計算物理学B

第10回
常微分方程式

藤本 悠輝、野垣 康介
（藤本担当回）

質問等あればメールでも受け付けます:
yuki.fujimoto.phys__at__niigata-u.ac.jp
(__at__ を @ に変えてください)

講義予定

10/07 両名：四則演算
10/14 野垣：制御文(for, if)
10/21 野垣：関数
10/28 藤本：配列(numpy)
11/04 藤本：可視化(matplotlib)
11/11 野垣：数値微分
11/18 藤本：数値積分
～中間レポート～

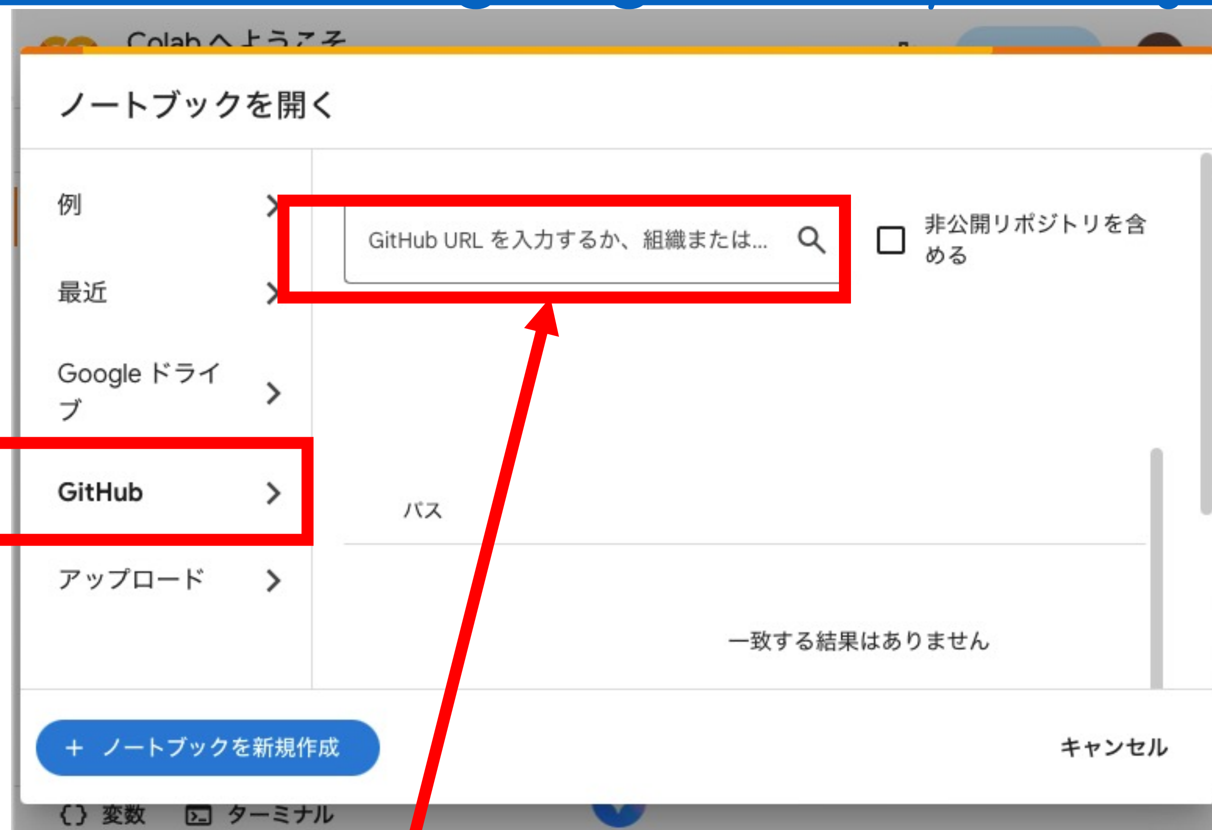
12/09 野垣：モンテカルロ1
12/16 野垣：モンテカルロ2
12/23 藤本：微分方程式1
01/13 藤本：微分方程式2
01/20 藤本：微分方程式3
01/27 野垣：最適化
02/03 藤本：機械学習
～期末レポート～

