4次のルンゲ・クッタ法とシンプソン公式

中嶋 慧

January 22, 2024

Abstract

常微分方程式の数値解法にオイラー法, ホイン法, ルンゲ・クッタ法がある。これらはそれぞれ数値積分の矩形積分 (区分求積法), 台形公式, シンプソン公式に対応することを示す。

§4 でルンゲ・クッタ法を導出する。

Contents

1 数値積分 **1**

2 ホイン法と台形公式 **2**

3 ルンゲ・クッタ法とシンプソン公式 **3**

4 ルンゲ・クッタ法の導出 **5**

5 多変数の場合 **9**

1 数値積分

関数 $f(x)$ の積分 $I=\int_{x_0}^{x_0+h}dx\ f(x)$ は、

$$
\begin{aligned}
I &= I_1 + O(h^2) && (1.1)\\
&= I_2 + O(h^3) && (1.2)\\
&= I_3 + O(h^5), && (1.3)\\
I_1 &= hf(x_0), && (1.4)\\
I_2 &= \frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_0+h)], && (1.5)\\
I_3 &= \frac{h}{6}[f(x_0)+4f(x_0+\frac{1}{2}h)+f(x_0+h)] && (1.6)
\end{aligned}
$$

と評価でき、I_1 が矩形積分 (区分求積法), I_2 が台形公式, I_3 がシンプソン公式である。

2　ホイン法と台形公式

常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{2.1}$$

に対して、$y(x)$ は、

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} dx'\ f(x', y(x')) \tag{2.2}$$

で与えられる。ここで、$y_0 = y(x_0)$ である。特に、$x = x_0 + h$ のとき、

$$\begin{aligned}
y(x_0 + h) &= y_0 + hf_1 + O(h^2) && (2.3)\\
&= y_0 + hf_2 + O(h^3) && (2.4)\\
&= y_0 + hf_3 + O(h^5), && (2.5)\\
f_1 &= f(x_0, y_0), && (2.6)\\
f_2 &= \frac{1}{2}[f(x_0, y_0) + f(x_0, y_0 + hf_1)], && (2.7)\\
f_3 &= \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), && (2.8)\\
k_1 &= f_1, && (2.9)\\
k_2 &= f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_1 h), && (2.10)\\
k_3 &= f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_2 h), && (2.11)\\
k_4 &= f(x_0 + h, y_0 + k_3 h) && (2.12)
\end{aligned}$$

である。(2.3) はオイラー法, (2.4) はホイン法, (2.5) は 4 次のルンゲ・クッタ法である。

ところで、(2.2) の積分を矩形積分, 台形公式, シンプソン公式で近似すると、

$$\begin{aligned}
y(x_0 + h) &= y_0 + hF_1 + O(h^2) && (2.13)\\
&= y_0 + hF_2 + O(h^3) && (2.14)\\
&= y_0 + hF_3 + O(h^5), && (2.15)\\
F_1 &= f(x_0, y_0) = f_1, && (2.16)\\
F_2 &= \frac{1}{2}[f(x_0, y_0) + f(x_0, y(x_0 + h))], && (2.17)\\
F_3 &= \frac{1}{6}[f(x_0, y_0) + 4f(x_0 + \frac{1}{2}h, y(x + \frac{1}{2}h)) + f(x_0 + h, y(x_0 + h))] && (2.18)
\end{aligned}$$

