数理工学実験 課題レポート

常微分方程式の数値解法

情報学科 2 回生 平田蓮

学生番号: 1029342830

実験日: 10 月 11, 17, 18, 24 日

実験場所: 京都大学工学部総合校舎数理計算機室

10 月 31 日 提出

目次

1 目的

多くの数理モデルには、微分方程式が現れる。これの解を解析的に得ることは一般的には難しいため、数値計算でその近似解求めるためのアルゴリズムを学習する。

2 原理

本章では、続く課題で用いるアルゴリズムについて述べる。

2.1 オイラー法

以下の関数を考える。

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{dt}}(t) = f(t, u(t)),\ u(0) = u_0 \tag{2.1}$$

この式の両辺を t について、$[t_a, t_b]$ の範囲で積分すると、

$$u(t_b) - u(t_a) = \int_{t_a}^{t_b} f(t, u(t))\mathrm{d}t$$

を得る。$\Delta t = t_b - t_a$ とすると、範囲内の積分を幅 Δt、高さ $f(t_a, u(t_a))$ の長方形の面積で近似でき、

$$\begin{aligned} u(t_b) - u(t_a) &\approx f(t_a, u(t_a))\Delta t \\ \rightarrow u(t_b) \qquad &\approx u(t_a) + f(t_a, u(t_a))\Delta t \end{aligned}$$

と書ける。ここで (a, b) を $(n, n+1)$ に置き換え、さらに $u(t_n)$ を u_n に書き換えると、

$$u_{n+1} \approx u_n + f(t_n, u_n)\Delta t \tag{2.2}$$

を得る。この式を n に対して繰り返し適用することで、式 (2.1) を満たす関数を数値計算することができる。

式 (2.2) は積分の近似の際に $f(t_a, u(t_a))$ を用いたが、$f(t_b, u(t_b))$ を用いても同様に近似でき、前者を前進オイラー法、後者を後退オイラー法と呼ぶ。

2.2 クランク・ニコルソン法

オイラー法では $[t_n, t_{n+1}]$ の積分を長方形の面積で近似したが、範囲内の関数を 1 次関数で近似することで、台形の面積で近似でき、精度を向上させることができる。台形で近似を行うと、

$$u_{n+1} \approx u_n + \frac{f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, u_{n+1})}{2}\Delta t \tag{2.3}$$

を得る。この式は、u_{n+1} の近似が u_{n+1} を用いて陰的に表されているため、そのまま計算するには工夫が必要である。

2.3 アダムス・バッシュフォース法

オイラー法やクランク・ニコルソン法では、u_{n+1} を求める際に u_n のみを用いるため、一段法と呼ばれる。対して、u_{n-1} や u_{n-2} など、より過去の値も用いて精度を高めるアルゴリズムを多段法と呼ぶ。

過去に計算した $N+1$ 個の点を用いてラグランジュ補間により式 (2.1) を満たす $f(t,u(t))$ を N 次多項式で構成することを考える。

2.3.1　$N=1$ の場合

まず、1 次式で近似する場合を考える。すでに計算した 2 点 $(t_n, f(t_n,u_n))$, $(t_{n-1}, f(t_{n-1},u_{n-1}))$ を用いてラグランジュ補完を行うと、

$$f(t,u(t)) \approx \frac{t-t_{n-1}}{t_n-t_{n-1}} f(t_n,u_n) + \frac{t-t_n}{t_{n-1}-t_n} f(t_{n-1},u_{n-1})$$

を得る。$t_n - t_{n-1} = \Delta t$ を踏まえると、

$$\begin{aligned} f(t,u(t)) &\approx \frac{t-t_{n-1}}{\Delta t} f(t_n,u_n) - \frac{t-t_n}{\Delta t} f(t_{n-1},u_{n-1}) \\ &= \frac{f(t_n,u_n)-f(t_{n-1},u_{n-1})}{\Delta t} t - \frac{t_{n-1}f(t_n,u_n)-t_n f(t_{n-1},u_{n-1})}{\Delta t} \end{aligned}$$

と書ける。これを $t_{n+1}-t_n = \Delta t$ を踏まえて $[t_n, t_{n+1}]$ の範囲で積分すると、

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t',u(t))dt' &\approx \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left\{ \frac{f(t_n,u_n)-f(t_{n-1},u_{n-1})}{\Delta t} t - \frac{t_{n-1}f(t_n,u_n)-t_n f(t_{n-1},u_{n-1})}{\Delta t} \right\} dt' \\ &= 2\Delta t f(t_n,u_n) - \frac{\Delta t}{2} f(t_n,u_n) - \frac{\Delta t}{2} f(t_{n-1},u_{n-1}) \\ &= \frac{\Delta t}{2}\{3f(t_n,u_n) - f(t_{n-1},u_{n-1})\} \end{aligned}$$

よって、

$$u_{n+1} \approx u_n + \frac{\Delta t}{2}\{3f(t_n,u_n) - f(t_{n-1},u_{n-1})\} \tag{2.4}$$

