

数値解析とはなにか

電気通信大学 2020 年度オープンキャンパス

緒方 秀教

電気通信大学 大学院情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻

2020 年 11 月

数値解析とは何か？

科学技術研究に現れる数学的問題を（特にコンピュータを用いて）解く方法の研究・開発.

- 人間は（コンピュータは）基本的には有限桁の数（浮動小数点数）の四則演算しかできない.
- その前提でどうやって微積分など数学の問題を解いて、答えを見つけるのか？

数値解析の社会への応用例

- 自動車などの設計 (↔ 風洞実験)
- 天気予報
- 新型コロナウイルス感染症の研究
(スーパーコンピュータ「富岳」)

数値解析 (numerical computation)

スーパーコンピュータ「富岳」による新型コロナウイルス感染症の研究。

The screenshot shows a web browser displaying the RIKEN CCS website. The page features a navigation bar with various menu items and a search box. The main content area includes a large banner image of the Fujaku supercomputer building and a sidebar with a list of links. The main text discusses the development of the Fujaku supercomputer and its application in research on COVID-19.

理化学研究所 計算科学研究センター
RIKEN Center for Computational Science

トップ | 計算科学研究センターとは | 研究成果 | 「富岳」について | 「京」について | イベント・広報 | もっと知りたい

スーパーコンピュータ「富岳」開発
—フラッグシップ2020プロジェクト—

トップ / スーパーコンピュータ「富岳」について / 【特集】新型コロナウイルスの克服に向けて

【特集】新型コロナウイルスの克服に向けて

- 実施している研究課題と成果
- 研究課題集集について
- 関連リンク
- スーパーコンピュータ「富岳」プロジェクト
- スーパーコンピュータ「富岳」開発概要
- スーパーコンピュータ「富岳」の主な受賞
- スーパーコンピュータ「富岳」

【特集】新型コロナウイルスの克服に向けて

理化学研究所は、文部科学省と連携し、新型コロナウイルスの対策に貢献する研究開発にスーパーコンピュータ「富岳」の計算資源を供出することとし、2020年4月7日にプレスリリースを行いました。

プレスリリース：[「新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な計算資源利用について」](#)

「富岳」は現在、2021年度の共用開始に向け、開発・整備が行われています。しかしながら、困難ともいえる今般の状況を受け、開発・整備に支障がない範囲で「富岳」の計算資源を優先的に提供し、新型コロナウイルス感染症の対策に貢献することを目的として、スーパーコンピュータ「富岳」の優先的な計算資源利用について、プレスリリースを行いました。

<https://www.r-ccs.riken.jp/jp/fugaku/corona/>

数値解析 (numerical computation)

数値解析の研究対象

- 関数近似, 数値積分, 数値微分.
- 非線形方程式の解.
- 線形計算 (連立一次方程式, 行列固有値計算など).
- 常微分方程式・偏微分方程式の数値解法.
- high performance computing
(HPC, 大規模並列計算, スーパーコンピュータ).
- 精度保証付き数値計算 (区間演算).
- その他いろいろ...

数値解析 (numerical computation)

数値解析の研究対象

- 関数近似, 数値積分, 数値微分.
- 非線形方程式の解.
- 線形計算 (連立一次方程式, 行列固有値計算など).
- 常微分方程式・偏微分方程式の数値解法.
- high performance computing
(HPC, 大規模並列計算, スーパーコンピュータ).
- 精度保証付き数値計算 (区間演算).
- その他いろいろ...

数値解析はいったいどういうことを学問するのか?
数値積分を例に説明する.

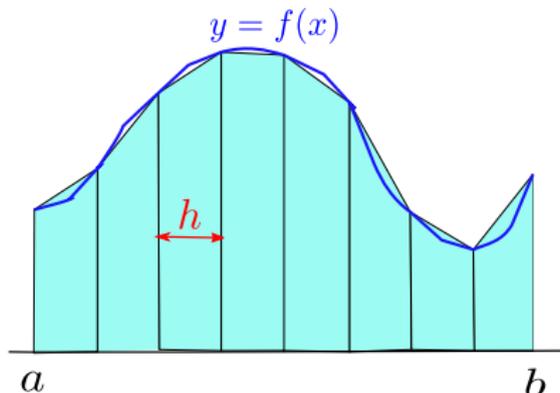
数値積分：台形則

数値積分 (numerical integration)

- 積分を高精度で近似計算する方法.
- 人間が手計算で計算できる積分はごく限られている.

