

常微分方程式の初期値問題のある補外計算法†

永坂 秀子†† 五十嵐 正夫††† 室 伏 誠††††

この論文は、常微分方程式の初期値問題の数値解に反復補外計算を適用する方法について述べたものである。われわれは、まず代表的な補外法について、補外計算に伴う誤差を詳細に分析し、これを根拠にして、補外計算値に現れる諸現象に合理的な解釈を与える。また、この誤差解析にもとづき、計算精度に対応した補外段数ならびに収束判定を用いて、自動的に積分区間を分割し、精度よい数値解を求めるアルゴリズムを示す。

1. ま え が き

常微分方程式の初期値問題の数値解に反復補外計算を利用した例は数多くある。また、その収束に関しての研究^{1)~3)}も多い。ところが実際に反復補外計算を行う場合には、その収束性に関して数値的な意味におけるいわば定量的な扱いが必要となる。すなわち制限された計算桁内において反復補外計算を進めていった場合、どの時点の数値を近似解として採用したらよいかという問題が常に生じる。この問題は、与えられた積分区間を分割しながら反復補外計算を重ねる場合に顕著にあらわれる。そして、これらに対する処理法は多分に経験的なものに依存していたと思われる。たとえば、G.B.S. 法において文献4)では、数値例によって、分割された区間長は0.2または0.5、収束判定は 10^{-D+3} (D は10進計算での仮数部の演算桁数—以後10進 D 桁計算とよぶ)、反復補外の回数(表1参照)は2進40桁計算で6回が用いられている。

われわれは多項式を利用し、刻み幅を $h/2$, $h/4$, $h/8$, ... と変化させる基本的な反復補外計算法において、計算桁による反復補外段数の制限および、打ち切り誤差と丸め誤差との関係によるある収束判定により分割区間長(以後単区間とよぶ)を決めてゆく計算法を数値的な考察から導いた。この計算法によって、つぎの方法で数値実験を試みた。反復補外計算の出発値

(以後初期系列値とよぶ)の計算法には中点法*, 修正中点法*, 4次の古典的 Runge-Kutta 法(以後古典的という語を省略する)を用い、丸め誤差の影響を調べるために、それぞれ Möller^{5)*} および Gill による丸め誤差補正計算法を加えた。計算精度については、単精度(16進6桁)、倍精度(16進14桁)、4倍精度(16進30桁)について計算した。これらの数値実験結果より、われわれの計算法では積分区間全域にわたり数値解は安定した精度が得られ、補外段数の制限によって中点法は修正中点法と差異がないことが確かめられた。さらに Möller および Gill による丸め誤差補正計算の有効性、ならびに高精度計算における中点法、修正中点法が Runge-Kutta 法より時間的に有利であり、また修正中点法を用いなくても中点法で十分であることが示された。

2. 準 備

与えられた微分方程式を $y' = f(x, y)$, 積分区間を $[a, b]$ とし、初期値を $y(a)$, 厳密解を $y(b)$ とする。刻み幅 h_k における中点法, 4次の Runge-Kutta 法等の数値解 Y_0^k (初期系列値)は、打ち切り誤差を T_0^k , 丸め誤差を R_0^k とし次式となる。

$$Y_0^k = y(b) + T_0^k + R_0^k, (k=0, 1, 2, \dots) \quad (1)$$

ただし,

$$T_0^k = a_1(b) \cdot h_k^{p_1} + a_2(b) \cdot h_k^{p_2} + \dots, (2 \leq p_1 < p_2 \dots)$$

これに対して表1に示す順序によって

$$Y_n^k = Y_{n-1}^{k+1} + \frac{Y_{n-1}^{k+1} - Y_{n-1}^k}{2^{p_n-1}} \quad \left(\begin{array}{l} n=1, 2, \dots \\ k=0, 1, 2, \dots \end{array} \right) \quad (2)$$

の反復補外計算を行う。反復補外計算式での丸め誤差を無視すると、 Y_1^k は

$$Y_1^k = y(b) + \frac{2^{p_1} \cdot T_0^{k+1} - T_0^k}{2^{p_1-1}} + \frac{2^{p_1} \cdot R_0^{k+1} - R_0^k}{2^{p_1-1}}$$

となり、一般に Y_n^k は次式となる。

† An Extrapolation Method for Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations by HIDEKO NAGASAKA (Department of Mathematics, College of Science and Technology Nihon University), MASAO IGARASHI (General Education, College of Agriculture and Veterinary Medicine, Nihon University) and MAKOTO MUROFUSHI (Department of Electronics, Institute of Vocational Training).

†† 日本大学理工学部数学科

††† 日本大学農獣医学部一般教養

†††† 職業訓練大学校電子科

* 付録参照。

表 1 Y_n^k 表 ($k=i-n$)Table 1 Table of Y_n^k .

刻み幅 h	段数 i	回数 n			
		初期 系列	1回	2回	3回 4回
h_0	0	Y_0^0			
h_1	1段	Y_0^1	Y_1^0		
h_2	2段	Y_0^2	Y_1^1	Y_2^0	
h_3	3段	Y_0^3	Y_1^2	Y_2^1	Y_3^0

計算順序: $Y_0^0, Y_0^1, Y_1^0, Y_0^2, Y_1^1, Y_2^0, Y_1^2, Y_2^1, Y_3^0, \dots$

$$Y_n^k = y(b) + T_n^k + R_n^k$$

ただし,

$$T_n^k = \frac{2^{p_n} T_{n-1}^{k+1} - T_{n-1}^k}{2^{p_n} - 1} \quad (3)$$

$$R_n^k = \frac{2^{p_n} R_{n-1}^{k+1} - R_{n-1}^k}{2^{p_n} - 1} \quad (4)$$

すると簡単な帰納法により, つぎの定理が成立する.

[定理 1] $l=b-a$, $h_k=2^{-k} \cdot l$ とする. (1)式に対して(2)式の反復補外計算を行い, 各補外計算式で入る丸め誤差を無視すると, 次式が成立する.

$$T_n^k = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\prod_{i=1}^n (2^{p_i} - 2^{p_{n+j}})}{\prod_{i=1}^n (2^{p_i} - 1)} \cdot h_{n+k} p_{n+j} \cdot a_{n+j}(b) \quad (5)$$

$$= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\prod_{i=1}^n (2^{p_i} - 2^{p_{n+j}})}{\prod_{i=1}^n (2^{p_i} - 1)} \cdot (2^{-(n+k)} \cdot l) p_{n+j} \cdot a_{n+j}(b) \quad (n \geq 1) \quad (6)$$

$$R_n^k = \sum_{j=0}^n c_j(n) \cdot R_0^{n+k-j}, \quad (n \geq 1) \quad (7)$$

ただし

$$c_0(n) = 2^{p_1 + p_2 + \dots + p_n} \prod_{i=1}^n (2^{p_i} - 1)$$

$$c_j(n) = (-1)^j \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_{n-j}} 2^{p_{i_1} + p_{i_2} + \dots + p_{i_{n-j}}} \prod_{i=1}^n (2^{p_i} - 1)$$

$$c_n(n) = (-1)^n \prod_{i=1}^n (2^{p_i} - 1)$$

3. T_n^k の評価

まず中点法で $Y_0^k (k=0, 1, 2, \dots)$ の値を求める場合について考える. この解法では, 少なくとも積分区間 $l=b-a$ は 2 等分されていないとてはならない. すなわち刻み幅 h_k は, $h_k = 2^{-(k+1)} \cdot l$ ($k=0, 1, 2, \dots$) となる. そこで $y(a)$ 以外の出発値 $y(a+h_k)$ の値は Euler

表 2 T_n^k の第 1 項の $l^{2(n+1)} \cdot a_{n+1}(b)$ の係数の絶対値 (中点法)Table 2 Absolute values of the coefficient of $l^{2(n+1)} \cdot a_{n+1}(b)$, the 1st term in T_n^k (Midpoint method).

