

打ち切り誤差評価の能力をもつ Runge-Kutta 型公式について*

田 中 正 次*

This paper, being a continuation of the preceding one by the same author, "On Kutta-Merson Process and its Allied Processes¹⁾," gives the development of it.

With the ordinary differential equation

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$$

we try, concerning firstly to the case where $f(x, y)$ is the function of x only and secondly to the case where $f(x, y)$ is a general function of x, y , to make those Runge-Kutta formulae with the ability of error estimation which compute the function three to five times at each step.

The basic difference between the methods of Kutta-Merson Process and also of F. Ceschino and the methods indicated by the author is that the procedure of making integral formula, which was omitted for the simplification's sake in the former, is made use of in the latter in order to obtain the higher accuracy of error estimation and also of the formulae searching for the numerical solutions.

In addition, for the optimization of the formulae, the author makes use of certain criteria used by A. Ralston and some others as well⁴⁾.

The formulae given by the author, which are concerned with the case where $f(x, y)$ is a general function of x, y , are especially effective when the function $f(x, y)$ is much complicated.

1. まえがき

この論文は、前著 "Kutta-Merson Process とその類似の方法について"¹⁾ の続編で、同方面に関するその後の研究をまとめたものである。

いま、数値解の対象となる微分方程式を

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (1.1)$$

とする。

最初、 $f(x, y)$ が特に x のみの関数である場合について、step 当りの関数値の計算回数が、3ないし5の、誤差評価能力をもつ Runge-Kutta 型公式を作る。なお、この場合、特に関数がある条件を満足するならば、もっと能率のよい公式を、作り得ることを示唆する。ついで、 $f(x, y)$ が2変数 x, y の一般関数である場合について、全く同様な公式を作る。また同部分

の研究に関連して、8けたの有効数字をもつ Kutta-Ceschino Process²⁾ の係数が十分な精度をもたないことを指摘すると共に、同 Process の有効数字10けたをもつ正しい係数を示す。最後に、たとえば Kutta-Merson Process³⁾ によって代表されるような、より低次の公式の打ち切り誤差をその公式の打ち切り誤差の目安として使用する方法について触れる。

R. Merson や F. Ceschino は、公式誘導の際、条件式のもつ自由度を計算手続きを少なくすることに費したが、著者は、同じ自由度を積分公式とその評価式の精度を上げるために費す。

著者による方法は、(1.1) の右辺の関数 $f(x, y)$ が複雑な場合に有効である。

2. $f(x, y)$ が x のみの関数である場合

この場合、初期値問題 (1.1) は、

$$\frac{dy}{dx} = f(x), \quad y(x_0) = y_0 \quad (2.1)$$

となる。

* On Runge-Kutta Type Formulae with the Error Estimating Ability, by Masatsugu Tanaka (The Faculty of Engineering Yamanashi University)

** 山梨大学工学部

2. においては、つぎのような一般式であらわされる、打切り誤差の評価が可能な Runge-Kutta 型公式について考える。

$$k_i = hf(x_0 + \alpha_i h) \quad i=1, 2, \dots, m \quad (2.2)$$

$$y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^n \nu_i k_i \quad (2.3)$$

$$y_2 = y_0 + \sum_{i=1}^m \mu_i k_i, \quad m \geq n \quad (2.4)$$

$$T = y_1 - y_2 \quad (2.5)$$

ここで、 α_i, ν_i, μ_i は定数で、特に $\alpha_1=0, y_1$ は数値解を求める公式、 y_2 は y_1 より高精度の公式で、その差 T は y_1 の打切り誤差の推定値をあらわす。

いま、上記の y_1 および y_2 が、それぞれ p th および q th order 法になるための条件を求めれば、つぎの連立方程式 (A) および (B) を得る。

$$(A) \begin{cases} \sum_{i=1}^n \nu_i = 1 \\ \sum_{i=2}^n \nu_i \alpha_i = 1/2 \\ \sum_{i=2}^n \nu_i \alpha_i^2 = 1/3 \\ \dots\dots \\ \dots\dots \\ \sum_{i=2}^n \nu_i \alpha_i^{p-1} = 1/p \end{cases} \quad (B) \begin{cases} \sum_{i=1}^m \mu_i = 1 \\ \sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i = 1/2 \\ \sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^2 = 1/3 \\ \dots\dots \\ \dots\dots \\ \sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^{q-1} = 1/q \end{cases}$$

公式 (2.2)~(2.5) における係数が、上の二つの方程式系 (A), (B) を満足するとき、 y_1 および y_2 の打切り誤差はおのおの

$$E_1 = \frac{h^{p+1}}{p!} \left\{ \sum_{i=2}^n \nu_i \alpha_i^p - \frac{1}{p+1} \right\} f(x_0)^{(p)} + \frac{h^{p+2}}{(p+1)!} \left\{ \sum_{i=2}^n \nu_i \alpha_i^{p+1} - \frac{1}{p+2} \right\} f(x_0)^{(p+1)} + \dots\dots \quad (2.6)$$

$$E_2 = \frac{h^{q+1}}{q!} \left\{ \sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^q - \frac{1}{q+1} \right\} f(x_0)^{(q)} + \frac{h^{q+2}}{(q+1)!} \left\{ \sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^{q+1} - \frac{1}{q+2} \right\} f(x_0)^{(q+1)} + \dots\dots \quad (2.7)$$

となる。後の便利のために

$$K_{11} = \left\{ \sum_{i=2}^n \nu_i \alpha_i^p - 1/(p+1) \right\} / p! \quad (2.8)$$

$$K_{12} = \left\{ \sum_{i=2}^n \nu_i \alpha_i^{p+1} - 1/(p+2) \right\} / (p+1)! \quad (2.9)$$

$$K_{21} = \left\{ \sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^q - 1/(q+1) \right\} / q! \quad (2.10)$$

$$K_{22} = \left\{ \sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^{q+1} - 1/(q+2) \right\} / (q+1)! \quad (2.11)$$

とおく。

2.1 $m=3$ の場合

$n=2$ および $n=3, \nu_1=0$ の二つの場合が考えられるが、ここでは前者についてのみ考察する。

(i) $p=2, q=3$ の場合

条件式は自由度 2 をもつので α_2, α_3 をパラメータとして解けば、

$$\nu_1 = (2\alpha_2 - 1)/2\alpha_2 \quad (2.1.1)$$

$$\nu_2 = 1/2\alpha_2 \quad (2.1.2)$$

$$\mu_1 = (6\alpha_2\alpha_3 - 3(\alpha_2 + \alpha_3) + 2)/6\alpha_2\alpha_3 \quad (2.1.3)$$

$$\mu_2 = (3\alpha_3 - 2)/6\alpha_2(\alpha_3 - \alpha_2) \quad (2.1.4)$$

いま $\mu_2 = a(\alpha_2, \alpha_3)$ とおけば、

$$\mu_3 = a(\alpha_3, \alpha_2) \quad (2.1.5)$$

ここで、たとえば $\alpha_2=1/2, \alpha_3=1$ とおけば、つぎの公式を得る。これを (公式 I) とする。

$$(公式 I) \begin{cases} k_1 = hf(x_0) \\ k_2 = hf(x_0 + h/2) \\ k_3 = hf(x_0 + h) \\ y_1 = y_0 + k_2 \\ y_2 = y_0 + (1/6)(k_1 + 4k_2 + k_3) \\ T = -(1/6)(k_1 - 2k_2 + k_3) \end{cases}$$

