

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、 $\frac{1}{n}$, 2^n , $n!$, $n!!$, $\binom{n}{m}$
1回だけ計算して保存

- 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: 純粋数学志向、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: そっけないが使いやすい
 - GnuMP: フリー、任意多倍長演算
 - GNUPLOT: 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 $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$
 - 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)

$\cos x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x^2)^n}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} - \dots \equiv c_0(x^2),$	$\cosh x = c_0(-x^2)$
$\sin x = x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x^2)^n}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} - \dots \equiv xc_1(x^2),$	$\sinh x = xc_1(-x^2)$
	$e^x = \cosh x + \sinh x$

ホーナー(Horner)法

- 多項式の計算の定番
 - 定義式で計算: 計算量 = $N(N+3)/2$ $P(x) \equiv \sum_{n=0}^N a_n x^n$
 - 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
$$P(x) = (y - c_0)(b_1 + (y - c_1)(b_2 + (y - c_2)(b_3 + \dots))), \quad y = (x - a)^2$$
- 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(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 $\frac{d^2 x}{dt^2} + \lambda x = 0 \rightarrow x = x_0 c_0(\lambda t^2) + v_0 t c_1(\lambda t^2)$
 - 問: 確認せよ

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 $C_n = 1 - n(n+1)z C_{n+2}$, $C_n(0) = 1$
- 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

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

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

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

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

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

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

■ 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(confluent)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

- ホツホハンマー(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→多項式
 - 問: ホーナー流の ${}_pF_q$ 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
 $e^x = {}_0F_0(x)$, $(1-x)^a = {}_1F_0(-a; x)$, $-\log(1-x) = xF(1, 1, 2; x)$,
 $\sin x = x {}_0F_1\left(\frac{3}{2}; -\frac{x^2}{2}\right)$, $\sinh x = x {}_0F_1\left(\frac{3}{2}; \frac{x^2}{2}\right)$,
 $\cos x = {}_0F_1\left(\frac{1}{2}; -x^2\right)$, $\cosh x = {}_0F_1\left(\frac{1}{2}; x^2\right)$,
 $\sin^{-1} x = xF\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; x^2\right)$, $\sinh^{-1} x = xF\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; -x^2\right)$,
 $\tan^{-1} x = xF\left(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}; -x^2\right)$, $\tanh^{-1} x = \frac{1}{2} \log\left(\frac{1+x}{1-x}\right) = xF\left(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}; x^2\right)$

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

$$e^x = 1 + \frac{x}{1 + \frac{B_1 x^2}{2}} = 1 + \frac{x}{1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} - \frac{x^3}{720} + \dots}$$
,
$$\log(1+x) = \frac{x + \frac{x^3}{12} + \frac{x^5}{30} + \frac{97x^7}{5040} + \dots}{1 + \frac{x}{2} + \frac{x^3}{12} + \frac{7x^5}{180} + \frac{181x^7}{7560} + \dots}$$
 - 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、 $B_{2n+1} = 0 (n > 1)$
- $$\{(-1)^n B_{2n}\} = \left\{ \frac{1}{6}, \frac{1}{30}, \frac{1}{42}, \frac{1}{30}, \frac{1}{66}, \frac{5}{2730}, \frac{691}{6}, \frac{3617}{510}, \frac{43867}{798}, \frac{174611}{330}, \frac{854513}{138}, \frac{236364091}{2730}, \dots \right\}$$

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 → m+n=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→より高速(～倍速)

パデ近似(2)

■ テイラー展開からの構成法 $f(x) \approx \sum_{i=0}^{m+n} f_i x^i$

- 仮定:mとnは固定

■ 分子多項式 p(x) $p(x) = \sum_{k=0}^m p_k x^k$, $q(x) = 1 + \sum_{j=1}^n q_j x^j$

■ 分母多項式 q(x)

■ 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→q、決定条件→p

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

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

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

連分数展開

■ 連分数

$$b_0 + \Phi_{n=1}^{\infty} \frac{a_n}{b_n} \equiv b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \dots}}$$

■ 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

$$\tan x = \frac{x}{1 + \Phi_{n=1}^{\infty} \frac{-x^2}{2k+1}} = \frac{x}{1 - \frac{x^2}{3 - \frac{x^2}{5 - \dots}}}$$

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 $y = \frac{a+bx}{c+dx}$
 - よくある例: 一次有理変換
- 例: 対数関数 $\log(1+x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x)^n}{n+1} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$
 - テイラー展開
 - $x > 0$ 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 $\log(1+x) = \log\left(\frac{1+y}{1-y}\right) = 2y \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^{2n}}{2n+1}$
 - 2次単調増加級数

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

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

- 双曲線関数: 基本は半角正接双曲線関数

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

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 $\text{atan2}(y, x)$
 $\sin^{-1} s = \text{atan2}(s, \sqrt{1-s^2}), \cos^{-1} c = \text{atan2}(\sqrt{1-c^2}, c), \tan^{-1} t = \text{atan2}(t, 1)$
- 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
 $\sinh^{-1} s = \tanh^{-1} \frac{s}{\sqrt{1+s^2}}, \cosh^{-1} c = \tanh^{-1} \frac{\sqrt{c^2-1}}{c}, \log x = 2 \tanh^{-1} \left(\frac{x-1}{x+1} \right)$
 - \log の引数が大のとき: 基本は対数
 $\sinh^{-1} s = \text{sign}(s) \log(|s| + \sqrt{1+s^2}), \cosh^{-1} c = \log(c + \sqrt{c^2-1}), \tanh^{-1} t = \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+t}{1-t} \right)$

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 $\text{do}(k=0, K) \{c_k := F(\theta_k)\}$
$$\vec{f} = \sum_k \vec{A}_k F(\theta_k), \text{do}(n=1, N) \{f_n := A_{n0} * c_0$$

$$\text{do}(k=1, K) \{f_n += A_{nk} * c_k\}$$
- 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
 $c_0 := 1.0; c_1 := x; \text{do}(k=2, K) \{c_k := c_{k-1} * x\}$

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

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 $L_n(x) = F(-n; 1; x), \quad k!! \equiv k(k-2)(k-4)\dots$

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

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

チェビシェフ多項式

■ 変形三角多項式

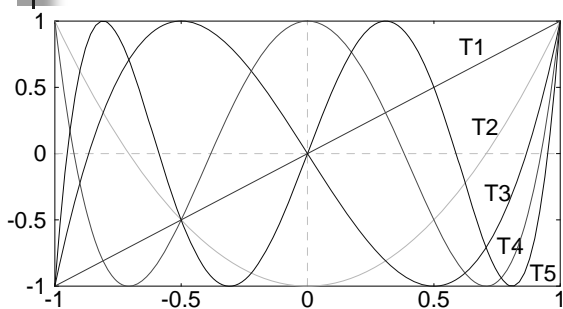
$$x \equiv \cos \theta$$

- 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 $T_n(y_k^{(n)}) = (-1)^k$

チェビシェフ多項式(2)



