

論文

Runge-Kutta 法の特徴について*

田中正次** 荒川 忠** 山下 茂**

Abstract

In the Runge-Kutta method we have a variety of formulas. To examine their characteristics fully, we draw many counter line maps which show the relation between parameters of formula and its error criteria. We use as error criteria three measures of the size of truncation error, which were used by A. Ralston, T. E. Hull and others, and also a measure which show the characteristics of error propagation.

By the observation of their maps, we clearly see that the optimization of the above authors are proper, and what characteristics the well-known formulas have.

1. ま え が き

Runge-Kutta 法は、一般に各次数について係数決定の際若干の自由度をもっており、公式を特性化するパラメータの選択には無限の可能性^{1),2)}がある。この無限の可能性の中から特定の一組を選択するための有効な選定基準としては、まず打ち切り精度が考えられる。すなわちおびたしい公式群の中から、打ち切り精度の最も優れているものを選び出すわけである。

このテーマが、1950年代の後半から1970年代にかけての Runge-Kutta 法研究の一つの大きな流れを形成しており、2~4次法が、J. Kuntzmann³⁾, R. L. Jhonston^{4),6)}, A. Ralston⁵⁾, T. E. Hull⁶⁾, 及び R. King⁷⁾によって研究された。著者もまた、5段数の公式 (step 当たり5回の関数値を使用する公式) について同種の研究を試みた⁸⁾。なお、論文によれば、E. B. Shanks は、5以上の段数をもつ高次法の最適化について研究したと推測される⁹⁾。

上記の研究者たちの中で A. Ralston, T. E. Hull ら及び著者は、最適化に当たって公式を特性化するパラメータのみに依存する——初期値問題に無関係な——打ち切り精度判定基準を使用した。特に T. E. Hull ら

と著者は、多くの数値実験によりこの判定基準の有効性を検討した。

著者は、最近の進歩した computer graphics の技法を用いてこの分野の研究に再び照明を投げかけることは極めて有意義であるにちがいないと判断した。そして2~4次法の各次数の完全解を用い、自由パラメータの通常考えられる全変域についていろいろな打ち切り精度判定基準の等高線図を描いた。ついで著者は、Runge-Kutta 法の桁落ち等を含む誤差伝播特性をとらえるために、その性格が直観的にほぼ明らか、公式を特性化するパラメータのみの関数 R_{mj} を導入する。そして打ち切り精度の場合と同じ2~4次法について、同じ自由パラメータの同一変域に対して R_{mj} の等高線図を描いた。classical Runge-Kutta 法などの著名な公式をはじめ2~4次のすべての Runge-Kutta 法の両特性は、上記等高線図の観察により直観的に直ちに知られる。また最適化に関する多くの研究成果に誤りがなくどうかをも容易に確かめることができる。

以下2.において、打ち切り精度、及び誤差伝播特性の両判定基準を導入し、その有効性に関する数値実験結果について触れる。3.においては、2~4次の Runge-Kutta 法について、自由パラメータがある変域内を変動するとき、それに伴って各判定基準がどのように変動するかを等高線図法により示す。最後に、4.において、得られた図形の観察により在来の公式を

* On the characteristics of Runge-Kutta methods by Masatsugu TANAKA, Tadashi ARAKAWA 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

評価し、従来行われた最適化に関する研究が妥当なものであったかどうかを検討する。

2. 打ち切り精度及び誤差伝播特性判定基準^{5), 6)}

step 当たり m 回の関数値を使用する Runge-Kutta 法は、一般に

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

$$\alpha_1 = \beta_{10} = 0 \quad (i=1, 2, \dots, m)$$

$$h_n = x_{n+1} - x_n$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m \mu_i k_i \quad (n=0, 1, 2, \dots) \quad (2.1)$$

と表すことができる。ここで、パラメータ $\alpha_i, \beta_{ij}, \mu_i$ は、公式 (2.1) が可能な限り高い打ち切り精度をもつように定められる。本論文において取り扱う $m=2, 3$ 及び 4 の場合、上述の公式はそれぞれ 2 次、3 次及び 4 次法になる。

いま、おのおのの打ち切り誤差項の主項をそれぞれ $\gamma_2 h^3, \gamma_3 h^4$ 及び $\gamma_4 h^5$ とおけば、

$$\gamma_2 = a_{21} D^2 f + a_{22} f_y D f \quad (2.2)$$

$$\gamma_3 = a_{31} D^3 f + a_{32} f_y D^2 f + a_{33} D f D f_y + a_{34} f_y^2 D f \quad (2.3)$$

$$\gamma_4 = a_{41} D^4 f + a_{42} D^2 f_y D f + a_{43} D f_y D^2 f + a_{44} f_y^2 D^2 f + a_{45} f_{yy} (D f)^2 + a_{46} f_y D^3 f + a_{47} f_y D f_y D f + a_{48} f_y^3 D f \quad (2.4)$$