台形則 (trapezoidal rule)

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{2}f(a) + h \sum_{k=1}^{N-1} f(a + kh) + \frac{h}{2}f(b) \quad \left(h = \frac{b-a}{N} \right).$$



数値積分：台形則

台形則の計算例（倍精度演算）：

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{4} (= 0.78539\ 81633\ 97448\ 3\dots).$$

N	計算値	誤差
4	<u>0.78279 41176 47058 9</u>	3×10^{-3}
8	<u>0.78474 71236 22772 2</u>	8×10^{-4}
16	<u>0.78523 54030 10347 2</u>	2×10^{-4}
32	<u>0.78535 74732 93743 8</u>	5×10^{-5}
64	<u>0.78538 79908 71413 4</u>	1×10^{-5}
128	<u>0.78539 56202 65938 1</u>	3×10^{-6}
256	<u>0.78539 75276 14570 4</u>	8×10^{-7}
512	<u>0.78539 80044 51730 5</u>	2×10^{-7}
1024	<u>0.78539 81236 61018 0</u>	5×10^{-8}

まあ、こんなものかなあ…

数値積分：全無限区間積分に対する台形則

台形則は、全無限区間 $(-\infty, +\infty)$ 上の解析関数の全無限区間積分に対して有効である。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh).$$

数値積分：全無限区間積分に対する台形則

台形則は、全無限区間 $(-\infty, +\infty)$ 上の解析関数の全無限区間積分に対して有効である。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh).$$

数値例（倍精度演算）：

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} (= 1.77245\ 38509\ 05516 \dots).$$

h	標本点数 $N_+ + N_- + 1$	計算値	誤差
1.0	15	<u>1.77263 72048 26653</u>	1×10^{-4}
0.5	27	<u>1.77245 38509 05516</u>	1×10^{-16}

刻み幅 $h = 0.5$ は相当粗い近似のように思えるが、それでも誤差 $\sim 10^{-16}$ という高精度を達成している。

数値積分：全無限区間積分に対する台形則

無限和の打ち切り.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh).$$

全無限区間積分に対する台形則は、本来は無限和である。
しかし、コンピュータでは有限和しか計算できない。

十分小さい正数 ε をとり、 $|f(kh)| < \varepsilon$ となったところで
無限和を打ち切る。

(前スライドの数値例では $\varepsilon = 10^{-15}$ ととっている.)

数値積分：台形則 & 変数変換

台形則は、全無限区間 $(-\infty, +\infty)$ 上の解析関数の全無限区間積分に対して有効である。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh).$$

これを任意の区間の積分に応用できないか？

数値解析：台形則 & 変数変換

- ① 変数変換 $x = \psi(u)$ により全無限区間積分に変換する。
- ② 変換した積分を台形則で近似計算する。

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(u))\psi'(u)du \\ &\simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi(kh))\psi'(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh), \\ \psi : (-\infty, +\infty) &\rightarrow (a, b) \quad \text{変数変換.}\end{aligned}$$

* 以降、積分区間は一般性を失うことなく $(-1, 1)$ ととる。
任意の有限区間 (a, b) 上の積分は次で計算できる。

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x'\right) dx'.$$

数値積分：台形則&変数変換

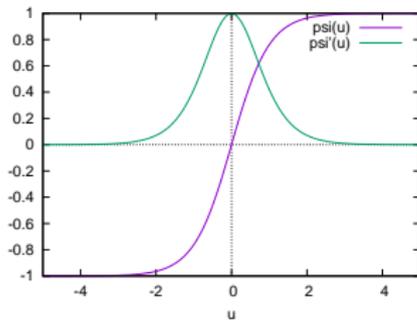
変数変換 $x = \psi(u)$ の例.

$$x = \psi(u) = \tanh u = \frac{e^u - e^{-u}}{e^u + e^{-u}}.$$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi(kh)) \psi'(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh)) \psi'(kh).$$

$$\begin{aligned} \psi'(u) &= 1 / \cosh^2 u \\ &\simeq 4 \exp(-2|u|) \quad (u \rightarrow \pm\infty). \end{aligned}$$

被積分関数は $u \rightarrow \pm\infty$ で急減衰。
→ 少ない項数で無限和を打ち切れる。



$\psi(u)$, $\psi'(u)$ のグラフ.

数值積分：台形則 & 変数変換，数值例

数值例（倍精度演算）：

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} (= 1.57079\ 63267\ 94897\ \dots).$$

h	標本点数 $N_+ + N_- + 1$	計算値	誤差
1	39	<u>1.61630 92660 41882</u>	3×10^{-2}
2^{-1}	75	<u>1.57112 13299 67824</u>	2×10^{-4}
2^{-2}	145	<u>1.57079 63436 04226</u>	1×10^{-8}
2^{-3}	285	<u>1.57079 63267 94895</u>	1×10^{-15}

