精度保証付き二重積分について

柏木 雅英
kashi@waseda.jp
http://verifiedby.me/

早稲田大学 基幹理工学部 応用数理学科

NVR 2020 (2020 年 11 月 28 日)

概要

- 精度保証付き数値積分を行う方法は、
  1. ベキ級数演算を用いる方法
  2. (伝統的な) 数値積分公式を用い、その理論誤差評価を区間演算で計算する方法

  の 2 つが考えられる。
- 昨年度の nvr2019 では、被積分関数が特異点を持つ場合の精度保証付き数値積分 (1 次元, 2 次元) について話した。これは、1のベキ級数演算を用いる方法でしか (今のところ) うまく実現できない。
- 今回は、2の数値積分公式と理論誤差評価を用いる方法を特に二重積分に適用した場合について論じる。具体的には、
  - 二重積分の直積型計算の誤差公式
  - 複合型公式の最適分割数の決定
  - 曲線で囲まれた領域の二重積分

  について述べる。

ベキ級数演算を用いた数値積分

- ベキ級数演算を用いると被積分関数を 2 つの多項式で包含できる。それを用いて積分値の精度保証を行う。
- うまく「多項式の約分」をすることにより、特異点の処理が出来る場合がある。
- 恐らく、伝統的な方法に比べて、精度の面では有利、速度の面では不利。

ベキ級数演算 (psa)

- 常微分方程式の初期値問題や数値積分の精度保証に使う。高階微分の計算にも使える。
- Type-I と Type-II の 2 種類がある。n を整数として、

Type-I PSA　単に n 次より高次の項を捨てる。

Type-II PSA　n 次より高次の項の影響を最高次の項 t^n の区間係数に含めさせる。

PSA の例 (積)

$1+2t-3t^2$ と $1-t+t^2$ の積	
Type-I PSA	Type-II PSA
定義域は決めなくてよい	定義域 $=[0,0.1]$
$1+t-4t^2$	$1+t+[-4,-3.5]t^2$

$$
\begin{aligned}
(1+2t-3t^2)(1-t+t^2) &= 1+t-4t^2+5t^3-3t^4 \\
&= 1+t+(-4+5t-3t^2)t^2 \in 1+t+[-4,-3.5]t^2
\end{aligned}
$$

Type-I PSA

ベキ級数型

$$x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + \cdots + x_n t^n$$

- ベキ級数型同士の加減乗除。
- ベキ級数型に対する exp, log, $\int$ などの数学関数。
- 演算結果の n 次までの項を残し、$n+1$ 次以降は切り捨てる。
- 以下とほとんど同じ:
  - Mathemarica の ‘`Series`’。
  - Intlab の ‘`taylor`’。
  - 1 変数関数の高階微分を計算する自動微分法。

Type-II PSA

ベキ級数型

$$x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + \cdots + x_n t^n$$

- 固定された有限閉区間 $D = [t_1, t_2]$ 上で定義される。
- 演算結果は n 次までしか保持しないが、$n+1$ 次以降の項の影響は n 次の項の係数を区間にすることで吸収する。
- 係数 $x_0, \cdots, x_n$ は区間。
- ただし多くの場合、$x_0, \cdots, x_{n-1}$ は幅の狭い区間、x_n は幅の広い区間。

Type-II PSA の演算規則 (1/5)

$$x(t) = x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + \cdots + x_n t^n$$
$$y(t) = y_0 + y_1 t + y_2 t^2 + \cdots + y_n t^n$$

加減算

$$x(t) \pm y(t) = (x_0 \pm y_0) + (x_1 \pm y_1)t + \cdots (x_n \pm y_n)t^n$$

加算の例

$$x(t) = 1 + 2t - 3t^2$$
$$y(t) = 1 - t + t^2$$

$$x(t) + y(t) = 2 + t - 2t^2$$

Type-II PSA の演算規則 (2/5)

乗算

1. まず、打ち切り無しで乗算を行う。

$$x(t) \times y(t) = z_0 + z_1 t + \cdots + z_{2n} t^{2n}$$

$$z_k = \sum_{i=\max(0,k-n)}^{\min(k,n)} x_i y_{k-i}$$

2. $2n$ 次から n 次に減次する。

m 次から n 次への減次

$$x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + \cdots + x_m t^m \Longrightarrow z_0 + z_1 t + \cdots + z_n t^n$$

$$z_i = x_i \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$z_n = \left\{ \sum_{i=n}^{m} x_i t^{i-n} \mid t \in D \right\}$$

Type-II PSA の演算規則 (3/5)

乗算の例

定義域を $D = [0, 0.1]$ とする。

$$x(t) = 1 + 2t - 3t^2$$
$$y(t) = 1 - t + t^2$$

$$\begin{aligned} x(t) \times y(t) &= 1 + t - 4t^2 + 5t^3 - 3t^4 \\ &= 1 + t + (-4 + 5t - 3t^2)t^2 \\ &\in 1 + t + \left\{-4 + 5t - 3t^2 \mid t \in [0, 0.1]\right\} t^2 \\ &= 1 + t + [-4, -3.5]t^2 \end{aligned}$$

