5 個の関数値を使用する Runge-Kutta 公式について*

田　中　正　次**

1. まえがき

Runge-Kutta 法の打切り誤差 (truncation error) は，係数選択——各オーダとも無限の可能性をもつ——によって種々に変動する．したがって，打切り誤差に対して係数を最適化することが問題になる．A. Ralston は，2nd, 3rd および 4th order 法について，ある意味でこの問題に解答を与えている[1]．著者は，この論文において，4th order 法と 5th order 法——4th order 法の 4 回に対して 6 回の関数計算を必要とする——の中間的な方法，すなわち 5 個の関数値を使用する Runge-Kutta 公式を取上げ，打切り誤差の観点から最適化を試みる．

このタイプの公式は，既に今世紀初頭 W. Kutta によって考察された[2]．彼は，この型の公式の一般形と，結果のみであるが，著者がこの論文の前半で導き出している係数に関する方程式群 (2·14) を記している．しかし，彼はそれ以上この問題に立入らず直ちに 5th order 法に向っている．その後，約半世紀にわたる空白時代を経て，この公式は Runge-Kutta 公式に誤差評価能力を与えようとする試みの中で再び登場する．すなわち，4th order 公式に誤差評価能力を与えようとする Merson の有名な Kutta-Merson Process[3] の中で，また，同様な意図にもとづく R.E. Scraton の研究[4] の中で姿をあらわす．それらと前後して，この公式は，F. Ceshino により，はじめて正面からとりあげられた[5]．

いま，与えられた微分方程式を

$$\frac{dy}{dx}=f(x, y),\quad y(x_0)=y_0 \tag{1·1}$$

とおけば，ここで扱う公式の一般形は

$$k_1=hf(x_0,\ y_0) \tag{1·2}$$

$$k_2=hf(x_0+\alpha h,\ y_0+\beta k_1) \tag{1·3}$$

$$k_3=hf(x_0+\alpha_1 h,\ y_0+\beta_1 k_1+\gamma_1 k_2) \tag{1·4}$$

$$k_4=hf(x_0+\alpha_2 h,\ y_0+\beta_2 k_1+\gamma_2 k_2+\delta_2 k_3) \tag{1·5}$$

$$k_5=hf(x_0+\alpha_3 h,\ y_0+\beta_3 k_1+\gamma_3 k_2+\delta_3 k_3+\eta_3 k_4) \tag{1·6}$$

$$y(x_0+h)=y_0+\sum_{i=1}^{5}\mu_i k_i \tag{1·7}$$

である．ここで，α_i, β_i, γ_i, δ_i, η_i, μ_i は公式を特性化する定数である．これらの係数決定は，次の方針にしたがう．まず，(1·7) の右辺の $x=x_0$, $y=y_0$ のまわりのテイラー展開が，解のテイラー展開と，h の 5 次以下のすべての項について一致するという条件から，15 個のパラメータに関する 16 個の方程式系を作る．ついで，この方程式系から h^5 を因数にもつ誤差項から導かれた 5 個の方程式を除き，残りの 11 個の方程式を 4 係数 α, α_1, α_2, α_3 をパラメータとして解く．

さらに，これらのパラメータのおのおのを一定の刻みである範囲を動かし，得られるおびただしい数の点について，打切り誤差の大小の目安と考えられる 3 量を計算する．ついで打切り誤差の観点から最も適当と思われる係数数組を選び，なお細かくその周辺を探索する．係数探索に当たっては，伝播誤差 (propagation error) にも若干考慮を払う．このようにして演繹された公式は，通常の 4th order 法に比較して著しく高精度で，さらに 1 回の関数計算の追加を必要とする 5th order 法とほぼ同等である．著者は，この方法の誤差評価能力をもつ公式への応用を考えているが，一般に 5th order 法の代わりに用いて時間を節約することができるであろう．

以下，2 節において公式の演繹および誤差解析，3 節において数値計算例について述べる．2 節の公式の演繹においては，記号その他多くの点で Michael J. Romanelli[6] にしたがった．

2. 公式の演繹および誤差解析

初期条件 $y(x_0)=y_0$ をもつ微分方程式

$$y'=f(x,\ y) \tag{2·1}$$

が与えられたとする．$x=x_0$ が特異点でなければ，解は存在し，テイラー級数の形に表現され得る．

すなわち

---

* On Runge-Kutta Formulas Using Five Functional Values, by Masatsugu Tanaka (Faculty of Engineering, Univ. of Yamanashi)

** 山梨大学工学部

$$y(x_0+h)=y_0+hy_0'+\frac{h^2}{2!}y_0''+\frac{h^3}{3!}y_0'''+\cdots\cdots \quad (2\cdot2)$$

ここで $h=x-x_0$ は，テイラー級数が収束するように十分小さいとする．さらに必要な点における高次導関数，同偏導関数の存在を仮定する．

$y'=f(x,\ y)\equiv f$

を x について微分すれば，$y''=f_x+ff_y$ を得る．

同様にして

$$y'''=f_{xx}+2ff_{xy}+f^2f_{yy}+f_y(f_x+ff_y)$$

…………………………

…………………………

ここで，$D=\frac{\partial}{\partial x}+f\frac{\partial}{\partial y}$ とおけば

$$y'=f(x,\ y)\equiv f$$
$$y''=f_x+ff_y=Df$$
$$y'''=f_{xx}+2ff_{xy}+f^2f_{yy}+f_y(f_x+ff_y)$$
$$=D^2f+f_yDf$$

…………………………

…………………………

(2.2) において，このようなおきかえをすれば，

$$y(x_0+h)-y(x_0)=k=\Big[hf+\frac{h^2}{2!}Df+\frac{h^3}{3!}(D^2f+f_yDf)+\frac{h^4}{4!}(D^3f+f_yD^2f+f_y^2Df+3DfDf_y)+\frac{h^5}{5!}(D^4f+6DfD^2f_y+4D^2fDf_y+D^2ff_y^2+Dff_y^3+3(Df)^2f_{yy}+D^3ff_y+7f_yDfDf_y)+\cdots\Big]_\circ \quad (2\cdot3)$$

括弧の下側につけた◦は，関数が点 $(x_0,\ y_0)$ において評価されることを示す．(2·2) において必要な，高次導関数そのものの評価を避けるために，(2·2) の左辺から y_0 を引いたものを，5 点で評価された関数 f の一次結合によって近似する．すなわち

$$\bar{y}(x_0+h)-y_0=\bar{k}=\sum_{i=1}^{5}\mu_ik_i \quad (2.4)$$

とおく．ここで，$\mu_i,\ i=1,2,3,4,5$ は定数，アルファベット上の一は近似値であることを示す．また k_i は，(1.2)～(1.6) で定義されるものである．問題は可能な限り近似度が高まるように，$\alpha_i,\beta_i,\gamma_i,\delta_i,\eta_i,\mu_i$ などの諸係数を決定することである．すなわち，(2.4) のテイラー展開が (2.3) の右辺と，h^5 を係数にもつ項までできるだけよく一致するように係数を定める．(2.4) の点 $(x_0,\ y_0)$ のまわりのテイラー展開を得るために，演算子 D_1,D_2,D_3,D_4 を次のように定義する．

k_2 の展開のために　$D_1=\alpha\frac{\partial}{\partial x}+\beta f_0\frac{\partial}{\partial y}$

k_3 の展開のために　$D_2=\alpha_1\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_1+\gamma_1)f_0\frac{\partial}{\partial y}$　(2.5)

k_4 の展開のために　$D_3=\alpha_2\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_2+\gamma_2+\delta_2)f_0\frac{\partial}{\partial y}$

k_5 の展開のために　$D_4=\alpha_3\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_3+\gamma_3+\delta_3+\eta_3)f_0\frac{\partial}{\partial y}$

