

第4章 常微分方程式の数値解法

4.1 目的

自然現象や社会現象の数理モデルには、多くの場合微分方程式が現れる。それゆえ、微分方程式を解くことは数学的な興味だけでなく現象を理解する上で重要であるが、限られた場合を除いて解析的に解を得ることはできないため、数値解析の必要性が生じる。本節では、微分方程式の中でも、独立変数をひとつしか持たない常微分方程式の数値解析手法について学習する。

独立変数を t 、未知変数を $\mathbf{u}(t)$ とする。ただし、 \mathbf{u} は n 次元のベクトルで、 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ とする。物理的には t は時間変数を表すことが多い。次の1階の常微分方程式の初期値問題を考える：

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0. \quad (4.1)$$

ここで、 $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n)$ は既知関数あるいは作用素である。特に、 \mathbf{f} が \mathbf{u} に対して線形（あるいは非線形）であるとき、常微分方程式は線形（あるいは非線形）であるという。また、 \mathbf{f} が t に依存しないとき、常微分方程式は自励系であるという。常微分方程式の初期値問題の解の存在や一意性については本節の範囲を超えるため、興味がある人は適宜参考文献（例えば [1, 2]）を参照せよ。表記の簡略化のため、必要に応じて $d\mathbf{u}/dt$ を \mathbf{u}' と表す。

常微分方程式の例について簡単に知っておくと理解の一助となるので、いくつか代表的なものを紹介しておく。なお、下記の二つの例はともに線形問題である。

例 4.1.1 質点の運動

x 軸上を運動する質量 m の質点を考える。時間変数を t とし、質点の位置と速度をそれぞれ $x(t)$

および $v(t)$ とする。質点には速度に比例する摩擦力 $-cv(t)$ ($c > 0$) が働く。また、初期位置と初期速度はそれぞれ $x(0) = x_0$ および $v(0) = v_0$ である。すでに学習しているように、この質点の運動を表す常微分方程式と初期条件は

$$x' = v, \quad mv' = -cv, \quad (4.2a)$$

$$x(0) = x_0, \quad v(0) = v_0, \quad (4.2b)$$

で与えられる。式 (4.1) の表記に合わせると、 $u_1 = x$, $u_2 = v$, $f_1 = v$, $f_2 = -(c/m)v$ となる。一方で、物体の運動方程式は x に対する2階の常微分方程式と見ることができることに注意する。この例から、1つの n 階の常微分方程式は、 n 個の1階常微分方程式のシステムに置き換えることができることが分かる。

例 4.1.2 熱方程式

t を時間、 x を位置変数とし、空間一次元の偏微分方程式を考える。具体的には、一様な材質からなる長さ L の棒の伝熱問題、すなわち棒の温度 $T(t, x)$ の振舞いを調べる。棒の温度は初期に $\bar{T}(x)$ とし、 $x = 0$ および L における温度は $T(t, 0) = T_0$ および $T(t, L) = T_L$ で一定とする。また、初期条件は $\bar{T}(0) = T_0$ および $\bar{T}(L) = T_L$ を満たしている。このとき、棒の温度 $T(t, x)$ が以下の熱方程式に従う：

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (4.3a)$$

$$\text{境界条件: } T(t, 0) = T_0, \quad T(t, L) = T_L, \quad (4.3b)$$

$$\text{初期条件: } T(0, x) = \bar{T}(x). \quad (4.3c)$$

ただし $\alpha (> 0)$ は温度伝導率である。式 (4.3) は偏微分方程式なので本節の学習の範囲外と思うかもしれないが、以下のように考えると式 (4.3) も本節の対象となっていることが分かる。まず、区間 $x \in [0, L]$ を $n - 1$ 個に分割しよう。すなわち、整数 $i = 1, 2, \dots, n$ に対して $x_i = (i - 1)\Delta x$ ($\Delta x = L/(n - 1)$) を定義する。合わせて、 $T_i(t) = T(t, x_i)$ と表しておこう。式 (4.3a) の右辺は、2階の中心差分を用いて以下のように近似できる：

$$\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \alpha \frac{T_{i-1}(t) - 2T_i(t) + T_{i+1}(t)}{\Delta x^2}. \quad (4.4)$$

この近似の下で、 $\mathbf{u} = (T_1, T_2, \dots, T_n)$ と考えれば、(4.3a) は n 個の連立常微分方程式になっていることが分かるだろう。もちろん、精度良く解を近似するためには n を大きくする必要があるため、偏微分方程式を解く際は巨大な連立方程式になることは想像に難くない。なお、境界条件の議論や f の具体形までは本節では紹介しない。

