天体物理学における非線形連立方程式を数値的に計算する革新的な手法

藤澤幸太郎(早稲田大学)

大川博督 (基研/ 早稲田大学)
山本佑 (早稲田大学)
平井遼介(オックスフォード大学)
安武伸俊(千葉工業大学)
長倉洋樹(プリンストン大学)
山田章一 (早稲田大学)

Okawa, Fujisawa et al. Submitted
arXiv:1809.04495
Fujisawa, Okawa et al. Submitted
arXiv:1809.04358

背景と概要

- 天体物理学の問題の多くは非線形。特に非線形楕円型方程式を解くためには非線形境界値問題を数値的に計算する必要がある。
  - 非線形楕円型方程式を差分化または関数展開により得られる非線形連立方程式を数値的に計算する必要がある。
- よく用いられるニュートンラプソン法(NR法)は、初期推量が解に十分に近くないと解が求まらない。
- そこで、大域収束性が改善された数値計算手法W4法の開発を行った。

方程式の変換の例

非線形偏微分方程式

(定常軸対称2次元回転磁気流体)

$$\frac{\partial p}{\partial \varpi} = -\rho \frac{\partial \phi}{\partial \varpi} + \varpi \rho \Omega^2 - \frac{j_z}{c} B_\varphi, \ \frac{\partial p}{\partial z} = -\rho \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{j_\varpi}{c} B_\varphi, 4\pi G \rho = \Delta \phi, \ p = k\rho^\Gamma,$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \ \nabla \times \vec{B} = 4\pi \frac{\vec{J}}{c}$$

↓(差分化)

$$\frac{p_{\{i+1,j\}} - p_{\{i,j\}}}{d\varpi} = -\rho_{\{i,j\}} \frac{\phi_{\{i+1,j\}} - \phi_{\{i,j\}}}{d\varpi} + \varpi_{\{i\}} \rho_{\{i,j\}} \Omega^2_{\{i,j\}} - \frac{j_{z\{i,j\}}}{c} B_{\varphi\{i,j\}}$$

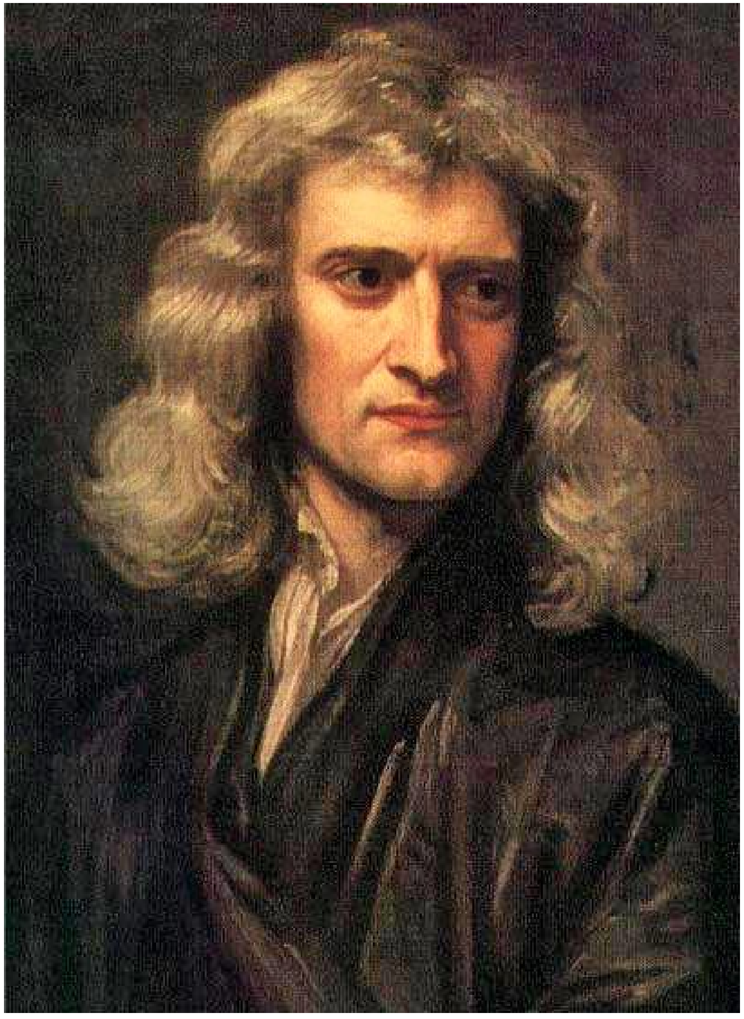
$$\frac{p_{\{i,j+1\}} - p_{\{i,j\}}}{dz} = -\rho_{\{i,j\}} \frac{\phi_{\{i,j+1\}} - \phi_{\{i,j\}}}{dz} + \frac{j_{\varpi\{i,j\}}}{c} B_{\varphi\{i,j\}}, \ \cdots$$

$$\longrightarrow \quad F_i(x_1, x_2, \cdots, x_N) = 0 \quad i = 1, 2, \cdots, N.$$

非線形連立代数方程式

Newton-Raphson 法

$$F_i(x_1, x_2, \cdots, x_N) = 0 \quad i = 1, 2, \cdots, N.$$



- 非線形(連立)代数方程式を数値的に求める手法。

Newton-Raphson法

方程式 $F_i(x_1, x_2, \cdots, x_N) = 0 \quad i = 1, 2, \cdots, N,$

テーラ展開

$$F_i(\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}) = F_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial F_i}{\partial x_j}\delta x_j + \mathcal{O}(\delta\boldsymbol{x}^2).$$

$$F_i(\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}) = F_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{N} J_{ij}\delta x_j = 0,$$

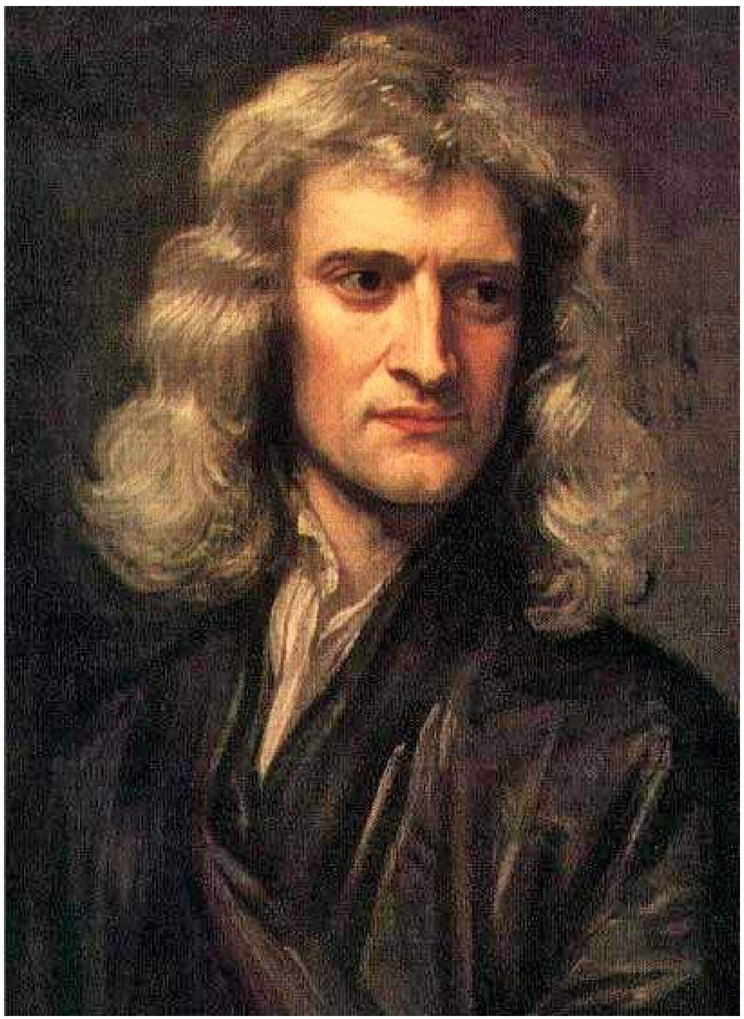
$$J_{ij} \equiv \frac{\partial F_i}{\partial x_j}.$$

推量の更新

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x}^n + \delta\boldsymbol{x}, \qquad \delta x_i = -\sum_{j=1}^{N} J_{ij}^{-1} F_j,$$

Newton-Raphson 法

$$F_i(x_1, x_2, \cdots, x_N) = 0 \quad i = 1, 2, \cdots, N.$$



- 非線形(連立)代数方程式を数値的に求める手法。
- 初期推量が解に十分に近いと二次収束する。
- 解に近くないと解が求まる保証は無い
  - 数値的な振動、発散を示す

