1 常微分方程式

1.1 初期値問題を解く

初期値問題

$$\begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{u}}{dt}(t) = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t)) \\ \boldsymbol{u}(t_0) = \boldsymbol{u}^{(0)} \end{cases} \tag{1}$$

を数値的に解く事を考える. 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 $\boldsymbol{u}$ の各時刻 $t_n := t_0 + nh$ 上の値 $\boldsymbol{u}(t_n)$ を求めようとする事である.

実際は必ず誤差が生じる為, $\boldsymbol{u}(t_n)$ の近似値 $\boldsymbol{v}^{(n)}$ 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 t_0 の値 $\boldsymbol{u}^{(0)}$ が既知であるので, 一般に過去の値 $\boldsymbol{u}(t_0), \boldsymbol{u}(t_1), \ldots, \boldsymbol{u}(t_n)$ から未来の値 $\boldsymbol{u}(t_{n+1})$(の近似値) を求める方法を決めれば, 逐次計算で数値解 $(\boldsymbol{v}^{(n)})_n$ を求める事ができる.

特に直前の値 $\boldsymbol{v}^{(n)}$ のみを用いて $\boldsymbol{v}^{(n+1)}$ の値を求める方法を, 方法論的な分類で, 一段法と言う. $\boldsymbol{u}$ 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

$$\widetilde{\boldsymbol{F}}(t, \boldsymbol{u}(t); h) = \frac{1}{h}(\boldsymbol{u}(t + h) - \boldsymbol{u}(t)) \tag{2}$$

を満たす関数 $\widetilde{\boldsymbol{F}}(\,\cdot\,, \,\cdot\,; h) : \mathbb{R}^{1+d} \to \mathbb{R}^d$ が取れれば

$$\boldsymbol{u}(t_{n+1}) = \boldsymbol{u}(t_n) + h\widetilde{\boldsymbol{F}}(t_n, \boldsymbol{u}(t_n); h)$$

となる.

実際は $\widetilde{\boldsymbol{F}}$ は未知, 或いは計算不能であるので, 近似的に式 (2) を満たす, 即ち

$$\boldsymbol{F}(t, \boldsymbol{u}(t); h) \fallingdotseq \frac{1}{h}(\boldsymbol{u}(t + h) - \boldsymbol{u}(t))$$

なる関数 $\boldsymbol{F}$ で定める漸化式

$$\boldsymbol{v}^{(n+1)} = \boldsymbol{v}^{(n)} + h\boldsymbol{F}(t_n, \boldsymbol{v}^{(n)}; h) \tag{3}$$

によって近似解 $(\boldsymbol{v}_n)_n$ を求める. 式 (3) を**差分方程式**と言い, $\boldsymbol{F}$ を**勾配関数**と言う. $\boldsymbol{u}(t_0) = \boldsymbol{v}^{(0)}$ から式 (3) を使って逐次計算する事により $(\boldsymbol{u}(t_n))_n$ の近似値 $(\boldsymbol{v}^{(n)})_n$ を求める事を**一段法**と言う.

一段法により求められた $\boldsymbol{v}_n$ が, 真の解 $\boldsymbol{u}$ の時刻 t_n での値 $\boldsymbol{u}(t_n)$ を近似するためには, 勾配関数 $\boldsymbol{F}$ が曲線 $(t, \boldsymbol{u}(t))$ 上で $\widetilde{\boldsymbol{F}}$ を近似しており, かつ, 曲線 $(t, \boldsymbol{u}(t))$ 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

$\boldsymbol{f}$ 自身が $\widetilde{\boldsymbol{F}}(\,\cdot\,, \,\cdot\,; h)$ の近似関数として最も簡単なものの一つである.

$$\boldsymbol{v}^{(n+1)} = \boldsymbol{v}^{(n)} + h\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{v}^{(n)})$$

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

[1] リプシッツ連続は, 連続と C^1-級の中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:

