# 数値解析法講座 1

## 基礎編

## 常微分方程式の差分化手法

伊藤　剛*

### 1. 数値解法について

#### （1） 数値解法の問題点

近代の高速度電子計算機ができて，いろいろな複雑な問題でも解けるようになった。しかし，なかには一応答と思われる数値が得られるが，はたしてそれが真の答であるかわからないものもある。とにかく，高速度電子計算機を使うようになって，われわれの技術進歩に大きな変革をもたらしたことは事実である。のみならず，社会生活にも，またわれわれの頭の中にも，ひいては人間の人格にすら大きな影響をもたらした。われわれは，電子計算機の便利さにおぼれて，それが万能の神であるごとく盲信するには，まだ問題がありそうだ。それらをこの講座の途中途中に述べるつもりであるが，ここにそのひとつを述べたい。

計算機で使用される数値は実数ではなく，有理数の有限な集合であるということである。これは，機械の性能上やむを得ないところである。したがって，その数値は実数として当然もつべき性質を備えていない（たとえば，「実数は代数的に閉じていないという性質」。これは代数方程式の根を求めるときに関係する。くわしくは代数学の書 参照)。

ここに述べたひとつの問題点は，実をいうと筆者自身

●「数値解析法講座」の開設にあたって――――――土木学会誌編集委員会

昨年好評のうちに連載を終りました「土木技術者のための法律講座」に引き続きまして，本年からは標記の「数値解析法講座」を連載することとなりました。本講座は，

① 技術の急速な進歩に対して，新しい技術のギャップをうめる再教育の意味をもった講座にしたいこと，② 読者に刺激を与えて，勉強意欲を起こさせる講座にしたいこと，③ コンピューターを前提として現象を考える講座にしたいこと，④ 水準は学部4年生程度を対象とすること，⑤ 他の参考書・論文などを参照しなくても，自然に誘導できるような書き方にすること，⑥ より高度な技術については参考書をあげ，指針を与えること，⑦ 数値計算をするに際し，常に具体的な問題との対応ということを考えられる講座としたいこと，⑧ 基礎編は導入部分とし，実際の問題の応用は，応用編がうけもつ講座としたいこと，の8項目を「編集の方針」とします。

久しぶりにハードな講座となりますが，時宜にあった企画と信じますので，会員各位のご支援をお願いいたします。

なお，本講座は「基礎編」と「応用編」の2つの編成として，前者を6回，後者を12回に分載いたします。

主要内容等は右表のとおりですが，一部事情により変更を加えることもありますので，ご承知おき下さい。

（1） 基礎編（6回）

| No. | 名　　称 | 執筆または編者 |
|---|---|---|
| 1. | 常微分方程式の差分化手法 | 伊藤　剛(新潟大) |
| 2. | 偏微分方程式の差分化手法 | 伊藤　剛(新潟大)<br>中川　友康(電　研) |
| 3. | 行列と連立一次方程式 | 大地　羊三(法政大) |
| 4. | 有限要素法 | 飯田　隆一(建設省) |
| 5. | 最適化手法 | 吉川　和広(京　大) |
| 6. | 関数近似・曲線近似・高次方程式の根 | 伊藤　剛(新潟大) |

（2） 応用編（12回）

| No. | 名　　称 | 執筆または編者 |
|---|---|---|
| 7. | 変形応力解析(I)（骨組み・板・殻） | （交渉中） |
| 8. | 変形応力解析(II)（振動・波動） | |
| 9. | 変形応力解析(III)（大変形・弾塑性・非線形） | |
| 10. | 流体解析(I)（拡散・不定流・高潮） | |
| 11. | 流体解析(II)（有限要素法） | |
| 12. | 統計・推計・解析(I)（交通計画・道路計画） | |
| 13. | 統計・推計・解析(II)（ネットワーク・モンテカルロ法） | |
| 14. | 偏微分方程式の誤差 | |
| 15. | 係数差の大きい方程式 | |
| 16. | 大次元行列の処理 | |
| 17. | OR 手法(I) | |
| 18. | OR 手法(II) | |

