

# 数値天文学入門

—天文学で用いる数値技法—

福島登志夫

東京大学、総合研究大学院大学

2006



# 目次

---


- 1. 計算の基本
- 2. 特殊関数
- 3. 楕円関数
- 4. 補間と外挿
- 5. 関数の近似
- 6. 連立1次方程式
- 7. 非線形方程式
- 8. 最適化問題
- 9. 最小2乗法
- 10. 数値微分
- 11. 数値積分
- 12. 常微分方程式の数値解法 I. 1段法
- 13. 常微分方程式の数値解法 II. 多段法
- 14. 常微分方程式の数値解法 III. その他
- 15. 計算のテクニック
- 16. 計算の高信頼性化



# はじめに

---

- ある天文学者の日常生活
  - メールの読み書き、情報検索、文書作成
  - 機器制御、データ管理、**データ解析**
  - **シミュレーション**、プレゼン作成、論文執筆
- 数値天文学とは
  - (天文学で行う)データ解析やシミュレーションに必要な数値計算技法



# はじめに(2)

---

- 本講義で扱わない分野
  - 偏微分方程式、積分方程式、微分・代数方程式、統計、乱数、ソート...
- 参考書
  - 名著: **Ralston and Rabinowitz** (邦訳あり)
  - 名著者: **Kernighan** (邦訳書多数)
  - 網羅的だが**玉石混交**: Numerical Recipes
    - 個人用ならフリーでダウンロード可



# 1. 計算の基本

---

- 基本演算のコツ
- 浮動小数点演算とは
- 数学ソフトウェアと数学ライブラリ
- 定義式による計算
- テイラー展開、パデ近似、連分数
- 基本変数から出発
- 中間結果の再利用、漸化式



# 基本演算のコツ

---

- 基礎知識：浮動小数点数の表現法
- 常に倍精度で計算するのが良い
  - ただし、メモリー不足にならない限り
  - もし使える環境にあるなら拡張精度で
    - IEEE754浮動小数点演算：拡張精度計算
  - 単精度は、倍精度より少し遅い
  - 4倍精度は、倍精度より数～数十倍遅い
  - 複素数は、実数のペアより遅い



# 浮動小数点数とは

---

- 整数(integer)、実数(real)、複素数(complex)
- 固定(fixed)小数点数: 絶対精度重視
- 浮動(floating)小数点数: 相対精度重視
  - 有限桁で効率的に数を近似表現
- 浮動小数点表現  $\langle x \rangle = s \times m \times b^e$ 
  - 符号(sign)  $s = \pm 1$ 、基数(base)  $b = 2$  or  $16$
  - 仮数(mantissa)  $m$ 、指数(exponent)  $e$

# 浮動小数点演算の精度

精度	Fortran	C	仮数+指数 (bit数)	マシン・エプシロン
単	Real*4	float	24+8	$2^{-24} \sim 5.96 \times 10^{-8}$
倍	Real*8	double	53+11	$2^{-53} \sim 1.11 \times 10^{-16}$
拡張	Real*10	-	64+16	$2^{-64} \sim 5.42 \times 10^{-20}$
4倍	Real*16	long double	113+15	$2^{-113} \sim 9.63 \times 10^{-35}$

- **ケチ表現**による仮数オマケ1ビット & 符号1ビット



# スケーリングの重要性

- 浮動小数点表現を最大限に活用
- 教訓：絶対値が大きい数値を扱わない
  - 悪例：惑星の軌道半径をmで記述
- 要点：1程度の量に変換して計算
  - オーバーフローの回避（特に大型行列など）
- 手法：**無次元化** = 代表(nominal)値で除算
  - $\xi = x/x_0$ ,  $u = v/v_0$  など
  - 丸め誤差の防止：代表値は2の累乗が良い

# 数学定数の計算

- なるべく**組み込まれた数学関数**を使う

$e := \exp(1.0)$ ,  $\pi := 4.0 * \text{atan}(1.0)$ ,  $\sqrt{2} := \text{sqrt}(2.0)$

- 頻繁に使う定数は、  
1回だけ計算して保存

$$\frac{1}{n}, 2^n, n!, n!!, \binom{n}{m}$$

- 超越定数の近似値

$\pi = 3.1415926535897932384626433832795\dots$

$e = 2.7182818284590452353602874713527\dots$



# 数学ソフトウェア

---

- 問: 調査せよ(参考: 山本他1999)
  - **Mathematica**, Maple: 純粹数学志向、高価
  - MATLAB: 行列に特化、応用数学志向、高価
  - MAXIMA: フリー、Mathematicaに類似
  - scilab: フリー、MATLABに類似
  - **awk**, bc, perl: そっけないが使い良い
  - GnuMP: フリー、任意多倍長演算
  - **GNU PLOT**: フリー、グラフ作成



# 数値計算ライブラリ

---

- 定番: IMSL, NAG, LAPACK
- 日本発: NUMPAC
  - <http://netnumpac.fuis.fukui-u.ac.jp/numpac/>
- 手軽だが要注意: Numerical Recipe
- 無料(ただ)ほど便利なものは無い
  - NetLIB: なんでもそろろうデパート
  - GSL(=GNU Sci. Lib.): C, C++
  - SLATEC: Fortran, FFTW: FFT専用

# 定義式による計算

- 非効率なことが多い

- 効率的な例: 行列の積

$$C_{nm} = \sum_k A_{nk} B_{km}$$

- 例外: シュトラッセン(Strassen)法

- **非効率**な例

- 桁落ちが起きる場合:  $x \sim 0$ での  $1 - \cos(x)$
- 逆行列を用いた連立1次方程式の解
- 多項式、連分数、フーリエ級数
- 直交多項式、球面調和関数など

# テイラー(Taylor)展開

## ■ 多項式近似の基礎

■ 微分が容易なら有効

■ 多項式の計算はホーナー法で

## ■ いくつかの例(注: $c_n$ は $n$ 次シュトゥンプ関数)

$$\cos x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x^2)^n}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} - \dots \equiv c_0(x^2)$$

$$\cosh x = c_0(-x^2)$$

$$\sin x = x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x^2)^n}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} - \dots \equiv xc_1(x^2)$$

$$\sinh x = xc_1(-x^2)$$

$$e^x = \cosh x + \sinh x$$

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$$

# ホーナー(Horner)法

- 多項式の計算の**定番**

$$P(x) \equiv \sum_{n=0}^N a_n x^n$$

- 定義式で計算: 計算量 =  $N(N+3) / 2$

- 計算量 = 加減算と乗算の数 ~ Flops

- 入れ子で計算: 計算量 =  $2N-1$ 、丸め誤差も低減

$$P(x) = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + x(a_3 + \dots)))$$

- アルゴリズム: **添字の向き**に注意 (問:なぜ)

$$P := a_N; \text{do } (k=N-1, 0, -1) \{ P := a_k + x * P \}$$

- ベクトル多項式: さらに工夫が必要

# 2次因子法

- 多項式計算の**決定版**

- 単純2次式の入れ子で計算: 計算量 =  $1.5N + 1$

$$P(x) = (y - c_0)(b_1 + (y - c_1)(b_2 + (y - c_2)(b_3 + \dots))) \quad y \equiv (x - a)^2$$

- 欠点: 準備に多大な計算コスト

- 理由: 多数の高次代数方程式を解く必要
- 詳細: Ralston and Rabinowitz 7.2
- 頻繁に用いる関数等でない限り**不必要**

# シュトゥンプフ (Stumpff) 関数

- Stumpff (Himmelsmechanik 1-3, 1959-74)
- 三角関数と双曲線関数の統一的扱い

$$c_n(z) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-z)^k}{(n+2k)!} = \frac{1}{n!} - \frac{z}{(n+2)!} + \frac{z^2}{(n+4)!} - \dots = \frac{1}{n!} - z c_{n+2}(z)$$

- $z = x^2 > 0$   $c_0(x^2) = \cos x$ ,  $c_1(x^2) = (\sin x)/x$ ,  $c_2(x^2) = (1 - \cos x)/x^2$

- $z = -x^2 < 0$   $c_0(-x^2) = \cosh x$ ,  $c_1(-x^2) = (\sinh x)/x$ ,  $c_2(-x^2) = (\cosh x - 1)/x^2$

- 一般調和振動解

- 問: 確認せよ

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \lambda x = 0 \rightarrow x = x_0 c_0(\lambda t^2) + v_0 t c_1(\lambda t^2)$$

# シュトゥンプ関数(2)

- 正規化シュトゥンプ関数  $C_n(z) \equiv n!c_n(z)$
- 逆行漸化式  $C_n = 1 - n(n+1)zC_{n+2}$   $C_n(0) = 1$
- 実用的な計算法(問:コードを書け)
  - 1. 初期値: 十分大きいN  $C_N = C_{N+1} = 1$ 
    - N=8(|z|<0.01), 10(|z|<0.1), 19(|z|<1)
  - 2. 逆行漸化式(添字が偶・奇で並列計算)
  - 3. (必要なら)標準形への変換  $c_n = \frac{C_n}{n!}$   
 $c_0 = C_0, c_1 = C_1$

# テイラー展開(2)

## ■ いくつかの例(続き)

### ■ 詳細は超幾何関数表現から

$$\tan x = x + \frac{x^3}{3} + \frac{2x^5}{15} + \frac{17x^7}{315} + \frac{62x^9}{2835} + \frac{1382x^{11}}{155925} + \frac{21844x^{13}}{6081075} + \frac{929569x^{15}}{638512875} + \dots \equiv xt(x^2)$$

$$\sin^{-1} x = x + \frac{x^3}{6} + \frac{3x^5}{40} + \frac{5x^7}{112} + \frac{35x^9}{1152} + \frac{63x^{11}}{2816} + \frac{231x^{13}}{13312} + \frac{143x^{15}}{10240} + \dots \equiv xs_{-1}(x^2)$$

$$-\log(1-x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n} = x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \dots$$

$$\tanh x = xt(-x^2)$$

$$\tan^{-1} x = x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x^2)^n}{2n+1} = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \dots \equiv xt_{-1}(x^2)$$

$$\sinh^{-1} x = xs_{-1}(-x^2)$$

$$\tanh^{-1} x = xt_{-1}(-x^2)$$

# ガウスの超幾何関数

- 超幾何(hypergeometric)関数

- 多くの初等関数の**統一的扱い**

- 級数による定義

$$F(a, b, c; x) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n} \right] \frac{x^n}{n!}$$

- ポツホハンマー(Pochhammer)記号

- Fの性質

$$(a)_n \equiv \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} = a(a+1)\cdots(a+n-1)$$

- aとbについて対称

- a or bが負整数なら有限和→超幾何多項式



# 合流型超幾何関数

- クンマー(Kummer)
- **合流型**(congruent)超幾何関数
  - 別種の特種関数の統一的扱い
- 級数による定義

$$F(a, c; x) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{(a)_n}{(c)_n} \right] \frac{x^n}{n!}$$

- $a$ が負整数→合流型超幾何多項式

# 一般化超幾何関数

- ポツホハンマー (Pochhammer)
- **一般化** (generalized) 超幾何関数

- **定義**

$${}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; x) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{(a_1)_n \cdots (a_p)_n}{(b_1)_n \cdots (b_q)_n} \right] \frac{x^n}{n!}$$

- $a_1, a_2, \dots, a_p$  のどれかが負整数  $\rightarrow$  多項式
- 問: ホーナー一流の  ${}_pF_q$  計算プログラムを書け

- ガウス超幾何関数と合流型超幾何関数

$$F(a, b, c; x) \equiv {}_2F_1(a, b; c; x)$$

$$F(a, c; x) \equiv {}_1F_1(a; c; x)$$

# 超幾何関数の応用

## ■ 初等関数の超幾何関数表現

$$e^x = {}_0F_0(x), \quad (1-x)^a = {}_1F_0(-a; x), \quad -\log(1-x) = xF(1, 1, 2; x),$$

$$\sin x = x {}_0F_1\left(\frac{3}{2}; \frac{-x^2}{2}\right), \quad \sinh x = x {}_0F_1\left(\frac{3}{2}; \frac{x^2}{2}\right),$$

$$\cos x = {}_0F_1\left(\frac{1}{2}; \frac{-x^2}{2}\right), \quad \cosh x = {}_0F_1\left(\frac{1}{2}; \frac{x^2}{2}\right),$$

$$\sin^{-1} x = xF\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; x^2\right), \quad \sinh^{-1} x = xF\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; -x^2\right),$$

$$\tan^{-1} x = xF\left(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}; -x^2\right), \quad \tanh^{-1} x = \frac{1}{2} \log\left(\frac{1+x}{1-x}\right) = xF\left(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}; x^2\right)$$

# 有理式近似

## ■ 有理式近似の二大手法

- パデ(Padé)近似と連分数(continued fraction)

## ■ 有理式近似の例

$$e^x = 1 + \frac{x}{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k x^k}{k!}} = 1 + \frac{x}{1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} - \frac{x^4}{720} + \dots}$$

$$\log(1+x) = \frac{x + \frac{x^3}{12} + \frac{x^5}{30} + \frac{97x^7}{5040} + \dots}{1 + \frac{x}{2} + \frac{x^3}{12} + \frac{7x^5}{180} + \frac{181x^7}{7560} + \dots}$$

- 問: テイラー展開と誤差・計算速度を比較せよ
- $B_n$ : ベルヌーイ(Bernoulli)数、 $B_{2n+1} = 0$  ( $n > 1$ )

$$\{(-1)^n B_{2n}\} = \left\{ \frac{1}{6}, \frac{1}{30}, \frac{1}{42}, \frac{1}{30}, \frac{5}{66}, \frac{691}{2730}, \frac{7}{6}, \frac{3617}{510}, \frac{43867}{798}, \frac{174611}{330}, \frac{854513}{138}, \frac{236364091}{2730}, \dots \right\}$$

# パデ近似

- (m,n)次パデ近似

- 分子m次式、分母n次式、近似次数 = m+n

$$R_{mn}(x) = \frac{\sum_{k=0}^m p_k x^k}{1 + \sum_{j=1}^n q_j x^j} = f(x) + O(x^{m+n+1})$$

- $m=n-1$  or  $n \rightarrow m+n = \text{一定の中で最も精確}$
- 計算コスト: m+n次テイラー展開と互角
  - 主要部分に偶奇性  $\rightarrow$  より高速 ( $\sim$  倍速)

# パデ近似(2)

- テイラー展開からの構成法

- 仮定:  $m$ と $n$ は固定

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^{m+n} f_i x^i$$

- 分子多項式  $p(x)$

$$p(x) = \sum_{k=0}^m p_k x^k$$

- 分母多項式  $q(x)$

$$q(x) = 1 + \sum_{j=1}^n q_j x^j$$

- **係数決定条件**  $p(x) = f(x)q(x) + O(x^{m+n+1})$

- 決定(連立1次)方程式の解  $\rightarrow q$ 、決定条件  $\rightarrow p$

$$\sum_{j=1}^n f_{m+i-j} q_j = -f_{m+i} \quad (i = 1, \dots, n)$$

$$p_k = f_k + \sum_{j=1}^k f_{k-j} q_j$$

# パデ近似(3)

## ■ パデ近似の特徴

- 長所: 同次数テイラー展開より誤差係数が小
- 欠点: 次数の変更 → 係数の再計算が必要

## ■ 一例: 指数関数の(n,n)次パデ近似

- 問: テイラー展開と誤差係数・計算速度を比べよ

$$\exp(x) = \frac{1 + \frac{x}{2}}{1 - \frac{x}{2}} + \frac{x^3}{12} + \dots = \frac{1 + \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12}}{1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12}} + \frac{x^5}{720} + \dots = \frac{1 + \frac{x}{2} + \frac{x^2}{10} + \frac{x^3}{120}}{1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{10} - \frac{x^3}{120}} - \frac{x^7}{100800} + \dots$$

# 連分数展開

## ■ 連分数

- 定義と略記法

- 長所: テイラー展開より収束が良い

- 欠点: 除算の連続 → 計算コスト高

## ■ 連分数級数の例: $\tan(x)$

- 問: 打ち切り次数を変えて、テイラー展開と誤差、速度を比較せよ

$$b_0 + \cfrac{\overset{\infty}{\Phi} \frac{a_n}{b_n}}{\quad} \equiv b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \dots}}$$

$$\tan x = \frac{x}{1 + \cfrac{\overset{\infty}{\Phi} -x^2}{2k+1}} = \frac{x}{1 - \frac{x^2}{3 - \frac{x^2}{5 - \dots}}}$$

# 連分数展開(2)

- 連分数展開の実用計算法: **漸化式**の活用

- 発想: 単純分数式に変換後、除算を1回

$$\Phi_{k=1}^n \frac{a_k}{b_k} = \frac{A_n}{B_n}$$

- 結果~パデ近似

- 最初の数項

$$A_0 = 0, B_0 = 1, A_1 = a_1, B_1 = b_1$$

- 三項漸化式

$$A_n = b_n A_{n-1} + a_n A_{n-2}$$

- 問: 導け

$$B_n = b_n B_{n-1} + a_n B_{n-2}$$

# パデ近似(4)

- 別の例:  $\tan(x)$  の連分数展開を整理

$$\begin{aligned}\tan x &= \frac{x}{1 - \frac{x^2}{3}} + O(x^5) = \frac{x - \frac{x^3}{15}}{1 - \frac{2x^2}{5}} + O(x^7) \\ &= \frac{x - \frac{2x^3}{21}}{1 - \frac{3x^2}{7} + \frac{x^4}{105}} + O(x^9) = \frac{x - \frac{x^3}{9} + \frac{x^5}{945}}{1 - \frac{4x^2}{9} + \frac{x^4}{63}} + O(x^{11})\end{aligned}$$

# 変数変換による加速

- 発想：変数変換→収束が遅い級数の加速

- 適切な変換を発見するのは職人芸

- よくある例：一次有理変換

$$y = \frac{a + bx}{c + dx}$$

- 例：対数関数

- テイラー展開

$$\log(1+x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x)^n}{n+1} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$$

- $x > 0$ では1次交代級数→収束が遅い

- 一次有理変換

$$y = \frac{x}{2+x}$$

- 加速後

- 2次単調増加級数

$$\log(1+x) = \log\left(\frac{1+y}{1-y}\right) = 2y \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^{2n}}{2n+1}$$

# 変数変換による加速(2)

## ■ オイラー(Euler)変換

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^{k+1}} \left[ \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} a_j \right]$$

## ■ ゆっくり変化する交代級数の計算に威力

$$a_n + a_{n+1} = b_n \rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} a_n = \frac{a_0}{2} + \frac{b_0}{4} + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{2^{k+1}} \left[ \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k-1}{j} b_j \right]$$

## ■ 問: 次の無限級数を4桁精度で求めよ

■ ヒント: 桁落ちに注意して $b_n$ を書き換えよ

$$a_n = \frac{(-1)^{n-1}}{\sqrt[3]{n}}$$

## ■ 応用: 振動積分の計算

$$\int f(x) \sin(kx) dx$$

# 基本変数から出発

- 三角関数: **基本は半角正接関数**
  - 同じ引数でsinとcosを計算する場合に好都合

$$t \equiv \tan \frac{\theta}{2}$$

$$\sin \theta = \frac{2t}{1+t^2}, \quad \cos \theta = \frac{1-t^2}{1+t^2}, \quad \tan \theta = \frac{2t}{1-t^2}$$

- 双曲線関数: **基本は半角正接双曲線関数**

$$t \equiv \tanh \frac{x}{2}$$

$$\sinh x = \frac{2t}{1-t^2}, \quad \cosh x = \frac{1+t^2}{1-t^2}, \quad \tanh x = \frac{2t}{1+t^2}$$



# 例: sinとcosの同時計算

- 同じ引数のsinとcosの双方を計算

- 仮定:  $0 < \theta < \pi/4$

```
t:=tan( $\theta$ *0.5); t2:=t*t; d:=1.0/(1.0+t2)
```

```
s:=(t*2.0)*d; c:=(1.0-t2)*d
```

- 問: 上記アルゴリズムを用いて、任意角度のsinとcosの同時計算ルーチンsincosを書け
- 問: 数学ライブラリのsinとcosを、それぞれ呼ぶ場合と計算誤差・計算速度を比較せよ

# 基本変数から出発(2)

- 逆三角関数: 基本は**2変数逆正接**  $\text{atan2}(y, x)$

$$\sin^{-1} s = \text{atan2}\left(s, \sqrt{1-s^2}\right), \cos^{-1} c = \text{atan2}\left(\sqrt{1-c^2}, c\right), \tan^{-1} t = \text{atan2}(t, 1)$$

- 逆双曲線関数と対数関数

- $\tanh^{-1}$ の引数が小のとき: 基本は逆正接双曲線

$$\sinh^{-1} s = \tanh^{-1} \frac{s}{\sqrt{1+s^2}}, \quad \cosh^{-1} c = \tanh^{-1} \frac{\sqrt{c^2-1}}{c}, \quad \log x = 2 \tanh^{-1} \left( \frac{x-1}{x+1} \right)$$

- $\log$ の引数が大のとき: 基本は対数

$$\sinh^{-1} s = \text{sign}(s) \log\left(|s| + \sqrt{1+s^2}\right), \quad \cosh^{-1} c = \log\left(c + \sqrt{c^2-1}\right), \quad \tanh^{-1} t = \frac{1}{2} \log\left(\frac{1+t}{1-t}\right)$$

# 中間結果の再利用

- 必要な中間結果は、**保存して何度でも使う**

- 例1: 同じ除数による除算 → 逆数による乗算

- 例2: ベクトル級数

$$\vec{f} = \sum_k \vec{A}_k F(\theta_k)$$

```
do(k=0,K){c_k:=F(theta_k)}
```

```
do(n=1,N){f_n:=A_n0*c_0
```

```
do(k=1,K){f_n += A_nk*c_k}}
```

- 特にベクトル多項式

- $F(x_k) = x^k$  の計算にホーナー法を併用

```
c_0:=1.0; c_1:=x; do(k=2,K){c_k:=c_{k-1}*x}
```



## 2. 特殊関数

---

- 超幾何関数による統一表現
- チェビシエフ(Chebyshev)多項式
- ルジャンドル(Legendre)多項式
  - ルジャンドル陪(associated)関数
- 整数次ベッセル(Bessel)関数
- エルミート(Hermite)多項式
- ラゲル(Laguerre)多項式

# 超幾何関数表現

## ■ 直交関数・直交多項式の超幾何関数表現

■ 負整数パラメータ → 多項式

■ チェビシエフ多項式  
■ Tchebysheffとも綴る

$$T_n(x) = F\left(n, -n, \frac{1}{2}; \frac{1-x}{2}\right)$$

■ ルジャンドル多項式

$$P_n(x) = F\left(-n, n+1, 1; \frac{1-x}{2}\right)$$

■ ルジャンドル陪多項式

$$P_n^m(x) = \frac{(n+m)!}{2^m m!(n-m)!} \left(\sqrt{1-x^2}\right)^m F\left(m-n, n+m+1, m+1; \frac{1-x}{2}\right)$$

# 超幾何関数表現(2)

- 合流型 or 一般化超幾何関数表現

- 整数次ベッセル関数

$$J_n(x) = \frac{1}{n!} \left(\frac{x}{2}\right)^n {}_0F_1\left(; n+1; -\frac{x^2}{4}\right)$$

- エルミート多項式

- 偶数次

$$H_{2n}(x) = (-1)^n (2n-1)!! F\left(-n; \frac{1}{2}; \frac{x^2}{2}\right)$$

- 奇数次

$$H_{2n+1}(x) = (-1)^n (2n+1)!! x F\left(-n; \frac{3}{2}; \frac{x^2}{2}\right)$$

- ラゲル多項式

$$L_n(x) = F(-n; 1; x)$$

$$k!! \equiv k(k-2)(k-4)\dots$$

# 漸化 (recurrence) 式

- 中間結果の再利用の典型
  - 超幾何関数の三項漸化式のいくつか

$$bF_{a,b+1,c} = (b-a)F_{a,b,c} + aF_{a+1,b,c}$$

$$(c-b)F_{a,b-1,c} = (a-b)(1-x)F_{a,b,c} + (c-a)F_{a-1,b,c}$$

$$(c-a)F_{a-1,b,c} = [c-2a+(a-b)x]F_{a,b,c} + a(1-x)F_{a+1,b,c}$$

- 合流型超幾何関数の三項漸化式の一つ

$$aF_{a+1,c} = (x+2a-c)F_{a,c} + (c-a)F_{a-1,c}$$

# チェビシエフ多項式

## ■ 変形三角多項式

$$x \equiv \cos \theta$$

- 第1種T、第2種U

$$T_n(x) \equiv \cos n\theta, U_n(x) \equiv \frac{\sin n\theta}{\sin \theta}$$

## ■ 自明な性質

- 1. ゼロ点

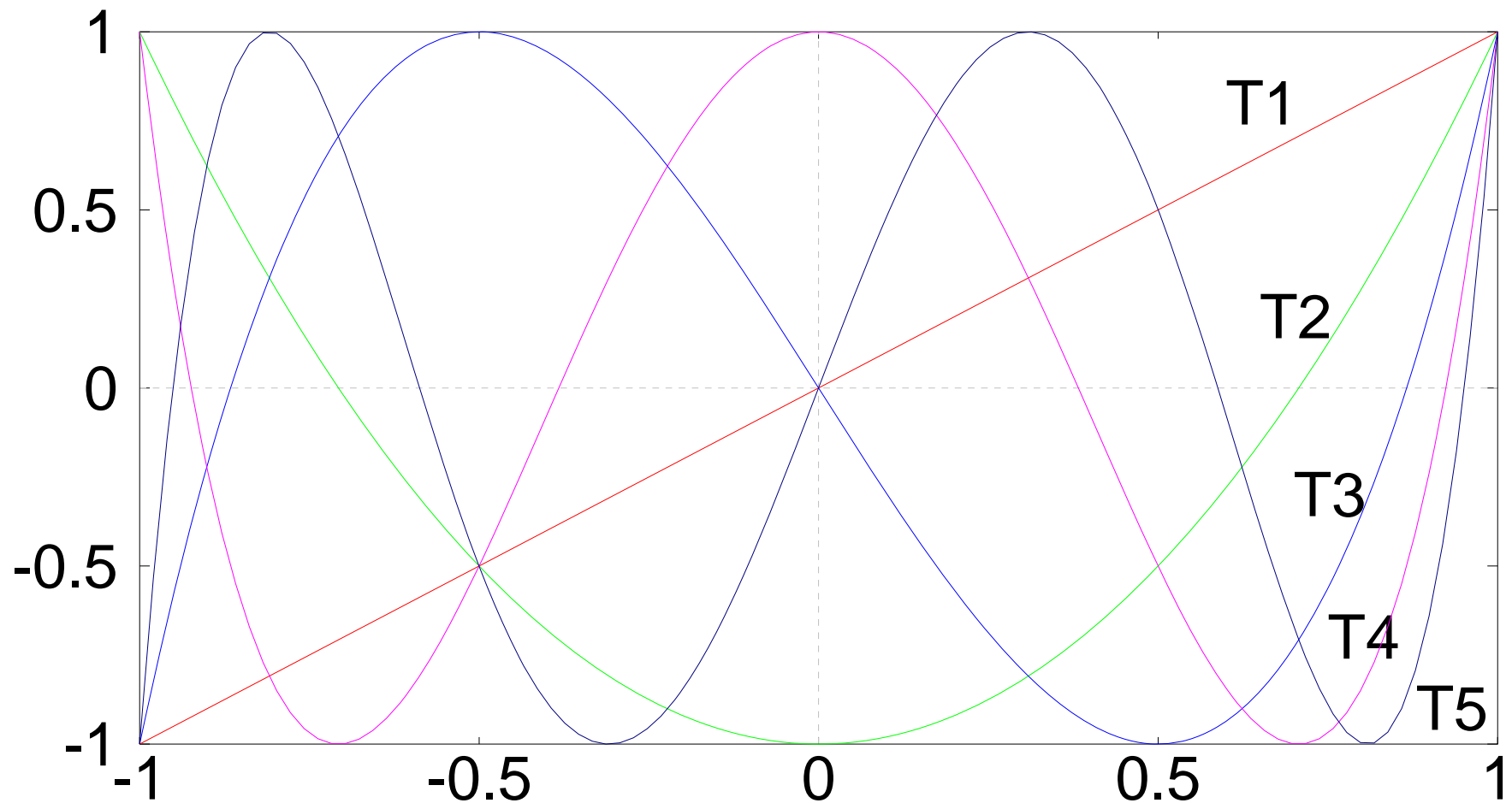
$$T_n(x_k^{(n)}) = 0 \rightarrow x_k^{(n)} = \cos \left[ \frac{(2k-1)\pi}{2n} \right] \quad (k = 1, \dots, n)$$

- 2. 極値点

$$\frac{dT_n}{dx}(y_k^{(n)}) = 0 \rightarrow y_k^{(n)} = \cos \left( \frac{k\pi}{n} \right) \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

- 3. 極値の交代性  $T_n(y_k^{(n)}) = (-1)^k$

# チェビシエフ多項式(2)



# チェビシエフ多項式(3)

- 計算法: **漸化式が最良**

- 最初の数項  $T_0 = 1, U_0 = 0, T_1 = x, U_1 = 1$

- 二項漸化式(加法定理): 誤差が増大

$$T_{n+1} = xT_n - (1 - x^2)U_n, U_{n+1} = xU_n + T_n$$

- **三項**漸化式(積和公式): 高速、独立計算可

$$T_{n+1} = 2xT_n - T_{n-1}, U_{n+1} = 2xU_n - U_{n-1}$$

# チェビシェフ多項式(4)

- チェビシェフ多項式の**変形**:  $W_n, V_n$ 
  - $y \sim 0$ のとき  $T_n$  の漸化式計算は桁落ちしやすい
  - $U_n$  より  $V_n$  のほうが実用的

$$W_n \equiv 1 - T_n, V_n \equiv yU_n = \sin n\theta \quad y \equiv \sin \theta$$

- 三項漸化式に基づくアルゴリズム(問:導け)

```
t:=tan(θ*0.5); y:=t*2.0/(1.0+t*t); w:=t*y; w2:=w*2.0; z:=r2+2.0;
W0:=0.0; T0:=1.0; V0:=0.0; W1:=w; T1:=1.0-w; V1:=y;
do(n=1,N){ Wn+1:=z*Wn+w2-Wn-1; Tn+1:=1.0-Wn; Vn+1:=z*Vn-Vn-1 }
```

# チェビシエフ多項式(5)

- 具体的表現(低次の場合)  $T_0(x) = 1, T_1(x) = x$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1$$

$$T_3(x) = 4x^3 - 3x$$

$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$$

$$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$$

$$T_6(x) = 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1$$

$$T_7(x) = 64x^7 - 112x^5 + 56x^3 - 7x$$

$$T_8(x) = 128x^8 - 256x^6 + 160x^4 - 32x^2 + 1$$

$$T_9(x) = 256x^9 - 576x^7 + 432x^5 - 120x^3 + 9x$$

# チェビシエフ多項式(6)

- **逆**表現 = 単項式をチェビシエフ多項式で

$$x^n = \frac{1}{2^{n-1}} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \binom{n}{k} T_{n-2k}(x)$$

- 例

$$1 = T_0$$

$$x = T_1$$

$$2x^2 = T_2 + T_0$$

$$4x^3 = T_3 + 3T_1$$

$$8x^4 = T_4 + 4T_2 + 6T_0$$

$$16x^5 = T_5 + 5T_3 + 10T_1$$

$$32x^6 = T_6 + 6T_4 + 15T_2 + 20T_0$$

$$64x^7 = T_7 + 7T_5 + 21T_3 + 35T_1$$

$$128x^8 = T_8 + 8T_6 + 28T_4 + 56T_2 + 70T_0$$

$$256x^9 = T_9 + 9T_7 + 36T_5 + 84T_3 + 126T_1$$

# 多重チェビシェフ多項式

- チェビシェフ多項式の**多次元**版

- 係数 (= 添字) が整数ベクトル、角度もベクトル

$$T_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \equiv \cos(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\theta}), V_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \equiv \sin(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\theta}) \quad (\mathbf{x})_k = x_k \equiv \cos \theta_k$$

- 摂動論で多用

- 好例: 章動理論 (十数次元、数千項)

- 効率的計算法 → 三角関数の利用を**最小化**

- (1次元の) 漸化式 + 加法定理
- 問: アルゴリズムを導け

# ルジャンドル多項式

■ 定義

$$P_n(x) \equiv \frac{1}{2^n n!} \left( \frac{d}{dx} \right)^n (x^2 - 1)^n$$

■ 性質

■ 1. 対称性

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$$

■ 2. 特別な点での値

$$P_{2n}(0) = (-1)^n P_{n0}, P_{2n+1}(0) = 0$$

$$P_{n0} \equiv \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}$$

$$P_n(1) = 1, P_n(-1) = (-1)^n$$

$$N!! \equiv N(N-2)(N-4)\cdots$$

# ルジャンドル多項式(2)

- 級数表現 
$$P_{2n}(x) = (-1)^n \sum_{k=0}^n P_{nk} (-x^2)^k$$

$$P_{2n+1}(x) = (-1)^n x \sum_{k=0}^n \left(1 + \frac{2n}{2k+1}\right) P_{nk} (-x^2)^k$$

- 係数の漸化式 (問: 定義式より導け)

$$P_{0,0} = 1 \quad P_{n+1,0} = \left(\frac{2n+1}{2n+2}\right) P_{n,0}$$

$$P_{n,k+1} = \frac{(n-k)(2n+2k-3)}{(k+1)(2k+1)} P_{n,k}$$

# ルジャンドル多項式(3)

- 具体的表現(低次の場合)  $P_0(x) = 1, P_1(x) = x$

$$P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$$

$$P_3(x) = (5x^3 - 3x)/2$$

$$P_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + 3)/8$$

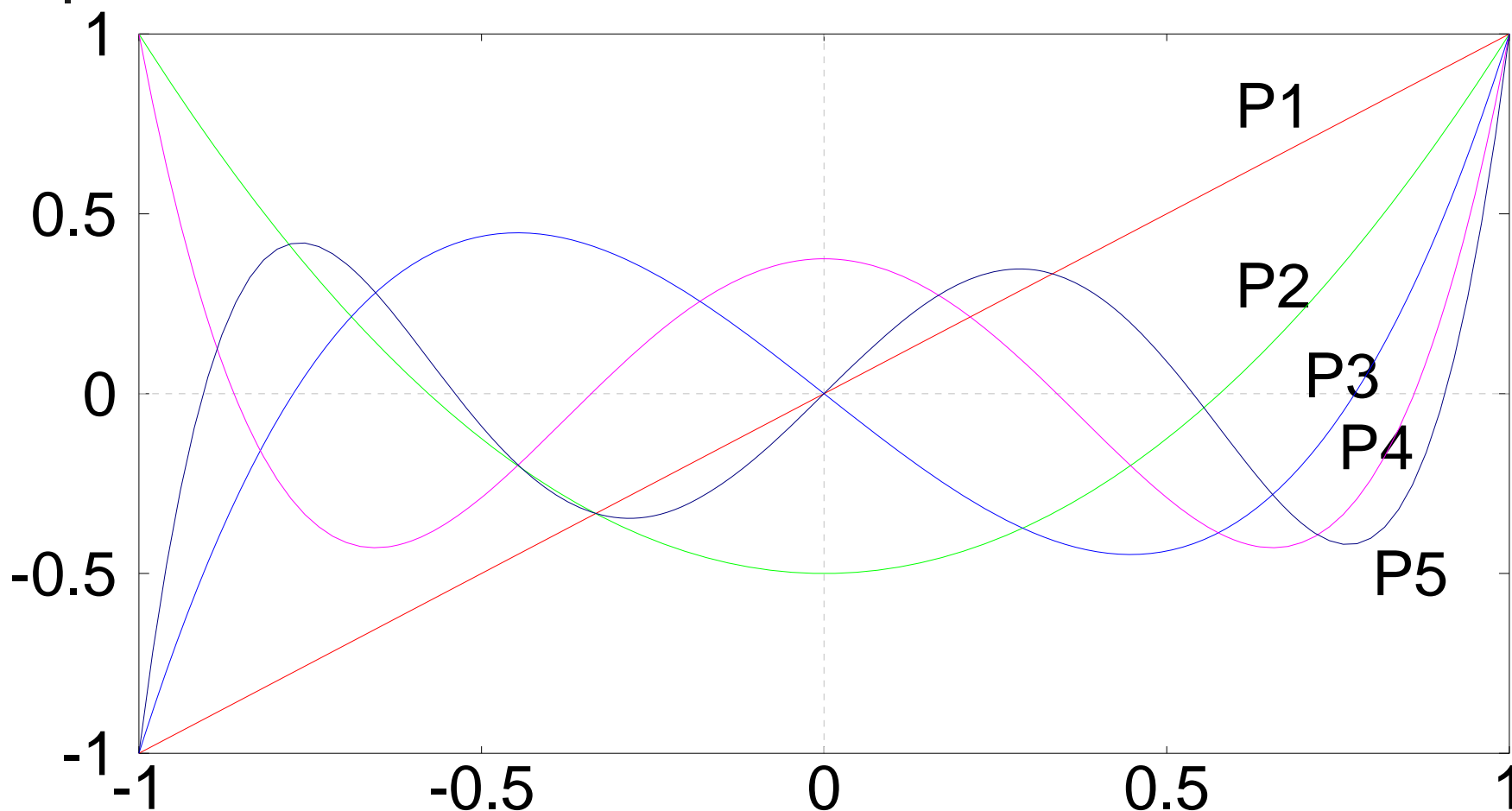
$$P_5(x) = (63x^5 - 70x^3 + 15x)/8$$

$$P_6(x) = (231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)/16$$

$$P_7(x) = (429x^7 - 693x^5 + 315x^3 - 35x)/16$$

$$P_8(x) = (6435x^8 - 12012x^6 + 6930x^4 - 1260x^2 + 35)/128$$

# ルジャンドル多項式(4)



# ルジャンドル多項式(5)

- 同一引数に対する $P_n$ の**一斉計算法**

- **三項漸化式**  $(n+1)P_{n+1} = (2n+1)xP_n - nP_{n-1}$

- 級数表現+ホーナーの方法より誤差が小

- **アルゴリズム**

$P_0 := 1.0; P_1 := x; \text{do } (n=1, N) \{ P_{n+1} := A_n * x * P_n - B_n * P_{n-1} \}$

- **コツ: 数定数は予め計算**

$$A_n = 1 + B_n, B_n = 1 - I_{n+1}$$

- **整数の逆数 $I_n$ は重宝**

- 常備すべし

$$I_n \equiv \frac{1}{n}$$

# ルジャンドル多項式(6)

- $P_n$ の根 (対称性より正值のみ表示)
  - 数値積分で有用
  - 注:  $P_6$ 以降は17桁正しい近似値

$$P_3 : \sqrt{3/5}, \quad P_4 : \sqrt{(15 \pm \sqrt{120})/35}, \quad P_5 : \sqrt{(35 \pm \sqrt{280})/63}$$

$$P_6 : 0.23861918608319691, \quad 0.66120938646626451, \quad 0.93246951420315203$$

$$P_7 : 0.40584515137739717, \quad 0.74153118559939444, \quad 0.94910791234275852$$

$$P_8 : 0.18343464249564980, \quad 0.52553240991632899, \\ 0.79666647741362674, \quad 0.96028985649753623$$



# ルジャンドル多項式(7)

■  $P_n$ の根(続)  $P_9$  : 0.32425342340380893, 0.61337143270059040,  
0.83603110732663579, 0.96816023950762609

$P_{10}$  : 0.14887433898163121, 0.43339539412924719, 0.67940956829902441,  
0.86506336668898451, 0.97390652851717172

$P_{11}$  : 0.26954315595234497, 0.51909612920681182, 0.73015200557404932,  
0.88706259976809530, 0.97822865814605699

$P_{12}$  : 0.12523340851146392, 0.36783149899818019, 0.58731795428661745,  
0.76990267419430469, 0.90411725637047486, 0.98156063424671925

$P_{13}$  : 0.23045831595513479, 0.44849275103644685, 0.64234933944034022,  
0.80157809073330991, 0.91759839922297797, 0.98418305471858815

# ルジャンドル多項式(8)

## ■ 1階微分

### ■ 緯度角 $\varphi$

$$Q_n \equiv \frac{dP_n}{dx} = \frac{1}{\cos \varphi} \left( \frac{dP_n}{d\varphi} \right)$$

$$x \equiv \sin \varphi$$

### ■ 非球対称ポテンシャルの偏微分に必要

## ■ 級数表現

$$Q_{2n}(x) = (-1)^{n+1} 2x \sum_{k=1}^n k p_{nk} (-x^2)^{k-1}$$

$$Q_{2n+1}(x) = (-1)^n \sum_{k=0}^n (2n+2k+1) p_{nk} (-x^2)^k$$

# ルジャンドル多項式(9)

- 1階微分の漸化式

$$(n+1)Q_{n+1} = (2n+1)(P_n + xQ_n) - nQ_{n-1}$$

- 問:  $P_n$  の漸化式を微分して導け

- 最初の2項  $Q_0 = 0, Q_1 = 1$

- アルゴリズム

$Q_0 := 0.0; Q_1 := 1.0$

do (n=1, N) {  $Q_{n+1} := A_n * (P_n + X * Q_n) - B_n * Q_{n-1}$  }

# ルジャンドル多項式(10)

- 具体的表現(低次の場合)  $Q_0(x) = 0, Q_1(x) = 1$

$$Q_2(x) = 3x$$

$$Q_3(x) = (15x^2 - 3)/2$$

$$Q_4(x) = (35x^3 - 15x)/2$$

$$Q_5(x) = (315x^4 - 210x^2 + 15)/8$$

$$Q_6(x) = (693x^5 - 630x^3 + 105x)/8$$

$$Q_7(x) = (3003x^6 - 3465x^4 + 945x^2 - 35)/16$$

$$Q_8(x) = (6435x^7 - 9009x^5 + 3465x^3 - 315x)/16$$

- 性質

$$Q_{2n}(0) = 0$$

# ルジャンドル多項式(11)

- $Q_n$ の根(端点を除く正值点のみ表示)
  - 数値積分・常微分方程式の数値解法で有用
  - 注:  $Q_7$ 以降は17桁正しい近似値

$$Q_3 : \sqrt{1/5}, \quad Q_4 : \sqrt{3/7}, \quad Q_5 : \sqrt{(7 \pm \sqrt{28})/21}, \quad Q_6 : \sqrt{(15 \pm \sqrt{60})/33}$$

$$Q_7 : 0.20929921790247887, \quad 0.59170018143314230, \quad 0.87174014850960662$$

$$Q_8 : 0.36311746382617816, \quad 0.67718627951073775, \quad 0.89975799541146016$$

$$Q_9 : 0.16527895766638702, \quad 0.47792494981044450, \\ 0.73877386510550508, \quad 0.91953390816645881$$



# ルジャンドル多項式(12)

■  $Q_n$  の

根(続)

$Q_{10}$  : 0.29575813558693939, 0.56523532699620501,  
0.784483473663144419, 0.93400143040805913

$Q_{11}$  : 0.13655293285492755, 0.39953094096534893, 0.63287615303186068,  
0.81927932164400668, 0.94489927222288222

$Q_{12}$  : 0.24928693010623999, 0.48290982109133620, 0.68618846908175743,  
0.84634756465187232, 0.95330984664216391

$Q_{13}$  : 0.11633186888370387, 0.34272401334271285, 0.55063940292864706,  
0.72886859909132614, 0.86780105383034725, 0.95993504526726090

$Q_{14}$  : 0.21535395536379424, 0.42063805471367248, 0.60625320546984571,  
0.76351968995181520, 0.88508204422297630, 0.96524592650383857

# ルジャンドル陪関数

- 定義

$$P_n^m(x) \equiv \frac{(\sqrt{1-x^2})^m}{2^n n!} \left( \frac{d}{dx} \right)^{n+m} (x^2-1)^n \quad P_n^0 \equiv P_n$$

- 最初の数項  $P_0^0 = 1, P_1^0 = x, P_1^1 = y$   $y \equiv \cos \varphi$

- 漸化式 (多数のうち、最も実用的な組合せ)

$$P_{m+1}^{m+1} = (2m+1) y P_m^m \quad P_{m+1}^m = (2m+1) y P_m^{m-1}$$

$$(n-m+1) P_{n+1}^m = (2n+1) x P_n^m - (n+m) P_{n-1}^m$$

- 注目:  $P_n$  の漸化式 ( $m=0$ ) を含んでいる

# ルジャンドル陪関数(2)

- アルゴリズム: 数定数は予め計算 & 保存

$$I_n \equiv \frac{1}{n}, C_n \equiv 2n+1, A_{nm} \equiv C_n I_{n-m+1}, B_{nm} \equiv (n+m) I_{n-m+1}$$

$$P_0^0 := 1.0; P_1^0 := x; P_1^1 := y;$$

$$\text{do } (m=1, M-1) \{$$

$$P_{m+1}^{m+1} := C_m * y * P_m^m; P_{m+1}^m := C_m * y * P_m^{m-1};$$

$$\text{do } (n=m+1, N-1) \{$$

$$P_{n+1}^m := A_{nm} * x * P_n^m - B_{nm} * P_{n-1}^m \}$$

# ルジャンドル陪関数(3)

## ■ 具体的表現(低次の場合)

$$P_2^1 = 3xy, P_2^2 = 3y^2$$

$$P_3^1 = (15x^2 - 3)y/2, P_3^2 = 15xy^2, P_3^3 = 15y^3$$

$$P_4^1 = (35x^3 - 15x)y/2, P_4^2 = (105x^2 - 15)y^2/2, P_4^3 = 105xy^3, P_4^4 = 105y^4$$

$$P_5^1 = (315x^4 - 210x^2 + 1)y/8, P_5^2 = (415x^3 - 105x)y^2/2,$$

$$P_5^3 = (945x^2 - 105)y^3/2, P_5^4 = 945xy^4, P_5^5 = 945y^5$$

$$P_6^1 = (693x^5 - 630x^3 + 105x)y/8, P_6^2 = (3465x^4 - 1890x^2 + 105)y^2/8,$$

$$P_6^3 = (3465x^3 - 945x)y^3/2, P_6^4 = (10395x^2 - 945)y^4/2,$$

$$P_6^5 = 10395xy^5, P_6^6 = 10395y^6$$

# ルジャンドル陪関数(4)

- 緯度角による微分

- 第2種 =  $Q_n^m$  より実用的

$$R_n^m \equiv \frac{dP_n^m}{d\varphi}$$

$$R_n^0 \equiv yQ_n$$

- 最初の数項  $R_0^0 = 0, R_1^0 = y, R_1^1 = -x$

- 漸化式 (問:  $P_n$  の漸化式の微分より導け)

$$R_{m+1}^{m+1} = (2m+1)(yR_m^m - xP_m^m)$$

$$R_{m+1}^m = (2m+1)(yR_m^{m-1} - xP_m^{m-1})$$

$$(n-m+1)R_{n+1}^m = (2n+1)(xR_n^m + yP_n^m) - (n+m)R_{n-1}^m$$

# ルジャンドル陪関数(5)

## ■ アルゴリズム

$$R_0^0 := 0.0; R_1^0 := y; R_1^1 := -x;$$

do (m=1, M-1) {

$$R_{m+1}^{m+1} := C_m * (y * R_m^m - x * P_m^m)$$

$$R_{m+1}^m := C_m * (y * R_m^{m-1} - x * P_m^{m-1})$$

do (n=m+1, N-1) {

$$R_{n+1}^m := A_{nm} * (x * R_n^m + y * P_n^m) - B_{nm} * R_{n-1}^m \}}}$$

# 球面調和関数展開

- 例：天体（地球など）の**重力ポテンシャル**

$$U(r, \phi, \lambda) = \frac{\mu}{r} \left[ 1 + \sum_{n=2}^{\infty} \left( \frac{a}{r} \right)^n \sum_{m=0}^n P_n^m(\sin \phi) (C_{nm} \cos m\lambda + S_{nm} \sin m\lambda) \right]$$

- 問1：極座標 $(r, \phi, \lambda)$ による偏微分を求めよ
- 問2：チェビシェフ多項式 $T_n, V_n$ とルジャンドル陪多項式 $P_n^m, R_n^m$ を使って、ポテンシャルおよび偏微分を表現せよ
- 問3：上記を計算するプログラムを書け

# 整数次ベッセル関数

- 定義

- テイラー展開

$$J_n(x) \equiv \left(\frac{x}{2}\right)^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k}$$

- 平方恒等式

$$\left[J_0(x)\right]^2 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left[J_n(x)\right]^2 = 1$$

