計算物理学 II 第 10 回：微分方程式の解法

ver. 2020/7/26

常微分方程式で初期値が与えられている場合の数値解の求め方を解説します。

1 Euler 法

解きたい方程式は一階常微分方程式で

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \tag{1}$$

の形で与えられているとしましょう。($f(x, y)$ の関数形と x_0, y_0 の値が既知)

$y(x)$ の x での Taylor 展開は

$$y(x+h) = y(x) + \frac{dy}{dx}h + \mathcal{O}(h^2) = y(x) + f(x, y)h + \mathcal{O}(h^2) \tag{2}$$

で与えられます。

Euler 法では $x + h$ での y の値を x での関数の値を用いて $y(x) + f(x, y)h$ で近似する方法です。初期値の与えられている $x = x_0$ から計算を始め、まずは x_0 での y の値が $y_0 = y(x_0)$ です。続いて、$x_1 = x_0 + h$ での y の値 y_1 は

$$y_1 = y(x_0 + h) = y_0 + f(x_0, y_0)h + \mathcal{O}(h^2) \tag{3}$$

と x_0 と y_0 を使って求まります。続いて $x_2 = x_0 + 2h$ での値は $y_2 = y(x_2) = y(x_0 + 2h)$ を $x_1 = x_0 + h$ で展開して、

$$y_2 = y_1 + \left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_1} h + \mathcal{O}(h^2) = y_1 + f(x_1, y_1)h + \mathcal{O}(h^2) \tag{4}$$

となり、x_1 と y_1 の値を用いて計算することができます。このように一般に x_n, y_n を用いて $x_{n+1} = x_n + h$ での y_{n+1} を求めることができます。

Euler 法は最も簡単に実装することができますが、Taylor 展開の 1 次までしか考慮しないため、精度がよくありません。また、同じ計算を何度も繰り返すため、初期値の点から離れるほど誤差が積もって大きくなる問題があるため実用的ではありません。

2 Runge-Kutta 法

2.1 2 次の Runge-Kutta 法

初期値のある常微分方程式の問題は x_n, $y_n = y(x_n)$ の値を用いて $x_{n+1} = x_n + h$ での y の値 $y_{n+1} = y(x_{n+1})$ を求める問題となります。この厳密解は積分を用いて

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{dy}{dx} dx = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \tag{5}$$

で与えられます。Euler 法では式 (3) や (4) を用いて x の値を進めていきますのでこの積分を

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx = f(x_n, y_n)h + \mathcal{O}(h^2) \tag{6}$$

と近似したことに対応します。つまり Euler 法では $f(x,y)$ の (x,y) の値は積分の左側の点 x_n とそこでの $y_n = f(x_n)$ を積分区間 $[x_n, x_{n+1}]$ で通して使っていました。これは積分のよい近似であるとは言えないでしょう。

ルンゲクッタ (Runge-Kutta) 法ではこの積分の評価を改良することによって、Euler 法よりも精度のよい計算を行うことができます。x_n の代わりに、被積分関数の値を積分区間の中点で評価された点を用いることで精度の向上が期待できます。積分区間の中点の x は $x_n + h/2$ で与えられます。y の中点は y_{n+1} が不明なので正確には与えられませんが、Euler 法を用いて推測します。Euler 法を用いると y_{n+1} は

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \mathcal{O}(h^2) \tag{7}$$

となりますので、$k_1 \equiv hf(x_n, y_n)$ とおいて、y の中点は $y_n + k_1/2$ と書きます。これらの変数を被積分関数に代入して評価したものが 2 次の Runge-Kutta 法です。式をまとめると

$$k_1 = hf(x_n, y_n), \tag{8}$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right), \tag{9}$$

$$y_{n+1} = y_n + k_2 + \mathcal{O}(h^3) \tag{10}$$

2 次の Runge-Kutta 法では h^2 のオーダーまで考慮されているため、Euler 法と比べて精度がよくなっています。プログラムへの実装も簡単で、式 (8) から式 (10) を順番に実行することで計算できます。式 (8) で k_1 を計算し、これを使って式 (9) で k_2 を計算、その後 k_2 を使って式 (10) で y_{n+1} を計算します。

2.2　4 次の Runge-Kutta 法

広く使われているのは 4 次の Runge-Kutta 法です。

$$k_1 = hf(x_n, y_n), \tag{11}$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right), \tag{12}$$

$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right), \tag{13}$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3), \tag{14}$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + \mathcal{O}(h^5). \tag{15}$$

