

Runge-Kutta 系極限公式からの近似公式

千葉大工学部 小野 令美 (Harumi Ono)

常微分方程式の初期値問題

$$dy/dt = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0 \quad (y, f \text{ はベクトル})$$

の陽的 Runge-Kutta 系数値解法において, 5 段と 6 段で達成し得る次数は高々 4 次と 5 次の精度までである。一方 1 ステップの中で関数計算を行う分点のある二つを近づけると 5 段で 5 次に近い精度が得られることも知られ, その極限として厳密に 5 段で 5 次と 6 段で 6 次の公式が導かれている。これは極限公式と呼ばれ必然的に f の導関数を含んでいる。この導関数の計算を避け関数計算だけで同精度を得る方法について先に報告したが, その際頂いたコメントに基づき検討し非常に効果的と思われる結果を得たので報告する。

極限公式の微分係数を含む項の計算にはあまり精度が要らないので微分係数を数値微分で近似する。その際極限公式に残されている自由パラメタの一つを最終的な計算結果に含まれる近似誤差が小さくなるようにとり, さらに残る一つの自

由パラメタは公式の局所打切り誤差の最適化に用いる。

数値微分による近似誤差の第1項が0となるように自由パラメタを選ばると近似誤差は積分の刻み幅 h のとき r 進法 q 桁計算で $O(h^3 r^{-q/2})$ となるが、5段公式では次の項まで0になり $O(h^4 r^{-q/2})$ となる。自由パラメタをこのように決めた極限公式の打切り誤差は、打切り誤差最適の極限公式のものよりは大きいが、その比は5段公式で約1.2倍、6段公式で約1.5倍程度である。伊理, Rallらにより提案されている自動微分法がまだすべてのシステムで自動化されていない現在、ここで提案する公式は次の点から精度の良い実用的な公式と言えよう。

- 1) 係数が極限公式のものなので簡単である。
- 2) 計算桁数に応じて数値微分に用いる値だけを変えればその計算桁用の公式が得られる。
- 3) 近似誤差は公式の精度に殆ど影響しない。特に5段公式では全く影響せず数値的に5次の精度が達成される。

1. 5段公式

1.1 5次極限公式

5段陽的 Runge-Kutta公式は、 t_n における値 y_n が得られているとき $t_n + h$ における値 y_{n+1} を次式で求める：

$$(1.1) \quad \left\{ \begin{array}{l} f_1 = f(t_n, y_n) \\ f_i = f(t_n + \alpha_i h, y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j), \quad i=2,3,4,5 \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^5 \mu_i f_i \end{array} \right.$$

ここで $\beta_{ij}, \mu_i, \alpha_i$ はパラメータで、公式に望ましい性質を与えるように定められる。通常は、この Taylor 展開が真の解関数の展開となるべく高次の項まで関数によらず一致するように定められる。5段公式(1.1)では h^4 の項までしか一致させることはできない。しかし、 $\alpha_5=1$ のとき、 $\alpha_2 \rightarrow 0$ の極限で考えると h^5 の項まで一致させることができる。この公式には必然的に df/dt が含まれる。このようにある分点 \Rightarrow を近づけた極限で考えた公式を極限公式と呼ぶ。戸田によって導かれた5段5次極限公式は \Rightarrow の自由パラメータを含む次のものである。

$$(1.2) \quad \left\{ \begin{array}{l} f_1 = f(t_n, y_n) \\ Df_1 = \left(\frac{\partial}{\partial t} + f_1 \frac{\partial}{\partial y} \right) f(t_n, y_n) \\ f_3 = f(t_n + \alpha_3 h, y_n + h(b_{31} f_1 + b_{32} h Df_1)) \\ f_4 = f(t_n + \alpha_4 h, y_n + h(b_{41} f_1 + b_{42} h Df_1 + b_{43} f_3)) \\ f_5 = f(t_n + h, y_n + h(b_{51} f_1 + b_{52} h Df_1 + b_{53} f_3 + b_{54} f_4)) \\ y_{n+1} = y_n + h(m_1 f_1 + m_2 h Df_1 + m_3 f_3 + m_4 f_4 + m_5 f_5) \end{array} \right.$$

ここでパラメータは、 α_3, α_4 を \Rightarrow の自由パラメータとして次のように表わされる：

$$\begin{aligned}
 m_2 &= \frac{10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3}{60\alpha_3\alpha_4}, & m_3 &= \frac{5\alpha_4 - 3}{60\alpha_3^2(1-\alpha_3)(\alpha_4 - \alpha_3)}, \\
 m_4 &= \frac{3 - 5\alpha_3}{60\alpha_4^2(1-\alpha_4)(\alpha_4 - \alpha_3)}, & m_5 &= \frac{20\alpha_3\alpha_4 - 15(\alpha_3 + \alpha_4) + 12}{60(1-\alpha_3)(1-\alpha_4)}, \\
 m_1 &= 1 - m_3 - m_4 - m_5 \\
 (1.3) \quad b_{31} &= \alpha_3, & b_{32} &= \frac{\alpha_3^2}{2}, \\
 b_{43} &= \frac{1}{60\alpha_3^2 m_4(1-\alpha_4)}, & b_{41} &= \alpha_4 - b_{43}, & b_{42} &= \frac{\alpha_4^2}{2} - b_{43}\alpha_3, \\
 b_{54} &= \frac{1}{m_5} \cdot m_4(1-\alpha_4), & b_{53} &= \frac{1}{m_5}(m_3(1-\alpha_3) - m_4 b_{43}), \\
 b_{51} &= 1 - b_{53} - b_{54}, & b_{52} &= \frac{1}{2} - b_{53}\alpha_3 - b_{54}\alpha_4
 \end{aligned}$$

