

Runge-Kutta 系の 6 段 6 次極限公式及び 6 段で数値的に 6 次の公式†

小野 令美††

常微分方程式の初期値問題 $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ の数値解法の一つの陽的 Runge-Kutta 公式では、5 段以上の場合その段数以上の次数の公式は得られないことが知られている。しかし、関数計算を行う x の分点のうちある二つを近付けた極限で考えると、5 段で 5 次、6 段で 6 次の公式となる。そのような公式は必然的に f の 1 階の導関数を含むことになる。このように二つの分点を近付けた極限で考えた公式を極限公式と呼ぶ。本論文で一つの一般的な 6 段 6 次極限公式を示す。これは 5 次以上の高次公式誘導の際、普通つけ加えられている付加条件をつけずに導いたもので、従来導かれたものすべてを含む一般的なものである。その結果 x の最後の分点が積分の刻みの端の点に一致する場合には、自由なパラメタを二つ含む唯一種類に限ることが証明される。以前導いた極限公式はこの二つの自由なパラメタがある関係式をみたく特別な場合に当たる。ここで導く公式は、自由なパラメタには何の制限もない、そこでこの二つを 7 次の誤差項の最小化に用いれば打ち切り誤差に関して最良の公式となる。次に、導関数計算を必要としない 6 回の関数計算だけの 6 段公式で、この 6 次の極限公式と数値的に同程度の精度をもつ公式を示す。これは打ち切り誤差最小の極限公式に基づいているので、打ち切り誤差に関しても 6 段で達成できる最も精度の良いものであり、計算の手間の面で効率の良い実用的な公式である。

1. ま え が き

常微分方程式の初期値問題

$dy/dx = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ (f, y はベクトル) の数値解法の一つの陽的 Runge-Kutta 公式は、 $x = x_n$ における y の値 y_n が得られているとき、 $x = x_n + h$ における y の近似値 y_{n+1} を

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_i = hf(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad (i=2, \dots, s)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^s \mu_i k_i$$

によって求める。この y_{n+1} と $y(x_n + h)$ の Taylor 展開が $f(x, y)$ に無関係に $O(h^p)$ の項まで一致するようにパラメタ $\alpha_i, \beta_{ij}, \mu_i$ が定められているとき s 段 p 次公式という。

よく知られているように 5 段では 5 次以上、6 段では 6 次以上の公式は得られない。しかし、 α_i のうちのある二つを近付けた極限で考えると 5 次¹⁾及び 6 次の公式が得られる。この考えに基づいた公式を極限公式と呼ぶ。この公式は必然的に f の 1 階の導関数を含む。

5 次以上の高次公式の誘導には、その次数の公式となるために満たすべき条件式のほかに、いくつかの条件をつけ加えているものが多い。それは満たすべき条件式に非線形のものも多く含まれてきて、これが解を

求めるのを困難にする一因となっているが、 $\sum \beta_{ij} \alpha_j = \alpha_i^{k+1}/(k+1)$ というようないくつかの条件を加えると、この非線形のものが線形のものとして一致してしまうほか、満たすべき条件式の数もずっと少なくなるからである。この付加条件のために 5 次以上のほとんどの公式が $\mu_2 = 0$ となっている。

5 次公式で $\mu_2 \neq 0$ の公式としてはわずかに Cassity²⁾ のものと田中ら³⁾ のものが知られている。Cassity の $\mu_2 \neq 0$ の 6 段 5 次公式は上に述べた付加条件は加えず、公式のパラメタが実数でかつ他のパラメタの有理式で表されるという条件のもとで導かれたもので、それは $\alpha_6 = 1$ の場合に限られ、その一つの公式として与えられたものである。また田中らの公式はこの Cassity の公式に基づいて、数値的探索により打ち切り誤差を最小化したものである。

著者はさきに一般につけ加えられている付加条件のもとでの 6 段 6 次極限公式を導いたが⁴⁾、これは $\mu_2 = 0$ の極限公式である。本報告で示す 6 段 6 次極限公式は、何の付加条件もつけずに導いたものである。

その結果、 x の最後の分点 α_6 が 1 の場合には、 $\mu_2 = 0$ のものも $\mu_2 \neq 0$ のものも含めた 6 段 6 次極限公式が唯一種類存在し、さきに導いた $\mu_2 = 0$ の極限公式はその特別な場合に相当することが明らかにされる。また Cassity と田中らの $\mu_2 \neq 0$ の公式も $\alpha_6 = 1$ であるから、これらの公式も含めての 6 段 6 次極限公式である。一般に段数と次数の等しい公式では自由なパラメタをどのように決めても、公式の絶対安定領域は一定である。そこで残っているパラメタを用いて $O(h^7)$ の

† A Six-Stage Runge-Kutta Formula of Numerically Sixth-Order Derived from the Best Limiting Formula of Exactly Sixth-Order by HARUMI ONO (Tokyo Metropolitan Nogeji Agricultural Upper Secondary School).

†† 東京都立豊島高等学校

誤差項の係数を最小化した公式を与える。

つぎに、極限公式において f の導関数を含む項の計算にはあまり精度が要らないという事実を用いて、6 回の関数計算だけで 6 次の極限公式と数値的に同精度の公式を示す。

2. 6 段 6 次極限公式

2.1 6 段 5 次公式となるための Cassity の場合分け

6 段 5 次公式となるために、 $O(h^6)$ までの誤差項の係数を 0 とおいた条件式から、 $\alpha_i \neq \alpha_j$ ($i \neq j$) のとき、これらすべての条件式がなりたつのは次の場合であることが Cassity によって明らかにされている³⁾。

- i) $\alpha_6 = 1$
- ii) $\alpha_6 \neq 1$ かつ

$$p\alpha_6(\alpha_2 - \alpha_6) + q\alpha_6^2(\alpha_2 - \alpha_6) + r c_6 + s\alpha_6 c_6 = 0$$

