

Pseudo-Runge-Kutta 法とその 2nd および 3rd order Runge-Kutta 法の打切り誤差の評価への応用について*

田 中 正 次**

Abstract

In this paper, the author tries to give the estimating ability of truncation error to the second and the third order Runge-Kutta methods without making the sacrifice of the computation of functions by utilizing the past information to which hitherto no attention has been paid. For that purpose, concerning to the second order methods, he makes use of the two step method devised by G. D. Byrne and others, while concerning to the third order methods, he prepares especially the three step method which is similar to the two step one. ([1], [2]) The author calls these multi-step methods, which are similar to Runge-Kutta methods, "Pseudo-Runge-Kutta methods" following the precedent of G. D. Byrne.

In section 2, the Pseudo-Runge-Kutta method which includes two and three points is studied. In section 3, the second order formulas with the ability of error estimation, and in section 4, the third order formulas with the same ability, are explained.

In addition, concerning to the application of the two step method to the error estimation, we have researches made by H. Shintani. ([3], [4])

1. まえがき

この研究において、著者は、従来まで顧みられなかった過去の情報の活用により、関数計算の犠牲なしに、2nd および 3rd order Runge-Kutta 法に打切り誤差評価の能力を与える。そのため、2nd order 法については、G. D. Byrne らの考案になる two step 法を用い、3rd order 法については、特に前者に類似の three step 法を準備する^{1,2)}。

著者は、これらの Runge-Kutta 法まがいの multi-step 法を、G. D. Byrne にならって Pseudo-Runge-Kutta 法と呼ぶことにする。

以下、2. において 2 点および 3 点をふくむ Pseudo-Runge-Kutta 法について考察し、3. において誤差評価能力をもつ 2nd order 公式、4. において同様な能力をもつ 3rd order 公式について述べる。

なお、two step 法の誤差評価への応用については、広島大新谷氏の研究がある^{3,4)}。

2. 2 点および 3 点をふくむ Pseudo-Runge-Kutta 法

2.1 公式の誘導と誤差解析

いま、与えられた微分方程式を

$$\left. \begin{aligned} \frac{dy_i}{dx} &= F_i(\mathbf{y}(x)), \quad x \in [a, b] \\ y_i(a) &= \eta_i \quad (i=1, 2, \dots, q) \end{aligned} \right\} \quad (2.1.1)$$

とする。ここで

$$\mathbf{y}(x) = \begin{pmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \\ \vdots \\ y_q(x) \end{pmatrix} \quad (2.1.2)$$

である。

この節において、初期値問題の解 $\mathbf{Y}(x)$ は一意でクラス \mathbf{C}^{m+2} にふくまれるものとする。ただし、 m は解法の order で、この場合は 3 あるいは 4 である。また $\mathbf{Y}(x_n)$ 、 $x_n \in [a, b]$ は $x = x_n$ における真の解で、 \mathbf{y}_n はその近似解をあらわし、刻み幅 h は一定で $h = x_i - x_{i-1}$,

* Pseudo-Runge-Kutta Methods and their Application to the Estimation of Truncation Errors in 2nd and 3rd Order Runge-Kutta Methods, by Masatsugu Tanaka (Faculty of Engineering, Yamanashi University)

** 山梨大学・工学部

$i=1, 2, \dots$ を満足するものとする。

そのとき、3 点のふくむ Pseudo-Runge-Kutta 法の一般形は

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-2}] \quad (2.1.3)$$

$$\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-2} + u_1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2})] \quad (2.1.4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-2} + (u_2 - u_3)\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) \\ &\quad + u_3\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2})] \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-1}] \quad (2.1.6)$$

$$\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-1} + u_1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})] \quad (2.1.7)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-1} + (u_2 - u_3)\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) \\ &\quad + u_3\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1})] \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_n] \quad (2.1.9)$$

$$\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_n + u_1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)] \quad (2.1.10)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}[\mathbf{y}_n + (u_2 - u_3)\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + u_3\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n)] \\ &\quad (2.1.11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}(\mathbf{y}_n) &= \sum_{i=0}^2 P_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_{n-2}) + \sum_{i=0}^2 A_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_{n-1}) \\ &\quad + \sum_{i=0}^2 B_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_n) \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \mathbf{K}(\mathbf{y}_n) \quad (2.1.13)$$

である。ここで

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}(x)) = \begin{pmatrix} F_1(\mathbf{y}(x)) \\ F_2(\mathbf{y}(x)) \\ \vdots \\ F_q(\mathbf{y}(x)) \end{pmatrix} \quad (2.1.14)$$

$u_i (i=1, 2, 3), P_j, A_j, B_j (j=0, 1, 2)$ は定数で、特に $P_i = A_2 = B_2 = 0 (i=0, 1, 2)$ の場合が 2 点をふくむ方法である。

そのとき変数が $x=x_n$ から $x=x_{n+1}$ に増すときの解の増分 $D(\mathbf{Y}(x_n))$ は

$$D(\mathbf{Y}(x_n)) = \mathbf{Y}(x_{n+1}) - \mathbf{Y}(x_n) \quad (2.1.15)$$

また、その際の \mathbf{y}_{n+1} の局所打切り誤差 $\mathbf{T}(\mathbf{Y}(x_n))$ は $\mathbf{T}(\mathbf{Y}(x_n)) = \mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n)) - D(\mathbf{Y}(x_n))$ (2.1.16) で与えられる。

4th order 法 \mathbf{y}_{n+1} の係数決定のための方程式系を Table 1 にかけげる。ただし、 $\mathbf{F}_{i,j} = \partial \mathbf{F} / \partial y_j$, $\mathbf{F}_{i,j} = \partial^2 \mathbf{F} / \partial y_i \partial y_j$ などで、くり返された添字は和をとることを表わす。たとえば

$$F_{i,j} v_j = \sum_{j=1}^q \frac{\partial F_i}{\partial y_j} v_j \quad (2.1.17)$$