あくまで予定なので変更の可能性あり

実習環境

まず、Google Colabを開く：
https://colab.research.google.com/?hl=ja

1. GitHubを選択



2. ここに今週のNotebookのURLを入力してEnter：
https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/blob/main/week10/week10.ipynb

第10回　常微分方程式

- 基本的な数値解法：
  オイラー法、ルンゲ・クッタ法
- 連立微分方程式・2次以上の微分方程式
- 陽解法と陰解法、硬い方程式
- 適応刻み幅制御

この講義は以下を参考に準備されています：
https://github.com/vlvovch/PHYS6350-ComputationalPhysics
「実践計算物理学」野本拓也 、是常隆、有田亮太郎 著（共立出版）
「理工学のための数値計算法」水島二郎、柳瀬眞一郎 著（数理工学社）

常微分方程式 (ODE)

1階の常微分方程式 (Ordinary Differential Equation):

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t)$$

この形の微分方程式を与えられた初期条件

$$x(t = 0) = x_0$$

のもとで解くことを考える。
つまり、$x(t)$ の時間発展を求める問題を考える。
t は時間である場合が多いが（運動方程式など）、
それ以外の場合もある。ここでは t は時間とする。

常微分方程式 (ODE)

1階の微分方程式の初期値問題(initial value problem)の解は

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t) \qquad x(t=0) = x_0$$

形式的には以下のように書ける:

$$x(t) = x_0 + \int_0^t dt'\, f\Big(x(t'), t'\Big)$$

関数 f が x に依らなければ、(解析的に)積分できる。
他に、変数分離形で書ける場合は解析的に解ける:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{4x}{t}$$

それ以外は t を離散化して数値的にしか解けない。

Pythonでは scipy.integrateという強力なライブラリにodeやsolve_ivpという関数があるが、この授業ではそれを使わず、アルゴリズムを学ぶことを目標とする。

常微分方程式の数値解法

常微分方程式

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t)$$

の数値解は、$x(t+h)$ と $x(t)$ の小さい差分を取ることで得られる:

$$\begin{aligned} x(t+h) &= x(t) + h\frac{dx}{dt} + O(h^2)\,, \\ &= x(t) + hf\Big(x(t), t\Big) + O(h^2) \end{aligned}$$

基本的な考え方は数値積分と同じ。
$h \to 0$ の極限で厳密な解と整合するような解法。

常微分方程式の数値解法

常微分方程式の数値解法の特徴

- 陽解法と陰解法
  - 陽解法：$x(t+h)$ を直接計算するために $x(t)$ を使う
  - 陰解法：$x(t+h)$ を求めるために方程式を解く
- 精度
  - 各ステップでの h の打ち切り誤差は $O(h^n)$
  - 適応刻み幅制御で h を制御して所望の精度を達成
- 安定性
  - N ステップ後の蓄積誤差 $O(N\,h^n)$ が制御されるか（陰解法が有用な場合）

常微分方程式の数値解法

この講義で扱う方法:

- オイラー(Euler)法:
  最もシンプルな場合
- 2次ルンゲ·クッタ (Runge-Kutta) 法:
  数値積分の中点則に対応
- 4次ルンゲ·クッタ (Runge-Kutta) 法:
  数値積分のシンプソン則に対応

オイラー(Euler)法

$x(t+h)$ を $x(t)$ で表すためにテイラー展開：

$$x(t+h) = x(t) + h\frac{dx}{dt} + O(h^2)$$

$dx/dt = f(x,t)$ であることを使って、h の高次の項を無視：

$$x(t+h) \approx x(t) + hf\Big(x(t), t\Big)$$

これを $t=0$ から $t=t_{\mathrm{end}}$ までN回逐次的に使って $x(t)$ を解く。

誤差：

- 各ステップで $O(h^2)$
- $N = t_{\mathrm{end}} / h$ ステップ後の全体で $O(N\,h^2) \sim O(h)$

2次ルンゲ・クッタ(Runge-Kutta)法

オイラー法は微分dx/dtを前方差分で近似することに対応:

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \approx \frac{x(t+h)-x(t)}{h} + O(h)$$

中心差分の方が誤差の次数が1次高い

$$f(x, t+\tfrac{h}{2}) \approx \frac{x(t+h)-x(t)}{h} + O(h^2)$$

したがって、 $x(t+h) = x(t) + hf\Big(x(t+\tfrac{h}{2}), t+\tfrac{h}{2}\Big) + O(h^3)$

右辺に現れる $x(t+h/2)$ をどう計算するか?
→ Euler 法を使う。

$$x(t+\tfrac{h}{2}) = x(t) + \tfrac{h}{2} f\Big(x(t), t\Big) + O(h^2)$$

2次ルンゲ・クッタ(Runge-Kutta)法

$$x(t+h) = x(t) + hf\left(x(t+\tfrac{h}{2}), t+\tfrac{h}{2}\right) + O(h^3)$$

$$x(t+\tfrac{h}{2}) = x(t) + \tfrac{h}{2}f\left(x(t), t\right) + O(h^2)$$

以上をまとめると、

$$k_1 = hf(x(t), t)\,,$$

$$k_2 = hf\left(x(t) + \tfrac{k_1}{2}, t + \tfrac{h}{2}\right),$$

$$x(t+h) = x(t) + k_2\,.$$

誤差：

- 各ステップで $O(h^3)$
- $N = t_{\mathrm{end}} / h$ ステップ後の全体で $O(N\,h^3) \sim O(h^2)$

4次ルンゲ・クッタ(RK4)法

ルンゲクッタ法は高次の h の誤差にまで拡張できる。

$$k_1 = hf\left(x(t), t\right),$$

$$k_2 = hf\left(x(t) + \tfrac{k_1}{2}, t + \tfrac{h}{2}\right),$$

$$k_3 = hf\left(x(t) + \tfrac{k_2}{2}, t + \tfrac{h}{2}\right),$$

$$k_4 = hf\left(x(t) + k_3, t + h\right),$$

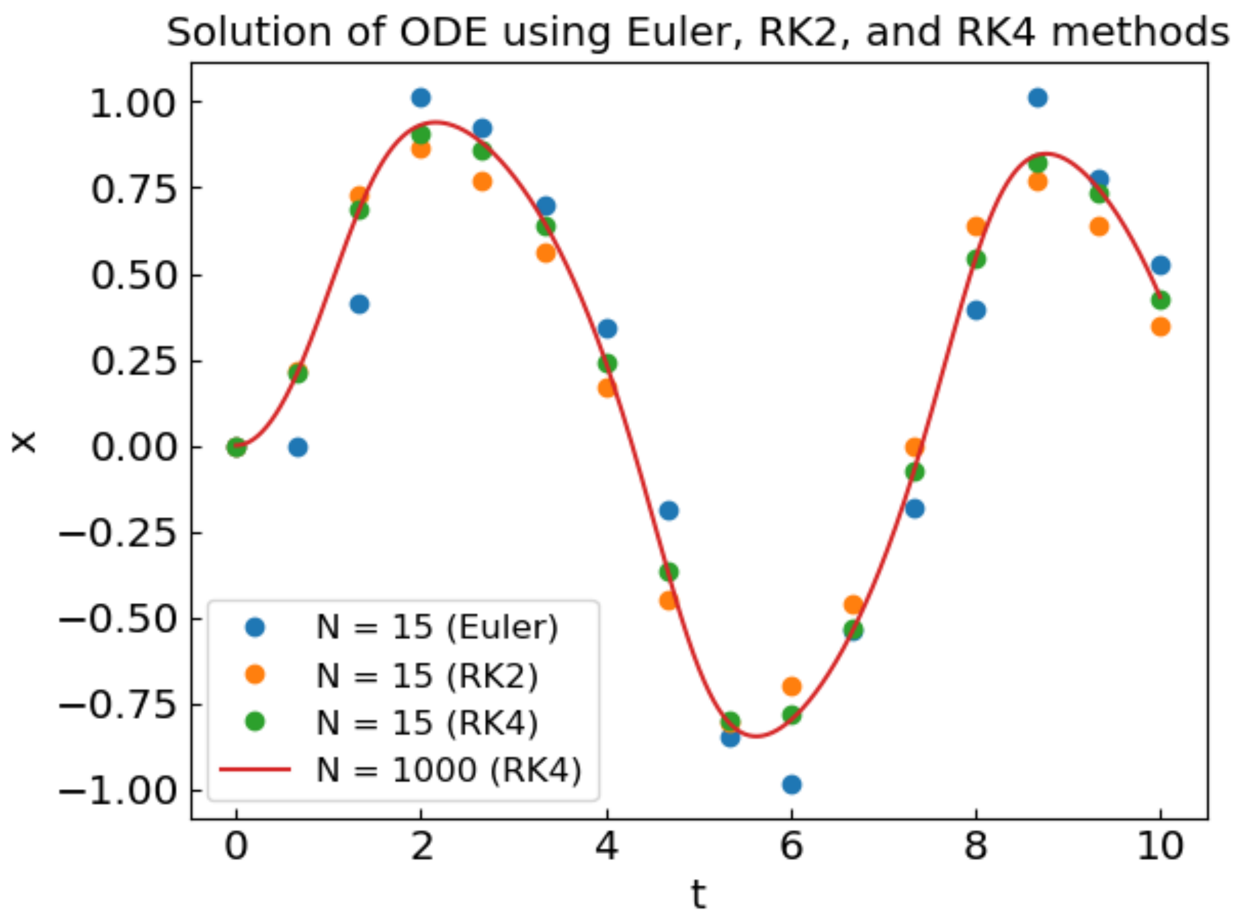
$$x(t+h) = x(t) + \tfrac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).$$

誤差：

- 各ステップで $O(h^5)$