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
0	2^{-2}											
1	2^{-4}	2^{-6}										
2	2^{-6}	2^{-10}	2^{-12}									
3	2^{-8}	2^{-14}	2^{-18}	2^{-20}								
4	2^{-10}	2^{-18}	2^{-24}	2^{-28}	2^{-30}							
5	2^{-12}	2^{-22}	2^{-30}	2^{-36}	2^{-40}	2^{-42}						
6	2^{-14}	2^{-26}	2^{-36}	2^{-44}	2^{-50}	2^{-54}	2^{-56}					
7	2^{-16}	2^{-30}	2^{-42}	2^{-52}	2^{-60}	2^{-66}	2^{-70}	2^{-72}				
8	2^{-18}	2^{-34}	2^{-48}	2^{-60}	2^{-70}	2^{-78}	2^{-84}	2^{-88}	2^{-90}			
9	2^{-20}	2^{-38}	2^{-54}	2^{-68}	2^{-80}	2^{-90}	2^{-98}	2^{-104}	2^{-108}	2^{-110}	2^{-112}	
10	2^{-22}	2^{-42}	2^{-60}	2^{-72}	2^{-84}	2^{-102}	2^{-112}	2^{-120}	2^{-126}	2^{-130}	2^{-132}	2^{-134}
11	2^{-24}	2^{-46}	2^{-66}	2^{-80}	2^{-100}	2^{-114}	2^{-126}	2^{-136}	2^{-144}	2^{-150}	2^{-154}	2^{-156}

法* で計算する. すると Gragg ら^{4), 5)} によって示されたように(1)式における T_0^k は, $h_k = 2^{-(k+1)} \cdot l$ として

$$T_0^k = a_1(b) \cdot h_k^2 + a_2(b) \cdot h_k^4 + a_3(b) \cdot h_k^6 + \dots \quad (8)$$

と刻み幅 h_k の偶数乗で表せる. これに対して,

定理 1 を適用すると, T_n^k の第 1 項は $h_{n+k} = 2^{-(n+k+1)} \cdot l$ として

$$(-1)^n 2^{-(n+1)(n+2k+2)} \cdot l^{2(n+1)} \cdot a_{n+1}(b) \quad (9)$$

となる. ここで $l^{2(n+1)} \cdot a_{n+1}(b)$ の係数の絶対値 $2^{-(n+1)(n+2k+2)}$ を以後における単区間設定の目安とするために表 2 に示す.

同様に 4 次の Runge-Kutta 法により $Y_0^k (k=0, 1, 2, \dots)$ を求めると, (1)式における T_0^k は,

$$T_0^k = a_1(b) \cdot h_k^4 + a_2(b) \cdot h_k^6 + a_3(b) \cdot h_k^8 + \dots \quad (10)$$

とおけるから⁶⁾, T_n^k の第 1 項は $h_{n+k} = 2^{-(n+k)} \cdot l$ として,

$$(-1)^n \frac{(2-1)(2^2-1)(2^3-1)}{(2^{n+1}-1)(2^{n+2}-1)(2^{n+3}-1)} \times 2^{-(n^2+2n+8k)/2} \cdot l^{n+4} \cdot a_{n+1}(b) \quad (11)$$

となる. ここでも $l^{n+4} \cdot a_{n+1}(b)$ の係数の絶対値を前と同様な理由により, 2 の乗で概算評価し表 3 に示す.

4. R_n^k の評価

(7)式からわかるように, R_n^k は $R_0^{n+k}, R_0^{n+k-1}, \dots, R_0^k$ の 1 次結合である. 丸め誤差は計算回数の増加とともに増大すると考えられるから

* 出発値 $y(a+h_k)$ を R-K 法で計算した場合, T_n^k は(8)式のようにならない⁷⁾.

表 3 T_n^k の第 1 項の $I^{n+k} \cdot a_{n+1}(b)$ の係数の絶対値 (ルンゲ・クッタ法)Table 3 Absolute values of the coefficient of $I^{n+k} a_{n+1}(b)$, the 1st term in T_n^k (Runge-Kutta method).

n \ k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
0	2^{-0}													
1	2^{-4}	2^{-5}												
2	2^{-8}	2^{-10}	2^{-10}											
3	2^{-12}	2^{-15}	2^{-16}	2^{-16}										
4	2^{-16}	2^{-20}	2^{-22}	2^{-23}	2^{-24}									
5	2^{-20}	2^{-25}	2^{-28}	2^{-30}	2^{-32}	2^{-32}								
6	2^{-24}	2^{-30}	2^{-34}	2^{-37}	2^{-40}	2^{-41}	2^{-41}							
7	2^{-28}	2^{-35}	2^{-40}	2^{-44}	2^{-48}	2^{-50}	2^{-51}	2^{-51}						
8	2^{-32}	2^{-40}	2^{-46}	2^{-51}	2^{-56}	2^{-59}	2^{-61}	2^{-62}	2^{-62}					
9	2^{-36}	2^{-45}	2^{-52}	2^{-58}	2^{-64}	2^{-68}	2^{-71}	2^{-73}	2^{-74}	2^{-74}				
10	2^{-40}	2^{-50}	2^{-58}	2^{-65}	2^{-72}	2^{-77}	2^{-81}	2^{-84}	2^{-86}	2^{-87}	2^{-87}			
11	2^{-44}	2^{-55}	2^{-64}	2^{-72}	2^{-80}	2^{-86}	2^{-91}	2^{-95}	2^{-98}	2^{-100}	2^{-101}	2^{-101}		
12	2^{-48}	2^{-60}	2^{-70}	2^{-79}	2^{-88}	2^{-95}	2^{-101}	2^{-106}	2^{-110}	2^{-113}	2^{-115}	2^{-116}	2^{-116}	
13	2^{-52}	2^{-65}	2^{-76}	2^{-86}	2^{-96}	2^{-104}	2^{-111}	2^{-117}	2^{-122}	2^{-126}	2^{-129}	2^{-131}	2^{-132}	2^{-132}

$$|R_0^{n+k}| \geq |R_0^{n+k-1}| \geq \dots \geq |R_0^k| \quad (12)$$

となる。さらに係数 $c_j(n)$ に関しては

$$|c_0(n)| > |c_1(n)| > \dots > |c_n(n)| \quad (13)$$

が成立することは (7) 式より示される (表 4, 表 5 参照)。すなわち Y_n^k に最も大きく作用している丸め誤差は (7) 式の右辺の第 1 項の $c_0(n) \cdot R_0^{n+k}$ であることがわかる。 $c_0(n)$ の大きさは Y_0^k を中点法で計算した場合は

$$\begin{aligned} c_0(n) &= \frac{4^1 + 2 + \dots + n}{\prod_{i=1}^n (4^i - 1)} \\ &= \frac{1}{\prod_{i=1}^n (1 - 4^{-i})} < \frac{1}{1 - \sum_{i=1}^n 4^{-i}} < 1.5 \end{aligned} \quad (14)$$

となり、4 次の Runge-Kutta 法で計算した場合は

$$\begin{aligned} c_0(n) &= \frac{2^4 + 5 + \dots + (n+3)}{\prod_{i=1}^n (2^{i+3} + 1)} = \frac{1}{\prod_{i=1}^n (1 - 2^{-i-3})} \\ &< \frac{1}{1 - \sum_{i=1}^n 2^{-i-3}} < 1.14 \end{aligned} \quad (15)$$

となる。このことより、反復補外計算値の丸め誤差は

$$\left. \begin{aligned} |R_n^k| &< 1.5 |R_0^{n+k}|, & (\text{中点法系列}) \\ |R_n^k| &< 1.14 |R_0^{n+k}|, & (\text{R-K 法系列}) \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

で評価できる。

5. 収束判定条件

単区間長を一つ固定した場合の反復補外計算において、どの時点の近似解をその区間におけるいわゆる最

表 4 R_0^{n+k-j} の係数 $c_j(n)$ (中点法)Table 4 $c_j(n)$; coefficients of R_0^{n+k-j} (Midpoint method).

