半無限積分に対する切断 Clenshaw-Curtis 則

M2015SS003 加藤聖也

指導教員：杉浦洋

1　はじめに

切断 Clenshaw-Curtis 則 (C-C 則) とは C-C 則の部分和として定義される積分則であり，具体的には急減少関数の無限積分や半無限積分で，0 に近い標本値を計算から省いて得られる．例えば急減少関数の半無限積分では半無限区間 $[0,\infty)$ における積分を有限区間 $[0,a]$ に打ち切り，それを C-C 則で近似する方法が行われてきた．この C-C 則において右端点 a 近傍の標本値は非常に小さいので省いても精度にほとんど影響しない．このような操作を組織的に行い，計算量を削減することが切断 C-C 則の基本的なアイディアである．これは，上岡 [3] の切断 Gauss 則の基本積分則である Gauss 則を C-C 則で置き換えたものである．C-C 則は，Gauss 則に対して次のような優越点を持つ．まず，同じ点数での Gauss 則に対して，標本点と重みが簡単に計算できる．また，低い計算コストで精密な誤差推定をすることが可能である．さらに，被積分関数によっては Gauss 則に匹敵する精度を持つ [2]．本論文では半無限積分に対する切断 C-C 則を提案し，その誤差解析と有効性を比較検証するための数値実験を行う．はじめに，C-C 則を定義する．次ぎに，切断 C-C 則を定義し，誤差解析を行う．最後に，実際に急減少関数を用いて数値実験を行い，切断 C-C 則，切断 Gauss 則，DE 公式 [1] の精度比較を行う．

2　Clenshaw-Curtis 則 (C-C 則)

区間 $[-1,1]$ の関数 $f(x)$ の定積分

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

を近似する n 次 Clenshaw-Curtis 則 (C-C 則)$C^{(n)}f\cong Qf$ は $n+1$ 点

$$x_j^{(n)}=\cos\left(\frac{\pi j}{n}\right)\ (0\le j\le n) \tag{1}$$

を標本点とする補間型積分則

$$C_nf=\sum_{j=0}^{n}w_j^{(n)}f(x_j^{(n)})\cong Q[f]$$

である．対称則 $(x_j=-x_{n-j}\ (0\le j\le n))$ であるので，n が偶数のときには $n+1$ 次積分則，n が奇数のときには n 次積分則である．

同じ点数 $n+1$ の Gauss-Legendre 則（G-L 則）に対し，C-C 則は次数が約半分で，一般に精度は低いが次の様な G-L 則に無い特長を持つ．

＜特長＞

1. 標本点と重み $x_j^{(n)}$，$w_j^{(n)}$，$0\le j\le n$ が簡単に計算できる．
2. 低い計算コストで精密な誤差推定ができる．
3. 低い計算コストで標本点数を増加し，より精度の高い近似積分値が得られる．
4. n が小さいとき，G-L 則に匹敵する精度を持つ [2]．

特長 1. について述べる．C-C 則の標本点は (1) で簡単に計算できる．また，重みは高速 cosine 変換で効率的に計算できる．Gauss 則では標本点を求めるために代数方程式 $P_n(x)=0$ を解く必要がある．

特長 2.について述べる．

$$E_n=\frac{2}{n}\left|f(x_0)+(-1)^nf(x_n)+2\sum_{j=1}^{n-1}(-1)^jf(x_j)\right| \tag{2}$$

は誤差 $|C_nf-Qf|$ のよい指標となることが知られている．

特長 3.について述べる．n 次C-C 則の誤差が大きいときは，より精度の高い $2n$ 次C-C 則を計算する．このとき，

$$x_j^{(n)}=\cos\left(\frac{\pi j}{n}\right)=\cos\left(\frac{2\pi j}{2n}\right)=x_{2j}^{(2n)}\quad(0\le j\le n)$$

だから，n 次 C-C 則の標本点は $2n$ 次 C-C 則の標本点でもある．よって，$2n$ 次 C-C 則を計算するとき，n 次 C-C 則で用いた標本値 $f(x_j^{(n)})$ を再利用できる．

