数理解析研究所講究録
第676巻 1988年 49-67

Runge-Kutta法に関する二三の話題

I 4段数7次陰的Runge-Kutta法について

山梨大工　田中正次 (Masatsugu Tanaka)
山下茂 (Shigeru Yamashita)
福井康人 (Yasuhito Fukui)
渡辺博 (Hiroshi Watanabe)

1. まえがき

著者たちは，これまで2段数及び3段数陰的Runge-Kutta法の打ち切り誤差特性及び安定特性について研究し，可能で有効なすべての公式の特性が一見して直観的に把握できるグラフを作成し，その図を利用して既知公式の評価と改良・新公式の導出を試みた[1),2)]。この研究はそれらの姉妹編で，同様な目的と意図に基いてなされたものである。

2. 4段数陰的Runge-Kutta法

初期値問題

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

において，$f(x,y)$ は十分滑らかで必要な限りの導関数及び偏

導関数をもつものとする。

$x=x_n$ における数値解 y_n が与えられているとき，$x=x_{n+1}$ における数値解 y_{n+1} を，次に示す (2.2) 及び (2.3) 式によって求める方法を，4段数[注1)]陰的 Runge-Kutta 法という。

$$y_{n+1} = y_n + w_1 k_1 + w_2 k_2 + w_3 k_3 + w_4 k_4 \qquad (2.2)$$

ここで

$$\begin{aligned}
k_1 &= hnf(x_n + a_1 hn,\ y_n + b_{11}k_1 + b_{12}k_2 + b_{13}k_3 + b_{14}k_4) \\
k_2 &= hnf(x_n + a_2 hn,\ y_n + b_{21}k_1 + b_{22}k_2 + b_{23}k_3 + b_{24}k_4) \qquad (2.3) \\
k_3 &= hnf(x_n + a_3 hn,\ y_n + b_{31}k_1 + b_{32}k_2 + b_{33}k_3 + b_{34}k_4) \\
k_4 &= hnf(x_n + a_4 hn,\ y_n + b_{41}k_1 + b_{42}k_2 + b_{43}k_3 + b_{44}k_4)
\end{aligned}$$

である。

注1) 段数とはその公式の1回の実行における関数評価回数である。

一般に，S段数陰的 Runge-Kutta 法の達成可能次数は 2S 次であることが知られている。しかしここでは，解空の自由パラメータの選び方により特性が多様な変化を示す，4段数7次陰的 Runge-Kutta 法について考察する。

3. 次数条件式とその解

4段数7次陰的 Runge-Kutta 法の次数条件式は，24個のパラメータに関する89個の方程式系になるが，Butcher の条件を用いてその中に含まれる多数の一次従属な方程式を除くと，最

結局には次に示す24個のパラメータに関する22個の方程式系に帰着される。

$$
\begin{aligned}
B(7)\ :\ & \sum_{i=1}^{4} w_i = 1 \\
& \sum_{i=1}^{4} w_i a_i = 1/2 \\
& \sum_{i=1}^{4} w_i a_i^2 = 1/3 \\
& \sum_{i=1}^{4} w_i a_i^3 = 1/4 \\
& \sum_{i=1}^{4} w_i a_i^4 = 1/5 \\
& \sum_{i=1}^{4} w_i a_i^5 = 1/6 \\
& \sum_{i=1}^{4} w_i a_i^6 = 1/7 \qquad\qquad (3.1)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
C(3)\ :\ & \sum_{j=1}^{4} b_{ij} = a_i && (i=1,2,3,4) \\
& \sum_{j=1}^{4} b_{ij} a_j = a_i^2/2 && (i=1,2,3,4) \\
& \sum_{j=1}^{4} b_{ij} a_j^2 = a_i^3/3 && (i=1,2,3,4) \\
D(3)\ :\ & \sum_{i=1}^{4} w_i b_{ij} = w_j(1-a_j)\ * && (j=1,2,3,4) \\
& \sum_{i=1}^{4} w_i a_i b_{ij} = w_j(1-a_j^2)/2\ * && (j=1,2,3,4) \\
& \sum_{i=1}^{4} w_i a_i^2 b_{ij} = w_j(1-a_j^3)/3\ * && (j=1,2,3,4)
\end{aligned}
$$

（ただし*の式において一次独立な式はそれぞれ1つしかない）

上の必要条件式(3.1)をa_4, b_{44}を自由パラメータとして解くと，以下に示す解系(3.2)が得られる。

$$
\begin{aligned}
&(700a_4^3-1050a_4^2+420a_4-35)a_3^3+(-1050a_4^3+1620a_4^2-675a_4+60)a_3^2 \\
&+(420a_4^3-675a_4^2+300a_4-30)a_3+(-35a_4^3+60a_4^2-30a_4+4)=0
\end{aligned}
$$

（a_3をa_4で表わすには、上の3次方程式を解く）

$$a_2 = \frac{\sqrt{\begin{array}{l}5(28((40a_4^2-24a_4-3)a_3-20(3a_4-2)a_3^2a_4-3a_4+2)(105a_3^2a_4-70a_4^2\\+120a_4-48)+5(280a_3^2a_4^2-168a_3^2a_4-21a_3^2-168a_3a_4^2+54a_3a_4+50a_3\\-21a_4^2+50a_4-24)^2))\\+1400a_3^2a_4^2-840a_3^2a_4-105a_3^2-840a_3a_4^2+270a_3a_4+250a_3-105a_4^2+250a_4\\-120)\end{array}}}{70((40a_4^2-24a_4-3)a_3-20(3a_4-2)a_3^2a_4-3a_4+2)}$$

$$a_1 = \frac{30a_2a_3a_4-20(a_2a_3+a_2a_4+a_3a_4)+15(a_2+a_3+a_4)-12}{60a_2a_3a_4-30(a_2a_3+a_2a_4+a_3a_4)+20(a_2+a_3+a_4)-15}$$

$$w_1 = -\frac{12a_2a_3a_4-6a_2a_3-6a_2a_4+4a_2-6a_3a_4+4a_3+4a_4-3}{12(a_1-a_2)(a_1-a_3)(a_1-a_4)}$$