n \ j	0	1	2	3	4	5	6
1	1.3333	-0.3333					
2	1.4222	-0.4444	0.2222				
3	1.4448	-0.4740	0.296	-0.00035			
4	1.4504	-0.4816	0.316	-0.00047	0.0000014		
5	1.4518	-0.4835	0.321	-0.00051	0.0000018	-10^{-9}	
6	1.4522	-0.4839	0.322	-0.00051	0.0000020	-10^{-9}	10^{-13}
7	1.4523	-0.4840	0.322	-0.00051	0.0000020	-10^{-9}	10^{-13}
8	1.4523	-0.4841	0.322	-0.00051	0.0000020	-10^{-9}	10^{-13}
9	1.4523	-0.4841	0.322	-0.00051	0.0000020	-10^{-9}	10^{-13}

表 5 R_0^{n+k-j} の係数 $c_j(n)$ (ルンゲ・クッタ法)Table 5 $c_j(n)$; coefficients of R_0^{n+k-j} (Runge-Kutta method).

n \ j	0	1	2	3	4	5	6
1	1.0666	-0.0666					
2	1.1010	-0.1032	0.0021				
3	1.1185	-0.1223	0.0038	-0.000034			
4	1.1273	-0.1321	0.0048	-0.000065	0.0000003		
5	1.1317	-0.1370	0.0053	-0.000084	0.0000005	-10^{-9}	
6	1.1339	-0.1395	0.0056	-0.000094	0.0000007	-10^{-9}	10^{-12}
7	1.1351	-0.1407	0.0057	-0.000099	0.0000008	-10^{-9}	10^{-12}
8	1.1356	-0.1414	0.0058	-0.000103	0.0000008	-10^{-9}	10^{-12}
9	1.1359	-0.1417	0.0058	-0.000104	0.0000009	-10^{-9}	10^{-12}

適解として採用したらよいのか、その収束判定条件について考える。最適解 Y_n^k は、 $Y_n^k = y(b) + T_n^k + R_n^k$ と表されるから、誤差 $|T_n^k + R_n^k|$ が最小のものである。ところでこの誤差を数値的に求めることは困難である。そこで最適解を T_n^k と R_n^k の関係から見いだすための収束判定条件を考える。

5.1 反復補外計算における最適解

反復補外計算全体における最適解を考えるために、縦系列における最適解について考える。

n 列の $Y_n^k (k=0, 1, \dots)$ は、刻み幅が h_{n+k} で打ち切り誤差が $O(h_{n+k}^{p_{n+1}})$ である一つの差分解法の数値解と考えられる。ただし、 h_{n+k} , p_{n+1} は単区間長を l として

$$h_{n+k} = 2^{-(n+k+1)} \cdot l, \quad p_{n+1} = 2(n+1), \quad (\text{中点法系列})$$

$$h_{n+k} = 2^{-(n+k)} \cdot l, \quad p_{n+1} = n+4, \quad (\text{R-K 法系列})$$

である。

ここで一つの差分解法における最適解を考える。差分解 Y_n^k の誤差 $E_n^k = T_n^k + R_n^k$ において、 $|T_n^k|$ は刻み幅 h を小さくすると減少するが、 $|R_n^k|$ は逆に増大するので、 $|E_n^k|$ は T_n^k が R_n^k に優越しているあいだは減少し、 R_n^k が T_n^k より優越してくると増大しはじめる。この減少から増大に変わる時点で $|E_n^k|$ は最小となり最適解が現れる。すなわち

$$|T_n^k| \doteq |R_n^k| \quad (17)$$

の近辺で最適解となる。一般に高次の差分解法ほど最

適解の $|T_n^k|$ は $|R_n^k|$ より小さくなる傾向がある⁹⁾.

つぎに反復補外計算全体の最適解を考える。ここで各列の最適解を $\bar{Y}_n^k$ で表すと、補外値 Y_n^k は

$$|\bar{Y}_n^k| \text{ より上の } Y_n^k \text{ は, } |T_n^k| > |R_n^k| \quad (18)$$

$$|\bar{Y}_n^k| \text{ より下の } Y_n^k \text{ は, } |T_n^k| < |R_n^k| \quad (19)$$

と考えられる。よって補外値は(18)式が成立する Y_n^k の集合 D_T と(19)式が成立する Y_n^k の集合 D_R に分かれる。前者を打ち切り誤差領域、後者を丸め誤差領域とよぶ。各列の $\bar{Y}_n^k$ を結ぶ線は D_T と D_R の境界線と考えられる。すなわち最適解はこの境界線付近に存在する。

反復補外計算の最適解は $\bar{Y}_n^k$ のなかで最も精度のよいものである。ところで $\bar{Y}_n^k$ の誤差 $E_n^k = T_n^k + R_n^k$ は、 T_n^k と R_n^k が符号を異にして桁落ちを起こす場合を除き、(17)式より R_n^k で推定することができる。さらに R_n^k は(16)式より初期系列値の丸め誤差 R_0^{n+k} で評価できる。 $|R_0^{n+k}|$ は補外段数 $n+k$ が小さいほど小さいから反復補外計算値の最適解は、最上段の $\bar{Y}_n^k$ となる。

5.2 一定値ラインと最適解

前節での考察を根拠にして、反復補外計算値とその最適解との数値的關係を調べる。反復補外計算を表1の順序で計算してゆくと、 $Y_{n-1}^{k+1} = Y_n^k$ と同じ数値が並んで現れる。これを一定値ライン⁶⁾とよぶことにする(表8, 表9参照)。この一定値ラインについてはつぎの事柄が成立する。以下一定値ラインの説明においては計算値を $\bar{Y}_n^k$ で示す。すなわち $\bar{Y}_n^k$ は計算桁内の数値情報しかもたない。それに対して Y_n^k は無限桁の情報をもつ。

$$\bar{Y}_{n-1}^k = \bar{y}(b) + \bar{T}_{n-1}^k + \bar{R}_{n-1}^k$$

$$\bar{Y}_{n-1}^{k+1} = \bar{y}(b) + \bar{T}_{n-1}^{k+1} + \bar{R}_{n-1}^{k+1}$$

を用いて $\bar{Y}_n^k$ を求めると

$$\begin{aligned} Y_n^k &= \bar{Y}_{n-1}^{k+1} + \frac{\bar{Y}_{n-1}^{k+1} - \bar{Y}_{n-1}^k}{2p_n - 1} \\ &= \{\bar{y}(b) + \bar{T}_{n-1}^{k+1} + \bar{R}_{n-1}^{k+1}\} \\ &\quad + \frac{\bar{T}_{n-1}^{k+1} - \bar{T}_{n-1}^k}{2p_n - 1} + \frac{\bar{R}_{n-1}^{k+1} - \bar{R}_{n-1}^k}{2p_n - 1} \end{aligned}$$

となる。ここで第2項、第3項の誤差評価のため、 T_{n-1}^{k+1} , R_{n-1}^{k+1} 等を無限桁数値によって

$$t = \frac{T_{n-1}^{k+1} - T_{n-1}^k}{2p_n - 1}, \quad r = \frac{R_{n-1}^{k+1} - R_{n-1}^k}{2p_n - 1} \quad (20)$$

* 右辺の計算値は有限桁内の数値とならない。よって右辺の無限桁の計算値を Y_n^k とする。

とおく。 t を補正打ち切り誤差、 r を加算丸め誤差とよぶ。 $\bar{Y}_n^k = \bar{Y}_{n-1}^{k+1}$ が成立するための必要十分条件は、 p 進 l 桁計算において

$$|t+r| \leq |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-l} \quad (21)$$

となる。ここで、 $t \cdot r$ を正、負の場合に分けて(21)式が成立する条件を考える。

(I) $t \cdot r < 0$ の場合 $\bar{Y}_n^k = \bar{Y}_{n-1}^{k+1}$ となる十分条件は

$$|r| \leq |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-l} \quad (22)$$

$$|t| \leq |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-l} \quad (23)$$

がともに成立することである。

(I-1) まず $|r| \leq |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-l}$ となる場合を考える。 R_{n-1}^{k+1} , R_{n-1}^k に(7)式の関係代入すると

$$\begin{aligned} |r| &= \left| \frac{R_{n-1}^{k+1} - R_{n-1}^k}{2p_n - 1} \right| \\ &= \left| \sum_{j=0}^n \frac{c_j(n-1) - c_{j-1}(n-1)}{2p_n - 1} \cdot R_0^{n+k-j} \right| \\ &\leq \sum_{j=0}^n \left| \frac{c_j(n-1) - c_{j-1}(n-1)}{2p_n - 1} \cdot R_0^{n+k-j} \right| \end{aligned}$$