ここで、 p, q, r, s は同時に 0 でない定数、 $c_6 = \sum_{j=2}^5 \beta_{6j} \alpha_j$ である。

この i) の場合についての 6 段 6 次極限公式を求めらる。

$\alpha_6 = 1$ の場合 5 次公式となるために満たすべき条件式は次のようにまとめられる。

$$\sum_{j=1}^5 \beta_{6j} = \alpha_i \quad (i=2, 3, \dots, 6) \quad (1)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 & 1 \\ 0 & \alpha_2^2 & \alpha_3^2 & \alpha_4^2 & \alpha_5^2 & 1 \\ 0 & \alpha_2^3 & \alpha_3^3 & \alpha_4^3 & \alpha_5^3 & 1 \\ 0 & \alpha_2^4 & \alpha_3^4 & \alpha_4^4 & \alpha_5^4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ 1/3 \\ 1/4 \\ 1/5 \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\begin{bmatrix} c_3 & c_4 & c_5 & c_6 \\ \alpha_3 c_3 & \alpha_4 c_4 & \alpha_5 c_5 & c_6 \\ \alpha_3^2 c_3 & \alpha_4^2 c_4 & \alpha_5^2 c_5 & c_6 \\ c_3^2 & c_4^2 & c_5^2 & c_6^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/6 \\ 1/8 \\ 1/10 \\ 1/20 \end{bmatrix} \quad (3)$$

$$\begin{bmatrix} \alpha_3(\alpha_2 - \alpha_3) & \alpha_4(\alpha_2 - \alpha_4) \\ c_3 & c_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_4 \beta_{43} + T_5 \beta_{53} \\ T_5 \beta_{54} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_2/24 - 1/60 \\ 1/120 \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$T_i = \mu_i(1 - \alpha_i), \quad (i=3, 4, 5) \quad (5)$$

$$c_i = \sum_{j=1}^5 \beta_{6j} \alpha_j, \quad (i=3, 4, 5, 6) \quad (6)$$

$$T_i = \sum_{j=i+1}^6 \mu_j \beta_{ji}, \quad (i=3, 4, 5) \quad (7)$$

2.2 $O(h^6)$ の誤差項の係数

6 段 5 次公式 ($O(h^5)$ までの誤差項がすべて 0) の $O(h^6)$ の誤差項の係数 20 項は $\alpha_6 = 1$ のときの条件式を用いて書き直すと次の 11 項にまとめられる：

$$\delta_{6,1} = \frac{1}{120} \left(\sum_{i=2}^6 \mu_i \alpha_i^5 - \frac{1}{6} \right)$$

$$= -\frac{1}{5} \delta_{6,2} = -\frac{1}{120} \left(\sum_{i=3}^6 \mu_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^4 - \frac{1}{30} \right)$$

$$\delta_{6,3} = \frac{1}{6} \left(\sum_{i=3}^5 T_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^3 - \frac{1}{120} \right)$$

$$= -\delta_{6,6} = -\frac{1}{6} \left(\sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^3 - \frac{1}{24} \right)$$

$$\delta_{6,4} = \frac{1}{2} \left((T_4 \beta_{43} + T_5 \beta_{53}) \beta_{32} \alpha_2^2 + T_5 \beta_{54} (\beta_{42} \alpha_2^2 + \beta_{43} \alpha_3^2) - \frac{1}{360} \right)$$

$$= -\delta_{6,7}^{(2)} = -\frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^5 U_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 - \frac{1}{72} \right)$$

$$\delta_{6,5} = T_5 \beta_{54} \beta_{43} c_3 - \frac{1}{720} = -\delta_{6,8}^{(3)}$$

$$= - \left((U_4 \beta_{43} + T_5 \beta_{53}) c_3 + T_5 \beta_{54} c_4 - \frac{1}{144} \right)$$

$$\delta_{6,7}^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^5 T_i \alpha_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 - \frac{1}{90} \right)$$

$$= -2\delta_{6,11} = -\frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^2 \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 - \frac{1}{18} \right)$$

$$\delta_{6,8}^{(1)} = (T_4 \beta_{43} + T_5 \beta_{53}) \alpha_3 c_3 + T_5 \beta_{54} \alpha_4 c_4 - \frac{1}{240}$$

$$= -\delta_{6,15} = - \left(\sum_{i=3}^5 U_i \alpha_i c_i - \frac{1}{48} \right)$$

$$\delta_{6,8}^{(2)} = (T_4 \alpha_4 \beta_{43} + T_5 \alpha_5 \beta_{53}) c_3 + T_5 \alpha_5 \beta_{54} c_4 - \frac{1}{180}$$

$$= -2\delta_{6,10}^{(2)} = - \left((\mu_4 \alpha_4^2 \beta_{43} + \mu_5 \alpha_5^2 \beta_{53} + \mu_6 \beta_{63}) c_3 + (\mu_5 \alpha_5^2 \beta_{54} + \mu_6 \beta_{64}) c_4 + T_5 c_5 - \frac{1}{36} \right)$$

$$\delta_{6,9} = \frac{1}{6} \left(\sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^2 c_i - \frac{1}{12} \right)$$

$$= -\frac{1}{3} \delta_{6,10}^{(1)} = -\frac{1}{6} \left(\sum_{i=3}^5 T_i \alpha_i^2 c_i - \frac{1}{60} \right)$$

$$\delta_{6,12} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^6 \mu_i c_i \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 - \frac{1}{36} \right)$$

$$\delta_{6,13}^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^5 T_i c_i^2 - \frac{1}{120} \right)$$

$$= -\delta_{6,14} = -\frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i c_i^2 - \frac{1}{24} \right)$$

$$\delta_{6,13}^{(2)} = (\mu_4 c_4 \beta_{43} + \mu_5 c_5 \beta_{53} + \mu_6 c_6 \beta_{63}) c_3$$

$$+ (\mu_5 c_5 \beta_{54} + \mu_6 c_6 \beta_{64}) c_4 + \mu_6 c_6 \beta_{65} c_5 - \frac{1}{72}$$

ここで、 $U_3 = \mu_4 \alpha_4 \beta_{43} + \mu_5 \alpha_5 \beta_{53} + \mu_6 \beta_{63}$, $U_4 = \mu_5 \alpha_5 \beta_{54} + \mu_6 \beta_{64}$, $U_5 = T_5$ である。

2.3 6段6次極限公式

6段6次極限公式を求めたいのでまず(1)~(7)を満たすようにパラメタを決める。すると、 $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \mu_i$ のうちの一つ、 $(\beta_{53}, \beta_{64}, \beta_{43})$ のうちの一つの計6個の自由なパラメタが残る。次に $O(h^6)$ の誤差項の係数がすべて0になるためにこれらの自由なパラメタの満たすべき条件を求めることにする。

