

微分係数を用いた埋込み型 Runge-Kutta 系 2 段公式について†

小野 令美^{††} 戸田 英雄^{††} 伊理 正夫^{†††}

数値計算の分野で、関数計算に加えて微分係数の計算も要する手法は、関数計算の手続きのほかに導関数計算の手続きも与えなければならないという理由から、従来極力回避され、やむを得ず微分係数を用いなければならない場合には数値微分が用いられてきた。しかし、伊理、Rall らにより提案されている自動微分法によると、関数計算の手続きさえ与えれば関数計算と同時に微分係数も効率よく精確に求められるから、微分係数をもっと積極的に使用されてよいと思われる。その一例として、微分係数を積極的に使用する Runge-Kutta 系の常微分方程式数値解法公式について考察する。この型の 2 段 4 次公式をさきに発表した⁴⁾が、本論文では、打切誤差推定能力を持つ埋込み型の公式を一般的に論じ、特に新しい 2 段 3-4 次公式を与える。これは、2 段 4 次公式の中に 3 次公式が含まれるようにし、余分の手間をかけることなく打切誤差を推定し、それに基づいて刻み幅を制御することを可能にしたものである。従来行われている一般の打切誤差推定能力を持つ Runge-Kutta 系埋込み型 3-4 次公式では 5 回の関数計算が必要であるが、ここで示す自動微分法を利用する 2 段 3-4 次公式は 4 回の関数計算を行う通常の Runge-Kutta 4 次公式とほぼ同じ時間で打切誤差推定ができる。したがって、打切誤差推定能力を持つ 3-4 次公式のうちで最も効率のよい公式であり、打切誤差の大きさの面からも最適なものである。

1. ま え が き

常微分方程式の初期値問題

$$dy/dt = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0$$

の数値解法に、自動微分法^{2), 7)}によって簡単に求められる df/dt を利用した 2 段の Runge-Kutta 系公式をさきに発表した⁴⁾が、本報告においてこの型の公式で打切誤差推定能力を持つ公式を与える。

文献 4) で与えた、自動微分法による微分係数を利用する 2 段公式は、2 段目の導関数を通常の

$$df/dt = \partial f/\partial t + f \cdot \partial f/\partial y$$

という形でなく、それまでに既に計算されている f_1 , df_1/dt および f_2 の値をとり入れ

$$\partial f/\partial t + (\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2 + hc_1 df_1/dt) \cdot \partial f/\partial y$$

によって計算する。この形を採用することによって、2 段目の分点を自由パラメータを持つ 4 次公式としたものである。

本報告で新たに、2 段目の導関数を除く $f_1, df_1/dt$ および f_2 による公式を考え、同じく 2 段目の分点を自由パラメータを持つ 3 次公式を導く。

これら二つの公式の自由パラメータである 2 段目の分点を等しくとり、4 次公式の中に 3 次公式が含まれた

† Runge-Kutta Type Two Stage Imbedded Formulas Using the Second Derivatives by HARUMI ONO, HIDEO TODA (Faculty of Engineering, Chiba University) and MASAO IRI (Department of Mathematical Engineering and Instrumentation Physics, Faculty of Engineering, University of Tokyo).

†† 千葉大学工学部

††† 東京大学工学部計数工学科

形の公式とし、余分な関数計算はもとより、何ら追加する手間なしで誤差推定が可能な新しい埋込み型 2 段 3-4 次公式を示す。この公式の自由パラメータは、単に二つの公式のものが等しいというだけでなく、両公式とも打切誤差に関して最適なものである。

さらに f_1 と df_1/dt を用いた 2 次公式とこの 3 次公式を組み合わせた打切誤差推定可能な埋込み型 2 段 2-3 次公式を与え、この型の公式はこの二つのほかにはないことを示す。

本報告で与える 2 段 3-4 次公式は打切誤差の大きさに関しては古典的 4 段 4 次 Runge-Kutta 公式⁸⁾とほぼ同精度が達成され、それに加えて打切誤差推定による刻み幅制御が可能である。しかもそのための余分の手間は一切不要である。したがって、この公式は手間の面で効率の良い 4 次公式であるといえる。

2. 誤差推定能力を持つ埋込み型公式

2.1 微分係数を利用した 2 段公式

常微分方程式の初期値問題

$dy/dt = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0$ (y, f はベクトル) の数値解法で、文献 4) で提案した自動微分法による微分係数を含む 2 段 4 次公式は、点 t_n における値 y_n が得られているとき、 $t_{n+1} = t_n + h$ における値 $y(t_{n+1})$ を次のように近似するものである。

$$y_{n+1} = y_n + h(\mu_1 f_1 + \mu_2 f_2) + h^2(m_1 Df_1 + m_2 Df_2) \quad (1)$$

ここで

$$f_1 = f(t_n, y_n),$$

$$Df_1 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n),$$

$$y_2 = y_n + h\alpha_2 f_1 + h^2 b_{21} Df_1,$$

$$f_2 = f(t_n + \alpha_2 h, y_2),$$

$$Df_2 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + \alpha_2 h, y_2)$$

$$+ (\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2 + hc_1 Df_1) \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + \alpha_2 h, y_2)$$

