精度保証付き定積分

2008MI280 安田理佳子
指導教員：杉浦洋

1　はじめに

積分は解析学における最も基本的な演算である．しかし，積分値が解析的に与えられていることは稀で，その値を与えるために数値計算に頼らざるを得ないことが多い．したがって，数値積分による値の精度保証は極めて重要な課題である．ここで，精度保証とは近似積分値の絶対誤差の上界を計算することである．

今回は正則関数の定積分の精度保証付積分について研究する．数値の絶対誤差の上界を与える理論としては，被積分関数の高階導関数を用いるもの [1] と被積分関数の複素周回積分を用いるものがある．この論文では，後者の方法について研究を行った．

2　複素区間計算

2.1　実区間関数

閉区間 $[\underline{x}, \overline{x}]$ $(\underline{x} < \overline{x})$ を $[x] = [\underline{x}, \overline{x}]$ と書く．実連続関数 $f(x)$ に対し，

$$f([x]) = \{f(x)|x \in [x]\}$$

を f の区間関数という．Mathematica には四則演算と標準的な実数関数の区間関数が実装されている．

標準関数と四則演算による合成関数を f とする．f を構成する標準関数と四則演算をすべてその区間関数で置き換えたものを f の区間拡張といい $[f]([x])$ で表す．このとき

$$f([x]) \subseteq [f]([x])$$

が成立する．

2.2　複素区間解析

複素平面上の閉長方形領域 $[z] = [x] + i[y]$ を複素区間という．これまでの区間演算は，複素関数を実部と虚部に分けて計算すれば自然に複素区間演算に拡張される．

3　数値積分公式と誤差の特性関数

実軸上の有限区間 $J = (-1, 1)$ の積分

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

を考える．この積分を数値的に近似計算するための公式を

$$I_n = \sum_{j=1}^{n} A_j f(a_j) \tag{2}$$

とする．$a_j \in [-1, 1]$ を積分公式 (2) の標本点，A_j を重みという．この公式を n 点公式と呼ぶ．積分誤差は次のように複素周回積分で表せる [2].

[定理 3.1]　$f(x)$ が K で正則のとき

$$\Delta I_n = I - I_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi_n(z) f(z) dz \tag{3}$$

$$\Phi_n(z) = \int_{-1}^{1} \frac{w(x)}{z - x} dx - \sum_{j=1}^{n} \frac{A_j}{z - a_j}.// \tag{4}$$

$\Phi_n(z)$ を数値積分公式の誤差の特性関数という．これは積分区間 J と積分公式 I_n だけから定まり，被積分関数 $f(x)$ にまったく依存しない．

補間型積分則については次の定理が成り立つ．

[定理 3.2]　すべての標本点を零点とする n 次多項式を

$$p_n(x) = c(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n),\ c \neq 0 \tag{5}$$

とすると，

$$\Phi_n(z) = \frac{1}{p_n(z)} \int_{-1}^{1} \frac{p_n(x)}{z - x} dx \qquad ,z \neq [-1, 1].// \tag{6}$$

具体的な積分則として n 点 Clenshaw-Curtis 則 (C-C 則):

$$C_n f = \sum_{l=0}^{n-1} \omega_l f(\xi_l) \tag{7}$$

を用いる．標本点は n 次 Chebyshev 多項式 $T_n(x), n \geq 1$ の零点

$$\xi_l = \cos \frac{\pi}{n} \left(l + \frac{1}{2} \right) \qquad (0 \leq l \leq n) \tag{8}$$

である．C-C 則は補間型積分則で，その重み ω_l は

$$\omega_l = \frac{2}{\pi} \left(1 - 2 \sum_{k=1}^{\lfloor (n-1)/2 \rfloor} \frac{\cos \frac{2\pi k}{n} \left(l + \frac{1}{2} \right)}{4k^2 - 1} \right) \qquad (0 \leq l \leq n) \tag{9}$$

である．C-C 則の誤差特性関数の絶対値の上界は以下の定理で与えられる．

[定理 3.3]　$z \in C - [-1, 1]$ について，

$$|\Phi_n(z)| \leq F_n(z)$$

$$F_n(z) = \frac{2 \log \frac{(|a|+1) + \sqrt{(|a|+1)^2 + b^2}}{(|a|-1) + \sqrt{(|a|-1)^2 + b^2}}}{|w^n + w^{-n}|},$$

$$w = z + \sqrt{z^2 - 1}, z = a + ib.//$$

4　精度保証付き計算法

定理 3.3 を用いて数値積分 (2) の精度保証を行う．定理 3.3 より

$$\begin{aligned} |E_n f| &\leq \frac{1}{2\pi} \left(\max_{z \in C} |\Phi_n(z) f(z)| \right) \oint_C |dz| \\ &\leq \frac{L}{2\pi} \left(\max_{z \in C} F_n(z) |f(z)| \right). \end{aligned} \tag{10}$$

ここで，

$$L = \oint_C |dz|$$

は閉曲線 C の長さである．

積分路 C は積分区間 [-1,1] を囲む実軸対称で実軸に平行な辺を持つ長方形とする．C の頂点を反時計回りに

$$\alpha_1 = a + id, \alpha_2 = a - id, \alpha_3 = b - id, \alpha_4 = b + id, \quad a < -1, b > 1, d > 0 \tag{11}$$

