

計算物理学および演習

常微分方程式の数値解法 1

畝山多加志

1 無次元化と離散化

1.1 無次元化

具体的な問題 (今回は常微分方程式) に入る前にまず、計算機で数値的に問題を解くということについて考える。計算機が扱うことができるのはデジタルデータであり、整数や実数、しかも有限な精度のものしか取り扱えないのはこれまでに説明した通りである。

実際の物理現象を計算機で表現するためには、物理量を何らかの形で計算機に入力する必要がある。物理量には通常何らかの単位が付いている。人間が計算する際には単位の付いた量を扱うことはさほど難しくはないが、計算機では単位付きの量を直接扱うことはできない。そのため、単位を含まない形に変換した物理量を使う必要がある。そのためには例えば、SI 単位系を基準に採用して、すべての物理量が SI 単位系で表現されているとみなしてやればよさそうである。しかしながら、単純に SI 単位系を採用すると分子のような小さなものや惑星のような大きなものを表す際に各種物理量の値が非常に小さくなったり大きくなったりすることになる。扱える数の精度が有限であることを考えるとこれは具合が悪い。むしろ、対象とする系に応じた単位系を基準に取る必要があると考えられる。例として調和ポテンシャル中に置かれた 1 次元の質点の運動に着目する。質量 m の質点が時刻 $t = 0$ で位置 $x = b$ に静止していたとすると、Newton の運動方程式および初期条件は

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -kx, \quad x(0) = b, \quad \left. \frac{dx(t)}{dt} \right|_{t=0} = 0 \quad (1)$$

と書ける。ただし、 k はバネ定数とする。この系の特徴的な時間と長さは

$$\tau = \sqrt{m/k}, \quad b \quad (2)$$

と見積もれる。これらを使って

$$\tilde{x} = \frac{x}{b}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{\tau} \quad (3)$$

という変数変換を行う。変換後の変数 \tilde{x}, \tilde{t} は分母と分子に同じ単位を持つ量が現れるため、単位を持たない。変換後の変数で運動方程式を書き直せば

$$\frac{d^2 \tilde{x}(\tilde{t})}{d\tilde{t}^2} = -\tilde{x}, \quad \tilde{x}(0) = 1, \quad \left. \frac{d\tilde{x}(\tilde{t})}{d\tilde{t}} \right|_{\tilde{t}=0} = 0 \quad (4)$$

となる。変換後の運動方程式と初期条件は m, k, b の値にはよらない。そのため、たとえ m や k が非常に小さな値や大きな値であっても計算機で扱う際に支障はない。これは対象の特徴的な時間や長さを使った無次元化と呼ばれる操作に相当する。計算物理ではほとんどの場合 (暗黙のうちに) まずこのような無次元化を行う。¹

¹無次元化は計算を直接行わない理論物理においても非常に重要な概念である。例えば、流体力学の基礎方程式である Navier-Stokes 方程式を無次元化すると粘度や特徴的速度を組み合わせた Reynolds 数と呼ばれるパラメータのみが残る。Reynolds 数は流れを議論する際に本質的に重要な量であり、無次元化を通じてどのような因子が物理的に重要なのかを知ることができる。

1.2 離散化

単純な実数についての演算は、有限精度による誤差が必ず入るということを除いてはさほど難しくはない。すなわち、プログラム中で実数型の変数を使うことで計算することができる。従って、無次元化をしてやればプログラムでそのまま扱うことができるようになる。

ところが、計算物理で扱いたい対象は単なる実数だけではない。前節で示した例では運動方程式は微分方程式であり、位置は時間の関数である。このように時間依存する量や場の量といった、何かの関数を扱いたい場面が多い。これは多くの物理法則が微積分を用いて表現されていることを考えれば自然なことと言える。例えば流体の速度場の時間発展を表現するためには速度を時間と空間の関数として表現せねばならない。

