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 (numerical computation)

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 (numerical computation)

数値解析の社会への応用例

- 自動車などの設計（$\leftrightarrow$ 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」）

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.

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

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.

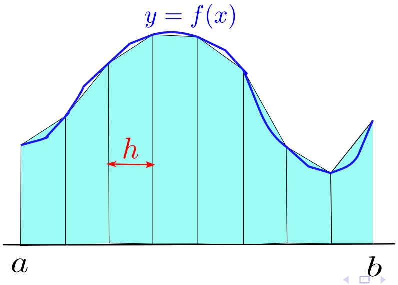
数値積分：台形則

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)

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



数値積分：台形則

台形則の計算例（倍精度演算）：

$$\int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{1+x^2} = \frac{\pi}{4} (= 0.78539\,81633\,97448\,3\ldots).$$

N	計算値	誤差
4	$\underline{0.78}279\,41176\,47058\,9$	3×10^{-3}
8	$\underline{0.78}474\,71236\,22772\,2$	8×10^{-4}
16	$\underline{0.785}23\,54030\,10347\,2$	2×10^{-4}
32	$\underline{0.7853}5\,74732\,93743\,8$	5×10^{-5}
64	$\underline{0.7853}8\,79908\,71413\,4$	1×10^{-5}
128	$\underline{0.78539}\,56202\,65938\,1$	3×10^{-6}
256	$\underline{0.78539}\,75276\,14570\,4$	8×10^{-7}
512	$\underline{0.78539\,8}0044\,51730\,5$	2×10^{-7}
1024	$\underline{0.78539\,81}236\,61018\,0$	5×10^{-8}

まあ，こんなものかなぁ…

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．

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

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．

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

数値例（倍精度演算）：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}(= 1.77245\,38509\,05516\ldots).$$

h	標本点数 $N_+ + N_- + 1$	計算値	誤差
1.0	15	$\underline{1.772}63\,72048\,26653$	1×10^{-4}
0.5	27	$\underline{1.77245\,38509\,05516}$	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．

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

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．

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

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．

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(u))\psi'(u)\mathrm{d}u$$

$$\simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi(kh))\psi'(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh),$$

$$\psi : (-\infty, +\infty) \to (a, b) \quad \text{変数変換}.$$

$*$ 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．

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

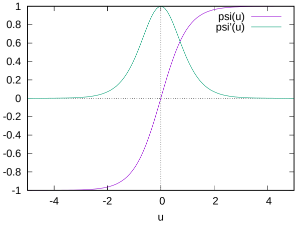
変数変換 $x = \psi(u)$ の例.

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

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

$$\psi'(u) = 1/\cosh^2 u$$
$$\simeq 4\exp(-2|u|) \quad (\, u \to \pm\infty\,).$$

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



$\psi(u)$, $\psi'(u)$ のグラフ.

数値例（倍精度演算）：

$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} (= 1.57079\,63267\,94897\ldots).$$

h	標本点数 $N_+ + N_- + 1$	計算値	誤差
1	39	$\underline{1}.61630\,92660\,41882$	3×10^{-2}
2^{-1}	75	$\underline{1.571}12\,13299\,67824$	2×10^{-4}
2^{-2}	145	$\underline{1.57079\,63}436\,04226$	1×10^{-8}
2^{-3}	285	$\underline{1.57079\,63267\,9489}5$	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．

もっと速く収束するような変数変換はないか？

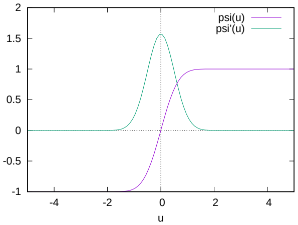
DE 公式 (double exponential rule) （高橋秀俊・森正武 1974 年）

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

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

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

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



$\psi(u)$, $\psi'(u)$ 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？

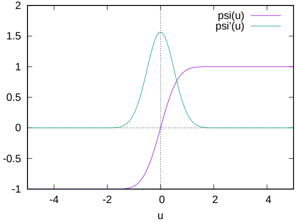
DE 公式 (double exponential rule) （高橋秀俊・森正武 1974 年）

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

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

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

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



$\psi(u)$, $\psi'(u)$ のグラフ.

数値例（倍精度演算）：

$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} (= 1.57079\,63267\,94897\ldots).$$

h	標本点数 $N_+ + N_- + 1$	計算値	誤差
1	11	$\underline{1}.81254\,30575\,87415$	2×10^{-1}
2^{-1}	17	$\underline{1.57}953\,08408\,49787$	6×10^{-3}
2^{-2}	29	$\underline{1.570}80\,84354\,07887$	8×10^{-6}
2^{-3}	55	$\underline{1.57079\,6326}8\,18231$	2×10^{-11}
2^{-4}	107	$\underline{1.57079\,63267\,9489}5$	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．

$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}} = \pi(= 3.14159\,26535\,89793\ldots).$$

h	標本点数 $N_1 + N_2 + 1$	積分値	相対誤差
1	11	$\underline{3.14}350\,79789\,30933$	6×10^{-4}
2^{-1}	19	$\underline{3.14159\,267}33\,05705$	6×10^{-9}
2^{-2}	35	$\underline{3.14159\,26535\,8979}4$	1×10^{-16}

無限区間積分に対する DE 公式もある.

例えば,

$$\int_0^\infty f(x)\mathrm{d}x, \quad f(x) \;:\; x \to \infty \text{ で遅く減衰.}$$

$$\Downarrow$$

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

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

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．

まとめ

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）

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

まとめ

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）

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

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！