

5 個の関数計算による実質的に 5 次の Runge-Kutta 法†

戸田 英雄^{††} 小野 令美^{†††}

1 階常微分方程式の初期値問題の数値解法の一つである Kutta 型公式において局所打ち切り誤差の 5 次のオーダーの項までを 0 とする“5 次”の公式を得るには 6 段が必要である。5 段のときには、5 次のオーダーの項のうち 5 個を 0 とすることはできるが、残りの 3 個の項を著しく小さくして高精度を得ようとするパラメタの中に符号が反対で絶対値が大きいものがでてきて大きな桁落ちが起こり、まるめの誤差の方が大きくなってしまふ。

これを、公式を一部変形してパラメタを数式的に求め、さらに加え合わせる項の有効桁数と加え合わせた結果の有効桁数を解析することによって、5 次のオーダーの誤差項が 6 次のオーダーの誤差項より小さい、実質的に 5 段で 5 次の公式が得られる。

これは 6 次のオーダーの誤差項に関しては、5 個の関数計算で達成できる最良のものとなっており、桁落ちによる誤差に関しては、実用的にはこの打ち切り誤差より小さくなっている。したがってここに示す公式は 5 個の関数計算による実質的に 5 次で最も精度のよいものである。

1. ま え が き

$$dy/dx = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$$

の数値解法で、Kutta³⁾ の与えた 5 段公式

$$y_{n+1} - y_n = \sum_{i=1}^5 \mu_i k_i$$

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

$$k_i = h f(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j)$$

$$i = 2, \dots, 5$$

では $O(h^5)$ までの局所打ち切り誤差を零とする 5 次法の公式は得られないことは Kutta 自身が述べている。

実際、 $O(h^5)$ の誤差項を零に近づけると、公式に含まれるいくつかの係数が限りなく大きくなる。田中^{4), 5)} は、そこで $O(h^5)$ の項が経験的に $O(h^6)$ の項とほぼ同程度の大きさと推測される点で妥協して、 $O(h^6)$ の誤差項をできるだけ小さくすることにより最適公式を求めた。この結果に着目し、戸田⁶⁾ は極限の場合（これを極限の公式と呼ぶ）を考察し $O(h^6)$ の誤差項を零にすることができた。さらにその際残る自由パラメタを用いて $O(h^6)$ の誤差項をできるだけ小さくする係数の最適化を行い、Runge-Kutta 系の 5 段公式で到達しうる 5 次の最適化公式を極限公式として与えた。しかし公式には f_x や f_y を用いなければならない。

ところで、 $O(h^5)$ の誤差項は完全に零としなくても $O(h^6)$ の誤差に比べて無視できる程度にすればよい。 $O(h^5)$ の誤差項を小さくするため、公式に含まれるいくつかの係数が非常に正と負の方向に大きくなる点は極限の公式と同じ式変形で防げる。これで防げない $k_2 - k_1$ や $k_4 - k_5$ の桁落ちのおこる計算を、極限の公式では f_x や f_y を用いている。

しかし、これらはほかの量に比べて相対的に小さいので加え合わせるときに必要な有効桁数は少なくてもよい。したがって、 f_x や f_y を用いなくても、この値は必要なだけ求められ、その際 m 進法 n 桁の演算方式での結果の有効桁数のみつもりも得られる。

すなわち、打ち切り誤差の主要項は $O(h^6)$ となり、計算で起こるまるめの誤差に関しては有効桁数の下限が抑えられしかも一般には $O(h^6)$ の打ち切り誤差よりも小さい、5 個の関数計算だけによる実質的に 5 次で $O(h^6)$ の打ち切り誤差に関して最良の公式が得られる。

一方最近田中⁷⁾ は Kutta 系 5 段数公式で、一松の“単調公式”のうち精度が最良に近い公式を導いているが、これは表 5 に示すように $O(h^5)$ の誤差項が主要項になっている。

2. Kutta 型 5 段公式

2.1 Kutta の条件式

1 階常微分方程式

$$dy/dx = f(x, y), \quad x(x_0) = y_0 \quad (1)$$

の数値解法で、Kutta 型 5 段公式は

† Substantially Fifth-order Runge-Kutta Methods with Five Stages by HIDEO TODA (Computer Sciences Division, Electrotechnical Laboratory) and HARUMI ONO (Tokyo Metropolitan Noge Agricultural Upper Secondary School).

†† 電子技術総合研究所ソフトウェア部
††† 東京都立農芸高等学校

$$\begin{cases} y_{n+1} - y_n = \sum_{i=1}^5 \mu_i k_i \\ k_1 = h f(x_n, y_n) \\ k_i = h f(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), i=2, \dots, 5 \end{cases} \quad (2)$$

ただし $h = x_{n+1} - x_n$ で表わされる。

この公式のパラメタ $\mu_i, \alpha_i, \beta_{ij}$ を, (2) の両辺の Taylor 展開が, h についてなるべく高次の項まで, その係数が一致するように決める。 $O(h^5)$ 項の 8 個の係数の差を $\delta_{5j}, j=1, \dots, 8$ とおくと, これらはずきのように表わされる:

$$\begin{cases} \delta_{51} = \frac{1}{24} \left(\sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i^4 - \frac{1}{5} \right), \\ \delta_{52} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^5 \mu_i \alpha_i^2 X_{i1} - \frac{1}{10} \right), \\ \delta_{53} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^5 \mu_i \alpha_i X_{i2} - \frac{1}{15} \right), \\ \delta_{54} = \frac{1}{2} \left(\mu_4 \beta_{43} X_{32} + \mu_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} X_{i2} - \frac{1}{60} \right), \\ \delta_{55} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=3}^5 \mu_i X_{i1}^2 - \frac{1}{20} \right), \\ \delta_{56} = \mu_4 \beta_{43} (\alpha_3 + \alpha_4) X_{31} + \mu_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} (\alpha_i + \alpha_5) X_{i1} - \frac{7}{120}, \\ \delta_{57} = \frac{1}{6} \left(\sum_{i=3}^5 \mu_i X_{i3} - \frac{1}{20} \right), \quad \delta_{58} = \mu_5 \beta_{54} \beta_{43} X_{31} - \frac{1}{120} \end{cases} \quad (3)$$

ここで $X_{it} = \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^t$ である。

よく知られているように, $\alpha_i \neq \alpha_j, 0 < \alpha_i \leq 1$ の条件のもとで, $O(h^4)$ までの項の係数を等しいとおいた 8 個の式と (3) の 8 個の δ_{5j} を 0 とおいた合計 16 個の式のすべてを満たす式解は存在しない。そこで $O(h^4)$ までの項から得られる式と, $\delta_{51}, \delta_{52}, \delta_{53}$ を 0 とおいた 11 個の式を, $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$ をパラメタとして解き, それを δ_{54}, δ_{57} に代入すると, 両式とも分子に因数 $1 - \alpha_5$ を持つので, $\alpha_5 = 1$ と決める。すると δ_{5j} の中で 0 でないものは $\delta_{55}, \delta_{56}, \delta_{58}$ の 3 個となり, パラメタ μ_i, β_{ij} は $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ を用いて表わされる⁶⁾, ただし分母に含まれている因数はすべて 0 でないとする。

2.2 $O(h^5)$ の誤差項

$O(h^5)$ の誤差項として残っている $\delta_{55}, \delta_{56}, \delta_{58}$ は 2.1 で求めた μ_i, β_{ij} を代入するとつぎのように表わされる:

$$\delta_{55} = - \frac{\alpha_2^2 (10\alpha_3\alpha_4 - 5\alpha_3 - 5\alpha_4 + 3)}{96(10\alpha_2\alpha_4 - 5\alpha_2 - 5\alpha_4 + 3)(10\alpha_2\alpha_3 - 5\alpha_2 - 5\alpha_3 + 3)}$$

$$\begin{aligned} & \times \frac{70\alpha_2\alpha_3\alpha_4 - 30(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_2)}{30\alpha_2\alpha_3\alpha_4 - 20(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_2)} \\ & * \frac{+15(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - 9}{+15(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - 12} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\delta_{56} = -\delta_{58} = \frac{\alpha_2(1 - \alpha_4)}{48(10\alpha_2\alpha_4 - 5\alpha_2 - 5\alpha_4 + 3)} \quad (5)$$