この極限公式に含まれる微分係数を数値微分で近似する公式をさきに報告したが、そのもとになる極限公式は二つの自由パラメータを公式の打ち切り誤差からみて最適になるように選んだものであった。これは積分する刻み幅を小さくしていくと公式の打ち切り誤差より、数値微分の近似誤差の方が優位となる心配があった。本報告で数値微分の近似誤差が公式全体の誤差に影響する心配のない公式を提案する。それは、極限公式に含まれる自由パラメータを、打ち切り誤差最適なものに限定せず、数値微分の近似誤差を小さくする観点から選ぶものである。

1.2 数値微分による近似誤差

(1.2) の hDf_1 の代りに, 小さい正の数 ε を使って

$$\begin{cases} f_2 = f(t_n + \varepsilon h, y_n + \varepsilon h f_1) \\ \hat{f}_2 = \frac{f_2 - f_1}{\varepsilon} \end{cases}$$

を計算し, \hat{f}_2 を用いる. このとき用いる ε の値を最良とする
よりに次のように決める.

簡単のため $(\frac{\partial}{\partial t} + f_1 \frac{\partial}{\partial y})^k f(t_n, y_n)$ を $D^k f_1$ と書くと

$$f_2 = f_1 + \varepsilon h Df_1 + \frac{(\varepsilon h)^2}{2!} D^2 f_1 + \frac{(\varepsilon h)^3}{3!} D^3 f_1 + \dots$$

なので, hDf_1 を \hat{f}_2 で近似したときの誤差は $|t| \approx 1$ のとき
r進法 q桁計算で

$$\text{打ち切り誤差の主要項} : E_T \doteq \varepsilon \cdot \frac{h^2}{2} |D^2 f_1|$$

$$\text{丸めの誤差} : E_R \doteq 2 \cdot r^{-q} \left| \frac{f_1}{\varepsilon} \right|$$

で見積ることができる. 従って全体の誤差を E とおくと

$$E = E_T + E_R$$

で, これを最小にする ε とそのときの E_{opt}

$$\varepsilon_{\text{opt}} \doteq 2 r^{-\frac{q}{2}} h^{-1} \sqrt{|f_1 / D^2 f_1|},$$

$$E_{\text{opt}} \doteq h \cdot 2 r^{-\frac{q}{2}} \sqrt{|f_1 \cdot D^2 f_1|} + O(h r^{-q})$$

である. この E_{opt} を含む \hat{f}_2 を用いた f_3 を \hat{f}_3 と書くと

$$\hat{f}_3 = f(t_n + \alpha_3 h, y_n + h(b_{31} f_1 + b_{32} \hat{f}_2))$$

$$= f(t_n + \alpha_3 h, y_n + h(b_{31} f_1 + b_{32} h Df_1) + h b_{32} E_{\text{opt}})$$

$$\doteq f_3 + h b_{32} E_{\text{opt}} \cdot f_{y_3} + O(h^4)$$

である。ここで $y_3 = y_n + h(b_{31}f_1 + b_{32}hDf_1)$, $f_{y_3} = \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + \alpha_3 h, y_3)$ を表す。同様の記号を用いると \hat{f}_4, \hat{f}_5 は

$$\begin{aligned}\hat{f}_4 &= f(t_n + \alpha_4 h, y_n + h(b_{41}f_1 + b_{42}\hat{F}_2 + b_{43}\hat{f}_3)) \\ &= f_4 + h b_{42} E_{opt} f_{y_4} + h^2 b_{43} b_{32} E_{opt} f_{y_3} \cdot f_{y_4} + O(h^4) \\ \hat{f}_5 &= f(t_n + h, y_n + h(b_{51}f_1 + b_{52}\hat{F}_2 + b_{53}\hat{f}_3 + b_{54}\hat{f}_4)) \\ &= f_5 + h b_{52} E_{opt} f_{y_5} + h^2 (b_{53} b_{32} f_{y_3} + b_{54} b_{42} f_{y_4}) E_{opt} f_{y_5} + O(h^4)\end{aligned}$$

よって、最終的に \hat{y}_{n+1} は

$$\begin{aligned}\hat{y}_{n+1} &= y_n + h(m_1 f_1 + m_2 \hat{F}_2 + m_3 \hat{f}_3 + m_4 \hat{f}_4 + m_5 \hat{f}_5) \\ &= y_{n+1} + h m_2 E_{opt} \\ &\quad + h^2 (m_3 b_{32} f_{y_3} + m_4 b_{42} f_{y_4} + m_5 b_{52} f_{y_5}) E_{opt} \\ &\quad + h^3 (m_4 b_{43} b_{32} f_{y_3} f_{y_4} \\ &\quad + m_5 (b_{53} b_{32} f_{y_3} + b_{54} b_{42} f_{y_4}) f_{y_5}) E_{opt} + O(h^5)\end{aligned}$$

