陰的 Runge-Kutta 法の位相誤差解析†

小 藤 俊 幸††

常微分方程式の初期値問題の，応用上重要かつ興味深いクラスとして，解が周期性をもつような問題を取り上げて考察する．このような問題に対しては，従来より解の周期性を重視した数値解法の研究が，いくつかの観点から行われている．P安定性等の安定性概念に基づく研究が，その典型であるが，他方，近似解の位相に相当する部分に含まれる誤差（位相誤差と称す）に着目した研究もなされている．本論文では，一般に安定性に関し優れた特性をもつ，陰的 Runge-Kutta 法を対象とし，その位相誤差について考察する．特に，高次数の数値解法のクラスに関する考察を通じ，m 段 $2m$ 次 Gauss-Legendre 型公式の位相誤差の観点からの，ある種の最適性を明らかにする．

1. はじめに

常微分方程式の初期値問題に対する数値解法は，できるだけ広範囲な問題に適用可能であることが望ましい．すなわち，種々の問題に簡単に適用できるような安定かつ高精度な数値積分法が望ましいことは周知のとおりである．しかし，そのような理想的な解法を得ることの難しさも一般によく知られている．

このような状況の下では，常微分方程式のクラスを限定し，そのクラスに適した解法を作り上げることにも十分な意義があると考えられる．この観点から，解の特性があらかじめ知られているような特定のクラスに対して，その特性をうまく利用する，安定な数値解法や高精度な数値解法の研究が行われてきた．

これまでよく研究されている常微分方程式のクラスとしては，周期解をもつような二階常微分方程式 $\mathrm{d}^2u/\mathrm{d}t^2=f(t,u)$ が挙げられる[3)~6),7)]．例えば，Lambert-Watson[7)] は，解の周期性を重視した数値解法をテスト方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}=-c^2u \quad (c:\text{実数}) \tag{1.1}$$

に基づいて研究し，P安定性の概念を導入している．しかし，このクラスに対する数値解法の安定性の問題は，(1.1)式が一階常微分方程式系

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=icu,\ \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=-icv \tag{1.2}$$

と等価であることに着目すると，

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=icu \quad (c:\text{実数}) \tag{1.3}$$

をテスト方程式とする一階常微分方程式の数値解法の安定性の問題に再定式化することもできる．実際，Nørsett-Wanner ら[6),8),12)]は，この定式化に基づき，一階常微分方程式に対する数値解法の安定性を研究して，I安定という興味ある概念に到達している．

一方，周期解をもつような問題においては，数値解に含まれる誤差の中でも特に位相的な部分を重視することがある．このような場合，振幅の誤差よりも位相に含まれる誤差を数値解法の精度の規範として考えることが必要となる．事実，Brusa-Nigro[1)] は真の（周期）解と数値解との位相に関する誤差が小さくなるような数値解法の設計を試みている．なお，この位相に関する誤差を彼らは phase lag とか phase error と称しているが，本論文では位相誤差と呼ぶことにする．

さらに安定性と精度の両面からの研究として，Thomas[9)] は Cash や Chawla のP安定な方法[3),4)]に対して位相誤差に関する包括的な研究を行っている．また，Van der Houwen-Sommeijer[10)] は陽的 Runge-Kutta (-Nyström) 法の一般公式における位相誤差について考察し，興味あるいくつかの数値解法を提案している．

しかし，実際の問題においては，周期解と stiff な解とが混在するような場合も多く，そのような点からは，陰的 Runge-Kutta 法に対する位相誤差，特にA安定な方法の位相誤差に関する研究が重要となる．

本論文では，(1.3)式をテスト方程式として，陰的 Runge-Kutta 法における位相誤差について考察する．すなわち，まず，公式の位相に関する精度の指標として位相次数と位相誤差定数の概念を導入し，公式の次数と位相次数との関係について考察する．さらに，陰的 Runge-Kutta 法として，特に高次数の方法を取り

† Phase Lag Analysis of Implicit Runge-Kutta Methods 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

上げて，その位相次数について論じる．これは，実用上は，位相誤差だけではなく全誤差が小さい積分公式が要請されるという認識に基づく．また，そのような考察を通じて，A安定な公式として知られる m 段 $2m$ 次 Gauss-Legendre 型公式[2]が位相次数，位相誤差定数の観点からも，ある意味で最適な公式であることを明らかにする．

