

1 階の常微分方程式 (初期値問題) の数値解法のまとめ

1. 解くべき問題

時間 t の関数である未知の変数 $u(t)$ ($t \geq 0$) が, 微分方程式

$$\frac{du}{dt} = f(u(t), t) \quad (\text{ただし } f \text{ は既知の関数}) \quad (1)$$

を満たすとき, これを初期条件 $u(0) = u_0$ のもとで数値的に解くことを考える。たとえば

減衰方程式: $\frac{du}{dt} = -\mu u$ (u は物体の速度, μ は速度に比例する摩擦係数)

振動方程式: $\frac{du}{dt} = i\omega u$ (u は物体の複素変位, ω は角周波数, i は虚数単位)

など。

2. 数値解法の原理

時間を $t_n \equiv n\Delta_t$ ($n = 0, 1, \dots$) のように離散化する。方程式 (1) の両辺を $t_n \leq t \leq t_{n+1}$ の範囲で時間積分することにより, 漸化式

$$u_{n+1} = u_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u, t) dt \quad (n = 0, 1, \dots) \quad (2)$$

を得る (ただし $u_n \equiv u(t_n)$)。これを逐次的に, 欲しい時間ステップに達するまで計算する。ただし式 (2) の右辺の積分は, 被積分関数に未知 (未来) の情報が含まれるので, 厳密には計算できない。この数値積分の近似のやり方によって, さまざまな数値解法が考えられる。表 1 にいくつかの基本的な解法 (スキーム) を示す。

スキームの呼称	基本原理	手順	積分の局所誤差
オイラー法	短冊積分	$u_{n+1} = u_n + \Delta_t f_n$	$O(\Delta_t^2)$
後退オイラー法	陰的な短冊積分	$u_{n+1} = u_n + \Delta_t f_{n+1}$	$O(\Delta_t^2)$
クラנק・ニコルソン法	陰的な台形則	$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}\Delta_t(f_n + f_{n+1})$	$O(\Delta_t^3)$
改良オイラー法	陽的な中点則	$\begin{cases} k_1 \equiv f_n, k_2 \equiv f(u_n + \frac{1}{2}k_1\Delta_t, t_n + \frac{1}{2}\Delta_t) \\ u_{n+1} = u_n + k_2\Delta_t \end{cases}$	$O(\Delta_t^3)$
ホイン法	陽的な台形則	$\begin{cases} k_1 \equiv f_n, k_2 \equiv f(u_n + k_1\Delta_t, t_n + \Delta_t) \\ u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}\Delta_t(k_1 + k_2) \end{cases}$	$O(\Delta_t^3)$
3 次ルンゲ・クッタ法	陽的なシンプソン則	$\begin{cases} k_1 \equiv f_n, k_2 \equiv f(u_n + \frac{1}{2}k_1\Delta_t, t_n + \frac{1}{2}\Delta_t), \\ k_3 \equiv f(u_n + (2k_2 - k_1)\Delta_t, t_n + \Delta_t), \\ u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6}\Delta_t(k_1 + 4k_2 + k_3), \end{cases}$	$O(\Delta_t^4)$
4 次ルンゲ・クッタ法	陽的なシンプソン則	$\begin{cases} k_1 \equiv f_n, k_2 \equiv f(u_n + \frac{1}{2}k_1\Delta_t, t_n + \frac{1}{2}\Delta_t), \\ k_3 \equiv f(u_n + \frac{1}{2}k_2\Delta_t, t_n + \frac{1}{2}\Delta_t), \\ k_4 \equiv f(u_n + k_3\Delta_t, t_n + \Delta_t), \\ u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6}\Delta_t(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{cases}$	$O(\Delta_t^5)$

表 1: 基本的な時間積分スキームのまとめ。ここに $f_n \equiv f(u_n, t_n)$, k_1, k_2, \dots は補助変数。改良オイラー法とホイン法は, ともに 2 次のルンゲ・クッタ法の一つでもある。

