

Runge-Kutta 系のある極限公式の打ち切り誤差について†

戸 田 英 雄††

常微分方程式の数値解法の1つである Runge-Kutta 系の5段階的公式では局所打ち切り誤差を5次のオーダーまで零とすることは出来ない。5次のオーダーの誤差項を小さくしようとすると公式に含まれるいくつかのパラメータを非常に大きくしなければならないという田中正次⁹⁾の結果に着目し、その極限の場合(これを極限の公式と呼ぶ)を考察すれば、5次のオーダーの誤差項を消滅させることが出来るはずである。

この考察に基づき、5段5次の極限公式には2つの型が存在することを示し、これをA型公式群、B型公式群(これはさらにB-1型とB-2型に細分される)と呼ぶ。A型公式群には自由なパラメータが2個、B型公式群には1個含まれる。

さらにA型公式群とB型公式群において、残されている自由パラメータを調節して、6次の打ち切り誤差の諸項をできるだけ小さくする。独立に変動するいくつかの6次の誤差項が存在するので“打ち切り誤差最小”という評価規準は一意には確定しないが、実用的見地から有意義とみなされるいくつかの規準に照して各公式群ごとに良いと認められる数個の公式が最終的に決定される。それらの公式のうちA型のものの方がB型のものより優れ、またA型公式群の中では最大誤差項最小化により定められるA-3型公式がどの尺度から見ても優れているといえる。数値実験の結果も理論的な結果とよく一致している。

1. ま え が き

常微分方程式の初期値問題の数値解法で、特に5段数の Runge-Kutta 系における5次の公式を極限の場合(これを極限の公式と呼ぶ)で導き、6次のオーダーの打ち切り誤差をできるだけ小さくするという意味での最適化された5段5次の極限公式を与える。

5段数(陽的)の公式は、古くは Kutta, W.¹⁰⁾ が取り上げ5次法(局所打ち切り誤差が5次のオーダーの項まで零にする公式)は得られないと述べて6段5次の公式の一例を示している。

5次のオーダーの誤差項を小さくしようとすると、公式の中に含まれるいくつかのパラメータが非常に大きくなるという田中²⁾の結果に着目し、その極限の場合を数式的に導けば、5次のオーダーの項を消滅させることが可能であろう。(→謝辞)

2章では、この考察に基づき、莫大な量の数式計算を、数式処理システム MACSYMA によって行い、5段5次の極限公式(f_x や f_y を含むことになる)を求め、これをA型、B-1型、B-2型の各公式群に分類することを述べる。

3章では、さらに残されている自由パラメータを調節して6次のオーダーの誤差の諸項をできるだけ小さくす

る。特に、A型公式群の中で最大誤差項を最小にする方式のA-3型公式は、Ralston⁹⁾, Hull¹⁰⁾, 田中³⁾, 等により使用されている打ち切り誤差計量のどの尺度から見ても優れていることを述べる。

4章では、前章までに求めた5個のA型公式および2個のB型公式と従来から知られている5次の公式(新谷⁶⁾, Fehlberg²¹⁾)と田中²⁾の式と性能比較を数値実験により検討しその結果が理論的な考案と一致していることを示している。

なお、最近、田中ら⁴⁾は5段数 Runge-Kutta 系公式のうちで、係数パラメータが $\alpha_i \geq 0, \beta_{ij} \geq 0$ という条件を満足する一松の“単調な”公式群を考察し、多変数関数の条件つき最適化法により係数が比較的簡単で無理のない自然な5段4次の公式を導いているが、この打ち切り誤差項は5次のオーダーが残っている。

2. 5 段 5 次 の 極 限 公 式 の 誘 導

2.1 Kutta 型 5 段 公 式

常微分方程式の初期値問題

$$dy/dx = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (2.1)$$

の数値解法で Kutta 型の5段公式を

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

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

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

$$i = 2(1)5 \quad (2.2)$$

† On the Truncation Error of a Limiting Formula of Runge-Kutta Methods by HIDEO TODA (Computer Science Division, Electrotechnical Laboratory).

†† 電子技術総合研究所

と表わす。ここで, $h = x_{n+1} - x_n$,

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} \quad i=2(1)5.$$

この公式の係数 $\mu_i, \beta_{ij}, \alpha_i$ は, (2.1)の右辺の関数 $f(x, y)$ には無関係に決めるべきなので, (2.2)の $y_{n+1} - y_n$ の h についての巾級数展開と, 正しい解の関数 $y(x+h) - y(x)$ の h についての巾級数展開を比較して, 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, "Kutta の条件式" を作って決める (h^5 まで両方の係数が一致すれば, 5次の公式となる).
いま $O(h^j)$ の項の両方の係数の差を δ_{ij} (j は i により定まる) と書き, $O(h^i)$ の打ち切り誤差をみつめるのに用いる. δ_{5j} ($j=1(1)8$), δ_{6j} ($j=1(1)15$) は次のように表わすことができる.

$$\delta_{51} = 1/24 \left\{ \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i^4 - 1/5 \right\},$$

$$\delta_{52} = 1/2 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i \alpha_i^2 X_{i1} - 1/10 \right\},$$

$$\delta_{53} = 1/2 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i \alpha_i X_{i2} - 1/15 \right\},$$

$$\delta_{54} = 1/2 \left\{ \mu_4 \beta_{43} X_{32} + \mu_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} X_{i2} - 1/60 \right\},$$

$$\delta_{55} = 1/2 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i X_{i1}^2 - 1/20 \right\},$$

$$\delta_{56} = \mu_4 \beta_{43} (\alpha_3 + \alpha_4) X_{31} + \mu_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} (\alpha_i + \alpha_5) X_{i1} - 7/120,$$

$$\delta_{57} = 1/6 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i X_{i3} - 1/20 \right\},$$

$$\delta_{58} = \mu_5 \beta_{54} \beta_{43} X_{31} - 1/120;$$

$$\delta_{61} = 1/120 \left\{ \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i^5 - 1/6 \right\},$$

$$\delta_{62} = 1/24 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i X_{i4} - 1/30 \right\},$$

$$\delta_{63} = 1/6 \left\{ \mu_4 \beta_{43} X_{33} + \mu_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} X_{i3} - 1/120 \right\},$$

$$\delta_{64} = 1/2 \left\{ \mu_5 \beta_{54} \beta_{43} X_{32} - 1/360 \right\}, \quad \delta_{65} = -1/720,$$

$$\delta_{66} = 1/6 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i \alpha_i X_{i3} - 1/24 \right\},$$

$$\delta_{67} = 1/2 \left\{ \mu_4 \beta_{43} (\alpha_3 + \alpha_4) X_{32} + \mu_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} (\alpha_i + \alpha_5) X_{i2} - 1/40 \right\},$$

$$\delta_{68} = \mu_5 \beta_{54} \beta_{43} (\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) X_{31} - 1/60,$$

$$\delta_{69} = 1/6 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i \alpha_i^3 X_{i1} - 1/12 \right\},$$

$$\delta_{6,10} = 1/2 \left\{ \mu_4 \beta_{43} (\alpha_3^2 + \alpha_4^2) X_{31} + \mu_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} (\alpha_i^2 + \alpha_5^2) X_{i1} - 2/45 \right\},$$

$$\delta_{6,11} = 1/4 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i \alpha_i^2 X_{i2} - 1/18 \right\},$$

$$\delta_{6,12} = 1/2 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i X_{i1} X_{i2} - 1/36 \right\},$$

$$\delta_{6,13} = 1/2 \left\{ \mu_4 \beta_{43} (X_{31}^2 + 2X_{31} \cdot X_{41}) + \mu_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} (X_{i1}^2 + 2X_{i1} \cdot X_{51}) - 13/360 \right\}$$

$$\delta_{6,14} = 1/2 \left\{ \sum_{i=3}^5 \mu_i \alpha_i X_{i2} - 1/24 \right\}$$

$$\delta_{6,15} = \left\{ \mu_4 \alpha_4 \beta_{43} \alpha_3 X_{31} + \mu_5 \alpha_5 \sum_{i=3}^4 \beta_{5i} \alpha_i X_{i1} - 1/48 \right\},$$

ただし,

$$X_{il} = \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^l \quad l=1(1)4, \quad i=3(1)5 \quad (2.3)$$

