

Runge-Kutta 法の打ち切り誤差の評価について*

田中正次**

Abstract

In this paper, firstly we optimize the Runge-Kutta methods with five functional values from a view-point of the truncation error. Nextly, using the above results we gave 3rd order Runge-Kutta methods the error estimating ability. Unlike the others our methods increase both the accuracy of the integral formula and the error estimating ability, although it causes a very small loss of the stability and a little increase of computation.

1. まえがき

誤差評価の面において Runge-Kutta 法の欠陥を克服しようとする試みは, R. H. Merson 以来多くの研究者によってなされて来た^{1)~4)}. 著者もこの問題についていくつかの論文を公にしたが^{5)~7)}, 当時発表したものは現在の時点で眺めると不備な点が多く, 著者にとって今やその不満は抑え難いものになっている. この論文はそのような事情を背景にして書かれたもので, 文献 5), 6), 7) の内容に徹底的な改訂を加えて簡潔にまとめたものである.

以下 2. においては, Runge-Kutta 法の打ち切り誤差および打ち切り精度判定基準について略述する. 3. においては, 5 個の関数値を使用する Runge-Kutta 法の最適化について述べる. ここでは, 5 個の関数値の使用により実質的に 5 次の精度が得られることおよび打ち切り精度の極度の追求は, 伝播誤差に関する性質を悪化させることが明らかにされる. 4. においては, 3. における考察に基づき, step 当り 5 回の関数値を用いて, 4 次に近い精度をもつ高精度 3 次法に打ち切り誤差評価の能力を付与する. その際可能な限り伝播誤差について好ましい性質をもつような配慮がなされる.

5. においては, 多くの数値実験を基礎として, 3. および 4. における公式の誘導に誤りがないことおよび

著者の主張の正当性が示される.

2. Runge-Kutta 法の打ち切り誤差と打ち切り精度判定基準

常微分方程式の初期値問題を

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (2.1)$$

とする. そのとき, step 当り m 回の関数評価を用いる Runge-Kutta 法は, 一般に次のように表わすことができる.

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^m \mu_i k_i \quad (2.2)$$

$$k_i = h_n f \left(x_n + \alpha_i h_n, y_n + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{ij} k_j \right) \quad (2.3)$$

$$h_n = x_{n+1} - x_n, \quad \alpha_1 = \beta_{10} = 0 \quad (i=1, 2, \dots, m)$$

ここで, y_n および $y(x_n)$ ($n=0, 1, 2, \dots$) は, それぞれ $x=x_n$ に対する数値解と理論解である. 後の便宜のために, y_n と y_{n+1} をそれぞれ $y(x_n)$ および $y(x_{n+1})$ によって置き換えた (2.2) 式を改めて (2.2)' と置く. (step 当りの関数評価回数 m と到達可能な最大次数 $p(m)$ との関係については, たとえば文献 8) を見よ.)

(2.2)' の両辺を $(x_n, y(x_n))$ に関してテイラー展開し, その差の h_n について $(M+1)$ 次の項を $\gamma_M h_n^{M+1}$ とおけば, $M=3, 4, 5$ に対して γ_M は次のように表わすことができる.

$$\begin{aligned} \gamma_3 = & a_{3,1} D^3 f + a_{3,2} f_y D^2 f + a_{3,3} D f D f_y \\ & + a_{3,4} f_y^2 D f \end{aligned} \quad (2.4)$$

* Estimation of the truncation error in Runge-Kutta methods by Masatsugu TANAKA (Faculty of Engineering, Yamanashi University)

** 山梨大学工学部

$$\begin{aligned} \gamma_4 = & a_{4,1}D^4f + a_{4,2}D^2f_v Df + a_{4,3}Df_v D^2f \\ & + a_{4,4}f_v^2 D^2f + a_{4,5}f_{vv} D^2f + a_{4,6}f_v D^3f \\ & + a_{4,7}f_v Df_v Df + a_{4,8}f_v^3 Df \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \gamma_5 = & a_{5,1}D^5f + a_{5,2}f_v D^4f + a_{5,3}f_v^2 D^3f \\ & + a_{5,4}f_v^3 D^2f + a_{5,5}f_v^4 Df \\ & + a_{5,6}D^3f Df_v + a_{5,7}f_v D^2f Df_v \\ & + a_{5,8}f_v^2 Df Df_v + a_{5,9}D^3f_v Df \\ & + a_{5,10}f_v D^2f_v Df + a_{5,11}D^2f_v D^2f \\ & + a_{5,12}f_{vv} D^2f Df + a_{5,13}f_v f_{vv} (Df)^2 \\ & + a_{5,14}Df_{vv} (Df)^2 + a_{5,15} (Df_v)^2 Df \end{aligned} \quad (2.6)$$

ここで a_{ij} ($i=3, 4, 5, j=1, 2, \dots, 15$) は、公式を特性化する係数のみの関数である。(a_{ij} の具体的な表現は、たとえば文献 9) Table 2.1 から直ちに知られる。) また D は、 $D = \frac{\partial}{\partial x} + f(x_n, y_n) \frac{\partial}{\partial y}$ によって定義される微分演算子である。(2.2), (2.3) が M 次法ならば、その打ち切り誤差 T_M は、

$$T_M = \gamma_M h_n^{M+1} + \gamma_{M+1} h_n^{M+2} + O(h^{M+3}) \quad (2.7)$$

によって表わすことができる。

次に M. Lotkin¹⁰⁾ にならって γ_i の上界を求めれば、関係

$$|\gamma_i| \leq A_{i1} M L^i \quad (i=3, 4, 5) \quad (2.8)$$

が得られる。ここで M, L は関数 f に依存して決まる定数である。(文献 9) を見よ。) また A_{i1} は下記のようになる。

$$A_{31} = 8|a_{3,1}| + 4|a_{3,2}| + 4|a_{3,3}| + 2|a_{3,4}| \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} A_{41} = & 16|a_{4,1}| + 4|a_{4,2}| + |a_{4,2} + 3a_{4,3}| \\ & + |2a_{4,2} + 3a_{4,3}| + |a_{4,2} + a_{4,3}| + |a_{4,3}| \\ & + 8|a_{4,4}| + |a_{4,5}| + |2a_{4,5} + a_{4,7}| \\ & + |a_{4,6}| + |2a_{4,6} + a_{4,7}| + |a_{4,7}| \\ & + 2|a_{4,8}| \end{aligned} \quad (2.10)$$

