Runge-Kutta 法についてのノート (早川尚男)

本ノートでは Runge-Kutta(RK) 法についての自己完結した解説を試みる。RK 法は非常に頻繁に使われる手法でありながら、その証明の繁雑さ故に天下り的に結果を用いている場合が多く、私もそれにならっていた。従って講義をする立場としても内心忸怩たるものがあった。

本ノートではその弊を改めるべくできるだけ省略せずに計算の結果を載せるつもりであるが、やはり結果として単に繁雑な計算というだけという気もする。ここでは陽解法にのみ限定する。参考書は注釈を見よ。[1]

1 概略

RK 法は常微分方程式の数値解法として、その手軽さと収束の良さから標準的解法として採用されている。一般には連立した常微分方程式を扱う場合が殆んどであるが数学的な証明のためには最も簡単な場合について論じれば充分である。ここでは

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)) \quad y(t_0) = y_0 \tag{1}$$

という初期値問題を扱う。(1) をどうやって解くのか。最も簡単な方法は t_n から $t_{n+1} = t_n + h$ まで積分することである。

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(\tau))d\tau = y(t_n) + h\int_0^1 d\tau f(t_n + h\tau, y(t_n + h\tau)) \tag{2}$$

実際には全ての y の情報がない限り、積分は実行できないので

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{j=1}^{\nu} b_j f(t_n + c_j h, y(t_n + c_j h)), \quad n = 0, 1, \cdots \tag{3}$$

に置き換える。但し $c_1 = 0$ としておいて初項は $f(t_n, y(t_n))$ という既知の情報だけで書けるものとする。こうすれば有限の点 $t_n + c_j h$ での $y(t_n + c_j h)$ を知る事で正しい y_{n+1} 及び $y(t_{n+1})$ を知ることができる。しかしその事は近似に頼らないといけないことは容易に理解出来るであろう。

$y(t_n + c_j h)$ の近似値を ξ_j と記そう:

$$\xi_j = y(t_n + c_j h) \tag{4}$$

ξ_j を $\xi_1 = y_n$ から出発して順次決めて行くことは可能であろうか。RK 法のアイデアは ξ_j を過去の $f(t_n, \xi_1), f(t_n + hc_2), \cdots, f(t_n + c_{j-1}h, \xi_{j-1})$ の線形結合を用いて表そうというものである。

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= y_n \\
\xi_2 &= y_n + ha_{21} f(t_n, \xi_1) \\
\xi_3 &= y_n + ha_{31} f(t_n, \xi_1) + ha_{32} f(t_n + c_2 h, \xi_2) \\
&\vdots \\
\xi_\nu &= y_n + h\sum_{i=1}^{\nu-1} a_{\nu i} f(t_n + c_i h, \xi_i) \\
y_{n+1} &= y_n + h\sum_{j=1}^{\nu} b_j f(t_n + c_j h, \xi_j)
\end{aligned} \tag{5}$$

[1] A. Iserles, A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations (Cambridge Univ. Press, 1996): 三井著：微分方程式の数値解法 I(岩波応用数学 5(方法 3), 1993).

行列 $A=(a_{ji})_{j,i=1,2,\cdots,\nu}$ は RK 行列と呼ばれ、ここに現われていない行列要素は 0 とする。また

$$
{}^T\mathbf{b}=(b_1,b_2,\cdots,b_\nu), \quad {}^T\mathbf{c}=(c_1,c_2,\cdots,c_\nu) \tag{6}
$$

はそれぞれ重み (weight)、ノード (node) である。ここで (5) 式は ν 段階を持つと呼ぶ。

こうして問題はどのように RK 行列を選ぶのか、同時に重みとノードも如何に決定するのかという問題に変わった。最も直観的な方法は (t_n,y_n) のまわりで Taylor 展開を行い、係数を無矛盾に決める方法である。

2 1段1次公式

RK 法の最低次の近似は 1 段 1 次のものである。これは Euler 法に一致する。実際、(2) 式において

$$
\int_0^1 f(t,y)d\tau \simeq \int_0^1 d\tau f(t_n,y(t_n)) = hf(t_n,y(t_n)) \tag{7}
$$

