

高位相次数をもつ Singly Implicit Runge-Kutta 法の構成†

小 藤 俊 幸††

陰的 Runge-Kutta 法の位相誤差解析 (phase-lag analysis) に基づき、周期解をもつ常微分方程式系に適した数値解法の構成について論じる。具体的には、陰的 Runge-Kutta 法の中では実現性の面で比較的有利な方法と考えられる、Singly Implicit Runge-Kutta 法 (SIRK 法) を対象として、位相誤差に関して高次数となる方法の構成について述べる。段数 m が偶数である場合は、通常の意味で最良な $m+1$ 次 SIRK 法が、位相次数の意味でも最良であるが、段数 m が 3 以上の奇数である場合には、通常の意味では m であるが、位相次数に関して、上の最良の方法をしのぐ方法が存在することを示し、最適化された位相次数をもついくつかの SIRK 法を具体的に構成する。また、これら高位相次数をもつ方法の効果を数値的に検証する。

1. はじめに

陰的 Runge-Kutta 法を、周期解をもつテスト方程式

$$\frac{du}{dt} = i\omega u \quad (\omega \in R) \quad (1.1)$$

に適用した際に生じる誤差の位相成分 (位相誤差と称す) の解析に基づき、周期解をもつ常微分方程式系に対して優れた特性をもつ数値解法の構成について論じる。同様の解析手法は、周期解をもつ二階常微分方程式に対する数値解法を構成する際には、しばしば用いられており、位相誤差解析 (phase-lag analysis) とも呼ばれている^{1), 8)~10), 16)~18), 20)}。また、Runge-Kutta 法の位相誤差特性に関しても、既にいくつかの研究がなされている^{11), 18), 19)}。

陰的 Runge-Kutta 法に対する位相誤差解析は、その安定性関数の特性解析としてとらえることができる。実際、テスト方程式に対する位相誤差は、陰的 Runge-Kutta 法の安定性関数を用いて表され、

$$\phi(y) = \sum_{j=0}^{\infty} C_{p,j} y^j \quad (1.2)$$

のようにべき級数展開される。ただし、 $y = \omega h$ 、 h は積分の刻み幅である。この展開に基づき、Runge-Kutta 法の位相に関する近似の次数を、 $C_{p,j} = 0$ ($j = 0, 1, \dots, q$)、 $C_{p,q+1} \neq 0$ を満たす整数 q により定義し、位相次数と呼ぶ。

位相次数 q と安定性関数の (指数関数に対する有理関数近似としての) 近似の次数 p との間の基本的な関

係として、 p が偶数ならば、 q は p と一致し、 p が奇数ならば、 q は $p+1$ 以上の偶数となることが示されている¹¹⁾。この結果は、 p が奇数の場合には、 $q \geq p+1$ と下界を与えるのみであり、その場合、より高い位相次数を有する積分法、すなわち、位相誤差に関し高精度な積分法の存在が期待される。

本論文では、陰的 Runge-Kutta 法の中では比較的実現性に富む方法と思われる、Singly Implicit Runge-Kutta 法 (SIRK 法)²⁾ を対象として、位相誤差に関し高精度な積分法を構成することを試みる。

m 段 SIRK 法の安定性関数は、

$$R(z) = \frac{P_m(z)}{(1-\alpha z)^m} \quad (\alpha \in R) \quad (1.3)$$

の形の有理関数で与えられる。ただし、 $P_m(z)$ は m 次以下の多項式である。また、 m 段 SIRK 法は少なくとも m 次の次数を有し、特に、その安定性関数は、指数関数に対する有理関数近似としては、 m 次以上の近似となる。一方、 m 段 SIRK 法の到達可能な次数は $m+1$ 次であり^{2), 13)}、その場合の位相次数は、 m が奇数ならば $q = m+1$ 、 m が偶数ならば $q = m+2$ と決定される。したがって、段数 m が偶数の場合、 m 次法の位相次数は m であることに着目すると、 $m+1$ 次 SIRK 法、すなわち、通常の意味で最良な SIRK 法が、位相次数の観点からも最良であることが結論される。

しかしながら、段数 m が奇数の場合には、事情は異なる。最高次数の SIRK 法は、位相次数の観点、すなわち周期解の積分法としては、必ずしも最良とは言えないのである。本論文では、この主張を明らかにするために、まず、次の定理を用意する： m (≥ 3) が奇数のとき、(1.3)の形の有理関数近似で、 $p = m$ 、 $q \geq m+3$ を満たすものが存在する。

† Construction of Singly Implicit Runge-Kutta Methods with Reduced Phase Errors by TOSHIYUKI KOTO (International Institute for Advanced Study of Social Information Science, Fujitsu Limited).

†† 富士通(株)国際情報社会科学研究所

さらに, SIRK 法の重要な部分クラスである Singly Implicit Collocation 法 (SIC 法) において, 上述の定理で与えられる有理関数近似を安定性関数としてもつ方法を構成し, 通常の意味で最高次数となる SIC 法との数値実験による比較を行う。

以下, 本論文の構成について述べる. 次の第2章では, 陰的 Runge-Kutta 法に関する基本的な概念である, SIRK 法, 安定性関数, 位相誤差, 位相次数等の概念を導入する. 第3章で, (1.3)の形の有理関数近似の位相誤差, 位相次数について論じ, 上述した定理の証明を与える. さらに, 第4章で, 対応する SIRK 法の構成について述べ, 第5章で, それらの方法を用いた数値例を示す. 最後の第6章はまとめである.

2. 準備

ここでは, 以下の議論に必要となる基本的な概念を用意する.

