12.3 精度の向上

オイラー法は非常に簡便でわかりやすい方法であるが，刻み幅を小さくとってもなかなか解の精度が上がらないという欠点がある．そこで本節では精度を上げる方法を紹介する．

微分方程式 (12.1) を解くためにテイラー展開の公式

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{1}{2}h^2 y''(x) + \frac{1}{6}h^3 y^{(3)} + \cdots$$

$$= y(x) + h\left\{y'(x) + \frac{1}{2}hy''(x) + \frac{1}{6}h^2 y^{(3)} + \cdots\right\} \qquad (12.7)$$

を利用を考える．上式の括弧内の y の導関数を微分方程式 (12.1) を用いて書き換えれば

$$y(x+h) = y(x) + h\left\{f(x,y) + \frac{1}{2}h\frac{df}{dx} + \frac{1}{6}h^2\frac{d^2 f}{dx^2} + \cdots\right\} \qquad (12.8)$$

となる．いま h が小さいとして上式右辺の括弧内の h のベキの項を省略すればオイラー法の式 (12.4)（ただし $h = \Delta x$）が得られる．このとき省略した項が誤差になるが，各導関数の値が同程度の大きさであると仮定すると，h が小さいとしたため，誤差の項の中でもっとも大きな項（主要項）は h の項であり，$h^2, h^3, \cdots$ の項は小さい．このとき誤差は h の（1 乗の）オーダーであると考えられるためオイラー法は精度が 1 であるとよばれる．

この議論からオイラー法より精度のよい公式をつくるには式 (12.7) の右辺の括弧内の項をなるべく多く残せばよいことがわかる．そこで h の項を残し，h^2 以上の項を省略すれば，式 (12.8) のかわりに

$$y(x+h) = y(x) + h\left\{f(x,y) + \frac{1}{2}h\frac{df}{dx}\right\} \qquad (12.9)$$

となる．ここで f は x と y の関数であるから，

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} = f_x + f_y f \qquad (12.10)$$

となることに注意すれば，式 (12.9) は

$$y(x+h) = y(x) + h\left\{f(x,y) + \frac{1}{2}h(f_x + f_y f)\right\} \qquad (12.11)$$

と書き換えられる．この公式の精度は 2 であるが，偏微分 f_x，f_y を計算する必要がある．そこで式 (12.11) と精度は同じであるが偏微分の計算の必要がない方法をつくることを考える．ただし，その場合には x と $x+h$ の間に別の評価点が必要になる．

いま，x から少し離れた点 $x+ph$ における関数 y の値は式 (12.4) から $y + phf(x,y)$ に近いと考えられるため，それを $y + qhf(x,y)$ とおく．ただし p, q はこれから定める定数である．このとき $f(x+ph, y+qhf)$ の値を $f(x,y)$ を使って評価してみよう．それには 2 変数に関するテイラー展開

$$f(x+\Delta x, y+\Delta y) = f(x,y) + f_x\Delta x + f_y\Delta y + O((\Delta x)^2, \Delta x\Delta y, (\Delta y)^2) \qquad (12.12)$$

を利用する．この式で Δx を ph，Δy を qhf とおけば

$$f(x+ph, y+qhf) = f(x,y) + phf_x + qhff_y + O(h^2) \qquad (12.13)$$

となるため，r，s を適当な定数として

$$rf(x,y) + sf(x+ph, y+qhf) = (r+s)f(x,y) + sphf_x + sqhff_y + O(h^2) \qquad (12.14)$$

という等式が得られる．ここで式 (12.11) の右辺の中括弧内に注目して式 (12.14) の右辺と比較すれば，もし

$$r + s = 1, \quad sp = \frac{1}{2}, \quad sq = \frac{1}{2} \qquad (12.15)$$

が成り立てば誤差 h^2 の範囲内で両者は一致することがわかる．ところが，微分方程式の近似解として式 (12.11) を用いた場合にはその括弧内にはすでに h^2 の誤差を含んでいたことを思い出すと，中括弧内の式を式 (12.14) の左辺で置き換えてもよいことがわかる．すなわち，式 (12.15) の条件のもとで，精度 2 の近似式

$$y(x+h) = y(x) + h\{rf(x,y) + sf(x+ph, y+qhf(x,y))\} \qquad (12.16)$$

が得られる．この場合はもはや偏微分を計算する必要はない．

河村哲也著「数値計算入門」
サイエンス社

12.4 ルンゲ・クッタ法

式 (12.15) は 4 つの未知数 p, q, r, s に対する 3 つの方程式であるため解はひととおりには決まらないが，たとえば

$$r = 1/2, \quad s = 1/2, \quad p = 1, \quad q = 1$$

とする．このとき式 (12.16) は

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}\{f(x_j, y_j) + f(x_j + h, y_j + hf(x_j, y_j))\} \tag{12.17}$$

