

陰的 Runge - Kutta 法 の 特 性 と 最 適 化 (3 段 数 5 次 法 の 場 合)

山梨大工 田中 正次 (Masatsugu Tanaka)

山梨大工 穂苅 康彦 (Yasuhiko Hokari)

山梨大工 山下 茂 (Shigeru Yamashita)

§ 1. ま え が き

我々は数年前、安定性を支配するパラメータ β_0 を変数とする打ち切り精度最良の 2 段数 3 次, 3 段数 5 次, 及び 4 段数 7 次陰的 Runge-Kutta 法を導いた^{3), 4), 5)}。この公式は、Butcher の 2 段数 4 次, 3 段数 6 次, 及び 4 段数 8 次法などを特別な場合として含んでいる。次に一例として我々の導出した 3 段数 5 次法を掲げよう。

【 3 段 数 5 次 法 】

$\frac{5+\sqrt{15}}{10}$	$\frac{1+8\beta_0}{36}$	$\frac{5+6\sqrt{15}+40\beta_0}{180}$	$\frac{20+3\sqrt{15}-20\beta_0}{45}$	
$\frac{5-\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5-6\sqrt{15}+40\beta_0}{180}$	$\frac{1+8\beta_0}{36}$	$\frac{20-3\sqrt{15}-20\beta_0}{45}$	
$\frac{1}{2}$	$\frac{20-3\sqrt{15}-20\beta_0}{72}$	$\frac{20+3\sqrt{15}-20\beta_0}{72}$	$\frac{-1+10\beta_0}{18}$	
	$\frac{5}{18}$	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$	(1.1)

ここで $\beta_0 = a_{11} + a_{22} + a_{33}$ で、上式は与えられた β_0 に対して打ち切り精度最良の公式である。(1.1)で $\beta_0 = \frac{1}{2}$ とおけばButcherの3段数6次法が得られる。

この研究の目的は、自由パラメータ β_0 と打ち切り精度や安定性の関係を調査し、それに基づいて数値解の精度が最良になるように β_0 を決定することである。

注) ★ 3 段数陰的Runge-Kutta法の一般式

$$\begin{cases} k_i = h f(x_n + c_i h, y_n + \sum_{j=1}^3 a_{ij} k_j) & (i=1,2,3) \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^3 b_i k_i & (n=0,1,2,\dots) \end{cases} \quad (1.2)$$

★ 表示法

c_1	a_{11}	a_{12}	a_{13}
c_2	a_{21}	a_{22}	a_{23}
c_3	a_{31}	a_{32}	a_{33}
	b_1	b_2	b_3

(1.3)

§ 2. 公式(1.1)の打ち切り誤差とその大小判定

公式(1.2)が5次法とすれば、その局所打ち切り誤差は、

$$T_n = h^6 \sum_{j=1}^{20} a_{5j} g_j(x_n, y_n) + o(h^7) \quad (2.1)$$

とかくことができる。ここで a_{5j} は公式の係数のみの関数で、 g_j は f に依存して定まる関数ベクトルである。

【定義1】 打ち切り精度判定基準

$$A_{52} = \sum_{j=1}^{20} |a_{5j}| \quad (2.2)$$

$$A_{53} = \sum_{j=1}^{20} a_{5j}^2 \quad (2.3)$$

(2.2), (2.3)によって定義される数量 A_{52} , A_{53} を、公式(1.2)の打ち切り精度判定基準という。

(1.1)の場合 a_{5j} は次に示す t_1 , t_2 の定数倍になっている。

$$t_1 = \frac{2\beta_0 - 1}{360} \quad (2.4)$$

$$t_2 = \frac{(2\beta_0 - 1)(10c_3^2 - 10c_3 + 1)}{600(6c_3^2 - 6c_3 + 1)} \quad (2.5)$$

したがって(2.2), (2.3)式は、

$$A_{52} = \alpha |t_1| + \beta |t_2| \quad (2.6)$$

$$A_{53} = \gamma t_1^2 + \delta t_2^2 \quad (\alpha, \beta, \gamma, \delta \text{ は正の定数}) \quad (2.7)$$