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

$$\begin{aligned} & + |a_{5,12} + a_{5,15}| + |a_{5,13}| + 2|a_{5,14}| \\ & + |a_{5,15}| \end{aligned} \quad (2.11)$$

定義 2.1 A_{ij} ($i=3, 4, 5, j=1, 2, 3$) を (2.9)~(2.11) および次の各式によって定義する。

$$A_{32} = \sum_{i=1}^4 |a_{3,i}| \quad (2.12)$$

$$A_{33} = \sum_{i=1}^4 a_{3,i}^2 \quad (2.13)$$

$$A_{42} = \sum_{i=1}^8 |a_{4,i}| \quad (2.14)$$

$$A_{43} = \sum_{i=1}^8 a_{4,i}^2 \quad (2.15)$$

$$A_{52} = \sum_{i=1}^{15} |a_{5,i}| \quad (2.16)$$

$$A_{53} = \sum_{i=1}^{15} a_{5,i}^2 \quad (2.17)$$

上に定義した判定基準の相互関係について次の定理が成り立つ。

定理 2.1

定義 2.1 の A_{ij} についてつぎの関係式が成り立つ。

- (i) $A_{i1} \geq A_{i2}$ ($i=3, 4, 5$)
- (ii) すべての j に対して $|a_{i,j}| \leq 1$ ならば $A_{i2} \geq A_{i3}$ ($i=3, 4, 5$)
- (iii) $\max_j |a_{i,j}| = a_{i,m}, \max_{j \neq m} |a_{i,j}| = a_{i,t}, a_{i,m} = ca_{i,t}$ とすれば、

$$c < \frac{1 - \sqrt{1 - 4|a_{i,t}|(|a_{i,t}| - r + 1)}}{2|a_{i,t}|}$$

または

$$c > \frac{1 + \sqrt{1 - 4|a_{i,t}|(|a_{i,t}| - r + 1)}}{2|a_{i,t}|}$$

なるとき $A_{i2} \leq A_{i3}$ ここで $r = \max(j)$ である。

- (iv) $A_{i2} = \sum_{j=1}^r |a_{ij}|, A_{i2}' = \sum_{i=1}^r |a_{ij}'|,$
 $A_{i2} = A_{i2}'$
 $\max_j |a_{ij}| = a_{i,m}, \max_j |a_{ij}'| = a_{i,k}'$
 $(\neq 0)$

$a_{i,m} = ca_{i,k}'$ とすれば、 $|c| > \sqrt{r}$ なるとき $A_{i3} > A_{i3}'$

となる。

上述の A_{ij} (i は解法の次数をあらわす) は、関数 $f(x, y)$ に無関係な公式の打ち切り精度の尺度であって、各次数の Runge-Kutta 法の打ち切り精度をかなり正確に反映する(文献 9), (11), (12) を見よ)。したがっ

て本論文においても、今後 Runge-Kutta 法の打ち切り精度判定基準として使用する。

3. 5個の関数値を使用する Runge-Kutta 法の最適化

公式の一般形は、(2.2) および (2.3) において $m=5$ とおいたものである。ここでは便宜上そのおのおのを (2.2)'' および (2.3)'' によって表わす。そのとき (2.2)'' によって表わされる公式が、関数 f に無関係に5次法であるための条件式群は、文献5)の(2.12) および (2.14) において置換え $\alpha=\alpha_2$, $\alpha_1=\alpha_3$, $\alpha_2=\alpha_4$, $\alpha_3=\alpha_5$, $\beta_1=\beta_{31}$, $\gamma_1=\beta_{32}$, $\beta_2=\beta_{41}$, $\gamma_2=\beta_{42}$, $\delta_2=\beta_{43}$, $\beta_3=\beta_{51}$, $\gamma_3=\beta_{52}$, $\delta_3=\beta_{53}$, $\eta_3=\beta_{54}$ を実行することによって得られる。このようにパラメータの名称を変更した系 (2.12) および (2.14) を、それぞれ (2.12)' および (2.14)' とする。方程式系 (2.12)' および (2.14)' が解を持たないことは既に明らかであるから、(2.14)' の第1式から第11式までを連立にして $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$ をパラメータとして解く。そのとき文献5)の(2.15)においてパラメータの名称を上述のように変更した式 (2.15)' を得る。 $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$ を与えたときの他のパラメータの値は、(2.15)' 式の (i)~(xv) を逐次計算することによって得られる。この場合 1 step の間に発生する打ち切り誤差 E は、

$$E = \gamma_4' h^5 + \gamma_5' h^6 + O(h^7) \quad (3.1)$$

と書くことができる。ただし γ_4' は、(2.5) によって与えられる γ_4 において $\alpha_i=0$ ($i=1, 2, 3$) とおいたもの、 γ_5' は (2.6) によって与えられる γ_5 である。したがって打ち切り精度判定基準は、 h^5 および h^6 の各次数の打ち切り誤差項について、それぞれ $\alpha_i=0$ ($i=1, 2, 3$) とおいた (2.10), (2.14), (2.15) および (2.11), (2.16), (2.17) によって与えられる。

