1　常微分方程式

1.1　ルンゲ・クッタ法

p-次のテイラー展開法の勾配関数 $\boldsymbol{F}_{Tp}$ は適当な条件の下で

$$\sup_{t_0 \le t \le T-h} \|\widetilde{\boldsymbol{F}}(t, \boldsymbol{u}(t); h) - \boldsymbol{F}_{Tp}(t, \boldsymbol{u}(t); h)\| \le Ch^p$$

を満たし, p 次の誤差が期待できた. しかしながら, テイラー展開法では $\boldsymbol{f}^{[p]}$ を用いるため, $\boldsymbol{f}$ の偏導関数が既知で, 計算可能である事が必要であった.

ルンゲ・クッタ法は $\boldsymbol{f}$ のみを用いてテイラー展開法を近似するものであると言える. 以下 $\boldsymbol{f}$ は C^p 級とする.

$p = 2$ のテイラー展開法の勾配関数は

$$\boldsymbol{F}_{T2}(t, \boldsymbol{x}; h) = \boldsymbol{f}^{[1]}(t, \boldsymbol{x}) + \frac{h}{2}\boldsymbol{f}^{[2]}(t, \boldsymbol{x})$$

であるが, 次の勾配関数を用いれば, これを 2 次のオーダーで近似できる.

命題 1 (ホイン法 (2 ステップ-ルンゲ・クッタ法 1))**.** *$\boldsymbol{f}$: C^2-級, かつ一様リプシッツ連続とすれば,*

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{F}_{RK2}(t, \boldsymbol{x}; h) &:= \frac{1}{2}(\boldsymbol{k}_1(t, \boldsymbol{x}) + \boldsymbol{k}_2(t, \boldsymbol{x})) \\
\boldsymbol{k}_1(t, \boldsymbol{x}) &:= \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{x}) \\
\boldsymbol{k}_2(t, \boldsymbol{x}) &:= \boldsymbol{f}(t + h, \boldsymbol{x} + h\boldsymbol{k}_1(t, \boldsymbol{x}))
\end{aligned}$$

と置けば,

$$\sup_{t_0 \le t \le T-h} \|\boldsymbol{F}_{T2}(t, \boldsymbol{u}(t); h) - \boldsymbol{F}_{RK2}(t, \boldsymbol{u}(t); h)\| \le Ch^2$$

よって

$$\sup_{t_0 \le t \le T-h} \|\widetilde{\boldsymbol{F}}(t, \boldsymbol{u}(t); h) - \boldsymbol{F}_{RK2}(t, \boldsymbol{u}(t); h)\| \le C'h^2$$

上記の勾配関数を用いた 1 段法をホイン法と言う. 定理から分かるように, ホイン法は 2 次のテイラー展開法と同じ 2 次の局所打切り誤差を持つ. また, 2 次のテイラー展開法と異なり, $\boldsymbol{f}$ の偏導関数を使用しない.

Proof. $h \mapsto f_i(t + h, \boldsymbol{u}(t) + h\boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t)))$ のテイラー展開を用いれば,

$$\begin{aligned}
F_{\mathrm{RK2},i} &= \frac{1}{2}f_i(t, \boldsymbol{u}(t)) + \frac{1}{2}f_i(t + h, \boldsymbol{u}(t) + h\boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t))) \\
&= \frac{1}{2}f_i(t, \boldsymbol{u}(t)) + \frac{1}{2}\left(f_i(t, \boldsymbol{u}(t)) + h\frac{\partial f_i}{\partial t}(t, \boldsymbol{u}(t)) + h\sum_j \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(t, \boldsymbol{u}(t))f_j(t, \boldsymbol{u}(t)) + O(h^2)\right) \\
&= f_i(t, \boldsymbol{u}(t)) + \frac{1}{2}h\left(\frac{\partial f_i}{\partial t}(t, \boldsymbol{u}(t)) + \sum_j \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(t, \boldsymbol{u}(t))f_j(t, \boldsymbol{u}(t))\right) + O(h^2)
\end{aligned}$$

ここで

$$F_{\mathrm{T2},i} = f_i + \frac{1}{2}h\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial f_i}{\partial x_j}f_j\right)$$

の $t, \boldsymbol{u}(t)$ での値を用いれば良い. □

$\boldsymbol{F}_{T2}$ を 2 次近似する方法は一意的ではない, 例えば次の勾配関数を用いても 2 次近似が得られる. 次の勾配関数を用いた一段法を改良オイラー法, または, 中点法と言う.

命題 2 (改良オイラー法 (2 ステップ-ルンゲ・クッタ法 2)).

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_{RK2'}(t,\boldsymbol{x};h) &:= \boldsymbol{k}_2(t,\boldsymbol{x}) \\ \boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x}) &:= \boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{x}) \\ \boldsymbol{k}_2(t,\boldsymbol{x}) &:= \boldsymbol{f}(t+\frac{1}{2}h,\boldsymbol{x}+\frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x})) \end{aligned}$$

と置けば,

$$\sup_{t_0\le t\le T-h}\|\boldsymbol{F}_{T2}(t,\boldsymbol{u}(t);h)-\boldsymbol{F}_{RK2'}(t,\boldsymbol{u}(t);h)\|\le Ch^2$$

よって

$$\sup_{t_0\le t\le T-h}\|\widetilde{\boldsymbol{F}}(t,\boldsymbol{u}(t);h)-\boldsymbol{F}_{RK2'}(t,\boldsymbol{u}(t);h)\|\le C'h^2$$

