応用数理実験

常微分方程式　RKF45 公式による刻み幅の自動調節

桂田 祐史

2018 年 8 月 23 日

1　レポートの書き方について

実験内容そのものについて

- (レポートにデータを含めるかどうかは別にして) 実験はなるべく多数行なう (一つや二つの例を計算するだけ、ということがないように)。
- 特に問題で指定されていなくても、理論が予告することのチェックを行なったり、自分なりの実験を考えること。

表現のしかたについて

- あっちこっち参照せずに、1 ページ目から読めば分かるように書くこと[1]。(比較したいものは並べて書く。データが多い場合は、ポイントを本文中に抜き出して書くなどして、すぐ分かるように書く。)
- 結果を再現できるだけの情報を分かりやすいところに書く。(プログラムを読まなくても済むように。また入力データも忘れずに書く。)
- 結果の自分なりの分析を書くこと。
- 日本語は正確に。
- マーカー、表、グラフなど自分で色々工夫をすること。
- 表示する桁数には注意する。
  - 書式指定を工夫して、必要なだけの桁数は表示するようにする[2]。
  - 誤差など大体の大きさ[3]が分かれば十分な量の場合に、不必要に多数の桁を表示しない。

---

[1] 最初がいきなりプログラムで、問題が分からないということのないように。

[2] 倍精度計算しているので、結果が 15 桁程度まで意味を持つことも多い。単に "%f", "%g", "%e" とするのでは、7 桁程度しか表示されないことに注意。

[3] 誤差などは、せいぜい 3 桁もあれば十分であることが多い。こういう量はグラフで可視化した方が分かりやすい。

2　RKF45 公式についてのメモ

E. Fehlberg (1970) は次の公式 RKF45 を提案した。

(1)
$$x_{j+1} = x_j + h\left(\frac{16}{135}k_1 + \frac{6656}{12825}k_3 + \frac{28561}{56430}k_4 - \frac{9}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6\right),$$

ただし

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_j, x_j) \\
k_2 &= f(t_j + \frac{1}{4}h, x_j + \frac{1}{4}hk_1) \\
k_3 &= f\left(t_j + \frac{3}{8}h, x_j + \frac{1}{32}h(3k_1 + 9k_2)\right) \\
k_4 &= f\left(t_j + \frac{12}{13}h, x_j + \frac{1}{2197}h(1932k_1 - 7200k_2 + 7296k_3)\right) \\
k_5 &= f\left(t_j + h, x_j + h\left(\frac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \frac{3680}{513}k_3 - \frac{845}{4104}k_4\right)\right) \\
k_6 &= f\left(t_j + \frac{1}{2}h, x_j + h\left(-\frac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \frac{3544}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5\right)\right)
\end{aligned}$$

これは 6 段 5 次の公式であるが、それだけでなく

(2)
$$x^*_{j+1} = x_j + h\left(\frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{2197}{4104}k_4 - \frac{1}{5}k_5\right)$$

という値を作ると、x^*_{j+1} は $x(t_{j+1})$ に対して 4 次の近似値となる。この次数の差を利用してステップ幅の自動調節をしよう、というアイディアが埋め込み型公式による刻み幅の自動調節 (adaptive stepsize control) である。

いま (1), (2) の局所離散化誤差をそれぞれ τ, τ^* とおくと

(3)
$$\begin{aligned}
\tau(t,h) &= C(t)h^5 + O(h^6) \\
\tau^*(t,h) &= C^*(t)h^4 + O(h^5)
\end{aligned}$$