3. 用語

- 陰的なスキーム (陰解法) とは, 解法の手順で, 未知の情報 (たとえば f_{n+1}) をもちいるようなスキームをいう。陰解法を扱うには, なんらかの代数方程式を解くような余分の計算が必要である。対義語は陽的なスキーム (陽解法) で, この場合そうした余分の計算は必要ない。
- 積分の局所誤差とは, 漸化式 (2) を 1 回進めるときに発生する, 変数の推定誤差。ある決められた時刻まで計算するとき, 必要となる時間ステップの数は Δ_t^{-1} に比例する。よって局所誤差が Δ_t^{p+1} に比例するスキームでも, 積分の大域誤差は最悪 Δ_t^p に比例するので, このスキームの精度は p 次であるという。

4. 時間積分の安定性

- 線形の微分方程式 $du/dt = \lambda u$ を数値的に解いたときに, 厳密解 $u(t) = u_0 e^{\lambda t}$ の振幅が発散しない (すなわち複素係数 λ の実部がゼロまたは負である) にもかかわらず, 数値解の振幅が増大してしまうとき, その数値解法は不安定である, という。
- 逆にある数値計算法が安定であるとは, 得られる数値解の振幅が増大しないこと, すなわち

$$\frac{|u_{n+1}|}{|u_n|} \leq 1 \quad (n = 0, 1, \dots)$$

が成り立つことである, と定義する。

- たとえばオイラー法の場合, $u_{n+1} = u_n + \lambda \Delta_t u_n$ だから, 安定条件は

$$\frac{|u_{n+1}|}{|u_n|} = |1 + \lambda \Delta_t| \leq 1,$$

すなわち複素数 $\lambda \Delta_t$ は, 複素平面上の点 $(-1, 0)$ を中心とする半径 1 の円板内に存在する必要がある。このような円板のことを安定領域という。種々のスキームの安定領域を図 1 に示す。

- 後退オイラー法の場合, $u_{n+1} = u_n + \lambda \Delta_t u_{n+1}$ だから, 安定条件は

$$\frac{|u_{n+1}|}{|u_n|} = \frac{1}{|1 - \lambda \Delta_t|} \leq 1,$$

すなわち複素平面上の点 $(1, 0)$ を中心とする半径 1 の円板の外側の領域が安定領域になる。

- 連立の線形常微分方程式 $du/dt = Au$ (u は N 元のベクトル変数, A は $N \times N$ の行列) を安定に時間積分するためには, A の複素固有値 $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\}$ に対して, $\{\lambda_1 \Delta_t, \lambda_2 \Delta_t, \dots, \lambda_N \Delta_t\}$ のいずれもが, その数値計算法に固有の複素平面上の安定領域内に入ることが必要。

演習課題 1 (6 月 11 日・13 日)

1. 減衰方程式 $du/dt = -u$ ($u_0 = 1$) を数値的に解くことを考える。
 - (a) 適当に Δ_t を定めて, オイラー法で $t = 10$ 程度まで解いてみよ。厳密解 $u(t) = e^{-t}$ と比較せよ。
 - (b) 数値解の振幅を発散させずに, 時間積分の刻み幅 Δ_t をどこまで大きくできるかを予想し, 数値的に確かめよ。
2. 振動方程式 $du/dt = iu$ (u は複素変数で $u_0 = 1$, i は虚数単位) を数値的に解くことを考える。
 - (c) 適当に Δ_t を定めて, オイラー法で $t = 20$ 程度まで解いてみよ。厳密解 $u(t) = e^{it} = \cos t + i \sin t$ と比較せよ。
 - (d) オイラー法の場合, どんなに Δ_t を小さくしても, t がじゅうぶん大きくなれば数値解の振幅が増大してしまう。その理由を述べ, 実際にそれを数値的に確かめよ。
 - (e) 後退オイラー法で解いたときの数値解の振幅の挙動を予測し, 実際に確かめよ。
 - (f) クランク・ニコルソン法で解いたときの数値解の振幅の挙動を予測し, 実際に確かめよ。