上記二つの例から想像ができるように、我々の身の回りの現象に対する数理モデルの多くは常微分方程式と結びついている。本節では、その数値解法の初歩的な部分を自分で構築し、実際の問題に適用できるようになることを目指す。

課題 1 身の回りにある現象からひとつ選んで、例に倣って常微分方程式の初期値問題を定式化せよ。

4.2 離散化

まず変数の離散化について述べる。これは、例 4.1.2 でも既に登場しているように、微分方程式を数値的に解く場合にしばしば行われる方法である。

簡単のため、 $t \in [0, T]$ で定義される 1 変数の常微分方程式を考える：

$$u' = f(t, u(t)), \quad u(0) = u_0. \quad (4.5)$$

ここで、 $n = 0, \dots, N$ とし (n の意味が 4.1 節と異なることに注意)、以下の離散変数を導入する：

$$t_n = n\Delta t, \quad u_n = u(t_n), \quad (\Delta t = T/N). \quad (4.6)$$

これは t を等間隔に分割した離散化の一例であり、 t_n の形は必ずしも (4.6) でなくてよい。 Δt をステップ幅と呼ぶ。これらの離散変数を用いると、例えばテイラー展開を用いて u_n を

$$\begin{aligned} u_n &= u(t_{n-1} + \Delta t) \\ &= u(t_{n-1}) + u'(t_{n-1})\Delta t + O(\Delta t^2), \end{aligned} \quad (4.7)$$

と表すことで、 u' は

$$u'(t_{n-1}) = \frac{u_n - u_{n-1}}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad (4.8)$$

と近似される。つまり、離散化した変数を用いれば、式 (4.5) は

$$u_n \approx u_{n-1} + f(t_{n-1}, u(t_{n-1}))\Delta t, \quad (4.9)$$

と変形できる。ここで、式 (4.9) の右辺の第二項目は $f(t_{n-1}, u(t_{n-1}))$ の代わりに $f(t_n, u(t_n))$ としても構わない。どちらを採用するか (あるいは他の形を採用するか) は数値解析手法の性質を決める重要な問題であり、次節以降で議論する。ここでは、初期条件 u_0 が与えられれば u_n ($n = 1, 2, \dots, N$) が式 (4.9) により逐次的に求められることに気づけば十分である。

4.3 代表的な解法

ここではいくつかの代表的な数値解法やその分類について説明する。ただし、 u_m ($m = 0, 1, \dots, n-1$) は既知として、 u_n を求める方法を記述する。また、ステップ幅は Δt で一定とする。必要に応じて、 $f_n = f(t_n, u_n)$ と簡略化した表記を用いる。

4.3.1 オイラー法

さて、再び (4.5) に立ち戻ろう。この式を $t \in [t_{n-1}, t_n]$ の範囲で積分すると

$$u_n - u_{n-1} = \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(\tau, u(\tau)) d\tau, \quad (4.10)$$

となる。 $\Delta t = t_n - t_{n-1}$ が十分小さければ、右辺の被積分関数の値は端点の値やそれらの平均で置き換えてもよさそうである。そこでまず、 $t \in [t_{n-1}, t_n]$ における f を $f(t_{n-1}, u_{n-1})$ で置き換えてみよう。 $f(t_{n-1}, u_{n-1})$ は積分変数 τ に依存しないので、得られる結果は

$$u_n \approx u_{n-1} + f(t_{n-1}, u_{n-1})\Delta t, \quad (4.11)$$

となり、これは式 (4.9) に他ならない。これを前進オイラー法と呼び、常微分方程式の数値解法の中で最も単純なものである。前進オイラー法では、未知数である u_n が既知である u_{n-1} のみを使って陽的に表されているため、陽解法 (explicit method) と呼ばれる。

一方、 $t \in [t_{n-1}, t_n]$ における f を $f(t_n, u_n)$ で近似すると、

$$u_n \approx u_{n-1} + f(t_n, u_n)\Delta t, \quad (4.12)$$

を得る．式 (4.12) は後退オイラー法と呼ばれる．前進オイラー法と大きく異なるのは，式 (4.12) が u_n に対して陰的に表されていることであり，このような方法を陰解法 (**implicit method**) という．つまり， $u_n = \dots$ と u_n について書き下すためには，式 (4.12) を u_n について解かなくてはならない． f が u_n に対して線形であればこれは容易だが，非線形である場合は，非線形方程式を解くためにニュートン法などの反復解法が必要となることが多い．

