

第7章 常微分方程式の数値解法

常微分方程式 (ordinary differential equation) を数値的に解くには、解のだいたいの様子 特に特異性や不連続性を知る必要がある。特異性や不連続性のある問題は通常の方法のみでは解くことができないので、あらかじめその対策を立てる必要がある。本章では常微分方程式の数値解法を初期値問題と境界値問題に分けて説明する。初期値問題では専ら次の問題が差分法で解かれる。すなわち区間 $[a \leq x \leq b]$ で定義される常微分方程式

$$u' = f(x, u) \tag{7.1}$$

の初期条件

$$u(x_0) = u_0 \tag{7.2}$$

を満足する解 $u(x)$ を求める問題である。ただし $x_0 = a$, $f(x, u)$ は既知の関数である。また境界値問題では差分法または有限要素法で、2 階または 4 階の常微分方程式の 2 点境界値問題が解かれる。ここには差分法についてのみ述べることにする。在来の古典的応用数学の教科書には、通常 1 階の常微分方程式、定係数の線形常微分方程式、超幾何関数 (Legendre 関数など) や合流型超幾何関数 (Bessel 関数など) の常微分方程式に関していわゆる解析的手法が述べられている。読者はこの講義と古典的教科書のどちらが幅広い問題に対処できると思われるであろうか。式 (7.1) だけでは心もとないようにも思われるが、この式は実用的初期値問題のほとんどすべてをカバーしている。一方古典的教科書はいかにマスターしてもそこに述べられている手法では実用的問題の多くは手に負えないのである。

7.1 出発値の求め方

式 (7.1) を差分法で解く際には、解法によっては初期値 u_0 のほかに x_0 の近傍に取られるいくつかの点の u の値、すなわち出発値 (starting values) が必要になる。出発値は本節の方法または次節の Runge-Kutta 法によって求めることができる。出発値は、全体の解に大きな影響を及ぼすこともあるので、必要十分な精度で求めなければならない。

7.1.1 テイラー展開に基づく方法

x_0 近傍の $u(x)$ の値は次のテイラー級数から求めることができる。

$$u(x) = u_0 + (x - x_0)u'_0 + \frac{1}{2!}(x - x_0)^2 u''_0 + \frac{1}{3!}(x - x_0)^3 u'''_0 + \dots \tag{7.3}$$

u'_0, u''_0, \dots の値は、式 (7.1) を x に関して次々に微分した式に初期値を入れれば決定できる。この微分に際しては $f(x, u(x))$ すなわち f が x だけでなく $u(x)$ の関数であることに注意しなければならない。結果は次

のように微分の階数がふえるとともに急激に複雑になる。

$$u'' = f_x + u' f_u = f_x + f f_u \quad (7.4a)$$

$$u''' = f_{xx} + u'(2f_{xu} + u' f_{uu}) + u'' f_u = f_{xx} + 2f f_{xu} + f^2 f_{uu} + (f_x + f f_u) f_u \quad (7.4b)$$

$$\begin{aligned} u^{(4)} &= f_{xxx} + u'(3f_{xuu} + 3u' f_{xuu} + u'^2 f_{uuu}) + 3u''(f_{xu} + u' f_{uu}) + u''' f_u \\ &= f_{xxx} + 3f f_{xuu} + 3f^2 f_{xuu} + f^3 f_{uuu} + 3(f_x + f f_u)(f_{xu} + f f_{uu}) \\ &\quad + (f_{xx} + 2f f_{xu} + f^2 f_{uu}) f_u + (f_x + f f_u) f_u^2 \end{aligned} \quad (7.4c)$$

.....

この方法は $f(x, u)$ が比較的簡単な関数形で微分できる場合に使える。

7.1.2 Picard 法

式 (7.1) を x に関して積分すれば，次式が得られる。

$$u(x) = u_0 + \int_{x_0}^x f(x, u) dx \quad (7.5)$$

Picard 法では，まず適当な推定値 $u^{(0)}(x)$ を式 (7.5) の右辺に用い第 1 近似値 $u^{(1)}(x)$ を計算し， $u^{(1)}(x)$ を再び式 (7.5) の右辺に用い第 2 近似値 $u^{(2)}(x)$ を計算するという手順を繰り返す。

$$u^{(k)}(x) = u_0 + \int_{x_0}^x f(x, u^{(k-1)}(x)) dx \quad (k = 1, 2, \dots) \quad (7.6)$$

収束は適当なノルムに対し $\|u^{(k)}(x) - u^{(k-1)}(x)\| < \varepsilon$ で判定される。 ε は小さい正数である。収束解は $f(x)$ が Lipschitz 連続で有界ならば存在する。なお推定値は例えば $u^{(0)}(x) = u_0$ が用いられ，また式 (7.6) の積分は解析的に難しいときには数値的に行われる。

等間隔計算点 $x_n = x_0 + nh$ の場合の出発値 $u_n = u(x_n)$ は，式 (7.6) の被積分関数に例えば次の Newton の前進補間公式 (4.2.1 項参照) を用いれば計算することができる。

$$f(x) = f_0 + \alpha \Delta f_0 + \frac{1}{2!} \alpha(\alpha-1) \Delta^2 f_0 + \frac{1}{3!} \alpha(\alpha-1)(\alpha-2) \Delta^3 f_0 + \dots + \frac{1}{n!} \alpha(\alpha-1) \dots (\alpha-n+1) \Delta^n f_0$$

ただし $x = x_0 + \alpha h$ ， $f_n = f(x_n, u_n)$ ， $\Delta^k f$ は k 階の前進差分である。この式を積分すれば

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^x f(x) dx &= h \int_0^\alpha f(x_0 + \alpha h) d\alpha \\ &= \alpha h \left\{ f_0 + \frac{1}{2!} \alpha \Delta f_0 + \frac{1}{3!} \alpha(\alpha - \frac{3}{2}) \Delta^2 f_0 + \frac{1}{4!} \alpha(\alpha-2)^2 \Delta^3 f_0 + \dots \right\} \end{aligned}$$

となる。出発値を u_1, u_2, u_3 まで取ることにし，それに合わせて 3 次 Newton 前進補間公式 ($n = 3$) すなわち 3 階の差分まで取れば，Picard 法の式は次のようになる。

$$u_1^{(k)} = u_0 + \frac{1}{24} h(9f_0 + 19f_1 - 5f_2 + f_3)^{(k-1)} - \frac{19}{6} \frac{1}{5!} h^5 f_2^{(4)} \quad (7.7a)$$

$$u_2^{(k)} = u_0 + \frac{1}{3} h(f_0 + 4f_1 + f_2)^{(k-1)} - \frac{1}{3 \cdot 5!} h^5 f_2^{(4)} \quad (7.7b)$$

$$u_3^{(k)} = u_0 + \frac{3}{8} h(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)^{(k-1)} - \frac{1}{2 \cdot 5!} h^5 f_2^{(4)} \quad (7.7c)$$

なおこれらの式の右辺第 2 項は， u_1 のものは 6.2.1 項に示した式， u_3 は Simpson の 3/8 公式になる。また u_2 も Simpson の 1/3 公式になっている。また最後の項は打切り誤差で $O(h^5)$ の大きさである。Newton 前進補間公式の項数を増減すれば各種の Picard 法の式を導出できる。

7.2 前進形解法

前進形解法は関数 $f(x, u)$ を区間 $[x_n, x_{n+1}]$ で積分するものである。以下には良く使われる簡単な 1 次精度のオイラー前進法から 4 次精度の Runge-Kutta 法までを分かり易く説明する。これらの解法は陽的解法で出発値は不要である。

7.2.1 Euler 前進法

Taylor 展開の式 (7.3) の 1 階微分までを取り, $x_0 = x_n, x = x_{n+1} = x_n + h, u'_0 = f_n$ と置けば次式が得られる。

$$u_{n+1} = u_n + hf_n \quad (7.8)$$

ただし $f_n = f(x_n, u_n)$ である。Euler 前進法 (forward Euler method) は初期値 u_0 だけから出発し, 式 (7.8) から u_1, u_2, \dots を次々に求めていく陽的解法である。この方法は簡便で広く用いられているが, ほかの方法に比べ誤差が大きい。

Euler 前進法の誤差について述べる。一般に前進形解法の誤差は打ち切り誤差 (truncation error), 丸めの誤差 (round-off error), 集積誤差 (inherited error) からなる。打ち切り誤差は差分近似の誤差で Taylor 展開を基に見積もられる。丸めの誤差は桁数の打ち切りによる誤差で, この誤差が大きくなる時には倍精度, 更には 4 倍精度で計算することが必要である。集積誤差は, 初期値問題や前進形解法で僅かな初期段階の誤差が計算の過程で増幅し顕在化するもので, 不安定性の主要因である。式 (7.1), (7.2) の初期値問題において真の解を U_n とすれば, Euler 前進法の数値解 u_n の誤差 ϵ_n は次のように定義される。

$$U_n = u_n + \epsilon_n$$

また打ち切り誤差 T_n と丸めの誤差 R_n を次のように定義する。

$$U_{n+1} = U_n + hf(x_n, U_n) + T_{n+1}$$

$$u_{n+1} = u_n + hf(x_n, u_n) - R_{n+1}$$

これらの式の差を取り, 上の ϵ の定義式と Taylor 展開の式 $f(x_n, U_n) = f(x_n, u_n) + (U_n - u_n)f_u(x_n, u_n^*)$ を用いれば次式が得られる。

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n(1 + hf_u(x_n, u_n^*)) + T_{n+1} + R_{n+1} \quad (7.9)$$

この式の打ち切り誤差と丸めの誤差の上限を E , ϵ の増幅率の上限を G とする。すなわち

$$|T_n| + |R_n| \leq E$$

$$|1 + hf_u(x_n, u_n^*)| \leq G$$

で定義される正数 E と G を導入する。式 (7.9) にこれらの上限を用いれば次の一連の式が得られる。

$$\epsilon_0 = 0, \quad |\epsilon_1| \leq E,$$

$$|\epsilon_2| \leq G|\epsilon_1| + E \leq (G+1)E,$$

.....

$$|\epsilon_n| \leq G|\epsilon_{n-1}| + E \leq (G^{n-1} + G^{n-2} + \dots + G + 1)E$$

結局 Euler 前進法の誤差の上限は次のようになる .

$$|\epsilon_n| \leq \frac{1-G^n}{1-G} E \quad (7.10)$$

これより Euler 前進法の解は $|G| < 1$ ならば安定に求めることができ, $|G| > 1$ ならば不安定になり発散する虞のあることが分かる .

7.2.2 Runge-Kutta 法

Euler 前進法の式 (7.8) は, 常微分方程式 (7.1) の u' を 1 次の片側差分 $u'_n = (u_{n+1} - u_n)/h + O(h)$ で近似したものである . 一方 $(u_{n+1} - u_n)/h$ を点 $x_{n+1/2}$ に関する 2 次の中心差分 $u'_{n+1/2} = (u_{n+1} - u_n)/h + O(h^2)$ と見て

$$u_{n+1} = u_n + h(f_n + f_{n+1})/2$$

のように置けば精度を改善できる . なおこの式は, Picard 法の式 (7.6) を台形公式で積分したものと解釈することもできる . ただしこの式の $f_{n+1} = f(x_{n+1}, u_{n+1})$ の u_{n+1} はこれから求めるもので今は未知である . これを Euler 前進法で求めることにすれば次の修正 Euler 法 (Euler's modified method) の式が導かれる .

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}h \{f_n + f(x_{n+1}, u_n + hf_n)\} \quad (7.11)$$

2 次 Runge-Kutta 公式はこれを一般化した次式をもとに導かれる .

$$u_{n+1} = u_n + h\{\kappa_1 f_n + \kappa_2 f(x_n + \alpha h, u_n + \alpha h f_n)\} \quad (7.12)$$

ここに $f(x_n + \alpha h, u_n + \alpha h f_n)$ は点 $x_n + \alpha h = x_{n+\alpha}$ における $f(x_{n+\alpha}, u_{n+\alpha}) = f_{n+\alpha}$ で $u_{n+\alpha} \approx u_n + \alpha h f_n$ と置いたことを意味する . $\kappa_1, \kappa_2, \alpha$ は未定定数で, 式 (7.12) が 2 次の Taylor 展開

$$u_{n+1} = u_n + h\{f_n + \frac{1}{2}h(f_x + f f_u)_n\} + O(h^3) \quad (7.13)$$

と等価になるように決定される . すなわち式 (7.12) に Taylor 展開

$$f(x_n + \alpha h, u_n + \alpha h f_n) = f_n + \alpha h(f_x + f f_u)_n$$

を代入した式と式 (7.13) を比較することによって得られる次の 2 つの条件を満足するように決定される .

$$\kappa_1 + \kappa_2 = 1, \quad \kappa_2 \alpha = 1/2 \quad (7.14)$$

これらの条件を満足する $\kappa_1, \kappa_2, \alpha$ は任意性を持つが, $0 \leq \kappa_1, \kappa_2, \alpha \leq 1$ に選ばれるべきである . $\kappa_1 = \kappa_2 = 1/2, \alpha = 1$ に選べば, 式 (7.12) は修正 Euler 法の式 (7.11) になり, また例えば $\kappa_1 = 1/4, \kappa_2 = 3/4, \alpha = 2/3; \kappa_1 = 0, \kappa_2 = 1, \alpha = 1/2$ のように選ぶこともできる . 2 次 Runge-Kutta 公式で求めた u_{n+1} の打ち切り誤差は $O(h^3)$ になり, またこの解法は常微分方程式 (7.1) を 2 次精度で近似するものである .

図 7.1 は前進形解法の背景や根拠を説明したものである . 図では誤差の原因が見えてくるように x_n と x_{n+1} の間隔を広くし $f(x, u) = f(x)$ 曲線の傾きも大きくしている . 厳密解では $f(x)$ 曲線の下すべて $\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x) dx$ が朱色になる . しかし Euler 前進法ではこれが朱色の長方形で近似され, $f(x)$ 曲線と長方形の間の三角形領域が誤差になる . また修正 Euler 法では朱色の梯形で近似され, 誤差がかなり小さくなることが分かる . 青色の対角線を入れた長方形は f_{n+1} の近似値 $f(x_{n+1}, u_n + hf_n)$ を求める際の近似積分領域で, これも本

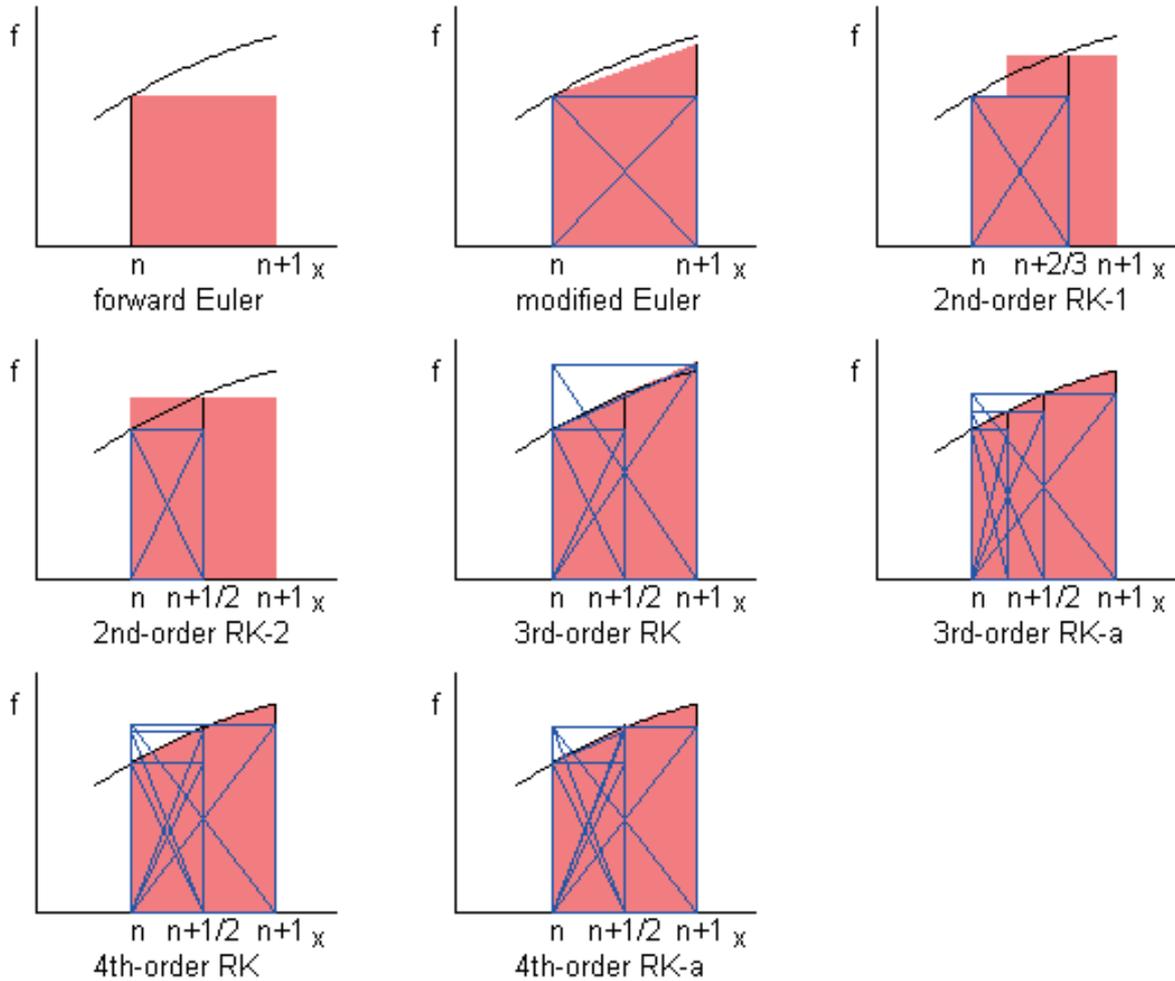


図 7.1: Euler 前進法と Runge-Kutta 法

来は $f(x)$ 曲線の下すべてであるべきものである。図の 2nd-order RK-1 は $\kappa_1 = 1/4, \kappa_2 = 3/4, \alpha = 2/3$ の場合, 2nd-order RK-2 は $\kappa_1 = 0, \kappa_2 = 1, \alpha = 1/2$ の場合で, この図はこれらの場合に $f(x)$ 曲線の下での面積を朱色の領域で近似し, また $f_{n+2/3}, f_{n+1/2}$ の値を青色の対角線を入れた長方形領域から求めていることを示している。

次に 3 次と 4 次の Runge-Kutta 公式について説明する。これらの公式は, Picard 法の式 (7.5) を Simpson の 1/3 公式で積分した式

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6}h(f_n + 4f_{n+1/2} + f_{n+1}) \tag{7.15}$$

を基に作られる。Simpson の 1/3 公式の精度は 4 次である。3 次 Runge-Kutta 公式では

$$u_{n+1} = u_n + h \left[\kappa_1 f_n + \sum_{\nu=2}^3 \kappa_\nu f(x_n + \alpha_\nu h, u_n + \alpha_\nu h f_{n+\beta_\nu}) \right] \tag{7.16}$$