である。この公式に含まれるパラメタは α_2 を自由パラメタとして次のように表される：

$$b_{21} = \alpha_2^2/2, \mu_2 = (2\alpha_2 - 1)/2\alpha_2^2,$$

$$m_2 = (3 - 4\alpha_2)/12\alpha_2^2, \gamma_2 = 1/(3 - 4\alpha_2),$$

$$\mu_1 = 1 - \mu_2, m_1 = 1/2 - (\mu_2\alpha_2 + m_2), \gamma_1 = 1 - \gamma_2,$$

$$c_1 = \alpha_2(1 - \gamma_2). \quad (2)$$

次に、新しく $y(t_{n+1})$ を f_1, Df_1, f_2 を用いて

$$\vartheta_{n+1} = y_n + h(\hat{\mu}_1 f_1 + \hat{\mu}_2 f_2) + h^2 \hat{m}_1 Df_1 \quad (3)$$

で近似した公式を考察する。この ϑ_{n+1} と真の解関数 $y(t_{n+1})$ を h のべきに展開したとき、なるべく高次の項まで関数によらず一致するように $\hat{\alpha}_2, \hat{b}_{21}, \hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2, \hat{m}_1$ を決める。すると、 h^3 の項まで一致させることができ、パラメタは $\hat{\alpha}_2$ を自由パラメタとして次のように表される。

$$\hat{b}_{21} = \hat{\alpha}_2^2/2, \hat{\mu}_2 = 1/3\hat{\alpha}_2^2, \hat{\mu}_1 = 1 - \hat{\mu}_2, \hat{m}_1 = 1/2 - \hat{\mu}_2\hat{\alpha}_2. \quad (4)$$

そこで、 $\hat{\alpha}_2 = \alpha_2$ にとれば、両公式の f_2 は同じものになり、いわゆる埋込み型 3-4 次公式が得られる。

2.2 自由パラメタの決定

公式(1)のパラメタを 4 次公式となるように決めた場合には、この公式の絶対安定領域は自由パラメタのとり方によらず一定で、約 -2.79 であり、自由パラメタ α_2 を用いて打切誤差の最適化を行うと、最適な α_2 はほぼ $0.7 \sim 0.8$ 付近と知られており、文献4) の公式は $\alpha_2 = 11/15$ としたものである。

一方、3 次公式の誤差の主要項である $O(h^4)$ の項は 4 項あり、その係数は次のとおりである：

$$D^3 f \text{ および } 3 Df \cdot Df_v \text{ の係数} \cdots \delta_{4,1} = (4\alpha_2 - 3)/72$$

$$Df \cdot f_v^2 \text{ および } D^2 f \cdot f_v \text{ の係数} \cdots \delta_{4,2} = -1/24$$

ここで、 $D^i f = \left(\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial y} \right)^i f$, $f_v = \frac{\partial f}{\partial y}$ である。

$\delta_{4,2}$ は α_2 によらず一定である。したがってこの公式の絶対安定領域も一定で約 -2.51 である。 $\delta_{4,1}$ は α_2 が $3/4$ のとき 0 になる。そこで $\alpha_2 = 3/4$ に決める。すると 4 次公式と 3 次公式の μ_2 と $\hat{\mu}_2$, したがって μ_1 と $\hat{\mu}_1$ および m_1 と \hat{m}_1 も一致する。ところ

が、4 次公式のパラメタ(2)の γ_2 から、このとき 2 段 4 次公式(1)はこのままの形では計算できないことがわかる。しかし

$$m_2 \gamma_2 = 1/12\alpha_2^2, m_2 \gamma_1 = m_2 - m_2 \gamma_2, m_2 c_1 = \alpha_2 m_2 \gamma_1 \quad (5)$$

であることを考慮すれば、 $m_2 Df_2$ をまとめて

$$\begin{aligned} m_2 Df_2 &= m_2 \frac{\partial}{\partial t} f(t + \alpha_2 h, y_2) \\ &+ (m_2 \gamma_1 f_1 + m_2 \gamma_2 f_2 + h m_2 c_1 Df_1) \\ &\times \frac{\partial}{\partial y} f(t + \alpha_2 h, y_2) \end{aligned}$$

として計算し、

$$y_{n+1} = \vartheta_{n+1} + h^2 m_2 Df_2$$

とすればよい。

このようにすれば、この公式に含まれる 3 次のは 4 次のもとのパラメタがすべて一致するので、3 次公式の値 ϑ_{n+1} は 4 次公式の計算の途中の値として得られ、手間の面で非常に能率が良い。

この公式のパラメタは(4)式あるいは γ_2, γ_1, c_1 を除いた(2)式および(5)式に $\alpha_2 = 3/4$ を代入して得られる。この公式を次節に示す。

2.3 2段3-4次公式 [DRK 234]

