

今回の課題においては、Python3(バージョンは3.6.1)を用いてプログラムを作成し、それに基づいて計算を行った。ソースコードおよび解軌道の図はわたしのGithubの optimization レポジトリ (https://github.com/Nano-UT/num_analysis/tree/master/report_2) で公開している。実行環境は個人所有のMacBook Pro(プロセッサ: 2 GHz Intel Core i5、メモリ: 8 GB 1867 MHz LPDDR3)である。

- (1) 実装した漸化式を述べる。解軌道はこのレポートの最後の2ページに図示する。

陽的Euler法: 漸化式 $p_{n+1} = p_n - hq_n, q_{n+1} = q_n + hp_n$ を繰り返し計算する。

陰的Euler法: $p_{n+1} = p_n - hq_{n+1}, q_{n+1} = q_n + hp_{n+1}$ であるので、これを解くと、

$$p_{n+1} = p_n - hq_{n+1} = p_n - h(q_n + hp_{n+1}) \text{ より } p_{n+1} = \frac{p_n - hq_n}{1+h^2} \text{ 同様に } q_{n+1} = \frac{q_n + hp_n}{1+h^2}$$

台形則: $p_{n+1} = p_n - h \frac{q_{n+1} + q_n}{2}, q_{n+1} = q_n + h \frac{p_{n+1} + p_n}{2}$ であるので、これを解くと、

$$p_{n+1} = p_n - h \frac{q_{n+1} + q_n}{2} = p_{n+1} = p_n - h \left(\frac{q_n}{2} + h \frac{p_{n+1} + p_n}{4} + \frac{q_n}{2} \right) \text{ より } p_{n+1} = \frac{\left(1 - \frac{h^2}{4}\right)p_n - hq_n}{1 + \frac{h^2}{4}}$$

なり、同様に $q_{n+1} = \frac{\left(1 - \frac{h^2}{4}\right)q_n + hp_n}{1 + \frac{h^2}{4}}$ となる。

4次Runge-Kutta法: $f(t, p, q) = \begin{pmatrix} -q \\ p \end{pmatrix}$ として、定義通り逐次計算する。

中点則: 漸化式は $p_{n+2} = p_n - 2hq_{n+1}, q_{n+2} = q_n + 2hp_{n+1}$ となるので、これを繰り返し計算すれば良い。なお、 $p_1 = p_0 - hq_0, q_1 = q_0 + hp_0$ で定める。

2次陽的Adams法: 漸化式は $p_{n+2} = p_{n+1} - \frac{h}{2}(3q_{n+1} - q_n), q_{n+2} = q_{n+1} + \frac{h}{2}(3p_{n+1} - p_n)$

であるので、これに代入して計算する。中点則と同様、 $p_1 = p_0 - hq_0, q_1 = q_0 + hp_0$ で定める。

- (2) 各手法について考察する。以下、 $r_n^1 = p_n + iq_n, r_n^2 = p_n - iq_n$ と定める。

- (i) 陽的Euler法

r_n^1, r_n^2 の定義に漸化式を代入すれば、

$$r_{n+1}^1 = p_n + iq_n + ihp_n - hq_n = p_n + iq_n + ih(p_n + iq_n) = (1 + ih)r_n^1$$

$$r_{n+1}^2 = p_n - iq_n - ihp_n - hq_n = p_n - iq_n - ih(p_n - iq_n) = (1 - ih)r_n^2$$

であり、安定性条件は r_n^1 と r_n^2 がともに発散しないこと、すなわち $|1 + ih| \leq 1$ かつ $|1 - ih| \leq 1$ である。これは $|h - i| \leq 1$ かつ $|h + i| \leq 1$ と同値であるので、そのような実数 $h \neq 0$ は存在しない。すなわち、どのような刻み幅 h を取っても、十分に大

