

計算機実験 (L2) — 常微分方程式の解法

藤堂眞治

wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp

2017/05/10

- 1 常微分方程式の初期値問題
- 2 Numerov 法
- 3 シンプレクティック積分法
- 4 物理に現れる連立一次方程式
- 5 連立一次方程式の直接解法

準備: 微分方程式の書き換え

- 2 階の常微分方程式の一般形

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + p(x) \frac{dy}{dx} + q(x)y = r(x)$$

- $y_1 \equiv y, y_2 \equiv \frac{dy}{dx}$ とおくと

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = y_2 \\ \frac{dy_2}{dx} = r(x) - p(x)y_2 - q(x)y_1 \end{cases}$$

- さらに $\mathbf{y} \equiv (y_1, y_2), \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) \equiv (y_2, r(x) - p(x)y_2 - q(x)y_1)$

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{f}(x, \mathbf{y})$$

- n 階常微分方程式 $\Rightarrow n$ 次元の 1 階常微分方程式

初期値問題と境界値問題

- 初期値問題
 - ▶ 微分方程式において、ある 1 点に関する全ての境界条件 (初期値) が与えられているもの
 - ▶ 質点の運動など (時系列の問題)
- 境界値問題
 - ▶ 複数の点に関する境界条件が与えられているもの
 - ▶ 物体のゆがみの計算や静電場の計算など (空間的に解く問題)
- 初期値問題は初期値から逐次的に解くことが可能
- 境界値問題は初期値問題に比べて計算法が複雑

初期値問題の解法 (Euler 法)

- 微分を差分で近似する (前進差分)

$$\frac{dy}{dt} \approx \frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t} = f(t, y)$$

- $t = 0$ における $y(t)$ の初期値を y_0 、 h を微少量、 $t_n \equiv nh$ 、 y_n を $y(t_n)$ の近似値とおくと、

$$y_{n+1} - y_n = hf(t_n, y_n)$$

- Euler 法
 - ▶ y_0 からはじめて、 y_1, y_2, \dots を順次求めていく

Euler 法の精度

- 微分方程式の両辺を t_n から t_{n+1} まで積分 (積分方程式)

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt = h \int_0^1 f(t_n + h\tau, y(t_n + h\tau)) d\tau$$

- Euler 法は、被積分関数を定数で近似することに対応

$$f(t_n + h\tau, y(t_n + h\tau)) = f(t_n, y(t_n)) + O(h)$$

- $t = 0$ からある t_f まで積分すると、反復回数 $N = t_f/h$
- $t = t_f$ における誤差 $\sim N \times h \times O(h) = O(h)$

Euler 法の改良

- 積分方程式の被積分関数をもう 1 次高次まで展開

$$f(t_n+h\tau, y(t_n+h\tau)) = f(t_n, y(t_n)) + \tau h \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right\}_{t=t_n, y=y_n} + O(h^2)$$

- 積分を実行すると

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf(t_n, y_n) + \frac{1}{2}h^2 \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right\}_{t=t_n, y=y_n} + O(h^3)$$

中点法 (2 次 Runge-Kutta 法)

■ 2 次公式

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(t_n, y_n) \\k_2 &= hf\left(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\y_{n+1} &= y_n + k_2\end{aligned}$$

■ このとき

$$k_2 = h \left\{ f(t_n, y_n) + \frac{1}{2}h \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{2}k_1 \frac{\partial f}{\partial y} + O(h^2) \right\}$$

■ したがって

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) + \frac{1}{2}h^2 \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right\}_{t=t_n, y=y_n} + O(h^3)$$

高次の Runge-Kutta 法

■ 3 次 Runge-Kutta 法

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(t_n, y_n) \\k_2 &= hf\left(t_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}k_1\right) \\k_3 &= hf\left(t_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}k_2\right) \\y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{4}k_1 + \frac{3}{8}k_2 + \frac{3}{8}k_3\end{aligned}$$

■ 4 次 Runge-Kutta 法

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(t_n, y_n) \\k_2 &= hf\left(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\k_3 &= hf\left(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right) \\k_4 &= hf(t_n + h, y_n + k_3) \\y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4\end{aligned}$$

■ 4 次までは次数と f の計算回数が等しい

計算コストと精度

- 実際の計算では $f(t, y)$ の計算にほとんどのコストがかかる
- 計算回数と計算精度の関係

	1 次 (Euler 法)	2 次 (中点法)	3 次	4 次
計算精度	$O(h)$	$O(h^2)$	$O(h^3)$	$O(h^4)$
計算回数	N	$2N$	$3N$	$4N$

