応用複素関数 第10回

～ 数値積分 (1) ～

かつらだ まさし
桂田 祐史

2020年7月15日

目次

本日の内容・連絡事項

- 体調を崩したので (多分風邪) 明日 (7 月 15 日) は質問 Zoom ミーティングを開きません。質問がある場合はメールでお願いします。
- レポート課題 3 を出すつもりですが、間に合うか自信がありません (7 月 16 日にずれ込むかもしれません)。
- 今回から 3 回 (2.5 回？) 数値積分をテーマとする。今回は数値積分についてのお話 (あまり理屈は出て来ない) で、気軽に聞けると思います。
- 授業アンケートをします。

数値積分

定積分 $I = \int_{\Omega} f(x)\,dx$ の値を数値計算で近似的に求めることを**数値積分**という。

数値積分

定積分 $I = \int_\Omega f(x)\,dx$ の値を数値計算で近似的に求めることを**数値積分**という。

導関数を知っている関数を組み合わせた関数の導関数は計算できる。原理は簡単で、効率を追求する話もある (自動微分)。

しかし積分の計算はしばしば難しい。それで数値積分の出番となる。

次元が問題

まず次元、すなわち $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ の n, あるいは f の変数の個数 $(x = (x_1, \cdots, x_n)$ の $n)$.

次元が問題

まず次元、すなわち $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ の n, あるいは f の変数の個数 ($x = (x_1, \cdots, x_n)$ の n).

1. 1 次元の場合、色々優れた公式 (後述) がある。
   次元がとても低ければ、重複積分にして、これらの公式が使えるかもしれない。

次元が問題

まず次元、すなわち $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ の n, あるいは f の変数の個数 ($x = (x_1, \cdots, x_n)$ の n).

1. 1 次元の場合、色々優れた公式 (後述) がある。
   次元がとても低ければ、重複積分にして、これらの公式が使えるかもしれない。
2. 高次元の場合、**モンテ・カルロ法**くらいしかやりようがない。
   Ω に一様分布する乱数 $x_1, \cdots, x_N$ を用いて

$$I_N := \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} f(x_k) \times (\Omega \text{ の体積})$$

で I を推定する。$f \in L^2(\Omega)$ という緩い仮定のもとで

$$\text{推定値の標準偏差} = O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

が知られている。つまり「誤差を 1 桁小さくするには、N を 100 倍にする」…

次元が問題

まず次元、すなわち $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ の n, あるいは f の変数の個数 ($x = (x_1, \cdots, x_n)$ の n).

1. 1 次元の場合、色々優れた公式 (後述) がある。
次元がとても低ければ、重複積分にして、これらの公式が使えるかもしれない。
2. 高次元の場合、**モンテ・カルロ法**くらいしかやりようがない。
Ω に一様分布する乱数 $x_1, \cdots, x_N$ を用いて

$$I_N := \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} f(x_k) \times (\Omega \text{ の体積})$$

で I を推定する。$f \in L^2(\Omega)$ という緩い仮定のもとで

$$\text{推定値の標準偏差} = O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

が知られている。つまり「誤差を 1 桁小さくするには、N を 100 倍にする」…ゾッとするほど低効率？そもそも扱っている問題が違うので比較する方がおかしい。

次元が問題

まず次元、すなわち $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ の n, あるいは f の変数の個数 ($x = (x_1, \cdots, x_n)$ の n).

