

常微分方程式に対する数値解の Balanced Pair について

北里大・教養 大橋常道 (Tsunemichi Oohashi)

§1 序. ここに述べる数値解法の大筋は 1985 年 4 月の数学会(都立大)において発表したものである。その後幾らかの修正を加え [1] にまとめた。この研究会では balanced pair なる数値解法を考えた動機, 公式の特徴, 数値例等を中心にして, この数値解法を紹介したい。

次の初期値問題の数値解法について考える。

$$(1.1) \quad y' = f(x, y), \quad y(a) = y_0.$$

ここに $f: R \times R^m \rightarrow R^m$, $f \in C^b$ ($b \geq 5$) とする。また閉区間 $[a, b]$ において (1.1) の一意解 $y(x)$ の存在を仮定する。 $y(x)$ の近似解を得るために, 次数 P の one-step 法の pair を考える。

$$(1.2a) \quad u_{n+1} = u_n + h \Phi_1(x_n, u_n, u_{n+1}; h),$$

$$(1.2b) \quad y_{n+1} = y_n + h \Phi_2(x_n, y_n, y_{n+1}; h).$$

これらの局所打ち切り誤差は各々次の形をもつものとする。

$$(1.3a) \quad T_{n+1}^u \equiv y(x_{n+1}) - y(x_n) - h \Phi_1(x_n, y(x_n), y(x_{n+1}); h) \\ = C_{P+1} h^{P+1} \varphi(x_n, y(x_n)) + O(h^{P+2}),$$

$$(1.3b) \quad T_{n+1}^y \equiv y(x_{n+1}) - y(x_n) - h\Phi_2(x_n, y(x_n), y(x_{n+1}); h) \\ = -C_{p+1}h^{p+1}\varphi(x_n, y(x_n)) + O(h^{p+2}),$$

ここに $C_{p+1} \neq 0$, $p=1$ あるいは 2 とする。 u_n, y_n の累積打切誤差を各々 $e_n^u = y(x_n) - u_n$, $e_n^y = y(x_n) - y_n$ と表す。

[定義1] 初期値問題 (1.1) に対する数値解法の Pair (1.2a), (1.2b) は、次のとき balanced pair と呼ばれる。

$$“ e_n^u + e_n^y = O(h^{p+1}) \quad \text{as } h \rightarrow 0, nh = x-a, a < x \leq b.”$$

Balanced pair を見つけるために, (1.2) の具体的な公式として, 次の2つの公式から可能な組合せを考える。

$$(1.4) \quad y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^r w_i k_i, \quad k_i = hf(x_n + \sigma_i h, y_n + \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} k_j), \quad \sigma_i = \sum_{j=1}^i \alpha_{ij}, \quad i=1, 2, \dots, r$$

$$(1.5) \quad y_{n+1} = y_n + h\{\theta f_n + (1-\theta)f_{n+1}\}, \quad 0 \leq \theta \leq \frac{1}{2}.$$

(1.5) を用いて目的の pair が得られない時は、次の one-leg 法を用いる。

$$(1.6) \quad y_{n+1} = y_n + hf(\theta x_n + (1-\theta)x_{n+1}, \theta y_n + (1-\theta)y_{n+1}), \quad 0 \leq \theta \leq \frac{1}{2}.$$

これらの解法は全て one-step 法なので (1.3) を満す pair が存在するとき、累積打切誤差の漸近的評価 (Gear [2], p63) は、

$$e_n^u = h^p e(x_n) + O(h^{p+1}), \quad e_n^y = -h^p e(x_n) + O(h^{p+1}).$$

ここに $e(x)$ は 次の初期値問題の解である。

$$(1.7) \quad e'(x) = f_y(x, y(x))e(x) + C_{p+1}\varphi(x, y(x)), \quad e(a) = 0.$$

よって、公式 (1.4), (1.5) から, (1.3) を満す様にして作られる数値解法の pair は balanced pair となる。

さて、 $z_n = \frac{1}{2}(y_n + u_n)$ とおくと z_n も (1.1) の 1 つの数値解となる。
 このとき z_n の局所打ち切り誤差は、 $T_{n+1}^z = \frac{1}{2}(T_{n+1}^u + T_{n+1}^y) = O(h^{p+2})$, また
 累積打ち切り誤差は $e_n^z = O(h^{p+1})$ となる。

[定義2] $(E, E)_p = \{ \text{balanced pair} \mid (1.2a), (1.2b) \text{ 共に } p\text{-次の陽的 Runge-kutta 法} \},$
 $(E, I)_p = \{ \text{balanced pair} \mid (1.2a) \text{ が } p\text{-次の陽的 R-K 法}, (1.2b) \text{ が } p\text{-次の } \theta\text{-method (1.5) (あるいは (1.6))} \},$
 $(I, I)_p = \{ \text{balanced pair} \mid (1.2a) \text{ が } p\text{-次の半陰的 R-K 法}, (1.2b) \text{ が } p\text{-次の } \theta\text{-method (1.5) (あるいは (1.6))} \}.$

R-K 法 に対しては、パラメーターの自由度が大となる可能性があるので、
 当面単調性を仮定する。

[定義3] 半陰的 R-K 法 (1.4) は、 $0 \leq w_i, 0 \leq \alpha_{ij}, 0 \leq \sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \dots \leq \sigma_r \leq 1$
 $(i, j = 1, 2, \dots, r)$ のとき 単調 であるという。

結局、我々の数値解法は次の様なスキームである。

$$(1.8) \left\{ \begin{array}{ll} u_{n+1} = u_n + h \Phi_1(x_n, u_n, u_{n+1}; h) & (\text{次数 } p) \\ y_{n+1} = y_n + h \Phi_2(x_n, y_n, y_{n+1}; h) & (\text{次数 } p) \\ z_{n+1} = \frac{1}{2}(u_{n+1} + y_{n+1}) & (\text{次数 } p+1) \\ d_{n+1} = \frac{h}{2} \{ \Phi_1(x_n, u_n, u_{n+1}; h) - \Phi_2(x_n, y_n, y_{n+1}; h) \} & (\text{局所打ち切り誤差の見積り}) \end{array} \right.$$

[定義4] Balanced pair の絶対安定領域とは、(1.2a) と (1.2b) の
 絶対安定領域の共通領域をいう。

§2. Motivation. Balanced pair なる解法は、基本的には 2つの異なる解法で真の解を追跡する方法である。この様な解法を考えるに至った動機を 2, 3 あげる。

- 1) 真の解がわからない方程式に対する trial computation として、低次の公式であってもより確実で信頼のできる解法をねらった。
- 2) できることならば、2つの数値解で真の解を挟み込む。
- 3) 求めたい解が不安定なとき、通常の解法では初期値を変えて、何回か計算を試みなければわからない様な不安定性を、少ない回数数の計算で察知したい(次の例参照)。

(例) $y' = 2y - 3e^{-x}$, $y(0) = 1$, 真の解 $y(x) = e^{-x}$.