定義 1. 一般に次の形の勾配関数を用いる一段法を n ステップ-ルンゲ・クッタ法と言う. [1]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_{RKn}(t,\boldsymbol{x};h) &:= c_1\boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x})+c_2\boldsymbol{k}_2(t,\boldsymbol{x})+c_3\boldsymbol{k}_3(t,\boldsymbol{x})+\cdots+c_n\boldsymbol{k}_n(t,\boldsymbol{x}) \\ \boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x}) &:= \boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{x}) \\ \boldsymbol{k}_2(t,\boldsymbol{x}) &:= \boldsymbol{f}(t+\alpha_1 h,\boldsymbol{x}+h\beta_{2,1}\boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x})) \\ \boldsymbol{k}_3(t,\boldsymbol{x}) &:= \boldsymbol{f}(t+\alpha_2 h,\boldsymbol{x}+h(\beta_{3,1}\boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x})+\beta_{3,2}\boldsymbol{k}_2(t,\boldsymbol{x}))) \\ &\vdots \\ \boldsymbol{k}_n(t,\boldsymbol{x}) &:= \boldsymbol{f}(t+\alpha_n h,\boldsymbol{x}+h(\beta_{n,1}\boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x})+\cdots+\beta_{n,n-1}\boldsymbol{k}_{n-1}(t,\boldsymbol{x}))) \end{aligned}$$

2 ステップ-ルンゲ・クッタ法では 2 次の精度が得られたが, 一般にはステップ数と精度の次数は一致しない, 実際, 5 次の精度を得るためには 6 ステップ必要である事が知られている. 次の 4 ステップ-ルンゲ・クッタ法がステップ数と精度の次数が同じで済む範囲での最も次数の高い近似となる. 単に, ルンゲクッタ法といった場合, 次の勾配関数を用いた 4 次精度の一段法のことを指す.

命題 3 (ルンゲ・クッタ法 (4 ステップ-ルンゲ・クッタ法)).

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_{RK}(t,\boldsymbol{x};h) &:= \frac{1}{6}(\boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x};h)+2\boldsymbol{k}_2(t,\boldsymbol{x};h)+2\boldsymbol{k}_3(t,\boldsymbol{x};h)+\boldsymbol{k}_4(t,\boldsymbol{x};h))) \\ \boldsymbol{k}_1(t,\boldsymbol{x};h) &:= \boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{x}) \\ \boldsymbol{k}_2(t,\boldsymbol{x};h) &:= \boldsymbol{f}(t+\frac{1}{2}h,\boldsymbol{x}+\frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1) \\ \boldsymbol{k}_3(t,\boldsymbol{x};h) &:= \boldsymbol{f}(t+\frac{1}{2}h,\boldsymbol{x}+\frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_2) \\ \boldsymbol{k}_4(t,\boldsymbol{x};h) &:= \boldsymbol{f}(t+h,\boldsymbol{x}+h\boldsymbol{k}_3) \end{aligned}$$

$$\sup_{t_0\le t\le T-h}\|\boldsymbol{F}_{T4}(t,\boldsymbol{u}(t);h)-\boldsymbol{F}_{RK}(t,\boldsymbol{u}(t);h)\|\le Ch^4$$

よって

$$\sup_{t_0\le t\le T-h}\|\widetilde{\boldsymbol{F}}(t,\boldsymbol{u}(t);h)-\boldsymbol{F}_{RK}(t,\boldsymbol{u}(t);h)\|\le C'h^4$$

例 1 (ばねの運動). $\frac{d\boldsymbol{u}}{dt}(t)=\boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{u}(t))$, $\boldsymbol{u}(t_0)=\boldsymbol{u}_0$ が次で与えられている;

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{du_1}{dt}=u_2 \\ \dfrac{du_2}{dt}=-\dfrac{k}{m}u_1 \end{array}\right., \qquad \left\{\begin{array}{l} u_1(t_0)=a \\ u_2(t_0)=0 \end{array}\right. .$$

(u_1 が質点の位置, u_2 が速度を表している)

$$f_1(\boldsymbol{u})=u_2, \qquad f_2(\boldsymbol{u})-\frac{k}{m}u_1$$

[1] c_i,α_i,$\beta_{i,j}$ は適切に選ばなければならない.

であるから，

$$
\begin{aligned}
k_1^{(1)} &= u_2^{(n)}, \qquad k_2^{(1)} = -\frac{k}{m}u_1^{(n)}, \\
k_1^{(2)} &= u_2^{(n)} + \frac{h}{2}k_2^{(1)}, \qquad k_2^{(2)} = -\frac{k}{m}(u_1^{(n)} + \frac{h}{2}k_1^{(1)}) \\
k_1^{(3)} &= u_2^{(n)} + \frac{h}{2}k_2^{(2)}, \qquad k_2^{(3)} = -\frac{k}{m}(u_1^{(n)} + \frac{h}{2}k_1^{(2)}) \\
k_1^{(4)} &= u_2^{(n)} + hk_2^{(3)}, \qquad k_2^{(4)} = -\frac{k}{m}(u_1^{(n)} + hk_1^{(3)}) \\
\boldsymbol{F}_{RK}(t_n, \boldsymbol{u}_n; h) &= \frac{1}{6}(\boldsymbol{k}_1 + 2\boldsymbol{k}_2 + 2\boldsymbol{k}_3 + \boldsymbol{k}_4)
\end{aligned}
$$

よってルンゲ・クッタ法による差分方程式は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_{n+1} &= \boldsymbol{u}_n + \boldsymbol{F}_{RK}(t_n, \boldsymbol{u}_n; h) \\
&= \boldsymbol{u}_n + \frac{h}{6}(\boldsymbol{k}_1 + 2\boldsymbol{k}_2 + 2\boldsymbol{k}_3 + \boldsymbol{k}_4)
\end{aligned}
$$

となる．