1. 1 次元の場合、色々優れた公式 (後述) がある。
次元がとても低ければ、重複積分にして、これらの公式が使えるかもしれない。
2. 高次元の場合、**モンテ・カルロ法**くらいしかやりようがない。
 Ω に一様分布する乱数 $x_1, \cdots, x_N$ を用いて

$$I_N := \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} f(x_k) \times (\Omega \text{ の体積})$$

で I を推定する。$f \in L^2(\Omega)$ という緩い仮定のもとで

$$\text{推定値の標準偏差} = O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

が知られている。つまり「誤差を 1 桁小さくするには、N を 100 倍にする」…ゾッとするほど低効率？そもそも扱っている問題が違うので比較する方がおかしい。(それなのに、$n = 1, 2$ の問題をモンテ・カルロ法の例として説明することが…)

次元が問題

3. 中間の次元、1 次元の公式への帰着が難しい、モンテカルロ法の精度では不満足という場合、**準モンテカルロ法** (quasi-Monte Carlo methods), **数論的数値積分法**
杉原・室田 [1] が参考になる。
   1. low-discrepancy sequences (超一様分布列) の利用
   2. method of good lattice points (「優良格子点法」), E. Hlawka, N. M. Korobov
   $n \le 4$ 程度で使える (?)。$\Omega = [0,1]^n$ のとき
   $$I_N = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} f\left(\left[kg_1^{(N)}/N\right], \cdots, \left[kg_n^{(N)}/N\right]\right)$$
   $g_i^{(N)}$ $(i = 1, \cdots, n)$ は例えばフィボナッチ数列を用いて決める。
   3. Haselgrove 法 (Haselgrove [4], Sugihara-Murota [3])
   $$I_N = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} w_q\left(\frac{k}{N}\right) f\left(\left[k\alpha_1\right], \cdots, \left[k\alpha_n\right]\right).$$
   ここで $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ は $\mathbb{Q}$ 上 1 次独立な代数的無理数で
   $$w_q(x) := \frac{(2q+1)!}{q!q!} x^q (1-x)^q.$$

脱線: Weyl の定理

定理 (Weyl の定理)

$1, \alpha_1, \cdots, \alpha_s$ が $\mathbb{Q}$ 上 1 次独立ならば、$f \in C([0,1]^s)$ に対して

$$\int_{[0,1]^s} f(x)\, dx = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f([k\alpha_1], \cdots, [k\alpha_s]).$$

脱線: Weyl の定理

定理 (Weyl の定理)

$1, \alpha_1, \cdots, \alpha_s$ が $\mathbb{Q}$ 上 1 次独立ならば、$f \in C([0,1]^s)$ に対して

$$\int_{[0,1]^s} f(x)\,dx = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f([k\alpha_1], \cdots, [k\alpha_s]).$$

(残り時間が厳しいかもしれないが、この定理の証明をレポートするのはアリかも。Fourier 解析的。)

1 次元の公式 概観

1 次元の定積分

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

に対しては、優秀な方法が色々ある。

1 次元の公式 概観

1 次元の定積分

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

に対しては、優秀な方法が色々ある。

1. **補間型数値積分公式**
   被積分関数の**補間多項式**を用いる。
   1. 等間隔標本点 (Newton-Cotes の公式 (Newton-Cotes rules))
      (この講義では定番の中点公式, 台形公式, Simpson 公式を紹介する。)

1次元の公式 概観

1次元の定積分

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

に対しては、優秀な方法が色々ある。

1. **補間型数値積分公式**
   被積分関数の**補間多項式**を用いる。
   1. 等間隔標本点 (Newton-Cotes の公式 (Newton-Cotes rules))
      (この講義では定番の中点公式, 台形公式, Simpson 公式を紹介する。)
   2. 区間の端点近くで密な標本点
      特に直交多項式の零点を標本点とする **Gauss 型数値積分公式** ▸ Link

1次元の公式 概観

1次元の定積分

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

に対しては、優秀な方法が色々ある。

1. **補間型数値積分公式**
   被積分関数の**補間多項式**を用いる。
   1. 等間隔標本点 (Newton-Cotes の公式 (Newton-Cotes rules))
      (この講義では定番の中点公式, 台形公式, Simpson 公式を紹介する。)
   2. 区間の端点近くで密な標本点
      特に直交多項式の零点を標本点とする **Gauss 型数値積分公式** ▸ Link
2. **変数変換型数値積分公式**
   IMT 公式, 今回取り上げる **DE 公式** (double exponential formula)