2.2節の11項の誤差項の係数のうちで μ_i だけの1次式は $\delta_{6,1}$ だけなのでこれを満たすように自由な μ_i の一つを決める。すると μ_i, T_i は α_i ($i=2, 3, 4, 5$)をパラメタとして定まる。 c_i は(3)を満たすように定められなければならないが、 $\delta_{6,9}$ は c_i の1次式なので、(3)式の最後の c_i の2次式を除いた残りの3式と $\delta_{6,9}$ を0とおいた4式から c_i を定め、これを(3)の最後の2次式に代入して α_i の満たすべき条件を求める。この式は $O(h^5)$ の誤差項の係数で、これを $\delta_{6,5}$ と書くと次のようになる：

$$\delta_{6,5} = \frac{1}{480g_{245}g_{235}g_{234}((30r_3 - 20r_2 + 15r_1 - 12)\alpha_2 - (20r_3 - 15r_2 + 12r_1 - 10))} \times \alpha_2^2 g_{345} \times [5\alpha_2^2(10r_3 - 5r_2 + 3r_1 - 2)(70r_3 - 30r_2 + 15r_1 - 9) - \alpha_2 \{3250r_3^2 + (-3300r_2 + 1975r_1 - 1340)r_3 + 825r_2^2 + (-975r_1 + 655)r_2 + 285r_1^2 - 380r_1 + 126\} + (10r_3 - 5r_2 + 3r_1 - 2)(75r_3 - 45r_2 + 30r_1 - 22)] \quad (8)$$

ここで

$$g_{ijk} = 10\alpha_i\alpha_j\alpha_k - 5(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_k + \alpha_k\alpha_i) + 3(\alpha_i + \alpha_j + \alpha_k) - 2$$

$$r_3 = \alpha_3\alpha_4\alpha_5, \quad r_2 = \alpha_3\alpha_4 + \alpha_3\alpha_5 + \alpha_4\alpha_5,$$

$$r_1 = \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5$$

である。

したがって、5次公式となるのは次の場合である。

- i) $g_{345} = 0 \cdots \mu_2 = 0$ の式となる (9)
- ii) $[] = 0$

これらの条件のもとで残りの $\delta_{6,j}$ のすべてを0にする条件を求める。

残っている $\delta_{6,j}$ にさきに定められた μ_i, c_i を代入すると $\delta_{6,3}, \delta_{6,8}^{(1)}$ は α_i だけの式、 $\delta_{6,4}, \delta_{6,5}, \delta_{6,7}^{(1)}$ 、 $\delta_{6,8}^{(2)}$ は β_{43} の1次式になる。残りの3式は自由なパラメタ β_{43} の2次式になる。すべての $\delta_{6,j}$ を0にしたいので、 β_{43} の1次式となるものを0にする β_{43} を等しいと置くと次の三つの条件式が得られる：

$$\alpha_2(5\alpha_4\alpha_5 - 4(\alpha_4 + \alpha_5) + 3) = 0 \quad (10)$$

$$(\alpha_5 - 1)(15\alpha_4\alpha_5 - 10(\alpha_4 + \alpha_5) + 7) = 0 \quad (11)$$

$$(\alpha_5 - 1)(15\alpha_2(5\alpha_4\alpha_5 - 3(\alpha_4 + \alpha_5) + 2) - 2(15\alpha_4\alpha_5 - 10(\alpha_4 + \alpha_5) + 7)) = 0 \quad (12)$$

また α_i だけの式になる2式は次のとおりである：

$$\delta_{6,3} = \frac{(1 - \alpha_5)}{720(5\alpha_2^2 - 5\alpha_5 + 1)} \times \{(50\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 25(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 15(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 10)\alpha_2 - (25\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 15(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 10(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 7)\} \quad (13)$$

$$\delta_{6,8}^{(1)} = \frac{(\alpha_5 - 1)}{240(5\alpha_2^2 - 5\alpha_5 + 1)} \times (25\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 15(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 10(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 7) \quad (14)$$

すべての $\delta_{6,j}$ を0にするためには(10)~(12)を満たし(13), (14)を0にすることが必要な条件である。

紙面の都合で、証明はすべて割愛するが、場合に分けて調べると次のことが証明される⁹⁾：上の条件を満たすのは $\alpha_2 \rightarrow 0$ かつ $\alpha_5 \rightarrow \alpha_6 = 1$ の場合に限る。このとき残りの $\delta_{6,12}, \delta_{6,13}^{(1)}$ 、 $\delta_{6,13}^{(2)}$ も0になる。

さらに(8)から条件(9)は不要となることがわかる。

すなわち、ここで導いた極限公式は $\mu_2 = 0$ の場合も含めての $\alpha_6 = 1$ の場合の唯一種類の極限公式であり、条件(9)が要らないので、自由なパラメタとして α_3 と α_4 の二つが残る。この唯一種類の極限公式は次のものである：

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$K_2 = h^2(f_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n) \cdot f_y(x_n, y_n))$$

$$k_3 = hf(x_n + \alpha_3 h, y_n + c_{31}k_1 + c_{32}K_2)$$

$$k_4 = hf(x_n + \alpha_4 h, y_n + c_{41}k_1 + c_{42}K_2 + \beta_{43}k_3)$$

$$y_p = y_n + c_{61}k_1 + c_{62}K_2 + \beta_{63}k_3 + \beta_{64}k_4$$

$$k_6 = hf(x_n + h, y_p)$$

$$K_5 = -h^2 f_x(x_n + h, y_p) + h(d_{61}k_1 + d_{62}K_2 + d_{63}k_3 + d_{64}k_4 + k_6) \times f_y(x_n + h, y_p)$$

$$y_{n+1} = y_n + \lambda_1 k_1 + \lambda_2 K_2 + \mu_3 k_3 + \mu_4 k_4 + \lambda_5 K_5 + \lambda_6 k_6 \quad (15)$$