以下，本論文の構成について述べる．第2章では若干の準備を行い，線形次数，位相誤差，位相次数等の定義を述べる．第3章では線形次数と位相次数とのあいだの基本的な関係について述べ，第4章では高次陰的 Runge-Kutta 法における線形次数と位相次数との関係について論じる．最後の第5章はまとめである．

2. 準備と位相誤差

ここでは，本論文で用いる記号等を準備し，陰的 Runge-Kutta 法に対する位相誤差の概念を導入する．

(a, b) を積分の全区間とし，刻み幅 $h\ (>0)$ を用いて，

$$a=t_0<t_1<\cdots<t_n<\cdots<t_N=b,$$
$$t_n=t_0+nh \quad (n=0, 1, \cdots, N)$$

のように分割する．さらに，各部分区間 (t_n, t_{n+1}) の m 個の分点による細分を

$$t_{n,j}=t_n+c_jh \quad (j=1, 2, \cdots, m),$$
$$0<c_1<\cdots<c_j<\cdots<c_m<1$$

とする．そのとき，常微分方程式の初期値問題

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=f(t, u) \quad (a\leqq t\leqq b),\ u(a)=u_0 \tag{2.1}$$

に対して，m 段陰的 Runge-Kutta 法は，次のように定式化される．

$$u_{n,j}=u_n+h\sum_{k=1}^{m}a_{j,k}f(t_{n,k},\ u_{n,k}) \tag{2.2}$$
$$(j=1, 2, \cdots, m),$$
$$u_{n+1}=u_n+h\sum_{j=1}^{m}b_jf(t_{n,j},\ u_{n,j}).$$

ここで，u_n, $u_{n,j}$ はそれぞれ $u(t_n)$, $u(t_{n,j})$ の近似値であり，$a_{j,k}$, b_j は結合係数と呼ばれる定数である．

陰的 Runge-Kutta 法 (2.2) の安定性を解析するために，テスト方程式として，線形方程式

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=\lambda u \quad (\lambda\in C) \tag{2.3}$$

が用いられることが多い．すなわち，Runge-Kutta 法 (2.2) をテスト方程式 (2.3) に適用するとき，次の形の差分方程式が得られることが知られている[2]．

$$u_{n+1}=R_m(z)u_n \quad (z=\lambda h). \tag{2.4}$$

ここで，$R_m(z)$ は Runge-Kutta 法 (2.2) の安定性を特徴づける有理関数で，具体的には，次のように表すことができる．

$$R_m(z)=P_m(z)/Q_m(z),$$
$$P_m(z)=\sum_{j=0}^{m}\alpha_jz^j, \tag{2.5}$$
$$Q_m(z)=\sum_{j=0}^{m}\beta_jz^j \quad (\alpha_0=\beta_0=1).$$

ただし，α_j, β_j $(j=1, 2, \cdots, m)$ は (2.2) 式の結合係数から一意に決定される実パラメータである．文献 2) に従って，有理関数 $R_m(z)$ を Runge-Kutta 法 (2.2) の安定性関数と呼ぶことにする．

簡単な考察により，安定性関数 $R_m(z)$ は指数関数 e^z に対する有理関数近似となることが分かる．したがって，安定性関数は，指数関数に対する有理関数近似という観点から解析することができる．以下，有理関数近似の観点から，若干の準備を与える．

有理関数近似における基本的な概念の一つは近似の次数であろう．$Q_m(0)=1$ であることから，有理関数近似 $R_m(z)$ は原点の近傍で正則であって，指数関数 e^z と $R_m(z)$ との差は，

$$e^z-R_m(z)=\sum_{j=0}^{\infty}C_jz^j \tag{2.6}$$

のようにベキ級数展開できる．このとき，$R_m(z)$ の近似の次数は

$$C_j=0\ (j=0, 1, \cdots, p),\ \ C_{p+1}\neq 0 \tag{2.7}$$

を満たす整数 p により定義することができる．以下，整数 p を陰的 Runge-Kutta 法 (2.2) の線形次数と呼ぶことにする．

本論文において重要な役割を果たす，もう一つの基本的な概念が，次に述べる位相に関する誤差である．これは，安定性関数 $R_m(z)$ の変域を虚軸上（すなわち，$z=iy$, $y\in R$）に制限して考察することにより定義される．