補間型数値積分公式

(1) $$I_N = I_N(f) := \int_a^b f_N(x)\, dx.$$

ここで f_N は f の**補間多項式**、すなわち $\{x_j\}_{j=1}^N$ を標本点として

(2) $$f_N(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg f_N(x) \le N-1, \quad f_N(x_j) = f(x_j) \quad (j = 1, \cdots, N).$$

補間型数値積分公式

(1) $$I_N = I_N(f) := \int_a^b f_N(x)\,dx.$$

ここで f_N は f の**補間多項式**、すなわち $\{x_j\}_{j=1}^N$ を標本点として

(2) $$f_N(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg f_N(x) \le N-1, \quad f_N(x_j) = f(x_j) \quad (j=1,\cdots,N).$$

φ_j $(j=1,\cdots,N)$ を

$$\varphi_j(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg \varphi_j(x) \le N-1, \quad \varphi_j(x_k) = \delta_{jk} \quad (j,k=1,\cdots,N)$$

を満たす関数とするとき (これは一意的に存在する)、

$$f_N(x) = \sum_{j=1}^N f(x_j)\varphi_j(x)$$

と書き換えられる。

補間型数値積分公式

(1) $$I_N = I_N(f) := \int_a^b f_N(x)\,dx.$$

ここで f_N は f の**補間多項式**、すなわち $\{x_j\}_{j=1}^N$ を標本点として

(2) $$f_N(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg f_N(x) \le N-1, \quad f_N(x_j) = f(x_j) \quad (j = 1, \cdots, N).$$

φ_j $(j = 1, \cdots, N)$ を

$$\varphi_j(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg \varphi_j(x) \le N-1, \quad \varphi_j(x_k) = \delta_{jk} \quad (j, k = 1, \cdots, N)$$

を満たす関数とするとき (これは一意的に存在する)、

$$f_N(x) = \sum_{j=1}^N f(x_j)\varphi_j(x)$$

と書き換えられる。ゆえに

(3) $$I_N = \sum_{j=1}^N f(x_j) w_j, \quad w_j := \int_a^b \varphi_j(x)\,dx.$$

w_j は f によらないので、事前に求めておくことができる。

等間隔標本点による補間型数値積分公式

$N = 1$ の場合は**中点公式** (midpoint rule)

$$I_1 = I_1(f) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)h, \quad h := b - a.$$

f を定数関数で近似している。f が 1 次多項式ならば $I(f) = I_1(f)$.

等間隔標本点による補間型数値積分公式

$N = 1$ の場合は**中点公式** (midpoint rule)

$$I_1 = I_1(f) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)h, \quad h := b - a.$$

f を定数関数で近似している。f が 1 次多項式ならば $I(f) = I_1(f)$.

$N = 2$ の場合は**台形公式** (trapezoidal rule)

$$I_2 = I_2(f) = \frac{h}{2}\left(f(a) + f(b)\right), \quad h := b - a.$$

f を 1 次関数で近似している。f が 1 次多項式ならば $I(f) = I_2(f)$.

等間隔標本点による補間型数値積分公式

$N = 1$ の場合は**中点公式** (midpoint rule)

$$I_1 = I_1(f) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)h, \quad h := b - a.$$

f を定数関数で近似している。f が 1 次多項式ならば $I(f) = I_1(f)$.

$N = 2$ の場合は**台形公式** (trapezoidal rule)

$$I_2 = I_2(f) = \frac{h}{2}\left(f(a) + f(b)\right), \quad h := b - a.$$

f を 1 次関数で近似している。f が 1 次多項式ならば $I(f) = I_2(f)$.

$N = 3$ の場合は **Simpson 公式** (Simpson's rule)

$$I_3 = I_3(f) = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right), \quad h := \frac{b-a}{2}.$$

f を 2 次関数で近似している。f が 3 次多項式ならば $I(f) = I_3(f)$.

