

6個の関数計算による実質的6次のRunge-Kutta法

都立農芸高校 小野令美
千葉大工学部 戸田英雄

1. 問題 1階常微分方程式

$$dy/dx = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$$

の6段Kutta型公式

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_i = h f(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \quad i=2, \dots, 6$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^6 \mu_i k_i$$

で、公式の変形と f_x, f_y を用いることにより、6次の公式(極限公式と呼ぶ)を導く。さらに、この f_x, f_y を用いて求めた値の精度はあまり要らないということから、 f_x, f_y を用いない、6個の関数計算だけによる公式で、

$O(h^6)$ の誤差項 $\ll O(h^7)$ の誤差項

となり、丸めの誤差に関しても心配のない、6段で実質的に6次の公式を導く。

2. 公式の位置づけ Luther, Konen²⁾の仮定

$$\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j = \alpha_i^2 / 2, \quad i=3, \dots, 6 \quad (2.1)$$

のもとの公式である。Cassidy⁴⁾による分類でいえば

$$\mu_2 = 0, \quad \sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j = \alpha_i^2 / 2$$

の場合にあたる。

3. Kutta の条件式

3 次の条件式は

$$\sum_{i=2}^6 \mu_i \alpha_i^2 = 1/3 \quad (3.1)$$

$$\sum_{i=3}^6 \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right) = 1/6 \quad (3.2)$$

である。(3.2)に仮定(2.1)を代入すると、(3.1)から

$$\mu_2 \alpha_2^2 = 0 \quad (3.3)$$

となる。5次までの条件式に、(3.3)と仮定(2.1)を代入し

て整理すると次の12式となる：

$$1 \text{ 次 } \quad \sum_{i=1}^6 \mu_i = 1,$$

$$2 \text{ 次 } \quad \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i = 1/2,$$

$$3 \text{ 次 } \quad \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^2 = 1/3,$$

$$4 \text{ 次 } \quad \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^3 = 1/4,$$

$$\sum_{i=3}^6 \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 \right) = 1/12,$$

$$\sum_{i=4}^6 \mu_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 \right) = 1/12,$$

$$5 \text{ 次 } \quad \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^4 = 1/5,$$

$$\sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 \right) = 1/15,$$

$$\sum_{i=4}^6 \mu_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \left(\sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^2 \right) \right) = 1/60,$$

$$\sum_{i=4}^6 \mu_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 (\alpha_i + \alpha_j) \right) = 7/60,$$

$$\sum_{i=3}^6 \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^3 \right) = 1/20,$$

$$\sum_{i=5}^6 \mu_i \left(\sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \left(\sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^2 \right) \right) = 1/60.$$

この12式と(3.3), 仮定(2.1)の4式, およびKuttaの条件式が関数 f に無関係になりつつための条件

$$\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} = \alpha_i, \quad i=2, \dots, 6 \quad (3.4)$$

の5式, 計22式がなりつつように, パラメタ $\alpha_i, (i=2, \dots, 6), \mu_i, (i=1, \dots, 6), \beta_{ij}, (i=2, \dots, 6, j=1, \dots, i-1)$ の計26個を定めればよい.

4. Kuttaの条件式の解

(3.3) で $\alpha_2 \neq 0$ を仮定すると,

$$\mu_2 = 0 \quad (4.1)$$

が得られる. 2次から5次までの条件式は, もとのKuttaの条件式と, 条件(2.1)を適当に組み合わせると, 次の4組の連立方程式となる:

$$\begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 & \alpha_6 \\ \alpha_3^2 & \alpha_4^2 & \alpha_5^2 & \alpha_6^2 \\ \alpha_3^3 & \alpha_4^3 & \alpha_5^3 & \alpha_6^3 \\ \alpha_3^4 & \alpha_4^4 & \alpha_5^4 & \alpha_6^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{5} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 \\ \alpha_3^2 & \alpha_4^2 & \alpha_5^2 \\ \alpha_3^3 & \alpha_4^3 & \alpha_5^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_4 \beta_{43} + \mu_5 \beta_{53} + \mu_6 \beta_{63} \\ \mu_5 \beta_{54} + \mu_6 \beta_{64} \\ \mu_6 \beta_{65} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{12} \\ \frac{1}{20} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 \\ \alpha_3^2 & \alpha_4^2 & \alpha_5^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_4 \alpha_4 \beta_{43} + \mu_5 \alpha_5 \beta_{53} + \mu_6 \alpha_6 \beta_{63} \\ \mu_5 \alpha_5 \beta_{54} + \mu_6 \alpha_6 \beta_{64} \\ \mu_6 \alpha_6 \beta_{65} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{8} \\ \frac{1}{15} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

$$\begin{pmatrix} \beta_{43} \alpha_3 & \beta_{53} \alpha_3 + \beta_{54} \alpha_4 \\ \beta_{43} \alpha_3^2 & \beta_{53} \alpha_3^2 + \beta_{54} \alpha_4^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_5 \beta_{54} + \mu_6 \beta_{64} \\ \mu_6 \beta_{65} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{24} \\ \frac{1}{60} \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

これらから解がつかないように求められる。

(4.2) から $\alpha_i \neq 0$, $\alpha_i \neq \alpha_j$ のとき,

$$\mu_i = \frac{-g_i}{60 \alpha_i \prod_{j=3, j \neq i}^6 (\alpha_i - \alpha_j)}, \quad i = 3, \dots, 6 \quad (4.6)$$

∴ ∴ ∴

$$g_i = 30 \alpha_l \alpha_m \alpha_n - 20 (\alpha_l \alpha_m + \alpha_m \alpha_n + \alpha_n \alpha_l) + 15 (\alpha_l + \alpha_m + \alpha_n) - 12,$$

$$l, m, n = 3, \dots, 6; \neq i.$$

(4.3), (4.4) から

$$\left\{ \begin{aligned} \beta_{65} &= - \frac{\alpha_6 (\alpha_6 - \alpha_5) (\alpha_6 - \alpha_4) (\alpha_6 - \alpha_3) (10 \alpha_3 \alpha_4 - 5 (\alpha_3 + \alpha_4) + 3)}{\alpha_5 (\alpha_5 - \alpha_4) (\alpha_5 - \alpha_3) g_6} \\ \beta_{64} &= - \frac{\alpha_6 (\alpha_6 - \alpha_4) (\alpha_6 - \alpha_3)}{2 \alpha_4 (\alpha_5 - \alpha_4) (\alpha_4 - \alpha_3) g_6} \times \left\{ (-20 \alpha_3 \alpha_4 + 10 (\alpha_3 + \alpha_4) - 6) \alpha_6 \right. \\ &\quad \left. + 20 \alpha_3 \alpha_5^2 - 10 \alpha_5^2 + 14 \alpha_5 - 25 \alpha_3 \alpha_5 + 15 \alpha_3 \alpha_4 - 8 \alpha_4 \right\} \end{aligned} \right. \quad (4.7)$$

$$\beta_{54} = - \frac{\alpha_5 (\alpha_5 - \alpha_4) (\alpha_5 - \alpha_3) (20 \alpha_3 \alpha_6 - 15 \alpha_3 - 10 \alpha_6 + 8)}{2 \alpha_4 (\alpha_4 - \alpha_3) g_5} \quad (4.8)$$

$$\begin{cases} \mu_4\beta_{43} + \mu_5\beta_{53} + \mu_6\beta_{63} = \frac{10\alpha_4\alpha_5 - 5(\alpha_4 + \alpha_5) + 3}{60\alpha_3(\alpha_5 - \alpha_3)(\alpha_4 - \alpha_3)} & (4.9) \\ \mu_4\alpha_4\beta_{43} + \mu_5\alpha_5\beta_{53} + \mu_6\alpha_6\beta_{63} = \frac{(\alpha_5 - \alpha_3)(15\alpha_4 - 8) + 20\alpha_6(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)}{120\alpha_3(\alpha_4 - \alpha_3)(\alpha_5 - \alpha_3)} \end{cases}$$