時間や空間は連続であるから、計算機で直接扱うことはできない。従って何らかの方法で近似的に連続的な関数を離散的なデータで表現する方法が必要となる。このような手続きは離散化と呼ばれる。単純な例として実数 x の関数 $f(x)$ を考える。変数 x が連続的には取り扱えず、離散的な点

$$x_i = ih \quad (i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (5)$$

のようにしか表現できないとする。 h は隣接する点の間の距離である ($x_{i+1} - x_i = h$)。このとき、関数 $f(x)$ も対応する点について

$$f_i = f(x_i) = f(ih) \quad (i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (6)$$

のように離散的な点についての値を与えてやればよい。さらに、 i が有限の範囲に収まっているとすれば、関数 $f(x)$ を有限個の実数 f_i の組で表現できる。このようにして、離散化によって近似的に関数を実数の組で表すことで計算機での取り扱いが可能となる。多変数関数についても同様の手続きで離散化できる。

離散化した関数は h が小さければもとの関数とほとんど同様に見えるはずであるが、 h は小さいとはいえ有限である。従って微積分操作を行う際に極限を取るような処理ができない。離散化後に微分や積分をどう扱うかは必要となった際に改めて説明する。

2 常微分方程式の数値解法

2.1 古典力学における常微分方程式

量子効果を考えなくてよく、電磁場の効果も静電相互作用や与えられた電場・磁場のみで十分な場合、相互作用する粒子からなる系の運動は Newton の運動方程式で記述される。すなわち、 N 個の粒子があり、 i 番目の粒子が質量 m_i であり時刻 t において位置 r_i にあるとすると、運動方程式は

$$m_i \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = - \frac{\partial U(\{r_i\})}{\partial r_i} \quad (7)$$

となる。 $U(r_i)$ はポテンシャルエネルギーを表すとする。運動方程式は $3N$ 個の変数に対する 2 階の常微分方程式である。従って、古典的な運動というものは常微分方程式を数値的に解ければ追跡することが可能となるわけである。

例えば、宇宙空間中で重力相互作用する多数の星の運動など、解析計算では解けないような問題に計算機が適用され、シミュレーションから銀河の形成過程のようなさまざまな非自明な結果が得られている。また、分子の運動をシミュレートする分子動力学でも、多数の分子が協同的に運動することによって、相転移のような特異な現象が観測されている。一見単純な複数の分子をただ混合しただけのような系でも、低温状態のシミュレーションで非常に複雑なダイナミクスが観測され、理論研究の発展を強く刺激した例などもある。

2.2 時間の差分化

まず、単一変数の常微分方程式からはじめる。変数 x が時間 t の関数であり、時間発展方程式が以下の常微分方程式で与えられるものとする。

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t) \quad (8)$$

ここで、関数 f はある時点での x の値および時間 t そのものに依存しているとする。時間についての常微分方程式の解は時間の関数になるが、既に述べたように「時間の関数」というものを計算機で直接扱うことはできないので、全ての時間についてではなくある時間間隔ごとの点を考えて離散化することにする。つまり、時間間隔を h とし、

$$t_i = ih \quad (i = 0, 1, 2, \dots) \quad (9)$$

についての x の値

$$x_i = x(t_i) = x(ih) \quad (i = 0, 1, 2, \dots) \quad (10)$$

のみを考える。 x_0 は初期条件より決まる。

$$x_0 = x(0) \quad (11)$$

あとはこの x_0 と常微分方程式から x_1, x_2, \dots を求めることができればよいわけである。

問題は、常微分方程式が微分を使って書かれていることである。計算機で微分を扱えない以上、常微分方程式を直接使うことはできない。逆に考えれば、微分を使わず、離散化した値のみで書かれていれば計算機で解くことができる。対象法はいくつかあるが、微分を微小変化に対する差分だと考え、微小ではなく有限の差分で近似するのが最も簡単な方法である。例えば

$$\left. \frac{dx(t)}{dt} \right|_{t=t_i} \approx \frac{x(t_{i+1}) - x(t_i)}{t_{i+1} - t_i} = \frac{x_{i+1} - x_i}{h} \quad (12)$$