μ_i, β_{ij} を $\alpha_i, i=2, 3, 4$ をパラメタとして解くときの条件から $\alpha_2 \neq 0, \alpha_4 \neq 1$ であり, $\delta_{55} = \delta_{56} = \delta_{58} = 0$ とすることは本質的にできないのであるが, $\alpha_2 = \varepsilon \neq 0$ あるいは $1 - \alpha_4 = \varepsilon \neq 0 (\varepsilon > 0)$ とすれば, $\delta_{55}, \delta_{56}, \delta_{58}$ を係数にもつ誤差項を $O(h^6)$ の誤差とくらべて無視できる程度に小さくすることはできよう。しかしその際つぎのような問題がでてくる。すなわち, μ_i, β_{ij} の分母に因数 α_2 や $1 - \alpha_4$ が含まれているので, ε を小さくしていくとこれらのパラメタの中に符号が反対で絶対値がほぼ等しくて非常に大きなものがでてきて, 計算の段階でまるめの誤差が非常に大きくなり, 打ち切り誤差より優位となってしまふ。

$1 - \alpha_4$ の場合について, この桁落ちをある尺度で測り, これと局所打ち切り誤差の尺度からみて最適な ε を, 数値的探索によって定めたのが田中の公式^{4), 5)} であるが, $\alpha_2 = \varepsilon$ の場合も $1 - \alpha_4 = \varepsilon$ の場合もともに次節に述べるようにすれば, $\delta_{55}, \delta_{56}, \delta_{58}$ をじゅうぶん小さくするような小さい ε とすることができる。したがって, $\delta_{55}, \delta_{56}, \delta_{58}$ を係数にもつ誤差項が $O(h^6)$ の誤差より小さく, しかも有効桁数の損失が通常の打ち切り誤差より小さい, 5 段で実質的に 5 次の公式が得られることになる。

3. 5 段で実質的に 5 次の公式

3.1 公式の変形と必要な精度の検討

$\alpha_2 = \varepsilon \neq 0$ のとき, 分母に α_2 を含むパラメタは $\mu_1, \mu_2, \beta_{i1}, \beta_{i2}, i=3, 4, 5$ であるが $\mu_1 + \mu_2, \beta_{i1} + \beta_{i2}, \mu_2\alpha_2, \beta_{i2}\alpha_2$ は分母に α_2 を含まない。したがって公式を極限の公式と同様に,

$$\begin{aligned} \mu_1 k_1 + \mu_2 k_2 &= (\mu_1 + \mu_2) k_1 + \mu_2 \alpha_2 (k_2 - k_1) / \alpha_2 \\ \beta_{i1} k_1 + \beta_{i2} k_2 &= (\beta_{i1} + \beta_{i2}) k_1 + \beta_{i2} \alpha_2 (k_2 - k_1) / \alpha_2, \\ & i=3, 4, 5 \end{aligned}$$

と変形すれば桁落ちは $k_2 - k_1$ のところだけで起こり $\mu_2 \alpha_2 (k_2 - k_1) / \alpha_2, \beta_{i2} \alpha_2 (k_2 - k_1) / \alpha_2$ (6)

の有効桁数は $k_2 - k_1$ の有効桁数だけ保たれる。

また $1 - \alpha_4 = \varepsilon \neq 0$ のとき, 分母に $1 - \alpha_4$ を含むパラメタは μ_4, μ_5 であるが, $\mu_4 + \mu_5, \mu_4(1 - \alpha_4)$ は分母に $1 - \alpha_4$ を含まない。したがって前の場合と同様に

$$\begin{aligned} \mu_4 k_4 + \mu_5 k_5 &= (\mu_4 + \mu_5) k_5 \\ &+ \mu_4 (1 - \alpha_4)(k_4 - k_5)/(1 - \alpha_4) \end{aligned}$$

と公式を変形すると、桁落ちは $k_4 - k_5$ で起こり

$$\mu_4 (1 - \alpha_4)(k_4 - k_5)/(1 - \alpha_4) \quad (7)$$

の有効桁数は $k_4 - k_5$ の有効桁数だけは保たれる。

この $(k_2 - k_1)/\alpha_2$ と $(k_4 - k_5)/(1 - \alpha_4)$ の値を数式的に求めた f_x, f_y を用いて Taylor 展開の第一項までとった式で近似して精度よく求め、 $\alpha_2 = 0$ あるいは $\alpha_4 = 1$ とし $\delta_{55} = \delta_{56} = \delta_{58} = 0$ にしたのが極限の公式⁶⁾である。しかし (6), (7) 式の値は、 $f(x, y)$ がじゅうぶん滑らかならば $|y_n|$ や $|k_i|$ の値にくらべて小さいから、和を求める計算での有効桁数は少なくてよい。しかも性質のよい関数で $k_2 - k_1$ や $k_4 - k_5$ が大きく桁落ちするものほど必要な有効桁数は少なくてよい。そこでこれらの値を求めるのに、精度の悪い数値微分 $(k_2 - k_1)/\alpha_2, (k_4 - k_5)/(1 - \alpha_4)$ を用いて求めても和には影響を与えない。したがって $\delta_{55}, \delta_{56}, \delta_{58}$ が必要なだけ小さくなり、しかも桁落ちによるまるめの誤差が、打ち切り誤差よりも大きくならないように ϵ をとることができればよい。

一般の積和の計算 $\sum c_i x_i$ (c_i は定数) においては c_i は定符号で大きさがほぼ揃っていることが桁落ちの面から望ましいとされているが、 $\sum \mu_i k_i$ や $\sum \beta_{ij} k_j$ の計算においては関数 $f(x, y)$ が十分なめらかならば k_i, k_j のほうでこの条件をみたしており、ここで導かれる公式では係数の符号が反対のものでも桁落ちが心配されるほど絶対値に近い値はないので、定符号単調公式でなくても、桁落ちの面で心配がない。

3.2 A型公式 ($\alpha_2 = \epsilon \approx 0 (\epsilon > 0)$) の公式

3.2.1 パラメタと誤差

$\alpha_2 = \epsilon$ としたとき残る自由なパラメタ α_3 と α_4 は $O(h^6)$ の誤差項の係数 $\delta_{6j}(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$, $j=1, \dots, 15$ を小さくするように選ぶ。 $\alpha_2 = \epsilon \approx 0$ ならば $\delta_{6j}(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) \approx \delta_{6j}(\alpha_2=0, \alpha_3, \alpha_4)$ であるからこれらを δ_{6j} と略記する。これらの大きさの尺度として $\max_j |\delta_{6j}|$ ($j=4, 5$) と、 $(\sum_{j=1}^{15} \delta_{6j}^2/15)^{1/2}$ と、Lotkin による導関数の上界を用いた $|\delta_{6j}|$ の和の上界との 3 つの尺度で決めることにすれば、 $\alpha_2 = 0$ の極限の公式において決定された $\alpha_3 = 1/2, \alpha_4 = 5/9$ をそのまま用いることができる。このときのパラメタ μ_i, β_{ij} はつぎのように与えられる：

$$\begin{cases} \mu_1 + \mu_2 = \frac{-900\alpha_2^3 + 2012\alpha_2^2 - 1533\alpha_2 + 466}{300(1-\alpha_2)(1-2\alpha_2)(5-9\alpha_2)}, \\ \mu_2\alpha_2 = \frac{3}{20(1-\alpha_2)(1-2\alpha_2)(5-9\alpha_2)}, \end{cases}$$

$$\mu_3 = -\frac{4(2+5\alpha_2)}{15(1-2\alpha_2)}, \quad \mu_4 = \frac{2187}{400(5-9\alpha_2)},$$

$$\mu_5 = \frac{31-40\alpha_2}{240(1-\alpha_2)}, \quad \beta_{21} = \alpha_2$$

$$\beta_{31} + \beta_{32} = \frac{1}{2}, \quad \beta_{32}\alpha_2 = \frac{1-2\alpha_2}{4(5\alpha_2+2)},$$

$$\beta_{41} + \beta_{42} = \frac{5(-90\alpha_2^2 - 76\alpha_2 + 61)}{729(1-2\alpha_2)},$$

$$\beta_{42}\alpha_2 = \frac{5(5-9\alpha_2)(5-8\alpha_2)}{1458(1-2\alpha_2)}, \quad \beta_{43} = \frac{10(5-9\alpha_2)(2-5\alpha_2)}{729(1-2\alpha_2)},$$

$$\beta_{51} + \beta_{52} = \frac{-450\alpha_2^3 + 358\alpha_2^2 - 447\alpha_2 + 359}{5(1-2\alpha_2)(5-9\alpha_2)(31-40\alpha_2)},$$

$$\beta_{52}\alpha_2 = \frac{(1-\alpha_2)(-72\alpha_2^2 + 157\alpha_2 + 7)}{2(1-2\alpha_2)(5-9\alpha_2)(31-40\alpha_2)},$$

$$\beta_{53} = -\frac{10(1-\alpha_2)(10+7\alpha_2)}{(1-2\alpha_2)(31-40\alpha_2)},$$

$$\beta_{54} = \frac{2916(1-\alpha_2)}{5(5-9\alpha_2)(31-40\alpha_2)} \quad (8)$$