(4.7), (4.8)は(4.5)も満足しなければならないことから, 条件

$$(1 - \alpha_6)(10\alpha_3^2\alpha_4 - 8\alpha_3\alpha_4 - \alpha_3 + 2\alpha_4) = 0 \quad (4.10)$$

が得られる. μ_i は1次の条件式から定まる. $(\beta_{43}, \beta_{53}, \beta_{63})$ は(4.9)から1個を自由なパラメータとして定まるので, $\beta_{i2}, (i=3, \dots, 6)$ は(2.1)から, $\beta_{i1}, (i=2, \dots, 6)$ は(3.4)から定まる. $(\alpha_3, \alpha_4, \alpha_6)$ のうち1個は(4.10)から定まる. 従って自由なパラメータは α_2, α_5 と β_{i3} のうち1個と, $\alpha_3, \alpha_4, \alpha_6$ のうちの2個の, 合計5個である.

5. f_x, f_y を用いる6次の公式(極限公式)

5.1 α_i だけで表わされる6次の誤差項の係数

15項ある6次の誤差項のうちの7項で, α_i を用いて

$$\begin{aligned} \delta_{61} &= \left\{ \sum_{i=2}^6 \mu_i \alpha_i^5 - 1/6 \right\} / 120 \\ &= -\frac{1}{7200} \left\{ (30\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 20(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 15(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 12)\alpha_6 \right. \\ &\quad \left. - (20\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 15(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 12(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 10) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{62} &= \left\{ \sum_{i=3}^6 \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^4 \right) - 1/30 \right\} / 24 \\ &= \frac{1}{1440} \left\{ 10\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 5(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 3(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 2 \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{63} &= \left\{ \sum_{i=4}^6 \mu_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \left(\sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^3 \right) \right) - 1/120 \right\} / 6 \\ &= -\frac{1}{720} \left\{ (20\alpha_3\alpha_4 - 10\alpha_4)\alpha_6 \right. \\ &\quad \left. - (15\alpha_3\alpha_4 + 2\alpha_3 - 8\alpha_4 - 1) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\delta_{66} &= \left\{ \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^3 \right) - 1/24 \right\} / 6 \\ &= \frac{1}{720} \left\{ (20\alpha_3\alpha_4 - 10(\alpha_3 + \alpha_4) + 6) \alpha_6 \right. \\ &\quad \left. - (15\alpha_3\alpha_4 - 8(\alpha_3 + \alpha_4) + 5) \right\}\end{aligned}$$

$$\delta_{69} = \left\{ \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^3 \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right) - 1/12 \right\} / 6 = \left\{ \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^5 - 1/6 \right\} / 12 = 10\delta_{61}$$

$$\delta_{614} = \left\{ \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right)^2 - 1/24 \right\} / 2 = \left\{ \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^5 - 1/6 \right\} / 8 = 15\delta_{61}$$

$$\begin{aligned}\delta_{615} &= \sum_{i=4}^6 \mu_i \alpha_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \left(\sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k \right) \right) - 1/48 \\ &= \left\{ \sum_{i=4}^6 \mu_i \alpha_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^3 \right) - 1/24 \right\} / 2 \\ &= \frac{1}{240} \left\{ (20\alpha_3\alpha_4 - 10(\alpha_3 + \alpha_4) + 6) \alpha_6 \right. \\ &\quad \left. - (15\alpha_3\alpha_4 - 8(\alpha_3 + \alpha_4) + 5) \right\} = 3\delta_{66}\end{aligned}$$

と表わされる。条件(4.10)をみたすように $\alpha_6 = 1$ にとると、

$$\begin{aligned}\delta_{61} &= -\frac{1}{5}\delta_{62} = \frac{1}{10}\delta_{69} = \frac{1}{15}\delta_{614} \\ &= -\frac{1}{7200} \left\{ 10\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 5(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 3(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 2 \right\} \quad (5.1)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\delta_{63} &= -\delta_{66} = \frac{1}{3}\delta_{615} \\ &= -\frac{1}{720} \left\{ 5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1 \right\} \quad (5.2)\end{aligned}$$

となる。そこで、 $\alpha_6 = 1$ のとき(5.2)が 0 となるように、

$$5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1 = 0 \quad (5.3)$$

とする。すると(5.1)の $\{ \}$ の中は

$$\begin{aligned}10\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 5(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 3(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 2 \\ = (5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1)(2\alpha_5 - 1) - (1 - \alpha_3 - \alpha_4)(1 - \alpha_5)\end{aligned}$$

と書けるので、これを 0 にするには後の項を 0 にすればよい。

$1 - \alpha_3 - \alpha_4 = 0$ にすると β_{54} の分母の因数 g_5 が, $\alpha_6 = 1$ の時

$$g_5 = 30\alpha_3\alpha_4\alpha_6 - 20(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_6 + \alpha_6\alpha_3) + 15(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6) - 12$$

$$= 10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3 = 2(5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1) + 1 - \alpha_3 - \alpha_4 = 0$$

となるので採用できない。

$1 - \alpha_5 = 0$ にすると, μ_5, μ_6 は分母に $(1 - \alpha_5)$ を因数として持つが, $\mu_5 + \mu_6$ は分母に因数 $(1 - \alpha_5)$ を含まないから, 公式の $\mu_5 k_5 + \mu_6 k_6$ の部分を

$$\mu_5 k_5 + \mu_6 k_6 = (\mu_5 + \mu_6) k_6 + \mu_5 (1 - \alpha_5) \cdot \frac{k_5 - k_6}{1 - \alpha_5}$$

と式変形する。そして, $(k_5 - k_6)/(1 - \alpha_5)$ は Taylor 展開

$$\begin{aligned} k_5 &= h f(x_n + \alpha_5 h, y_n + \sum_{i=1}^4 \beta_{5i} k_i) \\ &= h f(\overline{x_n + h - (1 - \alpha_5)h}, \overline{y_n + \sum_{i=1}^5 \beta_{6i} k_i + \sum_{i=1}^4 (\beta_{5i} - \beta_{6i}) k_i - \beta_{65} k_5}) \\ &= h \left[f(x_n + h, y_n + \sum_{i=1}^5 \beta_{6i} k_i) \right. \\ &\quad \left. - (1 - \alpha_5) h f_x + (1 - \alpha_5) \left(\sum_{i=1}^4 \frac{\beta_{5i} - \beta_{6i}}{1 - \alpha_5} k_i - \frac{\beta_{65}}{1 - \alpha_5} k_5 \right) \cdot f_y \right] + \dots \end{aligned}$$

の第1項だけで近似して

$$\frac{k_5 - k_6}{1 - \alpha_5} \doteq -h^2 f_x + h \left(\sum_{i=1}^4 \frac{\beta_{5i} - \beta_{6i}}{1 - \alpha_5} k_i - \frac{\beta_{65}}{1 - \alpha_5} k_5 \right)$$