- $N = t_{\mathrm{end}} / h$ ステップ後の全体で $O(N h^5) \sim O(h^4)$

物理でODEを解くときには通常RK4を用いることが多い

異なる数値解法の比較


Solution of ODE using Euler, RK2, and RK4 methods
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
x
0
2
4
6
8
10
t
N = 15 (Euler)
N = 15 (RK2)
N = 15 (RK4)
N = 1000 (RK4)

連立1階微分方程式

1階微分方程式のN元連立系を考えよう:

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, \ldots, x_N, t)\,,$$
$$\frac{dx_2}{dt} = f_2(x_1, \ldots, x_N, t)\,,$$
$$\vdots$$
$$\frac{dx_N}{dt} = f_N(x_1, \ldots, x_N, t)\,.$$

ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_N)\,, \qquad \boldsymbol{f} = (f_1, \ldots, f_N)$

を用いて書き直すと

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, t)$$

数値解法はベクトルの要素ごとにそのまま適用可能

連立1階微分方程式

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, t)$$

- Euler法： $\boldsymbol{x}(t+h) = \boldsymbol{x}(t) + h\boldsymbol{f}\Big(\boldsymbol{x}(t), t\Big)\,.$
- RK2:

$$\boldsymbol{k}_1 = h\boldsymbol{f}\Big(\boldsymbol{x}(t), t\Big)\,,$$
$$\boldsymbol{k}_2 = h\boldsymbol{f}\Big(\boldsymbol{x}(t) + \tfrac{\boldsymbol{k}_1}{2}, t + \tfrac{h}{2}\Big)\,,$$
$$\boldsymbol{x}(t+h) = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{k}_2\,.$$