のように置かれる。この式の $f(x_n + \alpha h, u_n + \alpha h f_{n+\beta})$ は, $f(x_{n+\alpha}, u_{n+\alpha}) = f_{n+\alpha}$ の値を見積もる際に

$u_{n+\alpha} \approx u_n + \alpha h f_{n+\beta}$ と置き, 安易に既知の f_n を使うのではなく $f_{n+\beta}$ とすることによって精度改善を図ろうとするものである. $\kappa_1, \kappa_2, \alpha, \beta$ は未定係数で, 2 次の場合と同様に, 式 (7.16) が Taylor 展開

$$u_{n+1} = u_n + h f_n + \frac{1}{2!} h^2 u_n'' + \frac{1}{3!} h^3 (f_{xx} + 2f f_{xu} + f^2 f_{uu} + u'' f_u)_n + \frac{1}{4!} h^4 [f_{xxx} + 3f f_{xxu} + 3f^2 f_{xuu} + f^3 f_{uuu} + 3u'' (f_{xu} + f f_{uu}) + u''' f_u]_n + \dots \quad (7.17)$$

と等価になるように決定される. 式 (7.16) に 2 次の Taylor 展開

$$\begin{aligned} & f(x_n + \alpha h, u_n + \alpha h f_{n+\beta}) \\ &= f_n + \alpha h (f_{x n} + f_{n+\beta} f_{u n}) + \frac{1}{2!} (\alpha h)^2 (f_{xx n} + 2f_{n+\beta} f_{x u n} + f_{n+\beta}^2 f_{uu n}) \\ &= f_n + \alpha h (f_x + f f_u)_n + h^2 \left[\frac{1}{2} \alpha^2 (f_{xx} + 2f f_{xu} + f^2 f_{uu}) + \alpha \beta (f_x + f f_u) f_u \right]_n \end{aligned}$$

を代入した式と式 (7.17) の 3 次の項までを比較すれば 次の 4 条件が得られる.

$$\kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3 = 1, \quad (7.18a)$$

$$\kappa_2 \alpha_2 + \kappa_3 \alpha_3 = 1/2, \quad \kappa_2 \alpha_2^2 + \kappa_3 \alpha_3^2 = 1/3, \quad (7.18b)$$

$$\kappa_2 \alpha_2 \beta_2 + \kappa_3 \alpha_3 \beta_3 = 1/6 \quad (7.18c)$$

通常の 3 次 Runge-Kutta 公式では, まず式 (7.15) に合わせ $\kappa_1 = \kappa_3 = 1/6$, $\kappa_2 = 4/6$ と置かれる. このとき式 (7.18a) は満足され, 式 (7.18b) から $\alpha_2 = 1/2$, $\alpha_3 = 1$ が得られ, これにより式 (7.18c) は $2\beta_2 + \beta_3 = 1$ となる. 3 次 Runge-Kutta 公式では $\beta_2 = 0$, $\beta_3 = 1$ と置かれ, f_{n+1} は未知のため f_n と $f_{n+1/2}$ から 1 次外挿される. 結局 3 次 Runge-Kutta 公式は次のようになる.

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + \frac{1}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3) + O(h^4) \quad (7.19) \\ k_1 &= h f(x_n, u_n), \quad k_2 = h f(x_n + h/2, u_n + k_1/2), \\ k_3 &= h f(x_n + h, u_n + 2k_2 - k_1) \end{aligned}$$

また例えば $\beta_2 = 1/4$, $\beta_3 = 1/2$, すなわち $\beta = \alpha/2$ になるように取ることもできる. この場合には, $u_{n+\alpha}$ の値が式 (7.5) により

$$u_{n+\alpha} = u_n + \int_{x_n}^{x_n + \alpha} f(x, u) dx = u_n + \alpha h f_{n+\alpha/2} \quad (7.20)$$

のように計算されることになり理に適っている. この場合の式 (7.19) の k_1, k_2, k_3 は次のようになる.

$$\begin{aligned} k_1 &= h f(x_n, u_n), \quad k^* = h f(x_n + h/4, u_n + k_1/4), \\ k_2 &= h f(x_n + h/2, u_n + k^*/2), \quad k_3 = h f(x_n + h, u_n + k_2) \end{aligned} \quad (7.21)$$

3 次の Runge-Kutta 法は Kutta-Simpson ともいわれる. これは, $f(x, u)$ が x のみの関数のときに, 式 (7.19) が Simpson の 1/3 公式になるからである.

ここで通常の 3 次 Runge-Kutta 公式の構成を図 7.1 を使って調べよう. この公式では, $f_{n+1/2}$ すなわち k_2 は 2 次のもので変わらず大きい誤差を含むが, これを k_3 の更に大きい誤差で相殺し 3 次精度を得ているのである. 通常 計算点の間隔 h は十分小さく取られ, $f(x)$ 曲線は検討の範囲ではほぼ 1 次的に変化し, また計算で求めた f_{n+1} 等も $f(x)$ 曲線のごく近傍にある. 図から分かるように k_2 は朱色の直角三角形の面積

に相当の誤差を含みまた k_3 は白色の直角三角形の面積に相当の誤差を含むが、それらの大きさの比は 1:4 で符号反対である。それゆえこれらの誤差は式 (7.19) の中で相殺されることになる。この方法では巧妙な手段で 3 次精度を得ているが、3rd-order RK-a では k_2, k_3 の精度そのものを上げ 3 次精度を得ている。

4 次 Runge-Kutta 公式では、式 (7.16) で $\nu = 4$ までの項を取り、更に精度を上げるべく式 (7.16) において

$$f_{n+\beta\nu} = f(x_n + \beta\nu h, u_n + \beta\nu h f_{n+\gamma\nu})$$

と置く。このように置くことの意味は、上記の $u_{n+\alpha}$ に関する説明から了解できるものと思う。このような考えによる 4 次の Runge-Kutta のもとになる式

$$u_{n+1} = u_n + h \left[\kappa_1 f_n + \sum_{\nu=2}^4 \kappa_\nu f(x_n + \alpha_\nu h, u_n + \alpha_\nu h f(x_n + \beta_\nu h, u_n + \beta_\nu h f_{n+\gamma_\nu})) \right]$$

に 3 次の Taylor 展開

$$\begin{aligned} f(x_n + \alpha h, u_n + \alpha h f_{n+\beta}) &= f_n + \alpha h (f_x + f f_u)_n + \alpha h^2 \left[\frac{1}{2} \alpha (f_{xx} + 2 f f_{xu} + f^2 f_{uu}) \right. \\ &\quad \left. + \beta (f_x + f f_u) f_u \right]_n + \alpha h^3 \left[\frac{1}{6} \alpha^2 (f_{xxx} + 3 f f_{xxu} + 3 f^2 f_{uux} + f^3 f_{uuu}) \right. \\ &\quad \left. + \alpha \beta (f_x + f f_u) (f_{xu} + f f_{uu}) + \frac{1}{2} \beta^2 (f_{xx} + 2 f f_{xu} + f^2 f_{uu}) f_u + \beta \gamma (f_x + f f_u) f_u^2 \right]_n \end{aligned}$$

を代入した式と f_{n+1} の Taylor 展開の式 (7.17) を比較すれば 次の条件が得られる。

$$\sum_{\nu=1}^4 \kappa_\nu = 1, \tag{7.22a}$$

$$\sum_{\nu=2}^4 \kappa_\nu \alpha_\nu = \frac{1}{2}, \quad \sum_{\nu=2}^4 \kappa_\nu \alpha_\nu^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{\nu=2}^4 \kappa_\nu \alpha_\nu^3 = \frac{1}{4}, \tag{7.22b}$$

$$\sum_{\nu=2}^4 \kappa_\nu \alpha_\nu \beta_\nu = \frac{1}{6}, \quad \sum_{\nu=2}^4 \kappa_\nu \alpha_\nu^2 \beta_\nu = \frac{1}{8}, \quad \sum_{\nu=2}^4 \kappa_\nu \alpha_\nu \beta_\nu^2 = \frac{1}{12}, \tag{7.22c}$$

$$\sum_{\nu=2}^4 \kappa_\nu \alpha_\nu \beta_\nu \gamma_\nu = \frac{1}{24} \tag{7.22d}$$

通常の 4 次 Runge-Kutta 公式では、式 (7.15) に合わせるが、 $f_{n+1/2}$ の項は 2 分し $\kappa_1 = \kappa_4 = 1/6$, $\kappa_2 = \kappa_3 = 2/6$ のように置かれる。このとき式 (7.22a) は満足され、式 (7.22b) から $\alpha_2 = \alpha_3 = 1/2$, $\alpha_4 = 1$ が得られ、式 (7.22c) の 3 条件は $\beta_2 + \beta_3 + \beta_4 = 1$, $\beta_2 + \beta_3 + 2\beta_4 = 3/2$, $\beta_2^2 + \beta_3^2 + \beta_4^2 = 1/2$ となる。これより $\beta_2 = 0$, $\beta_3 = \beta_4 = 1/2$ と置かれる。また最後の式 (7.22d) は $\gamma_3 + \gamma_4 = 1/2$ となり、計算式が簡潔になるように $\gamma_3 = 0$, $\gamma_4 = 1/2$ と置かれる。結局 4 次 Runge-Kutta 公式は次のようになる。

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(h^5) \tag{7.23}$$

$$k_1 = h f(x_n, u_n), \quad k_2 = h f(x_n + h/2, u_n + k_1/2),$$

$$k_3 = h f(x_n + h/2, u_n + k_2/2), \quad k_4 = h f(x_n + h, u_n + k_3)$$

この式では k_2 と k_3 をまとめれば $h\{f(x_n + h/2, u_n + k_1/2) + f(x_n + h/2, u_n + k_2/2)\} \approx 2h f(x_n + h/2, u_n + hf_{n+1/4}/2)$ のようになるので、 k_4 も含め $\beta = \alpha/2$ になっていること、すなわち式 (7.20) を満足しているこ

とが分かる．条件 $\gamma_3 + \gamma_4 = 1/2$ は， $\gamma_3 = \gamma_4 = 1/4$ ，したがって $\gamma = \beta/2$ に取っても満足され，この方が式の意味が釈然とする．この場合の式 (7.23) の k_3, k_4 は次のようになる．

$$\begin{aligned} k_3 &= hf(x_n + h/2, u_n + k^*/2), & k_4 &= hf(x_n + h, u_n + k^*) \\ k^* &= hf(x_n + h/2, u_n + (k_1 + k_2)/4) \end{aligned} \quad (7.24)$$

ここで再び図 7.1 を用い，4 次 Runge-Kutta 公式の改良版，4th-order RK-a の構成を見てみよう． k^* は理想に近い $f_{n+1/2}$ に h を乗じたもので， k_2 は図ではそれよりも小さくまた k_3 は大きくなる． $f(x)$ によっては k_2 が大きく k_3 が小さくなることもある． h が小さいときには図からも明らかなように k_2 と k_3 は大きさ等しく符号反対の誤差を含む．したがって k_2 と k_3 の平均値と k_4 は理想の値に近いものになり，4 次精度が得られるのである．次に通常の 4 次 Runge-Kutta 公式を見よう．図の条件ではその k_3 は改良判に較べ若干小さくめなり， k_4 は逆に大きめになり微妙なバランスで 4 次精度が得られるようである．図上で定量的に説明することは難しい．Runge-Kutta 法は陽的解法で，出発値の計算にも良く用いられる．

7.3 予測子修正子法

ここに述べる予測子修正子法 (predictor-corrector methods) は，まず前進形の式を用い予測子 (predictor) u_{n+1}^p を計算し，次に反復形の式を用い修正子 (corrector) u_{n+1}^c を収束するまで反復計算するものである．フィードバック形解法とも言われる．

7.3.1 Euler の予測子修正子法

この方法では予測子の計算に上述の Euler 法，修正子の計算に修正 Euler 法の式が用いられる．

$$u_{n+1}^p = u_n + hf_n \quad (7.25a)$$

$$u_{n+1}^c = u_n + \frac{1}{2}h[f_n + f(x_{n+1}, u_{n+1}^p)] \quad (7.25b)$$

式 (7.25a) から予測子 u_{n+1}^p を計算し，次にこれを式 (7.25b) に用い修正子 u_{n+1}^c を計算する．修正子の計算では 1 回目は予測子を用い，2 回目以降は前回求めた修正子を予測子として用いる．修正子の計算は 1 回のみとすることもあるが，通常は解が収束し $|u_{n+1}^c - u_{n+1}^p| < \epsilon$ になるまで反復される．

7.3.2 2 個以上の出発値を用いる予測子修正子法

等間隔 h で取られた計算点 x_1, x_2, \dots に対する常微分方程式 (7.1) の解を u_1, u_2, \dots とする．ここではすでに u_n までの解が求められているものとして， u_{n+1} の値を予測子修正子法で求めることについて述べる．式 (7.1) を区間 (x_{n-m}, x_{n+1}) で積分すれば，

$$u(x_{n+1}) - u(x_{n-m}) = \int_{x_{n-m}}^{x_{n+1}} f(x, u) dx \quad (7.26)$$

ここで $f(x, u)$ を $m+1$ 個の条件

$$\begin{aligned} f(x_{n-m}, u_{n-m}) &= f_{n-m}, \\ f(x_{n-m+1}, u_{n-m+1}) &= f_{n-m+1}, \\ &\dots\dots\dots \\ f(x_n, u_n) &= f_n \end{aligned}$$

を満足する m 次多項式 $p_m(x)$ で近似すれば, 式 (7.26) より次の予測子の式が得られる.

$$u_{n+1}^p = u_{n-m} + \int_{x_{n-m}}^{x_{n+1}} p_m(x) dx \tag{7.27}$$

次に上の $m+1$ 個の条件に $f(x_{n+1}, u_{n+1}^p) = f_{n+1}$ を加えた $m+2$ 個の条件を満足する $m+1$ 次多項式 $p_{m+1}(x)$ を用いれば, 式 (7.27) よりも精度の高い次の修正子の式が得られる.

$$u_{n+1}^c = u_{n-m} + \int_{x_{n-m}}^{x_{n+1}} p_{m+1}(x) dx \tag{7.28}$$

上記の式 (7.27) と (7.28) の中の多項式 $p_m(x)$ は Newton の後退補間多項式で近似するのが便利である. 次に後退差分表を示す.

| x | f | ∇f | $\nabla^2 f$ | $\nabla^3 f$ |
|-----------|-----------|------------------|--------------------|--------------------|
| x_{n-3} | f_{n-3} | | | |
| x_{n-2} | f_{n-2} | ∇f_{n-2} | | |
| x_{n-1} | f_{n-1} | ∇f_{n-1} | $\nabla^2 f_{n-1}$ | |
| x_n | f_n | ∇f_n | $\nabla^2 f_n$ | $\nabla^3 f_n$ |
| x_{n+1} | f_{n+1} | ∇f_{n+1} | $\nabla^2 f_{n+1}$ | $\nabla^3 f_{n+1}$ |

今 k 次の Newton 後退補間多項式

$$p_k(x_n + \alpha h) = f_n + \alpha \nabla f_n + \frac{1}{2!} \alpha(\alpha+1) \nabla^2 f_n + \dots + \frac{1}{k!} \alpha(\alpha+1) \dots (\alpha+k-1) \nabla^k f_n$$

を用いることにすれば, 予測子の式 (7.27) と修正子の式 (7.28) は次のようになる.

$$u_{n+1}^p = u_{n-m} + h \int_{-m}^1 p_k(x_n + \alpha h) d\alpha \tag{7.29a}$$

$$u_{n+1}^c = u_{n-m} + h \int_{-m-1}^0 p_k(x_{n+1} + \alpha h) d\alpha \tag{7.29b}$$

なお Newton 後退補間多項式の代わりに同じ次数の等間隔の Lagrange 補間多項式を用いても全く同じ結果が得られる. 次に具体例として良く使われる Milne 法と Adams-Moulton 法について述べる.

7.3.3 Milne 法

Milne 法では, 上記の方法で $k = 2$ すなわち $f(x)$ は 3 点を通る 2 次式で近似され, 予測子の計算では $m = 3$ すなわち 4 区間にわたって積分が行われ, 修正子の計算では $m = 1$ すなわち 2 区間にわたって積分が行われる.

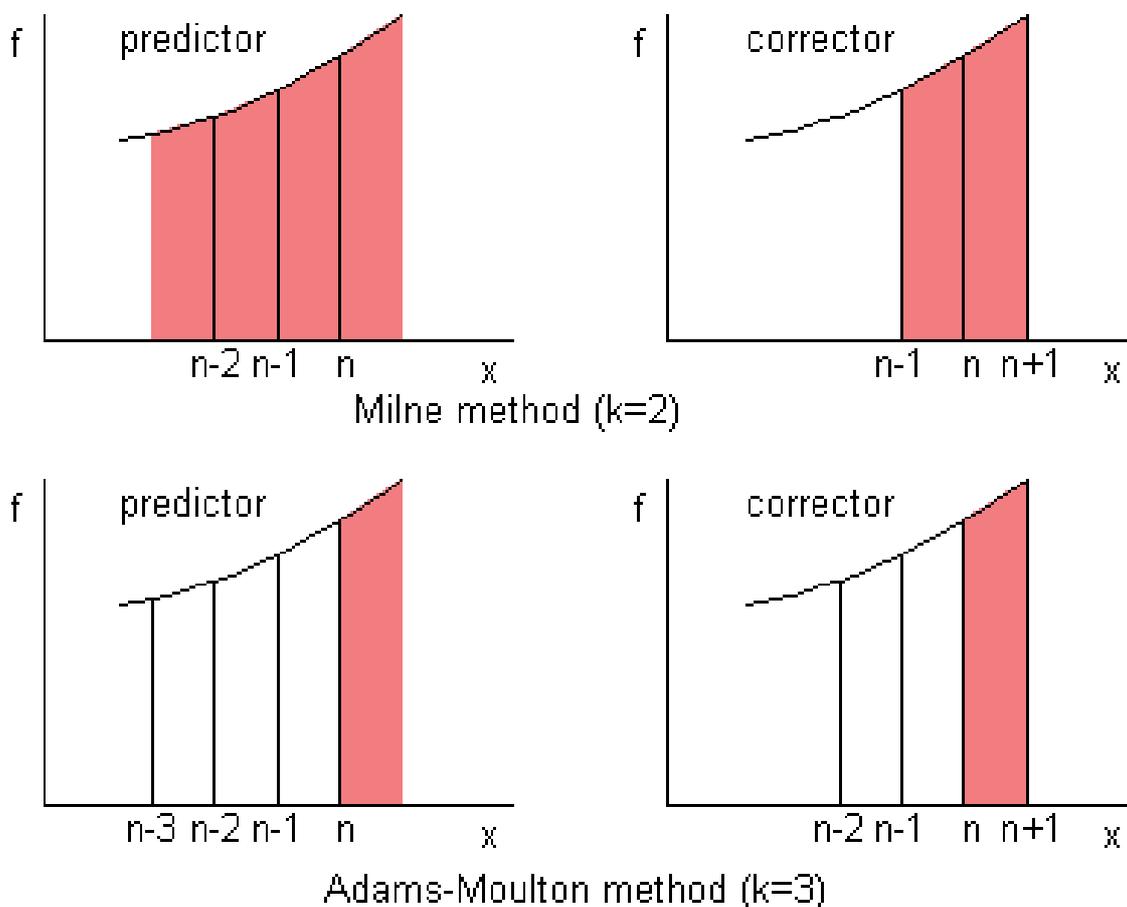


図 7.2: Milne 法と Adams-Moulton 法

この場合に予測子修正子法の式 (7.29) は積分を実行し、後退差分 $\nabla f_n = f_n - f_{n-1}$, $\nabla^2 f_n = f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}$ を入れれば、次のようになる。

$$u_{n+1}^p = u_{n-3} + \frac{4}{3}h(2f_{n-2} - f_{n-1} + 2f_n) + \frac{28}{90}h^5 u^{(5)} \quad (7.30a)$$

$$u_{n+1}^c = u_{n-1} + \frac{1}{3}h(f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1}) - \frac{1}{90}h^5 u^{(5)} \quad (7.30b)$$