(ii) $p=2, q=4$ の場合

条件式の解は、 α_3 を自由パラメータに選べば、

$$\alpha_2 = (4\alpha_3 - 3)/2(3\alpha_3 - 2) \quad (2.1.6)$$

および式 (2.1.1)~(2.1.5) によって与えられる。いま $\alpha_3=1/4$ とおけば、つぎに示す (公式 II) を得る。

$$(公式 II) \begin{cases} k_1 = hf(x_0) \\ k_2 = hf(x_0 + (4/5)h) \\ k_3 = hf(x_0 + (1/4)h) \\ y_1 = y_0 + (1/8)(3k_1 + 5k_2) \\ y_2 = y_0 + (1/264)(11k_1 + 125k_2 + 128k_3) \\ T = (1/33)(11k_1 + 5k_2 - 16k_3) \end{cases}$$

(iii) $p=3, q=4$ の場合

条件式は不能でそのような公式は存在しない。

2.2 $m=4$ の場合

$n=3$ および $n=4, \nu_1=0$ の場合が考えられる。

(1) $n=3$ の場合

(i) $p=3, q=4$ の場合

条件式の解は、式 (2.1.3)~(2.1.5) において、

$\mu_i = \nu_i, i=1, 2, 3$ とおいたもの、および

$$\mu_4 = \frac{Q(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) - P(\alpha_2, \alpha_3) - 6(\alpha_3\alpha_4)^*}{Q(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)} + \alpha_4\alpha_2 + 4\alpha_4 \quad (2.2.1)$$

$$\mu_5 = \frac{P(\alpha_3, \alpha_4)}{R(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)} \quad (2.2.2)$$

ここで $\mu_2 = c(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ とおけば、

$$\mu_3 = c(\alpha_3, \alpha_2, \alpha_4) \quad (2 \cdot 2 \cdot 3)$$

$$\mu_4 = c(\alpha_4, \alpha_3, \alpha_2) \quad (2 \cdot 2 \cdot 4)$$

$$\text{ただし } P(\alpha_2, \alpha_3) = 6\alpha_2\alpha_3 - 4(\alpha_2 + \alpha_3) + 3$$

$$Q(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) = 12\alpha_2\alpha_3\alpha_4$$

$$R(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) = 12(\alpha_2 - \alpha_3)(\alpha_2 - \alpha_4)\alpha_2$$

である。

たとえば, $\alpha_2 = 1/4, \alpha_3 = 3/4, \alpha_4 = 1$ とおけば次式を得る。これを (公式 III) とする。

$$(公式 III) \begin{cases} k_1 = hf(x_0) \\ k_2 = hf(x_0 + (1/4)h) \\ k_3 = hf(x_0 + (3/4)h) \\ k_4 = hf(x_0 + h) \\ y_1 = y_0 + (1/9)(k_1 + 3k_2 + 5k_3) \\ y_2 = y_0 + (1/18)(k_1 + 8k_2 + 8k_3 + k_4) \\ T = (1/18)(k_1 - 2k_2 + 2k_3 - k_4) \end{cases}$$

(ii) $p=3, q=5$ の場合

条件式の解中 $\nu_i, i=1, 2, 3$ は, 式 (2.1.3)~(2.1.5) において $\mu_i = \nu_i, i=1, 2, 3$ とおけば得られる。また他の係数は,

$$S(\alpha_2, \alpha_3) = 20\alpha_2\alpha_3 - 15(\alpha_2 + \alpha_3) + 12$$

$$T(\alpha_2, \alpha_3) = 4\alpha_2\alpha_3[15(\alpha_2\alpha_3 - \alpha_2 - \alpha_3) + 16]$$

$$U(\alpha_2) = 10\alpha_2^2 - 12\alpha_2 + 3$$

$$W(\alpha_2, \alpha_3) = 30\alpha_2^2\alpha_3 - 20\alpha_2(\alpha_2 + 3\alpha_3) + 15(2\alpha_2 + \alpha_3) - 12$$

とおけば,

$$\alpha_4 = \frac{S(\alpha_2, \alpha_3)}{5P(\alpha_2, \alpha_3)} \quad (2 \cdot 2 \cdot 5)$$

$$\mu_1 = \frac{T(\alpha_2, \alpha_3) + U(\alpha_2) + U(\alpha_3) - 3}{12\alpha_2\alpha_3 S(\alpha_2, \alpha_3)} \quad (2 \cdot 2 \cdot 6)$$

$$\mu_2 = -\frac{U(\alpha_3)}{12\alpha_2(\alpha_2 - \alpha_3)W(\alpha_2, \alpha_3)} \quad (2 \cdot 2 \cdot 7)$$

ここで $\mu_2 = d(\alpha_2, \alpha_3)$ とおけば,

$$\mu_3 = d(\alpha_3, \alpha_2) \quad (2 \cdot 2 \cdot 8)$$

$$\mu_4 = \frac{125P(\alpha_2, \alpha_3)^4}{12S(\alpha_2, \alpha_3)W(\alpha_2, \alpha_3)W(\alpha_3, \alpha_2)} \quad (2 \cdot 2 \cdot 9)$$

となる。

パラメータ α_2, α_3 は, 可能な限り高精度な公式 y_1 に十分な誤差評価能力を与えるように選ばれた。すなわち, α_2, α_3 のおのおのを -1.0 から 0.1 刻みで 1.0 まで動かして得られるすべての二次元格子点 (α_2, α_3) について, 式 (2.8)~(2.11) によって定義される $K_{ij}, i, j=1, 2$ を計算し, K_{12} があまり小さくないものの中で K_{11}, K_{21} をなるべく小にするような (α_2, α_3)

の組を選んだ。なお選ばれた点の周辺を, 同様な趣旨にもとづき, 刻み幅を小さくしてさらに詳細に探索した。これらの探索は数値例を補助として進められた。得られた公式の一例をつぎに示す。これを (公式 IV) とする。

$$(公式 IV) \begin{cases} k_1 = hf(x_0) \\ k_2 = hf(x_0 + 0.6h) \\ k_3 = hf(x_0 + 1.77h) \\ k_4 = hf(x_0 + 4.277777778h) \\ y_1 = y_0 + 0.1980539861k_1 \\ \quad + 0.7858499525k_2 \\ \quad + 0.01609606129k_3 \\ y_2 = y_0 + 0.2000350560k_1 \\ \quad + 0.7823640125k_2 \\ \quad + 0.01782904441k_3 \\ \quad - 0.0002281128525k_4 \\ T = -0.001981069778k_1 \\ \quad + 0.003485940042k_2 \\ \quad - 0.1732983117k_3 \\ \quad + 0.0002281128525k_4 \end{cases}$$

(iii) $p=4, q=5$ の場合

条件式は不能でそのような公式は作れない。

(2) $n=4, \nu_1=0$ の場合

(i) $p=3, q=5$ の場合

条件式は 2 自由度をもつので α_2, α_3 をパラメータとして解けば, 係数 $\alpha_4, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4$ は式 (2.2.5)~(2.2.9) によって与えられる。また他の係数は

$$\nu_2 = \frac{2\alpha_2P(\alpha_3, \alpha_4)}{R(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)} \quad (2 \cdot 2 \cdot 10)$$

