Numerical Caluculation Semi

Tohoku University Astronamical Institute
Kouhei Hayashi

8/11/2010

今まで勉強してきた積分公式に，Richardson's extrapolation を適応して，誤差を逐次減少させていく方法を **Romberg integration** と言う．この計算方法は，アルゴリズムが簡単で，必要な精度に自動的に到達するので，計算機での計算には適している．今回のゼミでは，Romberg integration を理解するのに必要なアルゴリズムである,「Neville's algorithm」と「Richardson's extrapolation」の説明から始め，その後，Romberg integration の説明に入る．

1 Richardson's extrapolation

この補外法は，数列の収束を加速する方法である．これを積分計算に応用するわけであるが，これまでの積分法は，刻み幅 h が決まれば収束の速さは，$O(h^\gamma)$ で，γ は定数であった．しかし，この補外法を用いると，γ を可変とし任意に設定できるようになる．

1.1 Neville's algorithm

s_c がある実数全体に属するように収束する数列 $s_1, s_2, ..., s_n, ...$ の一般項 s_i が，ある多項式関数 $S(x)$ を用いて

$$s_i = S(x_i) = s_c + c_1 x_i + c_2 x_i^2 + ... + c_m x_i^m + ... \tag{1}$$

と，書けるとする．$x_i \to 0$ の時，この数列 s_i の収束 $s_n \to s_c$ の収束スピードを速めるアルゴリズムを議論していこう．

(1) 式より，収束値は $s_c = S(0)$ となるため，$S(x)$ を多項式補間によって構成できれば，補間多項式によってより s_c に近い値を得ることが期待できる．これを，**Neville's algorithm** を用いて計算してみる．Neville's algorithm の特徴は，他の補間多項式では，補間点を追加するとほぼ最初から計算し直す必要があるのだが，このアルゴリズムはこの点を修正したものである．

まず，初期系列 (初期値のようなもの) として，

$$f_{11}(x) = f_1, \quad f_{22}(x) = f_2, \quad f_{33}(x) = f_3 \tag{2}$$

を与える．これを　**1 列目**に配置し，線形補間 (Appendix A 参照) を行う．

$$l_i(x) = \frac{(x - x_i)f_{i+1} - (x - xi + 1)f_i}{x_{i+1} - x_i}$$

すると，2 列目の値

$$f_{22} = \frac{(x - x_1)f_{21}(x) - (x - x_2)f_{11}(x)}{x_2 - x_1}$$

$$f_{32} = \frac{(x - x_2)f_{31}(x) - (x - x_3)f_{21}(x)}{x_3 - x_2}$$

を得る．よって，この式から 2 列目は 1 次の多項式の形で表現できることが分かる．この 2 列目を用いて更に線形補間を行う．$f_{22}(x), f_{32}(x)$ は，どちらも (x_2, f_2) を通過するので，$(x_1, f_1), (x_3, f_3)$ の 2 点を通る様に「線形補間」を行うと，

$$f_{33}(x) = \frac{(x - x_1)f_{32}(x) - (x - x_3)f_{22}(x)}{x_3 - x_1}$$

と，2 次の多項式になるのがわかる．以上を図示すると，以下の様になる．

$$\begin{tikzcd}
x_1 & f_{11}(x) \arrow[dr] & & \\
x_2 & f_{21}(x) \arrow[r] \arrow[dr] & f_{22}(x) \arrow[dr] & \\
x_3 & f_{31}(x) \arrow[r] & f_{32}(x) \arrow[r] & f_{33}(x)
\end{tikzcd}$$

•Neville's algorithm

1. $f_{j1}(x) = f_j (j = 1, 2, ..., n)$ **とする．**
2. $i = 1, 2, ..., n$ **において，以下の計算を行う．**

$$\begin{array}{ccc} f_{i-1,j-1}(x) & & \\ & \searrow & \\ f_{i,j-1}(x) & \longrightarrow & f_{ij}(x) \end{array}$$

$$f_{ij}(x) = \frac{(x-x_{i-j+1})f_{i,j-1}(x)-(x-x_i)f_{i-1,j-1}(x)}{x_i-x_{i-j+1}} \quad (j = 1, 2, ..., i) \ (*)$$

