

時間差分スキーム (5)

以下の常微分方程式を考える.

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

初期条件 : $U(0) = U_0$.

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 $U(t_{n+1})$ 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させ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¹⁾。 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 α_{ij} は重み ω_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

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

という制約がつく。

p の値によって位数 (order)²⁾ と段数 (stage)³⁾ 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、 $p = 3, 4$ は式の説明にとどめて導出はしない⁴⁾。

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

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

¹⁾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。

²⁾真の解に q 次まであっている時 q 位という。

³⁾ 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。

⁴⁾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⁵⁾. 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

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

⁵⁾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⁶⁾, (1) 式の 2 次の項まで一致するには

$$\begin{aligned}\omega_1 + \omega_2 &= 1, \\ \omega_2 \alpha_{21} &= \frac{1}{2}\end{aligned}\tag{7}$$

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. この式を満たすパラメータとして次の 2 通りが用いられることが多い.

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

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

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)

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

⁶⁾ 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.

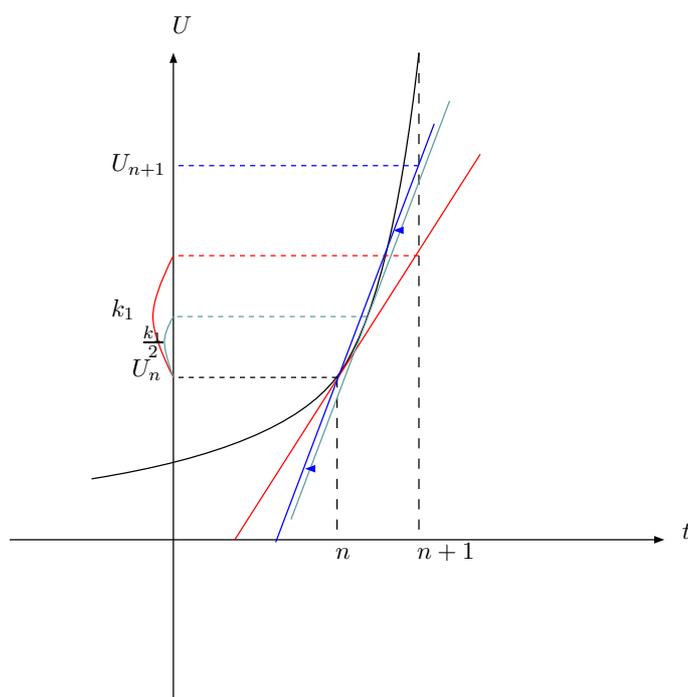


図 1: 改良オイラー法の概略図. $U = U_n$ での傾きの $\Delta t = h$ に対する増分 ΔU を k_1 とする. $U = U_n + \frac{k_1}{2}$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_2 とする. U_{n+1} は $U_n + k_2$ で評価する. 赤線は $U = U_n$ での傾き. 海緑線は $U = U_n + \frac{k_1}{2}$ での傾き. 矢印は矢印先へ線を平行移動させたことを表す. 青線は海緑線が $U = U_n$ を通るように平行移動したときの傾き.

と選ぶ. この場合の対応する公式の形は,

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(U_n, t_n), \\ k_2 &= hf(U_n + k_1, t_n + h), \\ U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned} \quad (9)$$

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.