ここでパラメタは次のとおりである：

$$c_{31} = \alpha_3, \quad c_{32} = \frac{\alpha_2^2}{2}, \quad \beta_{43} = \frac{\alpha_2^2(\alpha_4 - \alpha_5)}{3\alpha_2^2(1 - 2\alpha_3)}$$

$$c_{42} = \frac{\alpha_4^2}{2} - \beta_{43}\alpha_3, \quad c_{41} = \alpha_4 - \beta_{43}$$

$$\beta_{64} = \frac{(1 - \alpha_3)(1 - \alpha_4)(1 - 2\alpha_3)}{2\alpha_2^2(\alpha_4 - \alpha_5)(5\alpha_3\alpha_4 - 3(\alpha_3 + \alpha_4) + 2)}$$

$$\beta_{63} = \frac{-(1-\alpha_3)(1-\alpha_4)(1-2\alpha_4)}{2\alpha_3^2(\alpha_4-\alpha_3)(5\alpha_3\alpha_4-3(\alpha_3+\alpha_4)+2)}$$

$$\frac{1-\alpha_3}{3\alpha_3^2(5\alpha_3\alpha_4-3(\alpha_3+\alpha_4)+2)}$$

$$c_{62} = \frac{1}{2} - \beta_{63}\alpha_3 - \beta_{64}\alpha_4, \quad c_{61} = 1 - \beta_{63} - \beta_{64},$$

$$\lambda_1 = \frac{\alpha_3\alpha_4(30\alpha_3\alpha_4-4(\alpha_3+\alpha_4)+4)-2(\alpha_3+\alpha_4)^2+(\alpha_3+\alpha_4)}{60\alpha_3^2\alpha_4^2}$$

$$\lambda_2 = \frac{5\alpha_3\alpha_4-2(\alpha_3+\alpha_4)+1}{60\alpha_3\alpha_4}, \quad \mu_3 = \frac{2\alpha_4-1}{60\alpha_3^2(\alpha_4-\alpha_3)(1-\alpha_3)^2}$$

$$\mu_4 = \frac{-2\alpha_3+1}{60\alpha_3^2(\alpha_4-\alpha_3)(1-\alpha_4)^2}, \quad \lambda_5 = \frac{5\alpha_3\alpha_4-3(\alpha_3+\alpha_4)+2}{60(1-\alpha_3)(1-\alpha_4)}$$

$$\lambda_6 = \frac{\alpha_3\alpha_4(30\alpha_3\alpha_4-56(\alpha_3+\alpha_4)+56)+24(\alpha_3+\alpha_4)^2-45(\alpha_3+\alpha_4)+20}{60(1-\alpha_3)^2(1-\alpha_4)^2}$$

$$d_{54} = \frac{1}{\lambda_5}(\mu_4(1-\alpha_4)-\lambda_6\beta_{64}), \quad d_{53} = \frac{1}{\lambda_5}(\mu_3(1-\alpha_3)-\mu_4\beta_{43}-\lambda_6\beta_{63}),$$

$$d_{52} = -2-d_{53}\alpha_3-d_{54}\alpha_4, \quad d_{51} = -2-d_{53}-d_{54}.$$

2.4 打ち切り誤差最小の 6 段 6 次極限公式

6 段で打ち切り誤差に関して最も精度の良い公式となるように α_3, α_4 を決めたい。そのため $O(h^7)$ の誤差項の係数 $\delta_{7,i}^{(k)}$ に 2.3 節で定められたパラメタを代入して整頓すると、次のように 5 種類の式に分類される。 $\delta_{7,i}^{(k)}$ は連立方程式では 48 項、単一の方程式の場合は上つきの数の異なるものが一つになり 28 項となる。

簡単のために

$$\xi = \frac{14\alpha_3\alpha_4-7(\alpha_3+\alpha_4)+4}{302400}, \quad \eta = \frac{7\alpha_4-4}{15120}$$

$$\zeta = \frac{7\alpha_3-3}{15120}, \quad \omega = \delta_{7,28}, \quad A = \frac{1}{5040}$$

とおくと、次のように分類される。

$$\delta_{7,1} = -\xi, \quad \delta_{7,2} = 6\xi, \quad \delta_{7,3} = -15\xi, \quad \delta_{7,7} = 15\xi,$$

$$\delta_{7,11} = -15\xi, \quad \delta_{7,12}^{(1)} = 60\xi, \quad \delta_{7,13}^{(1)} = -90\xi,$$

$$\delta_{7,17}^{(1)} = 90\xi, \quad \delta_{7,23} = -45\xi, \quad \delta_{7,24}^{(1)} = 90\xi, \quad \delta_{7,25}^{(1)} = 45\xi,$$

$$\delta_{7,26}^{(3)} = -45\xi, \quad \delta_{7,27} = -15\xi.$$

$$\delta_{7,9}^{(1)} = 3\eta, \quad \delta_{7,10}^{(2)} = 3\eta, \quad \delta_{7,12}^{(2)} = \eta, \quad \delta_{7,13}^{(2)} = -3\eta,$$

$$\delta_{7,14} = \eta, \quad \delta_{7,15}^{(1)} = -3\eta, \quad \delta_{7,19} = 3\eta, \quad \delta_{7,20}^{(1)} = -3\eta,$$

$$\delta_{7,21} = -3\eta, \quad \delta_{7,22}^{(2)} = -3\eta, \quad \delta_{7,24}^{(2)} = 3\eta, \quad \delta_{7,26}^{(4)} = -3\eta.$$

$$\delta_{7,4} = \zeta, \quad \delta_{7,8}^{(1)} = -2\zeta, \quad \delta_{7,8}^{(2)} = -\zeta, \quad \delta_{7,10}^{(1)} = 3\zeta,$$

$$\delta_{7,16} = \zeta, \quad \delta_{7,17}^{(2)} = 3\zeta, \quad \delta_{7,18} = \zeta, \quad \delta_{7,22}^{(1)} = -6\zeta,$$

$$\delta_{7,22}^{(3)} = -3\zeta, \quad \delta_{7,25}^{(2)} = 3\zeta.$$

$$\delta_{7,20}^{(3)} = 2\omega, \quad \delta_{7,26}^{(1)} = \omega, \quad \delta_{7,28} = \omega.$$

$$\delta_{7,5} = -A, \quad \delta_{7,6} = -A, \quad \delta_{7,9}^{(2)} = 2A, \quad \delta_{7,9}^{(3)} = A,$$

$$\delta_{7,10}^{(3)} = 2A, \quad \delta_{7,10}^{(4)} = A, \quad \delta_{7,13}^{(3)} = -A, \quad \delta_{7,15}^{(2)} = -A,$$

$$\delta_{7,20}^{(2)} = -A, \quad \delta_{7,26}^{(2)} = -A.$$

ここで ω は次式を表す：

$$\omega = \frac{1}{30240(1-2\alpha_3)(5\alpha_3\alpha_4-3(\alpha_3+\alpha_4)+2)^2} \times \{(305\alpha_4^2-296\alpha_4+72)\alpha_3^3 + (175\alpha_3^2-466\alpha_3+340\alpha_4-76)\alpha_3^2 + (-210\alpha_3^2+395\alpha_3^2-248\alpha_4+52)\alpha_3 + 63\alpha_3^2-120\alpha_3^2+76\alpha_4-16\}.$$

