

微分係数を利用する常微分方程式数値解法公式について —自動微分法の応用—

Numerical Methods for Ordinary Differential Equations using Partial Derivatives

千葉大学工学部 小野 令美 (Harumi Ono)

1 はじめに

数値計算の分野で微分係数を用いて得られる手法は多いが、微分係数を用いるには導関数を別に数式的に求めて与えなければならないことから、微分係数の使用は極力回避されてきた。古典的 Runge-Kutta の公式も微分係数の代わりに 1 ステップの中で何回かの関数計算を行うことにより、高階の微分係数を用いたのと同じ精度を得る方法として考えられたものであった。

到達可能次数が段数より低い陽的 Runge-Kutta 公式において、関数計算を行うある分点を近づけると、その極限で段数と同じ次数が達成できる一連の公式がある。これを極限公式というが、この公式には当然の事ながら微分係数が含まれている。この極限公式の概観について述べる。さらに、近年高速自動微分法と呼ばれる手法が提案され、この方法を用いると関数値を計算する手続きだけ与えれば関数値と微分係数を同時に精度良くしかも少ない手間で求めることが出来る。そこではじめからこの極限公式に含まれる形の微分係数を積極的に取り入れた Runge-Kutta 系公式について述べる。

2 陽的 Runge-Kutta 系極限公式

常微分方程式の初期値問題

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

の数値解法の一つの陽的 Runge-Kutta 公式の到達可能次数は、よく知られているように表 1 の通りである。

表 1 Attainable order.

stage	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
order	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7

また, Runge-Kutta 公式のパラメタを次のように表すことにする.

c_2	a_{21}									
c_3	a_{31}	a_{32}								
$\vdots$	$\vdots$			$\ddots$						
c_s	a_{s1}	a_{s2}	$\cdots$	$a_{s,s-1}$						
	b_1	b_2	$\cdots$						b_s	

さらに, 各分点 c_k での関数計算に用いる y 座標を y_k すなわち

$$y_k = y_n + h \sum_{j=1}^{k-1} a_{k,j} f_j$$

とする. ここで

$$\begin{aligned} f_1 &= f(t_n, y_n), \\ f_i &= f(t_n + c_i h, y_i) \quad (i = 2, 3, \dots) \end{aligned}$$

である.

到達可能次数が段数より 1 次低い, 田中の 5 段 4 次 Runge-Kutta 公式 [12] において, 分点 c_4 が $c_5 (= 1)$ に近付いていくと, 公式の $O(h^5)$ の誤差項の係数は小さくなっていく. 戸田はこのことに着目し, $c_4 \rightarrow 1$ の極限では精確に 5 次の公式となる事, および $c_2 \rightarrow 0$ の極限でも 5 次公式が得られることを示し, 残されている自由なパラメタを用いて打ち切り誤差の観点から推奨できる 2, 3 の公式を与えた [13].

戸田の極限公式は, 4 次までの誤差項の係数を 0 とおきたいわゆる Kutta の条件式 8 式に加えて, 5 次の誤差項の係数のいくつかを取り入れて解いたものである. 戸田が極限公式の誘導で取り入れた 5 次の誤差項の係数を別の誤差項の係数に入れ替えると, また別の極限公式が得られるのではないかとさらにこのようなやり方が 6 次以上の公式, 4 段 4 次公式, あるいはそれ以下の公式でも可能か? という疑問が残る. 著者はこれらの問題について調べ, 表 2 に示す結果を明らかにした [5],[6],[7].

表 2 Limmiting formulas.

stage	limiting formula	abscissa
≤ 4	none	
5	5 stage 5th order	$c_2 \rightarrow 0$
	5 stage 5th order	$c_4 \rightarrow c_5 = 1$
6	6 stage 6th order	$c_2 \rightarrow 0$ and $c_5 \rightarrow c_6 = 1$
7	7 stage 7th order	$c_2 \rightarrow 0, c_3 \rightarrow 0$ and $c_6 \rightarrow c_7 = 1$

これらの極限公式に含まれる微分係数で, $c_2 \rightarrow 0$ および $c_3 \rightarrow 0$ のところに現れるものは通常の微分係数

$$\left. \frac{d^2 y}{dt^2} \right|_{t=t_n} = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f(t_n, y_n) \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n)$$

および

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^3 y}{dt^3} \right|_{t=t_n} &= \frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t_n, y_n) + 2f(t_n, y_n) \frac{\partial^2}{\partial t \partial y} f(t_n, y_n) + f^2(t_n, y_n) \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(t_n, y_n) \\ &\quad + \left. \frac{d^2 y}{dt^2} \right|_{t=t_n} \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n) \end{aligned}$$

であるが, $c_{s-1} \rightarrow c_s = 1$ のところに現れるものは点 $(t_n + c_s h, y_s)$ における微分係数

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t_n + c_s h, y_s) + f(t_n + c_s h, y_s) \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + c_s h, y_s)$$

ではなくて, $\frac{\partial}{\partial y} f(t_n + c_s h, y_s)$ に掛ける $f(t_n + c_s h, y_s)$ の部分が, それまでに計算されている $f_1, f_2, \dots, f_s$ の線形結合

$$d_{s,1}f_1 + d_{s,2}f_2 + \dots + d_{s,s-2}f_{s-2} + d_s f_s$$

になっている. ここで $d_{s,1}, d_{s,2}, \dots, d_s$ は定数である. この形の微分係数が, この後述べるはじめから微分係数を取り入れた形の Runge-Kutta 系公式において重要な役割を果たす.

段数と次数の等しい陽的 Runge-Kutta 公式では, 安定領域が公式の自由パラメタによらず一定である. そこで, 自由パラメタが局所打ち切り誤差の観点から最良となるように選ばれている 5 段 5 次, 6 段 6 次の極限公式を以下に示す.

5 段 5 次極限公式 [13]:

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

$$\begin{aligned}
F_2 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n), \\
f_3 &= f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + h(\frac{1}{2}f_1 + \frac{1}{8}hF_2)), \\
f_4 &= f(t_n + \frac{5}{9}h, y_n + h(\frac{305}{729}f_1 + \frac{125}{1458}hF_2 + \frac{100}{729}f_3)), \\
f_5 &= f(t_n + h, y_n + h(\frac{359}{775}f_1 + \frac{7}{310}hF_2 - \frac{100}{31}f_3 + \frac{2916}{775}f_4)), \\
y_{n+1} &= y_n + h(\frac{233}{750}f_1 + \frac{3}{100}hF_2 - \frac{8}{15}f_3 + \frac{2187}{2000}f_4 + \frac{31}{240}f_5).
\end{aligned}$$

6 段 6 次極限公式 [5] :

$$\begin{aligned}
f_1 &= f(t_n, y_n), \\
F_2 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n), \\
f_3 &= f(t_n + \frac{3}{7}h, y_n + h(\frac{3}{7}f_1 + \frac{9}{98}hF_2)), \\
f_4 &= f(t_n + \frac{4}{7}h, y_n + h(-\frac{4}{189}f_1 - \frac{40}{441}hF_2 + \frac{16}{27}f_3)), \\
y_6 &= y_n + h(\frac{2327}{2376}f_1 + \frac{25}{99}hF_2 - \frac{490}{297}f_3 + \frac{147}{88}f_4), \\
f_6 &= f(t_n + h, y_6), \\
F_5 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + h, y_6) + \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + h, y_6) \\
&\quad \times \left[\frac{317489}{34848}f_1 + \frac{7817}{2904}hF_2 - \frac{51401}{2178}f_3 + \frac{63847}{3872}f_4 - f_6 \right], \\
y_{n+1} &= y_n + h(\frac{1919}{8640}f_1 + \frac{11}{720}hF_2 + \frac{2401}{8640}f_3 + \frac{2401}{8640}f_4 - \frac{11}{720}hF_5 + \frac{1919}{8640}f_6).
\end{aligned}$$