打切誤差推定能力を持つ自動微分法による微分係数を利用した 2 段 3-4 次公式は次のもので、これを [DRK 234] と名付ける。

$$f_1 = f(t_n, y_n),$$

$$Df_1 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n),$$

$$y_2 = y_n + \frac{3}{4} h f_1 + \frac{9}{32} h^2 Df_1,$$

$$f_2 = f\left(t_n + \frac{3}{4} h, y_2\right),$$

$$\vartheta_{n+1} = y_n + h\left(\frac{11}{27} f_1 + \frac{16}{27} f_2\right) + \frac{1}{18} h^2 Df_1,$$

$$E = h^2 m_2 Df_2$$

$$= h^2 \left(-\frac{4}{27} (f_1 - f_2) - \frac{1}{9} h Df_1 \right) \frac{\partial}{\partial y} f\left(t_n + \frac{3}{4} h, y_2\right),$$

$$y_{n+1} = \vartheta_{n+1} + E.$$

[DRK 234]

この E が 3 次公式の誤差の見積りを与える。一般に埋込み型公式では、たまたま次数の低い方の公式の誤差の主要項が 0 になると誤差推定ができないので、すべての誤差項の係数が 0 でないことが望ましいとされている。しかしすべての項が 0 でなくても加え合わせるとちょうど 0 になるという例も知られている⁵⁾。

[DRK 234] の 3 次公式 ϑ_{n+1} の誤差項 $D^3 f$ の係数

表 1 $O(h^4)$ の誤差項の係数
Table 1 Error coefficient of $O(h^4)$ terms.

Derivative	Formula		RK 44	DRK 234
	Coefficient			
D^4f	$\delta_{s,1}$.347 ₁₀ -3	-.521 ₁₀ -3
$Df \cdot D^3f_y$	$\delta_{s,2}$.208 ₁₀ -2	-.313 ₁₀ -2
$D^2f \cdot Df_y$	$\delta_{s,3}$		-.208 ₁₀ -2	-.208 ₁₀ -2
$D^3f \cdot f_y^2$	$\delta_{s,4}$.208 ₁₀ -2	-.833 ₁₀ -2
$(Df)^2 \cdot f_{yy}$	$\delta_{s,5}$.625 ₁₀ -2	-.156 ₁₀ -2
$Df \cdot f_y \cdot Df_y$	$\delta_{s,6}^{(1)}$		-.417 ₁₀ -2	-.208 ₁₀ -2
$Df \cdot Df_y \cdot f_y$	$\delta_{s,6}^{(2)}$.833 ₁₀ -2	.625 ₁₀ -2
$D^2f \cdot f_y$	$\delta_{s,7}$		-.139 ₁₀ -2	.208 ₁₀ -2
$Df \cdot f_y^2$	$\delta_{s,8}$		-.833 ₁₀ -2	-.833 ₁₀ -2
System of equations	$\sqrt{\frac{\sum(\delta_{s,i}^{(k)})^2}{9}}$.483 ₁₀ -2	.475 ₁₀ -2
Single equation	$\sqrt{\frac{\sum\delta_{s,i}^2}{8}}$.462 ₁₀ -2	.470 ₁₀ -2

は 0 で、 f が y を含まない (すなわち数値積分の) ときには確かに誤差推定には使えない。しかし、 f が y を含む場合には、 $Df \cdot f_y^2$ の項は必ず残る。したがって、もう一つの残っている $D^2f \cdot f_y$ の項と加え合わせて 0 になるというごく特殊な例を除けばうまく働くであろう。

表 1 に古典的 Runge-Kutta 公式 [RK 44] と [DRK 234] の 4 次公式の $O(h^4)$ の誤差項の係数の大きさを示す。 $\delta_{s,6}^{(1)}$ と $\delta_{s,6}^{(2)}$ は単一の方程式のとき加え合わせて一つの項になる。夙に Kutta も述べているが、誤差の大きさを比較するのに例題を用いると、その例題を選んだ時点で既にある特定の公式が有利になり公平でなくなる。したがって誤差の大きさの比較には関数によらない部分で議論すべきなのでこれら $\delta_{s,i}$ で比べる。 $\sqrt{\sum\delta^2}$ /項数 の尺度で見ても、両公式はほぼ同じ精度であることがわかる。