きな n については発散し、刻み幅によらず安定しない(不安定である)ことが保証される。

(ii) 陰的Euler法

(i)と同様の計算により $r_{n+1}^1 = \frac{1+ih}{1+h^2} r_n^1, r_{n+1}^2 = \frac{1-ih}{1+h^2} r_n^2$ となるから、安定性条件は $\left| \frac{1+ih}{1+h^2} \right| \leq 1$ かつ $\left| \frac{1-ih}{1+h^2} \right| \leq 1$ である。 $(1+ih)(1-ih) = 1+h^2$ に注意すれば、これは $|1+ih| \geq 1$ かつ $|1-ih| \geq 1$ と同値なので、(i)の結論と合わせて考えると、そのような実数 h は全ての実数である。すなわち、任意の実数 h について、陰的Euler法は発散せず、刻み幅によらず安定であることが保証される。

ここで、解の安定性と精度は全く別であることに注意する必要がある。解が安定するからといって、それが解の近似値として良い精度を持つとは限らない。実際、 $h \neq 0$ のとき、 r_n^1 と r_n^2 は $n \rightarrow \infty$ の極限で0に収束するから、 p と q はいずれも十分大きな n において0に限りなく近づいてしまう。

(iii) 台形則

(i)(ii)と同様に計算すれば、

$$r_{n+1}^1 = \frac{\left(1 - \frac{h^2}{4}\right)p_n - hq_n}{1 + \frac{h^2}{4}} + i \frac{\left(1 - \frac{h^2}{4}\right)q_n + hp_n}{1 + \frac{h^2}{4}} = \frac{(4-h^2) + 4ih}{4+h^2} r_n^1$$

$$r_{n+1}^2 = \frac{\left(1 - \frac{h^2}{4}\right)p_n - hq_n}{1 + \frac{h^2}{4}} - i \frac{\left(1 - \frac{h^2}{4}\right)q_n + hp_n}{1 + \frac{h^2}{4}} = \frac{(4-h^2) - 4ih}{4+h^2} r_n^2$$

したがって、安定性条件は $\left| \frac{(4-h^2)+4ih}{4+h^2} \right| \leq 1$ かつ $\left| \frac{(4-h^2)-4ih}{4+h^2} \right| \leq 1$ である。ところが、実際に計算すると、任意の実数 h について $\left| \frac{(4-h^2)+4ih}{4+h^2} \right| = \left| \frac{(4-h^2)-4ih}{4+h^2} \right| = 1$ であるから、台形則では刻み幅によらず解は常に安定である(発散しない)。

(iv) 4次Runge-Kutta法

$$k_1 = f(p_n, q_n) = \begin{pmatrix} -q_n \\ p_n \end{pmatrix}, k_2 = f\left(p_n + \frac{h}{2}k_1, q_n + \frac{h}{2}k_1\right) = \begin{pmatrix} -\frac{h}{2}p_n - q_n \\ p_n - \frac{h}{2}q_n \end{pmatrix}$$

$$k_3 = f\left(p_n + \frac{h}{2}k_2, q_n + \frac{h}{2}k_2\right) = \begin{pmatrix} -\frac{h}{2}p_n - \left(1 - \frac{h^2}{4}\right)q_n \\ \left(1 - \frac{h^2}{4}\right)p_n - \frac{h}{2}q_n \end{pmatrix}$$

