

- [5] 隣り合う4つの分点に対して3次のラグランジュの補間多項式を用いることにより、被積分関数を近似する。これによって得られる数値積分の公式を求めよ。

5 常微分方程式

天体の軌道や電気回路の電圧変化など、微分方程式で表現できる現象は数多く存在する。また、未知の現象を微分方程式による数学モデルで表現し、解を求めることによって現象を理解するという手法は、理工学における常套手段である。この章では、独立変数が1つである常微分方程式の解を、数値計算によって求める方法について説明する。

5-1 常微分方程式

常微分方程式と解 まず常微分方程式とはどのようなものであるかを説明しよう。いま、 t の関数 $y(t)$ を考え、 t, y および y の1階導関数 y' を含むような方程式を考える。例えば

$$y' = (1-t)y \quad (5.1)$$

である。この方程式の独立変数は t ひとつだけである。このように従属変数の導関数を含む方程式のことを微分方程式(differential equation)といい、さらに、独立変数がひとつだけのものを常微分方程式(ordinary differential equation)という。任意の t に対して(5.1)式を満たす解 y は存在するであろうか。まず、両辺を y で割ると

$$\frac{y'}{y} = 1-t \quad (5.2)$$

となる。左辺は $(\log|y|)'$ に等しいので、両辺を積分すると

$$\log|y| = -\frac{1}{2}(1-t)^2 + C \quad (5.3)$$

となる。C は積分定数である。したがって A を任意定数として、解

$$y = A \exp\left(-\frac{1}{2}(1-t)^2\right) \quad (5.4)$$

が得られる。

上の解は常微分方程式を解く方法に従って導いただけである。では、もういちど(5.1)式に戻って、この式がどのような解を要求しているのかを考えてみよう。まず、 t の関数 y を仮定する。すると、(5.1)式の右辺から任意の t に対して y' の値が定まる。一方、関数 y を t で微分すれば直接 y' が定まってしまう。解 y とはこの両方の y' がつねに一致しているような t の関数なのである。

こんどは図を用いて説明する。まず、解 y を仮定するとそのグラフを描くことができる。同時に任意の t においてグラフの接線を引くことができ、その傾きは(5.1)式の右辺に等しくなければならない。図5-1に、解 y を得たと仮定したときのグラフと、各 t における接線を短い線分で示す。

ところが、(5.1)式が与えられた時点では解が未定なのでグラフは描けない。

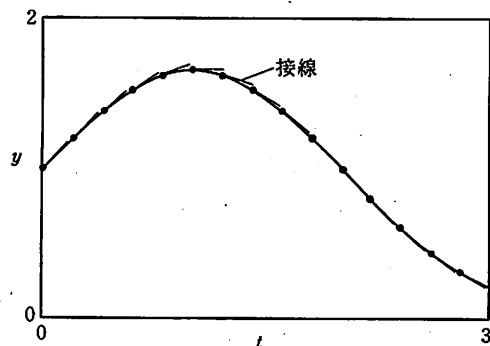


図5-1 解のグラフと各 t における接線

そこで、(5.1)式の右辺を用いて接線を先に ty 平面の各点で準備しておこう。図5-2(a)にその様子を示す。もちろん、図中の各線分が接線になるかどうかは解を求めない限りわからないが、もし解のグラフがその点を通ったなら接線になるはずの線分である。解 $y(t)$ のグラフは任意の t でこの線分に接している曲線である。このような曲線を図5-2(b)に示す。じつは、図に示すように答となり得るグラフはいくつもある。このことが(5.4)式に任意定数 A が含まれている理由である。

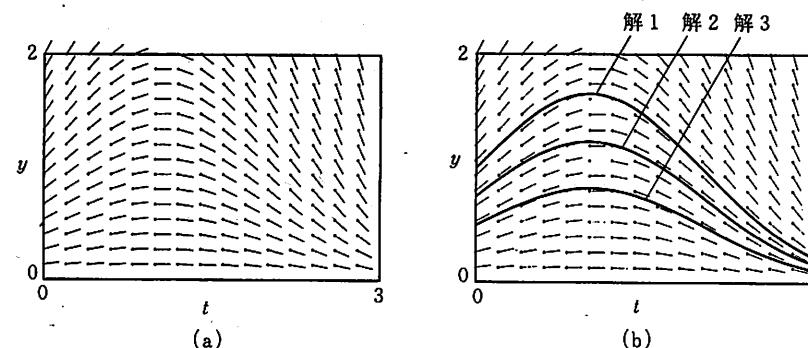


図5-2 (a)(5.1)式の右辺から定まる各点での接線、(b)接線に接する解 y のグラフ

次に、(5.1)式に制限条件を加えて解をひとつに定めよう。そのためには(5.4)式の A の値を指定すればよい。そこで $t=0$ での y の値を

$$y(0) = 1 \quad (5.5)$$

と指定することにする。すると(5.4)式から

$$A = \sqrt{e} \quad (5.6)$$

と A の値が確定し、解は $y = \exp(t - t^2/2)$ と一意に定まる。これは、図5-2(b)において $t=0$ で解のグラフが通る点を指定することでもある。(5.5)式のように、ある t の値での y の値を定める条件のことを、 t を時刻と見立てて初期条件(initial condition)という。そして、常微分方程式を初期条件の下で解く問題を常微分方程式の初期値問題(initial value problem)という。

常微分方程式の問題の分類 ここで、この章で扱う常微分方程式の問題の一般的な形のいくつかを示しておく。

$f(u, v)$ を u, v の適当な関数とする。このとき

$$\begin{cases} y' = f(t, y) \end{cases} \quad (5.7a)$$

$$y(0) = a \quad (5.7b)$$

は、1 階の常微分方程式 (5.7a) 式を初期条件 (5.7b) 式の下で解く初期値問題である。ここで a は定数である。さらに、解 $y(t)$ は $t > 0$ の範囲で求めればよいとする。

次に、 y_1, y_2 をそれぞれ t の関数、 $f_1(u, v, w), f_2(u, v, w)$ をそれぞれ適当な関数とする。このとき

$$\begin{cases} y_1' = f_1(t, y_1, y_2) \end{cases} \quad (5.8a)$$

$$\begin{cases} y_2' = f_2(t, y_1, y_2) \end{cases} \quad (5.8b)$$

$$y_1(0) = a_1, \quad y_2(0) = a_2 \quad (5.8c)$$

は、連立 1 階常微分方程式 (5.8a), (5.8b) 式を、(5.8c) 式の y_1, y_2 に対する初期条件の下で解く初期値問題である。ここで a_1, a_2 はそれぞれ定数である。解 $y_1(t), y_2(t)$ は (5.8a), (5.8b) 式を通じて互いに関連していることに注意して欲しい。

2 階以上の高階導関数を含むような初期値問題も存在する。例えば $f(u, v, w)$ を適当な関数とする。このとき、

$$\begin{cases} y'' = f(t, y, y') \end{cases} \quad (5.9a)$$

$$y(0) = a_1, \quad y'(0) = a_2 \quad (5.9b)$$

を考える。ここで a_1, a_2 は定数である。 y'' は y の 2 階導関数であり、(5.9a) 式は、式に含まれる導関数の最高階数が 2 階なので 2 階常微分方程式とよばれる。解 $y(t)$ が定まればその導関数 y', y'' も同時に定まり、それらが任意の $t (> 0)$ において (5.9a) 式を、 $t = 0$ において (5.9b) 式を満たさなければならない。

2 階常微分方程式には (5.9b) 式と異なるタイプの条件を与えることもある。例えば、

$$\begin{cases} y'' = f(t, y, y') \end{cases} \quad (5.10a)$$

$$y(0) = a_1, \quad y(1) = a_2 \quad (5.10b)$$

という問題を考える。ここで a_1, a_2 は定数である。(5.10b) 式で 2 つの異なる

t において y の値を与えている点が (5.9b) 式と異なる。(5.10b) 式のタイプの条件を、 t を空間変数に見立てて境界条件 (boundary condition) といい、(5.10) 式は境界値問題 (boundary value problem) とよばれる。また、この場合は通常 $0 < t < 1$ の範囲の解 $y(t)$ を求める。

常微分方程式の実例 では次に、常微分方程式の実例を紹介する。常微分方程式は世の中のさまざまな現象を表現することができる。例えばボールを鉛直に投げ上げる状況を想定してみよう。ボールが手を離れた後は重力の法則に従ってボールの位置 (高さ) が変化していく。また、手を離れた瞬間のボールの高さと速度を指定すればボールの運動は一意に定まる。時刻 t でのボールの高さを $y(t)$ とすれば、運動の第 2 法則より

$$y'' = -g \quad (5.11)$$

となる。ここで g は重力加速度の大きさである。この式は 2 階の常微分方程式に他ならない。さらに、ボールが手を離れた時刻を $t = 0$ とし、そのときの高さを h 、速さを v とすると

$$y(0) = h, \quad y'(0) = v \quad (5.12)$$

となる。これらは初期条件である。ゆえにこのボールの運動は (5.9) 式の問題に帰着する。

上の例では y', y'' がそれぞれボールの速度、加速度に対応している。このように、ある量の導関数はその量の変化率とみなすことができる。もし現象が何らかの変化を伴い、その変化がある法則に支配されているならば、その現象を常微分方程式で記述することができて何ら不思議はない。以下では、常微分方程式が記述することのできる世の中の現象や問題のほんの一部を紹介する。解を初等関数で表わすことができるものは併記しておき、そのグラフを示す。そうでないものは数値計算によって解き、やはりグラフを示す。また、常微分方程式中の係数や初期 (境界) 条件はなるべく簡単なものに設定している。なお、解を初等関数で表現できないような常微分方程式の問題が世の中に無数に存在しており、この章で紹介する数値計算が役立つことが多い。