5段5次の公式とするためには

$$\delta_{11} = 0, \quad \delta_{21} = 0, \quad \delta_{3j} = 0 \quad (j=1, 2),$$

$$\delta_{4j} = 0 \quad (j=1(1)4) \quad (2.4)$$

$$\delta_{5j} = 0 \quad (j=1(1)8) \quad (2.5)$$

を満たすように $\mu_i, \beta_{ij}, \alpha_i$ を決めなければならない。 $\alpha_i \neq \alpha_j$ ($i \neq j$), $0 < \alpha_i \leq 1$ で(2.4)と(2.5)を満足する解を求めることはできないことはよく知られている¹¹⁾。そこで(2.4)と(2.5)の中から $\delta_{51} = \delta_{52} = \delta_{53} = 0$ を選び, $(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$ をパラメタとして μ_i と β_{ij} を解き, これを δ_{54} と δ_{57} に代入すると両方とも $(1 - \alpha_5)$ なる因数をもつ⁵⁾ので $\alpha_5 = 1$ と決めれば $\delta_{54} = \delta_{57} = 0$ とすることができる。(田中^{2), 3)}が数値的探索で $\alpha_5 = 1$ とした根拠を与える。) $\alpha_5 = 1$ とし, 分母に含まれる因数はすべて0でないとして, $(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ をパラメタとして μ_i, β_{ij} を次のように表わすことができる^{5), *}。

$$\mu_1 = p_5 / (60 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4),$$

$$\mu_2 = f_{34} / \{60 \alpha_2 (1 - \alpha_2) (\alpha_3 - \alpha_2) (\alpha_4 - \alpha_2)\},$$

$$\mu_3 = -f_{24} / \{60 \alpha_3 (1 - \alpha_3) (\alpha_4 - \alpha_3) (\alpha_3 - \alpha_2)\},$$

$$\mu_4 = f_{23} / \{60 \alpha_4 (1 - \alpha_4) (\alpha_4 - \alpha_3) (\alpha_4 - \alpha_2)\},$$

$$\mu_5 = -p_5 / \{60 (1 - \alpha_2) (1 - \alpha_3) (1 - \alpha_4)\},$$

$$\beta_{31} = \alpha_3 \{ (5\alpha_3 + 20\alpha_2^2 - 15\alpha_2) \alpha_4 - 3\alpha_3 - 10\alpha_2^2 + 9\alpha_2 \} / \{2\alpha_2 f_{24}\},$$

$$\beta_{32} = \alpha_3 (\alpha_3 - \alpha_2) (3 - 5\alpha_4) / \{2\alpha_2 f_{24}\},$$

* (2.6)は数式処理システム MACSYMA により検算済みである。

$$\begin{aligned}
\beta_{41} &= \alpha_4 \{ (2-5\alpha_2)\alpha_4^2 \\
&\quad + (5\alpha_3^2 + 5\alpha_2\alpha_3 - 5\alpha_3 + 5\alpha_2^2 - 2\alpha_2)\alpha_4 \\
&\quad + 20\alpha_2^2\alpha_3^2 - 15\alpha_2^2\alpha_3 - 15\alpha_2\alpha_3^2 + 11\alpha_2\alpha_3 \} \\
&\quad / \{ 2\alpha_2\alpha_3 f_{23} \}, \\
\beta_{42} &= \alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)(-5\alpha_3^2 + 5\alpha_3 - 3\alpha_2 + 5\alpha_2\alpha_4 - 2\alpha_4) \\
&\quad / \{ 2\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2) f_{23} \}, \\
\beta_{43} &= \alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)(\alpha_4 - \alpha_3)(2-5\alpha_2) \\
&\quad / \{ 2\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2) f_{23} \} \\
\beta_{51} &= [\alpha_4^2 \{ (60\alpha_2^2 - 60\alpha_2 + 20)\alpha_3^2 \\
&\quad + (-60\alpha_2^2 + 75\alpha_2 - 25)\alpha_3 \\
&\quad + 20\alpha_2^2 - 30\alpha_2 + 10 \} \\
&\quad + \alpha_4 \{ (-60\alpha_2^2 + 75\alpha_2 - 25)\alpha_3^2 \\
&\quad + (75\alpha_2^2 - 105\alpha_2 + 36)\alpha_3 \\
&\quad - 25\alpha_2^2 + 39\alpha_2 - 14 \} \\
&\quad + (20\alpha_2^2 - 30\alpha_2 + 10)\alpha_3^2 \\
&\quad + (-30\alpha_2^2 + 46\alpha_2 - 16)\alpha_3 + 10\alpha_2^2 - 16\alpha_2 + 6] \\
&\quad / (2\alpha_2\alpha_3\alpha_4 p_5) \\
\beta_{52} &= -(1-\alpha_2) \{ \alpha_4^2(20\alpha_3^2 - 25\alpha_3 - 5\alpha_2 + 10) \\
&\quad + \alpha_4(-25\alpha_3^2 - 5\alpha_3\alpha_2 + 36\alpha_3 + 5\alpha_2^2 + 3\alpha_2 - 14) \\
&\quad - 5\alpha_3^2\alpha_2 + 10\alpha_3\alpha_2 - 16\alpha_3 - 3\alpha_2^2 \\
&\quad - 2\alpha_2 + 6 \} / \{ 2\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2)(\alpha_4 - \alpha_2) p_5 \}, \\
\beta_{53} &= (1-\alpha_2)(1-\alpha_3) \{ \alpha_4^2(-20\alpha_2 + 10) \\
&\quad + \alpha_4(25\alpha_2 - 14) + 5\alpha_2\alpha_3 - 2\alpha_3 - 10\alpha_2 + 6 \} \\
&\quad / \{ 2\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)(\alpha_4 - \alpha_3) p_5 \}, \\
\beta_{54} &= -(1-\alpha_2)(1-\alpha_3)(1-\alpha_4) f_{23} \\
&\quad / \{ \alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)(\alpha_4 - \alpha_3) p_5 \},
\end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
p_5 &\equiv 30\alpha_2\alpha_3\alpha_4 - 20(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_2) \\
&\quad + 15(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - 12, \\
f_{mn} &\equiv 10\alpha_m\alpha_n - 5\alpha_m - 5\alpha_n + 3, \\
m &\neq n; \quad m, n = 2, 3, 4
\end{aligned} \tag{2.6}$$

である。

2.2 Kutta 型 5 段 5 次の極限公式

$O(h^5)$ の誤差項で未だ 0 とならずに残る $\delta_{55}, \delta_{56}, \delta_{58}$ に (2.6) の μ_i, β_{ij} を代入して整理すると,

$$\begin{aligned}
\delta_{55} &= -\alpha_2^2(10\alpha_3\alpha_4 - 5\alpha_3 - 5\alpha_4 + 3) \\
&\quad \cdot \{ 70\alpha_2\alpha_3\alpha_4 - 30(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_2) \\
&\quad + 15(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - 9 \} \\
&\quad / 96(f_{24} \cdot g_{234})
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
g_{234} &= 30\alpha_2\alpha_3\alpha_4 - 20(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_2) \\
&\quad + 15(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - 12 \\
\delta_{56} &= -\delta_{58} = \frac{\alpha_2(1-\alpha_4)}{48(10\alpha_2\alpha_4 - 5\alpha_2 - 5\alpha_4 + 3)}
\end{aligned} \tag{2.7}$$

となる*。

ところで (2.2) を 5 次の公式とするためには

$$\delta_{55} = \delta_{56} = \delta_{58} = 0$$

でなければならないので、次の三通りの場合が考えられる：

- A) $\alpha_2 = 0,$
 B-1) $\alpha_4 = 1$ であつ、 $10\alpha_3\alpha_4 - 5\alpha_3 - 5\alpha_4 + 3 = 0,$
 B-2) $\alpha_4 = 1$ であつ、
 $70\alpha_2\alpha_3\alpha_4 - 30(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_2)$
 $+ 15(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) - 9 \equiv g_{70} = 0$ (2.8)

しかし (2.6) の示すように、 μ_1, μ_2 および β_{i1}, β_{i2} ($i=3, 4, 5$) は因数 $1/\alpha_2$ をもち、また μ_4, μ_5 は因数 $1/(1-\alpha_4)$ をもつので、このままでは A) または B-1), B-2) を満足する公式は実現できない。実際、田中²⁾ の 5 次のオーダの誤差項を小さくしようとして $\alpha_4 \rightarrow 1$ とすると、公式の μ_4 と μ_5 が非常に大きくなった理由が (2.6) よりあきらかとなる。また μ_i や β_{ij} はいずれも $1/\alpha_2$ や $1/(1-\alpha_4)$ の程度なので数式的に処理し極限の場合 (これを極限の公式と呼ぶ) を考察すれば、5 次の誤差項を消滅させることは可能と分かる。しかし公式には $f_x(x, y)$ や $f_y(x, y)$ を含むことにはなる。

