

ヤコビ行列を含む有理型陽的Runge-Kutta法

千葉大・工 大野 博(Hiroshi Ohno)

1. はじめに

まず, 初期値問題

$$y' = f(y), \quad y(x_0) = y_0. \quad (1.1)$$

の数値解法の一つ有理型ルンゲークッタ法

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \frac{\sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s w_{ij} g_i g_j}{\sum_{k=1}^s c_k g_k} \\ g_i = f(y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} g_j), \quad i=1, 2, \dots, s \end{cases} \quad (1.2)$$

について考える。“Rational Runge-Kutta Methods”のところで考察したように, 有理型ルンゲークッタ法は解のユークリッド・ノルムに関しては安定な公式となるが, 解の成分に関しては安定な公式とはいえないことが分った。有理型ルンゲークッタ法は陽的な方法なので, 計算は陰的な方法に比べて簡単である。ここでは, 計算が簡単であるという特性を生かし, 解の成分に関しても安定な公式となるものを求める。

公式の安定性の解析のために, テスト方程式

$$y' = Ay \quad (1.3)$$

を与える。ただし、係数行列 A と対角行列 Λ に分解できるものを考える。すなわち、

$$A = \bar{U}^T \Lambda U \quad (1.4)$$

ただし、 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s)$

$$\text{Re}(\lambda_i) < 0, i=1, 2, \dots, s.$$

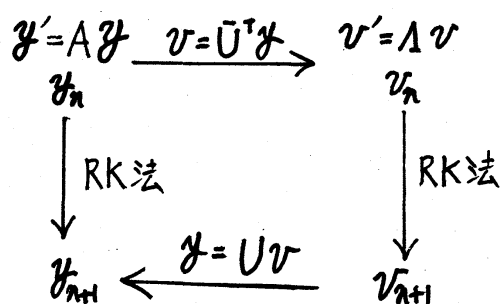


図1. ユニタリー変換

ここでは、図1に示すように、

(1.3) 式を直接ルンゲークッタ法で解いても、(1.3) 式をユニタリー変換し、

$$v' = \Lambda v \quad (1.5)$$

をルンゲークッタ法で解き、その値 v_{n+1} を逆ユニタリー変換した値が常に同じになると仮定する。こうすると、公式の安定性の解析のためには、テスト方程式(1.5)を用いればよい。

解の成分に関して安定な公式を求めるために、次の定義を与えておく。

定義 v_n, v_{n+1} を(1.5) 式のルンゲークッタ法による数値解としたとき、 $\text{Re}(\lambda_i) < 0$ ならば常に

$$\frac{|v_{n+1}^i|}{|v_n^i|} = |r_i(z_1, z_2, \dots, z_s; v_n)| \leq 1, i=1, 2, \dots, s, z_i = \lambda_i h$$

となるルンゲークッタ法を **CA-安定** と呼ぶ。

定義 CA-安定な方法に, 条件

$$\lim_{\operatorname{Re}(z_i) \rightarrow -\infty} r_i(z_1, z_2, \dots, z_s; v_n) = 0$$

を加えたものをCL-安定であると呼ぶ。

2. ヤコビ行列を含む有理型ルンゲークック法

ここでは, CA-安定またはCL-安定になる有理型ルンゲークック法を提案する。(1.2)式を元にとると, 微分方程式

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y_1 \\ y_1 - y_2^2 \\ y_2^2 \end{pmatrix}$$

のようにヤコビ行列の行列式の値が0になるものは, 解けなくなる。初期値問題

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

に対する数値解法

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \frac{\sum_{i=0}^s \sum_{j=1}^s w_{ij} g_i k_j}{\sum_{l=0}^s c_l g_l} \\ k_i = f(x_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j) \\ g_i = y_n + h \sum_{j=1}^i b_{i+1,j} k_j \end{cases} \quad (2.2)$$

を元にして求める。CA-安定またはCL-安定となるように, (2.2)式を次のようにおきかえる。

$$\begin{aligned} g_i &\rightarrow \frac{\partial g_i}{\partial y_n} = \partial G_i = I + h \sum_{j=1}^s b_{i+1,j} \partial k_j \\ g_l &\rightarrow \frac{\partial g_l}{\partial y_n} = \partial G_l = I + h \sum_{j=1}^l b_{l+1,j} \partial k_j \end{aligned}$$

ヤコビ行列を含む有理型ルンゲークッタ法

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \left(\sum_{i=0}^s c_i \partial G_i \right)^{-1} \left(\sum_{i=0}^s \sum_{j=1}^s w_{ij} \partial G_i k_j \right) \\ k_i = f(x_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j) \\ \partial G_0 = I, \quad I \text{ は単位行列} \\ \partial G_i = I + h \sum_{j=1}^i b_{i+1,j} \partial K_j, \quad i=1, 2, \dots, s \\ \partial K_i = f_y(x_n + a_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j) \partial G_{i-1}, \quad i=1, 2, \dots, s \end{cases} \quad (2.3)$$

