

常微分方程式の数値計算法

山本昌志*

2006年9月5日

概要

常微分方程式の数値計算法を学習する。学習する数値計算法は、オイラー法にはじまり、2次と4次のルンゲ・クッタ法である。

1 常微分方程式

1.1 常微分方程式のイメージ

微分方程式は、物理や工学の分野で問題を解く強力なツールばかりか、生物や経済などでも広く応用されている。自然科学や工学の問題を定量的に考察する場合、微分方程式ほど強力な道具はない。この微分方程式を使うためには、方程式を作ることと解くことが必要である。ここでは、微分方程式を解くこと、特に数値計算により非常に精度の良い近似値を求める方法を学習する。微分方程式には解析解が無いのが普通であるが、理工学上の諸問題では精度良く解の近似値を求めたい状況にしばしば遭遇する。このような時、数値計算の出番となる。数学に無い面白さがありますので、楽しんでください。

すでに学習したように、独立変数が二つ以上の多変数の関数の微分(偏微分)を含む微分方程式を偏微分方程式(partial differential equation)という。それに対して、一変数の関数の微分を含む方程式を常微分方程式(ordinary differential equation)という。ここでは、常微分方程式、特に1階の場合の解の近似値を求める方法を学習する。学習する方程式の形は

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

である。1階だといってバカにはできない。後で述べることになるが、これが数値計算できると、どんな高階の常微分方程式も同じ方法で計算ができるのである。数学だと1解が解ければ高階の微分方程式が解けるわけではないが、数値計算では可能なのである。

ここでの主題は、この微分方程式を満たす $y(x)$ を求めることになる。計算を進める前に、この方程式が何を表すか考えることにする。式(1)の左辺は、解 $y(x)$ の導関数となっている。即ち、解の曲線の接線を表す。導関数の値が座標 (x, y) の関数になっているので、座標が決まれば、その場の曲線の傾きが決まることになる。

*国立秋田工業高等専門学校 電気工学科

それでは、この常微分方程式のイメージをつかむことにする。それには、実際の微分方程式を考えるのが良いであろう。例えば、

$$\frac{dy}{dx} = \sin x \cos x - y \cos x \quad (2)$$

のような常微分方程式を考えることにする。いかにも難しげな微分方程式であるが、これには解析解がある。解析解はとりあえずおいておくことにして、この式の右辺を考える。先ほど述べたように、これは接線の傾きを表す。場所ごとに接線の傾きが決まっているので、それを xy 平面に図示することができる。式(2)の右辺の値である各座標の傾きを線の傾きで表すと、図1のようになる。この傾きを方向場と言う。方向場から、大体の解の様子がわかる。

この微分方程式の解析解は、

$$y = \sin x - 1 + c_1 e^{-\sin x} \quad (3)$$

である。1階の微分方程式なので、1個の未知数を含む。この未知数の値が異なる5本の曲線と、先ほどの方向場を重ねて書きすると、図2のようになる。微分方程式の解である曲線 $y(x)$ が方向場に沿うことが理解できるであろう。元の微分方程式が傾きを表すので、あたりまえのことである。

式(2)の微分方程式から、関数 $y(x)$ の値を得るにはもう一つ条件が必要である。通常この条件は、 $y(x_0) = y_0$ のように与えられる。これを初期値といい、初期値が与えられるものを初期値問題という。一方、2点以上の x で定める y の値が決まっているような問題を境界値問題という¹。ここでは、もっぱら初期値問題を解くことにする。

1.2 数値計算のイメージ

初期値問題を計算するルーチンの基礎的な考え方はどれも似通っており、次に述べるとおりである。まず、(1)式の微分方程式を極限の d の代わりに有限な Δ に置き換える。 Δ が小さければ、元の微分方程式の良い近似になるはずである。すると、式(1)の微分方程式は、

$$\Delta y = f(x, y) \Delta x \quad (4)$$

のように近似できる。これを用いて、 x_i から Δx 離れた y の値 y_{i+1} を計算する。

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y(x_i + \Delta x) \\ &= y_i + \Delta y \\ &= y_i + f(x_i, y_i) \Delta x \end{aligned} \quad (5)$$

