

微分係数を用いる 2 段陽的 Runge-Kutta 系埋込公式について

小野 令美 (Harumi Ono)

1 はじめに

常微分方程式の初期値問題は独立変数 t をベクトル変数 $y(t)$ の一つの成分と見なせば

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

と書ける. ここで f は必要な回数微分可能で Taylor 級数は収束すると仮定する. 代表的な陽的解法の Runge-Kutta 系公式に微分係数を取り入れた公式としては, Fehlberg[4, 5], 新谷 [15, 16], 戸田ら [17, 11, 10, 12, 13], 吉田ら [18] によりいろいろな提案がなされてきた. ここでは 2 段公式について考察する. 最初の分点における f の $k-3$ 階までの微分係数と, 2 番目の分点における 1 階の微分係数を用いて, k 次と $k-1$ 次の埋め込み型公式を一般的な形で導く.

次の形の公式を考える:

$$\begin{aligned} f_1 &= f(y_n), \\ \dot{f}_1 &= \left. \frac{df}{dt} \right|_{t=t_n} = \left. \frac{d^2 y}{dt^2} \right|_{t=t_n}, \quad \ddot{f}_1 = \left. \frac{d^2 f}{dt^2} \right|_{t=t_n} = \left. \frac{d^3 y}{dt^3} \right|_{t=t_n}, \dots, \quad {}^{(k-3)}\dot{f}_1 = \left. \frac{d^{k-3} f}{dt^{k-3}} \right|_{t=t_n} = \left. \frac{d^{k-2} y}{dt^{k-2}} \right|_{t=t_n}, \\ y_2 &= y_n + hc_2 f_1 + \frac{(hc_2)^2}{2!} \dot{f}_1 + \frac{(hc_2)^3}{3!} \ddot{f}_1 + \dots + \frac{(hc_2)^{k-2}}{(k-2)!} {}^{(k-3)}\dot{f}_1, \\ f_2 &= f(y_2), \quad \tilde{f}_2 = \gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2 + h\bar{\gamma}_1 \dot{f}_1 + h^2 \bar{\gamma}_1 \ddot{f}_1 + \dots + h^{k-3} \frac{{}^{(k-3)}\dot{f}_1}{{}^{(k-3)}\bar{\gamma}_1} {}^{(k-3)}\dot{f}_1, \\ \tilde{f}_2 &= \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_{y=y_2} \cdot \tilde{f}_2, \\ y_{n+1} &= y_n + h(b_1 f_1 + b_2 f_2) + h^2(\bar{b}_1 \dot{f}_1 + \bar{b}_2 \ddot{f}_2) + h^3 \bar{b}_1 \ddot{f}_1 + \dots + h^{k-2} \frac{{}^{(k-3)}\dot{f}_1}{{}^{(k-3)}\bar{b}_1} {}^{(k-3)}\dot{f}_1. \quad (1) \end{aligned}$$

ここで, $c_2, \gamma_1, \gamma_2, \bar{\gamma}_1, \bar{\gamma}_2, \dots, \bar{\gamma}_1, b_1, b_2, \bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_1, \dots, \bar{b}_1$ は公式のパラメータである.

この公式の特徴は f_2 において, $(\partial f / \partial y)_{y=y_2}$ に掛けるベクトルを f_2 だけでなく $f_1, f_2, \dot{f}_1, \dots, {}^{(k-3)}\dot{f}_1$ の全ての線形結合の形にしたことである. これによりすでに提案したものも含めた k 次公式が得られる. Butcher[3] の簡単化の仮定に対応する条件のもとで次数条件式を解くと, この解系には第 2 の分点 c_2 が自由なパラメータとして残る. この自由なパラメータ c_2 の選び方で先に提案した公式が得られる. さらに $\tilde{f}_2$ を除いた線形結合で $k-1$ 次の近似 $\hat{y}_{n+1}$ が得られ, k 次の近似 y_{n+1} と組み合わせれば埋め込み型 $(k, k-1)$ 次公式となる. 次数条件式は高次になるにつれて膨大な数になるが, $t_n + c_2 h$ での真値を用いて展開することにより, 局所打ち切り誤差の主要項までが簡単な形にまとめられ, 一般的な次数 k に対するものを導くことが可能になる. さらに, 自由なパラメータを決める際考慮される公式の性質を考えるのに役立つ. ここでは二三の選び方の例を示す.

