

陰的 Runge-Kutta 法 の 特 性 に つ い て

山梨大工学部 穂 莉 康 彦 (Yasuhiko Hokari)
山梨大工学部 田 中 正 次 (Masatsugu Tanaka)
山梨大工学部 山 下 茂 (Shigeru Yamashita)

§ 1. ま え が き

常微分方程式の初期値問題

$$y' = f(x, y), y(x_0) = y_0 \tag{1.1}$$

において、 x_n における数値解 y_n が得られているとき、 x_{n+1} における数値解 y_{n+1} を

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

によって求める方法を S 段数陰的 Runge-Kutta 法という。陰的 Runge-Kutta 法は、特に $i < j$ のとき $a_{ij} = 0$ ならば半陰的と呼ばれる。

本論文においては $S=2, 3$ 及び 4 の陰的 Runge-Kutta 法について考察する。

我々は、次に示すような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。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。

【2 段数 3 次法】

$\frac{3+\sqrt{3}}{6}$	$\frac{\beta_0}{2}$	$\frac{3+\sqrt{3}-3\beta_0}{6}$	
$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$	$\frac{3-\sqrt{3}-3\beta_0}{6}$	$\frac{\beta_0}{2}$	
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	(1.3)

ここで $\beta_0 = a_{11} + a_{22}$ 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。(1.3) で $\beta_0 = \frac{1}{2}$ とおけば Butcher の 2 段数 4 次法が得られる。

【3 段数 5 次法】

$\frac{5+\sqrt{15}}{10}$	$\frac{1+8\beta_0}{36}$	$\frac{5+6\sqrt{15}+40\beta_0}{180}$	$\frac{20+3\sqrt{15}-20\beta_0}{45}$
$\frac{5-\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5-6\sqrt{15}+40\beta_0}{180}$	$\frac{1+8\beta_0}{36}$	$\frac{20-3\sqrt{15}-20\beta_0}{45}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{20-3\sqrt{15}-20\beta_0}{72}$	$\frac{20+3\sqrt{15}-20\beta_0}{72}$	$\frac{-1+10\beta_0}{18}$
	$\frac{5}{18}$	$\frac{5}{18}$	(1.4)

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。(1.4)で $\beta_0 = \frac{1}{2}$ とおけばButcherの3段数6次法が得られる。

【4段数7次法】

$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{140}}$	a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	
$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{140}}$	a_{21}	a_{22}	a_{23}	a_{24}	
$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{140}}$	a_{31}	a_{32}	a_{33}	a_{34}	
$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{140}}$	a_{41}	a_{42}	a_{43}	a_{44}	
	$\frac{3\sqrt{30}-5}{12\sqrt{30}}$	$\frac{3\sqrt{30}+5}{12\sqrt{30}}$	$\frac{3\sqrt{30}+5}{12\sqrt{30}}$	$\frac{3\sqrt{30}-5}{12\sqrt{30}}$	(1.5)

いま、 $A = \sqrt{2\sqrt{30}+15}$, $B = \sqrt{-2\sqrt{30}+15}$, $C = \sqrt{30}$, $D = \sqrt{35}$ とおけば(1.5)の係数は、

$$a_{11} = (3\beta_0(C-3)+2)/(12C)$$

$$a_{12} = (9\beta_0D(-ABC+10AB-5C-90)+7ABCD-45AC+450A-75BC-1350B+75CD-120D)/(360D(AB+2C-15))$$

$$a_{13} = (9\beta_0D(-ABC+10AB+5C+90)+7ABCD+45AC-450A-75BC-1350B-75CD+120D)/(360D(AB-2C+15))$$

$$a_{14} = (9\beta_0D(C-10)+15AC-120A-7CD+90D)/(360D)$$

$$a_{21} = (63\beta_0D(ABC-4AB-7C)+7(-ABCD+18ABD-45AC+180A+105BC-21CD+210D))/(72D(3ABC+5AB-35C+105))$$

$$a_{22} = (3\beta_0(C+3)-2)/(12C)$$

$$a_{23} = (-21\beta_0CD-25BC-30B+23CD-20D)/(120D(C-3))$$

$$a_{24} = (21\beta_0D(2ABC-15AB+105)+7(-3ABCD+40ABD+75AC-300A-105BC+35CD-420D))/(60D(ABC+18AB+21C-210))$$

$$a_{31} = (63\beta_0D(ABC-4AB+7C)+7(-ABCD+18ABD+45AC-180A+105BC+21CD-210D))/(72D(3ABC+5AB+35C-105))$$

$$a_{32} = (-21\beta_0CD+25BC+30B+23CD-20D)/(120D(C-3))$$

$$a_{33} = (3\beta_0(C+3)-2)/(12C)$$

$$a_{34} = (21\beta_0D(2ABC-15AB-105)+7(-3ABCD+40ABD-75AC+300A-105BC-35CD+420D))/(60D(ABC+18AB-21C+210))$$

$$a_{41} = (9\beta_0D(C-10)-15AC+120A-7CD+90D)/(360D)$$

$$a_{42} = (3\beta_0D(-ABC+3AB+9C+15)+3ABCD-2ABD+15AC-150A+15BC+270B-31CD+30D)/(12D(ABC-15C+60))$$

$$a_{43} = (3\beta_0D(-ABC+3AB-9C-15)+3ABCD-2ABD-15AC+150A+15BC+270B+31CD-30D)/(12D(ABC+15C-60))$$

$$a_{44} = (3\beta_0(C-3)+2)/(12C)$$

で与えられる。ここで $\beta_0 = a_{11} + a_{22} + a_{33} + a_{44}$ で、上式は与えられた β_0 に対し

で打ち切り精度最良の公式である。(1.5)で $\beta_0 = \frac{1}{2}$ とおけばButcherの4段数8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、それに基づいてある条件の下で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。また、半陰的法の既知公式の特性を調査し、上の思想を生かした実用公式を導き出すことである。

§ 2. 打ち切り誤差とその大小判定

一般にS段数p次Runge-Kutta法による数値解 y_{n+1} の局所打ち切り誤差 T_{n+1} は、 $T_{n+1} = t_n h^{p+1} + o(h^{p+2})$ (2.1)と表すことができる。ここで t_n は、与えられた微分方程式(1.1)の右辺の関数系 $f(x, y)$ に依存する部分と、公式を特徴づける係数の関数 a_{p1} の積和の形になっている。

打ち切り誤差の大小の判定には、次式によって定義される A_{p2} 及び A_{p3} を使用する。これを、打ち切り精度判定基準という。

$$A_{p2} = \sum_1 |a_{p1}|, \quad A_{p3} = \sum_1 (a_{p1})^2 \quad (2.2)$$

§ 3. 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s段数p次法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_n は(3.2)の第一項の計算の際に生ずる丸め誤差である。(3.2)の $R(h\lambda, \beta_0)$ を公式の安定関数という。

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、

$$y(x_{n+1}) = R(h\lambda, \beta_0)y(x_n) - T_n \quad (3.3)$$

が得られる。ここで T_n は公式の局所打ち切り誤差である。また(3.2)から(3.3)を辺々引き算し、

$$e_n = y_n - y(x_n) \quad (3.4)$$

$$E_n = r_n + T_n \quad (3.5)$$

と置くと、

$$e_{n+1} = R(h\lambda, \beta_0)e_n + E_n \quad (3.6)$$

が得られる。

$|R(h\lambda, \beta_0)| < 1$ ならば、その $h\lambda$ に対して公式は絶対安定であるといわれる。また次式によって定義される複素平面上の領域 S を、公式の絶対安定領域という。

$$S = \{h\lambda \mid |R(h\lambda, \beta_0)| < 1, h\lambda \text{は複素数}\} \quad (3.7)$$

