次の微分方程式を考える:

$$\frac{du(t)}{dt} = A(t)u(t) + f(t, u(t)) \tag{1}$$

ここで $u\colon [0,T] \to \mathbb{R}^n$, $f\colon [0,T] \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$, $A\colon [0,T] \to \mathrm{Mat}_{n\times n}(\mathbb{R})$ とする．Au が線形項, f が非線形項であり, 線形項が数値積分の上で硬さの原因になっている状況を考える．

(1) の線形項のみを取り出した方程式

$$\frac{dv(t)}{dt} = A(t)v(t) \tag{2}$$

を考える．この方程式の解は明示的に書くことができ,

$$v(t) = \exp\left(\int_0^t A(\tau)d\tau\right)v(0)$$

となる．以下, 記号の簡略化のために

$$R(t,s) = \exp\left(\int_s^t A(\tau)d\tau\right)$$

と置くことにする．これは線形の方程式 (2) に従って時刻 s の状態から時刻 t の状態へ時間発展させる演算子である．これを用いて, 形式的に

$$\tilde{u}(t,s) = R(s,t)u(t) \quad (s < t)$$

とおく．$\tilde{u}(t,s)$ は (それが数学的に可能かどうかは別として) $u(t)$ を線形項のみの方程式 (2) を用いて時刻 s まで “巻き戻した” ものに対応する．s を一旦固定し, t について微分すると

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\tilde{u}(t,s)}{\partial t} &= \frac{\partial R(s,t)}{\partial t}u(t) + R(s,t)\frac{du(t)}{dt} \\
&= -R(s,t)A(t)u(t) + R(s,t)\left\{A(t)u(t) + f(t,u(t))\right\} \\
&= R(s,t)f(t, R(t,s)\tilde{u}(t,s))
\end{aligned} \tag{3}$$

となる．もしこの方程式を解くことができれば, $u(t) = R(t,s)\tilde{u}(t,s)$ により時刻 t の $u(t)$ が求まる．

以上の計算方法のポイントは, 線形項に関する積分と非線形項に関する積分を分離できていることにある．単に (1) を Runge-Kutta などで積分する場合は, 線形項と非線形項を一緒に処理するために, 硬さの原因の線形項を対処できず, 時間刻み幅を気合で小さくするしかない．一方で新たな方法では, R を求める際に (線形の場合には知られていることが多い) 数値的な安定性の高い方法を用いることで, 線形項に対する硬さを回避できる．敵はもはや非線形項のみであり, 時間刻み幅をさほど細かく取らなくても計算ができる, という寸法である．

とはいえ, $\tilde{u}(t,s)$ という, “巻き戻し” を用いて定義された, 必ずしも存在性が保証できない[*1]量が間に入っており, 少々扱いが難しい. そこで以下では非線形項由来の方程式 (3) をメジャーないくつかの方法で差分化し, “巻き戻し” の時間発展が実は不要であることを見る.

以下, 時間刻み幅を ε とおく. 時刻 $t=s$ での $u(t)=u(s)=\tilde{u}(s,s)$ が与えられたとき, (3) を $t=s\sim s+\varepsilon$ で積分して $\tilde{u}(s+\varepsilon,s)$ が得られれば, $u(s+\varepsilon)=R(s+\varepsilon,s)\tilde{u}(s+\epsilon)$ により $t=s+\varepsilon$ における $u(t)$ が得られる. そこで (3) を $t=s\sim s+\varepsilon$ で数値積分する方法を考える. 説明の簡略化のため, $F(t,x)=R(s,t)f(t,R(t,s)\tilde{u}(t,s))$ とおく (固定した s は省略). また記号を濫用し, 数値解でも u や $\tilde{u}$ といった記号を用いることとする.

(1) Euler 法 $\ldots\varepsilon^1$ 精度

$$\begin{aligned}\tilde{u}(s+\varepsilon,s)&=\tilde{u}(s,s)+\varepsilon F(s,\tilde{u}(s,s))\\&=u(s)+\varepsilon f(s,u(s))\end{aligned}$$

と表される. よって

$$\begin{aligned}u(s+\varepsilon)&=R(s+\varepsilon,s)\,\tilde{u}(s+\varepsilon,s)\\&=R(s+\varepsilon,s)\,\{u(s)+\varepsilon f(s,u(s))\}\end{aligned}$$

となる. “巻き戻し” は起きない.