等間隔標本点による補間型数値積分公式

$N=1$ の場合は**中点公式** (midpoint rule)

$$I_1 = I_1(f) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)h, \quad h := b-a.$$

f を定数関数で近似している。f が 1 次多項式ならば $I(f) = I_1(f)$.

$N=2$ の場合は**台形公式** (trapezoidal rule)

$$I_2 = I_2(f) = \frac{h}{2}\left(f(a)+f(b)\right), \quad h := b-a.$$

f を 1 次関数で近似している。f が 1 次多項式ならば $I(f) = I_2(f)$.

$N=3$ の場合は **Simpson 公式** (Simpson's rule)

$$I_3 = I_3(f) = \frac{h}{3}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right), \quad h := \frac{b-a}{2}.$$

f を 2 次関数で近似している。f が 3 次多項式ならば $I(f) = I_3(f)$.

$N=4$ の場合は **Simpson$\frac{3}{8}$ 公式** (Simpson's 3/8 rule — 多分だれも使わない)

$$I_4 = I_4(f) = \frac{3h}{8}\left(f(a)+3f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+3f\left(\frac{a+2b}{3}\right)+f(b)\right), \quad h := \frac{b-a}{3}.$$

f を 3 次関数で近似している。f が 3 次多項式ならば $I(f) = I_4(f)$.

良くある誤解　Runge の現象

N を大きくすると良い公式になる？

良くある誤解　Runge の現象

N を大きくすると良い公式になる？**NO!**

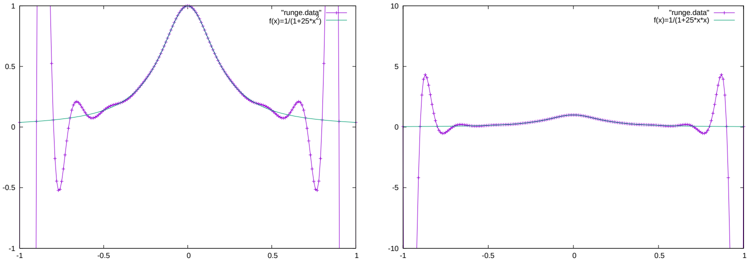
良くある誤解　Runge の現象

N を大きくすると良い公式になる？**NO!**

Runge の現象

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx, \quad f(x) = \frac{1}{1+25x^2}.$$

$[-1,1]$ を 20 等分した点を標本点にした場合 ($N = 21$)、補間多項式 f_{21} のグラフを見ると、区間の端点近くで暴れている。



f_{21} は f とは似ても似つかない。N を大きくするともっとひどくなる。

Runge の現象への対処法

大きく分けて 2 つの対処法がある。

大きく分けて 2 つの対処法がある。

(a) 区間を小区間に分割し、小区間で次数が低い多項式を用いる。(区間全体で 1 つの補間多項式を使うことはあきらめる)。あちこちで顔を出す。
- **スプライン近似**
- 有限要素法の**有限要素空間** (近似解、試験関数の属する空間)
- 数値積分の**複合数値積分公式**

Runge の現象への対処法

大きく分けて 2 つの対処法がある。

(a) 区間を小区間に分割し、小区間で次数が低い多項式を用いる。
(区間全体で 1 つの補間多項式を使うことはあきらめる)。
あちこちで顔を出す。

- **スプライン近似**
- 有限要素法の**有限要素空間** (近似解、試験関数の属する空間)
- 数値積分の**複合数値積分公式**

(b) **直交多項式**の根を標本点とする補間多項式を利用する。
(直交多項式の根は、区間の端点の近くに密集している。)

- **Gauss 型数値積分公式**
n 次の公式で、$2n-1$ 次の多項式の積分を誤差なく計算できる。

複合数値積分公式

- 複合中点公式 ($[a, b]$ を N 等分して、各小区間で中点公式を用いる。)

$$(4) \qquad M_N := h \sum_{j=1}^{N} f\left(a + \frac{j-1}{2} h\right), \quad h := \frac{b-a}{N}.$$