Newton-Raphson 法

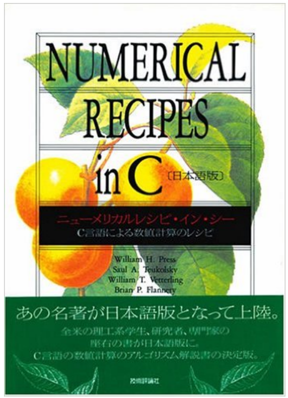
9.6

非線形連立方程式の Newton-Raphson 法

次に述べることは，極論ではあるが根拠はある。非線形連立方程式を解くための一般的な優れた方法はないし，将来にわたって（おそらく）ないであろう。理由はさほど難しく

中略

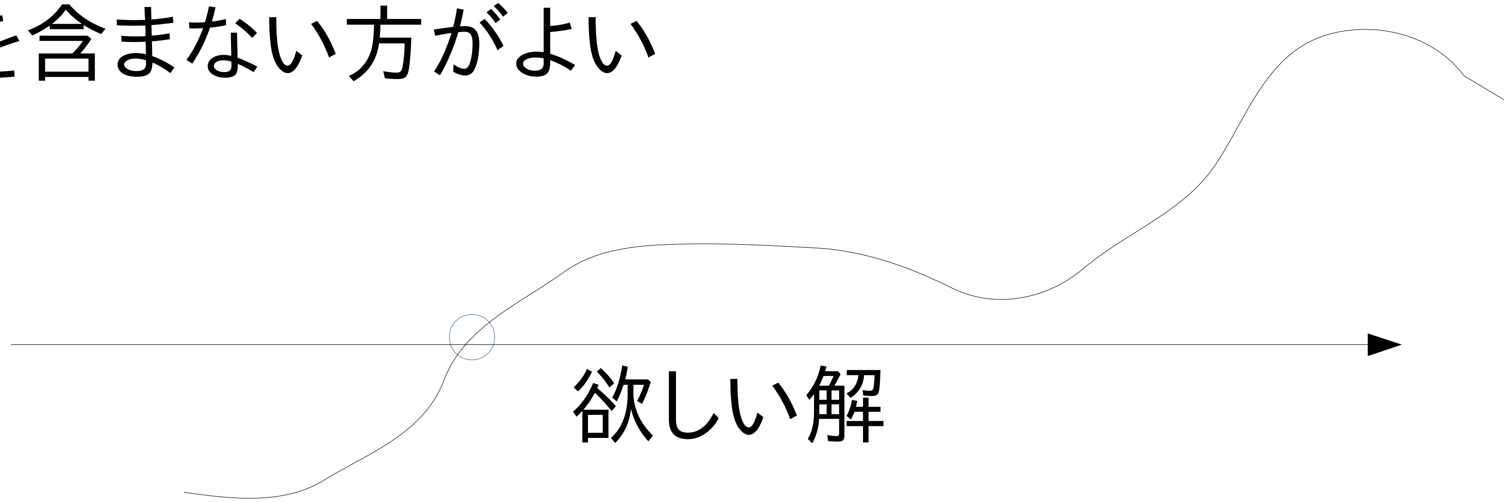
しかし，根の近くの点，あるいは根のありそうな領域がわかりさえすれば，問題はかなりしっかりしたものになる。ここまで来れば，Newton-Raphson 法をただちに多次元に一般化して使うことができる。この方法は，根が存在すれば非常にうまく収束する。全く収束しないなら，あると思った根が近くにないことを示唆する（この証明はしない）。



NR法での解近傍

- 解の近くで関数がリプシッツ連続
(〜関数が連続でかつその微分値が有限)である。

- 初期条件と解の間にヤコビ行列の行列式が0となる領域を含まない方がよい



解近傍以外の初期条件からも解を求めたい!

大域収束的な先行手法

- Damped NR 法
  - 値の更新にDamped パラメータを導入
- 準N法、擬N法(Broyden 法)
  - ヤコビ行列を更新しない or 数値的に発展させる
- ホモトピー法
  - 初期推量が解となるように方程式をホモトピー的に変形し、解をNR法で連続的に計算していく

→ いずれもNR法の拡張

もっと全く新しい手法が望まれる

Okawa, Fujisawa et al. Submitted
arXiv:1809.04495
Fujisawa, Okawa et al. Submitted
arXiv:1809.04358

非線形連立方程式を計算する新手法

$$F_i(x_1, x_2, \cdots, x_N) = 0 \quad i = 1, 2, \cdots, N.$$

Newton-Raphson

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x}^n + \delta\boldsymbol{x},$$

$$\delta x_i = -\sum_{j=1}^{N} J_{ij}^{-1} F_j,$$

W4

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x}^n + \Delta\tau \mathbf{X} \boldsymbol{p}^n$$

$$\boldsymbol{p}^{n+1} = (1 - 2\Delta\tau)\boldsymbol{p}^n - \Delta\tau \mathbf{Y} \boldsymbol{F}$$

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} \equiv \mathbf{J}^{-1}$$

W4法の概要

NR法を次のような常微分方程式だと考えてみる

$$\frac{\boldsymbol{x}^{n+1}-\boldsymbol{x}^{n}}{\Delta\tau}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\equiv\frac{\delta\boldsymbol{x}}{\Delta\tau}=-\frac{\mathbf{J}^{-1}\boldsymbol{F}}{\Delta\tau}. \longrightarrow \frac{d\boldsymbol{x}}{d\tau}+\frac{\mathbf{J}^{-1}\boldsymbol{F}}{d\tau}=0$$

それを次のような二階の方程式に拡張する

$$\frac{d^2\boldsymbol{x}}{d\tau^2}+\mathbf{M}_1\frac{d\boldsymbol{x}}{d\tau}+\mathbf{M}_2\boldsymbol{F}=0,\qquad \frac{d\boldsymbol{x}}{d\tau}=\mathbf{X}\boldsymbol{p},\quad \frac{d\boldsymbol{p}}{d\tau}=-2\boldsymbol{p}-\mathbf{Y}\boldsymbol{F},$$

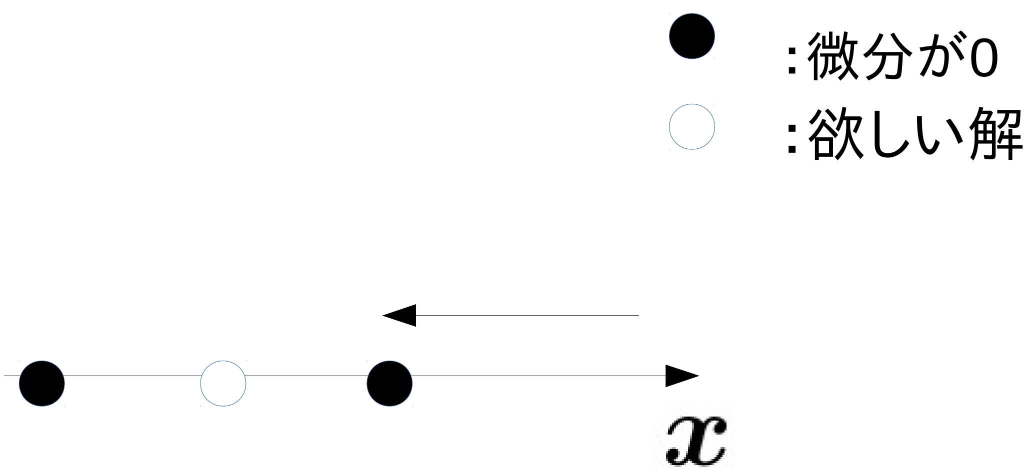
差分化して次のような漸化式にする $\mathbf{X}.\ \mathbf{Y}\equiv\mathbf{J}^{-1}$

$$\boldsymbol{x}^{n+1}=\boldsymbol{x}^{n}+\Delta\tau\mathbf{X}\boldsymbol{p}^{n}\qquad \boldsymbol{p}^{n+1}=(1-2\Delta\tau)\boldsymbol{p}^{n}-\Delta\tau\mathbf{Y}\boldsymbol{F}$$

