

RUNGE-KUTTA法に関する二つの話題について

山梨大学 工学部 計算機科学科

田 中 正 次 (Masatugu Tanaka)

山 下 忠 志 (Tadashi Yamashita)

高 山 尚 文 (Naofumi Takayama)

山 下 茂 (Shigeru Yamashita)

1. はじめに

常微分方程式の初期値問題の数値解法として知られている RUNGE-KUTTA法には、そのアルゴリズムの簡単さの点で優れている陽的法(EXPLICIT R-K METHOD)と安定性と打ち切り精度に長所をもつ陰的法(IMPLICIT R-K METHOD)がある。

陽的法は線形、非線形を問わず一般的な微分方程式に対して有効であり、高次の陽的RUNGE-KUTTA法を利用することにより能率的な数値計算が可能である。

陰的法は数値計算の過程において NEWTON法などの反復法に頼らねばならないが、その優れた安定性により、特にSTIFFな微分方程式に対して有効である。

以下において我々は、RUNGE-KUTTA法に関する2つの話題 I, IIを提供しよう。

I BUTCHERによる5次陽的RUNGE-KUTTA法の特長について

2. BUTCHERによる5次陽的RUNGE-KUTTA法

J. C. BUTCHERは6段数5次陽的 RUNGE-KUTTA法において4つの具体的な公式を提案しているが、これらの公式のうち3つは、いずれも彼によって得られた2つの自由パラメータ μ , λ を含んだ解系に属するものである。[1], [2]

ここでは、BUTCHERによって提案された上記の解系が、打ち切り誤差、安定性、丸め誤差等についてどのような特性を持つか、またそのバランスのとれたよい特性を持つ3つの公式は最適なものであるか、何等の意味で改良可能か否か、等について研究した。

3. BUTCHERによる6段5次法の解系.

BUTCHERによる5次陽的RUNGE-KUTTA法の解系は、次のように2つの自由パラメータ μ , λ を含む形で与えられる。

$$\begin{aligned}
 k_1 &= h_n \cdot f(X_n, Y_n) \\
 k_2 &= h_n \cdot f(X_n + \mu h, Y_n + \mu k_1) \\
 k_3 &= h_n \cdot f(X_n + h/4, Y_n + (1/4 - 1/(32\mu))k_1 + 1/(32\mu)k_2) \\
 k_4 &= h_n \cdot f(X_n + h/2, Y_n + (4\lambda\mu - \lambda)k_1 + \lambda k_2 + (1/2 - 4\lambda\mu)k_3) \\
 k_5 &= h_n \cdot f(X_n + 3h/4, Y_n + (-3/16 + 3/(32\mu) + 3\lambda/4 - 3\lambda\mu)k_1 \\
 &\quad + (-3/(32\mu) - 3\lambda/4)k_2 + (3/8 + 3\lambda\mu)k_3 + (9/16)k_4) \\
 k_6 &= h_n \cdot f(X_n + h, Y_n + ((5 - 12\lambda - 2/\mu + 48\lambda\mu)/7)k_1 + ((2/\mu + 12\lambda)/7)k_2 \\
 &\quad + ((6 - 48\lambda\mu)/7)k_3 + (-12/7)k_4 + (8/7)k_5) \\
 Y_{n+1} &= Y_n + (7k_1 + 32k_3 + 12k_4 + 32k_5 + 7k_6)/90
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

BUTCHERによる3公式を, BUTCHER(1), BUTCHER(2), 及び BUTCHER(3)として引用する。

注) 文献[1]に示されているBUTCHERの公式は容易に判別し難いミスを含んでいるので注意を要する。正しくは(3.1)のようになる。

BUTCHER(1) { $\mu=1/8, \lambda=-1$ の場合 } (3.2)

1/8	1/8					
1/4	0	1/4				
1/2	1/2	-1	1			
3/4	1/16	0	0	9/16		
1	-5/7	4/7	12/7	-12/7	8/7	
	1/90	0	32/90	12/90	32/90	7/90

BUTCHER(2) { $\mu=1/4$, $\lambda=-1/2$ の場合 } (3.3)

1/4	1/4					
1/4	1/8	1/8				
1/2	0	-1/2	1			
3/4	3/16	0	0	9/16		
1	-3/7	2/7	12/7	-12/7	8/7	
	1/90	0	32/90	12/90	32/90	7/90

BUTCHER(3) { $\mu=-1/2$, $\lambda=1/4$ の場合 } (3.4)

-1/2	-1/2					
1/4	5/16	1/16				
1/2	-3/4	1/4	1			
3/4	3/16	0	0	9/16		
1	0	-1/7	12/7	-12/7	8/7	
	1/90	0	32/90	12/90	32/90	7/90

表 1 BUTCHERの3つの具体的な公式

4. BUTCHERによる解系の打ち切り誤差とその大小判定

BUTCHERによる公式(3.1)によって得られる数値解 Y_{n+1} の局所打ち切り誤差 T_{n+1} は, 下のようになる。(連立微分方程式にたいする局所打ち切り誤差)

$$T_{n+1} = r_n \cdot h_n^6 + O(h_n^7) \quad (4.1)$$

ここで

$$\begin{aligned} r_n = & a_{51}f^5(f, f, f, f, f) + a_{52}f^4(f'(f), f, f, f) + a_{53}f^3(f''(f, f), f, f) \\ & + a_{54}f''(f^3(f, f, f), f) + a_{55}f'(f^4(f, f, f, f) + a_{56}f'(f'(f^3(f, f, f)))) \\ & + a_{57}f'(f'(f'(f''(f, f)))) + a_{58}f'(f'(f'(f'(f(f)))))) \\ & + a_{59}f^3(f'(f), f'(f), f) + a_{510}f''(f''(f, f), f'(f)) \\ & + a_{511}f''(f''(f'(f), f), f) + a_{512}f^3(f'(f'(f)), f, f) \\ & + a_{513}f'(f^3(f'(f), f, f)) + a_{514}f''(f'(f'(f'(f(f))))), f) \\ & + a_{515}f''(f'(f'(f'(f(f))))), f) + a_{516}f'(f'(f''(f'(f), f))) \\ & + a_{517}f'(f''(f'(f), f'(f))) + a_{518}f''(f'(f'(f)), f'(f)) \\ & + a_{519}f''(f'(f''(f, f)), f) + a_{520}f'(f''(f''(f, f), f)) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} a_{51} &= (-72\lambda\mu - 7)/11520 \\ a_{52} &= (288\lambda\mu^2 - 72\lambda\mu + 12\mu - 7)/11520 \\ a_{53} &= -1/1920 \\ a_{54} &= -1/5760 \\ a_{55} &= (24\lambda\mu + 5)/11520 \\ a_{56} &= (-96\lambda\mu^2 + 24\lambda\mu - 24\mu + 5)/11520 \\ a_{57} &= a_{58} = a_{59} = 0 \\ a_{510} &= (72\lambda\mu + 7)/11520 \\ a_{511} &= (-288\lambda\mu^2 + 72\lambda\mu - 12\mu + 7)/11520 \\ a_{512} &= 1/1920 \\ a_{513} &= 1/5760 \\ a_{514} &= (-24\lambda\mu - 5)/23040 \\ a_{515} &= (96\lambda\mu^2 - 24\lambda\mu + 24\mu - 5)/23040 \\ a_{516} &= (-24\lambda\mu - 5)/23040 \\ a_{517} &= (96\lambda\mu^2 - 24\lambda\mu + 24\mu - 5)/23040 \\ a_{518} &= a_{519} = a_{520} = 0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