- 複合台形公式 ($[a, b]$ を N 等分して、各小区間で台形公式を用いる。)

$$(5) \qquad T_N := h\left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(a + jh) + \frac{1}{2} f(b)\right), \quad h := \frac{b-a}{N}.$$

- 複合 Simpson 公式 ($[a, b]$ を m 等分して、$[a_j, b_j]$ で Simpson 公式を使う。)

$$(6) \quad S_{2m} = \frac{h}{3}\left(f(a) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(a + 2jh) + 4\sum_{j=1}^{m} f(a + (2j-1)h) + f(b)\right),$$

$$h := \frac{b-a}{2m}.$$

普通は「複合」を省略して、それぞれ単に「中点公式」、「台形公式」、「Simpson 公式」と呼ぶ。「公式」のところを「則」という人もいる。

見てみよう (百聞は一見にしかず)

C 言語によるサンプル・プログラムを用意した。次のようにしてネット経由でダウンロードしてコンパイル&実行してみよう。

Mac のターミナルで以下の 4 つのコマンドを実行

```
curl -O http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/complex2/prog20200715.tar.gz
tar xzf prog20200715.tar.gz
cd prog20200715
make
```

- `curl -O` *URL* は、ファイルをインターネット経由で入手するコマンド。
- `.tar.gz` は、`tar` で複数のファイルを 1 つのアーカイブ・ファイルにまとめ、`gzip` で圧縮したファイルの拡張子である。復元するには `tar xzf` ファイル名 とする。
- `prog20200715` というディレクトリィが現れるので、そこに cd (change directory) する。
- `make` する (`Makefile` に記述した指示に従って、コンパイルなどの作業を行う)。今回は、いくつかの C のプログラムをコンパイルして、実行する。

→ 画面に色々なグラフが出て来るはず。

滑らかな関数の場合

$I = \int_0^1 e^x \, dx$ を中点公式, 台形公式, Simpson 公式で計算すると

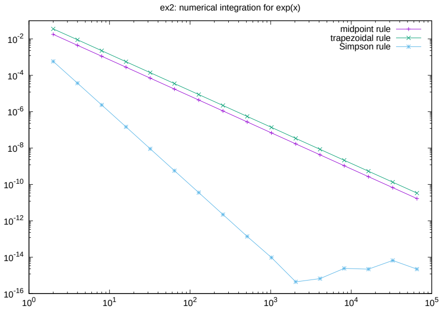


Figure: 横軸は $N = 2, 4, \cdots, 2^{16} = 65536$, 縦軸は誤差 (両軸とも対数目盛)

誤差は、中点公式, 台形公式では $O\left(\frac{1}{N^2}\right)$, Simpson 公式では $O\left(\frac{1}{N^4}\right)$.

用語紹介 (m 位の公式) と余談

数値積分公式が m 位の公式 (m 次の精度) であるとは、関数 f の数値積分公式の誤差を $E(f)$ と書くとき

$$E(x^k) = 0 \quad (k = 0, 1, \cdots, m), \quad E(x^{m+1}) \neq 0$$

が成り立つことをいう。(m 次多項式の積分が誤差なく計算できる。)

用語紹介 (m 位の公式) と余談

数値積分公式が m 位の公式 (m 次の精度) であるとは、関数 f の数値積分公式の誤差を $E(f)$ と書くとき

$$E(x^k) = 0 \quad (k = 0, 1, \cdots, m), \quad E(x^{m+1}) \neq 0$$

が成り立つことをいう。(m 次多項式の積分が誤差なく計算できる。)

