

3 C言語による数値計算の基礎 (3)

運動方程式の数値解法・常微分方程式の数値解法, ルンゲ・クッタ法について

3.1 オイラー法の誤差見積もり

1つの未知関数 ϕ に対する微分方程式

$$\dot{\phi}(t) = F(t, \phi) \quad (1)$$

に対して、 $t = t_0$ での初期条件 $\phi(t_0) = x_0$ が与えられたとする。

オイラー法による数値解法とは、(微小な) 時間の刻み幅 h をとって、第 n ステップでの近似値、すなわち $t_n = t_0 + nh$ での ϕ の値 $x_n = \phi(t_n)$ から、次の第 $n+1$ ステップでの近似値を、以下の関係式で次々と計算していくものであった：

$$x_{n+1} = x_n + F(t_n, x_n)h.$$

ここでは、このオイラー法による近似計算がどの程度の誤差を与えるか見積もってみる。オイラー法による近似の根拠は、 h がとても小さいときに

$$\dot{\phi}(t) \doteq \frac{\phi(t+h) - \phi(t)}{h}$$

すなわち

$$\phi(t+h) \doteq \phi(t) + \dot{\phi}(t)h$$

とすることにあつた。そこで、 $\phi(t+h)$ を $\phi(t) + \dot{\phi}(t)h$ で近似する際の誤差、

$$\phi(t+h) - \phi(t) - \dot{\phi}(t)h$$

に着目すればよい。Taylor の定理により、二階微分可能な関数は、ある数 $0 \leq \theta \leq 1$ が存在して

$$\phi(t+h) = \phi(t) + \dot{\phi}(t)h + \frac{1}{2}\ddot{\phi}(t+\theta h)h^2$$

と表せることが知られている。このことから直ちに、近似の誤差が $\frac{1}{2}\ddot{\phi}(t+\theta h)h^2$ で与えられることが分かる。これを用いて、 $t = t_0$ から出発して T 秒後の誤差を見積もろう。 T 秒後の近似値を求めるには、 $n = T/h$ ステップの計算が必要で、 $\left| \frac{1}{2}\ddot{\phi}(t+\theta h) \right|$ の最大値を L と見積もっておけば、誤差の大きさは

$$(\text{各ステップの誤差}) \times n \doteq Lh^2 \times n = LTh$$

程度になることが分かる。この式より、近似の精度を維持するためには、 T に反比例するように h を小さくとる必要があることが分かる。

3.2 2次ルンゲ・クッタ法 (中点法)

先の節で、オイラー法による近似がうまくいかない理由を数式を用いて概説したが、幾何学的に説明するほうがより直感的だろう。すなわち、オイラー法による近似は、 $t = t_n$ における接線の方程式を用いるので、 $t = t_n + h$ における値が大きくなるということである。

そこで、近似を行う接線を引く場所を t_n と t_{n+1} の中間点にとって、 x_{n+1} の値を近似してみよう。式で表せば以下のようになる：

$$x_c = x_n + F(t_n, x_n) \frac{h}{2} \quad (x_c \text{ は中間点での } \phi \text{ の値})$$

とにおいて

$$x_{n+1} = x_n + F(t_n + \frac{h}{2}, x_c)h \quad (\text{中間点で接線を引いて } x_{n+1} \text{ の値を近似}).$$

このように中間点の値をオイラー法で一旦計算し、中間点における接線を用いて次のステップの近似を行う方法を、2次ルンゲ・クッタ法、あるいは中点法と呼ばれている。

2次ルンゲ・クッタ法で、 N 個の未知関数 $\phi^\mu(t)$, ($\mu = 1, 2, \dots, N$) に対する m 個の微分方程式

$$\dot{\phi}^\mu(t) = F^\mu(t, \phi^1, \phi^2, \dots, \phi^N), \quad (\mu = 1, 2, \dots, N)$$

を解く場合は、第 n ステップの値 x_n^μ から中間点の値

$$x_c^\mu = x_n^\mu + F^\mu(t_n, x_n^1, x_n^2, \dots, x_n^N) \frac{h}{2}$$

を一旦求め、次に x_c^μ における接線の式によって x_{n+1}^μ を近似する

$$x_{n+1}^\mu = x_n^\mu + F^\mu(t_n + \frac{h}{2}, x_c^1, x_c^2, \dots, x_c^N)h.$$

以上の手続きを繰り返せばよい。

2次ルンゲ・クッタ法による、微分方程式の近似解を求める漸化式 (多変数)

N 個の未知関数 $\phi^\mu(t)$, ($\mu = 1, 2, \dots, N$) に関する微分方程式の系

$$\dot{\phi}^\mu = F^\mu(t, \phi^1(t), \phi^2(t), \dots, \phi^N(t)) \quad (\mu = 1, 2, \dots, N)$$

