第1章　常微分方程式の数値積分法 I

本章の目標は MATLAB に装備されている数値積分法の仕組みを理解することにある。Runge-Kutta 法の次数、Butcher 表の見かた、陽的、陰的、埋め込み型、可変ステップ、硬い方程式といった概念を理解し、適切な数値積分アルゴリズムを選択する判断力を身に付けることを目指す。

1.1　Taylor 展開の式を使わないのはなぜか？

数値積分は Taylor 展開と比べてどこがいいのか？

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + h \cdot y'(x_0) + \frac{h^2}{2!} y''(x_0) + \cdots$$

Taylor 展開では、高階微分の項が複雑になる。数値積分公式は、微分項の計算なしに積分ができるすぐれものの近似式である。

1.2　分類

	1段階法	多段階法
陽公式	Euler, Runge-Kutta	Adams
陰公式	Implicit Euler, Implicit Runge-Kutta	Gear

陽公式　左辺 y_{n+1} 、右辺 y_n など (n+1 未満) 陰公式　左辺 y_{n+1} 右辺も y_{n+1}。まず陽公式で y_{n+1} を予測し、それを陰公式に代入して修正する、といった使い方をする。

1.3　紙と鉛筆の限界を知る

線形なら対角化すれば解析的に解ける。

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}[A] &= -2k[A] \\ \frac{d}{dt}[B] &= 2k[A] - k[B] \\ \frac{d}{dt}[C] &= k[B] \end{cases}$$

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \\ C_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\ \mathrm{mM} \\ 0\ \mathrm{mM} \\ 0\ \mathrm{mM} \end{pmatrix}$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{AP} &= \mathbf{P\Lambda} \\ \mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP} &= \mathbf{\Lambda} \\ \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A} &= \mathbf{\Lambda P}^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{-1}\frac{d}{dt}\mathbf{x} &= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{Ax} \\ \frac{d}{dt}(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}) &= \mathbf{\Lambda}(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}) \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{-1}\mathbf{x} &= \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2\exp(-t) \\ C_3\exp(-2t) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} A + B + C &= C_1 \\ 2A + B &= C_2\exp(-t) \\ A &= C_3\exp(-2t) \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \\ C_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \text{ mM} \\ 0 \text{ mM} \\ 0 \text{ mM} \end{pmatrix}$$

より $C_3 = 1$、$C_2 = 2$、$C_1 = 1$ とわかる。

$$\begin{aligned} A + B + C &= 1 \\ 2A + B &= 2\exp(-t) \\ A &= \exp(-2t) \end{aligned}$$

この連立方程式を解いて、

$$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(-2t) \\ 2\exp(-t) - 2\exp(-2t) \\ 1 - 2\exp(-t) + \exp(-2t) \end{pmatrix} \text{mM}$$

1.4 Euler 法: 数値積分アルゴリズム入門

1.4.1 Tayler 展開との関係

最も単純な数値積分アルゴリズムは Euler 法です。定義としては、Taylor 展開の式

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + h \cdot y'(x_0) + \frac{h^2}{2!} y''(x_0) + \cdots$$

から 2 次以降の項を取り除いた次の式が Euler 法です。

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + h \cdot y'(x_0)$$

Euler 法の近似精度は、Taylor 展開式の 1 次までの精度と同等です。

これだと一般的すぎるので、生物の場合にあてはめて考えてみましょう。時刻 t における物質 S の濃度を $S(t)$ とし、そこから微小時間 Δt だけ進んだ時刻 $t + \Delta t$ における物質 S の濃度を $S(t + \Delta t)$ で表します。これを上の Euler 法の定義に当てはめると、

$$S(t + \Delta t) = S(t) + \Delta t S'(t)$$

となります。 $S'(t)$ というのは S の時間微分 $\dfrac{dS}{dt}$ のことですので、

$$S(t+\Delta t) = S(t) + \Delta t \frac{dS}{dt}$$

という式が得られます。$\dfrac{dS}{dt}$ は反応速度式で表されます。ここではテストケースとして $\dfrac{dS}{dt} = -k \cdot S$ としてみましょう。

$$S(t+\Delta t) = S(t) - \Delta t \cdot k \cdot S$$

これを増分の形にすると、

$$\begin{aligned} \Delta S(t) &= S(t+\Delta t) - S(t) \\ &= -\Delta t \cdot k \cdot S \end{aligned}$$

