1 常微分方程式

1.1 初期値問題を解く

初期値問題

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases} \quad (1)$$

を数値的に解く事を考える。勿論関数は数値ではないので完全に記述する事は不可能である。(例えば $[0, 1]$ 区間上の関数を表そうとすれば (非可算) 無限個の数値が必要) この場合, 「数値的に解く」とは, 微小なきざみ (増分) h を決定しておき, (1) の解 $\mathbf{u}$ の各時刻 $t_n := t_0 + nh$ 上の値 $\mathbf{u}(t_n)$ を求めようとする事である。

実際は必ず誤差が生じる為, $\mathbf{u}(t_n)$ の近似値 $\mathbf{u}_n$ を求める事になる。

1.2 一段法

初期値問題においては時刻 $\mathbf{u}(t_0)$ の値が既知であるので, 一般に過去の値 $\mathbf{u}(t_0), \mathbf{u}(t_1), \dots, \mathbf{u}(t_n)$ から未来の値 $\mathbf{u}(t_{n+1})$ (の近似値) を求める方法を決めれば, 逐次計算で数値解 $(\mathbf{u}_n)_n$ を求める事ができる。

特に直前の値 $\mathbf{u}_n$ のみを用いて $\mathbf{u}_{n+1}$ の値を求める方法を一段法と言う。 $\mathbf{u}$ を初期値問題 (1) の解とする。

$$\mathbf{u}(t_{n+1}) = \mathbf{u}(t_n + h) = \mathbf{u}(t_n) + \{\mathbf{u}(t_n + h) - \mathbf{u}(t_n)\}$$

なる事に注意し, 任意の t で

$$\tilde{\mathbf{F}}(t, \mathbf{u}(t); h) = \frac{1}{h}(\mathbf{u}(t+h) - \mathbf{u}(t))$$

を満たす関数 $\tilde{\mathbf{F}}(\cdot, \cdot; h) : \mathbb{R}^{1+d} \rightarrow \mathbb{R}^d$ を考える。この様な $\tilde{\mathbf{F}}$ が取れれば

$$\mathbf{u}(t_{n+1}) = \mathbf{u}(t_n) + h\tilde{\mathbf{F}}(t_n, \mathbf{u}(t_n); h) \quad (2)$$

となる。

実際は $\tilde{\mathbf{F}}$ は未知であるので, 式 (2) の $\tilde{\mathbf{F}}$ を近似関数 $\mathbf{F}$ で置き換えた漸化式

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + h\mathbf{F}(t_n, \mathbf{u}_n; h) \quad (3)$$

によって近似解 $(\mathbf{u}_n)_n$ を求める。式 (3) を差分方程式と言い, $\mathbf{F}$ を勾配関数と言う。 $\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0$ から式 (3) を使って逐次計算する事により $(\mathbf{u}(t_n))_n$ の近似値 $(\mathbf{u}_n)_n$ を求める事を一段法と言う。

一段法により求められた $\mathbf{u}_n$ が、真の解 $\mathbf{u}$ の時刻 t_n での値 $\mathbf{u}(t_n)$ を近似するためには、勾配関数 $\mathbf{F}$ が曲線 $(t, \mathbf{u}(t))$ 上で $\tilde{\mathbf{F}}$ を近似しており、かつ、曲線 $(t, \mathbf{u}(t))$ の付近で滑らか¹である事が必要である。

1.3 オイラー法

$\tilde{\mathbf{F}}(\cdot, \cdot; h)$ の近時間関数として最も簡単なものは $\mathbf{f}$ である。

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n)$$

よって $\mathbf{u}(t_n)$ の近似値を求める方法、即ち、 $\mathbf{f}$ を勾配関数として採用した一段法をオイラー法と言う。

例 1 (ばねの運動). $\frac{d\mathbf{u}}{dt}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t))$, $\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0$ が次で与えられている;

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = u_2 \\ \frac{du_2}{dt} = -\frac{k}{m}u_1 \end{cases}, \quad \begin{cases} u_1(t_0) = a \\ u_2(t_0) = 0 \end{cases}$$

(u_1 が質点の位置, u_2 が速度を表している) よってオイラー法による差分方程式 $\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n)$ は

$$\begin{aligned} u_1^{(n+1)} &= u_1^{(n)} + hu_2^{(n)} \\ u_2^{(n+1)} &= u_2^{(n)} - h\frac{k}{m}u_1^{(n)} \end{aligned}$$

となる。下に、 $a = 1$, $k/m = 1$ の方程式の、きざみ $h = 0.05$ とした時の時刻 $t_0 = 0$ から 5 までのオイラー法による数値解を示す。