チェビシェフ多項式(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:=t2+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}
```

チェビシェフ多項式(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

$1 = T_0,$	$16x^5 = T_5 + 5T_3 + 10T_1$
$x = T_1,$	$32x^6 = T_6 + 6T_4 + 15T_2 + 20T_0$
$2x^2 = T_2 + T_0,$	$64x^7 = T_7 + 7T_5 + 21T_3 + 35T_1$
$4x^3 = T_3 + 3T_1,$	$128x^8 = T_8 + 8T_6 + 28T_4 + 56T_2 + 70T_0$
$8x^4 = T_4 + 4T_2 + 6T_0,$	$256x^9 = T_9 + 9T_7 + 36T_5 + 84T_3 + 126T_1$

多重チェビシエフ多項式

- チェビシエ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
$$T_n(\mathbf{x}) \equiv \cos(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\theta}), V_n(\mathbf{x}) \equiv \sin(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\theta}), (\mathbf{x})_k = x_k \equiv \cos \theta_k$$
- 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
$$P_{2n}(0) = (-1)^n P_{n0}, P_{2n+1}(0) = 0, P_{n0} \equiv \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}$$

$$P_n(1) = 1, P_n(-1) = (-1)^n, N!! \equiv N(N-2)(N-4) \dots$$

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) $P_0(x) = 1, P_1(x) = x$

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

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

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

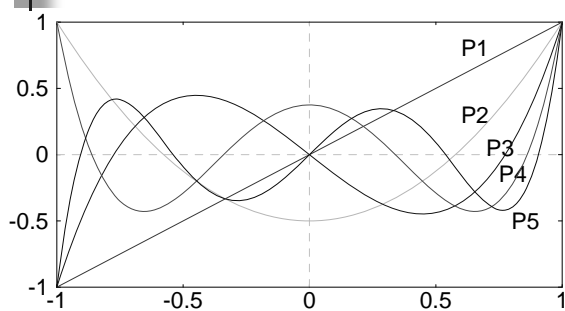
$$P_5(x) = (63x^5 - 70x^3 + 15x)/8$$

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

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

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

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 $I_n \equiv \frac{1}{n}$
→ 常備すべし

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

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

$P_6: 0.23861918608319691, 0.66120938646626451, 0.93246951420315203$

$P_7: 0.40584515137739717, 0.74153118559939444, 0.94910791234275852$

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

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 $Q_n \equiv \frac{dP_n}{dx} = \frac{1}{\cos \varphi} \left(\frac{dP_n}{d\varphi} \right) \quad x \equiv \sin \varphi$
 - 緯度角 φ
 - 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

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

$Q_7: 0.20929921790247887, 0.59170018143314230, 0.87174014850960662$

$Q_8: 0.36311746382617816, 0.67718627951073775, 0.89975799541146016$

$Q_9: 0.16527895766638702, 0.47792494981044450,$

$0.73877386510550508, 0.91953390816645881$

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 $P_0^0 = 1, P_1^0 = x, P_1^1 = y, \quad y \equiv \cos \varphi$
- 漸化式(多数のうち、最も実用的な組合せ)
 - $P_{m+1}^{m+1} = (2m+1)yP_m^m, \quad P_{m+1}^m = (2m+1)yP_m^{m-1}$
 - $(n-m+1)P_{n+1}^m = (2n+1)xP_n^m - (n+m)P_{n-1}^m$
- 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

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

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

do (m=1, M-1) {

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

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 $R_n^m \equiv \frac{dP_n^m}{d\varphi}, R_n^0 \equiv yQ_n$
- 第2種 = Q_n^m より実用的

- 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, ϕ, λ) 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

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

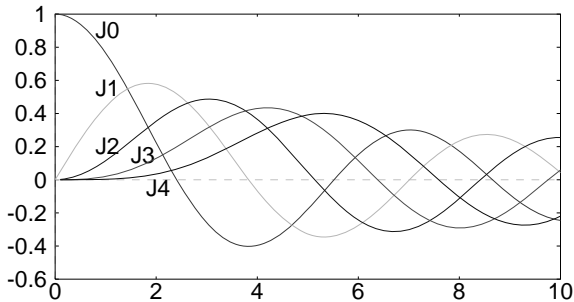
■ 三項漸化式

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

■ 微分漸化式

$$\frac{dJ_n}{dx} = \frac{n}{x} J_n + \frac{1}{2} J_{n-1}, \quad \frac{dJ_0}{dx} = -J_1$$

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

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

■ 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 $J_{n+1} = \left(\frac{2n}{x}\right) J_n - J_{n-1}$
- 3. それ以外
 - 漸化式による逆行計算法

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 ε
 - 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

$$J_k = \frac{j_k}{\sqrt{C}}, \quad C \equiv (j_0)^2 + 2 \sum_{n=1}^N (j_n)^2$$

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 $\frac{dJ_n}{dx} = \left(\frac{n}{x}\right)J_n + \left(\frac{1}{2}\right)J_{n-1}$
($|x| > 0.1$): 微分漸化式
 - 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 (ρ, θ) による偏微分を求めよ
 - 問2: チェビシエフ多項式 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 $H_n(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k (2k-1)!! \binom{n}{2k} x^{n-2k}$

■ 性質

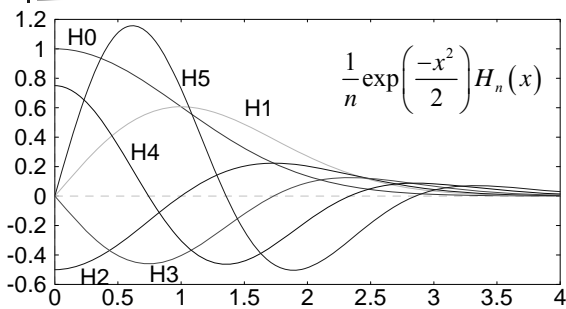
■ 1. 対称性

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

■ 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 $H_{n+1} = xH_n - nH_{n-1}, \quad H'_{n+1} = (n+1)H_n$

■ 具体的表現(低次の場合)

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = x$$

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

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

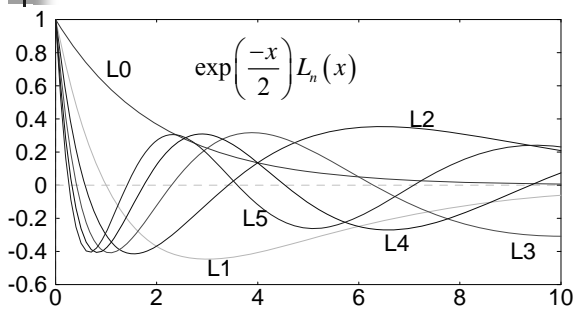
$$H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3$$

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

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

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

- sn, cn, dn: ヤコビ(Jacobi)の楕円関数
 - 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 $u = \int_0^x \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}} \equiv \text{sn}^{-1}x$ による定義

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

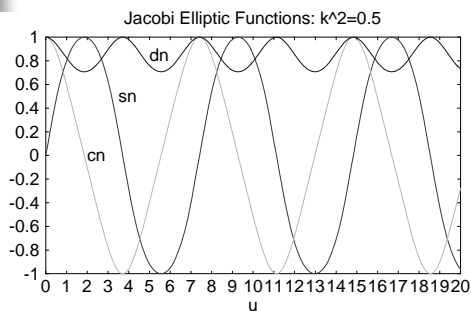
- 引数(argument) u、母数(modulus) k
- 普通は母数を省略して表記

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

$$k' = k_c \equiv \sqrt{1-k^2}, \quad m' = m_c \equiv 1-m = k_c^2$$
- 母数を陽に表記するときは表現法に注意
 $\text{sn}(u|m) \equiv \text{sn}(u;k)$, etc.

楕円関数のグラフ



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, $\text{dn}(u;k) = \Delta(\phi)$
- 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 $\text{pq}(u;k) \equiv \frac{\text{pr}(u;k)}{\text{qr}(u;k)}$
 - 例
$$\text{nd}(u;k) = \frac{1}{\text{dn}(u;k)}, \text{sd}(u;k) = \frac{\text{sn}(u;k)}{\text{dn}(u;k)}, \text{cs}(u;k) = \frac{\text{cn}(u;k)}{\text{sn}(u;k)}$$

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 $(\operatorname{sn} u, \operatorname{cn} u, \operatorname{dn} u) = \left(\frac{1}{\sqrt{1+k}}, \sqrt{\frac{k}{1+k}}, \sqrt{k} \right)$
 - $u=K(k)/2$
 - $K(k)$ は第1種完全楕円積分

振幅(amplitude)関数

- 表記 $\varphi = \operatorname{am}(u; k)$ 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

$$u = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} \equiv \operatorname{am}^{-1} \varphi$$
- 楕円関数の三角関数的表現

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

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

- $k > 1$ を $k < 1$ に

$$k \rightarrow k^{-1}, \quad \text{cn}(u; k) = \text{dn}(ku; k^{-1})$$

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

母数の虚数変換

■ 虚数変換

- 純虚数の k を
実数の k に

$$k \rightarrow \tilde{k} \equiv \sqrt{\frac{-k^2}{1-k^2}}, \quad \text{sn}(u; k) = \frac{\sqrt{1-\tilde{k}^2} \text{sn}(\tilde{u}; \tilde{k})}{\text{dn}(\tilde{u}; \tilde{k})}$$

$$u \rightarrow \tilde{u} \equiv \sqrt{1-k^2}u, \quad \text{dn}(u; k) = \frac{1}{\text{dn}(\tilde{u}; \tilde{k})}$$

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

(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)

$$k \rightarrow \bar{k} \equiv \frac{2\sqrt{k}}{1+k}, \quad \text{sn}(u; k) = \frac{1 - (1 + \sqrt{1 - \bar{k}^2}) \text{sn}^2(\bar{u}; \bar{k})}{\text{dn}(\bar{u}; \bar{k})}$$

$$u \rightarrow \bar{u} \equiv \frac{u}{1 + \sqrt{1 - \bar{k}^2}}, \quad \text{dn}(u; k) = \frac{1 - (1 - \sqrt{1 - \bar{k}^2}) \text{sn}^2(\bar{u}; \bar{k})}{\text{dn}(\bar{u}; \bar{k})}$$

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

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

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

- $1/2 < k^2 < 1$ 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

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

$$s = \sin v, c = \cos v, v \equiv \frac{\pi u}{2K(k)}, \quad \beta \equiv \frac{2\sqrt[4]{q}}{\sqrt{k}} = \frac{1+2(q+q^4+q^9+\dots)}{1+q^2+q^6+q^{12}+\dots}$$

- $y(q)$: 正規化された4つの楕円テータ関数
- 問: β 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: チェビシエフ多項式と、その変形

- 漸化式の活用 $T_n \equiv \cos(nv), U_n \equiv \frac{\sin nv}{\sin v}, S_n \equiv \frac{T_n}{\cos v}$

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

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

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

$$\operatorname{dn}(u; k) = \frac{\pi}{2K(k)} + \frac{2\pi}{K(k)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^n}{1+q^{2n}} \cos 2nv,$$

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 $\phi_{n+1} = 2 \tan^{-1} \left[\tanh \left(\frac{u_n}{2} \right) \right]$
 - ϕ_n から出発し、 k_j を用いて逆変換で ϕ_0 まで戻す

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

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

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

- 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

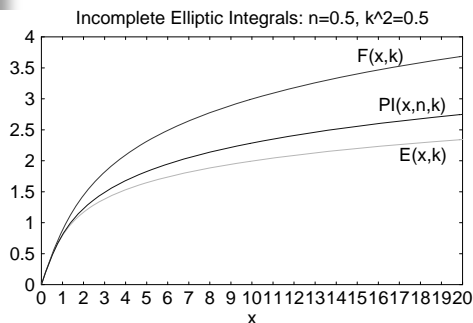
- 第1種 $F(x; k) = \int_0^x \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}}$

- 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

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

不完全楕円積分(2)



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)

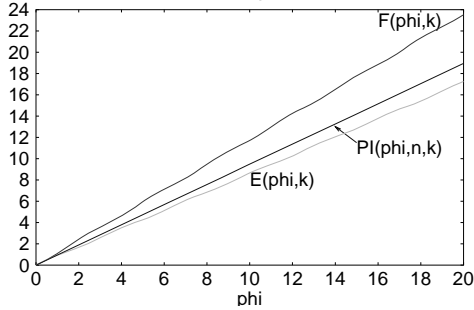
- 第1種 $F(\varphi; k) = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta}}$

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

不完全楕円積分(4)

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

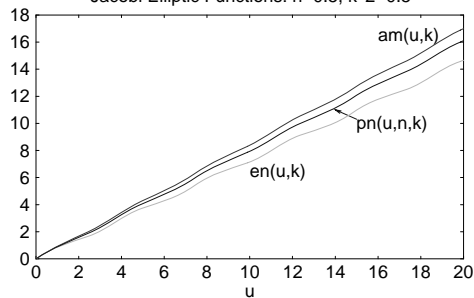


不完全楕円積分(5)

- 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en,pnを導入
- 第1種 $F(u,k) = u$
- 第2種 $E(u,k) = \int_0^u \text{cn}^2(v;k) dv = \text{en}(u,k)$
- 第3種 $\Pi(u;n,k) \equiv \int_0^u \frac{dv}{1+n\text{sn}^2(v;k)} = \text{pn}(u;n,k)$

不完全楕円積分(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

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

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

不完全楕円積分(8)

- 特殊な場合

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

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

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

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

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

$$\frac{\partial \text{sn}(u; k)}{\partial u} = \text{cn} u \text{dn} u, \quad \frac{\partial \text{am}(u; k)}{\partial u} = \text{dn} u$$

$$\frac{\partial \text{cn}(u; k)}{\partial u} = -\text{sn} u \text{dn} u, \quad \frac{\partial \text{en}(u; k)}{\partial u} = \text{cn}^2 u$$

$$\frac{\partial \text{dn}(u; k)}{\partial u} = -k^2 \text{sn} u \text{cn} u, \quad \frac{\partial \text{pn}(u; n, k)}{\partial u} = \frac{1}{1 + \text{nsn}^2(u; k)}$$

