

連続と離散

—微分方程式の視点から—

齊藤 宣一

私たちを取り巻く様々な現象を知るために、数理的概念・方法が活躍します。私たちは、まず対象とする現象を数理モデル化します。これは通常、方程式の形で表現され、その方程式をいろいろな方法で調べることにより、現象についての本質的な理解や有益な予見を得ることができます。工学的な応用などでよく現れるのは微分方程式で、その研究には、解析学の理論と共に、コンピュータ・シミュレーションによる近似的・数値的方法が用いられます。例えば、自動車の形状を設計する際、車の周りの空気の流れを微分方程式で表現し、その方程式に近似を施し、離散的な方程式(連立一次方程式や漸化式など)に帰着させ、コンピュータを用いて離散的な方程式を解き数値を得て、空気の流れについて研究をします。このようなコンピュータを用いた数値的解析方法による現象の研究は、狭い意味での理工学を超えて、生命科学、臨床医学、経済学にまで応用範囲を拡げ、幅広く有益な情報をもたらしています。そして、複雑かつ超大規模な系のシミュレーションが可能になり、実行されるにつれ、それに関わる数学的諸問題解決へのニーズは深くなるばかりなのです。というのも、数値的方法は、コンピュータの内部で完結するものではなく、数理モデル化、モデルの数学解析、近似と離散化、アルゴリズムの実装とプログラムの作成、データの可視化、現実データとのつき合わせ、信頼性の検証などの一連の過程であり、それらが数理という幹で強く繋がっているからです。

この講演では、いろいろな具体例を通じて、微分方程式とその離散化に現れるいろいろな問題(issue)を紹介したいと思います。それにより、現象の追及のための数値的解析方法が、「コンピュータが自動的に答えを出してくれる」ものではなく、それ自体が深い数学的研究の対象であることを、少しでも感じてもらえれば幸いです。

まずは、初心に帰り、I. Newton の導いた、太陽の周りを動く惑星の運動を記述する微分方程式を例にとります。ただし、Newton の考えたものを、そっくりそのまま扱うのは骨が折れますので、以下の話の本質を損なわない程度に簡略化したものを考えます。惑星の質量に比べて、太陽の質量 M は非常に大きいします。そして、太陽の位置を位置ベクトルの基準(原点)とします。このとき、時刻 t における惑星の位置ベクトル $(x(t), y(t))$ の各成分は、微分方程式

$$\frac{d^2}{dt^2}x(t) = -\frac{GM}{r(t)^3}x(t), \quad \frac{d^2}{dt^2}y(t) = -\frac{GM}{r(t)^3}y(t) \quad (1)$$

を満たします。ここで、 G は万有引力定数で $r(t) = \sqrt{x(t)^2 + y(t)^2}$ は太陽と惑星の距離を表します。適当な初期条件 $x(0) = a_1, y(0) = a_2, x'(0) = a_3, y'(0) = a_4$ の下で、(1) を解いて 2 つの関数 $x(y), y(t)$ を求めれば、惑星の運動がわかったこととなりますが、残念ながら (1) は、解析的には解けません(初等関数を使って解が表現できないということ)。それでも、方程式そのものを使って、Kepler の法則

1. 惑星は太陽を焦点の 1 つとする楕円軌道上を運動する

2. 太陽と惑星を結ぶ線分が単位時間に掃く面積は一定である
3. 惑星の公転周期の自乗は、楕円軌道の軌道の半長軸の長さの三乗に比例する

を導くことはできます。しかし、ある時刻に惑星が xy 平面上のどこにいるのかを知ることはできません。そこで活躍するのが数値解法です。

(1) に対する数値解法を説明するために、 $x = x(t)$ などが t の関数であることは了解事項とし、変数 t を省略することにして、

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ x' \\ y' \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{u}) \\ f_2(\mathbf{u}) \\ f_3(\mathbf{u}) \\ f_4(\mathbf{u}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \\ -GMu_1/r^3 \\ -GMu_2/r^3 \end{pmatrix}$$