5個の関数値を使用する Runge-Kutta 法の最適化においては、より少数の関数値を使用する同型の公式の場合と異なり、高精度を追求する際打ち切り誤差項の主項が著しく小さくなり、むしろ第二項の方が絶対値が大きくなるという変わった現象があらわれてくる。したがってその打ち切り精度を判定するには、主項の大きさを測定するのみでは不十分で、第二項についても考慮する必要がある。このような観点から、 h^5 および h^6 両次の打ち切り誤差項を併せ評価するため、次のような打ち切り精度判定基準を導入した。すなわち、

$$\bar{A}_\omega = \omega A_{42} + A_{52} \quad (3.2)$$

ここで $\omega=10, 100, 1000$ 等とした。またこれもより低次の公式の場合には見られない現象であるが、打ち切り精度を極限まで追求しようとするれば、公式を特性化する係数パラメータが著しく大きくなって、伝播誤差について好ましくない性質があらわれてくる。そこでこの性質を検査する目的から次のような判定基準 R を導入した。

$$R = \sum_{i=1}^5 |\mu_i| + \sum_{i=2}^5 \sum_{j=0}^{i-1} |\beta_{ij}| \quad (3.3)$$

前章および本章において定義した各種判定基準の有効性、実際の誤差との関係などの詳細は文献9)に譲る。

最適化は、各 α_i ($i=2, 3, 4, 5$) を変域 $0.0 \sim 1.0$ において変動させることによって得られるすべての四次元格子点 ($\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$) について、 A_{4j}, A_{5j} ($j=1, 2, 3$), A_ω および R を計算し比較することによってなされた。探索過程は数次にわたっており、逐次変域をしばり刻み幅を縮小 (最大 0.1 から最小 0.001 まで) して行われた。(詳細については9)を見よ。) その結果次のような事実が発見された。

- (1) α_2 が小さい程 \bar{A}_ω は小さく R は大である。経験上 $\bar{A}_{1000} < 0.2$ の場合実質的に5次の精度をもつと思われるが、そのような α_2 の範囲は $0 < \alpha_2 \leq 0.3$ である。
- (2) ほぼ同等の \bar{A}_{1000} を与える係数群の中では、 $\alpha_3=0.4$ 付近のものが R を最小にする。
- (3) $\alpha_5=1$ が打ち切り精度の観点から最適である。
- (4) α_4 が小さい方から 0.97 付近に近づくにつれて \bar{A}_{1000}, R は共に減少する。しかし $\alpha_4=0.97$ 付近で R は最小値をとり、 α_4 が 0.97 付近から 0.999 に向って増加すれば、 \bar{A}_{1000} は依然として減少を続けるが、 R は徐々に増加を始め $\alpha_4=0.999$ 付近では増加の勾配は非常に大きい。

以上の事実を検証する目的で、各パラメータを

$$\alpha_5=1, \alpha_2=0.0 \sim 1.0 \text{ (0.02 刻み)}$$

$$\alpha_3=0.11 \sim 0.91 \text{ (0.1 刻み)}$$

$$\alpha_4=0.0 \sim 1.0 \text{ (0.02 刻み)}$$

とし、 α_2, α_4 をそれぞれ横軸および縦軸にとり、各 α_3 に対する A_{42} および R の等高線を X - Y プロッターを用いて描いた。また $\alpha_5=1$ の最適性を確認するために、 A_{42} について最適に近いいくつかの α_3 について、 $\alpha_5=1$ の周辺で α_2 を変動させ、各 α_3 に対する A_{42} の等高線を描いて見た。一例として、 $\alpha_5=1, \alpha_3=0.45$ に対する A_{42} および最適領域の周辺におけ

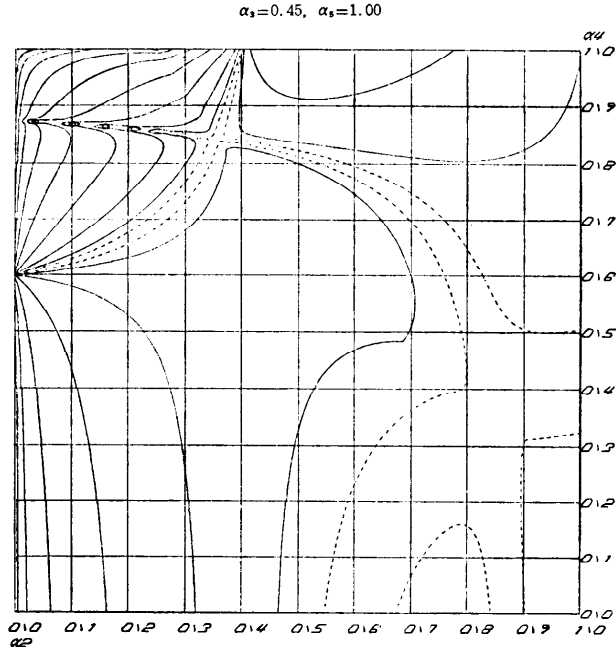


Fig. 1 Counter line map of A_n .
The dotted lines show the highest counter lines $A_n=10^{-1}$.
The difference between the heights of neighboring counter lines are $10^{-0.5}$.

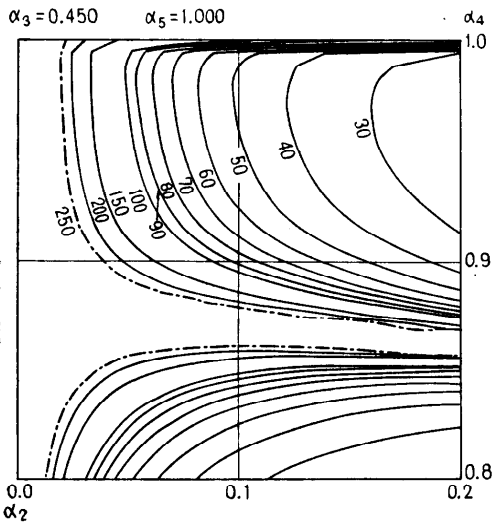


Fig. 2 Counter line map of R (The dotted lines show the highest counter lines $R=250$.)