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)

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

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

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

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)

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

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

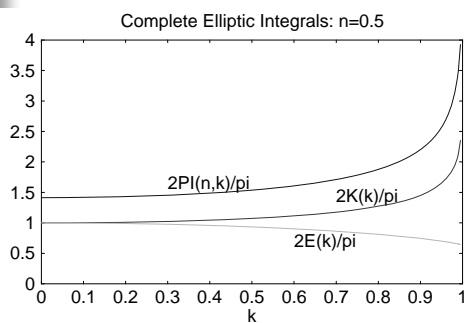
$$K'(k) \equiv K(k'), E'(k) \equiv E(k'), \quad k' \equiv \sqrt{1-k^2}$$

- 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



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

$$q \approx \frac{m}{16}, \quad k' \approx 1 - \frac{m}{2}, \quad K \approx \frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{m}{2} \right), \quad E \approx \frac{\pi}{2}, \quad \nu \approx \left(1 - \frac{m}{2} \right) u$$

$$\operatorname{sn} u = \left(1 + \frac{m}{4} \cos^2 u \right) \sin \nu, \quad \operatorname{cn} u = \left(1 - \frac{m}{4} \sin^2 u \right) \cos \nu$$

$$\operatorname{dn} u = 1 - \frac{m}{2} \sin^2 u, \quad \operatorname{znu} \approx \frac{m}{4} \sin 2u, \quad \operatorname{enu} = \left(1 + \frac{m}{2} \right) u + \operatorname{znu}$$

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
 $(x_n, f_n) \quad (n=0,1,\dots), \quad f(x_n) = f_n \quad (n=0,1,\dots)$
- 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 $x_0 \quad f_0$
- 前提: 等間隔標本点 $x_1 \quad f_1 \quad \nabla f_1$
 - 常微分方程式の数値積分(多段法) $x_2 \quad f_2 \quad \nabla f_2 \quad \nabla^2 f_2$
 - $x_3 \quad f_3 \quad \nabla f_3 \quad \nabla^2 f_3 \quad \nabla^3 f_3$
- 桁落ちに注意 $\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots$
 - 丸め誤差は階数の累乗で増幅される
- 更新アルゴリズム
 $f_{jk} \equiv \nabla^k f_j, \quad f_{n,0} := f_n; \text{do}(k=1, n) \{ f_{n,k} = f_{n,k-1} - f_{n-1,k-1} \}$

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 Δ

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

- 除算

- 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)

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

- 2. ルジャンドル陪多項式の差分

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

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

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

差分商

- ニュートンの差分商(Divided Difference)

- 定義

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

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

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

- 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

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

差分商の計算

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

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

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

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

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

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

■ 更新アルゴリズム (桁落ちに注意)

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

差分商の計算(2)

■ 同一点を含む場合

$$y_0 = x_0 \quad F_{00} = f_0$$

$$y_1 = x_0 \quad F_{10} = f_0 \quad F_{11}$$

$$y_2 = x_1 \quad F_{20} = f_1 \quad F_{21} \quad F_{22}$$

$$y_3 = x_1 \quad F_{30} = f_1 \quad F_{32} \quad F_{31} \quad F_{33}$$

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

■ 更新アルゴリズム

- 逆引き配列 $j(n)$ を用意

- 上記の場合

$$y_n := x_{j(n)}; F_{n,n} := f_{j(n)}; \text{do}(k=n-1, 0, -1) \{$$

$$j(0) = 0, j(1) = 0, \quad \text{if}(j(n) = j(k)) \text{ then } \{ F_{n,k} := f_{j(n)}^{(n-k)} / (n-k)! \}$$

$$j(2) = 1, j(3) = 1,$$

...

$$\text{else } \{ F_{n,k} := (F_{n,k+1} - F_{n-1,k}) / (y_n - y_k) \} \}$$

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 $L_n(x_k) \equiv \delta_{nk}$, $L_n(x) \equiv \prod_{k \neq n} \frac{x - x_k}{x_n - x_k}$
- ラグランジュ補間の欠点
 - 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 $P_N(x) \equiv f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + f[x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) + \dots + f[x_0, \dots, x_n] \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k) + \dots$

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 $x_0 \quad f_0 = T_{00}$

$T_{n,0} = f_n,$	$x_1 \quad f_1 = T_{10} \quad T_{11}$
$T_{n,k} = T_{n,k-1} + \frac{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-1}}{\frac{x - x_{n-k}}{x - x_n} - 1},$	$x_2 \quad f_2 = T_{20} \quad T_{21} \quad T_{22}$
	$x_3 \quad f_3 = T_{30} \quad T_{31} \quad T_{32} \quad T_{33}$
	$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots$

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
$$\ell_{ik}(x) \equiv \frac{(x-x_i)^k}{k!} \sum_{j=0, j \neq i}^m \left(\frac{x-x_i}{x_i-x_j} \right)^{n_j}$$
 - 定義漸化式
$$L_{i, n_i-1}(x) = \ell_{i, n_i-1}(x), L_{ik}(x) = \ell_{ik}(x) - \sum_{j=k+1}^{n_i-1} \ell_{ik}^{(j)}(x) L_{ij}(x)$$

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

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

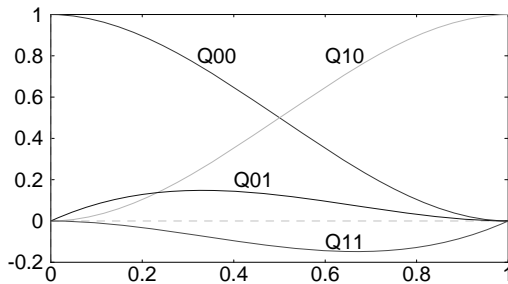
- 標準変数 $\xi \equiv (x - x_0)/(x_1 - x_0)$ $0 \leq \xi \leq 1$
- 基底多項式(問:示せ)

$$Q_0^0(\xi) \equiv (1 - \xi)^2(2\xi + 1), \quad Q_1^0(\xi) \equiv (1 - \xi)^2\xi$$

$$Q_0^1(\xi) \equiv \xi^2(3 - 2\xi), \quad Q_1^1(\xi) \equiv \xi^2(\xi - 1)$$

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

$$\sum_{i=0}^n w_i \psi_j(x_i) \psi_k(x_i) = \lambda_k \delta_{jk}, \quad \psi_{n+1}(x_k) = 0$$

- 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 λ_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 λ_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)

$$\frac{2}{n} \sum_{i=1}^n T_j(x_i^{(n)}) T_k(x_i^{(n)}) = \varepsilon_k \delta_{jk}, \quad x_k^{(n)} \equiv \cos \left[\frac{(2k-1)\pi}{2n} \right]$$

■ 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 → 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
$$2f'_0 + f'_1 = \frac{3}{h}(f_1 - f_0), \quad f'_{N-1} + 2f'_N = \frac{3}{h}(f_N - f_{N-1})$$
 - 境界部分: Pスプライン
$$f'_0 + f'_1 = \frac{2}{h}(f_1 - f_0), \quad f'_{N-1} + f'_N = \frac{2}{h}(f_N - f_{N-1})$$

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 $T_1 \equiv T(h_1) = T^{(0)} + T^{(p)}h_1^p + \dots$
結果を2つ用意 $T_2 \equiv T(h_2) = T^{(0)} + T^{(p)}h_2^p + \dots$
 - 2. 主要誤差項を消去
 - 3. 反復 $T^{(0)} = \frac{T_2h_1^p - T_1h_2^p}{h_1^p - h_2^p} + \dots = T_2 + \frac{T_2 - T_1}{(h_1/h_2)^p - 1} + \dots$

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 $1, 2, 4, 8, \dots, 2^n, \dots$
 - プリシュ列 $1, 2, 3, 4, 6, \dots, 2^n, 3 \times 2^{n-1}, \dots$
 - 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 $T(h) = T^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} T^{(k)} h^{2k}$
- ロンバーグ列、多項式補間アルゴリズム
 - 更新公式 $T_{n,k} = T_{n,k-1} + \frac{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-1}}{4^k - 1}$
 - 数値積分で有用
- 調和列、多項式補間アルゴリズム
 - 更新公式 $T_{n,k} = T_{n,k-1} + \frac{T_{n,k-1} - T_{n-1,k-1}}{\left(\frac{n}{n-k}\right)^2 - 1}$
 - 常微分方程式の数値解法で有用

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_∞ : 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)

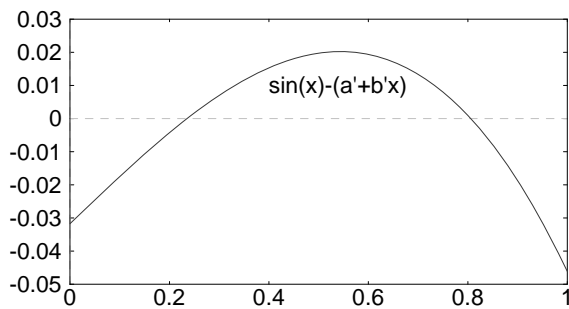
- 例: $g(x)=\sin(x)$ を $[0,1]$ で1次関数近似
 - 重み=1, 近似関数 $f(x)=a'+b'x$

- 正規方程式

$$\begin{pmatrix} A_0 & A_1 \\ A_1 & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_0 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad A_k = \int_0^1 x^k dx, B_k = \int_0^1 x^k \sin x dx$$

- 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2乗近似(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 2π)を最小2乗近似
- 近似区間: $[0, 2\pi)$

$$\min_p \int_0^{2\pi} [\varepsilon(\theta; p)]^2 d\theta, \quad \varepsilon(\theta; p) \equiv g(\theta) - f(\theta; p)$$

- 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)

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

$$\int_0^{2\pi} \sin j\theta \cos k\theta d\theta = 0, \quad \varepsilon_0 \equiv 2, \quad \varepsilon_k \equiv 1 \quad (k \neq 0)$$

- フーリエ級数の最小2乗近似係数(問: 示せ)

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

離散フーリエ展開

- 周期関数 g (周期 2π)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 $\theta_j^{(n)} = \frac{j\pi}{n}$
- 積分→台形則による離散和

$$\min_p \sum_{j=0}^{2n} [\varepsilon(\theta_j^{(n)}; p)]^2, \quad \sum_{j=0}^N A_j \equiv \frac{A_0 + A_N}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} A_j$$

離散フーリエ展開(2)

- 三角多項式の選点直交性(問: 示せ)

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

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

- 離散フーリエ展開係数(問: 示せ)

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

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

$$\min_p \left[\max | \varepsilon(x; p) | \right], \quad \varepsilon(x; p) \equiv g(x) - f(x; p)$$

- 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

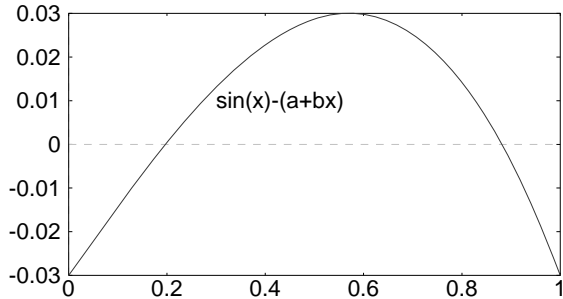
- B: 両端で同じ(負)値 $\varepsilon(1) = \varepsilon(0) = -a < 0$

- 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)



チェビシェフ展開

- フーリエ展開で変数変換 $x = \cos \theta$
- 近似区間: $[-1, 1]$
- 近似関数 $f(x, c) = \frac{c_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} c_k T_k(x)$
 - チェビシェフ級数
- チェビシェフ展開係数(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 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
 - 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

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

$$A'_{jk} = A_{jk} - \left(\frac{A_{j1}}{A_{11}} \right) A_{1k}, \quad \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ 0 & A'_{22} & \cdots & A'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & A'_{n1} & \cdots & A'_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{pmatrix}$$

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

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を保存しておくが便利
- 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 $A = \mathbf{LDV}$ $L_{kk} = V_{kk} = 1, D_{jk} = 0 (j \neq k)$
- 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 $A = QR$

- Q: 直交行列、R: 右上三角行列
- 連立方程式の解 $QRx = b \rightarrow c = Q^T b \rightarrow Rx = c$
- 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 $A_n = Q_n R_n \rightarrow A_{n+1} = R_n Q_n$
- 次第に対角化

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: A, Bを具体的に示せ $A_{k+1} \mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{b}_{k+1} \equiv B_k \mathbf{u}_k$

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

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

do(k=2,n) { $c_{k-1} = 1.0/A_{k-1,k-1}$; $d = A_{k,k-1} * c_{k-1}$;

$A_{k,k} = d * A_{k-1,k}$; $b_k = d * b_{k-1}$ }

$x_n = b_n / A_{n,n}$; do(k=n-1,1,-1) { $x_k = c_k * (b_k - x_{k+1} * A_{k,k+1})$ }

コレスキー(Cholesky)法