(1.2)～(1.6) の k_i を逐次展開する．まず

$$k_1=hf_0 \quad (2\cdot6)$$

次に k_2 の展開を得るために

$$hD_1=\alpha h\frac{\partial}{\partial x}+\beta hf_0\frac{\partial}{\partial y}=\alpha h\frac{\partial}{\partial x}+\beta k_1\frac{\partial}{\partial y}\equiv D_{11}$$

とおけば

$$k_2=h\Big[f+D_{11}f+\frac{D_{11}^2f}{2!}+\frac{D_{11}^3f}{3!}+\frac{D_{11}^4f}{4!}+\cdots\Big]_\circ$$
$$=h\Big[f+hD_1f+\frac{h^2}{2!}D_1^2f+\frac{h^3}{3!}D_1^3f+\frac{h^4}{4!}D_1^4f+\cdots\Big]_\circ \quad (2\cdot7)$$

k_3 の展開を得るために

$$\alpha_1h\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_1k_1+\gamma_1k_2)\frac{\partial}{\partial y}=h\Big(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x}+\beta_1f_0\frac{\partial}{\partial y}\Big)+\gamma_1k_2\frac{\partial}{\partial y}$$

これに (2.7) を用いれば

$$=hD_2+h^2\gamma_1\Big[D_1f+\frac{h}{2!}D_1^2f+\frac{h^2}{3!}D_1^3f+\cdots\Big]_\circ\frac{\partial}{\partial y}\equiv D_{21}$$

これより

$$k_3=h\Big[f+D_{21}f+\frac{D_{21}^2f}{2!}+\frac{D_{21}^3f}{3!}+\frac{D_{21}^4f}{4!}+\cdots\Big]_\circ$$
$$=h\Big\{f+hD_2f+\frac{h^2}{2!}D_2^2f+\frac{h^3}{3!}D_2^3f+\frac{h^4}{4!}D_2^4f+\cdots+h^2\gamma_1\Big[f_yD_1f+hD_1fD_2f_y+\frac{h}{2!}f_yD_1^2f+\frac{h^2}{3!}f_yD_1^3f+\frac{h^2}{2!}D_1^2fD_2f_y+\frac{h^2}{2!}\gamma_1f_{yy}(D_1f)^2+\frac{h^2}{2!}D_1fD_2^2f_y+\cdots\cdots\Big]\Big\}_\circ \quad (2.8)$$

つぎに，k_4 の展開を得るために

$$\alpha_2h\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_2k_1+\gamma_2k_2+\delta_2k_3)\frac{\partial}{\partial y}$$
$$=hD_3+[\gamma_2(k_2-hf_0)+\delta_2(k_3-hf_0)]_\circ\frac{\partial}{\partial y}\equiv D_{31}$$

とおき，(2.7), (2.8) を用いれば

$$hD_3+h^2\Big\{\gamma_2\Big[D_1f+\frac{h}{2!}D_1^2f+\frac{h^2}{3!}D_1^3f+\cdots\cdots\Big]$$

$$+\delta_2\Big[D_2f+\frac{h}{2!}(D_2^2f+2\gamma_1f_yD_1f)+\frac{h^2}{3!}D_2^3f$$

$$+\frac{h^2}{2!}\gamma_1f_yD_1^2f+h^2\gamma_1D_1fD_2f_y+\cdots\cdots\Big]\Big\}_{\circ}\frac{\partial}{\partial y}$$

$$\equiv D_{31}$$

これより

$$k_4=h\Big[f+D_{31}f+\frac{D_{31}^2f}{2!}+\frac{D_{31}^3f}{3!}+\frac{D_{31}^4f}{4!}+\cdots\cdots\Big]_{\circ}$$

$$=h\Big\{f+hD_3f+h^2f_y\Big[\gamma_2\Big(D_1f+\frac{h}{2}D_1^2f+\frac{h^2}{3!}D_1^3f$$

$$+\cdots\cdots\Big)+\delta_2\Big(D_2f+h\gamma_1f_yD_1f+\frac{h}{2}D_2^2f$$

$$+\frac{h^2}{2}\gamma_1f_y\,D_1^2f+h^2\gamma_1D_1fD_2f_y+\frac{h^2}{3!}D_2^3f+\cdots\Big)\Big]$$

$$+\frac{1}{2!}\Big(h^2D_3^2f+2h^3D_3f_y\Big[\gamma_2\Big(D_1f+\frac{h}{2}D_1^2f+\cdots\Big)$$

$$+\delta_2\Big(D_2f+h\gamma_1f_yD_1f+\frac{h}{2}D_2^2f+\cdots\cdots\Big)\Big]$$

$$+h^4f_{yy}\Big[\gamma_2^2(D_1f)^2+2\gamma_2\delta_2D_1fD_2f+\delta_2^2(D_2f)^2$$

$$+\cdots\cdots\Big]\Big)+\frac{1}{3!}\Big(h^3D_3^3f+3h^4D_3^2f_y\Big[\gamma_2D_1f$$

$$+\delta_2D_2f+\cdots\cdots\Big]\Big)+\frac{1}{4!}(h^4D_3^4f+\cdots\cdots)+\cdots\cdots\Big\}_{\circ} \tag{2・9}$$