- RK4:

$$\boldsymbol{k}_1 = h\boldsymbol{f}\Big(\boldsymbol{x}(t), t\Big)\,,$$
$$\boldsymbol{k}_2 = h\boldsymbol{f}\Big(\boldsymbol{x}(t) + \tfrac{\boldsymbol{k}_1}{2}, t + \tfrac{h}{2}\Big)\,,$$
$$\boldsymbol{k}_3 = h\boldsymbol{f}\Big(\boldsymbol{x}(t) + \tfrac{\boldsymbol{k}_2}{2}, t + \tfrac{h}{2}\Big)\,,$$
$$\boldsymbol{k}_4 = h\boldsymbol{f}\Big(\boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{k}_3, t + h\Big)\,,$$
$$\boldsymbol{x}(t+h) = \boldsymbol{x}(t) + \tfrac{1}{6}(\boldsymbol{k}_1 + 2\boldsymbol{k}_2 + 2\boldsymbol{k}_3 + \boldsymbol{k}_4)\,.$$

2階微分方程式

運動方程式などは(N元連立)2階微分方程式である:

$$\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{x}, \frac{d\boldsymbol{x}}{dt}, t\right)$$

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}, \boldsymbol{F} = \begin{pmatrix} F_1 \\ \vdots \\ F_N \end{pmatrix}$$

これを解くためには、通常1次微分を従属変数として新たに定義して、2N元連立系として書き直す。つまり、

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{v}$$

と新しく変数を定義すると(速度)、

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}(t) \\ \boldsymbol{v}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}(t) \\ \boldsymbol{F}\Big(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{v}(t), t\Big) \end{pmatrix}$$

という2N元連立1階方程式に帰着できる。
これは今まで紹介してきた方法で解ける。

陽解法と陰解法

前進オイラー法:

$$x(t+h) \approx x(t) + hf\Big(x(t), t\Big)$$

... 陽 (explicit) 解法。現在知っている値 *x(t)* を使って、
知りたい解 *x(t+h)* が陽(あらわ)に書ける。

後退オイラー法:

$$x(t+h) \approx x(t) + hf\Big(x(t+h), t\Big)$$

$$\because x(t) = x(t+h) - h\frac{dx(t+h)}{dt} + O(h^2)$$

... 陰 (implicit) 解法。知りたい解 *x(t+h)* を求めるには、
上の(非線形)方程式を数値的に解く必要がある。

なぜこのように、面倒なことを考えるのか?