定義 Runge-Kutta 法 (2.2) に対して，

$$\phi(y)=y-\arg(R_m(iy)) \quad (y\in R) \tag{2.8}$$

によって定まる $\phi(y)$ を（y における）位相誤差と呼ぶ．□

位相誤差 $\phi(y)$ の等価な定義として

$$\phi(y)=y-\arctan\left[\frac{\mathrm{Im}(R_m(iy))}{\mathrm{Re}(R_m(iy))}\right], \tag{2.9}$$
$$\mathrm{Im}(R_m(iy))=(R_m(iy)-R_m(-iy))/(2i),$$
$$\mathrm{Re}(R_m(iy))=(R_m(iy)+R_m(-iy))/2$$

を用いることができる．これは，計算により容易に確かめることができる．

(2.9)式により $\phi(y)$ は明らかに $y=0$ の近傍で実解析的である．したがって，

$$\phi(y)=\sum_{j=0}^{\infty}C_{P,j}y^j \tag{2.10}$$

のようにベキ級数展開が可能である．この展開に基づき，Runge-Kutta 法の位相に関する近似精度の指標を，次のように定義することができる．

定義 (2.10)式において，

$$C_{P,j}=0 \quad (j=0,1,\cdots,q),\quad C_{P,q+1}\neq 0 \tag{2.11}$$

が成立するとき，整数 q を Runge-Kutta 法(2.2)の位相次数，定数 $C_{P,q+1}$ を位相に関する局所打切誤差定数，あるいは単に位相誤差定数と呼ぶ．□

3. 位相次数

ここでは，陰的 Runge-Kutta 法(2.2)の線形次数 p と位相次数 q との関係を議論する．

3.1 偶数次数公式の位相次数

次は線形次数と位相次数との関係を示す基本的な補題である．線形次数が偶数の場合には，この補題だけで位相次数が決定される．

補題 1 陰的 Runge-Kutta 法(2.2)の線形次数を p とする．そのとき，位相次数 q に関して

$$p \text{ が偶数ならば，} q=p, \tag{3.1.1}$$

$$p \text{ が奇数ならば，} q\geqq p+1 \tag{3.1.2}$$

の関係が成立する．

証明 仮定により，原点の近傍で，

$$e^z-R_m(z)=\sum_{j=p+1}^{\infty}C_jz^j \quad (C_{p+1}\neq 0)$$

とベキ級数展開される．

$[x]$ で x の整理部分を表すものとし，$k=[(p+1)/2]$, $l=[(p+2)/2]$ とおく．上式より，

$$\sin(y)-\mathrm{Im}(R_m(iy)) \tag{3.1.3}$$
$$=(-1)^kC_{2k+1}y^{2k+1}+O(y^{2k+3}),$$
$$\cos(y)-\mathrm{Re}(R_m(iy))$$
$$=(-1)^lC_{2l}y^{2l}+O(y^{2l+2})$$

が成立する．ここで，

$$\tan(y)-\{\mathrm{Im}(R_m(iy))\}/\{\mathrm{Re}(R_m(iy))\}$$
$$=\frac{\mathrm{Re}(R_m(iy))\sin(y)-\mathrm{Im}(R_m(iy))\cos(y)}{\mathrm{Re}(R_m(iy))\cos(y)}$$

の関係に注意すると，p が偶数のとき，

$$\tan(y)-\{\mathrm{Im}(R_m(iy))\}/\{\mathrm{Re}(R_m(iy))\}$$
$$=(-1)^kC_{p+1}y^{p+1}+O(y^{p+2}),$$

p が奇数のとき，

$$\tan(y)-\{\mathrm{Im}(R_m(iy))\}/\{\mathrm{Re}(R_m(iy))\}$$
$$=(-1)^k(C_{p+2}-C_{p+1})y^{p+2}+O(y^{p+3})$$

を得る．さらに，$\tan(x)$ の加法定理，および，

$$\arctan(x)=x+O(x^3)$$

により，

p が偶数のとき，

$$\phi(y)=(-1)^kC_{p+1}y^{p+1}+O(y^{p+2}) \tag{3.1.4}$$

p が奇数のとき，

$$\phi(y)=(-1)^k(C_{p+2}-C_{p+1})y^{p+2}+O(y^{p+3}) \tag{3.1.5}$$

が従い，補題の証明が完了する．□

この補題によると，線形次数 p が偶数の場合には位相次数 q は $q=p$ として一意に決定されるのであるが，p が奇数の場合には $q\geqq p+1$ と下界が与えられるのみである．したがって，p が奇数の場合の位相次数 q が興味の対象となる．これについては次で議論する．