この式と初期値 x_0, y_0 を用いると、次々に $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \dots$ が計算できる。

式(5)は、

- 次の y_{i+1} 値は、もとの y_i に、そこでの傾き $f(x_i, y_i)$ に x の増分 Δx を乗じたものを加えることにより求められる。

¹1階の微分方程式では初期値問題しかないが、2階以上になると初期値問題と境界値問題がある。

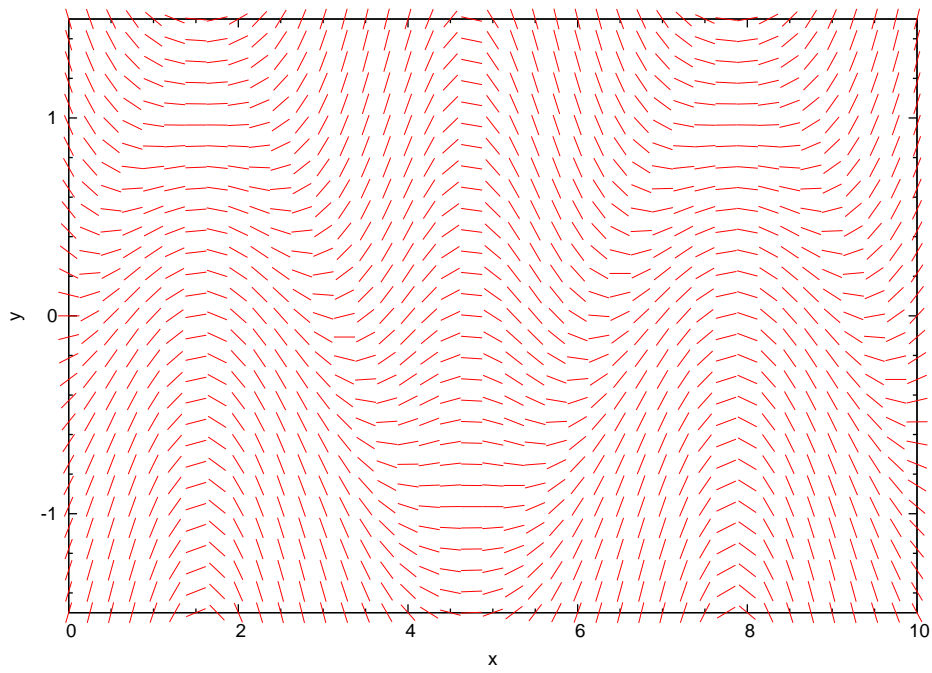


図 1: 微分方程式 $\frac{dy}{dx} = \sin x \cos x - y \cos x$ の方向場

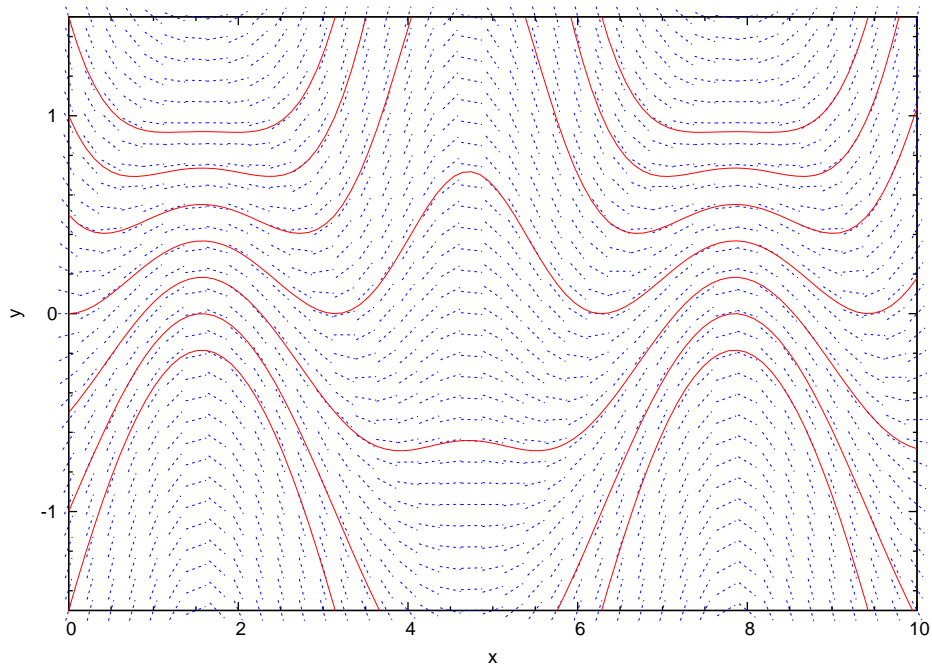


図 2: 方向場と解曲線

と言っているのである．イメージにすると，図3のようになる．この図からも分かるようにこの方法をそのまま適用した場合（オイラー法），精度がよくない．出発点のみの導関数を用いているため，終点付近では傾きが異なるからである．刻み巾 Δx を小さくすることにより解決できるが，その分，計算時間が必要になる．そのため， x_i と x_{i+1} の間で，出来るだけ精度よく，この間の導関数の平均を計算する工夫がいろいろ考えられている．これから，以降その方法を示すことになる．

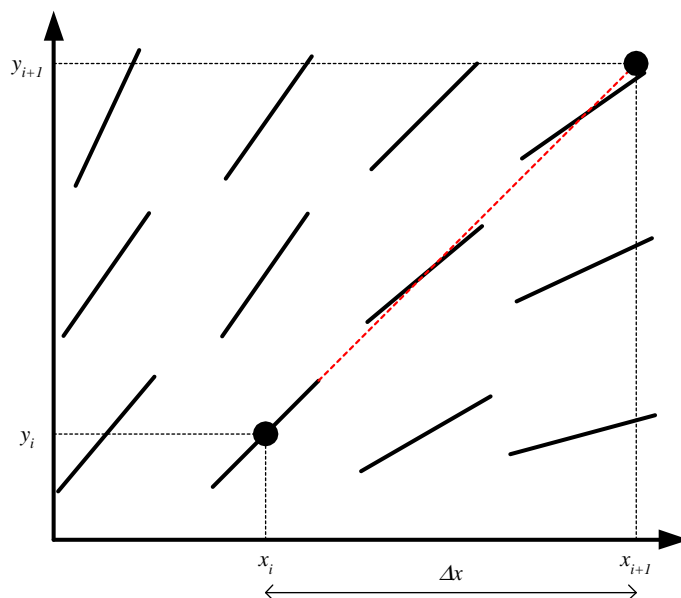


図 3: 方向場と微分方程式の解 (x_i, y_i) と (x_{i+1}, y_{i+1})

2 数値計算法

2.1 オイラー法

常微分方程式を数値計算で解く方法の中でもっとも単純ではあるが，最も精度の悪い方法である．よっぽどのが無い限り，この方法で微分方程式を計算してはならない．ただし，常微分方程式を数値計算することのイメージがつかみやすいので，学習する価値はある．

もう一度，初期条件を含めて数値計算により解くべき方程式を示す．

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \text{初期条件 } y(a) = b \quad (6)$$

この微分方程式の解を $y = y(x)$ とすると， x_i のまわりのテイラー展開は，

$$y_{i+1} = y(x_i + \Delta x) = y(x_i) + \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_i} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2y}{dx^2} \right|_{x=x_i} \Delta x^2 + \frac{1}{6} \left. \frac{d^3y}{dx^3} \right|_{x=x_i} \Delta x^3 + \dots \quad (7)$$

となる．この式の右辺第2項は，式(6)から計算できる．したがって，テイラー展開は，

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i) \Delta x + O(\Delta x^2) \quad (8)$$

と表すことができる。

オイラー法での数値計算では，計算の刻み幅 Δx は十分に小さいとして，

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)\Delta x \quad (9)$$

を計算する．式 (5) と全く同じである．このとき計算の精度は 1 次と言う²．

オイラー法をまとめると，以下に示すように微分方程式は差分方程式に近似できる．

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(a) = b \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x} = f(x_i, y_i) \\ x_{i+1} = x_i + \Delta x \\ x_0 = a \\ y_0 = b \end{cases} \quad (10)$$