る R の等高線を **Fig. 1** および **Fig. 2** に示す。等高線図法による調査結果は、前述の数次にわたる探索の結論に誤りがないことを裏付けるものであった。

公式の決定は次のように行われた。まず、公式が実

質的に 5 次の精度をもつと考えられる \bar{A}_{1000} の範囲について、自由パラメータの二つを固定し他の一つを変化させるときに $(\log_{10}\bar{A}_{1000}, \log_{10}R)$ の描く曲線群の一部、特に R 最小の曲線の近傍を描いた。ついで、点 $\{(\log_{10}(\bar{A}_{1000})_{mx}, (\log_{10}R)_{mx}) | (\log_{10}R)_{mx} = \min_{\bar{A}_{1000} < (\bar{A}_{1000})_x} \log_{10}R\}$ の軌跡であり、また α_3 一定の諸断面における R の最適曲線の $\log_{10}\bar{A}_{1000}-\log_{10}R$ 平面への正射影の包絡線である曲線 C を求めた。ただし $(\bar{A}_{1000})_x$ および $(\bar{A}_{1000})_{mx}$ は共に \bar{A}_{1000} の変域内の点で、 $\log_{10}(\bar{A}_{1000})_{mx}$ は $\log_{10}R$ が $(\log_{10}R)_{mx}$ の値をとるときの横座標である。(詳しくは 9) を見よ.)

以上を準備した後、上述の曲線 C 上の点に対応する打ち切り精度に若干差のある次の四公式を得た。

$$\begin{cases}
 k_1 = hf(x_n, y_n) \\
 k_2 = hf(x_n + 0.28h, y_n + 0.28k_1) \\
 k_3 = hf(x_n + 0.47h, y_n - 0.0665865385k_1 \\
 \quad \quad \quad + 0.5366586538k_2) \\
 k_4 = hf(x_n + 0.992h, y_n + 1.028507330k_1 \\
 \quad \quad \quad - 2.224851032k_2 + 2.188343702k_3) \\
 k_5 = hf(x_n + h, y_n + 1.101036623k_1 \\
 \quad \quad \quad - 2.419722520k_2 + 2.327455364k_3)
 \end{cases}
 \quad \text{(公式 I)}$$

$$\begin{cases}
 -0.008769466297k_4) \\
 y_{n+1} = y_n + 0.1111240481k_1 \\
 + 0.2153577608k_2 + 0.3928911845k_3 \\
 + 3.198254540k_4 - 2.917627533k_5
 \end{cases}
 \quad
 \begin{cases}
 -5.700619681k_2 + 3.475432537k_3 \\
 -0.02044388983k_4) \\
 y_{n+1} = y_n + 0.1112205737k_1 \\
 + 0.05797557950k_2 + 0.5413794997k_3 \\
 + 13.32979272k_4 - 13.04036837k_5
 \end{cases}
 \quad (3.4)$$

(公式II)

$$\begin{cases}
 k_1 = hf(x_n, y_n) \\
 k_2 = hf(x_n + 0.265h, y_n + 0.265k_1) \\
 k_3 = hf(x_n + 0.460h, y_n - 0.04448359441k_1 \\
 + 0.5044835944k_2) \\
 k_4 = hf(x_n + 0.994h, y_n + 1.186393374k_1 \\
 - 2.643431455k_2 + 2.451038081k_3) \\
 k_5 = hf(x_n + h, y_n + 1.249804631k_1 \\
 - 2.809894656k_2 + 2.566514049k_3 \\
 - 0.006424023062k_4) \\
 y_{n+1} = y_n + 0.1106664598k_1 \\
 + 0.1820267369k_2 + 0.4258503824k_3 \\
 + 4.264113681k_4 - 3.982657260k_5
 \end{cases}
 \quad (3.5)$$

(公式III)

$$\begin{cases}
 k_1 = hf(x_n, y_n) \\
 k_2 = hf(x_n + 0.235h, y_n + 0.235k_1) \\
 k_3 = hf(x_n + 0.44h, y_n - 0.02727517047k_1 \\
 + 0.4672751705k_2) \\
 k_4 = hf(x_n + 0.994h, y_n + 1.575551617k_1 \\
 - 3.482031955k_2 + 2.900480338k_3) \\
 k_5 = hf(x_n + h, y_n + 1.662142522k_1 \\
 - 3.692727659k_2 + 3.037003908k_3 \\
 - 0.006418770952k_4) \\
 y_{n+1} = y_n + 0.1110609498k_1 \\
 + 0.1213113928k_2 + 0.4818885658k_3 \\
 + 4.379706308k_4 - 4.093967217k_5
 \end{cases}
 \quad (3.6)$$

(公式IV)

$$\begin{cases}
 k_1 = nf(x_n, y_n) \\
 k_2 = hf(x_n + 0.17h, y_n + 0.17k_1) \\
 k_3 = nf(x_n + 0.42h, y_n - 0.1174836658k_1 \\
 + 0.5374836658k_2) \\
 k_4 = hf(x_n + 0.998h, y_n + 3.169535857k_1 \\
 - 5.595064010k_2 + 3.423528152k_3) \\
 k_5 = hf(x_n + h, y_n + 3.227231534k_1
 \end{cases}$$

上述の各公式に対する打切り精度判定基準 A_{4i} A_{5i} ($i=1, 2, 3$), \bar{A}_{1000} および伝播誤差に関係した数量 R を **Table 1** に示す。

数値例としては拙著 5) に収録されている問題をとりに上げた。ただし例 1, 例 2 については積分区間を 2 倍半程拡大した。結果は同文献所載のものと大同小異であって、伝播誤差の影響も余り顕著にあらわれていないので紙面の節約上省略する。(詳しくは 9) を見よ。)

数値例の観察により、公式 I ~ 公式 IV は、よく知られた在来の 4 次法より著しく高精度であって、step 当り 6 回の関数計算を必要とする 5 次法に匹敵する精度を持つことがわかった。しかし、特異点の周辺の積分である例 3 の問題においてはやや劣る。上述の四公式の中では、II, III が高精度でむしろ望ましい式といえよう。