と表すことができる。 β_0 が与えられたとき A_{52} , A_{53} を最小にする c_3 の値は、

$t_2=0$ の解である。これより、

$$c_3 = \frac{1}{2} \text{ または } c_3 = \frac{5 \pm \sqrt{15}}{10} \quad (2.8)$$

が得られ、次数条件式の解から公式(1.1)が導かれる。また公式(1.1)に対して

$$A_{53} = \frac{(2\beta_0 - 1)^2}{360^2} \quad (2.9)$$

となる。

§ 3. 公式(1.1)の安定性とその評価

テスト方程式

$$y' = \lambda y \quad (\lambda \text{ は複素定数}) \quad (3.1)$$

に3段数5次法(1.1)を適用し整理すると、

$$y_{n+1} = R(h\lambda, \beta_0)y_n + r_n \quad (3.2)$$

が得られる。

ここで、

$$R(h\lambda, \beta_0) = \frac{1 + (1 - \beta_0)h\lambda - \left(\frac{\beta_0}{2} - \frac{7}{20}\right)h^2\lambda^2 - \left(\frac{\beta_0}{12} - \frac{1}{20}\right)h^3\lambda^3}{1 - \beta_0 h\lambda - \left(\frac{\beta_0}{2} + \frac{3}{20}\right)h^2\lambda^2 - \left(\frac{\beta_0}{12} - \frac{1}{30}\right)h^3\lambda^3} \quad (3.3)$$

であり、 r_n は(3.2)の第一項の計算の際に生ずる丸め誤差である。

【定義2】 (3.3)で与えられる $R(h\lambda, \beta_0)$ を公式(1.1)の安定関数という。

いま(3.2)において数値解 y_n, y_{n+1} をそれぞれ理論解 $y(x_n), y(x_{n+1})$ で置き換えると、

$$y(x_{n+1}) = R(h\lambda, \beta_0)y(x_n) - T_n \quad (3.4)$$

が得られる。ここで T_n は(1.1)の局所打ち切り誤差である。また(3.2)から(3.4)

を辺々引き算し、

$$e_n = y_n - y(x_n) \quad (3.5)$$

$$E_n = r_n + T_n \quad (3.6)$$

と置くと、

$$e_{n+1} = R(h\lambda, \beta_0)e_n + E_n \quad (3.7)$$

が得られる。

【定義3】 $|R(h\lambda, \beta_0)| < 1$ ならば、その $h\lambda$ に対して公式(1.1)は絶対安定であるといわれる。

【定義4】 次式によって定義される複素平面上の領域 S を、公式(1.1)の絶対安定領域という。

$$S = \{h\lambda \mid |R(h\lambda, \beta_0)| < 1, h\lambda \text{は複素数}\} \quad (3.8)$$

ここでは、安定性を次のような方法で評価する。

(イ)絶対安定領域が有限の場合

絶対安定領域 S の面積 $A(S)$ の大小や包含関係によって評価する。また、安定関数の絶対値の大きさを用いることもある。

(ロ)絶対安定領域が有限でない場合

包含関係、不安定領域 S^c の面積 $A(S^c)$ 、また安定関数の絶対値の大きさなどによって評価する。

点 $h\lambda$ において

$$|R(h\lambda, \beta_1)| < |R(h\lambda, \beta_2)| \quad (3.9)$$

ならば、安定性を支配するパラメータが β_1 をもつ公式の方が安定性がよいと考える。

その他に優劣がはっきりしている安定性の新概念を用いることも考えられるが、ここでは古典的な安定性について比較を試みた。

§ 4. 既知公式と我々の公式の比較

Butcherによる3段数6次法、我々による公式(1.1)から得られる2公式及びL安定な公式の四者の比較を試みる (Fig.1~Fig.6参照)。

(イ) Butcherの公式 ($\beta_0 = \frac{1}{2}$ の場合)

打ち切り精度は最良で6次である。また、A安定であるが臨界的である。したがって、係数の誤差によってはA安定でなくなる可能性がある。

また、 $\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} |R(h\lambda, 0.5)| \approx 1.0$ になり絶対値の大きい $h\lambda$ に対して誤差伝播特性が悪い。

