

## 時間差分スキーム (5)

解くべき常微分方程式は

$$\frac{dU(t)}{dt} = f(U, t),$$

初期条件 :  $U(0) = U_0$

を考える. この方程式を数値的に解くためには独立変数  $t$  を離散値  $t_0, t_1, \dots$  で考えて,  $t_n$  での解の近似値  $U_n$  を求めることになる. これ以降は時間刻みを  $h$  として

$$\begin{aligned}t_n &= n\Delta t, \\t_{n+1} &= t_n + h, \\U_n &= U(t_n), \\f &= f(U_n, t_n)\end{aligned}$$

とする.

### 1 ルンゲ-クッタ型公式

真の解  $U_{n+1}$  の  $t = t_n$  の周りでのテイラー展開を考えると,

$$U(t_{n+1}) = U(t_n) + \frac{dU(t_n)}{dt}h + \frac{1}{2} \frac{d^2U(t_n)}{dt^2}h^2 + \dots \quad (1)$$

となる. 数値的に求めた近似解  $U_{n+1}$  のテイラー展開は

$$\begin{aligned}U_{n+1} &= U_n + O(h), \\O(h) &= fh + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2}h^2 \dots\end{aligned} \quad (2)$$

となる.

精度良く  $U_{n+1}$  を求めるには  $O(h)$  が高次の項まで (1) 式と等しくなれば良い。ルンゲ-クッタ型公式とは  $O(h)$  を高次の項まで一致するためにいくつかの  $(U, t)$  で  $f(U, t)$  を求めて、その重みつき平均を取る解法である<sup>1)</sup>。  $U_{n+1}$  を  $U_n$  と  $f_n$  だけで評価するのでルンゲ-クッタ型公式は 1 段階公式である。

一般的な  $p$  段のルンゲクッタ型公式は

$$k_i = hf \left( U_n + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} k_j, t_n + c_i h \right), \quad (3)$$

$$c_i = \sum_{j=1}^p \alpha_{ij}, \quad (4)$$

$$U_{n+1} = U_n + \sum_{i=1}^p \omega_i k_i \quad (5)$$

の形で表される。ここで  $\alpha_{ij}$  は重み  $\omega_i$  とともに、数値解がテイラー展開の高次の項まで一致するように決定されるパラメータである。

今、簡単のため陽的な解法に限定すると

$$\alpha_{ij} = 0 (i \leq j) \quad (6)$$

という制約がつく。

$p$  の値によって位数 (order)<sup>2)</sup> と段数 (stage)<sup>3)</sup> が決まる。

$p$  に値を代入してルンゲ-クッタ型公式を見ていく。なお、 $p = 3, 4$  は簡単のため式の説明にとどめて導出はしない<sup>4)</sup>。

## 1.1 ルンゲ-クッタ型公式の 1 段 1 位公式

(3),(4), (5) 式で  $p = 1$  とすると (3) 式は

$$k_1 = hf(U_n, t_n).$$

(5) 式は

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U_n + \omega_1 k_1 \\ &= U_n + \omega_1 hf \end{aligned}$$

<sup>1)</sup>つまり、色々な  $f(U, t)$  で  $hf + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_n h^2 + \dots$  を表すということ。

<sup>2)</sup>真の解に  $q$  次まであっている時  $q$  位という。

<sup>3)</sup> $U_n$  から  $U_{n+1}$  を計算するのに必要な  $f(U, t)$  の評価の回数。

<sup>4)</sup>式の導出は 荻原 (2010) を参照されたい。

となる. この式は (1) 式の 1 次の近似式になっている<sup>5)</sup>. この式が (1) 式と 1 次の項まで一致するには

$$\omega_1 = 1$$

が要請される. その結果

$$U_{n+1} = U_n + hf$$

が得られる. この形はオイラー法に他ならない. 相対誤差は  $O(h)$  となる.

