

5 段数陽的 Runge-Kutta 法について†

田中正次** 寺川秀樹** 山下 茂**

常微分方程式の初期値問題

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (1)$$

が与えられたとき、公式

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^5 \mu_i k_i \quad (2)$$

$$k_i = h_n f \left(x_n + \alpha_i h_n, y_n + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{ij} k_j \right)$$

$$h_n = x_{n+1} - x_n, \quad \alpha_i = \beta_{i0} = 0 \quad (i=1, 2, 3, 4, 5)$$

により、 x_n における数値解 y_n から x_{n+1} における数値解 y_{n+1} を求める方法を、5 段数陽的 Runge-Kutta 法という。ここで、 y, y', f は十分滑らかな関数からなるベクトル、 y_0 は初期値ベクトルであり、また $\alpha_i, \beta_{ij}, \mu_i$ は定数である。(2)式の係数パラメータが、条件

$$\alpha_i \geq 0, \quad \beta_{ij} \geq 0 \quad (i=1, 2, 3, 4, 5, i > j), \quad \alpha_i \leq \alpha_j \quad (i < j)$$

を満足するとき、この公式は単調（一松が定義を与えた）であるという。

この研究は、誤差評価能力をもつ Runge-Kutta 法などで近年その実用的な意義が広く認識されるようになったが、次数の観点からは興味が乏しく研究者たちに顧みられなかった 5 段数公式を、正面から取り上げたものである。

著者は、A. Ralston, T. E. Hull らによって用いられた打ち切り精度判定基準を使い、多変数関数の条件付最適化の手法などを駆使して、単調で有理係数をもち、しかも打ち切り精度が最良に近い公式を導いた。著者による公式は、4 段数の唯一の単調公式である古典的な Runge-Kutta 法に対応する 5 段数公式で、桁落ちなどに対してよい性質をもち、係数が比較的簡単で精度もよく、無理のない自然な公式である。

1. ま え が き

5 段数の陽的 Runge-Kutta 法に関する研究は、Runge-Kutta 法の歴史と共に古く、最初、Runge-Kutta 法の創始者の一人に数えられている W. Kutta によって取り上げられた¹⁾。彼は、5 段数公式が 5 次法であるために係数が満足しなければならない条件式群を導いたが、この問題にさらに立ち入ることを避けて、6 段数 5 次法の誘導に向った。

厳密な意味で 5 段数の 5 次法を得ることの不可能性は、1960 年代になって、F. Ceschino と J. Kuntzmann (1963) および J. C. Butcher (1964) によって相継いで証明された^{2), 3)}。しかしその後 E. B. Shanks (1966) と田中 (1966) は、係数を適当に選ぶことにより、この方法を実質的に 5 次法にすることが可能であることを発見した^{4), 5)}。ついで田中は、この命題が連立微分方程式についても成立することを確めた。

5 段数公式は、R. H. Merson (1957), F. Ceschino (1962), R. E. Scraton (1965) および田中 (1976) らに

よって、3 次または 4 次の Runge-Kutta 公式に打ち切り誤差評価の能力を与える目的に使用された⁶⁾⁻⁹⁾。しかし、この方法自身に関する研究は、上述の精度に関するもの、F. Ceschino と J. Kuntzmann²⁾ によるものを除いてほとんど見当たらない。これはおそらく、4 次法はより少ない段数で可能であるし、一方 5 次法の不可能性も知られているので、5 段数公式は次数の観点からは魅力の乏しい対象として映るからであろう。しかし立場を変えれば、次数ではなく段数について実用的な公式を考えることも可能ではなからうか。このような発想に基づいて、著者は、先に実用的な 5 段数公式として実質的に 5 次の精度をもち、同時に丸めや誤差伝播についても比較的よい特性を有する公式を提案した⁹⁾。

一松教授は、Runge-Kutta 法に単調性という概念を導入し、桁落ちの起る可能性の少ない 3, 4 次法について研究しているが、氏の着眼の鋭さには驚かされる¹⁰⁾。著者も同氏の研究に刺激されて、実用的な公式として単調な 5 段数公式を誘導した。以下その詳細について述べる。

2 章においては、まず単調公式が定義され、ついで、5 段数 4 次法の係数の間の条件式群とその解が示される。3 章においては、同法の打ち切り誤差とその判

† On Explicit 5 Stage Runge-Kutta Methods by MASATSUGU TANAKA, HIDEKI TERAKAWA, and SHIGERU YAMASHITA (Department of Computer Science Faculty of Engineering, Yamanashi University).

** 山梨大学工学部計算機科学科

定基準が述べられる。4 章においては、実用価値があると思われる 5 段数公式の探索がなされる。ここでは多変数関数の最適化の技法が用いられ、有理係数をもつ単調な、打ち切り精度が極めて最良に近い公式が導かれる。5 章においては数値例が示され、6 章においては結果の考察が述べられる。

2. 5 段数陽的 Runge-Kutta 法

2.1 q 段数陽的 Runge-Kutta 法と単調性

いま与えられている常微分方程式の初期値問題を

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (2.1.1)$$

とする。ここで、 y, y', f はそれぞれ m 次元関数ベクトル、 y_0 は m 次元ベクトルである。また、 $f(x, y)$ は十分滑らかで、必要な限りの次数の導関数および偏導関数が存在するものとする。 $h > 0$ を刻み幅、 $x_n = x_0 + nh (n=1, 2, \dots)$ 、 y_n を $y(x_n)$ に対応する m 次元の数値解ベクトルとすれば、 q 段数陽的 Runge-Kutta 法は次のように表すことができる。

$$\begin{cases} k_i = hf \left(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{ij} k_j \right) \\ \quad (\alpha_1 = \beta_{i0} = 0, i=1, 2, \dots, q) \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^q \mu_i k_i \end{cases} \quad (2.1.2)$$

ここで、 $\alpha_i, \beta_{ij}, \mu_i$ は公式を特徴づける定数で、(2.1.2) 式が可能な限り高い次数の公式になるように定められる。また、 k_i は m 次元ベクトルである。

(2.1.2) において、特にすべての i, j に対して

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \alpha_i, \beta_{ij} \geq 0 \quad (i > j) \\ \text{(ii)} \quad & \alpha_i \leq \alpha_j \quad (i < j) \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

が満足されるとき、公式 (2.1.2) は単調であるといわれる¹⁰⁾。(2.1.2) において $q=5$ の場合が、本論文で取り扱う 5 段数陽的 Runge-Kutta 法である。便宜上 (2.1.2) において $q=5$ とおいた公式を、(2.1.2)' として引用する。

2.2 5 段数 4 次法の係数が満足しなければならない条件式群とその解

(2.1.2)' が 4 次法であるために係数が満足しなければならない条件式群は、微分方程式 (2.1.1) が単一であるかまたは連立であるかに関係なく、次のように表わされる^{11), 5)}。