である。F_2 において $y(x_0 + h)$ の値を $y_0 + hf_1$ で近似したものがホイン法である。この近似で、

$$F_2 = f_2 + O(h^2) \tag{2.19}$$

である。

もしも、

$$f_3 = F_3 + O(h^4) \tag{2.20}$$

ならば (2.15) から (2.5) が得られる。

3　ルンゲ・クッタ法とシンプソン公式

$F(x) := f(x, y(x))$ の導関数は、

$$
\begin{aligned}
F'(x) &= f_x + f_y F, && (3.1)\\
F''(x) &= f_{xx} + f_{xy}F + f_{xy}F + f_{yy}F^2 + f_y(f_x + f_y F)\\
&= f_{xx} + 2f_{xy}F + f_x f_y + f_y^2 F + f_{yy}F^2, && (3.2)\\
F'''(x) &= f_{xxx} + f_{xxy}F + 2f_{xxy}F + 2f_{xyy}F^2 + 2f_{xy}(f_x + f_y F)\\
&\quad + f_{xx}f_y + f_{xy}f_y F + f_x f_{xy} + f_x f_{yy} F\\
&\quad + 2f_y f_{xy} F + 2f_y f_{yy} F^2 + f_y^2(f_x + f_y F)\\
&\quad + f_{yyy}F^3 + f_{xyy}F^2 + 2f_{yy}F(f_x + f_y F)\\
&= f_{xxx} + 3f_{xxy}F + 3f_{xyy}F^2 + 3f_{xy}f_x + 5f_{xy}f_y F + f_{xx}f_y\\
&\quad + 3f_{yy}f_x F + 4f_{yy}f_y F^2 + f_x f_y^2 + f_y^3 F + f_{yyy}F^3 && (3.3)
\end{aligned}
$$

である。よって、

$$
F(x_0 + h) = F(x_0) + F'(x_0)h + \frac{1}{2}F''(x_0)h^2 + \frac{1}{6}F'''(x_0)h^3 + O(h^4) \tag{3.4}
$$

である。

以下、$\tilde{h} := \frac{1}{2}h$ とする。このとき、

$$
F(x_0 + \tilde{h}) = F(x_0) + F'(x_0)\tilde{h} + \frac{1}{2}F''(x_0)\tilde{h}^2 + \frac{1}{6}F'''(x_0)\tilde{h}^3 + O(h^4) \tag{3.5}
$$

である。一方、

$$
\begin{aligned}
k_2 &= f(x_0 + \tilde{h}, y_0 + k_1\tilde{h})\\
&= F(x_0) + (f_x + f_y k_1)\tilde{h} + \frac{1}{2}(f_{xx} + 2f_{xy}k_1 + f_{yy}k_1^2)\tilde{h}^2\\
&\quad + \frac{1}{6}(f_{xxx} + 3f_{xxy}k_1 + f_{xyy}k_1^2 + f_{yyy}k_1^3)\tilde{h}^3 + O(h^4)\\
&= F(x_0) + (f_x + f_y F)\tilde{h} + \frac{1}{2}(f_{xx} + 2f_{xy}F + f_{yy}F^2)\tilde{h}^2\\
&\quad + \frac{1}{6}(f_{xxx} + 3f_{xxy}F + f_{xyy}F^2 + f_{yyy}F^3)\tilde{h}^3 + O(h^4)\\
&=: F(x_0) + k_{2,1}\tilde{h} + \frac{1}{2}k_{2,2}\tilde{h}^2 + \frac{1}{6}k_{2,3}\tilde{h}^3 + O(h^4) && (3.6)
\end{aligned}
$$

であり、

$$
\begin{aligned}
k_3 &= F(x_0) + (f_x + f_y k_2)\tilde{h} + \frac{1}{2}(f_{xx} + 2f_{xy}k_2 + f_{yy}k_2^2)\tilde{h}^2\\
&\quad + \frac{1}{6}(f_{xxx} + 3f_{xxy}k_2 + 3f_{xyy}k_2^2 + f_{yyy}k_2^3)\tilde{h}^3 + O(h^4)\\
&=: F(x_0) + k_{3,1}\tilde{h} + \frac{1}{2}k_{3,2}\tilde{h}^2 + \frac{1}{6}k_{3,3}\tilde{h}^3 + O(h^4) && (3.7)
\end{aligned}
$$

である。まず、

$$k_{3,1} = k_{2,1} = f_x + f_y F = F'(x_0) \tag{3.8}$$

である。次に、

$$\begin{align} k_{2,2} &= f_{xx} + 2f_{xy}F + f_{yy}F^2, \tag{3.9} \\ k_{3,2} &= k_{2,2} + 2k_{2,1}f_y \nonumber \\ &= f_{xx} + 2f_{xy}F + f_{yy}F^2 + 2(f_x + f_y F)f_y \nonumber \\ &= f_{xx} + 2f_{xy}F + f_{yy}F^2 + 2f_x f_y + 2f_y^2 F \tag{3.10} \end{align}$$