A) $\alpha_2 \rightarrow 0$ の場合の極限公式

$\mu_1, \mu_2, \beta_{i1}, \beta_{i2}$ ($i=3, 4, 5$) は因数 $1/\alpha_2$ をもつが、 $\mu_1 + \mu_2, \beta_{i1} + \beta_{i2}, \mu_2\alpha_2, \beta_{i2}\alpha_2$ ($i=3, 4, 5$) には因数 $1/\alpha_2$ が無くなる⁵⁾ ので、(2.2) の 5 段公式で

$$\begin{aligned}
\mu_1 k_1 + \mu_2 k_2 &= (\mu_1 + \mu_2)k_1 + \mu_2\alpha_2(k_2 - k_1)/\alpha_2 \\
\beta_{i1} k_1 + \beta_{i2} k_2 &= (\beta_{i1} + \beta_{i2})k_1 + \beta_{i2}\alpha_2(k_2 - k_1)/\alpha_2
\end{aligned} \tag{2.9}$$

と一部分を書き直し、

$$\lim_{\alpha_2 \rightarrow 0} (k_2 - k_1)/\alpha_2 = h^2(f_x + f \cdot f_y) \tag{2.10}$$

なので (2.9) の $(k_2 - k_1)/\alpha_2$ の代りに (2.10) を用いると $\alpha_2 \rightarrow 0$ の極限公式 (A 型) が求められる。

A 型公式：

$$y_{n+1} - y_n = \mu_{12} k_1 + \bar{\mu}_2 k_2 + \mu_3 k_3 + \mu_4 k_4 + \mu_5 k_5 \tag{2.11}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
k_1 &= h f(x_n, y_n) \\
\bar{k}_2 &= h^2 \cdot D f(x_n, y_n) \\
k_3 &= h f(x_n + \alpha_3 h, y_n + c_{31} k_1 + c_{32} \bar{k}_2) \\
k_4 &= h f(x_n + \alpha_4 h, y_n + c_{41} k_1 + c_{42} \bar{k}_2 + \beta_{43} k_3)
\end{aligned}$$

* (2.7) は MACSYMA により得られた。

$$k_5 = hf(x_n + h, y_n + c_{51}k_1 + c_{52}k_2 + \beta_{53}k_3 + \beta_{54}k_4) \quad (2.12)$$

ただし,

$Df(x, y) = f_x(x, y) + f(x, y) \cdot f_y(x, y)$ である。公式の係数は, α_3, α_4 をパラメタとして記述される。 $(\alpha_3, \alpha_4$ はここでは可変パラメタで, 3章で決定される。)

B) $\alpha_4 \rightarrow 1$ の場合の極限公式

μ_4, μ_5 には因数 $1/(1-\alpha_4)$ があるが, $\mu_4 + \mu_5, \mu_4(1-\alpha_4)$ には無くなる⁵⁾。また $\beta_{4j} - \beta_{5j}$ ($j=1, 2, 3$) および β_{54} は分子に $(1-\alpha_4)$ の因数がある⁵⁾ ので, (2.2) の5段公式の一部を

$$\mu_4 k_4 + \mu_5 k_5 = (\mu_4 + \mu_5) k_5 + \mu_4(1-\alpha_4) \cdot \{(k_4 - k_5)/(1-\alpha_4)\} \quad (2.13)$$

と変形して(2.9), (2.10)と同様に $(k_4 - k_5)/(1-\alpha_4)$ の代わりに

$$-h^2 f_x + h \left[\sum_{j=1}^3 \{(\beta_{4j} - \beta_{5j})/(1-\alpha_4)\} k_j - \{\beta_{54}/(1-\alpha_4)\} k_4 \right] \cdot f_y \quad (2.14)$$

を用いれば $\alpha_4 \rightarrow 1$ の場合の極限公式 (B型) が求められる。

B型公式:

$$y_{n+1} = y_n + \mu_1 k_1 + \mu_2 k_2 + \mu_3 k_3 + \mu_4 k_4 + \bar{\mu}_4 \left[-h^2 f_x + h \left(\sum_{j=1}^3 \beta_{45j} k_j + k_4 \right) f_y \right] \quad (2.15)$$

ここに

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n), \\ k_2 &= hf(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} k_1), \\ k_3 &= hf(x_n + \alpha_3 h, y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2), \\ k_4 &= hf(x_n + h, y_n + \beta_{41} k_1 + \beta_{42} k_2 + \beta_{43} k_3), \\ f_x &\equiv f_x(x_n + h, y_n + \beta_{41} k_1 + \beta_{42} k_2 + \beta_{43} k_3) \\ f_y &\equiv f_y(x_n + h, y_n + \beta_{41} k_1 + \beta_{42} k_2 + \beta_{43} k_3) \end{aligned} \quad (2.16)$$

である。

公式の係数は α_2, α_3 をパラメタとして記述され, そのうち5次の公式とするため(2.8)から $\alpha_3 = 1/2$ (B-1型), $\alpha_3 = (15\alpha_2 - 6)/(40\alpha_2 - 15)$ (B-2型) でなくてはならない。(B型公式では5次の公式とするため α_3 が使われてしまうので可変なパラメタは α_2 だけになる。これは3章で決定される)。

3. 5次の極限公式の可変なパラメタの決定

2.2節で導いた5段5次の極限公式において, A型

公式群では α_3 と α_4 が, B型公式群では α_2 が可変なパラメタとして残る。そこでこれらの可変なパラメタを用いて6次の打ち切り誤差をできるだけ小さくして公式の最適化を行う。そのため(2.3)の中の δ_{6j} ($j=1(1)15$) を便宜的に用いる。

3.1 A型公式の決定

可変なパラメタ α_3, α_4 の決め方として次のものが考えられる。

1) $j=1(1)15$ で $\delta_{6j}=0$ となる個数を max にする。

2) $\max_j |\delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4)|$ を min にする。

3) $Q = \sqrt{\sum_{j=1}^{15} \delta_{6j}^2(\alpha_3, \alpha_4)/15}$ を min にする。

4) $\delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4)$ の Lotkin 和 (Lotkin¹²⁾ による打ち切り誤差の判定基準) を min にする。

さて, (2.3)の δ_{6j} 中の μ_i, β_{ij} に(2.6)式の結果を代入して, δ_{6j} を $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ をパラメタとして計算し⁵⁾, これに $\alpha_2=0$ とすれば次のようになる。

$$\begin{aligned} \delta_{61} &= (5\alpha_3\alpha_4 - 3\alpha_3 - 3\alpha_4 + 2)/7200, \\ \delta_{62} &= -(5\alpha_3\alpha_4 - 3\alpha_3 - 3\alpha_4 + 2)/1400, \\ \delta_{63} &= (2\alpha_3 - 1)/720, \quad \delta_{64} = \delta_{65} = -1/720, \\ \delta_{66} &= (-2\alpha_3 + 1)/720, \quad \delta_{67} = (2\alpha_4 - 1)/240, \\ \delta_{68} &= (\alpha_3 + \alpha_4 - 1)/120, \\ \delta_{69} &= (5\alpha_3\alpha_4 - 3\alpha_3 - 3\alpha_4 + 2)/720, \\ \delta_{6,10} &= (-15\alpha_3\alpha_4 + 9\alpha_3 + 6\alpha_4 - 4)/720, \\ \delta_{6,11} &= (-3\alpha_4 + 2)/720, \quad \delta_{6,12} = (-3\alpha_4 + 2)/720, \\ \delta_{6,13} &= (-15\alpha_3\alpha_4 + 9\alpha_3 + 3\alpha_4 - 2)/1440, \\ \delta_{6,14} &= (5\alpha_3\alpha_4 - 3\alpha_3 - 3\alpha_4 + 2)/480, \\ \delta_{6,15} &= (-2\alpha_3 + 1)/240 \end{aligned} \quad (3.1)$$

これらについて, $\delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4) = 0$ を満たす曲線群を図3.1に示す。

3.1.1 $\delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4) = 0$ の個数を max にする法

図3.1における点 A-1 ($\alpha_3 = (5 - \sqrt{5})/10, \alpha_4 = (5 + \sqrt{5})/10$) では, $\delta_{61} = \delta_{62} = \delta_{69} = \delta_{6,14} = \delta_{68} = 0$ となり, 0となる個数が5で最大となる。また点 A-2 ($\alpha_3 = 1/2, \alpha_4 = 2/3$) では $\delta_{63} = \delta_{66} = \delta_{6,15} = \delta_{6,11} = \delta_{6,12} = 0$ となり, 0となる個数が5で最大である。

3.1.2 $\max_j |\delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4)|$ を min にする法

$0.4 \leq \alpha_3 \leq 0.55, 0.45 \leq \alpha_4 \leq 0.6$ の範囲で

$$z = \max_{j=4,5} |\delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4)| \quad (3.2)$$