滑らかな関数の定積分を m 位の数値積分公式で計算したときの誤差は、$O\left(\frac{1}{N^{m+1}}\right)$ となる。

用語紹介 (m 位の公式) と余談

数値積分公式が m 位の公式 (m 次の精度) であるとは、関数 f の数値積分公式の誤差を $E(f)$ と書くとき

$$E(x^k) = 0 \quad (k = 0, 1, \cdots, m), \quad E(x^{m+1}) \neq 0$$

が成り立つことをいう。(m 次多項式の積分が誤差なく計算できる。)

滑らかな関数の定積分を m 位の数値積分公式で計算したときの誤差は、$O\left(\frac{1}{N^{m+1}}\right)$ となる。

実は、中点公式 ($N = 1$) と台形公式 ($N = 2$) は、ともに 1 位の公式で、Simpson 公式 ($N = 3$) は 3 位の公式である。

用語紹介 (m 位の公式) と余談

数値積分公式が m 位の公式 (m 次の精度) であるとは、関数 f の数値積分公式の誤差を $E(f)$ と書くとき

$$E(x^k) = 0 \quad (k = 0, 1, \cdots, m), \quad E(x^{m+1}) \neq 0$$

が成り立つことをいう。(m 次多項式の積分が誤差なく計算できる。)

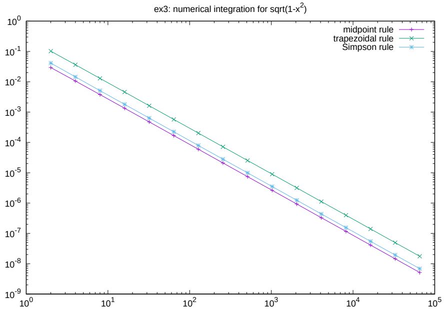
滑らかな関数の定積分を m 位の数値積分公式で計算したときの誤差は、$O\left(\frac{1}{N^{m+1}}\right)$ となる。

実は、中点公式 ($N = 1$) と台形公式 ($N = 2$) は、ともに 1 位の公式で、Simpson 公式 ($N = 3$) は 3 位の公式である。

(一般化できて) N 個の標本点を使う $N-1$ 次の補間多項式で作った数値積分公式は、少なくとも $N-1$ 位であるが、実は N が奇数のときは N 位の公式である。

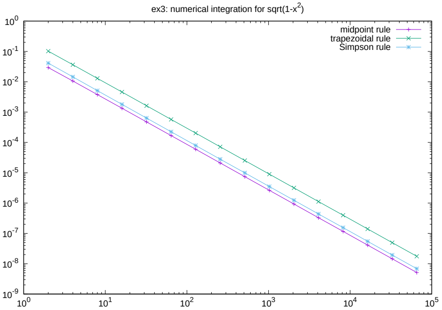
滑らかでない関数の場合

$I = \int_0^1 \sqrt{1-x^2}\,dx$ を中点公式, 台形公式, Simpson 公式で計算すると



滑らかでない関数の場合

$I = \int_0^1 \sqrt{1-x^2}\,dx$ を中点公式, 台形公式, Simpson 公式で計算すると



連続ではあるが、滑らかではない関数 (実際 $x = 1$ で微分可能でない) に対しては、誤差は N の増加とともに減少する (0 に近く) が、滑らかの被積分関数の場合と比べると遅い。

また、中点公式, 台形公式, Simpson 公式で差が出ない。高次の公式の優位性はない。

滑らかな関数 vs 滑らかでない関数

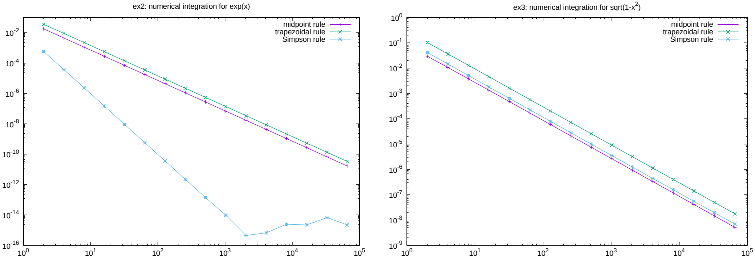
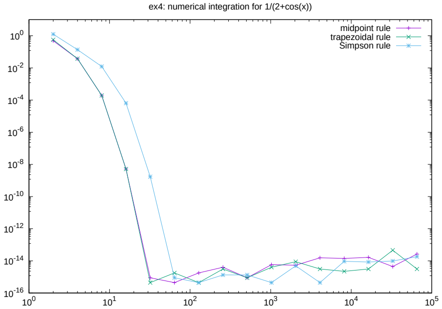