なので、

$$\begin{align} \frac{1}{2}(k_{2,2} + k_{3,2}) &= f_{xx} + 2f_{xy}F + f_{yy}F^2 + f_x f_y + f_y^2 F \nonumber \\ &= F''(x_0) \tag{3.11} \end{align}$$

である。そして、

$$\begin{align} k_{2,3} &= f_{xxx} + 3f_{xxy}F + 3f_{xyy}F^2 + f_{yyy}F^3, \tag{3.12} \\ k_{3,3} &= k_{2,3} + 6f_{yy}Fk_{2,1} + 6f_{xy}k_{2,1} + 3f_y k_{2,2} \nonumber \\ &= f_{xxx} + 3f_{xxy}F + f_{xyy}F^2 + f_{yyy}F^3 + 6(f_{yy}F + f_{xy})(f_x + f_y F) \nonumber \\ &\quad + 3f_y(f_{xx} + 2f_{xy}F + f_{yy}F^2) \nonumber \\ &= f_{xxx} + 3f_{xxy}F + 3f_{xyy}F^2 + f_{yyy}F^3 + 6f_{yy}f_x F + 6f_{yy}f_y F^2 + 6f_{xy}f_x + 6f_{xy}f_y F \nonumber \\ &\quad + 3f_y f_{xx} + 6f_y f_{xy}F + 3f_y f_{yy}F^2 \nonumber \\ &= f_{xxx} + 3f_{xxy}F + 3f_{xyy}F^2 + f_{yyy}F^3 + 6f_{yy}f_x F + 6f_{xy}f_x + 12f_{xy}f_y F \nonumber \\ &\quad + 3f_{xx}f_y + 9f_{yy}f_y F^2 \tag{3.13} \end{align}$$

である。

k_4 は、

$$\begin{align} k_4 &= F(x_0) + (f_x + f_y k_3)h + \frac{1}{2}(f_{xx} + 2f_{xy}k_3 + f_{yy}k_3^2)h^2 \nonumber \\ &\quad + \frac{1}{6}(f_{xxx} + 3f_{xxy}k_3 + f_{xyy}k_3^2 + f_{yyy}k_3^3)h^3 + O(h^4) \nonumber \\ &=: F(x_0) + k_{4,1}h + \frac{1}{2}k_{4,2}h^2 + \frac{1}{6}k_{4,3}h^3 + O(h^4) \tag{3.14} \end{align}$$

である。ここで、

$$\begin{align} k_{4,1} &= f_x + f_y F = F'(x_0), \tag{3.15} \\ k_{4,2} &= k_{2,2} + k_{3,1}f_y \nonumber \\ &= F''(x_0), \tag{3.16} \end{align}$$

$$
\begin{aligned}
k_{4,3} &= k_{2,3} + 3f_{yy}Fk_{3,1} + 3f_{xy}k_{3,1} + \frac{3}{4}f_y k_{3,2} \\
&= f_{xxx} + 3f_{xxy}F + 3f_{xyy}F^2 + f_{yyy}F^3 + 3(f_{yy}F + f_{xy})(f_x + f_y F) \\
&\quad + \frac{3}{4}f_y(f_{xx} + 2f_{xy}F + f_{yy}F^2 + 2f_x f_y + 2f_y^2 F) \\
&= f_{xxx} + 3f_{xxy}F + 3f_{xyy}F^2 + f_{yyy}F^3 + 3(f_{yy}f_x F + f_{xy}f_x + f_{yy}f_y F^2 + f_{xy}f_y F) \\
&\quad + \frac{3}{4}(f_{xx}f_y + 2f_{xy}f_y F + f_{yy}f_y F^2 + 2f_x f_y^2 + 2f_y^3 F) \\
&= f_{xxx} + 3f_{xxy}F + 3f_{xyy}F^2 + f_{yyy}F^3 + 3f_{yy}f_x F + 3f_{xy}f_x + \frac{9}{2}f_{xy}f_y F \\
&\quad + \frac{3}{4}f_{xx}f_y + \frac{15}{4}f_{yy}f_y F^2 + \frac{3}{2}f_x f_y^2 + \frac{3}{2}f_y^3 F
\end{aligned} \tag{3.17}
$$