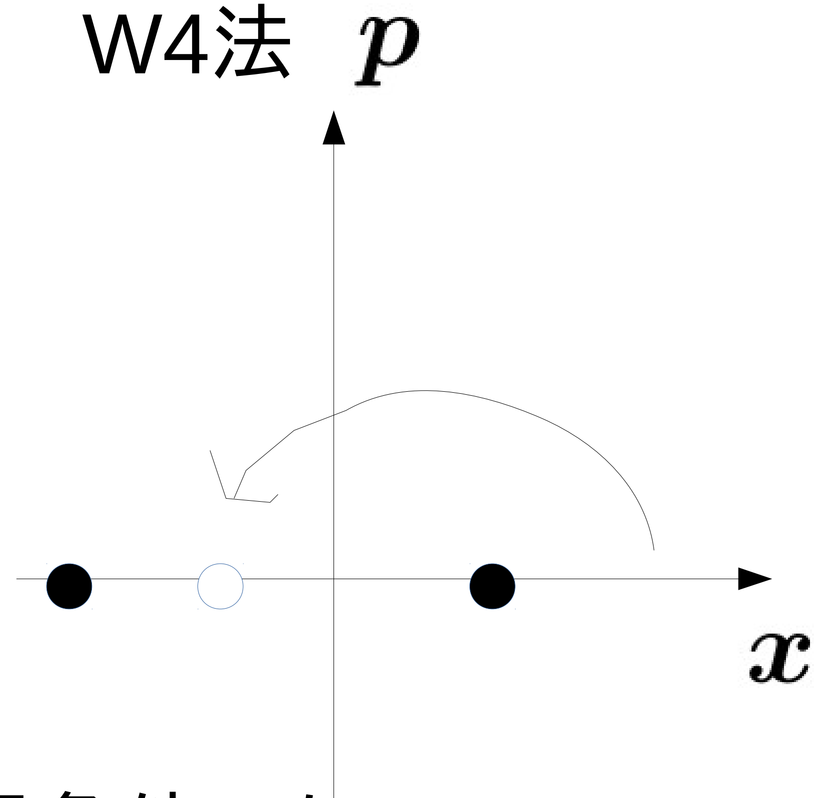
$$\boldsymbol{x}^{n+1}=\boldsymbol{x}^{n}+\Delta\tau\mathbf{X}_n(1-2\Delta\tau)\boldsymbol{p}^{n-1}-(\Delta\tau)^2\mathbf{X}_n\mathbf{Y}_{n-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{n-1})$$

W4法の模式図

NR法



W4法



NR法では近傍ではない初期条件でも、

W4法なら解が求まることがある

W4法の概要

NR法を次のような常微分方程式だと考えてみる

$$\frac{\boldsymbol{x}^{n+1}-\boldsymbol{x}^{n}}{\Delta\tau}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\equiv\frac{\delta\boldsymbol{x}}{\Delta\tau}=-\frac{\mathbf{J}^{-1}\boldsymbol{F}}{\Delta\tau}. \longrightarrow \frac{d\boldsymbol{x}}{d\tau}+\frac{\mathbf{J}^{-1}\boldsymbol{F}}{d\tau}=0$$

次の二階の方程式に拡張する

$$\frac{d^2\boldsymbol{x}}{d\tau^2}+\mathbf{M}_1\frac{d\boldsymbol{x}}{d\tau}+\mathbf{M}_2\boldsymbol{F}=0,\qquad \frac{d\boldsymbol{x}}{d\tau}=\mathbf{X}\boldsymbol{p},\quad \frac{d\boldsymbol{p}}{d\tau}=-2\boldsymbol{p}-\mathbf{Y}\boldsymbol{F},$$

差分化して次のような漸化式にする $\mathbf{X}, \mathbf{Y}\equiv\mathbf{J}^{-1}$

$$\boldsymbol{x}^{n+1}=\boldsymbol{x}^{n}+\Delta\tau\mathbf{X}\boldsymbol{p}^{n}\qquad \boldsymbol{p}^{n+1}=(1-2\Delta\tau)\boldsymbol{p}^{n}-\Delta\tau\mathbf{Y}\boldsymbol{F}$$

$$\boldsymbol{x}^{n+1}=\boldsymbol{x}^{n}+\Delta\tau\mathbf{X}_n(1-2\Delta\tau)\boldsymbol{p}^{n-1}-(\Delta\tau)^2\mathbf{X}_n\mathbf{Y}_{n-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{n-1})$$

分解の例(UL W4法)

XとYを次のように選び、$\Delta\tau = \dfrac{1}{2}$ とすると

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x}^n + \frac{1}{2}\mathbf{L}_n^{-1}\boldsymbol{p}^n, \quad \boldsymbol{p}^{n+1} = -\frac{1}{2}\mathbf{U}_n^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^n),$$

すると最終的に次のような更新式になる

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x}^n - \frac{1}{4}\mathbf{L}_n^{-1}\mathbf{U}_{n-1}^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{n-1}),$$

$$J \equiv UL \qquad L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \ell_{21} & 1 & 0 & 0 \\ \ell_{31} & \ell_{42} & 1 & 0 \\ \ell_{41} & \ell_{42} & \ell_{43} & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

ここで一般的には $\mathbf{L}_n^{-1}\mathbf{U}_{n-1}^{-1} \neq \mathbf{J}_n^{-1}$ and $\mathbf{L}_n^{-1}\mathbf{U}_{n-1}^{-1} \neq \mathbf{J}_{n-1}^{-1}$

ただし解近傍では $\mathbf{L}_n^{-1}\mathbf{U}_{n-1}^{-1} \simeq \mathbf{J}_{n-1}^{-1} \simeq \mathbf{J}_n^{-1}$

他の分解例(LH W4法)

ハウスホルダー行列 $\mathbf{H}^T = \mathbf{H}^{-1} = \mathbf{H}$

からQR分解を用いて次のような分解を考える

$$\mathbf{J}^T = \mathbf{H}_{(0)}\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{R} \Rightarrow \mathbf{J} = (\mathbf{H}_{(0)}\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{R})^T = \mathbf{L}\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{H}_{(0)},$$

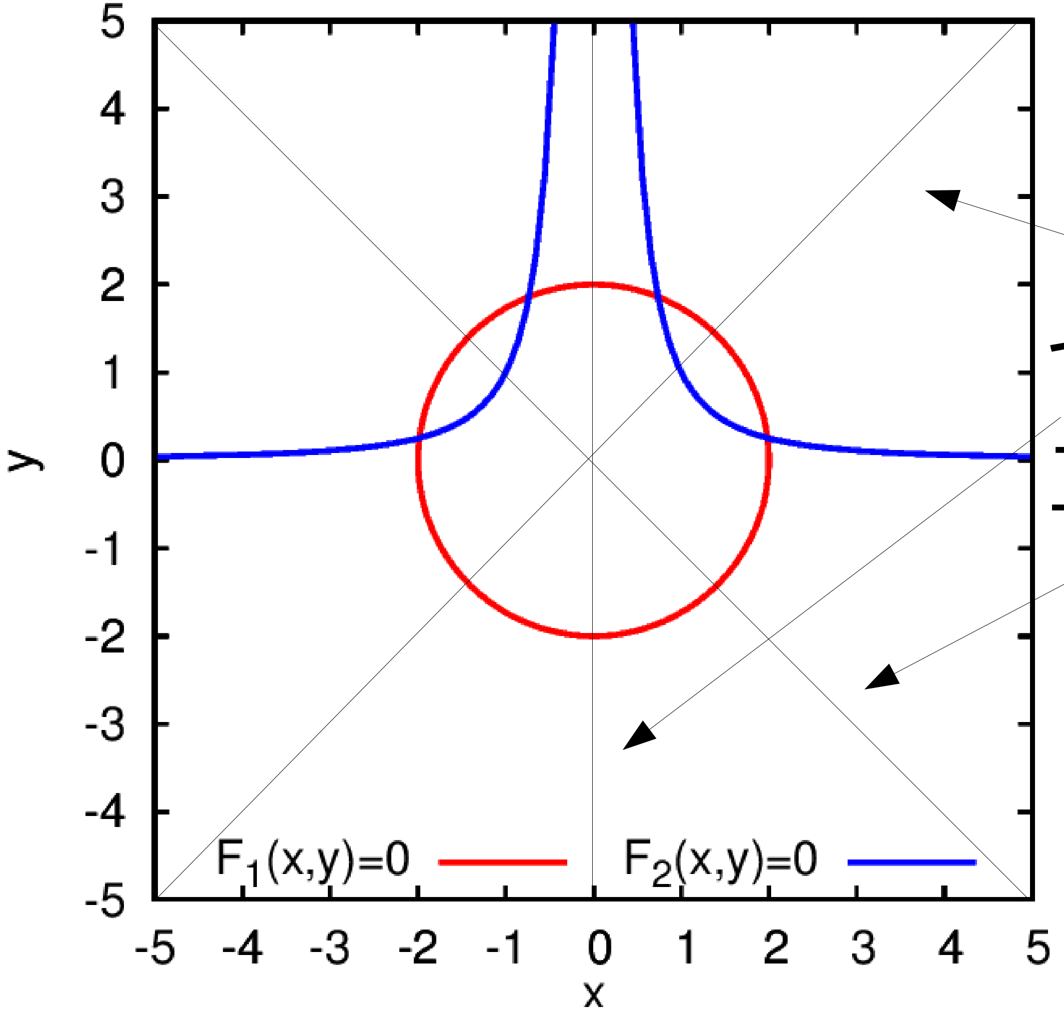
$\mathbf{R}$:上三角行列

より逆行列を求めると次の更新式が得られ、この更新式を用いて解を求めていく。

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x} + \frac{1}{2}\mathbf{H}_{(0)}\boldsymbol{p}^n, \quad \boldsymbol{p}^{n+1} = -\frac{1}{2}\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{L}^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}).$$