$$k_4 = f(p_n + hk_3, q_n + hk_3) = \begin{pmatrix} -\left(h - \frac{h^3}{4}\right)p_n - \left(1 - \frac{h^2}{2}\right)q_n \\ \left(1 - \frac{h^2}{2}\right)p_n - \left(h - \frac{h^3}{4}\right)q_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ &= \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} + \frac{h}{6} \begin{pmatrix} -q_n - hp_n - 2q_n - hp_n - \left(2 - \frac{h^2}{2}\right)q_n - \left(h - \frac{h^3}{4}\right)p_n - \left(1 - \frac{h^2}{2}\right)q_n \\ p_n + 2p_n - hq_n + \left(2 - \frac{h^2}{2}\right)p_n - hq_n + \left(1 - \frac{h^2}{2}\right)p_n - \left(h - \frac{h^3}{4}\right)q_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} + \frac{h}{6} \begin{pmatrix} -\left(3h - \frac{h^3}{4}\right)p_n - (6 - h^2)q_n \\ (6 - h^2)p_n - \left(3h - \frac{h^3}{4}\right)q_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{h^2}{2} + \frac{h^4}{24}\right)p_n - \left(h - \frac{h^3}{6}\right)q_n \\ \left(h - \frac{h^3}{6}\right)p_n + \left(1 - \frac{h^2}{2} + \frac{h^4}{24}\right)q_n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるので、この漸化式を代入すれば、

$$\begin{aligned} r_{n+1}^1 &= \left(1 + ih - \frac{h^2}{2} - \frac{ih^3}{6} + \frac{h^4}{24}\right)p_n + \left(i - h - \frac{ih^2}{2} + \frac{h^3}{6} + \frac{ih^4}{24}\right)q_n \\ &= \left(1 + ih - \frac{h^2}{2} - \frac{ih^3}{6} + \frac{h^4}{24}\right)r_n^1 \\ r_{n+1}^2 &= \left(1 - ih - \frac{h^2}{2} + \frac{ih^3}{6} + \frac{h^4}{24}\right)p_n - \left(i + h - \frac{ih^2}{2} - \frac{h^3}{6} + \frac{ih^4}{24}\right)q_n \\ &= \left(1 - ih - \frac{h^2}{2} + \frac{ih^3}{6} + \frac{h^4}{24}\right)r_n^2 \end{aligned}$$

従って、安定性条件は $\left|1 + ih - \frac{h^2}{2} - \frac{ih^3}{6} + \frac{h^4}{24}\right| \leq 1$ かつ $\left|1 - ih - \frac{h^2}{2} + \frac{ih^3}{6} + \frac{h^4}{24}\right| \leq 1$ である。上の条件は $\left|1 - \frac{h^2}{2} + \frac{h^4}{24} + i\left(h - \frac{h^3}{6}\right)\right| \leq 1$ かつ $\left|1 - \frac{h^2}{2} + \frac{h^4}{24} - i\left(h - \frac{h^3}{6}\right)\right| \leq 1$ と書き直せるから、 h を実数に制限したとき、この二つの条件は同値である。従って条件は $\left(1 - \frac{h^2}{2} + \frac{h^4}{24}\right)^2 + \left(h - \frac{h^3}{6}\right)^2 \leq 1 \Leftrightarrow \frac{h^8}{576} - \frac{h^6}{72} + 1 \leq 1 \Leftrightarrow h^8 - 8h^6 \leq 0 \Leftrightarrow h^2 \leq 8$ と書き直せるから、安定性条件は $-2\sqrt{2} \leq h \leq 2\sqrt{2}$ となる。 $t > 0$ より $h > 0$ であるので、これと合わせて $0 < h \leq 2\sqrt{2}$ であり、このとき h は安定である。また、 $h > 2\sqrt{2}$ のとき、解は安定せず発散する。