の立体図を示したのが図3.2である。すなわち, $z = |\delta_{67}|, z = |\delta_{6,15}|, z = |\delta_{68}|, z = |\delta_{6,11}|, z = |\delta_{6,10}|$ 等の壁に囲まれた谷の一番深い点 (α_3, α_4) を求める。

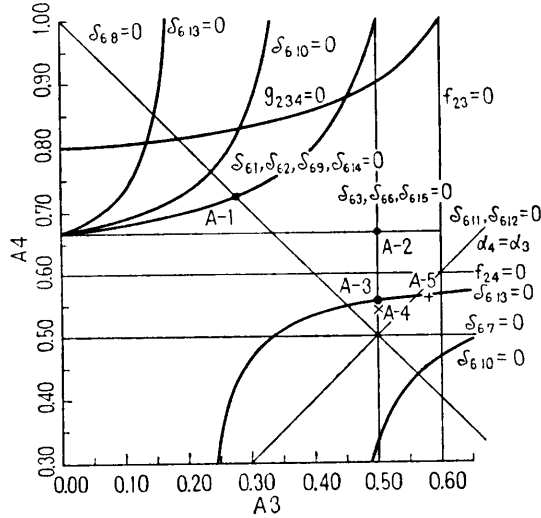


図 3.1 $\alpha_2=0$ の場合の $\delta_{6,j}(\alpha_3, \alpha_4)=0$ の曲線群
 Fig. 3.1 A group of curves that $\delta_{6,j}(\alpha_3, \alpha_4)=0, \alpha_2=0$.

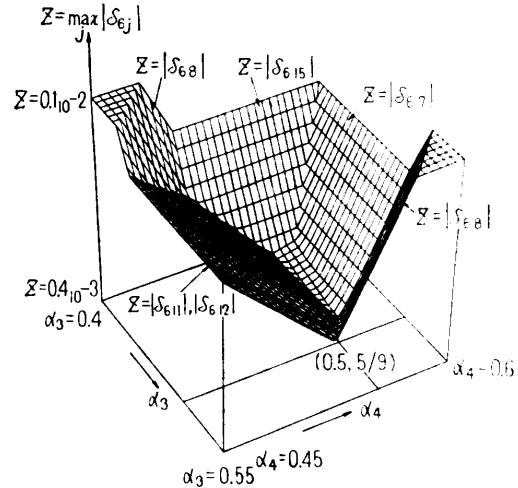


図 3.2 $z = \max_j |\delta_{6,j}(\alpha_3, \alpha_4)|$
 Fig. 3.2 $z = \max_j |\delta_{6,j}(\alpha_3, \alpha_4)|$.

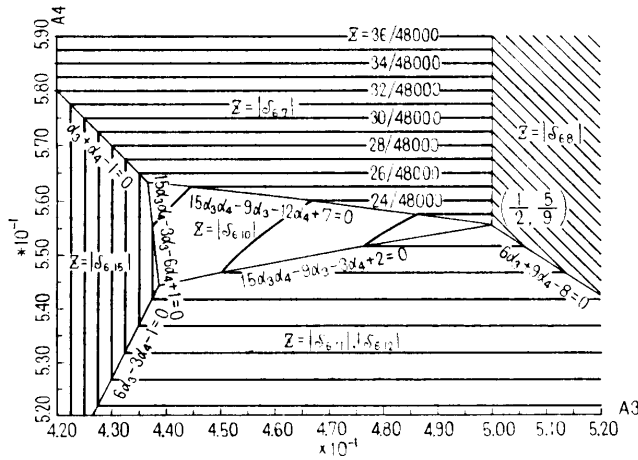


図 3.3 $z = \max_j |\delta_{6,j}(\alpha_3, \alpha_4)|$ の等高線図

Fig. 3.3 Contour lines of $z = \max_j |\delta_{6,j}(\alpha_3, \alpha_4)|$.

この様子を説明するため、谷の一番深い付近の等高線図 ($\alpha_4=3/5$ のとき $z=1/1200$ と $\alpha_4=1/2$ のとき $z=0$ の高さを 40 等分して $1/48000$ の間隔で描かれている) が図 3.3 に示される。これから分かるように (3.2) を min にする (α_3, α_4) は $(1/2, 5/9)$ と決定される。

3.1.3 $Q = \sqrt{\sum_{j=1}^{15} \delta_{6,j}^2(\alpha_3, \alpha_4)}$ を min にする

$0.4 \leq \alpha_3 \leq 0.6, 0.5 \leq \alpha_4 \leq 0.6$ において刻み巾 0.02 で数値的二次探索を行い、 Q を min にする点 (α_3, α_4) を求めると $(0.48, 0.54)$ で $Q = .5873 \times 10^{-3}$ となる。この近くで $\delta_{6,j}=0$ となる個

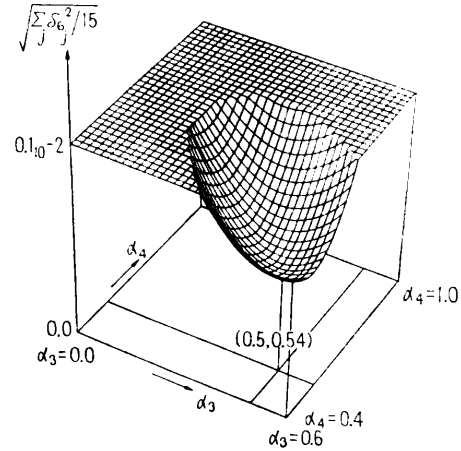


図 3.4 $z = \sqrt{\sum_j \delta_{6,j}^2(\alpha_3, \alpha_4)} / 15$

Fig. 3.4 $z = \sqrt{\sum_j \delta_{6,j}^2(\alpha_3, \alpha_4)} / 15$.

数が 3 個の点 $(0.5, 0.54)$ と決定する。この点では $Q = 0.5878 \times 10^{-3}$ となる。

3.1.4 $\delta_{6,j}(\alpha_3, \alpha_4)$ の Lotkin 和を min にする

3.1.3 と同じ範囲において 0.02 刻みで二次元の探索を行い、Lotkin 和を min にする点 (α_3, α_4) は $(0.58, 0.58)$ で極小値は 0.2459×10^{-1} である。しかし $\alpha_3 \neq \alpha_4$ の解を求めないので $(0.58, 0.56)$ とする。このときの極小値は 0.2492×10^{-1} である。これらの様子が図 3.4 と図 3.5 に示される。

以上のようにして A 型公式群が次の表 3.1 に分類される。

3.2 B 型公式の決定

表 3.1 A 型公式の分類

Table 3.1 Classification of type A formulas.

A 型	(α_3, α_4) の決め方	$\{\delta_{6j}=0\}$ の も の	α_2	α_3	α_4
A-1	$j=1(1)15$ で $\{\delta_{6j}=0\}$	$\delta_{61}=\delta_{62}=\delta_{63}=\delta_{6,11}=\delta_{6,12}=0$	0	$\frac{5-\sqrt{5}}{10}$	$\frac{5+\sqrt{5}}{10}$
A-2	の数を max にする (最大5個)	$\delta_{63}=\delta_{66}=\delta_{6,15}=\delta_{6,11}=\delta_{6,12}=0$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$
A-3	$\max_{j=4,5} \delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4) \rightarrow \min$ (準 min max)	$\delta_{63}=\delta_{66}=\delta_{6,15}=\delta_{6,11}=0$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{9}$
A-4	$\sqrt{\sum_{j=1}^{15} \{\delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4)\}^2/15} \rightarrow \min$ (最小二乗)	$\delta_{63}=\delta_{66}=\delta_{6,15}=0$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{27}{50}$
A-5	$\delta_{6j}(\alpha_3, \alpha_4)$ の Lotkin 和 $\rightarrow \min$ (Lotkin 和最小)	なし	0	$\frac{29}{50}$	$\frac{14}{25}$

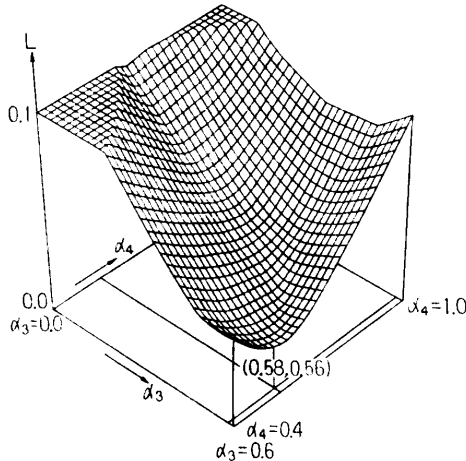


図 3.5 $z=L(\alpha_3, \alpha_4)$, L は Lotkin 和
Fig. 3.5 $z=$ Lotkin's function $L(\alpha_3, \alpha_4)$.