また打ち切り誤差の主要項は、

$O(h^5)$ の項：

$$\delta_{55} = -\frac{3\alpha_2^2(27-50\alpha_2)}{32(2+5\alpha_2)(31-40\alpha_2)} \approx -\frac{81}{1984}\alpha_2^2,$$

$$\delta_{56} = -\delta_{58} = \frac{\alpha_2}{12(2+5\alpha_2)} \approx \frac{\alpha_2}{24},$$

$O(h^6)$ の項の近似値 $\delta_{6j}(\alpha_2=0, \alpha_3=1/2, \alpha_4=5/9)$:

$$|\delta_{61}| = 1/32400 \approx .309_{10} - 4,$$

$$|\delta_{62}| = 1/6480 \approx .154_{10} - 3, \quad \delta_{63} = \delta_{66} = \delta_{613} = \delta_{615} = 0,$$

$$|\delta_{64}| = |\delta_{65}| = 1/720 \approx .139_{10} - 2,$$

$$|\delta_{67}| = |\delta_{68}| = |\delta_{610}| = |\delta_{611}| = |\delta_{612}| = |\delta_{614}| \\ = 1/2160 \approx .463_{10} - 3,$$

$$|\delta_{69}| = 1/3240 \approx .309_{10} - 3.$$

3.2.2 α_2 の決定と結果の有効桁数の見積り

$|\delta_{56}| = |\delta_{58}| \gg |\delta_{55}|$ なので

$|\delta_{56}| \approx \alpha_2/24 \approx (|\delta_{6j}| \text{ の代表}) \times (\text{小さい } h \text{ の代表})$

としておけば、 $O(h^6)$ の誤差項がちょうど 0 であるような特別な場合を除けば $O(h^5)$ の誤差項 $\ll O(h^6)$ の誤差項となろう。 $|\delta_{6j}|$ の代表として $1/2160$ 、小さい h の代表として $1/1000$ を選べば $\alpha_2 \approx .11_{10} - 4$ となるので、これに近い 2 進数 $2^{-16} \approx .15_{10} - 4$ に決める。

このとき、 k_i と y_{n+1} の有効桁数は $|\beta_{i2}\alpha_2(k_2 - k_1)/\alpha_2|$ が $|y_n|, |(\beta_{i1} + \beta_{i2})k_1|, |\beta_{ij}k_j|$ のいずれよりも大きい場合を除き、 m 進法 n 桁演算で $n - 14 \log_m 2$ 桁以上保たれる。これはつぎのようにして示すことができる。

i) k_3 の計算における

$$y_n + (\beta_{31} + \beta_{32})k_1 + \beta_{32}\alpha_2(k_2 - k_1)/\alpha_2 \quad (9)$$

の有効桁数を N_3 とする。この和の3つの項の中で $\beta_{32}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2$ だけはその有効桁数が桁落ちした k_2-k_1 の有効桁数となっている。

この3つの項の大きさの中で $|y_n|$ が最大ならば、 N_3 は y_n と $\beta_{32}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2$ の m 進法での桁数の差と、 k_2-k_1 の m 進法での有効桁数の和となるから

$$\begin{aligned} N_3 &= \log_m |y_n| - \log_m |\beta_{32}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2| \\ &\quad + \{n - (\log_m |k_1| - \log_m |k_2-k_1|)\} \\ &= n - \log_m \beta_{32}\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log |y_n/k_1| \end{aligned}$$

仮定から $|(\beta_{31} + \beta_{32})k_1| = |\alpha_3 k_1| < |y_n|$ なので

$$N_3 > n - \log_m \beta_{32}\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log_m \alpha_3$$

となり (8) からわかるように $\beta_{32}\alpha_2 \doteq 1/8$ なので

$$\doteq n - \log_m 1/8 + \log_m 2^{-16} + \log_m 1/2 = n - 14 \log_m 2.$$

また (9) 式の3つの項の大きさのうち $|(\beta_{31} + \beta_{32})k_1|$ が最大ならば、 N_3 は $(\beta_{31} + \beta_{32})k_1$ と $\beta_{32}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2$ の m 進法での桁数の差と、 k_2-k_1 の m 進法での有効桁数の和となり、

$$\begin{aligned} N_3 &= \log_m |(\beta_{31} + \beta_{32})k_1| - \log_m |\beta_{32}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2| \\ &\quad + \{n - (\log_m |k_1| - \log_m |k_2-k_1|)\} \\ &= n - \log_m \beta_{32}\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log_m \alpha_3 \doteq n - 14 \log_m 2. \end{aligned}$$

となつて、 $|\beta_{32}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2|$ が最大である場合を除き

$$N_3 \geq n - 14 \log_m 2 \doteq n - 4.21 \quad (m=10 \text{ のとき}) \quad (10)$$

となる。

ii) k_4 の計算における

$$y_n + (\beta_{41} + \beta_{42})k_1 + \beta_{42}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2 + \beta_{43}k_3 \quad (11)$$

の有効桁数を N_4 とすると、i) と同様にして (11) の4つの項の大きさのうち $|\beta_{42}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2|$ が最大でなければ、 k_4 はほぼ同程度の大きさと考えられ、(8) から $\beta_{41} + \beta_{42} \doteq 305/729$, $\beta_{43} \doteq 100/729$ なので $|(\beta_{41} + \beta_{42})k_1| > |\beta_{43}k_3|$ であり、 $\beta_{42}\alpha_2 \doteq 125/1458$ なので

$$\begin{aligned} N_4 &\geq n - \log_m \beta_{42}\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log_m (\beta_{41} + \beta_{42}) \\ &\doteq n - \log_m 125/1458 + \log_m 2^{-16} + \log_m 305/729 \\ &\doteq n - \log_m 2^{15} \cdot 5^2/61 \doteq n - 4.13 \quad (m=10 \text{ のとき}). \end{aligned} \quad (12)$$

iii) k_5 の計算における

$$\begin{aligned} y_n + (\beta_{51} + \beta_{52})k_1 + \beta_{52}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2 \\ + \beta_{53}k_3 + \beta_{54}k_4 \end{aligned} \quad (13)$$

の有効桁数を N_5 とすると、全く同様に (13) の各項の大きさのうち $|\beta_{52}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2|$ が最大でなければ、 $\beta_{51} + \beta_{52} \doteq 359/775$, $\beta_{53} \doteq -100/31$, $\beta_{54} \doteq 2916/775$ なので $|\beta_{54}k_4| > |(\beta_{51} + \beta_{52})k_1|$, $|\beta_{53}k_3|$ であり、 $\beta_{52}\alpha_2 \doteq$