ここでは安定性を絶対安定領域 S の面積 $A(S)$ 、あるいは不安定領域 S^c の面積 $A(S^c)$ の大小や包含関係、また安定関数の絶対値の大きさをを用いて評価する。点 $h\lambda$ において

$$|R(h\lambda, \beta_1)| < |R(h\lambda, \beta_2)| \quad (3.8)$$

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

§ 4. 新公式とその特性

4. 1 序論

我々は2から4段数の各段数について、一番弱いA安定をもつButcherの β_0 と、我々が求めて求めた不安定領域最小の公式の β_0 の中間の β_0 をもつ公式を導いた。この公式は両者の中間の安定特性と打ち切り精度をもつ。各段数についてButcherの公式は打ち切り精度が最良であるが、 $h\lambda$ の絶対値が大きくなるとその安定関数の絶対値は急速に1に近づく。したがって、stiff問題における急速に減衰する成分が消滅した後の大きな刻み幅を用いる積分段階では、集積誤差の伝播率が大きく精度が不良になることが予想される。そこで、Butcherの公式に比べて大きな $h\lambda$ に対して安定関数の絶対値が小さく、かつ打ち切り精度が余り変わらないように β_0 を選んで公式を導いた。

4. 2 2段数法

Butcherによる2段数4次法、大野法、我々による公式(1.3)から得られた3公式(Opt. st1, M. Norsett1, 新公式 I)及びL安定な公式(M. Ladau IA&IIA)の6者の比較を試みる(Table 1, Fig. 1~Fig. 4参照)。ここでButcherと大野の公式を除く公式は我々によって導出されたもの、または改良されたものである。なお、これらの諸公式はすべて解系(1.3)に含まれることを付記する。

公式名	β_0	A_{33}	不安定領域 の面積	$\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} R(h\lambda, \beta_0) $
Butcher	$\frac{1}{2}$	0.0	∞	1.0
Opt. st1	0.95	2.8125000d-03	12.79771	$\frac{17}{37} = 0.459$
M. Ladau IA&IIA	$\frac{2}{3}$	3.8580247d-04	37.92670	0.0
M. Norsett1	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	8.3098113d-05	143.8287	$\frac{\sqrt{3}-1}{2} = 0.366$
大野	$\frac{3+\sqrt{3}}{6}$	1.1574074d-03	17.60855	$2-\sqrt{3} = 0.268$
新公式 I	0.6	1.3888889d-04	90.12213	$\frac{1}{4} = 0.25$

Table 1 2段数3次法の β_0 と打ち切り精度及び安定性の関係

Table 1は上記の各公式の打ち切り精度及び安定性に関する特性値を表にしたものである。Fig. 1は β_0 を横軸にとり、打ち切り精度判定基準の常用対数 $\log_{10}(A_{33})$ 、不安定領域 S^c の面積 $A(S^c)$ 及び安定関数の絶対値の極限值($\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} |R(h\lambda, \beta_0)|$)を縦軸にとって、公式(1.3)の特性をグラフに画いたものである。Fig. 2はTable 1に示す諸公式の絶対安定領域を複素平面上に画いたものである。Fig. 3, 4は $h\lambda$ を横軸にとって、同じ公式に対する安定関数の絶対値のグラフを示したものである。

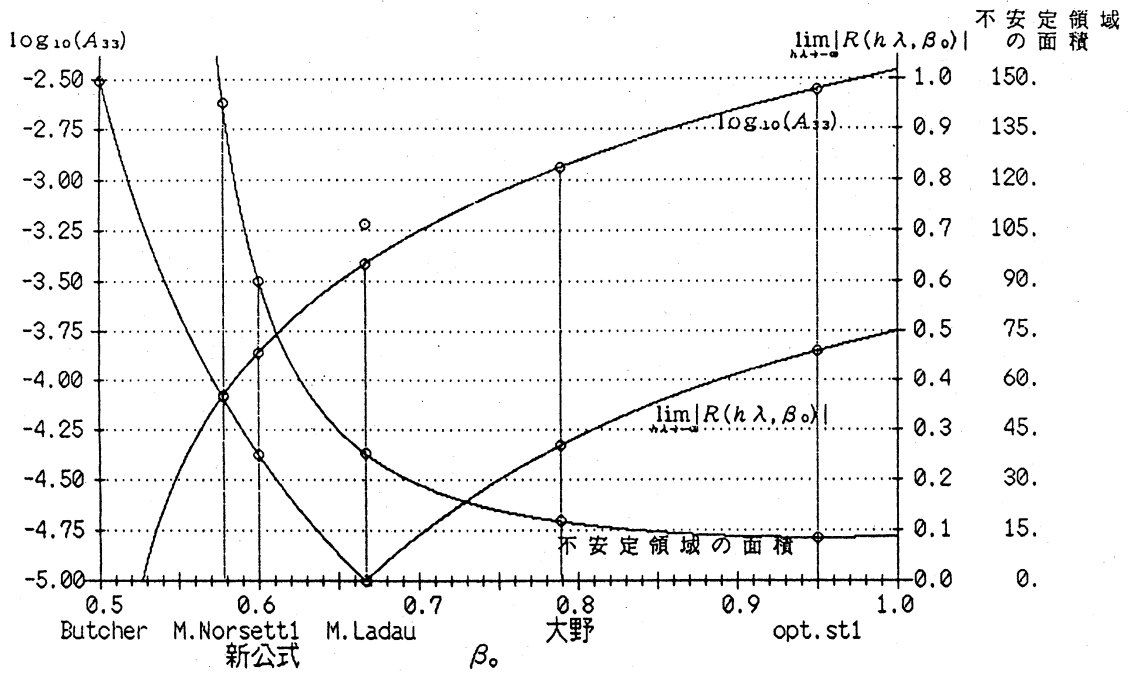


Fig.1 β_0 と安定性及び切り精度の関係
(2段数3次陰的Runge-Kutta法(1.3)の場合)

