itpass 実習数値計算編　2016 年 12 月 19 日
2017 年　1 月 16 日
2022 年　7 月　7 日
2022 年　7 月 11 日

計算機で常微分方程式を解こう

目次

- 計算機で常微分方程式を解く

計算機で常微分方程式を解く はじめに (1)

- 下の方程式を計算機を使って解こう.

$$\frac{dv(t)}{dt} = -g - kv(t)$$
$$v(0) = 10$$

- これは, 一様重力場中で抵抗力を受けながら運動する質点の速度を表す方程式である.
- この手の方程式の数値解法は複数ある. ここでは下の方法を考える.
  - オイラー法
  - テイラー法
  - 2 次のルンゲ・クッタ法

計算機で常微分方程式を解く オイラー法 (1)

- 微分方程式を計算機を使って解くためには, 離散化する必要がある.
  - つまり, 連続的な温度分布,
    $$v = v(t)$$
  - は, 多数の離散的な値,
    $$v = v(t_1), v(t_2), \dots, v(t_n), v(t_{n+1}), \dots$$
  - で表現される. これらを下のように表記することにする.
    $$v_1 = v(t_1), \qquad v_2 = v(t_2), \dots$$
    $$v_3 = v(t_3), \qquad v_4 = v(t_4), \dots$$

計算機で常微分方程式を解く オイラー法 (2)

- 微分はどのように離散化された形で表現されるのか?
- 微分の定義を思い出してみよう.

$$\frac{dv(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t}$$

  – そこで, 下のように離散化しよう.

$$\frac{dv(t)}{dt} \sim \frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t}$$

計算機で常微分方程式を解く オイラー法 (3)

- しかし, この説明はテキトー.
  - テイラー展開の式展開から求めるのが「正しい」.

$$v(t+\Delta t)=v(t)+\frac{dv(t)}{dt}(\Delta t)+\frac{1}{2!}\frac{d^2v(t)}{dt^2}(\Delta t)^2+O\big((\Delta t)^3\big)\ldots$$

より

$$\frac{dv(t)}{dt}=\frac{v(t+\Delta t)-v(t)}{\Delta t}-\frac{1}{2!}\frac{d^2v(t)}{dt^2}(\Delta t)+O\big((\Delta t)^2\big)+\cdots$$

したがって, $O(\Delta t)$ の誤差を伴う離散化式として

$$\frac{dv(t)}{dt}\sim\frac{v(t+\Delta t)-v(t)}{\Delta t}$$

となる.

計算機で常微分方程式を解く オイラー法 (4)

- また, 右辺にはｔの時刻における値を用いることにすると, 元の方程式は下のように離散化される.

$$\frac{v(t+\Delta t)-v(t)}{\Delta t}=-g-kv(t)$$

- さらに, 先のページの記法を用いると下のようになる.

$$\frac{v_{n+1}-v_n}{\Delta t}=-g-kv_n$$

計算機で常微分方程式を解く オイラー法 (5)

- 以上より, 下のように変形できる.

$$v_{n+1} = v_n + (-g - kv_n) \times (\Delta t)$$

- この方法はオイラー法, または前進差分と呼ばれる.

計算機で常微分方程式を解く オイラー法 (6)

- 今までの説明は, 若干回りくどい.
- 要するに, t+1 の時刻の値を求めればよいので, テイラー展開において 2 次以上の項を無視しているだけとも言える.

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 v(t)}{dt^2}(\Delta t)^2 + O\left((\Delta t)^3\right)$$

$$\sim v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t)$$

計算機で常微分方程式を解く オイラー法 (7)

- 下の内容の ode.f90 を作成して実行し, 結果を図示しよう.

```
program ode
  implicit none
  real(8) :: Vel
  real(8) :: VelN
  real(8) :: Grav = 9.8d0
  real(8) :: DragCoef = 1.0d0
  real(8) :: Time
  real(8) :: DelTime = 0.5d0
  integer :: i
```

右に続く

```
  Time = 0.0d0
  Vel = 10.0d0
  do i = 1, 100
    Time = Time + DelTime
    VelN = Vel + ( - Grav - DragCoef * Vel ) * DelTime
    write( 6, * ) Time, VelN
    Vel = VelN
  end do
end program ode
```