## 1.2 ルンゲ-クッタ型公式の 2 段 2 位公式

$p = 2$  のときのルンゲ-クッタ型公式を導く.  $p = 2$  のとき (3) 式は

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(U_n, t_n), \\ k_2 &= hf(U_n + \alpha_{21}k_1, t_n + c_2h) \end{aligned}$$

となる. ここで  $k_2$  の右辺を  $(\alpha_{21}k_1, c_2)$  の周りで 1 次の項までテイラー展開をすると,

$$\begin{aligned} k_2 &= h \left( f(U_n, t_n) + \alpha_{21}k_1 \left( \frac{\partial f(U_n, t_n)}{\partial U} \right) + c_2h \left( \frac{\partial f(U_n, t_n)}{\partial t} \right) + O(h^2) \right) \\ &= h (f + \alpha_{21}k_1 f_U + \alpha_{21}hf_t + O(h^2)). \end{aligned}$$

ここで  $\left( \frac{\partial f(U_n, t_n)}{\partial U} \right) = f_U$ ,  $\left( \frac{\partial f(U_n, t_n)}{\partial t} \right) = f_t$  とした. この式を用いて (5) 式を書くと,

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U_n + \omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 \\ &= U_n + \omega_1 hf + \omega_2 h (f + \alpha_{21}hf_U + \alpha_{21}hf_t + O(h^2)) \\ &\approx U_n + h(\omega_1 + \omega_2)f + h^2\omega_2\alpha_{21}(ff_U + f_t) \end{aligned}$$

となる. この式は (1) 式の 2 次の項までの近似式になっている. ここで

$$\frac{d^2U}{dt^2} = ff_U + f_t$$

<sup>5)</sup>何次の近似式になるかは  $h$  の次数によって決まってしまう.

なので<sup>6)</sup>, (1) 式の 2 次の項まで一致するには

$$\begin{aligned}\omega_1 + \omega_2 &= 1, \\ \omega_2 \alpha_{21} &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

が要請される. パラメータ  $\omega_1, \omega_2, \alpha_{21}$  の 3 つに対して, 式が 2 本なので自由度が 1 つ余る. この式を満たすようにパラメータは次の 2 つで選ばれることが多い.

改良オイラー法

$$\begin{aligned}\omega_1 &= 0, \omega_2 = 1, \\ c_2 &= \alpha_{21} = \frac{1}{2}\end{aligned}$$

と選んだとき, 公式の形は

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(U_n, t_n), \\ k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{2}k_1, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\ U_{n+1} &= U_n + k_2\end{aligned}\tag{7}$$

となる. この式を改良オイラー法と呼ぶ. この式は  $k_1$  で求めた値の半分の値である  $k_2$  によって  $U_{n+1}$  を評価している式である. 概略図を図 1 にまとめた.

修正オイラー法 (ホイン法)

$$\begin{aligned}\omega_1 &= \frac{1}{2}, \omega_2 = \frac{1}{2}, \\ c_2 &= \alpha_{21} = 1\end{aligned}$$

<sup>6)</sup> $U$  の 2 階微分を求める.  $U$  の 2 階微分は

$$\begin{aligned}\frac{d^2U}{dt^2} &= \frac{dU'}{dt} \\ &= \frac{df}{dt} \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{dU}{dt} \frac{\partial}{\partial U}\right) f \\ &= f_t + f f_U\end{aligned}$$

となる.