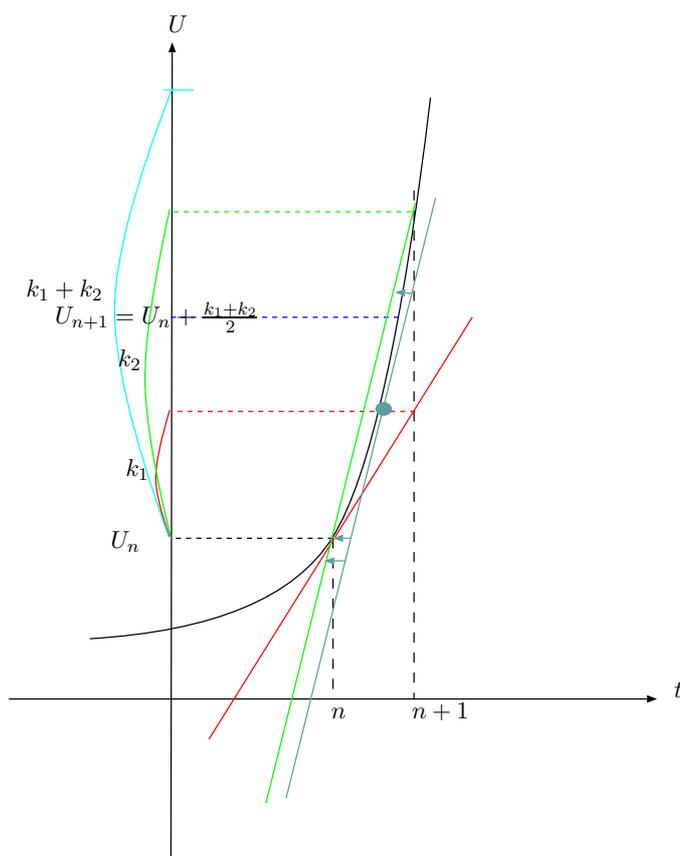


図 2: 修正オイラー法の概略図. $U = U_n$ での傾きの $\Delta t = h$ に対する増分 ΔU を k_1 とする. $U = U_n + k_1$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_2 とする. U_{n+1} は U_n に k_1 と k_2 の平均を足すことで評価している. 赤線は改良オイラーと同様. 海緑線は $U = U_n + k_1$ での傾き. 黄緑線は海緑線が $U = U_n$ を通るように平行移動させた傾き.

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 (7) 式のような条件式が出るがここでは省略する⁷⁾. 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 位公式の相対誤差は $O(h^3)$ となっている.

⁷⁾ 詳しくは荻原 (2010) を参照されたい.

ホインの 3 次公式

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(U_n, t_n), \\
 k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{3}k_1, t_n + \frac{1}{3}h\right), \\
 k_3 &= hf\left(U_n + \frac{2}{3}k_2, t_n + \frac{2}{3}h\right), \\
 U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_3)
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

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

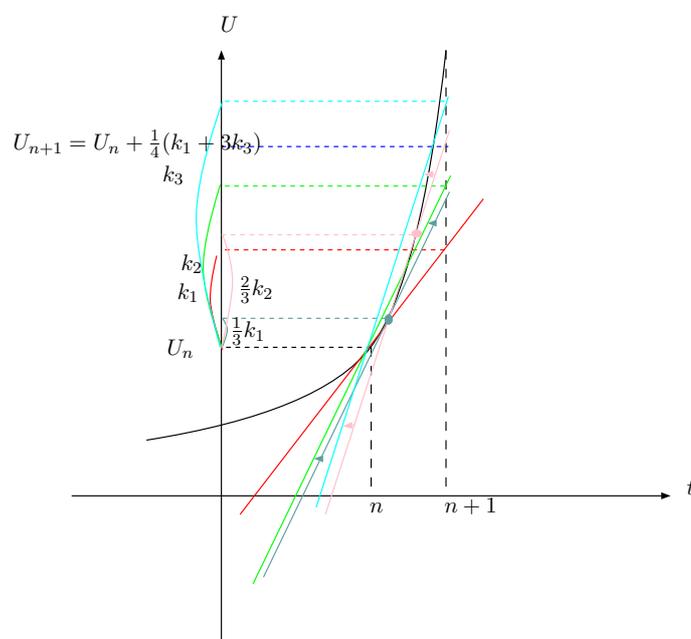


図 3: ホインの 3 次公式の概略図. $U = U_n$ での傾きの $\Delta t = h$ に対する増分 ΔU を k_1 とする. $U = U_n + \frac{k_1}{3}$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_2 とする. また, $U = U_n + \frac{2k_2}{3}$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_3 とする. $U = U_{n+1}$ は $U = U_n$ に k_1 と k_3 の重み付き平均を足すことで評価されている. 赤線は改良オイラー法と同様である. 海緑線は $U = U_n + \frac{k_1}{3}$ での傾き. 黄緑線は海緑線を $U = U_n$ が通るように平行移動させたときの傾き. 桃色線は $U = U_n + \frac{2k_2}{3}$ での傾き. 水色線は桃色線が $U = U_n$ を通るように平行移動させたときの傾き.

