数 値 解 析 30 − 3
(1 9 8 9. 1 0. 7)

一般化R.K.法の一構成法

杉浦 洋　鳥居達生

名古屋大学工学部情報工学科

我々は，陰的R.K.法を実現する際に現われる非線形方程式を解くNewton反復過程について考察する．この反復過程における第k回反復はそれ自体一般化R.K.法であり，元のR.K.法がA-安定であれば，A-安定な方法となる．この事実に基づいて，その実現に際して非線形方程式を解く必要のない高い次数を持つA-安定公式がえられる．

A Method for Constructing Generalized R.K. Method

Hiroshi Sugiura　Tatsuo Torii

Department of Information Engineering,
Faculty of Engineering, Nagoya University

We consider the Newton iteration process for solving the non-linear equations in the implementation of an implicit Runge-Kutta method. The k-th iteration of this process, as itself, is a generalized R.K. method and is A-stable if the original R.K. method is A-stable. Based on this fact, we construct a high order A-stable method for which we don't need solving non-linear equations in the implementation.

1. はじめに

陰的R.K.公式の族は，高い次数と安定性を持つ公式を含み，それらの公式はstiffな問題の解法のための有力な手段である．しかし，陰的R.K.公式はその実現において非線形連立方程式を解かねばならず，それが実用化に際しての大きな困難となっている．

一般化R.K.法は微分方程式の定義関数の高階微分を用いる方法であり，非線形方程式を解くことなく*A*-安定な方法が得られる[3,4]が，高い次数のものは設計が難しい．

本稿では，陰的R.K.公式を実現する際に現われる非線形方程式を解くNewton反復過程を分析し，その反復過程を有限回で打ち切ったものが一般化R.K.法になっていることを示す．この一般化R.K.法は，高次公式の設計が容易で，元の陰的R.K.公式が*A*-安定ならば*A*-安定となる．

最後に１ステップあたりの関数と微係数の評価回数を減らす工夫について述べる．

2. 補間型陰的R.K.公式

我々は次の式で与えられる初期値問題を考える．

(2-1) $y' = f(y),\ y(0) = y_0$.

簡単のため，ここでは１次元自律系の方程式を考えるが，一般の多次元問題への拡張は容易である．s 段の補間型陰的R.K.公式は次のように定義される．

(2-2) $Y(h) = y_0 + \sum_{i=1}^{s} b_i d_i \approx y(h)$,

(2-3) $d_i = f(y_0 + h \sum_{j=0}^{s} a_{ij} d_j),\ 1 \le i \le s$.

ここで，$\{b_i\}$，$\{a_{ij}\}$は公式固有のパラメータである．hを固定したとき，非線形方程式(2-3)を解いて$\{d_i\}$を求めれば，(1-2)式の右辺$Y(h)$は$y(h)$の近似となる．

補間型陰的R.K.公式は陽的R.K.公式と比べて設計が容易で高精度のものが得られる．設計方針は次のようなものである．

<1> 節$0 \le \xi_1 < \xi_2 < \ldots < \xi_s \le 1$を決定する．

<2> 節上で次の$s+1$個の$s-1$次補間型積分則を作る．

(2-4) $\sum_{j=1}^{s} a_{ij} \varphi(\xi_j) \cong \int_0^{\xi_i} \varphi(x) dx(x),\quad 1 \le i \le s$.

(2-5) $\sum_{j=1}^{s} b_j \varphi(\xi_j) \cong \int_0^{1} \varphi(x) dx(x)$.

積分則の重み$\{b_i\}$，$\{a_{ij}\}$はφが$s-1$次多項式のとき(2-4),(2-5)が等式になるように決定され，その値は次の式で計算できる．

(2-6) $a_{ij} = \int_0^{\xi_i} \prod_{\substack{k \ne j \\ k=1}}^{s} \frac{x - \xi_k}{\xi_j - \xi_k},\ 1 \le i, j \le s$,

(2-7) $b_i = \int_0^{1} \prod_{\substack{k \ne i \\ k=1}}^{s} \frac{x - \xi_k}{\xi_i - \xi_k},\ 1 \le i \le s$.

