数値解析
第拾参回　常微分方程式

舟木　剛

平成30年1月17日２限

シラバス

- 授業の目的
  - 工学分野でよく用いられる数値計算の算法ならびにそれらの数値的な特性について理解させる.
- 授業計画
  - 数値計算と誤差（1回）
    - 数値計算の必要性ならびに誤差の種類について説明するとともに，行列式とその性質，行及び列の交換などの基本演算，逆行列の定義と求め方について説明する.
  - 代数方程式（2回）
    - ２分法，Newton-Raphson 法，Bailey 法について解説する．また，多変数に対するNewton-Raphson 法と収束に関する留意点について述べる.
  - 連立方程式（３回）
    - Gauss の消去法，Gauss-Jordan の掃き出し法，LU 分解法の手順ならびに計算複雑度について解説する．また，Jacobi 法，Gauss-Seidel 法，SOR 法などの反復法について手順並びに収束条件について解説する.
  - 行列の固有値（３回）
    - 固有値の性質，べき乗法，Householder 法，QR 法について述べる．QR 法の収束定理について解説する.
  - 補間法（２回）
    - 線形補間，Lagrange 補間，Newton 補間，スプライン補間について述べる．多項式補間については算出方法をスプライン補間については３次のスプライン関数の導出方法を説明する．また，自然なスプライン関数とその特徴について解説する.
  - 関数近似（１回）
    - 最小２乗法による関数の近似について解説する.
  - 数値積分（１回）
    - 台形公式，シンプソンの公式による数値積分について解説する.
  - 常微分方程式（１回）
    - 単区分法である Euler 法，修正Euler 法，Runge-Kutta 法ならびに複区分法である Adams-Moulton の予測子・修正子法について解説する．また，数値不安定性についても解説する.
- 教科書 佐藤・中村共著「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社

常微分方程式

- 高階の微分方程式の解析解の求解は困難
  - 特に非線形微分方程式の場合
- 常微分方程式の初期値問題
  - 初期条件を与えて微分方程式の特殊解を求める問題
  - 常微分方程式$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$
  - 初期条件 $\begin{cases} x = x_0 \\ y = y_0 \end{cases}$
    - 連続系シミュレーションとも呼ぶ
    - 微分方程式が$\frac{dy}{dx} = f(x)$の形の場合，前回の数値積分法と一致

常微分方程式の解法

- 数値解法
  - 一段階法
    - 一組の(x_i, y_i)を用いて$x = x_{i+1}$での$y = y_{i+1}$を求める
      - オイラー法，ルンゲクッタ法
  - 多段階法
    - 数組の(x_i, y_i)を用いて$x = x_{i+1}$での$y = y_{i+1}$を求める

