

応用複素関数 第 11 回

～ 数値積分 (2) ～

かつらだ まさし
桂田 祐史

2020 年 7 月 22 日

1 本日の内容・連絡事項

2 数値積分 (続き)

● 二重指数関数型数値積分公式 (DE 公式)

- 変数変換型数値積分公式
- 二重指数関数型数値積分公式の紹介
- サンプル・プログラムの入手・実行

● DE 公式の数値例 (1) $\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} dx$ に再挑戦

● DE 公式の数値例 (2) $\int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$

● 関数論を用いた数値積分の誤差解析

- 特性関数
- 誤差の特性関数ギャラリー (1) 複合 Simpson 公式
- 誤差の特性関数ギャラリー (2) 8 次 Gauss-Legendre 公式

3 参考文献

- いよいよ授業は今回を含め残り2回。今回は、**二重指数関数型数値積分公式** (Mathematicaにも採用されている優秀な数値積分公式) と、**関数論を用いた数値積分の誤差解析手法**を紹介します。関数論の意外な活躍が見られるところです。残りの時間でうまく説明できるかどうか少し心配ですが、多分当初予定していた内容は講義できることになりそうです。
- レポートについて
 - レポート課題3 締め切り 8月1日 (提出は8月2日 0:30)
注意 レポート課題1, 2を提出した人は提出する必要はない。
 - 期末レポート課題 (“レポート課題ABC”) 締め切り 7月31日と宣言したつもりで、そう書いてあるところもありますが、Oh-o! Meijiで8月8日 0:30となっていました。今さら訂正はしませんが、出来れば7月中に提出してもらえると嬉しいです。
- 授業アンケートをします。

二重指数関数型数値積分公式 (DE 公式)

変数変換型数値積分公式

与えられた定積分 $\int_a^b f(x) dx$ を前回紹介した

Ⓐ 滑らかな周期関数の周期にわたる積分 $\int_0^T f(x) dx$ (台形公式)

$$T_N = h \sum_{j=0}^{N-1} f(jh), \quad h := T/N \text{ を適用}$$

Ⓑ $x \rightarrow \pm\infty$ のときの減衰の速い解析的な関数 f の \mathbb{R} 上の積分 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$

$$\text{(台形公式 } I_{h,N} := h \sum_{n=-N}^N f(nh) \text{ を適用)}$$

などの非常にうまく行く場合に変数変換で直して、それから数値積分する、というアイデアが提出された (1970 年頃)。

IMT 公式 (伊理・森口・高澤 1970 年) は、(A) に帰着させるものである。

二重指数関数型数値積分公式 (double exponential formula, 高橋・森 1974 年) は、(B) に帰着させるものである。

二重指数関数型数値積分公式の紹介

高橋・森は以下のような数値積分公式を提案した。解析関数 f の定積分

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx$$

に対して

$$(1) \quad x = \varphi_1(t) := \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right) \quad (t \in \mathbb{R})$$

により変数変換 (置換積分) をする。

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varphi_1(t)) \varphi_1'(t) dt.$$

この I に対して、前回紹介したような台形公式を適用する。

$$I_{h,N} = h \sum_{n=-N}^N f(\varphi_1(nh)) \varphi_1'(nh) \quad (h > 0, N \in \mathbb{N}).$$

この公式を**二重指数関数型数値積分公式** (double exponential formula) と呼ぶ。以下では、**DE 公式**と呼ぶことにする。

二重指数関数型数値積分公式の紹介 (続き)

高橋・森は、 φ_1 が (ある定数 C に対して)

$$(2) \quad |f(\varphi_1(t))\varphi_1'(t)| \sim \exp(-C \exp|t|) \quad (t \rightarrow \pm\infty)$$

を満たすように選んだ。高橋・森の誤差解析手法に基づき、ある種の最適性があると判断したためという。これが「二重指数関数型数値積分公式」という名前の由来である。

上では積分区間が $[-1, 1]$ の場合を説明したが、一般の有界閉区間上の積分 $\int_a^b f(u) du$ の場合は、変数変換 $u = a + \frac{b-a}{2}(x+1)$ ($x \in [-1, 1]$) を利用すれば良い。

非有界区間の定積分 $I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ (f の減衰が遅い場合),
 $I = \int_0^{\infty} f(x) dx$ などについても、(2) が成り立つような具体的な変数変換 $x = \varphi(t)$ ($t \in \mathbb{R}$) が提案されている。