すると，

$$f_{nn}(x) = p_{n-1}(x) \ (p(x) \text{ は補間多項式})$$

となる．

1.2 Richardson's extrapolation

今，無限大に発散する補助数列 $x_1, w_2, ..., w_n, ...(w_i > 0)$ を用いて，$x_i = h/w_i$ として，x_i を 0 に収束するように設定する．補間点として，

$$(x_1, S(x_1)), (x_2, S(x_2)), ..., (x_{m+1}, S(x_{m+1}))$$

をとり，$x = 0$ における補間多項式の値を先に説明した Neville's algorithm によって求める．

初期系列を，

$$T_{11} = S(x_1), \quad T_{21} = S(x_2) \quad , ..., \quad T_{m+1,1} = S(x_{m+1})$$

とし，$x = 0$ における m 次補間多項式を出すための漸化式は，$(*)$ 式より

$$\begin{aligned} T_{ij} &= \frac{(0 - x_{i-j+1})T_{i,j-1} - (0 - x_i)T_{i-1,j-1}}{x_i - x_{i-j+1}} \\ &= \frac{x_i T_{i-1,j-1} - x_{i-j+1}T_{i,j-1}}{x_i - x_{i-j+1}} \qquad (3) \\ &= T_{i,j-1} + \frac{T_{i,j-1} - T_{i-1,j-1}}{\frac{x_{i-j+1}}{x_i} - 1} \\ &= T_{i,j-1} + \frac{T_{i,j-1} - T_{i-1,j-1}}{\frac{w_i}{w_{i-j+1}} - 1} \qquad (4) \end{aligned}$$

この様に，$T_{m+1,m+1}$ を求める操作は，補間点 $x_1, x_2, ..., x_{m+1}$ の外部 $x=0$ にある値を求めているので，**extrapolation(補外)** と言う．

得られた $T_{m+1,m+1}$ は，もし 0 と補間点 $x_1, x_2, ..., x_{m+1}$ を含む区間 I において $S(x)$ が $m+1$ 回連続微分可能である時，

補間多項式の打ち切り誤差の定理

> 元の関数 $y=f(x)$ が $x_1, x_2, ..., x_n$ を含む区間 I で，n 階連続微分可能であるとき
> $$f_{n,n} - f(x) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}(x-x_1)(x-x_2)...(x-x_n)$$
> を満足する $\xi \in I$ が存在する．

から，

$$|T_{m+1,m+1} - S(0)| = (-1)^{m+1}\frac{S^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\prod_{i=1}^{m+1} x_i \tag{5}$$

を満足する $\xi \in I$ が存在する．したがって，

$$|T_{m+1,m+1} - S(0)| = O(\prod_{i=1}^{m+1} x_i) = O(|h|^{m+1}) \tag{6}$$

となり，$O(|h|)$ で収束する s_i よりも高速に，$(m+1)$ **次の速さで収束することが期待できる**.

もし，$S(x)$ が定数 $\alpha \geq 1$ に対して，

$$s_i = S(x_i) = s_c + c_1 x_i^{\alpha} + c_2 x_i^{2\alpha} + ... + c_m x_i^{m\alpha} + ...$$

であれば,

$$T_{ij} = T_{i,j-1} + \frac{T_{i,j-1} - T_{i-1,j-1}}{(\frac{w_i}{w_{i-j+1}})^{\alpha} - 1} \tag{7}$$

この時の収束スピードは

$$|T_{m+1,m+1} - S(0)| = O(|h|^{(m+1)\alpha}) \tag{8}$$

となる事が期待できる．

実際，補外計算を行う時は，最大段数 $L \geq 2$ を決め，まず

$$T_{11} = S(h/w_1) \quad \& \quad T_{21} = S(h/w_2)$$

を求め，

$$\begin{array}{ccc} T_{11} & & \\ & \searrow & \\ T_{21} & \rightarrow & \underline{T_{22}} \end{array}$$