通常の台形則：標本点数 1024 で誤差 5×10^{-8} 。

直接台形則を適用するのに比べて，収束が断然速くなっている。

数値積分：DE 公式

もっと速く収束するような変数変換はないか？

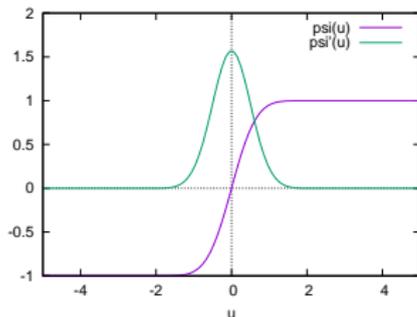
DE 公式 (double exponential rule) (高橋秀俊・森正武 1974 年)

$$x = \psi(u) = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right) \quad \text{DE 変換,}$$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi(kh)) \psi'(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh)) \psi'(kh).$$

$$\sinh u = \frac{e^u - e^{-u}}{2},$$

$$\tanh u = \frac{e^u - e^{-u}}{e^u + e^{-u}},$$



$\psi(u)$, $\psi'(u)$ のグラフ。

数値積分：DE 公式

もっと速く収束するような変数変換はないか？

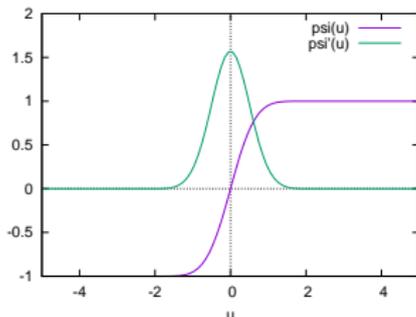
DE 公式 (double exponential rule) (高橋秀俊・森正武 1974 年)

$$x = \psi(u) = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right) \quad \text{DE 変換,}$$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi(kh)) \psi'(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh)) \psi'(kh).$$

$$\begin{aligned} \psi'(u) &= \frac{(\pi/2) \cosh u}{\cosh^2((\pi/2) \sinh u)} \\ &\simeq \pi \exp(|u|) - (\pi/2) \exp |u| \\ &\quad (u \rightarrow \pm\infty). \end{aligned}$$

$u \rightarrow \pm\infty$ で二重指数関数的急減衰。
→ 少ない項数で無限和を打ち切れる。



$\psi(u)$, $\psi'(u)$ のグラフ。

数値積分：DE 公式，数値例

数値例（倍精度演算）：

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} (= 1.57079\ 63267\ 94897\ \dots).$$

h	標本点数 $N_+ + N_- + 1$	計算値	誤差
1	11	<u>1.81254 30575 87415</u>	2×10^{-1}
2^{-1}	17	<u>1.57953 08408 49787</u>	6×10^{-3}
2^{-2}	29	<u>1.57080 84354 07887</u>	8×10^{-6}
2^{-3}	55	<u>1.57079 63268 18231</u>	2×10^{-11}
2^{-4}	107	<u>1.57079 63267 94895</u>	7×10^{-16}

変数変換 $x = \tanh u$ に比べて，収束がもっと速くなっている。

数値積分：DE 公式，端点特異性を持つ積分

DE 公式は端点特異性のある積分も計算できる。

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \pi (= 3.14159\ 26535\ 89793\dots).$$

h	標本点数 $N_1 + N_2 + 1$	積分値	相対誤差
1	11	<u>3.14350 79789 30933</u>	6×10^{-4}
2^{-1}	19	<u>3.14159 26733 05705</u>	6×10^{-9}
2^{-2}	35	<u>3.14159 26535 89794</u>	1×10^{-16}

数値積分：無限区間積分に対する DE 公式

無限区間積分に対する DE 公式もある。

例えば,

$$\int_0^{\infty} f(x)dx, \quad f(x) : x \rightarrow \infty \text{ で遅く減衰.}$$

↓

$$\int_0^{\infty} f(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(u))\psi'(u)du \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh),$$

$$\text{with } \psi(u) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right).$$

数値積分：DE 公式の最適性

もっと速く収束するような変数変換はないか？

(三重指数関数的変数変換, ...)

→ **DE 変換 (二重指数関数的変換)** が最適な変数変換であることが理論的に示されている.

(これ以上速く収束するような変数変換はない).

(参考文献)

- M. Sugihara: Optimality of the double exponential formula — functional analysis approach —, *Numerische Mathematik*, **75**, 379–395 (1997).
- 関数解析的手法により, DE 変換の最適性を証明.

数値積分に対する DE 公式

- 素朴な道具（台形則）
- 数学的知識（台形則は解析関数の全無限区間積分に有効）
- トンチ（DE 変換で任意区間積分を全無限区間積分に書き直す）

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(u))\psi'(u)du \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh).$$

数値積分に対する DE 公式

- 素朴な道具（台形則）
- 数学的知識（台形則は解析関数の全無限区間積分に有効）
- トンチ（DE 変換で任意区間積分を全無限区間積分に書き直す）

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(u))\psi'(u)du \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh).$$

結局、数値解析とは何か…

- 数学的知識を用いていろんな計算ができる。
- 数値解析ほど創造的な学問はない！