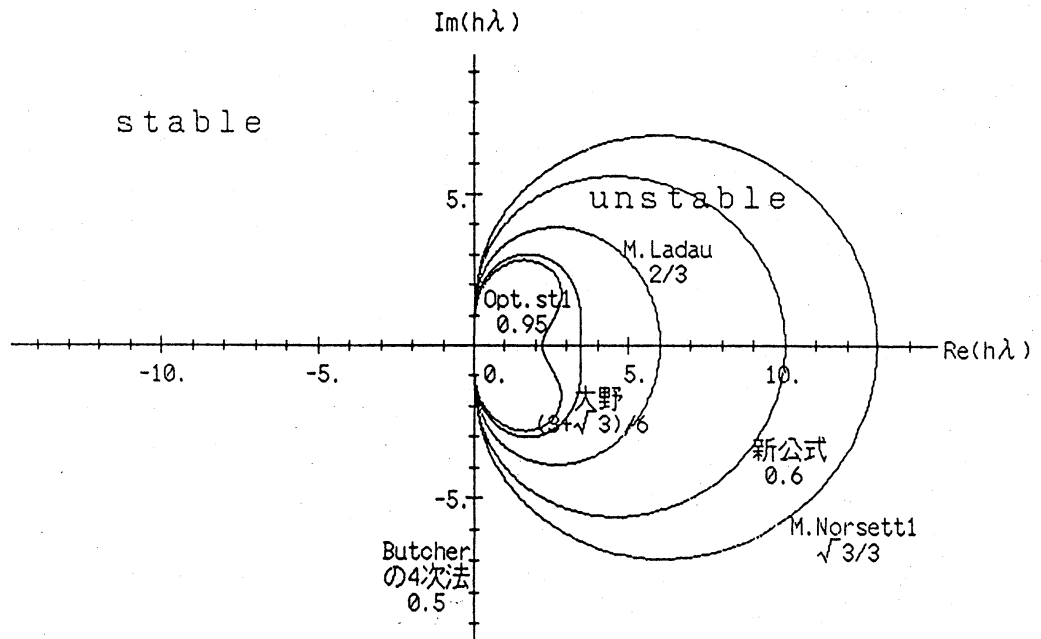


Fig.2 2段数陰的Runge-Kutta法の絶対安定領域
(注) 公式名に傍記された数値は β_0 を示す

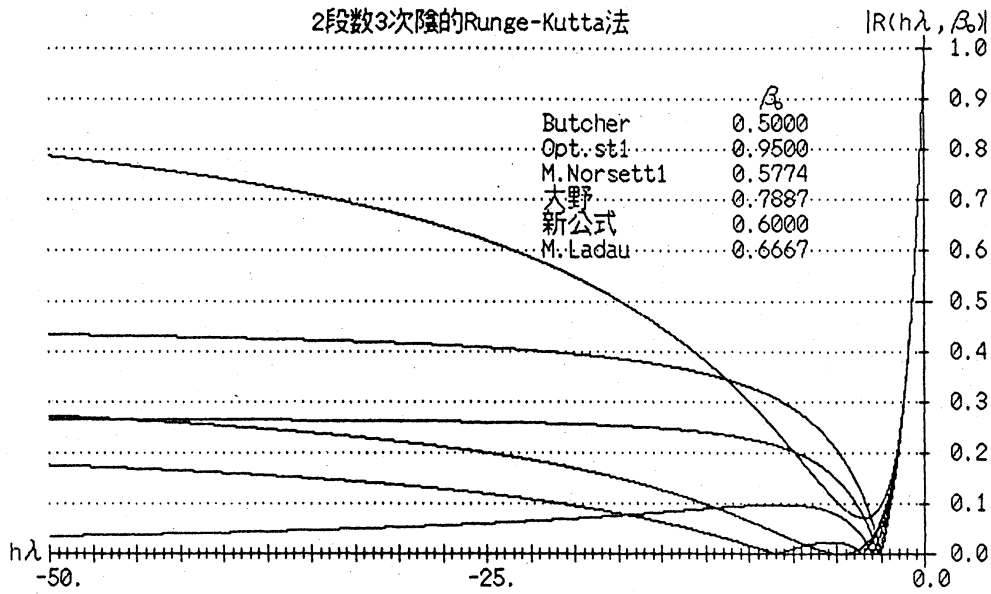


Fig. 3 $y=|R(h\lambda, \beta_0)|$ のグラフ ($h\lambda : -50.0 \sim 0.0$)
 注) 公式名はグラフの左端の上からの順序に対応する

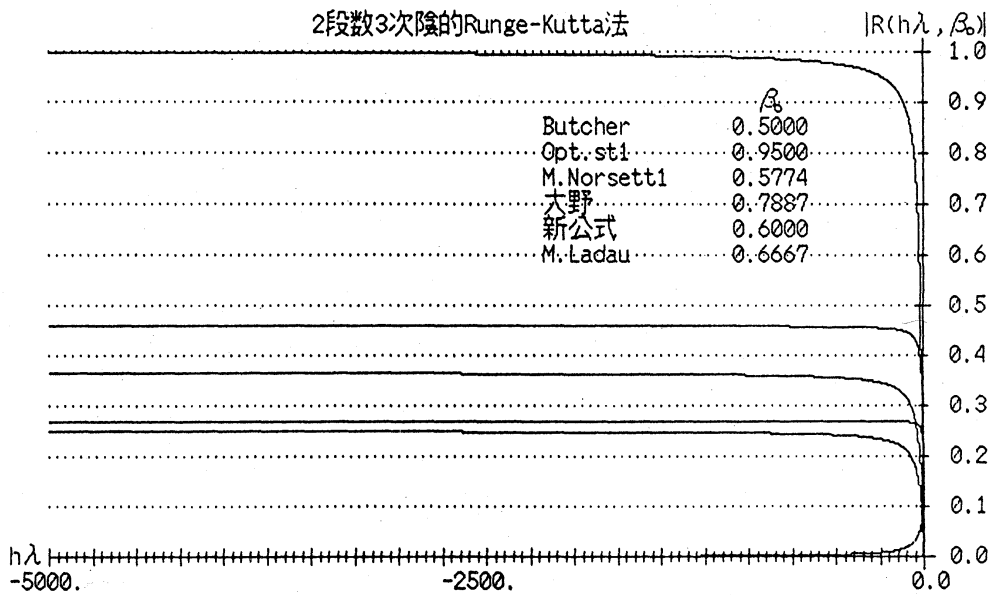


Fig. 4 $y=|R(h\lambda, \beta_0)|$ のグラフ ($h\lambda : -5000.0 \sim 0.0$)
 注) 公式名はグラフの左端の上からの順序に対応する

4. 2の表とグラフからButcherの公式は4次法であるが安定性が余り良くないことがわかる。Opt.st1は不安定領域の面積は最小であるが、打ち切り精度や安定関数の絶対値の極限值において劣る。M.Ladau IA&IIAはL安定であるが打ち切り精度はまだ良くない。M.Norsett1は3次法の中では打ち切り精度がよいが安定性で見劣りがする。大野の公式は安定性はよいが打ち切り精度が十分ではない。そこで、打ち切り精度や安定関数の絶対値の極限値の面でかなり優れている次に示す新公式 I (4.1)を導いた。

《新公式 I》

$\frac{3+\sqrt{3}}{6}$	$\frac{3}{10}$	$\frac{6+5\sqrt{3}}{30}$	(4.1)
$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$	$\frac{6-5\sqrt{3}}{30}$	$\frac{3}{10}$	
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	

2 段数 3 次代数的安定半陰的Runge-Kutta法の次数条件式群の解は、自由パラメータ c_1 のみを含むので、このパラメータと打ち切り精度及び安定性の関係を Fig. 5 に示す。すなわち Fig. 5 は横軸に c_1 とり、打ち切り精度判定基準の常用対数 $\log_{10}(A_{33})$ 、不安定領域 S^c の面積 $A(S^c)$ 及び安定関数の絶対値の極限值 ($\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} |R(h\lambda)|$) を縦軸にとり、前記の解系の特性をグラフに画いたものである。

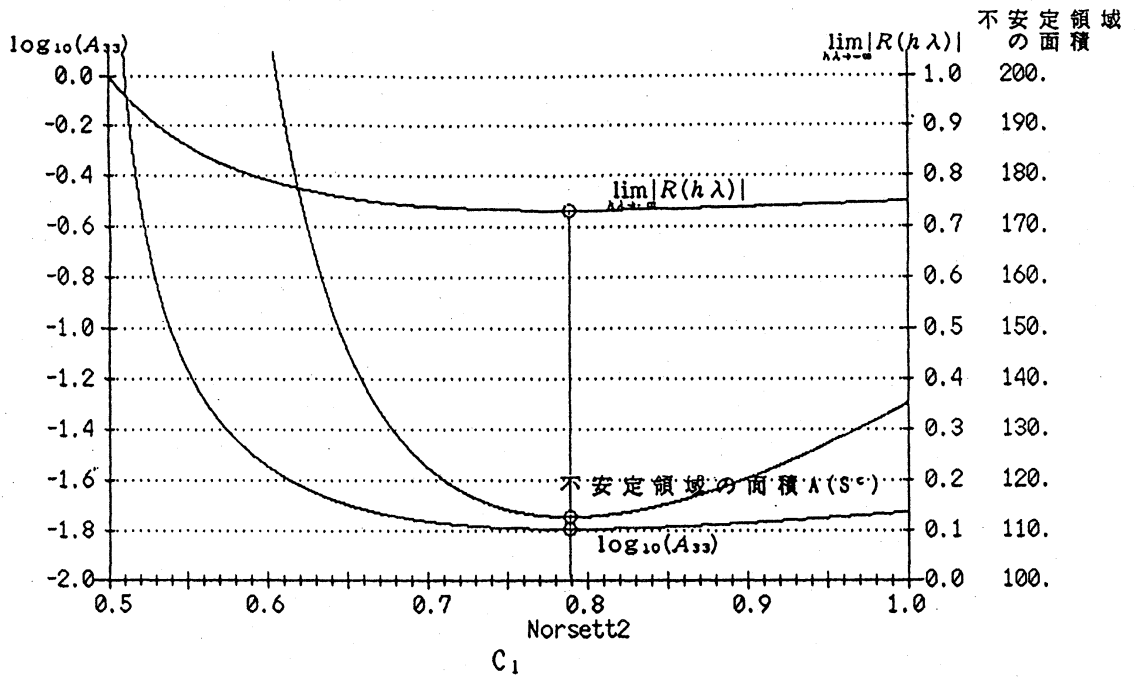


Fig. 5 安定性及び切り精度の関係
(2 段数 3 次半陰的 Runge-Kutta 法の場合)