Type-II PSA の演算規則 (4/5)

sin などの数学関数

その関数を g として、

$$
\begin{aligned}
& g(x_0 + x_1 t + \cdots + x_n t^n) \\
&= g(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{i!} g^{(i)}(x_0)(x_1 t + \cdots + x_n t^n)^i \\
&+ \frac{1}{n!} g^{(n)} \left(\mathrm{hull} \left(x_0, \left\{ \sum_{i=0}^{n} x_i t^i \,\middle|\, t \in D \right\} \right) \right) (x_1 t + \cdots + x_n t^n)^n
\end{aligned}
$$

のように g の点 x_0 での剰余項付きの Taylor 展開に代入することによって得る。この計算中に現れる加算や乗算は Type-II PSA で行う。

Type-II PSA の演算規則 (5/5)

除算

$x \div y = x \times (1/y)$ と乗算と逆数関数に分解

不定積分

$$\int_0^t x(t)dt = x_0 t + \frac{x_1}{2}t^2 + \cdots \frac{x_n}{n+1}t^{n+1}$$

精度保証付き数値積分 (1 変数)

区間 $[x_i, x_i + \Delta t]$ における積分

$$\int_{x_i}^{x_i+\Delta t} f(t)dt$$

を次のように計算する。

1. n 次のベキ級数

$$x(t) = 0 + t \quad (+0t^2 + \cdots 0t^n)$$

に対して、

$$y(t) = \int_0^t f(x_i + x(t))dt$$

を $[0, \Delta t]$ を定義域とした Type-II PSA で計算する。

2. 計算結果 $y(t)$ を

$$y(t) = y_1 t + y_2 t^2 + \cdots y_{n+1} t^{n+1}$$

とすると、積分値は $y(\Delta t)$ で得られる。

べき級数演算を用いた二重積分 (1)

二重べき級数を使う。

$$
\begin{aligned}
&(x_{00} + x_{01}s + x_{02}s^2 + \cdots + x_{0n}s^n) \\
+&(x_{10} + x_{11}s + x_{12}s^2 + \cdots + x_{1n}s^n)t \\
+&(x_{20} + x_{21}s + x_{22}s^2 + \cdots + x_{2n}s^n)t^2 \\
+&\vdots \\
+&(x_{n0} + x_{n1}s + x_{n2}s^2 + \cdots + x_{nn}s^n)t^n
\end{aligned}
$$

(「s に関するべき級数」を係数に持つ t に関するベキ級数)

べき級数演算を用いた二重積分 (2)

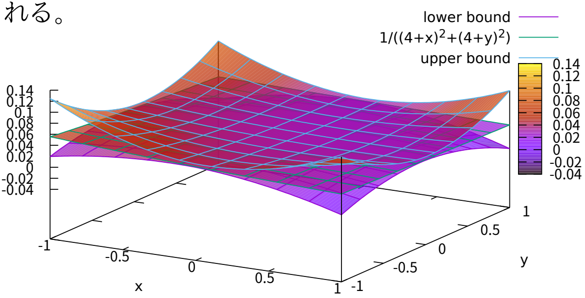
例：

$$I = \int_3^5 \int_3^5 \frac{1}{x^2+y^2} dxdy$$

被積分関数は、$s \in [-1,1]$, $t \in [-1,1]$ において

$$\begin{array}{rrrr}
(0.03125 & -0.0078125s & +[-0.0003, 0.006]s^2 &) \\
+(-0.0078125 & +0.0039625s & +[-0.005, 0.0007]s^2 &)t \\
+([-0.0003, 0.006] & +[-0.007, 9 \times 10^{-5}]s & +[-0.03, 0.05]s^2 &)t^2
\end{array}$$

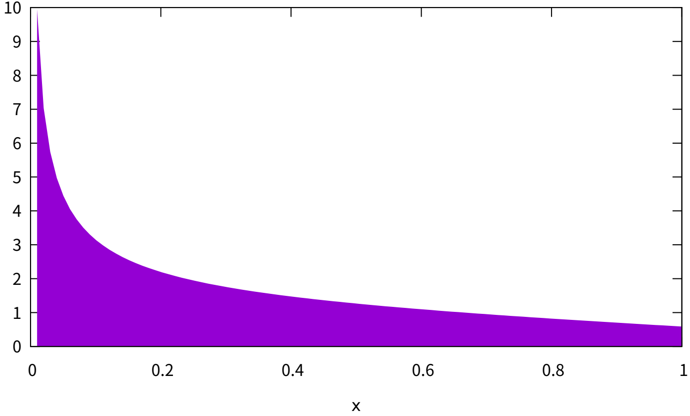
のように包含される。



昨年 (NVR2019) のスライドから抜粋 (開始)

$$\int_0^1 (\sin x)^{-0.5} cos(x)dx \in [\underline{1.8346345519562}108, \underline{1.8346345519562}22]$$

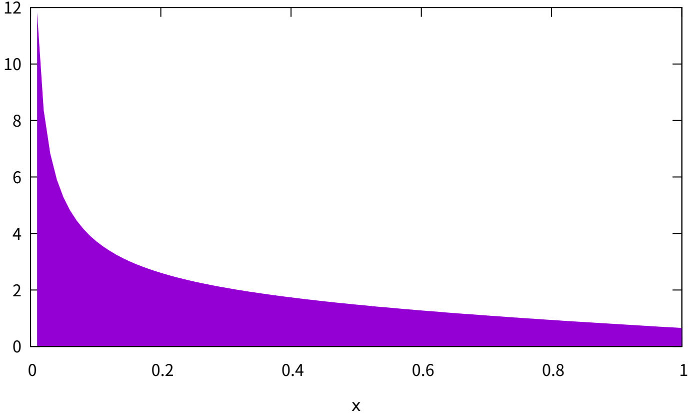
(multiplicity: 1)



example 2

$$\int_0^1 (1-\cos x)^{-0.25} cos(x) dx \in [\underline{2.1587160632723}119, \underline{2.1587160632723}395]$$

