加速法と可積分方程式

ソリトンの数理 B

金泉大介 (丸野研究室)

2017 年 11 月

本発表の流れ

1. 研究背景
2. 加速法の歴史
3. 加速法の数値実験
4. まとめ

研究背景

- 級数の数値計算法として"加速法"(級数の収束を加速させる方法) がある.
- 加速法の中には可積分な離散ソリトン方程式に書き換えられるものがある.
- 加速法と可積分方程式の関係について学ぶのが今日の目標だが, その前に加速法が数値計算にどのように影響するかを数値実験を通して見ていく.

定義 (級数の収束加速)

数列 $\{S_m\}$ が S_∞ に収束し, 数列 $\{S_m\}$ に変換 T を施してできる数列 $\{T_m\}$ が T_∞ に収束するとする. このとき,

$$\lim_{m\to\infty} \frac{T_m - T_\infty}{S_m - S_\infty} = 0$$

が成り立つとき, 変換 T は数列 $\{S_m\}$ の収束を加速させているという.

加速法の歴史

加速法の歴史

17 世紀: ヨーロッパと日本で研究が始まる.
日本では関孝和など, ヨーロッパでは Newton などが研究した [a].
1926 年: Aitken 加速
1956 年: ϵ アルゴリズム, ρ アルゴリズム
1959 年: η アルゴリズム
1990 年代: 加速法と可積分方程式の関係が明らかになる. また, 可積分な方程式から加速法を作ることが試みられる.
2000 年代以降: q-ϵ アルゴリズムなどの q-加速法 [b] [c]$\cdots$

[a] 長田直樹, 収束の加速法の歴史, 数理解析研究所講究録第 1787 巻, 2012 年, 88-104

[b] He, Y., Hu, X. B., Tam, H. W. (2009). A q-Difference Version of the ϵ-Algorithm. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 42(9), 095202.

[c] Sun, J. Q., He, Y., Hu, X. B., Tam, H. W. (2011). Q-difference and Confluent Forms of the Lattice Boussinesq Equation and the Relevant Convergence Acceleration Algorithms. Journal of Mathematical Physics, 52(2), 023522.

本発表では 1990 年代の研究に着目する.

(参考) その他の加速法

本発表で扱う Aitken 加速, ϵ アルゴリズム, ρ アルゴリズム, η アルゴリズム以外にも次の加速法が知られている [1] .

一次有理変換

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

Euler 変換

$$a_n = \frac{1}{2^{n+1}} \sum_{j=0}^{n} \binom{n}{j} a_j.$$

[1] 福島登志夫, 数値天文学入門 -天文学で用いる数値技法-

chiron.mtk.nao.ac.jp/~ toshio/education/numerical_mono_2006.pdf

η アルゴリズム

変形前の数列を $\{c_m\}$ として,

$$\eta_0^{(m)} = \infty (i.e.\ 1/\eta_0^{(m)} = 0), \eta_1^{(m)} = c_m, m = 0, 1, 2, \cdots ,$$

$$\begin{cases} \eta_{2n+1}^{(m)} + \eta_{2n}^{(m)} = \eta_{2n}^{(m+1)} + \eta_{2n-1}^{(m+1)} \\ \dfrac{1}{\eta_{2n+2}^{(m)}} + \dfrac{1}{\eta_{2n+1}^{(m)}} = \dfrac{1}{\eta_{2n+1}^{(m+1)}} + \dfrac{1}{\eta_{2n}^{(m+1)}} \end{cases}$$

という規則に従った数列の変換を η アルゴリズムという.
$c'_n = \eta_n^{(0)} (n = 1, 2, \cdots)$ が変換後の数列である.

