加速法と可積分方程式

金泉大介 (丸野研究室, 精度保証付き数値計算グループ OB)

2019 年 6 月, @柏木研究室, 数学応用数理専攻

[0] 2017 年後期の「ソリトンの数理 B」（高橋大輔先生担当）での発表を加筆しました.

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

はじめに

本資料では可積分系を扱うが, 可積分系には厳密な定義はない (可積分系を定義することを目標としている). そのため, 人によって解釈が異なることに留意する必要がある.

研究背景

可積分系と異分野の関係について様々な研究がなされている (応用可積分系).

- 数値計算 (私が興味あるのはここ)
- 幾何学 $\longrightarrow$ 可積分幾何学 (integrable geometry)[1]
- セルオートマトン [2]

[1] 井ノ口順一. (2010). 曲線とソリトン. 朝倉書店.
[2] 時弘哲治. (2010). 箱玉系の数理. 朝倉書店.

研究背景

数値計算と可積分系の関係 (可積分アルゴリズムなど) については様々な研究がなされている.

- ソリトン方程式の数値解法
  - 自己適合移動格子スキーム（Feng-Maruno-Ohta (2010), 構造保存型数値解法 [3] の一種）
  - 可積分差分スキーム (Ablowitz-Ladik, Ablowitz-Taha, Hirota etc)[4]
  - 数値逆散乱法 (numerical inverse scattering method)
  - Painlevé 方程式・Painlevé 超越関数の数値解析 (Novokshenov など)
- Riemann-Hilbert 問題の数値解 (cf: Trogdon-Olver)
- 固有値・特異値問題の数値解法と直交多項式・離散可積分系の関係 [5,6]
- 加速法と離散可積分系の関係 [7,8] $\longrightarrow$ 本資料の主題

[3] 日本では森正武先生を中心としたグループが研究を行っている.

[4] 中村佳正. (2000). 可積分系の応用数理, 裳華房.

[5] 中村佳正 et al. (2018). 可積分系の数理, 朝倉書店.

[6] 離散可積分系から創出された固有値問題の数値解法 (dLV アルゴリズムなど) と固有値に関する摂動定理・事後評価を使えば固有値の精度保証ができる. 摂動定理・事後評価については次を参照: 山本哲朗 (2003). 数値解析入門, サイエンス社. 大石進一 (2000). 精度保証付き数値計算, コロナ社. 大石進一 et al. (2018). 精度保証付き数値計算の基礎, コロナ社.

[7] 永井敦, 薩摩順吉 (1995). Acceleration Methods and Discrete Soliton Equations, 数理解析研究所講究録 933, 44-60.

[8] Papageorgiou, Grammaticos and Ramani (1993). Integrable Lattices and Convergence Acceleration Algorithms, Phys. Lett. A 179, 111-115.

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繋がりについて学ぶのが今日の目標だが, 加速法が数値計算にどう影響するかを数値実験を通して見ていくところから始めよう.

Definition (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 [b]
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 年代以降: 加速法と可積分方程式の関係が明らかになった. 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 [c,d]$\cdots$

[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] 山本哲朗 (2003). 数値解析入門 [増訂版], サイエンス社.
[c] 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.
[d] 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 年代以降の研究に着目する.

(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 [9] .

一次有理変換

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

Euler 変換

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

[9] 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,

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

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

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

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[10].

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

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.

[10] 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

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

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．

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

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

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．

プログラム例は下記を参照 (長田先生@東京女子大学のページ):
`http://www.cis.twcu.ac.jp/ osada/rikei/2009-1.html`

---

[10] ϵ アルゴリズムを作った Wynn の研究業績については次を参照:
Brezinski, C. (2019). Reminiscences of Peter Wynn, Numerical Algorithms.

ϵ アルゴリズムと離散 potential KdV 方程式

ϵ アルゴリズム

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

離散 potential KdV 方程式

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.

加速法は万能か?

収束率と収束の分類

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.
$\kappa \in [-1, 1)\backslash\{0\}$ のとき線形収束, .$\kappa = 1$ のとき対数収束するという.

Aitken 加速は線形収束数列を加速できるが, .$p(> 1)$ 次収束数列に適用すべきでない.

山本哲朗 (2003). 数値解析入門 [増訂版], サイエンス社.
Reich, S. (1970). On Aitken's Δ^3-Method. The American Mathematical Monthly, 77(3), 283-284.