とにおいて、(1) を

$$\frac{d}{dt}\mathbf{u} = \mathbf{f}(\mathbf{u}) \quad (2)$$

と書き直します。そして、 $0 \leq t \leq T$ における惑星の動きについて考えましょう。まず、整数 $N (\geq 1)$ を採って $h = T/N$ とおき、閉区間 $[0, T]$ 内に $N + 1$ 個の点

$$t_n = nh \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

を定義します。各 t_n 上で、 $\mathbf{u}(t_n)$ の近似値 (数値解) U^n を

$$U^{n+1} = U^n + hf(U^n) \quad (n = 0, 1, \dots, N-1) \quad (3)$$

に従って求めます。ただし、 U^0 は初期条件から $U^0 = (a_1, a_2, a_3, a_4)$ とします。実際に、 U^n は (3) により逐次的に計算できます。 N の値が大きいときには、人間の手で計算するのは大変でも、コンピュータを用いれば一瞬で答えが返ってきます。この数値解法は、Euler 法と呼ばれています。微分法手式の解 $x(t), y(t)$ は、任意の時刻 t に対して値が定義されている (第 2 次導関数までが) 連続な関数ですが、数値解 U^n は、とびとびの時刻 t_n でのみ値が定義されている離散的な関数 (数列) です。すなわち、この数値解法は、連続を離散で近似することに基づいているのです。

(3) の具体的な計算に進む前に、どのようにして (3) が出てきたかを説明しておきましょう。そのために、スカラー値関数 $u = u(t)$ に対する微分方程式

$$\frac{du}{dt} = f(u) \quad (4)$$

を考えます。この場合、 f は 1 変数の関数です。微分の定義 $\frac{du(t)}{dt} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(t+h) - u(t)}{h}$ に立ち戻ると、 h を十分小さくとることによって、

$$\frac{du(t)}{dt} \approx \frac{u(t+h) - u(t)}{h}$$

としても良さそうです。そこで、(4) の左辺を差分商 $\frac{u(t+h) - u(t)}{h}$ で置き換えて、 $t = t_n$ とすると、

$$\frac{u(t_n+h) - u(t_n)}{h} \approx f(u(t_n))$$

を得ます。この関係式が等号で成立する場合の解 U^n 、すなわち、

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{h} = f(U^n)$$

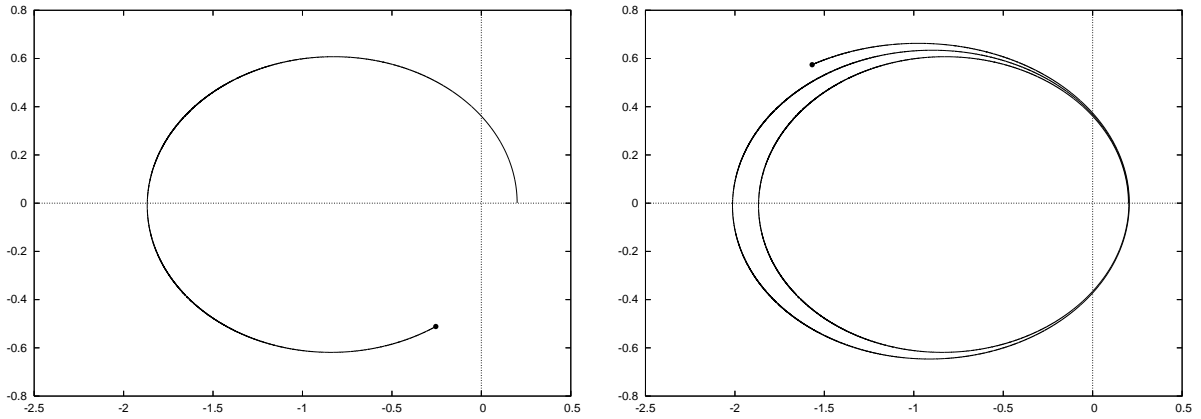


図1 惑星の軌道 $(x(t), y(t))$ の近似値 . Euler 法 ($h = 0.0001$). 左 : $T = 2$, 右 : $T = 5$.