それ故、強Stiff問題などに対して十分有効な安定性を持つかどうか疑問である。

(ロ) L安定な公式 ($\beta_0 = 0.6$)

$$\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} |R(h\lambda, 0.6)| \approx 0.0$$

誤差伝播特性は著しくよく、打ち切り精度もかなりよい。

(ハ) $\beta_0 = 0.7$ に対応する我々の公式

最大絶対安定領域をもつ。

$$\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} |R(h\lambda, 0.7)| \approx \frac{1}{3}$$

となり、誤差伝播特性はButcherより著しくよい。

また、打ち切り精度もかなりよいが一層の改良が必要であろう。

(ニ) $\beta_0 = 0.55$ に対応する我々の公式

ここで取り上げる我々によって導かれた公式を(4.1)に示す。

$|R(h\lambda, 0.55)|$ で見る安定性は著しくよい。

打ち切り精度も(ロ), (ハ)に示す公式に優る。

また、絶対安定領域も最大に近い。

かなり有効な公式ではなかろうか。

$\frac{5+\sqrt{15}}{10}$	$\frac{3}{20}$	$\frac{9+2\sqrt{15}}{60}$	$\frac{3+\sqrt{15}}{15}$
$\frac{5-\sqrt{15}}{10}$	$\frac{9-2\sqrt{15}}{60}$	$\frac{3}{20}$	$\frac{3-\sqrt{15}}{15}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{3-\sqrt{15}}{24}$	$\frac{3+\sqrt{15}}{24}$	$\frac{1}{4}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$

(4.1)