とし, 係数はすべて $\alpha_5 \rightarrow 1$ の極限の値を用いることにすればよい。

このようにして, 公式の変形と f_x, f_y を用いることによつて, 6次の15個の誤差項の係数のうち, α_i だけで表わされる7項は, すべて0にすることができる。

5.2 β_{43} を含む式で表わされる6次の誤差項の係数

残りの8項のうち、 $\alpha_3, \alpha_4, \beta_{43}$ だけで表わされるものは1項で、 $\alpha_6 = 1$ のとき、

$$\delta_{65} = \mu_6 \beta_{65} \beta_{54} \beta_{53} \beta_{32} \alpha_2 - 1/720 = \frac{1}{240} \left\{ \frac{\alpha_3^2(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{3} \right\}$$

となる。

そこで、 $\alpha_6 = 1$ のとき、あとの7項を、5.1で0とするように決めた因数、 $5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1$ 、 $1 - \alpha_5$ と、 δ_{65} の{}の因数を含む式の和の形に書くと次のようになる:

$$\begin{aligned} \delta_{64} &= \left\{ \sum_{i=5}^6 \mu_i \left(\sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \left(\sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} \left(\sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l^2 \right) \right) \right) - 1/360 \right\} / 2 \\ &= \frac{1}{240} \left\{ \frac{\alpha_3^2(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{3} \right\} - \frac{1}{240} \left\{ \frac{\alpha_3(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - 1 \right\} \alpha_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{67} &= \left\{ \sum_{i=4}^6 \mu_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} (\alpha_i + \alpha_j) \left(\sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k^2 \right) \right) - 1/40 \right\} / 2 \\ &= \frac{1}{24} \left\{ \frac{\alpha_3^2(1-2\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{5} \right\} (1 - \alpha_5) - \frac{1}{24} \left\{ \frac{\alpha_3(1-2\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{2} \right\} \alpha_2 (1 - \alpha_5) \\ &\quad - \frac{1}{80} \left\{ \frac{\alpha_3^2(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{3} \right\} + \frac{1}{80} \left\{ \frac{\alpha_3(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - 1 \right\} \alpha_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{68} &= \sum_{i=5}^6 \mu_i \left(\sum_{j=4}^{i-1} \beta_{ij} \left(\sum_{k=3}^{j-1} \beta_{jk} (\alpha_i + \alpha_j + \alpha_k) \left(\sum_{l=2}^{k-1} \beta_{kl} \alpha_l \right) \right) \right) - 1/60 \\ &= -\frac{1}{240} \left\{ 5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1 \right\} + \frac{1}{24} \left\{ \frac{\alpha_3^2(1-2\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{5} \right\} (1 - \alpha_5) \\ &\quad - \frac{1}{80} \left\{ \frac{\alpha_3^2(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{3} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\delta_{610} &= \left\{ \sum_{i=4}^6 \mu_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} (\alpha_i^2 + \alpha_j^2) \right) \left(\sum_{k=2}^{i-1} \beta_{jk} \alpha_k \right) - 2/45 \right\} / 2 \\ &= \frac{2\alpha_5 - 1}{240} \left\{ 5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1 \right\} - \frac{1}{48} \left\{ \frac{\alpha_3^2(1-2\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - \frac{\alpha_3 + \alpha_4}{5} \right\} (1 - \alpha_5) \\ &\quad + \frac{1}{240} \left\{ \frac{\alpha_3^2(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{3} \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\delta_{611} &= \left\{ \sum_{i=3}^6 \mu_i \alpha_i^2 \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 \right) - 1/18 \right\} / 4 \\ &= -\frac{1}{48} \left\{ \frac{\alpha_3^2(1-2\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{5} \right\} (1 - \alpha_5) + \frac{1}{48} \left\{ \frac{\alpha_3(1-2\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{2} \right\} \alpha_2 (1 - \alpha_5) \\ &\quad + \frac{1}{240} \left\{ \frac{\alpha_3^2(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{3} \right\} - \frac{1}{240} \left\{ \frac{\alpha_3(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - 1 \right\} \alpha_2\end{aligned}$$

$$\delta_{612} = \left\{ \sum_{i=3}^6 \mu_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j \right) \left(\sum_{j=2}^{i-1} \beta_{ij} \alpha_j^2 \right) - 1/36 \right\} / 2 = \delta_{611}$$

$$\begin{aligned}\delta_{613} &= \left\{ \sum_{i=4}^6 \mu_i \left(\sum_{j=3}^{i-1} \beta_{ij} \left(\sum_{k=2}^{j-1} \beta_{jk} \alpha_k \right) \left(\sum_{k=2}^{i-1} \beta_{jk} \alpha_k + 2 \sum_{l=2}^{i-1} \beta_{il} \alpha_l \right) \right) - 13/160 \right\} / 2 \\ &= \frac{2\alpha_5 - 1}{480} \left\{ 5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1 \right\} - \frac{1}{48} \left\{ \frac{\alpha_3^2(1-2\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1 + \alpha_3 + \alpha_4}{10} \right\} (1 - \alpha_5) \\ &\quad + \frac{1}{240} \left\{ \frac{\alpha_3^2(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - \frac{1}{3} \right\}.\end{aligned}$$

そこで δ_{65} の $\{ \}$ の因数を 0 とするようには,

$$\beta_{43} = \frac{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)}{3\alpha_3^2(2-5\alpha_3)} \quad (5.4)$$

にすれば, $\delta_{65}, \delta_{68}, \delta_{610}, \delta_{613}$ は 0 となり, 残るのは

$$\begin{aligned}\delta_{64} &= -\frac{1}{3} \delta_{67} = \delta_{611} = \delta_{612} \\ &= -\frac{1}{240} \left\{ \frac{\alpha_3(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \beta_{43} - 1 \right\} \alpha_2\end{aligned}$$

である。これを 0 にすることを考える。

$$\frac{\alpha_3(2-5\alpha_3)}{\alpha_4(\alpha_4-\alpha_3)} \beta_{k_3} - 1 = 0 \text{ にすると (5.4) から } \alpha_3 = \frac{1}{3}, \text{ (5.3)}$$

から $\alpha_4 = 1$ となり, $\alpha_6 = \alpha_5 = 1$ なので採用できない。

$\alpha_2 = 0$ にすると, α_2 は $\beta_{i_1}, \beta_{i_2}, (i=3, \dots, 6)$ の分母の因数であるが, $\beta_{i_1} + \beta_{i_2}$ の分母には含まれないので, 5.1 の場合と同様な式変形と f_x, f_y を用い, $\alpha_2 \rightarrow 0$ の極限で考えればよい。すなわち,

$$\beta_{i_1} k_1 + \beta_{i_2} k_2 = (\beta_{i_1} + \beta_{i_2}) k_1 + \beta_{i_2} \alpha_2 \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2}$$

と式変形し, Taylor 展開

$$\begin{aligned} k_2 &= h f(x_m + \alpha_2 h, y_m + \beta_{i_2} k_1) \\ &= h \left[f(x_m, y_m) + \alpha_2 h f_x + \beta_{i_2} k_1 f_y + \dots \right] \end{aligned}$$

