

連立微分方程式に対するルンゲ-クッタ系公式の安定性†

大野 博††

2つのA安定なルンゲ-クッタ系公式(多項式型陰的, 有理型)で同じ連立微分方程式を解いても安定性がかなり差がでてくる。その原因は, 安定性を評価する微分方程式のモデルが実情に合わないためであると考えられる。そこで, 絶対安定性の定義を非線形連立微分方程式に対して与える。この定義では, 絶対安定領域を複素左半平面だけではなく全空間(Cを複素平面とすると, 一段公式ではC, 二段公式ではC², 三段公式ではC³, ...)について考えなければならない。以下では, 簡単のために, ルンゲ-クッタ系二段公式, 絶対安定領域を二次元の実数平面(実数係数連立微分方程式を対象)に限定して考える。さらに, 積分を使って, 絶対安定領域を定量的に表す。こうすると, 上記のことがうまく定量的に示せる。この定義で安定性最良の多項式型陰的ルンゲ-クッタ二段三次公式を求め, 数値例により, 絶対安定領域の異なる多項式型陰的ルンゲ-クッタ公式を比較する。同様に, 数値例により, 異なるタイプ(有理型, 多項式型)のルンゲ-クッタ公式を比較する。

1. はじめに

多項式型陰的ルンゲ-クッタ法²⁾は, 安定性がよく, 陽的方法では得られないA安定性が可能である。しかし, 1ステップ当りの計算過程が複雑になってしまう(一般に, 陽的方法の計算過程に加えて連立非線形方程式を何らかの逐次反復法で解かなければならない)。A. Wambecq³⁾が, 有理型ルンゲ-クッタ法を連立微分方程式に対して拡張した。この方法は, 陽的で, A安定性が可能である。ところが, G. Sottas⁵⁾は, 新たに連立微分方程式に対してA安定性の定義を与えて, 有理型ルンゲ-クッタ法が, 硬い連立微分方程式を解くには不適當であることを示した。また, A. Srivastava⁶⁾は, 有理型ルンゲ-クッタ法は, 線形連立微分方程式の固有値が大きく異なっていると発散してしまうことを数値例で示した。

多項式型陰的ルンゲ-クッタ法に対しては, G. Sottasのような反論が出ていないところから, 同じA安定な公式で連立微分方程式を解いても安定性がだいぶ違ってくるのが分かる。この原因は, 連立微分方程式に対する安定性を考えるとき,

$$\mathbf{y}' = \mathbf{A}\mathbf{y}, \mathbf{y}(x_0) = \mathbf{y}_0, \mathbf{A} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \quad (1.1)$$

をモデル³⁾にして公式の安定性を評価しているためだと考えられる。

2章で, 連立微分方程式に対して絶対安定性を定義し, 公式の安定性を定量的に表す方法を示す。連立微分方程式を,

$$d/dx \begin{pmatrix} y^1 \\ y^2 \\ \vdots \\ y^s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f^1(x, y^1, y^2, \dots, y^s) \\ f^2(x, y^1, y^2, \dots, y^s) \\ \vdots \\ f^s(x, y^1, y^2, \dots, y^s) \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

多項式型陰的ルンゲ-クッタ法 P 段公式⁴⁾を

$$\begin{cases} y_{n+1}^i = y_n^i + \sum_{j=1}^p w_j k_j^i, & i=1, \dots, s \\ k_j^i = h * f^i(x_n + a_j h, y_n^1 + \sum_{i=1}^p b_{ji} k_i^1, \dots, \\ y_n^s + \sum_{i=1}^p b_{ji} k_i^s) \end{cases} \quad (1.3)$$

有理型ルンゲ-クッタ法 P 段公式⁵⁾を

$$\begin{cases} y_{n+1}^i = y_n^i + \sum_{j=1}^p \sum_{m=1}^i w_{jm} k_j^i k_m^i / \sum_{j=1}^p c_j k_j^i \\ i=1, \dots, s \\ k_j^i = h * f^i(x_n + a_j h, y_n^1 + \sum_{i=1}^p b_{ji} k_i^1, \dots, \\ y_n^s + \sum_{i=1}^p b_{ji} k_i^s) \end{cases} \quad (1.4)$$

とする。ただし, 2つのベクトル \mathbf{a}, \mathbf{b} を

$$\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_s)^T, \mathbf{b} = (b_1, \dots, b_s)^T$$

としたとき, A. Wambecq が使ったベクトル演算⁵⁾

$$\begin{cases} \mathbf{a} * \mathbf{b} = \mathbf{a}\mathbf{b}^T + \mathbf{b}\mathbf{a}^T - \mathbf{a}^T \mathbf{b} \mathbf{E}, \mathbf{E} \text{ は単位行列} \\ \mathbf{a}^{-1} = \mathbf{a} / |\mathbf{a}|^2, |\mathbf{a}|^2 = \mathbf{a}^T \mathbf{a} \end{cases} \quad (1.5)$$

$$\quad (1.6)$$

を用いず, ベクトルの成分どうしの積や商

$$\mathbf{a} * \mathbf{b} = (a_1 * b_1, \dots, a_s * b_s)^T \quad (1.7)$$

$$\mathbf{a} / \mathbf{b} = (a_1 / b_1, \dots, a_s / b_s)^T \quad (1.8)$$

を用いる。上記のように計算すれば, A. Srivastava が示したように固有値が大きく異なっても必ずしも発散しない, 多項式型との比較も容易である。さらに, よく使われる二段公式(多項式型陽的公式, 多項式型A安定な陰的公式, 有理型A安定な公式)の安定性を定量的に比較する。このことを, 数値例で確認する。

3章では, この定義で安定性最良の公式を多項式型陰的ルンゲ-クッタ法と有理型ルンゲ-クッタ法について求める。多項式型陰的ルンゲ-クッタ法について, 数

† Stability of Runge-Kutta Type Methods for Systems of Ordinary Differential Equations by HIROSHI OHNO (Specialty of Mathematics and Physical Sciences, Graduate School of Science and Technology, Chiba University).

