

陽的Runge-Kutta法の評価ルーチンとその特性について

山梨大学 工学部 矢崎 寛 (Hiroshi Yasaki)
日本大学 工学部 田中正次 (Masatsugu Tanaka)
山梨大学 工学部 山下 茂 (Shigeru Yamashita)

§ 1. まえがき

Runge-Kutta 法は, C. Runge, W. Kuttaらにより1900年ごろ創始された常微分方程式の初期値問題

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

を解く代表的な数値解法で, 1段階法で最も普通に使われる方法であり, 他の多段階法の出発値の計算をはじめとして, その安定性とアルゴリズムの簡単さのために長区間を連続的に積分する場合にも科学者や技術者によって古くから愛好されてきた方法である.

ここで陽的Runge-Kutta法の一般形を示そう. 常微分方程式の初期値問題(1.1)において, $x = x_n$ における y の数値解 y_n が得られているとき, $x = x_{n+1}$ における y の数値解 y_{n+1} を

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^p c_i k_i \quad (n=0, 1, 2, \dots)$$

$$k_i = h_n f(x_n, y_n)$$

$$k_i = h_n f(x_n + a_i h_n, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j) \quad (i=2, 3, \dots, p)$$

$$h_n = x_{n+1} - x_n \quad (1.2)$$

によって求める方法を p 段数陽的Runge-Kutta法という. a_i, b_{ij}, c_i は公式を特徴づける係数であり

$$a_i = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} \quad (i=2, 3, \dots, p)$$

とする. また a_i, b_{ij}, c_i は, 次のような係数マトリックスによっても表現される.

a_2	b_{21}										
a_3	b_{31}	b_{32}									
\vdots											
a_p	b_{p1}	b_{p2}						$b_{p,p-1}$			
	c_1	c_2						c_{p-1}	c_p		

q 次法を得るための最低必要段数 p は, $q \leq 4$ では $p=q$ であるが, $q > 4$ では $p > q$ であることが分かっている. 表1.1に段数と到達可能次数の関係を示す.

段数 p	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	...
次数 q	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7	8	...

表 1.1 段数と到達可能次数の関係

また, 以下の年表はRunge-Kutta法の歴史を簡略に表記したものである。

研究内容と出来事	
1900年	Runge-Kutta法創始
1950年	電子計算機の登場 高次法
1960年	最適化 (打ち切り精度) 高次法, 陰的法, 半陰的法 Pseudo-Runge-Kutta法 安定性の解析 埋め込み型公式
1970年	最適化 (安定性, 精度) 単調公式 数式処理技術の開発 ソフトウェアの開発 極限公式, 実質公式
1980年	高次法 極限公式

このような歴史的背景を経て、現在では低次から高次に至るおびただしい数の陽的Runge-Kutta法が存在し、いかなる公式を利用すべきかユーザを戸惑わせるような現状を招来するに至っており、現在公にされている多くの公式の特性の総合的な調査が強く求められている。

そこで我々の研究室では、石原、高山、渋谷、大坪により昭和58年度から60年度にかけて、陽的 Runge-Kutta公式の段数と係数 a_i, b_{ij}, c_i が入力されたとき、その公式について次数、打ち切り精度、丸め誤差特性、安定特性などの重要な情報を提供する陽的 Runge-Kutta 法診断ルーチン D R E R K F (Diagnostic Routine for Explicit Runge-Kutta Formula) を開発した(文献(6), (11))。このルーチンでは打ち切り精度判定基準を、局所打ち切り誤差の主誤差項 $h^{q+1} t_n$ に関して求めているが、今回われわれは D R E R K F に改良を加え、更に $h^{q+2} t_{n+1}$ の項についても求め、より慎重を期すようにした。また、新たに公式の単調性についても診断できるようにするとともに、やや物足りなかった絶対安定領域の図形情報の出力機能についても拡張を加え、絶対安定領域の内外に等高線を出力できるようにし、さらに同一画面上に安定多項式のグラフも出力させ、両者の比較が容易にできるようにするなど安定性のより正確な把握を期した。

本研究は、このようにして発展させた新しい診断ルーチン D R E R K F を用いて、おびただしい数の陽的 Runge-Kutta 公式それぞれについて特性の調査を行い、それを総合的にまとめることによってユーザの意志決定を支援し、さらには多くの研究者に有用なデータを提供するという希望のもとに進められた。

§ 2. 陽的Runge-Kutta法の評価の観点と尺度

2.1 打ち切り誤差の大小とその評価

p 段数 q 次法の $x=x_{n+1}=x_n+h$ における近似解 y_{n+1} の局所打ち切り誤差は

$$T_{n+1} = g_q h^{q+1} + O(h^{q+2}) \quad (2.1.1)$$

と表すことができる。ここで g_q は、次式に示すように公式の係数のみの関数 a_{qj} と、(1.1)の右辺の関数に依存する関数ベクトル $g_j(x_n, y_n)$ との積和の形で表現される。

$$g_q = \sum_{j=1}^{l_p} a_{qj} g_j(x_n, y_n) \quad (2.1.2)$$

ここで l_p は、微分方程式(1.1)が単一か連立かと、公式の次数 q に依存して定まる自然数である。我々は、 p 段数 q 次法の打ち切り誤差の大小を判定するために、その有効性について十分な実績をもつ次の二つの数量 A_{q2} 及び A_{q3} を使用する。

$$A_{q2} = \sum_{j=1}^{l_q} |a_{qj}| \quad (2.1.3)$$

$$A_{q3} = \sum_{j=1}^{l_q} a_{qj}^2 \quad (2.1.4)$$

2.2 安定性とその優劣の評価

一般の常微分方程式(1.1)を線形微分方程式

$$y' = \lambda y \quad (\lambda \text{ は複素定数}) \quad (2.2.1)$$

で近似しよう。いま p 段数 q 次陽的 Runge-Kutta 法 (以下 p 段数 q 次法と略称する) (1.2) を (2.2.1) に適用すると、簡単な計算から

$$e_{n+1} = P_{p,q}(h\lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p) e_n + E_n \quad (2.2.2)$$

