数理解析研究所講究録
第520巻 1984年 140-152

5段数陽的Runge-Kutta法の完全解

山梨大工　若林　晴彦（Haruhiko Wakabayashi）
田中　正次（Masatsugu Tanaka）
山下　茂（Sigeru Yamashita）

1．5段数陽的Runge-Kutta法

常微分方程式の初期値問題

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \tag{1.1}$$

が与えられたとき、5段数陽的Runge-Kutta法は

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^{5} w_i k_i \\ k_i &= h_n f(x_n + a_i h_n,\ y_n + \sum_{j=0}^{i-1} b_{ij} k_j) \\ h_n &= x_{n+1} - x_n, \quad a_1 = b_{10} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, 5) \end{aligned} \tag{1.2}$$

と表すことができる。

ここで y, y', f は十分滑らかな関数ベクトル、y_0は初期値ベクトル、a_i, b_{ij}, w_iはこの公式を特徴づけるパラメータである。

2．4次法であるための次数条件式

公式（1.2）が4次法であるために、係数が満足しなければならない条件式群は、微分方程式（1.1）が単一であるか連立であるかに関係なく次のように表される。

$$
\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{5} w_i = 1 \qquad \sum_{i=2}^{5} w_i a_i = 1/2 \\
&\sum_{i=2}^{5} w_i a_i^2 = 1/3 \\
&w_2 a_2 b_{32} + w_4\Big(\sum_{i=2}^{3} a_i b_{4i}\Big) + w_5\Big(\sum_{i=2}^{4} a_i b_{5i}\Big) = 1/6 \\
&\sum_{i=2}^{5} w_i a_i^3 = 1/4 \qquad\qquad (2.1) \\
&w_3 a_2^2 b_{32} + w_4\Big(\sum_{i=2}^{3} a_i^2 b_{4i}\Big) + w_5\Big(\sum_{i=2}^{4} a_i^2 b_{5i}\Big) = 1/12 \\
&w_4 a_2 b_{32} b_{43} + w_5\Big\{a_2 b_{32} b_{53} + \Big(\sum_{i=2}^{3} a_i b_{4i}\Big) b_{54}\Big\} = 1/24 \\
&w_3 a_2 a_3 b_{32} + w_4 a_4\Big(\sum_{i=2}^{3} a_i b_{4i}\Big) + w_5 a_5\Big(\sum_{i=2}^{4} a_i b_{5i}\Big) = 1/8 \\
&a_i = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} \quad (i=2,3,4,5)
\end{aligned}
$$

3．打ち切り誤差とその判定基準

公式（1.2）の局所打ち切り誤差をTとすれば、Tは次のように表される。

$$T = t h^5 + O(h^6)$$

ここで

$$
\begin{aligned}
t = {} & \alpha_{41} D^4 f + \alpha_{42} D^2 f_y Df + \alpha_{43} Df_y D^2 f + \alpha_{44} f_y^2 D^2 f + \alpha_{45} f_{yy}(Df)^2 \\
& + \alpha_{46} f_y D^3 f + \alpha_{47} f_y Df_y Df + \alpha_{48} f_y^3 Df
\end{aligned}
$$

である。ただし $D = \partial/\partial x + f\,\partial/\partial y$ であり、また α_{4j}（$j=1,2,\ldots,8$）は公式の係数のみに依存する関数である。（α_{4j}の詳細に

ついては、たとえば文献１を見よ。）

打ち切り誤差の主項の大小を判定するために、その有効性が確認されている、次の打ち切り精度判定基準 A_{43} を導入する。[1]

$$A_{43} = \sum_{j=1}^{8} a_{4j}^{2}$$

次に丸め誤差に関する性質を判断するため、次式によって定義される数量 R_{42} を導入する。

$$R_{42} = \sum_{i=1}^{5} |\omega_i| + \sum_{i=2}^{5} \sum_{j=1}^{i-1} |b_{ij}|$$

4. 安定性に関する諸概念[2]

安定性のテスト方程式 $y' = \lambda y$（λは複素数）を公式（1.2）に代入し、４次法であるための条件式を用いて整理すると

$$y_{n+1} = \{1 + h\lambda + (h\lambda)^2/2! + (h\lambda)^3/3! + (h\lambda)^4/4! + \gamma_5 (h\lambda)^5\} y_n$$

が得られる。ここで

$$\gamma_5 = \omega_5 a_2 b_{32} b_{43} b_{54}$$

である。

［定義１］

$$P(h\lambda, \gamma_5) = 1 + h\lambda + (h\lambda)^2/2! + (h\lambda)^3/3! + (h\lambda)^4/4! + \gamma_5 (h\lambda)^5$$

