常微分方程式の差分法による数値解析

差分法

- 1階常微分方程式（1変数の支配方程式）

$$\frac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t)$$

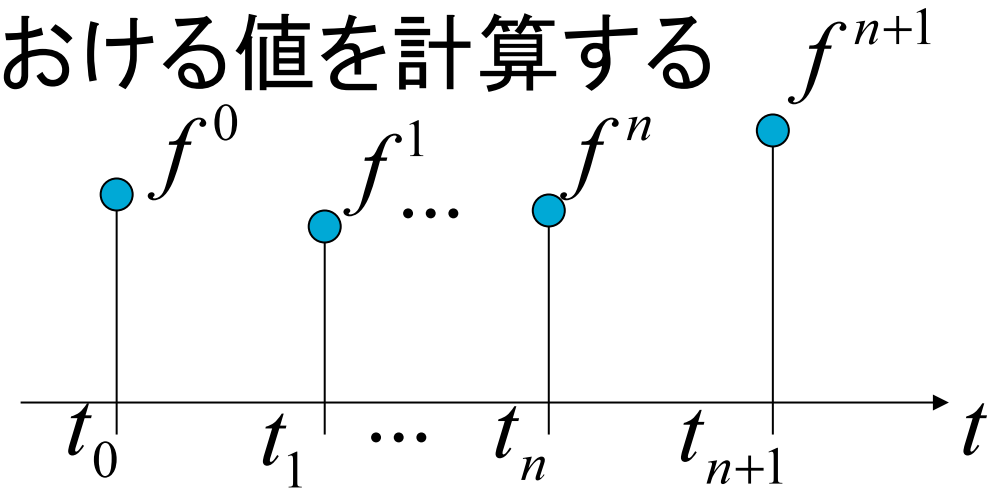
- t:多くの場合時刻
- s(t):時刻tの任意の関数

差分法の基本的性質（計算方法と誤差の関係）について
今回は紹介する。

数値計算における離散化

- とびとびの計算点（計算時刻）での値のみ計算機上では保存できる。
- 計算時刻t_nにおける値を計算する

$$f^n = f(t_n)$$

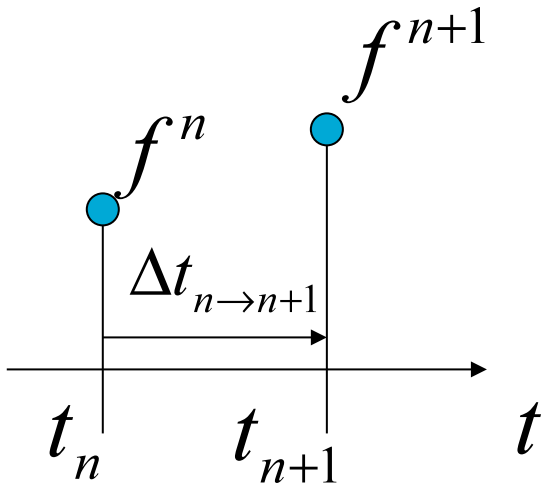


- f^nを用いて支配方程式を書き換える。（離散化）

差分法による離散化方法

- 時刻 t_n と $t_{n+1} = t_n + \Delta t_{n \to n+1}$

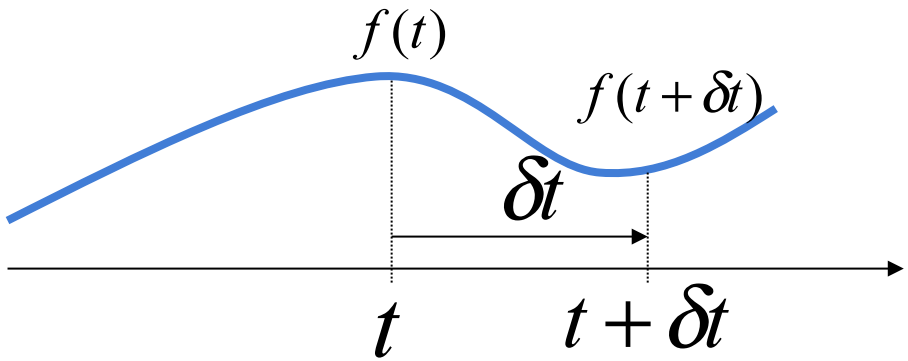
  $\Delta t_{n \to n+1}$:時間刻み幅



- Taylor展開

$$f(t+\delta t) = f(t) + \frac{df(t)}{dt}\delta t + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t)}{dt^2}\delta t^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\delta t^3 + \ldots.$$

tからδtずれた時刻での値 $f(t+\delta t)$ はTaylor展開で求めることができる（数学的に厳密）

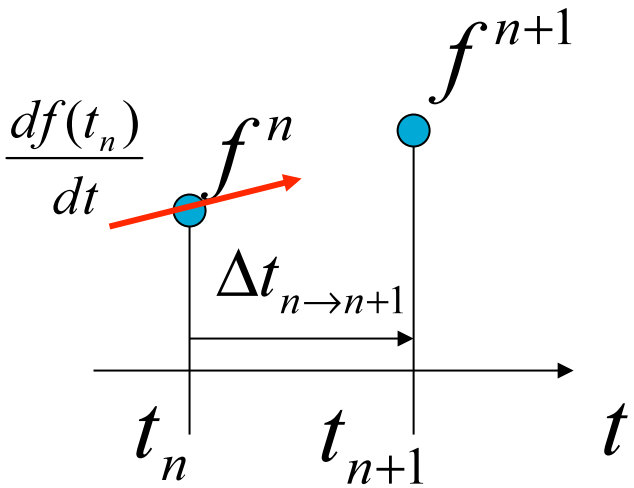


1階微分の差分法による近似

- Taylor展開($t \to t_n$, $\delta t \to \Delta t$と置き換え)

$$f(t_n + \Delta t_{n\to n+1}) = f(t_n) + \frac{df(t_n)}{dt}\Delta t_{n\to n+1} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2}\Delta t^2_{n\to n+1} + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\Delta t^3_{n\to n+1} + \ldots$$

時刻t_nにおける微分



1階微分の差分法による近似-2

- $f(t_n) = f^n, f(t_n + \Delta t_{n\to n+1}) = f(t_{n+1}) = f^{n+1}$ で書き換えれば

$$f^{n+1} = f^n + \frac{df(t_n)}{dt}\Delta t_{n\to n+1} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2}\Delta t^2_{n\to n+1} + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\Delta t^3_{n\to n+1} + \ldots.$$

- 1階微分の項について解けば

$$\frac{df(t_n)}{dt} = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}} - \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} - \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\Delta t^2_{n\to n+1} - \ldots.$$

- Δt<<1として近似

$$\frac{df(t_n)}{dt} \cong \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}}$$

離散化結果

- 時刻t_nで支配方程式が成り立つとすると、

$$\frac{df(t_n)}{dt} + Af(t_n) = s(t_n)$$

- 近似された式は、

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n \to n+1}} + Af^n \cong s(t_n)$$

$$\therefore f^{n+1} \cong f^n - Af^n \Delta t_{n \to n+1} + s(t_n) \Delta t_{n \to n+1}$$

離散結果−2

- f^{n+1}について解いて、

$$\therefore f^{n+1} \cong f^{n} - A\Delta t_{n\to n+1} f^{n} + s(t_n)\Delta t_{n\to n+1}$$

ある時刻t_nにおける値f^nがわかっていれば、その次の時刻t_{n+1}における値f^{n+1}を計算可能!!