この公式に含まれる微分係数は, ヤコビ行列の個々の要素は不要で, あるベクトルとの積であり, これは自動微分法 [6, 14] を用いて容易に求められ, 現今では幾つかのシステ

ムも提供されている [1, 7, 19]. k 次の Taylor 法では f の $k-1$ 階までの微分係数が必要なので我々の公式は次数が 2 次低い Taylor 法の計算量と同程度である. 一般に高階の微分係数の計算量は階数の二乗に比例するから, 高次になるにしたがってその差は大きくなり Taylor 法より有利である.

2 次数条件式とその解系

公式 (1) の係数に次の条件を仮定する:

$$\gamma_1 + \gamma_2 = 1, \quad c_2 \gamma_2 + \bar{\gamma}_1 = c_2, \quad \frac{c_2^2}{2} \gamma_2 + \bar{\gamma}_1 = \frac{c_2^2}{2}, \quad \dots, \quad \frac{c_2^{k-3}}{(k-3)!} \gamma_2 + \frac{(k-3)}{\bar{\gamma}_1} = \frac{c_2^{k-3}}{(k-3)!}. \quad (2)$$

これは通常の高次公式における Butcher の簡単化の仮定に相当するもので, この条件と Butcher の簡単化の仮定および基本微係数との対応を表 1 に示す. f の t に関する微分係数と基本微係数には次の関係がある.

$$f_1 = f, \quad \dot{f}_1 = f_j f^j, \quad \ddot{f}_1 = f_{jl} f^j f^l + f_j f_l^j f^l = f_{jl} f^j f^l + f_j \cdot f_1^j.$$

表 1: 仮定する条件と Butcher の簡単化の仮定との対応

公式 (1) の条件	行簡単化の仮定	基本微係数
$\frac{c_2^2}{2!} \gamma_2 + \bar{\gamma}_1 = \frac{c_2^2}{2!}$	$\sum_j a_{ij} c_j = \frac{c_i^2}{2}$	$f_j f_l^j f^l \Rightarrow f_{jl} f^j f^l$
$\frac{c_2^3}{3!} \gamma_2 + \bar{\gamma}_1 = \frac{c_2^3}{3!}$	$\sum_j a_{ij}^2 c_j = \frac{c_i^3}{3}$	$f_j f_{lm}^j f^l f^m \Rightarrow f_{jlm} f^j f^l f^m$
.....		
$\frac{c_2^{k-3}}{(k-3)!} \gamma_2 + \frac{(k-3)}{\bar{\gamma}_1} = \frac{c_2^{k-3}}{(k-3)!}$	$\sum_j a_{ij}^{k-3} c_j = \frac{c_i^{k-2}}{k-2}$	$f_j f_{lm \dots w} \overbrace{f^l f^m \dots f^w}^{k-3} \Rightarrow f_{jlm \dots w} \overbrace{f^j f^l \dots f^w}^{k-2}$

次に $t = t_n + c_2 h$ における真値の展開を利用して数値解を展開する. $t = t_n + c_2 h$ における真値は

$$\begin{aligned} y(t_n + c_2 h) = & y_n + hc_2 f_1 + \frac{(hc_2)^2}{2!} \dot{f}_1 + \frac{(hc_2)^3}{3!} \ddot{f}_1 + \dots + \frac{(hc_2)^{k-2}}{(k-2)!} f_1^{(k-3)} \\ & + \frac{(hc_2)^{k-1}}{(k-1)!} f_1^{(k-2)} + \frac{(hc_2)^k}{k!} f_1^{(k-1)} + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