1 階常微分方程式の初期値問題

積分 常微分方程式の最も簡単な問題は、この例のように直ちに積分でき

る形の問題である。積分の問題は第4章でも別に取り上げている。

$$\begin{cases} y' = \sin t \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.13a)$$

$$\begin{cases} y' = \sin t \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.13b)$$

[解] $y(t) = \int_0^t \sin t dt + y(0) = 2 - \cos t$

図5-3に $0 \leq t \leq 20$ の範囲での解のグラフを示す。■

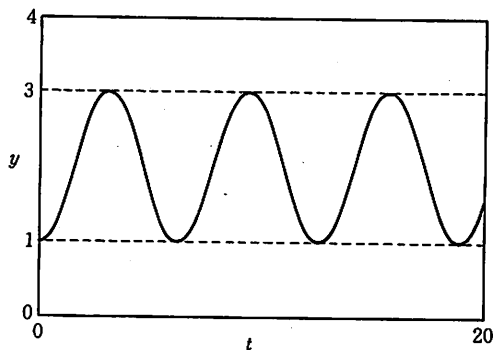


図5-3 (5.13)式の解 $y = 2 - \cos t$

生物の増殖 ある生物が理想的な環境の下でどんどん増殖しているとする。その生物の時刻 t での個体数を $y(t)$ としたときの簡単なモデルである。時刻0での個体数を1とする。

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.14a)$$

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.14b)$$

[解] $y(t) = \exp(t)$

図5-4に $0 \leq t \leq 5$ の範囲での解のグラフを示す。■

増殖に上限がある生物 上に述べた生物の増殖モデルは、無限に増殖することを許す単純なものである。そこで、ある程度以上は増殖できないという状況を考慮して、モデルを実際の現象にすこし近づける。時刻 t での生物の個体数を $y(t)$ とし、時刻0での個体数を1とする。

$$\begin{cases} y' = y(5-y) \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.15a)$$

$$\begin{cases} y' = y(5-y) \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.15b)$$

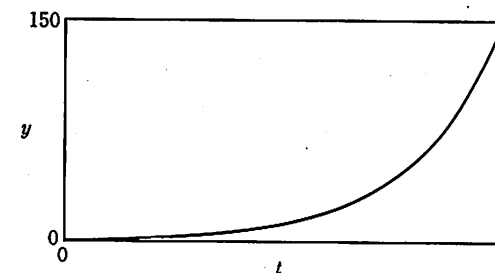


図5-4 生物の増殖

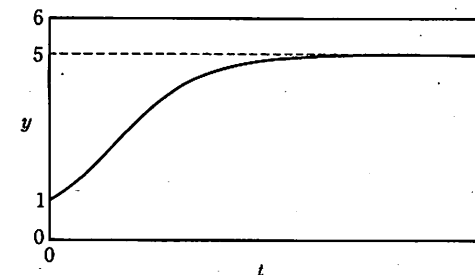


図5-5 増殖に上限がある生物

[解] $y(t) = \frac{5}{1 + 4 \exp(-5t)}$

図5-5に $0 \leq t \leq 2$ の範囲での解のグラフを示す。■

変数係数常微分方程式 常微分方程式の係数が独立変数に依存する問題である。物性値が時間(場所)に依存する場合などに登場する。

$$\begin{cases} y' = 2ty - 2 \\ y(0) = 2 \end{cases} \quad (5.16a)$$

$$\begin{cases} y' = 2ty - 2 \\ y(0) = 2 \end{cases} \quad (5.16b)$$

[解] $y(t) = \left(2 - 2 \int_0^t e^{-s^2} ds\right) e^{t^2}$

図5-6に $0 \leq t \leq 2$ の範囲での解のグラフを示す。■

2階常微分方程式の初期値問題

バネによるおもりの単振動 図5-7のように、壁に一端を固定されている

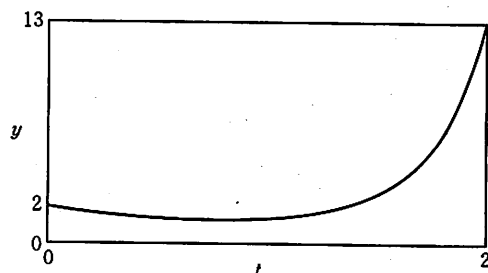


図 5-6 変数係数常微分方程式

バネの他端におもりが取り付けられているとする。このおもりを、少し右に引張ってから手を離す。おもりの中心の、時刻 t におけるつり合いの位置からのずれを $y(t)$ とする。また、時刻 0 でのおもりの位置を $y(0)=1$ 、おもりの速度を $y'(0)=0$ とする。

$$\begin{cases} y'' = -y \\ y(0) = 1, \quad y'(0) = 0 \end{cases} \quad (5.17a)$$

$$(5.17b)$$

$$[\text{解}] \quad y(t) = \cos t$$

図 5-8 に $0 \leq t \leq 20$ の範囲での解のグラフを示す。■

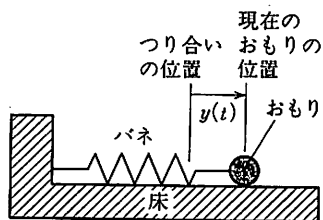


図 5-7 バネとおもりの模式図

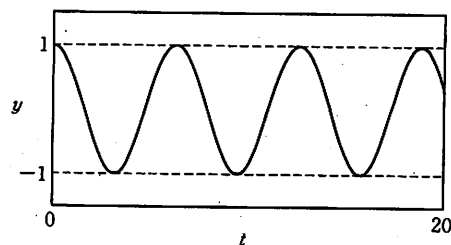


図 5-8 バネによるおもりの単振動

減衰振動 上の単振動では、おもりに働く力はバネによる復元力だけである。この例では、復元力以外におもりの速度 y' に比例する抵抗が働く場合を考える。

$$\begin{cases} y'' + 2ky' + \omega^2 y = 0 \\ y(0) = 1, \quad y'(0) = 0 \end{cases} \quad (5.18a)$$

$$(5.18b)$$

ここで k, ω は、それぞれ抵抗係、復元力の強さを表わす正の定数である。

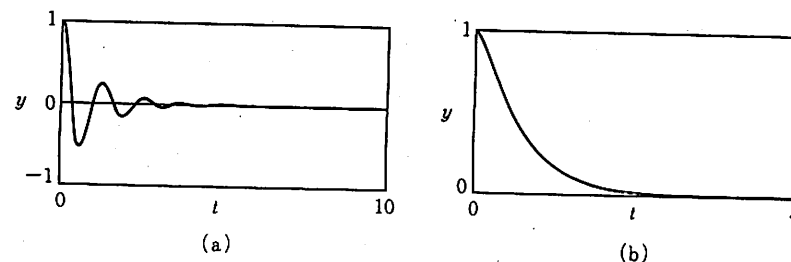
[解] (i) $k < \omega$, すなわち、抵抗が小さいとき

$$y(t) = \exp(-kt) \left\{ \cos(\sqrt{\omega^2 - k^2} t) + \frac{k}{\sqrt{\omega^2 - k^2}} \sin(\sqrt{\omega^2 - k^2} t) \right\}$$

(ii) $k > \omega$, すなわち、抵抗が大きいとき(過減衰)

$$y(t) = \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{k}{\sqrt{k^2 - \omega^2}} + 1 \right) \exp(-(k - \sqrt{k^2 - \omega^2})t) - \left(\frac{k}{\sqrt{k^2 - \omega^2}} - 1 \right) \exp(-(k + \sqrt{k^2 - \omega^2})t) \right\}$$

図 5-9(a) に $k < \omega$ の場合の解を、図 5-9(b) に $k > \omega$ の場合の解を示す。■

図 5-9 (a) $k < \omega$ の場合 ($k=1, \omega=5$), (b) $k > \omega$ の場合 ($k=5, \omega=4$)

