計算情報学Ｉ

名古屋大学　情報文化学部
自然情報学科３年
第１２回

鈴木泰博
情報文化学部・大学院情報科学研究科
複雑系科学専攻

Science of
interactions

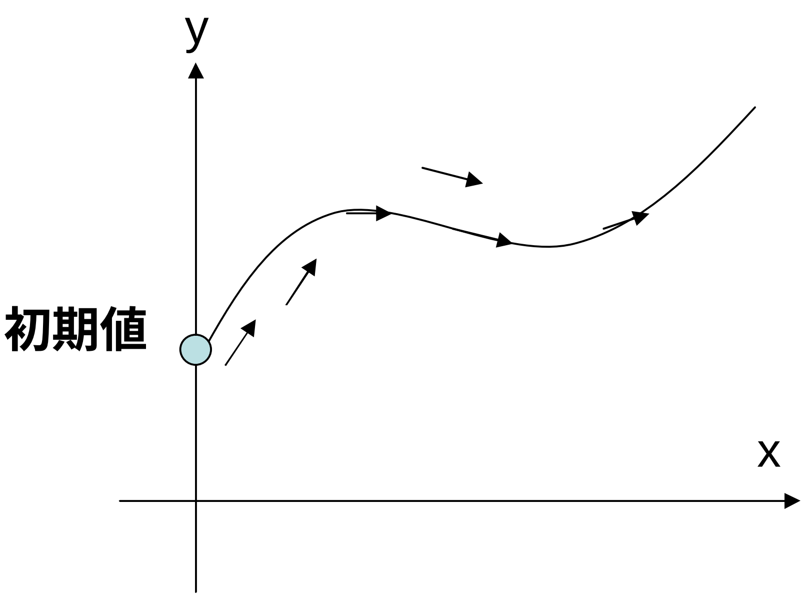
Agenda

計算情報学 Ｉ 第１２回

微分方程式の数値解法　その２

Science of
interactions

微分方程式の数値解法
初期値問題



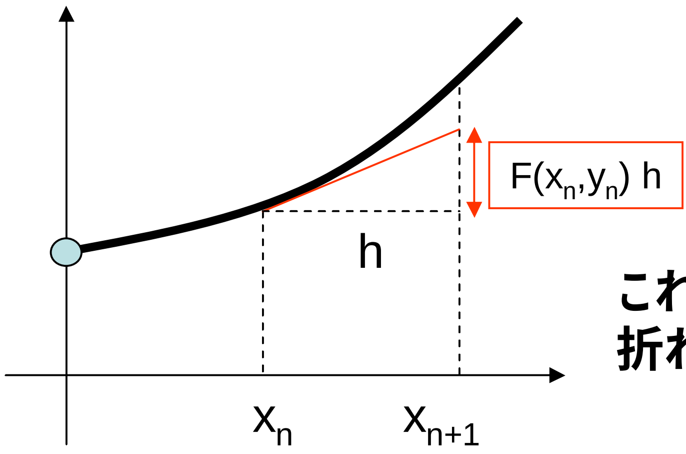
$$\frac{dx}{dy} = f(x, y)$$

とは、x,yの各々の点での傾きがf(x,y)の値を持つ方程式を表している。

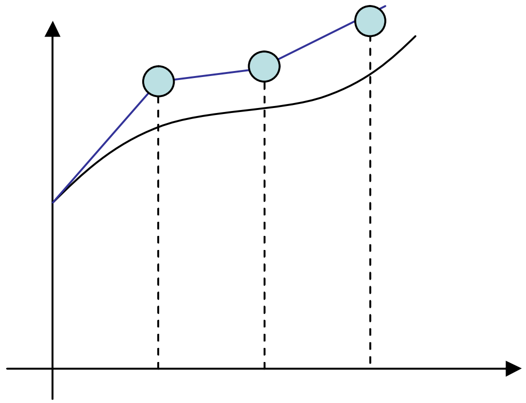
こうした解曲線は一般には無数に存在するが、初期値を与えることによりそこからの値をたどることで一意に決めることができる。

Science of interactions

微分方程式の数値解法
～オイラー法



これを繰り返すことにより
折れ線近似を行う。



$$\frac{f(x_n + h) - f(x_n)}{h} \cong f'(x_n)$$

演習：上式を$f(x_n+h)$について解け．ただし、$f'(x)=F(x,y)$とする。

オイラー法の基本式

$$\frac{f(x_n + h) - f(x_n)}{h} \cong f'(x_n)$$

$$\boxed{\begin{aligned} & y' = y(x+h) \cong y(x) + hF(x, y) \ldots \Leftarrow y' \\ & y(x_0) = a \end{aligned}}$$