ただし、

$$c_{-1}(n-1) = c_n(n-1) = 0$$

となる。ここで R_0^{n+k-j} に対し $|R_0^k| \equiv 2|R_0^{k-1}|^*$, $|Y_0^{n+k}| \equiv |Y_0^{n+k-j}|$, ($j=1, 2, \dots, n$) とおくと

$$|R_0^{n+k-j}| \leq \begin{cases} 2^{n+k-j+1} |Y_0^{n+k}| \cdot p^{-l}, & (\text{中点法系列}) \\ 2^{n+k-j} |Y_0^{n+k}| \cdot p^{-l}, & (\text{R-K 法系列}) \end{cases} \quad (24)$$

と評価できるから

$$\varepsilon_n^k = \begin{cases} \sum_{j=0}^n \left| \frac{c_j(n-1) - c_{j-1}(n-1)}{2p_n - 1} \right| \cdot 2^{n+k-j+1} & (\text{中点法系列}) \\ \sum_{j=0}^n \left| \frac{c_j(n-1) - c_{j-1}(n-1)}{2p_n - 1} \right| \cdot 2^{n+k-j} & (\text{R-K 法系列}) \end{cases} \quad (25)$$

ただし、

$$c_{-1}(n-1) = c_n(n-1) = 0$$

とおくと

$$|r| < \varepsilon_n^k \cdot |Y_0^{n+k}| \cdot p^{-l} \quad (26)$$

となる。 $\bar{Y}_{n-1}^{k+1}$ が近似解に収束したとき $|\bar{Y}_0^{n+k}| \equiv$

* Y_0^k は、中点法では $y_1 = y_0 + h_k \cdot f_0$, $y_m = y_{m-1} + 2h_k \cdot f_{m-1}$, ($m=2, 4, \dots, 2^{k+1}$) の $y_{2^{k+1}}$ であり、R-K 法では $y_m = y_{m-1} + (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)/6$, ($m=1, 2, \dots, 2^k$) の y_{2^k} である。両者とも y_m の右辺は h_k が十分小さいとき |第1項| $\geq$ |第2項| となるので、各 y_m 計算での丸め誤差は計算桁末尾でただか1しか入らない⁵⁾。よって中点法では $R_0^k \leq 2^{k+1} |Y_0^k| \cdot p^{-l}$, R-K 法では $R_0^k \leq 2^k |Y_0^k| \cdot p^{-l}$ となり両者とも $|R_0^k| \equiv 2|R_0^{k-1}|$ となる。

表 6 ε_n^k , $k=j-n$ (中点法)Table 6 ε_n^k , $k=j-n$ (Midpoint method).

$n \backslash k$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0										
1	2.									
2	4.	1.2								
3	8.	2.4	0.6							
4	16.	4.8	1.3	0.32						
5	32.	9.6	2.5	0.64	0.16					
6	64.	19.2	5.0	1.27	0.32	0.08				
7	128.	38.4	10.1	2.54	0.64	0.16	0.04			
8	256.	76.8	20.1	5.09	1.28	0.32	0.08	0.02		
9	512.	153.6	40.2	10.2	2.55	0.64	0.16	0.04	0.01	
10	1024.	307.2	80.5	20.4	5.10	1.28	0.32	0.08	0.02	
11	2048.	614.4	160.9	40.7	10.2	2.55	0.64	0.16	0.04	

表 7 ε_n^k , $k=j-n$ (ルンゲ・クッタ法)Table 7 ε_n^k , $k=j-n$ (Runge-Kutta method).

$n \backslash k$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0										
1	0.2									
2	0.4	0.21								
3	0.8	0.43	0.33							
4	1.6	0.85	0.44	0.22						
5	3.2	1.70	0.88	0.45	0.23					
6	6.4	3.41	1.76	0.89	0.45	0.23				
7	12.8	6.82	3.52	1.78	0.90	0.45	0.23			
8	25.6	13.63	7.04	3.56	1.80	0.90	0.45	0.23		
9	51.2	27.26	14.08	7.14	3.60	1.81	0.90	0.45	0.23	
10	102.4	54.52	28.16	14.27	7.20	3.62	1.81	0.90	0.45	
11	204.8	109.05	56.32	28.54	14.40	7.23	3.63	1.81	0.91	

$|\tilde{Y}_{n-1}^{k+1}|$ となるから, $\varepsilon_n^k \leq 1$ のとき(26)式は(22)式と同じになり r は計算桁から落される. ここで r が加算されず $\tilde{R}_n^k = \tilde{R}_{n-1}^{k+1}$ となる範囲を丸め誤差一定領域とよぶことにする. ε_n^k を(25)式により中点法系列と R-K 法系列により計算した結果をそれぞれ表 6, 表 7 に示す. さらに丸め誤差一定領域を太枠で囲む.

(I-2) つぎに $|t| \leq |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-i}$ となる場合について考える.

i) $\tilde{Y}_{n-1}^k, \tilde{Y}_{n-1}^{k+1}$ にそれぞれ $\tilde{T}_{n-1}^k, \tilde{T}_{n-1}^{k+1}$ が含まれていない場合は, (23)式は成立する.

ii) $\tilde{Y}_{n-1}^k, \tilde{Y}_{n-1}^{k+1}$ にそれぞれ $\tilde{T}_{n-1}^k, \tilde{T}_{n-1}^{k+1}$ が含まれている場合を考える. T_{n-1}^k, T_{n-1}^{k+1} は(6)式より

$$T_{n-1}^k = a_n'(b) \cdot h_{n+k-1} p_n + a_{n+1}'(b) \cdot h_{n+k-1} p_{n+1} + \dots \quad (27)$$

$$T_{n-1}^{k+1} = a_n'(b) \cdot h_{n+k} p_n + a_{n+1}'(b) \cdot h_{n+k} p_{n+1} + \dots \quad (28)$$

とおけるから

$$t = -a_n'(b) \cdot h_{n+k} p_n - \frac{2p_{n+1}-1}{2p_n-1} a_{n+1}'(b) h_{n+k} p_{n+1} - \dots$$

となり右辺の第 1 項は T_{n-1}^{k+1} の右辺の第 1 項と絶対値は等しく符号を異にする. h_{n+k} が十分小さくなると T_{n-1}^{k+1} は第 1 項が優越し, $t \doteq -T_{n-1}^{k+1}$ となるので, $|t| \doteq |T_{n-1}^{k+1}| > |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-i}$ となり(23)式は成立しない. すなわち(23)式が成立するためには $\tilde{Y}_{n-1}^{k+1}$ は $\tilde{T}_{n-1}^{k+1}$ を含んではならない.

iii) $\tilde{Y}_{n-1}^k$ が $\tilde{T}_{n-1}^k$ を含み, $\tilde{Y}_{n-1}^{k+1}$ が $\tilde{T}_{n-1}^{k+1}$ を含まない場合の t について考える. このとき

$$t = -T_{n-1}^k / (2p_n - 1) \quad (29)$$

$$|T_{n-1}^k| > |Y_{n-1}^k| \cdot p^{-i}, |T_{n-1}^{k+1}| < |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-i} \quad (30)$$

となる. (27)式, (28)式より $T_{n-1}^k \doteq 2p_n \cdot T_{n-1}^{k+1}$ の関係があるから

$$|t| = \frac{|T_{n-1}^k|}{2p_n - 1} \doteq \frac{2p_n}{2p_n - 1} |T_{n-1}^{k+1}| \quad (31)$$

となるが, n が大きくなると $2p_n / (2p_n - 1) > 1$ は 1 に近づき, 一方 $|T_{n-1}^{k+1}|$ は $|T_{n-1}^k|$ より急激に減少するので, ほとんどの場合

$$\frac{2p_n}{2p_n - 1} |T_{n-1}^{k+1}| \leq |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-i} \quad (32)$$

が成立し, (23)式は満たされる.