可変なパラメタ α_2 の決め方として

1) $j=1(1)15$ で $\delta_{6j}=0$ となる個数を max にする。

2) $Q = \sqrt{\sum_{j=1}^{15} \delta_{6j}^2(\alpha_2)/15}$ を min にする。

3) $\delta_{6j}(\alpha_2)$ の Lotkin 和を min にする。

そこで、さきほどの $\delta_{6j}(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ の式⁵⁾に $\alpha_4=1$ とし、さらに B-1 型では $\alpha_3=2/5$, B-2 型では $\alpha_3=(15\alpha_2-6)/(40\alpha_2-15)$ を代入して $\delta_{6j}(\alpha_2)$ の式⁵⁾を求め (式は省略), α_2 を横軸にして図示すると図 3.6, 図 3.7 となる。

B-1 型では、図 3.6 で示すように $\alpha_2=1/3$ と決めると $\delta_{64}=\delta_{67}=\delta_{6,11}=\delta_{6,12}=0$ となり、しかも Q も min になるし、Lotkin 和も min になる。

B-2 型では図 3.7 で示されるように Q と Lotkin 和は $\alpha_2=1/4$ 付近で min となる。このようにして B 型公式群が表 3.2 に分類される。

表 3.2 B 型公式の分類

Table 3.2 Classification of type B formulas.

B 型	極限で 5 次の公式とするための条件		可変なパラメタ α_2 の決定方針	結 果 値 α_2 の値
	α_4	α_3		
B-1	1	$\begin{cases} f_{34}=0 \\ \alpha_4=1 \\ \alpha_3=2/5 \end{cases}$ から	$\delta_{6j}=0$ となる j の個数を最大にする	図 3.6 から $\alpha_2=1/3$
B-2	1	$\begin{cases} \theta_{76}=0 \\ \alpha_4=1 \\ \alpha_3=15\alpha_2-6 / 40\alpha_2-15 \end{cases}$ から	$\sum_{j=1}^{15} \delta_{6j}^2$ を最小にする	図 3.7 から $\alpha_2=1/4$

3.3 公式の評価

A 型公式群と B 型公式群ともに打ち切り誤差は $O(h^6)$ の項が主要項となる。ここで得られた公式を評価するのに次の三種類の尺度を用いる。

Hull¹⁰⁾ による $\sqrt{\sum_{j=1}^{15} \delta_{6j}^2/15}$ と $\sum_{j=1}^{15} |\delta_{6j}|$

および Ralston⁹⁾, 田中^{2),3)}による Lotkin 和である。この結果 min-max 法で $\alpha_3=1/2, \alpha_4=5/9$ と決定した A-3 型公式がどの尺度で見てもよい。B-1 型公式は B-2 型公式 (田中^{2),3)} の公式の極限に相当する)よりは少しよい。この様子を表 3.5 に示す。

なお A 型, B 型の公式の係数の一覧を表 3.3 と 6 次のオーダの誤差項をみつめる δ_{6j} の一覧を表 3.4 に与える。

4. 数 値 例

前章までに導いた 5 段 5 次の極限公式 A 型と B 型を他の著名な 5 次の公式と比較するため、各論文の数値例で使用されているものを表 4.1 に示す。 x_0 と x_n における打ち切り誤差の数値実験の結果を表 4.2 である。これを図示したのが図 4.1 である。ここで、Fehlberg⁸⁾

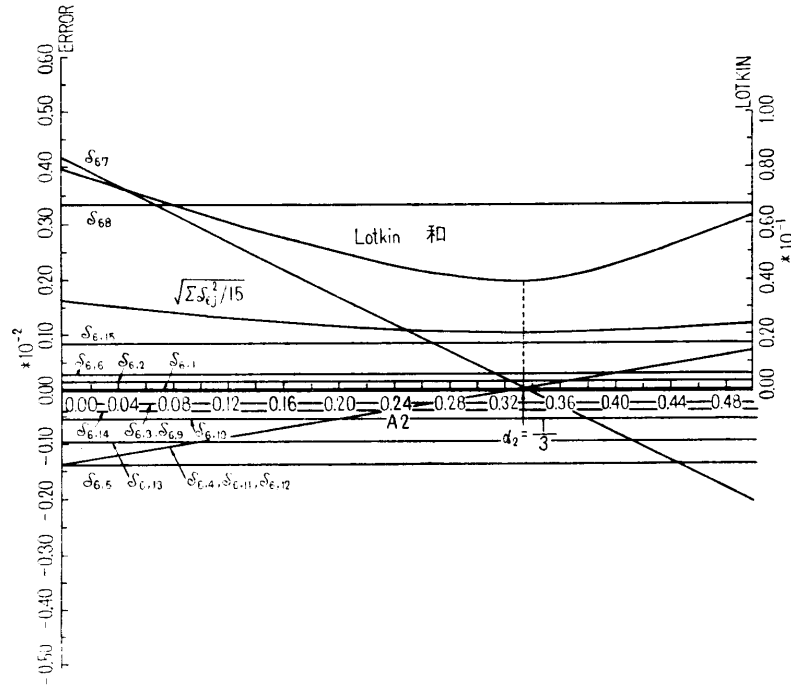


図 3.6 $\delta_{6,j}(\alpha_1=1, \alpha_2=2/5)$ の値を min にする α_2
 Fig. 3.6 α_2 minimizing the value $\delta_{6,j}(\alpha_1=1, \alpha_2=2/5)$.

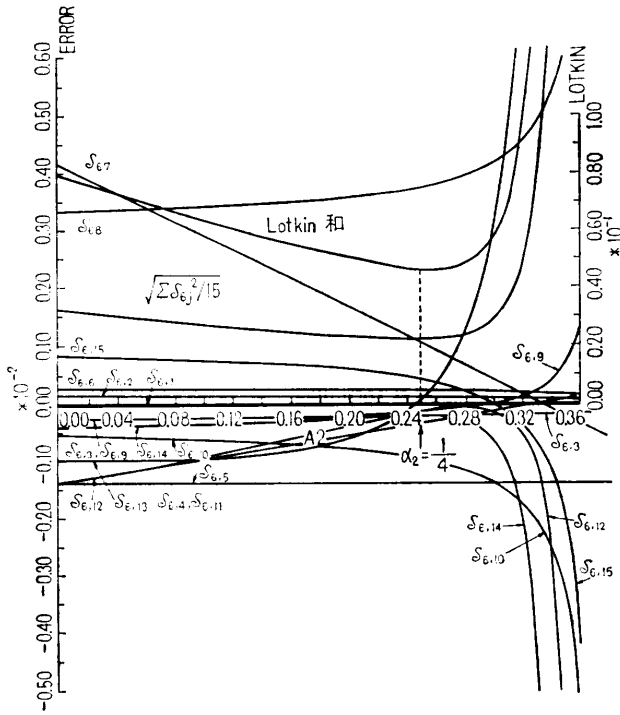


図 3.7 $\sqrt{\sum_j \delta_{6,j}^2} (\alpha_1=1, \alpha_2=\frac{15\alpha_2-6}{40\alpha_2-15}) / 15$ を min にする α_2
 Fig. 3.7 α_2 that minimized the value of $\sqrt{\sum_j \delta_{6,j}^2} (\alpha_1=1, \alpha_2=\frac{15\alpha_2-6}{40\alpha_2-15}) / 15$.

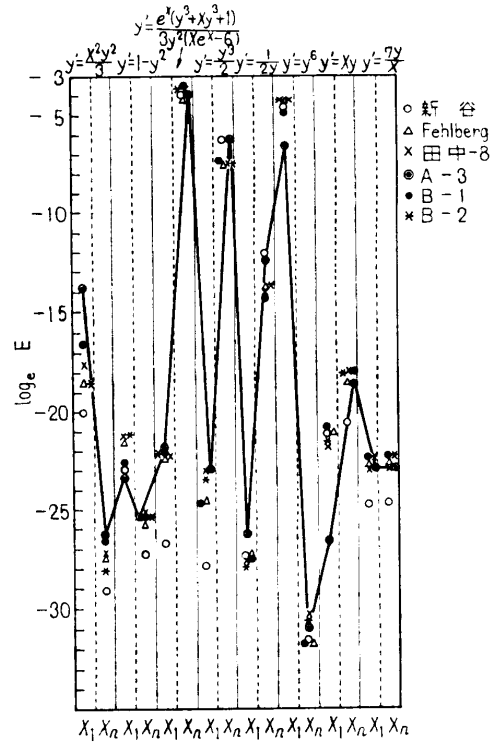


図 4.1 表 4.2 の図示
 Fig. 4.1 Graphical representation of Table 4.2.