クッタの3次公式

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(U_n, t_n), \\
 k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{2}k_1, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\
 k_3 &= hf(U_n - k_1 + 2k_2, t_n + h), \\
 U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)
 \end{aligned}
 \tag{11}$$

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。

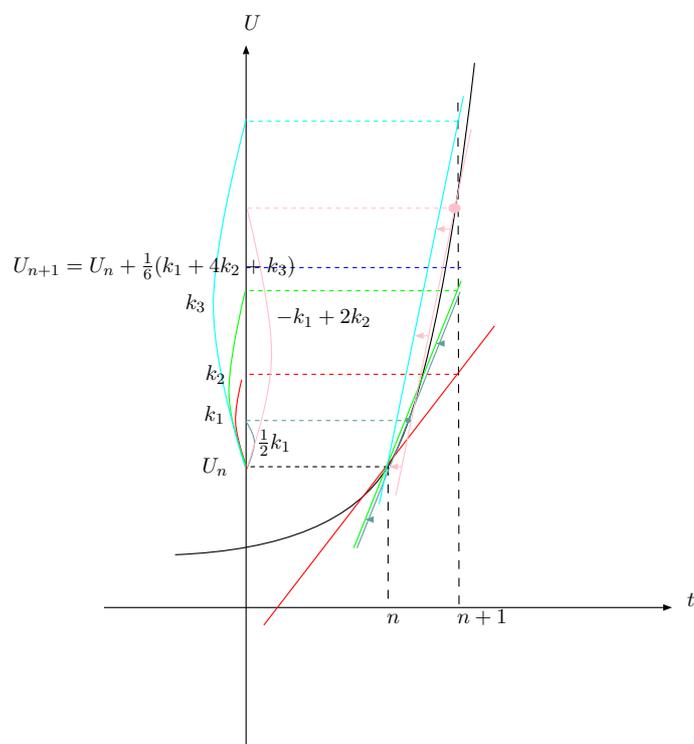


図4: クッタの3次公式の概略図. $U = U_n$ での傾きの $\Delta t = h$ に対する増分 ΔU を k_1 とする. $U = U_n + \frac{k_1}{2}$ での傾きを $U = U_n$ で与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_2 とする. また, $U = U_n - k_1 + 2k_2$ での傾きを $U = U_n$ で与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_3 とする. $U = U_{n+1}$ は $U = U_n$ に k_1 と k_2 と k_3 の重み付き平均を足すことで評価されている. 赤線, 黄緑線, 水色線はホインの3次公式と同様. 海緑線は $U = U_n + \frac{k_1}{2}$ での傾き. 桃色線は $U = U_n - k_1 + k_2$ での傾き.

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

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(U_n, t_n), \\k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{2}k_1, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\k_3 &= hf\left(U_n + \frac{1}{2}k_2, t_n + \frac{1}{2}h\right), \\k_4 &= hf(U_n + k_3, t_n + h), \\U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\end{aligned}\tag{12}$$

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.