初期値問題 (1) の $\mathbf{f}$ が解の存在の十分条件であるリプシッツ条件を満たしていればオイラー法の勾配関数も自明にリプシッツ条件を満たす。勾配関数のもう一つの条件である $(t, \mathbf{u}(t))$ 上での $\tilde{\mathbf{F}}$ の近似は次の様に与えられる;

命題 1. 真の解 $\mathbf{u}$ が連続で $\mathbf{f}$ が C^1 -級ならば在る定数 $C > 0$ が存在して

$$\sup_{t_0 \leq t \leq T-h} \|\tilde{\mathbf{F}}(t, \mathbf{u}(t); h) - \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t))\| \leq hC$$

Proof. $\mathbf{u}$ の t を中心とした 1 次のテイラー展開により

$$\mathbf{u}(t+h) = \mathbf{u}(t) + h\frac{d\mathbf{u}}{dt}(t) + \frac{h^2}{2}\frac{d^2\mathbf{u}}{dt^2}(t+\theta h)$$

¹リプシッツ連続は、連続と C^1 -級の間程度の滑らかさを表していると言える。具体的に、コンパクト集合上の関数 f について次が成り立つ:

$$C^1\text{-級} \Rightarrow \text{リプシッツ連続} \Rightarrow \text{連続}$$

図 1: ばねの運動方程式の数値解

なる $0 < \theta < 1$ が存在する. $\frac{d\mathbf{u}}{dt}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t))$ を代入すれば.

$$\mathbf{u}(t+h) = \mathbf{u}(t) + h\mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t)) + \frac{h}{2} \frac{d\mathbf{f}}{dt}(t+\theta h, \mathbf{u}(t+\theta h))$$

よって

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{F}}(t, \mathbf{u}(t); h) - \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t)) &= \frac{1}{h}(\mathbf{u}(t+h) - \mathbf{u}(t)) - \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t)) \\ &= \frac{h}{2} \frac{d\mathbf{f}}{dt}(t+\theta h, \mathbf{u}(t+\theta h))\end{aligned}$$

特に

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{f}}{dt}(\cdot, \mathbf{u}(\cdot)) &= \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t}(\cdot, \mathbf{u}(\cdot)) + \left(\frac{d\mathbf{u}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right)\mathbf{f}(\cdot, \mathbf{u}(\cdot)) \\ &= \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t}(\cdot, \mathbf{u}(\cdot)) + (\mathbf{f} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}})\mathbf{f}(\cdot, \mathbf{u}(\cdot))\end{aligned}$$

であるが, 滑らかさの仮定より右辺に出てくる関数は全て連続なので $\frac{d\mathbf{f}}{dt}(\cdot, \mathbf{u}(\cdot))$ は閉区間 $[t_0, T]$ で最大値を持つ, それを $2C$ とすれば良い. $\square$

1.4 テイラー展開法

オイラー法におけるテイラー展開の次数を上げればより良い近似が得られる. 次の命題で与えられる $\mathbf{F}$ を勾配関数として使う一段法を p 次のテイラー展開法と言う. (オイラー法は 1 次のテイラー展開法)

命題 2. 真の解 $\mathbf{u}$ が連続で $\mathbf{f}$ が C^p -級とする. $\mathbf{f}^{(0)} := \mathbf{f}$ として

$$\begin{aligned}\mathbf{F}(t, \mathbf{v}; h) &:= \mathbf{f}(t, \mathbf{v}) + \cdots + \frac{h^{p-1}}{p!} \mathbf{f}^{(p-1)}(t, \mathbf{v}) \\ \mathbf{f}^{(k+1)}(t, \mathbf{y}) &:= \frac{\partial \mathbf{f}^{(k)}}{\partial t}(t, \mathbf{y}) + (\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}) \mathbf{f}^{(k)}(t, \mathbf{y})\end{aligned}$$

とおけば, $\mathbf{F}$ は $\tilde{\mathbf{F}}$ の近似で

$$\sup_{t_0 \leq t \leq T-h} \|\tilde{\mathbf{F}}(t, \mathbf{u}(t); h) - \mathbf{F}(t, \mathbf{u}(t); h)\| = Ch^p$$

Proof. まず

$$\frac{d^k \mathbf{f}}{dt^k}(t, \mathbf{u}(t)) = \mathbf{f}^{(k)}(t, \mathbf{u}(t)) \quad (4)$$

