数理解析研究所講究録
18巻 1966年 39-62

One-step method について

広大 理　新 谷 尚 義

§1 One-step method

常微分方程式

(1.1) $$y' = f(x,y)$$

と初期条件 $y(x_0)=y_0$ が与えられたとする。ただし、$f(x,y)$ は十分滑らかな函数であるとする。$x=u$ のとき、$y=v$ となる (1) 式の解を $y(x;u,v)$ とかき、$y(x;x_0,y_0)$ を $y(x)$ とかくことにする。

$y(u+h;u,v)$ $(0<h\leqq h_0)$ の近似値を求める問題を考える。導函数の値

(1.2) $$\begin{cases} k_1 = f(u,v) \\ k_i = f(u+a_i h, v+h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}k_j) \quad (i=2,3,\ldots,r) \end{cases}$$

を計算して、$v+h\sum_{i=1}^{r} p_i k_i$ で $y(u+h;u,v)$ を近似する方法が one-step method である。ただし、

(1.3) $$\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} = a_i, \quad 0\leqq a_i \leqq 1 \quad (i = 2,3,\ldots,r)$$

(1.4) $$\sum_{i=1}^{r} p_i = 1$$

である。

(1.5) $$\sum_{i=1}^{r} p_i k_i = \Phi(u,v;h)$$

(1.6) $$v+h\Phi(u,v;h) - y(u+h;u,v) = T(u,v;h)$$

とおく。$T(u,v;h)$ の h についてのテイラー展開の係数が h^p まで 0

であるように定数 a_i, b_{ij}, p_i　$(i=1,2,...,r)$ が定められているとき、この one-step method の order は p であるという。$\Phi(u,v;h)$ を増分函数、$T(u,v;h)$　を公式誤差という。

Multistep method と違つて、one-step method では公式誤差の見積りが簡単にはえられないので step-size h の制御がむつかしい。この問題に対して次のような方法が従来使われている。

$\Phi(u,v;h)$　を order p の増分函数とし、

(1.7) $$Z_1 = v + h\Phi(u,v;h), \quad Z_2 = Z_1 + h\Phi(u+h, Z_1;h)$$

(1.8) $$\tilde{Z}_2 = v + 2h\Phi(u,v;2h)$$

(1.9) $$T(u,v;h) = h^{p+1}\varphi(u,v) + O(h^{p+2})$$

とすると、

(1.10) $$Z_1 - y(u+h;u,v) = T(u,v;h) = h^{p+1}\varphi(u,v) + O(h^{p+2})$$

(1.11) $$\begin{aligned} Z_2 - y(u+2h;u,v) &= T(u+h,Z_1;h) + y(u+2h;u+h,Z_1) - y(u+2h;u,v) \\ &= 2h^{p+1}\varphi(u,v) + O(h^{p+2}) \end{aligned}$$

(1.12) $$\tilde{Z}_2 - y(u+2h,u,v) = 2^{p+1}h^{p+1}\varphi(u,v) + O(h^{p+2})$$

である。すると

(1.13) $$e = \frac{1}{2^p - 1}(\tilde{Z}_2 - Z_2) = 2h^{p+1}\varphi(u,v) + O(h^{p+2})$$

だから

(1.14) $$Z_1 - y(u+h;u,v) = \frac{1}{2}e + O(h^{p+2})$$

(1.15) $$Z_2 - y(u+2h;u,v) = e + O(h^{p+2})$$

となる。したがつて、 h が十分小さければ、 e/2, e で Z_1, Z_2 の公式誤差を近似することができる。この方法で 2 step 同じ幅 hで進むに必要な導函数の計算回数を s とすると、 s は表1のようになる。 r は 1 step 進むに必要な導函数の計算回数

表 1

p	r	s	公 式
1	1	2	Euler
2	2	5	改良 Euler, 修正 Euler
3	3	8	Kutta, Heun, Ceschino
4	4	11	Runge-Kutta, Gill, Boulton, Merson
5	6	17	Nyström, Huta, Guerra, Shanks, Butcher
6	8	23	Huta, Shanks, Guerra

である。

実際計算の場合には、同じ幅で数 step 進むことがないから、そのような場合に f(x,y) 以外の函数の値を計算することなしに、誤差の近似計算をする方法について考える。

§ 2 n-step process

2. 1. 準 備

x_0 から幅 h で n step 進む場合を考えることにし、

(2.1) $x_{j+1}= x_0+ (j+1)h,\ p_{j+1}= \Phi(x_j,y_j;h),\ y_{j+1}= y_j+ hp_{j+1}$ $(j=0,1,\ldots,n-1)$

(2.2) $d_i= y_i- y(x_i),\ f_i= f(x_i,y_i)$ $(i=0,1,\ldots,n)$

とおく。

伝播誤差を考慮に入れるために、 y(x) に近い解 $y(x;e) = y(x,x_0,y_0- e)$ を考え

$$(2.3)\qquad C(x) = y(x) - y(x;e)$$

とおく。 e が y_0 の誤差ならば、y_i の誤差は $C(x_i)+d_i$ で与えられる。

$C(x)$ は初期条件 $C(x_0)=e$ をみたす微分方程式

$$(2.4)\qquad C' = F(x,y(x),C)$$

の解で、 $C(x)=e\cdot O(1)$ とかける。ただし

$$(2.5)\qquad F(x,y,u) = f(x,y) - f(x,y-u)$$

である。

r $(r \leqq n)$を正の整数とし、

$$(2.6)\qquad m = 2n - r + 1$$

$$(2.7)\qquad T(x,y;h) = h^p[\sum_{i=1}^{m} h^i \varphi_i(x,y)+O(h^{m+1})]$$

$$(2.8)\qquad y(x+h;x,y)=y+h\Delta(x,y;h)=y_0+\sum_{i=1}^{m} h^i\Delta_i(x,y)+O(h^{m+1})$$