と書けるので, これを用いて数値解 y_2 を展開すると

$$y_2 = y(t_n + c_2 h) - \left(\frac{(hc_2)^{k-1}}{(k-1)!} f_1^{(k-2)} + \frac{(hc_2)^k}{k!} f_1^{(k-1)} + \dots \right) \stackrel{\text{def}}{=} y(t_n + c_2 h) - R(k-1) \quad (4)$$

となる. 同様に f_2 を展開し, $\tilde{f}_2$ と点 y_2 におけるヤコビ行列も同様に行って, $\tilde{f}_2$ を求める. これらから次の数値解 y_{n+1} の展開が得られる.

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1 + b_2)f_1 + h^2(b_2 c_2 + \bar{b}_1 + \bar{b}_2)\dot{f}_1 + h^3 \left(\frac{b_2 c_2^2}{2!} + \bar{b}_2 c_2 + \bar{b}_1 \right) \ddot{f}_1 + \dots$$

$$\begin{aligned}
& +h^{k-2} \left(\frac{b_2 c_2^{k-3}}{(k-3)!} + \frac{\bar{b}_2 c_2^{k-4}}{(k-4)!} + \frac{c_2^{(k-3)}}{\bar{b}_1} \right) f_1^{(k-3)} + h^{k-1} \left(\frac{b_2 c_2^{k-2}}{(k-2)!} + \frac{\bar{b}_2 c_2^{k-3}}{(k-3)!} \right) f_1^{(k-2)} \\
& + h^k \left[\left(\frac{b_2 c_2^{k-1}}{(k-1)!} + \frac{\bar{b}_2 c_2^{k-2}}{(k-2)!} \right) (f_1^{(k-1)} - f_j f_1^{(k-2)}) + \gamma_2 \frac{\bar{b}_2 c_2^{k-2}}{(k-2)!} f_j f_1^{(k-2)} \right] + \dots \quad (5)
\end{aligned}$$

真値 $y(t_n + h)$ の展開と (5) を比較すると次の次数条件式が得られる：

$$h f_1 \text{ の係数} \quad b_1 + b_2 = 1, \quad (6)$$

$$h^2 f_1 \text{ の係数} \quad b_2 c_2 + \bar{b}_1 + \bar{b}_2 = \frac{1}{2!}, \quad (7)$$

$$h^3 f_1 \text{ の係数} \quad b_2 \frac{c_2^2}{2!} + \bar{b}_2 c_2 + \bar{b}_1 = \frac{1}{3!}, \quad (8)$$

$$h^4 f_1 \text{ の係数} \quad b_2 \frac{c_2^3}{3!} + \bar{b}_2 \frac{c_2^2}{2!} + \bar{b}_1 = \frac{1}{4!}, \quad (9)$$

$$h^{k-2} f_1^{(k-3)} \text{ の係数} \quad b_2 \frac{c_2^{k-3}}{(k-3)!} + \bar{b}_2 \frac{c_2^{k-4}}{(k-4)!} + \frac{c_2^{(k-3)}}{\bar{b}_1} = \frac{1}{(k-2)!}, \quad (10)$$

$$h^{k-1} f_1^{(k-2)} \text{ の係数} \quad b_2 \frac{c_2^{k-2}}{(k-2)!} + \bar{b}_2 \frac{c_2^{k-3}}{(k-3)!} = \frac{1}{(k-1)!}, \quad (11)$$

$$h^k (f_1^{(k-1)} - f_j f_1^{(k-2)}) \text{ の係数} \quad b_2 \frac{c_2^{k-1}}{(k-1)!} + \bar{b}_2 \frac{c_2^{k-2}}{(k-2)!} = \frac{1}{k!}, \quad (12)$$

$$h^k f_j f_1^{(k-2)} \text{ の係数} \quad \bar{b}_2 \gamma_2 \frac{c_2^{k-2}}{(k-2)!} = \frac{1}{k!}. \quad (13)$$