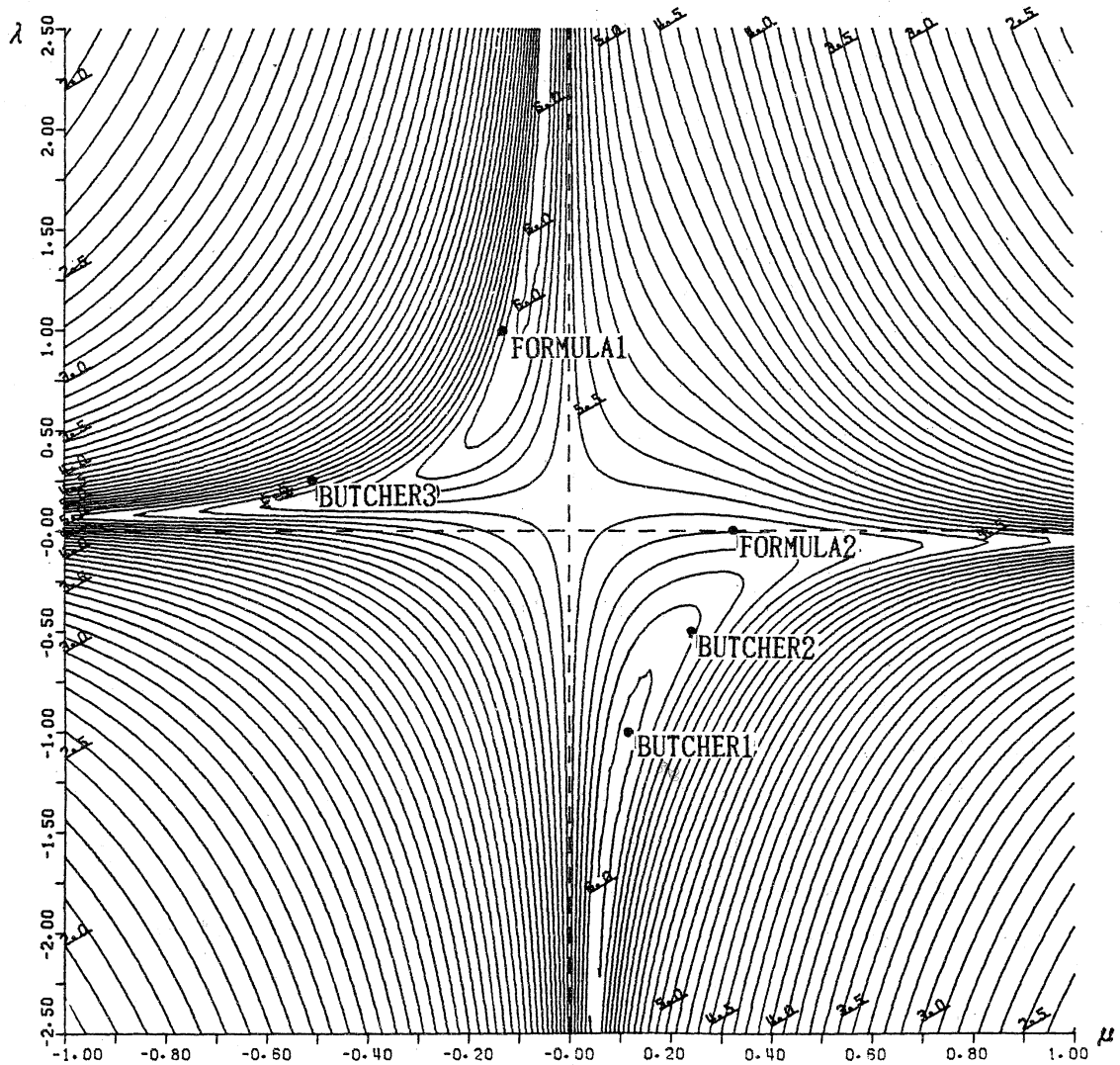
公式(3.1)の打ち切り誤差の大小を判定するために、打ち切り精度判定基準を次のように定義する。

$$A_{52} = \sum_{i=1}^{20} |a_{5i}|$$

$$A_{53} = \sum_{i=1}^{20} (a_{5i})^2 \quad (4.4)$$

Fig.1は、自由パラメータ μ 、 λ を両軸に取って、その広い領域について $-\log_{10}(A_{53})$ の等高線図を描いたものである。また、この図中に付記されている印は、既知公式や我々の導いた公式の μ 、 λ を座標とする点を示す。

Fig.1によって我々は、BUTCHERによる諸公式の打ち切り誤差特性を容易に知る事ができる。



5. BUTCHERによる解系の安定性とその優劣の判定

普通使われる安定性のテスト方程式

$$Y' = \lambda Y \quad (\lambda \text{ は複素定数}) \quad (5.1)$$

に, BUTCHERの一般公式(3.1)を適用し, 次数条件式を用いて整理すると,

$$Y_{n+1} = P_{6,5}(h\lambda, \tau_6(\mu, \lambda)) \cdot Y_n \quad (5.2)$$

が得られる。ここで,

$$P_{6,5}(h\lambda, \tau_6(\mu, \lambda)) = 1 + h\lambda + (h\lambda)^2/2! + (h\lambda)^3/3! + (h\lambda)^4/4! + (h\lambda)^5/5! + \tau_6(\mu, \lambda) \cdot (h\lambda)^6/6! \quad (5.3)$$

$$\tau_6(\mu, \lambda) = ((1 - 8\lambda\mu)/1280)6! \quad (5.4)$$

である。

公式(3.1)の絶対安定領域 $S(\tau_6(\mu, \lambda))$ は,

$$S(\tau_6(\mu, \lambda)) = \{h\lambda \mid |P_{6,5}(h\lambda, \tau_6(\mu, \lambda))| \leq 1, h\lambda : \text{複素数}\} \quad (5.5)$$

によって定義される。原点の左側にあり原点を含む(安定性にとって有効な) $S(\tau_6(\mu, \lambda))$ の閉部分領域 $Se(\tau_6(\mu, \lambda))$ を, 公式(3.1)の有効絶対安定領域とする。我々は安定性の優劣を評価するために, 有効絶対安定領域の面積 $A(Se(\tau_6(\mu, \lambda)))$ を用いる。

Fig. 2は, μ, λ の十分広い変域について有効絶対安定領域の面積 $A(Se(\tau_6(\mu, \lambda)))$ の等高線図を描いたものである。図中の BUTCHER(1)~(3)と傍記された点は, それぞれ BUTCHER(1)~(3)の μ, λ を座標とする点である。

Fig. 3は, τ_6 を横軸にとり, 公式(3.1)の有効絶対安定領域の面積 $A(Se(\tau_6(\mu, \lambda)))$ を縦軸にとって描いたグラフである。