となる。自明な結果であるが、最も自然な計算法になっている。

3 2段2次公式

非自明な場合の最低次が 2 段 2 次の RK 法となる。まずは (2) 式から

$$
f(t_n+h\tau,y(t_n+h\tau)) \simeq f(t_n+h\tau,y(t_n)+\frac{dy}{dt_n}h\tau+\cdots) \simeq f(t_n,y(t_n))+(f_t+f_y y)h\tau+\cdots \tag{8}
$$

が成立する。ここで $f_y=\partial f(t_n,y(t_n))/\partial y$ 等である。最終的な表式で τ に依存するのは τ だけなので直ちに積分でき

$$
h\int_0^1 d\tau f(t_n+h\tau,y(t_n+h\tau)) = hf(t_n,y(t_n))+\frac{h^2}{2}(f_t+f_y f)+O(h^3) \tag{9}
$$

という式が成立する。この式は 2 次の Taylor 展開と整合する exact な展開となっている。

一方、(3) 式は重みやノードを含んだ形になっている。(5) より $\xi_2=y_n+ha_{21}f(t_n,\xi_1)$ であるから

$$
f(t_n+c_2h,\xi_2)=f(t_n,y_n)+h[c_2f_t(t_n,y(t_n))+a_{21}f_yf(t_n,y(t_n))]+O(h^3) \tag{10}
$$

となる。従って (5) の最後の式は

$$
y_{n+1}=y_n+h(b_1+b_2)f(t_n,y(t_n))+h^2b_2[c_2f_t+a_{21}f_yf]+O(h^3) \tag{11}
$$

となる。(11) 式は (9) を用いた正確な展開

$$
\tilde{y}(t_{n+1})=y(t_n)+hf(t_n,y(t_n))+\frac{h^2}{2}(f_t+f_yf)+O(h^3) \tag{12}
$$

と整合する必要がある。両者の比較から 2 次の RK 法に対する適合条件は

$$
b_1+b_2=1, \quad b_2c_2=\frac{1}{2}, \quad a_{21}=c_2 \tag{13}
$$

が直ちに導かれる。

2 段 2 次の公式に含まれるパラメータは 4 つであるが、(13) の条件は 3 つしかない。従って 2 段 2 次の公式は一意に決まらない。よく用いられるのは

$$
\begin{aligned}
{}^T\mathbf{c} &= (0,1/2), \quad {}^T\mathbf{b}=(0,1), \quad a_{21}=1/2, \\
{}^T\mathbf{c} &= (0,2/3), \quad {}^T\mathbf{b}=(1/4,3/4), \quad a_{21}=2/3, \\
{}^T\mathbf{c} &= (0,1), \quad {}^T\mathbf{b}=(1/2,1/2), \quad a_{21}=1,
\end{aligned}
$$

等である。

4　3段3次公式

3段の公式も同様に求める事が出来る。$dy/dt = f(t, y(t)) = 1$ のときも RK 法が使える事を考慮すると

$$\sum_{i=1}^{j-1} a_{ji} = c_j, \quad j = 1, 2, \cdots, \nu \tag{14}$$

が成立する必要がある。実際、このとき (4) 式から $\xi_j = y(t_n + c_j h) = y(t_n) + c_j h$ が成立するが (5) 式から $\xi_j = y_n + h\sum_{i=1}^{j-1} a_{ji}$ が要求される。両者を等値すると (14) が導かれることになる。この条件は

$$\frac{dy}{dt} = f(y), \quad y(t_0) = y_0 \tag{15}$$

という autonomous 方程式と無矛盾である。(15) 式を仮定することで2段2次公式を導いた方法をそのまま用いる場合と比べていくらか計算を簡略化できる。

以上の条件より

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= y \to f(\xi_1) = f \\
\xi_2 &= y(t_n + c_2 h) = y + h a_{21} f = y + h c_2 f \to f(\xi_2) = f + h c_2 f f_y + \frac{h^2}{2} c_2^2 f^2 f_{yy} + O(h^3) \\
\xi_3 &= y + h a_{31} f(\xi_1) + h a_{32} f(\xi_2) = y + h(c_3 - a_{32}) f(\xi_1) + h a_{32} f(\xi_2) \\
&= y + h c_3 f + h^2 a_{32} c_2 f f_y + O(h^3), \\
&\to f(\xi_3) = f + h c_3 f f_y + h^2 (a_{32} c_2 f f_y^2 + \frac{1}{2} c_3^2 f^2 f_{yy}) + O(h^3)
\end{aligned} \tag{16}$$

