

# 端補正 Clenshaw–Curtis 則の精度保証付き計算

M2018SS014 高棹 義裕

指導教員：杉浦洋

## 1 はじめに

Clenshaw–Curtis 則は、1 変数関数の定積分を近似するための積分則である。本研究では、Clenshaw–Curtis 則の改良版である端補正 C–C 則 [1] を精度保証付きで計算するプログラムの作成を目標とする。

Hasegawa-Sugiura[1] は、被積分関数  $f(x)$  の正則性を仮定し、その解析接続  $f(z)$  の計量、特に正則領域の広さ、により積分誤差のオーダーを与えている。しかし、精度保証付き計算を行うには、絶対誤差の上界を具体的に計算することが必要である。第 1 の目標は、[1] の証明を検討し、絶対誤差の上界の計算法を導くことである。解析接続  $f(z)$  の計量を精度保証付き計算するために、正則フラグ付き円板システム (加藤 [2], 柴田 [5]) を用いる。特に、正則領域の確定には、高棹 [6] の特異点自動検出アルゴリズムを用いる。

## 2 正則フラグ付き円板演算システム

精度保証付き計算を行うには、計算過程で発生する丸め誤差、近似誤差をその都度評価する必要がある。それを自動的に実行してくれるシステムが、精度保証付き演算システムである。実数計算用には、区間演算システムがあり、Mathematica にも実装されている。複素計算用には、Petković[3] などにより円板演算システムが提案されており、加藤 [2] と柴田 [5] によって Mathematica 上に実装されたものが利用できる。

### 2.1 円板の定義

中心  $c \in \mathbb{C}$ 、半径  $r \in \mathbb{R}$  の複素閉円板領域を

$$Z = \langle c; r \rangle = \{z : |z - c| \leq r\}, \quad (1)$$

と表し、以後これを単に円板と呼ぶ。また、円板全体の集合を

$$\mathbb{KC} = \{\langle c; r \rangle : c \in \mathbb{C}, r \in \mathbb{R}, r \geq 0\}$$

と書く。

#### 2.1.1 円板関数

円板演算システムでは、1 変数複素関数

$$f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$$

に対して、

$$f(\langle c; r \rangle) \subset \hat{f}(\langle c; r \rangle)$$

を満たす円板関数

$$\hat{f} : \mathbb{KC} \rightarrow \mathbb{KC}$$

を計算する。多変数複素関数に関しても同様である。

連続した計算においても、用いられる全ての関数の円板関数があれば、入力値の精度から出力値の精度が分かる。

#### 2.1.2 正則性フラグ

正則性フラグ Rflag とは、基本関数が入力円板で正則かどうか知らせるものである。これは円板のデータに付加する。入力円板で Rflag = True のとき、入力円板が関数の特異点を含まないとと言えるなら、Rflag = True、含まないとはいえないなら Rflag = False を出力円板に付加する。入力円板で Rflag = False ときは、無条件に出力円板に Rflag = False を付加する。

このように基本関数を構成することにより、基本関数の合成関数についても、入力円板の Rflag = True として関数計算すれば、その出力円板の正則性フラグを見ることにより、入力円板で関数が正則かどうか判定できる。

このとき、基本関数の合成関数  $f$  において、出力円板の Rflag が True なら、入力円板において  $f$  は必ず正則である。「 $f$  は入力円板で正則である」は、数学的に真の命題である。出力円板の Rflag が False でも、入力円板において  $f$  が正則である可能性はある。合成関数の計算の途中結果において要素となる関数の値域は、円板で包囲され大きめに扱われるからである。

## 3 端補正 Clenshaw–Curtis 則

### 3.1 Clenshaw–Curtis 則の定義

区間  $[-1, 1]$  で与えられた関数  $f(x)$  の積分

$$If = \int_{-1}^1 f(x) dx \quad (2)$$

を近似する、 $n$  点 Clenshaw–Curtis 則 (C–C 則)[4] は、 $m = n - 1$  次 Chebyshev 点  $x_j = \cos(\pi j/m)$ ,  $0 \leq j \leq m$  を標本点とする補間型積分則：

$$Q_n f = \sum_{j=0}^m w_j f(x_j) \cong If$$

である。

第 1 種の  $k$  次 Chebyshev 多項式を

$$T_k(x) = \cos(k \cos^{-1} x)$$

と定義する。

### 3.2 端補正 Clenshaw–Curtis 則の定義

Hasegawa-Sugiura[1] は、C–C 則の改良として端補正 C–C 則を提案した。標本点数  $n \geq 6$  の端補正 C–C 則の標本点は、 $m = n - 3$  次 Chebyshev 点  $\{x_j\}_{0 \leq j \leq m}$  に

$$\pm\beta = \pm \cos \frac{\pi}{2m}$$

を追加したものである。 $n$  端補正 C–C 則を、

$$\tilde{Q}_n f = \sum_{j=0}^m v_j f(x_j) + u(f(\beta) + f(-\beta)) \cong If \quad (3)$$