である。よって、

$$
2(k_{2,3} + k_{3,3})\frac{1}{2^3} + k_{4,3} = (\frac{4}{2^3} + 1)F'''(x_0) = \frac{3}{2}F'''(x_0) \tag{3.18}
$$

となる。すなわち、

$$
2k_2 + 2k_3 + k_4 = 4F(x + \frac{1}{2}h) + F(x + h) + O(h^4) \tag{3.19}
$$

である。以上より、(2.20) が示された。

ただし、

$$
F(x + \frac{1}{2}h) = \frac{1}{2}(k_2 + k_3) + O(h^3), \tag{3.20}
$$

$$
F(x + h) = \frac{1}{2}k_4 + O(h^3), \tag{3.21}
$$

$$
4F(x + \frac{1}{2}h) + F(x + h) = 2k_2 + 2k_3 + k_4 + O(h^4) \tag{3.22}
$$

であることに注意せよ。シンプソン公式から 4 次のルンゲ・クッタ法 (すなわち各種の係数) が導出された、というよりは、後者は前者によって解釈できる、と理解した方が良い。一般にニュートン・コーツの公式から高次のルンゲ・クッタ法を導出することはできなそうに思える。

4　ルンゲ・クッタ法の導出

ルンゲ・クッタ法の導出する。そのために、一般的に

$$
k_i = f(x_0 + c_i h, y_0 + hd_i), \quad d_i = \sum_{j=1}^{4} a_{ij}k_j, \tag{4.1}
$$

$$
\Delta y = h\sum_{i=1}^{4} b_i k_i \tag{4.2}
$$

とおき、

$$
\Delta y = y(x_0 + h) - y_0 + O(h^5) \tag{4.3}
$$

となるように a_{ij}, b_i, c_i を決める。いま、

$$k_i = \sum_{n=0}^{3} \frac{1}{n!} k_{i,n} h^n + O(h^4) \tag{4.4}$$

と置くと、まず、

$$k_{i,0} = F(x_0, y_0), \tag{4.5}$$

$$k_{i,1} = f_x c_i + f_y \sum_j a_{ij} F \tag{4.6}$$

である。これより、

$$\sum_{i=1}^{4} b_i = 1, \tag{4.7}$$

$$\sum_{i=1}^{4} b_i c_i = \frac{1}{2}, \tag{4.8}$$

$$\sum_{i=1}^{4} b_i \tilde{c}_i = \frac{1}{2}, \quad \tilde{c}_i := \sum_{j=1}^{4} a_{ij} \tag{4.9}$$

である。

さて、

$$\begin{aligned} k_i = F(x_0) + (f_x c_i + f_y d_i)h + \frac{1}{2}(c_i^2 f_{xx} + 2f_{xy} c_i d_i + f_{yy} d_i^2)h^2 \\ + \frac{1}{6}(f_{xxx} c_i^3 + 3f_{xxy} c_i^2 d_i + 3f_{xyy} d_i^2 + f_{yyy} d_i^3)h^3 + O(h^4) \end{aligned} \tag{4.10}$$

である。いま、

$$d_i = D_i + h d_i^{(1)} + \frac{h^2}{2} d_i^{(2)} + O(h^3) \tag{4.11}$$

と置くと、

$$k_{i,2} = c_i^2 f_{xx} + 2f_{xy} c_i D_i + f_{yy} D_i^2 + 2f_y d_i^{(1)}, \tag{4.12}$$

$$k_{i,3} = f_{xxx} c_i^3 + 3f_{xxy} c_i^2 D_i + 3f_{xyy} D_i^2 + f_{yyy} D_i^3 + 6f_{xy} c_i d_i^{(1)} + 6f_{yy} D_i d_i^{(1)} + 3f_y d_i^{(2)} \tag{4.13}$$

である。ここで、

$$D_i = F \sum_{j=1}^{4} a_{ij} = F \tilde{c}_i, \tag{4.14}$$

$$\begin{aligned} d_i^{(1)} &= \sum_{j=1}^{4} a_{ij} k_{j,1} \\ &= \sum_{j=1}^{4} a_{ij} (f_x c_j + f_y F \tilde{c}_j), \end{aligned} \tag{4.15}$$

$$
\begin{aligned}
d_i^{(2)} &= \sum_{j=1}^{4} a_{ij} k_{j,2} \\
&= \sum_{j=1}^{4} a_{ij} [c_j^2 f_{xx} + 2 f_{xy} F c_j \tilde{c}_j + f_{yy} F^2 \tilde{c}_j^2 + 2 f_y \sum_{k=1}^{4} a_{jk} (f_x c_k + f_y F \tilde{c}_k)] \qquad (4.16)
\end{aligned}
$$