最後に k_5 の展開を得るために

$$\alpha_3h\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_3k_1+\gamma_3k_2+\delta_3k_3+\eta_3k_4)\frac{\partial}{\partial y}$$

$$=hD_4+\Big[\gamma_3(k_2-hf_0)+\delta_3(k_3-hf_0)+\eta_3(k_4$$

$$-hf_0)\Big]_{\circ}\frac{\partial}{\partial y}=hD_4+h^2\Big\{\gamma_3\Big[D_1f+\frac{hD_1^2f}{2!}$$

$$+\frac{h^2D_1^3f}{3!}+\cdots\cdots\Big]+\delta_3\Big[D_2f+\frac{h}{2}(D_2^2f$$

$$+2\gamma_1f_yD_1f)+\frac{h^2}{3!}D_2^3f+\frac{h^2}{2!}\gamma_1f_y\,D_1^2f$$

$$+h^2\gamma_1D_1fD_2f_y+\cdots\cdots\Big]+\eta_3\Big[D_3f+hf_y\Big\{\gamma_2\Big(D_1f$$

$$+\frac{h}{2}D_1^2f+\cdots\cdots\Big)+\delta_2\Big(D_2f+h\gamma_1f_yD_1f+\frac{h}{2}D_2^2f$$

$$+\cdots\cdots\Big)\Big\}+\frac{1}{2!}\Big(hD_3^2f+2h^2D_3f_y\Big[\gamma_2\Big(D_1f+\cdots\Big)$$

$$+\delta_2\Big(D_2f+\cdots\cdots\Big)\Big]+\cdots\cdots\Big)+\frac{1}{3!}\Big(h^2D_3^3f+\cdots\cdots\Big)$$

$$+\cdots\cdots\Big]\Big\}_{\circ}\frac{\partial}{\partial y}\equiv D_{41}$$

これより

$$k_5=h\Big[f+D_{41}f+\frac{D_{41}^2f}{2!}+\frac{D_{41}^3f}{3!}+\frac{D_{41}^4f}{4!}+\cdots\cdots\Big]_{\circ}$$

$$=h\Big\{f+hD_4f+h^2f_y\Big[\gamma_3\Big\{D_1f+\frac{h}{2!}D_1^2f$$

$$+\frac{h^2}{3!}D_1^3f+\cdots\cdots\Big\}+\delta_3\Big\{D_2f+\frac{h}{2}(D_2^2f$$

$$+2\gamma_1f_yD_1f)+\frac{h^2}{3!}D_2^3f+\frac{h^2}{2!}\gamma_1f_yD_1^2f$$

$$+h^2\gamma_1D_1fD_2f_y+\cdots\cdots\Big\}+\eta_3\Big\{D_3f+hf_y\Big[\gamma_2\Big(D_1f$$

$$+\frac{h}{2!}D_1^2f+\cdots\cdots\Big)+\delta_2\Big(D_2f+h\gamma_1f_yD_1f+\frac{h}{2}D_2^2f$$

$$+\cdots\cdots\Big)\Big]+\frac{1}{2!}\Big(hD_3^2f+2h^2D_3f_y\Big[\gamma_2D_1f+\delta_2D_2f$$

$$+\cdots\cdots\Big]+\cdots\cdots\Big)+\frac{1}{3!}(h^2D_3^3f+\cdots\cdots)+\cdots\cdots\Big\}\Big]$$

$$+\frac{1}{2!}\Big(h^2D_4^2f+2h^3D_4f_y\Big[\gamma_3\Big(D_1f+\frac{h}{2!}D_1^2f+\cdots\Big)$$

$$+\delta_3\Big(D_2f+\frac{h}{2}\Big[D_2^2f+2\gamma_1f_yD_1f\Big]+\cdots\cdots\Big)$$

$$+\eta_3(D_3f+hf_y[\gamma_2D_1f+\delta_2D_2f+\cdots\cdots]$$

$$+\frac{1}{2!}hD_3^2f+\cdots\cdots)\Big]+h^4f_{yy}[\gamma_3^2(D_1f)^2$$

$$+2\gamma_3\delta_3D_1fD_2f+\delta_3^2(D_2f)^2+\eta_3^2(D_3f)^2$$

$$+2\delta_3\eta_3D_2fD_3f+2\gamma_3\eta_3D_1fD_3f+\cdots\cdots]+\cdots)$$

$$+\frac{h^3D_4^3f}{3!}+\frac{1}{2!}h^4D_4^2f_y[\gamma_3D_1f+\delta_3D_2f+\eta_3D_3f$$

$$+\cdots\cdots]+\cdots\cdots+\frac{h^4D_4^4f}{4!}+\cdots\cdots\Big\}_{\circ} \tag{2・10}$$

(2・6)～(2・10) を (2・4) に代入し同類項をまとめれば，$\bar{k}$ の展開が得られる．この展開における hf, h^2Df, h^3D^2f, h^3f_yDf, h^4D^3f, $h^4f_yD^2f$, $h^4f_y{}^2Df$, $h^4Df\cdot Df_y$, h^5D^4f, $h^5DfD^2f_y$, $h^5D^2ff_y{}^2$, $h^5D^2fDf_y$, $h^5Dff_y{}^3$, $h^5(Df)^2f_{yy}$, $h^5D^3ff_y$, $h^5f_yDfDf_y$ などの項の係数を，(2.3) の同類項の係数と等置し，級数 (2.3) と $\bar{k}$ の展開とが h^5 の項まで可能な限りよく一致するようにする．

これから公式を特性化する 19 個のパラメーター——形式的には 15 個のパラメータであるが，D_i, $i=1, 2, 3, 4$ の定義により 19 個のパラメータになる——に関する 16 個の方程式系が導かれる．すなわち，

$$\sum_{i=1}^{5}\mu_i=1,\quad \sum_{i=1}^{4}\mu_{i+1}D_if=Df/2!$$

$$\sum_{i=1}^{4}\mu_{i+1}D_i^2f=(2!/3!)D^2f,$$

$$\sum_{i=1}^{4}\mu_{i+1}D_i^3f=(3!/4!)D^3f$$

$$\sum_{i=1}^{4}\mu_{i+1}D_i^4f=(4!/5!)D^4f$$

$$\mu_3\gamma_1 D_1 f+\mu_4(\gamma_2 D_1 f+\delta_2 D_2 f)+\mu_5(\gamma_3 D_1 f+\delta_3 D_2 f+\eta_3 D_3 f)=(1/3!)Df$$

$$\mu_3\gamma_1 D_1^2 f+\mu_4(\gamma_2 D_1^2 f+\delta_2 D_2^2 f)+\mu_5(\gamma_3 D_1^2 f+\delta_3 D_2^2 f+\eta_3 D_3^2 f)=(2!/4!)D^2 f$$

$$\mu_4\gamma_1\delta_2 D_1 f+\mu_5(\gamma_1\delta_3 D_1 f+\gamma_2\eta_3 D_1 f+\delta_2\eta_3 D_2 f)=(1/4!)Df$$

$$\mu_3\gamma_1 D_1 f D_2 f_y+\mu_4(\gamma_2 D_1 f+\delta_2 D_2 f)D_3 f_y+\mu_5(\gamma_3 D_1 f+\delta_3 D_2 f+\eta_3 D_3 f)D_4 f_y=(3/4!)Df Df_y$$

$$\mu_3\gamma_1 D_1 f D_2^2 f_y+\mu_4(\gamma_2 D_1 f+\delta_2 D_2 f)D_3^2 f_y+\mu_5(\gamma_3 D_1 f+\delta_3 D_2 f+\eta_3 D_3 f)D_4^2 f_y=(2!3!/5!)Df D^2 f_y$$

$$\mu_4\gamma_1\delta_2 D_1^2 f+\mu_5(\gamma_1\delta_3 D_1^2 f+\gamma_2\eta_3 D_1^2 f+\delta_2\eta_3 D_2^2 f)=(2!/5!)D^2 f$$