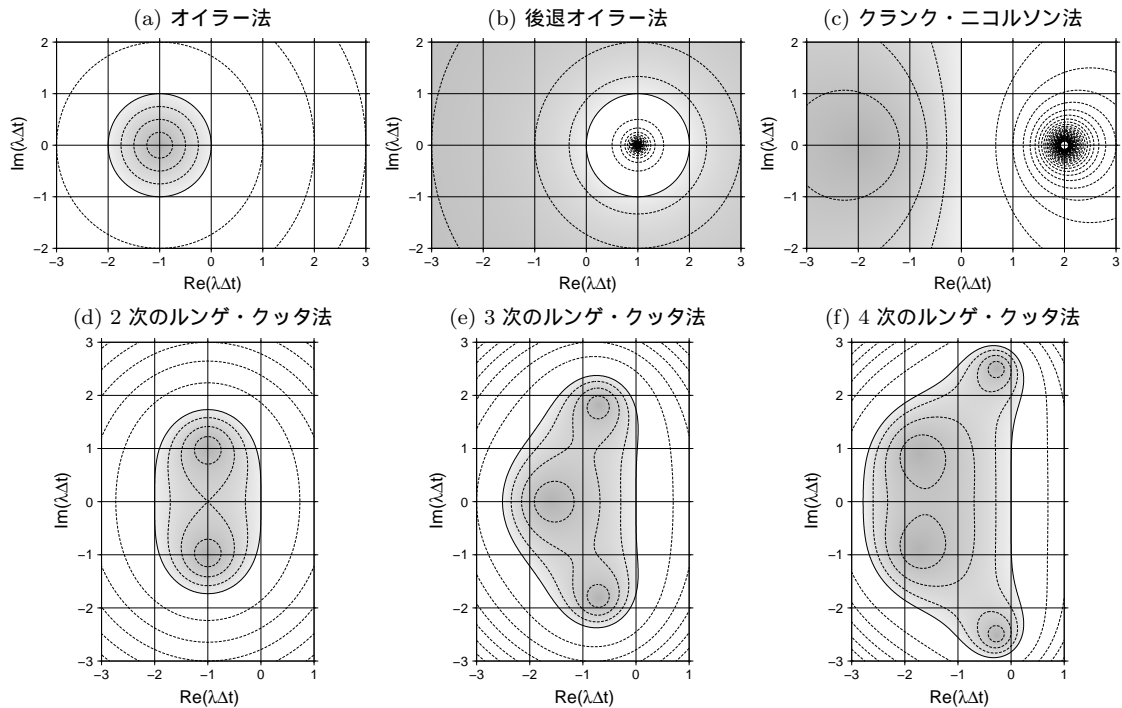


図 1: 線形の微分方程式 $du/dt = \lambda u$ を, 時間ステップの刻み幅 Δt で, さまざまなスキームで数値的に解いたときの複素平面上の安定領域を, 灰色の領域で示す。 $|u_{n+1}|/|u_n|$ の値をコンターであらわして、コンター間隔は安定領域内で 0.25, 外側で 1 である。(b)(c) は陰解法で, 少なくとも左半平面 (固有値 λ の実部が負の領域) がすべて安定である。すなわち, 本来振幅が減衰すべき解が, 数値解でもきちんと減衰する。その他は陽解法で, 安定領域は有限である。

課題の提出について

小問 (b) および (d)–(f) について, 結果を電子メールで簡潔に報告すること。しめきりは 6 月 13 日中とする。なお今後同様の形式でレポートを課すが, その提出の際に共通の注意事項を以下に記す。

- 電子メールは, 桜庭 (sakuraba@eps.s.u-tokyo...) あてで。
- テキスト形式でじゅうぶんである。ただし TeX などで清書して PDF 形式のファイルとしてメールに添付することを妨げない。
- たとえば演習課題 1 の場合は, メール subject は半角で “exercise 1” とすること。
- 作成した Fortran のソースプログラムはあえて添付する必要はない。ただしあきらかにバグがあって, どうすれば直るか見当がつかない場合は, その旨ことわってプログラムを添付すること。
- 報告の際に適当な図やムービーを引用する必要がある場合は, 画像は JPEG, GIF など (PostScript ファイルは不可), ムービーは MPEG や GIF 動画などに変換して, わかりやすいファイル名 (たとえば figure1.gif など) にした上で, メールに添付してよい (ただし必ず本文中で引用すること)。
- よくわからなかった点, また演習全体についての感想などがあればそれらについても述べること。