これらの補間型積分則の重み$\{b_i\}$，$\{a_{ij}\}$がそのまま補間型陰的R.K.公式のパラメータとなる．

このように設計された補間型陰的R.K.公式の次数は次の主張[1]で決定される．

主張1-1. (2-5)の補間型積分則の次数を$p(\geq s\text{-}1)$とすると，

(2-8) $d_i - y'(h\xi_i) = O(h^s), 1 \leq i \leq s$,

(2-9) $Y(h) - y(h) = O(h^{p+2})$,

となり，補間型陰的R.K.公式の次数は$p+1$である．

補間型陰的R.K.公式においては，(2-5)式の補間型積分則の次数がそのまま公式の次数に反映する． したがって，高次の補間型積分則が得られる節を選択すれば高次の公式を得る．次の系にいくつかの例をあげる．

系1-2.

(1) $\{\xi_i\}$がGauss-Legendre 積分則の節なら得られる補間型陰的R.K.公式は2s次である．

(2) $\{\xi_i\}$がRadau 積分則の節なら得られる補間型陰的R.K.公式は$2s$-1次である．

(3) $\{\xi_i\}$がLobatto 積分則の節なら得られる補間型陰的R.K.公式は$2s$-2次である．

系1-2にあげた3種の公式はすべて高い次数を持ちしかもA-安定である．しかし，これらの公式を実用化するためには，一般には解の存在も一意性も保証されていない非線形方程(2-3)を解かねばならない．また，(2-3)を解くために採用した反復解法の収束性の保証や停止則の設定にも難しい問題をはらんでいる．次の節で我々は(2-3) の解法としてNewton法を採用したときの収束過程を分析する．

3. Newton 法

我々は，(1-3)式を次のように書く．

(3-1) $P(\mathbf{d}) \equiv d - F(\mathbf{d}) = 0$ ·

ここで，$\mathbf{d} = (d_1, d_2, \ldots, d_s)^{\mathrm{T}}$であり，$F$は

(3-2) $F(\mathbf{d}) \equiv \left(f(y_0 + \sum_{j=1}^{s} a_{ij} d_j)\right)^{\mathrm{T}}_{i=1,\cdots,s}$ ，

で定義される．以下，断わりのない限りベクトルの要素は下付添字で表わすことにする．

(3-1)を解くためのNewton反復は，$\mathbf{d}^{(0)}$を初期値として，

(3-3) $\mathbf{d}^{(k+1)} = \mathbf{d}^{(k)} - \{P'(\mathbf{d}^{(k)})\}^{-1} P(\mathbf{d}^{(k)})$ ， $k \geq 0$,

となる． ここで，P' はP のJacobian行列である．次の定理はKantrovichの収束定理[2]より明らかである．

定理3-1.

節の上の解の微係数をベクトルとして

$$y'(y_0 + h\xi) \equiv (y'(y_0 + h\xi_1), \cdots, y'(y_0 + h\xi_s))^{\mathrm{T}}$$

とかく．初期値について

(3-4) $\mathbf{d}^{(0)} = y'(y_0 + h\xi) + O(h^n)$,

が成立すれば，十分小さなhで方程式(3-1)は唯一の解$\mathbf{d}^*$を持ち(3-3)のNewton反復列は，

$$\text{(3-5)}\quad \mathbf{d}^{(k)} = \mathbf{d}^* + O(h^{2^k n'-1}),$$
$$n' = \min(s,n)+1,$$

を満たす.

このことからただちに，

系3-2.

定理3-1の仮定の下で，もとの補間型陰的R.K.公式がt次法なら，

$$Y^{(k)}(h) = y_0 + \sum_{i=1}^{s} b_i d_i^{(k)}$$

について，

$$\text{(2-6)}\, Y^{(k)}(h) = y(h) + O(h^{\min(t+1, 2^k n')})$$

が成立する．ここで，$n' = \min(s,n)+1$ である.

系3-2は，Newton法のk回反復$Y^{(k)}(h)$が次数$\min(t, 2^k n'-1)$の一般化R.K.法になっていることを示している.

次に，$Y^{(k)}(h)$ の安定性について述べる.

