N体系の計算と計算精度について

第3回HPC-Phys勉強会

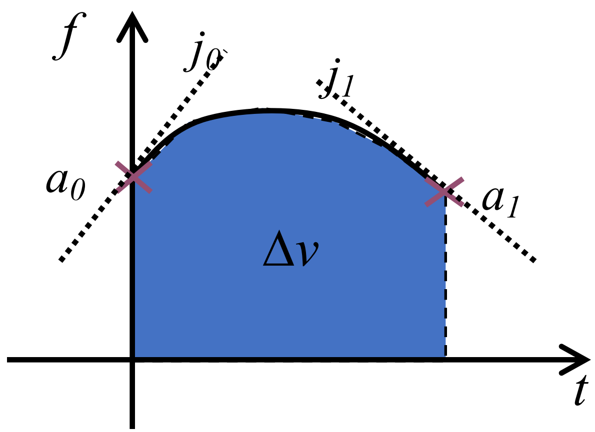
理研CCS　似鳥啓吾　（にたどり　けいご）

簡単に自己紹介

- 国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センターコデザイン推進チーム研究員
- 東大理学天文出身（09年3月博士号）
- 専門：N体計算の高速化や高精度化

- 量子力学のことはよくわからないのですが、重点課題９の会議（格子QCD）に参加させてもらっています

今日の話：高次Hermite積分法の構築



$$\boldsymbol{a}_i = G\sum_{j\neq i}^{N}\frac{m_j}{r_{ij}^3}\boldsymbol{r}_{ij}$$

$$\dot{\boldsymbol{a}}_i = G\sum_{j\neq i}^{N}\frac{m_j}{r_{ij}^3}\left[\boldsymbol{v}_{ij} - \frac{3(\boldsymbol{v}_{ij}\cdot\boldsymbol{r}_{ij})}{r_{ij}^2}\boldsymbol{r}_{ij}\right]$$

$$\Delta\boldsymbol{v} = \frac{\Delta t}{2}(\boldsymbol{a}_0 + \boldsymbol{a}_1) + \frac{\Delta t^2}{12}(\dot{\boldsymbol{a}}_0 - \dot{\boldsymbol{a}}_1)$$

- 常微分方程式の数値解法のひとつ
  - 線形多段階法、予測子修正子法のひとつ
- ４次のものが*N*体計算ではよく使われている（Makino & Aarseth, 1992）
  - 重力加速度の１階導関数（jerk）も直接計算、２段法で４次精度
  - Hermite補間で３次の多項式を構築

より高次の方法

- Nitadori & Makino (2008)
  - 加速度の２階微分（snap）まで計算して６次精度
  - 加速度の３階微分（crackle）まで計算して８次精度
  - 人力で最適化された謎の導関数公式を使用した（Findlay 1983 via Aarseth 2003）
  - なので８次精度で打ち止め、一般化までは考えず

with $a = \mathbf{R} \cdot \mathbf{V}/R^2$. The total contributions are obtained by summation over all N particles. Next, the mutual second- and third-order terms are formed from

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij}^{(2)} &= -m_j(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j)/R^3 - 6a\mathbf{F}_{ij}^{(1)} - 3b\mathbf{F}_{ij}\,, \\ \mathbf{F}_{ij}^{(3)} &= -m_j(\mathbf{F}_i^{(1)} - \mathbf{F}_j^{(1)})/R^3 - 9a\mathbf{F}_{ij}^{(2)} - 9b\mathbf{F}_{ij}^{(1)} - 3c\mathbf{F}_{ij}\,, \end{aligned} \tag{2.5}$$

with

$$\begin{aligned} b &= \left(\frac{V}{R}\right)^2 + \frac{\mathbf{R} \cdot (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j)}{R^2} + a^2\,, \\ c &= \frac{3\mathbf{V} \cdot (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j)}{R^2} + \frac{\mathbf{R} \cdot (\mathbf{F}_i^{(1)} - \mathbf{F}_j^{(1)})}{R^2} + a(3b - 4a^2)\,. \end{aligned} \tag{2.6}$$

A second double summation gives the corresponding values of $\mathbf{F}^{(2)}$ and $\mathbf{F}^{(3)}$ for all particles. This pair-wise *boot-strapping* procedure provides a convenient starting algorithm, since the extra cost is usually small. Here