よって Euler 法を用いる場合、微小時間 Δt の間に S がどの程度増減するかは $-\Delta t \cdot k \cdot S$ で計算できることがわかりました。

1.4.2　演習

1. グルコース濃度の変動に関する常微分方程式 $\frac{d[\mathrm{Glucose}]}{dt} = -k[\mathrm{Glucose}]$ をオイラー法で解きなさい。積分ステップ幅 $\Delta t = 1.0\mathrm{sec}$ とし、$t = 0 \sim 5.0$ sec の範囲について解くこと。反応定数 $k = 0.2\mathrm{sec}^{-1}$、$t = 0$ sec のとき [Glucose]=1.0mM とする。

2. (1) の常微分方程式の解析解を求め、$t = 5.0$ sec 時点までの数値解との時系列平均誤差 $\varepsilon = \dfrac{1}{n}\displaystyle\sum_{i=1}^{n} \frac{|X_i^{\mathrm{analytical}} - X_i^{\mathrm{numerical}}|}{X_i^{\mathrm{analytical}}}$ を計算しなさい。

3. 積分ステップ幅 Δt を 1.0 sec より大きくした場合と小さくした場合では、解析解との時系列平均誤差がどのように変化するか仮説を立てなさい。理由も述べること。

4. 仮説を検証しなさい。

1.5 1段階法

1.5.1 s段の陽的 Runge-Kutta 法

1段階法に分類される数値積分法の中では、Runge-Kutta 法とその亜種がシステム生物学の数理モデルに用いられる。

$$
\left\{
\begin{array}{lcl}
k_1 & = & f(x_0, y_0) \\
k_2 & = & f(x_0 + c_2 h, y_0 + h a_{21} k_1) \\
k_3 & = & f(x_0 + c_3 h, y_0 + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)) \\
 & \vdots & \\
k_s & = & f(x_0 + c_s h, y_0 + h(a_{s1} k_1 + a_{s,s-1} k_{s-1})) \\
 & & \\
y_1 & = & y_0 + h(b_1 k_1 + \cdots + b_s k_s)
\end{array}
\right.
$$

ただし

$$
\begin{array}{lcl}
c_2 & = & a_{21} \\
c_3 & = & a_{31} + a_{32} \\
 & \vdots & \\
c_s & = & a_{s1} + \cdots + a_{s,s-1}
\end{array}
$$

これをs段の陽的 Runge-Kutta 法と呼ぶ。

1.5.2 Butcher 表

s段の陽的 Runge-Kutta 法の係数を以下の形式で表記したものを Butcher 表と呼ぶ。今後、さまざまな数値積分法のアルゴリズムを説明する際に標準的に用いられる形式なので、慣れて欲しい。

$$
\begin{array}{ll|lllll}
k_1\text{の係数} & 0 & & & & & \\
k_2 & c_2 & a_{21} & & & & \\
k_3 & c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
k_s & c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} & \\
\cline{2-6}
y_1 & & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} & b_s
\end{array}
$$

1.5.3 Runge-Kutta 法の係数を決める (RK2)

2 段 2 次の Runge-Kutta 法は以下のようになる。

$$
\begin{cases}
k_1 = f(x_0, y_0) \\
k_2 = f(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}k_1) \\
\\
y_1 = y_0 + hk_2
\end{cases}
$$

1.5.4 Runge-Kutta 法の次数

一般に、

$$||y(x_0 + h) - y_1|| \leq Kh^{p+1}$$

となる Runge-Kutta 公式のことを「p 次の Runge-Kutta 法」と呼ぶ。Taylor 級数とは、p 次の項まで一致する。

1.5.5 Taylor 展開との精度比較

まず、ステップの長さを半分にした Euler 法を書く

$$y_1 = y_0 + hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}f_0\right)$$