が得られる。ここで $y_n, y(x_n)$ はそれぞれ $x=x_n$ における数値解及び理論解、

$$e_n = y_n - y(x_n) \quad (2.2.3)$$

$$P_{p,q}(h\lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p) = \sum_{k=0}^q \frac{(h\lambda)^k}{k!} + \sum_{i=q+1}^p \gamma_i \cdot \frac{(h\lambda)^i}{i!} \quad (2.2.4)$$

また、 E_n はこのステップで発生する局所誤差である。

$P_{p,q}(h\lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p)$ は p 段数 q 次法の安定多項式と呼ばれる。(2.2.4)式の各 γ_i は、公式の係数のみの関数である。(2.2.2)式から、安定多項式は集積誤差の次のステップへの伝播率になっていることがわかる。 p 段数 q 次法(1.2)は、

$$|P_{p,q}(h\lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p)| \leq 1 \quad (2.2.5)$$

であるとき、その $h\lambda$ に対して絶対安定であるという。また次式によって定義される領域 S を p 段数 q 次法の絶対安定領域という。

$$S = \{h\lambda \mid |P_{p,q}(h\lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p)| \leq 1, h\lambda \text{ は複素数}\} \quad (2.2.6)$$

安定性に有効な原点を含む絶対安定領域の単連結な閉部分領域 S_e を、 p 段数 q 次法の有効絶対安定領域と呼ぶことにしよう。そのとき次式によって定義される閉区間 S_1 を、 p 段数 q 次法の絶対安定区間という。

$$S_1 = R \cap S_e = [-\alpha, 0.0] \quad (2.2.7)$$

ただし R は実数全体の集合である。ここでは有界な絶対安定領域をもつ p 段数 q 次法の安定性の優劣を、(1)有効絶対安定領域 S_e の面積 $A(S_e)$ の大小 (2)絶対安定区間の長さ α

(3)有効絶対安定領域の包含関係 (4)同じ $h\lambda$ に対する安定多項式の絶対値の大小 によって評価する。

2.3 丸め誤差に関する性質の評価とその他の観点

公式の丸め誤差に関する性質の良否を判定するために、やや粗雑な尺度ではあるが、次式によって定義される数量R1を使用する。

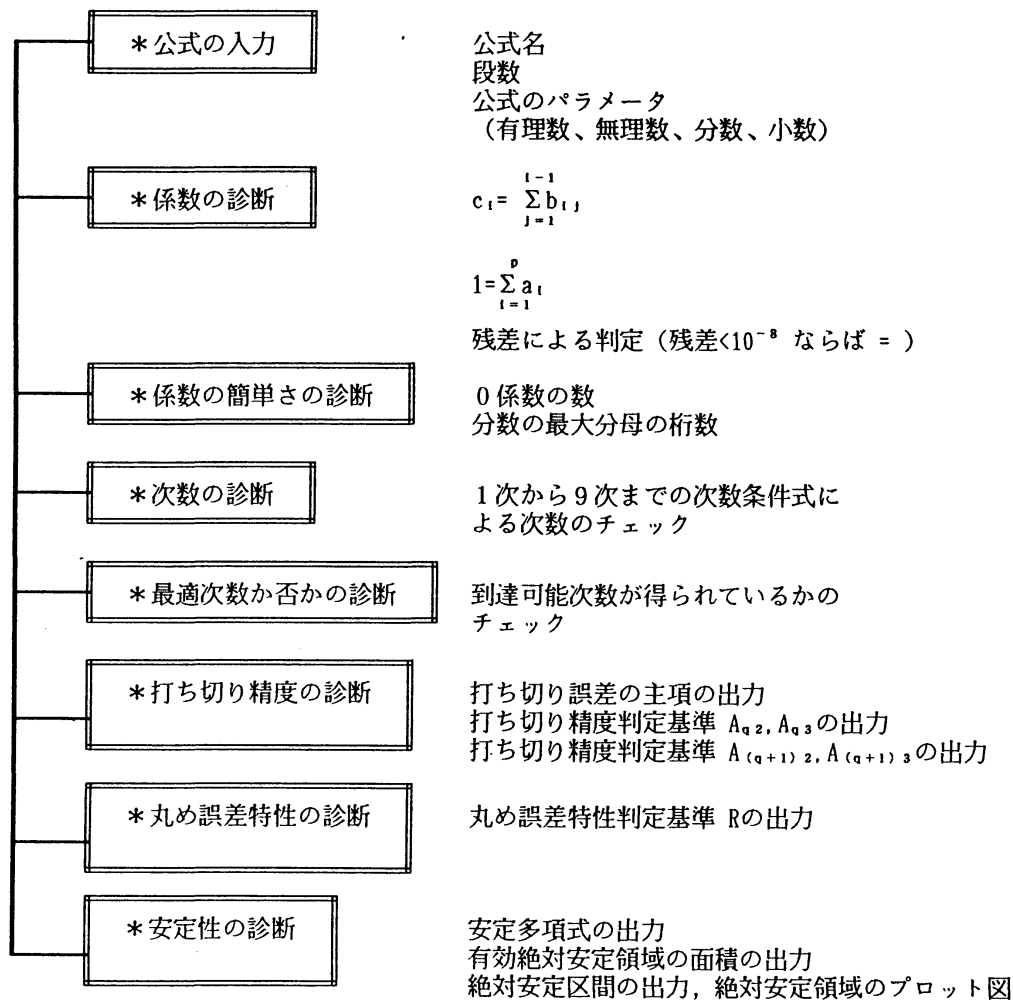
$$R1 = \sum_{i=1}^p |c_i| + \sum_{i=2}^p \sum_{j=1}^{i-1} |b_{ij}| \quad (2.3.1)$$

