常微分方程式の数値計算

本文述べたように、惑星の軌道は 2 階の常微分方程式 $u'' + u = 1$ の形に帰着される。2 階 (以上) の常微分方程式は常に連立 1 階常微分方程式にすることが可能である。たとえば、上の場合、$v = u'$ とおくと、$v' = -u - 1,\ u' = v$ となる。従って、以下では 1 階常微分方程式の数値的近似解法を論じる。

常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y(x)) \tag{1}$$

を考える。ただし、初期条件 $y(x = 0) = y_0$ とする。式 (1) で、連続な x を有限個数の x_i $(i = 0, \cdots, n)$ で代表させ (ただし、$x_0 = 0$、$x_{i+1} = x_i + h$)、各 x_i での解 $y(x_i)$ の近似値 y_i を求めることを考える。

[A] オイラー法

最も簡単な近似は $y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h$ である。これは h を十分小さく取ると、真の解に近い解が得られる。このとき、誤差は h^2 のオーダーである。つまり、1 次まで正しい (1 次の精度)。実際の計算では、h を無限には小さくできないので、与えられた h でより精度の良い解法が用いられる。より精度の良い方法として考えられたのが、以下で示すルンゲ・クッタ法である。

[B] ルンゲ・クッタ法

ルンゲ・クッタ法では、y_i から y_{i+1} を求める際に、格子点 x_i での値だけでなく、x_{i+1} での値や間 (例えば、$x_i + h/2$ 等) の値も使うことにより精度を上げる。

まず、2 次のルンゲ・クッタ法を説明する。ここでは、y_i から y_{i+1} を計算するのに、x_i の情報だけでなく、$x_i + h$ の情報も使う。つまり、

$$y_{i+1} = y_i + h\left\{\alpha y'(x_i) + \beta y'(x_i + h)\right\} \tag{2}$$

とおく。ここで、重み $\alpha : \beta$ で端点と中点の情報を使って近似している。$\alpha = 1, \beta = 0$ としたものが、上で説明したオイラー法である。$\Delta y = y_{i+1} - y_i$ とおき、式 (2) をテーラー展開すると、

$$\Delta y = (\alpha + \beta)y'(x_i)h + \beta y''(x_i)h^2 + O(h^3) \tag{3}$$

となる。また、y の x_i の周りでのテーラー展開より、

$$y(x_i + h) - y(x_i) = y'(x_i)h + \frac{1}{2}y''(x_i)h^2 + O(h^3) \tag{4}$$

式 (3) と (4) を比較すると、式 (2) が h の 2 次まで正しい精度を持つためには、$\alpha = \beta = 1/2$ であれば良い。従って、

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_i, y_i) \\ k_2 &= hf(x_i + h, y_i + k_1) \\ y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned} \tag{5}$$

を採用すれば、2 次の精度まで正しい数値スキームが得られる。この方法を 2 次のルンゲ・クッタ法という。

同様に、4 次の精度を持つルンゲ・クッタ法も

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \tag{6}$$

ただし、

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_i,\, y_i) \\
k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2},\, y_i + \frac{h}{2}k_1\right) \\
k_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2},\, y_i + \frac{h}{2}k_2\right) \\
k_4 &= f(x_i + h,\, y_i + hk_3)
\end{aligned}$$

である。区間の両端と中央の値を使って精度を上げていることが分かる。興味がある人は、これが h の 4 次の精度を持つことを示してみよう。