よって

$$\frac{d\mathbf{F}}{dx} = \mathbf{F}' = \mathbf{F}_{i,j} F_j \quad (2.1.18)$$

Table 1 4th order 法誘導のための係数

項	係 数	
	$D(\mathbf{Y}(x_n))$	$\mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n))$
$h\mathbf{F}$	1	$P_0 + P_1 + P_2 + A_0 + A_1 + A_2 + B_0 + B_1 + B_2$
$h^2\mathbf{F}'$	1/2	$-2P_0 + (u_1 - 2)P_1 + (u_2 - 2)P_2 - A_0 + (u_1 - 1)A_1 + (u_2 - 1)A_2 + u_1 B_1 + u_2 B_2$
$(h^3/2)\mathbf{F}''$	1/3	$4P_0 + (u_1 - 2)^2 P_1 + (u_2 - 2)^2 P_2 + A_0 + (u_1 - 1)^2 A_1 + (u_2 - 1)^2 A_2 + u_1^2 B_1 + u_2^2 B_2$
$(h^4/2)\mathbf{F}_{i,j}\mathbf{F}'$	0	$-u_1^2 P_1 + (2u_1 u_3 - u_2^2) P_2 - u_1^2 A_1 + (2u_1 u_3 - u_2^2) A_2 - u_1^2 B_1 + (2u_1 u_3 - u_2^2) B_2$
$(h^4/6)\mathbf{F}^{(3)}$	1/4	$-8P_0 + (u_1 - 2)^3 P_1 + (u_2 - 2)^3 P_2 - A_0 + (u_1 - 1)^3 A_1 + (u_2 - 1)^3 A_2 + u_1^3 B_1 + u_2^3 B_2$
$(h^4/2)\mathbf{F}_{i,m}\mathbf{F}_j\mathbf{F}_m'$	0	$u_1^2 (2 - u_1) P_1 + (2u_1 u_3 - u_2^2) (u_2 - 2) P_2 + u_1^2 (1 - u_1) A_1 + (2u_1 u_3 - u_2^2) (u_2 - 1) A_2 - u_1^3 B_1 + u_2 (2u_1 u_3 - u_2^2) B_2$
$(h^4/6)\mathbf{F}_{i,j}\mathbf{F}_j''$	0	$u_1^2 (6 - u_1) P_1 + (3u_1 u_3 (u_1 - 4) + u_2^2 (6 - u_2)) P_2 + u_1^2 (3 - u_1) A_1 + (3u_1 u_3 (u_1 - 2) - u_2^2 (u_2 - 3)) A_2 - u_1^2 B_1 + (3u_1^2 u_3 - u_2^3) B_2$
$(h^4/2)\mathbf{F}_{i,j}\mathbf{F}_j,k\mathbf{F}_k'$	0	$-u_1^2 u_3 (P_1 + A_2 + B_2)$
$(h^5/24)\mathbf{F}^{(4)}$	1/5	$16P_0 + (u_1 - 2)^4 P_1 + (u_2 - 2)^4 P_2 + A_0 + (u_1 - 1)^4 A_1 + (u_2 - 1)^4 A_2 + u_1^4 B_1 + u_2^4 B_2$
$(h^5/6)\mathbf{F}_{i,m}\mathbf{F}_j\mathbf{F}_m''$	0	$u_1^2 (6 - u_1) (u_1 - 2) P_1 + (u_2 - 2) \{3u_1 u_3 (u_1 - 4) - u_2^2 (u_2 - 6)\} P_2 + u_1^2 (3 - u_1) (u_1 - 1) A_1 + (3u_1 u_3 (u_1 - 2) - u_2^2 (u_2 - 3)) (u_2 - 1) A_2 - u_1^4 B_1 + u_2 (3u_1^2 u_3 - u_2^3) B_2$
$(h^5/4)\mathbf{F}_{i,k}\mathbf{F}_j\mathbf{F}_j\mathbf{F}_k\mathbf{F}_m'$	0	$-u_1^2 (u_1 - 2)^2 P_1 + (2u_1 u_3 - u_2^2) (u_2 - 2)^2 P_2 - u_1^2 (u_1 - 1)^2 A_1 + (2u_1 u_3 - u_2^2) (u_2 - 1)^2 A_2 - u_1^4 B_1 + u_2^2 (2u_1 u_3 - u_2^2) B_2$
$(h^5/8)\mathbf{F}_{i,m}\mathbf{F}_j'\mathbf{F}_m'$	0	$-u_1^2 (u_1^2 - 8u_1 + 8) P_1 + \{4u_1 u_3 (4 - 4u_2 + u_1 u_3) - u_2^2 (u_2^2 - 8u_2 + 8)\} P_2 - u_1^2 (u_1^2 - 4u_1 + 2) A_1 + \{4u_1 u_3 (1 - 2u_2 + u_1 u_3) - u_2^2 (u_2^2 - 4u_2 + 2)\} A_2 - u_1^4 B_1 + (4u_1^2 u_3^2 - u_2^4) B_2$
$(h^5/24)\mathbf{F}_{i,j}\mathbf{F}_j^{(3)}$	0	$-u_1^2 (u_1^2 - 8u_1 + 24) P_1 + \{4u_1 u_3 (u_1^2 - 6u_1 + 12) - u_2^2 (u_2^2 - 8u_2 + 24)\} P_2 - u_1^2 (u_1^2 - 4u_1 + 6) A_1 + \{4u_1 u_3 (u_1^2 - 3u_1 + 3) - u_2^2 (u_2^2 - 4u_2 + 6)\} A_2 - u_1^4 B_1 + (4u_1^2 u_3 - u_2^4) B_2$
$(h^5/2)\mathbf{F}_{i,j}\mathbf{F}_j,k\mathbf{F}_k'\mathbf{F}_m$	0	$u_1^2 u_3 (2 - u_1) P_2 + u_1^2 u_3 (1 - u_1) A_2 - u_1^2 u_3 B_2$
$(h^5/2)\mathbf{F}_{i,m}\mathbf{F}_j,k\mathbf{F}_k'\mathbf{F}_m$	0	$u_1^2 u_3 (2 - u_2) P_3 + u_1^2 u_3 (1 - u_2) A_2 - u_1^2 u_3 u_3 B_2$
$(h^5/6)\mathbf{F}_{i,j}\mathbf{F}_j,k\mathbf{F}_k''$	0	$u_1^2 u_3 (6 - u_1) P_2 + u_1^2 u_3 (3 - u_1) A_2 - u_1^2 u_3 B_2$

$$\frac{d^2\mathbf{F}}{dx^2} = \mathbf{F}'' = \mathbf{F}_{,jk}\mathbf{F}_j\mathbf{F}_k + \mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_{jk}\mathbf{F}_k \quad (2.1.19)$$

となる。

G. D. Byrne らによれば、two step の Pseudo-Runge-Kutta 法において、stepあたり 2 あるいは 3 回の関数計算により 3rd, あるいは 4th order の精度を得ることができる。two step 法については文献(1), (2)にゆずり、ここでは、3rd order Runge-Kutta 法の打切り誤差の評価に応用するために、3 点をふくむ three step 法を誘導する。

いま、(2.1.13) によって表わされる \mathbf{y}_{n+1} が 4th order 法になるための条件式を、 u_1, u_2, u_3, P_0 および B_0 をパラメータとして解けば

$$\begin{aligned} P_1 &= [R(u_1, u_2, u_3)\{T(u_2, P_0) - V(P_0)\} \\ &\quad + 3u_1\{W(u_1, u_2, u_3)(u_1 - 2u_2 + 1) \\ &\quad - u_1u_2(u_2 - 1)\}S(P_0, B_0)]/D \end{aligned} \quad (2.1.20)$$

$$\begin{aligned} P_2 &= [3u_1S(P_0, B_0)\{(u_1 - 1)R(u_1, u_2, u_3) \\ &\quad + u_1(u_1 - u_2)(u_2 - u_1 + 1)\} \\ &\quad + R(u_1, u_2, u_3)\{V(P_0) - T(u_1, P_0)\}]/D \end{aligned} \quad (2.1.21)$$

$$A_0 = 1 - P_0 - B_0 \quad (2.1.22)$$

$$\begin{aligned} A_1 &= 2[S(P_0, B_0)W(u_1, u_2, u_3)\{Y(u_1, u_2) \\ &\quad - X(u_1)\} + u_1^2S(P_0, B_0)\{Y(u_2, u_2) \\ &\quad - X(u_2)\} + R(u_1, u_2, u_3)\{V(P_0) \\ &\quad - S(P_0, B_0)T(u_2, P_0)\}]/D \end{aligned} \quad (2.1.23)$$

$$\begin{aligned} A_2 &= 2[R(u_1, u_2, u_3)\{T(u_1, P_0) - V(P_0)\} \\ &\quad + 3u_1S(P_0, B_0)\{E(u_1, u_2) + u_1^2 \\ &\quad - (u_1 - 1)W(u_1, u_2, u_3)\}]/D \end{aligned} \quad (2.1.24)$$

$$\begin{aligned} B_1 &= [R(u_1, u_2, u_3)\{T(u_2, P_0) - V(P_0)\} \\ &\quad - 3C(u_1, u_2)S(P_0, B_0) \\ &\quad + 3F(u_1, u_2)S(P_0, B_0)W(u_1, u_2, u_3)]/D \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

$$\begin{aligned} B_2 &= [R(u_1, u_2, u_3)\{V(P_0) - T(u_1, P_0)\} \\ &\quad + 3u_1S(P_0, B_0)\{(u_1 - 1)W(u_1, u_2, u_3) \\ &\quad - u_1F(u_2, u_1)\}]/D \end{aligned} \quad (2.1.26)$$

ここで

$$\begin{aligned} D &= 6(u_2 - u_1)R(u_1, u_2, u_3) \\ R(u_1, u_2, u_3) &= u_1^2 + 2u_1u_3 - u_2^2 \\ V(P_0) &= \frac{7}{12} + 4P_0 \\ S(P_0, B_0) &= \frac{3}{2} + P_0 - B_0 \\ W(u_1, u_2, u_3) &= 2u_1u_3 - u_2^2 \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} T(u_1, P_0) &= (3u_1 - 1)\left(\frac{5}{6} - 2P_0\right) \\ X(u_1) &= 3u_1^2 - 4u_1 + 2 \\ Y(u_1, u_2) &= (3u_2 - 2)(2u_1 - 1) \\ C(u_1, u_2) &= u_1^2u_2(u_2 - 1) \\ E(u_1, u_2) &= u_1u_2(u_2 - 2u_1) \\ F(u_1, u_2) &= (u_1 - 1)(u_1 - 2u_2) \end{aligned} \right\} \quad (2.1.27)$$