一般解は $y(x) = e^{-x} + ce^{2x}$ なので, $y = e^{-x}$ は不安定である。この初期値問題に対し balanced pair (E, E)2, 公式2 ... 下の表の上段) と, 公式2 において z_n を次の step の u_{n+1} , y_{n+1} の計算に用いる方法(即ち普通の Predictor-Corrector 法のような解法になる ... 表の下段) との比較を試みた。尚 stepsize は共に $h = 0.01$ とした。

n	x_n	u_n	y_n	z_n	d_n
200	2.0	1.35706-01	1.34958-01	1.35332-01	7.4346-06
		1.35332-01	1.35332-01	1.35332-01	2.8307-08
400	4.0	3.86271-02	-2.32003-03	1.81535-02	4.0541-04
		1.81511-02	1.81511-02	1.81511-02	3.7773-09
600	6.0	1.11153+00	-1.12412+00	-6.29801-03	2.2134-02
		-6.50479-03	-6.50479-03	-6.50749-03	2.4167-09
800	8.0	6.05562+01	-6.15059+01	-4.74871-01	1.2085+00
		-4.90149-01	-4.90149-01	-4.90149-01	1.6019-07

明らかなことであるが, balanced pair では u_n と y_n がどんどん離れていき, それにともなって d_n の値も大きくなるので, 不安定な解を追跡していることが判断できる。これに反して下段の方法では, 全2の値が正常に計算されている様にみえるので, 数値解が真の解からどんどん離れていくという状況をとらえることはできない。

さて, 理論的には安定な系である stiff system に適用できる様な balanced pair を考えたとき, 我々の方法は2つの implicit な公式を用意しなければならないので, 計算上いくつかの困難が予想される。というのは現在 stiff system に対する研究は, いかん公式の implicitness を減するか, いかん公式の精度を上げるかということが中心テーマとなっているからである。そしてその様な解法として, implicitness が極度に軽減されている Kaps-Rentrop 公式 (ROW 法の1つで, 埋め込み型公式, [3]あるいは[4]を参照せよ) がある。この様な状況の中で我々は, R-K法と θ -method からなる $(I,I)_p$ 型の公式を作ったが, 重度な implicitness をもつ。計算を工夫することにより, implicitness はかなり改善されるが本質的には ROW 法に及ばない。よって $(I,I)_p$ 型の公式はさらに改良, 工夫されなければならない。前4節では, 参考のために, Kaps-Rentrop 公式の計算結果ものを示す。

§3 Balanced Pairs. 結論を先に言えば、3つの型のいずれに対しても balanced pair は存在する。この節では結果だけを述べる(詳細は[1]を参照せよ)。

(E, E)₁, 公式1

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} \{ f(x_n, u_n) + f(x_n + \frac{2}{3}h, u_n + \frac{2}{3}hf_n) \}.$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}hf_n)$$

$$T^u = \frac{1}{6}h^2 y''(x) + h^3 \left(\frac{1}{18}F_2 + \frac{1}{6}f_y F_1 \right) + O(h^4)$$

$$T^y = -\frac{1}{6}h^2 y''(x) + h^3 \left(-\frac{1}{18}F_2 + \frac{1}{6}f_y F_1 \right) + O(h^4)$$

$$T^z = \frac{1}{6}h^3 f_y F_1 + O(h^4), \quad \text{ここに } F_2 = \left(\frac{\partial}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial y} \right) f.$$

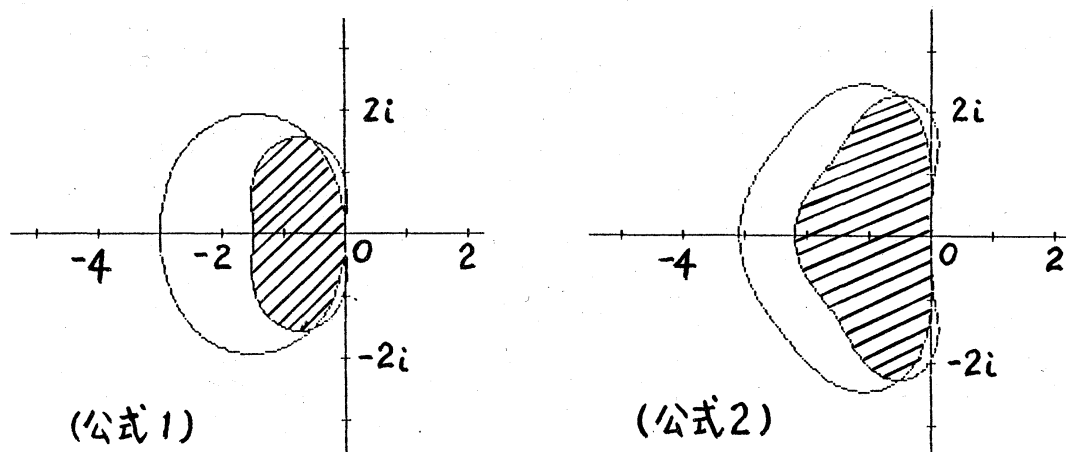


図1. 絶対安定領域(斜線部分)

(E, E)₂, 公式2

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6}k_2 + \frac{5}{6}k_3, \quad k_1 = hf(x_n, y_n), \quad k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{k_1}{2})$$

$$k_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{1}{2}k_2)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{3}(k'_1 + k'_2 + k'_3), \quad k'_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k'_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k'_1), \quad k'_3 = hf(x_n + h, y_n + \frac{1}{4}k'_1 + \frac{3}{4}k'_2)$$

$$T^u = h^3 \left\{ \frac{1}{24}F_2 - \frac{1}{24}f_y F_1 \right\} + h^4 \left\{ \frac{1}{48}F_3 + \frac{1}{48}(f_{xy} + ff_{yy})F_1 - \frac{1}{96}f_y F_2 + \frac{1}{24}f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^y = h^3 \left\{ -\frac{1}{24} F_2 + \frac{1}{24} f_y F_1 \right\} + h^4 \left\{ -\frac{1}{48} F_3 + \frac{1}{96} f_y F_2 + \frac{1}{24} f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^z = h^4 \left\{ \frac{1}{96} (f_{xy} + f_y f_{yy}) F_1 + \frac{1}{24} f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5).$$

(E, I)_1, 公式3 $u_{n+1} = u_n + h f(x_n + \frac{h}{4}, u_n + \frac{1}{4} h f_n)$

$$y_{n+1} = y_n + h \left\{ \frac{1}{4} f_n + \frac{3}{4} f_{n+1} \right\}$$

$$T^u = \frac{1}{4} h^2 y''(x) + h^3 \left(\frac{13}{96} F_2 + \frac{1}{6} f_y F_1 \right) + O(h^4)$$

$$T^y = -\frac{1}{4} h^2 y''(x) + h^3 \left\{ -\frac{5}{24} F_2 - \frac{5}{24} f_y F_1 \right\} + O(h^4)$$

$$T^z = h^3 \left\{ -\frac{7}{192} F_2 - \frac{1}{48} f_y F_1 \right\} + O(h^4)$$

(E, I)_1, 公式4

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} \left\{ f(x_n, u_n) + f(x_n + \frac{2}{3}h, u_n + \frac{2}{3}h f_n) \right\}$$

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n + \frac{2}{3}h, \frac{1}{3}y_n + \frac{2}{3}y_{n+1})$$

$$T^u = \frac{1}{6} h^2 y''(x) + h^3 \left(\frac{1}{18} F_1 + \frac{1}{6} f_y F_1 \right) + h^4 \left\{ \frac{11}{648} F_3 + \frac{1}{24} (f_y F_2 + f_y^2 F_1) + \frac{1}{8} (f_{xy} + f_y f_{yy}) F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^y = -\frac{1}{6} h^2 y''(x) + h^3 \left(-\frac{1}{18} F_1 - \frac{1}{6} f_y F_1 \right) + h^4 \left\{ -\frac{5}{648} F_3 - \frac{7}{72} (f_{xy} + f_y f_{yy}) F_1 - \frac{5}{72} (F_2 + f_y F_1) f_y \right\} + O(h^5)$$

$$T^z = h^4 \left\{ \frac{1}{216} F_3 + \frac{1}{72} (f_{xy} + f_y f_{yy}) F_1 - \frac{1}{72} (F_2 + f_y F_1) f_y \right\} + O(h^5)$$

