

偏微分方程式の発展問題に対する Runge-Kutta スキム[†]

小 藤 俊 幸^{††}

偏微分方程式の初期値・境界値問題に対する差分スキムにおいて、時間変数を陰的、あるいは、陽的 Runge-Kutta 公式を用いて近似する際の精度特性について考察する。公式の次数から期待されるほどの精度が達成されないという、いわゆる、次数低下 (order reduction) 現象の実例を示し、原因ならびに対策について論じる。

1. はじめに

偏微分方程式の発展問題に対する数値スキムは、差分法、有限要素法等の手法を用いて空間変数を離散化することにより、偏微分方程式を常微分方程式系に帰着し、さらに、線形多段階法、Runge-Kutta 法等の常微分方程式の解法公式を適用して時間変数を離散化する、という 2 段階の離散化過程を経て構成されることが多い。したがって、空間変数の近似精度に応じて、時間変数の離散化に高精度公式を用いることは、理想的には、きわめて自然な考え方に思われる。

しかしながら、こうした場面で、実際に高精度公式が用いられることは、きわめて稀であろう。いくつかの理由が考え得るが、ひとつには、第 1 の離散化により得られる常微分方程式系は、通常、非常な大規模系であるため、時間近似スキムに、特に計算量の面での簡易さが要請されるという、現行の計算機性能からの制約とも言える問題が挙げられよう。さらに、より理論的な面からの問題点として、次数低下 (order reduction) の現象を指摘することができる。

Runge-Kutta 公式の精度規範とされる次数 (整合性次数, order of consistency) は、必ずしも絶対的なものではなく、種々の問題への適用を図る際には、次数から期待されるほどの精度が得られない場合も少なくない。こうした現象は、次数低下現象とも呼ばれ、様々な視点から、活発な研究がなされてきた。本稿では、そうした現象の一典型として、偏微分方程式の初期値・境界値問題に対する差分スキムにおける事例を取り上げ、原因ならびに対策について論じる。

† Runge-Kutta Schemes for Evolutionary Problems in Partial Differential Equations
by TOSHIYUKI KOTO (Department of Computer Science and Information Mathematics
the University of Electro-Communications)

†† 電気通信大学 情報工学科

2. Runge-Kutta 法

まず、以降の議論に対する全般的な準備として、Runge-Kutta 法に関する基本的な事項を、簡単にまとめておく。

常微分方程式の初期値問題

$$(2.1) \quad u'(t) = f(t, u(t)) \quad (0 \leq t \leq T), \quad u(0) = u_0$$

に対する数値解法である Runge-Kutta (RK) 法は、一般には、次のように定式化される：
時間変数の区間 $[0, T]$ に対する

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n = \tau < \dots < t_N = T \quad (\tau = T/N)$$

のような分割を考え、 t_n における近似値 u_n を

$$(2.2) \quad v_{n,i} = u_n + \tau \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j \tau, v_{n,j}) \quad (1 \leq i \leq s)$$

$$(2.3) \quad u_{n+1} = u_n + \tau \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i \tau, v_{n,i})$$

により逐次的に定める。ここで、 a_{ij} 、 b_i 、 c_i は係数パラメータと呼ばれる実数であり、 $v_{n,i}$ は u_n から u_{n+1} を算出するための中間変数である。中間変数の数 s は、通常、RK法の段数と呼ばれている。また、係数パラメータは、しばしば、

| | | | | |
|----------|----------|----------|---------|----------|
| c_1 | a_{11} | a_{12} | \dots | a_{1s} |
| c_2 | a_{21} | a_{22} | \dots | a_{2s} |
| \vdots | \vdots | \vdots | | \vdots |
| c_s | a_{s1} | a_{s2} | \dots | a_{ss} |
| | b_1 | b_2 | \dots | b_s |



のような配列を用いて表され、特に、 $a_{ij} = 0$ ($i \leq j$)、すなわち、行列 (a_{ij}) が下三角であるとき、対応する方法を陽的RK法、そうでない場合を陰的RK法と呼んで両者を区別している。これは、中間変数の計算に際して、非線形方程式の求解を要しない（関数値計算のみでよい）か、否かの相違による。なお、パラメータ c_i については、

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij} \quad (1 \leq i \leq s)$$

とするのが慣習となっているので、以下の記述はそれに従う。

初期値問題 (2.1) における関数 f は十分滑らかであるとし、この形の任意の初期値問題 (u の次元、 f 、 u_0 が任意という意味) に対して

$$u(t_1) - u_1 = O(\tau^{p+1})$$

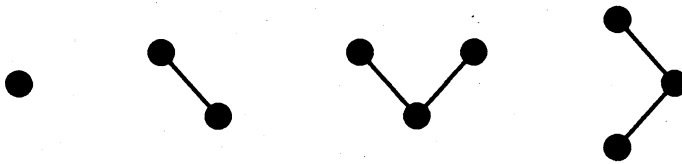
の評価が成立するとき、RK法の次数は p 次であると言う。このように定義することに