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^5 \mu_i = 1 & \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i = 1/2 \\ \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i^2 = 1/3 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mu_3 \alpha_2 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^4 \alpha_i \beta_{5i} \right) = 1/6 \\ \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i^3 = 1/4 \\ \mu_3 \alpha_2^2 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i^2 \beta_{4i} \right) + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^4 \alpha_i^2 \beta_{5i} \right) = 1/12 \\ \mu_4 \alpha_2 \beta_{32} \beta_{43} + \mu_5 \left\{ \alpha_2 \beta_{32} \beta_{53} + \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) \beta_{54} \right\} \\ = 1/24 \\ \mu_3 \alpha_2 \alpha_3 \beta_{32} + \mu_4 \alpha_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) + \mu_5 \alpha_5 \left(\sum_{i=2}^4 \alpha_i \beta_{5i} \right) \\ = 1/8 \\ \alpha_2 = \beta_{21} \\ \alpha_3 = \beta_{31} + \beta_{32} \\ \alpha_4 = \beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43} \\ \alpha_5 = \beta_{51} + \beta_{52} + \beta_{53} + \beta_{54} \end{cases} \quad (2.2.1)$$

条件式群 (2.2.1) を、次の各場合についていくつかの変数を自由パラメタとして解く。

- (i) $\alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5$ の場合
- (ii) $\alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4$ の場合
- (iii) $\alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5$ の場合
- (iv) $\alpha_2 = \alpha_3$ の場合
- (v) $\alpha_3 = \alpha_4$ の場合
- (vi) $\alpha_4 = \alpha_5$ の場合
- (vii) $\alpha_i \neq \alpha_j (i \neq j)$ の場合

自由パラメタのいくつかの値が一致する場合を取り上げたのは、4 次の単調な Runge-Kutta 法が古典的な Runge-Kutta 法のみであることや¹⁰⁾、高精度 5 段数公式に対する著者の経験に基づく。

以下上記の各場合について詳述する。

- (i) $\alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5$ の場合

(2.2.1) を満足する解は存在しない。

- (ii) $\alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4$ の場合

(2.2.1) を、5 変数 $\beta_{32}, \beta_{42}, \beta_{43}, \beta_{53}, \beta_{54}$ を自由パラメタとして解けば次の解が得られる。

$$\begin{aligned} \alpha_2 = 1/2, \quad \alpha_5 = 1, \quad \mu_5 = 1/6 \\ \mu_1 = 1/6, \quad \beta_{52} = 1 - (\beta_{53} + \beta_{54}) \\ \mu_4 = [1 - 2\{\beta_{32}\beta_{53} + (\beta_{42} + \beta_{43})\beta_{54}\}] / (12\beta_{32}\beta_{43}) \\ \mu_3 = \{1 - 6\mu_4(\beta_{42} + \beta_{43})\} / (6\beta_{32}) \\ \mu_2 = \frac{2}{3} - (\mu_3 + \mu_4) \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

ただし、 $\beta_{32}\beta_{43} \neq 0$ とする。

- (iii) $\alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5$ の場合

(2.2.1) を満足する解は存在しない。

(iv) $\alpha_2 = \alpha_3$ の場合

(2.2.1) を, 6 変数 $\alpha_2, \alpha_4, \alpha_5, \beta_{32}, \beta_{42}, \beta_{43}$ を自由パラメタとして解けば次の解が得られる.

$$\begin{aligned}\mu_1 &= [12\alpha_2\alpha_4\alpha_5 - \{6(\alpha_2\alpha_4 + \alpha_2\alpha_5 + \alpha_4\alpha_5) \\ &\quad - 4(\alpha_2 + \alpha_4 + \alpha_5) + 3\}] / (12\alpha_2\alpha_4\alpha_5) \\ \mu_4 &= \{-6\alpha_2\alpha_5 + 4(\alpha_2 + \alpha_5) \\ &\quad - 3\} / \{12\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)(\alpha_5 - \alpha_4)\} \\ \mu_5 &= \{6\alpha_2\alpha_4 - 4(\alpha_2 + \alpha_4) \\ &\quad + 3\} / \{12\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_4)(\alpha_5 - \alpha_2)\} \\ \mu_3 &= \{(4\alpha_5 - 3) - 24\mu_4\alpha_2(\beta_{42} + \beta_{43})(\alpha_5 - \alpha_4)\} \\ &\quad / \{24\alpha_2\beta_{32}(\alpha_5 - \alpha_2)\} \quad (2.2.4) \\ \mu_2 &= \{6\alpha_4\alpha_5 - 4(\alpha_4 + \alpha_5) \\ &\quad + 3\} / \{12\alpha_2(\alpha_5 - \alpha_2)(\alpha_4 - \alpha_2)\} - \mu_3 \\ \beta_{53} &= [1 - 24\alpha_2\{\mu_4\beta_{32}\beta_{43} \\ &\quad + \mu_5\beta_{54}(\beta_{42} + \beta_{43})\}] / (24\mu_5\alpha_2\beta_{32}) \\ \beta_{52} &= [1 - 6\alpha_2\{\mu_3\beta_{32} + \mu_4(\beta_{42} + \beta_{43}) + \mu_5\beta_{53}\} \\ &\quad - 6\mu_5\alpha_2\beta_{54}] / (6\mu_5\alpha_2)\end{aligned}$$

ただし, $\mu_5\beta_{32}\alpha_2\alpha_4\alpha_5 \neq 0, \alpha_2 \neq \alpha_4, \alpha_2 \neq \alpha_5, \alpha_4 \neq \alpha_5$ とする.

(v) $\alpha_3 = \alpha_4$ の場合

(2.2.1) を, 6 変数 $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_5, \beta_{43}, \beta_{53}, \beta_{54}$ を自由パラメタとして解けば次の解が得られる.

$$\begin{aligned}\mu_1 &= [12\alpha_2\alpha_3\alpha_5 - \{6(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_2\alpha_5 + \alpha_3\alpha_5) \\ &\quad - 4(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_5) + 3\}] / (12\alpha_2\alpha_3\alpha_5) \\ \mu_2 &= \{6\alpha_3\alpha_5 - 4(\alpha_3 + \alpha_5) \\ &\quad + 3\} / \{12\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2)(\alpha_5 - \alpha_2)\} \\ \mu_5 &= \{6\alpha_2\alpha_3 - 4(\alpha_2 + \alpha_3) \\ &\quad + 3\} / \{12\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_3)(\alpha_5 - \alpha_2)\} \\ \mu_4 &= \{1 - 2\alpha_2 - 12\mu_5\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)(\beta_{53} \\ &\quad + \beta_{54})\} / \{12\alpha_3\beta_{43}(\alpha_3 - \alpha_2)\} \\ \mu_3 &= \{-6\alpha_2\alpha_5 + 4(\alpha_2 + \alpha_5) \\ &\quad - 3\} / \{12\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)(\alpha_5 - \alpha_3)\} - \mu_4 \quad (2.2.5) \\ \beta_{52} &= \{3 - 4\alpha_3 - 24\mu_5\alpha_3(\beta_{53} + \beta_{54})(\alpha_5 - \alpha_3)\} \\ &\quad / \{24\mu_5\alpha_2(\alpha_5 - \alpha_3)\} \\ \beta_{42} &= [24\alpha_2(\mu_4\beta_{43} + \mu_5\beta_{53}) \\ &\quad - 192\alpha_2\mu_5(\alpha_2\beta_{52} + \alpha_3\beta_{53} + \alpha_4\beta_{54}) \\ &\quad \times \alpha_5(\mu_4\beta_{43} + \mu_5\beta_{53}) - 8\mu_3\alpha_2\alpha_3 \\ &\quad - 192\alpha_2\alpha_3\{\mu_4(\mu_4\beta_{43} + \mu_5\beta_{53}) \\ &\quad \times \alpha_3\beta_{43} - \mu_3\mu_5\alpha_3\beta_{43}\beta_{54}\}] / \{192\alpha_2^2\alpha_3(\mu_4^2\beta_{43} \\ &\quad + \mu_4\mu_5\beta_{53} - \mu_3\mu_5\beta_{54})\} \\ \beta_{32} &= [1 - 8\mu_4\alpha_3(\alpha_2\beta_{42} + \alpha_3\beta_{43}) \\ &\quad - 8\mu_5\alpha_5(\alpha_2\beta_{52} + \alpha_3\beta_{53} + \alpha_4\beta_{54})] / (8\mu_3\alpha_2\alpha_3)\end{aligned}$$