Fig. 5 から半陰的法では打ち切り精度及び安定性の両者がほぼ最良のところに既知公式が位置しているので、同様な観点からより特性の優れた公式を導く余地はないことがわかる。

4. 3 3 段数法

Butcher による 3 段数 6 次法、我々による公式 (1.4) から得られる 2 公式 (Opt. st2, 新公式 II) 及び L 安定な公式 (M. Ladau IA&IIA) の 4 者の比較を試みる (Table 2, Fig. 6 ~ Fig. 9 参照)。ここで Butcher の公式を除く諸公式は我々によって導出されたもの、または改良されたものであって、いずれも解系 (1.4) に含まれることを付記する。

公式名	β_0	A_{53}	不安定領域の面積	$\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} R(h\lambda, \beta_0) $
Butcher	$\frac{1}{2}$	0.0	∞	1.0
Opt.st2	0.7	1.23456790d-06	69.0490273	$\frac{1}{3} = 0.33333$
M.Ladau IA&IIA	0.6	3.08641975d-07	144.973525	0.0
新公式 II	0.55	7.71604938d-08	486.896876	$\frac{1}{3} = 0.33333$

Table 2 3段数5次法の β_0 と打ち切り精度及び安定性の関係

Table 2は上記の各公式の打ち切り精度及び安定性に関する特性値を表にしたものである。Fig. 6は β_0 を横軸にとり、打ち切り精度判定基準の常用対数 $\log_{10}(A_{53})$ 、不安定領域 S^c の面積 $A(S^c)$ 及び安定関数の絶対値の極限值 ($\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} |R(h\lambda, \beta_0)|$) を縦軸にとって、公式 (1.4) の特性をグラフに画いたものである。Fig. 7は Table 2 に示す諸公式の絶対安定領域を複素平面上に画いたものである。Fig. 8, 9は $h\lambda$ を横軸にとって、同じ公式に対する安定関数の絶対値のグラフを示したものである。

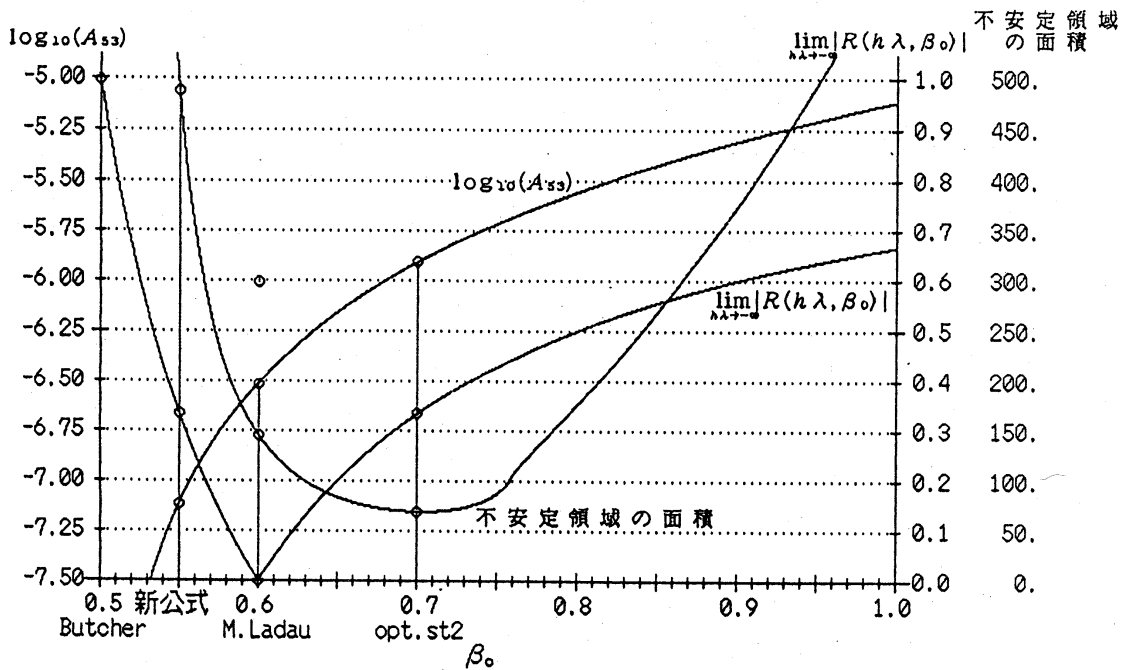


Fig. 6 β_0 と安定性及び切り精度の関係
(3段数5次陰的Runge-Kutta法(1.4)の場合)