■ 対称行列のとき $A^T = A \rightarrow A = S^T S$

- 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 $S^T y = b$
2. 後退代入: 第1段
3. 後退代入: 第2段 $Sx = y$

- 同じAを繰り返し使うとき→Sを保存

コレスキー分解

- 分解条件 $S^T S = A \rightarrow \sum_{i=1}^n S_{ij} S_{ik} = A_{jk}$
- アルゴリズム

$$S_{11} = \sqrt{A_{11}}, \quad S_{kk} = \sqrt{A_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} S_{jk}^2}$$

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

- 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^T分解

■ **A**が対称→LDV分解で**V=L^T** (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^T分解

$$\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b} \rightarrow \mathbf{z} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{L}^T\mathbf{x} = \mathbf{z}$$

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

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \sigma(x, y), \quad u_{j+1,k} + u_{j-1,k} + u_{j,k+1} + u_{j,k-1} - 4u_{j,k} = h^2 \sigma_{j,k}$$

- 連立方程式の形に書くと係数行列は対角優位
- 問: **A, U**などを具体的に示せ $\mathbf{AU} = h^2 \Sigma$

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

$$x_j^{(k+1)} = \frac{1}{A_{jj}} \left(b_j - \sum_{i=1, i \neq j}^n A_{ji} x_i^{(k)} \right)$$
- **A**が対角優位 → 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 $\mathbf{N} = (\mathbf{D} + \mathbf{E})^{-1}, \mathbf{M} = -\mathbf{N}\mathbf{F},$
- 反復公式

$$x_j^{(k+1)} = \frac{1}{A_{jj}} \left(b_j - \sum_{i=1}^{j-1} A_{ji} x_i^{(k+1)} - \sum_{i=j+1}^n A_{ji} x_i^{(k)} \right)$$
- **A**が対角優位 or **A**と**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 (ω : 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
- ω 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 $\min_{\mathbf{x}} \Phi, \quad \Phi \equiv |\mathbf{r}|^2$
- 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) $\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{F}(\{\mathbf{r}^{(j)}\}, \{\mathbf{p}^{(j)}\}, \{\Phi_j\})$
- 直線上の最小探索 $\min_{\alpha} \Phi \rightarrow \alpha_k = \frac{\mathbf{p}^{(k)} \cdot \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{p}^{(k)} \cdot \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k)}}$
- 解表現 (問: 示せ)

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} の固有値が違く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)

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

- 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⇒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
 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \rightarrow \mathbf{B}\mathbf{y} = \mathbf{c}, \quad \mathbf{c} \equiv \mathbf{C}^{-1}\mathbf{b}, \quad \mathbf{B} \equiv \mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{C}^T)^{-1}, \quad \mathbf{y} \equiv \mathbf{C}^T\mathbf{x}$
- 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→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^T分解
- LDL^T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

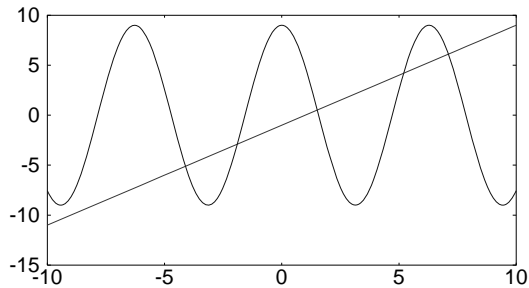
- 重要: 見かけに惑わされない
- 実は単純な例
$$3 \sin x + \cos 2x + 1 = 0$$
 - 変数変換で簡易化 $s \equiv \sin x$
 - 問: 解け(落とし穴に注意)
- 真に難しい例
$$x - 1 = \sin x$$

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
 - 解の困り込み: 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

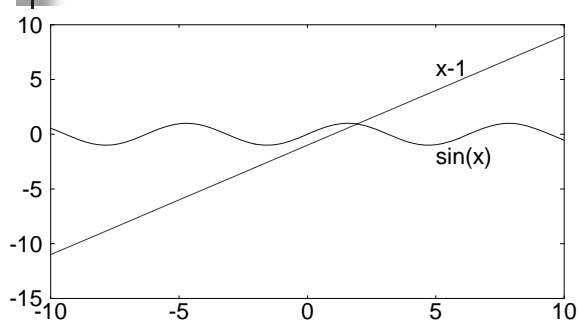
- 例: $x-1=9\cos(x)$



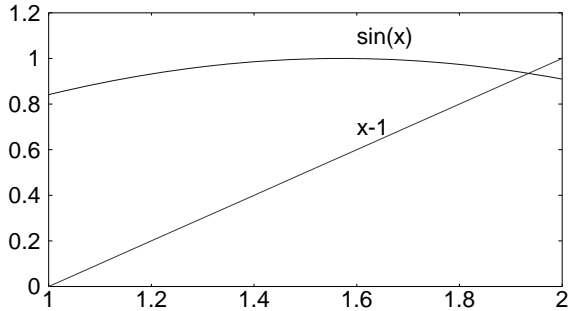
グラフによる近似解法

- 適当なグラフ・ソフトを用意
 - お勧め: GNUPLOT
- 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 $x-1 = \sin x$

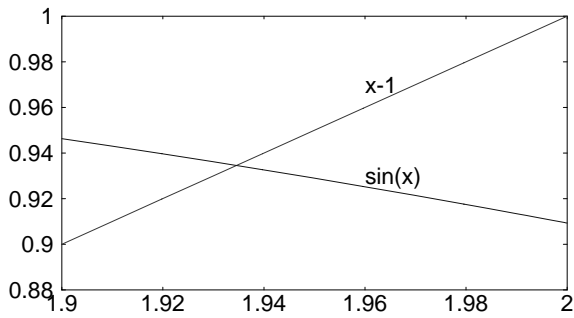
グラフ解法の例



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
- セカント法とミューラー法
- 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 $x_{n+1} = a^{-1}[b + \varepsilon(x_n)]$
- 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
- 実用的: ニュートン法 $x = \frac{2c}{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}$

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 $|\Delta x| = |x|\sqrt{\varepsilon}$
 - 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 ÷ 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 $x_M := 0.5*(x_L + x_R); f_M := f(x_M)$
 - 2) 収束判定 収束判定
 - 3) 囲い込み更新 $\text{if } (f_L * f_M < 0)$
- 1次収束 $\text{then } \{x_R := x_M; f_R := f_M\}$
 $|x_{n+1} - x| \sim |x_n - x|/2, \text{ else } \{x_L := x_M; f_L := f_M\}$

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

逆補間(regula falsi)

- 2分法の変形: 確実に収束 $x_N = \frac{x_L f_R - x_R f_L}{f_R - f_L}$
- 反復公式: 1次補間式を解く
 - 問: 求めよ $x_N := (x_L * f_R - x_R * f_L) / (f_R - f_L)$
- アルゴリズム $f_N := f(x_N)$
 - 2分法とほぼ同様 収束判定
- 1次収束(問: 示せ) $\text{if } (f_L * f_N < 0)$
 $x_N - x = \left(\frac{f''}{2f'}\right)(x_L - x)(x_R - x), \text{ then } \{x_R := x_N; f_R := f_N\}$
 $\text{else } \{x_L := x_N; f_L := f_N\}$

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

- 微小項 ε_n を無視

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

- 加速後は超1次収束

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

- 問: 示せ

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: 囲い込みの確認を放棄

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

- 次数 ~ 1.618 $f_{n+1} := f(x_{n+1})$

$$x_{n+1} - x = \left(\frac{f''}{2f'} \right) (x_n - x)(x_{n-1} - x), \quad \begin{array}{l} \text{収束判定} \\ n++ \end{array}$$

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 ε_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~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
 - アルゴリズム
 - 2次収束(問: 示せ)
- $$x_{n+1} = x_n - \frac{f_n}{f'_n}$$
- $$x_{n+1} := x_n - f_n/f'_n$$
- $$f_{n+1} := f(x_{n+1}); f'_{n+1} := f'(x_{n+1})$$
- $$x_{n+1} - x \approx \left(\frac{f''_n}{2f'_n}\right)(x_n - x)^2, \quad \text{収束判定}$$
- 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

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

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 $x_0 = \min \left(\frac{1}{2} + \frac{a}{2}, \frac{3}{4} + \frac{a}{3}, 1 + \frac{a}{4} \right)$
 - 部分集合 $(1, 3/2, 2)$
 - 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 が求まれば平方根自体は $a*y$ 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 $X_{n+1} = 2X_n - X_nAX_n$
 - 問: 行列Aが対角優位のととき、対角成分Dの逆行列から出発して、ニュートン法で逆行列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 ε_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) $0 = g(x) \equiv \frac{f(x)}{f'(x)}$
 - 桁落ちに注意
 - 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

$$p(x) = q(x)(x^2 - rx - s) + Ax + B = 0, \quad q(x) \equiv \sum_{k=0}^{n-2} b_k x^{n-2-k}$$

- 未知数: 2次式 $x^2 - rx - s$ の2係数 (r, s)

- 方程式

- $A=B=0$

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

- ニュートン法

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)

$$\begin{aligned} b_{1,r} &= b_0; b_{2,r} = b_1 r + b_2 & b_{2,q} &= b_0; b_{3,q} = b_{2,q} r + b_1 \\ b_{k,r} &= b_{k-2,q} q + b_{k-1,r} r + b_{k-1} \quad (k = 3, \dots, n-2) & b_{k,q} &= b_{k-2,q} q + b_{k-1,q} r + b_{k-2} \quad (k = 4, \dots, n-2) \\ \frac{\partial A}{\partial r} &= b_{n-3,q} q + b_{n-2,r} r + b_{n-2} & \frac{\partial B}{\partial r} &= b_{n-2,r} q & \frac{\partial A}{\partial q} &= b_{n-3,q} q + b_{n-2,q} r + b_{n-3} & \frac{\partial B}{\partial q} &= b_{n-2,q} q + b_{n-2} \end{aligned}$$

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)

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

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

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

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

デュラン・ケルナー (Durand-Kerner)法

- 高次代数方程式 $f(z) = \sum_{k=0}^N a_k z^k = a_N \prod_{j=1}^N (z - z_j)$
 - 全根を一斉に求める

- 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: 囲い込みの困難

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 $\lambda = m(\Delta\lambda)$ ($m=1, 2, \dots$)
- 初期値発見の困難

連続変形法

- 仮定1: 方程式の分解 $f(x) \equiv g(x) + h(x) = 0$
- 仮定2: 基本方程式の解が既知 $g(y) = 0 \rightarrow y$
- 方程式を少しずつ変形して解を逐次求める
 $f(\lambda; z) \equiv g(z) + \lambda h(z) = 0, \quad \lambda = 0 \rightarrow 1; \quad z = y \rightarrow x$
- 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 $K_n \Delta x_n = -f_n$
 - K: ヤコビ行列の近似行列
 - セカント条件 $K_{n+1} \Delta x_n = \Delta f_n, \quad \Delta f_n \equiv f(x_{n+1}) - f(x_n)$
 - 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
$$K_{n+1} = K_n + \frac{(\Delta f_n - K_n \Delta x_n) \otimes \Delta x_n}{|\Delta x_n|^2}$$
 - 初期値: 何も情報がなければ単位行列 $K_0 = 1$

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 $\Delta x_n = -L_n f_n$
- 逆行列版ブロイデン更新公式
$$L_{n+1} = L_n + \frac{[(\Delta x_n - L_n \Delta f_n) \otimes \Delta x_n] L_n}{\Delta x_n \cdot (L_n \Delta f_n)}$$
 - 初期値: 何も情報がなければ単位行列 $L_0 = 1$

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→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→(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)
$$(x_L, x_M, x_R): x_L < x_M < x_R, [F(x_L) - F(x_M)][F(x_R) - F(x_M)] < 0$$

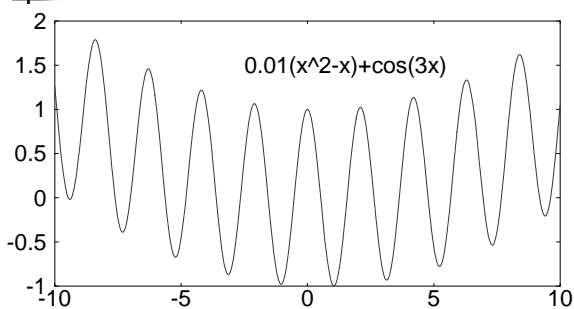
1次元最適化問題(2)

- 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
 - 解の困り込み: 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?

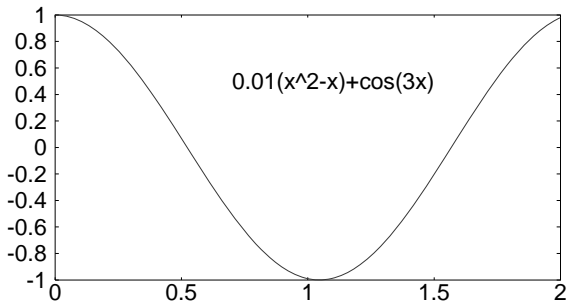
グラフによる解の探索

- 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: $\min [0.01(x^2 - x) + \cos 3x]$

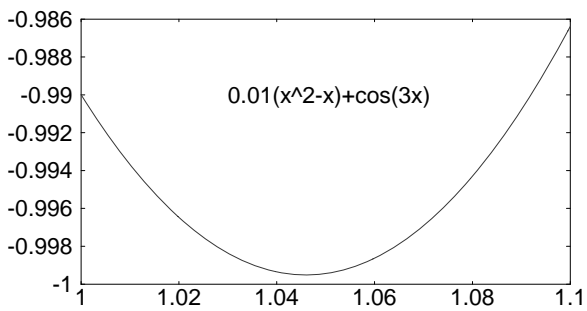
グラフ探索の例



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 $x_M := 0.5 * (x_L + x_R); F_M := F(x_M)$
 - 1) 中点で評価 収束判定
 - 2) 収束判定 $\text{if } (F_L < F_M \text{ or } F_L < F_R)$
 - 3) 凸三つ組更新 $\text{then } \{x_R := x_M, F_R := F_M\}$
 - 1次収束 $\text{else } \{x_L := x_M, F_L := F_M\}$
- $|x_{n+1} - x| \sim |x_n - x|/2,$

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_L }
  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

$r \equiv (\sqrt{5}-1)/2 \approx 0.61803\dots$, $x_M := (1.0-r)*x_n + r*x_{n-1}$; $F_M := F(x_M)$

収束判定
 ■ アルゴリズム if ($F_M < F_n$)
 then { $x_{n+1} := x_M$; $F_{n+1} := F_M$ }

■ 1次収束 (問: 示せ) else { $x_{n+1} := x_n$; $F_{n+1} := F_n$; $x_n := x_M$; $F_n := F_M$ }

$|x_{n+1} - x_n| \leq (1-r)|x_n - x_{n-1}|$

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
- \mathbf{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 \mathbf{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): μ
- 最適条件
$$(\text{opt} F(\mathbf{x}), H_j(\mathbf{x}) = 0) \rightarrow \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = 0, \frac{\partial L}{\partial \mu_j} = 0 \right)$$
- 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
$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = 0, \frac{\partial L}{\partial \lambda_k} = 0, \frac{\partial L}{\partial \mu_j} = 0, \lambda_k \geq 0, \lambda_k G_k(\mathbf{x}) = 0$$
- 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: $w \leftarrow$ データの誤差 $w_m = \frac{1}{\sigma_m^2}$