†† 千葉大学大学院自然科学研究科数理・物質科学専攻

値例で他の公式と比較する。

2. 安定性の比較

2.1 連立微分方程式に対する絶対安定性の定義

単一微分方程式の場合は、テスト方程式⁴⁾

$$y' = \lambda y, \text{Re}(\lambda) < 0$$

を使って絶対安定領域を決めていた。連立微分方程式のテスト方程式は、

$$d/dx \begin{pmatrix} y^1 \\ y^2 \\ \vdots \\ y^s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y^1 \\ y^2 \\ \vdots \\ y^s \end{pmatrix}$$

ただし、係数行列の固有値 λ_i は、

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

というものを考える。これの i 行目を考える。

$$y^i' = \sum_{j=1}^s a_{ij} y^j \\ = \left\{ \sum_{j=1}^s a_{ij} * y^j / y^i \right\} y^i$$

上式のアンダーラインの部分は、 y^i とは独立であり独立変数 x の値によって変化するので、上式は、

$$y^i' = g^i(x) y^i$$

と書ける。連立微分方程式の場合のテスト方程式は、単一の場合の係数の部分が x の関数になっており、係数行列の固有値の実数部分がすべて負数であっても必ずしも $\text{Re}(g^i(x))$ は負にならない。単一微分方程式の場合と違って全平面について考えなければならない。後は、従来の AN 安定¹⁾と同様に

$$z_1^i = h * g^i(x_n + a_{1i} * h), \dots, z_p^i = h * g^i(x_n + a_{pi} * h)$$

とおいて、 y_{n+1}^i / y_n^i を求める。

$y_{n+1}^i / y_n^i = r(z_1^i, z_2^i, \dots, z_p^i)$ とおけば、関数 r のかたちは、各行とも同じになり、関数 r は公式の安定性をよく表している。この考え方を一般化し非線形連立微分方程式 (1.2) に拡張した定義を次に示す。

定義 (連立微分方程式に対する絶対安定領域)

ルンゲ-クッタ系公式 (1.3), (1.4) に対して、

$$z_j^i = k_j^i / (y_n^i + \sum_{l=1}^p b_{jl} k_l^i), \\ i=1, \dots, s, \quad j=1, \dots, p$$

とおく。

$$\begin{vmatrix} 1 - z_1^i b_{11} & -z_1^i b_{12} & \cdots & -z_1^i b_{1p} \\ -z_2^i b_{21} & 1 - z_2^i b_{22} & \cdots & -z_2^i b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -z_p^i b_{p1} & -z_p^i b_{p2} & \cdots & 1 - z_p^i b_{pp} \end{vmatrix} \neq 0, \quad i=1, \dots, s$$

ならば、

$$y_{n+1}^i / y_n^i = r(z_1^i, z_2^i, \dots, z_p^i), \quad i=1, \dots, s$$

となる関数 r が1つの公式に対して1つ決まる。このとき

$$|r(z_1, z_2, \dots, z_p)| < 1$$

を満たす空間 (z_1, z_2, \dots, z_p) を絶対安定領域という。

この絶対安定性は、単一の非自励系微分方程式 $y' = g(x) * y$ に対する絶対安定性と同じで、考える領域が広がったことが異なるだけである。また、この定義を単一の自励系微分方程式 $y' = \lambda y$ に適用すると、 $z_1 = z_2 = \dots = z_p = \lambda h$ となり、従来の絶対安定性の定義と一致する。

2.2 絶対安定性の違いの考察

ここでは、簡単のために、以下の3つのルンゲ-クッタ系の多項式型陽的二段二次公式として Heun の公式、多項式A安定陰的二段四次公式として Butcher の公式そして有理型A安定二段二次公式として Wambecq の公式を使って安定性を比較する。ただし、 z_1, z_2 は、実数として扱う。実際の硬い微分方程式は、実数係数のものが大部分であるから、 z_1, z_2 が実数のものだけを考えても十分である。これら3つの公式について、上の定義に従って描いた絶対安定領域をそれぞれ図 1~3 に示す。

1. 多項式型ルンゲ-クッタ陽的二段二次公式¹⁾, Heun の公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + (k_1 + k_2)/2 \\ k_1 = h * f(x_n, y_n) \\ k_2 = h * f(x_n + h, y_n + k_1) \\ r(z_1, z_2) = 1 + z_1/2 + z_2/2 + z_1 z_2/2 \end{cases} \quad (2.1)$$