より、次数は、個々の問題に依らない方法固有の量となり、具体的には、係数パラメータの満たすべき代数的な条件として決定される。例えば、RK法が3次となるための条件は

$$(2.4) \quad \sum_{i=1}^s b_i = 1, \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i = 1/2, \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = 1/3,$$

$$\sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s b_i a_{ij} c_j = 1/6$$

の方程式系により与えられる。なお、このような次数条件式は、グラフ構造の一種である根付き木 (rooted tree, この場合は、特に、Butcher tree と呼ばれている) と (1対1) に対応づけることが可能である ([1], [2])。例えば、(2.4) の各条件式は、順に、



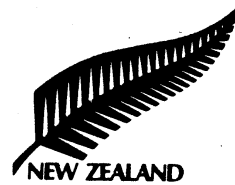
のような根付き木 (最下部の頂点が“根”) と対応づけられる。

段数、すなわち、計算に使用する中間変数の数を増やすほど、より高い次数の公式が得られることが期待されるが、陽的RK法の場合、このことは古くから調べられている。与えられた次数を実現するために必要な段数の最小値に限定して、主要結果をまとめると、ほぼ、表1のようになる。(文献 [1], [2] の記述に基づく。) ただし、上限、下限とは現在知られている最良の結果という程度の意味である。なお、“10次”は、“陽的RK公式を具体的に構成することにより得られた”最高次数として、ギネスブック記録となっている。(任意の次数に対し、その次数を達成するなんらかの陽的RK公式が存在することは、数学的に保証されている。例えば、[1], 167頁, [2], 228頁参照。)

一方、陰的RK法に関しては、同法の提唱とほぼ時期を同じくして (1964年)、極めて明快な結果が、提唱者の Butcher 自身により示されている ([3])。すなわち、任意の段数 s に対して $2s$ 次 (到達可能次数) の公式が唯一存在し、具体的には、($[0, 1]$ 区間に変換された) s 次 Legendre 多項式の根 c_j ($1 \leq j \leq s$) を用いて

$$(2.5) \quad a_{ij} = \int_0^{c_i} \ell_j(\sigma) d\sigma, \quad b_i = \int_0^1 \ell_i(\sigma) d\sigma$$

$$\left[\ell_i(\sigma) = \prod_{j \neq i} \frac{\sigma - c_j}{\sigma - c_i} \right]$$



と表される。というものである。なお、この公式は、定積分公式 (quadrature) として有名な Gauss(-Legendre) 公式の、微分方程式 (不定積分) への自然な拡張と考えられることから、Gauss 公式とも呼ばれている。以下、この用語を用いることにする。

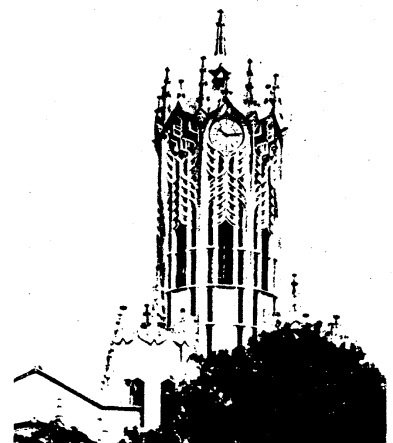
以降、陰的RK法、とりわけ、Gauss 公式は、いわゆる硬い微分方程式系に対して、多くの優れた安定性をもつことが、つぎつぎと明らかにされていった。線形方程式系に対す

る安定性概念であるA安定性 ([4], [5]), さらには, 縮小性をもつ力学系を定める非線形方程式に対するB安定性 ([6], [7]) 等である. 他方, 種々の問題に対して同法の適用が図られるにつれ, いくつかの方向から, 精度規範である次数に対する反省もなされてきた. ひとつは, B安定性から導出される収束性の概念であるB収束の研究 ([8] - [10]) であり, いま一つは, 微分方程式と代数方程式とが混在した系である微分・代数系に関する研究 ([11] - [16]) である. いずれも, 問題によっては, 公式の次数どおりの精度が得られないという現象, 次数低下現象の解析が基本となっている.

本稿では, 上記B収束理論の応用 (ある方向での精密化) という観点から, 偏微分方程式の発展問題の数値スキムについて考察し, 時間変数の近似にRK公式を用いる際の特性を論じる. ただし, 実用性の面に配慮し, 公式の実現が比較的容易である, 2段 Gauss 公式, ならびに, 陽的公式を対象として考察を行う. なお, RK法の偏微分方程式への応用に関しては, 参考文献として挙げた [17] - [23] 以外にも, いくつかの異なる立場からの研究がなされていることを指摘しておく. 例えば, 並列処理向きの陰的RK法に関する研究 ([24]) においても, その主たる応用として, 偏微分方程式の初期値・境界値問題が取り上げられている.