3 極限公式の近似公式

前節の極限公式を見ると、微分係数を含む項は加え合わせる他の項より h 倍だけ小さい。従って、微分係数を含む項の精度は他の項より少なくてもよい。そこで、微分係数の代わりに数値微分を用いることを考え、その際、数値微分による丸め誤差が計算桁の精度内で極限公式の打ち切り誤差より小さくなるように自由パラメタを決める。そのようにして微分係数の計算を避けた公式に近似公式と呼ばれる公式がある。5 段 5 次極限公式と 6 段 6 次極限公式に対して近似公式が得られている [6]。このうち 5 段 5 次極限公式の近似公式は次式で与えられる：

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

$$\begin{aligned}
f_2 &= f(t_n + \epsilon h, y_n + h\epsilon f_1), & F_2 &= \frac{f_2 - f_1}{\epsilon}, \\
f_3 &= f(t_n + \frac{5 - \sqrt{5}}{10}h, y_n + h(\frac{5 - \sqrt{5}}{10}f_1 + \frac{3 - \sqrt{5}}{20}F_2)), \\
f_4 &= f(t_n + \frac{5 + \sqrt{5}}{10}h, y_n + h(-\frac{5 + 3\sqrt{5}}{10}f_1 - \frac{3 + \sqrt{5}}{20}F_2 + \frac{5 + 2\sqrt{5}}{5}f_3)), \\
f_5 &= f(t_n + h, y_n + h((1 + 2\sqrt{5})f_1 + \frac{\sqrt{5}}{2}F_2 - \frac{5 + 3\sqrt{5}}{2}f_3 + \frac{5 - \sqrt{5}}{2}f_4)), \\
y_{n+1} &= y_n + h(\frac{1}{12}f_1 + \frac{5}{12}f_3 + \frac{5}{12}f_4 + \frac{1}{12}f_5).
\end{aligned}$$

ここで ϵ は r 進 q 桁計算刻み幅 h の時,

$$\epsilon = \frac{8}{h}r^{-q/2} = \begin{cases} \frac{1}{33554432h} & (16 \text{ 進 } 14 \text{ 桁計算}) \\ \frac{1}{512h} & (16 \text{ 進 } 6 \text{ 桁計算}) \end{cases}$$

とする.

f の一階の微分係数に対してはこの方式が使えるが, 二階の微分係数に対してはうまくいかない [8]. 従って, 7 段 7 次極限公式に対しては 5 段 5 次極限公式および 6 段 6 次極限公式の近似公式に相当する近似公式を得ることは出来ない. それは次の理由による.

5 段 5 次および 6 段 6 次極限公式の近似公式において, $\frac{d^2 y}{dt^2}\bigg|_{t=t_n}$ を数値微分 F_2 で近似したとき起こる丸め誤差の主要項は最適な ϵ を用いたとき $O(\epsilon h^2)$ である. これを近似誤差と呼び, この F_2 を用いて求めた $f_3, f_4, \dots$ を $\hat{f}_3, \hat{f}_4, \dots$ のように $\hat{}$ をつけて表すことにする. この近似誤差を含んだ $\hat{f}_3, \hat{f}_4, \dots, \hat{y}_{n+1}$ を h のべきで展開し, 極限公式の展開と比較する. $\hat{y}_{n+1}$ の展開は極限公式の展開と近似誤差を含む項の和になる. そこでこの近似誤差を含む項を h のべきについて整頓する. 5 段 5 次極限公式の近似公式では, 残っている二つの自由パラメタの内の一つを用いて近似誤差を含む項の h^0 と h^1 の項の係数を同時に 0 にすることが出来る. また, 6 段 6 次極限公式の近似公式では h^0 の項の係数を 0 にすることが出来る. 従って, 最終的に $\hat{y}_{n+1}$ に含まれる近似による誤差は 5 段 5 次極限公式の近似公式では $O(\epsilon h^4)$, 6 段 6 次極限公式の近似公式のでは $O(\epsilon h^3)$ となり, 計算桁の範囲内で極限公式の打ち切り誤差より十分小さく, 数値的に極限公式と同精度が達成される.

7 段 7 次極限公式では数値微分 F_2 と, $\frac{d^3 y}{dt^3}\bigg|_{t=t_n}$ を数値微分 F_2 を用いた数値微分 $\hat{F}_3$ で置き換え 5 段 5 次公式の場合と同様に展開すると, $\hat{F}_3$ には近似誤差の項の他に h^2 の項がでて来る. 従って最終的な $\hat{y}_{n+1}$ の展開には極限公式の y_n の展開の各項と近似誤差を含む項の他に $h^3, h^4, \dots$ の項がでてくる. 7 段 7 次公式を考えているので少なくとも h^7

の項までそれらの係数を 0 にしなければならない。しかし、自由なパラメタを用いて 0 に出来るのは h^3, h^4, h^5 の項までで h^6 の項の係数を 0 にするように自由パラメタを選ぶことはできず、 h^7 の項の係数は定数である。従って、7 段 7 次極限公式に含まれる微分係数の全てを数値微分で近似すると 5 次公式になってしまう。

7 段 7 次極限公式に含まれる微分係数を数値微分で置き換えたときの公式の精度を表 3 に示す。

表 3 Leading error terms of the seventh-order limiting formulas replaced derivatives with numerical differentiations.

case	numerical differentiation	derivative	leading error term
I	F_2, F_3, F_6	——	$O(h^6)$ (fifth-order formula)
II	F_3, F_6	F_2	$O(h^2 r^{-q/2})$ (considerably large)
III	F_3	F_2, F_6	$O(h^6 r^{-q/2})$ (small enough)

この表から、7 段 7 次極限公式において微分係数を数値微分で代用できるのは f の 1 階の微分係数だけであることが分かる。

4 極限公式型の微分係数を取り入れた Runge-Kutta 公式

前節で微分係数の使用を避ける方法を取りあげたが、最近開発された自動微分法 [1],[10] を用いると、関数計算の手続きだけを与えれば関数計算と同時に微分係数も精度よくしかも数値微分より一般に少ない手間で見られるので、これを積極的に用いる方法を考える。高階の微分係数まで用いる公式としては Taylor 法がある。また、関数値とその分点での微分係数を用いる公式としては新谷の公式が知られている [11]。しかし、 k 次の Taylor 法では打ち切り誤差の主要項は $k+1$ 次の項そのままであるのにたいして k 次の Runge-Kutta の公式では打ち切り誤差の主要項を構成する各項に公式のパラメタによる係数が掛かりこれらの係数は普通 1 に比べて相当小さい。また、自動微分法で高階の微分係数を求める手間は、乗除算の場合、掛け算の回数が階数に比例して増すので高階になるにつれて関数計算より有利とはいえなくなってくる。このような観点から、一階の微分係数だけを取り入れた Runge-Kutta 系の公式について考察する。