の収束判定を行う．収束していないのなら，$T_{31} = S(h/w_3)$ を求め，

$$
\begin{array}{ccccc}
T_{11} & & & & \\
 & \searrow & & & \\
T_{21} & \rightarrow & \underline{T_{22}} & & \\
 & \searrow & & \searrow & \\
T_{31} & \rightarrow & \underline{T_{32}} & \rightarrow & \underline{T_{33}}
\end{array}
$$

と計算して，T_{23}, T_{33} の収束判定を行う．この様に，初期系列の段数を少なく抑えることで，補外計算全体の効率化を図ることができる．

•Richardson's extrapolation

1. 補助数列 w_i**，最大段数** L**，相対許容度** ε_R**，絶対許容度** ε_A **を与える．**

2.$T_{11} = S(h/w_1)$ **とする．**

3. $i = 2, ..., L$ **とし，**

- **(a) 初期系列** $T_{i1} = S(h/w_i)$ **を与える．**
- **(b)** $j = 2, ..., i$ **において以下の計算を行う．**
  - **(i) (7) 式を分割して計算する**

$$R_{ij} = \frac{T_{i,j-1} - T_{i-1,j-1}}{(\frac{w_i}{w_{i-j+1}})^{\alpha} - 1}$$

$$T_{ij} = T_{i,j-1} + R_{ij}$$

  - **(ii) 収束判定**

$$|R_{ij}| \leq \varepsilon_R |T_{i,j-1}| + \varepsilon_A$$

ならば，収束したと判断する．

因みに，補助数列 w_i の候補として

- Romberg 数列
  $1, 2, 4, 8, ..., 2^i, ...$
- Bulirsch 数列
  $1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, ..., 3 \cdot 2^{i/2-1}, 2^{(i-1)/2}$
- Harmonic 数列
  $1, 2, 3, 4, ..., i+1, ...$ (但し，収束しない可能性あり)

がある．

1.3 丸め誤差の伝播

収束する数列 s_i に対する Richardson's extrapolation の初期系列 $T_{11}, T_{21}, ...$ は，同じ値に近づく．この性質を用いて，初期系列に含まれる丸め誤差 $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{21}, ...$ が，どのように伝播するかを調べる．

T_{i1} の丸め誤差を $\varepsilon_{i1} = (-1)^{i-1}\varepsilon$ とし，隣接する初期系列の差によって打ち消さないものとする．この時，(7) 式によって T_{i2} に含まれる丸め誤差は，

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{i2} &= \varepsilon_{i1} + \frac{\varepsilon_{i1} - \varepsilon_{i-1,1}}{(\frac{w_i}{w_{i-j+1}})^\alpha - 1} \\
&= \left\{(-1)^{i-1} + \frac{(-1)^{i-1} - (-1)^{i-2}}{(\frac{w_i}{w_{i-j+1}})^\alpha - 1}\right\}\varepsilon \\
&= \frac{(\frac{w_i}{w_{i-j+1}})^\alpha + 1}{(\frac{w_i}{w_{i-j+1}})^\alpha - 1} \cdot (-1)^{i-1}\varepsilon \qquad (9)
\end{aligned}$$

これが，丸め誤差の拡大率になる．

2 Romberg integration

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

を等間隔 $h_i = h/w_{i-1}$ で，積分区間を分割し，台形公式

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &\approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2}(f(x_i) + f(x_{i+1})) \\
&= \frac{h}{2}\{f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\} \qquad (10)
\end{aligned}$$