オイラー法

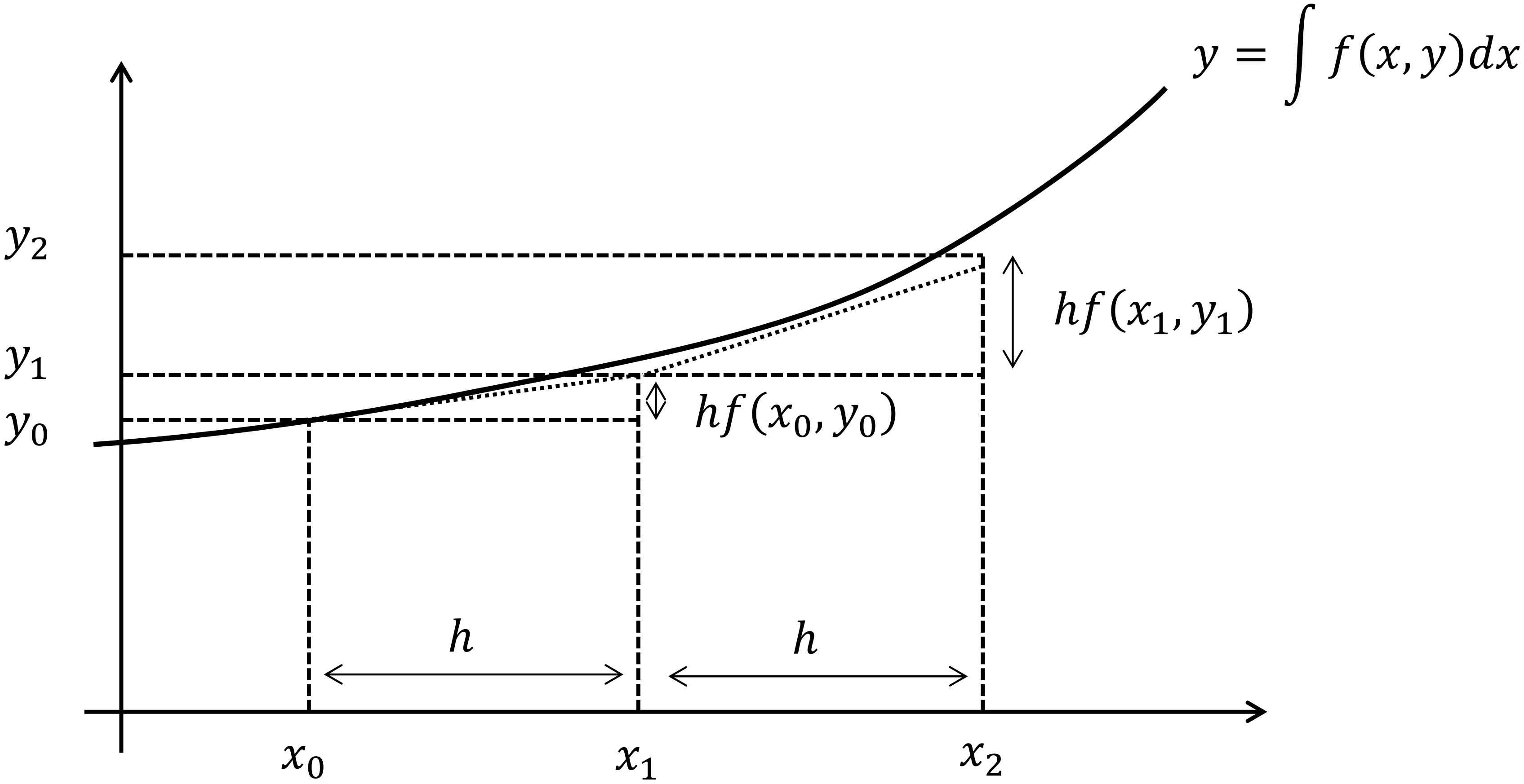
- 微分方程式　$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ →接線の傾き
- 初期値　$y(x_0) = y_0$
- 刻み幅hの分点$x = x_1, x_2, \cdots, x_n$における$y(x)$の近似値$y(x_1), y(x_2), \cdots, y(x_n)$を求める
- 微分の定義　$\frac{dy}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{y(x+h) - y(x)}{h}$
  - 近似$y'(x) = f(x, y) \cong \frac{y(x+h) - y(x)}{h}$ → 差は離散化誤差
  - $y(x + h) \cong y(x) + hf(x, y)$
  - 初期値の次の点
    - $x_1 = x_0 + h$
    - $y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$

  漸化式

  $x_{i+1} = x_i + h$

  $y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$

オイラー法



オイラー法

- 離散化誤差　$f(x,y) - \frac{y(x+h)-y(x)}{h}$

量子化誤差とは違う

  - $y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$
    - 一回計算する毎に誤差が生じる
    - 次の計算で誤差を含んだy_{i+1}を用いるため，誤差が累積する
      - 1ステップ毎の誤差 →局所離散化誤差
      - $x = x_n$に達した時の誤差　→大域離散化誤差
  - 解曲線の傾きは$x = x_i \rightarrow x_i + h$の間も変化している
    - 平均的な傾きで評価したほうが良い？