である。よって、

$$
k_{i,2} = c_i^2 f_{xx} + 2 f_{xy} F c_i \tilde{c}_i + f_{yy} F^2 \tilde{c}_i^2 + \sum_{j=1}^{4} 2 a_{ij} (f_x f_y c_j + f_y^2 F \tilde{c}_j) \qquad (4.17)
$$

である。一方、

$$
F''(x) = f_{xx} + 2 f_{xy} F + f_x f_y + f_y^2 F + f_{yy} F^2 \qquad (4.18)
$$

である。よって、

$$
\sum_{i=1}^{4} b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \qquad (4.19)
$$

$$
\sum_{i,j=1}^{4} b_i c_i \tilde{c}_i = \frac{1}{3}, \qquad (4.20)
$$

$$
\sum_{i=1}^{4} b_i \tilde{c}_i^2 = \frac{1}{3}, \qquad (4.21)
$$

$$
\sum_{i,j=1}^{4} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}, \qquad (4.22)
$$

$$
\sum_{i,j=1}^{4} b_i a_{ij} \tilde{c}_j = \frac{1}{6} \qquad (4.23)
$$

を得る。

$k_{i,3}$ は、

$$
\begin{aligned}
k_{i,3} = {} & f_{xxx} c_i^3 + 3 f_{xxy} F c_i^2 \tilde{c}_i + 3 f_{xyy} F^2 \tilde{c}_i^2 + f_{yyy} F^3 \tilde{c}_i^3 \\
& + \sum_{j=1}^{4} c_i a_{ij} (6 c_j f_{xy} f_x + 6 \tilde{c}_j f_{xy} f_y F) + \sum_{j=1}^{4} 6 a_{ij} (\tilde{c}_i c_j f_{yy} f_x F + \tilde{c}_i \tilde{c}_j f_{yy} f_y F^2) \\
& + \sum_{j=1}^{4} a_{ij} [3 c_j^2 f_{xx} f_y + 6 c_j \tilde{c}_j f_{xy} f_y F + 3 \tilde{c}_j^2 f_{yy} f_y F^2 + \sum_{k=1}^{4} 6 a_{jk} (c_k f_x f_y^2 + \tilde{c}_k f_y^3 F)] \qquad (4.24)
\end{aligned}
$$

である。一方、

$$
\begin{aligned}
F'''(x) = {} & f_{xxx} + 3 f_{xxy} F + 3 f_{xyy} F^2 + 3 f_{xy} f_x + 5 f_{xy} f_y F + f_{xx} f_y \\
& + 3 f_{yy} f_x F + 4 f_{yy} f_y F^2 + f_x f_y^2 + f_y^3 F + f_{yyy} F^3 \qquad (4.25)
\end{aligned}
$$

である。よって、以下の条件を得る：

$$\sum_{i=1}^{4} b_i c_i^3 = \frac{1}{4}, \tag{4.26}$$

$$\sum_{i=1}^{4} b_i c_i^2 \tilde{c}_i = \frac{1}{4}, \tag{4.27}$$

$$\sum_{i=1}^{4} b_i c_i \tilde{c}_i^2 = \frac{1}{4}, \tag{4.28}$$

$$\sum_{i=1}^{4} b_i \tilde{c}_i^3 = \frac{1}{4}, \tag{4.29}$$

$$\sum_{i,j=1}^{4} b_i a_{ij} c_i c_j = \frac{1}{8}, \tag{4.30}$$

$$\sum_{i,j=1}^{4} (b_i a_{ij} c_i \tilde{c}_j + b_i a_{ij} c_j \tilde{c}_j) = \frac{5}{24}, \tag{4.31}$$

$$\sum_{i,j=1}^{4} b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \tag{4.32}$$