注：応用編の実施目次は予告なく変更することもございます．

以　上

* 正会員　工博　新潟大学教授　工学部土木工学科

もよくわからない。ただ，電子計算機は“有限の”数値しか扱えないという点が，たしかにひとつの問題点で，これが以下に述べる誤差の議論にもつながるのである。一応，頭にいれておいていただきたい。

### （2） 数値解法の利用範囲

数値解法は，次のような型の問題の解法に使われる。

① 近似計算：微分，積分，級数の和，データを代数式で表現する。

② 方程式の解：常微分方程式，偏微分方程式，積分方程式，simulation

③ 代数：線形方程式の根，非線形方程式の根

④ マトリックス：線形方程式の根，行列式，逆行列，固有値と固有ベクトル。

線形方程式の根を求める方法等をみるとわかるとおりひとつの問題をとくにも，いくつかの方法がある。その中には，良い方法もあれば悪い方法もある。ある特定の問題を解くには良い方法であったものが，他の問題に対して悪い場合もある。しかも，その良い悪いが，あらかじめ事前にはわからないことが多い。

しかし，convergency（収束性）とか stability（安定性）の性質は微分方程式，とくに偏微分方程式を解く場合には，きわめて重要な，必ずチェックしなければならない性質である。これは，微分方程式の数値解法のときくわしく説明するつもりであるが，概要は次のような性質である。convergency とは，その数値解法による答がはたして原方程式の真の答であるかどうかという問題である。stability とは，数値解法の初めの段階で生じた誤差が，たとえ小さくとも，計算をすすめる段階で累積していって，大きな誤差になりはしないかという問題である。これは，微分方程式を数値積分する場合おこりやすい。

さて，われわれが convergent な，stable な数値解法をみつけ得たとしても，われわれはなお，より精密な数値を求めるべく努力をしなければならない。それは，accuracy の問題である。

accuracy をはかる一般的な方法は後述するが，ここでは，ひとつの例を示してみよう。

［例—1］：$f(x)$ なる関数を $-1$ から $1$ まで積分した値を $f(-1)$，$f(0)$，$f(+1)$ なる既知の値で近似すること。

解：3つの係数 $a$，$b$，$c$ をとり，次式で近似できるとする。

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = af(-1)+bf(0)+cf(+1)$$

係数 $a$，$b$，$c$ を求めればよいわけだが，まず，

$f(x)=1$ とする。積分の値は2となるので，次の式がなりたつ。

$$a+b+c=2$$

次に，$f(x)=x$ とおいてみる。$-a \quad +c=0$

最後に $f(x)=x^2$ とおいてみる。$a \quad +c=2/3$

この連立方程式をとくと

$a=c=1/3$，$b=4/3$ を得る。

したがって，

$$\int_{-1}^{1} f(x) = \frac{1}{3}[f(-1)+4f(0)+f(1)]$$

なる近似式を得る。これは，Simpson の 1/3 公式であって，一般的に書くと

---

### ● 編者のことば

編者代表　伊藤　剛

今月から 18 回にわたって，表記の課題につき講座を続けることになった。会誌編集委員長からの厳命によると，1回6ページで，内容は簡明にしてわかりやすいこと，とのことであった。6ページで 18 回というと，108 ページでありこの中で数値解析全般を，しかもわかりやすく述べなければならないことになる。したがって，重要なところでも奥院までゆくことができない場合もあろう。例題や例示も十分示せないかも知れない。それでいて，わかりやすく書かなければならないのであるから，筆者一同身のひきしまる思いがする次第である。

さて，わかりやすさの程度であるが，いまの新制公私立の大学を出た人が，必ずしも数値解析を専門としない職業について社会生活をし，10年ぐらいたって，なおわかる程度のところを目標としたい。そして本講座で述べきれないところは参考文献を引用してもらうということにしたい。

おわりに，執筆にあたっては，ところどころに，息抜きも含めて筆者の感想等を折りこみ，講座に花をそえたい希望をもっている。この講座開講の発想は会誌編集委員会からも述べられたし，私自身，雑誌「用水と廃水」(1969, No. 6~12) に記載されている，東京都下水道局・藤田昌一さんの“やさしい Fortran”を読んで思いついたものである。