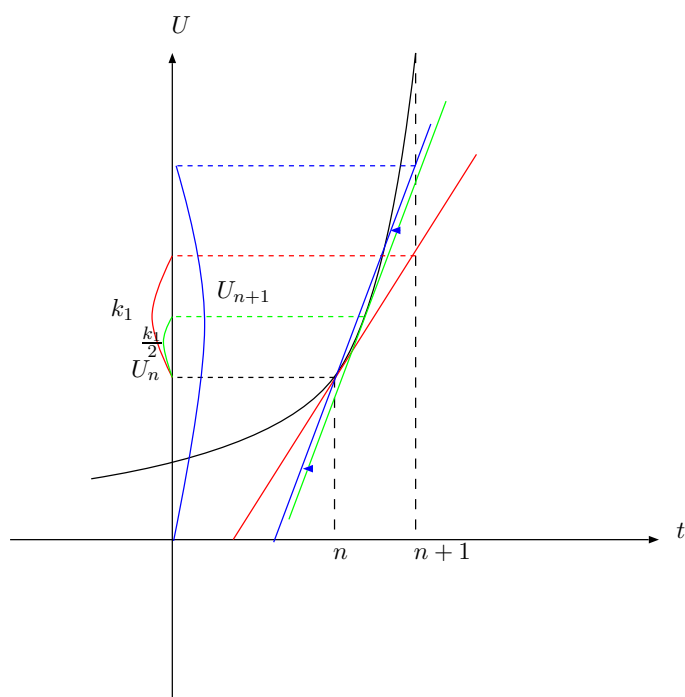


図 1: 改良オイラー法の概略図.  $U_n$  での微分した傾きを与えて  $\Delta t = h$  に対する増分  $\Delta U$  を  $k_1$ .  $U_n + \frac{k_1}{2}$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_2$  とする.  $U_{n+1}$  は  $U_n + k_2$  で評価する.

と選ぶ. この場合の対応する公式の形は,

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(U_n, t_n), \\ k_2 &= hf(U_n + k_1, t_n + h), \\ U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned} \quad (8)$$

となる. この式を修正オイラー法また, ホイン法と呼ぶ. 時間差分スキーム (2) ででたホインスキームと同じ式である. この式は  $k_1$  とそれを用いて出した  $k_2$  の二つの平均を取って  $U_{n+1}$  を評価している. 概略図を図 2 にまとめた.

2 段 2 位公式の相対誤差は  $O(h^2)$  となっている.

### 1.3 ルンゲ-クッタ型公式の 3 段 3 位公式

$p = 3$  のルンゲ-クッタ型公式にも 2 段 2 位公式のような条件式が出るがここでは省略する<sup>7)</sup>. 3 段 3 位公式でも代表的な 2 つの式を紹介する. なお, 3 段 3 位公式の

<sup>7)</sup>詳しくは荻原 (2010) を参照されたい.

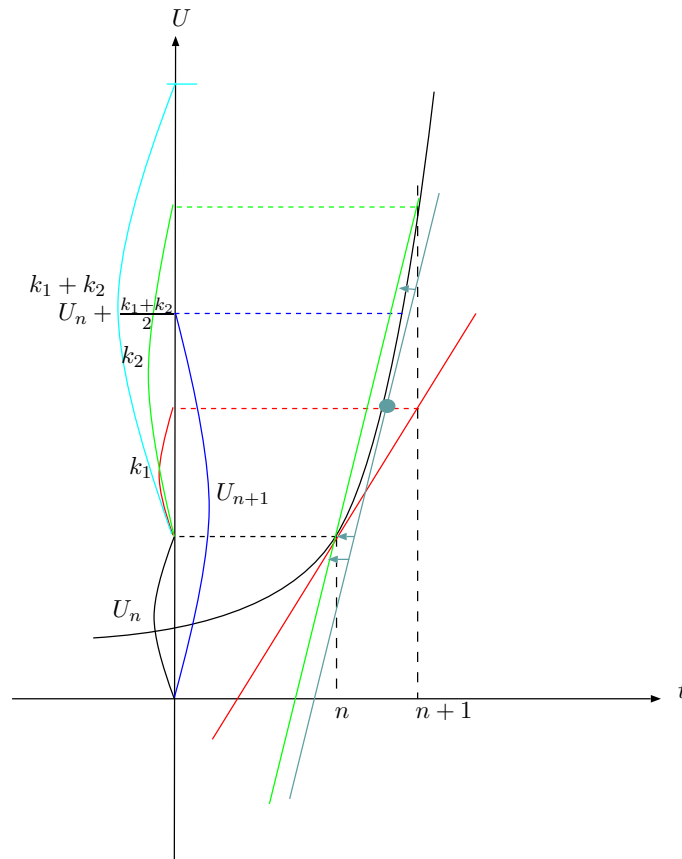


図 2: 修正オイラー法の概略図.  $U_n$  での微分した傾きを与えて  $\Delta t = h$  に対する増分  $\Delta U$  を  $k_1$ .  $U_n + k_1$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_2$  とする.  $U_{n+1}$  は  $U_n$  に  $k_1$  と  $k_2$  の平均を足すことで評価している.

相対誤差は  $O(h^3)$  となっている.