と書くことができる。ここで

$$D = \frac{\partial}{\partial x} + f(x_n, y_n) \frac{\partial}{\partial y}$$

$$a_{21} = 1/6 - \alpha_2^2 \mu_2 / 2$$

$$a_{22} = 1/6$$

$$a_{31} = 1/4! - 1/3! (\alpha_2^3 \mu_2 + \alpha_3^3 \mu_3)$$

$$a_{32} = 1/4! - 1/2! \alpha_2^2 \beta_{32} \mu_3$$

$$a_{33} = 3/4! - \alpha_2 \alpha_3 \beta_{32} \mu_3$$

$$a_{34} = 1/4!$$

$$a_{41} = 1/120 - 1/24 (\mu_2 \alpha_2^4 + \mu_3 \alpha_3^4 + \mu_4 \alpha_4^4)$$

$$a_{42} = 1/20 - 1/2 \{ \mu_3 \alpha_2 \alpha_3^2 \beta_{32} + \mu_4 \alpha_4^2 (\alpha_2 \beta_{42} + \alpha_3 \beta_{43}) \}$$

$$a_{43} = 1/30 - 1/2 \{ \mu_3 \beta_{32} \alpha_2^2 \alpha_3 + \mu_4 \alpha_4 (\beta_{42} \alpha_2^2 + \beta_{43} \alpha_3^2) \}$$

$$a_{44} = 1/120 - 1/2 \mu_4 \beta_{43} \beta_{32} \alpha_2^2$$

$$a_{45} = 1/40 - 1/2 \{ \mu_3 \beta_{32} \alpha_2^2 + \mu_4 (\beta_{43} \alpha_3 + \beta_{42} \alpha_2)^2 \}$$

$$a_{46} = 1/120 - 1/6 \{ \mu_3 \beta_{32} \alpha_2^3 + \mu_4 (\beta_{43} \alpha_3^3 + \beta_{42} \alpha_2^3) \}$$

$$a_{47} = 7/120 - \mu_4 \beta_{43} \beta_{32} \alpha_2 (\alpha_3 + \alpha_4)$$

$$a_{48} = 1/120 \quad (2.5)$$

である。

次に各次数の公式の打ち切り精度を判定するために 3 種類の基準を導入する。

定義 1 $A_{ij} (i=2, 3, 4, j=1, 2, 3)$ を次のように定義する。ここで i および j は、それぞれ公式の次数及び判定基準の種類を表す。

$$A_{21} = 4|a_{21}| + 2|a_{22}| \quad (2.6)$$

$$A_{22} = \sum_{i=1}^2 |a_{2i}| \quad (2.7)$$

$$A_{23} = \sum_{i=1}^2 a_{2i}^2 \quad (2.8)$$

$$A_{31} = 8|a_{31}| + 4|a_{32}| + 4|a_{33}| + |a_{34}| \quad (2.9)$$

$$A_{32} = \sum_{i=1}^4 |a_{3i}| \quad (2.10)$$

$$A_{33} = \sum_{i=1}^4 a_{3i}^2 \quad (2.11)$$

$$A_{41} = 16|a_{41}| + 4|a_{42}| + |a_{42} + 3a_{43}| + |2a_{42} + 3a_{43}| + |a_{42} + a_{43}| + |a_{43}| + 8|a_{44}| + |a_{45}| + |2a_{45} + a_{47}| + |a_{45} + a_{46} + a_{47}| + |a_{46}| + |2a_{46} + a_{47}| + |a_{47}| + 2|a_{48}| \quad (2.12)$$

$$A_{42} = \sum_{i=1}^8 |a_{4i}| \quad (2.13)$$

$$A_{43} = \sum_{i=1}^8 a_{4i}^2 \quad (2.14)$$

次に、桁落ち等を含む誤差伝播特性を判定するための基準を導入しよう。(2.1) において $m=4$ とおいた式について考える。いま、 $x=x_n$ における数値解及び理論解を、それぞれ \tilde{y}_n 及び $y(x_n)$ とする、そのとき $e_n = \tilde{y}_n - y(x_n)$ (2.15)

によって定義される \tilde{y}_n の誤差 e_n は、次のように表すことができる。すなわち、

$$\begin{aligned} e_{n+1} = & e_n [1 + h_n \{ \mu_1 f_y(x_n, \xi_1) + \mu_2 f_y(x_n + \alpha_2 h, \xi_2) \\ & + \mu_3 f_y(x_n + \alpha_3 h, \xi_3) + \mu_4 f_y(x_n + \alpha_4 h, \xi_4) \} \\ & + h_n^2 \{ \mu_2 \beta_{21} f_y(x_n + \alpha_2 h, \xi_2) f_y(x_n, \xi_1) \\ & + \mu_3 \{ \beta_{31} f_y(x_n, \xi_1) + \beta_{32} f_y(x_n + \alpha_2 h, \xi_2) \} \\ & \times f_y(x_n + \alpha_3 h, \xi_3) + \mu_4 \{ \beta_{41} f_y(x_n, \xi_1) \\ & + \beta_{42} f_y(x_n + \alpha_2 h, \xi_2) + \beta_{43} f_y(x_n + \alpha_3 h, \xi_3) \} \\ & \times f_y(x_n + \alpha_4 h, \xi_4) \} + h_n^3 \{ \mu_3 \beta_{32} \beta_{21} f_y(x_n \\ & + \alpha_3 h, \xi_3) f_y(x_n + \alpha_2 h, \xi_2) f_y(x_n, \xi_1) \\ & + \mu_4 (\beta_{42} \beta_{21} f_y(x_n + \alpha_2 h, \xi_2) f_y(x_n, \xi_1) \\ & + \beta_{43} \{ \beta_{31} f_y(x_n, \xi_1) + \beta_{32} f_y(x_n + \alpha_2 h, \xi_2) \} \\ & \times f_y(x_n + \alpha_3 h, \xi_3) \} f_y(x_n + \alpha_4 h, \xi_4) \\ & + h_n^4 \mu_4 \beta_{43} \beta_{32} \beta_{21} f_y(x_n + \alpha_4 h, \xi_4) f_y(x_n \end{aligned}$$

$$+ \alpha_3 h, \xi_3) f_y(x_n + \alpha_2 h, \xi_2) f_y(x_n, \xi_1)] + E_{n+1} \tag{2.16}$$