という近似を考えることができる。微分をこのような差分の近似系で置き換えることを差分化という。しかし、差分の取り方は一意ではない。例えば次のような形を考えることもできる。

$$\left. \frac{dx(t)}{dt} \right|_{t=t_i} \approx \frac{x(t_i) - x(t_{i-1})}{t_i - t_{i-1}} = \frac{x_i - x_{i-1}}{h} \quad (13)$$

一見、先ほどの差分と変わらないように見えるが、 $x_{i+1} - x_i$ が $x_i - x_{i-1}$ に変わっており、時間の差分を取る際に少し前の時間で見ると後の時間で見るとの違いがある。(前者は前進差分、後者は後退差分と呼ばれる。) さらに、前か後かどちらかに偏るのを嫌うのであれば

$$\left. \frac{dx(t)}{dt} \right|_{t=t_i} \approx \frac{x(t_{i+1}) - x(t_{i-1})}{t_{i+1} - t_{i-1}} = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2h} \quad (14)$$

という差分もありうる。(中心差分と呼ばれる。) もちろん、他にもさまざまな形の差分がありうる。

ここで示した差分はどれも $h \rightarrow 0$ の極限を取れば全て微分 $dx(t)/dt$ に帰着する。従って極限を取って解析的に解くような場合にはこれらの差分の違いは問題とはならない。ところが、有限の差分しか使えない場合はどの差分を使うかで状況は大きく変化しうるため、どの差分を使うかが重要となることがある。

2.3 陽解法と陰解法

前進差分と後退差分の違いについて少し考えてみる。常微分方程式中の微分を前進差分で微分を近似してみる。

$$\frac{x_{i+1} - x_i}{h} \approx f(x_i, t_i) \quad (15)$$

これを变形すれば

$$x_{i+1} \approx x_i + hf(x_i, t_i) \quad (16)$$

となる。(これは後述する Euler 法に他ならない) 左辺の x_{i+1} を求めるには x_i, t_i を使って f を計算すればいいことになる。つまり、 $x(t)$ についての常微分方程式が x_i についての単純な漸化式で近似されたわけである。 x_0 は初期条件から得られるから、 x_0 から x_1 を求め、その x_1 から x_2 を求め、と順番に計算すれば x_i の値が得られる。プログラムは繰り返し処理を使えば比較的単純に実現できる。このように x_{i+1} について陽的な式が得られる方法を陽解法と呼ぶ。

一方、同様に後退差分で微分を近似してみる。

$$\frac{x_{i+1} - x_i}{h} \approx f(x_{i+1}, t_{i+1}) \quad (17)$$

これを変形すれば

$$x_{i+1} \approx x_i + hf(x_{i+1}, t_{i+1}) \quad (18)$$

となる。いま、右辺には関数 f の引数に x_{i+1} が含まれてしまっているため、 x_{i+1} についての陽的な式に変形することができない。このように x_{i+1} について陽的な式が得られず、陰的にしか表現できない方法を陰解法と呼ぶ。陰解法の場合にはプログラム中で式を満たすような x_{i+1} を何らかの方法で求める必要があり、一般に複雑になりがちである。

陰解法に利点が無いように見えるかもしれないが、プログラムが複雑になることを差し引いても陰解法が有用なこともある。ある種の常微分方程式は陽解法では解くのが難しくても（計算が安定しないで破綻する等）陰解法では苦勞せず解けることがある。対象とする微分方程式の性質や状況に応じて使い分けるのが望ましい。

2.4 Euler 法

ここでは具体的に数値計算に用いる差分化の方法の導出を行う。差分化して解くための一連の方法はスキーム（数値スキーム）とも呼ばれる。前節で示したように単純に微分を差分で置き換えるというのも考え方の一つではあるのだが、どの程度の正当性があるのか、精度がいいのか悪いのか等がよくわからない。そこで、もとの常微分方程式に対する Taylor 展開からスキームを考える。 h が小さいため、 h についての Taylor 展開を考える。 $x(t_{i+1})$ を $t = t_i$ の周りで展開すれば