ただし、 $z_1 = k_1 / y_n, z_2 = k_2 / (y_n + k_1)$

2. 多項式型A安定なルンゲ-クッタ陰的二段四次公式、Butcher の公式¹⁾

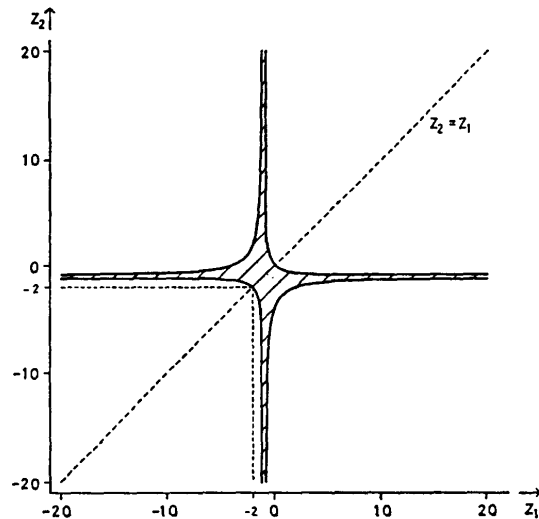


図 1 Heun の公式の絶対安定領域図 Fig. 1 Absolute stable area of Heun's formula.

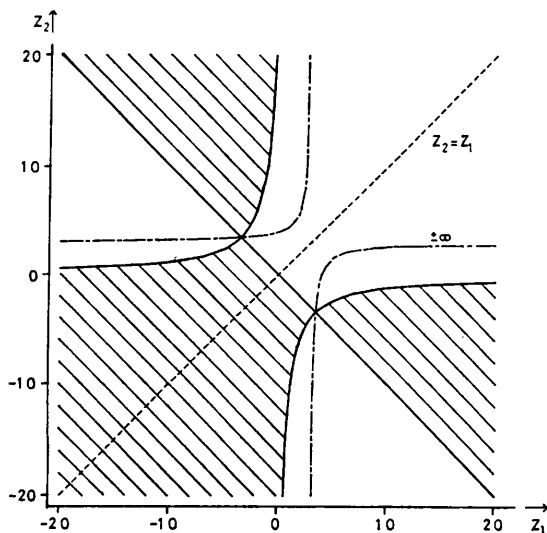


図 2 Butcher の公式の絶対安定領域
Fig. 2 Absolute stable area of Butcher's formula.

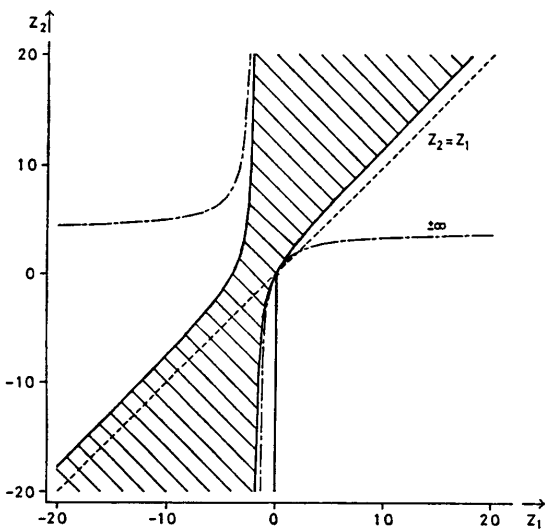


図 3 Wambecq の公式の絶対安定領域
Fig. 3 Absolute stable area of Wambecq's formula.

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + (k_1 + k_2)/2 \\ k_1 = h * f(x_n + h * (3 + \sqrt{3})/6, \\ \quad y_n + k_1/4 + k_2 * (3 + 2\sqrt{3})/12) \\ k_2 = h * f(x_n + h * (3 - \sqrt{3})/6, \\ \quad y_n + k_1 * (3 - 2\sqrt{3})/12 + k_2/4) \end{cases} \quad (2.2)$$

$$r(z_1, z_2) = \frac{\{12 + 3(z_1 + z_2) + z_1 z_2\}}{\{12 - 3(z_1 + z_2) + z_1 z_2\}}$$

ただし, $z_1 = k_1 / \{y_n + k_1/4 + k_2 * (3 + 2\sqrt{3})/12\}$
 $z_2 = k_2 / \{y_n + k_1 * (3 - 2\sqrt{3})/12 + k_2/4\}$

3. 有理型 A 安定なルンゲ-クッタ二段二次公式⁸⁾,
Wambecq の公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + k_1^2 / (2k_1 - k_2) \\ k_1 = h * f(x_n, y_n) \\ k_2 = h * f(x_n + h/2, y_n + k_1/2) \end{cases} \quad (2.3)$$

$$r(z_1, z_2) = 1 + z_1^2 / (2z_1 - z_2 - z_1 z_2 / 2)$$

ただし, $z_1 = k_1 / y_n, z_2 = k_2 / (y_n + k_1/2)$

従来の安定性の定義では, 図 1 ~ 3 の直線 $z_2 = z_1$ 上を見ていたので, Butcher の公式と Wambecq の公式は, 同じ安定性を持っているように見える. 実際には, 図 2, 3 に示したように Butcher の公式と Wambecq の公式の安定領域の面積が異なっている. さらに, 図を見て分かるように関数 r が無限大になるところがある. 固有値の実数部がすべて負の場合でも, 有理型ばかりではなく多項式型も, 発散する危険がある. また, 表 1 に安定領域の面積をそれぞれ求めた. 表 1 の面積は, すべて無限大になってしまうが, そこを敢えて比較しようとしたものである. 表の面積の比較の仕方を説明するために, 補助定理を与えておく.

補助定理

$$(1) \lim_{a \rightarrow \infty} \left(\int_0^a x dx \right) / \left(\int_0^a \int_0^a dx dy \right) = 1/2$$

表 1 公式の特性
Table 1 Character of formula.

