

One-step method について

広 大 理 新 谷 尚 義

§ 1 One-step method

常微分方程式

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

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。

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

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

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、

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

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

である。

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

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

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 ($i=1,2,\dots,r$) 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 と違って、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 の制御がむづかしい。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、

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

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

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

とすると、

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

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

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

である。すると

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

だから

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

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

となる。したがって、 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 で進むに必要な導関数の計算回数を s とすると、 s は表 1 のようになる。 r は 1 step 進むに必要な導関数の計算回数

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 $f(x, y)$ 以外の関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、

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

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

とおく。

伝播誤差を考慮に入れるために、 $y(x)$ に近い解 $y(x; e)$

$$= y(x, x_0, y_0 - e) \quad \text{を考え}$$

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

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

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

の解で、 $C(x) = e \cdot O(1)$ とかける。ただし

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

である。

r ($r \leq n$) を正の整数とし、

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

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

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

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

とする。

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

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

だから、次の式がえられる。

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

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。

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

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

ここで、 $P_i(x), Q_i(x)$ はたかだか i 次の多項式で

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

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、

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

$$(k=0, 1, \dots, n)$$

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

が成り立つように係数 a_{kj}, b_{kj} を定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

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

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

をみたす定数 a_{kj}, b_{kj} ($j, k = 1, 2, \dots, n$) 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

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

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

が成り立つ。

(20)式に対応して

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

を考え、

$$(2.23) \quad g_k = d_k - S_k$$

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

とおく。

(12), (13), (14) 式を使うと次の式がえられる。

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

また

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

とおくと、(18)式により

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

だから

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

が成り立つ。さらに、(19)式により

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

である。

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

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。

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

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

2.2. 誤差の近似式

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

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

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

よりよい近似式をえるために条件

$$(2.33) \quad m \geq p + r + 1$$

すなわち条件

$$(2.34) \quad 2(n-r) \geq p \geq 1$$

がみたされている場合を考えることにする。

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

とおき、次の函数を考える。

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

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

ここで、 $a(u)$, $c_i(u)$, $b(u)$ は

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

となるような、たかだか n 次の補間多項式である。

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

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

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

とおくと

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

となる。すると次の lemma がえられる。

Lemma 5.

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

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。

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

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 $x = x_k$ ($k = 0, 1, \dots, n$) 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 $x = t + jh/k$ ($j = 0, 1, \dots, k$) 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 $1 \leq q \leq p+r+1$ とする。 n を越えない k の整数倍を ℓ とし、 $t = [n/\ell]$, $v = t\ell$ とおく。

x_0 から x_v まで幅 ℓh で積分する場合を考え

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

$$(2.46) \quad w_{j+\ell}(e) = e + \ell h Z_{j+\ell}(e)$$

$$(2.47) \quad Z_{j+\ell}(e) = Z_j(e) + q_{j+\ell}(e) \quad (j=0, \ell, 2\ell, \dots, (t-1)\ell)$$

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

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

$$(2.49) \quad p \geq n-r-1, \quad 1 \leq q \leq p+r+1$$

の下で次の式が成り立つ。

$$(2.50) \quad y_j - y(x_j; e) = T_j(e) + e \cdot O(h^{q+1}) + O(h^{p+\ell_j+1})$$

($j = \ell, 2\ell, \dots, t\ell$)

ただし

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

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

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。

$$(2.53) \quad y_i^* = y_{i-1}^* + h p_i^* - r_i^* \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

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

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

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

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

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

がえられる。

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

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

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

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

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

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. $m \geq p+1$ ならば

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

また、条件 (2.34), (2.49) の下で

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

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

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

したがって

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

は理論上 0 である。 R_k^*, v_k^* は次のようにかける。

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

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

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し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。