(v) 中点則

漸化式は $p_{n+2} = p_n - 2hq_{n+1}$, $q_{n+2} = q_n + 2hp_{n+1}$ であるので、

$$r_{n+2}^1 = p_n + iq_n + 2ihp_{n+1} - 2hq_{n+1} = 2ihr_{n+1}^1 + r_n^1$$

$$r_{n+2}^2 = p_n - iq_n - 2ihp_{n+1} - 2hq_{n+1} = -2ihr_{n+1}^2 + r_n^2$$

これは単純な3項間漸化式なので、安定性条件は特性方程式の解の絶対値が1以下

となることである。ここで、 r_n^1 と r_n^2 が共役な複素数であることを用いれば、これらの安定性条件は同値であるから、 r_n^1 のみについて考えれば良い(ちなみにこれはここまでの他の手法についても成立する考え方である)。特性方程式は λ を用いて $\lambda^2 - 2ih\lambda - 1 = 0$ と表せるから、この解は $\lambda = ih \pm \sqrt{1 - h^2}$ である。 $0 < h \leq 1$ のとき $|\lambda| = 1$ となり、解は安定する。また、 $h > 1$ のとき、 $\lambda = i(h \pm \sqrt{h^2 - 1})$ と表せるため、 $|\lambda| = |h \pm \sqrt{h^2 - 1}|$ となり、 $|h + \sqrt{h^2 - 1}| > 1$ となるため r_n^1 は発散する。以上より、 $0 < h \leq 1$ で解は安定し、 $h > 1$ で解は発散する(不安定になる)。

(vi) 2次陽的Adams法

漸化式 $p_{n+2} = p_{n+1} - \frac{h}{2}(3q_{n+1} - q_n)$, $q_{n+2} = q_{n+1} + \frac{h}{2}(3p_{n+1} - p_n)$ より、

$$r_{n+2}^1 = p_{n+1} + iq_{n+1} + \frac{h}{2}i(3p_{n+1} - p_n) - \frac{h}{2}(3q_{n+1} - q_n) = \left(1 + \frac{3ih}{2}\right)r_{n+1}^1 - \frac{h}{2}i r_n^1$$

$$r_{n+2}^2 = p_{n+1} - iq_{n+1} - \frac{h}{2}i(3p_{n+1} - p_n) - \frac{h}{2}(3q_{n+1} - q_n) = \left(1 - \frac{3ih}{2}\right)r_{n+1}^2 + \frac{h}{2}i r_n^2$$

従って、(v)と同様に r_n^1 の特性方程式の解は $\lambda = \frac{1}{4}(\pm\sqrt{4 - 9h^2} - 4ih - 3ih + 2)$ となる。これは少し計算が煩雑である為WolframAlphaに頼ることにすると、計算結果として $|\lambda| \leq 1 \Leftrightarrow h = 0$ が得られた。すなわち、 $h > 0$ では刻み幅によらず解が発散する(不安定である)ことがわかる。

(3) 以下では、まず $A(h)$ を任意のサイズの西方ベクトルとした一般論について述べる。

$z_{n+1} = A(h)z_n$ となるとき、 $z_0 = (p_0, q_0)^T$ (もしくはそれに相当する初期ベクトル)に対して $z_n = (A(h))^n z_0$ である。ここで、任意の行列 A は適切な正則行列 P を用いてジョルダン標準形 $J = PAP^{-1}$ とすることができるから、 $z_n = (A(h))^n z_0 = P^{-1}J^n P z_0$ と表せる。従って、任意の z_0 に対して z_n が安定することは、 J^n が安定することと同値である。さらに、ジョルダン標準形をジョルダン細胞 J_1, J_2, \dots, J_m の直和 $J_1 \oplus J_2 \oplus \dots \oplus J_m$ で表せば、その指数乗に関して $J^n = J_1^n \oplus J_2^n \oplus \dots \oplus J_l^n$ となるから、 J^n の安定性は個々のジョルダン細胞の指数乗の安定性と同値であることがわかる。

$m \times m$ サイズのジョルダン細胞 $J^*(\lambda)$ について、

$$J^*(\lambda) = \lambda E + N \text{ (但し } E \text{ は単位行列、 } N = [N_{ij}] = [\delta_{i(j-1)}])$$