この連立方程式は c_2 を自由なパラメータとして、分母はすべて零にならないという条件のもとで以下の解系を持ち、 k 次公式が得られる。

$$(11) \text{ と } (12) \text{ から} \quad b_2 = \frac{k c_2 - (k-2)}{k c_2^{k-1}}, \quad \bar{b}_2 = \frac{-k c_2 + (k-1)}{k(k-1) c_2^{k-2}}, \quad (14)$$

$$(13) \text{ から} \quad \gamma_2 = \frac{1}{-k c_2 + (k-1)}, \quad (15)$$

$$(6), \dots, (10) \text{ から} \quad b_1 = 1 - b_2, \quad \frac{1}{\bar{b}_1} = \frac{1}{(l+1)!} - b_2 \frac{c_2^l}{l!} - \bar{b}_2 \frac{c_2^{l-1}}{(l-1)!} \quad (l = 1, 2, \dots, k-3). \quad (16)$$

この連立方程式で (7) から (11) までの $\bar{b}_2$ を 0 とおいたものは (6) から (11) まで満たすことができ、 $k-1$ 次公式が得られることがわかる。混乱を避けるため、 $k-1$ 次公式の近似値を $\hat{y}_{n+1}$ 、パラメータ b を β で表すことにする。これらは次のとおりである：

$$(11) \text{ から} \quad \beta_2 = \frac{1}{(k-1) c_2^{k-2}}, \quad (17)$$

$$(6), \dots, (10) \text{ から} \quad \beta_1 = 1 - \beta_2, \quad \frac{1}{\bar{\beta}_1} = \frac{1}{(l+1)!} - \beta_2 \frac{c_2^l}{l!} \quad (l = 1, 2, \dots, k-3). \quad (18)$$

以上二つの解において、自由パラメータ c_2 を同じ値にすれば、埋め込み型公式になる。

3 自由なパラメータの決定

この公式では絶対安定領域の広さは自由パラメータ c_2 の値によらず一定である。そこでいろいろな選び方が考えられる。ここでは選び方の例として、第2の分点 c_2 における微分係数が通常の形となるもの、局所打ち切り誤差の二乗和および Lotkin[8] による和からみてほぼ最良のもの、局所打ち切り誤差最大のものを最小にするもの、それに、刻み幅 h だけ進んだ $c_2 = 1$ とするものについて述べる。

3.1 第2の分点 c_2 における微分係数が通常の形となるもの

(1) の $\tilde{f}_2$ は条件 (2) を用いると次のように書き直せる：

$$\tilde{f}_2 = \gamma_2 f_2 + (1 - \gamma_2) \left(f_1 + c_2 h \dot{f}_1 + \frac{1}{2!} (c_2 h)^2 \ddot{f}_1 + \cdots + \frac{1}{(k-3)!} (c_2 h)^{k-3} f_1^{(k-3)} \right) \quad (19)$$

$$= \left(f_1 + c_2 h \dot{f}_1 + \frac{1}{2!} (c_2 h)^2 \ddot{f}_1 + \cdots + \frac{1}{(k-3)!} (c_2 h)^{k-3} f_1^{(k-3)} \right) + \gamma_2 \left(f_2 - \left(f_1 + c_2 h \dot{f}_1 + \frac{1}{2!} (c_2 h)^2 \ddot{f}_1 + \cdots + \frac{1}{(k-3)!} (c_2 h)^{k-3} f_1^{(k-3)} \right) \right). \quad (20)$$