2.1 Singly Implicit Runge-Kutta 法

(a, b) を積分区間とし, 次のような分割を考える.

$$a = t_0 < t_1 < \cdots < t_n < \cdots < t_N = b,$$

$$t_n = t_0 + nh \quad (n=0, 1, \dots, N).$$

ただし, N は積分区間の分割数と呼ばれる正整数である. 常微分方程式の初期値問題

$$\frac{du}{dt} = f(t, u) \quad (a < t < b), \quad u(a) = u_0 \quad (2.1.1)$$

に対して, m 段陰的 Runge-Kutta 法は,

$$\begin{aligned} u_n &= u_{n-1} + h \sum_{j=1}^m b_j f(t_{n-1} + c_j h, U_j), \\ U_j &= u_{n-1} + h \sum_{k=1}^m a_{jk} f(t_{n-1} + c_k h, U_k) \\ &\quad (j=1, 2, \dots, m) \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

と定式化される. ただし, u_n は $u(t_n)$ の近似値, U_j は中間変数である. また, a_{jk}, b_j, c_j は Runge-Kutta 法の係数で, 通常, 実数であることが仮定される. 特に, $A = (a_{jk})$ ($1 \leq j, k \leq m$) で与えられる m 次正方行列は, Runge-Kutta 行列 (R-K 行列) と呼ばれている.

Runge-Kutta 法の次数 (order of consistency) に関する条件は, 係数の満たすべき代数方程式系の形で与えられるが, 高次の場合には, 非常に複雑な非線形方程式系となる. その方程式系の取扱いを容易にするために, 係数に対して, 次のような簡約化条件を仮定して議論することが多い.

$$\begin{aligned} B(p) : \sum_{k=1}^m b_k c_k^{r-1} &= 1/r \\ (r=1, 2, \dots, p). \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

$$\begin{aligned} C(p) : \sum_{k=1}^m a_{jk} c_k^{r-1} &= c_j^r / r \\ (j=1, 2, \dots, m, r=1, 2, \dots, p). \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

$$\begin{aligned} D(p) : \sum_{k=1}^m b_k c_k^{r-1} a_{kj} &= b_j (1 - c_j^r) / r \\ (j=1, 2, \dots, m, r=1, 2, \dots, p). \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

この簡約化条件に関して, Butcher⁴⁾ は

$$p \leq \min \{ \xi + \eta + 1, 2\xi + 2 \} \quad (2.1.6)$$

を満たす整数 p, ξ, η に対して, 条件 $B(p), C(\xi), D(\eta)$ が成立するならば, (2.1.2) は少なくとも p 次の次数を有することを示している.

整数 s ($0 \leq s \leq m$) に対し, Runge-Kutta 法 (2.1.2) の係数が, 簡約化条件 $B(m+s), C(m-1), D(s)$ を満たし, さらに, c_j ($j=1, 2, \dots, m$) が相異なるとき, (2.1.2) は変換型 Runge-Kutta 法 (transformed method) と呼ばれる. 上述のことから, その次数は $m+s$ 以上である. 特に, R-K 行列の固有値が唯一つの元 α からなる変換型 Runge-Kutta 法は, Singly Implicit Runge-Kutta 法 (SIRK 法) と呼ばれ, 種々の観点から, 研究がなされている^{2), 3), 7)}.

2.2 位相誤差, 位相次数

$A^* = (a_{jk} - b_k)$ ($1 \leq j, k \leq m$) とおく. Runge-Kutta 法 (2.1.2) を線形方程式

$$\frac{du}{dt} = \zeta u \quad (\zeta \in C) \quad (2.2.1)$$

に適用するとき, 差分方程式

$$u_n = R_m(\zeta) u_{n-1}, \quad (2.2.2)$$

$$R_m(\zeta) = \frac{\det(I - \zeta A^*)}{\det(I - \zeta A)} \quad (\zeta = h\zeta) \quad (2.2.3)$$

が得られることは, よく知られている (例えば, 文献 15)). ここで, $R_m(\zeta)$ は Runge-Kutta 法の安定性関数と呼ばれる有理関数であり, 特に, 指数関数 $\exp(\zeta)$ に対する有理関数近似となっている.

(2.2.3) 式により, m 段 SIRK 法の安定性関数は, m 次以下の多項式 $P_m(\zeta)$ を用いて, (1.3) の形に表される. ただし, α は R-K 行列 A の (唯一つの) 固有値であり, 特に, A が実行列であることから実数となる. また, SIRK 法は少なくとも m 次の次数を有することから, その安定性関数の (有理関数近似としての) 近似の次数も m 次以上である.

以下, Runge-Kutta 法の近似特性を考察する準備

として、指数関数に対する有理関数近似 $R(z)$ に関するいくつかの定義を述べる。

誤差関数 $\exp(z) - R(z)$ の Taylor 展開を

$$\exp(z) - R(z) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j z^j \quad (2.2.4)$$

とするとき、有理関数近似 $R(z)$ の次数は

$$C_j = 0 \quad (j=0, 1, \dots, p), \quad C_{p+1} \neq 0 \quad (2.2.5)$$

を満たす整数 p により定義することができるが、特に、 $R(z)$ が Runge-Kutta 法の安定性関数である場合には、この次数 p を Runge-Kutta 法の線形次数と呼ぶことにする。

また、

$$\phi(y) = y - \arg(R(iy)) \quad (y \in R) \quad (2.2.6)$$

により定義される関数 $\phi(y)$ を位相誤差関数と呼ぶ。 $\phi(y)$ は原点の近傍で実解析的であり、(1.2)の形にベキ級数展開が可能である。(1.2)の展開に基づき、有理関数近似 $R(z)$ の位相に関する精度の指標を次のように定義する。