と表せるから、 E と N の積が可換であることを用いて、二項定理より、

$$(J^*(\lambda))^n = \sum_{k=0}^n {}_n C_k \lambda^{n-k} N^k$$

ここで、 $N^k = [\delta_{i(j-k)}]$ となり、 $m \leq k$ のとき $N^k = 0$ であるから、上の式は

$$(J^*(\lambda))^n = \sum_{k=0}^{m-1} {}_n C_k \lambda^{n-k} N^k$$

と書き直せる。従って、 n が十分に大きいとき、 $(J^*(\lambda))^n$ の i 行 j 列成分は ${}_nC_{j-i}\lambda^{n-j+i}$ となるから(但し、 $i > j$ のときは0)、これは高々 $O(n^{k-1}\lambda^n)$ と評価される。 $|\lambda| < 1$ のとき $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{k-1}\lambda^n = 0$ だから、 J^n は収束し安定する。また、 $|\lambda| > 1$ のとき $n \rightarrow \infty$ で $n^{k-1}\lambda^n$ は発散する。 $|\lambda| = 1$ のときは注意が必要であり、このような $k \geq 2$ なるジョルダン細胞が存在すれば $n \rightarrow \infty$ で発散し、そうでなければ発散しない(安定である)。

以上をまとめれば、任意の初期値ベクトルに対して数値解が安定であるためには、「 $A(h)$ の全ての固有値の絶対値が1未満で、かつ絶対値が1の固有値については対角化可能」であることが必要十分である。当然、初期値ベクトルによっては A^n では発散する項に0がかかることで数値解が安定する可能性もあることは注意するべきであろう。

続いて、今回の各手法について考察する。

(i)陽的Euler法

$A(h) = \begin{pmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{pmatrix}$ であるので、固有値は $1 \pm ih$ となり、その絶対値は $\sqrt{1+h^2} > 1$ であるから、実数 h の値によらず解が不安定になりうるということがわかる。これは(2)(i)の考察と全く同じことである。

(ii)陰的Euler法

$A(h) = \frac{1}{1+h^2} \begin{pmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{pmatrix}$ より、固有値は $\frac{1 \pm ih}{1+h^2}$ であるから、絶対値は $\left| \frac{1 \pm ih}{1+h^2} \right| = \frac{1}{\sqrt{1+h^2}} < 1$ となり、これも(2)(ii)と同値な議論である。すなわち、実数 h の値によらず解は安定である。

(iii) 台形則

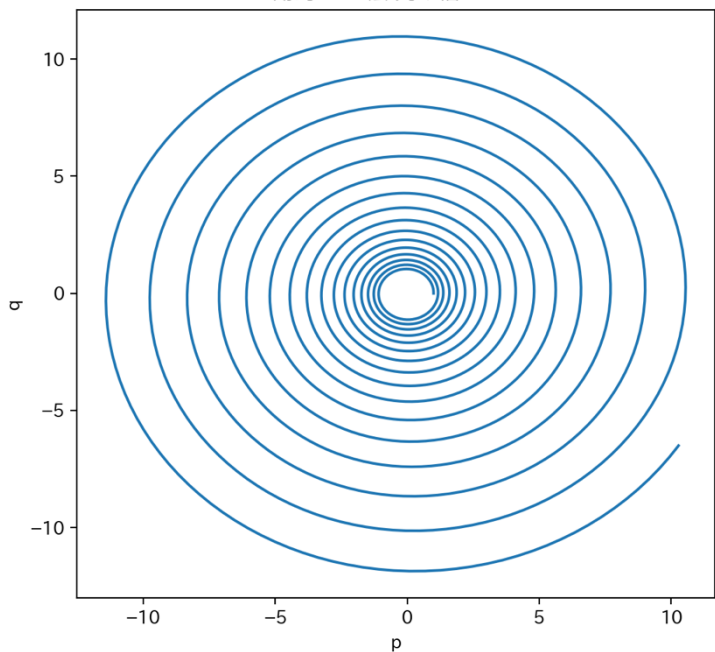
$A(h) = \frac{1}{1+\frac{h^2}{4}} \begin{pmatrix} 1-\frac{h^2}{4} & -h \\ h & 1-\frac{h^2}{4} \end{pmatrix}$ より、固有値は $\frac{1-\frac{h^2}{4} \pm hi}{1+\frac{h^2}{4}} = \frac{4-h^2 \pm 4hi}{4+h^2}$ である。(2)(iii)と同