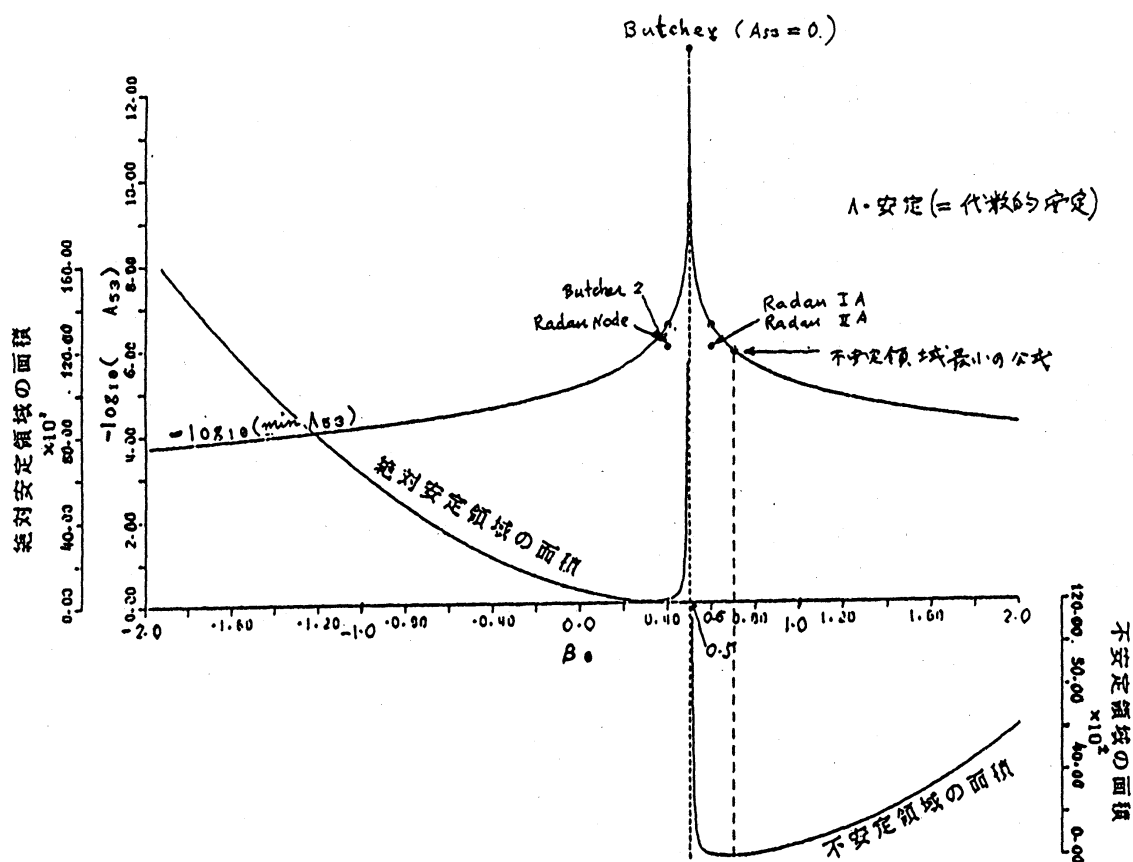


Fig. 1 β_0 と安定性と打ち切り精度の関係

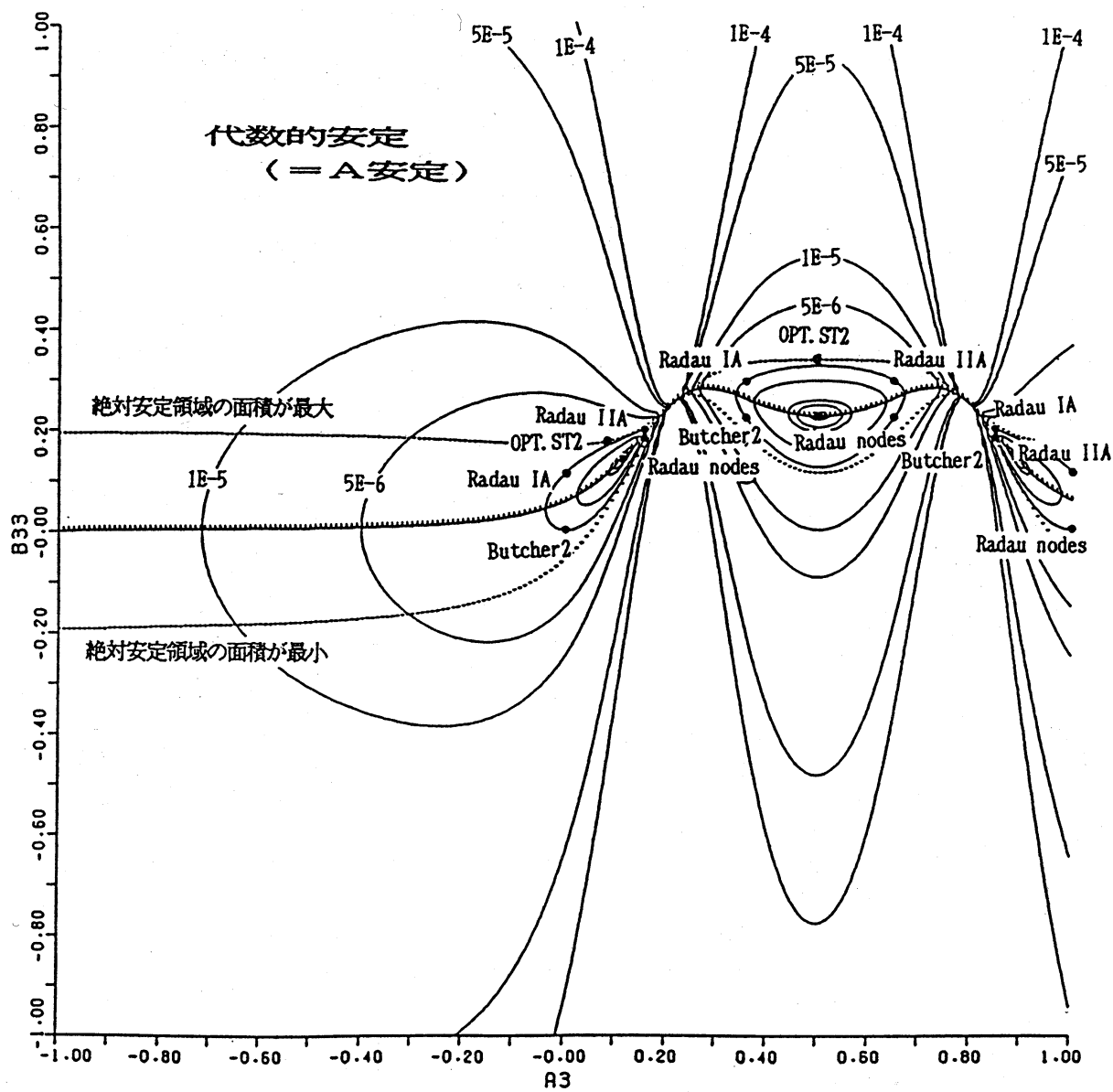


Fig 2 3段数5次陰的Runge-Kutta法の
安定性と打ち切り精度の関係