となる。 $f_{y_3}, f_{y_4}, f_{y_5}$ は異なる値であるが、近い値と考えられるのでこれを f_y とおくと

$$\begin{aligned}\hat{y}_{n+1} &\doteq y_n + h m_2 E_{opt} \\ (1.4) \quad &\quad + h^2 (m_3 b_{32} + m_4 b_{42} + m_5 b_{52}) f_y \cdot E_{opt} \\ &\quad + h^3 ((m_4 b_{43} + m_5 b_{53}) b_{32} + m_5 b_{54} b_{42}) f_y^2 \cdot E_{opt} + O(h^5)\end{aligned}$$

と書ける。

打ち切り誤差が最適となるように自由パラメータを選んだ極限公式では $m_2 \neq 0$ なので、 \hat{y}_{n+1} の近似誤差の主要項は $h m_2 E_{opt} = O(h^2 r^{-\frac{p}{2}})$ であるが、 $m_2 = 0$ となるように自由パラ

メタを選べば, 近似誤差は $O(h^3 r^{-\frac{2}{3}})$ となることがわかる.

(1.4) の h^2 , h^3 の項のパラメタの式の部分に, 極限公式の係数の関係式 (1.3) を代入して整理すると

$$\begin{aligned} h^2 \text{ の項: } C_2 &= m_3 b_{32} + m_4 b_{42} + m_5 b_{52} \\ &= \frac{3}{2}(m_3 \alpha_3^2 + m_4 \alpha_4^2 + m_5) - (m_3 \alpha_3 + m_4 \alpha_4 + m_5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h^3 \text{ の項: } C_3 &= m_4 b_{43} b_{32} + m_5 (b_{53} b_{32} + b_{54} b_{42}) \\ &= \frac{1}{2}(m_3 \alpha_3^2 + m_4 \alpha_4^2 + m_5) - \frac{1}{2}(m_3 \alpha_3^3 + m_4 \alpha_4^3 + m_5) - \frac{1}{60 \alpha_3} \end{aligned}$$

となる. ここで, 公式が満たさなければならぬ条件式

$$O(h^2) \text{ の項の係数} \quad : \quad m_2 + m_3 \alpha_3 + m_4 \alpha_4 + m_5 = \frac{1}{2}$$

$$O(h^3) \text{ の項の係数の一つ: } m_2 \alpha_2 + m_3 \alpha_3^2 + m_4 \alpha_4^2 + m_5 = \frac{1}{3}$$

$$O(h^4) \text{ の項の係数の一つ: } m_2 \alpha_2^2 + m_3 \alpha_3^3 + m_4 \alpha_4^3 + m_5 = \frac{1}{4}$$

から, $m_2 = 0$ のときには

$$C_2 = \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{3} - \frac{1}{2} = 0, \quad C_3 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4} - \frac{1}{60 \alpha_3} = \frac{5\alpha_3 - 2}{120 \alpha_3}$$

となり, h^2 の係数も無条件で 0 になる. C_3 は $m_2 = 0$ の条件

$$10\alpha_3 \alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3 = 0 \quad \text{から 0 にできないので } (\alpha_3 = 2/5 \text{ にす}$$

ると $\alpha_4 = 1$ になる), 残る一つの自由パラメタは打切り誤差

から最適となるように選ぶことにする. $m_2 = 0$ の極限公式の

うちで最良のものは $\alpha_3 = (5 - \sqrt{5})/10$, $\alpha_4 = (5 + \sqrt{5})/10$ と与えら

れているのでこれに決める.

ε_{opt} の大きさは次のように決める. f_1, Df_1 の大きさは関数によつて異なるが, 一般に関数の性質の良いときにはまるめ

の誤差が大きくなるので ε は大きめの方が良く、関数の性質の悪いものは数値微分の打ち切り誤差が大きいため ε は小さい方がよい。公式の打ち切り誤差は関数の性質が良いものは小さいので、性質の良いときに数値微分の誤差が優位となることがないように ε は大きめに決める。経験的に $\sqrt{|f_1 D^4|}$ を 4 として