$$w_2 = \frac{12a_1a_3a_4-6a_1a_3-6a_1a_4+4a_1-6a_3a_4+4a_3+4a_4-3}{12(a_1-a_2)(a_2-a_3)(a_2-a_4)}$$

$$w_3 = -\frac{12a_1a_2a_4-6a_1a_2-6a_1a_4+4a_1-6a_2a_4+4a_2+4a_4-3}{12(a_1-a_3)(a_2-a_3)(a_3-a_4)} \qquad (3.2)$$

$$w_4 = \frac{12a_1a_2a_3-6a_1a_2-6a_1a_3+4a_1-6a_2a_3+4a_2+4a_3-3}{12(a_1-a_4)(a_2-a_4)(a_3-a_4)}$$

$$b_{41} = -\frac{6(a_4-a_2)(a_4-a_3)b_{44}+3(a_2+a_3)a_4^2-2a_4^3-6a_2a_3a_4}{6(a_1-a_2)(a_1-a_3)}$$

$$b_{42} = \frac{6(a_4-a_1)(a_4-a_3)b_{44}+3(a_1+a_3)a_4^2-2a_4^3-6a_1a_3a_4}{6(a_1-a_2)(a_2-a_3)}$$

$$b_{43} = -\frac{6(a_4-a_1)(a_4-a_2)b_{44}+3(a_1+a_2)a_4^2-2a_4^3-6a_1a_2a_4}{6(a_1-a_3)(a_2-a_3)}$$

$$b_{14} = -\frac{\begin{array}{l}(6(a_4-a_2)(a_4-a_3)b_{44}-3(a_2+a_3)a_4^2-3(2a_3-1)a_2\\+2a_4^3+6a_2a_3a_4+3a_3-2)w_4\end{array}}{6(a_1-a_2)(a_1-a_3)w_1}$$

$$b_{24} = \frac{\begin{array}{l}(6(a_4-a_1)(a_4-a_3)b_{44}-3(a_1+a_3)a_4^2-3(2a_3-1)a_1\\+2a_4^3+6a_1a_3a_4+3a_3-2)w_4\end{array}}{6(a_1-a_2)(a_2-a_3)w_2}$$

$$b_{34} = -\frac{\begin{array}{l}(6(a_4-a_1)(a_4-a_2)b_{44}-3(a_1+a_2)a_4^2-3(2a_2-1)a_1\\+2a_4^3+6a_1a_2a_4+3a_2-2)w_4\end{array}}{6(a_1-a_3)(a_2-a_3)w_3}$$

$$b_{11} = -\frac{3(a_2+a_3)a_1^2+6(a_2-a_4)(a_3-a_4)b_{14}-2a_1^3-6a_1a_2a_3}{6(a_1-a_2)(a_1-a_3)}$$

$$b_{12} = \frac{6(a_1-a_4)(a_3-a_4)b_{14}+a_1^3-3a_1^2a_3}{6(a_1-a_2)(a_2-a_3)}$$

$$b_{13} = -\frac{6(a_1-a_4)(a_2-a_4)b_{14}+a_1^3-3a_1^2a_2}{6(a_1-a_3)(a_2-a_3)}$$

$$b_{21} = \frac{6(a_2-a_4)(a_3-a_4)b_{24}+a_2^3-3a_2^2a_3}{6(a_2-a_1)(a_1-a_3)}$$

$$b_{22} = -\frac{3(a_1+a_3)a_2^2+6(a_1-a_4)(a_3-a_4)b_{24}-2a_2^3-6a_1a_2a_3}{6(a_2-a_1)(a_2-a_3)}$$

$$b_{23} = -\frac{6(a_2-a_4)(a_1-a_4)b_{24}+a_2^3-3a_1a_2^2}{6(a_2-a_3)(a_1-a_3)}$$

$$b_{32} = \frac{6(a_3-a_4)(a_2-a_4)b_{34}+a_3^3-3a_2a_3^2}{6(a_3-a_1)(a_1-a_2)}$$

$$b_{32} = -\frac{6(a_3-a_4)(a_1-a_4)b_{34}+a_3^3-3a_1a_3^2}{6(a_3-a_2)(a_1-a_2)}$$

$$b_{33} = -\frac{3(a_1+a_2)a_3^2+6(a_1-a_4)(a_2-a_4)b_{34}-2a_3^3-6a_1a_2a_3}{6(a_3-a_1)(a_3-a_2)}$$

4. 局所打ち切り誤差とその大小判定

4段数7次陰的Runge-Kutta法の局所打ち切り誤差を T_{n+1} とすると，

$$T_{n+1} = y_{n+1} - y(x_{n+1})$$
$$= t_n h_n^8 + O(h_n^9) \qquad (4.1)$$

と書くことができる。ここで y_{n+1} 及び $y(x_{n+1})$ は，それぞれ $y_n = y(x_n)$ のときの4段数7次法(2.2)，(2.3)による数値解及び