グラフ上の BUTCHERと傍記された点は, BUTCHERの3公式の $A(Se(\tau_6(\mu, \lambda)))$ を示す点である。

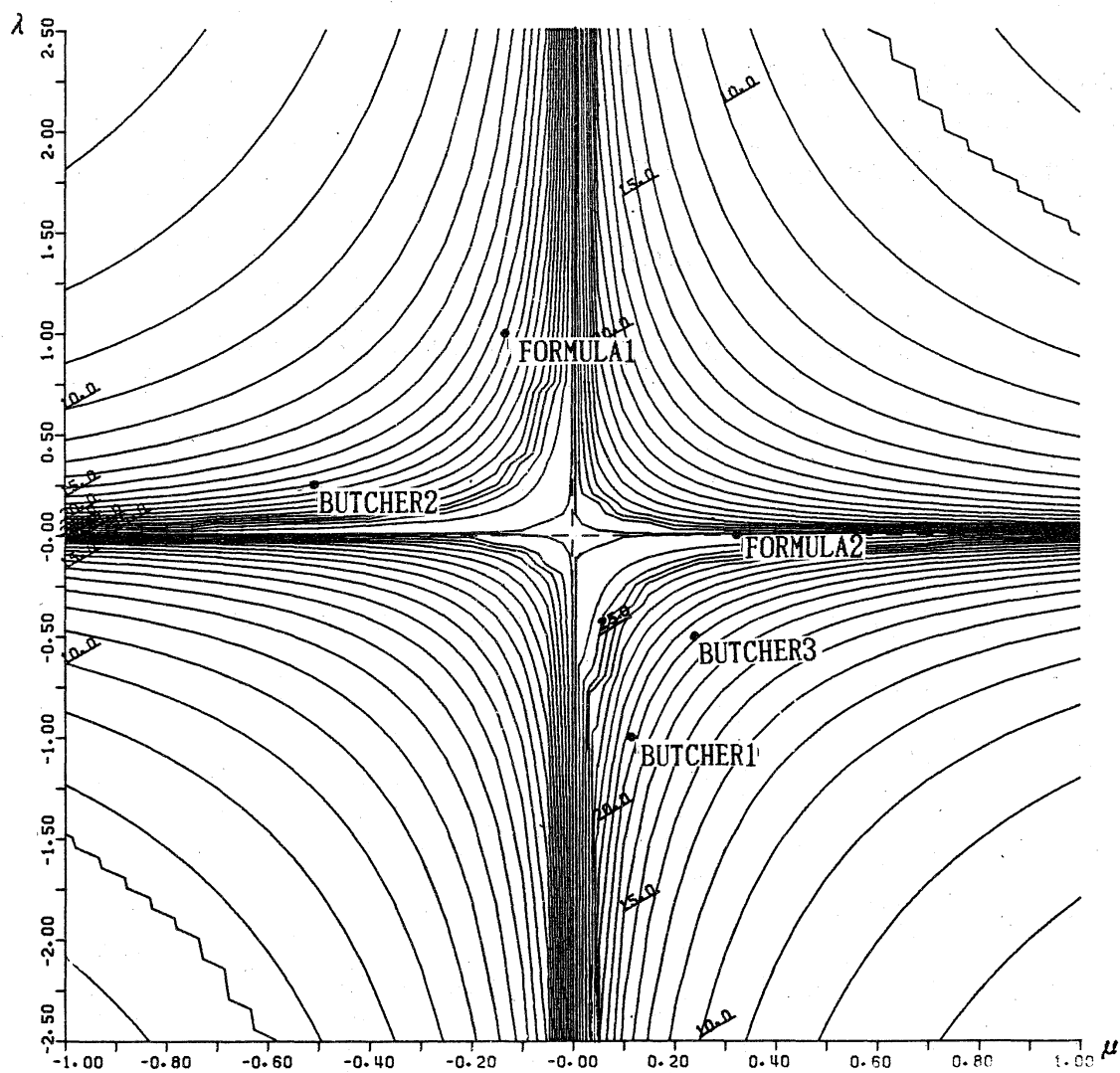


Fig. 2 有効絶対安定領域の面積 $A(Se)$ の等高線図

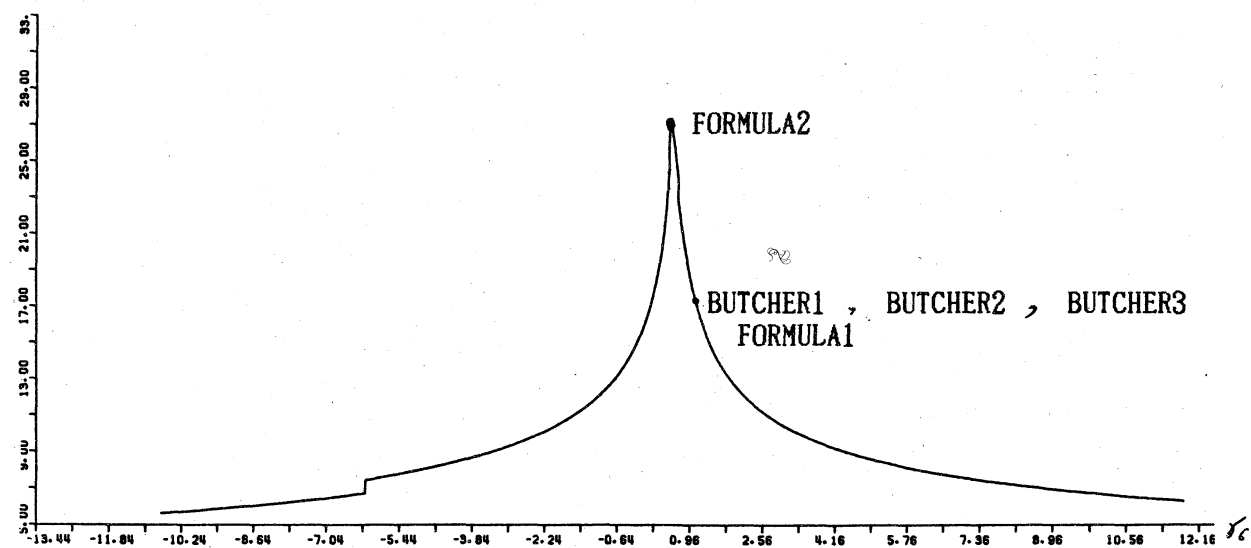


Fig. 3 γ_6 と有効絶対安定領域の面積 $A(Se(\gamma_6))$ の関係

6. 丸め誤差に関する性質の判定

丸め誤差に関する性質を判定するために次の数量 R

$$R = \sum_{i=1}^6 |c_i| + \sum_{i=2}^6 \sum_{j=1}^{i-1} |b_{ij}| \quad (6.1)$$

を用いる。この R を丸め誤差特性判定基準と呼ぶことにする。

Fig. 4 は、 μ , λ の十分広い変域について丸め誤差判定基準 R の等高線図を描いたものである。

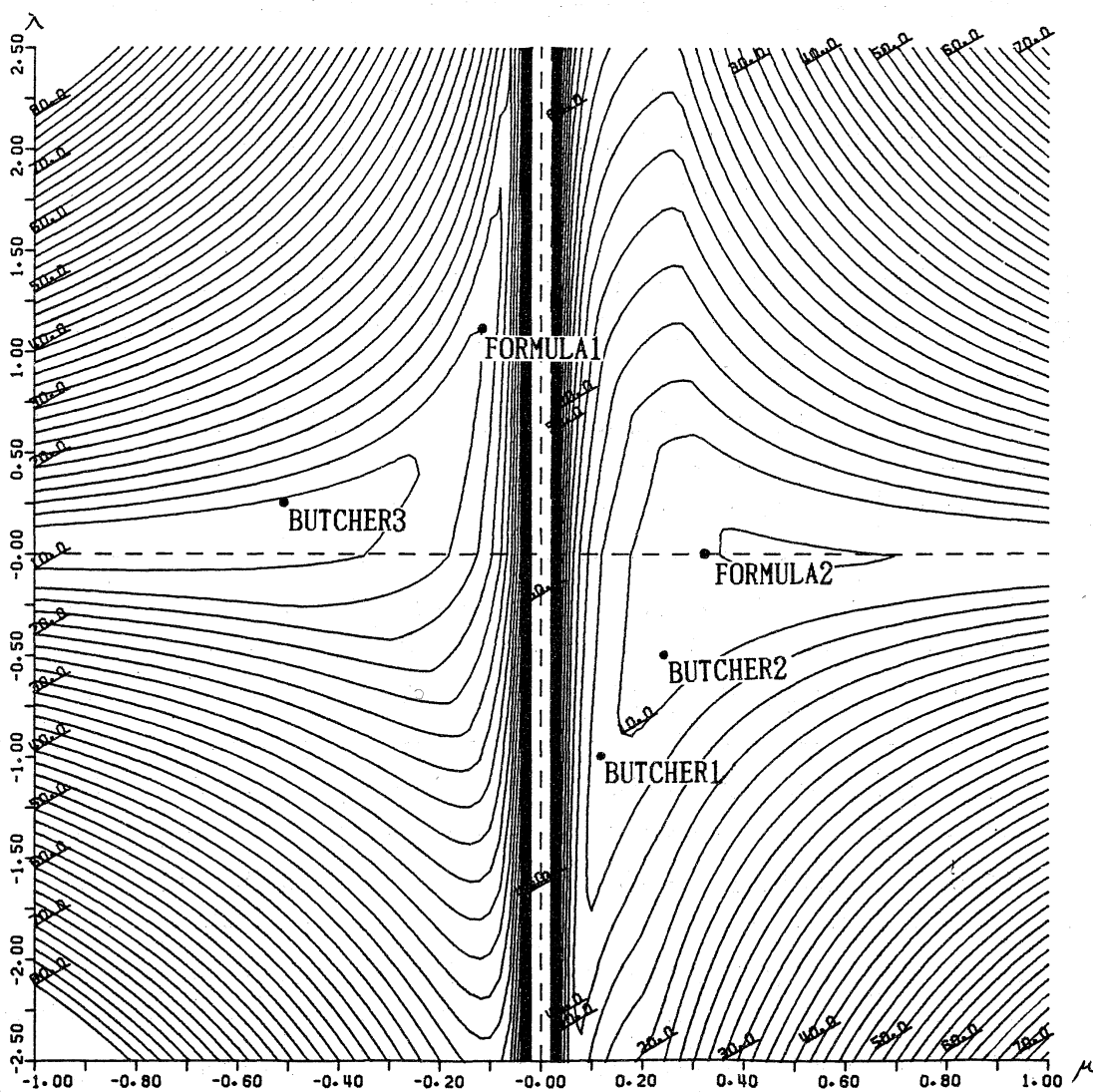


Fig. 4 丸め誤差特性判定基準 R の等高線図

7. BUTCHERによる解系及び公式の特性

Fig. 1~4の観察及び、これまでの6段数5次法に関する研究から、次のような結論が得られる。

- (1) BUTCHERによる解系は、6段数5次法の解系中、打ち切り精度の観点からはあまりよい特性を持つとはいえない。(BUTCHERによる公式の1つは、この解系に含まれる公式中、最良の打ち切り精度をもつものである。一方、6段数5次法の解系中には、実質6次の精度を持つものもある([3][4])。)
- (2) BUTCHERによる解系は、安定性について他の公式に劣らない。すなわち、安定性の優劣を示す特性値(有効絶対安定領域の面積、絶対安定区間の長さなど)について、最良の場合を含む広い変域をもつ。
- (3) BUTCHERによる解系の、丸め誤差に関する性質は、他の解系と同様である。表 2に、BUTCHERによる3公式の特性値を示す。この表及び Fig. 1~4の観察から次のような結論が得られる。

表 2 BUTCHERの3公式及び著者による公式の特性値

特性値	打ち切り精度		安定性		丸め誤差
公式名	A_{52}	A_{53}	$A(\text{Se}(\tau_6))$	$\text{Si}(\tau_6)$	R
BUTCHER (1)	0.2344E-2	0.7262E-6	17.05	(-3.386, 0)	10.4
BUTCHER (2)	0.2951E-2	0.9607E-6	17.05	(-3.386, 0)	8.96
BUTCHER (3)	0.5903E-2	0.4386E-5	17.05	(-3.386, 0)	9.26
公式 (1) *	0.3559E-2	0.1223E-5	17.05	(-3.386, 0)	11.62
公式 (2) *	0.4514E-2	0.1861E-5	27.03	(-5.604, 0)	7.7

*) この2つの公式は後で述べる著者による公式である。

$\text{Si}(\tau_6)$ は絶対安定区間を示す。

- (4) BUTCHERの3公式は、安定性について全く同等で、丸め誤差に関する性質にも差がないので、打ち切り精度最良のBUTCHER(1)が最も好ましいと考えられる。また、3公式ともに係数が比較的簡単で、普通の既知公式(特に最適化の行なわれた公式を除く)の中では、バランスのとれた良い特性を持った公式と言えよう。

8. 公式の改良と新公式の提案