図 7.2 に Milne 法の計算における多項式 $f(x)$ とその積分領域を示す。左図の予測子の計算では、既知の f_{n-2} , f_{n-1} , f_n を通る 2 次曲線の下に朱色を付けた部分を積分し、これを u_{n-3} に加え予測値 u_{n+1}^p を求めている。また右図の修正子の計算では、既知の f_{n-1} , f_n と今求めた f_{n+1} を通る 2 次曲線の下に朱色を付けた部分を積分し、これを u_{n-1} に加え修正値 u_{n+1}^c を求めている。この方法の誤差すなわち修正子の式 (7.30b) の誤差は Simpson 1/3 公式と同じである。この方法では初期値を含め 4 個の出発値が必要である。

7.3.4 Adams-Bashforth 法 , Adams-Moulton 法

Adams-Moulton 法では , 7.3.2 項の一般的な予測子修正子法で , 積分は 1 区間のみとし , $f(x)$ は高次多項式で近似される . その予測子の部分は Adams-Bashforth 法と呼ばれ , この方法は単独に用いられることも多い . この方法の計算式は予測子修正子法の式 (7.29) で $m = 0$ と置いたもので次のようになる .

$$\begin{aligned} u_{n+1}^p &= u_n + h \int_0^1 \left[f_n + \alpha \nabla f_n + \frac{1}{2!} \alpha(\alpha+1) \nabla^2 f_n + \dots \right] d\alpha \\ &= u_n + h \left[f_n + \frac{1}{2} \nabla f_n + \frac{5}{12} \nabla^2 f_n + \frac{3}{8} \nabla^3 f_n + \frac{251}{720} \nabla^4 f_n + \dots \right] \end{aligned} \quad (7.31a)$$

$$\begin{aligned} u_{n+1}^c &= u_n + h \int_{-1}^0 \left[f_{n+1} + \alpha \nabla f_{n+1} + \frac{1}{2!} \alpha(\alpha+1) \nabla^2 f_{n+1} + \dots \right] d\alpha \\ &= u_n + h \left[f_{n+1} - \frac{1}{2} \nabla f_{n+1} - \frac{1}{12} \nabla^2 f_{n+1} - \frac{1}{24} \nabla^3 f_{n+1} - \frac{19}{720} \nabla^4 f_{n+1} + \dots \right] \end{aligned} \quad (7.31b)$$

式 (7.31a) の打ち切り誤差は k 次多項式を用いた場合に次のようになる .

$$\frac{1}{(k+1)!} h^{k+2} u^{(k+2)} \int_0^1 \alpha(\alpha+1) \dots (\alpha+k) d\alpha$$

また式 (7.31b) の誤差も同様のものでこの誤差の式の積分区間を $[-1, 0]$ に変更したものである .

$k = 3$ の場合の Adams-Moulton 法の式 (7.31) は次のようになる .

$$u_{n+1}^p = u_n + \frac{1}{24} h (55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) + \frac{251}{720} h^5 u^{(5)} \quad (7.32a)$$

$$u_{n+1}^c = u_n + \frac{1}{24} h (9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) - \frac{19}{720} h^5 u^{(5)} \quad (7.32b)$$

図 7.2 に Adams-Moulton 法の計算における補間データと積分領域を示す . まず予測子 u_{n+1}^p を , 既知の $f_{n-3}, f_{n-2}, f_{n-1}, f_n$ を通る 3 次曲線下の朱色の部分を積分することによって求め , 次に修正子 u_{n+1}^c を $f_{n-2}, f_{n-1}, f_n, f_{n+1}$ 通る 3 次曲線下の朱色の部分を積分することによって求め , この修正子の計算を前回求めたものとの差が小さい正数 ϵ よりも小さくなるまで反復する . この方法では初期値を含め 4 個の出発値が必要である .

7.3.5 予測子修正子法の集積誤差と安定性

修正子公式 (7.29b) の安定性を議論すれば十分で , その誤差の式は容易に導出できる . 真の解 U_n に対する数値解 u_n の誤差 ϵ_n , 打ち切り誤差 T_{n+1} , 丸めの誤差 R_{n+1} を

$$U_n = u_n + \epsilon_n,$$

$$U_{n+1} = U_{n-m} + h\beta_{-1}f(x_{n+1}, U_{n+1}) + h \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_{n-j}, U_{n-j}) + T_{n+1},$$

$$u_{n+1} = u_{n-m} + h\beta_{-1}f(x_{n+1}, u_{n+1}) + h \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_{n-j}, u_{n-j}) - R_{n+1}$$

のように定義する . これらの式から次の誤差の式が導かれる .

$$\epsilon_{n+1} = \frac{\epsilon_{n-m} + h \sum \beta_j (f_u)_{n-j} \epsilon_{n-j} + T_{n+1} + R_{n+1}}{1 - h\beta_{-1}(f_n)_{n+1}} \quad (7.33)$$

この式の導出に際しては $f(x_n, U_n) = f(x_n, u_n) + \epsilon_n f_u(x_n, u_n^*) \equiv f_n + \epsilon_n (f_u)_n$ が用いられた。しかしながらこの誤差の式から安定性を一般的に論じることは困難で、また個々のケースについても必ずしも容易でない。なお 7.4.2 項の数値実験の結果は上述のすべての方法が十分安定であることを示している。

7.4 数値計算例とプログラム

7.2.1 項には簡単な Euler 前進法の安定性について述べたが、一般に解法の安定性を論じることは難しく、また実際問題において必ずしも理論通りに不安定になるわけでもない。本節では上述の解法を用い具体的問題を解き、安定性を確かめまた精度を比較する。

7.4.1 後退差分法

常微分方程式の解法は、放物型や双曲型偏微分方程式の初期値問題に利用される。その際にも解の不安定性が問題になり、Euler 前進法や普通の Runge-Kutta 法は敬遠され、後退差分 (backward-difference) 法が広く用いられている。式 (7.1) に梯形則 (trapezoidal law) を適用すれば次式が得られる。

$$u_{n+1} = u_n + h\{(1-\theta)f(x_n, u_n) + \theta f(x_{n+1}, u_{n+1})\} \quad (7.34)$$

ただし $0 \leq \theta \leq 1$ である。右辺の u_{n+1} の値は Euler 前進法で求められるか、偏微分方程式の場合にはこの式そのものが陰的 (implicit) に解かれることが多い。 $\theta = 0$ ならば Euler 前進法 (forward Euler method) の式 (7.8), $\theta = 1/2$ ならば修正 Euler 法 (modified Euler method) の式 (7.11), $\theta = 1$ ならば Euler 後退法 (backward Euler method) または 1 次後退差分法 (first-order backward-difference scheme) と呼ばれるものになる。 $\theta = 1/2$ の場合は偏微分方程式の解法では Crank-Nicholson 法と呼ばれる。式 (7.34) の打ち切り誤差はこの場合に限って $O(h^3)$ で一般には $O(h^2)$ である。

これらの解法の安定性は 7.2.1 項の Euler 前進法の場合に倣えば容易に論じることができる。真の解 U_n に対する数値解 u_n の誤差 ϵ_n と、打ち切り誤差 T_n 、丸めの誤差 R_n を次のように定義する。

$$\begin{aligned} U_n &= u_n + \epsilon_n, \\ U_{n+1} &= U_n + h\{(1-\theta)f(x_n, U_n) + \theta f(x_{n+1}, U_{n+1})\} + T_{n+1}, \\ u_{n+1} &= u_n + h\{(1-\theta)f(x_n, u_n) + \theta f(x_{n+1}, u_{n+1})\} - R_{n+1} \end{aligned}$$

これらの式から前と同様にして次式が得られる。

$$\{1 - h\theta (f_u)_{n+1}\} \epsilon_{n+1} = \{1 + h(1-\theta)(f_u)_n\} \epsilon_n + T_{n+1} + R_{n+1} \quad (7.35)$$

ここで、格子間隔 h が十分小さいものとして、打ち切り誤差と丸めの誤差 および ϵ の増幅率に関する上限を

$$\begin{aligned} (|T_n| + |R_n|) / \{1 - h\theta (f_u)_n\} &\leq \tilde{E} \\ \{1 + h(1-\theta)(f_u)_n\} / \{1 - h\theta (f_u)_{n+1}\} &\leq \tilde{G} \end{aligned}$$

のように定義すれば式 (7.35) から次式が得られる。

$$|\epsilon_{n+1}| \leq \tilde{G} |\epsilon_n| + \tilde{E}$$

結局 誤差の上限は次のようになる .

$$|\epsilon_n| \leq \frac{1 - \tilde{G}^n}{1 - \tilde{G}} \tilde{E} \quad (7.36)$$

これより解 u は $\tilde{G} < 1$ すなわち $f_u < 0$ のときにのみ安定に求められることが分かる . しかしながら安定性に関しては , 7.4.2 項の数値実験の結果が示すように , 安定解析で不安定と判定されても数値解が必ずしも振動を起こし計算不能に陥るわけではなく , また偏微分方程式の初期値問題では逆のことも起きる .

常微分方程式 (7.1) に 2 次後退差分 $u'_n = (u_{n-2} - 4u_{n-1} + 3u_n)/2h$ を用いれば , 次の 2 次後退差分法 (second-order backward-difference scheme) の式が導かれる .

$$u_n = \frac{1}{3}(4u_{n-1} - u_{n-2} + 2hf_n) + \frac{2}{9}h^3u''' \quad (7.37)$$

この式は u_{n-1} までの解が既知のときに u_n の値を求める式である . したがって $f_n = f(x_n, u_n)$ の u_n は未知であるが , Euler 前進法により $u_n = u_{n-1} + hf_{n-1}$ と置けば計算を続行することができる . またこれを予測子に修正子を反復計算すれば多少精度を改善できよう . あるいは f_n が u_n の簡単な関数 例えば 1 次関数の場合には , 式 (7.37) を u_n に関して解いて直接的に解を求めることができる . また偏微分方程式の場合には陰的に解かれる . この方法は偏微分方程式の数値解法では Gear 法とも呼ばれる .

7.4.2 常微分方程式の初期値問題の数値実験

この項には本節の解法に限らずこれまでに述べてきた初期値問題の解法に対して数値実験を行い , これらの解法の精度や安定性を検討する . ここで取り上げた解法はいずれも実用的諸問題に使用されてきたものである . あえてひとこと付け加えれば偏微分方程式の初期値問題への利用に際しては , Euler 前進法は条件付き安定 , Crank-Nicholson 法も必ずしも安定ではないが , 1 次と 2 次の後退差分法は安定である . さて上記の安定解析によれば Euler 法とそれを拡張した修正 Euler 法 , 後退 Euler 法は $f_u < 0$ ならば安定である . しかし修正 Euler 法は丸めの誤差に起因し必ずしも安定でないことが指摘されている¹ . ここではその追実験から始めることにする .

次の初期値問題を考える .

$$u' = 1 - u, \quad u(0) = 0 \quad (7.38)$$

この問題では $f_u = -1 < 0$ である . この問題を解く Euler 前進法 , 修正 Euler 法 , Euler 後退法の FORTRAN プログラムを次にそのメインプログラムを含めて示す .

```

program MAIN
DIMENSION x(0:100),u(0:100)
DATA nf/100/ h/.1/
OPEN(20,FILE='OUTPUT.dat')
FORALL (n=0:nf)x(n)=FLOAT(n)*h
! forward Euler  theta=0.
CALL EULERT(x,u,nf,h,0.)
WRITE(20,' (/20A/101F8.4/101F8.4)')'Forward Euler',x,u
! modified Euler  theta=.5
:
! backward Euler  theta=1.
:

```

¹ 森口・高田 , 数値計算法 II, 102, 1958, 岩波講座現代応用数学 .

```

CLOSE(20)
STOP; END
! ***** Subroutine Trapezoidal method
SUBROUTINE EULERT(x,u,nf,h,theta)
DIMENSION x(0:nf),u(0:nf)
x(0)=0.; u(0)=0.; n=0; 10 n=n+1
u0=u(n-1); f0=1.-u0; u1=u0+h*f0; f1=1.-u1
u(n)=u0+h*((1.-theta)*f0+theta*f1)
u(n)=1.E-4*FLOAT(NINT(1.E+4*u(n)))      !cf 1.000050=1.; 1.000051=1.0001
IF(n<nf)GOTO 10
END

```

このプログラムでは、文献の数値実験に合わせるため、丸めの誤差が大きくなるように小数第4位で四捨五入している。計算の結果は次表に示すのようになり、不安定性はもとよりその兆候すら現れない。

表 7.1: $u' = 1 - u$ の初期値問題の計算結果

| 解 法 (θ) | $x = 0$ | 1 | 2 | 4 | 6 | 8 | 9.9 | 10 |
|------------------|---------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Euler 前進法 (0.0) | 0 | .6513 | .8784 | .9851 | .9981 | .9995 | .9995 | .9995 |
| 修正 Euler 法 (0.5) | 0 | .6315 | .8642 | .9816 | .9976 | .9995 | .9995 | .9995 |
| Euler 後退法 (1.0) | 0 | .6105 | .8483 | .9770 | .9965 | .9995 | .9995 | .9995 |

次に同じ問題を Euler 前進法，修正 Euler 法，Euler 後退法のほかに，3 次 Runge-Kutta 法，4 次 Runge-Kutta 法，Milne 法，Adams-Moulton 法，Adams-Bashforth 法，2 次後退差分法で解き，初期値近辺の計算結果を比較する。参考までにこの計算に用いたプログラムを以下に示す。ここでは出発値は，Milne 法，Adams-Moulton 法，Adams-Bashforth 法では Picard 法で，また 2 次後退差分法では Taylor 展開を基に求めている。e は反復計算の収束判定用の小さい正数，maxn は最大反復数を記録するためのものである。

```

! ***** Subroutine 3rd-order Runge-Kutta
SUBROUTINE RK3(x,u,nf,h)
DIMENSION x(0:nf),u(0:nf)
n=0; u(0)=0.
10 u0=u(n); f0=1.-u0; ak1=h*f0
ua=u0+ak1/4.; fa=1.-ua; aka=h*fa
u2=u0+aka/2.; f2=1.-u2; ak2=h*f2
u3=u0+ak2; f3=1.-u3; ak3=h*f3
u(n+1)=u0+(ak1+4.*ak2+ak3)/6.
n=n+1; IF(n<nf)GOTO 10
END
! ***** Subroutine 4th-order Runge-Kutta
SUBROUTINE RK4(x,u,nf,h)
DIMENSION x(0:nf),u(0:nf)
n=0; u(0)=0.
10 u0=u(n); f0=1.-u0; ak1=h*f0
u2=u0+ak1/2.; f2=1.-u2; ak2=h*f2
ua=u0+(ak1+ak2)/4.; fa=1.-ua; aka=h*fa
u3=u0+aka/2.; f3=1.-u3; ak3=h*f3
u4=u0+aka; f4=1.-u4; ak4=h*f4
u(n+1)=u0+(ak1+2.*(ak2+ak3)+ak4)/6.
n=n+1; IF(n<nf)GOTO 10
END
! ***** Subroutine Starting values
SUBROUTINE STAVAL(x,u,nf,h,e,maxn,nt)
DIMENSION x(0:nf),u(0:nf)
u(0)=0.; u0=u(0); f0=1.-u0; u1=u0; u2=u0; u3=u0

```

```

n=0; maxn=0; 10 n=n+1; maxn=MAX(maxn,n)
f1=1.-u1; f2=1.-u2; f3=1.-u3
u(1)=u0+h*(9.*f0+19.*f1-5.*f2+f3)/24.
u(2)=u0+h*(f0+4.*f1+f2)/3.
u(3)=u0+h*3.*(f0+3.*(f1+f2)+f3)/8.
a=MAX(ABS(u(1)-u1),ABS(u(2)-u2),ABS(u(3)-u3))
u1=u(1); u2=u(2); u3=u(3)
IF(n<nt.AND.a>e)GOTO 10
END
! ***** Subroutine Milne
SUBROUTINE MILNE(x,u,nf,h,e,maxn)
DIMENSION x(0:nf),u(0:nf)
n=2; maxn=0; 10 n=n+1; nn=0
f0=1.-u(n); f1=1.-u(n-1); f2=1.-u(n-2); f3=1.-u(n-3)
up=u(n-3)+h*4.*(2.*f2-f1+2.*f0)/3.
11 nn=nn+1; maxn=MAX(maxn,nn); fp=1.-up
uc=u(n-1)+h*(f1+4.*f0+fp)/3.
IF(ABS(uc-up)>e)THEN; up=uc; GOTO 11
ELSE; u(n)=uc; IF(n<nf)GOTO 10
ENDIF
END
! ***** Subroutine Adams-Moulton
SUBROUTINE AM3(x,u,nf,h,e,maxn)
:
up=u(n)+h*(55.*f0-59.*f1+37.*f2-9.*f3)/24.
:
uc=u(n)+h*(9.*fp+19.*f0-5.*f1+f2)/24.
:
! ***** Subroutine Adams-Bashforth
SUBROUTINE AB3(x,u,nf,h)
DIMENSION x(0:nf),u(0:nf)
n=2; 10 n=n+1
f0=1.-u(n); f1=1.-u(n-1); f2=1.-u(n-2); f3=1.-u(n-3)
u(n+1)=u(n)+h*(55.*f0-59.*f1+37.*f2-9.*f3)/24.
IF(n<nf)GOTO 10
END
! ***** Subroutine 2nd-order backward-difference
SUBROUTINE BD2(x,u,nf,h)
DIMENSION x(0:nf),u(0:nf)
u(0)=0.; u0=u(0); f0=1.-u0
u(1)=u0+h*(1.-h/2.+h*h/6.-h*h*h/24.)*f0 !start value based on Taylor series
n=1; 10 n=n+1; u2=u(n-2)
u1=u(n-1); f1=1.-u1; u0=u1+h*f1; f0=1.-u0
u(n)=(4.*u1-u2+2.*h*f0)/3.; IF(n<nf)GOTO 10
END