2 変数関数の Taylor 展開公式を用いてこれを展開する。

$$
\begin{aligned}
f\left(x_0 + \tfrac{h}{2}, y_0 + \tfrac{h}{2}f_0\right) &= f(x_0, y_0) && + \left(\tfrac{h}{2}\tfrac{\partial}{\partial x} + \tfrac{h}{2}f_0\tfrac{\partial}{\partial y}\right) f(x_0, y_0) \\
& && + \tfrac{1}{2!}\left(\tfrac{h}{2}\tfrac{\partial}{\partial x} + \tfrac{h}{2}f_0\tfrac{\partial}{\partial y}\right)^2 f(x_0, y_0) + \cdots \\
&= f(x_0, y_0) && + \tfrac{h}{2}\left(f_x + ff_y\right)(x_0, y_0) \\
& && + \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{h^2}{4}\tfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{h^2}{2}f_0\tfrac{\partial}{\partial x}\tfrac{\partial}{\partial y} + \tfrac{h^2}{4}f_0^2\tfrac{\partial^2}{\partial y^2}\right) f(x_0, y_0) + \cdots \\
&= f(x_0, y_0) && + \tfrac{h}{2}\left(f_x + ff_y\right)(x_0, y_0) \\
& && + \tfrac{h^2}{8}\left(f_{xx} + 2ff_{xy} + f^2 f_{yy}\right)(x_0, y_0) + \cdots \\
\therefore \quad y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) && + \tfrac{h^2}{2}\left(f_x + f_y f\right)(x_0, y_0) \\
& && + \tfrac{h^3}{8}\left(f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2\right)(x_0, y_0) + \cdots
\end{aligned}
$$

これと厳密解の精度を比較するため、厳密解の Taylor 展開を行う。

$$
\begin{aligned}
y(x_0+h) &= y_0 &+& \; hy'(x_0,y_0) + \tfrac{h^2}{2}y''(x_0,y_0) + \tfrac{h^3}{6}y'''(x_0,y_0) + \cdots \\
&= y_0 &+& \; hf(x_0,y_0) + \tfrac{h^2}{2}(f_x + f_y f)(x_0,y_0) \\
&&+& \; \tfrac{h^3}{6}(f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f_y^2 f)(x_0,y_0) + \cdots
\end{aligned}
$$

数値解と厳密解の差をとる。1 階微分の項までは両者一致するので、2 階の項の差がものを言う。

$$
y(x_0+h) - y_1 = \frac{h^3}{24}\{(f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + 4(f_x f_y + f_y^2 f)\}(x_0,y_0) + \cdots
$$

よって、

$$
||y(x_0+h) - y_1|| \le Kh^3
$$

となるので、前述の 2 段の Runge-Kutta 法の式は 2 次の精度である。

1.5.6 素材？

$$
\begin{aligned}
\frac{dy}{dx} &= f(x,y) \\
df &= \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy \\
\frac{df}{dx} &= \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} \\
&= y'' \\
y'' &= f_x + f_y f
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
dy'' &= \frac{\partial y''}{\partial x}dx + \frac{\partial y''}{\partial y}dy \\
\frac{dy''}{dx} &= \frac{\partial y''}{\partial x} + \frac{\partial y''}{\partial y}\frac{dy}{dx} \\
&= \frac{\partial}{\partial x}(f_x + f_y f) + \frac{\partial}{\partial y}(f_x + f_y f)\frac{dy}{dx} \\
&= \{f_{xx} + (f_{xy}f + f_y f_x)\} + \{f_{xy} + (f_{yy}f + f_y^2)\}f \\
y''' &= f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f_y^2 f
\end{aligned}
$$

1.6 多段階法

多段階法とは以下のような一般式で書ける数値積分法のことである。

$$\alpha_0 y_n + \alpha_1 y_{n-1} + \cdots + \alpha_k y_{n-k} = h(\beta_0 f_n + \beta_1 f_{n-1} + \cdots + \beta_m f_{n-m})$$

y_n は t_n 時点における y の値を意味する。また、$y_{n-k} = y(t_n - kh)$、$f = y'$ である。

1.6.1 Adams-Bashforth 法 (陽的 Adams 法)

陽的な多段階法の代表例である。あまり使ったことはないが、Gear 法を理解する目的で足がかりとなるので紹介する。

Adams 法は

$$y_n = \alpha_1 y_{n-1} + h(\beta_1 f_{n-1} + \beta_2 f_{n-2})$$

という形の多段階法である。係数 α, β を Taylor 展開から定める。まず上の式を書き換える。

$$y(t_n) = \alpha_1 y(t_{n-1}) + h(\beta_1 f(t_{n-1}, y(t_{n-1})) + \beta_2 f(t_{n-2}, y(t_{n-2})))$$