下記の”著者による公式 公式(1)”は、BUTCHER(3)を他の特性を変えずに打ち切り精度の面で改良したものである。また”公式(2)”は、BUTCHERによる解系に含まれる公式中安定性が最良であり、その中では打ち切り精度が、ほぼ最良で、丸め誤差に関する特性も比較的良い公式である。

以下にこれらの公式の係数を掲げる。なおこれらの公式の特性値は表2に示される。

公式 (1) $\mu = -1/8 \quad \lambda = 1$ (8.1)

-1/8	-1/8					
1/4	1/2	-1/2				
1/2	-3/2	1	1			
3/4	3/16	0	0	9/16		
1	3/7	-4/7	12/7	-12/7	8/7	
	1/90	0	32/90	12/90	32/90	7/90

公式 (2) $\mu = 1/3 \quad \lambda = 0$ (8.2)

1/3	1/3					
1/4	5/32	3/32				
1/2	0	0	1/2			
3/4	3/32	-9/32	12/32	18/32		
1	-1/7	6/7	6/7	-12/7	8/7	
	1/90	0	32/90	12/90	32/90	7/90

表-3 著者の提案した2つの公式

9. 数値実験結果

表-2に示した5公式による数値実験結果を表-4~5に示す。

表-4は、初期値問題(9.1)にたいする最初のステップの誤差、最終ステップの誤差、及び最大誤差の一覧表である。この表の観察から 各々の公式の計算や打ち切り精度の評価に誤りがないことが推測されるだろう。

$$Y' = e^{-X} - Y \quad Y(0) = 1 \quad (\text{理論解 } Y = (X+1)e^{-X}) \quad (9.1)$$

表-4 5公式による初期値問題(9.1)の数値解の誤差 (刻み幅 0.04, 20ステップ)

公式名	first step error	last step error	maximum error
BUTCHER (1)	0.28468E-12	0.530315E-11	0.530315E-11
BUTCHER (2)	0.13619E-11	0.153791E-10	0.153791E-10
BUTCHER (3)	0.51559E-11	0.455841E-10	0.455841E-10
公式 (1)	0.18807E-11	0.149500E-10	0.149500E-10
公式 (2)	0.41985E-11	0.305367E-10	0.306680E-10

次に、安定性の特性値が正しく導かれているかどうかを確認するために、Stiff問題(9.2)に対する数値実験の結果を掲げる。

$$Y' = 100 \cdot (\sin(X) - Y), \quad Y(0) = 0 \quad (9.2)$$

$$\text{理論解} \quad Y = (\sin(X) - 0.01 \cdot \cos(X) + 0.01 \cdot e^{-100X}) / 1.0001$$

この場合、 $h\lambda = h(\partial f / \partial y) = -100h$ であるから、刻み幅 $h=0.04$ とすると $-100h = -4.00$ となるので、BUTCHER (1)~(3)、及び 公式 (1)については、 $h\lambda$ が絶対安定区間からはみだすことになる。そのため誤差が拡大することが予想される。次の数値実験は、それを裏付けている。

表-5 5公式による Stiff問題(9.2)の数値解の誤差 (刻み幅 0.04, 20ステップ)

