これまでのまとめ

電気工学科 山本昌志 平成 15 年 9 月 18 日

第1章 基本

1.1 テイラー展開

数値計算は言うに及ばず科学技術全般の考察にテイラー展開 (Taylor expansion) は、重要な役割を果たす。電気の諸問題を考察する場合、いたるところにテイラー展開は顔を出します。以下のテイラー展開は、非常に重要なので、理解してください。まずは、x=aの回りのテイラー展開は、

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{1}{2!}f''(a)(x - a)^{2} + \frac{1}{3!}f'''(a)(x - a)^{3} + \frac{1}{4!}f^{(4)}(a)(x - a)^{4} + \cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}f^{(n)}(a)(x - a)^{n}$$
(1.1)

です。0 の階乗は 0!=1 となることに注意が必要です。 $f^{(n)}(a)$ は、関数 f(x) を n 回微分したときの x=a の値です。テイラー展開の意味は、任意の関数 f(x) は、無限のべき級数に展開できると言うことです。その係数が、 $\frac{1}{n!}f^{(n)}(a)$ です。次に a=0 にしてみましょう。この場合、

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{1}{2!}f''(0)x^2 + \frac{1}{3!}f'''(0)x^3 + \frac{1}{4!}f^{(4)}(0)x^4 + \cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}f^{(n)}(0)x^n$$
(1.2)

となります。これがマクローリン展開 (Maclaurin expansion) です。次に $x-a=\Delta x$ とします。そして、 $a=x_0$ とすると

$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{1}{2!}f''(x_0)\Delta x^2 + \frac{1}{3!}f'''(x_0)\Delta x^3 + \frac{1}{4!}f^{(4)}(x_0)\Delta x^4 + \cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)\Delta x^n$$
(1.3)

となります。これは、しばしばお目にかかるパターン。

通常我々がテイラー展開を使う場合、この式 (1.1)~式 (1.3) のいずれかです。

第2章 非線型方程式の数値計算法

f(x) = 0 の方程式を数値計算により、近似解を求める方法です。2 分法とニュートン法を学習しました。これらの方法を用いると、どんな形の方程式でも近似解を求めることが出来ます。

2.1 2分法

閉区間 [a,b] で連続な関数 f(x) の値が

$$f(a)f(b) < 0 \tag{2.1}$$

の場合、 $f(\alpha)=0$ となる α が区間 [a,b] にあります。2 分法はこの性質を利用して近似解を求めます。実際の数値計算のプログラムでは、区間 [a,b] の中点 c を計算し、[a,c] または [b,c] のうち式 (2.1) のように両端の値を乗算した結果が負になる区間をさがします。1 回この操作を行うことにより、解が存在する区間の領域が半分になります。これを繰り返すことにより、任意の精度で方程式の近似解を求めることが出来ます。この方法の長所と短所は次のようになります。

長所 閉区間 [a,b] の間に解があるならば、必ず解に収束します。間違いなく解を探すので、ロバスト (robust: 強靭な) な解法といわれます。ニュートン法とは異なり、連続であればどんな形の関数でも解に収束します。さらに、解の精度が分かります。解の誤差は、区間の幅 |b-a| 以下です。

短所 解への収束が遅いことです。一次収束です。

2分法のプログラムのフロチャートは図2.1のようになります。

2.2 ニュートン法

関数 f(x) のゼロ点 α に近い近似値 x_0 から出発します。そして、関数 f(x) 上の点 $(x_0,f(x_0))$ での接線が、x 軸と交わる点を次の近似解 x_1 とします。そして、次の接線が x 軸と交わる点を次の近似解 x_2 とします。同様に x_3,x_4,\cdots を計算します (図 2.2)。この計算結果の数列は、 $(x_0,x_1,x_2,x_3,x_4,\cdots)$ は初期値 x_0 が適当であれば、真の解 α に収束します。

数列の漸化式は次のようにして求めます。 関数 f(x) 上の点 $(x_i, f(x_i))$ の接線を引き、それと x 軸と交点 が点 x_{i+1} となります。 x_{i+1} を求めましょう。点 $(x_i, f(x_i))$ を通り、傾きが $f'(x_i)$ の直線の方程式は、

$$y - f(x_i) = f'(x_i)(x - x_i)$$
(2.2)