を満たす U^n を , 微分方程式 (4) の解 $u(t_n)$ に対する近似値として採用するのが Euler 法の考え方で
す . (3) は , これをベクトル値に素直に拡張しています .

さて , (3) を用いて実際に軌道を計算して , 図を描いてみましょう . 軌道は楕円を描くはずですが ,
長軸が x 軸上にあるように初期値を設定して , 計算してみます . (実際には , (2) そのものではなく ,
適当に変数変換をして , 図を描きやすいように方程式に出てくる定数を調整しています .) 結果を ,
図 1 に示します . 図 1 左を見ると , 楕円が描かれていそうですが , 図 1 右では , 軌道が閉じずにどん
どん広がっている様子わかります . すなわち , Euler 法は微分方程式をうまく近似できていないよ
うです (h をもっと小さく採ると , $T = 5$ までうまく計算できますが , もっと長時間に渡って解こ
うとすれば , いずれ軌道にずれが生じます) .

そこで , Euler 法についてもう少し考えてみましょう . Taylor の定理などを応用すると , Euler 法
の解 U^n と微分方程式の解 $u(t_n)$ の間に ,

$$\max_{0 \leq t_n \leq T} \|u(t_n) - U^n\| \leq C_E h$$

という関係が成立することが導けます . ただし , 一般にベクトル $v = (v_1, v_2, v_3, v_4)$ に対して ,
 $\|v\| = \max\{|v_1|, |v_2|, |v_3|, |v_4|\}$ なる表記を用いています . また , C_E は , T と u の高階導関数によっ
て定まる定数で , 特に h には依存しません . これより , $h \rightarrow 0$ (すなわち $N \rightarrow \infty$) とすれば , 近似
解は微分方程式の解に収束することがわかります . このように , $\alpha > 0$ に対して $|(誤差)| \leq (\text{定数})$
 $\times h^\alpha$ の形をしている数値解法を (少なくとも) α 次精度の解法と言い , このとき数値解は微分方程
式の解に (少なくとも) α 次収束していると言います . 「少なくとも」という断りが必要なのは , 誤差
を表現している式が不等式になっているからです . h の値を , 0.1, 0.01, 0.001, ... と 0 に近づけてい
けば明らかなように , α の値が大きい方が , 収束がより速くなっていることがわかります . $\alpha_1 < \alpha_2$
のときに , α_1 次精度の解法よりも , α_2 次精度の解法の方が高精度であると言います . Euler 法は 1
次精度の解法です .

そこで , (3) の代わりに ,

$$U^{n+1} = U^n + hF(U^n)$$

とにおいて , F をうまく工夫して , より高精度の数値解法 , すなわち , 2 次や 3 次収束をするものを作
ることはできないでしょうか . 実際 , Taylor の定理を応用して , 少し (?) 計算をしてみると ,

$$F(U^n) = \frac{k_1^n + k_2^n}{2} \quad \left(k_1^n = f(U^n), k_2^n = f(U^n + hk_1^n) \right)$$