ここで、 ξ_i は、 g_n 及び $y(x_n)$ を代入した k_i の y 部の中間値であり、 E_{n+1} はこの step において発生した全誤差である。いま、問題にしている領域において $|f_y(x, y)| \leq k$ (k は定数)

とすれば、

$$|\partial_{n+1}| \leq |\partial_n| \{1 + (|\mu_1| + |\mu_2| + |\mu_3| + |\mu_4| + |\mu_5|) h_n k + \{|\mu_2 \beta_{21}| + |\mu_3| (|\beta_{31}| + |\beta_{32}|) + |\mu_4| (|\beta_{41}| + |\beta_{42}| + |\beta_{43}|)\} \times h_n^2 k^2 + \{|\mu_3 \beta_{32} \beta_{21}| + |\mu_4| \{|\beta_{42} \beta_{21}| + |\beta_{43}| (|\beta_{31}| + |\beta_{32}|)\} \} h_n^3 k^3 + |\mu_4 \beta_{43} \beta_{32} \beta_{21}| h_n^4 k^4 + |E_{n+1}|\} \tag{2.17}$$

が得られる。一般に、公式を特性化する係数の絶対値が大きいき、関数計算に伴う誤差は拡大増幅されるであろうし、また同じ係数の符号の相違は、容易に桁落ち現象を引き起こすと推測される。これらの観点及び上式の観察から、次の誤差伝播特性判定基準が得られる。

定義 2 $R_{m,j}$ ($m=2, 3, 4, j=1, 2$) を次のように定義する。ここで、 m 及び j は、それぞれ公式の次数及び判定基準の種類を示す。

$$R_{m1} = \sum_{i=1}^m |\mu_i| \tag{2.18}$$

$$R_{m2} = \sum_{i=1}^m |\mu_i| + \sum_{i=2}^m \sum_{j=1}^{i-1} |\beta_{ij}| \tag{2.19}$$

定義 1, 2 によって与えられた判定基準の有効性を調べるために、単一の微分方程式 8 個、連立微分方程式 3 個を選び、各問題について何種類かの刻み幅を用いて一定区間の積分を行い、最初及び最終 step の誤差と、全区間における最大誤差を求めた。実験は $m=3, 4$ の場合について、

- (i) A_{m2} 一定で R_{m1} (または R_{m2}) が異なる公式群
- (ii) R_{m1} (または R_{m2}) が一定で A_{m2} が異なる公式群

について行われた。その結果、 $A_{m,j}$ 及び $R_{m,j}$ により打ち切り精度や誤差伝播特性の傾向や程度を知ろうと試みることは十分の根拠があることが確認された。

3. 判定基準等高線図

$m=2$ の場合、(2.1) が 2 次法であるための条件式群を解けば、1 パラメータ族

$$\mu_1 = 1 - 1/(2\alpha_2)$$

$$\mu_2 = 1/(2\alpha_2)$$

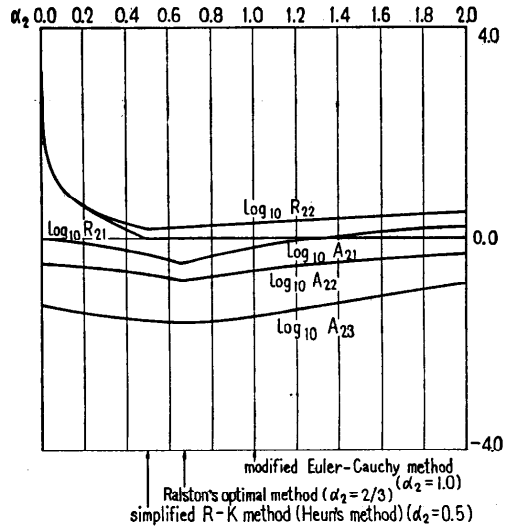


Fig. 1 Criteria in the 2nd order method.

$$\beta_{21} = \alpha_2 \tag{3.1}$$

が得られる⁵⁾。自由パラメータ α_2 が 0 から 2 まで変化するときの各種判定基準の常用対数が Fig. 1 に示される。なお、図には Simplified Runge-Kutta 法 (Heun 法)¹⁰⁾、A. Ralston の最適公式⁵⁾ 及び修正 Euler-Cauchy 法²⁾ の 3 つが記入されている。

$m=3$ の場合、(2.1) が 3 次法であるための条件式群の完全解は次の 3 つの族を構成する。

- (i) $\alpha_2 \neq 0, \alpha_3 \neq 0$ 及び $\alpha_2 \neq \alpha_3$ なるとき

解は 2 パラメータ族

$$\begin{aligned} \mu_1 &= 1 + [2 - 3(\alpha_2 + \alpha_3)] / 6\alpha_2\alpha_3 \\ \mu_2 &= (3\alpha_2 - 2) / [6\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2)] \\ \mu_3 &= (2 - 3\alpha_2) / [6\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)] \\ \beta_{32} &= [\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)] / [\alpha_2(2 - 3\alpha_2)] \end{aligned} \tag{3.2}$$

となる。

- (ii) $\alpha_3 = 0$ なるとき

解は 1 パラメータ族

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= 2/3, \mu_1 = 1/4 - \mu_3 \\ \beta_{32} &= 1/(4\mu_3), \mu_2 = 3/4 \end{aligned} \tag{3.3}$$

となる。

- (iii) $\alpha_2 = \alpha_3 = 2/3$ なるとき

解は 1 パラメータ族

$$\mu_1 = 1/4, \mu_2 = 3/4 - \mu_3, \beta_{32} = 1/(4\mu_3) \tag{3.4}$$

となる。

解(i)の場合、判定基準 $A_{31}, A_{32}, A_{33}, R_{31}$ 及び R_{32} の等高線図は、自由パラメータ α_2 及び α_3 が共に変域 0.0~1.0 をもつ場合について描かれ、それぞれ Fig.