- 高次の Runge-Kutta を使う方が効率的
- どれくらい小さな h が必要となるか、前もっては分からない
- 刻み幅を変えて ($h, h/2, h/4, \dots$) 計算してみることが大事
 - ▶ 誤差の評価
 - ▶ 公式の間違いの発見

陽解法と陰解法

- 陽解法: 右辺が既知の変数のみで書かれる (例: Euler 法)
 - ▶ プログラムがシンプル
- 陰解法: 右辺にも未知変数が含まれる
 - ▶ 例: 逆 Euler 法

$$y(t) = y(t + h - h) = y(t + h) - hf(t + h, y(t + h)) + O(h^2)$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(t + h, y_{n+1})$$

- ▶ 数値的により安定な場合が多い
- ▶ Newton 法などを使って、非線形方程式を解く必要がある

時間依存しないシュレディンガー方程式

- 井戸型ポテンシャル中の一粒子問題

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & a \leq x \leq b \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

- $\hbar^2/2m = 1$ 、 $a = 0$ 、 $b = 1$ となるように変数変換して

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + E \right) \psi(x) = 0 \quad 0 \leq x \leq 1$$

を境界条件 $\psi(0) = \psi(1) = 0$ のもとで解けば良い

微分方程式の積分による解法

■ Numerov 法

- ▶ 二階の常微分方程式で一階の項がない場合に使える
- ▶ 4 次の陰解法
- ▶ 方程式が線形の場合は陽解法に書き直せる

■ 微分方程式

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = f(x, y)$$

$y = y(x)$ を $x = x_i$ のまわりでテイラー展開する。

$x_{i\pm 1} = x_i \pm h$ での表式は

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) \pm hy'(x_i) + \frac{h^2}{2} y''(x_i) \pm \frac{h^3}{6} y'''(x_i) + \frac{h^4}{24} y''''(x_i) + O(h^5)$$

Numerov 法

- 二階微分の差分近似 ($y_i \equiv y(x_i)$ 等と書く)

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = y_i'' + \frac{h^2}{12}y_i'''' + O(h^4)$$

一方で、微分方程式より

$$y_i'''' = \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x=x_i} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2)$$

組み合わせると

$$y_{i+1} = 2y_i - y_{i-1} + \frac{h^2}{12}(f_{i+1} + 10f_i + f_{i-1}) + O(h^6)$$

Numerov 法

- 方程式が線形の場合、 $f(x, y) = -a(x)y(x)$ を代入すると

$$y_{i+1} = 2y_i - y_{i-1} - \frac{h^2}{12}(a_{i+1}y_{i+1} + 10a_i y_i + a_{i-1}y_{i-1}) + O(h^6)$$

y_{i+1} を左辺に集めると、陽解法となる

$$y_{i+1} = \frac{2(1 - \frac{5h^2}{12}a_i)y_i - (1 + \frac{h^2}{12}a_{i-1})y_{i-1}}{1 + \frac{h^2}{12}a_{i+1}} + O(h^6)$$

Numerov 法による固有値問題の解法

- $x_i = h \times i$ ($h = 1/n$)、 $x_0 = 0$ 、 $x_n = 1$ とする
- $\psi(x_0) = 0$ 、 $\psi(x_1) = 1$ を仮定 ($\psi'(x_0) = 1/h$ と与えたことに相当)
- $E = 0$ とおく
- Numerov 法を用いて、 $x = x_n$ まで積分
- $\psi(x_n)$ の符号が変わるまで、 E を少しずつ増やす
- 符号が変わったら、 E の区間を半分ずつに狭めていき、 $\psi(x_n) = 0$ となる E (固有エネルギー) と $\psi(x)$ (波動関数) を得る

ハミルトン力学系

- 時間をあらわに含まない場合のハミルトン方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

- ▶ エネルギー保存則

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} = 0$$

- ▶ 位相空間の体積が保存 (Liouville の定理)
位相空間上の流れの場 $\mathbf{v} = \left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt}\right)$ について

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial}{\partial p} \frac{dp}{dt} = 0$$

- Euler 法、Runge-Kutta 法などはいずれの性質も満たさない

シンプレクティック数値積分法 (Symplectic Integrator)

- 体積保存を満たす解法
- 例: 調和振動子 $H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$ の運動方程式

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -q$$

の一方を Euler 法で、他方を逆オイラー法で解く

$$\begin{aligned}q_{n+1} &= q_n + hp_n \\p_{n+1} &= p_n - hq_{n+1} = (1 - h^2)p_n - hq_n \\ \begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1 - h^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}\end{aligned}$$