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

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

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

ただし、

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

である。この場合

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

したがって

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

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。

$$(\xi = 5 \times 10^{-7}, \delta = 5 \times 10^{-4})$$

例 1. $y' = 2xy, y(0) = 1$

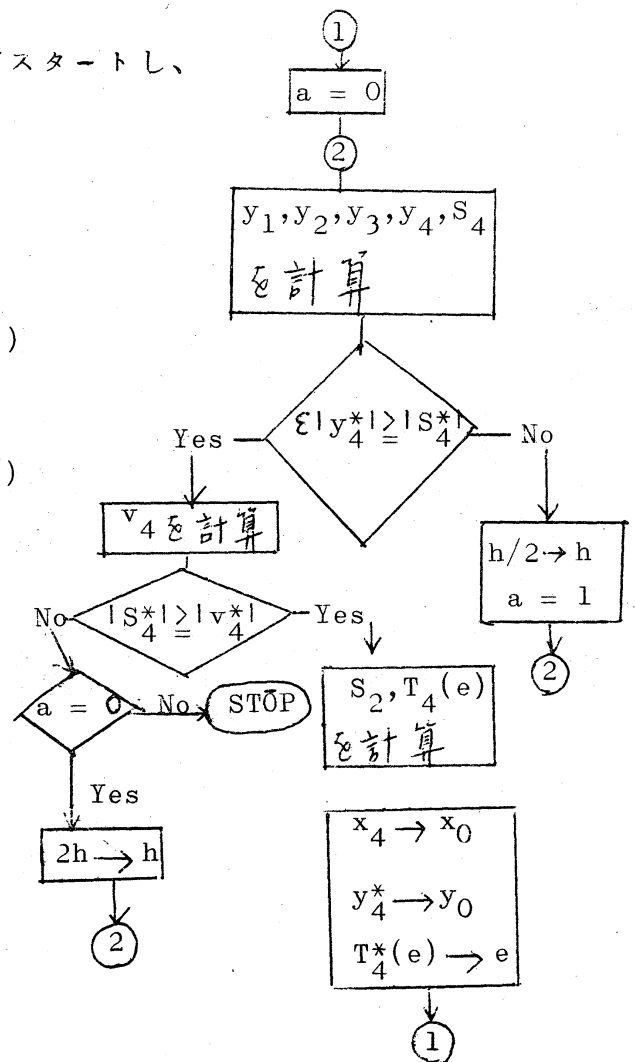
$$y(x) = \exp(x^2) \quad (\text{表 2})$$

例 2. $y' = 12x^3 - 8y/x, y(-1) = 1$

$$y(x) = x^4 \quad (\text{表 3})$$

表 2

誤差 x	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、3 回余分に導関数の

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回だけ余分に導関数の計算をして 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

表 3

$$(3.1) \quad D = \frac{\partial}{\partial x} + k_1 \frac{\partial}{\partial y}$$

を導入し、

$$(3.2) \quad \begin{aligned} D^j f(x_0, y_0) &= T^j, \\ D^j f_y(x_0, y_0) &= S^j \\ (j=1, 2, \dots, 5) \end{aligned}$$

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

$$(3.4) \quad \begin{aligned} f_y(x_0, y_0) &= f_y \\ f_{yy}(x_0, y_0) &= f_{yy} \end{aligned}$$

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。

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

いま

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

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。

$$(3.8) \quad \begin{cases} p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1 \\ a_2 p_2 + a_3 p_3 + p_4 = \frac{1}{2} \\ c_1 p_3 + c_2 p_4 = \frac{1}{6} \\ c_1 b_{43} p_4 = \frac{1}{24} \end{cases}$$

$$(3.9) \quad \begin{cases} a_4 = 1 \\ a_3(a_3 - a_2) = 2(1 - 2a_2)c_1 \\ (1 - a_3)c_2 = (3 - 4a_3)c_1 b_{43} \\ (1 - a_2)(1 - a_3) = 2(3 - 4a_2 - 4a_3 + 6a_2 a_3)c_1 b_{43} \end{cases}$$

ただし

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

である。このとき $T(x_0, y_0; h)$ は次のようになる。

$$(3.11) \quad T(x_0, y_0; h) = \frac{h^5}{5!} [A_1 T^4 + A_2 T S^2 + A_3 T^2 S + A_4 \int_{yy} P + A_5 \int_y T^3 \\ + A_6 \int_y^2 T^2 + A_7 \int_y^3 T + A_8 \int_y T S] + O(h^6)$$

$$(3.12) \quad A_1 = \frac{1}{12}(3 - 5a_2 + 5a_3 + 10a_2 a_3) \\ A_2 = \frac{1}{2}(3 - 5a_3), \quad A_3 = \frac{1}{2}(2 - 5a_2)$$

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

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

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

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

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

とおく。すると、

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

となる。

また

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

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 $\int_{yy} P, \int_y TS$ 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。