テスト計算

$$f_1(x, y) = \ x^2 + y^2 - 4 = 0,\ f_2(x, y) = \ x^2 y - 1 = 0$$
を様々な初期条件から計算する

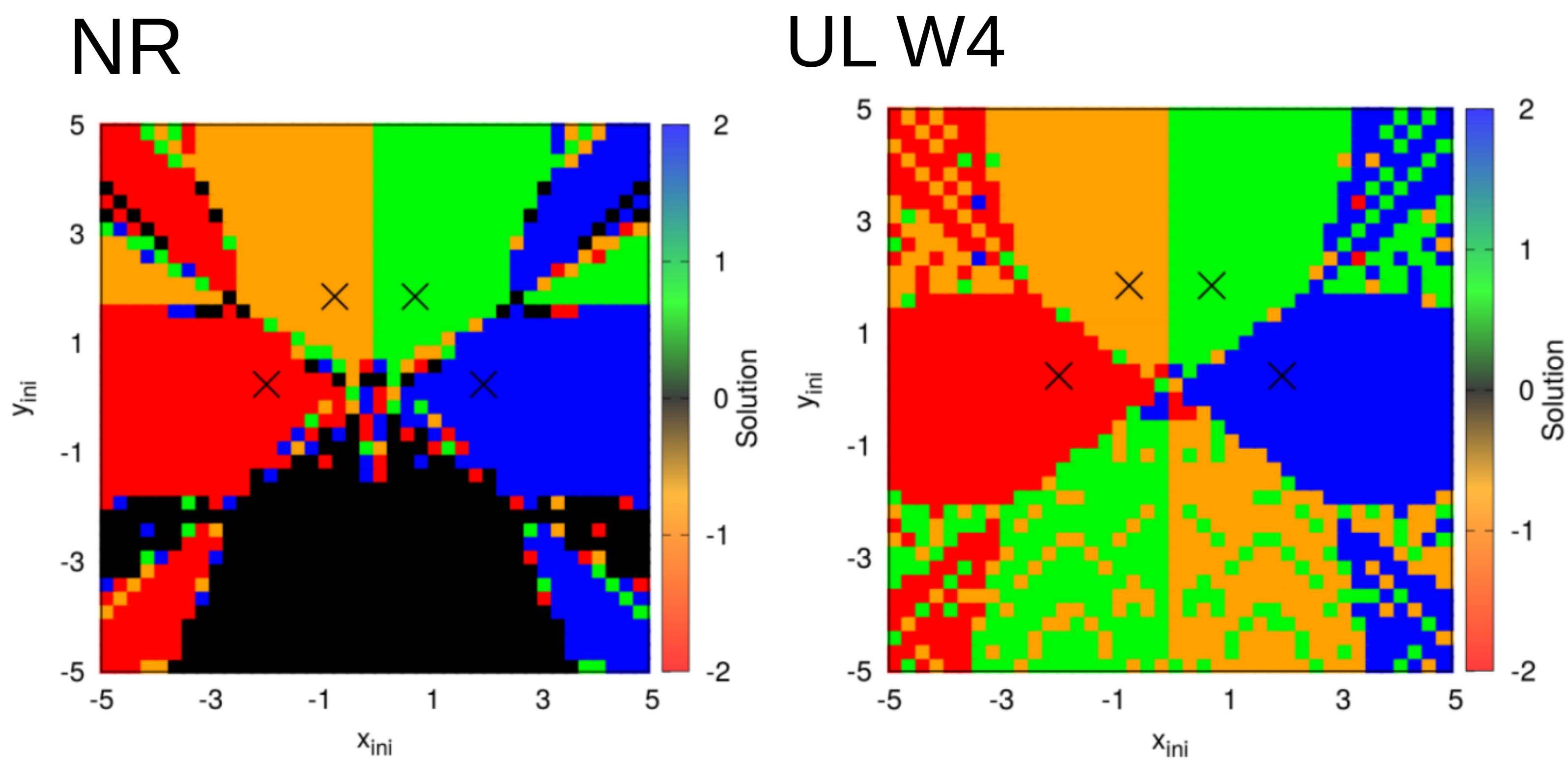


ヤコビ行列が
正則 でない線

テスト計算

$$f_1(x,y) = \ x^2 + y^2 - 4 = 0,\ f_2(x,y) = \ x^2 y - 1 = 0$$

を様々な初期条件から計算する



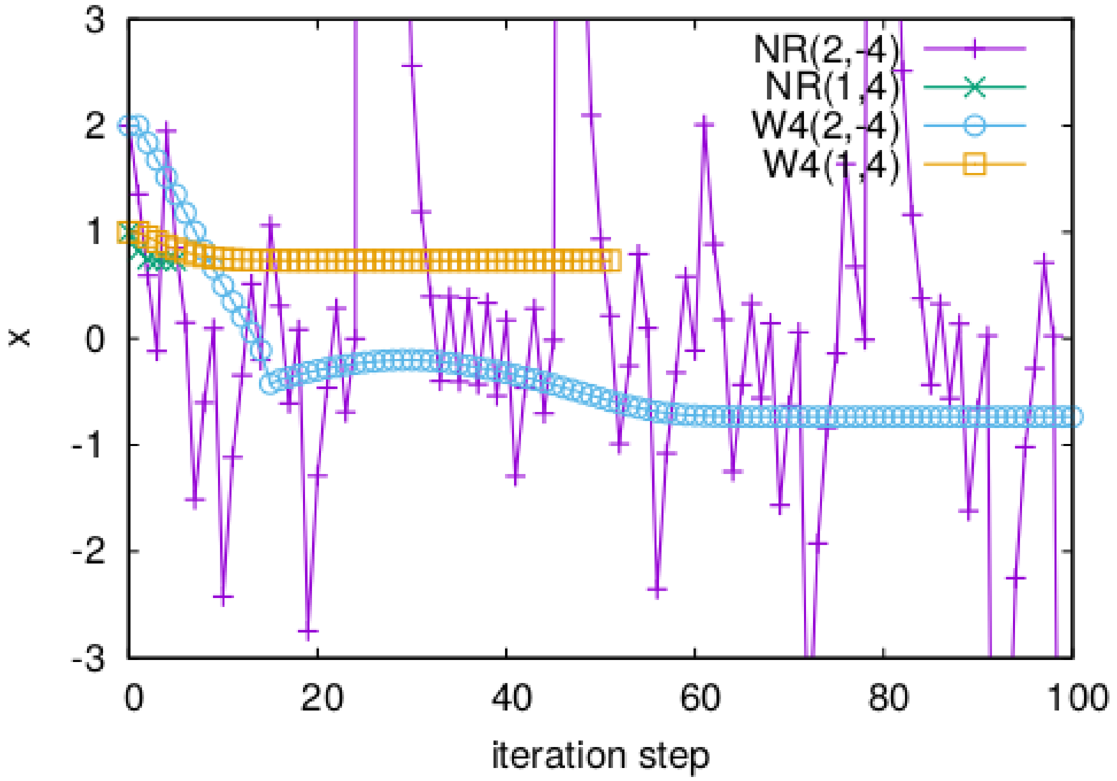
NR法よりも広い初期条件で解が求まる

(分解を適切に行わないとNRと同様のパターンになる)