$7/310$ なので

$$\begin{aligned} N_5 &\geq n - \log_m \beta_{52}\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log_m \beta_{54} + \log_m |k_4/k_1| \\ &\doteq n - \log_m 7/310 + \log_m 2^{-16} + \log_m 2916/775 \\ &= n - \log_m 2^{16} \cdot 5 \cdot 7/3^6 \doteq n - 2.59 \quad (m=10 \text{ のとき}). \end{aligned} \quad (14)$$

iv) y_{n+1} の計算における有効桁数を N_6 とすると $|\mu_2\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2|$ が最大でなければ、同様にして、 $\mu_1 + \mu_2 \doteq 233/750$, $\mu_3 \doteq -8/15$, $\mu_4 \doteq 2187/2000$, $\mu_5 \doteq 31/240$ なので $|\mu_4 k_4| > |(\mu_1 + \mu_2)k_1|$, $|\mu_3 k_3|$, $|\mu_5 k_5|$ であり $\mu_2\alpha_2 \doteq 3/100$ なので

$$\begin{aligned} N_6 &\geq n - \log_m \mu_2\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log_m \mu_4 + \log_m |k_4/k_1| \\ &\doteq n - \log_m 3/100 + \log_m 2^{-16} + \log_m 2187/2000 \\ &= n - \log_m 2^{18} \cdot 5/3^6 \doteq n - 3.25 \quad (m=10 \text{ のとき}). \end{aligned} \quad (15)$$

したがって (10), (12), (14), (15) から y_{n+1} の有効桁数は最悪の場合でも N_3 桁すなわち $n - 14 \log_m 2$ 桁は保証される。

3.2.3 A型公式とパラメタ

$$y_{n+1} = y_n + (\mu_1 + \mu_2)k_1 + \mu_2\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2 + \sum_{i=3}^5 \mu_i k_i$$

ここで

$$\begin{aligned} k_1 &= h f(x_n, y_n) \\ k_2 &= h f(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} k_1) \\ k_3 &= h f(x_n + \alpha_3 h, y_n + (\beta_{31} + \beta_{32})k_1 \\ &\quad + \beta_{32}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2) \\ k_4 &= h f(x_n + \alpha_4 h, y_n + (\beta_{41} + \beta_{42})k_1 \\ &\quad + \beta_{42}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2 + \beta_{43}k_3) \\ k_5 &= h f(x_n + h, y_n + (\beta_{51} + \beta_{52})k_1 \\ &\quad + \beta_{52}\alpha_2(k_2-k_1)/\alpha_2 + \beta_{53}k_3 + \beta_{54}k_4) \end{aligned}$$

で、パラメタは

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= \frac{1}{65536}, \quad \alpha_3 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_4 = \frac{5}{9}, \\ \mu_1 + \mu_2 &= \frac{2 \ 18601 \ 25849 \ 02641}{7 \ 03635 \ 90338 \ 14950}, \\ \mu_2\alpha_2 &= \frac{3518 \ 43720 \ 88832}{1 \ 17272 \ 65056 \ 35825}, \\ \mu_3 &= -\frac{2 \ 62154}{4 \ 91505}, \quad \mu_4 = \frac{89 \ 57952}{81 \ 91775}, \quad \mu_5 = \frac{84649}{6 \ 55350}, \\ \beta_{21} &= \frac{1}{65536}, \\ \beta_{31} + \beta_{32} &= \frac{1}{2}, \quad \beta_{32}\alpha_2 = \frac{32767}{2 \ 62154}, \\ \beta_{41} + \beta_{42} &= \frac{7 \ 27744 \ 51175}{17 \ 39408 \ 67072}, \quad \beta_{42}\alpha_2 = \frac{24853 \ 84535}{2 \ 89901 \ 44512} \end{aligned}$$

$$\beta_{43} = \frac{2 \ 38593 \ 63865}{17 \ 39408 \ 67072'}$$

$$\beta_{51} + \beta_{52} = \frac{3 \ 36825 \ 32270 \ 73521}{7 \ 27087 \ 21245 \ 55144'}$$

$$\beta_{52}\alpha_2 = \frac{8212 \ 37111 \ 27555}{3 \ 63543 \ 60622 \ 77572'}$$

$$\beta_{53} = -\frac{7 \ 15824 \ 60575}{2 \ 21895 \ 50264'}, \quad \beta_{54} = \frac{10 \ 43661 \ 12768}{2 \ 77370 \ 22479'}$$

である。

3.3 B型公式 ($1-\alpha_4 = \epsilon \neq 0$ ($\epsilon > 0$) の公式)

この場合 $\delta_{55} \neq 0$ とするには2つの場合がある。すなわち(4)の分子の α_2 を除く2つの因数のいずれかを小さくすればよい。

3.3.1 B-1型公式 ($10\alpha_3\alpha_4 - 5\alpha_3 - 5\alpha_4 + 3 = \epsilon' \neq 0$ の場合)

$\alpha_4 = 1$ のとき $\alpha_3 = 2/5$ ならば $\epsilon' = 0$ となるので $\alpha_3 = 2/5$ に決め、残る1つのパラメタ α_2 は $\delta_{6j}(\alpha_2, \alpha_3 = 2/5, \alpha_4 = 1)$ の大きさを、A型公式で用いた尺度からみて最適として決めた極限の公式における値 $\alpha_2 = 1/3$ を用いる。このときのパラメタ μ_i, β_{ij} はつぎのように与えられる:

$$\mu_1 = \frac{5\alpha_4 - 2}{24\alpha_4}, \quad \mu_2 = \frac{27(1-\alpha_4)}{8(3\alpha_4 - 1)}, \quad \mu_3 = \frac{125(5\alpha_4 - 4)}{72(5\alpha_4 - 2)},$$

$$\mu_4 + \mu_5 = \frac{195\alpha_4^3 - 113\alpha_4^2 - 34\alpha_4 + 12}{72\alpha_4(3\alpha_4 - 1)(5\alpha_4 - 2)},$$

$$\mu_4(1-\alpha_4) = \frac{1}{6\alpha_4(5\alpha_4 - 2)(3\alpha_4 - 1)}, \quad \beta_{21} = \frac{1}{3},$$

$$\beta_{31} = \frac{35\alpha_4 - 31}{25(5\alpha_4 - 4)}, \quad \beta_{32} = \frac{3(5\alpha_4 - 3)}{25(5\alpha_4 - 4)},$$

$$\beta_{41} = \frac{\alpha_4(15\alpha_4^2 - 29\alpha_4 + 16)}{8},$$

$$\beta_{42} = -\frac{3\alpha_4(3\alpha_4 - 1)(5\alpha_4 - 3)}{4},$$

$$\beta_{43} = \frac{5\alpha_4(3\alpha_4 - 1)(5\alpha_4 - 2)}{8},$$

$$\beta_{51} = \frac{14\alpha_4^2 - 25\alpha_4 + 12}{2\alpha_4(13\alpha_4 - 11)},$$

$$\beta_{52} = -\frac{3(69\alpha_4^2 - 122\alpha_4 + 57)}{(3\alpha_4 - 1)(13\alpha_4 - 11)},$$

$$\beta_{53} = \frac{15(50\alpha_4^2 - 85\alpha_4 + 38)}{2(5\alpha_4 - 2)(13\alpha_4 - 11)},$$

$$\beta_{54} = -\frac{12(1-\alpha_4)}{\alpha_4(3\alpha_4 - 1)(5\alpha_4 - 2)(13\alpha_4 - 11)}.$$

また、打ち切り誤差の主要項は $O(h^5)$ の項:

$$\delta_{55} = \frac{(1-\alpha_4)(7\alpha_4 - 6)}{192(5\alpha_4 - 4)(13\alpha_4 - 11)} \doteq \frac{1-\alpha_4}{384}$$

$$\delta_{56} = -\delta_{58} = -\frac{1-\alpha_4}{48(5\alpha_4 - 4)} \doteq -\frac{1-\alpha_4}{48}$$