の第 1 項だけで

$$\frac{k_2 - k_1}{\alpha_2} \doteq h^2 (f_x + f \cdot f_y)$$

と近似する。係数は $\alpha_2 \rightarrow 0$ の極限の値を用いる。

以上が, $\alpha_6 = 1$ のときの 6 次の極限公式である。

5.3 極限公式 ($O(h^6)$ の誤差項はすべて 0)

4 個の関数計算と, 2 個づつの f_x, f_y の計算を含み, 係数は $\alpha_2 \rightarrow 0, \alpha_5 \rightarrow 1$ の極限での値を用いる。自由なパラメータとして, α_3, α_4 のうちの 1 個が残る。6 次の誤差項が 0 になれば, 誤差は $O(h^7)$ となるから, 残った 1 個のパラメータは, 7 次の誤差項の係数の最適化に用いる。

α_3 : 任意の α_3 に対し,

$$\alpha_2 = 0, \quad \alpha_4 = \frac{2\alpha_3 - 1}{5\alpha_3 - 2}, \quad \alpha_5 = 1, \quad \alpha_6 = 1, \quad \beta_{43} = \frac{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)}{3\alpha_3^2(2 - 5\alpha_3)}$$

とすると,

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2' = h^2 \left[f_x(x_n, y_n) + f(x_n, y_n) \cdot f_y(x_n, y_n) \right]$$

$$k_3 = h f(x_n + \alpha_3 h, y_n + B_{312} k_1 + B_3' k_2')$$

$$k_4 = h f(x_n + \alpha_4 h, y_n + B_{412} k_1 + B_4' k_2' + \beta_{43} k_3)$$

$$k_5 = h f(x_n + h, y_n + B_{512} k_1 + B_5' k_2' + \beta_{53} k_3 + \beta_{54} k_4)$$

$$k_5' = h \left[-h f_x(x_n + h, y_n) + f_y(x_n + h, y_n) \right]$$

$$\times \left\{ B_{5612} k_1 + B_{56} k_2' + B_{563} k_3 + B_{564} k_4 + B_{565} k_5 \right\}$$

$$y_{n+1} = y_n + \mu_1 k_1 + \mu_3 k_3 + \mu_4 k_4 + M_{56} k_5 + M_5 k_5'.$$

次に、

$$B_{i12} = \lim_{\alpha_2 \rightarrow 0} (\beta_{i1} + \beta_{i2}), \quad B_i = \lim_{\alpha_2 \rightarrow 0} \beta_{i2} \alpha_2, \quad (i = 3, 4, 5)$$

$$B_{5612} = \lim_{\alpha_2 \rightarrow 0} \lim_{\alpha_5 \rightarrow 1} \left(\frac{\beta_{51} - \beta_{61}}{1 - \alpha_5} + \frac{\beta_{52} - \beta_{62}}{1 - \alpha_5} \right), \quad B_{56} = \lim_{\alpha_2 \rightarrow 0} \lim_{\alpha_5 \rightarrow 1} \frac{\beta_{52} - \beta_{62}}{1 - \alpha_5} \cdot \alpha_2$$

$$B_{56j} = \lim_{\alpha_5 \rightarrow 1} \frac{\beta_{5j} - \beta_{6j}}{1 - \alpha_5}, \quad (j = 3, 4), \quad B_{565} = \lim_{\alpha_5 \rightarrow 1} \frac{-\beta_{65}}{1 - \alpha_5},$$

$$y_n = y_n + B_{512} k_1 + B_5 k_2' + \beta_{53} k_3 + \beta_{54} k_4,$$

$$M_{56} = \lim_{\alpha_5 \rightarrow 1} (\mu_5 + \mu_6), \quad M_5 = \lim_{\alpha_5 \rightarrow 1} \mu_5 (1 - \alpha_5).$$

6. 6個の関数計算だけによる実質的に6次の公式

極限公式で用いた k_2', k_5' の値の精度はあまり要らない。

$\alpha_2, 1-\alpha_5 = \varepsilon$ として $\frac{k_2-k_1}{\alpha_2}, \frac{k_5-k_6}{1-\alpha_5}$ を, このまま計算する。

ε は, $\alpha_2, 1-\alpha_5$ が 0 でないために残る $O(h^6)$ の誤差項の係数が $O(h^7)$ のもの比べて, 無視できる程度となるように決める。また, このとき起こる桁落ちによる誤差の見積りも得られ, 余程特殊な問題でない限り心配がないことがわかる。

6.1 パラメータの決定と打ち切り誤差

α_3, α_4 が (5.3) をみたすように, 曲線 $5\alpha_3\alpha_4 - 2(\alpha_3 + \alpha_4) + 1 = 0$ 上を動かして $O(h^7)$ の誤差項の係数の変化を調べる。 $O(h^7)$ の誤差項 28 項の係数 δ_{7j} が, 全部 10^{-3} より小さくなるのは, 大体 $0.185 < \alpha_3 < 0.232$ で, $\sqrt{\sum \delta_{7j}^2 / 28}$ が最小になるのは $\alpha_3 \doteq 0.2$ である (図-1)。そこで,