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

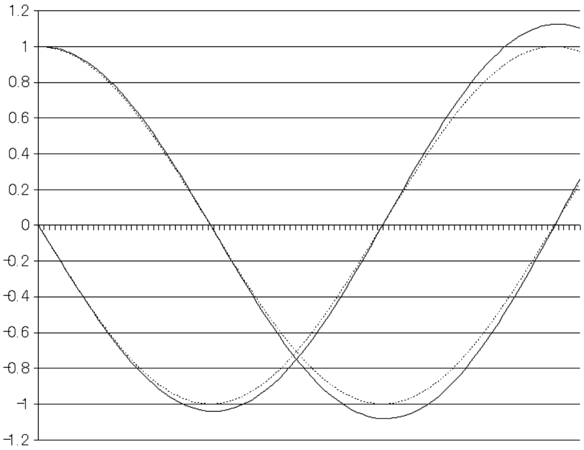
例 1 (ばねの運動)**.** $\dfrac{d\boldsymbol{u}}{dt}(t) = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t))$, $\boldsymbol{u}(t_0) = \boldsymbol{u}_0$ が次で与えられている;

$$\begin{cases} \dfrac{du_1}{dt}(t) = u_2(t) \\ \dfrac{du_2}{dt}(t) = -\dfrac{k}{m}u_1(t) \end{cases}, \qquad \begin{cases} u_1(t_0) = a \\ u_2(t_0) = 0 \end{cases}.$$

(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 $\boldsymbol{v}^{(n)} = \boldsymbol{v}^{(n)} + h\boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{v}^{(n)})$ は成分表示すれば

$$\begin{aligned} v_1^{(n+1)} &= v_1^{(n)} + hv_2^{(n)} \\ v_2^{(n+1)} &= v_2^{(n)} - h\frac{k}{m}v_1^{(n)} \end{aligned}$$

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 $(t, \boldsymbol{u}(t))$ 上での $\widetilde{\boldsymbol{F}}$ の近似は次の様に与えられる;

命題 1. 初期値問題における $\boldsymbol{f}$ が C^1-級 (真の解 $\boldsymbol{u}$ が C^2-級) ならば在る定数 $C > 0$ が存在して

$$\sup_{t_0 \le t \le T-h} \left\| \frac{1}{h}\left(\boldsymbol{u}(t+h) - \boldsymbol{u}(t)\right) - \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t)) \right\| \le hC$$

Proof. $\boldsymbol{u}$ の C^2-級を仮定して始める. $\boldsymbol{u}$ の t を中心とした 1 次のテイラー展開により

$$u_i(t+h) = u_i(t) + h\frac{du_i}{dt}(t) + \frac{h^2}{2}\frac{d^2u_i}{dt^2}(t+\theta_i h)$$

なる $0 < \theta_i < 1$ が存在する. ここで $\boldsymbol{u}$ が解である事 (即ち $\frac{du_i}{dt} = f_i(t, \boldsymbol{u})$) を使えば

$$\frac{1}{h}(u_i(t+h) - u_i(t)) - f_i(t, \boldsymbol{u}(t)) \quad = \quad \frac{h}{2}\frac{d^2u_i}{dt^2}(t+\theta_i h)$$

$\dfrac{d^2u_i}{dt^2}$ は連続なので有界閉区間 $[t_0, T]$ で最大値を持つ, $2C = \sqrt{\sum_i \sup(\frac{d^2u_i}{dt^2})^2}$ とすれば良い.

最後に $\boldsymbol{u}$ の C^2-級が $\boldsymbol{f}$ の C^1-級から導かれることを示しておく. 解である事より一階導関数 $\dfrac{d\boldsymbol{u}}{dt} = \boldsymbol{f}(\,\cdot\,, \boldsymbol{u}(\,\cdot\,))$ の存在は明らか, 二階微分は

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

であり, $\boldsymbol{f}$ の滑らかさの仮定より右辺に出てくる関数は全て連続であるので連続. □

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 $\boldsymbol{F}$ 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. $\boldsymbol{f}$ が C^p-級とする. $\boldsymbol{f}^{[1]} := \boldsymbol{f}$ として

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

とおけば, $\boldsymbol{F}$ は次を満たす

$$\sup_{t_0 \le t \le T-h} \left\| \frac{1}{h}(\boldsymbol{u}(t+h) - \boldsymbol{u}(t)) - \boldsymbol{F}(t, \boldsymbol{u}(t); h) \right\| = Ch^p$$

Proof. まず

$$\frac{d^k \boldsymbol{u}}{dt^k} = \boldsymbol{f}^{[k]}(t, \boldsymbol{u}(t)) \tag{4}$$

と $\boldsymbol{f}^{[p]}$ が C^1-級である事を仮定して進める. この時, 前と同種の議論によって, $\boldsymbol{u}$ は C^{p+1}-級である. u_i の t を中心とした $p+1$ 次のテイラー展開により

$$u_i(t+h) = u_i(t) + h\frac{du_i}{dt}(t) + \cdots + \frac{h^p}{p!}\frac{d^p u_i}{dt^p}(t) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\frac{d^{p+1}u_i}{dt^{p+1}}(t + \theta_i h)$$

なる $0 < \theta_i < 1$ が存在する. $\boldsymbol{F}$ の定義と (4) により

$$\frac{1}{h}(u_i(t+h) - u_i(t)) - F_i(t, \boldsymbol{u}(t); h) \quad = \quad \frac{h^p}{(p+1)!}\frac{d^{p+1}u_i}{dt^{p+1}}(t + \theta_i h)$$

よって $C := \dfrac{1}{(p+1)!}\sqrt{\displaystyle\sum_j \sup_{t_0 \le t \le T} \big(\frac{d^{p+1}u_i}{dt^{p+1}}(t)\big)^2}$ とおけば良い.