この公式では、 T^u, T^y の h^2, h^3 の項が共に絶対値等しく、符号が逆になる様に選んである。この様な公式は $(E, I)_1$ の中ではただ1つしかない。

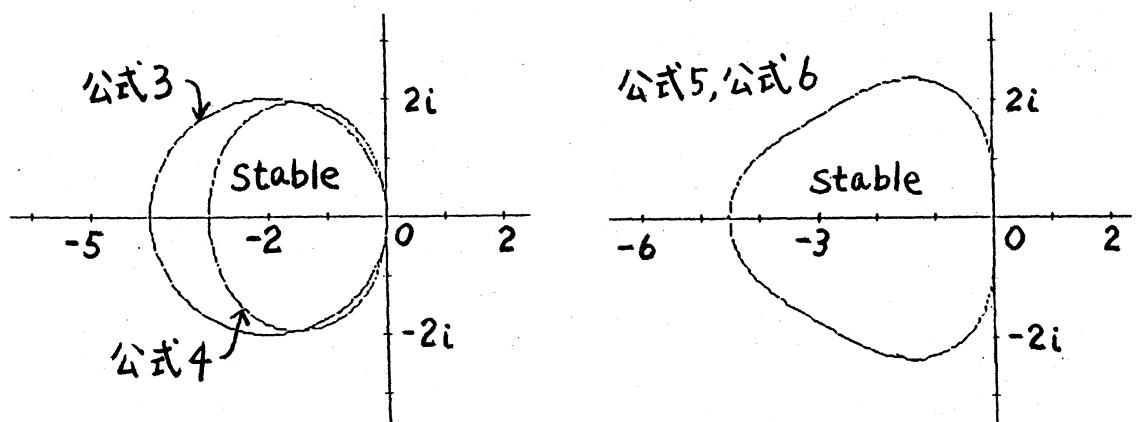


図2. 絶対安定領域 (閉曲線の内側)

(E,I)₂, 公式5 $u_{n+1} = u_n + \frac{1}{3}(k_1 + k_2 + k_3), \quad k_1 = hf(x_n, u_n)$
 $k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{1}{2}k_1), \quad k_3 = hf(x_n + h, u_n + \frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_3)$
 $y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{h}{2}, \frac{1}{2}y_n + \frac{1}{2}y_{n+1})$

$$T^u = h^3 \left\{ -\frac{1}{24}F_2 + \frac{1}{12}f_y F_1 \right\} + h^4 \left\{ -\frac{1}{48}F_3 + \frac{1}{24}(f_{xy} + f f_{yy})F_1 + \frac{1}{48}f_y F_2 + \frac{1}{24}f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^y = h^3 \left\{ \frac{1}{24}F_2 - \frac{1}{12}f_y F_1 \right\} + h^4 \left\{ \frac{1}{48}F_3 - \frac{1}{24}f_y F_2 - \frac{1}{24}f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^z = h^4 \left\{ \frac{1}{48}(f_{xy} + f f_{yy})F_1 - \frac{1}{96}f_y F_2 \right\} + O(h^5)$$

台形法を用いたときは、下の例の様に R-K 法は単調にならない。

(E,I)₂, 公式6 $u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6} \{-k_1 + 4k_2 - k_3\}, \quad k_1 = hf(x_n, u_n)$
 $k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{1}{2}k_1), \quad k_3 = hf(x_n + h, u_n + 2k_1 - k_2)$
 $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \{f_n + f_{n+1}\}$

$$T^u = \frac{1}{12}h^3 y^{(3)}(x) + h^4 \left\{ \frac{1}{24}F_3 + \frac{1}{24}(f_{xy} + f f_{yy})F_1 + \frac{1}{48}f_y F_2 + \frac{1}{24}f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^y = -\frac{1}{12}h^3 y^{(3)}(x) + h^4 \left\{ -\frac{1}{24}F_3 - \frac{3}{24}(f_{xy} + f f_{yy})F_1 - \frac{1}{24}f_y F_2 - \frac{1}{24}f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^z = h^4 \left\{ -\frac{1}{24}(f_{xy} + f f_{yy})F_1 - \frac{1}{96}f_y F_2 \right\} + O(h^5)$$

この公式では、 h^4 の項の符号が逆になっていることに注意された。また公式5, 公式6の絶対安定領域(図2)は同じである。

(I,I)_p 型の公式について。次の2つの公式の pair を考える。

(3.1a) $u_{n+1} = u_n + w_1 k_1 + w_2 k_2$

$$k_1 = hf(x_n + \alpha h, u_n + \alpha k_1)$$

$$k_2 = hf(x_n + \beta h, u_n + (\beta - \lambda)k_1 + \lambda k_2)$$

(3.1b) $y_{n+1} = y_n + h \{ \theta f_n + (1 - \theta) f_{n+1} \}, \quad 0 \leq \theta \leq \frac{1}{2}$

$P=1$ に対しては、次の方程式を満たすように係数を決定する。

$$(3.2) \quad w_1 + w_2 = 1, \quad \alpha w_1 + \beta w_2 = \theta, \quad 0 < \theta < \frac{1}{2}$$

この一般解は、

$$(3.3) \quad w_1 = \frac{\beta - \theta}{\beta - \alpha}, \quad w_2 = \frac{\theta - \alpha}{\beta - \alpha}, \quad \alpha \leq \theta \leq \beta \quad (\text{単調性の仮定より})$$

$$(I, I)_1, \text{公式7} \quad \alpha = \frac{1}{4}, \beta = \frac{2}{5}, \lambda = \frac{1}{5}, w_1 = 0, w_2 = 1 \quad \Big| \quad \theta = \frac{2}{5}$$

$$T^u = \frac{1}{10} h^2 y''(x) + h^3 \left\{ \frac{13}{150} F_2 + \frac{11}{300} f_y F_1 \right\} + O(h^4)$$

$$T^y = -\frac{1}{10} h^2 y''(x) - \frac{2}{15} h^3 y^{(3)}(x) + O(h^4)$$

$$T^z = h^3 \left\{ -\frac{7}{300} F_2 - \frac{29}{600} f_y F_1 \right\} + O(h^4)$$

この公式の R-K 法は単調かつ stiffly stable (Gear [2], p.213) である。

一般に次の定理が成立する。

[定理1] 次の (A1), (A2) を仮定する。

$$(A1) \quad \{\theta - (\alpha + \lambda)\} \{\theta + 2\alpha\lambda - (\alpha + \lambda)\} < 0$$

$$(A2) \quad \{2(\alpha + \lambda) + 1\}^2 < 8(\theta + 2\alpha\lambda)$$

このとき, (3.3) を満たす半陰的 R-K 法は stiffly stable である。

ここで, z_n の局所打ち切誤差の次数が 3 となる $P=1$ の公式を考える。係数が満たすべき方程式は, (3.2) の他に 2 つ追加されて, 次の様になる。