(multiplicity: 2)

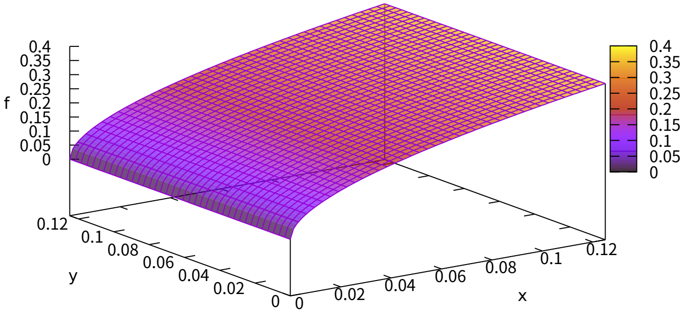


Double Integral for Functions with Edge Singularity (4)

Example:

$$\int_0^{0.125}\int_0^{0.125}\sqrt{x\cos y}\cos(xy)dxdy$$
$$\in [\underline{0.0036779864914043}189, \underline{0.0036779864914043}42]$$

singular at edge $x = 0$
multiplicity $n_x = 1$

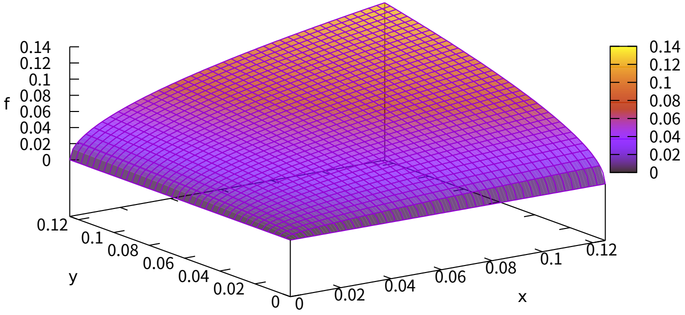


Double Integral for Functions with Edge Singularity (7)

Example:

$$\int_0^{0.125}\int_0^{0.125} \sqrt{xy}\cos{(xy)}dxdy$$
$$\in [\underline{0.000868036092974752}11, \underline{0.000868036092974758}52]$$

singular at both edge $x = 0$ and $y = 0$
multiplicity $n_x = 1$, $n_y = 1$

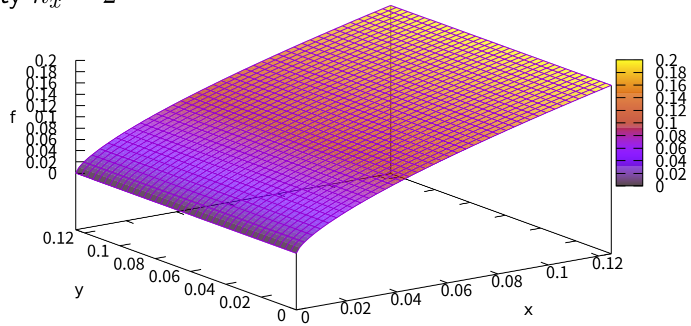


Example:

$$\int_0^{0.125}\int_0^{0.125}((1-\cos x)\cos y)^{\frac{1}{3}}\cos(xy)dxdy$$
$$\in[\underline{0.000868036092974752}11, \underline{0.000868036092974758}52]$$

singular at edge $x=0$

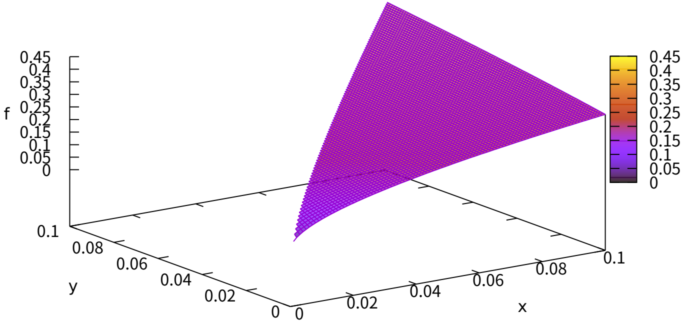
multiplicity $n_x=2$



Double Integral for Triangles with Corner Singularity (3)

Easy Example: Let K be a triangle with corner $(0,0)$, $(0.1,0)$, $(0.1,0.1)$,

$$\iint_K \sqrt{x+y}\,dxdy$$

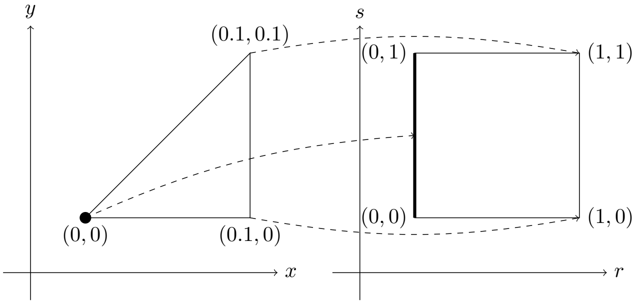


Double Integral for Triangles with Corner Singularity (4)

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.1 \\ 0 \end{pmatrix} r + \begin{pmatrix} 0 \\ 0.1 \end{pmatrix} rs$$

$$(0 \le r \le 1, \quad 0 \le s \le 1)$$

$$x = 0.1r$$
$$y = 0.1rs$$



Double Integral for Triangles with Corner Singularity (5)

$$\int_0^1 \int_0^1 \sqrt{0.1r + 0.1rs} \begin{vmatrix} 0.1 & 0 \\ 0.1s & 0.1r \end{vmatrix} drds = \int_0^1 \int_0^1 \sqrt{0.1r(1+s)}\, 0.01r\, drds$$

This is double integral on the square domain with edge singularity $r = 0$.
Multiplicity of r is $n_r = 1$.