```

ϵ を 10^{-6} に取るときに、Picard 法による出発値の計算は 7 回の反復で収束し、また Milne 法と Adams-Moulton 法の修正子の計算は最大 2 回で収束した。また 10^{-5} に取るときには出発値は 6 回、修正子の計算は 1 回で収束し、全く同じ結果が得られる。いずれの解法においても不安定性は全く見られない。次表の結果から、この問題と条件のもとでは、4 次の Runge-Kutta 法、Milne 法、4 次の Adams-Moulton 法は同じ高精度の結果を示し、また 3 次 Runge-Kutta 法と 4 次の Adams-Bashforth 法も遜色なく、2 次後退差分法、2 次の修正 Euler 法がこれに続くが、1 次の Euler 前進法と Euler 後退法は精度不足が否めない。なお初期値の 2 つの方法による計算結果は同じである。

表 7.2: $u' = 1 - u$ の初期値問題の計算結果

| 解 法 | $x = 0.1$ | 0.2 | 0.5 | 1.0 | 2.0 | 4.0 | 6.0 | 10.0 |
|------------|-----------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Euler 前進法 | .10000 | .19000 | .40951 | .65132 | .87842 | .98522 | .99838 | .99997 |
| 修正 Euler 法 | .09500 | .18098 | .39292 | .63146 | .86418 | .98155 | .99773 | .99995 |
| Euler 後退法 | .09000 | .17190 | .37597 | .61058 | .84836 | .97700 | .99683 | .99992 |
| 3 次 R-K 法 | .09517 | .18127 | .39348 | .63213 | .86467 | .98169 | .99776 | .99996 |
| 4 次 R-K 法 | .09516 | .18127 | .39347 | .63212 | .86466 | .98168 | .99776 | .99996 |
| Milne 法 | .09516 | .18127 | .39347 | .63212 | .86467 | .98168 | .99776 | .99995 |
| A-M 法 | .09516 | .18127 | .39347 | .63212 | .86467 | .98169 | .99776 | .99996 |
| A-B 法 | .09516 | .18127 | .39347 | .63211 | .86466 | .98168 | .99776 | .99996 |
| 2 次後退差分法 | .09516 | .18117 | .39307 | .63152 | .86418 | .98155 | .99773 | .99995 |

最後に安定条件を満足しない常微分方程式の初期値問題を上記の 9 つの解法で解いてみよう。

$$u' = 1 + u, \quad u(0) = 0 \quad (7.39)$$

この問題では $f_u = 1 > 0$ で集積誤差が増幅することになるが、その計算の結果は次のようになり、計算の範囲では不安定性は見られない。これは解 $u(x)$ が x と共に加速度的に増加し集積誤差が埋没してしまったためと思われる。なお上と同様に ϵ を 10^{-5} に取るときに、Picard 法による出発値の計算は 6 回の反復で収束し、また Milne 法と Adams-Moulton 法の修正子の計算は最大 4 回で収束した。ただし計算の初期段階では 1 回で収束し、解の桁数の増加と共に最大反復数も増加する。各解法の精度評価に関しては上と全く同じことがいえる。

表 7.3: $u' = 1 + u$ の初期値問題の計算結果

| 解 法 | $x = 0.2$ | 0.5 | 1.0 | 2.0 | 4.0 | 6.0 | 8.0 | 10.0 |
|------------|-----------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|
| Euler 前進法 | .2100 | .6105 | 1.5937 | 5.7275 | 44.259 | 303.48 | 2047.4 | 13780.6 |
| 修正 Euler 法 | .2210 | .6474 | 1.7141 | 6.3662 | 53.261 | 398.70 | 2943.3 | 21687.4 |
| Euler 後退法 | .2321 | .6851 | 1.8394 | 7.0623 | 64.001 | 523.06 | 4224.1 | 34063.2 |
| 3 次 R-K 法 | .2214 | .6487 | 1.7182 | 6.3888 | 53.594 | 402.38 | 2979.5 | 22021.2 |
| 3 次 R-K 法* | .2214 | .6487 | 1.7182 | 6.3885 | 53.590 | 402.34 | 2979.0 | 22017.0 |
| 4 次 R-K 法 | .2214 | .6487 | 1.7183 | 6.3890 | 53.598 | 402.43 | 2979.9 | 22025.3 |
| Milne 法 | .2214 | .6487 | 1.7183 | 6.3891 | 53.598 | 402.43 | 2980.0 | 22025.6 |
| A-M 法 | .2214 | .6487 | 1.7183 | 6.3891 | 53.599 | 402.43 | 2980.0 | 22026.0 |
| A-B 法 | .2214 | .6487 | 1.7182 | 6.3887 | 53.592 | 402.36 | 2979.3 | 22019.1 |
| 2 次後退差分法 | .2213 | .6479 | 1.7149 | 6.3691 | 53.293 | 399.01 | 2946.1 | 21712.1 |

* 式 (7.21) を併用せず式 (7.19) のみで計算したもの

7.5 連立常微分方程式と高階常微分方程式

上述の1階常微分方程式の数値解法は、そのまま連立1階常微分方程式の解法に拡張することができる。また高階常微分方程式は、新たに未知変数を導入することによって等価な1階常微分方程式の系に変換できる。かような観点からは、高階常微分方程式について何も述べる必要はない。しかしながら一方高階常微分方程式を直接解く方法はこれまで多数提案され、その優位性が主張されてきた。筆者にはその根拠が薄弱のように思えるが、本節には直接解法についても簡単に触れることにする。

7.5.1 連立1階常微分方程式

m 個の未知変数 u^1, u^2, \dots, u^m を持つ m 個の式からなる連立1階常微分方程式 (system of the first-order ordinary differential equations) は一般に次のように書くことができる。

$$\begin{aligned}(u^1)' &= f^1(x, u^1, u^2, \dots, u^m) \\ (u^2)' &= f^2(x, u^1, u^2, \dots, u^m) \\ &\dots\dots\dots \\ (u^m)' &= f^m(x, u^1, u^2, \dots, u^m)\end{aligned}\tag{7.40}$$

ただし f^1, f^2, \dots, f^m は x, u^1, u^2, \dots, u^m の関数で与えられるものとする。この常微分方程式系の初期条件

$$u^i(x_0) = u_0^i \quad (i = 1, 2, \dots, m)\tag{7.41}$$

を満足する解を求める問題を考える。今ベクトル表示

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \\ \vdots \\ u^m \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} f^1 \\ f^2 \\ \vdots \\ f^m \end{pmatrix}$$

を導入すれば式 (7.40) と (7.41) は次のように簡潔に表わすことができる。

$$\begin{aligned}\mathbf{u}' &= \mathbf{f}(x, \mathbf{u}) \\ \mathbf{u}(x_0) &= \mathbf{u}_0\end{aligned}$$

この初期値問題は、上述の常微分方程式の解法をほとんどそのまま用いて解くことができる。例えば4次 Runge-Kutta 公式は

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \\ \mathbf{k}_1 &= h\mathbf{f}(x_n, \mathbf{u}_n), \quad \mathbf{k}_2 = h\mathbf{f}(x_n + h/2, \mathbf{u}_n + \mathbf{k}_1/2), \\ \mathbf{k}^* &= h\mathbf{f}(x_n + h/2, \mathbf{u}_n + (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)/4) \\ \mathbf{k}_3 &= h\mathbf{f}(x_n + h/2, \mathbf{u}_n + \mathbf{k}^*/2), \quad \mathbf{k}_4 = h\mathbf{f}(x_n + h, \mathbf{u}_n + \mathbf{k}^*)\end{aligned}\tag{7.42}$$

のようになる。また Milne 法の式は

$$\mathbf{u}_{n+1}^p = \mathbf{u}_{n-3} + \frac{4}{3}h(2\mathbf{f}_{n-2} - \mathbf{f}_{n-1} + 2\mathbf{f}_n)\tag{7.43a}$$

$$\mathbf{u}_{n+1}^c = \mathbf{u}_{n-1} + \frac{1}{3}h(\mathbf{f}_{n-1} + 4\mathbf{f}_n + \mathbf{f}_{n+1})\tag{7.43b}$$

のようになり, $k = 3$ の場合の Adams-Moulton 法の式は

$$\mathbf{u}_{n+1}^p = \mathbf{u}_n + \frac{1}{24}h(55\mathbf{f}_n - 59\mathbf{f}_{n-1} + 37\mathbf{f}_{n-2} - 9\mathbf{f}_{n-3}) \quad (7.44a)$$

$$\mathbf{u}_{n+1}^c = \mathbf{u}_n + \frac{1}{24}h(9\mathbf{f}_{n+1} + 19\mathbf{f}_n - 5\mathbf{f}_{n-1} + \mathbf{f}_{n-2}) \quad (7.44b)$$

のようになる.

7.5.2 k 階常微分方程式

k 階の常微分方程式

$$u^{(k)} = f(x, u, u', \dots, u^{(k-1)}) \quad (7.45)$$

の初期条件

$$u(x_0) = u_0, \quad u'(x_0) = u'_0, \quad \dots, \quad u^{(k-1)}(x_0) = u_0^{(k-1)} \quad (7.46)$$

を満足する解 $u(x)$ を求める問題を考える. 今 $u = u^0, u' = u^1, \dots, u^{(k-1)} = u^{k-1}$ と置けば式 (7.45) は次の 1 階常微分方程式の系に書き替えることができる.

$$\begin{aligned} (u^0)' &= u^1 \\ (u^1)' &= u^2 \\ &\dots\dots\dots \\ (u^{k-2})' &= u^{k-1} \\ (u^{k-1})' &= f(x, u^0, u^1, \dots, u^{k-1}) \end{aligned} \quad (7.47)$$

今これらの常微分方程式系を 4 次 Runge-Kutta 法 (7.23) を適用して解くことにする. そのとき例えば第 1 式は

$$u_{n+1}^0 = u_n^0 + \frac{1}{6}(k_1^0 + 2k_2^0 + 2k_3^0 + k_4^0) \quad (7.48)$$

となる. 式 (7.47) の第 1 式から $k_1^0 = hf(x_n, u_n^0) = hu_n^1$ となる. 次に $k_2^0 = hf(x_n + h/2, u_n^0 + k_1^0/2)$ は, $f(x_n, u_n^0) = (u^0)'_n$ であるから, 第 2 式を用い $k_2^0 = h(u^0 + hu^1/2)'_n = h(u^1 + hu^2/2)_n$ となる. k が適当に大きいときには, 同様に k^{*0}, k_3^0, k_4^0 も書替えることができ, まとめて書けば次のようになる.

$$\begin{aligned} k_1^0 &= hf(x_n, u_n^0) = hu_n^1 \\ k_2^0 &= hf(x_n + h/2, u_n^0 + k_1^0/2) = h(u^1 + hu^2/2)_n \\ k^{*0} &= hf(x_n + h/2, u_n^0 + (k_1^0 + k_2^0)/4) = h(u^1 + hu^2/2 + h^2u^3/8)_n \\ k_3^0 &= f(x_n + h/2, u_n^0 + k^{*0}/2) = h(u^1 + hu^2/2 + h^2u^3/4 + h^3u^4/16)_n \\ k_4^0 &= f(x_n + h, u_n^0 + k^{*0}) = h(u^1 + hu^2 + h^2u^3/2 + h^3u^4/8)_n \end{aligned}$$

これらの関係を式 (7.48) に入れば次式が得られる.

$$u_{n+1}^0 = u_n^0 + hu_n^1 + \frac{1}{2!}h^2u_n^2 + \frac{1}{3!}h^3u_n^3 + \frac{1}{4!}h^4u_n^4 \quad (7.49)$$

この式は u_{n+1}^0 の Taylor 展開にほかならない² . 計算では, 式 (7.47) の第 1 式から $k-4$ 式に対しては, 式 (7.49) に相当の Taylor 展開式が用いられ, また第 $k-3$ 式から $k-1$ 式に対しては, これを基にした式

$$u_{n+1}^{k-4} = u_n^{k-4} + hu_n^{k-3} + \frac{1}{2!}h^2u_n^{k-2} + \frac{1}{3!}h^3u_n^{k-1} + \frac{1}{4!}h^4f_n \quad (7.50a)$$

$$u_{n+1}^{k-3} = u_n^{k-3} + hu_n^{k-2} + \frac{1}{2!}h^2u_n^{k-1} + \frac{1}{3!}h^3f_n + \frac{1}{4!}h^4f'_n \quad (7.50b)$$

$$u_{n+1}^{k-2} = u_n^{k-2} + hu_n^{k-1} + \frac{1}{2!}h^2f_n + \frac{1}{3!}h^3f'_n + \frac{1}{4!}h^4f''_n \quad (7.50c)$$

が用いられる. ただし $f'_n = (f_x + u^1\partial f/\partial u^0 + \dots + u^{k-1}\partial f/\partial u^{k-2} + f\partial f/\partial u^{k-1})_n$, $f''_n = (f_{xx} + \dots)_n$ は式 (7.4) の多変数への拡張である. 式 (7.47) の第 k 式, 終りの式に対しては 4 次 Runge-Kutta 公式がそのまま用いられる (7.5.5 項参照).

7.5.3 2 階線形常微分方程式

2 階線形常微分方程式 (the second-order linear ode) は一般に次のように表される.

$$u'' + P(x)u' + Q(x)u = R(x) \quad (7.51)$$

P が連続微分可能で, Q, R が連続関数ならば $u = U \exp(-(1/2)\int P dx)$ と置くことによって 1 階微分の項を除くことができる. すなわち上式は次のように書き変えることができる.

$$U'' + A(x)U = B(x)$$

ただし $A = Q - P'/2 - P^2/4$, $B = \exp((1/2)\int P dx)R$ である.

ここでは, 1 階微分の項を含まない 2 階常微分方程式の初期値問題を直接解く方法について述べる. その方程式と初期値は

$$u'' = f(x, u) \quad (7.52)$$

$$u(x_0) = u_0, \quad u'(x_0) = \dot{u}_0 \quad (7.53)$$

のように与えられる. 式 (7.52) を x に関して 2 回積分すれば次のようになる.

$$u(x) = u_0 + (x-x_0)\dot{u}_0 + \int_{x_0}^x dx' \int_{x_0}^{x'} f(x'', u) dx'' \quad (7.54)$$

ここでは 3 個の出発値を用いる予測子修正子法について説明する. 出発値 u_1, u_2, u_3 は, Picard 法を一般化した方法で求められ, このためにまず $f(x, u)$ を f_0, f_1, f_2, f_3 を通る 3 次 Lagrange 補間多項式

$$f(x_0+h\xi) = -\frac{(\xi-1)(\xi-2)(\xi-3)}{6}f_0 + \frac{\xi(\xi-2)(\xi-3)}{2}f_1 - \frac{\xi(\xi-1)(\xi-3)}{2}f_2 + \frac{\xi(\xi-1)(\xi-2)}{6}f_3 + O(h^4)$$

で近似する. この式を使って式 (7.54) の積分を実行すれば次式が得られる.

$$\begin{aligned} u_1 &= u_0 + h\dot{u}_0 + \frac{1}{60}h^2(-97f_0 + 38f_1 + 13f_2 + 8f_3) + O(h^6) \\ u_2 &= u_0 + 2h\dot{u}_0 + \frac{4}{15}h^2(-14f_0 + 11f_1 + f_2 + f_3) + O(h^6) \\ u_3 &= u_0 + 3h\dot{u}_0 + \frac{9}{20}h^2(-13f_0 + 12f_1 - 3f_2 + 2f_3) + O(h^6) \end{aligned} \quad (7.55)$$

²この箇所は筆者による. これは当然の帰結のように思われる. しかし一方 Taylor 展開にはならないという観点からこの部分の精度を上げる方法も提案されている.

出発値 u_1, u_2, u_3 は、はじめに $u_1 = u_2 = u_3 = u_0$ と置き、これらの式を反復計算することによってその収束解として求めることができる。

次にこれら 3 つの出発値を用いる 1 つの予測子修正子法について述べる。予測子の式は、式 (7.54) を書き変えた次の 2 つの式から導かれる。

$$u_{n+1} = u_{n-1} + 2h\dot{u}_{n-1} + \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} dx' \int_{x_{n-1}}^{x'} f(x'', u) dx'' \quad (7.56)$$

$$u_{n-3} = u_{n-1} - 2h\dot{u}_{n-1} + \int_{x_{n-1}}^{x_{n-3}} dx' \int_{x_{n-1}}^{x'} f(x'', u) dx'' \quad (7.57)$$

すなわちこれらの式から \dot{u}_{n-1} を消去し、被積分関数に Stirling の補間公式

$$f(x_n + \alpha h) = f_n + \alpha \delta f_n + \frac{1}{2!} \alpha^2 \delta^2 f_n + \frac{1}{3!} \alpha(\alpha^2 - 1) \delta^3 f_n + O(h^4)$$

を代入し、積分を実行する。ただし δ は中心差分の演算子で

$$\begin{aligned} \delta f_0 &= f_{1/2} - f_{-1/2}, & \delta^2 f_0 &= f_1 - 2f_0 + f_{-1}, \\ \delta^3 f_0 &= f_{1+1/2} - 3f_{1/2} + 3f_{-1/2} - f_{-1-1/2}, & \dots \end{aligned}$$

である。同様に修正子の式は式 (7.57) と次式から導かれる。

$$u_n = u_{n-1} + h\dot{u}_{n-1} + \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx' \int_{x_{n-1}}^{x'} f(x'', u) dx''$$

結局 この解法の予測子と修正子の式は次のようになる。

$$u_{n+1}^p = 2u_{n-1} - u_{n-3} + 4h^2 \left(f_{n-1} + \frac{1}{3} \delta^2 f_{n-1} \right) + O(h^6) \quad (7.58a)$$

$$u_{n+1}^c = 2u_n - u_{n-1} + h^2 \left(f_n + \frac{1}{12} \delta^2 f_n \right) + O(h^6) \quad (7.58b)$$

同様にして次数の異なる他の公式を導くこともできる。

7.5.4 2 階非線形常微分方程式

2 階非線形常微分方程式 (the second-order nonlinear ode)

$$u'' = f(x, u, u') \quad (7.59)$$

の初期条件

$$u(x_0) = u_0, \quad u'(x_0) = \dot{u}_0 \quad (7.60)$$

を満足する解 $u(x)$ を求める初期値問題を考える。出発値 $u_0, u_1, u_2, u_3; u'_0, u'_1, u'_2, u'_3$ は他の方法で求められているものとする。

ここには Milne 法を拡張した解法を示す。この解法では次の Milne の予測子公式から $u'_{n+1}{}^p$, Simpson の 1/3 則から $u_{n+1}{}^p$, Milne の修正子公式から $u'_{n+1}{}^c$, Simpson の 1/3 則から $u_{n+1}{}^c$ の値が順に計算される。

$$u'_{n+1}{}^p = u'_{n-3} + \frac{4}{3}h(2f_{n-2} - f_{n-1} + 2f_n), \quad u_{n+1}{}^p = u_{n-1} + \frac{1}{3}h(u'_{n-1} + 4u'_n + u'_{n+1}{}^p) \quad (7.61a)$$

$$u'_{n+1}{}^c = u'_{n-1} + \frac{1}{3}h(f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1}{}^p), \quad u_{n+1}{}^c = u_{n-1} + \frac{1}{3}h(u'_{n-1} + 4u'_n + u'_{n+1}{}^c) \quad (7.61b)$$

7.5.5 連立 k 階常微分方程式

m 個の未知変数 u^1, u^2, \dots, u^m を持つ k 階常微分方程式の系

$$\mathbf{u}^{(k)} = \mathbf{f}(x, \mathbf{u}, \mathbf{u}', \dots, \mathbf{u}^{(k-1)}) \quad (7.62)$$

の初期値

$$\mathbf{u}(x_0) = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{u}'(x_0) = \mathbf{u}'_0, \quad \dots, \quad \mathbf{u}^{(k-1)}(x_0) = \mathbf{u}_0^{(k-1)} \quad (7.63)$$

を満足する解 $\mathbf{u}(x)$ を求める問題について述べる. $\mathbf{u} = \mathbf{u}^0, \mathbf{u}' = \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^{(k-1)} = \mathbf{u}^{k-1}$ と置けば式 (7.62) は次のようになる.

