

連続系アルゴリズムレポート課題6

• 宿題(レポート)

- 提出状況に応じて、期末試験の点に最大 50 点を加算します
 - まったく提出しなくても、期末試験の点で成績が出ます
 - ただし、試験を受けなければ単位は出ません
- プログラムだけはメールの添付ファイルで reiji@is.s.u-tokyo.ac.jp に送付してください
 - 所属学科、学年、学籍番号、氏名をメール本文に明記すること
 - メール の 題名 (Subject) は「連続系レポート課題第6回 提出者氏名」とすること
- 手計算をするものや、計算結果と考察など、プログラム以外は A4 の紙(裏もつかってよい)にまとめてください
 - 所属学科、学年、学籍番号、氏名をレポートの最初に明記すること
 - 次回の講義の前に集めます
 - あるいは PDF で A4 サイズでもよい(プログラムと一緒にメールで送付してください)

• 問題1

- 前進 Euler 法の絶対安定領域を求めよ

• 問題2

- 万有引力を及ぼしあう2つの質点の運動を、適当な Runge-Kutta 法で解け
 - 実質的に2次元(以上)で、衝突しないこと
- 1. 刻み幅を半分にしたときに、どれだけ解に差が出るかを観察せよ
- 2. 2つの質点が最も近づくときの質点間の距離が非常に短くなるような初期値を設定して、1と同様の観察をせよ
- 3. 余力があれば、2の問題に対して、刻み幅制御を実装して、結果を見よ

有名な Runge-Kutta 法

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Euler 法: 1 段 1 次陽的 RK 法

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

後退 Euler 法
1 段 1 次
陰的 RK 法

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array}$$

中点則
1 段 2 次
陰的 RK 法

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & \\ \hline \frac{1}{2\beta} & \frac{1}{2\beta} & 0 \\ & 1-\beta & \beta \end{array}$$

2 段 2 次の陽的 RK 法
修正 (modified) Euler 法: $\beta=1$
改良 (improved) Euler 法: $\beta=1/2$

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & & & \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \end{array}$$

4 段 4 次陽的 RK 法
「古典的」RK 法

補足: 常微分方程式の数値解法には、RK 法のほかに、線形多段階法 (Adams 法) や BDF 法がある。これらは RK 法より 1 ステップあたりの計算量が少ない。

2 段 2 次陽的 Runge-Kutta 法

☞ 右の形に限られる, つまり

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & \\ \alpha & \alpha & 0 \\ \hline & 1-\beta & \beta \end{array}$$

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + \alpha h, y_n + \alpha h k_1) = f(x_n + \alpha h, y_n + \alpha h f(x_n, y_n))$$

$$y_{n+1} = y_n + h[(1-\beta)k_1 + \beta k_2] = y_n + h[(1-\beta)f(x_n, y_n) + \beta f(x_n + \alpha h, y_n + \alpha h f(x_n, y_n))]$$

☞ 微分を計算 $\frac{dy}{dx} = f \quad \frac{d^2y}{dx^2} = \frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx}$

☞ Taylor 展開は $y(x+h) = y(x) + hf + (h^2/2)(f_x + f_y f) + O(h^3)$

☞ 公式に代入 $y_{n+1} = y_n + h[(1-\beta)f(x_n, y_n) + \beta f(x_n + \alpha h, y_n + \alpha h f(x_n, y_n))]$
 $= y_n + h(1-\beta)f + h\beta[f + \alpha h f_x + \alpha h f_y f + O(h^2)]$
 $= y_n + hf + \alpha\beta h^2(f_x + f_y f) + O(h^3)$

☞ よって $\alpha\beta = 1/2$ つまり $\alpha = 1/(2\beta)$

23

Milne の工夫

☐ 線形多段階法の誤差はどう推定する?