テスト計算

$$f_1(x,y) = \ x^2 + y^2 - 4 = 0,\ \ f_2(x,y) = \ x^2 y - 1 = 0$$

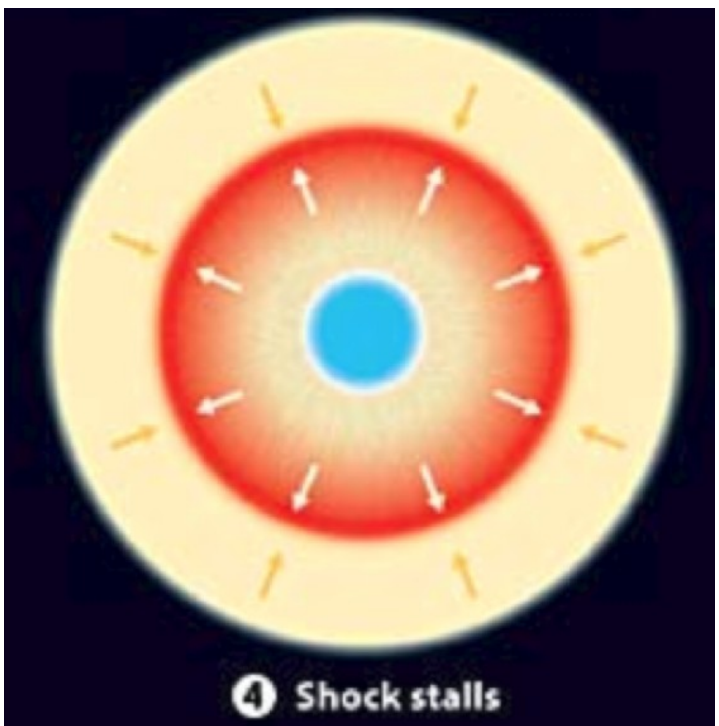
を様々な初期条件から計算する



NRでは振動する初期条件でもW4なら解が求まる

天体物理学への応用例

重力崩壊後中心部に原始中性子星が形成され衝撃波が外向きに反跳し、衝撃波と降着流が停滞する定常的な系が形成される。



方程式を定常化して、
降着率、ニュートリノ光度を与えると定常解が求まる

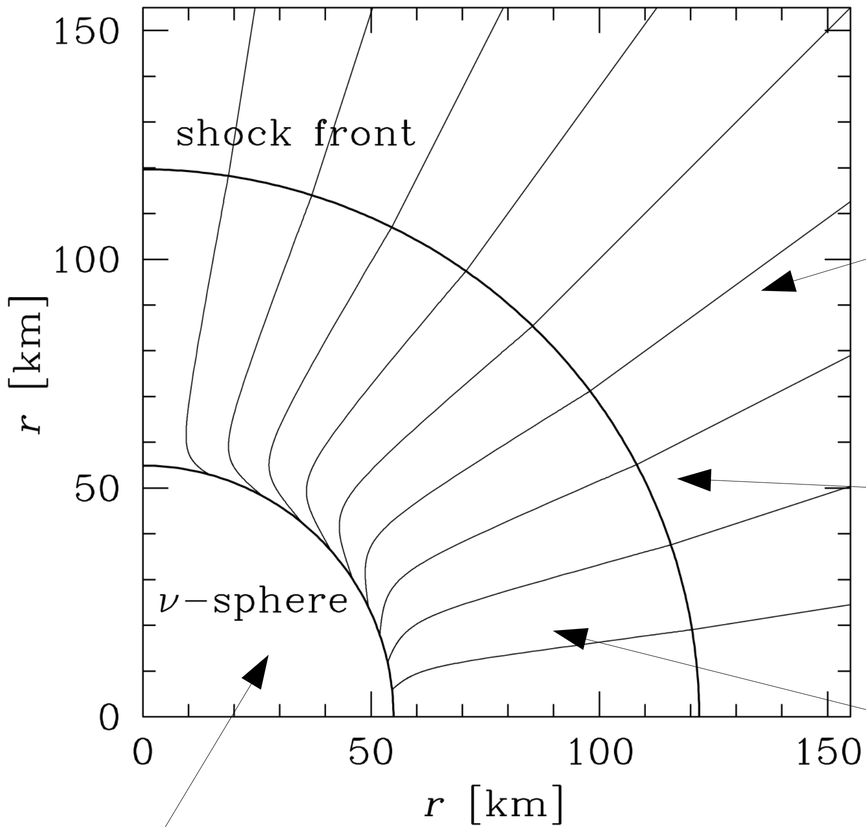
(Burrows & Goshy 1993)

計算モデル

Fujisawa et al.

r=1000km の地点で

一様な回転、磁場を与える



球対称的な降着

停滞衝撃波は
Rankine-Hugoniot関係
で上流と下流をつなぐ

回転or磁場で歪む降着流

原始中性子星 $1.3\ \mathrm{M}_\odot$.
（ρ〜10^{11}g cm^{-3} を表面とする)

ニュートリノ温度

$$T_\nu = 4.5\ \mathrm{MeV}$$

基礎方程式

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\rho u_r\right)+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\rho u_\theta\right)=0, \tag{1a}$$

$$\begin{aligned}u_r\frac{\partial u_r}{\partial r}&+\frac{u_\theta}{r}\frac{\partial u_r}{\partial\theta}-\frac{u_\theta^2+u_\varphi^2}{r}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r}-\frac{GM}{r^2}\\&-\frac{1}{4\pi\rho}\left[B_\theta\frac{\partial B_\theta}{\partial r}+B_\varphi\frac{\partial B_\varphi}{\partial r}+\frac{B_\theta^2+B_\varphi^2}{r}\right],\end{aligned} \tag{1b}$$

$$\begin{aligned}u_r\frac{\partial u_\theta}{\partial r}&+\frac{u_\theta}{r}\frac{\partial u_\theta}{\partial\theta}+\frac{u_r u_\theta}{r}-\frac{u_\varphi^2\cot\theta}{r}=-\frac{1}{\rho r}\frac{\partial p}{\partial\theta}\\&+\frac{1}{4\pi\rho}\left[B_r\frac{\partial B_\theta}{\partial r}-\frac{B_r}{r}\frac{\partial B_r}{\partial\theta}\right.\\&\left.-\frac{B_\varphi}{r}\frac{\partial B_\varphi}{\partial\theta}+\frac{B_rB_\theta-B_\varphi^2\cot\theta}{r}\right],\end{aligned} \tag{1c}$$

$$\begin{aligned}u_r\frac{\partial u_\varphi}{\partial r}&+\frac{u_\theta}{r}\frac{\partial u_\varphi}{\partial\theta}+\frac{u_\varphi u_r}{r}+\frac{u_\theta u_\varphi\cot\theta}{r}\\&=\frac{1}{4\pi\rho}\left[B_r\frac{\partial B_\varphi}{\partial r}+\frac{B_\theta}{r}\frac{\partial B_\varphi}{\partial\theta}+\frac{B_rB_\varphi-B_\theta B_\varphi\cot\theta}{r}\right],\end{aligned} \tag{1d}$$

$$u_r\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial r}-\frac{p}{\rho^2}\frac{\partial\rho}{\partial r}\right)+\frac{u_\theta}{r}\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\theta}-\frac{p}{\rho^2}\frac{\partial\rho}{\partial\theta}\right)=\dot{q}, \tag{1e}$$

$$L_\nu=\frac{7}{4}\pi r_\nu^2\sigma_S T_\nu^4, \tag{5}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2B_r\right)+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta B_\theta\right)=0, \tag{2a}$$

$$\begin{aligned}&-u_\theta\frac{\partial B_r}{\partial\theta}+u_r\frac{\partial B_\theta}{\partial\theta}-B_r\frac{\partial u_\theta}{\partial\theta}\\&\quad+B_\theta\frac{\partial u_r}{\partial\theta}+u_rB_\theta\cot\theta-u_\theta B_r\cot\theta=0,\end{aligned} \tag{2b}$$

$$\begin{aligned}&ru_\theta\frac{\partial B_r}{\partial r}-ru_r\frac{\partial B_\theta}{\partial r}-rB_\theta\frac{\partial u_r}{\partial r}\\&\quad+rB_r\frac{\partial u_\theta}{\partial r}+B_ru_\theta-B_\theta u_r=0,\end{aligned} \tag{2c}$$

$$\begin{aligned}&rB_r\frac{\partial u_\varphi}{\partial r}-rB_\varphi\frac{\partial u_r}{\partial r}+ru_\varphi\frac{\partial B_r}{\partial r}-ru_r\frac{\partial B_\varphi}{\partial r}\\&\quad+B_\theta\frac{\partial u_\varphi}{\partial\theta}-B_\varphi\frac{\partial u_\theta}{\partial\theta}+u_\varphi\frac{\partial B_\theta}{\partial\theta}\\&\quad-u_\theta\frac{\partial B_\varphi}{\partial\theta}+B_ru_\varphi-B_\varphi u_r=0,\end{aligned} \tag{2d}$$

$$p=\frac{11\pi^2}{180}\frac{k^4}{c^3\hbar^3}T^4+\frac{\rho kT}{m_N}, \tag{3a}$$

$$\varepsilon=\frac{11\pi^2}{60}\frac{k^4}{c^3\hbar^3}\frac{T^4}{\rho}+\frac{3}{2}\frac{kT}{m_N}, \tag{3b}$$

$$\begin{aligned}\dot{q}=&\,4.8\times10^{32}\left[1-\sqrt{1-\frac{r_\nu^2}{r^2}}\right]\frac{L_\nu}{2\pi r_\nu^2}T_\nu^2\\&-2.0\times10^{18}T^6\ \left[\mathrm{ergs\ s^{-1}\ g^{-1}}\right],\end{aligned} \tag{4}$$

差分化

$$\mathcal{A}\left(\boldsymbol{Q}\right)\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial q}+\mathcal{B}\left(\boldsymbol{Q}\right)\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial \theta}+\mathcal{C}\left(\boldsymbol{Q}\right)=0,$$