理論解を示す。また t_n は，次の (4·2) によって定義される関数を $x=x_n$, $y=y_n$ において評価したものである。

$$
\begin{aligned}
t_n=\ & a_{71}f'(f'(f'(f'(f'(f'(f'(f)))))))+a_{72}f'(f'(f'(f'(f'(f''(f.f)))))) \\
& +a_{73}f'(f'(f'(f'(f''(f'(f),f)))))+a_{74}f'(f'(f'(f'(f'''(f,f,f)))) \\
& +a_{75}f'(f'(f'(f''(f'(f'(f)),f))))+a_{76}f'(f'(f'(f''(f''(f,f),f)))) \\
& +a_{77}f'(f'(f'(f''(f'(f),f'(f)))))+a_{78}f'(f'(f'(f'''(f'(f),f,f)))) \\
& +a_{79}f'(f'(f'(f''''(f,f,f,f))))+a_{710}f'(f'(f''(f'(f'(f'(f))),f))) \\
& +a_{711}f'(f'(f''f'(f''(f,f)),f)))+a_{712}f'(f'(f''(f''(f'(f),f),f))) \\
& +a_{713}f'(f'(f''(f'''(f,f,f),f)))+a_{714}f'(f'(f''f'(f'(f)),f'(f)))) \\
& +a_{715}f'(f'(f''(f''(f,f),f'(f))))+a_{716}f'(f'(f'''f'(f'(f)),f,f))) \\
& +a_{717}f'(f'(f'''(f''(f,f),f,f)))+a_{718}f'(f'(f'''(f'(f),f'(f),f))) \\
& +a_{719}f'(f'(f''''(f'(f),f,f,f)))+a_{720}f'(f'(f'''''(f,f,f,f,f))) \\
& +a_{721}f'(f''(f'(f'(f'(f'(f)))),f))+a_{722}f'(f''(f'(f'(f''(f,f))),f)) \\
& +a_{723}f'(f''(f'(f''((f'(f),f)),f))+a_{724}f'(f''(f'(f'''(f,f,f)),f)) \\
& +a_{725}f'(f''(f''(f'(f'(f)),f)),f))+a_{726}f'(f''(f''(f''(f,f),f),f)) \\
& +a_{727}f'(f''(f''(f'(f),f'(f)),f))+a_{728}f'(f''(f'''(f'(f),f,f),f)) \\
& +a_{729}f'(f''(f''''(f,f,f,f),f))+a_{730}f'(f''(f'(f'(f'(f))),f'(f))) \\
& +a_{731}f'(f''(f'(f''(f,f)),f'(f)))+a_{732}f'(f''(f''(f'(f),f),f'(f))) \\
& +a_{733}f'(f''(f'''(f,f,f),f'(f)))+a_{734}f'(f''(f'(f'(f)),f'(f'(f)))) \\
& +a_{735}f'(f''(f'(f'(f)),f''(f,f)))+a_{736}f'(f''(f''(f,f),f''(f,f))) \\
& +a_{737}f'(f'''f'(f'(f'(f))),f,f))+a_{738}f'(f'''f'(f''(f,f)),f,f)) \\
& +a_{739}f'(f'''(f''(f'(f),f),f,f))+a_{740}f'(f'''(f'''(f,f,f),f,f)) \\
& +a_{741}f'(f'''f'(f'(f)),f'(f),f))+a_{742}f'(f'''(f''f,f),f'(f),f)) \\
& +a_{743}f'(f'''(f'(f),f'(f),f'(f))+a_{744}f'(f''''(f'(f'(f)),f,f,f)) \\
& +a_{745}f'(f''''(f''(f,f),f,f,f))+a_{746}f'(f''''(f'(f),f'(f),f,f)) \\
& +a_{747}f'(f'''''(f'(f),f,f,f,f))+a_{748}f'(f''''''(f,f,f,f,f,f)) \\
& +a_{749}f''(f'(f'(f'(f'(f'(f))))),f)+a_{750}f''(f'(f'(f'(f''(f,f)))),f) \\
& +a_{751}f''(f'(f'(f''(f'(f),f))),f)+a_{752}f''(f'(f'(f'''(f,f,f))),f) \\
& +a_{753}f''(f'(f''(f'(f'(f)),f)),f)+a_{754}f''(f'(f''(f''(f,f),f)),f) \\
& +a_{755}f''(f'(f''(f'(f),f'(f))),f)+a_{756}f''(f'(f'''(f'(f),f,f)),f) \\
& +a_{757}f''(f'(f''''(f,f,f,f)),f)+a_{758}f''(f''(f'(f'(f'(f))),f),f) \\
& +a_{759}f''(f''(f'(f''(f,f)),f),f)+a_{760}f''(f''(f''(f'(f),f),f),f) \\
& +a_{761}f''(f''(f'''(f,f,f),f),f)+a_{762}f''(f''(f'(f'(f)),f'(f)),f) \\
& +a_{763}f''(f''(f''(f,f),f'(f)),f)+a_{764}f''(f'''(f'(f'(f)),f,f),f) \\
& +a_{765}f''(f'''(f''(f,f),f,f),f)+a_{766}f''(f'''(f'(f),f'(f),f),f) \\
& +a_{767}f''(f''''(f'(f),f,f,f),f)+a_{768}f''(f'''''(f,f,f,f,f),f) \\
& +a_{769}f''(f'(f'(f'(f'(f)))),f'(f))+a_{770}f''(f'(f'(f''(f,f))),f'(f))
\end{aligned}
\qquad (4\cdot2)
$$