と書く。重みは、 $n-2$ 点 C-C 則の重み  $w_i$ ,  $0 \leq i \leq m$  を用いて、

$$u = \frac{\rho_{m-L} - \rho_{m+L}}{4 \sin \frac{\pi L}{2m}}, \quad (4)$$

$$v_j = w_j + z_j,$$

$$z_j = (-1)^j h_j^{(m)} \frac{(\rho_{m-L} - \rho_{m+L})(2 \cos \frac{\pi j}{m})^{2-L}}{4m \sin \frac{\pi(2j+1)}{2m} \sin \frac{\pi(2j-1)}{2m}}, \quad 0 \leq j \leq m \quad (5)$$

である。ここで、 $n$  が偶数のとき  $L=1$ ,  $n$  が奇数のとき  $L=2$  である。また、

$$\rho_k = IT_k = \begin{cases} 2/(1-k^2), & k \text{ even,} \\ 0, & k \text{ odd} \end{cases} \quad (6)$$

とし、 $h_j^{(m)} = 1$ ,  $0 < j < m$ ,  $h_0^{(m)} = h_m^{(m)} = 1/2$  である。 $\ddot{Q}_n f$  の誤差を

$$E_n f = I_n f - \ddot{Q}_n f \quad (7)$$

と書く。

#### 4 端補正 C-C 則の誤差解析

本論文では、被積分関数  $f(x)$  は区間  $[-1, 1]$  で正則であると仮定する。

$f(x)$  の Chebyshev 級数展開について次の定理が知られている。

**定理 1** (Rivlin[4]) 正定数  $r$  ( $0 < r < 1$ ) に対して  $\mathcal{E}_r$  を、複素平面  $\mathbb{C}$  上で  $z = \pm 1$  を焦点とし、長軸と短軸の長さの和を  $2/r$  の楕円

$$\mathcal{E}_r : |z-1| + |z+1| = r + r^{-1} \quad (8)$$

とする。関数  $f(z)$  は楕円  $\mathcal{E}_r$  の周上及び内部で正則とする。

$$M = \max_{z \in \mathcal{E}_r} |f(z)| \quad (9)$$

とすると、 $f(z)$  の Chebyshev 級数展開

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k T_k(x) \quad (10)$$

の係数について、

$$|a_k| \leq M r^k, \quad (11)$$

が成立する。

この定理により、 $f(z)$  が区間  $[-1, 1]$  を含む領域で正則ならば、式 (11) を満たす正定数  $r$  ( $0 < r < 1$ ) と  $M > 0$  が存在する。

#### 5 端補正 C-C 則の誤差の上界

$T_k(x)$  に対する  $\ddot{Q}_n$  の誤差を、

$$e_k = E_n T_k = IT_n - \ddot{Q}_n T_n, \quad k \geq 0,$$

と書く。 $\ddot{Q}_n$  は  $n$  次未満の多項式に対して正確なので、

$$e_k = 0, \quad k < n,$$

また、対称則なので

$$e_{2k+1} = 0, \quad k \geq 0,$$

が得られる。従って、式 (10) と式 (11) から、

$$\begin{aligned} |E_n f| &\leq \sum_{k=0}^{\infty} |a_k| |E_n T_k| \\ &= \sum_{k=[(n+1)/2]}^{\infty} |a_{2k}| |e_{2k}| \leq M \sum_{k=[(n+1)/2]}^{\infty} r^{2k} |e_{2k}| \end{aligned} \quad (12)$$