これから，オイラー法での数値計算の漸化式

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)\Delta x \\ x_{i+1} = x_i + \Delta x \end{cases} \quad (11)$$

となる．初期値 (x_0, y_0) が決まれば， $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots$ が同じ手続きで，芋づる式に計算できるのである．この芋づる式がコンピューターの得意なところである．通常，初期値 (a, b) は問題で与えられる．

実際にプログラムを行うときは，for や while を用いて繰り返し計算を行う (芋づる式の部分)．そして，計算結果の x_i と y_i は，配列 $x[i]$ や $y[i]$ に格納する．

```
x[0]=a;
y[0]=b;
dx = きざみ幅の計算

for(計算終了条件){
  x[i+1]=x[i]+dx;
  y[i+1]=y[i]+f(x[i],y[i])*dx;
}
```

この方法の計算のイメージは，図 4 の通りである．明らかに，出発点の導関数のみ利用しているために精度が悪い．式も対称でないため，逆から計算すると元に戻らない．

²誤差項が $O(\Delta x^{n+1})$ のとき，方法は n 次の精度という慣わしです．要するに n 次まで正しいということである．

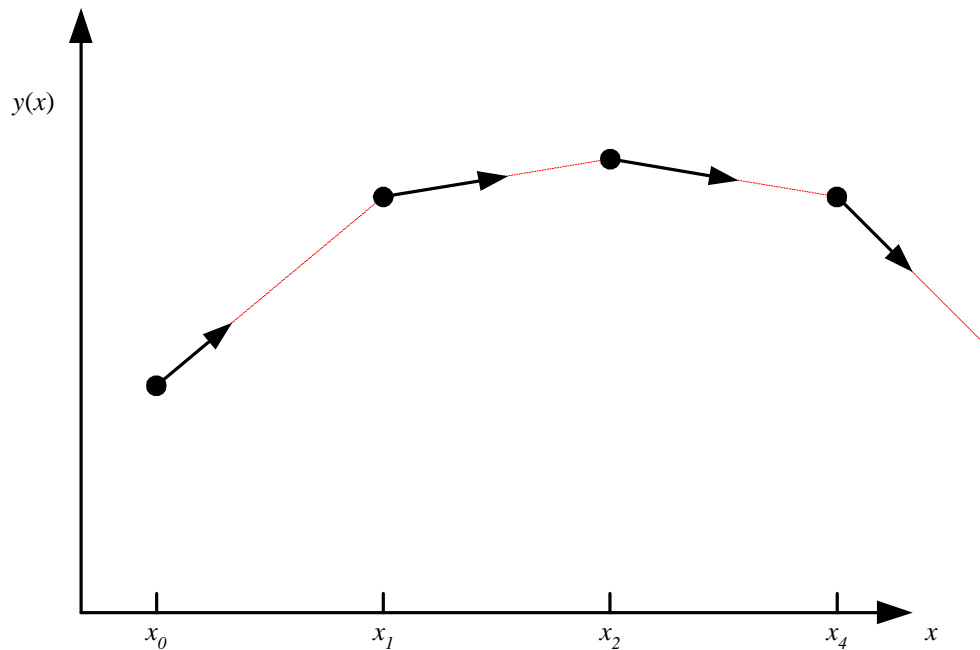


図 4: オイラー法 . ある区間での y の変化 Δy は , 計算の始めの点の傾きに区間の幅 Δx を乗じて , 求めている .

2.2 2 次のルンゲクッタ法

2 次のルンゲ・クッタと呼ばれる方法は , いろいろある . ここでは , 代表的なホイン法と中点法を示す . オイラー法は 1 次の精度であったが , これらは 2 次の精度になる .

2.2.1 ホイン法

漸化式 先に示したように , オイラー法の精度は 1 次です . それに対して , 2 次のルンゲ・クッタ法の精度は 2 次となる . 今まで刻み幅を Δx と記述してきたが , これからは少し式が長くなるので , それを h と表現するこのとにする .