4.1 一般形

関数値と極限公式型の微分係数を用いた次の形の Runge-Kutta 系公式を考える：

$$\begin{aligned}
 f_1 &= f(t_n, y_n), \\
 Df_1 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n), \\
 y_k &= y_n + h \sum_{j=1}^{k-1} a_{k,j} f_j + h^2 \sum_{j=1}^{k-1} \alpha_{k,j} Df_j, \\
 f_k &= f(t_n + c_k h, y_k), \\
 \tilde{f}_k &= \sum_{j=1}^k d_{k,j} f_j + h \sum_{j=1}^{k-1} \delta_{k,j} Df_j, \\
 Df_k &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + c_k h, y_k) + \tilde{f}_k \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + c_k h, y_k) \quad (k = 2, 3, \dots, l), \\
 y_{n+1} &= y_n + h \sum_{j=1}^{s_f} b_j f_j + h^2 \sum_{j=1}^{s_d} \beta_j Df_j.
 \end{aligned}$$

到達可能な最高次数の公式となるようにパラメタを決めると、 $s_f = s_d = 1$ のとき、公式は

$$\begin{aligned}
 f_1 &= f(t_n, y_n), \\
 Df_1 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n), \\
 y_{n+1} &= y_n + h f_1 + \frac{1}{2} h^2 Df_1
 \end{aligned}$$

となって 2 次の Taylor 法である。

4.2 $l = 2$ の場合

次に、 $l = 2$ の場合を考察する。この y_{n+1} と真値 $y(t_{n+1})$ の Taylor 展開の各 h のべきについて、微分係数の種類毎の差は以下の通りである：

h の項	$b_1 + b_2$	$-1,$
h^2 の項	$b_2 c_2 + \beta_1 + \beta_2$	$-\frac{1}{2},$
h^3 の項	$\frac{1}{2} b_2 c_2^2 + \beta_2 c_2$	$-\frac{1}{6},$
	$b_2 \alpha_{2,1} + \beta_2 (d_{2,2} c_2 + \delta_{2,1})$	$-\frac{1}{6},$

$$\begin{array}{llll}
h^4 \text{ の項} & \frac{1}{6}b_2c_2^3 & + \frac{1}{2}\beta_2c_2^2 & -\frac{1}{24}, \\
& & \frac{1}{2}\beta_2d_{2,2}c_2^2 & -\frac{1}{24}, \\
& b_2c_2\alpha_{2,1} & + \beta_2(\alpha_{2,1} + c_2(d_{2,2}c_2 + \delta_{2,1})) & -\frac{1}{8}, \\
& & \beta_2d_{2,2}\alpha_{2,1} & -\frac{1}{24}, \\
h^5 \text{ の項} \dots, & & & \\
\dots & & &
\end{array}$$

4.2.1 $s_f = 2, s_d = 1$ のとき

$s_f = 2, s_d = 1$ のとき公式は

$$\begin{aligned}
f_1 &= f(t_n, y_n), \\
Df_1 &= \frac{\partial}{\partial t}f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y}f(t_n, y_n), \\
y_2 &= y_n + ha_{2,1}f_1 + h^2\alpha_{2,1}Df_1, \\
f_2 &= f(t_n + c_2h, y_2), \\
y_{n+1} &= y_n + h(b_1f_1 + b_2f_2) + h^2\beta_1Df_1
\end{aligned}$$

となり，誤差項の係数は h^3 の項まで 0 にすることができる．パラメタは上の条件式で $\beta_2 = 0$ とおくと c_2 を自由パラメタとして

$$a_{2,1} = c_2, \quad \alpha_{2,1} = \frac{c_2^2}{2}, \quad b_2 = \frac{1}{3c_2^2}, \quad b_1 = 1 - b_2, \quad \beta_1 = \frac{1}{2} - b_2c_2$$

となる．

4.2.2 $s_f = s_d = 2$ のとき

$s_f = s_d = 2$ のとき公式は

$$\begin{aligned}
f_1 &= f(t_n, y_n), \\
Df_1 &= \frac{\partial}{\partial t}f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y}f(t_n, y_n), \\
y_2 &= y_n + ha_{2,1}f_1 + h^2\alpha_{2,1}Df_1, \\
f_2 &= f(t_n + c_2h, y_2), \\
\tilde{f}_2 &= d_{2,1}f_1 + d_{2,2}f_2 + h\delta_{2,1}Df_1,
\end{aligned}$$

$$Df_2 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + c_2 h, y_2) + \tilde{f}_2 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + c_2 h, y_2),$$

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 f_1 + b_2 f_2) + h^2(\beta_1 Df_1 + \beta_2 Df_2)$$

で、誤差項の係数は h^4 の項まですべて 0 にすることができる。しかも自由なパラメタが一つ残る。すなわち解は c_2 を自由パラメタとして

$$a_{2,1} = c_2, \quad \alpha_{2,1} = \frac{c_2^2}{2}, \quad d_{2,2} = \frac{1}{3-4c_2}, \quad b_2 = \frac{2c_2-1}{2c_2^3}, \quad \beta_2 = \frac{3-4c_2}{12c_2^2},$$

$$\delta_{2,1} = c_2(1-d_{2,2}), \quad d_{2,1} = 1-d_{2,2}, \quad b_1 = 1-b_2, \quad \beta_1 = \frac{1}{2} - b_2 c_2 - \beta_2$$

と表される。

自由に選べるパラメタが残ることが 4.2.3 で導く公式に重要な役割を果たす。これは Df_2 を求める際 $\frac{\partial f}{\partial y}$ に掛けるのが f_2 ではなくて、それまでに計算されている全ての f と Df の線形結合 $\tilde{f}_2$ を用いたために得られるものである。通常の f_2 を用いるものは誤差項の式で $d_{2,2} = 1, \delta_{2,1} = 0$, 解の式で $c_2 = 1/2$ とおいたものになる。すなわち解は

$$c_2 = \frac{1}{2}, \quad a_{2,1} = \frac{1}{2}, \quad \alpha_{2,1} = \frac{1}{8}, \quad b_1 = 1, \quad b_2 = 0, \quad \beta_1 = \frac{1}{6}, \quad \beta_2 = \frac{1}{3}$$

となり、4 次公式ではあるが自由なパラメタは残らない。 $\tilde{f}_2$ を用いた微分係数 Df_2 を自動微分法で求めるには、いくつか発表されているルーチン [4],[15] で微分係数の計算を行う手続きの初期設定の f_2 を $\tilde{f}_2$ で置き換えるだけなので手間は殆ど変わらず全く問題はない。

4.2.3 2 段埋め込み型 3-4 次公式

残されている自由パラメタの決め方としてはいろいろ考えられるが、ここでは、低次の公式と組み合わせたいわゆる埋め込み型公式で、打ち切り誤差のなるべく小さいものを求める。4.2.2 で導いた 4 次公式の打ち切り誤差の主要項 $O(h^5)$ の誤差項の係数は、次の 9 式である（連立方程式のとき）：

$$\begin{aligned} D^4 f \quad \text{の係数} \quad \Delta_{5,1} &= -\frac{10c_2^2 - 15c_2 + 6}{720}, \\ Df \cdot D^2 f_y \quad \text{の係数} \quad \Delta_{5,2} &= -\frac{10c_2^2 - 15c_2 + 6}{120}, \\ D^2 f \cdot Df_y \quad \text{の係数} \quad \Delta_{5,3} &= \frac{5c_2 - 4}{120}, \\ D^2 f \cdot f_y^2 \quad \text{の係数} \quad \Delta_{5,4} &= -\frac{1}{120}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(Df)^2 \cdot f_{yy} \text{ の係数 } \Delta_{5,5} &= -\frac{10c_2^2 - 15c_2 + 6}{240}, \\
Df \cdot Df_y \cdot f_y \text{ の係数 } \Delta_{5,6}^{(1)} &= \frac{5c_2 - 3}{120}, \\
Df \cdot f_y \cdot Df_y \text{ の係数 } \Delta_{5,6}^{(2)} &= \frac{5c_2 - 4}{120}, \\
D^3f \cdot f_y \text{ の係数 } \Delta_{5,7} &= \frac{5c_2 - 3}{360}, \\
Df \cdot f_y^3 \text{ の係数 } \Delta_{5,8} &= -\frac{1}{120}.
\end{aligned}$$

