計算物理学:No.5

1　常微分方程式の数値解法 2

常微分方程式の数値解法で、単純なオイラー法よりも精度が上がる方法を紹介する。一つは修正オイラー法、もう一つは 2 次の Runge-Kutta 法である。1 変数の常微分方程式については簡単に拡張できるが、多変数の常微分方程式に関してはやや注意がいる。

1.1　修正 Euler 法

$y(x+h)$ の厳密な値は、積分を用いて

$$y(x+h) = y(x) + \int_x^{x+h} f(x, y(x))dx \tag{1}$$

と表すことができる。オイラー法は、この積分を

$$\int_x^{x+h} f(x, y(x))dx \approx hf(x, y(x)) \tag{2}$$

で近似すること (図 1-a) に相当するが、離散近似による誤差をもっと小さくするためには、台形公式を用いて、

$$\int_x^{x+h} f(x, y(x))dx \approx \frac{h}{2}(f(x, y(x)) + f(x+h, y(x+h))) \tag{3}$$

で近似する (図 1-b)。

しかし、微分方程式の計算の場合には数値積分と違い、被積分関数の中に未知関数があり、(3) の右辺には左辺で予測すべき量が含まれている。

そこで、まずオイラー法で $y(x+h)$ の近似値

$$\boxed{\tilde{y} = y(x) + hf(x, y(x))} \tag{4}$$

を計算し、それを (3) の右辺に代入する

$$\boxed{y(x+h) = y(x) + \frac{h}{2}\left[f(x, y(x)) + f(x+h, \tilde{y})\right]} \tag{5}$$

これが修正オイラー法である。

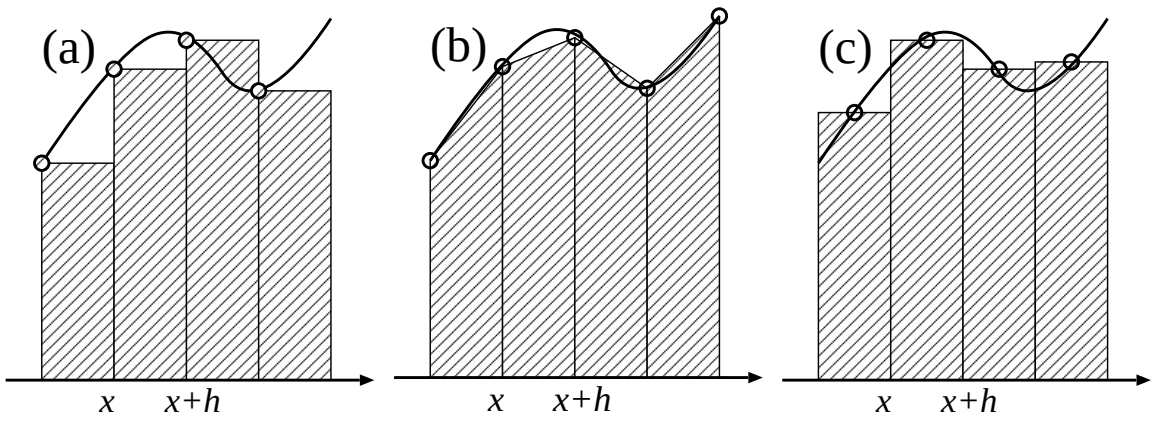

図 1: (a) オイラー法 (b) 修正オイラー法 (c) 2 次のルンゲクッタ法に相当。

1.2 連立常微分方程式

一般には (多変数、高階の) 常微分方程式は m 元連立 1 階常微分方程式

$$\frac{dy^i(x)}{dx} = f^i(x, y^1, y^2, \ldots, y^m), \qquad i = 1, \ldots, m \tag{6}$$

になるが、その場合も y, f をベクトル (配列) の形にすれば良い。この場合修正オイラー法の手続きは次のようになる。パラメーター $x_n = a + nh$ に対して、求めるべき値の $y^i(x_n)$ の近似値を y_n^i で表す。

ステップ 0

x, y^i の組が与えられた時、

$$f^i(x, y^1, y^2, \ldots, y^m) \tag{7}$$

を $i = 1, \cdots m$ まで 1 次元配列として出すサブルーチンを作成する (これは問題ごとに異なる)。

ステップ 1

$$\tilde{y}^i = y_n^i + h f^i(x_n, y_n^i) \tag{8}$$

を $i = 1, \cdots m$ まで 1 次元配列として出す。

ステップ 2

$$y_{n+1}^i = y_n^i + \frac{h}{2}[f^i(x_n, y_n^i) + f^i(x_{n+1}, \tilde{y^i})] \tag{9}$$

で、次のステップの y^i を出す。

ステップ 3

x_{n+1} と、求めた y_{n+1}^i を新たにステップ 1,2 での x_n, y_n^i に置き換える。すると次に y_{n+2}^i が求まる。以下順次これを繰り返す。

1.3 修正オイラー法の誤差

オイラー法の誤差は 刻み幅 h に対し $O(h)$ 程度なので精度を上げようとすると計算量が非常に増える。これに対し、修正オイラー法の誤差は $O(h^2)$ なのでずっと効率が良い。

$y(x+h)$ の x の回りでのテイラー展開を考えると、

$$y(x+h) = y(x) + hf(x) + \frac{1}{2}h^2 y''(x) + O(\,h^3\,) \tag{10}$$

逆に $y(x)$ の $x+h$ の回りでのテイラー展開を考えると、

$$y(x) = y(x+h) - hf(x+h) + \frac{1}{2}h^2 y''(x+h) + O(\,h^3\,) \tag{11}$$

この 2 つの式から、

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x) + \frac{h}{2}[y'(x) + y'(x+h)] + O(h^3) \\ &= y(x) + \frac{h}{2}[f(x) + f(x+h)] + O(h^3) \end{aligned} \tag{12}$$

なので、修正オイラー法の常微分方程式全体としての誤差は、$O(h^2)$ に押えられる。

修正オイラー法はやや複雑であるが、100 倍精度を上げるのに、10 倍の計算量で済むので効果的である。さらにこの結果と収束加速法の組合せも考えられる。

1.4 2 次の Runge-Kutta 法

離散近似による誤差を小さくするには、台形公式の他、中点公式を用いて

$$\int_x^{x+h} f(x, y(x))dx \approx hf\left(x + \frac{h}{2}, y(x + \frac{h}{2})\right) \tag{13}$$

で近似することも考えられる (図 1-c)。

しかし、$y(x+h/2)$ の評価が必要なのでオイラー法で $y(x+h/2)$ の近似値

$$\tilde{y} = y(x) + \frac{h}{2}f(x, y(x)) \tag{14}$$

を計算し、それを (13) の右辺に代入する

$$y(x+h) \approx hf\left(x + \frac{h}{2}, \tilde{y}\right) \tag{15}$$

これを 2 次のルンゲクッタ法という。誤差は $O(h^2)$ である。

2 課題

前回の課題を修正オイラー法で扱ってみよ。刻み幅を半分にすると誤差が約 $1/4$ になることを確認せよ。余裕があれば 2 次のルンゲクッタ法でも扱ってみよ。