より高次／高精度を目指して

考えられる問題、疑問と回答

- 導関数計算のコストは？人間が正しく実装できる？
  - 項数が線形にしか伸びずp階微分までは$O(p^2)$で計算できることがわかった
  - チェーンルールを用いた自動微分というアプローチもある
- 積分公式の係数とか巨大な有理密行列になって大変では？
  - LU分解しておけば次数に依存しないかたちで書けることがわかった。$A^{-1} = U^{-1}L^{-1}$の成分に一般型はみつかっていない
- 倍精度で足りる？
  - 12次精度ぐらいで倍精度ギリギリの計算ができる、16次精度では次数を確認するにもdouble-double型が必要だった
- そもそもそんな高精度は必要？
  - 必要な問題を探してくるとか設定する必要がある（太陽系の長期安定性解析とか）

公開コード

- 16次精度まで実装してみたもの
  https://github.com/nitadori/HighOrder
  - 力の計算には簡単なコード生成（といってもループを回してprintするだけのもの）を行ってみた
  - 積分のところは手書き
- 自動微分型
  https://github.com/nitadori/AutoDer
  - {pos} -> {acc}のような実装を書くだけで{pos, vel} -> {acc, jrk}を計算するコードが発生する
  - Post-Newtonianとか色んな常微分方程式でHermite積分を試してみたい人向け
  - 3階微分（8次精度）用までを作った

積の高階微分

- 項数は線形にしか増えない
- 係数はパスカルの三角形

$$
\begin{aligned}
z &= xy \\
\dot{z} &= \dot{x}y + x\dot{y} \\
\ddot{z} &= \ddot{x}y + 2\dot{x}\dot{y} + x\ddot{y} \\
\dddot{z} &= \dddot{x}y + 3\ddot{x}\dot{y} + 3\dot{x}\ddot{y} + x\dddot{y}
\end{aligned}
$$

冪関数の高階微分

- もう少し工夫が必要

無題 1

```
(%i1) depends(x, t);
```

(%o1) $[x(t)]$

```
(%i2) y : x^n;
```

(%o2) x^n

```
(%i3) diff(y, t, 5);
```

(%o3)
$$n\,x^{n-1}\left(\frac{d^5}{d\,t^5}x\right)+5\,(n-1)\,n\,x^{n-2}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)\left(\frac{d^4}{d\,t^4}x\right)+10\,(n-1)\,n\,x^{n-2}\left(\frac{d^2}{d\,t^2}x\right)\left(\frac{d^3}{d\,t^3}x\right)+10\,(n-2)(n-1)\,n\,x^{n-3}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)^2\left(\frac{d^3}{d\,t^3}x\right)+15\,(n-2)(n-1)\,n\,x^{n-3}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)\left(\frac{d^2}{d\,t^2}x\right)^2+10\,(n-3)(n-2)(n-1)\,n\,x^{n-4}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)^3\left(\frac{d^2}{d\,t^2}x\right)+(n-4)(n-3)(n-2)(n-1)\,n\,x^{n-5}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)^5$$

```
(%i4) ratsimp(%);
```

(%o4)
$$\left(n\,x^{n+4}\left(\frac{d^5}{d\,t^5}x\right)+(5\,n^2-5\,n)\,x^{n+3}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)\left(\frac{d^4}{d\,t^4}x\right)+\left((10\,n^2-10\,n)\,x^{n+3}\left(\frac{d^2}{d\,t^2}x\right)+(10\,n^3-30\,n^2+20\,n)\,x^{n+2}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)^2\right)\left(\frac{d^3}{d\,t^3}x\right)+(15\,n^3-45\,n^2+30\,n)\,x^{n+2}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)\left(\frac{d^2}{d\,t^2}x\right)^2+(10\,n^4-60\,n^3+110\,n^2-60\,n)\,x^{n+1}\left(\frac{d}{d\,t}x\right)^3\left(\frac{d^2}{d\,t^2}x\right)+(n^5-10\,n^4+35\,n^3-50\,n^2+24\,n)\,x^n\left(\frac{d}{d\,t}x\right)^5\right)/x^5$$

wxMaximaへようこそ 入力可能

冪関数の微分（工夫したもの）

- 自分より低階の微分を再利用する形になる
- 係数はパスカルの三角形に似たもの

対数を取ってから微分

$$
\begin{aligned}
y &= x^n \\
\ln y &= n \ln x \\
\frac{\dot{y}}{y} &= n\frac{\dot{x}}{x} \\
0 &= n\dot{x}y - x\dot{y}
\end{aligned}
$$

これで項数は線形にしか増えない

$$
\begin{aligned}
0 &= n\dot{x}y - x\dot{y} \\
0 &= n\ddot{x}y + (n-1)\dot{x}\dot{y} - x\ddot{y} \\
0 &= n\dddot{x}y + (2n-1)\ddot{x}\dot{y} + (n-2)\dot{x}\ddot{y} - x\dddot{y}
\end{aligned}
$$