公 式	絶対安定領域の面積	打ち切り精度 ⁹⁾
Heun の公式	$\lim_{a \rightarrow \infty} \left(16 \int_1^a 1/x dx \right)$	0.0347 (h^2 の項)
Wambecq の公式	$\lim_{a \rightarrow \infty} \left(2 \int_0^a x dx + 16 \int_1^a 1/x dx \right)$	0.2795 (h^2 の項)
Butcher の公式	$\lim_{a \rightarrow \infty} \left(4 \int_0^a x dx \right)$	0 (h^4 の項)
田中の公式	$\lim_{a \rightarrow \infty} \left(8 \int_0^a x dx - 12.85 \int_0^a dx + 9.40 \int_1^a 1/x dx \right)$	0.002812 (h^4 の項)
大野の公式	$\lim_{a \rightarrow \infty} \left(8 \int_0^a x dx - 48 \int_1^a 1/x dx \right)$	0.001157 (h^4 の項)

$$(2) \lim_{a \rightarrow \infty} \left(\int_0^a dx \right) / \left(\int_0^a x dx \right) = 0$$

$$(3) \lim_{a \rightarrow \infty} \left(\int_1^a 1/x dx \right) / \left(\int_0^a dx \right) = 0$$

証明 (1) 与式 = $\lim_{a \rightarrow \infty} (a^2/2)/a^2 = 1/2$

(2) 与式 = $\lim_{a \rightarrow \infty} a/(a^2/2) = 0$

(3) 与式 = $\lim_{a \rightarrow \infty} \log(a)/a = 0$

(終わり)

補助定理(2), (3)より, 被積分関数の次数が一次でも低ければ, 一次高いものの無限小になってしまう. このことを使って面積の比較をする. 表1で Heun の公式と Wambecq の公式を比較すると, Wambecq の公式のほうが高次の被積分関数をもつので, Wambecq の公式のほうが広い. Wambecq の公式と Butcher の公式を比較すると, 最高次の被積分関数の係数が Butcher の公式のほうが大きいので, Butcher の公式のほうが広い. 大野の公式と田中の公式を比較すると, 最高次の被積分関数の係数は同じで次に高次の被積分関数の係数が大野の公式が大きいので, 大野の公式のほうが広い. また, 表1の打ち切り精度は, 田中氏がよく用いるもの⁷⁾を使った. Heun の公式, Wambecq の公式については, 公式(3.5), (3.6)を, Butcher の公式, 大野の公式, 田中の公式については, 公式(3.1), (3.2)を使った.

このようにして表1を見ると, Butcher の公式(多項式型陰的ルンゲ-クッタ法), Wambecq の公式(有理型ルンゲ-クッタ法), Heun の公式(多項式型陽的ルンゲ-クッタ法)の順番で安定性がよい.

例1 硬い線形連立微分方程式

$$\begin{cases} y_1' = -64.5y_1 + 63.5y_2 + 1, & y_1(0) = 2 \\ y_2' = 63.5y_1 - 64.5y_2 + 1, & y_2(0) = 1 \end{cases}$$

理論解

$$\begin{cases} y_1(x) = 0.5e^{-x} + 0.5e^{-128x} + 1 \\ y_2(x) = 0.5e^{-x} - 0.5e^{-128x} + 1 \end{cases}$$

この微分方程式を Heun の公式, Butcher の公式, Wambecq の公式で解く. $x=1$ での y_2 の相対誤差を図4に示す. 図4より, Butcher の公式と Wambecq の公式を比較する. ステップ幅 h が長いところでは, 同程度であるが, Butcher の公式の方が Wambecq の公式より長いステップ幅 h のところから公式がもつ次数で収束しているので, Butcher の公式の方が安定である. Wambecq の公式と Heun の公式を比較すると明らかに Wambecq の公式の方が安定である.

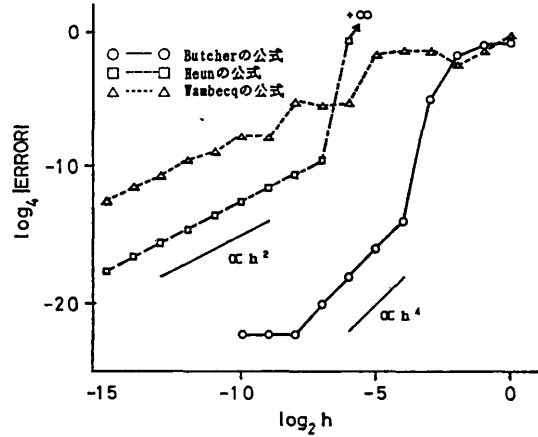


図4 例1の $x=1$ での相対誤差の比較
Fig. 4 Comparison of relative error at $x=1$ for problem 1.

安定性は, 表1の絶対安定領域の面積の順番になっていることが分かる. また, この例1の固有値は, $-1, -128$ である. 有理型ルンゲ-クッタ法については, 固有値が大きく異なっても必ずしも発散しないことが分かる.(発散は, (z_1, z_2) が図3の $\pm\infty$ の曲線の近傍の値をとったときに起こる. 多項式型でも同様に起こる.)

3. 安定性最良の二段公式

3.1 安定性最良の多項式型陰的ルンゲ-クッタ二段三次公式

この論文で定義した安定性について最良の多項式型陰的ルンゲ-クッタ二段三次公式を求め. 絶対安定領域の面積が最大または最小になる条件を求め, それに次数が三次になる条件を付け加えて求める.