が得られる。(2.3)式は次の性質をもつ。

定理 3 (2.3)式はユニタリー変換で不変である。テスト方程式 $v' = \Lambda v$, $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s)$ の(2.3)式による解を v_n , v_{n+1} とすると、各成分の比は $z_i = h\lambda_i$ のみの関数となり、全て同じ形をしてゐる。すなわち、

$$\begin{aligned} \frac{|v_{n+1}^i|}{|v_n^i|} &= r_i(z_i), \quad i=1, 2, \dots, s \\ r_1(z) &= r_2(z) = \dots = r_s(z). \end{aligned}$$

定理より、従来通り、安定性は単一テスト方程式 $y' = \lambda y$ について解析すればよい。次の1段と2段公式が得られる。

CL-安定な1段1次公式 (RRK11) [3]

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(2\partial G_0 - \partial G_1)^{-1} \partial G_0 k_1 \\ k_1 = f(x_n, y_n), \quad \partial G_0 = I \\ \partial G_1 = I + h \partial K_1, \quad \partial K_1 = f_y(x_n, y_n) \end{cases} \quad (2.4)$$

CL-安定な2段3次公式 (RRK23) [3]

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{17}{8} \partial G_0 - \frac{1}{8} \partial G_1 + \frac{1}{4} \partial G_2 \right)^{-1} \\ \quad \times \left(\partial G_0 - \partial G_1 + \frac{1}{4} \partial G_2 \right) k_1 + \left(\frac{9}{8} \partial G_0 - \frac{3}{8} \partial G_1 \right) k_2 \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f\left(x_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}h k_1\right) \\ \partial G_0 = I \\ \partial G_1 = I + \frac{2}{3}h \partial K_1, \quad \partial K_1 = f_y(x_n, y_n) \\ \partial G_2 = I + h \partial K_2, \quad \partial K_2 = f_y\left(x_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}h k_1\right) \partial G_1 \end{array} \right. \quad (2.5)$$

3. 数値例

RRK23と以下に示すCL-安定な3段3次公式(LSTIFF3)を数値例で比較する。

例. Kroghのテスト微分方程式系 [2]

$$\left\{ \begin{array}{l} y' = -U^T \text{diag}(1000, 800, -10, 0.001) U y + G(y) \\ y(0) = (-1, -1, -1, -1)^T \end{array} \right. \quad (3.1)$$

ただし,

$$U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad G(y) = U^T (z_1^2, z_2^2, z_3^2, z_4^2)^T$$

$$(z_1, z_2, z_3, z_4)^T = U y$$

(3.1) 式をユニタリー変換した中に, $z_3' = 10z_3 + z_3^2, z_3(0) = -1$ という初期値問題が現われる。この方程式の固有値は $10 + 2z_3$ となり, 方程式の解は -1 から -10 まで単調に減少する。この固有値

は、始めは正の値をとるが、その後は負の値をとる。従って、解が発散することはない。

(3.1)式をRRK23とLSTIFF3とで、 $X=1000$ まで、次の規則に従って、初期ステップ幅 $h_0=0.001$ で積分する。

y_{n+1} を y_n からステップ幅 h で計算した値とし、 y_{n+1}^* を y_n からステップ幅 $\frac{h}{2}$ で2度計算した値とする。局所離散化誤差 E_{n+1}

$$E_{n+1} = \|y_{n+1}^* - y_{n+1}\| / 4$$

で与えられる。EPSを要求精度とする。

- (i) $E_{n+1} > \text{EPS}$ のとき、期待誤差 $\sim \frac{\text{EPS}}{5}$ となるように新しいステップ幅を決め、もう一度そのステップを計算する。
- (ii) $\frac{3}{4}\text{EPS} < E_{n+1} \leq \text{EPS}$ のとき、期待誤差 $\sim \frac{\text{EPS}}{5}$ となるように新しいステップ幅を決め、次のステップに移る。
- (iii) $\frac{1}{10}\text{EPS} < E_{n+1} \leq \frac{3}{4}\text{EPS}$ のとき、ステップ幅をそのままにして、次のステップに移る。
- (iv) $E_{n+1} \leq \frac{1}{10}\text{EPS}$ のとき、期待誤差 $\sim \frac{\text{EPS}}{2}$ となるように新しいステップ幅を決め、次のステップに移る。

[LSTIFF3] [1]

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h(k_2 + k_3)/2 \\ k_1 = A^{-1}(y_n) f(y_n) \\ k_2 = A^{-1}(y_n) f(y_n + h a_{21} k_1) \\ k_3 = A^{-1}(y_n) f(y_n + h a_{31} k_1 + h a_{32} k_2) \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A(y_n) = I - dh f_y(y_n) \\ d = 0.4358665215084589, \quad \alpha_{21} = -0.5096436823208324 \\ \alpha_{31} = 0.3270258662045891, \quad \alpha_{32} = 0.3108847730993256 \end{array} \right.$$

