数値解析（松尾）　期末レポート　　　　　　2020 年 1 月 18 日

- 質問は matsuo@mist.i.u-tokyo.ac.jp まで.
- **提出日： 2021 年 2 月 12 日 (金) 正午（12:00）**．提出先：ITC-LMS.
- PDF ファイルひとつにまとめて提出.（複数のファイルをアップロードできるが，処理が大変なのでひとつの PDF にまとめてください.）
- 計算機を使う場合，計算環境（分かる範囲で良い）を付記すること．またプログラムコードも添付することが望ましい．コードが長く添付が難しい場合などは，適当なクラウド上に置き，そこへの URL を含めるのでもよい.

「数値解析」の期末レポートは，自由研究課題とする．下記の要領に沿ってレポートを作成し提出せよ．課題が見つけにくい場合は，後続の節に記した具体的課題をベースとして用いてもよい.

1　期末レポート課題：自由研究課題

「数値解析」講義で学習したトピック，あるいはその周辺のトピックについて（すなわち講義で扱っていない算法等も対象としてよい），実装・解析・評価等を行う課題を設定し，結果をまとめて報告せよ．

内容は問わないが，例えば以下のようなトピックが考えられる.

- 講義で習ったが，数値例（プログラム）が与えられなかった算法を実装し，数値的性能を評価する．特に，複数の算法の比較を行う.
- 既存の算法について，自分なりの改良を提案する
- 既存の算法（等）について，数学的な解析を行う
- 具体的な応用例題に対して算法を適用し，その問題についての，および使用した算法についての考察を行う，など.

論述は，例えば以下のようにきちんとシナリオ立てて行うこと.

1. 目的：何を見たい，行いたいのか.
2. 研究の方法と計画：それをどのように行うのか
3. 実際の実施・遂行
4. 結果とその考察：得られた結果そのものについての考察
5. 結論と残された課題：最初の「目的」に照らしてより広い視点からの考察

課題の内容によっては構成が変わりうるので，必ずしもこれに厳密に従う必要はない．また，松尾のホームページに「レポートの書き方」の一般的な説明を書いておいたので，適宜それも参照のこと：
http://www.sr3.t.u-tokyo.ac.jp/matsuo/?p=797

評価（採点）は，以下のポイントについて行う．以下の★ひとつは，第１回，第２回レポートの★と同じ程度の重さである予定である.

- 評価点１：課題設定の適切さ（★）
  課題設定は妥当・適切であるか
- 評価点２：研究の計画・方針の適切さ（★★）
  上で設定した課題に対して，適切な計画・方針が立てられているか
- 評価点３：具体的な実行内容（★★）
  上で立てた計画・方針に基づき，適切な研究実行が成されているか

- 評価点４：考察・結論（★）
  上の結果について，妥当な考察が与えられ，レポート全体に適切な結論が導き出されているか
- 評価点５（エクストラ）：上記がひととおり適切に与えられた上で，さらにプラス評価できる点があるか（☆〜☆☆）

評価点３，４は便宜上（★★）,（★）と分けて書いたが，連動しているので，合わせて（★★★）程度のつもりである．

最後の☆は，レポートに特に高い独創性，工夫が凝らされている点，トータルとしての完成度の高さなどが認められる場合に，それについて与えられるボーナス点である（☆の重さは★とほぼ同じの予定）．細かい（小さな）独創性などももちろん評価の対象となるが，それを含めて全体的に判断するつもりである．成績で優上を目指す人はこのレベルの評価を目指すとよい．このボーナス点は，必ずしもレポート分量（ページ数）の多寡，瑕疵のあるなしではない．

※第一回，第二回レポートに引き続き，どうしても計算機が使えない人は，紙と鉛筆だけで検討できる課題を設定してもよい．さらに，その課題設定も難しい場合には，次節で紹介する各種話題や，第一回，第二回レポートの中で紙と鉛筆で検討できるもの（で，自分が過去に解いていないもの）を拾い，それを束ねてレポートとしてもよい．ただし，いずれの場合にも,（実際の計算を奨励している「数値解析」講義としては）満額の評価とはならない可能性があるので，その点は承知の上で行うこと．