の近似解を求める2次ルンゲ・クッタ法の漸化式は、 $t_n = t_0 + nh$ での ϕ^μ の近似値を x_n^μ とおけば、

$$x_c^\mu = x_n^\mu + F^\mu(t_n, x_n^1, x_n^2, \dots, x_n^N) \frac{h}{2} \quad (2)$$

を中間値として計算し、

$$x_{n+1}^\mu = x_n^\mu + F^\mu(t_n + \frac{h}{2}, x_c^1, x_c^2, \dots, x_c^N)h \quad (3)$$

で与えられる。

以下のソースコードは、一次元のバネ (バネ定数=1.0) に取り付けられた質量 1.0kg の物体の運動方程式を、初期条件をバネを 1.0m 伸ばした位置から静かに手を放した (= 初速 0) として、2次ルンゲ・クッタ法で解いたものである。微分方程式は

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = -x$$

で与えられる。近似解を求める2次ルンゲ・クッタ法による漸化式は、(2),(3) によって

$$x_c = x_n + v_n \frac{h}{2}$$

$$v_c = v_n - kx_n \frac{h}{2}$$

$$x_{n+1} = x_n + v_c h$$

$$v_{n+1} = v_n - kx_c h$$

のようになる。

```
/* 2次ルンゲ・クッタ法による、バネに結び付けられた質点の運動方程式の数値解を求めるプログラム */
#include <stdio.h>
```

```

#define K 1

int main(){
    double t;      /* 時間変数 */
    double x,xa;   /* x は現在の x の値、 xa は次のステップの v の値 */
    double v,va;   /* v は現在の v の値、 va は次のステップの v の値 */
    double xc,vc; /* x,v の中間ステップの値 */
    double dt;     /* 時間の刻み */

    dt=0.05;      /* 時間の刻みを 0.05 にする */
    x=1.0;        /* 初期条件の設定 (初期位置) */
    v=0.0;        /* 初期条件の設定 (初速度) */

    for(t=0.0; t<10; t=t+dt){ /* 0 秒から 10 秒まで dt 刻みで計算 */
        printf("%f %f\n",t,x); /* 時刻 とそのときの値 を出力 */

        xc=x+v*dt/2; /* 中間ステップの値を求める */
        vc=v-K*x*dt/2;

        xa=x+vc*dt; /* 中間ステップの値で接線を作り、近似する*/
        va=v-K*xc*dt;

        x=xa; /* 次のステップの値を現在の値とする*/
        v=va;
    }
    return 0;
}

```

このプログラムでは、時間の刻み=0.05 とし、 $t = 0.0$ から $t = 1.0$ までの範囲で数値解を求め、時刻 t と質点の位置 x を、画面に出力する。この出力結果をファイルにリダイレクトして、gnuplot を用いればグラフ化もできる。

3.3 2次ルンゲ・クッタ法の誤差見積もり

これまで2次ルンゲ・クッタ法による近似を、幾何学的な意味で考えてきたが、ここでは、この近似式を解析して、この方法による誤差の見積もりを行ってみる。

x_c を消去することにより、2次ルンゲ・クッタ法による近似は

$$\phi(t+h) \doteq \phi(t) + F\left(t + \frac{h}{2}, \phi(t) + F\left(t, \phi(t)\right) \frac{h}{2}\right)h$$

のように書き換えられるから、近似誤差は

$$\phi(t+h) - \phi(t) - F\left(t + \frac{h}{2}, \phi(t) + F\left(t, \phi(t)\right) \frac{h}{2}\right)h.$$

となる。

ここで、この式を2変数関数の Taylor の定理

$$F(t+h, x+k) = F(t, x) + \frac{\partial F}{\partial t}(t, x)h + \frac{\partial F}{\partial x}(t, x)k + R(t, x)$$

を用いて変形する。ここで $R(t, x)$ は h, k に関するある2次式である。

$x \rightarrow \phi(t), h \rightarrow \frac{h}{2}, k \rightarrow F(t, \phi(t)) \frac{h}{2}$ の置き換えをすれば, 近似誤差の式の3項目は,

$$F\left(t + \frac{h}{2}, \phi(t) + F(t, \phi(t)) \frac{h}{2}\right)h = \left(F(t, \phi(t)) + \frac{\partial F}{\partial t}(t, \phi(t)) \frac{h}{2} + \frac{\partial F}{\partial x}(t, \phi(t)) F(t, \phi(t)) \frac{h}{2} + R(t, \phi(t))\right)h$$

ここで微分方程式 (1) を用いれば,

$$= \left(\dot{\phi}(t) + \frac{\partial F}{\partial t}(t, \phi(t)) \frac{h}{2} + \frac{\partial F}{\partial x}(t, \phi(t)) \dot{\phi}(t) \frac{h}{2} + R(t, \phi(t))\right)h$$

2変数関数の合成関数の微分則より, この式の2,3項目はまとめられて

$$\begin{aligned} &= \left(\dot{\phi}(t) + \frac{d}{dt}F(t, \phi(t)) \frac{h}{2} + R(t, \phi(t))\right)h \\ &= \left(\dot{\phi}(t) + \ddot{\phi}(t) \frac{h}{2} + R(t, \phi(t))\right)h \\ &= \dot{\phi}(t)h + \frac{1}{2}\ddot{\phi}(t)h^2 + R(t, \phi(t))h \end{aligned}$$

のようになる.