(32)式が満たされない場合は, つぎの補外計算

$$Y_{n+1}^{k-1} = \tilde{Y}_n^k + t' + r'$$

において, t' は(27)式, (28)式より

$$\begin{aligned} |t'| &= \frac{|T_{n-1}^{k-1}|}{2p_n - 1} \doteq \frac{2p_{n+1}}{2p_n - 1} |T_n^k| \\ &\doteq \left| \frac{a_{n+1}'(b)}{a_n'(b)} \right| \cdot \frac{2p_n |2p_n - 2p_{n+1}|}{(2p_{n+1} - 1)(2p_n - 1)} \\ &\quad \times h_{n+k} p_{n+1} - p_n \cdot |T_{n-1}^{k+1}| \\ &< \left| \frac{a_{n+1}'(b)}{a_n'(b)} \right| \cdot \frac{(2p_n |2p_n - 2p_{n+1}|)}{(2p_{n+1} - 2p_n)(2p_n - 1)} \\ &\quad \times 2 - (n+k)(p_{n+1} - p_n) |T_{n-1}^{k+1}| \\ &\doteq \left| \frac{a_{n+1}'(b)}{a_n'(b)} \right| \cdot 2 - (n+k)(p_{n+1} - p_n) |T_{n-1}^{k+1}| \end{aligned}$$

となる. $a_n'(b), a_{n+1}'(b)$ は未知であるが $|a_{n+1}'(b)/a_n'(b)| \doteq 1$ とおけば

$$\begin{aligned} |t'| &= \frac{2p_{n+1}}{2p_n - 1} |T_n^k| < |T_{n-1}^{k+1}| \\ &< |Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-i} \doteq |Y_n^k| \cdot p^{-i} \quad (33) \end{aligned}$$

となる. すなわち $Y_n^k = \tilde{Y}_{n-1}^{k+1} + t' + r'$ の t が(23)式を満たさない場合は, つぎの $Y_{n+1}^{k+1} = \tilde{Y}_n^k + t' + r'$ の t' が必ず(33)式を満たす.

以上(I-1), (I-2)より, $t \cdot r < 0$ の場合は, 丸め誤差一定領域内でかつ $\tilde{Y}_{n-1}^k$ が $\tilde{T}_{n-1}^k$ を含み, (32)式が満たされたとき $\tilde{Y}_n^k = \tilde{Y}_{n-1}^{k+1}$ となる. まれに(32)式が成立しない場合でも, つぎの補外値で $\tilde{Y}_{n+1}^{k-1} = \tilde{Y}_n^k$ となる. このとき一定値 $\tilde{Y}_n^k$ は D_T と D_R の境界線のすぐ下のライン上の丸め誤差のみの近似解となる.

(II) $t \cdot r > 0$ の場合は, (22)式, (23)式が成立するとき

$$|t+r| \leq 2|Y_{n-1}^{k+1}| \cdot p^{-i} \quad (34)$$

となるが, 一般に t と r はオーダ差があるので数値的には(21)式が成立する場合がほとんどである. まれに

表 8 $y' = -10y$ の補外計算値とその誤差 (中点法)Table 8 Extrapolation of the numerical results of $y' = -10y$ and its errors (Midpoint method).

$i \setminus n$	MP法	1回	2回	3回	4回	5回	6回	7回	8回	9回
0	1.625000 00 1.542914 00 1.879655 01									
	$y' = -10y, y(0)=1$ の $y(0.25)$ 計算 $y(0.25) = 8.208499863 - 02$									
1段	8.925781-01 8.104931-01 9.873833 00	6.484375-01 5.663525-01 6.899590 00								
2段	3.500752-01 2.679902-01 3.264791 00	1.692410-01 8.715591-02 1.061777 00	1.372945-01 5.520952-02 6.725900-01	← 計算値 ← 誤差 ← 相対誤差						
3段	1.547087-01 7.262372-02 8.847386-01	8.958650-02 7.501539-03 9.138751-02	8.427620-02 2.191245-03 2.669485-02	8.343464-02 1.349688-03 1.644257-02						
4段	1.006261-01 1.854115-02 2.258776-01	8.259857-02 5.136130-04 6.257091-03	8.213270-02 4.774330-05 5.816328-04	8.209866-02 1.370906-05 1.670107-04	8.209342-02 8.463861-06 1.031110-04					
5段	8.674496-02 4.660010-03 5.677058-02	8.211792-02 3.296136-05 4.015518-04	8.208585-02 8.940693-07 1.089200-05	8.208501-02 1.192093-07 1.452267-06	8.208495-02 5.960464-08 0.0					
6段	8.325100-02 1.166045-03 1.420535-02	8.208632-02 1.370906-06 1.670107-05	8.208412-02 7.748603-07 -9.439736-06	8.208406-02 8.940693-07 -1.016587-05	8.208406-02 -8.940693-07 -1.089200-05	8.208406-02 -8.940693-07 -1.089200-05				
7段	8.237445-02 2.894997-04 3.526831-03	8.208227-02 -2.682209-06 -3.267601-05	8.208191-02 -2.980232-06 -3.630668-05	8.208191-02 -3.039836-06 -3.703281-05	8.208185-02 -3.099442-06 -3.775895-05	8.208185-02 -3.099442-06 -3.775895-05	8.208185-02 -3.099442-06 -3.775895-05			
8段	8.215714-02 7.218122-05 8.793478-04	8.208477-02 -2.980231-07 -3.630667-06	8.208477-02 -1.788139-07 -2.178401-06	8.208477-02 -1.788139-07 -2.178401-06	8.208477-02 -1.788139-07 -2.178401-06	8.208477-02 -1.788139-07 -2.178401-06	8.208477-02 -1.788139-07 -2.178401-06	8.208477-02 -1.788139-07 -2.178401-06		
9段	8.209795-02 1.299381-05 1.582971-04	8.207822-02 -6.735325-06 -8.205310-05	8.207774-02 -7.212161-06 -8.786216-05	8.207762-02 -7.331371-06 -8.931443-05	8.207756-02 -7.390975-06 -9.004056-05	8.207750-02 -7.450580-06 -9.076670-05	8.207750-02 -7.450580-06 -9.076670-05	8.207750-02 -7.450580-06 -9.076670-05	8.207750-02 -7.450580-06 -9.076670-05	8.207750-02 -7.450580-06 -9.076670-05
10段	8.208215-02 2.801477-06 3.412827-05	8.207685-02 -8.106231-06 -9.875417-05	8.207673-02 -8.225437-06 -1.002064-04	8.207667-02 -8.285047-06 -1.009326-04	8.207661-02 -8.344649-06 -1.016587-04	8.207661-02 -8.344649-06 -1.016587-04	8.207661-02 -8.344649-06 -1.016587-04	8.207661-02 -8.344649-06 -1.016587-04	8.207661-02 -8.344649-06 -1.016587-04	8.207661-02 -8.344649-06 -1.016587-04
11段	8.206344-02 -2.151726-05 -2.621340-04	8.205718-02 -2.775755-05 -3.383781-04	8.205587-02 -2.908706-05 -3.543531-04	8.205551-02 -2.944688-05 -3.587098-04	8.205539-02 -2.956390-05 -3.601622-04	8.205533-02 -2.962349-05 -3.608882-04	8.205527-02 -2.968310-05 -3.616144-04	8.205527-02 -2.968310-05 -3.616144-04	8.205527-02 -2.968310-05 -3.616144-04	8.205527-02 -2.968310-05 -3.616144-04

表 9 $y' = -10y$ の補外計算値とその誤差 (ルンゲ・クッタ法)Table 9 Extrapolation of the numerical results of $y' = -10y$ and its errors (Runge-Kutta methods).

