誤差特性関数による定積分の精度保証

2009SE127 児玉康裕

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，積分値が解析的にあた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．

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，積分関数の高階導関数を用いるものと被積分関数の複素周回積分を用いるもの [1] がある．後者の方法ついて野間 [2] は積分路を手動で決めたが本研究では計算機による自動決定をめざす．

2　積分誤差の包囲

2.1　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].

$f(x)$ 単純閉曲線 C の内部で $f(z)$ が正則で，C がその内部に積分区間 $[-1,1]$ を含むとき

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

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

$\Phi_n(z)$ を数値積分公式の誤差の特性関数という．

具体的な積分則として n 点 polya 則:

$$C_n f=\sum_{l=0}^{n-1}\omega_l f(\xi_l) \tag{5}$$

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

$$\xi_l=\cos\frac{\pi}{n}\left(l+\frac{1}{2}\right) \qquad (0\leq l\leq n) \tag{6}$$

である．

Polya 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．

$z\in C-[-1,1]$ について，

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

Polya 則 Q_n の誤差は周回積分 (1) で評価され

$$|E_n f|=|\frac{1}{2\pi i}\oint_C \Phi_n(z)f(z)dz|\leq\frac{1}{2\pi}\oint_C F_n(z)|f(z)||dz| \tag{7}$$

である．本論文では，この式の最右辺が小さくなるような積分路 C を自動的に構成する方法を考える．最右辺の積分を精度保証付で計算する方法についてはここでは述べないので，野間 [x] を参照して頂きたい．

3　積分路の自動決定

3.1　基本的枠組み

（1）　積分路 C は点 $P_1,\ldots,P_n$ を頂点とする多角形とする．

（2）　積分路 C 上の積分

$$M(P_1,\ldots,P_n)=\frac{1}{2\pi i}\int_C F(z)|f(z)||dz| \tag{8}$$

を最小化する．

3.2　頂点の動かし方

（1）　点 $P_1,P_2,\ldots,P_n$ の順に 1 点づつ動かして最小化, すなわち P_i を動かすときは z の一変数関数

$$g(z)=M(P_1,\ldots,P_{i-1},z,P_{i+1},\ldots,P_n) \tag{9}$$

を最小化する．そして，

最急降下方向に直線探索する．すなわち，

$$g(z)=g(x+iy) \tag{10}$$

と考え，グラディエント

$$\nabla g(z)=\frac{\partial}{\partial x}g(z)+i\frac{\partial}{\partial x}g(z) \tag{11}$$

を差分近似する．そして

$$\text{直線}: z=P_i-t\nabla g(P_i) \qquad (t\in\mathbb{R})$$

上で最小値を探索する．すなわち一変数関数

$$h(t) = g(P_i - t\nabla g(P_i)) \tag{12}$$

を最小化し，最小点 $t = t^{(min)}$ における

$$P_i^{(min)} = P_i - t^{(min)}\nabla g(P_i) \tag{13}$$

を新しい頂点として採用する．これを $p_1, \ldots, p_n$ の順に行うことを大反復という．

3.3 極小値の黄金比探索法

一変数関数 $h(t)$ の極小点を求める黄金比探索法を説明する．まず基本定理を述べる．

［定理 1］2 回連続微分可能な 1 変数関数 $h(t)$ で $h'(t)$ が単純零点しか持たないないとする．このとき，$t_1 < t_2 < t_3$ において，

$$h(t_1) \geq h(t_2) < h(t_3) \text{ または } h(t_1) > h(t_2) \leq h(t_3) \tag{14}$$

を満たすなら，区間 (t_1, t_3) に極小値を持つ．//

（証明） $h(t_1) \geq h(t_2) < h(t_3)$ が成立するとき，平均値の定理より，

$$h'(\tau_1) = \frac{h(t_2) - h(t_1)}{t_2 - t_1} \leq 0, h'(\tau_2) = \frac{h(t_3) - h(t_2)}{t_3 - t_2} > 0 \tag{15}$$