サンプル・プログラムの入手・実行

前回 (7月15日) の授業の指示にしたがってサンプル・プログラムを入手した人は、既に DE 公式のサンプル・プログラムを持っている。

再録: 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
```

以上をしてあれば (同じディレクトリで)

```
./example6
./example6kai
```

とすれば良い。

DE 公式の数値例 (1) $\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} dx$ に再挑戦

中点公式、台形公式、Simpson 公式でうまく計算できなかった (open ex3.png で見られる) $I = \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} dx (= \pi/2)$ を DE 公式で積分すると

```
% ./example6
DE 公式による数値積分
test1 (sqrt(1-x^2) の積分)
h=1.000000, N= 3, I_hN= 1.7125198292703636, I_hN-I=1.417235e-01
h=0.500000, N= 6, I_hN= 1.5709101233831166, I_hN-I=1.137966e-04
h=0.250000, N= 12, I_hN= 1.5707963267997540, I_hN-I=4.857448e-12
h=0.125000, N= 24, I_hN= 1.5707963267948970, I_hN-I=4.440892e-16
```

(後略)

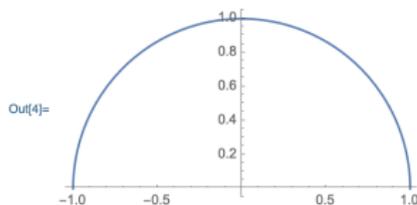
$N = 24$ (49 項) のときに、使用している浮動小数点数 (10 進 16 桁弱) の精度の近似値が得られた (実は $N = 18$ で $I - I_{h,N} \approx 2.22 \times 10^{-16}$)。

DE 公式の数値例 (1) 変数変換後の被積分関数のグラフ

```
In[1]:= f[x_] := Sqrt[1 - x^2]
          平方根
```

```
In[2]:= phi1[t_] := Tanh[Pi / 2 Sinh[t]]
          双曲正切関数 円周率 双曲線正弦
```

```
In[4]:= g1 = Plot[f[x], {x, -1, 1}, AspectRatio -> Automatic]
          プロット 縦横比 自動
```



```
In[6]:= g2 = Plot[f[phi1[t]] * phi1'[t], {t, -3, 3}, AspectRatio -> Automatic]
          プロット 縦横比 自動
```

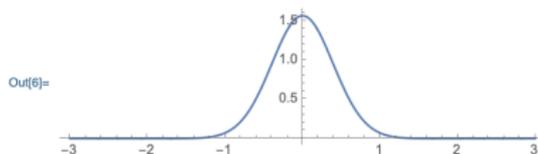


Figure: $f(x) = \sqrt{1-x^2}$ と $f(\varphi_1(t))\varphi_1'(t)$ のグラフ

直観的に分かる？

DE 公式の数値例 (2) $\int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$

驚くべきことに広義積分 $\int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} (= \pi)$ (端点で分母が 0) を計算できる。

example6 の test 2 では、 $N = 6$, $h = 1/2$ のとき、誤差が 1.8×10^{-8} という結果が得られる。 N を大きくしてもそれ以上精度が改善されないが、それはいわゆる**桁落ち現象**による ($x = \pm 1$ のとき $1 - x^2$ の有効桁がたくさん失われる)。

桁落ちが起こらない工夫をした example6kai の計算結果は次のようになる。

```
% ./example6kai
```

(中略)

test2 (1/sqrt(1-x^2) の (-1,1) での積分)

h=1.000000, N= 4, I_hN= 3.1435079789309328, I_hN-I=1.915325e-03

h=0.500000, N= 8, I_hN= 3.1415926733057051, I_hN-I=1.971591e-08

h=0.250000, N= 16, I_hN= 3.1415926535897940, I_hN-I=8.881784e-16

$N = 16$ (33 項) で、誤差が 10^{-15} を下回っている。満足すべき結果である。

DE 公式の数値例 (2) 変数変換後の被積分関数のグラフ

```
In[9]:= f2[x_] := 1 / Sqrt[1 - x ^ 2]
```

[平方根]