$t_{n-1} = t - h$ より、Taylor 展開する。

$$\begin{aligned} y(t_n) &\simeq \alpha_1 \left\{ y(t_n) - h\frac{d}{dt}y(t_n) + \frac{h^2}{2}\frac{d^2}{dt^2}y(t_n) \right\} \\ &+ h\beta_1 \left\{ f(t_n) - h\frac{d}{dt}f(t_n) + \frac{h^2}{2}\frac{d^2}{dt^2}f(t_n) \right\} \\ &+ h\beta_2 \left\{ f(t_n) - 2h\frac{d}{dt}f(t_n) + \frac{4h^2}{2}\frac{d^2}{dt^2}f(t_n) \right\} \end{aligned}$$

h の次数が同じ項ごとに整理する。

$$\begin{array}{ccccl} h^0 & : & y(t_n) & = & \alpha_1 y(t_n) \\ h^1 & : & 0 & = & -\alpha_1 h y'(t_n) + h\beta_1 y'(t_n) + h\beta_2 y'(t_n) \\ h^2 & : & 0 & = & \alpha_1 \frac{h^2}{2} y''(t_n) - h^2\beta_1 y''(t_n) - 2h^2\beta_2 y''(t_n) \end{array}$$

これで、α, β に関する連立方程式を立てることができる。

$$\left\{ \begin{array}{ccl} 1 & = & \alpha_1 \\ 0 & = & -\alpha_1 + \beta_1 + \beta_2 \\ 0 & = & \frac{1}{2}\alpha_1 - \beta_1 - 2\beta_2 \end{array} \right.$$

これを解くと、2 次の Adams-Bashforth 法の係数は $\alpha_1 = 1, \beta_1 = \frac{3}{2}, \beta_2 = \frac{1}{2}$ と求まる。よって Adams-Bashforth 法は

$$y_n = y_{n-1} + h\left(\frac{3}{2}f_{n-1} + \frac{1}{2}f_{n-2}\right)$$

と書ける。化学反応系 $\frac{dS}{dt} = -k \cdot S$ にあてはめると、

$$\Delta S = \Delta t\left(-\frac{3}{2}k \cdot S_{t=t-\Delta t} - \frac{1}{2}k \cdot S_{t=t-2\Delta t}\right)$$

となる。

1.6.2 Gear 法または後退微分法 (BDF: Backward Differential Formula)

陰的な多段階法の代表例であり、後述する「硬い方程式」に強い。

$$\alpha_0 y_n + \alpha_1 y_{n-1} + \cdots + \alpha_k y_{n-k} = hf_n$$

という形の多段階法である。陽的 Adams 法同様、Taylor 展開で係数を求める。Gear の"Numerical initial value problems" pp.214 に"stiffly stable method"として登場する。

$$\begin{aligned}
L.H.S. \;&\simeq\; \alpha_0 y(t_n) \\
&+\; \alpha_1\left\{y(t_n) - h\frac{d}{dt}y(t_n) + \frac{h^2}{2}\frac{d^2}{dt^2}y(t_n)\right\} \\
&+\; \alpha_2\left\{y(t_n) - 2h\frac{d}{dt}y(t_n) + \frac{4h^2}{2}\frac{d^2}{dt^2}y(t_n)\right\} \\
R.H.S. \;&=\; h\frac{d}{dt}y(t_n)
\end{aligned}$$

h の次数が同じ項ごとに整理する。

$$\begin{array}{lccc}
h^0 & : & \alpha_0 y(t_n) + \alpha_1 y(t_n) + \alpha_2 y(t_n) & = & 0 \\
h^1 & : & -\alpha_1 h y'(t_n) - 2h\alpha_2 y'(t_n) & = & hy'(t_n) \\
h^2 & : & \alpha_1 \frac{h^2}{2} y''(t_n) + \alpha_2 2h^2 y''(t_n) & = & 0
\end{array}$$

$$\left\{\begin{array}{lcl}
\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 & = & 0 \\
-\alpha_1 - 2\alpha_2 & = & 1 \\
\frac{1}{2}\alpha_1 + 2\alpha_2 & = & 0
\end{array}\right.$$