- 三項漸化式

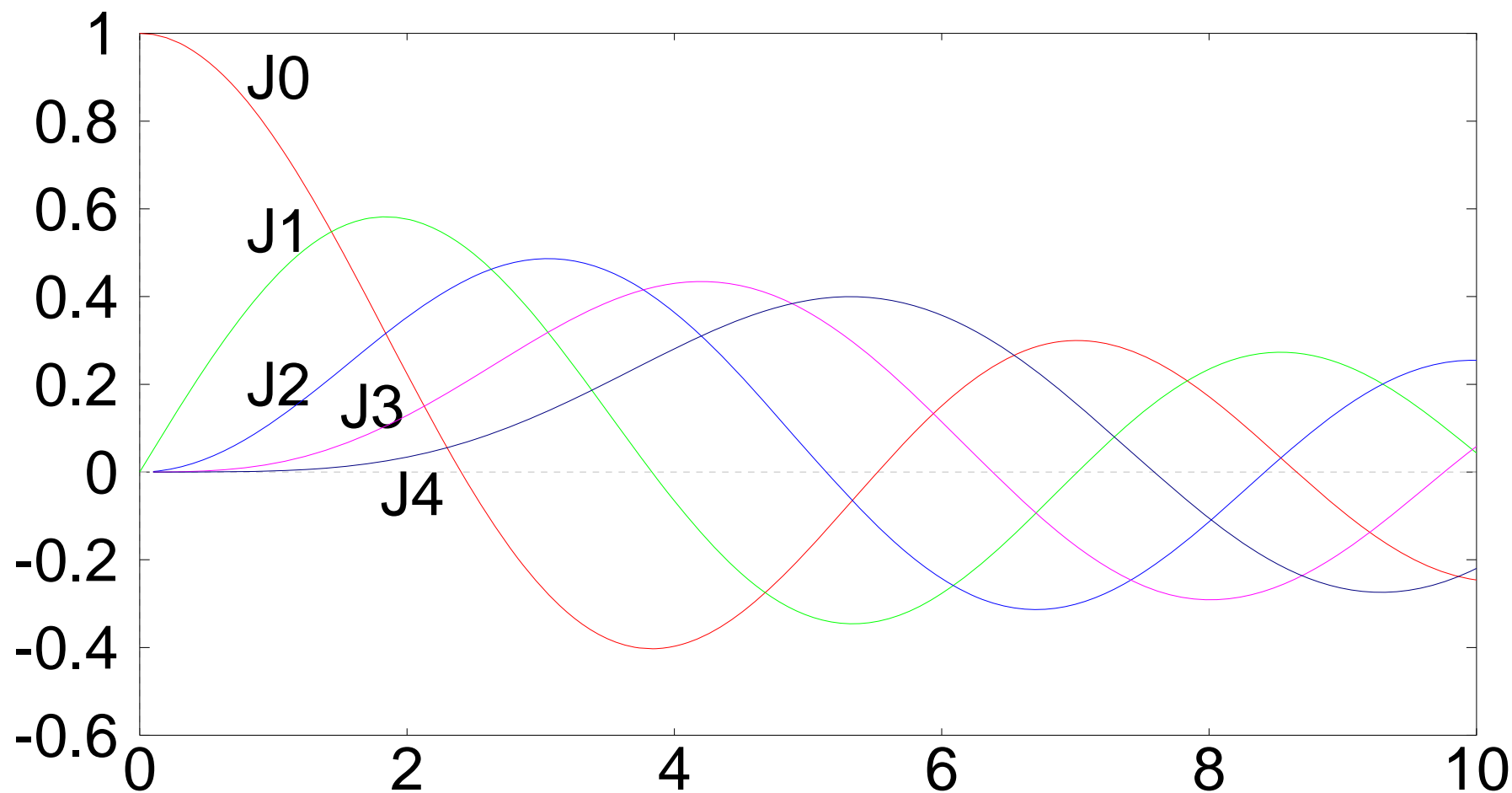
$$xJ_{n+1} = 2nJ_n - xJ_{n-1}$$

- 微分漸化式

$$\frac{dJ_n}{dx} = \frac{n}{x} J_n + \frac{1}{2} J_{n-1}$$

$$\frac{dJ_0}{dx} = -J_1$$

# 整数次ベッセル関数(2)



# 整数次ベッセル関数(3)

- 補助関数  $K_n$  の導入

$$J_n(x) \equiv \frac{1}{n!} \left(\frac{x}{2}\right)^n K_n\left(\frac{-x^2}{4}\right)$$

$$K_n(z) \equiv {}_0F_1(n+1; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{(n+1)_k k!}$$

$$K_n(0) = 1$$

- 補助関数の三項(逆行)漸化式

$$K_{n-1} = K_n + \frac{z}{n(n+1)} K_{n+1}$$

# 整数次ベッセル関数(4)

- ベッセル関数の計算法
- 1. 小さい引数 ( $|x| < 0.1$ ) → テイラー展開
- 2. 中程度の引数 ( $|x| < n$ ) で  $J_0$  と  $J_1$  の関数ライブラリが利用可能
  - $J_2$  以降は三項漸化式で
- 3. それ以外
  - 漸化式による逆行計算法

$$J_{n+1} = \left( \frac{2n}{x} \right) J_n - J_{n-1}$$

# 整数次ベッセル関数(5)

## ■ 漸化式による逆行計算法 ( $|x| > 0.1$ )

- 1. 初期値: 十分大きい  $N$   $j_N = 0, j_{N-1} = \varepsilon$

- $N=13$  ( $x < 1$ ),  $30$  ( $x < 10$ ),  $150$  ( $x < 100$ )

- マシン・エプシロン  $\varepsilon$

- 2. 逆行漸化式

$$j_{n-1} = \left( \frac{2n}{x} \right) j_n - j_{n+1}$$

- 3. 平方恒等式による定数調整

$$J_k = \frac{j_k}{\sqrt{C}}$$

$$C \equiv (j_0)^2 + 2 \sum_{n=1}^N (j_n)^2$$

# 整数次ベッセル関数(6)

## ■ 1階微分 ( $n > 0$ ) の計算法

- 引数が小さくないとき

( $|x| > 0.1$ ): 微分漸化式

$$\frac{dJ_n}{dx} = \left(\frac{n}{x}\right) J_n + \left(\frac{1}{2}\right) J_{n-1}$$

- 引数が小さいとき ( $|x| < 0.1$ )

- 微分漸化式は桁落ちが激しい
- 補助関数による表現 (問: 示せ)

$$\frac{dJ_n}{dx} = \frac{1}{2(n-1)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n-1} \left[ K_n \left(\frac{-x^2}{4}\right) + K_{n-1} \left(\frac{-x^2}{4}\right) \right]$$

# 円盤調和関数展開

- 例：円盤（銀河など）上の**重力ポテンシャル**

$$U(\rho, \theta) = \mu \left[ J_0\left(\frac{\rho}{a}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} J_n\left(\frac{\rho}{a}\right) \sum_{m=0}^n (C_{nm} \cos m\theta + S_{nm} \sin m\theta) \right]$$

- 問1：極座標 $(\rho, \theta)$ による偏微分を求めよ
- 問2：チェビシェフ多項式 $T_n, V_n$ と整数次ベッセル関数 $J_n, J'_n$ を使って、ポテンシャルおよび偏微分を表現せよ
- 問3：上記を計算するプログラムを書け

# エルミート多項式

- 定義

$$H_n(x) \equiv (-1)^n \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \left(\frac{d}{dx}\right)^n \left(\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\right)$$

- 級数表現

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k (2k-1)!! \binom{n}{2k} x^{n-2k}$$

- 性質

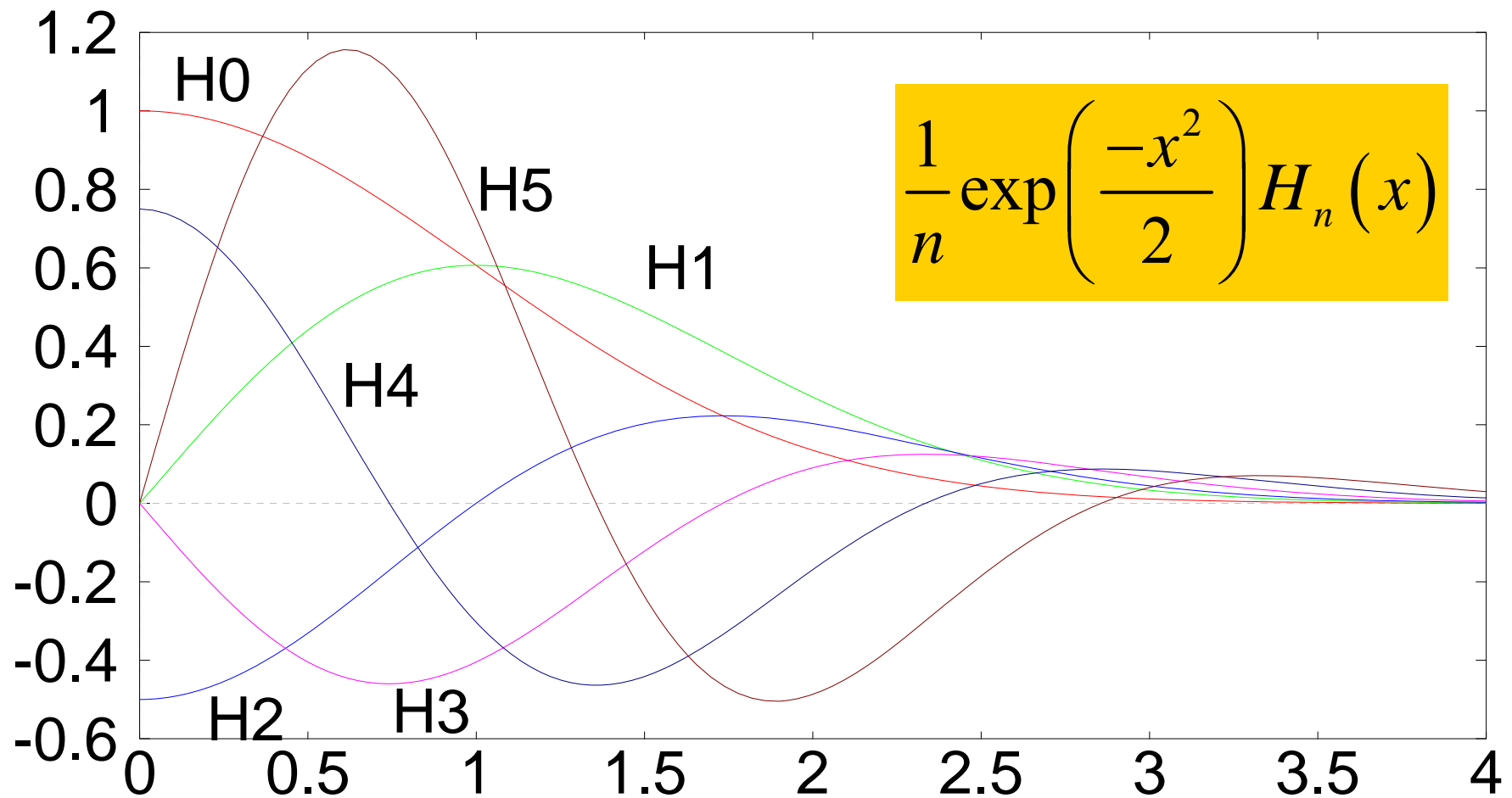
- 1. 対称性

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$$

- 2. 特別な点での値

$$H_{2n}(0) = (-1)^n (2n-1)!!, \quad H_{2n+1}(0) = 0$$

# エルミート多項式(2)



# エルミート多項式(3)

- 漸化式  $H_{n+1} = xH_n - nH_{n-1}$   $H'_{n+1} = (n+1)H_n$
- 具体的表現(低次の場合)

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = x$$

$$H_2(x) = x^2 - 1$$

$$H_3(x) = x^3 - 3x$$

$$H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3$$

$$H_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15x$$

# ラゲル多項式

- 定義

$$L_n(x) \equiv \frac{e^x}{n!} \left( \frac{d}{dx} \right)^n (e^{-x} x^n)$$

- 級数表現

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} \frac{x^k}{k!}$$

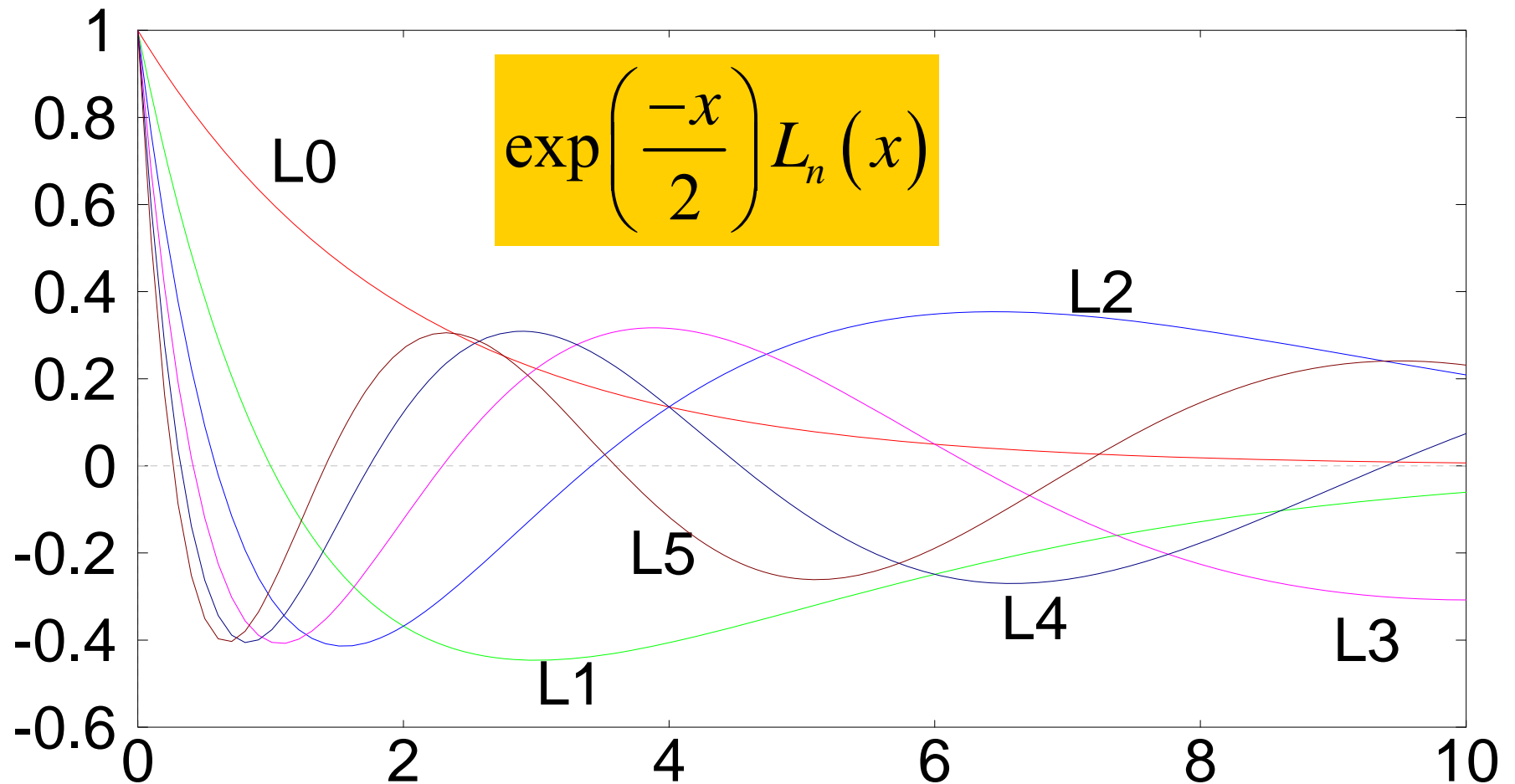
- 漸化式

$$(n+1)L_{n+1} = (2n+1-x)L_n - nL_{n-1}$$

- 特別な点での値

$$L_n(0) = 1, \quad L'_n(0) = -n$$

# ラゲル多項式(2)



# ラゲル多項式(3)

- 具体的表現  
(低次の場合)

$$L_0(x) = 1$$

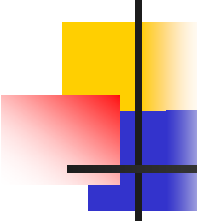
$$L_1(x) = 1 - x$$

$$L_2(x) = 1 - 2x + \frac{x^2}{2}$$

$$L_3(x) = 1 - 3x + \frac{3x^2}{2} - \frac{x^3}{6}$$

$$L_4(x) = 1 - 4x + 3x^2 - \frac{2x^3}{3} + \frac{x^4}{24}$$

$$L_5(x) = 1 - 5x + 5x^2 - \frac{5x^3}{3} + \frac{5x^4}{24} - \frac{x^5}{120}$$



## 3. 楕円関数

---

- 楕円関数と楕円積分
- 母数・引数の変換
- ヤコビのノーム
- 算術幾何平均
- 不完全楕円積分
- 完全楕円積分
- 楕円関数・楕円積分の偏微分



# 楕円関数と楕円積分

- **難解**な特殊関数
  - よいライブラリが少ない
- 楕円関数(各種あるが)
  - 最も実用的: ヤコビの楕円関数
- 楕円積分
  - 定積分 = 完全(complete)楕円積分
  - 不定積分 = 不完全(incomplete)楕円積分
- 高速**ライブラリ**: 講師より入手可能

# 楕円 (elliptic) 関数

- $\text{sn}, \text{cn}, \text{dn}$ : ヤコビ (Jacobi) の楕円関数
  - $\text{sn}$ : 第1種不完全楕円積分 (有理関数形) の逆関数
  - 他は恒等式による定義

$$u = \int_0^x \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}} \equiv \text{sn}^{-1} x$$

$$\text{cn}(u; k) \equiv \pm \sqrt{1 - \text{sn}^2(u; k)}, \text{dn}(u; k) \equiv \sqrt{1 - k^2 \text{sn}^2(u; k)}$$

- 引数 (argument)  $u$ 、母数 (modulus)  $k$
- 普通は母数を省略して表記

# 楕円関数の母数

- 母数(modulus):  $k$
- $m=k^2$ のほうが扱いやすい
  - 不完全楕円積分の定義式から明らか

- 補(complimentary)母数

$$k' = k_c \equiv \sqrt{1 - k^2}$$

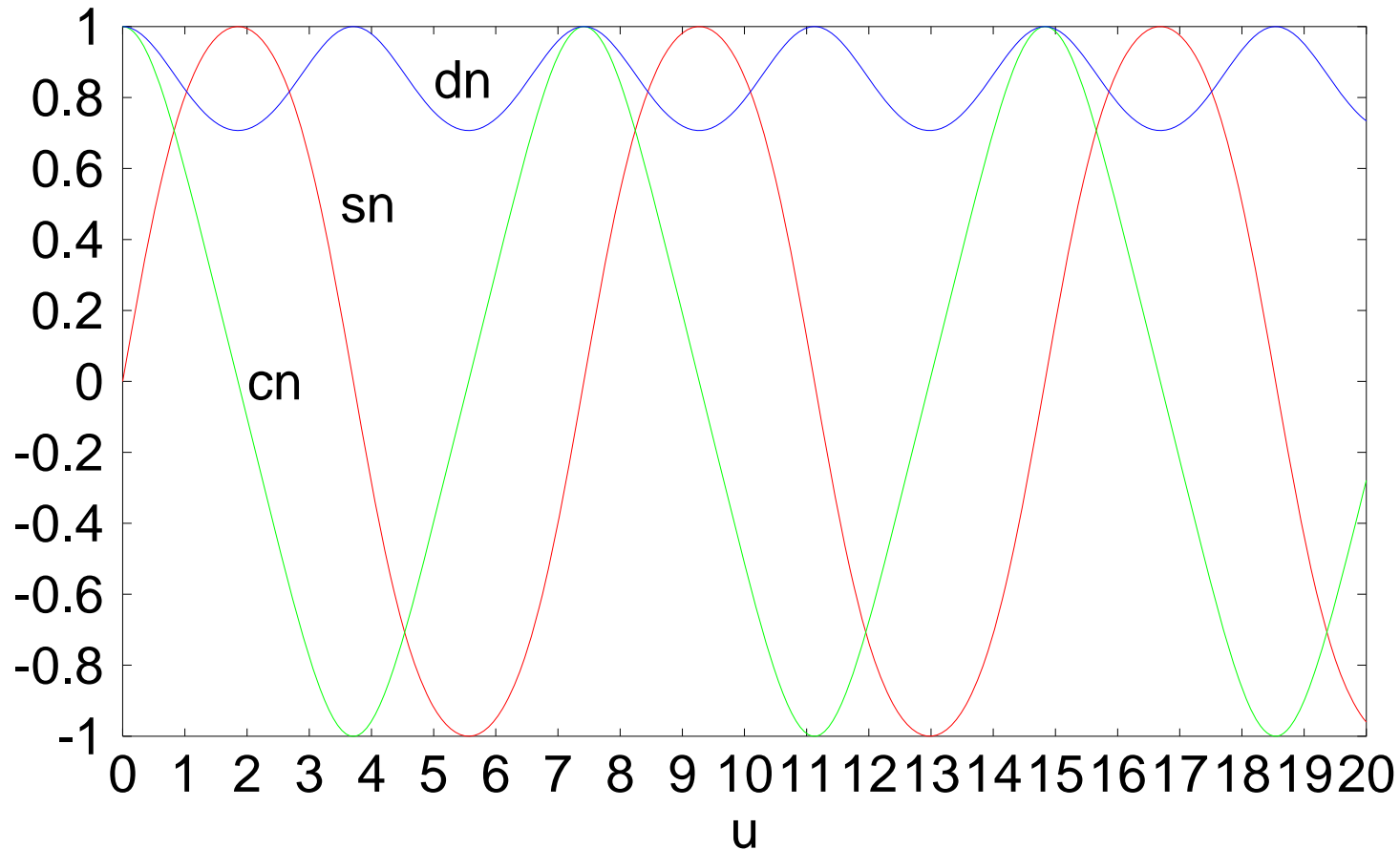
$$m' = m_c \equiv 1 - m = k_c^2$$

- 母数を陽に表記するときは表現法に注意

$$\operatorname{sn}(u | m) \equiv \operatorname{sn}(u; k), \text{ etc.}$$

# 楕円関数のグラフ

Jacobi Elliptic Functions:  $k^2=0.5$



# 楕円関数の記法

- グーデルマン(Guderman)記法
  - 正弦振幅sn、余弦振幅cn、デルタ振幅dn
  - 正接振幅tn=sn/cn,  $dn(u;k) = \Delta(\phi)$
- グレイシャー(Glaisher)記法 (分数記法)

- p,q,rは(s,c,d,n)のどれか

$$pq(u;k) \equiv \frac{pr(u;k)}{qr(u;k)}$$

- 例

$$nd(u;k) = \frac{1}{dn(u;k)}, sd(u;k) = \frac{sn(u;k)}{dn(u;k)}, cs(u;k) = \frac{cn(u;k)}{sn(u;k)}$$

# 楕円関数の諸公式

- 恒等式  $\operatorname{sn}^2 u + \operatorname{cn}^2 u = 1, \operatorname{dn}^2 u + k^2 \operatorname{sn}^2 u = 1$

- 特別な母数

- $k=0$   $\operatorname{sn} u, \operatorname{cn} u, \operatorname{dn} u \rightarrow \sin u, \cos u, 1$

- $k=1$   $\operatorname{sn} u, \operatorname{cn} u, \operatorname{dn} u \rightarrow \tanh u, \operatorname{sech} u, \operatorname{sech} u$

- 特別な引数

- $u = K(k)/2$

$$(\operatorname{sn} u, \operatorname{cn} u, \operatorname{dn} u) = \left( \frac{1}{\sqrt{1+k}}, \sqrt{\frac{k}{1+k}}, \sqrt{k} \right)$$

- $K(k)$  は第1種完全楕円積分

# 振幅(amplitude)関数

- 表記  $\varphi = \text{am}(u; k)$  逆表現  $u = F(\varphi; k)$
- 第1種不完全楕円積分(三角関数形)の

逆関数

$$u = \int_0^{\varphi} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} \equiv \text{am}^{-1} \varphi$$

- 楕円関数の三角関数的表現

$$\text{sn}u = \sin \varphi, \quad \text{cn}u = \cos \varphi, \quad \text{dn}u = \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}$$

# 楕円関数の逆関数

- 逆楕円関数の基本: 2変数逆楕円関数

$$x = \operatorname{rcn}(u; k), y = \operatorname{rsn}(u; k) \rightarrow u = \operatorname{atn2}(y, x; k)$$

- 第1種不完全楕円積分(三角関数形)による表現

$$\operatorname{atn2}(y, x; k) = F(\operatorname{atan2}(y, x); k)$$

- 振幅関数の一般表現(下記の[]はガウス記号)

$$\operatorname{am}(u; k) = 2\pi \left[ \frac{u}{4K(k)} \right]_{\text{Gauss}} + \operatorname{atan2}(\operatorname{sn}(u; k), \operatorname{cn}(u; k))$$

# 母数の逆数変換

- 母数の範囲の制限

- 逆数変換 + 虚数変換  $\rightarrow 0 < k < 1$

- ガウス変換 + ランデン変換  $\rightarrow k \sim 0$  or  $k \sim 1$

- 逆数変換

- $k > 1$  を  $k < 1$  に

$$k \rightarrow k^{-1}$$

$$\operatorname{sn}(u; k) = k^{-1} \operatorname{sn}(ku; k^{-1})$$

$$\operatorname{cn}(u; k) = \operatorname{dn}(ku; k^{-1})$$

$$\operatorname{dn}(u; k) = \operatorname{cn}(ku; k^{-1})$$

# 母数の虚数変換

- **虚数**変換
  - 純虚数の $k$ を  
実数の $k$ に

$$k \rightarrow \tilde{k} \equiv \sqrt{\frac{-k^2}{1-k^2}}$$

$$u \rightarrow \tilde{u} \equiv \sqrt{1-k^2} u$$

$$\operatorname{cn}(u; k) = \frac{\operatorname{cn}(\tilde{u}; \tilde{k})}{\operatorname{dn}(\tilde{u}; \tilde{k})}$$

$$\operatorname{sn}(u; k) = \frac{\sqrt{1-\tilde{k}^2} \operatorname{sn}(\tilde{u}; \tilde{k})}{\operatorname{dn}(\tilde{u}; \tilde{k})}$$

$$\operatorname{dn}(u; k) = \frac{1}{\operatorname{dn}(\tilde{u}; \tilde{k})}$$

# (上昇)ランデン変換

## ■ いわゆるランデン(Landen)変換

- $0 < k < 1$ をより大きく(=なるべく1に近づける)

$$k \rightarrow \bar{k} \equiv \frac{2\sqrt{k}}{1+k}$$

$$u \rightarrow \bar{u} \equiv \frac{u}{1 + \sqrt{1 - \bar{k}^2}}$$

$$\text{cn}(u; k) = \frac{\left(1 + \sqrt{1 - \bar{k}^2}\right) \text{sn}(\bar{u}; \bar{k}) \text{cn}(\bar{u}; \bar{k})}{\text{dn}(\bar{u}; \bar{k})}$$

$$\text{sn}(u; k) = \frac{1 - \left(1 + \sqrt{1 - \bar{k}^2}\right) \text{sn}^2(\bar{u}; \bar{k})}{\text{dn}(\bar{u}; \bar{k})}$$

$$\text{dn}(u; k) = \frac{1 - \left(1 - \sqrt{1 - \bar{k}^2}\right) \text{sn}^2(\bar{u}; \bar{k})}{\text{dn}(\bar{u}; \bar{k})}$$

# 下降ランデン変換

- 別名: **ガウス**変換
  - $0 < k < 1$ を、より小さく
  - $k^2 = 1/2$ から出発して  
4回の変換で  $k < 10^{-10}$

$$k \rightarrow \hat{k} \equiv \left( \frac{k}{1 + \sqrt{1 - k^2}} \right)^2$$

$$u \rightarrow \hat{u} \equiv \frac{u}{1 + \hat{k}}$$

$$\text{cn}(u; k) = \frac{\text{cn}(\hat{u}; \hat{k}) \text{dn}(\hat{u}; \hat{k})}{1 + \hat{k} \text{sn}^2(\hat{u}; \hat{k})}$$

$$\text{sn}(u; k) = \frac{(1 + \hat{k}) \text{sn}(\hat{u}; \hat{k})}{1 + \hat{k} \text{sn}^2(\hat{u}; \hat{k})}$$

$$\text{dn}(u; k) = \frac{1 - \hat{k} \text{sn}^2(\hat{u}; \hat{k})}{1 + \hat{k} \text{sn}^2(\hat{u}; \hat{k})}$$

# ヤコビのノーム (nome)

- 楕円関数の数値計算に便利

- 定義

$$q \equiv \exp\left(\frac{-\pi K'}{K}\right)$$

- 完全楕円積分 $K$ と、その補数 $K'$

$$K'(k) \equiv K(k') \quad k' \equiv \sqrt{1-k^2}$$

- $k$ が大きくても $q$ は小さい

$$k \leq \frac{1}{\sqrt{2}} \rightarrow q \leq e^{-\pi} \sim 0.0432$$

# ノームの計算

- $|k^2| < 1/2$  のとき

- **4倍数** べき展開: 非常に速い収束 (問: 確かめよ)

$$q = \lambda (1 + 2\lambda^4 + 15\lambda^8 + 150\lambda^{12} + \dots)$$

- 展開因子

$$\lambda \equiv \frac{k^2}{2(1+k')(1+\sqrt{k'})^2}$$

$$k' \equiv \sqrt{1-k^2}$$

- $1/2 < k^2 < 1$  のときは **双対変換** で補ノームへ

# 母数の双対変換

- **双対変換** (補数変換 or プライム変換)

$$k \rightarrow k' \equiv \sqrt{1-k^2} \quad m \rightarrow m' \equiv 1-m$$

- $0 < k^2 < 1/2 \rightarrow 1/2 < k^2 < 1$

- **完全楕円積分**  $K, E \rightarrow K', E'$

- **ノーム**

$$q \rightarrow q' \equiv \exp\left(\frac{\pi^2}{\log q}\right)$$

# 楕円関数のノーム表現

- ノームを用いた**分数表現** (数値計算に有利)
  - 基本母数範囲 ( $0 < k^2 < 1/2$ ) に還元後を想定

$$\operatorname{sn}(u; k) = \frac{\beta s y_s}{y_n}, \operatorname{cn}(u; k) = \frac{\sqrt{k'} \beta c y_c}{y_n}, \operatorname{dn}(u; k) = \frac{\sqrt{k'} y_d}{y_n}$$

$$s = \sin \nu, c = \cos \nu, \nu \equiv \frac{\pi u}{2K(k)}$$

$$\beta \equiv \frac{2\sqrt[4]{q}}{\sqrt{k}} = \frac{1 + 2(q + q^4 + q^9 + \dots)}{1 + q^2 + q^6 + q^{12} + \dots}$$

- $y(q)$ : 正規化された4つの楕円テータ関数
- 問:  $\beta$ と $q$ を $k$ の関数として図示せよ

# 平方指数展開

## ■ 正規化テータ関数: 収束が非常に高速

■  $N(N+1)$ 次:  $y_s, y_c$

$$y_s = 1 - U_3 q^2 + U_5 q^6 - U_7 q^{12} + \dots$$

■  $N^2$ 次:  $y_d, y_n$

$$y_c = 1 + S_3 q^2 + S_5 q^6 + S_7 q^{12} + \dots$$

■ 問: 高速性を  
体感せよ

$$y_d = 1 + 2(T_2 q + T_4 q^4 + T_6 q^9 + \dots)$$

$$y_n = 1 - 2(T_2 q - T_4 q^4 + T_6 q^9 + \dots)$$

## ■ 展開係数: チェビシェフ多項式と、その変形

■ 漸化式の活用

$$T_n \equiv \cos(n\nu), U_n \equiv \frac{\sin n\nu}{\sin \nu}, S_n \equiv \frac{T_n}{\cos \nu}$$

# 楕円関数のフーリエ展開

- フーリエ展開: ノーム展開ほど収束は速くない

$$\operatorname{sn}(u; k) = \frac{2\pi}{kK(k)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^{n+1/2}}{1 - q^{2n+1}} \sin(2n+1)v$$

$$\operatorname{cn}(u; k) = \frac{2\pi}{kK(k)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^{n+1/2}}{1 + q^{2n+1}} \cos(2n+1)v$$

$$\operatorname{dn}(u; k) = \frac{\pi}{2K(k)} + \frac{2\pi}{K(k)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q^n}{1 + q^{2n}} \cos 2nv$$

$$\operatorname{am}(u; k) = v + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2q^n}{n(1 + q^{2n})} \sin 2nv$$

$$v \equiv \frac{\pi u}{2K(k)}$$

# 振幅関数の数値計算

- 振幅関数のランデン変換  $v_n \equiv k_n u_n$

$$u_{n+1} = \frac{u_n + v_n}{2}, v_{n+1} = \sqrt{u_n v_n}, \phi_{n+1} = \frac{\phi_n + \sin^{-1}(k_n \sin \phi_n)}{2}$$

- 算術幾何平均に他ならない
- アルゴリズムの概要 (問: プログラムを書け)
  - $u_0 = u, v_0 = ku$  から出発し、順変換を繰り返す
  - $k_j = v_j / u_j$  は記録しておく
  - 収束後は  $u_n = v_n, k_n = 1$  だから
  - $\phi_n$  から出発し、 $k_j$  を用いて逆変換で  $\phi_0$  まで戻す

$$\phi_{n+1} = 2 \tan^{-1} \left[ \tanh \left( \frac{u_n}{2} \right) \right]$$



# 算術幾何平均

- arithmetic-geometric mean: AGM(a,b)
  - 2変数の算術平均と幾何平均の共通収束値

$$a_{n+1} = \frac{a_n + b_n}{2}, \quad b_{n+1} = \sqrt{a_n b_n}$$

- 一例 
$$\text{AGM}\left(1, \sqrt{1-k^2}\right) = \frac{\pi}{2K(k)}$$

- 非常に収束が速い (問: 確かめよ)
- 平方根の多用: 計算コストはかかるが...

# 不完全楕円積分

- ヤコビ (1850): **有理4次式**の不定積分の基本形

- 第1種

$$F(x; k) = \int_0^x \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}}$$

- 第2種

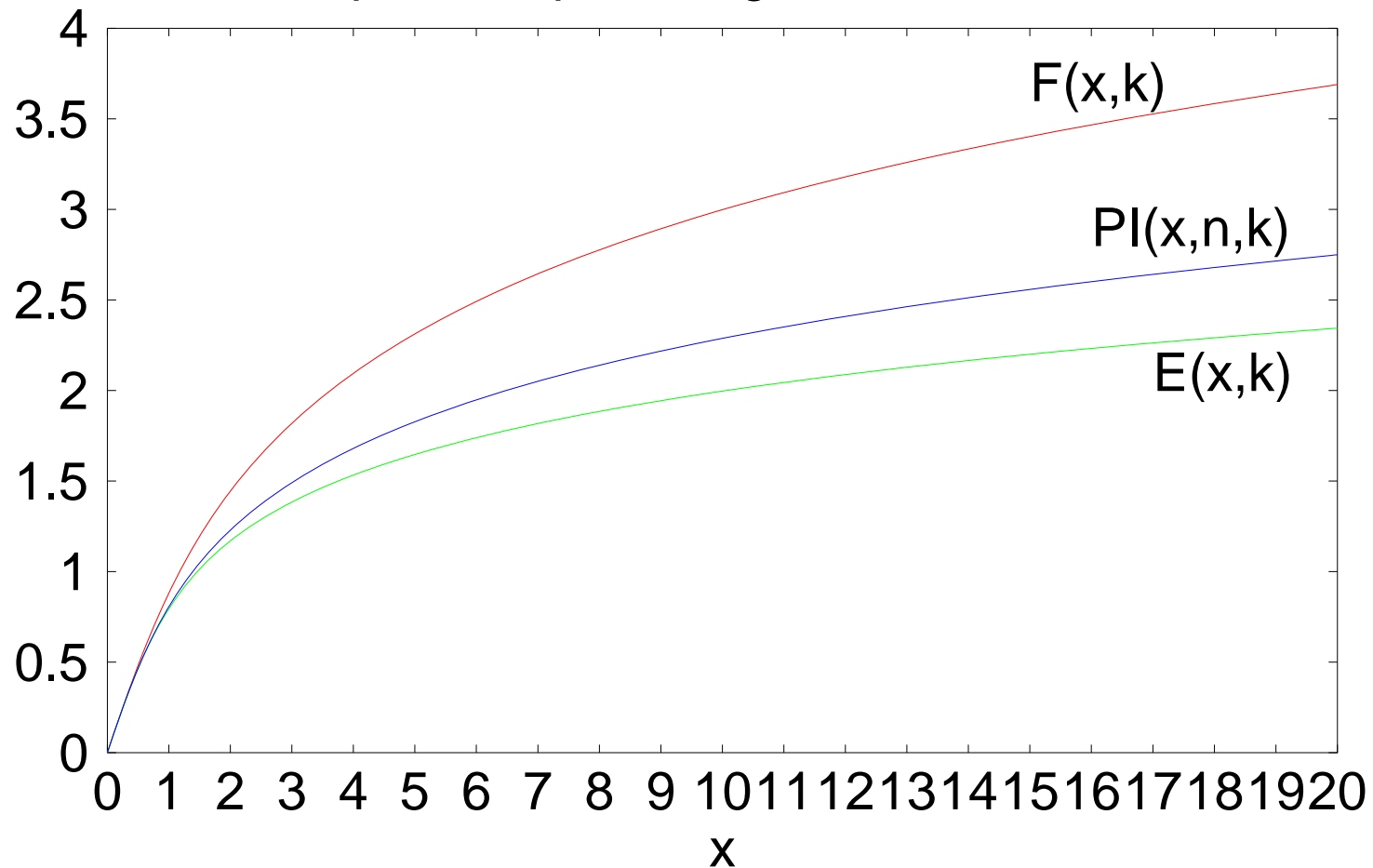
$$E(x; k) = \int_0^x \sqrt{\frac{1-s^2}{1-k^2s^2}} ds$$

- 第3種: パラメータ  $n$  を  $-\alpha^2$  と表現することもある

$$\Pi(x; n, k) \equiv \int_0^x \frac{ds}{(1+ns^2)\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}}$$

# 不完全橢圓積分(2)

Incomplete Elliptic Integrals:  $n=0.5$ ,  $k^2=0.5$



# 不完全楕円積分(3)

- **三角関数**を使った積分表現(ルジャンドル)
  - 広く普及(他の表現と第1引数の違いに注意)

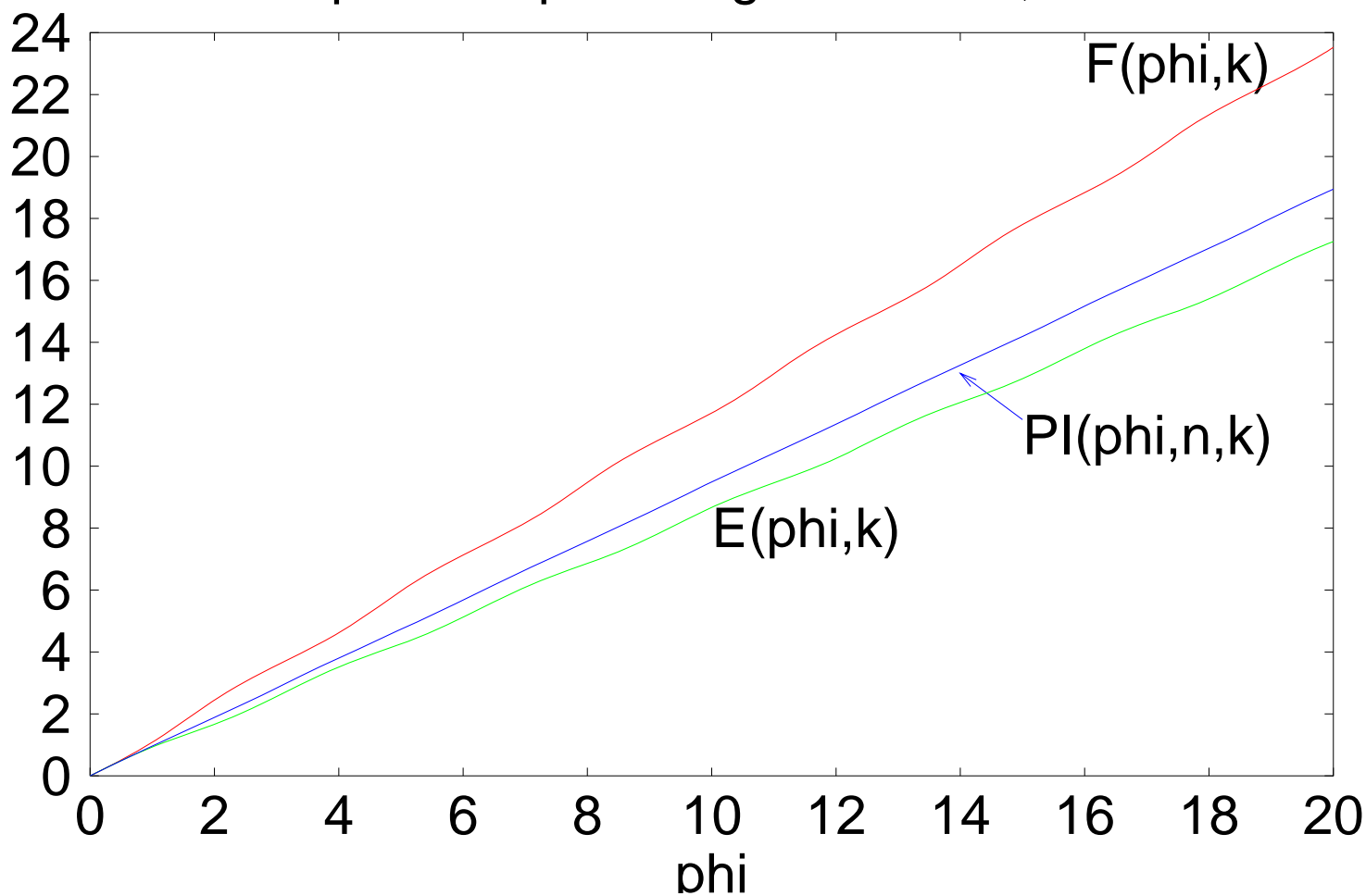
- 第1種 
$$F(\varphi; k) = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}$$

- 第2種 
$$E(\varphi; k) = \int_0^\varphi \frac{\cos^2 \theta d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}$$

- 第3種 
$$\Pi(\varphi; n, k) = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{(1 + n \sin^2 \theta) \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}$$

# 不完全橢圓積分(4)

Incomplete Elliptic Integrals:  $n=0.5$ ,  $k^2=0.5$



# 不完全楕円積分(5)

- **楕円関数**を使った積分表現(ヤコビ)
  - (再び)他の表現と第1引数の違いに注意
  - 他と区別するために**新記号** $e_n, p_n$ を導入

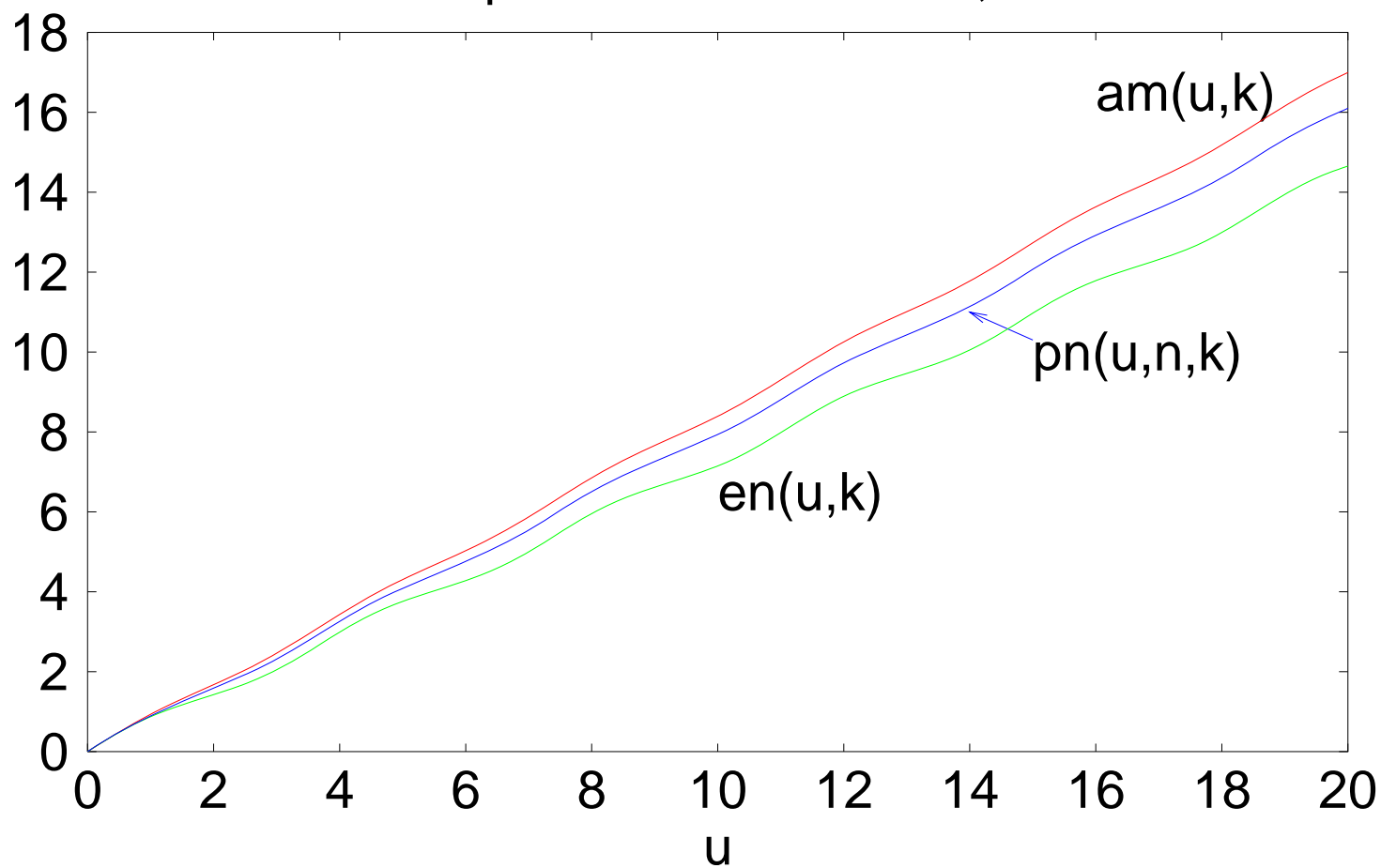
- 第1種  $F(u; k) = u$

- 第2種  $E(u; k) = \int_0^u \text{cn}^2(v; k) dv = e_n(u; k)$

- 第3種  $\Pi(u; n, k) \equiv \int_0^u \frac{dv}{1 + n \text{sn}^2(v; k)} = p_n(u; n, k)$

# 不完全橢圓積分(6)

Jacobi Elliptic Functions:  $n=0.5$ ,  $k^2=0.5$



# 不完全楕円積分(7)

- 第2種不完全楕円積分の別表現

$$E(u; k) = \left( \frac{K(k)}{E(k)} \right) u + Z(u; k)$$

- ヤコビのゼータ関数 =  $E(u; k)$  の周期成分

$$Z(u; k) \equiv \text{zn}(u; k)$$

$$\simeq \frac{\pi}{K(k)} \left( \frac{2q \sin 2v - 4q^4 \sin 4v + 9q^9 \sin 6v}{1 - 2q \cos 2v + 2q^4 \cos 4v - 2q^9 \cos 6v} \right)$$

$$v \equiv \frac{\pi u}{2K(k)}$$

# 不完全楕円積分(8)

## ■ 特殊な場合

■  $k=0$

$$E(\varphi; 0) = F(\varphi; 0) = \varphi$$

$$\Pi(\varphi; n, 0) = \frac{\tan^{-1}(\sqrt{1+n} \tan \varphi)}{\sqrt{1+n}}$$

■  $k=1$

$$E(\varphi; 1) = \sin \varphi$$

$$F(\varphi; 1) = \ln \left( \frac{1 + \sin \varphi}{\cos \varphi} \right)$$

$$\Pi(\varphi; n, 1) = \frac{1}{n+1} \left[ n \tan^{-1}(n \sin \varphi) + \frac{1}{2} \log \left| \frac{1 - \sin \varphi}{1 + \sin \varphi} \right| \right]$$

■  $n=-k^2$

$$\Pi(\varphi; -k^2, k) = \frac{1}{1-k^2} \left[ E(\varphi; k) - \frac{k^2 \sin \varphi \cos \varphi}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \varphi}} \right]$$