結局このかたちに落ち着く

$$
\begin{aligned}
\dot{y} &= \left[n\dot{x}y\right]/x \\
\ddot{y} &= \left[n\ddot{x}y + (n-1)\dot{x}\dot{y}\right]/x \\
\dddot{y} &= \left[n\dddot{x}y + (2n-1)\ddot{x}\dot{y} + (n-2)\dot{x}\ddot{y}\right]/x
\end{aligned}
$$

Newton重力の微分

- 積の微分と冪関数の微分ができれば十分

重力加速度の計算式は,

$$\ddot{\boldsymbol{r}} = -GM\left[(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r})^{-3/2}\right]\boldsymbol{r}$$

$s = (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r})/2$ と置くことで,

$$\begin{aligned}\dot{s} =& (\boldsymbol{r}\cdot\dot{\boldsymbol{r}})\\ \ddot{s} =& (\boldsymbol{r}\cdot\ddot{\boldsymbol{r}}) + (\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\dot{\boldsymbol{r}})\\ \dddot{s} =& (\boldsymbol{r}\cdot\dddot{\boldsymbol{r}}) + 3(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\ddot{\boldsymbol{r}})\end{aligned}$$

$q = (2s)^{-3/2}$ と置くことで,

$$\begin{aligned}\frac{\dot{q}}{q} =& -\frac{1}{s}\left[3\dot{s}\right]\\ \frac{\ddot{q}}{q} =& -\frac{1}{s}\left[3\ddot{s} + 5\dot{s}\left(\frac{\dot{q}}{q}\right)\right]\\ \frac{\dddot{q}}{q} =& -\frac{1}{s}\left[3\dddot{s} + 8\ddot{s}\left(\frac{\dot{q}}{q}\right) + 7\dot{s}\left(\frac{\ddot{q}}{q}\right)\right]\end{aligned}$$

加速度は $\boldsymbol{a} = -GMq\boldsymbol{r}$ なので,

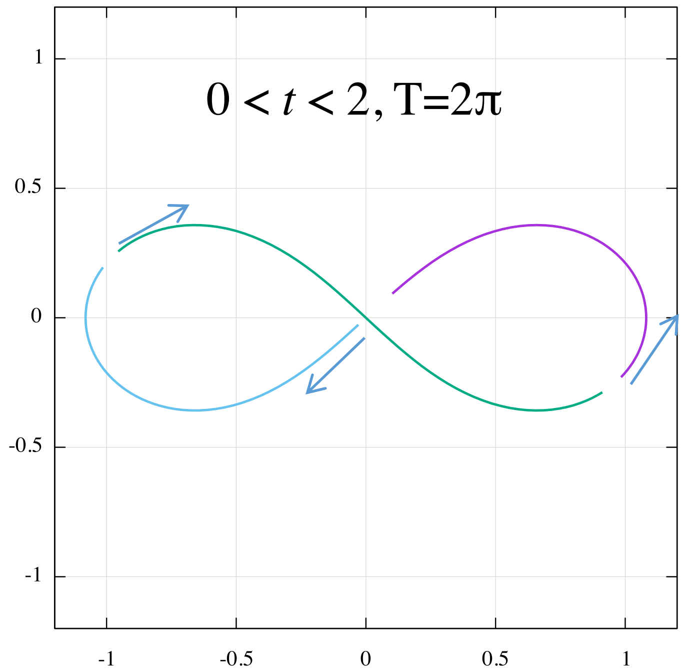
$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{a}} =& -GMq\left(\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\dot{q}}{q}\boldsymbol{r}\right)\\ \ddot{\boldsymbol{a}} =& -GMq\left(\ddot{\boldsymbol{r}} + 2\frac{\dot{q}}{q}\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\ddot{q}}{q}\boldsymbol{r}\right)\\ \dddot{\boldsymbol{a}} =& -GMq\left(\dddot{\boldsymbol{r}} + 3\frac{\dot{q}}{q}\ddot{\boldsymbol{r}} + 3\frac{\ddot{q}}{q}\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\dddot{q}}{q}\boldsymbol{r}\right)\end{aligned}$$