```
In[10]:= g3 = Plot[f2[phi1[t]] * phi1'[t], {t, -3, 3}, AspectRatio -> Automatic]
```

[プロット]

[縦横比]

[自動]

Out[10]=

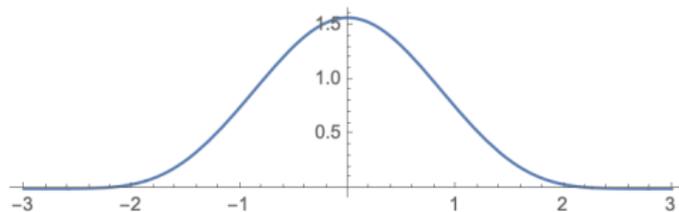


Figure: $f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ の場合の $f(\varphi_1(t))\varphi_1'(t)$ のグラフ

ゆっくり考えてみることを勧める

この後どこに向かうか

前回の最後に紹介した「不思議な好結果」は、特殊なケースに限られて、実際の役には立たないように思えたかもしれない。しかし、色々な定積分が、二重指数関数型変数変換によって、「不思議な好結果」をもたらす定積分に変換できることが分かった。

こうなると

なぜ(不思議なくらい)好結果をもたらすか？

知りたくなる。

この講義に残された時間は少ないが、高橋・森の誤差解析手法の門をくぐってみよう。

$-\infty \leq a < b \leq \infty$, D は \mathbb{C} の開集合, $\overline{(a, b)} \subset D$, $p: (a, b) \rightarrow (0, \infty)$, $f: D \rightarrow \mathbb{C}$ は正則とするととき、次の定積分を考える。

$$(3) \quad I = \int_a^b f(x)p(x) dx.$$

数値積分公式は色々あるけれど、大抵は次の形をしている。

$$(4) \quad I_n = \sum_{k=1}^n f(x_k)w_k.$$

ここで $\{x_k\}_{k=1}^n \subset \overline{(a, b)}$, $w_k \in \mathbb{R}$ ($1 \leq k \leq N$).

Γ を D 内の曲線で $\overline{(a, b)}$ を正の向きに一周するとする。Cauchy の積分公式が成り立つ:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f(z)}{z-x} dz.$$

関数論を用いた数値積分の誤差解析 特性関数 (2/5)

定積分 (3) の $f(x)$ を Cauchy の積分公式で置き換えて、積分順序を交換すると

$$I = \int_a^b \left(\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f(z)}{z-x} dz \right) p(x) dx = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z) \left(\int_a^b \frac{p(x)}{z-x} dx \right) dz.$$

$$\Psi(z) := \int_a^b \frac{p(x)}{z-x} dx$$

で Ψ を定義すると、

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z) \Psi(z) dz.$$

この Ψ は $\mathbb{C} \setminus [a, b]$ で正則である (積分記号下の微分が正当化できる)。特に重み関数 $p(x) \equiv 1$ のときは

$$\Psi(z) = \int_a^b \frac{dx}{z-x} = \text{Log} \frac{z-a}{z-b} \quad (z \in \mathbb{C} \setminus [a, b]).$$

ただし Log は対数関数の主値とする。

関数論を用いた数値積分の誤差解析 特性関数 (3/5)

一方、数値積分公式 (4) の $f(x_k)$ を Cauchy の積分公式で置き換えて、 \int と \sum の順番を交換すると

$$I_n = \sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f(z)}{z - x_k} dz \right) w_k = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z) \left(\sum_{k=1}^n \frac{w_k}{z - x_k} \right) dz.$$

$$\Psi_n(z) := \sum_{k=1}^n \frac{w_k}{z - x_k}$$

とおくと

$$I_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z) \Psi_n(z) dz.$$

ゆえに

$$\Phi_n(z) := \Psi(z) - \Psi_n(z).$$

とおくと

$$I - I_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \Phi_n(z) f(z) dz.$$

$$(5) \quad I = \int_a^b f(x)p(x) dx = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z)\Psi(z) dz,$$

$$(6) \quad I_n = \sum_{k=1}^n f(x_k)w_k = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z)\Psi_n(z) dz,$$

$$(7) \quad I - I_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z)\Phi_n(z) dz.$$

ただし

$$(8) \quad \Psi(z) := \int_a^b \frac{p(x)}{z-x} dx,$$

$$(9) \quad \Psi_n(z) := \sum_{k=1}^n \frac{w_k}{z-x_k},$$

$$(10) \quad \Phi_n(z) := \Psi(z) - \Psi_n(z)$$

Ψ_n を数値積分公式の**特性関数**, Φ_n を数値積分公式の**誤差の特性関数**という。

高橋・森による数値積分の誤差解析 (5/5)

もし $|\Phi_n|$ が小さければ

$$|I - I_n| \leq \max_{z \in \Gamma^*} |f(z)| \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} |\Phi_n(z)| |dz|$$

と評価して、数値積分の誤差が小さいことが結論できそうである。

誤差の特性関数 Φ_n は個々の f によらない。したがって、個々の計算の良し悪しでなく、**数値積分公式そのものの良し悪しが直接的に調べられる**かもしれない。

実際、高橋・森は、 \mathbb{C} 内の $[a, b]$ を含む領域で、 $|\Phi_n|$ の値を等高線表示して調べることで、数値積分公式の解析を行い、二重指数関数型変数変換を発見した。

Simpson 公式と Gauss-Legendre 公式の誤差の特性関数を見てみよう。

誤差の特性関数ギャラリー (1) 複合 Simpson 公式

$[a, b] = [-1, 1]$, $p(x) = 1$ の場合の 21 点複合 Simpson 公式 S_{20}

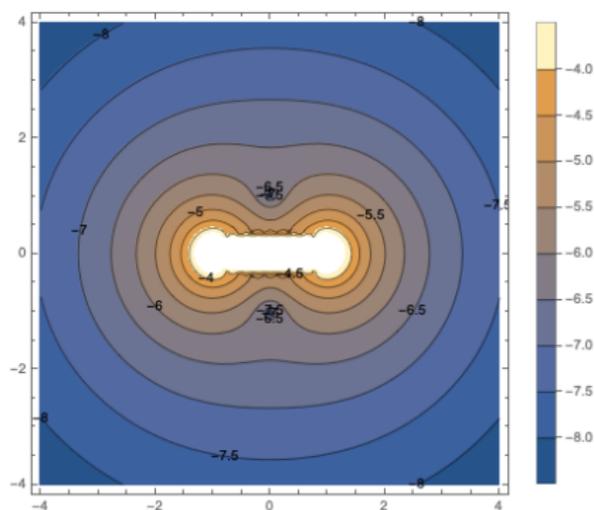


Figure: 21 点複合 Simpson 公式の誤差の特性関数 (絶対値の常用対数)

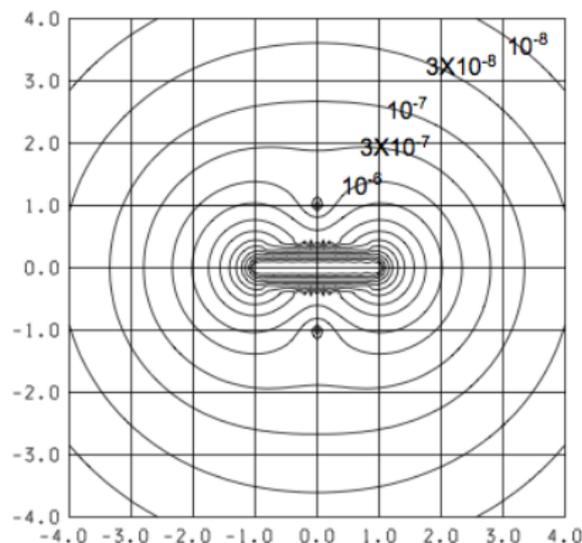


Figure: 森 [4] から $|\Phi_n(z)|$ for Simpson's formula ($h = 0.1$)

誤差の特性関数ギャラリー (1)

$$a = -1, \quad b = 1, \quad m = 10, \quad h = \frac{b-a}{2m}, \quad x_j = a + jh \quad (j = 0, 1, \dots, 2m),$$

$$w_0 = w_{2m} = \frac{h}{3}, \quad w_{2j} = \frac{2h}{3} \quad (j = 1, 2, \dots, m-1), \quad w_{2j-1} = \frac{4h}{3} \quad (j = 1, 2, \dots, m),$$

$$\Phi_{2m+1}(z) = \text{Log} \frac{z-a}{z-b} - \sum_{k=0}^{2m} \frac{w_k}{z-x_k}.$$

21 点複合 Simpson 公式の誤差の特性関数の描画 (Mathematica プログラム)