ここで $D^k f = (\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial y})^k f$, $f_y = \frac{\partial f}{\partial y}$ である. 組み合わせる 3 次公式の打ち切り誤差の主要項 $O(h^4)$ の誤差項の係数は

$$\begin{aligned}
D^3f \text{ の係数 } \Delta_{4,1} &= \frac{4c_2 - 3}{72}, \\
Df \cdot Df_y \text{ の係数 } \Delta_{4,2} &= \frac{4c_2 - 3}{24}, \\
D^2f \cdot f_y \text{ の係数 } \Delta_{4,3} &= -\frac{1}{24}, \\
Df \cdot f_y^2 \text{ の係数 } \Delta_{4,4} &= -\frac{1}{24}
\end{aligned}$$

で, このうち定数でない 2 項は $c_2 = 3/4$ で 0 になる. 4 次公式の $O(h^5)$ の誤差項の係数で定数でない 7 項の全体としての誤差の大きさを尺度 $\sum \Delta_{5,j}^2$ で見積り, 最小となる c_2 を求めると $c_2 \approx .7309$ で $3/4$ に近いが, $c_2 = 3/4$ のとき, 4 次公式のパラメタ $d_{2,2}, \delta_{2,1}$ は計算できない. しかし, これらのパラメタは $\tilde{f}_2$ の計算の所で使われているが, 最終的な y_{n+1} の中で $\beta_2 Df_2$ の係数のところに現れるだけである.

$$\beta_2 Df_2 = \beta_2 \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + c_2 h, y_2) + (\beta_2 d_{2,1} f_1 + \beta_2 d_{2,2} f_2 + h \beta_2 \delta_{2,1} Df_1) \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + c_2 h, y_2)$$

なのでこれらの係数をまとめて計算すると

$$\beta_2 d_{2,2} = \frac{1}{12c_2^2}, \quad \beta_2 d_{2,1} = \frac{1 - 2c_2}{6c_2^2}, \quad \beta_2 \delta_{2,1} = \frac{1 - 2c_2}{6c_2}$$

となる. $c_2 = 3/4$ のときは $\beta_2 = 0$ となるだけでなく,

$$3 \text{ 次公式の } b_2 = \frac{1}{3c_2^2} = \frac{16}{27}, \quad 4 \text{ 次公式の } b_2 = \frac{2c_2 - 1}{2c_2^3} = \frac{16}{27}$$

となって, 両公式の b_2 従って b_1, β_1 も等しくなる. そこで 4 次公式の y_{n+1} の値は 3 次公式の y_{n+1} の値に

$$(\beta_2 d_{2,1} f_1 + \beta_2 d_{2,2} f_2 + h \beta_2 \delta_{2,1} Df_1) \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + c_2 h, y_2)$$

の値を加えれば得られ、この値が3次公式の誤差の主要項になっているので、非常に簡単に3次公式の誤差の見積が得られる。

極限公式型の微分係数を取り入れた埋め込み型3-4次公式は次のものでこれを[DRK234]公式と呼ぶ[9]：

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned}
 & f_1 = f(t_n, y_n), \\
 & Df_1 = \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n), \\
 & y_2 = y_n + \frac{3}{4}h f_1 + \frac{9}{32}h^2 Df_1, \\
 & f_2 = f(t_n + \frac{3}{4}h, y_2), \\
 & \hat{y}_{n+1} = y_n + h(\frac{11}{27}f_1 + \frac{16}{27}f_2) + \frac{1}{18}h^2 Df_1, \\
 & E_3 = h^2(\frac{4}{27}(f_2 - f_1) - \frac{1}{9}h Df_1) \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + \frac{3}{4}h, y_2), \\
 & y_{n+1} = \hat{y}_{n+1} + E_3.
 \end{aligned} \right\} \begin{aligned}
 & \\
 & \\
 & \\
 & \\
 & \\
 & \text{(3 次公式)} \\
 & \text{(4 次公式)}
 \end{aligned}
 \end{aligned}$$

4次公式の打ち切り誤差の係数の大きさを、[DRK234]、古典的 Runge-Kutta 公式、Fehlberg [3] と Verner [14] のそれぞれ埋め込み型公式の中の5段数3-4次公式とについて二乗和の平均の平方根を尺度として比較したものを表4に示す。

表4 Comparison of the magnitude $\sqrt{\sum \Delta_{k,j}^2 / (\text{the number of terms})}$ in fourth order formulas.

	classical Runge-Kutta	DRK234		Fehlberg (five stage)		Verner (five stage)	
		3	4	3	4	3	4
$O(h^4)$	0	.295 ₁₀ - 1	0	.228 ₁₀ - 2	0	.134 ₁₀ - 1	0
$O(h^5)$	.483 ₁₀ - 2	.185 ₁₀ - 1	.475 ₁₀ - 2	.435 ₁₀ - 2	.304 ₁₀ - 2	.113 ₁₀ - 1	.416 ₁₀ - 3
$O(h^6)$	.359 ₁₀ - 2	.877 ₁₀ - 2	.345 ₁₀ - 2	.308 ₁₀ - 2	.222 ₁₀ - 2	.628 ₁₀ - 2	.121 ₁₀ - 2

この表から分かるように[DRK234]の4次公式の誤差はFehlbergやVernerの5段数の公式と比べてもそれほど大きくはなく、古典的 Runge-Kutta の公式とほぼ同程度である。組み合わせた3次公式の誤差はFehlbergやVernerのものよりは大きい。FehlbergやVernerの公式が5段数であることを考慮すると手間の面で[DRK234]のほうが有利であろう。また、誤差推定に関していえば、 f が y を含まない(数値積分の)ときには

$f_y = 0$ なので係数が 0 でない 3 次公式の二つの誤差項の微分係数 $D^2 f \cdot f_y$ と $Df \cdot f_y^2$ はともに 0 になり誤差推定がうまく働かないが, f が y を含めば $Df \cdot f_y^2$ の項は必ず残るので $D^2 f \cdot f_y$ の項と加え合わせてちょうど 0 になる特殊な例を除けばうまく働くであろう.