☞ Milne の工夫 (Milne's device)

☐ 予測子・修正子法の誤差の主要項まで求めておく

☐ 予測子の誤差

$$T_P = \gamma_P h^p y^{(p)}(x_n) + O(h^{p+1})$$

☐ 修正子の誤差

$$T_C = \gamma_C h^p y^{(p)}(x_n) + O(h^{p+1})$$

☐ よって $T_C \approx \gamma_C \frac{T_P - T_C}{\gamma_P - \gamma_C}$

別解: E. Hairer, S. P. Nørsett, G. Wanner,
Solving Ordinary Differential Equations I
Nonstiff Problems, Springer, p.421-423.

24

刻み幅制御

- 刻み幅はどう決める？
 - 広すぎると誤差が大きくなる (p 次なら p 乗で効く)
 - 狭すぎると計算量が多くなる (何次でも定数倍)
 - よってやや狭く設定するのが安全だった
- 誤差を評価すれば、刻み幅を自動設定できる
 - 局所誤差 $\propto C h^{p+1}$, 目標誤差 e
 - 刻み h での推定誤差 T なら $C \propto T/h^{p+1}$
 - 目標誤差 e を得るには $e = C/H^{p+1}$ を解いて
 $H = (e/C)^{1/(p+1)} = h(e/T)^{1/(p+1)}$

5

刻み幅制御のやり方

- 刻み幅制御
 - ステップ幅 h で y_{n+1} を求め、局所誤差 T を推定する
 - 局所離散化誤差のオーダー $O(h^{p+1})$ は事前に解析しておく
 - 目標誤差レベルを e として、 $h' = \alpha h (e/T)^{1/(p+1)}$ とする
 - 目標誤差は事前に決めておく (相対誤差でも絶対誤差でも)
 - α は安全係数; さらに h'/h を上下から制限することも多い
 - $|T| > e$ なら、この計算は「失敗」で、 y_{n+1} は捨てる
 - ステップ幅 $h = h'$ として、このステップをやりなおし
 - $|T| \leq e$ なら、この計算は「成功」で、 y_{n+1} を採用
 - $h = h'$ として、次のステップへ

6

埋め込み型 Runge-Kutta 法

- RK 法において、誤差の推定はどうするか？
- Fehlberg による「埋め込み (embedded) 公式」
- Butcher 配列の同じ A を使い、異なる b によって次数の違う公式を「同時」に計算する

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad \hat{y}_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i k_i$$