ホインの 3 次公式

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(U_n, t_n), \\
 k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{3}k_1, t_n + \frac{1}{3}h\right), \\
 k_3 &= hf\left(U_n + \frac{2}{3}k_2, t_n + \frac{2}{3}h\right), \\
 U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_3)
 \end{aligned} \tag{9}$$

となるルンゲ-クッタ型公式をホインの 3 次公式と呼ぶ. 概略図を図 3 にまとめた

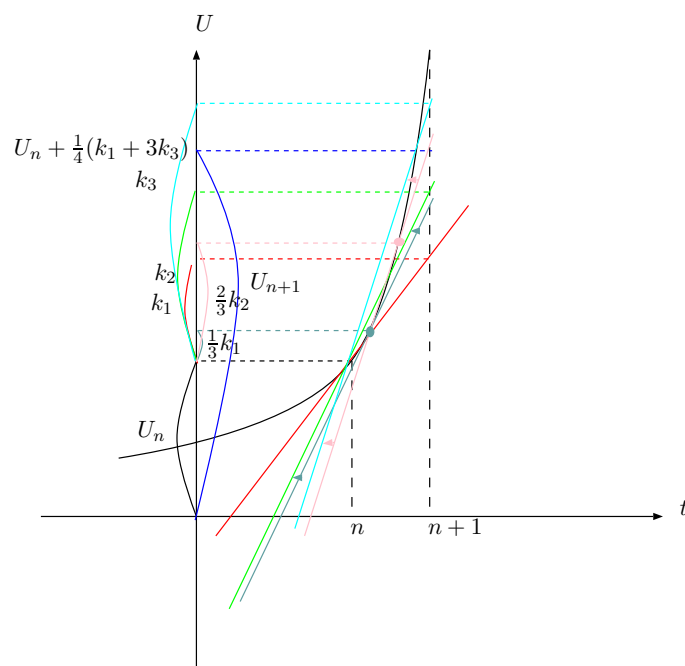


図 3: ホインの 3 次公式の概略図.  $U_n$  での微分した傾きを与えて  $\Delta t = h$  に対する増分  $\Delta U$  を  $k_1$ .  $U_n + \frac{k_1}{3}$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_2$  とする. また,  $U_n + \frac{2k_2}{3}$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_3$  とする.  $U_{n+1}$  を  $U_n$  に  $k_1$  と  $k_3$  の重み付き平均を足して評価している.

### クッタの 3 次公式

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(U_n, t_n), \\
 k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{2}k_1, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\
 k_3 &= hf(U_n - k_1 + 2k_2, t_n + h), \\
 U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)
 \end{aligned} \tag{10}$$

となるルンゲ-クッタ型公式をクッタの 3 次公式と呼ぶ. 概略図を図 4 にまとめた.