これを解くと、2 次の Gear 法の係数は $\alpha_0 = \frac{3}{2}, \alpha_1 = -2, \alpha_2 = \frac{1}{2}$ と求まる。
よって 2 次の Gear 法は

$$\frac{3}{2}y_n - 2y_{n-1} + \frac{1}{2}y_{n-2} = hf_n$$

化学反応系 $\dfrac{dS}{dt} = -k \cdot S$ にあてはめると、

$$\frac{3}{2}S_t - 2S_{t-\Delta t} + \frac{1}{2}S_{t-2\Delta t} = -\Delta t \cdot k \cdot S_t$$

となる。

1.6.3 陰公式と予測子修正子法

予測子修正子 (predictor-corrector) 法とは、陽公式と陰公式を組み合わせて両者のいいとこどりを図る方法のことである。

	長所	短所
陽公式	過去の値を使って、次のステップの値が出せる	安定性で陰公式に劣る
陰公式	安定性が優れている	現時点の値がないと計算できな

陽公式で予測値を計算し (予測子)、予測値をもとに現時点の値を陰公式で計算 (修正子)

Backward Differential Formula(ode15s)

第2章　常微分方程式の数値積分法 II

2.1　ステップ幅の変更

2.1.1　埋め込み型公式

「公式名 $p(\hat{p})$」は次数 p、誤差評価に用いる式の次数 $\hat{p}$ であることを示す (例: Dormand-Prince 5(4), Bogacki-Shampine 3(2) がそれぞれ ode45, ode23 に対応)。また、「Dormand-Prince 法は陽的な Runge-Kutta(5,4) の式である」のようにも書かれる。

埋め込み型＝可変ステップ

2.1.2　RK3(2) の係数を求める

RK3 の係数

まず、3 段 3 次公式の係数を求める。

$$
\begin{cases}
k_1 = f(x_n, y_n) & (1) \\
k_2 = f(x_n + c_2 h, y_n + h a_{21} k_1) & (2) \\
k_3 = f(x_n + c_2 h, y_n + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)) & (3) \\
y_{n+1} = y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + b_3 k_3) & (4)
\end{cases}
$$

k_2 をテイラー展開する。今ここで求めたいのは 3 次公式なので、h^3 が掛かる項までテイラー展開して、厳密解と比較しなければならない。k_2 には上の (4) 式で h が掛かるので、h^2 の項まで展開すれば事足りる。

$$
\begin{aligned}
k_2 &= f(x_n, y_n) + \frac{h}{1!}\left(c_2 \frac{\partial}{\partial x} + a_{21} k_1 \frac{\partial}{\partial y}\right) f \\
&\quad + \frac{h^2}{2!}\left(c_2 \frac{\partial}{\partial x} + a_{21} k_1 \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f + O(h^3) \\
&= f(x_n, y_n) + h(c_2 f_x + a_{21} f f_y) + \frac{h^2}{2}(c_2^2 f_{xx} \\
&\quad + 2 c_2 a_{21} f f_{xy} + a_{21}^2 f^2 f_{yy}) + O(h^3)
\end{aligned}
$$

k_3 も同様にテイラー展開する。

$$
\begin{aligned}
k_3 &= f(x_n,y_n) &+& \tfrac{h}{1!}\left(c_3\tfrac{\partial}{\partial x}+(a_{31}k_1+a_{32}k_2)\tfrac{\partial}{\partial y}\right)f \\
&& +& \tfrac{h^2}{2!}\left(c_3\tfrac{\partial}{\partial x}+(a_{31}k_1+a_{32}k_2)\tfrac{\partial}{\partial y}\right)^2 f+O(h^3) \\
&= f(x_n,y_n) &+& h(c_3f_x+a_{31}ff_y+a_{32}k_2f_y) \\
&& +& \tfrac{h^2}{2}\{c_3^2f_{xx}+2c_3(a_{31}f+a_{32}k_2)f_{xy}+(a_{31}f+a_{32}k_2)^2f_{yy}+O(h^3)
\end{aligned}
$$