前進オイラー法は後退オイラー法も導出過程で Δt^2 の項を無視しているので，数値解法の次数は1次精度である．一見すると後退オイラー法を用いるうまみは無い．しかし，実際には陰解法の方が陽解法に比べて安定であり，問題の性質によっては陰解法が好まれる場合がある．なお，オイラー法は u_n を求めるときに u_{n-1} より過去の情報 (例えば u_{n-2}) を用いていない．このような方法を一段法 (**one step method**) と呼ぶ．

4.3.2 クランク・ニコルソン法

オイラー法は1次精度であったが，これを2次精度に向上させる方法がクランク・ニコルソン法であり，これは台形法や2次のアダムス・ムルトン法とも呼ばれる．アダムス・ムルトン法については4.3.3節で詳しく紹介する．式 (4.10) の中の f を，積分範囲の二つの端点

$$(t_{n-1}, f_{n-1}), (t_n, f_n),$$

を通る1次関数で近似しよう．このとき f は

$$f(\tau, u(\tau)) \approx \frac{\tau - t_{n-1}}{t_n - t_{n-1}} f_n + \frac{\tau - t_n}{t_{n-1} - t_n} f_{n-1}, \quad (4.13)$$

と表すことができる．式 (4.13) は τ の1次関数なので，式 (4.10) の積分は容易に実行できて，

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} f(\tau, u(\tau)) d\tau \approx \frac{\Delta t}{2} (f_{n-1} + f_n), \quad (4.14)$$

を得る．つまり， u_n は

$$u_n \approx u_{n-1} + \frac{\Delta t}{2} (f_{n-1} + f_n), \quad (4.15)$$

であり，これがクランク・ニコルソン法である．

式 (4.13) は f のテイラー展開において $O(\Delta t^2)$ を無視したものに他ならないので，式 (4.14) は結果的に $O(\Delta t^3)$ を無視している．つまり，クランク・ニコルソン法は2次精度の陰解法である．また，式 (4.15) の右辺に (u_n, u_{n-1}) しか含まれていないので，クランク・ニコルソン法は一段法である．

4.3.3 多段法

上記に紹介した一段法に対して，多段にして数値解析の精度の次数を向上させる多段法 (**multi step method**) がある．式 (4.10) の中の f を， τ に関する N 次多項式 $p_N(\tau)$ で近似する (N の意味は式 (4.6) と異なることに注意せよ)：

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} f(\tau, u(\tau)) d\tau \approx \int_{t_{n-1}}^{t_n} p_N(\tau) d\tau. \quad (4.16)$$

$p_N(\tau)$ が τ の多項式なので，式 (4.16) の積分は解析的に実行できることに注意しよう．

p_N の構成方法は， u_n を用いるかどうかで二つに大別でき，それぞれ陽解法および陰解法となる．まず，最も一般的な陽解法について述べる． $p_N(\tau)$ を Lagrange 補間により構成することを考えよう．これには $N+1$ 個の点が必要である．陽解法なので，

$$(t_{n-1}, f_{n-1}), (t_{n-2}, f_{n-2}), \dots, (t_{n-N-1}, f_{n-N-1}),$$

を使うのが自然だろう．結果として，例えば $N=1$ のときは

$$u_n \approx u_{n-1} + \frac{\Delta t}{2} (3f_{n-1} - f_{n-2}), \quad (4.17)$$

また， $N=2$ のときは

$$u_n \approx u_{n-1} + \frac{\Delta t}{12} (23f_{n-1} - 16f_{n-2} + 5f_{n-3}), \quad (4.18)$$

となる．式 (4.17) および式 (4.18) をそれぞれ2次および3次のアダムス・バッシュフォース法と呼ぶ．このような高精度化の考え方は，数値積分法と密接に関連している．

次に陰解法について述べる．先の陽解法の例と同様に $N+1$ 個の点を用いて f を Lagrange 補間するが，ここでは

$$(t_n, f_n), (t_{n-1}, f_{n-1}), \dots, (t_{n-N}, f_{n-N}),$$

を使う． f_n すなわち $f(t_n, u_n)$ を用いて多項式を構成するため，結果が陰的になることが想像できるだろう．また， $N=1$ のときはクランク・ニコルソン法と一致するため，これは一段法であることも分かる． $N=2$ のときは，

$$u_n \approx u_{n-1} + \frac{\Delta t}{12}(5f_n + 8f_{n-1} - f_{n-2}), \quad (4.19)$$