$+a_{771}f''(f'(f''(f'(f),f)),f'(f))+a_{772}f''(f'(f'''(f,f,f)),f'(f))$
$+a_{773}f''(f''(f'(f'(f)),f,f'(f))+a_{774}f''(f''(f''(f,f),f),f'(f))$
$+a_{775}f''(f''(f'(f),f'(f)),f'(f))+a_{776}f''(f'''(f'(f),f,f),f'(f))$
$+a_{777}f''(f''''(f,f,f,f),f'(f))+a_{778}f''(f'(f'(f'(f))),f'(f'(f)))$
$+a_{779}f''(f'(f'(f'(f))),f''(f,f))+a_{780}f''(f'(f''(f,f)),f'(f'(f)))$
$+a_{781}f''(f'(f''(f,f)),f''(f,f))+a_{782}f''(f''(f'(f),f),f'(f'(f)))$
$+a_{783}f''(f''(f'(f),f),f''(f,f))+a_{784}f''(f'''(f,f,f),f'(f'(f)))$
$+a_{785}f''(f'''(f,f,f),f''(f,f))+a_{786}f'''(f'(f'(f'(f'(f)))),f,f)$
$+a_{787}f'''(f'(f'(f''(f,f))),f,f)+a_{788}f'''(f'(f''(f'(f),f)),f,f)$
$+a_{789}f'''(f'(f'''(f,f,f)),f,f)+a_{790}f'''(f''(f'(f'(f)),f),f,f)$
$+a_{791}f'''(f''(f''(f,f),f),f,f)+a_{792}f'''(f''(f'(f),f'(f)),f,f)$
$+a_{793}f'''(f'''(f'(f),f,f),f,f)+a_{794}f'''(f''''(f,f,f,f),f,f)$
$+a_{795}f'''(f'(f'(f'(f))),f'(f),f)+a_{796}f'''(f'(f''(f,f)),f'(f),f)$
$+a_{797}f'''(f''(f'(f),f),f'(f),f)+a_{798}f'''(f'''(f,f,f),f'(f),f)$
$+a_{799}f'''(f'(f'(f)),f'(f'(f)),f)+a_{7100}f'''(f'(f'(f)),f''(f,f),f)$
$+a_{7101}f'''(f''(f,f),f''(f,f),f)+a_{7102}f'''(f'(f'(f)),f'(f),f'(f))$
$+a_{7103}f'''(f''(f,f),f'(f),f'(f))+a_{7104}f''''(f'(f'(f'(f))),f,f,f)$
$+a_{7105}f''''(f'(f''(f,f)),f,f,f)+a_{7106}f''''(f''(f'(f),f),f,f,f)$
$+a_{7107}f''''(f'''(f,f,f),f,f,f)+a_{7108}f''''(f'(f'(f)),f'(f),f,f)$
$+a_{7109}f''''(f''(f,f),f'(f),f,f)+a_{7110}f''''(f'(f),f'(f),f'(f),f)$
$+a_{7111}f'''''(f'(f'(f)),f,f,f,f)+a_{7112}f'''''(f''(f,f),f,f,f,f)$
$+a_{7113}f'''''(f'(f),f'(f),f,f,f)+a_{7114}f''''''(f'(f),f,f,f,f,f)$
$+a_{7115}f'''''''(f,f,f,f,f,f,f)$

ただし，a_{7j} $(j=1,2,\cdots,115)$ は公式(2.2)，(2.3)のパラメータのみの関数で，

$$t_1=\sum_{i,j=1}^{4} w_i a_i^3 b_{ij} a_j^3 - 1/32 \qquad t_2=\sum_{i=1}^{4} w_i a_i^7 - 1/8 \qquad (4.3)$$

とおくと次のように表される。

$a_{71}=-t_1/36$	$a_{72}=-t_1/36$	$a_{73}=-t_1/12$	$a_{74}=-t_1/36$	$a_{75}=-t_2/36$
$a_{76}=-t_2/36$	$a_{77}=-t_2/48$	$a_{78}=-t_2/24$	$a_{79}=-t_2/144$	$a_{710}=t_1/12$
$a_{711}=t_1/12$	$a_{712}=t_1/4$	$a_{713}=t_1/12$	$a_{714}=t_2/24$	$a_{715}=t_2/24$
$a_{716}=t_2/24$	$a_{717}=t_2/24$	$a_{718}=t_2/16$	$a_{719}=t_2/24$	$a_{720}=t_2/240$
$a_{721}=t_1/18$	$a_{722}=t_1/18$	$a_{723}=t_1/6$	$a_{724}=t_1/18$	$a_{725}=t_2/18$
$a_{726}=t_2/18$	$a_{727}=t_2/24$	$a_{728}=t_2/12$	$a_{729}=t_2/72$	$a_{730}=-t_1/12$ (4.4)
$a_{731}=-t_1/12$	$a_{732}=-t_1/4$	$a_{733}=-t_1/12$	$a_{734}=-t_2/72$	$a_{735}=-t_2/36$
$a_{736}=-t_2/72$	$a_{737}=-t_1/12$	$a_{738}=-t_1/12$	$a_{739}=-t_1/4$	$a_{740}=-t_1/12$
$a_{741}=-t_2/12$	$a_{742}=-t_2/12$	$a_{743}=-t_2/48$	$a_{744}=-t_2/36$	$a_{745}=-t_2/36$
$a_{746}=-t_2/16$	$a_{747}=-t_2/48$	$a_{748}=-t_2/720$	$a_{749}=\ /36$	$a_{750}=t_1/36$
$a_{751}=t_1/12$	$a_{752}=t_1/36$	$a_{753}=t_2/36$	$a_{754}=t_2/36$	$a_{755}=t_2/48$

$a_{756}=t_2/24$	$a_{757}=t_2/144$	$a_{758}=-t_1/12$	$a_{759}=-t_1/12$	$a_{760}=-t_1/4$
$a_{761}=-t_1/12$	$a_{762}=-t_2/24$	$a_{763}=-t_2/24$	$a_{764}=-t_2/24$	$a_{765}=-t_2/24$
$a_{766}=-t_2/16$	$a_{767}=-t_2/24$	$a_{768}=-t_2/240$	$a_{769}=-t_1/36$	$a_{770}=-t_1/36$
$a_{771}=-t_1/12$	$a_{772}=-t_1/36$	$a_{773}=-t_2/36$	$a_{774}=-t_2/36$	$a_{775}=-t_2/48$
$a_{776}=-t_2/24$	$a_{777}=-t_2/144$	$a_{778}=t_1/36$	$a_{779}=t_1/36$	$a_{780}=t_1/36$
$a_{781}=t_1/36$	$a_{782}=t_1/12$	$a_{783}=t_1/12$	$a_{784}=t_1/36$	$a_{785}=t_1/36$
$a_{786}=-t_1/36$	$a_{787}=-t_1/36$	$a_{788}=-t_1/12$	$a_{789}=-t_1/36$	$a_{790}=-t_2/36$
$a_{791}=-t_2/36$	$a_{792}=-t_2/48$	$a_{793}=-t_2/24$	$a_{794}=-t_2/144$	$a_{795}=t_1/12$
$a_{796}=t_1/12$	$a_{797}=t_1/4$	$a_{798}=t_1/12$	$a_{799}=t_2/72$	$a_{7100}=t_2/36$
$a_{7101}=t_2/36$	$a_{7102}=t_2/48$	$a_{7103}=t_2/48$	$a_{7104}=t_1/36$	$a_{7105}=t_1/36$
$a_{7106}=t_1/12$	$a_{7107}=t_1/36$	$a_{7108}=t_2/24$	$a_{7109}=t_2/24$	$a_{7110}=t_2/48$
$a_{7111}=t_2/144$	$a_{7112}=t_2/144$	$a_{7113}=t_2/48$	$a_{7114}=t_2/240$	$a_{7115}=t_2/5040$