1変数の Taylor の定理を用いて t^2 まで展開すれば, ある $0 \leq \theta \leq 1$ が存在して,

$$\phi(t+h) = \phi(t) + \dot{\phi}(t)h + \frac{1}{2!}\ddot{\phi}(t)h^2 + \frac{1}{3!}\ddot{\phi}(t+\theta h)h^3$$

となるので, 2次ルンゲ・クッタ法の誤差は

$$\frac{1}{3!}\ddot{\phi}(t+\theta h)h^3 - R(t, \phi(t))h = (h \text{ の } 3 \text{ 次式})$$

のようになることが分かる. すなわち, 各ステップごとの誤差は h^3 に比例するので, オイラー法よりもより精度の高い近似になっていることが分かる.

3.4 その他の近似法

3.4.1 修正オイラー法

2次ルンゲ・クッタ法(中点法)は, 中間点 $t + \frac{h}{2}$ での傾きをオイラー法で一旦求めて, それを用いて次の近似値を求める公式であった.

それに対して修正オイラー法は, 中間点での傾きとして, t と $t+h$ での傾きの平均を考えることで次の近似値を用いる公式である.

数学的な詳細は省略して, 結果だけを書けば次のようになる:

修正オイラー法による, 微分方程式の近似解を求める漸化式

N 個の未知関数 $\phi^\mu(t)$, ($\mu = 1, 2, \dots, N$) に関する微分方程式の系

$$\dot{\phi}^\mu = F^\mu(t, \phi^1(t), \phi^2(t), \dots, \phi^N(t)) \quad (\mu = 1, 2, \dots, N)$$

の近似解を求める修正オイラー法の漸化式は, $t_n = t_0 + nh$ での ϕ^μ の近似値を x_n^μ とおけば,

$$\begin{aligned} k_1^\mu &= F^\mu(t_n, x_n^1, x_n^2, \dots, x_n^N) \\ k_2^\mu &= F^\mu(t_n, x_n^1 + hk_1^1, x_n^2 + hk_1^2, \dots, x_n^N + hk_1^N) \end{aligned}$$

を一旦計算し,

$$x_{n+1}^\mu = x_n^\mu + (k_1^\mu + k_2^\mu) \frac{h}{2}$$

で与えられる.

近似誤差の見積もりとしては, 2次ルンゲ・クッタ法と同じ程度であることが証明できる.

3.4.2 4次ルンゲ・クッタ法

2次ルンゲ・クッタ法のアイデアをさらに発展させたものとして、次の4次ルンゲ・クッタ法があげられる。これは常微分方程式の近似解法としては、もっともポピュラーに用いられているものの一つである。

2次ルンゲ・クッタ法では単に中間点だけを求めて、それを用いて次の近似値を与えていたが、4次ルンゲ・クッタ法では4箇所の「中間点」を求めて、それを用いて次の近似値を与える。数学的な詳細は省略して、結果だけを書けば次のようになる：

4次ルンゲ・クッタ法による、微分方程式の近似解を求める漸化式

N 個の未知関数 $\phi^\mu(t)$, ($\mu = 1, 2, \dots, N$) に関する微分方程式の系

$$\dot{\phi}^\mu = F^\mu(t, \phi^1(t), \phi^2(t), \dots, \phi^N(t)) \quad (\mu = 1, 2, \dots, N)$$

の近似解を求める4次ルンゲ・クッタ法の漸化式は、 $t_n = t_0 + nh$ での ϕ^μ の近似値を x_n^μ とおけば、

$$k_1^\mu = F^\mu(t_n, x_n^1, x_n^2, \dots, x_n^N)$$

$$k_2^\mu = F^\mu(t_n + \frac{h}{2}, x_n^1 + \frac{h}{2}k_1^1, x_n^2 + \frac{h}{2}k_1^2, \dots, x_n^N + \frac{h}{2}k_1^N)$$

$$k_3^\mu = F^\mu(t_n + \frac{h}{2}, x_n^1 + \frac{h}{2}k_2^1, x_n^2 + \frac{h}{2}k_2^2, \dots, x_n^N + \frac{h}{2}k_2^N)$$

$$k_4^\mu = F^\mu(t_n + h, x_n^1 + hk_3^1, x_n^2 + hk_3^2, \dots, x_n^N + hk_3^N)$$

の4箇所を中間値として計算し、

$$x_{n+1}^\mu = x_n^\mu + \frac{k_1^\mu + 2k_2^\mu + 2k_3^\mu + k_4^\mu}{6} h$$

で与えられる。