定義 (1.2)において、

$$C_{p,j} = 0 \quad (j=0, 1, \dots, q), \quad C_{p,q+1} \neq 0 \quad (2.2.7)$$

が成り立つとき、整数 q を $R(z)$ の位相次数と呼ぶ。

また、定数 $C_{p,q+1}$ を位相誤差定数と呼ぶ。□

さらに、Runge-Kutta 法(2.1.2)の位相次数および位相誤差定数を、安定性関数(2.2.3)の位相次数 q および位相誤差定数により定義する。

次の補題は、線形次数 p と位相次数 q との間の基本的な関係を示す。

補題 1 (文献 11)) 有理関数近似 $R(z)$ の次数を p とする。そのとき、 p が偶数ならば、位相次数 q は p と一致し、 p が奇数ならば、 q は $p+1$ 以上の偶数となる。□

この補題は、 p が奇数の場合には、 $q \geq p+1$ と下界を与えるのみであり、 q を決定するためには、何らかの別の条件が必要となるが、例えば、 $q \geq p+3$ となるための条件として

$$C_{p+2} - C_{p+1} = 0 \quad (2.2.8)$$

が得られている¹¹⁾。

3. SIRK 法の安定性関数の特性

ここでは、高位相次数をもつ SIRK 法を構成する際に必要な知識として、その安定性関数に関する若干の考察を述べる。具体的には、(1.3)の形の有理関数近似で m 以上の次数を有するものに関し、その位相誤差、位相次数について論じる。

$L_m(\lambda)$ を m 次 Laguerre 多項式、

$$L_m(\lambda) = \sum_{j=0}^m (-\lambda)^j \frac{m!}{(m-j)!(j!)^2} \quad (3.1)$$

とする。 $k=1, 2, \dots$ に対して、 $L_m(\lambda)$ の k 階導関数を $L_m^{(k)}(\lambda)$ で表す。また、 $k=0, -1, -2, \dots$ に対して、 $L_m^{(k)}(\lambda)$ を

$$\begin{aligned} L_m^{(0)}(\lambda) &= L_m(\lambda), \\ L_m^{(k)}(\lambda) &= \int_0^\lambda L_m^{(k+1)}(\mu) d\mu \\ (k &= -1, -2, \dots) \end{aligned} \quad (3.2)$$

により帰納的に定義する。これらは、Laguerre の多項式に関する基本的な恒等式(例えば、文献 12))を用いると、

$$L_m^{(-1)}(\lambda) = -\frac{\lambda}{m+1} L_{m+1}'(\lambda), \quad (3.3)$$

$$L_m^{(-2)}(\lambda) = \frac{\lambda}{m+2} L_{m+2}'(\lambda) - \frac{\lambda}{m+1} L_{m+1}'(\lambda), \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} L_m^{(-3)}(\lambda) &= -\frac{\lambda}{m+3} L_{m+3}'(\lambda) + \frac{2\lambda}{m+2} L_{m+2}'(\lambda) \\ &\quad - \frac{\lambda}{m+1} L_{m+1}'(\lambda) \end{aligned} \quad (3.5)$$

のように表される。なお、 $L_m'(\lambda)$ は、 $L_m^{(1)}(\lambda)$ の意味である。

以上の記号のもとで、次の等式が成立することは、計算により容易に示すことができる⁶⁾。

$$(1-z/\lambda)^m \exp(z) = (-1)^m \sum_{j=0}^{\infty} L_m^{(m-j)}(\lambda) (z/\lambda)^j. \quad (3.6)$$

この等式を用いると、(1.3)の形の有理関数近似で m 以上の次数を有するものは、次のように表される：

$$\begin{aligned} R(z) &= \frac{P_m(z)}{(1-z/\lambda)^m}, \\ P_m(z) &= (-1)^m \sum_{j=1}^m L_m^{(m-j)}(\lambda) (z/\lambda)^j. \end{aligned} \quad (3.7)$$

ただし、 $\lambda=1/\alpha$ である。このとき、誤差項は

$$\begin{aligned} \exp(z) - R(z) &= C_{m+1} z^{m+1} + C_{m+2} z^{m+2} \\ &\quad + C_{m+3} z^{m+3} + O(z^{m+4}), \\ C_{m+1} &= (-1)^m L_m^{(-1)}(\lambda) / \lambda^{m+1}, \\ C_{m+2} &= (-1)^m \{ L_m^{(-2)}(\lambda) + m L_m^{(-1)}(\lambda) \} / \lambda^{m+2}, \\ C_{m+3} &= (-1)^m \left\{ L_m^{(-3)}(\lambda) + m L_m^{(-2)}(\lambda) \right. \\ &\quad \left. + \frac{m(m+1)}{2} L_m^{(-1)}(\lambda) \right\} / \lambda^{m+3} \end{aligned} \quad (3.8)$$

と計算される.

上式の C_{m+1} は, (3.3)式を用いると,

$$C_{m+1} = (-1)^{m+1} \frac{1}{m+1} L_{m+1}'(\lambda) / \lambda^m \quad (3.9)$$

と変形される. したがって, 有理関数近似 (3.7) の到達可能な近似の次数は $m+1$ 次であり, λ が $L_{m+1}'(\lambda)$ の根である場合に限り, (3.7) は $m+1$ 次の近似を与える.

以上の準備のもとで, 次の定理を得る. この定理は, m 段 $m+1$ 次 SIRK 法の位相次数を特徴づけるものと解釈される.