によって定義される $h\lambda$ の多項式 $P(h\lambda, \gamma_5)$ を公式（1.2）の安定多項式という。

[定義2]

$$S=\{h\lambda \mid |P(h\lambda,\gamma_5)|\leqq 1,\ h\lambda\text{は複素数}\}$$

によって定義される複素平面上の閉領域を、公式(1.2)の絶対安定領域という。便宜上、原点を含む単連結な絶対安定領域を S_e、その面積を S_A で表す。

[定義3]

Rを実数全体の集合とするとき

$$S_I = R\cap S_e$$

によって定義される閉区間 $S_I=[\alpha, 0.0]$ を、公式(1.2)の絶対安定区間という。

5. 次数条件式の解

公式(1.2)の係数パラメータが条件

$$a_i\geqq 0,\quad b_{ij}\geqq 0\qquad (i=1,2,\dots,5\ ,\ i>j)$$

$$a_i\leqq a_j\quad (i\leqq j)$$

を満足するとき、この公式は単調であると言われる。[3]

4次の次数条件式に単調性を仮定して得られた解系は、次の5つの解系である。

(i) $a_2=a_3=a_4$

(ii) $a_2=a_3$

(iii) $a_3=a_4$

(iv) $a_4 = a_5$

(v) $a_i \neq a_j \quad (i \neq j)$

本研究では単調性を仮定せず、4次の次数条件式の解系を可能な限り導いた。まず、4次の次数条件式を $a_i \neq a_j$ の場合について、係数 $a_2, a_3, a_4, a_5, b_{43}, b_{53}, b_{54}$ を自由パラメータとして解く。それが次の解系である。[4]

$$w_5 = \frac{a_4(a_4-a_2)(a_4-a_3)(1-2a_2) - a_3 b_{43}\{3-4(a_2+a_3)+6a_2a_3\}}{12[a_4(a_4-a_2)(a_4-a_3)\{a_3 b_{53}(a_3-a_2)+a_4 b_{54}(a_4-a_2)\} - a_3 b_{43}(a_3-a_2)a_5(a_5-a_2)(a_5-a_3)]}$$

$$w_4 = \frac{\{3-4(a_2+a_3)+6a_2a_3\} - 12 w_5 a_5(a_5-a_2)(a_5-a_3)}{12 a_4(a_4-a_2)(a_4-a_3)}$$

$$w_3 = \frac{2-3a_2-6\{w_4 a_4(a_4-a_2)+w_5 a_5(a_5-a_2)\}}{6a_3(a_3-a_2)}$$

$$w_2 = \frac{1-2(w_3a_3+w_4a_4+w_5a_5)}{2a_2} \qquad (5.1)$$

$$b_{32} = \frac{w_4 a_2(a_5-a_4)(1-24 w_5 a_3 b_{43} b_{54}) - w_5 b_{54}\langle(2a_5-3a_2) - 24[w_2 a_3 b_{43}(a_3a_5-a_2a_4)+w_5 a_5\{a_3 b_{53}(a_3-a_2)+a_4 b_{54}(a_4-a_2)\}]\rangle}{24 a_2^2\{w_4(a_5-a_4)(w_4 b_{43}+w_5 b_{53}) - w_3 w_5 b_{54}(a_5-a_4)\}}$$

$$b_{42} = \frac{1-24\{w_4 a_2 b_{32} b_{43} + w_5(a_2 b_{32} b_{53} + a_3 b_{43} b_{54})\}}{24 w_5 a_2 b_{54}}$$

$$b_{52}=\frac{1-8\{\omega_3 a_2 a_3 b_{32}+\omega_4 a_4(a_2 b_{42}+a_3 b_{43})+\omega_5 a_5(a_3 b_{53}+a_4 b_{54})\}}{8\omega_5 a_2 a_5}$$

(5.1) 式で示される解系において分母が零になる場合を考え、その条件を(2.1)式に付加して再び解く。このような手続きをくり返すことにより求められるすべての解系を、完全解とよぶことにする。解系の総数は25個である。