※皆さんのレポートの中に，学問的に新規かつ重要なアイデア・結果が含まれていることに気づいた場合には，きちんとその旨をお知らせします.（研究倫理の問題；松尾がそれを黙って盗用することは決して行いません.）

2　ベース課題例

特に課題が思いつかない人のために，自然に考え得るトピックをいくつか挙げておく．これらをベースとして自分なりの課題を設定してもよい.（下記を採用してもすぐに課題・研究方法設定等に満点が付くとは限らないし，反対に下記をベースにしていても，工夫を凝らした場合は独創性のプラス評価が付く可能性はある．また，下記に類似のトピックを設定する場合でも，下記のヒントを無視して自分なりの方法を設定してももちろんよい.）

2.1　各種連立一次方程式の解法の比較

講義で，直接法・反復法，様々な解法を紹介したが，ごく一部の簡単な数値例以外は紹介できなかった．これらについて自分で色々試し，性能評価してみるというのはひとつの課題案であろう．その際，例えば次のような点が具体的な検討対象になりうる．

- 種々の反復法について，実際の行列に適用したときの収束の様子の違い
- 特に SOR 法について，算法パラメータ ω への依存性，理論的に最適値を議論できるかどうかの検討
- 共役勾配法 (CG 法）について，前処理の種類やその影響の調査
- 帯行列に対する LU 分解の算法設計・実装とその評価

実際に科学・工学で出現する行列は，各種行列データサイトに多数掲載されており，それらを参照することもできる．いくつかそのようなサイトのリンクを ITC-LMS 上に用意しておくので必要に応じて参照のこと．

2.2　数値積分公式の実装と評価

数値積分については，過去のレポートでは出題しなかった．これは実は，Gauss 型数値積分公式，二重指数変換型公式のどちらについても，講義で説明した手法概略に加えてそれぞれ実装上の工夫が必要で，実装にはかなり手間がかかるためである．同じ理由でサンプルプログラムも（非常に単純な複合台形則を除いて）提供していなかったため，ひとつの課題設定としては，自分で算法実装方法を調べ（考え），実装して様子を見ることが考えられる．

Gauss 型積分を実装するには，分点と重みの値が必要になる．代表的な分点数に対して事前に値が与えられておりそれを使うライブラリもあるが，以下のヒントを参考に，自力でそれらも計算して積分公式を実装することも可能である．以下の説明では一番簡単な Gauss–Legendre の場合だけを考え，Legendre 多項式の係数は（直交性だけからは定まらないが），Wikipedia の Ledendre 多項式ページ：
`https://en.wikipedia.org/wiki/Legendre_polynomials`
にも載っている標準的なものを採用するとする.（以下のヒントは，他の Gauss 型公式（すなわち直交多項式）の場合にも実は同様のものが成立する.）

- 積分の重み w_k は，実は解析的に積分を実行できる：

  $$w_k := \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x = \frac{2(1-{x_k}^2)}{(nP_{n-1}(x_k))^2} \qquad (k=1,\ldots,n).$$

  ただし $P_{n-1}(x)$ は $(n-1)$ 次 Legendre 多項式，x_k は $P_n(x)$ の零点.（紙と鉛筆サブ課題：証明には直交多項式の性質（講義で説明していないもの）も使い，やや複雑である．興味がある人は証明を調べてみよ.）
- $P_n(x)$ の零点は，各点 x_k ごとに Newton 法で求めるのが通例である．初期値は

  $$\cos\left(\frac{\pi(k-1/4)}{n+1/2}\right) \qquad (k=1,\ldots,n)$$

  が十分良いことが知られている.（紙と鉛筆サブ課題：n が大きいときの $P_n(\cos(\theta))$ の漸近挙動に基づく．興味がある人は上の Wikipedia ページを見ながら理屈を考えてみよ.）
- 算法を実際に動かすには，$P_n(x)$，$(P_n(x))'$ の関数値の計算が必要である．これには，Legendre 多項式の満たす漸化式，例えば

  $$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \qquad (n=1,2,\ldots)$$

  などを使えばよい（他に成立する漸化式は，例えば上の Wikipedia を参照）.（紙と鉛筆サブ問題：これは「数値解析」講義で常に警戒してきた「三項間漸化式」というやつである．この漸化式は数値計算に使って安全か，考察してみよ.）