2.4 2 段 2-3 次公式 [DRK 223]

f_1 と Df_1 だけを用いて

$$\hat{y}_{n+1} = y_n + h\bar{\mu}_1 f_1 + h^2 \bar{m}_1 Df_1 \tag{6}$$

で近似すると、

$$\bar{\mu}_1 = 1, \bar{m}_1 = 1/2$$

のとき 2 次公式となる。これは 2 次の Taylor 級数法にはかならない。そこで、これと前述の f_1, Df_1, f_2 を用いた 3 次公式 (3) を組み合わせると打切誤差推定能力を持つ次の埋込み型 2 段 2-3 次公式 [DRK 223] が得られる：

$$f_1 = f(t_n, y_n),$$

$$Df_1 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n),$$

$$\hat{y}_{n+1} = y_n + hf_1 + \frac{1}{2}h^2 Df_1,$$

$$f_2 = f\left(t_n + \frac{3}{4}h, y_n + \frac{3}{4}hf_1 + \frac{9}{32}h^2 Df_1\right),$$

$$E = -\frac{16}{27}h(f_1 - f_2) - \frac{4}{9}h^2 Df_1,$$

$$\hat{y}_{n+1} = \hat{y}_{n+1} + E. \tag{DRK 223}$$

この E が 2 次公式の誤差の見積りを与える。

2.5 より高次の公式について

微分係数を利用した 2 段公式 (1) に、 α_3 での関数値 f_3 を加えた公式を作ると 3 段で 5 次の公式となる。 f_3 に加えて、さらに Df_3 まで用いると 6 次の公式が得られる⁶⁾。そこで、(1) の 2 段 4 次公式と 3 段 5 次公式、および 3 段 5 次公式と 3 段 6 次公式を用いて前節と同様な埋込み型公式が作れないかということが考えられるが、それはできない。紙幅の都合で誘導はすべて省略し、存在しない理由だけを次に示す。

$$f_1 = f(t_n, y_n),$$

$$Df_1 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n),$$

$$y_2 = y_n + h\alpha_2 f_1 + h^2 b_{21} Df_1,$$

$$f_2 = f(t_n + \alpha_2 h, y_2),$$

$$Df_2 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + \alpha_2 h, y_2)$$

$$+ (\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2 + hc_1 Df_1) \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + \alpha_2 h, y_2)$$

$$y_3 = y_n + h(\beta_{31} f_1 + \beta_{32} f_2) + h^2 (b_{31} Df_1 + b_{32} Df_2),$$

$$f_3 = f(t_n + \alpha_3 h, y_3),$$

$$Df_3 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + \alpha_3 h, y_3)$$

$$+ (\sigma_1 f_1 + \sigma_2 f_2 + \sigma_3 f_3 + h(s_1 Df_1 + s_2 Df_2))$$

$$\times \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + \alpha_3 h, y_3)$$

とおくとき、 $f_1, Df_1, f_2, Df_2, f_3$ を用いて $y(t_{n+1})$ を

$$y_{n+1} = y_n + h(\mu_1 f_1 + \mu_2 f_2 + \mu_3 f_3)$$

$$+ h^2 (m_1 Df_1 + m_2 Df_2)$$

で近似すると 5 次の公式になるが、このときパラメタは一つの自由パラメタ α_2 を用いて表され、 γ_2 は

$$\gamma_2 = 1/(3-5\alpha_2) \tag{7}$$

となる。2 段 4 次公式の γ_2 は (2) に示したように $\gamma_2 = 1/(3-4\alpha_2)$ なので、この公式の組が埋込み型公式となるためには、これらが等しい、すなわち $\alpha_2 = 0$ でなければならないのでこのタイプの埋込み型公式は作れないことがわかる。

全く同様に $f_1, Df_1, f_2, Df_2, f_3, Df_3$ を用いて

$y(t_{n+1})$ を

$$y_{n+1} = y_n + h(\mu_1 f_1 + \mu_2 f_2 + \mu_3 f_3) + h^2(m_1 Df_1 + m_2 Df_2 + m_3 Df_3)$$

で近似すると6次の公式が得られ、パラメタ γ_2 はここでも自由パラメタ α_2 を用いて

$$\gamma_2 = 1/(3 - 6\alpha_2) \tag{8}$$

と表される。そこで(7)と(8)の γ_2 を等しくするためには $\alpha_2 = 0$ でなければならず、やはり埋込み型公式は作れない。微分係数を用いる7次公式は t_n のところで f の2階の導関数が必要で⁹⁾、このタイプの公式は3段6次までしかない。

以上から自動微分法によって得られる1階の微分係数を利用する最小段数の Runge-Kutta 系の埋込み型公式は2段2-3次公式 [DRK 223] および2段3-4次公式 [DRK 234] に限ることがわかる。

3. 微分係数の計算法と手間

3.1 自動微分法による微分係数の計算法

この公式に現れる Df_1, Df_2 の計算法は、伊理²⁾、Rall⁷⁾ らによって提案されている自動微分法を少し変形した形として得られる⁴⁾。すなわち次のようにする。

準備:

t, y から f を計算する過程を基本演算に分解する。これを計算過程という。また個々の基本演算の結果として得られる値を中間変数、それらの中間変数に対してその中間変数を求めるのに用いた1個(単項演算)あるいは2個(2項演算)の(中間)変数に関する偏導関数を要素的偏導関数と呼ぶ。 t, y, f と各中間変数 w に対して微分係数を入れる場所 $D(t), D(y), D(f), D(w)$ を用意する。

Stage 1:

t, y から計算過程を順にたどって f を計算する。それと並行して各中間変数に対して要素的偏導関数を計算しその中間変数に付随させて置く。

Stage 2:

初期設定: 次の値を $D(t), D(y)$ とする。

1段目 (Df_1 の計算...通常の df/dt の計算)

$D(t)=1, D(y)$ には Stage 1 で得られた f_1 の各成分を成分ごとに入れる。

2段目 ($m_2 Df_2$ の計算)

$D(t)=0, D(y)$ には Stage 1 で得られた f_2 と、

1段目で計算した f_1, Df_1 を用いて、

$$-\frac{4}{27}(f_1 - f_2) - \frac{1}{9}hDf_1$$

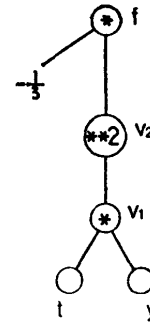


図1 例題の計算過程に対する計算グラフ
Fig. 1 Computational graph for $dy/dt = -t^2 y^2 / 3$.

の各成分を成分ごとに入れる。

この2段目の初期設定の部分だけが通常の自動微分法による df/dt と異なるものである。

反復過程: $D(t), D(y)$ の側から計算過程を順にたどりながら各中間変数に対してそこに置かれている要素的偏導関数を用いて $D(w)$ を、

2項演算 $w = u \odot v$ に対しては

$$D(w) := (\partial w / \partial u) \cdot D(u) + (\partial w / \partial v) \cdot D(v),$$

単項演算 $w = \odot u$ に対しては

$$D(w) := (\partial w / \partial u) \cdot D(u)$$

を計算する。

結果:

1段目、2段目とも f のところに得られた $D(f)$ の値がそれぞれ $Df_1, m_2 Df_2$ である。

例えば、単一方程式

$$dy/dt = -t^2 y^2 / 3$$

の場合は次のようになる。

準備: 計算過程 (図1)

$$v_1 = t \cdot y,$$

$$v_2 = v_1^2,$$

$$f = (-1/3) \cdot v_2.$$

Stage 1:

$$v_1 := t * y; \quad \frac{\partial v_1}{\partial t} := y, \quad \frac{\partial v_1}{\partial y} := t,$$

$$v_2 := v_1 * v_1; \quad \frac{\partial v_2}{\partial v_1} := 2 * v_1,$$

$$f := (-1/3) * v_2; \quad \frac{\partial f}{\partial v_2} := -1/3.$$

Stage 2:

1段目の Df_1 の計算

$$\text{初期設定 } D(t) := 1, D(y) := f_1.$$

$$\text{反復過程 } D(v_1) := y * D(t) + t * D(y),$$

表 2 基本演算に対する微分係数の計算と手間
Table 2 Derivatives and costs for basic operations.

w	dw/dt	operation counts	
		w	w, dw/dt
$u \pm v$	$\frac{du}{dt} \pm \frac{dv}{dt}$	1A	2A
$u \cdot v$	$\frac{du}{dt} \cdot v + u \cdot \frac{dv}{dt}$	1M	3M+1A
$\frac{u}{v}$	$\left(\frac{du}{dt} - w \frac{dv}{dt}\right) \frac{1}{v}$	1D	1D+3M+1A
e^u	$w \cdot \frac{du}{dt}$	1T	1T+1M
$\sin u$ $\cos u$	$\begin{matrix} \cos u \\ -\sin u \end{matrix} \frac{du}{dt}$	1T	2T+1M
$\log u$	$\frac{1}{u} \cdot \frac{du}{dt}$	1T	1T+1D
\sqrt{u}	$\frac{1}{2u} \cdot \frac{du}{dt}$	1T	1T+1D+1A

A...addition/subtraction, M...multiplication,
D...division, T...other operations

$$D(v_2) := 2 * v_1 * D(v_1),$$

$$Df_1 \equiv D(f) := (-1/3) * D(v_2).$$

2 段目では f の計算の Stage 1 は全く同じで,
Stage 2 は $m_2 Df_2$ の計算を行うために初期設定を

$$D(t) := 0, D(y) := -\frac{4}{27}(f_1 - f_2) - \frac{1}{9}h Df_1$$

とすればよい。

基本演算○に対する $D(w)$ の具体的な計算とその手間の見積りを表 2 に示す。

3.2 公式の手間の見積りと数値例

まず公式で用いられる微分係数を計算する手間について考える。ベクトル関数のヤコビアン行列とベクトルとの積は関数自身を計算する手間の高々定数倍で求められることが証明されている^{2),3)}。ここで述べた公式に含まれる微分係数を求める計算では、掛けるベクトルの第 1 成分が 1 段目では 1, 2 段目では 0 である。したがって、例えば乗法の場合、1 回の乗法の手間を M とすると、微分係数を求めるのに通常 $2M$ の手間がかかるのが t と結ばれているところでは M でよい。さらに t だけから計算された中間変数のところでは 2 段目では 0 になる。また、関数計算は乗法ばかりではなく初等関数を含むこともある。自動微分法による微分係数は、大抵の場合、関数値を計算する際に既に得られている値による四則演算だけで求められるが、初等関数の計算には四則演算より手間がかかる。したがって関数値と微分係数を 2 回求める手間は、関数値を 4 回求める手間に比べてそれほど多くはならない。