# 引数による偏微分

- 引数 $u$ による偏微分
  - 母数 $k$ とパラメータ $n$ を固定

$$\frac{\partial \operatorname{sn}(u; k)}{\partial u} = \operatorname{cn} u \operatorname{dn} u$$

$$\frac{\partial \operatorname{cn}(u; k)}{\partial u} = -\operatorname{sn} u \operatorname{dn} u$$

$$\frac{\partial \operatorname{dn}(u; k)}{\partial u} = -k^2 \operatorname{sn} u \operatorname{cn} u$$

$$\frac{\partial \operatorname{am}(u; k)}{\partial u} = \operatorname{dn} u$$

$$\frac{\partial \operatorname{en}(u; k)}{\partial u} = \operatorname{cn}^2 u$$

$$\frac{\partial \operatorname{pn}(u; n, k)}{\partial u} = \frac{1}{1 + n \operatorname{sn}^2(u; k)}$$

# 母数による偏微分

- $m=k^2$ による楕円関数の偏微分(問:示せ)

$$\frac{\partial \operatorname{sn}(u|m)}{\partial m} = \operatorname{cn}(u|m) \frac{\partial \operatorname{am}(u|m)}{\partial m}$$

$$\frac{\partial \operatorname{cn}(u|m)}{\partial m} = -\operatorname{sn}(u|m) \frac{\partial \operatorname{am}(u|m)}{\partial m}$$

$$\frac{\partial \operatorname{dn}(u|m)}{\partial m} = \frac{-\operatorname{sn}(u|m)}{2\operatorname{dn}(u|m)} \left[ \operatorname{sn}(u|m) + 2m\operatorname{cn}(u|m) \frac{\partial \operatorname{am}(u|m)}{\partial m} \right]$$

$$\frac{\partial \operatorname{am}(u|m)}{\partial m} = \operatorname{dn}(u|m) \left[ \frac{\operatorname{pn}(u; -m|m) - u}{2m} \right]$$

# 母数などによる偏微分

- $m$ および $n$ による偏微分(問:示せ)

$$\frac{\partial \text{en}(u | m)}{\partial m} = \frac{\text{en}(u | m) - u}{2m}$$

$$\frac{\partial \text{pn}(u; n | m)}{\partial m} = \frac{1}{2} \left[ u + \frac{\text{pn}(u; -m | m) - \text{pn}(u; n | m)}{m + n} \right]$$

$$\frac{\partial \text{pn}(u; n | m)}{\partial n} = \frac{1}{2(1+n)} \left[ \frac{\text{pn}(u; n | m) - u}{n} + \frac{1-m}{m+n} \text{pn}(u; -m | m) \right. \\ \left. + \frac{\text{sn}(u | m) \text{cn}(u | m)}{\{1 + n \text{sn}^2(u | m)\} \text{dn}(u | m)} \right]$$

# 不完全楕円積分の計算

- 一般不完全楕円積分の数値計算

(Fukushima and Ishizaki 1994b, CMDA)

$$G(\varphi; n_c, m_c, a, b) \equiv \int_0^\varphi \frac{a \cos^2 \theta + b \sin^2 \theta}{(\cos^2 \theta + n_c \sin^2 \theta) \sqrt{\cos^2 \theta + m_c \sin^2 \theta}} d\theta$$

- 基本公式(問: 確かめよ)

$$\lambda F(\varphi; k) + \mu E(\varphi; k) = G(\varphi; 1, 1 - k^2, \lambda + \mu, \lambda + \mu(1 - k^2))$$

$$\lambda F(\varphi; k) + \mu \Pi(\varphi; n, k) = G(\varphi; 1 + n, 1 - k^2, \lambda + \mu, \lambda(1 + n) + \mu)$$



# 一般楕円関数

- 一般不完全楕円積分の楕円関数版

$$\text{gn}(u; n | m, a, b) \equiv G(\text{am}(u | m); 1+n, 1-m, a, b)$$

- 基本公式

$$\lambda u + \mu \text{en}(u | m) = \text{gn}(u; 1, 1-m, \lambda + \mu, \lambda + \mu(1-m))$$

$$\lambda u + \mu \text{pn}(u; n | m) = \text{gn}(u; 1+n, 1-m, \lambda + \mu, \lambda(1+n) + \mu)$$

- 応用その1 (問: 確かめよ)

$$\text{zn}(u | m) = \text{gn}\left(u; 1, 1-m, 1 - \frac{K}{E}, 1-m - \frac{K}{E}\right)$$



# 一般楕円関数の応用

- 応用その2 (問: 確かめよ)
  - 注: 各種の偏微分計算で必要となる

$$\frac{(1-m)u - \text{en}(u|m)}{m} = \text{gn}(u; 1, 1-m, 1, 0)$$

$$\frac{u - \text{pn}(u; n|m)}{n} = \text{gn}(u; 1+n, 1-m, 0, 1)$$

$$\text{fn}(u|m) \equiv \frac{\text{pn}(u; -m|m) - u}{m} = \text{gn}(u; 1-m, 1-m, 0, 1)$$

# 完全楕円積分

- 完全積分 = 不完全積分の定積分

- 第1種 
$$K(k) \equiv F(1; k) = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}}$$

- 第2種 
$$E(k) \equiv E(1; k) = \int_0^1 \sqrt{\frac{1-x^2}{1-k^2x^2}} dx$$

- 第3種

$$\Pi(n, k) \equiv \Pi(1; n, k) = \int_0^1 \frac{ds}{(1+ns^2)\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}}$$

# 完全楕円積分(2)

- 第3種完全楕円積分の別表現 ( $n > 0$  の場合)

$$\Pi(n, k) = \frac{k^2 K(k)}{k^2 + n} + \left(\frac{\pi}{2}\right) \frac{\sqrt{n} \Lambda_0(\beta; k)}{\sqrt{(1+n)(k^2 + n)}} \quad \beta \equiv \tan^{-1} \frac{\sqrt{n}}{k}$$

- ホイマン(Heuman)のラムダ関数

$$\Lambda_0(\beta; k) \equiv \frac{2}{\pi} \left[ \{E(k) - K(k)\} F(\beta; k') + K(k) E(\beta; k') \right]$$

# 完全楕円積分(3)

- 楕円関数の周期:  $4K$ 
  - $K(0) = \pi/2, K(1) = \infty$

- 補数関係

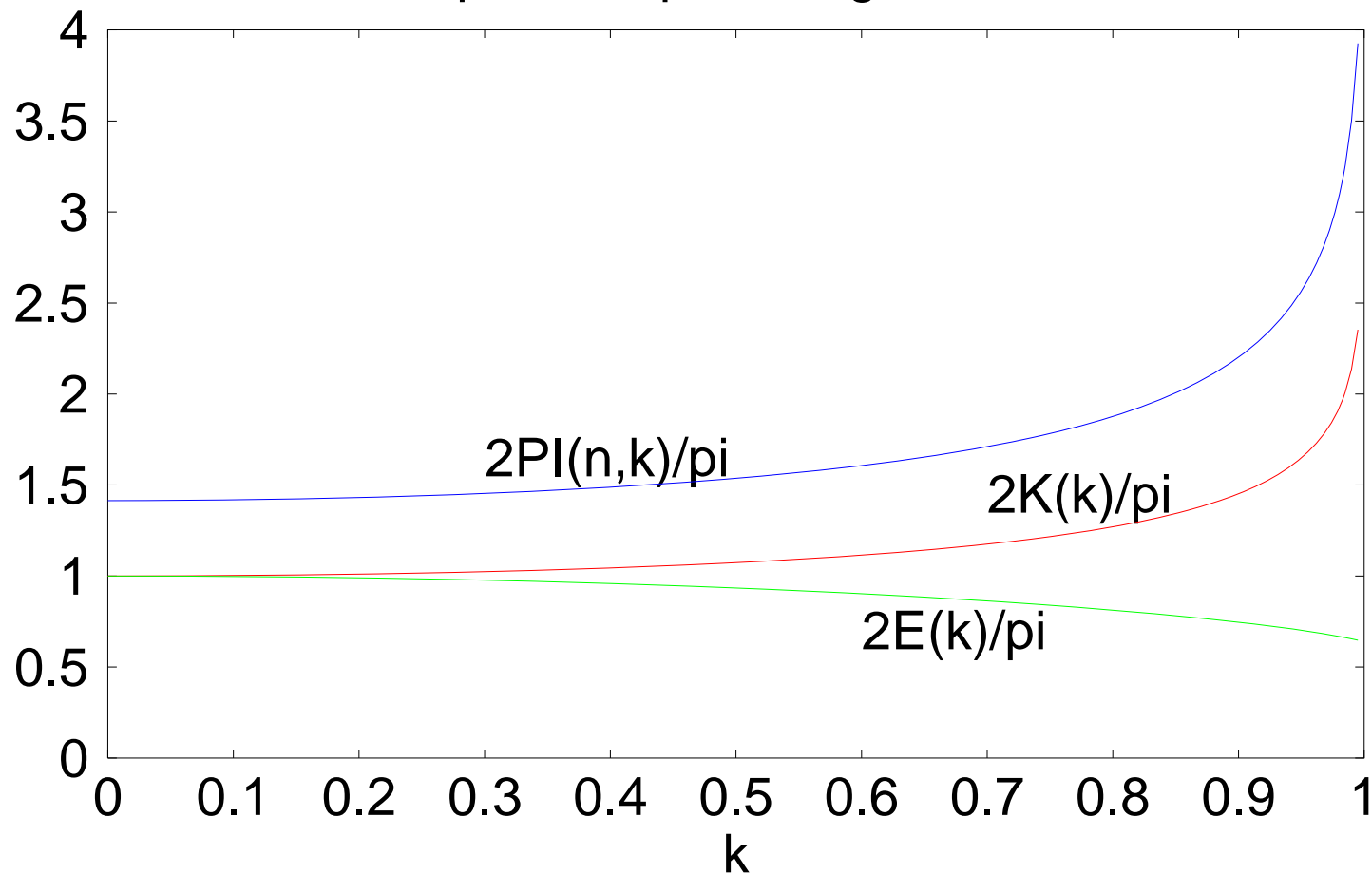
$$K'(k) \equiv K(k'), E'(k) \equiv E(k') \quad k' \equiv \sqrt{1-k^2}$$

- 母数 $k$ を省くことが多い $\rightarrow K, K', E, E'$
- ルジャンドルの関係式

$$\Lambda_0\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = 1 \rightarrow EK' + E'K - KK' = \frac{\pi}{2}$$

# 完全楕円積分のグラフ

Complete Elliptic Integrals:  $n=0.5$



# 完全楕円積分の計算

- 大げさ: 不完全楕円積分の計算ルーチンと呼ぶ
- 定番: 算術幾何平均(Numerical Recipe他)
- 実用的: 母数変換とノーム展開

- 例:  $k^2 < 1/2$  の場合

- 第1種

$$K(k) = 2\pi \left( \frac{1 + 2q^4 + \dots}{1 + \sqrt{k'}} \right)^2$$

- 第2種

$$E(k) = K(k) - \left( \frac{2\pi^2}{K(k)} \right) \left( \frac{q - 4q^4 + 9q^9 - \dots}{1 - 2(q - q^4 + q^9 - \dots)} \right)$$

# 母数が小さいとき

- (母数の二乗である) $m$ の1次までの展開

$$q \approx \frac{m}{16}$$

$$k' \approx 1 - \frac{m}{2}$$

$$K \approx \frac{\pi}{2} \left( 1 + \frac{m}{2} \right)$$

$$E \approx \frac{\pi}{2}$$

$$v \approx \left( 1 - \frac{m}{2} \right) u$$

$$\operatorname{sn} u = \left( 1 + \frac{m}{4} \cos^2 u \right) \sin v$$

$$\operatorname{cn} u = \left( 1 - \frac{m}{4} \sin^2 u \right) \cos v$$

$$\operatorname{dn} u = 1 - \frac{m}{2} \sin^2 u$$

$$\operatorname{zn} u \approx \frac{m}{4} \sin 2u$$

$$\operatorname{enu} = \left( 1 + \frac{m}{2} \right) u + \operatorname{zn} u$$



## 4. 補間と外挿

---

- 補間とは？外挿とは？
- 和分、差分、差分商
- ラグランジュ補間とエルミート補間
- 直交多項式補間
- スプライン補間
- 平面上の補間
- リチャードソンの外挿

# 補間とは？外挿とは？

- = 選点 (collocation) 近似 : 関数近似の一つ
- 標本点で関数値などに一致

$$(x_n, f_n) \quad (n = 0, 1, \dots)$$

$$f(x_n) = f_n \quad (n = 0, 1, \dots)$$

- 応用の対象
  - 標本点区間の内側 : 補間 Interpolation
  - 標本点区間の外側 : 外挿 Extrapolation
- 数値微分・数値積分の諸公式の基礎



# 補間・外挿の分類

---

- 応用区間: 内側(補間) vs 外側(外挿)
- 基底: 多項式、三角多項式、指数多項式
- 基底の台: 大局的 vs 局所的(スプライン)
- 非線形性: 線形 vs 非線形(三角級数など)
- 微分値の利用: ラグランジュ vs エルミート
- 構成法: 一斉的 vs 逐次的(ニュートン)
- 標本点の配置: 等間隔 vs 非等間隔

# 和分

- 和分(mean) = 平均

- 中心和分 = 2者の平均

$$\mu f_n \equiv \frac{f_{n+1/2} + f_{n-1/2}}{2}$$

- 高階和分

- 例: 2階中心和分

$$\mu^2 f_n \equiv \frac{f_{n+1} + 2f_n + f_{n-1}}{4}$$

- 用途

- 差分との組み合わせ: 差分の対称化
- 偏微分方程式の数値解法
- データの平滑化

# 差分

- 差分(difference) = 有限な差

- 桁落ちに注意 → 差分演算子

- 前進(forward)差分  $\Delta f_n \equiv f_{n+1} - f_n$

- 後退(backward)差分  $\nabla f_n \equiv f_n - f_{n-1}$

- 等間隔標本点の場合 = 階差

- 中心(central)差分  $\delta f_n \equiv f_{n+1/2} - f_{n-1/2}$

- 倍幅中心差分  $(\mu\delta) f_n \equiv (f_{n+1} - f_{n-1}) / 2$

- 2階中心差分  $\delta^2 f_n \equiv f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}$

# 階差表

- 高階階差の表
- 前提: 等間隔標本点
  - 常微分方程式の  
数値積分(多段法)

$x_0$	$f_0$			
$x_1$	$f_1$	$\nabla f_1$		
$x_2$	$f_2$	$\nabla f_2$	$\nabla^2 f_2$	
$x_3$	$f_3$	$\nabla f_3$	$\nabla^2 f_3$	$\nabla^3 f_3$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

- 桁落ちに注意
  - 丸め誤差は階数の累乗で増幅される
- 更新アルゴリズム

$$f_{jk} \equiv \nabla^k f_j$$

$$f_{n,0} := f_n; \text{do}(k=1, n) \{ f_{n,k} = f_{n,k-1} - f_{n-1,k-1} \}$$

# 高次元の差分と和分

- 高次元の場合：成分別に適用
- 偏微分方程式の差分化に必須
  - 中心差分、中心和分を多用
  - 例：2次元ラプラシアン（直交座標）の近似
    - 仮定：等方等間隔刻み幅  $\Delta x = \Delta y = h$

$$\left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{n,m} \approx \frac{(\delta_x^2 + \delta_y^2) u_{n,m}}{h^2}$$
$$= (u_{n+1,m} + u_{n-1,m} + u_{n,m+1} + u_{n,m-1} - 4u_{n,m}) / h^2$$



# 差分演算子

- 微小だが有限な差を表現する演算子  $\Delta$

- 定義  $\Delta x \equiv x - x_0$

- 演算法則(問:確かめよ)

- 定数  $\Delta c = 0$

- 加減算  $\Delta(x \pm y) = (\Delta x) \pm (\Delta y)$

- 乗算  $\Delta(xy) = (\Delta x) y_0 + x(\Delta y) = x_0(\Delta y) + (\Delta x) y$

# 基本差分演算

- 問: 導け

- 除算

$$\Delta\left(\frac{y}{x}\right) = \frac{(\Delta y)x_0 - y_0(\Delta x)}{xx_0} = \frac{(\Delta y)x - y(\Delta x)}{xx_0}$$

- 2乗

$$\Delta(x^2) = (x + x_0)(\Delta x)$$

- 3乗

$$\Delta(x^3) = (x^2 + xx_0 + x_0^2)(\Delta x)$$

- 平方根

$$\Delta(\sqrt{x}) = \frac{\Delta x}{\sqrt{x} + \sqrt{x_0}}$$

- 立方根

$$\Delta(\sqrt[3]{x}) = \frac{\Delta x}{(\sqrt[3]{x})^2 + (\sqrt[3]{x})(\sqrt[3]{x_0}) + (\sqrt[3]{x_0})^2}$$

# 基本差分演算(2)

## ■ 三角関数

$$\Delta(\sin x) = 2 \cos\left(\frac{x + x_0}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta x}{2}\right)$$

$$\Delta(\cos x) = -2 \sin\left(\frac{x + x_0}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta x}{2}\right)$$

$$\Delta(\tan x) = (1 + \tan x \tan x_0) \tan(\Delta x)$$

## ■ 逆三角関数

$$\Delta(\tan^{-1} x) = \tan^{-1}\left[\frac{\Delta x}{1 + xx_0}\right]$$

$$\Delta\left[\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)\right] = \tan^{-1}\left[\frac{(\Delta y)x - y(\Delta x)}{xx_0 + yy_0}\right] = \tan^{-1}\left[\frac{(\Delta y)x_0 - y_0(\Delta x)}{xx_0 + yy_0}\right]$$

# 基本差分演算(3)

## ■ 双曲線関数

$$\Delta(\sinh x) = 2 \cosh\left(\frac{x+x_0}{2}\right) \sinh\left(\frac{\Delta x}{2}\right)$$

$$\Delta(\cosh x) = 2 \sinh\left(\frac{x+x_0}{2}\right) \sinh\left(\frac{\Delta x}{2}\right)$$

$$\Delta(\tanh x) = (1 - \tanh x \tanh x_0) \tanh(\Delta x)$$

## ■ 逆双曲線関数

$$\Delta(\tanh^{-1} x) = \tanh^{-1} \left[ \frac{\Delta x}{1 - xx_0} \right]$$

$$\Delta \left[ \tanh^{-1} \left( \frac{y}{x} \right) \right] = \tanh^{-1} \left[ \frac{(\Delta y)x - y(\Delta x)}{xx_0 - yy_0} \right] = \tanh^{-1} \left[ \frac{(\Delta y)x_0 - y_0(\Delta x)}{xx_0 - yy_0} \right]$$

# 基本差分演算(4)

- 指数関数

$$\Delta[\exp(x)] = 2 \exp\left(\frac{x+x_0}{2}\right) \sinh\left(\frac{\Delta x}{2}\right)$$

- 対数関数

$$\Delta(\log x) = \log\left(1 + \frac{\Delta x}{x_0}\right)$$

- 微分

$$\Delta\left(\frac{dy}{dx}\right) = \frac{d(\Delta y)}{dx}$$

- 積分

$$\Delta\left(\int y dx\right) = \int (\Delta y) dx$$



# 基本差分演算(5)

---

- ベクトル

- 成分

$$(\Delta \mathbf{x})_j = \Delta(x_j)$$

- 加減算

$$\Delta(\mathbf{x} \pm \mathbf{y}) = (\Delta \mathbf{x}) \pm (\Delta \mathbf{y})$$

- 内積

$$\Delta(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}) = (\Delta \mathbf{x}) \cdot \mathbf{x} + \mathbf{x}_0 \cdot (\Delta \mathbf{x})$$

- ベクトル積

$$\Delta(\mathbf{x} \times \mathbf{y}) = (\Delta \mathbf{x}) \times \mathbf{y} + \mathbf{x}_0 \times (\Delta \mathbf{y})$$

# 基本差分演算(6)

## ■ 行列

$$(\Delta \mathbf{A})_{jk} = \Delta(A_{jk})$$

### ■ 成分

### ■ 転値

$$\Delta(\mathbf{A}^T) = (\Delta \mathbf{A})^T$$

### ■ 加減算

$$\Delta(\mathbf{A} \pm \mathbf{B}) = (\Delta \mathbf{A}) \pm (\Delta \mathbf{B})$$

### ■ 乗算

$$\Delta(\mathbf{A}\mathbf{B}) = (\Delta \mathbf{A})\mathbf{B} + \mathbf{A}_0(\Delta \mathbf{B})$$

### ■ 逆行列

$$\Delta(\mathbf{A}^{-1}) = -(\mathbf{A}_0)^{-1}(\Delta \mathbf{A})\mathbf{A}^{-1}$$

# 差分演算の応用

- 1. 万有引力の加速度 (**エンケ法**で活用)

$$\Delta \left( \frac{-\mu \mathbf{x}}{r^3} \right) = -\mu \left[ \left( \frac{1}{r^3} \right) \Delta \mathbf{x} - \left( \frac{1}{r^3 r_0^3} \right) \left\{ \frac{(\mathbf{x} + \mathbf{x}_0) \cdot \Delta \mathbf{x}}{r + r_0} \right\} \mathbf{x}_0 \right]$$

- 2. ルジャンドル陪多項式の差分

$$\Delta P_0^0 = 0, \Delta P_1^0 = \Delta \sin \beta, \Delta P_1^1 = \Delta \cos \beta,$$

$$\Delta P_{m+1}^{m+1} = (2m+1) \left[ (\Delta \cos \beta) P_m^m + \cos \beta_0 (\Delta P_m^m) \right]$$

$$\Delta P_{n+1}^m = \frac{2n+1}{n-m+1} \left[ (\Delta \sin \beta) P_n^m + \sin \beta_0 (\Delta P_n^m) \right] - \frac{(n+m) \Delta P_{n-1}^m}{n-m+1}$$

# 差分商

- ニュートンの**差分商** (Divided Difference)

- 定義

$$f[x_n] \equiv f(x_n), \quad f[x_{n-1}, x_n] \equiv \frac{\nabla f_n}{\nabla x_n} = \frac{f_n - f_{n-1}}{x_n - x_{n-1}},$$

$$f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] \equiv \frac{f[x_{n-2}, x_{n-1}] - f[x_{n-1}, x_n]}{x_{n-2} - x_n}, \quad \dots$$

$$f[x_{n-k}, \dots, x_n] \equiv \frac{f[x_{n-k}, \dots, x_{n-1}] - f[x_{n-k+1}, \dots, x_n]}{x_{n-k} - x_n}, \quad \dots$$

- 重要: 標本点列の順序に**依存しない** (問: 示せ)

# 差分商(2)

## ■ 差分商の性質

- 微分の「ある種の」**拡張**
- 全ての標本点が同一なら微分値に比例

$$f \left[ \underbrace{x, \dots, x}_{n+1} \right] = \frac{f^{(n)}}{n!}$$

- 標本点が等間隔で順番に並んでいる場合

$$x_{n-k} = x_n - kh \rightarrow f \left[ x_{n-k}, \dots, x_n \right] = \frac{\nabla^k f_n}{k! h^k}$$

# 差分商の計算

- 差分商表  $f_{ij\dots k} \equiv f[x_i, x_j, \dots, x_k]$

$$x_0 \quad F_{00} \equiv f_0$$

$$x_1 \quad F_{11} \equiv f_1 \quad F_{10} \equiv f_{10}$$

$$x_2 \quad F_{22} \equiv f_2 \quad F_{21} \equiv f_{21} \quad F_{20} \equiv f_{210}$$

$$x_3 \quad F_{33} \equiv f_3 \quad F_{32} \equiv f_{32} \quad F_{31} \equiv f_{321} \quad F_{30} \equiv f_{3210}$$

$$\vdots$$
$$\vdots$$
$$\vdots$$
$$\vdots$$
$$\vdots$$

- 更新アルゴリズム (桁落ちに注意)

$$F_{n,n} := f_n; \text{do}(k=n-1, 0, -1) \left\{ F_{n,k} = (F_{n,k+1} - F_{n-1,k}) / (x_n - x_k) \right\}$$

# 差分商の計算(2)

- 同一点を含む場合

$$f_{kk} \equiv \frac{f'_k}{2}, f_{kkk} \equiv \frac{f''_k}{6}, \dots$$

- 更新アルゴリズム

- 逆引き配列j(n)を用意

- 上記の場合

$$\begin{aligned} j(0) &= 0, j(1) = 0 \\ j(2) &= 1, j(3) = 1 \\ &\dots \end{aligned}$$

$$\begin{array}{lllll} y_0 = x_0 & F_{00} = f_0 & & & \\ y_1 = x_0 & F_{10} = f_0 & F_{10} & & \\ y_2 = x_1 & F_{20} = f_1 & F_{21} & F_{20} & \\ y_3 = x_1 & F_{30} = f_1 & F_{32} & F_{31} & F_{30} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array}$$

$$\begin{aligned} &y_n := x_{j(n)}; F_{n,n} := f_{j(n)}; \text{do}(k=n-1, 0, -1) \{ \\ &\text{if } (j(n) = j(k)) \text{ then } \{ F_{n,k} := f_{j(n)}^{(n-k)} / (n-k)! \} \\ &\text{else } \{ F_{n,k} := (F_{n,k+1} - F_{n-1,k}) / (y_n - y_k) \} \} \end{aligned}$$

# ラグランジュ補間

- 補間の代表

- 多項式、関数値のみ利用、一斉的構成

- ラグランジュ補間公式

$$P_L(x) \equiv \sum_n f_n L_n(x)$$

- ラグランジュ多項式

- 選点直交性  $L_n(x_k) \equiv \delta_{nk}$

- ラグランジュ補間の欠点

$$L_n(x) \equiv \prod_{k \neq n} \frac{x - x_k}{x_n - x_k}$$

- 等間隔補間の場合: ルンゲの現象
- 一斉的構成: 点数の追加に対応が困難



# ルンゲ(Runge)の現象

- 等間隔補間の**破綻**の典型
  - 標本点を増やせば増やすほど精度が劣化する
  - 補間される関数が実軸上に近い極を持つとき
    - 詳細は森(2002)、二宮(2002)を参照
- 問:  $f(x) = 1/(1+x^2)$  に、区間  $[0, 1]$  において、両端を含む等間隔標本点でのラグランジュ補間を試み、ルンゲの現象を確認せよ
  - 注意: (ローレンツ分布関数)  $f(x)$  の極は  $\pm i$

# ニュートン補間

- 実用的な補間
  - 多項式、関数値のみ利用、逐次的構成
- ニュートン補間公式: **差分商**の活用

- 補間点の追加が容易
- 問: ラグランジュ補間公式との等価性を示せ

$$\begin{aligned} P_N(x) &\equiv f[x_0] \\ &+ f[x_0, x_1](x - x_0) \\ &+ f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\ &+ f[x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &+ \cdots + f[x_0, \cdots, x_n] \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k) + \cdots \end{aligned}$$

# ニュートン補間(2)

- 等間隔標本点の場合  $x_n = x_0 + nh$

$$s \equiv \frac{x - x_n}{h}$$

- ニュートン階差公式

$$f(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \binom{s+m-1}{m} \nabla^m f_n = f_n + s \nabla f_n + \frac{s(s+1)}{2} \nabla^2 f_n + \dots$$

- 一般化二項係数

$$\binom{s+m-1}{m} \equiv \frac{(s)_m}{m!} = \frac{\Gamma(s+m)}{m! \Gamma(s)}$$

# 逐次多項式補間

- 用途: 1点(x)での補間値だけ欲しいとき
- **エイトキン・ネビル**(Aitken-Neville) の方法
  - 更新公式(問: ニュートン補間公式から導け)
  - 右下端が最良近似列

$$T_{n,0} = f_n$$

$$T_{n,k} = T_{n,k-1} + \frac{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-1}}{\frac{x - x_{n-k}}{x - x_n} - 1}$$

$$x_0 \quad f_0 = T_{00}$$

$$x_1 \quad f_1 = T_{10} \quad T_{11}$$

$$x_2 \quad f_2 = T_{20} \quad T_{21} \quad T_{22}$$

$$x_3 \quad f_3 = T_{30} \quad T_{31} \quad T_{32} \quad T_{33}$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots$$

# 逐次有理関数補間

- **ブリシュ・シュテアー** (Burlisch-Stoer)の方法
  - 更新公式 (パデ近似の応用)

- 問: 導け

$$T_{n,0} = f_n$$

$$T_{n,1} = T_{n,0} + \frac{T_{n,0} - T_{n-1,0}}{\left(\frac{x - x_{n-1}}{x - x_n}\right) \left(1 + \frac{T_{n-1,0}}{T_{n,0}}\right) - 1}$$

$$T_{n,k} = T_{n,k-1} + \frac{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-1}}{\left(\frac{x - x_{n-k}}{x - x_n}\right) \left(1 - \frac{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-1}}{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-2}}\right) - 1}$$

# エルミート補間

- 微分値も利用できる場合

- 不定積分、常微分方程式の数値解など

- エルミート補間公式

$$P_H(x) \equiv \sum_{i=0}^m \sum_{k=0}^{n_i-1} f_i^{(k)} L_{ik}(x)$$

- 拡張ラグランジュ多項式

- 補助多項式

- 定義漸化式

$$\ell_{ik}(x) \equiv \frac{(x-x_i)^k}{k!} \sum_{j=0, j \neq i}^m \left( \frac{x-x_i}{x_i-x_j} \right)^{n_j}$$

$$L_{i,n_i-1}(x) = \ell_{i,n_i-1}(x), L_{ik}(x) = \ell_{ik}(x) - \sum_{j=k+1}^{n_i-1} \ell_{ik}^{(j)}(x) L_{ij}(x)$$

# エルミート補間(2)

- ニュートン・エルミート補間公式: 実用的
  - 例: 2点3階=5次多項式

$$\begin{aligned} P_H(x) &\equiv f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) \\ &+ f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)(x - x_1) \\ &+ f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1) \\ &+ f[x_0, x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1)^2 \\ &+ f[x_0, x_0, x_0, x_1, x_1, x_1](x - x_0)^3(x - x_1)^2 \end{aligned}$$

# エルミート補間(3)

- 重要: エルミート補間多項式の微分は、元の関数の微分を、**それなりに**近似する
  - 運動方程式の数値解から位置・速度の近似多項式が構成可能: 2点3階の例

$$\begin{aligned} P'_H(x) = & f[x_0, x_1] + f[x_0, x_0, x_1](2x - x_0 - x_1) \\ & + f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)(3x - x_0 - 2x_1) \\ & + f[x_0, x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)(x - x_1)(4x - 2x_0 - 2x_1) \\ & + f[x_0, x_0, x_0, x_1, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1)(5x - 2x_0 - 3x_1) \end{aligned}$$

# エルミート補間の例

- 2点2階3次多項式
- 両端での値と微分値の線形結合表現

$$P(x) = f(x_0)Q_0^0(\xi) + f(x_1)Q_1^0(\xi) + f'(x_0)Q_0^1(\xi) + f'(x_1)Q_1^1(\xi)$$

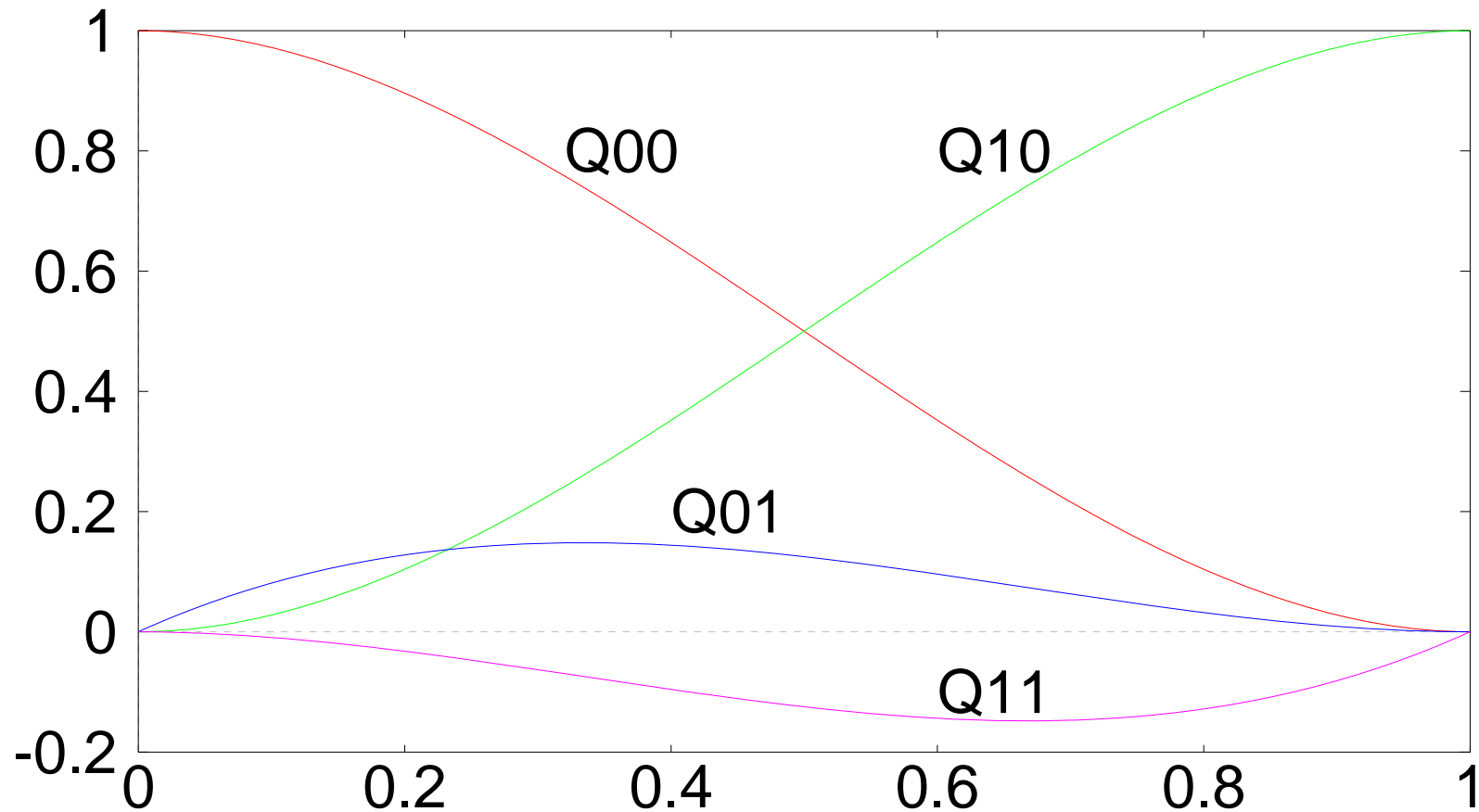
- 標準変数  $\xi \equiv (x - x_0) / (x_1 - x_0)$   $0 \leq \xi \leq 1$
- 基底多項式 (問: 示せ)

$$Q_0^0(\xi) \equiv (1 - \xi)^2 (2\xi + 1) \quad Q_0^1(\xi) \equiv (1 - \xi)^2 \xi$$

$$Q_1^0(\xi) \equiv \xi^2 (3 - 2\xi) \quad Q_1^1(\xi) \equiv \xi^2 (\xi - 1)$$

# エルミート補間の例(2)

## ■ 2点2階3次基底多項式



# 直交多項式補間

## ■ 選点直交多項式

$$f(x) = \sum_{j=0}^n c_j \psi_j(x)$$

- 定義: 標本点で離散直交関係を満足

$$\sum_{i=0}^n w_i \psi_j(x_i) \psi_k(x_i) = \lambda_k \delta_{jk}$$

$$\psi_{n+1}(x_k) = 0$$

- 標本点*i*での重み:  $w_i$
- 実用的な標本点: 高次直交多項式のゼロ点
- 正規化係数  $\lambda_n$

## ■ 補間公式(問: 示せ)

$$c_j = \frac{1}{\lambda_j} \sum_{i=0}^n w_i \psi_j(x_i) f(x_i)$$



# 直交多項式補間(2)

- 代表的な直交多項式

名称	記号	補間区間	重み関数	正規化係数 $\lambda_n$
ルジャンドル	$P_n(x)$	$[-1, 1]$	1	$2/(2n+1)$
チェビシェフ	$T_n(x)$	$[-1, 1]$	$(1-x^2)^{-1/2}$	$\varepsilon_n \pi/2$ ( $\varepsilon_0=2, \varepsilon_{n \neq 0}=1$ )
ラゲル	$L_n(x)$	$[0, \infty)$	$\exp(-x)$	1
エルミート	$H_n(x)$	$(-\infty, \infty)$	$\exp(-x^2)$	$(\pi)^{1/2} 2^n n!$

# チェビシェフ補間

- チェビシェフ補間 = 離散チェビシェフ展開

$$f(x; c) = \frac{c_0}{2} + \sum_{k=1}^n c_k T_k(x)$$

- チェビシェフ多項式の選点直交性 (問: 示せ)

$$\frac{2}{n} \sum_{i=1}^n T_j(x_i^{(n)}) T_k(x_i^{(n)}) = \varepsilon_k \delta_{jk}$$

$$x_k^{(n)} \equiv \cos \left[ \frac{(2k-1)\pi}{2n} \right]$$

- チェビシェフ補間係数 (問: 示せ)

$$c_k = \frac{2}{\varepsilon_k n} \sum_{j=1}^n g(x_j^{(n)}) T_k(x_j^{(n)})$$



# スプライン補間

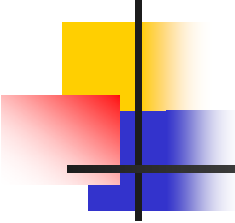
---

- スプライン(spline) = 自在定規
- 区分多項式の種類
  - 折れ線を $n$ 回積分 $\rightarrow n+1$ 次スプライン
  - 自然(natural)スプライン
  - 正規(cardinal) スプライン
  - 基底(basis)スプライン = B-スプライン
  - 3次(cubic)スプライン: 実用的
  - 秋間(Akima)スプライン: 日本の誇り

# 正規スプライン

- 選点直交性  $C_k(x_j) = \delta_{kj}$
- 欠点1: 余分な決定条件が必要
  - N次ならN+1個: 普通、両端の高階微分値を0
- 欠点2: 計算量が多い
- 長所: 同じ標本点→2回目以降が簡単
  - 補間表現が直接的

$$f(x; x_1, \dots, x_N) = \sum_{k=1}^N f_k C_k(x)$$



# B-スプライン

---

- 基底(basis)スプライン
- 性質 or 定義づけ
  - 与えられた $n+1$ 個の標本点:  $x_0, x_1, \dots, x_n$
  - 標本点の外側では恒等的に0
  - 各小区間で $n$ 次多項式
  - 各標本点で $n-1$ 階微分値まで連続
- 特徴: **凸型形状**

# 3次スプライン

## ■ 特徴1: 曲率最小化

- 3次の自然スプラインは曲率のL2ノルムを最小化

$$\min \int [f''(x)]^2 dx$$

- (ある意味で) 最も滑らかな近似

## ■ 特徴2: そこそこ高精度 & 計算が容易

- 仮定: 標本点  $x_i$  で関数値と1階微分値が既知
- $\rightarrow [x_i, x_{i+1}]$  でエルミート3次補間多項式は確定
- 三重対角の連立1次方程式の解法に帰着



# 3次スプライン(2)

---

- 3次スプラインの決定法
  - $f_k$ は既知なので未知数 $f'_k$ を求める
    - 注: 2階微分値を未知数として求める手法もある
- 標本点で2階微分が連続 $\rightarrow f'_k$ の方程式
  - 問: (連立1次)方程式を具体的に導け
- 係数行列は**三重対角** $\rightarrow$ 簡単な解法(後述)
  - 注意: 両端での微分値( $f'_0, f'_N$ )が必要

# 3次スプライン(3)

## ■ 重要: 両端の微分値の指定法

$$f'_0 \cong \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}$$

- 1. 最も身近な差分商で近似
- 2. 近似多項式の両端での2階微分値=0
  - 3次自然スプライン
- 3. 近似多項式の両端での3階微分値=0
  - 別名:Pスプライン
- 上記2. or 3. のいずれも条件式が追加
  - 問: 追加の条件式を導け

# 3次スプライン(4)

- 等間隔標本点の場合 (間隔=h)

- 連立方程式の主要部分

$$f'_{k-1} + 4f'_k + f'_{k+1} = \frac{3}{h}(f_{k+1} - f_{k-1})$$

- 境界部分: 自然スプライン

$$2f'_0 + f'_1 = \frac{3}{h}(f_1 - f_0)$$

$$f'_{N-1} + 2f'_N = \frac{3}{h}(f_N - f_{N-1})$$

- 境界部分: Pスプライン

$$f'_0 + f'_1 = \frac{2}{h}(f_1 - f_0)$$

$$f'_{N-1} + f'_N = \frac{2}{h}(f_N - f_{N-1})$$

# 秋間 (Akima) スプライン

- 特徴: そこそこの精度 & 計算が**高速**
  - Akima (1970, J. ACM): 3次スプラインの1種
  - 近傍5点のデータだけから1階微分値を推定
  - →両端点では2次式に退化
  - 微分値推定公式: 両側差分商の重み付き平均

$$f'_n \approx (w_- f[x_n, x_{n-1}] + w_+ f[x_n, x_{n+1}]) / (w_- + w_+)$$

$$w_{\pm} \equiv |f[x_n, x_{n\pm 1}] - f[x_{n\pm 1}, x_{n\pm 2}]|$$

# 問：解析関数の補間

- 以下の解析関数について、補間区間をいろいろ変えて、下記の補間を試み、その優劣（精度、計算時間）を論じよ
  - 等間隔ラグランジュ、等間隔エルミート、ルジャンドル、チェビシェフ、3次自然スプライン、秋間スプライン
- 1. ローレンツ分布関数  $f_1(x) = \frac{1}{1+x^2}$
- 2. 正規分布関数  $f_2(x) = \exp(-x^2)$
- 3. 低次シュトゥンプ関数;  $C_0, C_1$



# 平面上の補間

---

- 安直:  $xy$ 各次元ごとに補間
  - 例: 双3次スプライン、双Akimaスプライン
  - 難点: 座標系依存性、任意領域に適用困難
- 本格的: **デローネ(Delone)三角分割**
  - 本来: 測地網の最適化理論
  - 双対=ボロノイ(Voronoi)多角形分割
  - 最低次: 各三角形ごとに折れ面(1次式)補間
  - 次の段階: Akima 2次元スプライン bivar.f



# 外挿

---

- 外挿 = 標本点の外側で近似すること
- 補間は安全 ⇔ 外挿は危険
- 問: 以下の例で確かめよ
  - 1.  $\sin(x)$ を区間 $[0,1]$ で多項式補間
    - 標本点: 両端点を含む等間隔の $n+1$ 点
  - 2.  $[0,1]$ の外側で補間式の誤差を図示
  - 3. 「 $n$ を増加 → 誤差が急激に増加」を確認せよ



# リチャードソンの外挿

- 非常に重要: 数値計算全般に**応用可能**
  - Richardson (1910, 1927) 天気数値予報の始祖
- 有限刻み幅 $h$ の離散計算結果を $h=0$ へ**外挿**
  - $h=0$ : 実現不可能だが、手法によらず誤差0
  - $h$ を変えて計算→計算値から補間表を構成
- 外挿の逐次近似アルゴリズム
  - 多項式: エイトキン・ネビル
  - 有理式: ブリシュ・シュテアー

# リチャードソンの外挿(2)

## ■ 発想: 誤差項の逐次消去

- 0. 仮定: 計算値は $h$ のテイラー級数で展開可能  
(多項式外挿の場合)  $T(h) = T^{(0)} + T^{(p)}h^p + \dots$

- 1. 異なる $h$ での計算  
結果を2つ用意  
 $T_1 \equiv T(h_1) = T^{(0)} + T^{(p)}h_1^p + \dots$   
 $T_2 \equiv T(h_2) = T^{(0)} + T^{(p)}h_2^p + \dots$

- 2. 主要誤差項を消去

- 3. 反復 
$$T^{(0)} = \frac{T_2 h_1^p - T_1 h_2^p}{h_1^p - h_2^p} + \dots = T_2 + \frac{T_2 - T_1}{(h_1 / h_2)^p - 1} + \dots$$

# リチャードソンの外挿(3)

- 刻み幅変更法の王道 = 整数分割:  $h=H/n$
- 代表的な分割数列
  - ロンバーグ (Romberg) 列  $1, 2, 4, 8, \dots, 2^n, \dots$
  - ブリシュ列  $1, 2, 3, 4, 6, \dots, 2^n, 3 \times 2^{n-1}, \dots$
  - 調和 (harmonic) 列  $1, 2, 3, 4, \dots, n, \dots$
- $h$  の偶数乗展開 → 収束が高速
  - 関数の数値積分: ロンバーグ法
  - 常微分方程式の初期値問題: グラッグ法

# リチャードソンの外挿(4)

- hの偶数乗展開

$$T(h) = T^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} T^{(k)} h^{2k}$$

- ロンバーク列、多項式補間アルゴリズム

- 更新公式
- 数値積分で有用

$$T_{n,k} = T_{n,k-1} + \frac{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-1}}{4^k - 1}$$

- 調和列、多項式補間アルゴリズム

- 更新公式
- 常微分方程式の数値解法で有用

$$T_{n,k} = T_{n,k-1} + \frac{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-1}}{\left(\frac{n}{n-k}\right)^2 - 1}$$



# 5. 関数の近似

---

- 発想: 標本点での一致 → 区間内で最も近い
  - 「近い」= 関数空間での相互距離が小さい
- 距離の三大定義
- 最小2乗近似
  - フーリエ展開、離散フーリエ展開
- ミニマックス近似
  - チェビシェフ展開

# 関数の近似(2)

- $L_n$ ノルム

$$L_n(f, g) \equiv \sqrt[n]{\int |f(x) - g(x)|^n dx}$$

- 距離の三大定義 ( $n=1, 2, \infty$ )

- $L_1$ : 通常は使われない

- $L_2$ : 最小2乗近似、計算しやすい

- $L_\infty$ : **ミニマックス**近似、別名「最良近似」

→ 実現は難しい、チェビシェフ展開で代用



# 関数の近似(3)

---

- 近似基底関数の三大構成法
- 大局的 (例: フーリエ近似)
  - 全区間で定義、全区間で有限値
- 完全局所的 (例: スプライン近似)
  - ある区間だけで定義、外部ではゼロ
- 部分局所的 (例: ウェーブレット近似)
  - 全区間で定義、ある区間以外でほぼゼロ

# 最小2乗近似

## ■ 最小2乗近似の定義

- 近似誤差の重み付き2乗積分を**最小化**

$$\min_p \int [\varepsilon(x; p)]^2 w(x) dx \quad \varepsilon(x; p) \equiv g(x) - f(x; p)$$