3.2 奇数次数公式の位相次数

ここでは，線形次数が奇数である場合の位相次数の決定方法について述べる．

まず，$j>m$ に対しては，$\alpha_j=0$, $\beta_j=0$ と定義することにより，

$$Q_m(z)e^z-P_m(z)=\sum_{j=0}^{\infty}D_jz^j, \tag{3.2.1}$$

ただし，

$$D_j=\sum_{k=0}^{j}\beta_k/(j-k)!-\alpha_j \tag{3.2.2}$$

と展開することができる．したがって，有理関数近似 $R_m(z)$ の次数が p であるための必要十分条件は，パラメータ α_j, β_j $(j=1,2,\cdots,m)$ に関して

$$D_j=0 \quad (j=1,2,\cdots,p),\quad D_{p+1}\neq 0 \tag{3.2.3}$$

が成立することである．

次に，位相次数が q となるためのパラメータ α_j, β_j に関する必要十分条件を与える．まず関数 $\psi(y)$ を

$$\psi(y)=\frac{\mathrm{Im}(R_m(iy))}{\mathrm{Re}(R_m(iy))} \tag{3.2.4}$$

とおく．この $\psi(y)$ は α_j, β_j を用いて次のように展開できる．

$$\psi(y)=P_{T,m}(y)/Q_{T,m}(y), \tag{3.2.5}$$

$$P_{T,m}(y)=\sum_{j=0}^{m-1}A_jy^{2j+1},$$

$$Q_{T,m}(y)=\sum_{j=0}^{m}B_jy^{2j}.$$

ここで，係数 A_j, B_j は

$$A_j=(-1)^j\sum_{k=0}^{j}(\alpha_{2k+1}\beta_{2(j-k)}-\alpha_{2k}\beta_{2(j-k)+1}),$$

$$B_j=(-1)^j\sum_{k=0}^{j}(\alpha_{2k}\beta_{2(j-k)}-\alpha_{2k+1}\beta_{2(j-k)-1}) \tag{3.2.6}$$

により与えられる．ただし，$\beta_{-1}=0$ とする．

また，$\tan(y)$ の Taylor 展開は

$$\tan(y)=\sum_{j=0}^{\infty}\tau_{2j}y^{2j+1} \tag{3.2.7}$$

と表される．この式および(3.2.5)式より，次の関係を得る．

$$Q_{T,m}(y)\tan(y)-P_{T,m}(y)=\sum_{j=0}^{\infty}D_{T,2j+1}z^{2j+1}. \tag{3.2.8}$$

ただし，係数 $D_{T,2j+1}$ は，(3.2.6)式で与えられる A_j，B_j から，

$$D_{T,2j+1}=\sum_{k=0}^{j}B_k\tau_{2(j-k)}-A_j \tag{3.2.9}$$

と計算される．

(3.2.8)式と位相誤差の定義(2.8)を比較することにより，位相次数 q は常に偶数であり，$R_m(z)$ の位相次数が q であるための必要十分条件は

$$D_{T,2j+1}=0 \quad (j=0,1,\cdots,q/2-1), \qquad D_{T,q+1}\neq 0 \tag{3.2.10}$$

であることが結論される．このとき，位相誤差定数 $C_{P,q+1}$ に関し，

$$C_{P,q+1}=D_{T,q+1} \tag{3.2.11}$$

が成立することは明らかであろう．

以上の考察から，特に，線形次数が奇数である場合の位相次数の決定方法をまとめると，次の定理が得られる．

定理 1 陰的 Runge-Kutta 法(2.2)の線形次数 p は奇数であるものとする．そのとき，(3.2.9)式で定義された $D_{T,2j+1}$ が，ある整数 r ($\geqq 0$) に対して，

$$D_{T,2j+1}=0\ (j=(p+1)/2,\cdots,(p-1)/2+r), \qquad D_{T,p+2+2r}\neq 0 \tag{3.2.12}$$

