数理解析研究所講究録
746巻 1991年 1-10

多倍長演算の数値積分への応用

神奈川工科大学　平山　弘(Hiroshi Hirayama)

1.はじめに

数値計算では、限られた有限桁で計算が行われるため、桁落ちの大きい問題では十分な精度が得られない。このため解くことが出来ない場合もある。数値解析ではこのような問題に対し、桁落ちしないようないろいろな計算方法を研究してきているがすべての問題がうまくいくわけではない。数値微分法は桁落ちの激しい問題としてよく知られた問題である。特に高階の微分係数の計算では、桁落ちが激しいので数値計算法としては殆ど使われていない。低次の微分係数でも桁落ちが生じ易いので、数値微分は数値計算法としては、あまり使われていない。しかしながら、微分係数の値は数値計算のいろいろな分野によく現れる非常に重要な値であり、完全に避けることは出来ない。このような問題に対しては、微分演算を数式処理を利用した解析的な微分法である高速自動微分法[1)2)]で行うことが大変有効であることが知られている。

有限の桁ではあるが、もっと精度の高い計算機が利用できる場合、このような理由で解けない問題はかなり少なくなり、高速自動微分法を使わないでも、かなり広い範囲の問題が数値演算だけで解けると思われる。この場合、記号処理を利用した微分は不要となるので、高速演算が可能となる。高精度の演算が可能な計算機が出現しない場合でも、現在の計算機はかなり高速で、また多倍長計算では、数値の乗算においてベクトル演算機能が非常に有効なので、高精度計算は昔に比べてかなり容易になっている。まだ応用範囲は限定されると思われるが、実際の問題にも利用できるものと思われる。本論文では、多倍長演算ルーチンを使い高精度の計算が可能な場合、高階微分係数を十分な精度で計算し、それを利用して数値積分を行い、その可能性を調べた。

多倍長演算には、著者が開発した多倍長演算パッケージ（ＭＰＰ）を利用した。これは東京大学計算センターに登録する予定である。

２．数値積分法

数値積分は、次のEuler-Maclaurinの総和公式

$$\int_a^b f(x)\,dx = h\left\{\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(a+hi) + \frac{1}{2}f(b)\right\} \qquad (2.1)$$
$$-\sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k}\{f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\} - R_{2m+1}$$

ここで、$h=(b-a)/n$、B_mはベルヌイ数である。(2.1)の公式を使えば、台形公式で計算した数値積分の値を微分係数を使って、高次の補正を行うことができる。

逆に、積分の値がわかる場合には、台形則で計算する部分は、級数になるから、級数の計算を求めることもできる。この方法については長田[3)]で述べられている。また、積分区間の端点に特異性がある場合のEuler-Maclaurinの総和公式については、Navot[4-5)]で述べられている。

３．計算方法

高次の微分係数を計算するには、微分係数を求める関数を高精度で計算する必要がある。最も高次の微分係数は２９階で、精度としては倍精度の約１５桁を考えているので単純に考えれば、計算精度は約４３５（２９×１５）桁となる。しかしながら、今回の問題では２９階の微分係数を必要とすることはく、最高でも１３階であった。このため計算は、１０進で約２００桁（１３×１５）の精度で計算を行った。

微分係数は、計算位置を中心に対称に計算点等間隔に配置し、次のような公式によって計算を行った。計算位置を計算点の中心に置くことによって、高精度化をはかった。ここでは１階微分から１３階微分の公式を示す。この公式の導出には数式処理言語REDUCE3を使った。

$$f_0' = \frac{1}{2h}\{f_1 - f_{-1}\} \tag{3.1}$$

$$f_0^{(3)} = \frac{1}{2h^3}\{(f_2 - f_{-2}) - 2(f_1 - f_{-1})\} \tag{3.2}$$

$$f_0^{(5)} = \frac{1}{2h^5}\{(f_3 - f_{-3}) - 4(f_2 - f_{-2}) + 5(f_1 - f_{-1})\} \tag{3.3}$$