k_2 が掛かっている項を f で書き直しておきたい。そこで $a_{32}k_2$ を

$$
a_{32}k_2 = a_{32}\left\{f+h(c_2f_x+a_{21}ff_y)+O(h^2)\right\}
$$

あるいは

$$
a_{32}k_2 = a_{32}(f+O(h))
$$

と表す。これらを項ごとの h の次数に応じて k_3 のテイラー展開式に代入する。

$$
\begin{aligned}
k_3 &= f(x_n,y_n) &+& h[c_3f_x+a_{31}ff_y+a_{32}\left\{f+h(c_2f_x+a_{21}ff_y)+O(h^2)\right\}f_y] \\
&& +& \tfrac{h^2}{2}[c_3^2f_{xx}+2c_3\{a_{31}f+a_{32}(f+O(h))\}f_{xy}+\{a_{31}f+a_{32}(f+O(h))\}^2f_{yy}]
\end{aligned}
$$

さてこれでRK公式のテイラー展開が完了した。次にやることは厳密解もテイラー展開し、h の次数ごとに各項をRK公式と厳密解とで比較することである。厳密解のテイラー展開は、次の通りである。

$$
\begin{aligned}
y(x+h) &= y(x)+h\frac{dy}{dx}+\frac{h^2}{2!}\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{h^3}{3!}\frac{d^3y}{dx^3}+O(h^4) \\
y(x+h)-y(x) &= hf+\frac{h^2}{2}(f_x+f_yf)+\frac{h^3}{6}(f_{xx}+2f_{xy}f+f_{yy}f^2+f_yf_x+f_y^2f)+O(h^4)
\end{aligned}
$$

$\dfrac{d^2y}{dx}=f_x+f_yf$ となるのは、全微分の公式 $\dfrac{df}{dx}=\dfrac{\partial f}{\partial x}+\dfrac{\partial f}{\partial y}\dfrac{df}{dx}$ による。
さて、RK公式と厳密解のテイラー級数を h の次数ごとに比較しよう。

$$
\begin{array}{llcl}
 & \text{厳密解} & & \text{RK 公式} \\
1\text{次：} & hf & = & h(b_1+b_2+b_3)f \\
2\text{次：} & \dfrac{h^2}{2}(f_x+f_yf) & = & b_2h^2(c_2f_x+a_{21}ff_y) \\
 & & + & b_3h^2(c_3f_x+a_{31}ff_y+a_{32}ff_y) \\
3\text{次：} & \dfrac{h^3}{6}(f_{xx}+2f_{xy}f+f_{yy}f^2+f_yf_x+f_y^2f) & = & \dfrac{1}{2}b_2h^3(c_2^2f_{xx}+2c_2a_{21}ff_{xy}+a_{21}^2f^2f_{yy}) \\
 & & + & b_3h^3a_{32}(c_2f_x+a_{21}ff_y)f_y \\
 & & + & \dfrac{1}{2}b_3h^3\{c_3^2f_{xx} \\
 & & & +2c_3a_{31}ff_{xy}+2c_3a_{32}ff_{xy} \\
 & & & +(a_{31}+a_{32})^2f^2f_{yy}\}
\end{array}
$$

h が１次の項の比較より、

$$
b_1+b_2+b_3=1
$$

次いで、h^2 の項を比較すると、

$$
\begin{array}{lrcl}
f_x\text{について：} & \dfrac{h^2}{2}f_x & = & b_2h^2c_2f_x+b_3h^2c_3f_x \\
 & \dfrac{1}{2} & = & b_2c_2+b_3c_3 \\
ff_y\text{について：} & \dfrac{h^2}{2}f_yf & = & b_2h^2a_{21}ff_y+b_3h^2(a_{31}+a_{32})ff_y \\
 & \dfrac{1}{2} & = & b_2a_{21}+b_3(a_{31}+a_{32})
\end{array}
$$