- $w(x)$ : 重み関数 = 積分密度 = 分布関数

## ■ 近似関数の決定方法

- 1. 「パラメータ $p$ についての偏微分=0」を解く
- 2. 近似関数 $f$ が $p$ について線形なら  
線形最小2乗法を解く

# 最小2乗近似(2)

- 例:  $g(x) = \sin(x)$  を  $[0, 1]$  で1次関数近似

- 重み=1, 近似関数  $f(x) = a' + b'x$

- 正規方程式

$$\begin{pmatrix} A_0 & A_1 \\ A_1 & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_0 \\ B_1 \end{pmatrix}$$

$$A_k = \int_0^1 x^k dx, B_k = \int_0^1 x^k \sin x dx$$

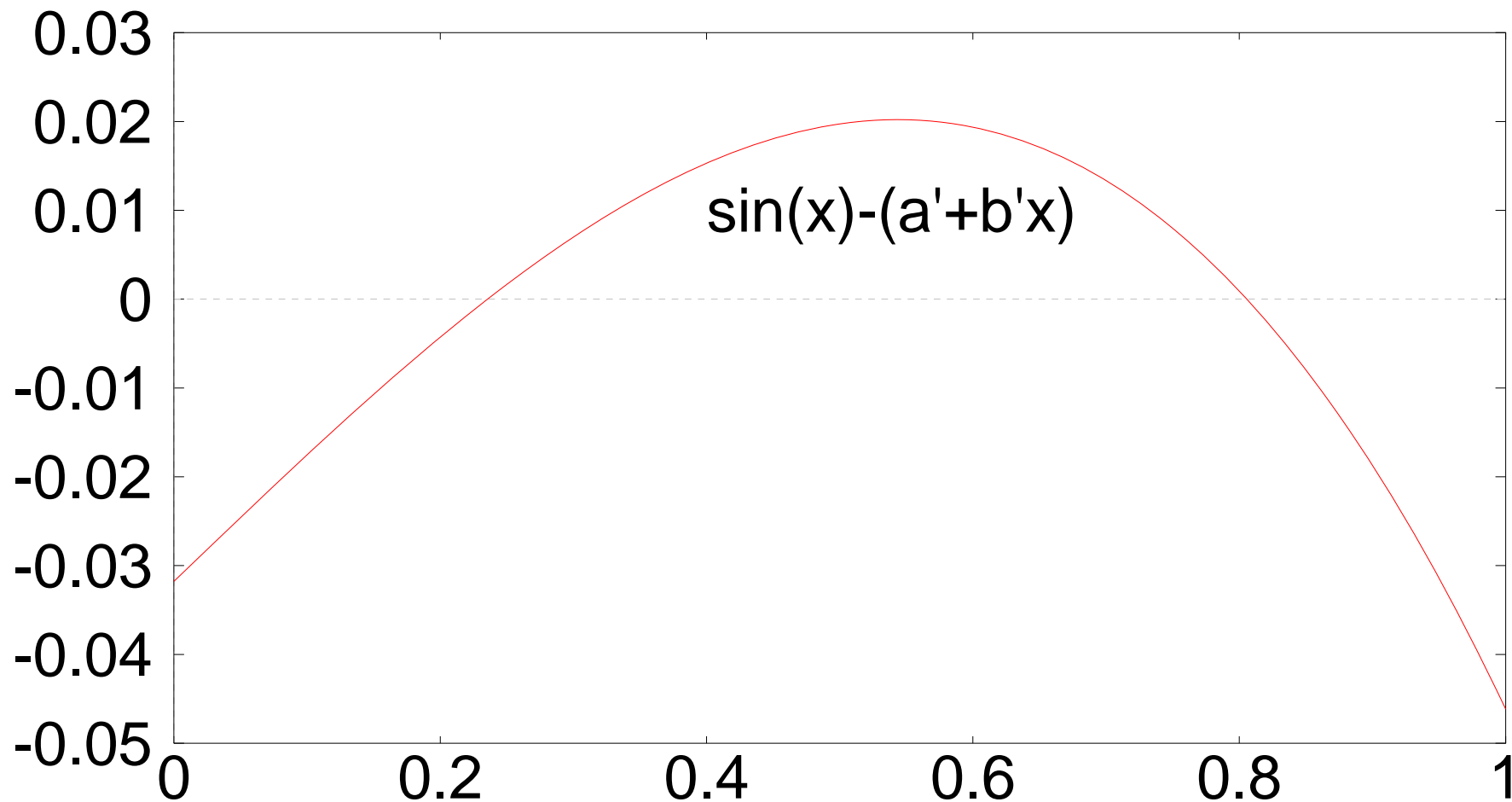
- 解

$$a' = 4 + 2 \cos 1 - 6 \sin 1 \sim 0.0318$$

- 問: 導け

$$b' = -6 - 6 \cos 1 + 12 \sin 1 \sim 0.8558$$

# 最小二乘近似(3)





# 直交多項式近似

- **ランク落ちしない** 最小2乗近似の秘策
- 理想形: 正規方程式の係数が対角行列

- 近似関数

$$f(x) = \sum_{j=0}^n c_j \psi_j(x)$$

- 直交多項式

$$\int \psi_j(x) \psi_k(x) w(x) dx = \lambda_j \delta_{jk}$$

- 近似係数公式

$$c_j = \frac{1}{\lambda_j} \int \psi_j(x) f(x) w(x) dx$$

# フーリエ展開

- 周期関数  $g$  (周期  $2\pi$ ) を最小2乗近似
- 近似区間:  $[0, 2\pi)$

$$\min_p \int_0^{2\pi} [\varepsilon(\theta; p)]^2 d\theta$$

$$\varepsilon(\theta; p) \equiv g(\theta) - f(\theta; p)$$

- 近似関数: フーリエ級数

$$f(\theta; c, s) = \frac{c_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (c_k \cos k\theta + s_k \sin k\theta)$$

# フーリエ展開(2)

- 三角関数の直交性 (問: 示せ)

$$\int_0^{2\pi} \cos j\theta \cos k\theta d\theta = \varepsilon_k \delta_{jk} \pi$$

$$\int_0^{2\pi} \sin j\theta \sin k\theta d\theta = \delta_{jk} \pi$$

$$\int_0^{2\pi} \sin j\theta \cos k\theta d\theta = 0$$

$$\varepsilon_0 \equiv 2, \quad \varepsilon_k \equiv 1 \quad (k \neq 0)$$

- フーリエ級数の最小2乗近似係数 (問: 示せ)

$$c_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} g(\theta) \cos k\theta d\theta$$

$$s_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} g(\theta) \sin k\theta d\theta$$

# 離散フーリエ展開

- 周期関数 $g$ (周期 $2\pi$ )を**離散**最小2乗近似
  - 近似関数:  $2n+1$ 個の三角多項式

$$f(\theta; c, s) = \frac{c_0}{2} + \sum_{k=1}^n (c_k \cos k\theta + s_k \sin k\theta)$$

- $[0, 2\pi)$ 中の $2n$ 個の等間隔標本点
- 積分 $\rightarrow$ 台形則による**離散和**

$$\theta_j^{(n)} = \frac{j\pi}{n}$$

$$\min_p \sum_{j=0}^{2n} \left[ \varepsilon(\theta_j^{(n)}; p) \right]^2$$

$$\sum_{j=0}^N A_j \equiv \frac{A_0 + A_N}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} A_j$$

# 離散フーリエ展開(2)

- 三角多項式の選点直交性 (問: 示せ)

$$\sum_{i=0}^{2n-1} \cos j\theta_i^{(n)} \cos k\theta_i^{(n)} = \varepsilon_k \delta_{jk} n$$

$$\sum_{i=0}^{2n-1} \sin j\theta_i^{(n)} \sin k\theta_i^{(n)} = \delta_{jk} n$$

$$\sum_{i=0}^{2n-1} \sin j\theta_i^{(n)} \cos k\theta_i^{(n)} = 0$$

- 離散フーリエ展開係数 (問: 示せ)

$$c_k = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{2n-1} g(\theta_j^{(n)}) \cos k\theta_j^{(n)}$$

$$s_k = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{2n-1} g(\theta_j^{(n)}) \sin k\theta_j^{(n)}$$

# ミニマックス近似

## ■ ミニマックス (mini-max) 近似の定義

- 近似誤差の最大(max)絶対値を最小(mini)化

$$\min_p \left[ \max |\varepsilon(x; p)| \right]$$

$$\varepsilon(x; p) \equiv g(x) - f(x; p)$$

## ■ ミニマックス近似の誤差関数の特徴

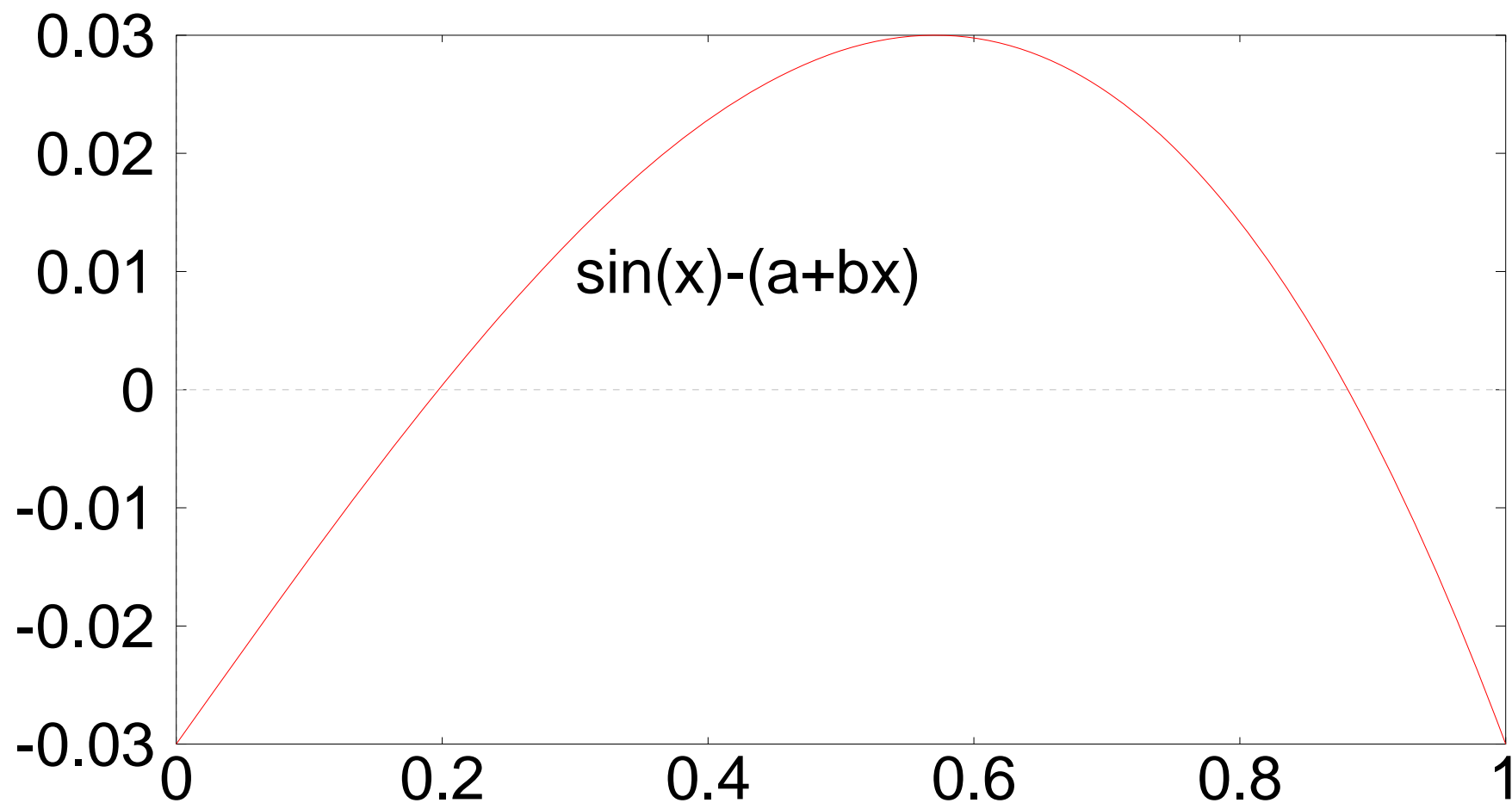
- 1. 両端で絶対値最大
- 2. 全ての極値は符号が交代で絶対値が同じ
- 3. 近似関数がn次多項式→極値はn+2個

# ミニマックス近似(2)

- 例:  $g(x) = \sin(x)$  を  $[0, 1]$  で 1 次関数近似
- 誤差関数のミニマックス条件  $f(x) = a + bx$ 
  - A: 1次式なので極値は(両端を含めて)3個
  - B: 両端で同じ(負)値  $\varepsilon(1) = \varepsilon(0) = -a < 0$
  - C: 中間点で最大値  $\varepsilon'(x) = 0, \varepsilon(x) = a$
- 解(問:導け)

$$a = \frac{1}{2} \left[ \sin\left(\frac{\pi}{2} - 1\right) - \left(\frac{\pi}{2} - 1\right)(\sin 1) \right] \sim 0.0300, \quad b = \sin 1 \sim 0.8415$$

# ミニマックス近似(3)



# チェビシエフ展開

- フーリエ展開で**変数変換**  $x = \cos \theta$

- 近似区間:  $[-1, 1]$

- 近似関数

- チェビシエフ級数

$$f(x; c) = \frac{c_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} c_k T_k(x)$$

- チェビシエフ展開係数 (問: 示せ)

$$c_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{g(x) T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$$



# 6. 連立1次方程式

---

- 方程式の分類
  - 線形と非線形、1次元と多次元
- 線形1次元: 自明
- 線形多次元: 連立1次方程式の解法
  - 定番: ガウス、コレスキー、SOR、PCG
- 非線形1次元: 複雑、ニュートン法など
- 非線形多次元: 難解、準ニュートン法など

# 連立1次方程式(2)

- 膨大な知識の蓄積

$$Ax = b$$

- A: 正方行列

- 重要: 逆行列 ( $N^3$  の計算量) の利用を避ける

- 定番: **良いライブラリ**あり

- 一般密行列: ガウスの消去法

- 対称密行列: コレスキー法

- 近似解が既知: 加速緩和法 (SOR)、共役傾斜法

- 疎行列: 形態に応じて種々の方法

# 右上三角行列の場合

- もっとも単純
- 後退代入
  - 最下行から順次に

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ 0 & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$x_n = \frac{b_n}{A_{n,n}}, x_{n-1} = \frac{b_{n-1} - A_{n-1,n}x_n}{A_{n-1,n-1}}, \dots,$$

$$x_{n-k} = \frac{1}{A_{n-k,n-k}} \left( b_{n-k} - \sum_{j=0}^{k-1} A_{n-k,n-j} x_{n-j} \right), \dots$$

# ガウスの消去法

- 時間はかかるが汎用で強力

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

- 背景思想: 行列のLU分解

- Lは左下三角、Uは右上三角

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

- アルゴリズム

- 1. 前進消去

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b}$$

- 2. 後退代入

$$\mathbf{x} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{b}$$

- 欠点: Uは直接求められない

# ガウスの消去法(2)

## ■ 第1段

- 1行目を使って  
(j,1)成分を消去

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$A'_{jk} = A_{jk} - \left( \frac{A_{j1}}{A_{11}} \right) A_{1k}$$

$$b'_j = b_j - \left( \frac{A_{j1}}{A_{11}} \right) b_1$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ 0 & A'_{22} & \cdots & A'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & A'_{n1} & \cdots & A'_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{pmatrix}$$



# ガウスの消去法(3)

- 第2段以降: 右下の小行列で繰り返す
- 問題点: **ピボット**(=対角成分)が0のとき
  - 対策: 行and/or列の入れ替え
  - **完全**選択: 絶対値最大となるように行も列も
    - 安全だがコードが複雑化
  - **部分**選択: 絶対値最大となるように行だけ
    - コスト・パフォーマンスに優れる←お勧め
- 破局: どの成分も、ほぼ0→ランク落ち
  - 一つの処方: すべて強制的に0

# LU分解 (decomposition)

- ガウスの消去法で同一のAを繰り返し使う  
→ LとUを保存しておくで便利
- LU分解の不定性 → 三大流儀
  - ドリトル(Doolittle)法  $L_{kk} = 1$
  - クラウト(Crout)法  $U_{kk} = 1$
  - LDV分解  $\mathbf{A} = \mathbf{LDV}$   $L_{kk} = V_{kk} = 1, D_{jk} = 0 (j \neq k)$
- 詳細は数学ライブラリを参照
  - 忠告: 自己流はやめて既存ライブラリを使え



# LU分解の応用

- 行列式の計算

$$|A| = \prod_k L_{kk} U_{kk} = \prod_k D_{kk}$$

- 行ピボット交換をm回した場合は $(-1)^m$ 倍

- 逆行列の計算

- ドリトル(Doolittle)法
- クラウト(Crout)法
- LDV分解法

# QR分解

## ■ QR分解

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$$

- $\mathbf{Q}$ : 直交行列、 $\mathbf{R}$ : 右上三角行列

- 連立方程式の解  $\mathbf{Q}\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{b} \rightarrow \mathbf{c} = \mathbf{Q}^T \mathbf{b} \rightarrow \mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{c}$

- 欠点: LU分解より2~3倍遅い

- アルゴリズム: 数学ライブラリを参照

## ■ 応用: 行列の全固有値を求める方法

- QR反復

- 次第に対角化

$$\mathbf{A}_n = \mathbf{Q}_n \mathbf{R}_n \rightarrow \mathbf{A}_{n+1} = \mathbf{R}_n \mathbf{Q}_n$$

# 三重対角行列

- 三重対角性  $A_{jk} = 0 \quad (|j-k| > 1)$

- 例: 1次元拡散方程式の離散化

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- クランク・ニコルソン法

$$\frac{u_{j,k+1} - u_{j,k}}{\Delta t} = \frac{c}{2} \left( \frac{u_{j+1,k+1} - 2u_{j,k+1} + u_{j-1,k+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{j+1,k} - 2u_{j,k} + u_{j-1,k}}{(\Delta x)^2} \right)$$

- 連立1次方程式の係数は三重対角  $(\mathbf{u}_k)_j = u_{j,k}$

→「三項方程式」という

- 問:  $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ を具体的に示せ

$$\mathbf{A}_{k+1} \mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{b}_{k+1} \equiv \mathbf{B}_k \mathbf{u}_k$$

# 三重対角行列(2)

- ガウスの消去法
  - 三重対角行列に応用
- アルゴリズム
  - ピボット選択を省略

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_{32} & A_{33} & A_{34} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & A_{43} & A_{44} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

```
do (k=2,n) {ck-1 = 1.0/Ak-1,k-1; d = Ak,k-1 * ck-1;
```

```
  Ak,k -= d * Ak-1,k; bk -= d * bk-1 }
```

```
xn = bn / An,n; do (k=n-1,1,-1) { xk = ck * ( bk - xk+1 * Ak,k+1 ) }
```

# コレスキー(Cholesky)法

- 対称行列のとき  $\mathbf{A}^T = \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} = \mathbf{S}^T \mathbf{S}$

- LU分解でLとUが互いに転置行列

- アルゴリズム

- 1. コレスキー分解

$$\mathbf{S}^T \mathbf{y} = \mathbf{b}$$

- 2. 後退代入: 第1段

- 3. 後退代入: 第2段

$$\mathbf{S} \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

- 同じAを繰り返し使うとき  $\rightarrow \mathbf{S}$ を保存

# コレスキー分解

- 分解条件
- アルゴリズム

$$\mathbf{S}^T \mathbf{S} = \mathbf{A} \rightarrow \sum_{i=1}^n S_{ij} S_{ik} = A_{jk}$$

$$S_{11} = \sqrt{A_{11}}, \quad S_{kk} = \sqrt{A_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} S_{jk}^2}$$
$$S_{1k} = \frac{A_{1k}}{S_{11}}, \quad S_{jk} = \frac{1}{S_{kk}} \left( A_{jk} - \sum_{i=1}^{k-1} S_{ij} S_{ik} \right)$$

- 破局: 平方根の中が負 → ランク落ち
  - 一つの処方: 強制的に  $S_{kk} = S_{jk} = 0$

# 修正コレスキー法

## ■ LDL<sup>T</sup>分解

■ **A**が対称→LDV分解で**V=L<sup>T</sup>** (問:示せ)

■ アルゴリズム

$$D_{11} = A_{11}, L_{kj} = \frac{1}{D_{jj}} \left( A_{kj} - \sum_{i=1}^{j-1} L_{ki} D_{ii} L_{ji} \right), D_{kk} = A_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} (L_{ki})^2 D_{ii}$$

## ■ 修正コレスキー法(平方根が**不要**)

■ コレスキー法でコレスキー分解→ LDL<sup>T</sup>分解

$$\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{z} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{y}$$

$$\mathbf{L}^T\mathbf{x} = \mathbf{z}$$



# 反復法

---

- 近似解が得やすい場合
  - エンケの方法: 既知解が近似解
  - 係数行列が、ほぼ対角 or ほぼ右上三角
- 主な反復法: すべて1次収束
  - ヤコビ (Jacobi) 法: 非対角成分を右辺に移項
  - ガウス・ザイデル (Gauss-Seidel) 法
    - ヤコビ法の各行で、常に最新補正值を使用
  - 加速緩和 (SOR) 法
    - ガウス・ザイデル法で修正量を最大2倍まで増加

# 対角優位行列

- 対角優位性

$$|A_{kk}| > \sum_{j=1, j \neq k}^n |A_{jk}|$$

- 例: 2次元ポアソン方程式の離散化

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \sigma(x, y)$$

$$u_{j+1,k} + u_{j-1,k} + u_{j,k+1} + u_{j,k-1} - 4u_{j,k} = h^2 \sigma_{j,k}$$

- 連立方程式の形に書くと係数行列は対角優位
- 問:  $\mathbf{A}, \mathbf{U}$ などを具体的に示せ

$$\mathbf{AU} = h^2 \mathbf{\Sigma}$$

# 一般反復法

■ 反復法の一般表現  $\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{M}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{N}\mathbf{b}$

■ 係数行列のDEF分解  $\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{E} + \mathbf{F}$

■ D: 対角行列  $D_{jk} = 0 \quad (j \neq k)$

■ E: 狭義の左下三角行列  $E_{jk} = 0 \quad (j < k)$

■ F: 狭義の右上三角行列  $F_{jk} = 0 \quad (j > k)$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & D_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & D_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ E_{21} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ E_{31} & E_{32} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E_{n1} & E_{n2} & E_{n3} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 0 & F_{12} & F_{13} & \cdots & F_{1n} \\ 0 & 0 & F_{23} & \cdots & F_{2n} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & F_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

# ヤコビ法

- 一般表現

$$\mathbf{N} = \mathbf{D}^{-1}, \mathbf{M} = -\mathbf{N}(\mathbf{E} + \mathbf{F})$$

- 反復公式

$$x_j^{(k+1)} = \frac{1}{A_{jj}} \left( b_j - \sum_{i=1, i \neq j}^n A_{ji} x_i^{(k)} \right)$$

- $\mathbf{A}$ が対角優位  $\rightarrow$  ヤコビ法は収束
- 注意: **ほとんどの場合**、ヤコビ法より  
ガウス・ザイデル法のほうが良い

# ガウス・ザイデル法

- 一般表現  $\mathbf{N} = (\mathbf{D} + \mathbf{E})^{-1}, \mathbf{M} = -\mathbf{NF}$
- 反復公式

$$x_j^{(k+1)} = \frac{1}{A_{jj}} \left( b_j - \sum_{i=1}^{j-1} A_{ji} x_i^{(k+1)} - \sum_{i=j+1}^n A_{ji} x_i^{(k)} \right)$$

- $\mathbf{A}$ が対角優位 or  $\mathbf{A}$ と $\mathbf{D}$ が正値対称  
→ ガウス・ザイデル法は収束
- 収束が遅いとき、**エイトキンの加速**が有効

# 加速緩和(SOR)法

- Successive Over Relaxation
- 一般表現 ( $\omega$ : 加速パラメータ)

$$\mathbf{M} = (\mathbf{I} + \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1} [(1 - \omega) \mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{F}] \quad \mathbf{N} = \omega (\mathbf{D} + \omega \mathbf{E})^{-1}$$

- $\omega = 1 \rightarrow$  ガウス・ザイデル法
- $\omega$  の決め方: 様々な手法
- 反復公式 ( $\mathbf{A}, \mathbf{D}$  が正値対称、 $0 < \omega < 2 \rightarrow$  収束)

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} + \omega \left[ \frac{1}{A_{jj}} \left( b_j - \sum_{i=1}^{j-1} A_{ji} x_i^{(k+1)} - \sum_{i=j+1}^n A_{ji} x_i^{(k)} \right) - x_j^{(k)} \right]$$

# 傾斜 (gradient) 法

- 最小2乗問題へ置換

$$\min_{\mathbf{x}} \Phi$$

$$\Phi \equiv |\mathbf{r}|^2$$

- 別名: 逐次最小化法

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$$

- 解の修正

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}$$

- 探索方向決定

- 多様な決定法 (後述)

$$\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{F}\left(\left\{\mathbf{r}^{(j)}\right\}, \left\{\mathbf{p}^{(j)}\right\}, \left\{\Phi_j\right\}\right)$$

- 直線上の最小探索

- 解表現 (問: 示せ)

$$\min_{\alpha} \Phi \rightarrow \alpha_k = \frac{\mathbf{p}^{(k)} \cdot \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{p}^{(k)} \cdot \mathbf{A}\mathbf{p}^{(k)}}$$



# 傾斜法(2)

---

- 探索方向の代表的な決定方法
  - 最急降下 (steepest descent) 法  $\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)}$ 
    - $\mathbf{A}$ の固有値が違うと収束が非常に遅い
  - 共役 (conjugate) 傾斜 (CG) 法
    - 探索方向ベクトル: グラム・シュミットの直交化
    - 定番: 前処理付共役傾斜 (preconditioned CG) 法
  - 準 (quasi) ニュートン法
- 詳細は「非線形最適化問題」で

# 共役傾斜法

- 共役 (conjugate) = 直交 (orthogonal)
- 直交条件  $\mathbf{p}^{(k)} \cdot \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)} = 0 \quad (j < k)$
- グラム・シュミットの直交化 (問: 示せ)

$$\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)} + \beta_{k-1} \mathbf{p}^{(k-1)}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{-\mathbf{p}^{(k-1)} \cdot \mathbf{A}\mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{p}^{(k-1)} \cdot \mathbf{A}\mathbf{p}^{(k-1)}}$$

- **有限** (N次元ならN) 回探索で解に到達
- 欠点: 丸め誤差に弱い  $\Rightarrow$  一度は**没落**

# 前処理付共役傾斜法

- **PCG** (=Preconditioned CG)法

- 背景: クリロフ部分空間法(森 2002)

- 発想: **A**を前処理 + 共役傾斜法

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \rightarrow \mathbf{By} = \mathbf{c} \quad \mathbf{c} \equiv \mathbf{C}^{-1}\mathbf{b} \quad \mathbf{B} \equiv \mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{C}^T)^{-1} \quad \mathbf{y} \equiv \mathbf{C}^T\mathbf{x}$$

- 前処理の思想  **$\mathbf{B} \approx \mathbf{I}$**

- **$\mathbf{B} = \mathbf{I}$** なら1回の探索で解に到達(問: 確かめよ)

- 例: **A**が対称  $\rightarrow$  不完全コレスキー分解

- 不完全コレスキー分解共役傾斜 (**ICCG**)法



# 不完全コレスキー分解

---

- = 不完全LDL<sup>T</sup>分解
- LDL<sup>T</sup>分解の欠点
  - Aが疎でもLが密(問:示せ)
- 発想:  $A_{ij}=0$ なら強制的に $L_{ij}=0$ 
  - アルゴリズムの詳細→数学ライブラリを参照
- Aが非対称→不完全LDV分解
  - 詳細は福井(1999)を参照



# 7. 非線形方程式

---

- 見かけの複雑さ
- 非線形方程式の一般論
  - グラフによる近似解法
- 低次代数方程式
- 1次元非線形方程式
- 高次代数方程式
- 連立非線形方程式



# 見かけの複雑さ

---

- 重要: **見かけ**に惑わされない
- 実は単純な例

$$3 \sin x + \cos 2x + 1 = 0$$

- 変数変換で簡易化  $s \equiv \sin x$
- 問: 解け(落とし穴に注意)

- 真に難しい例

$$x - 1 = \sin x$$

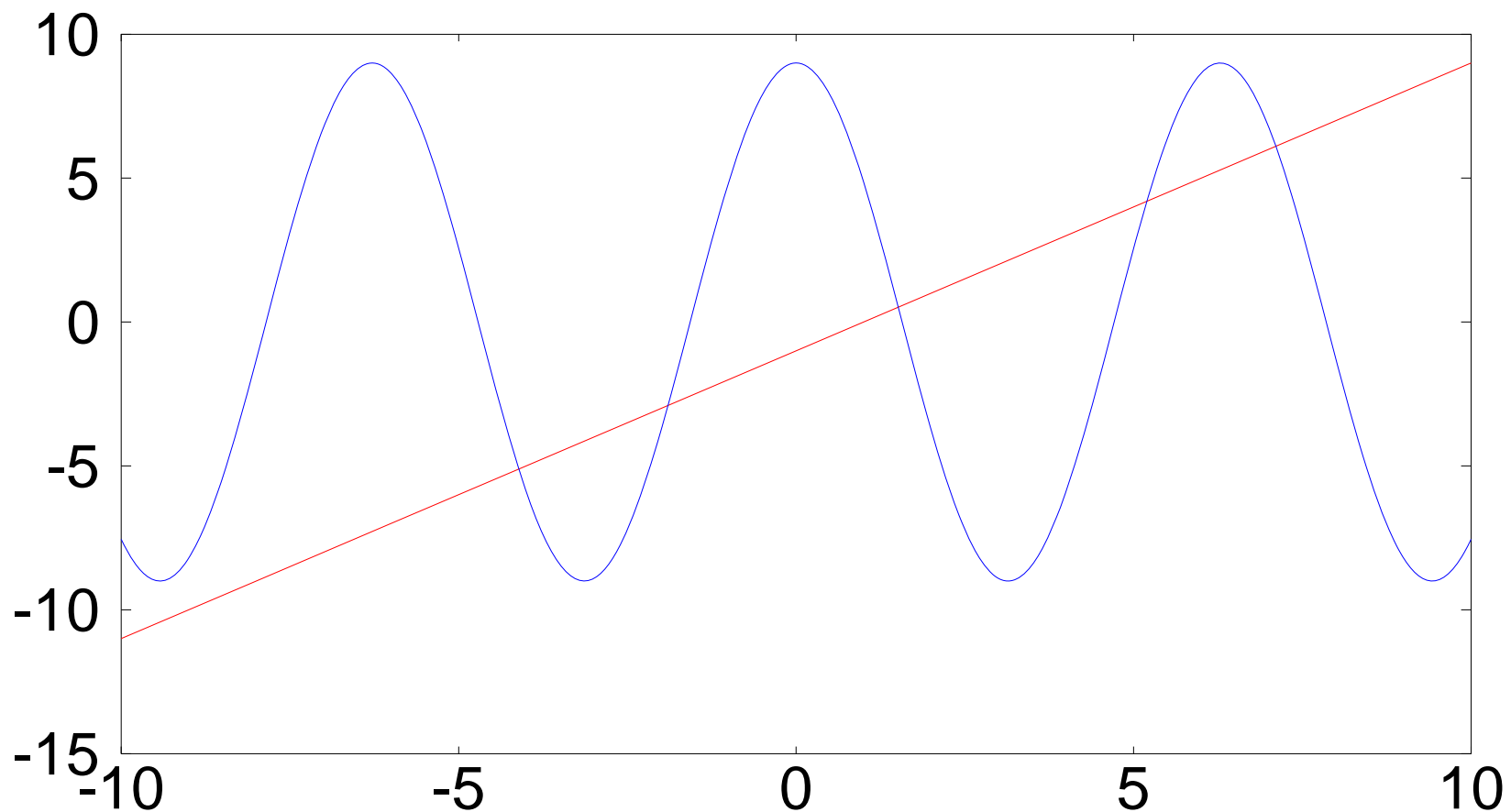


# 非線形方程式の一般論

- 解の存在と唯一性
  - 多重解の困難
  - 近似解の重要性: 特に**グラフ解法**の有効性
  - 解の囲い込み: 既存知識、グラフ解法、多分法
- 反復解法→収束判定の難しさ
- 解の妥当性の吟味
  - 物理的に正しい解か？
  - 得られた解は求めていた解か？

# 多重解の例

■ 例:  $x-1=9\cos(x)$



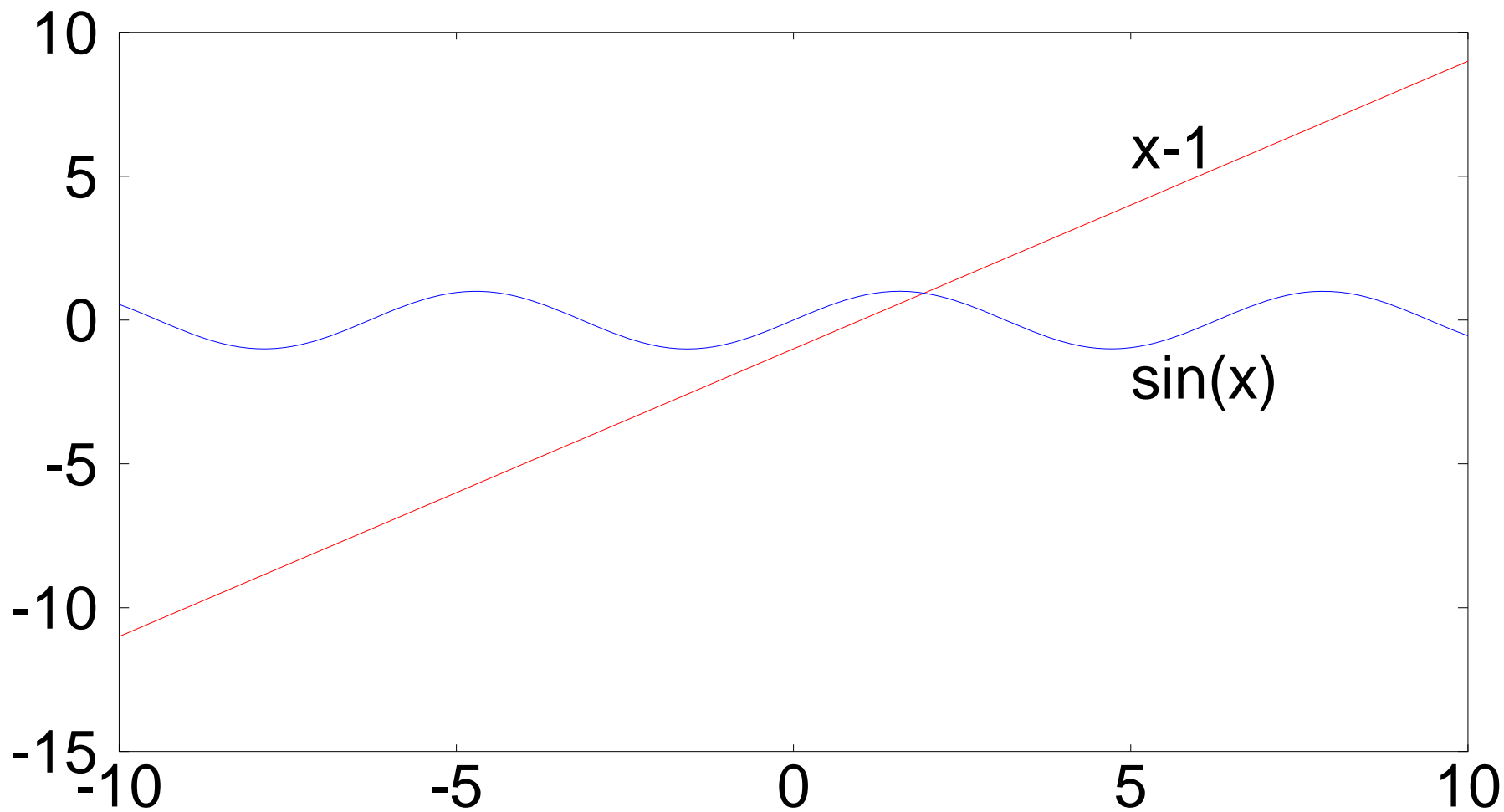


# グラフによる近似解法

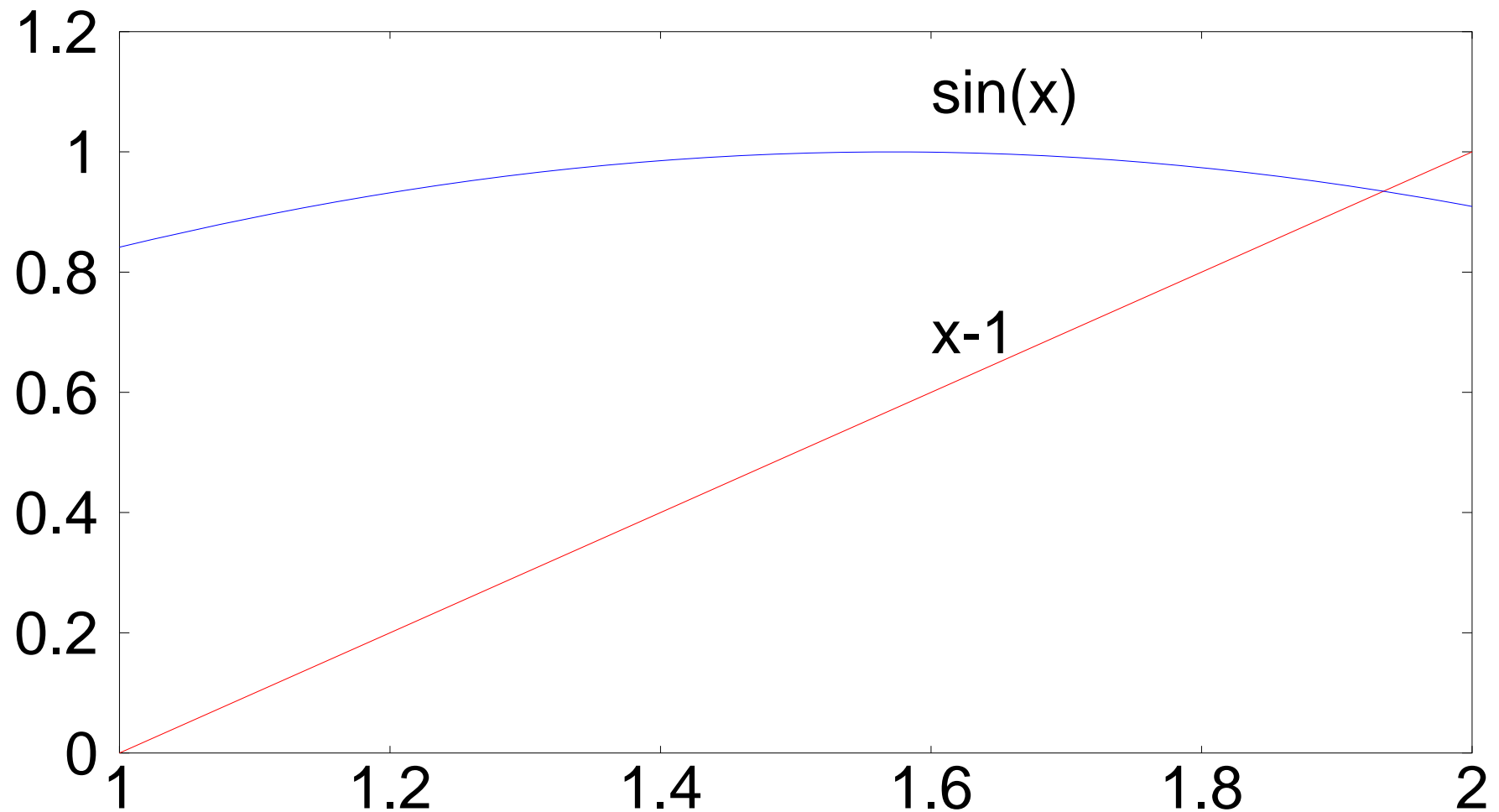
---

- 適当なグラフ・ソフトを用意
  - お勧め: **GNU PLOT**
- 手法
  - 1. 解の探索: グラフを描き、近似解を読み取る
  - 2. 収束判定
  - 3. 精密化: 描画範囲を狭める
- 例題  $x - 1 = \sin x$

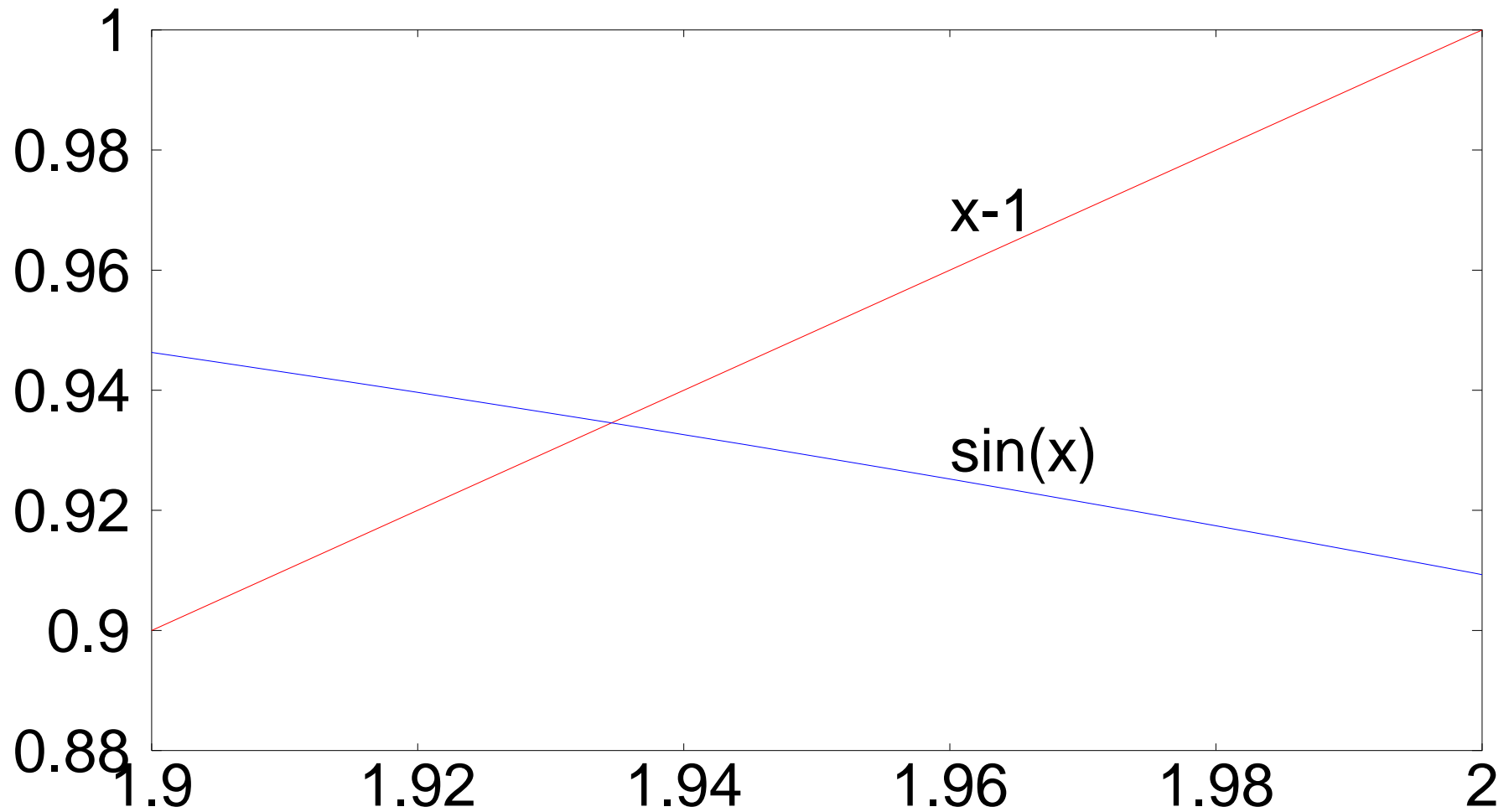
# グラフ解法の例



# グラフ解法の例(2)



# グラフ解法の例(3)



# 方程式解の収束判定

- 条件1: 方程式の値 (本筋)  $|f_n| < \delta_f$ 
  - 絶対判定基準 ( $f_0$ は代表値)  $\delta_f = |f_0| \delta$
- 条件2: 解の変化量 (要注意)  $|x_{n+1} - x_n| < \delta_x$ 
  - 三大判定基準
    - 絶対:  $x_0$ は代表値  $\delta_x = |x_0| \delta$
    - 相対: 解が大変動する場合  $\delta_x = |x_n| \delta$
    - 複合  $\delta_x = \max(|x_0|, |x_n|) \delta$
- 判定微小量の設定例  $\frac{\delta}{\varepsilon} = 10 \sim 100$



# 1次元非線形方程式

---

- 準1次方程式
- 2次方程式
- 高次代数方程式
- 2分法と多分法
- 逆補間
- セカント法とミュラー法
- ニュートン法とハレー法
- デュラン・ケルナー法

# 準1次方程式

## ■ ほとんど1次方程式

$$ax = b + \varepsilon(x)$$

- 例: ケプラー方程式でeが小さいとき

- 単純反復法が有効

$$E = M + e \sin E$$

- 1次収束

$$x_0 = a^{-1}b$$

- 連立方程式でも適用可

$$x_{n+1} = a^{-1} \left[ b + \varepsilon(x_n) \right]$$

## ■ より良い方法

- 微小項の計算が面倒 → セカント法
- 微小項が微分可能 → ニュートン法

# 2次方程式

$$ax^2 + bx + c = 0$$

- 落とし穴: 根の公式
- 困難1: **近接根** ( $4ac \sim b^2$ )

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

- やむをえない精度劣化

- 困難2: 準1次方程式 ( $ac \sim 0$ )

$$x_2 = \frac{c}{ax_1}$$

- 方法1: 根と係数の関係を活用

- 第1根 ← 分子の絶対値が大きくなる符号の方

- 方法2: 分子の有理化

$$x = \frac{2c}{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

- 実用的: ニュートン法



# 近接2根の困難

- 一般の非線形方程式でも同様
  - 近接2根の近傍では、ほぼ2次方程式だから
- 現象1: 根の**精度劣化**  $|\Delta x| \approx |x| \sqrt{\varepsilon}$ 
  - 根の相対誤差: 計算精度の半分の桁数
- 現象2: 丸め誤差→複素根となる危険性
- 現象3: 反復法の収束次数の低下
  - 例: ニュートン法で2次→1次



# 2次方程式(2)

- 問: なるべく正確な実根を求めよ

- 真に2次の場合  $x^2 - 3x + 1 = 0$

- 準1次方程式の場合

$$0.000001x^2 - 2x + 1 = 0$$

- 近接根の場合

$$x^2 - 2.000001x + 1 = 0$$

- 解の吟味が必要な例(変数変換せよ)

$$4 \sin x + 2 \cos 2x = 1$$



# 高次代数方程式

---

- 根の公式: 限定的かつ非実用的
  - 3次: カルダノ、4次: フェラリ (問: 調査せよ)
- 実用的な方法
  - 単根: ニュートン法、ハレー法
  - 実係数方程式の2複素共役根: ベアストウ法
  - 全根
    - 安直: (単根探索 + 単項式の除算) などの繰り返し
    - 本格的: 一斉に求める → 連立法 (DK法など、後述)

# 多項式の四則演算

- 式の演算 = 係数ベクトルの演算
- 加減算: 自明
- 乗算: 単純

$$\left( \sum_{i=0}^N a_i x^i \right) \times \left( \sum_{j=0}^M b_j x^j \right) = \sum_{k=0}^{N+M} c_k x^k$$

- 係数公式

$$c_k = \sum_{i=0}^k a_i b_{k-i}$$

# 多項式の四則演算(2)

- 除算: 割り切れない限り不可能
  - 割り切れるとき(その1): 多項式 ÷ 単項式

$$\left( \sum_{i=0}^N a_i x^i \right) \div (x - x_0) = \sum_{j=0}^{N-1} b_j x^j$$

- 係数の漸化式: 乗算公式の逆(問: 確かめよ)

$$b_{N-1} := a_N$$

$$\text{do}(i=N-2, 0, -1) \{ b_i := a_{i+1} + b_{i+1} * x_0 \}$$

# 多項式の四則演算(3)

- 割り切れるとき(その2): 多項式  $\div$  2次式
  - 2次式の根が実根でないときに有効

$$\left( \sum_{i=0}^N A_i x^i \right) \div (x^2 - rx - s) = \sum_{j=0}^{N-2} B_j x^j$$

- 係数の漸化式: 乗算公式の逆(問: 確かめよ)

$$B_{N-2} := A_N; B_{N-3} := A_{N-1} + r * B_{N-2}$$

$$\text{do } (i=N-4, 0, -1) \{ B_i := A_{i+2} + r * B_{i+1} + s * B_{i+2} \}$$

# 2分(bisection)法

- 遅いが**確実**  $x_L < x < x_R$   $f_L := f(x_L), f_R := f(x_R)$

- 仮定: 囲い込みが終了

- アルゴリズム

$$x_M = (x_L + x_R) / 2$$

- 1) 中点で評価
- 2) 収束判定
- 3) 囲い込み更新

- 1次収束

$$|x_{n+1} - x| \sim |x_n - x| / 2$$

$$x_M := 0.5 * (x_L + x_R); f_M := f(x_M)$$

収束判定

if ( $f_L * f_M < 0$ )

then {  $x_R := x_M; f_R := f_M$  }

else {  $x_L := x_M; f_L := f_M$  }

# 多分 (multisection) 法

- グラフ解と**等価** : 2分法より遅いが、より確実
  - 並列計算機ならメリットあり
- 主な用途 : 複数根の分離
- アルゴリズム : 多点評価 + 囲い込み更新

- 枝分かれ  
に注意

```
do (k=1,n-1) {  $x_k := (k * (x_0 + x_n)) / n; f_k := f(x_k)$  }  
do (k=0,n-1) {  
  if ( $f_k * f_{k+1} < 0$ )  
    then {  $m++; x_0^m := x_k; f_1^m := f_{k+1}$  } }
```