表 3.3 A型公式とB型公式の係数一覧表

Table 3.3 Parameters of both type A and type B formulas.

パラメタ	A型					B型	
	A-1	A-2	A-3	A-4	A-5	B-1	B-2
	$\delta_{sj}=0$ が max		準 min max	$\sum \delta_{sj}^2$ が min		$\delta_{sj}=0$ が max	$\sum \delta_{sj}^2$ が min
α_1	$\frac{5-\sqrt{5}}{10}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{29}{50}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$
c_{31}	$\frac{5-\sqrt{5}}{10}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{29}{50}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{9}{20}$
c_{32}	$\frac{3-\sqrt{5}}{20}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{841}{5000}$	$\frac{4}{25}$	$-\frac{3}{100}$
α_4	$\frac{5+\sqrt{5}}{10}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{5}{9}$	$\frac{27}{50}$	$\frac{14}{25}$	$\frac{6}{25}$	$\frac{12}{25}$
c_{41}	$\frac{-5-3\sqrt{5}}{10}$	$\frac{2}{27}$	$\frac{305}{729}$	$\frac{13959}{31250}$	$\frac{15694}{21025}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{7}{5}$
c_{42}	$\frac{-3-\sqrt{5}}{20}$	$-\frac{2}{27}$	$\frac{125}{1458}$	$\frac{12393}{125000}$	$\frac{4802}{18125}$	-3	$-\frac{63}{20}$
β_{43}	$\frac{5+2\sqrt{5}}{5}$	$\frac{16}{27}$	$\frac{100}{729}$	$\frac{1458}{15625}$	$-\frac{784}{4205}$	$\frac{15}{4}$	$\frac{11}{4}$
c_{51}	$1+2\sqrt{5}$	$\frac{17}{28}$	$\frac{359}{775}$	$\frac{3064}{6561}$	$\frac{573877}{8218252}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{182}{15}$
c_{52}	$\frac{\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1}{7}$	$\frac{7}{310}$	$\frac{7}{486}$	$-\frac{827}{10121}$	27	$\frac{154}{5}$
β_{53}	$\frac{-5-3\sqrt{5}}{2}$	$-\frac{4}{7}$	$-\frac{100}{31}$	$-\frac{89}{18}$	$\frac{892500}{293509}$	$-\frac{55}{2}$	$-\frac{62}{3}$
β_{54}	$\frac{5-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{27}{28}$	$\frac{2916}{775}$	$\frac{71875}{13122}$	$-\frac{20625}{9772}$	-1	-1
μ_{12}	$\frac{1}{12}$	$\frac{67}{240}$	$\frac{233}{750}$	$\frac{692}{2187}$	$\frac{590263}{1978032}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{9}$
$\bar{\mu}_1$	0	$\frac{1}{40}$	$\frac{3}{100}$	$\frac{5}{162}$	$\frac{137}{4872}$	0	$\frac{4}{27}$
μ_3	$\frac{5}{12}$	$\frac{4}{15}$	$-\frac{8}{15}$	-1	$\frac{62500}{52983}$	$\frac{125}{216}$	$\frac{500}{1089}$
μ_4	$\frac{5}{12}$	$\frac{27}{80}$	$\frac{2187}{2000}$	$\frac{78125}{50301}$	$-\frac{15625}{25872}$	$\frac{8}{27}$	$\frac{920}{3267}$
μ_5	$\frac{1}{12}$	$\frac{7}{60}$	$\frac{31}{240}$	$\frac{3}{23}$	$\frac{349}{2772}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{5}{198}$

表 3.5 A型公式とB型公式の評価

Table 3.5 Evaluation of both type A and type B formulas.

公式	(m=6) 5次 Fehlberg	(m=5) 4.5次 田中	(m=5) 極限 5次						
			A型公式 $\alpha_1=0$					B型公式 $\alpha_1=1$	
			A-1	A-2	A-3	A-4	A-5	B-1	B-2
			$\alpha_4 = \frac{5-\sqrt{5}}{10}$	$\alpha_3 = \frac{1}{2}$	$\alpha_2 = \frac{1}{2}$	$\alpha_1 = \frac{1}{2}$	$\alpha_5 = \frac{29}{50}$	$\alpha_2 = \frac{1}{3}$	$\alpha_3 = \frac{1}{4}$
$\alpha_4 = \frac{5+\sqrt{5}}{10}$	$\alpha_4 = \frac{2}{3}$	$\alpha_4 = \frac{5}{9}$	$\alpha_4 = \frac{27}{50}$	$\alpha_4 = \frac{14}{25}$	$\alpha_3 = \frac{2}{5}$	$\alpha_3 = \frac{9}{20}$			
$\delta_{sj}=0$ の個数	0	0	5	5	4	3	0	4	0
$\sqrt{\sum \delta_{sj}^2}/15$.8648 ₁₀ -3	.1150 ₁₀ -2	.8869 ₁₀ -3	.7531 ₁₀ -3	.5924 ₁₀ -3	.5878 ₁₀ -3	.6760 ₁₀ -3	.1014 ₁₀ -2	.1115 ₁₀ -2
$\sum \delta_{sj} $.8269 ₁₀ -2	.9648 ₁₀ -2	.8696 ₁₀ -2	.7315 ₁₀ -2	.6049 ₁₀ -2	.5969 ₁₀ -2	.7748 ₁₀ -2	.8500 ₁₀ -2	.9406 ₁₀ -2
Lotkin 和	.3469 ₁₀ -1	.4657 ₁₀ -1	.5158 ₁₀ -1	.2690 ₁₀ -1	.3031 ₁₀ -1	.3118 ₁₀ -1	.2492 ₁₀ -1	.3922 ₁₀ -1	.4553 ₁₀ -1

◎は A-3 型の極限公式が、他の次の公式と比較しても一番よいことを表す。
B-2 型の公式は、田中の公式の極限公式に相当する。

表 3.4 A型公式とB型公式の δ_i の値
Table 3.4 Values of δ_i of both type A and type B formulas.

