

応用複素関数 第13回

～ 数値積分 (3) ～

かつらだ まさし
桂田 祐史

2021年7月13日

目次

① 本日の内容・連絡事項

② 数値積分 (続き)

- 関数論を用いた数値積分の誤差解析 (続き)
 - 無限区間の台形公式 I_h の誤差の特性関数
 - 台形公式 I_h の誤差解析
 - 台形公式 $I_{h,N}$ の誤差解析 — DE 公式に向けて
 - むすび

③ 付録: Euler-Maclaurin の定理

④ 参考文献

- 講義内容: \mathbb{R} 上の解析関数の積分に対する台形公式 $I_h, I_{h,N}$ の誤差解析 (DE 公式に向けて) …… かなりのスピードで駆け抜けます。
- レポートについて
 - レポート課題 3 締め切り 7 月 31 日 23:00
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 23:00.
前回 7 月 27 日と言いましたが、公開が遅れたため、ずらします。
- 数値積分は今回でおしまい。次回 (最終回) は「佐藤超関数の紹介」です。

前回の復習: 高橋・森 [1], [2] の関数論を用いた数値積分公式の誤差解析

$a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, その他いくつかの仮定のもと

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

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

$$(3) \quad I - I_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z)\Phi_n(z) dz.$$

ただし

$$(4) \quad \Psi(z) := \int_a^b \frac{p(x)}{z-x} dx,$$

$$(5) \quad \Psi_n(z) := \sum_{k=1}^n \frac{w_k}{z-x_k},$$

$$(6) \quad \Phi_n(z) := \Psi(z) - \Psi_n(z).$$

Ψ_n を数値積分公式 I_n の特性関数, Φ_n を数値積分公式 I_n の誤差の特性関数という。

5.11.3 無限区間の台形公式 I_h の誤差の特性関数 (1)

$$(7) \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$$

に対する台形公式 (ただし無限和バージョン)

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh)$$

の特性関数はどうなるだろうか? (今回は積分区間が有界区間 (a, b) である場合の数値積分公式を調べた。それとは随分様子が違っている。)

$x_n = nh$, $w_n = h$ ($n \in \mathbb{Z}$) だから、積分公式の特性関数は形式的には

$$\Psi_h(z) \stackrel{?}{=} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{w_n}{z - x_n} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{h}{z - nh}.$$

この級数は見覚えがある。これは収束しないが、次のように修正すれば収束する (第2回授業)。

$$(8) \quad \Psi_h(z) := \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \frac{h}{z - nh} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \frac{1}{(z/h) - n} = \pi \cot \frac{\pi z}{h}$$

5.11.3 無限区間の台形公式 I_h の誤差の特性関数 (2)

一方、 Ψ については、有界区間 (a, b) , $p(x) = 1$ の場合の $\text{Log} \frac{z-a}{z-b}$ の極限

$$(9) \quad \Psi(z) = \lim_{R \rightarrow \infty} \text{Log} \frac{z - (-R)}{z - R} = \begin{cases} -i\pi & (\text{Im } z > 0) \\ +i\pi & (\text{Im } z < 0) \end{cases}$$

を採用すると良い。

実際、 f が、ある $d > c$ について $D(d) := \{z \in \mathbb{C} \mid |\text{Im } z| < d\}$ で正則と仮定すると

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_c} f(z) \Psi(z) dz.$$

ただし c は正の数で、

$$\Gamma_c := \Gamma_c^- - \Gamma_c^+, \quad \Gamma_c^- : z = x - ic \quad (x \in \mathbb{R}), \quad \Gamma_c^+ : z = x + ic \quad (x \in \mathbb{R}).$$

ゆえに

$$(10) \quad I - I_h = \int_{\Gamma_c} f(z) \Phi_h(z) dz, \quad \Phi_h(z) := \Psi(z) - \Psi_h(z).$$