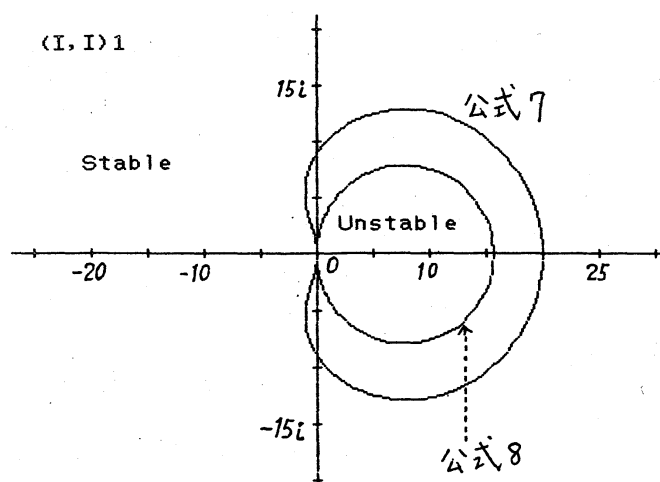


図3. 絶対安定領域(由曲線の外側)

$$(3.4) \quad w_1 + w_2 = 1, \alpha w_1 + \beta w_2 = \theta, \alpha^2 w_1 + \beta^2 w_2 = \theta - \frac{1}{3}, \alpha^2 w_1 + (\alpha\beta + \beta\lambda - \alpha\lambda)w_2 = \frac{\theta}{2} - \frac{1}{6}$$

この一般解は、

$$(3.5) \quad \alpha = 1, \lambda = 2\beta - \frac{1}{2}, \theta = 1 - \frac{1}{3\beta}, w_1 = \frac{1 - 3\beta + 3\beta^2}{3\beta(\beta - 1)}, w_2 = \frac{1}{3\beta(1 - \beta)}, \frac{1}{3} < \beta < \frac{2}{3}.$$

$\alpha > \beta, w_1 < 0$ なので R-K法は単調ではない。

[定理2] (3.5) をみたす半陰的 R-K法は、 $\frac{3 + \sqrt{105}}{24} < \beta < \frac{2}{3}$ のとき、Stiffly stable である。

[系] (3.3) および (3.5) を満たす半陰的 R-K法で A-stable なものは存在しない

$$(I, I)_1, \text{公式8} \quad \alpha = 1, \beta = \frac{3}{5}, \lambda = \frac{7}{10}, w_1 = -\frac{7}{18}, w_2 = \frac{25}{18} \quad | \quad \theta = \frac{4}{9}$$

$$T^4 = \frac{1}{18} h^2 y''(x) + \frac{1}{9} h^3 y'''(x) + h^4 \left\{ \frac{61}{1080} F_3 + \frac{47}{360} f_y F_2 + \frac{89}{360} (f_{xy} + f f_{yy}) F_1 + \frac{31}{120} f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^3 = -\frac{1}{18} h^2 y''(x) - \frac{1}{9} h^3 y'''(x) + h^4 \left\{ -\frac{11}{216} F_3 - \frac{11}{72} (f_{xy} + f f_{yy}) F_1 - \frac{11}{216} (F_2 + f_y F_1) f_y \right\} + O(h^5)$$

$$T^2 = h^4 \left\{ \frac{1}{360} F_3 + \frac{43}{1080} f_y F_2 + \frac{17}{360} (f_{xy} + f f_{yy}) F_1 + \frac{14}{135} F_1 f_y^2 \right\} + O(h^5)$$

この公式は、真の解をよりよく挟むという点で良い性質をもっている。

$p=2$ の公式に対して、満たすべき方程式は、

$$(3.6) \quad w_1 + w_2 = 1, \alpha w_1 + \beta w_2 = \frac{1}{2}, \alpha^2 w_1 + \beta^2 w_2 = \frac{1}{6}, \alpha^2 w_1 + (\alpha\beta - \alpha\lambda + \beta\lambda)w_2 = \frac{1}{12}$$

この一般解は、

$$(3.7) \quad w_1 = \frac{-1}{2(1-6\alpha+6\alpha^2)}, w_2 = \frac{3(1-2\alpha)^2}{2(1-6\alpha+6\alpha^2)}, \beta = \frac{1-3\alpha}{3(1-2\alpha)}, \lambda = \frac{1-6\alpha}{6(1-2\alpha)}$$

$w_1 w_2 < 0$ なので、半陰的 R-K法は単調とはならない。一般に

次の定理が成立する。

[定理3] (3.7) を満たす半陰的 R-K法は、 $\alpha > \frac{1}{2}$ のとき

A-stable である。

$$(I, I)_2, \text{公式9} \quad \alpha = \frac{2}{3}, \beta = 1, \lambda = \frac{3}{2}, \omega_1 = \frac{3}{2}, \omega_2 = -\frac{1}{2} \quad | \quad \theta = \frac{1}{2}$$

$$T^u = \frac{1}{12} h^3 y^{(3)}(x) + h^4 \left\{ \frac{11}{216} F_3 + \frac{5}{36} f_3 F_2 + \frac{19}{72} (f_{xy} + f f_{yy}) F_1 + \frac{13}{36} f_y^2 F_1 \right\} + O(h^5)$$

$$T^y = -\frac{1}{12} h^3 y^{(3)}(x) - \frac{1}{24} h^4 y^{(4)}(x) + O(h^5)$$

$$T^z = h^4 \left\{ \frac{1}{216} F_3 + \frac{7}{144} f_3 F_2 + \frac{23}{144} f_y^2 F_1 + \frac{5}{72} (f_{xy} + f f_{yy}) F_1 \right\} + O(h^5).$$

この公式では、 T^u と T^y の h^4 の項の符号が逆になっていることに注意されたい。

(I, I)_p 型の公式は
精度に関係なく計算の手間
は同じなのであるが、実際には
stepsize の Control をし
ながら計算するので $p=1$ の
ものが必ずしも不利である
とはいえない。しかし精度
と Stability の両方から
(I, I)₂ の方が少し優れている。

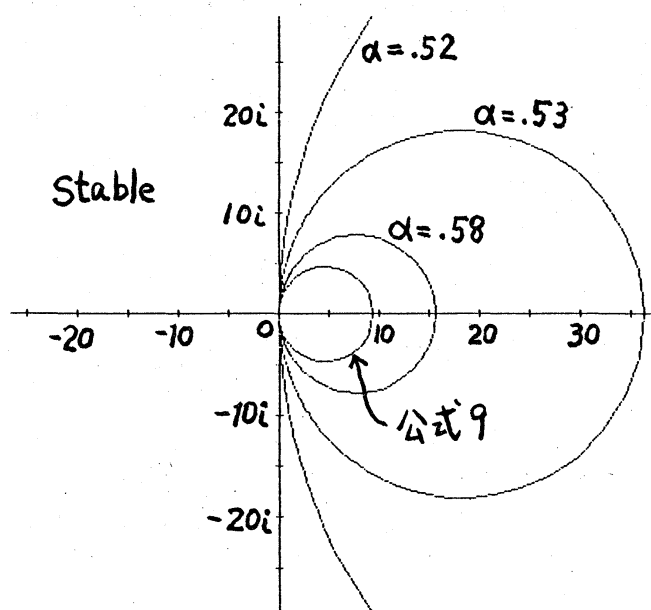


図4. (3.7)を係数にもつR-K法の絶対安定領域(円の外側)。

§4. 数値例. 我々の数値解法では、局所打ち切誤差を d_n によって見積ることができるので、基本的に variable stepsize を用いる。

Stepsize は次の様に決める。

$$1^\circ. \quad h_{n+1} = \begin{cases} h_n & \text{if } \varepsilon_1 \leq |d_{n+1}| \leq \varepsilon_2 \\ \frac{1}{2} h_n & \text{if } \varepsilon_2 < |d_{n+1}| \\ \frac{3}{2} h_n & \text{if } |d_{n+1}| < \varepsilon_1 \end{cases}$$

