

加速法

加速とは

無限和を有限和で代用したりすることによって生じる誤差（離散化誤差）の構造が既知であれば，それを利用して近似値を補正することができる．このような方法を加速という．まず，数値微分の例を用いて，基本的な考え方を説明しよう．

$$a = f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} [f(x+h) - f(x)]/h \quad (1)$$

を有限の刻み幅 $h = h_n = 2^{-n}$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) による前進差分：

$$a_n = [f(x+h_n) - f(x)]/h_n \quad (2)$$

で近似する．例えば， $f(x) = \exp x$, $x = 1.3$ に対して近似誤差を観察すると， n と誤差 $a_n - a$ の間には図 1 のような関係が見られる．

誤差の振舞いは， $f(x+h)$ の Taylor 展開から得られる

$$a_n \sim a + c_1 2^{-n} + c_2 2^{-2n} + c_3 2^{-3n} + \dots \quad (n \geq 0) \quad (3)$$

によって説明される． $c_i = f^{(i+1)}(x)/(i+1)!$ の値は未知であるが，このような構造が分かっているので， a_n と a_{n-1} を組み合わせて誤差の主要項 $c_1 2^{-n}$ を消去することができる．実際，

$$a_n^{(1)} = [a_n - 2^{-1} a_{n-1}]/[1 - 2^{-1}] \sim a + c_2' 2^{-2n} + c_3' 2^{-3n} + \dots \quad (n \geq 1) \quad (4)$$

は，もとの数列 $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$ より速く a に収束すると期待される． $\{a_n^{(1)}\}_{n=1}^{\infty}$ に対しても同様の加速を適用することができ，一般に， $m = 2, 3, \dots$ に対して

$$a_n^{(m)} = [a_n^{(m-1)} - 2^{-m} a_{n-1}^{(m-1)}]/[1 - 2^{-m}] \quad (n \geq m) \quad (5)$$

と定義すると， $\{a_n^{(m)}\}_{n=m}^{\infty}$ は $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$ よりもずっと速く a に収束するようになる．ただし，図に見られるように，丸め誤差の影響にも注意する必要がある．

Richardson 加速

数列 $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$ が，十分大きい n に対して

$$a_n \sim a + c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n + \dots \quad (1 > |\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots) \quad (6)$$

のように表せる場合を考える． λ_1 の値が既知ならば

$$a_n^{(1)} = \frac{a_n - \lambda_1 a_{n-1}}{1 - \lambda_1} \quad (n \geq 1) \quad (7)$$

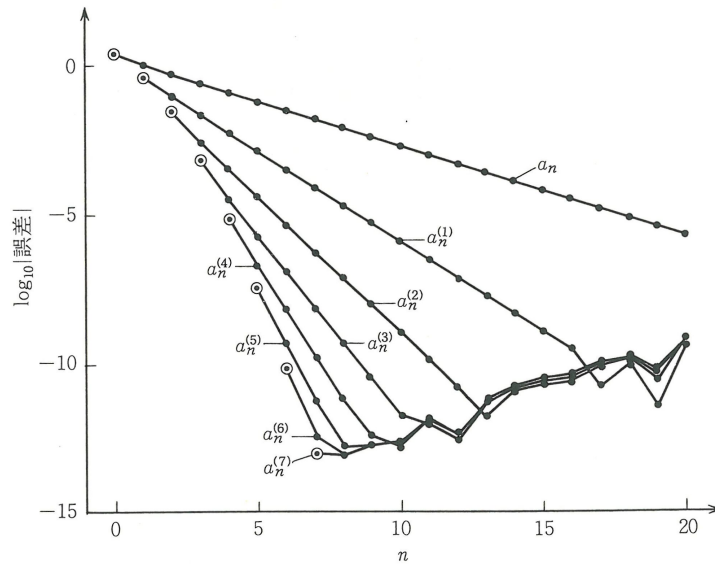


図 1: 前進差分による数値微分とその Richardson 加速
 $(f(x) = \exp x, x = 1.3, a_n = [f(x + 2^{-n}) - f(x)]/2^{-n}, \odot : a_n^{(n)})$
 (2進53桁0捨1入による)

を作ることができる.

$$a_n^{(1)} \sim a + \sum_{k=2}^{\infty} c_k \frac{1 - \lambda_1/\lambda_k}{1 - \lambda_1} \lambda_k^n \quad (n \rightarrow \infty) \quad (8)$$

となるので, $\{a_n^{(1)}\}_{n=1}^{\infty}$ は $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$ より速く a に収束する. これを Richardson 加速と呼ぶ.