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}^0)' &= \mathbf{u}^1 \\ (\mathbf{u}^1)' &= \mathbf{u}^2 \\ &\dots\dots\dots \\ (\mathbf{u}^{k-2})' &= \mathbf{u}^{k-1} \\ (\mathbf{u}^{k-1})' &= \mathbf{f}(x, \mathbf{u}^0, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^{k-1}) \end{aligned} \quad (7.64)$$

これらの式は $k \times m$ 個の未知変数を持つ $k \times m$ 個の 1 階常微分方程式系である.

一例として $k = m = 2$ の場合を取り上げ, 3 次 Runge-Kutta 公式で解く. その計算に用いられる式は式 (7.19), (7.21) と (7.50) を参照すれば次のようになる.

$$\mathbf{u}_{n+1}^0 = \mathbf{u}_n^0 + h\mathbf{u}_n^1 + \frac{1}{2!}h^2\mathbf{f}_n + \frac{1}{3!}h^3\mathbf{f}'_n \quad (7.65a)$$

$$\mathbf{u}_{n+1}^1 = \mathbf{u}_n^1 + \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1^1 + 4\mathbf{k}_2^1 + \mathbf{k}_3^1) \quad (7.65b)$$

ただし

$$\begin{aligned} \mathbf{f}'_n &= (\mathbf{f}_x + u^1 \partial \mathbf{f} / \partial u^0 + v^1 \partial \mathbf{f} / \partial v^0 + f \partial \mathbf{f} / \partial u^1 + g \partial \mathbf{f} / \partial v^1)_n, \\ \mathbf{k}_1^1 &= h\mathbf{f}_n, \quad \mathbf{k}^{1*} = h\mathbf{f}(x_n + h/4, \mathbf{u}_n^0 + \mathbf{k}_1^0/4, \mathbf{u}_n^1 + \mathbf{k}_1^1/4), \\ \mathbf{k}_2^1 &= h\mathbf{f}(x_n + h/2, \mathbf{u}_n^0 + \mathbf{k}_1^0/2, \mathbf{u}_n^1 + \mathbf{k}^{1*}/2), \\ \mathbf{k}_3^1 &= h\mathbf{f}(x_n + h, \mathbf{u}_n^0 + \mathbf{k}_2^0, \mathbf{u}_n^1 + \mathbf{k}_2^1) \\ \mathbf{u} &= \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \quad \mathbf{k}_1^0 = h\mathbf{u}_n^1, \quad \mathbf{k}_2^0 = h(\mathbf{u}^1 + h\mathbf{f}/2)_n \end{aligned}$$

7.6 常微分方程式の境界値問題

常微分方程式の境界値問題 (boundary value problem) は数値解法では通常 差分法 (finite-difference method) または有限要素法 (finite element method, FEM) によって解かれる。ここでは差分法による解法について述べる。

7.6.1 差分演算子

等間隔 h に取られた点列 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 上に関数値 $f_0, f_1, f_2, \dots, f_n$ が離散的 (discrete) に与えられているものとする。以下には点 x_i における微分 $f'_i, f''_i, f'''_i, \dots$ を近似する差分演算子の代表的なものをいくつか示す。

$$f'_i = \frac{1}{h}(-f_{i-1} + f_i) + \frac{1}{2}hf'' \quad (7.66a)$$

$$f'_i = \frac{1}{h}(-f_i + f_{i+1}) - \frac{1}{2}hf'' \quad (7.66b)$$

$$f'_i = \frac{1}{2h}(-f_{i-1} + f_{i+1}) - \frac{1}{6}h^2f''' \quad (7.66c)$$

$$f'_i = \frac{1}{12h}(f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}) + \frac{1}{30}h^4f^{(5)} \quad (7.66d)$$

$$f'_i = \frac{1}{2h}(-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}) + \frac{1}{3}h^2f''' \quad (7.66e)$$

$$f''_i = \frac{1}{h^2}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) - \frac{1}{12}h^2f^{(4)} \quad (7.67a)$$

$$f''_i = \frac{1}{12h^2}(-f_{i-2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i+1} - f_{i+2}) + \frac{1}{90}h^4f^{(6)} \quad (7.67b)$$

$$f''_i = \frac{1}{h^2}(f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2}) - hf''' \quad (7.67c)$$

$$f''_i = \frac{1}{h^2}(2f_i - 5f_{i+1} + 4f_{i+2} - f_{i+3}) + \frac{11}{12}h^2f^{(4)} \quad (7.67d)$$

$$f'''_i = \frac{1}{2h^3}(-f_{i-2} + 2f_{i-1} - 2f_{i+1} + f_{i+2}) - \frac{1}{4}h^2f^{(5)} \quad (7.68a)$$

$$f'''_i = \frac{1}{h^3}(-f_{i-1} + 3f_i - 3f_{i+1} + f_{i+2}) - \frac{1}{2}hf^{(4)} \quad (7.68b)$$

$$f'''_i = \frac{1}{h^3}(-f_i + 3f_{i+1} - 3f_{i+2} + f_{i+3}) - \frac{3}{2}hf^{(4)} \quad (7.68c)$$

$$f'''_i = \frac{1}{2h^3}(-3f_{i-1} + 10f_i - 12f_{i+1} + 6f_{i+2} - f_{i+3}) + \frac{1}{4}h^2f^{(5)} \quad (7.68d)$$

$$f'''_i = \frac{1}{2h^3}(-5f_i + 18f_{i+1} - 24f_{i+2} + 14f_{i+3} - 3f_{i+4}) + \frac{7}{4}h^2f^{(5)} \quad (7.68e)$$

$$f_i^{(4)} = \frac{1}{h^4}(f_{i-2} - 4f_{i-1} + 6f_i - 4f_{i+1} + f_{i+2}) - \frac{1}{6}h^2f^{(6)} \quad (7.69a)$$

$$f_i^{(4)} = \frac{1}{h^4}(f_{i-1} - 4f_i + 6f_{i+1} - 4f_{i+2} + f_{i+3}) - hf^{(5)} \quad (7.69b)$$

$$f_i^{(4)} = \frac{1}{h^4}(f_i - 4f_{i+1} + 6f_{i+2} - 4f_{i+3} + f_{i+4}) - 2hf^{(5)} \quad (7.69c)$$

$$f_i^{(4)} = \frac{1}{h^4}(2f_{i-1} - 9f_i + 16f_{i+1} - 14f_{i+2} + 6f_{i+3} - f_{i+4}) + \frac{5}{6}h^2f^{(6)} \quad (7.69d)$$

これらの差分式の右辺の最終項は打ち切り誤差 (truncation errors) で、数値計算には直接関係のないものである。例えば式 (7.66c) の打ち切り誤差は $O(h^2)$ で、この差分演算子は 2 次精度 (second-order accuracy) である。一般に高次の差分式を用いれば、少ない計算点で高精度の結果が得られ、全体の計算機時間も短縮されるが、与えられたデータが十分滑らかでないとき実質的な精度は上がらずかえって不安定性を惹き起こす虞がある。普通 2 次の差分式が用いられるが、不連続性のある場合にはこれに柔軟に対処するため 4 次以上の差分式が安定化対策を施した上で用いられる。境界値問題では内点 (interior points) に対しては i に関して対称な中心差分 (central-differences), 式 (7.66c), (7.67a) などが用いられ、境界点 (boundary points) に対しては i に関して非対称な領域外のデータを使わない片側差分 (one-side-differences), 式 (7.66a), (7.66e), (7.67d) などが用いられる。

上記の差分式はすべて次の Taylor 展開から導かれたものである。

$$\dots\dots\dots$$

$$f_{i-2} = f_i - 2hf'_i + 2h^2f''_i - \frac{4}{3}h^3f'''_i + \dots \quad (7.70a)$$

$$f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{1}{2}h^2f''_i - \frac{1}{6}h^3f'''_i + \dots \quad (7.70b)$$

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{1}{2}h^2f''_i + \frac{1}{6}h^3f'''_i + \dots \quad (7.70c)$$

$$f_{i+2} = f_i + 2hf'_i + 2h^2f''_i + \frac{4}{3}h^3f'''_i + \dots \quad (7.70d)$$

$$\dots\dots\dots$$

例えば式 (7.66a) は式 (7.70b) から直接的に導かれ、式 (7.66c) と (7.67a) は式 (7.70b) と (7.70c) を 1 次結合したものである。一般に 下記の不等間隔計算点の場合も含め、 k 階差分の精度 $O(h^n)$ の式は、 $k+n-1$ 個の Taylor 展開式の 1 次結合 すなわちこれらの式から $k+n-2$ 個の $f'_i, f''_i, \dots, f_i^{(k+n-1)}$ から $f_i^{(k)}$ を除いた微分を消去することによって導かれ、 $k+n$ 個のデータ f_j の 1 次同次式である。ただし等間隔計算点の中心差分の場合には、対称性により Taylor 展開式したがってデータの個数が 1 つ少ないものもある。

不等間隔計算点 (nonuniform calculating points) $x_{i+1} = x_i + h_i$ の場合の差分式について簡単に述べる。この場合の差分式も Taylor 展開を基に作られる。

$$\dots\dots\dots$$

$$f_{i-2} = f_i - (h_{i-2} + h_{i-1})f'_i + \frac{1}{2!}(h_{i-2} + h_{i-1})^2f''_i - \frac{1}{3!}(h_{i-2} + h_{i-1})^3f'''_i + \dots \quad (7.71a)$$

$$f_{i-1} = f_i - h_{i-1}f'_i + \frac{1}{2!}h_{i-1}^2f''_i - \frac{1}{3!}h_{i-1}^3f'''_i + \dots \quad (7.71b)$$

$$f_{i+1} = f_i + h_i f'_i + \frac{1}{2!}h_i^2 f''_i + \frac{1}{3!}h_i^3 f'''_i + \dots \quad (7.71c)$$

$$f_{i+2} = f_i + (h_i + h_{i+1})f'_i + \frac{1}{2!}(h_i + h_{i+1})^2f''_i + \frac{1}{3!}(h_i + h_{i+1})^3f'''_i + \dots \quad (7.71d)$$

$$\dots\dots\dots$$

例えば 1 階の片側差分は式 (7.71c) から

$$f'_i = \frac{1}{h_i}(f_{i+1} - f_i) - \frac{1}{2}h_i f''_i \quad (7.72)$$

また 1 階と 2 階の中心差分の式は式 (7.71b) と (7.71c) の 1 次結合を取ることによって

$$f'_i = \frac{1}{h_{i-1} + h_i} \left\{ \frac{h_{i-1}}{h_i}(f_{i+1} - f_i) - \frac{h_i}{h_{i-1}}(f_{i-1} - f_i) \right\} - \frac{1}{3!}h_{i-1}h_i f'''_i \quad (7.73)$$

$$f''_i = \frac{2}{h_{i-1} + h_i} \left\{ \frac{1}{h_{i-1}}(f_{i-1} - f_i) + \frac{1}{h_i}(f_{i+1} - f_i) \right\} - \frac{1}{3}(h_i - h_{i-1})f'''_i + O(h^2) \quad (7.74)$$

となる．これより不等間隔計算点の場合には，1 階中心差分は等間隔の場合と同じ 2 次精度であるが，2 階中心差分は 1 次精度におち，計算点の間隔が十分滑らかに変化するとき限り 2 次に近いものになる．4 つのデータ $f_{i-1}, f_i, f_{i+1}, f_{i+2}$ を使えば 2 次の式が得られる．

$$\begin{aligned} f''_i &= \frac{2(2h_i + h_{i+1})}{h_{i-1}(h_{i-1} + h_i)(h_{i-1} + h_i + h_{i+1})}(f_{i-1} - f_i) + \frac{2(h_i + h_{i+1} - h_{i-1})}{(h_{i-1} + h_i)h_i h_{i+1}}(f_{i+1} - f_i) \\ &\quad - \frac{2(h_i - h_{i-1})}{(h_{i-1} + h_i + h_{i+1})(h_i + h_{i+1})h_{i+1}}(f_{i+2} - f_i) + O(h^2) \end{aligned} \quad (7.75)$$

境界点に用いられる 2 次の片側差分の式は

$$f'_i = \frac{h_i + h_{i+1}}{h_i h_{i+1}}(f_{i+1} - f_i) - \frac{h_i}{(h_i + h_{i+1})h_{i+1}}(f_{i+2} - f_i) + O(h^2) \quad (7.76)$$

$$\begin{aligned} f''_i &= -\frac{2(2h_i + 2h_{i+1} + h_{i+2})}{h_i h_{i+1}(h_{i+1} + h_{i+2})}(f_{i+1} - f_i) + \frac{2(2h_i + h_{i+1} + h_{i+2})}{(h_i + h_{i+1})h_{i+1}h_{i+2}}(f_{i+2} - f_i) \\ &\quad - \frac{2(2h_i + h_{i+1})}{(h_i + h_{i+1} + h_{i+2})(h_{i+1} + h_{i+2})h_{i+2}}(f_{i+3} - f_i) + O(h^2) \end{aligned} \quad (7.77)$$

のようになる．なお雑誌や単行本に印刷されている式は必ずしも正しいとは言えない．簡単にチェックを入れてから実際の計算に使うべきである．例えば式 (7.75) に対しては， $h_{i-1} = h_i = h_{i+1} = h$ の場合に等間隔の式になるかどうか，更に与えられたデータが 1 次変化する $-(f_{i-1} - f_i)/h_{i-1} = (f_{i+1} - f_i)/h_i = (f_{i+2} - f_i)/(h_i + h_{i+1}) = 1$ の場合に， $f''_i = 0$ になるかどうかを調べれば十分であろう．

7.6.2 2 階線形常微分方程式

2 階の線形常微分方程式

$$u'' + p(x)u' + q(x)u = r(x) \quad (7.78)$$

は，2 次中心差分の式 (7.66c)，(7.67a) を用いれば，次の差分方程式 (finite-difference equation) になる．

$$\frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \frac{p_i}{2h}(u_{i+1} - u_{i-1}) + q_i u_i = r_i$$

この式は多少書き換えれば

$$\left(1 - \frac{h}{2}p_i\right)u_{i-1} - (2 - h^2q_i)u_i + \left(1 + \frac{h}{2}p_i\right)u_{i+1} = h^2r_i \quad (7.79)$$

ただし $p_i = p(x_i)$ ， $q_i = q(x_i)$ ， $r_i = r(x_i)$ ，のようになる．

はじめに常微分方程式 (7.78) の 2 点境界値問題について述べる。式 (7.79) は各内点に対し 1 つ成立し、これに境界条件 $u(x_0) = u_0$, $u(x_n) = u_n$ を考慮したものは、 $n-1$ 個の未知数 u_1, u_2, \dots, u_{n-1} をもつ次の連立 1 次方程式になる。

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & & 0 \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \alpha_{n-2} & \beta_{n-2} & \gamma_{n-2} \\ 0 & & & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_1 - \alpha_1 u_0 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{n-2} \\ \delta_{n-1} - \gamma_{n-1} u_n \end{pmatrix} \quad (7.80)$$

ただし $\alpha_i = 1 - hp_i/2$, $\beta_i = -2 + h^2 q_i$, $\gamma_i = 1 + hp_i/2$, $\delta_i = h^2 r_i$ である。この方程式の係数行列は 3 行の対角要素を除いた残りの要素がすべて 0 になる 3 重対角行列 (tridiagonal matrix) になっている。このような連立 1 次方程式は Gauss 消去法によって能率良く解くことができる。

境界条件として $u'(x_0) = \dot{u}_0$, $u(x_n) = u_n$ が与えられる場合には、境界上の関数値 u_0 も未知になるので、ここで成立する方程式を加えなければならない。解 $u(x)$ が境界を越えて外側に滑らかに延長 (解析接続) できるものとして、境界の外側に距離 h にある仮設点 (fictitious point) x_{-1} の関数値 u_{-1} を導入すれば、

$$\begin{aligned} \alpha_0 u_{-1} + \beta_0 u_0 + \gamma_0 u_1 &= \delta_0 \\ -u_{-1} + u_1 &= 2h\dot{u}_0 \end{aligned}$$

が成立するので、これらの式から u_{-1} を消去すれば次式が導かれる。

$$\beta_0 u_0 + (\alpha_0 + \gamma_0) u_1 = \delta_0 + 2h\alpha_0 \dot{u}_0 \quad (7.81)$$

結局解くべき連立 1 次方程式は次のようになる。

$$\begin{pmatrix} \beta_0 & \alpha_0 + \gamma_0 & & & 0 \\ \alpha_1 & \beta_1 & \gamma_1 & & \\ & \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \alpha_{n-2} & \beta_{n-2} & \gamma_{n-2} \\ 0 & & & & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_0 + 2h\alpha_0 \dot{u}_0 \\ \delta_1 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{n-2} \\ \delta_{n-1} - \gamma_{n-1} u_n \end{pmatrix} \quad (7.82)$$

この方程式の係数行列も 3 重対角行列になる。

7.6.3 2 階非線形常微分方程式

ここでは 1 階微分を含まない 2 階非線形常微分方程式の 2 点境界値問題

$$u'' = f(x, u) \quad (7.83)$$

$$u(x_0) = u_0, \quad u(x_n) = u_n \quad (7.84)$$

を取り上げる³。ただし $x_0 \leq x \leq x_n$, $-\infty < u < \infty$ において $f(x, u)$ は Lipschitz 連続で、 $f_u(x, u)$ は正の連続関数とする。このときこの境界値問題の解は一意的に定まることが知られている。

³一般に微分方程式は最高階数の項が主役を演じる。右辺に 1 階微分 u' が含まれる場合にはまず右辺を定数と見て u を計算し、右辺を修正し反復計算を行うのが基本である。

式 (7.83) は 2 次の差分を用いれば

$$u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} - h^2 f_i = 0 \quad (7.85)$$

となる．あるいは 7.5.3 項に示した高精度の修正子の式 (7.58b) を活用すれば

$$u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} - \frac{h^2}{12}(f_{i-1} + 10f_i + f_{i+1}) = 0 \quad (7.86)$$

となる．この式は Cowell 公式と呼ばれるもので，また 7.6.5 項に示す Hermite 法の式の 1 つでもある．式 (7.85) または (7.86) に境界条件を考慮したものは，ベクトルと行列を用い簡潔に表せば次のようになる．

$$\mathbf{J}\mathbf{u} + h^2 \mathbf{B}\mathbf{f}(\mathbf{u}) + \mathbf{a} = 0 \quad (7.87a)$$

ただし

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-2} \\ f_{n-1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} u_0 - \beta_0 h^2 f_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_n - \beta_2 h^2 f_n \end{pmatrix}, \quad (7.87b)$$

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ 0 & & & & 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & & & 0 \\ \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 \\ 0 & & & & \beta_0 & \beta_1 \end{pmatrix}$$

である．式 (7.87) は f が x のみの関数で線形の場合には式 (7.80) になり，前述のように Gauss 消去法で容易に解くことができる．一方 非線形の場合には直接解くことが困難になり，例えば Newton-Raphson 法により反復計算で解くことになる．

Newton-Raphson 法では解 \mathbf{u} は推定値 $\mathbf{u}^{(0)}$ に修正値 $\Delta\mathbf{u}$ を加えたものとして表される．すなわち $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(0)} + \Delta\mathbf{u}$ と Taylor 展開の式

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} f_1^{(0)} + (f_u)_1^{(0)} \Delta u_1 \\ f_2^{(0)} + (f_u)_2^{(0)} \Delta u_2 \\ \vdots \\ f_{n-1}^{(0)} + (f_u)_{n-1}^{(0)} \Delta u_{n-1} \end{pmatrix} = \mathbf{f}(\mathbf{u}^{(0)}) + \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)})\Delta\mathbf{u}$$

$$f_i = f(x_i, u_i), \quad (f_u)_i = f_u(x_i, u_i),$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} (f_u)_1 & & & 0 \\ & (f_u)_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & (f_u)_{n-1} \end{pmatrix}$$

を式 (7.87) に代入すれば次式が得られる .