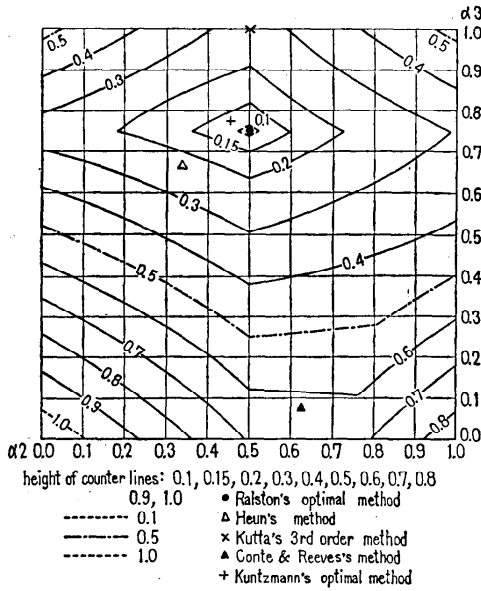


Fig. 2 Counter line map of A_{31} .

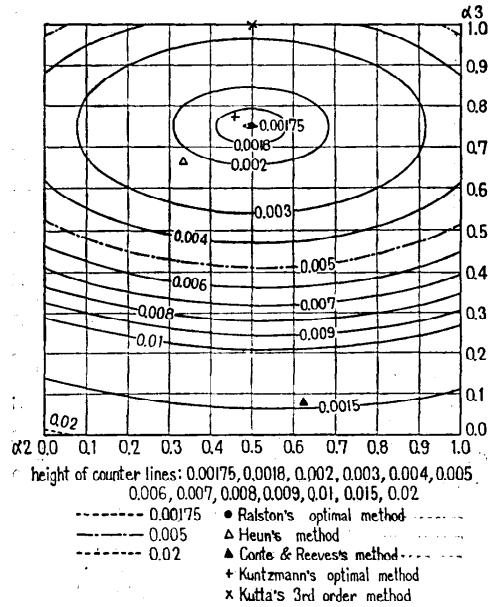


Fig. 4 Counter line map of A_{32} .

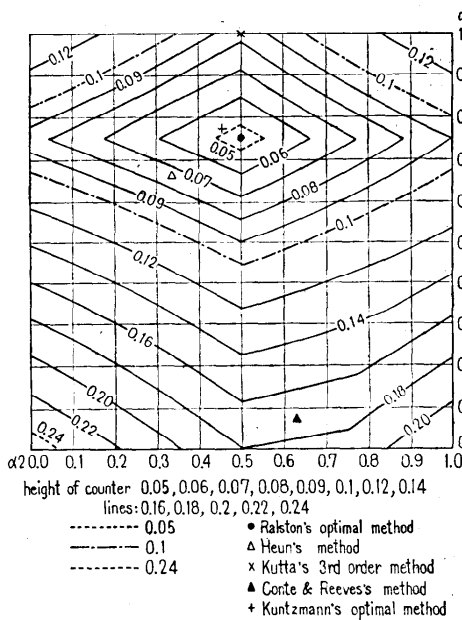


Fig. 3 Counter line map of A_{33} .

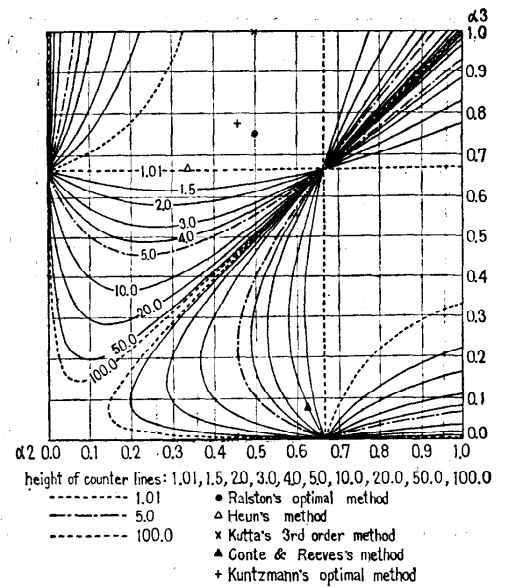


Fig. 5 Counter line map of R_{31} .

2, Fig. 3, Fig. 4, Fig. 5 及び Fig. 6 に示される。また同図には、Heun の公式¹¹⁾, Kutta の 3 次法¹¹⁾, Ralston の最適公式⁹⁾, Kuntzmann の最適公式⁹⁾ 及び Conte & Reeves の公式¹²⁾ が記入されている。

解(ii) の場合、自由パラメータ β_{32} が 0.0~2.0 ま

で変化するときの各種判定基準の常用対数が、Fig. 7 に示される。

解(iii) の場合も同様に、自由パラメータ β_{32} が 0.~2.0 まで変化するときの各種判定基準の常用対数が Fig. 8 に示される。また同図には Nyström の公式¹²⁾ が記入されている。

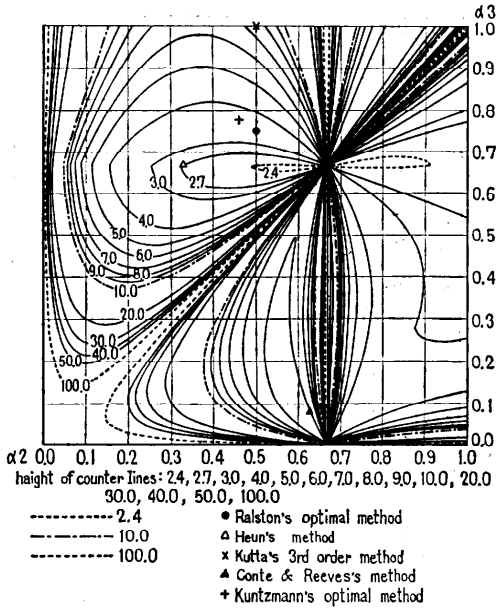


Fig. 6 Counter line map of R_{33} .