ただし, $\mu_3\mu_5\alpha_2\alpha_3\alpha_5\beta_{43} \neq 0, \alpha_2 \neq \alpha_3, \alpha_2 \neq \alpha_5, \alpha_3 \neq \alpha_5,$
 $\mu_4^2\beta_{43} + \mu_4\mu_5\beta_{53} - \mu_3\mu_5\beta_{54} \neq 0$

とする.

(vi) $\alpha_4 = \alpha_5$ の場合

(2.2.1) を, 6 変数 $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_5, \beta_{43}, \beta_{53}, \beta_{54}$ を自由パラメタとして解けば次の解が得られる.

$$\begin{aligned}\mu_1 &= [12\alpha_2\alpha_3\alpha_5 - \{6(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_2\alpha_5 + \alpha_3\alpha_5) \\ &\quad - 4(\alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_5) + 3\}] / (12\alpha_2\alpha_3\alpha_5) \\ \mu_2 &= \{6\alpha_3\alpha_5 - 4(\alpha_3 + \alpha_5) \\ &\quad + 3\} / \{12\alpha_2(\alpha_5 - \alpha_2)(\alpha_3 - \alpha_2)\} \\ \mu_3 &= \{-6\alpha_2\alpha_5 + 4(\alpha_2 + \alpha_5) \\ &\quad - 3\} / \{12\alpha_3(\alpha_5 - \alpha_3)(\alpha_3 - \alpha_2)\} \\ \mu_5 &= [\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_2)(\alpha_5 - \alpha_3)(2\alpha_2 - 1) \\ &\quad + \alpha_3\beta_{43}(\alpha_3 - \alpha_2)\{6\alpha_2\alpha_3 \\ &\quad - 4(\alpha_2 + \alpha_3) + 3\}] / \{12\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_2)(\alpha_5 - \alpha_3) \\ &\quad \times \{\alpha_3\beta_{43}(\alpha_3 - \alpha_2) - \alpha_3\beta_{53}(\alpha_3 - \alpha_2) \\ &\quad - \alpha_5\beta_{54}(\alpha_5 - \alpha_2)\}\} \\ \mu_4 &= \{6\alpha_2\alpha_3 - 4(\alpha_2 + \alpha_3) \\ &\quad + 3\} / \{12\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_2)(\alpha_5 - \alpha_3)\} - \mu_5 \quad (2.2.6) \\ \beta_{32} &= (4\alpha_5 - 3) / \{24\mu_3\alpha_2(\alpha_5 - \alpha_3)\} \\ \beta_{42} &= \{1 - 24\mu_4\alpha_2\beta_{32}\beta_{43} \\ &\quad - 24\mu_5(\alpha_2\beta_{32}\beta_{53} + \alpha_3\beta_{43}\beta_{54})\} / (24\mu_5\alpha_2\beta_{54}) \\ \beta_{52} &= [1 - 6\{\mu_3\alpha_2\beta_{32} + \mu_4(\alpha_2\beta_{42} + \alpha_3\beta_{43}) \\ &\quad + \mu_5(\alpha_3\beta_{53} + \alpha_5\beta_{54})\}] / (6\mu_5\alpha_2)\end{aligned}$$

ただし, $\mu_3\mu_5\alpha_2\alpha_3\alpha_5\beta_{54} \neq 0, \alpha_2 \neq \alpha_3, \alpha_2 \neq \alpha_5, \alpha_3 \neq \alpha_5,$
 $\alpha_3\beta_{43}(\alpha_3 - \alpha_2) - \alpha_3\beta_{53}(\alpha_3 - \alpha_2) - \alpha_5\beta_{54}(\alpha_5 - \alpha_2) \neq 0$

とする.

(vii) $\alpha_i \neq \alpha_j (i \neq j)$ の場合

(2.2.1) を, 7 変数 $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \beta_{43}, \beta_{53}, \beta_{54}$ を自由パラメタとして解けば次の解が得られる.

$$\begin{aligned}\mu_5 &= [\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)(\alpha_4 - \alpha_3)(1 - 2\alpha_2) \\ &\quad - \alpha_3\beta_{43}\{3 - 4(\alpha_2 + \alpha_3) \\ &\quad + 6\alpha_2\alpha_3\}] / \{12[\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)(\alpha_4 - \alpha_3) \\ &\quad \times \{\alpha_3\beta_{53}(\alpha_3 - \alpha_2) + \alpha_4\beta_{54}(\alpha_4 - \alpha_2)\} \\ &\quad - \alpha_3\beta_{43}(\alpha_3 - \alpha_2)\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_2)(\alpha_5 - \alpha_3)]\} \\ \mu_4 &= [\{3 - 4(\alpha_2 + \alpha_3) + 6\alpha_2\alpha_3\} \\ &\quad - 12\mu_5\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_2)(\alpha_5 - \alpha_3)] \\ &\quad / \{12\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)(\alpha_4 - \alpha_3)\} \quad (2.2.7) \\ \mu_3 &= [2 - 3\alpha_2 - 6\{\mu_4\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2) \\ &\quad + \mu_5\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_2)\}] / \{6\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)\} \\ \mu_2 &= \{1 - 2(\mu_3\alpha_3 + \mu_4\alpha_4 + \mu_5\alpha_5)\} / (2\alpha_2) \\ \mu_1 &= 1 - (\mu_2 + \mu_3 + \mu_4 + \mu_5) \\ \beta_{32} &= [\mu_4\alpha_2(\alpha_5 - \alpha_4)(1 - 24\mu_5\alpha_3\beta_{43}\beta_{54}) \\ &\quad - \mu_5\beta_{54}(2\alpha_5 - 3\alpha_2) \\ &\quad - 24[\mu_4\alpha_3\beta_{43}(\alpha_3\alpha_5 - \alpha_2\alpha_4)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \mu_5 \alpha_5 \{ \alpha_3 \beta_{53} (\alpha_3 - \alpha_2) + \alpha_4 \beta_{54} \\
 & \times (\alpha_4 - \alpha_2) \}] / [24 \alpha_2^2 \{ \mu_4 (\alpha_5 - \alpha_4) (\mu_4 \beta_{43} \\
 & + \mu_5 \beta_{53}) - \mu_3 \mu_5 \beta_{54} (\alpha_5 - \alpha_3) \}] \\
 \beta_{42} = & [1 - 24 \{ \mu_4 \alpha_2 \beta_{32} \beta_{43} \\
 & + \mu_5 (\alpha_2 \beta_{32} \beta_{53} + \alpha_3 \beta_{43} \beta_{54}) \}] / (24 \mu_5 \alpha_2 \beta_{54}) \\
 \beta_{52} = & [1 - 8 \{ \mu_3 \alpha_2 \alpha_3 \beta_{32} + \mu_4 \alpha_4 (\alpha_2 \beta_{42} + \alpha_3 \beta_{43}) \\
 & + \mu_5 \alpha_5 (\alpha_3 \beta_{53} + \alpha_4 \beta_{54}) \}] / (8 \mu_5 \alpha_2 \alpha_5)
 \end{aligned}$$

