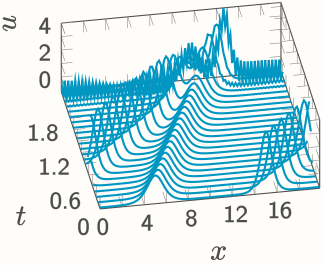
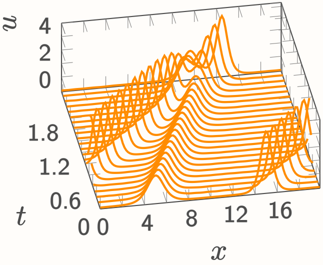
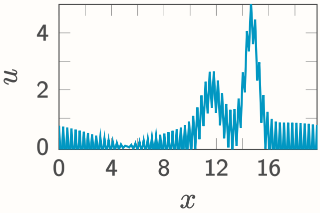
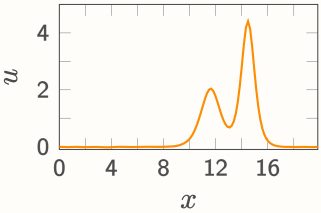
数値実験例

例：非線形波動のシミュレーション (KdV 方程式)

	汎用解法	構造保存数値解法
時間発展		
$T = 2.07$		

本講義の話題：構造保存数値解法

汎用解法

Runge–Kutta 法，線形多段階法，...

- ＋ 全ての方程式に利用可能
- ＋ 豊富な理論 (精度，安定性)
- − 難しい問題に対しては非効率的

特殊解法

Störmer 法，Verlet 法，...

- ＋ 優れたパフォーマンス (特に長時間積分)
- − 「方程式」に強く依存

構造保存数値解法 (GNI: Geometric Numerical Integration)

- 方程式の「重要な」性質を抽出
  symplecticity (symplectic 法), 保存性/散逸性 (離散勾配法,...)，...
- 優れた長時間挙動
- 適用範囲の拡大：離散勾配法の場合
  各論 → Hamilton 系 [Gonzalez 1996]
  → (任意の) 保存/散逸系 [McLachlan, Quispel, and Robidoux 1999]

目次

常微分方程式 (ODE: Ordinary Differential Equation)

常微分方程式の初期値問題 ($x\colon [0,T) \to \mathbb{R}^d$, $\dot{x} := \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$)

$$\dot{x}(t) = g(t, x(t)) \quad (t \in (0,T)), \qquad x(0) = x_0.$$

$g(t,\cdot)$ が局所 Lipschitz 連続であれば，解は一意に存在する．

古典的な例

- 調和振動子：

$$\begin{cases} \dot{p} = kx, \\ m\dot{x} = p. \end{cases}$$

- Lotka–Volterra 方程式：

$$\begin{cases} \dot{x} = ax - bxy, \\ \dot{y} = cxy - dy. \end{cases}$$

近年の例

- 加速勾配法の連続極限 [Su, Boyd, and Candes 2014]：

$$\ddot{x} + \frac{3}{t}\dot{x} + \nabla f(x) = 0.$$

- Neural ODE [Chen, Rubanova, Bettencourt, and Duvenaud 2018]：

$$\dot{x} = f_{\mathrm{NN}}(\theta, x, t).$$

最も単純な数値解法：陽的 Euler 法

陽的 Euler 法：

$$\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{h_k} = g\left(t_k, x^{(k)}\right) \quad (k = 0, 1, \dots), \qquad x^{(0)} = x_0.$$

cf. ODE

$$\dot{x}(t) = g(t, x(t)) \quad (t \in (0, T)), \qquad x(0) = x_0.$$

適切な仮定の下，

$$\left\| x^{(k)} - x(t_k) \right\| \le C h_{\max} \qquad \left(h_{\max} := \max_i h_i \right).$$

- ステップ幅 h_k が十分小さいとき，$x^{(k)}$ は $x(t_k)$ の良い近似.
- 右辺が $h_{\max}$ について 1 次なので，1 次精度という.

より高度な数値解法

陽的 Euler 法：

$$\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{h_k} = g\left(t_k, x^{(k)}\right) \quad (k = 0, 1, \dots), \qquad x^{(0)} = x_0.$$

1 ステップの中に
内部段を作る

過去の情報の利用
($x^{(k-1)}$ など)

Runge–Kutta 法

- Heun 法
- いわゆる Runge–Kutta 法
- Dormand–Prince の方法 (MATLAB の ode45, scipy.integrate.solve_ivp 等)

線形多段階法

- Adams–Bashforth 公式
- Adams–Moulton 公式
- 後退微分公式
(BDF: Backward Differentiation Formula)