まず, 関数 $r(z_1, z_2)$ を求める.

$$\begin{cases} z_1 = h * f(x_n + a_1h, y_n + b_{11}k_1 + b_{12}k_2) / (y_n + b_{11}k_1 + b_{12}k_2) \\ z_2 = h * f(x_n + a_2h, y_n + b_{21}k_1 + b_{22}k_2) / (y_n + b_{21}k_1 + b_{22}k_2) \end{cases}$$

とおくと(詳細は, 付録を参照のこと),

$$r(z_1, z_2) = 1 + [w_1z_1 + w_2z_2 + \{w_1(b_{12} - b_{22}) + w_2(b_{21} - b_{11})\}z_1z_2] / \delta \quad (3.1)$$

ただし, $\delta = 1 - (b_{11}z_1 + b_{22}z_2) + (b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21})z_1z_2$ を得る.

次に, (3.1)式を使って, 安定領域を求める(詳細は, 付録を参照のこと). これを図5に示す. 図5は, 斜線の部分が安定領域, 白い部分が不安定領域である一例である(パラメータの値により, 斜線部分と白い部分が逆になったり, 概形や漸近線の位置が変わった

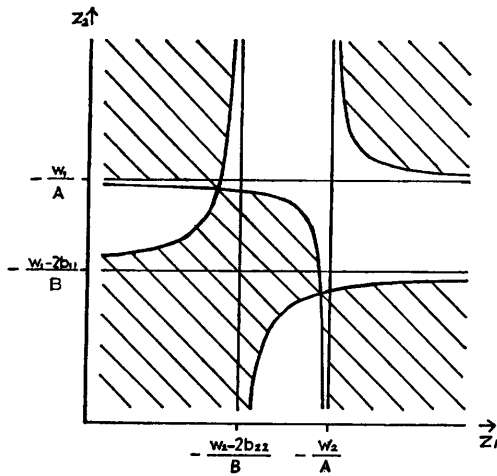


図 5 絶対安定領域の一例
Fig. 5 An absolute stable area.

りする)。

図 5 から安定領域が最大または最小になる条件を求める。図 5 より明らかに 2 組の漸近線がそれぞれ一致したときが、斜線の部分が最大になるのが分かる。したがって、安定領域が最大または最小になる条件は、

$$\begin{cases} -w_2/A = -(w_2 - 2b_{22})/B \\ -w_1/A = -(w_1 - 2b_{11})/B \\ \text{ただし、} A = w_1(b_{12} - b_{22}) + w_2(b_{21} - b_{11}) \\ B = w_1(b_{12} - b_{22}) + w_2(b_{21} - b_{11}) \\ \quad + 2(b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}) \end{cases}$$

となる。(3.1) 式の分母の最高次の係数 $b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}$ が 0 にならないように整理する。

$$\begin{cases} w_1b_{12} - w_2b_{11} = 0 & \text{または、} & w_1b_{22} - w_2b_{21} = 0 \\ b_{12} - b_{22} = 0 & & b_{11} - b_{21} = 0 \end{cases}$$

がでてくる。これに公式が三次になる条件⁷⁾

$$\begin{cases} a_2 = (3a_1 - 2) / \{3(2a_1 - 1)\} \\ b_{11} = a_1 - b_{12} \\ b_{21} = (-2a_1 + b_{12} + 1) / \{3(2a_1 - 1)^2\} \\ b_{22} = (6a_1^2 - 5a_1 - b_{12} + 1) / \{3(2a_1 - 1)^2\} \\ w_1 = 1 / \{4(3a_1^2 - 3a_1 + 1)\} \\ w_2 = 3(2a_1 - 1)^2 / \{4(3a_1^2 - 3a_1 + 1)\} \end{cases}$$

を加えると、

- (1) $a_1 = (3 + \sqrt{3})/6, a_2 = (3 - \sqrt{3})/6,$
 $w_1 = w_2 = 1/2,$
 $b_{11} = b_{12} = b_{22} = (3 + \sqrt{3})/12, b_{21} = (1 - \sqrt{3})/4$
- (2) $a_1 = (3 - \sqrt{3})/6, a_2 = (3 + \sqrt{3})/6,$
 $w_1 = w_2 = 1/2,$
 $b_{11} = b_{12} = b_{22} = (3 - \sqrt{3})/12, b_{21} = (1 + \sqrt{3})/4$
- (3) $a_1 = (3 + \sqrt{3})/6, a_2 = (3 - \sqrt{3})/6,$
 $w_1 = w_2 = 1/2,$

$$\begin{aligned} b_{11} = b_{21} = b_{22} &= (3 - \sqrt{3})/12, b_{12} = (1 + \sqrt{3})/4 \\ (4) \quad a_1 &= (3 - \sqrt{3})/6, a_2 = (3 + \sqrt{3})/6, \\ w_1 = w_2 &= 1/2, \end{aligned}$$

$b_{11} = b_{21} = b_{22} = (3 + \sqrt{3})/12, b_{12} = (1 - \sqrt{3})/4$ という解を得る。(2), (3) は、安定領域の面積が最小になってしまうので除く。(1), (4) の安定領域の面積は、同じになってしまう。打ち切り精度を比較する⁷⁾。

$$\begin{cases} a_{31} = \sum_{i=1, j=1, k=1}^2 w_i b_{ij} b_{jk} a_k - 1/24 \\ a_{32} = (\sum_{i=1, j=1}^2 w_i b_{ij} a_j^2 - 1/12)/2 \\ a_{33} = \sum_{i=1, j=1}^2 w_i a_i b_{ij} a_j - 1/8 \\ a_{34} = (\sum_{i=1}^2 w_i a_i^3 - 1/4)/6 \end{cases} \quad (3.2)$$