2 次の精度ということは , テイラー展開より

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + y'(x_0)h + \frac{1}{2}y''(x_0)h^2 + O(h^3) \quad (12)$$

となっていることを意味する . 即ち , 計算アルゴリズムが ,

$$\begin{aligned} \Delta y &= y(x_0 + h) - y(x_0) \\ &= y'(x_0)h + \frac{1}{2}y''(x_0)h^2 + O(h^3) \end{aligned} \quad (13)$$

となっている必要がある .

式 (13) から分かるように, y の増分 Δy を計算するためには, 1 階微分と 2 階微分の 2 項を満たす式が必要である. そうすると少なくとも, 2 点の値が必要となる. 2 点として, 計算区間の両端の導関数の値を使うことにする. この導関数は問題として与えられているので, 計算は簡単である. そうして, 区間の増分を α, β のパラメーターとした和で表現する. 即ち,

$$\Delta y = h\{\alpha y'(x_0) + \beta y'(x_0 + h)\} \quad (14)$$

とあらわすのである. この α, β を上手に選ぶことにより, 式 (13) と同一にできる.

この式を x_0 の回りでテイラー展開すると

$$\Delta y = (\alpha + \beta)y'(x_0)h + \beta y''(x_0)h^2 + O(h^3) \quad (15)$$

となる. これを, 式 (13) と比べると, $\alpha + \beta = 1, \beta = 1/2$ になるので

$$\begin{cases} \alpha = \frac{1}{2} \\ \beta = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (16)$$

が得られる. これで, 必要な式は求まった. まとめると, 式 (6) を数値計算で近似解を求めるには

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + h, y_n + k_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{cases} \quad (17)$$

を使うことになる. 何のことはない, 出発点と終着点の平均の傾きを使っているのである. この式のイメージは, 図 5 の示すところである. オイラー法では, 区間の平均の傾きを出発点だけで決めていたが, ホイン法は両端で決めていたのである. これにより, 計算精度が向上するのである.

精度の検証 よく見ると, この式 (17) は, 本当に 2 次の精度なのか?, と疑問が湧く. α や β のパラメーターを計算したときの $x + h$ の導関数は $y'(x + h)$ を使った. 一方, 式 (17) では, $f(x_n + h, y_n + k_1)$ を使っている. ほんのちょっとした違いではあるが, 式 (17) の精度をきちんと調べる必要がある. 紙面の都合上, 精度の確認は 2 段階で行う. まず初めに, 少なくとも 2 次の精度があることを確認する. その後, 3 次の精度が無いことを示す.

まずは, 少なくとも 2 次の精度があることを確認である. 漸化式は,

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \\ &= y_n + \frac{h}{2} \{f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))\} \\ &= y_n + \frac{h}{2} \left\{ f(x_n, y_n) + f(x_n, y_n) + \frac{\partial f}{\partial x} h + \frac{\partial f}{\partial y} f(x_n, y_n) h + O(h^2) \right\} \\ &= y_n + f(x_n, y_n) h + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f(x_n, y_n) \right\} h^2 + O(h^3) \\ &= y_n + \frac{dy}{dx} h + \frac{1}{2} \frac{d^2 y}{dx^2} h^2 + O(h^3) \end{aligned} \quad (18)$$

一方，ホイン法の 3 次の精度を表すのは，式 (18) の右辺のテイラー展開の 2 次の項である．これは，

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))}{dh^2} &= \frac{d^2 f(x_n + h, y_n + Fh)}{dh^2} \\
 &= \frac{d}{dh} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} F \right) \\
 &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} F + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} F + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} F^2 \\
 &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} f + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} f^2 \\
 &= \left(\frac{\partial}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f
 \end{aligned} \tag{20}$$

となる．

明らかに，テイラー展開の 3 次の項である式 (19) とホイン法の 3 次の項の式 (20) は異なっている．したがって，ホイン法は 3 次の精度がないことが分かる．少なくとも 2 次の精度があって，3 次の精度がないことが示されわけで，ホイン法は 2 次の精度であることが証明されたことになる．