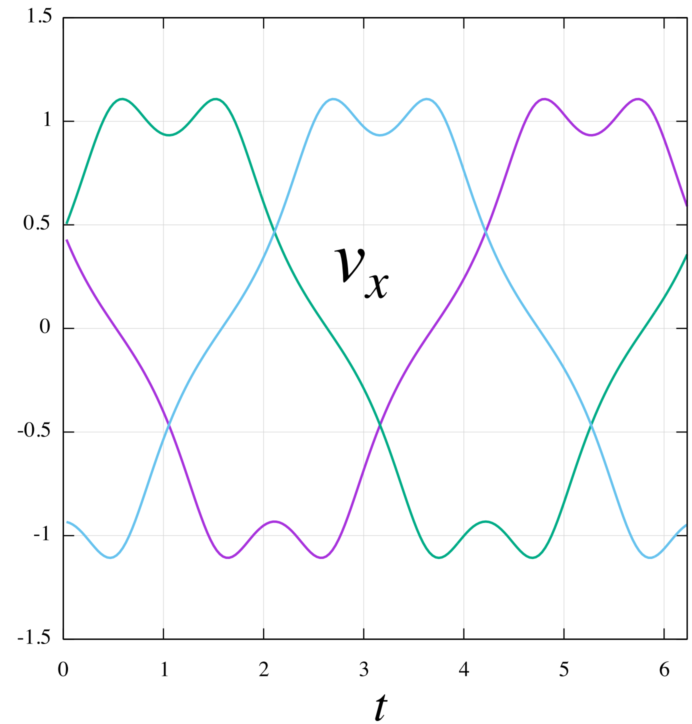
多倍長ライブラリQDの利用

- 106-bitのdouble-doubleと212-bitのquad-doubleが提供されている
- C++からdd_realをもちいる場合、四則演算だけならヘッダのみで使える（今回はこれを利用した）
- FMA (fused multiply-add)が使えるハードウェア（Intelなら Haswell以降）では乗算が高速
- 簡単な係数を掛ける操作ならdouble * double-double