体積・エネルギーの保存

- 体積保存

$$\det \begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1 - h^2 \end{pmatrix} = 1$$

- エネルギーの保存

$$\frac{1}{2}(p_{n+1}^2 + q_{n+1}^2) + \frac{h}{2}p_{n+1}q_{n+1} = \frac{1}{2}(p_n^2 + q_n^2) + \frac{h}{2}p_nq_n$$

- 位相空間の体積は厳密に保存

- エネルギーは $O(h)$ の範囲で保存し続ける

2次のシンプレクティック積分法

- ハミルトニアンが $H(p, q) = T(p) + V(q)$ の形で書けるとする
- リープ・フロッグ法

$$p(t + h/2) = p(t) - \frac{h}{2} \frac{\partial V(q)}{\partial q} \Big|_{q=q(t)}$$

$$q(t + h) = q(t) + hp(t + h/2)$$

$$p(t + h) = p(t + h/2) - \frac{h}{2} \frac{\partial V(q)}{\partial q} \Big|_{q=q(t+h)}$$

シンプレクティック積分法

- ハミルトン力学系の満たすべき特性 (位相空間の体積保存) を満たす
- 一般的には陰解法
- ハミルトニアンが $H(p, q) = T(p) + V(q)$ の形で書ける場合は陽的なシンプレクティック積分法が存在する
- エネルギーは近似的に保存する
- n 次のシンプレクティック積分法では、エネルギーは $O(h^n)$ の範囲で振動 (発散しない)

連立一次方程式の現れる例

- 微分方程式の初期値問題の陰解法
- 非線形連立方程式に対するニュートン法

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} - \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

- 偏微分方程式の境界値問題の差分法による求解
- ベクトルに逆行列を掛ける代わりに連立一次方程式を解く場合が多い

$$\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b} \Rightarrow A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

ポアソン方程式の境界値問題

■ 二次元ポアソン方程式

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = f(x, y) \quad 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$$

■ ディリクレ型境界条件: $u(x, y) = g(x, y)$ on $\partial\Omega$

■ 有限差分法により離散化

- ▶ x 方向、 y 方向をそれぞれ n 等分: $(x_i, y_j) = (i/n, j/n)$
- ▶ $(n+1)^2$ 個の格子点の上で $u(x_i, y_j) = u_{ij}$ が定義される
- ▶ そのうち $4n$ 個の値は境界条件で定まる
- ▶ ポアソン方程式を中心差分で近似 ($h = 1/n$)

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{h^2} = f_{ij}$$

残り $(n-1)^2$ 個の未知数に対する連立一次方程式

ポアソン方程式の境界値問題

- ノイマン型境界条件の場合
 - ▶ 境界上で $u(x, y)$ の微分が定義される。
 - ▶ 例) $\partial u(0, y)/\partial x = h(0, y)$
- 境界条件を差分近似で表す

$$\frac{u_{1j} - u_{0j}}{h} = h_{0j} \quad j = 1 \cdots (n-1)$$

$(n+1)^2 - 4$ 個の未知数に対して、ポアソン方程式の差分近似とあわせて、合計 $(n-1)^2 + 4(n-1) = (n+1)^2 - 4$ 個の連立一次方程式

逆行列の「間違った」求め方

- 線形代数の教科書に載っている公式

$$A^{-1} = \frac{\tilde{A}}{|A|}$$

$|A|$: A の行列式、 \tilde{A} : A の余因子行列

- $n \times n$ 行列の行列式を定義通り計算すると、計算量 $\sim O(n!)$
- したがって、上の方法で逆行列を計算すると、計算量 $\sim O(n!)$
- $n = 100$ の場合: $n! \approx 9.3 \times 10^{157}$

逆行列の「正しい」求め方

- 連立一次方程式 $Ax = e_j$ を全ての e_j について解く
- Gauss の消去法による連立一次方程式の解法: 計算量 $\sim O(n^3)$
- Gauss の消去法の途中で出てくる下三角行列 (L) と上三角行列 (U) 行列を再利用 (LU 分解) すれば、逆行列全体を求めるための計算量も $O(n^3)$
- 行列式も $O(n^3)$ で計算可
- $n = 100$ の場合: $n^3 = 10^6 \ll 9.3 \times 10^{157}$

ガウスの消去法

■ 解くべき連立方程式

$$a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)}$$

$$a_{21}^{(1)} x_1 + a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{2n}^{(1)} x_n = b_2^{(1)}$$

$$a_{31}^{(1)} x_1 + a_{32}^{(1)} x_2 + a_{33}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{3n}^{(1)} x_n = b_3^{(1)}$$