が導かれる。従って

$$\begin{aligned}
y_{n+1} &= y + h b_1 f + h b_2 (f + h c_2 f f_y + \frac{h^2}{2} c_2^2 f^2 f_{yy}) \\
&\quad + h b_3 [f + h c_3 f f_y + h^2 (a_{32} c_2 f f_y^2 + \frac{1}{2} c_3^2 f^2 f_{yy})] \\
&= y_n + h(b_1 + b_2 + b_3) f + h^2 (c_2 b_2 + c_3 b_3) f_y f + h^3 [\frac{1}{2}(b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2) f_{yy} f^2 + b_3 a_{32} c_2 f_y^2 f]
\end{aligned} \tag{17}$$

となる。一方で (15) 式を考慮し、(8) や (12) をそのまま拡張した正しい展開は

$$\tilde{y}(t_{n+1}) = y(t_n) + h f + \frac{h^2}{2} f_y f + \frac{h^3}{6}(f_{yy} f^2 + f_y^2 f) + O(h^4) \tag{18}$$

となる。(17) と (18) の比較から

$$b_1 + b_2 + b_3 = 1, \quad b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{1}{2}, \quad b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{1}{3}, \quad b_3 a_{32} c_2 = \frac{1}{6} \tag{19}$$

である。ここでも条件が足りないのでいろいろな組合せが可能になる。最も良く使われるのは

$$\begin{aligned}
{}^T\mathbf{c} &= (0, 1/2, 1), \quad {}^T\mathbf{b} = (1/6, 2/3, 1/6), \quad a_{21} = 1/2, a_{31} = -1, a_{32} = 2 \\
{}^T\mathbf{c} &= (0, 2/3, 2/3), \quad {}^T\mathbf{b} = (1/4, 3/8, 3/8), \quad a_{21} = 2/3, a_{31} = 0, a_{32} = 2/3
\end{aligned} \tag{20}$$

等である。

5　4段4次公式

さていよいよ4段4次のいわゆる古典的 Runge-Kutta 法について議論してみよう。より見通しの良い方法はグラフ理論を用いるが、4段4次であれば3段3次の方法をそのまま用いることが可能になる。ここで仮定されているのは (14),(15) の両式である。

4 段公式の導出法は殆んど 3 段の場合と並行している[2]。(16) 式の ξ_1, ξ_2 は

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= y \to f(\xi_1) = f \\
\xi_2 &= y(t_n + c_2 h) = y + h a_{21} f = y + h c_2 f \\
&\to f(\xi_2) = f + h c_2 f f_y + \frac{h^2}{2} c_2^2 f^2 f_{yy} + \frac{1}{6} h^3 c_2^3 f^3 f_{yyy} + O(h^4)
\end{aligned} \tag{21}$$

となる。ここで (14) を用いている事に注意されたい。ξ_3 も同様に

$$\begin{aligned}
\xi_3 &= y + h a_{31} f(\xi_1) + h a_{32} f(\xi_2) = y + h(c_3 - a_{32}) f(\xi_1) + h a_{32} f(\xi_2) \\
&= y + h c_3 f + h^2 a_{32} c_2 f f_y + \frac{1}{2} h^3 a_{32} c_2^2 f^2 f_{yy} + O(h^4), \\
&\to f(\xi_3) = f + h c_3 f f_y + h^2 (a_{32} c_2 f f_y^2 + \frac{1}{2} c_3^2 f^2 f_{yy}) \\
&\quad + h^3 (\frac{1}{2} a_{32} c_2^2 f^2 f_y f_{yy} + a_{32} c_2 c_3 f^2 f_y f_{yy} + \frac{1}{6} c_3^3 f^3 f_{yyy}) + O(h^4)
\end{aligned} \tag{22}$$

である。ξ_4 も繁雑であるが同様に計算できる。まず

$$\begin{aligned}
\xi_4 &= y + h a_{41} f(\xi_1) + h a_{42} f(\xi_2) + h a_{43} f(\xi_3) \\
&= y + (c_4 - a_{42} - a_{43}) f + a_{42} (h f + h^2 c_2 f f_y + \frac{h^2}{2} c_2^2 f^2 f_{yy}) \\
&\quad + a_{43} \{ h f + h^2 c_3 f f_y + h^3 (a_{32} c_2 f f_y^2 + \frac{c_3^2}{2} f^2 f_{yy}) \} + O(h^4) \\
&= y + h c_4 f + h^2 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) f f_y + h^3 \{ a_{32} a_{43} c_2 f f_y^2 + \frac{1}{2} (a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) f^2 f_{yy} \} + O(h^4)
\end{aligned} \tag{23}$$