$$\varepsilon = 8 \cdot r^{-\frac{2}{3}} h^{-1}$$

に決める。ただし、 $|t| > r$ のところでは t との相対的な大きさにして $\varepsilon' = t\varepsilon$ にする。

1.3 5段近似5次公式

5段で数値的に5次といえる公式は次のものでこれを5段近似5次公式 [N5] と名づける。

$$\begin{aligned}
 & f_1 = f(t_n, y_n) \\
 & f_2 = f(t_n + \varepsilon h, y_n + \varepsilon h f_1) \quad F_2 = \frac{f_2 - f_1}{\varepsilon} \\
 [N5] \quad & f_3 = f\left(t_n + \frac{5-\sqrt{5}}{10} h, y_n + h\left(\frac{5-\sqrt{5}}{10} f_1 + \frac{3-\sqrt{5}}{20} F_2\right)\right) \\
 & f_4 = f\left(t_n + \frac{5+\sqrt{5}}{10} h, y_n + h\left(\frac{-5-3\sqrt{5}}{10} f_1 + \frac{-3-\sqrt{5}}{20} F_2 + \frac{5+2\sqrt{5}}{5} f_3\right)\right) \\
 & f_5 = f\left(t_n + h, y_n + h\left((1+2\sqrt{5})f_1 + \frac{\sqrt{5}}{2} F_2 + \frac{-5-3\sqrt{5}}{2} f_3 + \frac{5-\sqrt{5}}{2} f_4\right)\right) \\
 & y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{1}{12} f_1 + \frac{5}{12} f_3 + \frac{5}{12} f_4 + \frac{1}{12} f_5\right)
 \end{aligned}$$

ただし、 ε は1進法浮動小数点計算で次の値とする。

$$\varepsilon = 8 \cdot r^{-\frac{2}{3}} h^{-1} \quad (|t| > r \text{ のときは } \varepsilon' = t \cdot 8 r^{-\frac{2}{3}} h^{-1})$$

1.4 数値例

$$\frac{dy}{dt} = \frac{e^t(y^3(t+1)+1)}{3y^2(6-tet)}, \quad y(0)=1$$

を $t=0$ から 1 まで刻み幅 h を変えて積分したときの $t=1$ における誤差を図1に示す。計算は FACOM M340S で16進15切捨て方式の倍精度(14桁)で行った。さらに数値微分による近似誤差を見るために、倍精度用の ϵ を用いた4倍精度計算を行った。図から

も近似公式 [N5] の数値微分による近似誤差の累積は h^3 に比例し、これが公式の打ち切り誤差より優位となるのは4倍精度計算の範囲に入ってからで倍精度の範囲では精確に5次である極限公式と数値的に同精度が達成されていることがわかる。

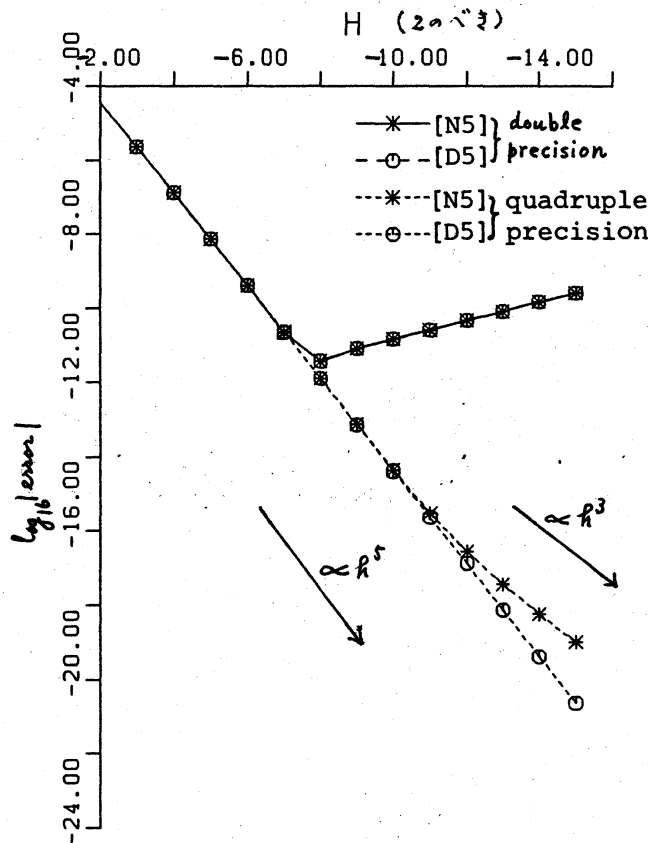


図1 $\frac{dy}{dt} = \frac{e^t(y^3(t+1)+1)}{3y^2(6-tet)}, \quad y(0)=1$

の $t=1$ における誤差

[D5] …… [N5] のもとになっている極限公式

2. 6段公式

2.1 6次極限公式

6段公式では, $\alpha_6=1$ のとき $\alpha_2 \rightarrow 0$ かつ $\alpha_5 \rightarrow 1$ の場合に極限で6次の公式が得られ, 5段の場合と同じく二つの自由なパラメータが残る. 公式は次のように書ける:

$$\begin{aligned}
 (2.1) \quad & f_1 = f(t_n, y_n) \\
 & Df_1 = \left(\frac{\partial}{\partial t} + f_1 \frac{\partial}{\partial y} \right) f(t_n, y_n) \\
 & f_3 = f(t_n + \alpha_3 h, y_n + h(b_{31}f_1 + b_{32}hDf_1)) \\
 & f_4 = f(t_n + \alpha_4 h, y_n + h(b_{41}f_1 + b_{42}hDf_1 + b_{43}f_3)) \\
 & y_p = y_n + h(b_{61}f_1 + b_{62}hDf_1 + b_{63}f_3 + b_{64}f_4) \\
 & f_6 = f(t_n + h, y_p) \\
 & \tilde{f} = b_{561}f_1 + b_{562}hDf_1 + b_{563}f_3 + b_{564}f_4 + b_{565}f_6 \\
 & Df_5 = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \tilde{f} \frac{\partial}{\partial y} \right) f(t_n + h, y_p) \\
 & y_{n+1} = y_n + h(m_1f_1 + m_2hDf_1 + m_3f_3 + m_4f_4 + m_5hDf_5 + m_6f_6)
 \end{aligned}$$

ここでパラメータ b_{ij} , b_{56j} , m_i は自由パラメータ α_3 と α_4 の有理式で表わされる.