彼のことばを借りれば，「どうかあせらず，ゆっくりと勉強して下さい。筆者もゆっくり，ていねいに解説してゆくつもりです。とくに初めての方が，疑問に思いがちな点は気をつけて十分説明してゆこうと思っています」ということになりますが，本講座の執筆者一同も，同様な気持でやってゆくつもりです。

大方のご支持をお願いいたします。

$$\int_a^{a+2h} f(x) = \frac{h}{3}[f(a)+4f(a+h)+f(a+2h)] - \frac{h^5 f^{(4)}(\theta)}{90}$$

誤差は$-\frac{h^5 f^{(4)}(\theta)}{90}$であり，$\theta$ は $a$ と $a+2h$ 間の任意の数である。$f(x)=x^3$ の場合，$f^{(4)}(x)$ は 0 で，したがって，誤差は 0 となる。この近似式は，$f(x)=x, x^2, x^3$ の場合は正確な関係を表わすが，それ以外のとき，たとえば $f(x)=\sin x$, $f(x)=x^4$ のときは，もはや誤差がでてくる。

この例は，あまり文章がつづきすぎたので，ちょっと数式をいれて頭の洗濯をしたつもりである。Simpson の1/3 公式では，誤差の評価は $-h^5 f^{(4)}(\theta)$ でなされることを示している。

### （3） 数値解の誤差の恐しさ

人間のおこす mistake は別として，誤差は次のような場合に必然的におこってくる。

① 数値計算式の中には，長さ・時間・温度等の観測値がパラメーターとしてはいってくる。それらの観測が不正確なために式の答が不正確になる場合。

② 数値計算の中には，無限回数の計算とか，無限級数の計算をしなければ答の出ないものがある。しかし，実際は有限の計算しかできない。そのためにおこる誤差で “truncation error” といわれるもの。

③ 数値計算にでてくる数値は，必ずある限界点以下は切り捨てられる。その切捨てられた数値が累積して生ずる誤差で，“roundoff error” といわれるもの。

誤差の正確な定義は後述の微分方程式のところで再述するが，ここでは誤差の実体を一，二例示してみよう。

［例—2］：$99x+999y=1\,098$

$98x+998y=1\,096$

なる連立方程式の根は，$x=1.0$, $y=1.0$ であるが，係数を少し変えた式

$100x+1\,000y=1\,100$

$98x+1\,000y=1\,100$

の根は　$x=0$, $y=1.1$ となる。

［例—3］：$y''=-(\pi^2/4)y$, $x_0=0$, $y_0=0$, $y_0'=\pi/2$

なる微分方程式を，次のような近似計算で解いてみよう。

まず，2次微分を次のように近似する。

$$y_n''=(y_{n+2}-2y_{n+1}+y_n)/h^2 \quad \cdots\cdots(1)$$

この形は，前進形差分近似と呼ばれているものである。$h$ は $x$ のきざみ間隔で，$y_n$ は $x=nh$ のときの $y$ の値とする。上の近似式を原式に代入して

$$(y_{n+2}-2y_{n+1}+y_n)/h^2=-(\pi^2/4)y_n$$

を得るが，きざみ間隔 $h$ の値と，初期値 $y_0$, $y_1$ の値が与えられれば，順次 $y_n$ $(n=0,1,2,\cdots\cdots)$ の値が求められてゆく。それらの値を原微分方程式の解

$$y=\sin(\pi x/2)$$

と比較すれば，**表—1** のようになる。

**表—1**

| $x$ | 真の解 $\sin \pi x/2$ | 近似解 $h=0.1$ | $h=0.5$ |
|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0.5 | 0.71 | 0.77 | 0.79 |
| 1.0 | 1.00 | 1.22 | 1.58 |
| 1.5 | 0.71 | 1.12 | 1.88 |
| 2.0 | 0 | 0.47 | 1.20 |
| 8.0 | 0 | | −45.39 |

絶対1より大きくならないはずの $\sin \pi x/2$ の値が実に −45.39 になってしまった。これは，明らかに近似した差分式 (1) が不適当で，なんらかの欠陥があったためである。