オイラー法の基本式

演習：以下の微分方程式に対するオイラー法の基本式を求めよ。

① 2y' + 3y = x

② y' – xy = 0

Science of interactions

オイラー法の基本式

演習：以下のオイラー法の基本式について最初の数項のみ計算せよ。

① $y' = y(x+h) = y(x) + h(x - 3y(x)) / 2$
ただし、$y(0) = 1$, $h = 0.1$ **とする。**

② $y' = y(x+h) = y(x) + hxy(x)$
ただし、$y(1) = 1$, $h = 0.01$**とする。**

Science of interactions

$$\boxed{\begin{array}{l} ① \; y(x+h) = y(x) + h(x - 3y(x))/2 \\ \quad y(0) = 1,\ h = 0.1 \end{array}}$$

$$y(0 + 0.1) = y(0) + 0.1\,(0 - 3y(0))/2$$
$$= 1 + 0.1\,(0 - 3 \times 1)/2 = 0.85$$

$$y(0.1 + 0.1) = y(0.1) + 0.1\,(0.1 - 3y(0.1))/2$$
$$= 0.85 + 0.1(0.1 - 3 \times 0.85)/2$$
$$= 0.7275$$

$$\boxed{\begin{array}{l} ② \; y(x+h) = y(x) + hxy(x) \\ \quad y(1) = 1,\ h = 0.01 \end{array}}$$

$$y(1 + 0.01) = y(1) + 0.01 \times 1 \times y(1)$$
$$= 1 + 0.01 \times 1 \times 1 = 1.01$$

$$y(1.01 + 0.01) = y(1.01) + 0.01 \times 1.01 \times y(1.01)$$
$$= 1.01 + 0.01 \times 1.01 \times 1.01 = 1.020201$$

Science of interactions

オイラー法
another view②

微分方程式の初期値問題は、

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

の形で書ける。数値計算での解は厳密解が得られないので近似解を得ることを考える。そこで考える区間を等分割し、$x_0=a$, $x_n=a+nh$, $n=1,2,\ldots N$ とする。

$y(x)$を $x=x_0$ の近傍でテイラー展開すると

$$\boxed{y(x) = y(x_0) + (x - x_0)y'(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 y''(\xi_0)}$$

$y(x_0) = y_0 = Y_0$, $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$ 2乗の項を無視して$x = x_0 + h = x_1$
$y(x_1)$の近似値をY_1 $y(x_1)$とすると、

$$\boxed{Y_1 = Y_0 + hf(x_0, y_0)}$$

同様に$Y_2=Y_1+hf(x_1,Y_1)$

$Y_3=Y_2+hf(x_2, Y_2)$

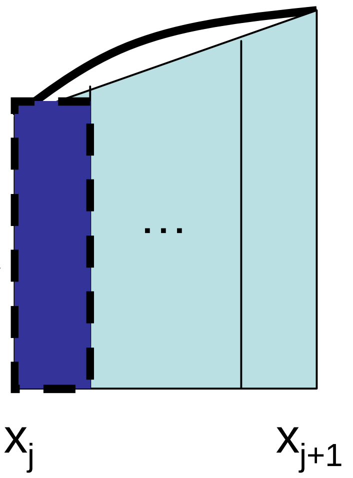
….

$$\longrightarrow \begin{cases} Y_0 = y_0 \\ Y_{n+1} = Y_n + hf(x_n, y_n), n = 0,1,2,\ldots, N-1 \end{cases}$$

オイラー法とはテイラー展開を第1項で打ち切って近似解を求める方法

Science of interactions

オイラー法
another view③



$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx$$

この面積を hf(x_j, y_j,)で近似

Science of interactions

オイラー法のまとめ

① $$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(x_n, y_n)$$

y'=f(x, y)の左辺を差分で置き換えたもの。

② $$y(x) = y(x_0) + (x - x_0)y'(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 y''(\xi_0)$$

テイラー展開を第1項で打ち切ったもの

③ $$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx$$

積分をhf(x,y)で置き換えたもの

簡便な方法ではあるが、精度はあまりよくない。
例）　y'=2xy

Science of interactions

ルンゲ-クッタ法

- 精度を上げる方法はいろいろあるが、本方法では直前のY_nの値のみを用いて、オイラー法のごとく計算できる(１段階法)