$i \setminus n$	R-K法	1回	2回	3回	4回	5回	6回	7回	8回	9回
0	6.484375-01 5.663525-01 6.899590 00									
	$y' = -10y, y(0)=1$ の $y(0.25)$ 計算 $y(0.25) = 8.208499863 - 02$									
1段	9.452844-02 1.244348-02 1.515927-01	5.760117-02 -2.448378-02 -2.982737-02								
2段	8.252692-02 4.419682-04 5.384278-03	8.172679-02 -3.581642-04 -4.363336-03	8.250499-02 4.200338-04 5.117062-03	← 数値解 ← 誤差 ← 相対誤差						
3段	8.210623-02 2.127886-05 2.592297-04	8.207816-02 -6.794928-06 -8.277922-05	8.208948-02 4.529952-06 5.518614-05	8.208287-02 -2.086162-06 -2.541467-05						
4段	8.208609-02 1.132488-06 1.379654-05	8.208472-02 -2.384185-07 -2.904534-06	8.208489-02 -5.960464-08 -7.261336-07	8.208477-02 -1.788139-07 -2.178401-06	8.208477-02 -1.788139-07 -2.178401-06					
5段	8.208495-02 0.0 0.0	8.208483-02 -1.192093-07 -1.452267-06	8.208483-02 -1.192093-07 -1.452267-06	8.208483-02 -1.192093-07 -1.452267-06	8.208483-02 -1.192093-07 -1.452267-06	8.208483-02 -1.192093-07 -1.452267-06				
6段	8.208442-02 -5.364417-07 -6.535202-06	8.208436-02 -5.960464-07 -7.261336-06	8.208430-02 -6.556510-07 -7.987469-06	8.208424-02 -7.152557-07 -8.713603-06	8.208418-02 -7.748603-07 -9.439736-06	8.208418-02 -7.748603-07 -9.439736-06	8.208418-02 -7.748603-07 -9.439736-06			
7段	8.208400-02 -9.536744-07 -1.161814-05	8.208394-02 -1.013279-06 -1.234427-05	8.208388-02 -1.072883-06 -1.307040-05	8.208382-02 -1.132488-06 -1.379654-05	8.208382-02 -1.132488-06 -1.379654-05	8.208382-02 -1.132488-06 -1.379654-05	8.208382-02 -1.132488-06 -1.379654-05	8.208382-02 -1.132488-06 -1.379654-05		
8段	8.208275-02 -2.205371-06 -2.686694-05	8.208263-02 -2.324581-06 -2.831921-05	8.208257-02 -2.384184-06 -2.904533-05	8.208251-02 -2.443790-06 -2.977147-05	8.208245-02 -2.503394-06 -3.049760-05	8.208239-02 -2.562999-06 -3.122374-05	8.208239-02 -2.562999-06 -3.122374-05	8.208239-02 -2.562999-06 -3.122374-05	8.208239-02 -2.562999-06 -3.122374-05	8.208239-02 -2.562999-06 -3.122374-05
9段	8.208048-02 -4.470348-06 -5.446002-05	8.208030-02 -4.649161-06 -5.663841-05	8.208019-02 -4.768371-06 -5.809068-05	8.208013-02 -4.827976-06 -5.881682-05	8.208007-02 -4.887579-06 -5.954294-05	8.208001-02 -4.947185-06 -6.026909-05	8.207995-02 -5.006789-06 -6.099521-05	8.207995-02 -5.006789-06 -6.099521-05	8.207995-02 -5.006789-06 -6.099521-05	8.207995-02 -5.006789-06 -6.099521-05

$|t+r| > |Y_{n+1}^{k+1}| \cdot p^{-l}$ となる場合は, つぎの補外計算 $Y_{n+1}^{k+1} = \bar{Y}_n^{k+1} + r'$ において, $r' = r$, $|l'| < |l|$ となるので, 必ず $|l' + r'| \leq |Y_n^k| \cdot p^{-l}$ が成立し $\bar{Y}_{n+1}^{k+1} = \bar{Y}_n^k$ となる.

以上のことより一定値ラインは D_T 内には現れず, 丸め誤差一定領域内の D_R 内に現れる. さらに, 丸め誤差一定領域内の D_T と D_R の境界線のすぐ下のライン上に必ず現れる. ところで 5.1 節で最適解はこの境界線の最上段付近に現れることが示されている. このことより反復補外計算を繰り返し最初に現れた一定値 $\bar{Y}_n^k = \bar{Y}_{n-1}^{k+1}$ が最適解もしくは, これに最も近い近似値となる. 表 8, 表 9 に $y' = -10y$, $y(0) = 1$ の単区間 $[0, 0.25]$ の $y(0.25)$ を, それぞれ中点法と R-K 法により補外計算した結果を示す. 丸め誤差一定領域を太枠で囲み, D_T と D_R の境界線を --- で示す. 太枠内の D_R 内で一定値が並び, 最上段の一定値が最適解もしくはこれに近い近似解となっていることがよくわかる.

5.3 単区間における収束判定

5.2 節の一定値ラインの考察より, 単区間での補外計算を表 1 の手順で繰り返えし, はじめて

$$Y_n^k = Y_{n-1}^{k+1} \quad (35)$$

となったとき, Y_n^k は D_T と D_R の境界線に最も近い D_R 内の近似解となり, かつ最上段のものであるから, 単区間での最適解もしくは, これに最も近い近似解となる. このことより (35) 式を収束判定条件として用いる. この収束判定条件によって得られた近似解の誤差は丸め誤差のみとなるので Y_n^k の誤差 E は (16) 式より, 次式で推定できる.

$$|E| = \begin{cases} |R_{n-1}^{k+1}| < 1.5 |R_0^{n+k}|, & (\text{中点法系列}) \\ |R_{n-1}^{k+1}| < 1.14 |R_0^{n+k}|, & (\text{R-K 法系列}) \end{cases} \quad (36)$$

6. 計算手順

単区間 $[a, b]$ における最適解を $Y_{n-1}^{k+1} = Y_n^k$ の収束判定で求めたとき, その誤差は丸め誤差のみであるから, 補外段数が大きいときは (16) 式より誤差は大きくなり精度が悪くなる. 一方 Y_n^k の T_n^k は計算桁以下になっていることより, 3 章の T_n^k の基準評価を用い補外段数を表 10 のように制限する. すなわち単精度計算, 倍精度計算では, それぞれ 16 進計算の 6 桁, 14 桁となるので, 表 2, 表 3 の値が 2^{-23} , 2^{-55} 以下となる段数の上限を制限段数とした. 4 倍精度計算では 16 進 30 桁より, 表 2, 表 3 の 2^{-119} 以下とな

表 10 反復補外段数の上限

Table 10 Upper bound of the stage of repeated extrapolation method.

初期系列	計算精度		
	単精度	倍精度	4倍精度
中点法	4 段	6 段	10 段
R-K 法	4 段	8 段	11 段

る段数の上限は, 中点法では 10 段, Runge-Kutta 法は 13 段となる. ところが Runge-Kutta 法の場合は, 補外段数 m が大きくなると初期値系値の関数計算が 2^{2+m} 回となり計算時間が非常に多くなる. ちなみに $m=11$ のときでも関数計算は 8,192 回で, $m=13$ となると 32,768 回と急激に増加する. さらに演算回数の増大によって丸め誤差も増大するので 11 段で止めたほうが得策であるので, 4 倍精度の Runge-Kutta 法は 11 段で制限することにした (表 13 参照).

表 3, 表 4 の T_n^k の評価は $l=1$, $a_{n+1}(b)=1$ としたから, はじめの単区間長を $l=1$ として $[a, a+1]$ で補外計算をする. 制限段数内で収束しないときは, $|a_{n+1}(b)|$ が大きいと考え h を小さくするため区間長

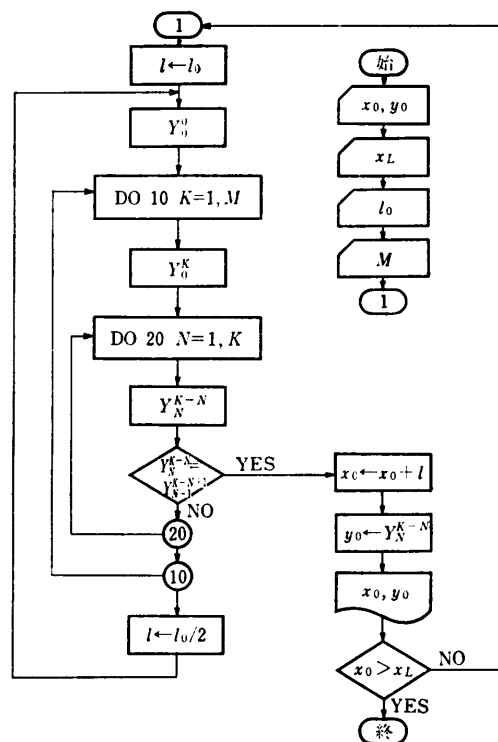


図 1 反復補外計算の流れ図

Fig. 1 Flow-chart for the repeated extrapolation method.