連立 1 階常微分方程式の初期値問題

餌の生物とそれを食べる生物の関係 ある環境下での 2 種類の生物(生物 1, 生物 2 とよぶ)の集団を考える。生物 2 は生物 1 を食べて生きていくとしよう。すると、生物 2 は生物 1 を食べて増殖し、生物 1 が少ないと減少していく。生物 1 は生物 2 が少ないと増殖し、多いと減少する。この状況の簡単なモデルが以下の(5.19)式である。時刻を t とし、生物 1, 2 の個体数をそれぞれ y_1, y_2 とする。

$$\begin{cases} y_1' = (2 - y_2)y_1 \\ y_2' = (2y_1 - 3)y_2 \end{cases} \quad (5.19a)$$

$$(5.19b)$$

$$\begin{cases} y_1(0) = 4, \quad y_2(0) = 1 \end{cases} \quad (5.19c)$$

横軸を y_1 、縦軸を y_2 とし、解 $y_1(t), y_2(t)$ が描く曲線 $(y_1(t), y_2(t))$ を図 5-10

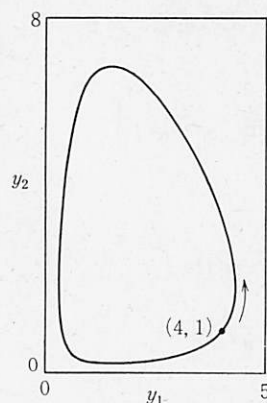


図 5-10 餌の生物 y_1 とそれを食べる生物 y_2 の関係

に示す。■

2 階常微分方程式の境界値問題

梁のたわみ 図 5-11 のように、長い梁が両端で固定されているとする。ただし、梁の左端の位置を $x=0$ 、高さを 0 とし、右端の位置を $x=1$ 、高さを 0.1 とする。このとき、梁は自重ですこしたわみ、位置 x における梁の高さを $y(x)$ とすると、 $y(x)$ は次の式に近似的に従う。

$$\begin{cases} y'' = x(1-x) \\ y(0) = 0, \quad y(1) = 0.1 \end{cases} \quad (5.20a)$$

$$(5.20b)$$

$$[\text{解}] \quad y(x) = -\frac{x^4}{12} + \frac{x^3}{6} + \frac{x}{60}$$

図 5-12 に、解のグラフを示す。■

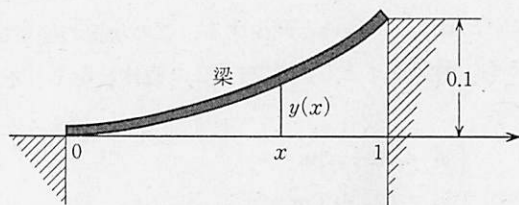


図 5-11 両端を固定した梁のたわみ

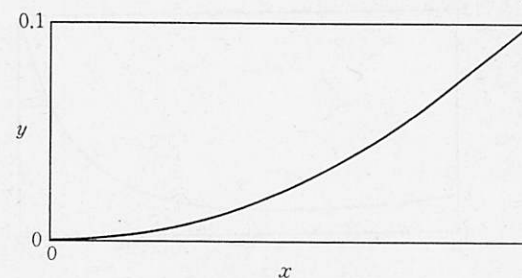


図 5-12 梁のたわみ

5-2 微分と差分

微分係数

$f(x)$ を x の関数としたとき、 $f(x)$ の $x=a$ における微分係数 (differential coefficient) は

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \{f(a+h) - f(a)\} \quad (5.21)$$

で定義され、 $f'(a)$ 等の記号で表わされる。上式の定義には \lim という極限操作が入っている。具体的に $f(x)=x^2$ として、 $f'(1)$ を計算してみると

$$f'(1) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \{(1+h)^2 - 1\} = \lim_{h \rightarrow 0} (2+h) = 2 \quad (5.22)$$

となる。この例の場合、定義から微分係数を計算することは容易である。次に、 $f(x)=\sin x$ としたときの $f'(1)$ はどのように計算されるであろうか。結果は、

$$\begin{aligned} f'(1) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \{\sin(1+h) - \sin 1\} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{2}{h} \cos\left(1 + \frac{h}{2}\right) \sin \frac{h}{2} \\ &= \cos 1 = 0.540302\cdots \end{aligned} \quad (5.23)$$

となる。上式を導く途中で、3 角関数の和を積に直す公式 $\sin A - \sin B = 2 \cos \frac{A+B}{2} \sin \frac{A-B}{2}$ と、極限值 $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1$ を用いた。

極限值への収束 では、微分係数の定義どおりに h をだんだん 0 に近づけていくと、どのように極限值としての微分係数に近づいていくのであろうか。

このことを実際に確かめてみるために、 $f(x)=\sin x$ の場合に対し微分係数の定義中の $\lim_{h \rightarrow 0}$ を取り払い、 h を有限にとどめておいた

$$D = \frac{1}{h} \{\sin(1+h) - \sin 1\} \quad (5.24)$$

という量を考える。 h の絶対値を小さくしていったときの D の値と、微分係数との誤差 $|D - f'(1)|$ の値を、表 5-1 にまとめる。この程度の計算であれば、わざわざプログラムを書いて実行する必要はなく、3 角関数が計算できる関数電卓を使えばすむ。

表 5-1 $D = \{\sin(1+h) - \sin 1\}/h$ と誤差 $|D - f'(1)|$

h	D	誤差	h	D	誤差
1	0.067826	4.7×10^{-1}	-1	0.841470	3.0×10^{-1}
0.1	0.497363	4.3×10^{-2}	-0.1	0.581440	4.1×10^{-2}
0.01	0.536085	4.2×10^{-3}	-0.01	0.544500	4.2×10^{-3}
0.001	0.539881	4.2×10^{-4}	-0.001	0.540722	4.2×10^{-4}
0.0001	0.540260	4.2×10^{-5}	-0.0001	0.540344	4.2×10^{-5}
0.00001	0.540298	4.2×10^{-6}	-0.00001	0.540306	4.2×10^{-6}

$f'(1) = \cos 1 = 0.540302 \dots$

この表を見ると、 h の絶対値を小さくしていくと D がどんどん $f'(1)$ に近づいていく様子がわかる。 $h = \pm 0.00001$ で有効数字 5 桁程度真の値と一致している。ただし、この表には示されていないが、 h の絶対値を小さくしすぎると、 $\sin(1+h) - \sin 1$ の計算で桁落ちの現象が起こるので逆に結果が悪くなる。

微分係数の近似値の誤差 さて、上の計算では(5.23)式のように式の変形を行なったわけではなく、単に $\sin(1+h)$ と $\sin 1$ の値を計算して差を求め、 h で割っただけである。つまり、元の関数の値が計算できれば、四則演算だけで微分係数の近似値を求めることができるのである。

じつは、任意の関数 $f(x)$ に対し、

$$D = \frac{1}{h} \{f(a+h) - f(a)\} \quad (5.25)$$

の値が、ある範囲内で $f'(a)$ と近い値になることを示すことができる。まず、テイラーの公式(1.16b)式を用いると、

$$f(a+h) = f(a) + hf'(a) + \frac{h^2}{2} f''(\xi) \quad (5.26)$$

となる。 ξ は a と $a+h$ の間の数である。これを(5.25)式に代入し、整理すると

$$D - f'(a) = \frac{h}{2} f''(\xi) \quad (5.27)$$

となる。右辺は D と $f'(a)$ との誤差を与える。すると、 $h \rightarrow 0$ で

$$D - f'(a) = O(h) \quad (5.28)$$

となる。ただし、 $f''(x)$ の値は $x=a$ の付近で有限であるとする。この式は、 h が十分小さくなれば D と $f'(a)$ の誤差はせいぜい h に比例して小さくなるということを意味する。表 5-1 の結果もそのことを裏付けている。

差分商

この D のように、関数のいくつかの点における値の差を用いてその関数の微分係数を近似することを差分近似(difference approximation)といい、(5.25)式右辺のような量を差分商(difference quotient)という。いまの場合は 1 階微分係数を近似する 1 階差分商である。さらに、 Δx を正の数としたとき、

$$\frac{1}{\Delta x} \{f(a+\Delta x) - f(a)\} \quad (5.29)$$

を $x=a$ における前進差分商(forward difference quotient)といい、

$$\frac{1}{\Delta x} \{f(a) - f(a-\Delta x)\} \quad (5.30)$$

を後退差分商(backward difference quotient)という。前者は(5.25)式で $h = \Delta x$ とした場合に相当し、後者は $h = -\Delta x$ とした場合に相当する。

その他に、

$$\frac{1}{\Delta x} \left\{ f\left(a + \frac{\Delta x}{2}\right) - f\left(a - \frac{\Delta x}{2}\right) \right\} \quad (5.31)$$

を $x=a$ における中心差分商(central difference quotient)という。テイラーの公式(1.16c)式を用いると、

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Delta x} \left\{ f\left(a + \frac{\Delta x}{2}\right) - f\left(a - \frac{\Delta x}{2}\right) \right\} \\
&= \frac{1}{\Delta x} \left[f(a) + \frac{\Delta x}{2} f'(a) + \frac{(\Delta x)^2}{8} f''(a) + \frac{(\Delta x)^3}{48} f'''(\xi_1) \right. \\
&\quad \left. - \left\{ f(a) - \frac{\Delta x}{2} f'(a) + \frac{(\Delta x)^2}{8} f''(a) - \frac{(\Delta x)^3}{48} f'''(\xi_2) \right\} \right] \\
&= f'(a) + \frac{(\Delta x)^2}{48} (f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)) \\
&= f'(a) + O((\Delta x)^2) \quad (5.32)
\end{aligned}$$