ただし、各解の分母は 0 ではないものとする。

3. 打切り誤差とその判定基準

3.1 5 段数 4 次法の打切り誤差

5 段数 4 次法 (2.1.2)' の局所打切り誤差を T とすれば、 T は次のように表される。

$$T = \gamma_4 h^5 + \gamma_5 h^6 + O(h^7) \tag{3.1.1}$$

(2.1.2)' が単一の微分方程式に対する公式の場合、 γ_4, γ_5 はそれぞれ次のように表される¹²⁾。

$$\begin{aligned}
 \gamma_4 = & a_{4,1} D^4 f + a_{4,2} D^2 f_v D f + a_{4,3} D f_v D^2 f \\
 & + a_{4,4} f_v^2 D^2 f + a_{4,5} f_{vv} (D f)^2 \\
 & + a_{4,6} f_v D^3 f + a_{4,7} f_v D f_v D f \\
 & + a_{4,8} f_v^3 D f
 \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

$$\begin{aligned}
 \gamma_5 = & a_{5,1} D^5 f + a_{5,2} f_v D^4 f + a_{5,3} f_v^2 D^3 f \\
 & + a_{5,4} f_v^3 D^2 f + a_{5,5} f_v^4 D f + a_{5,6} D^3 f D f_v \\
 & + a_{5,7} f_v D^2 f D f_v + a_{5,8} f_v^2 D f D f_v \\
 & + a_{5,9} D^3 f_v D f + a_{5,10} f_v D^2 f_v D f \\
 & + a_{5,11} D^2 f_v D^2 f + a_{5,12} f_{vv} D^2 f D f \\
 & + a_{5,13} f_v f_{vv} (D f)^2 + a_{5,14} D f_{vv} (D f)^2 \\
 & + a_{5,15} (D f_v)^2 D f
 \end{aligned} \tag{3.1.3}$$

ここで、 $D = \frac{\partial}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial y}$ である。 $a_{4,i}, a_{5,j}$ ($i=1, 2, \dots, 8, j=1, 2, \dots, 15$) は公式を特徴づけるパラメタのみの関数で、その具体的な表現は、たとえば文献 13) などを参照することによって知られる。

また、(2.1.2)' が連立微分方程式系に対する公式である場合、 γ_4, γ_5 はそれぞれ次のように表される。

$$\begin{aligned}
 \gamma_4 = & b_{4,1} \{f\} + b_{4,2} \{\{f\} f^2\} + b_{4,3} \{\{f^2\} f\} \\
 & + b_{4,4} \{3f^2\}_3 + b_{4,5} \{\{f\}^2\} + b_{4,6} \{2f^3\}_2 \\
 & + b_{4,7} \{\{2f\} 2f\} + b_{4,8} \{2\{f\} f\}_2 \\
 & + b_{4,9} \{4f\}_4
 \end{aligned} \tag{3.1.4}$$

$$\begin{aligned}
 \gamma_5 = & b_{5,1} \{f^3\} + b_{5,2} \{2f^4\}_2 + b_{5,3} \{3f^3\}_3 \\
 & + b_{5,4} \{4f^2\}_4 + b_{5,5} \{5f\}_5 + b_{5,6} \{\{f^3\} f\} \\
 & + b_{5,7} \{\{2f^2\} 2f\} + b_{5,8} \{2\{f^2\} f\}_2 \\
 & + b_{5,9} \{\{3f\} 3f\} + b_{5,10} \{2\{2f\} 2f\}_2 \\
 & + b_{5,11} \{3\{f\} f\}_3 + b_{5,12} \{\{f\} f^3\} \\
 & + b_{5,13} \{\{f 2\} 2f^2\} + b_{5,14} \{2\{f\} f^2\}_2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + b_{5,15} \{\{f^2\} f^2\} + b_{5,16} \{\{f^2\} \{f\}\} \\
 & + b_{5,17} \{\{2f\} 2\{f\}\} + b_{5,18} \{2\{f^2\} 2\} \\
 & + b_{5,19} \{\{f\}^2 f\} + b_{5,20} \{\{\{f\} f\} f\}
 \end{aligned} \tag{3.1.5}$$

ここで、 $b_{4,i}, b_{5,j}$ ($i=1, 2, \dots, 9, j=1, 2, \dots, 20$) は、やはり公式を特徴づけるパラメタのみの関数で、J. C. Butcher の論文¹¹⁾を参照することによって求めることができる。また、 $b_{4,i}, b_{5,j}$ の係数は、微分方程式 (2.1.1) の右辺の関数 f に依存する部分で、以下にその記法の定義を簡単に示しておく。(詳細は文献 11) を参照せよ。)

y および $f(y)$ を m 次元関数ベクトルとすると、 f の s 階基本微分および次数 r を次のように再帰的に定義する。

- (1) f は次数 1 の 0 階基本微分である。
- (2) F_1, F_2, \dots, F_s をそれぞれ次数 r_1, r_2, \dots, r_s の s 階基本微分とすると、

$$\begin{aligned}
 & \{F_1 F_2 \dots F_s\} \\
 & = \sum_{j_1=1}^m \sum_{j_2=1}^m \dots \sum_{j_s=1}^m \frac{\partial^s f}{\partial y_{j_1} \partial y_{j_2} \dots \partial y_{j_s}} \\
 & \quad \times F_{1j_1} F_{2j_2} \dots F_{sj_s}
 \end{aligned} \tag{3.1.6}$$

は次数 $1 + \sum_{j=1}^s r_j$ の s 階基本微分である。ただし、 F_{ij} は、 F_i の第 j 成分である。

このように定義すれば、たとえば y のテイラー展開

$$y = y_0 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{h^i}{i!} D^{i-1} f \tag{3.1.7}$$

における $D^{r-1} f$ ($r=2, 3, \dots$) の各々は、

$$\begin{aligned}
 D f & = \{f\} \\
 D^2 f & = \{2f\}_2 + \{f^2\} \\
 D^3 f & = \{3f\}_3 + 3\{\{f\} f\} + \{2f^2\}_2 + \{f^3\} \\
 & \dots
 \end{aligned} \tag{3.1.8}$$

と書ける。ただし、記法を簡潔にするために

$$f^k = \underbrace{f f \dots f}_{k \text{ 個}}, \{ \underbrace{\dots}_{k \text{ 個}}, \}_{k \text{ 個}} \dots \tag{3.1.9}$$