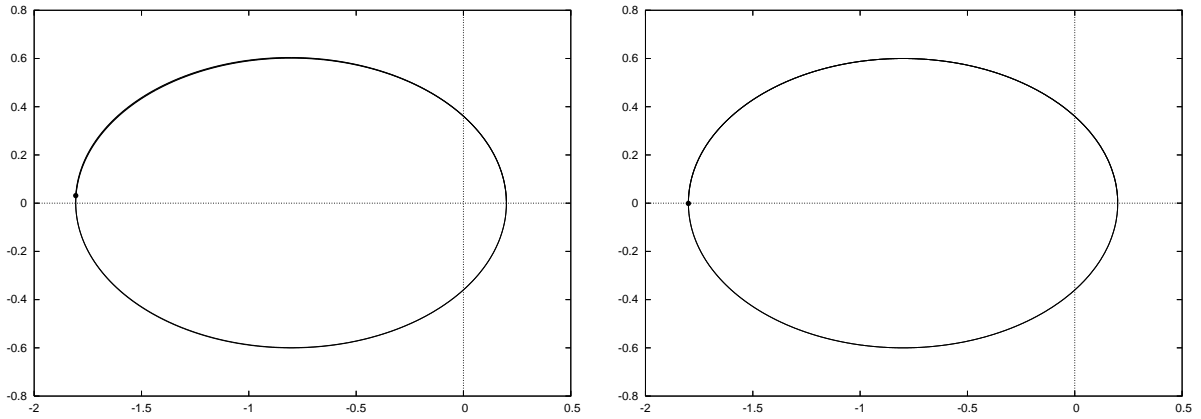


図 2 惑星の軌道 $(x(t), y(t))$ の近似値 . 左 : Heun 法 ($h = 0.001$) , 右 : Runge-Kutta 法 ($h = 0.001$) . 共に , $T = 5$.

ととることにより ,

$$\max_{0 \leq t_n \leq T} \|\mathbf{u}(t_n) - \mathbf{U}^n\| \leq C_H h^2$$

とできます (C_H の意味は C_E と同じ) . これを , Heun 法と呼びます . さらに , 複雑になるので具体的には書きませんが , Runge-Kutta 法と呼ばれる方法では ,

$$\max_{0 \leq t_n \leq T} \|\mathbf{u}(t_n) - \mathbf{U}^n\| \leq C_{RK} h^4 \quad (5)$$

が成り立ちます . これらの解法は , Euler 法よりも高精度なので , 収束が速く , より良い数値解が得られることが期待できます .

図 2 に , Heun 法と Runge-Kutta 法を用いた計算結果を示しました . とともに , Euler 法よりも 10 倍大きい時間幅 ($h = 0.001$) で , 楕円軌道がきれいに再現できていることがわかります . 実は , 周期 2 で , $t = 0$ で $(x(0), y(0)) = (0.2, 0)$ となるように , 初期値を選んでいるので , 終了時刻の $t = T = 5$ では , 惑星は x 軸上になければなりません . この点からも , Runge-Kutta 法は良い近似なっています . ただし , 高精度の解法を用いることによって , 誤差の増幅を先送りしているだけなので , Runge-Kutta 法でいくら h を小さく採っても , 長時間計算を続ければ , いずれ図 1 右のように , 軌道にずれが生じてしまいます . とはいえ , 同じ条件 ($h = ?$, $T = ?$) 下では , Runge-Kutta 法は Euler 法よりも良い数値解法であることには変わりはありません .

・・・と , ここまでが前置きです . 今まで , 微分方程式の近似解法の良し悪しを計る尺度として , 精度を採り上げました . しかし , 私はある時 , 高橋大輔先生 (早稲田大学基幹理工学部) から , 次のような例を教えてください , たいへん驚きました .

単振動の微分方程式

$$-\frac{d^2 x}{dt^2} = x \quad (6)$$

を考えましょう . これは極めて簡単な方程式です . 大学 1 年 (または 2 年) 生程度の知識で , 一般解が ,

$$x(t) = A \cos x + B \sin x \quad (A, B \text{ は定数})$$

となることがすぐにわかります . 解がよく知られている関数で書けているのだから , もうすることは無いような気もしますが , 試しに , 上で議論した近似解法を適用してみましよう . 図 3 に , Euler 法