行列式解の導出

$$\begin{cases} \eta_{2n+1}^{(m)} + \eta_{2n}^{(m)} = \eta_{2n}^{(m+1)} + \eta_{2n-1}^{(m+1)} \\ \dfrac{1}{\eta_{2n+2}^{(m)}} + \dfrac{1}{\eta_{2n+1}^{(m)}} = \dfrac{1}{\eta_{2n+2}^{(m+1)}} + \dfrac{1}{\eta_{2n}^{(m+1)}} \end{cases}$$

この方程式は行列式解を持つ．行列式解がこの方程式を満たすことの確認には次の恒等式を用いる．

Jacobi 恒等式 [a]

[a] 中村佳正．(2000)．可積分系の応用数理，裳華房．

任意の行列式 D に対して以下が成り立つ．

$$D \times D\begin{bmatrix} i & j \\ k & l \end{bmatrix} - D\begin{bmatrix} i \\ k \end{bmatrix} \times D\begin{bmatrix} j \\ l \end{bmatrix} + D\begin{bmatrix} i \\ l \end{bmatrix} \times D\begin{bmatrix} j \\ k \end{bmatrix} = 0.$$

加速法の数値実験

$\log 2 \in [0.69314718055994528, 0.69314718055994529]$ である[2].

$$S_m = 1 - 1/2 + 1/3 - \cdots + (-1)^m/(m+1)$$

を変換すると,

$$1 - 1/3 + \frac{1}{30} - \frac{1}{130} + \frac{1}{975} - \frac{1}{4725} + \frac{1}{32508} \cdots$$

となる.

実験結果

変換前の和 (最初の 7 項):$0.7595\cdots$
変換後の和 (最初の 7 項):$0.693152\cdots$

変換後（加速後）の方が真値の存在範囲に近づいていることがわかる.

[2] 柏木雅英, kv - C++による精度保証付き数値計算ライブラリ

http://verifiedby.me/kv/index.html

ϵ アルゴリズムと ρ アルゴリズム

$$\epsilon_0^{(m)} = 0, \epsilon_1^{(m)} = S_m(\text{given}), m = 0, 1, 2, \cdots ,$$
$$\left(\epsilon_{n+1}^{m} - \epsilon_{n-1}^{m+1}\right)\left(\epsilon_n^{m+1} - \epsilon_n^{m}\right) = 1$$

という規則に従った数列の変換を ϵ アルゴリズムという．$\epsilon_{2n+1}^{(m)} (m = 0, 1, \cdots)$ が変換後の数列である．Mathematica の `NSum`, `NLimit` でも使われている [a].

[a] Weisstein, Eric W. "Wynn's Epsilon Method." From MathWorld–A Wolfram Web Resource. http://mathworld.wolfram.com/WynnsEpsilonMethod.html

$$\rho_0^{(m)} = 0, \rho_1^{(m)} = S_m(\text{given}), m = 0, 1, 2, \cdots ,$$
$$\left(\rho_{n+1}^{m} - \rho_{n-1}^{m+1}\right)\left(\rho_n^{m+1} - \rho_n^{m}\right) = n$$

という規則に従った数列の変換を ρ アルゴリズムという．
$\rho_{2n+1}^{(m)} (m = 0, 1, \cdots)$ が変換後の数列である [a].

[a] プログラム例は下記を参照 (長田先生のページ):

`http://www.cis.twcu.ac.jp/ osada/rikei/2009-1.html`

ϵ アルゴリズムと離散 potential KdV 方程式

ϵ アルゴリズム

$$\epsilon_0^{(m)} = 0, \epsilon_1^{(m)} = S_m(\text{given}), m = 0, 1, 2, \cdots,$$
$$\left(\epsilon_{n+1}^{m} - \epsilon_{n-1}^{m+1}\right)\left(\epsilon_n^{m+1} - \epsilon_n^{m}\right) = 1$$

離散 potential KdV 方程式 [a]

[a] Hietarinta, J., Joshi, N., Nijhoff, F. W. (2016). Discrete Systems and Integrability (Vol. 54). Cambridge University Press.

$$\left(w_{n+1}^{m+1} - w_n^{m}\right)\left(w_n^{m+1} - w_{n+1}^{m}\right) = 1$$

ϵ アルゴリズムと離散 potential KdV 方程式の従属変数はそれぞれ正方形, 菱型の格子を成すが, 適切な変数変換を考えればこの 2 つを同一視できる.