2°. 1°で定められた h_{n+1} が $h_{n+1} > h_{\max}$ ならば $h_{n+1} = h_{\max}$, $\varepsilon_1 = 0$ とおく。

3°. 一度 $h_{\max}$ になった stepsize が再び半分になったとき, ε_1 を最初の ε_1 に設定する。

ここに, $h_{\max}$, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ は, 使用する公式および与えられた微分方程式に対応して適当に決める。また implicit な公式に対しては, Newton法を用いる。Newton法では,

$$\left| \frac{Y^{(n+1)} - Y^{(n)}}{Y^{(n)}} \right| < 10^{-8}$$

となったとき収束とみなす。計算した例では, θ -method (or One-leg法) の場合, 1step の中での iteration の回数は平均して2回位である。

(I,I)_p 型の公式では θ -method の方を先に計算して, R-K法の k_j の iteration に対しては, k_j の初期値を θ -method の f_n と f_{n+1} で補間する。この様にするこゝで, k_j の iteration の回数も平均して2回位におさえることができる。例3の計算では, k_j の iteration は1回ですませた。

(例1) $y' = (1-x)y^2$, $y(0) = 1.5$, 真の解 $y(x) = \frac{6}{3(x-1)^2 + 1}$

積分区間は $[0, 4]$, 使用する公式は,

$$\begin{array}{l} (E,I)_1, \text{公式4} \\ (E,E)_2, \text{公式2} \\ (E,I)_2, \text{公式6} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} h_0 = 0.01, \varepsilon_1 = 10^{-6}, \varepsilon_2 = 10^{-3} \\ h_0 = 0.01, \varepsilon_1 = 10^{-8}, \varepsilon_2 = 10^{-5} \end{array} \right.$$

$P=3$ の Heun 法 (R-K法); h_n は上の公式に合わせて計算。

尚公式5の結果については [1] を参照したい。

$$(例2) \begin{cases} y_1' = y_2, & y_1(0)=0 \\ y_2' = -9y_1, & y_2(0)=6 \end{cases} \quad \text{真の解} \begin{cases} y_1(x) = 2 \sin 3x \\ y_2(x) = 6 \cos 3x \end{cases}$$

積分区間 $[0, 4]$

(E,I)1, 公式4 ; $h_0 = 0.01$, $\varepsilon_1 = 10^{-5}$, $\varepsilon_2 = 10^{-2}$

(E,E)2, 公式2 } $h_0 = 0.01$, $\varepsilon_1 = 10^{-7}$, $\varepsilon_2 = 10^{-4}$

(E,I)2, 公式6

$p=3$ の Heun 法, また公式5の結果については[1]を参照せよ。

$$(例3) \begin{cases} y_1' = 998y_1 + 1998y_2, & y_1(0)=1 \\ y_2' = -999y_1 - 1999y_2, & y_2(0)=0 \end{cases} \quad \text{真の解} \begin{cases} y_1(x) = 2e^{-x} - e^{-1000x} \\ y_2(x) = -e^{-x} + e^{-1000x} \end{cases}$$

積分区間 $[0, 4]$

(I,I)1, 公式8 ; $h_0 = .0002$, $h_{\max} = .1$, $\varepsilon_1 = 10^{-5}$, $\varepsilon_2 = 10^{-2}$

(I,I)2, 公式9 ; $h_0 = .0002$, $h_{\max} = .1$, $\varepsilon_1 = 10^{-7}$, $\varepsilon_2 = 10^{-3}$

Kaps-Rentrop 公式 (a) ; $h_0 = .0001$, $h_{\max} = .1$, $\varepsilon_1 = 10^{-9}$, $\varepsilon_2 = 10^{-6}$

" (b) ; $h_0 = .0002$, $h_{\max} = .1$, $\varepsilon_1 = 10^{-8}$, $\varepsilon_2 = 10^{-5}$

(I,I)1, 公式7の結果は[1]を参照。また Kaps-Rentrop 公式については、[3]を参照されたい。

以上3つの例の計算結果および数値解の誤差をプロットした図の一部は、最後にまとめている。

§5 あとがき. Balanced pair として多くの公式をあげたが、 $p=1$ のものとしては、公式4, 公式8を推せんしたい。これらの公式は真の解を挟むという点ですぐれている。 $p=2$ の公式としては、公式2, 公式6, 公式9

を推せんしたい。これらは、かなり実用的な公式であると思われるので同時に公式の特徴、注意等を記す。

公式	微分方程式	公式の特徴, その他
(E,E)2 公式2	nonstiff用	周期解に対しては良い。積分区間が短い場合は、公式6に比べて精度は良い。区間が長い場合は丸め誤差の消去*必要。絶対安定領域は狭い。真の解を挟むという点では、公式5, 6に比べて信頼性はやや低い。計算時間は平均すると一番短い。
(E,I)2 公式6	nonstiff用	周期解に対しては良い。長区間の積分の場合、R-K法は丸め誤差の消去必要。Stiffnessが小の時は適用可能。又 Stiffnessが中程度**でも積分区間が短い場合は適用可能。解を挟むという点では信頼性は高い。
(I,I)2 公式9 A-stable	stiff用	台形法よりも R-K法の方がある意味で安定。積分区間が長い場合でも、ある程度の精度を保つためには、Hmax の設定は必要。Hmaxの設定がなく Stepsizeが大きくなった時、真の解を挟むという事は必ずしも保証できない。R-K法の K_j に対するNewton法は One-iterationで十分。

註 * Gillの方法あるいは Møllerの方法を用いれば可能である ([5]参照)。

** Stiffnessが中程度とは、Stiffness Ratio 10^3 程度をいう。又 10^6 程度のものは Very Stiff と呼ばれている ([6], P107 参照)。

最後に、balanced Pair なる解法について、多くの有益な助言をしてくださいました 清水辰次郎先生、東京理科大学の 林健児先生 ならびに名古屋大学の 三井斌友先生に感謝の意を表します。

参考文献

- [1] T.Oohashi : Balanced Pair of Numerical Solutions for Initial value Problems of Ordinary Differential Equations, Kitasato J. of Liberal Arts and Sciences, vol.21 pp41-67 (1987)
- [2] C.W.Gear : Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations, Prentice Hall (1971)
- [3] P.Kaps and P.Rentrop : Generalized Runge-Kutta Methods of Order Four with Stepsize Control for Stiff Ordinary differential Equations, Numer. Math.33 pp55-68 (1979)
- [4] 三井 斌友 : 数値解析入門, 朝倉 (1985)
- [5] 清水辰次郎 : 丸め誤差考, bit臨時増刊12, PP126-135 (1975)
- [6] A.I.Johnson and J.R.Barney : Numerical Solution of Large Systems of Stiff O.D.E.'s in a Modular Simulation Framework, Numerical Methods for Differential Systems, Academic Press, PP97-124 (1976)
- [7] 一松 信 : 数値解析, 朝倉 (1982)