を得る．式 (4.19) を 3 次のアダムス・ムルトン法と呼び，これは陰的な多段法である．

さて，アダムス・バッシュフォース法は陽解法なので， f の形に依らず簡単に構成できる．一方，アダムス・ムルトン法は陰解法なので安定性は高いが，場合によっては非線形方程式を解く必要がある．また，過去に参照できる点を制限した場合，アダムス・ムルトン法の方が精度が高い．これは，過去に参照している点が f_{n-2} である 2 次精度のアダムス・バッシュフォース法 (4.17) と 3 次精度のアダムス・ムルトン法 (4.19) を比較すれば分かる．これら二つの方法の長所を組み合わせた方法として，予測子・修正子法がある．予測子・修正子法では，まずアダムス・バッシュフォース法で u_n の予測値 \tilde{u}_n を求めておく．次に，アダムス・ムルトン法 (4.19) の右辺で， f_n に含まれる u_n の代わりに \tilde{u}_n を用いて，修正値として u_n を求める．予測子・修正子法は完全に陽的な方法であることに注意しよう．また，修正値を求める段階のアダムス・ムルトン法を繰り返すこともできる．この操作は反復法により非線形方程式 (4.19) を解くことに相当するため，数値解法は陰的になる．ただし，この反復法が収束するためには，予測値 \tilde{u}_n が u_n に十分近く，また Δt が十分小さい必要がある ([3] の 5.2 章参照)．

この節で述べた多段法は，後に述べるルンゲ・クッタ法に比べて 1 ステップにおける f の計算回数が少ないため，全計算時間における f の計算の割合が大きい問題では有用である．

課題 2 式 (4.18) や式 (4.19) にならって，4 次のアダムス・バッシュフォース法とアダムス・ムルトン法を構成せよ．また，4 次のアダムス・バッシュフォース法と 4 次のアダムス・ムルトン法を用いて，予測子・修正子法を構成せよ．

4.3.4 高次精度一段法

これまで見てきたように，多段法を用いることで数値計算の精度の次数を向上させることができる．しかし，多段法においては，問題で与えられた初期値以外に，計算を開始するにあたって必要な初期値があり，これらを別途求めておく必要がある．これには，より低次の多段法を逐次的に適用していくことで対応できるが，計算全体の精度が低次部分の計算結果に依存してしまうため，例えばステップ幅を非一様にする工夫などが必要となる．このような問題を回避するためには，以下の高次精度一段法が便利である．

式 (4.11) を少し変形した次の形

$$\begin{cases} u_n = u_{n-1} + \frac{\Delta t}{2}(f_{n-1} + f(t_n, u_n^*)), \\ u_n^* = u_{n-1} + f_{n-1}\Delta t, \end{cases} \quad (4.20)$$

を考えよう．これは，クランク・ニコルソン法 (4.15) に似ているが，右辺で u_n を使う代わりに， $n-1$ ステップ目の情報だけで構成される u_n^* を使っている点が異なる．式 (4.20) はホイン法あるいは 2 次のルンゲ・クッタ法と呼ばれ，高次精度一段法の代表的なものである．ホイン法の考え方は既出の予測子・修正子法と似ており，未知の $f(t_n, u_n)$ を既知の $f(t_n, u_n^*)$ で近似して高次精度化を試みている．もっとも一般的に使われる高次精度一段法は以下の 4 次のルンゲ・クッタ法で，これを単にルンゲ・クッタ法と呼ぶこともある．

4次のルンゲ・クッタ法は

$$u_n = u_{n-1} + \frac{\Delta t}{6}(F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4), \quad (4.21a)$$

$$\begin{cases} F_1 = f(t_{n-1}, u_{n-1}), \\ F_2 = f(t_{n-1} + \Delta t/2, u_{n-1} + F_1 \Delta t/2), \\ F_3 = f(t_{n-1} + \Delta t/2, u_{n-1} + F_2 \Delta t/2), \\ F_4 = f(t_n, u_{n-1} + F_3 \Delta t), \end{cases} \quad (4.21b)$$

と書ける。上述の解法はすべて陽解法であることに注意する。一般のルンゲ・クッタ法の構築については[2]を参照するとよい。

課題3 常微分方程式の初期値問題

$$u' = u, \quad u(0) = 1, \quad (4.22)$$

を考える。解析解は $u = \exp(t)$ で与えられる。式(4.22)を $t \in [0, 1]$ の範囲で数値的に解いて、その精度を確認してみよう。

まず、ステップ幅を $\Delta t = 1/2^i$ 、ステップ数を $N = 2^i$ 、離散化した時間変数を $t_n = n\Delta t$ ($n = 0, \dots, N$) と定義する。また、ステップ幅が $\Delta t = 1/2^i$ の条件の下で得られた数値解を $u_n^{(i)}$ と表す。精度の確認は、 i の値を $i = 1, 2, \dots, i_{\max}$ の範囲で様々に変更した計算を実行し、それらの結果を比較すればよい。比較には、 $t = 1$ における数値解 $u_N^{(i)}$ と解析解との差 $E^{(i)} = |u_N^{(i)} - u(1)|$ を用いる。 p を計算手法の次数とし、 $E_r^{(i)} = E^{(i)} / E^{(i-1)}$ ($i = 2, \dots, i_{\max}$) と定義すると、 $E_r^{(i)}$ は i の増加とともに $1/2^p$ に近づくはずである。