初期条件: f^0

時刻t_1 $f^1 \cong f^0 - A\Delta t_{0\to 1} f^0 + s(t_0)\Delta t_{0\to 1}$

代入

時刻t_2 $f^2 \cong f^1 - A\Delta t_{1\to 2} f^1 + s(t_1)\Delta t_{1\to 2}$

代入

時刻t_3 $f^3 \cong f^2 - A\Delta t_{2\to 3} f^2 + s(t_2)\Delta t_{2\to 3}$

⋮

計算例

- 支配方程式 $\dfrac{df}{dt} = -\kappa f + \alpha$

- 解析解：ロジスティック曲線

$$f(t) = \frac{\alpha}{\kappa} - ce^{-\kappa t}$$

- 初期条件： $f(t_0 = 0) = 0$ ⇒ $c = \dfrac{\alpha}{\kappa}$

$$\boxed{f(t) = \frac{\alpha}{\kappa}\left(1 - e^{-\kappa t}\right)}$$

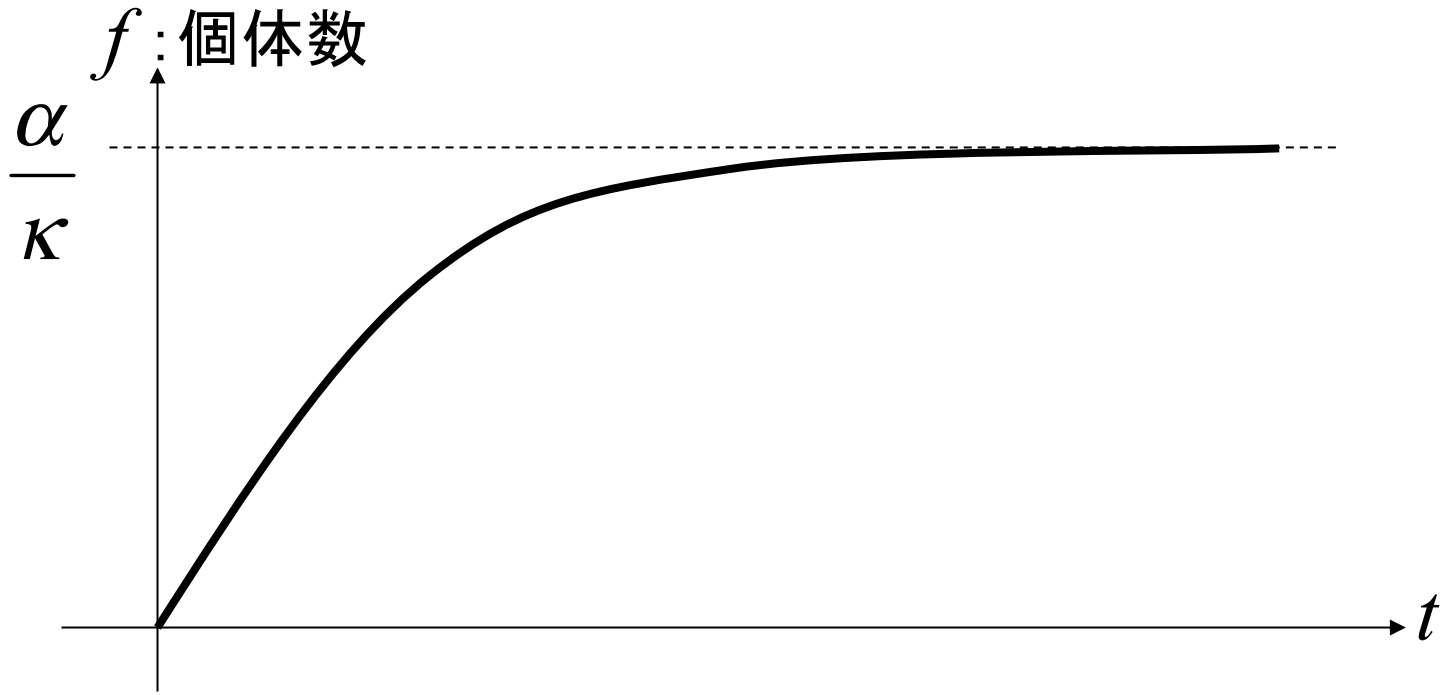
支配方程式の意味

- 生物の個体数の変化に関する数理モデル

f：ある生物の個体数
κ：1個体あたりの生存に必要な単位時間あたり食料
α：外部から単位時間あたり供給される食料
-κf+α：生存以外の生殖に使用可能な食料

「個体数の増加 $\frac{df}{dt}$ は、使用可能な食料に比例する」と仮定するモデル

支配方程式の意味



差分法による離散化結果

- 前述の離散化結果を用いれば、

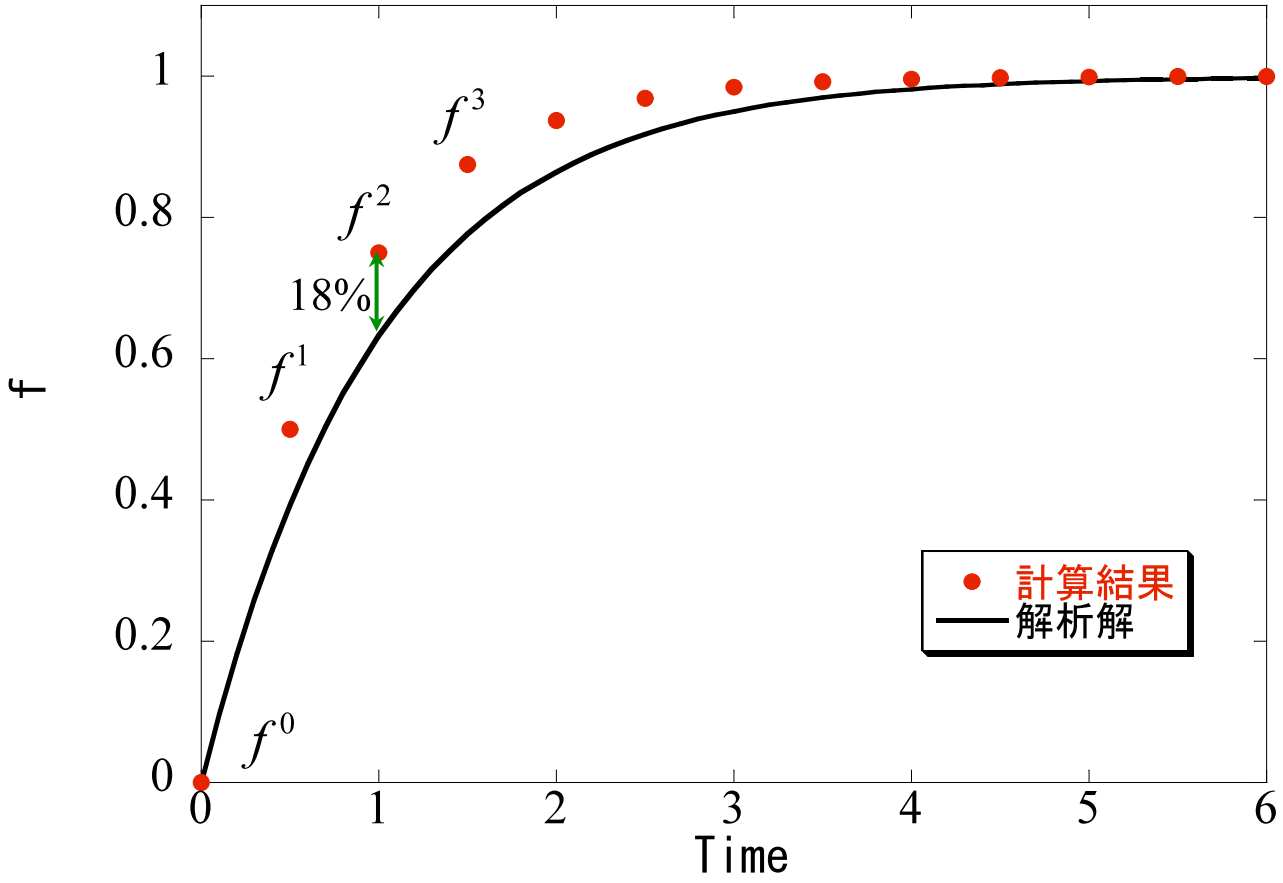
$$\frac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t)$$ において $s(t) = \alpha, A = \kappa$ として

<u>差分による離散化方程式</u>

$$\therefore f^{n+1} \cong f^{n} - \kappa \Delta t_{n \to n+1} f^{n} + \alpha \Delta t_{n \to n+1}$$