ここで $\nu_2 = e(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ とおけば,

$$\nu_3 = e(\alpha_3, \alpha_2, \alpha_4) \quad (2 \cdot 2 \cdot 11)$$

$$\nu_4 = e(\alpha_4, \alpha_3, \alpha_2) \quad (2 \cdot 2 \cdot 12)$$

となる。

パラメータ α_2, α_3 および他の係数は, (公式 IV) の誘導の際用いられたのと同様な考え方により, 計算機による多くの数値実験にもとづき適当に選ばれた。得られた公式の一例をつぎに示す。これを (公式 V) とする。

$$(公式 V) \begin{cases} k_1 = hf(x_0) \\ k_2 = hf(x_0 + 0.5h) \\ k_3 = hf(x_0 + 0.1h) \\ k_4 = hf(x_0 + 0.888888889h) \\ y_1 = y_0 + 0.4642857143k_2 \\ \quad + 0.2640845070k_3 \end{cases}$$

$$(公式V) \begin{cases} +0.2716297787 k_1 \\ y_2 = y_0 - 0.0208333333 k_1 \\ +0.4523809524 k_2 \\ +0.2934272300 k_3 \\ +0.2750251509 k_4 \\ T = 0.0208333333 k_1 \\ +0.01190476190 k_2 \\ -0.02934272300 k_3 \\ -0.003395372233 k_4 \end{cases}$$

(iii) $p=4, q=5$ の場合

容易にわかるように適当な解が存在せずそのような公式は作れない。

2.3 $m=5$ の場合

$n=4$ および $n=5, \nu_1=0$ の二つの場合が考えられる。

(1) $n=4$ の場合

(i) $p=4, q=6$ の場合

条件式は3自由度をもつので $\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$ をパラメータとして解けば、

$$\alpha_2 = \frac{10 - 12X(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)^*}{12 - 15X(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)^*} \frac{+15Y(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) - 20Z(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)}{+20Y(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) - 30Z(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)} \quad (2.3.1)$$

ここで $X(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) = \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5$

$$Y(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) = \alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_3\alpha_5$$

$$Z(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) = \alpha_3\alpha_4\alpha_5$$

$$\mu_2 = \Delta_2 / \Delta \quad (2.3.2)$$

$$\mu_3 = \Delta_3 / \Delta \quad (2.3.3)$$

$$\mu_4 = \Delta_4 / \Delta \quad (2.3.4)$$

$$\mu_5 = \Delta_5 / \Delta \quad (2.3.5)$$

$$\mu_1 = 1 - \sum_{i=2}^5 \mu_i \quad (2.3.6)$$

ただし

$$\Delta = \alpha_2(\alpha_2 - \alpha_3)(\alpha_2 - \alpha_4)(\alpha_2 - \alpha_5)M(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$$

ここで

$$M(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) = \alpha_3\alpha_4\alpha_5(\alpha_3 - \alpha_4)(\alpha_3 - \alpha_5)(\alpha_4 - \alpha_5)$$

$$\Delta_2 = M(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) \left\{ \frac{1}{5} - \frac{1}{4}X(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) + \frac{1}{3}Y(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) - \frac{1}{2}Z(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) \right\}$$

いま $\Delta_2 = f(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$ とおけば、

$$\Delta_3 = -f(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$$

$$\Delta_4 = f(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$$

$$\Delta_5 = -f(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$$

である。他の係数 $\nu_i, i=1, 2, 3, 4$ は、式(2.2.4)~(2.2.7)において $\mu_i = \nu_i, i=1, 2, 3, 4$ とおけば得られる。

4)~(2.2.7)において $\mu_i = \nu_i, i=1, 2, 3, 4$ とおけば得られる。

公式誘導において3の自由度は、電子計算機による多くの数値実験を参考にし、 y_1 の打切り精度を可能な限り高めるように費された。その考え方、方法は、(公式IV)の場合と同様である。得られた公式の一例をつぎに示す。これを(公式VI)とする。

$$(公式VI) \begin{cases} k_1 = hf(x_0) \\ k_2 = hf(x_0 + 0.8365878726 h) \\ k_3 = hf(x_0 + 0.3 h) \\ k_4 = hf(x_0 - 0.5 h) \\ k_5 = hf(x_0 - 0.85 h) \\ y_1 = y_0 + 0.03692328692 k_1 \\ + 0.4027789988 k_2 \\ + 0.5539860393 k_3 \\ + 0.006311674997 k_4 \\ y_2 = y_0 + 0.01652856065 k_1 \\ + 0.4006292846 k_2 \\ + 0.5686749535 k_3 \\ + 0.01793724026 k_4 \\ - 0.003770039033 k_5 \\ T = 0.02039472628 k_1 \\ + 0.002149714190 k_2 \\ - 0.01468891424 k_3 \\ - 0.01162556526 k_4 \\ + 0.003770039033 k_5 \end{cases}$$

(ii) $p=5, q=6$ の場合

条件式の解は、 $\nu_i = \mu_i, i=1, 2, 3, 4, \mu_5=0$ となるものであって、当面の目的には適しない。すなわち、そのような公式は作れない。

(2) $n=5, \nu_1=0$ の場合

(i) $p=4, q=6$ の場合

条件式の解は、

$$\nu_2 = \Delta_2'' / \Delta'' \quad (2.3.7)$$

$$\nu_3 = \Delta_3'' / \Delta'' \quad (2.3.8)$$

$$\nu_4 = \Delta_4'' / \Delta'' \quad (2.3.9)$$

$$\nu_5 = \Delta_5'' / \Delta'' \quad (2.3.10)$$

ただし、

$$\Delta'' = (\alpha_2 - \alpha_3)(\alpha_2 - \alpha_4)(\alpha_2 - \alpha_5)N(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$$

ここで

$$N(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) = (\alpha_3 - \alpha_4)(\alpha_3 - \alpha_5)(\alpha_4 - \alpha_5)$$

$$\Delta_2'' = N(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) \{ X(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)O(\alpha_4, \alpha_5) - K(\alpha_4, \alpha_5) \}$$

ここで

$$O(\alpha_4, \alpha_5) = \left(\frac{1}{2} - \alpha_5 \right) \alpha_4 + \frac{1}{2} \alpha_5 - \frac{1}{3}$$

$$K(\alpha_4, \alpha_5) = \alpha_4 \left(\frac{1}{2} - \alpha_5 \right) (\alpha_4 + \alpha_5) + \frac{1}{2} \alpha_5^2 - \frac{1}{4}$$

いま $d_2'' = n(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$ とおけば,

$$d_3'' = -n(\alpha_2, \alpha_4, \alpha_5)$$

$$d_4'' = n(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_5)$$

$$d_5'' = -n(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$$

である。他の係数 $\alpha_2, \mu_i, i=1, 2, \dots, 5$ は、式 (2.3.1)~(2.3.6) によって与えられる。自由度3は、電子計算機による多くの数値実験にもとづき、 y_1 の打ち切り精度を可能な限り高めるように費された。得られた公式の一例をつぎに示す。これを (公式VII) とする。

$$\left. \begin{aligned} k_1 &= hf(x_0) \\ k_2 &= hf(x_0 + 0.8877551020 h) \\ k_3 &= hf(x_0 - 0.2 h) \\ k_4 &= hf(x_0 + 0.1 h) \\ k_5 &= hf(x_0 + 0.5 h) \\ y_1 &= y_0 + 0.2758872083 k_2 \\ &\quad - 0.004467077638 k_3 \\ &\quad + 0.2752590674 k_4 \\ &\quad + 0.4533208020 k_5 \\ (公式VII) \quad y_2 &= y_0 - 0.03256704981 k_1 \\ &\quad + 0.2768673718 k_2 \\ &\quad + 0.001861282349 k_3 \\ &\quad + 0.3058434082 k_4 \\ &\quad + 0.4479949875 k_5 \\ T &= 0.03256704981 k_1 \\ &\quad - 0.0009801635404 k_2 \\ &\quad - 0.006328359987 k_3 \\ &\quad - 0.03058434082 k_4 \\ &\quad + 0.005325814536 k_5 \end{aligned} \right\}$$