(19) から、 $\gamma_2 = 1$ となるように $c_2 = (k-2)/k$ とすれば、 $\tilde{f}_2$ は f_2 となり、 $\tilde{f}_2$ は y_2 における通常の微分係数

$$\tilde{f}_2 = \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_{y=y_2} \cdot f_2 \stackrel{\text{def}}{=} \dot{f}_2,$$

となり、 b_2 は (14) から零になる。

3.2 局所打ち切り誤差から定めるもの

係数の条件 (2) を用いると k 次公式の局所打ち切り誤差の主要項 $O(h^{k+1})$ は次の四つのグループの項の和に纏められる：

$$\lambda_1 f_j f_l^j \overbrace{f_m^j \cdots f_w^j}^{k-2}, \quad -\lambda_1 \frac{1}{(k+1)!}, \quad (21)$$

$$\lambda_2 f_j f_l^j \overbrace{f_m^j \cdots f_w^j}^{k-1}, \quad \lambda_2 \left(\bar{b}_2 \gamma_2 \frac{c_2^{k-1}}{(k-1)!} - \frac{1}{(k+1)!} \right) = \lambda_2 \frac{(k+1)c_2 - (k-1)}{(k+1)!(k-1)}, \quad (22)$$

$$\lambda_3 f_j f_l^j \overbrace{f_m^j \cdots f_w^j}^{k-2}, \quad \lambda_3 \left(\bar{b}_2 \gamma_2 \frac{c_2^{k-1}}{(k-2)!} - \frac{k}{(k+1)!} \right) = \lambda_3 \frac{(k+1)c_2 - k}{(k+1)!}, \quad (23)$$

$$\lambda_4 f_j f_l^j \overbrace{f_m^j \cdots f_w^j}^k, \quad \lambda_4 \left(b_2 \frac{c_2^k}{k!} + \bar{b}_2 \frac{c_2^{k-1}}{(k-1)!} - \frac{1}{(k+1)!} \right) = \lambda_4 \frac{-k(k+1)c_2^2 + 2(k^2-1)c_2 - k(k-1)}{k(k-1)(k+1)!}. \quad (24)$$

また、 $k-1$ 次公式の局所打ち切り誤差の主要項 $O(h^k)$ は

$$\lambda_5 f_j f_l^j \overbrace{f_m^j \cdots f_w^j}^{k-2}, \quad -\lambda_5 \frac{1}{k!}, \quad (25)$$

$$\lambda_6 \mathbf{f}_{jl \dots v} \overbrace{\mathbf{f} \mathbf{f} \dots \mathbf{f}}^{k-1}, \quad \lambda_6 \left(\beta_2 \frac{c_2^{k-1}}{(k-1)!} - \frac{1}{k!} \right) = \lambda_6 \frac{k c_2 - (k-1)}{k!(k-1)}, \quad (26)$$

の二つのグループの項の和になる, ここで λ_i は個々の木によって定まる整数である.

3.2.1 二乗和を最小にする

誤差項 (24) の係数の分子の大きさは $c_2 = (k-1)/k$ のとき最小値 $(k-1)/k$ をとる. また (22) と (23) の分子の大きさはそれぞれ $(k-1)/k$ と $1/k$ で, 誤差項の係数の二乗和および Lotkin[8] による和もほぼ最小になる.

一方 $c_2 = (k-1)/k$ にすると (15) から γ_2 は無限大になることがわかる. しかし, 公式 (1) の中で γ_2 が使われているのは $\tilde{f}_2$ だけで, しかも $\tilde{f}_2$ は $\bar{b}_2$ との積として現れる. 従って (12) と (13) から,

$$\bar{b}_2 \gamma_2 = \frac{1}{k(k-1)c_2^{k-2}}, \quad \bar{b}_2 = 0 \quad (27)$$