3　切断 Clenshaw-Curtis 積分則

3.1　積分公式

3.1.1　有限区間 $[a,b]$ 上の Clenshaw-Curtis 積分

区間 $[-1,1]$ 上における n 点C-C 則の標本点を小さい順に並べて，改めて $x_1^{(n)}<x_2^{(n)}<\cdots<x_n^{(n)}$と書き，対応する重みを $w_1^{(n)},w_2^{(n)},....,w_n^{(n)}$とする．有界区間 $[a,b]$ 上の関数 $f(x)$ の積分

$$I=\int_a^b f(x)dx$$

対し，変数変換

$$x=\varphi(t)=c+rt,\ c=\frac{a+b}{2},\ r=\frac{b-a}{2}$$

により，

$$I=\int_{-1}^{1}f(rt+c)rdt=r\int_{-1}^{1}f(c+rt)dt$$

とする．積分区間は $[-1,1]$ に変換される．これに n 点 C-C 則を用いて

$$I\cong r\sum_{l=1}^{n}w_lf(c+rx_l)=:I_{[a,b]}^{(n)}$$

である．

3.1.2 半無限区間の C-C 則

半無限区間 $[0,\infty)$ の積分

$$I=\int_0^\infty f(x)dx$$

に対する標準的な C-C 則の適用法を述べる．

$$I=\lim_{a\to\infty}\int_0^a f(x)dx$$

であるから，十分大きな a をとれば

$$I\cong\int_0^a f(x)dx$$

である．右辺に区間 $[0,a]$ の C-C 則を用いれば

$$I\cong\int_0^a f(x)dx\cong\frac{a}{2}\sum_{l=1}^n w_l^{(n)}f\left(\frac{a}{2}(x_l^{(n)}+1)\right)=:I_a^{(n)}$$

である．

3.1.3 切断 Clenshaw-Curtis 則

整数 $m>n$ をとり，区間 $[0,a^{(m)}]$，$a^{(m)}=2a/(x_n^{(m)}+1)>a$ 上の積分を m 点C-C 則で近似すると

$$\begin{aligned}I_{a^{(m)}}^{(m)}&=\frac{a^{(m)}}{2}\sum_{l=1}^m w_l^{(m)}f\left(\frac{a^{(m)}}{2}(x_l^{(m)}+1)\right)\\&\cong\int_0^{a^{(m)}}f(x)dx.\end{aligned}$$

$x>a$ で $|f(x)|$ は小さいと仮定したので，近似積分則

$$I_a^{(m,n)}:=\frac{a^{(m)}}{2}\sum_{l=1}^n w_l^{(m)}f\left(\frac{a^{(m)}}{2}(x_l^{(m)}+1)\right)\cong\int_0^a f(x)dx$$

が得られる．ここで

$$\frac{a^{(m)}}{2}(x_l^{(m)}+1)>\frac{a^{(m)}}{2}(x_n^{(m)}+1)=a\qquad(l>n)$$

である．$I_a^{(m,n)}$を切断比 n/m の n 点 切断 C-C 則という．

3.2 誤差解析

無限積分 $I=\int_0^\infty f(x)dx$ に対する C-C 則と切断比 $1/2$ の切断 C-C 則の適用を考える．

$$\max_{x\geq a}|f(x)|\leq\varepsilon_1,\ \int_{2a}^\infty|f(x)|dx\leq\varepsilon_2\qquad(3)$$

で$\varepsilon_1,\varepsilon_2$ は小さくて無視できるものとする．この時,

$$|I_a^{(n)}-I|\cong\left|I_a^{(n)}-\int_0^a f(x)dx\right|$$

$$|I_a^{(2n,n)}-I|\cong\left|I_{2a}^{(2n)}-\int_0^{2a}f(x)dx\right|$$

となる．

次の定理が成り立つ．

[**定理 3.1**] $f(x)$ が複素平面上の点 0 と点 a を焦点とする楕円

$$\varepsilon(a,\rho)=\left\{z\in\mathbb{C}|\ |z|+|z-a|=\frac{a}{2}(\rho+\rho^{-1})\right\},\ \rho>1$$

および，その内部を含む複素領域で有理型であり，特異点は $\varepsilon(a,\rho)$ 上にある 1 位の極のみであるときには

$$|I_a^{(n)}-I_a|\leq\frac{C}{\rho^n}.//$$

一方，切断 C-C 則の誤差は

$$|I_a^{(2n,n)}-I|\leq\frac{C}{\rho^{2n}}.$$

簡単のために $f(x)$ の特異点が $z=\alpha$ の極のみである場合を考える．C-C 則の場合，点 α を含む楕円を $\varepsilon(a,\rho)$ とすると

$$A=|\alpha|+|\alpha-a|=\frac{a}{2}(\rho+\rho^{-1}),\ \rho>1$$

である．これより，

$$\rho+\rho^{-1}=\frac{2A}{a}.\ \rho^2-\frac{2A}{a}\rho+1=0.$$
$$\rho=\frac{A}{a}\pm\sqrt{\left(\frac{A}{a}\right)^2-1}.$$