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}^{(0)})\Delta\mathbf{u} = -\mathbf{r}(\mathbf{u}^{(0)}) \quad (7.88a)$$

ただし

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \mathbf{J} + h^2\mathbf{B}\mathbf{F}(\mathbf{u}), \quad \mathbf{r}(\mathbf{u}) = \mathbf{J}\mathbf{u} + h^2\mathbf{B}\mathbf{f}(\mathbf{u}) + \mathbf{a} \quad (7.88b)$$

である . 式 (7.88) は未知変数 $\Delta\mathbf{u}$ の連立 1 次方程式で , その係数行列 $\mathbf{A}(\mathbf{u}^{(0)})$ は 3 重対角である . この係数行列 $\mathbf{A}(\mathbf{u}^{(0)})$ と式 (7.87) の残差 $\mathbf{r}(\mathbf{u}^{(0)})$ の値は容易に決定でき , 式 (7.88) は Gauss 消去法で解かれ , その第 1 近似値は $\mathbf{u}^{(1)} = \mathbf{u}^{(0)} + \Delta\mathbf{u}$ となる . このような計算を解 $\mathbf{u}(x)$ が十分に収束するまで反復する . この反復計算は解 $\mathbf{u}(x)$ にある程度近い妥当な推定値 $\mathbf{u}^{(0)}$ から始めれば収束する .

7.6.4 4 階線形常微分方程式

4 階の常微分方程式の境界値問題では , 境界条件は領域の両端に u, u', u'', u''' の中から 2 個ずつ与えられる . もっとも , どれを取っても問題が正当に成立つというわけではないが , 具体的問題で物理的意味をなすものを与えれば一意解が得られるはずである . この境界値問題も前節同様 差分法によって解を求めることができる . 例えば境界値問題

$$u^{(4)} - 16u = x \quad (7.89)$$

$$u(0) = u''(0) = 0, \quad u(1) = u'(1) = 0 \quad (7.90)$$

の差分方程式は次のようになる .

$$\begin{aligned} (5 - 16h^4)u_1 - 4u_2 + u_3 &= h^4x_1 \\ u_{i-2} - 4u_{i-1} + (6 - 16h^4)u_i - 4u_{i+1} + u_{i+2} &= h^4x_i \quad (i = 2, 3, \dots, n-2) \\ u_{n-3} - 4u_{n-2} + (7 - 16h^4)u_{n-1} &= h^4x_{n-1} \end{aligned} \quad (7.91)$$

なお $i = 1$ と $n-1$ の式には , 境界条件より得られる関係 $u_0 = 0, u_{-1} = -u_1, u_n = 0, u_{n+1} = u_{n-1}$ が用いられた . 計算のプログラムと結果は次のようになる .

```
*****
! Solution of boundary value problem of 4th-order ODE by FDM
*****
program MAIN
REAL(4)  x(0:100),u(0:100)
REAL(8)  a(99,-2:2),b(99)
DATA if/100/
OPEN(20,FILE='OUTPUT.dat')
h=1./FLOAT(if); h4=h*h*h*h
FORALL (i=0:if)x(i)=FLOAT(i)*h
FORALL (i=1:if-1)
  a(i,-2)=1.; a(i,-1)=-4.; a(i,0)=6.-16.*h4; a(i,1)=-4.; a(i,2)=1.
  b(i)=h4*x(i)
ENDFORALL
a(1,0)=a(1,0)-1.; a(if-1,0)=a(if-1,0)+1.
CALL GAUSSB(a,b,if-1,-2,2,det)
FORALL (i=1:if-1)u(i)=b(i)
```

```

WRITE(20,'(101F10.5/101F10.5)')x,u
CLOSE(20)
STOP; END

!***** Solve simultaneous linear eqns with band matrix by Gaussian elimination
SUBROUTINE GAUSSB(a,b,n,m1,m2,det)
REAL(8) a(n,m1:m2),b(n)
det=1.
cycle_1: DO k=1,n; i2=MINO(n,k-m1); j2=MINO(m2,n-k)
  det=a(k,0)*det; b(k)=b(k)/a(k,0)
  IF(k==n)CYCLE cycle_1
  FORALL(j=1:j2)a(k,j)=a(k,j)/a(k,0)
  DO i=k+1,i2; j0=k-i
    b(i)=b(i)-a(i,j0)*b(k)
    DO jk=1,j2; j=jk+k-i
      a(i,j)=a(i,j)-a(i,j0)*a(k,jk)
    ENDDO
  ENDDO
ENDDO cycle_1
DO n-1,1,-1; j2=MINO(m2,n-i)
  DO j=1,j2; k=i+j
    b(i)=b(i)-a(i,j)*b(k)
  ENDDO
ENDDO
END

```

GAUSSB は 1.4 節に述べた帯行列の連立 1 次方程式を Gauss 消去法で解くサブルーチンで、このプログラムはこのサブルーチンの使用を前提に作られている。次表は計算で求めた u の値を 10^5 倍したものを示す。

| h | $x = 0$ | .1 | .2 | .3 | .4 | .5 | .6 | .7 | .8 | .9 | 1.0 |
|--------|---------|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|-----|
| 0.100 | 0 | 92 | 173 | 233 | 265 | 265 | 233 | 175 | 102 | 35 | 0 |
| 0.050 | 0 | 89 | 167 | 225 | 256 | 255 | 222 | 165 | 94 | 30 | 0 |
| 0.025 | 0 | 88 | 166 | 223 | 253 | 252 | 220 | 162 | 92 | 29 | 0 |
| 0.010 | 0 | 88 | 166 | 223 | 253 | 251 | 219 | 162 | 92 | 29 | 0 |
| 0.010* | 0 | 88 | 151 | 203 | 231 | 231 | 202 | 150 | 85 | 27 | 0 |

* 実数型で計算

$h = 0.1, 0.05, 0.025$ の場合には実数型でも倍精度実数型でも結果は同じになるが、 $h = 0.01$ の場合には実数型では丸めの誤差のため桁落ちする。

7.6.5 Hermite 法と spline 法

Hermite 法 (Hermitian method) と spline 法 (spline method) について、ここでは 2 階常微分方程式を例にとり説明する。これらの方法では各計算点 x_i 上に関数 u_i とともにその微分 u'_i と u''_i が未知変数として定義される。このとき微分方程式は、線形ならば未知変数の 1 次式、非線形でも普通 簡単な代数式になる。これらの方法ではまた、各計算点上で成立する 未知変数とその微分の関係式が用いられる。これらの関係式は微分方程式によらず共用できるもので、一般に高精度で、Hermite 法のものは Taylor 展開を基にまた spline 法のもは多項式から導かれる。各計算点上の 3 つの未知変数 u_i, u'_i, u''_i に対し 3 条件が揃えば、常微分方程式の境界値問題は連立 1 次方程式を解く問題に帰着する。

ここでは初めに Hermite 法の簡単な関係式を Taylor 展開を基に導出する。Taylor 展開の式 (7.70b) と

(7.70c) の差を取れば次式が得られる .

$$u_{i+1} - u_{i-1} = 2hu'_i + \frac{2}{3!}h^3u_i''' + \frac{2}{5!}h^5u_i^{(5)} \quad (7.92)$$

また 1 階微分の Taylor 展開の式

$$\begin{aligned} u'_{i-1} &= u'_i - hu''_i + \frac{1}{2!}h^2u_i''' - \frac{1}{3!}h^3u_i^{(4)} + \frac{1}{4!}h^4u_i^{(5)} + \dots \\ u'_{i+1} &= u'_i + hu''_i + \frac{1}{2!}h^2u_i''' + \frac{1}{3!}h^3u_i^{(4)} + \frac{1}{4!}h^4u_i^{(5)} + \dots \end{aligned}$$

の和を取れば次式が得られる .

$$u'_{i-1} - 2u'_i + u'_{i+1} = h^2u_i''' + \frac{2}{4!}h^4u_i^{(5)} \quad (7.93)$$

式 (7.92) と (7.93) から u_i''' の項を消去すれば次の Hermite 公式が導かれる .

$$u'_{i-1} + 4u'_i + u'_{i+1} = \frac{3}{h}(u_{i+1} - u_{i-1}) + \frac{1}{30}h^4u_i^{(5)} \quad (7.94)$$

次に式 (7.70b) と (7.70c) の和を取れば次式が得られる .

$$u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} = h^2u_i'' + \frac{2}{4!}h^4u_i^{(4)} + \frac{2}{6!}h^6u_i^{(6)} \quad (7.95)$$

また 2 階微分の Taylor 展開の式

$$\begin{aligned} u''_{i-1} &= u''_i - hu_i''' + \frac{1}{2!}h^2u_i^{(4)} - \frac{1}{3!}h^3u_i^{(5)} + \frac{1}{4!}h^4u_i^{(6)} + \dots \\ u''_{i+1} &= u''_i + hu_i''' + \frac{1}{2!}h^2u_i^{(4)} + \frac{1}{3!}h^3u_i^{(5)} + \frac{1}{4!}h^4u_i^{(6)} + \dots \end{aligned}$$

の和を取れば次式が得られる .

$$u''_{i-1} - 2u''_i + u''_{i+1} = h^2u_i^{(4)} + \frac{2}{4!}h^4u_i^{(6)} \quad (7.96)$$

式 (7.95) と (7.96) から $u_i^{(4)}$ の項を消去すれば次の Hermite 公式が導かれる .

$$u''_{i-1} + 10u''_i + u''_{i+1} = \frac{12}{h^2}(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) + \frac{1}{20}h^4u_i^{(6)} \quad (7.97)$$

境界点では通常 次の Pedé の式が用いられる .

$$u_0 - u_1 + \frac{h}{2}(u'_0 + u'_1) + \frac{h^2}{12}(u''_0 - u''_1) + \frac{1}{6!}h^3u_0^{(5)} = 0 \quad (7.98)$$

この式は , u_1, u'_1, u''_1 の点 x_0 まわりの Taylor 展開の式から $u_0''', u_0^{(4)}$ の項を消去することによって導かれる . 2 階常微分方程式の境界値問題を Hermite 法で解く場合には , 等間隔計算点上に未知変数 u_i, u'_i, u''_i が定義される . 内点の 3 条件は微分方程式と上記の Hermite 公式 (7.94) , (7.97) である . また境界点の 3 条件は微分方程式と境界条件 u_0 または u'_0 と Pedé の式 (7.98) である .

spline は雲形定規のことで , 雲形定規は通常 3 次曲線で作られるとのことである . spline 法で用いられる spline 曲線は 3 次以上のものであるが , ここには 3 次の spline 法について述べる . 3 次式は一般に次のように与えることができる .

$$S(x) = \sum_{\nu=0}^3 c_\nu t^\nu$$

ただし $t = (x - x_i)/h_i$, $x_{i+1} = x_i + h_i$ である . この式の未定係数 c_0, c_1, c_2, c_3 は 4 条件

$$\begin{aligned} S(x_i) &= u_i, & S''(x_i) &= u''_i, \\ S(x_{i+1}) &= u_{i+1}, & S''(x_{i+1}) &= u''_{i+1} \end{aligned}$$

を満足するように決定される . 結局 3 次 spline の式は次のようになる .

$$S(x) = (1-t)u_i + t u_{i+1} + \frac{1}{6} h_i^2 \left[\{ (1-t)^3 - (1-t) \} u''_i + (t^3 - t) u''_{i+1} \right] \quad (7.99)$$

この式を x に関して微分すれば次式が得られる .

$$S'(x) = \frac{1}{h_i} (-u_i + u_{i+1}) - \frac{1}{6} h_i \{ (2-6t+3t^2) u''_i + (1-3t^2) u''_{i+1} \}$$

この式から境界点上の勾配 u'_i, u'_{i+1} の式と , その下添字を付け替えた u'_{i-1}, u'_i の式が得られる .

$$u'_{i-1} = \frac{1}{h_{i-1}} (u_i - u_{i-1}) - \frac{h_{i-1}}{6} (2u''_{i-1} + u''_i) \quad (7.100a)$$

$$u'_i = \frac{1}{h_{i-1}} (u_i - u_{i-1}) + \frac{h_{i-1}}{6} (u''_{i-1} + 2u''_i) \quad (7.100b)$$

$$u'_i = \frac{1}{h_i} (u_{i+1} - u_i) - \frac{h_i}{6} (2u''_i + u''_{i+1}) \quad (7.100c)$$

$$u'_{i+1} = \frac{1}{h_i} (u_{i+1} - u_i) + \frac{h_i}{6} (u''_i + 2u''_{i+1}) \quad (7.100d)$$

これら 4 つの式から $u''_{i-1}, u''_i, u''_{i+1}$ を消去すれば次の spline 公式が導かれる .

$$\frac{1}{3h_{i-1}} (u'_{i-1} + 2u'_i) + \frac{1}{3h_i} (2u'_i + u'_{i+1}) = \frac{1}{h_{i-1}^2} (u_i - u_{i-1}) + \frac{1}{h_i^2} (u_{i+1} - u_i) \quad (7.101)$$

また式 (7.100b) と (7.100c) の勾配を等値すれば次の spline 公式が導かれる .

$$\frac{h_{i-1}}{6} (u''_{i-1} + 2u''_i) + \frac{h_i}{6} (2u''_i + u''_{i+1}) = \frac{1}{h_{i-1}} (u_i - u_{i-1}) - \frac{1}{h_i} (u_{i+1} - u_i) \quad (7.102)$$

境界点では次の勾配の式が補われる .

$$u'_0 = \frac{u_1 - u_0}{h_0} - \frac{h_0}{6} (2u''_0 + u''_1) \quad (7.103)$$

$$u'_n = \frac{u_n - u_{n-1}}{h_{n-1}} + \frac{h_{n-1}}{6} (u''_{n-1} + 2u''_n)$$

spline 法の場合にも Hermite 法と同様に , 各計算点上の未知変数は u_i, u'_i, u''_i の 3 個で , これに対する 3 条件は内点では微分方程式と 2 つの spline 公式 (7.101) , (7.102) , 境界点では微分方程式と境界条件と勾配の式 (7.103) から構成される .

2 階常微分方程式の境界値問題は , Hermite 法または spline 法では , 3×3 ブロック 3 重対角行列の連立 1 次方程式を解く問題になり , この連立 1 次方程式はブロック消去法で解かれる . あるいはこれを 8 重対角行列の連立 1 次方程式と見て直接 Gauss 消去法で解くこともできる . また 3 つの 3 重対角行列の連立 1 次方程式に帰着させる方法⁴ , 反復コンパクト法⁵ が計算量を節減する目的で提案されているが , コンピュータの性能が格段に向上した今日ではその必要性は薄れている .

⁴Rubin, S.G. and Graves, Jr., R.A., Comput. & Fluids, **3**-1(1975), 1.

⁵Rubin, S.G. and Khosla, P.K., Lecture Notes in Physics, **90**(1979), 468, Springer-Verlag.

以上 Hermite 法と spline 法の入門的基礎的部分について述べた。これらの方法では、更に高次高精度の公式が各種提案されている^{6,7}。ここで注意すべきことは、十分滑らかな解の期待できる問題では高次公式の使用は実質的に高精度の結果をもたらす。しかしながら、何らかの原因でゆらぎの問題では高次公式の使用はゆらぎを拡大し不自然な結果を招くことになる。ゆらぎを抑えるために平滑化 (smoothing) 処理が施されてきた。しかし古典的な全領域に一樣に、拡散項 $\kappa u''$ や $-\kappa u^{(4)}$ のような項を直接間接に加える方法は、局所的ゆらぎを抑えることはできても解全体の精度を低下させる虞がある。これらの項は局所的に、関数やその微分の不当な極値の発生を抑える程度に必要量だけ加えられるべきである。

付録 常微分方程式の基礎

ここには在来の教科書に書かれている解析的手法による 1 階常微分方程式と線形常微分方程式の解法について略述する。なお特殊関数を解に持つ線形常微分方程式には触れないことにする。

1. 1 階常微分方程式

ここには簡単に解ける 1 階常微分方程式の解法を列挙する。

線形微分方程式

1 階線形微分方程式 (first-order linear ode) は

$$u' + p(x)u + q(x) = 0 \quad (7.104)$$

のように書かれ、その一般解は次のようになる。

$$u = \left[c - \int q(x)P(x)dx \right] / P(x) \quad (7.105)$$

ただし $P(x) = \exp(\int p(x)dx)$ 、 c は積分定数である。

ベルヌーイの微分方程式 (Bernoulli's ode) $u' + p(x)u + q(x)u^\alpha = 0$, ($\alpha \neq 0, 1$) は、 $v = u^{1-\alpha}$ と置けば $v' + (1-\alpha)p(x)v + (1-\alpha)q(x) = 0$ となり、線形微分方程式になる。

変数分離型と同次型微分方程式

変数分離型微分方程式 (separation of variables type ode) は

$$dy/dx = X(x)/Y(y) \quad (7.106)$$

のように書かれ、その一般解は次のようになる。

$$\int^y Y(y)dy = c + \int^x X(x)dx \quad (7.107)$$

ただし c は積分定数である。

例 $mu'' = mg - ku'$ の初期条件 $u(0) = u'(0) = 0$ を満足する解を求めよ。

⁶Hirsh, R., J. Comput. Phys., 19-1(1975-9), 90.

⁷Rubin, S.G. and Khosla, P.K., J. Comput. Phys., 24-3(1977-7), 217.

