常微分方程式の数値解法

1階常微分方程式

$$\frac{d}{dt}y(t) = f(t, y), \quad y(t=0) = a$$

を解くことを考える。
　t=0 での境界条件を与えているので、解は一意に定まる。
微分方程式をy(t)の時間(t)発展の式と考えれば、初期条件を与えていることになるので、初期値問題と呼ぶ。

これを数値的に解く。

オイラー法

$$\frac{d}{dt}y(t) = f(t, y), \quad y(t=0) = a$$

微分をΔtの１次精度で近似する。

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

$$y(t+\Delta t) = y(t) + \Delta t\, f(t, y(t))$$

$$y(\Delta t) = y(0) + \Delta t\, f(0, y(0) = a)$$

$$y(2\Delta t) = y(\Delta t) + \Delta t\, f(\Delta t, y(\Delta t))$$

$$y(3\Delta t) = y(2\Delta t) + \Delta t\, f(2\Delta t, y(2\Delta t))$$

$$\ldots$$

t=0から順次数値的にy(t)を求めることができる！

オイラー法の例

$$\frac{d}{dt}y(t) = y(t),\ \ y(t=0)=1 \qquad \text{厳密解は} \quad y(t)=\exp(t)$$

$$y(\Delta t) = 1 + \Delta t$$

$$y(2\Delta t) = (1+\Delta t) + \Delta t(1+\Delta t) = (1+\Delta t)^2$$

$$y(3\Delta t) = (1+\Delta t)^2 + \Delta t\,(1+\Delta t)^2 = (1+\Delta t)^3$$

$$\cdots$$

$$y(n\Delta t) = (1+\Delta t)^{n-1} + \Delta t\,(1+\Delta t)^{n-1} = (1+\Delta t)^n$$

区間[0,T]をn等分すると、Δt=T/nより

$$y(T) = \left(1+\frac{T}{n}\right)^n \Rightarrow \quad n \to \infty\,(\Delta t \to 0)\text{の時}, y(T) = \exp(T)$$

精度の向上

微分をテイラー展開

$$y(t+\Delta t) = y(t) + \Delta t\, y'(t) + \frac{1}{2}\Delta t^2 y''(t) + \frac{1}{6}\Delta t^3 y'''(t) + \cdots$$

$$= y(t) + \Delta t \left\{ y'(t) + \frac{1}{2}\Delta t\, y''(t) + \frac{1}{6}\Delta t^2 y'''(t) + \cdots \right\}$$

$$= \underline{y(t) + \Delta t\, \{ f(t,y)} + \frac{1}{2}\Delta t \frac{df(t,y)}{dt} + \frac{1}{6}\Delta t^2 \frac{d^2 f(t,y)}{dt^2} + \cdots \}$$

ここで打ち切ればオイラー法

精度の向上（2）

2次の項まで残すことを考える

$$y(t+\Delta t) = y(t) + \Delta t\left\{f(t,y) + \frac{1}{2}\Delta t\frac{df(t,y)}{dt} + O(\Delta t^2)\right\}$$

$$\frac{df(t,y)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t}\frac{dt}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dt} = f_t + f_y f$$ より

$$y(t+\Delta t) = y(t) + \Delta t\left\{f(t,y) + \frac{1}{2}\Delta t(f_t + f_y f)\right\}$$

f_t, f_y をどのように評価するか？

精度の向上（3）

$f+\frac{1}{2}\Delta t(f_t+f_y f)$ をどのように近似するか？

tから少し離れた点、t+(pΔt) における y の値は、y+(pΔt) f(t,y) に近い。
なので、その値を y+(qΔt) f(t,y) とおく。f をテーラー展開して評価する。

$$f(t+(p\Delta t), y+(q\Delta t)f)$$
$$=f(t,y)+(p\Delta t)f_t+(q\Delta t)f\,f_y+O(\Delta t^2)$$

適当な定数 r, s を用いて $\frac{1}{2}\Delta t(f_t+f_y f)$ を近似

$$r\,f(t,y)+s\,f(t+(p\Delta t), y+(q\Delta t)f)$$
$$=(r+s)f(t,y)+s(p\Delta t)f_t+s(q\Delta t)f\,f_y+O(\Delta t^2)$$
$$=f+\frac{1}{2}\Delta t\,f_t+\frac{1}{2}\Delta t\,f\,f_y$$

精度の向上（4）、ホイン法

結局、　$r+s=1,\ sp=\dfrac{1}{2},\ sq=\dfrac{1}{2}$

をみたす r, s, p, q を選べば、Δtの1次の精度で偏微分項が近似できる。

$$y(t+\Delta t)=y(t)+\Delta t\left\{r\,f(t,y)+s\,f(t+(p\Delta t),y+(q\Delta t)f)\right\}$$