計算結果

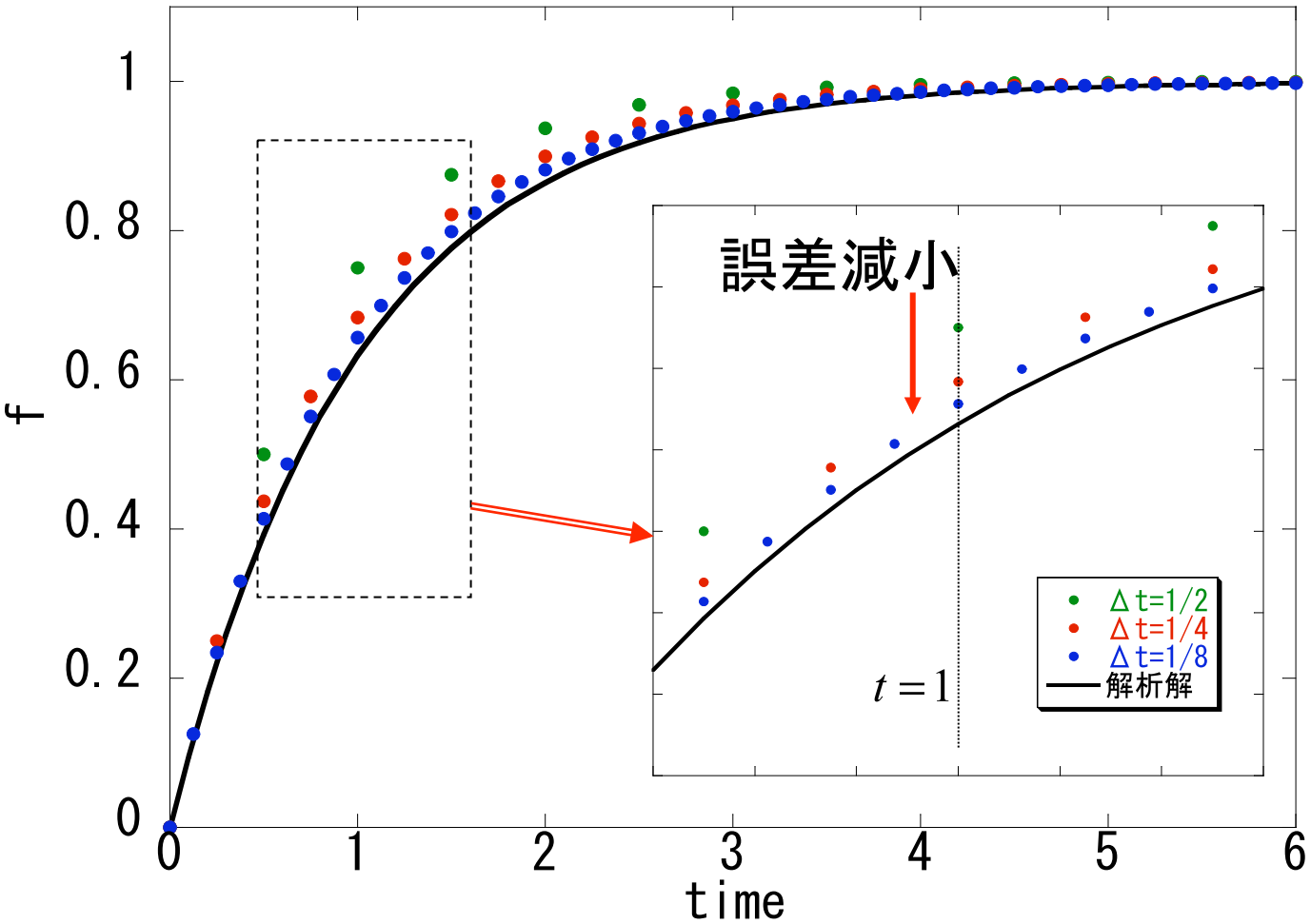
- Δt=0.5, α=κ=1.



t=1：理論=0.6321　計算結果=0.7500　相対誤差=0.1865

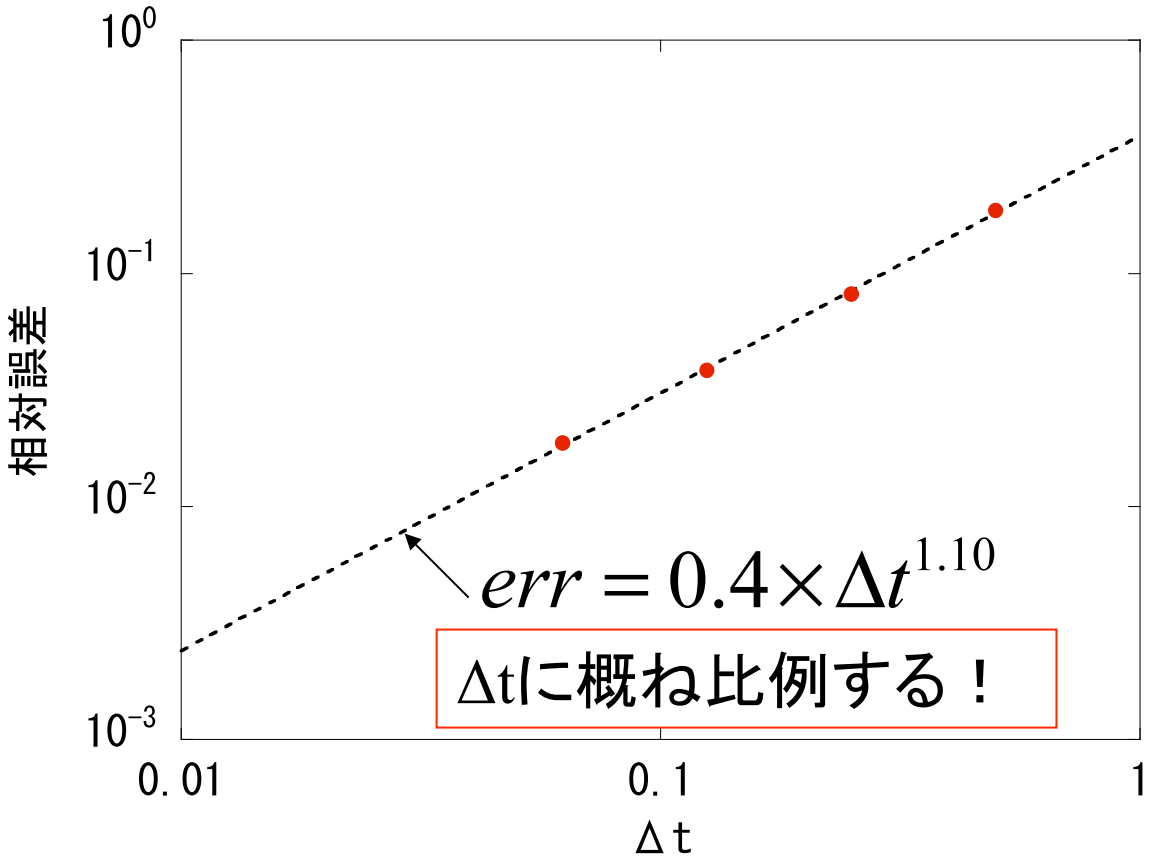
計算結果

- 同じ計算式でΔtを小さくすれば…



誤差の比較

	Δt=1/2	Δt=1/4	Δt=1/8	Δt=1/16
相対誤差	0.186482	0.0814294	0.0383954	0.0186757



計算精度（誤差項の次数）

- Taylor展開から微分を近似する時、

$$\frac{df(t_n)}{dt} = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}} \boxed{- \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} - \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\Delta t^2_{n\to n+1} - \ldots}$$

近似

$$\frac{df(t_n)}{dt} \cong \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}}$$

無視

誤差を生じる原因になっている！
誤差（項）の大きさは、Δtに概ね比例！

時間に関する離散手法のいろいろ

- 時間tに関して差分により近似するやり方は無数にある。

<u>①微分の近似式の構成方法</u>

単段解法

多段解法ールンゲ・クッタ法

<u>②支配方程式がどの時刻で成り立つのか？</u>

Euler陽解法

Euler陰解法

Crank-Nicolson法

…

時間離散手法のいろいろ
②支配方程式の時刻による違い

- <u>Euler陽解法（前述の方法）</u>

  時刻t_nで支配方程式が成り立つと考える

$$\frac{df(t_n)}{dt} + Af(t_n) = s(t_n)$$

- <u>Euler陰解法</u>

  時刻t_{n+1}で支配方程式が成り立つと考える

$$\frac{df(t_{n+1})}{dt} + Af(t_{n+1}) = s(t_{n+1})$$

時間離散手法のいろいろ
②支配方程式の時刻による違い

- Euler陰解法

Taylor展開

$$f(t+\delta t)=f(t)+\frac{df(t)}{dt}\delta t+\frac{1}{2!}\frac{d^2f(t)}{dt^2}\delta t^2+\frac{1}{3!}\frac{d^3f(t)}{dt^3}\delta t^3+\ldots.$$

$t\rightarrow t_{n+1},\delta t\rightarrow -\Delta t_{n\rightarrow n+1}$ と置き換え

$$f(t_{n+1}-\Delta t_{n\rightarrow n+1})=f(t_{n+1})-\frac{df(t_{n+1})}{dt}\Delta t_{n\rightarrow n+1}+\frac{1}{2!}\frac{d^2f(t_{n+1})}{dt^2}\Delta t_{n\rightarrow n+1}^2$$
$$-\frac{1}{3!}\frac{d^3f(t_{n+1})}{dt^3}\Delta t_{n\rightarrow n+1}^3+\ldots.$$