また、すべての係数が非負で、 $0 \leq a_i \leq 1.0$ および $a_i \leq a_j$ ($i < j$) が満足されるとき、陽的Runge-Kutta法(1.2)は単調であるという。

公式の係数の簡単さは(1)零係数の数、(2)係数が分数であるときの最大分母の桁数、(3)無理係数であるか否かのチェック、によって判断する。

§3. 陽的Runge-Kutta法の評価のためのプログラムDREKRF

上のような観点に基づいて、陽的Runge-Kutta法の諸特性を評価するシステムがDREKRFであり、以下はその診断機能の概要である。



DREKRFは主に INPUT, ORDER, ERROR, STABILITY の4つのサブルーチンから構成されている。

3.1 SUBROUTINE INPUT

・機能

診断に必要なデータ、すなわち公式の段数、公式の係数の種類(小数か、分数か、無理数を使用しているか)、公式の係数 a_i, b_{ij}, c_i を読み込む。そして係数マトリックスの出力、さらに係数のチェックを行い、その結果も同時に出力する。もしこの時点でエラーが検出されると、メッセージを出力し診断を停止する。また、零係数の数と分数係数の最大桁

数も出力する。対応できる公式の係数のタイプは次の4タイプである。

- ・小数型（無理数未使用）
- ・分数型（無理数未使用）
- ・小数型（無理数使用）
- ・分数型（無理数使用）

3.2 SUBROUTINE ORDER

・機能

入力された公式が何次法で、連立微分方程式と、単一微分方程式のどちらを対象に作られた公式であるかを次数条件式より判定する。ここで次数条件式は、打ち切り誤差および打ち切り精度判定基準の計算の準備として、達成次数より2次上の次数条件式群の左辺の値まですべて計算しておく。また、異常公式を指摘する。すなわち、入力段数の達成可能次数より小さい次数法の指摘を行う。

・アルゴリズム

次数条件式の右辺の正確な値は、DATA文を用いて1次から9次までの連立微分方程式、単一微分方程式についてそれぞれ $RR(I)$ ($I=1, 483$), $TR(J)$ ($J=1, 104$) に入れておく。ただしTRは連立と重複していないもののみとする。

入力された係数パラメータにより、次数条件式群の左辺の値 RL , TL を計算する。次数条件式群が成立しているかどうかの判定基準は、

- (1) 連立については $|RL(I)-RR(I)| < 1.0 \times 10^{-8}$
- (2) 単一については $|TL(J)-TR(J)| < 1.0 \times 10^{-8}$

とする。

3.3 SUBROUTINE ERROR

・機能

このサブルーチンではサブルーチンORDERにおいて計算しておいた達成次数より2次上までの次数条件式群の左辺の値により打ち切り誤差の主項 g_n とその次の項 g_{n+1} 、それによる打ち切り誤差特性判定基準 A_{q2} , $A_{(q+1)2}$, A_{q3} , $A_{(q+1)3}$ (q は達成次数) を求める。さらに丸め誤差特性判定基準と、単調性についての評価を行う。

・アルゴリズム

連立、単一の微分方程式の右辺の関数に依存する部分を、それぞれ $RF(I)$ ($I=1, 482$), $TF(J)$ ($J=1, 200$) に、それぞれしまっておく。また、各次数に対する打ち切り誤差項の項数、連立の場合と重ならない単一のものの項数、さらにどの次数条件式と対応しているかなどがわかるように先頭番号などをにしまっておく。

サブルーチンORDERから引き渡されたDEにより、連立、単一のどちらに対応するか判断し、連立と単一のいずれかについて打ち切り誤差の主項の値を計算する。こうして求めた打ち切り誤差の主項の a_{qi} より打ち切り精度判定基準 A_{q2} , A_{q3} を計算する。

$$A_{q2} = \sum_{i=1}^{num} |a_{qi}| \quad A_{q3} = \sum_{i=1}^{num} (a_{qi})^2 \quad (3.3.1)$$

また、その次の項 g_{q+1} についても同様に求める。(num; 次数条件式の個数)

ついで丸め誤差特性判定基準R1を計算し、単調性の検証もする。

$$R1 = \sum_{i=1}^p |c_i| + \sum_{i=2}^p \sum_{j=1}^{i-1} |b_{ij}| \quad (3.3.2)$$

3.4 SUBROUTINE STABILITY

・機能

安定多項式を出力し安定性を支配するパラメータ γ_i を求める。

有効絶対安定領域の面積と絶対安定区間を求める。

$h_n \lambda$ を実軸に沿って動かしたときの安定多項式 $P_{p,q}(h_n \lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p)$ のグラフを出力し絶対安定領域をプロットし、その内外に等高線も画く。

・アルゴリズム

1段数1次から11段数8次までの安定多項式を $PP(I)$, ($I=1, 11$) にしまっておく。サブルーチンERRORから引き渡された段数Pに応じて安定多項式を出力する。

安定多項式の各項の係数を、段数P、次数Qに応じて計算し、P次の項の係数を ALPHA(1) に、(P-1) 次の項を ALPHA(2) に、... 1次の項を ALPHA(P) に入れる。ただし ALPHA(1)=0 であるときは、後でD-K-A法が使えないので、添字を1ずつずらしておく

(ALPHA(1) ← ALPHA(2) ← ...)