が得られる。これを、低次項と高次項に分け、

$$|E_n f| \leq M r^n (S_1 + S_2), \quad (13)$$

$$S_1 := \sum_{k=N_1}^{N_2} r^{2k-n} |e_{2k}|, \quad (14)$$

$$S_2 := \sum_{k=N_2+1}^{\infty} r^{2k-n} |e_{2k}|. \quad (15)$$

とする。ただし、 $N_1 = [(n+1)/2]$ ,  $N_2 = [(n+m/2-4)/2]$  である。

この  $S_1, S_2$  を評価する

##### 5.1 $S_1$ の評価

次の補題 [1] を用いる。

**補題 1** 実数  $x$  に対して、 $\hat{\rho}(x) = 2/(1-x^2)$  とする。また、 $K \geq 3$  とする。 $K = k - m$  を満たす整数  $k$  と  $\hat{\rho}(x)$  に対して、

$$\begin{aligned} \varphi_k(x) &= \hat{\rho}(x^{-1} + k) - \hat{\rho}(x^{-1} - k), \\ \psi_k(x) &= \sin(kx)/\sin x, \\ \varepsilon_k(x) &= \varphi_K(x) - \varphi_L(x) \psi_{K/L}(\pi Lx/2) \end{aligned} \quad (16)$$

とおくと、

$$e_{2k} = \varepsilon_{2k}(m^{-1}) > 0, \quad n \leq 2k \leq n+m-5 \quad (17)$$

である。

式 (14) と補題 1 から、次式が得られる。

$$S_1 = \sum_{k=N_1}^{N_2} r^{2k-n} \varepsilon_{2k}(m^{-1}). \quad (18)$$

$S_1$  は有限級数であり、具体的に計算できる。したがって、 $S_1$  の右辺を区間演算し、その上限  $\bar{S}_1$  により、 $S_1 \leq \bar{S}_1$  である。

##### 5.2 $S_2$ の評価

$\ddot{Q}_n$  のノルム

$$\|\ddot{Q}_n\| = \sum_{j=0}^m |v_j| + 2|u|$$

を区間演算した結果を  $[\underline{P}, \bar{P}]$  とし、

$$B = 2 + \bar{P} \quad (19)$$

とする。これにより、

$$|e_k| = |IT_k - \ddot{Q}_n T_k| \leq \|I\| \|T_k\| + \|\ddot{Q}_n\| \|T_k\| \leq B$$

となる。これを用いて、 $S_2$  の評価式

$$S_2 = \sum_{k=N_2+1}^{\infty} r^{2k-n} |e_{2k}| \leq \frac{Br^{2N_2-n+2}}{1-r^2} \quad (20)$$

を得る。

### 5.3 Chebyshev 展開係数の収束率 $r$ の計算

Rivlin の定理 4.1 の不等式 (11) の右辺現れる  $r$  を計算するアルゴリズムを与える。

高棹のアルゴリズム [6] により、複素平面上で原点を中心とする半径  $R_0$  の円板  $C$  に内接し、辺が実軸に平行な正方形の内部  $S$  に存在する  $f(x)$  全ての特異点を囲む小円板のリスト

$$rclist = (\langle c_i; r \rangle)_{1 \leq i \leq N}$$

が得られる。 $S$  からこれらの小円板を除いた領域で  $f(x)$  は正則である。したがって、収束率  $r$  を決定する楕円

$$\mathcal{E}_r : |z-1| + |z+1| = r + r^{-1}$$

は、 $rclist$  の小円板がその外部に配されるように取る。

### 5.4 楕円 $\mathcal{E}_r$ 上の $|f(z)|$ の上界 $\bar{M}$ の計算

式 (9) の  $M$  の上界  $\bar{M}$  を正則性フラグ付き円板演算システムで計算するアルゴリズムを与える。ここでは、

$$1 \leq \frac{\bar{M}}{M} \leq p = 1.1 \quad (21)$$

が保証されるように、 $\bar{M}$  を計算する。

初期被覆円板リストを

$$Mclist = \{D_k\}_{0 \leq k < K}$$

とする (図 1)。

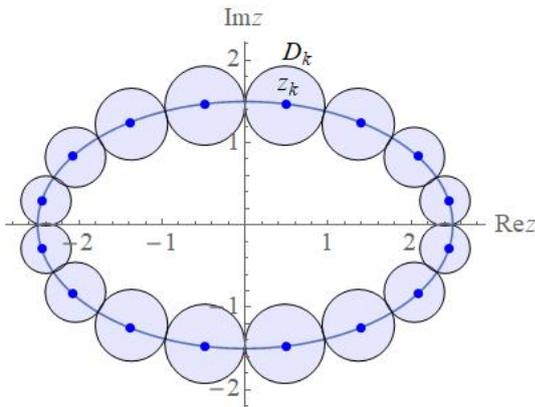


図 1 初期被覆円板 ( $K = 16$ ) と  $z_k$

$z_k \in D_k \cap \mathcal{E}_r$  をとり、正則円板システムで、

$$\begin{aligned} F_k &= \langle c_k; r_k \rangle = f(D_k), \\ G_k &= \langle d_k; s_k \rangle = f(\langle z_k; 0 \rangle) \quad (0 \leq k < K) \end{aligned}$$