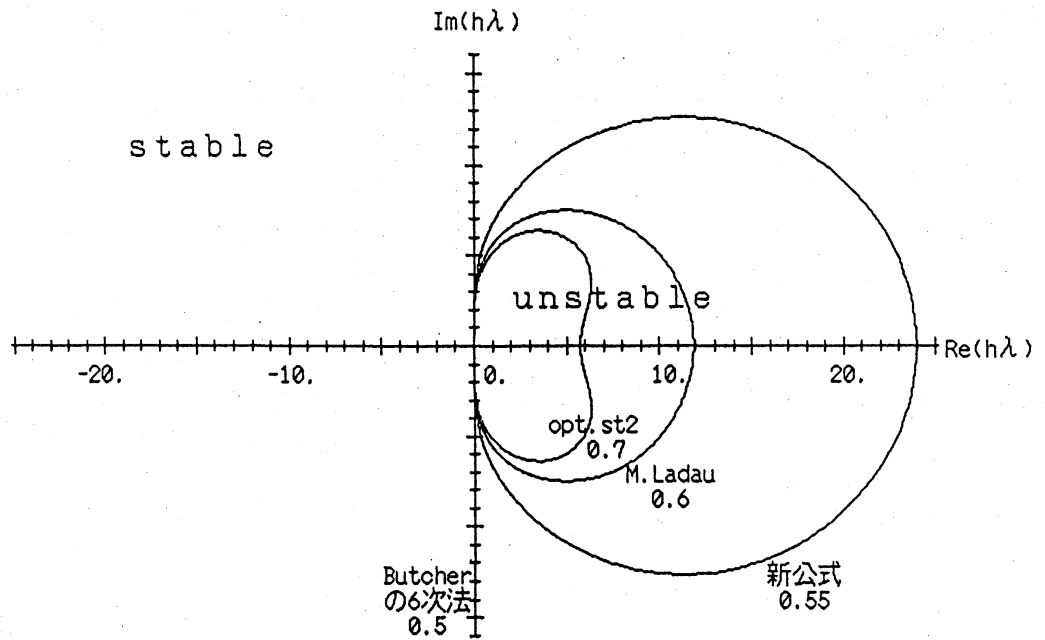


Fig. 7 3段数陰的Runge-Kutta法の絶対安定領域
 注) 公式名に傍記された数値は β_0 を示す

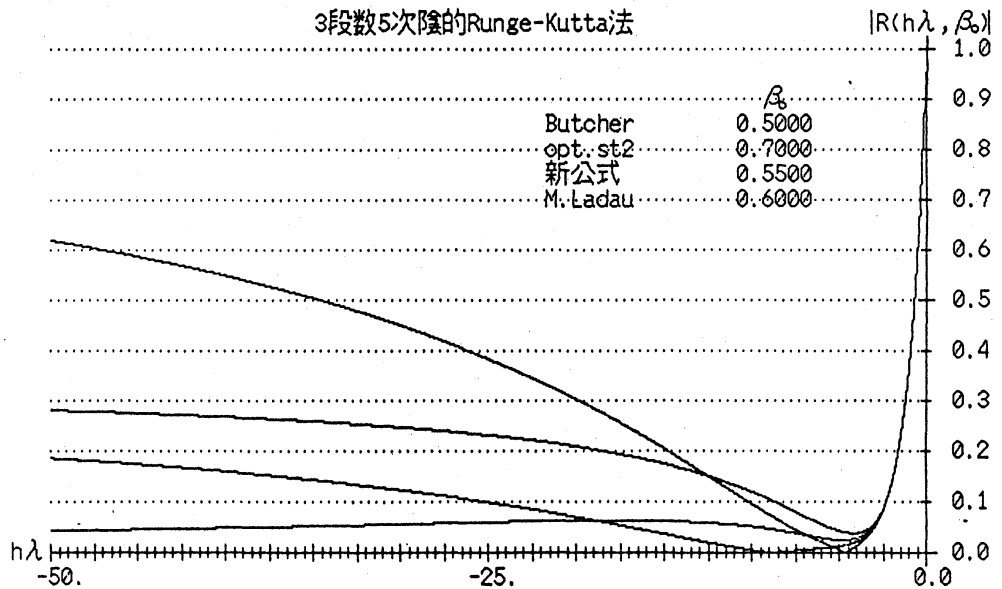


Fig. 8 $y=|R(h\lambda, \beta_0)|$ のグラフ ($h\lambda : -50.0 \sim 0.0$)
 注) 公式名はグラフの左端の上からの順序に対応する

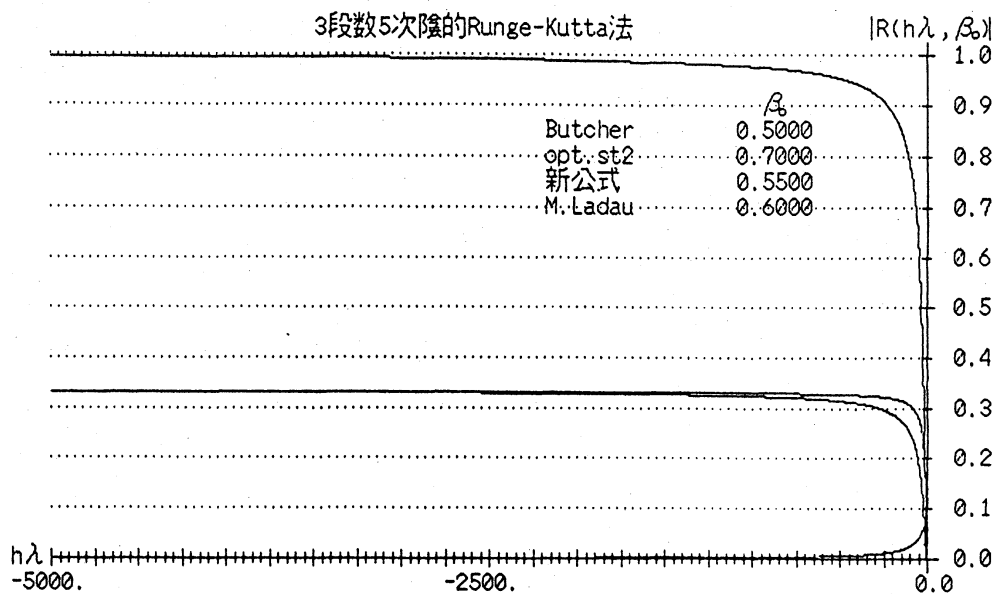


Fig. 9 $y=|R(h\lambda, \beta_0)|$ のグラフ ($h\lambda : -5000.0 \sim 0.0$)
 注) 公式名はグラフの左端の上からの順序に対応する

4. 3の表とグラフからButcherの公式は6次法であるが安定性が余り良くないことがわかる。Opt.st2は不安定領域の面積は最小であるが、打ち切り精度や安定関数の絶対値の極限值において劣る。M.Ladau IA&IIAはL安定であるが打ち切り精度はまだ良くない。そこで、打ち切り精度や安定関数の絶対値の極限値の面でかなり優れている次に示す新公式Ⅱ(4.2)を導いた。

《新公式Ⅱ》

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

(4.2)

3段数4次代数的安定半陰的Runge-Kutta法の4次の次数条件式群の解は、自由パラメータ c_1 のみを含むので、このパラメータと打ち切り精度及び安定性の関係をFig. 10に示す。すなわちFig. 10は横軸に c_1 とり、打ち切り精度判定基準の常用対数 $\log_{10}(A_{43})$ 、不安定領域 S° の面積 $A(S^\circ)$ 及び安定関数の絶対値の極限值($\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} |R(h\lambda)|$)を縦軸にとって、前記の解系の特性をグラフに画いたものである。

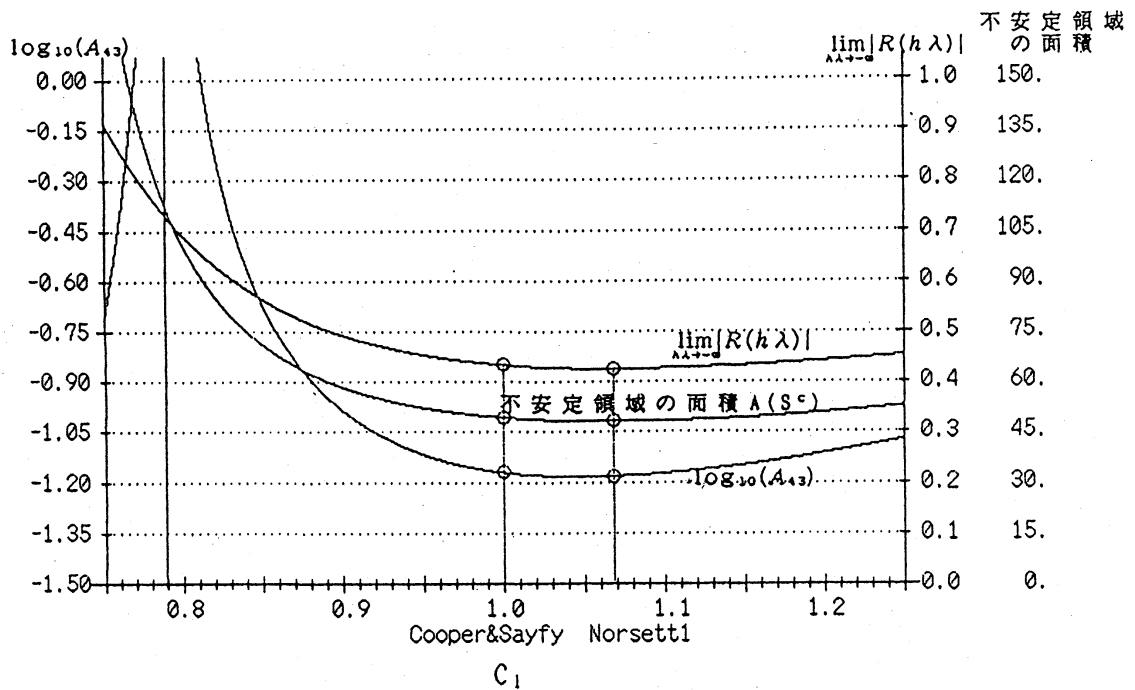


Fig.10 安定性及び切り精度の関係
(3段数4次半陰的Runge-Kutta法の場合)