2.2.2 中点法

漸化式 これも，ホイン法と同じ 2 次の精度である．ホイン法は区間の両端の点の導関数を使ったが，中点法は出発点と中点で漸化式を作る．先ほど同様，2 点を使うので，2 次の精度にすることができる．ホイン法の式 (14) に対応するものは，

$$\Delta y = h \left\{ \alpha y'(x_0) + \beta y' \left(x_0 + \frac{h}{2} \right) \right\} \tag{21}$$

である．これを x_0 の回りでテイラー展開すると，

$$\Delta y = (\alpha + \beta) y'(x_0) h + \frac{\beta}{2} y''(x_0) h^2 + O(h^3) \tag{22}$$

となる．これを，式 (13) と比較すると，

$$\begin{cases} \alpha = 0 \\ \beta = 1 \end{cases} \tag{23}$$

となる必要がある．したがって，中点法の漸化式は，

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf \left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2} \right) \\ y_{n+1} = y_n + k_2 \end{cases} \tag{24}$$

となる．この公式のイメージを，図 6 に示しておく．

精度の検証 式 (18) と同じ手順でを用いることにより，中点法が 2 次の精度であることが証明できる．漸化式をテーラー展開すると，

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + k_2 \\
 &= y_n + hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{hf(x_n, y_n)}{2}) \\
 &= y_n + h \left\{ f(x_n, y_n) + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{h}{2} + \frac{\partial f}{\partial y} f(x_n, y_n) \frac{h}{2} + O(h^2) \right\} \\
 &= y_n + f(x_n, y_n)h + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f(x_n, y_n) \right\} h^2 + O(h^3) \\
 &= y_n + \frac{dy}{dx} h + \frac{1}{2} \frac{d^2y}{dx^2} h^2 + O(h^3)
 \end{aligned} \tag{25}$$

が導かれる．ホイン法の場合と同様，これは，式 (7) の 2 次の部分まで等しいので，少なくとも 2 次の精度があることが分かる．一方，3 次の精度がないことは，以下の通り明らかである．式 (20) と比べて，微小変位 h は， $\frac{1}{2}$ 異なるだけですので，計算結果は，

$$\frac{d^2f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{hf(x_n, y_n)}{2})}{dh^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f \tag{26}$$