まず $u' = v$ と置いて得られる微分方程式 $dv/dx = (mg - kv)/m$ から v を求め、次にこの v を x に関し積分し u を求める。 $u = (mg/k)x - (m^2g/k^2)(1 - \exp(-kx/m))$

同次型微分方程式 (first-order homogeneous ode) は

$$dy/dx = f(y/x) \quad (7.108)$$

のように書かれる。この方程式は、 $y/x = v$ と置けば $dv/dx = (f(v) - v)/x$ となり、変数分離型になる。

微分方程式 $P(x, y)dx + Q(x, y)dy = 0$

微分方程式

$$P(x, y)dx + Q(x, y)dy = 0 \quad (7.109)$$

は条件 $P_y = Q_x$ が満足されるときに完全微分型と言われ、その一般解は次式で与えられる。

$$\int Pdx + \int [Q - \int P_y dx] dy = c \quad \text{あるいは} \quad \int_{x_0}^x P(x, y)dx + \int_{y_0}^y Q(x_0, y)dy = c \quad (7.110)$$

xy 空間における曲線の式は $\phi(x, y) = c$ で与えられる。これを微分形で表せば、 $d\phi = \phi_x dx + \phi_y dy = 0$ となる⁸。ここで $\phi_x = P$ 、 $\phi_y = Q$ と置けば式 (7.109) が得られ、また $P_y = \phi_{xy} = Q_x$ 、完全微分の条件が得られる。 $\phi_x = P$ を x で積分すれば、 $\phi = \int Pdx + Y(y)$ となる。次にこれを y で微分すれば $\phi_y = Q = \int P_y dx + Y'(y)$ となる。これを y で積分すれば $Y = \int (Q - \int P_y dx) dy - c$ 、あるいは $Y = \int (Q - \int Q_x dx) dy - c = \int Q(x_0, y) dy - c$ となる。式 (7.110) はこのようにして導かれたものである。

次に微分方程式 (7.109) は完全微分型でないが、この式に適当な因数 $M(x, y)$ を乗じた式 $M(x, y)\{P(x, y)dx + Y(x, y)dy\} = 0$ は、条件 $\partial MP/\partial y = \partial MQ/\partial x$ を満足し完全微分方程式になる場合がある。このような $M(x, y)$ を積分因数という。積分因数を見出すことは一般に容易でないが、 $M(x, y) = x^m y^n$ 、または M が x または y のみの関数の場合などには解くことができる。

クレローの微分方程式とラグランジュの微分方程式

クレロー (Clairaut) の微分方程式は

$$y = xp + \psi(p), \quad \left(p \equiv \frac{dy}{dx}\right) \quad (7.111)$$

のように書かれ非線形である。この式を x で微分すれば

$$p = p + x \frac{dp}{dx} + \psi'(p) \frac{dp}{dx}, \quad \frac{dp}{dx}(x + \psi'(p)) = 0$$

となる。第1の因子の $dp/dx = 0$ の解は $p = c$ 。これを式 (7.111) に入れれば一般解

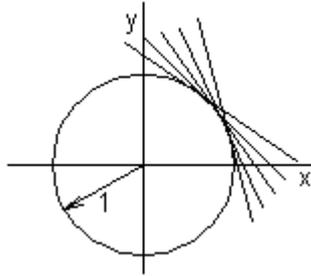
$$y = cx + \psi(c) \quad (7.112)$$

が得られる。これは1パラメータ直線族 (one-parameter family of lines) を表している。また第2の因子の $x + \psi'(p) = 0$ と式 (7.111) から p を消去すれば特異解 (singular solution) が得られる。これは直線族の包絡線を表している⁹。

⁸パラメータ c の値を変えれば1パラメータ族の曲線を発生させることができる。 $\phi_x dx + \phi_y dy = 0$ は幾何学的に解釈すれば1つの曲線に沿うベクトル (dx, dy) とこの曲線の勾配 $\text{grad}\phi = (\phi_x, \phi_y)$ が直交し、これらのベクトルのスカラー積が0になることを示している。

⁹包絡線 (envelope): xy 空間における1パラメータ族の曲線 $F(x, y, \alpha) = 0$ が包絡線を持つときに、包絡線の式 $y = y(x)$ は曲線族の式とその α に関する微分 $F_\alpha(x, y, \alpha) = 0$ から α を消去することによって導かれる。曲線の式 $F = 0$ のパラメータ α を動かせば曲線は一般にシフトするから、 α は曲線を横断する曲線の外の座標になる。しかし包絡線のところでは曲線は重なり合い α を動かしても F は動かないので $F_\alpha = 0$ になる。例 x 軸上に中心を持つ半径1の1パラメータ族の円は $(x - \alpha)^2 + y^2 - 1 = 0$ で表される。この式を α で微分すれば $\alpha = x$ が得られ、これを円の式に代入すれば包絡線の式 $y = \pm 1$ が導かれる。

例 Clairaut の微分方程式 $y = xp + (1+p^2)^{1/2}$, $p = dy/dx$ の解を図示せよ .
 一般解は $y = cx + (1+c^2)^{1/2}$ で直線族, 特異解は $x^2 + y^2 = 1$ で半径 1 の円になる .



ラグランジュ (Lagrange) の微分方程式は Clairaut の微分方程式を一般化したもので

$$y = x\phi(p) + \psi(p), \quad \left(p \equiv \frac{dy}{dx} \right) \tag{7.113}$$

のように書かれる . この式を x で微分すれば

$$p = \phi + xg\phi'(p)\frac{dp}{dx} + \psi'(p)\frac{dp}{dx}, \quad (\phi(p) - p) \left[\frac{dx}{dp} + \frac{\phi'(p)}{\phi(p) - p}x + \frac{\psi'(p)}{\phi(p) - p} \right] = 0$$

第 2 因子の微分方程式は $x(p)$ の 1 階線形微分方程式で, その解 $F(x, p, c) = 0$ と式 (7.113) から p を消去すれば一般解が得られる . また第 1 因子 $\phi(p) - p = 0$ の根 p_0 を式 (7.113) に用いれば直線の式 $y = xp_0 + \psi(p_0)$ が得られる . この解は特異解になることもある .

2. 線形常微分方程式

線形常微分方程式 (linear ordinary differential equation) は一般に

$$L(u) = r(x) \tag{7.114}$$

のように書かれる . L は線形演算子で

$$L \equiv a_0(x) + a_1(x)D + \dots + a_{n-1}(x)D^{n-1} + D^n$$

ただし $D = d/dx$, また係数 a_0, a_1, \dots, a_{n-1} と右辺 r は区間 $a < x < b$ で x の一価連続関数とする . (a, b) 内の点 x_0 に与えられた関数値とその微分値 $u_0, u'_0, u''_0, \dots, u_0^{(n-1)}$ を持つ連続な解 $u(x)$ はただ一つ存在し, その $n-1$ 階までの導関数も連続になる . これはコーシー・カヴァレフスキー (Cauchy-Kowalewski) の存在定理として知られるものである . 式 (7.114) の初期値問題では, x は例えば時間を表し, $x = 0$ における必要十分な初期値はこの定理から決まる . なお式 (7.114) の境界値問題では, n 個の境界値が 2 つの境界点に分けて与えられる . ただしこれらの境界値は関数値または $(n-1)$ 階までの微分値からなる . 例えば 2 階の方程式では 2 つの境界点に u の値, あるいは 1 つの境界点に u 他の境界点に u' の値が与えられる . 4 階の方程式では 2 つの境界点にそれぞれ u と u' の値, また例えば 1 つの境界点に u と u' の値 他の境界点に u'' と u''' の値が与えられる .

式 (7.114) の同次線形常微分方程式 (homogeneous linear ode)

$$L(u) = 0 \tag{7.115}$$

において n 個の 1 次独立の解 $u_1(x), u_2(x), \dots, u_n(x)$ が既知のときに, n 個の任意定数 c_1, c_2, \dots, c_n を含む解

$$u(x) = c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + \dots + c_n u_n(x)$$

は式 (7.115) の一般解 (general solution) と呼ばれる. 初期値問題ではこれらの定数は与えられた初期値 $u_0, u'_0, \dots, u_0^{(n-1)}$ を満足するように, すなわち

$$u(x_0) = u_0, \quad u'(x_0) = u'_0, \quad \dots, \quad u^{(n-1)}(x_0) = u_0^{(n-1)} \quad (7.116)$$

になるように決定される. 式 (7.114) の 1 つの解 $u_p(x)$ が知れば,

$$u(x) = u_p(x) + c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + \dots + c_n u_n(x) \equiv u_p(x) + u_c(x)$$

は式 (7.114) の一般解になる. $u_p(x)$ は任意定数を含まないもので, また

$$u_p(x_0) = u'_p(x_0) = \dots = u_p^{(n-1)}(x_0) = 0$$

になるものを選べば, この一般解 $u(x)$ は初期条件, 式 (7.116) を満足する解になる. $u_c(x)$ は微分方程式 (7.114) の余関数 (complementary function), $u_p(x)$ は特解 (particular integral) と呼ばれる.

行列式

$$\Delta(u_1, u_2, \dots, u_n) \equiv \begin{vmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_n \\ u'_1 & u'_2 & \dots & u'_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1^{(n-1)} & u_2^{(n-1)} & \dots & u_n^{(n-1)} \end{vmatrix} \quad (7.117)$$

は関数 $u_1(x), u_2(x), \dots, u_n(x)$ のロンスキー行列式 (Wronskian) といわれる. この行列式が恒等的に 0 になることは u_1, u_2, \dots, u_n が 1 次従属であるための必要条件, また 0 にならないことは 1 次独立になるための十分条件である. n 階の同次微分方程式 $L(u) = 0$ の 1 次独立の n 個の解の集合は基本系 (system of fundamental solutions) をなすといわれる. 与えられた n 個の解の集合が基本系を作るための条件はこれらの解のロンスキー行列式が 0 でないことである.

階数低減法

ダランベール (D'Alembert) の階数低減法は, n 階の同次微分方程式 (7.115) において, その 1 つの解 u_1 が既知のときに, 残りの解を $n-1$ 階の微分方程式から求めるものである. この階数低減方程式は式 (7.115) に $u = u_1 w(x)$ を代入することによって得られる. まず $u_1 w$ を x に関し微分すれば

$$\begin{aligned} u &= u_1 w && \times a_0 \\ Du &= u'_1 w + u_1 w' && \times a_1 \\ D^2 u &= u''_1 w + 2u'_1 w' + u_1 w'' && \times a_2 \\ &\dots && \dots \\ D^n u &= u_1^{(n)} w + \binom{n}{1} u_1^{(n-1)} w' + \dots + \binom{n}{n-1} u'_1 w^{(n-1)} + u_1 w^{(n)} && \times 1 \end{aligned}$$

次にこれらの式を式 (7.115) に代入すれば, すなわち各式にそれぞれ係数 $a_0, a_1, \dots, 1$ を乗じ加えれば

$$\begin{aligned} & (a_0 u_1 + a_1 u_1' + \dots + a_{n-1} u_1^{(n-1)} + u_1^{(n)}) w + \\ & a_1 u_1 w' + a_2 (2u_1' w' + u_1 w'') + \dots + \binom{n}{1} u_1^{(n-1)} w' + \dots + \binom{n}{n-1} u_1' w^{(n-1)} + u_1 w^{(n)} = 0 \end{aligned} \quad (7.118)$$

この式の 1 行目は u_1 が式 (7.115) の解であるから 0 になり, この式は w' の $n-1$ 階の微分方程式になる.
2 階微分方程式

$$w'' + p(x)w' + q(x)w = 0 \quad (7.119)$$

の場合には, 階数低減方程式は

$$u_1 w'' + (2u_1' + p u_1) w' = 0 \quad (7.120)$$

となり, $w'(x)$ の 1 階の微分方程式になる. その解は, $u' + pu = 0$ の解が $u = c \exp(-\int p dx)$ であるから,

$$w' = c \exp\left\{-\int \left(2\frac{u_1'}{u_1} + p\right) dx\right\} = c u_1^{-2} e^{-\int p dx}$$

したがって式 (7.119) の一般解は次のようになる.

$$w = c_1 u_1 + c_2 u_1 \int \left(u_1^{-2} e^{-\int p dx}\right) dx$$

この考えを一般化すれば, n 階同次微分方程式 (7.115) において, m 個の独立な解 u_1, u_2, \dots, u_m が既知のときに残りの解は $n-m$ 階の微分方程式から求められることになる. いま 2 階微分方程式 (7.119) において, $v_1 = u_1, v_2 = (d/dx)(u_2/v_1)$ と置けば, 階数低減方程式 (7.120) は

$$(v_1'' + p v_1' + q v_1) \int v_2 dx + v_1 v_2' + (2v_1' + p v_1) v_2 = v_1 v_2' + (2v_1' + p v_1) v_2 = 0$$

のように v_2 の 1 階微分方程式なる. 基本解 u_2 は v_2 を積分することによって得られる. n 階微分方程式 (7.115) においては,

$$v_1 = u_1, \quad v_2 = \frac{d}{dx} \frac{u_2}{v_1}, \quad v_3 = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{v_2} \frac{d}{dx} \frac{u_3}{v_1} \right), \quad \dots \quad v = \frac{d}{dx} \frac{d}{v_m dx} \dots \frac{d}{v_2 dx} \frac{u}{v_1}$$

のように置けば $v(x)$ の $n-m$ 階の微分方程式が得られる. この階数低減方程式の解 v_{m+1}, \dots, v_n を m 回積分すれば元の微分方程式 (7.115) の基本解 u_{m+1}, \dots, u_n が得られる.

定数変化法

式 (7.114) の特解は基本系 $u_1(x), u_2(x), \dots, u_n(x)$ が既知のときに定数変化法 (method of variation of parameters) によって求めることができる. この方法では特解 $u(x)$ が基本系の 1 次結合

$$u = v_1 u_1 + v_2 u_2 + \dots + v_n u_n \quad (7.121a)$$

の形に置かれる．ここに v_1, v_2, \dots, v_n は x の未定関数で，式 (7.114) を満足するように決定される．そのためには，まず n 個の式

$$\begin{aligned}
 v'_1 u_1 + v'_2 u_2 + \dots + v'_n u_n &= 0 \\
 v'_1 u'_1 + v'_2 u'_2 + \dots + v'_n u'_n &= 0 \\
 &\dots\dots\dots \\
 v'_1 u_1^{(n-2)} + v'_2 u_2^{(n-2)} + \dots + v'_n u_n^{(n-2)} &= 0 \\
 v'_1 u_1^{(n-1)} + v'_2 u_2^{(n-1)} + \dots + v'_n u_n^{(n-1)} &= r
 \end{aligned}
 \tag{7.121b}$$

から v'_1, v'_2, \dots, v'_n を求め，次にこれらを x に関し積分する．

次に何ゆえこのようにして式 (7.114) の特解が得られるのかを簡単に説明する．式 (7.121a) を x に関し次々に微分すれば下式が得られる．これらの式の右辺の後半の部分は，微分を重ねても項数が増えないように，式 (7.121b) に示すように 0 と置かれる．

$$\begin{aligned}
 u &= v_1 u_1 + \dots + v_n u_n && \times a_0 \\
 u' &= v_1 u'_1 + \dots + v_n u'_n + v'_1 u_1 + \dots + v'_n u_n && \times a_1 \\
 u'' &= v_1 u''_1 + \dots + v_n u''_n + v'_1 u'_1 + \dots + v'_n u'_n && \times a_2 \\
 &\dots\dots\dots \\
 u^{(n-1)} &= v_1 u_1^{(n-1)} + \dots + v_n u_n^{(n-1)} + v'_1 u_1^{(n-2)} + \dots + v'_n u_n^{(n-2)} && \times a_{n-1} \\
 u^{(n)} &= v_1 u_1^{(n)} + \dots + v_n u_n^{(n)} + v'_1 u_1^{(n-1)} + \dots + v'_n u_n^{(n-1)} && \times 1
 \end{aligned}$$

次にこれらの式を式 (7.114) に代入すれば，すなわち各式に係数 $a_0, a_1, \dots, a_{n-1}, 1$ を乗じ加えれば次式が得られる．

$$v_1 L(u_1) + \dots + v_n L(u_n) + v'_1 u_1^{(n-1)} + \dots + v'_n u_n^{(n-1)} = r$$

この式の左辺前半の部分は u_1, \dots, u_n が基本系をなすので 0 になり，式 (7.121b) の最後の式が得られる．

式 (7.121b) から v'_i を Cramer 公式で求め，これを x で積分すれば

$$v_i(x) = \int^x \frac{\Delta_i(\xi)r(\xi)}{\Delta(\xi)} d\xi$$

ただし

$$\Delta(x) = \begin{vmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_n \\ u'_1 & u'_2 & \dots & u'_n \\ \dots\dots\dots \\ u_1^{(n-1)} & u_2^{(n-1)} & \dots & u_n^{(n-1)} \end{vmatrix},$$

$$\Delta_i(x) = \begin{vmatrix} u_1 & \dots & u_{i-1} & 0 & u_{i+1} & \dots & u_n \\ u'_1 & \dots & u'_{i-1} & 0 & u'_{i+1} & \dots & u'_n \\ \dots\dots\dots \\ u_1^{(n-2)} & \dots & u_{i-1}^{(n-2)} & 0 & u_{i+1}^{(n-2)} & \dots & u_n^{(n-2)} \\ u_1^{(n-1)} & \dots & u_{i-1}^{(n-1)} & 1 & u_{i+1}^{(n-1)} & \dots & u_n^{(n-1)} \end{vmatrix}$$

これより求める特解 $u(x)$ は次のようになる．

$$u(x) = \sum_{i=1}^n u_i(x) \int^x \frac{\Delta_i(\xi)r(\xi)}{\Delta(\xi)} d\xi = \int^x \frac{\bar{\Delta}_i(x, \xi)r(\xi)}{\Delta(\xi)} d\xi \tag{7.122}$$

ただし

$$\bar{\Delta}(x, \xi) = \sum_{i=1}^n u_i(x) \Delta_i(\xi) = \begin{vmatrix} u_1(\xi) & u_2(\xi) & \cdots & u_n(\xi) \\ u_1'(\xi) & u_2'(\xi) & \cdots & u_n'(\xi) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ u_1^{(n-2)}(\xi) & u_2^{(n-2)}(\xi) & \cdots & u_n^{(n-2)}(\xi) \\ u_1(x) & u_2(x) & \cdots & u_n(x) \end{vmatrix}$$

特に 2 階微分方程式の場合には

$$v_1 = - \int \frac{u_2(\xi)}{\Delta(\xi)} r(\xi) d\xi, \quad v_2 = \int \frac{u_1(\xi)}{\Delta(\xi)} r(\xi) d\xi$$

ただし $\Delta(\xi)$ は基本解 u_1, u_2 のロンスキー行列式である .