$O(h^6)$ の項の近似値 $\delta_{6j}(\alpha_2 = 1/3, \alpha_3 = 2/5, \alpha_4 = 1)$:

$$|\delta_{61}| = 1/36000 \doteq .278_{10} - 4,$$

$$|\delta_{62}| = 1/7200 \doteq .139_{10} - 3,$$

$$|\delta_{63}| = |\delta_{66}| = |\delta_{69}| = 1/3600 \doteq .278_{10} - 3,$$

$$\delta_{64} = \delta_{67} = \delta_{611} = \delta_{612} = 0,$$

$$|\delta_{65}| = 1/720 \doteq .139_{10} - 2,$$

$$|\delta_{68}| = 1/300 \doteq .333_{10} - 2,$$

$$|\delta_{610}| = 1/1800 \doteq .566_{10} - 3,$$

$$|\delta_{613}| = 7/7200 \doteq .972_{10} - 3,$$

$$|\delta_{614}| = 1/2400 \doteq .417_{10} - 3,$$

$$|\delta_{615}| = 1/1200 \doteq .833_{10} - 3$$

である。そこで α_4 を $\delta_{55}, \delta_{56}, \delta_{58}$ が $O(h^6)$ の誤差項にくらべ小さくなるように決める。この場合も

$|\delta_{56}| = |\delta_{58}| \gg |\delta_{55}|$ なので

$|\delta_{56}| \doteq (1-\alpha_4)/48 \doteq (|\delta_{6j}| \text{ の代表}) \times (\text{小さい } h \text{ の代表})$

とし、 $|\delta_{6j}|$ の代表として $1/3600$ 、小さい h の代表として $1/1000$ を選ぶと $1-\alpha_4 \doteq .13_{10} - 4$ となり、 $2^{-16} \doteq .15_{10} - 4$ なので $\alpha_4 = 1 - 2^{-16}$ に決める。A型公式と同様に結果の有効桁数についてはつぎようになる。

y_{n+1} の有効桁数を N とすると $|\mu_4(1-\alpha_4)(k_4 - k_5)/(1-\alpha_4)|$ が加え合わせる項のうち最大でなければ、 $\mu_1 \doteq 1/8, \mu_2 \doteq 0, \mu_3 \doteq 125/216, \mu_4 + \mu_5 \doteq 8/27, \mu_4(1-\alpha_4) \doteq 1/36$ なので

$$N \geq n - \log_m \mu_4(1-\alpha_4) + \log_m(1-\alpha_4) + \log_m \mu_3 + \log_m |k_3/k_5|$$

$$\doteq n - \log_m 2^{17} \cdot 3/5^3 \doteq n - 3.50 \quad (m=10 \text{ のとき})$$

となり、したがって y_{n+1} の有効桁数は最悪の場合でも $n - \log_m 2^{17} \cdot 3/5^3$ 桁は保証される。

3.3.2 B-2型公式 ($70\alpha_2\alpha_3\alpha_4 - 30(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_2) + 15(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - 9 = \epsilon'' \neq 0$ の場合)

$\alpha_4 = 1$ のとき $\alpha_3 = (15\alpha_2 - 6)/(40\alpha_2 - 15)$, ($\alpha_2 \neq 3/8$) ならば $\epsilon'' = 0$ となる。 α_2 の値としては、ここでもまた極限の公式で求めた最適な値 $1/4$ とする。すると $\alpha_3 = 9/20$ となり残りのパラメタはつぎようになる:

$$\mu_1 = \frac{11\alpha_4 - 5}{54\alpha_4}, \quad \mu_2 = \frac{4(3 - 2\alpha_4)}{9(4\alpha_4 - 1)}, \quad \mu_3 = \frac{500(10\alpha_4 - 7)}{297(20\alpha_4 - 9)},$$

$$\mu_4 + \mu_5 = \frac{5(560\alpha_4^3 - 312\alpha_4^2 + 87\alpha_4 + 33)}{198\alpha_4(4\alpha_4 - 1)(20\alpha_4 - 9)},$$

$$\mu_4(1-\alpha_4) = \frac{5}{6\alpha_4(20\alpha_4 - 9)(4\alpha_4 - 1)}, \quad \beta_{21} = \frac{1}{4},$$

$$\beta_{31} = -\frac{9(11-10\alpha_4)}{100(10\alpha_4-7)}, \quad \beta_{32} = \frac{18(5\alpha_4-3)}{25(10\alpha_4-7)},$$

$$\beta_{41} = \frac{\alpha_4(80\alpha_4^2-92\alpha_4+33)}{15},$$

$$\beta_{42} = \frac{3\alpha_4(-80\alpha_4^2+72\alpha_4-13)}{20},$$

$$\beta_{43} = \frac{\alpha_4(20\alpha_4-9)(4\alpha_4-1)}{12},$$

$$\beta_{51} = \frac{109\alpha_4^2-143\alpha_4+55}{15\alpha_4(7\alpha_4-6)},$$

$$\beta_{52} = \frac{3(-496\alpha_4^2+3060\alpha_4-323)}{20(28\alpha_4^2-31\alpha_4+6)},$$

$$\beta_{53} = \frac{11(400\alpha_4^2-620\alpha_4+253)}{12(140\alpha_4^2-183\alpha_4+54)},$$

$$\beta_{54} = \frac{-33(1-\alpha_4)}{\alpha_4(560\alpha_4^3-872\alpha_4^2+399\alpha_4-54)}.$$

また打ち切り誤差の主要項は

$O(h^5)$ の項:

$$\delta_{55} = \frac{(1-\alpha_4)(3-2\alpha_4)}{320(10\alpha_4-7)(7\alpha_4-6)} \doteq \frac{1-\alpha_4}{960},$$

$$-\delta_{56} = \delta_{58} = \frac{1-\alpha_4}{48(10\alpha_4-7)} \doteq \frac{1-\alpha_4}{144},$$

$O(h^6)$ の項の近似値 $\delta_{6j}(\alpha_2=1/4, \alpha_3=9/20, \alpha_4=1)$:

$$|\delta_{61}| = 13/576000 \doteq .226_{10}-4,$$

$$|\delta_{62}| = 13/115200 \doteq .113_{10}-3,$$

$$|\delta_{63}| = |\delta_{66}| = 13/57600 \doteq .226_{10}-3,$$

$$|\delta_{64}| = |\delta_{611}| = 1/2880 \doteq .347_{10}-3,$$

$$|\delta_{65}| = 1/720 \doteq .139_{10}-2,$$

$$|\delta_{67}| = 1/960 \doteq .104_{10}-2,$$

$$|\delta_{68}| = 3/800 \doteq .375_{10}-2,$$

$$|\delta_{69}| = |\delta_{612}| = 1/7200 \doteq .139_{10}-3,$$

$$|\delta_{610}| = 7/7200 \doteq .972_{10}-3,$$

$$|\delta_{613}| = 1/14400 \doteq .694_{10}-4,$$

$$|\delta_{614}| = 1/4800 \doteq .208_{10}-3,$$

$$|\delta_{615}| = 1/2400 \doteq .417_{10}-3,$$

である。ここでもまた $|\delta_{56}| = |\delta_{58}| \gg |\delta_{55}|$ なので B-1 型と同様に $|\delta_{6j}|$ の代表として $.5_{10}-3$ を、小さい h の代表として $1/1000$ を選び

$$|\delta_{56}| \doteq (1-\alpha_4)/144 \doteq .5_{10}-6$$

とすれば $1-\alpha_4 \doteq .72_{10}-4$ となり、 $2^{-14} \doteq .61_{10}-4$ なので $\alpha_4 = 1-2^{-14}$ に決める。

この公式による結果の有効桁数を N とすると、前と同様に、 $\mu_4(1-\alpha_4)(k_4-k_5)/(1-\alpha_4)$ が加え合わせる項の中で最大でなければ、 $\mu_1 \doteq 1/9, \mu_2 \doteq 4/27, \mu_3 \doteq 500/1089, \mu_4 + \mu_5 \doteq 920/3267, \mu_4(1-\alpha_4) \doteq 5/198$ なので

$$N \geq n - \log_m \mu_4(1-\alpha_4) + \log_m(1-\alpha_4) + \log_m \mu_3 + \log_m |k_3/k_5|$$

$$\doteq n - \log_m 2^{11} \cdot 11/5^2 \doteq n - 2.95 \quad (m=10 \text{ のとき}).$$

したがって y_{n+1} の有効桁数は最悪の場合でも $n - \log_m 2^{11} \cdot 11/5^2$ 桁は保証される。

3.3.3 B型公式とパラメタ

$$y_{n+1} = y_n + \mu_1 k_1 + \mu_2 k_2 + \mu_3 k_3 + (\mu_4 + \mu_5) k_5 + \mu_4(1-\alpha_4)(k_4-k_5)/(1-\alpha_4)$$