Figure: $\displaystyle\int_0^1 e^x\,dx$ と $\displaystyle\int_0^1 \sqrt{1-x^2}\,dx$ の数値積分の結果

不思議な好結果 (1) 滑らかな周期関数の周期積分

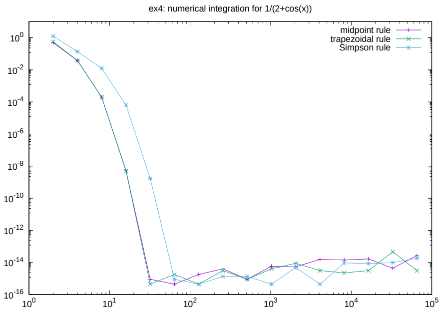
$$I = \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2+\cos x} \quad \left(= \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right)$$ を中点公式, 台形公式, Simpson 公式で計算すると



$N = 32$ で中点公式、台形公式、Simpson 公式の誤差は、それぞれ 4.44×10^{-16}, -1.78×10^{-16}, 1.70×10^{-9}.

不思議な好結果 (1) 滑らかな周期関数の周期積分

$I = \displaystyle\int_0^{2\pi} \frac{dx}{2+\cos x} \quad \left(= \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right)$ を中点公式, 台形公式, Simpson 公式で計算すると



$N = 32$ で中点公式、台形公式、Simpson 公式の誤差は、それぞれ 4.44×10^{-16}, -1.78×10^{-16}, 1.70×10^{-9}.

C 言語処理系の double 型は 10 進法に換算して 16 桁弱の精度なので、(わずか) $N = 32$ の台形公式で満足すべき結果を言える。

台形公式について細かい注意

台形公式の定義式は

$$T_N = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(a+jh) + \frac{1}{2}f(b)\right), \quad h := b - a$$

であったが、周期関数の周期積分の場合は $f(a) = f(b)$ が成り立つので

台形公式について細かい注意

台形公式の定義式は

$$T_N = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(a+jh) + \frac{1}{2}f(b)\right), \quad h := b-a$$

であったが、周期関数の周期積分の場合は $f(a) = f(b)$ が成り立つので

$$T_N = h\sum_{j=1}^{N} f(a+jh) = h\sum_{j=0}^{N-1} f(a+jh) \quad (\text{長方形公式？}).$$

台形公式について細かい注意

台形公式の定義式は

$$T_N = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{N-1} f(a+jh) + \frac{1}{2}f(b)\right), \quad h := b - a$$

であったが、周期関数の周期積分の場合は $f(a) = f(b)$ が成り立つので

$$T_N = h\sum_{j=1}^{N} f(a+jh) = h\sum_{j=0}^{N-1} f(a+jh) \quad (\text{長方形公式？}).$$

一方、中点公式は

$$M_N = h\sum_{j=1}^{N} f(a+(j-1/2)h)$$

であった。周期関数の周期積分については、どちらも N 等分点での被積分関数の値の和に h をかけたものである ($h/2$ ずれているけれど)。その意味では台形公式と中点公式には、本質的な違いはないことが分かる。

不思議な好結果 (2)　$x \to \pm\infty$ での減衰の速い解析関数の $\mathbb{R}$ 上の積分

$I = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx$ に対して、$h > 0$, $N \in \mathbb{N}$ を適当にえらんで

$$I_h := h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh), \quad I_{h,N} := h \sum_{n=-N}^{N} f(nh)$$