(ii) $p=5, q=6$ の場合

条件式の解は、 $\nu_i = \mu_i, i=2, 3, 4, 5, \mu_1=0$ となつてこの場合には不適当である。すなわち、そのような公式は作れない。

2.4 数値例

公式の誘導が、正しく行なわれたことを立証するため、二つの数値例をかかげる。

Table 1. は常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = e^x, y(0)=1 \tag{2.4.1}$$

を、2. の各公式を用いて $x=0$ から刻み幅 0.1 で 1 ステップ積分したときの数値解 y_1, y_1 の真の誤差および推定打ち切り誤差を示す。

Table 2. は、常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{1+x}, y(0)=0 \tag{2.4.2}$$

を、 $x=0$ から刻み幅 0.1 で 1 ステップ積分したもののについて、Table 1. と同様なことを調べたものである。

Table 1. $\frac{dy}{dx} = e^x, y(0)=1$ の数値解

公式	数値解 y_1	真の誤差 $\times 10^9$	推定誤差 $\times 10^9$
I	1.105127109	-43809	-43812
II	1.105205441	34523	34525
III	1.105170734	-184	-183
IV	1.105171094	176	178
V	1.105170901	-17	-16
VI	1.105170917	-1	-1
VII	1.105170916	-2	-1

Table 2. $\frac{dy}{dx} = \frac{1}{1+x}, y(0)=0$ の数値解

公式	数値解 y_1	真の誤差 $\times 10^9$	推定誤差 $\times 10^9$
I	0.09523809523	-72084	-72150
II	0.09537037036	60191	60222
III	0.09531102286	844	859
IV	0.09530973639	-443	-505
V	0.09531025988	80	81
VI	0.09531020165	22	22
VII	0.09531017720	-2	-2.5

Table 1, 2 の観察から、公式の誘導にあやまりがないことが推測されるであろう。

作り方からわかるように、上述の各式はかなりよいものではあるが、必ずしも最適なものではない。なお、2. の随所に見られるように関数が 1 変数の場合には、2 変数の場合とちがって Runge-Kutta 型公式の達成されるオーダーは、関数計算の回数より大である⁶⁾。

2.5 注意

2. においてのべた諸公式中、特につぎのような型の公式については、ある条件の下において y_1 より高次の公式 y_2 の打ち切り誤差の近似値をとらえることができる。

$$k_i = hf(x_n + \alpha_i h) \quad \alpha_i = 0, i = 1, 2, \dots, m \tag{2.5.1}$$

$$y_1 = y_n + \sum_{i=1}^{m-1} \nu_i k_i \tag{2.5.2}$$

$$y_2 = y_n + \sum_{i=1}^m \mu_i k_i \tag{2.5.3}$$

$$T^{n+1} = y_1 - y_2 \tag{2.5.4}$$

ここで y_1, y_2 は、それぞれ $(m-1)$ th および m

th order 法で, T^{n+1} は y_1 の第 $(n+1)$ step における打切り誤差の推定値である.

このとき y_1 および y_2 の第 $(n+1)$ step における打切り誤差 E_1^{n+1} および E_2^{n+1} は, おおの

$$E_1^{n+1} = \frac{h_{n+1}^{m+1}}{(m-1)!} \left(\sum_{i=2}^{m-1} \nu_i \alpha_i^{m-1} - \frac{1}{m} \right) f(x_n)^{(m-1)} + \dots \quad (2.5.5)$$

$$E_2^{n+1} = \frac{h_{n+1}^{m+1}}{m!} \left(\sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^m - \frac{1}{m+1} \right) f(x_n)^{(m)} + \dots \quad (2.5.6)$$

によって与えられる. ここで $h_i = x_i - x_{i-1}$, $i=1, 2, \dots$ である. これより, 刻み幅 h_i を十分小さくとれば,

$$\begin{aligned} E_2^{n+1} &= \frac{h_{n+1}^{m+1}}{m!} \left(\sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^m - \frac{1}{m+1} \right) f(x_n)^{(m)} + \dots \\ &\doteq \frac{h_{n+1}^{m+1}}{m!} \left(\sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^m - \frac{1}{m+1} \right) \\ &\quad \frac{f(x_n)^{(m-1)} - f(x_{n-1})^{(m-1)}}{x_n - x_{n-1}} \\ &\doteq \frac{h_{n+1}}{mh_n} \frac{\left(\sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^m - \frac{1}{m+1} \right) (E_1^{n+1} - E_1^n)}{\left(\sum_{i=2}^{m-1} \nu_i d_i^{m-1} - \frac{1}{m} \right)} \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

一方 $E_1^n \doteq T^n$ であるから,

$$E_2^{n+1} \doteq \frac{h_{n+1} \left(\sum_{i=2}^m \mu_i \alpha_i^m - \frac{1}{m+1} \right) (T^{n+1} - T^n)}{mh_n \left(\sum_{i=2}^{m-1} \nu_i \alpha_i^{m-1} - \frac{1}{m} \right)} \quad (2.5.8)$$

よって, 刻み幅が十分小さく $f(x)^{(m)}$ が急変しない場合には, 前のステップの打切り誤差 T^n を T^{n+1} と併用することにより, y_2 の打切り誤差の推定値を得ることができる. 詳細は別の機会に譲る.

3. $f(x, y)$ が x および y の一般関数である場合

公式の一般形は,

$$h_i = hf(x_0 + \alpha_i h, y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j) \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.1)$$

$$y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^m \nu_i k_i \quad (3.2)$$

$$y_2 = y_0 + \sum_{i=1}^m \mu_i k_i \quad (3.3)$$

$$T = y_1 - y_2 \quad (3.4)$$

である. ここで $m \geq n$, $\alpha_i, \beta_{ij}, \nu_i, \mu_i$ は定数で, 特に $\alpha_1 = \beta_{10} = 0$ である. また y_1 は数値解を求める公式, y_2 は y_1 より高精度の公式で, y_1 の打切り誤差

の推定値 T を求めるのに必要なものである.