を満たすならば，(2.2)の位相次数は $q=p+1+2r$ である．□

証明 線形次数が p ならば，補題より，$q\geqq p+1$ である．したがって，

$$D_{T,2j+1}=0\ (j=0,1,\cdots,(p-1)/2)$$

が成立する．さらに(3.2.12)が成り立てば $q=p+1+2r$ に対する条件(3.2.10)が満たされ，位相次数は $q=p+1+2r$ と決定される．□

3.3 具体例

一つの具体例として，$m=2$ の場合について考察する．すなわち，

$$R_2(z)=\frac{1+\alpha_1 z+\alpha_2 z^2}{1+\beta_1 z+\beta_2 z^2} \tag{3.3.1}$$

について考察する．このとき，線形次数 p および位相次数 q は，それぞれ

$$D_1=1+\beta_1-\alpha_1,$$
$$D_2=1/2+\beta_1+\beta_2-\alpha_2,$$
$$D_3=1/6+\beta_1/2+\beta_2, \tag{3.3.2}$$
$$D_4=1/24+\beta_1/6+\beta_2/2,$$

および，

$$D_{T,1}=1-(\alpha_1-\beta_1),$$
$$D_{T,3}=1/3+\alpha_1\beta_1-\alpha_2-\beta_2-(\alpha_2\beta_1-\alpha_1\beta_2), \tag{3.3.3}$$
$$D_{T,5}=2/15+1/3(\alpha_1\beta_1-\alpha_2-\beta_2)+\alpha_2\beta_2$$
$$D_{T,7}=17/315+2/15(\alpha_1\beta_1-\alpha_2-\beta_2)+1/3\alpha_2\beta_2$$

の方程式系により定決される．

まず，$p=1$ の場合を考える．方程式系

$$D_1=0,\ D_{T,3}=0,\ D_{T,5}=0,\ D_{T,7}=0 \tag{3.3.4}$$

は，近似的に

$$\alpha_1=0.633735,\ \alpha_2=0.109408,\quad \beta_1=-0.366265,\ \beta_2=8.70488\times10^{-2} \tag{3.3.5}$$

あるいは，

$$\alpha_1=0.366265,\ \alpha_2=8.70488\times10^{-2},\quad \beta_1=-0.633735,\ \beta_2=0.109408 \tag{3.3.6}$$

と表される 2 組の実根をもつ．このとき，定理 1 によりそれら 2 組の実根から定まる有理関数近似(3.3.1)はいずれも位相次数 $q=8$ である．同様に $p=1$ に対しては $q=2,4,6$ となる近似を構成することができる．

次に，$p=3$ の場合を考える．方程式系

$$D_1=0,\ D_2=0,\ D_3=0,\ D_{T,5}=0 \tag{3.3.7}$$

は実根をもたない．すなわち，$p=3$ であるような任意の α_1，α_2，β_1，β_2 の組に対して，

$$D_{T,5}\neq 0 \tag{3.3.8}$$

が成立する．したがって，定理 1 により $p=3$ の場合は $q=4$ と位相次数が一意に決定される．また，$p=2$，4 の場合は補題 1 により，それぞれ，$q=2$，4 であることから，$m=2$ に対する線形次数と位相次数との関係は完全に決定されたことになる．

4. 高次陰的 Runge-Kutta 法の位相次数

本章では，実際的な見地から有益と思われる，高次陰的 Runge-Kutta 法について，位相誤差の観点からの考察を行い，一つの結果として，陰的な m 段 $2m$ 次

Gauss-Legendre 型公式が位相次数の観点からもある意味で最良であることを示す．

まず，いくつかの準備をする．整数 m $(\geqq 2)$ に対して，次数 p $(\geqq 2m-3)$ の有理関数近似(2.5)は線形方程式系

$$D_j=0 \quad (j=1,2,\cdots,2m-3) \tag{4.1}$$

を満たすような α_j, β_j $(j=1,2,\cdots,m)$ によって定まる（必要十分条件(3.2.3)）．(4.1)式は，$2m$ 個の未知変数に対する $2m-3$ 連立の線形方程式系であり，$m\geqq 3$ のとき，実数パラメータ a, b, c を用いて次の形に表される解系をもつことは容易に示される．

$$\begin{aligned}\alpha_j&=\alpha_{m,j}+a\alpha_{m-1,j-1}+b\alpha_{m-2,j-2}+c\alpha_{m-3,j-3},\\ \beta_j&=\beta_{m,j}+a\beta_{m-1,j-1}+b\beta_{m-2,j-2}+c\beta_{m-3,j-3}.\end{aligned} \tag{4.2}$$