硬い方程式

硬い(stiff)常微分方程式: $\frac{dx}{dt} = -cx\,, (c \gg 1)$

これを初期条件 $x(t{=}0) = 1$ の下、陽解法で解くと、
刻み幅を極めて小さくしない限り、数値的に不安定

このような微分方程式を硬い方程式と一般にいう

典型的には、解に急激な減衰解を含む場合、
硬い方程式になる

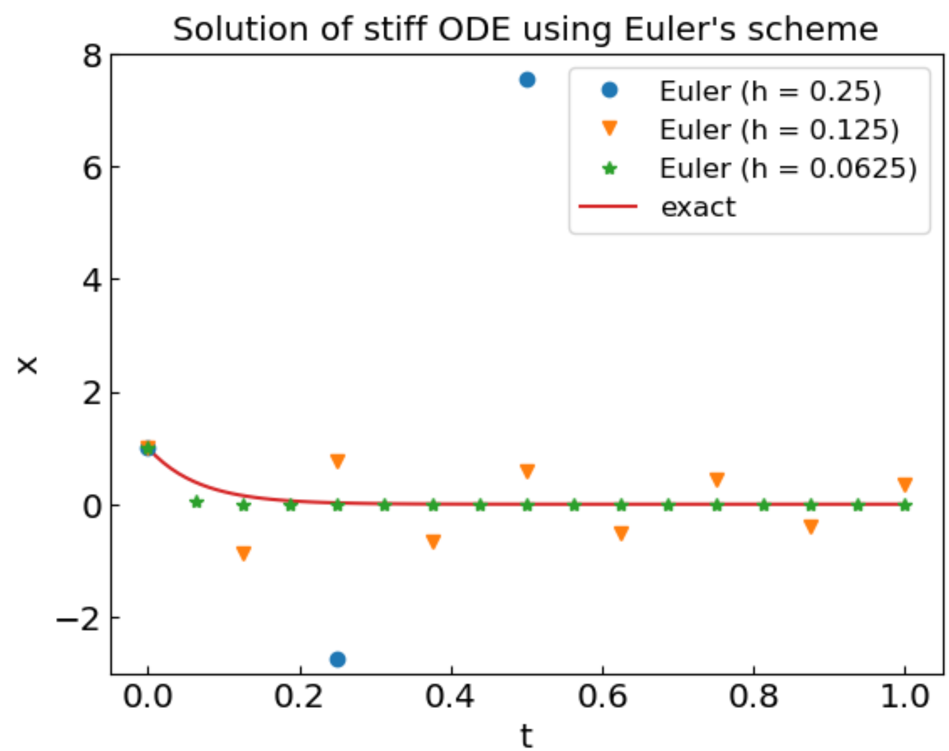
陽解法と硬い方程式

硬い(stiff)常微分方程式： $\dfrac{dx}{dt} = -cx\,,(c \gg 1)$

これを初期条件 $x(t=0) = 1$ の下、Euler法で解こう。
厳密解は $x(t) = e^{-ct}$ である。

刻みを $h = 1/4,\ 1/8,\ 1/16,$
定数を $c=15$とする。

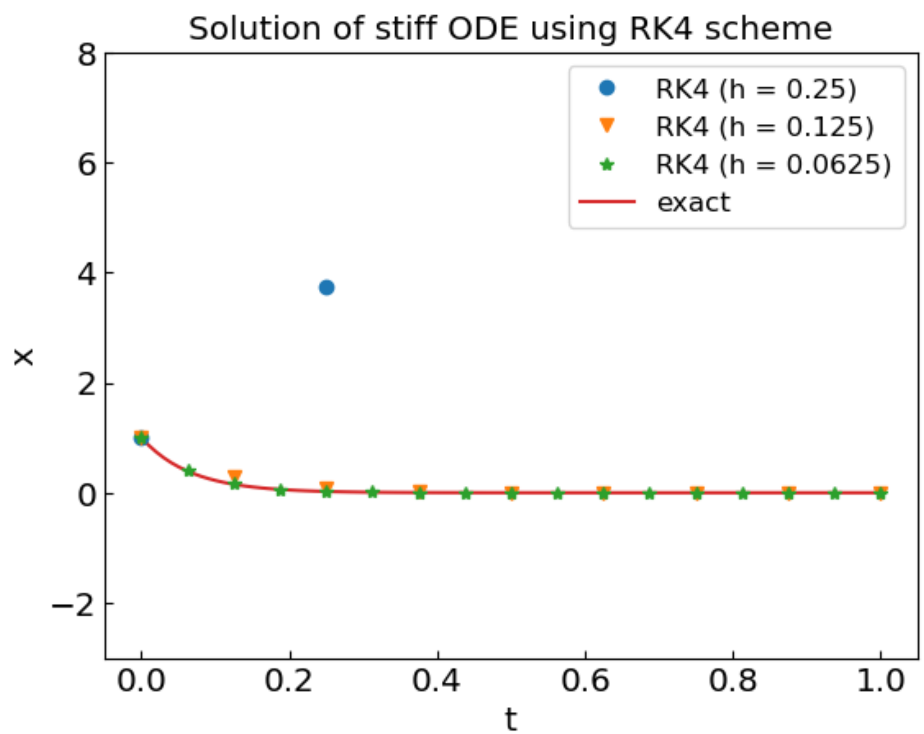
前進オイラー法で解くと、
$h = 1/4$ は発散してしまう！



陽解法と硬い方程式

硬い(stiff)常微分方程式： $\dfrac{dx}{dt} = -cx\,,(c \gg 1)$

これを初期条件 $x(t=0) = 1$ の下、Euler法で解こう。
厳密解は $x(t) = e^{-ct}$ である。



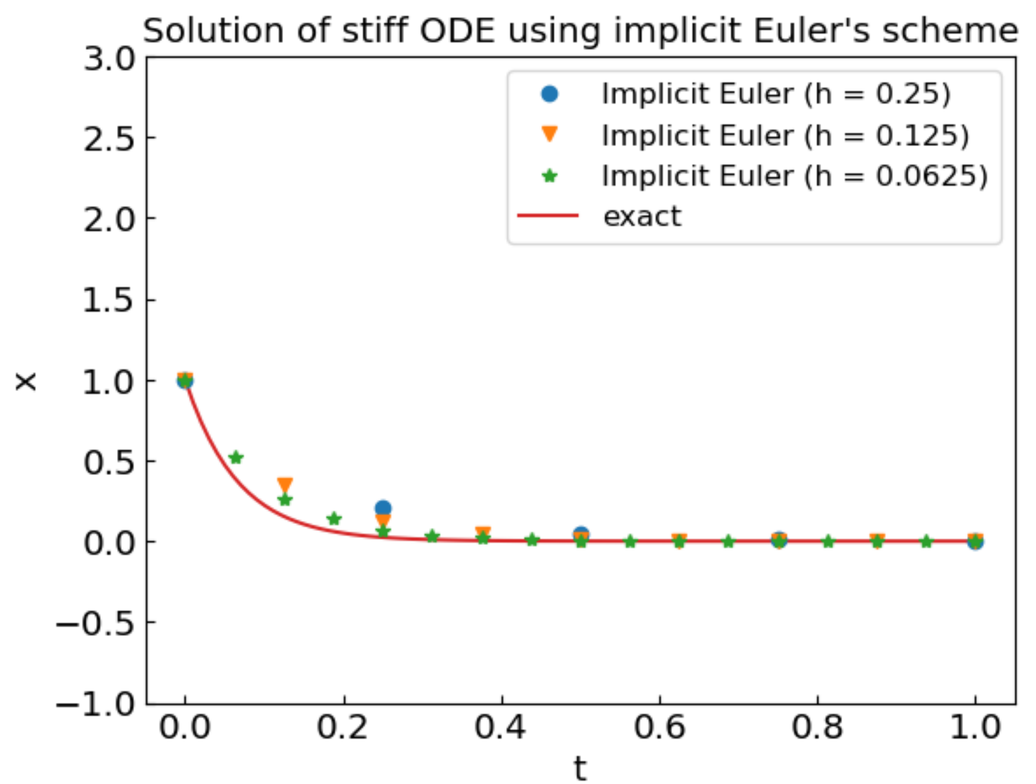
刻みを $h= 1/4, 1/8, 1/16,$
定数を $c=15$とする。

多少マシだがRK4法でも、