3.1 $m=4$ の場合

$n=3$ および $n=4$, $\nu_1=0$ の場合が考えられるが, 前者については既に文献 1) において考察した. したがって, ここでは後者のみを取扱う. (3.2) および (3.3) で与えられる y_1 および y_2 が, それぞれ 3rd および 4th order 法であるために係数が満足しなければならない条件式を求めれば, つぎの (A), (B) 二つの方程式系が得られる. すなわち,

$$(A) \begin{cases} \sum_{i=2}^4 \nu_i = 1 & (3.1.1) \\ \sum_{i=2}^4 \nu_i \alpha_i = 1/2 & (3.1.2) \\ \sum_{i=2}^4 \nu_i \alpha_i^2 = 1/3 & (3.1.3) \\ \nu_3 \alpha_2 \beta_{32} + \nu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) = 1/6 & (3.1.4) \end{cases}$$

$$(B) \begin{cases} \sum_{i=1}^4 \mu_i = 1 & (3.1.5) \\ \sum_{i=2}^4 \mu_i \alpha_i = 1/2 & (3.1.6) \\ \sum_{i=2}^4 \mu_i \alpha_i^2 = 1/3 & (3.1.7) \\ \mu_3 \alpha_2 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) = 1/6 & (3.1.8) \\ \sum_{i=2}^4 \mu_i \alpha_i^3 = 1/4 & (3.1.9) \\ \mu_3 \alpha_2^2 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i^2 \beta_{4i} \right) = 1/12 & (3.1.10) \\ \mu_3 \alpha_2 \alpha_3 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) \alpha_4 = 1/8 & (3.1.11) \\ \mu_4 \alpha_2 \beta_{32} \beta_{43} = 1/24 & (3.1.12) \end{cases}$$

方程式系 (A), (B) は, 13 未知変数に関する 12 個の方程式で 1 自由度をもつが, その解は容易にわかるように $\mu_i = \nu_i$, $i=2, 3, 4$, $\mu_1=0$ となり, 当面の目的には適しない. そこで, (3.1.4) を除く方程式系 (A), (B) を二つのパラメータ α_2, α_3 について解けば, 文献 7) p. 199 の $w_i = \mu_i$, $i=1, 2, 3, 4$ とおいた (5.6-47) 式, および

$$\nu_2 = \frac{3\alpha_3 - 1}{6(1-\alpha_2)(\alpha_3 - \alpha_2)} \quad (3.1.13)$$

$$\nu_3 = \frac{3\alpha_2 - 1}{6(\alpha_3 - 1)(\alpha_3 - \alpha_2)} \quad (3.1.14)$$

$$\nu_4 = \frac{6\alpha_2\alpha_3 - 3(\alpha_2 + \alpha_3) + 2}{6(\alpha_2 - 1)(\alpha_3 - 1)} \quad (3.1.15)$$

を得る.

よって, α_2, α_3 を任意に与え, 上述の諸式を用いて他の係数を計算すれば, 式 (3.2) および (3.3) によって与えられる y_1, y_2 は, それぞれ 2nd および 4th order 法となる. y_1 は 2nd order 法として

かなり高精度であるが、さらに可能な限り高精度になるよう α_2, α_3 を選んだ。この係数選択には電子計算機が使われ、 y_2 の打ち切り精度にも若干の考慮が払われた。公式の打ち切り精度の判定には、文献 1) の 2. において述べたものと同様な判定基準が用いられた。得られた公式の一例をつぎに示す。これを (公式 VIII) とする。

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned}
 k_1 &= hf(x_0, y_0) \\
 k_2 &= hf(x_0 - 0.4h, y_0 - 0.4k_1) \\
 k_3 &= hf(x_0 + 0.425h, \\
 & y_0 + 0.6684895833k_1 - 0.2434895833k_2) \\
 k_4 &= hf(x_0 + h, y_0 - 2.323685857k_1 \\
 & + 1.125483559k_2 + 2.198202298k_3) \\
 y_1 &= y_0 + 0.03968253968k_2 \\
 & + 0.7729468599k_3 \\
 & + 0.18737060041k_4 \\
 y_2 &= y_0 + 0.03431372549k_1 \\
 & + 0.02705627706k_2 \\
 & + 0.7440130202k_3 \\
 & + 0.1946169772k_4 \\
 T &= -0.03431372549k_1 \\
 & + 0.01262626263k_2 \\
 & + 0.02893383968k_3 \\
 & - 0.007246376812k_4
 \end{aligned} \right\} \text{(公式 VIII)}
 \end{aligned}$$

3・2 m=5 の場合

$n=4$ および $n=5, \nu_1=0$ の二つの場合が考えられる。後者については既に文献 1) において考察したので、ここでは前者のみを取扱う。(3・2) および (3・3) によって与えられる y_1 および y_2 が、それぞれ 4th および 5th order 法であるために係数が満足しなければならない条件式を求めれば、3・1 における方程式系 (B) において $\mu_i = \nu_i, i=1, 2, 3, 4$ とおいた方程式系 (C) および、つぎに示す方程式系 (D) が得られる。

$$\begin{aligned}
 & \sum_{i=1}^5 \mu_i = 1 \quad (3 \cdot 2 \cdot 1) \\
 & \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i = 1/2 \quad (3 \cdot 2 \cdot 2) \\
 & \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i^2 = 1/3 \quad (3 \cdot 2 \cdot 3) \\
 & \mu_3 \alpha_2 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^5 \alpha_i \beta_{5i} \right) = 1/6 \quad (3 \cdot 2 \cdot 4) \\
 & \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i^3 = 1/4 \quad (3 \cdot 2 \cdot 5) \\
 & \mu_3 \alpha_2^2 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i^2 \beta_{4i} \right) + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^5 \alpha_i^2 \beta_{5i} \right) = 1/12 \quad (3 \cdot 2 \cdot 6)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \mu_3 \alpha_2 \alpha_3 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) \alpha_4 + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^5 \alpha_i \beta_{5i} \right) \alpha_5 = 1/8 \quad (3 \cdot 2 \cdot 7) \\
 & \mu_4 \alpha_2 \beta_{32} \beta_{43} + \mu_5 \left\{ \alpha_2 \beta_{32} \beta_{53} + \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) \beta_{54} \right\} = 1/24 \quad (3 \cdot 2 \cdot 8) \\
 & \sum_{i=2}^5 \mu_i \alpha_i^4 = 1/5 \quad (3 \cdot 2 \cdot 9) \\
 & \left. \begin{aligned}
 & \mu_3 \alpha_2 \alpha_3^2 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) \alpha_4^2 \\
 & + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^5 \alpha_i \beta_{5i} \right) \alpha_5^2 = 1/10 \quad (3 \cdot 2 \cdot 10) \\
 & \mu_4 \alpha_2^2 \beta_{32} \beta_{43} + \mu_5 \left\{ \alpha_2^2 \beta_{32} \beta_{53} + \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i^2 \beta_{4i} \right) \beta_{54} \right\} = 1/60 \quad (3 \cdot 2 \cdot 11) \\
 & \mu_3 \alpha_2^2 \alpha_3 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i^2 \beta_{4i} \right) \alpha_4 + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^5 \alpha_i^2 \beta_{5i} \right) \alpha_5 = 1/15 \quad (3 \cdot 2 \cdot 12) \\
 & \mu_3 \alpha_2 \beta_{32}^2 \beta_{43} \beta_{54} = 1/120 \quad (3 \cdot 2 \cdot 13) \\
 & \mu_3 \alpha_2^2 \beta_{32}^2 + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right)^2 + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^5 \alpha_i \beta_{5i} \right)^2 = 1/20 \quad (3 \cdot 2 \cdot 14) \\
 & \mu_3 \alpha_2^3 \beta_{32} + \mu_4 \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i^3 \beta_{4i} \right) + \mu_5 \left(\sum_{i=2}^5 \alpha_i^3 \beta_{5i} \right) = 1/20 \quad (3 \cdot 2 \cdot 15) \\
 & \mu_4 \alpha_2 (\alpha_3 + \alpha_4) \beta_{32} \beta_{43} + \mu_5 \left\{ \alpha_2 (\alpha_3 + \alpha_5) \beta_{32} \beta_{53} \right. \\
 & \left. + \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) (\alpha_4 + \alpha_5) \beta_{54} \right\} = 7/120 \quad (3 \cdot 2 \cdot 16)
 \end{aligned} \right\} \text{(D)}
 \end{aligned}$$