オイラー法

- 微分方程式$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$
  - 解析解$y(x)$の$x = x_0$近傍でのテイラー展開
    - $y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_0) + \cdots$
      - ただし$y(x_0) = y_0$。$y'(x_0) = f(x_0, y_0)$は点(x_0, y_0)での接線の傾き
      - hが十分に小さいときは，h^2以上の項は無視できる
        - $y(x_0 + h) \cong y(x_0) + hy'(x_0) = y(x_0) + hf(x_0, y_0)$
      - $x_1 = x_0 + h, y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) \rightarrow x_{i+1} = x_i + h, y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$
        - 分点x_iでの近似解y_iから，次の分点x_{i+1}の近似解y_{i+1}が求まる

オイラー法

- オイラー法の打ち切り誤差
  - h^2以上の項を無視 → $O(h^2) \cong \frac{h^2}{2!} f'(x_0)$
    - 繰り返し計算によって誤差が蓄積する
    - オイラー法のn回繰り返しによる打切り誤差
      - 初期値$x = x_0$から$x = x_n$までをn等分した刻み幅$h = \frac{x_n - x_0}{n}$
      - $E \cong n \times \frac{h^2}{2!} f'(x_0) = n \times \frac{x_n - x_0}{n} \frac{h}{2!} f'(x_0) = \frac{x_n - x_0}{2} h f'(x_0) = O(h)$
        - 誤差は刻み幅hに比例する$O(h)$
        - 誤差を小さくするには刻み幅hを小さくする必要あり