である。あらかじめ許容誤差限界 $\varepsilon_{\mathrm{TOL}}$ を決めておき、第 j ステップでは

$$\|x^*_{j+1} - x_{j+1}\| \le \varepsilon_{\mathrm{TOL}}$$

が成り立ったとする。これは (3) より高次項を無視して

$$\|C^*(t_j)h^5\| \le \varepsilon_{\mathrm{TOL}}$$

が成り立つことを意味する。そのとき、次のステップにおけるステップ幅 $\hat{h}$ は、やはり

$$\|C^*(t_{j+1})\hat{h}^5\| = \varepsilon_{\mathrm{TOL}}$$

となるように選ぶべきであろう。ステップ幅が小さいときにはもっともであると思われる $C^*(t_j) = C^*(t_{j+1})$ を仮定して

$$\|C^*(t_j)\hat{h}^5\| = \varepsilon_{\mathrm{TOL}}.$$

ところで近似的に

$$\|C^*(t_j)\| = \frac{\|x^*_{j+1} - x_{j+1}\|}{h^5}$$

とみなせるから、これを代入して

$$\frac{\|x^*_{j+1} - x_{j+1}\|}{h^5}\hat{h}^5 = \varepsilon_{\mathrm{TOL}}.$$

すなわち

$$\hat{h} = h \sqrt[5]{\frac{\varepsilon_{\mathrm{TOL}}}{\|x^*_{j+1} - x_{j+1}\|}}. \tag{4}$$

すなわち第 $j+1$ ステップでは、(4) で定められるステップ幅 $\hat{h}$ で公式を適用すれば、$\|x_{j+2} - x^*_{j+2}\|$ も $\varepsilon_{\mathrm{TOL}}$ の限界内にあるであろう、と考える。実際には安全率を見込んで

$$\hat{h} = \alpha h \sqrt[5]{\frac{\varepsilon_{\mathrm{TOL}}}{\|x^*_{j+1} - x_{j+1}\|}}. \tag{5}$$

とする。ここで α は 1 より小さい正数で普通 $0.8 \sim 0.9$ とする。こうして、次のアルゴリズムが得られる。

許容限界 $\varepsilon_{\mathrm{TOL}}$ を定めて、(1), (2) により x_{j+1}, x^*_{j+1} を求めよ。
次のステップ幅を (5) で求めて、計算を続行せよ。

このアイディアのキーは、 s 段 m 次公式に、f の値を計算することなく $(m-1)$ 次公式を付随させるところにある。このような Runge-Kutta 型公式を、$(m-1)$ 次公式が m 次公式に埋め込まれているといい、埋め込み型 Runge-Kutta 法と呼ぶ。

3 今回の課題

3.1 必修課題

離心率 $e = 0.9$ (あるいはそれよりも 1 に近い) の 2 次元 Kepler 問題

$$x''(t) = -\frac{x(t)}{[x(t)^2 + y(t)^2]^{3/2}}, \quad y''(t) = -\frac{y(t)}{[x(t)^2 + y(t)^2]^{3/2}}, \tag{6}$$

$$x(0) = 1 - e, \quad x'(0) = 0, \quad y(0) = 0, \quad y'(0) = \sqrt{(1+e)/(1-e)} \tag{7}$$

を

(i) 古典的な Runge-Kutta 法

(ii) RKF45 を用いて刻み幅の自動調節を行なう方法

で解き比べてみよ。ちなみに解はパラメーター ξ を用いて

$$\begin{aligned} t &= \xi - e \sin xi \\ x &= \cos\xi - e, \quad y = \sqrt{1-e^2}\sin\xi, \\ x' &= -\frac{\sin\xi}{1 - e\cos\xi}, \quad y' = \frac{\sqrt{1-e^2}\cos\xi}{1 - e\cos\xi} \end{aligned}$$

と表される（力学のテキストを参考）。(Runge-Kutta 法では、刻み幅を非常に小さくしないと高精度の解が得られず、その場合は長い計算時間がかかると予想される。RKF45 を用いて、刻み幅の自動調節をした場合に、刻み幅はどのように変わるか調べよ。)

3.2 研究課題

爆発する初期値問題

$$\begin{aligned} x' &= x^2 \quad (0 \le t < 1) \\ x(0) &= 1 \end{aligned}$$

をなるべくうまく解く方法を考えよ。