# 逆補間 (regula falsi)

- 2分法の変形: **確実に収束**
- 反復公式: 1次補間式を解く
  - 問: 求めよ
- アルゴリズム
  - 2分法とほぼ同様
- 1次収束 (問: 示せ)

$$x_N = \frac{x_L f_R - x_R f_L}{f_R - f_L}$$

$$x_N := (x_L * f_R - x_R * f_L) / (f_R - f_L)$$

$$f_N := f(x_N)$$

収束判定

$$\text{if } (f_L * f_N < 0)$$

$$\text{then } \{ x_R := x_N; f_R := f_N \}$$

$$\text{else } \{ x_L := x_N; f_L := f_N \}$$

$$x_N - x \approx \left( \frac{f''}{2f'} \right) (x_L - x)(x_R - x)$$

# エイトキン(Aitken)加速

- 用途: 1次収束を**超**1次収束に加速

- 注: 3点が必要

$$\tilde{x}_{n+1} = x_{n+1} - \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}$$

- 加速公式

- 元の数列が1次収束

$$x_{n+1} - x = (C + \varepsilon_n)(x_n - x)$$

- 収束条件を連立させて解く

- 微小項 $\varepsilon_n$ を無視

$$x_{n+1} - \tilde{x}_{n+1} = C(x_n - \tilde{x}_{n+1})$$

$$x_n - \tilde{x}_{n+1} = C(x_{n-1} - \tilde{x}_{n+1})$$

- 加速後は超1次収束

- 問: 示せ

$$\frac{\tilde{x}_{n+1} - x}{x_{n+1} - x} \approx \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}}{C(C-1)^2}$$

# セカント(secant)法

- 逆補間の**変形**: 高速だが不安定
  - ニュートン法より高速だが収束の保証が無い
- 反復公式: 逆補間と同じ
- アルゴリズム: 罫い込みの**確認を放棄**
- 超1次収束
  - 次数~1.618

$$x_{n+1} - x \simeq \left( \frac{f''}{2f'} \right) (x_n - x)(x_{n-1} - x)$$

$$x_{n+1} := (x_n * f_{n-1} - x_{n-1} * f_n) / (f_{n-1} - f_n)$$

$$f_{n+1} := f(x_{n+1})$$

収束判定

n++

# セカント法の加速

## ■ エイトキン加速の応用

- 注: 4点が必要

$$\tilde{x}_{n+1} = x_{n+1} - \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-2}}$$

## ■ 加速公式

- 元の数列の収束

$$x_{n+1} - x = (C + \varepsilon_n)(x_n - x)(x_{n-1} - x)$$

- 連立させて解く

$$x_{n+1} - \tilde{x}_{n+1} = C(x_n - \tilde{x}_{n+1})(x_{n-1} - \tilde{x}_{n+1})$$

- 微小項  $\varepsilon_n$  を無視

$$x_n - \tilde{x}_{n+1} = C(x_{n-1} - \tilde{x}_{n+1})(x_{n-2} - \tilde{x}_{n+1})$$

- 問: 加速後の収束条件式を求めよ

# ミュラー(Muller)法

- セカント法の拡張: **複素根に強い**
  - 反復公式: 2次ニュートン補間式を解く
  - 2次方程式の解: 絶対値が小さい方を選ぶ

- 複合は分母の絶対値が大となる方

$$x_{n+1} = x_n - \frac{2c_n}{-b_n \mp \sqrt{b_n^2 - 4a_n c_n}}$$

$$a_n = f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n], b_n = f[x_{n-1}, x_n] + a_n(x_n - x_{n-1}), c_n = f_n$$

- アルゴリズム: セカント法と同様(問: 導け)
- 超1次収束: 次数 $\sim 1.84$

# ニュートン(Newton)法

- **高速**だが**不安定**: 安定な初期値が必要
- 微分値が容易に計算可能なら有効

- 反復公式

- 1次テイラー展開を解く

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f_n}{f'_n}$$

- アルゴリズム

- 2次収束(問: 示せ)

$$x_{n+1} - x \simeq \left( \frac{f''_n}{2f'_n} \right) (x_n - x)^2$$

$$x_{n+1} := x_n - f'_n / f_n$$

$$f_{n+1} := f(x_{n+1}); f'_{n+1} := f'(x_{n+1})$$

収束判定

n++

# ニュートン法(2)

- 有効(=微分値が容易に計算可能)な例
  - ケプラー方程式  $f(E) \equiv E - e \sin E - M = 0$
- 安定な初期値
  - 区間内で下に凸→上界、上に凸→下界
  - 例:ケプラー方程式の場合
    - 前処理: modと鏡像変換  $0 \leq E < \pi \rightarrow E_0 = \pi$
- 2次収束の例外
  - 多重根の場合: 1次収束(問:示せ)

# ニュートン法(3)

- 等価な最適化問題  $f(x) = 0 \leftrightarrow \text{opt } f_N(x)$ 
  - ニュートン写像関数
  - 仮定: 2階微分が0とならない  $f_N(x) \equiv x - \frac{f(x)}{f'(x)}$
  - 問: 等価であることを示せ
- 安定な初期値 = 部分集合での最適値
  - 例: ケプラー方程式に対するNijenhuisの初期値

$$E_0 = \min_{E \in \left(0, \frac{\pi}{2}, \pi\right)} f_N(E) = \min \left( \frac{M}{1-e}, M+e, \frac{M+\pi e}{1+e} \right)$$

# ニュートン法(4)

- 応用1: **平方根**  $f(x) \equiv x^2 - a = 0$

- 反復公式(問: 示せ)

$$x_{n+1} = \frac{1}{2} \left( x_n + \frac{a}{x_n} \right)$$

- $1 < a < 4$ の場合に

安定な初期値の例

- 部分集合  $(1, 3/2, 2)$

$$x_0 = \min \left( \frac{1}{2} + \frac{a}{2}, \frac{3}{4} + \frac{a}{3}, 1 + \frac{a}{4} \right)$$

- 問:  $a$ が上記以外の場合は、どうすればよいか

- 問:  $n$ 乗根のニュートン反復公式と安定な初期値の例を示せ。

# ニュートン法(5)

## ■ 応用2:平方根の逆数

$$f(y) \equiv y^{-2} - a = 0$$

### ■ 反復公式(問:示せ)

$$y_{n+1} = 0.5y_n(3 - ay_n^2)$$

### ■ $1 < a < 4$ の場合に安定な初期値の例

#### ■ 部分集合

$(1/2, 3/4, 1)$

$$y_0 = \min \left( \left( \frac{3}{4} \right) - \left( \frac{a}{16} \right), \left( \frac{9}{8} \right) - \left( \frac{27a}{128} \right), \left( \frac{3}{2} \right) - \left( \frac{a}{2} \right) \right)$$

### ■ 平方根の逆数 $y$ が求めれば平方根自体は $a*y$ で求まる

### ■ 除算が不要なので、より実用的

# ニュートン法(6)

## ■ 応用3: 逆数 $f(x) \equiv x^{-1} - a = 0$

- 除算が低速 (orハードで計算不能) なら有効

- 好例: 逆行列の計算

- 反復公式 (問: 示せ)

$$x_{n+1} = x_n (2 - ax_n)$$

- 反復公式: 行列の場合

$$\mathbf{X}_{n+1} = 2\mathbf{X}_n - \mathbf{X}_n \mathbf{A} \mathbf{X}_n$$

- 問: 行列  $\mathbf{A}$  が対角優位のとき、対角成分  $\mathbf{D}$  の逆行列から出発して、ニュートン法で逆行列  $\mathbf{A}^{-1}$  を求めるプログラムを書き、他の方法と比較せよ

# ニュートン法の加速

## ■ エイトキン加速の応用その2

- 3点が必要

$$\tilde{x}_{n+1} = x_{n+1} + \frac{2(x_{n+1} - x_n)^3}{(x_{n+1} - x_{n-1})^2 - 3(x_{n+1} - x_n)^2}$$

## ■ 加速公式の導出

- 元の数列の収束

$$x_{n+1} - x = (C + \varepsilon_n)(x_n - x)^2$$

- 連立させる

$$x_{n+1} - \tilde{x}_{n+1} = C(x_n - \tilde{x}_{n+1})^2$$

- 微小項 $\varepsilon_n$ を無視

$$x_n - \tilde{x}_{n+1} = C(x_{n-1} - \tilde{x}_{n+1})^2$$

- 得られる2次方程式をニュートン法で解く

# ニュートン法の変形

- **多重根**の場合の収束速度の低下防止策

- 変形方程式を導入

- すべて単根(問:示せ)
- 桁落ちに注意

$$0 = g(x) \equiv \frac{f(x)}{f'(x)}$$

- ニュートン公式を適用:どんな場合も2次収束

- ハレー法(後述)  
との類似性に注意

$$\Delta x = \frac{-g_0}{g'_0} = \frac{-f_0}{f'_0 - \frac{f''_0 f_0}{f'_0}}$$

# ベアストウ (Bairstow) 法

- 発想: 「代数方程式を2次式で割った剰余 = 0」の方程式をニュートン法で解く

$$p(x) = q(x)(x^2 - rx - s) + Ax + B = 0$$

$$q(x) \equiv \sum_{k=0}^{n-2} b_k x^{n-2-k}$$

- 未知数: 2次式  $x^2 - rx - s$  の2係数  $(r, s)$

- 方程式

- $A = B = 0$

- ニュートン法

$$\begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix}_{n+1} = \begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix}_n - \begin{pmatrix} \frac{\partial A}{\partial r} & \frac{\partial A}{\partial s} \\ \frac{\partial B}{\partial r} & \frac{\partial B}{\partial s} \end{pmatrix}_n^{-1} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}_n$$

# ベアストウ法(2)

- $A, B$ を求める漸化式(問:求めよ)

$$b_0 = a_0; b_1 = b_0 r + a_1$$

$$b_k = b_{k-2} q + b_{k-1} r + a_k \quad (k = 2, \dots, n-2)$$

$$A = b_{n-3} q + b_{n-2} r + a_{n-1}; B = b_{n-2} r + a_n$$

- 偏微分を求める漸化式(問:上記から導け)

$$b_{1,r} = b_0; b_{2,r} = b_{1,r} r + b_1$$

$$b_{k,r} = b_{k-2,r} q + b_{k-1,r} r + b_{k-1} \quad (k = 3, \dots, n-2)$$

$$\frac{\partial A}{\partial r} = b_{n-3,r} q + b_{n-2,r} r + b_{n-2}; \frac{\partial B}{\partial r} = b_{n-2,r} q$$

$$b_{2,q} = b_0; b_{3,q} = b_{2,q} r + b_1$$

$$b_{k,q} = b_{k-2,q} q + b_{k-1,q} r + b_{k-2} \quad (k = 4, \dots, n-2)$$

$$\frac{\partial A}{\partial q} = b_{n-3,q} q + b_{n-2,q} r + b_{n-3}; \frac{\partial B}{\partial q} = b_{n-2,q} q + b_{n-2}$$

# ハレー(Halley)法

- E. Halley: 周期彗星の予言で有名
- 高速で、かなり安定(詳細は不明だが)
- 2階までの微分値が計算可能なら最強
- **巧妙な**反復公式
- 3次収束(問: 示せ)

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f_n}{f'_n - \frac{f_n f''_n}{2f'_n}}$$

$$x_{n+1} - x \simeq \left[ \frac{2f'_n f_n''' - 3(f_n'')^2}{12(f'_n)^2} \right] (x_n - x)^3$$

## ハレー法(2)

- **公式**の導出法: 2次テイラー展開

$$0 = f_0 + f_0' \Delta x + \frac{f_0''}{2} (\Delta x)^2 + \dots$$

- 形式解の右辺にニュートン公式を代入

$$\Delta x = \frac{-f_0}{f_0' + \frac{f_0''}{2} \Delta x} \cong \frac{-f_0}{f_0' - \frac{f_0'' f_0}{2 f_0'}}$$

# ハレー法(3)

- 応用1: 平方根

$$x^2 = a$$

$$x_{n+1} = \left( \frac{x_n^2 + 3a}{3x_n^2 + a} \right) x_n$$

- 応用2: 立方根

$$x^3 = a$$

$$x_{n+1} = \left( \frac{x_n^3 + 2a}{2x_n^3 + a} \right) x_n$$

- 応用3: 放物線軌道のケプラー方程式

$$t + \frac{t^3}{3} = M$$

$$t_{n+1} = \frac{3M + 6Mt_n^2 - t_n^3 + 2t_n^4 - t_n^5}{3 + 6Mt_n + 3t_n^2 + 2t_n^3}$$

# デュラン・ケルナー (Durand-Kerner)法

- 高次代数方程式

- 全根を一斉に求める

$$f(z) = \sum_{k=0}^N a_k z^k = a_N \prod_{j=1}^N (z - z_j)$$

- 発想:  $f(z_j) = 0$  を連立して解く

- ニュートン法 → 2次法、ハレー法 → 3次法

- ニュートン反復公式のDK近似

$$z_k^{(n+1)} = z_k^{(n)} - \frac{f(z_k^{(n)})}{f'(z_k^{(n)})} \cong z_k^{(n)} - \frac{f(z_k^{(n)})}{a_0 \prod_{j \neq k} (z_k^{(n)} - z_j^{(n)})}$$

- 問: 同様にして3次法の公式を導出せよ

# 問1: ケプラー方程式

- 問: 様々な $(M, e)$ に対して、各種の方法で楕円ケプラー方程式を解き、14桁正しい解を得る計算時間を比較せよ

$$f(E) = E - e \sin E - M = 0 \quad 0 \leq M < \pi, \quad 0 \leq e < 1$$

## ■ 参考

- 解 $E$ の存在範囲  $M \leq E < \min\left(\frac{M}{1-e}, M+e, \frac{M+\pi e}{1+e}\right)$
- 単純反復法は、大きな $e (> 0.6)$ では遅い収束
- $\sin$ と $\cos$ の同時計算法を使え

# 問2: ルジャンドル 多項式の根

- 問: 様々な方法で、 $n$ 次ルジャンドル多項式の根を求めよ(13次までの解は既出)

- 参考

- $P_{n+1}$ の根は $P_n$ の隣りあう根で挟まれる

- 漸近形

$$P_n(\cos \theta) \approx \sqrt{\frac{2}{n\pi \sin \theta}} \sin \left( \left( n + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4} \right)$$

- 正根の近似解

$$x_k^{(n)} \approx \cos \left( \left( \frac{4k-1}{4n+2} \right) \pi \right)$$

# 問3: ルジャンドル 多項式の極値点

- 問: 様々な方法で、 $P_n$ の極値点 =  $Q_n$ の根を求めよ(14次までの解は既出)

- 参考

- $Q_n$ の根は $P_n$ の隣りあう根で挟まれる

- 漸近形

$$Q_n(\cos \theta) \approx \frac{1}{\sin \theta} \sqrt{\frac{2n}{\pi}} \cos \left( \left( n + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4} \right)$$

→ 正根の**近似解**

$$x_k^{(n)} \approx \cos \left( \left( \frac{4k-3}{4n+2} \right) \pi \right)$$



# 連立非線形方程式

---

- 一般論: 解の存在、唯一性、適合性
- 主な解法
- ニュートン法: 2次収束
- 準(quasi)ニュートン法: 超1次収束
  - = 多次元セカント法
  - 定番: 逆行列版ブロイデン公式
- 次元の呪い: 困り込みの困難


# ニュートン法(7)

- 多次元: 連立1次方程式の解が必要

- ニュートン方程式  $\mathbf{J}(\mathbf{x}_n) \Delta \mathbf{x}_n = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_n)$

- ヤコビ行列(Jacobian)  $\mathbf{J}(\mathbf{x}) \equiv \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x})$

- 計算量は多いが2次収束
- 暴走(overshooting)の危険性



# ニュートン法(8)

- ニュートン法の**暴走**防止策

- 減速(damping)係数  $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \lambda_n \Delta \mathbf{x}_n$

- 係数決定法

- **直線探索**  $\min |\mathbf{f}(\mathbf{x}_n + \lambda \Delta \mathbf{x}_n)|^2 \rightarrow \lambda_n$

- 大局的最適解の発見は困難

- 一つの方法  $\lambda = m(\Delta \lambda) \quad (m = 1, 2, \dots)$

- 初期値発見の困難

# 連続変形法

■ 仮定1: 方程式の分解  $\mathbf{f}(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0$

■ 仮定2: 基本方程式の解が既知  $\mathbf{g}(\mathbf{y}) = 0 \rightarrow \mathbf{y}$

■ 方程式を少しずつ変形して解を逐次求める

$$\mathbf{f}(\lambda; \mathbf{z}) \equiv \mathbf{g}(\mathbf{z}) + \lambda \mathbf{h}(\mathbf{z}) = 0 \quad \lambda = 0 \rightarrow 1; \quad \mathbf{z} = \mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}$$

■ 計算量が多いが**確実**

■ 問: ケプラー方程式 ( $e=0.9$ ) を連続変形法で解け

$$f(e; E) = (E - M) - e \sin E = 0 \quad e = 0 \rightarrow 0.9; \quad E = M \rightarrow ?$$

# 準ニュートン法

- ヤコビ行列の計算を避ける  $\mathbf{K}_n \Delta \mathbf{x}_n = -\mathbf{f}_n$ 
  - $\mathbf{K}$ : ヤコビ行列の近似行列
  - セカント条件  $\mathbf{K}_{n+1} \Delta \mathbf{x}_n = \Delta \mathbf{f}_n$   $\Delta \mathbf{f}_n \equiv \mathbf{f}(\mathbf{x}_{n+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_n)$
  - 注意: セカント条件だけでは一意に決まらない
- **ブロイデン** (Broyden) の更新公式
$$\mathbf{K}_{n+1} = \mathbf{K}_n + \frac{(\Delta \mathbf{f}_n - \mathbf{K}_n \Delta \mathbf{x}_n) \otimes \Delta \mathbf{x}_n}{|\Delta \mathbf{x}_n|^2}$$
  - 初期値: 何も情報がなければ単位行列  $\mathbf{K}_0 = \mathbf{1}$

# 準ニュートン法(2)

- ブロイデン更新公式の難点
  - 連立方程式を解く必要性

- 発想: ヤコビ行列の逆を近似  $\Delta \mathbf{x}_n = -\mathbf{L}_n \mathbf{f}_n$

- 逆行列版ブロイデン更新公式

$$\mathbf{L}_{n+1} = \mathbf{L}_n + \frac{\left[ (\Delta \mathbf{x}_n - \mathbf{L}_n \Delta \mathbf{f}_n) \otimes \Delta \mathbf{x}_n \right] \mathbf{L}_n}{\Delta \mathbf{x}_n \cdot (\mathbf{L}_n \Delta \mathbf{f}_n)}$$

- 初期値: 何も情報がなければ単位行列  $\mathbf{L}_0 = \mathbf{1}$

# 8. 最適化問題

- 目的関数Fを最大化/最小化  $\text{opt } F(\mathbf{x})$
- 最適化問題の2大分類
  - 制約条件なし: 一般、簡易
  - 制約条件あり: 難解
- 注意: 最大化問題  $\rightarrow$  最小化問題
$$\max F(\mathbf{x}) \Leftrightarrow \min [-F(\mathbf{x})]$$
  - 以降では最小化問題として扱う



# 1次元最適化問題

---

- 1次元非線形方程式の解法と深い関連
- グラフによる解の探索
- 2分法と多分法
- 黄金分割法
- 放物線近似(ブレント法)
- セカント法と接線交差法

# 非線形方程式との関係

- 前提: 関数の最適値  $\rightarrow$  (偏)微分のゼロ点
  - 注1: 関数が(一部区間でも)微分不可能なら不成立
  - 注2: 微分可能でも逆は不成立(問: 反例を挙げよ)
  - 注3: 最大か最小かの判定は常に必要
- 囲い込み(bracketing)の基本
  - 方程式の解: 逆符号対  $(x_L, x_R): x_L < x_R, F(x_L)F(x_R) < 0$
  - 最適化問題: 関数値の凸三つ組(convex triplet)

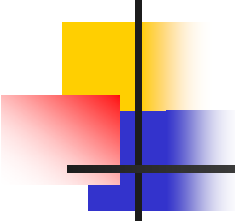
$$(x_L, x_M, x_R): x_L < x_M < x_R, [F(x_L) - F(x_M)][F(x_R) - F(x_M)] < 0$$



# 1次元最適化問題(2)

---

- 最適解の存在と唯一性
  - 多峰性の困難
  - 近似解の重要性: 特にグラフ解法の有効性
  - 解の囲い込み: 既存知識、グラフ解法、多分法
- 桁落ちの困難: 微分値が計算不能な場合
- 最適解の妥当性の吟味
  - 物理的に正しい解か? 求めている解か?



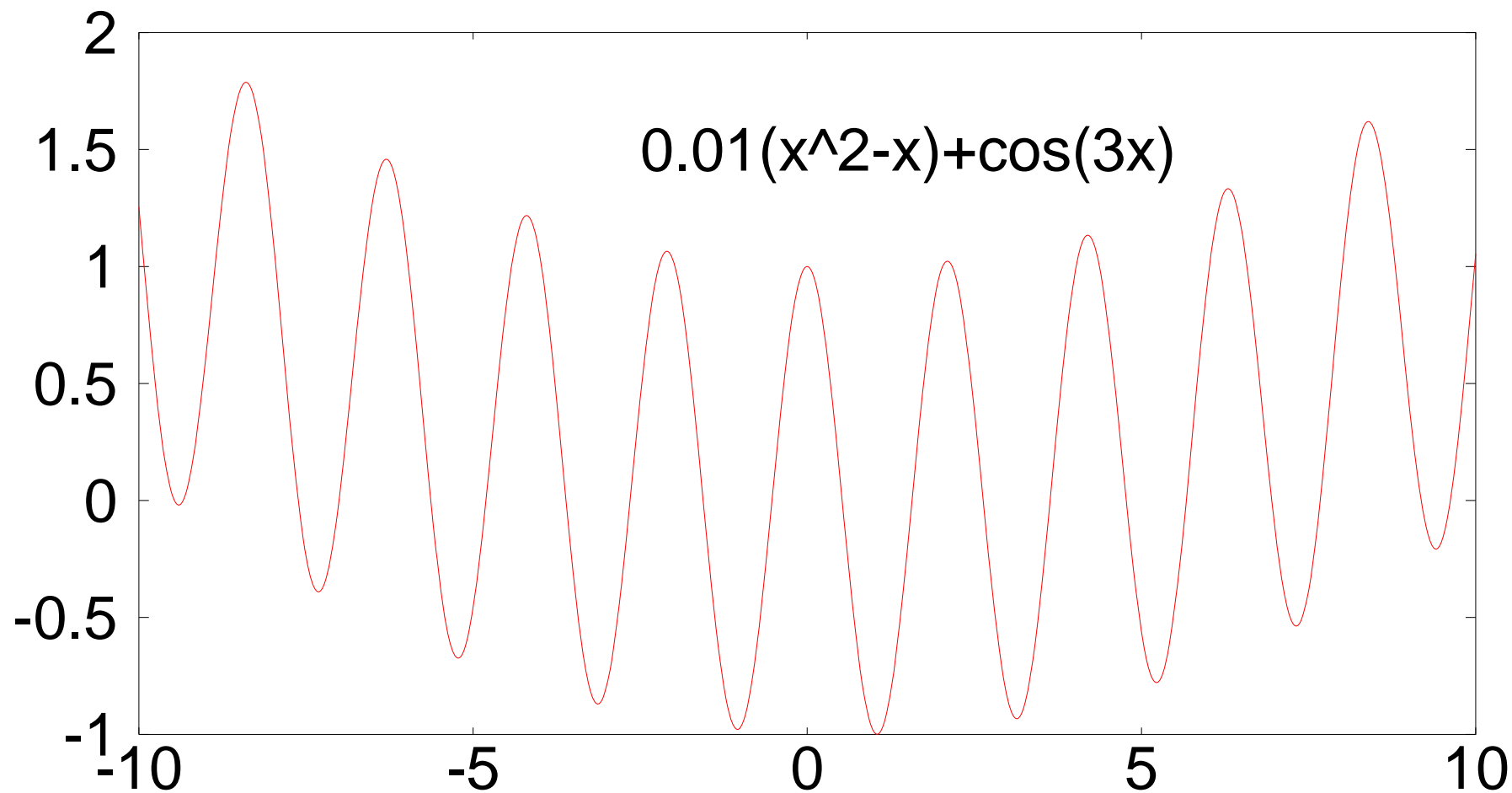
# グラフによる解の探索

## ■ 探索の手順

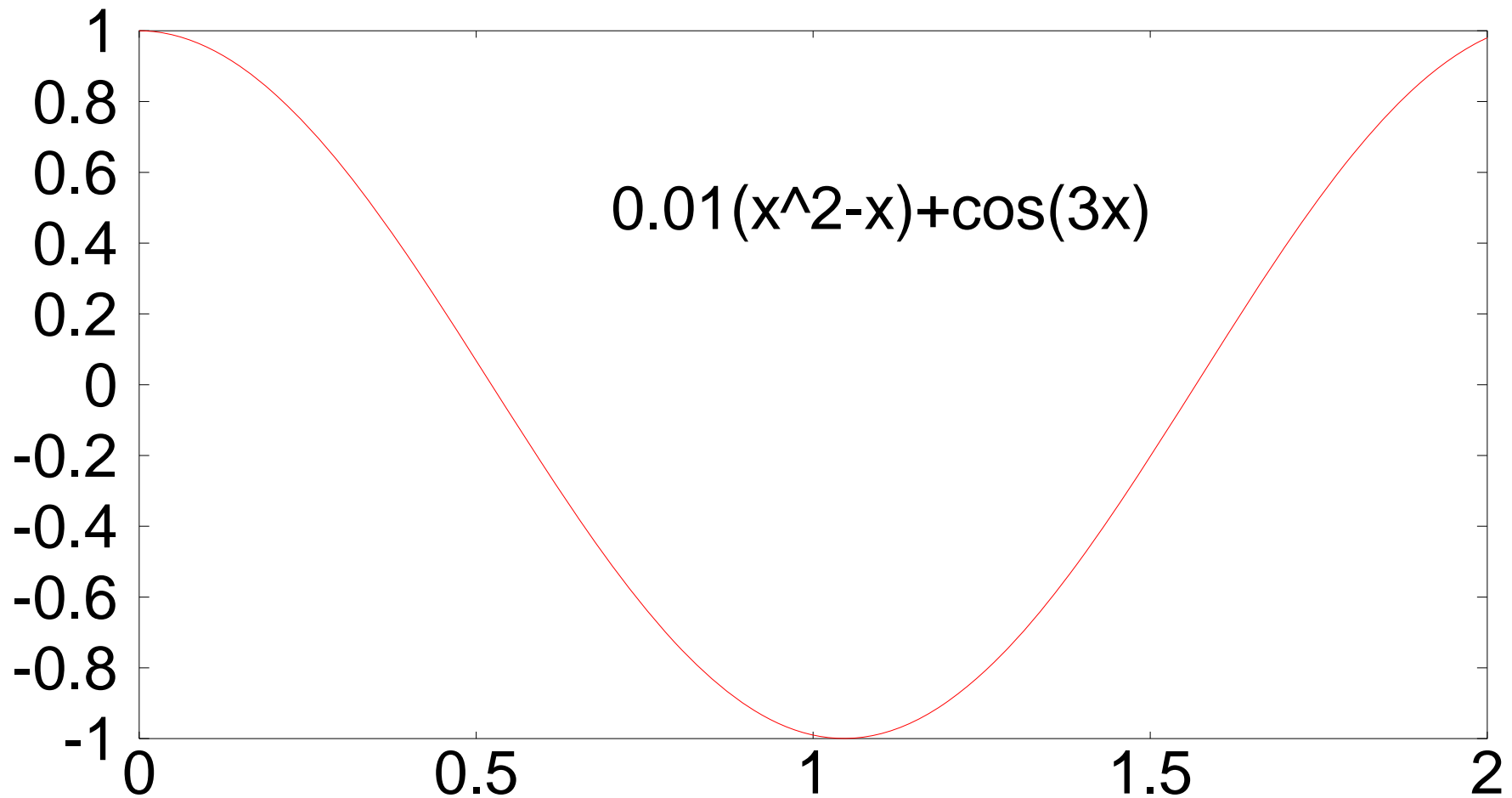
- 1. まず十分広い範囲でグラフを描く
- 2. グラフから最適解の近似存在範囲を読み取り、描画範囲を狭める
- 3. **単峰性**が確認されるまで2.を繰り返す
- 4. 単峰性を確認したら数値探索へ

■ 例題:  $\min \left[ 0.01(x^2 - x) + \cos 3x \right]$

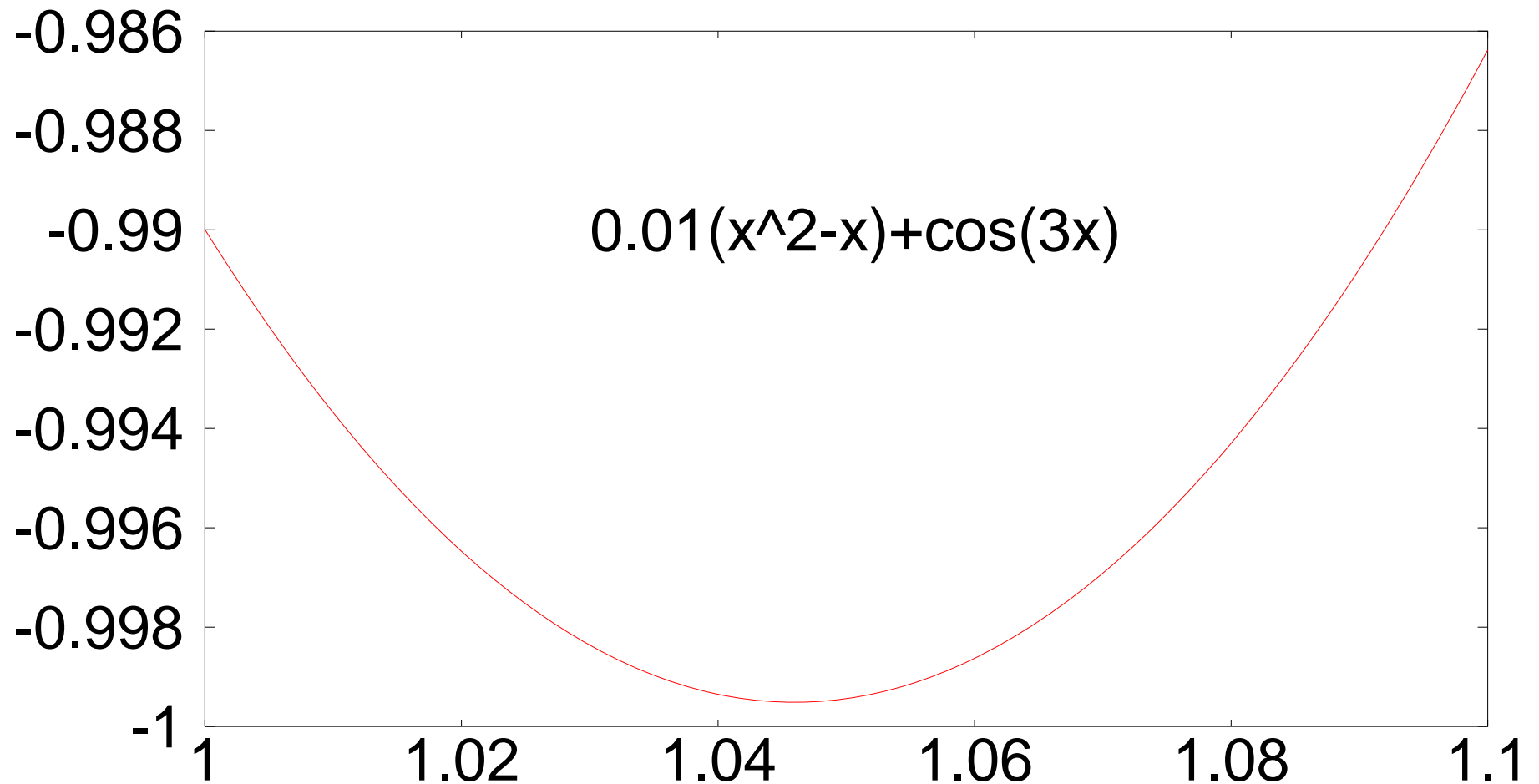
# グラフ探索の例



# グラフ探索の例(2)



# グラフ探索の例(3)



# 2分法

- 遅いが**確実**

$$x_L < x < x_R$$

- 仮定: 囲い込みが終了

$$F_L := F(x_L), F_R := F(x_R)$$

- アルゴリズム

- 1) 中点で評価

$$x_M := 0.5 * (x_L + x_R); F_M := F(x_M)$$

収束判定

- 2) 収束判定

if ( $F_L < F_M$  or  $F_L < F_R$ )

- 3) 凸三つ組更新

then  $\{x_R := x_M; F_R := F_M\}$

- 1次収束

else  $\{x_L := x_M; F_L := F_M\}$

$$|x_{n+1} - x| \sim |x_n - x| / 2$$



# 多分法

- グラフ探索と**等価**：2分法より遅い、より確実
- アルゴリズム：最小値判定＋凸三つ組更新
  - 1、2回実施した後は2分法か数値探索へ

```
 $F_L = F(x_L); k_M := 0; x_M := x_L; F_M := F_L; h := (x_R - x_L) / n$ 
```

```
do (k=1, n) {  $x_k := x_L + k * h; F_k := F(x_k);$ 
```

```
  if ( $F_k < F_M$ ) {  $k_M := k; x_M := x_k; F_M := F_k$  } }
```

```
if ( $k_M = 0$ ) then {  $x_R := x_L + h; F_R := F_1$  }
```

```
elseif ( $k_M = n$ ) then {  $x_L := x_R - h; F_L := F_{n-1}$  }
```

```
elseif ( $F_{k_M-1} < F_{k_M+1}$ ) then {  $x_L := x_M - h; x_R := x_M; F_L := F_{k_M-1}; F_R := F_M$  }
```

```
else {  $x_R := x_M + h; x_L := x_M; F_R := F_{k_M+1}; F_L := F_M$  }
```

# 最適化の収束判定

- **凸性**の確認: 最重要  $(F_{n+1} - F_n)(F_{n+1} - F_{n-2}) < 0$
- 条件1: 関数の変化量  $|F_{n+1} - F_n| < \delta_F$
- 条件2: 解の変化量  $|x_{n+1} - x_n| < \delta_x$
- 判定基準: 絶対値、相対値、複合判定
- 判定の閾(しきい)値  $\delta_F = |F_n| \delta$ 
  - 桁落ちへの**配慮**

$$\delta_x \approx \sqrt{\frac{2\delta_F}{|F_n''|}} \approx \sqrt{\frac{2|F_n|}{|F_n''|}} \sqrt{\delta}$$

# 最適化の収束判定(2)

- 微分値が**解析的に**計算可能な場合
  - もちろん凸性は確認

$$(F_{n+1} - F_n)(F_{n+1} - F_{n-2}) < 0$$

- 条件3: 微分値の値  $|F'_{n+1}| < \delta_{F'}$

- 判定の閾値の例  $\delta_{F'} = |F'_0| \delta$

- 添字0は代表値の意味

# 黄金分割法

## ■ 2分法の変形

$$x_{n+1} = (1-r)x_n + rx_{n-1}$$

### ■ 仮定: 単調減少列

$$F_n < F_{n-1}$$

### ■ 両端を比較して、より解に近い方に近づく

### ■ 近接法: 黄金分割(golden section)比

$$r \equiv (\sqrt{5}-1)/2 \cong 0.61803\dots$$

## ■ アルゴリズム

### ■ 1次収束(問: 示せ)

$$|x_{n+1} - x| \cong (1-r)|x_n - x|$$

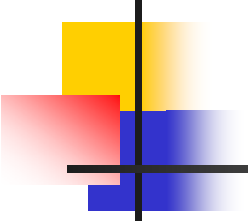
$$x_M := (1-r)x_n + r x_{n-1}; F_M := F(x_M)$$

収束判定

if ( $F_M < F_n$ )

then  $\{x_{n+1} := x_M; F_{n+1} := F_M\}$

else  $\{x_{n+1} := x_n; F_{n+1} := F_n; x_n := x_M; F_n := F_M\}$



# ブレント(Brent)法

- 凸三つ組のデータを基に、**放物線**近似
  - 近似式の頂点を逆に解く(問:求めよ)

$$x_{n+1} = x_n - \frac{(x_n - x_{n-2})^2 (F_n - F_{n-1}) - (x_n - x_{n-1})^2 (F_n - F_{n-2})}{2[(x_n - x_{n-2})(F_n - F_{n-1}) - (x_n - x_{n-1})(F_n - F_{n-2})]}$$

- アルゴリズムの核心
  - $(x_{n+1}, F_{n+1})$ の値による凸三つ組の更新
  - 問:自ら導け(参考:Numerical Recipe 10.2)

# セカント法と接線交差法

- 微分値が容易に計算できる場合
- 凸三つ組 → **凸境界** (= 微分値の逆符号対)
- セカント法  $(x_L, x_R); F'_L F'_R < 0$ 
  - 微分値 = 0 をセカント法で解く
  - 問: 凸境界の更新アルゴリズムを示せ
- 接線交差法 
$$x_M = \frac{(F'_R x_R - F'_L x_L) - (F_R - F_L)}{F'_R - F'_L}$$
  - 関数値も利用
  - 更新点: 凸境界の両端からの接線の交点

# 多次元最適化問題

- 間接法：非線型方程式  
の求解問題に変換

$$\text{opt } F(\mathbf{x}) \rightarrow \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} = 0$$

- 直接法（最適値を直接探索）の構成
  - 初期値・初期探索方向の決定
  - 直線探索 = 1次元最適化問題に帰着
  - 収束判定
  - 探索方向 $\mathbf{d}$ の更新：多種多様な方式



# 直接法の分類

---

- 探索方向の更新方法による分類
  - 最急降下 (steepest descent) 法
  - ニュートン法
  - 共役 (conjugate) 方向法: Powell
  - 共役傾斜法: Fletcher and Reeves (1964)
  - 準ニュートン法
    - 別名: セカント法、可変計量 (variable metric) 法
- 定番: 逆行列版BFGS公式

# 最急降下法

- Fを最適値のまわりに1次テイラー展開

$$F(\mathbf{x}) = F(\hat{\mathbf{x}}) + \mathbf{g}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \Delta \mathbf{x} + \dots \quad \mathbf{g} \equiv \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} \quad \Delta \mathbf{x} \equiv \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}$$

- 傾斜 (gradient) ベクトル:  $\mathbf{g}$

- 最急降下法 (Cauchy 1848)

- 各点で $\mathbf{g}$ の計算が必要

- 探索方向 = 最急降下方向  $\mathbf{d}_n = \mathbf{g}(\mathbf{x}_n)$

- **非常に遅い** (1次収束) が **確実** (大域的収束)

# ニュートン法

## ■ 2次テイラー展開

$$F(\mathbf{x}) = F(\hat{\mathbf{x}}) + \mathbf{g}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \Delta \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x} \cdot (\mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}) \Delta \mathbf{x}) / 2 + \dots$$

- ヘッセ(Hesse)行列 $\mathbf{H}$ : 対称

$$H_{jk} \equiv \frac{\partial^2 F}{\partial x_j \partial x_k}$$


## ■ ニュートン法

- 各点で $\mathbf{g}$ と $\mathbf{H}$ の計算が必要 → 膨大な計算量

- 探索方向 = ニュートン方向  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_n) \mathbf{d}_n = -\mathbf{g}(\mathbf{x}_n)$

- 連立1次方程式を解く必要 → コレスキー法

- 速い(2次収束)が非減少探索方向の可能性



# 準ニュートン法(3)

---

- ニュートン法の欠点
  - 「探索方向＝減少方向」が非保証
  - $H$ の計算量が膨大←例外: 最小2乗法では緩和
- 発想: ヘッセ行列を正定値行列  $D$  で近似
  - 高速性＋大域的収束性
- 代表的なヘッセ行列の更新公式
  - Davidon-Fletcher-Powell (DFP)
  - Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)

# 準ニュートン法(4)

- 準定番: BFGS更新公式

$$\mathbf{D}_n \mathbf{d}_n = -\mathbf{g}_n$$

$$\mathbf{D}_{n+1} = \mathbf{D}_n - \frac{(\mathbf{D}_n \Delta \mathbf{x}_n) \otimes (\mathbf{D}_n \Delta \mathbf{x}_n)}{(\mathbf{D}_n \Delta \mathbf{x}_n) \cdot \Delta \mathbf{x}_n} + \frac{\Delta \mathbf{g}_n \otimes \Delta \mathbf{g}_n}{\Delta \mathbf{g}_n \cdot \Delta \mathbf{x}_n}$$

- 定番: 逆行列版BFGS更新公式

- ヘッセ行列の逆行列の近似行列 $\mathbf{E}$   $\mathbf{d}_n = -\mathbf{E}_n \mathbf{g}_n$

- 連立1次方程式を解く必要なし

$$\mathbf{E}_{n+1} = \mathbf{E}_n - \frac{(\mathbf{E}_n \Delta \mathbf{g}_n) \otimes \Delta \mathbf{x}_n + \Delta \mathbf{x}_n \otimes (\mathbf{E}_n \Delta \mathbf{g}_n)}{\Delta \mathbf{g}_n \cdot \Delta \mathbf{x}_n} + \left( 1 + \frac{\Delta \mathbf{g}_n \cdot (\mathbf{E}_n \Delta \mathbf{g}_n)}{\Delta \mathbf{g}_n \cdot \Delta \mathbf{x}_n} \right) \frac{\Delta \mathbf{x}_n \otimes \Delta \mathbf{x}_n}{\Delta \mathbf{g}_n \cdot \Delta \mathbf{x}_n}$$

# 制約付き最適化問題

- 2種類の制約条件
  - 不等式  $G_k(\mathbf{x}) \leq 0$  等式  $H_j(\mathbf{x}) = 0$
- $F, G_k, H_j$  が全て線形 → 線形計画法
  - Linear Programming (LP)
  - 定番: シンプレックス (単体) 法
- それ以外 = 非線形計画法 (NLP)
  - 等式制約: ラグランジュの未定乗数法
  - 不等式制約: KKT条件付未定乗数法

# 未定乗数法

- ラグランジュ関数  $L(\mathbf{x}, \mu) \equiv F(\mathbf{x}) + \sum_j \mu_j H_j(\mathbf{x})$

- ラグランジュの未定乗数(multiplier):  $\mu$

- 最適条件

$$\left( \text{opt}F(\mathbf{x}), H_j(\mathbf{x}) = 0 \right) \rightarrow \left( \frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = 0, \frac{\partial L}{\partial \mu_j} = 0 \right)$$

- 結論: 制約なし最適化問題に帰着

# 未定乗数法(2)

- 拡張ラグランジュ関数

$$L(\mathbf{x}, \lambda, \mu) \equiv F(\mathbf{x}) + \sum_k \lambda_k G_k(\mathbf{x}) + \sum_j \mu_j H_j(\mathbf{x})$$

- Karush-Kuhn-Tucker (KKT) の5条件

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_k} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \mu_j} = 0, \quad \lambda_k \geq 0, \quad \lambda_k G_k(\mathbf{x}) = 0$$

- 結論: 乗数条件付きの最適化問題に帰着
  - 詳細は鈴木他(1994)を参照

# 9. 最小2乗法

- 最もよく使われる最適化問題

- Gauss (1801) 失踪小惑星セレスの軌道推定

- 目的関数

$$F(p) = \frac{1}{2} \sum_m w_m (g(t_m; p) - g_m)^2$$

- 差の2乗和

- パラメータ:p, 近似関数:g, 座標:t, データ:g

- 一般には近似関数もデータもベクトル値

- 重み:w ← データの誤差

- このとき「カイ2乗和」

$$w_m = \frac{1}{\sigma_m^2}$$

# 線形最小2乗法

- 線形: 近似関数 $g$ がパラメータ $c$ について線形

- 座標の依存性は不問
- $g =$ 基底関数の線形和

$$g(t; c) = \sum_k c_k \psi_k(t)$$

- 基底関数: 座標1次元の例

- 多項式
- フーリエ級数

$$g(t; c) = \sum_{k=0}^n c_k t^k$$

$$g(t; s, c) = \sum_{k=0}^n (s_k \sin \omega_k t + c_k \cos \omega_k t)$$



# 見かけの非線形性

- 注意: 基底関数(パラメータ)を選ぶとき、見かけの複雑さに**惑わされない**こと

- いくつかの例

- 1. 三角関数の振幅と位相→加法定理で展開

$$A \sin(\omega t + \theta) \rightarrow S \sin \omega t + C \cos \omega t$$

- 2. 2次式の標準形→多項式形

$$a(x - x_0)^2 + d \rightarrow ax^2 + bx + c$$

# 線形最小2乗法(2)

## ■ 座標1次元の例(続き)

$$g(t; c) = \sum_{k=0}^n c_k \exp(-\lambda_k t)$$

### ■ 指数関数

### ■ 減衰振動

$$g(t; s, c) = \sum_{k=0}^n (s_k e^{-\lambda_k t} \sin \omega_k t + c_k e^{-\lambda_k t} \cos \omega_k t)$$

### ■ 各種の直交関数

#### ■ チェビシェフ多項式: $|t| < 1$

#### ■ ルジャンドル多項式: 有限区間 ( $|t| < 1$ )

#### ■ ラゲル多項式: 半無限区間 ( $0 < t$ )

#### ■ エルミート多項式: 無限区間

### ■ 上記の組合せ

$$g(t; c) = \sum_{k=0}^n c_k X_k(t)$$

# 線形最小2乗法(3)

## ■ 座標2次元の例

$$g(x, y; c) = \sum_{n=0}^m \sum_{k=0}^n c_{nk} x^k y^{n-k}$$

### ■ 2元多項式

### ■ 円盤調和関数

$$g(\rho, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} J_n \left( \frac{\rho}{a} \right) \sum_{m=0}^n (C_{nm} \cos m\theta + S_{nm} \sin m\theta)$$

## ■ 座標3次元の例

### ■ 3元多項式

$$g(x, y, z; c) = \sum_{n=0}^m \sum_{k=0}^n \sum_{j=0}^k c_{nkj} x^k y^{j-k} z^{n-k}$$

### ■ 球面調和関数

$$g(r, \phi, \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{a}{r} \right)^{n+1} \sum_{m=0}^n P_n^m(\sin \phi) (C_{nm} \cos m\lambda + S_{nm} \sin m\lambda)$$

# 観測方程式

- 理論値と観測データの等式

$$\sum_{k=1}^N c_k \psi_k(t_m) = g_m$$

- 一般には過剰方程式系

= 未知数Nより方程式の数Mが(大幅に)過剰

- 観測方程式

- 理論や観測がベクトル値→1列に並べ直す
- 係数行列はN行M列(=縦長の長方形)

- 略記法  $\mathbf{Ac} \cong \mathbf{g}$

$$A_{kj} = \psi_j(t_k)$$

# 正規方程式

- 最小化: 目的関数のパラメータ偏微分=0

$$\frac{\partial F}{\partial c_k} = \sum_{m=1}^M w_m \left( \sum_{j=0}^n c_j \psi_j(t_m) - g_m \right) \psi_k(t_m) = 0$$

- **正規方程式**: pについての連立1次方程式

$$\mathbf{Bc} = \mathbf{b}$$

$$B_{kj} = \sum_{m=1}^M w_m \psi_j(t_m) \psi_k(t_m)$$

$$B_{kj} = B_{jk}$$

- **B**はN行N列正方実対称行列

- 標準解法: コレスキー法

$$b_k = \sum_{m=1}^M w_m \psi_k(t_m) g_m$$

# 分散共分散行列

$$\mathbf{C} \equiv (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$$

- 分散共分散 (variance-covariance) 行列

- (安直な) パラメータ推定誤差

$$\Delta p_k = \sigma \sqrt{C_{kk}}$$

- 標準偏差

$$\sigma \equiv \sqrt{2F_{\min} / W}$$

- 仮定: パラメータ間の分離が良

$$W \equiv \sum_m w_m$$

- = 共分散行列の逆行列が対角行列

- 正しい推定誤差:  $\mathbf{C}$  の固有値が必要

- 誤差楕円:  $F$  の2次形式表現 = 高次項を無視

- なかなか実行されない ← コスト高



# 正規方程式(2)

---

- 注意: 正規方程式の**ランク落ち**
  - 不適切な基底関数の選択
  - 不必要に多数の基底
- 対策1: 基底関数の分離(直交性)の向上
  - 選点直交多項式(例: チェビシェフ多項式)
- 対策2: 無理やり解く
  - (特にムーア・ペンローズの)**一般逆行列**
  - 観測方程式の係数行列を**特異値分解**