$$f_0^{(7)} = \frac{1}{2h^7}\{(f_4 - f_{-4}) - 6(f_3 - f_{-3}) + 14(f_2 - f_{-2}) - 14(f_1 - f_{-1})\} \tag{3.4}$$

$$f_0^{(9)} = \frac{1}{2h^9}\{(f_5 - f_{-5}) - 8(f_4 - f_{-4}) + 27(f_3 - f_{-3}) - 48(f_2 - f_{-2}) + 42(f_1 - f_{-1})\} \tag{3.5}$$

$$f_0^{(11)} = \frac{1}{2h^{11}}\{(f_6 - f_{-6}) - 10(f_5 - f_{-5}) + 44(f_4 - f_{-4}) - 110(f_3 - f_{-3}) + 165(f_2 - f_{-2}) - 132(f_1 - f_{-})\} \tag{3.6}$$

$$f_0^{(13)} = \frac{1}{2h^{13}}\{(f_7 - f_{-7}) - 12(f_6 - f_{-6}) + 65(f_5 - f_{-5}) - 208(f_4 - f_{-4}) + 429(f_3 - f_{-3}) - 572(f_2 - f_{-2}) + 429(f_1 - f_{-1})\} \tag{3.7}$$

ベルヌイ数は二項係数を求めるときのパスカルの三角形と同様な方法で求めた。この方法は、計算は高速だが大量の記憶領域を必要とする。

4. 数値例

数値例として次のような4つの例について行った。（1）と（2）は積分区間の近くに特異点がない場合、（3）は積分区間の近くに特異点がある場合、（4）は積分区間の非常に近くに特異点がある場合の例である。それらは、

（1） $\int_0^1 e^x dx$ (4.1)

（2） $\int_0^1 \sin x dx$ (4.2)

（3） $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ (4.3)

（4） $\int_0^1 \frac{dx}{1+25x^2}$ (4.4)

（A）積分区間の近くに特異点がない場合、高階微係数を使えば台形公式における分割数が少なくても高精度の結果が得られる。分割数2の場合の様子を表4．1に示す。

（B）（A）と同様なことを積分区間の近くに特異点がある問題について行うと表4．2に示すようにかなり高階の微係数を使ってもあまり良い結果は得られない。表4．2の例では分割数は表4．1と同様に2である。

（C）分割数がある程度多い場合（n＞50）には、1また

は３階の微係数の補正で十分な精度の結果が得られる。その結果を表４．３に示す。

表４．１

使用した微分係数の最高階数	$\int_0^1 e^x dx$ の誤差	$\int_0^1 \sin x\, dx$ の誤差
1	3.65×10^{-2}	9.62×10^{-3}
3	1.48×10^{-4}	4.01×10^{-5}
5	8.82×10^{-7}	2.39×10^{-7}
7	5.51×10^{-9}	1.49×10^{-9}
9	3.48×10^{-11}	9.43×10^{-12}
１１	2.21×10^{-13}	5.96×10^{-14}
１３	$0.0(<10^{-15})$	$0.0(<10^{-15})$

表４．２

使用した微分係数の最高階数	$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ の誤差	$\int_0^1 \frac{dx}{1+25x^2}$ の誤差
1	3.65×10^{-2}	9.62×10^{-3}
3	1.48×10^{-4}	4.01×10^{-5}
5	8.82×10^{-7}	2.39×10^{-7}

表4. 3

使用した微分係数の最高階	$\int_0^1 e^x dx$ の誤差	$\int_0^1 \sin x\, dx$ の誤差	$\int_0^1 \frac{dx}{1+25x^2}$ の誤差
1	1.42×10^{-10}	9.35×10^{-6}	1.51×10^{-6}
3	1.11×10^{-15}	3.81×10^{-11}	6.52×10^{-11}
5	2.22×10^{-16}	1.11×10^{-16}	9.44×10^{-15}