$$\mu_3\gamma_1 D_1^2 f D_2 f_y+\mu_4(\gamma_2 D_1^2 f+\delta_2 D_2^2 f)D_3 f_y+\mu_5(\gamma_3 D_1^2 f+\delta_3 D_2^2 f+\eta_3 D_3^2 f)D_4 f_y=(2!4/5!)D^2 f Df_y \qquad (2\cdot11)$$

$$\mu_5\gamma_1\delta_2\eta_3 D_1 f=Df/5!$$

$$\mu_3\gamma_1^2(D_1 f)^2+\mu_4\{\gamma_2^2(D_1 f)^2+2\gamma_2\delta_2 D_1 f D_2 f+\delta_2^2(D_2 f)^2\}+\mu_5\{\gamma_3^2(D_1 f)^2+\delta_3^2(D_2 f)^2+\eta_3^2(D_3 f)^2+2\gamma_3\eta_3 D_1 f D_3 f+2\gamma_3\delta_3 D_1 f D_2 f+2\delta_3\eta_3 D_2 f D_3 f\}=(3!/5!)(Df)^2$$

$$\mu_3\gamma_1 D_1^3 f+\mu_4(\gamma_2 D_1^3 f+\delta_2 D_2^3 f)+\mu_5(\gamma_3 D_1^3 f+\delta_3 D_2^3 f+\eta_3 D_3^3 f)=(3!/5!)D^3 f$$

$$\mu_4(\gamma_1\delta_2 D_1 f D_2 f_y+\gamma_1\delta_2 D_1 f D_3 f_y)+\mu_5(\gamma_1\delta_3 D_1 f D_2 f_y+\gamma_2\eta_3 D_1 f D_3 f_y+\delta_2\eta_3 D_2 f D_3 f_y+\gamma_1\delta_3 D_1 f D_4 f_y+\delta_2\eta_3 D_2 f D_4 f_y+\gamma_2\eta_3 D_1 f D_4 f_y)=(7/5!)Df Df_y$$

もし (2・11) が f に独立，すなわち，すべての関数 f に対して成立するためには，比 $D_r^j f/D^j f$ ($r, j=1, 2, 3, 4$) は定数でなければならない．演算子の定義から

もし
$$\alpha=\beta$$
$$\alpha_1=\beta_1+\gamma_1 \qquad (2\cdot12)$$
$$\alpha_2=\beta_2+\gamma_2+\delta_2$$
$$\alpha_3=\beta_3+\gamma_3+\delta_3+\eta_3$$

または
$$D_1=\alpha D,\ D_2=\alpha_1 D,\ D_3=\alpha_2 D,\ D_4=\alpha_3 D \qquad (2\cdot13)$$

ならば，上述の比は定数になるであろう．(2・13) を (2・11) に代入し，各式を Df の同次の項で割れば，f に独立な次の条件式が得られる．

$$\mu_1+\mu_2+\mu_3+\mu_4+\mu_5=1$$
$$\mu_2\alpha+\mu_3\alpha_1+\mu_4\alpha_2+\mu_5\alpha_3=1/2$$
$$\mu_2\alpha^2+\mu_3\alpha_1^2+\mu_4\alpha_2^2+\mu_5\alpha_3^2=1/3$$
$$\mu_2\alpha^3+\mu_3\alpha_1^3+\mu_4\alpha_2^3+\mu_5\alpha_3^3=1/4$$
$$\mu_2\alpha^4+\mu_3\alpha_1^4+\mu_4\alpha_2^4+\mu_5\alpha_3^4=1/5$$
$$\mu_3\alpha\gamma_1+\mu_4(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)+\mu_5(\alpha\gamma_3+\alpha_1\delta_3+\alpha_2\eta_3)=1/6$$
$$\mu_3\alpha^2\gamma_1+\mu_4(\alpha^2\gamma_2+\alpha_1^2\delta_2)+\mu_5(\alpha^2\gamma_3+\alpha_1^2\delta_3+\alpha_2^2\eta_3)=1/12$$
$$\mu_4\alpha\gamma_1\delta_2+\mu_5\{\alpha\gamma_1\delta_3+(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)\eta_3\}=1/24 \qquad (2\cdot14)$$
$$\mu_3\alpha\alpha_1\gamma_1+\mu_4(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)\alpha_2+\mu_5(\alpha\gamma_3+\alpha_1\delta_3+\alpha_2\eta_3)\alpha_3=1/8$$
$$\mu_3\alpha\alpha_1^2\gamma_1+\mu_4(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)\alpha_2^2+\mu_5(\alpha\gamma_3+\alpha_1\delta_3+\alpha_2\eta_3)\alpha_3^2=1/10$$
$$\mu_4\alpha^2\gamma_1\delta_2+\mu_5\{\alpha^2\gamma_1\delta_3+(\alpha^2\gamma_2+\alpha_1^2\delta_2)\eta_3\}=1/60$$
$$\mu_3\alpha^2\alpha_1\gamma_1+\mu_4(\alpha^2\gamma_2+\alpha_1^2\delta_2)\alpha_2+\mu_5(\alpha^2\gamma_3+\alpha_1^2\delta_3+\alpha_2^2\eta_3)\alpha_3=1/15$$
$$\mu_5\alpha\gamma_1\delta_2\eta_3=1/120$$
$$\mu_3\alpha^2\gamma_1^2+\mu_4(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)^2+\mu_5(\alpha\gamma_3+\alpha_1\delta_3+\alpha_2\eta_3)^2=1/20$$
$$\mu_3\alpha^3\gamma_1+\mu_4(\alpha^3\gamma_2+\alpha_1^3\delta_2)+\mu_5(\alpha^3\gamma_3+\alpha_1^3\delta_3+\alpha_2^3\eta_3)=1/20$$
$$\mu_4\alpha(\alpha_1+\alpha_2)\gamma_1\delta_2+\mu_5\{\alpha(\alpha_1+\alpha_3)\gamma_1\delta_3+(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)(\alpha_2+\alpha_3)\eta_3\}=7/120$$

(2・14) は，19 個のパラメータ中，関係 (2・12) あるいは (2・13) によって，パラメータ $\beta, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ が消去された 15 個の未知パラメータ：$\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \alpha, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \delta_2, \delta_3, \eta_3$ に関する 16 個の方程式系である．連立方程式 (2・14) が，一次従属で若干の自由度を有すれば，これらの方程式を直接代数的に解くことは，それほど困難でないかもしれない．しかし，本編では，これらの方程式は一次独立なものとして取り扱う．

まず，(2・14) 式の第 1 式から第 11 式までを連立にし，$\alpha, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ をパラメータとして解く．そのとき