例 1 の計算結果

表 1.1

公式	n	Xn	h _n	Un	Yn	Zn	Vn
(E,I)1, 公式4	50			1.4241-02	-1.4763-02	-2.6104-04	
(E,E)2, 公式2	50	.5	.01	-1.7192-04	1.7958-04	3.8280-06	2.7527-06
(E,I)2, 公式6	50			1.0669-04	-1.0807-04	-6.9061-07	
(E,I)1, 公式4	100		.01	3.4752-02	-3.6608-02	-9.2833-04	6.8132-06
(E,E)2, 公式2	148	1.0	.005	-6.0153-04	6.2555-04	1.2012-05	8.2549-06
(E,I)2, 公式6	125		.005	-8.1785-06	1.0327-05	1.0743-06	7.0164-06
(E,I)1, 公式4	200		.01	4.3180-03	-4.4084-03	-4.5219-05	8.6290-07
(E,E)2, 公式2	348	2.0	.005	-2.4913-05	2.6629-05	8.5797-07	5.7022-07
(E,I)2, 公式6	325		.005	2.6817-06	-2.5523-06	6.4697-08	4.9281-07
(E,I)1, 公式4	400	4.0	.01	4.8590-04	-4.8738-04	-7.4038-07	5.5677-08
(E,E)2, 公式2	656	4.0019	.016875	9.5363-07	-8.6720-07	4.3211-08	3.5999-08
(E,I)2, 公式6	515	4.0364	.037969	-1.3394-05	1.2977-05	-2.0866-07	3.0667-07

注 1) Un, Yn, Zn は Total 誤差 Un=y(x_n)-u_n, Yn=y(x_n)-y_n, Zn=y(x_n)-z_n を表す.
 2) Vn は 3次の Heun法の Total 誤差を表す.

表 1.2

公式	F.E.	h _n の平均	R.F.	計算時間(分:秒)
(E,I)1, 公式4	3189	.01	0/400 (0%)	6:49
(E,E)2, 公式2	3954	.0061004	3/656 (0.48%)	12:08
(E,I)2, 公式6	4156	.0078377	3/515 (0.58%)	11:05

注 1) F.E. は関数計算の回数を示す.
 2) R.F. は Un と Yn が同符号になったSTEP数の相対度数を示す.
 3) 計算時間は Heun法の計算 および 全ての計算値の誤差のグラフを描く時間を含む.

例2の計算結果

表 2.1 (y_1 に対する結果)

公式	n	Xn	h _n	Un	Yn	Zn	Vn
(E,I)1, 公式4	100	1.0	.01	-4.2663-03	3.6160-03	-3.2516-04	1.1126-06
(E,E)2, 公式2				-2.2058-04	2.2281-04	1.1151-06	
(E,I)2, 公式6				4.4451-04	-4.4543-04	-4.5841-07	
(E,I)1, 公式4	200	2.0	.01	1.7022-02	-1.5394-02	8.1384-04	-4.0820-06
(E,E)2, 公式2				4.2401-04	-4.3221-04	-4.0990-06	
(E,I)2, 公式6				-8.6037-04	8.6398-04	1.8073-06	
(E,I)1, 公式4	300	3.0	.01	-3.7944-02	3.4692-02	-1.6258-03	8.7856-06
(E,E)2, 公式2				-5.9755-04	6.1523-04	8.8385-06	
(E,I)2, 公式6				1.2157-03	-1.2235-03	-3.9292-06	
(E,I)1, 公式4	431	4.0	.005	6.3723-02	-5.8329-02	2.6972-03	-1.4008-05
(E,E)2, 公式2				7.2948-04	-7.5978-04	-1.5148-05	
(E,I)2, 公式6				-1.2174-03	1.2280-03	5.3113-06	
(E,I)1, 公式4	400	4.0	.01	7.2948-04	-7.5978-04	-1.5148-05	-1.5030-05
(E,E)2, 公式2				7.2948-04	-7.5978-04	-1.5148-05	
(E,I)2, 公式6				-1.2174-03	1.2280-03	5.3113-06	
(E,I)1, 公式4	502	4.0	.005	6.3723-02	-5.8329-02	2.6972-03	-1.4008-05
(E,E)2, 公式2				7.2948-04	-7.5978-04	-1.5148-05	
(E,I)2, 公式6				-1.2174-03	1.2280-03	5.3113-06	

表 2.2

公式	F.E.	INV.	h _n の平均	R.F.	計算時間
(E,I)1, 公式4	1728	864	.0092807	y ₁ : 2/431(.46%)	18:40
(E,E)2, 公式2	2402	0	.01	y ₁ : 8/400(2%)	11:43
(E,I)2, 公式6	3018	1006	.0079681	y ₁ : 1/502(.19%)	21:58
				y ₂ : 0/431(0%)	
				y ₂ : 7/400(1.7%)	
				y ₂ : 0/502(0%)	

注) INV.は逆行列の計算回数を示す.

例3の計算結果

表 3.1 (Y₁ に対する結果)

公式	n	Xn	h _n	Un	Yn	Zn
(I,I)1,公式8	40	.012855	.0034172	-1.4365-05	-1.8915-05	-1.6640-05
(I,I)2,公式9	50	.01	.0002	7.6524-07	-1.4972-06	-3.6596-07
Kaps-Ren.(a)	84	.0103	.0003375	3次: 3.4254-09	4次: 6.5426-10	6.5426-10
(b)	43	.0101	.00045	1.6287-08		5.4033-09
(I,I)1,公式8	92	1.00325	.0389239	8.5932-04	-8.4646-04	6.4268-06
(I,I)2,公式9	127	1.01588	.0259493	-1.4793-05	1.5700-05	4.5347-07
Kaps-Ren.(a)	139	1.02097	.0291929	3次: -3.6229-09	4次: -4.1395-10	-4.1395-10
(b)	75	1.00304	.0389239	-1.2602-08		-2.2680-09
(I,I)1,公式8	109	2.07903	.1	1.2936-03	-1.2300-03	3.1817-05
(I,I)2,公式9	158	2.00195	.0389239	-2.7975-05	3.1133-05	1.5791-06
Kaps-Ren.(a)	173	2.01353	.0291929	3次: -1.6094-09	4次: -4.2009-10	-4.2009-10
(b)	93	2.05399	.0583859	-2.3441-08		-5.1207-09
(I,I)1,公式8	129	4.07904	.1	5.2066-04	-4.8798-04	1.6342-05
(I,I)2,公式9	183	4.05290	.1	-3.7275-05	4.9837-05	6.2811-06
Kaps-Ren.(a)	219	4.04244	.0656841	3次: -4.6071-09	4次: -5.8689-10	-5.8689-10
(b)	119	4.03912	.0875788	-1.7811-08		-5.0371-09

表 3.2

公式	F.E.	INV.	h _n の平均	R.F.	計算時間
(I,I)1,公式8	710	580	.0316205	Y ₁ : 1/129(.77%)	9:02
(I,I)2,公式9	980	796	.0221470	Y ₁ : 3/183(1.6%)	12:16
Kaps-Ren.(a)	909	235	.0184586	Y ₂ : 3/183(1.6%)	7:53
(b)	507	134	.0339421		4:13