誤差の特性関数 $|\Phi_h(z)|$ ($h = 1/2, 1/4$) の等高線を描いてみる (次のスライド)。実軸から離れるにつれ、急速に減衰することが分かる。

5.11.3 無限区間の台形公式 I_h の誤差の特性関数 (3)

$$\Psi_h(z) := \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \frac{h}{z - nh} = \pi \cot \frac{\pi z}{h},$$

$$\Psi(z) := \lim_{R \rightarrow \infty} \operatorname{Log} \frac{z - (-R)}{z - R} = \begin{cases} -i\pi & (\operatorname{Im} z > 0) \\ +i\pi & (\operatorname{Im} z < 0) \end{cases},$$

$$\Phi_h(z) := \Psi(z) - \Psi_h(z).$$

次の結果は、数値積分から離れて、 $\pi \cot \pi z$ が実軸から離れるとどうなるかを描いたと考えると興味深い (後で式変形で示すことになります)。

```
Clear[PhiH,Psi,PsiH,MN,n,h]
Psi[z_] = If[Im[z]>0,-Pi I, Pi I]
PsiH[z_, h_] = Pi Cot[Pi z/h]
PhiH[z_, h_] = Psi[z] - PsiH[z, h]
g1=ContourPlot[Log10[Abs[PhiH[x + I y, 1/2]]], {x, -4, 4}, {y, -4, 4},
  Contours->9, ContourLabels -> True,
  ColorFunction -> (Hue[#] &), PlotLegends -> Automatic]
g2=ContourPlot[Log10[Abs[PhiH[x + I y, 1/4]]], {x, -4, 4}, {y, -4, 4},
  Contours->6, ContourLabels -> True, WorkingPrecision->100,
  ColorFunction -> (Hue[#] &), PlotLegends -> Automatic]
```

5.11.3 無限区間の台形公式 I_h の誤差の特性関数 (4)

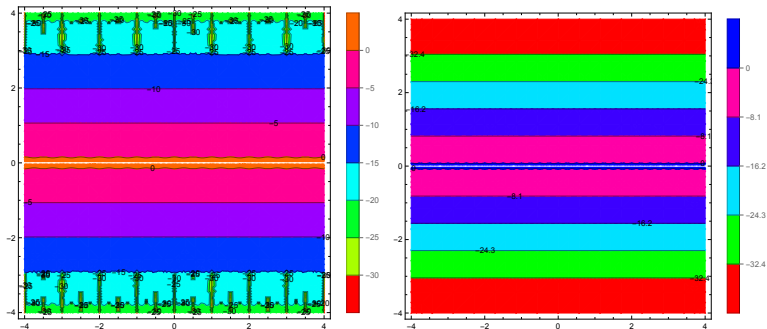


図 1: 台形公式 I_h の誤差の特性関数の絶対値 (左 $h = \frac{1}{2}$, 右 $h = \frac{1}{4}$)

$h = 1/2$ の場合に、グラフが荒れているのは、桁落ちして不十分な計算精度になっているためである。 $h = 1/4$ の場合は、演算精度を 100 桁に上げて計算している。

5.11.4 台形公式 I_h の誤差解析 (1)

定理 13.1 (Stenger [3], 1973 年)

$d > 0$, $f: \mathcal{D}(d) := \{z \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im} z| < d\} \rightarrow \mathbb{C}$ は正則で、次の (a), (b) を満たす。

Ⓐ 任意の $c \in (0, d)$ に対して

$$\Lambda(f, c) := \int_{-\infty}^{\infty} (|f(x + ic)| + |f(x - ic)|) dx < \infty.$$

さらに $\Lambda(f, d - 0) := \lim_{c \rightarrow d-0} \Lambda(f, c)$ は収束する。

Ⓑ 任意の $c \in (0, d)$ に対して

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \int_{-c}^c |f(x + iy)| dy = 0.$$

このとき、積分 $I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ と台形公式 $I_h := h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh)$ に対して、次の誤差評価式が成り立つ (右辺は $h \rightarrow 0$ のとき指数関数的に 0 に収束)。

$$(11) \quad |I_h - I| \leq \frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} \Lambda(f, d - 0) \quad (h > 0).$$