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x(t_{i+1}) = x(t_i + h) \\ &= x(t_i) + \left. \frac{dx(t)}{dt} \right|_{t=t_i} h + O(h^2) \end{aligned} \quad (19)$$

のようにできる。ここで、 $O(h^2)$ は h について h^2 以上の高次の項を表す (Landau の記号)。微分にもとの常微分方程式を代入してやれば

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x(t_i) + f(x(t), t)|_{t=t_i} h + O(h^2) \\ &= x_i + hf(x_i, t_i) + O(h^2) \end{aligned} \quad (20)$$

となる。 $O(h^2)$ の項を無視すれば Euler 法と呼ばれる次のスキームが得られる。

$$x_{i+1} = x_i + hf(x_i, t_i) \quad (21)$$

これは先ほど微分を前進差分で置き換えたものと同じである。

しかしながら、先ほどの手続きとは異なり、今の導出では明確に $O(h^2)$ の項を無視するという操作を行った。ここで無視した $O(h^2)$ が Euler 法の持つ誤差に相当する。このことを Euler 法の局所誤差、あるいは局所離散化誤差が $O(h^2)$ である、と表現する。微分方程式を解く際、 x_i から x_{i+1} の 1 回で計算が終わるのではなく、初期からある時刻 t までの計算を繰り返し行う。このとき、個々の段階での誤差が蓄積するので、全体で見ると局所誤差より大きな誤差を持つことになる。このような誤差を大域誤差あるいは大域離散化誤差と呼ぶ。計算する時間を固定すると、Euler 法を適用して計算をする必要がある回数は h が小さくなると $1/h$ に比例して増える。計算回数だけ誤差が蓄積すると考えると、Euler 法の大域誤差は $O(h^2 \times 1/h) = O(h)$ となる。

他にも、常微分方程式を形式的に積分して積分を展開することで Euler 法を得る方法がある。 $t = t_i$ から $t = t_{i+1}$ まで積分してやれば

$$x_{i+1} = x_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} dt f(x(t), t) \quad (22)$$

右辺に現れる積分を近似する。 $t = t_i$ まわりで Taylor 展開すると

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} dt [f(x_i, t_i) + O(h)] \\ &= x_i + hf(x_i, t_i) + O(h^2) \end{aligned} \quad (23)$$

とできる。被積分関数を $t = t_i$ の値のみで近似して積分を近似評価したことに相当している。当然のことながら局所誤差も先ほど得られたものと同じとなっている。

式から明らかのように Euler 法は陽解法である。既に述べたように陽解法は不安定になり計算が行えなくなるようなことがある。解析解が求められる単純な微分方程式を用いて安定性について考えてみる。ここでは $f(x, t) = -\lambda x$, $x(0) = 1$ という常微分方程式を考える。つまり対象とする微分方程式として

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\lambda x, \quad x(0) = 1 \quad (24)$$

を考える。解析解は容易に求められて、

$$x(t) = \exp(-\lambda t) \quad (25)$$

である。一方、Euler 法を適用すると、この微分方程式は次式のように差分化される。

$$x_{i+1} = x_i - h\lambda x_i = (1 - \lambda h)x_i \quad (26)$$

x_i は等比数列 ($x_0 = 1$) になっているので簡単に解けて、Euler 法の解は

$$x_i = (1 - \lambda h)^i \quad (27)$$

である。 h について Taylor 展開すると、解析解に $t = t_i = ih$ を代入したものと比べて h について 1 次までしか一致していないことがわかる。