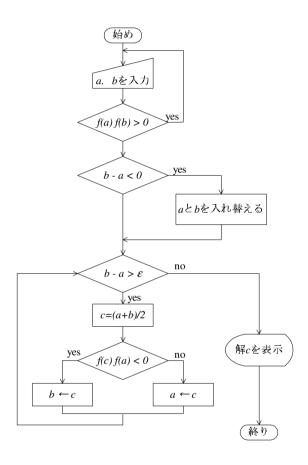


図 2.1: 2 分法のフローチャート

です。この式のy = 0のときのxの値が x_{i+1} になります。 x_{i+1} は、

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \tag{2.3}$$

です。右辺の x_i から、左辺の x_{i+1} が計算できます。これがニュートン法の漸化式です。精度を表す ε を使って、以下の条件を満たした場合、計算を終了させます。

$$\left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_i} \right| < \varepsilon \tag{2.4}$$

実際にニュートン法での計算を図 2.2 に示します。接線を引いて、x 軸との交点が次の近似解になっていることが分かります。

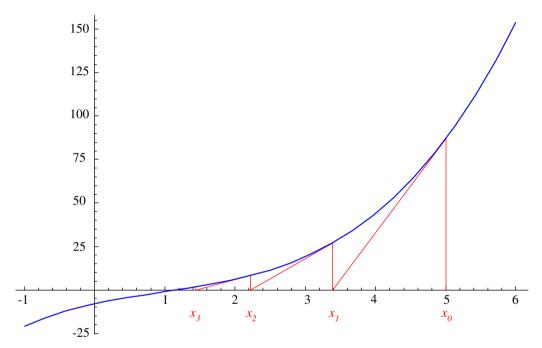


図 2.2: ニュートン法の解の収束の様子。

ニュートン法で求めた近似解の数列がどのように真の解 α に収束するか考える。 x_{i+1} と真値 α の差の絶対値、ようするに誤差を考えます。 $f(\alpha)=0$ を忘れないで、テイラー展開を用いて計算を進める。

この式から、 x_{i+1} は x_i に比べ 2 乗の精度があることが分かります。これを 2 次収束と言います。 x_i の精度が 10^{-3} であれば、 x_{i+1} は 10^{-6} の精度になることを意味します。

ニュートン法の長所と短所は以下の通りです。

長所 初期値が適当ならば、収束が非常に早い。2次収束である。

短所 初期値が悪いと、収束しない場合がある。そのため、反復回数の上限を決めておく必要があります。 ニュートン法のプログラムのフロチャートは図 2.3 のようになります。

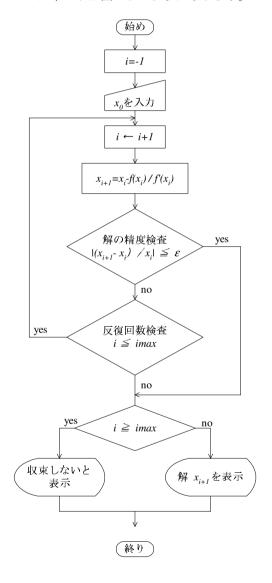


図 2.3: ニュートン法のフローチャート

第3章 常微分方程式の数値計算法

数値計算により、近似解を求める微分方程式は

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) 初期条件 y(a) = b (3.1)$$

です。これは問題として与えられ、この式に従うxとyの関係を計算します。

3.1 オイラー法

常微分方程式の解を y = y(x) とします。その x_i のまわりのテイラー展開は、

$$y_{i+1} = y(x_i + \Delta x) = y(x_i) + \frac{dy}{dx} \Big|_{x=x_i} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{d^2 y}{dx^2} \Big|_{x=x_i} \Delta x^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 y}{dx^3} \Big|_{x=x_i} \Delta x^3 + \dots$$
 (3.2)

です。この式の右辺第 2 項は、式 (3.1) から計算できます。したがって、テイラー展開は、次のように書き表すことが出来ます。

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)\Delta x + O(\Delta x^2)$$
(3.3)