表1 次数到達に必要な最小段数

| 次数 | 下限 | 上限 | |
|----|-----------------|----|--------------|
| 1 | | 1 | Euler 1768 |
| 2 | | 2 | Runge 1895 |
| 3 | | 3 | Heun 1900 |
| 4 | | 4 | Kutta 1901 |
| 5 | | 6 | Butcher 他 |
| 6 | | 7 | 1963-1964 |
| 7 | | 9 | Butcher 1965 |
| 8 | | 11 | Curtis 1970 |
| 9 | Butcher 1985 | 12 | 17 |
| 10 | | | |
| | | | Hairer 1978 |



3. 2段 Gauss スキム

まず, 簡単な例題として, 空間1次元の拡散方程式に対する初期値・境界値問題

$$(3.1) \quad \begin{aligned} u_t &= u_{xx} + g(t, x) \quad (0 \leq t \leq 1, 0 \leq x \leq 1), \\ u(0, x) &= u_0(x), \quad u(t, 0) = \phi_0(x), \quad u(t, 1) = \phi_1(x) \end{aligned}$$

を考える. 空間変数の区間 $[0, 1]$ を

$$0=x_0 < x_1 < \dots < x_m = mh < \dots < x_M = 1 \quad (h=1/M)$$

のように分割し, (3.1) を

$$(3.2) \quad \frac{U^{(m-1)'} + 10U^{(m)'} + U^{(m+1)'}}{12} = \frac{U^{(m-1)} - 2U^{(m)} + U^{(m+1)}}{h^2} + \frac{g(t, x_{m-1}) + 10g(t, x_m) + g(t, x_{m+1})}{12}$$

と空間変数に関して離散化する. $U^{(m)}$ ($1 \leq m \leq M-1$) が x_m 上の近似値である. これは, (3.1) を x に関する常微分方程式とみなして, 線形多段階法の公式である Numerov の公式 (例えば, [2], 423頁) を適用したものに他ならず, 4次精度, すなわち, 打ち切り誤差が, $O(h^4)$ の近似となっている.

いま,

$$(3.3) \quad u(t, x) = e^{-t} \cos(\pi x)$$

が (3.1) の解となるように関数 g , u_0 , ϕ_0 , ϕ_1 を定め, 半離散近似 (3.2) の時間変数を 2段 Gauss 公式を用いて離散化し, $t=0$ から $t=1$ まで数値積分する. 結果は表2のようになる. ただし,

$$N=M, \quad \text{すなわち, } \tau=h$$

として計算した際の, 終端点における近似値の有効桁数 (の ℓ^2 ノルムによる見積値)

$$e_N = -\log_{10} \left(h \sum_{m=1}^{M-1} [U^{(m)}_N - u(1, x_m)]^2 \right)^{1/2}$$

および, “次数” の実測値

$$p_N = (e_N - e_{2N}) / \log_{10} 2$$

が示されている. 空間変数, 時間変数ともにいわゆる4次精度の近似を用いているにもかかわらず全離散近似の精度は, ほぼ2.5次にしかならないことが観察される. なお, この例も含め, 数値計算はすべて Sun Pascal による実行結果である.

表2 拡散方程式に対する数値結果 (1)

| N | 10 | 20 | 40 | 80 | 160 |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| e_N | 5.134 | 5.978 | 6.748 | 7.504 | 8.257 |
| p_N | 2.80 | 2.56 | 2.51 | 2.50 | — |

2段 Gauss 公式に関するこうした現象は, 以下のように, 一般化して論じることができる. Ω を \mathbb{R}^d の有界領域, $\partial\Omega$ をその境界とし, 初期値・境界値問題

$$(3.4) \quad \begin{aligned} u_t &= Lu + g(t, x) \quad (0 \leq t \leq T, x \in \Omega), \\ u(0, x) &= u_0(x), L_b u(t, x) = \phi(t, x) \quad (x \in \partial \Omega) \end{aligned}$$

を考える。ここで、 L は x に関する定数係数線形偏微分作用素、 L_b は境界作用素である。 $g(t, x)$, $u_0(x)$, $\phi(t, x)$ は十分滑らかな関数とし、(3.4) は十分滑らかな解 $u(t, x)$ をもつものと仮定する。 u がベクトル値関数であっても同様な結果が成立するが、記述の簡単のため、 u はスカラとしておく。

まず、 $\Omega_h = \Omega \cap h\mathbf{Z}^d$ とおき、(3.4) の空間変数に関する離散近似を

$$(3.5) \quad U_h' = L_h U_h + g_h(t) + \phi_h(t) \equiv f_h(t, U_h)$$

とする。ここで、 U_h は格子点 Ω_h 上の u の近似関数 (縦ベクトルと考える)、 L_h は L の差分近似、 g_h は g の Ω_h 上への制限、 $\phi_h(t)$ は境界条件 $\phi(t, x)$ から定まる適当な関数とする。

格子点 Ω_h 上の関数に対して、内積

$$\langle U, V \rangle_h = h^d \sum_{x \in \Omega_h} U(x)V(x)$$

を考え、対応するノルム (ℓ^2 ノルム) を $\|\cdot\|_h$ と表す。さらに、 $u_h(t)$ を (3.4) の解の Ω_h 上への制限とし、

$$\alpha_h(t) = f_h(t, u_h(t)) - u_h'(t)$$

とおく。以上の記号のもとで、次の (H1), (H2) を仮定する。

(H1) 差分近似 (3.5) は整合的、すなわち、

$$\max_{0 \leq t \leq T} \|\alpha_h(t)\|_h \rightarrow 0 \quad (h \rightarrow 0).$$