- 2 つの近似解の差

$$T = \hat{y}_{n+1} - y_{n+1}$$

は、次数が低いほうの公式の誤差だと推定する

注: 刻み h の 1 ステップと $h/2$ の 2 ステップを比較する方法もある

7

埋め込み型 Runge-Kutta 法

Merson (1957) の 4 次「5 次」公式		Fehlberg (1969) の 4 次 5 次公式	
0	1/3	0	0
1/3	1/3	1/4	1/4
1/3	1/6	3/32	9/32
1/2	1/8	0	3/8
1	1/2	0	-3/2
4th	1/6	0	0
3rd	1/10	0	3/10
		2/3	1/6
		1/5	1/5
		1/2	1/2
		2/5	2/5
		1/6	1/6
		1/8	1/8
		1/10	1/10
		1/12	1/12
		1/16	1/16
		1/20	1/20
		1/24	1/24
		1/30	1/30
		1/36	1/36
		1/40	1/40
		1/48	1/48
		1/60	1/60
		1/72	1/72
		1/80	1/80
		1/90	1/90
		1/100	1/100
		1/120	1/120
		1/144	1/144
		1/160	1/160
		1/180	1/180
		1/200	1/200
		1/240	1/240
		1/288	1/288
		1/320	1/320
		1/360	1/360
		1/400	1/400
		1/450	1/450
		1/500	1/500
		1/540	1/540
		1/600	1/600
		1/640	1/640
		1/700	1/700
		1/720	1/720
		1/750	1/750
		1/800	1/800
		1/840	1/840
		1/900	1/900
		1/960	1/960
		1/1000	1/1000
		1/1080	1/1080
		1/1120	1/1120
		1/1200	1/1200
		1/1260	1/1260
		1/1320	1/1320
		1/1400	1/1400
		1/1440	1/1440
		1/1500	1/1500
		1/1560	1/1560
		1/1600	1/1600
		1/1680	1/1680
		1/1740	1/1740
		1/1800	1/1800
		1/1872	1/1872
		1/1920	1/1920
		1/2000	1/2000
		1/2070	1/2070
		1/2160	1/2160
		1/2240	1/2240
		1/2300	1/2300
		1/2376	1/2376
		1/2400	1/2400
		1/2480	1/2480
		1/2520	1/2520
		1/2600	1/2600
		1/2688	1/2688
		1/2700	1/2700
		1/2784	1/2784
		1/2800	1/2800
		1/2880	1/2880
		1/2960	1/2960
		1/3000	1/3000
		1/3072	1/3072
		1/3100	1/3100
		1/3168	1/3168
		1/3200	1/3200
		1/3276	1/3276
		1/3300	1/3300
		1/3376	1/3376
		1/3400	1/3400
		1/3474	1/3474
		1/3500	1/3500
		1/3564	1/3564
		1/3600	1/3600
		1/3672	1/3672
		1/3700	1/3700
		1/3774	1/3774
		1/3800	1/3800
		1/3876	1/3876
		1/3900	1/3900
		1/3972	1/3972
		1/4000	1/4000
		1/4074	1/4074
		1/4100	1/4100
		1/4176	1/4176
		1/4200	1/4200
		1/4274	1/4274
		1/4300	1/4300
		1/4374	1/4374
		1/4400	1/4400
		1/4474	1/4474
		1/4500	1/4500
		1/4574	1/4574
		1/4600	1/4600
		1/4674	1/4674
		1/4700	1/4700
		1/4774	1/4774
		1/4800	1/4800
		1/4874	1/4874
		1/4900	1/4900
		1/4974	1/4974
		1/5000	1/5000

Meron の公式の最後の列は線形な方程式に対しては 5 次だが、一般の方程式では 3 次

8

Runge-Kutta 法

■ 一般の Runge-Kutta 法

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i$$

$$k_i = f \left(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j \right)$$

□ 通常課される条件 $\sum_{i=1}^s b_i = 1, c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$

□ Butcher 配列 $\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$

1

Runge-Kutta 法の次数と適合性

■ 局所離散化誤差

$$T_{n+1} = \frac{1}{h} \left\{ y(x_{n+1}) - y(x_n) - h \sum_{i=1}^s b_i k_i \right\}$$

■ 次数: $T_{n+1} = O(h^p)$ のとき p 次

- 1 次以上で適合的: これは $\sum b_i = 1$ に等しい
- 次数の確認のためには k_i の h 幕での展開が必要
 - そのままやると非常に長い展開式になる
 - Butcher により Fréchet 導関数を用いた「基本微分の木」による簡潔な表現法が開発されている

2

硬い(stiffな)系

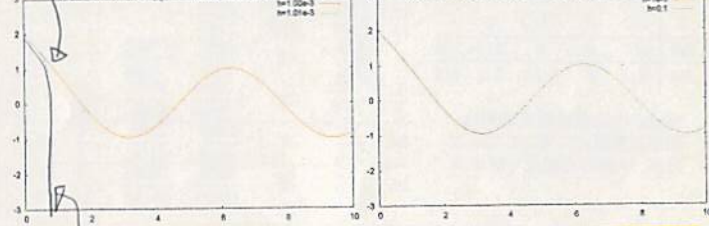
■ 連立常微分方程式

$$y' = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1998 & -1999 \end{pmatrix} y + \begin{pmatrix} -\cos x \\ 1999 \cos x - \sin x \end{pmatrix} \quad y(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$h = 1.00 \times 10^{-3}$

前進 Euler 法 ($h = 1.00e-3, 1.01e-3$)

後退 Euler 法 ($h = 1.00e-3, 1.00e-1$)



係数行列の固有値が -1 と -2000 , 解析解 $y = \begin{pmatrix} e^{-x} \\ \cos x + e^{-x} \end{pmatrix}$

3

$h = 1.01 \times 10^{-3}$

全々55!