2.2 近似公式の誤差

5段公式と同様に hDf_1 と hDf_5 の代りにそれぞれ

$$\begin{aligned}
 f_2 = f(t_n + \varepsilon h, y_n + \varepsilon h f_1), \quad \hat{F}_2 = \frac{f_2 - f_1}{\varepsilon} \\
 f_5 = f(t_n + h - \delta h, y_p - \delta h \tilde{f}), \quad \hat{F}_5 = \frac{f_6 - f_5}{\delta}
 \end{aligned}$$

を計算して \hat{F}_2 と \hat{F}_5 を用いる. ここで \tilde{f} は (2.1) における \tilde{f}

の右辺の hDf_1, f_3, f_4, f_6 をそれぞれ $\hat{F}_2, \hat{f}_3, \hat{f}_4, \hat{f}_6$ でおきかえられたものを表わす. \hat{f}_3, \hat{f}_4 の近似誤差は 5 段の場合と同じで, \hat{f}_6 は次のように見積られる.

$$\begin{aligned}\hat{y}_p &= y_n + h(b_{61}f_1 + b_{62}\hat{F}_2 + b_{63}\hat{f}_3 + b_{64}\hat{f}_4) \\ &= y_p + h b_{62} E_{opt} + h^2(b_{63}b_{32}f_{y_3} + b_{64}b_{42}f_{y_4}) E_{opt} + O(h^4)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{f}_6 &= f_6 + h b_{62} E_{opt} \cdot f_{y_p} + h^2(b_{63}b_{32}f_{y_3} + b_{64}b_{42}f_{y_4}) E_{opt} \cdot f_{y_p} + O(h^4) \\ &\doteq f_6 + h b_{62} E_{opt} \cdot f_y + h^2(b_{63}b_{32} + b_{64}b_{42}) E_{opt} \cdot f_y^2 + O(h^4)\end{aligned}$$

数値微分 $\hat{F}_5 = (\hat{f}_6 - \hat{f}_5) / \delta$ に用いる最適な δ を δ_{opt} , その時の \hat{F}_5 の誤差を Δ_{opt} と書くと

$$\delta_{opt} = 2r^{-\frac{2}{3}} h^{-1} \sqrt{|f_6 / D^2 f_6|}, \quad \Delta_{opt} = -h \cdot 2r^{-\frac{2}{3}} \sqrt{|f_6 \cdot D^2 f_6|}$$

である. これを用いると,

$$\begin{aligned}\hat{F}_5 &= \frac{\hat{f}_6 - \hat{f}_5}{\delta_{opt}} \doteq F_5 + \Delta_{opt} + h b_{562} E_{opt} \cdot f_y \\ &\quad + h^2(b_{563}b_{32} + b_{564}b_{42} + b_{565}b_{62}) E_{opt} \cdot f_y^2 \\ &\quad + O(h^4)\end{aligned}$$

従って最終的に \hat{y}_{n+1} は

$$\begin{aligned}\hat{y}_{n+1} &= y_n + h(m_1 f_1 + m_2 \hat{F}_2 + m_3 \hat{f}_3 + m_4 \hat{f}_4 + m_5 \hat{F}_5 + m_6 \hat{f}_6) \\ &= y_{n+1} + h(m_2 E_{opt} + m_5 \Delta_{opt}) \\ &\quad + h^2(m_3 b_{32} + m_4 b_{42} + m_5 b_{562} + m_6 b_{62}) E_{opt} \cdot f_y + O(h^4)\end{aligned}$$

となる. $|f_1 \cdot Df_1|$ と $|f_6 \cdot D^2 f_6|$ は異なるが近い値と考えると h と h^2 の項のパラメータの部分は

$$h \text{ の項} : d_1 = m_2 - m_5$$

$$h^2 \text{ の項} : d_2 = m_3 b_{32} + m_4 b_{42} + m_5 b_{52} + m_6 b_{62}$$

で、この d_2 に極限公式のパラメタの間になり立つ関係式を代入してせいとんすると m_2 になる。そこで $m_2 = m_5 = 0$ とするようによければ、近似誤差は $E_{opt} = O(h)$ となり、 $O(h^4)$ とすることもできるが、それはできない。なぜなら m_5 の分子の因数は b_{6j} の分母の因数になっているからである。