5. 誤差解析

単純な例を使って、積分区間の近くに特異点ある場合、このような計算はあまり良い結果を与えないことを示す。関数f(x)は$x=p$を特異点を持つ関数とする。このような関数で最も単純な関数は

$$f(x)=\frac{1}{p-x}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{x^{k-1}}{p^k} \quad (\text{p は収束半径}) \tag{5.1}$$

このとき

$$f^{(n)}(0)=\frac{n!}{p^{n+1}} \tag{5.2}$$

この結果をEuler-Maclaurinの総和公式に代入するする。微分係数は積分区間両端での値が影響するが主要項は両端点で特異点に最も近い方の特異点が大きく影響を与える。(5.1)およ

び（5.2）はどの様に原点を選んでも成り立つから、簡単のため、この影響の端点を原点にする。したがって、代入した結果は

$$\sum_{k=1}^{m}\frac{B_{2k}}{(2k)!}h^{2k}f^{(2k-1)}(0)=\sum_{k=1}^{m}S_{2k} \qquad (5.3)$$

ここで

$$S_{2k}=\frac{B_{2k}}{(2k)!}h^{2k}f^{(2k-1)}(0) \qquad (5.4)$$

である。kが大きいとき

$$B_{2k}=\frac{2(2k)!}{(2\pi)^{2k}} \qquad (5.5)$$

であるから、k→∞のとき、（5.2）より

$$S_{2k}=2\left(\frac{h}{2\pi p}\right)^{2k-1}(2k-1)! \qquad (5.6)$$

２kをrとおくと

$$S_{r}=2\left(\frac{h}{2\pi p}\right)^{r}(r-1)! \qquad (5.7)$$

発散級数では

$$\frac{S_{r+1}}{S_r}<1 \qquad (5.8)$$

の所まで意味を持つから

$$\frac{S_{r+1}}{S_r}=\frac{hr}{2\pi p}<1$$

でなければならない。したがって、

$$r<\frac{2\pi p}{h}=\alpha p n \qquad (5.9)$$

となる。ここでαは比例定数である。

この結果から次のようなことがわかる。

（１）収束半径pが大きいほどすなわち積分路の近くに特異点がないほど有効項数rを大きくとれる。このことは微分係数が急速に減少していることを意味する。このような級数は大変計算しやすい。したがって、積分の値も計算しやすい。

（２）分割数（n）が大きければ（１）ど同様に有効項数rを大きくとれるこれは高次の補正項が有効になることを意味する。そのため積分値は高階の微係数を利用して高精度補正ができることになる。

6. 結論

以上のような結果から、１または３階程度の微分係数ならばそれほど高精度の計算を必要としないから、この程度の微係数を使う公式はかなり実用的であると思われる。高階の微分係数を使う公式は、その微分係数を求めるための計算量が非常に小さいならば非常に有効と思われるが、一般に高階微分係数を求めるためにはかなりの計算が必要である。

指数関数や三角関数などは微分してもその式があまり複雑

にならないので、このような場合ならば高速自動微分法などの数式処理が有効であると思われる。

参考文献

1) 伊理 正夫、久保田 光一：高速自動微分法
数理科学 No. 285, March 1987 pp. 41-48

2) 戸田英雄、小野令美、伊理正夫：自動微分法を利用したRomberg積分の手間について，京都大学数理解析研究所講究録，No.613 (1987) pp.144-153

3) 長田直樹：対数収束級数の漸近展開と加速法、情報処理学会論文誌、Vol.29,No.3(1988)pp.256-261

4) Navot,I : An Extension of the Euler-Maclaurin summation formula to functions with a branch singularity, J. Math. and Phy. 40(1961)pp.271-276

5) Navot,I : A further extension of the Euler-Maclaurin summation formula, J. Math. and Phy. 41(1962)pp.155-164