↓（差分化）

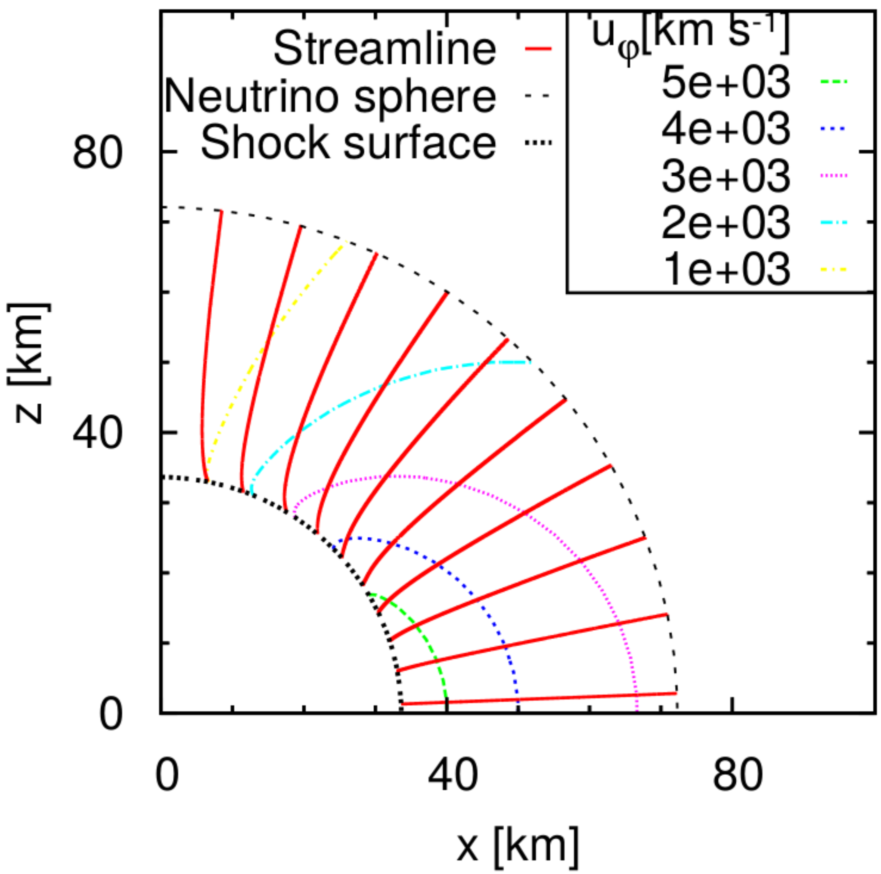
$$\boldsymbol{F}_{j-1,k}\equiv\mathcal{A}\left(\boldsymbol{Q}_{j-\frac{1}{2},k}\right)\frac{\boldsymbol{Q}_{j,k}-\boldsymbol{Q}_{j-1,k}}{q_j-q_{j-1}}+\mathcal{B}\left(\boldsymbol{Q}_{j-\frac{1}{2},k}\right)\frac{\boldsymbol{Q}_{j-\frac{1}{2},k+1}-\boldsymbol{Q}_{j-\frac{1}{2},k-1}}{\Delta\theta}+\mathcal{C}\left(\boldsymbol{Q}_{j-\frac{1}{2},k}\right)=0.$$

$$\boldsymbol{x}^{n+1}=\boldsymbol{x}^{n}+\frac{1}{2}\mathbf{L}^{-1}\boldsymbol{p}^{n},\quad \boldsymbol{p}^{n+1}=-\frac{1}{2}\mathbf{U}^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{n}),$$

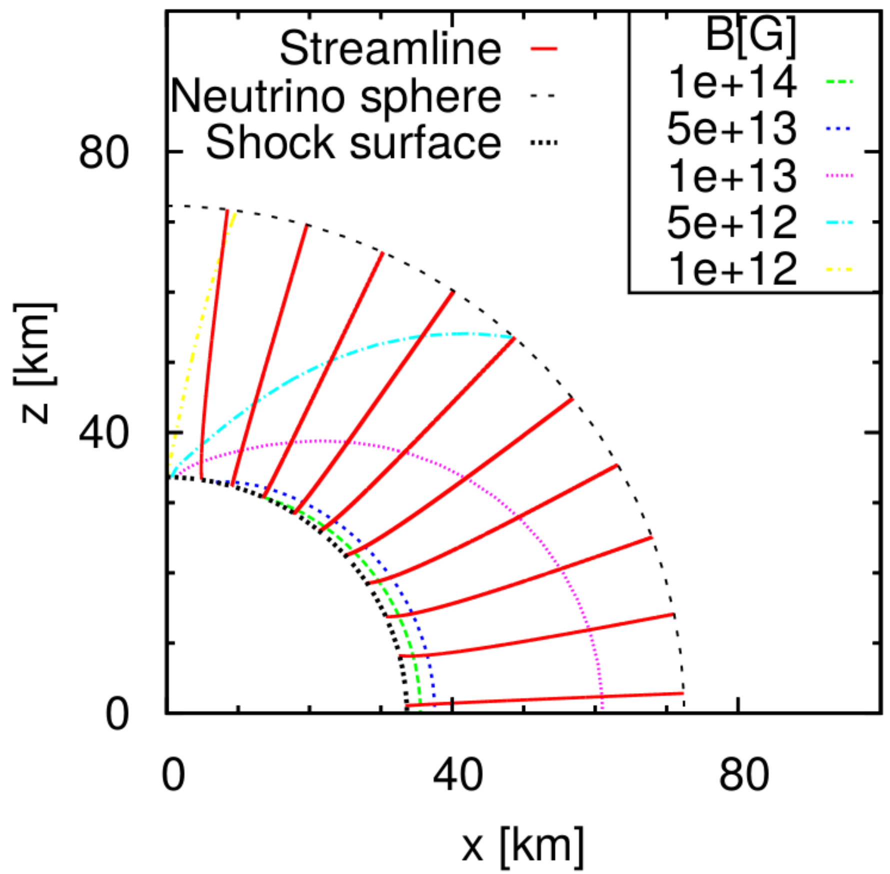
計算結果(流線)

Fujisawa et al.

回転入り



トロイダル磁場入り



多次元定常降着流

W4法のメリットとデメリット

メリット

- NR法では解が求まらない初期条件、求まりにくい問題でも、解が求まることがある
  - 慣性項、減衰項、ヤコビ行列の分解により、数値的に安定しやすい
  - 発散しづらい
- 何らかの解が求まることが多い
- 分解の仕方で挙動をある程度制御できる

デメリット

- NR法に比べて収束が遅い
  - 初期条件がNR法の解近傍ならNR法の収束が速い
- NR法に比べて計算時間が長い
  - pも計算する必要がある
  - ヤコビ行列の分解が必要

まとめ

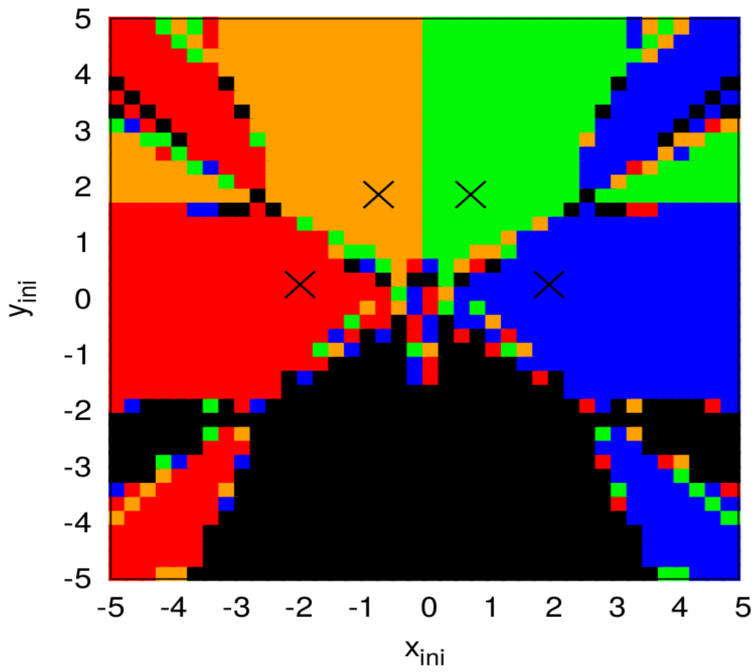
- NR法は初期推量が解の近傍でないと、振動や発散を示し解に収束しない。
- W4法は3項間漸化式に基づき、加速度項と減衰項、ヤコビ行列の分解があるので、局所的な収束性を維持しつつ大局的な収束性もある。
- 多次元定常降着流やウインド、磁気圏、多次元恒星進化計算、Rankine-Hugoniot問題など非線形方程式が必要となる様々な天体物理学の系への応用！