とおく。先の $b_{4,i}, b_{5,j}$ の係数は、(2.1.1) を

$$\begin{aligned}
 & y_1 = x, \quad f_1(y_1, y_2, \dots, y_m) = 1 \\
 & y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}, \quad f(y) = \begin{pmatrix} f_1(y_1, y_2, \dots, y_m) \\ f_2(y_1, y_2, \dots, y_m) \\ \dots \\ f_n(y_1, y_2, \dots, y_m) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

とおき、 $y' = f(y)$ と書きなおしてから、 γ_4, γ_5 を計算して得られたものである。

3.2 打ち切り精度判定基準

与えられた微分方程式 (2.1.1) が単一の方程式である場合, γ_i の上界を求めるために M. Lotkin¹⁴⁾ にならって次のように仮定する. (x_n, y_n) の近傍で, L, M を適当な正数とすると,

$$|f(x, y)| \leq M, \quad \left| \frac{\partial^{i+j} f}{\partial x^i \partial y^j} \right| \leq \frac{L^{i+j}}{M^{j-1}}, \quad i+j \leq 5 \quad (3.2.1)$$

が成り立つものとする. そのとき

$$\begin{aligned} |\gamma_4| &\leq A_{41} M L^4 \\ |\gamma_5| &\leq A_{51} M L^5 \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

と表すことができる.

ここで,

$$\begin{aligned} A_{41} = &16|a_{4,1}| + 4|a_{4,2}| + |a_{4,2} + 3a_{4,3}| \\ &+ |2a_{4,2} + 3a_{4,3}| + |a_{4,2} + a_{4,3}| + |a_{4,3}| \\ &+ 8|a_{4,4}| + |a_{4,5}| + |2a_{4,5} + a_{4,7}| \\ &+ |a_{4,5} + a_{4,6} + a_{4,7}| + |a_{4,6}| \\ &+ |2a_{4,6} + a_{4,7}| + |a_{4,7}| + 2|a_{4,8}| \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

$$\begin{aligned} A_{51} = &32|a_{5,1}| + |4a_{5,2} + a_{5,9}| + |6a_{5,2} + 3a_{5,9}| \\ &+ |4a_{5,2} + 3a_{5,9}| + |a_{5,2} + a_{5,9}| + |a_{5,2}| \\ &+ |a_{5,3}| + |3a_{5,3} + a_{5,10}| + |3a_{5,3} + 2a_{5,10}| \\ &+ |a_{5,14}| + |a_{5,3} + a_{5,10} + a_{5,14}| + |a_{5,4}| \\ &+ |2a_{5,4} + a_{5,8}| + |a_{5,4} + a_{5,8} + a_{5,13}| \\ &+ 2|a_{5,5}| + |3a_{5,6} + 2a_{5,11}| + |3a_{5,6} \\ &+ 4a_{5,11}| + |a_{5,6} + 2a_{5,11}| + 2|a_{5,6}| \\ &+ |3a_{5,6} + 2a_{5,11}| + |a_{5,6} + a_{5,11}| \\ &+ |3a_{5,6} + a_{5,11}| + |a_{5,7}| + |a_{5,7} + a_{5,12}| \\ &+ |2a_{5,7} + a_{5,15}| + |3a_{5,7} + 2a_{5,12} + 2a_{5,15}| \\ &+ |a_{5,7} + a_{5,12} + a_{5,15}| + |a_{5,8} + 2a_{5,13}| \\ &+ |a_{5,8}| + 8|a_{5,9}| + |a_{5,10}| \\ &+ |2a_{5,10} + 2a_{5,14}| + |a_{5,10} + 2a_{5,14}| \\ &+ 4|a_{5,11}| + |2a_{5,12} + 2a_{5,15}| + |a_{5,12}| \\ &+ |a_{5,12} + a_{5,15}| + |a_{5,13}| + 2|a_{5,14}| \\ &+ |a_{5,15}| \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

である.

本論では, 上記の A_{i1} ($i=4,5$) と次に示す A_{i2} , A_{i3} ($i=4,5$) を, 公式(2.1.2)'の打ち切り精度判定基準として使用する.

$$A_{42} = \sum_{i=1}^8 |a_{4,i}| \quad (3.2.5)$$

$$A_{43} = \sum_{i=1}^8 a_{4,i}^2 \quad (3.2.6)$$

$$A_{52} = \sum_{i=1}^{15} |a_{5,i}| \quad (3.2.7)$$

$$A_{53} = \sum_{i=1}^{15} a_{5,i}^2 \quad (3.2.8)$$

これらの判定基準は, Runge-Kutta 法の打ち切り精度をかなり正確に反映するので, A. Ralston¹⁵⁾, T. E. Hull¹⁶⁾ と R. L. Jhonston, 田中⁹⁾ らによって, 打ち切り精度の計量に使用されている.

与えられた微分方程式 (2.1.1) が連立微分方程式の場合には, 公式の打ち切り精度判定基準として, 単一の方程式に対するそれと同様な意味合いをもつ, 次の諸量を使用する.

$$A_{42s} = \sum_{i=1}^9 |b_{4,i}| \quad (3.2.9)$$

$$A_{43s} = \sum_{i=1}^9 b_{4,i}^2 \quad (3.2.10)$$

$$A_{52s} = \sum_{i=1}^{20} |b_{5,i}| \quad (3.2.11)$$

$$A_{53s} = \sum_{i=1}^{20} b_{5,i}^2 \quad (3.2.12)$$

4. 実用的な5段数公式

4.1 公式の誘導法

2.2 節の (ii), (iv), (v), (vi) および (vii) の各解系について, 各自由パラメタを 0.0 から 1.0 の範囲において, 刻み幅 2^{-5} および 2^{-4} (解系 (vii) の場合のみ 2^{-4} とした.) で変動させる. そのとき, 各解系について自由パラメタの値を座標とする格子点が得られるが, それらの可能なすべての格子点に対応する公式の中で, 単調でしかも打ち切り精度最良な公式を選んだ. 打ち切り精度の判定には, 公式(2.1.2)'が単一の微分方程式を対象とするか, または連立微分方程式を対象とするかに従って, 式(3.2.3)~(3.2.8)または式(3.2.9)~(3.2.12)によって定義される量 A_{4i}, A_{5i} ($i=1,2,3$), A_{4js}, A_{5js} ($j=2,3$) を使用した. 一方これと併行して, 多変数関数の最適化手法の一つである complex 法を使用し, 条件式を満足する様々な解を出発点として, 前述の判定基準を用い, 打ち切り誤差の観点から単調公式の最適化を進めた. ついで, 最適解の周辺で係数が分数形をとる公式を導いた. complex 法のプログラムの作成に当っては, J. A. Richardson らによるサブルーチン¹⁷⁾を参考にした. なお, complex 法の詳細については, たとえば文献 18), 19) を参照されたい.

4.2 打ち切り精度が最良に近い単調公式

4.1 節の方法によって導かれた, 打ち切り精度が最

良に近い単調公式を次に示す. 公式は, 一般式 (2.1.2)' の次に示す表示法に準じて表示する.

$$\begin{array}{c|cccccc}
 \alpha_2 & \beta_{21} & & & & & \\
 \alpha_3 & \beta_{31} & \beta_{32} & & & & \\
 \alpha_4 & \beta_{41} & \beta_{42} & \beta_{43} & & & \\
 \alpha_5 & \beta_{51} & \beta_{52} & \beta_{53} & \beta_{54} & & \\
 \hline
 & \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 & \mu_4 & \mu_5 &
 \end{array} \quad (4.2.1)$$

なお, 各公式の上欄に最適化に用いられた判定基準が示される.