最後に h^3 の項を比較する。

$$
\begin{aligned}
&f_{xx}\text{について：} & \frac{h^3}{6}f_{xx} &= \frac{1}{2}b_2h^3c_2^2f_{xx}+\frac{1}{2}b_3h^3c_3^2f_{xx}\\
& & \frac{1}{6} &= \frac{1}{2}b_2c_2^2+\frac{1}{2}b_3c_3^2\\
&ff_{xy}\text{について：} & \frac{h^3}{6}(2f_{xy}f) &= \frac{1}{2}b_2h^3(2c_2a_{21}ff_{xy})+\frac{1}{2}b_3h^3(2c_3a_{31}ff_{xy}+2c_3a_{32}ff_{xy})\\
& & \frac{1}{3} &= b_2c_2a_{21}+b_3c_3(a_{31}+a_{32})\\
&f_{yy}f^2\text{について：} & \frac{h^3}{6}f_{yy}f^2 &= \frac{1}{2}b_2h^3a_{21}^2f^2f_{yy}+\frac{1}{2}b_3h^3(a_{31}+a_{32})^2f^2f_{yy}\\
& & \frac{1}{6} &= \frac{1}{2}b_2a_{21}^2+\frac{1}{2}b_3(a_{31}+a_{32})^2\\
&f_yf_x\text{について：} & \frac{h^3}{6}f_yf_x &= b_3h^3a_{32}c_2f_xf_y\\
& & \frac{1}{6} &= b_3a_{32}c_2\\
&f_y^2f\ \text{について：} & \frac{h^3}{6}f_y^2f &= b_3h^3a_{32}a_{21}ff_y^2\\
& & \frac{1}{6} &= b_3a_{32}a_{21}
\end{aligned}
$$

これで係数間の条件式が次のように揃った。

$$
\begin{cases}
c_2=a_{21}\\
c_3=a_{31}+a_{32}\\
b_1+b_2+b_3=1\\
b_2c_2+b_3c_3=\dfrac{1}{2}\\
b_2c_2^2+b_3c_3^2=\dfrac{1}{3}\\
b_3a_{32}c_2^2=\dfrac{1}{6}
\end{cases}
$$

求めたい係数 8 個 $(a_{21},a_{31},a_{32},b_1,b_2,b_3,c_2,c_3)$ に対して条件式 6 本なので、不定パラメータを $c_2=u,c_3=v$ のようにおく。

$$
\begin{cases}
b_2u+b_3v &= \frac{1}{2}\\
b_2u^2+b_3v^2 &= \frac{1}{3}
\end{cases}
$$

より

$$
\begin{cases}
b_2u^2+b_3uv &= \frac{1}{2}u\\
b_2u^2+b_3v^2 &= \frac{1}{3}
\end{cases}
$$

$$
\begin{aligned}
(uv - v^2)b_3 &= \frac{1}{2}u - \frac{1}{3} \\
b_3 &= \frac{\frac{1}{2}u - \frac{1}{3}}{uv - v^2} \\
&= \frac{3u - 2}{6v(u - v)}
\end{aligned}
$$

また同様に

$$
\begin{cases}
b_2 uv + b_3 v^2 &= \frac{1}{2}v \\
b_2 u^2 + b_3 v^2 &= \frac{1}{3}
\end{cases}
$$

より

$$
\begin{aligned}
(uv - u^2)b_2 &= \frac{1}{2}v - \frac{1}{3} \\
b_2 &= \frac{3v - 2}{6u(v - u)}
\end{aligned}
$$

また、$b_3 a_{32} c_2 = \dfrac{1}{6}$ より、

$$
\begin{aligned}
\frac{3u - 2}{6v(u - v)} a_{32} u &= \frac{1}{6} \\
a_{32} &= \frac{v(u - v)}{u(3u - 2)}
\end{aligned}
$$

残りの変数は次のように書ける。

$$
\begin{aligned}
b_1 &= 1 - b_2 - b_3 \\
a_{21} &= c_2 = u \\
a_{31} &= c_3 - a_{32} = v - a_{32}
\end{aligned}
$$

埋め込み型公式 (RK2) の係数決定

埋め込み型公式とは、Runge-Kutta 式の係数 $b_1, b_2, b_3, \cdots$ の値だけを変えた式 $\hat{y}_{n+1} = y_n + h(\hat{b}_1 k_1 + \cdots + \hat{b}_s k_s)$ のことである。通常、埋め込み型公式は Runge-Kutta 式より 1 次多いか少ない次数にしておき、両者の差がユーザー定義の誤差