- オイラー法に比べてずっと精度がよい

- 微分方程式の数値解法における標準手法

Science of interactions

ルンゲ-クッタ法

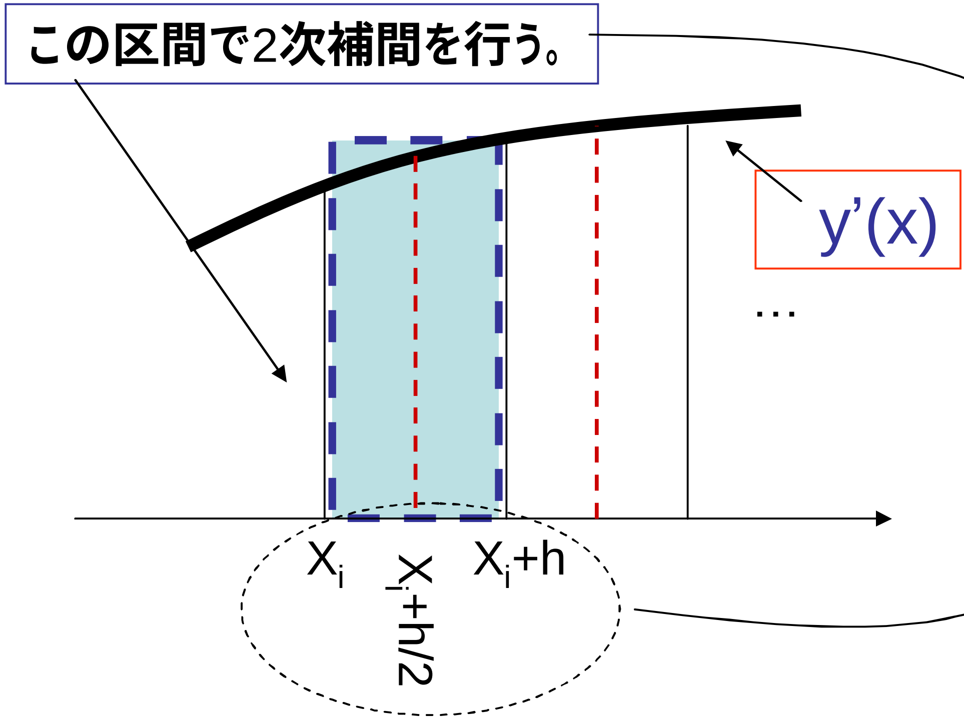
$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(x_i, y_i) \\
k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}\right) \\
k_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}\right) \\
k_4 &= f(x_i + h, y_i + hk_3) \\
y(x_{i+1}) &= \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
\end{aligned}
$$

Science of interactions

覚えていますか？

ルンゲクッタ法の幾何学的意味は？

ルンゲクッタ法
another view②



シンプソンの公式

$$y'(x) = a\,(x - x_j)^2 + b(x - x_j) + c$$

この3点を利用して、a,b,cを決定する。

Science of interactions

ルンゲクッタ法
another view ②

$y'(x) = a\,(x - x_j)^2 + b(x - x_j) + c$ が x_i, $x_i + h/2$, $x_i + h$を通ることより、

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \left(\frac{h}{2}\right)^2 & \frac{h}{2} & 1 \\ h^2 & h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y'(x_i) \\ y'(x_i + \frac{h}{2}) \\ y'(x_i + h) \end{pmatrix}$$

左から逆行列をかけ、$(a,b,c)^t$ を求めると、

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{h^2} y'(x_i) - \frac{4}{h^2} y'(x_i + \frac{h}{2}) + \frac{2}{h^2} y'(x_i + h) \\ -\frac{3}{h} y'(x_i) + \frac{4}{h} y'(x_i + \frac{h}{2}) - \frac{1}{h} y'(x_i + h) \\ y'(x_i) \end{pmatrix}$$

これを元の２次補間の方程式に代入して整理すると、

$$y(x_i + h) = \frac{h}{6}(y(x_i, y(x_i)) + 4y(x_i + \frac{h}{2}, y(x_i + \frac{h}{2})) + y(x_i + h, y(x_i + h)))$$

Science of interactions

演習

y’-2xy=0　をルンゲクッタ法により計算せよ。
ただし、x=0のときy(0)=1, h=0.1とする。

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(x_i, y_i) \\
k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right) \\
k_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right) \\
k_4 &= f(x_i + h, y_i + hk_3) \\
y(x_{i+1}) &= \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
\end{aligned}
$$