(方程式系 (D) の誘導については、8) にくわしい。)

y_2 を 5th order 法とすることの不可能性——すなわち、(D) 群の解の存在しないこと——については、F. Ceschino による証明がある⁹⁾。そこで、まず y_1 が 3rd order 法であるように (C) 群の方程式から最初の 4 式を選び、ついで、 y_2 がかなり精度の高い 4th order 法——8 項からなる h^5 のオーダーの打ち切り誤差項中 3 項が 0 である——になるように (D) 群の方程式から式 (3・2・1)~(3・2・11) を抜き出す。そのとき両群から選出された方程式系は 4 自由度をもつので、それらを $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$ をパラメータとして解けば、文献 1) 4・4 節の式 (1)~(15) および次に示す諸式を得る。

いま

$$\begin{aligned}
 E(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_{32}) &= \alpha_3(\alpha_2 - \alpha_3) \\
 & - 2\alpha_2\alpha_4(\alpha_2 - \alpha_4)\beta_{32}
 \end{aligned}$$

$$F(\alpha_2, \alpha_3, \beta_{32}) = \alpha_3(\alpha_2 - \alpha_3) - \alpha_2\beta_{32}(3\alpha_2 - 2)$$

$$G(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) = \alpha_3(\alpha_2 - \alpha_3) \{ 2\alpha_4(\alpha_2 - \alpha_4) - 3\alpha_3 + 2 \}$$

$H(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_{32}) = 6\alpha_2\alpha_4(\alpha_2 - \alpha_4)(\alpha_3 - \alpha_2)\beta_{32}$ とおけば,

$$\nu_2 = \frac{G(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) + H(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_{32})}{6\alpha_2(\alpha_2 - \alpha_3)E(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_{32})} \quad (3.2.17)$$

$$\nu_3 = \frac{(3\alpha_2 - 2)E(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_{32}) - 2\alpha_4 *}{6\alpha_3(\alpha_2 - \alpha_3)E(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_{32})} * \frac{(\alpha_2 - \alpha_4)F(\alpha_2, \alpha_3, \beta_{32})}{(3.2.18)}$$

$$\nu_4 = \frac{F(\alpha_2, \alpha_3, \beta_{32})}{3E(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_{32})} \quad (3.2.19)$$

$$\nu_1 = 1 - \sum_{i=2}^4 \nu_i \quad (3.2.20)$$

したがって、任意に選ばれた実数パラメータ $(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$ に対して、上に示した式 (1)~(15), (3.2.17)~(3.2.20) を順次適用することにより他の係数を計算すれば、 y_1 は 3rd order 法、 y_2 はかなり精度のよい 4th order 法になる。係数パラメータ $(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$ は、文献 1) の 2. において定義された打ち切り精度の判定基準を用い、電子計算機による広汎な探索にもとづいて定められた。探索の方針は、まず y_2 を高精度にするパラメータの組 $(\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$ の存在範囲を求め、ついで、その中で推定誤差の精度を落さない限りなるべく高精度な y_1 を与える係数の組を選んだ。 y_2 を高精度にするパラメータの組の分布範囲については、文献 8) の研究において既に知られていたため、その結果を用いた。得られた公式の一列をつぎに示す。これを (公式IX) とする。

$$(公式IX) \left\{ \begin{array}{l} k_1 = hf(x_0, y_0) \\ k_2 = hf(x_0 + 0.0005h, y_0 + 0.0005k_1) \\ k_3 = hf(x_0 + 0.285h, y_0 - 80.89939470k_1 + 81.18439470k_2) \\ k_4 = hf(x_0 + 0.992h, y_0 + 2113.327899k_1 - 2117.778035k_2 + 5.442136522k_3) \\ k_5 = hf(x_0 + h, y_0 + 2249.757677k_1 - 2254.489040k_2 + 5.739991965k_3 - 0.008629230728k_4) \\ y_1 = y_0 - 131.2823524k_1 + 131.4998223k_2 + 0.4837620276k_3 + 0.2987680554k_4 \\ y_2 = y_0 + 65.80784286k_1 - 65.94767173k_2 + 0.7959885276k_3 + 4.715404915k_4 - 4.371564570k_5 \\ T = -65.47450953k_1 + 197.4474940k_2 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -0.3122264999k_3 - 4.416636860k_4 \\ + 4.371564570k_5 \end{array} \right.$$

3.3 Kutta-Ceschino Process (くわしくは文献 10) をみよ.)

公式の一般形 (3.1)~(3.4) において、特に $m=5, n=4, \nu_j = \beta_{5j} (j=1, 2, 3, 4)$ とおけば Kutta-Ceschino Process の一般式が得られる。この場合数値解を求める公式 y_1 は、5 回目の関数計算の際の y 部としてあらわれ、特別に作る必要がない。

式 (3.1)~(3.4) において、 $\alpha_1 = \beta_{10} = 0, \alpha_2 = \beta_{21} = 0.2, \alpha_3 = 0.8, \beta_{31} = -1.9085441, \beta_{32} = 2.7085441, \alpha_4 = 0.58, \beta_{41} = -0.19998240, \beta_{42} = 0.72770983, \beta_{43} = 0.052272571, \alpha_5 = 1.0, \beta_{51} = \nu_1 = 0.78126170, \beta_{52} = \nu_2 = -1.1191761, \beta_{53} = \nu_3 = -0.23706888, \beta_{54} = \nu_4 = 1.5749833, \mu_1 = 0.10483420, \mu_2 = 0.20115260, \mu_3 = -0.031342495, \mu_4 = 0.57264801, \mu_5 = 0.15270764$ といったものが Kutta-Ceschino Process で、1962 年 F. Ceschino によって公にされた⁹⁾。しかし、彼による叙述は簡潔で、公式誘導や係数最適化の過程を詳らかにしない。著者は、その未発表の過程を検討中、彼による係数が十分な精度をもたないことを発見した。

まず、Kutta-Ceschino Process の一般式における係数の満足すべき条件式と、その解を示そう。 $\nu_j = \beta_{5j} (j=1, 2, 3, 4)$ とおかれた (3.2) 式で与えられる y_1 が 3rd order 公式であるという条件、および (3.3) で与えられる y_2 が 4th order 公式であるという条件から、つぎに示す方程式系 (3.3.1)~(3.3.4) および 3.2 における連立方程式 (3.2.1)~(3.2.8) を得る。

$$\sum_{j=1}^4 \beta_{5j} = 1 \quad (3.3.1)$$

$$\sum_{j=2}^4 \beta_{5j} \alpha_j = 1/2 \quad (3.3.2)$$

$$\sum_{j=2}^4 \beta_{5j} \alpha_j^2 = 1/3 \quad (3.3.3)$$

$$\alpha_2 \beta_{32} \beta_{53} + \beta_{54} \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{4i} \right) = 1/6 \quad (3.3.4)$$

それらの連立方程式を $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ をパラメータとして解けば、

$$\mu_3^* = \frac{(1 - \alpha_2) \{ 1 - 2\alpha_2^2 - 4I(\alpha_2, \alpha_4, \mu_4) * \}}{4J(\alpha_2, \alpha_3) \{ \alpha_2 \alpha_3 - (\alpha_2 + \alpha_3) + 1 \}} * \frac{(1 + \alpha_2) + 4\mu_4(\alpha_2 + \alpha_4)J(\alpha_2, \alpha_4)}{=} = P(\mu_4) \quad (3.3.5)$$