ただし，

$$\begin{aligned}\alpha_{m,j}&=\frac{m!(2m-j)!}{(2m)!(m-j)!j!},\\ \beta_{m,j}&=(-1)^j\frac{m!(2m-j)!}{(2m)!(m-j)!j!}(j\geqq 0),\\ \alpha_{m,j}&=\beta_{m,j}=0 \quad (j<0)\end{aligned} \tag{4.3}$$

とする．

特に，(4.2)式で $a=b=c=0$ の場合，すなわち，

$$\alpha_j=\alpha_{m,j}, \quad \beta_j=\beta_{m,j} \tag{4.4}$$

に対応する有理関数近似(2.5)は (m,m) 次 Padé 近似，すなわち，分子，分母にともに m 次以下の多項式を用いて，近似の次数 $2m$ を達成しうる唯一の有理関数近似である．これは，Gauss-Legendre 型公式と呼ばれる m 段 $2m$ 次陰的 Runge-Kutta 公式の安定性関数であることが知られている[2]．そのとき，

$$\lambda_m=\frac{(m!)^2}{(2m)!(2m+1)!} \tag{4.5}$$

で定義される λ_m に対して，

$$e^z-R_m(z)=(-1)^m\lambda_m z^{2m+1}+O(z^{2m+2}) \tag{4.6}$$

の関係が成り立つことは，計算により容易に示すことができる．以上の準備のもとで，次の補題を得る．

補題 2 α_j, β_j $(j=0,1,\cdots,m)$ は(4.2)式で与えられるものとする．(3.2.9)式で定義される $D_{T,2m-1}$, $D_{T,2m+1}$ に対して，次が成立する．

$$\begin{aligned}D_{T,2m-1}&=\lambda_{m-2}b+\lambda_{m-3}ac,\\ D_{T,2m+1}&=\lambda_m+\lambda_{m-1}a^2+\lambda_{m-2}b^2+\lambda_{m-3}c^2\\ &\quad-(\lambda_{m-2}b+\lambda_{m-3}ac)/2. \quad \square\end{aligned} \tag{4.7}$$

証明 (4.2)式で与えられる α_j, β_j がパラメータ a, b, c の関数であることを強調するために，$\alpha_j(a,b,c)$, $\beta_j(a,b,c)$ と書くことにする．また，$D_{T,2j+1}$ も a, b, c の関数であること，および整数 m への依存性を強調する意味で，$D^{(m)}_{T,2j+1}(a,b,c)$ と書くことにする．

まず，

$$\alpha_j(-a,b,-c)=(-1)^j\beta_j(a,b,c) \quad (j=1,2,\cdots,m) \tag{4.8}$$

の関係より，

$$\begin{aligned}D^{(m)}_{T,2m-1}(-a,b,-c)&=D^{(m)}_{T,2m-1}(a,b,c),\\ D^{(m)}_{T,2m+1}(-a,b,-c)&=D^{(m)}_{T,2m+1}(a,b,c),\end{aligned} \tag{4.9}$$

を得る．$D^{(m)}_{T,2m-1}(a,b,c)$, $D^{(m)}_{T,2m+1}(a,b,c)$ が a, b, c の二次形式で表されることから，この関係式により

$$\begin{aligned}D^{(m)}_{T,2m-1}&=k^{(m)}_{11}a^2+k^{(m)}_{22}b^2+k^{(m)}_{33}c^2\\ &\quad+k^{(m)}_{31}ac+l^{(m)}_2 b+n^{(m)}_0,\\ D^{(m)}_{T,2m+1}&=k'^{(m)}_{11}a^2+k'^{(m)}_{22}b^2+k'^{(m)}_{33}c^2\\ &\quad+k'^{(m)}_{31}ac+l'^{(m)}_2 b+n'^{(m)}_0\end{aligned} \tag{4.10}$$

の表現を得る．ここで，$k^{(m)}_{11}$, $k^{(m)}_{22}$, $k^{(m)}_{33}$, $k^{(m)}_{31}$, $l^{(m)}_2$, $n^{(m)}_0$, $k'^{(m)}_{11}$, $k'^{(m)}_{22}$, $k'^{(m)}_{33}$, $k'^{(m)}_{31}$, $l'^{(m)}_2$, $n'^{(m)}_0$ は定数で，以下のように決定することができる．