Science of
interactions

k_1	$=$	$f(x_i, y_i)$
k_2	$=$	$f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1)$
k_3	$=$	$f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2)$
k_4	$=$	$f(x_i + h, y_i + hk_3)$
$y(x_{i+1})$	$=$	$\frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$

y’-2xy=0 をルンゲクッタ法により計算せよ。
ただし、x=0のときy(0)=1とする。

演習

f (x,y) = f (x0, y0)= 2 x0 y0 = 2 x 0 x 1 = 0 … k1

f (x0+h/2, y0+hk1/2) = 2 (x0 + 0.1/2)(y0 + k1/2)
= 2 (0 + 0.05)(1 + 0.1/2 x 0)
= 0.1 … k2

f (x0 + h/2, y + hk2/2) = 2 (x0 + 0.1/2)(y0 + 0.1/2 x 0.1)
= 2 x 0.05 x (1 + 0.005)
= 0.1005 … k3

f (x0 + h, y0 + hk3) = 2(x0 + 0.1)(y0 + 0.1 x 0.1005)
= 2 x 0.1 x (1 + 0.10005)
= 0.2021 … k4

y1 = (k1 + 2k2 + 2k3 +k4) / 6 = 1.040811

Science of interactions

1段階法の誤差の評価

Science of
interactions

誤差の評価

一段階法の微分方程式の数値解法を大雑把に見積もってみる。

$y(x)$: 微分解
$Y(x)$: 差分解

差分によるx_iの時点からx_{i+1}の増分予測

$$| y(x_{i+1}) - Y(x_i + h)| = |y(x_{i+1}) - y(x_i) - \Delta t F(x_i, y(x_i))|$$

微分解でのx_{i+1} と x_iの実際の差

より

$$\delta = \left| \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{\Delta t} - F(x_i, y(x_i)) \right|$$

Science of interactions

誤差の評価

y(x): 微分解
Y(x): 差分解

$$\delta = \left| \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{\Delta t} - F(x_i, y(x_i)) \right|$$

演習：オイラー法の誤差評価を行え

Hint, **テイラーの公式より** $y(x_{i+1}) = y(x_i) + \Delta t\, y'(x_i) + O((\Delta t)^2)$

Science of interactions

誤差の評価

y(x): 微分解
Y(x): 差分解

$$\delta = \left| \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{\Delta t} - F(x_i, y(x_i)) \right|$$

演習：オイラー法の誤差評価を行え

Hint, **テイラーの公式より** $y(x_{i+1}) = y(x_i) + \Delta t y'(x_i) + O((\Delta t)^2)$

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{\Delta t} - f(x_i, y(x_i)) = y'(x_i) - f(x_i, y(x_i)) + O(\Delta t) \approx O(\Delta t)$$

つまり、理論的には⊿tが小さければ小さいほど精度はよくなる。
だが、実際は⊿tが小さくなると桁落ちなどが生ずる可能性があるので、注意が必要

Science of interactions

誤差がΔt(1次)とは？

テイラーの公式より $y(x_{i+1}) = y(x_i) + \Delta t y'(x_i) + O((\Delta x)^2)$

–) オイラー法のスキームより $Y(x_{i+1}) = Y(x_i) + \Delta t y'(x_i)$

1ステップでの誤差は$O((\Delta x)^2)$ ← $|y(x_{i+1}) - Y(x_{i+1})| = O((\Delta x)^2)$

計算する範囲をaからbとして、区間をmに等分割したとすると、$\Delta x = (b - a)/m$

したがって、$\Delta x^2 = \Delta x(b - a)/m$。各々の区間で誤差がm回蓄積すると$\Delta x$のm倍程度、$\Delta x(b - a)/ m \times m = \Delta x(b - a)$　$O(\Delta x)$、の誤差となる。

計算は煩雑になるが（2変数のテイラー展開）、同様の議論を行うとルンゲクッタの誤差は$O(\Delta x^4)$となる。

Science of interactions

高階微分方程式の場合

例えば、2階微分方程式の場合 → U'' + U = 0, U(0)=0, U'(0)=1

別の関数を“かまして”1階微分方程式に帰着させる。

$\boxed{v = u'}$ とすると U'' = (U')' = v'