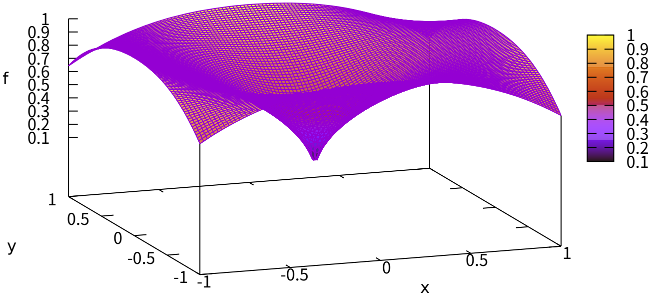
$$\begin{aligned} &\iint_K \sqrt{x+y}\, dxdy = \\ &\int_0^1 \int_0^1 \sqrt{0.1r(1+s)}\, 0.01r\, drds \\ &\in [\underline{0.00154186513332}575329, \underline{0.00154186513333}636226] \end{aligned}$$

One Point Singularity (1)

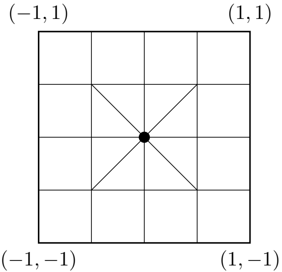
consider

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}(x^2+y^2)^{0.25}\cos(xy)dydx$$

again.



One Point Singularity (2)



Divide into 8 triangles with corner singularity and 12 square with no-singularity.
Multiplicity of r is $n_r = 2$.

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}(x^2+y^2)^{0.25}\cos(xy)dxdy$$
$$\in [\underline{3.200}2894881682673, \underline{3.200}3147015185261]$$

昨年 (NVR2019) のスライドから抜粋 (終了)

数値積分公式とその誤差評価

複合 Newton-Cotes 則

n 次多項式で近似、m は n の倍数、$h=\frac{b-a}{m}$、$x_i = a+ih$

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \frac{h}{2}\left(f(x_0)+2f(x_1)+\cdots+f(x_m)\right) - \frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi) \quad (n=1,\ \text{台形則}) \\
&= \frac{h}{3}\left(f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+\cdots+f(x_m)\right) - \frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi) \quad (n=2,\text{Simpson 則}) \\
&= \frac{3h}{8}\left(f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+2f(x_3)+\cdots+f(x_m)\right) - \frac{b-a}{80}h^4 f^{(4)}(\xi) \quad (n=3) \\
&= \frac{2h}{45}\left(7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+14f(x_4)+\cdots+7f(x_m)\right) \\
&\quad - \frac{2}{945}(b-a)h^6 f^{(6)}(\xi) \quad (n=4) \\
&= \frac{5h}{288}\left(19f(x_0)+75f(x_1)+50f(x_2)+50f(x_3)+75f(x_4)+38f(x_5)+\cdots+19f(x_m)\right) \\
&\quad - \frac{275}{12096}(b-a)h^6 f^{(6)}(\xi) \quad (n=5) \\
&= \frac{h}{140}\left(41f(x_0)+216f(x_1)+27f(x_2)+272f(x_3)+27f(x_4)+216f(x_5)+82f(x_6)+\cdots+41f(x_m)\right) \\
&\quad - \frac{3}{2800}(b-a)h^8 f^{(8)}(\xi) \quad (n=6) \\
&= \frac{7h}{17280}\left(751f(x_0)+3577f(x_1)+1323f(x_2)+2989f(x_3)+2989f(x_4)+1323f(x_5)+3577f(x_6)\right. \\
&\quad \left. +\ 1502f(x_7)+\cdots+751f(x_m)\right) - \frac{8183}{518400}(b-a)h^8 f^{(8)}(\xi) \quad (n=7)
\end{aligned}
$$

誤差項の計算

- 例えば Simpson 則なら

$$\frac{h}{3}\left(f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+\cdots+f(x_m)\right)-\frac{b-a}{180}h^4f^{(4)}([a,b])$$

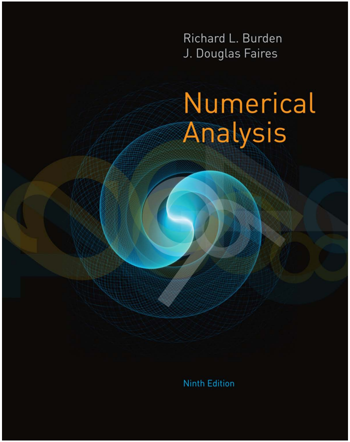
  を区間演算で計算すればよい。
- 近似計算ならば計算する必要のない、誤差項 $f^{(4)}([a,b])$ の計算に、f の高階微分に区間を代入したもの、が必要になる。
- 今のところ、Type-I PSA に区間を入れたもので実装している (自動微分と呼ばれる方法と本質的には同じ)。
- Goursat の定理を用いて高階微分を避ける方法、Hyper-Dual Number を用いて計算する方法なども知られているが、どれがいいかは今後の課題。