- 解系(I) $a_i \neq a_j$ $\Longrightarrow$
  - 解系(II) $a_2=a_3$ $\Longrightarrow$
    - (II-1) $a_2=a_3$ 及び $a_4=0$
    - (II-2) $a_2=a_3$ 及び $a_5=0$
    - (II-3) $a_2=a_3=a_4$
    - (II-4) $a_2=a_3=a_5$
    - (II-5) $a_2=a_3$ 及び $a_4=a_5$
  - 解系(III) $a_2=a_4$ $\Longrightarrow$
    - (III-1) $a_2=a_4$ 及び $a_3=0$
    - (III-2) $a_2=a_4$ 及び $a_5=0$
    - (III-3) $a_2=a_4=a_5$
    - (III-4) $a_2=a_4$ 及び $a_3=a_5$
  - 解系(IV) $a_3=a_4$ $\Longrightarrow$
    - (IV-1) $a_3=a_4=0$
    - (IV-2) $a_3=a_4$ 及び $a_2=a_5$
    - (IV-3) $a_3=a_4$ 及び $a_5=0$
  - 解系(V) $a_3=0$ $\Longrightarrow$
    - (V-1) $a_3=a_5=0$
    - (V-2) $a_2=a_5$ 及び $a_3=0$
    - (V-3) $a_4=a_5$ 及び $a_3=0$
  - 解系(VI) $a_4=0$ $\Longrightarrow$
    - (VI-1) $a_4=a_5=0$
    - (VI-2) $a_2=a_5$ 及び $a_4=0$
    - (VI-3) $a_3=a_5$ 及び $a_4=0$
  - 解系(VII) $a_5=0$

解系群(I)　　　解系群(II)

各解系が誤りなく得られていることを立証するために、数式処理システムREDUCE3.0が用いられた。下表にREDUCE3.0による解系（II-1）の検算結果を示す。[5]

表１

```
REDUCE 3.0 (Apr-15-83 (12 DEC 83) Factorizer and Integrator) : 26 DEC 83
A8523 on M-280H(SYSC) at TUCC running under VOS3/SP2 JSS4(V08-02) OS. ...

 AA1:=W1+W2+W3+W4+W5¥

 AA2:=W2*A2+W3*A3+W4*A4+W5*A5¥

 AA3:=W2*(A2**2)+W3*(A3**2)+W4*(A4**2)+W5*(A5**2)¥

 AA4:=W3*A2*B32+W4*(A2*B42+A3*B43)+W5*(A2*B52+A3*B53+A4*B54)¥

 AA5:=W2*(A2**3)+W3*(A3**3)+W4*(A4**3)+W5*(A5**3)¥

 AA6:=W3*(A2**2)*B32+W4*((A2**2)*B42+(A3**2)*B43)
     +W5*((A2**2)*B52+(A3**2)*B53+(A4**2)*B54)¥

 AA7:=W4*A2*B32*B43+W5*(A2*B32*B53+(A2*B42+A3*B43)*B54)¥

 AA8:=W3*A2*A3*B32+W4*A4*(A2*B42+A3*B43)+W5*A5*(A2*B52+A3*B53+A4*B54)¥

 A2:=1/2¥

 A3:=A2¥

 A4:=0¥

 A5:=1¥

 W5:=1/6¥

 W4:=(1-2*(B32*B53+(B42+B43)*B54))/
     (12*B32*B43)¥

 W1:=(1/6)-W4¥

 W3:=(1-12*W4*(B42+B43))/(6*B32)¥

 W2:=(2/3)-W3¥

 B52:=(3-6*W3*B32-2*B53)/2¥

AA1=1

AA2=1/2

AA3=1/3

AA4=1/6

AA5=1/4

AA6=1/12

AA7=1/24

AA8=1/8

 END;
```

6. 各解系の安定性と打ち切り精度の関係

公式(1.2)の4次の次数条件式に対する5.の解系は、a_i, b_{ij} のいくつかを自由パラメータに持っている。安定性と打ち切り精度の関係は次のように求めた。

(i) 自由パラメータ a_i は変域 0.0〜1.0 において刻み幅 0.1 で、自由パラメータ b_{ij} は変域 -2.0〜2.0 において刻み幅 0.2 でそれぞれ変動させる。そのとき得られるすべての自由パラメータの組について γ_5 と A_{43} を計算する。

(ii) 区間 $I=[0.0, 0.01]$ を50等分して小区間 I_i をつくり、$\gamma_5 \in I_i$ となるようなすべての自由パラメータの組のうち、A_{43} を最小にする組を初期値にして、γ_5 一定という条件の下に A_{43} を最小にする制約付き最小化を行った。

ついでに、$\min A_{43}$ を与えるパラメータに対応する公式について絶対安定区間 S_I、絶対安定領域の面積 S_A 及び R_{42} を求めた。

Fig1〜Fig6 は、横軸に γ_5 をとり、縦軸に有効絶対安定領域 Se の面積 S_A、絶対安定区間 $S_I=(\alpha, 0.0)$ の下限 α、$\log_{10} A_{43}$ 及び $\log_{10} R_{42}$ をとって、各解系に対するそれら諸量の間の相互関係を図示したものである。