4.3 $l = 3$ の場合

4.1 の一般形で $l = 3$ の場合を考察する. 4 次以下の誤差項の係数が 0 となるために必要な条件

$$\begin{aligned} d_{2,1} + d_{2,2} &= 1, & d_{3,1} + d_{3,2} + d_{3,3} &= 1, \\ d_{2,2}c_2 + \delta_{2,1} &= c_2, & d_{3,2}c_2 + d_{3,3}c_3 + \delta_{3,1} + \delta_{3,2} &= c_3, \\ a_{2,1} &= c_2, & a_{3,1} + a_{3,2} &= c_3, \\ \alpha_{2,1} &= \frac{c_2^2}{2}, & a_{3,2}c_2 + \alpha_{3,1} + \alpha_{3,2} &= \frac{1}{2}c_3^2 \end{aligned}$$

を用いて簡単化した誤差項の係数を以下に示す:

$$\begin{aligned} h \text{ の項 } & b_1 + b_2 + b_3 & -1, \\ h^2 \text{ の項 } & b_2c_2 + b_3c_3 + \beta_1 + \beta_2 + \beta_3 & -\frac{1}{2}, \\ h^3 \text{ の項 } & \frac{1}{2}b_2c_2^2 + \frac{1}{2}b_3c_3^2 + \beta_2c_2 + \beta_3c_3 & -\frac{1}{6}, \\ h^4 \text{ の項 } & \frac{1}{6}b_2c_2^3 + \frac{1}{6}b_3c_3^3 + \frac{1}{2}\beta_2c_2^2 + \frac{1}{2}\beta_3c_3^2 & -\frac{1}{24}, \\ & b_3\left(\frac{1}{2}a_{3,2}c_2^2 + \alpha_{3,2}c_2\right) + \frac{1}{2}\beta_2d_{2,2}c_2^2 + \beta_3\left(\frac{1}{2}(d_{3,2}c_2^2 + d_{3,3}c_3^2) + \delta_{3,2}c_2\right) & -\frac{1}{24}, \\ h^5 \text{ の項 } & \frac{1}{24}b_2c_2^4 + \frac{1}{24}b_3c_3^4 + \frac{1}{6}\beta_2c_2^3 + \frac{1}{6}\beta_3c_3^3 & -\frac{1}{120}, \\ & b_3\left(\frac{1}{6}a_{3,2}c_2^3 + \frac{1}{2}\alpha_{3,2}c_2^2\right) + \frac{1}{6}\beta_2d_{2,2}c_2^3 & \\ & + \beta_3\left(\frac{1}{6}(d_{3,2}c_2^3 + d_{3,3}c_3^3) + \frac{1}{2}\delta_{3,2}c_2^2\right) & -\frac{1}{120}, \\ & b_3c_3\left(\frac{1}{2}a_{3,2}c_2^2 + \alpha_{3,2}c_2\right) + \frac{1}{2}\beta_2d_{2,2}c_2^3 & \\ & + \beta_3\left(\frac{1}{2}a_{3,2}c_2^2 + \alpha_{3,2}c_2 + c_3\left(\frac{1}{2}(d_{3,2}c_2^2 + d_{3,3}c_3^2) + \delta_{3,2}c_2\right)\right) & -\frac{1}{30}, \\ & \frac{1}{2}b_3a_{3,2}d_{2,2}c_2^2 + \beta_3\left(d_{3,3}\left(\frac{1}{2}a_{3,2}c_2^2 + \alpha_{3,2}c_2\right) + \frac{1}{2}\delta_{3,2}d_{2,2}c_2^2\right) & -\frac{1}{120}, \\ h^6 \text{ の項 } & \frac{1}{120}b_2c_2^5 + \frac{1}{120}b_3c_3^5 + \frac{1}{24}\beta_2c_2^4 + \frac{1}{24}\beta_3c_3^4 & -\frac{1}{720}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& b_3 \left(\frac{1}{24} a_{3,2} c_2^4 + \frac{1}{6} \alpha_{3,2} c_2^3 \right) + \frac{1}{24} \beta_2 d_{2,2} c_2^4 \\
& \quad + \beta_3 \left(\frac{1}{24} (d_{3,2} c_2^4 + d_{3,3} c_3^4) + \frac{1}{6} \delta_{3,2} c_2^3 \right) - \frac{1}{720}, \\
& \frac{1}{2} b_3 c_3^2 \left(\frac{1}{2} a_{3,2} c_2^2 + \alpha_{3,2} c_2 \right) + \frac{1}{4} \beta_2 d_{2,2} c_2^4 \\
& \quad + \beta_3 c_3 \left(\frac{1}{2} a_{3,2} c_2^2 + \alpha_{3,2} c_2 + \frac{1}{2} c_3 \left(\frac{1}{2} (d_{3,2} c_2^2 + d_{3,3} c_3^2) + \delta_{3,2} c_2 \right) \right) - \frac{1}{72}, \\
& b_3 c_3 \left(\frac{1}{6} a_{3,2} c_2^3 + \frac{1}{2} \alpha_{3,2} c_2^2 \right) + \frac{1}{6} \beta_2 d_{2,2} c_2^4 \\
& \quad + \beta_3 \left(\frac{1}{6} a_{3,2} c_2^3 + \frac{1}{2} \alpha_{3,2} c_2^2 + c_3 \left(\frac{1}{6} (d_{3,2} c_2^3 + d_{3,3} c_3^3) + \frac{1}{2} \delta_{3,2} c_2^2 \right) \right) - \frac{1}{144}, \\
& \frac{1}{2} b_3 c_3 \alpha_{3,2} d_{2,2} c_2^2 \\
& \quad + \beta_3 \left(\frac{1}{2} \alpha_{3,2} d_{2,2} c_2^2 + c_3 (d_{3,3} \left(\frac{1}{2} a_{3,2} c_2^2 + \alpha_{3,2} c_2 \right) + \frac{1}{2} \delta_{3,2} d_{2,2} c_2^2) \right) - \frac{1}{144}, \\
& \frac{1}{6} b_3 \alpha_{3,2} d_{2,2} c_2^3 + \beta_3 (d_{3,3} \left(\frac{1}{6} a_{3,2} c_2^3 + \frac{1}{2} \alpha_{3,2} c_2^2 \right) + \frac{1}{6} \delta_{3,2} d_{2,2} c_2^3) - \frac{1}{720}, \\
& \frac{1}{2} b_3 \alpha_{3,2} d_{2,2} c_2^3 + \beta_3 (d_{3,3} c_3 \left(\frac{1}{2} a_{3,2} c_2^2 + \alpha_{3,2} c_2 \right) + \frac{1}{2} \delta_{3,2} d_{2,2} c_2^2) - \frac{1}{180}, \\
& \quad \frac{1}{2} \beta_3 d_{3,3} \alpha_{3,2} d_{2,2} c_2^2 - \frac{1}{720},
\end{aligned}$$

h^7 の項 …,

…

また公式に用いる関数値は次の値である：

$$\begin{aligned}
f_1 &= f(t_n, y_n), \\
Df_1 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n), \\
y_2 &= y_n + h a_{2,1} f_1 + h^2 \alpha_{2,1} Df_1, \\
f_2 &= f(t_n + c_2 h, y_2), \\
\tilde{f}_2 &= d_{2,1} f_1 + d_{2,2} f_2 + h \delta_{2,1} Df_1, \\
Df_2 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + c_2 h, y_2) + \tilde{f}_2 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + c_2 h, y_2), \\
y_3 &= y_n + h(a_{3,1} f_1 + a_{3,2} f_2) + h^2(\alpha_{3,1} Df_1 + \alpha_{3,2} Df_2), \\
f_3 &= f(t_n + c_3 h, y_3), \\
\tilde{f}_3 &= d_{3,1} f_1 + d_{3,2} f_2 + d_{3,3} f_3 + h(\delta_{3,1} Df_1 + \delta_{3,2} Df_2), \\
Df_3 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + c_3 h, y_3) + \tilde{f}_3 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + c_3 h, y_3).
\end{aligned}$$

4.3.1 $s_f = 3, s_d = 2$ のとき

$s_f = 3, s_d = 2$ のとき, $f_1, Df_1, f_2, Df_2, f_3$ を用いて

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 f_1 + b_2 f_2 + b_3 f_3) + h^2(\beta_1 Df_1 + \beta_2 Df_2)$$