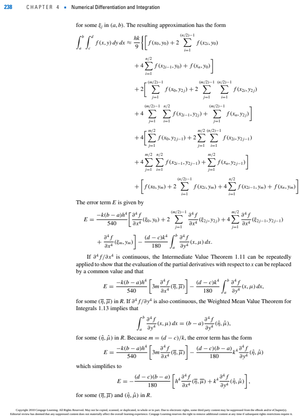
二重積分の場合の誤差評価式 (1)

Simpson 則の場合の誤差評価式とその証明を、

Richard L. Burden, J. Douglas Faires: Numerical Analysis 9th Edition, Cengage Learning, 2011

という教科書で見つけた。





for some ξ_j in (a, b). The resulting approximation has the form

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)\,dy\,dx \approx \frac{hk}{9}\Bigg\{\Bigg[f(x_0,y_0) + 2\sum_{i=1}^{(n/2)-1} f(x_{2i},y_0) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1},y_0) + f(x_n,y_0)\Bigg]$$

$$+ 2\Bigg[\sum_{j=1}^{(m/2)-1} f(x_0,y_{2j}) + 2\sum_{j=1}^{(m/2)-1}\sum_{i=1}^{(n/2)-1} f(x_{2i},y_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{(m/2)-1}\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1},y_{2j}) + \sum_{j=1}^{(m/2)-1} f(x_n,y_{2j})\Bigg]$$

$$+ 4\Bigg[\sum_{j=1}^{m/2} f(x_0,y_{2j-1}) + 2\sum_{j=1}^{m/2}\sum_{i=1}^{(n/2)-1} f(x_{2i},y_{2j-1}) + 4\sum_{j=1}^{m/2}\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1},y_{2j-1}) + \sum_{j=1}^{m/2} f(x_n,y_{2j-1})\Bigg]$$

$$+ \Bigg[f(x_0,y_m) + 2\sum_{i=1}^{(n/2)-1} f(x_{2i},y_m) + 4\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1},y_m) + f(x_n,y_m)\Bigg]\Bigg\}.$$

The error term E is given by

$$E = \frac{-k(b-a)h^4}{540}\Bigg[\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\xi_0,y_0) + 2\sum_{j=1}^{(m/2)-1}\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\xi_{2j},y_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{m/2}\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\xi_{2j-1},y_{2j-1}) + \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\xi_m,y_m)\Bigg] - \frac{(d-c)k^4}{180}\int_a^b \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(x,\mu)\,dx.$$

If $\partial^4 f/\partial x^4$ is continuous, the Intermediate Value Theorem 1.11 can be repeatedly applied to show that the evaluation of the partial derivatives with respect to x can be replaced by a common value and that

$$E = \frac{-k(b-a)h^4}{540}\left[3m\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\overline{\eta},\overline{\mu})\right] - \frac{(d-c)k^4}{180}\int_a^b \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(x,\mu)\,dx,$$

for some $(\overline{\eta},\overline{\mu})$ in R. If $\partial^4 f/\partial y^4$ is also continuous, the Weighted Mean Value Theorem for Integrals 1.13 implies that

$$\int_a^b \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(x,\mu)\,dx = (b-a)\frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(\hat{\eta},\hat{\mu}),$$

for some $(\hat{\eta},\hat{\mu})$ in R. Because $m = (d-c)/k$, the error term has the form

$$E = \frac{-k(b-a)h^4}{540}\left[3m\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\overline{\eta},\overline{\mu})\right] - \frac{(d-c)(b-a)}{180}k^4\frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(\hat{\eta},\hat{\mu})$$

which simplifies to

$$E = -\frac{(d-c)(b-a)}{180}\left[h^4\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\overline{\eta},\overline{\mu}) + k^4\frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(\hat{\eta},\hat{\mu})\right],$$

for some $(\overline{\eta},\overline{\mu})$ and $(\hat{\eta},\hat{\mu})$ in R.

Copyright 2010 Cengage Learning. All Rights Reserved. May not be copied, scanned, or duplicated, in whole or in part. Due to electronic rights, some third party content may be suppressed from the eBook and/or eChapter(s).
Editorial review has deemed that any suppressed content does not materially affect the overall learning experience. Cengage Learning reserves the right to remove additional content at any time if subsequent rights restrictions require it.

二重積分の場合の誤差評価式 (2)

その定理を一般の数値積分公式に拡張すると、こんな定理が成立しそう。

定理

C^p 級の関数 $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ の数値積分について、分点 $a \le x_0 \le x_1 \le \cdots \le x_n \le b$ を用いた p 次の積分公式

$$\exists \xi \in [a,b] \quad \int_a^b g(x)dx = \sum_{i=0}^{n} a_i g(x_i) + r g^{(p)}(\xi) \tag{1}$$

が成立し、また C^q 級の関数 $h : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ の数値積分について、分点 $c \le y_0 \le y_1 \le \cdots \le y_m \le d$ を用いた q 次の公式

$$\exists \mu \in [c,d] \quad \int_c^d g(y)dy = \sum_{j=0}^{m} b_j h(y_j) + s h^{(q)}(\mu) \tag{2}$$