最後に (4) を k についての帰納法で示す. k の時を仮定すれば,

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

$k = 0$ のとき明らかであるから, 任意の $0 \le k \le p$ について (4) が成り立つ. □

$\boldsymbol{f}$ 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 $\boldsymbol{F}$ 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, 刻みの回数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 $\boldsymbol{e}_n$, i.e.,

$$\boldsymbol{e}_n := \boldsymbol{u}(t_n) - \boldsymbol{v}^{(n)}$$

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)**.** 時間 $t_0 \le t \le T$ において曲線 $(t, \boldsymbol{u}(t))$ 上で $\boldsymbol{F}$ が近似的に式 (2) を満たす, 即ち

$$\sup_{t_0 \le t \le T} \left\| \frac{1}{h}(\boldsymbol{u}(t+h) - \boldsymbol{u}(t)) - \boldsymbol{F}(t, \boldsymbol{u}(t); h) \right\| \le \delta(h)$$

を満たしており, かつ $\boldsymbol{F}(t, \cdot; h)$ が一様にリプシッツ連続, 即ち, ある $L > 0$ が存在して,

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

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

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

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, ある定まった時刻 t における近似は, その時刻に辿りつく為の刻みの回数が増えるため, 必ずしも小さくなるとは限らない.

特に $\|\boldsymbol{e}_0\| = 0$ なので,

$$\|\boldsymbol{e}_n\| + \frac{\delta(h)}{L} \leq (1+hL)(\|\boldsymbol{e}_{n-1}\| + \frac{\delta(h)}{L}) \leq \cdots \leq (1+hL)^n(\|\boldsymbol{e}_0\| + \frac{\delta(h)}{L}) = (1+hL)^n \frac{\delta(h)}{L}$$

であるから $\|\boldsymbol{e}_n\| \leq ((1+hL)^n - 1)\frac{\delta(h)}{L}$ となり, 時刻 t までの段数は刻み幅 h に反比例する[2]から, $(1+hL)^{(t-t_0)/h} \fallingdotseq (1+hL)^n$ として

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

であるから $((1+hL)^n - 1)\frac{1}{L}$ の部分は h に依らない定数でおさえることができ, よって $h \to 0$ の時, 時刻 t の誤差は勾配関数の近似のオーダー $\delta(h)$ で減少する. h が十分少ならば

$$\|e_{\lfloor \frac{t}{h} \rfloor}\| \leq \frac{e^{L(t-t_0)} - 1}{L}\delta(h).$$

しかし実際には, 各段での計算に計算誤差 ε がはいって, $\|\boldsymbol{e}_{n+1}\| \leq (1+hL)\|\boldsymbol{e}_n\| + h\delta + \varepsilon$ である為

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

となり, 項 $\frac{\varepsilon}{hL}$ が存在する為に, 刻み幅を小さくしすぎるとかえって誤差が増える事がある.

Proof. 漸化式により

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

一方, 仮定より

$$\begin{aligned}
& \|\frac{1}{h}(\boldsymbol{u}(t_n+h) - \boldsymbol{u}(t_n)) - \boldsymbol{F}(t_n, \boldsymbol{v}^{(n)}; h)\| \\
\leq\ & \|\frac{1}{h}(\boldsymbol{u}(t_n+h) - \boldsymbol{u}(t_n)) - \boldsymbol{F}(t_n, \boldsymbol{u}(t_n); h)\| + \|\boldsymbol{F}(t_n, \boldsymbol{u}(t_n); h) - \boldsymbol{F}(t_n, \boldsymbol{v}^{(n)}; h)\| \\
\leq\ & \delta(h) + L\|\boldsymbol{u}(t_n) - \boldsymbol{v}^{(n)}\| \\
=\ & \delta(h) + L\|\boldsymbol{e}_n\|
\end{aligned}$$

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

□

[2] $t \fallingdotseq t_n$ となる n は $n \fallingdotseq (t-t_0)/h$ である