このようにして安定多項式を求めたのち、 $h_n \lambda$ を実軸に沿って動かしながらそのときの安定多項式の値をプロットする。

Durand-Kerner-Aberth 法を用いて、安定多項式 $P_{p,q}(h_n \lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p) = e^{\theta}$ (すなわち

$|P_{p,q}(h_n \lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p)| = 1$) とおいた方程式を解く. すなわち θ を 0 から 2π まで ($\pi/45$) ラジアンずつ変化させ, 毎回この p 次方程式を解く.

これにより得られた (90 * P) 個の解について, その実数部を REP(J, I) に, 虚数部を IMP(J, I) (J=0, 89, I=1, P) にしまう. また, 解をソートして複素平面上にプロットする. このソーティングは, 第 1 番目の解の集合 (90 個) から第 P 番目の解の集合 (90 個) の入れ替えを行い, 原点から一連の動作で単連結部をプロットする為に行う. また, ソーティングされた有効な解について順次台形則を適用することにより面積を近似する. 面積は, 単連結部全体, 有効部分, 無効部分に分けて計算し, 同時に絶対安定区間も求める.

また絶対安定領域の中と外に等高線を描くため, $|P_{p,q}(h_n \lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p)| = 0.9, 0.8, \dots, 0.1, |P_{p,q}(h_n \lambda, \gamma_{q+1}, \dots, \gamma_p)| = 3.0, 5.0, 10.0$ とおいた方程式を解き, 得られた解をソートしてプロットする.

(i) 安定性を支配するパラメータ γ_i の求め方

安定性を支配するパラメータ γ_i は次のような式から求めることができる.

$$\gamma_i = i! \sum_{k=1}^i c_k b_k \quad (q+1 \leq i \leq p) \quad (3.4.1)$$

i 個の積和

安定多項式(2.2.4)からもわかるように γ_i は (p-q) 個ある.

(ii) 絶対安定領域の面積の有効・無効の判定基準

【定義 3.1】 AREA, AREA1, AREA2, AREA3, (AREA4, AREA5) の定義

AREA : 絶対安定領域のうち原点を含む単連結の閉領域の面積.

AREA1 : AREAの中で, 第一, 第四象限にはみ出した部分の面積. 無効とみなす.

AREA2 : AREAの中で有効とみなされる部分の面積.

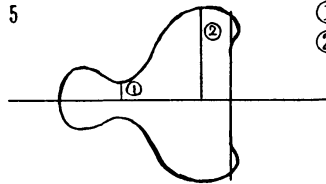
AREA3 : 絶対安定領域のうち原点を含む単連結の部分にくびれがあった場合, そのくびれより左側にある部分の面積. 有効な場合と無効な場合がある.

AREA4, AREA5は2つめ, 3つめのくびれがあったときのためのものである.

面積の有効・無効の判断は, 図 3.5 のようにくびれがあった場合, そのくびれの部分の Imaginary Part の大きさを LMIN, 第 2 象限の Imaginary Part の最大のものを LMAX とするとき, $\frac{LMIN}{LMAX} < \frac{1}{10}$ ならば無効とみなし, $\geq \frac{1}{10}$ ならば有効とみなす. これは図 3.

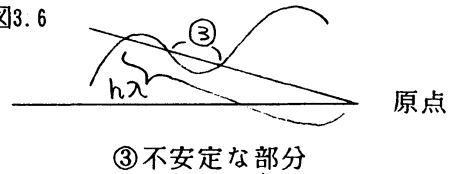
6 のようにくびれが大きいとき, $h_n \lambda$ を図のようにとれば, 途中に不安定な部分が出てくるからである. AREA1を無効とするのもこの理由からである. AREA3, AREA4, AREA5 は, このくびれの場合の対応のためのもので, くびれが3つある場合まで対処できる.

図3.5



① LMIN
② LMAX

図3.6



③ 不安定な部分

3.5 評価ルーチン DREKRF の使用法

まず, 公式を評価したいユーザは, 次のような公式の係数のファイル PAR.IN を作る.

①公式の係数が分数で, 無理数を使用していない場合 (例. Heun の 3 段数 3 次法)

ファイルの内容 : 説明

3	: 公式の段数
F	: 係数の種類 (分数は Fraction)
N	: 無理数を使っているか (No)
1.0d0,	: a ₂ の分子
3.0d0	: a ₂ の分母
2.0d0,	: a ₃ の分子
3.0d0	: a ₃ の分母
1.0d0,	: b ₂₁ の分子
3.0d0	: b ₂₁ の分母
0.0d0,	: b ₃₁ の分子
3.0d0	: b ₃₁ の分母
2.0d0,	: b ₃₂ の分子
3.0d0	: b ₃₂ の分母

Heun の 3 段数 3 次法の
係数マトリックス

1/3	1/3	
2/3	0/3	2/3
	1/4	0/4 3/4

以下略

② 公式の係数が分数で、無理数を使用している場合 (例. Gill の 4 段数 4 次法)
 ファイルの内容 : 説明

4 : 公式の段数
 F : 係数の種類 (分数は Fraction)
 Y : 無理数を使っているか (Yes)
 1. d0, : a₂ の d の部分 (右図参照)
 0. d0, : a₂ の e の部分 (右図参照)
 0. d0, : a₂ の f の部分 (右図参照)
 2. d0 : a₂ の g の部分 (右図参照)
 1. d0, : a₃ の d の部分
 0. d0, : a₃ の e の部分
 0. d0, : a₃ の f の部分
 2. d0 : a₃ の g の部分
 以下略

$$\frac{d + e\sqrt{f}}{g}$$

公式のフォーマット

③ 公式の係数が小数で、無理数を使用していない場合 (例. 田中の 5 段数 4 次法)
 ファイルの内容 : 説明

5 : 公式の段数
 D : 係数の種類 (小数は Decimal)
 N : 無理数を使っているか (No)
 0. 235d0 : a₂
 0. 44d0 : a₃
 0. 994d0 : a₄
 1. 0d0 : a₅
 0. 235d0 : b₂₁
 -0. 02727517047d0 : b₃₁
 0. 4672751705d0 : b₃₂
 以下略