となる。これを 2 次のアダムス・バッシュフォース法と呼ぶ。

2.3.2　$N=2$ の場合

2 次式で近似を行う場合、3 点が必要である。$(t_n, f(t_n,u_n))$, $(t_{n-1}, f(t_{n-1},u_{n-1}))$, $(t_{n-2}, f(t_{n-2},u_{n-2}))$ を用いて同様に補間を行うと、

$$\begin{aligned} f(t,u(t)) \approx\ & \frac{(t-t_{n-1})(t-t_{n-2})}{(t_n-t_{n-1})(t_n-t_{n-2})} f(t_n,u_n) + \\ & \frac{(t-t_{n-2})(t-t_n)}{(t_{n-1}-t_{n-2})(t_{n-1}-t_n)} f(t_{n-1},u_{n-1}) + \\ & \frac{(t-t_n)(t-t_{n-1})}{(t_{n-2}-t_n)(t_{n-2}-t_{n-1})} f(t_{n-2},u_{n-2}) \end{aligned}$$

を得る。$N=1$ の場合と同様に積分を行うと、

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t',u(t))dt' \approx \frac{\Delta t}{12}\{23f(t_n,u_n) - 16f(t_{n-1},u_{n-1}) + 5f(t_{n-2},u_{n-2})\}$$

$$\therefore u_{n+1} \approx u_n + \frac{\Delta t}{12}\{23f(t_n,u_n) - 16f(t_{n-1},u_{n-1}) + 5f(t_{n-2},u_{n-2})\} \tag{2.5}$$

となる。これを 3 次のアダムス・バッシュフォース法と呼ぶ。

2.4　ホイン法

2.2 節で、クランク・ニコルソン法を計算するには工夫が必要であると述べた。工夫の一つとして、$f(t_{n+1}, u_{n+1})$ を u_n と $f(t_n, u_n)$ を用いて表すことを考える。$[t_n, t_{n+1}]$ の範囲で、$u(t)$ を (t_n, u_n) を通る傾き $f(t_n, u_n)$ の 1 次関数で近似すると、

$$u_{n+1} \approx u(t_{n+1}) = u_n + f(t_n, u_n)\Delta t$$

と書ける。これを式 (2.3) に代入すると、

$$u_{n+1} \approx u_n + \frac{f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, u_n + f(t_n, u_n)\Delta t)}{2}\Delta t \tag{2.6}$$

を得る。これをホイン法と呼ぶ。

2.5　ルンゲ・クッタ法

ホイン法は 2 次の一段法であるが、これを 4 次に拡張したものを 4 次のルンゲ・クッタ法と呼び、これは以下の式で表される。

$$u_{n+1} = u_n + \frac{F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4}{6} \tag{2.7}$$

$$\begin{cases} F_1 = f(t_n, u_n) \\ F_2 = f(t_n + \dfrac{\Delta t}{2}, u_n + F_1\dfrac{\Delta t}{2}) \\ F_3 = f(t_n + \dfrac{\Delta t}{2}, u_n + F_2\dfrac{\Delta t}{2}) \\ F_4 = f(t_{n+1}, u_n + F_3\Delta t) \end{cases} \tag{2.8}$$

これの証明は膨大な記述量であるため、ここでは省略する。詳細は [2] を参照されたい。

3　課題

3.1　課題 3 常微分方程式の数値解

式 (3.1) で表される常微分方程式の初期値問題を考える。

$$\frac{\mathrm{du}}{\mathrm{dt}} = u,\ u(0) = 1 \tag{3.1}$$

ステップ幅を Δt として、t での数値解を $u_{\mathrm{calc}}(t, \Delta t)$ とする。$t = 1$ において、数値解 $u_{\mathrm{calc}}(1, \Delta t)$ と厳密解 $u(1)$ の差を

$$E(\Delta t) = |u_{\mathrm{calc}}(1, \Delta t) - u(1)| \tag{3.2}$$

とする。

以下のアルゴリズムに対して、式 (3.2) の関数形を調べる。

- 前進オイラー法
- 2 次のアダムス・バッシュフォース法

- 3 次のアダムス・バッシュフォース法
- ホイン法
- 4 次のルンゲ・クッタ法

3.1.1 関数形の予測

3.1.2 結果

3.1.3 考察

3.2 課題 4 アルゴリズムの安定性 1

3.2.1 クランク・ニコルソン法の安定性

3.2.2 ホイン法の安定性

3.2.3 数値計算による確認

3.2.4 考察

3.3 課題 5 アルゴリズムの安定性 2

3.3.1 数値計算による確認

3.3.2 考察

3.4 課題 7 ローレンツ方程式

3.4.1 ローレンツ方程式の描画

3.4.2 結果

3.4.3 考察

3.5 課題 8 連立微分方程式

3.5.1 結果

3.5.2 考察

参考文献

[1] 実験演習ワーキンググループ、“数理工学実験 2022 年度版”、京都大学工学部情報学科数理工学コース (2022)

[2] 斉藤宣一、“数値解析入門”、東京大学出版 (2012)