である。

上の解における D が 0 の場合、特に $u_1 = u_2$ のとき、その解はつきのようになる。

$$\begin{aligned} P_1 &= [W(u_1, u_2, u_3)\{G(u_1, u_2, P_0, A_1) \\ &\quad - 3u_1A_1\} + 3C(u_1, u_2)A_1]/D^* \end{aligned} \quad (2.1.28)$$

$$\begin{aligned} P_2 &= \{3C(u_1, u_2)I(P_0, A_1) \\ &\quad + u_1^2u_2Q(u_1, P_0, A_1) \\ &\quad + W(u_1, u_2, u_3)J(u_1, P_0, A_1)\}/D^* \end{aligned} \quad (2.1.29)$$

$$\begin{aligned} A_0 &= 2[u_1^2\{K(u_2, P_0) + M(u_1, u_2, P_0, A_1)\} \\ &\quad + W(u_1, u_2, u_3)\{L(u_1, u_2, P_0) \\ &\quad + M(u_1, u_2, P_0, A_1)\}]/D^* \end{aligned} \quad (2.1.30)$$

$$\begin{aligned} A_2 &= -2\left[W(u_1, u_2, u_3)J(u_1, P_0, A_1) \right. \\ &\quad \left. + u_1^2\left\{3(u_2 - 1)^2I(P_0, A_1) \right.\right. \\ &\quad \left.\left. + \frac{1}{2}(2u_2 - 1)Q(u_1, P_0, A_1)\right\}\right]/D^* \end{aligned} \quad (2.1.31)$$

$$\begin{aligned} B_1 &= [3C(u_1, u_2)A_1 \\ &\quad - W(u_1, u_2, u_3)\{G(u_1, u_2, P_0, A_1) \\ &\quad + 3(2u_2 - u_1)A_1\}]/D^* \end{aligned} \quad (2.1.32)$$

$$\begin{aligned} B_2 &= [W(u_1, u_2, u_3)J(u_1, P_0, A_1) \\ &\quad - u_1^2(u_2 - 1)\{N(u_1, P_0, A_1) \\ &\quad - (3u_2 - 4)I(P_0, A_1)\}]/D^* \end{aligned} \quad (2.1.33)$$

$$\begin{aligned} B_0 &= \left[2R(u_1, u_2, u_3)\left\{(3u_2 - 2)I(P_0, A_1) \right.\right. \\ &\quad \left.\left. - \frac{1}{2}N(u_1, P_0, A_1)\right\} \right. \\ &\quad \left. - 6\left(\frac{3}{2} + P_0\right)\{C(u_1, u_2) \right. \\ &\quad \left. + W(u_1, u_2, u_3)H(u_1, u_2)\}\right]/D^* \end{aligned} \quad (2.1.34)$$

ここで

$$\left. \begin{aligned}
 D^* &= -6\{H(u_1, u_2)W(u_1, u_2, u_3) \\
 &\quad + C(u_1, u_2)\} \\
 G(u_1, u_2, P_0, A_1) &= -\frac{9}{4} - 6u_2P_0 + 3u_1(2u_2 - u_1)A_1 + \frac{5}{2}u_2 \\
 H(u_1, u_2) &= 2u_1u_2 - u_1^2 - u_2 \\
 I(P_0, A_1) &= \frac{5}{6} - 2P_0 + A_1 \\
 Q(u_1, P_0, A_1) &= \frac{1}{2} - 12P_0 - 6(u_1 - 1)A_1 \\
 J(u_1, P_0, A_1) &= \frac{1}{4}(10u_1^2 - 18u_1 + 9) \\
 &\quad - 6u_1^2P_0 - 3u_1(u_1 - 1)A_1 \\
 K(u_2, P_0) &= \left(\frac{1}{2} + 2P_0\right)(3u_2^2 - 6u_2 + 2) \\
 L(u_1, u_2, P_0) &= \left(\frac{1}{2} + 2P_0\right)(6u_1u_2 - 3u_1^2 - 6u_2 + 2) \\
 M(u_1, u_2, P_0, A_1) &= \frac{5}{4} - 4P_0 - u_2(1 - 12P_0) + 3(u_1 - u_2)A_1 \\
 N(u_1, P_0, A_1) &= \frac{7}{6} + 8P_0 + 2(3u_1 - 2)A_1 \\
 P(u_1, P_0, A_1) &= \frac{1}{2} - 12P_0 - 6(u_1 - 1)A_1
 \end{aligned} \right\} \quad (2.1.35)$$

である。

上記の解を用いて各パラメータを定めれば、 \mathbf{y}_{n+1} は 4th order 法となり、そのときの局所打切り誤差 $T(\mathbf{Y}(x_n))$ は、

$$\begin{aligned}
 T(\mathbf{Y}(x_n)) &= h^5(a_1\mathbf{F}^{(4)} + a_2\mathbf{F}_{,jm}\mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_{,m}'' \\
 &\quad + a_3\mathbf{F}_{,jkm}\mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_{,k}\mathbf{F}_{,m}' \\
 &\quad + a_4\mathbf{F}_{,jm}\mathbf{F}_{,j}'\mathbf{F}_{,m}' + a_5\mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_{,j}^{(3)} \\
 &\quad + a_6\mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_{,j,km}\mathbf{F}_{,k}'\mathbf{F}_{,m} \\
 &\quad + a_7\mathbf{F}_{,jm}\mathbf{F}_{,j,k}\mathbf{F}_{,k}'\mathbf{F}_{,m} \\
 &\quad + a_8\mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_{,j,k}\mathbf{F}_{,k}'') + \dots \quad (2.1.36)
 \end{aligned}$$

となる。ここで $a_i, i=1, 2, \dots, 8$ は、公式を特徴化するパラメータの関数で、その式は Table 1 から直ちに知られるであろう。

公式の一例をつぎに示し（公式 I）とする。

$$\left. \begin{aligned}
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2})\right]
 \end{aligned} \right\} \quad (\text{公式 I})$$

$$\left. \begin{aligned}
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{2}{3}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{2}{3}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n)\right] \\
 \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n - \frac{1}{48} \left\{ 10\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) - 2\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) \right. \\
 &\quad \left. - 18\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) + \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) + 25\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) \right. \\
 &\quad \left. - 30\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) - 11\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) - 23\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) \right\}
 \end{aligned} \right\} \quad (2.1.37)$$

この型の公式は、また、4 節において示される諸公式の \mathbf{y}_{n+1}' として与えられる。

つぎに打切り誤差の観点から、公式を最適化することを考える。そのため、打切り精度について、つぎの 2 つの判定基準 A, B を使用する。

$$A = \sum_{i=1}^8 |\alpha_i| \quad (2.1.38)$$

$$B = \sum_{i=1}^8 \alpha_i^2 \quad (2.1.39)$$

公式の最適化はつぎの要領でなされた。

(1) 上の 2 とおりの解において、自由パラメータはそれぞれ $(u_1, u_2, u_3, P_0, B_0)$ および $(u_1=u_2, u_3, P_0, A_1)$ であって、 $u_i (i=1, 2, 3)$ は 0.1 から 1.0 まで 0.1 刻み、 P_0, B_0, A_1 は 0.0 から 1.0 まで同様に 0.1 刻みで動かされる。

(2) 上記の自由パラメーターの各組に対して、他の係数および打切り精度の判定基準 A, B を計算する。

(3) すべての係数の組の中から、 A, B のなるべく小さいものを選ぶ。

このようにして選ばれた公式の一例をつぎに示し、（公式 II）とする。

$$\left. \begin{aligned}
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{9}{10}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{2}{5}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2})\right]
 \end{aligned} \right\}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{9}{10}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})\right. \\
 &\quad \left.+ \frac{2}{5}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\
 (\text{公式II}) \quad \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{9}{10}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + \frac{2}{3}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n)\right] \\
 \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n - \frac{1}{20}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) + \frac{7}{15}\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 &\quad - \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) + \frac{1}{10}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 &\quad - \frac{14}{15}\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) + \frac{3}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) \\
 &\quad - \frac{1}{20}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) + \frac{7}{15}\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n)
 \end{aligned} \tag{2.1.40}$$