4. 誤差評価能力をもつ Runge-Kutta 法

次に、3. の結果の、step 当り 5 個の関数値を使用する誤差評価能力をもつ公式への応用について考察しよう。

ここで取り上げる誤差評価能力をもつ公式の一般形は次のようになる。

$$\begin{cases}
 k_i = h_n f\left(x_n + \alpha_i h_n, y_n + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{ij} k_j\right) \\
 \alpha_i = \beta_{i0} = 0 \quad (i=1, 2, 3, 4, 5)
 \end{cases}
 \quad (4.1)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^5 \nu_i k_i \quad \prod_{i=1}^5 \nu_i = 0 \quad (4.2)$$

$$y_{n+1}' = y_n + \sum_{i=1}^5 \mu_i k_i \quad \prod_{i=1}^5 \mu_i \neq 0 \quad (4.3)$$

$$T = y_{n+1} - y_{n+1}' \quad (4.4)$$

ただし y_{n+1} は数値解を求める公式、 y_{n+1}' は y_{n+1} よりも高精度な公式で、その差 T は y_{n+1} の局所打切

Table 1 The accuracies of Runge-Kutta methods with five functional values

method	A_{41}	A_{42}	A_{43}	A_{51}	A_{52}	A_{53}	\bar{A}_{1000}	R
I	4.83×10^{-4}	1.61×10^{-4}	1.28×10^{-8}	4.79×10^{-2}	1.01×10^{-2}	2.18×10^{-5}	1.71×10^{-1}	19.0
II	3.39×10^{-4}	1.10×10^{-4}	5.12×10^{-9}	4.66×10^{-2}	9.65×10^{-3}	1.98×10^{-5}	1.19×10^{-1}	22.7
III	2.19×10^{-4}	7.29×10^{-5}	2.64×10^{-9}	4.69×10^{-2}	9.93×10^{-3}	1.88×10^{-5}	8.29×10^{-2}	26.3
IV	3.75×10^{-5}	1.25×10^{-5}	2.68×10^{-11}	5.46×10^{-2}	1.22×10^{-2}	2.14×10^{-5}	2.46×10^{-2}	52.5

り誤差の推定値を与える。

上述の公式における y_{n+1} の打ち切り誤差の評価についておよそ次の命題が成り立つ。

命題

(4.2) および (4.3) によって与えられる y_{n+1} および y_{n+1}' を、それぞれ m 次および r 次法とし、その打ち切り誤差をおの

$$\sum_{i=m+1}^{r+1} \xi_i h^i + 0(h^{r+2}) \quad (4.5)$$

$$\xi_{r+1}' h^{r+1} + 0'(h^{r+2}) \quad (4.6)$$

とする。いま、 y_{n+1} および y_{n+1}' の h について $(r+1)$ 次の打ち切り誤差項の判定基準をそれぞれ $A_{r,j}$, $A_{r,j}'$ とすれば、(4.4) の T により y_{n+1} の打ち切り誤差が推定できるためには、

$$(i) \quad \left| \sum_{i=m+1}^r \xi_i h^i \right| \gg |\xi_{r+1} h^{r+1}| \gg |0(h^{r+2})|, \\ |\xi_{r+1}' h^{r+1}| \gg |0'(h^{r+2})| \quad \text{および} \quad A_{r,j} \gg A_{r,j}' \quad (4.7)$$

または、特に $\sum_{i=m+1}^r \xi_i h^i$ と $\xi_{r+1} h^{r+1}$ が同符号の時には、

$$(ii) \quad \left| \sum_{i=m+1}^{r+1} \xi_i h^i \right| \gg |0(h^{r+2})|, \quad |\xi_{r+1}' h^{r+1}| \\ \gg |0'(h^{r+2})| \quad \text{および} \quad A_{r,j} \gg A_{r,j}' \quad (4.8)$$

が成り立てばよい。

step 当り 5 個の関数値を使用する誤差評価能力をもつ公式には、R. H. Merson による有名な Kutta-Merson Process があるが、この方法は本質的な誤りを含んでいるので、ここでは特に取り上げない (1), (4), (6))。正当な考察によって得られたある観点からほぼ最適な公式には F. Ceschino による Kutta-Ceschino Process がある (2), (7))。Kutta-Ceschino Process をはじめとする在来の方法と著者の提案する方法の間の相異は、前者が y_{n+1} を k_5 の y 部として関数評価の中に組み入れたのに対して、後者が若干計算量を犠牲にして y_{n+1} を別に計算した点であろう。後者の狙いは、 y_{n+1} の計算を追加することによって得られる自由度を、 y_{n+1} の打ち切り精度の向上や推定誤差の精度を高める目的に活用することであった。

いろいろな場合が考えられるが、ここでは特に (i) $\nu_5=0$ の場合、(ii) $\nu_1=0$ の場合を取り扱う。(その他の場合についてはたとえば 9) を見よ。) 何れの場合についても明らかに次の定理が成り立つ。

定理 4.1

step 当り 5 回の関数評価により 4 次の Runge-

Kutta 法に誤差評価能力を与えることはできない。ただし、誤差評価が可能であるためには、数値解を求める公式 y_{n+1} とその推定誤差を求めるために必要な公式 y_{n+1}' の間に 1 次以上の精度の差が必要であるものとする。

(i) $\nu_5=0$ の場合: (4.2) および (4.3) によって定義される y_{n+1} および y_{n+1}' が、それぞれ 4 次および 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は、拙著 6) の 26 ページにおける方程式系 (A) において (4.4.7) 式を