テスト計算

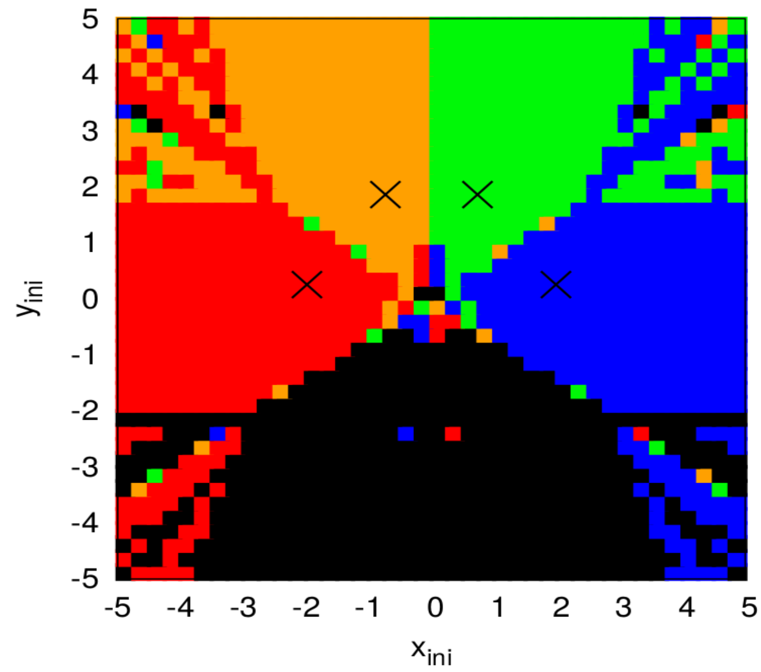
$$f_1(x, y) = \ x^2 + y^2 - 4 = 0,\ f_2(x, y) = \ x^2 y - 1 = 0$$

を様々な初期条件から計算する

NR

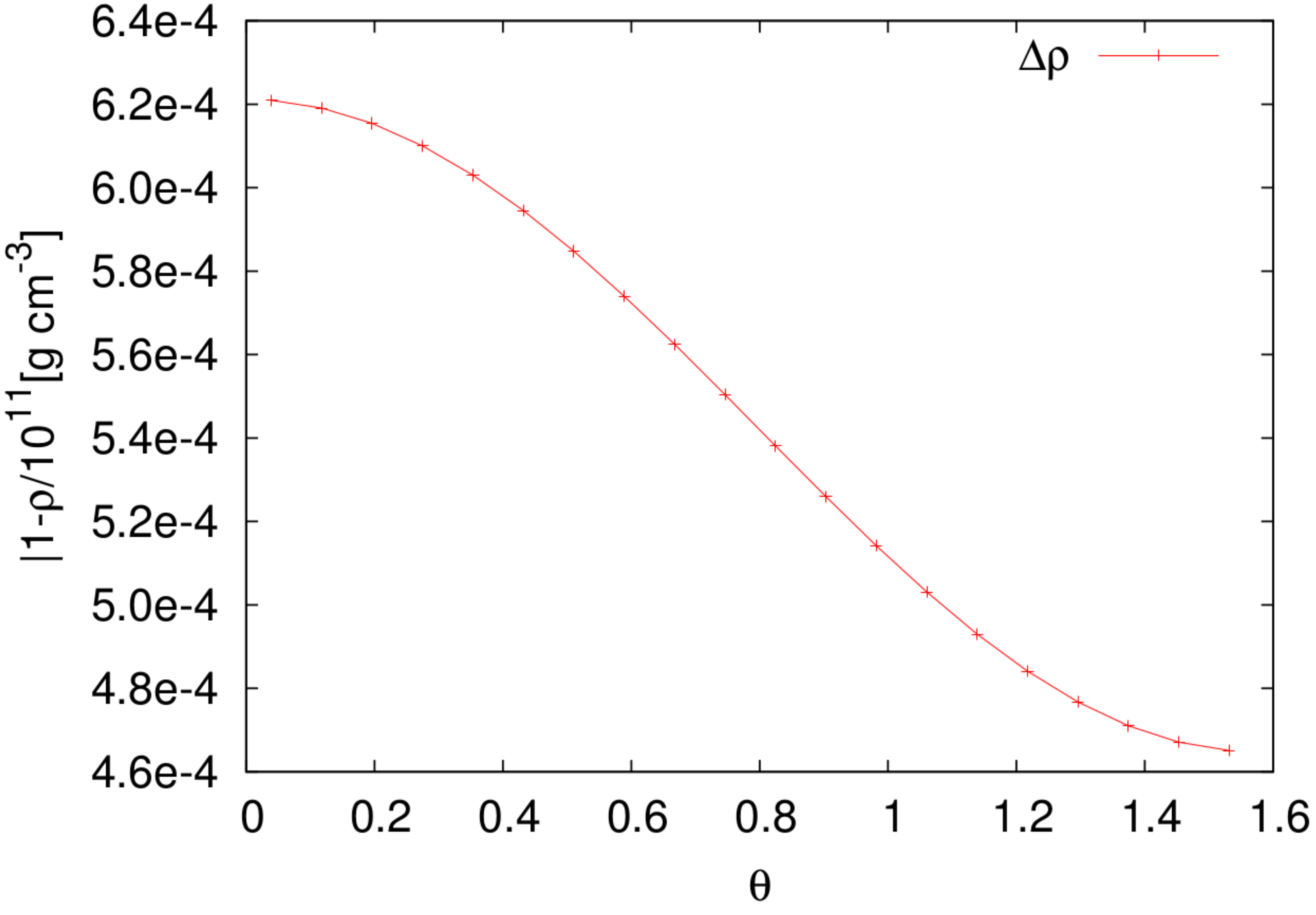


DNR



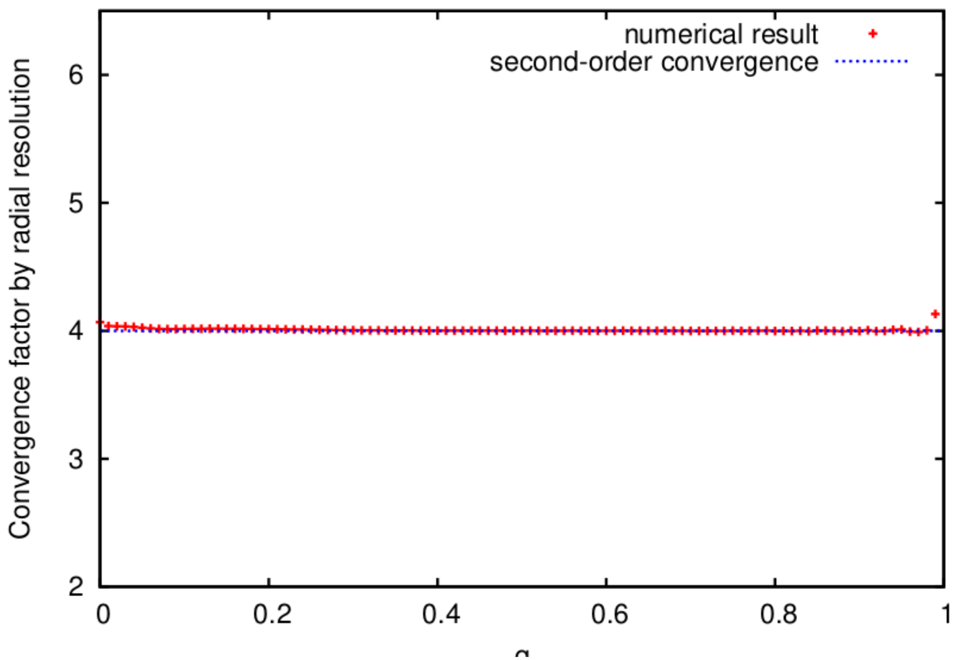
DNR法でも領域は似ている

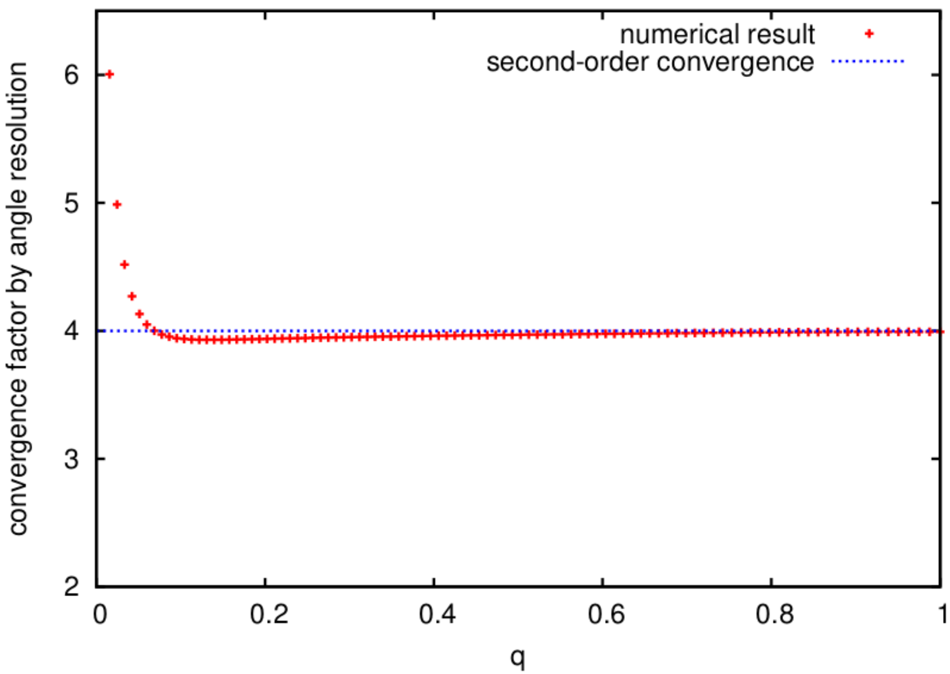
計算チェック



Δρ
6.4e-4
6.2e-4
6.0e-4
5.8e-4
5.6e-4
5.4e-4
5.2e-4
5.0e-4
4.8e-4
4.6e-4
|1-ρ/10^11|[g cm^-3]
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
θ