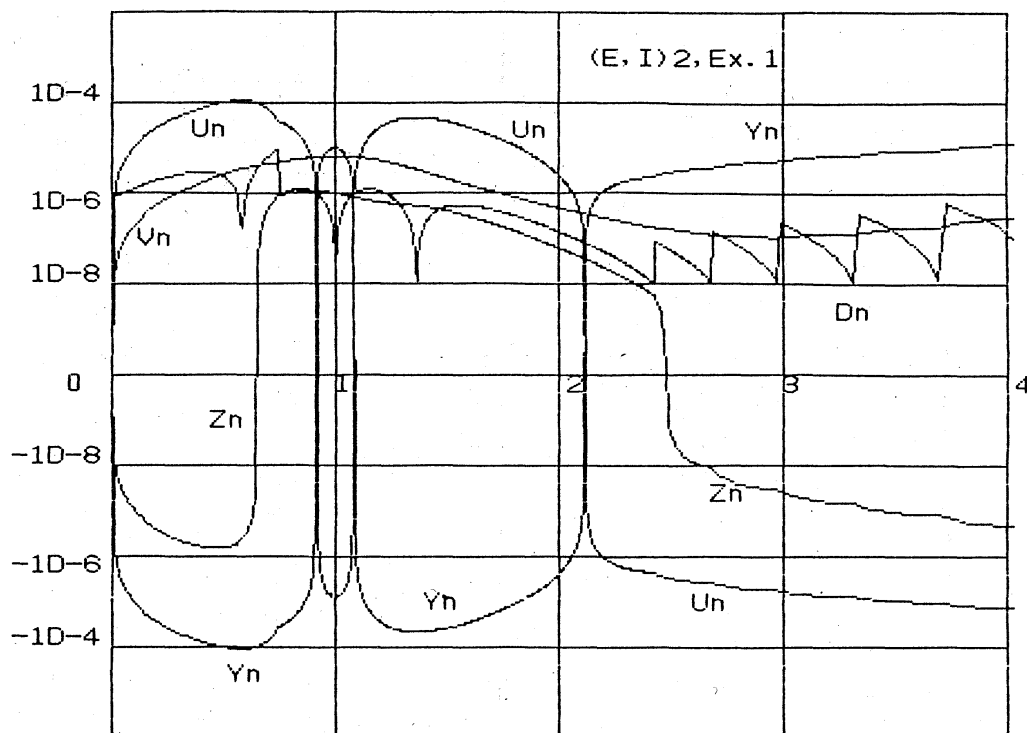


図5. 例1に対する公式6の誤差

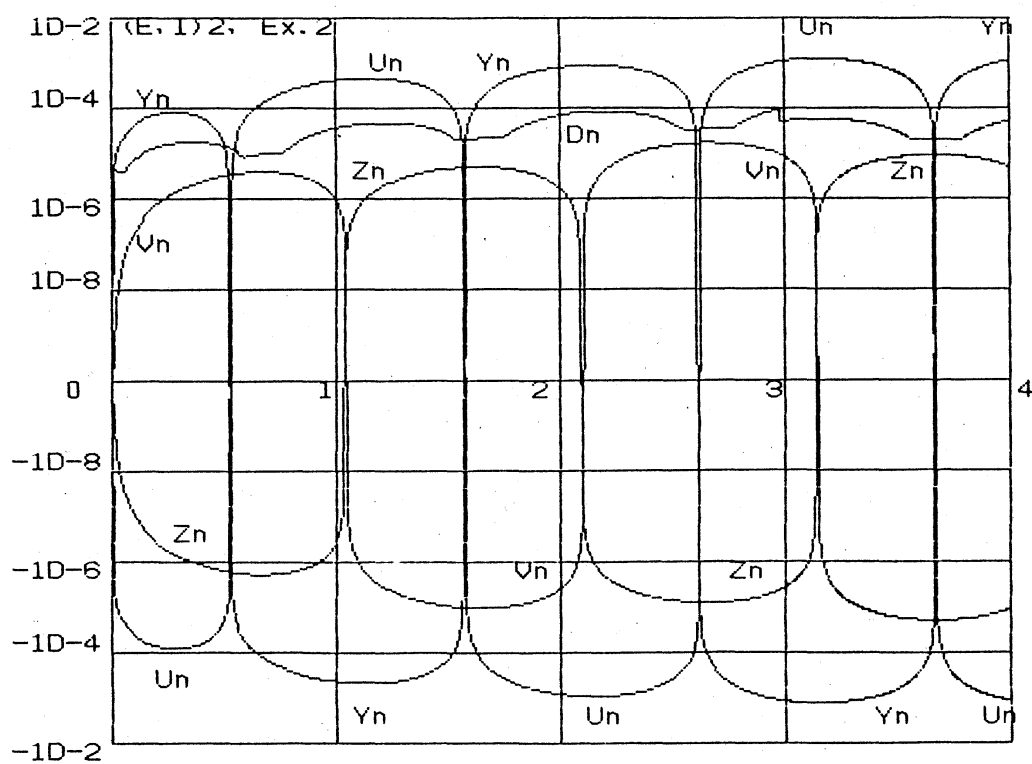


図6. 例2に対する公式6の誤差

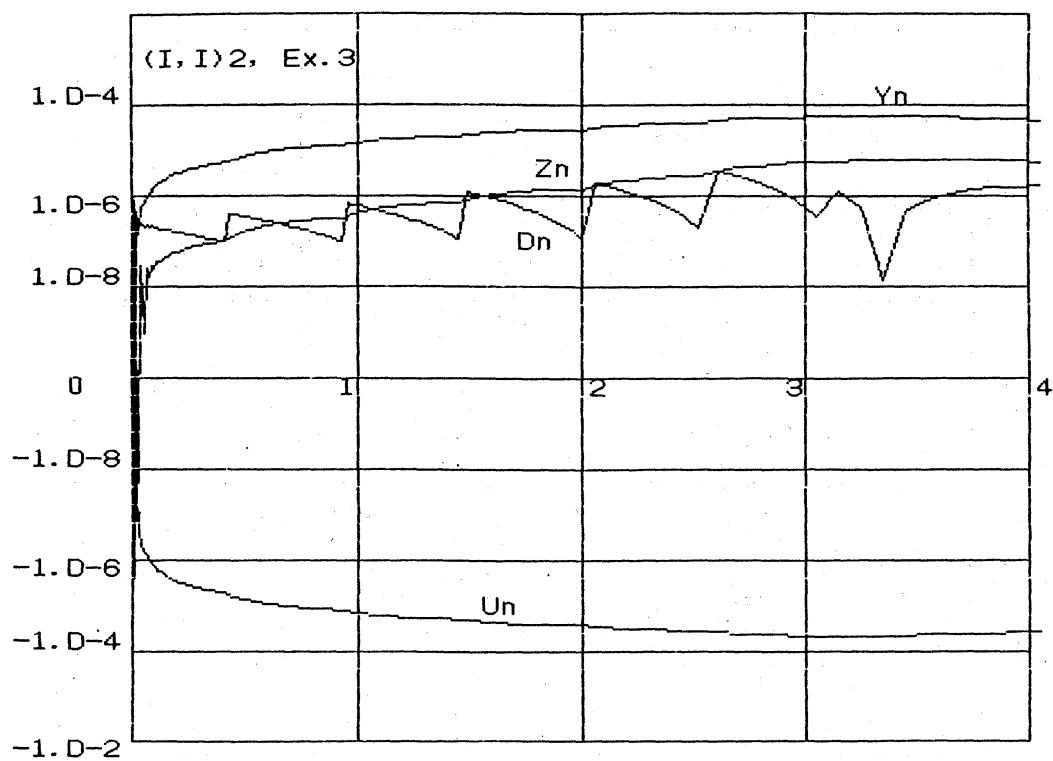


図7. 例3に対する公式9の誤差

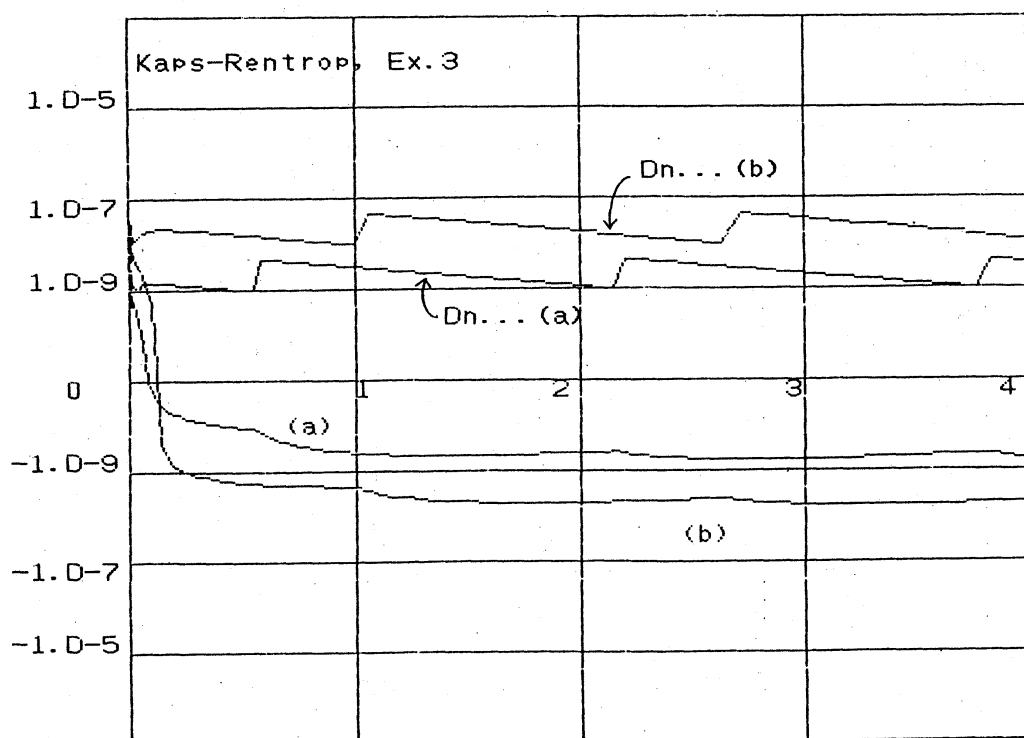