限界値 $\varepsilon_{\mathrm{tol}}$ を越えないようにステップ幅 h を調節する。これを数式で書くと以下のようになる。

$$|y_{1i} - \hat{y}_{1i}| \le \varepsilon_{\mathrm{tol}}$$

(中略)

RK3(2) 公式では $\hat{b}_3 = 0$ なので、

$$\hat{b}_1 = 1 - \hat{b}_2$$

$b_2 u + b_3 v = \frac{1}{2}$ に $\hat{b}_3 = 0$ を代入して、

$$\begin{array}{lcl} \hat{b}_2 u & = & \frac{1}{2} \\ \hat{b}_2 & = & \frac{1}{2u} = \frac{1}{2c_2} \\ \hat{b}_1 & = & 1 - \frac{1}{2c_2} \end{array}$$

ルンゲの 2 次公式の係数をこの埋め込み型公式 (RK2) にあてはめる。ルンゲの 2 次公式のブッチャー表は

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

であるから、$c_2 = \frac{1}{2}, a_{21} = \frac{1}{2}, \hat{b}_1 = 0, \hat{b}_2 = 1$ が得られ、RK3 のブッチャー表は

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & \\ \hline & b_1 & b_2 & b_3 \end{array}$$

となる。この形の RK3 には、たとえば Ralston の公式がある (REF.FIXME)。

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ \frac{3}{4} & 0 & \frac{3}{4} & \\ \hline & \frac{2}{9} & \frac{1}{3} & \frac{4}{9} \end{array}$$

よって、Ralston の公式にしたい場合、$a_{31} = 0, a_{32} = \frac{3}{4}, b_1 = \frac{2}{9}, b_2 = \frac{1}{3}, b_3 = \frac{4}{9}, c_3 = \frac{3}{4}$ とすればよい。Ralston の式以外にも RK3 公式は複数提案されている。これらは誤差係数の議論から導出されているが、本書の目的である「プライマー」としての役割を越えるため取り扱わない。(REF.FIXME) を参照されたい。

2.1.3　ステップ幅変更アルゴリズム

$$|y_{1i} - \hat{y}_{1i}| \leq \varepsilon_{\mathrm{tol}}$$

まず、

$$\mathrm{err} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{y_{1i} - \hat{y}_{1i}}{\varepsilon_{\mathrm{tol}}}\right)^2}$$

err が 1 を上回らないようにしたい。

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{err} & \simeq & Ch^{q+1} \\ 1 & \simeq & Ch_{\mathrm{opt}}^{q+1} \end{array}$$

より

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{err} & \simeq & (\frac{h}{h_{\mathrm{opt}}})^{q+1} \\ h_{\mathrm{opt}} & \simeq & h(\frac{1}{\mathrm{err}})^{\frac{1}{q+1}} \end{array}$$

許容誤算限界値を下回るステップ幅 h_{opt} を得る。ステップ幅を変更するアルゴリズムは以下の通りである。

1. err が 1 以下であれば、ステップ幅 h は変更せずに用いる。
2. err が 1 を上回ったら、h_{opt} を計算し、新しい h として採用する。

2.2　安定性

2.2.1　絶対安定

多段階法

安定性多項式の根がすべて 1 未満。

安定性多項式

Runge-Kutta 法

2.2.2 硬い方程式 (stiff equation) の安定性

硬度比 (stiffness ratio)

連立常微分方程式のヤコビ行列の固有値から、その系の「硬さ」を推定できる。

$$硬度比 = \frac{|\,実部最大の固有値\,|}{|\,実部最小の固有値\,|}$$

硬度比 $> 10^4$ 程度のとき、その微分方程式のことを「硬い (stiff)」という。

A 安定

離散変数法の絶対安定領域が、複素平面の左半面を含むこと。1 段階、2 段階の BDF は A 安定である。

硬安定 (stiffly stable)

・左半面における原点近傍・左半面を走る虚軸の平行線のうち、その左側全体が絶対安定領域になっっているものが存在する
1〜6 段階の BDF は硬安定である。

2.3 Further reading

三井斌友「常微分方程式の数値解法」岩波書店 Gear, Springer's yellow book
http://www.scholarpedia.org/article/Backward_differentiation_formulas
by Gear