$$(2.9)\qquad d_j = h^p e_j \quad (j = 0,1,\dots,n)$$

とする。

$$(2.10)\qquad y_{j+1}- y_j- h\Delta(x_j,y_j;h) = T(x_j,y_j;h)$$

$$(2.11)\qquad y(x_{j+1}) - y(x_j) = h\Delta(x_j,y(x_j);h)$$

だから、次の式がえられる。

$$(2.12)\qquad \begin{aligned} d_{j+1}-d_j &= y_{j+1}- y(x_{j+1})-y_j+y(x_j)=y_{j+1}-y_j-(y(x_{j+1})-y(x_j)) \\ &=h[\Delta(x_j,y(x_j)+d_j;h)- \Delta(x_j,y(x_j);h)]+T(x_j,y(x_j)+d_j;h) \\ &=\sum_{i=1}^{m} h^i[\Delta_i(x_j,y(x_j)+d_j)-\Delta_i(x_j,y(x_j)] \\ &\quad +h^p[\sum_{j=1}^{m} h^i \varphi_i(x_j,y(x_j)+d_j)+O(h^{m+1})] \end{aligned}$$

これを x_0 で展開すると次の lemma がえられる。

Lemma 1. e_j, $F(x_j,y_j,d_j)$は、次のようにかける。

(2.13) $$e_j = \sum_{i=1}^{m} h^i P_i(j) + 0(h^{m+1})$$

(2.14) $$F(x_j,y_j,d_j)=h^p[\sum_{i=1}^{m} h^i Q_i(j)+0(h^{m+1})] \quad (j=0,1,\ldots,n)$$

ここで、 $P_i(x)$, $Q_j(x)$ はたかだか i 次の多項式で

(2.15) $$P_i(0) = Q_i(0) \quad (i=1,2,\ldots,n)$$

である。

$[x_0,x_0+nh]$ で m+1 回連続微分可能な任意の函数 $Z(x)$ に対して、

(2.16) $$Z(x_k)-Z(x_0)=h\sum_{j=0}^{n} a_{kj}Z'(x_j)+\sum_{j=0}^{n} b_{kj}Z(x_j)+0(h^{m+1}) \quad (k=0,1,\ldots,n)$$

(2.17) $$\sum_{j=0}^{n} b_{kj}Z(x_j) = 0 \quad (k=0,1,\ldots,r)$$

が成り立つように係数 a_{kj}, b_{kj} を決めることができることを示して、次の lemma がえられる。

Lemma 2. 条件

(2.18) $$\ell\sum_{j=0}^{n} j^{\ell-1}a_{kj}+\sum_{j=0}^{n} j^{\ell}b_{kj}= k^{\ell} \quad (\ell=1,2,\ldots,m)$$

(2.19) $$\sum_{j=0}^{n} j^{\ell}\ell_{kj} = 0 \quad (\ell=0,1,\ldots,r)$$

をみたす定数 a_{kj}, b_{kj} $(j,k = 1,2,..,n)$ が存在する。

これから次の lemma がえられる。

Lemma 3. $y(x)$ に対して

(2.20) $$y(x_k)-y(x_0)=h\sum_{j=0}^{n} a_{kj}y'(x_j)+\sum_{j=0}^{n} b_{kj}y(x_j)+0(h^{m+1})$$

$$\sum_{j=0}^{n} b_{kj} y(x_j) = O(h^{p+1}) \quad (k=0,1,\ldots,n) \tag{2.21}$$

が成り立つ。

(20)式に対応して

$$S_k = y_k - y_0 - h\sum_{j=0}^{n} a_{kj} f_j - h\sum_{j=0}^{n} b_{kj} \sum_{q=1}^{j} p_q \quad (k=0,1,\ldots,n) \tag{2.22}$$

を考え、

$$g_k = d_k - S_k \tag{2.23}$$

$$\delta_k = \begin{cases} 1 & (\sum_{j=0}^{n} b_{kj} j^{r+1} = 0 \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \tag{2.24}$$

とおく。

(12), (13), (14) 式を使うと次の式がえられる。

$$\begin{aligned} y_k - y_0 - d_k = & \; h\sum_{j=0}^{n} a_{kj} f_j + h\sum_{j=0}^{n} b_{kj} \sum_{q=1}^{j} p_q \\ & - h^p [\sum_{i=1}^{m} h^{i+1} \sum_{j=0}^{n} a_{kj} Q_i(j) \\ & + \sum_{i=r+1}^{m} b_{kj} P_i(j)] + O(h^{m+1}) \end{aligned} \tag{2.25}$$

また

$$R_{i+1}(x) = \int_0^x Q_i(u)du \tag{2.26}$$

とおくと、(18) 式により

$$\sum_{j=0}^{n} j^{\ell-1} a_{kj} = \frac{1}{\ell} k^{\ell} - \frac{1}{\ell} \sum_{j=0}^{n} j^{\ell} b_{kj} \tag{2.27}$$

だから

(2.28) $$\sum_{j=0}^{n} a_{kj}Q_i(j) = R_{i+1}(k) - \sum_{j=0}^{n} b_{kj}R_{i+1}(j)$$

が成り立つ。さらに、(19)式により

(2.29) $$\sum_{j=0}^{n} b_{kj}R_{i+1}(j) = 0 \quad (k=0,1,\ldots,r-1)$$

である。

(2.30) $$c_{ki} = \sum_{j=0}^{n} b_{kj}[P_i(j) - R_i(j)]$$

とおき、(28)式を(25)式に代入すると、次の lemma がえられる。

Lemma 4. g_kは次のようにかける。

(2.31) $$g_k = h^p[\sum_{i=1}^{m} h^{i+1}R_{i+1}(k)+\sum_{i=r+1}^{m} c_{ki}h^i]+0(h^{m+1})$$