$$\sum_{i=1}^4 \nu_i = 1 \quad (4.9)$$

によって置きかえた系 (A)' および方程式系 (B) によって与えられる。定理 4.1 により 4 次法に誤差評価能力を与えることは不可能であるから、まず y_{n+1} が 3 次法になるように (A)' 群から最初の 4 式を選び、ついで y_{n+1}' がかなり精度の高い 4 次法——8 項よりなる h^5 のオーダーの打ち切り誤差項中 3 項が 0——になるように、(B) 群から最初の 11 式を選ぶ。このように選出された 15 個の方程式系は、4 自由度をもつので、 $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$ を自由パラメータとしてこの系を解けば、同文献の 26 ページから 27 ページに述べられている解 (1)~(15) および拙著 7) の 267 ページから 268 ページに述べられている解 (3.2.17)~(3.2.20) を得る。したがって、任意に選ばれた実数パラメータの組 ($\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$) に対し、上記の諸式を順次適用して他の係数を計算すれば、それらの係数に対して y_{n+1} は 3 次法、 y_{n+1}' はかなり精度のよい 4 次法になる。最適係数の決定は、(i) の $\nu_5=0$ の場合も、(ii) に述べる $\nu_1=0$ の場合も全く同様になされた。自由パラメータ α_i ($i=2, 3, 4$) の変域は 3. における探索結果に基づき、 y_{n+1}' が実質的に 5 次の精度をもち、また R も小さい範囲に限定された。すなわち、パラメータ α_2, α_3 および α_4 の変域と刻み幅は、それぞれ (0.005~0.30, 0.005), (0.3~0.5, 0.005) および (0.990~0.999, 0.001) であって、そのとき得られる自由パラメータの組合せ ($\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$) の可能なすべてについて、 y_{n+1} および y_{n+1}' の精度判定基準 $A_{i,j}$ ($i=3, 4, j=1, 2, 3$), $R, A_{i,j}'$ ($i=4, 5, j=1, 2, 3$), R' および次式によって定義される R'' を計算した。ここで右肩につけられた ' は、 y_{n+1}' の精度判定基準であることを示す。

$$R'' = R' + \sum_{i=1}^5 |\nu_i| \quad (4.10)$$

つぎに、

$$\begin{aligned}
 I_1 &= [0.1, 0.2], I_2 = [0.05, 0.1], \\
 I_3 &= [0.03, 0.05], I_4 = [0.0, 0.03], \\
 J_1 &= [0.05, 0.08], J_2 = [0.038, 0.05], \\
 J_3 &= [0.015, 0.038], J_4 = [0.008, 0.015], \\
 J_5 &= [0.006, 0.008], J_6 = [0.0, 0.006] \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

とおき、 A_{32} および \bar{A}_{1000}' がそれぞれ I_k および J_l に含まれる係数群の中で R'' 最小のものを選び、 $\{\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4\}_{k_l}$ とおく。すべての k および l に対して選ばれた 24 個の係数群の中から、いくつかの数値例を参考にして、数値解の精度、誤差評価能力および解の安定性などの面ですぐれている公式を選出した。このようにして、 $\nu_5=0$ の場合次の公式が得られた。

$$\begin{aligned}
 (公式V) \quad & \left\{ \begin{aligned}
 k_1 &= hf(x_n, y_n) \\
 k_2 &= hf(x_n+0.15h, y_n+0.15k_1) \\
 k_3 &= hf(x_n+0.37h, y_n-0.06674693705k_1 \\
 &\quad + 0.4367469371k_2) \\
 k_4 &= hf(x_n+0.981h, y_n+3.582246363k_1 \\
 &\quad - 6.605886376k_2 + 4.004640012k_3) \\
 k_5 &= hf(x_n+h, y_n+4.251375172k_1 \\
 &\quad - 7.856855926k_2 + 4.628816253k_3 \\
 &\quad - 0.02333550004k_4) \\
 y_{n+1} &= y_n + 0.03813599532k_1 \\
 &\quad + 0.03807631064k_2 + 0.6742179615k_3 \\
 &\quad + 0.2495697326k_4 \\
 y_{n+1}' &= y_n + 0.1475986690k_1 \\
 &\quad - 0.08959131915k_2 + 0.6295219061k_3 \\
 &\quad + 1.681850075k_4 - 1.369379331k_5 \\
 T &= y_{n+1} - y_{n+1}'
 \end{aligned} \right. \quad (4.12)
 \end{aligned}$$

(ii) $\nu_1=0$ の場合: (4.2) および (4.3) によって与えられる y_{n+1} および y_{n+1}' が、4 次法および 5 次

法になるための条件式群は、拙著 6) の 26 ページに掲載されている (A) および (B) 式によって与えられる。前述のように y_{n+1} および y_{n+1}' が 3 次法およびやや精度の高い 4 次法になるように、(A) 群の最初の 4 式、(B) 群の最初の 11 式を $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ および α_5 をパラメータとして解けば、同文献の 26~27 ページ所載の式 (1)~(19) が得られる。したがって、いま $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ および α_5 を任意に与え、式 (1)~(19) を用いて他の係数を計算すれば、得られた係数に対して y_{n+1} は 3 次、 y_{n+1}' はやや高精度の 4 次法になる。公式の最適化については既に (i) において述べたので省略する。得られた公式を次に示す。

$$\begin{aligned}
 (公式VI) \quad & \left\{ \begin{aligned}
 k_1 &= hf(x_n, y_n) \\
 k_2 &= hf(x_n+0.12h, y_n+0.12k_1) \\
 k_3 &= hf(x_n+0.47h, y_n-0.5150362486k_1 \\
 &\quad + 0.9850362486k_2) \\
 k_4 &= hf(x_n+0.974h, y_n+5.779160608k_1 \\
 &\quad - 7.710595385k_2 + 2.905434777k_3) \\
 k_5 &= hf(x_n+h, y_n+7.691954974k_1 \\
 &\quad - 10.34144841k_2 + 3.685976830k_3 \\
 &\quad - 0.03648339038k_4) \\
 y_{n+1} &= y_n + 0.2698222121k_2 \\
 &\quad + 0.4400888907k_3 + 1.127282356k_4 \\
 &\quad - 0.8371934589k_5 \\
 y_{n+1}' &= y_n + 0.04775704972k_1 \\
 &\quad + 0.1889292727k_2 + 0.4935378853k_3 \\
 &\quad + 0.9388504284k_4 - 0.6690746361k_5 \\
 T &= y_{n+1} - y_{n+1}'
 \end{aligned} \right. \quad (4.13)
 \end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{aligned}
 k_1 &= hf(x_n, y_n) \\
 k_2 &= hf(x_n+0.08h, y_n+0.08k_1) \\
 k_3 &= hf(x_n+0.45h, y_n-0.8526230049k_1)
 \end{aligned} \right.$$