公式名	first step error	last step error	maximum error
BUTCHER (1)	0.28484E-1	0.140424E+8	←
BUTCHER (2)	0.28482E-1	0.140371E+8	←
BUTCHER (3)	0.28477E-1	0.140588E+8	←
公式 (1)	0.28484E-1	0.140509E+8	←
公式 (2)	<u>0.35172E-2</u>	<u>0.376876E-4</u>	<u>0.351720E-2</u>

Fig.5は, 前掲の5公式による13個の初期値問題に対する最大誤差のグラフである。

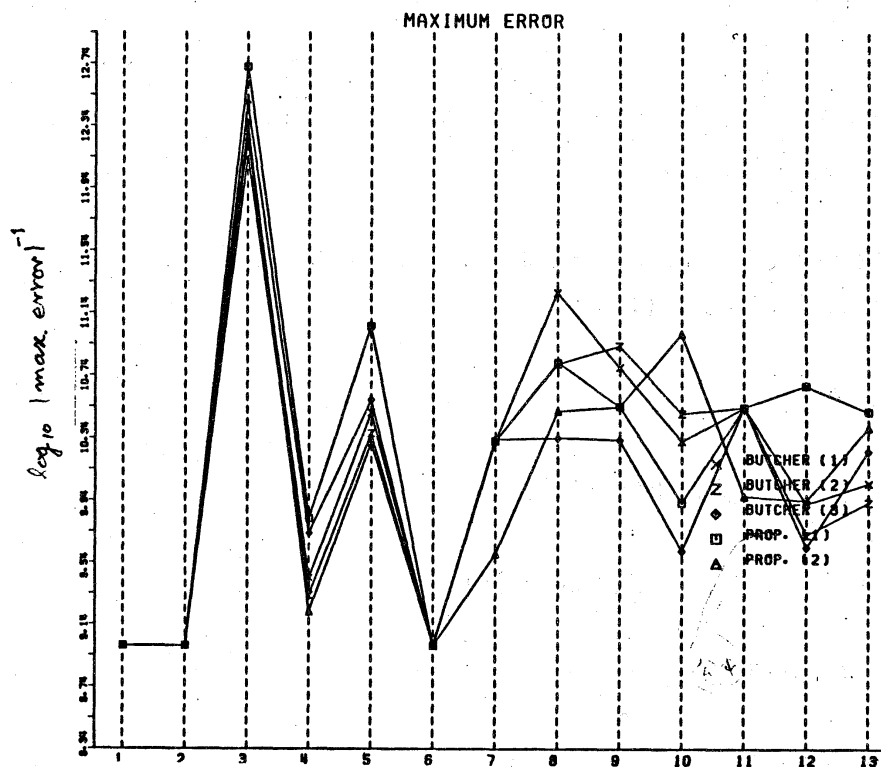


Fig.5 5公式による最大誤差のグラフ

II 2 段数 3 次陰的RUNGE-KUTTA法の打ち切り精度と安定性について

10. 2 段数 3 次陰的RUNGE-KUTTA法

常微分方程式の初期値問題 $Y' = f(X, Y)$, $Y(X_0) = Y_0$ (10.1) に対して

$$k_1 = hf(X_n + a_1 h, Y_n + b_{11} k_1 + b_{12} k_2)$$

$$k_2 = hf(X_{n+1} + a_2 h, Y_{n+1} + b_{21} k_1 + b_{22} k_2)$$

$$Y_{n+1} = Y_n + c_1 k_1 + c_2 k_2 \quad (10.2)$$

によって、 X_n における数値解 Y_n から X_{n+1} における数値解 Y_{n+1} を求める方法を2段数陰的RUNGE-KUTTA法という。特に $b_{12} = 0$ のとき半陰的(または半陽的)であるという。

2 段数で4次が可能であるが、我々はそれらをも特別な場合として含む2段数3次陰的RUNGE-KUTTA法の安定性と打ち切り精度の関係について研究した。

11. 次数条件式とその解

(10.2)が3次法になるために係数 $a_1, a_2, b_{11}, b_{12}, b_{21}, b_{22}, c_1, c_2$ が満たさなければならない条件式は、以下の様になる。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 c_i &= 1, \quad \sum_{i=1}^2 c_i a_i = 1/2, \quad \sum_{i=1}^2 c_i a_i^2 = 1/3, \quad \sum_{i,j=1}^2 c_i b_{ij} a_j = 1/6 \\ \sum_{j=1}^2 b_{ij} &= a_i \quad (i=1, 2) \end{aligned} \quad (11.1)$$

これらの次数条件式を a_1, b_{12} を自由パラメータにして解くと、

$$a_2 = (3a_1 - 2)/(3(2a_1 - 1))$$

$$b_{11} = a_1 - b_{12}$$

$$b_{21} = (-2a_1 + b_{12} + 1)/(3(2a_1 - 1)^2)$$

$$b_{22} = (6a_1^2 - 5a_1 - b_{12} + 1)/(3(2a_1 - 1)^2)$$

$$c_1 = 1/(4(3a_1^2 - 3a_1 + 1))$$

$$c_2 = 3(2a_1 - 1)^2/(4(3a_1^2 - 3a_1 + 1)) \quad (11.2)$$

が得られる。 $a_1 = 1/2$ のときは解を持たない(INCONSISTENT)。

12. 安定性

テスト方程式 $Y' = \lambda Y$ (λ は複素定数) を (10.2) に代入して整理すると,

$$Y_{n+1} = R(h\lambda) \cdot Y_n \quad (12.1)$$

が得られる。ここで $\beta_0 = b_{11} + b_{22}$ (12.2) とおけば,

$$R(h\lambda) = (1 + (1 - \beta_0)h\lambda - (\beta_0/2 - 1/3)h^2\lambda^2) / (1 - \beta_0 h\lambda + (\beta_0/2 - 1/6)h^2\lambda^2) \quad (12.2)$$

である。

(12.2) を公式 (10.2) の安定関数といい, $\text{Re}(h\lambda) < 0$ であるような全ての $h\lambda$ に対して $|R(h\lambda)| < 1$ ならば, A-安定 (A-STABILITY) であるという。

$\beta_0 \geq 1/2$ (12.3) のとき (10.2) は A-安定である。

(12.3) と (11.2) から,

$$b_{12} \leq a_1 - 1/(8(3a_1^2 - 3a_1 + 1)) \quad (12.4)$$

のとき, (10.2) は A-安定であることが分かる。

Fig. 6 に, いくつかの β_0 に対する絶対安定領域の図を示す。

13. 打ち切り精度とその大小判定

$$a_{31} = \sum_{i=1}^2 c_i b_{ij} b_{ij} a_k - 1/24$$

$$a_{32} = (\sum_{i=1}^2 c_i b_{ij} a_j^2 - 1/12) / 2$$

$$a_{33} = \sum_{i=1}^2 c_i a_i b_{ij} a_j - 1/8$$

$$a_{34} = (\sum_{i=1}^2 c_i a_i^3 - 1/4) / 6 \quad (13.1)$$

とすると, (10.2) による数値解 Y_{n+1} の局所打ち切り誤差 T_{n+1} は,

$$T_{n+1} = t_n h^4 + O(h^5)$$

$$t_n = a_{31} D f y^2 + a_{32} f_y D^2 f + a_{33} D f_y D f + a_{34} D^3 f \Big|_{\substack{x=x_n \\ y=y(x_n)}} \quad (13.2)$$