④ 公式の係数が小数で、無理数を使用している既知公式は今の所ないので省く。

以上のような公式の係数ファイル PAR. IN を作ったら、後は D R E R K F を実行させれば良い。プログラム中で OPEN(5, FILE='PAR. IN') となっているのですぐに公式の評価結果が得られる。

3. 6 使用例

この節では使用例として 4 段数 4 次古典的 Runge-Kutta 法の評価結果を掲載する。

***** THE DIAGNOSIS *****

----- INPUT DATA -----

公式の入力のチェック

* stages ----- 4 : 段数の出力
 * 4-stage explicit Runge-Kutta formula is : 4 段数陽的 R-K 法の一般形

$$K_1 = H_n * F(X_n, Y_n)$$

$$K_i = H_n * F(X_n + A_i * H_n, Y_n + \sum_{j=1, i-1} B_{ij} * K_j) \quad [i = 2, 4]$$

$$Y_{n+1} = Y_n + \sum_{i=1, 4} C_i * K_i \quad X_{n+1} = X_n + H_n$$

* formula ----- : 係数マトリックスの表示

1/	2		1/	2					
1/	2		0/	1	1/	2			
1/	1		0/	1	0/	1	1/	1	

		1/	6	2/	6	2/	6	1/	6

* check ----- : 係数のチェック

This formula is perfect] It has no error]

----- Coefficients -----

0 coefficients --- 3 : 0 係数の数

The largest coefficient --- 1 Keta : 係数の最大桁

----- ORDER -----

次数のチェック

This formula is 4th order method

The result of test, this formula satisfied conditional equations of 4th order
: この公式は4次の次数条件式

for systems of D.E. を満たしていた

Therefore, this formula is 4-stage 4th order explicit Runge-Kutta formula for
: この公式は4段階4次陽的

systems of D.E. Runge-Kutta法である

* check -----

This formula is normal]

For a 4-stage method, the best possible order is 4]

: 4段階の達成可能次数は4次
なのでこの公式はNormalである

----- TRUNCATION ERROR -----

打ち切り誤差特性

* for systems of D.E.

T4= g4* Hn**5 +g5 *Hn**6+ 0(Hn** 7) : 打ち切り誤差の主項の表示

g4=

<p>a 4 1* f'''' (f, f, f, f)</p> <p>+ a 4 2* f'' (f'' (f, f,), f)</p> <p>+ a 4 3* f'' (f' (f), f, f)</p> <p>+ a 4 4* f' (f'''' (f, f, f))</p> <p>+ a 4 5* f' (f' (f'' (f, f)))</p> <p>+ a 4 6* f' (f' (f' (f)))</p> <p>+ a 4 7* f'' (f' (f), f' (f))</p> <p>+ a 4 8* f'' (f' (f' (f)), f)</p> <p>+ a 4 9* f' (f'' (f' (f), f))</p>	<p>; a 4 1=-0.3472222222222222D-03</p> <p>; a 4 2= 0.2083333333333333D-02</p> <p>; a 4 3=-0.2083333333333333D-02</p> <p>; a 4 4= 0.13888888888888889D-02</p> <p>; a 4 5=-0.2083333333333333D-02</p> <p>; a 4 6= 0.8333333333333333D-02</p> <p>; a 4 7=-0.6250000000000000D-02</p> <p>; a 4 8=-0.8333333333333333D-02</p> <p>; a 4 9= 0.41666666666666667D-02</p>
-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

----- CRITERIA OF THE SIZE OF TRUNCATION ERROR (1st term) -----

* for systems of D.E.

* A 42 = Sum(i=1, 9) abs(a 4i) : 打ち切り精度判定基準A_{4,2}, A_{4,3}
の定義

* A 43 = Sum(i=1, 9) squ(a 4i)