とおく。I_h, $I_{h,N}$ も**台形公式**と呼ばれる。

不思議な好結果 (2)　$x \to \pm\infty$ での減衰の速い解析関数の $\mathbb{R}$ 上の積分

$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, dx$ に対して、$h > 0$, $N \in \mathbb{N}$ を適当にえらんで

$$I_h := h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh), \quad I_{h,N} := h \sum_{n=-N}^{N} f(nh)$$

とおく。I_h, $I_{h,N}$ も**台形公式**と呼ばれる。

ガウス積分 $I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, dx (= \sqrt{\pi})$ について

N	h	$I - I_{h,N}$
6	1	-1.833539e-04
12	0.5	-2.220446e-16
24	0.25	-4.440892e-16

$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx$ に対して、$h>0$, $N \in \mathbb{N}$ を適当にえらんで

$$I_h := h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh), \quad I_{h,N} := h \sum_{n=-N}^{N} f(nh)$$

とおく。I_h, $I_{h,N}$ も**台形公式**と呼ばれる。

ガウス積分 $I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,dx (= \sqrt{\pi})$ について

N	h	$I - I_{h,N}$
6	1	-1.833539e-04
12	0.5	-2.220446e-16
24	0.25	-4.440892e-16

(おおざっぱに言って $x \in [-6,6]$ の範囲を計算したことになっている。$x = \pm 6$ のとき $e^{-x^2} \fallingdotseq 2.3 \times 10^{-16}$ で、すでに十分小さい。)

$N = 12$ (25 個の標本点) で、満足行く精度の近似値 (ほぼ処理系の浮動小数点数の精度一杯) が得られている。

次回 (以降) 予告

- 最後に紹介した不思議な好結果を利用しようと考えて得られた数値積分公式がある。そのうち **DE 公式** (二重指数関数型数値積分公式) を紹介する。
  DE 公式を用いると、$\displaystyle\int_{-1}^{1}\sqrt{1-x^2}\,dx$ や $\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$ もうまく計算できる。
- 数値積分公式の性能を、複素関数論を用いて調べる**高橋・森の方法**を紹介する。それを使って
  - 数値積分公式の性能・性質を可視化する。
  - 不思議な好結果の理由を説明する。
  - DE 公式の優秀性を理解する。

おまけ: Gauss 型数値積分公式

この型の数値積分公式を考えるときは、考える定積分を

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

の形のものにするのが普通である。w は重み関数と呼ばれる非負関数である。

1, x, x^2, $\cdots$ を内積

$$\langle \varphi, \psi \rangle := \int_a^b \varphi(x)\psi(x)w(x)\,dx$$

について直交化して直交関数系 $\{P_n(x)\}_{n\geq 0}$ を作る。

n 次多項式 $P_n(x)$ の零点 $\{x_j\}_{j=1}^n$ を標本点に採用すると、非常に高性能 ($2n-1$ 次の多項式に対して真の値) の公式が得られる。

参考文献

私はモンテカルロ法については、ほとんど何も知らないので、参考書の紹介は差し控える。

数値積分について詳しいテキストとしては、杉原・室田 [1] をお勧めする。(以下は関数論としては脱線かもしれないが) Haselgrove の方法は、杉原・室田両氏の論文 [3] で、とても使いやすく改良された。

- 杉原, 室田, 数値計算法の数理, 岩波書店 (1994).
- 数論の応用, 数学セミナー, 1984 年 11 月号, 12 月号 (pp. 90–96).
- Masaaki Sugihara and Kazuo Murota, A Note on Haselgrove's Method for Numerical Integration, Mathematics of Computation, Vol. 39, No. 160, pp. 549–554 (1982).
- C. B. Haselgrove, A Method for Numerical Integration, Mathematics of Computation, Vol. 15, No. 76, pp. 323–337 (1961).