時間離散手法のいろいろ
②支配方程式の時刻による違い

- Euler陰解法

$t_{n+1} - \Delta t_{n\to n+1} = t_n$ だから、$f(t_{n+1} - \Delta t_{n\to n+1}) = f(t_n) = f^n$

$$f^n = f^{n+1} - \frac{df(t_{n+1})}{dt}\Delta t_{n\to n+1} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_{n+1})}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1}^2 - \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t_{n+1})}{dt^3}\Delta t_{n\to n+1}^3 + \ldots.$$

- 1階微分の項について解けば、

$$\frac{df(t_{n+1})}{dt} = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_{n+1})}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} - \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t_{n+1})}{dt^3}\Delta t_{n\to n+1}^2 + \ldots.$$

差分近似式：$\therefore \frac{df(t_{n+1})}{dt} \cong \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}}$ ⟺ 陽解法と同じ！

時間離散手法のいろいろ
②支配方程式の時刻による違い

- <u>Euler陰解法</u>

時刻t_{n+1}で支配方程式が成り立つと考える

$$\frac{df(t_{n+1})}{dt} + Af(t_{n+1}) = s(t_{n+1})$$

離散化された支配方程式

$$\frac{f^{n+1} - f^{n}}{\Delta t_{n\to n+1}} + Af^{n+1} \cong s(t_{n+1})$$

$$\therefore f^{n+1} \cong \frac{f^{n} + s(t_{n+1})\Delta t_{n\to n+1}}{1 + A\Delta t_{n\to n+1}}$$

陽解法とは異なる！

$$\therefore f^{n+1} \cong f^{n} - Af^{n}\Delta t_{n\to n+1} + s(t_{n})\Delta t_{n\to n+1}$$

Euler陰解法による計算例 −ロジスティック方程式

- 前述の離散化結果を用いれば、

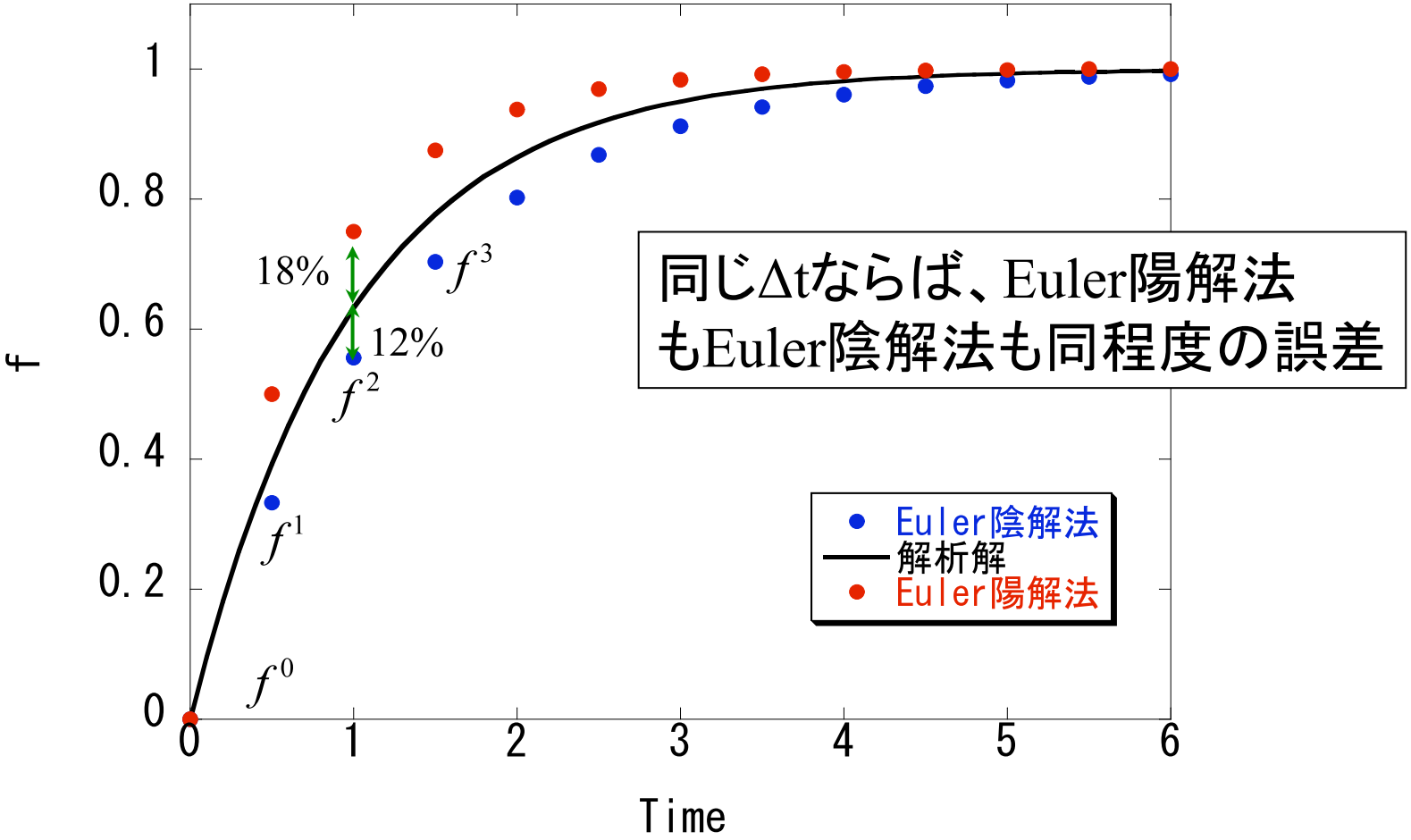
$$\frac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t)$$ において $s(t) = \alpha, A = \kappa$ として

<u>Euler陰解法による離散化方程式</u>

$$\therefore f^{n+1} \cong \frac{f^n + \alpha \Delta t_{n \to n+1}}{1 + \kappa \Delta t_{n \to n+1}}$$

計算結果

- Δt=0.5, α=κ=1.