となる。ただし、 ξ_1, ξ_2 はそれぞれ $a < \xi_1 < a + \frac{\Delta x}{2}$, $a - \frac{\Delta x}{2} < \xi_2 < a$ を満たす数である。前進もしくは後退差分商では、 $f'(a)$ との誤差の大きさが $O(\Delta x)$ であるのに対し、中心差分商では $O((\Delta x)^2)$ であり、 $\Delta x \rightarrow 0$ で $f'(a)$ にもっと速く収束する。そのことを例で確認するために、表 5-2 に $\sin x$ の $x=1$ における中心差分商の値と誤差を示す。

表 5-2 $\sin x$ の $x=1$ における
中心差分商と誤差

Δx	中心差分商	誤差
1	0.51806944799	2.2×10^{-2}
0.1	0.54007720804	2.3×10^{-4}
0.01	0.54030005461	2.3×10^{-6}
0.001	0.54030228335	2.3×10^{-8}
0.0001	0.54030230564	2.2×10^{-10}
$f'(1) = \cos 1 = 0.54030230586 \dots$		

Δx を 1 桁小さくすると、誤差はだいたい 2 桁小さくなっている。さらに、表 5-1 の前進もしくは後退差分商と比べてみると、この表の範囲では同じ Δx に対して中心差分商の方が誤差がずっと小さい。

2 階差分商 次に、2 階微分係数を近似する 2 階差分商を考える。まず、 $f''(a)$ を近似する 2 階差分商の代表的な例を、誤差の評価とともに以下に示す。

$$f''(a) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ f(a+2\Delta x) - 2f(a+\Delta x) + f(a) \} + O(\Delta x) \quad (5.33a)$$

$$f''(a) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ f(a) - 2f(a-\Delta x) + f(a-2\Delta x) \} + O(\Delta x) \quad (5.33b)$$

$$f''(a) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ f(a+\Delta x) - 2f(a) + f(a-\Delta x) \} + O((\Delta x)^2) \quad (5.33c)$$

いずれの式もテイラーの公式を用いれば確認できる。表 5-3 に $f(x) = \sin x$ としたときの $a=1$ における (5.33a)~(5.33c) 式の差分商の値を示す。2 階微分係数の値は、 $f''(1) = -\sin 1 = -0.8414709848 \dots$ である。

表 5-3 $\sin x$ の $x=1$ における 2 階差分商の値

Δx	(5.33a) 式	(5.33b) 式	(5.33c) 式
1	-0.8360038607	0	-0.7736445427
0.1	-0.8904649347	-0.7826743547	-0.8407699926
0.01	-0.8468247877	-0.8360190117	-0.8414639725
0.001	-0.8420107959	-0.8409301919	-0.8414709147
0.0001	-0.8415250163	-0.8414169472	-0.8414709817
$f''(1) = -\sin 1 = -0.8414709848 \dots$			

微分を 2 回適用すれば 2 階微分係数を得るのと同様に、(5.33a)~(5.33c) 式は、それぞれ前進、後退、中心差分を 2 回適用すれば得られる。例えば前進差分を 2 回適用すると、

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{1}{\Delta x} \{ f(a+2\Delta x) - f(a+\Delta x) \} - \frac{1}{\Delta x} \{ f(a+\Delta x) - f(a) \} \right] \\
&= \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ f(a+2\Delta x) - 2f(a+\Delta x) + f(a) \} \quad (5.34)
\end{aligned}$$

となり (5.33a) 式が得られる。ただし、

$$f''(a) = \frac{4}{(\Delta x)^2} \left\{ -f(a+\Delta x) + 4f\left(a + \frac{\Delta x}{2}\right) - 5f(a) + 2f\left(a - \frac{\Delta x}{2}\right) \right\} + O(\Delta x) \quad (5.35)$$

というように微分係数を近似する差分商はいろいろ考えられる。そのような差分商を作るには、誤差をテイラーの公式で評価し、 $\Delta x \rightarrow 0$ の極限で誤差が 0 になるように工夫すればよい。

5-3 差分方程式

微分方程式と差分方程式

この節では、(5.7)式で表わされる1階常微分方程式の初期値問題を考える。
(5.7)式をもういちど以下に示す。

$$\begin{cases} y' = f(t, y) \end{cases} \quad (5.36a)$$

$$\begin{cases} y(0) = a \end{cases} \quad (5.36b)$$

求めたいものは、 $t > 0$ の範囲の $y(t)$ であり、関数 $f(u, v)$ および定数 a は与えられているとする。また、 $f(u, v)$ の値は u, v が与えられればいつでも計算できると仮定する。

この初期値問題を数値計算で解くためにはどうすればよいであろうか。
(5.36a)式の左辺に数値計算が苦手とする微分係数がある。そこで微分係数を差分商で置き換えてみよう。前節で示したように、差分商は微分係数を近似できるからである。前進差分商を採用すると、

$$\frac{1}{\Delta t} \{y(t + \Delta t) - y(t)\} = f(t, y(t)) \quad (5.37)$$

となる。 t が独立変数なので、前節で用いた Δx の代わりに Δt を用い、 Δt は正の数とする。(5.37)式と(5.36a)式は異なる方程式であるので、(5.36a)式の $y(t)$ は一般に(5.37)式を満たさない。そこで、混乱を防ぐために(5.37)式の $y(t)$ を $Y(t)$ と書き換えることにする。

$$\frac{1}{\Delta t} \{Y(t + \Delta t) - Y(t)\} = f(t, Y(t)) \quad (5.38)$$

(5.38)式のように差分を含む方程式を差分方程式(difference equation)という。さらに、微分方程式の解 $y(t)$ を微分、差分方程式の解 $Y(t)$ を差分と本書ではよぶことにする。(正しくは、前者を微分方程式の解、後者を差分方程式の解というべきであるが、長くなるのでこれらの用語を用いる。)

格子点 次に、(5.36b)式の y を Y に置き換えた初期条件

$$Y(0) = a \quad (5.39)$$

の下で(5.38)式を解くことを考える。(5.38)式は

$$Y(t + \Delta t) = Y(t) + \Delta t f(t, Y(t)) \quad (5.40)$$

と変形できるので、 $t=0$ を代入すると、

$$Y(\Delta t) = Y(0) + \Delta t f(0, Y(0)) = a + \Delta t f(0, a) \quad (5.41)$$

となり、 $Y(0)$ から直ちに $Y(\Delta t)$ が定まる。同様にして(5.40)式を繰り返し用いると、

$$Y(2\Delta t) = Y(\Delta t) + \Delta t f(\Delta t, Y(\Delta t))$$

$$Y(3\Delta t) = Y(2\Delta t) + \Delta t f(2\Delta t, Y(2\Delta t))$$

.....

というように、 $Y((j+1)\Delta t)$ を $Y(j\Delta t)$ から計算できる。

Δt をいったん決めてしまうと、 $t=j\Delta t$ 以外の時刻の Y の値は(5.40)式からは求められない。このように、差分方程式を解くと従属変数はとびとびの時刻で値が定まる。そのようなとびとびの時刻を格子点(grid point)という。 Y は格子点でだけ意味があるので、そのことを明示するために $Y(j\Delta t)$ を Y_j と書き換え、 $t_j=j\Delta t$ とする。すると、(5.38)式と初期条件は、

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} \{Y_{j+1} - Y_j\} = f(t_j, Y_j) \end{cases} \quad (5.43a)$$

$$\begin{cases} Y_0 = a \end{cases} \quad (5.43b)$$

となり、結局、(5.36)式の常微分方程式の初期値問題が、 Y_j に関する漸化式の問題(5.43)式に置き換えられたことになる。

微分と差分の関係 (5.36a)式は(5.43a)式と別物であるが、微分係数を差分商に置き換えただけである。ゆえに Δt がある程度小さければ Y_j が $y(t_j)$ に近い値になることを期待できる。そのことを直観的に把握するため、図5-2をもういちど見てみよう。いま、(5.1)式の初期値問題

$$\begin{cases} y' = (1-t)y \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.44)$$

を考える。この問題を上で説明した方法で差分方程式の初期値問題に直すと、

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t}\{Y_{j+1}-Y_j\} = (1-t_j)Y_j \\ Y_0 = 1 \end{cases} \quad (5.45)$$