公式 6次の 誤差	A-1	A-2	A-3	A-4	A-5	B-1	B-2
		$\alpha_1 = \frac{5-\sqrt{5}}{10}$ $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$	$\alpha_1 = \frac{1}{2}$ $\alpha_2 = \frac{2}{3}$	$\alpha_1 = \frac{1}{2}$ $\alpha_2 = \frac{5}{9}$	$\alpha_1 = \frac{1}{2}$ $\alpha_2 = \frac{27}{50}$	$\alpha_1 = \frac{29}{50}$ $\alpha_2 = \frac{14}{25}$	$\alpha_1 = \frac{1}{3}$ $\alpha_2 = \frac{2}{5}$
$\delta_{6,1}$	0	$\frac{1}{43200} = .231_{10} - 4$	$\frac{1}{32400} = .309_{10} - 4$	$\frac{23}{720000} = .319_{10} - 4$	$\frac{51}{1800000} = .283_{10} - 4$	$\frac{1}{36000} = -.278_{10} - 4$	$-\frac{13}{576000} = -.226_{10} - 4$
$\delta_{6,2}$	0	$-\frac{1}{8640} = -.116_{10} - 3$	$-\frac{1}{6480} = -.154_{10} - 3$	$-\frac{23}{14400} = -.160_{10} - 3$	$-\frac{51}{360000} = -.142_{10} - 3$	$\frac{1}{7200} = .139_{10} - 3$	$\frac{13}{115200} = .113_{10} - 3$
$\delta_{6,3}$	$\frac{\sqrt{5}}{3600} = -.621_{10} - 3$	0	0	0	$\frac{1}{4500} = .222_{10} - 3$	$-\frac{1}{3600} = -.278_{10} - 3$	$-\frac{13}{57600} = -.226_{10} - 3$
$\delta_{6,4}$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	0	$-\frac{1}{2880} = -.347_{10} - 3$
$\delta_{6,5}$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$	$\frac{1}{720} = .139_{10} - 2$	$-\frac{1}{720} = -.139_{10} - 2$
$\delta_{6,6}$	$\frac{\sqrt{5}}{3600} = .621_{10} - 3$	0	0	0	$-\frac{1}{4500} = -.222_{10} - 3$	$\frac{1}{3600} = .278_{10} - 3$	$\frac{13}{57600} = .226_{10} - 3$
$\delta_{6,7}$	$\frac{\sqrt{5}}{1200} = .186_{10} - 2$	$\frac{1}{720} = .139_{10} - 2$	$\frac{1}{2160} = .463_{10} - 3$	$\frac{1}{3000} = .333_{10} - 3$	$\frac{1}{2000} = .5_{10} - 3$	0	$\frac{1}{960} = .104_{10} - 2$
$\delta_{6,8}$	0	$\frac{1}{720} = .139_{10} - 2$	$\frac{1}{2160} = .463_{10} - 3$	$\frac{1}{3000} = .333_{10} - 3$	$\frac{7}{6000} = .117_{10} - 2$	$\frac{1}{300} = .333_{10} - 2$	$\frac{3}{800} = .375_{10} - 2$
$\delta_{6,9}$	0	$\frac{1}{1320} = .231_{10} - 3$	$\frac{1}{3240} = .309_{10} - 3$	$\frac{23}{72000} = .319_{10} - 3$	$\frac{51}{180000} = .283_{10} - 3$	$-\frac{1}{3600} = -.278_{10} - 3$	$-\frac{1}{7200} = -.139_{10} - 3$
$\delta_{6,10}$	$\frac{5-3\sqrt{5}}{7200} = -.237_{10} - 3$	$-\frac{1}{1440} = -.694_{10} - 3$	$-\frac{1}{2160} = -.463_{10} - 3$	$-\frac{31}{72000} = -.431_{10} - 3$	$-\frac{73}{180000} = -.406_{10} - 3$	$-\frac{1}{1800} = -.556_{10} - 3$	$-\frac{7}{7200} = -.972_{10} - 3$
$\delta_{6,11}$	$\frac{5-3\sqrt{5}}{7200} = -.237_{10} - 3$	0	$\frac{1}{2160} = .463_{10} - 3$	$\frac{19}{36000} = .528_{10} - 3$	$\frac{1}{2250} = .444_{10} - 3$	0	$-\frac{1}{2880} = -.347_{10} - 3$
$\delta_{6,12}$	$\frac{5-3\sqrt{5}}{7200} = -.237_{10} - 3$	0	$\frac{1}{2160} = .463_{10} - 3$	$\frac{19}{36000} = .528_{10} - 3$	$\frac{1}{2250} = .444_{10} - 3$	0	$-\frac{1}{7200} = -.139_{10} - 3$
$\delta_{6,13}$	$\frac{5-3\sqrt{5}}{7200} = -.237_{10} - 3$	$-\frac{1}{2880} = -.347_{10} - 3$	0	$\frac{7}{144000} = .486_{10} - 4$	$\frac{7}{360000} = .194_{10} - 4$	$-\frac{7}{7200} = -.972_{10} - 3$	$\frac{1}{14400} = .694_{10} - 4$
$\delta_{6,14}$	0	$-\frac{1}{2880} = -.347_{10} - 3$	$\frac{1}{2160} = .463_{10} - 3$	$\frac{23}{48000} = .479_{10} - 3$	$\frac{17}{40000} = .425_{10} - 3$	$-\frac{1}{2400} = -.417_{10} - 3$	$-\frac{1}{4800} = -.208_{10} - 3$
$\delta_{6,15}$	$\frac{\sqrt{5}}{1200} = .186_{10} - 2$	0	0	0	$-\frac{1}{1500} = -.667_{10} - 3$	$\frac{1}{1200} = .833_{10} - 3$	$\frac{1}{2400} = .417_{10} - 3$

表 4.1 例題のリスト

Table 4.1 List of examples.

論文	例	$y' = f(x, y), y(x_0) = y_0$	解 $y(x)$	刻み巾 h	x_0	x_n
田中 [1]	1	$y' = -x^2 y^2 / 3, y(2) = 1$	$\frac{9}{1+x^3}$	0.1	2.0	7.0
Ralston [7] 田中 [1]	2	$y' = 1 - y^2, y(0) = 0$	$\tanh x$	0.1	0.0	5.0
Ralston [7] 田中 [1]	3	$y' = -\frac{e^x(y^2 + xy^2 + 1)}{3y^2(xe^x - 6)}, y(0) = 1$	$\left(\frac{e^x + 5}{6 - xe^x}\right)^{1/3}$	0.1	0.0	1.4
清水 [1]	4	$y' = y^3 / 2, y(0) = 1$	$\frac{1}{\sqrt{1-x}}$	0.05	0.0	0.95
清水 [11]	5	$y' = -\frac{1}{2y}, y(0) = 1$	$\sqrt{1-x}$	0.05	0.0	0.95
清水 [11]	6	$y' = y^4, y(0) = -2$	$\frac{-2}{(160x+1)^{1/5}}$	0.01	0.0	0.50
清水 [11]	7	$y' = -xy, y(0) = 1$	$\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$	0.1	0.0	3.0
	8	$y' = \frac{7y}{x}, y(1) = 1$	x^7	0.01	1.00	1.10

の公式は6段5次法であり, 新谷⁹⁾の公式は $f(x, y)$ の計算を1回, $Df(x, y)$ の計算を3回用いる5次の公式である.

また田中²⁾の公式は $O(h^5)$ の打ち切り誤差の項 δ_{55} と δ_{56}, δ_{58} が少し残っているが, $O(h^6)$ の打ち切り誤差と誤差同志の打ち消し合いが起きて, かって我々の極限公式よりよい結果を与えることもあり, そうでないこともある.

このような場合個々の問題の $f(x, y)$ により誤差項の符号によって誤差同志の打ち消し合い等があるので, 少数の例題で評価するのは困難である.

したがって公式の評価は, 問題の性質 $f(x, y)$ によらない6次のオーダの誤差項 $\delta_{6j}, j=1(1)15$ を用いた尺度で大局的におさえる表3.3がよいことになる.

5. 結 論

田中^{2), 3)}は, 一般的な Runge-Kutta 系5段公式で, 係数を最適化して実質的5次の公式を作成した. 著者はこの公式の極限を考えて5次の極限公式を導くのに数式処理システム MACSYMA 等を活用して数式的

処理で公式を求める努力をした. その結果,

1) 極限の公式はA型とB-1型, B-2型に分類できて, 田中(1972)の公式は実はB-2型に属している.

2) $O(h^6)$ の局所打ち切り誤差の諸項を種々な立場で出来るだけ小さくするような係数の最適化を行い, A型で5種類を求め, この中でA-3型がRalston⁹⁾, 田中²⁾が用いたLotkin尺度でも, Hull¹⁰⁾が用いた二種の尺度でも, どれから見ても一番よく, またA型の方がB型よりよいことが分かる.

謝辞 森口繁一教授(電通大), 伊理正夫教授(東大)から数式処理システムを活用する問題として本研究を示唆されご指導を頂いた. 新谷尚義教授(広島大), 田中正次教授(山梨大)には, 質問に対してご教示を頂いた. また報告をまとめるにあたって小野令美さんに大へんお世話になった. ここに厚く感謝する.

この研究を進めるのに必要な数式処理システムMACSYMAが日本で使用できるようになったのはMITのMoses J. 教授のご好意によるもので, 深く感謝する.

表 4.2 $x_1 = x_0 + h, x_n = x_{n-1} + h$ における局所打切り誤差
Table 4.2 One step truncation errors at $x_1 = x_0 + h$ and $x_n = x_{n-1} + h$.