計算チェック





$$Q_q \equiv \left| \frac{\phi_{2N_q} - \phi_{N_q}}{\phi_{N_q} - \phi_{N_q/2}} \right|,$$

$$Q_\theta \equiv \left| \frac{\phi_{2N_\theta} - \phi_{N_\theta}}{\phi_{N_\theta} - \phi_{N_\theta/2}} \right|,$$

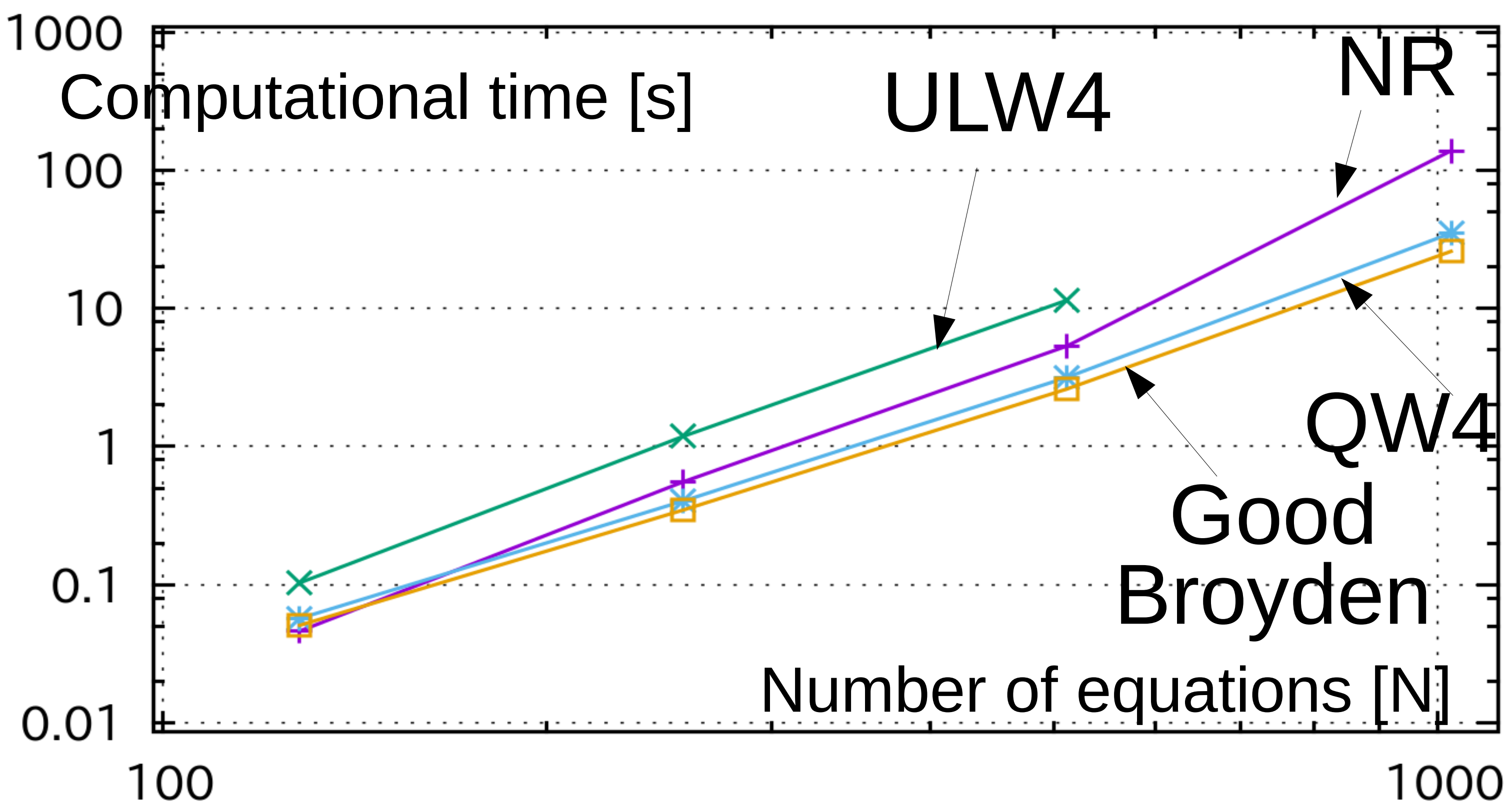
$$\phi(q) = \frac{1}{N_\theta} \sum_{k=1}^{N_\theta} u_\theta(q, \theta_k),$$

Convergence factor
(Okawa et al. 2014)

数値計算コストの比較

Extended Powell singular function: $F_{13}(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x))^T$, where

$$
\begin{aligned}
f_{4i-3}(x) &= x_{4i-3} + 10x_{4i-2}, \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, \frac{n}{4},\\
f_{4i-2}(x) &= \sqrt{5}(x_{4i-1} - x_{4i}), \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, \frac{n}{4},\\
f_{4i-1}(x) &= (x_{4i-2} - 2x_{4i-1})^2, \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, \frac{n}{4},\\
f_{4i}(x) &= \sqrt{10}(x_{4i-3} - x_{4i})^2, \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, \frac{n}{4},\\
x_s &= (3, -1, 0, 1, 3, -1, 0, 1, \dots, 3, -1, 0, 1)^T.
\end{aligned}
$$



LH W4法1

$\mathbf{J}^T \equiv \mathbf{QR}$ のようなQR分解を考える

$\mathbf{Q}$ 対角行列　$\mathbf{R}$ 上三角行列

$$\mathbf{J}^T = \mathbf{A}_{(0)} \equiv \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & a_{23}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} & a_{32}^{(0)} & a_{33}^{(0)} \end{pmatrix}.$$

に対して　$\boldsymbol{a}_{(0)} \equiv \left[a_{11}^{(0)} \; a_{21}^{(0)} \; a_{31}^{(0)} \right]^T,$　次のベクトルを考える

$$\boldsymbol{b}_{(0)} \equiv \left[-\mathrm{sign}\left(a_{11}^{(0)} \right) \left| \boldsymbol{a}_{(0)} \right| \; 0 \; 0 \right]^T,$$

LH W4法2

ここでハウスホルダー行列 $\mathbf{H}$ ($\mathbf{H}^T = \mathbf{H}^{-1} = \mathbf{H}$)

を作る

$$\mathbf{H}_{(0)} \equiv \mathbf{E} - 2\boldsymbol{c}_{(0)}\boldsymbol{c}_{(0)}^T; \qquad \boldsymbol{c}_{(0)} \equiv \frac{\boldsymbol{a}_{(0)} - \boldsymbol{b}_{(0)}}{|\boldsymbol{a}_{(0)} - \boldsymbol{b}_{(0)}|},$$

$$\mathbf{H}_{(0)}\boldsymbol{a}_{(0)} = \boldsymbol{b}_{(0)} \text{ and } \mathbf{H}_{(0)}\boldsymbol{b}_{(0)} = \boldsymbol{a}_{(0)}.$$

$$\mathbf{H}_{(0)}\mathbf{A}_{(0)} \equiv \mathbf{A}_{(1)} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \end{pmatrix},$$

以下同様に

$$\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{A}_{(1)} \equiv \mathbf{A}_{(2)} = \mathbf{H}_{(1)}\mathbf{H}_{(0)}\mathbf{J}^T = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \end{pmatrix} = \mathbf{R}.$$

LH W4法3

よって次のような分解ができた。

$$\mathbf{J}^T = \mathbf{H}_{(0)}\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{R} \ \Rightarrow \ \mathbf{J} = (\mathbf{H}_{(0)}\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{R})^T = \mathbf{L}\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{H}_{(0)},$$

$\mathbf{H}^T = \mathbf{H}^{-1} = \mathbf{H}_{)}$ より逆行列を求めると次の更新式が得られ、この更新式を用いて解を求めていく。

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x} + \frac{1}{2}\mathbf{H}_{(0)}\boldsymbol{p}^n, \quad \boldsymbol{p}^{n+1} = -\frac{1}{2}\mathbf{H}_{(1)}\mathbf{L}^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}).$$