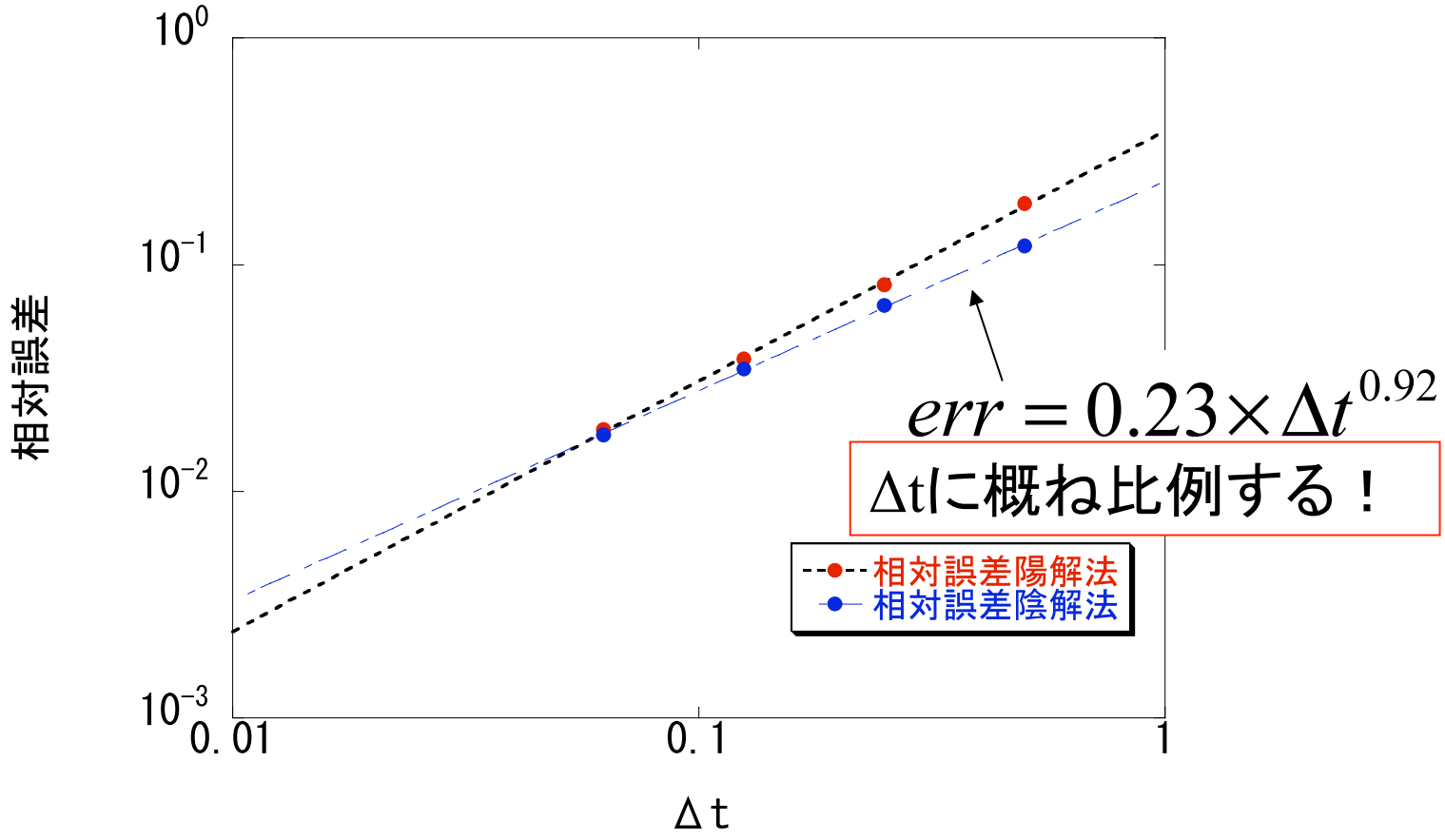
同じΔtならば、Euler陽解法もEuler陰解法も同程度の誤差

t=1：理論=0.6321　計算結果=0.556　相対誤差=−0.12

誤差の比較–Euler陰解法

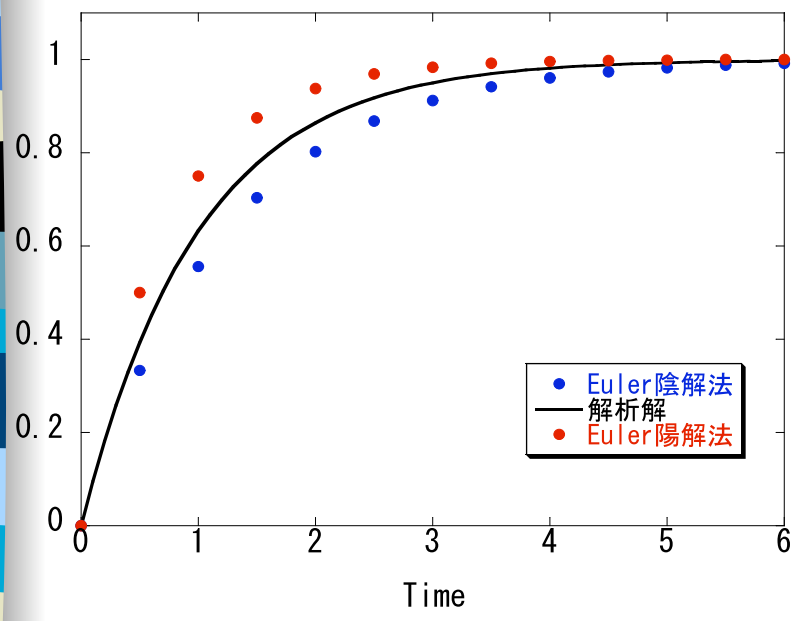
$$\frac{df(t_{n+1})}{dt} = \frac{f^{n+1} - f^{n}}{\Delta t_{n\to n+1}} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_{n+1})}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} - \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t_{n+1})}{dt^3}\Delta t^2_{n\to n+1} + \ldots$$

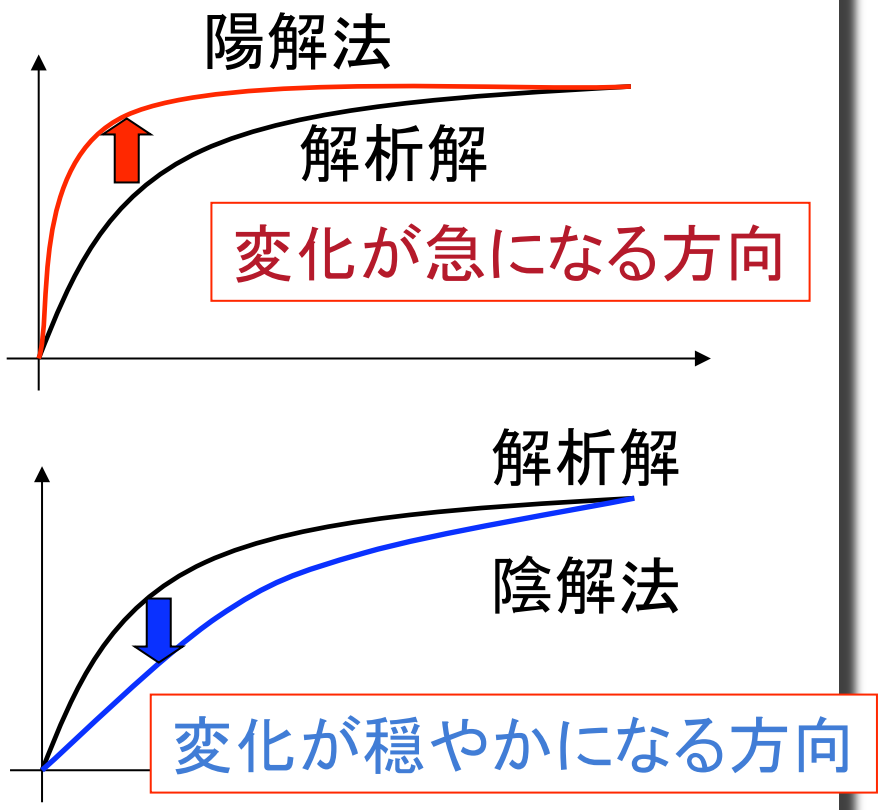
誤差項（近似で無視）：１次精度



Euler陰解法vs陽解法

- 誤差項の大きさ:同じ1次精度
- 誤差の生じ方が大きくことなる。





例題ーその2

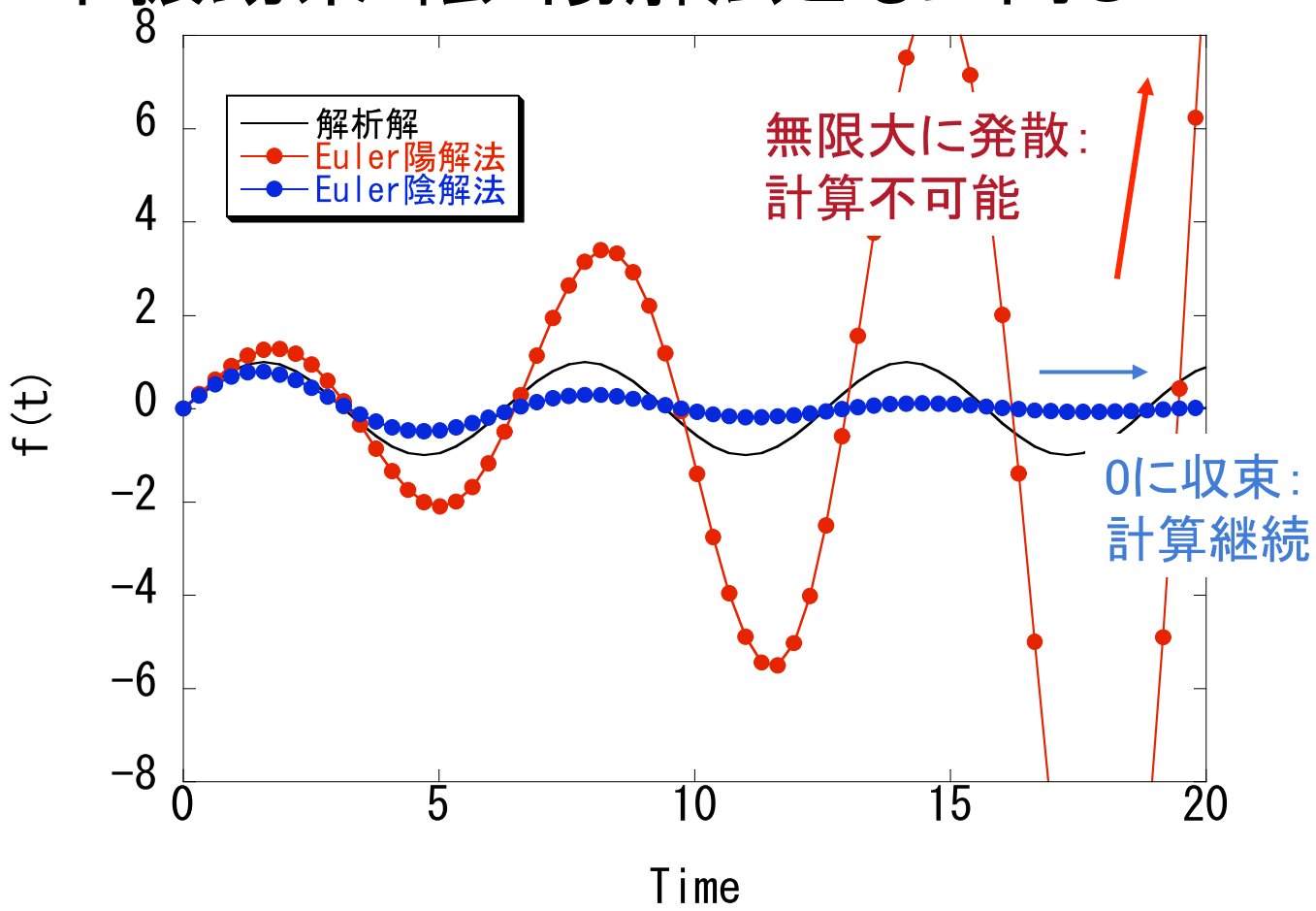
- 別の例題：単振動系 $\frac{d^2 f}{dt^2} = -f$
- 初期条件：$f(0) = 0, \frac{df(0)}{dt} = 1$
- 解析解：$f(t) = \sin(t)$