(H2) 定数 $h_0 > 0$, β が存在して、 $h \leq h_0$ を満たす任意の h に対して

$$\langle L_h U, U \rangle_h \leq \beta \|U\|_h^2$$

が成立する。

さらに、(3.5) を 2 段 Gauss 公式を用いて、離散化したものを

$$(3.6) \quad V_{h, n, i} = U_{h, n} + \tau \sum_{j=1}^2 a_{ij} f_h(t_n + c_j \tau, V_{h, n, j}) \quad (i=1, 2)$$

$$(3.7) \quad U_{h, n+1} = U_{h, n} + \tau \sum_{i=1}^2 b_i f_h(t_n + c_i \tau, V_{h, n, i})$$

とすると、全離散近似 (3.6), (3.7) に関し、次の誤差評価が成立する。

定理 定数 $C, h_1 > 0, \tau_1 > 0$ が存在して, 任意の $h \leq h_1, \tau \leq \tau_1$ に対して

$$(3.8) \quad \|u_h(t_n) - U_{h,n}\|_h \leq C(\tau^2 + \max_{0 \leq t \leq \tau} \|\alpha_h(t)\|_h)$$

および

$$(3.9) \quad \|u_h(t_n) - U_{h,n}\|_h \leq C(\tau^4 + \tau^4 \max_{\substack{0 \leq t \leq \tau \\ k=3,4}} \|L_h u_h^{(k)}(t)\|_h + \max_{0 \leq t \leq \tau} \|\alpha_h(t)\|_h)$$

が成立する.

この定理の主旨を簡単に述べる. 全離散近似の誤差を, (3.8) のように, 時間変数の誤差と空間変数の誤差を分離した形で評価しようとする, 時間変数は $O(\tau^2)$ でしか評価されず, 一方, (3.9) のように時間変数を $O(\tau^4)$ で評価しようとする,

$$(3.10) \quad \tau^4 \max_{0 \leq t \leq \tau} \|L_h u_h^{(k)}(t)\|_h$$

のような時間, 空間双方の誤差を含む項が混入してしまう, ということになる. したがって, (3.10) の項が次数低下の主原因とも考えられるが, 以下に述べるように, この項は, 空間変数の離散化手法, 中でも, 境界条件の処理との関係が深いと思われる.

拡散方程式の半離散近似 (3.2) の場合, L_h は, 具体的には,

$$L_h = (I + \frac{h^2}{12} L^*_{h})^{-1} L^*_{h}, \quad L^*_{h} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

となるが, 実は, $(I + h^2/12 L^*_{h})^{-1}$ は h に関して有界な作用素である. さらに, 中心差分近似の性質から

$$L^*_{h} u_h^{(k)}(t) = -\frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} u^{(k)}(t, 0) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u^{(k)}(t, 1) \end{bmatrix} + O(1)$$

となり, 一般には

$$(3.11) \quad \max_{0 \leq t \leq 1} \|L_h u_h^{(k)}(t)\|_h = O(h^{-1.5}),$$

と評価される. 特に, $\tau = h$ の場合, (3.10) の項は $O(\tau^{2.5})$ となり, 前述の数値結果と符合する.

一方, $u^{(k)}(t, 0) = u^{(k)}(t, 1) = 0$, 例えば, 境界条件が t に依存しないとき,

$$(3.12) \quad \max_{0 \leq t \leq 1} \|L_h u_h^{(k)}(t)\|_h = O(1)$$

となることに着目すると, (3.1) の解法として, 次のような計算法を考えることもできる.

“ $v(t, x) = u(t, x) - w(t, x)$ ($w(t, x) = (1-x)\phi_0(t) + x\phi_1(t)$) とおき, 方程式を v についての方程式に書き直し, v を数値計算で求めたのちに, u を計算する.”

結果を表3に示す. 問題, ならびに空間, 時間変数の離散化手法等は, 前述の例と全く同じである. $v(t, 0) = v(t, 1) \equiv 0$ となることから, (3.12) の評価が成り立ち, 4次の精度となっている.

表3 拡散方程式に対する数値結果 (2)

| N | 10 | 20 | 40 | 80 | 160 |
|-------|-------|-------|-------|-------|--------|
| e_N | 5.540 | 6.747 | 7.952 | 9.156 | 10.360 |
| p_N | 4.01 | 4.00 | 4.00 | 4.00 | — |

偏微分方程式そのものを変形して, 次数低下を避けるというアイデアは, [20] によるものである. このような工夫が多次元の一般的な場合に拡張されるかどうかは疑問であるが, 簡単な領域, 例えば, 正方形領域 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ のような場合には, 類似の手法が可能である. 実際, 与えられた境界値 $\phi(t, x, y)$ ($(x, y) \in \partial\Omega$) に対して

$$\begin{aligned} w(t, x, y) = & \phi(t, 0, y)(1-x) + \phi(t, 1, y)x + \phi(t, x, 0)(1-y) + \phi(t, x, 1)y \\ & - \phi(t, 0, 0)(1-x)(1-y) - \phi(t, 0, 1)(1-x)y \\ & - \phi(t, 1, 0)x(1-y) - \phi(t, 1, 1)xy \end{aligned}$$

とおくと, 境界上で ϕ に一致するような Ω 上の関数が得られる. この w を用いて, 上述の変形を行うことにより, この場合も, 問題を斉次な問題に帰着することができる.