であるから結果として $f(\xi_4)$ は

$$\begin{aligned}
f(\xi_4) &= f + h c_4 f f_y + h^2 [(a_{42} c_2 + a_{43} c_3) f f_y^2 + \frac{1}{2} c_4^2 f^2 f_{yy}] \\
&\quad + h^3 [a_{32} a_{43} c_2 f f_y^3 + (\frac{1}{2} (a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) + a_{42} c_2 c_4 + a_{43} c_3 c_4) f^2 f_y f_{yy} + \frac{1}{6} c_4^3 f^3 f_{yyy}]
\end{aligned} \tag{24}$$

となる。(21)-(24) 式を (5) 式の一番下の式に代入すると

$$\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + (b_1 + b_2 + b_3 + b_4) f + h^2 (b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_4 c_4) f f_y \\
&\quad + h^3 [\frac{1}{2} B_1 f^2 f_{yy} + B_2 f f_y^2] + h^4 [\frac{1}{6} C_1 f^3 f_{yyy} + C_2 f^2 f_y f_{yy} + a_{32} a_{43} b_4 c_2 f f_y^3]
\end{aligned} \tag{25}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}
B_1 &= b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 + b_4 c_4^2 \\
B_2 &= a_{32} b_3 c_2 + a_{42} b_4 c_2 + a_{43} b_4 c_3 \\
C_1 &= b_2 c_2^3 + b_3 c_3^3 + b_4 c_4^3 \\
C_2 &= \frac{1}{2} a_{32} b_3 c_2^2 + a_{32} b_3 c_2 c_3 + \frac{1}{2} a_{42} b_4 c_2^2 + \frac{1}{2} a_{43} b_4 c_3^2 + a_{42} b_4 c_2 c_4 + a_{43} b_4 c_3 c_4
\end{aligned} \tag{26}$$

である。一方で (18) 式を $O(h^4)$ の式に書き換えると

$$\tilde{y}(t_{n+1}) = y(t_n) + h f + \frac{h^2}{2} f_y f + \frac{h^3}{6} (f_{yy} f^2 + f_y^2 f) + \frac{h^4}{24} (f^3 f_{yyy} + 4 f^2 f_y f_{yy} + f f_y^3) + O(h^5) \tag{27}$$

である。(25),(27) の比較から次の諸式を得る。

$$b_1 + b_2 + b_3 + b_4 = 1 \tag{28}$$

[2] TA の矢島氏に計算のチェックをして頂いた。

$$b_2c_2 + b_3c_3 + b_4c_4 = \frac{1}{2} \tag{29}$$

$$b_2c_2^2 + b_3c_3^2 + b_4c_4^2 = \frac{1}{3} \tag{30}$$

$$a_{32}b_3c_2 + a_{42}b_4c_2 + a_{43}b_4c_3 = \frac{1}{6} \tag{31}$$

$$b_2c_2^3 + b_3c_3^3 + b_4c_4^3 = \frac{1}{4} \tag{32}$$

$$\frac{1}{2}a_{32}b_3c_2^2 + a_{32}b_3c_2c_3 + \frac{1}{2}a_{42}b_4c_2^2 + \frac{1}{2}a_{43}b_4c_3^2 + a_{42}b_4c_2c_4 + a_{43}b_4c_3c_4 = \frac{1}{6} \tag{33}$$

$$a_{32}a_{43}b_4c_2 = \frac{1}{24}. \tag{34}$$

こらららの諸式ではやはり条件が足りないので様々な組合せが可能になる。ここで 4 次の RK 法の

$$^T\mathbf{c} = (0, 1/2, 1/2, 1), \quad ^T\mathbf{b} = (1/6, 1/3, 1/3, 1/6), \quad a_{21} = 1/2, a_{32} = 1/2, a_{43} = 1, a_{31} = a_{41} = a_{42} = 0 \tag{35}$$

が上式の解となっていることは代入することで容易に確かめられる。