練習問題

- ode.f90 を変更して解析解も同時に計算し, 数値解と解析解の両方を図示しなさい.
  - 解くべき方程式:

$$\frac{dv(t)}{dt} = -g - kv(t)$$

$$v(0) = 10$$

計算機で常微分方程式を解く 陰解法 (1)

- オイラー法のように右辺に t（, t-Δt, t-2 Δt, …）の時刻における値を用いる方法を陽解法と呼ぶ.

$$\frac{v(t+\Delta t)-v(t)}{\Delta t} = -g - kv(t)$$

- 一方, 右辺に t+Δt の時刻における値を用いる方法を陰解法と呼ぶ.
  - 例えば, 時間後退差分を用いた場合は下のようになる.

$$\frac{v(t+\Delta t)-v(t)}{\Delta t} = -g - kv(t+\Delta t)$$

計算機で常微分方程式を解く 陰解法 (2)

- なお, テイラー展開を用いて表現すると下のように書けるだろう.

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{dv(t+\Delta t)}{dt}(\Delta t) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 v(t+\Delta t)}{dt^2}(\Delta t)^2 + O\left((\Delta t)^3\right)$$
$$\sim v(t) + \frac{dv(t+\Delta t)}{dt}(\Delta t)$$

練習問題

- ode.f90 をコピーして ode2.f90 を作成し, 時間後退差分で微分方程式を解くプログラムを作りなさい. また, その結果を, オイラー法の数値解および解析解とともに図示して比べなさい.
  – 時間後退差分を用いた場合の離散化式:

$$v_{n+1} = v_n + (-g - kv_{n+1}) \times (\Delta t)$$

計算機で常微分方程式を解く テイラー法 (1)

- 計算精度を上げることを考えよう.
- 離散化する際には, テイラー展開を用いることを既に述べた. つまり, テイラー展開に基づいて, より高精度の離散化を考えることができそうである.

計算機で常微分方程式を解く テイラー法 (2)

- テイラー展開

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 v(t)}{dt^2}(\Delta t)^2 + O\big((\Delta t)^3\big) \dots$$

より

$$\frac{dv(t)}{dt} = \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} - \frac{1}{2!}\frac{d^2 v(t)}{dt^2}(\Delta t) + O\big((\Delta t)^2\big) + \cdots$$

したがって, 右辺第二項の値を計算できるならば,

$$\frac{dv(t)}{dt} \sim \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} - \frac{1}{2!}\frac{d^2 v(t)}{dt^2}(\Delta t)$$

より, $O\big((\Delta t)^2\big)$ の精度で微分を評価できる.

計算機で常微分方程式を解く テイラー法 (3)

- 元の方程式

$$\frac{dv(t)}{dt} = -g - kv(t)$$

より,

$$\frac{d^2v(t)}{dt^2} = -k\frac{dv(t)}{dt} = gk + k^2v(t)$$

であるから, 下のように $O\left((\Delta t)^2\right)$ の精度で微分を評価できる.

$$\frac{dv(t)}{dt} \sim \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} - \frac{1}{2!}\frac{d^2v(t)}{dt^2}(\Delta t)$$
$$= \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} - \frac{1}{2!}\left(gk + k^2v(t)\right)(\Delta t)$$

計算機で常微分方程式を解く テイラー法 (4)

- 以上より, 方程式は下のように離散化される.

$$v_{n+1} = v_n + \left(-g - kv_n + \frac{1}{2}(gk + k^2 v_n)(\Delta t) \right) \times (\Delta t)$$

- この方法はテイラー法と呼ばれる（らしい）.