2.2 収束定理

二、三の仮定と定義がなされれば、解の収束が証明される。

仮 定

- (i) $\mathbf{F}(\mathbf{y}(x))$ は $x \in I$ において連続で $\|\mathbf{y}(x)\| < \infty$ である。
- (ii) \mathbf{F} は任意の 2 つのベクトル $\mathbf{y}^*(x)$ と $\mathbf{y}(x)$, $x \in I$ に対して Lipschitz の条件を満たす。
- (iii) $\mathbf{K}(\mathbf{y}(x))$ はすべての $x \in I$, $\|\mathbf{y}\| < \infty$, $x \pm h \in I$ であるようなすべての h に対して定義されている。

定義 1 Pseudo-Runge-Kutta 法は

$$\lim_{h \rightarrow 0} (\mathbf{K}(\mathbf{y}(x))) / h = \mathbf{F}(\mathbf{y}(x)), \\
 x \in I, \quad \|\mathbf{y}\| < \infty \tag{2.2.1}$$

なるとき初期値問題と無矛盾 (consistent) であるという。

定義 2 Pseudo-Runge-Kutta 法は任意の η に対して

$$\lim_{h \rightarrow 0, x_n=x} \mathbf{y} = \mathbf{y}(x), \quad x \in I \tag{2.2.2}$$

なるとき収束する (convergent) といいう。

Pseudo-Runge-Kutta 法は、 \mathbf{y} と \mathbf{F} が連続であるから無矛盾であることは作り方より明らか。

定理 (収束定理)

m を Pseudo-Runge-Kutta 法の order とし、第 1 成分が x_j であるベクトル

$$\mathbf{W}_j^*, \mathbf{W}_j \left(\begin{array}{l} j=n, n-1, n-2, \\ n=1, 2, \dots, P-1, \frac{x_n-a}{h} \leq P \leq \frac{b-a}{h} \end{array} \right)$$

に対して不等式

$$\begin{aligned}
 \|\mathbf{K}(\mathbf{W}^*) - \mathbf{K}(\mathbf{W})\| &\leq h \{ \|\mathbf{W}_n^* - \mathbf{W}_n\| N_m \\
 &\quad + \|\mathbf{W}_{n-1}^* - \mathbf{W}_{n-1}\| M_m \\
 &\quad + \|\mathbf{W}_{n-2}^* - \mathbf{W}_{n-2}\| O_m \} \tag{2.2.3}
 \end{aligned}$$

を満足する非負実数 N_m, M_m, O_m が存在するものとする。また

$$\|\mathbf{Y}(x_2) - \mathbf{y}_2\| \leq h^r L \tag{2.2.4}$$

$r \geq 0$, $L \geq 0$ を満足する定数が存在するものとする。

上の条件と仮定 (i)～(iii) のもとに、3 点をふくむ Pseudo-Runge-Kutta 法は収束する。

証 明

定義により

$$\begin{aligned}
 \mathbf{Y}(x_{n+1}) - \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{Y}(x_n) - \mathbf{y}_n + D(\mathbf{Y}(x_n)) - \mathbf{K}(\mathbf{y}_n) \\
 D(\mathbf{Y}(x_n)) &= \mathbf{Y}(x_{n+1}) - \mathbf{Y}(x_n) \\
 &\quad (h \neq 0, n=1, 2, \dots, P-1) \\
 \lim_{h \rightarrow 0} (D(\mathbf{Y}(x_n))) / h &= \mathbf{F}(\mathbf{Y}(x_n))
 \end{aligned}$$

$\mathbf{Y}(x_n) - \mathbf{y}_n = \mathbf{e}_n$ とおけば

$$\begin{aligned}
 \mathbf{e}_{n+1} &= \mathbf{e}_n + \{ D(\mathbf{Y}(x_n)) - h\mathbf{F}(\mathbf{Y}(x_n)) \} \\
 &\quad + \{ h\mathbf{F}(\mathbf{Y}(x_n)) - \mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n)) \} \\
 &\quad + \{ \mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n)) - \mathbf{K}(\mathbf{y}_n) \} \\
 &\quad n=1, 2, \dots, P-1
 \end{aligned}$$

平均値の定理により、ある定数 Q , $0 \leq Q \leq 1$ に対して

$$D(\mathbf{Y}(x_n)) = h\mathbf{F}(\mathbf{Y}(x_n + Qh))$$

さらに、無矛盾の条件が用いられるならば

$$\begin{aligned}
 \mathbf{e}_{n+1} &= \mathbf{e}_n + h \{ \mathbf{F}(\mathbf{Y}(x_n + Qh)) - \mathbf{F}(\mathbf{Y}(x_n)) \} \\
 &\quad + h \{ \lim_{h \rightarrow 0} (\mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n)) / h) - \mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n)) / h \} \\
 &\quad + \{ \mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n)) - \mathbf{K}(\mathbf{y}_n) \}
 \end{aligned}$$

最初の 2 項は $h \rightarrow 0$ のとき 0 に収束する。

$$\begin{aligned}
 hg(h) &= h \{ \|\mathbf{F}(\mathbf{Y}(x_n + Qh)) - \mathbf{F}(\mathbf{Y}(x_n))\| \\
 &\quad + \|\lim_{h \rightarrow 0} (\mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n)) / h) - \mathbf{K}(\mathbf{Y}(x_n)) / h\|
 \end{aligned}$$

$Z_n = \|\mathbf{e}_n\|$ おけば

$$\begin{aligned}
 Z_{n+1} &\leq Z_n + hg(h) \\
 &\quad + h \{ Z_n N_m + Z_{n-1} M_m + Z_{n-2} O_m \}
 \end{aligned}$$

これより

$$\sum_{n=2}^{j-1} (Z_{n+1} - Z_n) \leq Phg(h)$$

$$\begin{aligned} & + h(N_m + M_m + O_m) \sum_{n=2}^{j-3} Z_n \\ & + hO_m Z_0 + h(M_m + O_m) Z_1 \\ & + h(N_m + M_m) Z_{j-2} \\ & + hN_m Z_{j-1} \end{aligned}$$

よって

$$Z_j \leq Phg(h) + Z_2 + h(N_m + M_m + O_m) \sum_{n=0}^{j-1} Z_n$$

数学的帰納法により、すべての自然数 j に対して

$$Z_j \leq \{Phg(h) + h^r L\} (1 + h(N_m + M_m + O_m))^j$$

これより

$$Z_j \leq \{Phg(h) + h^r L\} \exp(jh(N_m + M_m + O_m))$$

あるいは

$$\begin{aligned} Z_j &\leq [(b-a)g(h) \\ &+ h^r L] \exp((b-a)(N_m + M_m + O_m)) \\ & \quad j = 0, 1, 2, \dots, P \end{aligned}$$

かくして

$$\lim_{h \rightarrow 0, x_n=x} Z_n = \lim_{h \rightarrow 0, x_n=x} \|e_n\| = \lim_{h \rightarrow 0, x_n=x} \|\mathbf{Y}(x_n) - \mathbf{y}_n\| = 0$$

すなわち

$$\lim_{h \rightarrow 0, x_n=x} \mathbf{y}_n = \mathbf{Y}(x_n)$$

以上の証明は two step 法に対する Byrne の証明と全く同様である¹⁾.