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.

中村佳正. (2000). 可積分系の応用数理, 裳華房.

Aitken 加速, 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, 他の加速法が必要になる.

対数収束数列について

Theorem (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.

Theorem (Gray-Clark, 対数収束の判定法)

実単調数列 S_n が s に収束して,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\Delta S_{n+1}}{\Delta S_n} = 1 \quad (\Delta\text{: 前進差分})$$

を満たすなら, S_n は s に対数収束する.

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.

加速法の数値実験

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

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.

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

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 によると近似値は以下のとおり:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{3/2}} = 2.612375348685488$$

.

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

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 は一般化調和数で, $H_m^s := \sum_{k\geq 1}^{m} k^{-s}$ である. また, $\zeta(s) = \sum_{k\geq 1} k^{-s}$ (Zeta 関数) である.

$$(s)_k := s(s+1)\cdots(s+k-1), \quad \text{(Pochhammer 記号)}.$$

Definition (Bernoulli 数)

B_n は *Bernoulli* 数とよばれ, 次の漸化式で決まる.

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

Weisstein, Eric W. "Bernoulli Number." From MathWorld–A Wolfram Web Resource. http://mathworld.wolfram.com/BernoulliNumber.html

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

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

とおくと, Euler-Maclaurin の公式により, $S_m \sim S_\infty + \sum_{k\geq 1} \frac{d_k}{m^{2k}}$ 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,

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

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

山本哲朗 (2003). 数値解析入門 [増訂版], サイエンス社.

kv ライブラリによると真値の存在範囲は次の通り:

$$\int_0^1 \frac{1}{(0.05+t)^{1/2}} dt \in [1.6021765576808946, 1.602176557247085].$$

実験手法 (精度保証付き数値積分)

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．

大石進一 et al. (2018). 精度保証付き数値計算の基礎, コロナ社.
大石進一 (2000). 精度保証付き数値計算, コロナ社.
Tucker, W. (2011). Validated numerics: a short introduction to rigorous computations. Princeton University Press.

"kv ライブラリ"による精度保証付き数値積分の流れ

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.

Definition (singularity confinement)

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.
→ かつては離散方程式の可積分性判定に使われていた.

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

注意 (Hietarinta-Viallet, 1998)

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

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

[10]Hietarinta-Viallet (1998) を契機に代数的エントロピー (Falqui-Viallet, 1993) で離散方程式の可積分性を判定しようという研究がより盛んになった. なお代数的エントロピーは区間演算における区間幅の増大と関係があるのではないかといわれている.

加速法の応用

Steffensen 反復

Aitken 加速の応用で, $x = g(x)$ の根を求める反復法である. 初期値をうまくとれば 1 次収束する ($g(x)$ が C^1 級なら超 1 次収束, C^2 級なら 2 次収束する.).

山本哲朗 (2003). 数値解析入門 [増訂版], サイエンス社.

Romberg 積分 (Romberg, 1955)

台形公式と加速法を組み合わせた数値積分法である. Bauer-Rutishauser-Stiefel (1963) により詳細な解析がなされている.

Romberg, W. (1955). Vereinfachte numerische integration. Norske Vid. Selsk. Forh., 28, 30-36.

山本哲朗 (2003). 数値解析入門 [増訂版], サイエンス社.

大石進一 et al.(2018) 精度保証付き数値計算の基礎, コロナ社.

特殊関数への応用

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)

$\rightarrow$ 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.

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.

まとめ

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

加速法に関する参考文献

- N. Osada (1993) Acceleration Methods for Slowly Convergent Sequences and their Applications, PhD Thesis.
- Brezinski, C., & Redivo-Zaglia, M. (2019). The genesis and early developments of Aitken's process, Shanks transformation, the ϵ-algorithm, and related fixed point methods. Numerical Algorithms, 80(1), 11-133.

(参考) 最近の研究

- Brezinski, C., He, Y., Hu, X. B., Sun, J. Q., & Tam, H. W. (2011). Confluent Form of the Multistep ϵ-Algorithm, and the Relevant Integrable System. Studies in Applied Mathematics, 127(2), 191-209.
- Chang, X. K., He, Y., Hu, X. B., & Li, S. H. (2018). A new integrable convergence acceleration algorithm for computing Brezinski-Durbin-Redivo-Zaglia's sequence transformation via Pfaffians. Numerical Algorithms, 1-20.