図8. 例3に対する Kaps-Rentrop 公式の誤差

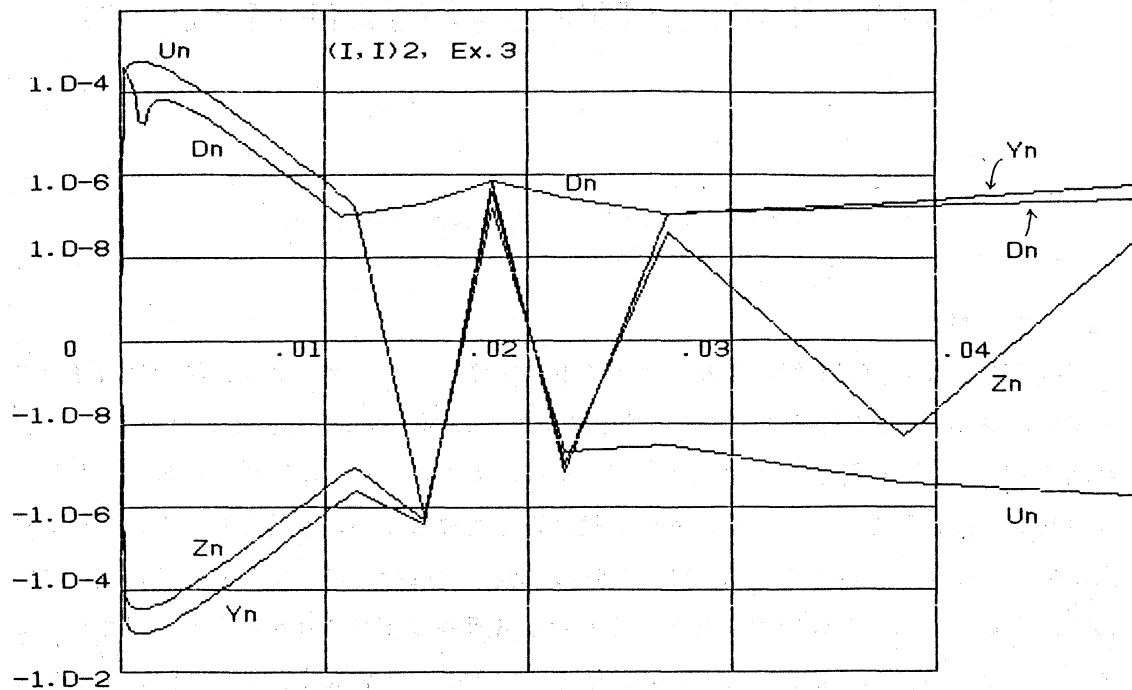


図9. 例3: $[0, 0.04]$ における公式9の誤差

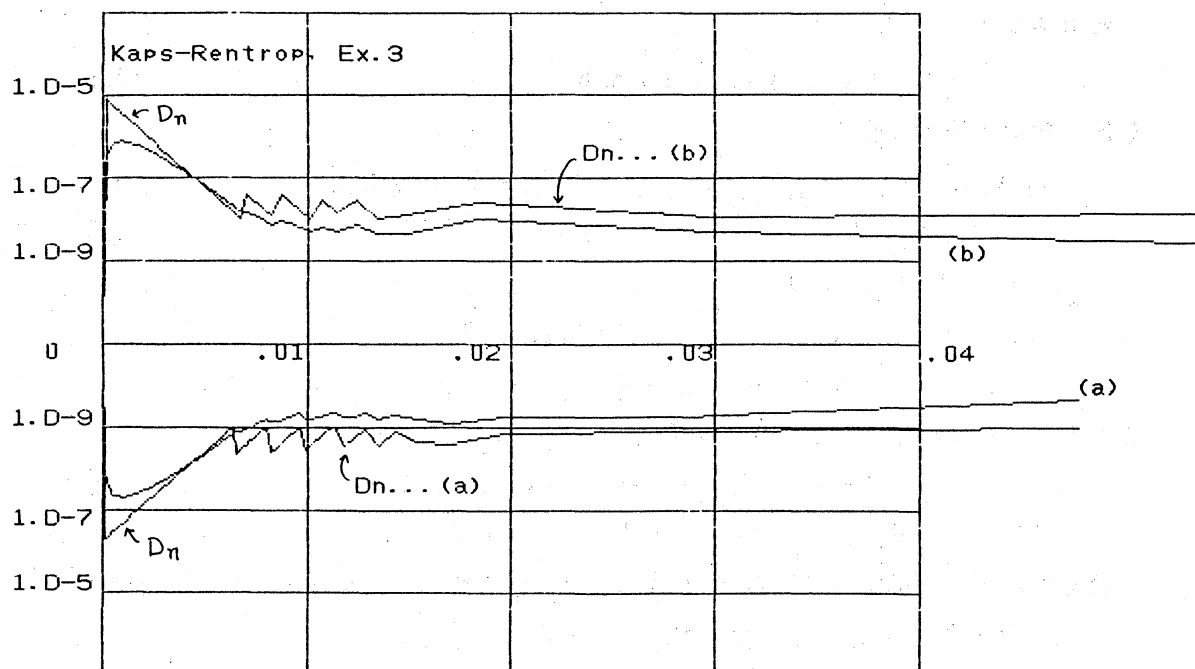


図10. 例3: $[0, 0.04]$ における Kaps-Rentrop 公式の誤差