また, 多次元問題でも境界条件が時間に依存しない場合, あるいは, 周期境界条件のような場合には, Gauss 公式の適用は有効であろう. なお, 周期境界条件の場合については, いくつかの興味深い結果が知られている. 例えば [21] では, 一定の条件を満たす陰的 RK 法 (Gauss 公式を含む) の KdV 方程式の数値解法 (空間変数の離散化は有限要素法) への応用が考察され, 次数どおりの結果が得られる, すなわち, 次数低下は起きないことが示されている.

4. 陽的 Runge-Kutta スキム

次数の低下現象は, 時間変数の近似に陽的 RK 公式を用いる場合においても見られる. 再び, 簡単な例題により, このことを示すことにする.

移流方程式

$$(4.1) \quad \begin{aligned} u_t &= -u_x + g(t, x) \quad (0 \leq t \leq 1, 0 \leq x \leq 1), \\ u(0, x) &= u_0(x), \quad u(t, 0) = \phi_0(t) \end{aligned}$$

について、拡散方程式の場合と同様、まず、空間変数を

$$(4.2) \quad U^{(m)'} = \frac{U^{(m-1)} - U^{(m)}}{h} + g(t, x_m)$$

と差分近似する。また、

$$(4.3) \quad u(t, x) = e^{-t}(1+x)$$

が方程式 (4.1) の解となるように各関数を定める。差分近似 (4.2) 自体は 1 次近似ではないが、(4.3) の解関数が x に関して線形であることから、空間変数に関する離散化の誤差はないものと考えられる。この例題に、いくつかの基本的な陽的 RK 公式 (例えば [25] 参照) を適用して、 $t=0$ から $t=1$ まで数値積分を実行した結果が表 4 である。この場合も

$$N=M, \quad \text{すなわち, } \tau=h$$

として計算している。修正 Euler 法 (Heun の 2 次公式) の場合は、ほぼ公式の次数どおりの結果となっているが、Kutta の 3 次公式、および、古典的 RK 公式の場合は、いずれも、2.5 次程度まで次数が低下している。

表 4 移流方程式に対する数値結果 (1)

| | N | 10 | 20 | 40 | 80 | 160 |
|------------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 修正 Euler 法 (2 段 2 次公式) | e_N | 2.651 | 3.237 | 3.824 | 4.416 | 5.009 |
| | p_N | 1.95 | 1.95 | 1.96 | 1.97 | — |
| Kutta の 3 次公式 (3 段 3 次公式) | e_N | 4.016 | 4.811 | 5.587 | 6.352 | 7.114 |
| | p_N | 2.64 | 2.58 | 2.54 | 2.53 | — |
| 古典的 RK 公式 (4 段 4 次公式) | e_N | 4.369 | 5.153 | 5.921 | 6.815 | 7.437 |
| | p_N | 2.60 | 2.55 | 2.53 | 2.51 | — |

陽的 RK 公式の場合も、基本的には、数値的境界層とも言うべき(?) 微分作用素の差分近似と境界条件との間のある種の不整合が原因となって次数の低下が起こっている。したがって、2 段 Gauss 公式の場合と同様の工夫により、次数低下を避けることも可能であるが、この場合は、式変形等がいささか複雑になる。以下では、公式そのものを工夫することにより、次数低下を避ける方法について述べる。基本的な考え方は、係数パラメータ

に対する通常の次数条件に付加条件をいくつか加え、(3.10)に相当する項がゼロとなるように、公式を構成し直そう、というものである。

4段陽的RK公式、すなわち、

| | |
|----------------|---|
| 0 | |
| C ₂ | a ₂₁ |
| C ₃ | a ₃₁ a ₃₂ |
| C ₄ | a ₄₁ a ₄₂ a ₄₃ |
| | b ₁ b ₂ b ₃ b ₄ |

により定まる公式で、通常の3次精度の条件(2.4)に加えて、

$$(4.4) \quad \begin{aligned} b_3 a_{32} C_2^2 + b_4 a_{42} C_2^2 + b_4 a_{43} C_3^2 &= 0 \\ b_4 a_{43} a_{32} C_2 &= 0 \end{aligned}$$

