二次元完全対称積分則の設計

2002MM068 野田 恭代
指導教員: 杉浦 洋

1 はじめに

本論文では2次元完全対称積分則，特に，三角領域上の積分則について考察する．

積分法には，大域的積分法と適応型積分法があるが，本論文では，適応型積分法を考える．適応型積分法のアルゴリズムは「精度が低いと判定された小三角形を２分する」という操作を繰り返して，必要な精度を達成する．このような数値積分法を用いる効率の良い積分公式を設計することが，本論文の目標である．本論文で重要になっているのは，完全対称性と再利用性である．

本論文では，三角領域は頂点の1つと重心を通る直線で分割する．また，公式の再利用可能性は有向グラフを用いて表現することができる．そしてこれを用いた設計法を考案した．

2 三角領域上の積分則

2.1 数値積分則の設計

$xy-$平面上の３点$\boldsymbol{\alpha} = (0,0), \boldsymbol{\beta} = (1,0), \boldsymbol{\gamma} = (0,1)$ を頂点とする三角領域Δを基本三角領域と呼ぶ．n個の標本点$\boldsymbol{\pi}_1 = (\xi_1, \eta_1), \boldsymbol{\pi}_2 = (\xi_2, \eta_2), \cdots, \boldsymbol{\pi}_n = (\xi_n, \eta_n) \in \Delta$と重み$\rho_1, \rho_2, \cdots, \rho_n$による積分公式を

$$I_n f = \sum_{l=1}^{n} \rho_l f(\boldsymbol{\pi}_l)$$

と書き，基本公式と言う．任意の全次数sの多項式を正確に積分できる公式をs次以上と言う．s次以上で$s+1$次以上でない公式をs次公式と言う．公式I_nがs次以上である条件は,

$$\sum_{i=1}^{n} \rho_i \xi_i^k \eta_i^l = \frac{k!l!}{(k+l+2)!} \quad (k, l \geq 0, k+l \leq s).$$

標本点，重みとも未知数なら$3n$変数非線形方程式，重みのみが未知数ならn変数線形方程式である．

得られた公式は，変数変換により任意の三角領域の近似積分に用いる．点$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$を頂点とする三角領域$D = D(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c})$の面積を$S$とする．$\Delta$から$D$へのアフィン変換$\varphi : \boldsymbol{q} = s\boldsymbol{\alpha} + t\boldsymbol{\beta} + u\boldsymbol{\gamma} \mapsto \boldsymbol{p} = s\boldsymbol{a} + t\boldsymbol{b} + u\boldsymbol{c}$ により，

$$Q(D)f = \iint_D f(\boldsymbol{p}) dxdy = 2S \iint_\Delta f(\varphi(\boldsymbol{q})) dtdu.$$

この右辺に積分則I_nを用いて積分公式

$$Q_n(D)f = 2S \sum_{i=1}^{n} \rho_i f(\varphi(\xi_i, \eta_i)) \cong Q(D)f \qquad (1)$$

を得る．アフィン変換で，x, yのk次の多項式はt, uのk次多項式に変換されるから，I_nがs次公式なら$Q_n(D)$もs次公式である．

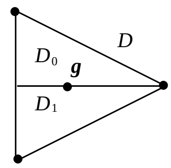

図 1: 分割の図

2.2 FS(Fully Symmetric：完全対称)集合

三角領域Dをそれ自身に移すアフィン変換は重心座標の置換であり，その数は頂点$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$の順列の数と等しく，6である．点 $\boldsymbol{p} \in D$の重心座標を(x, y, z)とし，その成分を置換した座標の全体を

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{p} \rangle &= \langle x, y, z \rangle \\ &= \{(x,y,z), (x,z,y), (y,x,z), \\ &\quad (y,z,x), (z,x,y), (z,y,x)\} \end{aligned}$$

と書き，原子と呼ぶ．

Dの部分集合$A \subset D$がこの6つのアフィン変換で不変なとき，AはFS(Fully Symmetric:完全対称)集合であると言う．AがFS集合なら，$\boldsymbol{p} \in A \Rightarrow \langle \boldsymbol{p} \rangle \subset A$である．FS集合は原子を単位として作られる．標本点が完全対称な積分公式で，重みが同一原子内で等しいものをFS公式と呼ぶ．原子を単位とするので，同一標本点数の一般の公式と比べ，FS公式のパラメーター数は少なく，設計も実装も容易となる．