- 倍精度のままでは高次積分法の検証もできない！
  - 誤差の傾きを測れない
  - 安定する刻み幅では打切り誤差が既に丸め誤差を下回ることも

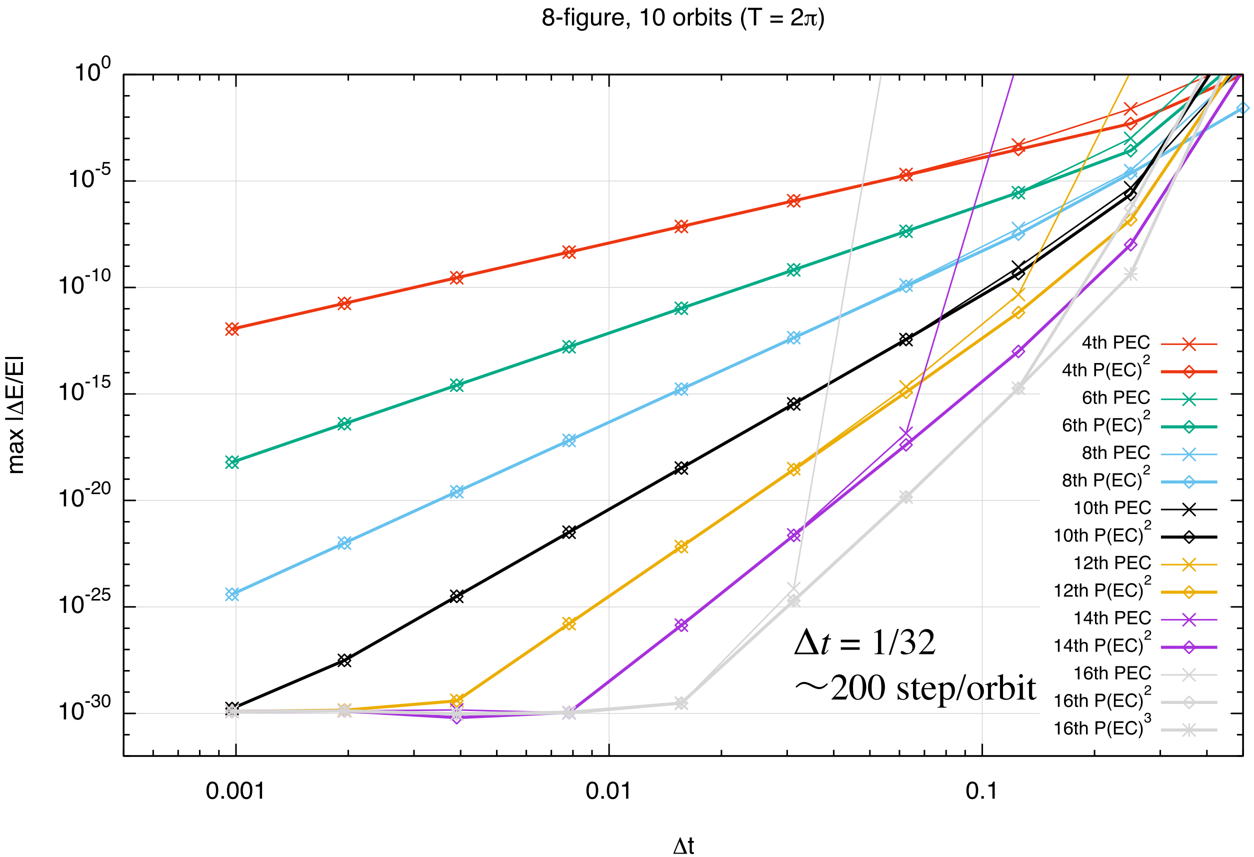
数値計算（８の字解）





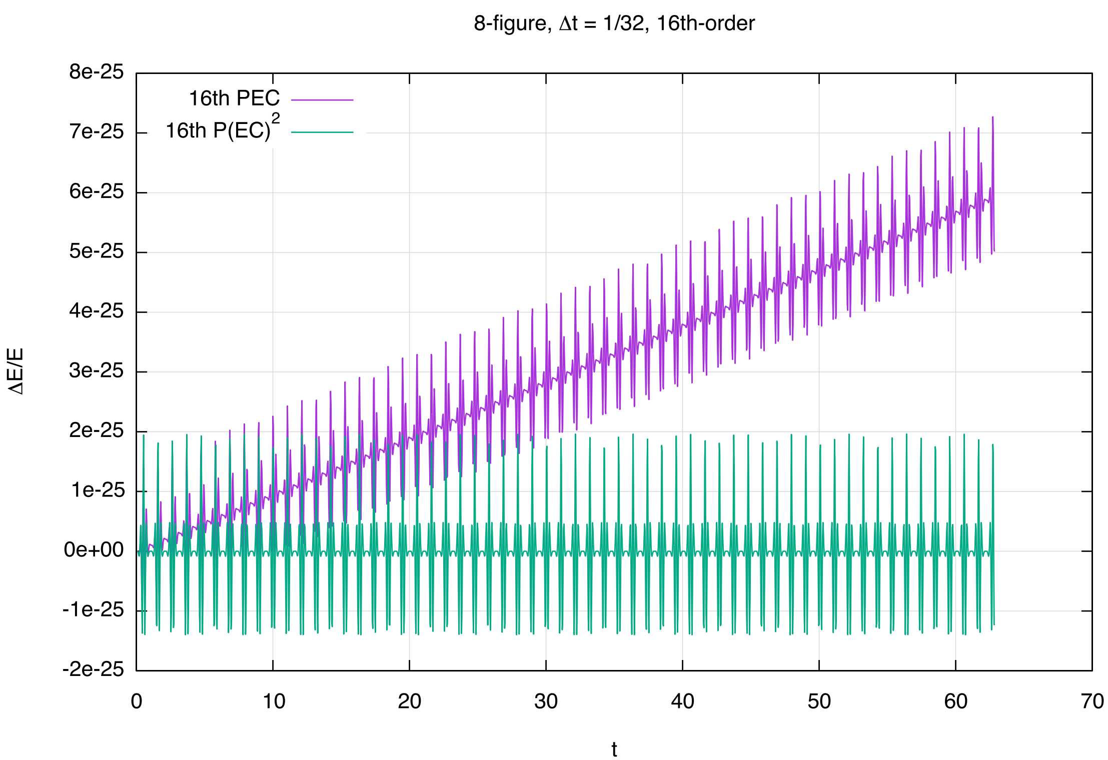
- 今世紀になってから発見された３体問題の解
- 速度が波打つのでそんなに大きな刻み幅はとれない

エネルギー誤差



- 高次に行くほどPECモードでは安定しなくなる
- P(EC)^{2}であればそれなりに安定する

時間対称性



- P(EC)^{2}モードではエネルギー誤差が積もらない
- これは周期解を持つ系に対する時間対称積分法の性質
- ２段のHermite積分法は台形公式の拡張
- シンプレクティックではない