が成立するとする。また、$\forall i\ a_i \ge 0$, $\forall j\ b_j \ge 0$ を仮定する。
このとき、十分なめらかな $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ について、

$$\begin{aligned} &\exists \underline{\xi} \in [a,b], \underline{\mu} \in [c,d], \overline{\xi} \in [a,b], \overline{\mu} \in [c,d] \\ \int_c^d \int_a^b f(x,y)dxdy &= \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{m} a_i b_j f(x_i, y_j) \\ &\quad + r(d-c)\frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\underline{\xi}, \underline{\mu}) + s(b-a)\frac{\partial^q f}{\partial y^q}(\overline{\xi}, \overline{\mu}) \end{aligned} \tag{3}$$

が成立する。

二重積分の場合の誤差評価式 (3)

(証明) y を固定し、x について数値積分公式 (1) を使うと、

$$\exists\xi(y) \in [a,b] \quad \int_a^b f(x,y)dx = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i, y) + r\frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\xi(y), y)$$

が成立する。この両辺を y について積分し数値積分公式 (2) を使うと、

$$\exists\mu_i \in [c,d] \quad \int_c^d \int_a^b f(x,y)dxdy = \sum_{i=0}^{n} a_i \left(\sum_{j=0}^{m} b_j f(x_i, y_j) + s\frac{\partial^q f}{\partial y^q}(x_i, \mu_i) \right) + r\int_c^d \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\xi(y), y)dy$$

が成立する。

次に $s\sum_{i=0}^{n} a_i \frac{\partial^q f}{\partial y^q}(x_i, \mu_i)$ の部分について議論する。まず、数値積分公式 (1) について $g(x)=1$ の場合を考えると、$b-a=\sum_{i=0}^{n} a_i$ が分かる。$a_i \geq 0$ で $\frac{\partial^q f}{\partial y^q}$ は連続なので中間値の定理を繰り返し用いることによりある $\overline{\xi} \in [a,b], \overline{\mu} \in [c,d]$ が存在して $s\sum_{i=0}^{n} a_i \frac{\partial^q f}{\partial y^q}(x_i, \mu_i) = s(b-a)\frac{\partial^q f}{\partial y^q}(\overline{\xi}, \overline{\mu})$ が成立することが示せる。

最後に $r\int_c^d \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\xi(y), y)dy$ の部分であるが、$\frac{\partial^p f}{\partial x^p}$ は連続なので、$[a,b]\times[c,d]$ で最小値 M_1、最大値 M_2 を持つ、すなわち $M_1 \leq \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\xi(y), y) \leq M_2$。$c$ から d まで積分すると、$(d-c)M_1 \leq \int_c^d \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\xi(y), y)dy \leq (d-c)M_2$ となり、$d-c$ で割ると、$M_1 \leq \frac{1}{d-c}\int_c^d \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\xi(y), y)dy \leq M_2$ が成立する。よって、$\frac{\partial^p f}{\partial x^p}$ に対して中間値の定理を使うと、ある $\underline{\xi} \in [a,b], \underline{\mu} \in [c,d]$ が存在して $\frac{1}{d-c}\int_c^d \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\xi(y), y)dy = \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\underline{\xi}, \underline{\mu})$ が成立することが分かる。両辺に $r(d-c)$ をかけて、$r\int_c^d \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\xi(y), y)dy = r(d-c)\frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\underline{\xi}, \underline{\mu})$ となる。

二重積分の場合の誤差評価式 (4)

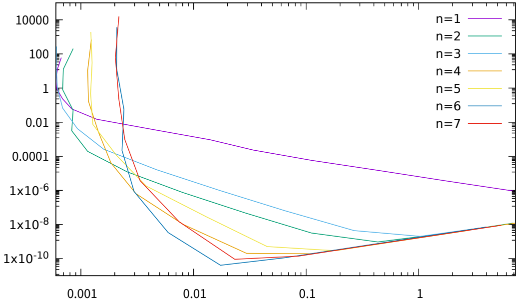
- この証明は例の教科書の二重 Simpson 則の誤差評価式の解説を見て、それを一般化し証明の誤りを修正したものである。
- 教科書に載っている話であるからよく知られている事実であろうと思われるが、教科書には出典の記載はない。本当の発見者を知りたい。誰か教えて下さい。
- 定理では、$\forall i\ a_i \geq 0$, $\forall j\ b_j \geq 0$ を仮定したが、証明中では前者しか使っていない。また、積分の順序を入れ替えて同様に証明すると、後者のみしか使わないことになる。これから言えるのは、「どちらか片方を満たせば」定理の結論が導けるということである。この仮定は不要な気もするが、うまく外せない。誰かお願い!
- (1) や (2) に使う積分公式は、Newton-Cotes の公式や Gauss 型積分公式など、厳密な誤差評価が分かっている公式を使えばよい。ただし、Newton-Cotes の場合は高次のときに係数が負になる場合があり、注意が必要である。
- この公式を精度保証に使う場合、

$$\frac{\partial^p f}{\partial x^p}([a-b],[c-d]),\ \frac{\partial^q f}{\partial y^q}([a-b],[c-d])$$

の 2 つの高階微分値を区間演算するだけでよく、二重ベキ級数演算を用いる方法に比べて高速であることが期待できる。

ちょっと数値実験

$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\frac{1}{1+x^2+2y^2}dxdy$ を n 次多項式近似による Newton-Cotes 公式を用い、全体の分割数 m を変化させたときの計算時間 (横軸) と区間幅 (縦軸) のプロット。



- 左の方が 0 に近づかないのは、高次の公式になればなるほど誤差項の計算が重くなるため。
- 右の方で誤差の上昇が見られる。分割しすぎると丸め誤差が大きくなり、計算時間をかければかけるほど誤差が大きくなってしまう。
- 誤差が最小になるような分割数 m を推定できないか?