まず，$\alpha_j(0,0,0)=\alpha_{m,j}$, $\beta_j(0,0,0)=\beta_{m,j}$ より，任意の m に対して，

$$D^{(m)}_{T,2m-1}(0,0,0)=0, \quad D^{(m)}_{T,2m+1}(0,0,0)=\lambda_m$$

が成立する．これは，(4.4)に対応する有理関数近似，すなわち (m,m) 次 Padé 近似の次数が $2m$ 次であること，および，(4.6)式，補題1の証明で用いた(3.1.4)式から示すことができる．したがって，

$$\begin{aligned}n^{(m)}_0&=D^{(m)}_{T,2m-1}(0,0,0),\\ k^{(m)}_{11}&=\lim_{a\to\infty}(D^{(m)}_{T,2m-1}(a,b,c)/a^2)=D^{(m-1)}_{T,2m-3}(0,0,0),\\ k^{(m)}_{22}&=\lim_{b\to\infty}(D^{(m)}_{T,2m-1}(a,b,c)/b^2)=D^{(m-2)}_{T,2m-5}(0,0,0),\\ k^{(m)}_{33}&=\lim_{c\to\infty}(D^{(m)}_{T,2m-1}(a,b,c)/c^2)=D^{(m-3)}_{T,2m-7}(0,0,0),\\ n'^{(m)}_0&=D^{(m)}_{T,2m+1}(0,0,0),\\ k'^{(m)}_{11}&=\lim_{a\to\infty}(D^{(m)}_{T,2m+1}(a,b,c)/a^2)=D^{(m-1)}_{T,2m-1}(0,0,0),\\ k'^{(m)}_{22}&=\lim_{b\to\infty}(D^{(m)}_{T,2m+1}(a,b,c)/b^2)=D^{(m-2)}_{T,2m-3}(0,0,0),\\ k'^{(m)}_{33}&=\lim_{c\to\infty}(D^{(m)}_{T,2m+1}(a,b,c)/c^2)=D^{(m-3)}_{T,2m-5}(0,0,0)\end{aligned}$$

の関係より，

$$\begin{aligned}&n^{(m)}_0=k^{(m)}_{11}=k^{(m)}_{22}=k^{(m)}_{33}=0, \quad n'^{(m)}_0=\lambda_m,\\ &k'^{(m)}_{11}=\lambda_{m-1}, \quad k'^{(m)}_{22}=\lambda_{m-2}, \quad k'^{(m)}_{33}=\lambda_{m-3}\end{aligned}$$

と決定される．

また，$c=0$, $b\neq 0$ のとき，$p=2m-2$ であることから，$q=2m-2$ である．したがって，$D^{(m)}_{T,2m-1}(a,b,0)=\lambda_{m-2}b$ の関係が，$D^{(m)}_{T,2m+1}(0,0,0)=\lambda_m$ と同じ論法で示され，$l^{(m)}_2=\lambda_{m-2}$ と決定される．さらに，$k^{(m)}_{31}=$

$l_2^{(m-1)}$ の関係より，$k_{31}^{(m)}$ も計算される．

$k'^{(m)}_{31}$，$l'^{(m)}_2$ も同様の議論により決定され，(4.7)式が示される．□

この補題を用いることによって，つぎの定理を証明することができる．

定理 2 陰的 Runge-Kutta 法(2.2)の線形次数を p とし，位相次数を q とする．そのとき，任意の整数 m ($\geqq 3$) に対して，次が成立する．

(1) $p \geqq 2m-3$ ならば，$q \leqq 2m$ である．

(2) $p \geqq 2m-3$ で $q=2m$ を達成する公式のうち，位相誤差定数の絶対値 $|C_{P,2m+1}|$ を最小にするものは，$p=2m$ 次の公式，すなわち，Gauss-Legendre 型公式である．□

証明 $p \geqq 2m-3$ ならば，$q \geqq 2m-2$ で定理 1 により，$D_{T,2m-1}$，$D_{T,2m+1}$ により位相次数が決定される．$D_{T,2m-1}=0$ を仮定すると，

$$D_{T,2m+1}=\lambda_m+\lambda_{m-1}a^2+\lambda_{m-2}b^2+\lambda_{m-3}c^2$$

となって，$D_{T,2m+1}=0$ とはなり得ない．したがって，位相次数は $2m$ を超えることはない．

さらに，$q=2m$ のとき $C_{P,2m+1}=D_{T,2m+1}$ である．この関数が最小となるのは明らかに $a=b=c=0$ のとき，すなわち，有理関数近似(2.5)が (m, m) 次 Padé 近似の場合である．□