5.11.4 台形公式 I_h の誤差解析 (2)

証明 $h > 0$ とする。任意の $c \in (0, d)$, $N \in \mathbb{N}$ に対して、4 点

$$\pm(N + 1/2)h - ci, \quad \pm(N + 1/2)h + ci$$

を頂点とする長方形の周を正の向きに一周する曲線を $C_{c,N}$ とする。

$$\varphi(z) := \cot \frac{\pi z}{h} = \frac{\cos(\pi z/h)}{\sin(\pi z/h)}$$

の極は kh ($k \in \mathbb{Z}$), 位数はすべて 1, 留数は

$$\operatorname{Res}(\varphi; kh) = \frac{\cos(\pi z/h)}{(\sin(\pi z/h))'} \Big|_{z=kh} = \frac{h}{\pi}.$$

留数定理により

$$\int_{C_{c,N}} f(z) \cot \frac{\pi z}{h} dz = 2\pi i \sum_{k=-N}^N f(kh) \operatorname{Res}(\varphi; kh) = 2ih \sum_{k=-N}^N f(kh).$$

ゆえに

$$h \sum_{k=-N}^N f(kh) = \frac{1}{2i} \int_{C_{c,N}} f(z) \cot \frac{\pi z}{h} dz.$$

5.11.4 台形公式 I_h の誤差解析 (3)

$N \rightarrow \infty$ とすると

$$\begin{aligned} I_h &= h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \\ &= \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-f(x+ic) \cot \frac{\pi(x+ic)}{h} + f(x-ic) \cot \frac{\pi(x-ic)}{h} \right) dx. \end{aligned}$$

一方、Cauchy の積分定理より (積分路の変形をして)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x+ic) dx = I, \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x-ic) dx = I$$

であるから

$$I = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (f(x+ic) + f(x-ic)) dx.$$

ゆえに (やや分かりにくい計算になるが)

$$I_h - I = \int_{-\infty}^{\infty} \left[f(x+ic) \frac{\exp \frac{2\pi i(x+ic)}{h}}{1 - \exp \frac{2\pi i(x+ic)}{h}} - f(x-ic) \frac{\exp \frac{-2\pi i(x-ic)}{h}}{1 - \exp \frac{-2\pi i(x-ic)}{h}} \right] dx.$$

5.11.4 台形公式 I_h の誤差解析 (4)

$$\left| \frac{\exp \frac{2\pi i(x+ic)}{h}}{1 - \exp \frac{2\pi i(x+ic)}{h}} \right|, \left| \frac{\exp \frac{-2\pi i(x-ic)}{h}}{1 - \exp \frac{-2\pi i(x-ic)}{h}} \right| \leq \frac{e^{-2\pi c/h}}{1 - e^{-2\pi c/h}}$$

が成り立つ。ゆえに

$$\begin{aligned} |I_h - I| &\leq \frac{\exp(-2\pi c/h)}{1 - \exp(-2\pi c/h)} \int_{-\infty}^{\infty} (|f(x+ic)| + |f(x-ic)|) dx \\ &= \frac{\exp(-2\pi c/h)}{1 - \exp(-2\pi c/h)} \Lambda(f, c). \end{aligned}$$

$c \rightarrow d - 0$ とすると

$$(12) \quad |I_h - I| \leq \frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} \Lambda(f, d - 0). \quad \square$$

5.11.5 台形公式 $I_{h,N}$ の誤差解析 — DE 公式に向けて

実際の数値計算では、 I_h を有限和で置き換えた $I_{h,N}$ を使わざるを得ない。その場合は、関数 f の遠方での減衰の具合が問題となる。

そこで遠方での減衰の具合の物差しとなるような正則関数 $w: \mathcal{D}(d) \rightarrow \mathbb{C}$ を固定して、 $|f(z)| \leq \text{定数} |w(z)|$ ($z \in \mathcal{D}(d)$) を満たす f について考える。