と表わすことができる。

(11.2)と(13.1)より

$$a_{31} = -a_{33} = (8(b_{12}-a_1)(3a_1^2-3a_1+1)+1)/(72(2a_1-1)^2)$$

$$a_{32} = -3a_{34} = -(6a_1^2-6a_1+1)/(72(2a_1-1)) \quad (13.3)$$

が得られる。

打ち切り精度の大小の判定には、次の判定基準を用いる。

$$A_{33} = \sum (a_{3j})^2 \quad (13.4)$$

14. 安定性と打ち切り精度の関係

Fig. 7 は横軸に a_1 、縦軸に b_{12} をとり、それぞれを $[-1, 1]$ の範囲で変動させたときの A_{33} の等高線図で、方法(10.2)がA-安定になるような領域、及び既知公式の (a_1, b_{12}) を座標とする点を示している。(等高線の高さは、 $1E-1, 5E-2, 1E-2, 5E-3, 1E-3, 5E-4, 1E-4, 5E-5, 1E-5, 5E-6, 1E-6, 5E-7$)

この図で $b_{12}=0$ の直線上を見れば、半陰的RUNGE-KUTTA法に対する A_{33} の変動の様と、A-安定であるための a_1 の範囲が分かる。これをさらに詳細に調べたものがFig. 8 である。

この図は横軸に a_1 をとり、縦軸上方に $-\log_{10}(A_{33})$ と絶対安定領域の面積($a_1 < 1/2$ の場合)、縦軸下方に不安定領域の面積($a_1 > 1/2$ の場合)をとって、自由パラメータ a_1 とそれらの関係を示したものである。

さらにFig. 9 は横軸に β_0 、縦軸上方に $-\log_{10}(\min(A_{33}))$ と絶対安定領域の面積($\beta_0 < 1/2$ の場合)、縦軸下方に不安定領域の面積($\beta_0 > 1/2$ の場合)をとって、それらの関係を示したものである。

又、図中の9個の既知公式の絶対安定領域の面積と、 A_{33} の値は表-6のようになり(各公式に対する絶対安定領域の図は、Fig. 6を参照)、 β_0 が与えられたとき A_{33} を最小にする公式は、表-7に示されている。

Fig. 7, Fig. 9 の観察から次のようなことが分かる。

1. BUTCHERの公式は、かろうじてA-安定性を有し、最良の打ち切り精度を持つ。
2. 既知公式は、概ね打ち切り精度の良い所に表われている。
3. 好ましい公式は、A-安定線($\beta_0=1/2$)の下側でつくられる。

4. NORSETT, BURRAGE2の公式は、同じ打ち切り精度を持つA-安定の公式に改良することができる。

また、NORSETT, BURRAGE1の公式は、安定性、打ち切り精度、共にRADAU IA, RADAU II Aより劣っている。

5. 安定性が最良の公式は、 $\beta_0=0.9503231$ の曲線上にある。

安定性が最良で最適な公式は、 $\beta_0=0.9503231$ を表-8の公式に代入することで得られる。

また、Fig.8 からは、

1. NORSETT1の公式は、打ち切り精度がほぼ最良で、A-安定ではないが安定性もかなりよい公式である。
2. NORSETT2の公式は、A-安定の公式中最良に近い打ち切り精度と、ほぼ最大の絶対安定領域を持つ公式である。
3. NORSETTの公式は、diagonally singly implicitであるから、2段数半陰的公式としては、最良の特性を持つと言ってもよいだろう。

表-6 既知公式の特性

公式名	β_0	絶対安定領域の面積	A_{33}
BUTCHER	1/2	A-安定	0.0
NORSETT, BURRAGE1	$(3+\sqrt{3})/3$	A-安定	1.572E-2
NORSETT, BURRAGE2	$(3-\sqrt{3})/3$	143.816	1.292E-4
RADAU IA	2/3	A-安定	6.001E-4
RADAU II A	2/3	A-安定	6.001E-4
NORSETT1	$(3-\sqrt{3})/3$	143.816	8.309E-5
NORSETT2	$(3+\sqrt{3})/3$	A-安定	1.612E-2
JAIN1	1/3	37.926	6.001E-4
JAIN2	1/3	37.926	6.001E-4