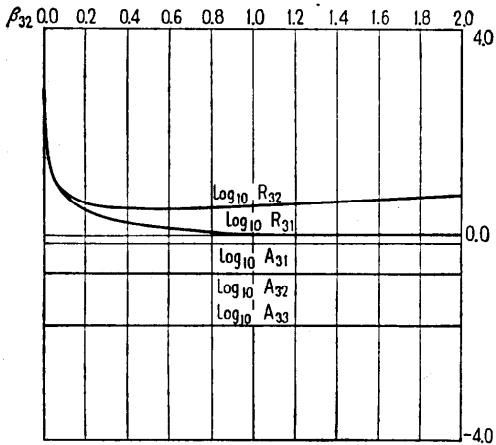


Fig. 7 Criteria in the 3rd order method (case where $\alpha_2=2/3$ and $\alpha_1=0.0$).

$m=4$ の場合, (2.1) が 4 次法になるための条件式群の解は次の 4 つの族を構成する.

(i) $\alpha_2 \neq 0, \alpha_3 \neq 0, \alpha_2 \neq 1, \alpha_3 \neq 1$ 及び $\alpha_2 \neq \alpha_3$ なるとき

解は 2 パラメータ族

$$\begin{aligned} \mu_1 &= (1/2) + [1 - 2(\alpha_2 + \alpha_3)] / [12\alpha_2\alpha_3] \\ \mu_2 &= (2\alpha_3 - 1) / [12\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2)(1 - \alpha_2)] \\ \mu_3 &= (1 - 2\alpha_2) / [12\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)(1 - \alpha_3)] \\ \mu_4 &= (1/2) + [2(\alpha_2 + \alpha_3) - 3] / [12(1 - \alpha_2)(1 - \alpha_3)] \\ \alpha_4 &= 1, \beta_{32} = [\alpha_3(\alpha_3 - \alpha_2)] / [2\alpha_2(1 - 2\alpha_2)] \end{aligned}$$

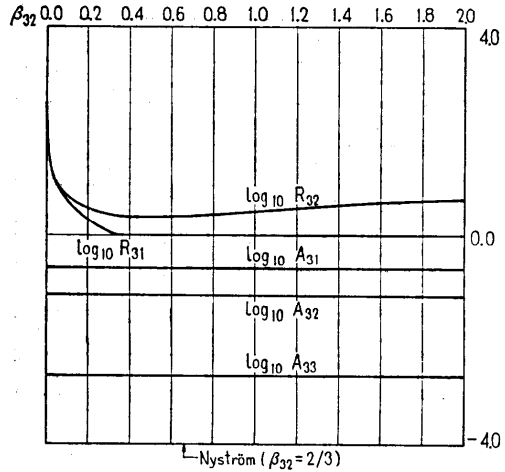


Fig. 8 Criteria in the 3rd order method (case where $\alpha_1=\alpha_2=2/3$)

$$\begin{aligned} \beta_{42} &= \frac{(1-\alpha_2)[\alpha_2+\alpha_3-1-(2\alpha_3-1)^2]}{2\alpha_2(\alpha_3-\alpha_2)[6\alpha_2\alpha_3-4(\alpha_2+\alpha_3)+3]} \\ \beta_{43} &= \frac{(1-2\alpha_2)(1-\alpha_2)(1-\alpha_3)}{\alpha_3(\alpha_3-\alpha_2)[6\alpha_2\alpha_3-4(\alpha_2+\alpha_3)+3]} \end{aligned} \quad (3.5)$$

となる.

(ii) $\alpha_2=\alpha_3=1/2$ なるとき

解は 1 パラメータ族

$$\begin{aligned} \alpha_4 &= 1, \mu_1 = 1/6, \mu_2 = 1/3(2 - \beta_{43}), \mu_4 = 1/6 \\ \beta_{32} &= 1/(2\beta_{43}), \beta_{42} = 1 - \beta_{43}, \mu_3 = \beta_{43}/3 \end{aligned} \quad (3.6)$$

となる.

(iii) $\alpha_2=1, \alpha_3=1/2$ なるとき

解は 1 パラメータ族

$$\begin{aligned} \alpha_4 &= 1, \mu_1 = 1/6, \mu_2 = 1/3(1/2 - 1/\beta_{43}), \mu_3 = 2/3 \\ \beta_{32} &= 1/8, \beta_{42} = -1/4\beta_{43}, \mu_4 = 1/(3\beta_{43}) \end{aligned} \quad (3.7)$$

となる.

(iv) $\alpha_2=1/2, \alpha_3=0$ なるとき

解は 1 パラメータ族

$$\begin{aligned} \alpha_4 &= 1, \mu_1 = 1/6(1 - \beta_{43}), \mu_2 = 2/3, \mu_4 = 1/6 \\ \beta_{32} &= 1/(2\beta_{43}), \beta_{42} = 3/2, \mu_3 = \beta_{43}/6 \end{aligned} \quad (3.8)$$

となる.