前進オイラー法 (FE)、2次および3次のアダムス・バッシュフォース法 (AB2 および AB3)、ホイン法 (H)、4次のルンゲ・クッタ法 (RK) の5種類の方法で、式(4.22)を $t \in [0, 1]$ の範囲で数値的に解き、理論的に予測される次数を達成していることを確認せよ。結果は分かりやすく表にまとめるとよい。

ヒント：単精度でなく倍精度で計算すること。 i_{\max} の値は自由に決めてよいが、 $i \approx 10$ 程度より i が大きくなると、倍精度演算でも結果を正し

く評価できない場合がある。また、多段法で必要となる初期条件に関しては、解析解の値を用いても構わない。多段法で前進オイラー法を用いると精度が悪くなることがある。

4.4 安定性

計算手法の安定性は手法の性質を議論する上で重要な要素のひとつである。ここでは、手法の安定性について簡単な例を題材に紹介する。より詳細な理論を知りたい場合は[2, 3]を参照せよ。常微分方程式の解それ自身の安定性ではなく、計算手法の安定性に注目していることに注意しよう。

手法の安定・不安定性を明確にするために、以下では $\lim_{t \rightarrow \infty} |u(t)| = \infty$ とならないような問題を考える。また、議論を簡単にするため、差分式が以下の形で書けるとする：

$$u_n = a_1 u_{n-1} + a_0. \quad (4.23)$$

例えば、線形方程式に対する前進オイラー法 (4.11) や後退オイラー法 (4.12) が式 (4.23) に対応することは容易に確認できるだろう。数値計算手法が不安定であるとき、 $\lim_{n \rightarrow \infty} |u_n| = \infty$ となるはずである。そこで、式 (4.23) を満たす数列 $\{u_n\}$ を、 $u_n = \lambda^n$ の形で探してみよう。 $u_n = \lambda^n$ を代入して整理すると、式 (4.23) は

$$\lambda^n - a_1 \lambda^{n-1} - a_0 = 0, \quad (4.24)$$

と書ける。これを特性方程式と呼ぶ。まず、同次解を求める。 $\lambda \neq 0$ として、式 (4.24) の同次方程式

$$\lambda^n - a_1 \lambda^{n-1} = 0, \quad (4.25)$$

を解くと、 $\lambda = a_1$ を得る。一方、式 (4.23) の非同次解として $u_n = a_0 / (1 - a_1)$ が見つかる。すなわち、(4.23) の解は、 c_1 を未定係数として、

$$u_n = c_1 a_1^n + a_0 / (1 - a_1), \quad (4.26)$$

である。 u_0 が与えられているので、 $c_1 = u_0 - a_0 / (1 - a_1)$ と決まる。結局、式 (4.23) の解は、

$$u_n = \left(u_0 - \frac{a_0}{1 - a_1} \right) a_1^n + \frac{a_0}{1 - a_1}, \quad (4.27)$$

である．もし $|a_1| > 1$ だとすると，式 (4.27) は $n \rightarrow \infty$ で発散してしまうことが分かる．それでは，例題でこのことを確認してみよう．

例 4.4.1 オイラー法の安定性

$t \in [0, \infty)$ における常微分方程式の初期値問題

$$u' = -\alpha u + \beta, \quad u(0) = u_0, \quad (\alpha > 0), \quad (4.28)$$

を考える．式 (4.28) の解は

$$u(t) = \left(u_0 - \frac{\beta}{\alpha}\right) \exp(-\alpha t) + \frac{\beta}{\alpha}, \quad (4.29)$$

であり． $\lim_{t \rightarrow \infty} u(t) = \beta/\alpha$ となる．

まず，式 (4.28) を前進オイラー法で離散化してみよう．このとき，

$$\begin{aligned} u_n &= u_{n-1} + (-\alpha u_{n-1} + \beta)\Delta t \\ &= (1 - \alpha\Delta t)u_{n-1} + \beta\Delta t, \end{aligned} \quad (4.30)$$