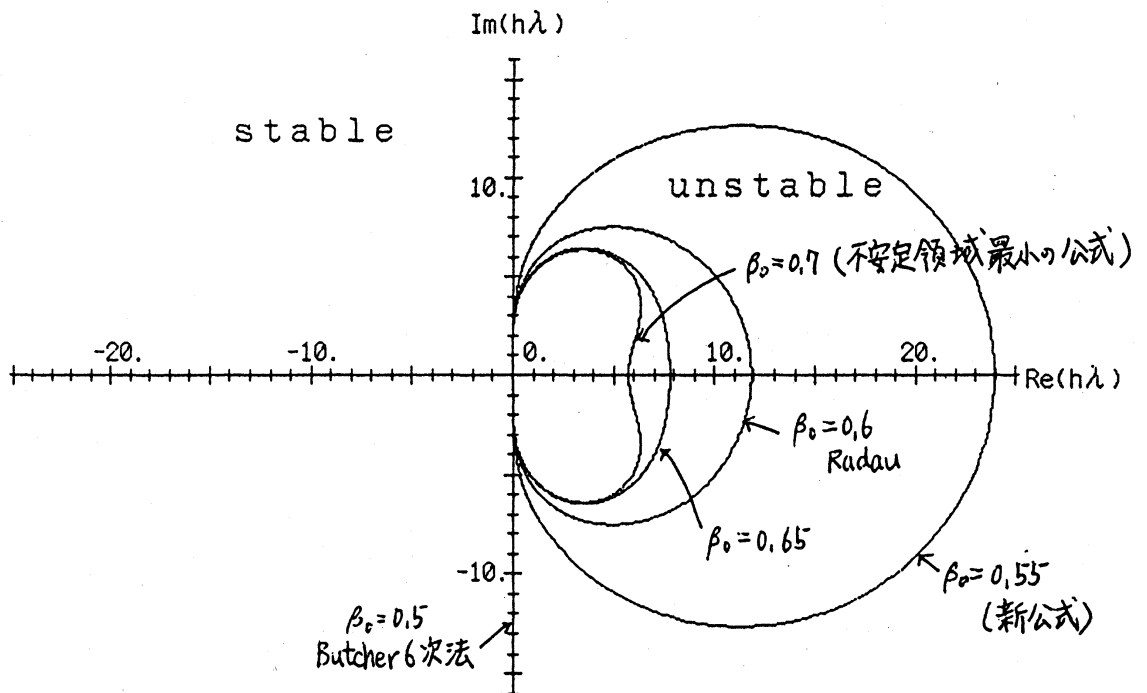


Fig.3 3 段数陰的 Runge-Kutta法の絶対安定領域

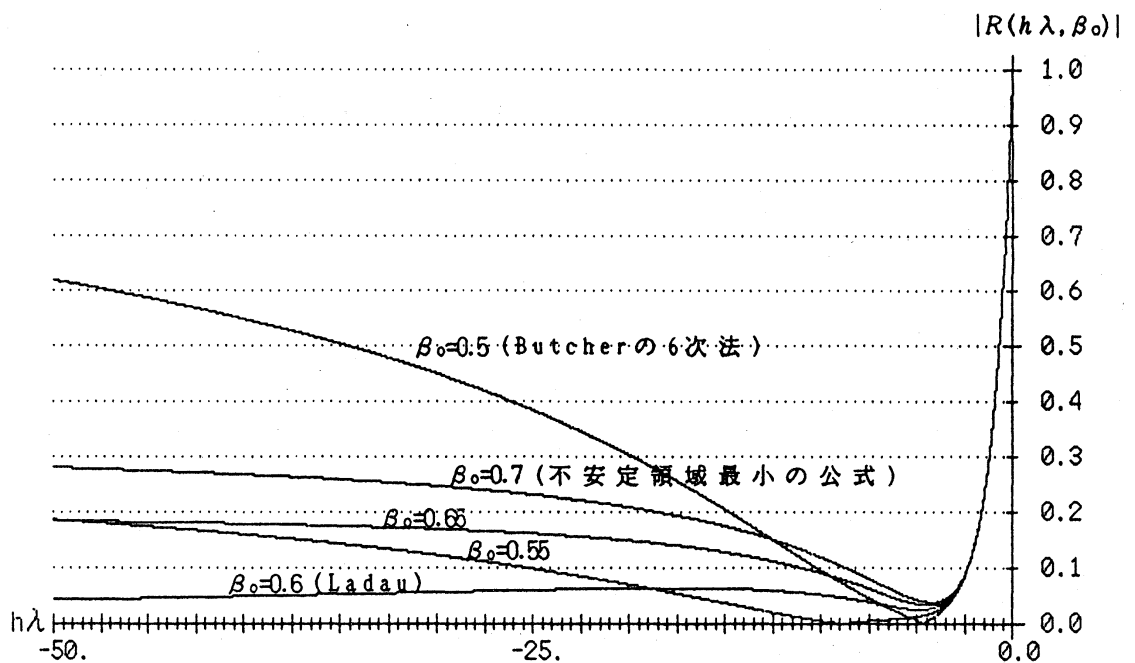


Fig.4 $y=|R(h\lambda, \beta_0)|$ のグラフ ($h\lambda: -50.0 \sim 0.0$)

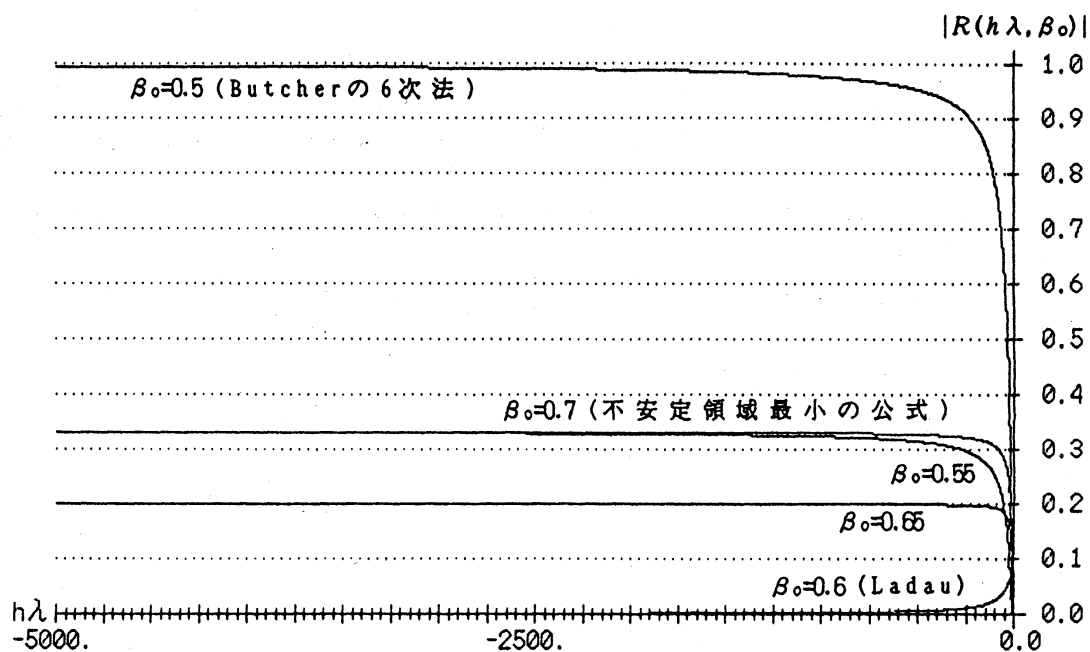


Fig.5 $y=|R(h\lambda, \beta_0)|$ のグラフ ($h\lambda: -5000.0 \sim 0.0$)