Fig.10から半陰的法では打ち切り精度，安定性の両者がほぼ最良のところに既知公式が位置しているので，同様な観点からより特性の優れた公式を導く余地はないことがわかる。

4. 4 4段数法

Butcherによる4段数8次法，我々による公式(1.5)から得られる4公式(kayo-Hisae, 公式011, 公式012, 公式021)及びL安定な公式の6者の比較を試みる (Table 3, Fig. 11~Fig. 14参照)。これらの公式はすべて解系(1.5)に含まれるもので，Butcherの公式を除く諸公式は，我々によって導出されたもの，または改良されたものである。

公式名	β_0	A_{73}	不安定領域の面積	$\lim_{h\lambda \rightarrow 0} R(h\lambda, \beta_0) $
Butcher	$\frac{1}{2}$	0.0	∞	1.0
Kayo-Hisae	0.626427	1.04651024d-09	198.521787	0.277973
L安定な公式	$\frac{4}{7}$	3.37436562d-10	370.402634	0.0
公式011	$\frac{43}{77}$	2.25887285d-10	521.791253	0.1
公式012	$\frac{37}{63}$	5.04071901d-10	273.322106	0.1
公式021	$\frac{23}{42}$	1.49971805d-10	757.297338	0.2

Table 3 4段数7次法の β_0 と打ち切り精度及び安定性の関係

Table 3は上記の各公式の打ち切り精度及び安定性に関する特性値を表にしたものである。Fig. 11は β_0 を横軸にとり，打ち切り精度判定基準の常用対数 $\log_{10}(A_{73})$ ，不安定領域 S^c の面積 $A(S^c)$ 及び安定関数の絶対値の極限值 $(\lim_{h\lambda \rightarrow 0} |R(h\lambda, \beta_0)|)$ を縦

軸にとって、公式(1.5)の特性ををグラフに画いたものである。Fig. 12は同じ諸公式の絶対安定領域を複素平面上に画いたものである。Fig. 13, 14は $h\lambda$ を横軸にとって、やはり同じ諸公式に対する安定関数の絶対値のグラフを示したものである。

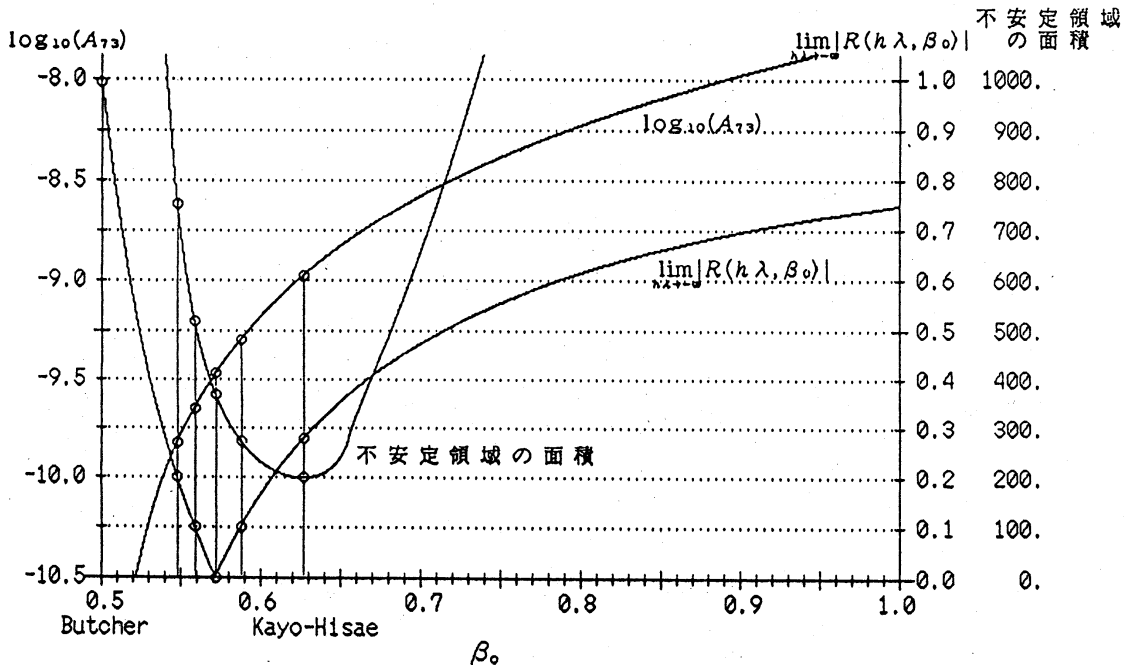


Fig. 11 β_0 と安定性及び切り精度の関係
(4段数7次陰的Runge-Kutta法(1.5)の場合)

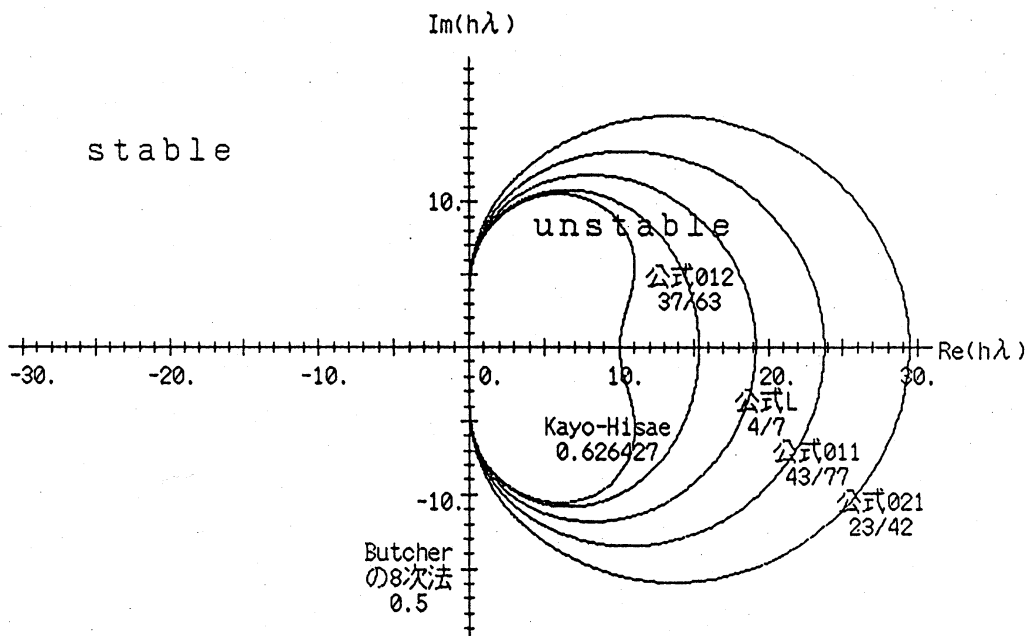


Fig. 12 4段数陰的Runge-Kutta法の絶対安定領域
注) 公式名に傍記された数値は β_0 を示す

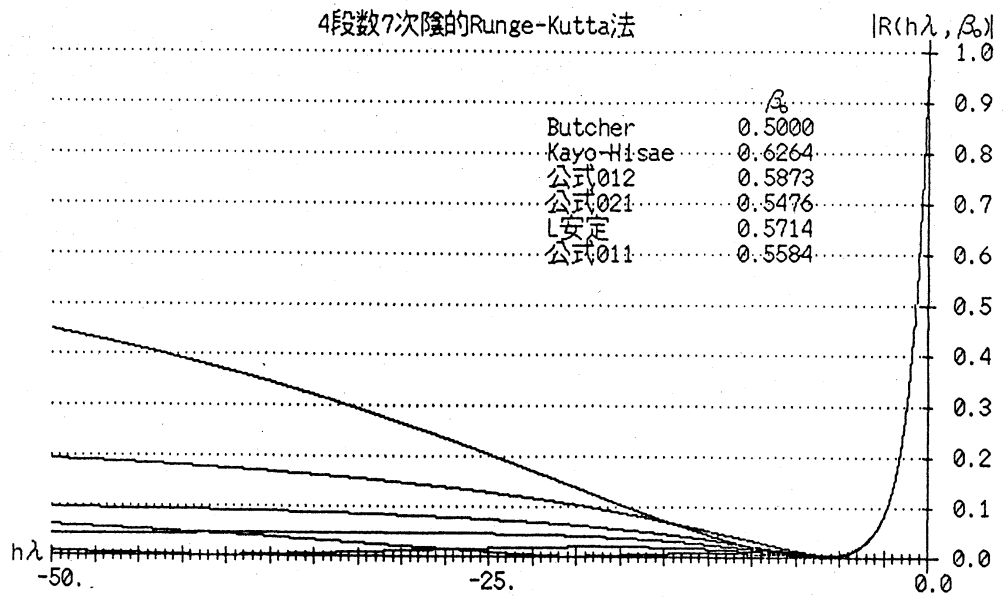


Fig. 13 $y=|R(h\lambda, \beta_0)|$ のグラフ ($h\lambda: -50.0 \sim 0.0$)