$\rho>1$ より，

$$\rho=\frac{A}{a}+\sqrt{\left(\frac{A}{a}\right)^2-1}=\rho_{CC}$$

ゆえに，誤差は

$$|I_a^{(n)}-I_a|\leq\frac{C_{CC}}{\rho_{CC}^n}\qquad(4)$$

となる．次に切断 C-C 則の場合，点 α を含む楕円を $\varepsilon(2a,\rho)$ とすると

$$B=|\alpha|+|\alpha-2a|=a(\rho+\rho^{-1}),\ \rho>1$$

である．上と同様にして ρ を求めると

$$\rho=\frac{B}{2a}+\sqrt{\left(\frac{B}{2a}\right)^2-1}=\rho_{TCC}$$

である．よって ε_1，ε_2 が無視できるときには

$$\text{誤差 }|I_a^{(2n,n)}-I_a|\leq\frac{C_{TCC}}{\rho_{TCC}^{2n}}\qquad(5)$$

となる．よって，(4), (5) から，

$$\rho_{TCC}^2>\rho_{CC}$$

が成立するような極 α では切断 Gauss 則の方が Gauss 則より精度が良いと期待できる．
$\beta=\frac{\alpha}{2a}$ と正規化すると

$$A=|\alpha|+|\alpha-a|=|2a\beta|+|2a\beta-a|=a(|2\beta|+|2\beta-1|)=aA_0$$

ここで，$A_0 = |2\beta| + |2\beta - 1|$ である．そして

$$\rho_{CC} = \frac{A}{a} + \sqrt{\left(\frac{A}{a}\right)^2 - 1} = A_0 + \sqrt{A_0^2 - 1}$$
$$= |2\beta| + |2\beta - 1| + \sqrt{(|2\beta| + |2\beta - 1|)^2 - 1}$$

同様に切断 C-C 則について

$$B = |\alpha| + |\alpha - 2a| = a(|2\beta| + |2\beta - 2|) = 2aB_0$$

ここで，$B_0 = |\beta| + |\beta - 1|$ であり，

$$\rho_{TCC} = \frac{B}{2a} + \sqrt{\left(\frac{B}{2a}\right)^2 - 1} = B_0 + \sqrt{B_0^2 - 1}$$
$$= |\beta| + |\beta - 1| + \sqrt{(|\beta| + |\beta - 1|)^2 - 1}$$

よって，

$$R(\beta) = \frac{\rho_{TCC}^2}{\rho_{CC}} = \frac{\left(|\beta| + |\beta - 1| + \sqrt{(|\beta| + |\beta - 1|)^2 - 1}\right)^2}{|2\beta| + |2\beta - 1| + \sqrt{(|2\beta| + |2\beta - 1|)^2 - 1}}.$$

$R(\beta) > 1$ なら切断 C-C 則の方が精度が良い．$R(\beta) < 1$ の領域図は図 1 灰色のようになる．$R(\beta) < 1$ の領域は $\beta = 0.82$ を中心とする半径 1/2 の円 (点数) の内部に収まる．この図は区間 $[0, a]$，$a = 1/2$ に相当する．

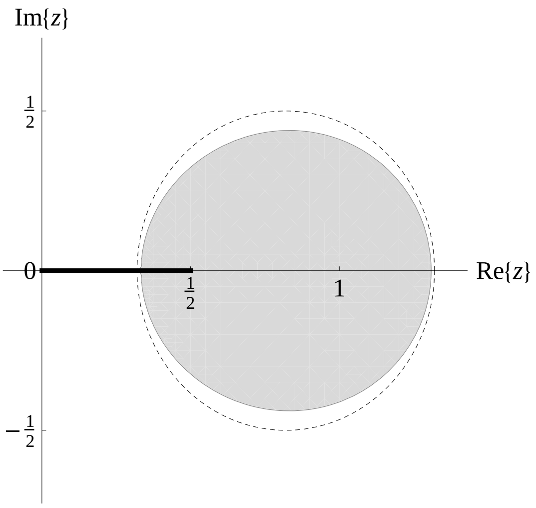

図 1　$R(\beta)$ の領域図

C-C 則と切断 C-C 則の誤差解析を行った結果，図 1 から原点付近に極がある場合は切断 C-C 則のほうが精度が良いとわかった．また，関数 $f(x)$ は急減少関数なので $z = a$ の近くの極の留数は小さく，精度の差も小さいと思われる．よって，全般的に切断 C-C 則の方が C-C 則より精度が良いと期待できる．