として、打ち切り精度の大小の判定には、

$$A_{33} = \sum_{j=1}^4 (a_{3j})^2 \quad (3.3)$$

を用いる。(1), (4) の A_{33} は、両方とも $1/864$ である。(1), (4) は、安定性も打ち切り精度も同じなので、どちらを使ってもよい。(1) を大野の公式と呼ぶことにする、すなわち

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + (k_1 + k_2)/2 \\ k_1 = h * f(x_n + (3 + \sqrt{3})/6 * h, \\ \quad y_n + (3 + \sqrt{3})/12 * k_1 + (3 + \sqrt{3})/12 * k_2) \\ k_2 = h * f(x_n + (3 - \sqrt{3})/6 * h, \\ \quad y_n + (1 - \sqrt{3})/4 * k_1 + (3 + \sqrt{3})/12 * k_2) \end{cases} \quad (3.4)$$

これは、田中氏が提案した β_0 が与えられたときの打ち切り精度最良の二段三次公式⁷⁾

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + (k_1 + k_2)/2 \\ k_1 = h * f(x_n + (3 + \sqrt{3})/6 * h, \\ \quad y_n + \beta_0/2 * k_1 + (3 + \sqrt{3} - 3\beta_0)/6 * k_2) \\ k_2 = h * f(x_n + (3 - \sqrt{3})/6 * h, \\ \quad y_n + (3 - \sqrt{3} - 3\beta_0)/6 * k_1 + \beta_0/2 * k_2) \end{cases} \quad (3.5)$$

において $\beta_0 = (3 + \sqrt{3})/6$ の場合と一致する。また、大野の公式と田中氏が安定性最良とする公式 ($\beta_0 = 0.9503$ の場合)⁷⁾ の絶対安定領域を図 6, 7 に示す。

例 2 硬い線形連立微分方程式²⁾

$$\begin{cases} y_1' = -100y_1 + y_2 + 99 \log(x+1) + 1/ \\ \quad (x+1), y_1(0) = 1 \\ y_2' = -10000y_1 - 100y_2 + 10100 \log(x+1) + 1/ \\ \quad (x+1), y_2(0) = -1 \end{cases}$$

理論解

$$\begin{cases} y_1(x) = e^{-100x} \{ \cos(100x) - 0.01 \sin(100x) \} \\ \quad + \log(x+1) \\ y_2(x) = e^{-100x} \{ \cos(100x) + 100 \sin(100x) \} \\ \quad + \log(x+1) \end{cases}$$

この微分方程式を Butcher の公式、大野の公式、田中の公式でそれぞれ解く。 $x=1$ での y_2 の結果を図 8 に示す。図 8 より、ステップ幅 h が長いところでは、

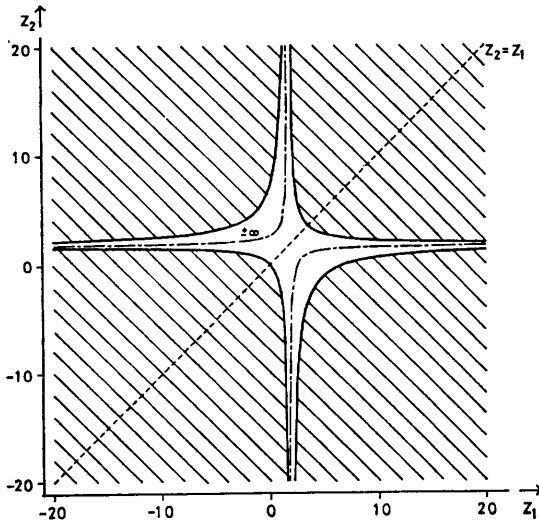


図 6 大野の公式の絶対安定領域
Fig. 6 Absolute stable area of Ohno's formula.

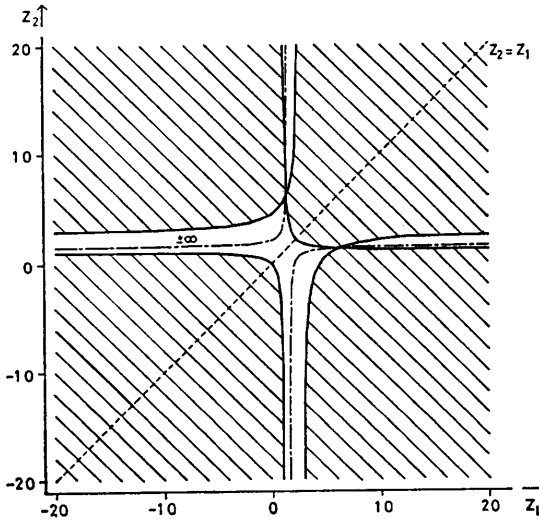


図 7 田中の公式の絶対安定領域
Fig. 7 Absolute stable area of Tanaka's formula.