 - このとき「カイ2乗和」

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 $g(t; c) = \sum_k c_k \psi_k(t)$
 - $g =$ 基底関数の線形和
- 基底関数: 座標1次元の例
 - 多項式 $g(t; c) = \sum_{k=0}^n c_k t^k$
 - フーリエ級数 $g(t; s, c) = \sum_{k=0}^n (s_k \sin \omega_k t + c_k \cos \omega_k t)$

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 \rightarrow 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 \rightarrow 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 $g(t; c) = \sum_{k=0}^n c_k X_k(t)$
 - チェビシエフ多項式: $|t| < 1$
 - 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

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 $\mathbf{Ac} \cong \mathbf{g} \quad A_{kj} = \psi_j(t_k)$

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

$$\mathbf{Bc} = \mathbf{b}, \quad B_{kj} = \sum_{m=1}^M w_m \psi_j(t_m) \psi_k(t_m), \quad B_{kj} = B_{jk}$$

- \mathbf{B} はN行N列正方実対称行列 $b_k = \sum_{m=1}^M w_m \psi_k(t_m) g_m$
 - 標準解法: コレスキー法

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 $\sigma = \sqrt{2F_{\min} / W}$
 - 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 $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T \quad \mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{1}$
 - \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
$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{V}\mathbf{S}^+ \mathbf{U}^T, \quad S_{kk}^+ = \begin{cases} 1/S_{kk} & (S_{kk} \neq 0) \\ 0 & (S_{kk} = 0) \end{cases}$$
 - 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)
$$\hat{c} = \frac{G}{W}, \quad W = \sum_{m=1}^M w_m, \quad G = \sum_{m=1}^M w_m g_m$$
 - 標準偏差の計算(データ数は十分大と仮定)
$$\sigma \cong \sqrt{\frac{2F_{\min}}{W}}, \quad 2F_{\min} = G_2 - \frac{G^2}{W}, \quad G_2 = \sum_{m=1}^M w_m g_m^2$$

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

$$\begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & B_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix}, \quad B_k = \sum_{m=1}^M w_m t_m^k, \quad b_k = \sum_{m=1}^M w_m g_m t_m^k$$

■ 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

$$\begin{pmatrix} B_0 & B_x & B_y \\ B_x & B_{xx} & B_{xy} \\ B_y & B_{xy} & B_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_x \\ c_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_x \\ b_y \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} B_0 &= \sum_{m=1}^M w_m, B_x = \sum_{m=1}^M w_m x_m, B_y = \sum_{m=1}^M w_m y_m, \\ B_{xx} &= \sum_{m=1}^M w_m x_m^2, B_{xy} = \sum_{m=1}^M w_m x_m y_m, B_{yy} = \sum_{m=1}^M w_m y_m^2, \\ b_0 &= \sum_{m=1}^M w_m g_m, b_x = \sum_{m=1}^M w_m g_m x_m, b_y = \sum_{m=1}^M w_m g_m y_m \end{aligned}$$

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(3σ)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 → cやσ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

$$\begin{pmatrix} B_{SS} & B_{SC} \\ B_{SC} & B_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_S \\ b_C \end{pmatrix}, \quad B_{SS} = \sum_{m=1}^M w_m \sin^2 \omega t_m, B_{CC} = \sum_{m=1}^M w_m \cos^2 \omega t_m, \\ B_{SC} = \sum_{m=1}^M w_m \sin \omega t_m \cos \omega t_m,$$

■ 注意

$$B_{SS} + B_{CC} = W \equiv \sum_{m=1}^M w_m, \quad b_S = \sum_{m=1}^M w_m g_m \sin \omega t_m, b_C = \sum_{m=1}^M w_m g_m \cos \omega t_m$$

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 ω 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

$$P(p) = 2\Delta F \equiv 2[F(c_k = \hat{c}_k) - F(c_k = 0)]$$

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

$$B_0 = \sum_{m=1}^M w_m, B_k = \sum_{m=1}^M w_m \exp(-k\lambda t_m),$$

$$\begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & B_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix}, \quad b_0 = \sum_{m=1}^M w_m g_m, b_1 = \sum_{m=1}^M w_m g_m \exp(-\lambda t_m)$$

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

$$B_{SS} = \sum_{m=1}^M w_m \exp(-2\lambda t_m) \sin^2 \omega t_m,$$

$$\begin{pmatrix} B_{SS} & B_{SC} \\ B_{SC} & B_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_S \\ b_C \end{pmatrix}, \quad B_{CC} = \sum_{m=1}^M w_m \exp(-2\lambda t_m) \cos^2 \omega t_m,$$

$$B_{SC} = \sum_{m=1}^M w_m \exp(-2\lambda t_m) \sin \omega t_m \cos \omega t_m,$$

- 問: 1次項A+Btを加えた

ときの正規方程式を
求めよ

$$b_S = \sum_{m=1}^M w_m g_m \exp(-\lambda t_m) \sin \omega t_m,$$

$$b_C = \sum_{m=1}^M w_m g_m \exp(-\lambda t_m) \cos \omega t_m$$

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

$$F = F(c, p), \quad g(t; \bar{c}, p) = \bar{c} \cdot \bar{\psi}(t; p)$$
$$g(t; a, b, s, c, \omega) = a + bt + \sum_{k=0}^n (s_k \sin \omega_k t + c_k \cos \omega_k t)$$

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 $\hat{c} = \hat{c}(p)$
 - 同一視: Fはpだけの関数
- 結論: 狭義の非線形最小2乗法に帰着

$$\hat{F}(p) \equiv F(\hat{c}(p), p)$$

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 $\frac{\partial^2 \hat{F}}{\partial p_l \partial p_m} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial p_l \partial p_m} \right)_{c=\hat{c}} + 2 \sum_i \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial p_m} \right)_{c=\hat{c}} \left(\frac{\partial \hat{c}_i}{\partial p_l} \right) + \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_i \partial c_j} \right)_{c=\hat{c}} \left(\frac{\partial \hat{c}_i}{\partial p_l} \right) \left(\frac{\partial \hat{c}_j}{\partial p_m} \right)$
- 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

$$\mathbf{B} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial p} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial p} \end{pmatrix} \mathbf{c}, \quad \frac{\partial B_{kj}}{\partial p_i} = 2 \sum_{m=1}^M w_m \frac{\partial \psi_j}{\partial p_i}(t_m; p) \psi_k(t_m; p)$$

- 問: 特異値分解が必要な $\frac{\partial b_k}{\partial p_j} = \sum_{m=1}^M w_m \frac{\partial \psi_k}{\partial p_j}(t_m; p) g_m$ 場合の手法を導け

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 $\mathbf{d} \quad \mathbf{H}(\mathbf{p}_n) \mathbf{d}_n = -\mathbf{g}(\mathbf{p}_n)$
 - 傾斜ベクトル $\frac{\partial F}{\partial p_k} = \sum_m w_m \left(\frac{\partial g}{\partial p_k} \right)_m (g(t_m; p) - g_m)$
 - ヘッセ行列 $\frac{\partial^2 F}{\partial p_j \partial p_k} = \sum_m w_m \left[\left(\frac{\partial g}{\partial p_j} \right)_m \left(\frac{\partial g}{\partial p_k} \right)_m + \left(\frac{\partial^2 g}{\partial p_j \partial p_k} \right)_m (g(t_m) - g_m) \right]$

$$H_{jk} = \frac{\partial^2 F}{\partial p_j \partial p_k} = \sum_m w_m \left[\left(\frac{\partial g}{\partial p_j} \right)_m \left(\frac{\partial g}{\partial p_k} \right)_m + \left(\frac{\partial^2 g}{\partial p_j \partial p_k} \right)_m (g(t_m) - g_m) \right]$$

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 $H_{jk} \cong \sum_m w_m \left(\frac{\partial g}{\partial p_j} \right)_m \left(\frac{\partial g}{\partial p_k} \right)_m$
 - 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

$$H_{jk} \cong \alpha_j \delta_{jk} + \sum_m w_m \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial p_j} \\ \frac{\partial g}{\partial p_k} \end{pmatrix}_m$$

- さまざまな混合係数

- レーベンベルグ (Levenberg) 係数 $\alpha_j^L = \sum_m w_m \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial p_j} \\ \frac{\partial g}{\partial p_j} \end{pmatrix}_m$
- 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

$$\begin{aligned}
 f'_n = & f[x_n, x_{n+1}] + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}](x_n - x_{n+1}) \\
 & + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}, x_{n+2}](x_n - x_{n+1})(x_n - x_{n-1}) \\
 & + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}, x_{n+2}, x_{n-2}](x_n - x_{n+1})(x_n - x_{n-1})(x_n - x_{n-2}) \\
 & + \dots + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}, \dots, x_{n+m}]\prod_{k=1}^{m-1}(x_n - x_{n+k})(x_n - x_{n-k}) \\
 & + f[x_n, x_{n+1}, x_{n-1}, \dots, x_{n+m}, x_{n-m}]\prod_{k=1}^{m-1}(x_n - x_{n+k})(x_n - x_{n-k}) + \dots
 \end{aligned}$$

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 $\varepsilon^{n/(n+1)}$ とまり

■ 例: 1階微分の $\left| f'_n - \left(\frac{f_{n+1} - f_{n-1}}{2h} \right) \right| \approx \frac{1}{6} |f_n^{(3)}| h^2 \cong \frac{|f_n| \varepsilon}{2h} \rightarrow$
 2次中心差分 $h_{\text{opt}} = \sqrt[3]{\frac{3}{2} \frac{|f_n| \varepsilon^2}{|f_n^{(3)}|}} \approx \sqrt[3]{\frac{3}{2} \frac{|f_n| \varepsilon^2}{|f_n^{(3)}|}}$

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

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{y, \dots} \leftrightarrow \frac{f(x(1+\sqrt[3]{\varepsilon}), y, \dots) - f(x(1-\sqrt[3]{\varepsilon}), y, \dots)}{2x(\sqrt[3]{\varepsilon})}$$

- 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 $I = \sum_{m=1}^M \int_{a_{m-1}}^{a_m} f(x)w(x)dx$
- 標本点の分布
 - 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 $I_2 = \frac{h}{2}(f(a_0) + f(a_1))$
- 2点公式

- 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 $\frac{1}{w_k} = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{\lambda_j} [\psi_j(x_k)]^2$
- 問: 導け

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

$$w_k^{(N)} = \frac{2(N+1)}{(N+2) \left[P_N' \left(x_k^{(N)} \right) \right]^2}$$

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)

$$\frac{\delta}{hD} = \frac{\mu\delta}{2 \sinh^{-1}(\delta/2) \sqrt{1+\delta^2/4}}$$

$$= \mu\delta \left(1 - \frac{\delta^2}{12} + \frac{11\delta^4}{720} - \frac{191\delta^6}{60480} + \frac{2497\delta^8}{3628800} - \frac{14797\delta^{10}}{95800320} + \frac{92427157\delta^{12}}{2615348736000} - \dots \right)$$

中心補間型公式(2)

- 中心差分和分公式(問:導け)
 - 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 $\mathcal{L}^{-1}(FG)(t) = (f * g)(t) \equiv \int_0^{+\infty} f(\tau) g(t-\tau) d\tau$
- 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

$$\int_a^b f(x) dx = h \sum_{k=0}^{n-1} f(a+kh) - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{B_{2j} h^{2j}}{(2j)!} [f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)], \quad h = \frac{b-a}{n}$$

■ 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

■ 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

$$I \cong h \sum_{k=0}^{n-1} f(a+kh)$$

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

$$I = \int f(x) dx \rightarrow I = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\phi(y)) \phi'(y) dy \cong h \sum_{n=-N}^N f(\phi(nh)) \phi'(nh)$$

■ 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)

- 端点の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 $\phi(y) = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh y\right)$
 - 積分公式

$$I = \frac{\pi h}{2} \sum_{n=-N}^N f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)\right) \frac{\cosh nh}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)}$$