注) 公式名はグラフの左端の上からの順序に対応する

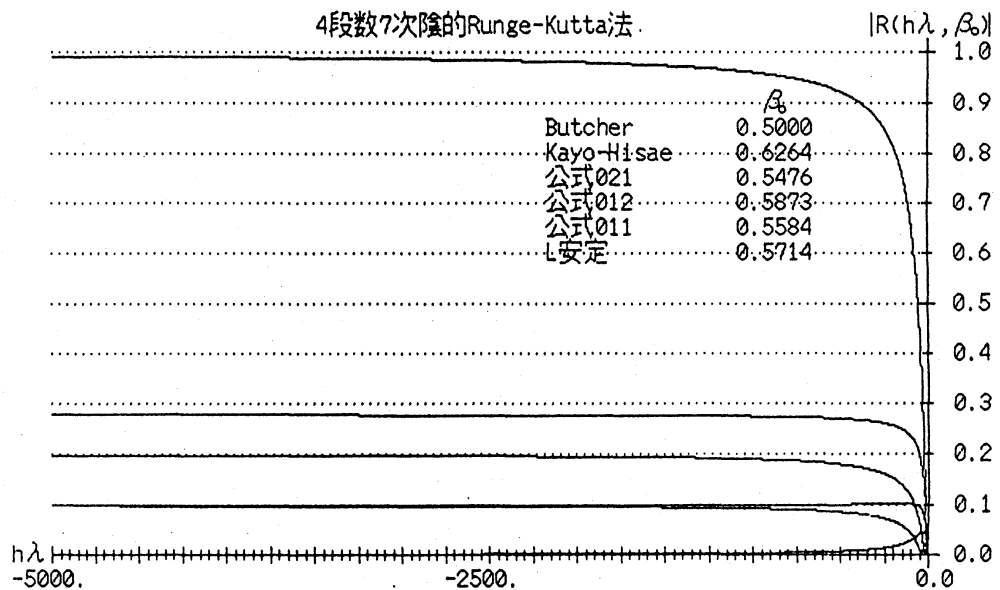


Fig. 14 $y=|R(h\lambda, \beta_0)|$ のグラフ ($h\lambda: -5000.0 \sim 0.0$)

注) 公式名はグラフの左端の上からの順序に対応する

4. 4の表とグラフからButcherの公式は8次法であるが安定性が余り良くないことがわかる。Kayo-Hisaeは不安定領域の面積は最小であるが、打ち切り精度や安定関数の絶対値の極限值において劣る。そこで、次のL安定な公式(公式L(4.3))、安定関数の絶対値の極限值が0.1で打ち切り精度の異なる公式(公式011(4.4)、公式012(4.5))及び打ち切り精度がかなり良く安定関数の絶対値の極限值が0.2である公式021(4.6)を導いた。

《公式L》

$$\begin{aligned}
c_1 &= 0.69431844202973713731d-01 \\
c_2 &= 0.33000947820757187134d+00 \\
c_3 &= 0.66999052179242812866d+00 \\
c_4 &= 0.93056815579702634178d+00 \\
a_{11} &= 0.95040094186056925385d-01 \\
a_{12} &= -0.47060810577250644648d-01 \\
a_{13} &= 0.33084093181656573646d-01 \\
a_{14} &= -0.11631532587489142386d-01 \\
a_{21} &= 0.17720653136163136421d+00 \\
a_{22} &= 0.19067419152822875916d+00 \\
a_{23} &= -0.55518331415063133794d-01 \\
a_{24} &= 0.17647086732774854012d-01 \\
a_{31} &= 0.17810350811242547930d+00 \\
a_{32} &= 0.32631510322115170331d+00 \\
a_{33} &= 0.19067419152822875916d+00 \\
a_{34} &= -0.25102281069377844341d-01 \\
a_{41} &= 0.16940618935282913959d+00 \\
a_{42} &= 0.33390174523412019525d+00 \\
a_{43} &= 0.33222012702402003992d+00 \\
a_{44} &= 0.95040094186056925385d-01 \\
b_1 &= 0.17392742256872692486d+00 \\
b_2 &= 0.32607257743127304739d+00 \\
b_3 &= 0.32607257743127304739d+00 \\
b_4 &= 0.17392742256872692486d+00
\end{aligned}$$

(4.3)

《公式011》

$$\begin{aligned}
c_1 &= 0.69431844202973713731d-01 \\
c_2 &= 0.33000947820757187134d+00 \\
c_3 &= 0.66999052179242812866d+00 \\
c_4 &= 0.93056815579702634178d+00 \\
a_{11} &= 0.93571660931203573530d-01 \\
a_{12} &= -0.43341423215023031079d-01 \\
a_{13} &= 0.29364705819428963546d-01 \\
a_{14} &= -0.10163099332635785327d-01 \\
a_{21} &= 0.17919045611403805474d+00 \\
a_{22} &= 0.18564911828957564310d+00 \\
a_{23} &= -0.50493258176409996918d-01 \\
a_{24} &= 0.15663161980368180831d-01 \\
a_{31} &= 0.17611958336001878878d+00 \\
a_{32} &= 0.33134017645980484712d+00 \\
a_{33} &= 0.18564911828957564310d+00 \\
a_{34} &= -0.23118356316971167691d-01 \\
a_{41} &= 0.17087462260768251920d+00 \\
a_{42} &= 0.33018235787189259556d+00 \\
a_{43} &= 0.33593951438624763961d+00 \\
a_{44} &= 0.93571660931203573530d-01 \\
b_1 &= 0.17392742256872692486d+00 \\
b_2 &= 0.32607257743127304739d+00 \\
b_3 &= 0.32607257743127304739d+00 \\
b_4 &= 0.17392742256872692486d+00
\end{aligned}$$

(4.4)

《公式012》

$$\begin{aligned}
c_1 &= 0.69431844202973713731d-01 \\
c_2 &= 0.33000947820757187134d+00 \\
c_3 &= 0.66999052179242812866d+00 \\
c_4 &= 0.93056815579702634178d+00 \\
a_{11} &= 0.96834845941988809126d-01 \\
a_{12} &= -0.51606728464417744862d-01 \\
a_{13} &= 0.37630011068823673859d-01 \\
a_{14} &= -0.13426284343421027861d-01 \\
a_{21} &= 0.17478173444202321773d+00 \\
a_{22} &= 0.19681594770880483924d+00 \\
a_{23} &= -0.61660087595639213875d-01 \\
a_{24} &= 0.20071883652383021301d-01 \\
a_{31} &= 0.18052830503203365353d+00 \\
a_{32} &= 0.32017334704057565098d+00 \\
a_{33} &= 0.19681594770880483924d+00 \\
a_{34} &= -0.27527077988986008161d-01 \\
a_{41} &= 0.16761143759689725585d+00 \\
a_{42} &= 0.33844766312128726771d+00 \\
a_{43} &= 0.32767420913685291195d+00 \\
a_{44} &= 0.96834845941988809126d-01 \\
b_1 &= 0.17392742256872692486d+00 \\
b_2 &= 0.32607257743127304739d+00 \\
b_3 &= 0.32607257743127304739d+00 \\
b_4 &= 0.17392742256872692486d+00
\end{aligned}$$