Runge-Kutta 法の線形安定性解析

■ Runge-Kutta 法

$$y_{n+1} = y_n + h b^T k$$

$$k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h a_i^T k)$$



に $y' = \lambda y$ を代入すると

$$k = \lambda (y_n \mathbf{1} + h A k), \quad k = (I - \lambda h A)^{-1} \lambda y_n \mathbf{1}$$

$$y_{n+1} = y_n + h b^T k = (1 + h \lambda b^T (I - \lambda h A)^{-1} \mathbf{1}) y_n = R(h \lambda) y_n$$

- $|R(\bar{h})| < 1$ を満たす \bar{h} の範囲を絶対安定領域という

4

補足:線形多段階法

9

線形多段階法(1)

■ 陽的 Adams (Adams-Bashforth) 公式

- 微分方程式を積分して

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$

- 等間隔の後方値 $f_n = f(x_n, y_n), f_{n-1} = f(x_{n-1}, y_{n-1}), \dots$ を多項式補間して $\varphi(x)$ を得, これを積分して右辺に

$$y_{n+1} - y_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \varphi(x) dx = h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{kj}^* f_{n-j}$$

- k 段階 k 次陽的公式で「ゼロ安定」(後述)
- 最初の k 回目までどうするか, は後述

10

線形多段階法(2)

■ 陰的 Adams (Adams-Moulton) 公式

- 等間隔の後方値 $f_n = f(x_n, y_n), f_{n-1} = f(x_{n-1}, y_{n-1}), \dots$ と $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$ を多項式補間して $\psi(x)$ を得, これを積分して右辺に

$$y_{n+1} - y_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \psi(x) dx = h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{kj} f_{n-j+1}$$

- 右辺に求めるべき y_{n+1} が含まれているので, 方程式を解いて y_{n+1} を求める(陰的公式という)
- k 段階 $k+1$ 次陰的公式で「ゼロ安定」

11

予測子・修正子法

■ 陰的公式の方が誤差係数・安定性がよい

- しかし方程式を解かなければならない

■ 予測子・修正子法

- 陽的公式の解を初期値に、陰的公式に逐次代入
 - 方程式を解かなくても、陰的公式に近い性質が得られる
 - 例: 3 次の AB 公式 $y_{n+1}^{[0]} = y_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2})$
+ 3 次の AM 公式 $y_{n+1}^{[1]} = y_n + \frac{h}{12}(5f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[0]}) + 8f_n - f_{n-1})$
 - 実際には 1, 2 回しか反復しないことが多い

12

線形多段階法の次数と適合性

- 線形多段階法の一般形 $\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j}$
- 局所離散化誤差

$$T_{n+k} = \frac{L[y(x_n)]}{h} \quad L[y(x)] = \sum_{j=0}^k \{ \alpha_j y(x+jh) - h \beta_j y'(x+jh) \}$$

- これは公式に真の解を入れたときの残差
- C^{p+1} 級の解を持つ任意の初期値問題に対し

$$T_{n+k} = C_p h^p y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+1})$$
 が成立つとき p 次, 1 次以上のとき適合的という

13

線形多段階法のゼロ安定性

- 第一特性多項式

$$\rho(\zeta) = \alpha_k \zeta^k + \alpha_{k-1} \zeta^{k-1} + \dots + \alpha_1 \zeta + \alpha_0$$

のすべての根 ζ につき $|\zeta| \leq 1$ で, $|\zeta| = 1$ となる根は単根のとき, ゼロ安定という

- 線形多段階法の一般形 $\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j}$
 - は, $h \downarrow 0$ では y_j に関する線形漸化式(左辺)に近づく
 - この漸化式の安定性条件がゼロ安定性