ϵ アルゴリズムは万能か?

収束率と収束の分類 [a]

[a] 中村佳正. (2000). 可積分系の応用数理, 裳華房.

S_∞ に収束する数列 $\{S_m\}$ が

$$\lim_{m\to\infty} \frac{S_{m+1} - S_\infty}{S_m - S_\infty} = \kappa$$

を満たすとき, κ を収束率という.

- $\kappa \in [-1, 1)\backslash\{0\}$ のとき $\{S_m\}$ は S_∞ に線形収束するという.
- $\kappa = 1$ のとき $\{S_m\}$ は S_∞ に対数収束するという.

定理 [a]

[a] 中村佳正. (2000). 可積分系の応用数理, 裳華房.

ϵ アルゴリズムは線形収束数列を加速できるが, 対数収束数列を加速できない.

ϵ アルゴリズムで加速できない数列を加速するためには, ρ アルゴリズムなど, 他の加速法が必要になる.

対数収束数列について

定理 (Delahaye, Germain-Bonne)

任意の対数収束数列を加速させる加速法はない.
$\longrightarrow$ 対数収束以外の条件が必要.

定理 (対数収束の判定法)[a]

[a] Gray, H. L., Clark, W. D. , On a Class of Nonlinear Transformations and their Applications to the Evaluation of Infinite Series, Journal of Research of the National Bureau of Standards, 73B(1969),251-274.

実単調数列 S_n が s に収束して,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\Delta S_{n+1}}{\Delta S_n} = 1$$

を満たすなら, S_n は s に対数収束する.

加速法の数値実験

$$x_0^{(m)} = 0, x_1^{(m)} = S_m(\text{given}), m = 0, 1, 2, \cdots ,$$
$$\left(x_{n+1}^m - x_{n-1}^{m+1}\right)\left(x_n^{m+1} - x_n^m\right) = \sigma(n+m) - \sigma(m)$$

という規則に従った数列の変換を Thiele の ρ アルゴリズムという.
$x_{2n+1}^{(0)} (n = 1, 2, \cdots)$ が変換後の数列である. $\sigma(x) = x$ と置けばこれは通常の ρ アルゴリズムに戻る.

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{3/2}}, \int_0^1 \frac{1}{(0.05+t)^{1/2}} \mathrm{d}t$$

の 2 つについて, ρ アルゴリズムを使った時と Thiele の ρ アルゴリズムを使った時の比較実験を行う.

実験手法

Thiele の ρ アルゴリズムでは次のようになる級数を加速する.

$$S_m \sim S_\infty + \sum_{k \geq 1} \frac{c_k}{(\sigma(m))^k}$$

$S_m = \sum_{k=1}^{m} \frac{1}{k^{3/2}}$ についての実験

この場合,

$$S_m \sim S_\infty + \sum_{k \geq 1} \frac{c_k}{(\sqrt{m})^k}$$

となるので, Thiele の ρ アルゴリズムにおいて $\sigma(x) = \sqrt{x}$ とおいて実験する.

Mathematica によると, $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{3/2}} = 2.612375348685488$ である.

今の場合, 定数 c_k は次の規則によって決まる.

一般化調和数の漸近展開 [a]

[a] Gourdon, X., Sebah, P. (2003). Numerical Evaluation of the Riemann Zeta-Function. http://numbers.computation.free.fr/Constants/Miscellaneous/zetaevaluations.pdf

$$\zeta(s) \sim H_m^s + \sum_{k \geq -1} \frac{B_{k+1}(s)_k}{(k+1)!m^{s+k}} \quad \text{as} \quad m \to \infty$$

H_m^s は一般化調和数とよばれ, $H_m^s := \sum_{k \geq 1}^m k^{-s}$ である. また, $\zeta(s) = \sum_{k \geq 1} k^{-s}$ である. $(s)_k$ は Pochhammer 記号である.