(1) 解系(ii) ($\alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4$) の場合

(イ) A_{41}, A_{42}, A_{43}

$$\begin{array}{c|cccccc}
 1/2 & 1/2 & & & & & \\
 1/2 & 1/4 & 1/4 & & & & \\
 1/2 & 1/10 & 0 & 1/5 & & & \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \\
 \hline
 & 1/6 & 1/10 & 2/5 & 1/6 & 1/6 &
 \end{array} \quad (4.2.2)$$

(ロ) A_{42}, A_{43}

$$\begin{array}{c|cccccc}
 1/2 & 1/2 & & & & & \\
 1/2 & 1/6 & 1/3 & & & & \\
 1/2 & 1/5 & 0 & 3/10 & & & \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \\
 \hline
 & 1/6 & 2/15 & 1/5 & 1/3 & 1/6 &
 \end{array} \quad (4.2.3)$$

(2) 解系(iv) ($\alpha_2 = \alpha_3$) の場合

(イ) A_{41} . 最適公式に近い係数簡単な公式

$$\begin{array}{c|cccccc}
 2/5 & 2/5 & & & & & \\
 2/5 & 3/20 & 1/4 & & & & \\
 7/10 & 0 & 0 & 7/10 & & & \\
 1 & 117/392 & 1/56 & 1/14 & 30/49 & & \\
 \hline
 & 1/7 & 5/36 & 35/108 & 50/189 & 7/54 &
 \end{array} \quad (4.2.4)$$

(ロ) A_{42}, A_{43}, A_{43} .

著者によって提案されているすべての公式中 A_{43} が最小なもの.

$$\begin{array}{c|cccccc}
 2/5 & 2/5 & & & & & \\
 2/5 & 1/10 & 3/10 & & & & \\
 7/10 & 1/20 & 0 & 13/20 & & & \\
 1 & 97/392 & 45/392 & 5/196 & 30/49 & & \\
 \hline
 & 1/7 & 775/4536 & 1325/4536 & 50/189 & 7/54 &
 \end{array} \quad (4.2.5)$$

(ハ) A_{41}, A_{42}

$$\begin{array}{c|cccccc}
 2/5 & 2/5 & & & & & \\
 2/5 & 4/35 & 2/7 & & & & \\
 7/10 & 1/30 & 0 & 2/3 & & & \\
 1 & 311/1176 & 235/2352 & 55/2352 & 30/49 & & \\
 \hline
 & 1/7 & 425/2592 & 5425/18144 & 50/189 & 7/54 &
 \end{array} \quad (4.2.6)$$

(3) 解系(v) ($\alpha_3 = \alpha_4$) の場合

(イ) A_{41}

$$\begin{array}{c|cccccc}
 1/3 & 1/3 & & & & & \\
 5/9 & 0 & 5/9 & & & & \\
 5/9 & 6/45 & 2/9 & 1/5 & & & \\
 1 & 67/420 & 1/840 & 1/8 & 5/7 & & \\
 \hline
 & 3/20 & 3/16 & 331/8960 & 841/1792 & 5/32 &
 \end{array} \quad (4.2.7)$$

(ロ) A_{42}

$$\begin{array}{c|cccccc}
 3/8 & 3/8 & & & & & \\
 9/16 & 0 & 9/16 & & & & \\
 9/16 & 11/64 & 3/64 & 11/32 & & & \\
 1 & 377/2112 & 85/2112 & 1/16 & 23/32 & & \\
 \hline
 & 25/162 & 32/135 & 139/594 & 2713/12474 & 11/70 &
 \end{array} \quad (4.2.8)$$

(ハ) A_{43}

$$\begin{array}{c|cccccc}
 3/8 & 3/8 & & & & & \\
 9/16 & 0 & 9/16 & & & & \\
 9/16 & 11/64 & 3/64 & 11/32 & & & \\
 1 & 377/2112 & 85/2112 & 3/32 & 11/16 & & \\
 \hline
 & 25/162 & 32/135 & 139/594 & 2713/12474 & 11/70 &
 \end{array} \quad (4.2.9)$$

(ニ) A_{42}

$$\begin{array}{c|cccccc}
 3/8 & 3/8 & & & & & \\
 9/16 & 0 & 9/16 & & & & \\
 9/16 & 3/16 & 0 & 3/8 & & & \\
 1 & 139/1056 & 191/1056 & 1/32 & 21/32 & & \\
 \hline
 & 25/162 & 32/135 & 7241/34020 & 8119/34020 & 11/70 &
 \end{array} \quad (4.2.10)$$

(ホ) A_{43}

著者によって提案されている公式中 A_{43} が最小なもの.

1/3	1/3				
5/9	0	5/9			
5/9	1/5	5/90	3/10		
1	3/20	1/40	1/40	4/5	
	3/20	3/16	119/640	41/128	5/32

(4. 2. 11)

(4) 解系(vii) ($\alpha_i \neq \alpha_j, i \neq j$) の場合

(イ) $A_{41}, A_{42}, A_{42s}, A_{43}$,

著者によって提案されているすべての公式中 A_{41}, A_{42} および A_{42s} が最小なもの。

1/4	1/4				
1/2	0	1/2			
5/8	13/112	9/112	3/7		
1	1783/6832	169/6832	0	5/7	
	46/387	740/3483	73/387	1184/3483	488/3483

(4. 2. 12)

(ロ) A_{43}

3/10	3/10				
1/2	1/12	5/12			
3/5	7/60	1/12	2/5		
1	43/192	5/192	0	3/4	
	25/178	50/267	52/267	175/534	40/267

(4. 2. 13)

公式(4. 2. 2)~公式(4. 2. 13)の打ち切り精度判定基準を表1および表2に示す。表1には、上記の公式を単一の微分方程式に対する解法と考えたときの打ち切り精度判定基準が、表2には、連立微分方程式に対する公式と考えたときのそれが示される。

表1 打ち切り精度判定基準(単一の微分方程式の場合)

Table 1 Criteria of the size of truncation error (a single differential equation).