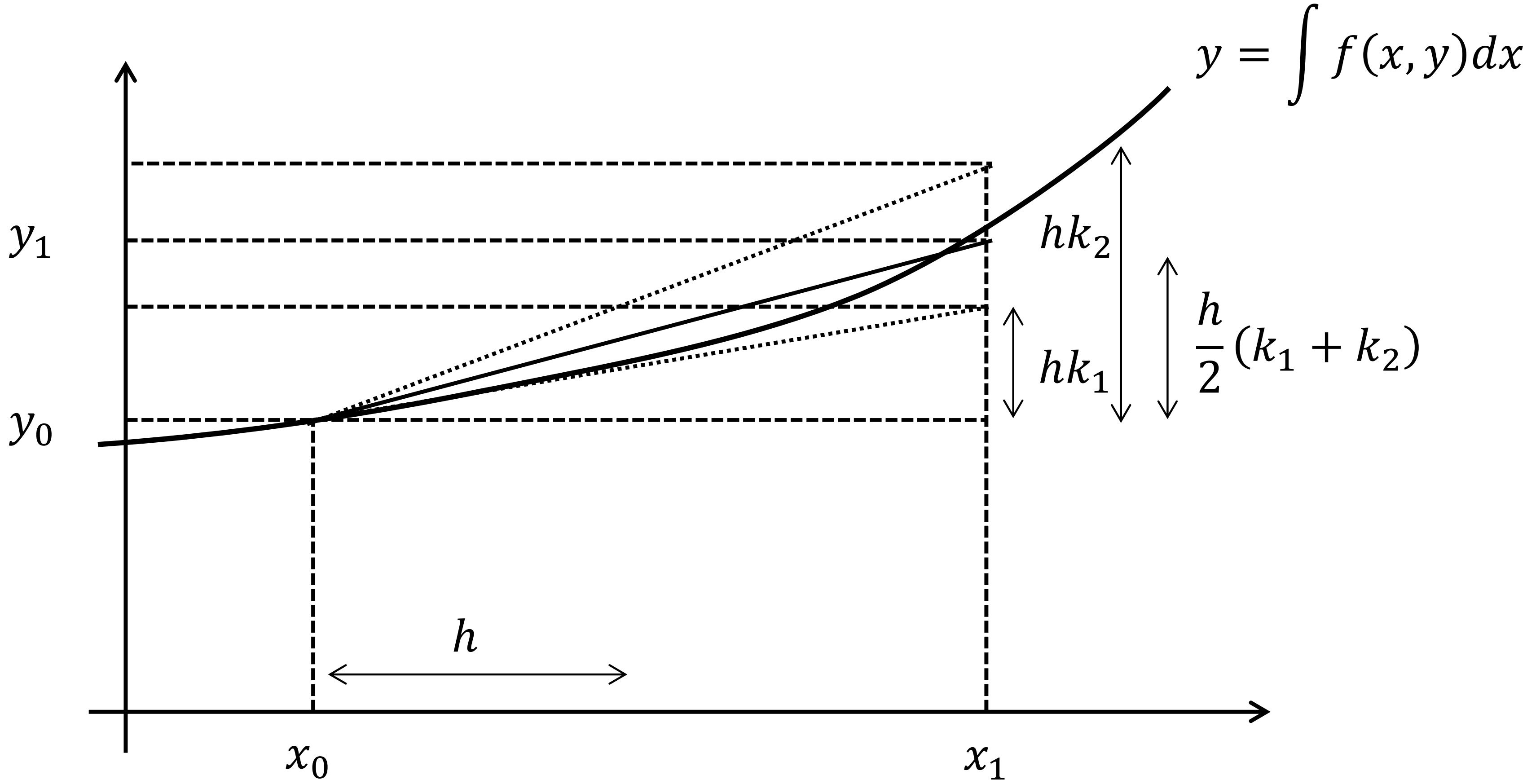
2次のルンゲクッタ法（ホイン法）

- オイラー法　→　積分区間の始点の傾きを用いる
  - 始点の傾き　$y'(x_i) = f(x_i, y_i)$
  - $y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$
- ホイン法　→　積分区間の始点と終点の傾きの平均値を用いる
  - 始点の傾き　$y'(x_i) = f(x_i, y_i)$
  - 終点の傾き　$y'(x_{i+1}) = f(x_{i+1}, y_{i+1}) = f\big(x_i + h, y(x_i + h)\big)$
  - $y_{i+1} = y_i + h\frac{f(x_i, y_i) + f\big(x_i + h, y(x_i + h)\big)}{2}$
    - 終点の値$y(x_i + h)$は未知なのでどうする？

2次のルンゲクッタ法（ホイン法）

- 終点の値をオイラー法で近似
  - $y(x_i + h) \cong y_i + hf(x_i, y_i)$
  - $y_{i+1} = y_i + h\frac{f(x_i,y_i)+f\left(x_i+h,y_i+hf(x_i,y_i)\right)}{2}$
  - 漸化式の一般形
    - $x_{i+1} = x_i + h$
    - $k_1 = f(x_i, y_i)$
    - $k_2 = f(x_i + h, y_i + hk_1)$
    - $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$

2次のルンゲクッタ法（ホイン法）



2次ルンゲクッタ法（ホイン法）

- $y(x)$の$x = x_0$近傍でのテイラー展開
  - $y(x_0+h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_0) + \cdots$
    $$= y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + O(h^3)$$
  - $y(x_0+h) - y(x_0) = \Delta y = hy'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + O(h^3)$
- 計算区間の両端の導関数を用いて増分Δyを表すことを考える
  - $\Delta y = h\{\alpha y'(x_0) + \beta y'(x_0+h)\}$
- 導関数$y'(x_0)$の$x = x_0$近傍でのテイラー展開
  - $y'(x_0+h) = y'(x_0) + hy''(x_0) + \frac{h^2}{2!}y'''(x_0) + \cdots$
    $$= y'(x_0) + hy''(x_0) + O(h^2)$$

2次ルンゲクッタ法（ホイン法）

- $\Delta y = h\{\alpha y'\,(x_0) + \beta y'(x_0 + h)\}$
$$= h\{\alpha y'\,(x_0) + \beta[y'(x_0) + hy''\,(x_0) + O(h^2)]\}$$
$$= (\alpha + \beta)y'\,(x_0)h + \beta y''\,(x_0)h^2 + \beta O(h^2)h$$
$$= (\alpha + \beta)y'\,(x_0)h + \beta y''\,(x_0)h^2 + O(h^3)$$
$$= y'(x_0) + hy''\,(x_0) + O(h^2)$$
- $\begin{cases} \alpha + \beta = 1 \\ \beta = \frac{1}{2} \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \alpha = \frac{1}{2} \\ \beta = \frac{1}{2} \end{cases}$
- 一般表現
- $\begin{cases} k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_n + h, y_n + hk_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \end{cases}$