$$\sum_{i,j=1}^{4} b_i a_{ij} \tilde{c}_i c_j = \frac{1}{8}, \tag{4.33}$$

$$\sum_{i,j=1}^{4} (2b_i a_{ij} \tilde{c}_i \tilde{c}_j + b_i a_{ij} \tilde{c}_j^2) = \frac{1}{3}, \tag{4.34}$$

$$\sum_{i,j,k=1}^{4} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}, \tag{4.35}$$

$$\sum_{i,j,k=1}^{4} b_i a_{ij} a_{jk} \tilde{c}_k = \frac{1}{24}. \tag{4.36}$$

いま、

$$\tilde{c}_i = \sum_{j=1}^{4} a_{ij} = c_i \tag{4.37}$$

を課す。独立な条件は以下である：

$$\sum_{i=1}^{4} b_i = 1, \tag{4.38}$$

$$\sum_{i=1}^{4} b_i c_i = \frac{1}{2}, \tag{4.39}$$

$$\sum_{i=1}^{4} b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \tag{4.40}$$

$$(4.41)$$

$$\sum_{i,j=1}^{4} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}, \tag{4.42}$$

$$\sum_{i=1}^{4} b_i c_i^3 = \frac{1}{4}, \tag{4.43}$$

$$\sum_{i,j=1}^{4} b_i a_{ij} c_i c_j = \frac{1}{8}, \tag{4.44}$$

$$\sum_{i,j=1}^{4} b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \tag{4.45}$$

$$\sum_{i,j,k=1}^{4} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}. \tag{4.46}$$

ルンゲ・クッタ法はこれの解である。また、クッタの 3/8 公式と呼ばれる以下も解である：

$$\Delta y = \frac{k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4}{8} h + O(h^5), \tag{4.47}$$

$$k_1 = f(x_0, y_0), \tag{4.48}$$

$$k_2 = f(x_0 + \frac{1}{3}h, y_0 + \frac{1}{3}k_1 h), \tag{4.49}$$

$$k_3 = f(x_0 + \frac{2}{3}h, y_0 + (k_2 - \frac{1}{3}k_1)h), \tag{4.50}$$

$$k_4 = f(x_0 + h, y_0 + (k_3 - k_2 + k_1)h). \tag{4.51}$$

これはシンプソンの 3/8 公式に対応する。

5 多変数の場合

多変数の場合

$$\frac{dy^A}{dx} = f^A(x, y) \quad (A = 1, \cdots, n) \tag{5.1}$$

である。$y^\alpha = (y^0, y^A) = (x, y^A)$ とすると、

$$\frac{dy^\alpha}{dx} = f^\alpha(y) \quad (\alpha = 0, \cdots, n), \quad f^0 = 1 \tag{5.2}$$

となる。まず、

$$\frac{df^\alpha}{dx} = f^\alpha{}_\beta f^\beta \tag{5.3}$$

である。ここで、$f^\alpha{}_\beta = \partial_\beta f^\alpha$ である。またアインシュタインの縮退を使う。次に、

$$\frac{d^2 f^\alpha}{dx^2} = f^\alpha{}_{\beta\gamma} f^\beta f^\gamma + f^\alpha{}_\beta f^\beta{}_\gamma f^\gamma \tag{5.4}$$

である。3 階微分は、

$$\begin{aligned}\frac{d^3 f^\alpha}{dx^3} &= f^\alpha{}_{\beta\gamma\delta} f^\beta f^\gamma f^\delta + 2 f^\alpha{}_{\beta\gamma} f^\beta{}_\delta f^\gamma f^\delta \\ &\quad + f^\alpha{}_{\beta\delta} f^\beta{}_\gamma f^\gamma f^\delta + f^\alpha{}_\beta f^\beta{}_{\gamma\delta} f^\gamma f^\delta + f^\alpha{}_\beta f^\beta{}_\gamma f^\gamma{}_\delta f^\delta \\ &= f^\alpha{}_{\beta\gamma\delta} f^\beta f^\gamma f^\delta + 3 f^\alpha{}_{\beta\gamma} f^\beta{}_\delta f^\gamma f^\delta + f^\alpha{}_\beta f^\beta{}_{\gamma\delta} f^\gamma f^\delta + f^\alpha{}_\beta f^\beta{}_\gamma f^\gamma{}_\delta f^\delta \qquad (5.5)\end{aligned}$$