また，(4.2) における a_{7j} $(j=1,2,\cdots,115)$ の因数は，微分方程式の右辺の関数に依存して定まる関数である。(くわしくは文献〔3〕または〔4〕を見よ)

4段数7次陰的 Runge-Kutta 法の局所打ち切り誤差の大小を判定するために，問題 (2.1) に独立で，公式 (2.2)，(2.3) の係数のみに依存する次の判定基準を用いる。

$$A_{72} = \sum_{j=1}^{115} |a_{7j}| \quad (4.5) \qquad A_{73} = \sum_{j=1}^{115} a_{7j}^2 \quad (4.6)$$

(4.5) 及び (4.6) によって定義される判定基準を，公式 (2.2)，(2.3) の打ち切り精度判定基準という。これらの判定基準は，低次法において打ち切り誤差の観点からの最適化に使用され，その有効性が実証されているものである。

5. 安定性とその評価

5.1 安定性の諸概念とその相互関係

テスト方程式

$$y' = \lambda y \quad (\lambda は複素定数) \qquad (5.1)$$

にS段数陰的 Runge-Kutta 法を適用すると，

$$y_{n+1} = R(h\lambda)\, y_n \qquad (5.2)$$

が得られる。ここで $R(h\lambda)$ は $h\lambda$ の有理関数である。

〔定義 1〕 $R(h\lambda)$ をS段数陰的 Runge-Kutta 法の安定関数という。

［定義２］ $|R(h\lambda)| \leqq 1$ であるときS段数陰的Ｒｕｎｇｅ-Ｋｕｔｔａ法は、その$h\lambda$に対して絶対安定であるという。

［定義３］ $s = \{h\lambda \mid |R(h\lambda)| \leqq 1, h\lambda$ は複素数$\}$ によって定義される複素平面上の領域ｓを、Ｓ段数陰的Ｒｕｎｇｅ-Ｋｕｔｔａ法の絶対安定領域という。

［定義４］ $s \supset \{h\lambda \mid Re(h\lambda) < 0, h\lambda$ は複素数$\}$ であるとき、Ｓ段数陰的Ｒｕｎｇｅ-Ｋｕｔｔａ法はＡ安定であるという。

変係数の微分方程式

$$y' = \lambda(t)\, y \quad (\lambda(t)は、tの複素関数) \qquad (5.3)$$

にＳ段数陰的Ｒｕｎｇｅ-Ｋｕｔｔａ法を適用すると

$$y_{n+1} = \{1 + W1^T \xi (I - B\xi)^{-1} e^T\}\, y_n \qquad (5.4)$$

が得られる。ここで

$$W1 = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_s \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & \cdots & b_{1s} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & \cdots & b_{2s} \\ \vdots & & & & \\ b_{s1} & b_{s2} & \cdots & \cdots & b_{ss} \end{bmatrix} \qquad e = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \qquad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \xi &= \mathrm{diag}(\xi_1, \xi_2, \cdots\cdots\cdots, \xi_s) \\ &= \mathrm{diag}\{h\lambda(t_n + a_1 h), h\lambda(t_n + a_2 h), \cdots\cdots\cdots, h\lambda(t_n + a_s h)\} \end{aligned}$$

である。

［定義５］Ｓ段数陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法は、もし

$$K(\xi) = 1 + W1^T \xi (I - B\xi)^{-1} e^T \qquad (5.6)$$

が、 $Re(\xi_i) \leqq 0$ $(i=1,..s)$であるようなすべての

$\xi = diag(\xi_1, \xi_2, \cdot \cdot \cdot \xi_s)$ $(a_i = a_j \rightarrow \xi_i = \xi_j)$

に対して

$$|K(\xi)| \leqq 1 \qquad (5.7)$$

ならばＡＮ安定であるという。

［定理１］陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法がＡＮ安定ならばＡ安定である。

［定義６］$a_i = a_j$ であるような$i, j (i \neq j)$が存在すれば、Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法はconfluent、そうでなければnonconfluentであるという

同一のＲｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法の相異なる初期値から得られる二つの数値解をy_n及び$\tilde{y}_n$としよう。

また

$$< f(t, \xi_1) - f(t, \xi_2), \xi_1 - \xi_2 > \leqq 0, \quad t \geqq 0, \xi_1, \xi_2 \in R^n \qquad (5.8)$$

を満足する微分方程式を消散方程式と呼ぼう。そのとき

［定義７］(5.8)を満足する自励系とすべての$y_n, \tilde{y}_n, h>0$に対して

$$\| y_{n+1} - \tilde{y}_{n+1} \| \leqq \| y_n - \tilde{y}_n \| \qquad (5.9)$$

ならば、その陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法はＢ安定であるという。

［定義８］(5.8)を満足するすべての関数$f(t, y)$とすべての$y_n, \tilde{y}_n$ $h>0$に対して(5.9)が成立するならば、その陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法はＢＮ安定であるという。

［定理２］陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法がＢＮ安定ならばＢ安定である。

行列Ｍを次式によって定義する。

$$M = WB + B^T W - W1W1^T \qquad (5.10)$$

ここで、Ｂ及びＷ１は(5.5)で定義された行列及び列ベクトルであり、

またWは次のような行列である。

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_s \end{bmatrix}$$

［定義９］行列W及びMが非負値行列である陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法を代数的安定であるという。

ある陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法が代数的安定であるか否かは、その方法のパラメータにより行列Ｍ及びWを計算することにより簡単に確認できる。