誤差項の係数の大きさを測る尺度としては、

(i) $\delta_{7,i}^{(k)} = 0$ となるものの数を最大にする。

(ii) 自乗和を最小にする。

(iii) 絶対値の和を最小にする。

などが考えられる。

$0 < \alpha_3, \alpha_4 < 1$ の範囲でこれらの値を求めると、(i) に対しては $\alpha_3 = 3/7, \alpha_4 = 4/7,$

(ii) に対しては $\alpha_3 \doteq .422, \alpha_4 \doteq .578,$ (iii)

に対しては $\alpha_3 \doteq .428, \alpha_4 \doteq .572$ となり、

$\alpha_3 = 3/7, \alpha_4 = 4/7$ と小数第 1 位まで一致す

るので、 $\alpha_3 = 3/7, \alpha_4 = 4/7$ に決める。この打ち切り誤差最小の 6 段 6 次極限公式を [D62] と名づける。

3. 6 回の関数計算だけの 6 段公式で 6 段 6 次極限公式と数値的に同精度の公式

$O(h^6)$ の誤差は完全に 0 でなくても、 $O(h^7)$ の誤差に比べて無視できる程度に小さければ、数値的に 6 次の公式といえよう。そのような公式を実質公式と呼ぶ。そこで $\alpha_3 = 3/7, \alpha_4 = 4/7$ とおいた、打ち切り誤差最小の極限公式に基づく実質公式を求めれば、6 段で打ち切り誤差に関して最良の公式となる。

α_2 と $1-\alpha_5$ をある小さい正の数として残し、公式は極限公式を導くときと同じ式変形、すなわち

$$\beta_{i1}k_1 + \beta_{i2}k_2 = (\beta_{i1} + \beta_{i2})k_1 + \beta_{i2}\alpha_2 \cdot \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2}, \quad (i=3, 4, 5, 6)$$

$$\mu_{i1}k_1 + \mu_{i2}k_2 = (\mu_{i1} + \mu_{i2})k_1 + \mu_{i2}\alpha_2 \cdot \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2},$$

$$\mu_{55}k_5 + \mu_{56}k_6 = (\mu_{55} + \mu_{56})k_6 + \mu_{55}(1-\alpha_5) \cdot \frac{k_5 - k_6}{1-\alpha_5}$$

を用いる。

この公式の誤差は $O(h^7)$ の誤差のほか次に次の二つが加わる。

(i) α_2 と $1-\alpha_5$ が 0 でないために残る打ち切り誤差

$O(h^6)$ の項は 0 にならずに残り、また (8) から $O(h^6)$

の誤差項の一つも残る。したがって打切り誤差は、各誤差項の関数による部分を $F_i^{(k)}$ と書けば

$$\delta_{5,5} F_{5,5} h^5 + \sum \delta_{6,6}^{(k)} F_{6,6}^{(k)} h^6 + O(h^7)$$

である。ここで、 $|\delta_{5,5}| = \frac{17}{480} \alpha_2^2$, $\delta_{6,6}^{(k)}$ のうち絶対値最

大のものは $|\delta_{6,6}^{(2)}| = \frac{\alpha_2}{120}$ である。したがって $O(h^5)$ の

誤差は $O(h^6)$ の誤差に比べて小さいと考えられる。また $O(h^7)$ の誤差は極限公式とほぼ等しい。

(ii) $(k_2 - k_1)/\alpha_2$, $(k_5 - k_6)/(1 - \alpha_5)$ で起こる桁落ちによる丸めの誤差

m 進法 q 桁計算のとき、それぞれほぼ $2m^{-q} \cdot k_1/\alpha_2$, $2m^{-q} k_6/(1 - \alpha_5)$ で見積られる。ここで $\alpha_2 = 1 - \alpha_5$ とし、 k_1 と k_6 の大きさはかわらないがほぼ y_n と同程度のオーダーとすれば y_{n+1} に含まれる桁落ちによる丸めの誤差はほぼ

$$2(\mu_2 \alpha_2 + \mu_5 (1 - \alpha_5)) m^{-q} \cdot \frac{1}{\alpha_2} h \approx \frac{11}{180} m^{-q} \cdot \frac{1}{\alpha_2} h$$

で見積ることができる。

(i) と (ii) から最適な α_2 を求めると $\alpha_2 \approx \sqrt{22}/3 \times m^{(-q/2)} h^{(-5/2)}$ となるが、積分の刻み幅 h が変わると α_2 が変わり、したがってすべてのパラメータが変わることになり実用的でない。そこで、16進14桁計算用のパラメータとして、公式のすべてのパラメータが16進14桁以内におさまるような値として $\alpha_2 = 1 - \alpha_5 = 1/2048$ に固定する。すると $\alpha_2 \approx 0$ のために残る打切り誤差と桁落ちによる丸めの誤差はそれぞれほぼ $\delta_{5,5} h^5 \approx .8410 - 8h^5$, $\delta_{6,6}^{(2)} h^6 \approx .4110 - 5h^6$, $.1710 - 14h^6$ で見積られる。

一方 $O(h^7)$ の誤差項の係数は $.410 - 3 \sim .110 - 3$ のものが13項あるので、 $O(h^7)$ の誤差がちょうど0になるような特殊な例を除けば $O(h^5)$ と $O(h^6)$ の誤差は $O(h^7)$ の誤差に比べ h が極端に小さくなければ無視できて公式の精度には影響を与えないことがわかる。

なお、 $(k_2 - k_1)/\alpha_2$ 及び $(k_5 - k_6)/(1 - \alpha_5)$ の除算についていえば、これらは非常に絶対値の小さい数同士の除算ではあるが、分母は $1/2048 \approx .4810 - 3$ なのでアンダーフロを起こして計算できなくなる心配は全くない。