```
Clear[a, b, m, n, h, xs, w, Psi, Phi]
a = -1; b = 1; m = 10; n = 2 m + 1; h = (b - a)/(2 m);
xs[j_] := x[j] = a + j*h
Table[xs[j], {j, 0, 2 m}]
w[0] = h/3.0; w[2 m] = h/3.0;
w[k_] := w[k] = If[EvenQ[k], 2 h/3.0, 4 h/3.0]
Table[w[k], {k, 1, 2 m - 1}]
Psi[z_] = Sum[w[k]/(z - xs[k]), {k, 0, 2 m}]
Phi[z_] := Log[(z - a)/(z - b)] - Psi[z]
g1=ContourPlot[Log10[Abs[Phi[x + I y]]], {x,-4,4}, {y,-4,4},
  PlotLegends -> Automatic,ContourLabels -> True]
g2=Plot3D[Log10[Abs[Phi[x+I y]]], {x,-4,4}, {y,-4,4}, PlotRange -> All]
```

誤差の特性関数ギャラリー (2) 8次 Gauss-Legendre 公式

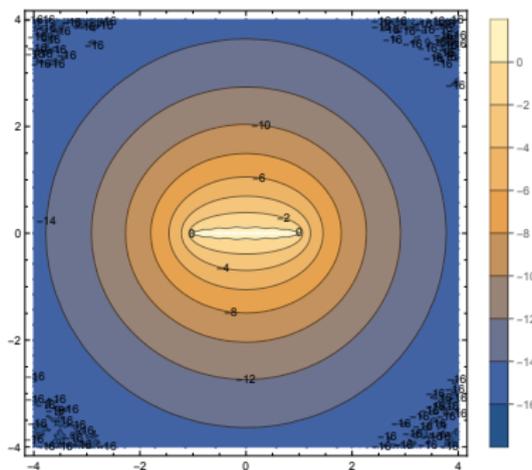


Figure: 8次 Gauss-Legendre 公式の誤差の特性関数 (絶対値の常用対数)

8次の Gauss-Legendre 公式は、 $n = 8$ 次の直交多項式の 8 個の零点を標本点に使い、 $2n - 1 = 15$ 次までの多項式について正確な積分を計算できる。つまり 15 位の公式である。

実際 $|\Phi(z)| = 10^{-16}$ の曲線が見え、21 点 Simpson 公式よりも格段に誤差の特性関数の値が小さいこと (8 桁下、つまり 1 億分の 1) が分かる。

誤差の特性関数ギャラリー (2) 8次 Gauss-Legendre 公式

$P_n(x)$ を n 次 Legendre 多項式とする。

$$a = -1, \quad b = 1, \quad w(x) = 1, \quad n = 8,$$

$$\{x_k\}_{k=1}^n = P_n(x) \text{ の根,}$$

$$w_k = \frac{2}{nP_{n-1}(x_k)P'_n(x_k)} = \frac{2(1-x_k^2)}{(nP_{n-1}(x_k))^2},$$

$$\Phi_n(z) = \text{Log} \frac{z-a}{z-b} - \sum_{k=1}^n \frac{w_k}{z-x_k}.$$

8 次 Legendre-Gauss 公式の誤差の特性関数の描画 (Mathematica プログラム)