$h = 1/4$ は発散してしまう!

陰解法と硬い方程式

硬い(stiff)常微分方程式：$\dfrac{dx}{dt} = -cx\,,(c \gg 1)$

これを初期条件 $x(t=0) = 1$ の下、Euler法で解こう。
厳密解は $x(t) = e^{-ct}$ である。



刻みを $h = 1/4,\ 1/8,\ 1/16,$
定数を $c=15$とする。

後退オイラー法で解くと、
$h = 1/4$ も発散しない！

なぜ？

陰解法と硬い方程式

硬い(stiff)常微分方程式: $\dfrac{dx}{dt} = -cx\,, (c \gg 1)$ $\quad x(t=0)=1$

前進オイラー法: $x(t+nh) = (1-ch)^n x(t)$

$\leftarrow x(t+h) = x(t) + hf\big(x(t), t\big)$

後退オイラー法: $x(t+nh) = \dfrac{1}{(1+ch)^n} x(t)$

$\leftarrow x(t+h) = x(t) + hf\big(x(t+h), t\big)$

前進オイラー法は $|1 - ch| > 1$ つまり $h > 2/c$ のとき発散!
一方、後退オイラー法は h に依らず $n \to \infty$で 0 に収束。

- 陰解法は陽解法に比べて減衰解が安定
- しかし一般に、各ステップで $x(t+h)$ についての非線形方程式を解かなければならない

適応刻み幅制御 (adaptive step size control)