の条件を満たすものを考える。具体的には、 C_2, C_3, C_4, b_4 ($C_2 \neq 0, C_2 \neq C_3, b_4 \neq 0$) を任意パラメータとし、

$$(4.5) \quad \begin{aligned} a_{21} &= C_2, \quad a_{31} = C_3, \quad a_{32} = 0, \\ a_{42} &= \frac{C_3}{6b_4 C_2 (C_3 - C_2)}, \quad a_{43} = \frac{C_2}{6b_4 C_3 (C_2 - C_3)}, \quad a_{41} = C_4 - a_{42} - a_{43}, \\ b_2 &= \frac{C_3 X - Y}{C_2 (C_3 - C_2)}, \quad b_3 = \frac{C_2 X - Y}{C_3 (C_2 - C_3)}, \quad b_1 = 1 - b_2 - b_3 - b_4 \end{aligned}$$

$$(X = 1/2 - b_4 C_4, \quad Y = 1/3 - b_4 C_4^2)$$

により計算される係数パラメータが、そのような公式を与える。また、任意パラメータの値に依らず、これらの公式の安定性多項式(例えば[25])は、3次パデ近似多項式、

$$P(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{6}$$

となることが、(4.4)の条件式から従う。

2段 Gauss 公式の場合、公式自体が優れた安定性(A安定性等)をもつため、偏微分方程式、および、半離散近似に対する仮定は極めて自然なもののみでよかったが、陽的RK公式の場合は、それほど単純ではない。以下では、(H2)以外の仮定、記号は、前節と同じとするが、(H2)だけは、次の(H3)に置き換えて考えるものとする。この仮定は、偏微分方程式、半離散近似だけではなく、公式、ならびに、 τ と h との関係をも含んだ条件となっている。なお、(H3)が成り立つための一つの十分条件として、

“各 L_h が正規行列であって、集合

$$\{z \in \mathbf{C} : |P(z)| \leq 1, P(z) \neq 1\} \cup \{0\}$$

に含まれるコンパクト集合 K が存在して、各 L_h の任意の固有値 λ に対し、 $\tau \lambda$ が K に含まれる (ように τ を十分小さくとる).”

を挙げることができる.

(H3) 定数 $C_0, C_1, h_0 > 0$ および h に依存して定まる $\tau_0 (= \tau_0(h))$ が存在して、 $h \leq h_0, \tau \leq \tau_0$ を満たす任意の h, τ に対して

$$\|\tau L_h\|_h \leq C_0,$$

$$\|P(\tau L_h)\|_h \leq 1,$$

$$\|(I - P(\tau L_h))^{-1} \tau L_h\|_h \leq C_1$$

が成立する.

以上の仮定のもとで、次の評価が成立する.

命題 定数 $C, h_1 > 0$ および h に依存して定まる $\tau_1 (= \tau_1(h)) > 0$ が存在して、任意の $h \leq h_1, \tau \leq \tau_1$ に対して

$$(4.6) \quad \|U_h(t_n) - U_{h,n}\|_h \leq C(\tau^3 + \max_{0 \leq t \leq \tau} \|\alpha_h(t)\|_h)$$

が成立する.

係数パラメータ (4.5) の任意パラメータに、 $c_2 \neq 0, b_4 \neq 0$ の条件がつくことから推測されるように、3段 (以下) では、(4.6) のような評価を満たす公式を構成することはできない. その意味では、4段が“3次”を到達するための最小段数である. また、同様な考え方に基づいて、“4次”公式を構成することも可能であるが、その際には、6段の公式を考えることが必要となる.“次数”条件は、通常の次数条件式

$$(4.7.1) \quad b_1 + b_2 + b_3 + b_4 + b_5 + b_6 = 1,$$

$$(4.7.2) \quad b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_4 c_4 + b_5 c_5 + b_6 c_6 = 1/2,$$

$$(4.7.3) \quad b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 + b_4 c_4^2 + b_5 c_5^2 + b_6 c_6^2 = 1/3,$$

$$(4.7.4) \quad b_3 a_{32} c_2 + b_4 a_{42} c_2 + b_4 a_{43} c_3 + b_5 a_{52} c_2 + b_5 a_{53} c_3 + b_5 a_{54} c_4 \\ + b_6 a_{62} c_2 + b_6 a_{63} c_3 + b_6 a_{64} c_4 + b_6 a_{65} c_5 = 1/6,$$

$$(4.7.5) \quad b_2 c_2^3 + b_3 c_3^3 + b_4 c_4^3 + b_5 c_5^3 + b_6 c_6^3 = 1/4,$$

$$(4.7.6) \quad b_3 a_{32} c_2^2 + b_4 a_{42} c_2^2 + b_4 a_{43} c_3^2 + b_5 a_{52} c_2^2 + b_5 a_{53} c_3^2 + b_5 a_{54} c_4^2 \\ + b_6 a_{62} c_2^2 + b_6 a_{63} c_3^2 + b_6 a_{64} c_4^2 + b_6 a_{65} c_5^2 = 1/12,$$

$$(4.7.7) \quad b_4 a_{43} a_{32} C_2 + b_5 a_{54} a_{42} C_2 + b_5 a_{54} a_{43} C_3 \\ + b_6 a_{64} a_{42} C_2 + b_6 a_{64} a_{43} C_3 + b_6 a_{65} a_{52} C_2 + b_6 a_{65} a_{53} C_3 + b_6 a_{65} a_{54} C_4 = 1/24,$$