そこで、 $m_2 - m_5 = 0$ をみたす d_3, d_4 の組で公式の局所打ち切り誤差をできる限り小さくするものを選ぶことにする。

6次極限公式の $O(h^7)$ の誤差項の係数は次の5種類に分類される：

$$K = \frac{1}{5040} \text{ の倍数} \quad 10 \text{ 項}$$

$$\xi = \frac{14d_3d_4 - 7(d_3 + d_4) + 4}{302400} \text{ の倍数} \quad 13 \text{ 項}$$

$$\eta = \frac{7d_4 - 4}{15120} \text{ の倍数} \quad 12 \text{ 項}$$

$$\zeta = \frac{7d_3 - 3}{15120} \text{ の倍数} \quad 10 \text{ 項}$$

$$\omega = \frac{1}{30240(1-2d_3)(5d_3d_4 - 3(d_3 + d_4) + 2)^2} \\ \times \left[(305d_4^2 - 296d_4 + 72)d_3^3 + (175d_4^3 - 466d_4^2 + 340d_4 - 76)d_3^2 \right. \\ \left. + (-210d_4^3 + 395d_4^2 - 248d_4 + 52)d_3 + 63d_4^3 - 120d_4^2 + 76d_4 - 16 \right] \text{ の倍数} \quad 3 \text{ 項}$$

図2に $m_2, m_5, m_2 - m_5, \xi, \eta, \zeta, \omega$ を0とおいた曲線を示す。最適な d_3, d_4 は $0 < d_3 < \frac{5-\sqrt{5}}{10}$ の範囲の $m_2 - m_5 = 0$ の線上にあると考えられるので、この線に添って $O(h^7)$ の誤差項の係数の

= の尺度 (= 乗和の平均の平方根と, 絶対値最大なもの) による変化のようすを調べると図3のようになり最適な α_3 は 0.15 ~ 0.2 附近とわかる。

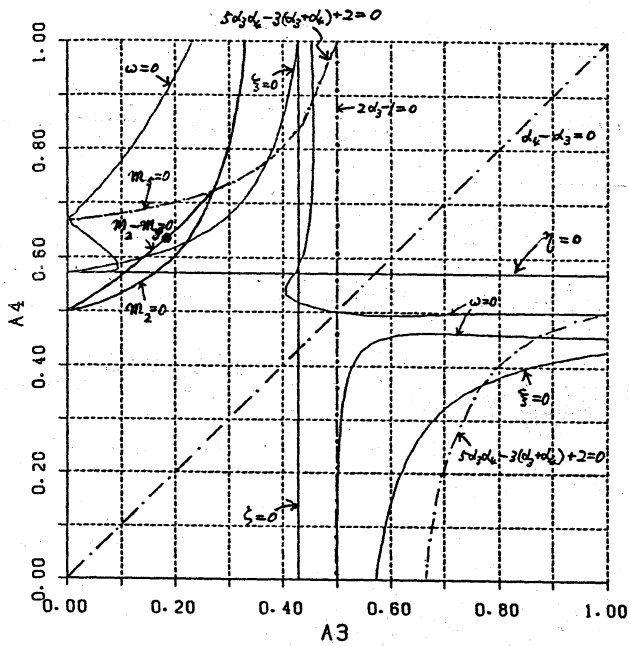


図2 $m_2, m_5, m_2 - m_5, \xi, \eta, \zeta, \omega$ を 0 とおいた曲線 $\bullet \text{EP} \dots (\frac{5-\sqrt{10}}{10}, \frac{\sqrt{10}}{5})$

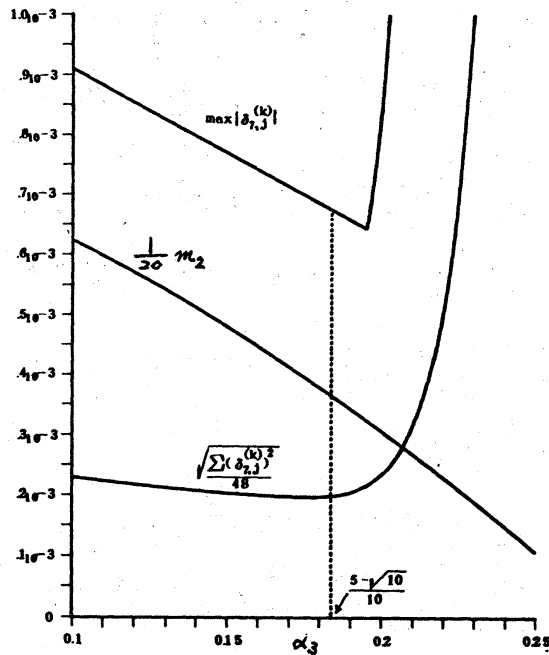


図3 $O(h^7)$ の誤差項の係数の α_3 による変化のようす

$$m_2 - m_5 = \frac{(10\alpha_3^2 - 10\alpha_3 + 2)\alpha_4^2 - (10\alpha_3^2 - 12\alpha_3 + 3)\alpha_4 + 2\alpha_3^2 - 3\alpha_3 + 1}{60\alpha_3\alpha_4(1-\alpha_3)(1-\alpha_4)}$$

から, パラメタが 2 次体の整数になるような組を求めると, $0.15 < \alpha_3 < 0.2$ の範囲では $\alpha_3 = \frac{5-\sqrt{10}}{10}, \alpha_4 = \frac{\sqrt{10}}{5}$ とする。