可換線形演算子

2 階微分方程式 (7.119) の演算子 L が因数に分解できるものとする .

$$(D + \alpha_2)(D + \alpha_1)u = 0 \tag{7.123}$$

ただし α_1, α_2 は x の関数で ,

$$\alpha_1 + \alpha_2 = p, \quad \alpha_1 \alpha_2 + \alpha_1' = q$$

から決定される . $(D + \alpha_1)u = 0$ の一般解は与えられた方程式 (7.119) の解であるが , $(D + \alpha_2)u = 0$ の一般解は通常式 (7.119) を満足しない . しかし式 (7.123) の演算子が可換 すなわち

$$(D + \alpha_2)(D + \alpha_1) = (D + \alpha_1)(D + \alpha_2)$$

ならば , $(D + \alpha_2)u = 0$ の一般解も式 (7.119) の解になる . 式 (7.123) の演算子が可換であるための必要十分条件は次のようになる .

$$\alpha_2'(x) = \alpha_1'(x)$$

定係数を持つ線形常微分方程式—基本系

初めに同次微分方程式

$$F(D)u \equiv (a_0 + a_1 D + \cdots + a_{n-1} D^{n-1} + D^n)u = 0 \tag{7.124}$$

について考える . $D = d/dx$, a_0, a_1, \dots, a_{n-1} はここでは定数である . この方程式に関する λ の n 次代数方程式

$$F(\lambda) \equiv a_0 + a_1 \lambda + \cdots + a_{n-1} \lambda^{n-1} + \lambda^n = 0 \tag{7.125}$$

は特性方程式 (characteristic equation) といわれる .

特性方程式が異なる実根 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ を持つ場合には, 式 (7.124) の演算子は次のように因数に分解することができる.

$$F(D) = (D - \alpha_1)(D - \alpha_2) \cdots (D - \alpha_n)$$

因数 $D - \alpha_i$, ($i = 1, \dots, n$) は可換であるから, $(D - \alpha_i)u = 0$ の解 $c_i \exp \alpha_i x$ はすべて式 (7.124) の解でもある. したがって式 (7.124) の一般解は, その特性方程式が異なる実根を持つ場合には次のようになる.

$$u = c_1 e^{\alpha_1 x} + c_2 e^{\alpha_2 x} + \cdots + c_n e^{\alpha_n x} \quad (7.126)$$

なお $\exp \alpha_i x$, ($i = 1, \dots, n$) が基本系であることは, そのロンスキー行列式が 0 にならないことから明らかである.

特性方程式 (7.125) が共役複素根 $\alpha_{r,s} = \alpha \pm i\beta$ を持つ場合には, 式 (7.124) の一般解のこの共役複素根に対応する部分は次のように書くこともできる. $i = \sqrt{-1}$

$$c_r e^{\alpha_r x} + c_s e^{\alpha_s x} = e^{\alpha x} (c_1 \cos \beta x + c_2 \sin \beta x) = c_0 e^{\alpha x} \cos(\beta x - \epsilon) \quad (7.127)$$

ただし $c_0 = (c_1^2 + c_2^2)^{1/2}$, $\epsilon = \tan^{-1}(c_2/c_1)$.

式 (7.125) が p 重根 α_1 を持つ場合には, 重複因数の方程式 $(D - \alpha_1)^p u = 0$ の一般解を求めなければならない. この方程式の 1 つの解は $u = ce^{\alpha_1 x}$ である. この方程式の一般解は, 未定関数 $v(x)$ を用い $u = ve^{\alpha_1 x}$ のように置き, これを重複因数方程式に代入することによって求められる¹⁰.

$$(D - \alpha_1)^p e^{\alpha_1 x} v = (D - \alpha_1)^{p-1} e^{\alpha_1 x} Dv = \cdots = e^{\alpha_1 x} D^p v = 0$$

これより未定関数 v は x の $p-1$ 次多項式になり, 重複因数方程式の一般解は次のようになる.

$$u = (c_0 + c_1 x + \cdots + c_{p-1} x^{p-1}) e^{\alpha_1 x} \quad (7.128)$$

この解は次の方法で求めることもできる. 微分方程式の係数 a_0, a_1, \dots, a_{n-1} のいくつかを動かせば一般に解 $u(x, \alpha_\nu)$ の α_ν も動くことになる. いま特性方程式が重根を持ち $\alpha_1 = \alpha_2$ とする. このときに微分方程式の係数をこくわずに動かせば, 一般に α_1 と α_2 は元の値からこくわずに動くと同時に異なる値をとることになる. このことから重根を持つ場合には 1 つの解は $u(x, \alpha_1)$, 残りの解は, 解の 1 次結合も解であるから, $\lim_{\Delta\alpha \rightarrow 0} (u(x, \alpha_2) - u(x, \alpha_1)) / \Delta\alpha = (\partial u(x, \alpha) / \partial \alpha)_{\alpha=\alpha_1}$ から求めることができる. ただし $\Delta\alpha = \alpha_2 - \alpha_1$ である. p 重根の場合には係数を動かすことにより p 重解 $u(x, \alpha_1)$ は一般に p 個のものに分かれるから, 上と同様にしてこの場合に不足する $p-1$ 個の解は次式から求められる.

$$\left[\frac{\partial u(x, \alpha)}{\partial \alpha} \right]_{\alpha=\alpha_1}, \dots, \left[\frac{\partial^{p-1} u(x, \alpha)}{\partial \alpha^{p-1}} \right]_{\alpha=\alpha_1}$$

この手法を上記の 1 つの解が $e^{\alpha_1 x}$ の場合に適用すれば

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha} e^{\alpha x} \right|_{\alpha=\alpha_1} = x e^{\alpha_1 x}, \dots, \left. \frac{\partial^{p-1}}{\partial \alpha^{p-1}} e^{\alpha x} \right|_{\alpha=\alpha_1} = x^{p-1} e^{\alpha_1 x}$$

となる¹¹. なおこの手法は定係数の方程式に限らず適用できる.

¹⁰これは定数変化法の考え方と同じである.

$$(D - \alpha) v e^{\alpha x} = v \alpha e^{\alpha x} + e^{\alpha x} Dv - \alpha v e^{\alpha x} = e^{\alpha x} Dv$$

¹¹ここに述べたことを例をあげて説明すれば, 常微分方程式 $u'' - 2u' + u = 0$ の場合には, 特性方程式は重根 1 を持ち, 1 つの解は e^x になる. またこれに近い方程式 $u'' - 2u' + 99u = 0$ の解は $e^{1.1x}$ と e^{-9x} になる. これら 2 つの解の 1 次結合 $(e^{1.1x} - e^{-9x}) / .2 = e^x (\sinh .1x) / .1$ は $x e^x$ に近いもので, 係数 .99 を 1 に近づければこの解の 1 次結合は $x e^x$ に限りなく近づく.

定係数を持つ線形常微分方程式—特解

非同次微分方程式

$$F(D)u = f(x) \quad (7.129)$$

の余関数が知られているときに特解は定数変化法によって求めることができる。定数変化法については既に述べたのでここには一つの例をあげるにとどめる。

例 $u^{(4)} + 4u = f(x)$ の一般解を求めよ。

特性方程式 $\lambda^4 + 4 = 0$ の根は $\lambda = \pm 1 \pm i$ 。したがって基本系は $u = e^{\pm x} \cos x, e^{\pm x} \sin x$ となる。特解はロンスキー行列式 $\Delta(x) = 32$ 定数になり、 $\overline{\Delta}(x, \xi) = 8\{-\sinh(x-\xi) \cos(x-\xi) + \cosh(x-\xi) \sin(x-\xi)\}$ 。一般解は

$$u(x) = (c_1 e^x + c_2 e^{-x}) \cos x + (c_3 e^x + c_4 e^{-x}) \sin x \\ + \frac{1}{4} \int_0^x \{-\sinh(x-\xi) \cos(x-\xi) + \cosh(x-\xi) \sin(x-\xi)\} f(\xi) d\xi$$

$f(x)$ が特別の形をしている場合には、特解は記号法によって簡単に求めることができる。 D の逆演算子、不定積分を D^{-1} で表す。 D^{-1} は任意定数 c を含むがこれは余関数に含まれるので特解には含めない。同様に $D^p, D-\alpha, (D-\alpha)^p, F(D)$ の逆演算子をそれぞれ $D^{-p}, (D-\alpha)^{-1}, (D-\alpha)^{-p}, F^{-1}(D)$ のように表す。またこの場合の任意要素 $c_0 + c_1 x + \dots + c_{p-1} x^{p-1}, ce^{\alpha x}, e^{\alpha x}(c_0 + c_1 x + \dots + c_{p-1} x^{p-1})$ も既に余関数として勘定されているので特解には含めない。

(a) $f(x) = e^{kx}, k$: 定数

$(D-\alpha)e^{kx} = (k-\alpha)e^{kx}$ であるから、 $(D-\alpha)^{-1}e^{kx} = (k-\alpha)^{-1}e^{kx}$ となる¹²。同様にして $(D-\alpha_1)^{-1} \dots (D-\alpha_p)^{-1}e^{kx} = (k-\alpha_1)^{-1} \dots (k-\alpha_p)^{-1}e^{kx}$, $(D-\alpha)^{-p}e^{kx} = (k-\alpha)^{-p}e^{kx}$ 。

したがって $F(k) \neq 0$ の場合には、特解は

$$u = F^{-1}(D)e^{kx} = \frac{1}{F(k)}e^{kx}$$

となる。この式で k を純虚数と考えれば $f(x) = \cos \beta x, \sin \beta x$ の特解、また k を複素数と考えれば $f(x) = e^{\alpha x} \cos \beta x, e^{\alpha x} \sin \beta x$ の特解を求めることができる。

次に $F(k) = 0$ の場合には、 k が単根ならば $F'(k) \neq 0, k$ が m 重根ならば $F(k) = F'(k) = \dots = F^{(m-1)}(k) = 0, F^{(m)}(k) \neq 0$ である。 $F(D)e^{kx} = e^{kx} F(k)$ の両辺を k に関して m 階微分すれば

$$F(D)x^m e^{kx} = e^{kx} \left(x^m F(k) + \binom{m}{1} x^{m-1} F'(k) + \dots + F^{(m)}(k) \right) = e^{kx} F^{(m)}(k)$$

したがってこの場合の特解は

$$u = F^{-1}(D)e^{kx} = \frac{x^m e^{kx}}{F^{(m)}(k)}$$

例 $u'' + 2au' + b^2u = A \sin \omega t, (a^2 < b^2)$ の一般解 $u(t)$ を求めよ。

余関数は

$$u_c(t) = e^{-at} (c_1 e^{i\omega_0 t} + c_2 e^{-i\omega_0 t}) = ce^{-at} \cos(\omega_0 t - \epsilon)$$

¹²まず $(D-\alpha)^{-1}$ を左から演算すれば $e^{kx} = (k-\alpha)(D-\alpha)^{-1}e^{kx}$, 次に定数 $(k-\alpha)$ で割算する。

ただし $\omega_0 = \sqrt{b^2 - a^2}$. また特解は¹³

$$\begin{aligned} u_p(t) &= \frac{A \sin \omega t}{D^2 + 2aD + b^2} = \Im \left[\frac{Ae^{i\omega t}}{D^2 + 2aD + b^2} \right] = \Im \left[\frac{Ae^{i\omega t}}{(i\omega)^2 + 2ai\omega + b^2} \right] \\ &= A \frac{(b^2 - \omega^2) \sin \omega t - 2a\omega \cos \omega t}{(b^2 - \omega^2)^2 + (2a\omega)^2} = A((b^2 - \omega^2)^2 + (2a\omega)^2)^{-1/2} \sin(\omega t - \theta) \end{aligned}$$

ただし $\theta = \tan^{-1}(2a\omega/(b^2 - \omega^2))$.

(b) $f(x) = e^{kx}\phi(x)$

$(D - \alpha)(e^{kx}\phi) = e^{kx}(D + k - \alpha)\phi$ であるから, $(D - \alpha)^{-1}e^{kx}\phi(x) = e^{kx}(D + k - \alpha)^{-1}\phi(x)$ となる¹⁴ . 同様に $(D - \alpha_1)^{-1} \cdots (D - \alpha_p)^{-1}e^{kx}\phi(x) = e^{kx}(D + k - \alpha_1)^{-1} \cdots (D + k - \alpha_p)^{-1}\phi(x)$. この場合に特解は

$$u = F^{-1}(D)e^{kx}\phi(x) = e^{kx}F^{-1}(D + k)\phi(x)$$

から求められる .

(c) $f(x) = x^n$

この場合の特解は, $F^{-1}(\xi)$ の $n+1$ 項までの展開を $b_0 + b_1\xi + \cdots + b_n\xi^n$ とすれば

$$u = F^{-1}(D)x^n = (b_0 + b_1D + \cdots + b_nD^n)x^n$$

から求められる .

例 $(D^4 - 2D^3 + D^2)u = x^2 - 1$ の一般解 $u(x)$ を求めよ .

余関数は $u_c(x) = c_1 + c_2x + (c_3 + c_4x)e^x$, 特解は

$$\begin{aligned} u_p(x) &= \frac{1}{D^2(1-D)^2}(x^2 - 1) = D^{-2}(1 + 2D + 3D^2 + 4D^3 + \cdots)(x^2 - 1) \\ &= \iint (x^2 + 4x + 5)dx^2 = \frac{1}{12}x^2(x^2 + 8x + 30) \end{aligned}$$

(d) 求積法による特解の決定

$F(D)$ が重複因数を持たないものとし部分分数に分解する .

$$F^{-1}(D) = \sum_{r=1}^n \frac{\alpha_r}{D - \alpha_r}$$

したがって特解は不定積分を行うこと, すなわち求積法 (quadrature) によって求めることができる .

$$u = \sum_{r=1}^n \frac{\alpha_r}{D - \alpha_r} f(x) = \sum \alpha_r e^{\alpha_r x} D^{-1} e^{-\alpha_r x} f(x) = \sum \alpha_r \int e^{\alpha_r(x-t)} f(t) dt$$

この積分の下限は任意で良い . それは下限の差による部分は余関数に含まれるからである .

¹³ \Re は以下の式の実部, \Im は虚部を取る記号である .

¹⁴この式は元の式を参考に, $e^{kx}\phi = e^{kx}(D + k - \alpha)(D + k - \alpha)^{-1}\phi = (D - \alpha)e^{kx}(D + k - \alpha)^{-1}\phi$, この式の左から $(D - \alpha)^{-1}$ を演算すれば導出できる .

$F(D)$ が因数 $(D-\alpha)^p$ を含む場合にはその部分の部分分数は

$$\sum_{r=1}^p \frac{\beta_r}{(D-\alpha_r)^r}$$

となり, その特解への寄与分は

$$\sum_{r=1}^p \frac{\beta_r}{(D-\alpha_r)^r} f(x) = \sum \beta_r e^{\alpha x} D^{-r} e^{-\alpha x} f(x) = \sum \beta_r \int \int^x \dots \int^t e^{\alpha(x-t)} f(t) dt^r$$

例 $u'' + 3u' + 2u = \log x, (x > 0)$ の一般解 $u(x)$ を求めよ.

余関数は $u_c(x) = c_1 e^{-x} + c_2 e^{-2x}$, また特解は次のようになる.

$$u_p(x) = (D^2 + 3D + 2)^{-1} \log x = \left(\frac{1}{D+1} - \frac{1}{D+2} \right) \log x$$

$$\frac{1}{D+\alpha} \log x = e^{-\alpha x} \int_1^x e^{\alpha t} \log t dt = \frac{e^{-\alpha x}}{\alpha} \left(e^{\alpha x} \log x - \int_1^x \frac{e^{\alpha t}}{t} dt \right)$$

この定積分は積分指数関数と呼ばれるもので初等関数で表すことはできない. その値は数値積分によって容易に求められる.

オイラーの線形常微分方程式

オイラーの方程式は

$$(a_0 + a_1 x D + \dots + a_{n-1} x^{n-1} D^{n-1} + x^n D^n) u = f(x) \tag{7.130}$$

のように書かれる. a_0, a_1, \dots, a_{n-1} は定数である. 式 (7.130) の独立変数 x を $x = e^z$ のように置き 独立変数 z の方程式に書換える.

$$xD = \frac{1}{x} \frac{d}{dx} = \frac{d}{d \ln x} = \frac{d}{dz} = \tilde{D}$$

$$x^2 D^2 = x^2 \frac{d^2}{dx^2} = x \frac{d}{dx} \left(x \frac{d}{dx} \right) - x \frac{d}{dx} = \frac{d^2}{dz^2} - \frac{d}{dz} = \tilde{D}(\tilde{D}-1)$$

.....

$$x^n D^n = \tilde{D}(\tilde{D}-1) \dots (\tilde{D}-n+1)$$

式 (7.130) は, これらの関係を用いれば 次の定係数を持つ線形微分方程式になる.

$$F(\tilde{D})u \equiv (a'_0 + a'_1 \tilde{D} + \dots + a'_{n-1} \tilde{D}^{n-1} + \tilde{D}^n) u = f(e^z)$$

微分方程式

$$(a_0 + a_1(px+q)D + \dots + a_{n-1}(px+q)^{n-1}D^{n-1} + (px+q)^n D^n) u = f(x)$$

ただし p, q は定数, も $(px+q) = e^z$ と置けば 上と同様にして定係数を持つ微分方程式に変換できる.

例 球座標のラプラス方程式

$$\frac{\partial}{\partial r}(r^2 u_r) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\sin \theta u_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} u_{\phi\phi} = 0$$

の基本系を求めよ。

ここではこの問題を変数分離法で解く。解を $u = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ と置き、上式に代入すれば

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 R') + \frac{1}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \mu} ((1 - \mu^2) \Theta') + \frac{1}{1 - \mu^2} \frac{\Phi''}{\Phi} = 0$$

ただし $\mu = \cos \theta$, $\Theta' = \partial \Theta(\mu) / \partial \mu$ である。ここで

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 R') = n(n+1) = -\frac{1}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \mu} ((1 - \mu^2) \Theta') - \frac{1}{1 - \mu^2} \frac{\Phi''}{\Phi}$$

と置けば

$$r^2 R'' + 2rR' - n(n+1)R = 0$$

これはオイラーの方程式で, $r = e^z$, $D = d/dz$ と置けば, $(D^2 + D - n(n+1))R = 0$, $\lambda^2 + \lambda - n(n+1) = (\lambda + n + 1)(\lambda - n) = 0$, $\lambda = n, -n - 1$, この方程式の解は $R(r) = r^n, r^{-n-1}$ となる。

次に

$$-(1 - \mu^2) \left\{ \frac{1}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \mu} ((1 - \mu^2) \Theta') + n(n+1) \right\} = -m^2 = \frac{\Phi''}{\Phi}$$

と置けば

$$(1 - \mu^2) \Theta'' - 2\mu \Theta' + \left\{ n(n+1) - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right\} \Theta = 0$$

$$\Phi'' + m^2 \Phi = 0$$

上の式は Legendre の陪微分方程式として知られるものでその解は Legendre の陪関数 $\Theta(\mu) = P_n^m(\mu), Q_n^m(\mu)$ で与えられる。また下の式の解は $\Phi(\phi) = \cos m\phi, \sin m\phi$ となる。

このような解法の研究は 20 世紀初頭に盛んに行われ, それらの成果は例えば H. Bateman, Partial Differential Equations of Mathematical Physics, 1932, Cambridge University Press. などに詳しい。筆者はコンピュータの普及した現時点においてこのような解法を学ぶことは不要と考えるものである。かつての理論的研究は解ける問題を探して解くものであったが, 今は解かなければならない問題をコンピュータを利用して解かなければならない。