ここにでてくる誤差は “stability error” と呼ばれるものである。誤差の発生が非常に早期に出てくるのは驚ろかれたであろう。

## 2．常微分方程式

### （1） 微分係数の差分近似

微分方程式の数値計算は，微分係数の差分近似からはじまる。差分近似とは，微分係数を次のように近似することである。

$$\frac{dy}{dx}=y_n'=\frac{y_{n+1}-y_n}{h} \quad \cdots\cdots(2)$$

ここに，$y_{n+1}$, $y_n$ は $x_n$ が微小値 $h$ だけ離れた点の $y$ の値である。式 (2) を書き直すと

$$y_{n+1}=y_n+hy_n' \quad \cdots\cdots(3)$$

となる。この式のように，近似することを Euler の方法といい，式 (2) の型を前進差分という。何とならば，$y_n$ 点の微分係数を近似するのに，$y_n$ と，$h$ だけ前進した値 $y_{n+1}$ とを使うからである。

差分近似は，次のような3つの形が基本的である。

$y_n'=(y_{n+1}-y_n)/h$　　前進差分…(4)

$y_n'=(y_n-y_{n-1})/h$　　後退差分…(5)

$y_n'=(y_{n+1}-y_{n-1})/h$　　中央差分…(6)

差分近似には，まだほかにいろいろの形がある。どれがよいかは convergency（収束性）・stability（安定性）・accuracy（正確度）・計算時間，等の関係できまるが，このうち一，二の性格は絶対的に必要である。convergency, stability, accuracy の性質は常微分方程式ではきざみ幅 $h$ によってきまり，偏微分方程式では，時間のきざみ幅 $\Delta t$, 距離のきざみ幅 $\Delta x$ の比 $\Delta t/\Delta x$ によってきまることが多い。ときには，常数項の近似が影響することもある。

常微分方程式の差分近似として，上述のほか Runge-Kutta 法等があるが，それらについては以下に述べる。

### （2） 差分近似による誤差（差分式の収束 convergency と安定 stability）および（accuracy）の定義

convergency とは，原微分方程式の exact solution を $U$, その差分近似式の exact solution を $u$ とするとき，きざみ幅 $\Delta x$ が 0 に tend するとき $u \to U$ になるならば，この差分近似式は convergent であるという。また，差 $(U\text{-}u)$ のことを discretization error ということにする。

stability とは，たとえば連立差分方程式をひとつずつ未知数をへらして解いてゆくとき，毎回小数点何位か以下を切り捨ててゆく。よって，得られる解は $u$ ではなく，数値解 $N$ が得られる。$(N\text{-}u)$ のことを round-off error という。一般に，round-off error の累積効果が無視できるように組み立てられた差分近似式を stable（安定）であるという。結局，Total error は次の式で得られる。

$$\text{Total error} = U-N=(U-u)+(u-N)$$
$$= \text{discretization error} + \text{stability error} \quad \cdots\cdots (7)$$

$$\text{Stability error} = \sum \text{round-off error} \cdots\cdots (8)$$

truneation error は，原微分方程式と差分近似式との差をいう。一般に差分近似式は，原微分方程式中の関数を Taylor 展開し，ある項以下を枝切りして得られる。だから，truncation error という。discretization error は両式の解の差をいい，数値で示されるが，truncation error は両式の違いであって数値では示されない。

いま $x$ の関数 $f(x)$ があって，$x$ が $\Delta x$ だけ増したときの値を $f(x+\Delta x)$ とすれば，これを Taylor 展開して次式を得る。

$$f(x+\Delta x)=f(x)+f'(x)\Delta x+\frac{f''(x)}{2!}\Delta x^2+\cdots \quad (9)$$

右辺第2項までをとり，以下枝切りして整理すれば

$$f'(x)=\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}+0(\Delta x) \cdots\cdots (10)$$

となる。ここに，$0(\Delta x)$ は $\Delta x$ のオーダーの意味である。

この式は，また式 (2) と同じである。ゆえに，式 (2) で示される差分近似の accuracy は，1次のオーダーであるという。

一般に，accuracy を求めるには Taylor 展開を使う。convergency, stability については偏微分方程式のところで述べる。

### （3） 常微分方程式の初期値問題

$$y'=\frac{dy}{dx}=f(x,y) \cdots\cdots (11)$$

の解 $y=y(x)$ を初期条件 $y(x_0)=y_0$ のもとでとくことである。

この問題は，解が存在することが証明されている。微分方程式を数値的にとくということは，まず，きざみ幅 $\Delta x$ を適当にきめ ——accuracy を考慮して——，計算区間につき与えられた初期値から出発して，次々に $y$ の値を計算してゆくことである。