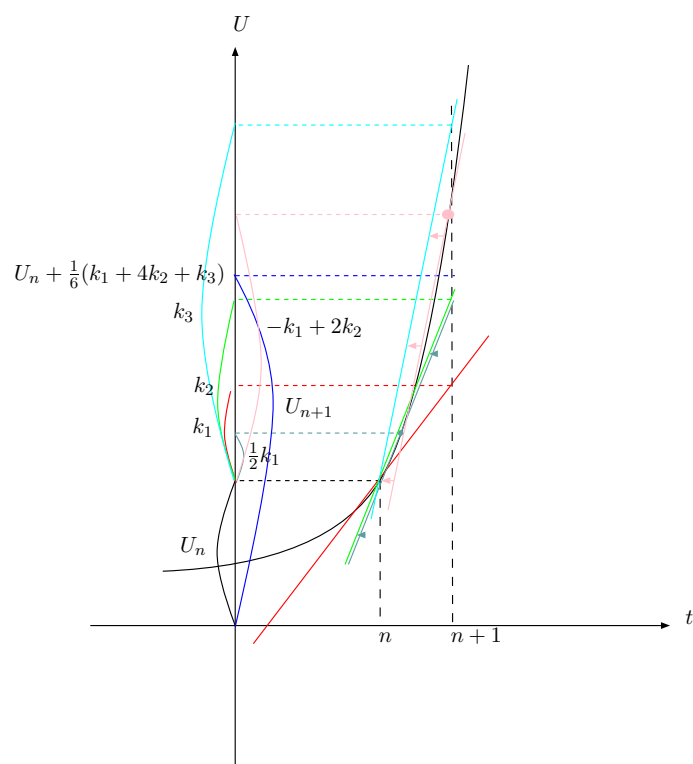


図 4: クッタの 3 次公式の概略図.  $U_n$  での微分した傾きを与えて  $\Delta t = h$  に対する増分  $\Delta U$  を  $k_1$ .  $U_n + \frac{k_1}{2}$  での傾きを  $U_n$  与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_2$  とする. また,  $U_n - k_1 + 2k_2$  での傾きを  $U_n$  与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_3$  とする.  $U_{n+1}$  を  $U_n$  に  $k_1$  と  $k_2$  と  $k_3$  の重み付き平均を足して評価している.



## 1.4 ルンゲ-クッタ型公式の 4 段 4 位公式

$p = 4$  のときでも条件式が出るがここでは省略する. 4 段 4 位公式のときも今までと同様に 2 つの代表的な公式を紹介する. なお, 4 段 4 位公式の相対誤差は  $O(h^4)$  となっている.

古典的ルンゲ-クッタ公式

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(U_n, t_n), \\k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{2}k_1, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\k_3 &= hf\left(U_n + \frac{1}{2}k_2, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\k_4 &= hf(U_n + k_3, t_n + h), \\U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\end{aligned}\tag{11}$$

となるルンゲ-クッタ型公式を古典的ルンゲ-クッタ公式, または単にルンゲ-クッタ公式と呼ぶ. 一般にルンゲ-クッタ公式と呼ばれるときはこの式をさすことが多い. 手順の概略図を図 5 にまとめた.

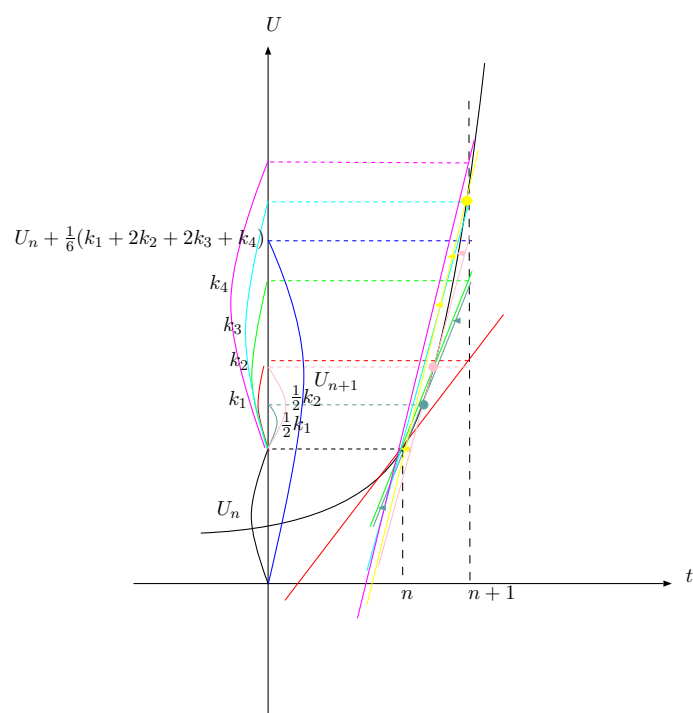


図 5: 古典的ルンゲ-クッタ公式の概略図.  $U_n$  での微分した傾きを与えて  $\Delta t = h$  に対する増分  $\Delta U$  を  $k_1$ .  $U_n + \frac{k_1}{2}$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_2$  とする. また,  $U_n + \frac{k_2}{2}$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_3$  とする. さらに  $U_n + k_3$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_4$  とする.  $U_{n+1}$  を  $U_n$  にこれらの重み付き平均を足して評価している.

クッタの  $\frac{3}{8}$  公式

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(U_n, t_n), \\k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{3}k_1, t_n + \frac{1}{3}h\right), \\k_3 &= hf\left(U_n - \frac{1}{3}k_1 + k_2, t_n + \frac{2}{3}h\right), \\k_4 &= hf(U_n + k_1 - k_2 + k_3, t_n + h), \\U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4)\end{aligned}\tag{12}$$

となる. ルンゲ-クッタ型公式をクッタの  $\frac{3}{8}$  公式と呼ぶ. 手順の概略図を図 6 にまとめた.