オイラー法での数値計算では、計算の刻み幅 Δx は十分に小さいとして、

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i) \Delta x \tag{3.4}$$

を計算します。このとき計算の精度は1次と言います1。

オイラー法での数値計算は、次の漸化式に従い計算します。解である $(x_0,y_0),(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots$ が同じ手続きで計算できます。実際にプログラムを行うときは、for や while を用いて繰り返し計算を行い、結果の x_i と y_i は、配列 x[i] や y[i] に格納します。

$$\begin{cases} x_0 = a \\ y_0 = b \\ x_{i+1} = x_i + \Delta x \\ y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i) \Delta x \end{cases}$$
(3.5)

この方法の計算のイメージは、図 3.1 の通りです。明らかに、出発点の導関数のみ利用しているために精度が悪いことが分かります。式も対称でないため、逆から計算すると元に戻りません。

 $^{^1}$ 誤差項が $O(\Delta x^{n+1})$ のとき、方法は n 次の精度という慣わしです

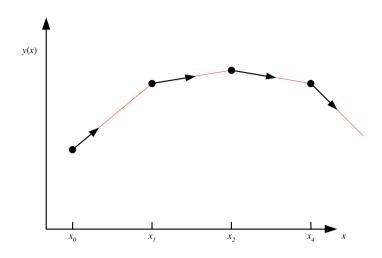


図 3.1: オイラー法。ある区間での y の変化 Δy は、計算の始めの点の傾きに区間の幅 Δx を乗じて、求めている。

3.2 2次のルンゲクッタ法 (ホイン法)

2次のルンゲ・クッタと呼ばれる方法は、いろいろあります。ここでは、教科書に載っているホイン法というものを理解してください。

先に示したように、オイラー法の精度は1次です。それに対して、2次のルンゲ・クッタ法の精度は2次です。今まで刻み幅を Δx と記述していましたが、教科書に合わせて h と表現します。

2次の精度ということは、テイラー展開より

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + y'(x_0)h + \frac{1}{2}y''(x_0)h^2 + O(h^3)$$
(3.6)

となっていることを意味します。即ち、計算アルゴリズムが、

$$\Delta y = y'(x_0)h + \frac{1}{2}y''(x_0)h^2 + O(h^3)$$
(3.7)

となっていることを言います。

式 (3.7) から分かるように、y の増分 Δy を計算するためには、1 階微分と 2 階微分の 2 項を満たす式が必要です。そうすると少なくとも、2 点の値が必要となります。2 点として、計算区間の両端の導関数の値を使います。この導関数は問題として与えられているので、計算は簡単です。そうして、区間の増分を α,β をパラメーターとした和で表すことにします。即ち、以下の通りです。

$$\Delta y = h\{\alpha y'(x_0) + \beta y'(x_0 + h)\}$$
(3.8)

この α, β を上手に選ぶことにより、式 (3.7) と同一にできます。この式を x_0 の回りでテイラー展開すると

$$\Delta y = (\alpha + \beta)y'(x_0)h + \beta y''(x_0)h^2 + O(h^3)$$
(3.9)

となります。これを、式 (3.7) と比較すると、

$$\begin{cases}
\alpha = \frac{1}{2} \\
\beta = \frac{1}{2}
\end{cases}$$
(3.10)

とすれば良いことが分かります。これで、必要な式は求まりました。まとめると、式(3.1)を数値計算で近似解を求めるには次式を使うことになります。

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + h, y_n + k_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{cases}$$
(3.11)

この式は、図3.2のようになります。オイラー法の図3.1との比較でも、精度が良いことが分かります。

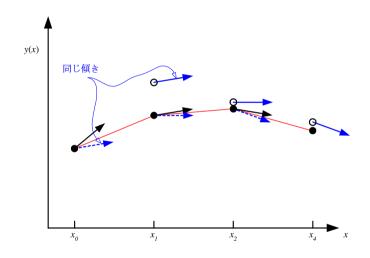


図 3.2: ホイン法 (教科書の方法)。ある区間での y の変化 Δy は、計算の始めと終わりの点付近の平均傾きに区間の幅 Δx を乗じて、求めている。

3.3 4次のルンゲ・クッタ法

今まで示したオイラー法や2次のルンゲ・クッタ法のように、パラメーターを増やして誤差項の次数を上げていく方法で、最良の方法と言われるのが4次のルンゲ・クッタ法です。パラメーターを増やして、5,6,7,… と誤差項を小さくすることは可能ですが、同じ計算量であれば4次のルンゲ・クッタの刻み幅を小さくするほうが精度が良いと言われています。

