

応用複素関数 第 11 回

～ 数値積分 (1) ～

かつらだ まさし
桂田 祐史

2022 年 6 月 28 日

目次

- 1 本日の内容・連絡事項
- 2 数値積分
 - はじめに
 - 次元ごとに方法を変える
 - 脱線: Weyl の定理
 - 1次元の公式 概観
 - 補間型数値積分公式
 - 補間多項式
 - 等間隔標本点による補間型数値積分公式
 - Runge の現象
 - よくある誤解
 - 対処法
 - 複合数値積分公式
 - 数値実験例
 - 不思議な好結果
 - 不思議な好結果 (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

本日の内容・連絡事項

- 先週、レポート課題を置いてある WWW サーバーに外部から攻撃がありました。そのため一時的に WWW サーバーを停止する措置を取りました。そのため、レポート課題の〆切を 1 週間延長しています。今後は Oh-o! Meiji にも課題文などを置くようにするつもりです。
- 既に話したことがあります。昨年度と比べると進行がやや遅れています。大事なところで時間切れは避けたいと考えるので、板書はやめて、スライドを写しての説明に切り替えます。
- 今回から 3 回数値積分をテーマとする。今回はお話が主体 (あまり理屈は出て来ない) で、気軽に聞けると思っています。講義ノート [1] を用意してあります。
- 数値積分について次回レポート課題 3 を発表する予定です。
- 期末レポート課題についても次回発表する予定です。

5 数値積分 5.1 はじめに

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** (numerical integration) 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(必ず)計算できる。原理は簡単で、計算の効率を追求する話もある (**自動微分** (automatic differentiation))。

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。

5.2 次元ごとに方法を変える

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 ($x = (x_1, \dots, x_n)$ 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** (Monte Carlo methods) くらいしかやりようがない。

Ω に一様分布する乱数 x_1, \dots, 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 $I = \int_{\Omega} f(x) dx$ 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。**モンテ・カルロ法は最後の手段。**

(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…)

5.2 次元ごとに方法を変える

- 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 [2] が参考になる。以下では、 $\{x\}$ で x の小数部分を表す。

- 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
 $n \leq 4$ 程度で使える (?). $\Omega = [0, 1]^n$ のとき

$$I_N = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\left\{\frac{kg_1^{(N)}}{N}\right\}, \dots, \left\{\frac{kg_n^{(N)}}{N}\right\}\right).$$

$g_i^{(N)}$ ($i = 1, \dots, n$) は例えばフィボナッチ数列を用いて決める。

- ③ Haselgrove 法 (Haselgrove [3], Sugihara-Murota [4])

$$I_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N w_q \left(\frac{k}{N} \right) f(\{k\alpha_1\}, \dots, \{k\alpha_n\}).$$

ここで $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ は \mathbb{Q} 上 1 次独立な代数的無理数で

$$w_q(x) := \frac{(2q+1)!}{q!q!} x^q (1-x)^q.$$

5.3 脱線: Weyl の定理

定理 11.1 (Weyl の定理)

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

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

(この定理の証明をレポートするのはアリかも。Fourier 解析的。)

例えば $s = 1$ ならば、 α_1 は無理数ということで、 $\alpha_1 = \sqrt{2}$ の場合に適用できて

$$\int_0^1 f(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N f(\{k\sqrt{2}\}).$$

$$\{\sqrt{2}\} = 0.41421356\dots, \quad \{2\sqrt{2}\} = 0.82842712\dots,$$

5.4 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))
(以下では、定番の midpoint 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 ▶ おまけへの 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)

5.5 補間型数値積分公式 5.5.1 補間多項式

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

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

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

φ_j ($j=1, \dots, N$) を

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

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

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

w_j は、 $\{x_j\}$ で定まり、 f にはよらないので、事前に求めておくことができる。

5.5.2 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)

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

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^{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 $I(f) = I_4(f)$.