積分公式の係数

- 一般型は東工大博士課程で理研AICSでJRAをしていた山本さんが見つけてくれた（更に証明も！）
- かなりえげつない組み合わせ数学の問題になる

	F_0^+	F_1^-	F_2^+	F_3^-	F_4^+	F_5^-	F_6^+	F_7^-
A2	1							
H4	1	$-\frac{1}{3}$						
H6	1	$-\frac{2}{5}$	$\frac{2}{15}$					
H8	1	$-\frac{3}{7}$	$\frac{4}{21}$	$-\frac{2}{35}$				
H10	1	$-\frac{4}{9}$	$\frac{6}{27}$	$-\frac{2}{21}$	$\frac{8}{315}$			
H12	1	$-\frac{5}{11}$	$\frac{8}{33}$	$-\frac{4}{33}$	$\frac{8}{165}$	$-\frac{8}{693}$		
H14	1	$-\frac{6}{13}$	$\frac{10}{39}$	$-\frac{20}{143}$	$\frac{48}{715}$	$-\frac{32}{1287}$	$\frac{16}{3003}$	
H16	1	$-\frac{7}{15}$	$\frac{12}{45}$	$-\frac{2}{13}$	$\frac{16}{195}$	$-\frac{16}{429}$	$\frac{64}{5005}$	$-\frac{16}{6435}$

表 1　16 次までの Hermite 積分法の係数一覧。

$$c_j^{(p)} = \frac{1}{(-2)^j} \frac{(2j)!!}{(2\lfloor j/2 \rfloor + 1)!!} \binom{p - \lfloor j/2 \rfloor}{p - j} \frac{(2p - 2\lceil j/2 \rceil + 1)!!}{(2p+1)!!}$$

0から数えたp行目j列目の成分

補間多項式の構築

- 力の多項式$f(t)$からp階微分$f^{(p)}(t)$の値を持っている
- 多項式は上三角パスカル行列でシフトできる

$$\boldsymbol{F}(t) = \begin{pmatrix} f(t) \\ hf^{(1)}(t) \\ h^2 f^{(2)}(t)/2! \\ \vdots \\ h^n f^{(p)}(t)/n! \end{pmatrix}, \qquad \frac{d}{dt}\boldsymbol{F}(t) = \frac{1}{h}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & n \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}\boldsymbol{F}(t)$$

$$\boldsymbol{F}(t+h) = \exp\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & n \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}\right]\boldsymbol{F}(t) = \begin{pmatrix} \binom{0}{0} & \binom{1}{0} & \binom{2}{0} & \cdots & \binom{n}{0} \\ 0 & \binom{1}{1} & \binom{2}{1} & \cdots & \binom{n}{1} \\ 0 & 0 & \binom{2}{2} & \cdots & \binom{n}{2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \binom{n}{n} \end{pmatrix}\boldsymbol{F}(t)$$

解きたい線形方程式

- 左端のF_i^Lと右端のF_i^Rたちから中点でのF_iを求めたい
- 偶数次と奇数次に分割できる

$$\begin{pmatrix} F_0^+ \\ F_1^- \\ F_2^+ \\ F_3^- \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \binom{0}{0} & \binom{2}{0} & \binom{4}{0} & \binom{6}{0} & \cdots \\ 0 & \binom{2}{1} & \binom{4}{1} & \binom{6}{1} & \cdots \\ 0 & \binom{2}{2} & \binom{4}{2} & \binom{6}{2} & \cdots \\ 0 & 0 & \binom{4}{3} & \binom{6}{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_0 \\ F_2 \\ F_4 \\ F_6 \\ \vdots \end{pmatrix}. \qquad \begin{pmatrix} F_0^- \\ F_1^+ \\ F_2^- \\ F_3^+ \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \binom{1}{0} & \binom{3}{0} & \binom{5}{0} & \binom{7}{0} & \cdots \\ \binom{1}{1} & \binom{3}{1} & \binom{5}{1} & \binom{7}{1} & \cdots \\ 0 & \binom{3}{2} & \binom{5}{2} & \binom{7}{2} & \cdots \\ 0 & \binom{3}{3} & \binom{5}{3} & \binom{7}{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1 \\ F_3 \\ F_5 \\ F_7 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

$$F_i^+ = \frac{1}{2}(F_i^R + F_i^L),\ F_i^- = \frac{1}{2}(F_i^R - F_i^L).$$

- 逆行列の一般形をみつけることができなかったが、LU分解、それぞれのL^{-1}とU^{-1}には行列サイズに依らない一般形があった

準備（組合わせ数学）

- 形式的冪級数と係数の抽出

$$f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} t^k f_k \iff [t^k]f(t) = f_k$$

- 簡単な例（Newtonの二項定理）

$$[t^k](1+t)^n = \binom{n}{k}$$

Riordan array

- 母関数を 2 つ取る下三角行列
  n行k列目は

$$\mathcal{R}\left(d(t), h(t)\right)_{n,k} = [t^n]d(t)\,(h(t))^k$$

- 群になっている
  - 乗算

$$\mathcal{R}(d(t), h(t)) \circ \mathcal{R}(a(t), b(t)) = \mathcal{R}(d(t) \times a(h(t)), b(h(t)))$$