い。また関数を関数副プログラムの形で計算するようにプログラムした場合には関数を呼ぶ手間もかかる(乗法の数倍程度)。[DRK 234] ではこの手間が [RK 44] の半分で済む。小規模な問題ではこの手間も大きく影響し、手間が単純に関数計算にかかる手間の比にはならない。

次に打切誤差推定を利用して刻み幅を調節する公式の手間と効果については、刻み幅調節の方法をどのようにするかという問題に関連するので、ここでは公式に埋め込まれた両方の次数の公式の誤差項の係数(問題の関数に無関係な部分)を比較するのにとどめる。

数値例として自動微分法を FORTRAN 77 でシミュレートした結果を示す。関数は関数副プログラムの形で与え公式の中の各段ごとにこれを呼ぶ方法でプログラムした。計算は FACOM-M 340 S 16 進 14 桁計算で行った。

例 1) $dy/dt = -t^2 y^2/3, y(2) = 1$

を固定刻み $h = 2^{-7}, 2^{-8}, \dots, 2^{-14}$ で $t = 2$ から 3 まで積分した結果を表 3 に示す。

表 3 例 1) の計算結果
Table 3 Results of numerical solution of example 1.

h	[RK 44]		[DRK 234]	
	Relative error at $t=3$	C. P. U. time	Relative error at $t=3$	C. P. U. time
2^{-7}	.25 ₁₀ -9	17 msec	.28 ₁₀ -9	14 msec
2^{-8}	.15 ₁₀ -10	34	.17 ₁₀ -10	28
2^{-9}	.96 ₁₀ -12	67	.11 ₁₀ -11	55
2^{-10}	.53 ₁₀ -13	133	.59 ₁₀ -13	109
2^{-11}	-.12 ₁₀ -13	267	-.11 ₁₀ -13	217
2^{-12}	-.32 ₁₀ -13	533	-.32 ₁₀ -13	433
2^{-13}	-.65 ₁₀ -13	1,066	-.65 ₁₀ -13	865
2^{-14}	-.13 ₁₀ -12	2,131	-.13 ₁₀ -12	1,731

表 4 例 2) の計算結果
Table 4 Results of numerical solution of example 2.

h	[RK 44]		[DRK 234]	
	Relative error at $t=-1/2$	C. P. U. time	Relative error at $t=-1/2$	C. P. U. time
2^{-8}	.21 ₁₀ -9	46 msec	-.79 ₁₀ -9	45 msec
2^{-9}	.13 ₁₀ -10	92	-.50 ₁₀ -10	89
2^{-10}	.83 ₁₀ -12	184	-.31 ₁₀ -11	179
2^{-11}	.31 ₁₀ -13	367	-.22 ₁₀ -12	357
2^{-12}	-.38 ₁₀ -13	734	-.53 ₁₀ -13	713
2^{-13}	-.83 ₁₀ -13	1,466	-.83 ₁₀ -13	1,427
2^{-14}	-.17 ₁₀ -12	2,932	-.17 ₁₀ -12	2,854

表 5 例 3) の計算結果
Table 5 Results of numerical solution of example 3.

h	[RK 44]		[DRK 234]	
	Relative error at t=1	C. P. U. time	Relative error at t=1	C. P. U. time
2 ⁻⁷	-.68 ₁₀ -9	msec 53	-.13 ₁₀ -10	msec 33
2 ⁻⁸	-.41 ₁₀ -10	105	-.79 ₁₀ -12	67
2 ⁻⁹	-.25 ₁₀ -11	210	-.50 ₁₀ -13	134
2 ⁻¹⁰	-.16 ₁₀ -12	417	-.44 ₁₀ -14	266
2 ⁻¹¹	-.12 ₁₀ -13	834	-.28 ₁₀ -14	532
2 ⁻¹²	-.59 ₁₀ -14	1,668	-.53 ₁₀ -14	1,065
2 ⁻¹³	-.11 ₁₀ -13	3,336	-.11 ₁₀ -13	2,128

表から、[DRK 234] は確かに 4 次式であることがわかる。計算の時間については、関数計算が簡単なのではかの手間の方が大きく影響し、C. P. U. 時間は [RK 44] の約 0.82 倍である。(因みに、公式の中に関数計算の部分まで全部書いて実行した結果では(乗法の数だけ数えれば [RK 44] が 16 回 [DRK 234] が 20 回である) [RK 44] の約 1.3 倍かかる。)