じ議論より、実数 h の値によらず固有値の絶対値はいずれも1であるから、あとは $A(h)$ が対角化可能かどうかを考えれば良い。ここで、固有値が2つあるから、固有値は縮重しておらず、 $A(h)$ は対角化可能である。従って、刻み幅 h によらず数値解は発散しない(安定である)。これも(2)(iii)と同値な議論である。

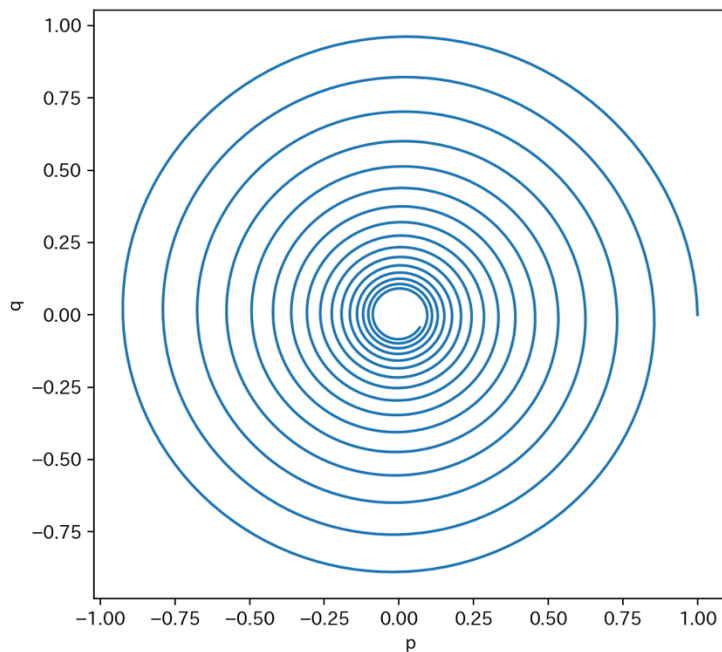
(番外)講義についての要望・感想

Runge-Kutta法やAdams法のように、複雑な式が与えられ、その式がどのように導出されるのか、誤差のオーダーは計算上どうなるのか、という説明がなかったことが少し気にかかりました。授業内でそれを扱うだけの余裕がないことは承知しておりますが、その上で参考になる書籍やサイトなどをご教授願えれば幸いです。