ただし、c_{ki} は定数で $c_{0i} = 0$ であり、$\delta_k = 1$ ならば $c_{k,n+1} = 0$ である。

2.2. 誤差の近似式

Lemma 4 から、$m \geqq p+1$ ならば $g_k = 0(h^{p+2})$ である。したがって次の定理がえられる。

定理 1. $m \geqq p+1$ ならば、y_k の局所誤差は次の式をみたす。

(2.32) $$y_k - y(x_k) = S_k + 0(h^{p+2}) \quad (k=1,2,\ldots,n)$$

よりよい近似式をえるために条件

(2.33) $$m \geqq p + r + 1$$

すなわち条件

(2.34) $$2(n-r) \geqq p \geqq 1$$

がみたされている場合を考えることにする。

(2.35) $x = x_u = x_0 + uh \quad (0 \leqq u \leqq n)$

とおき、次の函数を考える。

(2.36) $$e(x) = \sum_{i=1}^{m} h^i P_i(u) + h^{m+1} a(u)$$

(2.37) $$g(x) = h \left[\sum_{i=1}^{m} h^{i+1} R_{i+1}(u) + \sum_{i=r+1}^{m} h^i c_i(u) \right] + h^{m+1} b(u)$$

ここで、 $a(u)$, $c_i(u)$, $b(u)$ は

(2.38) $e(x_k) = e_k,\ c_i(k) = c_{ki},\ g(x_k) = g_k \quad (k=0,1,..,n)$

となるような、たかだか n 次の補間多項式である。

(2.39) $d(x) = h^p e(x)$

(2.40) $v(x) = y(x) - d(x)$

(2.41) $S(x) = d(x) - g(x)$

とおくと

(2.42) $d(x_k) = d_k,\quad v(x_k) = y_k,\quad S(x_k) = S_k$.

となる。すると次の lemma がえられる。

Lemma 5.

(2.43) $w' = F(x, v(x), S(x)+w),\quad w(x_0; e) = e$

をみたす解を $w(x;e)$ とすると、条件 (2.34) の下で次の式が成り立つ。

(2.44) $$y_k - y(x_k; e) = S_k + w(x_k; e) + O(h^{p+r+\delta_k+1}) \quad (k=0,1,\ldots,n)$$

S_k は計算できるから、y_k の誤差を近似するためには、 $w(x_k;e)$ の近似値を求めればよい。そのために one-step method を使うが、$S(x)$, $v(x)$ の値は $x = x_k$ $(k = 0,1,\ldots,n)$ でしかわかっていないから、

等間隔の点での導函数の値しか使わないものでなければならない。

$\psi(t,w;h)$ を $x = t+jh/k$ $(j = 0,1,\ldots,k)$ 以外での導函数の値は使わない order q の one-step method の増分函数とする。ただし、k は n を越えない自然数で $1 \leqq q \leqq p+r+1$ とする。n を越えない k の整数倍を ℓ とし、$t = [n/\ell]$, $\nu = t\ell$ とおく。

x_0 から x_ν まで幅 ℓh で積分する場合を考え

(2.45) $$q_{j+\ell}(e) = \psi(x_j, w_j(e); \ell h)$$

(2.46) $$w_{j+\ell}(e) = e + \ell h Z_{j+\ell}(e) \qquad (j=0,\ell,2\ell,\ldots,(t-1)\ell)$$

(2.47) $$Z_{j+\ell}(e) = Z_j(e) + q_{j+\ell}(e)$$

(2.42) $$w_0(e) = e, \quad Z_0(e) = 0$$

とする。このとき、次の結果がえられる。

定理 2. 条件 (2.34) と条件

(2.49) $$p \geqq n-r-1, \quad 1 \leqq q \leqq p+r+1$$

の下で次の式が成り立つ。

(2.50) $$y_j - y(x_j;e) = T_j(e) + e\cdot O(h^{q+1}) + O(h^{p+\ell_j+1}) \qquad (j=\ell,2\ell,\ldots,t\ell)$$

ただし

(2.51) $$T_j(e) = S_j + w_j(e)$$

(2.52) $$\ell_j = \min(q, r+\delta_j)$$

である。

2.3. 丸めの誤差

理論値 a の計算された値を a^* で表わすことにする。計算値 y_j^*, $w_j^*(e)$, $T_j^*(e)$ は次のようにかける。

(2.53) $$y_i^* = y_{i-1}^* + hp_i^* - r_i' \qquad (i = 1,2,\ldots,n)$$

(2.54) $$w_j^*(e) = e + \ell h Z_j^*(e) - s_j \quad (j=\ell,2\ell,\ldots,t\ell)$$

(2.55) $$T_j^*(e) = S_j^* + w_j^*(e) - t_j$$

ここで、 r_i', s_j, t_j は丸めの誤差で $y_0^* = y_0$, $w_0^* = e$ である。

これから

(2.56) $$y_i^* - y_i = y_{i-1}^* - y_{i-1} + h(p_i^* - p_i) - r_i'$$

(2.57) $$w_j^*(e) - w_j(e) = \ell h[Z_j^*(e) - Z_j(e)] - s_j$$

がえられる。

(2.58) $$\mu = \max(\,|p_i^*-p_i|, |Z_j^*(e)-Z_j(e)|; |\delta_k^*-\delta_k|)$$
$$(i=1,2,\ldots,n; j=\ell,2\ell,\ldots,t\ell; k=0,1,\ldots,n)$$

とすると、 S_k^*, $w_j^*(e)$, $T_j^*(e)$ は次のようにかける。

(2.59) $$S_k^* = y_k^* - y_k + S_k + 0(h\mu) - r_k$$

(2.60) $$w_j^*(e) = w_j(e) + 0(h\mu) - s_j$$

(2.61) $$T_j^*(e) = y_j^* - y_j + T_j(e) + 0(h\mu) - r_j - s_j - t_j$$

ただし、r_j は丸めの誤差である。これから次の結果がえられる。

定理 3. $m \geqq p+1$ ならば

(2.62) $$y_k^* - y(x_k) = S_k^* + 0(h^{p+2}) + 0(h\mu) + r_k \quad (k=1,2,..,n)$$

また、条件 (2.34), (2.49) の下で

(2.63) $$y_j^* - y(x_k;e) = T_j^*(e) + e\cdot 0(h^{q+1}) + 0(h^{p+\ell_j+1}) + 0(h\mu)$$
$$+ r_j + s_j + t_j \quad (j=\ell,2\ell,\ldots,t\ell)$$