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 $\phi(y) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh y\right)$
 - 積分公式

$$I = \frac{\pi h}{2} \sum_{n=-N}^N f\left(\exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)\right) \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right) \cosh nh$$

- 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
 - 変数変換 $f(x) = g(x) \exp(-x)$
 - 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 $\phi(y) = \sinh\left(\frac{\pi}{2} \sinh y\right)$

- 積分公式

$$I = \frac{\pi h}{2} \sum_{n=-N}^N f\left(\sinh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)\right) \cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right) \cosh nh$$

- 問: 右の積分を求めよ $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{(\sqrt{1+x^2})^3}$

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→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

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} (1+x^2)^{-5/2} dx, \quad I_2 = \int_{-1}^{+1} (1-x^2)^{-3/2} dx,$$

$$I_3(e) = \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{\cos x}{(\sqrt{1-e \cos x})^3} dx, \quad I_4(c, n) = \int_0^{+\infty} \frac{x^n}{1+ce^x} dx$$

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 = パラメータの可変性
 - 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 $\frac{dy}{dt} = f(y, t), \quad y(t_0) = y_0$
- 高階 → 連立

$$\frac{d^n y}{dt^n} = f(y, y', \dots, t) \rightarrow \left\{ \frac{dy_n}{dt} = f(y, t), \dots, \frac{dy_k}{dt} = y_{k+1}, \dots, \frac{dy_0}{dt} = y_1 \right\}$$

$$y = (y, y', \dots, y^{(n)}) = (y_0, y_1, \dots, y_n)$$

- 特殊な2階
 - 運動方程式に類出 $\frac{d^2 x}{dt^2} = f(x, t)$

1次元線形の場合

■ 一般形 $\frac{dy}{dt} = a(t)y + b(t), \quad y(t_0) = y_0$

■ 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 $\frac{dy}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$

■ 変分方程式などで頻出

■ 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)

$$y_{n+1} = y_n + hf_n$$

■ 陽(explicit)公式

- 別名: 前進オイラー $\frac{dy}{dt} \approx \frac{\Delta y}{h}$
- 思想: 微分を1階差分商で近似
- 特性: 1段、1回、1点、1次 $|\delta y_{n+1}| \cong h^2 f'_n$
- 局所誤差: fの微分値

■ 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 $\left| \frac{\delta y_n}{y_n} \right| \cong Ch^{p+1}$
- 誤差定数C: 誤差の比例定数

差分法の特性量

- 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 $H_{MAX} \equiv h\omega$
 - = 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 $y_{n+1} = y_n + hf_{n+1}$
 - 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

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t), \quad (1 - h\mathbf{A}_{n+1})\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{b}_{n+1}$$

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 $\rightarrow H_{MAX} = \infty$
- 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 $y_{n+1} = y_n + hf_n + \frac{h^2}{2} \left(\frac{df}{dt} \right)_n + \frac{h^3}{6} \left(\frac{d^2f}{dt^2} \right)_n + \dots$
- 高階微分の計算例 $\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) f + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)$
 - 一般には非常に複雑
$$\frac{d^2f}{dt^2} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial y} \right) ff + 2 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial t} \right) f + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \left(\frac{df}{dt} \right) + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right)$$

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
$$y_{n+1/2} = y_n + \frac{h}{2} f_n, \quad t_{n+p} \equiv t_n + ph$$
$$y_{n+1} = y_n + hf_{n+1/2}, \quad f_{n+1/2} \equiv f(y_{n+1/2}, t_{n+1/2})$$
- 2次2回1点陽公式: 修正台形則 (ホイン法)
$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + hf_n,$$
$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_n + \tilde{f}_{n+1}), \quad \tilde{f}_{n+1} \equiv f(\tilde{y}_{n+1}, t_{n+1})$$

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

$$\left(1 - \frac{h}{2} \mathbf{A}_{n+1}\right) \mathbf{y}_{n+1} = \left(1 + \frac{h}{2} \mathbf{A}_n\right) \mathbf{y}_n + \frac{h}{2} (\mathbf{b}_n + \mathbf{b}_{n+1})$$

- 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

$$k_1 = hf_n$$

$$z_2 = y_n + \frac{k_1}{2}; k_2 = hf(z_2, t_{n+1/2})$$

$$z_3 = y_n - k_1 + 2k_2; k_3 = hf(z_3, t_{n+1})$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_3 + k_3)$$

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 $k_1 = hf_n$

■ 特徴: 2点公式 $z_2 = y_n + \frac{k_1}{2}; k_2 = hf(z_2, t_{n+1/2})$

- f の計算で t 依存部分が重い場合は、 $z_3 = y_n + \frac{k_2}{2}; k_3 = hf(z_3, t_{n+1/2})$

依存部分の再利用 $z_4 = y_n + k_3; k_4 = hf(z_4, t_{n+1})$

により約2倍高速化 $y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$

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利用可能

$$\mathbf{k}_1 = h(\mathbf{A}_n \mathbf{y}_n + \mathbf{b}_n)$$

$$\mathbf{z}_2 = \mathbf{y}_n + \frac{1}{2} \mathbf{k}_1; \mathbf{k}_2 = h(\mathbf{A}_{n+1/2} \mathbf{z}_2 + \mathbf{b}_{n+1/2})$$

$$\mathbf{z}_3 = \mathbf{y}_n + \frac{1}{2} \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_3 = h(\mathbf{A}_{n+1/2} \mathbf{z}_3 + \mathbf{b}_{n+1/2})$$

$$\mathbf{z}_4 = \mathbf{y}_n + \mathbf{k}_3; \mathbf{k}_4 = h(\mathbf{A}_{n+1} \mathbf{z}_4 + \mathbf{b}_{n+1})$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_4) + \frac{1}{3}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)$$

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 $\left| \frac{\delta y_n}{y_n} \right| \cong \frac{(h\omega)^5}{120}$

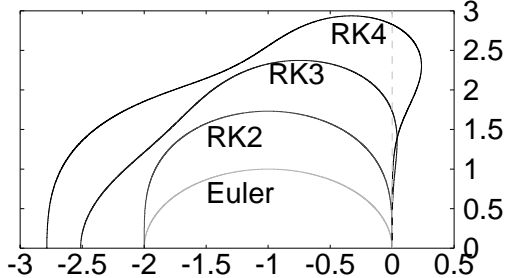
■ 線形安定領域

- 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 $\left| 1 + iH_{\text{MAX}} + \dots + \frac{(iH_{\text{MAX}})^p}{p} \right| = 1$
 - 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

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 $\rightarrow H_{\text{MAX}} = \infty$, 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 $k_1 = hf_n$
- J回N(M)次 $\tau_2 = t_n + c_2h; z_2 = y_n + a_{21}k_1; k_2 = hf(z_2, \tau_2)$
- N: 計算子 $\tau_3 = t_n + c_3h; z_3 = y_n + a_{31}k_1 + a_{32}k_2; k_3 = hf(z_3, \tau_3)$
- M: 比較子 \dots
- 比較子 $\tau_j = t_n + c_jh; z_j = y_n + \sum_{i=1}^{j-1} a_{ji}k_i; k_j = hf(z_j, \tau_j)$
- 最終段公式 \dots
- 刻み幅制御に用いる $y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^J b_j k_j$
- $\hat{y}_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^J \hat{b}_j k_j$

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} | $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ |
| c_3, a_{31}, a_{32} | $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ |
| \dots | \dots |
| $c_m, a_{m1}, a_{m2}, \dots, a_{m,m-1}$ | $1, 0, 0, 1$ |
| y, b_1, b_2, \dots, b_m | $\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}$ |
| $\hat{y}, \hat{b}_1, \hat{b}_2, \dots, \hat{b}_m$ | \dots |

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 ~ 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k₆を評価する点に注意

- 比較子のほうが高次→損

$$\begin{array}{l} \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \\ \frac{3}{8}, \frac{3}{32}, \frac{9}{32} \\ \frac{12}{13}, \frac{1932}{2197}, \frac{-7200}{2197}, \frac{7296}{2197} \\ \frac{1}{2}, \frac{439}{216}, -8, \frac{3680}{513}, \frac{-845}{4104} \\ \frac{1}{2}, \frac{-8}{27}, \frac{-3544}{2565}, \frac{1859}{4104}, \frac{-11}{40} \\ y, \frac{25}{216}, 0, \frac{1408}{2565}, \frac{2197}{4104}, \frac{-1}{5}, 0 \\ \tilde{y}, \frac{16}{135}, 0, \frac{6656}{12825}, \frac{28561}{56430}, \frac{-9}{50}, \frac{2}{55} \end{array}$$

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

$$\begin{array}{r} \frac{1}{5}, \frac{1}{5} \\ \frac{3}{10}, \frac{3}{40}, \frac{9}{40} \\ \frac{4}{5}, \frac{44}{45}, \frac{-56}{15}, \frac{32}{9} \\ \frac{8}{9}, \frac{19372}{6561}, \frac{-25360}{2187}, \frac{644448}{6561}, \frac{-212}{729} \\ 1, \frac{9017}{3168}, \frac{-355}{33}, \frac{46732}{5247}, \frac{49}{176}, \frac{-5103}{18656} \\ \frac{1}{384}, \frac{35}{384}, 0, \frac{500}{1113}, \frac{125}{192}, \frac{-2187}{6784}, \frac{11}{84} \\ \frac{35}{384}, 0, \frac{500}{1113}, \frac{125}{192}, \frac{-2187}{6784}, \frac{11}{84}, 0 \\ \frac{5}{57600}, 0, \frac{7571}{16695}, \frac{393}{640}, \frac{-92097}{339200}, \frac{187}{2100}, \frac{1}{40} \end{array}$$

DVERK

■ Verner (1978)

■ 6(5)次8回7点

$$\begin{array}{r} \frac{1}{6}, \frac{1}{6} \\ \frac{4}{15}, \frac{4}{75}, \frac{16}{75} \\ \frac{2}{3}, \frac{5}{6}, \frac{-8}{3}, \frac{5}{2} \\ \frac{5}{6}, \frac{-165}{64}, \frac{55}{6}, \frac{-425}{64}, \frac{85}{96} \\ 1, \frac{12}{5}, \frac{-8}{612}, \frac{4015}{36}, \frac{-11}{255}, \frac{88}{255} \\ \frac{1}{15}, \frac{-8263}{15000}, \frac{124}{75}, \frac{-643}{680}, \frac{-81}{250}, \frac{2484}{10625}, 0 \\ \frac{1}{1720}, \frac{3501}{43}, \frac{-300}{52632}, \frac{297275}{2322}, \frac{-319}{84065}, \frac{24068}{26703}, \frac{3850}{26703} \\ \frac{3}{40}, 0, \frac{875}{2244}, \frac{23}{72}, \frac{264}{1955}, 0, \frac{125}{11592}, \frac{43}{616} \\ \frac{13}{160}, 0, \frac{2375}{5984}, \frac{5}{16}, \frac{12}{85}, \frac{3}{44}, 0, 0 \end{array}$$

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

$$\begin{array}{r} \frac{2}{27}, \frac{2}{27} \\ \frac{1}{9}, \frac{1}{36}, \frac{1}{12} \\ \frac{1}{6}, \frac{1}{24}, \frac{1}{8} \\ \frac{5}{12}, \frac{5}{12}, 0, \frac{-25}{16}, \frac{25}{16} \\ \frac{1}{2}, \frac{1}{20}, 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{5} \\ \frac{5}{6}, \frac{-25}{108}, 0, \frac{125}{108}, \frac{-65}{27}, \frac{125}{54} \\ \frac{1}{6}, \frac{31}{300}, 0, 0, \frac{61}{225}, \frac{-2}{9}, \frac{13}{900} \\ \frac{2}{3}, \frac{2}{3}, 0, \frac{-53}{6}, \frac{704}{45}, \frac{-107}{9}, \frac{67}{90}, \frac{3}{3} \\ \frac{1}{3}, \frac{-91}{108}, 0, \frac{23}{108}, \frac{-976}{135}, \frac{311}{54}, \frac{-19}{60}, \frac{17}{6}, \frac{-1}{12} \\ \frac{1}{4100}, 0, 0, \frac{-341}{164}, \frac{4496}{1025}, \frac{-301}{82}, \frac{2133}{4100}, \frac{45}{82}, \frac{45}{164}, \frac{18}{41}, 0, 1 \\ \frac{0}{205}, \frac{0}{205}, 0, 0, \frac{-6}{41}, \frac{-3}{205}, \frac{-3}{41}, \frac{6}{41}, 0 \\ \frac{1}{4100}, 0, 0, \frac{-1777}{4100}, \frac{-341}{164}, \frac{4496}{1025}, \frac{-289}{82}, \frac{2193}{4100}, \frac{51}{82}, \frac{33}{164}, \frac{12}{41}, 0, 1 \\ \frac{41}{840}, 0, 0, 0, \frac{34}{105}, \frac{9}{35}, \frac{9}{280}, \frac{9}{280}, \frac{41}{840}, 0, 0 \\ \frac{41}{840}, 0, 0, 0, \frac{34}{105}, \frac{9}{35}, \frac{9}{280}, \frac{9}{280}, \frac{41}{840}, 0, 0 \\ \frac{41}{840}, 0, 0, 0, \frac{34}{105}, \frac{9}{35}, \frac{9}{280}, \frac{9}{280}, \frac{41}{840}, 0, 0 \end{array}$$

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 \rightarrow 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