［定理３］ 陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法が代数的安定ならばＢＮ安定である。

この定理により代数的安定性をもつ方法を用いて(5.8)を満足するStiff非線形問題等を解けば、その数値解がある値に収束することが理論的に保証される。

［定理４］Ｓ段数２Ｓ次陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法は代数的安定である。

［定理５］nonconfluentである陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法に対して

(1) 代数的安定 ↔ ＢＮ安定

(2) 代数的安定 ↔ ＡＮ安定

また任意の陰的Ｒｕｎｇｅ－Ｋｕｔｔａ法に対して

(3) ＡＮ安定 → Ａ安定

(4) ＢＮ安定 → Ｂ安定

が成立する。

5.2 安定性の優劣の評価

陰的 Runge-Kutta 法の安定性の優劣は、その方法が有限の絶対安定領域をもつ場合には、その絶対安定領域の原点を含む単

連結な閉部分領域（その閉部分領域を有効絶対安定領域とよびSeで表すことにしよう.）の面積 $A(S_e)$ または, S_e と実軸との交り $S_I = S_e \cap R = [-\alpha, 0.0]$（この S_I を絶対安定区間という）の長さによって測る。絶対安定領域が有限でないときは，包含関係または定理5による。

5.3　4段数7次陽的 Runge-Kutta 法の安定性

4段数7次陽的 Runge-Kutta 法の安定関数は，

$$\beta_0 = b_{11} + b_{22} + b_{33} + b_{44} \qquad (5.11)$$

とおくと β_0 の関数になり，次のように表される。したがって，β_0 が決まれば安定性は一意に定まることになる。

$$R(h\lambda, \beta_0) = \frac{1+(1-\beta_0)h\lambda-(\beta_0/2-5/14)h^2\lambda^2-(\beta_0/10-13/210)h^3\lambda^3-(\beta_0/120-1/210)h^4\lambda^4}{1-\beta_0 h\lambda+(\beta_0/2-1/7)h^2\lambda^2-(\beta_0/10-4/105)h^3\lambda^3+(\beta_0/120-1/280)h^4\lambda^4} \qquad (5.12)$$

この場合安定性について次の事がいえる。

(i) $\beta_0 = \frac{1}{2}$ ならば，絶対安定領域の境界は虚軸となり，左半面が絶対安定領域となる。（Fig. 1 を見よ）

(ii) $\beta_0 < \frac{1}{2}$ ならば，$|R(h\lambda, \beta_0)| = 1$ の境界で囲まれた左半平面上の領域内が絶対安定領域になる。

(iii) $\beta_0 > \frac{1}{2}$ ならば，$|R(h\lambda, \beta_0)| = 1$ の境界で囲まれた右半平面上の領域外で絶対安定になる。

(iv) $\beta_0' + \beta_0'' = 1$ $(\beta_0' > \frac{1}{2})$ であるとき，$\beta_0 = \beta_0'$ と $\beta_0 = \beta_0''$ のおのおのに対する絶対安定領域の境界は，原点に関して対称であること

が容易に知られる。

(v) $\beta_0 = 0.3735730$ 付近で絶対安定領域の面積が最小になることが実験的に確められる。(Fig. 2を見よ) (iv) において述べたことから，絶対不安定領域の面積は $\beta_0 = 1 - 0.3735730 = 0.626427$ において最小になり，その最小面積は $\beta_0 = 0.3735730$ に対応する最小絶対安定領域の面積と一致する。またこれらの領域は虚軸に対して対称である。

(vi) 4段数7次陰的Runge-Kutta法の解系において，代数的安定とA安定が等価であることが実験的に確められた。

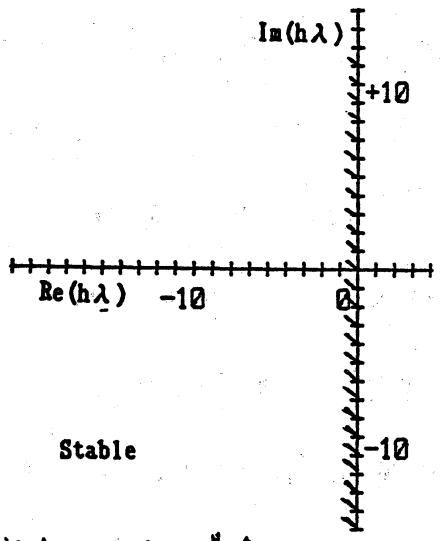


Fig.1 $\beta_0=1/2$ の場合

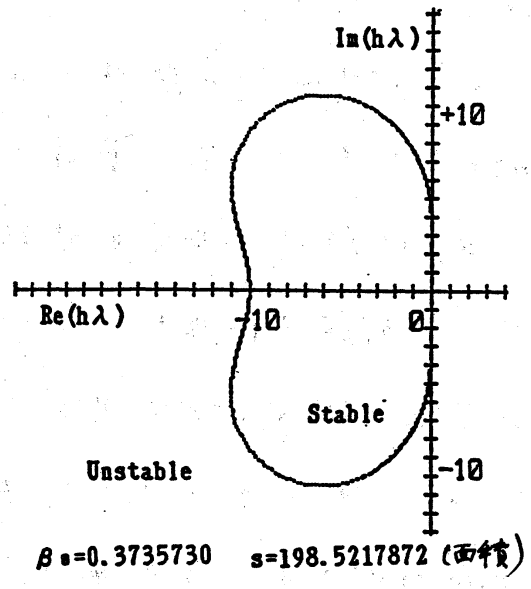


Fig.2 絶対安定領域の面積が最小になる場合

6. 特性図とその観察から得られる結論

Fig. 3は，自由パラメータの a_4 と b_{44} をそれぞれ両軸にとって，4段数7次陰的Runge-Kutta法 (2.2), (2.3) の打ち切り誤差特性

と安定特性が，自由パラメータの変動に伴ってどのように変動するかを図示したものである。すなわち，打ち切り誤差特性の変動の模様は，判定基準A73の等高線図によって示し，安定特性は，同平面に絶対安定領域最小及び最大の曲線と，最も強い安定である代数的安定（この解説においてはA安定と等価である）の範囲を図示することによってなされた。