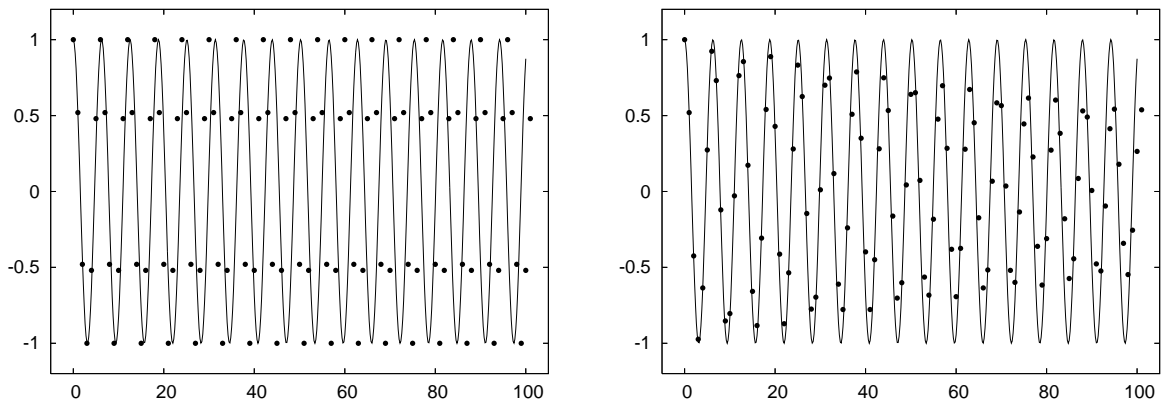


図3 点が近似解 X^n を，実線が微分方程式の解 $x(t) = \cos x + B \sin x$ を表す．初期条件は $x(0) = 1, x'(0) = B \approx -0.024127$ ．左：Euler(もどき)法 ($h = 1$)，右：Runge-Kutta 法 ($h = 1$)．

を(精度はそのままで)すこしだけ修正した解法を適用した際の数値解 X^n (左側)を，また，Runge-Kutta 法を適用した数値解 X^n (右側)を示しました．ともに， $h = 1, T = 100$ としています．実線は微分方程式の解 $x(t) = \cos x + B \sin x$ を表します(初期条件は $x(0) = 1, x'(0) = B \approx -0.024127$ としています)．

Euler(もどき)法の精度は1次で， $h = 1$ は大きく， $T = 100$ と長時間解いていることを考慮すると，あまり良い近似になっていないことが予想されます．実際，数値解が実線を大きく外れているところが多くなっています．しかしながら，方程式の解の持つ(そして振動現象を考える上で最も重要な)振動性が，長時間に渡って見事に再現されています．一方で，Runge-Kutta 法で求めた数値解は，実線にはより近くなっていますが，振動性は全く再現できていません．Runge-Kutta 法は Euler 法よりも高精度の解法です．それでは，Euler 法と Runge-Kutta 法は，どちらが「良い」解法なのでしょうか？

しかし，これは Runge-Kutta 法には少々酷な例です．というのも，(6)の解 $x = x(t)$ には保存則

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + x^2 = (\text{時間に依存しない定数}) \quad (7)$$

が成り立ちます．実は，Euler(もどき)法は，精度を保ったまま，

$$\left(\frac{X^{n+1} - X^n}{h}\right)^2 + X^{n+1}X^n = (n \text{ に依存しない定数})$$

が成立するように，Euler 法を修正したものなのです．Runge-Kutta 法には，このような保存則はありません．すなわち，長時間に渡る振動性の再現に着目した場合，(5)の形の精度よりも保存則(7)の再現を重視した方が，よい良い数値解法が導かれるのです．

精度 vs. 保存則で，近似解の良し悪しを決めつけてしまうのは不毛なことでしょう．大切なのは，対象としている現象・方程式を通じて，私達が何を知りたいか，何を再現したいかという主体性です．もっとも，微分方程式の近似解法を研究する立場からは，一つの尺度だけではなくいろいろな観点からの良い解法を研究することが肝要です．

実際の講演では，もう二三の例を挙げてお話します．

— 以上 —