ということで、皆さんが常微分方程式を計算する必要が生じたときは、何はともあれ4次のルンゲ・クッタで計算してください。普通の科学に携わる人にとって、4次のルンゲ・クッタは常微分方程式の最初で最後の解法なのです。

4次のルンゲ・クッタの公式は、式(3.12)に示す通りです。そして、これは図3.3のように表せます。

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}) \\ k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{cases}$$

$$(3.12)$$

4次のルンゲ・クッタ法のプログラムのフロチャートは図3.4のようになります。

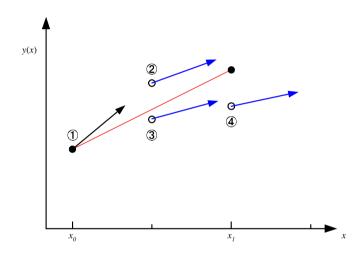


図 3.3: 4次のルンゲ・クッタ法。ある区間での y の変化 Δy は、区間内の 4点の傾きのある種の加重平均 に幅 Δx を乗じて、求めている。

3.4 高階の常微分方程式

3.4.1 1階の連立微分方程式に変換

ここまで示した方法は、1 階の常微分方程式しか取り扱えないので不便です。そこで、高階の常微分方程式を1 階の連立微分方程式に直す方法を示します。要するに、高階の常微分方程式を連立1 階常微分方程式に直し、4 次のルンゲ・クッタ法を適用すると言うことです。例えば、次のような3 次の常微分方程式があったとします。

$$y'''(x) = f(x, y, y', y'')$$
(3.13)

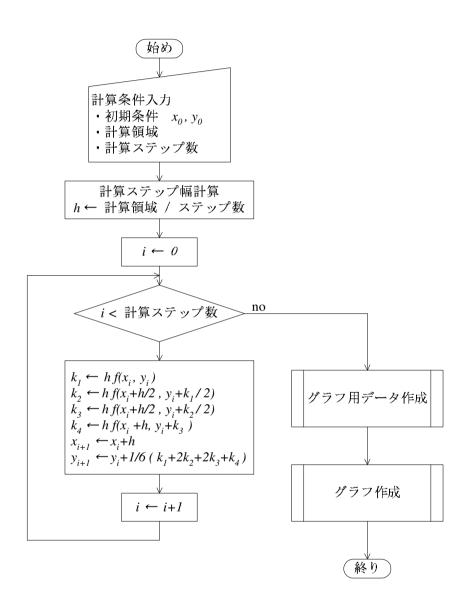


図 3.4: 4次のルンゲ・クッタ法のフローチャート

この3階常微分方程式を次に示す式を用いて変換します。

$$\begin{cases} y_0(x) = y(x) \\ y_1(x) = y'(x) \\ y_2(x) = y''(x) \end{cases}$$
(3.14)

この式を用いて、式 (3.13) を書き直すと

$$\begin{cases} y_0'(x) = y_1(x) \\ y_1'(x) = y_2(x) \\ y_2'(x) = f(x, y_0, y_1, y_2) \end{cases}$$
(3.15)

となります。これで、3階の常微分方程式が3元の1階の連立常微分方程式に変換されました。2階であろうが4階 \cdots でも同じ方法で連立微分方程式に還元できます。

3.4.2 練習問題

以下の高次常微分方程式を連立1階微分方程式に書き換えなさい。

(1)
$$y'' + 3y' + 5y = 0$$

$$(2) y'' + 6y' + y = 0$$

$$(3) \ 5y'' + 2xy' + 3y = 0$$

$$(4) \ y''' + y' + xy = 0$$

(5)
$$5y'' + y' + y = \sin(\omega x)$$

(6)
$$xy'' + y' + y = e^x$$

$$(7) \ 5y''y' + y' + y = 0$$

$$(8) y''y' + x^2y'y + y = 0$$