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

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

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

$$(3.21) \quad \begin{aligned} \tilde{T}(x_0, y_0; h) - v = & \frac{h^5}{5!} \left[-\frac{4}{9} \delta_y T^3 - \frac{2}{3} \delta_y^2 T^2 - \frac{22}{9} \delta_y^3 T \right] \\ & + \frac{h^5}{6!} \left[-\frac{100}{27} T^3 S - \frac{16}{3} T Q + \frac{25}{6} \delta_y \delta_{yy} P - \frac{17}{9} \delta_y T S^2 - 10 \delta_y T^2 S \right. \\ & \left. - \frac{154}{3} \delta_y^2 T S - \frac{109}{54} \delta_y T^4 - \frac{119}{27} \delta_y^2 T^3 - 10 \delta_y^3 T^2 - \frac{44}{3} \delta_y^4 T \right] \\ & + o(h^7) \end{aligned}$$

もう 1 回 $f(x, y)$ の値を計算して (21) 式の h^5 の項が消せばよいことになる。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。

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

$$(3.23) \quad k_9 = f(x_1 + \frac{1}{3}h, z_1 + \frac{h}{3}\tilde{k}_5 + P)$$

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

$$(3.25) \quad \begin{aligned} \tilde{T}(x_0, y_0; h) - m = & \frac{1}{3} \frac{h^6}{6!} \left[\frac{8}{3} T^3 S + \frac{64}{3} T Q + \frac{4}{3} \delta_y \delta_{yy} P \right. \\ & + \frac{4}{3} \delta_y T S^2 + 16 \delta_y T^2 S + \frac{8}{3} \delta_y^2 T S - 8 \delta_y^2 T^3 \\ & \left. - 24 \delta_y^3 T^2 - 56 \delta_y^4 T \right] + o(h^7) \end{aligned}$$

(1.13) と比べると

$$\begin{aligned}
 (3.26) \quad \tilde{T}(x_0, y_0; h) - e = & \frac{1}{3} \cdot \frac{h^6}{6!} \left[\frac{32}{9} T^3 S + 16 T Q - 8 \int_y \int_{yy} P - 8 \int_y T S^2 \right. \\
 & \left. + 16 \int_y T^2 S + 32 \int_y^2 T S - \frac{32}{9} \int_y^2 T^3 - 16 \int_y^3 T^2 - 32 \int_y^4 T \right] + O(h^7)
 \end{aligned}$$

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。

$$(3.27) \quad |m| \leq \xi |z_2| \quad (\xi = 0.5 \times 10^{-7})$$

がみたされるまで幅を半分にする。

$$(3.28) \quad v = u + m + 2h[f(x_1, z_1 + u) - \tilde{k}_5]$$

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。

$$(3.29) \quad |m| \leq \frac{1}{64} \xi |z_2|$$

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

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

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

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

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

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

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 個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。

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

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

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

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。

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

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

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

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

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。

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

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

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。

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

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

このとき

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

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。

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

4.2. Order 3 の one-step method

$$(4.18) \quad z_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^3 p_i k_i, \quad z_1 - y(x_1) = O(h^4)$$

という条件をつけると、次の式が満たされなければならない。

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

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

このとき、公式誤差は次のようになる。

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

さて、

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

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

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、

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

と定まり、 $\tilde{Z}_2, e$ は次のようになる。

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

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

$$(4.27) \quad z_1 = y_0 + \frac{h}{4}(k_1 + 3k_3)$$

ただし、

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

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

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

である。

$$m = e/2, \quad z_2 = \tilde{z}_2 + m \quad \text{とすると}$$

$$(4.31) \quad z_2 - y(x_2) = \frac{h^4}{4!}[-\frac{1}{9}T^3 - \frac{1}{3}TS - \frac{1}{9}\delta_y T^2 - \delta_y^2 T] + \frac{h^5}{5!}[-\frac{16}{27}T^4 \\ - \frac{32}{9}TS^2 + \frac{17}{54}T^2S - \frac{88}{9}\delta_{yy}P + \frac{1024}{243}\delta_y T^3 \\ + \frac{32}{9}\delta_y^2 T^2 + \frac{74}{3}\delta_y^3 T + \frac{28}{3}\delta_y TS] + O(h^6)$$

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)