定理 1 (1.3) の形の有理関数近似の次数が $m+1$ 次であると仮定する. そのとき, 位相次数は m が奇数ならば, $m+1$, m が偶数ならば $m+2$ で与えられる. $\square$

証明 m が奇数ならば, $p=m+1$ は偶数であり, 補題 1 により, 位相次数は $q=m+1$ となる. また, m が偶数のとき, 同様に, $q \geq m+2$ の評価を得る. 以下, m が偶数の場合, q が $m+2$ と真に等しいことを示す.

(3.3) 式から, $L_{m+1}'(\lambda)=0$ のとき, $L_m^{(-1)}(\lambda)=0$ となることに注意すると, (3.8) 式により, $C_{m+3}-C_{m+2}$ は

$$C_{m+3}-C_{m+2} = \{L_m^{(-3)}(\lambda) + (m-\lambda)L_m^{(-2)}(\lambda)\} / \lambda^{m+3} \quad (3.10)$$

と表される. さらに, (3.4), (3.5) 式, および, 恒等式

$$\begin{aligned} L_{m+2}'(\lambda) &= L_{m+1}'(\lambda) - L_{m+1}(\lambda), \\ L_{m+3}'(\lambda) &= L_{m+2}'(\lambda) - L_{m+2}(\lambda), \\ \lambda L_{m+2}'(\lambda) &= (m+2)L_{m+2}(\lambda) - (m+2)L_{m+1}(\lambda) \end{aligned}$$

を用いて, (3.10) 式は

$$C_{m+3}-C_{m+2} = \frac{\lambda-(m+1)}{m+3} L_{m+1}(\lambda) / \lambda^{m+2} \quad (3.11)$$

と変形される.

ここで, $L_{m+1}'(m+1) \neq 0$ となることに着目すると, $L_{m+1}(\lambda)$ の根はすべて単根であることから, $C_{m+3}-C_{m+2} \neq 0$ が結論され, 条件 (2.2.8) により, 位相次数は $q=m+2$ と決定される. $\square$

このように, 到達可能次数である $m+1$ 次を実現した場合は, もはや位相次数をさらに高めることはできない. しかし, 次数を m に留めたときは, 新しい可能性が生ずる. m が偶数のとき, 補題 1 により, m 次有理関数近似の位相次数は m である. したがって, $m+1$ 次近似が位相次数の意味でも最良となる. しか

しながら, 以下に示すように, m が 3 以上の奇数の場合には, 位相次数に関して $m+1$ 次近似をしのぐ m 次近似が存在するのである.

定理 2 $m (\geq 3)$ を奇数とする. そのとき, (1.3) の形の有理関数近似で, $p=m$, $q \geq m+3$ を満たすものが存在する. ただし, p は次数, q は位相次数である. $\square$

証明

$$f_m(\lambda) = \frac{1}{m+2} L_{m+2}'(\lambda) - \frac{m+1-\lambda}{m+1} L_{m+1}'(\lambda) \quad (3.12)$$

とおくと, (3.8) 式, および, (3.3), (3.4) 式より, $C_{m+2}-C_{m+1} = -f_m(\lambda) / \lambda^{m+1}$ が成り立つ. したがって, $f_m(\lambda)$ が実根 λ_0 をもつことを示せば, 条件 (2.2.8) により, $\lambda = \lambda_0$ に対する (3.7) 式が, $p=m$, $q \geq m+3$ を満たす有理関数近似を与えることになり, 証明が完了する. 以下, $f_m(\lambda)$ の実根の存在を示す.

$m > 1$ のとき, Laguerre の多項式 $L_{m+1}(\lambda)$ は, 少なくとも三つの正の実単根をもつことから, $L_{m+1}(\lambda^*) > 0$ を満たす極大点 $\lambda^* (> 0)$ が存在する. このとき, $L_{m+1}'(\lambda^*) = 0$, および (3.3) 式から,

$$f_m(\lambda^*) = -\frac{1}{m+2} L_{m+1}(\lambda^*) < 0$$

を得る. 一方, $L_m'(0) = -m$ の関係により, $f_m(0) = m > 0$ と計算される. したがって, $f_m(\lambda)$ は実根をもつ. $\square$

4. 高位相次数をもつ SIRK 法の構成

Runge-Kutta 法 (2.1.2) の係数が, 相異なる実数 c_j ($j=1, 2, \dots, m$) をパラメータとして,

$$\begin{aligned} a_{jk} &= \int_0^{c_j} \ell_k(s) ds, \\ b_j &= \int_0^1 \ell_j(s) ds, \\ \ell_j(t) &= \prod_{k=1, k \neq j}^m \frac{t-c_k}{c_j-c_k} \end{aligned} \quad (4.1)$$

で与えられるとき, (2.1.2) は補間型 Runge-Kutta 法, あるいは, Collocation 法と呼ばれる. 後者は, (4.1) で定義される Runge-Kutta 法と, 分点 c_j ($j=1, 2, \dots, m$) に対する Collocation 法との等価性¹⁴⁾に基づく用語である.