A 42 = 0.35069444444444444D-01 : 打ち切り精度判定基準A_{4,2}

A 43 = 0.21038290895061728D-03 : 打ち切り精度判定基準A_{4,3}

////////////////////////////////////

: 打ち切り誤差の第2項の表示

```

g5=
  a 5 1* f(5)(f, f, f, f, f) ; a 5 1=-0.17361111111111111111D-03
+ a 5 2* f''''(f'(f), f, f, f) ; a 5 2=-0.17361111111111111111D-02
+ a 5 3* f''''(f''(f, f), f, f) ; a 5 3= 0.86805555555555555556D-03
+ a 5 4* f''''(f''''(f, f, f), f) ; a 5 4= 0.17361111111111111111D-02
+ a 5 5* f''''(f''''(f''(f, f), f)) ; a 5 5= 0.52083333333333333333D-03
+ a 5 6* f''''(f''''(f''''(f, f, f))) ; a 5 6=-0.34722222222222222222D-03
+ a 5 7* f''''(f''''(f''''(f''(f, f)))) ; a 5 7= 0.13888888888888888889D-02
+ a 5 8* f''''(f''''(f''''(f''''(f, f)))) ; a 5 8= 0.13888888888888888889D-02
+ a 5 9* f''''(f''''(f''(f), f'(f), f)) ; a 5 9=-0.52083333333333333333D-02
+ a 5 10* f''''(f''''(f''(f, f), f'(f))) ; a 5 10=-0.17361111111111111111D-02
+ a 5 11* f''''(f''''(f''(f'(f), f, f))) ; a 5 11= 0.11754943508222875D-37
+ a 5 12* f''''(f''''(f''(f''(f), f, f))) ; a 5 12=-0.69444444444444444444D-02
+ a 5 13* f''''(f''''(f''''(f''(f), f, f))) ; a 5 13= 0.31250000000000000000D-02
+ a 5 14* f''''(f''''(f''''(f''''(f, f)))) ; a 5 14= 0.69444444444444444444D-02
+ a 5 15* f''''(f''''(f''''(f''''(f, f)))) ; a 5 15= 0.55555555555555555556D-02
+ a 5 16* f''''(f''''(f''''(f''''(f''(f, f)))) ; a 5 16= 0.41666666666666666667D-02
+ a 5 17* f''''(f''''(f''''(f''(f), f'(f)))) ; a 5 17=-0.10416666666666666667D-02
+ a 5 18* f''''(f''''(f''''(f''(f, f)), f'(f))) ; a 5 18=-0.69444444444444444444D-02
+ a 5 19* f''''(f''''(f''''(f''''(f, f), f))) ; a 5 19=-0.34722222222222222222D-02
+ a 5 20* f''''(f''''(f''''(f''''(f, f), f))) ; a 5 20= 0.34722222222222222222D-03

```

----- CRITERIA OF THE SIZE OF TRUNCATION ERROR (2nd term) -----

* for systems of D.E.

* A 52 = Sum(i=1, 20) abs(a 5i) : 打ち切り精度判定基準A₅₂, A₅₃
の定義

* A 53 = Sum(i=1, 20) squ(a 5i)

A 52 = 0.88715277777777777778D-01 : 打ち切り精度判定基準A₅₂

A 53 = 0.46751422646604938D-03 : 打ち切り精度判定基準A₅₃

----- CRITERION OF ROUND-OFF ERROR -----

丸め誤差特性

* for systems of D.E.

* R1 = Sum(i=1, 4) abs(Ci) + Sum(i=2, 4)Sum(j=1, i-1) abs(Bij)

* R2 = Sum(i=1, 4) abs(Ci) : 丸め誤差特性判定基準R₁, R₂の定義

R1 = 0.30000000000000000000D+01 : 丸め誤差特性判定基準R₁

R2 = 0.10000000000000000000D+01 : 丸め誤差特性判定基準R₂

* This formula is monotone. : この公式は単調な公式である

安定性に関する性質

----- POLYNOMIAL OF STABILITY -----

PP(44)=1+Z+Z**2/2!+Z**3/3!+Z**4/4! : 安定多項式の出力
Z = hλ である

Where, Z = h * LAMDA

----- THE AREA OF THE REGION OF ABSOLUTE STABILITY -----

: 絶対安定領域の定義

* AREA ; the area of the region of absolute stability

* AREA 1 ; the area of the non-effective region of absolute stability (in the first and the forth quadrant)

* AREA 2 ; the area of the effective region of absolute stability

* AREA 3: the area of the non-effective region of absolute stability (smaller than LMIN(1)) : LMIN は、くびれた部分のReal Part

AREA = 12.70008252277239400 : 絶対安定領域の面積
 AREA 1 = 0.50399783329155307 : 第1, 第4象限にはみ出た部分
 * AREA 2 = 12.19608468948084094 : 有効絶対安定領域の面積
 AREA 3 = 0.00000000000000000 : くびれた部分の面積

----- THE INTERVAL OF ABSOLUTE STABILITY -----
 (-2.78516567121230508 0.00000000000000000) : 絶対安定区間の長さ