$r=\dfrac{1}{2},\ s=\dfrac{1}{2},\ p=1,\ q=1$　を選んだ場合をホイン法と呼ぶ。

$$y(t+\Delta t)=y(t)+\frac{\Delta t}{2}\left\{f(t,y)+f(t+\Delta t,y+\Delta t\,f)\right\}$$

$$\boxed{\begin{aligned}&s_1=f(t_n,y_n),\ s_2=f(t_n+\Delta t,y_n+\Delta t\,s_1)\\&y_{n+1}=y_n+\frac{\Delta t}{2}(s_1+s_2)\end{aligned}}$$

4次のルンゲクッタ法

ホイン法と同様な手順でテイラー展開の4次の項までを残した場合に得られる公式を4次のルンゲクッタ法という。

13個の未知数に対する、11個の方程式になるので、4次の項まで残す係数はいろいろあるが、係数が簡単になるものが選ばれている。

$$
\boxed{
\begin{aligned}
s_1 &= f(t_n, y_n) \\
s_2 &= f(t_n + \Delta t/2, y_n + \Delta t\, s_1/2) \\
s_3 &= f(t_n + \Delta t/2, y_n + \Delta t\, s_2/2) \\
s_4 &= f(t_n + \Delta t, y_n + \Delta t\, s_3) \\
y_{n+1} &= y_n + \frac{\Delta t}{6}\left(s_1 + 2s_2 + 2s_3 + s_4\right)
\end{aligned}
}
$$

予測子･修正子法

t を t=t_0, t_1, t_2, … , t_{n-1}, t_n, t_{n+1}, …　と Δt 間隔で離散化
t_{n+1} を t_n, t_{n-1} , … , t_{n-k} の多点を使って精度を向上させる。

区間　[t_{n-k} , t_{n+1}]で微分方程式を積分する。

$$\int_{t_{n-k}}^{t_{n+1}} \frac{dy}{dt} dt = y_{n+1} - y_{n-k} = \int_{t_{n-k}}^{t_{n+1}} f(t, y)\, dt$$

k=0の場合、t_n, t_{n+1}を用いて、積分を台形公式で近似

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y)\, dt = \frac{\Delta t}{2}\left(f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})\right)$$

予測子・修正子法（2）

k=0の場合、t_n, t_{n+1}を用いて、積分を台形公式で近似

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t,y)\,dt = \frac{\Delta t}{2}\left(f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})\right)$$

y_{n+1} が未知のままなので、これを別の式で“予測”する。

$$\boxed{\begin{aligned} y^*_{n+1} &= y_n + \Delta t\, f(t_n, y_n) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{\Delta t}{2}\left\{f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y^*_{n+1})\right\} \end{aligned}}$$

予測子

修正子

オイラー法で予測をし、その値を使って後に修正する。

予測子・修正子法（3）

k=1の場合、t_{n-1}, t_n, t_{n+1}を用いて、
積分をシンプソン公式で近似

$$\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} f(t,y)\,dt = \frac{\Delta t}{3}\Big(f(t_{n-1},y_{n-1}) + 4f(t_n,y_n) + f(t_{n+1},y_{n+1})\Big)$$

$$\boxed{\begin{aligned} y^*_{n+1} &= y_{n-3} + \frac{4\Delta t}{3}\left\{2f(t_{n-2},y_{n-2}) - f(t_{n-1},y_{n-1}) + 2f(t_n,y_n)\right\} \\ y_{n+1} &= y_{n-1} + \frac{\Delta t}{3}\left\{f(t_{n-1},y_{n-1}) + 4f(t_n,y_n) + f(t_{n+1},y^*_{n+1})\right\} \end{aligned}}$$

ミルン法

アダムス・バッシュフォース法

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y)\, dt$$

区間　$[t_n , t_{n+1}]$で f(t,y)を多項式近似して積分する。

2点 t_{n-1}, t_n を用いて、1次直線で外挿する。

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2}\left\{3f(t_n, y_n) - f(t_{n-1}, y_{n-1})\right\}}$$

3点 t_{n-2}, t_{n-1}, t_n を用いて、2次曲線で外挿する。

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{12}\left\{23f(t_n, y_n) - 16f(t_{n-1}, y_{n-1}) + 5f(t_{n-2}, y_{n-2})\right\}}$$

高階微分方程式

高階常微分方程式

$$\frac{d^n}{dt^n}y(t)=f(t,y,\frac{dy}{dt},\cdots,\frac{d^{n-1}y}{dt^{n-1}})$$

はn元の連立1階常微分方程式に帰着できる。

$$\frac{dy_1}{dt}=f(t,y_1,\cdots,y_{n-1})$$

$$\frac{dy_2}{dt}=y_1,\cdots,\frac{dy_n}{dt}=y_{n-1}$$

例）運動方程式

$$m\frac{d^2\vec{x}}{dt^2}=\vec{F}$$

$$\frac{d\vec{x}}{dt}=\vec{v},\ \frac{d\vec{v}}{dt}=\frac{\vec{F}}{m}$$