Collocation 法については, 簡約化条件のうち, $B(m)$ および $C(m)$ が成り立つことが知られている⁵⁾. したがって, Collocation 法は変換型 Runge-Kutta

法であり、特に、R-K 行列の固有値が唯一つの元からなる Collocation 法は SIRC 法である。このようにして得られる SIRC 法は、Singly Implicit Collocation 法 (SIC 法) と呼ばれ、R-K 行列の固有値 α に対して、 c_j/α ($j=1, 2, \dots, m$) が m 次 Laguerre 多項式の根に一致するという性質をもつ⁶⁾。

この性質を用いると、前章で論じた有理関数近似を安定性関数にもつ SIRC 法を、構成することができる。定理 1 および定理 2 で述べられた有理関数近似は、いずれも (3.7) 式のパラメータ λ を特定することにより与えられるが、一方、SIRC 法の安定性関数は、R-K 行列の固有値 α に対して、(3.7) 式で $\lambda=1/\alpha$ とおいたものとなる。したがって、両者の関係から、逆に固有値を $\alpha=1/\lambda$ により定義すると、上述の性質から c_j ($j=1, 2, \dots, m$) が決定され、(4.1) 式によって、与えられた有理関数近似を安定性関数とする SIC 法が構成される。

ただし、そのような SIC 法の係数を実際に算出する際には、(4.1) 式を直接用いるよりも、Butcher による次の補題を用いるほうが便利であろう。

補題 2 (文献 5)) μ_j ($j=1, 2, \dots, m$) を $L_m(\lambda)$ のゼロ点とし、 m 次正方行列 T を

$$T = (L_{k-1}(\mu_j)) \quad (1 \leq j, k \leq m) \quad (4.2)$$

により定義する。そのとき、SIC 法の R-K 行列 A は

$$A = T \begin{bmatrix} \alpha & & & & \\ -\alpha & \alpha & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\alpha & \alpha & \\ & & & -\alpha & \alpha \end{bmatrix} T^{-1} \quad (4.3)$$

と表される。また、行列 T の逆行列は、公式

$$(T^{-1})_{j,k} = \frac{\mu_k L_{j-1}(\mu_k)}{m^2 L_{m-1}(\mu_k)^2} \quad (1 \leq j, k \leq m) \quad (4.4)$$

により計算される。□

与えられた段数 m に対して (4.2)、(4.4) の量をあらかじめ計算しておけば、(4.3) 式により、係数 a_{jk} は固有値 α から容易に計算される。

また、

$$L_j(t) = \int_0^t \left\{ \prod_{k=1, k \neq j}^m \frac{s - \mu_k}{s - \mu_j} \right\} ds \quad (4.5)$$

とおくと、係数 b_j は

$$b_j = \alpha L_j(1/\alpha) \quad (4.6)$$

と書ける。したがって、 b_j も固有値 α から (4.6) 式を

表 1 高位相次数 SIC 法の係数
Table 1 Coefficients of SIC methods with reduced phase errors.

(a) (3, 3, 6) 法の係数
(a) Coefficients of (3, 3, 6)-method.

方法 係数	(3, 3, 6) 法
a_{11}	4.670283440284504D-1
a_{12}	-6.911302887451862D-2
a_{13}	7.745354525402417D-3
a_{21}	1.285747544023089D+0
a_{22}	9.909038476028473D-1
a_{23}	-3.818034476094970D-2
a_{31}	3.456741302549081D-1
a_{32}	4.322173876998711D+0
a_{33}	1.46909157452923D+0
b_1	9.408475512114595D-1
b_2	6.276306960774626D-2
b_3	-3.610620819205725D-3
c_1	4.056606696793342D-1
c_2	2.238471046864986D+0
c_3	6.136939581705642D+0

(b) (5, 5, 8) 法の係数
(b) Coefficients of (5, 5, 8)-method.

方法 係数	(5, 5, 8) 法
a_{11}	1.424469162935971D-1
a_{12}	-3.024589658887313D-2
a_{13}	7.958780032825323D-3
a_{14}	-1.222024562383464D-3
a_{15}	7.321110639620502D-5
a_{21}	3.540143380718585D-1
a_{22}	3.094803047896618D-1
a_{23}	-2.88133351612936D-2
a_{24}	3.752801771713828D-3
a_{25}	-2.102210750291296D-4
a_{31}	2.410976744838572D-1
a_{32}	9.419005746816242D-1
a_{33}	4.597686647532996D-1
a_{34}	-1.971089586673871D-2
a_{35}	9.144588304966633D-4
a_{41}	5.183770012330567D-1
a_{42}	2.127365220901520D-1
a_{43}	1.875823955354131D+0
a_{44}	6.011664791676803D-1
a_{45}	-8.497741314171941D-3
a_{51}	-1.654194466416931D+0
a_{52}	5.192071285599994D+0
a_{53}	-2.768225130813713D+0
a_{54}	4.193423688330758D+0
a_{55}	7.448937799426921D-1
b_1	3.131585037726611D-1
b_2	6.594047332018487D-1
b_3	2.926430181607841D-2
b_4	-1.909619038339889D-3
b_5	8.208024775160781D-5
c_1	1.190109862815621D-1
c_2	6.382238883969057D-1
c_3	1.623970476882539D+0
c_4	3.199606216530848D+0
c_5	5.707969156642800D+0

用いて計算される。

以下では、具体的にいくつかの公式を構成する。段数 m としては、有理関数近似 (3.7) が A-acceptable となる α の範囲が知られている $m=3$ および 5 を用いる。 $m=3$ のとき、 $1/3 \leq \alpha \leq 1.06858$, $m=5$ のとき、 $0.24651 \leq \alpha \leq 0.36180$ または $0.42079 \leq \alpha \leq 0.47328$ ならば、(3.7) は A-acceptable な有理関数近似となる²⁾。

(i) $m=3, p=3, q=6$ の場合

定理 2 の証明に現れる多項式

$$f_3(\lambda) = 3 - 5\lambda + (5/2)\lambda^2 - \lambda^3/2 + \lambda^4/30 \quad (4.7)$$