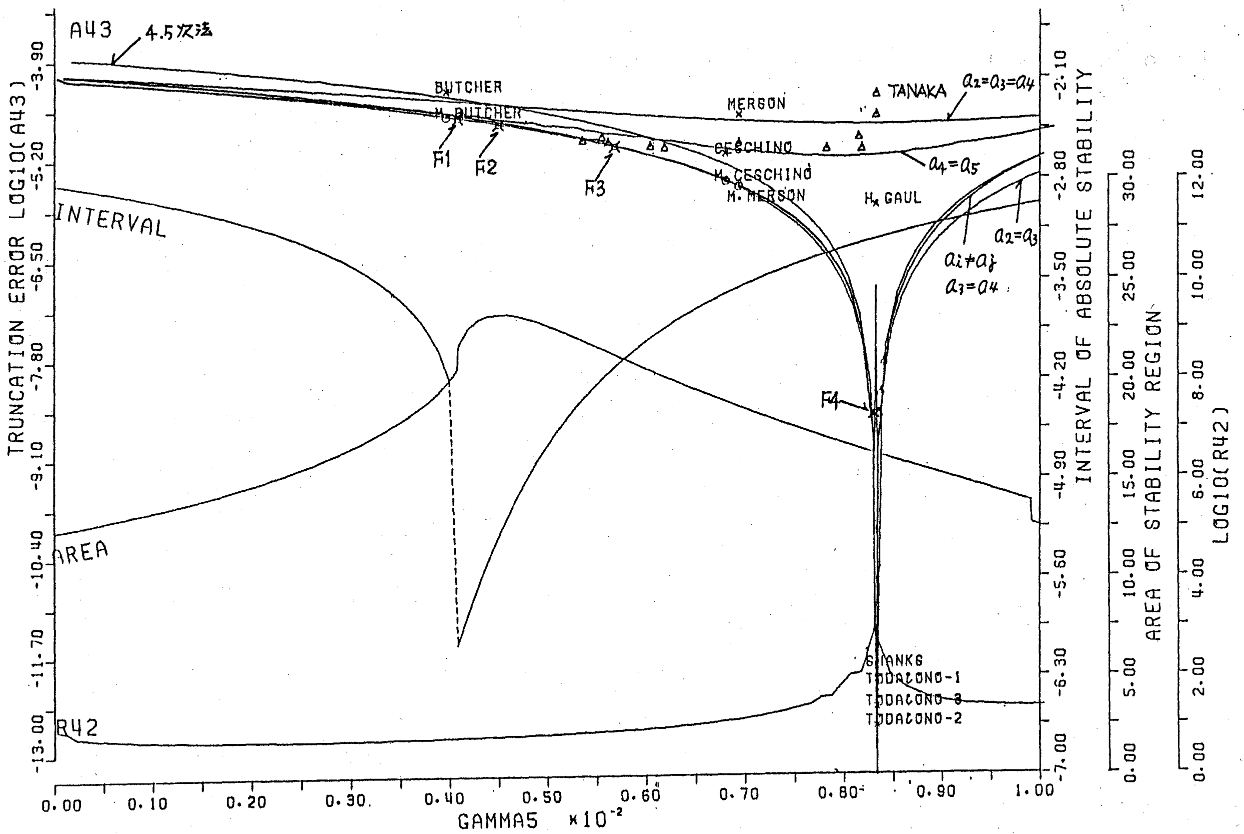

Fig1 安定性と打ち切り精度の関係（単調な公式）

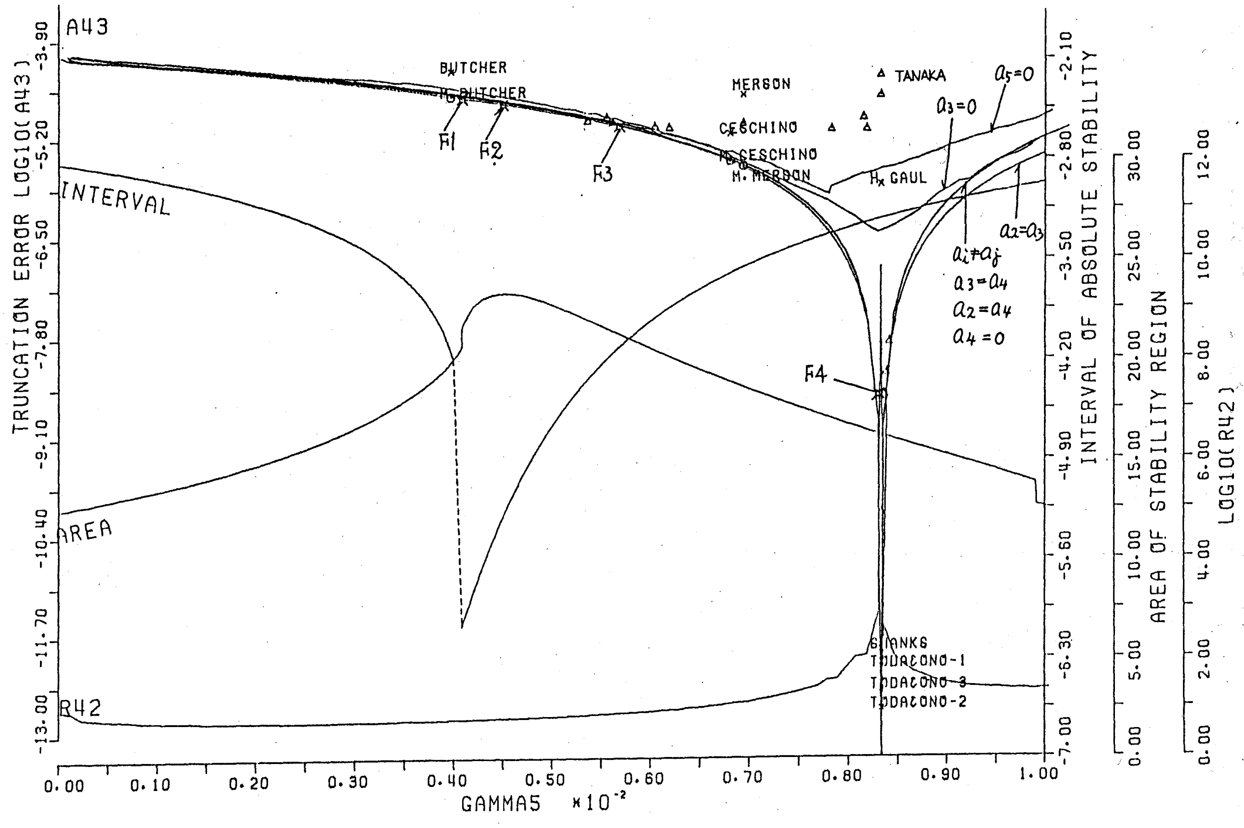