にとればよいことが分かる. このとき k 次公式のパラメータ $b_1, b_2, \bar{b}_1$ ($l = 1, 2, \dots, k-3$) は $k-1$ 次公式のパラメータ $\beta_1, \beta_2, \bar{\beta}_1$ ($l = 1, 2, \dots, k-3$) とそれぞれ一致し

$$b_2 = \beta_2 = \frac{1}{k c_2^{k-1}} = \frac{k^{k-2}}{(k-1)^{k-1}},$$

$$b_1 = \beta_1 = 1 - b_2, \quad \bar{b}_1 = \bar{\beta}_1 = \frac{1}{(l+1)!} - b_2 \frac{c_2^l}{l!} \quad (l = 1, 2, \dots, k-3)$$

となる. また, (27) の c_2 に $(k-1)/k$ を代入して (20) から

$$\bar{b}_2 \tilde{f}_2 = \frac{k^{k-3}}{(k-1)^{k-1}} \left(f_2 - \left(f_1 + c_2 h \dot{f}_1 + \frac{(c_2 h)^2}{2!} \ddot{f}_1 + \dots + \frac{(c_2 h)^{k-3}}{(k-3)!} f_1^{(k-3)} \right) \right) \quad (28)$$

が得られる. この公式では $k-1$ 次の近似値 $\hat{y}_{n+1}$, 局所打ち切り誤差の主要項 E , k 次の近似値 y_{n+1} はそれぞれ

$$\hat{y}_{n+1} = y_n + h(b_1 f_1 + b_2 f_2) + h^2 \bar{b}_1 \dot{f}_1 + h^3 \bar{b}_1 \ddot{f}_1 + \dots + h^{k-2} \bar{b}_1 f_1^{(k-3)},$$

$$E = h^2 \frac{k^{k-3}}{(k-1)^{k-1}} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_{y=y_2} \cdot \left[f_2 - \left(f_1 + c_2 h \dot{f}_1 + \frac{(c_2 h)^2}{2!} \ddot{f}_1 + \dots + \frac{(c_2 h)^{k-3}}{(k-3)!} f_1^{(k-3)} \right) \right],$$

$$y_{n+1} = \hat{y}_{n+1} + E$$

となり, 計算の手間から見て効率がよい.

ただ, $k-1$ 次公式の誤差項 (26) の係数は零となり, この公式を数値積分に適用したときは (25) の基本微係数は零なので, E で k 次公式の誤差を推定することはできない. この観点から考えた選び方を次節にあげる.

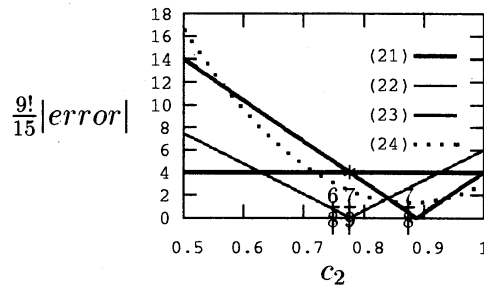
3.2.2 最大誤差を最小にする

誤差項の係数を具体的に表 2 に示す.

表 2: 局所打ち切り誤差の主要項の係数 ($k = 4, \dots, 8$, $\alpha \dots \alpha(\text{tree})$ は Butcher の記法)