なることを k についての帰納法で示す. k の時を仮定すれば,

$$\begin{aligned}\frac{d^{k+1} \mathbf{f}}{dt^{k+1}}(t, \mathbf{u}(t)) &= \frac{d}{dt} \frac{d^k \mathbf{f}}{dt^k}(t, \mathbf{u}(t)) = \frac{d}{dt} \mathbf{f}^{(k)}(t, \mathbf{u}(t)) \\ &= \frac{\partial \mathbf{f}^{(k)}}{\partial t}(t, \mathbf{u}(t)) + \left(\frac{d\mathbf{u}}{dt}(t) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \mathbf{f}^{(k)}(t, \mathbf{u}(t)) \\ &= \frac{\partial \mathbf{f}^{(k)}}{\partial t}(t, \mathbf{u}(t)) + (\mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t)) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}) \mathbf{f}^{(k)}(t, \mathbf{u}(t)) \\ &= \mathbf{f}^{(k+1)}(t, \mathbf{u}(t))\end{aligned}$$

$k = 0$ のとき明らかであるから, 任意の $0 \leq k \leq p$ について (4) が成り立つ. $\mathbf{u}$ の t を中心とした $p+1$ 次のテイラー展開により

$$\mathbf{u}(t+h) = \mathbf{u}(t) + h \frac{d\mathbf{u}}{dt}(t) + \cdots + \frac{h^p}{p!} \frac{d^p \mathbf{u}}{dt^p}(t) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!} \frac{d^{p+1} \mathbf{u}}{dt^{p+1}}(t + \theta h)$$

なる $0 < \theta < 1$ が存在する. (1) と (4) により

$$\frac{d^{k+1} \mathbf{u}}{dt^{k+1}} = \frac{d^k}{dt^k} (\mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t))) = \mathbf{f}^{(k)}(t, \mathbf{u}(t))$$

なる事に注意すれば

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{F}}(t, \mathbf{u}(t); h) &= \frac{1}{h} (\mathbf{u}(t+h) - \mathbf{u}(t)) \\ &= \frac{d\mathbf{u}}{dt}(t) + \cdots + \frac{h^{p-1}}{p!} \frac{d^p \mathbf{u}}{dt^p}(t) + \frac{h^p}{(p+1)!} \frac{d^{p+1} \mathbf{u}}{dt^{p+1}}(t + \theta h) \\ &= \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t)) + \cdots + \frac{h^{p-1}}{p!} \mathbf{f}^{(p-1)}(t, \mathbf{u}(t)) + \frac{h^p}{(p+1)!} \mathbf{f}^{(p)}(t + \theta h, \mathbf{u}(t + \theta h)) \\ &= \mathbf{F}(t, \mathbf{u}(t); h) + \frac{h^p}{(p+1)!} \mathbf{f}^{(p)}(t + \theta h, \mathbf{u}(t + \theta h))\end{aligned}$$

オイラー法の時と同様に $\mathbf{f}$ の偏導関数と $\mathbf{u}$ の連続性より $\mathbf{f}^{(p)}(t + \theta h, \mathbf{u}(t + \theta h))$ の有界性が得られる. $\square$

$\mathbf{f}$ に C^p -級を仮定すれば, 各偏導関数のリプシッツ連続性が得られるので勾配関数 $\mathbf{F}$ もリプシッツ連続である事が言える.

1.5 一段法の誤差

一段法は初期値から順次計算していく方法である為、時刻が積み重なるに連れて、誤差は累積されて増大する。時刻 t_n における誤差を $\mathbf{e}_n$ とすると、i.e.,

$$\mathbf{e}_n := \mathbf{u}(t_n) - \mathbf{u}_n$$

と置けば誤差は次の様に n に依存して増大する。

命題 3 (一段法の誤差). $t_0 \leq t \leq T$ において曲線 $(t, \mathbf{u}(t))$ 上で $\tilde{\mathbf{F}}$ の近似:

$$\sup_{t_0 \leq t \leq T} \|\tilde{\mathbf{F}}(t, \mathbf{u}(t); h) - \mathbf{F}(t, \mathbf{u}(t); h)\| \leq \delta$$

であり、かつ $\mathbf{F}(t, \cdot; h)$ が一様にリプシッツ連続、即ち、ある $L > 0$ が存在して、

$$\sup_{t_0 \leq t \leq T} \|\mathbf{F}(t, \mathbf{x}; h) - \mathbf{F}(t, \mathbf{y}; h)\| \leq L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