```
f_0 := f(y_0, t_0)
do(n=2, N, 2) {
  h := H/n; h_2 = h*2.0; y_1 := y_0 + h*f_0; t_1 := t_0 + h; f_1 := f(y_1, t_1)
  do(k=2, n) { y_k := y_{k-2} + h_2*f_{k-1}; t_k := t_0 + k*h; f_k := f(y_k, t_k) }
  y_n := y_{n-1} + h*f_n; y_n := (y_n + y_n_hat)*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 $\frac{d^2x}{dt^2} = f(x,t)$
- 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)],...
    - 4PUの例: [(1+8),(2+7),(3+6),(4+5)],...

---

---

---

---

---

---

---

---

## グラッグ法(7)

- グラッグ法の刻み幅制御
- 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)

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \frac{h}{2}(\mathbf{v}_{n+1} + \mathbf{v}_n) - \frac{h^2}{10}(\mathbf{a}_{n+1} - \mathbf{a}_n) + \frac{h^3}{120}(\mathbf{j}_{n+1} + \mathbf{j}_n), \quad \mathbf{j} = \frac{d\mathbf{a}}{dt}$$

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \frac{h}{2}(\mathbf{a}_{n+1} + \mathbf{a}_n) - \frac{h^2}{12}(\mathbf{j}_{n+1} - \mathbf{j}_n),$$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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
$$\frac{dy}{dt} = f(y, t), \quad y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y, t) dt$$
- 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)  $y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-2} \beta_k^* f_{n+1-k}$ 
  - 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  $y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \beta_{pk} f_{n-k}$ 
    - 過去のf値を保持
    - 係数が次数ごとに異なる  $y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-2} \beta_k^* f_{n+1-k}$
    - 丸め誤差に弱い
  - 階差表現(お勧め)  $y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \gamma_k \nabla^k f_n$ 
    - fの階差を保持
    - 次数によらず統一的表现
    - 丸め誤差に強い  $y_{n+1} = y_n + h \sum_{k=0}^{p-2} \gamma_k^* \nabla^k f_{n+1}$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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)  $\gamma_0 = 1, \gamma_m = 1 - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{\gamma_k}{m+1-k}$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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)  $\gamma_0^* = 1, \gamma_m^* = -\sum_{k=0}^{m-1} \frac{(-1)^{m-k} \gamma_k^*}{m+1-k}$

---

---

---

---

---

---

---

---

## アダムス法(7)

- 階差係数

- 陽公式

- 全て正

$$\gamma_m = 1, \frac{1}{2}, \frac{5}{12}, \frac{3}{8}, \frac{251}{720}, \frac{95}{288}, \frac{19087}{60480}, \frac{5257}{17280}, \frac{1070017}{3628800}, \frac{25713}{89600},$$

$$\frac{26842253}{1166309819657}, \frac{4777223}{25221445}, \frac{703604254357}{8092989203533249}, \frac{106364763817}{4483454976000}, \frac{2615348736000}{98402304}, \frac{402361344000}{32011868528640000}, \dots$$

- 陰公式

- 初項以外

- 全て負

$$\gamma_m = 1, \frac{-1}{2}, \frac{-1}{12}, \frac{-1}{24}, \frac{-19}{720}, \frac{-3}{160}, \frac{-863}{60480}, \frac{-275}{24192}, \frac{-33953}{3628800}, \frac{-8183}{1036800},$$

$$\frac{-3250433}{479001600}, \frac{-4671}{788480}, \frac{-13695779093}{2615348736000}, \frac{-2224234463}{475517952000},$$

$$\frac{-132282840127}{-132282840127}, \frac{-2639651053}{-2639651053}, \frac{-111956703448001}{-111956703448001}, \dots$$

$$\frac{31384184832000}{31384184832000}, \frac{689762304000}{689762304000}, \frac{32011868528640000}{32011868528640000}, \dots$$

## 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

- 実用的誤差  $|\delta y_n| = \gamma_p \left( 2 \sin \frac{h\omega}{2} \right)^p \sim \gamma_p (h\omega)^p$

- 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:  $j=0$

$$\sum_{k=0}^q \alpha_k y_{n+1-k} = h \sum_{k=0}^{q+j-1} \beta_k f_{n+j-k}$$

- 陰公式:  $j=1$

- 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  $\sigma$

$$\rho(z) \equiv \sum_{k=0}^q \alpha_k z^{q-k}, \quad \sigma(z) \equiv \sum_{k=0}^{q+j-1} \beta_k z^{q+j-1-k}$$

$$Q(z; \mu) \equiv \rho(z) - \mu \sigma(z)$$

## 差分方程式

- 斉次定数係数差分方程式  $\sum_{k=0}^q \alpha_k y_{n+k} = 0$ 
  - 前提: 等間隔刻み幅
  - 一般解 = 基本解の線形結合  $y_{n+m} = \sum_{k=0}^q C_k \psi_{km}$
- 基本解
  - 特性根 = 第1特性多項式の根  $\rho(z) \equiv \sum_{k=0}^q \alpha_k z^{q-k}$
  - 単根の場合: 特性根の累乗  $\psi_{km} = z_k^m$
  - n重根の場合:  $\psi_{km} = z_k^m, m z_k^m, m(m+1) z_k^m, \dots$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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確かめよ
- 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
  - 安定境界関数  $\mu(\theta) \equiv \frac{\rho(e^{i\theta})}{\sigma(e^{i\theta})}$ 
    - 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 & Tremaine (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