4　数値実験

切断 C-C 則と上岡 [3] の切断 Gauss 則，DE 公式を急減少関数の半無限積分において比較した．実線は切断 C-C 則，破線は切断 Gauss 則，点線は DE 公式を表わす．切断比は 1/2 である．

4.1　指数関数的な減少関数

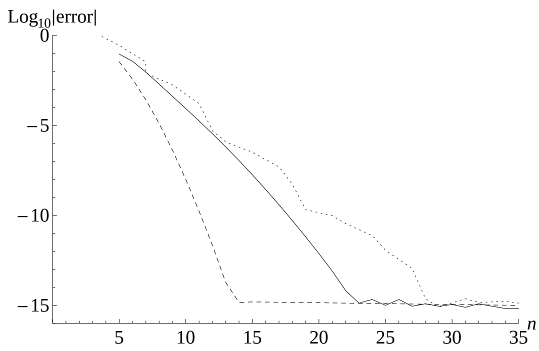

図 2　$f(x) = \mathrm{e}^{-x}$ のとき

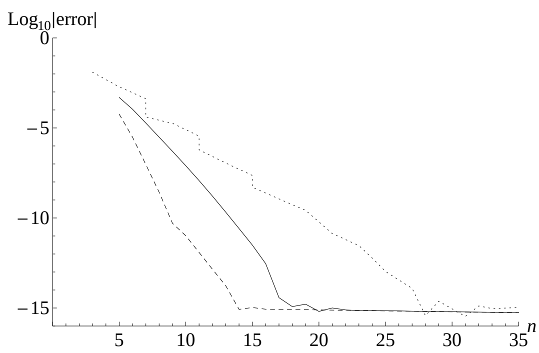

図 3　$f(x) = \frac{1}{(x-5)^2+100}\mathrm{e}^{-x}$ のとき

図 2，図 3 の関数に関しては切断Gauss 則が最も精度が良く，切断 C-C 則はそれに次ぎ，DE 公式は最も精度が悪い．

4.2　Gauss 関数的な減少関数

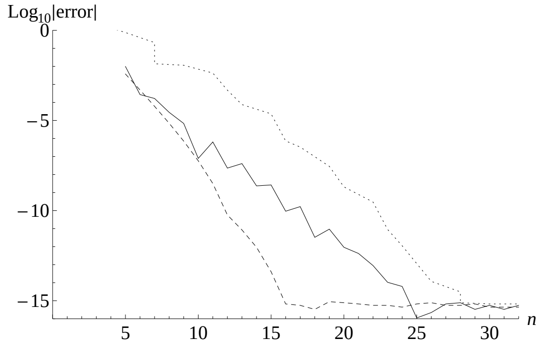

図 4　$f(x) = \mathrm{e}^{-x^2}$ のとき

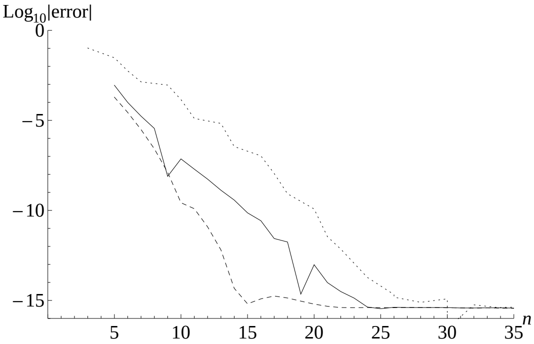

図 5 $f(x) = \frac{1}{(x-5)^2+1}\mathrm{e}^{-x^2}$ のとき

図 4，図 5 の関数に関しては切断 Gauss 則が最も精度が良く，切断 C-C 則はそれに次ぎ，DE 公式は最も精度が悪い．しかし，n が小さい所では，C-C 則は他と良い勝負をしている．

