「ルンゲ=クッタ」
「おいしかった？」

M1 高山正輝

平成 22 年 9 月 28 日

1　Runge-kutta 法の紹介

Runge-kutta 法（以下 RK）は常微分方程式を数値計算によって解く上で最もポピュラーな方法である。それ故に様々な改良を重ねられ、多くの「亜種」が存在したりする。しかしここでは最もオーソドックスな方法を紹介したい。一口にルンゲ=クッタと言っても精度のとりかたが様々あり、代表的なものは 2 次精度と 4 次精度の RK である。2 次精度は「2 次のルンゲ=クッタ」と「ホイン法」が有名で、用もないのに数値計算の教科書にちゃっかり載っている。一方 4 次の RK はオーソドックスなものの他にルンゲ=クッタ・ギル法（Kuroshima et al 2010）などが挙げられる。RK 法というと普通は精度の良い 4 次の RK を指す。今回は「2 次のルンゲ=クッタ」、「ホイン法」そして「普通の」ルンゲ=クッタの原理について紹介するが、、、

別に、アンタのためじゃないんだからねっ !!

2　2 次精度のルンゲ=クッタ法

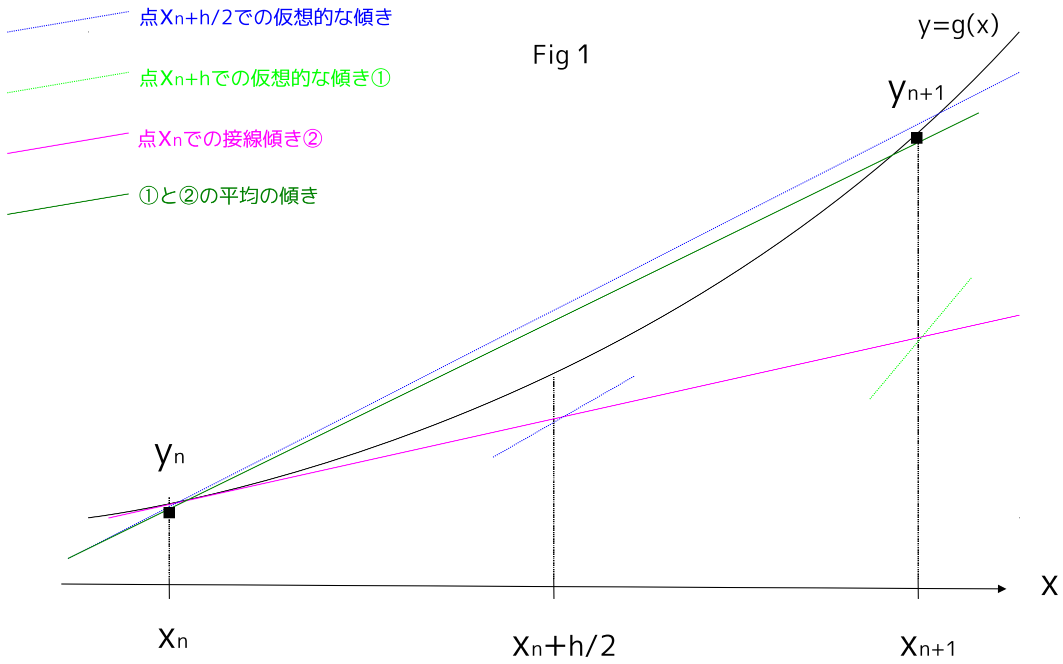
まず始めに 2 次の RK、およびホイン法の式を書き出してみよう。
2 次の RK

$$\frac{dy}{dx} \equiv f(x,y)$$
$$K_1 = hf(x_n, y_n)$$
$$K_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{K_1}{2})$$
$$y_{n+1} = y_n + K_2$$

次にホイン法

$$\frac{dy}{dx} \equiv f(x,y)$$
$$K_1 = hf(x_n, y_n)$$
$$K_2 = hf(x_n + h, y_n + K_1)$$
$$y_{n+1} = y_n + \frac{K_1 + K_2}{2}$$