計算機で常微分方程式を解く テイラー法 (5)

- 今までの説明は回りくどい.
- 要するに, t+1 の時刻の値を求めればよいので, 下の 3 式

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 v(t)}{dt^2}(\Delta t)^2 + O\big((\Delta t)^3\big) \dots$$

$$\frac{dv(t)}{dt} = -g - kv(t) \qquad \frac{d^2 v(t)}{dt^2} = -k\frac{dv(t)}{dt} = gk + k^2 v(t)$$

を使って,

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \big(-g - kv(t)\big)(\Delta t) + \frac{1}{2!}\big(gk + k^2 v(t)\big)(\Delta t)^2 + O\big((\Delta t)^3\big) \dots$$

となるだけである.（まあ, どう考えてもよいが.）

練習問題

- ode.f90 をコピーして ode3.f90 を作成し, テイラー法で微分方程式を解くプログラムを作りなさい. また, その結果を, オイラー法の数値解および解析解とともに図示して比べなさい.
  - テイラー法を用いた場合の離散化式:

$$v_{n+1} = v_n + \left(-g - kv_n + \frac{1}{2}(gk + k^2 v_n)(\Delta t) \right) \times (\Delta t)$$

計算機で常微分方程式を解く 2 次のルンゲ･クッタ法 (1)

- テイラー展開の 2 次の項を解析的に求めることで, 計算精度を上げることができた.

$$\frac{dv(t)}{dt} = \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} - \frac{1}{2!}\frac{d^2 v(t)}{dt^2}(\Delta t) + O\big((\Delta t)^2\big)$$

- 今回扱った簡単な問題では, 未知変数$v(t)$ の2階微分を解析的に求めることが容易なので, 実際に上の方法は実用に耐える.
- しかしながら, 一般には, 未知変数の高階微分の値（支配方程式）がわかるとは限らない.
  - だから, 実際には近いところでは使われない… ような.

計算機で常微分方程式を解く 2 次のルンゲ･クッタ法 (2)

- 未知変数の高階微分を解析的に求めなくても高精度で微分方程式を離散化する方法は, 多数考えられている.
- ここでは 2 次のルンゲ･クッタ法（ホイン法とも呼ばれるらしい）について述べる.

計算機で常微分方程式を解く 2 次のルンゲ･クッタ法 (3)

- $\frac{1}{2!}\frac{d^2v(t)}{dt^2}(\Delta t)$ を計算すればよい, との立場に立つならば, 下のように変形してみよう（無理やりっぽいけれど）.

$$\frac{1}{2!}\frac{d^2v(t)}{dt^2}(\Delta t) = -\frac{1}{2}\frac{dv(t)}{dt} + \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\left(v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t)\right)$$
$$= -\frac{1}{2}\frac{dv(t)}{dt} + \frac{1}{2}\frac{dv^*(t+\Delta t)}{dt}$$

  - $v^*(t+\Delta t)$ は, オイラー法で計算した仮の値と考えることができる. 上の式により, 2 階微分の値が陽にわからなくてもよいことになる.

計算機で常微分方程式を解く 2次のルンゲ･クッタ法 (4)

- これより, 下のようになる.

$$\frac{dv(t)}{dt} = \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} - \frac{1}{2!}\frac{d^2v(t)}{dt^2}(\Delta t) + O\left((\Delta t)^2\right)$$
$$= \frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} + \frac{1}{2}\frac{dv(t)}{dt} - \frac{1}{2}\frac{dv^*(t+\Delta t)}{dt} + O\left((\Delta t)^2\right)$$

- したがって,

$$\frac{dv(t)}{dt} \sim 2\frac{v(t+\Delta t) - v(t)}{\Delta t} - \frac{dv^*(t+\Delta t)}{dt} + O\left((\Delta t)^2\right)$$

計算機で常微分方程式を解く 2 次のルンゲ･クッタ法 (5)

- あるいは, t+1 の時刻の値は下のように書ける.

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}\left(\frac{dv(t)}{dt} + \frac{dv^*(t+\Delta t)}{dt}\right)(\Delta t) + O\left((\Delta t)^3\right)$$

  – 2 次の項が陽に現れていない（1 次の項に含まれる）ことに注意.
  – これにより, 右辺第 2 項までの計算で, 2 次の精度で計算できることになる.
- 2 次までとってまとめて書くと, 下のようになる.