ルンゲクッタ法

- 4次のルンゲクッタ法の予備知識
- 合成関数の微分
  - $z = f(u, v), u = g(x, y), v = h(x, y)$
  - $z' = \frac{dz}{dx} = \frac{\partial f}{\partial u}\frac{du}{dx} + \frac{\partial f}{\partial v}\frac{dv}{dx}$
- $y(x+h) = y(x) + hy' + \frac{1}{2}h^2 y'' + \frac{1}{3!}h^3 y''' + \frac{1}{4!}h^4 y'''' + \cdots$
  - $y' = \frac{dy}{dx} = f(x, y)$
  - $y'' = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}$
  - $y''' = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\frac{dy}{dx} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + f^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{df}{dx}$
  - $y'''' = \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + 3\frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y}\frac{dy}{dx} + 3\frac{\partial^3 f}{\partial x \partial y^2}\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + \frac{\partial^3 f}{\partial y^3}\left(\frac{dy}{dx}\right)^3 + 3\frac{d^2 y}{dx^2}\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + 3\frac{dy}{dx}\frac{d^2 y}{dx^2}\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{d^3 y}{dx^3}\frac{\partial f}{\partial y}$
    $= \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + 3f\frac{\partial^3 f}{\partial x^2 \partial y} + 3f^2\frac{\partial^3 f}{\partial x \partial y^2} + f^3\frac{\partial^3 f}{\partial y^3} + 3\frac{df}{dx}\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + 3f\frac{df}{dx}\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{d^2 f}{dx^2}\frac{\partial f}{\partial y}$