である。

いま、

$$k_i^\alpha = f^\alpha(y_0 + h d_i), \quad d_i^\alpha = \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j^\alpha, \qquad (5.6)$$

$$\Delta y^\alpha = h \sum_{i=1}^{s} b_i k_i^\alpha \qquad (5.7)$$

とおき、

$$\Delta y^\alpha = y^\alpha(x_0 + h) - y_0^\alpha + O(h^5) \qquad (5.8)$$

となるように a_{ij}, b_i を決める。以下、

$$c_i := \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \qquad (5.9)$$

とする。また、

$$d_i^\alpha = D_i^\alpha + h E_i^\alpha + \frac{h^2}{2} G_i^\alpha + O(h^3), \qquad (5.10)$$

$$k_i^\alpha = \sum_{n=0}^{3} \frac{k_{i,n}^\alpha}{n!} h^n + O(h^4) \qquad (5.11)$$

とする。このとき、

$$D_i^\alpha = c_i f^\alpha(y_0) \qquad (5.12)$$

である。さて、

$$k_i^\alpha = f^\alpha(y_0) + h f^\alpha{}_\beta(y_0) d_i^\beta + \frac{h^2}{2} f^\alpha{}_{\beta\gamma}(y_0) d_i^\beta d_i^\gamma + \frac{h^3}{6} f^\alpha{}_{\beta\gamma\delta}(y_0) d_i^\beta d_i^\gamma d_i^\delta + O(h^4) \qquad (5.13)$$

であるから、まず、

$$k_{i,0}^\alpha = f^\alpha(y_0), \qquad (5.14)$$

$$k_{i,1}^\alpha = f^\alpha{}_\beta(y_0) c_i f^\beta(y_0) \qquad (5.15)$$

である。よって、

$$\sum_{i=1}^{s} b_i = 1, \qquad (5.16)$$

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i = \frac{1}{2} \qquad (5.17)$$

を得る。次に、

$$k_{i,2}^{\alpha} = c_i^2 f^{\alpha}_{\ \beta\gamma} f^{\beta} f^{\gamma} + 2 f^{\alpha}_{\ \beta} E_i^{\beta} \tag{5.18}$$

である。ここで、

$$\begin{aligned} E_i^{\beta} &= \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_{j,1}^{\beta} \\ &= \sum_{j=1}^{s} a_{ij} c_j f^{\beta}_{\ \gamma} f^{\gamma} \end{aligned} \tag{5.19}$$

であるから、

$$k_{i,2}^{\alpha} = c_i^2 f^{\alpha}_{\ \beta\gamma} f^{\beta} f^{\gamma} + \sum_{j=1}^{s} 2 a_{ij} c_j f^{\alpha}_{\ \beta} f^{\beta}_{\ \gamma} f^{\gamma} \tag{5.20}$$

であり、

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \tag{5.21}$$

$$\sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6} \tag{5.22}$$

を得る。

さて、$k_{i,3}$ は、

$$k_{i,3}^{\alpha} = c_i^3 f^{\alpha}_{\ \beta\gamma\delta} f^{\beta} f^{\gamma} f^{\delta} + 3 f^{\alpha}_{\ \beta} G_i^{\beta} + 6 f^{\alpha}_{\ \beta\gamma} D_i^{\beta} E_i^{\gamma} \tag{5.23}$$

であり、

$$\begin{aligned} G_i^{\beta} &= \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_{j,2}^{\beta} \\ &= \sum_{j=1}^{s} a_{ij} c_j^2 f^{\beta}_{\ \gamma\delta} f^{\gamma} f^{\delta} + \sum_{j,k=1}^{s} 2 a_{ij} a_{jk} c_k f^{\beta}_{\ \gamma} f^{\gamma}_{\ \delta} f^{\delta} \end{aligned} \tag{5.24}$$