以上から、6段で達成できる最も精度の良い数値的に6次といえる、6段実質6次の公式は次のものである。これを [H62] と名づける。

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + \alpha_2 h, y_n + \alpha_2 k_1), K_2 = \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2},$$

$$k_3 = hf(x_n + \alpha_2 h, y_n + c_{31} k_1 + c_{32} K_2),$$

$$k_i = hf(x_n + \alpha_i h, y_n + c_{i1} k_1 + c_{i2} K_2 + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), (i=4, 5, 6),$$

$$y_{n+1} = y_n + \lambda_1 k_1 + \lambda_2 K_2 + \mu_3 k_3 + \mu_4 k_4$$

$$+ \lambda_5 \frac{k_5 - k_6}{\alpha_2} + \lambda_6 k_6.$$

ここでパラメータは次のとおりである：

$$\alpha_2 = \frac{1}{2048}, \alpha_3 = \frac{3}{7}, \alpha_4 = \frac{4}{7}, \alpha_5 = \frac{2047}{2048}, \alpha_6 = 1,$$

$$c_{31} = \alpha_3, c_{32} = \frac{377}{4100} \frac{24139}{38762}, c_{41} = -\frac{4}{189},$$

$$c_{42} = -\frac{1677}{18451} \frac{67868}{74429}, \beta_{43} = \frac{16}{27},$$

$$c_{51} = \frac{1995}{2040} \frac{97076}{96845} \frac{17525}{90592}, c_{52} = \frac{42}{170} \frac{94835}{08070} \frac{48917}{49216},$$

$$\beta_{53} = -\frac{209}{127} \frac{76470}{56052} \frac{56183}{86912}, \beta_{54} = \frac{125}{75} \frac{93468}{59142} \frac{22433}{44096}$$

$$c_{61} = \frac{12}{12} \frac{23188}{45086} \frac{80122}{71240} \frac{62322}{20957},$$

$$c_{62} = \frac{10}{41} \frac{53498}{50289} \frac{73371}{04134} \frac{58949}{03190},$$

$$\beta_{63} = -\frac{20}{12} \frac{61835}{45086} \frac{94429}{71240} \frac{33084}{20957},$$

$$\beta_{64} = \frac{3}{2} \frac{85990}{30571} \frac{02703}{61340} \frac{83129}{77955},$$

$$\beta_{65} = -\frac{113}{2} \frac{38713}{30571} \frac{66144}{61340} \frac{77955}{77955},$$

$$\lambda_1 = \frac{80373}{3} \frac{34531}{61665} \frac{68400}{68400}, \lambda_2 = \frac{2}{154} \frac{36223}{23534} \frac{20128}{48225},$$

$$\mu_3 = \frac{1}{3} \frac{00459}{61665} \frac{49669}{68400}, \mu_4 = \mu_3, \lambda_5 = \lambda_2, \lambda_6 = \lambda_1.$$

4. 数値例と公式の評価

最初に6段実質6次の公式 [H62] が16進14桁の範囲で6段6次極限公式と数値的に同精度であることを示す。

積分の刻み幅 h を次々に1/2倍にして一定区間を積分したとき、最終ステップの誤差は、はじめのうちは局所打切り誤差が計算回数 h^{-1} に比例して累積したものが優位なので、ほぼ刻み幅 h の (公式の次数) 乗に比例して減少していく。ある程度 h が小さくなると、1回の計算で起こる計算桁数によって定まる丸めの誤差 ϵ が計算回数 h^{-1} に比例して累積したものが優位となり、ほぼ h^{-1} に比例して増加していく。この誤差の h による変化のようすは、関数によらず同じなので、例として