Table 2 The accuracies of methods V, VI, VII and Kutta-Ceschino process

method	integral formula	criterion	order <i>i</i>	A_{i1}	A_{i2}	A_{i3}	$A_{(i+1)1}$	$A_{(i+1)2}$	$A_{(i+1)3}$	\bar{A}_{1000}	<i>R</i>	<i>R''</i>
V		y_{n+1}	3	1.66×10^{-1}	5.01×10^{-2}	8.42×10^{-4}	4.12×10^{-1}	7.96×10^{-2}	1.46×10^{-3}		15.8	36.5
			4	3.45×10^{-4}	1.11×10^{-4}	5.16×10^{-9}	5.58×10^{-2}	1.31×10^{-2}	2.08×10^{-5}	1.25×10^{-1}	33.5	
VI		y_{n+1}	3	2.60×10^{-2}	1.44×10^{-2}	8.17×10^{-5}	7.59×10^{-2}	1.77×10^{-2}	1.06×10^{-4}		42.4	44.7
			4	6.46×10^{-6}	1.86×10^{-6}	1.24×10^{-8}	6.50×10^{-2}	1.15×10^{-2}	2.57×10^{-5}	1.97×10^{-1}	42.1	
VII		y_{n+1}	3	1.41×10^{-2}	9.23×10^{-3}	2.48×10^{-5}	4.44×10^{-2}	9.21×10^{-3}	2.72×10^{-5}		62.6	67.5
			4	1.21×10^{-6}	3.61×10^{-6}	4.35×10^{-10}	6.89×10^{-2}	1.37×10^{-2}	2.94×10^{-5}	4.99×10^{-2}	62.1	
Kutta-Ceschino Process		y_{n+1}	3	3.51×10^{-1}	7.69×10^{-2}	3.38×10^{-3}	6.92×10^{-1}	1.10×10^{-1}	3.10×10^{-3}		9.5	10.6
			4	2.89×10^{-2}	6.17×10^{-3}	6.45×10^{-6}					10.6	

$$\begin{aligned}
 &+1.302623005k_2) \\
 k_4 &= hf(x_n+0.989h, y_n+10.21993945k_1 \\
 &\quad -12.51012764k_2+3.279188184k_3) \\
 k_5 &= hf(x_n+h, y_n+11.42460231k_1 \\
 &\quad -14.00569438k_2+3.593644467k_3 \\
 &\quad -0.01255238858k_4) \\
 \text{(公式VII)} \quad y_{n+1} &= y_n+0.2141446734k_2 \\
 &\quad +0.5017656464k_3+2.45598136k_4 \\
 &\quad -2.171891681k_5 \\
 y_{n+1}' &= y_n+0.02875145115k_1 \\
 &\quad +0.1720268482k_2+0.5246602649k_3 \\
 &\quad +2.220063891k_4-1.945502455k_5 \\
 T &= y_{n+1}-y_{n+1}'
 \end{aligned}
 \tag{4.14}$$

公式V~公式VIIおよび Kutta-Ceschino Process のおのおのについて、数値解を求める公式 y_{n+1} および

誤差評価のための公式 y_{n+1}' の打ち切り精度判定基準および (4.10) によって定義された R'' を Table 2(前頁参照) に示す。

5. 数値例と結果の考察

公式の誘導が正しく行われたかどうかをテストすると共に、step 当り 5 個の関数値を使用する同種の公式中最適と考えられる Kutta-Ceschino Process と比較するため、3. に述べた 3 例題を公式 V~公式 VII および Kutta-Ceschino Process を用いて解いた。紙面の都合で公式 VII および Kutta-Ceschino Process による計算結果のみを Table 3 および Table 4 に掲げる(詳しくは拙著 9) を参照されたい。Table 3, 4 において y_i, TE_i, EE_i, LTE_i および R_i は、それぞれ $x=x_i$ における数値解、数値解の真の誤差、第 i step における局所打ち切り誤差の推定値、同理論値およ

Table 3 Numerical solutions of $y' = -\frac{1}{3}x^2y^2, y(2)=1$ by method VII and their errors

x_i	y_i (numerical solution)	TE_i (true error)	EE_i (estimate of local truncation error)	LTE_i (theoretical value of local truncation error)	$R_i = \frac{EE_i}{LTE_i}$
2.05	0.9360252726	-2216×10^{-10}	-2261×10^{-10}	-2216×10^{-10}	1.00
2.10	0.8771072995	-3903×10^{-10}	-1955×10^{-10}	-1978×10^{-10}	0.99
2.15	0.8227909759	-5181×10^{-10}	-1745×10^{-10}	-1781×10^{-10}	0.98
2.20	0.7726643781	-6115×10^{-10}	-1545×10^{-10}	-1591×10^{-10}	0.97
2.25	0.7263550709	-6774×10^{-10}	-1367×10^{-10}	-1421×10^{-10}	0.96
2.30	0.6835263993	-7210×10^{-10}	-1210×10^{-10}	-1266×10^{-10}	0.96
2.35	0.6438739477	-7471×10^{-10}	-1073×10^{-10}	-1130×10^{-10}	0.95
2.40	0.6071228240	-7593×10^{-10}	-950×10^{-10}	-1008×10^{-10}	0.94
2.45	0.5730240939	-7610×10^{-10}	-846×10^{-10}	-901×10^{-10}	0.94
2.50	0.5413526292	-7542×10^{-10}	-750×10^{-10}	-805×10^{-10}	0.93
.....
3.00	0.3214260524	-5190×10^{-10}	-245×10^{-10}	-272×10^{-10}	0.90
.....
3.50	0.2051279011	-3040×10^{-10}	-88×10^{-10}	-101×10^{-10}	0.87