例 題	公 式	新 谷	Fehlberg	田 中	A 型 公 式 $\alpha_4=0$					B 型 公 式 $\alpha_4=1$		
					A-1	A-2	A-3	A-4	A-5	B-1	B-2	
1	$y' = \frac{x^2 y^2}{3}$	$-.198_{10}^{-8}$ $-.220_{10}^{-12}$	$-.903_{10}^{-8}$ $-.118_{10}^{-11}$	$.220_{10}^{-7}$ $-.139_{10}^{-11}$	$-.746_{10}^{-7}$ $-.336_{10}^{-11}$	$-.841_{10}^{-7}$ $-.346_{10}^{-11}$	$-.897_{10}^{-7}$ $-.381_{10}^{-11}$	$-.907_{10}^{-7}$ $-.386_{10}^{-11}$	$-.910_{10}^{-7}$ $-.377_{10}^{-11}$	$-.618_{10}^{-7}$ $-.273_{10}^{-11}$	$.817_{10}^{-8}$ $-.622_{10}^{-12}$	$\alpha_3 = \frac{1}{4}$ $\alpha_5 = \frac{9}{20}$
2	$y' = 1 - y^2$	$-.101_{10}^{-9}$ $.141_{10}^{-11}$	$-.440_{10}^{-9}$ $.617_{10}^{-11}$	$-.538_{10}^{-9}$ $.114_{10}^{-10}$	$-.940_{10}^{-9}$ $.958_{10}^{-11}$	$-.745_{10}^{-9}$ $.958_{10}^{-11}$	$-.693_{10}^{-10}$ $.958_{10}^{-11}$	$.339_{10}^{-11}$ $.958_{10}^{-11}$	$.250_{10}^{-9}$ $.958_{10}^{-11}$	$-.157_{10}^{-9}$ $.958_{10}^{-11}$	$-.622_{10}^{-9}$ $.958_{10}^{-11}$	$\alpha_3 = \frac{1}{3}$ $\alpha_5 = \frac{2}{5}$
3	$y' = \frac{e^x(y^2 + xy^2 + 1)}{-3y^4(xe^x - 6)}$	$.264_{10}^{-11}$ $-.189_{10}^{-1}$	$-.206_{10}^{-9}$ $-.146_{10}^{-1}$	$-.215_{10}^{-9}$ $-.220_{10}^{-1}$	$.668_{10}^{-11}$ $.836_{10}^{-2}$	$.221_{10}^{-9}$ $.136_{10}^{-1}$	$.324_{10}^{-9}$ $.180_{10}^{-1}$	$.339_{10}^{-9}$ $.185_{10}^{-1}$	$.291_{10}^{-9}$ $.159_{10}^{-1}$	$-.264_{10}^{-9}$ $-.260_{10}^{-1}$	$-.229_{10}^{-9}$ $-.240_{10}^{-1}$	$\alpha_3 = \frac{1}{2}$ $\alpha_5 = \frac{14}{25}$
4	$y' = \frac{y^2}{2}$	$.767_{10}^{-12}$ $-.184_{10}^{-2}$	$.214_{10}^{-10}$ $.574_{10}^{-3}$	$.932_{10}^{-10}$ $.554_{10}^{-3}$	$-.717_{10}^{-10}$ $-.113_{10}^{-2}$	$-.728_{10}^{-10}$ $-.128_{10}^{-2}$	$-.105_{10}^{-9}$ $-.181_{10}^{-2}$	$-.109_{10}^{-9}$ $-.187_{10}^{-2}$	$-.947_{10}^{-10}$ $-.198_{10}^{-2}$	$.192_{10}^{-10}$ $.582_{10}^{-3}$	$.647_{10}^{-10}$ $.573_{10}^{-3}$	$\alpha_3 = \frac{1}{2}$ $\alpha_5 = \frac{14}{25}$
5	$y' = \frac{1}{-2y}$	$-.124_{10}^{-11}$ $.502_{10}^{-5}$	$.146_{10}^{-11}$ $.996_{10}^{-6}$	$.106_{10}^{-11}$ $.793_{10}^{-6}$	$-.246_{10}^{-11}$ $-.375_{10}^{-5}$	$-.193_{10}^{-11}$ $-.236_{10}^{-5}$	$-.368_{10}^{-11}$ $-.415_{10}^{-5}$	$-.393_{10}^{-11}$ $-.441_{10}^{-5}$	$-.276_{10}^{-11}$ $-.278_{10}^{-5}$	$.114_{10}^{-11}$ $.620_{10}^{-6}$	$.741_{10}^{-12}$ $.111_{10}^{-5}$	$\alpha_3 = \frac{1}{2}$ $\alpha_5 = \frac{14}{25}$
6	$y' = y^6$	$-.951_{10}^{-2}$ $-.171_{10}^{-13}$	$-.146_{10}^{-1}$ $-.162_{10}^{-13}$	$-.131_{10}^{-1}$ $-.649_{10}^{-13}$	$.356_{10}^{-1}$ $.164_{10}^{-13}$	$.844_{10}^{-2}$ $.232_{10}^{-13}$	$.126_{10}^{-2}$ $.329_{10}^{-13}$	$.951_{10}^{-3}$ $.343_{10}^{-13}$	$-.638_{10}^{-2}$ $.276_{10}^{-13}$	$-.738_{10}^{-2}$ $-.149_{10}^{-13}$	$-.136_{10}^{-1}$ $-.443_{10}^{-13}$	$\alpha_3 = \frac{1}{2}$ $\alpha_5 = \frac{14}{25}$
7	$y' = -xy$	$.705_{10}^{-9}$ $-.114_{10}^{-8}$	$-.676_{10}^{-9}$ $-.940_{10}^{-8}$	$-.299_{10}^{-9}$ $.159_{10}^{-7}$	$-.187_{10}^{-8}$ $-.762_{10}^{-8}$	$.176_{10}^{-11}$ $-.932_{10}^{-8}$	$-.287_{10}^{-11}$ $-.866_{10}^{-8}$	$-.352_{10}^{-11}$ $-.857_{10}^{-8}$	$.668_{10}^{-9}$ $-.941_{10}^{-8}$	$-.826_{10}^{-9}$ $-.147_{10}^{-7}$	$-.405_{10}^{-9}$ $-.141_{10}^{-7}$	$\alpha_3 = \frac{1}{2}$ $\alpha_5 = \frac{14}{25}$
8	$y' = \frac{7y}{x}$	$-.170_{10}^{-10}$ $-.185_{10}^{-10}$	$-.126_{10}^{-9}$ $-.138_{10}^{-9}$	$-.106_{10}^{-9}$ $-.107_{10}^{-9}$	$-.965_{10}^{-10}$ $-.105_{10}^{-9}$	$-.115_{10}^{-9}$ $-.125_{10}^{-9}$	$-.105_{10}^{-9}$ $-.115_{10}^{-9}$	$-.103_{10}^{-9}$ $-.113_{10}^{-9}$	$-.113_{10}^{-9}$ $-.123_{10}^{-9}$	$-.189_{10}^{-9}$ $-.207_{10}^{-9}$	$-.182_{10}^{-9}$ $-.199_{10}^{-9}$	$\alpha_3 = \frac{1}{2}$ $\alpha_5 = \frac{14}{25}$

参 考 文 献

- 1) 田中正次: 5個の関数値を使用する Runge-Kutta 公式について, 情報処理, Vol. 7, No. 4, pp. 181-189 (1966).
- 2) 田中正次: Runge-Kutta 法の打切り誤差に関する研究, 東京大学に提出した論文 (1972).
- 3) 田中正次: Runge-Kutta 法の打切り誤差の評価について, 情報処理, Vol. 17, No. 12, pp. 1143-1151 (1976).
- 4) 田中正次: 5段数 Runge-Kutta 法について, 情報処理, Vol. 20, No. 5, pp. 382-391 (1979).
- 5) 戸田英雄: Runge-Kutta 系のある極限公式の打切り誤差についての研究, 東京大学に提出した論文, 電総研研究報告第 772 号 (1977).
- 6) Shintani, H.: On one-step methods utilizing the second derivative, Hiroshima Math. J. 1, pp. 349-372 (1971).
- 7) Shintani, H.: On explicit one-step methods utilizing the second derivative, Hiroshima Math. J. 2, pp. 353-368 (1972).
- 8) Waldvogel, J.: Numerical integration package used the Runge-Kutta method with the Fehlberg coefficients (NASA TR R-287) (1971).
- 9) Ralston, A.: Runge-Kutta methods with minimum error bounds, Math. Comp., 16, pp. 431-437 (1962).
- 10) Hull, T. E. and Johnston, R. L.: Optimum Runge-Kutta methods, Math. Comp., 18, pp. 306-310 (1964).
- 11) Butcher, J. C.: On the attainable order of Runge-Kutta methods, Math. Comp., 19, pp. 408-417 (1965).
- 12) Lotkin, M.: On the accuracy of Runge-Kutta's methods, MTAC, 5, pp. 128-132 (1951).
- 13) 清水辰次郎: 常微分方程式の数値解法における数学的諸問題, 第7回プログラミング・シンポジウム報告集 (1966).
- 14) Bogen, R. A., MACSYMA Reference Manual Version 6, 7, MIT (1974).
- 15) 森 正武: 曲線と曲面 計算機による作図と追跡 シリーズ新しい応用の数学, 教育出版社 (1974).
- 16) 小野令美: 78-03 森 正武氏の透視図のプログラムから斜景図のプログラムへの改良, 情報処理, Vol. 19, No. 1, pp. 576-578 (1978).
- 17) Runge, C.: Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen, Math. Ann. 46, pp. 167-178 (1895).
- 18) Kutta, W.: Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen. Z. Math. Phys. 46, pp. 435-453 (1901).
- 19) Henn, K.: Neue Methode zur approximativen Integration der Differentialgleichungen einer unabhängigen Veränderlichen. Z. Math. Physik, 45, pp. 23-38 (1900).

(昭和 54 年 12 月 25 日 受付)

(昭和 55 年 4 月 22 日 採録)