刻み幅の選び方は所望の精度を得るために重要:
- h 大きすぎ:精度が低くなる
- h 小さすぎ:不要な反復による計算資源の無駄
- 各ステップでの誤差は t の関数として求まる

適応刻み幅制御: 各ステップで局所的に誤差を評価し、hを制御して所望の精度を達成

各ステップでの誤差評価法の例:
- $x(t+2h)$を幅$2h$の1ステップと幅hの2ステップでそれぞれ計算し、比較
- 異なる次数の2つの解法を比較

適応刻み幅制御 (adaptive step size control)

$x(t+2h)$を幅 $2h$ の1ステップと幅 h の2ステップで計算

- 幅 $2h$ の1ステップでのRK4の $O(h^5)$ の誤差：

$$x(t+2h) \approx x_{2h\times 1} + c(2h)^5$$

- 幅 h の2ステップでのRK4の $O(h^5)$ の誤差：

$$x(t+2h) \approx x_{h\times 2} + 2ch^5$$

これより、幅 h の1ステップでのRK4の誤差は、
次のように見積もれる：

$$\epsilon = |ch^5| = \frac{|x_{2h\times 1} - x_{h\times 2}|}{30}$$

適応刻み幅制御 (adaptive step size control)

(続き) 幅 h の1ステップでのRK4の誤差：

$$\epsilon = |ch^5| = \frac{|x_{2h\times 1} - x_{h\times 2}|}{30}$$

各tで精度 δ (e.g. 10^{-3})を達成したいとする。
その時のステップ h' での所望の精度は $h'\delta = ch'^5$

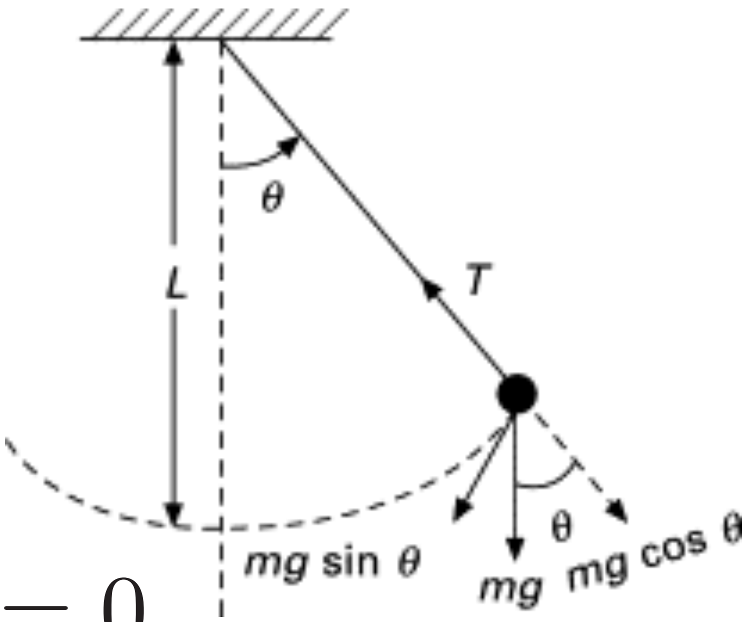
刻み幅を h から h' に適応させる：$h' = h\left(\dfrac{30h\delta}{|x_{2h\times 1} - x_{h\times 2}|}\right)^{\frac{1}{4}}$

- $h' > h$: 刻み幅小さすぎ。
  そのまま $x(t+2h)$ に進み、$h \rightarrow h'$ と増加
- $h' < h$: 刻み幅大きすぎ。
  $h \rightarrow h'$ と減少させ、$x(t+h)$ を再評価

実習タイム

- 単振り子の運動方程式を解いてみよ。

$$mL\frac{d^2\theta}{dt^2} = -mgL\sin\theta\,.$$



- 初期条件:

$$\theta(t=0) = \theta_0,\ \omega(t=0) = 0$$

詳しくはipynbを参照のこと。