```
Clear[a,b,n,ndigits,x,xs,ws,Psi,Phi]
a=-1; b=1; n=8; ndigits=30;
xs=x/.NSolve[LegendreP[n,x]==0,x,ndigits];
ws=Table[2(1-xs[[k]]^2)/(n LegendreP[n-1,xs[[k]])^2,{k,1,n}];
Psi[z_]=Sum[ws[[k]]/(z-xs[[k]]),{k,1,n}];
Phi[z_]:=Log[(z-a)/(z-b)]-Psi[z];
g1=ContourPlot[Log10[Abs[Phi[x+I y]]],{x,-4,4},{y,-4,4},
  PlotLegends->Automatic,ContourLabels -> True]
g2=Plot3D[Log10[Abs[Phi[x+I y]]], {x,-4,4}, {y,-4,4}, PlotRange -> All]
```

参考文献

森 [2] は、DE 公式の提唱者の 1 人である森先生による数値解析のテキストである。数値積分に詳しい。

高橋・森理論の入門的な部分は、関数論のテキストである一松 [3] の説明が分かりやすい。参考にさせていただいた。

高橋・森は数値積分の誤差解析手法を創案し、それを用いて DE 公式の研究をしたが、DE 公式の理論的誤差解析は杉原正顯氏の業績が大きい。[1] はまず参照すべき文献である。

 杉原 正顯, 室田 一雄, 数値計算法の数理, 岩波書店 (1994).

 森 ^{まさたけ} 正 武, 数値解析, 共立出版 (第 1 版 1973 年, 第 2 版 2002/2/25).

 一松 ^{しん} 信, 留数解析 — 留数による定積分と級数の計算, 共立出版 (1979).

 Masatake Mori, Discovery of the Double Exponential Transformation and Its Developments, Publ. RIMS, Kyoto Univ., Vol. 41, pp. 897–935 (2005), "http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~okamoto/paper/Publ_RIMS_DE/41-4-38.pdf" で入手可能.