4.3 二重指数関数的な減少関数

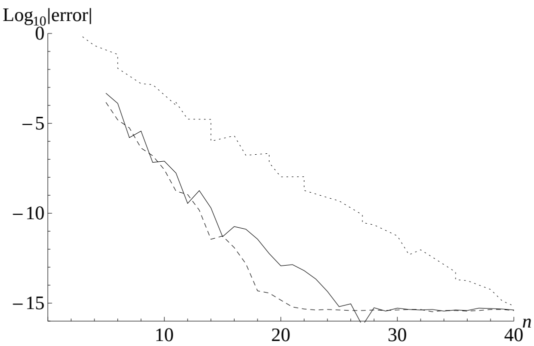

図 6 $f(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{e}^{x}}$ のとき

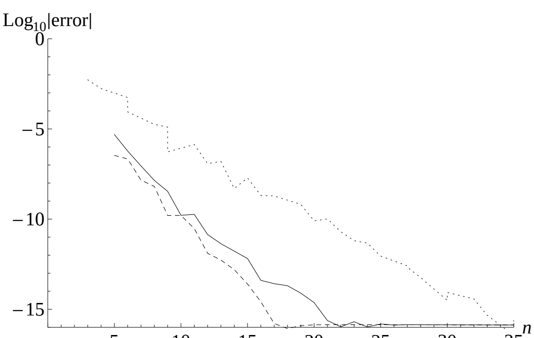

図 7 $f(x) = \frac{1}{(x-5)^2+100}\mathrm{e}^{-\mathrm{e}^{x}}$ のとき

図 6，図 7 の関数に関しては切断 Gauss 則が最も精度が良く，切断 C-C 則はそれに次ぎ，DE 公式は最も精度が悪い．しかし，n が小さい所では，C-C 則は他と良い勝負をしている．

4.4 任意切断比の切断 C-C 則

任意切断比の n 点 C-C 則 $I_a^{(m,n)}$ について数値実験を行う．被積分関数を

$$f(x) = \frac{1}{x+\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-x^2}$$

を区間 $[0, 7]$ で積分した．ここで，

$$|f(x)| < 7 \times 10^{-23} \quad (x > 7)$$

である．絶対誤差を図 8 に示す．横軸は m，4 本のグラフはそれぞれ使用する標本点数 $n = 10$，20，30，40 に対する誤差である．ここで $n = m$ のときはC-C 則である．この問題では標本点数 n が多いほど，誤差は小さくなる．

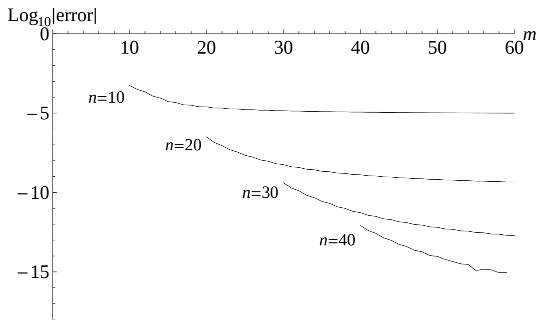

図 8 任意切断比の n 点 C-C 則

5 まとめと今後の課題

切断 C-C 則，切断 Gauss 則，DE 公式を急減少関数の半無限積分において比較した結果，全体的には切断 Gauss 則の誤差精度が良いことがわかった．しかし標本点が小さい所では，切断 C-C 則は他に負けず劣らずといった部分がある．また，切断 C-C 則はそれ自身が誤差評価能力を持つので，切断 Gauss 則に比べて自動積分法に組み込んだ時に有利である．その意味では，性能的には切断 Gauss 則に負けていないといえる．

今後の課題は，切断 C-C 則を用いた急減少関数の半無限積分に対する効率的な積分法を設計することである．また，限られた数値例しかないが，標本点数 n を固定したとき，切断比が小さいほど精度が高くなる傾向が見られた．$m \to \infty$ とした極限公式の追求も興味深い課題である．

6 参考文献

[1] 杉原正顯， 室田一雄, “数値計算法の数理,” 岩波オンデマンドブックス (2012).

[2] Trefethen, L.N: Is Gauss quadrature better than Clenshaw-Curtis? SIAM Rev. 50, pp. 67-87 (2008).

[3] 上岡航平, “半無限積分に対する切断 Gauss 則,”2014 年度 南山大学大学院 理工学研究科 修士論文 (2015).