数値解析（松尾）　レポート　　2020年12月21日

- 質問は `matsuo@mist.i.u-tokyo.ac.jp` まで．バグ等補足情報は ITC-LMS にて．
- **提出日： 2021年1月12日 (火) 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.）
- レポート冒頭に「数値解析（第２回）レポート」であること,「学籍番号，氏名」「どの問題を選択したか」を明記．その他，細かい注意事項を ITC-LMS に記したので，それをよく参照すること．
- 下記から**「★３つ分」**の問題を選択し解答せよ．★４つ分以上の組み合わせを選択しても差し支えないが，原則として成績には★３つ分しか参入されない．
- 計算機を使う場合, 計算環境（分かる範囲で良い；一般に数値解析論文で書かれるのは「CPU，メモリ量，OS，使ったプログラミング言語とそのバージョン」など）を付記すること．またプログラムコードを添付することが望ましい．

【手で解く問題】

(1) [★] 講義で紹介した Gauss–Legendre 数値積分が $(2n-1)$ 次多項式まで真値を与える性質が，より一般に他の直交多項式に基づく Gauss 型公式においても成立することを示せ．ただし，単なる数式の羅列ではなく，きちんと論証を行うこと．

(2) [★★] 常微分方程式 $\mathrm{d}y/\mathrm{d}t = f(y(t))$（これを「自励系」と言う） に対して，算法

$$\frac{y^{(m+1)} - y^{(m)}}{\Delta t} = F(y^{(m+1)}, y^{(m)}) \qquad (m = 0, 1, 2, \ldots)$$

を考える．ただし $F(y^{(m+1)}, y^{(m)})$ は,

$$F(y, y) = f(y), \quad F(y, \tilde{y}) = F(\tilde{y}, y)$$

を満たす任意の十分滑らかな関数とする．この算法式に微分方程式の真の解を代入したときの「残差」：

$$R := \frac{y((m+1)\Delta t) - y(m\Delta t)}{\Delta t} - F(y((m+1)\Delta t), y(m\Delta t))$$

について，ある $p \in \{1, 2, \ldots\}$ が存在して $|R(\Delta t)| = O(\Delta t^{2p})$ が成立することを示せ.（すなわち,「時間対称な」算法は常に最低でも 2 次精度を達成する．これは，微分方程式の数値解析分野ではよく知られた事実である.）
（ヒント：時刻 $(m + 1/2)\Delta t$ を中心に Taylor 展開を考える.）

【自分でプログラムを書く計算問題】

(3) [★] Newton 法により，様々な数値演算を実装することを考える．

(i) 実数の加算・減算・乗算はできるが，除算 $a \mapsto 1/a$（ただし $a \in \mathbb{R}, a \neq 0$）がまだ実装されていない計算機を考える．うまい関数 $f(x)$ を考えると，それに対する Newton 法で，加減乗算のみで $1/a$ が求められる．そのような $f(x)$ を作り，実際に Newton 反復を実装し様子を観察せよ．

(ii) 四則演算はできるものとする．実数 $a > 0$ に対し，その p 乗根を求めるための Newton 法反復を考案し，実際に実装して様子を観察せよ．

なおどちらにおいても，$f(x)$ のグラフを描き，反復が安全に収束するための初期値の取り方について考察し，それを数値的に確かめよ（証明する必要はない）.

(4) [★] 積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}$$

を考える．これは実軸上の解析関数の積分であり，複合台形則が極めて良く働くはずの問題である．複合台形則を実装し，それを確認せよ.（無限和はとれないので，離散化幅 h を決めるごとに，和の範囲を適宜決め打ち切る方法を考えること.）

(5) [★★] 講義で説明したように，Dahlquist の（第二）バリアーによって，絶対安定な 3 次以上の線形多段法は存在しない．しかし，極めて広い安定領域を持つ線形多段法も存在し,「後退微分公式」（“Backward Differentiation Formula (BDF)）がその典型例である：k を公式の次数として，

$$\begin{aligned}
k = 1 :& \frac{1}{\Delta t}(y^{(m+1)} - y^{(m)}) = f(y^{(m+1)}), \qquad \text{（陰的 Euler 法と一致）}\\
k = 2 :& \frac{1}{\Delta t}(\tfrac{3}{2}y^{(m+1)} - 2y^{(m)} + \tfrac{1}{2}y^{(m-1)}) = f(y^{(m+1)}),\\
k = 3 :& \frac{1}{\Delta t}(\tfrac{11}{6}y^{(m+1)} - 3y^{(m)} + \tfrac{3}{2}y^{(m-1)} - \tfrac{1}{3}y^{(m-2)}) = f(y^{(m+1)}),\\
k = 4 :& \frac{1}{\Delta t}(\tfrac{25}{12}y^{(m+1)} - 4y^{(m)} + 3y^{(m-1)} - \tfrac{4}{3}y^{(m-2)} + \tfrac{1}{4}y^{(m-3)}) = f(y^{(m+1)})
\end{aligned}$$

などである（最高 6 次の公式まで存在する．7 次以上の算法を同様の方針で設計すると，残念ながら安定領域が極めて狭くなり実用に耐えない）．2 次公式までは絶対安定，それ以上の公式は絶対安定とはならないが，虚軸付近を除く左半平面のほとんどが安定領域に入っている（具体的な安定領域の形状は Wikipedia「後退微分公式」のページなどを参照のこと）．

(i) Dahlquist のテスト方程式にこの手法を適用し，(I) それぞれ宣言された精度（次数）が達成されているかどうか，(II) 実際に「安定領域が広い」かを数値的に検証せよ.（テスト方程式の係数についていくつかの場合を試す，$k \in \{2,3,4\}$ のうち少なくとも 2 つ以上について試す，など，ある程度網羅的な検証になるよう工夫すること.）

(ii) 次の方程式は，数値的に解きにくい典型例として有名な問題である（「硬い（“stiff”）」微分方程式と呼ばれる）．これに BDF，および陽的 Euler 法を適用し，挙動を観察せよ．またなぜそのようになるか，可能な範囲で考察せよ．

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = -50(y - \cos(t)), \qquad y(0) = 0.$$

(iii) (ii) のように一般に右辺項 $f(y)$ が非線形な場合，BDF は各時間ステップで非線形方程式の解法を避けられないが，一方で,（特に連立常微分方程式で次元が高い場合），BDF は計算量が公式の次数 k にあまり依存しない（すなわち次数を上げてもあまり計算量は増えない）と考えられる．それがなぜか，説明せよ．

（番外） 講義についての要望・感想等があったら，**ITC-LMS での提出時にコメント欄に**書いてください．

※有意な意見に対しては,「$+\varepsilon$（$\varepsilon > 0$)」

※ ITC-LMS のコメント欄に書き切れない場合は，ITC-LMS で「レポートに意見を書きました」とコメントを付け，レポートの方に書いてください．