Fig2 安定性と打ち切り精度の関係（解系群Ⅰ）

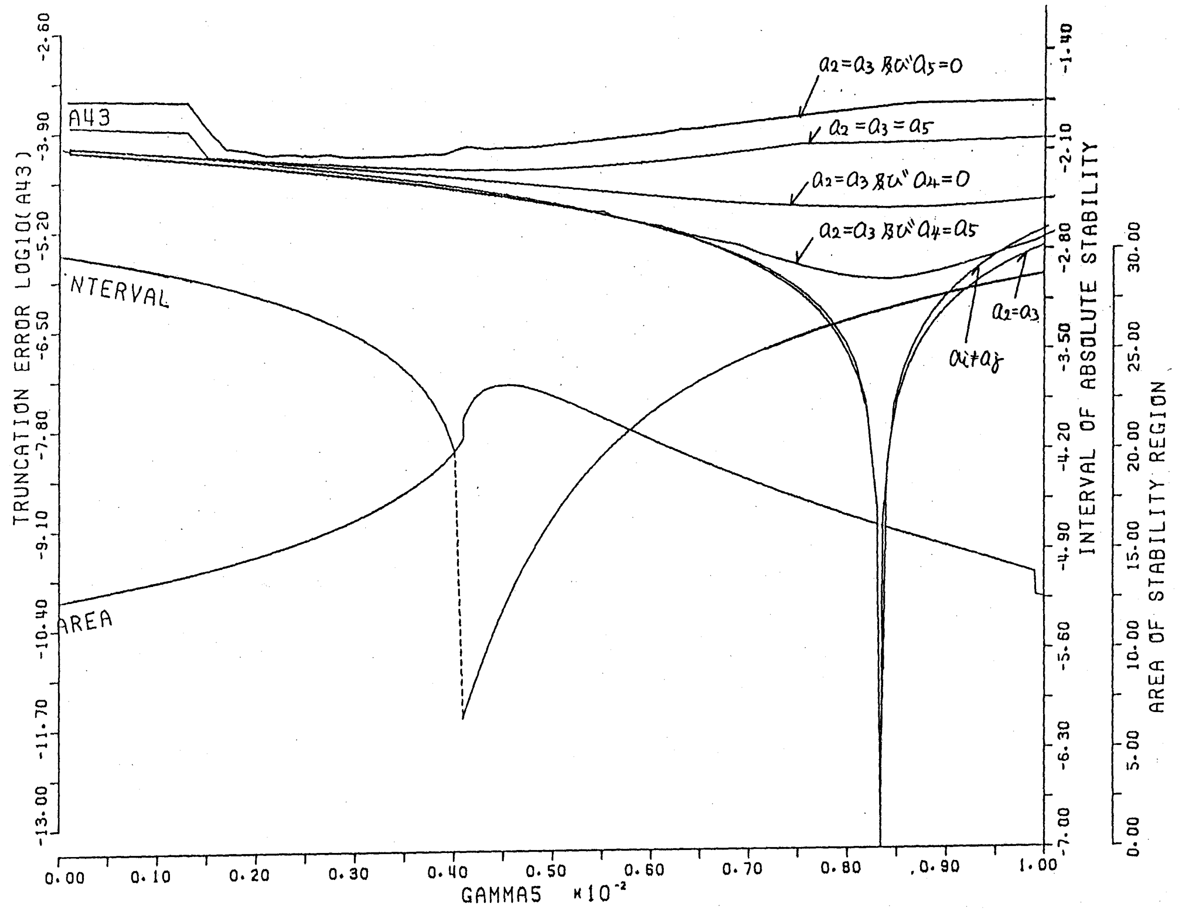