14

線形多段階法の収束性

- 初期値 y_0, y_1, \dots, y_{k-1} は, $h \downarrow 0$ において $y_j \rightarrow y_0$ を満たすとき, この初期値は適合するという
- C^1 級の解を持つ任意の初期値問題に, 適合する初期値が与えられたとき, 線形多段階法の解が $x = nh$ を固定して

$$\lim_{h \downarrow 0} y_n = y(x)$$

を満たすとき, この線形多段階法は収束するという

- 線形多段階法が
 - 収束する \Leftrightarrow 適合的かつゼロ安定

15

線形多段階法の線形安定性解析

- 線形多段階法

$$\sum \alpha_j y_{n-j} = h \sum \beta_j f_{n-j}$$

に $y' = \lambda y$ を代入すると $\sum (\alpha_j - \lambda h \beta_j) y_{n-j} = 0$

- これに $y_n = w^n y_0$ を入れると

$$w^n \sum (\alpha_j - \lambda h \beta_j) w^{-j} = w^n \pi(w, \lambda h) = 0$$

- $\pi(w; \bar{h}) = 0$ の根 w がすべて $|w| < 1$ を満たす \bar{h} の範囲を絶対安定領域という

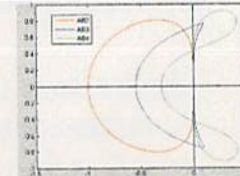


図: www.caam.rice.edu/~caam452/CAAM452Lecture3a.ppt

16

Euler法 (局所 Euler法)

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n).$$

Euler法の局所誤差

Taylor展開

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h f(x_n, y(x_n)) + O(h^2).$$

仮定: $h(x_n, y(x_n)) = 0, \dots$

$$|y(x_{n+1}) - y_n| = O(h^2).$$

(cf. O(h^{p+1}))

Euler法の全域誤差

Lipschitz連続

区間

誤差

$$|f(x, y) - f(x, z)| \leq L |y - z|$$

$$e_n = y(x_n) - y_n$$

2回連続微分可能

$$|y''| \leq M$$

$$e_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$$

$$= y(x_n) + h f(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2} y''(x_n + \theta h) - y_n - h f(x_n, y_n)$$

$$= e_n + h (f(x_n, y(x_n)) - f(x_n, y_n)) + \frac{h^2}{2} y''(x_n + \theta h)$$

$$|e_{n+1}| \leq |e_n| + h |f(x_n, y(x_n)) - f(x_n, y_n)| + \frac{h^2}{2} |y''(x_n + \theta h)|$$

$$\leq |e_n| + hL|e_n| + h^2 M$$

$$(1 + Lh)^n \leq e^{Lnh}$$

$$|e_{n+1}| + \frac{Mh}{L} \leq (1 + Lh) (|e_n| + \frac{Mh}{L})$$

$$\leq (1 + Lh)^{n+1} (|e_0| + \frac{Mh}{L})$$

$$\therefore |e_n| \leq \frac{Mh}{L} \left[(Lh)^{n-1} \right]$$

$$< \frac{M}{L} e^{Lnh} h.$$

$$nh = \alpha n$$

α の図は $\alpha > 1$, $\frac{M}{L} e^{Lnh}$ は α の図.

$\alpha < 1$ の図は $\alpha < 1$ の図は $O(h)$ の図. $\alpha < 1$.

Runge-Kutta 法

後進 Euler 法

$$k_1 = f(x_{n+1}, y_n + h k_1)$$

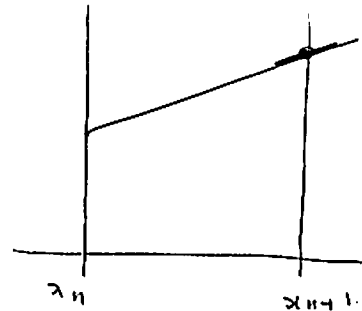
$$y_{n+1} = y_n + h k_1$$

また $\alpha < 1$.

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_{n+1}, y_{n+1}).$$

y_{n+1} は $\alpha < 1$ の図は $\alpha < 1$ の図.