と直ちに導くことができる．これは，式 (19) と異なりますので，3 次の精度がないことがはっきりしている．

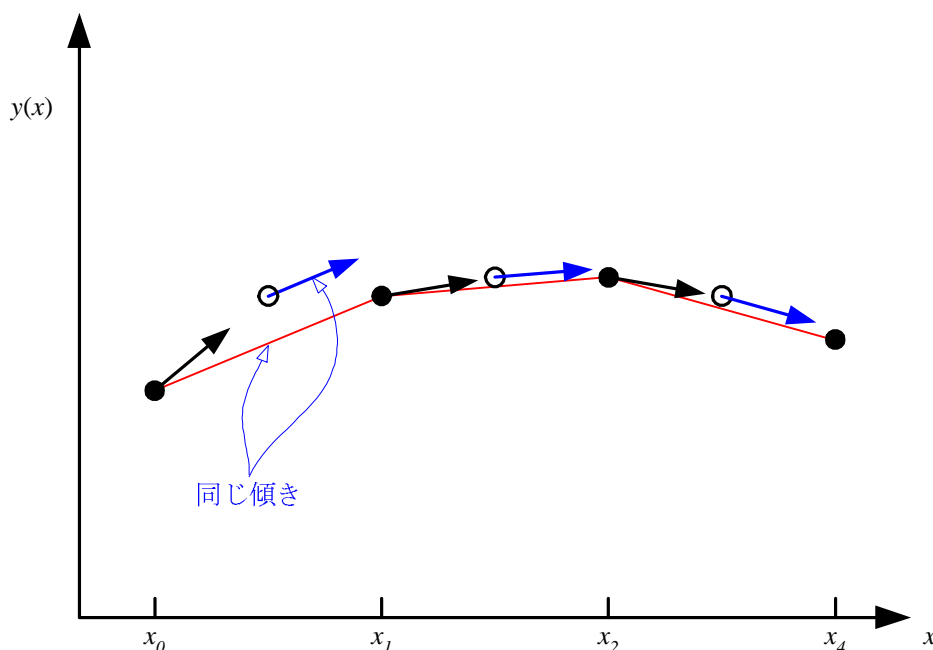


図 6: 中点法．ある区間での y の変化 Δy は，中点付近の傾きに区間の幅 Δx を乗じて，求めている．

2.3 4 次のルンゲ・クッタ法

今まで示したオイラー法や2次のルンゲ・クッタ法のように、パラメーターを増やして誤差項の次数を上げていく方法で、最良の方法と言われるのが4次のルンゲ・クッタ法である。パラメーターを増やして、5, 6, 7, ... と誤差項を小さくすることは可能であるが、同じ計算量であれば4次のルンゲ・クッタの刻み幅を小さくするほうが精度が良いと言われている。そのようなことから、私は5次以上のルンゲ・クッタの公式を見たことがない。

ということで、皆さんが常微分方程式を計算する必要が生じたときは、何はともあれ4次のルンゲ・クッタで計算すべきである！この問題を解く場合、「4次のルンゲクッタだな」と一言言ってプログラムを書き始めると、おぬしできるな—と思われること間違いなしである。間違っても「2次のルンゲ・クッタ...」と言ってはならない！4次の方が...」と言う輩が必ずでてくる。普通の科学に携わる者にとって、4次のルンゲ・クッタは常微分方程式の最初で最後の解法である。

ただし、4次のルンゲ・クッタ法よりも精度の良い方法があることも知っておく必要がある。より高精度な方法として、Bulirsch-Stoer 法や予測子・修正法などがある。進んだ勉強をしたいときに、学習するのがよいだろう。例えば文献 [1] 等に詳しくかかっている。

4次のルンゲ・クッタの公式は、式 (27) に示す通りである。そして、このイメージは図7のように表すことができる。

2次の場合と同じ手順で、公式を導き、そして4次の精度であることが証明できるであろう。しかし、計算は明らかに大変なので、腕力のある人はトライせよ。

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}) \\ k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{array} \right. \quad (27)$$

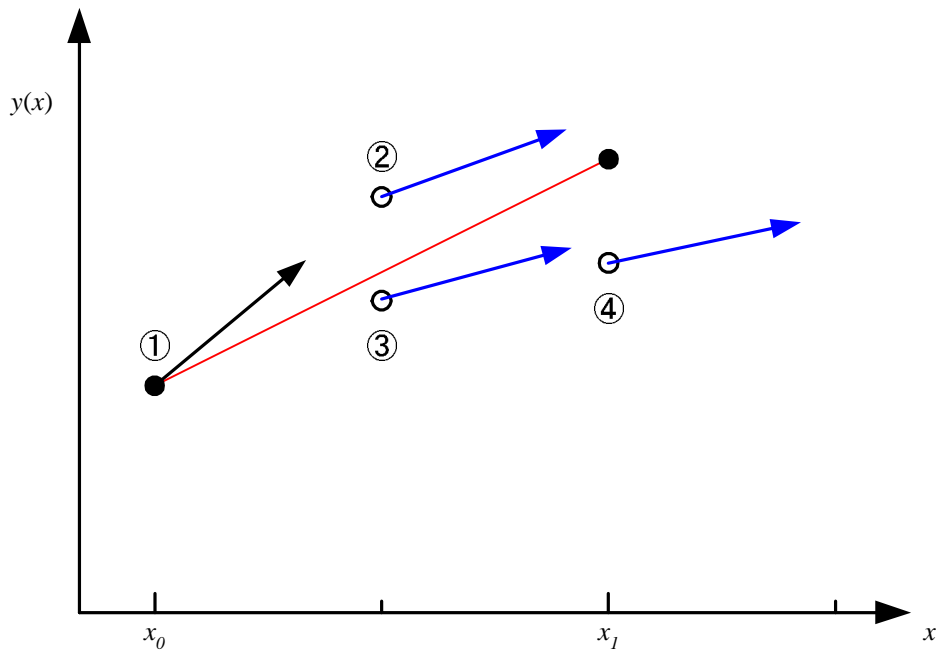


図 7: 4 次のルンゲ・クッタ法 . ある区間での y の変化 Δy は , 区間内の 4 点の傾きのある種の加重平均に幅 Δx を乗じて , 求めている .