※現在標準と思われている計算手順は上記であるが，必ずしもこれに完全に従わず，自分なりにやれることを模索しても，もちろんよい．

二重指数関数型積分公式は，講義で説明したように，被積分関数の特異性（パラメータ d）が判定できないと実装が困難であるが，これをいくつかの値を試しながら挙動を観察する，というのも興味深い話題である．なお，講義で紹介した変数変換の場合，それ自体から来る特異性から，そもそも $(0 \le) d \le \pi/2$ である．

2.3　微分方程式の数値解法の評価

講義では解法は色々紹介したが，後半紹介した構造保存型解法を中心に，数値例は十分見せられなかった．例えば，具体的な問題に種々の解法を適用して，性能を比較するということは考え得る．その際には，

- どのような問題を扱うか
- どのような手法を比較するか，どういう観点から比較するか
- 講義で習った（あるいは習っていないが，自分で文献に当たって調べた）理論に照らして，挙動は整合的か

などが（例えば）論点となるであろう．

下記に縛られることは全く推奨しないが，参考までに，具体的な Hamilton 系をいくつか与えておく．

[単振り子（剛体振り子）] 自由度 1 の Hamilton 系で $H(q,p) = p^2/2 - \cos(q)$ としたもの：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ -\sin q \end{pmatrix}.$$

$H(q,p)$ は保存量．座標系の定義から近似解は振り子の運動面（円）から決して出ないが，保存的でない解法の場合，エネルギー H が変化するため，(q,p) の 2 次元位相空間上では正しい軌道に乗らない．

[（Undamped）Duffing 振動子] 上記同様自由度 1 の Hamilton 系で，

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2} + \frac{(1-q^2)^2}{4}$$

としたもの．さらに，Hamilton 系を定義する symplectic 行列を

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -d \end{pmatrix}, \qquad d > 0$$

と変更した「摩擦項」付きを通常「Duffing 振動子」と呼ぶ．このとき

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}H(q,p) \leq 0.$$

すなわちこの問題は散逸的で，解は不動点 $(q,p) = (\pm 1, 0)$ に漸近する．（原点 $(q,p) = (0,0)$ も不動点だが，不安定で厳密解はそこには近づかない．）

[Hénon–Heiles 系] 自由度 2 の Hamilton 系で，

$$H(q,p) = \frac{{p_1}^2 + {p_2}^2}{2} + \frac{{q_1}^2 + {q_2}^2}{2} + {q_1}^2 q_2 - \frac{{q_2}^3}{3}$$

としたもの．銀河中心の惑星の運動を記述（？）し，軌道はカオス的．また原点 $q = 0$ の十分近くから出発すれば厳密解は有界領域（三角形になる）に閉じ込められるが，保存的でない場合，近似解はその限りではない．

[Kepler 問題] 自由度 2 の Hamilton 系で，

$$H(q,p) = \frac{{p_1}^2 + {p_2}^2}{2} + \frac{1}{\sqrt{{q_1}^2 + {q_2}^2}}$$

としたもの．ご存じ二体問題．以下の 3 つの保存量を持つ．

- $H(q,p)$
- 角運動量ベクトル $L = q \times p$（ただし「$\times$」はベクトルの外積）
- Laplace–Runge–Lenz ベクトル $p \times L - q/\|q\|$（これは楕円軌道の長軸を向く）

上ふたつを保存する解法は容易に作れるが，3 つすべての保存は常人には無理（→ Minesaki–Nakamura, Phys. Lett. A, **306**(2002), 127–133）．その帰結として，非保存的な解法はもちろん，保存的な解法であっても，一般には LRL ベクトルの破壊によって運動面は非物理的なものとなる．