Table 4 Numerical solutions of $y' = -\frac{1}{3}x^2y^2, y(2)=1$ by Kutta-Ceschino process and their errors

x_i	y_i (numerical solution)	TE_i (true error)	EE_i (estimate of local truncation error)	LTE_i (theoretical value of local truncation error)	$R_i = \frac{EE_i}{LTE_i}$
2.05	0.9360257573	4847×10^{-10}	4711×10^{-10}	4847×10^{-10}	0.97
2.10	0.8771083227	8284×10^{-10}	3911×10^{-10}	4073×10^{-10}	9.96
2.15	0.8227923847	10652×10^{-10}	3259×10^{-10}	3436×10^{-10}	9.95
2.20	0.7726660555	12204×10^{-10}	2721×10^{-10}	2902×10^{-10}	0.94
2.25	0.7263569255	13139×10^{-10}	2276×10^{-10}	2456×10^{-10}	0.93
2.30	0.6835283607	13614×10^{-10}	1910×10^{-10}	2085×10^{-10}	0.92
2.35	0.6438760695	13747×10^{-10}	1606×10^{-10}	1774×10^{-10}	0.91
2.40	0.6071249464	13631×10^{-10}	1353×10^{-10}	1512×10^{-10}	0.89
2.45	0.5730261885	13336×10^{-10}	1147×10^{-10}	1294×10^{-10}	0.89
2.50	0.5413546749	12915×10^{-10}	971×10^{-10}	1108×10^{-10}	0.88
.....
3.00	0.3214293056	7342×10^{-10}	214×10^{-10}	268×10^{-10}	0.86
.....
3.50	0.2051285796	3745×10^{-10}	59×10^{-10}	80×10^{-10}	0.74

Table 5 The accuracies of numerical solutions by each method and the realities of its error estimatinh ability

method	Ex 1 $y' = -\frac{1}{3}x^2y^2, y(2)=1$		Ex. 2 $y' = 1-y^2, y(0)=0$		Ex. 3 $y' = \frac{5y}{1+y}, y(0)=1$	
	error of $y_1 \times 10^{10}$	$R_1-1.0$	error of $y_1 \times 10^{10}$	$R_1-1.0$	error of $y_1 \times 10^9$	$R_1-1.0$
V	20431	0.0	2105	0.0009	47034	0.00495
VI	-4816	0.0004	-558	0.00537	-12740	-0.01986
VII	-2216	0.0	-342	0.00584	-5648	-0.04621
K-C process	4847	-0.028	-1868	0.079	33739	0.033

び局所打ち切り誤差の推定値と理論値の比を示す。

Table 5 は上述の 3 例題の結果を各公式の特徴が見やすいように整理したものである。この表において第 2 列は、第 1 列の各公式を用いて刻み幅 0.05 で 1 step 積分したときの数値解 y_1 の誤差、第 3 列は最初の step における推定誤差と真の誤差との比 R_1 から 1.0 を引いたもので誤差評価の一つの目安と考えられるものである。Table 2~Table 5 および紙面の都合でこの論文に収録されなかった多くの数値例を熟視することにより次のような結論が得られた。(詳しくは文献 9) を見よ。)

(1) 公式 VII は、他の方法に比較して積分公式の精度が非常によく、しかも誤差評価能力も十分である。 R'' がやや大きい、多くの数値例による実験では step 数をかなり大きくとっても問題は起らず、最も望ましい公式と考えられる。

(2) 公式 VI は、Kutta-Ceschino Process に比して積分公式の精度、誤差評価能力ともすぐれている方法である。

(3) 公式 V は、Kutta-Ceschino Process に比して積分公式の精度は同等あるいはやや低いが、誤差評価能力の点では同法よりはるかにすぐれている方法である。

謝辞 この研究をまとめるに当たって東大森口繁一教授にはいろいろ懇切なご指導をいただいた。また伊理正夫教授からも有益な助言をいただいた。また山梨大学山下茂技官は常に身辺にあって著者を助けてくれたし、研究室の学生岩田、中込の両君は、グラフの一部についてそれを描くためのプログラムを提供してくれた。併せて心から感謝する次第である。

参 考 文 献

- 1) R. H. Merson: An operational method for study of integration process, Proceedings of Symposium on Data Processing, Weapons Re-

search Establishment, Salisbury, South Australia (1957).

- 2) F. Ceschino: Evaluation de l'erreur par pas les problèmes Differentiels, Chiffres, 5 (1962).
- 3) E. England: Error estimate for Runge-Kutta type solutions to system of ordinary differential equations, comput. J., 12, 2 (1969).
- 4) R. E. Scraton: Estimation of the truncation error in Runge-Kutta and allied processes, Comput. J., 7, 3 (1965).
- 5) 田中正次: 5 個の関数値を使用する Runge-Kutta 法について, 情報処理, Vol. 7, No. 4, pp. 181~189 (1966).
- 6) 田中正次: Kutta-Merson Process とその類似の方法について, 情報処理, Vol. 9, No.1, pp. 18~30 (1968).
- 7) 田中正次: 打ち切り誤差評価の能力をもつ Runge-Kutta 型公式について, 情報処理, Vol. 9, No. 5, pp. 261~271 (1968).
- 8) J. D. Lambert: Computational Methods in Ordinary Differential Equations, Jhon Wiley & Sons, 122 (1973).
- 9) 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博士論文 (1972).
- 10) M. Lotkin: On the accuracy of Runge-Kutta methods, MTAC, 5, pp. 129~133 (1951).
- 11) A. Ralston: Runge-Kutta methods with minimum error bounds, Math. Comp., 16, pp. 431~437 (1962).
- 12) T. E. Hull and R. L. Jhonston: Optimum Runge-Kutta methods, Math. Comp., 18, pp. 306~310 (1964).
- 13) C. Runge: Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen, Math. Ann. 46, pp. 167~178 (1895).
- 14) W. E. Milne: Numerical Integration of Ordinary Differential Equations, Third Printing, Wiley, New York, (1960).
- 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).
(昭和 50 年 7 月 28 日受付)
(昭和 51 年 4 月 1 日再受付)