以上のデータに加えて、図3.8のような絶対安定領域の図と安定多項式のグラフが得られる。

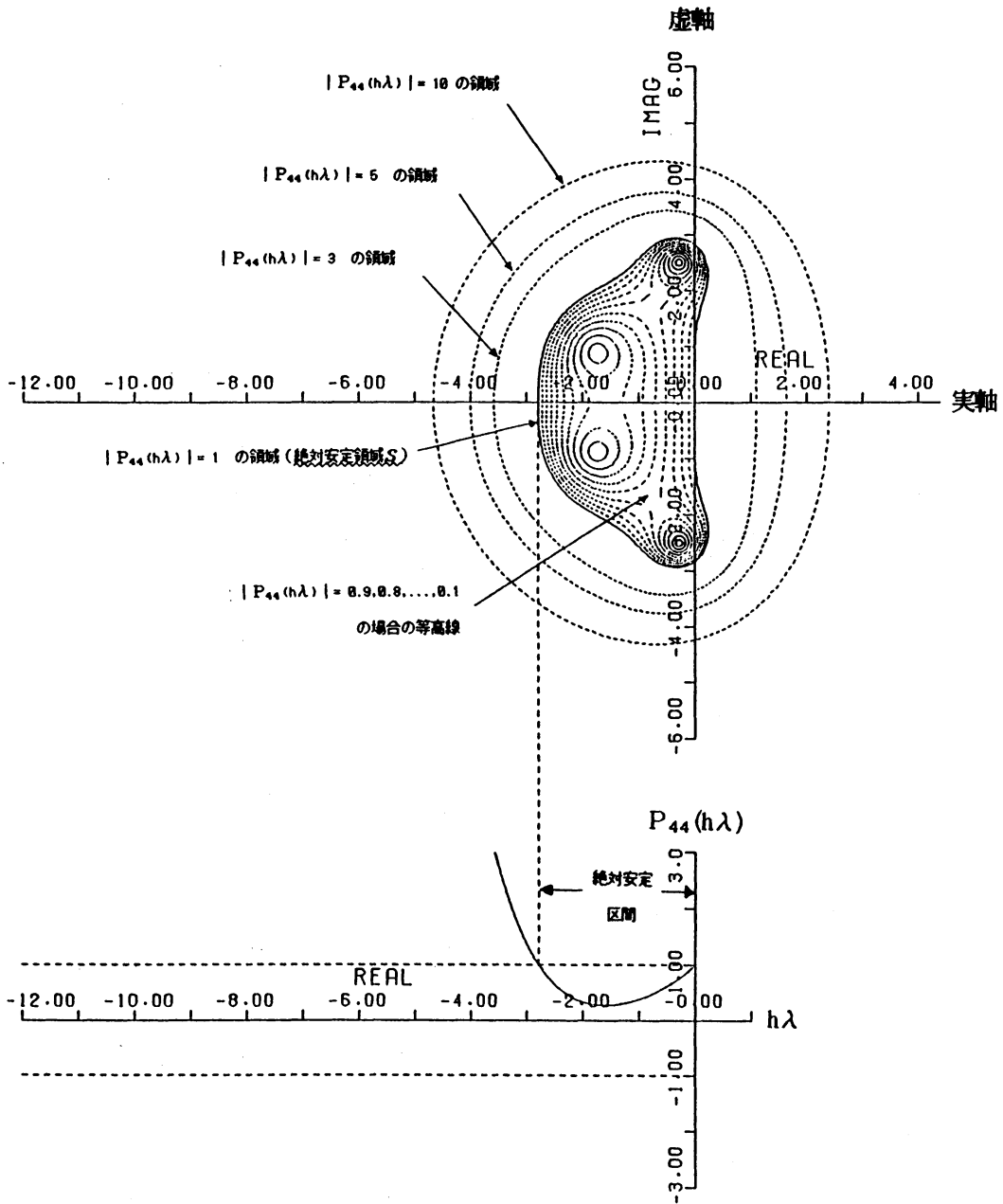


図 3.8
 絶対安定領域と安定多項式のグラフ

§ 4. 既知公式の特性

われわれは、低次から高次までのおびただしい数の陽的 Runge-Kutta 法の既知公式を、評価ルーチン D R E R K F を用いて評価した。この章では紙面の都合から、7 段数 6 次法についての評価結果のみを表にまとめて掲載するとともに、各公式間の比較を試みる。なお今回掲載できなかった他の次数の公式の評価結果については、近い将来まとめて発表する予定である。

4. 1 7 段数 6 次公式

打ち切り精度判定基準

$$* A 62 = \text{Sum}(i=1, 48) \text{abs}(a 6i) \quad * A 72 = \text{Sum}(i=1, 115) \text{abs}(a 7i)$$

$$* A 63 = \text{Sum}(i=1, 48) \text{sqr}(a 6i) \quad * A 73 = \text{Sum}(i=1, 115) \text{sqr}(a 7i)$$

公式名	A62	A63	A72	A73
TRUN	0.101854D-02	0.443632D-07	0.375617D-02	0.158492D-06
Butcher-opt	0.119834D-02	0.822232D-07	0.445757D-02	0.290579D-06
STAB	0.179268D-02	0.244672D-06	0.685129D-02	0.815980D-06
Lawson-opt	0.186204D-02	0.267658D-06	0.711524D-02	0.888077D-06
IM1	0.307961D-02	0.489164D-06	0.138530D-01	0.498585D-05
IM5	0.339396D-02	0.626285D-06	0.127776D-01	0.269807D-05
IM9	0.347155D-02	0.653700D-06	0.131043D-01	0.282740D-05
IM10	0.348854D-02	0.658382D-06	0.131356D-01	0.284717D-05
Butcher(2)	0.532370D-02	0.308779D-05	0.205533D-01	0.106124D-04
Butcher(3)	0.675121D-02	0.225590D-05	0.244074D-01	0.888553D-05
Butcher(1)	0.883997D-02	0.562654D-05	0.302428D-01	0.155023D-04
Butcher(5)	0.151305D-01	0.244433D-04	0.526144D-01	0.741048D-04
Luther	0.188997D-01	0.204835D-04	0.731339D-01	0.160377D-03
Lawson	0.196694D-01	0.193629D-03	0.558126D-01	0.410383D-03
Butcher(4)	0.161968D+00	0.444844D-02	0.729565D+00	0.394542D-01

評価の結果、公式 Shanks は 5 次法となった。

公式名	A52	A53	A62	A63
Shanks	0.150509D-03	0.446875D-08	0.195477D-02	0.215273D-06

丸め誤差特性

* $R1 = \sum_{i=1,7} \text{abs}(Ci) + \sum_{i=2,7} \sum_{j=1,i-1} \text{abs}(Bij)$
 * $R2 = \sum_{i=1,7} \text{abs}(Ci)$

公式名	R1	R2	単調性
TRUN	0.773776D+01	0.100000D+01	×
Butcher(1)	0.119929D+02	0.100000D+01	×
Butcher(3)	0.136121D+02	0.206666D+01	×
Butcher(5)	0.154416D+02	0.100000D+01	×
IM10	0.220661D+02	0.191781D+01	×
IM9	0.223339D+02	0.191597D+01	×
IM5	0.224710D+02	0.194325D+01	×
Butcher-opt	0.238242D+02	0.100000D+01	×
Butcher(2)	0.318118D+02	0.100000D+01	×
Luther	0.321179D+02	0.100000D+01	×
IM1	0.500891D+02	0.532610D+01	×
Butcher(4)	0.806699D+02	0.102500D+01	×
Lawson	0.208139D+03	0.100000D+01	×
STAB	0.441929D+03	0.176461D+02	×
Lawson-opt	0.255483D+04	0.100762D+03	×
Shanks	0.235534D+04	0.100000D+01	×