を $l=2^{-1}$ として $[a, a+1/2]$ で補外計算し, 制限段数内で収束するまで区間長を $l=2^{-1}, 2^{-2}, 2^{-4}, \dots$ と縮小する. 区間 $[a, a+2^{-m}]$ で収束したら, 収束値 $y(a+2^{-m})$ をつぎの区間の初期値として, 区間長 $l=1$ から同じ手続きを繰り返す. 計算手順を図1の流れ図で示す⁷⁾.

7. む す び

前項の計算手順により, つぎの例題を用い数値実験を行った.

数値実験例

EX. 1. $y' = -y$, 初期値 $y(0)=1$

厳密解 $y = e^{-x}$

EX. 2. $y' = -10y$, 初期値 $y(0)=1$

厳密解 $y = e^{-10x}$

EX. 3. $y' = 10y$, 初期値 $y(0)=1$

厳密解 $y = e^{10x}$

EX. 4. $y' = -2xy$, 初期値 $y(0)=1$

厳密解 $y = 1/(1+x^2)$

EX. 5. $y' = x - y^2$, 初期値 $y(10)=0$

($x \rightarrow \infty$ としたとき厳密解は $\sqrt{x}$ に下側より接近)

計算機は HITAC 8700 (16 進 6 桁計算) を使用した. 計算は可能な限り続行し, 最終値 x の相対誤差等を表 11 (単精度), 表 12 (倍精度), 表 13 (4 倍精

度) に示す. 表中の Y_0^k 計算の略記号は, MP は中点法, M-MP は修正中点法¹⁾, MP-m は中点法に Möller による丸め誤差補正を行ったもの, R-K は

表 12 倍精度計算による数値計算例 (HITAC 8700)

Table 12 Numerical results in the case of double precision. (HITAC 8700)

Eq.	Y_0^k	I	段数	最終 x 値	相対誤差	CPU T. *時間切れ
I. $y' = -y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{-x}$	MP	1.0	6	151.75	5.99-13	8.3
	M-MP	1.0	6	151.0	7.29-13	10.3
	MP-m	1.0	6	145.9	3.47-15	30.9
	R-K	1.0	8	151.0	4.96-13	20.2
	R-K-G	1.0	8	149.0	4.09-14	13.7
II. $y' = -10y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{-10x}$	MP	1.0	6	15.125	5.06-13	19.6
	M-MP	1.0	6	15.125	5.68-13	19.5
	MP-m	1.0	6	14.89	3.46-14	54.8
	R-K	1.0	8	15.0	4.99-13	18.2
	R-K-G	1.0	8	14.25	2.66-15	38.4
III. $y' = 10y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{10x}$	MP	1.0	6	17.0	7.35-13	16.6
	M-MP	1.0	6	16.688	7.03-13	15.2
	MP-m	1.0	6	14.594	3.47-15	30.9
	R-K	1.0	8	17.0	7.64-13	25.3
	R-K-G	1.0	8	17.125	5.50-14	32.8
IV. $y' = -2xy^2$ $y_0 = 1$ $y(x) = \frac{1}{1+x^2}$	MP	1.0	6	1500.75	1.36-13	7.6
	M-MP	1.0	6	1500.5	2.18-13	6.5
	MP-m	1.0	6	1500.125	2.58-14	42.3
	R-K	1.0	8	34.057	1.67-14	60.0 *
	R-K-G	1.0	8	147.179	2.07-14	60.0 *
V. $y' = x - y^2$ $y_0 = y(10) = 0$ $x \rightarrow \infty$ $y(x) \rightarrow \sqrt{x}$	MP	1.0	6	416 (DIV.)		
	M-MP	1.0	6	542.0	1.97-05	300.0 *
	MP-m	1.0	6	322.0 (DIV.)		
	R-K	1.0	8	945.68	8.59-06	300.0 *
	R-K-G	1.0	8	698.062	1.35-05	300.0 *

表 13 4 倍精度計算による数値計算例 (HITAC 8700)

Table 13 Numerical results in the case of quadruple precision. (HITAC 8700)

Eq.	Y_0^k	I	段数	最終 x 値	相対誤差	CPU T. *時間切れ
I. $y' = -y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{-x}$	MP	1.0	11	115.0	5.12-29	34.4
	M-MP	1.0	11	112.0	5.42-29	36.3
	MP-m	1.0	11	112.0	2.83-30	115.2
	R-K	1.0	11	57.75	5.76-29	300.0 *
	R-K-G	1.0	11	65.0	3.13-31	300.0 *
II. $y' = -10y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{-10x}$	MP	1.0	11	11.75	5.76-28	107.9
	M-MP	1.0	11	11.0	4.65-29	107.2
	MP-m	1.0	11	11.125	3.36-30	300.0 *
	R-K	1.0	11	3.0	2.35-29	300.0 *
	R-K-G	1.0	11	1.875	7.40-32	300.0 *
III. $y' = 10y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{10x}$	MP	1.0	11	17.0	8.89-29	158.5
	M-MP	1.0	11	16.25	8.74-29	134.4
	MP-m	1.0	11	17.0	3.33-31	215.0
	R-K	1.0	11	1.685	2.58-29	300.0 *
	R-K-G	1.0	11	1.25	7.75-32	300.0 *
IV. $y' = -2xy^2$ $y_0 = 1$ $y(x) = \frac{1}{1+x^2}$	MP	1.0	11	1500.0	7.82-30	57.5
	M-MP	1.0	11	1500.0	8.74-29	52.4
	MP-m	1.0	11	1500.0	1.86-31	75.5
	R-K	1.0	11	802.875	7.64-30	300.0 *
	R-K-G	1.0	11	1051.0	1.46-30	300.0 *
V. $y' = x - y^2$ $y_0 = y(10) = 0$ $x \rightarrow \infty$ $y(x) \rightarrow \sqrt{x}$	MP	1.0	11	72.0	4.09-04	300.0 *
	M-MP	1.0	11	75.0	3.85-04	300.0 *
	MP-m	1.0	11	62.0	5.13-04	300.0 *
	R-K	1.0	11	19.5	2.92-03	300.0 *
	R-K-G	1.0	11	18.5	3.17-03	300.0 *

表 11 単精度計算による数値計算例 (HITAC 8700)

Table 11 Numerical results in the case of single precision. (HITAC 8700)

Eq.	Y_0^k	I	段数	最終 x 値	相対誤差	CPU T. *時間切れ
I. $y' = -y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{-x}$	MP	1.0	4	170.125	5.35-04	2.4
	M-MP	1.0	4	170.375	6.80-04	1.7
	MP-m	1.0	4	170.5	1.28-04	1.8
	R-K	1.0	4	170.75	3.00-04	2.1
	R-K-G	1.0	4	170.0	5.90-05	1.7
II. $y' = -10y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{-10x}$	MP	1.0	4	17.078	5.05-04	6.2
	M-MP	1.0	4	17.008	8.05-04	6.0
	MP-m	1.0	4	17.141	4.78-04	6.2
	R-K	1.0	4	17.75	1.11-04	1.7
	R-K-G	1.0	4	17.75	4.00-05	2.7
III. $y' = 10y$ $y_0 = 1$ $y(x) = e^{10x}$	MP	1.0	4	17.125	4.77-04	2.7
	M-MP	1.0	4	17.75	4.36-04	1.9
	MP-m	1.0	4	17.125	1.25-04	3.6
	R-K	1.0	4	17.0	2.87-04	1.7
	R-K-G	1.0	4	17.0	9.97-05	2.4
IV. $y' = -2xy^2$ $y_0 = 1$ $y(x) = \frac{1}{1+x^2}$	MP	1.0	4	1500.75	2.02-04	2.6
	M-MP	1.0	4	1500.25	4.73-04	2.6
	MP-m	1.0	4	1500.5	2.46-04	2.3
	R-K	1.0	4	1500.5	1.45-04	2.5
	R-K-G	1.0	4	1500.0	5.53-05	2.6
V. $y' = x - y^2$ $y_0 = y(10) = 0$ $x \rightarrow \infty$ $y(x) \rightarrow \sqrt{x}$	MP	1.0	3	1200.0	1.60-04	300.0 *
		1.0	4	250.0	(DIV.)	
	M-MP	1.0	4	1050.0	(DIV.)	60.0 *
	MP-m	1.0	3	1000.0	8.23-04	300.0 *
	R-K	1.0	4	1200.0	5.70-06	60.0 *
	R-K-G	1.0	4	1900.0	2.80-06	60.0 *

Runge-Kutta 法, R-K-G は Runge-Kutta-Gill 法で R-K に丸め誤差の補正を行ったものである. この数値実験結果より, つぎの事柄が確かめられた.