定理 13.2 (有限項台形公式 $I_{h,N}$ の誤差評価)

$d > 0$. w は $\mathcal{D}(d)$ で正則かつ 0 にならず、 $\Lambda(w, d-0) < \infty$ とする。また、 f は $\mathcal{D}(d)$ で正則な関数で、定理 13.1 の条件 (a), (b) と次式を満たすとする。

$$(13) \quad \|f\| := \sup_{z \in \mathcal{D}(d)} \left| \frac{f(z)}{w(z)} \right| < \infty.$$

このとき $I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ と $I_{h,N} := h \sum_{n=-N}^N f(nh)$ に対して次式が成り立つ。

$$(14) \quad |I - I_{h,N}| \leq \|f\| \left(\frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} \Lambda(w, d-0) + h \sum_{|k| > N} w(kh) \right).$$

(右辺のカッコ内は f によらず w だけで定まることに注意)

5.11.5 台形公式 $I_{h,N}$ の誤差解析 — DE 公式に向けて

証明.

まず $|f(z)| \leq \|f\| |w(z)|$ に注意する。これから $\Lambda(f, d-0) \leq \|f\| \Lambda(w, d-0)$.
三角不等式から

$$(\#) \quad |I - I_{h,N}| \leq |I - I_h| + |I_h - I_{h,N}|.$$

(#) の右辺第 1 項については、定理 13.1 を用いて

$$|I - I_h| \leq \Lambda(f, d-0) \frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} \leq \|f\| \Lambda(w, d-0) \frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)}.$$

(#) の右辺第 2 項については

$$|I_h - I_{h,N}| = \left| h \sum_{|k|>N} f(kh) \right| \leq h \sum_{|k|>N} |f(kh)| \leq h \|f\| \sum_{|k|>N} |w(kh)|.$$

ゆえに

$$|I - I_{h,N}| \leq \|f\| \left(\frac{\exp(-2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} \Lambda(w, d-0) + h \sum_{|k|>N} |w(kh)| \right).$$

□

5.11.5 台形公式 $I_{h,N}$ の誤差解析 — DE 公式に向けて

すでに述べたように

$$w(z) := \varphi_1'(z) = \frac{d}{dz} \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh z\right) = \frac{\frac{\pi}{2} \cosh z}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh z\right)}$$

とおくと、これは遠方で二重指数関数的に減衰する。実際

$$w(x) \simeq \pi \exp\left(-\frac{\pi}{2} \exp|x| + |x|\right) \quad (\mathbb{R} \ni x \rightarrow \pm\infty).$$

$$\frac{2\pi d}{h} = \frac{\pi}{2} \exp(Nh)$$

を満たすように h, N をとると、 $|I_h - I| \doteq |I_h - I_{h,N}|$ となることが期待できて

$$|I_{h,N} - I| \leq C' \|f\| \exp(-CN/\log N)$$

が導ける。これは N が 2 倍になると、誤差が 2 乗になる、すなわち有効桁数が 2 倍近くになることを意味している。

高橋・森は色々な w を考えた末に、ここにあげたような (二重指数関数的に減衰する) w が最良の結果を生じると論じた ([4])。

5.11.6 むすび

数値積分は、応用上重要であり、特に1変数の場合は深く研究されている。二重指数関数型数値積分公式は、1970年代前半に発見された比較的新しいアルゴリズムであり、すぐれた数値積分公式として現在でも良く利用されている。その発見の過程のみならず、誤差評価式の証明にも複素関数論が利用された。それにまつわるアイデアの多くは、参考になると信じて紹介した次第である。

当初予定では、杉原 [5] による DE 公式の誤差解析まで紹介する予定であったが、時間切れとなった。関数論の講義としては既にかかなり深入りしているので、切り上げのタイミングとしてはほどほどかもしれない。