# 一般 (generalized) 逆行列

$$\mathbf{A}^+ \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

- 定義:  $\mathbf{A}$  が縦長  $\rightarrow \mathbf{A}^+$  は横長

- 観測方程式の解  $\mathbf{A}\mathbf{c} \cong \mathbf{g} \rightarrow \mathbf{c} = \mathbf{A}^+ \mathbf{g}$

- 注意:  $\mathbf{A}^+$  は一意でない

- **ムーア・ペンローズ** (Moore-Penrose) の  $\mathbf{A}^+$

- 以下の4条件を満たす一般逆行列

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^+ \mathbf{A} = \mathbf{A}, \quad (\mathbf{A}\mathbf{A}^+)^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^+,$$

$$\mathbf{A}^+ \mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+, \quad (\mathbf{A}^+ \mathbf{A})^T = \mathbf{A}^+ \mathbf{A}$$

# 特異値分解 (singular value decomposition)

■ 特異値分解  $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T$   $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{1}$

- $\mathbf{U}$ : N行M列、 $\mathbf{S}$ : M行M列対角、 $\mathbf{V}$ : M行M列直交
- アルゴリズム: 数値計算ライブラリを参照

■ ムーア・ペンローズの一般逆行列の構築

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{V}\mathbf{S}^+\mathbf{U}^T$$

$$S_{kk}^+ = \begin{cases} 1/S_{kk} & (S_{kk} \neq 0) \\ 0 & (S_{kk} = 0) \end{cases}$$

- 問: 4条件を確かめよ
- 分散共分散行列

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1} = \mathbf{V}(\mathbf{S}^+)^2\mathbf{V}^T$$

# 平均と標準偏差

- 最も単純な最小2乗法
- スカラー・データに対する定数値の推定
  - 答は**重み付き平均**値(問:確かめよ)

$$\hat{c} = \frac{G}{W}$$

$$W = \sum_{m=1}^M w_m$$

$$G = \sum_{m=1}^M w_m g_m$$

- 標準偏差の計算(データ数は十分大と仮定)

$$\sigma \equiv \sqrt{\frac{2F_{\min}}{W}}$$

$$2F_{\min} = G_2 - \frac{G^2}{W}$$

$$G_2 = \sum_{m=1}^M w_m g_m^2$$

# 直線回帰

- 1次関数(1次元)の当てはめ  $g(t; c) = c_0 + c_1 t$ 
  - 例1: 測光データから背景光(スカイ)を除去
  - 例2: スペクトル・データから連続光部分を除去
  - 正規方程式

$$\begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & B_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix}$$

$$B_k = \sum_{m=1}^M w_m t_m^k, b_k = \sum_{m=1}^M w_m g_m t_m^k$$

■ 解

$$\hat{c}_0 = \frac{b_0 B_2 - b_1 B_1}{B_0 B_2 - B_1^2}, \quad \hat{c}_1 = \frac{b_1 B_0 - b_0 B_1}{B_0 B_2 - B_1^2}$$

# 平面回帰

- 1次関数(2次元)の当てはめ

$$g(x, y; c) = c_0 + c_x x + c_y y$$

- 例: CCD画像データから背景光部分を除去
- 正規方程式

$$\begin{pmatrix} B_0 & B_x & B_y \\ B_x & B_{xx} & B_{xy} \\ B_y & B_{xy} & B_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_x \\ c_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_x \\ b_y \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} B_0 &= \sum_{m=1}^M w_m, B_x = \sum_{m=1}^M w_m x_m, B_y = \sum_{m=1}^M w_m y_m, \\ B_{xx} &= \sum_{m=1}^M w_m x_m^2, B_{xy} = \sum_{m=1}^M w_m x_m y_m, B_{yy} = \sum_{m=1}^M w_m y_m^2, \\ b_0 &= \sum_{m=1}^M w_m g_m, b_x = \sum_{m=1}^M w_m g_m x_m, b_y = \sum_{m=1}^M w_m g_m y_m \end{aligned}$$

# 例外値(outlier)の除去

- 観測データの場合は**非常に重要**
- 除去判定条件
  - **3シグマ**( $3\sigma$ )管理  $|g(t_m; c) - g_m| > 3\sigma$
  - 閾(しきい)値(例: 負値)  $g(t_m; c) < G_{\min}$
- アルゴリズム上の工夫
  - データの採用・不採用を示す論理配列を用意
- 重要: 例外値を除去  $\rightarrow$   $c$ や $\sigma$ が変化
  - 新たな除去データがなくなるまで繰り返す



# データの部分的集約

---

- 膨大なデータ: 正確に計算→計算コスト大
  - 例: 能動的観測値(探査機などとの通信)
- 正規点(normal point)
  - =座標が近いデータ群を集約する代表点
  - 最も簡単な例: 均質データの場合
    - 正規点 =  $N$ 個のデータ群の座標の重心
    - 代表値 =  $N$ 個のデータ群の値の平均
    - 重み = 個々のデータの重みの $N$ 倍



# データの部分的集約(2)

## ■ 実用的な方法

- 1. 座標について一定範囲ごとにデータを分離
- 2. 分離後の各データ群に対し、**低次多項式**で最小2乗法(例外値の除去も含む)による当てはめを実施
- 3. 正規点 = 除去後の重み付き重心
- 4. 代表値 = 正規点における推定多項式の値
- 5. 重み = 除去後のデータ群の重みの総和

# データの部分的集約(3)

- 例: (等間隔・等重み) 5点データを2次近似
  - 間隔:  $h$ , データ:  $(g_{-2}, g_{-1}, g_0, g_1, g_2)$
  - 2次近似式  $g(n) = a + bn + cn^2$
  - 最小2乗法 → 係数と代表値 (問: 求めよ)

$$b = \frac{-2g_{-2} - g_{-1} + g_1 + 2g_2}{10}, c = \frac{2g_{-2} - g_{-1} - 2g_0 + g_1 - 2g_2}{14}$$

$$a = \frac{-3g_{-2} + 12g_{-1} + 17g_0 + 12g_1 - 3g_2}{35}$$

# 三角回帰

## ■ 三角関数 (1次元) の当てはめ

$$g(t; S, C) = S \sin \omega t + C \cos \omega t$$

■ 例: 時系列データから特定周波数成分を検出

■ 正規方程式

$$\begin{pmatrix} B_{SS} & B_{SC} \\ B_{SC} & B_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_S \\ b_C \end{pmatrix}$$

■ 注意

$$B_{SS} + B_{CC} = W \equiv \sum_{m=1}^M w_m$$

$$B_{SS} = \sum_{m=1}^M w_m \sin^2 \omega t_m, B_{CC} = \sum_{m=1}^M w_m \cos^2 \omega t_m,$$

$$B_{SC} = \sum_{m=1}^M w_m \sin \omega t_m \cos \omega t_m,$$

$$b_S = \sum_{m=1}^M w_m g_m \sin \omega t_m, b_C = \sum_{m=1}^M w_m g_m \cos \omega t_m$$

# ペリオドグラム (Periodogram)

- ロム(Romb) 太陽の黒点データの解析
- 発想: 三角回帰で解(S,C)を $\omega$ の関数と解釈
  - **パワー・スペクトル**  $P(\omega) \equiv S^2(\omega) + C^2(\omega)$
  - **位相スペクトル**  $\varphi(\omega) \equiv \text{atan2}(S(\omega), C(\omega))$
- 特徴
  - 長所1: 非等間隔データでもOK → 天文向き
  - 長所2: 高い分解能
  - 欠点: 計算量が多い

# 拡張ペリオドグラム

- 発想: 基底関数を三角関数以外に**拡張**
  - Harada and Fukushima (2003)
  - 非線形パラメータ $p$ を固定して、線形パラメータ $c$ について線形最小2乗法を解く

$$g(t; c, p) = \sum_{k=1}^n c_k \psi_k(t, p)$$

- パワー・スペクトル = 目的関数の減少値の2倍

$$P(p) = 2\Delta F \equiv 2 \left[ F(c_k = \hat{c}_k) - F(c_k = 0) \right]$$

# 拡張ペリオドグラム(2)

## ■ (指数関数的) 単調減衰

- 指数関数 + 定数 → 減衰率と定常値を推定

$$g(t; c) = c_0 + c_1 \exp(-\lambda t)$$

- 例: 超新星の減光曲線

- 正規方程式

$$\begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & B_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix}$$

$$B_0 = \sum_{m=1}^M w_m, B_k = \sum_{m=1}^M w_m \exp(-k\lambda t_m),$$
$$b_0 = \sum_{m=1}^M w_m g_m, b_1 = \sum_{m=1}^M w_m g_m \exp(-\lambda t_m)$$

# 拡張ペリオドグラム(3)

■ 減衰振動  $g(t; S, C) = (S \sin \omega t + C \cos \omega t) \exp(-\lambda t)$

■ 2次元(減衰率と周波数)スペクトルの例

■ 正規方程式

$$\begin{pmatrix} B_{SS} & B_{SC} \\ B_{SC} & B_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_S \\ b_C \end{pmatrix}$$

■ 問: 1次項A+Btを加えたときの正規方程式を求めよ

$$B_{SS} = \sum_{m=1}^M w_m \exp(-2\lambda t_m) \sin^2 \omega t_m,$$

$$B_{CC} = \sum_{m=1}^M w_m \exp(-2\lambda t_m) \cos^2 \omega t_m,$$

$$B_{SC} = \sum_{m=1}^M w_m \exp(-2\lambda t_m) \sin \omega t_m \cos \omega t_m,$$

$$b_S = \sum_{m=1}^M w_m g_m \exp(-\lambda t_m) \sin \omega t_m,$$

$$b_C = \sum_{m=1}^M w_m g_m \exp(-\lambda t_m) \cos \omega t_m$$

# 拡張ペリオドグラム(4)

- **ケプラー運動**  $g(t; A, S, C) = A + S \sin E(t) + C \cos E(t)$ 
  - 2次元スペクトルの別の例
  - 例: 伴星(惑星?)による視線速度変動
  - 離心近点角Eはケプラー方程式を解いて求める

$$E - e \sin E = nt \rightarrow E(t)$$

- 非線形パラメータは2つ: 平均運動nと離心率e
- 問: 正規方程式の表現を求めよ

# 非線形最小2乗法

- 2種類の非線形最小2乗法：広義と狭義
- 狭義：全てのパラメータについて非線形
- 広義：一部のパラメータについて非線形
  - 例：近似関数が非線形基底の線形和の場合
- 一例：フーリエ級数（周波数も未知）＋1次項

$$F = F(c, p) \quad g(t; \vec{c}, p) = \vec{c} \cdot \vec{\psi}(t; p)$$

$$g(t; a, b, \mathbf{s}, \mathbf{c}, \boldsymbol{\omega}) = a + bt + \sum_{k=0}^n (s_k \sin \omega_k t + c_k \cos \omega_k t)$$

# 広義から狭義へ

- 広義最適化問題の簡易化
  - = 広義から狭義への還元
- 発想：非線形パラメータ $p$ を固定
  - 解釈： $c$ の線形最小2乗解は $p$ の関数
  - 同一視： $F$ は $p$ だけの関数

$$\hat{c} = \hat{c}(p)$$

$$\hat{F}(p) \equiv F(\hat{c}(p), p)$$

- 結論：狭義の非線形最小2乗法に**帰着**

# 広義から狭義へ (2)

- 傾斜ベクトル

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial p} = \left( \frac{\partial F}{\partial p} \right)_{c=\hat{c}}$$

- ヘッセ行列

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \hat{F}}{\partial p_\ell \partial p_m} &= \left( \frac{\partial^2 F}{\partial p_\ell \partial p_m} \right)_{c=\hat{c}} + 2 \sum_i \left( \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial p_m} \right)_{c=\hat{c}} \left( \frac{\partial \hat{c}_i}{\partial p_\ell} \right) \\ &\quad + \sum_{i,j} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial c_j} \right)_{c=\hat{c}} \left( \frac{\partial \hat{c}_i}{\partial p_\ell} \right) \left( \frac{\partial \hat{c}_j}{\partial p_m} \right) \end{aligned}$$

- 問: 上記表現を示せ

# 広義から狭義へ (3)

- (非線形パラメータ $p$ に関する)線形最小2乗解の係数 $c$ の偏微分が必要
- 正規方程式が解ける場合: 簡単
  - ← 正規方程式と類似の連立1次方程式の解

$$\mathbf{B} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial p} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial p} \end{pmatrix} \mathbf{c}$$

$$\frac{\partial B_{kj}}{\partial p_i} = 2 \sum_{m=1}^M w_m \frac{\partial \psi_j}{\partial p_i}(t_m; p) \psi_k(t_m; p)$$

- 問: 特異値分解が必要な場合の手法を導け

$$\frac{\partial b_k}{\partial p_j} = \sum_{m=1}^M w_m \frac{\partial \psi_k}{\partial p_j}(t_m; p) g_m$$

# 非線形最小2乗法(2)

- 以降は狭義非線形最小2乗法に限定

- ニュートン法  $F \cong F_0 + \mathbf{g}_0 \cdot \Delta \mathbf{p} + \Delta \mathbf{p} \cdot (\mathbf{H}_0 \Delta \mathbf{p}) / 2$

- ニュートン探索方向  $\mathbf{d}$   $\mathbf{H}(\mathbf{p}_n) \mathbf{d}_n = -\mathbf{g}(\mathbf{p}_n)$

- 傾斜ベクトル
- ヘッセ行列  $\frac{\partial F}{\partial p_k} = \sum_m w_m \left( \frac{\partial g}{\partial p_k} \right)_m (g(t_m; p) - g_m)$

$$H_{jk} = \frac{\partial^2 F}{\partial p_j \partial p_k} = \sum_m w_m \left[ \left( \frac{\partial g}{\partial p_j} \right)_m \left( \frac{\partial g}{\partial p_k} \right)_m + \left( \frac{\partial^2 g}{\partial p_j \partial p_k} \right)_m (g(t_m) - g_m) \right]$$

# 非線形最小2乗法(3)

- ニュートン法の欠点: 計算量が大きい
- 対策1: **ガウス近似** (H計算の簡易化)

- Hの表現中で  
第2項を無視

$$H_{jk} \cong \sum_m w_m \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial p_j} \end{pmatrix}_m \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial p_k} \end{pmatrix}_m$$

- 注意: 残差が小さくないと危険

- 対策2: ハートレー(Hartley)法

- **減速係数**の導入  $\mathbf{p}_{n+1} = \mathbf{p}_n + \lambda_n \mathbf{d}_n$
- 直線探索の必要性: コスト高

# 非線形最小2乗法(4)

- 対策3: マルカート(Marquardt)法
  - ガウス近似と単位行列の混合で近似→安定化

$$H_{jk} \cong \alpha_j \delta_{jk} + \sum_m w_m \left( \frac{\partial g}{\partial p_j} \right)_m \left( \frac{\partial g}{\partial p_k} \right)_m$$

- さまざまな混合係数

- レーベンベルグ  
(Levenberg)係数

$$\alpha_j^L = \sum_m w_m \left( \frac{\partial g}{\partial p_j} \right)_m \left( \frac{\partial g}{\partial p_j} \right)_m$$

- ナッシュ(Nash)係数

$$\alpha_j^N = 1 + \alpha_j^L$$



# 10. 数値微分

---

- 等間隔標本点の場合
- 非等間隔標本点の場合
- 補間多項式の微分
- 近似関数の微分
- 1階微分と高階微分
- 桁落ちの影響
- 数値微分の活用法

# 等間隔数値微分

- 等間隔標本点の場合 (数値積分結果など)
- 階差表現の導出: **演算子法**の活用
  - 微分演算子  $Dy \equiv f$
  - シフト演算子  $Sy_n \equiv y_{n+1}$
  - テイラー展開と後退差分の演算子解釈

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^k}{k!} y_n^{(k)} \rightarrow S = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(hD)^k}{k!} = e^{hD}$$

$$\nabla y_n = y_n - y_{n-1} \rightarrow \nabla = 1 - S^{-1} = 1 - \exp(-hD)$$

# 等間隔数値微分(2)

- 微分の差分・和分表現 (問: 示せ)

- 後退差分と前進差分

$$hD = -\log(1 - \nabla) = \log(1 + \Delta)$$

- 中心差分と和分

$$hD = 2 \sinh^{-1}(\delta / 2) = 2 \cosh^{-1} \mu$$

- 倍幅中心差分と中心差分和分

$$hD = \sinh^{-1}(\mu\delta) = \frac{2\mu}{\sqrt{1 + \delta^2 / 4}} \sinh^{-1}\left(\frac{\delta}{2}\right)$$

# 等間隔数値微分(3)

- 微分の中心差分和分表現(問:確かめよ)

$$hD = \frac{2\mu}{\sqrt{1+\delta^2/4}} \sinh^{-1}\left(\frac{\delta}{2}\right) = \mu\delta \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!)^2}{(2n+1)!} (-\delta^2)^n = \mu\left(\delta - \frac{\delta^3}{6} + \frac{\delta^5}{30} - \frac{\delta^7}{140} + \dots\right)$$

- 1階微分の中心差分和分公式(問:示せ)

- 2次  $2hf'_n = f_{n+1} - f_{n-1}$

- 4次  $12hf'_n = -(f_{n+2} - f_{n-2}) + 8(f_{n+1} - f_{n-1})$

- 6次  $60hf'_n = (f_{n+3} - f_{n-3}) - 9(f_{n+2} - f_{n-2}) + 45(f_{n+1} - f_{n-1})$

- 8次  $840hf'_n = -(f_{n+4} - f_{n-4}) + 32(f_{n+3} - f_{n-3}) - 168(f_{n+2} - f_{n-2}) + 672(f_{n+1} - f_{n-1})$

# 等間隔数値微分(4)

- 2階微分の中心差分表現(問:確かめよ)

$$h^2 D^2 = 4 \left[ \sinh^{-1} \left( \frac{\delta}{2} \right) \right]^2 = \delta^2 - \frac{\delta^4}{12} + \frac{\delta^6}{90} - \frac{\delta^8}{560} + \frac{\delta^{10}}{3150} - \frac{\delta^{12}}{16632} + \dots$$

- 2階微分の中心差分公式(問:示せ)

- 2次  $h^2 f_n'' = (f_{n+1} + f_{n-1}) - 2f_n$

- 4次  $12h^2 f_n'' = -(f_{n+2} + f_{n-2}) + 16(f_{n+1} + f_{n-1}) - 30f_n$

- 6次  $180h^2 f_n'' = (f_{n+3} + f_{n-3}) - 21(f_{n+2} + f_{n-2}) + 255(f_{n+1} + f_{n-1}) - 470f_n$

- 8次  $5040h^2 f_n'' = -(f_{n+4} + f_{n-4}) + 64(f_{n+3} + f_{n-3}) - 784(f_{n+2} + f_{n-2})$   
 $+ 7616(f_{n+1} + f_{n-1}) - 13790f_n$

# 非等間隔数値微分

- 非等間隔標本点の場合（点 $x_n$ での微分値）
  - ニュートン補間公式を微分して $x=x_n$ を代入
  - 実用的ヒント：標本点は $x_n$ から近い順に交互に

$$\begin{aligned} f'_n &= f[x_n, x_{n+1}] + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}](x_n - x_{n+1}) \\ &\quad + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}, x_{n+2}](x_n - x_{n+1})(x_n - x_{n-1}) \\ &\quad + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}, x_{n+2}, x_{n-2}](x_n - x_{n+2})(x_n - x_{n+1})(x_n - x_{n-1}) \\ &\quad + \cdots + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}, \dots, x_{n+m}] \prod_{k=1}^{m-1} (x_n - x_{n+k})(x_n - x_{n-k}) \\ &\quad + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}, \dots, x_{n+m}, x_{n-m}] (x_n - x_{n+m}) \prod_{k=1}^{m-1} (x_n - x_{n+k})(x_n - x_{n-k}) + \cdots \end{aligned}$$

# 桁落ちの影響

## ■ 数値微分の原理的困難

- 似たような値の差 → 桁落ちが深刻

- 刻み幅を小さく取れない → 刻み幅の最適値

- 対策: 近似誤差 ~ 丸め誤差 ← 刻み幅を調節

## ■ 重要: n次公式の計算精度は $\varepsilon^{n/(n+1)}$ どまり

- 例: 1階微分の  
2次中心差分

$$\left| f'_n - \left( \frac{f_{n+1} - f_{n-1}}{2h} \right) \right| \approx \frac{1}{6} |f_n^{(3)}| h^2 \cong \frac{|f_n| \varepsilon}{2h} \rightarrow$$
$$h_{\text{opt}} = \sqrt[3]{3 |f_n| \varepsilon^2 / |f_n^{(3)}|}, |\delta f'_n|_{\text{min}} \approx \sqrt[3]{3 |f_n|^2 |f_n^{(3)}| \varepsilon^2}$$

# 数値微分の活用法

## ■ 微分公式の**検査**

### ■ 複雑な関数の常微分・偏微分

→ 公式の導出やコード化を間違いやすい

- 例: 陰関数、超高次元、多数回の変数変換

### ■ 検査目的: 倍精度2次公式(誤差12桁)で十分

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{y,\dots} \leftrightarrow \frac{f\left(x\left(1+\sqrt[3]{\varepsilon}\right), y, \dots\right) - f\left(x\left(1-\sqrt[3]{\varepsilon}\right), y, \dots\right)}{2x\left(\sqrt[3]{\varepsilon}\right)}$$

### ■ 注意: 事前スケーリングが重要

# 数値微分の活用法(2)

- 常微分・偏微分の代用
  - 超高精度は不要→計算コストは大きくない
  - 常微分
    - 2次公式の評価～関数評価2回
  - 偏微分
    - 発想: 原点値を共有
    - 1次公式の成分毎コスト＝関数評価N/(N+1)回

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{y,\dots} \cong \frac{f(x(1+\sqrt{\varepsilon}), y, \dots) - f(x, y, \dots)}{x\sqrt{\varepsilon}}$$



# 11. 数値積分

---

## ■ 線積分

- 有限区間: ニュートン・コーツ、ガウス型
  - 等間隔データ: 中心補間型公式
  - 周期関数の1周期積分→台形則が最良
  - 無限・半無限区間: ガウス型、二重指数関数型
  - 特異点の処理→二重指数関数型
- ## ■ 定番: 外挿法(ロンバーグ法)

# 有限区間の数値積分

- 既知関数の定積分を線形結合で近似

$$I = \int_a^b f(x) w(x) dx \approx \sum_{k=1}^N A_k f(x_k)$$

- まずは**区分化**

- 標本点の分布

$$I = \sum_{m=1}^M \int_{a_{m-1}}^{a_m} f(x) w(x) dx$$

- 等間隔: ニュートン・コーツ(Newton-Cotes)公式
- 直交多項式の根: ガウス型公式

# ニュートン・コーツ公式

- 等間隔の多項式補間公式を全域で積分

- 最も重要: **台形則**

- 2点公式

$$I_2 = \frac{h}{2} (f(a_0) + f(a_1))$$

- 他の公式(あまり使われない)

- 3点: シンプソン1/3

$$I_3 = \frac{h}{3} (f(a_0) + 4f(a_{1/2}) + f(a_1))$$

- 4点: シンプソン3/8

$$I_4 = \frac{h}{8} (f(a_0) + 3f(a_{1/3}) + 3f(a_{2/3}) + f(a_1))$$

# ガウス型公式

- 直交多項式による補間公式を積分

$$I_N = \sum_{k=1}^N w_k f(x_k)$$

- 評価点 = 高次直交多項式の根
  - ルジャンドル多項式:  $P_{13}$ まで既に記述
  - チェビシエフ多項式: 三角関数表現

- 重み係数

- 問: 導け

$$\frac{1}{w_k} = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{\lambda_k} [\psi_j(x_k)]^2$$



# ガウス型公式(2)

---

- 直交多項式による分類
  - $P_n$ : ルジャンドル、有限区間(端点値含まず)
  - $P'_n$ : ロバット、有限区間(端点値含む)
  - $T_n$ : チェビシエフ、周期関数に有効
  - $L_n$ : ラゲル、半無限区間積分
  - $H_n$ : エルミート、無限区間積分

# ガウス・ルジャンドル公式

- 有限区間、評価点は区間の**内部点**
  - 一次変換で基本区間 $[-1, 1]$ に変換後

$$I_N = \int_{-1}^{+1} f(x) dx = \sum_{k=1}^N w_k^{(N)} f(x_k^{(N)})$$

- 評価点 $x_k$ :  $P_N$ の**根**
- 次数:  $2N$
- 重み $w_k$

$$w_k^{(n)} = \frac{2 \left[ 1 - \left\{ x_k^{(N)} \right\}^2 \right]}{\left[ n P_{N-1} \left( x_k^{(N)} \right) \right]^2}$$

# ロバット(Lobatto)型公式

- 有限区間、評価点は**両端点と内部点**
  - 一次変換で基本区間 $[-1, 1]$ に変換後

$$I_{N+2} = \int_{-1}^{+1} f(x) dx = \frac{2\{f(-1) + f(+1)\}}{(N+2)(N+1)} + \sum_{k=1}^N w_k^{(N)} f(x_k^{(N)})$$

- 評価点 $x_k$ :  $P'_{N+1} = Q_{N+1}$ の根

- 次数:  $2N+1$

- 重み $w_k$

$$w_k^{(N)} = \frac{2(N+1)}{(N+2) \left[ P'_N(x_k^{(N)}) \right]^2}$$

# 中心補間型公式

- 有限区間、評価点は**両端点と等間隔外部点**

$$I_{2N+2} = \int_{x_m}^{x_{m+1}} f(x) dx = \sum_{k=0}^N w_k^{(N)} \left[ f(x_{m-k}) + f(x_{m+1+k}) \right]$$

- 次数:  $2N+3$
- 積分の**中心差分和分表現**(問:導け)

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{hD} &= \frac{\mu\delta}{2 \sinh^{-1}(\delta/2) \sqrt{1+\delta^2/4}} \\ &= \mu\delta \left( 1 - \frac{\delta^2}{12} + \frac{11\delta^4}{720} - \frac{191\delta^6}{60480} + \frac{2497\delta^8}{3628800} - \frac{14797\delta^{10}}{95800320} + \frac{92427157\delta^{12}}{2615348736000} - \dots \right) \end{aligned}$$



# 中心補間型公式(2)

## ■ 中心差分和分公式(問:導付)

■ 3次=台形則  $I_2 = (h/2)(f_{n+1} + f_n)$

■ 5次  $I_4 = (h/24)[13(f_{n+1} + f_n) - (f_{n+2} + f_{n-1})]$

■ 7次  $I_6 = (h/1440)[802(f_{n+1} + f_n) - 93(f_{n+2} + f_{n-1}) + 11(f_{n+3} + f_{n-2})]$

■ 9次  $I_8 = (h/120960)[68323(f_{n+1} + f_n) - 9531(f_{n+2} + f_{n-1})$   
 $+ 1879(f_{n+3} + f_{n-2}) - 191(f_{n+4} + f_{n-3})]$

■ 11次  $I_{10} = (h/7257600)[4134338(f_{n+1} + f_n) - 641776(f_{n+2} + f_{n-1})$   
 $+ 162680(f_{n+3} + f_{n-2}) - 28939(f_{n+4} + f_{n-3}) + 2497(f_{n+5} + f_{n-4})]$

# 数値的畳み込み

## ■ ラプラス変換

$$\mathcal{L}(f)(s) = F(s) \equiv \int_0^{+\infty} f(t) \exp(-st) dt$$

## ■ ラプラス逆変換

$$\mathcal{L}^{-1}(F)(t) = f(t) \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} F(s) \exp(st) ds$$

### ■ 多項式→微分

$$\mathcal{L}^{-1}(sF(s) - f(0)) = \frac{df}{dt}$$

### ■ 分数式→積分

$$\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{F(s)}{s}\right) = \int_0^t f(\tau) d\tau$$

## ■ 畳み込み $\mathcal{L}^{-1}(FG)(t) = (f * g)(t) \equiv \int_0^{+\infty} f(t) g(t-\tau) d\tau$

## ■ 有理式との数値的畳み込み→数値微積分

# 数値的畳み込み(2)

## ■ フーリエ変換

$$\mathcal{F}(f)(\omega) = F(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \exp(-i\omega t) dt$$

## ■ フーリエ逆変換

$$\mathcal{F}^{-1}(F)(t) = f(t) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) \exp(i\omega t) d\omega$$

### ■ 多項式→微分

$$\mathcal{F}^{-1}(i\omega F(\omega)) = \frac{df}{dt}$$

### ■ 分数式→積分

$$\mathcal{F}^{-1}\left(\frac{F(\omega)}{i(\omega - \alpha)}\right) = \int_{-\infty}^t f(\tau) \exp[i\alpha(t - \tau)] d\tau$$

## ■ 畳み込み

$$\mathcal{F}^{-1}(FG)(t) = (f * g)(t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau) g(t - \tau) d\tau$$

## ■ 応用例: Shirai and Fukushima (2000, AJ)

# 周期関数の積分

- 基本: 重み1での1周期積分

$$I = \int_0^{2\pi} f(x) dx$$

- オイラー・マクローリン展開

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{k=0}^n f(a+kh) - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{B_{2j} h^{2j}}{(2j)!} \left[ f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a) \right] \quad h = \frac{b-a}{n}$$

- 周期関数 → 上記展開の誤差項は非常に小

- 結論: **台形則**は非常に高精度

$$I \cong h \sum_{k=0}^{n-1} f(a+kh)$$

- 周期性より、和が簡単になる

- 応用: 離散フーリエ変換公式 → FFT

# 周期関数の積分(2)

- 例: ベッセル関数の積分定義

$$J_{2m}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(2mx - y \sin x) dx$$

- 台形則による近似(問: 示せ)

$$J_{2m}(y) \cong \frac{1}{n} \left[ 1 + \sum_{k=1}^{n-1} \cos \left( \frac{2mk\pi}{n} - y \sin \left( \frac{k\pi}{n} \right) \right) \right]$$

- 問: 標本点数  $n=4, 8, 16$  として、適当な  $m, y$  で積分の精度を調べよ

# 二重指数関数型公式

- Takahashi and Mori (1974)
  - 無限区間のオイラー・マクローリン展開→被積分関数が無限遠で急減少なら台形則は最良
- 発想: 無限区間に**変数変換 + 台形則**

$$I = \int f(x) dx \rightarrow I = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\phi(y)) \phi' dy \cong h \sum_{n=-N}^N f(\phi(nh)) \phi'(nh)$$

- 最適な変換 = 変換後が2重指数関数的

$$f(\phi(y)) \phi'(y) \cong \exp(-a \exp|y|)$$

# 二重指数関数型公式(2)

- 端点が**特異点**のときは効果絶大
- 有限区間の場合
  - 準備: 1次変換で積分区間を $[-1, 1]$ に
  - 変数変換
  - 積分公式

$$\phi(y) = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh y\right)$$

$$I = \frac{\pi h}{2} \sum_{n=-N}^N f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)\right) \frac{\cosh nh}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)}$$

# 二重指数関数型公式(3)

- 半無限区間の場合

- 積分区間  $[0, \infty]$

- 変数変換

- 積分公式

$$\phi(y) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh y\right)$$

$$I = \frac{\pi h}{2} \sum_{n=-N}^N f\left(\exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)\right) \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right) \cosh nh$$

- 問: 右の積分を求めよ

$$I = \int_0^{+\infty} \frac{dx}{1 + (\sqrt{x})^3}$$

# 二重指数関数型公式(4)

- 半無限区間の場合(その2)

- 被積分関数が既に指数関数的に減少する場合

$$f(x) = g(x) \exp(-x)$$

- 変数変換

- 積分公式

$$\phi(y) = \exp\left[\frac{\pi}{2}\{y - \exp(-y)\}\right]$$

$$I = \frac{\pi h}{2} \sum_{n=-N}^N f\left(\exp\left[\frac{\pi}{2}\{nh - \exp(-nh)\}\right]\right) \left[\frac{\pi}{2}\{nh - \exp(-nh)\}\right] \{1 + \exp(-nh)\}$$

- 問: 右の積分を求めよ

$$I = \int_0^{+\infty} \frac{\exp(-x)}{1 + \sqrt{x}} dx$$

# 二重指数関数型公式(5)

- 無限区間の場合

- 積分区間  $[-\infty, \infty]$

- 変数変換

- 積分公式

$$\phi(y) = \sinh\left(\frac{\pi}{2} \sinh y\right)$$

$$I = \frac{\pi h}{2} \sum_{n=-N}^N f\left(\sinh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)\right) \cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right) \cosh nh$$

- 問: 右の積分を求めよ

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\left(\sqrt{1+x^2}\right)^3}$$

# ロンバーグ (Romberg) 法

- 発想: 台形則の誤差はhの偶数累乗展開

$$I(h) = I^{(0)} + I^{(2)}h^2 + I^{(4)}h^4 + I^{(6)}h^6 + \dots$$

- 台形則の積分結果を $h \rightarrow 0$ へ多項式外挿

$$I_{n,k} = I_{n,k-1} + (I_{n,k-1} - I_{n-1,k-1}) / (4^k - 1)$$

- 分割数は倍々で増やす (ロンバーグ列)
  - 試験積分の計算に前回の結果を利用可能
- 積分点数が可変、コードが簡単 → 定番

# ロンバーグ法(2)

## ■ 第一段

$$I_{1,0} = \frac{b-a}{4} \left[ f(a) + 2f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

## ■ 第二段以降: 前段の結果を再利用

■ hを半減  $h_{n+1} = 0.5h_n$        $h_1 = 0.5(b-a)$

■ → 新たな標本点の総和の追加ですむ

$$I_{n+1,0} = I_{n,0} + h_{n+1} S_{n+1}, \quad S_{n+1} = \sum_{j=1}^{2^n} f(a + (2j-1)h_{n+1})$$

■ 1階差分は直接計算可能  $I_{n+1,0} - I_{n,0} = h_{n+1} S_{n+1}$

# 問: 数値積分

- さまざまな方法で次の定積分の値を求めよ
  - パラメータの値は許容範囲内で適宜与えよ

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} (1+x^2)^{-5/2} dx$$

$$I_2 = \int_{-1}^{+1} (1-x^2)^{-3/2} dx$$

$$I_3(e) = \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{\cos x}{\left(\sqrt{1-e \cos x}\right)^3} dx$$

$$I_4(c, n) = \int_0^{+\infty} \frac{x^n}{1+ce^x} dx$$

# 12. 常微分方程式の 数値解法 I. 1段法

- 差分法の分類
  - 1段法と多段法
  - 陽公式と陰公式
- 外挿法
- 特殊な2階常微分方程式専用の方法
- 適応的積分法＝パラメータの可変変化
  - 刻み幅、次数、外挿の段数、...

# 常微分方程式

- 特別な場合：線形、変数分離形など
- 一般形と初期条件
- 高階→連立

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t) \quad y(t_0) = y_0$$

$$\frac{d^n y}{dt^n} = f(y, y', \dots, t) \rightarrow \left\{ \frac{dy_n}{dt} = f(y, t), \dots, \frac{dy_k}{dt} = y_{k+1}, \dots, \frac{dy_0}{dt} = y_1 \right\}$$

$$\mathbf{y} = (y, y', \dots, y^{(n)}) = (y_0, y_1, \dots, y_n)$$

- 特殊な2階
  - 運動方程式に頻出

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = f(x, t)$$

# 1次元線形の場合

- 一般形

$$\frac{dy}{dt} = a(t)y + b(t)$$

$$y(t_0) = y_0$$

- 解の積分表現

- 合成積の登場

$$y(t) = \frac{1}{z(t)} \left[ y_0 - \int_{t_0}^t b(\tau) z(\tau) d\tau \right]$$

- 補助解の表現

$$z(t) = \exp \left[ \int_{t_0}^t a(\tau) d\tau \right]$$

# 1次元線形の場合(2)

- 定数係数: 連立定数係数の場合の基本解

$$\frac{dy}{dt} = ay + b(t) \quad y(t_0) = y_0$$

- 解の積分表現: 合成積 = 畳み込み

- 数値的畳み込みが可能

$$y(t) = y_0 e^{-a(t-t_0)} - \int_{t_0}^t b(\tau) e^{a(t-\tau)} d\tau$$

# 連立線形の場合

## ■ 一般の場合

- 変分方程式などで頻出

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$$

- 非線形の場合と同様に解くしかない

## ■ 定数係数行列の場合

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}$$

- 1) 係数行列の対角化

$$\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{D}$$

- 2) 変数変換

$$\mathbf{z} = \mathbf{P}\mathbf{y}, \mathbf{c} = \mathbf{P}\mathbf{b}$$

- 3) 変換後、成分別に解く

$$\frac{dz}{dt} = \mathbf{D}\mathbf{z} + \mathbf{c}(t)$$

# 変数分離形

- 1次元、自律的

- 変数の主従を逆転→数値積分に帰着

$$\frac{dy}{dt} = f(y) \rightarrow \frac{dt}{dy} = \frac{1}{f(y)} \rightarrow t = \int \frac{dy}{f(y)}$$

- 1次元、積の形

- 媒介変数を導入→数値積分+補間に帰着

$$\frac{dy}{dt} = f(y)g(t) \rightarrow \frac{ds}{dt} = g(t), \frac{ds}{dy} = \frac{1}{f(y)} \rightarrow s = \int g(t) dt = \int \frac{dy}{f(y)}$$

# オイラー(Euler)法

- Euler (1768)
- 陽(explicit)公式

$$y_{n+1} = y_n + hf_n$$

- 別名: 前進オイラー
- 思想: 微分を1階差分商で近似
- 特性: 1段、1回、1点、1次
- 局所誤差:  $f$ の微分値

$$\frac{dy}{dt} \approx \frac{\Delta y}{h}$$

$$|\delta y_{n+1}| \cong h^2 f'_n$$

- 略記法  $y_n \equiv y(t_n), f_n \equiv f(y_n, t_n), h \equiv t_{n+1} - t_n$

# 差分法の特異指数

- 段数(step):  $n$ 
  - 未来予測に必要な(現在及び過去の)総ステップ数
- 回数(stage):  $r$ 
  - $f$ を何回計算するか = 主コスト
- 点数(point)
  - いくつ異なる時点( $t$ )での情報が必要か = 副コスト
- 次数(order):  $p$ 
  - 公式が $h$ の何乗まで正しいか
  - 誤差定数 $C$ : 誤差の比例定数

$$\left| \frac{\delta y_n}{y_n} \right| \cong Ch^{p+1}$$



# 差分法の特数量

- **線形安定領域** (Linear Stability Region)
  - 線形問題  $y' = \lambda y$  に対して「安定な」複素パラメータ  $\mu \equiv h\lambda$  の領域
  - 安定: 成長率 ( $= |y_{n+1}/y_n|$ ) が1以下
- **周期安定境界** (Interval of Periodicity)
  - 特に**単振動問題**  $y' = i\omega y$  において安定な最大位相  $H_{\text{MAX}} \equiv h\omega$
  - = 線形安定領域の虚軸上の限界

# オイラー法(2)

- 陽公式の線形安定条件

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n \rightarrow \left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = |1 + \mu| \leq 1$$

- 安定領域 = 中心-1/2, 半径1/2の円の内側
- 周期安定境界
  - 虚軸上に安定領域なし  $\rightarrow H_{MAX} = 0$
- 結論: 陽公式は**非常に不安定**

# オイラー法(3)

- 陰(implicit)公式

- 別名: 後退オイラー

- 硬い常微分方程式で多用

- 陰公式 = 直接には計算できない

- 一般: 予測子修正子法(後述)で収束するまで解く

- 連立線形: 付随(adjoint)連立1次方程式を解く

$$y_{n+1} = y_n + hf_{n+1}$$

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$$

$$(\mathbf{1} - h\mathbf{A}_{n+1})\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{b}_{n+1}$$

# 硬い常微分方程式

- **硬い**(stiff) = 大きさが異なる固有成長率 (or 減衰率) が複数ある方程式系

- 簡単な例 
$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ 10^{-8} y \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} f(x, y) \\ g(x, y) \end{pmatrix}$$

- 振動的に(oscillatory)硬い = 大きさが異なる固有振動数が複数ある方程式系

- 典型例: 太陽系天体の軌道運動
  - イオ: 1日、海王星: 約300年

# オイラー法(4)

- 陰公式の線形安定条件

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1} \rightarrow \left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = \frac{1}{|1 - \mu|} \leq 1$$

- 安定領域 = 中心  $1/2$ , 半径  $1/2$  の円の外側
- 周期安定境界
  - 虚軸上は全て安定  $\rightarrow H_{\text{MAX}} = \infty$
- 結論: 陰公式は**非常に安定**

# テイラー級数法

- オイラー法の第一の拡張
- 高階微分の計算が容易でない限り**非効率**

- 積分公式

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}_n + \frac{h^2}{2} \left( \frac{d\mathbf{f}}{dt} \right)_n + \frac{h^3}{6} \left( \frac{d^2\mathbf{f}}{dt^2} \right)_n + \dots$$

- 高階微分の計算例

$$\frac{d\mathbf{f}}{dt} = \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right) \mathbf{f} + \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \right)$$

- 一般には非常に複雑

$$\frac{d^2\mathbf{f}}{dt^2} = \left( \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y} \partial \mathbf{y}} \right) \mathbf{f}\mathbf{f} + 2 \left( \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y} \partial t} \right) \mathbf{f} + \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right) \left( \frac{d\mathbf{f}}{dt} \right) + \left( \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial t^2} \right)$$



# ルンゲ・クッタ法

---

- Runge(1895), Heun(1900), Kutta(1901)
- オイラー法の拡張の第二の方向
  - 思想: 中間点 (= 内部点) で **試行錯誤**
  - 長所1: 事前の準備が不要 = 自動出発可能
  - 長所2: 安定領域が広い
  - 短所1: コスト高
  - 短所2: 高次公式が複雑かつ導出が困難
  - 短所3: 陰公式は非実用的 (例外あり)



# ルンゲ・クッタ法(2)

---

- ルンゲ・クッタ法の特徴

- 1段、多数の内部点、多数回評価

- 低次の公式

- 2次2回2点陽公式: 中点則 (Runge 1895)
- 2次2回1点陽公式: 修正台形則
- 2次2回1点陰公式: 台形則
- 3次3回3点陽公式: Heun (1900)
- 3次3回2点陽公式: Kutta (1901)
- 4次4回2点陽公式: The ルンゲ・クッタ

# 低次ルンゲ・クッタ法

- 2次2回2点陽公式: 中点 (midpoint) 則

$$y_{n+1/2} = y_n + \frac{h}{2} f_n$$

$$t_{n+p} \equiv t_n + ph$$

$$y_{n+1} = y_n + hf_{n+1/2}$$

$$f_{n+1/2} \equiv f(y_{n+1/2}, t_{n+1/2})$$

- 2次2回1点陽公式: 修正台形則 (ホイン法)

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + hf_n$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f_n + \tilde{f}_{n+1})$$

$$\tilde{f}_{n+1} \equiv f(\tilde{y}_{n+1}, t_{n+1})$$

# 低次ルンゲ・クッタ法(2)

- 2次2回1点陰公式: **台形** (trapezoidal) 則
  - 「硬い」方程式で重宝、**対称** 公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f_n + f_{n+1}) \quad f_{n+1} \equiv f(y_{n+1}, t_{n+1})$$

- 連立線形の場合: 付随連立1次方程式を解く

$$\left( \mathbf{1} - \frac{h}{2} \mathbf{A}_{n+1} \right) \mathbf{y}_{n+1} = \left( \mathbf{1} + \frac{h}{2} \mathbf{A}_n \right) \mathbf{y}_n + \frac{h}{2} (\mathbf{b}_n + \mathbf{b}_{n+1})$$

- 3次以上の陰公式は非実用的

# 低次ルンゲ・クッタ法(3)

- 3次3回3点陽公式: ホインの3次公式

$$k_1 = hf_n$$

$$z_2 = y_n + \frac{k_1}{3}; k_2 = hf(z_2, t_{n+1/3})$$

$$z_3 = y_n + \frac{2k_2}{3}; k_3 = hf(z_3, t_{n+2/3})$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_3)$$

# 低次ルンゲ・クッタ法(4)

- 3次3回2点陽公式: クッタの3次公式

$$k_1 = hf_n$$

$$z_2 = y_n + \frac{k_1}{2}; k_2 = hf(z_2, t_{n+1/2})$$

$$z_3 = y_n - k_1 + 2k_2; k_3 = hf(z_3, t_{n+1})$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)$$

# 低次ルンゲ・クッタ法(5)

- 4次4回2点陽公式: The **ルンゲ・クッタ法**

- RK4と略記

- **特徴**: 2点公式

- $f$  の計算で  $t$  依存部分が重い場合は、依存部分の再利用により約2倍高速化

$$k_1 = hf_n$$

$$z_2 = y_n + \frac{k_1}{2}; k_2 = hf(z_2, t_{n+1/2})$$

$$z_3 = y_n + \frac{k_2}{2}; k_3 = hf(z_3, t_{n+1/2})$$

$$z_4 = y_n + k_3; k_4 = hf(z_4, t_{n+1})$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

# 低次ルンゲ・クッタ法(6)

- RK4: 連立線形の場合

- 注目:  $\mathbf{A}_{n+1}$  と  $\mathbf{b}_{n+1}$  は次のステップで再活用可能

$$\mathbf{k}_1 = h(\mathbf{A}_n \mathbf{y}_n + \mathbf{b}_n)$$

$$\mathbf{z}_2 = \mathbf{y}_n + \frac{1}{2} \mathbf{k}_1; \mathbf{k}_2 = h(\mathbf{A}_{n+1/2} \mathbf{z}_2 + \mathbf{b}_{n+1/2})$$

$$\mathbf{z}_3 = \mathbf{y}_n + \frac{1}{2} \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_3 = h(\mathbf{A}_{n+1/2} \mathbf{z}_3 + \mathbf{b}_{n+1/2})$$

$$\mathbf{z}_4 = \mathbf{y}_n + \mathbf{k}_3; \mathbf{k}_4 = h(\mathbf{A}_{n+1} \mathbf{z}_4 + \mathbf{b}_{n+1})$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_4) + \frac{1}{3}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)$$

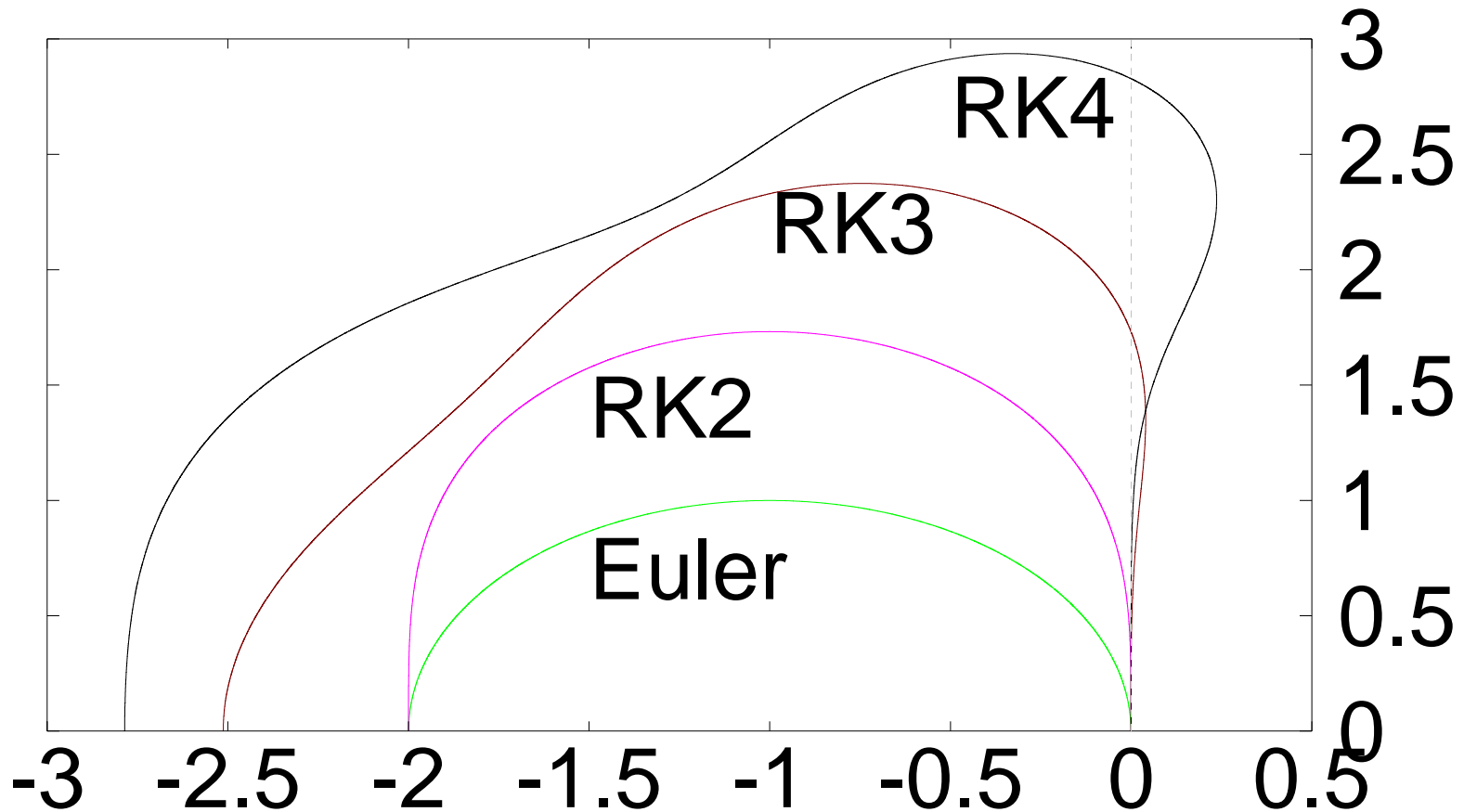
# ルンゲ・クッタ法(3)

- **誤差** (陽公式): ほぼ $p+1$ 次のテイラー展開項
  - 理由:  $p$ 次陽公式の係数は、テイラー展開の $p$ 次までの項を再現するように決定するから
  - 例: RK4、単振動  $\left| \frac{\delta y_n}{y_n} \right| \cong \frac{(h\omega)^5}{120}$
- **線形安定領域**
  - $p$ 次 ( $p < 5$ )陽公式では、以下の領域

$$\left| \sum_{n=0}^p \frac{z^n}{n} \right| = \left| 1 + z + \dots + \frac{z^p}{p} \right| \leq 1$$

# ルンゲ・クッタ法(4)

- 陽公式の安定領域: RK1~4 (複素上半面)



# ルンゲ・クッタ法(5)

- 陽公式の周期安定境界

- 決定方程式 ( $p < 5$ )

- 周期安定境界の例

- Euler: 完全不安定

- RK2: 完全不安定

- RK3  $H_{\text{MAX}} = \sqrt{3} \approx 1.732$

- RK4  $H_{\text{MAX}} = 2\sqrt{2} \approx 2.828$

- 高次になるほど周期安定境界は大

$$\left| 1 + iH_{\text{MAX}} + \dots + \frac{(iH_{\text{MAX}})^p}{p} \right| = 1$$

# ルンゲ・クッタ法(6)

- 台形則(2次陰公式)の線形安定条件

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{2}(y_{n+1} + y_n) \rightarrow \left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = \left| \frac{1 + \mu/2}{1 - \mu/2} \right| \leq 1$$

- 安定領域 = 複素左半面 = 実部が0または負
- 周期安定境界
  - 虚軸上は全て弱安定  $\rightarrow H_{MAX} = \infty$ 、摂動に弱い
- 結論: 台形則は、**かなり安定**



# 高次ルンゲ・クッタ法

---

- ブッチャー(Butcher)の**次数障壁**
  - 5次6回、6次7回、7次9回、8次11回、...
- 主な高次公式
  - Fehlberg: RKF4(5), RKF7(8)
  - Verner: DVERK
- **Dormand and Prince**: DOPRI5, DOP853
  - DOP853の係数は複雑
  - <http://www.unige.ch/~hairer/software.html>

# 高次ルンゲ・クッタ法(2)

- 一般表現
- J回N(M)次
  - N:計算子
  - M:比較子
- 比較子
  - 最終段公式
  - 刻み幅制御に用いる

$$k_1 = hf_n$$

$$\tau_2 = t_n + c_2 h; z_2 = y_n + a_{21} k_1; k_2 = hf(z_2, \tau_2)$$

$$\tau_3 = t_n + c_3 h; z_3 = y_n + a_{31} k_1 + a_{32} k_2; k_3 = hf(z_3, \tau_3)$$

...

$$\tau_j = t_n + c_j h; z_j = y_n + \sum_{i=1}^{j-1} a_{ji} k_i; k_j = hf(z_j, \tau_j)$$

...