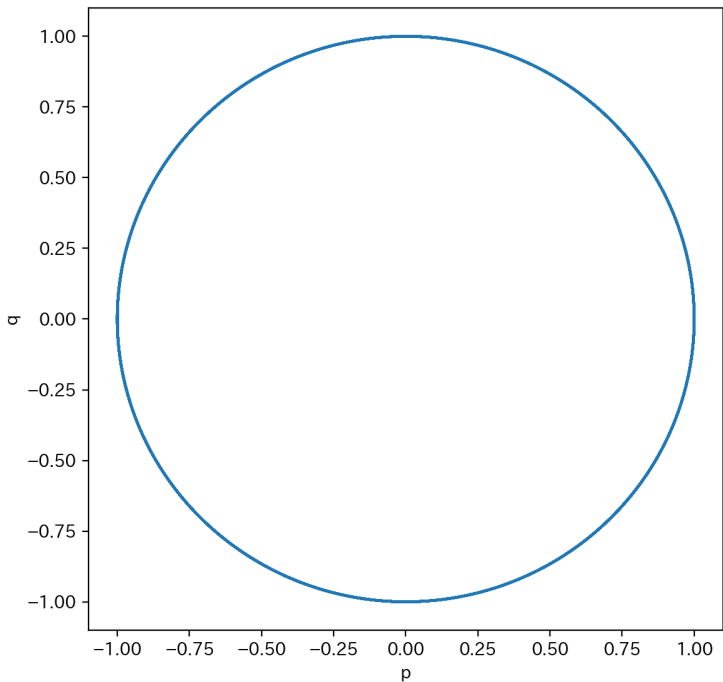
陽的Euler法 刻み幅: 0.05



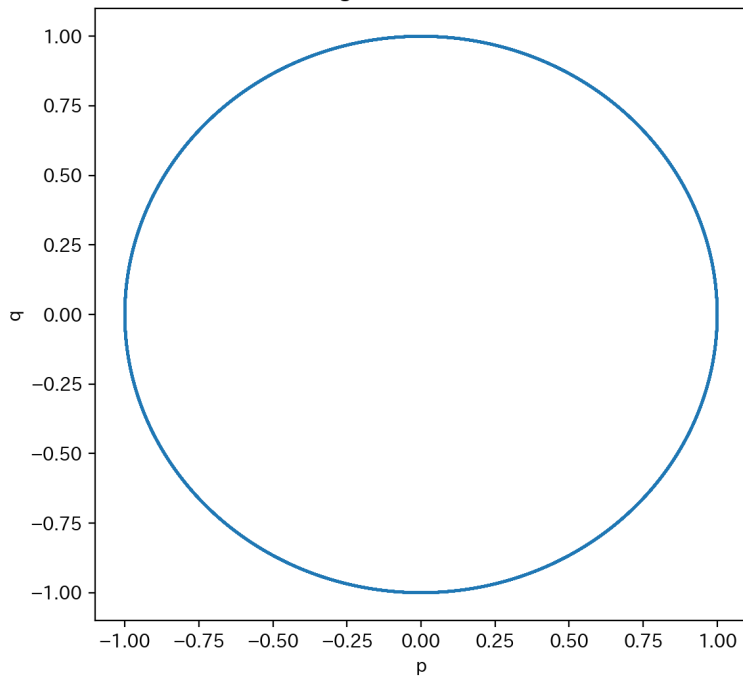
陰的Euler法 刻み幅: 0.05



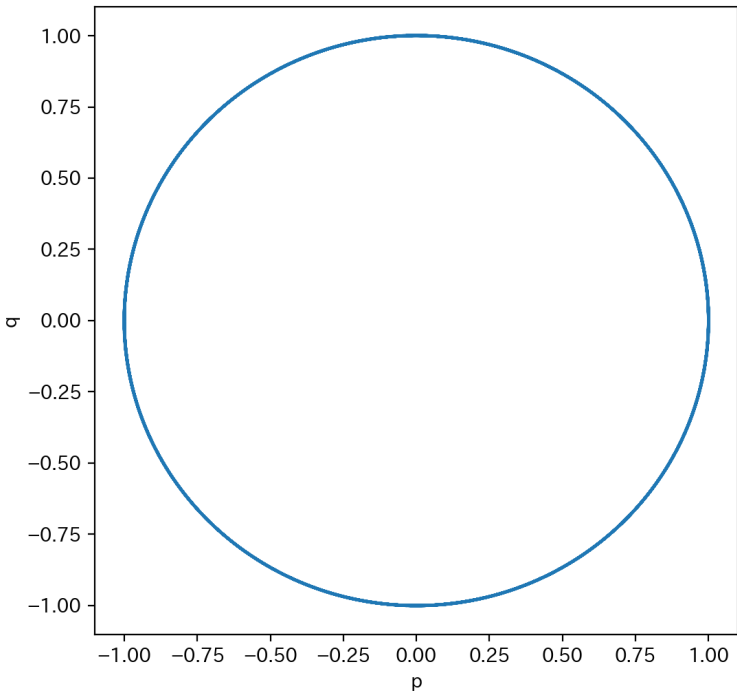
台形則 刻み幅: 0.05



4次Runge-Kutta法 刻み幅: 0.05



中点則 刻み幅: 0.05



2次陽的Adams法 刻み幅: 0.05