<u>Euler陽解法：</u> $\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2} = -f(t_n)$

<u>Euler陰解法：</u> $\frac{d^2 f(t_{n+1})}{dt^2} = -f(t_{n+1})$

陽解法vs陰解法計算結果比較

- 単振動系：陰・陽解法ともに同じΔt



陽解法：変化が急になる方向に誤差蓄積
陰解法：変化が穏やかになる方向に誤差蓄積

数値安定性

- 計算機では無限大は扱えない！
- 陽解法：“無限大“で計算不可能となる可能性
- 陰解法：“変化が無くなる方向”に誤差が蓄積
  計算は継続できる場合が多い
- “数値安定性”：継続して計算をできるような性質
- 数値安定性：“陰解法”>>“陽解法”

数値安定性の相違の理由

- Taylor展開により明らかになる

支配方程式: $$\frac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t)$$

<u>離散化された計算式</u>

Euler陽解法: $$\frac{f^{n+1} - f^{n}}{\Delta t_{n \to n+1}} + Af^{n} = s(t_n)$$

Euler陰解法: $$\frac{f^{n+1} - f^{n}}{\Delta t_{n \to n+1}} + Af^{n+1} = s(t_{n+1})$$

上の式が実際の計算に使用している支配方程式である。
この実際の計算式の意味を再びTaylor展開を用いて調べる

数値安定性の相違の理由

- Taylor展開（これは厳密に成り立つ式）

$$f^{n+1} = f^n + \frac{df(t_n)}{dt}\Delta t_{n\to n+1} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2}\Delta t^2_{n\to n+1} + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\Delta t^3_{n\to n+1} + \ldots.$$

代入

Euler陽解法の計算式：

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}} + Af^n = s(t_n)$$

$$\frac{f^n + \frac{df(t_n)}{dt}\Delta t_{n\to n+1} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2}\Delta t^2_{n\to n+1} + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\Delta t^3_{n\to n+1} + \ldots. - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}} + Af^n = s(t_n)$$

$$\frac{df(t_n)}{dt} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\Delta t^2_{n\to n+1} + \ldots. + Af^n = s(t_n)$$

数値安定性の相違の理由

- 結局、実際にEuler陽解法で計算している式は以下のように書き換えられる。

$$\therefore \frac{df(t_n)}{dt} + Af(t_n) = s(t_n) - \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_n)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} - \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t)}{dt^3}\Delta t_{n\to n+1}^2 - \cdots$$

比較

$$\frac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t)$$ ：もともと計算したかった支配方程式

誤差項（赤線部分）だけことなる方程式を実際には計算していることになっている！！

数値安定性の相違の理由

- Taylor展開（これは厳密に成り立つ式）

$$f^n = f^{n+1} - \frac{df(t_{n+1})}{dt}\Delta t_{n\to n+1} + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_{n+1})}{dt^2}\Delta t^2_{n\to n+1} - \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t_{n+1})}{dt^3}\Delta t^3_{n\to n+1} + \ldots.$$

代入

Euler陰解法の計算式: $\dfrac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}} + Af^{n+1} = s(t_{n+1})$

- 実際にEuler陰解法で計算している式は以下のように書き換えられる。

$$\therefore \frac{df(t_{n+1})}{dt} + Af(t_{n+1}) = s(t_{n+1}) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t_{n+1})}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(t_{n+1})}{dt^3}\Delta t^2_{n\to n+1} + \ldots.$$

数値安定性の相違の理由

- 実際の計算式の意味

元の支配方程式: $\dfrac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t)$

<u>Euler陽解法:</u> $\dfrac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t) - \dfrac{1}{2!}\dfrac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} - \ldots.$

<u>Euler陰解法:</u> $\dfrac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t) + \dfrac{1}{2!}\dfrac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} + \ldots.$

誤差を生じさせる項の大きさは同じだが、符号が反転している。

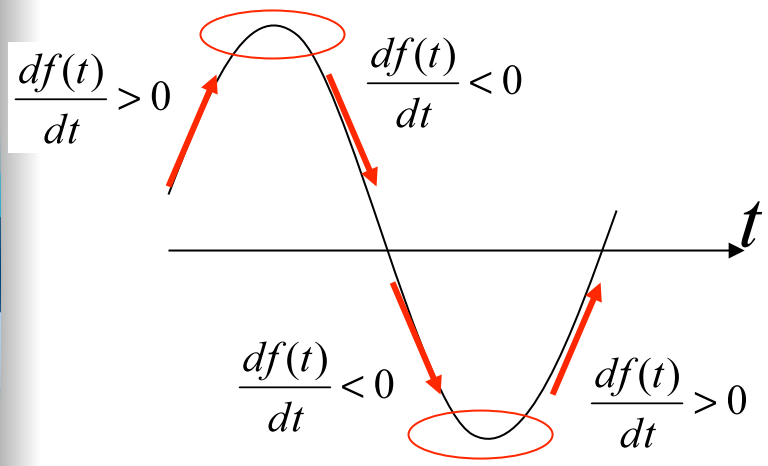
数値安定性の相違の理由

- Euler陽解法: $\dfrac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t) - \dfrac{1}{2!}\dfrac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} - \ldots$

$$\Rightarrow \quad \frac{df(t)}{dt} = -\frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1}$$

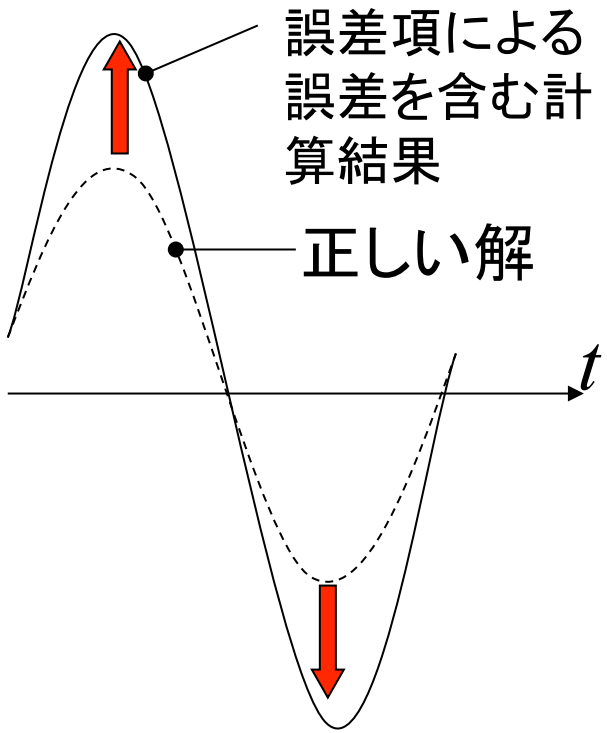
誤差項の寄与のみ考えると

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} < 0 \Rightarrow -\frac{1}{2}\frac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t > 0$$



$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} > 0 \Rightarrow -\frac{1}{2}\frac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t < 0$$