はじめの 2 つは 2 次の Runge-Kutta 法と同じです。まず Euler 法を行って y の変化分を計算し (k_1)、それを用いて中点での値を用いて y の変化分を計算します (k_2)。続いて y の評価を先ほどの中点での変化分による評価での値に更新して y の変化分を計算し (k_3)、これを用いて右端の点での値を計算します (k_4)。これらの 4 点を重み付きで足し合わせたものが 4 次の Runge-Kutta の公式となります。

最後の足し合わせは Simpson の公式に近いものになっています。特に $f(x,y)$ が y によらない場合、つまり $f(x,y) = g(x)$ の形であれば、

$$\begin{aligned}\int_{x_n}^{x_{n+1}} g(x)dx &= \frac{h}{6}\left[g(x_n) + 4g\left(x_n + \frac{h}{2}\right) + g(x_{n+1})\right] + \mathcal{O}(h^5) \\ &= \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + \mathcal{O}(h^5)\end{aligned} \tag{16}$$

となり、Simpson の公式と一致します。

4 次の Runge-Kutta 法の導出は複雑ですので省略しますが (教科書でも導出は書かれていないことが多いため、導出に興味のある方はインターネットで調べてください。) 実装は 2 次の場合と同様に簡単に行えるためよく使われます。y の値を更新するステップとして式 (11) から式 (15) を順番にプログラムの中に組み込むことによって実装できます。

3 二階常微分方程式

続いて二階常微分方程式を考えます。

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right). \tag{17}$$

これも Euler 法や Runge-Kutta 法を用いて解くことができます。二階常微分方程式は連立一階常微分方程式の形に変換することができます。$dy/dx = z$ とおくと、式 (17) は

$$\frac{dy}{dx} = z, \tag{18}$$

$$\frac{dz}{dx} = f(x, y, z), \tag{19}$$

となります。これれは y および z の x に関する一階微分のみが含まれている連立一階微分方程式です。

それではこれを 4 次の Runge-Kutta 法で解くアルゴリズムを考えてみます。ある $x = x_n$ での $y = y_n, z = z_n$ の値が既知であるとします。これらをもとに $x = x_{n+1} = x_n + h$ での y_{n+1} と z_{n+1} の値を計算します。4 次の Runge-Kutta 法では

$$k_1 = hz_n, \qquad l_1 = hf(x_n, y_n, z_n), \tag{20}$$

$$k_2 = h\left(z_n + \frac{l_1}{2}\right), \qquad l_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}, z_n + \frac{l_1}{2}\right), \tag{21}$$

$$k_3 = h\left(z_n + \frac{l_2}{2}\right), \qquad l_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}, z_n + \frac{l_2}{2}\right), \tag{22}$$

$$k_4 = h\left(z_n + l_3\right), \qquad l_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3, z_n + l_3), \tag{23}$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \qquad z_{n+1} = z_n + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4), \tag{24}$$

と書けます。例えば k_2 の計算には l_1 が必要、l_2 の計算には k_1 と l_1 が必要、という構造になっていますので上から一行ずつ順番に実行することで y_{n+1} と z_{n+1} を計算することができます。このように連立微分方程式の場合でも Runge-Kutta 法の適用が可能です。また、二階のみならず高階の常微分方程式は同様にして新しい変数を導入することにより連立一階微分方程式の形に変換して解くことができます。

4 演習問題

第 10 回分の演習問題のサンプルプログラムは Fortran, C 言語それぞれ

```
$ wget https://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/~hinohara/compphys2-20/src/fortran10.tgz
$ wget https://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/~hinohara/compphys2-20/src/c10.tgz
```

とすることでダウンロードできます。解凍は

```
$ tar zxvf fortran10.tgz
$ tar zxvf c10.tgz
```

微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = \cos x, \quad y(0) = 0$$

について

(27)　ステップサイズ $h = 0.1$ として Euler 法で解を求めよ。$x > 0$ のみでよい。

(28)　$h = 0.1$ として 4 次の Runge-Kutta 法で解を求めよ。$x > 0$ のみでよい。

速度に比例する空気抵抗がある場合の質点 m の鉛直方向の運動方程式

$$m\ddot{z} = -mg - \kappa\dot{z}$$

を考える。これは連立一階微分方程式

$$\begin{aligned}\dot{z} &= v, \\ \dot{v} &= -g - \frac{\kappa}{m}v\end{aligned}$$

とみなすことができる。

(29)　$g = 9.8$, $\kappa/m = 0.5$, $z(t = 0) = 0.0$, $v(t = 0) = 100$ として $z(t)$ および $v(t)$ を図示せよ。