が成り立つ。 r_k, s_j, t_j はそれぞれ S_k, $w_j(e)$, $S_j^*+W_j^*(e)$ を計算

するときの丸めの誤差である。

S_k と丸めの誤差を比べるために、S_k を次のようにかき直す

(2.64) $$R_k = y_k - y_0 - h\sum_{j=0}^{n} a_{kj} f_j - \sum_{j=0}^{n} b_{kj} y_j$$

したがつて

(2.65) $$v_k = R_k - S_k$$

は理論上 0 である。R_k^*, v_k^* は次のようにかける。

(2.66) $$R_k^* = y_k^* - y_0 - h\sum_{j=0}^{n} a_{kj} f_j^* - \sum_{j=0}^{n} b_{kj} \sum_{q=1}^{j} (hp_q^* - r_k') - t_k'$$

(2.67) $$v_k^* = \sum_{j=0}^{n} b_{kj} \sum_{q=1}^{j} r_q' + r_k - t_k' - t_k''$$

ただし t_k', t_k'' は丸めの誤差である。v_k^* は丸めの誤差の集まりである。これから、y_k の局所誤差が丸めの誤差に対して支配的であるならば、$|v_k^*|$ は $|S_k^*|$ に比べて相当小さくなければならないことがわかる。

2. 4. 数値例

次の例では、$n = \ell = 4$ で、$y(x), w(x;e)$ を近似するのに Runge-Kutta 法が使われている。S_2, S_4, R_4 は次の式で計算する。

(2.68) $$S_2 = y_2 - y_0 - hP + h(p_4 - p_2 + p_3 - p_1)/2$$

(2.69) $$S_4 = y_4 - y_0 - 2hP$$

(2.70) $$R_4 = \frac{1}{21}[5(y_4 - y_0) + 32(y_3 - y_1)] - 2h(2f_2 + \frac{4}{7}\Delta^2 f_1 + \frac{1}{35}\Delta^4 f_0)$$

ただし、

(2.71) $$P = 2f_2 + \frac{4}{7}\Delta^2 f_1 + \frac{1}{35}\Delta^4 f_0 + \frac{8}{24}(p_4 - p_3 + p_1 - p_2)$$

である。この場合

(2.72) $$m = 8,\ r = 1,\ \delta_4 = 1$$

したがつて

(2.73) $$y_4 - y(x_4;e) = T_4(e) + e\cdot 0(h^5) + 0(h^7)$$

である。

最初 $e = 0$, $h = 0.05$ にしてスタートし、図のような手順で計算した。

($\varepsilon = 5\times10^{-7}$, $\delta = 5\times10^{-4}$)

例 1. $y' = 2xy$, $y(0) = 1$

$y(x) = \exp(x^2)$ (表 2)

例 2. $y' = 12x^3 - 8y/x$, $y(-1) = 1$

$y(x) = x^4$ (表 3)

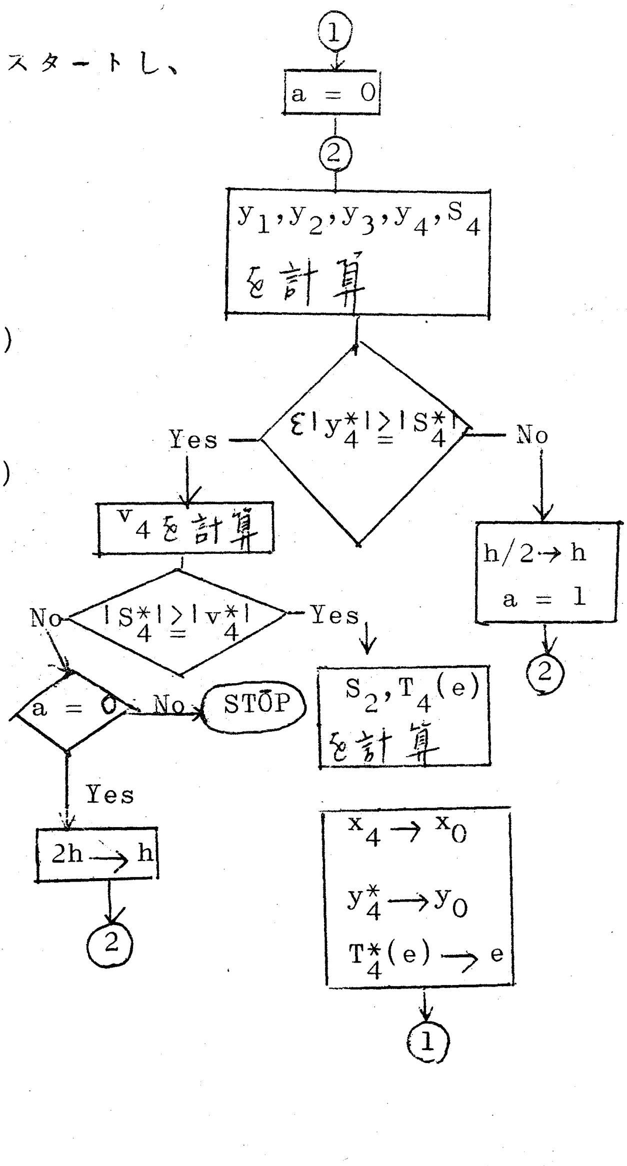

表 2

x \ 誤差	計算値	真値
1.0	-8.361-07	-8.720-07
2.0	-9.946-05	-9.941-05
3.0	-3.057-02	-3.039-02
4.0	-6.386+01	-6.343+01
5.0	-9.764+05	-9.687+05

§ 3 2-step process

order 4 の one-step method で 2-step 幅 h で進んだとき、(1.13) 式によつて局所誤差を近似しようとすると、3回余分に導函数の

値を計算しなければならない。この方法は、積分公式に依存しないから一般的なものであるが、1回だけ余分に導函数の計算をして 2-step 当りの局所誤差が近似できるような公式はないかという問題について考えて見る。