を求める。全ての  $F_k$  の正則性フラグが True なら、

$$M \leq \max_{0 \leq k < K} \max_{z \in D_k} |f(z)| \leq \bar{M} = \max_{0 \leq k < K} \{|c_k| + r_k\}$$

である。また、 $z_k \in \mathcal{E}_r$  であるから、

$$M \geq \max_{0 \leq k < K} |f(z_k)| \geq M' = \max_{0 \leq k < K} \{|d_k| - s_k\}$$

である。したがって、

$$\frac{\bar{M}}{M'} \leq p = 1.1 \quad (22)$$

となれば、条件 (21) が満たされる。

そこで、(22) が満たされるまで被覆円板リストを細分する。細分は、個々の  $D_k$  を調べ、 $D_k$  が大きすぎると判定されれば、 $D_k$  は  $D_k \cap \mathcal{E}_r$  を被覆する 2 つの小円板で置き換える。

細分の原則は次の 2 つである。

1.  $F_k = f(D_k)$  の正則性フラグが False なら  $D_k$  を 2 分する。または、
2.  $(|c_k| + r_k) / (|d_k| - s_k) > p = 1.1$  なら  $D_k$  を 2 分する。

必要なら細分を繰り返し、全ての  $D_k$  において、 $F_k = f(D_k)$  の正則性フラグが True で、 $(|c_k| + r_k) / (|d_k| - s_k) \leq p$  となったところで細分を停止し、最終的な被覆リスト  $Mclist$  を得る。この  $Mclist$  では、不等式 (4) が満たされ、 $M$  は不等式 (1) を満たす  $\hat{M}$  の上界となる。

[例] 関数

$$f(z) = \frac{1}{1+z^2} \quad (23)$$

に対して、5.3 節のアルゴリズムで  $r$  を求め、本節のアルゴリズムで  $\bar{M}$  を求めた。 $r = 0.4179$ ,  $\bar{M} = 43.57$  である。計算された楕円と被覆リスト  $Mclist$  を図 2 に示す。 $f(z)$  の極  $z = \pm i$  の近傍では特異点が近く、また関数の変化が激しいため、原則被覆円板が非常に細かく分割されている。

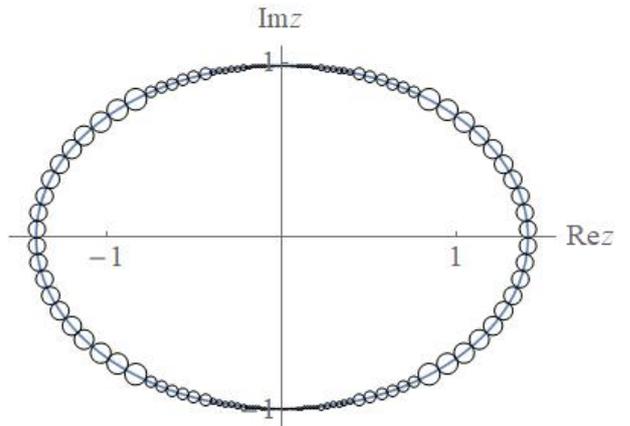


図 2  $f(z) = \frac{1}{1+z^2}$  の楕円  $\mathcal{E}_r$  とその被覆円板

## 6 精度保証付き積分のアルゴリズム

関数  $f(z)$  の積分  $If(2)$  を  $n$  点端補正 C-C 則を用い精度保証付きで求めるアルゴリズムについて述べる。

1. まず、高棹のアルゴリズム [6] で、正方形領域

$$S = \left[-\frac{R_0}{\sqrt{2}}, \frac{R_0}{\sqrt{2}}\right] \times \left[-\frac{R_0}{\sqrt{2}}, \frac{R_0}{\sqrt{2}}\right], \quad R_0 = 5$$

において特異点を含む小円板 (半径 0.0097...) のリストを生成する。それにより、5章のアルゴリズムで楕円  $\mathcal{E}_r$  のパラメタ  $r$  と楕円上の  $|f(z)|$  の上界  $\bar{M}$  を計算する。

特異点が  $S$  内に存在しない場合は、 $S$  に含まれる最大の楕円のパラメタ  $r$  が計算される。

2.  $r$  と  $\bar{M}$  を用い、4章のアルゴリズムにより、 $n$  点端補正 C-C 則による近似積分の絶対誤差の上界  $E'_n$  を計算する。