に, 特殊な条件式

$$(4.8.1) \quad b_4 a_{43} a_{32} C_2^2 + b_5 a_{54} a_{42} C_2^2 + b_5 a_{54} a_{43} C_3^2 + b_6 a_{64} a_{42} C_2^2 \\ + b_6 a_{64} a_{43} C_3^2 + b_6 a_{65} a_{52} C_2^2 + b_6 a_{65} a_{53} C_3^2 + b_6 a_{65} a_{54} C_4^2 \\ = 2(b_5 a_{54} a_{43} a_{32} C_2 + b_6 a_{64} a_{43} a_{32} C_2 \\ + b_6 a_{65} a_{53} a_{32} C_2 + b_6 a_{65} a_{54} a_{42} C_2 + b_6 a_{65} a_{54} a_{43} C_3),$$

$$(4.8.2) \quad b_3 a_{32} C_2^3 + b_4 a_{42} C_2^3 + b_4 a_{43} C_3^3 + b_5 a_{52} C_2^3 + b_5 a_{53} C_3^3 + b_5 a_{54} C_4^3 \\ + b_6 a_{62} C_2^3 + b_6 a_{63} C_3^3 + b_6 a_{64} C_4^3 + b_6 a_{65} C_5^3 \\ = 3(b_4 a_{43} a_{32} C_2^2 + b_5 a_{54} a_{42} C_2^2 + b_5 a_{54} a_{43} C_3^2 + b_6 a_{64} a_{42} C_2^2 \\ + b_6 a_{64} a_{43} C_3^2 + b_6 a_{65} a_{52} C_2^2 + b_6 a_{65} a_{53} C_3^2 + b_6 a_{65} a_{54} C_4^2),$$

$$(4.8.3) \quad b_4 a_{43} a_{32} C_2^3 + b_5 a_{54} a_{42} C_2^3 + b_5 a_{54} a_{43} C_3^3 + b_6 a_{64} a_{42} C_2^3 \\ + b_6 a_{64} a_{43} C_3^3 + b_6 a_{65} a_{52} C_2^3 + b_6 a_{65} a_{53} C_3^3 + b_6 a_{65} a_{54} C_4^3 = 0,$$

$$(4.8.4) \quad b_5 a_{54} a_{43} a_{32} C_2^2 + b_6 a_{65} a_{54} a_{42} C_2^2 + b_6 a_{65} a_{54} a_{43} C_3^2 = 0,$$

$$(4.8.5) \quad b_5 a_{54} a_{43} a_{32} C_2^3 + b_6 a_{65} a_{54} a_{42} C_2^3 + b_6 a_{65} a_{54} a_{43} C_3^3 = 0,$$

$$(4.8.6) \quad b_6 a_{65} a_{54} a_{43} a_{32} C_2 = 0$$

が加わった, 計13の式によって与えられる. なお, この場合の安定性多項式は, 4次パデ近似多項式,

$$P(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{6} + \frac{z^4}{24}$$

となる.

表5 “次数” 到達に必要な最小段数

| | | | | | |
|------|---|---|---|---|---|
| “次数” | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| 段数 | 1 | 2 | 4 | 6 | ? |

上述のように構成される陽的RK公式を用いた数値結果を示しておく. 問題としては, (4.1) の移流方程式を考え, 拡散方程式の計算において用いた (3.3) の関数が解となるように, 各関数を定める. また, 空間変数の離散化としては, Simpson の公式に基づく

$$(4.9) \quad \frac{U^{(m-1)'} + 4U^{(m)'} + U^{(m+1)'}}{6} = \frac{U^{(m-1)} - U^{(m+1)}}{2h} \\ + \frac{g(t, X_{m-1}) + 4g(t, X_m) + g(t, X_{m+1})}{6}$$

の近似を用いる。この近似は 4 次精度ではあるが、例えば、 $U^{(0)}$ が定まらないと、計算ができない。そこで、便宜上、(4.1) に人工的な境界条件

$$u(t, 1) = \phi_1(t)$$

を付け加えて数値計算を行った。表 6 が実際に使用した公式の係数パラメータ、表 7 が数値結果である。

表 6 公式の係数パラメータ

| 4 段“3次”公式 | | | | 6 段“4次”公式 | | | | | | |
|-----------|-----|-----|----|-----------|--------|-------|------|-------|------|------|
| | | | | 0 | | | | | | |
| | | | | 1/4 | 1/4 | | | | | |
| 0 | | | | 1/2 | 1/2 | 0 | | | | |
| 1/3 | 1/3 | | | 3/4 | 3/4 | 0 | 0 | | | |
| 2/3 | 2/3 | 0 | | 1 | 37/15 | -12/5 | 6/5 | -4/15 | | |
| 1 | -2 | 4 | -1 | 1 | -49/30 | -18/5 | 19/5 | 74/15 | -5/2 | |
| | 0 | 3/4 | 0 | 1/4 | 1/6 | 0 | 2/3 | 0 | 1/12 | 1/12 |