ただし

$$I(\alpha_2, \alpha_4, \mu_4) = (1/3) - (\alpha_2/2) + \mu_4 \alpha_4 (\alpha_2 - \alpha_4)$$

$$J(\alpha_2, \alpha_4) = \alpha_4(\alpha_2 - \alpha_4)$$

である。

$$\begin{aligned} \mu_5 &= \{I(\alpha_2, \alpha_4, \mu_4) + J(\alpha_2, \alpha_3)\mu_3\} / (1 - \alpha_2) \\ &= R(\mu_4) \end{aligned} \quad (3 \cdot 3 \cdot 6)$$

$$\begin{aligned} \beta_{53} &= \frac{(\alpha_4 - \alpha_3)P(\mu_4)\mu_4 + \alpha_3 P(\mu_4)K(\mu_4) *}{K(\mu_4)(\alpha_4\mu_4 - \alpha_3 P(\mu_4)Z) + L(\mu_4)} * \\ &\quad * \frac{L(\mu_4)P(\mu_4)W}{(\mu_4 - P(\mu_4)Z)} \end{aligned} \quad (3 \cdot 3 \cdot 7)$$

ただし

$$K(\mu_4) = 1 - 3R(\mu_4), \quad L(\mu_4) = 3R(\mu_4) - 0.75$$

である。

$$\beta_{54} = W + Z\beta_{53} = Q(\beta_{53}) \quad (3 \cdot 3 \cdot 8)$$

ここで

$$W = \frac{2 - 3\alpha_2}{6\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)}, \quad Z = \frac{\alpha_3(\alpha_2 - \alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_2)} \text{ である。}$$

$$\begin{aligned} \beta_{43} &= - \frac{J(\alpha_2, \alpha_3)R(\mu_4)\beta_{53} + J(\alpha_2, \alpha_4) *}{J(\alpha_2, \alpha_3)\mu_4} * \\ &\quad * \frac{Q(\beta_{53})R(\mu_4) + \frac{1}{12}(1 - 2\alpha_2)}{Q(\beta_{53})R(\mu_4) + \frac{1}{12}(1 - 2\alpha_2)} \end{aligned} \quad (3 \cdot 3 \cdot 9)$$

$$\begin{aligned} \beta_{42} &= \frac{\frac{1}{6}(\beta_{53} - P(\mu_4)) - \frac{1}{2}R(\mu_4)\beta_{53} *}{\alpha_2 K(\beta_{53}, \mu_4)} * \\ &\quad * \frac{-\alpha_3 \beta_{43} K(\beta_{53}, \mu_4)}{\alpha_2 K(\beta_{53}, \mu_4)} \end{aligned} \quad (3 \cdot 3 \cdot 10)$$

ここで $K(\beta_{53}, \mu_4) = \beta_{53}\mu_4 - P(\mu_4)Q(\beta_{53})$ である。

$$\mu_2 = \frac{1 - 2(\mu_3\alpha_3 + \mu_4\alpha_4 + \mu_5)}{2\alpha_2} \quad (3 \cdot 3 \cdot 11)$$

$$\beta_{32} = \frac{\frac{1}{6} - \beta_{54} \left(\sum_{i=2}^3 \alpha_i \beta_{54i} \right)}{\alpha_2 \beta_{53}} \quad (3 \cdot 3 \cdot 12)$$

$$\beta_{52} = \frac{1 - 2 \left(\sum_{i=3}^4 \alpha_i \beta_{54i} \right)}{2\alpha_2} \quad (3 \cdot 3 \cdot 13)$$

$$\beta_{51} = 1 - \left(\sum_{i=2}^4 \beta_{54i} \right) \quad (3 \cdot 3 \cdot 14)$$

$$\mu_1 = 1 - \left(\sum_{i=2}^5 \mu_i \right) \quad (3 \cdot 3 \cdot 15)$$

$$\alpha_3 = 1 \quad (3 \cdot 3 \cdot 16)$$

ただし、上の各式における μ_4 は、つぎの方程式の

根である。

$$\begin{aligned} &4J(\alpha_2, \alpha_3)R(\mu_4)\beta_{53} + \{4J(\alpha_2, \alpha_4)\beta_{54}R(\mu_4) \\ &+ \frac{1}{3}(1 - 2\alpha_2)\}(\mu_4 - \beta_{54}K(\mu_4)) - J(\alpha_2, \alpha_3)\{ \\ &4\beta_{53}\mu_4 R(\mu_4) - \beta_{53}\mu_4 + P(\mu_4)\beta_{54}(1 - 4R(\mu_4))\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3 \cdot 3 \cdot 17)$$

積分公式の打ち切り精度の判定には、文献 1) の 2. において定義された尺度を用い、試行錯誤法により係数の最適化を試みた。しかし、この論文を書く時点までの探索においては、Kutta-Ceschino Process の顕著な改良は不可能と思われた。この探索によって得られた収穫は、F. Ceschino による 8 けたの有効数字をもつ係数は、下位 3 けたのあやまりを含む場合もあり十分な精度をもたないことが知られたことである。四捨五入法により有効数字 10 けたに丸められた、正しい係数をもつ Kutta-Ceschino Process を、つぎに示す。

Kutta-Ceschino Process

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_0, y_0) \\ k_2 = hf(x_0 + 0.2h, y_0 + 0.2k_1) \\ k_3 = hf(x_0 + 0.8h, y_0 - 1.908543733k_1 \\ \quad + 2.708543733k_2) \\ k_4 = hf(x_0 + 0.58h, y_0 - 0.1999824887k_1 \\ \quad + 0.7277099168k_2 + 0.05227257188k_3) \\ y_1 = y_0 + 0.7812626965k_1 - 1.119177885k_2 \\ \quad - 0.2370692383k_3 + 1.574984427k_4 \\ k_5 = hf(x_0 + h, y_1) \\ y_2 = y_0 + 0.1048342712k_1 + 0.2011525848k_2 \\ \quad - 0.03134250489k_3 + 0.5726480043k_4 \\ \quad + 0.1527076443k_5 \\ T = y_1 - y_2 \end{cases}$$

いま、原方程式 (3.3.1)~(3.3.4) および (3.2.1)~(3.2.8) において、各式の左辺と右辺との差を 10^{10} 倍したものをそれぞれ $x_1, x_2, \dots, x_{11}, x_{12}$ とおく。そのとき、F. Ceschino による 8 けたの係数、著者による同 process の 8 けたおよび 10 けた

Table 3. 各種解の検算

Kutta-Ceschino Process 係数	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	x_{12}
Ceschino による係数 (8 けた)	200	-100	-784	-629	-450	98	44	19	-99	-148	-83	-67
著者による係数 (8 けた)	-400	-200	-108	-31	-150	-80	-61	-54	-54	-33	-15	-54
著者による係数 (10 けた)	0	0	0	0	-10	-3	-1	-1	-1	0	-1	-2

の係数のおおのに対する $x_1, x_2, \dots, x_{11}, x_{12}$ の値は, Table 3. のようになる.

3.4 公式の性能と数値例

$f(x, y)$ が x, y の一般関数である場合の諸公式の性能は, 打切り精度の判定基準 (文献 1. の 2 節をみよ.) を一べつすることにより, ある程度つかむことができる. よって, 便利のため, 3 において誘導された諸公式に対するそれらの値を, 一覧表にして Table 4. に示す.