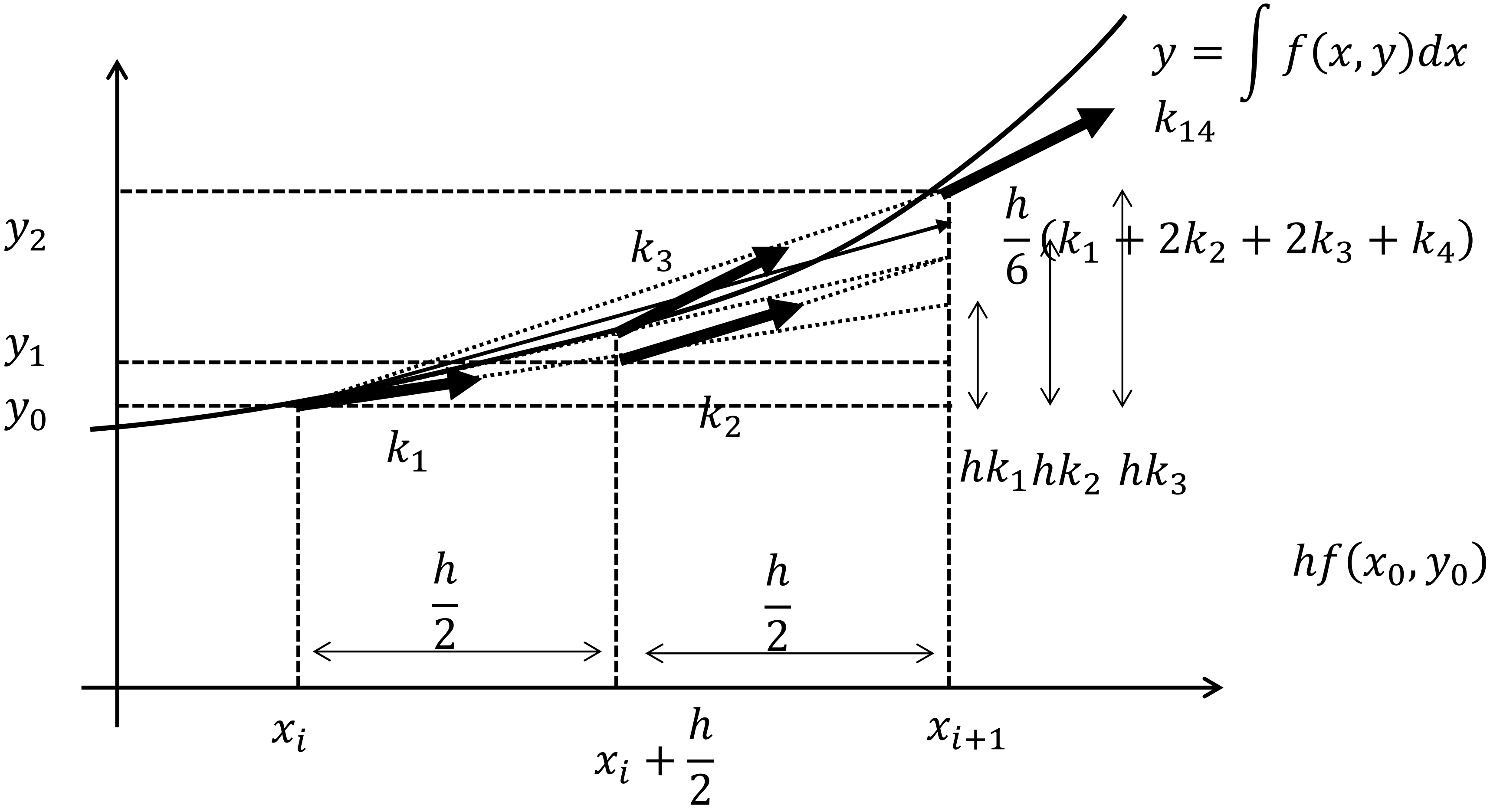
ルンゲクッタ法

- $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
  - $k_1 = f(x_i, y_i)$
  - $k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right)$
  - $k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right)$
  - $k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3)$
  - 誤差は$O(h^5)$

ルンゲクッタ法

- 2実数変数x, yの関数$f(x, y)$がx_0, y_0の近傍でN回連続微分可能
  - $f(x_0 + h, y_0 + k) = \sum_{r=0}^{N-1} \frac{1}{r!}\left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)^r f(x_0, y_0) + R_N$
    - $R_N = \frac{1}{r!}\left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)^N f(x_0 + \theta h, y_0 + \theta k)$
      - $0 < \theta < 1$
- 係数をテイラー展開
  - $k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right)$
  - $k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right)$
  - $k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3)$
  - $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$とすると，$y(x + h)$のテイラー展開に$O(h^4)$で一致

ルンゲクッタ法



$y = \int f(x,y)dx$
k_{14}
y_2
k_3
$\frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
y_1
y_0
k_2
k_1
$hk_1 hk_2\ hk_3$
$hf(x_0, y_0)$
$\frac{h}{2}$
$\frac{h}{2}$
x_i
$x_i + \frac{h}{2}$
x_{i+1}

常微分方程式の積分計算

- 常微分方程式$y' = f(x,y) = f(x)$の場合
  - オイラー法
    - $y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) = y_i + hf(x_i)$　→区分求積法
  - ホイン法
    - $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$
      - $k_1 = f(x_i, y_i), k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1)$より
        $k_1 = f(x_i), k_2 = f(x_i + h)$
      - $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_i + h)\right)$　→台形公式

常微分方程式の積分計算

- ルンゲクッタ法
  - $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
    - $k_1 = f(x_i, y_i), k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right), k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right), k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3)$より
    $$k_1 = f(x_i), k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}\right), k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}\right), k_4 = f(x_i + h)$$
    - $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}\left(f(x_i) + 2f\left(x_i + \frac{h}{2}\right), +2f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + f(x_i + h)\right)$
    $= y_i + \frac{h}{6}\left(f(x_i) + 4f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + f(x_i + h)\right)$
    →シンプソン公式$\left(h = \frac{1}{2}\right)$