大野の公式, 田中の公式, Butcher の公式の順番で精度が良い。したがって, この順番で安定性が良いと言える。これは, 表 1 に示した絶対安定領域の面積の順番と一致する。

3.2 安定性最良の有理型ルンゲ-クッタ二段二次公式

3.1 節と同様にこの論文で定義した安定性最良の有理型ルンゲ-クッタ二段二次公式を求める。次数が二次になるための条件を求め, それを使って絶対安定領域が最大になるものを求める。

二次になるための条件式を b_{21}, c_2, w_{22} を自由パラ

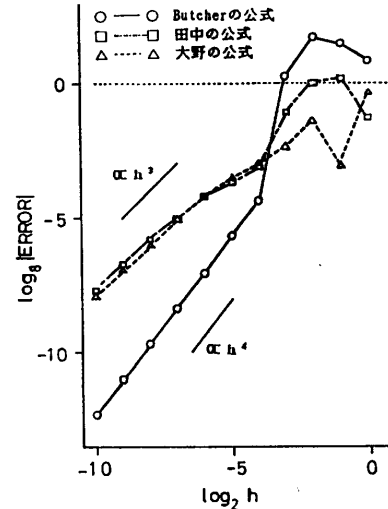


図 8 例 2 の $x=1$ での相対誤差の比較
Fig. 8 Comparison of relative error at $x=1$ for problem 2.

メータとして解く。

$$\begin{cases} w_{11} = 1 - c_2 + w_{22} - 1/(2b_{21}) \\ w_{21} = c_2 - 2w_{22} + 1/(2b_{21}) \\ c_1 = 1 - c_2 \\ a_2 = b_{21} \end{cases}$$

安定性を示す関数 $r(z_1, z_2)$ を求める。

$$\begin{aligned} r(z_1, z_2) = & 1 + [\{ 1 - c_2 + w_{22} - 1/(2b_{21}) \} z_1^2 \\ & + \{ c_2 - 2w_{22} + 1/(2b_{21}) \} z_1 z_2 (1 + b_{21} z_1) \\ & + w_{22} \{ z_2 (1 + b_{21} z_1) \}^2] \\ & / \{ (1 - c_2) z_1 + c_2 z_2 (1 + b_{21} z_1) \} \end{aligned}$$

安定領域を広くするために

$$\begin{cases} c_2 - 2w_{22} + 1/(2b_{21}) = 0 \\ w_{22} = 0 \end{cases}$$

という条件を追加する。安定領域でないところの面積を求める。

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \left\{ 6 \int_0^a x dx - (8/b_{21}) \int_1^a 1/x dx \right\}$$

となる。 $b_{21} \rightarrow 0$ のとき最小となるが高次の被積分関数があるので, 全体的には, b_{21} の値が変わってもあまり影響がない。打ち切り精度を比較する。

$$\begin{cases} a_{21} = b_{21}^2 (w_{11}/2 + w_{22} - c_2/2) - 1/6 \\ a_{22} = 1/6 \\ a_{23} = w_{22} b_{21}^2 - b_{21} c_2 / 2 \end{cases} \quad (3.6)$$

として, 打ち切り精度の大小の判定には,

$$A_{22} = \sum_{j=1}^3 (a_{2j})^2 \quad (3.7)$$

を用いる。この場合は,

$$A_{22} = (1/6 - b_{21}/4)^2 + (1/6)^2 + (-1/2)^2$$

となる。打ち切り精度の場合も b_{21} の値が変わっても A_{22} にあまり影響を与えない。A. Wambecq⁸⁾ が提案した $b_{21}=1/2$ がほぼ適当であると思う。

4. おわりに

ここで与えた連立微分方程式に対する絶対安定性の定義は、従来の安定性、A安定、AN安定、BN安定¹⁾などをまとめたものと同じである。ただ、考える範囲が複素左半平面から全空間に広がったところが異なるだけである。したがって、従来の安定性の定義で求めた公式を硬い連立微分方程式を解くために使ってもそう違和感がなく使える。ここでは、 z_1, z_2, \dots, z_p を実数について考えたが、複素数に拡張したものについても考えてみたい。また、公式の安定性を安定領域の面積を求めることにより、定量的に表してみたが、公式の安定性をよく表していると思う。

有理型ルンゲ-クッタ法は、硬い連立微分方程式に対しては不適当という論文⁵⁾もあるが、多項式型陽のルンゲ-クッタ法よりは安定領域はだいぶ広いので、あまり硬くない連立微分方程式に対しては、有効である。

謝辞 千葉大学戸田英雄博士、小野令美博士には、有益なご指導をいただいた。名古屋大学三井斌友博士には貴重なコメントをいただいた。ここに記して深甚なる謝意を表する次第である。

参 考 文 献

- 1) Butcher, J. C.: *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations*, John Wiley & Sons, pp. 237-273 (1987).
- 2) Enright, W. H., Hull, T. E. and Lindberg, B.: *Comparing Numerical Methods for Stiff Systems of O. D. E.s*, BIT, Vol. 15, pp. 10-48 (1975).
- 3) Hairer, E.: *Unconditionally Stable Explicit Methods for Parabolic Equations*, Numer. Math., Vol. 35, pp. 57-68 (1980).
- 4) 三井斌友: 数値解析入門, 朝倉書店 (1985).
- 5) Sottas, G.: *Rational Runge-Kutta Methods Are Not Suitable for Stiff Systems of ODE's*, J. Comput. Appl. Math., Vol. 10, pp. 169-174 (1984).
- 6) Srivastava, A. and Paveri-Fontana, S. L.: *Numerical Experiments on the Rational Runge-Kutta Method*, Comp. & Maths. with Appls., Vol. 12 A, pp. 1161-1170 (1986).
- 7) 田中正次, 山下忠志, 高山尚文, 山下茂: *Runge-Kutta法に関する二つの話題について*, 数理解析研究所講究録 585, pp. 54-62 (1986).