とする (図 5.1)．C の長さは

$$L = 2(b - a + d) \tag{12}$$

である．

C の辺を $C_1 : \alpha_1 \to \alpha_2$, $C_2 : \alpha_2 \to \alpha_3$, $C_3 : \alpha_3 \to \alpha_4$, $C_4 : \alpha_4 \to \alpha_1$, とし，各辺を複素区間とみなし，

$$C_1 = [a, a] + i[-d, d], C_2 = [a, b] + i[-d, -d],$$
$$C_3 = [b, b] + i[-d, d], C_4 = [a, b] + i[d, d]$$

とすると，

$$\max_{z\in C} F_n|f(z)| \le \max_{1\le i\le 4} \max_{z\in C_i} F_n(z)|f(z)| \tag{13}$$
$$\max_{z\in C_i} F_n(z)|f(z)| = \max S_n(C_i), \tag{14}$$
$$S_n(z) = F_n(z)|f(z)| \tag{15}$$

となる．さらに，$S_n(C_i)$ を区間拡張 $[S_n](C_i)$ で包囲し，

$$\max_{z\in C_i} F_n(z)|f(z)| \le \max[S_n](C_i) \tag{16}$$

を得る．$[F_n](C_i)$ は 2 節の複素区間計算で計算する．

大きな複素区間 C_i について区間拡張 $[S_n](C_i)$ を計算することは，出力区間が $S_n(C_i)$ に比べて過大となり，好ましくない．そこで，実際の計算では，辺 C_i を m 等分して

$$C_i = \bigcup_{j=1}^{m} C_{ij},$$
$$C_{ij} : \alpha_i + (j-1)\delta \to \alpha_i + j\delta \ \ (1 \le j \le m)$$

とし，

$$\begin{aligned}\max S_n(C_i) &= \max_{1\le j\le m} \max S_n(C_{ij}) \\ &\le \max_{1\le j\le m} \max[S_n](C_{ij}) =: M_i\end{aligned} \tag{17}$$

の最右辺を計算することで，精度の向上を図る．

式 (10),(14),(17) より，

$$|E_n f| \le M = \frac{b - a + d}{\pi}(M_1 + M_2 + M_3 + M_4) \tag{18}$$

を得る．

以上まとめると，以下のアルゴリズムを得る．

Step0:　C-C 則による近似積分値 $C_n f$ を計算．

Step1:　長方形 C の頂点 (12) を決める．

Step2:　各辺 C_i について式 (17) の M_i を計算する．

Step3:　式 (18) で積分誤差の上界 M を計算する．

以上により，積分値 If に対する近似積分値 $C_n f$ の精度保証

$$|C_n f - If| = |E_n f| \le M \tag{19}$$

を得る．

5　数値実験

関数 $f(x) = \cos x$ について定積分

$$If = \int_{-1}^{1} f(x)dx = 1.682941969615793\cdots, \quad f(x) = \cos x \tag{20}$$

の精度保証付計算を行う．

Step0:標本点数を $n = 10$ として $C_n f$ を計算し，

$$C_{10} f = 1.682941969605210\cdots \tag{21}$$

得る．式 (11) のパラメータを

$$a = -9.0, b = 9.0, d = 9.0$$

と定めた．式 (17) の M_i は

$$M_1 = 1.33\cdots \times 10^{-11}, M_2 = 5.67\cdots \times 10^{-10},$$
$$M_3 = 1.34\cdots \times 10^{-11}, M_4 = 5.67\cdots \times 10^{-10}$$

となった．以上を式 (18) に代入して

$$|E_n f| \le M = 6.05\cdots \times 10^{-9} \tag{22}$$

が得られた．式 (20),(21) より，

$$|E_n f| = 1.05\cdots \times 10^{-11} < M \tag{23}$$

であり，精度保証は成功した．

6　まとめ

正則関数 $f(x)$ の定積分の精度保証付計算の理論について研究し，それに基づき，Mathematica 上でプログラムを作成した．積分誤差は $f(z)$ と誤差特性関数 $\Phi_n(z)$ の積の周回積分で表現できる．我々は積分則として Clenshaw-Curtis 則 (C-C 則) を用い，C-C 則の誤差特性関数の絶対値の上界関数 $F_n(z)$ を構成した．それを用いて積分路上の絶対値 $f(z)\Phi_n(z)$ の上界を計算し，数値積分の精度保証に成功した．計算には Mathematica の実区間演算を拡張した複素演算システムを用いた．積分路の決定には，$F_n(z)|f(z)|$ の複素平面における等高線を用いた．その結果，高精度の精度保証を得ることができた．

今後の課題では，$F_n(z)$ を改良し，精度を向上させることと，等高線によらず積分路を自動的に決定することである．

7　参考文献

[1] 斉藤裕樹：精度保証付き数値積分，南山大学数理情報学部情報システム数理学科 2009 年度卒業論文，2010

[2] 森正武:数値解析と複素関数論, 筑摩書房, 東京，1975, pp.216-218