この結果は表1, 図2, 図3 に示す。表1は $x=1000$ まで積分したときの計算回数の比較を示す。ただし,

FUN: 関数の計算回数, JAC: ヤコビアン計算回数

LUD: LU分解の回数, SOL: 連立1次方程式を解いた回数

STE: ステップ数 REJ: 捨てたステップ数

とする。RRK23の方が計算回数が少ないことが分る。図2は、要求精度と実際の誤差を比較したものである。RRK23は要求精度と同程度の精度であるのに対し、LSTIFF3はかなり高精度になっていることが分る。図3は要求精度と計算時間の関係を示した。RRK23の方が効率的に解けることが分る。

4. おわりに

有理型ルンゲクッタ法は非線形な公式であるのに対し、本論文で提案した方法は線形な公式になっている。解の各成分に関して安定な公式を求めようとする、公式は線形になってしまうことが分る。

表 1. 計算回数

EPS = 10^{-3} の場合

	FNC	JAC	LUD	SOL	STE	REJ
RRK23	135	135	81	81	27	0
LSTIFF3	4200	1050	1575	4725	525	80

EPS = 10^{-6} の場合

	FNC	JAC	LUD	SOL	STE	REJ
RRK23	1080	1080	648	648	216	.1
LSTIFF3	77512	17878	27817	89451	8682	1257

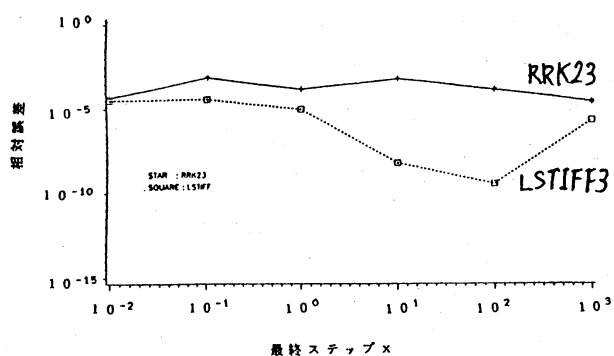
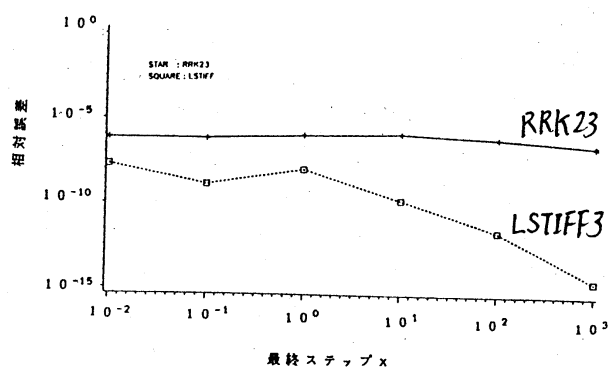
(1) 要求精度 $EPS = 10^{-3}$ (2) 要求精度 $EPS = 10^{-6}$

図 2. 相対誤差

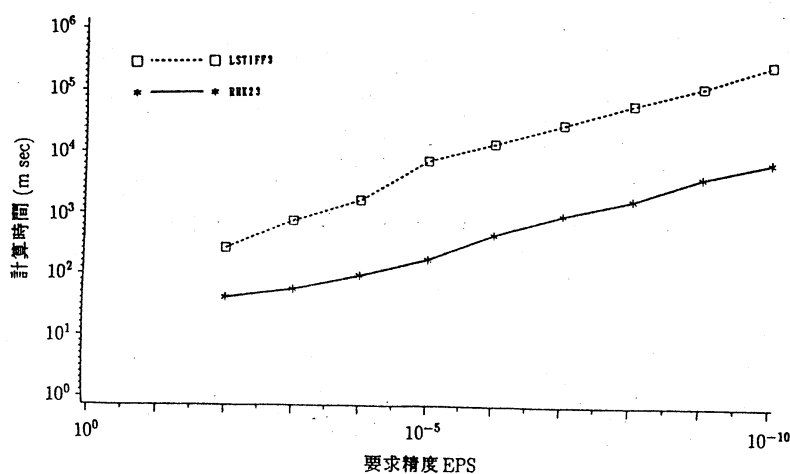


図 3. 要求精度に対する計算時間

参 考 文 献

- [1] Bui, T.D, and Bui, T. R. : Numerical Methods for Extremely Stiff Systems of Ordinary Differential Equations, Appl. Modelling, Vol.3, pp 355~358 (1979)
- [2] Geor, C.W. : Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations, Prontice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. (1971)
- [3] 大野 博 : 石更い微分方程式系向きのヤコビ行列を含む有理型陽的 Runge-Kutta法, 情報処理学会論文誌, Vol33 (1992)