, R. L.: Optimum Runge-Kutta Methods, *Math. Comp.*, Vol. 18, pp. 306-310 (1964).
- 9) 田中正次: Runge-Kutta 法の打ち切り誤差に関する研究, 博士論文 (東京大学) (1972).
- 10) Shanks, E. B.: Solutions of Differential Equations by Evaluations of Functions, *Math. Comp.*, Vol. 20, No. 93, pp. 21-38 (1966).

(平成4年7月21日受付)

(平成4年9月10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 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.



矢崎 寛 (正会員)

昭和43年生. 平成3年3月山梨大学工学部計算機科学科卒業. 同年4月同大学大学院工学研究科修士課程計算機科学専攻に進学, 現在に至る.



岩田 亨

昭和44年生. 平成3年3月山梨大学工学部計算機科学科卒業. 同年4月富士ファコム制御(株)に入社, 現在に至る.



三吉 広美

昭和43年生. 平成3年3月山梨大学工学部計算機科学科卒業. 同年4月日本電装(株)に入社. 現在は電子技術部技2設計1課において, マツダ車のプログラム設計に従事する.