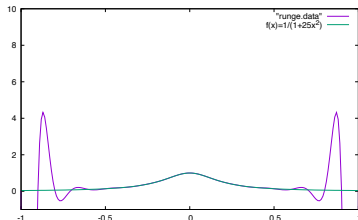
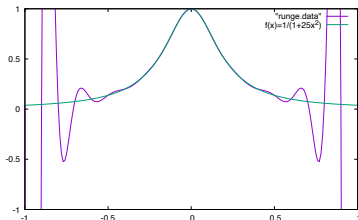
5.6 Runge の現象 5.6.1 良くある誤解

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。

大きく分けて2つの対処法がある。

- ㉓ 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)。
この考え方は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**
- ㉔ **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。

5.7 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。)

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

- 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。)

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

- 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」のところに「則」という人もいる。

5.8 数値実験例

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/prog20220628.tar.gz
tar xzf prog20220628.tar.gz
cd prog20220628
make
```

- ① `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。
- ② `.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。
- ③ `prog20220628` というディレクトリが現れるので、そこに `cd (change directory)` する。
- ④ `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。

5.8 数値実験例 数値積分公式のコード

今年度は試験的に Python で書いたサンプル・プログラム (Jupyter Notebook 用) を用意しました。

<http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/complex2/20220628ni.ipynb>

5.8 数値実験例 数値積分公式のコード

```
/* nc.c --- Newton-Cotes の積分公式: 中点公式, 台形公式, Simpson 公式 */
typedef double ddfunction(double);

/* 関数 f の [a,b] における積分の複合中点公式による数値積分 M_N */
double midpoint(ddfunction f, double a, double b, int N)
{
    int j;
    double h = (b - a) / N, M = 0.0;
    for (j = 1; j <= N; j++) M += f(a + (j - 0.5) * h);
    M *= h;
    return M;
}

/* 関数 f の [a,b] における積分の複合台形公式による数値積分 T_N */
double trapezoidal(ddfunction f, double a, double b, int N)
{
    int j;
    double h = (b - a) / N, T = (f(a) + f(b)) / 2;
    for (j = 1; j < N; j++) T += f(a + j * h);
    T *= h;
    return T;
}