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

$$k_i = hf(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad i=2, \dots, 5, \alpha_5=1$$

ここでパラメタ μ_i, β_{ij} はつぎのとおりである。

| | B-1 型 | B-2 型 |
|---------------------|---|--|
| α_2 | $\frac{1}{3}$ | $\frac{1}{4}$ |
| α_3 | $\frac{2}{5}$ | $\frac{9}{20}$ |
| α_4 | $\frac{65535}{65536}$ | $\frac{16383}{16384}$ |
| μ_1 | $\frac{1}{15} \frac{96603}{72840}$ | $\frac{98293}{848682}$ |
| μ_2 | $\frac{27}{10} \frac{48552}{48552}$ | $\frac{5462}{36861}$ |
| μ_3 | $\frac{81}{141} \frac{91357}{55416}$ | $\frac{61}{133} \frac{42750}{80147}$ |
| $\mu_4 + \mu_5$ | $\frac{1}{4} \frac{33433}{50331} \frac{73751}{33021} \frac{01831}{59320}$ | $\frac{1532}{5441} \frac{36204}{20358} \frac{23985}{33826}$ |
| $\mu_4(1-\alpha_4)$ | $\frac{14073}{5} \frac{74883}{06622} \frac{55328}{74649} \frac{29235}{29235}$ | $\frac{68}{2720} \frac{71947}{60179} \frac{67360}{16913}$ |
| β_{21} | $\frac{1}{3}$ | $\frac{1}{4}$ |
| β_{31} | $\frac{2}{16} \frac{62109}{38275}$ | $\frac{73773}{24} \frac{57100}{57100}$ |
| β_{32} | $\frac{3}{16} \frac{93201}{38275}$ | $\frac{2}{6} \frac{94867}{14275}$ |
| β_{41} | $\frac{56293}{2} \frac{70695}{25179} \frac{67985}{98136} \frac{85248}{85248}$ | $\frac{192}{137} \frac{36476}{43895} \frac{75049}{34720}$ |
| β_{42} | $\frac{3}{1} \frac{37744}{12589} \frac{20285}{99068} \frac{84915}{42624}$ | $\frac{1731}{549} \frac{18225}{75581} \frac{03921}{38880}$ |
| β_{43} | $\frac{8}{2} \frac{44371}{25179} \frac{24415}{98136} \frac{48725}{85248}$ | $\frac{302}{109} \frac{28908}{95116} \frac{79657}{27776}$ |
| β_{51} | $\frac{7157}{28629} \frac{95117}{83855}$ | $\frac{11271}{8049} \frac{83177}{13173}$ |
| β_{52} | $\frac{5}{1} \frac{15364}{71777} \frac{62031}{72071}$ | $\frac{192}{60} \frac{13145}{97703}$ |
| β_{53} | $\frac{9}{2} \frac{66293}{57665} \frac{91735}{92577}$ | $\frac{60881}{22134} \frac{02163}{00681}$ |
| β_{54} | $\frac{1}{73774} \frac{12589}{96725} \frac{99068}{84622} \frac{42624}{89985}$ | $\frac{27}{4} \frac{48779}{50053} \frac{06944}{49032} \frac{85699}{85699}$ |

表 1 A 型公式と極限の公式による結果の比較

Table 1 Comparison of results obtained by type A formula and limiting formula.

▲: truncation error of $O(h^5)$.

例 1) $dy/dx = -1/2y$, $y(0)=1$, $h=0.05$, $y(x) = \sqrt{1-x}$

| | x_n | y_n | $y_n - y(x_n)$ | $\beta_{32}\alpha_2 \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2}$ | $\beta_{43}\alpha_3 \frac{k_3 - k_1}{\alpha_3}$ | $\beta_{54}\alpha_4 \frac{k_4 - k_1}{\alpha_4}$ | $\mu_5 \alpha_5 \frac{k_5 - k_1}{\alpha_5}$ |
|----------|-----------|--|----------------|---|---|---|---|
| A 型公式 | 0.500D-01 | 0.9746794344772095 ▲ | -0.3687D-11 | -0.7812E-04 | -0.5358E-04 | -0.1412E-04 | -0.1875E-04 |
| A 型極限の公式 | 0.500D-01 | 0.9746794344772164 0.9746794344808964 | -0.3680D-11 | -0.7813E-04 | -0.5358E-04 | -0.1411E-04 | -0.1875E-04 |
| $y(x_n)$ | 0.950 | 0.2236026460606580 ▲ | -0.4152D-05 | -0.2470E-02 | -0.1694E-02 | -0.4465E-03 | -0.5930E-03 |
| | 0.950 | 0.2236026468033837 0.2236067977499790 | -0.4151D-05 | -0.2471E-02 | -0.1694E-02 | -0.4463E-03 | -0.5929E-03 |

例 2) $dy/dx = y^2$, $y(0) = -2$, $h = 0.01$, $y(x) = -2/(160x+1)^{1/2}$

| | | | | | | | |
|--|-----------|--|------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | 0.100D-01 | -1.650838970093880 ▲ | 0.1257D-02 | -0.1536 | -0.1053 | -0.2776E-01 | -0.3687E-01 |
| | 0.100D-01 | -1.650838531746555 -1.652096176384267 | 0.1258D-02 | -0.1536 | -0.1053 | -0.2775E-01 | -0.3686E-01 |
| | 0.200 | -0.9938645673664113 ▲ | 0.9442D-11 | -0.7818E-04 | -0.5363E-04 | -0.1413E-04 | -0.1877E-04 |
| | 0.200 | -0.9938645673663980 -0.9938645673758531 | 0.9455D-11 | -0.7819E-04 | -0.5363E-04 | -0.1412E-04 | -0.1877E-04 |

例 3) $dy/dx = -xy$, $y(0)=1$, $h=0.1$, $y(x) = \exp(-x^2/2)$

| | | | | | | | |
|--|-------|--|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| | 0.100 | 0.9950124791894952 ▲ | -0.3187D-11 | -0.1250E-02 | -0.8573E-03 | -0.2259E-03 | -0.3000E-03 |
| | 0.100 | 0.9950124791898148 0.9950124791926823 | -0.2867D-11 | -0.1250E-02 | -0.8573E-03 | -0.2258E-03 | -0.3000E-03 |
| | 3.00 | 0.1110898790035604D-01 ▲ | -0.8638D-08 | 0.1382E-03 | 0.9479E-04 | 0.2498E-04 | 0.3317E-04 |
| | 3.00 | 0.1110898788005302D-01 0.1110899653824231D-01 | -0.8658D-08 | 0.1382E-03 | 0.9479E-04 | 0.2497E-04 | 0.3317E-04 |

表 2 B-1 型公式と極限の公式による結果の比較

Table 2 Comparison of results obtained by type B-1 formula and limiting formula. ▲: truncation error of $O(h^5)$.