Fig. 3の観察から次のようなことがわかる。

(1) Butcherの4段数公式は確かに8次で，これ以上高精度な公式は存在しないこと。またこれが唯一つの8次公式であることがわかる。

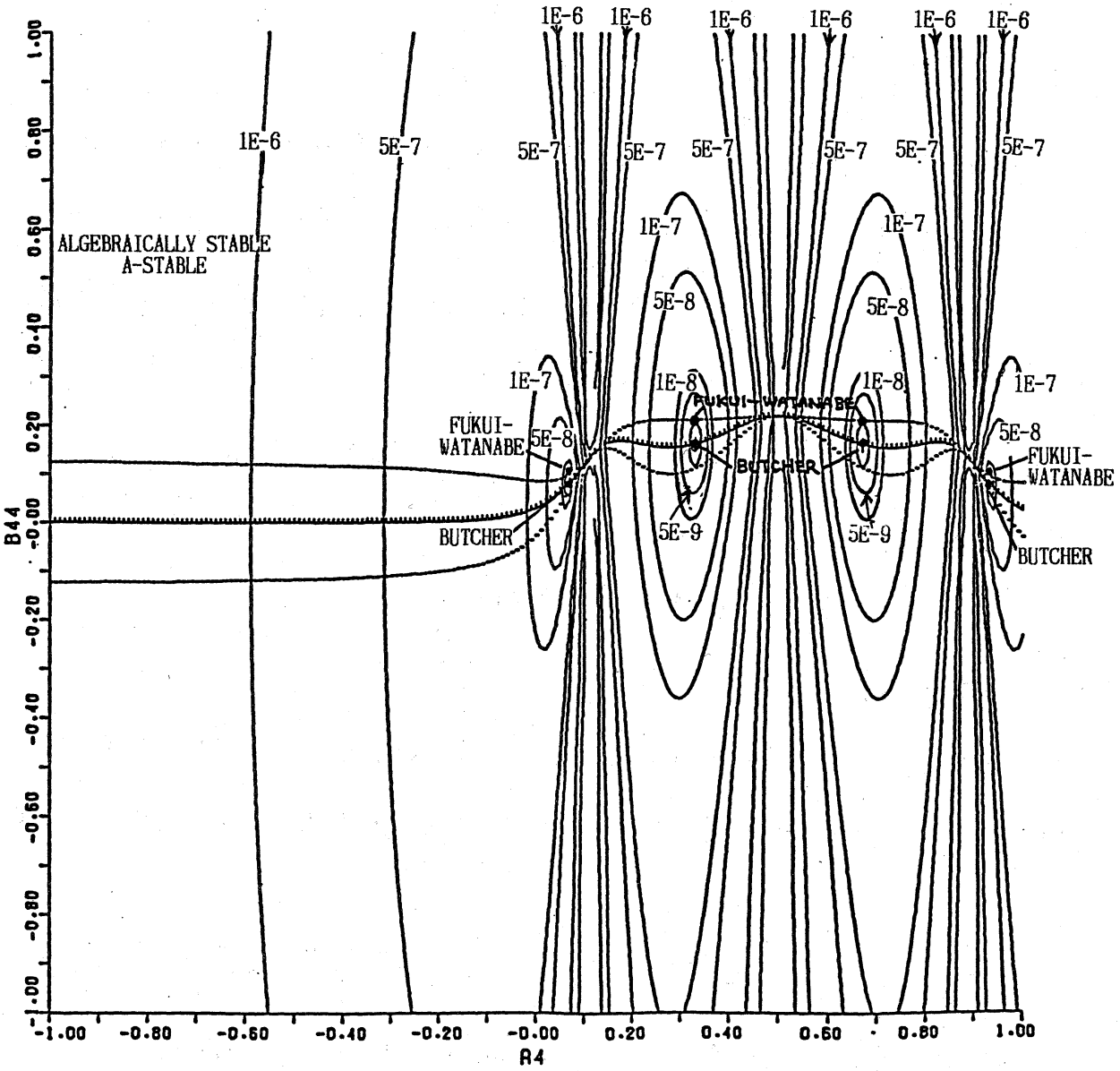
(2) Butcherの公式は，a_4-b_{44}平面上で代数的安定（またはA安定）とそうでない範囲の境界線上に存在していること。

(3) 代数的に安定な領域の内部深く絶対安定領域の面積最大の公式群が存在し，Fig. 3の利用によりその中で打ち切り精度最良の公式がどの辺に存在するか予想できること。

(4) このタイプの公式中実用的に有意義な公式は，a_4-b_{44}平面のどのような範囲に現れるか知ることができる。また，既知公式をはじめとするこのタイプの任意の公式は，Fig. 3のグラフ上の一点として表すことができ，その特性値の近似値を容易に図上で読みとることができること。

上記の(2)に示すようにButcherの公式は最も強い安定性，すなわち

代数的安定性をもつが，その安定は臨界的なので，なお十分その意味を検討する必要があると思われる。



FUKUI-WATANABE = our method

Fig.3　安定性と打ち切り精度の関係

7. 任意の安定特性をもつ打ち切り精度最良な公式

4.の記述と若干の考察から，4段数7次陰的 Runge-Kutta 法 (2.2), (2.3)

の打ち切り精度判定基準 A_{72}, A_{73} 及び t_1, t_2 は，定数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \zeta$ 及び $g(x,y)$ を適当に選ぶと次のように表されることがわかる。

$$A_{72} = \alpha|t_1| + \beta|t_2| \qquad A_{73} = \gamma t_1^2 + \delta t_2^2$$

$$t_1 = \zeta(2\beta_0 - 1) \qquad t_2 = g(a_{44}, b_{44})$$

これより β_0 を適当に定めたとき（安定性を適当に定めたとき）打ち切り精度最良な公式は，t_2^2 を最小にするものであることが知られる。表2に示すのは，β_0 を固定したとき打ち切り精度判定基準 A_{73} を最小にする公式である。また，表3に示すのは，β_0 が絶対安定領域の面積を最大にするように選ばれたときの打ち切り精度最良の公式である。表4に，Butcher の公式及び我々によって導かれた表3の公式の特性値を示す。