$\lambda_1 f_j f_l^j f_m^l \dots^w \overbrace{f^m \dots f^w}^{k-2}$				$\lambda_2 f_j f_l^j \dots^w \overbrace{f^l f^m \dots f^w}^{k-1}$				$\lambda_3 f_{jl} f_l^j f_m^l \dots^w \overbrace{f^m f^o \dots f^w}^{k-2}$				$\lambda_4 f_{jl} \dots^w \overbrace{f^j f^l \dots f^w}^k$			
k	n	$\max \alpha_1$		n	$\max \alpha_2$		n	$\max \alpha_3$		n	$\max \alpha_4$				
4	2	1	$-\frac{1}{5!}$	2	3	$\frac{5c_2-3}{5!}$	2	4	$\frac{5c_2-4}{5!}$	3	6	$-\frac{10c_2^2-15c_2+6}{5!}$			
5	4	3	$-\frac{3}{6!}$	5	6	$\frac{3(3c_2-2)}{6!}$	4	15	$\frac{3(6c_2-5)}{6!}$	7	15	$-\frac{3(15c_2^2-24c_2+10)}{2 \cdot 6!}$			
6	9	6	$-\frac{6}{7!}$	11	15	$\frac{3(7c_2-5)}{7!}$	9	36	$\frac{6(7c_2-6)}{7!}$	19	60	$-\frac{4(21c_2^2-35c_2+15)}{7!}$			
7	20	15	$-\frac{15}{8!}$	28	60	$\frac{20(4c_2-3)}{8!}$	20	105	$\frac{15(8c_2-7)}{8!}$	47	315	$-\frac{15(28c_2^2-48c_2+21)}{8!}$			
8	71	60	$-\frac{60}{9!}$	67	315	$\frac{45(9c_2-7)}{9!}$	48	480	$\frac{60(9c_2-8)}{9!}$	100	1260	$-\frac{45(36c_2^2-63c_2+28)}{9!}$			
k		$-\alpha_1 \frac{1}{(k+1)!}$			$\alpha_2 \frac{(k+1)c_2-(k-1)}{(k+1)!(k-1)}$			$\alpha_3 \frac{(k+1)c_2-k}{(k+1)!k}$			$\alpha_4 \frac{-k(k+1)c_2^2+2(k^2-1)-k(k-1)}{(k+1)!k(k-1)}$				

表 2 から, $k = 4, \dots, 8$ については誤差項の係数最大のものを最小にするのは $\max_{\lambda_1} = \max_{\lambda_3} / k$ なので $|-1/(k+1)!| = |((k+1)c_2 - k)/(k+1)!|$ から $c_2 = (k-1)/(k+1)$ となる. このとき $k-1$ 次公式の誤差項 (26) の係数は一般に零とはならないから, 数値積分に適用し (25) の基本微係数が零でも, E で k 次公式の誤差を推定できる. $k=8$ のときの各誤差項のグループの中で最大のもののグラフを図 1 に示す.

図 1: $k=8$ の最大の誤差項の係数

3.3 その他の例

図 1 から, (22) と (23) の交点 ($k=8$ のとき $c_2 = 5/6$), (21) と (22) の交点 ($k=8$ のとき $25/27$) 等も誤差の小さい公式の有力な候補となることが分かる. しかし, これらの値を一般的に k の式としては未だ得ていない.

4 数値例

前節にあげた公式が k 次 ($4 \leq k \leq 8$) の精度であることを, ここでは次の数値例 [2] に依って示す.

$$\frac{dy^{(1)}}{dt} = y^{(2)}y^{(3)}, \quad y^{(1)}(0) = 0,$$

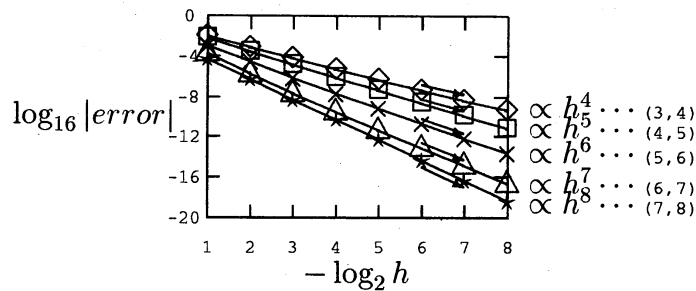


図 2: 3.1 節の公式による $y^{(2)}$ の $t = 60$ における誤差

$$\begin{aligned} \frac{dy^{(2)}}{dt} &= -y^{(1)}y^{(3)}, & y^{(2)}(0) &= 1, \\ \frac{dy^{(3)}}{dt} &= -k^2 y^{(1)}y^{(2)}, & y^{(3)}(0) &= 1, & k^2 &= 0.51 \end{aligned}$$

を $t = 0$ から 60 まで刻み幅 h を変えて積分する. 紙面の都合で $4 \leq k \leq 8$ に対する 3.1 節の公式による $y^{(2)}$ の最終ステップにおける誤差だけを図 2 に示す. 計算は HITAC M-880 の FORTRAN 4 倍精度で行った. また, 真値の計算には NUMPAC [9] を用いた. 図 2 から, すべての k について, 累積誤差はそれぞれ h^k に比例しており k 次の精度を達成している事が分かる.