ヒントと補足

- 変数の値はどんどん新しい値で上書きするのがよい。計算結果はファイルに (または標準出力に) 書き出す。これは無駄にメモリを消費しないためである。プログラム例 (図 2) を見よ。
- 時間積分を何万ステップもおこなうような応用問題では, 丸め誤差の蓄積が深刻になる場合が多いので, 一般的に変数は倍精度 (double precision または kind=8) で定義するのがよい。

```

! 微分方程式 du/dt = f(u), f(u) = c u を, 初期条件 u = uzero のもと, 0 < t < tend の範囲で解く。
program attenuation
  implicit none
  real(8) :: u, f, t, dt
  real(8), parameter :: c = - 1.0d0, uzero = 1.0d0, tend = 10.0d0
  ! 時間ステップの刻み幅 dt を標準入力から読み込む。
  read(*, *) dt
  ! 未知変数 u と時刻 t の初期化。
  u = uzero
  t = 0.0d0
  ! 時間積分の開始 (無限 do loop)。
  do
    ! 時刻 t での変数の値, 厳密解, およびそれらの差を標準出力に書き出す。
    write(*, "(f12.8, 3e16.8)") t, u, exp(c*t), u - exp(c*t)
    ! 時刻が tend を超えたら無限 do loop から脱出する。
    if ( t >= tend ) exit
    ! 微分方程式の右辺を計算する。
    f = c * u
    ! 未知変数 u と時刻 t を次の時間ステップでの値で上書きする (オイラー法)。
    u = u + dt * f
    t = t + dt
  end do
  stop
end

```

図 2: 演習課題 1(a) のプログラム例。

```

program oscillation
  implicit none
  real(8) :: t, dt
  real(8), parameter :: tend = 20.0d0
  complex(8) :: u, f
  complex(8), parameter :: c = (0.d0, 1.d0), uzero = (1.d0, 0.d0)

```

図 3: 演習課題 1(c) のプログラム例。ただし冒頭部分のみ。これ以降は問題 1(a) のプログラムと同じでよい。

- 問題 2 は, 単に問題 1 のプログラム中で, 未知変数 u を複素数に定義し直してやればよいだろう。倍精度の複素数は `complex(kind=8)` で定義できる。複素数の定数は“(実部, 虚部)”のように, 丸括弧で囲んで, 実部と虚部をカンマで区切る。丸括弧内には定数 (1.0d0 や `parameter` 属性で定義された数) しか書けない。プログラム例 (図 3) を参照のこと。
- 今回は未知変数の数が 1 個で, かつ微分方程式が線形なので, 陰解法は「割り算」をもちいて扱うことができる。たとえば方程式 $du/dt = \lambda u$ を後退オイラー法で解くには,

$$u_{n+1} = u_n + \Delta_t \cdot \lambda u_{n+1}, \quad \text{すなわち} \quad u_{n+1} = \frac{1}{1 - \lambda \Delta_t} u_n$$

なる漸化式を逐次的に計算すればよい。未知変数の数が 2 個以上のときは, 連立 1 次方程式を解く必要が生じる。また非線形の微分方程式ならば, もっと複雑な代数方程式を解かなければならない。

参考文献

- 「時間発展問題の数値解法」拙著
<http://www-solid.eps.s.u-tokyo.ac.jp/~ataru/edu/ensyu08.pdf>
- “Numerical Recipes in Fortran 77” W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Chap. 16, Cambridge Univ. Press (1992)
- “Solving ordinary differential equations I: Nonstiff problems” E. Hairer, S. P. Norsett, G. Wanner, Springer (1993). 邦訳: 「常微分方程式の数値解法 I」三井斌友監訳, Springer (2007)
- 「微分方程式の数値解法 I」三井斌友, 岩波講座応用数学・方法 3, 岩波書店 (1993)
- 「微分方程式の数値解法 II」田端正久, 岩波講座応用数学・方法 3, 岩波書店 (1994)