---

---

---

---

---

---

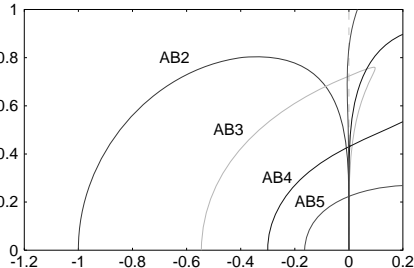
---

---

## アダムス法(10)

### ■ 陽公式の線形安定領域: 2~5次

- 複素上半面
- 高次ほど不安定
- 注意:  
4,5次では  
原点近くの  
閉領域




---

---

---

---

---

---

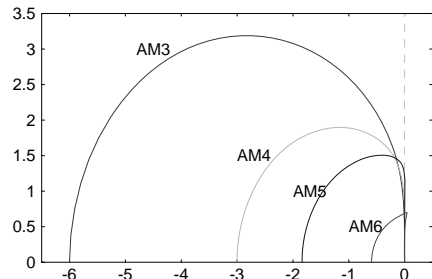
---

---

## 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)

$$b(z) = \frac{z - (1-z)a(z)}{-(1-z)\log(1-z)}, \quad b^*(z) = \frac{b(z)}{1-z}$$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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  $z_j$  を選ぶ
  - 注1:  $z_j$  は実根もしくは複素共役根のペア
  - 注2:  $z_j$  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  $\alpha_k = -\alpha_{p-1-k}$ ,  $\beta_k = \beta_{p-1-k}$
  - 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  $Q_{PEC}(z; \mu) \equiv z^p [\rho(z) - \mu\sigma(z)] + \mu [\sigma(z)\rho^*(z) - \rho(z)\sigma^*(z)]$
  - PECE  $Q_{PECE}(z; \mu) \equiv \rho(z) - \mu\sigma(z) + \mu\beta_0 [\rho(z) - \mu\sigma(z)]$
- 安定性関数 (Q=0の解)
  - PEC  $\mu_{PEC} \equiv \frac{\rho}{\sigma - z^{-p}(\sigma\rho^* - \rho\sigma^*)}$
  - PECE  $\mu_{PECE} \equiv \frac{2\rho}{\sigma - \beta_0\rho + \sqrt{(\sigma - \beta_0\rho)^2 + 4\beta_0\sigma\rho}}$

---

---

---

---

---

---

---

---

### 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)
 
$$\frac{dy}{dt} = f_0(y, t) + f_1(t), \quad \frac{dy}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$$
- 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

$$\frac{d^2x}{dt^2} = a\left(x, \frac{dx}{dt}, t\right) \rightarrow \frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = a(x, v, t)$$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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

$$v_{n+1} = v_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \gamma_k \nabla^k a_n, \quad x_{n+1} = x_n + h \sum_{k=0}^{p-1} \gamma_k^* \nabla^k v_{n+1}$$

- 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  $\frac{d^2x}{dt^2} = f(x,t)$
- 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

$$\rho(z) \equiv \sum_{k=0}^q \alpha_k z^{q-k}, \quad \sigma(z) \equiv \sum_{k=0}^{q+j-1} \beta_k z^{q+j-1-k}$$

$$Q(z; \mu) \equiv \rho(z) - \mu^2 \sigma(z)$$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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

$$\frac{dy}{dt} = f(y,t), \quad y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y,t) dt$$

- 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

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 \sum_{k=0}^{p-1} \beta_{pk} f_{n-k}, \quad x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 \sum_{k=0}^{p-1} \sigma_k \nabla^k f_n$$

### ■ 陰公式: (狭義の)カウエル

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 \sum_{k=0}^{p-1} \beta_{pk}^* f_{n+1-k}, \quad x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 \sum_{k=0}^{p-1} \sigma_k^* \nabla^k f_{n+1}$$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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)

$$\sigma_0 = 1, \quad \sigma_m = 1 - 2 \sum_{k=0}^{m-1} \frac{h_{m+1-k} \sigma_k}{m+2-k}, \quad h_m \equiv \sum_{k=1}^m \frac{1}{k}$$

---

---

---

---

---

---

---

---

## カウエル法(4)

### ■ 階差係数の母関数: 陰公式

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k^* \nabla^k = \frac{S-2+S^{-1}}{h^2 S D^2} = \left[ \frac{\nabla}{\log(1-\nabla)} \right]^2$$

### ■ 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

$$\sigma_m = 1, 0, \frac{1}{12}, \frac{1}{240}, \frac{19}{40}, \frac{3}{12096}, \frac{863}{4032}, \frac{275}{51840}, \frac{33953}{129600}, \dots$$

- 陽公式

$$3250433, 4671, 13695779093, 2224234463, \dots$$

- 全て正

$$53222400, 78848, 237758976000, 39626496000, \dots$$

- (第2項以外)

$$132282840127, 2639651053, 111956703448001, \dots$$

- 陰公式

$$\sigma_m^* = 1, -1, \frac{1}{12}, 0, \frac{-1}{240}, \frac{-1}{240}, \frac{-221}{60480}, \frac{-19}{6048}, \frac{-9829}{3628800}, \frac{-407}{172800}, \dots$$

- 全て負

$$-330157, -24377, -4281164477, -70074463, \dots$$

- (第1,3,4項

$$159667200, 13305600, 2615348736000, 47551795200, \dots$$

- 以外)

$$-1197622087, -97997951, -264713507083, \dots$$

$$896690995200, 80472268800, 237124952064000, \dots$$

## 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

$$v_{n+1} = u_{n+1} + h \sum_{k=0}^{p-1} \rho_k \nabla^k f_n, \quad v_{n+1} = u_{n+1} + h \sum_{k=0}^{p-1} \rho_k^* \nabla^k f_{n+1}$$

- 階差係数の母関数(問: 導け)

$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho_k z^k = \frac{-z - \log(1-z)}{(1-z)[\log(1-z)]^2}, \quad \sum_{k=0}^{\infty} \rho_k^* z^k = \frac{-z - \log(1-z)}{[\log(1-z)]^2}$$

## 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  $= (z-1)^2 z^n$  ...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  $\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \frac{dp}{dt} = -\left(\frac{\partial H}{\partial q}\right)$ 
  - =運動方程式が正準形
- 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

- $S_q(c_1h)S_p(a_1h)S_q(c_2h)S_p(a_2h)S_q(c_2h)S_p(a_1h)S_q(c_1h)$

$$a_1 = \frac{1}{2 - \sqrt{2}}, a_2 = 1 - 2a_1, c_1 = \frac{a_1}{2}, c_2 = \frac{1}{2} - c_1$$

- 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

- $S_{\theta}^{(0)}(h/2)S_q^{(1)}(h/2)S_p^{(1)}(h)S_q^{(1)}(h/2)S_{\theta}^{(0)}(h/2)$

---

---

---

---

---

---

---

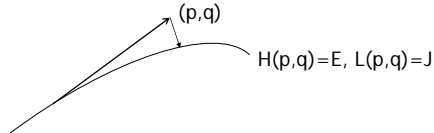
---

---

---

## 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

---

---

---

---

---

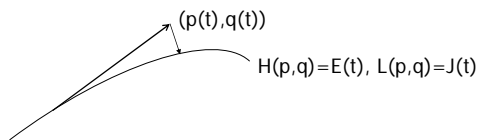
---

---

---

## 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  $K \equiv \frac{v^2}{2} - \left(\frac{\mu}{r}\right), \frac{dK}{dt} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{a}$ 
    - 二体エネルギーK
  - 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  $\left(\frac{v^2}{2}\right)s^3 - Ks + \left(\frac{\mu}{r}\right) = 0$ 
    - ニュートン法
    - 初期値:  $s=1$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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  $\begin{cases} J = J_0 + J_1(t) \\ \theta = \theta_0 + n_0 t + \theta_1(t) \end{cases}$ 
    - 厳密な数値解が得られる

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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  $F(p) = \frac{1}{2} \sum_m w_m (g(t_m; \mathbf{y}(p)) - g_m)^2$
  - $(\partial\mathbf{y}/\partial p)$ 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 $y_0$ 、モデル・パラメータ $\mu$
- 常微分方程式  $\frac{dy}{dt} = f(y, t; \mu)$ ,  $y = y_0(t = t_0)$   
と初期条件
- 変分方程式  $\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial y_0} \\ \frac{\partial y}{\partial \mu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial \mu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial y_0} \\ \frac{\partial y}{\partial \mu} \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial y_0} \\ \frac{\partial y}{\partial \mu} \end{pmatrix}_{jk} = \delta_{jk} (t = t_0)$   
と初期条件

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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
$$y(t) = \sum_{k=0}^{\infty} Y_k T_k(t), \quad f(y(t), t) = \sum_{k=0}^{\infty} F_k T_k(t)$$
- 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
  - 2) 右辺の評価  $y^{(n)}(t) \rightarrow f(y^{(n)}(t), t)$
  - 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

- 境界値問題とは  $\frac{dy}{dt} = f(y, t)$ 
  - 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

- 簡単に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
  - 72865.4
  - 72823.5
  - 値がほぼ同じ数の差
  - 41.9
  - 有効桁数の著しい減少
- 情報落ち: 計算の無駄
  - 72865.4
  - 絶対値の大きさに大きな + 32.1583
  - 違いがある数の加減 72897.6???
  - 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

$$1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} = e, \quad 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n+1} = \log 2$$

$$1 + \frac{1}{10^{12}} + \frac{2}{10^{12}} + \dots + \frac{1}{10^6} = 1 + \sum_{n=1}^{10^6} \frac{n}{10^{12}} = 1.5000005$$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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、打ち切り、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  $20 \sim 100\varepsilon$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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  $\frac{xf'(x)}{f(x)}$ 
  - 教訓: 関数のゼロ点付近は要注意

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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

---

---

---

---

---

---

---

---

## 丸めの方式

- 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
$$\langle \epsilon_j, \epsilon_k \rangle = \epsilon^2 \delta_{jk}$$
- 仮定2: 局所丸め誤差の平均はゼロ
$$\langle \epsilon_k \rangle = 0$$
- 結論: 累積誤差の推定値
$$\left\langle \sum_{k=1}^N \epsilon_k \right\rangle = \sqrt{N} \epsilon$$
  - 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  
 $((a_1 + a_2) + (a_3 + a_4)) + ((a_5 + a_6) + (a_7 + a_8)) + \dots$
- 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
    - $z_1 := s_1 + y$
    - 総和( $s += y$ )で、 $s$ を2変数化  $z_2 := ((s_1 - z_1) + y) + s_2$
    - 上位 $s_1$ , 下位 $s_2$ , 積み残し $z_2$   $s_1 := z_1 + z_2$
    - 括弧()の有無が重要  $s_2 := (z_1 - s_1) + z_2$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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  $\frac{d^2 \tilde{x}}{dt^2} + \mu_0 \tilde{x} = 0$
  - 有限変化量  $\Delta x$  の方程式
$$\frac{d^2 \Delta x}{dt^2} + \mu_0 \Delta x = \varepsilon(\tilde{x}(t) + \Delta x, t) - \Delta\mu(\tilde{x}(t) + \Delta x, t)[\tilde{x}(t) + \Delta x]$$

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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る
  - 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ィーの法則
  - 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:  $a(i) \rightarrow a(\max(1, \min(i, \text{IMAX})))$
  - 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xl)
  - 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: 既存デバッグの活用
- 実践的: 適切な出力文の挿入
  - 最善: 自作デバッグ出力ルーチンの呼び出し
  - 出力: 呼び出し箇所、変数名、変数値、...
- 効用
  - 1. 整形された出力→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)
- 入力打ちやすく、出力読みやすく

---

---

---

---

---

---

---

---

## 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 数値計算、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/>



---

---

---

---

---

---

---

---