2.3 6 段近似 6 次公式

6 段で数値的に 6 次といえる公式は次のものにてこれを

[N6] と名づける。

$$f_1 = f(t_n, y_n)$$

$$f_2 = f(t_n + \varepsilon h, y_n + \varepsilon h f_1), \quad F_2 = \frac{f_2 - f_1}{\varepsilon}$$

$$f_3 = f\left(t_n + \frac{5-\sqrt{10}}{10}h, y_n + h\left(\frac{5-\sqrt{10}}{10}f_1 + \frac{7-2\sqrt{10}}{40}F_2\right)\right)$$

$$f_4 = f\left(t_n + \frac{\sqrt{10}}{5}h, y_n + h\left(\frac{-220-23\sqrt{10}}{135}f_1 + \frac{-11-\sqrt{10}}{45}F_2 + \frac{2(22+5\sqrt{10})}{27}f_3\right)\right)$$

$$y_p = y_n + h\left(\frac{1064+313\sqrt{10}}{54}f_1 + \frac{55+14\sqrt{10}}{18}F_2 + \frac{-8(905+283\sqrt{10})}{351}f_3 + \frac{50+17\sqrt{10}}{26}f_4\right)$$

[N6]

$$f_6 = f(t_n + h, y_p)$$

$$f_5 = f\left(t_n + (1-\varepsilon)h, y_p - \varepsilon h\left(\frac{2(1599+503\sqrt{10})}{9}f_1 + \frac{2(232+73\sqrt{10})}{9}F_2 + \frac{-4(11265+3574\sqrt{10})}{117}f_3 + \frac{2(620+203\sqrt{10})}{39}f_4 - f_6\right)\right)$$

$$F_5 = \frac{f_6 - f_5}{\varepsilon}$$

$$y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{100-37\sqrt{10}}{540}f_1 + \frac{5-2\sqrt{10}}{180}F_2 + \frac{40(7-\sqrt{10})}{351}f_3 + \frac{5(62+19\sqrt{10})}{1404}f_4 + \frac{5-2\sqrt{10}}{180}F_5 + \frac{-55+31\sqrt{10}}{270}f_6\right)$$

∴ c, ε は 5 段公式と同様に r 進法 q 桁計算のとき

$$\varepsilon = 8 \cdot r^{-\frac{2}{3}} h^{-1} \quad (|t| > r \text{ のときは } \varepsilon' = t \cdot \varepsilon)$$

にする。

2.4 数値例

5 段公式と同じ例

$$\frac{dy}{dt} = \frac{e^t(y^3(t+1)+1)}{3y^2(6-te^t)}, \quad y(0) = 1$$

を [N6] を用いて 5 段公式と同じ方法で実行した結果を図 4 に

示す。図からも倍精度計算の範囲では極限公式とほぼ同精度が達成されていることがわかる。

3. まとめ

3.1 公式の評価

ここで提案した5段公式 [N5] と6段公式 [N6] について、公式の打ち切り誤差と数値微分の近似誤差をまとめると表1のようになる。打ち切り誤差の尺度は誤差項の係数の二乗和の平均の平方根である。

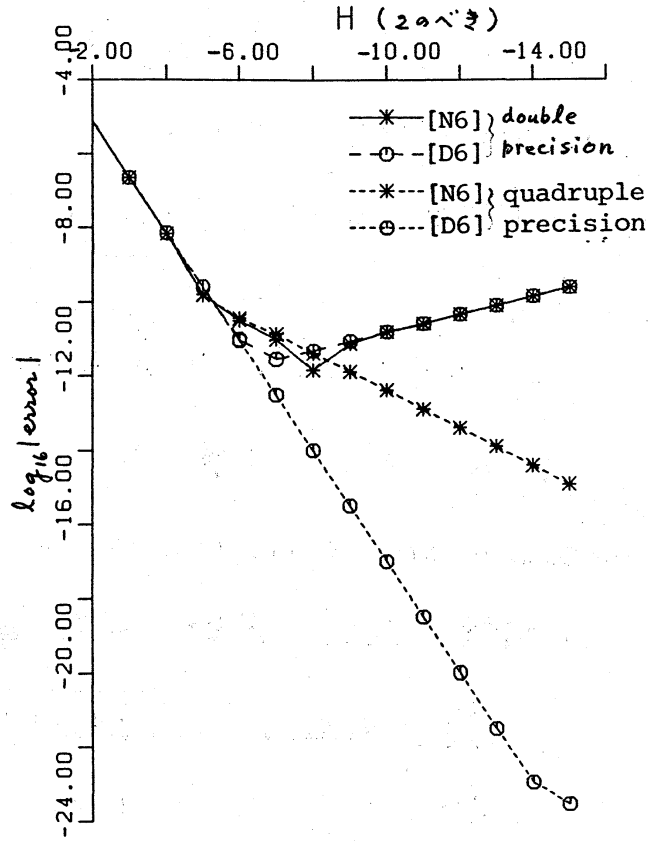


図4 $\frac{dy}{dt} = \frac{e^t(y^2(t+1)+1)}{3y^2(6-te^t)}$, $y(0)=1$

の $t=1$ における誤差。[D6] は [N6] のもとになっている極限公式

表1 公式の打ち切り誤差と数値微分の近似誤差

		打ち切り誤差	近似誤差
5段公式	最良の極限公式	$.765_{10} \cdot 3 h^6$	
	[N5]	$.897_{10} \cdot 3 h^6$	$k_5 r^{-\frac{5}{2}} h^4$ ($k_5 \doteq -.37_{10} \cdot 1 \cdot \sqrt{ h_1 \cdot D_5 }$)
6段公式	最良の極限公式	$.121_{10} \cdot 3 h^7$	
	[N6]	$.198_{10} \cdot 3 h^7$	$k_6 r^{-\frac{6}{2}} h^3$ ($k_6 \doteq -.15_{10} \cdot 1 \cdot \sqrt{ h_1 \cdot D_6 }$)