なので、

$$\begin{aligned} k_{i,3}^{\alpha} = c_i^3 & f^{\alpha}_{\ \beta\gamma\delta} f^{\beta} f^{\gamma} f^{\delta} \\ &+ \sum_{j=1}^{s} 3 a_{ij} c_j^2 f^{\alpha}_{\ \beta} f^{\beta}_{\ \gamma\delta} f^{\gamma} f^{\delta} + \sum_{j,k=1}^{s} 6 a_{ij} a_{jk} c_k f^{\alpha}_{\ \beta} f^{\beta}_{\ \gamma} f^{\gamma}_{\ \delta} f^{\delta} \\ &+ \sum_{j=1}^{s} 6 c_i a_{ij} c_j f^{\alpha}_{\ \beta\gamma} f^{\gamma}_{\ \delta} f^{\beta} f^{\delta} \end{aligned} \tag{5.25}$$

である。よって、

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^3 = \frac{1}{4}, \tag{5.26}$$

$$\sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} c_i c_j = \frac{1}{8}, \tag{5.27}$$

$$\sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \tag{5.28}$$

$$\sum_{i,j,k=1}^{s} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24} \tag{5.29}$$

を得る。

なお、

$$\begin{aligned}
\frac{d^4 f^\alpha}{dx^4} &= f^\alpha_{\ \beta\gamma\delta\varepsilon} f^\beta f^\gamma f^\delta f^\varepsilon + 3 f^\alpha_{\ \beta\gamma\delta} f^\beta_{\ \varepsilon} f^\gamma f^\delta f^\varepsilon \\
&\quad + 3 f^\alpha_{\ \beta\gamma\varepsilon} f^\beta_{\ \delta} f^\gamma f^\delta f^\varepsilon + 3 f^\alpha_{\ \beta\gamma} f^\beta_{\ \delta\varepsilon} f^\gamma f^\delta f^\varepsilon + 3 f^\alpha_{\ \beta\gamma} f^\beta_{\ \delta} f^\gamma_{\ \varepsilon} f^\delta f^\varepsilon + 3 f^\alpha_{\ \beta\gamma} f^\beta_{\ \delta} f^\delta_{\ \varepsilon} f^\gamma f^\varepsilon \\
&\quad + f^\alpha_{\ \beta\varepsilon} f^\beta_{\ \gamma\delta} f^\gamma f^\delta f^\varepsilon + f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma\delta\varepsilon} f^\gamma f^\delta f^\varepsilon + 2 f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma\delta} f^\gamma_{\ \varepsilon} f^\delta f^\varepsilon \\
&\quad + f^\alpha_{\ \beta\varepsilon} f^\beta_{\ \gamma} f^\gamma_{\ \delta} f^\delta f^\varepsilon + f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma\varepsilon} f^\gamma_{\ \delta} f^\delta f^\varepsilon + f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma} f^\gamma_{\ \delta\varepsilon} f^\delta f^\varepsilon + f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma} f^\gamma_{\ \delta} f^\delta_{\ \varepsilon} f^\varepsilon \\
&= f^\alpha_{\ \beta\gamma\delta\varepsilon} f^\beta f^\gamma f^\delta f^\varepsilon + 6 f^\alpha_{\ \beta\gamma\delta} f^\beta_{\ \varepsilon} f^\gamma f^\delta f^\varepsilon + 4 f^\alpha_{\ \beta\gamma} f^\beta_{\ \delta\varepsilon} f^\gamma f^\delta f^\varepsilon \\
&\quad + 3 f^\alpha_{\ \beta\gamma} f^\beta_{\ \delta} f^\gamma_{\ \varepsilon} f^\delta f^\varepsilon + 4 f^\alpha_{\ \beta\gamma} f^\beta_{\ \delta} f^\delta_{\ \varepsilon} f^\gamma f^\varepsilon + f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma\delta\varepsilon} f^\gamma f^\delta f^\varepsilon \\
&\quad + 3 f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma\delta} f^\gamma_{\ \varepsilon} f^\delta f^\varepsilon + f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma} f^\gamma_{\ \delta\varepsilon} f^\delta f^\varepsilon + f^\alpha_{\ \beta} f^\beta_{\ \gamma} f^\gamma_{\ \delta} f^\delta_{\ \varepsilon} f^\varepsilon
\end{aligned} \tag{5.30}$$

であり、9 タイプの項が現れる。5 階微分には 20 タイプの項が現れる [2]。

References

[1] 緒方秀教「常微分方程式の数値解法と数値積分」

[2] J. C. Butcher, “Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes”, Journal of the Australian Mathematical Society, **3**, 185 (1963).