を満たす $\tau_1 \in (t_1, t_2), \tau_2 \in (t_2, t_3)$ が存在する．したがって，中間値の定理により，$h'(t)$ は区間 $[\tau 1, \tau 2]$ に零点を持つ．$h'(t)$ の連続性より，$[\tau_1, \tau_2]$ における $h'(t)$ の零点の集合は閉集合で最大値 τ を持つ．条件より τ は単純零点ゆえ，$h''(\tau) \neq 0$．ここで $h''(\tau) < 0$ を仮定すると，十分小さい $\epsilon > 0$ で

$$\tau + \epsilon < \tau_2, h'(\tau + \epsilon) < h'(\tau) = 0 \tag{16}$$

となる．これと $h'(\tau_2) > 0$ から，中間値の定理を用いて，区間 $(\tau, \tau 2)$ における $h'(t)$ の零点の存在が示される．これは τ の最大性に反する．ゆえに，$h''(\tau) > 0$ であり，τ は極小点である．$h(t_1) \geq h(t_2) < h(t_3)$ が成立するときも同様である．//

ひとたび (1) を満たす 3 点 $t_1 < t_2 < t_3$ が見つかれば，それを反復改良して極小値を含む区間 (t_1, t_3) の幅をいくらでも小さくできる．まず区間 $(t_1, t_2), (t_2, t_3)$ の長い方を選ぶ．仮にそれを (t_1, t_2) としたとき，その内分点 $a \in (t_1, t_2)$ をとり，

$$(t_1, t_2, t_3) = \begin{cases} (t_1, a, t_2), h(a) < h(t_2) \\ (a, t_2, t_3), h(a) \geq h(t_2) \end{cases} \tag{17}$$

とすれば，新しい 3 点 $t_1 < t_2 < t_3$ も再び (1) を満たす．

黄金比探索法は，3 点 $t_1 < t_2 < t_3$ を $(t_2 - t_1) : (t_3 - t_2)$ が黄金比またはその逆比となるように取る．黄金比は黄金数

$$\phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \tag{18}$$

で定義される比 $1 : \phi$ であり，ギリシャ以来最も美しい比とされてきた．いま，$(t_2 - t_1) : (t_3 - t_2) = \phi : 1$ のとき，区間 (t_2, t_3) より長い区間 (t_1, t_2) が内分点 $a \in (t_1, t_2)$ で分割される．このとき分割比を $(a - t_1) : (t_2 - a) = \phi : 1$ と，黄金比に取る．こうすると，(2) で $h(a) < h(t_2)$ のとき，区間幅縮小比は $\phi^2 = 1 + \phi$ に注目して，

$$\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_1} = \frac{\phi}{1 + \phi} = \frac{\phi}{\phi^2} = \phi^{-1} \tag{19}$$

$h(a) \geq h(t_2)$ のときも，区間縮小比が

$$\frac{t_3 - a}{t_3 - t_1} = \frac{1 + \phi\frac{1}{1+\phi}}{1 + \phi} = \frac{1 + \phi\frac{1}{\phi^2}}{\phi^2} = \frac{1 + \phi}{\phi^3} = \frac{\phi^2}{\phi^3} = \phi^{-1} \tag{20}$$

となり，縮小比が変化しない．区間 (t_2, t_3) が区間 (t_1, t_2) より長いときも同様である．

黄金比探索法により，極小点を含む区間は黄金比の逆比 $\phi^{-1} = 0.618 \cdots$ で縮小する．

4 数値実験結果

被積分関数 $f(x) = e^x, \cos x, 1/(x^2 + 1)$ に関して数値実験を行った．$f(x) = e^x, \cos x$ に関しては，適当な多角形積分路から出発し，野間 [2] の結果とほぼ同等の結果を得ることができた．しかし $f(x) = 1/(1 + x^2)$ の場合は，解として特異点 $z = \pm i$ を内部に含む積分路 C を出力して失敗した．

5 おわりに

野間 [2] は $F_n(z)|f(z)|$ の複素平面における等高線を用い，鞍点法により積分路の決定を行った．我々は等高線の観察によらず，適当な初期多角形から出発し，頂点位置を動かして，逐次最適多角形をめざして，積分路を自動的に決定する方法を開発した．

その結果 $f(x) = e^x$, $\cos x$ の精度保証の改良には成功したが $\frac{1}{x^2+1}$ の精度保証の改良はうまくいかなかった．原因は，積分路の変形の過程で「C が内部に $f(z)$ の特異点を含まない」という条件を満たさなくなるためである．これを制約条件として最適化するアルゴリズムの開発が今後の課題である．

6 参考文献

参考文献

[1] 森正武：数値解析と複素関数論，薩摩書房 (1975).

[2] 野間ちほ：『定積分の誤差特性関数の評価』. 南山大学数理情報学部情報システム数理学科 2012 年度卒業論文 (2013).