[N5] では公式の打ち切り誤差 $O(h^6)$ に対して数値微分の近似誤差が $O(r^{-\frac{1}{2}}h^4)$ であるのに対して, [N6] では打ち切り誤差が h' だけ良くなっているのに近似誤差は h' だけ悪くなっているので近似誤差の影響が少し出てくる心配がある. 従って, 結論としては5段近似公式 [N5] がパラメタも簡単で推奨できる公式といえる.

3.2 他の公式との比較

Bulirsch, Stoer (1966) にとり上げられ Hairer (1978) で比較されている問題, Euler の運動方程式

$$\frac{dy_1}{dt} = y_2 y_3, \quad y_1(0) = 0$$

$$\frac{dy_2}{dt} = -y_1 y_3, \quad y_2(0) = 1$$

$$\frac{dy_3}{dt} = -k^2 y_1 y_2, \quad y_3(0) = 1, \quad k^2 = 0.51$$

の実行結果を表 2 に示す.

表 2 Euler の運動方程式の計算結果

公式	刻み幅	$x=60$ における最大誤差	関数計算の回数
古典的 Runge-Kutta	.0078125	1.7_{10}^{-9}	30720
5段近似5次公式 [N5]	.015625	5.9_{10}^{-10}	19200

また Hairer の結果は次の通りである。

公式	刻み幅	$x=601$ における最大誤差	関数計算の回数
古典的 Runge-Kutta	.005	2.8_{10}^{-10}	48000
Adams-Moulton-Bashforth (6段階法)	.01	7.1_{10}^{-9}	12000
Bulirsch, Stoer 多項式補外		1.2_{10}^{-9}	5276
Curtis 18段10次	.25	1.3_{10}^{-10}	4320
Hairer 17段10次	.25	8.4_{10}^{-11}	4080

これらの結果を、精度と関数計算の回数の関係から図示すると図5のようになる。図中の6段実質公式 [H62] とは文献[4]のものである。図からも [N5] は手間の面でかなり効率が良いことがわかる。

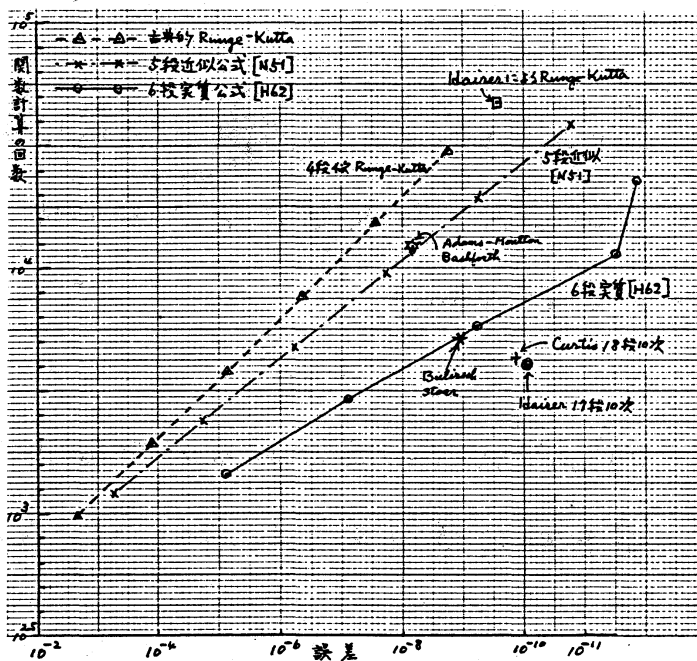


図5 各種公式による結果 (精度と関数計算回数)

参 考 文 献

- [1] Bulirsch, R. and Stoer, J.: Numerical Treatment of Ordinary Differential Equations by Extrapolation Methods, Numer. Math., 8, pp.1-13 (1966).
- [2] Hairer, E.: A Runge-Kutta Method of Order 10, J. Inst. Maths Applics, 21, pp.47-59 (1978).
- [3] 小野令美, 戸田英雄: Runge-Kutta 5段5次型と6段6次型の実用公式, 情報処理学会論文誌 Vol.26, No.2, pp.228-238(1985).
- [4] 小野令美: Runge-Kutta 系の6段6次極限公式及び6段で数値的に6次の公式, 情報処理学会論文誌 Vol.27, No.10, pp.936-944(1986).
- [5] 戸田英雄: Runge-Kutta 系のある極限公式の打ち切り誤差について, 情報処理学会論文誌 Vol.21, No.4, pp.285-296(1980).