を満たすとすれば、勾配関数 $\mathbf{F}$ を用いた一段法による t_{n+1} の誤差 $\mathbf{e}_{n+1}$ は次で評価できる:

$$\|\mathbf{e}_{n+1}\| \leq (1 + hL)\|\mathbf{e}_n\| + h\delta$$

note. h を小さくすれば一回の誤差あたりの誤差は小さくなる。しかし、ある時刻 t における近似は必ずしもよくなるとは限らない。特に $\|\mathbf{e}_0\| = 0$ より、

$$\|\mathbf{e}_n\| + \frac{\delta}{L} \leq (1 + hL)(\|\mathbf{e}_{n-1}\| + \frac{\delta}{L}) \leq (1 + hL)^n \frac{\delta}{L}$$

であるから $\|\mathbf{e}_n\| \leq ((1 + hL)^n - 1) \frac{\delta}{L}$ となり、 $n \doteq (t - t_0)/h$ であるから、 $(1 + hL)^{(t-t_0)/h} \doteq (1 + hL)^n$ として

$$\lim_{h \rightarrow 0} (1 + hL)^{(t-t_0)/h} = \exp(L(t - t_0)).$$

よって $h \rightarrow 0$ の時、時刻 t の誤差は勾配関数の近似のオーダー $\delta \rightarrow 0$ で減少する様に見える。しかし実際には、各段に計算誤差 ε がはいて、 $\|\mathbf{e}_{n+1}\| \leq (1 + hL)\|\mathbf{e}_n\| + h\delta + \varepsilon$ である為

$$\|\mathbf{e}_n\| \leq ((1 + hL)^n - 1) \left(\frac{\delta}{L} + \frac{\varepsilon}{hL} \right)$$

となり、項 $\frac{\varepsilon}{hL}$ が存在する為刻み幅を小さくしすぎると返って誤差が増える事がある。

Proof. 漸化式により

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{n+1} &= \mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}_{n+1} \\ &= (\mathbf{u}(t_n) + h\tilde{\mathbf{F}}(t_n, \mathbf{u}(t_n); h)) - (\mathbf{u}_n + h\mathbf{F}(t_n, \mathbf{u}_n; h)) \\ &= \mathbf{e}_n + h(\tilde{\mathbf{F}}(t_n, \mathbf{u}(t_n); h) - \mathbf{F}(t_n, \mathbf{u}_n; h)) \end{aligned}$$

一方, 仮定より

$$\begin{aligned} & \|\tilde{\mathbf{F}}(t_n, \mathbf{u}(t_n); h) - \mathbf{F}(t_n, \mathbf{u}_n; h)\| \\ & \leq \|\tilde{\mathbf{F}}(t_n, \mathbf{u}(t_n); h) - \mathbf{F}(t_n, \mathbf{u}(t_n); h)\| + \|\mathbf{F}(t_n, \mathbf{u}(t_n); h) - \mathbf{F}(t_n, \mathbf{u}_n; h)\| \\ & \leq \delta + L\|\mathbf{u}(t_n) - \mathbf{u}_n\| \\ & = \delta + L\|\mathbf{e}_n\| \end{aligned}$$

であるので

$$\begin{aligned} \|\mathbf{e}_{n+1}\| & = \|\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}_{n+1}\| \\ & \leq \|\mathbf{e}_n\| + h\|\tilde{\mathbf{F}}(t_n, \mathbf{u}(t_n); h) - \mathbf{F}(t_n, \mathbf{u}_n; h)\| \\ & \leq (1 + hL)\|\mathbf{e}_n\| + h\delta \end{aligned}$$

□

課題 1 (質点の自由落下). 運動方程式

$$mg = m \frac{d^2 x}{dt^2}, \quad x(0) = 0, \quad \frac{dx}{dt}(0) = -1$$

に従う質点の位置と速度を次の手順に従って数値的に求めよ.(但し $g = 1$ とする.)

1. $u_1 := x, u_2 := \frac{dx}{dt}$ として初期値問題に帰着し具体的に書け.
2. きざみ幅を 0.5 としたオイラー法の差分方程式を具体的に書け.
3. オイラー法により 5 秒後まで (10 ステップ) の数値解を順次求めよ.
4. 上の結果を使って質点の時刻に対する位置と速度のグラフを書け.
5. 考察せよ.

3, 4 は電卓或いは計算機を用いても良い. 計算機を用いた場合はプログラムも提出. 余力があれば空気中の落下

$$mg = m \frac{d^2 x}{dt^2} - k \frac{dx}{dt}, \quad x(0) = 0, \quad \frac{dx}{dt}(0) = 0$$

についてもやってみよう.($m = k = 1$ ぐらいにすると計算し易いだろう)