8. 数値例

公式の誘導に誤りがないことを立証するため，non-stiff の非線形問題及び stiff 問題各一例の計算結果を，表5及び表6に掲げる。

公式名	β_0	面積	区間	A_{73}
Butcher 注2)	1/2	代数的安定		0
FUKUI-WATANABE	0.6292570	代数的安定		1.0819644046995D-9

表4　公式の特性

注2) Fukui-Watanabe が我々によって得られた公式である。

謝辞　公式の誘導に誤りがないかどうかチェックしてくれた杉田佳代，田中久恵の両氏に感謝致します。

表 2　β_0が与えられたとき打ち切り誤差が最小となる公式

	0.00028529369424496	−0.00061883223487302	0.0015972081985714	−0.00052901541040850
	+0.0010601052536769β_0	+0.0053076625863941β_0	+0.0035033518188928β_0	+0.0011290291459389β_0
0.069431844202973	0.0093757075111167	−0.0053076625863941	0.012232680046207	−0.0099852792985735
	−0.0026319274771117	−0.00017141029408379	−0.0021497491931033	−0.00073807311713554
	+0.0015200764923038β_0	+0.0021796255932516β_0	+0.0050234283111965β_0	+0.0016189059132713β_0
0.33000947820757	−0.0099506057993651	0.0056331170794977	−0.012982761766538	0.010597555222244
	0.0020825978912374	−0.0071070017094842	−0.00091048651979413	−0.0015189637328277
	+0.0035033518188928β_0	+0.0050234283111965β_0	+0.011577599417011β_0	+0.0037311260351639β_0
0.66999052179243	0.022933367565903	−0.012982761766538	0.029921640311744	−0.024424405318838
	−0.013435073049718	0.0055331853653993	−0.037143286963060	0.0018605290041467
	+0.0064913808832687β_0	+0.0093079394230175β_0	+0.021452201039140β_0	+0.0069134250482967β_0
0.93056815579703	−0.057410609270816	0.032500602490799	−0.074904812637873	0.061143222267830
	0.17392742256873	0.32607257743127	0.32607257743127	0.17392742256873

表 3　安定性、打ち切り精度が最良の公式　（ FUKUI-WATANABEの公式 ）

0.069431844202973	0.10157871763050	−0.063622457710523	0.049645740314929	−0.018170156031937
0.33000947820757	0.16837253304728	0.21304978236951	−0.077893922256341	0.026481085047122
0.66999052179243	0.18693750642677	0.30393951237988	0.21304978236951	−0.033936279383725
0.93056815579703	0.16286756590839	0.35046339236738	0.31565847989077	0.10157871763050
	0.17392742256873	0.32607257743127	0.32607257743127	0.17392742256873

表 6　数値実験結果(2)

II　$y' = 100(\sin x - y)$　$y(0) = 0$　$h=0.13$　100ステップ

	第一ステップ 真値	第一ステップ 誤差	最終ステップ 真値	最終ステップ 誤差	最大誤差
FUKUI-WATANABE	1.19706575628D-01	5.80D-04	4.11051463866D-01	2.56D-08	5.80D-04
BUTCHER		-5.02D-04		1.08D-09	-5.02D-04

《参考》 3段数5次法の数値実験結果[4]

	第一ステップ 真値	第一ステップ 誤差	最終ステップ 真値	最終ステップ 誤差	最大誤差
BUTCHER1	1.19706575628D-01	1.62D-03	4.11051463866D-01	8.20D-08	1.62D-03
BUTCHER2		1.23D-02		-1.27D+07	-1.27D+07
RADAU NODES		1.24D-02		-1.28D+07	-1.28D+07
M.BUTCHER2 & RADAU NODES		1.24D-02		-1.27D+07	-1.27D+07
RADAU IA		-6.19D-04		-1.88D-05	-6.19D-04
RADAU IIA		-6.00D-04		-5.35D-08	-6.00D-04
RADAU IA & IIA		-6.10D-04		-9.40D-06	-6.10D-04

表 5　数値実験結果(1)

I　$y' = -x^2y^2/3$　$y(2) = 1$　$h=0.01$　100ステップ

	第一ステップ 真値	第一ステップ 誤差	最終ステップ 真値	最終ステップ 誤差	最大誤差
FUKUI-WATANABE	9.86777077519D-01	-1.39D-17	3.21428571429D-01	-2.50D-16	-3.05D-16
BUTCHER		-1.39D-17		-1.39D-16	-2.22D-16

《参考》 3段数5次法の数値実験結果[4]

	第一ステップ 真値	第一ステップ 誤差	最終ステップ 真値	最終ステップ 誤差	最大誤差
BUTCHER1	9.86777077519D-01	1.80D-16	3.21428571429D-01	4.33D-15	5.19D-15
BUTCHER2		7.73D-15		6.59D-14	1.10D-13
RADAU NODES		6.40D-15		4.81D-14	8.49D-14
M.BUTCHER2 & RADAU NODES		7.06D-15		5.70D-14	9.74D-14
RADAU IA		-6.04D-15		-3.91D-14	-7.48D-14
RADAU IIA		-7.37D-15		-5.71D-14	-9.99D-14
RADAU IA & IIA		-6.70D-15		-4.81D-14	-8.73D-14

〔文　献〕

1. 田中，山下，高山，山下(俊)，Runge-Kutta法に関する二三の諸題について，II 2段および3次陰的Runge-Kutta法の打ち切り精度と安定性の関係，数理解析研究所講究録 585，p.54～p.62（1986）

2. 田中，三村，山下，陰的Runge-Kutta法の特性について，数理解析研究所講究録 643，p.48～p.73（1988）

3. Butcher, J. C., The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations (Runge-Kutta and general Linear Methods), John Wiley & Sons (1987)

4. Hall, G. and Watt, J. M. (Eds.), Modern numerical methods for ordinary differential equations, Clearendon Press. Oxford (1976)