安定特性

* 安定多項式
 $PP(\Gamma b) = 1 + Z + Z^{*2}/2! + Z^{*3}/3! + Z^{*4}/4! + Z^{*5}/5! + \text{GAMMA}6 + z^{*6}/6! ; Z = h \lambda$

公式名	γ_6	A (Se)	α
STAB	0.580000	29.7945	5.93984
IM5	0.572310	29.6999	6.06072
IM1	0.635340	29.3586	5.27331
IM9	0.551118	28.1922	6.43637
Lawson	0.549750	28.0328	6.46284
Lawson-opt	"	"	"
IM10	0.547310	27.7769	5.22668
Butcher(2)	0.865248	25.1098	4.20609
Butcher-opt	"	"	"
TRUN	1.000000	23.2102	3.95392
Butcher(1)	-2.265248	12.2946	2.86558
Butcher(3)	-2.333333	12.2166	2.85607
Butcher(4)	"	"	"
Butcher(5)	"	"	"
Luther	"	"	"

公式Shanksは5次法なので、安定性を支配するパラメータは γ_6, γ_7 の2つある。

公式名	γ_6, γ_7	A (Se)	α
Shanks	$\gamma_6 = 1.00000$ $\gamma_7 = 0.93459$	24.0732	4.06226

各公式の比較

文献から抽出した7段数6次公式は16個ある。公式Butcher-opt, Lawson-opt, STAB, TRUN, IM10, IM9, IM5, IM1 は、われわれが過去に提案した公式である。係数が簡単な公式は Butcher(3), (4), (5)である。

打ち切り精度判定基準を見ると、公式TRUN, Butcher-opt, STAB, Lawson-opt が良い値を示している。

丸め誤差特性判定基準では、ここでも公式TRUN, それに公式Butcher(1), (3), (5)が上位にある。しかしR1は著しく大きい場合を除けば、さほど大きな影響はないので、公式IM1までは許容範囲内である。なお、単調な公式は無い。

安定特性に関しては、有効絶対安定領域の面積では公式STAB, 絶対安定区間の長さでは公式LawsonとIM9, 誤差の伝播率が小さいIM1がよい。

すべての評価基準において上位に位置する公式としては、若干打ち切り精度判定基準は落ちるが、公式IM1, IM5, IM9があげられる。

まとめると、一般的なユーザには打ち切り精度判定基準と丸め誤差特性判定基準が良い公式TRUN, 安定性を重視するユーザには公式IM1, IM5, IM9が推薦できる。

§ 5. 結語

従来、陽的 Runge-Kutta 法の特徴を調査するには膨大な計算量を必要とし、そのためのプログラムの作成にも大変な時間と労力を必要としてきた。しかし、この評価ルーチン DREK F の開発によってその評価が容易となり、様々な特性値をすぐに得られるようになったことは、今後の Runge-Kutta 法の研究を強力に支援できるものと思われる。

また本研究では、DREK F を用いて低次から高次までの数多くの陽的 Runge-Kutta 法の公式を次数ごとに分類し、様々な評価基準から各公式の評価を行った。特に打ち切り精度特性と安定特性の部分は貴重なデータが得られたと思われる。これにより公式の相対的な比較が可能となり、陽的 Runge-Kutta 法のユーザの意志決定を支援できるであろう。今回は紙面の都合から、7 段数 6 次法についての評価結果のみを表にまとめて掲載したが、掲載できなかった他の次数の公式の評価結果については、近い将来まとめて発表する予定であるので、そちらを参照していただきたい。

なお、陽的 Runge-Kutta 法公式は数多く存在するため、埋め込み型公式をはじめ今回評価しきれなかった公式もあり、また DREK F の出力をより分かりやすくするなど改良の余地もあるので、今後の課題としたい。

【参考文献】

- (1) J.C. Butcher : The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, John Wiley & Sons (1986)
- (2) J.H. Verner : Explicit Runge-Kutta Methods with Estimates of the Local Truncation Error, SIAM J. Numer. Anal. Vol.15 ,No.4 pp.772-790 (1978)
- (3) R.F. Churchill : Handbook of Applicable Mathematics, Vol. III, Numerical Methods, pp.321-335
- (4) G.J. Cooper & J.H. Verner : Some Explicit Runge-Kutta Methods of High Order, SIAM J. Numer. Anal. Vol.9, No.3, pp.389-405
- (5) 田中 正次 : Runge-Kutta法の打ち切り誤差に関する研究, 東京大学に提出した学位論文 (1972)
- (6) 田中 正次 : Runge-Kutta法の研究と評価のためのソフトウェア, コンピュータ No.12 (コナ社), pp.29-35 (1985)
- (7) M.K. Jain : Numerical Solution of Differential Equations, A Halsted Press Book, pp.32-40
- (8) J.C. Butcher : On Runge-Kutta Processes of high order, J. Austral Math. Soc., Vol.4, pp.179-194 (1964)
- (9) F. Ceschino & J. Kuntzmann : Numerical Solution of Initial Value Problems, Prentice-Hall, pp.37-77 (1966)
- (10) A. Ralston & P. Rabinowitz : a First Course in Numerical Analysis, McGRAW-Hall, pp.208-233 (1965)
- (11) 高山 尚文 : 7 段数 6 次陽的 Runge-Kutta法の最適化と陽的 Runge-Kutta法の評価システムについて, 山梨大学計算機科学科修士論文 (1987)