誤差項により



変化が激しい方向

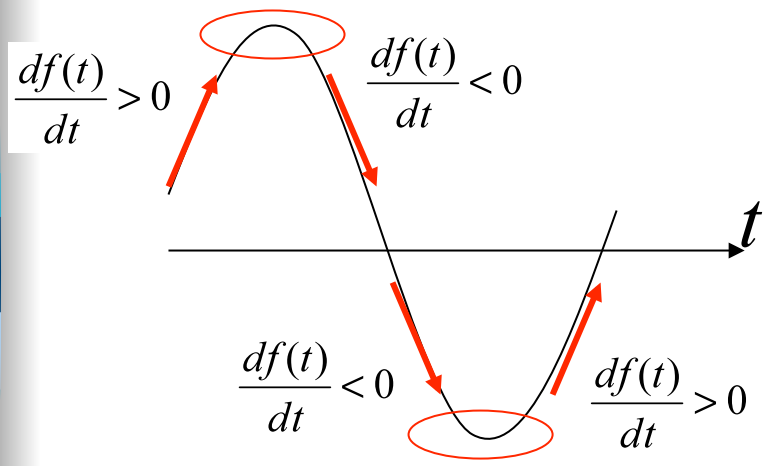
数値安定性の相違の理由

- Euler陰解法: $\dfrac{df(t)}{dt} + Af(t) = s(t) + \dfrac{1}{2!}\dfrac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1} + \ldots.$

$$\Rightarrow \quad \frac{df(t)}{dt} = +\frac{1}{2!}\frac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1}$$

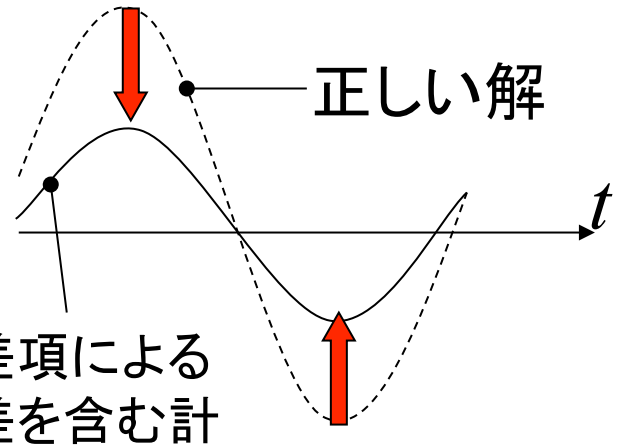
誤差項の寄与のみ考えると

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} < 0 \Rightarrow +\frac{1}{2}\frac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t < 0$$



$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} > 0 \Rightarrow +\frac{1}{2}\frac{d^2 f(t)}{dt^2}\Delta t > 0$$

誤差項により



誤差項による誤差を含む計算結果

変化を抑制する方向

陰解法の難点

- 陰解法は数値安定性が非常に高い！
- しかし、陽解法ほど簡単に計算できない場合が多い

$$\frac{df(t)}{dt} = \sin(f(t)), \frac{df(t)}{dt} = \exp(-f(t)), \frac{df(t)}{dt} = f^2(t), \ldots.$$

S(t)がfにも依存する場合

支配方程式

$$\frac{df(t_{n+1})}{dt} = \sin(f(t_{n+1}))$$

→

離散化式

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = \underline{\underline{\sin(f^{n+1})}}$$

離散化式を“f^{n+1}=“の形に書き下すことが出来ない！
単純にf^nの値を代入する計算だけでは不可能！
→ 非線形行列解法(Newton法)等…

時間離散手法のいろいろ
②支配方程式の時刻による違い

- Euler陽解法 $$\frac{df(t_n)}{dt} + Af(t_n) = s(t_n)$$

- Euler陰解法 $$\frac{df(t_{n+1})}{dt} + Af(t_{n+1}) = s(t_{n+1})$$

- Crank-Nicolson法

  時刻 $t_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(t_n + t_{n+1})$ で支配方程式が成り立つとする

$$\frac{df(t_{n+1/2})}{dt} + Af(t_{n+1/2}) = s(t_{n+1/2})$$

時間離散手法のいろいろ
②支配方程式の時刻による違い

■ Crank-Nicolson法

$$\frac{df(t_{n+1/2})}{dt} + Af(t_{n+1/2}) = s(t_{n+1/2})$$

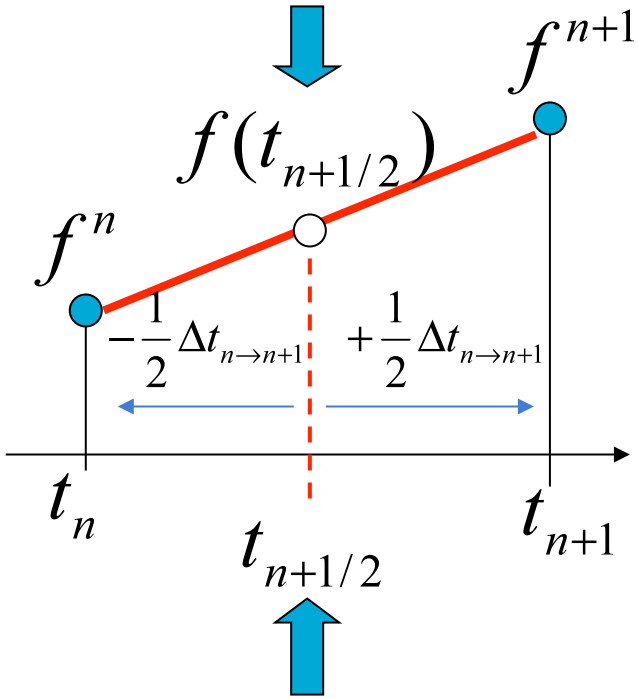
差分近似 : $\boxed{f(t_{n+1/2}) = \frac{f^{n+1} + f^n}{2}}$ $\boxed{\frac{df(t_{n+1/2})}{dt} = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}}}$

Crank-Nicolson法の離散化式 :

$$\left(\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t_{n\to n+1}}\right) + A\left(\frac{f^{n+1} + f^n}{2}\right) \cong s(t_{n+1/2})$$

$$\therefore f^{n+1} \cong \frac{\left(1 - \frac{A}{2}\Delta t_{n\to n+1}\right) f^n + s(t_{n+1/2})\Delta t_{n\to n+1}}{\left(1 + \frac{A}{2}\Delta t_{n\to n+1}\right)}$$

この値は計算機上
に記憶されていない



ここで支配方程式
が成り立つと考える

時間離散手法のいろいろ
②支配方程式の時刻による違い

■ Crank-Nicolson法

Taylor展開より、

(A)+(B): $f^{n+1}+f^{n}=2f(t_{n+1/2})+\frac{d^2f(t_{n+1/2})}{dt^2}\left(\frac{\Delta t_{n\to n+1}}{2}\right)^2+\ldots$

$$\boxed{\therefore f(t_{n+1/2})=\frac{f^{n+1}+f^{n}}{2}-\frac{1}{8}\frac{d^2f(t_{n+1/2})}{dt^2}\Delta t_{n\to n+1}^2+\ldots}$$

中心の値

(A)-(B): $f^{n+1}-f^{n}=2\frac{df(t_{n+1/2})}{dt}\frac{\Delta t_{n\to n+1}}{2}+\frac{2}{3!}\frac{d^3f(t_{n+1/2})}{dt^3}\left(\frac{\Delta t_{n\to n+1}}{2}\right)^3+\ldots$

$$\boxed{\therefore \frac{df(t_{n+1/2})}{dt}=\frac{f^{n+1}-f^{n}}{\Delta t_{n\to n+1}}-\frac{1}{24}\frac{d^3f(t_{n+1/2})}{dt^3}\Delta t_{n\to n+1}^2+\ldots}$$

中心での微分

上の結果を $\frac{df(t_{n+1/2})}{dt}+Af(t_{n+1/2})=s(t_{n+1/2})$ に代入してみると、

時間離散手法のいろいろ
②支配方程式の時刻による違い

■ Crank-Nicolson法

$$\left(\frac{df(t_{n+1/2})}{dt}+\frac{1}{24}\frac{d^3 f(t_{n+1/2})}{dt^3}\Delta t^2_{n\to n+1}+\ldots\right)+A\left(f(t_{n+1/2})+\frac{1}{8}\frac{d^2 f(t_{n+1/2})}{dt^2}\Delta t^2_{n\to n+1}+\ldots\right)=s(t_{n+1/2})$$