3. 1. 準　備

微分演算子

$$D = \frac{\partial}{\partial x} + k_1 \frac{\partial}{\partial y} \tag{3.1}$$

を導入し、

$$D^j f(x_0, y_0) = T^j, \quad D^j f_y(x_0, y_0) = S^j \quad (j=1,2,..,5) \tag{3.2}$$

$$(Df)^2(x_0, y_0) = P, \quad (Df_y)^2(x_0, y_0) = Q, \quad Df_{yy}(x_0, y_0) = R \tag{3.3}$$

$$f_y(x_0, y_0) = f_y, \quad f_{yy}(x_0, y_0) = f_{yy} \tag{3.4}$$

表　3

誤差 / x	計算値	真値
-0.9	-2.374-07	-2.370-07
-0.8	-8.889-07	-8.877-07
-0.7	-2.925-06	-2.922-06
-0.6	-1.007-05	-1.006-05
-0.5	-4.331-05	-4.328-05
-0.4	-2.581-04	-2.580-04
-0.3	-2.575-03	-2.578-03
-0.2	-6.599-02	-6.706-02
-0.1	-1.688+01	-1.691+01

とおく。すると、 $y(x_0+h)$ は次のように展開される。

$$\begin{aligned} y(x_0+h) = {} & y_0 + hk_1 + \frac{h^2}{2!}T + \frac{h^3}{3!}(T^2 + f_y T) + \frac{h^4}{4!}(T^3 + 3TS + f_y T^2 + f_y^2 T) \\ & + \frac{h^5}{5!}[T^4 + 6TS^2 + 4T^2S + 3f_{yy}P + f_y T^3 + f_y^2 T^2 + f_y^3 T + 7f_y TS] \\ & + \frac{h^6}{6!}[T^5 + 10TS^3 + 10T^2S^2 + 5T^3S + 15PR + 15TQ + 13f_y f_{yy}P + 16f_y TS^2 \\ & + 9f_y T^2S + 12f_y^2 TS + 10f_{yy}TT^2 + f_y T^4 + f_y^2 T^3 + f_y^3 T^2 + f_y^4 T] \\ & + 0(h^7) \end{aligned} \tag{3.5}$$

いま

$$Z_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^{4} p_i k_i \tag{3.7}$$

の展開式の係数が h^4 まで (5) 式と一致するように、(1.2) の a_i, b_{ij}

p_i を決めると、次の条件がみたされねばならない。

$$\left\{\begin{aligned} & p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1 \\ & a_2p_2 + a_3p_3 + p_4 = \frac{1}{2} \\ & c_1p_3 + c_2p_4 = \frac{1}{6} \\ & \quad c_1b_{43}p_4 = \frac{1}{24} \end{aligned}\right. \tag{3.8}$$

$$\left\{\begin{aligned} & a_4 = 1 \\ & a_3(a_3 - a_2) = 2(1 - 2a_2)c_1 \\ & (1 - a_3)c_2 = (3 - 4a_3)c_1b_{43} \\ & (1 - a_2)(1 - a_3) = 2(3-4a_2-4a_3+6a_2a_3)c_1b_{43} \end{aligned}\right. \tag{3.9}$$

ただし

$$c_i = \sum_{j=2}^{i+1} a_j b_{i+2,j} \qquad (i=1,2) \tag{3.10}$$

である。このとき $T(x_0,y_0;h)$ は次のようになる。

$$T(x_0,y_0;h) = \frac{h^5}{5!}[A_1T^4+A_2TS^2+A_3T^2S+A_4\delta_{yy}P+A_5\delta_yT^3 +A_6\delta_y^2T^2+A_7\delta_y^3T+A_8\delta_yTS]+0(h^6) \tag{3.11}$$

$$A_1 = \frac{1}{12}(3 - 5a_2+ 5a_3+ 10a_2a_3) \tag{3.12}$$

$$A_2 = \frac{1}{2}(3 - 5a_3), \quad A_3 = \frac{1}{2}(2 - 5a_2)$$

$$A_4 = \frac{5}{2(1-a_3)}[(3-4a_3)c_2 + c_1] - 3$$

$$A_5 = -4A_1, \ A_6 = -A_3, \ A_7 = -1, \ A_8 = 5a_3 - 2$$

x_1 から幅 h でもう 1 step 進むために、

$$(3.13) \quad \begin{cases} \tilde{k}_5 = f(x_1, Z_1) \\ \tilde{k}_{4+i} = f(x_1 + a_i h, Z_1 + h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}\tilde{k}_{4+j}) \quad (i=2,3,4) \end{cases}$$

を計算し

$$(3.14) \qquad Z_2 = Z_1 + h\sum_{i=1}^{4} p_i \tilde{k}_{4+i}$$

$$(3.15) \qquad \tilde{T}(x_0, y_0; h) = Z_2 - y(x_2)$$

とおく。すると、

$$(3.16) \qquad \tilde{T}(x_0, y_0; h) = 2T(x_0, y_0; h) + O(h^6)$$

となる。

また

$$(3.17) \qquad v = h\sum_{i=1}^{4} (q_i k_i + q_{4+i} k_{4+i})$$

とおくと、この展開式が h^5 から始まるように q_i, q_{4+i} を定めることができ、定数倍を除いて一意的に定まる。

3.2. 積分公式の存在性

$\tilde{T}(x_0, y_0; h)$ と v の T^4, TS^2, T^2S の係数が一致するという条件をつけると、この問題は一意的な解をもち、しかも $\delta_{yy}P$, $\delta_y TS$ の係数も一致する。そしてすべての係数が次のように定まる。

$$(3.18) \qquad a_2 = \frac{1}{3}, \quad a_3 = \frac{1}{2}, \quad b_{32} = \frac{3}{2}, \quad b_{42} = -\frac{3}{2}, \quad b_{43} = 2$$

(3.19) $$p_1 = p_4 = \frac{1}{6}, \quad p_2 = 0, \quad p_3 = \frac{4}{6}$$

(3.20) $$v = \frac{h}{90}(k_1 - 4k_3 + 6k_4 - 4\tilde{k}_7 + \tilde{k}_8 + 3(\tilde{k}_5 - k_4))$$