**a)** オイラー法 (Euler's method)

はじめの $x_0$ に対し，初期値 $y_0$ が与えられているとき

$$y_1=y_0+\Delta x f(x_0, y_0)$$

により $y_1$ を求め，次に

$$y_2=y_1+\Delta x f(x_1, y_1)$$

により $y_2$ を求め，順次計算をすすめて最後の $y_N=y_{N-1}+\Delta x f(x_{N-1}, y_{N-1})$ まで求めてゆく。ここに，$N$ は計算区間 $a, b$ を $\Delta x$ で割った数である。

$$N=\frac{b-a}{\Delta x} \cdots\cdots (12)$$

この方法は，式 (2)，すなわち式 (10) を使うのであるから，accuracy は1次である。したがって，誤差が大きく実際には使われていない。オイラー法は，前進差分を使っているが，accuracy を上げるためには式(6)の中央差分を使うとよい。accuracy は次の計算でみるとおり，2次である。

$$y_{n+1}=y_{n-1}+2\Delta x y'_n+0\left(\frac{\Delta x^3}{3}\right)$$

より，

$$\frac{y_{n+1}-y_{n-1}}{2\Delta x}=y_n'+0(\Delta x^2) \cdots\cdots (13)$$

すなわち，2次となる。

この中央差分を使う方法を修正オイラー法という。

**b)** ルンゲ-クッタ法 (Runge-Kutter Methods)

この方法は stable で，精度もよい。すなわち，$y'=F(x,y)$, $y(x_0)=y_0$ において，次の2つの方法がよく使われる。

① Third-order accuracy formula :

$$y_{n+1}=y_n+\frac{1}{6}(k_0+4k_1+k_2)+0(h^4) \cdots\cdots (14)$$

ここに

$$k_0=hF(x_n, y_n),$$
$$k_1=hF\left(x_n+\frac{1}{2}h,\ y_n+\frac{1}{2}k_0\right)$$
$$k_2=hF(x_n+h, y_n+2k_1-k_0)$$
$$h=\text{きざみ幅 } \Delta x$$

② Fourth-order accuracy formula :

$$y_{n+1}=y_n+\frac{1}{6}(k_0+2k_1+2k_2+k_3)+0(h^5)\cdots\cdots(15)$$

$k_0$, $k_1$ は前式と同じ。

$$k_2=hF\left(x_n+\frac{1}{2}h,\ y_n+\frac{1}{2}k_1\right)$$

$$k_3=hF(x_n+h,\ y_n+k_2)$$

式 (14) では

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{h}=\frac{1}{6h}(k_0+4k_1+k_2)+0(h^3)$$

ゆえに，accuracy は3次である。同様にして，式(15)は4次である。

ルンゲ-クッタ法の誘導は次のようにして求める。原式：$y'=f(x,y)$ の両辺を逐次微分すれば，

$$y^{(n)}\equiv\frac{d^ny}{dx^n}=\left(\frac{\partial}{\partial x}+f\frac{\partial}{\partial y}\right)^nf(x,y)$$

いま，次のような記号を考える。

$$D(y)=\frac{\partial f}{\partial x}+f\frac{\partial f}{\partial y}$$

$$D^2(y)=\frac{\partial^2 f}{\partial x}+2f\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}+\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}=\left(\frac{\partial f}{\partial x}+f\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

そうすると，$y_0'$, $y_0''$, $y_0'''\cdots\cdots$，は次のようにかける。

$$y_0'=f$$

$$y_0''=D(f)$$

$$y_0'''=D^2(f)+f_yD(f)$$

$$y_0''''=D^3(f)+f_yD^2(f)+f_y^2D(f)+3D(f)D(f_y)$$

$$y_0^{(V)}=D^4(f)+f_yD^3(f)+f_y^2D^2(f)+f_y^3D(f)+4D^2(f)D(f_y)+6D(f)\ D^2(f_y)+7f_yD(f)D(f_y)+3f_{yy}(D(f))^3$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