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}\left(\frac{dv(t)}{dt} + \frac{dv^*(t+\Delta t)}{dt}\right)(\Delta t)$$

$$v^*(t+\Delta t) = v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t)$$

計算機で常微分方程式を解く 2次のルンゲ･クッタ法 (6)

- しかし, この説明もとても回りくどい.
  - 普通は決してこんな説明はしない.
- 要は, t+1 の時刻の値を求めればよいので, 下の式が正しくなる（＝テイラー展開と近くなる）ようにすればよいだけである.

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{\delta v}{\delta t}(\Delta t)$$

計算機で常微分方程式を解く 2 次のルンゲ･クッタ法 (7)

- $\frac{\delta v}{\delta t}$ を, より使いやすい値で表したいので, 下のように表すことにする.

$$\frac{\delta v}{\delta t} = \alpha \frac{dv(t)}{dt} + (1-\alpha) + \frac{dv^*(t+\Delta t)}{dt}$$

$$v^*(t+\Delta t) = v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t)$$

- これは, $\alpha = \frac{1}{2}$ のときに, テイラー展開と 2 次の精度で一致する.

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 v(t)}{dt^2}(\Delta t)^2 + O\left((\Delta t)^3\right)$$

計算機で常微分方程式を解く 2 次のルンゲ･クッタ法 (8)

- 結局, 先の説明と同じように下のようにまとめられる.

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}\left(\frac{dv(t)}{dt} + \frac{dv^*(t+\Delta t)}{dt}\right)(\Delta t)$$

$$v^*(t+\Delta t) = v(t) + \frac{dv(t)}{dt}(\Delta t)$$

計算機で常微分方程式を解く 2 次のルンゲ･クッタ法 (9)

- よくある書き方では下のように表される.

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \times (\Delta t)$$
$$k_1 = f(t_n, v_n)$$
$$k_2 = f(t_{n+1}, v_n + k_1 \times (\Delta t))$$

- この方法は 2 次のルンゲ･クッタ法と呼ばれる.

計算機で常微分方程式を解く その他の方法

- 他にも様々な方法が考えられている. ここでは詳細を述べないが, 例えば下のようなものが良く(？)使われる.
  - 4 次ルンゲ･クッタ法
  - リープ･フロッグ法
  - …

計算機で常微分方程式を解く
コメント: 精度について

- ここまで, 深く考えずに「精度」という単語を使ってきた.
- …

練習問題

1. 2 次のルンゲ･クッタ法で下の微分方程式を解くプログラムを作りなさい. そして結果をオイラー法とテイラー法の数値解, および解析解と比べなさい.

$$\frac{dv(t)}{dt} = -g - kv(t) = f(t, v)$$

$$v(0) = 10$$

   – なお, 2 次のルンゲ･クッタ法を使うと上の方程式は下のように離散化される.

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \times (\Delta t)$$

$$k_1 = f(t_n, v_n), \qquad k_2 = f(t_{n+1}, v_n + k_1 \times (\Delta t))$$

練習問題

2. 下の方程式の解を求めるプログラムを作りなさい.

$$C\frac{dT}{dt} = \frac{1}{4}(1 - A)F_s - \sigma T^4$$

$$A = \begin{cases} 0.7 & (T < 230\ K) \\ \text{線形で変化} & (230\ K \leq T \leq 263\ K) \\ 0.1 & (T > 263\ K) \end{cases}$$

練習問題

3. 次の連立常微分方程式を解き, x, y, z の時間変化を図示しなさい.
   – 時間差分にはオイラー法を用いてよい.

$$\frac{dx(t)}{dt} = a\{y(t) - x(t)\}$$

$$\frac{dy(t)}{dt} = bx(t) - y(t) - x(t)z(t)$$

$$\frac{dz(t)}{dt} = x(t)y(t) - cz(t)$$

$$x(0) = y(0) = z(0) = 0.5$$

$$\mathrm{a} = 10, \mathrm{b} = 28, \mathrm{c} = 8/3$$

練習問題

4. 先の連立常微分方程式において, 初期値をわずかに変化させて解き, 変化させる前と後の x の差の時間変化を図示しなさい.

$$x(0) = 0.5 + 10^{-6}, \qquad y(0) = z(0) = 0.5$$