が得られるので， $a_1 = 1 - \alpha\Delta t$ ， $a_0 = \beta\Delta t$ である．つまり， $|a_1| \leq 1$ となるためには， $0 \leq \Delta t \leq 2/\alpha$ が要求される．一方，後退オイラー法では，

$$\begin{aligned} u_n &= u_{n-1} + (-\alpha u_n + \beta)\Delta t \\ \Rightarrow u_n &= \frac{u_{n-1}}{1 + \alpha\Delta t} + \frac{\beta\Delta t}{1 + \alpha\Delta t}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

と変形できるので， $a_1 = (1 + \alpha\Delta t)^{-1}$ ， $a_0 = (\beta\Delta t)/(1 + \alpha\Delta t)$ である． $\alpha > 0$ に対して，後退オイラー法では常に $|a_1| < 1$ が満たされるため，後退オイラー法は任意の $\Delta t > 0$ に対して安定である．

図 4.1 と 4.2 にそれぞれ前進オイラー法と後退オイラー法による数値解を示す．パラメータは $u_0 = 1$ ， $\alpha = 10$ ， $\beta = 1$ として， $\Delta t = 0.01, 0.19, 0.205$ とした．図 4.1 より，前進オイラー法で $\Delta t = 0.205 (> 2/\alpha = 0.2)$ の場合に，解が振動しながら発散していく様子が分かる．この振動は， $a_1 < -1$ であることと式 (4.27) の形からも想像できるだろう．一方，図 4.2 より，後退オイラー法では数値解の発散は見られない．この一例からも分かるように，一般に陰解法の方が安定性が高い．

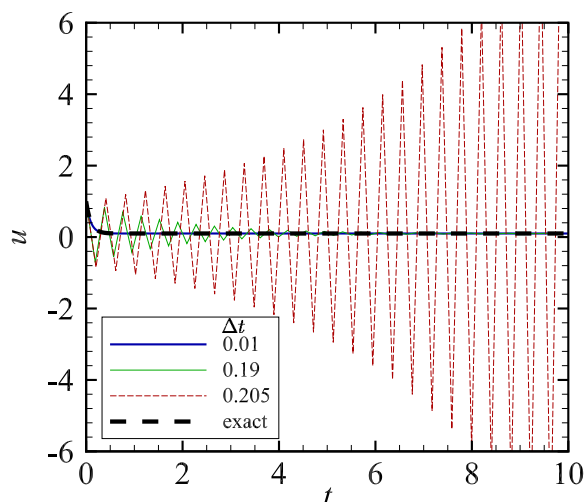


図 4.1: 前進オイラー法による式 (4.28) の数値解.

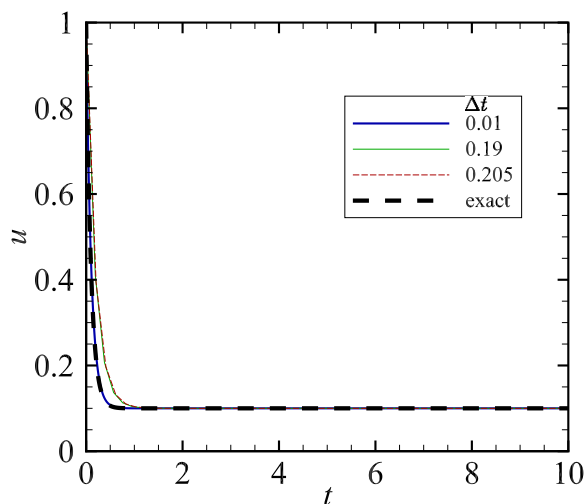


図 4.2: 後退オイラー法による式 (4.28) の数値解.

上記の例のように，陽解法を用いた場合， Δt を十分小さくとらなければ安定した数値解が得られないことがある．このような微分方程式は**硬い (stiff)** と表現される．式 (4.28) の場合は， α が Δt の大きさに制限を加えていることは明らかだが，一般の非線形連立常微分方程式系を扱う場合は安定性を議論することは容易ではない．

課題 4 式 (4.28) に対して，クランク・ニコルソン法，予測子・修正子法，ホイン法を適用した場合に安定性がどのように変わるか示し，数値的に確認せよ．

課題 5 これまで見てきたように，数値計算手法

は自由に作ることができる. 例えば, 式 (4.10) の代わりに,

$$u_n = u_{n-2} + \int_{t_{n-2}}^{t_n} f(\tau, u(\tau)) d\tau, \quad (4.32)$$

として, $t \in [t_{n-2}, t_n]$ の範囲で $f \approx f_{n-1}$ と近似すれば,

$$u_n = u_{n-2} + 2f(t_{n-1}, u_{n-1})\Delta t, \quad (4.33)$$

を得る. 式 (4.33) は陽的な多段法であり一見問題なさそうだが, $t \in [0, \infty)$ における常微分方程式の初期値問題

$$u' = -2u + 1, \quad u(0) = 1, \quad (4.34)$$

を解くことができない. このことを本節の議論にのっとして示し, 数値計算で確かめてみよう.