(3.21) $$\tilde{T}(x_0, y_0; h) - v = \frac{h^5}{5!}[-\frac{4}{9}\delta_y T^3 - \frac{2}{3}\delta_y^2 T^2 - \frac{22}{9}\delta_y^3 T]$$

$$+ \frac{h^5}{6!}[-\frac{100}{27}T^3 S - \frac{16}{3}TQ + \frac{25}{6}\delta_y \delta_{yy} P - \frac{17}{9}\delta_y TS^2 - 10\delta_y T^2 S$$

$$- \frac{154}{3}\delta_y^2 TS - \frac{109}{54}\delta_y T^4 - \frac{119}{27}\delta_y^2 T^3 - 10\delta_y^3 T^2 - \frac{44}{3}\delta_y^4 T]$$

$$+ O(h^7)$$

もう１回　f(x,y) の値を計算して　(21) 式の　h^5の項が消せればよいことになる。それには色々のし方があるが、結局次のようなものを選んだ。

(3.22) $$P = \frac{h}{45}[17k_1 - 66k_2 + 52k_3 - 25k_4 + 23\tilde{k}_5 + 3\tilde{k}_6 - 4\tilde{k}_7)$$

(3.23) $$k_9 = f(x_1 + \frac{1}{3}h, Z_1 + \frac{h}{3}\tilde{k}_5 + P)$$

(3.24) $$m = h[\frac{1}{90}(k_1 - 4k_3 + 6\tilde{k}_5 - 4\tilde{k}_7 + \tilde{k}_8) + \frac{1}{2}(\tilde{k}_5 - k_4) + \frac{1}{2}(\tilde{k}_9 - k_6)]$$

(3.25) $$\tilde{T}(x_0, y_0; h) - m = \frac{1}{3}\frac{h^6}{6!}[\frac{8}{3}T^3 S + \frac{64}{3}TQ + \frac{4}{3}\delta_y \delta_{yy} P$$

$$+ \frac{4}{3}\delta_y TS^2 + 16\delta_y T^2 S + \frac{8}{3}\delta_y^2 TS - 8\delta_y^2 T^3$$

$$- 24\delta_y^3 T^2 - 56\delta_y^4 T] + O(h^7)$$

(1.13) と比べると

$$(3.26)\qquad \widetilde{T}(x_0,y_0;h)-e = \frac{1}{3}\cdot\frac{h^6}{6!}\Big[\frac{32}{9}T^3S+16TQ-8\delta_y\delta_{yy}P-8\delta_yTS^2$$
$$+16\delta_yT^2S+32\delta_y^2TS-\frac{32}{9}\delta_y^2T^3-16\delta_y^3T^2-32\delta_y^4T\Big]+0(h^7)$$

で大差はない。

3.3. 数値例

次の例での計算手順は次の通りである。

$$(3.27)\qquad |m| \leqq \varepsilon|Z_2| \qquad (\varepsilon = 0.5\times10^{-7})$$

がみたされるまで幅を半分にする。

$$(3.28)\qquad v = u + m + 2h[f(x_1,Z_1+u) - \tilde{k}_5]$$

を計算し、 u, y_0, x_0 をそれぞれ v, Z_2, x_2 で置きかえる。

$$(3.29)\qquad |m| \leqq \frac{1}{64}\varepsilon|Z_2|$$

ならば幅を倍にする。

積分を始めるときには $u = 0$, $h = 0.05$ とし、誤差 E, 公式誤差 T, (1.13) の e が比較のために計算してある。

例 1. $y' = 2xy$, $y(0) = 1$ （表 4 ）

例 2. $y' = -5y$, $y(0) = 1$ （表 5 ）

表 4

x	m	e	T	u	E
0.2	2.786-09	2.680-09	4.053-09	2.401-09	4.919-09
0.4	6.156-09	5.723-09	7.563-09	1.443-08	2.023-08
0.6	-4.501-09	-7.609-09	-4.904-09	1.739-08	2.548-08
0.8	-7.016-08	-8.371-08	-8.374-08	-7.682-08	-8.457-08
1.0	-1.327-08	-1.427-08	-1.480-08	-1.452-07	-1.621-07
1.2	-5.019-08	-5.386-08	-5.651-08	-3.651-07	-4.197-07
1.4	-1.760-07	-1.891-07	-2.004-07	-1.147-06	-1.330-06
1.6	-6.027-07	-6.495-07	-6.954-07	-3.924-06	-4.656-06
1.8	-7.501-08	-7.803-08	-8.201-08	-8.010-06	-9.703-06
2.0	-2.651-07	-2.764-07	-2.905-07	-1.826-06	-2.262-06

表 5

x	m	e	T	u	E
0.2	6.788-09	6.512-09	6.165-09	5.272-08	4.828-08
0.4	2.497-09	2.396-09	2.269-09	3.751-08	3.626-08
0.6	9.187-10	8.813-10	8.343-10	2.002-08	2.001-08
0.8	3.380-10	3.242-10	3.070-10	9.070-10	9.505-09
1.0	1.243-10	1.193-10	1.129-10	4.232-09	4.512-09
1.2	4.574-11	4.388-11	4.154-11	1.809-09	1.991-09
1.4	1.683-11	1.614-11	1.528-11	7.523-10	8.546-10
1.6	6.190-12	5.938-12	5.622-12	3.066-10	3.592-10
1.8	2.277-12	2.185-12	2.069-12	1.230-10	1.487-10
2.0	8.378-13	8.037-13	7.609-13	4.878-11	6.077-11

§ 4 2-step process (II)

4. 1. Order 4 の one-step method.