...

$$a_{n1}^{(1)} x_1 + a_{n2}^{(1)} x_2 + a_{n3}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{nn}^{(1)} x_n = b_n^{(1)}$$

- ある行を定数倍しても、方程式の解は変わらない
- ある行の定数倍を他の行から引いても、方程式の解は変わらない

ガウスの消去法

- 1 行目を $m_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$ 倍して、 i 行目 ($i \geq 2$) から引く

$$a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)}$$

$$a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)}$$

$$a_{32}^{(2)} x_2 + a_{33}^{(2)} x_3 + \cdots + a_{3n}^{(2)} x_n = b_3^{(2)}$$

...

$$a_{n2}^{(2)} x_2 + a_{n3}^{(2)} x_3 + \cdots + a_{nn}^{(2)} x_n = b_n^{(2)}$$

- ここで

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)} \quad i \geq 2, j \geq 2$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)} \quad i \geq 2$$

ガウスの消去法

- 2行目を $m_{i2} = a_{i2}^{(2)} / a_{22}^{(2)}$ 倍して、 i 行目 ($i \geq 3$) から引く

$$a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)}$$

$$a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)}$$

$$a_{33}^{(3)} x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)} x_n = b_3^{(3)}$$

...

$$a_{n3}^{(3)} x_3 + \cdots + a_{nn}^{(3)} x_n = b_n^{(3)}$$

- ここで

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - m_{i2} a_{2j}^{(2)} \quad i \geq 3, j \geq 3$$

$$b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - m_{i2} b_2^{(2)} \quad i \geq 3$$

ガウスの消去法

- 最終的には、左辺が右上三角形をした連立方程式となる

$$a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)}$$

$$a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)}$$

$$a_{33}^{(3)} x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)} x_n = b_3^{(3)}$$

...

$$a_{n-1,n-1}^{(n-1)} x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)} x_n = b_{n-1}^{(n-1)}$$

$$a_{nn}^{(n)} x_n = b_n^{(n)}$$

- これを下から順に解いていけばよい (後退代入)

練習問題

- 次の連立方程式をガウスの消去法で (手で) 解け

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 \\ 24 \\ 31 \end{pmatrix}$$

ガウスの消去法のコード

```
for (k = 0; k < n; ++k) {
    for (i = k + 1; i < n; ++i) {
        for (j = k + 1; j < n; ++j) {
            a[i][j] -= a[k][j] * a[i][k] / a[k][k];
        }
        b[i] -= b[k] * a[i][k] / a[k][k];
    }
}
for (k = n-1; k >= 0; --k) {
    for (j = k + 1; j < n; ++j) {
        b[k] -= a[k][j] * b[j];
    }
    b[k] /= a[k][k];
}
```

- C 言語では配列の添字が 0 から始まることに注意

ピボット選択

- ガウスの消去法の途中で $a_{kk}^{(k)}$ が零になると、計算を先に進めることができなくなる
- 行を入れ替えても、方程式の解は変わらない \Rightarrow k 行以降で、 $a_{ik}^{(k)}$ が非零の行と入れ替える (ピボット選択)
- 実際のコードでは、情報落ちを防ぐため、 $a_{kk}^{(k)}$ が零でない場合でも、 $a_{ik}^{(k)}$ の絶対値が最大の行と入れ替える
- ピボット選択が必要となる例

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 6 & 4 \\ 4 & 6 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 19 \\ 23 \end{pmatrix}$$

LU 分解

■ M_k の逆行列

$$L_k = M_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ 0 & 1 & & & & & & \\ 0 & 0 & \ddots & & & & & \\ \vdots & \vdots & & & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & & m_{k+1,k} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & & m_{k+2,k} & 0 & \ddots & \\ \vdots & \vdots & & & \vdots & \vdots & & 1 \\ 0 & 0 & \dots & m_{nk} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

から $L = L_1 L_2 \cdots L_n$ を定義すると、 L は下三角行列、また $U = A^{(n)}$ (上三角行列) とすると、 $A = LU$

LU 分解

- LU 分解による連立一次方程式の解法
 - ▶ 方程式は $A\mathbf{x} = LU\mathbf{x} = \mathbf{b}$ と書ける
 - ▶ まず、 $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$ を解いて、 \mathbf{y} を求める (前進代入)
 - ▶ 次に、 $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$ を解いて、 \mathbf{x} を求める (後退代入)
- 計算量はガウスの消去法と変わらない
- 一度 LU 分解をしておけば、異なる \mathbf{b} に対する解も簡単に求められる
- 行列式は U の対角成分の積で与えられる