例 1) $dy/dx = -1/2y$, $y(0)=1$, $h=0.05$, $y(x) = \sqrt{1-x}$

| | x_n | y_n | $y_n - y(x_n)$ | $\mu_4(1-\alpha_4) \frac{k_4 - k_3}{1-\alpha_4}$ |
|---------|-----------|--|----------------|--|
| B-1 型公式 | 0.500D-01 | 0.9746794344820355 ▲ | 0.1139D-11 | 0.1876E-04 |
| | 0.500D-01 | 0.9746794344820329 0.9746794344808964 | 0.1137D-11 | 0.1876E-04 |
| | 0.950 | 0.2236074179939644 ▲ | 0.6202D-06 | 0.1507E-02 |
| | 0.950 | 0.2236074177982346 0.2236067977499790 | 0.6200D-06 | 0.1507E-02 |

例 2) $dy/dx = y^2$, $y(0) = -2$, $h = 0.01$, $y(x) = -2/(160x+1)^{1/2}$

| | | | | |
|--|-----------|--|-------------|------------|
| | 0.100D-01 | -1.659472679505785 ▲ | -0.7377D-02 | 0.2241E-01 |
| | 0.100D-01 | -1.659471600900501 -1.652096176384267 | -0.7375D-02 | 0.2241E-01 |
| | 0.200 | -0.9938645673803950 ▲ | -0.4542D-11 | 0.1564E-04 |
| | 0.200 | -0.9938645673804059 -0.9938645673758531 | -0.4553D-11 | 0.1564E-04 |

例 3) $dy/dx = -xy$, $y(0)=1$, $h=0.1$, $y(x) = \exp(-x^2/2)$

| | | | | |
|--|-------|--|-------------|-------------|
| | 0.100 | 0.9950124783667946 ▲ | -0.8259D-09 | 0.2736E-03 |
| | 0.100 | 0.9950124783666667 0.9950124791926823 | -0.8260D-09 | 0.2736E-03 |
| | 3.00 | 0.1110898187370353D-01 ▲ | -0.1466D-07 | -0.2850E-04 |
| | 3.00 | 0.1110898188405225D-01 0.1110899653824231D-01 | -0.1465D-07 | -0.2850E-04 |

表 3 B-2 型公式と極限の公式による結果の比較

Table 3 Comparison of results obtained by type B-2 formula and limiting formula. ▲: truncation error of $O(h^2)$.

例 1) $dy/dx = -1/2y$, $y(0)=1$, $h=0.05$, $y(x) = \sqrt{1-x}$

| | x_n | y_n | $y_n - y(x_n)$ | $\mu_n(1-\alpha_n) \frac{k_1 - k_2}{1-\alpha_n}$ |
|----------------------------|-----------|--|----------------|--|
| B-2 型公式 | 0.500D-01 | 0.9746794344816424 | 0.7460D-12 | 0.1690E-04 |
| B-2 型 極限の公式 $y(x_n)$ | 0.500D-01 | 0.9746794344816374 ▲ 0.9746794344808964 | 0.7411D-12 | 0.1690E-04 |
| | 0.950 | 0.2236079108997409 | 0.1113D-05 | 0.1360E-02 |
| | 0.950 | 0.2236079113696007 ▲ 0.2236067977499790 | 0.1114D-05 | 0.1359E-02 |

例 2) $dy/dx = y^2$, $y(0) = -2$, $h = 0.01$, $y(x) = -2/(160x+1)^{1/2}$

| | | | | |
|--|-----------|--|-------------|------------|
| | 0.100D-01 | -1.665665760293473 | -0.1357D-01 | 0.1904E-01 |
| | 0.100D-01 | -1.665662236364354 ▲ -1.652096176384267 | -0.1357D-01 | 0.1903E-01 |
| | 0.200 | -0.9938645673900593 | -0.1421D-10 | 0.1462E-04 |
| | 0.200 | -0.9938645673900571 ▲ -0.9938645673758531 | -0.1420D-10 | 0.1462E-04 |

例 3) $dy/dx = -xy$, $y(0)=1$, $h=0.1$, $y(x) = \exp(-x^2/2)$

| | | | | |
|--|-------|--|-------------|-------------|
| | 0.100 | 0.9950124787876904 | -0.4050D-09 | 0.2500E-03 |
| | 0.100 | 0.9950124787875000 ▲ 0.9950124791926823 | -0.4052D-09 | 0.2499E-03 |
| | 3.00 | 0.1110898246910664D-01 | -0.1407D-07 | -0.2983E-04 |
| | 3.00 | 0.1110898246259336D-01 ▲ 0.1110899653824231D-01 | -0.1406D-07 | -0.2982E-04 |

表 4 各種公式の第 1 および最終ステップの誤差の比較

Table 4 Comparison of errors $y_1 - y(x_1)$ and $y_n - y(x_n)$ in several formulas.

| 例題 | 5 段 公 式 | | | | | | 6 段 公 式 | | |
|--|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------|
| | A 型 | B-1 型 | B-2 型 | 田中-II | 田中-III | 田中-IV | Butcher | Luther & Konen | |
| $y' = \frac{x^2 y^2}{3}$, $y(2)=1$ $h=0.1$ $x_0=2, x_n=7$ | -.897 ₁₀ -7 | -.618 ₁₀ -7 | .817 ₁₀ -8 | .218 ₁₀ -7 | -.216 ₁₀ -7 | -.454 ₁₀ -7 | -.113 ₁₀ -6 | -.128 ₁₀ -6 | x_1 |
| | -.381 ₁₀ -11 | -.273 ₁₀ -11 | -.622 ₁₀ -12 | -.189 ₁₀ -11 | -.181 ₁₀ -11 | -.692 ₁₀ -11 | -.430 ₁₀ -11 | -.431 ₁₀ -11 | x_n |
| $y' = 1 - y^2$, $y(0)=0$ $h=0.1$ $x_0=0, x_n=5$ | -.693 ₁₀ -10 | -.157 ₁₀ -9 | -.622 ₁₀ -9 | -.520 ₁₀ -9 | -.736 ₁₀ -9 | -.522 ₁₀ -9 | -.466 ₁₀ -9 | .383 ₁₀ -9 | x_1 |
| | .956 ₁₀ -11 | .959 ₁₀ -11 | .960 ₁₀ -11 | .114 ₁₀ -10 | .109 ₁₀ -10 | .991 ₁₀ -11 | .958 ₁₀ -11 | .958 ₁₀ -11 | x_n |
| $y' = \frac{e^x(y^2 + xy^2 + 1)}{3y^2(xe^x - 6)}$ $y(0)=1, h=0.1$ $x_0=0, x_n=1.4$ | .324 ₁₀ -9 | -.264 ₁₀ -9 | -.229 ₁₀ -9 | -.214 ₁₀ -9 | -.243 ₁₀ -9 | -.237 ₁₀ -9 | -.586 ₁₀ -10 | .390 ₁₀ -10 | x_1 |
| | .180 ₁₀ -1 | -.260 ₁₀ -1 | -.240 ₁₀ -1 | -.220 ₁₀ -1 | -.236 ₁₀ -1 | -.267 ₁₀ -1 | .243 ₁₀ -2 | .702 ₁₀ -2 | x_n |
| $y' = \frac{y^2}{2}$, $y(0)=1$ $h=0.05$ $x_0=0, x_n=0.95$ | -.105 ₁₀ -9 | .193 ₁₀ -10 | .649 ₁₀ -10 | .884 ₁₀ -10 | .454 ₁₀ -10 | .812 ₁₀ -10 | -.549 ₁₀ -10 | -.328 ₁₀ -10 | x_1 |
| | -.181 ₁₀ -2 | .582 ₁₀ -3 | .572 ₁₀ -3 | .554 ₁₀ -3 | .563 ₁₀ -3 | .634 ₁₀ -3 | .337 ₁₀ -3 | -.694 ₁₀ -3 | x_n |
| $y' = -\frac{1}{2y}$, $y(0)=1$ $h=0.05$ $x_0=0, x_n=0.95$ | -.368 ₁₀ -11 | .114 ₁₀ -11 | .746 ₁₀ -12 | .101 ₁₀ -11 | .169 ₁₀ -10 | -.636 ₁₀ -10 | -.234 ₁₀ -11 | -.131 ₁₀ -11 | x_1 |
| | -.415 ₁₀ -5 | .620 ₁₀ -6 | .111 ₁₀ -5 | .793 ₁₀ -6 | .135 ₁₀ -5 | .247 ₁₀ -5 | -.586 ₁₀ -5 | -.233 ₁₀ -5 | x_n |
| $y' = y^2$, $y(0) = -2$ $h=0.01$ $x_0=0, x_n=0.2$ | .126 ₁₀ -2 | -.738 ₁₀ -2 | -.136 ₁₀ -1 | -.131 ₁₀ -1 | -.146 ₁₀ -1 | -.177 ₁₀ -1 | .220 ₁₀ -2 | .155 ₁₀ -3 | x_1 |
| | .944 ₁₀ -11 | -.454 ₁₀ -11 | -.142 ₁₀ -10 | .569 ₁₀ -12 | -.198 ₁₀ -11 | .105 ₁₀ -10 | .117 ₁₀ -13 | .680 ₁₀ -14 | x_n |
| $y' = -xy$, $y(0)=1$ $h=0.1$ $x_0=0, x_n=3$ | -.319 ₁₀ -11 | -.826 ₁₀ -9 | -.405 ₁₀ -9 | -.299 ₁₀ -9 | -.468 ₁₀ -9 | -.685 ₁₀ -9 | -.839 ₁₀ -9 | -.576 ₁₀ -9 | x_1 |
| | -.864 ₁₀ -8 | -.147 ₁₀ -7 | -.141 ₁₀ -7 | -.160 ₁₀ -7 | -.149 ₁₀ -7 | -.130 ₁₀ -7 | -.101 ₁₀ -7 | -.146 ₁₀ -7 | x_n |
| $y' = \frac{7y}{x}$, $y(0)=1$ $h=0.01$ $x_0=1, x_n=1.1$ | -.106 ₁₀ -9 | -.189 ₁₀ -9 | -.182 ₁₀ -9 | -.117 ₁₀ -9 | -.165 ₁₀ -9 | -.249 ₁₀ -11 | -.123 ₁₀ -9 | -.184 ₁₀ -9 | x_1 |
| | -.116 ₁₀ -9 | -.206 ₁₀ -9 | -.199 ₁₀ -9 | -.124 ₁₀ -9 | -.200 ₁₀ -9 | .939 ₁₀ -10 | -.134 ₁₀ -9 | -.201 ₁₀ -9 | x_n |