解(i)の場合, 判定基準 $A_{41}, A_{42}, A_{43}, R_{41}$ 及び R_{42} の等高線図は, 自由パラメータ α_2 及び α_3 が共に変域 $0.0 \sim 1.0$ をもつ場合について描かれ, それぞれ Fig. 9, Fig. 10, Fig. 11, Fig. 12 及び Fig. 13 に示される. また, これらの図には, Kutta の 3/8 則¹¹⁾, Berezin & Zidkov の著書に掲載されている公式¹³⁾, Ralston の最適公式⁵⁾ 及び Kuntzmann の最適公式³⁾ が記入されている.

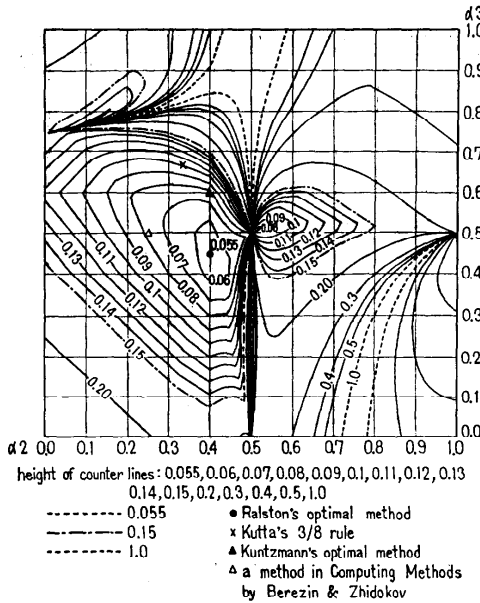


Fig. 9 Counter line map of A_{11} .

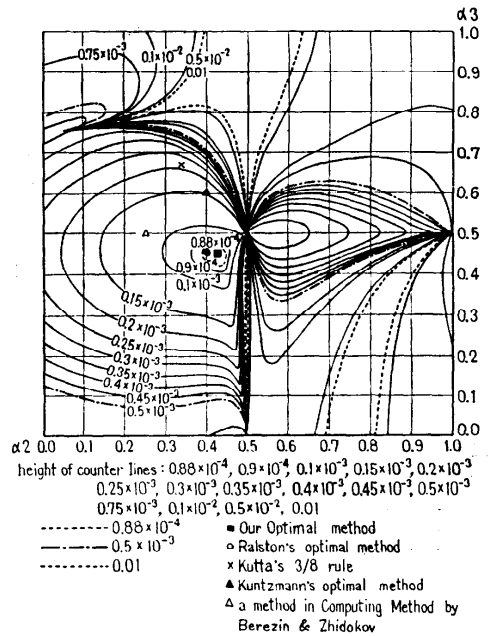


Fig. 11 Counter line map of A_{12} .

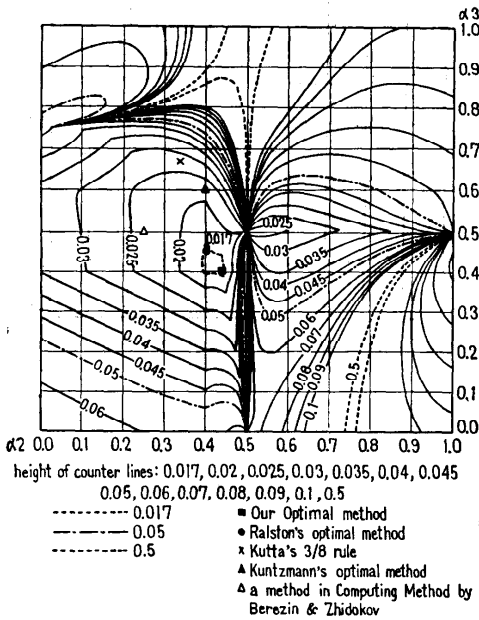


Fig. 10 Counter line map of A_{22} .

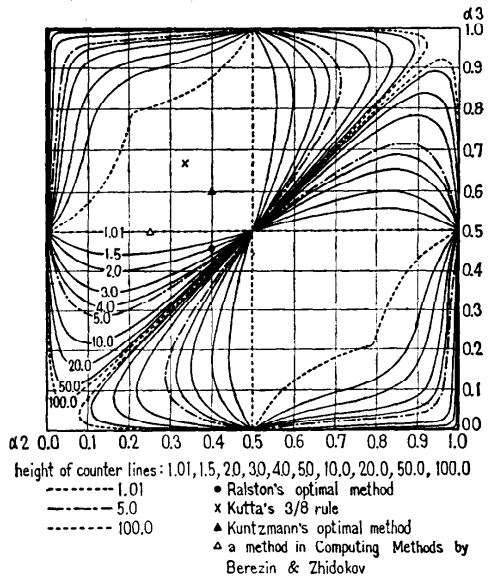


Fig. 12 Counter line map of R_{11} .

解(ii), (iii), (iv)の場合は, 自由パラメータ β_{43} が 0.0~2.0 まで変化するときの各種判定基準の常用対数が, Fig. 14, Fig. 15 及び Fig. 16 に示される. また Fig. 12 には, classical Runge-Kutta 法¹⁾と, Runge-Kutta-Gill 法¹⁰⁾が記入されている.