$$\boxed{\begin{cases} u' = v & u(0) = 0 \\ v' = -u & v(0) = 1 \end{cases}}$$

演習：U''' + U = 0 の場合はどうなるか？

Science of interactions

演習：U''' ＋ U = 0 **の場合はどうなるか？**

$$\overline{(\underline{(U')})')'}\ = -U$$

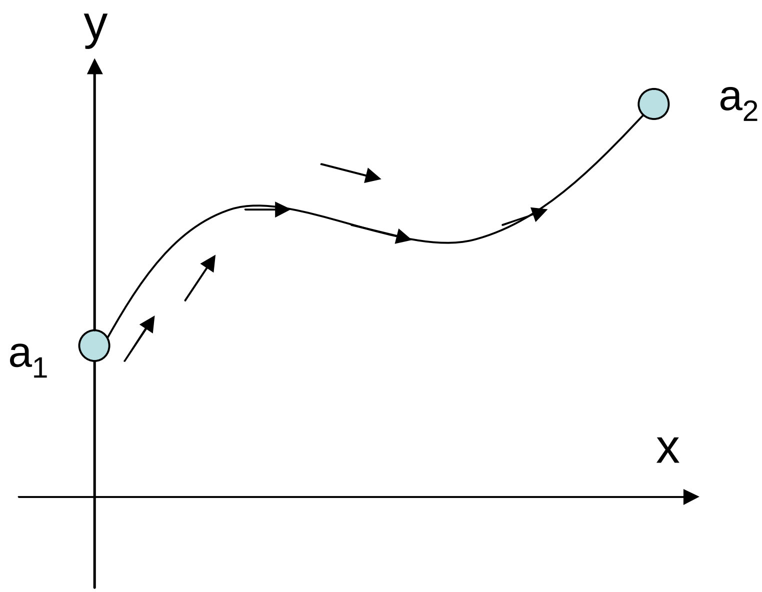
$\boxed{V' = W}$

$\boxed{U' = V}$

$$\begin{cases} u' = v \\ v' = w \\ w' = -u \end{cases}$$

Science of interactions

2階常微分方程式の境界値問題



$$\begin{cases} y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x) \\ y(0) = a_1,\ y(1) = a_2 \end{cases}$$

初期値問題と異なり、境界条件があらかじめ与えられている場合は、初期値問題とおき方か大幅に異なる。

差分方程式による近似

演習

① $y(x+h)$ を第3項までテイラー展開せよ。

② $y(x-h)$ を第3項までテイラー展開せよ。

③ ①、②より$y'(x)$について解け

④ ①、②より$y''(x)$について解け

Science of
interactions

差分方程式による近似

演習

① y(x + h) を第3項までテイラー展開せよ。

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + O((\Delta x)^2)$$

② y(x – h) を第3項までテイラー展開せよ。

$$y(x-h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + O((\Delta x)^2)$$

③ ①、②よりy'(x)について解け… ① ー ②

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = y'(x)$$

④ ①、②よりy''(x)について解け…① + ②

$$\frac{f(x+h) - 2y(x) + f(x-h)}{h^2} = y''(x)$$

Science of interactions

常微分方程式の境界値問題

$$\frac{f(x+h)-2y(x)+f(x-h)}{h^2}=y''(x)$$

$$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}=y'(x)$$

$$\begin{cases} y''=p(x)y'+q(x)y+r(x) \\ y(0)=a_1,\ y(1)=a_2 \end{cases}$$

$$\frac{f(x_j+h)-2f(x_j)+f(x_j-h)}{h^2}=p_j\frac{f(x_j+h)-f(x_j-h)}{2h}+q_j y(x_j)+r_j$$

$$\underbrace{-(1-\frac{h}{2}p_j)}_{\beta_j}y_{j-1}+\underbrace{(2+h^2q_j)}_{\alpha_j}y_j\underbrace{-(1-\frac{h}{2}p_j)}_{\gamma_j}y_{j+1}=\underbrace{-h^2r_j}_{d_j}$$

Science of interactions

境界値問題

以上を整理すると

$$
\begin{array}{cccccc}
\alpha_1 y_1 & +\gamma_1 y_2 & & & = & d_1-\beta_1 y_0 \\
\beta_2 y_1 & +\alpha_2 y_2 & +\gamma_2 y_3 & & = & d_2 \\
 & \beta_3 y_2 & +\alpha_3 y_3 & +\gamma_3 y_4 & = & d_3 \\
 & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 & & \beta_{N-1} y_{N-1} & +\alpha_{N-1} y_{N-1} & = & d_{N-1}-\gamma_{N-1} y_N
\end{array}
$$

最終的には以下の連立方程式に帰着される。

$$
\begin{pmatrix}
\alpha_1 & \gamma_1 & & & & \\
\beta_2 & \alpha_2 & \gamma_2 & & & \\
 & \beta_3 & \alpha_3 & \gamma_3 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & \beta_{N-2} & \alpha_{N-2} & \gamma_{N-2} \\
 & & & & \beta_{N-1} & \alpha_{N-1}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
d_1-\beta_1 y_0 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{N-2} \\ d_{N-1}
\end{pmatrix}
$$

あとは、ガウスの消去法などで連立方程式を解けばよい。
境界条件を様々に変える場合はLU分解をしておくと計算が楽

Science of interactions