(i) $\mu_2=\Delta_2/\Delta$

(ii) $\mu_3=\Delta_3/\Delta$

(iii) $\mu_4=\Delta_4/\Delta$

(iv) $\mu_5=\Delta_5/\Delta$

ただし，$\Delta, \Delta_2, \Delta_3, \Delta_4, \Delta_5$ は次式によって定義される行列式である．

$$\Delta=\begin{vmatrix}\alpha & \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3\\ \alpha^2 & \alpha_1^2 & \alpha_2^2 & \alpha_3^2\\ \alpha^3 & \alpha_1^3 & \alpha_2^3 & \alpha_3^3\\ \alpha^4 & \alpha_1^4 & \alpha_2^4 & \alpha_3^4\end{vmatrix},\quad \Delta_2=\begin{vmatrix}1/2 & \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3\\ 1/3 & \alpha_1^2 & \alpha_2^2 & \alpha_3^2\\ 1/4 & \alpha_1^3 & \alpha_2^3 & \alpha_3^3\\ 1/5 & \alpha_1^4 & \alpha_2^4 & \alpha_3^4\end{vmatrix}$$

$$\varDelta_3=\begin{vmatrix}\alpha & 1/2 & \alpha_2 & \alpha_3\\ \alpha^2 & 1/3 & \alpha_2^2 & \alpha_3^2\\ \alpha^3 & 1/4 & \alpha_2^3 & \alpha_3^3\\ \alpha^4 & 1/5 & \alpha_2^4 & \alpha_3^4\end{vmatrix},\quad \varDelta_4=\begin{vmatrix}\alpha & \alpha_1 & 1/2 & \alpha_3\\ \alpha^2 & \alpha_1^2 & 1/3 & \alpha_3^2\\ \alpha^3 & \alpha_1^3 & 1/4 & \alpha_3^3\\ \alpha^4 & \alpha_1^4 & 1/5 & \alpha_3^4\end{vmatrix}$$

$$\varDelta_5=\begin{vmatrix}\alpha & \alpha_1 & \alpha_2 & 1/2\\ \alpha^2 & \alpha_1^2 & \alpha_2^2 & 1/3\\ \alpha^3 & \alpha_1^3 & \alpha_2^3 & 1/4\\ \alpha^4 & \alpha_1^4 & \alpha_2^4 & 1/5\end{vmatrix} \qquad (2\cdot15)$$

(v) $\delta_2=\dfrac{\frac{1}{12}\alpha_3-\frac{1}{6}\alpha\alpha_3+\frac{1}{8}\alpha-\frac{1}{15}}{\mu_4\alpha_1(\alpha-\alpha_1)(\alpha_2-\alpha_3)}$

(vi) $\gamma_2=\dfrac{\left(\frac{1}{4}\alpha_3-\frac{1}{5}\right)\left(\frac{5}{6}\alpha_1-\frac{1}{3}\alpha_2-\frac{1}{2}\alpha\right)}{\mu_4\alpha(\alpha_1-\alpha)(\alpha_2-\alpha_1)}$

$\qquad\qquad +\dfrac{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{3}\alpha_3-\frac{1}{4}\right)(\alpha\alpha_2-\alpha_1^2)}{(\alpha_3-\alpha_2)}$

(vii) $\gamma_1=\dfrac{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{3}\alpha_3-\frac{1}{4}\right)-\mu_4(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)(\alpha_3-\alpha_2)}{\mu_3\alpha(\alpha_3-\alpha_1)}$

(viii) $\delta_3=\dfrac{D_2+D_3}{D_1}$

ここで，$D_1=\mu_5\{\alpha\alpha_2\gamma_1(\alpha-\alpha_2)+\alpha_1(\alpha_1-\alpha)(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)\}$

$D_2=(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)\left\{\frac{1}{6}\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)+\mu_4\alpha_1(\alpha-\alpha_1)\delta_2\right\}$

$D_3=\alpha_2(\alpha-\alpha_2)\left(\frac{1}{24}-\mu_4\alpha\gamma_1\delta_2\right)$

である．

(ix) $\eta_3=\dfrac{\frac{1}{\mu_5}\left(\frac{1}{24}-\mu_4\alpha\gamma_1\delta_2\right)-\alpha\gamma_1\delta_3}{\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2}$

(x) $\gamma_3=\dfrac{1}{\alpha}\left[\dfrac{1}{\mu_5}\left\{\dfrac{1}{6}-\mu_3\alpha\gamma_1-\mu_4(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)\right\}-\alpha_1\delta_3-\alpha_2\eta_3\right]$

(xi) $\mu_1=1-(\mu_2+\mu_3+\mu_4+\mu_5)$

(xii) $\beta=\alpha$

(xiii) $\beta_1=\alpha_1-\gamma_1$

(xiv) $\beta_2=\alpha_2-\gamma_2-\delta_2$

(xv) $\beta_3=\alpha_3-\gamma_3-\delta_3-\eta_3$

$\alpha, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ を与えたときの他のパラメータの値は，上の (i)～(xv) を次々と計算することによって得られる．よって $\alpha, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ を任意に与えれば，(2·4) の右辺のテイラー展開は，(2·3) の右辺と h^5 の項の最初の3項まで一致する．したがって，この場合1ステップの間に発生する打切り誤差は

$$\begin{aligned}E=\bar{k}-k&=h^5\{a_1f_y{}^2D^2f+a_2f_{yy}(Df)^2+a_3f_yD^3f\\&\quad+a_4f_yDf_yDf+a_5f_y^3Df\}+\cdots\cdots\\&=h^5\{a_1f_y^2f_{xx}+(2a_1+a_4)ff_y^2f_{xy}+(a_1+a_2\\&\quad+a_4)f^2f_y^2f_{yy}+a_2f_x^2f_{yy}+(2a_2+a_4)ff_xf_yf_{yy}\\&\quad+a_3f_yD^3f+a_4f_xf_yf_{xy}+a_5f_y^3Df\}+\cdots\cdots\end{aligned} \qquad (2\cdot16)$$

となる．ここで

$$a_1=\frac{\mu_4\alpha^2\gamma_1\delta_2+\mu_5\{\alpha^2\gamma_1\delta_3+(\alpha^2\gamma_2+\alpha_1^2\delta_2)\eta_3\}}{2}-\frac{1}{120}$$

$$a_2=\frac{\mu_3\alpha^2\gamma_1^2+\mu_4(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)^2+\mu_5(\alpha\gamma_3+\alpha_1\delta_3+\alpha_2\eta_3)^2}{2}-\frac{1}{40}$$

$$a_3=\frac{\mu_3\alpha^3\gamma_1+\mu_4(\alpha^3\gamma_2+\alpha_1^3\delta_2)+\mu_5(\alpha^3\gamma_3+\alpha_1^3\delta_3+\alpha_2^3\eta_3)}{6}-\frac{1}{120}$$

$$a_4=\mu_4\alpha(\alpha_1+\alpha_2)\gamma_1\delta_2+\mu_5\{\alpha(\alpha_1+\alpha_3)\gamma_1\delta_3+(\alpha_2+\alpha_3)(\alpha\gamma_2+\alpha_1\delta_2)\eta_3\}-\frac{7}{120} \qquad (2\cdot17)$$

$$a_5=\mu_5\alpha\gamma_1\delta_2\eta_3-\frac{1}{120}$$

である．Lotkin[7] にならって誤差限界を求めれば

$$|E|\leqq(|a_1|+|2a_1+a_4|+|a_1+a_2+a_4|+|a_2|+|2a_2+a_4|+8|a_3|+|a_4|+2|a_5|)ML^4h^5 \qquad (2\cdot18)$$