$$\alpha_3 = \frac{1}{5},$$

(5.3) から

$$\alpha_4 = \frac{3}{5}$$

に決める。

つぎに, ε は, すべての係数の分子, 分母が, 16進14桁以内の整数になるように,

$$\varepsilon = \alpha_2 = 1 - \alpha_5 = \frac{1}{2048}$$

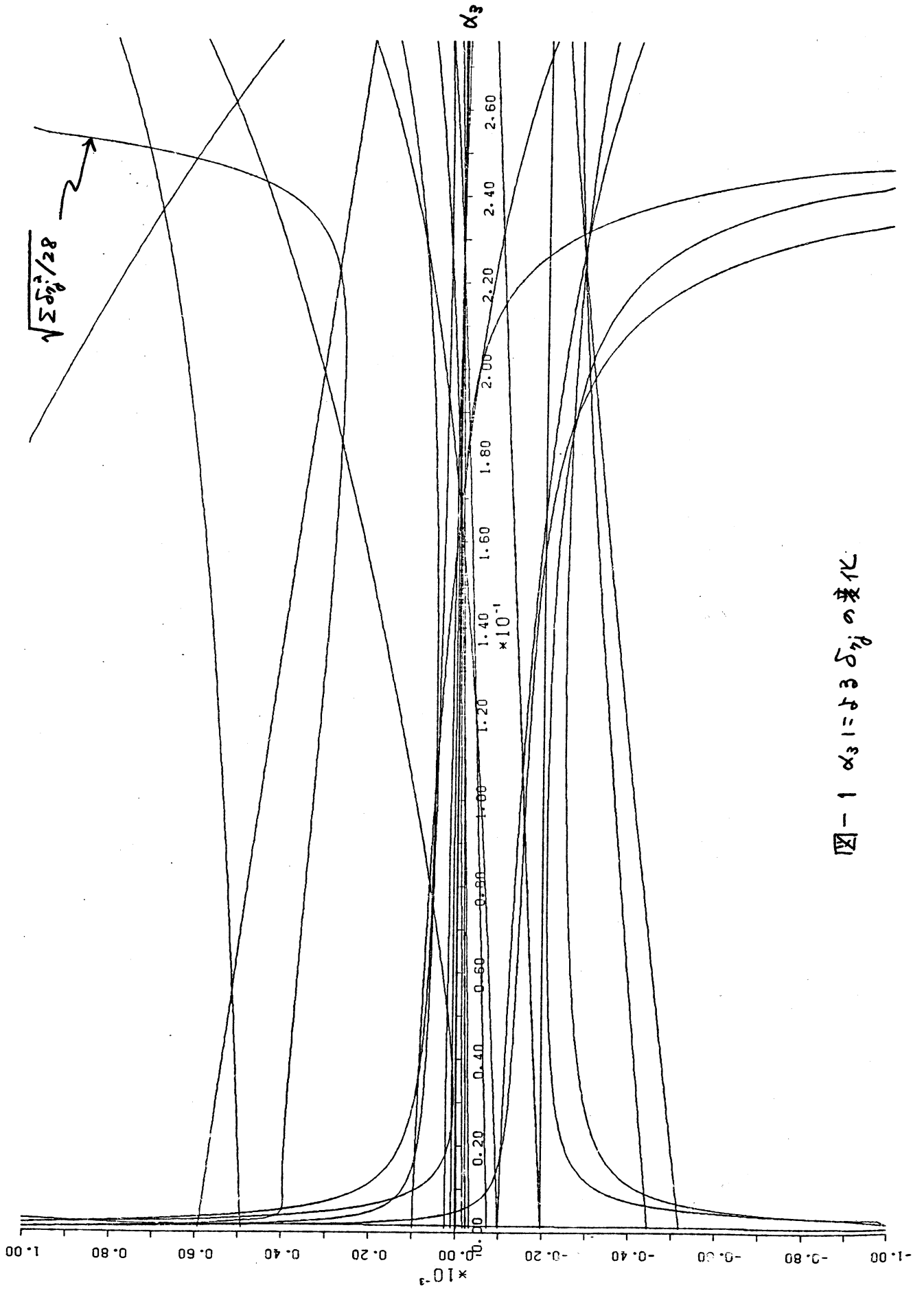


図-1 α_3 による δ_{ij} の変化

にする。このとき α_i だけで表わされる $O(h^6)$ の誤差項の係数は

$$\delta_{63}, \delta_{66}, \delta_{615} = 0,$$

$$\delta_{614} = 15\delta_{61} \doteq .203_{10^{-6}},$$

$$\delta_{69} = 10\delta_{61} \doteq .136_{10^{-6}},$$

$$\delta_{62} = -5\delta_{61} \doteq -.678_{10^{-7}},$$

$$\delta_{61} \quad \doteq .136_{10^{-7}}$$

となる。 $\sqrt{\sum \delta_{6j}^2 / 28} \doteq .270_{10^{-3}}$ であるから、この程度で十分である。

β_{43} は極限公式と同じに、 $\delta_{65} = 0$ となるように選べば、 $\delta_{68} = 0$ となるが、残る 6 項のうち最大のものは $\delta_{67} \doteq .41_{10^{-5}}$ となる。そこで β_{43} を変化させたときの δ_{6j} ($j=4, 5, 7, 8, 10, 11, 12, 13$) のようすと調べると、全部がほぼ揃って小さくなり、しかも係数の分子分母が 16 進 14 桁以内の整数になるのは

$$\beta_{43} = \frac{2049}{1024}$$

なので、この値に決める (図-2)。誤差は次の通りである。

$$|\delta_{67}|, |\delta_{68}| \quad \doteq .204_{10^{-5}}$$

$$|\delta_{64}|, |\delta_{65}|, |\delta_{611}|, |\delta_{612}| \doteq .680_{10^{-6}}$$

$$\delta_{63} \quad \doteq .474_{10^{-6}}$$

$$\delta_{610} \quad \doteq .270_{10^{-6}}$$

$\beta_{43} = \frac{2049}{1024}$ のとき $D(4) = -0.680E-06$ $D(5) = 0.678E-06$ $D(7) = 0.204E-05$
 $D(8) = -0.203E-05$ $D(10) = 0.270E-06$ $D(11) = -0.678E-06$
 $D(13) = 0.474E-06$

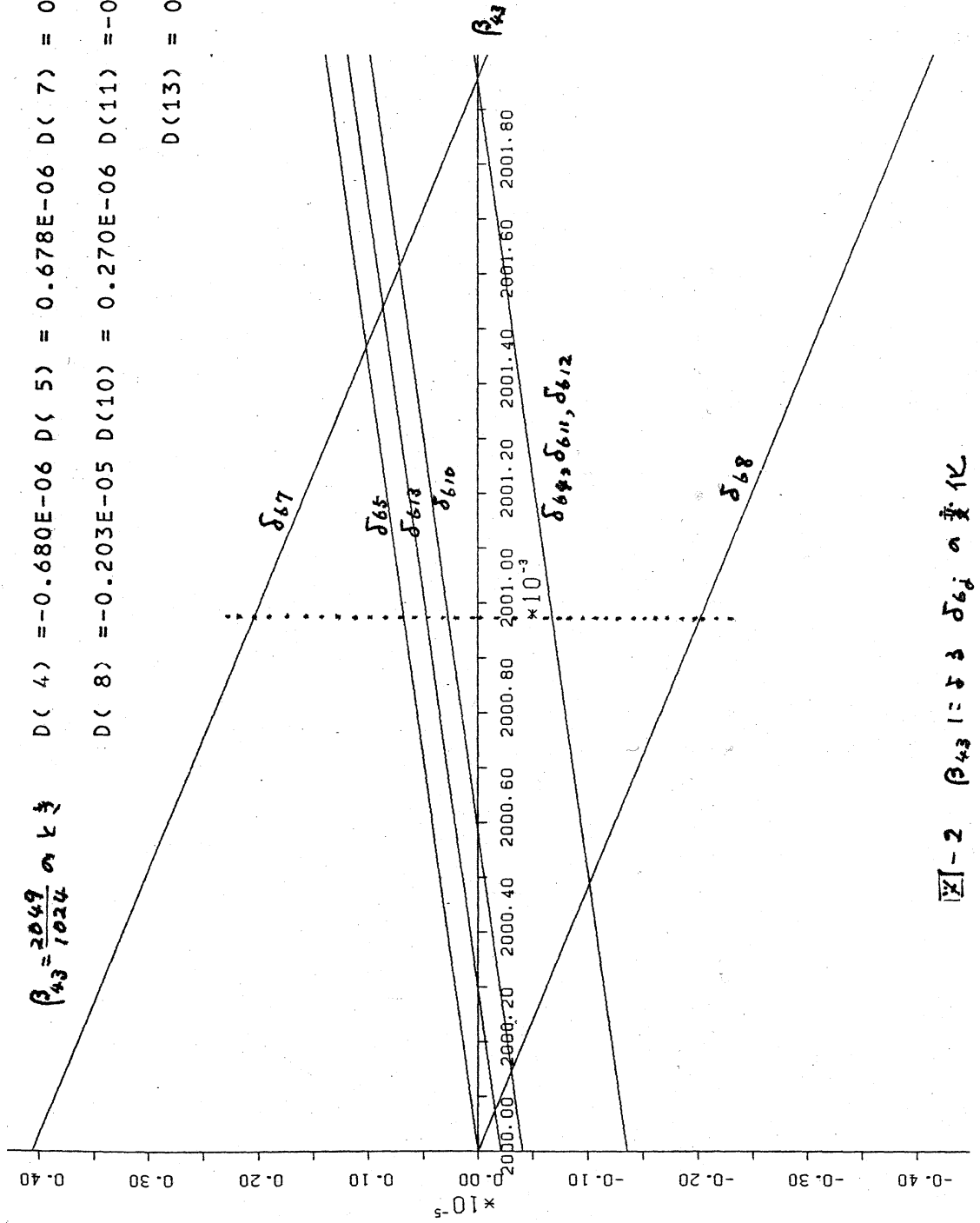


図-2 β_{43} による δ_{6j} の変化

6.2 桁落ちによる誤差

式変形

$$\beta_{i1}k_1 + \beta_{i2}k_2 = (\beta_{i1} + \beta_{i2})k_1 + \beta_{i2}\alpha_2 \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2}$$

$$\mu_5k_5 + \mu_6k_6 = (\mu_5 + \mu_6)k_6 + \mu_5(1 - \alpha_5) \frac{k_5 - k_6}{1 - \alpha_5}$$