式(1)の積分公式$Q_n(D)$は，一般には基本三角領域Δから三角領域Dへアフィン変換φに依存する．しかし，基本公式I_nをFS公式にすれば，$Q_n(D)$はアフィン変換φに依存せず一意に定まる．FS公式はこの意味でも使いやすい公式である．次節では，FS公式のみを考える．原子がFS公式の標本点からなるとき，その原子を公式の標本原子という．

3 再利用

3.1 再利用性

三角領域D=$D(\boldsymbol{a}$,$\boldsymbol{b}$,$\boldsymbol{c})$上での近似積分$Q_n(D)f$の精度が悪いときは，Dの頂点と重心$\boldsymbol{g}$を通る直線で小三角形D_0とD_1に２分し,

より精度の高い近似積分$Q_n(D_0)f$+$Q_n(D_1)f \cong Q(D)f$を得る．この領域分割をD_0, D_1以下にも再帰的に繰り返し，十分精度の高い近似積分値が得られる．このような領域分割による近似積分法を適用型積分則という．

原子$\langle \boldsymbol{p} \rangle$が$Q_n(D)$の標本原子であるとする．$\langle \boldsymbol{p} \rangle$の全ての点が$Q_n(D_0)$か$Q_n(D_1)$の標本点にもなっていれば，$\langle \boldsymbol{p} \rangle$は再利用可能であるという．$Q_n(D)$の全ての標本点が再利用可能であるとき$Q_n(D)$をR(Reusable：再利用可能)公

式と言う．またその標本点集合はR集合であるという．R公式は標本点上で一度計算した関数値が，領域分割の過程で再利用できるため効率的である．

$D = D(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c})$の頂点$\boldsymbol{a}$を選び，$\boldsymbol{a}$と$\boldsymbol{g}$を通る直線で$D$を分割すると小三角形$D_1 = D(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{d})$と$D_2 = D(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{d}, \boldsymbol{c})$ができる．ここで，$\boldsymbol{d} = \frac{(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})}{2}$は点$\boldsymbol{b}$,$\boldsymbol{c}$の中点である．$Q_n(D)$の標本点$\boldsymbol{p}$の重心座標を$(x, y, z)$とすると

$$\begin{aligned} \boldsymbol{p} &= x\boldsymbol{a} + y\boldsymbol{b} + z\boldsymbol{c} = x\boldsymbol{a} + (y-z)\boldsymbol{b} + 2z\frac{\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}}{2} \\ &= x\boldsymbol{a} + (y-z)\boldsymbol{b} + 2z\boldsymbol{d} \end{aligned}$$

ゆえに$\boldsymbol{p}$のD_1における重心座標は$(x, y-z, 2z)$である．$y-z \geq 0$のとき$\boldsymbol{p} \in D_1$である．さらに$(x, y-z, 2z)$が$Q_n(D_1)$の標本点の重心座標なら，$\boldsymbol{p}$は$Q_n(D_1)$で再利用される．同様に$(x, 2y, z-y)$は$\boldsymbol{p}$のD_2における重心座標である．$z-y \geq 0$のとき$\boldsymbol{p} \in D_2$である．さらに$(x, 2y, z-y)$が$Q_n(D_2)$の標本点の重心座標なら，$\boldsymbol{p}$は$Q_n(D_2)$で再利用される．

以上により，$Q_n(D)$の標本点$\langle \boldsymbol{p} \rangle = \langle x, y, z \rangle (x \leq y \leq z)$ が再利用可能であるための必要十分条件は，三つの原子$\langle \boldsymbol{p}_0 \rangle = \langle 2x, y-x, z \rangle, \langle \boldsymbol{p}_1 \rangle = \langle 2x, y, z-x \rangle, \langle \boldsymbol{p}_2 \rangle = \langle x, 2y, z-y \rangle$ が$Q_n(D)$の標本原子であることである．この依存関係をグラフ的に表現し，$\langle \boldsymbol{p} \rangle \to \langle \boldsymbol{p}_i \rangle (0 \leq i \leq 2)$と矢印で結ぶ．$Q_n(D)$がR公式であるための必要十分条件は，$Q_n(D)$ の標本原子$\langle p \rangle$から出る三本の矢印の終点が再び$Q_n(D)$の標本原子であることである．