さて，$x=x_0+h$ における $y$ を Taylor 展開すると

$$y=y_0+y_0'h+\frac{y_0''}{2!}h^2+\frac{y_0'''}{3!}h^3+\frac{y_0''''}{4!}h^4+\frac{y_0^{(V)}}{5^5}h^5+\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(16)$$

となるが，ここに上で求めた $y_0'$, $y_0''$,……，の値を代入すると

$$y_0=y_0+fh+D(f)\frac{h^2}{2}+[D^2(f)+5_yD(f)]\frac{h^3}{6}+[D^2(f)+f_yD^2(f)+f_y^2D(f)+3D(f)D(f_y)]\frac{h^4}{24}+\cdots\cdots$$

を得る。いま

$$k_1=f(x_0,\ y_0)h$$

$$k_2=f\left(x_0+\frac{h}{2},\ y_0+\frac{k_1}{2}\right)h$$

$$k_3=f\left(x_0+\frac{h}{2},\ y_0+\frac{k_2}{2}\right)h$$

$$k_4=f(x_0+h,\ y_0+k_3)h$$

とおけば，次のようになる。

$$k_1=fh$$

$$k_2=fh+D(f)\frac{h^2}{2}+D^2(f)\frac{h^3}{8}+D^3(f)\frac{h^4}{48}+D^4(f)\frac{h^3}{384}$$

$$k_3=fh+D(f)\frac{h^2}{2}+D^2(f)\frac{h^3}{8}+D^3(f)\frac{h^4}{48}+D^4(f)\frac{h^3}{384}+f_yD(f)\frac{h^3}{4}+f_yD^2(f)\frac{h^4}{10}+f_yD^3(f)\frac{h^5}{96}+D(f)D(f_y)\frac{h^4}{8}+\cdots\cdots$$

$$k_4=fh+D(f)h^2+D^2(f)\frac{h^3}{2}+D^3(f)\frac{h^4}{6}+D^4(f)\frac{h^5}{24}+5yD(f)\frac{h^3}{2}+f_yD(f)\frac{h^3}{2}+f_yD^2(f)\frac{h^4}{8}+f_yD^3(f)\frac{h^5}{48}+f^2{}_yD(f)\frac{h^4}{4}+\cdots\cdots$$

ここで，$k=\frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)$ を計算してみると

$$k=fh+D(f)\frac{h^2}{2}+[D^2(f)+f_yD(f)]\frac{h^3}{6}+\cdots$$

となり，式 (16) とくらべてみると

$$y=y_0+k$$

と $h^4$ の項まで一致することがわかる。この式を一般的に書けば

$$y_{n+1}=y_n+k$$

となる。すなわち，式 (5)，Fourth-order accuracy formula が誘導できた。

**c)** Runge-Kutta-Gill 法

Runge-Kutta 法を改良して電子計算機を使用するとき，記憶容量が小さくてすむようにしたものである。Runge-Kutta 法とともに，詳細は文献 1)～5) を参照されたい。

**d)** Milne's method

Euler 法，Runge-Kutta 法は，前進形の差分近似をしているので，計算は初期値から出発して，1 step ずつ前進しながら計算を続けて，最後まですすめてゆける。Milne 法は前進形の式を使って，ひとつ前の値 $y_{n+1}$ を予測し，この値を使って反覆形の式で修正するというやり方である。このような方法を，Predictor-corrector methods ともいう。Milne の方法は，その一種で，次のような式を用いる。まず，

$$\left.\begin{aligned}&\text{予測子：}y^p{}_{n+1}=y_{n-3}+\frac{4h}{3}(2y'_{n-2}-y'_{n-1}+2y'_n)+\frac{28}{90}h^5y^{(V)}\\&\text{修正子：}y^c{}_{n+1}=y_{n-1}+\frac{h}{3}(y'_{n-1}+4y'_n+y'_{n+1})-\frac{1}{90}k^5y^{(V)}\end{aligned}\right\}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(17)$$