ヒント: 特性方程式は二次方程式になる. その解を λ_1, λ_2 として, $|\lambda_i| > 1$ を示せばよい. 数値計算では, 与えられた Δt に対しある \tilde{t} が決まり, $t > \tilde{t}$ の範囲で数値解が発散していく様子が観察できるはずである. \tilde{t} の値は Δt が小さいほど大きくなる.

4.5 爆発解

有限の T に対して, $t \rightarrow T$ で $u = u(t)$ が発散するとき, 解は爆発するという. 数値計算上では, 微小なステップ幅に対しても大きな u の変動が生じるため, 爆発解の計算は一般には難しい. 例えば, ステップ幅が解の振舞いに応じて自動的に変化するようなアルゴリズムが必要である. ここでは, 変数変換することで爆発解の数値計算が簡単になることを示そう [4].

スカラー $u(t)$ に対する常微分方程式の初期値問題

$$u' = f(t, u), \quad u(0) = u_0, \quad (4.35)$$

を考える. 式 (4.35) が, ある t の値 (あるいは t の範囲) で u' が非常に大きくなる性質を持っているとしよう. このような場合, 独立変数として, t の代わりに曲線の長さを用いることが考えられる.

t は新しい従属変数になることに注意する. t - u 平面において解が描く軌道に沿った長さを s とする. つまり,

$$\frac{ds}{dt} = \sqrt{1 + (u')^2} = \sqrt{1 + (f(t, u))^2}, \quad (4.36)$$

である. このとき, 式 (4.35) は $u = u(s)$ および $t = t(s)$ を用いて

$$\frac{du}{ds} = \frac{f(t, u)}{\sqrt{1 + (f(t, u))^2}}, \quad u(0) = u_0, \quad (4.37a)$$

$$\frac{dt}{ds} = \frac{1}{\sqrt{1 + (f(t, u))^2}}, \quad t(0) = 0, \quad (4.37b)$$

と表される. 式 (4.37) は t, u を従属変数, s を独立変数とした連立常微分方程式に他ならない. 式 (4.35) に比べて式 (4.37) が数値的に扱い易いことを, 以下の例で確認してみよう.

例 4.5.1 オイラー法による爆発解の計算 非線形な常微分方程式の初期値問題

$$u' = u^2, \quad u(0) = 1, \quad (4.38)$$

を考える. 解析解は $u = (1 - t)^{-1}$ なので, $t \rightarrow T = 1$ で $u \rightarrow \infty$ である. 前進オイラー法により数値解析した結果を図 4.3 に示す. 変数変換 (4.37) を使わない場合, 数値解は $t = T = 1$ を超えた範囲にまで進んでいる. 本来このような挙動は許されない. 一方, 変数変換 (4.37) を用いた結果ではこのような不具合は生じておらず, 解析解により近い数値解を得られていることが分かる.

課題 6 生物の個体数の増減に関する数理モデルを考えよう. $t \geq 0$ を時刻, $u(t)$ を時刻 t における個体数, $u(0) = u_0 > 0$ を初期個体数とする. 個体数の時間変化 u' は, 個体数が多いほど大きいと考えるのが自然である. そこで, $u' = ru$ ($r > 0$) と仮定するのが最も単純であろう. しかし, ある種の生物では, u が小さいと交配相手が見つかる確率が減り, 結果として r が小さくなるという仮定が成り立つ. 逆に, u が大きいと交配相手が見つかる確率が高まるので, r は増加する. これをアリー効果という. 一例として,

$$u' = (u - 1)u, \quad u(0) = u_0, \quad (4.39)$$

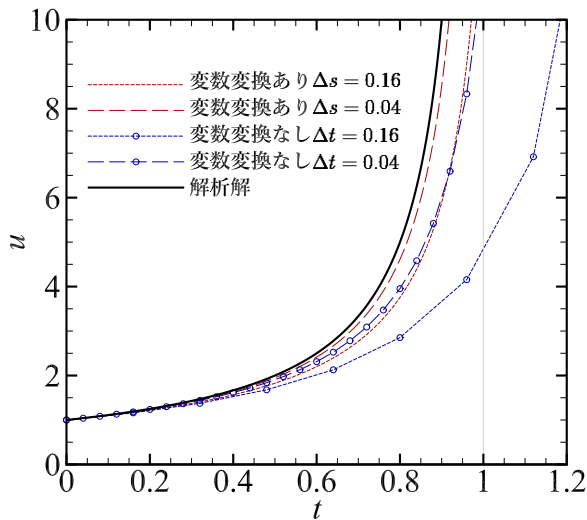


図 4.3: 前進オイラー法による式 (4.38) の数値解.