結論として, 高階の微分係数を用いる 2 段埋込み型公式を一般的に k 次公式として導くことができた. これは極限公式型の微分係数を利用したことと, $y(t_n + c_2 h)$ における真値の展開を利用したことによる. 局所打ち切り誤差は Taylor 法よりもいずれの公式も小さい. また手間に関しては, 公式に含まれる微分係数はヤコビ行列とベクトルの積の形のもので, これは自動微分法により簡単に求められ, 現今では幾つかのシステムも提供されている [1, 7, 19]. 一般に高階の微分係数の計算量は階数の二乗に比例する. ここで導いた公式は Taylor 法より必要な微分係数の階数は 2 階低く高次になるにしたがってその差は大きくなり Taylor 法より有利である.

参考文献

- [1] C. Bischof, A. Carle, G. Corliss, A. Griewank and P. Hovland, ADIFOR—Generating Derivative Codes from Fortran Programs, *Scientific Programming*, **1** (1992) 11–29.
- [2] R. Bulirsch and J. Stoer, Numerical Treatment of Ordinary Differential Equations by Extrapolation Methods, *Num. Math.*, **8** (1966) 1–13.
- [3] J.C. Butcher, *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations*, Wiley, New York, 1987.
- [4] E. Fehlberg, Eine Methode zur Fehlerverkleinerung beim Runge–Kutta–Verfahren, *ZAMM*, **38** (1958) 421–426.

- [5] E. Fehlberg, New high-order Runge-Kutta formulas with step size control for systems of first and second order differential equations, *ZAMM*, **44** (1964) T17-T29.
- [6] M. Iri, Simultaneous computation of functions, partial derivatives and estimates of rounding errors, — complexity and practicality —, *Japan. J. Appl. Math.*, **1** (1984) 223-252.
- [7] K. Kubota, 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).
- [8] M. Lotkin, On the Accuracy of Runge-Kutta's Method, *Math. Tables Aids Comput.*, **5** (1951) 128-133.
- [9] ライブラリ・プログラム利用の手引き (数値計算編: NUMPAC VOL.3), 名古屋大学大型計算機センター, 1991.
- [10] H. Ono, Limiting Formulas of Nine-stage Explicit Runge-Kutta Methods of Order Eight, *Trans IPS Japan*, **38** (1997) 1886-1893.
- [11] H. Ono and H. Toda, Runge-Kutta Type Seventh-order Limiting Formula, *Journal of Information Processing*, **12** (1989) 286-290.
- [12] H. Ono and H. Toda, Explicit Runge-Kutta methods using second derivatives, *Annals of Numer. Math.*, **1** (1994) 171-182.
- [13] 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.
- [14] L.B. Rall, *Automatic Differentiation Techniques and Applications*, Lecture Notes in computer Science, **120** Springer, 1981.
- [15] Shintani, H., On One-step Methods Utilizing the Second Derivative, *Hiroshima Math. J.*, **1** (1971) 349-372.
- [16] Shintani, H., On Explicit One-step Methods Utilizing the Second Derivative, *Hiroshima Math. J.*, **2** (1972) 353-368.
- [17] 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.
- [18] 吉田利信, 小野令美, 高階の微分係数を用いる Runge-Kutta 公式について (I), 研究集会資料, (名古屋大学工学部 1996-10-15~17).
- [19] 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.