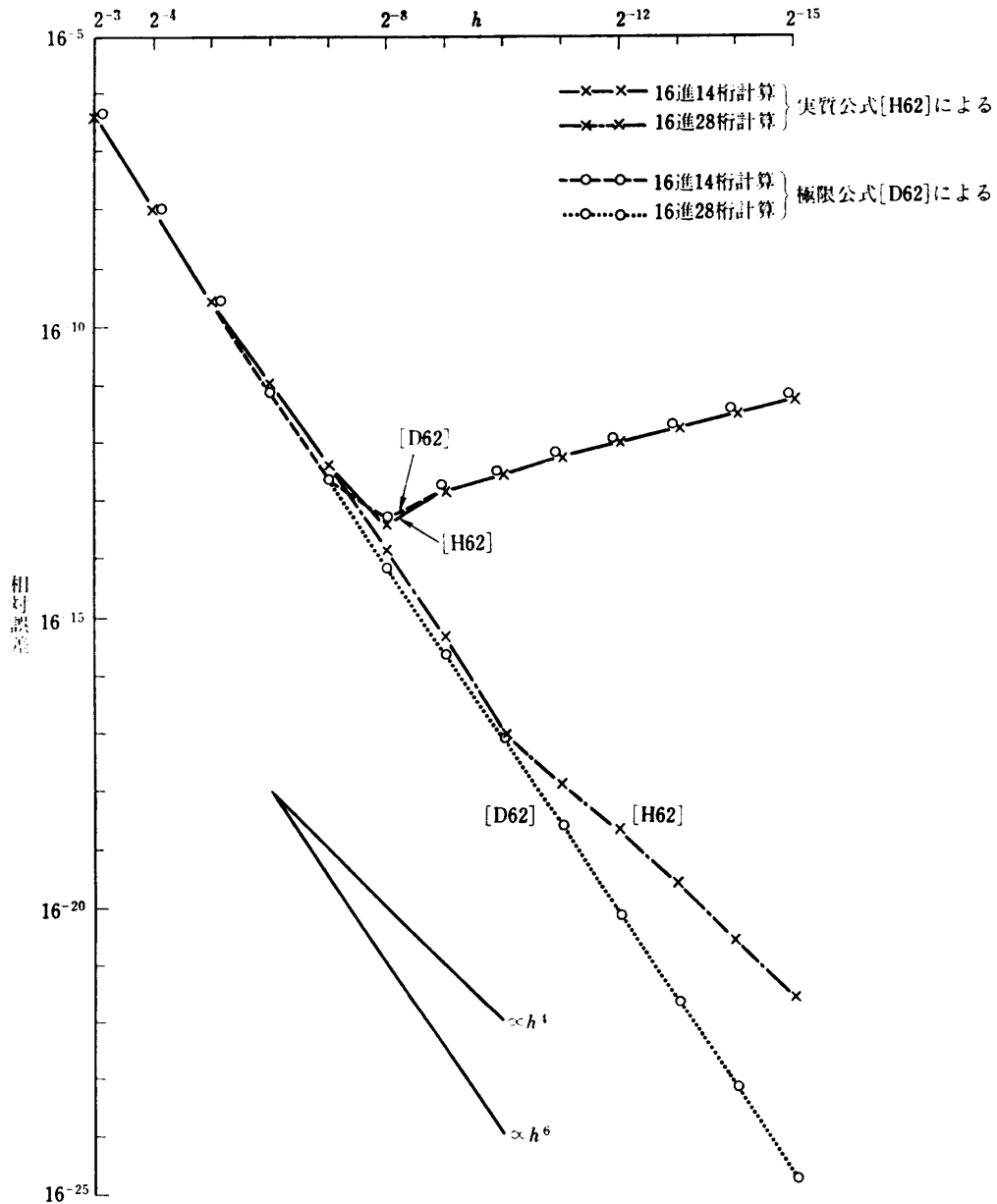


図 1 $y' = -x^2 y^2/3, y(2)=1$ を $x=2$ から 2.125 まで積分したときの $x=2.125$ における相対誤差
 Fig. 1 Relative error of numerical solution of $y' = -x^2 y^2/3, y(2)=1$ for $x=2.125$.

$y' = -x^2 y^2/3, y(2)=1$
 を $x=2$ から 2.125 まで、刻み幅 h を 2^{-3} から 2^{-15} まで変えて積分したときの最終ステップにおける相対誤差を図 1 に示す。計算は 16 進 14 桁で行い、さらに計算桁数によって定まる丸めの誤差を除いたときのような様子を見るために 16 進 28 桁で行った。

図からも次のことがわかる。実質公式 [H62] の累積誤差は h^6 に比例して減少し、 h^4 に比例するようになる ($\delta_{6,5} F_{6,5} h^5$ の誤差の累積したものが優位となる)

のは 16 進 28 桁計算の範囲に入ってからである。したがって 16 進 14 桁の範囲では 6 次の公式といえる。

次に、公式の精度を他の公式と比較する。尺度としては $O(h^6), O(h^7)$ の誤差項の係数について、 $\sqrt{\sum \delta_{i,j}^2}$ /項数と $\sum |\delta_{i,j}|$ /項数を用いた。単一の方程式と連立方程式のそれぞれについて表 1 に示す。比較した他の公式は、Shanks¹⁰⁾ と田中ら¹³⁾ がそれぞれ 6 段で実質的に 6 次として与えたものと、科学技術計算用ライブラリに組み込まれている Fehlberg¹¹⁾ と Verner¹²⁾ のそれぞ

表 1 各種公式の $O(h^6)$, $O(h^7)$ の誤差項の係数の大きさ
Table 1 Error coefficients of $O(h^6)$ and $O(h^7)$ terms.

尺度		公式	6 段 公 式			7 段 公 式	
			[H62]	Shanks ⁽¹⁾	田中ら ^{(1),*}	Fehlberg ⁽¹⁾	Verner ⁽¹⁾
6 次 の誤差項の係数	単一方程式	$\sqrt{\frac{\sum \delta_{6,j}^2}{15}}$.2230 ₁₀ -5	.1963 ₁₀ -4	.4841 ₁₀ -5	---	---
		$\frac{\sum \delta_{6,j} }{15}$.1140 ₁₀ -5	.1247 ₁₀ -4	.2311 ₁₀ -5	---	---
	連立方程式	$\sqrt{\frac{\sum (\delta_{6,j}^{(k)})^2}{20}}$.1435 ₁₀ -5	.1662 ₁₀ -4	.3430 ₁₀ -5	---	---
		$\frac{\sum \delta_{6,j}^{(k)} }{20}$.8553 ₁₀ -6	.9352 ₁₀ -5	.1733 ₁₀ -5	---	---
7 次 の誤差項の係数	単一方程式	$\sqrt{\frac{\sum \delta_{7,j}^2}{28}}$.1976 ₁₀ -3	.2532 ₁₀ -3	.3176 ₁₀ -3	.1770 ₁₀ -3	.1004 ₁₀ -3
		$\frac{\sum \delta_{7,j} }{28}$.1128 ₁₀ -3	.1665 ₁₀ -3	.2108 ₁₀ -3	.8039 ₁₀ -4	.5907 ₁₀ -4
	連立方程式	$\sqrt{\frac{\sum (\delta_{7,j}^{(k)})^2}{48}}$.1211 ₁₀ -3	.1608 ₁₀ -3	.1970 ₁₀ -3	.1721 ₁₀ -3	.6831 ₁₀ -4
		$\frac{\sum \delta_{7,j}^{(k)} }{48}$.6729 ₁₀ -4	.1150 ₁₀ -3	.1392 ₁₀ -3	.7444 ₁₀ -4	.4602 ₁₀ -4

* 若林ら⁽¹⁾ (1983) のものを 1984 年 4 月田中が訂正したもの。

表 2 Euler の運動方程式の計算結果
Table 2 Results of numerical solution of Euler's equation.

公式	刻み幅	t=60 における最大誤差	関数計算の回数
古典的 Runge-Kutta	.0078125	1.7 ₁₀ -9	30720
提案した公式 [H62]	.0625	6.2 ₁₀ -10	5760

表 3 Hairer の比較の表
Table 3 The table given by Hairer.

公式	刻み幅	t=60 における最大誤差	関数計算の回数
古典的 Runge-Kutta	.005	2.8 ₁₀ -10	48000
Adams-Moulton-Bashforth (6 段階法)	.01	7.1 ₁₀ -9	12000
Bulirsch-Stoer (多項式補外法)		1.2 ₁₀ -9	5276
Curtis 18 段 10 次	.25	1.3 ₁₀ -10	4320
Hairer 17 段 10 次	.25	8.4 ₁₀ -11	4080

れ 7 段で 6 次の公式である。

これらの図と表からも実質公式 [H62] は 6 段公式の中で最も精度がよく、7 段で 6 次の公式にも匹敵する精度が得られていることがわかる。

さらに、他の方法との比較の例として Hairer⁽⁵⁾ にとり上げられている Euler の運動方程式の例を示す。

$$\begin{cases} dy_1/dt = y_2 y_3, & y_1(0) = 0, \\ dy_2/dt = -y_1 y_3, & y_2(0) = 1, \\ dy_3/dt = -k^2 y_1 y_2, & y_3(0) = 1, \quad k^2 = 0.51 \end{cases}$$