は 2 実根 $\lambda_1 = 1.0249318897\dots$, $\lambda_2 = 7.3349397944\dots$ をもつ。これらの根を (3.7) 式に代入したものは、いずれも次数 $p=3$, 位相次数 $q=6$ の有理関数近似を与えるが、そのうち $\lambda = \lambda_1$ の場合に (3.7) は A-acceptable となる。そこで、固有値として $\alpha = 1/\lambda_1 = 0.9756745886\dots$ を採用し、この α に対して得られる 3 段 SIC 法を (3, 3, 6) 法と呼ぶことにする。

(ii) $m=5, p=5, q=8$ の場合

$$f_5(\lambda) = 5 - 13\lambda + 10\lambda^2 - (10/3)\lambda^3 + (13/24)\lambda^4 - \lambda^5/24 + \lambda^6/840 \quad (4.8)$$

は 4 実根 $\lambda_1 = 0.6370003271\dots$, $\lambda_2 = 2.2145881481\dots$, $\lambda_3 = 7.9062073243\dots$, $\lambda_4 = 14.0065986132\dots$ をもち、 $\lambda = \lambda_2$ の場合に有理関数近似は A-acceptable となる。そこで、 $\alpha = 1/\lambda_2 = 0.451551289\dots$ を採用し、対応する 5 段 SIC 法を (5, 5, 8) 法と呼ぶ。

高位相次数の SIC 法、(3, 3, 6) 法、(5, 5, 8) 法は、具体的には、表 1 で表される係数をもつ。なお、これらの係数は、数式処理システム (muSIMP/muMATH システム) を用いて、上述の公式により 20 桁まで算出し、17 桁目を四捨五入したものである。

通常の意味で最高次数となる SIC 法も同様な方法により構成される。すなわち、 $m=3$ のとき、 $L_4'(\lambda)$ の根 $\lambda_1 = 0.935822275\dots$, $m=5$ のとき、 $L_6'(\lambda)$ の根 $\lambda_2 = 2.1129659585\dots$ を用いて、3 段 4 次、5 段 6 次の A 安定な SIC 法が構成される。なお、SIRK 法の

一般論²⁾ から、これらの方法は、線形次数のみならず通常の次数 (order of consistency) の意味でも、4 次または 6 次となっていることを指摘しておく。以上の方法は、(3, 4, 4) 法、(5, 6, 6) 法として参照する。

各方法の特性値をまとめたものが表 2 である。 $|C_{p,q+1}|$ は位相誤差定数の絶対値であり、 $|R_m(\infty)|$ は $z \rightarrow \infty$ としたときの $|R_m(z)|$ の極限値を表す。

5. 誤差解析と数値例

本章では、位相誤差と周期解の累積誤差との関係について述べたのち、4 章で構成したいくつかの SIC 法について数値実験による比較を行う。

まず、周期解をもつ線形方程式の典型として、

$$\frac{du}{dt} = \begin{bmatrix} & \omega \\ -\omega & \end{bmatrix} u(t) \quad (a < t < b),$$

$$u(a) = u_0 \quad (5.1)$$

を考察する。ただし、 $\omega \in R$, $u(t) = (u_{(1)}(t), u_{(2)}(t))^T$, $u_0 = (u_{(1)0}, u_{(2)0})^T \in R^2$ である。簡単のため、 $a=0$ とおくと、(5.1) の真の解は

$$\begin{aligned} u_{(1)}(t) &= u_{(1)0} \cos(\omega t) + u_{(2)0} \sin(\omega t), \\ u_{(2)}(t) &= -u_{(1)0} \sin(\omega t) + u_{(2)0} \cos(\omega t) \end{aligned} \quad (5.2)$$

と書くことができる。

(5.1) を、Runge-Kutta 法 (2.1.2) を用いて、区間 $(0, b)$ 上で積分する際の累積誤差は、各成分ごとに、

$$e_{(1)}(h) = |u_{(1)}(b) - u_{(1)N}|, \quad (5.3)$$

$$e_{(2)}(h) = |u_{(2)}(b) - u_{(2)N}| \quad (5.4)$$

と記述される。ただし、 N は積分区間の分割数、 $h = b/N$ である。 $e_{(1)}(h)$, $e_{(2)}(h)$ の $h \downarrow 0$ に関する挙動は、一般には、Runge-Kutta 法 (2.1.2) の次数 (あるいは、線形次数) p に支配される。しかし、積分区間の右端 b が特別な値の場合には、位相次数 q が決定的となることがある。

命題 $u_{(1)}(b) = 0$ とする。また、Runge-Kutta 法 (2.1.2) は A 安定であると仮定する。そのとき、

$$e_{(1)}(h) = |u_0| |b\omega| |C_{p,q+1}| |h\omega|^q + O((h\omega)^{q+2}) \quad (5.5)$$

が成立する。ただし、 q は Runge-Kutta 法の位相次数 $C_{p,q+1}$ は位相誤差定数である。□

証明

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

とおくと、(5.1) は

$$T^{-1} \frac{du}{dt} = \begin{bmatrix} i\omega & \\ & -i\omega \end{bmatrix} T^{-1} u(t) \quad (5.7)$$

表 2 SIC 法の特性値

Table 2 Characteristic values of SIC methods.