複合公式の分割数の自動設定

p 次の精度を持つ複合公式は、全体の分割数を m とすると

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m} a_i f(x_i) + \frac{K}{m^p} f^{(p)}(\xi)$$

の形をしている。また二重積分の場合は、x 方向の分割数を m_1、y 方向の分割数を m_2 とすると

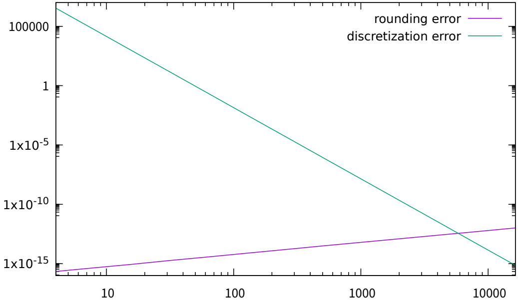
$$\int_d^c \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m_1} \sum_{j=0}^{m_2} a_i b_j f(x_i, y_j) + \frac{K_1}{m_1^p} \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(\underline{\xi}, \underline{\mu}) + \frac{K_2}{m_2^p} \frac{\partial^p f}{\partial y^p}(\overline{\xi}, \overline{\mu})$$

の形になる。この区間幅を最小にするような分割数 m (m_1, m_2) を求める問題を考える。

- $f^{(p)}(\xi)$ の部分は $\xi = [a, b]$ として区間演算をするので、定数区間。よって、離散化誤差は m^p に反比例すると考えてよい。
- $\sum_{i=0}^{m} a_i f(x_i)$ の部分は、
  - $a_i f(x_i)$ の評価の誤差に起因する部分は、m が増えれば a_i の絶対値が小さくなってバランスを取るので、ほぼ一定値と考えて良い。
  - $\sum$ の丸め誤差に起因する部分は、ほぼ m に比例すると考えられる。
- つまり全体の誤差は、$Q + Rm + \frac{S}{m^p}$ の形。Q はどうしようもないので、 $Rm + \frac{S}{m^p}$ の最小化を目指す。

本当に仮説通りなのか検証

$\displaystyle\int_{-1}^{1} \frac{1}{1+10x^2}dx$ を $n=4$ (6 次) の Newton-Cotes 公式で計算したときの、$\displaystyle\sum_{i=0}^{m} a_i f(x_i)$ の区間幅 (rounding error) と $\dfrac{K}{m^p} f^{(p)}([a,b])$ の区間幅 (discretization error) を実測したものを、m を変えながら図示する。



ともにきれいな直線に乗っていることが分かる。
(注意: 定数項の影響を排除するため、$a_i f(x_i)$ はわざと区間演算をせず、$\sum$ のみ区間演算を行わせた。)

最適な分割数の決定アルゴリズム (1 次元)

1. 適当な小さな分割数 k (例えば $k = 10$) を用いて、$\displaystyle\sum_{i=0}^{k} a_i f(x_i)$ と $\dfrac{K}{k^p} f^{(p)}([a,b])$ を計算する。但し、前者は $a_i f(x_i)$ の計算は区間演算を使わず幅を 0 とし、和のみを区間演算で行う。それぞれの区間幅を w_1, w_2 する。
2. 比例定数を、$R = \dfrac{w_1}{k}$、$S = w_2 k^p$ で推定する。
3. (R と S に微小な数 (例えば machine epsilon) を加える。)
4. $$m = \left(\frac{pS}{R}\right)^{\frac{1}{p+1}}$$

   を最適な m とする。(このとき m は $Rm + \dfrac{S}{m^p}$ を最小化する)。

最適な分割数の決定アルゴリズム (二重積分)

1. 適当な小さな分割数 k_1, k_2 (例えば $k_1 = k_2 = 10$) を用いて、$\displaystyle\sum_{i=0}^{k_1}\sum_{j=0}^{k_2} a_i b_j f(x_i, y_j)$ 、$\displaystyle\frac{K_1}{k_1^p}\frac{\partial^p f}{\partial x^p}([a,b],[c,d])$ 、$\displaystyle\frac{K_2}{k_2^p}\frac{\partial^p f}{\partial y^p}([a,b],[c,d])$ を計算する。但し、前者は $a_i b_j f(x_i, y_j)$ の計算は区間演算を使わず幅を 0 とし、和のみを区間演算で行う。それぞれの区間幅を w_0, w_1, w_2 する。
2. 比例定数を、$R = \dfrac{w_0}{k_1 k_2}$ 、$S_1 = w_1 k_1^p$ 、$S_2 = w_2 k_2^p$ で推定する。
3. (R, S_1, S_2 に微小な数 (例えば machine epsilon) を加える。)
4.
$$m_1 = \sqrt{\left(\frac{p^2 S_1 S_2}{R^2}\right)^{\frac{1}{p+2}}\left(\frac{S_1}{S_2}\right)^{\frac{1}{p}}}, m_2 = \sqrt{\left(\frac{p^2 S_1 S_2}{R^2}\right)^{\frac{1}{p+2}}\left(\frac{S_2}{S_1}\right)^{\frac{1}{p}}}$$
を最適な m_1, m_2 とする。(このとき m_1, m_2 は $Rm_1m_2 + \dfrac{S_1}{m_1^p} + \dfrac{S_2}{m_2^p}$ を最小化する)。