予測子は $y_{n+1}$ を $y_{n-1}$ で展開したものである。修正子は積分の近似計算に使われる Simpson's rule：

$$\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} y(x)\,dx=h(f_{n-1}+4f_n+f_{n+1}),$$

ただし，$f_{n+1}=f(x_{n+1},y_{n+1})$

を少し修正したものである。計算のすすめ方は，まず予測子 $y^p{}_{n+1}$ を計算し，それを修正子の式中の $y'_{n+1}=f(x_{n+1},y_{n+1})$ に代入して $y^c{}_{n+1}$ を求め，これを修正子の右辺の $y'_{n+1}$ に代入し，再び $y^c{}_{n+1}$ を計算する。結局

$$C=y^c{}_{n+1}-y^p{}_{n+1}$$

があらかじめきめておいたある数値 $C$ より小さくなったとき反覆計算をやめて，このときの $y^C{}_{n+1}$ を求める答とし，次の step に移る。この方法は，instability になるおそれがあり，注意を要する。

### （4） 常微分方程式の境界問題

連立または高次の微分方程式では，積分区間の両端で境界条件が与えられて，それに合うような解を求める場合がある。これが境界値問題といわれるものであるが，構造力学等によくでてくる問題である。

原微分方程式が線形の場合は，以下述べるように，多元一次の連立方程式をとくことになるが，非線形の場合は非常に困難になる。ここでは，線形の場合についてのみ述べることにし，非線形の場合は後続の講座にゆずることにする。

**a）** 差分法

［**例—4**］：$y''=0$ を境界条件 $x=0$ で $y=y_0$，$x=nh$ で $y=y_n$ になるよう解を求めること。

差分近似により

$$y''_i=\frac{1}{h^2}(y_{i+1}-2y_i+{}_{i-1})$$

とおく。この関係を原微分方程式に逐次代入してゆくと，次の連立方程式が得られる。

$$\left.\begin{array}{ll}
y_0-2y_1+y_2 & =0\\
\quad y_1-2y_2+y_3 & =0\\
\qquad y_2-2y_3+y_4 & =0\\
\qquad\quad\cdots\cdots\cdots & \\
\qquad\qquad y_{n-2}-2y_{n-1}+y_n & =0
\end{array}\right\}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(18)$$

$y_0, y_n$ は与えられているので右辺にまわし，この連立方程式を行列表示で表わすと次のようになる。

$$\left.\begin{pmatrix}
2 & -1 & 0 & 0 & \\
-1 & 2 & -1 & 0 & \\
0 & -1 & 2 & -1 & \\
\cdots\cdots & & & & \\
 & & & -1 & 2
\end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1\\ y_2\\ y_3\\ \cdots\\ y_{n-1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y_0\\ 0\\ 0\\ \cdots\\ y_n\end{pmatrix}\right\}\cdots(19)$$

左辺の行列を $A$，ベクトルを $Y$，右辺のベクトルを $B$ で表わすと

$$AY=B\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(20)$$

$$\therefore\ Y=A^{-1}B\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(21)$$

$B$ なるベクトルは $(y_0,\cdots\cdots,y_n)$ で既知であるので $A^{-1}$ なる逆行列が計算できれば，$Y(y_1,y_2,\cdots\cdots,y_{n-1})$ なるベクトルの要素 $y_1,y_2,\cdots\cdots,y_{n-1}$ が全部求められ，解が得られたことになる。

しかし，連立方程式の数が多くなると，いわゆる "Large Matrix" の問題として，電子計算機を使ってもそう簡単にはとけない。Large Matrix についても後続の講座で述べるつもりである。

さて，式（21）の $A$ の逆行列の計算をすすめてみる。

$$A^{-1}=\begin{pmatrix}
(1-1/n) & (1-2/n) & (1-3/n) & 2/n & 1/n\\
(1-2/n) & 2(1-2/n) & 2(1-3/n) & & 2/n\\
(1-3/n) & 2(1-3/n) & 3(1-3/n) & & \\
(1-4/n) & 2(1-4/n) & 3(1-4/n) & & \\
\cdots\cdots\cdots & & & & \\
1/n & 2/n & 3/n & & (n-1)/n
\end{pmatrix}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(22)$$