という数理モデルが考えられるだろう. ただし, 式 (4.39) は適切に無次元化されているとする. 式 (4.39) を数値解析し, 解の振舞いを調べよ. 式 (4.39) は解析解を求めることができるが, ここではあえて解析解を知らないふりをして, どのような結果になるか予想しながら取り組んでみよう.

ヒント: $u_0 > 1$, $u_0 = 1$, $u_0 < 1$ の 3 つの場合で, 解の振舞いは大きく異なる.

4.6 カオス

最後に, 解が興味深い振舞いをする例として, カオスを紹介する. 数値計算の演習なので, 物理的な背景や数学的な事柄はここでは紹介しない. 興味がある人は, 例えば [5] や, より数学的に発展的な内容については [6] を勉強するとよい. 下記に示すローレンツ方程式について, 物理的な背景や数学的な性質が紹介されている.

3 つの未知数 $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$ が, 次のローレンツ方程式

$$x' = \sigma(y - x), \quad x(0) = x_0, \quad (4.40a)$$

$$y' = rx - y - xz, \quad y(0) = y_0, \quad (4.40b)$$

$$z' = xy - bz, \quad z(0) = z_0, \quad (4.40c)$$

に従うとしよう. σ, r, b はパラメータであり, すべて正とする. 式 (4.40) は非線形連立常微分方程式であり, 本章で紹介してきた数値計算手法で解

析できる. 一見シンプルな方程式であるが, その解の挙動は非常に複雑でカオス的である. なお, 文献 [5] では, カオスを「決定論的なシステムにおける非周期的な長時間挙動であり, 初期条件への鋭敏な依存性を示す」と定義している. 式 (4.40) には乱数が用いられていないため, 決定論的なシステムであることは明らかである. 以下の課題では, カオス的な性質のうち, 非周期的な長時間挙動と初期条件への鋭敏な依存性について調べることにしよう. なお, 初期条件に鋭敏に依存する方程式は, 解が数値計算上の誤差にも強く影響を受ける. そのため, 数値計算の精度にも十分に気を配る必要がある.

課題 7 ローレンツ方程式 (4.40) において, $\sigma = 10$, $b = 8/3$, $r = 28$, $x_0 = 1 + \epsilon$, $y_0 = 0$, $z_0 = 0$ として, 数値解析を行う. 手法としては, 前進オイラー法とルンゲ・クッタ法を用いよ. また, 計算領域は $t \in [0, 100]$ とする.

1. まず, $\epsilon = 0$ とする. $x(t)$ を t の関数として図示せよ. また, $(x(t), y(t), z(t))$ の軌道を x - y - z 空間上に図示し, 非周期的な長時間挙動を確認せよ.
2. $\Delta t = 0.01 \times 2^{-i}$ ($i = 0, \dots, 13$) として, 前進オイラー法とルンゲ・クッタ法でそれぞれの i に対する数値解を求めよ. $t = 15, 30, 60$ の 3 つの時刻において, Δt を小さくするとともに $x(t)$ がどのように変化するか図示し, 数値計算の誤差の影響が $x(t)$ に与える影響を議論せよ.
3. $\epsilon = 0, 0.1, 0.01, 0.001$ として, ϵ が $x(t)$ の振舞いに与える影響を議論せよ. ただし, 解の振舞いに対する数値計算の誤差の影響が ϵ の違いによる影響より小さい必要があるため, ルンゲ・クッタ法を用いて Δt も十分小さく設定すること.

参考文献

- [1] 水野克彦編, “解析学”, 学術図書出版 (2001)

- [2] 齊藤宣一, “数値解析入門”, 東京大学出版 (2012)
- [3] G. H. Golub and J. M. Ortega, “Scientific Computing and Differential Equations: An Introduction to Numerical Methods”, Academic Press (1992)
- [4] 伊理正夫, 藤野和建, “数値計算の常識”, 共立出版 (1985)
- [5] ストロガッツ, “非線形ダイナミクスとカオス”, 田中久陽, 中尾裕也, 千葉逸人訳, 丸善出版 (2015)
- [6] アリグッド, サウアー, ヨーク, “カオス第 1-3 巻, 力学系入門”, 津田一郎監訳, シュプリンガー・ジャパン (2006)

[辻徹郎]