公 式	A_{41}	A_{42}	A_{43}	A_{51}	A_{52}	A_{53}
4. 2. 2	0.508×10^{-1}	0.103×10^{-1}	0.203×10^{-4}	0.142×10^0	0.199×10^{-1}	0.463×10^{-4}
4. 2. 3	0.575×10^{-1}	0.145×10^{-1}	0.380×10^{-4}	0.123×10^0	0.188×10^{-1}	0.447×10^{-4}
4. 2. 4	0.228×10^{-1}	0.578×10^{-2}	0.838×10^{-8}	0.548×10^{-1}	0.129×10^{-1}	0.245×10^{-4}
4. 2. 5	0.229×10^{-1}	0.553×10^{-2}	0.809×10^{-8}	0.555×10^{-1}	0.128×10^{-1}	0.226×10^{-4}
4. 2. 6	0.233×10^{-1}	0.673×10^{-2}	0.113×10^{-4}	0.565×10^{-1}	0.142×10^{-1}	0.345×10^{-4}
4. 2. 7	0.309×10^{-1}	0.968×10^{-2}	0.233×10^{-4}	0.114×10^0	0.191×10^{-1}	0.754×10^{-4}
4. 2. 8	0.343×10^{-1}	0.653×10^{-2}	0.752×10^{-8}	0.770×10^{-1}	0.116×10^{-1}	0.129×10^{-4}
4. 2. 9	0.343×10^{-1}	0.679×10^{-2}	0.749×10^{-8}	0.726×10^{-1}	0.106×10^{-1}	0.119×10^{-4}
4. 2. 10	0.398×10^{-1}	0.825×10^{-2}	0.106×10^{-4}	0.788×10^{-1}	0.128×10^{-1}	0.152×10^{-4}
4. 2. 11	0.335×10^{-1}	0.802×10^{-2}	0.908×10^{-8}	0.789×10^{-1}	0.125×10^{-1}	0.163×10^{-4}
4. 2. 12	0.168×10^{-1}	0.544×10^{-2}	0.101×10^{-4}	0.613×10^{-1}	0.117×10^{-1}	0.327×10^{-4}
4. 2. 13	0.204×10^{-1}	0.598×10^{-2}	0.952×10^{-8}	0.640×10^{-1}	0.120×10^{-1}	0.297×10^{-4}
C-R-K	0.101×10^0	0.267×10^{-1}	0.141×10^{-3}	0.241×10^0	0.467×10^{-1}	0.407×10^{-3}
K-N				0.315×10^{-1}	0.733×10^{-2}	0.143×10^{-4}

表2 打ち切り精度判定基準(連立微分方程式の場合)

Table 2 Criteria of the size of truncation error (a system of differential equations).

公 式	A_{42s}	A_{43s}	A_{52s}	A_{53s}
4. 2. 2	0.186×10^{-1}	0.550×10^{-4}	0.303×10^{-1}	0.785×10^{-4}
4. 2. 3	0.145×10^{-1}	0.380×10^{-4}	0.255×10^{-1}	0.559×10^{-4}
4. 2. 4	0.975×10^{-2}	0.175×10^{-4}	0.166×10^{-1}	0.207×10^{-4}
4. 2. 5	0.981×10^{-2}	0.173×10^{-4}	0.167×10^{-1}	0.205×10^{-4}
4. 2. 6	0.101×10^{-1}	0.206×10^{-4}	0.176×10^{-1}	0.248×10^{-4}
4. 2. 7	0.109×10^{-1}	0.255×10^{-4}	0.218×10^{-1}	0.385×10^{-4}
4. 2. 8	0.940×10^{-2}	0.120×10^{-4}	0.166×10^{-1}	0.199×10^{-4}
4. 2. 9	0.966×10^{-2}	0.120×10^{-4}	0.161×10^{-1}	0.191×10^{-4}
4. 2. 10	0.840×10^{-2}	0.109×10^{-4}	0.153×10^{-1}	0.189×10^{-4}
4. 2. 11	0.887×10^{-2}	0.107×10^{-4}	0.156×10^{-1}	0.194×10^{-4}
4. 2. 12	0.791×10^{-2}	0.138×10^{-4}	0.152×10^{-1}	0.193×10^{-4}
4. 2. 13	0.926×10^{-2}	0.153×10^{-4}	0.171×10^{-1}	0.219×10^{-4}
C-R-K	0.350×10^{-1}	0.210×10^{-3}	0.536×10^{-1}	0.257×10^{-3}
K-N			0.218×10^{-1}	0.934×10^{-4}

5. 数 値 例

5.1 テスト公式

前節に示された公式(4. 2. 2)~(4. 2. 13), 古典的 Runge-Kutta 法(4 段数公式)¹⁰⁾および Kutta-Nystrom の5次法²⁰⁾(6 段数公式)が、六つの例題に対してテストされる。

5.2 テスト問題およびテスト方法

上記の諸公式が、次に示す6問題, 問題1~問題6によってテストされる。ここで問題1~問題3は単一の微分方程式, 問題4~問題6は連立微分方程式である。

テストは、各問題ごとに刻み幅0.1を用いて、併記してあるステップ数の数値解を求め、最初のステップの誤差 E_1 , 最終ステップの誤差 E_f , 最大誤差 E_m を求めることにより行われる。

問題 1 $y' = -\frac{1}{3}x^2y^2, y(2)=1$

50 ステップ

解 $y = \frac{9}{1+x^3}$

問題 2 $y' = 1-y^2, y(0)=0$

50 ステップ

解 $y = \tanh x$

問題 3 $y' = \{-e^x(y^3 + xy^3 + 1)\} / \{3y^2(xe^x - 6)\}$

$y(0)=1$

14 ステップ

解 $y = \{(e^x + 5)/(6 - xe^x)\}^{1/3}$

問題 4 $y_1' = y_2, y_2' = y_1$

$y_1(0)=1, y_2(0)=-1$

50 ステップ

解 $y_1 = e^{-x}, y_2 = -e^{-x}$

問題 5 $y_1' = y_2, y_2' = -y_1$

$y_1(0)=1, y_2(0)=1$

50 ステップ

解 $y_1 = \sin x, y_2 = \cos x$

問題 6 $y_1' = y_2, y_2' = -y_1 + 3\cos x$

$y_1(0)=1, y_2(0)=1$

40 ステップ

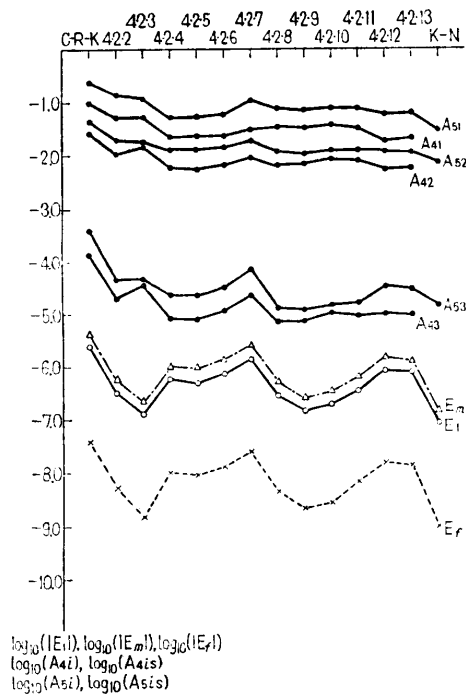


図 1 判定基準と問題 1 の解 y の誤差

Fig. 1 Criteria and errors in the solution y of problem 1.

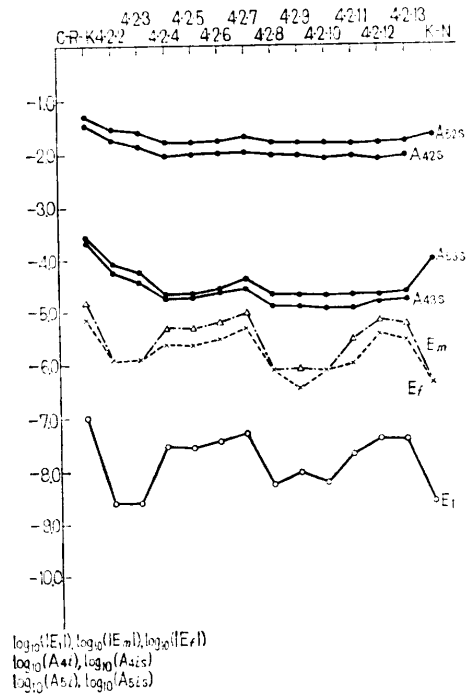


図 2 判定基準と問題 6 の解 y_1 の誤差

Fig. 2 Criteria and errors in the solution y_1 of problem 6.