逆行列の計算方法については，文献その他行列の専門書をみていただきたい。そこで，解は

$$Y=\begin{pmatrix} y_1\\ y_2\\ y_3\\ \cdots\\ y_{n-1}\end{pmatrix}=A^{-1}\begin{pmatrix} y_0\\ 0\\ 0\\ \cdots\\ y_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(1-1/n)y_0+y_n/n\\ (1-2/n)y_0+2y_n/n\\ \cdots\cdots\\ \cdots\cdots\\ 1/n\ y_0+(n-1)y_n/n\end{pmatrix}\cdots(23)$$

**b）** 初期値問題に変換する方法

この方法は線形常微分方程式にのみ適用される。例として

$$y''+f_1(x)y'+f_2(x)y=0,\quad 境界条件\ y(0)=a_1,$$
$$y(b)=a_2,\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(24)$$

を考える。その一般解は，次のように表わされる。

$$y=c_1y_1+c_2y_2$$

ここに，$c_1$，$c_2$ は環境条件からきめられる係数とする。$y_1, y_2$ を次の初期条件を満足する式（24）の解とする。

$$\left.\begin{array}{ll} y_1(0)=1, & y_2(0)=0\\ y_1'(0)=0, & y_2'(0)=1\end{array}\right\}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(25)$$

$y_1, y_2$ を求めるのは，すでに述べた初期値問題に帰する。ゆえに，ルンゲ-クッタ法等を使って解けるはずである。式（25）なる条件は便宜上つけ加えたものである。

さて，境界条件をいれると次の関係を得る。

$$c_1=a_1$$

$$c_2=\frac{a_2-a_1y_1(b)}{y_2(b)}$$

求める解は

$$y(x)=a_1y_1(x)+c_2y_2(x)\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(26)$$

で表わされる。

**(5) きざみ幅の問題**

解説の中できざみ幅 $h$, $\Delta x$ の適当な大きさについては，なるべく小さい程よいようなことを書いた。そうすれば，discretization error は小さくなるといわれている。accuracy も上ることは事実である。しかし，きざみ幅を小さくすれば step 数（目盛り）は細かくなり，計算回数がふえる。

上述の境界値問題で連立方程式をとく方法を述べたが，この場合は，連立方程式の数がふえる。そうなると，round-off error がふえるといわれている。ゆえに，結局両者の error の和が最小になるようなきざみ幅をとることが最適であると結論される。しかし，一般にきざみ幅と各種の error の関係の解明は非常に困難である。

もうひとつ，誤差の問題をあげる。

$$y'=1-y \qquad \cdots\cdots(27)$$

この式中の $y'$ を中央差分でおきかえると

$$y_{n+1}=y_{n-1}+2h(1-y_n),\ h：きざみ幅 \qquad \cdots\cdots(28)$$

となり，その解は

$$y_n=1+a\lambda_1{}^n+b\lambda_2{}^n \qquad \cdots\cdots(29)$$

＝特解＋斎次解

の形で表わされる。また

$$\lambda_1=\sqrt{1+h^2}-h,\ \lambda_2=-(\sqrt{1+h^2}+h) \qquad \cdots\cdots(30)$$

である。なんとならば，$y_n=\lambda^n$ とおくと，$y_{n+1}=\lambda^{n+1}$, $y_{n-1}=\lambda^{n-1}$ となる。これらを式 (28) に代入すると

$$\lambda^2+2h\lambda-1=0$$

を得る。この根 $\lambda_1$, $\lambda_2$ は式 (30) であるから。

ここに，$\lambda_2$ は絶対値が1より大きい負値をとっている。ゆえに，はじめ式 (29) で $b=0$ であっても，丸めのためにこの項が0でなくなると，$\lambda_2$ が $n$ 乗で拡大されてゆく。

そのために解が振動をおこすことになる。

**参考文献**


1) C. Runge und H. König: Numerisches Rechnen, Julius Springer
2) L.G. Kelly: Handbook of Numerical Methods And Application, Addison-Wesley
3) 日高孝次：数値積分法（上），岩波書店
4) 杉山昌平・高橋磐郎：数値解析　広川書店
5) 磯田和男・大野豊監修：数値計算ハンドブック，オーム社書店