方 法	$ C_{p,q+1} $	$ R_m(\infty) $
(3, 3, 6) 法	0.2092	0.6785
(5, 5, 8) 法	7.4581×10^{-3}	0.9141
(3, 4, 4) 法	0.4486	0.6304
(5, 6, 6) 法	2.1636×10^{-3}	0.8373

と書ける。したがって、(5.1)に Runge-Kutta 法 (2.1.2)を適用すると、差分方程式

$$T^{-1}u_n = \begin{bmatrix} R_m(ih\omega) \\ R_m(-ih\omega) \end{bmatrix} T^{-1}u_{n-1} \quad (5.8)$$

が得られる。この差分方程式を解くことにより、数値解の第一成分は

$$u_{(1)n} = u_{(1)0} \frac{R_m(ih\omega)^n + R_m(-ih\omega)^n}{2} + u_{(2)0} \frac{R_m(ih\omega)^n - R_m(-ih\omega)^n}{2i} \quad (5.9)$$

と表される。

さらに、位相誤差関数の定義から、 $y \in R$ に対して

$$R_m(iy) = \rho(y) \exp(iy - i\phi(y)) \quad (\rho(y) = |R_m(iy)|) \quad (5.10)$$

と表されることに注意すると、 $u_{(1)}(b)$ の近似値 $u_{(1)N}$ は、

$$u_{(1)N} = u_{(1)0} \rho(h\omega)^N \cos(\omega b - N\phi(h\omega)) + u_{(2)0} \rho(h\omega)^N \sin(\omega b - N\phi(h\omega)) \quad (5.11)$$

と表すことができる。三角関数の加法定理、および、 $u_{(1)}(b)=0$ の関係を用いて、累積誤差を計算すると、

$$e_{(1)}(h) = |u_0| \rho(h\omega)^N |\sin(N\phi(h\omega))| \quad (5.12)$$

を得る。ここで、 $\sin(z) = z + O(z^3)$ に注意すると、A 安定性の仮定により、(5.5)の評価を得る。□

以下では、周期解(振動解)をもつ方程式に対し、前章で構成した SIC 法を適用し、周期解(振動解)のゼロ点まで積分した際の累積誤差について調べる。具体的には、まず、複数の分割数 N に対して近似解の有効桁数を $-\log_{10}(|u_N|)$ で評価する。さらに、これらの評価値は(高次の項を無視することにより) $-\log_{10}(h)(h=(b-a)/N)$ に関する直線で近似できるものとし、直線の傾きを、各方法の実効的な位相次数(q_{eff} と表す)として、最小二乗法により算出する。なお、係数計算を除くすべての数値計算は、富士通 FM 11 AD 2*, BASIC 倍精度演算で実行し、Runge-Kutta 法における各ステップの前進に必要な線形方程式の求解には、Gauss の消去法を用いた。

例 1

(5.1)において、 $\omega=1$, $u(0)=(1,0)^T$ とすると、解の第一成分は $u_{(1)}(t)=\cos(t)$ で与えられる。この方程式を、 $a=0$ から $\cos(t)$ のゼロ点 $b=2.5\pi$ まで積分した際の、 $u_{(1)}$ に対する近似解の有効桁数(の評価値)、 $-\log_{10}(|u_{(1)N}|)$ を表 3 に示す。この場合の q_{eff} は、位相次数 q に近い値となっている。

表 3 例 1 に対する数値結果

Table 3 Numerical results of solution for example 1.

(a) $m=3$ の場合
(a) The case $m=3$.

方法 \ N	20	40	80	160	320	640	1280	q_{eff}
(3,3,6) 法	2.40	4.07	5.84	7.64	9.45	11.25	13.05	5.9
(3,4,4) 法	1.90	2.81	3.94	5.13	6.35	7.60	9.13	4.0

(b) $m=5$ の場合
(b) The case $m=5$.

方法 \ N	10	20	40	80	160	320	q_{eff}
(5,5,8) 法	3.30	5.54	7.90	10.30	12.70	14.75	7.7
(5,6,6) 法	3.17	4.54	6.25	8.03	9.83	11.64	5.7

例 2

$$\frac{d^2 u}{dt^2} + \left(1 - \frac{2}{t^2}\right) u(t) = 0,$$

$$u(8\pi)=1, \quad u'(8\pi)=-0.125/\pi \quad (5.13)$$

の解は、 $u(t)=\cos(t)-\sin(t)/t$ で与えられるが、これは分数次の Bessel 関数を用いて、 $u(t)=-(2/\pi t)^{1/2} J_{3/2}(t)$ とも表すことができる。表 4 に、この方程式を $a=8\pi$ から $u(t)$ のゼロ点 $b=32.95638903\dots$ まで積分した際の近似解の有効桁数を示す。次数を最適化した方法((3,4,4)法、(5,6,6)法)においては、有効桁数の増大は例 1 とほぼ同様な傾向を示す。しかし、位相次数を最適化した方法((3,3,6)法、(5,5,8)法)では、分割数 N が小さい場合には、有効桁数の増大は位相次数 q に従うが、分割数 N が大きくなると、次数 p に従うという結果が得られている。これは、分割数が増大する際に、近似解の誤差の主要項が、周期成分 $(\cos(t))$ の誤差から、減衰成分 $(-\sin(t)/t)$ の誤

表 4 例 2 に対する数値結果

Table 4 Numerical results of solution for example 2.

(a) $m=3$ の場合
(a) The case $m=3$.

方法 \ N	20	40	80	160	320	640	1280	q_{eff}
(3,3,6) 法	2.42	4.09	5.92	8.76	10.57	12.39	14.19	4.4
(3,4,4) 法	1.91	2.82	3.96	5.13	6.36	7.62	9.15	4.0

(b) $m=5$ の場合
(b) The case $m=5$.