でも、ちょっと趣味に走りすぎたかもしれない…

付録: Euler-Maclaurin の定理

周期関数の一周積分が台形公式で高精度に計算できることは、関数論を使った説明もできるが、多くのテキストでは次の定理で説明している。

命題 13.3 (Euler-Maclaurin 展開, Euler (1736), MacLaurin (1742), Jacobi (1834))

$f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ が C^{2m} 級であれば、任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して $h = (b - a)/n$ とおくととき、

$$\int_a^b f(x) dx = h \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} f(a + jh) + \frac{1}{2} f(b) \right) - \sum_{r=1}^m \frac{h^{2r} B_{2r}}{(2r)!} \left(f^{(2r-1)}(b) - f^{(2r-1)}(a) \right) + R_m,$$

$$R_m = \frac{h^{2m+1}}{(2m)!} \int_0^1 B_{2m}(t) \left(\sum_{k=0}^{n-1} f^{(2m)}(a + kh + th) \right) dt$$

が成り立つ。ただし $B_m, B_m(t)$ は、それぞれ次式で定義される **Bernoulli 数**、**Bernoulli 多項式**である:

$$\frac{s}{e^s - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} s^n, \quad \frac{se^{ts}}{e^s - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n(t)}{n!} s^n \quad (|s| < 2\pi).$$

$$B_0 = 1, \quad B_1 = -\frac{1}{2}, \quad B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_3 = 0, \quad B_4 = -\frac{1}{30}, \quad B_5 = 0, \quad B_6 = \frac{1}{42}, \dots$$

$$B_0(x) = 1, \quad B_1(x) = x - \frac{1}{2}, \quad B_2(x) = x^2 + x - \frac{1}{6}, \quad B_3(x) = x^3 - \frac{3x^2}{2} + \frac{x}{2}, \dots$$

付録: Euler-Maclaurin の定理

関数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ が周期 $b - a$ であれば、 $f^{2r-1}(b) - f^{2r-1}(a) = 0$ ($r = 1, \dots, m$) であるから

$$\int_a^b f(x) dx = h \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} f(a + jh) + \frac{1}{2} f(b) \right) + R_m.$$

ゆえに $I = \int_a^b f(x) dx$ を $T_h = h \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} f(a + jh) + \frac{1}{2} f(b) \right)$ で計算すると、誤差は R_m であり、これは $O(h^{2m+1})$ で、かなり小さいことが期待できる。

Euler や MacLaurin は、 $\sum_{k=1}^n k^r$ ($r = \pm 1, \pm 2, \dots$) や $\sum_{k=1}^n \log k$ を評価するためにこの公式を導出した。つまり、積分を使って和を評価したわけであるが、上の使い方は、積分と和の差を評価する、ということである。

参考文献

DE 公式にしても、台形公式にしても、杉原・室田 [6] が最初に参照すべきテキストである。

- [1] 高橋秀俊, 森正武: 解析関数の数値積分の誤差の新しい評価法, 数理解析研究所講究録, Vol. 91, pp. 119–141 (1970), <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/0091-04.pdf>.
- [2] Takahasi, H. and Mori, M.: Error estimation in the numerical integration of analytic functions, *Rep. Comput. Centre Univ. Tokyo*, Vol. 3, pp. 41–108 (1970).
- [3] Stenger, F.: Integration formula based on the trapezoidal formula, *Journal of the Institute of Mathematics and Its Applications*, Vol. 12, No. 1, pp. 103–114 (1973).
- [4] Takahashi, H. and Mori, M.: Double exponential formulas for numerical integration, *Publ. RIMS Kyoto Univ.*, Vol. 9, pp. 721–741 (1974).
- [5] 杉原正顕: DE 変換公式の最適性について, 京都大学数理解析研究所講究録, Vol. 585, pp. 150–175 (1986), <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/0585-09.pdf>.
- [6] 杉原正^{まさあき}顕, 室田^{むろた}一雄: 数値計算法の数理, 岩波書店 (1994).