  - 単位元

$$\mathcal{R}(1, t)$$

  - 逆元

$$\mathcal{R}(d(t), h(t))^{-1} = \mathcal{R}\left(\frac{1}{d(h^{-1}(t))}, h^{-1}(t)\right)$$

調べたかった行列

$$[M_{(a,b)}]_{ij} = \binom{aj+b}{i}$$

- この行列で、$(a,b)=(2,0)$のときが偶数次$(a,b)=(2,1)$のときが奇数次
- 上三角パスカル行列で、

$$M_{(a,b)} = L_{(a,b)} U_{\mathrm{pas}}$$

- のようにLU分解することができる。まずはこの分解を証明して$L_{(a,b)}$の性質を調べていく

LU分解

- U_{pas}^{-1}を右から掛けて結果が下三角になっていることを確かめる

$$
\begin{aligned}
\left[L_{(a,b)}\right]_{ij} &= \left[M_{(a,b)}U_{\mathrm{pas}}^{-1}\right]_{ij} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\binom{ak+b}{i}(-1)^{k+j}\binom{j}{k} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}[y^i](1+y)^{ak+b}\cdot[t^k](-1+t)^j \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}[t^k](-1+t)^j\cdot[y^i](1+y)^b\left((1+y)^a\right)^k \\
&=[t^i](1+t)^b\left(-1+(1+t)^a\right)^j \\
&= \left[\mathcal{R}\left((1+t)^b,-1+(1+t)^a\right)\right]_{ij}.
\end{aligned}
$$

- 途中合成則と畳込み則を用いたが詳細は略。
- $L_{(a,b)}$が下三角のRiordan arrayとなった

2 変数のRiordan subgroup

$$L_{(a,b)} = \mathcal{R}\left((1+t)^b, -1+(1+t)^a\right)$$

に対して

- 乗算

$$L_{(a,b)}L_{(c,d)} = L_{(ac,ad+b)}$$

- 単位元

$$L_{(1,0)}L_{(a,b)} = L_{(a,b)}L_{(1,0)} = L_{(a,b)}$$

- 逆元

$$L_{(a,b)}^{-1} = L_{(1/a,-b/a)}$$

- 最初の2×2成分を実体化してみるとわかりやすい

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ b & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ d & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ ad+b & ac \end{pmatrix}$$

偶数次のL^{-1}の行列要素

$M^{-1}_{(2,0)} = U^{-1}_{\mathrm{pas}} L^{-1}_{(2,0)} = U^{-1}_{\mathrm{pas}} L_{(1/2,0)}$,

に対して

We use Lagrange inverse formula with $w(t) = -1 + \sqrt{1+t}$. For $t = w(w+2)$, $\phi(t) = 1/(2+t)$ satisfies $w = t\phi(w)$.

$$
\begin{aligned}
[L_{1/2,\,0}]_{nk} &= [t^n]\left(-1 + (1+t)^{1/2}\right)^k \\
&= [t^n] w^k \\
&= \frac{k}{n}[t^{n-1}] t^{k-1}\phi(t)^n \\
&= \frac{k}{n}[t^{n-k}](2+t)^{-n} \\
&= 2^{k-2n}\frac{k}{n}\binom{-n}{n-k} \\
&= (-1)^{n+k} 2^{k-2n}\frac{k}{n}\binom{2n-k-1}{n-k}.
\end{aligned} \tag{29}
$$

In case $n = 0$, it is δ_{k0}.

$$[L_{1/2,0}]_{nk} = \frac{(-2)^k}{(-4)^n}\frac{k}{n}\binom{2n-k-1}{n-k}$$

$$\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\frac{1}{8} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{1}{16} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\frac{5}{128} & \frac{5}{64} & -\frac{3}{32} & \frac{1}{16} & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{7}{256} & -\frac{7}{128} & \frac{9}{128} & -\frac{1}{16} & \frac{1}{32} & 0 & 0 \\
0 & -\frac{21}{1024} & \frac{21}{512} & -\frac{7}{128} & \frac{7}{128} & -\frac{5}{128} & \frac{1}{64} & 0 \\
0 & \frac{33}{2048} & -\frac{33}{1024} & \frac{45}{1024} & -\frac{3}{64} & \frac{5}{128} & -\frac{3}{128} & \frac{1}{128}
\end{pmatrix}$$