ただし M, L は，(x, y) に無関係な定数で，(x_0, y_0) を含むある領域において

$$|f(x, y)|<M$$

$$\left|\frac{\partial^{i+j}f}{\partial x^i\partial y^j}\right|\leqq\frac{L^{i+j}}{M^{j-1}}\quad(i+j\leqq4)$$

なるものとする．いま

$$A=|a_1|+|2a_1+a_4|+|a_1+a_2+a_4|+|a_2|+|2a_2+a_4|+8|a_3|+|a_4|+2|a_5| \qquad (2\cdot19)$$

とおけば，Aはパラメータ $\alpha, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ の関数である．すなわち，打切り誤差限界は，解法（パラメータの値によってきまる）に依存する量 A，与えられた微分方程式のみによって定まる量 M, L および刻み幅 h の5乗（M, L, h は解法に独立な量である）の3者の積である．このAは A. Ralston が 2nd, 3rd および 4th order 公式の最適化に使用した measure[1] で，公式の打切り精度の一つの目安と考えられる．この論文においては，公式の打切り誤差の観点からの最適化のために，打切り精度の measures として，さらに他の2量 B, C を併用する．この B, C は，T.E. Hull らが 4th order 法の最適化に使用した measures[8] で，次のように定義される．

$$B=\sum_{i=1}^{5}|a_i| \qquad (2\cdot20)$$

$$C=\sum_{i=1}^{5}a_i^2 \qquad (2\cdot21)$$

つぎに伝播誤差について考える．あらゆる one step 法は，つぎの形に書くことができる．

$$y_{n+1}=y_n+h\varphi(x_n, y_n\,;h)\ \ (n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots\cdots) \qquad (2\cdot22)$$

ここで，$h=x_{n+1}-x_n$ である．もし，$y(x)$ が与えられた微分方程式の真の解であるならば，

$$y(x_{n+1})=y(x_n)+h\varphi(x_n, y(x_n)\,;h)-r(x_n\,;h) \qquad (2\cdot23)$$

ただし，$r(x:h)$ は，局所打切り誤差である．したがって，$\varepsilon_n=y_n-y(x_n)$ が第 n ステップにおける誤差をあらわすものとすれば，(2·22) から (2·23) を辺々差引くことにより，

$$\varepsilon_{n+1}=\varepsilon_n+h\{\varphi(x_n,\ y_n:\ h)-\varphi(x_n,\ y(x_n):h)\}+r(x_n:\ h) \qquad (2\cdot24)$$

が得られる．一方

$$\varphi(x_n, y_n:h)-\varphi(x_n, y(x_n):h)=\frac{\partial\varphi}{\partial y}(y_n-y(x_n))=\frac{\partial\varphi}{\partial y}\varepsilon_n \qquad (2\cdot25)$$

とかける．ただし，$\partial\varphi/\partial y$ は点 (x_n, y_n), $(x_n, y(x_n))$ を結ぶ線分上の適当な点で評価されたものである．よって

$$\varepsilon_{n+1}=\Bigl(1+h\frac{\partial\varphi}{\partial y}\Bigr)\varepsilon_n+r(x_n:\ h) \qquad (2\cdot26)$$

n が大きくなるに従って伝播誤差，すなわち上式右辺の第1項に示すものが ε_n の行動に対して決定的な役割を果すようになる．もし，すべての n に対して，

$$\Bigl|1+h\frac{\partial\varphi}{\partial y}\Bigr|\leqq\rho<1$$

を満足する定数 ρ が存在するならば，誤差は有界である．これに反して，すべての n に対して

$$\Bigl|1+h\frac{\partial\varphi}{\partial y}\Bigr|>1$$

ならば，ε_n が幾何級数的に増加することが予想される．また，$\partial\varphi/\partial y=0$ ならば，ε_n の増加は幾何級数的ではない．ここでは問題の公式について，伝播誤差をあらわす式およびその評価式を求め，当面の首題に有効に利用できるかどうか考える．

ここでは，

$$\varphi(x,\ y:\ h)=\sum_{s=1}^{5}\mu_s k_s(x, y)$$

$$k_1(x,\ y)=hf(x,\ y)$$

$$k_2(x,\ y)=hf(x+\alpha h,\ y+\beta k_1(x, y))$$

$$k_3(x, y)=hf(x+\alpha_1 h, y+\beta_1 k_1(x, y)+\gamma_1 k_2(x, y))$$

$$k_4(x, y)=hf(x+\alpha_2 h,\ y+\beta_2 k_1(x,\ y)+\gamma_2 k_2(x, y)+\delta_2 k_3(x,\ y)) \qquad (2\cdot27)$$

$$k_5(x,\ y)=hf(x+\alpha_3 h,\ y+\beta_3 k_1(x,\ y)+\gamma_3 k_2(x,\ y)+\delta_3 k_3(x,\ y)+\eta_3 k_4(x,\ y))$$

であるから，

$$\varepsilon_n+h\{\varphi(x_n,\ y_n:\ h)-\varphi(x_n,\ y(x_n):\ h)\}$$

$$=\varepsilon_n+h\sum_{s=1}^{5}\mu_s\{k_s(x_n, y_n:h)-k_s(x_n, y(x_n):h)\}$$

$$=\varepsilon_n+h\Bigl[\mu_1 h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))+\mu_2 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl\{y_n-y(x_n)+\beta h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))\Bigr\}+\mu_3 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl[y_n$$

$$-y(x_n)+\beta_1 h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))+\gamma_1 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl\{y_n-y(x_n)+\beta h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))\Bigr\}\Bigr]+\mu_4 h\frac{\partial f}{\partial y}$$

$$\Bigl\langle y_n-y(x_n)+\beta_2 h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))+\gamma_2 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl\{y_n-y(x_n)+\beta h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))\Bigr\}+\delta_2 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl[y_n$$

$$-y(x_n)+\beta_1 h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n)+\gamma_1 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl\{y_n-y(x_n)+\beta h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))\Bigr\}\Bigr]\Bigr\rangle+\mu_5 h\frac{\partial f}{\partial y}$$

$$\Bigl\langle y_n-y(x_n)+\beta_3 h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))+\gamma_3 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl\{y_n-y(x_n)+\beta h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))\Bigr\}+\delta_3 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl[y_n$$

$$-y(x_n)+\beta_1 h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))+\gamma_1 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl\{y_n-y(x_n)+\beta h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))\Bigr\}\Bigr]+\eta_3 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl[y_n$$

$$-y(x_n)+\beta_2 h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))+\gamma_2 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl\{y_n-y(x_n)+\beta h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))\Bigr\}+\delta_2 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl[y_n$$

$$-y(x_n)+\beta_1 h\frac{\partial f}{\partial y}(y_n-y(x_n))+\gamma_1 h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigl\{y_n-y(x_n)+\beta h(y_n-y(x_n))\Bigr\}\Bigr]\Bigr]\Bigr\rangle \qquad (2\cdot28)$$