上記の等高線図を描くに当たっては, 京大森 正武助教授の書かれたプログラムに負うところが多かった¹⁰⁾. また特に 4 次法解(i)の作図においては, 記憶容量の関係から全領域を 25 の小正方形に分け, 各小正方形を細かい刻み幅を用いて次々と作図し, それら

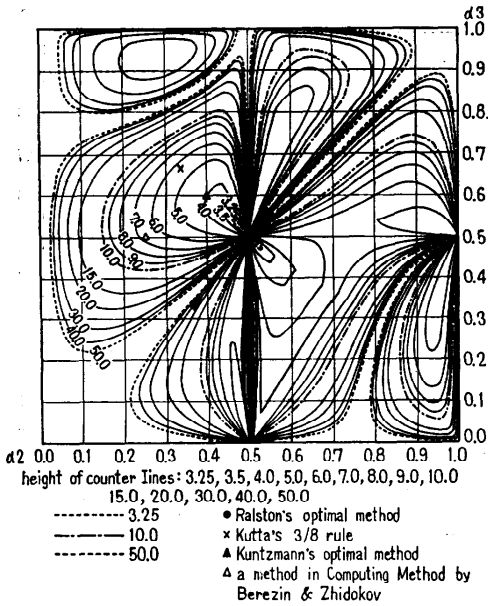


Fig. 13 Counter line map of R_{42} .

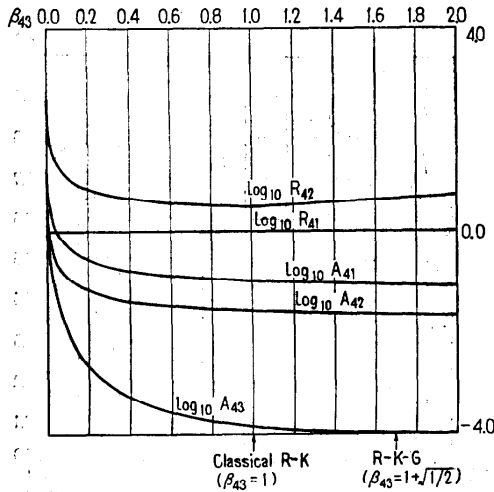


Fig. 14 Criteria in the 4th order method (case where $\alpha_2=\alpha_3=1/2$)

を続けて全体の画像が得られるようにプログラムが作られた。なお、判定基準について多数の3次元図形が得られているが、紙面の都合で省略する¹⁷⁾。

4. 結果の考察

この研究の目的は、2~4次のRunge-Kutta法について、その完全解における自由パラメータが常識的に考えられる変域において変動するとき、これまで多

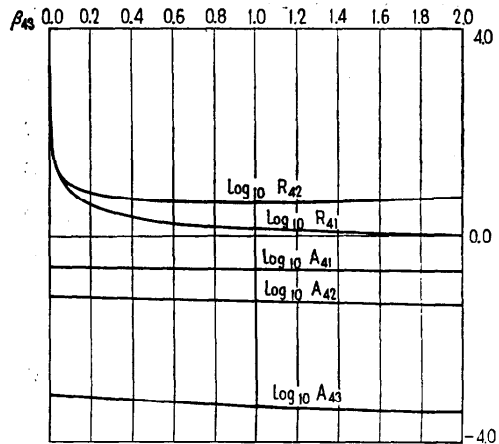


Fig. 15 Criteria in the 4th order method (case where $\alpha_2=1.0$ and $\alpha_3=1/2$)

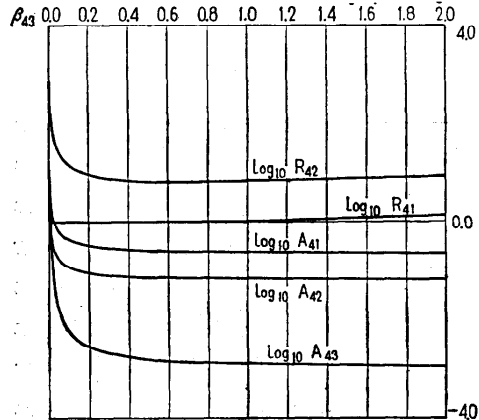


Fig. 16 Criteria in the 4th order method (case where $\alpha_2=1/2$ and $\alpha_3=0.0$)

くの研究者によって用いられて来た打ち切り精度判定基準、及び誤差伝播特性の傾向を示すと考えられる同判定基準がどのように変動するか、その変動の様相を数式的図式的にとらえることであった。そしてこれにより最適化に関する従来の研究が適切なものであったかどうか、在来の公式は如何なる特性をもっているか、今後さらに性能のよい公式を開発する可能性は残されているか等について容易に知ることができる。また任意の公式が与えられたとき、その特性を直観的に直ちに評価することも可能になる。以下Fig. 1~Fig. 16の観察によって知られる事柄を列挙しよう。

1. A. Ralston は、2次法について、 A_{21} を判定基準に使い打ち切り誤差の観点から最適な公式として

$\alpha_2=2/3$ の場合を選んでいますが, Fig. 1 によればこの判断は適切であることが知られる. さらに同図の観察から, この最適公式は他の打ち切り精度判定基準 A_{22}, A_{23} に照しても最適であり, 誤差伝播特性も最良に近いことがわかる.

2. 在来のよく知られた2次法, Heun の公式と修正 Euler-Cauchy 法についていえば, 何れも比較的良好な特性をもっている. 特に Heun の公式は, 誤差伝播特性が2次法中最良であり, また, 打ち切り精度もかなりよい.

3. A. Ralston は3次法について, A_{31} を判定基準に使い打ち切り誤差の観点から, 最適な公式として $\alpha^2=1/2, \alpha_3=3/4$ の場合を選んでいますが, Fig. 2 の観察からこの判断は適切であることが知られる. またこの公式が他の打ち切り精度判定基準 A_{32}, A_{33} に照しても最適であること, 及び誤差伝播特性もかなりよい公式であることが, Fig. 3~Fig. 6 の観察によって知られる.