前節の $\tilde{k}_{4+i}$ $(i = 1,2,3,4)$ の計算には k_i はあらわには使われていない。そこで k_i を使うようにすれば、導函数の値を計算する回数をへらして、前節と同様なことができるのではないかという問題について考えることにする。すなわち

$$(4.1) \qquad Z_1 = y_0 + h\sum_{i=1}^{4} p_i k_i, \quad Z_1 - y(x_1) = 0(h^5)$$

$$(4.2) \qquad Z_2 = y_0 + h\sum_{i=1}^{7} r_i k_i, \quad Z_2 - y(x_2) \fallingdotseq 2(Z_1 - y(x_1)) + 0(h^6)$$

$$(4.3) \qquad e = h\sum_{i=1}^{7} q_i k_i, \quad Z_2 - e - y(x_2) = 0(h^6)$$

となるように、 $a_i, b_{ij}, p_i, r_i, q_i$ が決められないかという問題である。

まず (1) 式が成り立つためには (3.9) 式がみたされねばならない。次に、この条件の下で

(4.4) $\tilde{Z}_2 = y_0 + h\sum_{i=1}^{6} r_i k_i, \quad \tilde{Z}_2 - y(x_2) = 0(h^6)$

および、 $\tilde{Z}_2 - y(x_2)$ の T^5, TS^3, T^2S^2 の係数は 0 であるという条件をつけると１９ケの方程式がみたされねばならない。これから次の条件式がえられる。

(4.5)
$$(a_6 - 2)[-\frac{8}{5} + \frac{20}{3}(a_2 + a_3) - \frac{40}{3}a_2a_3 + a_5(1 - 4a_2 - 4a_3 + 8a_2a_3)] + (a_5 - \frac{3}{2})(\frac{2}{5} - \frac{4}{3}a_2 - \frac{4}{3}a_3 + \frac{8}{3}a_2a_3) - \frac{4}{15}(a_3 - \frac{1}{2})(a_2 - \frac{1}{2}) = 0$$

(4.6)
$$(a_6 - 2)[-\frac{4}{5} + \frac{10}{3}a_3 + \frac{1}{2}a_5 - 2a_2a_5] + (a_5 - \frac{3}{2})(\frac{1}{5} - \frac{2}{3}a_3) + \frac{1}{15}(a_3 - \frac{1}{2}) = 0$$

(4.7)
$$(a_6 - 2)[-\frac{8}{15} + \frac{10}{3}a_2 + \frac{1}{3}a_5 - 2a_2a_5] + (a_5 - \frac{3}{2})(\frac{2}{15} - \frac{2}{3}a_2) + \frac{1}{15}(a_2 - \frac{1}{3}) = 0$$

そこで $a_2 = \frac{1}{3}$, $a_3 = \frac{1}{2}$, $a_5 = \frac{3}{2}$, $a_6 = 2$ と選ぶと、係数はすべて定まり、次のようになる。

(4.8) $k_5 = f(x_1 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{3}{8}h(k_1 + 3k_4))$

(4.9) $k_6 = f(x_1 + h, y_0 + \frac{2}{7}h(-4k_1 + 3k_2 + 12(k_3 - k_4) + 8k_5))$

(4.10) $$\widetilde{Z}_2 = y_0 + \frac{h}{45}[7k_1 + 32k_3 + 12k_4 + 32k_5 + 7k_6]$$

(4.11) $$\widetilde{Z}_2 - y(x_2) = \frac{h^6}{6!}[8T^3S + 24TQ - 4\delta_y\delta_{yy}P + \frac{28}{3}\delta_y TS^2 + 8\delta_y T^2S - 24\delta_y^2 TS + 16\delta_y T^4 - 8\delta_y^2 T^2 - 8\delta_y^3 T - \frac{2021}{81}\delta_y^4 T] + O(h^7)$$

次に $w = h\sum_{i=1}^{6} q_i k_i = O(h^4)$ で T^3 の係数が 0 という条件をつけると、 $q_1 = q_6$, $q_2 = 0$, $q_3 = q_5 = -4q_6$, $q_4 = 6q_6$ となる。
$q_6 = 1/90$ に選ぶと次の式がえられる。

(4.12) $$w = \frac{h}{90}[k_1 - 4k_3 + 6k_4 - 4k_5 + k_6]$$

(4.13) $$\widetilde{T}(x_0, y_0; h) - w = -\frac{h^4}{4!}\cdot\frac{1}{7}\delta_y^2 T + \frac{h^5}{5!}[-\frac{40}{63}\delta_y T^3 - \frac{5}{7}\delta_y^2 T^2 - \frac{15}{14}\delta_y^3 T - \frac{15}{14}\delta_y TS] + \frac{h^6}{6!}[-\frac{44}{7}T^3S - \frac{82}{7}TQ + \frac{17}{2}\delta_y\delta_{yy}P + \frac{57}{28}\delta_y TS^2 - \frac{265}{7}\delta_y T^2S - \frac{233}{7}\delta_y^2 TS - \frac{755}{252}\delta_y T^4 - \frac{191}{42}\delta_y^2 T^3 - \frac{137}{14}\delta_y^3 T - \frac{134}{7}\delta_y^4 T] + O(h^7)$$

もう1回 f を計算して、 (13) 式の h^4 の項となるだけ多くの h^5 の項を消したい。それには、たとえば次のようにすればよい。

(4.14) $$k_7 = f(x_0 + \frac{3}{2}h, y_0 + \frac{3}{8}h(-9k_2 + 16k_3 - 4k_4 + k_6))$$

(4.15) $$e = w - \frac{2}{63}h(k_7 - k_5), \quad Z_2 = \widetilde{Z}_2 + e$$

このとき

$$(4.16)\qquad \tilde{T}(x_0,y_0;h)-e = \frac{h^5}{5!}\left[-\frac{85}{49}\delta_y^3 T + \frac{15}{7}\delta_y TS\right] + \frac{h^6}{6!}\left[-\frac{4}{7}T^3S + \frac{53}{7}TQ + \frac{673}{27}\delta_y\delta_{yy}P + \frac{269}{14}\delta_y TS^2 - \frac{120}{7}\delta_y T^2S - \frac{151}{49}\delta_y^2 TS + \frac{15}{28}\delta_y T^4 + \frac{89}{147}\delta_y^2T^3 - \frac{272}{49}\delta_y^3T^2 - \frac{758}{49}\delta_y^4 T\right] + O(h^7)$$

