

二重指数型積分則の誤差解析

2005MM044 森勇人

指導教員：杉浦洋

1 はじめに

二重指数型積分則（以下 DE 公式）は、万能型の数値積分公式として今日広く用いられている。この DE 公式には、通常の有限区間用の DE 公式や無限区間用の DE 公式や振動積分用の DE 公式などさまざまな種類があり、応用上重要な積分の多くを効率よく計算してくれる。DE 公式による具体的な自動積分アルゴリズムには、離散化誤差を推測し、計算を打ち切るといったプロセスが必要になる。この推測は、積分則の刻み幅を半減させるごとに積分による精度が倍になるという性質を用いて行う。しかし、この性質は絶対誤差の上からの評価においてのみ成り立つものであり、そのことを考慮せずに推定を行うと収束判定を誤ることがある。そこで従来から、安全因子を推定誤差に乗じて判定をより厳しくすることで信頼度を上げるといった方法がとられてきた。しかしこの方法は、多くの場合で、要求するよりも過剰な精度の計算を行い、DE 公式の効率を悪化させる。

それに対し大浦は、従来の離散化誤差計算に加えて、重みつき積分に対する離散化誤差計算をすることで精度を二重に保証する方法を提案した [1]。本研究では、DE 公式と大浦の新しい評価法を理解し、その効果を数値実験により検証する。

2 DE 公式とその誤差解析

有限区間の積分

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \quad (1)$$

について考える。この積分を適当な変数変換 $x = \varphi(t)$, $a = \varphi(-\infty)$, $b = \varphi(\infty)$ で

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} g(t) dt, \quad g(t) = f(\varphi(t))\varphi'(t) \quad (2)$$

と、急減少関数 $g(t)$ の無限積分に変換できたとする。このとき、右辺は無限台形則の総和の上下限を調整した

$$T_h^n g = h \sum_{l=-n}^n g(lh) = h \sum_{l=-n}^n f(\varphi(lh))\varphi'(lh) \quad (3)$$

で精度よく近似できる。 n は $|g(lh)|$ が $|l| > n$ で十分小さくなるように選ぶ。特に、 $g(t)$ がある正定数 $\alpha, \beta > 0$ に対し

$$|g(t)| = O(e^{-\alpha \exp \beta |t|}), |t| \rightarrow \infty$$

と二重指数関数的に減少するよう変換する方法を DE 公式という。有限区間 $[-1, 1]$ 上の積分に対する変数変換としては、次のようなものが推奨される。

$$\varphi(t) = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right) + c, \quad (4)$$

$$\varphi'(t) = \frac{\pi r \cosh t}{2 \cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right)}$$

積分 $I = \dots$ に対する無限台形則近似を

$$T_h = h \sum_{k=-\infty}^{+\infty} f(kh) \quad (5)$$

とし、その離散化誤差： $E_D = T_h - I$ とすると、以下の定理が成り立つ。以下で、

$$D(d) = \{z \in C \mid |\operatorname{Im} z| < d\} \quad (6)$$

は複素平面上の幅 $2d > 0$ の実軸に平行な帯状領域を表す。 [定理 1] $D(d)$ で正則な関数 $f(z)$ がつぎの 2 条件を満たすとする（条件 1）任意の c ($0 < c < d$) に対して

$$\Lambda(f, c) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x + ic)| + |f(x - ic)| dx \quad (7)$$

が存在し、さらに、

$$\Lambda(f, d-0) \equiv \lim_{c \rightarrow d-0} \Lambda(f, c) \quad (8)$$

が有限値である（条件 2）任意の c ($0 < c < d$) に対して

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \int_{-c}^c |f(x + iy)| dy = 0 \quad (9)$$

である。このとき、任意の $h > 0$ に対して

$$|E_D| = |T_h - I| \leq \frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} \Lambda(f, d-0) \quad (10)$$

が成り立つ。//

すなわち、 $h \rightarrow 0$ で、 T_h は、 I に指数関数的に収束する。式 (3) の $T_h^n g$ についても、 n を十分大きくとることにより、指数関数的に真の積分値に収束する。

3 大浦の収束判定法

3.1 従来の収束判定法

有限区間の DE 公式は与えられた積分

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \quad (11)$$

に対して、変数変換（DE 変換）(4) を施して

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varphi(t))\varphi'(t) dt$$

とした上で刻み幅 h の台形公式を施して得られる近似式

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\varphi(nh))\varphi'(nh) \quad (12)$$