(2) 中点法 (または修正 (modified) Euler 法) $\ldots\varepsilon^2$ 精度

$$\begin{aligned}\tilde{u}(s+\varepsilon,s)&=\tilde{u}(s,s)+\varepsilon F\left(s+\frac{\varepsilon}{2},\tilde{u}(s,s)+\frac{\varepsilon}{2}F(s,\tilde{u}(s,s))\right)\\&=u(s)+F\left(s+\frac{\varepsilon}{2},u(s)+\frac{\varepsilon}{2}F(s,u(s))\right)\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}u(s+\varepsilon)&=R(s+\varepsilon,s)\tilde{u}(s+\varepsilon,s)\\&=R(s+\varepsilon,s)u(s)\\&\qquad+\varepsilon R\left(s+\varepsilon,s+\frac{\varepsilon}{2}\right)f\left(s+\frac{\varepsilon}{2},R\left(s+\frac{\varepsilon}{2},s\right)G(s)\right),\\G(s)&\coloneqq u(s)+\frac{\varepsilon}{2}f(s,u(s))\end{aligned}$$

となる. “巻き戻し” は起きない.

[*1] 例えば Navier-Stokes のように, 拡散項を含む方程式の場合. 拡散項に対応する偏微分方程式は熱方程式で, “巻き戻し” は ill-defined である. なお偏微分方程式の場合は $\mathbb{R}^n$ を関数空間に置き換えればよい.

(3) Heun 法 (または改良 (improved) Euler 法) $\ldots \varepsilon^2$ 精度

$$\begin{aligned}
G_1(s) &= F(s, \tilde{u}(s,s)) = f(s, u(s)), \\
G_2(s) &= F(s+\varepsilon, \tilde{u}(s,s) + \varepsilon G_1(s)) \\
&= R(s, s+\varepsilon) f(s+\varepsilon, R(s+\varepsilon, s)\{u(s) + \varepsilon G_1(s)\}), \\
\tilde{u}(s+\varepsilon, s) &= \tilde{u}(s,s) + \frac{\varepsilon}{2}(G_1(s) + G_2(s)) \\
&= u(s) + \frac{\varepsilon}{2}(G_1(s) + G_2(s))
\end{aligned}$$

である.

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_1(s) &\coloneqq R(s+\varepsilon, s) G_1(s) = R(s+\varepsilon, s) f(s, u(s)), \\
\tilde{G}_2(s) &\coloneqq R(s+\varepsilon, s) G_2(s) = f(s+\varepsilon, R(s+\varepsilon, s) u(s) + \varepsilon \tilde{G}_1(s))
\end{aligned}$$

とおけば,

$$\begin{aligned}
u(s+\varepsilon) &= R(s+\varepsilon, s)\tilde{u}(s+\varepsilon, s) \\
&= R(s+\varepsilon, s) u(s) + \frac{\varepsilon}{2}(\tilde{G}_1(s) + \tilde{G}_2(s))
\end{aligned}$$

となる. “巻き戻し” は起きない.

(4) 4 次 Runge-Kutta 法 $\ldots \varepsilon^4$ 精度

$$\begin{aligned}
G_1(s) &= F(s, \tilde{u}(s,s)), \\
G_2(s) &= F\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, \tilde{u}(s,s) + \frac{\varepsilon}{2} G_1(s)\right), \\
G_3(s) &= F\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, \tilde{u}(s,s) + \frac{\varepsilon}{2} G_2(s)\right), \\
G_4(s) &= F(s+\varepsilon, \tilde{u}(s,s) + \varepsilon G_3(s)), \\
\tilde{u}(s+\varepsilon, s) &= \tilde{u}(s,s) + \frac{\varepsilon}{6}(G_1(s) + 2G_2(s) + 2G_3(s) + G_4(s))
\end{aligned}$$

である.

$$
\begin{aligned}
\tilde{G}_1(s) &\coloneqq R(s+\varepsilon, s)G_1(s) \\
&= R(s+\varepsilon, s)f(s, u(s)), \\
H_1(s) &\coloneqq R\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, s\right)G_1(s) \\
&= R\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, s\right)f(s, u(s)) \\
\tilde{G}_2(s) &\coloneqq R(s+\varepsilon, s)G_2(s) \\
&= R\left(s+\varepsilon, s+\frac{\varepsilon}{2}\right)f\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, R\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, s\right)u(s)+\frac{\varepsilon}{2}H_1(s)\right) \\
H_2(s) &\coloneqq R\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, s\right)G_2(s) \\
&= f\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, R\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, s\right)u(s)+\frac{\varepsilon}{2}H_1(s)\right) \\
\tilde{G}_3(s) &\coloneqq R(s+\varepsilon, s)G_3(s) \\
&= R\left(s+\varepsilon, s+\frac{\varepsilon}{2}\right)f\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, R\left(s+\frac{\varepsilon}{2}, s\right)u(s)+\frac{\varepsilon}{2}H_2(s)\right) \\
\tilde{G}_4(s) &\coloneqq R(s+\varepsilon, s)G_4(s) \\
&= f\left(s+\varepsilon, R(s+\varepsilon, s)u(s)+\varepsilon\tilde{G}_3(s)\right)
\end{aligned}
$$