例 2) dy/dt

$$= -(2ty^5 + 5t^4y - 4t^3y^3 - y^5 - 4t^3y + 2ty^3 + 1) / (-3t^4y^2 + 5t^2y^4 + t^5 - 5ty^4 - t^4 + 3t^2y^2 - 1)$$

$$y(-1) = 0, (y(-1/2) = 1/2 \text{ である})$$

を固定刻み $h=2^{-8}, 2^{-9}, \dots, 2^{-14}$ で $t=-1$ から $-1/2$

まで積分した結果が表 4 である。

この例は右辺の関数計算に乗法が多く含まれ(整頓すると乗法が 19, 除法が 1 になる), 微分係数の計算で乗法の回数が 2 倍になる勘定であるが, 実際には t と結ばれている中間変数のところでの微分係数の計算が簡単化されることから, 1 step 当たりの関数計算に含まれる演算は [RK 44] の乗法 76, 除法 4 に対して [DRK 234] では乗法 77, 除法 2 なので, C. P. U. 時間は [RK 44] と同程度で済んでいる。

例 3) $dy/dt = (\cos t - (t \cos t - \sin t)y - y^2) / (1 - t \sin t),$

$$y(0) = 1, (y(1) = (1 + \sin 1) / 2 \text{ である})$$

を固定刻み $h=2^{-7}, 2^{-8}, \dots, 2^{-13}$ で $t=0$ から 1 まで積分する。結果は表 5 のようである。この例は関数計算に sine と cosine が含まれており, [RK 44] では 1 step についてそれぞれ 4 回ずつ計算しなければならない。これに対して [DRK 234] ではそれぞれ 2 回ずつで済み, さらに t だけで計算される中間変数に対する微分係数の計算が 2 段目では不要になることと相まって非常に速くなっている。(C. P. U. 時間は [RK 44] の約 0.64 倍である。)

計算過程を手手で書いて FORTRAN で自動微分を行った結果ではあるが, 微分係数を用いても関数値のみを用いるものと同じオーダの時間でほぼ同精度が達

表 6 埋込み型 3-4 次式の誤差項の係数
Table 6 Error coefficients of embedded formulas.

Formula	[DRK 234]		Five-stage			
	Third-order	Fourth-order	[F 534]		[V 534] (in CSIRK(6.5))	
			Third-order	Fourth-order	Third-order	Fourth-order
$\delta_{s,1}$	0		-.390 ₁₀ -3		.217 ₁₀ -2	
$\delta_{s,2}$	0		0		.276 ₁₀ -2	
$\delta_{s,3}$.417 ₁₀ -1		-.117 ₁₀ -2		.651 ₁₀ -2	
$\delta_{s,4}$.417 ₁₀ -1		.439 ₁₀ -2		.257 ₁₀ -1	
$\sqrt{\frac{\sum \delta_{s,j}^2}{4}}$.295 ₁₀ -1		.228 ₁₀ -2		.134 ₁₀ -1	
$\delta_{s,1}$	-.521 ₁₀ -3	-.521 ₁₀ -3	.170 ₁₀ -4	.250 ₁₀ -3	.125 ₁₀ -2	-.181 ₁₀ -4
$\delta_{s,2}$	-.500 ₁₀ -1	-.312 ₁₀ -2	.102 ₁₀ -3	.150 ₁₀ -2	.750 ₁₀ -2	-.108 ₁₀ -3
$\delta_{s,3}$	-.333 ₁₀ -1	-.208 ₁₀ -2	.804 ₁₀ -3	.139 ₁₀ -2	.566 ₁₀ -2	-.919 ₁₀ -4
$\delta_{s,4}$	-.833 ₁₀ -2	-.833 ₁₀ -2	-.175 ₁₀ -2	-.139 ₁₀ -2	.919 ₁₀ -4	.919 ₁₀ -4
$\delta_{s,5}$	-.250 ₁₀ -1	-.156 ₁₀ -2	.511 ₁₀ -4	.749 ₁₀ -3	.375 ₁₀ -2	-.542 ₁₀ -4
$\delta_{s,6}^{(1)}$	-.333 ₁₀ -1	-.208 ₁₀ -2	-.351 ₁₀ -2	-.300 ₁₀ -2	.924 ₁₀ -3	.217 ₁₀ -3
$\delta_{s,6}^{(2)}$	-.250 ₁₀ -1	.625 ₁₀ -2	.908 ₁₀ -2	.578 ₁₀ -2	.311 ₁₀ -1	-.858 ₁₀ -3
$\delta_{s,7}$	-.833 ₁₀ -2	.208 ₁₀ -2	-.159 ₁₀ -2	-.100 ₁₀ -2	-.161 ₁₀ -2	.723 ₁₀ -4
$\delta_{s,8}$	-.833 ₁₀ -2	-.833 ₁₀ -2	-.833 ₁₀ -2	-.578 ₁₀ -2	-.833 ₁₀ -2	.858 ₁₀ -3
$\sqrt{\frac{\sum \delta_{s,j}^2}{9}}$.262 ₁₀ -1	.475 ₁₀ -2	.435 ₁₀ -2	.304 ₁₀ -2	.113 ₁₀ -1	.416 ₁₀ -3