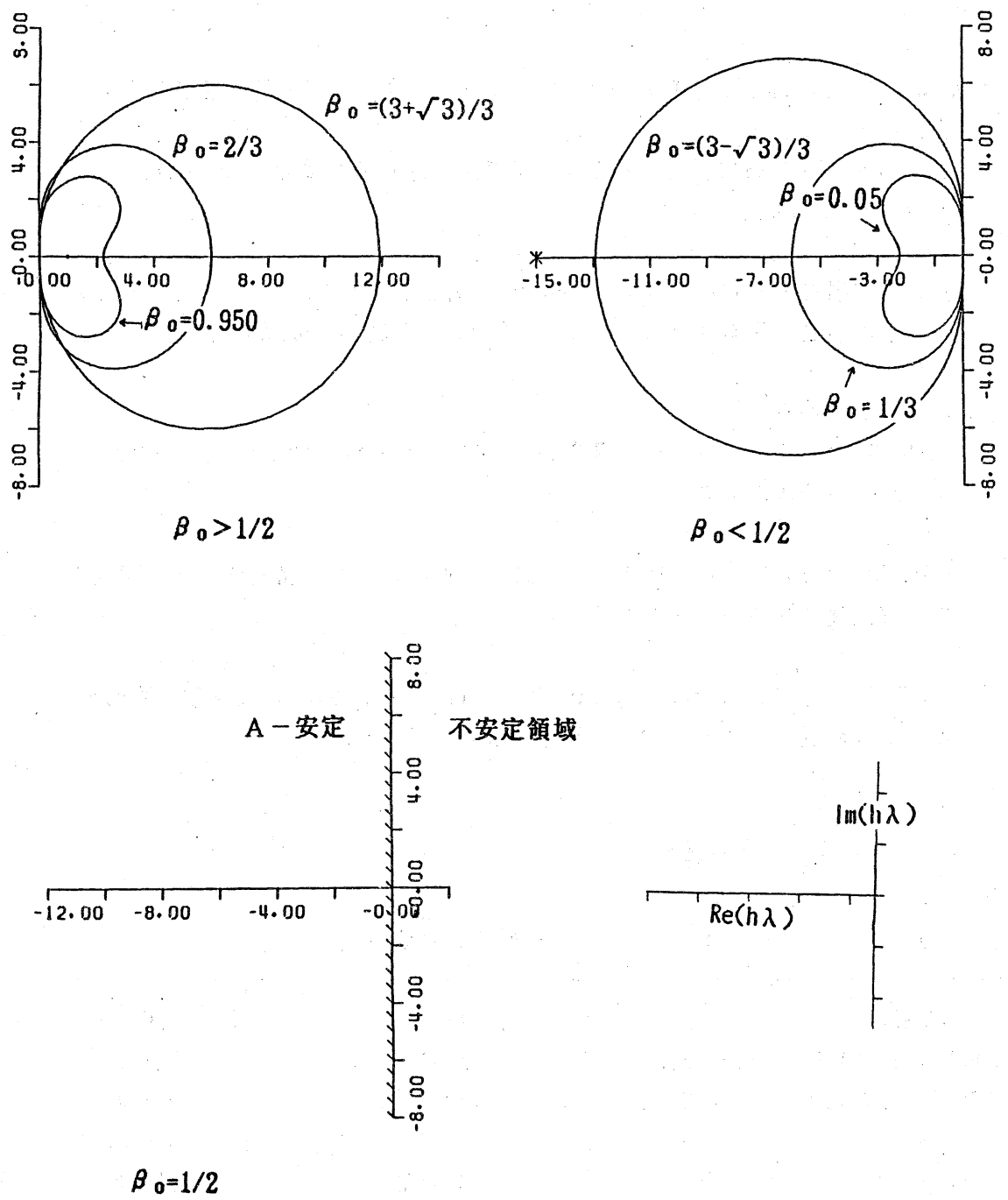


Fig. 6 絶対安定領域の図

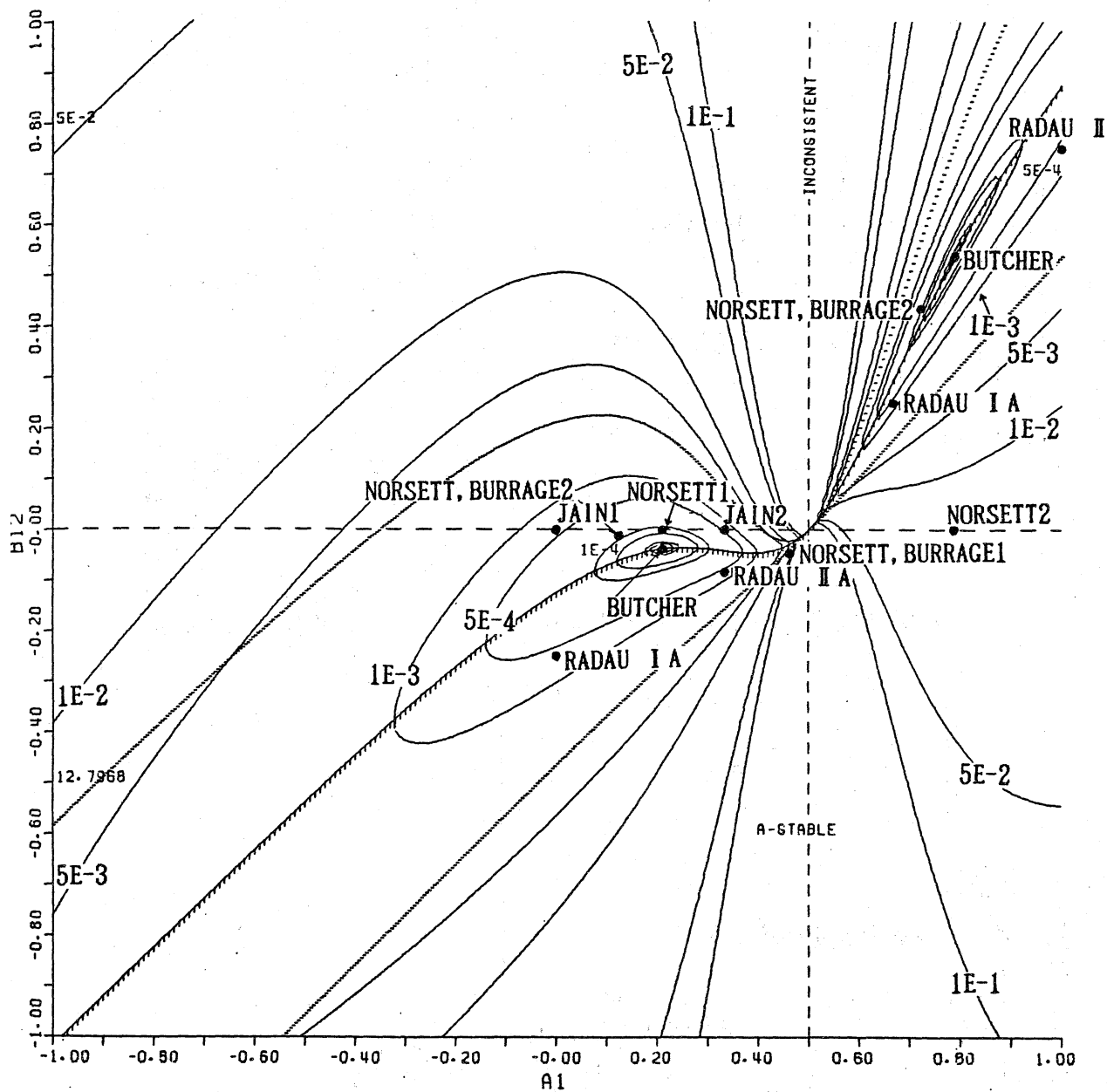


Fig.7 安定性と打ち切り精度の関係

表-7 β_0 が与えられたときの打ち切り精度最良の公式

$(3+\sqrt{3})/6$	$\beta_0/2$	$(3+\sqrt{3-3\beta_0})/6$
$(3-\sqrt{3})/6$	$(3+\sqrt{3-3\beta_0})/6$	$\beta_0/2$
	1 / 2	1 / 2
$A_{33}=(2\beta_0-1)^2/288$		