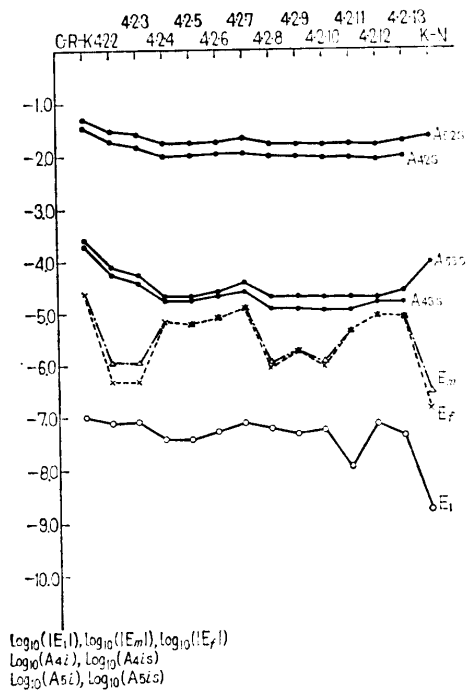


図 3 判定基準と問題 6 の解 y_2 の誤差

Fig. 3 Criteria and errors in the solution y_2 of problem 6.

$$\text{解 } y_1 = \cos x + \sin x + \frac{3}{2} x \sin x$$

$$y_2 = -\sin x + \cos x + \frac{3}{2} (x \cos x + \sin x)$$

三つの単一の微分方程式に対する結果は、いずれの場合もほぼ同様な傾向を示すので、ここでは、各公式の打ち切り精度判定基準 A_{ij} ($i=4, 5, j=1, 2, 3$) と、各公式による問題1の数値解の3種の誤差を、**図1**に示す。

連立微分方程式の場合についても、上と同様な理由から、各公式の打ち切り精度判定基準 A_{ij} ($i=4, 5, j=2, 3$) と、一数值例、すなわち問題6の各公式による数値解の3種の誤差のみを、**図2**と**図3**に示す。

図1、**図2**および**図3**は、横軸に上述の14公式を、縦軸に3種の誤差の絶対値および各種判定基準の常用対数をと、比較を容易にするために、同種の量を表す点を折れ線で結んだものである。

なお以上の例題計算は、FACOM 230-45Sを用いて倍精度で実行された。

6. 結果の考察

数値実験により単調な5段数陽的 Runge-Kutta 法の存在が知られたので、本論文においては、それぞれ単一および連立微分方程式を対象とする2種の公式について、単調でしかも打ち切り精度が最良に近い、有理係数をもつ公式を導いた。

表1、表2、**図1**～**図3**を含むすべての数値例の観察から次の結論を引き出すことができる。

(1) 得られた5段数公式は、ステップ当たりの関数計算回数にふさわしく、4段数4次法と6段数5次法の間精度をもつ。

(2) 得られた5段数公式について、概して、 h^5 の打ち切り誤差項の判定基準の大きいものは、 h^6 の対応する判定基準も大きく、また前者の小さいものは後者もまた小さい。

(3) 数値例の選び方にも問題があるかもしれないが、微分方程式が単一であるかまたは連立であるかを問わず、公式(4.2.2)、(4.2.3)、(4.2.8)、(4.2.9)および公式(4.2.10)の場合により精度が得られている。また、公式(4.2.7)は、いずれの場合についても最悪な結果を与える。

(4) 公式(4.2.2)および(4.2.3)は、係数が単純な点ですぐれている。また、0である係数の多いことも好ましい。

我々によって導かれた上述の諸公式は、4段数の古典的 Runge-Kutta 法と同様桁落ちの危険の少ない安定な公式であるが、そのような特性をもつ公式の中では、また、きわめて打ち切り精度の高いものである。特に上述の(4.2.2)、(4.2.3)、(4.2.8)～(4.2.10)は好ましい公式といえよう。これらの諸公式を実用的な5段数公式として提案したい。

終りに、この研究をまとめるに当たってご協力をいただいた、著者の研究室の学生飯田隆次、高橋昭両君に深く感謝する。この研究のある部分は、両君の協力によってはじめて可能であったことを付記する。

参 考 文 献

- 1) Kutta, W.: Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen, Z. Math. Phys., 46, pp. 435-453 (1901).
- 2) Ceschino, F. and Kuntzmann, J.: Numerical Solution of Initial Value Problems, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1966).
- 3) Butcher, J.C.: On Runge-Kutta processes of high order, J. Austral. Math. Soc., 4, pp. 179-194 (1964).
- 4) Shanks, E.B.: Solutions of differential equations by evaluations of functions, Math. Comp., 20, 21 (1966).
- 5) 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, 7, 4, pp. 181-189 (1966).
- 6) Merson, R.H.: An operational method for study of integration processes, Proceedings of Symposium on Data Processing, Weapons Research Establishment, Salisbury, South Australia (1957).
- 7) Ceschino, F.: Evaluation de L'erreur par pas les problèmes Differentiels, Chiffres, 5 (1962).
- 8) Scraton, R.E.: Estimation of the truncation error in Runge-Kutta and allied processes, Compt. J. 7, 3 (1965).
- 9) 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, 17, 12, pp. 1143-1151 (1976).
- 10) 一松 信: 微分方程式と解法, 教育出版, pp. 126-153 (1976).
- 11) Butcher, J.C.: Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes, J. Austral. Math. Soc., 3, pp. 185-201 (1963).
- 12) 田中正次: ルンゲクッタ法の打ち切り誤差に関する研究, 博士論文(東京大学) (1972).
- 13) Huřa, A.: Une amélioration de la methode de Runge-Kutta-Nyström pour la résolution numérique des équations differentials du pre-

- mier ordre, Acta Fac. Nat. Univ. Comenian Math., 1, pp. 201-224 (1956).
- 14) Lotkin, M.: On the accuracy of Runge-Kutta's method, M. T. A. C., 5, pp. 128-132 (1951).
- 15) Ralston, A.: Runge-Kutta methods with minimum error bound, Math. Comp. 17, pp. 431-437 (1962).
- 16) Hull, T. E. and Jhonston, R. L.: Optimum Runge-Kutta methods, Math. Comp., 18, pp. 306-310 (1964).
- 17) Richardson, J. A. and Kuester, J. L.: The complex method for constrained optimization, Commun. ACM., 16, pp. 487-489 (1973).
- 18) Box, M. J.: A new method of constrained optimization and a comparison with other methods, Comput. J., 3, pp. 45-52 (1965-1966).
- 19) Box, M. J., Davis, D., Swann, W. H., 黒田充訳: 非線形最適化の技法, 培風館 (1972).
- 20) Lapidus, L. and Seinfeld, J. H.: Numerical Solution of Ordinary Differential Equations, Academic Press (1971).

(昭和53年11月20日受付)

(昭和54年4月19日採録)