(4.5)

《公式021》

$$\begin{aligned}
c_1 &= 0.69431844202973713731d-01 \\
c_2 &= 0.33000947820757187134d+00 \\
c_3 &= 0.66999052179242812866d+00 \\
c_4 &= 0.93056815579702634178d+00 \\
a_{11} &= 0.92347966552159113651d-01 \\
a_{12} &= -0.40241933746500049840d-01 \\
a_{13} &= 0.26265216350905982307d-01 \\
a_{14} &= -0.89394049535913306520d-02 \\
a_{21} &= 0.18084372674104359779d+00 \\
a_{22} &= 0.18146155725736470843d+00 \\
a_{23} &= -0.46305697144199083060d-01 \\
a_{24} &= 0.14009891353362632568d-01 \\
a_{31} &= 0.17446631273301324572d+00 \\
a_{32} &= 0.33552773749201575404d+00 \\
a_{33} &= 0.18146155725736470843d+00 \\
a_{34} &= -0.21465085689965621163d-01 \\
a_{41} &= 0.17209831698672695133d+00 \\
a_{42} &= 0.32708286840336958656d+00 \\
a_{43} &= 0.33903900385477059309d+00 \\
a_{44} &= 0.92347966552159113651d-01 \\
b_1 &= 0.17392742256872692486d+00 \\
b_2 &= 0.32607257743127304739d+00 \\
b_3 &= 0.32607257743127304739d+00 \\
b_4 &= 0.17392742256872692486d+00
\end{aligned}$$

(4.6)

§ 5. 数値例

テスト問題

$$\begin{aligned} y_1' &= -0.1y_1 - 199.9y_2, & y_1(0) &= 2 \\ y_2' &= & -200.0y_2, & y_2(0) &= 1 \end{aligned} \quad (5.1)$$

理論解

$$\begin{aligned} y_1 &= e^{-200x} + e^{-0.1x} \\ y_2 &= e^{-200x} \end{aligned} \quad (5.2)$$

この問題において急速に減速する成分 (e^{-200x}) がほぼ消滅した x の値を出発点として、上記の諸公式によりいろいろな刻み幅を用いて解き数値解の誤差を得た。

また、他に10問のstiff問題について同様の数値実験を行ったが、各段数、各問題の結果が同様な傾向を示しているので、ここではそれらの代表として3段数法による(5.1)の数値解をとり上げ、第一ステップ及び最終ステップの誤差の絶対値の常用対数をFig. 15及びFig. 16に示す。最大誤差を特にとり上げなかったのは、殆どの場合においてそれは第一ステップの誤差と一致したからである。

第一ステップ誤差のグラフ

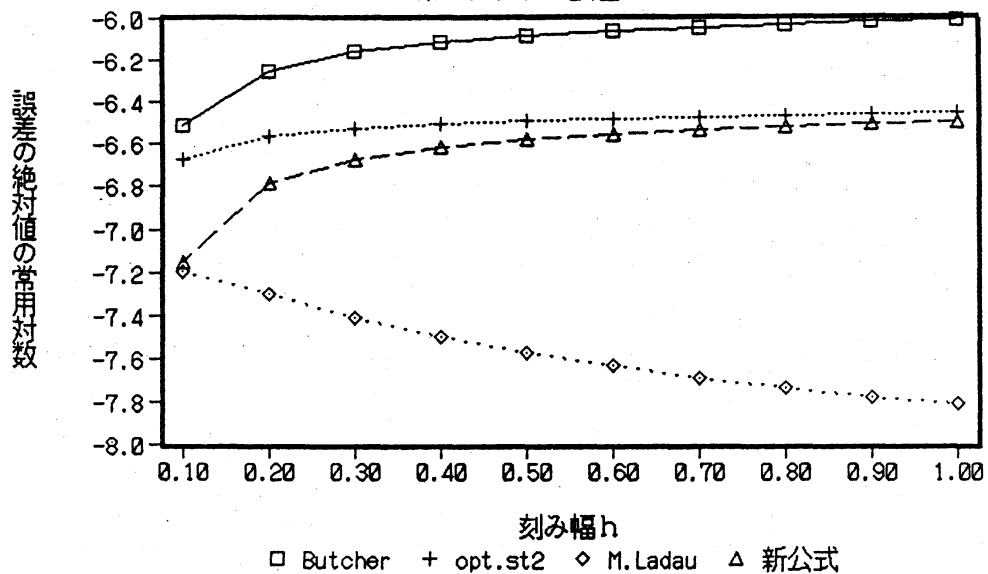


Fig. 15 第一ステップの誤差の絶対値のグラフ

最終ステップ誤差のグラフ

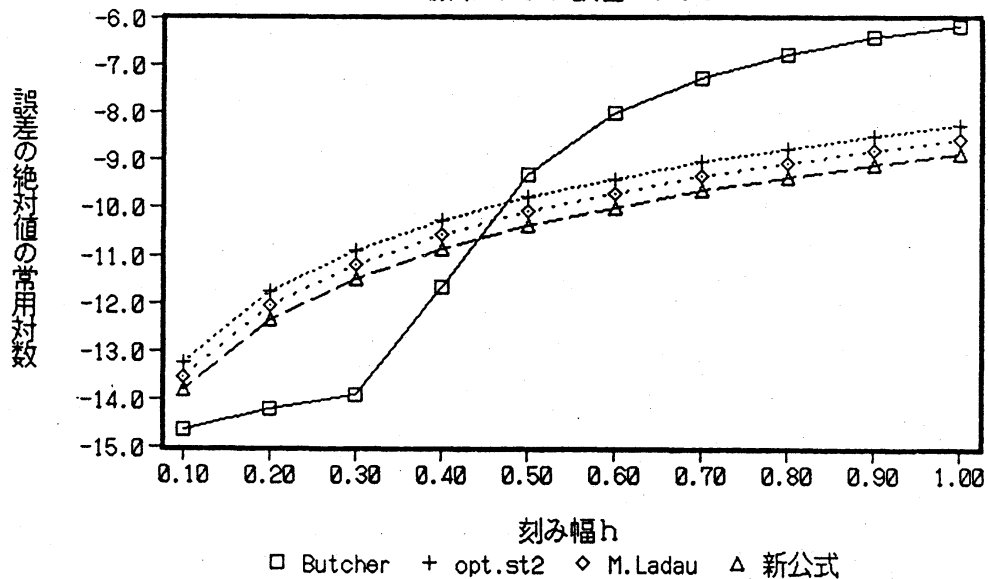


Fig. 16 最終ステップの誤差の絶対値のグラフ

数値実験の結果から、stiff問題において急速に減衰する成分が消滅した後の長区間の積分において刻み幅を大きくとる場合、打ち切り精度がかなり良く安定関数の絶対値の極限值が小さい公式において良い精度が得られることがわかった。

§ 6. あとがき

特性値の表やグラフと数値例の誤差の調査から、stiff問題において急速に減衰する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において有効な公式（すなわちstiff問題の求解の継投策として有効な公式）は、単に打ち切り精度がよければでなく、安定関数の絶対値の小さい（一方これは不安定領域の面積の大きさと関係があるが）公式でなければならないことがわかる。

今後は、この思想を生かしてstiff問題向きの有用な道具を作って行きたい。

《参考文献》

1. Butcher, J. C.; The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, John Wiley & Sons (1987)
2. Dekker, K, Verwer J. G.; Stability of Runge-Kutta method for stiff nonlinear differential equations, North-Holland (1984)
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