表 7 移流方程式に対する数値結果 (2)

| | N | 10 | 20 | 40 | 80 | 160 |
|-----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 古典的RK公式 | e_N | 4.119 | 5.252 | 6.201 | 7.009 | 7.790 |
| | p_N | 3.76 | 3.15 | 2.68 | 2.59 | — |
| 4 段“3次”公式 | e_N | 4.154 | 5.317 | 6.247 | 7.107 | 7.979 |
| | p_N | 3.79 | 2.76 | 2.85 | 2.93 | — |
| 6 段“4次”公式 | e_N | 4.071 | 5.277 | 6.482 | 7.685 | 8.890 |
| | p_N | 4.00 | 4.00 | 4.00 | 4.00 | — |



References

- [1] Butcher, J. C. : *The numerical analysis of ordinary differential equations; Runge-Kutta and general linear methods*, John Wiley & Sons, 1987.
- [2] Hairer, E. , Nørsett, S. P. & Wanner, G. : *Solving ordinary differential equations I; Nonstiff problems*, Springer-Verlag, 1987.
- [3] Butcher, J. C. : *Implicit Runge-Kutta processes*, Math. Comp., 18, 50-64, 1964.
- [4] Ehle, B. L. : *A-stable methods and Padé approximations to the exponential*, SIAM J. Math. Anal. , 4, 671-677 (1973).
- [5] Wanner, G. , Hairer, E. & Nørsett, S. P. : *Order stars and stability theorems*, BIT, 18, 475-489 (1978).
- [6] Butcher, J. C. : *A stability property of implicit Runge-Kutta methods*, BIT, 15, 358-361 (1975).
- [7] Burrage, K. & Butcher, J. C. : *Stability criteria for implicit Runge-Kutta methods*, SIAM J. Numer. Anal. , 16, 45-57 (1979).
- [8] Prothero, A. & Robinson, A. : *On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff system of ordinary differential equations*, Math. Comp. , 28, 145-162 (1974).
- [9] Frank, R. , Schneid, J. & Ueberhuber, C. W. : *The concept of B-convergence*, SIAM J. Numer. Anal. , 18, 753-780 (1981).
- [10] Dekker, K. & Verwer, J. G. : *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*, North-Holland, 1984.
- [11] Gear, C. W. & Petzold, L. R. : *ODE methods for the solution of differential/algebraic systems*, SIAM J. Numer. Anal. , 21, 716-728 (1984).
- [12] Brenan, K. E., Campbell, S. L. & Petzold, L. R. : *Numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations*, North-Holland, 1989.
- [13] Hairer, E., Lubich, C. & Roche, M. : *The numerical solution of differential-algebraic equations by Runge-Kutta methods*, Lecture Note in Math. 1409,

Springer-Verlag, 1989.

- [14] Hairer, E. & Wanner, G. : *Solving ordinary differential equations II; Stiff and differential-algebraic problems*, Springer-Verlag, 1991.
- [15] Koto, T. : *Third-order semi-implicit Runge-Kutta methods for time-dependent index-one differential-algebraic equations*, J. Inf. Process. , 14, 172-177 (1991).
- [16] 小藤俊幸 : 陰的 Runge-Kutta 法に関する研究, 名古屋大学大学院工学研究科学位論文, 1992.
- [17] Crouzeix, M. : *Sur l'approximation des équations différentiels opérationnelles linéaires par des méthodes de Runge-Kutta*, Thèse, Université Paris VI, 1975.
- [18] Karakashian, O. A. : *On Runge-Kutta methods for parabolic problems with time-dependent coefficients*, Math. Comp. , 47 , 77-101 (1986)
- [19] Verwer, J. G. : *Convergence and order reduction of diagonally implicit Runge-Kutta schemes in the method of lines*, Proc. Dundee Numer. Anal. Conf. 220-237 (1986).
- [20] Sanz-Serna, J. M. , Verwer, J. G. & Hundsdorfer, W. H. : *Convergence and order reduction of Runge-Kutta schemes applied to evolutionary problems in partial differential equations*, Numer. Math. , 50, 405-418 (1986).
- [21] Karakashian, O. A. & McKinney, W. : *On optimal high-order in time approximations for the Korteweg-de Vries equation*, Math. Comp. , 55, 473-496 (1992).
- [22] 小藤俊幸 : 陰的ルンゲ・クッタ法と偏微分方程式, 情報処理学会研究報告, 92, No. 46, 1-8 (1992)
- [23] Koto, T. : *Explicit Runge-Kutta schemes for evolutionary problems in partial differential equations*, International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SCADE 93), Auckland, 1993.
- [24] Karakashian, O. A. & Rust, W. : *On the parallel implementation of implicit Runge-Kutta methods*, SIAM J. Sci. Statist. Comput., 9, 1085-1090 (1988).
- [25] 三井斌友 : 数値解析入門 ー常微分方程式を中心にー, 朝倉書店, 1985.