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^J b_j k_j$$

$$\hat{y}_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^J \hat{b}_j k_j$$

# 高次ルンゲ・クッタ法(3)

- 一般表現の係数表とRK4の例

- 注: RK4には比較子は無い

$$c_2, a_{21}$$

$$c_3, a_{31}, a_{32}$$

...

$$c_m, a_{m1}, a_{m2}, \dots, a_{m,m-1}$$

$$y, b_1, b_2, \dots, b_m$$

$$\hat{y}, \hat{b}_1, \hat{b}_2, \dots, \hat{b}_m$$

$$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$$

$$1, 0, 0, 1$$

$$y, \frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}$$

# 刻み幅(step size)制御

- 適応(adaptive)積分法: 自動積分の一種
  - 可変刻み幅、可変次数、可変次数可変刻み幅
- 最も簡単な適応積分法: 刻み幅制御
  - 仮定1: 局所誤差が測定可能(例: 比較子)
  - 仮定2: 局所誤差の**次数が既知**  $|\delta y| \propto h^{p+1}$
  - 制御法: 変更後の局所誤差増加率  $\sim$  制御値

$$\frac{|\delta \tilde{y}|}{\tilde{h}} \cong c \rightarrow \tilde{h} = h \left( \frac{ch}{|\delta y|} \right)^{1/p}$$



# 刻み幅制御(2)

---

- アルゴリズムの一例

```
r:=(1.0+abs(y))*c*h/(abs(y-ŷ)+EPS)
if (r > 2.0 || r < 0.5)
  then {h:=h*exp(log(r)/p)}
```

- 注1: 複合誤差を採用

- 注2: 頻繁な変更を避けている点に注目

- **安全策**

- 変更後の誤差が制御範囲内に入ることを確認

# RKF4(5)

- Fehlberg (1969)
- 4(5)次6回6点
  - 比較子のために、一度、中点(1/2)まで戻って $k_6$ を評価する点に注意
- 比較子のほうが高次→**損**

$$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$$

$$\frac{3}{8}, \frac{3}{32}, \frac{9}{32}$$

$$\frac{12}{13}, \frac{1932}{2197}, \frac{-7200}{2197}, \frac{7296}{2197}$$

$$1, \frac{439}{216}, -8, \frac{3680}{513}, \frac{-845}{4104}$$

$$\frac{1}{2}, \frac{-8}{27}, 2, \frac{-3544}{2565}, \frac{1859}{4104}, \frac{-11}{40}$$

$$y, \frac{25}{216}, 0, \frac{1408}{2565}, \frac{2197}{4104}, \frac{-1}{5}, 0$$

$$\hat{y}, \frac{16}{135}, 0, \frac{6656}{12825}, \frac{28561}{56430}, \frac{-9}{50}, \frac{2}{55}$$

# DOPRI5

- Dormand and Prince (1980)
- 5(4)次6回6点
- 巧妙な方法
  - $k_7$ は次ステップの $k_1$ として再利  
用可能

$$\frac{1}{5}, \frac{1}{5}$$

$$\frac{3}{10}, \frac{3}{40}, \frac{9}{40}$$

$$\frac{4}{5}, \frac{44}{45}, \frac{-56}{15}, \frac{32}{9}$$

$$\frac{8}{9}, \frac{19372}{6561}, \frac{-25360}{2187}, \frac{644448}{6561}, \frac{-212}{729}$$

$$1, \frac{9017}{3168}, \frac{-355}{33}, \frac{46732}{5247}, \frac{49}{176}, \frac{-5103}{18656}$$

$$1, \frac{35}{384}, 0, \frac{500}{1113}, \frac{125}{192}, \frac{-2187}{6784}, \frac{11}{84}$$

$$y, \frac{35}{384}, 0, \frac{500}{1113}, \frac{125}{192}, \frac{-2187}{6784}, \frac{11}{84}, 0$$

$$\hat{y}, \frac{5179}{57600}, 0, \frac{7571}{16695}, \frac{393}{640}, \frac{-92097}{339200}, \frac{187}{2100}, \frac{1}{40}$$

# DVERK

- Verner (1978)
- 6(5)次8回7点

$$\frac{1}{6}, \frac{1}{6}$$

$$\frac{4}{15}, \frac{4}{75}, \frac{16}{75}$$

$$\frac{2}{3}, \frac{5}{6}, \frac{-8}{3}, \frac{5}{2}$$

$$\frac{5}{6}, \frac{-165}{64}, \frac{55}{6}, \frac{-425}{64}, \frac{85}{96}$$

$$1, \frac{12}{5}, -8, \frac{4015}{612}, \frac{-11}{36}, \frac{88}{255}$$

$$\frac{1}{15}, \frac{-8263}{15000}, \frac{124}{75}, \frac{-643}{680}, \frac{-81}{250}, \frac{2484}{10625}, 0$$

$$1, \frac{3501}{1720}, \frac{-300}{43}, \frac{297275}{52632}, \frac{-319}{2322}, \frac{24068}{84065}, 0, \frac{3850}{26703}$$

$$y, \frac{3}{40}, 0, \frac{875}{2244}, \frac{23}{72}, \frac{264}{1955}, 0, \frac{125}{11592}, \frac{43}{616}$$

$$\hat{y}, \frac{13}{160}, 0, \frac{2375}{5984}, \frac{5}{16}, \frac{12}{85}, \frac{3}{44}, 0, 0$$

# RKF7(8)

- Fehlberg (1968)
- 7(8)次12回10点
- 注意:  $k_{12}=k_1$
- 難点
  - 評価回数が多い
  - 比較子の方が高次
  - $f=f(t)$  のとき、比較子が不適格

$$\begin{array}{l}
 \frac{2}{27}, \frac{2}{27} \\
 \frac{1}{9}, \frac{1}{36}, \frac{1}{12} \\
 \frac{1}{6}, \frac{1}{24}, 0, \frac{1}{8} \\
 \frac{5}{12}, \frac{5}{12}, 0, \frac{-25}{16}, \frac{25}{16} \\
 \frac{1}{2}, \frac{1}{20}, 0, 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{5} \\
 \frac{5}{6}, \frac{-25}{108}, 0, 0, \frac{125}{108}, \frac{-65}{27}, \frac{125}{54} \\
 \frac{1}{6}, \frac{31}{300}, 0, 0, 0, \frac{61}{225}, \frac{-2}{9}, \frac{13}{900} \\
 \frac{2}{3}, 2, 0, 0, \frac{-53}{6}, \frac{704}{45}, \frac{-107}{9}, \frac{67}{90}, 3 \\
 \frac{1}{3}, \frac{-91}{108}, 0, 0, \frac{23}{108}, \frac{-976}{135}, \frac{311}{54}, \frac{-19}{60}, \frac{17}{6}, \frac{-1}{12} \\
 1, \frac{2383}{4100}, 0, 0, \frac{-341}{164}, \frac{4496}{1025}, \frac{-301}{82}, \frac{2133}{4100}, \frac{45}{82}, \frac{45}{164}, \frac{18}{41} \\
 0, \frac{3}{205}, 0, 0, 0, 0, \frac{-6}{41}, \frac{-3}{205}, \frac{-3}{41}, \frac{3}{41}, \frac{6}{41}, 0 \\
 1, \frac{-1777}{4100}, 0, 0, \frac{-341}{164}, \frac{4496}{1025}, \frac{-289}{82}, \frac{2193}{4100}, \frac{51}{82}, \frac{33}{164}, \frac{12}{41}, 0, 1 \\
 y, \frac{41}{840}, 0, 0, 0, 0, \frac{34}{105}, \frac{9}{35}, \frac{9}{35}, \frac{9}{280}, \frac{9}{280}, \frac{41}{840}, 0, 0 \\
 \hat{y}, 0, 0, 0, 0, 0, \frac{34}{105}, \frac{9}{35}, \frac{9}{35}, \frac{9}{280}, \frac{9}{280}, 0, \frac{41}{840}, \frac{41}{840}
 \end{array}$$



# 外挿法

---

- 一種のメタ積分法：非常に強力
  - 刻み幅に関するリチャードソンの外挿 ( $h \rightarrow 0$ )
  - 単段法、等間隔内部点、可変次数
  - 誤差が  $h^2$  展開される積分法 → 速い収束
  - 手間をかければ超高精度の結果が得られる
- 定番：調和点列のグラッグ法（並列化可能）
- 特殊な2階の場合：2倍の高速化



# 外挿法(2)

- (可変次数)アルゴリズムの概要
  - 0. 使用する積分法(=試験積分法)を決める
  - 1.  $t$ の区間 $[0, H]$ を整数分割:  $h_n = H/n$
  - 2.  $t=0$ から $t=H$ まで、刻み幅を $h_n$ として積分
  - 3.  $t=H$ における結果を $Y(h_n)$ とおく
  - 4. 得られた $Y(h_k)$ 群から $Y(0)$ (=解)を**外挿**
  - 5. 収束判定
  - 6.  $n$ を増やして1.に戻る

# 外挿法の簡単な例

- 試験積分法が**前進オイラー法**の場合
  - 終点 $t=H$ での積分誤差の振舞い
$$y(H;h) = y(H;0) + hy_1(H) + h^2 y_2(H) + \dots$$
  - 必要なのは $y(H;0)$ だけ
  - 多項式外挿: エイトキン・ネビルのアルゴリズム
    - 補間表の最右下端が各回の最良近似解
  - 調和点列  $h_n = H / n$

# グラッグ法

## ■ 試験積分法: 修正中点則

- 例外1 (最初): 前進オイラーで代用
- 例外2 (最終): 後退オイラーとの平均値
  - 不安定を押さえる工夫 → 分割数が偶数の必要性
- 積分誤差は $h^2$ 展開

$$y(H; h) = y(H; 0) + h^2 y_2(H) + h^4 y_4(H) + \dots$$

## ■ 逐次外挿法: エイトキン・ネビル

- 点列: 倍調和点列  $h_n = H / (2n)$



# グラッグ法(2)

---

## ■ グラッグ法の特徴

- 長所1: **可変次数**(偶数)→精度向上が容易
- 長所2: プログラムが簡単(任意精度で可能)
- 長所3: 1段法と等価→刻み幅制御が容易
- 長所4: 小規模並列化で**加速**
  - 折りたたみ法: 例) 4PUで、ほぼ4倍速
- 短所1: 低精度用途ではコスト高
- 短所2: 頻繁に結果を出力するときもコスト高

# グラッグ法(3)

- 一般の場合のアルゴリズム: **調和点列**を採用

```
f0 := f(y0, t0)
```

```
do(n=2, N, 2) {
```

```
  h := H/n; h2 = h*2.0; y1 := y0 + h*f0; t1 := t0 + h; f1 := f(y1, t1)
```

```
  do(k=2, n) { yk := yk-2 + h2*fk-1; tk = t0 + k*h; fk = f(yk, tk) }
```

```
  ŷn := yn-1 + h*fn; yn := (yn + ŷn)*0.5
```

```
  外挿&収束判定}
```

- 添字を偶奇に分割 → 中間変数の数が大幅削減

# グラッグ法(4)

- 特殊な2階常微分方程式の場合

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = f(x, t)$$

- 試験積分法: 中点則

- 例外1(最初): 前進オイラー
- 例外2(最終): 後退オイラー
- 積分誤差は $h^2$ 展開

- 逐次外挿法: 再びエイトキン・ネビル

- 点列: 純調和点列  $h_n = H / n$

# グラッグ法(5)

## ■ 特殊な2階の場合のアルゴリズム

$f_0 := f(x_0, t_0)$

do(n=1, N){

$h := H/n; h_{1/2} := h * 0.5;$

$v_{1/2} := v_0 + h_{1/2} * f_0; x_1 := x_0 + h * v_{1/2}; t_1 := t_0 + h; f_1 := f(x_1, t_1)$

  do(k=1, n-1){

$v_{k+1/2} := v_{k-1/2} + h * f_k; x_{k+1} := x_k + h * v_{k+1/2}; t_k = t_0 + k * h; f_k = f(x_k, t_k)$

$v_n := v_{n-1/2} + h_{1/2} * f_n$

  外挿&収束判定}



# グラッグ法(6)

---

- **折りたたみ**計算: 並列化による加速
  - Ito and Fukushima (1997, AJ)
- 発想: 試験積分は並列化可能
  - $h=H/n$ のときは、 $h=H$ の $n$ 倍だけ時間がかかる
  - PU毎の負荷を均等化 + 途中でも判定可能
  - 調和点列の場合は実装が容易
    - 2PUの例:  $[(1+4), (2+3)], [(5+8), (6+7)], \dots$
    - 4PUの例:  $[(1+8), (2+7), (3+6), (4+5)], \dots$



# グラググ法(7)

---

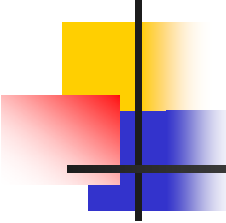
- グラググ法の刻み幅制御
- 方針: 外挿回数を固定化
  - 3回外挿 = 7次、7回外挿 = 15次、...
- 局所誤差 = 最終外挿結果と、その前の差
  - 局所誤差の次数例: 6次 (3回と2回目の差)
- 刻み幅制御のアルゴリズム (既述)
  - 問: 外挿7回の場合のアルゴリズムを書け



# GBS法

---

- Burlisch and Stoer (1965)
  - GBS=Gragg, Burlisch, Stoerの3人の頭文字
- グラッグ法との違いは、ごくわずか
  - 逐次外挿法: 有理式(Burlisch & Stoer)
  - 点列: Burlisch列
- しかし、**グラッグ法 + 調和点列**が最良
  - Deuffhard (1980)



# エルミート積分法

- **エルミート補間**に基づく積分公式
  - 1段法陽公式 = テイラー級数法
- もし  $f$  の時間微分の計算が簡単なら有効
  - 例1: 部分的定数係数線形微分方程式

$$\frac{df}{dt} = ay + b(t) \rightarrow \frac{d^n f}{dt^n} = a^n y + \sum_{k=0}^n a^{n-k} \left( \frac{d^k b}{dt^k} \right)$$

- 例2: 線形微分方程式
- 例3: 古典重力多体問題 (3階までなら)

# エルミート積分法(2)

## ■ 1段陰公式

- 導出法:  $\exp(x)$  のパデ近似 (問: 導け)

## ■ 2階4次陰公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n) + \frac{h^2}{12} \left[ -\left(\frac{df}{dt}\right)_{n+1} + \left(\frac{df}{dt}\right)_n \right]$$

## ■ 3階6次陰公式

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n) - \frac{h^2}{10} \left[ \left(\frac{df}{dt}\right)_{n+1} - \left(\frac{df}{dt}\right)_n \right] + \frac{h^3}{120} \left[ \left(\frac{d^2f}{dt^2}\right)_{n+1} + \left(\frac{d^2f}{dt^2}\right)_n \right]$$

# エルミート積分法(3)

## ■ 古典重力多体問題の場合

- 加速度の時間微分の計算コストは比較的小

$$\mathbf{a}_K = \sum_{J \neq K} \left( \frac{-\mu_J}{r_{JK}^3} \right) \mathbf{r}_{JK} \rightarrow \frac{d\mathbf{a}_K}{dt} = \sum_{J \neq K} \left( \frac{-\mu_J}{r_{JK}^3} \right) \mathbf{v}_{JK} + 3 \sum_{J \neq K} \left( \frac{\mu_J (\mathbf{r}_{JK} \cdot \mathbf{v}_{JK})}{r_{JK}^5} \right) \mathbf{r}_{JK}$$

$$\mu_J \equiv GM_J, \mathbf{r}_{JK} \equiv \mathbf{x}_J - \mathbf{x}_K, r_{JK} \equiv |\mathbf{r}_{JK}|, \mathbf{u}_{JK} \equiv \mathbf{v}_J - \mathbf{v}_K$$

## ■ Makino and Aarseth (1992)

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \frac{h}{2} (\mathbf{v}_{n+1} + \mathbf{v}_n) - \frac{h^2}{10} (\mathbf{a}_{n+1} - \mathbf{a}_n) + \frac{h^3}{120} (\mathbf{j}_{n+1} + \mathbf{j}_n)$$

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \frac{h}{2} (\mathbf{a}_{n+1} + \mathbf{a}_n) - \frac{h^2}{12} (\mathbf{j}_{n+1} - \mathbf{j}_n)$$

$$\mathbf{j} = \frac{d\mathbf{a}}{dt}$$

# エルミート積分法(4)

- 陰公式の解法: 予測子修正子法(後述)
  - 代表的なモード: PEC, PECEC
- 予測子の例
  - 1. テイラー級数法による1段陽公式
$$\mathbf{x}_{n+1}^{(P)} = \mathbf{x}_n + h\mathbf{v}_n + \frac{h^2}{2}\mathbf{a}_n + \frac{h^3}{6}\mathbf{j}_n, \quad \mathbf{v}_{n+1}^{(P)} = \mathbf{v}_n + h\mathbf{a}_n + \frac{h^2}{2}\mathbf{j}_n$$
  - 2. 2段陽公式(後述)
    - 可変刻み幅のときは要注意

# 13. 常微分方程式の 数値解法 II. 多段法

- **多段**(multistep)法
- オイラー法の拡張の第三の方向
- 思想: 過去の結果を再利用する
  - 長所1: **低コスト**
  - 長所2: 高次公式が構築しやすい
  - 短所1: 高次ほど不安定
  - 短所2: 出発値を別途準備する必要あり
  - 短所3: 刻み幅の変更が困難



# 多段法

---

- 補間公式積分型多段法
  - 一般1階: 定番 = アダムス法
  - 特殊2階: 定番 = カウエル法
- 一般多段法、対称多段法
- 陽公式と陰公式
  - 陰公式の解法: 予測子修正子法と陰陽法
- 出発値表の計算: 外挿法がお勧め

# 補間公式積分型多段法

- 1ステップ数値積分＋被積分関数の補間

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t)$$

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y, t) dt$$

- 補間公式による分類

- 等間隔：ラグランジュ補間→アダムス法

- 不等間隔：ガウス・ルジャンドル型補間

→ガウス・ルジャンドル積分法、ロバット積分法

# アダムス(Adams)法

- 発想: オイラー法で過去のfの情報も使う
  - J.C. Adams: 海王星の予言で有名

- p段陽公式(p次)

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \beta_{pk} f_{n-k}$$

- 実用上、最も重要

- 別名: アダムス・バッシュフォース(Bashforth)

- p-1段陰公式(p次)

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-2} \beta_{pk}^* f_{n+1-k}$$

- 予測子修正子法で活用

- 別名: アダムス・ムールトン(Moulton)

# アダムス法(2)

## ■ 公式の2大表現法

### ■ 直接表現

- 過去のf値を保持
- 係数が次数ごとに異なる
- 丸め誤差に弱い

### ■ 階差表現(お勧め)

- fの階差を保持
- 次数によらず統一的表現
- 丸め誤差に強い

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \beta_{pk} f_{n-k}$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-2} \beta_{pk}^* f_{n+1-k}$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \gamma_k \nabla^k f_n$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-2} \gamma_k^* \nabla^k f_{n+1}$$

# アダムス法(3)

- 直接表現の例

- 陽公式 Adams-Bashforth (AB)

- 2次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})$

- 3次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2})$

- 4次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$

- 5次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}(1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} - 1274f_{n-3} + 251f_{n-4})$

- 6次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{1440}(4277f_n - 7923f_{n-1} + 9982f_{n-2} - 7298f_{n-3} + 2877f_{n-4} - 475f_{n-5})$

# アダムス法(4)

- 直接表現の例

- 陰公式 Adams-Moulton (AM)

- 2次 = 台形則  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$

- 3次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$

- 4次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$

- 5次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}(251f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} + 106f_{n-2} - 19f_{n-3})$

- 6次  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{1440}(475f_{n+1} + 1427f_n - 798f_{n-1} + 482f_{n-2} - 173f_{n-3} + 27f_{n-4})$

# アダムス法(5)

- 階差係数の母 (generating) 関数

- 階差表現の演算子解釈 (陽公式)

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{\infty} \gamma_k \nabla^k f_n \rightarrow S = 1 + h \sum_{k=0}^{\infty} \gamma_k \nabla^k D$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \gamma_k \nabla^k = \frac{S-1}{hD} = \frac{\nabla}{-(1-\nabla)\log(1-\nabla)}$$

- 係数漸化式  
(問: 導け)

$$\gamma_0 = 1, \quad \gamma_m = 1 - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{\gamma_k}{m+1-k}$$

# アダムス法(6)

## ■ 階差係数の母関数(2)

### ■ 階差表現の演算子解釈(陰公式)

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{\infty} \gamma_k^* \nabla^k f_{n+1} \rightarrow S = 1 + h \sum_{k=0}^{\infty} \gamma_k^* \nabla^k SD$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \gamma_k^* \nabla^k = \frac{S-1}{hSD} = \frac{\nabla}{-\log(1-\nabla)}$$

### ■ 係数漸化式 (問:導け)

$$\gamma_0^* = 1, \quad \gamma_m^* = - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{m-k} \gamma_k^*}{m+1-k}$$

# アダムス法(7)

- 階差係数

- 陽公式

- 全て正

$$\gamma_m = 1, \frac{1}{2}, \frac{5}{12}, \frac{3}{8}, \frac{251}{720}, \frac{95}{288}, \frac{19087}{60480}, \frac{5257}{17280}, \frac{1070017}{3628800}, \frac{25713}{89600},$$
$$\frac{26842253}{95800320}, \frac{4777223}{17418240}, \frac{703604254357}{2615348736000}, \frac{106364763817}{402361344000},$$
$$\frac{1166309819657}{4483454976000}, \frac{25221445}{98402304}, \frac{8092989203533249}{32011868528640000}, \dots$$

- 陰公式

- 初項以外  
全て負

$$\gamma_m^* = 1, \frac{-1}{2}, \frac{-1}{12}, \frac{-1}{24}, \frac{-19}{720}, \frac{-3}{160}, \frac{-863}{60480}, \frac{-275}{24192}, \frac{-33953}{3628800}, \frac{-8183}{1036800},$$
$$\frac{-3250433}{479001600}, \frac{-4671}{788480}, \frac{-13695779093}{2615348736000}, \frac{-2224234463}{475517952000},$$
$$\frac{-132282840127}{31384184832000}, \frac{-2639651053}{689762304000}, \frac{-111956703448001}{32011868528640000}, \dots$$

# アダムス法(8)

- 理論誤差 = 階差表現で打ち切った次の項

- 例: 単振動

$$|\delta y_n| = \gamma_p \left( 2 \sin \frac{h\omega}{2} \right)^p \sim \gamma_p (h\omega)^p$$

- 実用的誤差

- 増分子 = 同次数の予測子と修正子の差

$$\delta y_n = h \left[ f_{n+1} - \sum_{k=0}^{p-2} (\gamma_k - \gamma_{k+1}^*) \nabla^k f_{n-k} + \gamma_{p-1} \nabla^{p-1} f_{n+1-p} \right]$$

- 注1: 陽公式、陰公式を問わず計算可能
- 注2: 修正子より増分子を計算する方が実用的

# 1階用多段法

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t)$$

- 一般q段公式: **刻み幅一定**を仮定

- 陽公式:  $j=0$

- 陰公式:  $j=1$

$$\sum_{k=0}^q \alpha_k y_{n+1-k} = h \sum_{k=0}^{q+j-1} \beta_k f_{n+j-k}$$

- 二つの**特性多項式**と**安定性多項式** $Q$

- 第1特性多項式 $\rho$ 、第2特性多項式 $\sigma$

$$\rho(z) \equiv \sum_{k=0}^q \alpha_k z^{q-k}$$

$$\sigma(z) \equiv \sum_{k=0}^{q+j-1} \beta_k z^{q+j-1-k}$$

$$Q(z; \mu) \equiv \rho(z) - \mu\sigma(z)$$

# 差分方程式

## ■ 斉次定数係数差分方程式

- 前提: 等間隔刻み幅

- 一般解 = 基本解の線形結合

## ■ 基本解

- **特性根** = 第1特性多項式の根

- 単根の場合: 特性根の累乗

- n重根の場合:

$$\sum_{k=0}^q \alpha_k y_{n+k} = 0$$

$$y_{n+m} = \sum_{k=0}^q C_k \psi_{km}$$

$$\rho(z) \equiv \sum_{k=0}^q \alpha_k z^{q-k}$$

$$\psi_{km} = z_k^m$$

$$\psi_{km} = z_k^m, m z_k^m, m(m+1) z_k^m, \dots$$

# 1階用多段法(2)

- **ゼロ安定性** (zero stability)
  - 常に  $f=0$  でも安定して解けるか？
  - 不安定な例  $y_{n+1} = -2y_n + 3y_{n-1} + h(3f_n - f_{n-1})$ 
    - 問:  $f=0$ でも、勝手に発振することを確認せよ
- **安定性条件**  $z_0 = 1, |z_k| \leq 1$ 
  - 主根を除く全ての特性根の絶対値が1以下
  - 強安定: 1未満、弱安定: =1
- **最安定**: 特性多項式  $= (z-1)z^n \dots$  アダムス法



# 1階用多段法(3)

---

- 線形(linear)安定性
  - 線形問題  $f = \lambda y$  のとき、安定して解けるか?
- 線形安定性条件  $\mu \equiv h\lambda$ 
  - $Q(z; \mu)$  の主根以外の根の絶対値が1以下
  - 強安定: 1未満、弱安定: =1
- 線形安定領域の二大決定法
  - 根追跡法と境界追跡法

# 1階用多段法(4)

- 根位置(root locus)追跡法  $\mu \equiv h\lambda$ 
  - 個々の $\mu$ に対して、代数方程式  $Q(z; \mu) = 0$  の全複素根を決定 → 非常に時間がかかる
- 境界(boundary)追跡法  $\mu(\theta) \equiv \frac{\rho(e^{i\theta})}{\sigma(e^{i\theta})}$ 
  - 安定境界関数
    - 意味:  $Q=0$ のときの $\mu$ の値
  - 複素面上で $\mu(\theta)$ をプロットし、閉領域(複数)の内側か外側かを判定 → 簡単かつ高速

# 周期性関数

- 周期性 (periodicity) 関数  $g(\theta) \equiv i\mu(\theta)$
- 周期安定性境界  $H_{\max}$  の決定手法
  - Fukushima (1998): 2階対称多段法で創始
  - Evans & Tremain (1999): 1階対称に応用
  - Yamamoto (2003): 1階一般に拡張
- 境界追跡法の応用
- 条件:  $g(\theta)$  の虚部=0, 実部が絶対値最小
  - $H_{\max} = g(\theta)$  の実部の最小絶対値

# アダムス法(9)

- 第1特性多項式(p次)  $\rho(z) = (z-1)z^{p-1}$ 
  - ゼロ安定性: 最も強い(確認済み)
- 線形安定領域: 別図を参照
- 周期安定境界(陽公式)
  - $AB_2=0.0$ ,  $AB_4 \sim 0.430$ ,  $AB_6 \sim 0.114$
  - $AB_8 \sim 0.0295$ ,  $AB_{12} \sim 0.00759$
- 陰公式は陽公式より、かなり安定
- 高次になるほど安定境界は小さくなる

# アダムス法(10)

- 陽公式の線形安定領域: 2~5次

- 複素上半面<sup>1</sup>

- 高次ほど

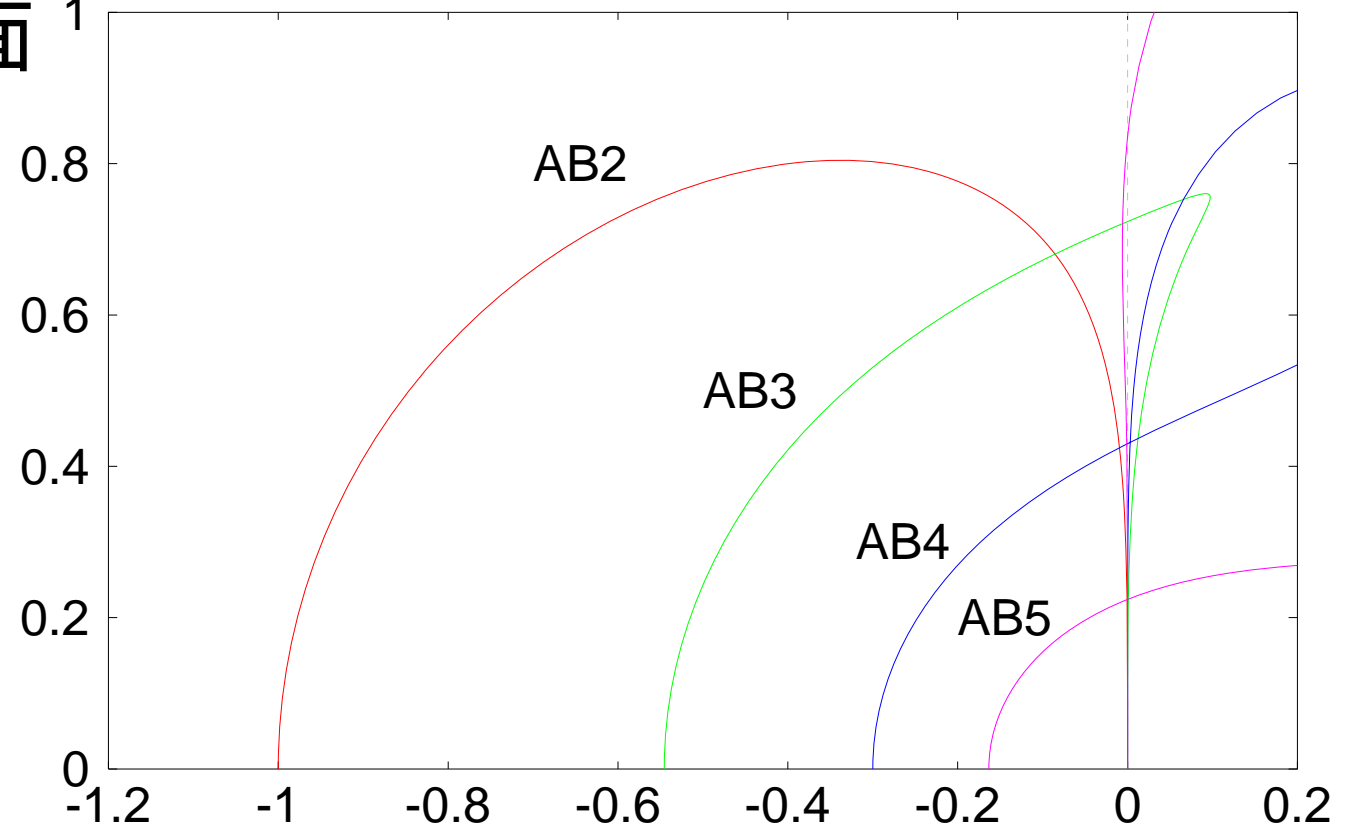
- 不安定

- 注意:

- 4,5次では

- 原点近くの

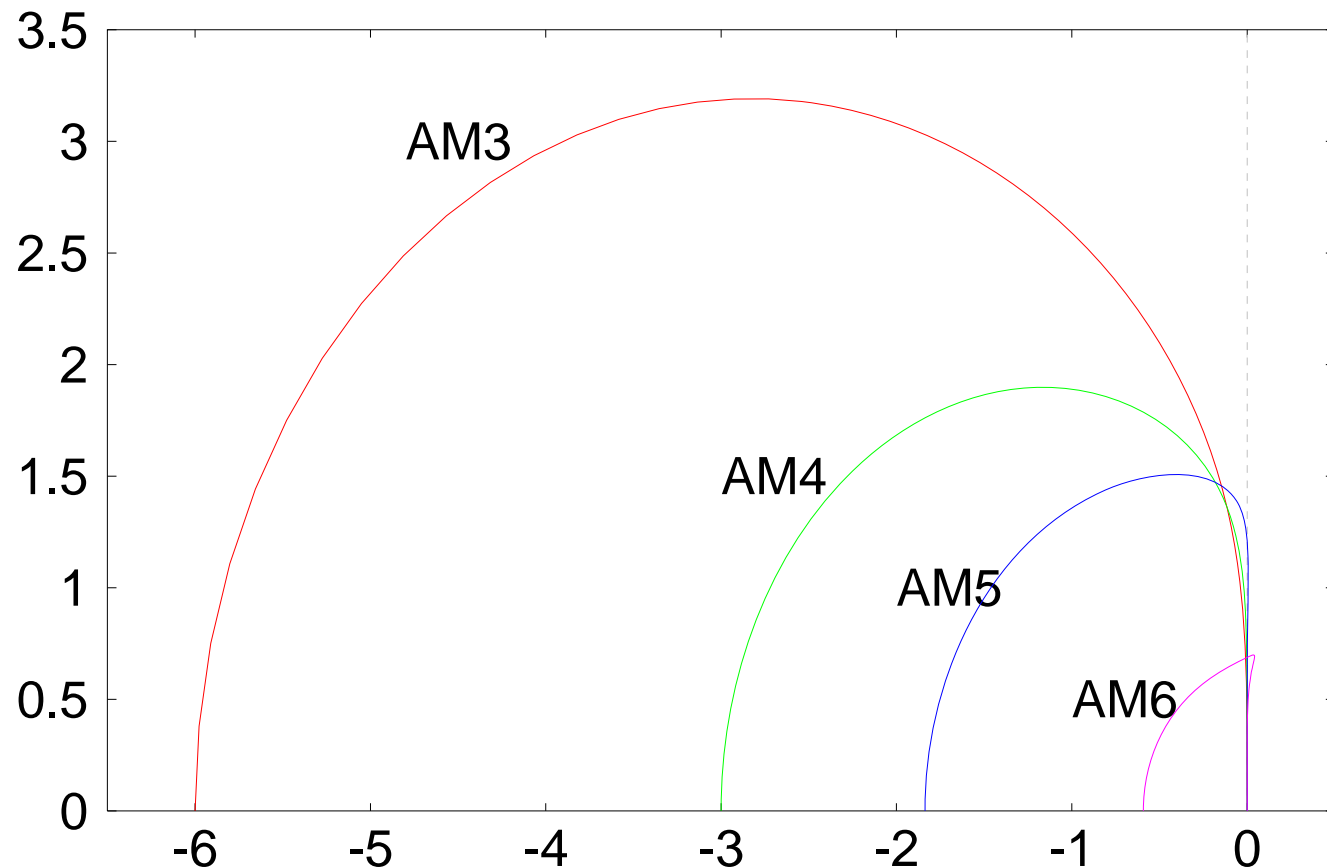
- 閉領域



# アダムス法(11)

- 陰公式の線形安定領域: 3~6次

- 2次は台形則
- 陽公式より安定
- RKより不安定





# 1階用一般多段法

- 1階用一般多段法の階差表現
  - p段p次陽公式

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{k=1}^{p-1} a_k \nabla^k y_n + h \sum_{k=0}^{p-1} b_k \nabla^k f_n$$

- p段p+1次陰公式

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{k=1}^{p-1} a_k \nabla^k y_n + h \sum_{k=0}^{p-1} b_k^* \nabla^k f_{n+1}$$

# 1階用一般多段法(2)

- 母関数の導入
  - 注:  $a(z)$  は  $p-1$  次多項式

$$a(z) \equiv \sum_{k=1}^{p-1} a_k z^k, b(z) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} b_k z^k, b^*(z) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} b_k^* z^k$$

- 母関数同士の関係 (問: 示せ)

$$b(z) = \frac{z - (1-z)a(z)}{-(1-z)\log(1-z)}$$

$$b^*(z) = \frac{b(z)}{1-z}$$

# 1階用一般多段法(3)

- 特性根と階差係数 $a$ の関係(問:示せ)

$$\rho(z) \equiv (z-1) \prod_{j=1}^{p-1} (z-z_j) = z^{p-1} \left[ (z-1) - \sum_{k=1}^{p-1} a_k \left(1 - \frac{1}{z}\right)^k \right]$$

$$\prod_{j=1}^{p-1} (1 + \xi - z_j) = (1 + \xi)^{p-1} - \xi \sum_{k=1}^{p-1} a_k (1 + \xi)^{p-1-k} \xi^k$$

- 問: 特性根から階差係数を求める漸化式を導け



# 1階用一般多段法(4)

- 一般多段法公式の**設計**手順
  - 1. 次数および陰陽の別を設定する
  - 2. 0以外の適当な数の特性根 $z_i$ を選ぶ
    - 注1:  $z_i$ は実根もしくは複素共役根のペア
    - 注2:  $z_i$ は単位円内から選ぶ(0安定性の確保)
  - 3. 対応する $y$ の階差係数 $a_k$ を求める
  - 4.  $f$ の階差係数 $b_k$  (もしくは  $b^*_k$ )を求める
  - 5. 誤差定数 $C$ を求める

# 1階用対称多段法

## ■ 対称性の定義 (1階微分方程式の場合)

- 一般係数表現  $\alpha_k = -\alpha_{p-1-k}, \quad \beta_k = \beta_{p-1-k}$

- 特性多項式

$$\rho(z) = -z^{2(p-1)} \rho(z^{-1}), \quad \sigma(z) = z^{2(p-1)} \sigma(z^{-1})$$

- 注意: 自由度が大きい  $\rightarrow$  多数の公式群

## ■ 対称多段法の光と影

- 長所: 最大次数定理、時間対称系に適合

- 短所: 弱安定、奇妙な現象 (刻み幅共鳴)



# 1階用対称多段法(2)

- 対称多段法の一例

- 4次4段対称陽公式(最適型)  $(-1 < a < 1)$

$$y_{n+1} = 2a(y_n - y_{n-2}) + y_{n-3} + h \left[ \frac{8-2a}{3}(f_n + f_{n-2}) - \frac{4+8a}{3}f_{n-1} \right]$$

- 4次3段対称陰公式(標準型)  $(-1 < b < 1)$

$$y_{n+1} = (1+2b)(y_n - y_{n-1}) + y_{n-2} + h \left[ \frac{-5-b}{12}(f_{n+1} + f_{n-2}) + \frac{17-11b}{12}(f_n + f_{n-1}) \right]$$

# 1階用対称多段法(3)

- 対称公式の2大形式:  $q$ は公式の自由度
  - 最適型: 偶数の特性根  $\pm 1, \exp(\pm i\theta_j)$

$$\rho(z) = (z^2 - 1) \prod_{j=1}^q (z^2 - 2c_j z + 1) \quad c_j \equiv \cos \theta_j$$

- 標準型: 奇数の特性根  $1, \exp(\pm i\theta_j)$

$$\rho(z) = (z - 1) \prod_{j=1}^q (z^2 - 2c_j z + 1)$$



# 1階用対称多段法(4)

---

- ダールキスト(Dahlquist)の**最大次数定理**
  - 同一段数で最大次数の多段法＝対称多段法
- 次数公式(q段)
  - 陽公式最適型:  $p=2q$
  - 陽公式標準型:  $p=2q-2$
  - 陰公式最適型:  $p=2q+2$
  - 陰公式標準型:  $p=2q$
  - アダムス法では次数は約半分(問:確認せよ)



# 予測子修正子法

- 陰公式の代表的解法
  - 予測子 Predictor (P):  $y_{n+1}$ を予測すること
    - 定番: 同種 (= 同じ特性多項式) の同次陽公式
  - 修正子 Corrector (C): 陰公式そのもの
  - 評価子 Evaluator (E):  $f_{n+1}$ を計算すること
- 代表的な組み合わせ(mode): PECE
  - $P \rightarrow E \rightarrow C \rightarrow E \rightarrow$  次のステップ
  - 陽公式の倍のコスト: どちらが良いかは難解



# 予測子修正子法(2)

---

- 予測子修正子法の2大モード列
  - PEC列:  $P(EC)^n$ 、安定性に欠ける
  - PECE列:  $P(EC)^nE$ 、安定性が良好
- 普通は収束判定せず反復回数を固定
  - 注意: 安定性は陰公式より少し悪くなる
- 収束するまで繰り返すのはコスト高
  - 例外: 「硬い」方程式の場合など

# 予測子修正子法(3)

- **安定性多項式**: 詳細は三井(1985)

- PEC  $Q_{\text{PEC}}(z; \mu) \equiv z^p [\rho(z) - \mu\sigma(z)] + \mu [\sigma(z)\rho^*(z) - \rho(z)\sigma^*(z)]$

- PECE  $Q_{\text{PECE}}(z; \mu) \equiv \rho(z) - \mu\sigma(z) + \mu\beta_0 [\rho(z) - \mu\sigma(z)]$

- **安定性関数 (Q=0の解)**

- PEC  $\mu_{\text{PEC}} \equiv \frac{\rho}{\sigma - z^{-p} (\sigma\rho^* - \rho\sigma^*)}$

- PECE  $\mu_{\text{PECE}} \equiv \frac{2\rho}{\sigma - \beta_0\rho + \sqrt{(\sigma - \beta_0\rho)^2 + 4\beta_0\sigma\rho}}$

# 予測子修正子法(4)

- 増分子 (increaser): (修正子) - (予測子)

- 予測子 
$$y_{n+1}^{(P)} = y_n - \sum_{k=1} \alpha_k^{(P)} y_{n-k} + h \sum_{k=0} \beta_k^{(P)} f_{n-k}$$

- 修正子 
$$y_{n+1}^{(C)} = y_n - \sum_{k=1} \alpha_k^{(C)} y_{n-k} + h \sum_{k=0} \beta_k^{(C)} f_{n+1-k}$$

- 増分子 
$$y_{n+1}^{(I)} = y_{n+1}^{(P)} - \sum_{k=1} \alpha_k^{(I)} y_{n-k} + h \sum_{k=0} \beta_k^{(I)} f_{n+1-k}$$

- 増分係数 
$$\alpha_k^{(I)} = \alpha_k^{(C)} - \alpha_k^{(P)}, \beta_0^{(I)} = \beta_0^{(C)}, \beta_k^{(I)} = \beta_k^{(C)} - \beta_{k-1}^{(P)}$$

# 予測子修正子法(5)

- **増分子**が有効←右辺のy-依存性が軽い時
  - 右辺の分割(例:線型方程式、変分方程式)

$$\frac{dy}{dt} = f_0(y, t) + f_1(t)$$

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$$

- 軽い依存性
  - $f_0(y, t)$ の計算コストが $f_1(t)$ のコストより小さい
- 好例:(地球の章動など)強制振動



# 陰陽法

- 依存が**非対称**な場合の陰公式の活用法
  - Yamamoto (2003)
- 非対称な常微分方程式系

$$\frac{dw}{dt} = f(w, t), \frac{dz}{dt} = g(z, w, t)$$

- 良い例: **一般2階**微分方程式

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = a\left(x, \frac{dx}{dt}, t\right) \rightarrow \frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = a(x, v, t)$$

# 陰陽法(2)

- 発想：陽公式と陰公式の組み合わせ
  - 他に依存する部分を、先に陽公式で
  - 他に依存しない部分を、次に陰公式で
- 2階常微分方程式、アダムス法の場合

$$v_{n+1} = v_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \gamma_k \nabla^k a_n$$

$$x_{n+1} = x_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \gamma_k^* \nabla^k v_{n+1}$$

- 特徴：全体では陽公式、安定性が強化
  - 並列化するときには要注意

# エルミート積分法(5)

## ■ アダムス型エルミート積分公式の導出法

- 1.  $f$ のエルミート補間公式を導出

$$f_n(s) = \sum_{k=0} f_{n-k} P_k(s) + \sum_{k=0} \left( \frac{df}{dt} \right)_{n-k} Q_k(s)$$

- 2. 補間公式を積分

$$y_{n+1} = y_n + \int_0^1 f_n(s) ds$$

## ■ 例: 2階2段4次陽公式(一定刻み幅を仮定)

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (-f_n + 3f_{n-1}) + \frac{h^2}{12} (17f'_n + 7f'_{n-1})$$

- 用途: 既出の2階4次陰公式に対する予測子

# 特殊2階用多段法

- 1階用と同じ記号を使うので**注意**

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = f(x, t)$$

- 一般q段公式

- 陽:  $j=0$ 、陰:  $j=1$

$$\sum_{k=0}^q \alpha_k x_{n+1-k} = h^2 \sum_{k=0}^{q+j-1} \beta_k f_{n+j-k}$$

- 二つの特性多項式と拡張特性多項式

$$\rho(z) \equiv \sum_{k=0}^q \alpha_k z^{q-k}$$

$$\sigma(z) \equiv \sum_{k=0}^{q+j-1} \beta_k z^{q+j-1-k}$$

$$Q(z; \mu) \equiv \rho(z) - \mu^2 \sigma(z)$$

# 補間公式積分法(2)

- 1ステップ数値積分 + 被積分関数の補間

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t)$$

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y, t) dt$$

- 補間公式による分類
  - 等間隔: ラグランジュ補間 → アダムス法
  - 不等間隔: ガウス・ルジャンドル型補間  
→ ガウス・ルジャンドル積分法、ロバット積分法