において，無限和を適当な有限和で打ち切って得られるものである．この離散化誤差は， $f(x)$ にある弱い解析性がいれば， $C, C' > 0$ が存在して

$$|I - I_h| \leq C' \|f\| \exp(-C/h) \quad (13)$$

となる．ここで， $\|f\|$ は $f(z)$ のある複素領域でのノルムである．したがって，刻み幅 h を半減させることに有効桁数がほぼ倍になっていくという性質がある．この性質を利用して，誤差推定できる．ただし正確には，この推定は，ある $h = h_0, h_0/2, h_0/2^2, \dots, h_0/2^M$ に対して

$$\alpha |I| \exp(-C/h) \leq |I - I_h| \leq \beta |I| \exp(-C/h) \quad (14)$$

となる $\alpha, \beta > 0$ が存在するという仮定のもとで行われる．まず， $h = h_0$ に対して $I_h, I_{h/2}$ が計算されているとき， I_h の相対誤差 E_h は，

$$E_h = |I - I_h|/|I| \simeq |I_{h/2} - I_h|/|I_{h/2}|$$

のようにほぼ正確に計算できる．次に， $I_{h/2}$ の相対誤差 $E_{h/2}$ は

$$E_{h/2} \leq \beta \exp(-2C/h) \leq \frac{\beta}{\alpha^2} E_h^2$$

と評価することができる．したがって，収束判定は，

$$|I_{h/2} - I_h|/|I_{h/2}| < \frac{\alpha}{\sqrt{\beta}} \sqrt{\epsilon} \quad (15)$$

を満たしたとき $I_{h/2}$ を I の近似値として返して計算を終了する．満たさなければさらに $I_{h/4}$ を計算し反復する．ここで， $\epsilon > 0$ は許容相対誤差であり， $\alpha/\sqrt{\beta}$ が安全因子になる．安全因子は理論的に定められないためにいくつかの関数 $f(x)$ を積分して実験的に定める．

3.2 改良された収束判定法

大浦の提案した離散化誤差の推定は，(12) 式と同時に

$$J_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\varphi(nh)) \frac{2}{\cosh^2(\frac{\pi}{2} \sinh(nh))} \quad (16)$$

を計算することでなされる．これは，重みつき積分

$$J = \int_{-1}^1 \frac{4}{\sqrt{\pi^2 + 4(\tanh^{-1} x)^2}} f(x) dx \quad (17)$$

を計算することに相当する．ここで，この重みつき積分(16)は，標本数の増加なしで高速かつ容易に計算できることに注意する．さらに， J_h の離散化誤差に対して，(13) 式と同様の評価

$$|J - J_h| \leq C'' \|f\| \exp(-C/h), C'' > 0 \quad (18)$$

が得られ， I_h の離散化誤差の代用とすることができる．したがって，改良された収束判定法は，

$$\max(|I_{h/2} - I_h|, |J_{h/2} - J_h|)/|I_{h/2}| < \frac{\alpha'}{\sqrt{\beta}} \sqrt{\epsilon} \quad (19)$$

を満たしたとき計算を終了するというものになる．

4 Mathematica による数値実験

$$I_B = \int_{-1}^1 \frac{dx}{(x+2p)^2 + 1+q} (= \frac{1}{\sqrt{1+q}} \tan^{-1} \frac{2\sqrt{1+q}}{4p^2+q})$$

とし，従来と大浦の収束判定の正確さについて比較する．パラメータ p, q を格子点 $p = j/N_p, q = k/N_q, 0 \leq j \leq N_p, 0 \leq k \leq N_q$ 上に選び，積分値を計算するものとする．このとき， $h_0 = 1, \epsilon = 10^{-12}$ とし，安全因子を 0.05 で固定したときの収束判定が誤る積分の個数 N_{fail} と最大相対誤差 E_{max} を求め，表 1 に示す．

大浦の収束判定による自動積分ルーチンは，正確に I_B の積分を求めることがわかる．

一方，従来の収束判定による自動積分ルーチンは，誤る積分が見られ，正確に計算できないことがあることがわかる．ただし，安全因子を 0.000018 に選ぶことで従来の収束判定でも正確に計算できるが，計算効率が悪くなる．

表 1 I_B の収束判定

N_p	N_q	従来法		大浦法	
		N_{fail}	E_{max}	N_{fail}	E_{max}
16	16	0	6.1×10^{-14}	0	2.6×10^{-14}
64	64	6	2.8×10^{-7}	0	1.4×10^{-13}

次に，従来と大浦の収束判定による自動積分ルーチンを用いて，標本点数を比較する．

I_B に関して，収束判定条件を満たした時の $I_{h/2}$ に対する標本点数を求める．

まず，安全因子を 0.05 に固定したときは，大浦の収束判定の方が標本点数が多かった．

これは大浦の収束判定が，従来の収束判定よりもより厳しい条件で計算することで正確さを得ているからである．このことは，従来の収束判定を安全因子 0.000018 にして収束判定をした時の標本点数を比較するとわかる．

5 おわりに

ここまで DE 公式について従来と大浦の収束判定法の比較をしてきた．

この研究により，安全因子と標本点数から大浦の収束判定法の方が効率よく計算できることがわかる．今後の課題は，大浦の研究をさらに改良した独自の収束判定法を考えることである．

6 参考文献

参考文献

- [1] 大浦拓哉：二重指数関数型積分公式の収束判定法の改良．日本応用数学会論文誌，pp.225 ~ 230, 2003.
- [2] 杉原正顕・室田一雄：数値計算法の数理．岩波書店，2007．
- [3] 杉浦洋：数値計算の基礎と応用．サイエンス社，2000．