上式にあらわれてくる $\partial f/\partial y$ は，必ずしも同一の点で評価されたものではないが，それらが評価される変域は十分小さいので，すべて同一の値をとるものと仮定する．そのとき，

$$\varepsilon_n+h\{\varphi(x_n,\ y_n:\ h)-\varphi(x_n,\ y(x_n):\ h)\}$$

$$=\Bigl[1+(\mu_1+\mu_2+\mu_3+\mu_4+\mu_5)h\frac{\partial f}{\partial y}+\{\mu_2\beta+\mu_3(\beta_1+\gamma_1)+\mu_4(\beta_2+\gamma_2+\delta_2)+\mu_5(\beta_3+\gamma_3+\delta_3+\eta_3)\}\Bigl(h\frac{\partial f}{\partial y}\Bigr)^2+[\mu_3\beta\gamma_1+\mu_4\{\beta\gamma_2+(\beta_1+\gamma_1)\delta_2\}$$

$$+\mu_5\{\beta\gamma_3+(\beta_1+\gamma_1)\delta_3+(\beta_2+\gamma_2+\delta_2)\eta_3\}]\left(h\frac{\partial f}{\partial y}\right)^3$$
$$+[\mu_4\beta\gamma_1\delta_2+\mu_5\{\beta\gamma_1\delta_3+(\beta\gamma_2+\beta_1\delta_2+\gamma_1\delta_2)\eta_3\}]$$
$$\left(h\frac{\partial f}{\partial y}\right)^4+\mu_5\beta\gamma_1\delta_2\eta_3\left(h\frac{\partial f}{\partial y}\right)^5\Big]\varepsilon_n \qquad (2\cdot 29)$$

とかける．いま問題にしている領域において

$$\left|\frac{\partial f}{\partial y}\right|<K \quad (K\text{は定数})$$

とすれば，伝播誤差について次の評価式が得られる．

$$|\varepsilon_n+h\{\varphi(x_n,\ y_n:\ h)-\varphi(x_n,\ y(x_n):\ h)\}|$$
$$\leqq[1+|\mu_1+\mu_2+\mu_3+\mu_4+\mu_5|hK+|\mu_2\beta+\mu_3(\beta_1+\gamma_1)+\mu_4(\beta_2+\gamma_2+\delta_2)+\mu_5(\beta_3+\gamma_3+\delta_3+\eta_3)|h^2K^2+|\mu_3\beta\gamma_1+\mu_4(\beta\gamma_2+\beta_1\delta_2+\gamma_1\delta_2)+\mu_5\{\beta\gamma_3+(\beta_1+\gamma_1)\delta_3+(\beta_2+\gamma_2+\delta_2)\eta_3\}|h^3K^3+|\mu_4\beta\gamma_1\delta_2+\mu_5\{\beta\gamma_1\delta_3+(\beta\gamma_2+\beta_1\delta_2+\gamma_1\delta_2)\eta_3|h^4K^4+|\mu_5\beta\gamma_1\delta_2\eta_3|h^5K^5 \qquad (2\cdot 30)$$

generalized Runge-Kutta 4 th order method の (2·29) および (2·30) に対応する式は，それぞれの式において $\mu_5=0$ とおけば得られる．

(2·29) の $\left(h\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2$, $\left(h\frac{\partial f}{\partial y}\right)^3$, $\left(h\frac{\partial f}{\partial y}\right)^4$ および $\left(h\frac{\partial f}{\partial y}\right)^5$ の係数をおのおの D, E, F および G とおく．誤差集積をおさえるには，打切り誤差の大小の標識と考えられる A, B, C および伝播誤差に影響する諸量 D, E, F, G などの動向に注意しなければならない．しかし (2·14) および (2·15) より $D=1/2$, $E=1/6$, $F=1/24$ である．すなわち，伝播誤差に影響する諸量中 G を除く他の3量は，公式の演繹の仕方にのみ依存して定まる定数で，係数選択には無関係である．

また，$|G|$ を小にしたいという要求は A, B, C などを小にしたいという要求と相互に牟盾する．係数選択の方針をきめるために打切り精度を若干犠牲にし，その代り伝播誤差に関与する D, E, F, G などの諸量を制御することにより，安定な公式が得られるかどうか数値実験をしてみたが，望ましい結果は得られなかった．ここでは電子計算機を用い試行錯誤法により，まず A, B, C を小さくするパラメータの組をふるい分け，ついで，さらにその中で G の絶対値が小さい組合わせを選んだ．これらの measures の計算は，まず $\alpha, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ のおのおのを -1.0 から 1.0 まで 0.1 刻みに動かしたときに得られるすべての格子点 16 万点について行ない，ついで，初回のデータから最適係数が存在すると思われる個所をなお細かく探索した．これらの探索から，最適な点においては $\alpha_3=1.0$ であると推測された．このようにして演繹された公式の一例を以下に示す．ここで係数は，可変長語計算機 FACOM 231 により 30 桁で計算され，10 桁に丸められたものである．

$$k_1=hf(x_0,\ y_0)$$
$$k_2=hf(x_0-0.002\,h,\ y_0-0.002\,k_1)$$
$$k_3=hf(x_0+0.5\,h,\ y_0+62.93654307\,k_1-62.43654307\,k_2)$$
$$k_4=hf(x_0+0.992\,h,\ y_0-727.6185882\,k_1+724.7256376\,k_2+3.884950550\,k_3) \qquad (2\cdot 31)$$
$$k_5=hf(x_0+h,\ y_0-803.8682408\,k_1+800.6546102\,k_2+4.222612167\,k_3-0.008981570067\,k_4)$$
$$y(x_0+h)=y_0+8.567204301\,k_1-8.333567073\,k_2+0.5317051577\,k_3+2.147165931\,k_4-1.912508317\,k_5$$

上述の公式および古典的な Runge-Kutta 公式，Runge-Kutta-Gill 法，A. Ralston による 4 th order の最適公式などに関する A, B, C, D, E, F, G の諸量は，**第1表**に示される．

3. 数値計算例

公式の演繹が正しく行なわれたかどうか，および，2節で用いられた打切り精度の measures の信頼度をテストするために，次の三つの例題を，classical 4 th

第 1 表

誤差に関係する諸量 / 公式	打切り誤差			伝播誤差				関数計算回数
	A	B	C	D	E	F	G	step
R-K 法	10.1×10^{-2}			0.5	0.1666···	0.04166···	0	4
R-K-G 法	8.83×10^{-2}			0.5	0.1666···	0.04166···	0	4
A. Ralston 法	5.46×10^{-2}			0.5	0.1666···	0.04166···	0	4
***著者による方法	8.76×10^{-7}	4.07×10^{-7}	6.21×10^{-14}	0.5	0.1666···	0.04166···	0.008333	5