により, $k_2 - k_1$, $k_5 - k_6$ の計算のところで桁落ちによる精度の減少が起こる. しかし, ここで精度が減っても, 全体の精度にはあまり影響しない (つまり $k_2 - k_1$, $k_5 - k_6$ の精度はあまり要らない) ことがつぎのようにしてわかる.

k_3 を求めるとき, f を計算する y 座標と決める式

$$y_m + (\beta_{31} + \beta_{32})k_1 + \beta_{32}\alpha_2 \cdot \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2}$$

で, 和之合わせる3項のうち, y_m が絶対値最大ならば, m 進法 m 桁演算を行なうとき, 和の有効桁数はおよそ

$$\begin{aligned} N_3 &= \log_m |y_m| - \log_m \left| \beta_{32}\alpha_2 \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2} \right| + \left\{ m - (\log_m |k_1| - \log_m |k_2 - k_1|) \right\} \\ &= m - \log_m \beta_{32}\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log_m \left| \frac{y_m}{k_1} \right| \\ &> m - \log_m \beta_{32}\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log_m \alpha_3 \doteq m - 2.31 \quad (m=10 \text{ のとき}) \end{aligned}$$

と見積ることができる. また, $(\beta_{31} + \beta_{32})k_1$ が絶対値最大ならば,

$$\begin{aligned} N_3 &= \log_m |(\beta_{31} + \beta_{32})k_1| - \log_m \left| \beta_{32}\alpha_2 \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2} \right| \\ &\quad + \left\{ m - (\log_m |k_1| - \log_m |k_2 - k_1|) \right\} \\ &= m - \log_m \beta_{32}\alpha_2 + \log_m \alpha_2 + \log_m \alpha_3 \doteq m - 2.31 \quad (m=10 \text{ のとき}) \end{aligned}$$

となるから、いずれの場合にも、この計算で失われる精度はほぼ 10 進 2.3 桁と見積ることができる。f と計算する y 座標の後 2.3 桁のちがいが、f の値にどの位影響するかは、関数 f により異なり一概にいえないが、2.3 桁以上のちがいにすることはまれであらう。全く同様に考えると、 k_4, k_5, k_6 の y 座標の計算で $n-2.35, n-2.44, n-2.44$ となり y_n の計算では $n-1.69$ となる。従って普通の場合には、最悪でも $n-2.44$ 桁は保証される。

6.3 公式

$\alpha_6 = 1$ のとき変形した公式に必要なパラメータは

$$\mu_1 = \frac{30\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 10(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 5(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 3}{60\alpha_3\alpha_4\alpha_5},$$

$$\mu_3 = \frac{10\alpha_4\alpha_5 - 5(\alpha_4 + \alpha_5) + 3}{60\alpha_3(1-\alpha_3)(\alpha_5-\alpha_3)(\alpha_4-\alpha_3)}, \quad \mu_4 = -\frac{10\alpha_3\alpha_5 - 5(\alpha_3 + \alpha_5) + 3}{60\alpha_4(1-\alpha_4)(\alpha_5-\alpha_3)(\alpha_4-\alpha_3)},$$

$$\begin{aligned} \mu_5 + \mu_6 = & \frac{1}{60\alpha_5(1-\alpha_4)(1-\alpha_3)(\alpha_5-\alpha_4)(\alpha_5-\alpha_3)} \times \left[(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)(1-\alpha_5-\alpha_4+\alpha_5) \right. \\ & \left. + (\alpha_5-\alpha_4)(\alpha_5-\alpha_3) \{ (30\alpha_3\alpha_4 - 20(\alpha_3 + \alpha_4) + 15)\alpha_5 + 10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3 \} \right], \end{aligned}$$

$$\mu_5(1-\alpha_5) = \frac{10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3}{60\alpha_5(\alpha_5-\alpha_4)(\alpha_5-\alpha_3)},$$

$$\beta_{21} = \alpha_2, \quad \beta_{31} + \beta_{32} = \alpha_3, \quad \beta_{32}\alpha_2 = \frac{\alpha_3^2}{2},$$

$$\beta_{41} + \beta_{42} = \alpha_4 - \beta_{43}, \quad \beta_{42}\alpha_2 = \frac{\alpha_4^2}{2} - \alpha_3\beta_{43},$$

$$\beta_{51} + \beta_{52} = \alpha_5 \left\{ 1 - \frac{(\alpha_5 - \alpha_4)(\alpha_5 - \alpha_3)(5\alpha_3 + 5\alpha_4 - 2)}{2\alpha_3\alpha_4(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)} - \frac{(\alpha_5 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_5 - 5(\alpha_3 + \alpha_5) + 3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)} \cdot \beta_{43} \right\},$$

$$\beta_{52}\alpha_2 = \frac{-5\alpha_5^2 + 10\alpha_3\alpha_4\alpha_5 + 3\alpha_5 - 5\alpha_3\alpha_4}{2(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)} - \frac{\alpha_3\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_5 - 5(\alpha_3 + \alpha_5) + 3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)} \cdot \beta_{43},$$

$$\beta_{53} = \alpha_5 \left\{ \frac{(\alpha_5 - \alpha_4)(\alpha_5 - \alpha_3)(5\alpha_4 - 2)}{2\alpha_3(\alpha_4 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)} + \frac{(\alpha_5 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_5 - 5(\alpha_3 + \alpha_5) + 3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)} \cdot \beta_{43} \right\},$$

$$\beta_{54} = \frac{\alpha_5(\alpha_5 - \alpha_4)(\alpha_5 - \alpha_3)(2 - 5\alpha_3)}{2\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)},$$

$$\begin{aligned} \beta_{61} + \beta_{62} = & 1 + \frac{(1 - \alpha_3)}{\alpha_4(30\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 20(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 15(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 12)} \\ & \times \left\{ \frac{(1 - \alpha_4)(15\alpha_3 + 15\alpha_4 - 8)}{2\alpha_3} + \frac{(1 - \alpha_4)(1 - \alpha_5)(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)}{\alpha_3\alpha_5} \right. \\ & \left. - \frac{\alpha_5(1 - \alpha_4)(10\alpha_3 + 10\alpha_4 - 5)}{\alpha_3} - \frac{10\alpha_3\alpha_5 - 5(\alpha_3 + \alpha_5) + 3}{\alpha_4 - \alpha_3} \cdot \beta_{43} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_{62}\alpha_2 = & \frac{1}{30\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 20(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 15(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 12} \\ & \times \left\{ \frac{(10\alpha_3\alpha_4 - 5)\alpha_5 - 5\alpha_3\alpha_4 + 3}{2} - \frac{\alpha_3(1 - \alpha_3)(10\alpha_3\alpha_5 - 5(\alpha_3 + \alpha_5) + 3)}{\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)} \cdot \beta_{43} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_{63} = & \frac{(1 - \alpha_3)}{(\alpha_4 - \alpha_3)(30\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 20(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 15(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 12)} \\ & \times \left\{ \frac{(1 - \alpha_4)(15\alpha_4 - 8)}{2\alpha_3} - \frac{(1 - \alpha_4)(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)}{\alpha_3(\alpha_5 - \alpha_3)} \right. \\ & \left. + \frac{\alpha_5(1 - \alpha_4)(10\alpha_4\alpha_5 - 5(\alpha_4 + \alpha_5) + 3)}{\alpha_3(\alpha_5 - \alpha_3)} + \frac{10\alpha_3\alpha_5 - 5(\alpha_3 + \alpha_5) + 3}{\alpha_4} \cdot \beta_{43} \right\}, \end{aligned}$$