奇数次のL^{-1}の行列要素

$$M_{(2,1)}^{-1} = U_{\mathrm{pas}}^{-1} L_{(1/2,-1/2)}.$$

に対して

$$\begin{aligned}
\left[L_{1/2,\,-1/2}\right]_{nk} &= [t^n](1+t)^{-1/2}\left(-1+(1+t)^{1/2}\right)^k \\
&= [t^n]\frac{w^k}{1+w} \\
&= [t^n]\frac{t^k}{1+t}\phi(t)^{n-1}\left(\phi(t)-t\phi'(t)\right) \\
&= [t^n]\frac{t^k}{1+t}\frac{1}{(2+t)^{n-1}}\frac{2(1+t)}{(2+t)^2} \\
&= 2[t^{n-k}](2+t)^{-n-1} \\
&= 2^{k-2n}\binom{-n-1}{n-k} \\
&= (-1)^{n+k}2^{k-2n}\binom{2n-k}{n-k}.
\end{aligned}$$

$$[L_{1/2,-1/2}]_{nk} = \frac{(-2)^k}{(-4)^n}\binom{2n-k}{n-k}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{5}{16} & \frac{5}{16} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{35}{128} & -\frac{35}{128} & \frac{15}{64} & -\frac{5}{32} & \frac{1}{16} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{63}{256} & \frac{63}{256} & -\frac{7}{32} & \frac{21}{128} & -\frac{3}{32} & \frac{1}{32} & 0 & 0 \\ \frac{231}{1024} & -\frac{231}{1024} & \frac{105}{512} & -\frac{21}{128} & \frac{7}{64} & -\frac{7}{128} & \frac{1}{64} & 0 \\ -\frac{429}{2048} & \frac{429}{2048} & -\frac{99}{512} & \frac{165}{1024} & -\frac{15}{128} & \frac{9}{128} & -\frac{1}{32} & \frac{1}{128} \end{pmatrix}$$

予測子・修正子

- 予測子は補間多項式の係数が求まったらテイラー級数で外挿するだけ
- 修正子は偶関数の積分として与えられる
  - 次数に依らない逆行列の一般形は求められなかった
  - しかし横ベクトルを掛け

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & \frac{1}{5} & \frac{1}{7} & \cdots \end{pmatrix} U_{\mathrm{pas}}^{-1} L_{(1/2,0)}$$

得られる係数列には一般形があった

積分公式（修正子）

	F_0^+	F_1^-	F_2^+	F_3^-	F_4^+	F_5^-	F_6^+	F_7^-
A2	1							
H4	1	$-\frac{1}{3}$						
H6	1	$-\frac{2}{5}$	$\frac{2}{15}$					
H8	1	$-\frac{3}{7}$	$\frac{4}{21}$	$-\frac{2}{35}$				
H10	1	$-\frac{4}{9}$	$\frac{6}{27}$	$-\frac{2}{21}$	$\frac{8}{315}$			
H12	1	$-\frac{5}{11}$	$\frac{8}{33}$	$-\frac{4}{33}$	$\frac{8}{165}$	$-\frac{8}{693}$		
H14	1	$-\frac{6}{13}$	$\frac{10}{39}$	$-\frac{20}{143}$	$\frac{48}{715}$	$-\frac{32}{1287}$	$\frac{16}{3003}$	
H16	1	$-\frac{7}{15}$	$\frac{12}{45}$	$-\frac{2}{13}$	$\frac{16}{195}$	$-\frac{16}{429}$	$\frac{64}{5005}$	$-\frac{16}{6435}$

$$c^{(p)}{}_k = \frac{1}{(-2)^k}\frac{(2k)!!}{(2k+1)!!}\binom{p-k+m}{p-k}\frac{(2k+1)!!}{(2k+1-2m)!!}\frac{(2p+1-2m)!!}{(2p+1)!!},$$

with $m = \lfloor (k+1)/2 \rfloor$.

まとめ

- 任意次数の2 step Hermite積分法を開発した
  - 導関数はその気になればいくらでも計算できる
- 行列要素の計算には組合わせ数学
  - 深堀りしてみると綺麗な石が埋まっていることもある
  - Maximaで行列をダンプしたり、関連した数列をOEIS（オンライン整数列大辞典）で検索したりの手探り作業
- 実用上大事なこと
  - $A_{ij} = a(i, j)$のように行列要素が行番号と列番号で決まるとき、行列サイズに依らずそのLU分解も$L_{ij} = l(i, j)$、$U_{ij} = u(i, j)$のようにこの性質を引き継ぐ。LとUの逆行列までも同様。$A^{-1} = U^{-1}L^{-1}$は行列サイズ依存となってしまう