中点法. $y_{n+1} = y_n + h f\left(x_n + \frac{h}{2}, \frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right)$

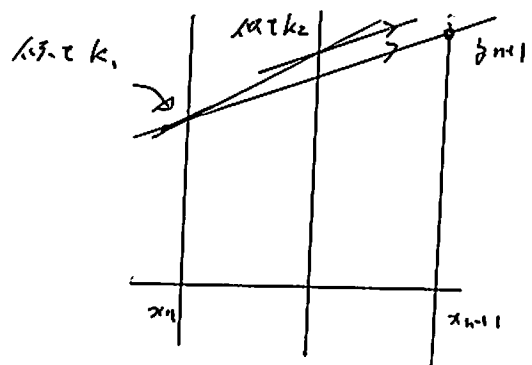


修正 Euler 法. $h > \frac{h}{2}$ の図.

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

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

$$y_{n+1} = y_n + h k_2.$$

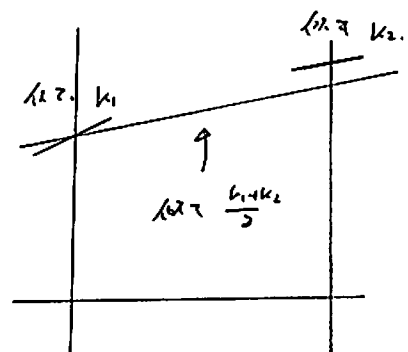


改良 Euler 法

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + h, y_n + h k_1)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{k_1 + k_2}{2}$$



陽的 RK 法.

A が 積 累 下 三 角

方 程 式 を 解 け る べ だ り.

次	5	6	8		
反.	6	7	11	..	

陰的 RK 法.

A が 積 累 下 三 角 不 成 立.

s 級 7 25 次 の 公 司

陽.

h を 適 切 な 大 小 に 選 ぶ と 解 が 発 散.

陰.

発 散 し ぬ.

線形安定性解析.

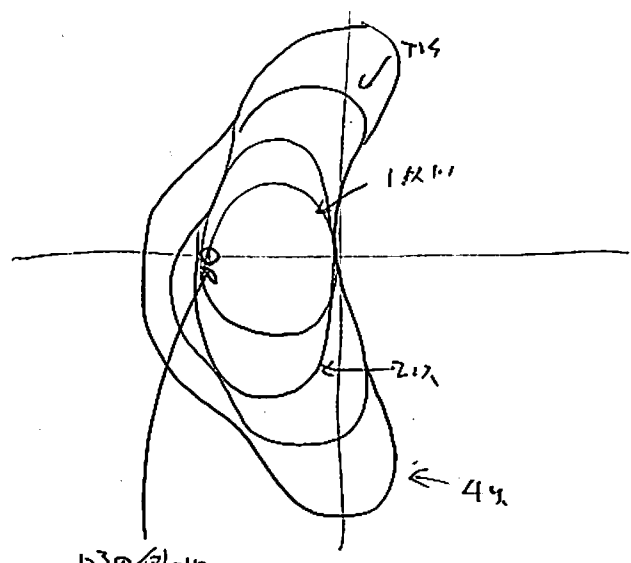
$$\frac{dx}{dt} = Ax \quad A \in \mathbb{C}$$

解 け ぬ.

$$x_{n+1} = R(h\lambda) \cdot x_n$$

$$|R(h\lambda)| < 1 \text{ の } h \text{ を 選 ぶ.}$$

h を 十分 小 さい と 選 ぶ と 発 散 し ぬ.



3 次 の 例 題.
 1.0×10^{-1}
 $t = 10$

h を 十分 小 さい と 選 ぶ べ だ り.

陽的 RK 法.

陰的 RK 法.

A 級. 左 半 部 が 能 力 有 限 級 法.
 右 半 部 が 能 力 有 限 級 法.

刻字控制御.

刻字控制御 自动的に 是れ也.

分取也

次取の 差; 公利を 同様に 計算す.

理論 及び 型 Runge-Kutta 法.

精度の 保証 あり たり.

0 = 小

0 刻字控制御 小正しく あり. $\frac{h}{2}$