これらの共通の一般化 (一般線形法) や，これらに属さない手法もある．

Runge–Kutta 法

定義： Runge–Kutta 法

$\dot{x} = g(t, x)$ に対する s 段 Runge–Kutta 法：

$$\begin{cases} X_i^{(k)} = x^{(k)} + h \displaystyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij} g\left(t_k + c_j h, X_j^{(k)}\right) \quad (i = 1, \ldots, s), \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + h \displaystyle\sum_{i=1}^{s} b_i g\left(t_k + c_i h, X_i^{(k)}\right). \end{cases}$$

$X_i^{(k)}$ ：内部段

a_{ij}, b_i, c_i ：パラメータ

例：陽的 Euler 法

$$\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{h} = g\left(t_k, x^{(k)}\right) \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} X_1^{(k)} = x^{(k)} + h \cdot 0 \cdot g\left(t_k, X_1^{(k)}\right) \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + h \cdot 1 \cdot g\left(t_k, X_1^{(k)}\right) \end{cases}$$

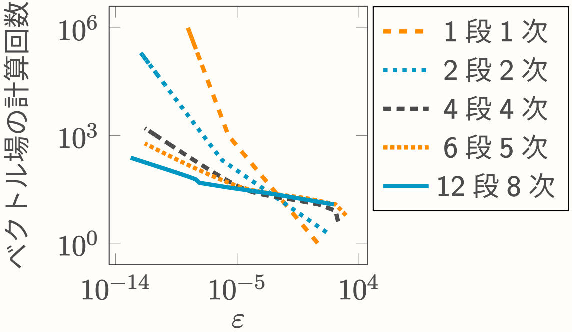
拡張のご利益 (の例)：計算量の改善

問題設定：時刻 $T > 0$ の厳密解 $x(T)$ の誤差 $\varepsilon > 0$ 以内の近似の計算
(簡単のため，ステップ幅 $h := T/K$ は固定．)

- 陽的 Euler 法：ベクトル場の計算回数 $\mathrm{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$
  $\because$ 誤差評価 $\left\|x^{(K)} - x(T)\right\| \le Ch = C\frac{T}{K} = \varepsilon \quad \Rightarrow \quad K = \frac{CT}{\varepsilon}$
- p 次精度の Runge–Kutta 法：ベクトル場の計算回数 $\mathrm{O}\left(\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right)$
  $\because$ 誤差評価 $\left\|x^{(K)} - x(T)\right\| \le C_p h^p = C_p\left(\frac{T}{K}\right)^p = \varepsilon \Rightarrow K = T\left(\frac{C_p}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$

数値例：
$\dot{x} = -x,\ T = 10.$

要求精度が小さいとき，
次数が高いほど有利．



Butcher 配列

Runge–Kutta 法のパラメータは，[Butcher 1964] に従って以下のように表示することが多い：

$$
\begin{array}{c|ccc}
c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\
\hline
 & b_1 & \cdots & b_s
\end{array}
$$

再掲：Runge–Kutta 法

$\dot{x} = g(t, x)$ に対する s 段 Runge–Kutta 法：

$$
\begin{cases}
X_i^{(k)} = x^{(k)} + h \displaystyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij} g\left(t_k + c_j h, X_j^{(k)}\right) \quad (i = 1, \ldots, s), \\
x^{(k+1)} = x^{(k)} + h \displaystyle\sum_{i=1}^{s} b_i g\left(t_k + c_i h, X_i^{(k)}\right).
\end{cases}
$$

陽的 Runge–Kutta 法と陰的 Runge–Kutta 法

定義：陽的 Runge–Kutta 法

Runge–Kutta 法が陽的 $\iff$ 任意の $i \le j$ に対して，$a_{ij} = 0$.
そうでない場合，陰的 Runge–Kutta 法と呼ばれる．

Heun 法 (陽的)：

$$X_2^{(k)} = x^{(k)} + h \cdot 0 \cdot g\left(t_k, X_1^{(k)}\right) + h \cdot 0 \cdot g\left(t_k + h, X_2^{(k)}\right)$$

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}$$

$X_1^{(k)}$ は陽的に計算可能

$X_2^{(k)}$ は陽的に計算可能

$$X_2^{(k)} = x^{(k)} + h \cdot 1 \cdot g\left(t_k, X_1^{(k)}\right) + h \cdot 0 \cdot g\left(t_k + h, X_2^{(k)}\right)$$

陰的台形則 (陰的):

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}$$

$X_1^{(k)}$ は陽的に計算可能

$X_2^{(k)}$ は陽的に計算できない

$$X_2^{(k)} = x^{(k)} + h \cdot \frac{1}{2} \cdot g\left(t_k, X_1^{(k)}\right) + h \cdot \frac{1}{2} \cdot g\left(t_k + h, X_2^{(k)}\right)$$