数値実験 (1 次元)

$\displaystyle\int_{-1}^{1} \frac{1}{1+10x^2}dx$ を n 次多項式近似による Newton-Cotes 公式で計算したときの m の推定値と区間幅、計算時間。

n	p	m の推定値	区間幅	計算時間 (s)
1	2	2908919	2.66×10^{-10}	0.26
2	4	25615	3.51×10^{-12}	0.0023
3	4	55692	4.31×10^{-12}	0.0050
4	6	6270	6.75×10^{-13}	0.00095
5	6	8802	8.51×10^{-13}	0.00105
6	8	3211	2.85×10^{-13}	0.00081
7	8	4297	3.45×10^{-13}	0.00098

数値実験 (多重積分)

$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\frac{1}{1+x^2+2y^2}dxdy$ を n 次多項式近似による Newton-Cotes 公式で計算したときの m_1, m_2 の推定値と区間幅、計算時間。

n	p	m_1	m_2	区間幅	計算時間 (s)
1	2	35332	67225	4.67×10^{-7}	249
2	4	1041	1948	7.82×10^{-10}	0.219
3	4	2887	5404	2.72×10^{-9}	1.70
4	6	392	730	9.00×10^{-11}	0.0338
5	6	525	977	1.60×10^{-10}	0.058
6	8	234	434	2.73×10^{-11}	0.0131
7	8	306	569	4.82×10^{-11}	0.0209

数値実験 (多重積分, ベキ級数演算)

$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\frac{1}{1+x^2+2y^2}dxdy$ を 8 次のベキ級数を用い、分割数を変化させたときの区間幅、計算時間。

分割数	区間幅	計算時間 (s)
4×4	0.006	0.0638
8×8	1.08×10^{-6}	0.118
16×16	1.23×10^{-9}	0.466
32×32	2.31×10^{-12}	1.87
64×64	7.60×10^{-13}	7.49
128×128	3.01×10^{-12}	29.9
256×256	1.20×10^{-11}	120

補足事項

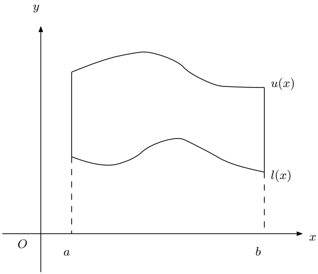
計算環境

core i7 9700, memory 32G, Ubuntu 20.04, gcc 9.3.0, kv-0.4.50

Q & A

- なぜ Gauss-Legendre を使わないのか? → 修士の学生が今やってるから邪魔をしたくない。あと係数と重みの計算が面倒。
- 3 重積分にも拡張できるのでは? → 修士の学生が今やってるから邪魔をしたくない。
- このプログラムは利用可能なのか? → kv-0.4.51 に入る予定です。

オマケ: 曲線で囲まれた領域での二重積分 (1)



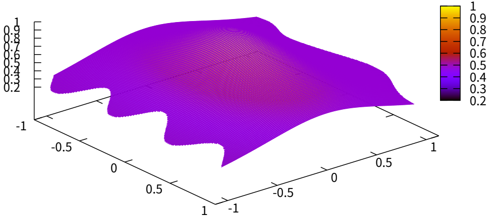
$$\int_a^b \int_{l(x)}^{u(x)} f(x,y)dydx$$

$y = l(x) + z(u(x) - l(x))$ のように変数変換し、

$$\int_a^b \int_{l(x)}^{u(x)} f(x,y)dydx = \int_a^b \int_0^1 f(x, l(x)+z(u(x)-l(x)))(u(x)-l(x))dzdx$$

とすることで簡単に精度保証できる。

曲線で囲まれた領域での二重積分の例



$$\int_{-1}^{1}\int_{-1+0.125\sin(10x)}^{1+0.125\sin(5x)} \frac{1}{1+x^2+2y^2}\,dydx$$
$$\in [\textcolor{red}{2.230010548}6105175, \textcolor{red}{2.230010549}659109]$$

kv ライブラリ

kv ライブラリ

- http://verifiedby.me/kv/ で公開中。
- 作成開始は 2007 年秋頃。公開開始は 2013 年 9 月 18 日。最新版は version 0.4.50。
- 言語は C++。boost C++ Libraries も必要。
- 全てヘッダファイルで記述されており、インストールはヘッダファイルをどこかに配置するだけ。
- オープンソースである。精度保証付き数値計算の結果が「証明」であると主張するならば、計算に使われたプログラムは必ず公開されているべき。
- 計算に使う数値の型は double に制限されていない。C++のテンプレート機能を用いて容易に変更することが出来る。
- (数値型) 区間演算 (多数の数学関数含む)、4 倍精度 (double-double) 演算、MPFR ラッパー、複素数演算、自動微分、affine arithmeric、ベキ級数演算、とそれらの組み合わせ。
- (アプリケーション) Krawczyk 法による非線形方程式の精度保証、非線形方程式の全解探索、常微分方程式の初期値問題、常微分方程式の境界値問題、数値積分、特殊関数、他

皆様のご利用をお待ちしております!