3 高階の常微分方程式

3.1 4 次のルンゲ・クッタ法を使う方法

ここまで示した方法は , わりとエレガントな方法である . しかし , 1 階の常微分方程式しか取り扱えないので不便きわまりないと思っている者もいるだろう . 一般に , 高階の常微分方程式は , 1 階の連立微分方程式に変形できる . このことから , 高階の常微分方程式の近似解は , これまで示した方法を用いて計算できるようになる . 諸君は , 1 階の常微分方程式が計算できれば , ちょっとの工夫で高階のものも計算できるのである .

重要なことは , 高階の常微分方程式を 1 階の連立微分方程式に直すことである . まずは , その方法を示す . 例えば , 次のような 2 階の常微分方程式があったとする .

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right) \quad (28)$$

この方程式の右辺は , $(x, y, dy/dx)$ の 3 つの関数に見えるが , 実際には独立変数は x のみである . y も , dy/dx も x の関数となっている .

この 2 階常微分方程式を 1 階の連立微分方程式にするために ,

$$\begin{cases} Y_0(x) = y(x) \\ Y_1(x) = y'(x) \end{cases} \quad (29)$$

のように変数変換をする．すると，式 (28) は

$$\begin{cases} \frac{dY_0}{dx} = Y_1 \\ \frac{dY_1}{dx} = f(x, Y_0, Y_1) \end{cases} \quad (30)$$

と変形できる．これで，2 階の常微分方程式が 1 階連立常微分方程式に変換されたことになる．1 階の微分方程式ということで，4 次のルンゲ・クッタ法が使える．次のようにすればよい．

$$\begin{cases} k_1 = hY_{1,n} \\ \ell_1 = hf(x_n, Y_{0,n}, Y_{1,n}) \\ \\ k_2 = h \left(Y_{1,n} + \frac{\ell_1}{2} \right) \\ \ell_2 = hf \left(x_n + \frac{h}{2}, Y_{0,n} + \frac{k_1}{2}, Y_{1,n} + \frac{\ell_1}{2} \right) \\ \\ k_3 = h \left(Y_{1,n} + \frac{\ell_2}{2} \right) \\ \ell_3 = hf \left(x_n + \frac{h}{2}, Y_{0,n} + \frac{k_2}{2}, Y_{1,n} + \frac{\ell_2}{2} \right) \\ \\ k_4 = h(Y_{1,n} + \ell_3) \\ \ell_4 = hf(x_n + h, Y_{0,n} + k_3, Y_{1,n} + \ell_3) \\ \\ Y_{0,n+1} = Y_{0,n} + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ Y_{1,n+1} = Y_{1,n} + \frac{1}{6}(\ell_1 + 2\ell_2 + 2\ell_3 + \ell_4) \end{cases} \quad (31)$$

この漸化式を芋づる式に計算すれば，元の 2 階の微分方程式の近似解が求められるわけである．近似解 $y(x)$ は $Y_{0,i}$ となり，その微分も同時に計算され $Y_{1,i}$ である．

4 計算の刻み巾

計算精度を監視しながら，計算の刻み幅 h を変化させると計算の効率は非常に良くなる．変化の少ない領域では大きなステップで，変化の大きい領域では小さなステップで計算するのである．場合によっては，数十倍，あるいは数百倍の速度が得られる．

この問題は高度で，ここでの学習の範囲を超える．興味のある者は，自分で学習すべし．例えば，文献 [1] に詳しくかかっている．

参考文献

- [1] Willam H. Press et al. NUMERICAL RECIPES in C [日本語版]. 技術評論社, 1996.