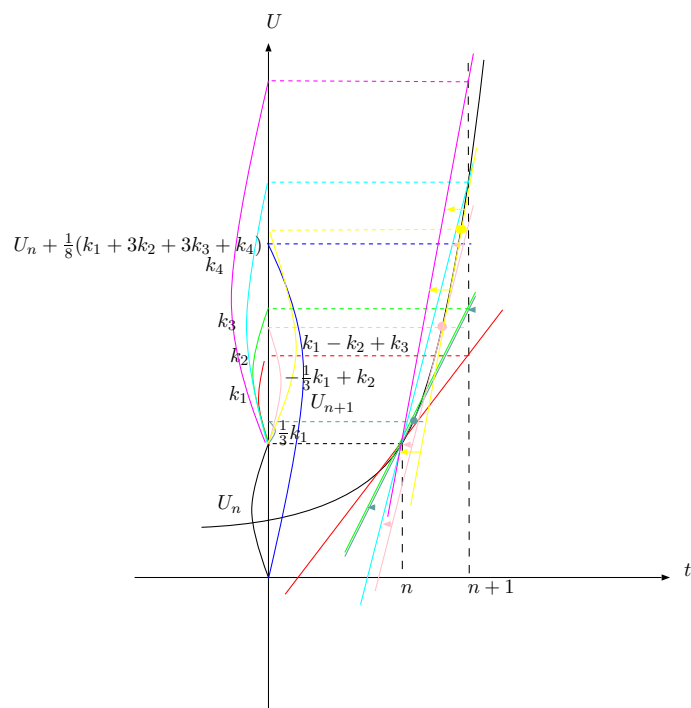


図 6: クッタの  $\frac{3}{8}h$  公式の概略図.  $U_n$  での微分した傾きを与えて  $\Delta t = h$  に対する増分  $\Delta U$  を  $k_1$ .  $U_n + \frac{k_1}{3}$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_2$  とする. 次に  $U_n + \frac{1}{3}k_1 + k_2$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_3$  とする. さらに,  $U_n + k_1 - k_2 + k_3$  での傾きを  $U_n$  で与えて  $\Delta t = h$  に対する増分を  $k_4$  とする.  $U_{n+1}$  を  $U_n$  にこれらの重み付き平均を足して評価している.

### 1.5 $p \geq 5$ のとき

$p \geq 5$  のときでも同様に式を作ることはできるが  $p$  段では  $p$  位公式は作れない.  $p$  段公式の到達可能位数<sup>8)</sup>を  $q$  とすると,  $p$  と  $q$  の間には以下の表 1 のような関係がある. 表から分かるように 5 段以上では到達可能位数が段数よりも低くなってしま

段数 $p$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
到達可能位数 $q$	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7

表 1: 段数  $p$  と到達可能位数  $q$  の関係 (石岡圭一, 2004: スペクトル法による数値計算入門より)

う. さらに, 4 段までの場合に比べて係数も急に複雑になってしまう. また, 無理やり位数を増やしたとしても滑らかでない関数<sup>9)</sup> に対してはかえって精度が低下してしまう<sup>10)</sup>. 以上の理由から 4 段 4 位公式が好んで使われる.

<sup>8)</sup>  $p$  段公式で実現できる最高位数のこと

<sup>9)</sup> 無限階微分可能ではない関数.

<sup>10)</sup> 実際の関数は  $f$  の高階微分ができないものがあるそう言った関数に対してはルンゲの高位公式は  $f$  の高階微分可能性を仮定して作られているため合わなくなる.

## 参考文献

石岡 圭一, 2004, 「スペクトル法による数値計算入門」, 東京大学出版会, ISBN:4130613057

荻原 弘堯, 2010, 「スペクトル法を用いた数値計算- 一次元線形移流方程式の場合-」

URL:[http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/~psg/doc2011/ogihara\\_B/ogihara\\_B.pdf](http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/~psg/doc2011/ogihara_B/ogihara_B.pdf)