2.3 数値例

公式の誘導にあやまりがないことを立証するためには、1つの数値例を Table 2 に示す。

なお、本節にかけた公式の打切り精度を一瞥して知るのに便利であるから、それらの公式および classical Runge-Kutta 法について、前述の判定基準を Table

Table 2 $dy/dx = 5y/1+x$, $y(0)=1$ の正確な解と（公式 I），（公式 II），classical Runge-Kutta 法による数値解の比較

x	公式 I	公式 II	正確な解	classical R-K 法
0.0625	(1.354081154)	(1.354081154)	1.354081154	
0.1250	(1.802032471)	(1.802032471)	1.802032471	(1.802032471)
0.1875	2.361376907	2.361392737	2.361392021	2.361369265
0.2500	3.051721850	3.051759624	3.051757813	3.051705547
0.3125	3.894839247	3.894905383	3.894902229	3.894812576
0.3750	4.914789899	4.914891264	4.914886475	4.914750312
0.4375	6.138037357	6.138181798	6.138175011	6.137981851
0.5000	7.593562744	7.593759202	7.593750000	7.593487860
1.0000	31.99894779	32.00005138	32.00000000	31.99852740
1.5000	97.65281972	97.65641732	97.65625000	97.65143785

() 内の値は出発値として与えたもの

Table 3 公式 I, 公式 II および classical Runge-Kutta 法の打切り精度

判定基準	公式 I	公式 II	classical R-K 法
A	5.25×10^{-1}	1.14×10^{-2}	2.67×10^{-2}
B	4.24×10^{-2}	6.23×10^{-5}	1.41×10^{-4}

3 に示す。

3. 誤差評価能力をもつ 2nd Order 公式

3.1 公式の誘導と誤差解析

公式の一般形はつぎのようになる。

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \quad (3.1.1)$$

$$\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1} + u_1 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})) \quad (3.1.2)$$

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \quad (3.1.3)$$

$$\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n + u_1 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)) \quad (3.1.4)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \sum_{i=0}^1 C_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_n) \quad (3.1.5)$$

$$\mathbf{y}_{n+1}' = \mathbf{y}_n + \sum_{i=0}^1 A_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_{n-1}) + \sum_{i=0}^1 B_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_n) \quad (3.1.6)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \quad (3.1.7)$$

ここで $u_1, A_i, B_i, C_i (i=0, 1)$ は定数、 \mathbf{y}_{n+1} および \mathbf{y}_{n+1}' はそれぞれ 2nd および 3rd order 公式で、その差 \mathbf{T} は \mathbf{y}_{n+1} の打切り誤差の推定値である。

\mathbf{y}_{n+1} および \mathbf{y}_{n+1}' が、それぞれ 2nd および 3rd order 法となるための条件式を解けば

$$C_1 = \frac{1}{2u_1} \quad (3.1.8)$$

$$C_0 = 1 - C_1 \quad (3.1.9)$$

$$A_0 = \frac{5 - 6u_1}{12u_1} \quad (3.1.10)$$

$$B_0 = 1 - A_0 \quad (3.1.11)$$

$$B_1 = \frac{5}{12u_1} \quad (3.1.12)$$

$$A_1 = -B_1 \quad (3.1.13)$$

となる¹⁾。

よく知られた 2nd order 法（たとえば、文献 (5)を見よ）を数値解を求める公式として使用した公式 3 例をつぎに示す。

(i) $u_1 = 1/2$ に対応するもの

数値解を求める公式は Runge によって考案されたものである。

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned} \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\ \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\ \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)\right] \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \\ \mathbf{y}_{n+1}' &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{6} \left\{ 2\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) - 5\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) \right. \\ & \quad \left. + 4\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + 5\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \right\} \\ \mathbf{T} &= \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \end{aligned} \right\} \quad (3.1.14)
 \end{aligned}$$

(ii) $u_1 = 2/3$ に対応するもの

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned} \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\ \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\ \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{2}{3}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)\right] \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{4} \left\{ \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + 3\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \right\} \\ \mathbf{y}_{n+1}' &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{8} \left\{ \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) - 5\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) \right. \\ & \quad \left. + 7\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + 5\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \right\} \\ \mathbf{T} &= \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \end{aligned} \right\} \quad (3.1.15)
 \end{aligned}$$

(iii) $u_1 = 1$ に対応するもの

数値解を求める公式は Heun によるものである。

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned} \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\ \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1} + \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})) \\ \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\ \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n + \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)) \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \right\} \\ \mathbf{y}_{n+1}' &= \mathbf{y}_n - \frac{1}{12} \left\{ \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) + 5\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) \right. \\ & \quad \left. - 13\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) - 5\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \right\} \\ \mathbf{T} &= \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \end{aligned} \right\} \quad (3.1.16)
 \end{aligned}$$

つぎに打切り誤差の観点から、公式を最適化することを考える。そのため前節と同様な、公式の打切り精度の判定基準を使用する。

\mathbf{y}_{n+1} および \mathbf{y}_{n+1}' の打切り誤差を、それぞれ

$\mathbf{T}(\mathbf{Y}(x_n))$ および $\mathbf{T}'(\mathbf{Y}(x_n))$ とすれば

$$\mathbf{T}(\mathbf{Y}(x_n)) = h^3(b_1\mathbf{F}'' + b_2\mathbf{F}_j\mathbf{F}_j') + \dots \quad (3.1.17)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{T}'(\mathbf{Y}(x_n)) &= h^4(c_1\mathbf{F}^{(3)} + c_2\mathbf{F}_{,jm}\mathbf{F}_j\mathbf{F}_m' \\ & \quad + c_3\mathbf{F}_{,i}\mathbf{F}_j'' + c_4\mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_{i,k}\mathbf{F}_k') + \dots \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

ここで $b_i (i=1, 2)$, $c_i (i=1, 2, 3, 4)$ は公式を特徴化するパラメータの関数で、Table 1 および解(3.1.8)～(3.1.13)からつきのようになる。

$$b_1 = \frac{1}{4} \left(u_1 - \frac{2}{3} \right) \quad (3.1.19)$$

$$b_2 = -\frac{1}{4} u_1 \quad (3.1.20)$$

$$C_1 = \frac{5u_1 - 4}{24} \quad (3.1.21)$$

$$C_2 = C_3 = -\frac{5u_1}{24} \quad (3.1.22)$$

$$C_4 = 0 \quad (3.1.23)$$

\mathbf{y}_{n+1} および \mathbf{y}_{n+1}' の打切り精度の判定基準としては、つきの諸量

$$A' = \sum_{i=1}^2 |b_i| \quad (3.1.24)$$

$$B' = \sum_{i=1}^2 b_i^2 \quad (3.1.25)$$

$$A'' = \sum_{i=1}^4 |c_i| \quad (3.1.26)$$

$$B'' = \sum_{i=1}^4 c_i^2 \quad (3.1.27)$$

を使用する。

そのとき u_1 と A' , A'' の関係、および u_1 と B' , B'' の関係は、それぞれ Fig. 1 および Fig. 2 で与えられる。

特に $\mathbf{F}(\mathbf{y}(x)) = \mathbf{F}[x]$ の場合には、Fig. 1 および Fig. 2 に対応するものは、それぞれ Fig. 3 および Fig. 4 のようになる。

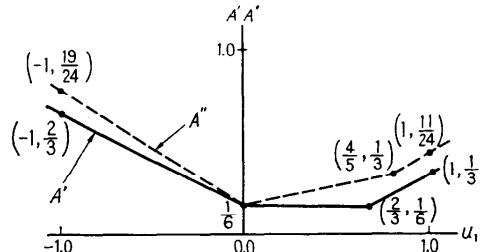


Fig. 1 u_1 と A' および A'' の関係

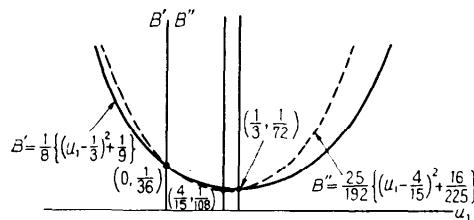
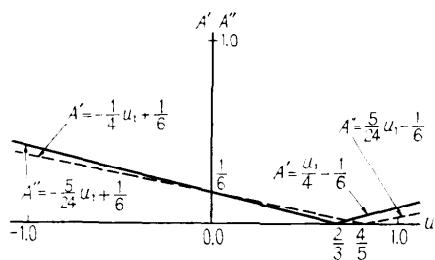
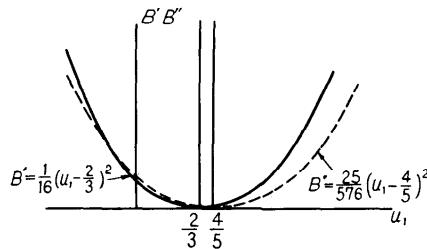
Fig. 2 u_1 と B' , B'' との関係