を用いて求めた近似値を初期系列 T_{i1} とする補外法を考える．この時，T_{i1} の打ち切り誤差を $T_{i1} = e(h_i)$ とする．

$$T_{i1} - \int_a^b f(x)dx = e(h_i). \qquad (11)$$

もし，誤差が添字に関係なしに

$$e(h) = e_2h^2 + e_4h^4 + e_6h^6 + ...$$

と，h の 2 の冪乗で表されるとすると，区間の分割数を w_{i-1} 倍して求めた初期系列に含まれる誤差も 2 の冪乗で表現できるはずである．よって，

$$|T_{i1} - \int_a^b f(x)dx| = O(h^{2i}) \tag{12}$$

となることが期待できる．

また，台形公式の誤差項は漸近展開の形で次の様に表現できる．

•Euler-Maclaurin expansion

$f(x)$ が $[a,b]$ において $2m+2$ 回微分可能であるならば，台形公式による定積分の近似によって，

$$\begin{aligned}
&\frac{h}{2}\{f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\} \\
&\qquad = \int_a^b f(x)dx \quad + \quad \sum_{l=1}^{m} h^{2l}\frac{B_{2l}}{(2l)!}\{f^{(2l-1)}(x_n) - f^{(2l-1)}(x_0)\} \\
&\qquad\qquad\qquad + \quad \frac{(b-a)h^{2m+2}B_{2m+2}}{(2m+2)!}f^{(2m+2)}(\xi)
\end{aligned} \tag{13}$$

という等式を成立させる ξ が区間 $(a,b) = (x_o, x_n)$ 内に存在する．ここで，B_i は，Bernoulli 数である．

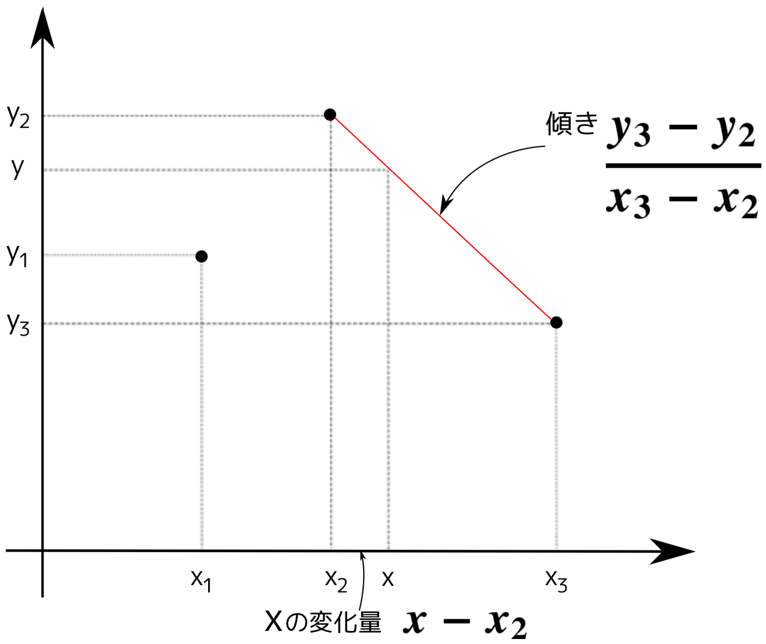
上の定理から，初期系列に台形公式を用いて補外を行うと，T_{ij} に含まれる打ち切り誤差は $O(h^{2i})$ で小さくなることが期待できる．

この様に，台形則を初期系列に用い，Richardson's extrapolation によって次数を 2 次ずつ上げていく数値積分法を **Type Romberg integration** と呼ぶ．特に，補助数列として，Romberg 数列を用いるものを **Romberg integration** と言う．

Appendix

A　線形補間

線形補間とは，既知の 2 点を直線で結び，その 2 点間の値は，その直線上にあると考えて，その間にある値を求める方法である．



上図から，

$$(y\text{ の変化量}) = (\text{傾き}) \times (x\text{ の変化量}) = \frac{y_3 - y_2}{x_3 - x_2}(x - x_2)$$

これに y_2 を足すと，x の時の y の値が出る．

$$y = y_2 + \frac{y_3 - y_2}{x_3 - x_2}(x - x_2)$$

変形していくと，

$$y = \frac{(x - x_2)y_3 - (x - x_3)y_2}{x_3 - x_2}$$

となる．

B Code

NUMERICAL RECIPES in C(第3, 4章) を参照してください m(_ _)m