# カウエル(Cowell)法

- 特殊2階常微分方程式専用
  - Störmer (1907) オーロラ中の荷電粒子の運動
  - Cowell & Crommelin (1910) ハレー彗星の軌道
- 発想: 2階微分を**中心差分の2乗**で近似
- 陽公式の例
  - 3点2次対称  $x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 f_n$
- 陰公式の例
  - 3点4次対称  $x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + \frac{h^2}{12} (f_{n+1} + 10f_n + f_{n-1})$

# カウエル法(2)

- 陽公式: シュテールマー(Störmer)
  - 一般表現と階差表現

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 \sum_{k=0}^{p-1} \beta_{pk} f_{n-k}$$

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 \sum_{k=0}^{p-1} \sigma_k \nabla^k f_n$$

- 陰公式: (狭義の)カウエル

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 \sum_{k=0}^{p-1} \beta_{pk}^* f_{n+1-k}$$

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 \sum_{k=0}^{p-1} \sigma_k^* \nabla^k f_{n+1}$$

# カウエル法(3)

- 階差係数の母関数: 陽公式

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k \nabla^k = \frac{S - 2 + S^{-1}}{h^2 D^2} = \frac{\nabla^2}{(1 - \nabla) [\log(1 - \nabla)]^2}$$

- 係数漸化式(問: 導け)

$$\sigma_0 = 1, \quad \sigma_m = 1 - 2 \sum_{k=0}^{m-1} \frac{h_{m+1-k} \sigma_k}{m+2-k}$$

$$h_m \equiv \sum_{k=1}^m \frac{1}{k}$$

# カウエル法(4)

- 階差係数の母関数: 陰公式

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k^* \nabla^k = \frac{S - 2 + S^{-1}}{h^2 SD^2} = \left[ \frac{\nabla}{\log(1 - \nabla)} \right]^2$$

- 係数漸化式(問:導け)

$$\sigma_0^* = 1, \quad \sigma_m^* = -2 \sum_{k=0}^{m-1} \frac{h_{m+1-k} \sigma_k^*}{m+2-k}$$

# カウエル法(5)

- 階差係数
- 陽公式
  - 全て正  
(第2項以外)
- 陰公式
  - 全て負  
(第1,3,4項以外)

$$\sigma_m = 1, 0, \frac{1}{12}, \frac{1}{12}, \frac{19}{240}, \frac{3}{40}, \frac{863}{12096}, \frac{275}{4032}, \frac{33953}{518400}, \frac{8183}{129600},$$
$$\frac{3250433}{53222400}, \frac{4671}{78848}, \frac{13695779093}{237758976000}, \frac{2224234463}{39626496000},$$
$$\frac{132282840127}{2414168064000}, \frac{2639651053}{49268736000}, \frac{111956703448001}{2134124568576000}, \dots$$

$$\sigma_m^* = 1, -1, \frac{1}{12}, 0, \frac{-1}{240}, \frac{-1}{240}, \frac{-221}{60480}, \frac{-19}{6048}, \frac{-9829}{3628800}, \frac{-407}{172800},$$
$$\frac{-330157}{159667200}, \frac{-24377}{13305600}, \frac{-4281164477}{2615348736000}, \frac{-70074463}{47551795200},$$
$$\frac{-1197622087}{896690995200}, \frac{-97997951}{80472268800}, \frac{-264713507083}{237124952064000}, \dots$$

# カウエル法(6)

- より良い実装法: 1階階差の導入

$$u_{n+1} \equiv \frac{x_{n+1} - x_n}{h}$$

- 陽公式

$$u_{n+1} = u_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \sigma_k \nabla^k f_n, \quad x_{n+1} = x_n + hu_{n+1}$$

- 陰公式

$$u_{n+1} = u_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \sigma_k^* \nabla^k f_{n+1}, \quad x_{n+1} = x_n + hu_{n+1}$$

- 問: 1階階差の導入の利点を二つ上げよ

# カウエル法(7)

- **速度公式**: 1階階差を利用
  - エネルギーの計算などに必要
  - 陽公式と陰公式

$$v_{n+1} = u_{n+1} + h \sum_{k=0}^{p-1} \rho_k \nabla^k f_n$$

$$v_{n+1} = u_{n+1} + h \sum_{k=0}^{p-1} \rho_k^* \nabla^k f_{n+1}$$

- 階差係数の母関数(問:導け)

$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho_k z^k = \frac{-z - \log(1-z)}{(1-z)[\log(1-z)]^2}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho_k^* z^k = \frac{-z - \log(1-z)}{[\log(1-z)]^2}$$



# 特殊2階用多段法(2)

---

- ゼロ安定性

- 主根(=重根1)を除いて、全ての特性根の絶対値が1以下
- 強安定: 1未満、弱安定: =1

- 最も安定

- 特性多項式 =  $(z-1)^2 z^n \dots$  カウエル法

# 14. 常微分方程式の 数値解法 III. その他

- 軌道運動の誤差成長
- シンプレクティック(symplectic)積分法
- 多様体補正(manifold correction)
- **変数変換**の重要性
- 変分方程式
- 非差分解法(ピカール法、線形変分法)
- 境界値問題



# 数値積分の誤差測定

---

- 解析解との差：非現実的
- 往復誤差：コスト高、非可逆系に適用不能
  - 終期値から逆算して初期値に戻るか？
- 高次公式との差：数値不安定に弱い
  - 埋込型解法 (DOPRI, 外挿法など) は重宝
- 高精度解法との差：安易、コスト高
- 本格的：刻み幅を半分にして比較



# 軌道運動の誤差成長

---

- (摂動)二体問題を直交座標で数値積分
  - 問:以下の経験法則を確かめよ
- 打切り誤差の成長(特殊な場合を除いて)
  - 位置(特に軌道経度方向)誤差は時間の2次
  - エネルギーなど他の成分は時間の1次
- 丸め誤差の成長 (Brouwer 1937, AJ)
  - 位置(特に軌道経度方向)誤差は時間の1.5次
  - エネルギーなど他の成分は時間の平方根

# シンプレクティック積分法

- シンプレクティック積分法 = 正準変換積分法

- 仮定1: ハミルトン系

- = 運動方程式が正準形

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = - \left( \frac{\partial H}{\partial q} \right)$$

- 仮定2: ハミルトニアンが分離可能

- 多くの力学系で実現

$$H = T(p) + U(q)$$

- 特徴: 劇的な誤差減少

- 打切り誤差: 位置は1次成長、その他は一定

- 中心力では角運動量の積分誤差 = 厳密に0

# シンプレクティック 積分法(2)

- **1次** 1回公式 (添字の微妙な違いに注意)
  - 座標先行:  $S_p(h)S_q(h)$

$$q_{n+1} = q_n + h \left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_n, p_{n+1} = p_n + h \left( \frac{\partial U}{\partial q} \right)_{n+1}$$

- 運動量先行:  $S_q(h)S_p(h)$

$$p_{n+1} = p_n + h \left( \frac{\partial U}{\partial q} \right)_n, q_{n+1} = q_n + h \left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_{n+1}$$

# シンプレクティック 積分法(3)

- 2次1回公式 = 1次公式の組み合わせ

- 座標先行:  $S_q(h/2) S_p(h) S_q(h/2)$

$$q_{n+1/2} = q_n + \frac{h}{2} \left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_n, p_{n+1} = p_n + h \left( \frac{\partial U}{\partial q} \right)_{n+1/2}, q_{n+1} = q_{n+1/2} + \frac{h}{2} \left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_{n+1}$$

- 運動量先行:  $S_p(h/2) S_q(h) S_p(h/2)$

$$p_{n+1/2} = p_n + \frac{h}{2} \left( \frac{\partial U}{\partial q} \right)_n, q_{n+1} = q_n + h \left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_{n+1/2}, p_{n+1} = p_{n+1/2} + \frac{h}{2} \left( \frac{\partial U}{\partial q} \right)_{n+1}$$

- 吉田の理論 (Yoshida 1990 Phys. Rev. A)

# シンプレクティック 積分法(4)

## ■ 4次3回公式(Ruth): 座標先行版

- $S_q(c_1h)S_p(a_1h)S_q(c_2h)S_p(a_2h)S_q(c_2h)S_p(a_1h)S_q(c_1h)$

$$a_1 = \frac{1}{2 - \sqrt[3]{2}}, a_2 = 1 - 2a_1, c_1 = \frac{a_1}{2}, c_2 = \frac{1}{2} - c_1$$

## ■ 6次7回公式(Yoshida): 座標先行版の一つ

- $S_q(d_1h)S_p(b_1h)S_q(d_2h)S_p(b_2h)S_q(d_3h)S_p(b_3h)S_q(d_4h)S_p(b_4h)S_q(d_4h)S_p(b_3h)S_q(d_3h)S_p(b_2h)S_q(d_2h)S_p(b_1h)S_q(d_1h)$

$$b_1 \cong 0.784513610477560, b_2 \cong 0.235573213359357, b_3 \cong -1.177679984178870,$$

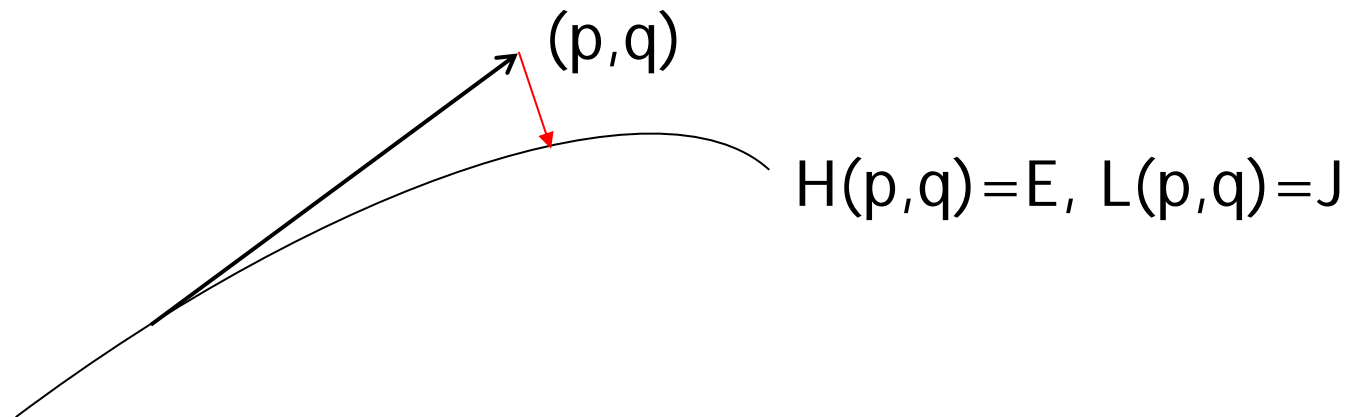
$$b_4 = 1 - 2(b_1 + b_2 + b_3), d_1 = \frac{b_1}{2}, d_2 = \frac{b_1 + b_2}{2}, d_3 = \frac{b_2 + b_3}{2}, d_4 = \frac{b_3 + b_4}{2}$$

# シンプレクティック 積分法(5)

- **混合変数**シンプレクティック積分法(MVS)
  - Kinoshita, Nakai, and Yoshida (1991, CMDA)
- 仮定3: 摂動ハミルトニアン  $H = H_0(J) + H_1(p, q)$ 
  - ほとんど全ての力学系で実現
- 2通りの変数空間: 要素  $(J, \theta)$  と座標  $(p, q)$
- 発想: 2つの変数空間で**交互に**正準変換
  - $S^{(0)}_{\theta}(h/2)S^{(1)}_q(h/2)S^{(1)}_p(h)S^{(1)}_q(h/2)S^{(0)}_{\theta}(h/2)$

# 多様体補正

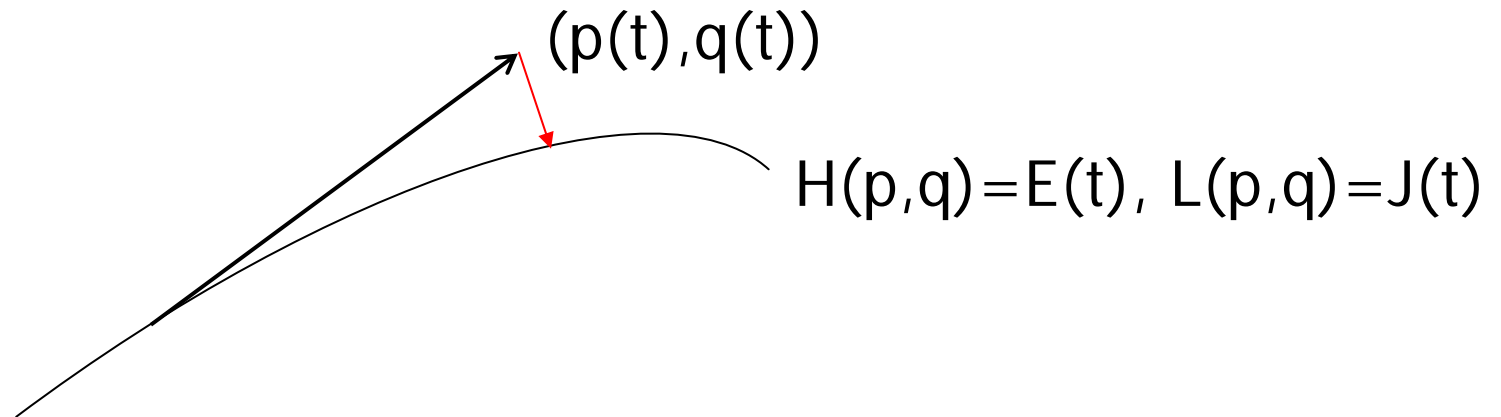
- 発想: 系の保存量が一定である多様体上に載るように数値解を補正する



- Nacozy (1971), Murrison (1989)
- 欠点: 系の保存量がないと適用不可能

# 多様体補正(2)

- 発想: **準保存量**一定多様体に変更
  - Fukushima (2003-2005)



- 長所: 劇的な誤差減少、積分法に非依存
- コスト: 準保存量の時間発展も**同時に**追跡



# 多様体補正 (3)

---

- アルゴリズム
  - 1. 状態変数  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  と準保存量を同時に積分
    - 例: エネルギー  $E$ , 全角運動量  $L$ , 角運動量  $Z$  成分  $L_z$
  - 2. 準保存量の定義式を満たすように、状態変数を幾何学的に厳密補正
    - 補正法: スケール変換、回転、射影、...
- ポイント: 積分の各ステップで補正

# 多様体補正(4)

- 例: 摂動二体問題

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}, \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\left(\frac{\mu}{r^3}\right)\mathbf{x} + \mathbf{a}$$

- 運動方程式

- 準保存量

- 二体エネルギーK

$$K \equiv \frac{\mathbf{v}^2}{2} - \left(\frac{\mu}{r}\right)$$

$$\frac{dK}{dt} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{a}$$

- 単スケール変換:  $(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \rightarrow (s\mathbf{x}, s\mathbf{v})$

- 補正量決定方程式

- ニュートン法

- 初期値:  $s=1$

$$\left(\frac{\mathbf{v}^2}{2}\right)s^3 - Ks + \left(\frac{\mu}{r}\right) = 0$$



# 変数変換の重要性

- 変数変換 → 微分方程式系の数値安定化
- 例1: 摂動二体問題の正則化(regularization)
  - (非線形)ケプラー問題 → (線形)調和振動子
  - Euler, Levi-Civita, Kustaanheimo-Stiefel, ...
- 例2: 要素の変化方程式  $H = H_0(J) + H_1(J, \theta)$ 
  - 作用変数J + 角変数 $\theta$
  - 無摂動解 = 直線運動
    - 厳密な数値解が得られる

$$\begin{cases} J = J_0 + J_1(t) \\ \theta = \theta_0 + n_0 t + \theta_1(t) \end{cases}$$

# 変分 (variational) 方程式

- 常微分方程式の解  $\mathbf{y}$ 、パラメータ  $p$
- 変分方程式 =  $(\partial \mathbf{y} / \partial p)$  の常微分方程式
  - 元の常微分方程式 + 初期条件を偏微分して得る
  - 一般には非斉次線形微分方程式
- 例: 運動方程式から派生する最小2乗法
  - 目的関数の例 
$$F(p) = \frac{1}{2} \sum_m w_m \left( g(t_m; \mathbf{y}(p)) - g_m \right)^2$$
  - $(\partial \mathbf{y} / \partial p)$  は傾斜ベクトルなどの計算に必須

# 変分方程式(2)

- パラメータの2大分類
  - 解の初期値 $\mathbf{y}_0$ 、モデル・パラメータ $\mu$

- 常微分方程式と初期条件  $\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, t; \mu), \quad \mathbf{y} = \mathbf{y}_0 (t = t_0)$

- 変分方程式と初期条件  $\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{y}_0} \right) = \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right) \left( \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{y}_0} \right), \quad \left( \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{y}_0} \right)_{jk} = \delta_{jk} (t = t_0)$   
 $\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mu} \right) = \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right) \left( \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mu} \right) + \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mu} \right), \quad \left( \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mu} \right) = 0 (t = t_0)$



# ピカールの逐次近似法

- 発想：常微分方程式の数値解より、既知関数の数値積分のほうが簡単
- 近似解から出発して逐次、数値積分を実行

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t), y = y_0 (t = t_0)$$

$$y^{(n+1)}(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(y^{(n)}(s), s) ds$$

- あまり数値解法として使われない
- 長所1：**並列化**で大幅な加速
- 長所2：(多点)境界値問題にも対応可能



# 線形変分法

- 発想：解を基底関数の線形和で表現
  - 非線形だと面倒  $y(t) = \sum_k c_k \psi_k(t)$
- 変分原理、微分方程式、初期条件・境界条件等を**係数の**連立方程式に翻訳
- 連立方程式を解く
  - コツ：方程式が簡単になる直交関数系が便利
- 欠点：非線形性が強いと破綻

# ピカール・チェビシェフ法

- ピカール法 + 線形変分法 + チェビシェフ展開
  - 詳細: Fukushima (1997a,b, AJ)
- 0. 一次変換で基本区間 $[-1, 1]$ に変換
- 1. 解と右辺を、それぞれチェビシェフ展開

$$y(t) = \sum_{k=0}^{\infty} Y_k T_k(t)$$

$$f(y(t), t) = \sum_{k=0}^{\infty} F_k T_k(t)$$

- 2. 微分方程式の翻訳(主要部分)

■ 問: 示せ

$$2Y_k = F_{k-1} - F_{k+1}$$

# ピカール・ チェビシェフ法(2)

- 3. 初期・境界条件の翻訳

$$Y_0 = y_0 - \sum_{k=1}^{\infty} Y_k T_k(t_0)$$

- 4. 打ち切り

$$\Sigma^{\infty} \cong \Sigma^{N^{(n)}}$$

- 5. 逐次近似アルゴリズム

$$Y_k^{(n)} \rightarrow y^{(n)}(t)$$

- 1) 近似解の構築

$$y^{(n)}(t) \rightarrow f(y^{(n)}(t), t)$$

- 2) 右辺の評価

- 3) 右辺のチェビシェフ展開

$$f(y^{(n)}(t), t) \rightarrow F_k^{(n)}$$

- 4) 積分の実行

$$F_k^{(n)}, y_0 \rightarrow Y_k^{(n+1)}$$

- 5) 収束判定

# 常微分方程式の 境界値問題

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t)$$

## ■ 境界値問題とは

■ 固定境界値: 例

$$y(t_0) = y_0, y(t_1) = y_1$$

■ 自由境界値: 例

$$\exists t, ay(t) + by'(t) = c$$


## ■ 代表的な方法

■ 射的(shooting)法: 多数の初期値問題に変換

■ うまく行かないことが多い

■ 緩和法: 差分化 → 大規模連立1次方程式

■ 変分法: 直交関数展開 → 係数の最適化



# 15. 計算のテクニック

---

- **まず**「高信頼性化」(後述)
- 何度も使うなら「高速化」
- 必要に迫られたら「高精度化」
  - 誤差の分類と誤差伝播
  - 丸め誤差
  - エンケの方法
  - 倍長演算



# 計算の高速化

---

- プログラム全体の高速化は不必要
  - プロファイリング (profiling) の重要性
- 高速化の手法
  - 計算機の高速化、専用計算機の利用
  - より高速なアルゴリズムの採用
  - 近似の活用 ← 必要な計算精度の見直し
  - 低精度・高精度計算のハイブリッド化
  - 最後の手段: 実行文の高速化



# プロファイリング

---

- 99:1の法則
  - 1%の部分が99%の時間を消費する
- 極意: 大消費時間部分だけ**集中して**高速化
- profiling = コードの部分毎の実行時間測定
  - 経過時間を実行回数で代用することが多い
  - 動的プロファイリング: 実行して計測
  - 静的プロファイリング: 机上で解析



# 動的プロファイリング

---

- 既存プロファイラーの活用: gprof, gcov
- 動的プロファイリングの実際
  - 0. プログラムの構造化 (サブルーチン、関数)
  - 1. 呼び出し回数の計測
    - 大消費時間ルーチン候補の選定
  - 2. 候補ルーチンごとに実行時間を測定
  - 3. 消費時間順にルーチンを高速化
  - 4. 確認: プログラムの実行時間を再測定



# 呼び出し回数の計測

---

- 簡単で効果的な動的プロファイリング
  - 0. ルーチンの全てに**カウンター**を設定
  - 1. 全体の実行の最初にカウンターをリセット
  - 2. ルーチン実行時にカウンターを加算
  - 3. プログラム終了時にカウンター内容を出力
- 注1: 複数の入り口設定は、なるべく避ける
- 注2: カウンター加算はルーチンの最初で



# 実行時間の測定

- 準備: 時間計測プログラム or ルーチン
- 測定の手順: 「呼び出し回数計測」に準拠
  - 注1: 一回の実行時間は短いことが多い
  - 注2: マルチタスクOSで正確な時間計測は疑問
- 測定法 (他の計算負荷を最小化して実行)
  - 0. 当該ルーチンだけ実行するプログラムを準備
  - 1. 十分な ( $10^6 \sim 10^8$ ) 回数だけ実行して計測
  - 2. 上記を多数回繰り返し、**最小値**を採用



# 静的プロファイリング

---

- 巨大プログラムでは事実上、不可能
  - 動的プロファイリング→対象ルーチンを選別
- 静的プロファイリングのコツ
  - 安直だが確実:プログラムの**達人**に依頼
  - 目標1:実行文よりループ
  - 目標2:多重ループなら最内側ループ
  - 条件分岐→動的プロファイリングを実施
  - 最終段階:**実行文の高速化**



# 実行文の高速化

- 基礎知識：基本演算の実行速度の経験則
  - 問：各自、体感せよ
- その他の実行文の実行速度の経験則
  - 添字計算は非常に速い
  - 条件分岐・ループ・ルーチン呼び出しは速い
  - 大規模配列の呼び出しは遅い
  - 入出力：2進10進変換は非常に遅い
    - 中間ファイルは書式なしで読み書き



# 基本演算の実行速度

---

- 整数演算は浮動小数点演算より格段に速い
- 実数の加・減・乗算は、ほぼ同じ計算速度
  - 加減乗算の回数=FLOPS
- (chipにもよるが) $x+y*z$ の形式は速い
- (賢いコンパイラでは)定数式は予め計算
- 除算は遅く、平方根はもっと遅い
- 特殊関数(sin,expなど)は、数十倍遅い



# 実行文の高速化(2)

---

- 計算回数の軽減: **中間結果の再利用**
  - 少数回の計算: 速度向上の必要性は低い
  - 定数計算: 一度だけ実施
- 簡単で効果的な処方箋
  - 複合分数式 → 整理して単純分数式
  - 低次の累乗 → 積の繰り返し
  - 多項式の計算 → **ホーナーの方法**
  - 複素数演算 → 実数ペアの演算



# 実行文の高速化(3)

- 工夫前  
 $f := (5.0/2.0) * \sin(x) ** 1.5 / (1.0/x + x ** 3)$   
 $g := (5.0/2.0) * \sin(x) ** 1.5 / (1.0/x - x ** 3)$
- 工夫後  
 $s := \sin(x); r := \text{sqrt}(s)$   
 $r3 := s * r; h := 2.5 * r3 * x$   
 $x2 = x * x; x4 = x2 * x2$   
 $f := h / (1.0 + x4)$   
 $g := h / (1.0 - x4)$



# 計算の高精度化

---

- 高精度化は、**本当に必要か**
  - **コスト・パフォーマンス**を、よくよく考えよ
- 高精度化の手法
  - 計算環境の高精度化
  - 数学ソフトウェア
  - 定数表・数学ライブラリの高精度化
  - アルゴリズムの見直し
  - 丸め誤差の防止



# 演算精度の測定法

---

- 簡単で確実: より高い精度の計算と比較
  - 好例: 倍精度の結果を4倍精度の結果と比較
  - 問: 基本関数(sinなど)の計算精度を測れ
    - 計算精度は引数の値に依存することに注意
- 複雑だが自己完結
  - 保存量、恒等式、加法定理などを検査
- 実用的(離散計算の場合)
  - 刻み幅を半分にして共通格子点で比較



# 演算精度の向上策

---

- 整数で計算できるものは整数演算で
- 常に倍精度計算（不足なら4倍精度）
  - 注意：数定数の精度明示（1.0D-7など）
- 1程度の量に変換：**スケーリング**、無次元化
- なるべく小さい量だけを扱う：**エンケ法**
- 丸め誤差に強い公式・アルゴリズムを採用
  - 二大丸め誤差：**桁落ち**と**情報落ち**

# 桁落ちと情報落ち

## ■ 桁落ち：最も危険

- 値がほぼ同じ数の差
- 有効桁数の著しい減少

$$\begin{array}{r} 72865.4 \\ - 72823.5 \\ \hline 41.9 \end{array}$$

## ■ 情報落ち：計算の無駄

- 絶対値の大きさに大きな違いがある数の加減

$$\begin{array}{r} 72865.4 \\ + \quad 32.1583 \\ \hline 72897.6??? \end{array}$$

- 桁そろえ→小さい量の計算精度がロス

# 桁落ちと情報落ち(2)

- 問: 左辺を数値計算し、右辺と比較せよ
  - 注: 無限級数の場合は、有限和の上限をいろいろ変えて、収束する様子を観察せよ
  - どうしたら結果がより良く一致するか、工夫せよ

$$1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} = e$$

$$1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n+1} = \log 2$$

$$1 + \frac{1}{10^{12}} + \frac{2}{10^{12}} + \dots + \frac{1}{10^6} = 1 + \sum_{n=1}^{10^6} \frac{n}{10^{12}} = 1.5000005$$



# 誤差の分類

---

- 測定(measurement)誤差
  - 系統(systematic)誤差: 理論、機械、個人
  - 偶発(spontaneous)誤差: 過失、自然
- 計算(computational)誤差: **極力、減らすべし**
  - 入出力(I/O)誤差: 入力時のミス、2進10進変換
  - 系統誤差: 定数、関数、打切り、離散化
  - 偶発誤差: 収束判定、累積(統計的意味で)
  - 丸め(round-off)誤差: 型変換、桁落ち、情報落ち



# 誤差の例

---

- 2進10進変換誤差、型変換誤差
  - 10進有限小数  $\neq$  2進有限小数
  - 小さい数は  $10^{-n}$  より  $2^{-n}$
  - 型変換での誤差例: 倍精度0.1  $\neq$  単精度0.1
- 定数誤差 (光速度など物理定数も **要注意**)
  - $\pi$ 、直交多項式 ( $P_n$  など) のゼロ点、...
- 関数誤差 (教訓: ライブラリを **過信しない** 事)
  - 関数ライブラリの誤差は  $20 \sim 100\epsilon$

# 演算の誤差伝播

- 絶対誤差と相対誤差  $\langle x \rangle = x + \Delta x = x(1 + \delta x)$ 
  - 真の値 $x$ と計算機内での近似値 $\langle x \rangle$
- 乗算  $\langle \langle x \rangle \times \langle y \rangle \rangle = \langle [x(1 + \delta x)] \times [y(1 + \delta y)] \rangle$   
 $\cong x \times y \times (1 + \delta x + \delta y + \theta)$ 
  - 局所丸め誤差 $\theta$ ,  $|\theta| < \varepsilon$
  - 相対誤差  $\delta(x \times y) \cong \delta x + \delta y + \theta$
- 除算の相対誤差  $\delta(x \div y) \cong \delta x - \delta y + \theta$ 
  - 問: 示せ

# 演算の誤差伝播(2)

- 加減算  $\langle\langle x \rangle \pm \langle y \rangle\rangle = \langle [x(1 + \delta x)] \pm [y(1 + \delta y)] \rangle$

- 相対誤差(問:示せ)

$$\delta(x \pm y) = \frac{x\delta x \pm y\delta y + \theta \max(|x|, |y|, |x \pm y|)}{x \pm y}$$

- $x, y$ が同符号、同程度なら問題ない

- 桁落ち  $|x \pm y| \ll \max(|x|, |y|) \rightarrow |\delta(x \pm y)| \nearrow$

- 情報落ち  $|x| \gg |y| \rightarrow |\delta(x \pm y)| \cong |\delta x + \theta| \gg |\delta y|$

# 演算の誤差伝播(3)

- 他の演算: 結局は四則演算に帰着
  - 関数内の誤差 = 原理的に推定可能
  - 複雑(判定を含む)な演算 → 正確な推定は困難

- 関数の誤差

$$\delta f(x) = \left[ \frac{xf'(x)}{f(x)} \right] \delta x + \theta$$

- 相対誤差伝播の感度

- 教訓: 関数のゼロ点付近は要注意

$$\frac{xf'(x)}{f(x)}$$



# 丸め誤差

---

- 有限桁計算の宿命
- 丸めの方式
- 二大丸め誤差: 桁落ちと情報落ち
- 累積(accumulated)丸め誤差
- 区間(interval)演算と区間解析: 非実用的
- 丸め誤差の軽減策



# 丸め的方式

- 最小単位**ULP** (Unit in the Last Place)
  - 値 $x$ を表現するときの最終桁の1,  $ULP \sim |x|\epsilon$
- 四大丸め方式: **絶対誤差**  $\Delta x \equiv |x|\epsilon$ 
  - RN: 0捨1入,  $|\Delta x| < 0.5ULP$ , もっとも望ましい
  - RP: 切り上げ,  $0 < \Delta x < ULP$
  - RM: 切捨て,  $-ULP < \Delta x < 0$
  - RZ: 0方向丸め,  $|x|$ が小さくなるように丸める
    - $x > 0$ ならRM,  $x < 0$ ならRP

# 累積丸め誤差

- 仮定1: 局所(local)丸め誤差は互いに独立

$$\langle \varepsilon_j \varepsilon_k \rangle = \varepsilon^2 \delta_{jk}$$

- 仮定2: 局所丸め誤差の平均はゼロ

$$\langle \varepsilon_k \rangle = 0$$

- 結論: 累積誤差の推定値

$$\left\langle \sum_{k=1}^N \varepsilon_k \right\rangle = \sqrt{N} \varepsilon$$

- 注意: 実際は仮定が成立しない場合が多い



# 丸め誤差の軽減策

---

- 基本: 単精度計算は使わない
- 安直: 高精度計算(4倍精度、任意長演算)
- 方策1: 加減算の工夫
  - 小さい量から加える、同符号でまず加算、...
- 方策2: 微小量に着目
  - エンケの方法、差分演算子、式の変形
- 方策3: むやみに刻み幅を小さくしない

# 加減算の工夫

$$\sum_{n=0}^N a_n$$

- 工夫1: なるべく絶対値をそろえる
  - 例: 2分木(B-tree)和: 実現が面倒な割に効果小

$$\left(\left(\left(a_1 + a_2\right) + \left(a_3 + a_4\right)\right) + \left(\left(a_5 + a_6\right) + \left(a_7 + a_8\right)\right)\right) + \dots$$

- 工夫2: 絶対値が**増大する方向**に加算

- 例: 絶対値が単調減少 → 逆順に加算  $|a_n| \geq |a_{n+1}|$

- 工夫3: まず同符号で加算 + 最後に減算

- 例: 交代級数 
$$\sum_{n=1}^{2N} (-1)^n a_n = \left( \sum_{n=1}^N a_{2n} \right) - \left( \sum_{n=1}^N a_{2n-1} \right)$$

# 加減算の工夫(2)

- 工夫4: 加減算だけ、より高い精度で演算
  - 難点: コスト高
- 決定版: デッカー(Dekker)の倍長和
  - 加減算だけ事実上の倍精度で実施
  - アルゴリズムの例
    - 総和( $s += y$ )で、 $s$ を2変数化
    - 上位 $s_1$ , 下位 $s_2$ , 積み残し $z_2$
    - 括弧()の有無が重要

$$z_1 := s_1 + y$$

$$z_2 := ((s_1 - z_1) + y) + s_2$$

$$s_1 := z_1 + z_2$$

$$s_2 := (z_1 - s_1) + z_2$$



# エンケ(Encke)の方法

---

- 本来：彗星の高速軌道計算 (Encke 1854)
- 発想：小さい量だけを扱う
  - 仮定：問題＝解ける問題＋微小変化
  - 「解ける問題」の解析解を活用
  - 微小有限変化量だけを変数→桁落ちの回避
- 例1：非線型方程式の解法
- 例2：常微分方程式の数値解法

# エンケの方法(2)

## ■ 例1: ケプラー方程式の差分解法

$$E - e \sin E = M$$

■ 仮定1: 類似解が既知  $E_0 - e_0 \sin E_0 = M_0$

■ 仮定2: パラメータの変化量が直接与えられる

■ 有限変化量  $x$  の方程式  $\Delta e \equiv e - e_0, \Delta M \equiv M - M_0$

$$x - e \cos(E_0 + x) \sin x = N$$

■ 注:  $x$  は小さい  $x \equiv \Delta E / 2, N \equiv (\Delta M - \Delta e \sin E_0) / 2$

# エンケの方法(3)

## ■ 例2: 摂動調和振動子の数値積分

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + [\mu_0 + \Delta\mu(x, t)]x = \varepsilon(x, t)$$

- 無摂動部分の運動方程式
- 有限変化量  $\Delta x$  の方程式

$$\frac{d^2 \tilde{x}}{dt^2} + \mu_0 \tilde{x} = 0$$

$$\frac{d^2 \Delta x}{dt^2} + \mu_0 \Delta x$$

$$= \varepsilon(\tilde{x}(t) + \Delta x, t) - \Delta\mu(\tilde{x}(t) + \Delta x, t) [\tilde{x}(t) + \Delta x]$$



# 倍長倍精度演算

---

- 元祖: デッカー、単精度で倍精度を実現
- 発想: 倍精度演算だけで4倍精度計算を実現
  - 変数を倍精度変数のペア(上位、下位)で表現
  - 通常の4倍精度より3~10倍程度高速
- 四則演算: Dekker (1971, Numer. Math.)
- 平方根: Fukushima (2001, AJ)
- 指数関数、三角関数: Fukushima (2003)

# 倍長倍精度演算(2)

- 倍長表現  $\langle x_1, x_2 \rangle$
- 和条件と正規化条件  $x = x_1 + x_2, |x_2| \leq \varepsilon |x_1|$
- ルーチン群 (講師から入手可能)
  - 1. 入出力: read, write
  - 2. 加減乗算: norm, add, sq, mul
  - 3. 基本初等関数: pow, exp, sin, cos
  - 4. 派生初等関数: tan, sinh, cosh, tanh
  - 5. 逆関数: div, sqrt, cbrt, log, atan2, atanh



# 16. 計算の高信頼性化

---

- 高信頼性(reliability)化の手法
- 良いプログラムの書き方
  - プログラムの極小化
  - 予防(preemptive)プログラミング
  - 試作(prototyping)プログラミング
  - リサイクルとテンプレートの活用
  - プログラムの可読化・可搬化・文書化
- 実践的デバッグ、その他の教訓



# 高信頼性化の手法

---

- 正しくなければ、意味がない
- 高信頼性化の直接手法
  - 計算結果の精度の確認
  - 入力データ・定数の妥当性の確認
  - 他と比較：手計算、他の手法、他人の計算
  - 物理的直感との比較
- 高信頼性化の間接かつ強力な手法
  - 良いプログラムを書く



# プログラムの極小化

---

- 巨大プログラム＝エラーの温床
- 個々のプログラム単位は、なるべく小さく
  - 理想：一画面で全体が一望できるサイズ
- 単能プログラムを組み合わせて利用
  - プログラムの万能化を避けよ
  - UNIX流の考え方：フィルターとパイプライン
- 前処理・後処理・検査・入出力などの分離



# 予防プログラミング

- プログラミングにおけるマーフイーの法則
  - 可能性が少しでもあれば、必ずエラーは起きる
  - 典型：添字や引数の範囲逸脱(out of range)
  - 特にループ中の境界値(=最初と最後)に注意
- 予防(preemptive)プログラミング
  - 「転ばぬ先の杖」
  - 例1：  $a(i) \rightarrow a(\max(1, \min(i, IMAX)))$
  - 例2：  $\text{sqrt}(x) \rightarrow \text{sqrt}(\text{abs}(x) + \text{EPSILON})$

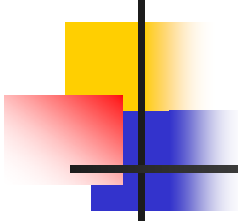


# 予防のコツ

---

## ■ 名前

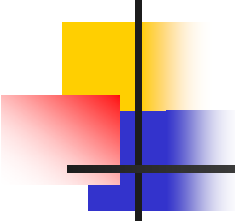
- 紛らわしい変数名の不使用(悪例: x1とxI)
- 定数、変数、ルーチン名の容易な区別化
  - 例: 定数は全大文字、変数は小文字主体
- 意味のある名前付け(例: PI\_HALF)
- 類似名で違う部分は先頭に
  - 例: positionx, positiony → x\_pos, y\_pos
- 大文字・特殊記号の活用(例: SumX, x\_mean)



# 予防のコツ(2)

---

- (広い意味での)型(type)
  - **全ての**変数の型を明示的に(explicit)指定
    - Fortranでは、implicit none宣言を忘れずに
  - お勧め→名前による型の(自己流)区別
  - 一例:(Fortran風の)先頭文字による型区別
    - 整数:I,J,K,N、実数:R,F、複素数:W,Z
    - 単精度:S、倍精度:D、4倍精度:Q
    - 論理:L、文字:C、文字列:A、2進数:B、ポインタ:P
    - 単位ベクトル:U、ベクトル:V、行列:M

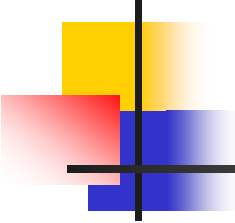


# 予防のコツ(3)

---

## ■ 入出力

- 入力の安全化: **自由欄**(column-free)入力
- 生の(raw)入力の保存 or 直接(direct)出力
- 入力変数の入念な検査
  - 許容範囲、桁間違い、単位間違い、型制限
- 検査出力: 自作ルーチン(my\_print等)の活用
  - 検査出力専用ファイル、十分な事前検査と適合化
- 正規出力の整形(formatting)
  - グラフ化、桁そろえ、余分な情報の抑制



# 予防のコツ(4)

---

- 演算前の検査と適合化(adaptation)
  - 添字(index)、除数(divisor)、引数(argument)
  - 検査による警告＋例外処理
    - 例: `if(x<0.0) then call ALERT`
  - 既定(default)値による**強制適合化**
    - 例: `g=max(gMIN,min(g,gMAX))`
  - **微小量加算**による適合化
    - 例: `z=x/(y+sign(y)*EPSILON)`



# 予防のコツ(5)

---

## ■ 関数とサブルーチン

- 典型的エラー: 引数の数、順序や型の不一致
  - 効果的: (grepによる) 定義・呼び出し一覧表の作成
- 引数の3大区別(注釈化するのが賢明)
  - 1) 入力(=参照)、2) 出力、3) 入出力兼用
- お勧め: 実行状態を関数値として返す関数
  - 実行状態: 正常終了、異常終了(その1、その2...)
  - 本体の構成が簡易化 & 例外処理に便利



# 試作プログラミング

---

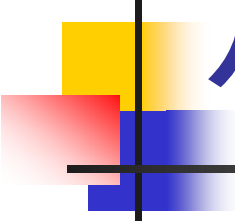
- 設計時の試作
  - アルゴリズムを(自己流)疑似言語で記述
  - Mathematicaなどで試作アルゴリズムを試験
- コーディング時の試作は**トップ・ダウン**で
  - なるべく既成品を活用←工具箱
  - 難しい部分は後回し=埋め草(stab)化
- 試作(Proto), 実用(Practice), 可搬(Portable)
  - 部品を一つずつ試作・検査→固定



# ルーチンのリサイクル

---

- 最も有効な生産性の向上策
- 名人への近道＝工具箱(toolbox)の整備
  - 自分で経験した優秀ルーチンを収集・整理
  - 定評あるライブラリから拝借 & 自己変形
  - 理想は自家製ライブラリ化 (mylib.h)
- 数定数の名前付き定数化←再利用可能
- 実用的な知恵: ラッピングとマクロ



# ルーチンのリサイクル(2)

---

- **ラッピング** (wrapping): 別名「薄皮饅頭」
  - = 既存ルーチンに、その時の用途に合うように前処理・後処理をかぶせること
  - 引数の変換 → 既存ルーチン(群)の呼び出し → 結果を逆変換 (場合分けも含まれる)
- 道具 (mini-tool) としての **マクロ**
  - 1行程度のミニルーチン → 文字置換が効果的
  - **使いすぎ**に注意



# テンプレートの活用

---

- プログラム・テンプレート(template)
  - 理想: 名人の作った簡単なプログラム
  - 次善: 定番プログラムを自分でテンプレート化
  - 実際: 以前に作ったプログラム
- テンプレートの活用法
  - 枠組みだけ利用、部品は工具箱から選択
- 実用的な例: 7段階テンプレート
  - 前準備・後始末、入・出力、前・後処理、本体



# 7段階テンプレート

---

- 1. 前準備: 型・配列の宣言、ファイルの開 (open)、**全変数値のリセット**、定数の計算
- 2. 入力: 入力変数の検査・適合化・**直出力**
- 3. 前処理: 変数変換、係数・準定数の計算
- 4. 本体: 計算本体
- 5. 後処理: 逆変換、最終結果への整形
- 6. 出力: 中間結果の保存、最終結果表示
- 7. 後始末: ファイルの閉(close)、**例外処理**



# プログラムの可読化

---

- 適切かつ多すぎないコメント
  - 参考文献、変数の意味、アルゴリズムの核心
- 意味のある変数名 → 予防プログラミング
- 構造表現のための字下げ・サブルーチン化
  - 注意: 「完全構造化」に、こだわらない
- 外部とのインターフェースの明確化
  - 呼び出しルーチン、入力・出力変数の明示



# プログラムの可搬化

---

- 可搬性(portability)の確保
  - プラットフォーム、OS、プログラミング言語...
  - 方言(dialect)・特殊ライブラリの使用を避ける
- **輸出**(export)のための望ましい条件
  - 0. プログラムの可読化
  - 1. 試運転プログラム・使用例・入出力例の添付
  - 2. 作者名・問い合わせ先・メールアドレスの明記
  - 3. 利用手引き(manual)の添付



# プログラムの文書化

---

- 文書化(documentation)は**他人の為ならず**
  - 「明日の君は他人も同然」
- 背景説明メモの重要性
  - 動機、主要アルゴリズム、試作品、開発日誌
- 簡単で効果的な**整理法**
  - 1. 主要ファイルの全てをアーカイブ化
  - 2. 複数の写しを別々の場所・媒体に保存
  - 3. ファイル名一覧＋保存場所→印刷&保管



# 実践的デバッグ

---

- 安直: 既存デバッガの活用
- 実践的: 適切な出力文の挿入
  - 最善: 自作デバッグ出カルーチンの呼び出し
  - 出力: 呼び出し箇所、変数名、変数值、...
- 効用
  - 1. 整形された出カ→バグ発見の簡易化
  - 2. 無駄な出力の防止→情報の精選化
  - 3. 終了時にコメント化→再利用が容易



# その他の教訓

---

- 1に「正しさ」、2に「わかりやすさ」
- コメントは中身と一致させる
- 自己流は避けてライブラリを活用
- Know-HowよりKnow-Who
- 名人のプログラムを熟読玩味
- 分割統治(divide and rule)
- 入力は打ちやすく、出力は読みやすく



## その他の教訓(2)

---

- 設計は一気に、コーディングは休みながら
- 机上デバッグは実行時デバッグに百倍優る
- 汎用プログラムは不用プログラム
- 単一言語・同一環境に固執しない
- 単純なプログラムは速く、かつ間違いにくい
- 一つの虫の発見は百匹の虫の可能性
- 実数の等値(equality)比較は無意味



## その他の教訓(3)

---

- ダメなプログラムは改良より書き直し
- コードの高速化よりアルゴリズムの高速化
- 工具箱には良いルーチンだけを精選
- 添字が一つ違いのエラーに注意
- 多入力多出力より単一入力単一出力
- 高精度化のときは手抜き厳禁
- 変更の前に、まず現状保存(save & store)



## その他の教訓(4)

---

- マジック・ナンバーは名前付き定数に
- (宣言文など)同一部分はinclude化
- 大域変数やcommonブロックは最小限に
- ジャンプ命令の利用は最小限に
- 無理にジャンプ命令を一掃する必要はない
- 一つのコンパイラを過信せずに他も試す
- 古いプログラムでは言語定義の変遷に留意



## その他の教訓(5)

---

- ループの初めと終わりに悪魔が潜む
- if文のネストはif-then-elseの繰り返しで
- if-then-elseでは最後のelseに注意
- 読みやすいプログラムは間違いにくい
- 保守する立場に立ってプログラムを書く
- 実行文の繰り返しはルーチンに書き直す
- 意味のない中間変数は、なるべく使わない



# 参考文献

---

- 福井他; 1999、新 数值計算、共立出版
- Gear; 1971, Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations, Prentice-Hall
- Hairer, Nørsett, and Wanner; 1993, Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems, 2<sup>nd</sup> ed., Springer-Verlag
- Hairer, and Wanner; 1991, Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems, Springer-Verlag



## 参考文献(2)

---

- Henrici; 1962, Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations, Wiley (邦訳:ヘンリッチ、清水・小林訳;1973、計算機による常微分方程式の解法 I、II、サイエンス社)
- 一松・戸川編;1975、数値計算における誤差、共立出版
- 茨木・福島;1991、FORTRAN77最適化プログラミング、岩波書店



## 参考文献(3)

---

- 市田・吉本; 1979、スプライン関数とその応用、教育出版
- 伊理・藤野; 1985、数値計算の常識、共立出版
- Kernighan; 1976, Software Tools, Addison-Wesley. (邦訳:カーニハン、木村訳; 1981、ソフトウェア作法、共立出版)



## 参考文献(4)

---

- Kernighan and Pike; 1999, Practice of Programming Style, Addison-Wesley. (邦訳: カーニハン・パイク、福崎訳; 2000、プログラミング作法、アスキー)
- Kernighan and Plauger; 1974, Elements of Programming Style, Bell Telephone Lab. (邦訳: カーニハン・プロローガー、木村訳; 1976、プログラム書法(第2版)、共立出版)
- Lambert; 1973, Computational Methods in Ordinary Differential Equations, Wiley



## 参考文献(5)

---

- Mathews and Fink; 2004, Numerical Methods: Using MATLAB, 4<sup>th</sup> ed., Prentice-Hall
- 三井; 1985、数値解析入門、朝倉書店
- 森; 2002、数値解析(第2版)、共立出版
- 森; 1984、数値解析法、朝倉書店
- Nash; 1990, Compact Numerical Methods for Computers, 2<sup>nd</sup> ed., Adam Hilger (邦訳: ナッシュ、有賀・加藤・宮里訳; 1996、わかるコンピュータ数値計算、オーム社)



## 参考文献(6)

---

- 二宮編; 2004、数値解析のつぼ、共立出版
- 二宮編; 2006、数値解析のわざ、共立出版
- Ralston and Rabinowitz; 1978, First Course in Numerical Analysis, 2<sup>nd</sup> ed., McGraw Hill, reprinted from Dover, 2001 (邦訳:ラルストン・ラヴィノビッツ、戸田・小野訳; 1986、電子計算機のための数値解析の理論と応用、ブレイン図書)



# 参考文献(7)

---

- Stoer and Bulirsch; 1980, Introduction to Numerical Analysis, Springer-Verlag
- 山内・森口・一松編; 1965、電子計算機のための数値計算法I,II,III、培風館
- 山本他; 1999、これだけは知っておきたい数学ツール、共立出版

# 講師



- 福島登志夫
- 自然科学研究機構  
国立天文台 (NAOJ)
- 181-8588 東京都三鷹市大沢2-21-1
- [Toshio.Fukushima@nao.ac.jp](mailto:Toshio.Fukushima@nao.ac.jp)
- <http://chiron.mtk.nao.ac.jp/~toshio/>