Fig. 1 および Fig. 2 の観察から, $\mathbf{y}(x)$ が一般関数の場合には, u_1 として 0 の周辺の値をとるのが望しいと考えられる。また, Fig. 3 および Fig. 4 の観察から, \mathbf{F} が x のみの関数である場合には, u_1 として $4/5$ の周辺の値をとるのが適当であろう。このようにして, $\mathbf{y}(x)$ が一般関数および \mathbf{F} が x のみの関数である場合について, つぎの二公式 (公式 VI) および

Fig. 3 $\mathbf{F}(\mathbf{y}(x)) = \mathbf{F}[x]$ の場合における
 u_1 と A' , A'' との関係Fig. 4 $\mathbf{F}(\mathbf{y}(x)) = \mathbf{F}[x]$ の場合における
 u_1 と B' , B'' の関係

(公式 VII) が得られる。

$$\begin{aligned} k_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\ k_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{1}{10}k_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ k_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\ k_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{1}{10}k_0(\mathbf{y}_n)\right] \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n - 4k_0(\mathbf{y}_n) + 5k_1(\mathbf{y}_n) \\ \mathbf{y}_{n+1}' &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{6}\left\{22k_0(\mathbf{y}_{n-1}) - 16k_1(\mathbf{y}_{n-1})\right. \\ &\quad \left.+ 25k_0(\mathbf{y}_n) - 25k_1(\mathbf{y}_n)\right\} \\ \mathbf{T} &= \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \end{aligned} \quad (3.1.28)$$

$$\begin{aligned} k_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\ k_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{4}{5}k_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ k_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\ k_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{4}{5}k_0(\mathbf{y}_n)\right] \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{8}\left\{3k_0(\mathbf{y}_n) + 5k_1(\mathbf{y}_n)\right\} \\ \mathbf{y}_{n+1}' &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{48}\left\{k_0(\mathbf{y}_{n-1}) - 25k_1(\mathbf{y}_{n-1})\right. \\ &\quad \left.+ 47k_0(\mathbf{y}_n) + 25k_1(\mathbf{y}_n)\right\} \\ \mathbf{T} &= \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \end{aligned} \quad (3.1.29)$$

本節に掲げる諸公式に対する打切り精度判定基準を Table 4 に示す。この表の観察から, われわれは各公式の性能を概括的にとらえることができる。

3.2 数値例

つぎに公式の誘導が正しく行なわれたことを立証するため, 二つの数値例を Table 5 および Table 6 に示す。Fig. 1~Fig. 4 および Table 4 と数値例とは, ある程度符合していることが認められる。

Table 4 各公式の打切り精度

式 判定基準 積分公式	公式 III	公式 IV	公式 V	公式 VI	公式 VII
\mathbf{y}_{n+1}	A' 1/6(1/24)	$1/3(0)$	$1/3(1/12)$	$1/6(17/120)$	$7/30(1/30)$
	B' 5/288(1/576)	$1/18(0)$	$5/72(1/144)$	$149/7200(289/14400)$	$37/900(1/900)$
\mathbf{y}_{n+1}'	A'' 13/48(1/16)	$11/36(1/36)$	$11/24(1/24)$	$9/48(7/48)$	$1/3(0)$
	B'' 59/2304(1/256)	$17/432(1/1296)$	$17/192(1/576)$	$17/768(49/2304)$	$1/18(0)$

() 内は $\mathbf{F}(\mathbf{y}(x)) = \mathbf{F}[x]$ の場合を示す

Table 5 $dy/dx = e^x, y(0)=1$ の数値解における誤差とその推定値

[ここで, $(t \cdot e)_i$ =(第 i step における真の誤差)× 10^8 , $(e \cdot e)_i$ =(第 i step における推定誤差)× 10^8 , $r_i = (e \cdot e)_i / \{(t \cdot e)_i - (t \cdot e)_{i-1}\}$ である.]

公式 誤差 x_i	公式 III			公式 IV			公式 V			公式 VI			公式 VII		
	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i
0.02	-4.3	-4.1	0.95	-10.0	0	0	8.3	8.3	1.0	-14.3	-14.1	0.99	3.3	3.4	1.03
0.03	-8.5	-4.1	0.98	-10.0	0	不定	16.8	8.3	0.98	-28.7	-14.2	0.99	6.8	3.5	1.0
0.04	-12.9	-4.2	0.95				25.2	8.4	1.0	-43.4	-14.5	0.99	10.1	3.5	1.06
0.05	-17.3	-4.2	0.95				33.8	8.5	0.99	-58.1	-14.6	0.99	13.5	3.4	1.0
0.10	-40.0	-4.4	0.94				78.1	9.1	1.01	-134.3	-15.4	0.99	30.9	3.8	1.09
0.20	-88.9	-4.9	0.94				173.8	9.9	1.0	-298.5	-17.0	0.99	68.5	4.0	1.05

Table 6 $dy/dx = -(1/3)x^2y^2, y(2)=1$ の数値解における誤差とその推定値

[ここで, $(t \cdot e)_i$ =(第 i step における真の誤差)× 10^6 , $(e \cdot e)_i$ =(第 i step における推定誤差)× 10^6 , r_i は Table 5 と同じ.]

公式 誤差 x_i	公式 III			公式 IV			公式 V			公式 VI			公式 VII		
	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i
2.04	6.9389	9.2328	1.04	7.4530	7.7724	1.04	8.4622	8.8319	1.04	5.6795	5.911	1.04	7.8597	8.1993	1.04
2.06	13.2270	7.1084	1.13	14.2003	7.6315	1.13	16.1107	8.6581	1.13	10.08425	5.827	1.13	14.9702	8.0452	1.13
2.08	18.9148	6.8040	1.20	20.2972	7.2978	1.20	23.0106	8.2671	1.20	15.5274	5.594	1.19	21.3907	7.6884	1.20
2.10	24.0489	6.5129	1.27	25.7949	6.9793	1.27	29.2219	7.8946	1.27	19.7706	5.3702	1.27	27.1761	7.3482	1.27
2.12	28.6725	6.2342	1.35	30.7407	6.6748	1.35	34.8000	7.5398	1.35	23.6047	5.1546	1.34	32.3768	7.0235	1.35
2.20	42.8219	5.2367	1.77	45.8354	5.5897	1.78	51.7490	6.2820	1.78	35.4379	4.3721	1.76	48.2190	5.8688	1.78
2.30	53.0466	4.9124	2.78	56.6755	4.4893	2.80	63.7950	5.0189	2.83	44.1546	3.5582	2.71	59.5453	4.7026	2.81

4. 誤差評価能力をもつ 3rd order 公式

4.1 公式の誘導と誤差解析

公式の一般形は

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2}) \quad (4.1.1)$$

$$\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2} + u_1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2})) \quad (4.1.2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2} + (u_2 - u_3)\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) \\ &\quad + u_3\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2})) \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \quad (4.1.4)$$

$$\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1} + u_1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})) \quad (4.1.5)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1} + (u_2 - u_3)\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) \\ &\quad + u_3\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1})) \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \quad (4.1.7)$$

$$\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n + u_1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)) \quad (4.1.8)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n + (u_2 - u_3)\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) \\ &\quad + u_3\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n)) \end{aligned} \quad (4.1.9)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \sum_{i=0}^2 C_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_n) \quad (4.1.10)$$

$$\mathbf{y}_{n+1}' = \mathbf{y}_n + \sum_{i=0}^2 P_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_{n-2}) + \sum_{i=0}^2 A_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_{n-1}) \\ + \sum_{i=0}^2 B_i \mathbf{k}_i(\mathbf{y}_n) \quad (4.1.11)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \quad (4.1.12)$$

ここで, $u_i (i=1, 2, 3)$, $C_i, P_i, A_i, B_i (i=0, 1, 2)$ は

定数, $\mathbf{y}_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}'$ はそれぞれ 3rd および 4th order 公式, \mathbf{T} は \mathbf{y}_{n+1} の打切り誤差の推定値である.