を t=0 から 60 まで、4 次の古典的 Runge-Kutta 法、ここで提案した公式 [H62] で積分したときの結果を表 2 及び図 2 に、Hairer の結果を表 3 に示す。

表 2, 3 及び図 2 から、[H62] は手間の面からかなり効率が良く Bulirsch, Stoer の多項式補外法⁽¹⁾に匹敵する精度が得られていることがわかる。

5. む す び

以上要約すると、理論的には、6 段 6 次極限公式で $\alpha_6=1$ のものは唯一種類に限ることと、その場合得られる精度の限界を明らかにした。実用的には、導関数計算を含まない関数計算だけの 6 段公式で、数値的に上の極限公式と同精度の公式 [H62] を与えた。

[H62] は通常の 6 次の Runge-Kutta 系公式に比べ関数計算の回数が 1 回少ないにもかかわらず数値的に

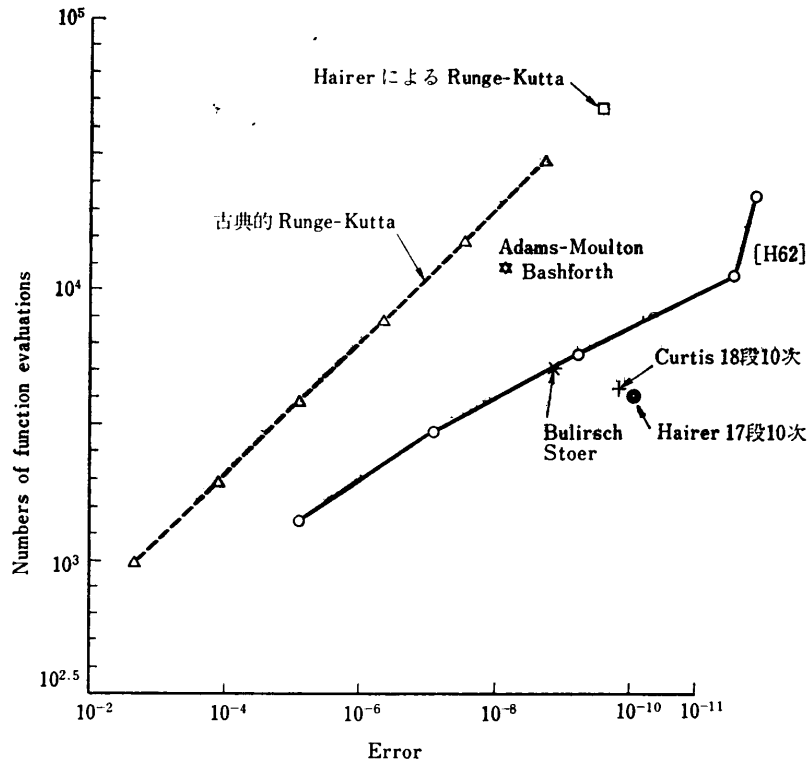


図 2 誤差と関数計算の回数

Fig. 2 Results of computation of Euler's equation.

6次の精度が達成されるので、手間の面で効率の良い公式である。

極限公式(導関数計算を含む)は、導関数を含まない最も精度の良い公式[H62]の誘導の理論的基礎を与えるものである。この極限公式は伊理の提案した⁶⁾高速微分法を適用すれば2倍程度の手間で実現できるが、高速微分法を自動的に実現するシステム(コンパイラ等)が提供されていない現在、関数計算だけの公式[H62]は最も効率の良い公式といえる。

導関数を含むRunge-Kutta系公式の一般的議論は別の研究主題であり、これについては最近発表した⁷⁾。

本論文は東京大学に提出した審査学位論文⁹⁾の一部の要約である。

謝辞 東京大学教授伊理正夫博士には、ご懇篤なるご指導とご助言を賜った。千葉大学教授戸田英雄博士には、数値解析という学問の分野への目を開いていただき、以来今日まで、きめ細かいご指導と多大なご援助を賜り、さらに本報告をまとめるようお勧め下された。

また情報処理研修センタ事務局の方々には、計算機の使用に関し一方ならぬお世話になった。

以上の方々に対し、ここに深甚なる謝意を表する次

第である。

参考文献

- 1) Bulirsch, R. and Stoer, J.: Numerical Treatment of Ordinary Differential Equations by Extrapolation Methods, *Numer. Math.*, 8, pp. 1-13 (1966).
- 2) Cassity, C. R.: Solutions of the Fifth-order Runge-Kutta Equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 3, No. 4, pp. 598-606 (1966).
- 3) Cassity, C. R.: The Complete Solution of the Fifth Order Runge-Kutta Equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 6, No. 3, pp. 432-436 (1969).
- 4) Fehlberg, E.: Classical Fifth-, Sixth-, Seventh- and Eighth-Order Runge-Kutta Formulas with Step Size Control, NASA Technical Report, R-287 (1968).
- 5) Hairer, E.: A Runge-Kutta Method of Order 10, *J. Inst. Math. Appl.*, Vol. 21, pp. 47-59 (1978).
- 6) 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).

- 7) 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).
- 8) 小野令美, 戸田英雄: 6 個の関数計算による実質的 6 次の Runge-Kutta 法, 情報処理学会論文誌, Vol. 23, No. 6, pp. 599-607 (1982).
- 9) 小野令美: Runge-Kutta 系の常微分方程式数値解法公式の研究, 東京大学に提出した審査学位論文 (1985).
- 10) Shanks, E. B.: Solutions of Differential Equations by Evaluations of Functions, *Math. Comp.*, Vol. 20, pp. 21-38 (1966).
- 11) 戸田英雄: Runge-Kutta 系のある極限公式の打ち切り誤差について, 情報処理学会論文誌, Vol. 21, No. 4, pp. 285-296 (1980).
- 12) Verner, J. H.: Explicit Runge-Kutta Methods with Estimates of the Local Truncation Error, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 15, No. 4, pp. 772-790 (1978).
- 13) 若林晴彦, 田中正次, 山下 茂: 打ち切り精度のよいあるタイプの 5 次陽的 Runge-Kutta 法について, 第 27 回情報処理学会全国大会論文集, 4N-8, pp. 1303-1304 (1983).
- (昭和 60 年 8 月 26 日受付)
(昭和 61 年 7 月 16 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. 東京都立農芸高等学校に勤務. 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.

用統計学会会員.