m 段 $2m$ 次 Gauss-Legendre 型公式の安定性関数，すなわち，(m, m) 次 Padé 近似は左半平面で，

$$|R_m(z)| \leqq 1 \quad (z \in C,\ \mathrm{Re}\, z \leqq 0) \tag{4.11}$$

の評価を満たすが，特に，虚軸上では

$$|R_m(iy)|=1 \quad (y \in R) \tag{4.12}$$

となっている[2)]．前者は，A 安定性の定義として，よく知られている．後者は，二階微分方程式の解法に翻訳したときに，P 安定性に対応する性質である[5)]．したがって，Gauss-Legendre 型公式が，周期解をもつ問題に対して優れた特性を有することは，P 安定性の観点からも主張されよう．定理 2 は，同様な主張を，精度の面から述べたものである．実際，定理 2 の(1)(および，補題 1) から，その位相次数は $p \geqq 2m-4$ ($m \geqq 3$) において到達可能な $q=2m$ となる．さらに，定理 2 の(2)では，位相誤差定数の絶対値が最小となることが示されている．すなわち，Gauss-Legendre 型公式は周期解の位相誤差に関して，上述の意味で，最適な数値積分法であることが示されたことになる．

5. おわりに

本論文では，陰的 Runge-Kutta 法の周期解に対する近似特性の解析を目的として，線形方程式に適用した際の位相誤差，位相次数について論じた．

具体的には，公式の線形次数 (線形方程式に適用した際の次数) が偶数であれば位相次数が一意に定まるが，奇数の場合は必ずしも一意ではないことを示した (補題 1)．さらに，奇数次数の場合を詳しく調べて，位相次数の決定方法を与えた (定理 1)．また，この定理の応用として，$2m-3$ 次以上の線形次数を有する m 段陰的 Runge-Kutta 法の位相次数に関する特徴づけを与えた (定理 2)．この結果から，精度，および安定性に関して優位性が示されている Gauss-Legendre 型公式が，位相次数，位相誤差定数の観点からも最適な公式，すなわち，周期解の積分公式としても極めて優れた特性をもつ公式である，との結論を得る．

しかしながら，このような陰的方法を実際に用いる際には，留意しなければならない問題点がいくつか指摘される．常微分方程式が非線形である場合の非線形方程式の求解は，最も本質的な問題であり，そのような観点から，文献 11) のような研究もなされている．また，丸め誤差に対する配慮も，とりわけ周期解の積分においては，必要となろう．このような問題点の解決は，今後の重要な課題である．

謝辞 日頃から御指導頂く，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 Directed Integration of Structural Dynamic Equations, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Vol. 15, pp. 685-699 (1980).
2) Butcher, J. B.: *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*, p. 528, John Wiley & Sons, Chichester (1987).
3) 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).
4) Chawla, M. M.: Two-Step Fourth Order P-Stable Methods for Second Order Differential Equations, *BIT*, Vol. 21, pp. 190-193 (1981).
5) Hairer, E.: Unconditionally Stable Methods for Second Order Differential Equations, *Numer. Math.*, Vol. 32, pp. 373-379 (1979).
6) Jeltsch, R.: Stability on the Imaginary Axis and A-Stability of Linear Multistep Methods, *BIT*, Vol. 18, pp. 170-174 (1978).
7) Lambert, J. and Watson, I. A.: Symmetric Multistep Methods for Periodic Initial Value

Problems, *J. Inst. Math. Appl.*, Vol. 18, pp. 189-202 (1976).

8) Nφrsett, S. P. and Wanner, G.: The Real-Pole Sandwich for Rational Approximations and Oscillation Equations, *BIT*, Vol. 19, pp. 79-94 (1979).

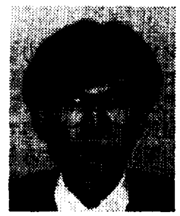
9) Thomas, R. M.: Phase Properties of High Order, Almost P-Stable Formulae, *BIT*, Vol. 24, pp. 225-238 (1984).

10) 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, No. 3, pp. 595-617 (1987).

11) Van der Houwen, P. J. and Sommeijer, B. P.: Phase-lag Analysis of Implicit Runge-Kutta Methods, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 26, No. 1, pp. 214-229 (1989).

12) Wanner, G., Hairer, E. and Nφrsett, S. P.: When I-Stability Implies A-Stability, *BIT*, Vol. 18, p. 503 (1978).

(平成元年3月 9 日受付)
(平成元年7月 18 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.