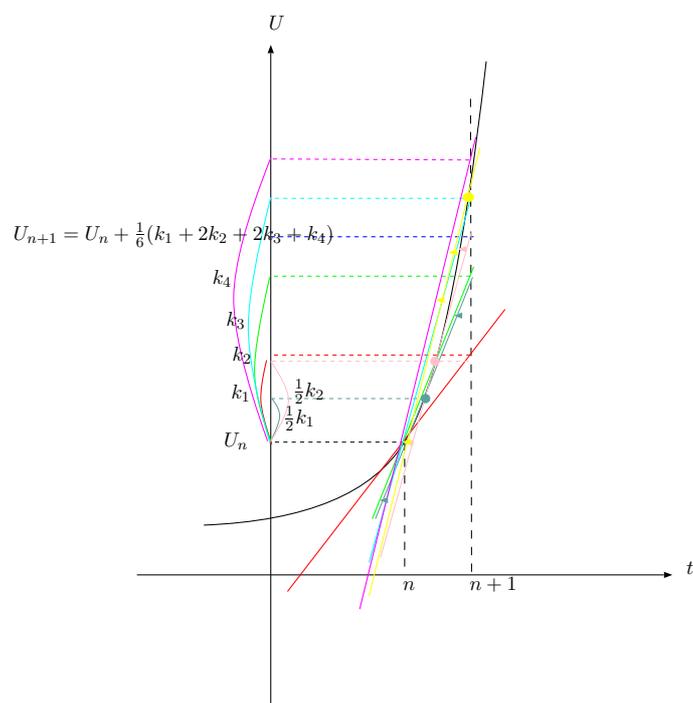


図 5: 古典的ルンゲ-クッタ公式の概略図. $U = U_n$ での傾きの $\Delta t = h$ に対する増分 ΔU を k_1 とする. $U = U_n + \frac{k_1}{2}$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_2 とする. また, $U = U_n + \frac{k_2}{2}$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_3 とする. さらに $U = U_n + k_3$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_4 とする. $U = U_{n+1}$ は $U = U_n$ に k_1, k_2, k_3, k_4 の重み付き平均を足すことで評価されている. 赤線, 黄緑線, 水色線はホインの 3 次公式と同様. 海緑線は $U = U_n + \frac{k_1}{2}$ での傾き. 桃色線は $U = U_n + \frac{k_2}{2}$ での傾き. 黄色線は $U = U_n + k_3$ での傾き. 紫線は黄色線が $U = U_n$ を通るように平行移動させたときの傾き.

クッタの $\frac{3}{8}$ 公式

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(U_n, t_n), \\k_2 &= hf\left(U_n + \frac{1}{3}k_1, t_n + \frac{1}{3}h\right), \\k_3 &= hf\left(U_n - \frac{1}{3}k_1 + k_2, t_n + \frac{2}{3}h\right), \\k_4 &= hf(U_n + k_1 - k_2 + k_3, t_n + h), \\U_{n+1} &= U_n + \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4)\end{aligned}\tag{13}$$

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。

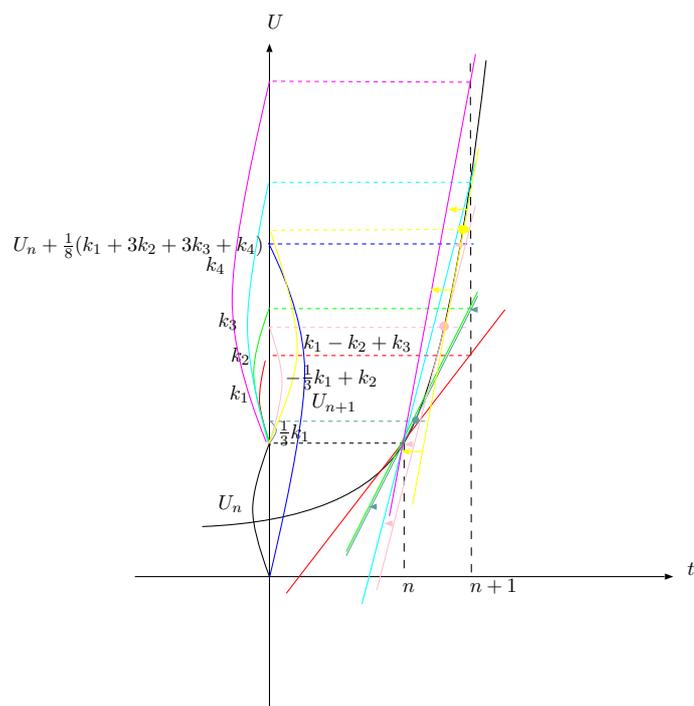


図 6: クッタの $\frac{3}{8}$ 公式の概略図. $U = U_n$ での傾きの $\Delta t = h$ に対する増分 ΔU を k_1 とする. $U = U_n + \frac{k_1}{3}$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_2 とする. 次に $U = U_n - \frac{1}{3}k_1 + k_2$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_3 とする. さらに, $U = U_n + k_1 - k_2 + k_3$ での傾きを $U = U_n$ に与えたときの $\Delta t = h$ に対する増分を k_4 とする. $U = U_{n+1}$ は $U = U_n$ に k_1, k_2, k_3, k_4 の重み付き平均を足すことで評価されている. 赤線, 黄緑線, 水色線, 紫線は古典的ルンゲ-クッタ公式と同様. 海緑線は $U = U_n + \frac{k_1}{3}$ での傾き. 桃色線は $U = U_n - \frac{1}{3}k_1 + k_2$ での傾き. 黄色線は $U = U_n + k_1 - k_2 + k_3$ での傾き.

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⁸⁾. p 段公式の到達可能位数⁹⁾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¹⁰⁾ に対してはかえって精度が低下してしまう¹¹⁾. 以上の理由から 4 段 4 位公式が好んで使われる.

⁸⁾ $p \geq 5$ のときも (7) 式と同様な条件式が出る. しかし, その条件式の自由度が足りなくなり, p 位に到達できないと思われる.

⁹⁾ p 段公式で実現できる最高位数のこと

¹⁰⁾ 無限階微分可能ではない関数.

¹¹⁾ 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