となる。微分解と $\Delta t=0.2$ の場合の差分解を図 5-13 に示す。

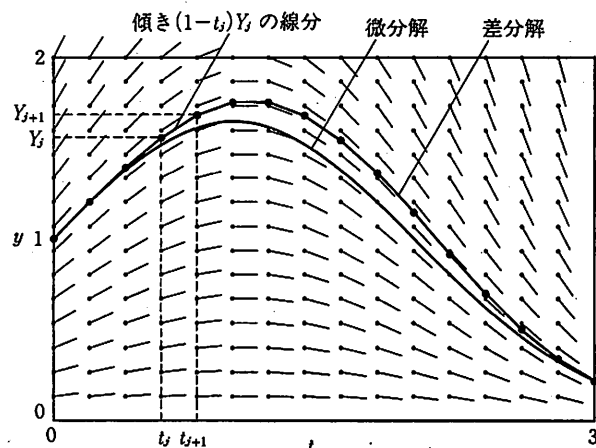


図 5-13 微分解と差分解($\Delta t=0.2$)

差分解の方は格子点でのみ値をもつので、得られた点同士を直線で結んで折れ線グラフにしよう。すると、差分解のグラフは接線の分布をもとにして解をおおざっぱに予想した感じのグラフになっている。さらに、 Δt がもっと小さいと差分解が微分解の変動に追従でき、そのときの折れ線グラフは格子点以外の時刻でも微分解のグラフを近似することが期待できる。以上のように、微分の問題を差分の問題に置き換え、格子点上の値を数値計算し、得られた差分解から微分解を推定する方法を差分法(difference method)という。

代表的な差分法

ところで、(5.43a)式は(5.36a)式の近似方程式のひとつに過ぎず、その他にもいろいろな差分方程式が考えられる。以下に、代表的な方法の差分方程式を、名前とともに3つ挙げる。

(1) オイラー法 (Euler's method)

$$\frac{1}{\Delta t}\{Y_{j+1}-Y_j\} = f(t_j, Y_j) \quad (5.46a)$$

(2) ホイン法 (Heun's method)

$$k_1 = f(t_j, Y_j), \quad k_2 = f(t_j + \Delta t, Y_j + \Delta t k_1)$$

として

$$\frac{1}{\Delta t}\{Y_{j+1}-Y_j\} = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \quad (5.46b)$$

(3) ルンゲ-クッタ法 (Runge-Kutta method)

$$\begin{cases} k_1 = f(t_j, Y_j), & k_2 = f\left(t_j + \frac{\Delta t}{2}, Y_j + \frac{\Delta t}{2} k_1\right) \\ k_3 = f\left(t_j + \frac{\Delta t}{2}, Y_j + \frac{\Delta t}{2} k_2\right), & k_4 = f(t_j + \Delta t, Y_j + \Delta t k_3) \end{cases}$$

として

$$\frac{1}{\Delta t}\{Y_{j+1}-Y_j\} = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (5.46c)$$

ここで、(1)~(3)の方法のどれにも初期条件として $Y_0=a$ を用いる。(5.43)式はオイラー法である。ホイン法では、 k_1 の値を計算した後に、その k_1 を用いて k_2 の値を計算する。ルンゲ-クッタ法でも、一見複雑であるが、 k_1, k_2, k_3, k_4 の順に定まっていく形をしている。(1)~(3)のすべての方法で、 Y_{j+1} の計算に1つ前の時刻の Y_j の値しか用いていない。このような方法を1段階法(single step method)という。これに対し、 Y_{j+1} の計算に Y_j, Y_{j-1} など複数個の前の時刻の値を用いる方法を多段階法(multistep method)というが、本書では解説しない。

オイラー法とルンゲ-クッタ法のアルゴリズム

上の3つの方法のうちオイラー法とルンゲ-クッタ法について、それぞれアルゴリズムを以下に示す。ただし、どちらも上の漸化式を忠実に翻訳した形を採用した。解を求める時刻の上限値を T とし、適当な自然数 N を定めて $\Delta t = T/N$ とする。

オイラー法

(1) T, N を設定する

$$\Delta t := T/N$$

$$Y := a$$

(2) $j := 0, 1, \dots, N-1$ の順に
 $t := j\Delta t$
 $Y := Y + \Delta t f(t, Y)$
 を繰り返す

ルンゲ-クッタ法

(1) T, N を設定する

$$\Delta t := T/N$$

$$Y := a$$

(2) $j := 0, 1, \dots, N-1$ の順に
 $t := j\Delta t$
 $k_1 := f(t, Y)$
 $k_2 := f\left(t + \frac{\Delta t}{2}, Y + \frac{\Delta t}{2}k_1\right)$
 $k_3 := f\left(t + \frac{\Delta t}{2}, Y + \frac{\Delta t}{2}k_2\right)$
 $k_4 := f(t + \Delta t, Y + \Delta t k_3)$
 $Y := Y + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
 を繰り返す

近似の考え方と計算の手間

さて、オイラー法、ホイン法、ルンゲ-クッタ法の3つの差分法は元の微分方程式(5.36a)式をどのように近似しているであろうか。まず、3つの方法のいずれも(5.36a)式の左辺の微分係数を前進差分商 $\frac{1}{\Delta t}\{Y_{j+1} - Y_j\}$ で置き換えている。そして、オイラー法では(5.36a)式の右辺の $f(t, y)$ を $t = t_j$ での近似値 $f(t_j, Y_j)$ で置き換えている。ホイン法では、 k_2 を定義する関数 f の2番目の引

数が、 $Y_j + \Delta t k_1 = Y_j + \Delta t f(t_j, Y_j)$ となっている。これはオイラー法で Y_j から Y_{j+1} を計算する形と同じである。したがって、ホイン法では、 $t = t_j$ での f の近似値 k_1 と $t = t_{j+1}$ での f の近似値 k_2 との平均値を、最終的な $f(t, y)$ の近似値にしているとみなすことができる。ルンゲ-クッタ法ではさらに複雑になる。 $t = t_j$ での f の近似値 k_1 、 $t = t_j + \Delta t/2$ という格子点に含まれない時刻での近似値 k_2, k_3 、および、 $t = t_{j+1}$ での近似値 k_4 を $(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6$ と重みをかけて平均し、 $f(t, y)$ の近似値としている。

どの方法でも、 $f(t, y)$ の計算の手間が他の計算の手間よりもずっと大きいと一般に仮定できる。すると同じ Δt に対して、オイラー法、ホイン法、ルンゲ-クッタ法の計算の手間の比がほぼ $1:2:4$ になることが、それぞれの差分方程式中に現われる f の数からわかる。

局所打ち切り誤差

これら3つの差分法は、いずれも微分方程式(5.36a)式を近似しているが、その近似のよさを示す目安を次に説明する。各方法の差分方程式はどれも $\frac{1}{\Delta t}\{Y_{j+1} - Y_j\} = F(t_j, Y_j)$ という形をしている。 F は各方法に応じて定まる関数である。例えば、ホイン法では

$$F(t_j, Y_j) = \frac{1}{2}\{f(t_j, Y_j) + f(t_j + \Delta t, Y_j + \Delta t f(t_j, Y_j))\} \quad (5.47)$$

となる。

いま $t = t_j$ での微分解の値 $y(t_j)$ を差分方程式の Y_j に代入し、 Y_{j+1} を計算すると、

$$Y_{j+1} = y(t_j) + \Delta t F(t_j, y(t_j)) \quad (5.48)$$

となる。このとき Y_{j+1} と $y(t_{j+1})$ との誤差

$$|y(t_{j+1}) - Y_{j+1}| = |y(t_{j+1}) - y(t_j) - \Delta t F(t_j, y(t_j))| \quad (5.49)$$

は、差分法と微分法がどれだけずれているかを示す目安になる。なぜならば上の量は「時刻 t_j で微分法がわかっているときに次の時刻 t_{j+1} での解を差分法で計算すれば、それがどれだけ微分法とずれているか」を示しているからである。ただし、時刻 t_j では正確な微分法がわかっているという前提の下で評価されており、最初から差分方程式に従って Y_j を次々に計算すると微分法から

どうずれていくかは見積もっていない。しかしながら、上の量は F の具体形が与えられたときに容易に計算できるので、微分解と差分分解の近さをおおざっぱに示す指標としてよく用いられる。

上の量を Δt で割った量

$$\delta = \left| \frac{y(t_{j+1}) - y(t_j)}{\Delta t} - F(t_j, y(t_j)) \right| \quad (5.50)$$

を局所打ち切り誤差(local truncation error)という。(Δt で割る前の量をそう呼んでいる書物もある。) 局所打ち切り誤差を $O((\Delta t)^p)$ という形で評価したとき、 p を次数(order)とよび、その差分方程式は p 次の公式であるという。 p の値が大きいほど、 Δt を小さくしたときの誤差が急激に小さくなり、元の微分方程式に対するよい近似になっていると考えられる。

オイラー法では、テイラーの公式(1.16b)式から $y(t_{j+1}) = y(t_j) + \Delta t y'(t_j) + O((\Delta t)^2)$ であることに注意すると、

$$\begin{aligned} \frac{y(t_{j+1}) - y(t_j)}{\Delta t} - f(t_j, y(t_j)) &= y'(t_j) - f(t_j, y(t_j)) + O(\Delta t) \\ &= O(\Delta t) \end{aligned} \quad (5.51)$$