Crank-Nicolson法の計算式は実際には、

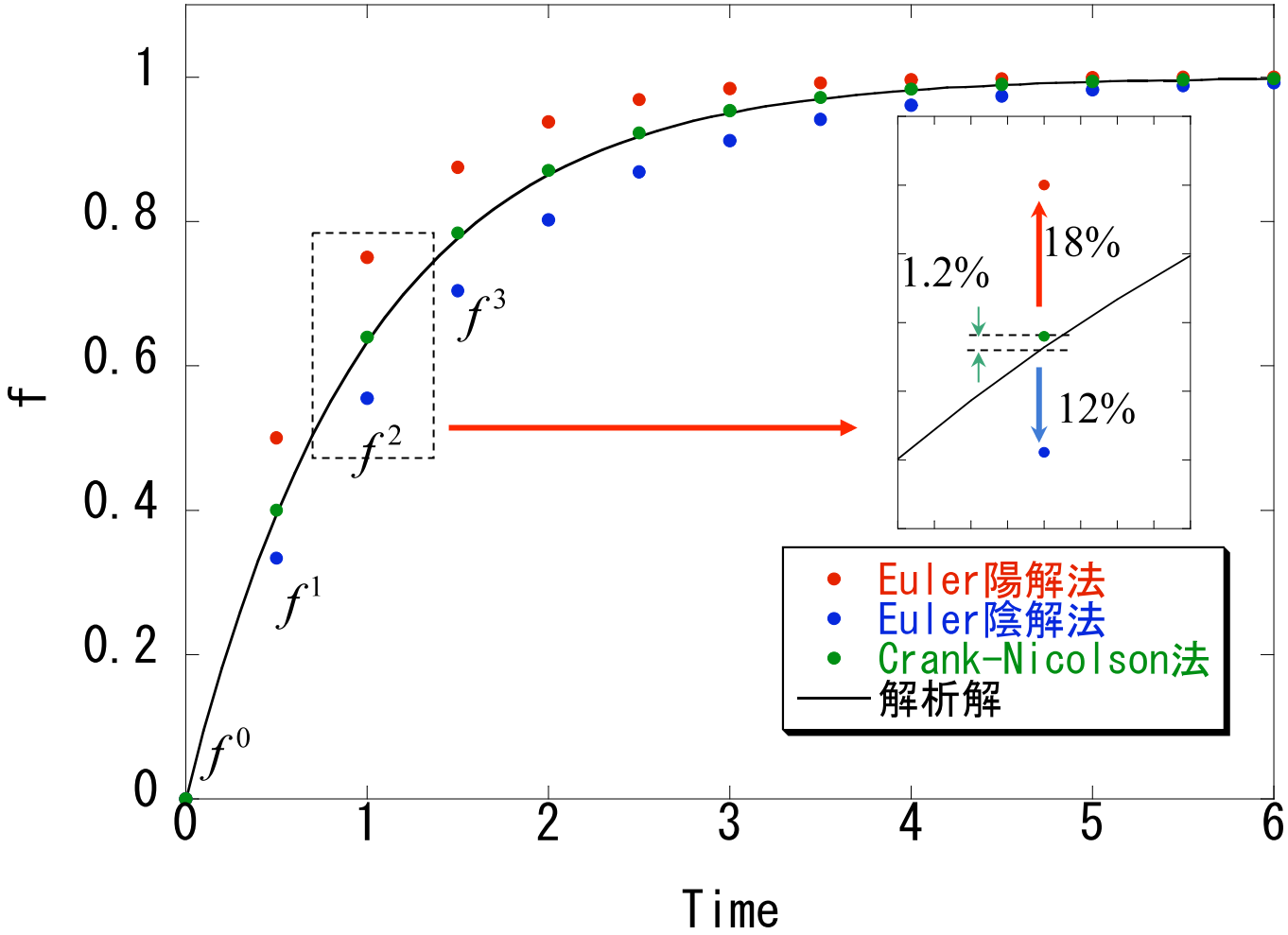
$$\frac{df(t_{n+1/2})}{dt}+Af(t_{n+1/2})=s(t_{n+1/2})-\left(\frac{1}{24}\frac{d^3 f(t_{n+1/2})}{dt^3}+\frac{1}{8}\frac{d^2 f(t_{n+1/2})}{dt^2}\right)\Delta t^2_{n\to n+1}+\ldots$$

を計算していることになる。

誤差項: $\left(\frac{1}{24}\frac{d^3 f(t_{n+1/2})}{dt^3}+\frac{1}{8}\frac{d^2 f(t_{n+1/2})}{dt^2}\right)\Delta t^2_{n\to n+1}+\ldots$ ２次精度！

計算結果

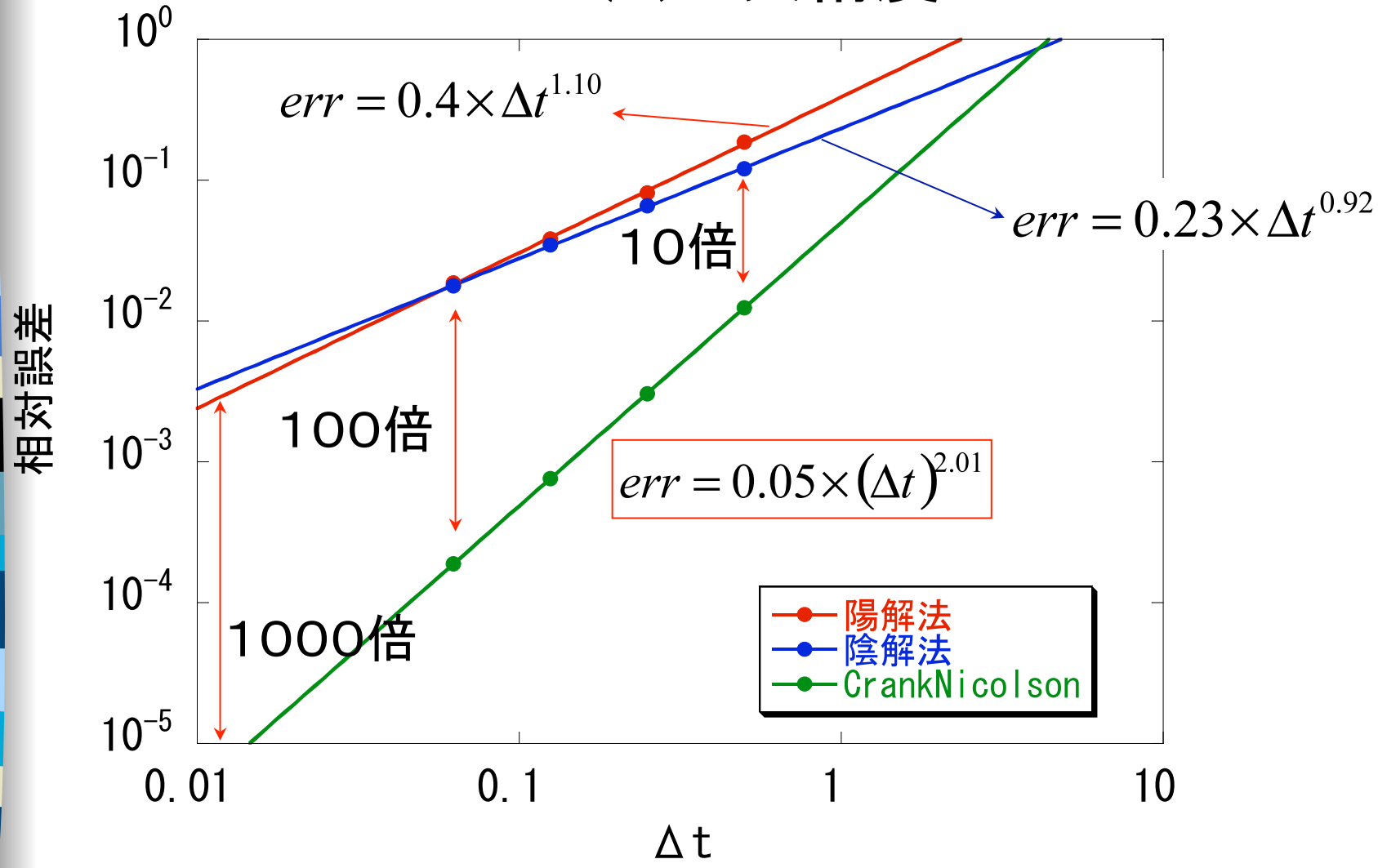
- Δt=0.5, α=κ=1.



t=1：理論=0.6321　計算結果=0.640　相対誤差=0.0124

精度検証

- Crank-Nicolson法:2次精度



誤差項の次数が上がると、計算誤差は飛躍的に減少する