さらに、この解の振る舞いは h の値によって大きく変わる。 $h < 1/\lambda$ のときは絶対値こそ異なるものの指数関数的な減衰挙動自体は得られる。 $h = 1/\lambda$ のとき x_1 から先はすべて 0 になってしまう。 $1/\lambda < h < 2/\lambda$ のとき、 x_i は減衰振動を示す。 $2/\lambda < h$ のとき x_i は振動しながら絶対値が大きくなっていき発散する。(こうなると計算機が扱える最大の数を越えることになり、計算自体が破綻してしまう。) h の値をある程度以上大きくすると振動や発散といった本来ならばありえない現象を示すようになるわけである。このような状況に陥らずに計算できる状態を数値的に安定と呼び、振動や発散が現れる状態を数値的に不安定と呼ぶ。ここで示したものは簡単な例であるが、より複雑で解析的に解けないような常微分方程式も似たような振る舞いを示すものが多い。不安定な振る舞いが見られたら h の値を小さくするのが定石である。

2.5 Heun 法

Euler 法は単純ではあったが、精度は決していいとは言えない。これは Taylor 展開をして $O(h^2)$ の項を無視したことに起因する。展開の高次項を取り込めば高精度なスキームが得られるはずである。つまり

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x(t_i) + \frac{dx(t)}{dt} \Big|_{t=t_i} h + \frac{1}{2} \frac{d^2x(t)}{dt^2} \Big|_{t=t_i} h^2 + O(h^3) \\ &= x_i + hf(x_i, t_i) + \frac{h^2}{2} \frac{df(x(t), t)}{dt} \Big|_{t=t_i} + O(h^3) \\ &= x_i + hf(x_i, t_i) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{\partial f(x(t), t)}{\partial x} \Big|_{t=t_i} f(x_i, t_i) + \frac{\partial f(x(t), t)}{\partial t} \Big|_{t=t_i} \right] + O(h^3) \end{aligned} \quad (28)$$

のように、Euler 法以上の高次項が残るようにすればよい。しかしながら、Taylor 展開の高次項は高次の微分を含むことになるから、 f の微分が必要となり、そのまま評価するのは難

しいこともある。そのような場合には展開の高次項まで残しつつ f の微分を必要としないようなスキームが望ましい。Heun 法と呼ばれるスキームはそのようなスキームの 1 つである。Heun 法は次のように表現される。

$$x_i^* = x_i + hf(x_i, t_i) \quad (29)$$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}[f(x_i, t_i) + f(x_i^*, t_{i+1})] \quad (30)$$

まず、1 つ目の式で Euler 法のように x_i から x_i^* を求める。(ただし、Euler 法と異なり、この x_i^* は求める x_{i+1} ではない。) 次に 2 つ目の式で x_i と x_i^* から x_{i+1} を求める。なお、 x_{i+1} と x_i^* は異なるから、これは陰解法ではなく陽解法である。

Heun 法を変形、展開してやれば

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + \frac{h}{2}f(x_i, t_i) + \frac{h}{2}f(x_i + hf(x_i, t_i), t_i + h) \\ &= x_i + \frac{h}{2}f(x_i, t_i) + \frac{h}{2} \left[f(x_i, t_i) + \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \Big|_{t=t_i} hf(x_i, t_i) + \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} \Big|_{t=t_i} h + O(h^2) \right] \\ &= x_i + hf(x_i, t_i) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \Big|_{t=t_i} f(x_i, t_i) + \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} \Big|_{t=t_i} \right] + O(h^3) \end{aligned} \quad (31)$$

となり、確かに Taylor 展開の h^2 の項まで一致していることが確認できる。従って Heun 法は局所誤差が $O(h^3)$ であり、Euler 法よりも高精度である。また、大域誤差は $O(h^2)$ となる。