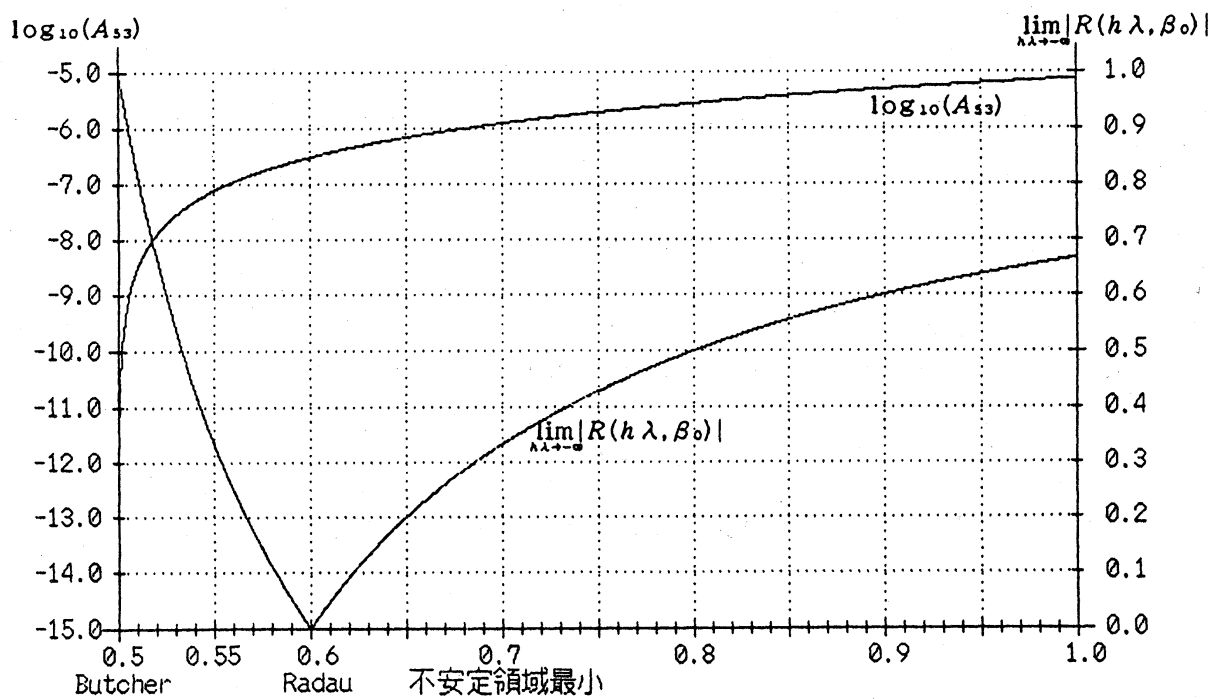


Fig.6 $\lim_{h\lambda \rightarrow \infty} |R(h\lambda, \beta_0)|$ と $\log_{10}(A_{53})$ のグラフ

§ 5. あとがき

我々の提案する公式は、 $h\lambda$ の絶対値が著しく大きいとき、誤差の拡大率に相当する安定関数の絶対値が著しく小さいので、Stiff問題において急速に減衰す成分が消滅した後の大きなステップによる長区間の積分、すなわちStiff問題の求解の継続策として有効ではなかろうか。

《参考文献》

1. Butcher, J.C., The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, Jhon Wiley & Sons (1987)
2. Hall G. and Watt J.M., Modern numerical methods for ordinary differential eqations, Clarendon Press. Oxford (1976)
3. 山下 忠志, 陰的Runge-Kutta法の特性について, 昭和60年度山梨大学
計算機科学専攻修士論文
4. 三村 和正, 低段数陰的Runge-Kutta法の特性とその誤差評価に関する
研究, 昭和62年度山梨大学計算機科学専攻修士論文
5. 杉田 佳代, 田中 久恵, 4段数陰的Runge-Kutta法について,
昭和63年度山梨大学計算機科学科卒業論文