である。この表記をみて図形的に意味を理解できたあなたはすばらしい。できなかったあなたはこれからご説明しましょう。では「よくわかる (?) 解説」。まずは Fig 1 をご覧あれ。2 次の RK での K_1 は、初期値（点 (x_n, y_n)）での接線の傾き（にステップ幅を掛けたもの）となっている。したがって K_2 の成分である、$y_n + \frac{K_1}{2}$ は $Fig\ 1$ の $x_n + \frac{h}{2}$ での ”仮想的な ”y の値を意味している。これらを関数 f に代入するもんだから、さあ大変。$f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{K_1}{2})$



は $x_n + \frac{h}{2}$ での真の傾きとはならないのである。だが、この f の値を平均の傾きとしてみたらどうだろう。すなわち、

$$\frac{y(x+h)-y(x)}{h} \approx f(x_n+\frac{h}{2}, y_n+\frac{K_1}{2})$$

と考えるのである。すると「まあ、平均の傾き使ってるし、オイラー法より精度いいんじゃね？」って話になるわけで、実際精度もオイラー法は 1 次なのに対して、2 次ルンゲ=クッタはその名の通り 2 次の精度がでているのである。

同様のことがホイン法でも議論できる。ホイン法では初期値での真の傾きと、そこから伸ばした直線によって得られる”仮想的な ”y_{n+1} を用いて（この y_{n+1} はオイラー法で得られた y_{n+1} に一致している。）得られた傾き $f(x_n+h, y_n+K_1)$ との相加平均をとったものを平均の傾きと考え、つまり、

$$\frac{y(x+h)-y(x)}{h} \approx \frac{f(x_n,y_n)+f(x_n+h,y_n+K_1)}{2}$$

と思って真の y_{n+1} を求めるために利用するのである。以上が 2 次精度の RK のお話。

3　2 次精度は本当に出ているか？

数値計算をするときによく「何次の精度で計算してる」や「この精度が欲しい」ということが話題になる。では実際に上で紹介した 2 つの解法は 2 次の精度が出ているのだろうか？これから見ていくことにする。
まず始めに 2 つの関数を定義する。

$$G(x,y) \equiv \frac{y(x+h)-y(x)}{h}$$
$$y_{n+1} \equiv y_n + hF(x_n,y_n)$$

また、初期値は真の値とする。

$$y(x) = y_n$$

次に関数 G を点 (x,y) のまわりで展開する。

$$G(x,y) = \frac{1}{h}(y(x)+hy'-\frac{h^2}{2!}y''+O(h^3)-y(x)) = f(x,y)+\frac{h}{2}(f_x+ff_y)+O(h^2)$$

のように書ける。関数 F は以下のような形をしているものを考える。

$$F(x_n,y_n) \equiv Af(x_n,y_n) + Bf(x_n+sh,y_n+th)$$

点 (x_n,y_n) のまわりで展開すると、

$$F(x_n,y_n) = Af + B(f+shf_x+thf_y) = (A+B)f + Bshf_x + Bthf_y + O(h^2)$$

である。よって 2 次の精度、すなわち、

$$y(x+h) - y_{n+1} = O(h^3)$$

となるためには関数 F,G の係数の比較から、

$$A+B = 1$$
$$Bsh = \frac{h}{2}$$
$$Bth = \frac{h}{2}f$$

を実現しなけれがならないだろう。そこで例えば $f(x_n,y_n)$ の値は使いたくない、と思うならば $A=0$,$B=1$ とすればよく、この場合 $s=\frac{1}{2}$,$t=\frac{1}{2}f$ となって、2 次の RK の形に一致する。また、傾きの平均を使いたいと思えば、$A=B=\frac{1}{2}$ ととり $s=1$,$t=f$ となってホイン法の形に一致する。以上から先ほど紹介した 2 つの解法はしっかり 2 次の精度が出ていることがわかる。このように A,B,s,t のとり方次第でいかようにもなるので、解法は無限通り存在する。もっとも、安定性など数値計算特有の問題を考えなければだが。さらに、4 次の RK の精度の評価も同様の方法で行えばよい。まあ、4 次まで展開するのは大変だし、関数 F も関数 f が 4 つも出てくるので証明するのは老後の楽しみにすると良いだろう。