$$\beta_{64} = \frac{(1-\alpha_4)(1-\alpha_3)\{-20\alpha_3+10\}\alpha_5^2 + (25\alpha_3-14)\alpha_5 + 5\alpha_3\alpha_4 - 2\alpha_4 - 10\alpha_3 + 6}{2\alpha_4(\alpha_5-\alpha_4)(\alpha_4-\alpha_3)(30\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 20(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 15(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 12)},$$

$$\beta_{65} = \frac{-(1-\alpha_5)(1-\alpha_4)(1-\alpha_3)(10\alpha_3\alpha_4 - 5(\alpha_3 + \alpha_4) + 3)}{\alpha_5(\alpha_5-\alpha_4)(\alpha_4-\alpha_3)(30\alpha_3\alpha_4\alpha_5 - 20(\alpha_3\alpha_4 + \alpha_4\alpha_5 + \alpha_5\alpha_3) + 15(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5) - 12)},$$

である。そこで、6.1で決めた値を代入すると、パラメータと公式はつぎのようになる。

公式

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} k_1)$$

$$k_3 = h f(x_n + \alpha_3 h, y_n + (\beta_{31} + \beta_{32}) k_1 + \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2})$$

$$k_4 = h f(x_n + \alpha_4 h, y_n + (\beta_{41} + \beta_{42}) k_1 + \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2} + \beta_{43} k_3)$$

$$k_5 = h f(x_n + \alpha_5 h, y_n + (\beta_{51} + \beta_{52}) k_1 + \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2} + \beta_{53} k_3 + \beta_{54} k_4)$$

$$k_6 = h f(x_n + h, y_n + (\beta_{61} + \beta_{62}) k_1 + \frac{k_2 - k_1}{\alpha_2} + \beta_{63} k_3 + \beta_{64} k_4 + \beta_{65} k_5)$$

$$y_{n+1} = y_n + \mu_1 k_1 + \mu_3 k_3 + \mu_4 k_4 + (\mu_5 + \mu_6) k_6 + \mu_5 (1 - \alpha_5) \frac{k_5 - k_6}{1 - \alpha_5}$$

ここで、

$$\alpha_2 = \frac{1}{2048}, \quad \alpha_3 = \frac{1}{5}, \quad \alpha_4 = \frac{3}{5}, \quad \alpha_5 = \frac{2047}{2048},$$

$$\mu_1 = \frac{4093}{73692}, \quad \mu_3 = \frac{2\ 55875}{7\ 85952}, \quad \mu_4 = \frac{2\ 55625}{5\ 89104},$$

$$\mu_5 + \mu_6 = \frac{121\ 74695\ 54363}{658\ 17797\ 56704}, \quad \mu_5 (1 - \alpha_5) = \frac{21474\ 83648}{20\ 56806\ 17397},$$

$$\beta_{21} = \alpha_2, \quad \beta_{31} + \beta_{32} = \frac{1}{5}, \quad \beta_{32}\alpha_2 = \frac{1}{50},$$

$$\beta_{41} + \beta_{42} = -\frac{7173}{5120}, \quad \beta_{42}\alpha_2 = -\frac{5637}{25600}, \quad \beta_{43} = \frac{2049}{1024},$$

$$\beta_{51} + \beta_{52} = \frac{36875 \ 44391 \ 63779}{1759 \ 21860 \ 44416}, \quad \beta_{52}\alpha_2 = \frac{5561 \ 97902 \ 16167}{1759 \ 21860 \ 44416},$$

$$\beta_{53} = -\frac{40967 \ 55520 \ 02435}{1759 \ 21860 \ 44416}, \quad \beta_{54} = \frac{11 \ 42670 \ 09665}{3 \ 43597 \ 38368},$$

$$\beta_{61} + \beta_{62} = \frac{13 \ 51089 \ 25003}{63984 \ 30720}, \quad \beta_{62}\alpha_2 = \frac{33 \ 18523}{10 \ 41920},$$

$$\beta_{63} = -\frac{4 \ 00269 \ 25081}{17060 \ 39808}, \quad \beta_{64} = \frac{167 \ 15836}{49 \ 95111},$$

$$\beta_{65} = -\frac{6 \ 87194 \ 76736}{13952 \ 00188 \ 00965}$$

である。これらの値を倍精度実数にしたものを表-1に示す。

7. 誤差と公式の評価

$O(h^6)$ と $O(h^7)$ の誤差項の係数はつぎのようになる。

$O(h^6)$ の誤差項の係数:

$$\delta_{61} = .136_{10}^{-7}, \quad \delta_{62} = -5\delta_{61} = -.678_{10}^{-7},$$

$$\delta_{63} = \delta_{66} = \delta_{65} = 0, \quad \delta_{64} = -.680_{10}^{-6},$$

$$\delta_{65} = .678_{10}^{-6}, \quad \delta_{67} = .204_{10}^{-5},$$

$$\delta_{68} = -.203_{10}^{-5}, \quad \delta_{69} = 10\delta_{61} = .136_{10}^{-6},$$

$$\delta_{610} = .270_{10}^{-6}, \quad \delta_{611} = \delta_{612} = -.678_{10}^{-6},$$

$$\delta_{613} = .474_{10}^{-6}, \quad \delta_{614} = 15\delta_{61} = .203_{10}^{-6}.$$

$O(h^7)$ の誤差項の係数:

$$\begin{aligned}
 \delta_{71} &= -.256_{10^{-6}}, & \delta_{72} &= .155_{10^{-5}}, & \delta_{73} &= -.397_{10^{-5}}, & \delta_{74} &= -.106_{10^{-3}}, \\
 \delta_{75} &= -.198_{10^{-3}}, & \delta_{76} &= -.198_{10^{-3}}, & \delta_{77} &= .390_{10^{-5}}, & \delta_{78} &= .317_{10^{-3}}, \\
 \delta_{79} &= .631_{10^{-3}}, & \delta_{710} &= .319_{10^{-3}}, & \delta_{711} &= -.384_{10^{-5}}, & \delta_{712} &= .294_{10^{-4}}, \\
 \delta_{713} &= -.264_{10^{-3}}, & \delta_{714} &= .126_{10^{-4}}, & \delta_{715} &= -.236_{10^{-3}}, & \delta_{716} &= -.106_{10^{-3}}, \\
 \delta_{717} &= -.293_{10^{-3}}, & \delta_{718} &= -.106_{10^{-3}}, & \delta_{719} &= .379_{10^{-4}}, & \delta_{720} &= -.315_{10^{-3}}, \\
 \delta_{721} &= -.377_{10^{-4}}, & \delta_{722} &= .909_{10^{-3}}, & \delta_{723} &= -.115_{10^{-4}}, & \delta_{724} &= .648_{10^{-4}}, \\
 \delta_{725} &= -.305_{10^{-3}}, & \delta_{726} &= -.292_{10^{-3}}, & \delta_{727} &= -.384_{10^{-5}}, & \delta_{728} &= -.389_{10^{-4}}.
 \end{aligned}$$