- 8) Wambecq, A.: *Rational Runge-Kutta Methods for Solving Systems of Ordinary Differential Equations*, Computing, Vol. 20, pp. 333-342 (1978).

付 録

(1) 安定性を示す関数 $r(z_1, z_2)$ を導く過程 ((3.1) 式)

$$\begin{cases} z_1 = h * f(x_n + a_1 h, y_n + b_{11} k_1 + b_{12} k_2) \\ \quad (y_n + b_{11} k_1 + b_{12} k_2) \\ z_2 = h * f(x_n + a_2 h, y_n + b_{21} k_1 + b_{22} k_2) \\ \quad (y_n + b_{21} k_1 + b_{22} k_2) \end{cases}$$

とおくと、 k_1, k_2 は、それぞれ

$$\begin{cases} k_1 = z_1 (y_n + b_{11} k_1 + b_{12} k_2) \\ k_2 = z_2 (y_n + b_{21} k_1 + b_{22} k_2) \end{cases}$$

と書ける。これを整理すると、

$$\begin{cases} (1 - b_{11} z_1) k_1 - b_{12} z_1 k_2 = z_1 y_n \\ -b_{21} z_2 k_1 + (1 - b_{22} z_2) k_2 = z_2 y_n \end{cases}$$

となり、 k_1, k_2 を変数とする連立一次方程式と考えられる。この方程式を解くと次のようになる。

$$\begin{cases} k_1 = y_n z_1 \{1 + (b_{12} - b_{22}) z_2\} / \delta \\ k_2 = y_n z_2 \{1 + (b_{21} - b_{11}) z_1\} / \delta \end{cases}$$

ただし、

$$\delta = 1 - (b_{11} z_1 + b_{22} z_2) + (b_{11} b_{22} - b_{12} b_{21}) z_1 z_2$$

これを、二段公式 $y_{n+1} = y_n + w_1 k_1 + w_2 k_2$ に代入する。

$$y_{n+1} = [1 + \{w_1 z_1 + w_2 z_2 + \{w_1 (b_{12} - b_{22}) + w_2 (b_{21} - b_{11})\} * z_1 z_2\} / \delta] y_n$$

関数 $r(z_1, z_2)$ は、定義より、

$$\begin{aligned} r(z_1, z_2) &= y_{n+1} / y_n \\ &= 1 + [w_1 z_1 + w_2 z_2 + \{w_1 (b_{12} - b_{22}) + w_2 (b_{21} - b_{11})\} z_1 z_2] / \delta \end{aligned} \quad (3.1)$$

となる。

(2) 安定性領域を求める過程 (図5)

$r(z_1, z_2) = 1$ の曲線は、(3.1)式より、

$$w_1 z_1 + w_2 z_2 + \{w_1 (b_{12} - b_{22}) + w_2 (b_{21} - b_{11})\} z_1 z_2 = 0$$

を満たす。これを变形すると、

$$\begin{cases} z_2 = -w_1 / A + (w_1 w_2 / A^2) \{1 / (z_1 + w_2 / A)\} \\ \text{ただし、} A = w_1 (b_{12} - b_{22}) + w_2 (b_{21} - b_{11}) \end{cases}$$

となり、求める曲線は漸近線が $z_1 = -w_2 / A$, $z_2 = -w_1 / A$ の双曲線である。

同様に、 $r(z_1, z_2) = -1$ の曲線は、

$$\begin{aligned} &2 + (w_1 - 2b_{11}) z_1 + (w_2 - 2b_{22}) z_2 + \{w_1 (b_{12} - b_{22}) \\ &+ w_2 (b_{21} - b_{11}) + 2(b_{11} b_{22} - b_{12} b_{21}) z_1 z_2 = 0 \end{aligned}$$

を満たす。これを变形すると、

$$\left\{ \begin{array}{l} z_2 = -(w_1 - 2b_{11})/B + (w_1 - 2b_{12})(w_2 - 2b_{21})/B^2 \\ \quad * [1 / \{z_1 + (w_2 - 2b_{22})/B\}] \\ \text{ただし, } B = w_1(b_{12} - b_{22}) + w_2(b_{21} - b_{11}) \\ \quad + 2(b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}) \end{array} \right.$$

となり, 求める曲線は漸近線が $z_1 = -(w_2 - 2b_{22})/B$, $z_2 = -(w_1 - 2b_{11})/B$ の双曲線である.

関数 $r(z_1, z_2)$ を z_2 で偏微分すると,

$$\partial r / \partial z_2 = \{(b_{11} - b_{21})z_1 - 1\} \{(w_2 b_{11} - w_1 b_{12})z_1 - w_2\} / \{1 - b_{11}z_1 - b_{22}z_2 + (b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21})z_1z_2\}^2$$

となる. 関数 $r(z_1, z_2)$ は, z_1 の値により, z_2 方向は単調増加または単調減少する. 以上のことから図5のような安定領域が求められる.

(平成2年9月25日受付)

(平成3年6月13日採録)



大野 博 (正会員)

1960年生. 1983年宇都宮大学工学部電子工学科卒業. 1988年茨城大学大学院理学研究科数学専攻, 修士課程修了. 1988年4月より, 千葉大学大学院博士課程にて, 常微分方程式の数値解法を研究している.