となり、1次の公式であることがわかる。ホイン法、ルンゲ-クッタ法では、もっと計算が複雑になるが、同様の計算からそれぞれ2次、4次の公式であることがわかる。

5-4 1階常微分方程式の初期値問題

オイラー法の計算例 前節で1階常微分方程式の差分法の準備が整った。そこで、この節では5-1節に挙げた微分方程式を例にして、具体的な数値計算に話を進める。まず、(5.13)式の初期値問題

$$\begin{cases} y' = \sin t \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.52a)$$

$$y(0) = 1 \quad (5.52b)$$

にオイラー法を適用する。すると差分方程式と初期条件は、

$$\begin{cases} \frac{Y_{j+1} - Y_j}{\Delta t} = \sin t_j \end{cases} \quad (5.53a)$$

$$Y_0 = 1 \quad (5.53b)$$

となる。この式を用いて(5.52)式を満たす y の $t=1$ での値を推定することにする。

N を任意の自然数とし、 $\Delta t = 1/N$ とすれば $N\Delta t = 1$ となるので、 Y_N を計算すればよい。計算手順は94ページのオイラー法のアルゴリズムに従う。 $N = 10, 100, 1000, 10000$ に対し、それぞれ Y_N を計算した結果を表5-4に示す。微分解の値は、 $y(1) = 2 - \cos 1 = 1.459697\cdots$ である。

表5-4 N に対する Y_N の変化

N	Δt	Y_N
10	0.1	1.417240
100	0.01	1.455486
1000	0.001	1.459276
10000	0.0001	1.459655
$y(1) = 2 - \cos 1 = 1.459697\cdots$		

(5.52a)式の両辺を t について0から1まで積分し、初期条件(5.52b)式を考慮すると、 $y(1) = 1 + \int_0^1 \sin t dt$ となる。右辺の積分の部分は、図5-14(a)の網掛け部分のように $0 \leq t \leq 1$ の範囲で曲線 $y = \sin t$ と t 軸との間にはさまれた領域の面積に等しい。一方、(5.53)式の差分分解は、 $Y_N = 1 + \Delta t \sum_{j=0}^{N-1} \sin t_j$ となる。

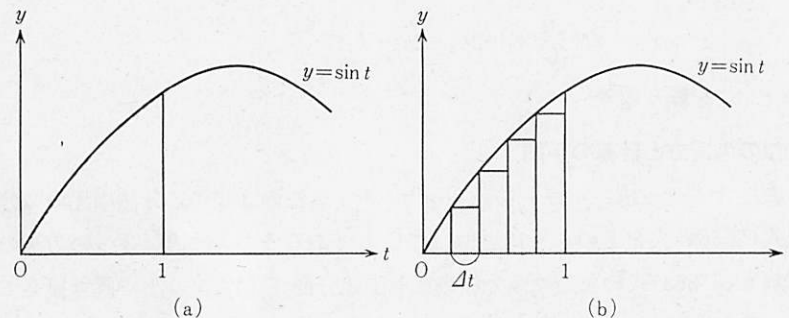


図5-14 (a)網掛け部は $\int_0^1 \sin t dt$, (b)網掛け部は $\Delta t \sum_{j=0}^{N-1} \sin t_j$

$\Delta t \sum_{j=0}^{N-1} \sin t_j$ の部分は図 5-14(b) の網掛け部分の面積を求めることに相当する。図 5-14(b) の網掛け部分の面積は、 Δt を小さくすると、図 5-14(a) の網掛け部分の面積を区分別積法によって求めることに他ならない。したがって、 Δt を小さくすれば Y_N が $y(1)$ の値に近づいていく。表 5-4 から、 $\Delta t=0.1, 0.01, 0.001, 0.0001$ と小さくしていくと、真の値と一致する桁数が 2, 3, 4, 5 桁というように増えていく様子がわかる。さらに、 $\Delta t=0.001$ と $\Delta t=0.0001$ での Y_N の値が先頭から 4 桁一致しているから、真の値はだいたい 1.459... であろうと見当がつく。

各方法の計算結果の比較 次に、(5.14) 式の初期値問題

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad (5.54)$$

について考える。この問題にオイラー法、ホイン法、ルンゲ-クッタ法を適用して数値計算を行なう。図 5-15 に微分解 $\exp(t)$ と、 $\Delta t=1/2$ の場合の差分分解をグラフにして比較する。差分分解のグラフでは、格子点での値を●などの印で示し、隣りあった印同士を直線で結んでいる。この図から次数の高い公式ほど微分解に近いことがわかる。特に、ルンゲ-クッタ法の差分分解は微分解とほとんど一致している。

また、オイラー法を用いて $\Delta t=1/2, 1/4, 1/8, 1/16$ とした場合に得られた差

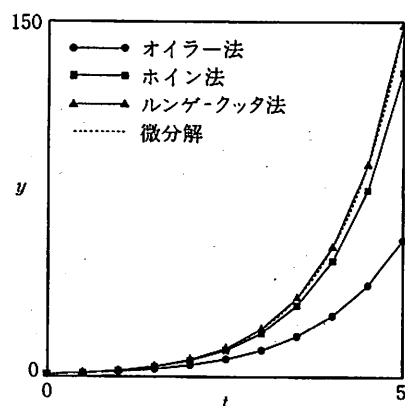


図 5-15 $\Delta t=1/2$ のときの各方法の比較

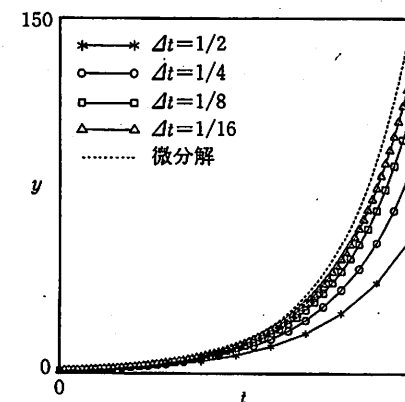


図 5-16 オイラー法による差分分解の Δt に対する変化

表 5-5 各方法による Y_N の比較(括弧内は誤差)

Δt	オイラー法	ホイン法	ルンゲ-クッタ法
0.1	2.59374246010 (1.24×10^{-1})	2.71408084660 (4.20×10^{-3})	2.71827974413 (2.08×10^{-6})
0.01	2.70481382942 (1.34×10^{-2})	2.71823686255 (4.49×10^{-5})	2.71828182823 (2.24×10^{-10})
$y(1)=e=2.7182818284590\cdots$			

分解をグラフにして図 5-16 にまとめる。この図から Δt を小さくするほど微分解に近づくことがわかる。さらに、各方法で $\Delta t=0.1, 0.01$ としたときの $y(1)$ の推定値、すなわち Y_N ($N=1/\Delta t$) の値を表 5-5 に示す。オイラー法、ホイン法、ルンゲ-クッタ法で Δt を $1/10$ にすると、それぞれ誤差がだいたい $1/10, 1/10^2, 1/10^4$ になることを表から読み取ることができる。結局、公式の次数が高い方法ほど速く真の答に収束していく。そして、ルンゲ-クッタ法が計算の手間の多さという不利を十分にカバーするだけのよい結果を与えている。

5-5 連立1階もしくは2階常微分方程式の初期値問題

連立1階常微分方程式と2階常微分方程式の関係

この節では、5-1節の連立1階常微分方程式(5.8)式と2階常微分方程式(5.9)式の初期値問題について考える。もういちど、両式を以下に示す。

$$\begin{cases} y_1' = f_1(t, y_1, y_2) \\ y_2' = f_2(t, y_1, y_2) \\ y_1(0) = a_1, \quad y_2(0) = a_2 \end{cases} \quad (5.55)$$

$$\begin{cases} y'' = f(t, y, y') \\ y(0) = a_1, \quad y'(0) = a_2 \end{cases} \quad (5.56)$$

求めるものは、(5.55)式では $t > 0$ の範囲の $y_1(t)$ と $y_2(t)$ であり、(5.56)式では $t > 0$ の範囲の $y(t)$ である。

じつは、(5.56)式の問題を(5.55)式の問題に帰着させることができる。(5.56)式で $y(t), y'(t)$ をそれぞれ $y_1(t), y_2(t)$ と書き換えると、(5.56)式の問題は次の問題と等価になる。

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = f(t, y_1, y_2) \\ y_1(0) = a_1, \quad y_2(0) = a_2 \end{cases} \quad (5.57)$$

(5.55)式で $f_1(t, y_1, y_2) = y_2$, $f_2(t, y_1, y_2) = f(t, y_1, y_2)$ とすれば(5.57)式と一致し、たしかに(5.56)式は(5.55)式の特別な場合となっている。そこで、(5.56)式を解くときには(5.57)式に変形することにし、(5.55)式の差分法だけを以下で説明する。