方法 \ N	10	20	40	80	160	320	q_{eff}
(5,5,8) 法	3.32	5.57	8.00	10.80	13.73	16.17	6.7
(5,6,6) 法	3.18	4.55	6.26	8.05	9.85	11.65	5.7

差へと交代するために起こる現象である。なお、この例においても、さらに長い区間での積分を考えると、高位相次数の方法の優位性はより顕著に現れる。

6. おわりに

周期解をもつ常微分方程式系に適した数値解法の導出を目的として、位相誤差に関して高精度な Singly Implicit Runge-Kutta 法 (SIRK 法) の構成について論じた。具体的には、高位相次数をもつ有理関数近似の存在を示し、実際にそのような有理関数近似を安定性関数としてもつ方法を、SIRK 法の重要な例である Singly Implicit Collocation 法 (SIC 法) のクラスにおいて構成した。さらに、位相誤差と周期解の累積誤差との関係を明らかにし、高位相次数をもつ方法の効果を数値的に示した。

本論文で構成した方法は、いずれも A 安定な方法であり、周期解をもつ問題の中でも、とりわけ、微小な振幅をもつ高周波成分を含むような問題に対して、高周波成分のフィルタ機能の観点から、有効である。このことは、いくつかの数値例により確認している。また、本方法は、より実際的な問題として、人工衛星の寿命計算などにも応用可能であると考えられる。しかしながら、比較的緩やかに減衰する振動解をもつ系に対しては、高位相次数の方法は必ずしも有効ではない、という数値結果も報告されており¹⁹⁾、本方法の有効な適用範囲をさらに明確にすることは、今後の重要な研究課題のひとつとして挙げられよう。

謝辞 日頃から御指導いただく、当研究所鈴木千里博士に感謝します。

参 考 文 献

- 1) Brusa, L. and Nigro, L.: A One-Step Method for Direct Integration of Structural Dynamic Equations, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Vol. 15, pp. 685-699 (1980).
- 2) Burrage, K.: A Special Family of Runge-Kutta Methods for Solving Stiff Differential Equations, *BIT*, Vol. 18, pp. 22-41 (1978).
- 3) Burrage, K., Butcher, J.B. and Chipman, F.H.: An Implementation of Singly-Implicit Runge-Kutta Methods, *BIT*, Vol. 20, pp. 326-340 (1980).
- 4) Butcher, J.B.: Implicit Runge-Kutta Processes, *Math. Comp.*, Vol. 18, pp. 50-64 (1964).
- 5) Butcher, J.B.: A Transformed Implicit Runge-Kutta Method, *J. ACM*, Vol. 26, No. 4, pp. 731-738 (1979).
- 6) Butcher, J.B.: *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*, p. 528, John Wiley and Sons, Chichester (1987).
- 7) Butcher, J.B.: Towards Efficient Implementation of Singly-Implicit Runge-Kutta Methods, *ACM Trans. Math. Softw.*, Vol. 14, No. 1, pp. 68-75 (1988).
- 8) Cash, J.R.: Higher Order P-stable Formulae for the Numerical Integration of Periodic Initial Value Problems, *Numer. Math.*, Vol. 37, pp. 355-370 (1981).
- 9) Chawla, M. M., Rao, P. S. and Neta, B.: Two-Step Fourth Order P-stable Methods with Phase-Lag of Order Six for $y''=f(t, y)$, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 16, pp. 233-236 (1986).
- 10) Gladwell, I. and Thomas, R. M.: Damping and Phase Analysis of Some Methods for Solving Second Order Ordinary Differential Equations, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Vol. 19, pp. 495-503 (1983).
- 11) 小藤俊幸: 陰的 Runge-Kutta 法の位相誤差解析, 情報処理学会論文誌, Vol. 30, No. 11, pp. 1357-1363 (1989).
- 12) 森口繁一, 宇田川銑久, 一松 信: 岩波 数学公式Ⅲ特殊函数, p. 319, 岩波書店, 東京 (1960).
- 13) Nørsett, S. P.: Restricted Padé Approximation to the Exponential Function, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 15, pp. 1008-1029 (1978).
- 14) Nørsett, S. P. and Wanner, G.: The Real-Pole Sandwich for Rational Approximations and Oscillation Equations, *BIT*, Vol. 19, pp. 79-94 (1979).
- 15) Scherer, R.: A Necessary Condition for B-stability, *BIT*, Vol. 19, pp. 111-115 (1979).
- 16) Thomas, R. M.: Phase Properties of Higher Order Almost P-stable Formulae, *BIT*, Vol. 24, pp. 225-238 (1984).
- 17) Twizell, E. H.: Phase-Lag Analysis for a Family of Two-Step Methods for Second Order Periodic Initial Value Problems, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 15, pp. 261-263 (1986).
- 18) Van der Houwen, P. J. and Sommeijer, B. P.: Explicit Runge-Kutta (-Nyström) Methods with Reduced Phase Errors for Computing Oscillating Solutions, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 24, pp. 595-617 (1987).
- 19) Van der Houwen, P. J. and Sommeijer, B. P.: Phase-Lag Analysis of Implicit Runge-Kutta Methods, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 26, pp. 214-229 (1989).
- 20) Van der Houwen, P. J. and Sommeijer, B. P.: Diagonally Implicit Runge-Kutta-Nyström

Methods for Oscillatory Problems, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 26, pp. 414-429 (1989).

(平成元年 8 月 28 日受付)

(平成元年 12 月 12 日採録)

小藤 俊幸 (正会員)

1961 年 7 月 31 日島根県松江市生.

1984 年東京大学理学部数学科卒業.

1986 年同修士課程修了. 同年富士通

(株)に入社, 国際情報社会科学研究

所に配属. 以来, 数値解析の研究に

従事. 微分方程式の数値解法, 並列アルゴリズム等に

興味をもつ.