(4.1.10) および (4.1.11) によって与えられる \mathbf{y}_{n+1} および \mathbf{y}_{n+1}' を, それぞれ 3rd および 4th order 法とするための条件式の解は

(1) (2.1.27)における D が 0 でないとき つきの式 (4.1.13)～(4.1.16) および (2.1.20)～(2.1.27) によって与えられる.

$$u_3 = \frac{u_2(u_1 - u_2)}{u_1(3u_1 - 2)} \quad (4.1.13)$$

$$C_0 = \frac{6u_1u_2 - 3(u_1 + u_2) + 2}{6u_1u_2} \quad (4.1.14)$$

$$C_1 = \frac{3u_2 - 2}{6u_1(u_2 - u_1)} \quad (4.1.15)$$

$$C_2 = \frac{3u_1 - 2}{6u_2(u_1 - u_2)} \quad (4.1.16)$$

(2) (2.1.27)における D が 0 のとき

(i) $u_1 = u_2$ のとき つきの (4.1.17)～(4.1.20) および (2.1.28)～(2.1.35) である.

$$u_1 = u_2 = \frac{2}{3} \quad (4.1.17)$$

$$C_0 = \frac{1}{4} \quad (4.1.18)$$

$$C_1 = \frac{3u_3 - 1}{4u_3} \quad (4.1.19)$$

$$C_2 = \frac{1}{4u_3} \quad (4.1.20)$$

(ii) $u_1 \neq u_2 = 0$ のとき つぎの(4.1.21)~(4.1.24) および(2.1.28)~(2.1.35) によって与えられる。

$$u_1 = \frac{2}{3} \quad (4.1.21)$$

$$C_0 = \frac{u_3 - 1}{4u_3} \quad (4.1.22)$$

$$C_1 = \frac{3}{4} \quad (4.1.23)$$

$$C_2 = \frac{1}{4u_3} \quad (4.1.24)$$

よく知られた 3rd order 法 (たとえば、文献(6)を見よ) に誤差評価能力を示した公式 5 例をつぎに示す。

$$\begin{aligned} & k_0(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-2}] \\ & k_1(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{1}{3}k_0(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{2}{3}k_1(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\ & k_0(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-1}] \\ & k_1(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{1}{3}k_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{2}{3}k_1(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ & k_0(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_n] \\ & k_1(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{1}{3}k_0(\mathbf{y}_n)\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{2}{3}k_1(\mathbf{y}_n)\right] \\ & \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}\left\{k_0(\mathbf{y}_n) + 3k_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\ & \mathbf{y}_{n+1}' = \mathbf{y}_n + \frac{1}{120}\left\{12k_1(\mathbf{y}_{n-2}) - 56k_2(\mathbf{y}_{n-2})\right. \\ & \quad + 81k_0(\mathbf{y}_{n-1}) - 24k_1(\mathbf{y}_{n-1}) \\ & \quad - 29k_2(\mathbf{y}_{n-1}) + 39k_0(\mathbf{y}_n) + 12k_1(\mathbf{y}_n) \\ & \quad \left.+ 85k_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\ & \mathbf{T} = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \end{aligned} \quad (4.1.25)$$

$$\begin{aligned} & k_0(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-2}] \\ & k_1(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{2}{3}k_0(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2} - k_0(\mathbf{y}_{n-2}) + k_1(\mathbf{y}_{n-2})) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & k_0(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-1}] \\ & k_1(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{2}{3}k_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1} - k_0(\mathbf{y}_{n-1}) + k_1(\mathbf{y}_{n-1})) \\ & k_0(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_n] \\ & k_1(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{2}{3}k_0(\mathbf{y}_n)\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n - k_0(\mathbf{y}_n) + k_1(\mathbf{y}_n)) \\ & \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}\left\{3k_1(\mathbf{y}_n) + k_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\ & \mathbf{y}_{n+1}' = \mathbf{y}_n + \frac{1}{7992}\left\{148k_1(\mathbf{y}_{n-2})\right. \\ & \quad - 296k_2(\mathbf{y}_{n-2}) + 2960k_0(\mathbf{y}_{n-1}) \\ & \quad - 5513k_1(\mathbf{y}_{n-1}) - 1147k_2(\mathbf{y}_{n-1}) \\ & \quad + 5032k_0(\mathbf{y}_n) + 5365k_1(\mathbf{y}_n) \\ & \quad \left.+ 1443k_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\ & \mathbf{T} = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \end{aligned} \quad (4.1.26)$$

$$\begin{aligned} & k_0(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-2}] \\ & k_1(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{2}{3}k_0(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_{n-2}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{1}{3}k_0(\mathbf{y}_{n-2})\right. \\ & \quad \left.+\frac{1}{3}k_1(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\ & k_0(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_{n-1}] \\ & k_1(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{2}{3}k_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_{n-1}) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{1}{3}k_0(\mathbf{y}_{n-1})\right. \\ & \quad \left.+\frac{1}{3}k_1(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\ & k_0(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}[\mathbf{y}_n] \\ & k_1(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{2}{3}k_0(\mathbf{y}_n)\right] \\ & k_2(\mathbf{y}_n) = h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{1}{3}k_0(\mathbf{y}_n) + \frac{1}{3}k_1(\mathbf{y}_n)\right] \\ & \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}\left\{k_0(\mathbf{y}_n) + 3k_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\ & \mathbf{y}_{n+1}' = \mathbf{y}_n - \frac{1}{48}\left\{85k_1(\mathbf{y}_{n-2}) - 77k_2(\mathbf{y}_{n-2})\right. \\ & \quad - 18k_0(\mathbf{y}_{n-1}) - 170k_1(\mathbf{y}_{n-1}) \\ & \quad + 196k_2(\mathbf{y}_{n-1}) - 30k_0(\mathbf{y}_n) \\ & \quad \left.+ 85k_1(\mathbf{y}_n) - 119k_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\ & \mathbf{T} = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \end{aligned} \quad (4.1.27)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2} - \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) + 2\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2})) \\
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1} - \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) + 2\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1})) \\
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{1}{2}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n - \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + 2\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n)) \\
 \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{6}\left\{\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + 4\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) + \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\
 \mathbf{y}_{n+1}' &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{7992}\left\{-629\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2})\right. \\
 &\quad + 74\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) + 2479\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 &\quad - 3922\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) - 1443\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 &\quad + 5513\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + 4551\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \\
 &\quad \left.+ 1369\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\
 \mathbf{T} &= \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \tag{4.1.28}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-2} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2})\right] \\
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_{n-1} + \frac{2}{3}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1})\right] \\
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{2}{3}\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)\right] \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}\left[\mathbf{y}_n + \frac{2}{3}\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n)\right] \\
 \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{1}{8}\left\{2\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + 3\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) + 3\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\
 \mathbf{y}_{n+1}' &= \mathbf{y}_n - \frac{1}{48}\left\{10\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) - 2\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2})\right. \\
 &\quad - 18\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) + \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) + 25\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 &\quad \left.- 30\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) - 11\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) - 23\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n)\right\} \\
 \mathbf{T} &= \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}' \tag{4.1.29}
 \end{aligned}$$

以上の各公式中（公式VII）および（公式XI）は、それぞれ Heun による 3rd order 公式および Kutta's 3rd order rule を数値解を求める公式として使用するものである。

つぎに公式の最適化について考える。そのため、(4.1.10)によって与えられる \mathbf{y}_{n+1} の打切り誤差を求めれば

$$\begin{aligned}
 \mathbf{T}(\mathbf{Y}(x_n)) &= h^4(d_1\mathbf{F}^{(3)} + d_2\mathbf{F}_{,im}\mathbf{F}_i\mathbf{F}_m' \\
 &\quad + d_3\mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_j'' + d_4\mathbf{F}_{,j}\mathbf{F}_{j,k}\mathbf{F}_k') \\
 &\quad + \dots \tag{4.1.30}
 \end{aligned}$$