複素数λをパラメータに持つ初期値問題

$$\text{(3-7)}\quad y' = \lambda y,\ y(0) = 1$$

に対して，ある解法により，ステップ幅$h>0$で得られた$y(h)$の近似値を$Y(\lambda;h)$とする．$\mathrm{Re}\lambda \le 0$ ならば $|Y(\lambda;h)| \le 1$を満たすとき，その解法はA-安定であるという.

主張3-3.

もし，元の陰的R.K.法がA-安定ならば，Newton法のk回反復$Y^{(k)}(h)$，$k\ge1$，もまたA-安定である.

(証明) 微分方程式(3-7)に関しては，(2-3)は線形方程式となり，$k\ge1$で$\mathbf{d}^{(k)} = \mathbf{d}^*$，すなわち$Y^{(k)}(h) = Y(h)$ が成立する．//

系3-2と主張3-3は，A-安定な陰的R.K.法に基づく限り初期値$\mathbf{d}^{(0)}$については非常に弱い条件，すなわち(3-4)で$n\ge1$，でA-安定な一般化R.K.法$Y^{(k)}(h)$が得られることを示している.

4. A-安定公式の構成

前節の最後で述べたことから，すべての初期値問題の解法，たとえば陽的R.K.法や多段法が初期値$\mathbf{d}^{(0)}$ を用意するために利用できる．ここでは，Newton反復のみで構成された方法についてのみ述べる.

Radau公式(系2-1の(2)) の節を$0=\xi_{s,1}<\xi_{s,2}<\dots<\xi_{s,s}$とし，その上で構成された補間型陰的R.K.法のパラメータを$\{a_{s,ij}\}$，$\{b_{s,j}\}$とする．解法を構成する3つの作用素を定義する.

<1>Newton法1回反復 $N_s : \mathbf{R}^s \to \mathbf{R}^s$.

$$\text{(4-1)}\quad N_s(\mathbf{d}) = \mathbf{d} - P_s'(\mathbf{d})^{-1} P_s(\mathbf{d}).$$

ここでP_s は(3-1)のP を節$\{\xi_{s,i}\}$上で定義したものである.

<2>補間 $I_{s',s} : \mathbf{R}^s \to \mathbf{R}^{s'}$.

標本点$\{h\xi_{s,i}\}$上で値$\{d_i\}$をとる補間多

項式$d_s(x)$を$\{h\xi_{s',i}\}$上で評価した値を与える．すなわち，

(4–2)　$I_{s',s}(\mathbf{d})=(d_s(h\xi_{s',i}))^T$　．

<3>積分 $Q_s:\boldsymbol{R}^s\rightarrow\boldsymbol{R}$　．

標本点$\{h\xi_{s,i}\}$上で値$\{d_i\}$をとる補間多項式$d_s(x)$を区間 $[0,h]$で積分する．

(4-3)　$Q_s(\mathbf{d})=y_0+h\sum_{i=1}^{s}b_{s,i}d_i\cong y(h)$　．

ここで，$\mathbf{d}\in\boldsymbol{R}^s$ が

$$d_i=f(h\xi_{s,i})+O(h^{n+1}),1\leq i\leq s$$

を満たすとき$\mathbf{d}$は次数n の近似であると言うことにする．補間多項式の誤差理論と定理3-1，系3-2より，上で定義した３つの作用素の入力と出力の近似次数は次のようになる．

主張4-1.

ベクトル$\mathbf{d}\in\boldsymbol{R}^s$ が近似次数n であるとすると，

(1) $N_s(\mathbf{d})$ は近似次数 $\min(2n+2,s-1)$を持つ．

(2) $I_{s',s}(\mathbf{d})$ は近似次数 $\min(n,s-1)$を持つ．

(3) $Q_s(N_s(\mathbf{d}))$ は次数$\min(2n+3,t)$の方法である．ここで，t は基礎となる陰的R.K.法の次数で，ここでは$t=2s-1$である．

今，簡単のために$s=2^m$とする．初期値$\mathbf{d}^{(0)}=(f(y_0),\ldots,f(y_0))^T\in\boldsymbol{R}^s$から出発するNewton反復は，