で近似すると, 誤差項の係数は h^5 の項まで 0 にすることができて, $\beta_3 = 0$ とおいた条件式の解は一つの自由パラメタ c_2 を用いて次のように表される:

$$\begin{aligned} c_3 &= 1, \quad a_{2,1} = c_2, \quad \alpha_{2,1} = \frac{c_2^2}{2}, \quad d_{2,2} = \frac{1}{3-5c_2}, \quad \alpha_{3,2} = \frac{(1-c_2)^2(3-5c_2)}{2c_2^2(10c_2^2-15c_2+6)}, \\ b_2 &= \frac{-10c_2^2+12c_2-3}{30c_2^3(1-c_2)^2}, \quad b_3 = \frac{10c_2^2-15c_2+6}{30(1-c_2)^2}, \quad \beta_2 = \frac{3-5c_2}{60c_2^2(1-c_2)}, \\ a_{3,2} &= \frac{2}{c_2^2} \left(\frac{(1-c_2)(4-5c_2)}{4(10c_2^2-15c_2+6)} - \alpha_{3,2}c_2 \right), \quad a_{3,1} = 1 - a_{3,2}, \quad \alpha_{3,1} = \frac{1}{2} - a_{3,2}c_2 - \alpha_{3,2}, \\ \delta_{2,1} &= c_2(1-d_{2,2}), \quad d_{2,1} = 1 - d_{2,2}, \quad b_1 = 1 - b_2 - b_3, \quad \beta_1 = \frac{1}{2} - b_2c_2 - b_3 - \beta_2. \end{aligned}$$

4.3.2 $s_f = 3, s_d = 3$ のとき

$s_f = 3, s_d = 3$ のとき, $f_1, Df_1, f_2, Df_2, f_3, Df_3$ を用いて

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 f_1 + b_2 f_2 + b_3 f_3) + h^2(\beta_1 Df_1 + \beta_2 Df_2 + \beta_3 Df_3)$$

で近似すると, 誤差項の係数は h^6 の項まで 0 にすることができて, 条件式の解はこのときも一つの自由パラメタ c_2 を持つ. 他のパラメタは次のように表される:

$$\begin{aligned} c_3 &= 1, \quad a_{2,1} = c_2, \quad \alpha_{2,1} = \frac{c_2^2}{2}, \\ d_{3,3} &= -1, \quad d_{2,2} = \frac{1}{3(1-2c_2)}, \quad \alpha_{3,2} = \frac{(1-2c_2)(1-c_2)^2}{2c_2^2(5c_2^2-6c_2+2)}, \\ b_2 &= \frac{-5c_2^2+5c_2-1}{30c_2^3(1-c_2)^3}, \quad b_3 = \frac{-15c_2^3+41c_2^2-35c_2+10}{30(1-c_2)^3}, \\ \beta_2 &= \frac{1-2c_2}{60c_2^2(1-c_2)^2}, \quad \beta_3 = \frac{-5c_2^2+6c_2-2}{60(1-c_2)^2}, \\ a_{3,2} &= \frac{2}{c_2^2} \left(\frac{(2-3c_2)(1-c_2)}{6(5c_2^2-6c_2+2)} - \alpha_{3,2}c_2 \right), \quad \delta_{3,2} = \frac{1}{\beta_3} \left(\frac{1-2c_2}{60c_2^2(1-c_2)} - b_3\alpha_{3,2} \right), \\ d_{3,2} &= \frac{1}{\beta_3} \left(\frac{-8c_2^2+9c_2-2}{60c_2^3(1-c_2)^2} - b_3a_{3,2} - \beta_2d_{2,2} \right), \\ \alpha_{3,1} &= \frac{1}{2} - a_{3,2}c_2 - \alpha_{3,2}, \quad a_{3,1} = 1 - a_{3,2}, \quad \delta_{3,1} = 2 - d_{3,2}c_2 - \delta_{3,2}, \quad d_{3,1} = 2 - d_{3,2}, \\ \delta_{2,1} &= c_2(1-d_{2,2}), \quad d_{2,1} = 1 - d_{2,2}, \\ b_1 &= 1 - b_2 - b_3, \quad \beta_1 = \frac{1}{2} - b_2c_2 - b_3 - \beta_2 - \beta_3. \end{aligned}$$

4.3.3 5 次および 6 次の公式

パラメタ $d_{2,2}$ は $\tilde{f}_2$ の計算に用いられる. 4 次以上の公式では Df_2 はそれ以降の全ての関数計算の y 座標の計算に用いられるので, 埋め込み型の公式を得るためにはこの $d_{2,2}$ が同じでなければならない. ところが,

$$4 \text{ 次公式の } d_{2,2} = \frac{1}{3-4c_2}, \quad 5 \text{ 次公式の } d_{2,2} = \frac{1}{3-5c_2}, \quad 6 \text{ 次公式の } d_{2,2} = \frac{1}{3-6c_2}$$

なので, どの二つも同時に成り立つように $c_2 \neq 0$ を選ぶことはできない. 従って, 4.2.3 の [DRK234] のような公式は作れないことが分かる.

打ち切り誤差の観点から推奨される公式を示すにとどめる.

5 次公式 ($c_2 = 1/2$ に選んだもの):

$$\begin{aligned} f_1 &= f(t_n, y_n), \\ Df_1 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n), \\ y_2 &= y_n + \frac{1}{2} h f_1 + \frac{1}{8} h^2 Df_1, \\ f_2 &= f(t_n + \frac{1}{2} h, y_2), \\ \tilde{f}_2 &= -f_1 + 2f_2 - \frac{1}{2} h Df_1, \\ Df_2 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + \frac{1}{2} h, y_2) + \tilde{f}_2 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + \frac{1}{2} h, y_2), \\ y_3 &= y_n + \frac{1}{2} h (f_1 + f_2) + \frac{1}{4} h^2 Df_2, \\ f_3 &= f(t_n + h, y_3), \\ y_{n+1} &= y_n + h \left(\frac{1}{3} f_1 + \frac{8}{15} f_2 + \frac{2}{15} f_3 \right) + h^2 \left(\frac{1}{30} Df_1 + \frac{1}{15} Df_2 \right). \end{aligned}$$

6 次公式 ($c_2 = 3/7$ に選んだもの):

$$\begin{aligned} f_1 &= f(t_n, y_n), \\ Df_1 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n, y_n) + f_1 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n, y_n), \\ y_2 &= y_n + \frac{3}{7} h f_1 + \frac{9}{98} h^2 Df_1, \\ f_2 &= f(t_n + \frac{3}{7} h, y_2), \\ \tilde{f}_2 &= -\frac{4}{3} f_1 + \frac{7}{3} f_2 - \frac{4}{7} h Df_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Df_2 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + \frac{3}{7}h, y_2) + \tilde{f}_2 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + \frac{3}{7}h, y_2), \\
y_3 &= y_n + h(\frac{263}{459}f_1 + \frac{196}{459}f_2) + h^2(-\frac{15}{306}Df_1 + \frac{56}{153}Df_2), \\
f_3 &= f(t_n + h, y_3), \\
\tilde{f}_3 &= \frac{40204}{7803}f_1 - \frac{24598}{7803}f_2 - f_3 + h(-\frac{916}{2601}Df_1 + \frac{9632}{2601}Df_2), \\
Df_3 &= \frac{\partial}{\partial t} f(t_n + h, y_3) + \tilde{f}_3 \frac{\partial}{\partial y} f(t_n + h, y_3), \\
y_{n+1} &= y_n + h(\frac{101}{405}f_1 + \frac{26411}{51840}f_2 + \frac{463}{1920}f_3) + h^2(\frac{1}{54}Df_1 + \frac{343}{8640}Df_2 - \frac{17}{960}Df_3).
\end{aligned}$$