となる．同じことであるが式 (12.17) は

$$s_1 = f(x_j, y_j), \quad s_2 = f(x_j + h, y_j + hs_1), \quad y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}(s_1 + s_2)$$

とも書ける．この方法はホイン法または **2 次のルンゲ・クッタ法**とよばれている．

同じ考え方でテイラー展開式を 4 次の項まで残すと，4 次精度の公式が得られる．このとき，13 個の未知数に対する 11 個の方程式になるため解は不定になるが，係数が簡単になるものを選ぶと次の公式が得られる．

$$\begin{aligned} s_1 &= f(x_j, y_j) \\ s_2 &= f(x_j + h/2, y_j + hs_1/2) \\ s_3 &= f(x_j + h/2, y_j + hs_2/2) \\ s_4 &= f(x_j + h, y_j + hs_3) \\ y_{j+1} &= y_j + \frac{h}{6}(s_1 + 2s_2 + 2s_3 + s_4) \end{aligned} \tag{12.18}$$

この方法は **4 次のルンゲ・クッタ法**（または単に**ルンゲ・クッタ法**）とよばれるが，常微分方程式の初期値問題を解く標準的な方法のひとつである．

4 次のルンゲ・クッタ法のアルゴリズム

1. $f(x, y)$, a, b, n, y_0 を入力
2. $h = (b - a)/n$, $x_0 = a$
3. $j = 0, 1, 2, \cdots, n-1$ に対して次の計算を行う．

$$\begin{aligned} s_1 &= f(x_j, y_j) \\ s_2 &= f(x_j + h/2, y_j + hs_1/2) \\ s_3 &= f(x_j + h/2, y_j + hs_2/2) \\ s_4 &= f(x_j + h, y_j + hs_3) \end{aligned}$$

$$x_{j+1} = x_j + h, \quad y_{j+1} = y_j + \frac{h}{6}(s_1 + 2s_2 + 2s_3 + s_4)$$

例 1 リッカチの方程式（ルンゲ・クッタ法）

12.2 節の例 1 の方程式をルンゲ・クッタ法で解くと

$$s_1 = 0.1 \times (1 - 0.5 + 0.25) = 0.075$$

$$s_2 = 0.1 \times [(0.05)^2 + 0.05 + 1 - (2 \times 0.05 + 1) \times 0.5375 + (0.5375)^2]$$
$$= 0.07502$$

同様に，$s_3 = 0.07502$, $s_4 = 0.07506$, となるため

$$y_1 = 0.5 + \frac{1}{6}(0.075 + 2 \times 0.07502 + 2 \times 0.07502 + 0.07506) = 0.57502$$

$$\cdots$$

というように y_1 が求まる．以下同じことを繰り返す．この問題は 12.2 節でも取り上げたが，厳密解との比較を表 12.2 に示す．オイラー法に比べて精度がよいことがわかる．

表 12.2 近似解と厳密解の比較（ルンゲ・クッタ法）

x の値	近似解	厳密解
0.00000	0.50000000	0.50000000
0.10000	0.57502079	0.57502085
0.20000	0.65016598	0.65016609
0.30000	0.72555745	0.72555751
0.40000	0.80131233	0.80131239
0.50000	0.87754065	0.87754065
0.60000	0.95434368	0.95434374
0.70000	1.03181219	1.03181231
0.80000	1.11002553	1.11002553
0.90000	1.18905044	1.18905067
1.00000	1.26894140	1.26894152
1.10000	1.34973991	1.34974003
1.20000	1.43147528	1.43147540
1.30000	1.51416516	1.51416516
1.40000	1.59781623	1.59781611
1.50000	1.68242562	1.68242574
1.60000	1.76798177	1.76798177
1.70000	1.85446548	1.85446537
1.80000	1.94185126	1.94185138
1.90000	2.03010869	2.03010869
2.00000	2.11920309	2.11920333