連立1階常微分方程式の差分法

まず、(5.55)式の2つの微分方程式はいずれも1階の常微分方程式なので、5-3, 5-4節で説明した従属変数が1つの場合の1階常微分方程式の差分法が応用できる。 Δt を正の数、 $t_j = j\Delta t$ とし、 $Y_j^{(1)}, Y_j^{(2)}$ をそれぞれ微分解 $y_1(t_j), y_2(t_j)$ に対応する差分解とする。

オイラー法を応用すると、(5.55)式の問題は

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t}(Y_{j+1}^{(1)} - Y_j^{(1)}) = f_1(t_j, Y_j^{(1)}, Y_j^{(2)}) \\ \frac{1}{\Delta t}(Y_{j+1}^{(2)} - Y_j^{(2)}) = f_2(t_j, Y_j^{(1)}, Y_j^{(2)}) \\ Y_0^{(1)} = a_1, \quad Y_0^{(2)} = a_2 \end{cases} \quad (5.58)$$

と近似できる。また、ルンゲ-クッタ法を応用すると、

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t}(Y_{j+1}^{(1)} - Y_j^{(1)}) = \frac{1}{6}(k_1^{(1)} + 2k_2^{(1)} + 2k_3^{(1)} + k_4^{(1)}) \\ \frac{1}{\Delta t}(Y_{j+1}^{(2)} - Y_j^{(2)}) = \frac{1}{6}(k_1^{(2)} + 2k_2^{(2)} + 2k_3^{(2)} + k_4^{(2)}) \\ Y_0^{(1)} = a_1, \quad Y_0^{(2)} = a_2 \end{cases} \quad (5.59)$$

となる。ただし、 $n=1, 2$ に対して

$$\begin{cases} k_1^{(n)} = f_n(t_j, Y_j^{(1)}, Y_j^{(2)}) \\ k_2^{(n)} = f_n\left(t_j + \frac{\Delta t}{2}, Y_j^{(1)} + \frac{\Delta t}{2}k_1^{(1)}, Y_j^{(2)} + \frac{\Delta t}{2}k_1^{(2)}\right) \\ k_3^{(n)} = f_n\left(t_j + \frac{\Delta t}{2}, Y_j^{(1)} + \frac{\Delta t}{2}k_2^{(1)}, Y_j^{(2)} + \frac{\Delta t}{2}k_2^{(2)}\right) \\ k_4^{(n)} = f_n(t_j + \Delta t, Y_j^{(1)} + \Delta tk_3^{(1)}, Y_j^{(2)} + \Delta tk_3^{(2)}) \end{cases} \quad (5.60)$$

とする。 $k_i^{(n)}$ は、 $Y_j^{(1)}, Y_j^{(2)}$ の値から $(k_1^{(1)}, k_1^{(2)}) \rightarrow (k_2^{(1)}, k_2^{(2)}) \rightarrow (k_3^{(1)}, k_3^{(2)}) \rightarrow (k_4^{(1)}, k_4^{(2)})$ の順に計算される。なお、ホイン法については省略する。

オイラー法とルンゲ-クッタ法のアルゴリズム

では、オイラー法とルンゲ-クッタ法のアルゴリズムを示す。ただし、どちらも上の漸化式を忠実に翻訳した形を採用した。解を求める時刻の上限値を T とし、適当な自然数 N を定めて $\Delta t = T/N$ とする。

オイラー法

(1) T, N を設定する

$$\Delta t := T/N$$

$$Y^{(1)} := a_1, \quad Y^{(2)} := a_2$$

(2) $j := 0, 1, \dots, N-1$ の順に
 $t := j\Delta t$
 $new_Y^{(1)} := Y^{(1)} + \Delta t f_1(t, Y^{(1)}, Y^{(2)})$
 $new_Y^{(2)} := Y^{(2)} + \Delta t f_2(t, Y^{(1)}, Y^{(2)})$
 $Y^{(1)} := new_Y^{(1)}$
 $Y^{(2)} := new_Y^{(2)}$
 を繰り返す

ルンゲ-クッタ法

(1) T, N を設定する

$$\Delta t := T/N$$

$$Y^{(1)} := a_1, \quad Y^{(2)} := a_2$$

(2) $j := 0, 1, \dots, N-1$ の順に

$$t := j\Delta t$$

$$k_1^{(1)} := f_1(t, Y^{(1)}, Y^{(2)})$$

$$k_1^{(2)} := f_2(t, Y^{(1)}, Y^{(2)})$$

$$k_2^{(1)} := f_1\left(t + \frac{\Delta t}{2}, Y^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} k_1^{(1)}, Y^{(2)} + \frac{\Delta t}{2} k_1^{(2)}\right)$$

$$k_2^{(2)} := f_2\left(t + \frac{\Delta t}{2}, Y^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} k_1^{(1)}, Y^{(2)} + \frac{\Delta t}{2} k_1^{(2)}\right)$$

$$k_3^{(1)} := f_1\left(t + \frac{\Delta t}{2}, Y^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} k_2^{(1)}, Y^{(2)} + \frac{\Delta t}{2} k_2^{(2)}\right)$$

$$k_3^{(2)} := f_2\left(t + \frac{\Delta t}{2}, Y^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} k_2^{(1)}, Y^{(2)} + \frac{\Delta t}{2} k_2^{(2)}\right)$$

$$k_4^{(1)} := f_1(t + \Delta t, Y^{(1)} + \Delta t k_3^{(1)}, Y^{(2)} + \Delta t k_3^{(2)})$$

$$k_4^{(2)} := f_2(t + \Delta t, Y^{(1)} + \Delta t k_3^{(1)}, Y^{(2)} + \Delta t k_3^{(2)})$$

$$Y^{(1)} := Y^{(1)} + \frac{\Delta t}{6} (k_1^{(1)} + 2k_2^{(1)} + 2k_3^{(1)} + k_4^{(1)})$$

$$Y^{(2)} := Y^{(2)} + \frac{\Delta t}{6} (k_1^{(2)} + 2k_2^{(2)} + 2k_3^{(2)} + k_4^{(2)})$$

を繰り返す

単振動の計算例 バネによるおもりの単振動を記述している(5.17)式の初

期値問題

$$\begin{cases} y'' = -y \\ y(0) = 1, \quad y'(0) = 0 \end{cases}$$

を, 上の解法を用いて解く. 微分解は $y(t) = \cos t$ であることがわかっている. 上の問題は, 前に述べた手続きに従って $y_1(t) = y(t)$, $y_2(t) = y'(t)$ とおくと,

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = -y_1 \\ y_1(0) = 1, \quad y_2(0) = 0 \end{cases} \quad (5.61)$$

という連立1階常微分方程式の問題に帰着する.

$\Delta t = 0.1$ の場合にオイラー法を用いて数値計算し, $Y_j^{(1)}$ をプロットしたものが図5-17である. 微分解を見ずに差分解だけを見てみると, 計算結果がもっともらしく思える. ところが, 元の微分方程式が表わしている現象, すなわち, バネによるおもりの単振動に対して, この結果から以下の誤った結論を導く可能性が生じる. 「 $Y_j^{(1)}$ は j が大きくなるにつれて値のふれが大きくなる, つまり, 単振動では時間が経つにつれて振幅が大きくなる.」微分解を見れば, この結論が誤りであることは明らかである.

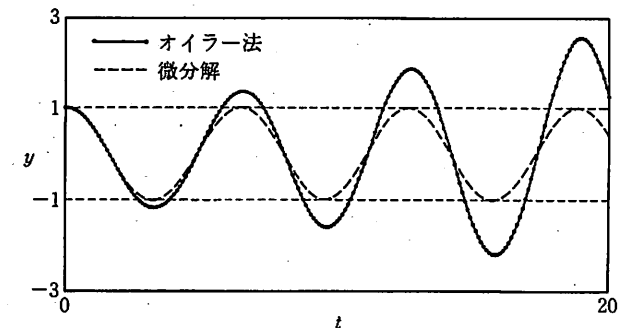


図5-17 オイラー法による差分解($\Delta t = 0.1$)と微分解

そこで Δt を前の $1/4$ の 0.025 にして数値計算を行なった結果を図5-18(a)に, ルンゲ-クッタ法を適用して $\Delta t = 0.2$ で数値計算を行なった結果を図5-18(b)に示す. 図5-18(a)では振幅のふれの変化が図5-17に比べて小さくなって