5 微分係数の計算法

今まで述べてきた公式に含まれている微分係数 Df_1, Df_2 の計算には、伊理[1], Rall[10] らにより提案された自動微分法を用いる。 m 個の連立方程式のとき、個々の関数を $f^{(1)}, f^{(2)}, \dots, f^{(m)}$ で、従属変数を $y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(m)}$ で表す。独立変数 t 及び $y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(m)}$ から $f^{(1)}, f^{(2)}, \dots, f^{(m)}$ を計算する過程を単項及び二項の基本演算（四則および組み込み関数）に分解する。この時分解した個々の基本演算の結果として得られる値を中間変数 $v(1), v(2), \dots, v(l)$ ，その中間変数を得る基本演算に用いた一個または二個の中間変数に関する偏導関数を要素的偏導関数という。 $t, y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(m)}, v(1), v(2), \dots, v(l), f^{(1)}, f^{(2)}, \dots, f^{(m)}$ に対して、 t に関する微分係数を入れる場所 $D(t), D(y^{(1)}), \dots, D(y^{(m)}), D(1), D(2), \dots, D(l), D(f^{(1)}), D(f^{(2)}), \dots, D(f^{(m)})$ を用意する。必要なものは個々の偏微分係数ではなくて Jacobi 行列とベクトル $(1, f^{(1)}, \dots, f^{(m)})^t$ の積

$$\left. \frac{df^{(1)}}{dt} \right|_{t=t_n} = \left. \frac{d^2y^{(1)}}{dt^2} \right|_{t=t_n}, \quad \left. \frac{df^{(2)}}{dt} \right|_{t=t_n} = \left. \frac{d^2y^{(2)}}{dt^2} \right|_{t=t_n}, \quad \dots, \quad \left. \frac{df^{(m)}}{dt} \right|_{t=t_n} = \left. \frac{d^2y^{(m)}}{dt^2} \right|_{t=t_n}$$

である。従って、入力変数の側から計算過程を順に辿ればよい [2]。即ち、まず、 $t, y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(m)}$ に $t_n, y_n^{(1)}, y_n^{(2)}, \dots, y_n^{(m)}$ を入れ、計算過程を $v(1), v(2), \dots, v(l)$ の順に辿って $f^{(1)}, f^{(2)}, \dots, f^{(m)}$ まで計算する。得られた関数値 $f^{(1)}, f^{(2)}, \dots, f^{(m)}$ が $\left. \frac{dy^{(1)}}{dt} \right|_{t=t_n}, \left. \frac{dy^{(2)}}{dt} \right|_{t=t_n}, \dots, \left. \frac{dy^{(m)}}{dt} \right|_{t=t_n}$ である。次に微分係数の計算の初期設定として、 $D(t), D(y^{(1)}), D(y^{(2)}), \dots, D(y^{(m)})$ に $1, f^{(1)}, f^{(2)}, \dots, f^{(m)}$ の値を入れ、 $D(1)$ には $v(1)$ を求めるのに用いた一つ（単項演算のとき）または二つ（二項演算のとき）の値の所にある $D(\)$ の値と要素的偏導関数の積（単項演算のとき）または積和（二項演算のとき）を入れる。 $D(2), \dots, D(l), D(f^{(1)}), D(f^{(2)}), \dots, D(f^{(m)})$ についても全く同様に計算する。 $D(f^{(1)}), D(f^{(2)}), \dots,$

$D(f^{(m)})$ の値が $Df_1^{(1)}$ 即ち $\frac{d^2 y^{(1)}}{dt^2} \Big|_{t=t_n}$, $Df_1^{(2)}$ 即ち $\frac{d^2 y^{(2)}}{dt^2} \Big|_{t=t_n}$, $\dots$, $Df_1^{(m)}$ 即ち $\frac{d^2 y^{(m)}}{dt^2} \Big|_{t=t_n}$ である。中間変数に対する $D(\cdot)$ の具体的な計算を表 5 に示す。

例として、次の連立微分方程式に対する計算グラフを図 1 に、計算過程を図 2 に示す。

$$\begin{aligned} \text{例} \quad \frac{dx}{dt} &= .01 - (.01 + x + y)[1 + (x + 1000)(x + 1)], \\ \frac{dy}{dt} &= .01 - (.01 + x + y)(1 + y^2), \\ x(0) &= y(0) = 0, \quad 0 \leq x \leq 100. \end{aligned}$$

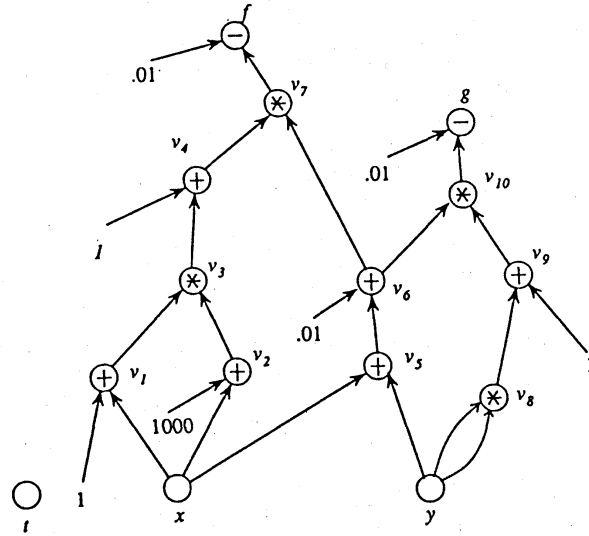


図 1 Computational graph for the example.

$v_1 := x + 1$	$D(1) := D(x)$
$v_2 := x + 1000$	$D(2) := D(x)$
$v_3 := v_1 * v_2$	$D(3) := v_2 * D(1) + v_1 * D(2)$
$v_4 := v_3 + 1$	$D(4) := D(3)$
$v_5 := x + y$	$D(5) := D(x) + D(y)$
$v_6 := v_5 + .01$	$D(6) := D(5)$
$v_7 := v_4 * v_6$	$D(7) := v_6 * D(4) + v_4 * D(6)$
$f := .01 - v_7$	$D(f) := -D(7)$
$v_8 := y * y$	$D(8) := 2 * y * D(y)$
$v_9 := v_8 + 1$	$D(9) := D(8)$
$v_{10} := v_6 * v_9$	$D(10) := v_9 * D(6) + v_6 * D(9)$
$g := .01 - v_{10}$	$D(g) := -D(10)$

図 2 Computational scheme for the example.