ここで $d_i (i=1, 2, 3, 4)$ は公式を特性能するパラメータの関数で、Table 1 からつぎのようになる。

$$d_1 = \left(u_1^3 C_1 + u_2^3 C_2 - \frac{1}{4}\right)/6 \tag{4.1.31}$$

$$d_2 = \{-u_1^3 C_1 + u_2 (2u_1 u_3 - u_2^2) C_2\}/2 \tag{4.1.32}$$

$$d_3 = \{-u_1^3 C_1 + (3u_1^2 u_3 - u_2^3) C_2\}/6 \tag{4.1.33}$$

$$d_4 = 0 \tag{4.1.34}$$

前節同様 \mathbf{y}_{n+1} の打切り精度の判定基準として

$$A''' = \sum_{i=1}^4 |d_i| \tag{4.1.35}$$

$$B''' = \sum_{i=1}^4 d_i^2 \tag{4.1.36}$$

を使用する。また \mathbf{y}_{n+1}' の打切り精度については、(2.1.38) および (2.1.39) によって定義される判定基準 A, B を使用する。

ここでは \mathbf{y}_{n+1}' が高精度、したがって、 \mathbf{y}_{n+1} の推定誤差が正確なものを選んだ。その公式をつぎに示す。

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2} + 0.1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2})) \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-2} - 3.335294118\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 &\quad + 4.235294118\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2})) \\
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1} + 0.1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1})) \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_{n-1} - 3.335294118\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 &\quad + 4.235294118\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1})) \\
 \mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n) \\
 \mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n + 0.1\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n)) \\
 \mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) &= h\mathbf{F}(\mathbf{y}_n - 3.335294118\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) \\
 &\quad + 4.235294118\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n)) \\
 \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n - 0.8518518519\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) \\
 &\quad + 1.458333333\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \\
 &\quad + 0.3935185185\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{y}_{n+1}' &= \mathbf{y}_n - 0.0135\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 &\quad + 0.2681666667\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-2}) \\
 &\quad + 0.1\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) - 0.4455\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 &\quad - 0.6638333333\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_{n-1}) \\
 &\quad + 0.9\mathbf{k}_0(\mathbf{y}_n) + 0.459\mathbf{k}_1(\mathbf{y}_n) \\
 &\quad + 0.3956666667\mathbf{k}_2(\mathbf{y}_n) \\
 \mathbf{T} &= \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}'
 \end{aligned}
 \tag{4.1.37}$$

公式の打切り精度や誤差評価に関する性能を概括的にとらえるのに便利であるから、本節に掲げる諸公式について、その判定基準を Table 7 に示す。

Table 7 各公式の打切り精度

判定基準 式	A'''	B''	A	B
公式 VIII	4.17×10^{-2}	8.79×10^{-4}	1.93×10^{-1}	6.83×10^{-3}
公式 IX	1.90×10^{-1}	1.58×10^{-2}	5.63×10^{-1}	5.80×10^{-2}
公式 X	7.87×10^{-2}	3.45×10^{-3}	2.21×10^0	1.15×10^0
公式 XI	8.33×10^{-2}	3.47×10^{-3}	3.20×10^{-1}	1.60×10^{-2}
公式 XII	7.87×10^{-2}	3.45×10^{-3}	5.25×10^{-1}	4.24×10^{-2}
公式 XIII	6.03×10^{-2}	1.72×10^{-3}	3.41×10^{-2}	1.92×10^{-4}

4.2 数値例

公式の透導が正しく行なわれたことを立証するためには、一つの数値例を Table 8 に示す。

5. むすび

以上述べてきたことから、one-step 法である Runge-Kutta 法において、すべて顧みない過去の情報の活用により、2nd および 3rd order Runge-Kutta 法に関する計算の犠牲なしに、誤差評価能力を与えることが知られるであろう。

3.において示された著名な公式に誤差評価能力を与えたものの中では、(公式III)がむしろ望ましく、(公式IV)は \mathbf{F} が x のみの関数であるときは、誤差評価能力をもたない。最適化によって得られた(公式VI)

および(公式VII)は、それぞれ $\mathbf{y}(x)$ が一般関数および \mathbf{F} が x のみの関数のとき望ましい公式である。

4.において示された著名な公式に誤差評価能力を与えたものは、性能上大同小異であるが、(公式X)は \mathbf{y}_{n+1}' の精度が低いので避けたらよいと思う。最適化によって得られた(公式XIII)は、前者に比してむしろ望ましいといえよう。このような評価は、Table 4 や Table 7 を熟視することによって得られる。この研究をまとめるに当って有益な助言を賜わられた東京大学森口繁一教授、著者の身辺にあって、計算機使用その他で著者を助けた山梨大学山下茂氏に心から感謝する。また、3.の一部について、研究室の学生石垣、桜井両君の協力をいたいたことを付記して、謝意を表わす次第である。

参考文献

- Byrne, G. D. and Lambert R. J.: "Pseudo-Runge-Kutta Methods Involving Two Points," J. ACM, vol. 13, No. 1, 1966, pp. 114~123.
- Byrne, G. D.: "Parameters for Pseudo-Runge-Kutta Methods," Comm. ACM, vol. 10, No. 2, 1967, pp. 102~104.
- Shintani, H.: "On a one step method of order 4," J. Sci. Hiroshima Univ. Ser. A-1, 30 (1966), No. 1, pp. 91~107.
- Shintani, H.: "Two-step Process by One-step Methods of Order 3 and of Order 4," J. Sci. Hiroshima Univ. Ser. A-1, 30 (1966), No. 2, pp. 183~195.
- Kopal, Z.: "Numerical Analysis," London, Chapman & Hall, 1961, pp. 201~202.
- Kunz, K. S.: "Numerical Analysis," New York, Tronto, London, McGRAW-HILL, 1957, pp. 183~187.

(昭和 44 年 5 月 30 日受付)

Table 8 $dy/dx = -(1/3)x^2y^2$, $y(2)=1$ の数値解における誤差とその推定値

[ただし、 $(t \cdot e)_i$ =(第 i step における真の誤差) $\times 10^8$, $(e \cdot e)_i$ =(第 i step における推定誤差) $\times 10^8$, $r_i = (e \cdot e)_i / [(t \cdot e)_i - (t \cdot e)_{i-1}]$ である。]

xi 誤差	(公式 VIII)		(公式 IX)		(公式 X)		(公式 XI)		(公式 XII)		(公式 XIII)				
	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i	$(t \cdot e)_i$	$(e \cdot e)_i$	r_i
2.00	(0.0)			(0.0)			(0.0)			(0.0)			(0.0)		
2.02	(0.0)			(0.0)			(0.0)			(0.0)			(0.0)		
2.04	(0.0)			(0.0)			(0.0)			(0.0)			(0.0)		
2.06	-8.31	-9.06	1.09	-13.54	-14.48	1.07	-10.01	-7.01	0.70	-8.22	-8.55	1.04	-10.09	-10.23	1.01
2.08	-15.8	-8.65	1.15	-25.74	-14.12	1.16	-19.02	-6.79	0.75	-15.60	-8.30	1.12	-19.15	-9.88	1.09
2.10	-22.53	-8.41	1.25	-36.70	-13.45	1.23	-27.09	-6.51	0.81	-22.21	-7.90	1.20	-27.27	-9.47	1.17
2.12	-28.58	-8.01	1.32	-46.53	-12.79	1.30	-34.32	-6.16	0.85	-28.14	-7.49	1.26	-34.55	-8.98	1.23
2.14	-33.98	-7.63	1.41	-55.31	-12.18	1.39	-40.76	-5.83	0.91	-33.40	-7.11	1.35	-41.03	-8.54	1.32
2.16	-38.8	-7.25	1.50	-63.14	-11.59	1.48	-46.49	-5.50	0.95	-38.08	-6.75	1.44	-46.79	-8.08	1.40
2.20	-46.85	-6.57	1.74	-76.23	-10.50	1.71	-56.02	-4.92	1.10	-45.86	-6.09	1.67	-56.37	-7.30	1.63
2.30	-59.68	-5.12	2.74	-97.06	-8.20	2.69	-71.04	-3.77	1.73	-58.06	-4.70	2.67	-71.45	-5.65	2.59