Fig 3 解系群 I と解系群 II の比較 (I)

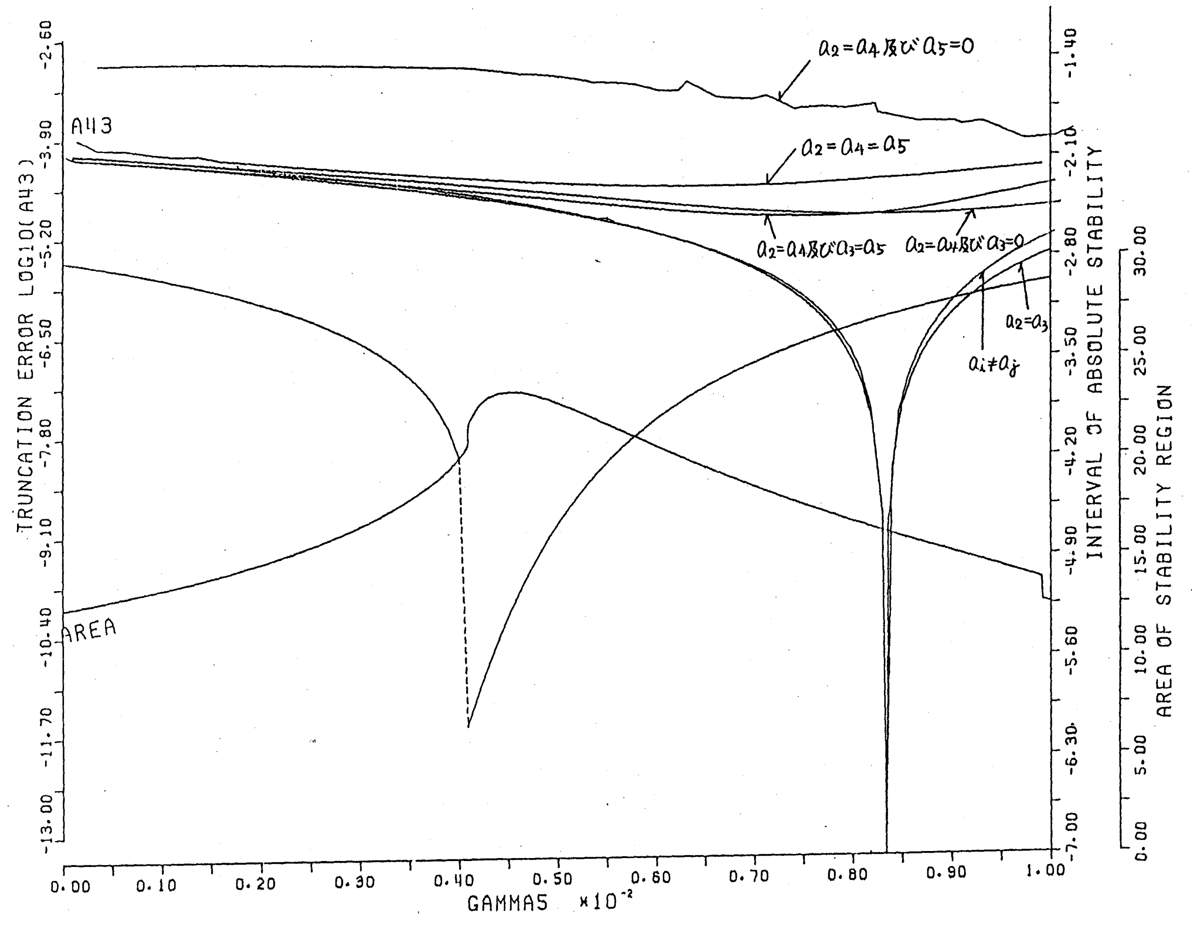

Fig 4 解系群 I と解系群 II の比較 (II)