4. 在来の公式としては, Ralston の最適公式以外に Heun の公式, Kutta の3次法, Conte & Reeves の公式, Nyström の公式及び Kuntzmann の最適公式をとり上げたが, その中で, 特に Kuntzmann の最適公式及び Heun の公式は, 両特性とも優れている (Fig. 2~Fig. 6 を見よ). また Fig. 7 及び Fig. 8 の観察によれば, $\alpha_2=\alpha_3=2/3$ の型の公式群は明らかに $\alpha_2=2/3, \alpha_3=0$ の型の公式群より優れている. 後者の型の公式群の中に知られた公式が存在しないのであろう. 前者の型の公式中には, $\beta_{32}=2/3$ に対応する Nyström の公式があるが, この公式は打ち切り精度一定のこの族に含まれる公式中では, 誤差伝播特性が最良で, したがって最適公式である. Heun の公式及び Nyström の公式は, いずれも公式を特性化する係数がすべて正であって, 一松氏のいわゆる桁落ちの少ない公式¹⁰⁾であるが, 両者の中では打ち切り精度・誤差伝播特性が共にまさっている Heun 法を選ぶべきであらう.

5. A. Ralston は4次法について, A_{41} を判定基準に使い, 打ち切り誤差の観点から最適な公式として $\alpha_2=0.4, \alpha_3=0.45573725$ の場合を選んでいますが, Fig. 9 よりこの判断は適切であることが知られる. またこの最適公式は, 他の打ち切り精度判定基準 A_{42}, A_{43} に照してもほぼ最適であるように思われる (Fig. 10, Fig. 11 を見よ). T. E. Hull らは, すべての判定基準は, $\alpha_2=0.35, \alpha_3=0.45$ 付近の点に対応するほぼ同じ最適

公式に導くとしているが, この判断も正当である (Fig. 9~Fig. 11 を見よ). なお, Fig. 9 及び Fig. 10 において単に最適公式と書かれているのは, 著者によって求められた判定基準 A_{42}, A_{43} に対する最適公式である.

6. 在来の公式としては, Ralston の最適公式, Kutta の3/8 則, Kuntzmann の最適公式, Berezin & Zhidkov の著書に掲載されている公式, classical Runge-Kutta 法及び Runge-Kutta-Gill 法を選んだが, いずれの公式も打ち切り精度及び誤差伝播の両特性のかなりよいものである. 解(ii), (iii), (iv) の1パラメータ族では, 解(ii)の族がすべての点ですぐれており, classical Runge-Kutta 法や Runge-Kutta-Gill 法もこの族に含まれる. 解(iii), (iv) の族中には知られた公式は存在しない. classical Runge-Kutta 法は,

- (1) 打ち切り精度がかなりよい.
- (2) 係数が簡単でまた0になることが多い.
- (3) すべての係数が非負で $i < j$ するとき $\alpha_i \leq \alpha_j$ である唯一つの4段数の4次法である. したがって一松氏の指摘するように桁落ちの危険が少ない.

などの点で特に優れている. 上の(iii)の主張は, Fig. 14 においてその族に含まれる公式中誤差伝播特性が最善であるという形であらわれている.

3次法の Conte & Reeves の公式について補足すれば, この公式の性能劣化は記憶容量節約の工夫に起因する.

この種の研究は, 5段数以上の高次法についても試みられているが, それについては紙面を改めて論じたい.

参 考 文 献

- 1) A. Ralston : A First Course in Numerical Analysis, pp. 192~202, McGraw-Hill, New York (1965)
- 2) J. D. Lambert : Computational Methods in Ordinary Differential Equations, pp. 114~161, John Wiley & Sons, London (1973)
- 3) J. Kuntzman : Deux Formules Optimales du Fyce de Runge-Kutta, Chiffres, Vol. 2, No. 21 (1959)
- 4) R. L. Johnston : On Optimum Runge-Kutta Methods for the Solution of Ordinary Differential Equations, M. A. Thesis, University of British Columbia (1961)
- 5) A. Ralston : Runge-Kutta Methods with Minimum Error Bounds, Math. Comp. Vol. 16, pp. 431~437 (1962)

- 6) T. E. Hull and R. L. Johnston : Optimum Runge-Kutta Methods, Math. Comp. Vol. 18, pp. 306~310 (1964)
- 7) R. King : Runge-Kutta Methods with Constrained Minimum Error Bounds, Math. Comp. Vol. 20, pp. 386~391 (1966)
- 8) 田中正次 : Runge-Kutta 法の打ち切り誤差に関する研究, pp. 6~15, pp. 45~57, 東京大学に提出した博士論文 (1972)
- 9) E. B. Shanks : Solution of Differential Equations by Evaluations of Functions, Math. Comp. Vol. 20, No. 93 (1966)
- 10) P. Henrici : Elements of Numerical Analysis, p. 274, John Wiley & Sons, New York (1964)
- 11) K. S. Kunz : Numerical Analysis, pp. 167~191, McGraw-Hill, New York (1957)
- 12) F. Ceschino and J. Kuntzmann : Numerical Solution of Initial Value Problems, pp. 57~58, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J. (1966)
- 13) L. S. Berezin and N. P. Zhidkov : Computing Methods, p. 320, Pergamon Press, Oxford (1965)
- 14) S. Gill : A Process for the Step by Step Integration of Differential Equations in an automatic Digital Computing Machine, pp. 96~108, Proc. Camb. Phil. Soc., 47 (1951)
- 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 5, 教育出版 (1974)
- 16) 一松 信 : 3位および4位の Runge-Kutta 型の公式について, pp. 157~160, 日本数学会応用数学分科会予稿集 (昭和51年4月)
- 17) 浅川, 鈴木, 寺川 : 図形利用による Runge-Kutta 法の研究, 山梨大学工学部計算機科学科卒業論文 (昭和51年3月)

(昭和51年9月10日受付)
(昭和52年1月19日再受付)