である。

$m = e/2$ だけ Z_2 に補正をして、$\hat{Z}_2 = Z_2 + m$ を $y(x_2)$ の近似値とし、m で $\hat{Z}_2 - y(x_2)$ を近似する方法も考えられる。

$$(4.17)\qquad \hat{Z}_2 - y(x_2) = \frac{h^5}{5!}\left[\frac{1}{24}T^4 + \frac{1}{4}TS^2 + \frac{1}{6}T^2S + \frac{1}{8}\delta_{yy}P - \frac{1}{6}\delta_y T^3 - \frac{1}{6}\delta_y^2T^2 - \frac{13}{98}\delta_y^3T - \frac{4}{7}\delta_y TS\right] + \frac{h^6}{6!}\left[\frac{1}{4}T^5 + \frac{5}{2}TS^3 + \frac{5}{2}T^2S^2 + \frac{15}{4}PR + \frac{5}{2}\delta_{yy}TT^2 + \frac{487}{63}T^3S + \frac{159}{7}TQ - \frac{533}{56}\delta_y\delta_{yy}P + \frac{167}{42}\delta_y TS^2 + \frac{225}{14}\delta_y T^2S - \frac{4023}{98}\delta_y^2 TS + \frac{839}{56}\delta_y T^4 - \frac{8597}{882}\delta_y^2T^3 - \frac{953}{98}\delta_y^3T^2 - \frac{96113}{3969}\delta_y^4T\right] + O(h^7)$$

4.2. Order 3 の one-step method

$$(4.18)\qquad Z_1 = y_0 + h\sum_{i=1}^{3} p_i k_i,\quad Z_1 - y(x_1) = O(h^4)$$

という条件をつけると、次の式がみたされねばならない。

(4.19) $$p_1 + p_2 + p_3 = 1,\quad a_2 p_2 + a_3 p_3 = \frac{1}{2},\quad c_1 p_3 = \frac{1}{6}$$

(4.20) $$a_3(a_3 - a_2) = (2 - 3a_2)c_1$$

このとき、公式誤差は次のようになる。

(4.21) $$Z_1 - y(x_1) = \frac{h^4}{4!}[(-1 + \frac{4}{3}a_2 + \frac{4}{3}a_3 - 2a_2a_3)T^3 + (4a_3 - 3)TS + (2a_2 - 1)\delta_y T^2 - \delta_y^2 T] + O(h^5)$$

さて、

(4.22) $$\tilde{Z}_2 = y_0 + h\sum_{i=1}^{5} q_i k_i,\quad \tilde{Z}_2 - y(x_2) = O(h^5)$$

(4.23) $$e = h\sum_{i=1}^{5} r_i k_i = \frac{h^4}{4!}[2(-1 + \frac{4}{3}a_2 + \frac{4}{3}a_3 - 2a_2a_3)T^3 + 2(4a_3 - 3)TS + 2(2a_2 - 1)\delta_y T^2 - 2\delta_y^2 T] + O(h^5)$$

で $\tilde{Z}_2 - y(x_2)$の T^4, TS^2, T^2S の係数は 0 であるという条件をつけると、

(4.24) $$a_2 = \frac{4}{9},\quad a_3 = \frac{2}{3},\quad a_4 = 2,\quad a_5 = \frac{8}{5}$$

と定まり、$\tilde{Z}_2, e$ は次のようになる。

(4.25) $$\tilde{Z}_2 = y_0 + \frac{h}{168}[14k_1 + 63k_2 + 120k_3 + 14k_4 + 125k_5]$$

(4.26) $$e = \frac{5}{1344}h[7(k_1 - k_3) + 11(k_5 - k_3) + 14(k_5 - k_4)]$$

(4.27) $$Z_1 = y_0 + \frac{h}{4}(k_1 + 3k_3)$$

ただし、

(4.28)
$$\begin{cases} k_2 = f(x_0 + \frac{4}{9}h, y_0 + \frac{4}{9}hk_1) \\ k_3 = f[x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + h(\frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{2}k_2)] \\ k_4 = f[x_0 + 2h, y_0 + h(\frac{7}{2}k_1 - \frac{27}{2}k_2 + 12k_3)] \\ k_5 = f[x_0 + \frac{8}{5}h, y_0 + \frac{4}{125}h(-5k_1 + 27k_2 + 21k_3 + 7k_4)] \end{cases}$$

(4.29)
$$\tilde{Z}_2 - y(x_2) = \frac{h^5}{5!}[-8\delta_{yy}P + \frac{32}{9}\delta_y T^3 + \frac{32}{9}\delta_y^2 T^2 + \frac{64}{3}\delta_y^3 TS + \frac{64}{3}\delta_y TS] + O(h^6)$$

(4.30)
$$e = \frac{h^4}{4!}[-\frac{2}{9}T^3 - \frac{2}{3}TS - \frac{2}{9}\delta_y T^2 - 2\delta_y^2 T] + \frac{h^5}{5!}[-\frac{32}{27}T^4 - \frac{64}{9}TS^2 + \frac{17}{27}T^2 S - \frac{32}{9}\delta_{yy}P + \frac{320}{243}\delta_y T^3 + \frac{20}{3}\delta_y^3 T - 24\delta_y TS] + O(h^6)$$

である。

$m = e/2$, $Z_2 = \tilde{Z}_2 + m$ とすると

(4.31)
$$Z_2 - y(x_2) = \frac{h^4}{4!}[-\frac{1}{9}T^3 - \frac{1}{3}TS - \frac{1}{9}\delta_y T^2 - \delta_y^2 T] + \frac{h^5}{5!}[-\frac{16}{27}T^4 - \frac{32}{9}TS^2 + \frac{17}{54}T^2 S - \frac{88}{9}\delta_{yy}P + \frac{1024}{243}\delta_y T^3 + \frac{32}{9}\delta_y^2 T^2 + \frac{74}{3}\delta_y^3 T + \frac{28}{3}\delta_y TS] + O(h^6)$$

62

となる。

参 考 文 献

[1] Ralston, A. and H. S. Wilf: Mathematical methods for digital computers, New York (1960).

[2] Shintani, H.: Approximate computation of errors in numerical integration of ordinary differential equations by one-step methods, J. Sci. Hiroshima Univ., Ser. A-I (1965), 97-120.

[3] Shintani, H.: On a one-step method of order 4, J. Sci. Hiroshima Univ., (1966) （印刷中）