1] EX. 1 から EX. 4 においては, 積分区間全域にわたり, 収束判定条件 $Y_n^k = Y_{n-1}^{k+1}$ と補外段数の制限が適切に作動し, 各分割点での近似解は一定して計算桁限界と認められる程度の精度が得られている.

2] 表 8 の中点法の例では, 収束値 $Y_4^2 = Y_5^1$ より上段の Y_4^1 のほうが精度がよい. また, 下段の Y_4^4 も Y_4^2 より精度がよいが, この場合は Y_0^8 の $|R_0^8|$ がとくに小さくなったため Y_4^4 の $|E_4^4| = |R_4^4|$ が小さくなり精度がよくなっている. 表 9 の R-K 法の例では, 収束値 $Y_3^1 = Y_4^0$ は上段の Y_3^0 より精度がよいが, 下段の Y_3^2 より精度が悪い. この場合も前と同様に Y_0^5 の $|R_0^5|$ が小さくなったため 5 段目は $|R_n^k|$ が小さくなったためである. このように最上段の一定値よりも下段の一定値が精度がよくなる場合もあるが, これらは数値的にたまたま起こる現象であるので除外して考えると, 収束値は D_T と D_R の境界線のすぐ下のライン上で必ずとらえられ, 最適解もしくはこれに最も近い近似解といえる.

3] 収束値 Y_n^k の誤差は丸め誤差 R_n^k である. R_n^k は初期系列値 Y_0^{n+k} の R_0^{n+k} により (16) 式で評価できる (表 8, 表 9 の D_R 内の誤差参照). ところで $|R_0^{n+k}|$ は (24) 式で概算評価できるが, この計算法では $n+k$ はただか 4, 6, 10 (単精度, 倍精度, 4 倍精度計算) であるので, 実際の $|R_0^{n+k}|$ はその評価よりはるかに小さい値になる.

4] 中点法により初期系列値を求める場合は, 振動現象の懸念があるが, 補外段数の制限が有効に作用して, それはみられなかった. そのため MP 法と M-MP 法における差異は認められなかった.

5] 単精度計算では, R-K 法系列が中点法系列より多少精度がよいが, 倍精度計算, 4 倍精度計算では精度は同程度である. しかし 4 倍精度計算となると中点法での加速の早さが顕著にあらわれ, 時間的には R-K 法より有利である. ただし, 中点法の制限段数は表 10 から 10 段であるが, この数値実験例では $l_0 = 1$ で 11 段にて収束するものが多かったので, 表 13 には 11 段制限の結果を示した. 10 段で制限すると分割区間が $1/2$ となり, 計算時間は 11 段制限の場合の 2 倍となる. しかし 2 倍になっても R-K 法より, はるかに早い.

6] MP-m 法, R-K-G 法では丸め誤差補正の効

果があらわれ精度がよい. このことと 5] を考慮すると, 初期系列は単精度計算では R-K-G 法を高精度計算では MP-m 法を用いたほうが有利である.

7] EX. 5 の Riccati の問題では, 表 10 の MP 法に見られるように, 補外段数制限を 3 段にすれば $x = 1, 200$ まで (5 分 Job で計算が打ち切られたが, まだ先まで計算できる) 安定して計算できるが, 4 段にすると $x = 250$ で発散してしまう. M-MP 法でも同様のことがいえる. このように打ち切り誤差の変動がはげしい問題に関しては, まだ段数の制限に問題があり, 今後の課題である.

参 考 文 献

- 1) Bulirsch, R. and Stoer, J.: Numerical Treatment of Ordinary Differential Equations by Extrapolation Methods, *Numer. Math.*, Vol. 8, pp. 1-13 (1966).
- 2) Bilirsch, R. and Stoer, J.: Asymptotic Upper and Lower Bounds for Results of Extrapolation Methods, *ibid.*, Vol. 8, pp. 93-104 (1966).
- 3) Gragg, W.B.: On Extrapolation Algorithms for Ordinary Initial Value Problems, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 2, No. 3, pp. 384-403 (1965).
- 4) Stetter, H.J.: *Analysis of Discretization Methods for Ordinary Differential Equations*, pp. 372-375, Springer, New York (1973).
- 5) Stoer, J. and Bulirsch, R.: *Introduction to Numerical Analysis*, pp. 410-462, Springer, New York (1980).
- 6) 豊久智子, 永坂秀子: ロンバーク積分の誤差について, 応用数学科会予稿集, 日本数学会秋季大会, pp. 123-133 (1978).
- 7) 永坂秀子, 五十嵐正夫, 室伏 誠: 常微分方程式の初期値問題の新しい解法 (NIM 法) の Y_0^k とその加速について, 数理解析研究所講究録 382, 京都大学数理解析研究所, pp. 168-180 (1980).
- 8) 清水辰次郎, 大橋常道: Runge-Kutta-Gill タイプの数値計算法について, I, 応用数学科会予稿集, 日本数学会秋季大会, pp. 101-105 (1975).
- 9) 永坂秀子, 福井義成: 数値微分の誤差, 情報処理学会論文誌, Vol. 22, No. 5, pp. 411-416 (1981).

付 録

中点法, 修正中点法, Møller 法の公式 $y' = f(x, y)$ において, x_0, y_0 から刻み幅 $h = x/m$ で x の関数値 $y(x)$ を求める各公式は, つぎのとおりである.

1. 中 点 法

中点法は初期値が二つである. x_0 の y_0 は与えられ

るが, x_1 の y_1 は未知である. ここでは y_1 は Euler 法を用いる.

$$y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) \quad [\text{Euler 法}]$$

$$y_j = y_{j-2} + 2h \cdot f(x_{j-1}, y_{j-1}) \quad [\text{中点法}]$$

$$(j=2, 3, \dots, m)$$

$$y_m = y_x \sim y(x)$$

2. 修正中点法

中点法の最後の y_m と一つ前の y_{m-1} によって y_x を次式で修正する.

$$y(x) \sim y_x = \frac{1}{2} [y_{m-1} + y_m + h f(x_m, y_m)]$$

3. Møller 法

一般に y_{j-1} から y_j に進むとき, y_{j-1} の補正値を

$$H_j \text{ とすると } (H_1 = h \cdot f(x_0, y_0), H_j = 2h f(x_{j-1}, y_{j-1}))$$

$$y_j = y_{j-1} + H_j \quad (j=1, 2, \dots, m)$$

となる. 各段階で次の計算により丸め誤差を補正する. いま y_{j-1} の丸め誤差を q_{j-1} とする. ただし, $q_0=0$ である.

$$s_j = H_j - q_{j-1}$$

$$y_j = y_{j-1} + s_j$$

$$r_j = y_j - y_{j-1}$$

$$q_j = r_j - s_j$$

により, y_j の丸め誤差 q_j が y_{j+1} に繰り越される.

(昭和 56 年 9 月 9 日受付)

(昭和 57 年 5 月 19 日採録)