とおけば,

$$
\begin{aligned}
u(s+\varepsilon) &= R(s+\varepsilon, s)\tilde{u}(s+\varepsilon, s) \\
&= R(s+\varepsilon, s)u(s) + \frac{\varepsilon}{6}\left(\tilde{G}_1(s)+2\tilde{G}_2(s)+2\tilde{G}_3(s)+\tilde{G}_4(s)\right)
\end{aligned}
$$

となる. “巻き戻し” は起きない.

以上, 時間差分化したあとでは “巻き戻し” が問題にならないことを見た. 最後に, 実際の実装のステップをまとめる. 非線形項よりも線形項の数値積分に時間がかかる (例えば陰的解法を用いるために連立方程式を解く必要があるなど) 状況を考えると, 線形項の積分の回数を極力少なくする必要がある. この点に注意してまとめてみる.

(1) Euler 法

Step1. $U_1 = u(s) + \varepsilon f(s, u(s))$ を計算

Step2. $u(s+\varepsilon) = R(s+\varepsilon, s)U_1$ を計算

(2) 中点法 (または修正 (modified) Euler 法)

Step1. $U_1 = u(s) + \dfrac{\varepsilon}{2}f(s, u(s))$ を計算

Step2. $U_2 = R\left(s+\dfrac{\varepsilon}{2}, s\right)U_1$ を計算

Step3. $U_3 = f\left(s+\dfrac{\varepsilon}{2}, U_2\right)$ を計算

Step4. $U_4 = R\left(s+\varepsilon, s+\dfrac{\varepsilon}{2}\right)U_3$ を計算

Step5. $U_5 = R(s+\varepsilon, s)u(s)$ を計算

Step6. $u(s+\varepsilon) = U_5 + \varepsilon U_4$ を計算

または次の手順でもよい.

Step1. $U_1 = R\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, s\right) u(s)$ を計算

Step2. $U_2 = R\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, s\right) f(s, u(s))$ を計算

Step3. $U_3 = U_1 + \frac{\varepsilon}{2} U_2$ を計算

Step4. $U_4 = f\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, U_3\right)$ を計算

Step5. $U_5 = U_1 + \varepsilon U_4$ を計算

Step6. $u(s+\varepsilon) = R\left(s+\varepsilon, s + \frac{\varepsilon}{2}\right) U_5$ を計算

(3) Heun 法 (または改良 (improved) Euler 法)

Step1. $U_1 = u(s) + \varepsilon f(s, u(s))$ を計算

Step2. $U_2 = R(s+\varepsilon, s)U_1$ を計算

Step3. $U_3 = f(s+\varepsilon, U_2)$ を計算

Step4. $U_4 = u(s) + \frac{\varepsilon}{2} f(s, u(s))$ を計算

Step5. $U_5 = R(s+\varepsilon, s)U_4$ を計算

Step6. $u(s+\varepsilon) = U_5 + \frac{\varepsilon}{2} U_3$ を計算

(4) 4 次 Runge-Kutta 法

Step1. $U_1 = u(s) + \frac{\varepsilon}{6} f(s, u(s))$ を計算

Step2. $U_2 = R(s+\varepsilon, s)U_1$ を計算

Step3. $U_3 = u(s) + \frac{\varepsilon}{2} f(s, u(s))$ を計算

Step4. $U_4 = R\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, s\right) U_3$ を計算

Step5. $U_5 = f\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, U_4\right)$ を計算

Step6. $U_6 = R\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, s\right) u(s)$ を計算

Step7. $U_7 = U_6 + \frac{\varepsilon}{2} U_5$ を計算

Step8. $U_8 = f\left(s + \frac{\varepsilon}{2}, U_7\right)$ を計算

Step9. $U_9 = \frac{\varepsilon}{3}(U_5 + U_8)$ を計算

Step10. $U_{10} = R\left(s+\varepsilon, s + \frac{\varepsilon}{2}\right) U_9$ を計算

Step11. $U_{11} = U_6 + \varepsilon U_8$ を計算

Step12. $U_{12} = R\left(s+\varepsilon, s + \frac{\varepsilon}{2}\right) U_{11}$ を計算

Step13. $U_{13} = f\left(s+\varepsilon, U_{12}\right)$ を計算

Step14. $u(s+\varepsilon) = U_2 + U_{10} + \frac{\varepsilon}{6} U_{13}$ を計算