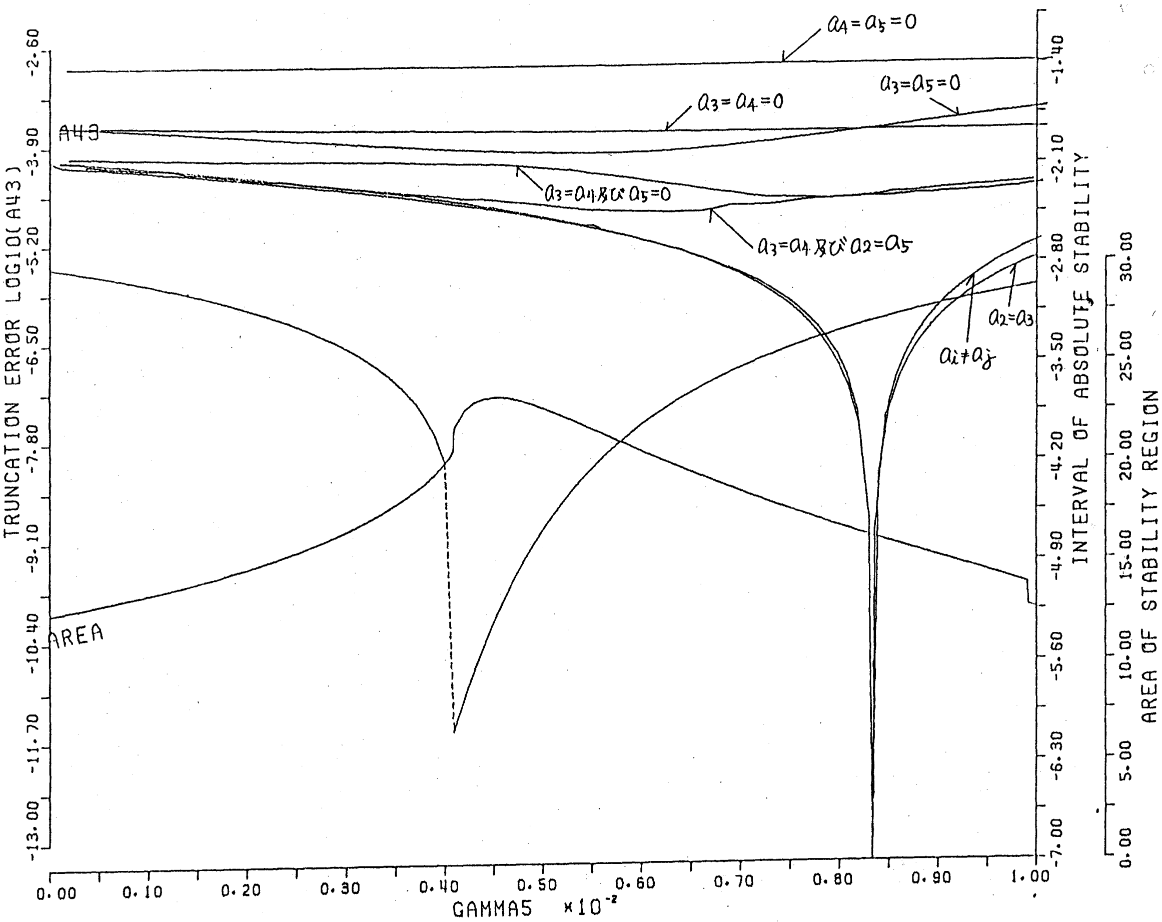

Fig5 解系群Ⅰと解系群Ⅱの比較（Ⅲ）

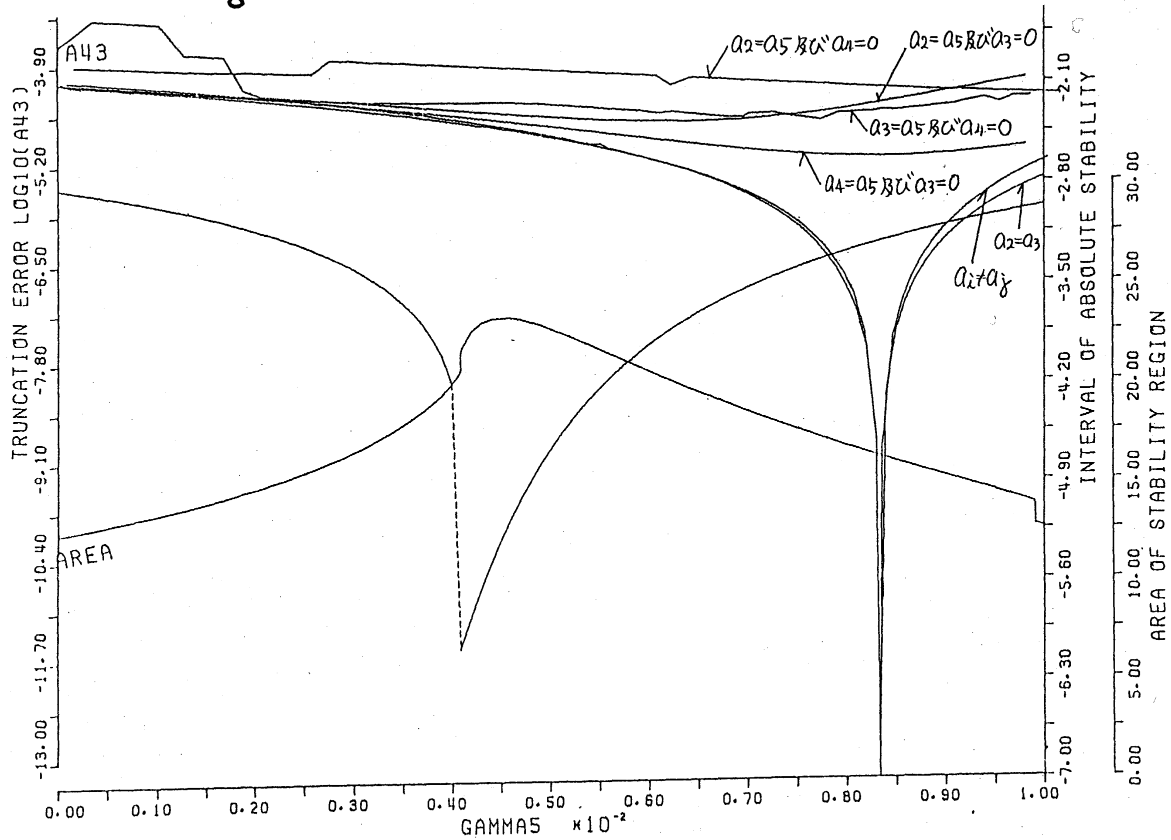

Fig6 解系群Ⅰと解系群Ⅱの比較（Ⅳ）

7. 結論

(1)　Fig1～Fig6 の観察により、解系群(I)に属する $a_i \neq a_j$ $a_2=a_3$ 及び $a_3=a_4$ の3つの解系に対応する $\log_{10} \min A_{43}$ 曲線が一番下の曲線を形成してあり、したがってこれらの解系が最適公式を与えることがわかる。一般に解系(II)の公式は、解系(I)の公式に比べて劣っている。

(2)　Fig1～Fig6 の観察により、打ち切り精度と安定性は相互に矛盾する要求であって、両者を共に最良にすることは不可能であることがわかる。また $\max_{\gamma_5} S_A$ を与える γ_5 を γ_5^{*}、$\min_{\gamma_5} A_{43}$ を与える γ_5 を γ_5^{**} とすると、好ましい公式の γ_5 は $\gamma_5^{*} \leqq \gamma_5 \leqq \gamma_5^{**}$ でなければならないことが知られる。

(3)　既知公式は打ち切り精度の面でなお若干改良の余地がある。

(4)　Shanks[6]、田中[7]、戸田・小野[8]などの打ち切り精度最良の公式はすべて $\gamma_5 = 1/120$ において現れる。

文献

[1]　田中正次：ルンゲ・クッタ法の打ち切り誤差に関する研究，博士論文（東京大学），1972

[2]　J.D.Lambert：Computational Method in Ordinary Differential Equation，John Wiley & Sons，1973

〔3〕 一松信：微分方程式と解法，教育出版，1976

〔4〕 田中、寺川、山下：5段数陽的Runge-Kutta法について 情報処理，vol.20，No.5，1979

〔5〕 A.C.Hearn： REDUCE USER'S MANUAL Version 3.0，1983

[6] E. B. Shanks : Solution of differential equations by evaluations of functions, Math. of Comp. Vol. 20, 1966

[7] 田中正次, Runge-Kutta法の打ち切り誤差の評価について, Vol. 17, No. 12, 1976

〔8〕 戸田英雄・小野令美, 5個の関数値による実質的5次の Runge-Kutta法, 情報処理学会論文誌, Vol. 22, No.2, 1981