Table 4. 公式の打切り精度

積分公式	方法判定基準	(公式 VIII)	(公式 IX)	Kutta-Ceschino Process
		y_1	B ₃ C ₃ A ₄ B ₄ C ₄	6.895×10^{-4} 4.754×10^{-7} 3.074×10^{-2} 7.488×10^{-8} 1.573×10^{-5}
y_2	A ₅ B ₅ C ₅	2.593×10^{-1} 5.176×10^{-2} 6.524×10^{-4}	2.575×10^{-7} 8.567×10^{-8} 3.642×10^{-15}	2.890×10^{-2} 6.169×10^{-8} 6.536×10^{-8}
関数計算回数		4	5	5

Table 5. $\frac{dy}{dx} = -\frac{1}{3}x^2y^2, y(2)=1$ の $x=2.1$ における数値解

公式	数値解 y_1	$10^6 \times$ (真の誤差) TE	$10^6 \times$ (推定誤差) T	T/TE
(公式 VIII)	0.8772275929	118.8	120.1	0.99
(公式 IX)	0.8771340986	26.6	26.9	1.01
Kutta-Ceschino Process (10 けた)	0.8771164490	9.0	8.6	0.96

Table 6. $\frac{dy}{dx} = \frac{5y}{1+x}, y(0)=1$ の $x=0.1$ における解

公式	数値解 y_1	$10^6 \times$ (真の誤差) TE	$10^6 \times$ (推定誤差) T	T/TE
(公式 VIII)	1.610011268	-498.7	-445.6	0.89
(公式 IX)	1.610923240	415.2	422.9	1.02
Kutta-Ceschino (10 けた)	1.610932634	422.6	463.7	1.10

なお, 3 において公式の誘導が正しく行なわれたことを立証するために, 二つの数値例を示そう. Table 5. は, (公式VIII), (公式IX) および Kutta-Ceschino Process を用いて, 常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{1}{3}x^2y^2, y(2)=1 \quad (3.4.1)$$

を, 刻み幅 0.1 で $x=2.0$ から 1 ステップ積分したときの数値解, 真の誤差および推定誤差を示す. Table 6. は, 常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = \frac{5y}{1+x}, y(0)=1 \quad (3.4.2)$$

を, $x=0.0$ から刻み幅 0.1 で 1 ステップ積分したもののについて, 同様な調査を試みたものである.

(公式IX) と Kutta-Ceschino Process は, 同じ 5 回の関数計算を使用する方法であるが, 前者には後者において不必要であった数値解を求める公式を作る手続きが加わる. しかし, その代償として y_2 が高精度になり, 推定誤差の精度が上る. Table 4, 5 および 6 の観察からこの事実は確かめられる.

3.5 注 意

つぎに示す公式は, Kutta's 3rd order rule (Simpson's one-third rule) と classical Runge-Kutta Method とを組合わせたもので, y_1 および y_2 はそれぞれ 3rd および 4th order 法である¹¹⁾. これを (公式 X) とする.

$$(公式 X) \begin{cases} k_1 = hf(x_0, y_0) \\ k_2 = hf(x_0 + h/2, y_0 + k_1/2) \\ k_3 = hf(x_0 + h/2, y_0 + k_2/2) \\ k_4 = hf(x_0 + h, y_0 - k_1 + 2k_2) \\ k_5 = hf(x_0 + h, y_0 + k_3) \\ y_1 = y_0 + (1/6)(k_1 + 4k_2 + k_4) \\ y_2 = y_0 + (1/6)(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_5) \\ T = |y_1 - y_2| \end{cases}$$

上式における T は, 本来 y_1 の打切り誤差の推定値を与えるものであるが, ここでは y_2 の打切り誤差の見積りに使用される. このように, 数値解を求めようとする式の打切り誤差の見積りに, より低次の公式の打切り誤差を使っているものに, 他に Kutta-Merson Process がある. 著者が, 文献 1) およびこの 3 節において提案した諸公式は, y_2 を数値解を求める公式, T をその打切り誤差の見積りを与えるものと解釈すれば, 同様な型の公式となる. これらの式によれば, 4 回あるいは 5 回の関数計算により 4th order あるいはほぼ 5th order の公式の打切り誤差の見積りが得られる.

4. む す び

文献 1) および本論文において考察された諸公式は, すべて二つの精度の異なる積分公式 y_1, y_2 の差

として、低精度の公式 y_1 の打ち切り誤差の推定値、あるいは高精度の公式 y_2 の打ち切り誤差の見積りを得る方法である。いずれの場合においても、 y_1 の打ち切り誤差が、 y_2 の打ち切り誤差に比較して著しく大きいことが仮定されている。ところが、この仮定は一般には自明ではない。これは、関数 $f(x, y)$ にも、また公式を特性化する諸係数にも依存するものである。著者は、この仮定がなるべく広範囲にわたって成立するよう y_2 の打ち切り精度を可能な限り高め、 y_1 の打ち切り精度をある程度おさえた。ここでは問題提起にとどめるが、上記仮定の検討はこの種の公式の根本に横たわる問題である。

著者が3.において提案する方法は、関数 $f(x, y)$ が複雑で、step 当たりについて、積分公式を作る手続きの全計算量に対する割合が小さいとき特に有効である。

終りに、この研究をまとめるに当たって懇切な御指導を賜られた東京大学森口繁一教授、常に身边にあって著者を助けた山梨大学山下茂氏に心から感謝致します。また2節および3節の一部について、著者の研究室における学生角田、志村、岡本、土橋、清水、相吉の諸君に御協力をいただきました。一言付言して謝意をあらわす次第です。

参考文献

- 1) 田中正次: Kutta-Merson Process とその類似の方法について、情報処理, 1968, vol. 9, No. 1

- 2) F. Ceschino: Evaluation de l'erreur par pas les problèmes Différentiels, 1962, Chiffres, 5
- 3) R.H. Merson: An Operational Method for Study of Integration Process, 1957, *Proceedings of Symposium on Data Processing*, Weapons Research Establishment, Salisbury, South Australia
- 4) A. Ralston: Runge-Kutta Methods with Minimum Error Bounds, *Mathematics of Computation*, October, 1962, vol. 16, No. 80
- 5) T.E. Hull & R.L. Johnston: Optimum Runge-Kutta Methods, *Mathematics of Computation*, April 1964, vol. 18, No. 86
- 6) R. King: Runge-Kutta Methods with Constrained Minimum Error Bounds, *Mathematics of Computation*, 1966, vol. 20, No. 95
- 7) A. Ralston: *A First Course in Numerical Analysis*, McGraw-Hill, New York, 1965, pp. 191~200
- 8) 田中正次: 5個の関数値を使用する Runge-Kutta 公式について、情報処理, 1966, vol. 7, No. 4
- 9) F. Ceschino and J. Kuntzmann: *Méthode Numériques Problèmes Différentiels de Conditions Initiales*, Dunod, Paris, 1963, p. 89~91
- 10) 田中正次: Kutta-Ceschino Process について, 1968, *FACOM EDP 論文集*, FACOM ファミリ会編
- 11) 松尾隆雄: Continuous system modeling program, *IBM コンピューター・サイエンス・シンポジウム予稿集*, 1967, 日本 IBM 株式会社

(昭和43年5月2日受付)