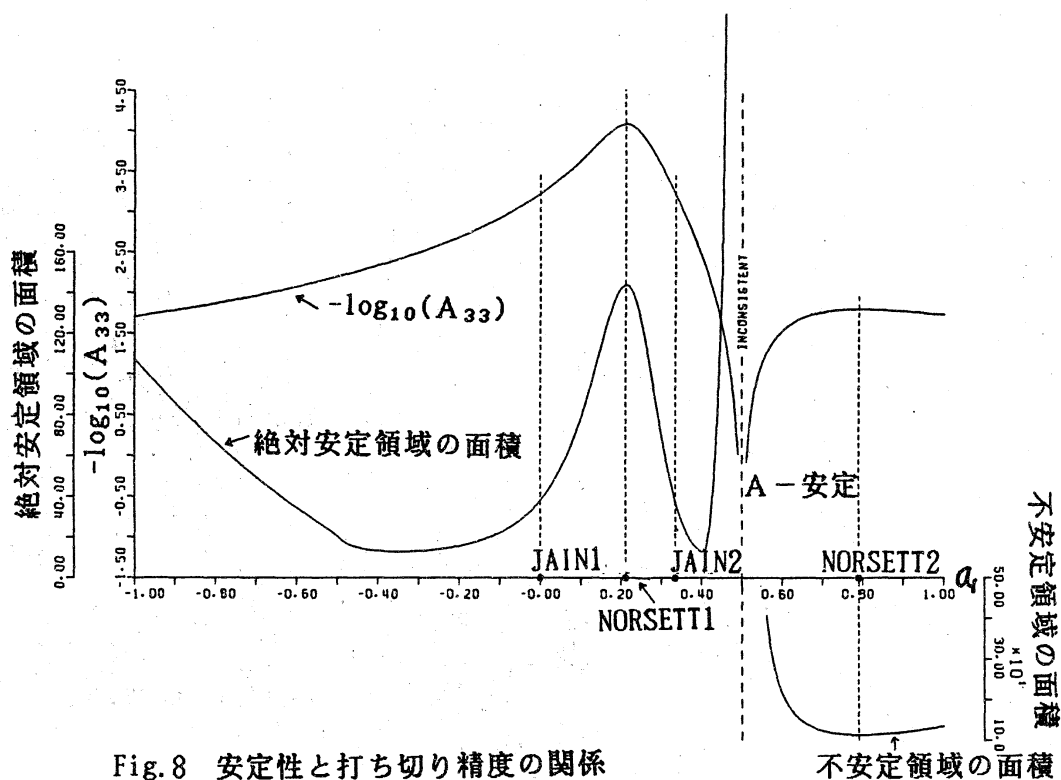


Fig. 8 安定性と打ち切り精度の関係

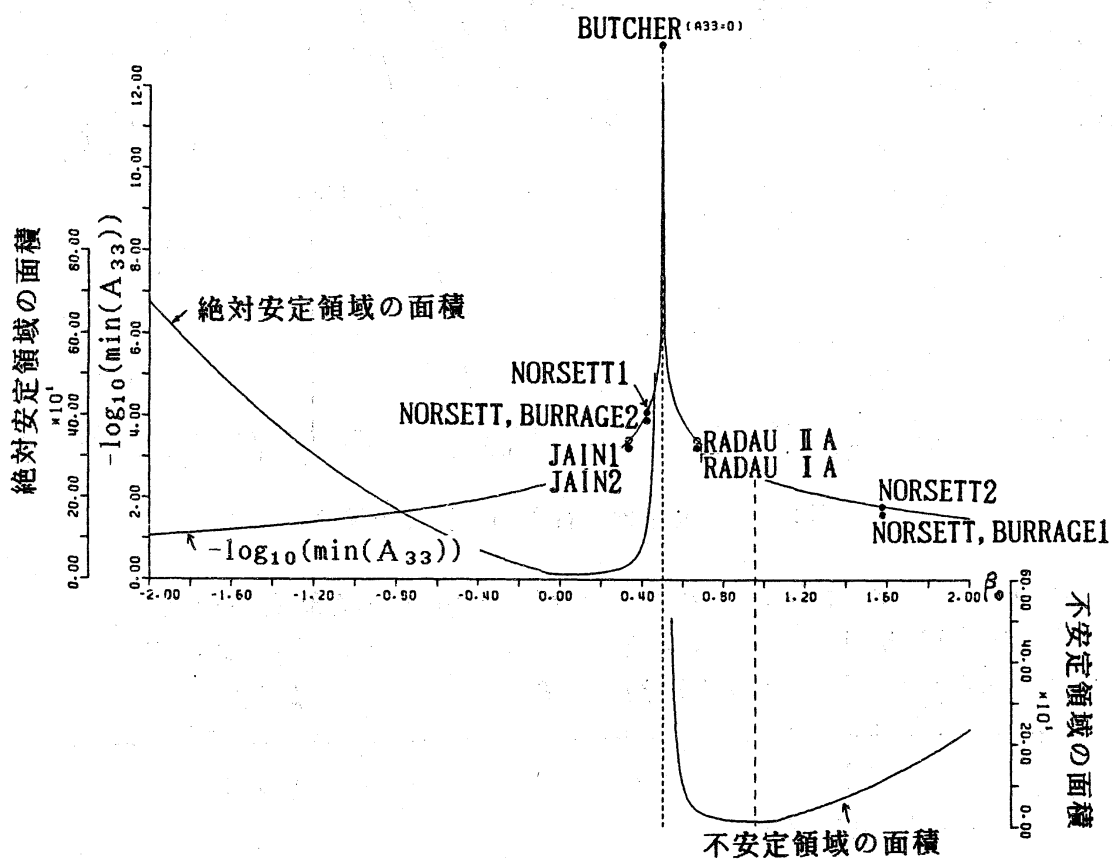


Fig. 9 安定性と打ち切り精度の関係

15. 数値実験

既知公式を用いて、次の2問題について数値実験を行なった。

A. $Y' = -X^2 Y^2/3$, $Y(2) = 1$ $h=0.01$ 100ステップ

理論解 $Y(X)=9/(X^3+1)$

B. $Y' = 100 \cdot (\sin(X) - Y)$, $Y(0) = 0$ $h=0.15$ 100ステップ

理論解 $Y = (\sin(X) - 0.01 \cdot \cos(X) + 0.01 \cdot e^{-100X})/1.0001$

それぞれについて、第一ステップの誤差、最終ステップの誤差、最大誤差を表-8に示す。Aの結果は、判定基準で測られた各公式の打ち切り精度をよく反映している。

またBの結果からは、 $h\lambda$ がその安定領域を越えてしまったNORSETT1, NORSETT, BURRAGE2, JAIN1, JAIN2の公式に対する計算結果の発散が観察される。

表 8 数値実験結果

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

	第一ステップ		最終ステップ		
	真値	誤差	真値	誤差	最大誤差
BUTCHER	9.86777077519D-01	-3.73D-12	3.21428571429D-01	-3.22D-11	-5.26D-11
NORSETT1		-8.73D-10		-8.76D-09	-1.31D-08
M.NORSETT1		8.63D-10		8.67D-09	1.30D-08
NORSETT, BURRAGE2		-7.75D-10		-8.20D-09	-1.20D-08
RADAU 1A		2.08D-09		2.00D-08	3.05D-08
RADAU 11A		1.65D-09		1.75D-08	2.55D-08
M.RADAU 1A & 11A		1.86D-09		1.87D-08	2.79D-08
JAIN1		-1.67D-09		-1.77D-08	-2.58D-08
JAIN2		-2.09D-09		-2.00D-08	-3.05D-08
M.JAIN 1 & 2		-1.88D-09		-1.89D-08	-2.82D-08
NORSETT2		1.18D-08		1.19D-07	1.78D-07
NORSETT, BURRAGE1		1.05D-08		1.11D-07	1.62D-07

$y' = 100(\sin x - y)$ $y(0)=0$ $h=0.15$ 100ステップ

	第一ステップ		最終ステップ		
	真値	誤差	真値	誤差	最大誤差
BUTCHER	1.39536471106D-01	-4.56D-03	6.57818937392D-01	7.09D-05	-4.56D-03
NORSETT1		-1.14D-02		-1.53D+03	-1.53D+03
M.NORSETT1		-1.37D-03		-6.93D-04	-1.37D-03
NORSETT, BURRAGE2		-1.15D-02		-4.34D+03	-4.34D+03
RADAU 1A		5.93D-04		-1.86D-03	-2.68D-03
RADAU 11A		8.44D-04		-1.29D-05	8.44D-04
M.RADAU 1A & 11A		6.94D-04		-9.20D-04	-1.34D-03
JAIN1		-4.77D-02		-4.69D+65	-4.69D+65
JAIN2		-4.60D-02		-4.37D+65	-4.37D+65
M.JAIN 1 & 2		-4.70D-02		-4.55D+65	-4.55D+65
NORSETT2		5.45D-03		-1.19D-03	5.45D-03
NORSETT, BURRAGE1		6.10D-03		-2.40D-04	6.10D-03

15. おわりに

BUTCHERの6段数5次法は、その係数の簡単さにもかかわらず、他の5次法の公式と比較して劣っているとは言えないが、安定性において改良の余地があることが絶対安定領域の面積の等高線図や安定性のグラフからよみとれる。

我々が提案した公式は、その意味で評価されるであろう。

2段数3次陰的法の研究においてFig. 7~Fig. 9は、その特性を知る上で極めて有効な資料となるであろう。また、任意の公式の a_1, b_{12} を座標とする点をプロットすることにより、その公式の特性を直感的に把握できる有効な手段として利用していただければ幸いである。

* 謝辞 *

この研究にあたり、御協力頂いた当研究室の学生諸君と、有益な助言を頂いた山梨大学工学部田口東助教授に感謝の意を表します。

* 参考文献 *

- 1: Hall J. O. & Watt J. M. (eds.), Modern numerical methods for ordinary differential equations, Clarendon Press (1976)
- 2: Lapidus L. & Seinfeld J. M., Numerical solution of ordinary differential equations, Academic Press (1971)
- 3: 若林, 田中, 山下, 打ち切り精度の良いあるタイプの5次陽的RUNGE-KUTTA法について, 情報処理学会第27回全国大会論文集(1983)
- 4: 小野令美, 戸田英雄, 6個の関数計算による実質的6次のRUNGE-KUTTA法, 情報処理学会論文誌, Vol. 23, No. 6, (1982)
- 5: Dekker, K. and Verwer, J. G., Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations, North-Holland, (1984)
- 6: Jain, K. M., Numerical solution of differential equations, 2nd ed., John Wiley & Sons, (1984)
- 7: Hull, T. E. and Johnston, R. L., Optimum Runge-Kutta methods, Math. Comp. 306, (1964)