これで Heun 法の精度は確かめられたものの、直感的には納得しづらい結果かもしれない。Taylor 展開を使って Heun 法を導出してみる。 $t = t_i$ まわりでの展開は既に求めたので、陰解法的に $t = t_{i+1}$ まわりで展開してみる。

$$\begin{aligned} x_i &= x(t_i) = x(t_{i+1} - h) \\ &= x_{i+1} - \frac{dx(t)}{dt} \Big|_{t=t_{i+1}} h + \frac{1}{2} \frac{d^2x(t)}{dt^2} \Big|_{t=t_{i+1}} h^2 + O(h^3) \end{aligned} \quad (32)$$

整理すると

$$x_{i+1} = x_i + hf(x_{i+1}, t_{i+1}) - \frac{h^2}{2} \frac{d^2x(t)}{dt^2} \Big|_{t=t_{i+1}} + O(h^3) \quad (33)$$

h^2 の項の符号が $t = t_i$ まわりの場合とは異なりマイナスになっている。従って、 $t = t_i$ まわりと $t = t_{i+1}$ まわりの展開の平均を求めてやれば

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + \frac{h}{2}[f(x_i, t_i) + f(x_{i+1}, t_{i+1})] + \frac{h^2}{2} \left[\frac{d^2x(t)}{dt^2} \Big|_{t=t_i} - \frac{d^2x(t)}{dt^2} \Big|_{t=t_{i+1}} \right] + O(h^3) \\ &= x_i + \frac{h}{2}[f(x_i, t_i) + f(x_{i+1}, t_{i+1})] + O(h^3) \end{aligned} \quad (34)$$

となり、 h^2 の項は消えてしまい誤差は $O(h^3)$ となる。しかしこのままでは右辺に x_{i+1} が含まれた陰的な形で使いづらい。もし

$$f(x_i^*, t_{i+1}) = f(x_{i+1}, t_{i+1}) + O(h^2) \quad (35)$$

のような x_i^* を陽解法で求められるならば x_{i+1} を x_{i+1}^* で置き換えても誤差は変わらないので都合がよい。Euler 法の局所誤差が $O(h^2)$ だったことを思い出せば、

$$x_i^* = x_i + hf(x_i, h) \quad (36)$$

とすれば

$$x_{i+1} = x_i^* + O(h^2) \quad (37)$$

すなわち

$$\begin{aligned} f(x_{i+1}, t_{i+1}) &= f(x_i^*, t_{i+1}) + \left. \frac{\partial f(x, t_{i+1})}{\partial x} \right|_{x=x_i^*} O(h^2) + O(h^2) \\ &= f(x_i^*, t_{i+1}) + O(h^2) \end{aligned} \quad (38)$$

である。従って

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}[f(x_i, t_i) + f(x_i^*, t_{i+1})] + O(h^3) \quad (39)$$

となり $O(h^3)$ の項を無視すれば Heun 法が得られる。すなわち、Heun 法は本来であれば x_{i+1} の値を右辺に含む高精度な陰解法 (h^2 の項が消える) を x_i^* を使って近似的に陽解法に変換した方法、と言える。

積分を用いて考える場合、被積分関数の積分を $t = t_i$ の値と $t = t_{i+1}$ の値の平均で計算する、いわゆる台形則を用いると精度を $O(h^3)$ にできる。すなわち

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} dt \left[f(x_i, t) + \left. \frac{df(x, t)}{dt} \right|_{t=t_i} (t - t_i) + O(h^2) \right] \\ &= x_i + hf(x_i, t_i) + \frac{h^2}{2} \left. \frac{df(x, t)}{dt} \right|_{t=t_i} + O(h^3) \end{aligned} \quad (40)$$

および

$$x_{i+1} = x_i + hf(x_{i+1}, t_{i+1}) - \frac{h^2}{2} \left. \frac{df(x, t)}{dt} \right|_{t=t_{i+1}} + O(h^3) \quad (41)$$

より

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}[f(x_i, t_i) + f(x_{i+1}, t_{i+1})] + O(h^3) \quad (42)$$

であるから、Taylor 展開で考えた場合と同様に右辺の x_{i+1} の部分を x_i^* について展開して $O(h^3)$ の項を無視すると Heun 法が得られる。