3.  $n$  点端補正 C-C 則による近似積分を区間演算で行い、近似積分値の真値を含む区間

$$[\hat{Q}_n] = (\hat{Q}_n; E''_n) \quad (24)$$

を計算する。

4.  $\hat{Q}_n$  の絶対誤差の上界

$$E_n = E'_n + E''_n \quad (25)$$

を計算する。

これにより、真の積分値  $I$  について、

$$|\hat{Q}_n - I| \leq E_n \quad (26)$$

が保証される。

## 7 数値実験

例として、式 (23) の

$$f(z) = \frac{1}{1+z^2}$$

を精度保証付きで積分した。

10進 200桁計算で真値  $I$  を求め、

$$e_n \equiv |\hat{Q}_n - I| \leq E_n \quad (27)$$

が成立するかどうか確認した。

まず、高棹のアルゴリズムで極 ( $z = \pm i$ ) を含む 2つの小円板 (半径 0.0097...) を検出した。

それにより、楕円  $\mathcal{E}_r$  のパラメタ  $r$  と楕円上の  $|f(z)|$  の上界  $\bar{M}$  を計算し、

$$r = 0.4179, \quad \bar{M} = 43.57,$$

を得た。

図 3 は、横軸が端補正 C-C 則の標本点数  $n$ 、縦軸が絶対誤差の常用対数である。青いグラフは、計算された誤差上界  $E_n$  であり、赤いグラフは、実際の絶対誤差  $e_n$  である。青いグラフは、常に赤いグラフの上にある。不等式 (27) は、 $n$  によらず常に成立しており、精度保証は成

功している。特に、 $n$  が大きい高精度の近似積分値を精度保証することができた。

$E_n/e_n$  は  $n = 100$  で約 680 であった。全体的に  $E_n$  は  $e_n$  の 1000 倍弱である。

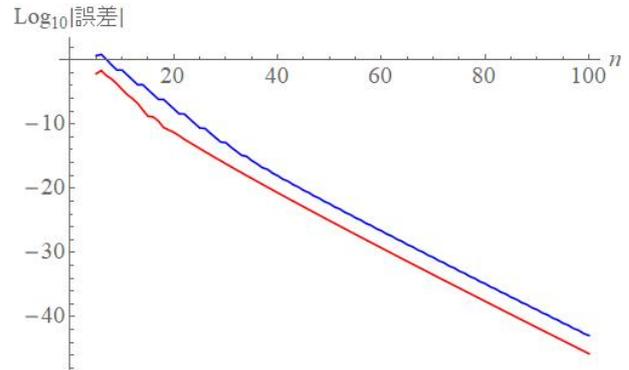


図 3 赤：絶対誤差，青：誤差上限

## 8 おわりに

Hasegawa-Sugiura[1] の端補正 C-C 則による正則関数  $f(x)$  の精度保証付き積分計算について研究した。

[1] の誤差解析を検討し、具体的に誤差上界を計算するアルゴリズムを提案した。

このアルゴリズムでは、積分区間  $[-1, 1]$  に近接する  $f(x)$  の特異点を検出する必要がある。また、境界楕円上の  $|f(z)|$  の上界を求める必要がある。そのために、加藤 [2] と柴田 [5] が開発した正則性フラグ付き円板演算システムを用いた。また、正則性フラグ付き円板演算システム上に構築された、高棹 [6] による特異点の自動検出アルゴリズムを用いた。

3つの関数につき実験を行い、非常に精度の高い積分値 (最大小数点以下 80 桁) を精度保証することができた。

しかし、問題と標本点数  $n$  によっては実際の誤差と計算された誤差上界の比はかなり大きく、評価法の改良が今後の課題として残された。

## 参考文献

- [1] Hasegawa, T. and Sugiura, H.: Error estimate for a corrected Clenshaw–Curtis quadrature rule, Numer. Math., vol. 130/1, pp. 135-149(2015).
- [2] 加藤里奈：複素円板法による初等関数の正則性判定システムの構築，南山大学情報理工学部卒業論文 (2016).
- [3] Petković, M. and Petković, L. D.: Complex Interval Arithmetic and Its Applications (Mathematical Research), Wiley-VCH(1998).
- [4] Rivlin, T., J.: Chebyshev Polynomials 2nd ed., Wiley(1990).
- [5] 柴田菜里：複素円板法による初等関数の正則性判定システムとその応用，南山大学情報理工学部卒業論文 (2017).
- [6] 高棹義裕：複素解析関数の特異点の探索と留数の計算法，南山大学理工学部卒業論文 (2018).