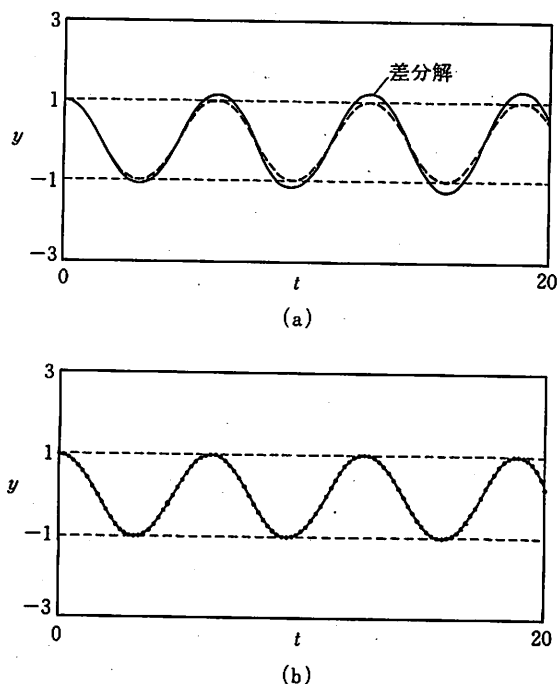


図 5-18 (a)オイラー法による差分分解($\Delta t=0.025$),
(b)ルンゲ-クッタ法による差分分解($\Delta t=0.2$)

いる。また、図 5-18(b)では微分分解とぴったり一致している。以上のことから、ある方法の 1 回だけの数値計算から結論を導くことが危険であることがわかる。

減衰振動の計算例 次に、 $k=5$, $\omega=4$ の場合の(5.18)式の初期値問題

$$\begin{cases} y'' + 10y' + 16y = 0 \\ y(0) = 1, \quad y'(0) = 0 \end{cases} \quad (5.62)$$

を考える。まず、(5.62)式を連立 1 階常微分方程式に変形する。

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = -16y_1 - 10y_2 \\ y_1(0) = 1, \quad y_2(0) = 0 \end{cases} \quad (5.63)$$

この式にオイラー法を適用し、 $\Delta t=0.1$ として数値計算した結果を、図 5-19

(a)に示す。(5.62)式の微分分解は

$$y(t) = \frac{1}{3} \{4 \exp(-2t) - \exp(-8t)\} \quad (5.64)$$

であることがわかっており、図中に点線で示している。微分分解と差分分解がだいたい一致しており、オイラー法の近似の度合いを考え合わせると満足できる結果となっている。そこで、 Δt をすこし大きめにとって $\Delta t=0.2$ とした場合の計算結果を図 5-19(b)に示す。値がすこし上下に振動する現象が差分分解に観察される。さらに、 Δt をもうすこし大きめにとって、 $\Delta t=2/7=0.285\cdots$ とした場合の計算結果を図 5-19(c)に示す。こんどは差分分解が激しく上下に振動し、時間が経つにつれてますます結果が悪くなっていく。

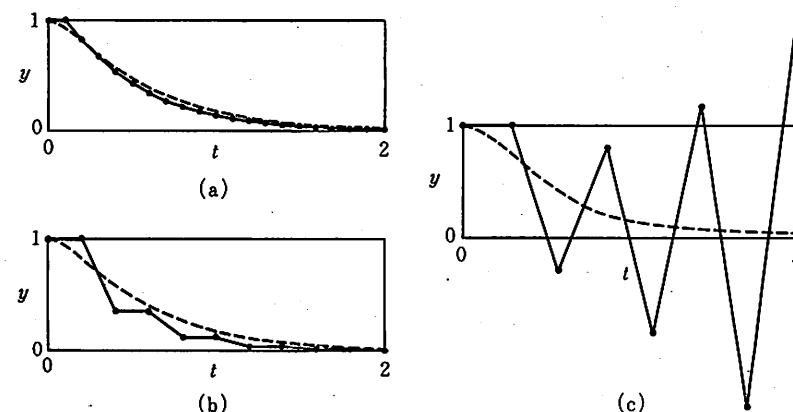


図 5-19 オイラー法による差分分解. (a) $\Delta t=0.1$, (b) $\Delta t=0.2$,
(c) $\Delta t=2/7=0.285\cdots$

計算の不安定性 オイラー法を適用したいままでの例では、図 5-19(c)のような極端に悪い結果が見られなかった。また、いままでの例では、 Δt を大きくしていくと差分分解がじょじょに微分分解からはずれていった。ところが、今回の場合は Δt を大きくすると計算結果に突然異常をきたしている。なぜ、このような現象が生じたのであろうか。その理由を探るため、オイラー法の差分分解を具体的に式で求めてみよう。

(5.58)式に $f_1(t, y_1, y_2) = y_2$, $f_2(t, y_1, y_2) = -16y_1 - 10y_2$ を代入し、初期条件

から $a_1=1$, $a_2=0$ とすると,

$$\begin{cases} Y_{j+1}^{(1)} = Y_j^{(1)} + \Delta t Y_j^{(2)} \\ Y_{j+1}^{(2)} = -16\Delta t Y_j^{(1)} + (1-10\Delta t) Y_j^{(2)} \\ Y_0^{(1)} = 1, \quad Y_0^{(2)} = 0 \end{cases} \quad (5.65)$$

が得られる。(5.65)式を解くと, $Y_j^{(1)}$ は

$$Y_j^{(1)} = \frac{1}{3} \{4(1-2\Delta t)^j - (1-8\Delta t)^j\} \quad (5.66)$$

となる。 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限では, $j\Delta t = t$ とすると, $(1-2\Delta t)^j \rightarrow \exp(-2t)$, $(1-8\Delta t)^j \rightarrow \exp(-8t)$ となり, たしかに(5.66)式の差分解は(5.64)式の微分解に収束する。そして, (5.64)式の2つの指数関数の項は, t が大きくなると急速に0に近づく。

ところが, 有限の Δt に対して, j が大きくなるにつれて差分解の $(1-2\Delta t)^j$, $(1-8\Delta t)^j$ の項が0に近づくためには, $|1-2\Delta t| < 1$ かつ $|1-8\Delta t| < 1$ でなければならない。したがって, $\Delta t < 1/4 = 0.25$ を満たさなければならない。 $\Delta t > 1/4$ の場合には $1-8\Delta t < -1$ となり, j が増加するとともに $(1-8\Delta t)^j$ の値は符号を変えつつ, その絶対値がどんどん増加することになる。図5-19(c)が $\Delta t = 0.285\cdots$ なのでこの場合に相当する。また, $1/8 = 0.125 < \Delta t < 0.25$ の場合は $-1 < 1-8\Delta t < 0$ となる。この場合, j が1増える毎に $(1-8\Delta t)^j$ の値の絶対値は小さくなるが符号が毎回変わる。図5-19(b)が $\Delta t = 0.2$ なのでこの場合に相当する。初期の時刻でグラフがギザギザになり, 微分解の滑らかな減衰とはだいぶん様子が異なる。結局 $\Delta t < 1/8$ を満たしていれば差分解は微分解のように滑らかに減衰する。図5-19(a)が $\Delta t = 0.1$ なのでこの場合に相当する。

以上のように, 差分法には公式の次数だけでは把握できないような計算の不安定性(instability)が存在することがある。不安定性に関する議論は数多くあり, また, 不安定性は公式の次数とともに差分法の善し悪しを判断する材料になっている。しかしながら, それらを考慮しても, 差分法の結果をどの程度信用してよいかの判断は経験をつまないとむずかしい。そこで, 計算結果が得られたときに, その妥当性を状況証拠から調べてみるためのヒントを以下に並べておく。

- (1) 計算結果が得られたら, 結果の数値データを並べるだけでなく, グラフにして一目で把握できるようにする。
- (2) たとえ微分解を式で書き下すことができなくても, 微分解の性質をできるだけ調べておき, 差分解がその性質をどれだけ満足しているかを調べる。例えば, 微分解は $t \rightarrow \infty$ で0に収束するはずなのに, 差分解がそうなりそうになれば結果を検討すべきである。
- (3) 計算に不安定性が生じている場合には, 計算が途中で発散したり, 図5-19(b), (c)のように異常振動が生じることが多い。
- (4) Δt を小さくしたり, 別の方法を適用したりして計算結果を比較し, 結果がどのように変わったかを調べる。
- (5) とにかく Δt が小さければよいというわけでもない。あまり Δt を小さくすぎると, 丸めの誤差が結果に影響しやすくなる。

なお, ここに挙げたヒントは他の章の数値計算にも通ずるところが多い。

5-6 2階常微分方程式の境界値問題

線形常微分方程式の境界値問題 常微分方程式の問題には, いままで取り扱ってきたような初期値問題の他に境界値問題とよばれるものが存在する。(5.10)式は2階常微分方程式の境界値問題である。(5.10)式をもういちど以下に示す。ただし, 独立変数を空間変数に見立てて, t の代わりに x を用いる。

$$y'' = f(x, y, y') \quad (5.67a)$$

$$y(0) = a_1, \quad y(1) = a_2 \quad (5.67b)$$

初期値問題と異なり, (5.67b)式では離れた地点 $x=0$, $x=1$ での境界条件が課せられている。このため, 初期値問題と境界値問題では数値計算法が大きく異なる。ここでは, (5.67)式のような一般的な形の境界値問題に対する解法を紹介しない。代わりに, 次章の偏微分方程式の数値計算への準備を兼ねて, (5.67)式の問題の特別な場合

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x) \quad (5.68a)$$

$$y(0) = a_1, \quad y(1) = a_2 \quad (5.68b)$$