4　4 次のルンゲ=クッタ法

ついに真打ち登場である。このぐらいの精度が出るとようやく科学計算に耐えられる、と言えるのではなかろうか。では例によって式を書き下してみる。

$$\frac{dy}{dx} \equiv f(x, y)$$

$$K_1 = hf(x_n, y_n)$$

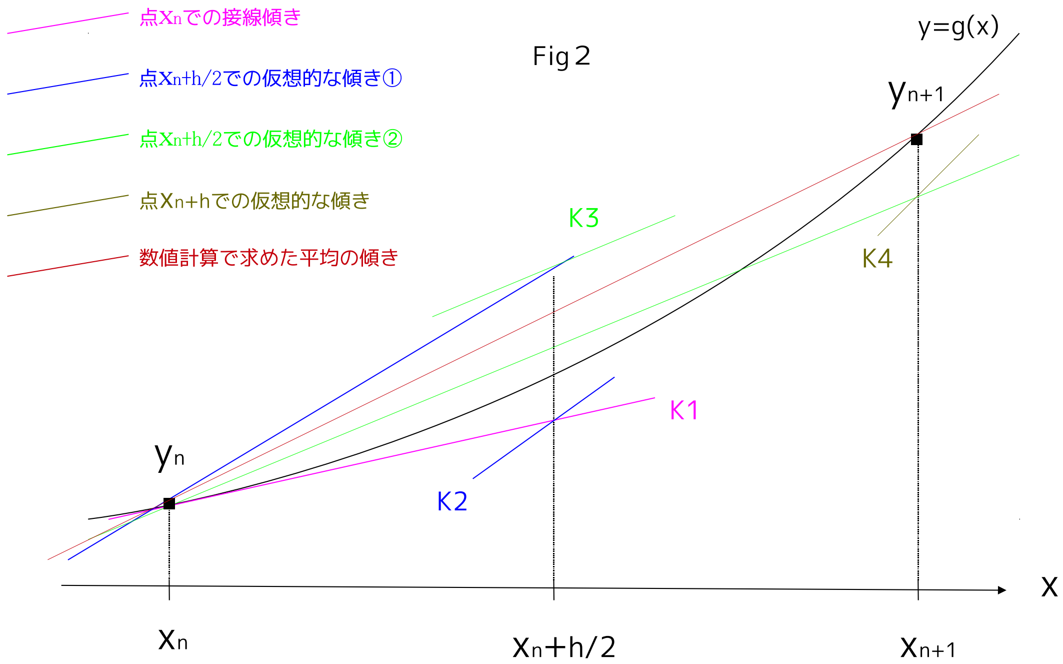
$$K_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{K_1}{2})$$

$$K_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{K_2}{2})$$

$$K_4 = hf(x_n + h, y_n + K_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

とても見慣れた形である。何か故郷に帰ってきたような安心感さえ漂わせている、そんな感じである。これも 2 次の RK 同様図形的に理解するのが手っ取り早い。Fig 2 を見てほしい。これを見てもらうと、まず第一段階として



点 (x_n, y_n) の接線 (傾きは K1 に依存する) から $x_n + \frac{h}{2}$ での仮想的な y の値 $y_n + \frac{K_1}{2}$ を求め、それを使って作った仮想的な傾き (点 (x_n, y_n) での傾きと $(x_n + h, y_{n+1})$ での傾きの平均のようなもの。K2 に依存する) の直線を (x_n, y_n) から引き、再び $x_n + \frac{h}{2}$ での仮想的な y の値 $y_n + \frac{K_2}{2}$ を求め、それを使って作った仮想的な傾き (点 (x_n, y_n) での傾きと $(x_n + h, y_{n+1})$ での傾きの平均のようなもの。K3 に依存する) の直線を (x_n, y_n) から引き、仮想的な y_{n+1} を作り、その点での仮想的な傾き (K4 に依存する) を求める。最後に今まで導いた傾きの平均をとるのだが、このとき、K2,K3 はそれぞれ「2 つの傾きの平均値」のようなものなので、導いた傾きの数 (母集団の数) は 6 個に等しい。よって、K2,K3 への重みも考慮すると最終的には点 (x_n, y_n) から $(x_n + h, y_{n+1})$ への平均の傾きは、$\frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$ となる。したがって、

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

が導かれるのである。

以上が基本的なルンゲ=クッタの紹介である。