表 5 局所打ち切り誤差の比較

Table 5 Comparison of local truncation errors.

| 公式 | 尺度 | $\delta_{s,j} \neq 0$ の個数 | $15 \sum_{j=1} \delta_{s,j}^2$ | $15 \sum_{j=1} \delta_{s,j} $ | Lotkin 和 | $8 \sum_{j=1} \delta_{s,j}^2$ | $8 \sum_{j=1} \delta_{s,j} $ |
|------------------|---------------------------------|------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| | | | | | | | |
| 5 段 公 式 | A 型 | 4 | .526 ₁₀ - 5 | .605 ₁₀ - 2 | .303 ₁₀ - 1 | .809 ₁₀ -12 | .127 ₁₀ - 5 |
| | B-1 型 | 4 | .153 ₁₀ - 4 | .85 ₁₀ 0- 2 | .392 ₁₀ - 1 | .202 ₁₀ -12 | .636 ₁₀ - 6 |
| | B-2 型 | 0 | .188 ₁₀ - 4 | .941 ₁₀ - 2 | .455 ₁₀ - 1 | .360 ₁₀ -12 | .848 ₁₀ - 6 |
| | 田中ら 4. 2. 9 ⁷⁾ | 0 | .119 ₁₀ - 4 | .106 ₁₀ - 1 | .726 ₁₀ - 1 | .749 ₁₀ - 5 | .679 ₁₀ - 2 |
| | 田中-II ⁸⁾ | 0 | .198 ₁₀ - 4 | .965 ₁₀ - 2 | .466 ₁₀ - 1 | .512 ₁₀ - 8 | .110 ₁₀ - 3 |
| | 田中-III ⁸⁾ | 0 | .188 ₁₀ - 4 | .993 ₁₀ - 2 | .469 ₁₀ - 1 | .264 ₁₀ - 8 | .729 ₁₀ - 4 |
| | 田中-IV ⁸⁾ | 0 | .214 ₁₀ - 4 | .122 ₁₀ - 1 | .546 ₁₀ - 1 | .268 ₁₀ -10 | .125 ₁₀ - 4 |
| 6 段 公 式 | Butcher | 2 | .375 ₁₀ - 5 | .515 ₁₀ - 2 | .277 ₁₀ - 1 | 0 | 0 |
| | Luther & Konen ⁸⁾ | 3 | .719 ₁₀ - 5 | .713 ₁₀ - 2 | .353 ₁₀ - 1 | 0 | 0 |

4. 数 値 例

参考文献⁶⁾の中でとり上げられている例題について、極限の公式 ($O(h^5)$ の誤差項は完全に 0) との比較を表 1, 表 2, 表 3 に示す。本論文で提案している公式の誤差は——の部分で、▲は極限の公式 (本論文で提案している公式における 5 次の誤差項を完全に 0 としたもの) との差である。この公式を多倍長 (10 進 40 桁) で計算したものと最後の桁まで一致していて、 k_2-k_1 や k_4-k_5 を用いたための桁落ちや単調公式でないための桁落ちの心配は最後の結果には全くないことがいえる。

さらに、ここで導いた公式と、田中⁵⁾の 3 つの 5 段公式および Butcher と Luther & Konen⁸⁾の 2 つの 6 段 5 次の公式について文献 6) の数値例で x_j から x_{j+1} に進む各ステップにおいて計算値 y_j を真値 $y(x_j)$ におきかえて得られたときの誤差 $y_{j+1}-y(x_{j+1})$ を、第 1 ステップおよび最終ステップについて比較したものが表 4 に示されている。

5. 結果の考察

ここで導いた 3 つの公式は、予期した通りいずれも $O(h^5)$ の誤差項が $O(h^6)$ の誤差項より小さくなっている。桁落ちによる精度の点からみると、この計算は仮数部が 2 進 62 bit なので (FACOM-230-75), 桁落ち

によるまるめの誤差は $O(h^5)$ の誤差よりさらに小さくなっている。

したがって、桁落ちについて、公式の変形が有効であること、極限の公式で f_x や f_y を用いて求めた量の精度はあまり必要でないこと、さらに公式のパラメタの単調性にはこだわらなくてもよいことがわかり、ここにあげた公式が 5 個の関数計算だけで達成できる $O(h^6)$ の打ち切り誤差に関して最も精度のよい 5 次の公式となっている。極限の公式の A 型で、ここでとりあげなかった文献 6) にあるほかの α_3, α_4 の値に対応する公式も同様に導くことができる。

上の 3 つの公式のうちどれがよいかは、適用する個個の問題の誤差項の符号や大きさによってちがってくるので、少数の例題で判定することはできない。これは関数によらない部分で比較すべきであり、表 5 のようになって A 型公式が最もよく、6 次の誤差に関して 6 段 5 次の 2 つの公式の間にあることがわかる。

桁落ちの面から眺めると、失なわれる桁数は A 型公式が 10 進で 0~4.2 桁、B-1 型公式が 10 進で 0~3.5 桁、B-2 型公式が 10 進で 0~3.0 桁となっていて B-2 型公式が最もよい。

しかしたいいてい問題では、例題にもみられるように、 $O(h^6)$ の局所打ち切り誤差のほうが大きく、また $14 \log_2 2$ 桁まで桁落ちすることはめったにないから A 型公式が最良であるといえよう。

また、数値例ではとり上げなかったが、連立型の公式についても全く同様である。

謝辞 6段5次の公式についてご教示賜わった山梨大学教授田中正次博士に心から感謝の意を表す。

参 考 文 献

- 1) Runge, C.: Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen, *Math. Ann.* 46, pp. 167-178 (1895).
- 2) Heun, K.: Neue Methode zur approximativen Integration der Differentialgleichungen einer unabhängigen Veränderlichen, *Z. Math. Physik*, 45, pp. 23-38 (1900).
- 3) Kutta, W.: Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen, *Z. Math. Physik*, 46, pp. 435-453 (1901).
- 4) 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論文 (1972).
- 5) 田中正次: Runge-Kutta 法の打ち切り誤差の評価について, *情報処理*, Vol. 17, No. 12, pp. 1143-1151 (1976).
- 6) 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の研究, *電子技術総合研究所研究報告*, 772 (1977).
- 7) 田中正次, 寺川秀樹, 山下 茂: 5段数陽的 Runge-Kutta 法について, *情報処理*, Vol. 20, No. 5, pp. 382-391 (1979).
- 8) Luther, H. A. and Konen, H. P.: Some fifth-order classical Runge-Kutta formulas, *SIAM Review*, Vol. 7, No. 1, pp. 551-558 (1965).
- 9) Lapidus Seinfeld: *Numerical Solution of Ordinary Differential Equations*, Academic Press (1971).

(昭和54年12月26日受付)

(昭和55年9月18日採録)