さらに, $\{a_n^{(1)}\}_{n=1}^{\infty}$ も (6) の形であるから, $\lambda_2, \lambda_3, \dots$ の値も既知の場合には, 同様の加速を繰り返し施すことができる. $a_n^{(0)} = a_n$ とおき, $m = 1, 2, \dots$ に対して

$$a_n^{(m)} = \frac{a_n^{(m-1)} - \lambda_m a_{n-1}^{(m-1)}}{1 - \lambda_m} \quad (n \geq m) \quad (9)$$

と定義する. これを次のような配列の形に書くことが多い:

$$\begin{array}{ccccccc} a_0 & & & & & & \\ a_1 & a_1^{(1)} & & & & & \\ a_2 & a_2^{(1)} & a_2^{(2)} & & & & \\ a_3 & a_3^{(1)} & a_3^{(2)} & a_3^{(3)} & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \end{array} \quad (10)$$

配列 (10) の縦の列の収束性を調べるために, (6) を (9) に代入すると

$$a_n^{(m)} \sim a + \sum_{k=m+1}^{\infty} c_k \frac{\prod_{j=1}^m (1 - \lambda_j/\lambda_k)}{\prod_{j=1}^m (1 - \lambda_j)} \lambda_k^n \quad (n \rightarrow \infty) \quad (11)$$

のようになる．したがって $\{a_n^{(m)}\}_{n=m}^{\infty}$ は，収束率 λ_{m+1} で a に 1 次収束する．

さらに，配列 (10) の対角線上の列 $\{a_n^{(n)}\}_{n=0}^{\infty}$ の収束は，一定の収束率の 1 次収束よりも速いことが期待される．詳しい解析によると

$$|a_n^{(n)} - a| \leq \hat{c}_{n+1} K(\lambda) |\lambda|^{n(n+1)/2} \quad (12)$$

の形となる．ここで， \hat{c}_{n+1} は n だけに依る定数， $K(\lambda)$ は λ だけに依る定数で， $K(1/2) = 8.256\dots$ ， $K(1/4) = 1.969\dots$ などである．例えば，数値微分の例では， $\lambda = 1/2$ ， $\hat{c}_{n+1} = C/(n+2)!$ にとれるので， $a_n^{(n)}$ の誤差は大略 $2^{-n(n+1)/2 - cn \log n}$ のように減少する (図 1 の ⊙ の振舞いを参照)．

補足．数列 $\{a_n\}$ の漸近挙動が， c_i を定数， $0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \dots$ として

$$a_n \sim a + c_1 n^{-\alpha_1} + c_2 n^{-\alpha_2} + \dots \quad (13)$$

の形や，より特殊な

$$a_n \sim a + c_1 n^{-\alpha} + c_2 n^{-2\alpha} + \dots \quad (14)$$

の形の場合には， $\tilde{a}_n = a_{2^n}$ で定義される数列 \tilde{a}_n は，(6) の型になり，Richardson 加速を適用できる．台形則をこのように加速する数値積分法は Romberg 積分の名で知られている．

Aitken 加速

式 (6) の型の数列に Richardson 加速を適用するには，収束率 λ_1 が既知である必要があるが，これが未知のときには，

$$a_n - a_{n-1} \sim \lambda_1 (a_{n-1} - a_{n-2}) \quad (15)$$

に着目して， λ_1 をその推定値

$$\hat{\lambda}_1 = (a_n - a_{n-1}) / (a_{n-1} - a_{n-2}) \quad (16)$$

で置き換えてみるのは自然であろう．このとき

$$a_n^{(1)} = \frac{a_n - \hat{\lambda}_1 a_{n-1}}{1 - \hat{\lambda}_1} = a_n - \frac{(a_n - a_{n-1})^2}{a_n - 2a_{n-1} + a_{n-2}} \quad (n \geq 2) \quad (17)$$

となるが，これを Aitken 加速と呼ぶ．

Euler 変換

例えば，交代級数

$$S_n = 1 - \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{3}} - \dots + (-1)^{n-1} \frac{1}{\sqrt{n}} \quad (18)$$

は $S = 0.60489864 \dots$ に収束するが、その収束は非常に遅くて

$$S_n \sim S + (-1)^n \left(c_1 n^{-1/2} + c_2 n^{-3/2} + c_3 n^{-7/2} + \dots \right) \quad (19)$$