*** $A=2.71\times10^{-4}$, $B=4.07\times10^{-7}$, $C=6.21\times10^{-14}$, $G=8.333\times10^{-8}$ の場合について数値計算を試みたが，精度上はとんど差異が認められなかった．この事実は注目に値する，

第2表　$\dfrac{dy}{dx}=-\dfrac{1}{3}x^2y^2$, $y(2)=1$

$\left(\text{解析解}\ y=\dfrac{9}{x^3+1}\right)$

x_i	$10^{10}\times$(Error of R-K)	$10^{10}\times$(Error of A. Ralston)	$10^{10}\times$(Error of (2.31))	$10^{10}\times$(Error of 5 th)
2.1	−22,765	−29,325	191	817
2.2	−34,531	−44,676	167	1,218
2.3	−39,570	−51,389	148	1,371
2.4	−40,603	−52,902	102	1,381
2.5	−39,343	−51,404	121	1,316
2.6	−36,859	−48,273	134	1,213
2.7	−33,806	−44,366	157	1,095
2.8	−30,577	−40,201	107	975
2.9	−27,402	−36,083	102	861
3.0	−24,404	−32,181	65	756
3.1	−21,646	−28,580	74	661
3.2	−19,150	−25,312	46	577
3.3	−16,918	−22,383	54	503
3.4	−14,936	−19,778	26	439
3.5	−13,184	−17,472	37	383
3.6	−11,643	−15,441	15	334
3.7	−10,291	−13,655	19	291
3.8	−9,103	−12,086	22	256
3.9	−8,062	−10,709	13	224
4.0	−7,151	−9,500	14	196

第3表　$\dfrac{dy}{dx}=1-y^2$, $y(0)=0$ (解析解 $y=\tan hx$)

x_i	$10^{10}\times$(Error of R-K)	$10^{10}\times$(Error of A. Ralston)	$10^{10}\times$(Error of (2.31))	$10^{10}\times$(Error of 5 th)
0.1	837	−7	−55	1
0.2	1,766	11	−86	66
0.3	2,889	131	−81	12
0.4	4,269	436	−49	8
0.5	5,906	1,002	−15	−10
0.6	7,735	1,860	33	−43
0.7	9,643	2,994	34	−91
0.8	11,491	4,328	43	−148
0.9	13,141	5,749	23	−210
1.0	14,486	7,136	−39	−268
1.5	15,537	10,705	−208	−402
2.0	10,818	8,589	−238	−311

order 法, A. Ralston による最小誤差限界をもつ 4 th order 法[1], E.J. Nyström によって修正された W. Kutta の 5th order 法[9] および2節において導かれた公式 (2·31) を用いて解き, **第 2, 3, 4 表**に示した.

例 題 1.

初期条件 $y(2)=1$ をもつ微分方程式

$$\frac{dy}{dx}=-\frac{1}{3}x^2y^2$$

を, $x=2.0$ から刻み幅 0.1 で $x=4.0$ まで数値積分せよ.

第4表　$\dfrac{dy}{dx}=-\dfrac{e^x(y^3+xy^3+1)}{3\,y^2(xe^x-6)}$, $y(0)=1$

解析解　$y=\left(\dfrac{e^x+5}{6-xe^x}\right)^{1/3}$

x_i	$10^9\times$(Error of R-K)	$10^9\times$(Error of A. Ralston)	$10^9\times$(Error of (2.31))	$10^9\times$(Error of 5 th)
0.1	−7	−9	0	1
0.2	−19	−23	2	2
0.3	−37	−44	3	4
0.4	−67	−78	3	5
0.5	−118	−135	5	7
0.6	−205	−235	8	9
0.7	−365	−419	16	16
0.8	−686	−793	30	28
0.9	−1,399	−1,640	70	55
1.0	−3,263	−3,874	193	136
1.1	−9,390	−11,310	696	443
1.2	−38,895	−47,481	3,911	2,293
1.3	−340,310	−417,458	52,390	28,110
1.4	−34,220,758	−40,103,530	16,487,499	3,873,023

例 題 2.

初期条件, $y(0)=0$ をもつ微分方程式

$$\frac{dy}{dx}=1-y^2$$

を, $x=0.0$ から刻み幅 0.1 で $x=2.0$ まで数値積分せよ.

例 題 3.

初期条件, $y(0)=1$ をもつ微分方程式

$$\frac{dy}{dx}=-\frac{e^x(y^3+xy^3+1)}{3y^2(xe^x-6)}$$

を, $x=0.0$ から刻み幅 0.1 で $x=1.4$ まで数値積分せよ.

第2,3,4表において, 第1列は x の値, 第2, 第3, 第4, 第5の各列は, それぞれ, 第1列の x の値に対する各方法による数値解の誤差を示す.

上記諸表の観察から, 公式 (2·31) は, 通常の 4th order 法に比べて著しく高精度で, 5th order 法にほぼ匹敵することがわかる. また, A. Ralston による方法などよりもはるかに安定した精度をもつことも知られる.

4. 結　び

上の実験例は, 打切り誤差の観点からの最適化が効果的に行なわれたことを示すと同時に, 使用された measures の妥当性を保証する. 2節で導かれた公式の応用については機会を改めて述べる.

終りに, この研究をまとめるに当っていろいろと御指導を賜られた東京大学森口繁一教授, 計算機使用な

どで著者を助けた IBM 奥田晃，山梨大学山下茂の両氏に心から感謝致します.

参考文献

1) Anthony Ralston: Runge-Kutta Methods with Minimum Error Bounds, Mathematics of Computation, October, 1962, Vol. 16, No. 80.
2) W. Kutta: Beitrage zur Näherungsweisen Integration Totaler Differentialgleichungen, Z. Math. Phys. Vol. 46, pp. 435～453, 1901.
3) Fox L.: Numerical Solution of Ordinary and Partial Differential Equations; Based on Summer School held in Oxford August-Sept. 1961, 1962, (Pergamon P.) pp. 24～25.
4) R.E. Scraton: Estimation of the Truncation Error in Runge-Kutta and Allied Process, Computer Journal, January 1965, Vol. 7, No. 3, pp. 246～248.
5) F. Ceshino: Sur une formule de rang 5, Chiffres, 2 (1959), pp. 39～42.
6) M.J. Romanelli: Runge-Kutta Methods for the Solution of Ordinary Differential Equations pp. 110～120, in "Mathematical Methods for Digital Computers" A. Ralston and H.S. Wilf (eds), John Wiley & Sons, Inc., New York, 1960.
7) M. Lotkin: On the Accuracy of Runge-Kutta's Methods, Math. Table Aids Compt. Vol. 5, pp. 128～133, 1951.
8) T.E. Hull & R.L. Johnston: Optimum Runge-Kutta Methods, Mathematics of Computation, April 1964, Vol. 18, No. 86
9) W.E. Milne: Numerical Solution of Differential Equations, pp. 73～74, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1960.

(昭和 40 年 10 月 14 日受付)