表 5 Derivatives for basic operations.

w	$\frac{dw}{dx}$	$\frac{d^2w}{dx^2}$	$\frac{d^3w}{dx^3}$	operation counts		
				w, $\frac{dw}{dx}$	w, $\frac{dw}{dx}$, $\frac{d^2w}{dx^2}$	w, $\frac{dw}{dx}$, $\frac{d^2w}{dx^2}$, $\frac{d^3w}{dx^3}$
$u \pm v$	$\frac{du}{dx} \pm \frac{dv}{dx}$	$\frac{d^2u}{dx^2} \pm \frac{d^2v}{dx^2}$	$\frac{d^3u}{dx^3} \pm \frac{d^3v}{dx^3}$	2A	3A	4A
$u \cdot v$	$\frac{du}{dx}v + \frac{dv}{dx}u$	$\frac{d^2u}{dx^2}v + 2\frac{du}{dx}\frac{dv}{dx} + u\frac{d^2v}{dx^2}$	$\frac{d^3u}{dx^3}v + 3\frac{d^2u}{dx^2}\frac{dv}{dx} + 3\frac{du}{dx}\frac{d^2v}{dx^2} + u\frac{d^3v}{dx^3}$	3M + 1A	6M + 4A	11M + 7A
$\frac{u}{v}$	$\left(\frac{du}{dx} - w\frac{dv}{dx}\right)\frac{1}{v}$	$\left(\frac{d^2u}{dx^2} - 2\frac{dw}{dx}\frac{dv}{dx} - w\frac{d^2v}{dx^2}\right)\frac{1}{v}$	$\left(\frac{d^3u}{dx^3} - 3\frac{d^2w}{dx^2}\frac{dv}{dx} - 3\frac{dw}{dx}\frac{d^2v}{dx^2} - w\frac{d^3v}{dx^3}\right)\frac{1}{v}$	1D + 3M + 1A	1D + 6M + 4A	1D + 11M + 7A
e^u	$w\frac{du}{dx}$	$\frac{dw}{dx}\frac{du}{dx} + w\frac{d^2u}{dx^2}$	$\frac{d^2w}{dx^2}\frac{du}{dx} + 2\frac{dw}{dx}\frac{d^2u}{dx^2} + w\frac{d^3u}{dx^3}$	1T + 1M	1T + 3M + 1A	1T + 6M + 4A
$\sin u$	$\cos u \left\{ \frac{du}{dx} \right\}$	$-w\left(\frac{du}{dx}\right)^2 + \cos u \left\{ \frac{d^2u}{dx^2} \right\}$	$-\left(\frac{dw}{dx}\frac{du}{dx} + 3w\frac{d^2u}{dx^2}\right)\frac{du}{dx} + \cos u \left\{ \frac{d^3u}{dx^3} \right\}$	2T + 1M	2T + 4M + 1A	2T + 9M + 3A
$\cos u$	$-\sin u \left\{ \frac{du}{dx} \right\}$	$-\sin u \left\{ \frac{d^2u}{dx^2} \right\}$	$-\sin u \left\{ \frac{d^3u}{dx^3} \right\}$			
$\log u$	$\frac{1}{u} \cdot \frac{du}{dx}$	$\left(\frac{d^2u}{dx^2} - \frac{dw}{dx}\frac{du}{dx}\right)\frac{1}{u}$	$\left(\frac{d^3u}{dx^3} - 2\frac{d^2w}{dx^2}\frac{du}{dx} - \frac{dw}{dx}\frac{d^2u}{dx^2}\right)\frac{1}{u}$	1T + 1D	1T + 1D + 3M + 1A	1T + 1D + 6M + 4A
$\sqrt{u}$	$\frac{1}{2w} \cdot \frac{du}{dx}$	$\left(\frac{d^2u}{dx^2} - 2\left(\frac{dw}{dx}\right)^2\right)\frac{1}{2w}$	$\left(\frac{d^3u}{dx^3} - 6\frac{d^2w}{dx^2}\frac{dw}{dx}\right)\frac{1}{2w}$	1T + 1D + 1A	1T + 1D + 2M + 3A	1T + 1D + 5M + 4A

A... addition/subtraction, M... multiplication, D... division, T... other operations.

この例に, [DRK234] を用いる場合は次のように計算すればよい. まず1段目は, t, x, y に t_n, x_n, y_n を入れ, 計算過程を順に辿って $v(1), v(2), \dots, g$ まで計算する. 次に $D(t), D(x), D(y)$ に, $1, f, g$ の値を入れ $D(1), D(2), \dots, D(g)$ を順に計算する. $D(f)$ の値が Df_1 , $D(g)$ の値が Dg_1 である. 次に2段目の $t_n + c_2h$ に対しては微分係数の計算のとき, $D(t)$ には0を, $D(x)$ には $\frac{4}{27}(f_2 - f_1) - \frac{1}{9}hDf_1$ を, $D(y)$ には $\frac{4}{27}(g_2 - g_1) - \frac{1}{9}hDg_1$ を入れて1段目と同様に計算する. $D(f), D(g)$ の値が $E_3^{(x)}, E_3^{(y)}$ の値である.

6 おわりに

自動微分法で微分係数を計算するのに用いる基本演算に対する要素的偏導関数は, 表5からわかるように $\sin$ と $\cos$ を除けば, 関数計算を行う際得られる中間変数の値なので計算の手間は2数の積だけで関数計算よりはるかに少ない手間で済む. また, 例題からもわかるように, ただ置き換えたり符号を変えるだけで, 実質的に計算しないところや, 直接つながっていない中間変数の値が利用できるところもある. 図2では説明用に全部書いてあるが, このようなものを検出縮約して効率よく計算するプログラムコードを生成するシステムが日本では研究者のレベルで開発され使用できるようになっているし [4], [15], 海外では最近すでに販売されているとも聞く. こうした状況を考えると, 自動微分法は強力な数値計算技術としてここに述べた公式に限らず数値計算のいろいろな分野にもっと積極的に使われてよいと思う.

参考文献

- [1] Iri, M., Simultaneous computation of functions, partial derivatives and estimates of rounding errors — Complexity and practicality —, *Jpn. J. Appl. Math.*, 1 (1984), 223-252.
- [2] 伊理正夫・小野令美・戸田英雄, 合成関数の高速微分法とその導関数を含む Runge-Kutta 系の常微分方程式数値解法公式への応用, 情報処理学会論文誌, 27 (1986), 389-396.
- [3] Fehlberg, E., Klassische Runge-Kutta-Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle und ihre Anwendung auf Wärmeleitungsprobleme, *Computing*, 6 (1970), 61-71.

- [4] Kubota, K., PADRE2, a FORTRAN precompiler yielding error estimates and second derivatives, *Proceedings of the SIAM Workshop on "Automatic Differentiation of Algorithms — Theory, Implementation and Application"* (1991).
- [5] 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, **27** (1986), 936-944.
- [6] Ono, H., Five and Six Stage Runge-Kutta Type Formulas of Orders Numerically Five and Six, *Journal of Information Processing*, **12** (1989), 251-260.
- [7] Ono, H., and Toda, H., Runge-Kutta Type Seventh-order Limiting formula, *Journal of Information Processing*, **12** (1989), 286-298.
- [8] Ono, H., and Toda, H., An Addendum to the Previous Paper "Runge-Kutta Type Seventh-order Limiting formula (1989)", *Journal of Information Processing*, **14** (1991), 204-207.
- [9] 小野令美・戸田英雄・伊理正夫, 微分係数を用いた埋込み型 Runge-Kutta 系 2 段公式について, 情報処理学会論文誌, **28** (1987), 807-814.
- [10] Rall, L. B., *Automatic Differentiation — Techniques and Applications*, Lecture Notes in Computer Science **120**, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1981.
- [11] Shintani, H., On one-step methods utilizing the second derivative, *Hiroshima Math. J.* **1** (1971), 349-372.
- [12] 田中正次, Runge-Kutta 法の打ち切り誤差に関する研究, 東京大学に提出した学位論文, (1972).
- [13] 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, **21** (1980), 285-296.
- [14] Verner, J.H., Families of Imbedded Runge-Kutta Method, *SIAM J. Numer. Anal.*, **16** (1979), 857-875.
- [15] 吉田利信, 自動微分法導出システム, 情報処理学会論文誌, **30** (1989), 799-806.