Bernoulli 数

B_n は Bernoulli 数とよばれ, 次の漸化式で決まる.

$$B_0 = 1, \quad B_n = -\frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n+1}{k} B_k \quad (n \geq 1).$$

$\int_0^1 \frac{1}{(0.05+t)^{1/2}}\mathrm{d}t$ を計算する際,

$$S_m = \frac{1}{m}\left\{\frac{1}{2}g(0) + \sum_{k=1}^{m-1} g\left(\frac{k}{m}\right) + \frac{1}{2}g(1)\right\},\ g(t) = \frac{1}{(0.05+t)^{1/2}}$$

とおくと, Euler-Maclaurin の公式より, $S_m \sim S_\infty + \sum_{k\geq 1}\frac{d_k}{m^{2k}}$ という形になるので Thiele の ρ アルゴリズムで $\sigma(x) = x^2$ として実験する.

Euler-Maclaurin の公式

関数 $f(x)$ が区間 $[a,b]$ で C^2 級とし, $h = (a-b)/n$ とおく. このとき,

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \sim h\left\{\frac{1}{2}f(a) + \sum_{k=1}^{m-1} f(a+kh) + \frac{1}{2}f(b)\right\}$$
$$+\sum_{k=1}^{m-1}\frac{B_{2k}}{(2k)!}h^{2k}\left\{f^{(2k-1)}(a) - f^{(2k-1)}(b)\right\}$$

kv ライブラリによると,
$\int_0^1 \frac{1}{(0.05+t)^{1/2}}\mathrm{d}t \in [1.6021765576808946, 1.602176557247085]$ である.

実験手法

$\int_0^1 \frac{1}{(0.05+t)^{1/2}}\mathrm{d}t$ には C++による精度保証付き数値計算ライブラリである"kv ライブラリ"に組み込まれている精度保証付き数値積分パッケージを使う.

精度保証付き数値計算

近似値計算と同時に計算結果の誤差評価も行う数値計算のこと. 真値を含む区間を出力する.

"kv ライブラリ"による精度保証付き数値積分の流れ [a]

[a]柏木雅英, ベキ級数演算について, http://verifiedby.me/kv/psa/psa.pdf

積分区間を分割する (実験では 20 個に分割)

$\Downarrow$

被積分関数 f に対して剰余項付き Taylor 展開を行う

$\Downarrow$

各区分で f の像を係数が区間である多項式として得る (実験では 20 次に指定)

$\Downarrow$

各区分で得られた多項式を不定積分して原始関数を得る

$\Downarrow$

各区分で区間端の値を代入して定積分の値を区間として得る

PGR 法

PGR 法は singularity confinement から導出される.

singularity confinement[a]

[a] Grammaticos B., Ramani A., Papageorgiou V. (1991). Do Integrable Mappings Have the Painlevé Property ?, Physical Review Letters, 67, 1825.

初期値に依存する特異点が有限回のステップで打ち消されてなくなり, 特異点を通過しても初期値の情報が残ることを singularity confinement という.

注意 [a]

[a] Hietarinta, J., Viallet, C. (1998). Singularity Confinement and Chaos in Discrete Systems. Physical Review Letters, 81(2), 325.

Singularity confinement であっても方程式が可積分性を持つとは限らない.

まとめ

- 加速法から可積分方程式が得られることが分かった.
- 可積分方程式が収束を加速させるとは限らないということが分かった

おまけ (加速法の応用)

級数の収束加速によって複素関数をより広い領域で計算できる (1 種の解析接続)
$\longrightarrow$ 誤差関数, 不完全 gamma 関数などの特殊関数の数値計算に応用される [3].

[3] 森正武 (2000), 解析接続と級数の収束の加速, 数理解析研究所講究録, 1155, 104-119