公式の評価を行なうために、関数 f によらない、これらの誤差項の係数による次の三つの尺度を用いる。 $\sqrt{\sum \delta_{6j}^2/15}$, $\sum |\delta_{6j}|$, Lotkin 和。Shanks³⁾ が実質 6 次の公式として与えたものと比較してみると次のようになる。

尺度 公式	$\sqrt{\sum \delta_{6j}^2/15}$	$\sum \delta_{6j} $	Lotkin 和	$\sqrt{\sum \delta_{7j}^2/28}$	$\sum \delta_{7j} $
実質 6 次	.836 -6	.795 -5	.441 -4	.270 -3	.484 -2
Shanks ³⁾	.196 -4	.187 -3	.104 -2	.253 -3	.466 -2

この表から、どの尺度でみても、 $O(h^6)$ の誤差項は $O(h^7)$ のもの比べて無視できる程度であることがわかる。従って余程特殊な問題でない限り、打ち切り誤差の主要項は $O(h^7)$ となり、実質的に 6 次の公式といえる。

8. 数値例

例題で公式の比較をすることは、Kutta も夙に述べているように、問題を選んだ時点で、ある特定の公式に有利になってしまう。7次の誤差項が Shanks の公式で 0 にしてある2項だけのものや、刻み幅 h が、真の関数の Taylor 展開の収束半径より大きいものなど、ごく特殊な問題を除けば、大体同じような傾向である。田中正次の問題から2例を選ば表-2 に示す。

数値解の下線の部分は、真の解 $y(x_m)$ とのちがいを、実質6次の Δ 印は、極限公式 (6次の誤差項は完全に 0) とのちがいを表わす。

9. 結論

6個の関数計算を用いる Kutta 型公式をもとに、式変形と極限を考へることによって、 $\alpha_6=1$ のとき、4個の関数計算と4個の微係数の計算を用いる6次の極限公式が導かれる。しかし、微係数を用いて計算した値の精度はあまり要らないことと、 $O(h^6)$ の誤差は $O(h^7)$ の誤差に比べ無視できる程度であればよいことから、6個の関数計算だけで、極限公式と実質的に同等な公式が得られる。数値例でもわかるように6次の誤差は完全に7次の誤差の範囲内にあり、桁落ちに関しても全く心配がない。

表 - 1

M1 = 4093.0D0 / 73692.0D0
 M3 = 255875.0D0 / 785952.0D0
 M4 = 255625.0D0 / 589104.0D0
 M56 = 1217469554363.0D0 / 6581779756704.0D0
 M51MA5 = 2147483648.0D0 / 205680617397.0D0
 B312 = 1.0D0 / 5.0D0
 B32A2 = 1.0D0 / 50.0D0
 B412 = -7173.0D0 / 5120.0D0
 B42A2 = -5637.0D0 / 25600.0D0
 B43 = 2049.0D0 / 1024.0D0
 B512 = 368754439163779.0D0 / 17592186044416.0D0
 B52A2 = 55619790216167.0D0 / 17592186044416.0D0
 B53 = -409675552002435.0D0 / 17592186044416.0D0
 B54 = 114267009665.0D0 / 34359738368.0D0
 B612 = 135108925003.0D0 / 6398430720.0D0
 B62A2 = 3318523.0D0 / 1041920.0D0
 B63 = -40026925081.0D0 / 1706039808.0D0
 B64 = 16715836.0D0 / 4995111.0D0
 B65 = -68719476736.0D0 / 139520018800965.0D0

α_i
 0.488281250000000D-03 0.2000000000000000 0.6000000000000000 0.9995117187500000
 μ_i
 0.5554198556152635D-01 0.0 0.3255605940311876 0.4339216844563948
 0.1849757359508912 0.1044086543096560D-01

$\beta_{ij}, \beta_{i1} + \beta_{i2}, \beta_{i2}\alpha_i$
 0.488281250000000D-03 0.2000000000000000D-01 2.0009765625000000
 0.2000000000000000 -0.2201953125000000 -23.28735899950715
 -1.4009765625000000 3.161619032207852 -23.46189396830300
 20.96126304216904 3.185007486179361 3.325607676088111
 21.11594716196286 3.185007486179361 3.346439348394860
 -0.4925420547285985D-03

表 - 2

例 1)

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{x^2 y^2}{3}, \quad y(2) = 1, \quad h = 0.1, \quad y(x) = \frac{9}{1+x^3}$$

	x_n	y_n	$y_n - y(x_n)$
実値6次	2.10	0.8771074973636819 Δ	0.2967D-08
極限		0.8771074972738272	0.2878D-08
Shankes		0.8771075016091511	0.7213D-08
$y(x_n)$		0.8771074943962579	
	2.20	0.7726648373145431 Δ	0.2150D-08
		0.7726648372514301	0.2087D-08
		0.7726648403653626	0.5201D-08
		0.7726648351648352	

例 2)

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{e^x(y^3 + xy^3 + 1)}{3y^2(xe^x - 6)}, \quad y(0) = 1, \quad h = 0.1, \quad y(x) = \left(\frac{e^x + 5}{6 - xe^x}\right)^{\frac{1}{3}}$$

	x_n	y_n	$y_n - y(x_n)$
実値6次	0.10	1.012061460169105 Δ	-0.2546D-11
極限		1.012061460169008	-0.2643D-11
Shankes		1.012061460187909	0.1626D-10
$y(x_n)$		1.012061460171651	
	0.20	1.026272992591286 Δ	-0.4549D-11
		1.026272992591137	-0.4698D-11
		1.026272992621081	0.2525D-10
		1.026272992595835	

参 考 文 献

- 1) W. Kutta, Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen, Z. Math. Phys., 46, pp.435-453 (1901).
- 2) H. A. Luther and H. P. Konen, Some fifth-order classical Runge-Kutta formulas, SIAM Review, Vol.7, No.4, Oct., pp.551-558 (1965).
- 3) E. B. Shanks, Solutions of differential equations by evaluations of functions, Math. Comp., 20, pp.21-38 (1966).
- 4) C. R. Cassity, Solutions of the fifth-order Runge-Kutta equations, SIAM J. Numer. Anal., Vol.3, No.4, pp.598-606 (1966).
- 5) C. R. Cassity, The complete solution of the fifth order Runge-Kutta equations, SIAM. J. Numer. Anal, Vol.6, No.3, pp.432-436 (1969).
- 6) 戸田英雄, Runge-Kutta系のある極限公式の打切り誤差について, 情報処理学会論文誌, Vol.21, No.4, pp.285-296 (1980).
- 7) 田中正次, 5次陽的 Runge-Kutta法の特性的比較と最適化, 京都大学数理解析研究所講究録 442, pp.37-58 (1981).
- 8) 戸田英雄・小野令美, 5個の関数計算による実復的に5次のRunge-Kutta法, 情報処理学会論文誌, Vol.22, No.2, pp.89-98 (1981).