のようになる。このような場合に有効な加速法として、Euler 変換が知られている。

一般に、交代級数

$$S = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k f_k \quad (20)$$

に対して、シフト演算子 E (定義: $E f_n = f_{n+1}$) と差分演算子 Δ (定義: $\Delta f_n = f_{n+1} - f_n$) を用いた形式的な変形

$$\begin{aligned} S &= (I - E + E^2 - E^3 + \dots) f_0 \\ &= (I + E)^{-1} f_0 = (2I + \Delta)^{-1} f_0 = \frac{1}{2} (I + \frac{1}{2} \Delta)^{-1} f_0 \\ &= \frac{1}{2} (I - \frac{1}{2} \Delta + \frac{1}{4} \Delta^2 - \frac{1}{8} \Delta^3 + \dots) f_0 \end{aligned} \quad (21)$$

を考えることができる。この変形を念頭において、

$$S^{(m)} = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{m-1} \left(-\frac{1}{2} \right)^l \Delta^l f_0 \quad (m = 1, 2, \dots) \quad (22)$$

を部分和にもつ級数を、 S の Euler 変換と呼ぶ。具体的には

$$S^{(1)} = \frac{1}{2} f_0, \quad (23)$$

$$S^{(2)} = \frac{1}{2} f_0 - \frac{1}{4} (f_1 - f_0), \quad (24)$$

$$S^{(3)} = \frac{1}{2} f_0 - \frac{1}{4} (f_1 - f_0) + \frac{1}{8} (f_2 - 2f_1 + f_0), \quad (25)$$

$$S^{(4)} = \frac{1}{2} f_0 - \frac{1}{4} (f_1 - f_0) + \frac{1}{8} (f_2 - 2f_1 + f_0) - \frac{1}{16} (f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0) \quad (26)$$

などとなる。普通の部分和

$$S_n = \sum_{k=0}^n (-1)^k f_k \quad (27)$$

の収束が遅い場合でも、ある程度大きい m に対して、 $S^{(m)}$ は S の十分よい近似値を与えることがある。

実際には、初めの幾つかの項の和を元の形で計算し、それ以降の級数に Euler 変換を適用する方が有効であることが知られている。初めの $n+1$ 項の和を元の形で計算して、 $n+2$ 項から m 項分 Euler 変換を施して得られる量を $T_n^{(m)}$ とする。すなわち

$$T_n^{(m)} = \sum_{k=0}^n (-1)^k f_k + (-1)^{n+1} \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{m-1} \left(-\frac{1}{2} \right)^l \Delta^l f_{n+1} \quad (28)$$

表 1: Euler 変換の加速効果

n	$T_n^{(0)} - S$	$T_n^{(1)} - S$	$T_n^{(2)} - S$	$T_n^{(3)} - S$	$T_n^{(4)} - S$	$T_n^{(5)} - S$	$T_n^{(6)} - S$	$T_n^{(7)} - S$
-1	-0.605							
0	0.395	-0.105						
1	-0.312	0.415E-1	-0.317E-1					
2	0.265	-0.233E-1	0.911E-2	-0.113E-1				
3	-0.235	0.153E-1	-0.399E-2	0.256E-2	-0.436E-2			
4	0.213	-0.110E-1	0.215E-2	-0.922E-3	0.818E-3	-0.177E-2		
5	-0.196	0.843E-2	-0.131E-2	0.421E-3	-0.251E-3	0.284E-3	-0.744E-3	
6	0.182	-0.671E-2	0.863E-3	-0.222E-3	0.994E-4	-0.757E-4	0.104E-3	-0.320E-3
7	-0.171	0.550E-2	-0.605E-3	0.129E-3	-0.463E-4	0.265E-4	-0.246E-4	0.397E-4
8	0.162	-0.461E-2	0.443E-3	-0.810E-4	0.241E-4	-0.111E-4	0.773E-5	-0.843E-5
9	-0.154	0.394E-2	-0.336E-3	0.536E-4	-0.317E-4	0.523E-5	-0.292E-5	0.240E-5
10	0.147	-0.342E-2	0.262E-3	-0.371E-4	0.827E-5	-0.271E-5	0.126E-5	-0.831E-6

とする．この量は次の漸化式によって容易に計算することができる ($T_n^{(m)}$ の三角形配列を考えるとわかり易い):

$$T_{-1}^{(0)} = 0, \quad T_n^{(0)} = \sum_{k=0}^n (-1)^k f_k, \quad T_n^{(m)} = \frac{1}{2} \left(T_n^{(m-1)} + T_{n-1}^{(m-1)} \right) \quad (m \geq 1, \quad n \geq m - 1). \quad (29)$$

式 (18) の交代級数に対して $T_n^{(m)}$ を計算すると, 表 1 のようになる．通常の部分和 $S_n = T_n^{(0)}$ に比べて, 収束が加速されていることがよく分かる．

以上 (2013-08-05)

[この資料は, 杉原正顯, 室田一雄, 数値計算法の数理, 4 章 (岩波書店, 1994) の記述に基づいて編集したものである.]