成されていることがわかる。しかも打切誤差が推定できるといふ [RK 44] にはない利点を持っている。

表 6 に [DRK 234] および通常の Kutta 型の 5 段で 3-4 次の埋込み型公式, Fehlberg¹⁾ の [F 534] と Verner⁹⁾ の [V 534] の $O(h^4)$ と $O(h^5)$ の誤差項の係数の大きさを示す。表から [DRK 234] の 3 次公式は [V 534] に, 4 次公式は [F 534] に近い精度が達成されていることがわかる。

4. む す び

Runge-Kutta 系の常微分方程式数値解法公式に自動微分法によって得られる微分係数を利用する, ここに示した 2 段 4 次公式 [DRK 234] は, 計算の過程に 3 次公式が含まれている。したがって, 打切誤差推定による刻み幅制御機能を持たせることができる。しかも 3 次公式のために付加する計算は不要なので, 手間の面で非常に効率が良い。

さらに, 打切誤差に関しても最適なものであり, 古典的 Runge-Kutta 公式はもとより, 刻み幅自動制御機能を持つ 5 段公式 [F 534] とほぼ同精度が達成されている。

この公式に含まれる微分係数は, さきに提案されている自動微分法から容易に得られる。この微分係数は, 各基本演算に対し, 関数計算の際既に得られている値を用いて高々 2, 3 回の乗法の手間で得られるが, 関数計算では, 四則以外の基本演算には乗法より多くの手間がかかる。したがって微分係数を用いても関数計算だけのものよりも手間の面で特に不利にはならず, 誤差推定が可能という有利な公式になっている。

以上から, 将来自動微分法の計算システム (コンパイラなど) が提供されるようになれば, ここで提案した打切誤差推定能力を持つ公式 [DRK 234] は手間の面からも, 精度の面からも推奨される公式となる。

謝辞 名古屋大学三井斌友博士, 千葉大学星守博士には貴重なコメントを頂いた。また, 情報処理開発協会情報処理研修センター事務局の方々には計算機の使用について特段の便宜を図っていただいた。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) Fehlberg, E.: Klassische Runge-Kutta-

Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle und ihre Anwendung auf Wärmeleitungsprobleme, *Computing*, Vol. 6, pp. 61-71 (1970).

2) Iri, M.: Simultaneous Computation of Functions, Partial Derivatives and Estimates of Rounding Errors—Complexity and Practicality—, *Jpn. J. Appl. Math.*, Vol. 1, No. 2, pp. 223-252 (1984).

3) 伊理正夫, 久保田光一: 高速自動微分法とその周辺, 統計数理研究所昭和 61 年度共同研究報告書 61-共会-14, pp. 61-75 (1987).

4) 伊理正夫, 小野令美, 戸田英雄: 合成関数の高速微分法とその導関数を含む Runge-Kutta 系の常微分方程式数値解法公式への応用, 情報処理学会論文誌, Vol. 27, No. 4, pp. 389-396 (1986).

5) 小野令美, 戸田英雄: Runge-Kutta 5 段 5 次型と 6 段 6 次型の実用公式, 情報処理学会論文誌, Vol. 26, No. 2, pp. 228-238 (1985).

6) 小野令美, 戸田英雄: 合成関数の高速微分法とその適用例, 統計数理研究所昭和 61 年度共同研究報告書 61-共会-14, pp. 117-133 (1987).

7) Rall, L. B.: Automatic Differentiation—Techniques and Applications, *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 120, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York (1981).

8) Ralston, A. and Rabinowitz, P.: *A First Course in Numerical Analysis* (Second Edition), McGraw-Hill, New York (1978) (戸田英雄, 小野令美(訳): 電子計算機のための数値解析の理論と応用, ブレイン図書出版, 東京(1986)).

9) Verner, J. H.: Families of Imbedded Runge-Kutta Method, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 16, No. 5, pp. 857-875 (1979).

(昭和 62 年 1 月 8 日受付)

(昭和 62 年 5 月 13 日採録)



小野 令美 (正会員)

1932 年生。1954 年お茶の水女子大学理学部数学科卒業。工学博士。千葉大学工学部講師。数値計算に興味をもっている。著書「入門数値計算」(共著, オーム社)。応用統計学会会員。

**戸田 英雄** (正会員)

1927年生。1950年東京大学工学部計測工学科卒業。1958年東京大学工学部大学院(旧制)了。工学博士。1958年7月電気試験所物理部応用数学課勤務。1981年6月より千葉大学工学部教授現在に至る。計算数学、計算統計学に興味をもっている。著書「入門数値計算」(共著、オーム社)など。応用統計学会会員。

**伊理 正夫** (正会員)

昭和8年生。昭和30年東京大学工学部応用物理学科(数理学科)卒業。昭和35年同大学院博士課程修了。工学博士。九州大学工学部助手、助教授(通信工学科)、東京大学助教授(工学部計数工学科)を経て、現在同大教授。回路、グラフ、数値計算、言語などの研究、教育に従事。昭和40年松永賞受賞。著書「Network Flow, Transportation and Scheduling」など。