3.2 再利用関係グラフ

原子集合Xにあらわれるすべての関係$p \to q (p, q \in X)$を矢印で結んだものをXの再利用関係グラフと呼び$G(X)$と書く．

R集合を系統的に作り出す方法として，それ自身R集合である原子集合Xの再利用関係グラフ$G(X)$を作り，その部分グラフ$G(P), P \subset X$の再利用性を判定することである．

Xとしては自然数nに対して

$$X_n = \{< \frac{i}{n}, \frac{j}{n}, \frac{k}{n} >: i + j + k = n, 0 \leq i \leq j \leq k\}$$

が考えられる．$< \frac{i}{n}, \frac{j}{n}, \frac{k}{n} >$に対し再利用関係をもつ$< \frac{2i}{n}, \frac{j-i}{n}, \frac{k}{n} >, < \frac{2i}{n}, \frac{j}{n}, \frac{k-i}{n} >, < \frac{i}{n}, \frac{2j}{n}, \frac{k-j}{n} >$はすべて$X_n$の元であるから$X_n$はR集合である．

本研究では，重心座標の分母が20以下の全ての原子についてグラフ

$$G(X), X = \cup_{n=1}^{20} X_n$$

を描いた．総原子数は263である．nが既約共通分母となっている原子からなる部分集合

$$Y_n = \{< \frac{i}{n}, \frac{j}{n}, \frac{k}{n} >: \mathrm{GCD}(i, j, k, n) = 1\} \subset X_n$$

を「n系」と呼ぶ．GCDは最大公約数である．明らかに$p \in Y_n, p \to q$なら

$$p \in \begin{cases} Y_n & ,n\text{は奇数} \\ Y_n \cup Y_{\frac{n}{2}} & ,n\text{は偶数} \end{cases}$$

である．ゆえに，$G(X)$は20以下のすべての奇数Kに関する部分グラフ

$$G(Z_K), Z_K = Y_K \cup Y_{2K} \cup \cdots \cup Y_{LK}, LK \leq 20 < 2LK$$

に分割される．この原子集合Z_Kを「K系統」と呼ぶ．

$G(Z_K)$において，2原子p, qが双方向の有向路で結ばれるとき,「同構」と言う．特別にp自身はpと同構であるとする．pと同構な原子全体$K(p)$をp の「構」と言う．pがR集合Aに含まれるなら$K(p) \subset A$である．

4 成功例

作成した再利用関係グラフから得られたR集合を用いてR公式を構成した．その中から，いくつかの有用な公式を発見した．その中で高い性能をもつものを1つ紹介する．標本原子は$(0,0,1)(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}), (0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}), (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$ の順列を含めた16点を用いる．通常5次公式は，図2のように21点を必要とする．しかし，この標本点の場合，16点でも5次となった．重みは，5つの原子について順に

$$\begin{aligned} & w[1] = -\frac{3}{45}, w[2] = \frac{64}{315}, w[3] = \frac{27}{560}, \\ & w[4] = -\frac{81}{280}, w[5] = \frac{1}{126} \end{aligned}$$

となった．$w[1], w[4]$にマイナスの値がでてくるものの値自体は大変小さいものなのでこの程度のマイナスならば数値的安定性に影響はないと考えられる．

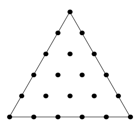

図 2: 5次21点の標準公式

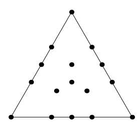

図 3: 16点5次の新公式

5 まとめ

本研究では，重心座標の分母が20以下のすべての原子についての再利用関係グラフを完成した．それを用いて5次以下のR公式で性能の良いものを探索し，標準より少ない点数の公式を発見した．

今後の課題は，グラフの作成とR公式の探索を自動化して，より高次の公式を発見することである．

参考文献

[1] A.Genz and R.Cools：An Adaptive Numerical Cubature Algorithm for Simplices, ACM Transactions on Mathematical Software, vol.29, no.3, pp.297-308(2003).

[2] A.H.Stroud ：Approximate Calculation of Multiple Integrals, Prentice-Hall(1971).