(4-4)　$\mathbf{d}^{(k+1)}=N_s(\mathbf{d}^{(k)})$　$,k\geq0$ ．

と書ける．$\mathbf{d}^{(0)}$は０次近似だから，主張4-1より$\mathbf{d}^{(k)}$は$\min(2^{k+1}-2,2^m-1)$次近似である．また，その積分結果$Q_s(\mathbf{d}^{(k)})$は$k\geq1$で$\min(2^{k+1}-1,2^{m+1}-1)$次の方法となり，$k=m$で$2^m$点Radau公式の次数$2^{m+1}-1$に一致し，それ以降次数は向上しない．$y_0$における(2-1)の方程式の定義関数$f$とその微係数$f'$の値を，最初に計算しておけば，(4-3)の計算１回あたりに新しく必要なf，f'の評価回数はそれぞれs-1回である．したがって，この方法で$2^{m+1}-1$次の方法を得るために必要なf，f'の評価回数は，合計$m(s-1)+2$ 回づつ必要である．

関数とその微係数の計算回数を減らすために以下のように考える．式(4-4)みると，作用素N_s は$k\leq m-2$のとき，$(2^{k+1}-2)$次近似$\mathbf{d}^{(k)}$から$(2^{k+2}-2)$次近似$\mathbf{d}^{(k+1)}$を作っている．対象とするベクトル空間の次元は小さいが，作用素

$$N^{(k)}=N_{2^{k+2}-1}\cdot I_{2^{k+2}-1,2^{k+1}-1}$$
$$N^{(k)}:\boldsymbol{R}^{2^{k+1}-1}\rightarrow\boldsymbol{R}^{2^{k+2}-1}$$

もまた$(2^{k+1}-2)$次近似に作用させると$(2^{k+2}-2)$次近似を出力することが主張4-1から確かめられる．$N^{(k)}$の計算に要するf，f'の評価回数は，y_0における値がすでに計算してあるものとして，それぞれ$2^{k+2}-2$回である．この$N^{(k)}$を使って次のようなアルゴリズムを考える．

<アルゴリズム4-2>

$m\geq2$として，

(0) 初期化

$$\mathbf{d}^{(0)}=(f(y_0))$$

(1)反復過程

$$\mathbf{d}^{(k+1)}=N^{(k)}(\mathbf{d}^{(k)}) \quad ,0\le k\le m-2$$

(1')最終回反復

$$\mathbf{d}^{(m)}=N_{2^m}(I_{2^m,2^{m-1}}(\mathbf{d}^{(m-1)}))$$

(2)積分

$$Y(h)=Q_{2^m}(\mathbf{d}^{(m)})$$

主張4-1より，最終結果$Y(h)$は2^m点Radau公式と同じ次数$2^{m+1}-1$持つ．また，主張3-2より，$Y(h)$はA-安定である．アルゴリズム4-2においては，関数と微係数がそれぞれn_f回評価され，

$$n_f=1+\sum_{k=0}^{m-2}(2^{k+2}-2)+(2^m-1)$$
$$=3\cdot 2^m-2\cdot m-2$$

となる．関数評価回数n_fは，すべてのmについて到達次数の1.5倍以下に抑えられ，元のNewton反復法から大幅に改善された．mが小さいときには，さらに効率的で，例えば，$m=2$のとき$n_f=6$で7次公式，$m=3$のとき$n_f=16$で15次公式が得られる．

5. まとめ

A-安定な陰的R.K.法を実用化する際に現われる非線形方程式を解くNewton法の反復過程において，その有限反復結果がA-安定な一般化R.K.法になっていることを示した．また，元の陰的R.K.法と同じ次数を持つ一般化R.K.法の構成において，微分方程式を定義する関数とその微係数の計算回数を減少させる方法について述べた．我々の方法では，定義関数の微分の計算回数がかなり多くなっている．反復法を，準Newton法に置き換えた方法などについても考察する必要があると思われる．

参考文献

[1] Bucher, J.C. : Implicit Runge-Kutta Processes. Math. Comp. 18,pp.50-64(1964).

[2] Kantrovich, L.V. and Akilov, G.P. : Functional analysis, 2nd edition. Pergamon Press, p.(1982).

[3] Kaps, P. and Rentrop, P. : Generalized Runge-Kutta methods of order four with stepsize control for stiff ordinary differential equations. Numer. Math. 33,pp.55-68(1979).

[4] Rosenbrock, H.H.: Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations. Comp.J.5,pp.329-331(1963).