/* 関数 f の [a,b] における積分の複合 Simpson 公式による数値積分 S_{N} */
double simpson(ddfunction f, double a, double b, int N)
{
    int m = N / 2;
    return (trapezoidal(f, a, b, m) + 2 * midpoint(f, a, b, m)) / 3;
}
```


5.8 数値実験例 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

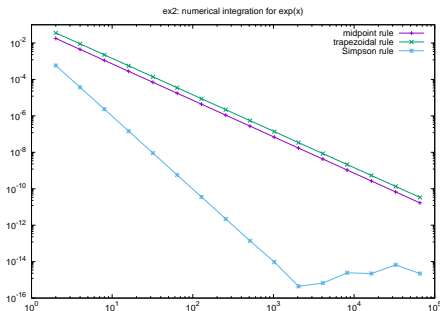


図 1: 横軸は $N = 2, 4, \dots, 2^{16} = 65536$; 縦軸は誤差 (両軸とも対数目盛)

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

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

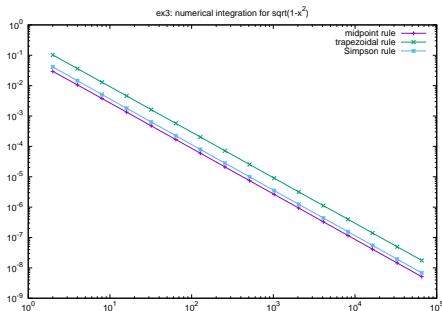
が成り立つことをいう。(m 次多項式の積分が誤差なく計算できる。)

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 (1 位分お得)。

$I = \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx$ 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、滑らかな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 (こういう結果は割と一般的に見られる)。

5.8 数値実験例 滑らかな関数 vs 滑らかなでない関数

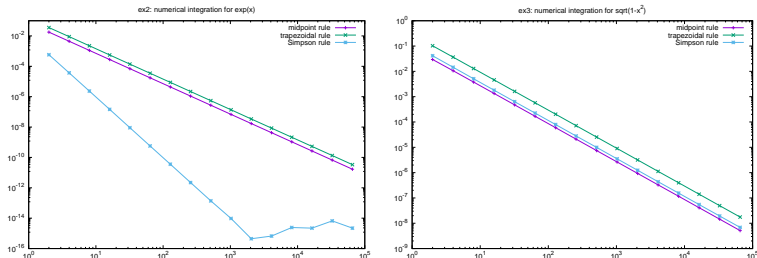
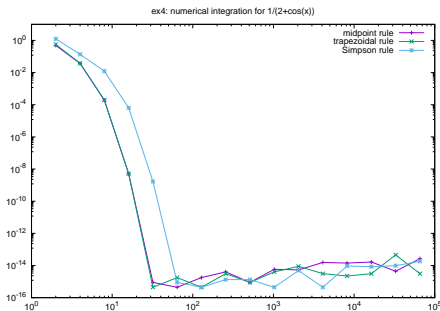


図 2: $\int_0^1 e^x dx$ と $\int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx$ の数値積分の結果

5.9 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} (中点 ≒ 台形 ≪ Simpson)。

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) $N = 32$ の台形公式ではあるが、満足すべき結果が得られたと言える。

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。

5.9 不思議な好結果 (2) $x \rightarrow \pm\infty$ 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

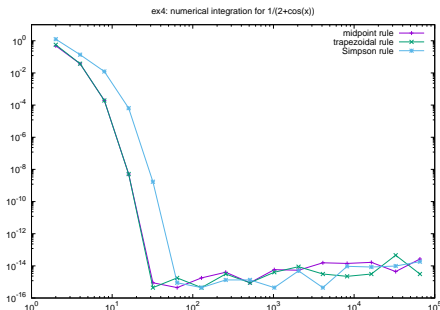
N	h	$I - I_{h,N}$
6	1	-1.833539×10^{-4}
12	0.5	$-2.220446 \times 10^{-16}$
24	0.25	$-4.440892 \times 10^{-16}$

(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る。
 $x = \pm 6$ のとき $e^{-x^2} \cong 2.3 \times 10^{-16}$ 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。

5.9 不思議な好結果 (1) 滑らかな周期関数の周期積分 (再掲)

$I = \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2 + \cos x} \quad \left(= \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \right)$ 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} (中点 \approx 台形 \ll Simpson).

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と言える。

5.9 不思議な好結果 (2) $x \rightarrow \pm\infty$ 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 と $I_{h,N}$ 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	-1.833539×10^{-4}
12	0.5	$-2.220446 \times 10^{-16}$
24	0.25	$-4.440892 \times 10^{-16}$

(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 $e^{-x^2} \cong 2.3 \times 10^{-16}$ 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。

5.10 二重指数関数型数値積分公式 (DE 公式)

5.10.1 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、上で紹介した

Ⓐ 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 $T_N = h \sum_{j=0}^{N-1} f(jh)$, $h := T/N$ 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 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$

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

などの非常にうまく行く場合の形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。

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

5.10.2 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

$$(7) \quad x = \varphi_1(t) := \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right) \quad (t \in \mathbb{R})$$

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。

5.10.2 二重指数関数型数値積分公式の紹介 (続き)

$t \rightarrow \infty$ のとき $\varphi_1(t) \rightarrow 1$, $t \rightarrow -\infty$ のとき $\varphi_1(t) \rightarrow -1$ であるが、ともに非常に速く収束する。

また $t \rightarrow \pm\infty$ のとき $\varphi_1' \rightarrow 0$ も非常に速い。

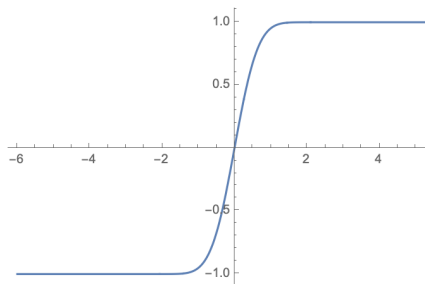


図 3: φ_1 は \mathbb{R} を $(-1, 1)$ に写す

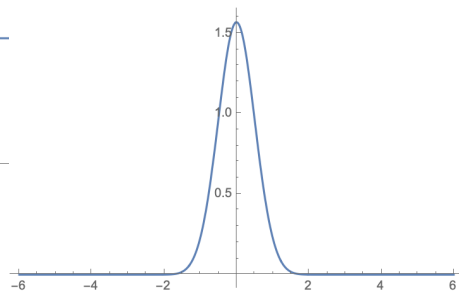


図 4: φ_1' は $t \rightarrow \pm\infty$ のとき急速に減衰

5.10.2 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)

$$(8) \quad |f(\varphi_1(t))\varphi_1'(t)| \sim \exp(-C \exp|t|) \quad (t \rightarrow \pm\infty)$$

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、(8) 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 (桂田 [1] を見よ)。

5.10.3 サンプル・プログラムの入手・実行

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/prog20220628.tar.gz
tar xzf prog20220628.tar.gz
cd prog20220628
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。

5.10.4 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 (その結果は open ex3.png で見られる)

$$I = \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} dx = \pi/2 = 1.5707963267948966192\dots$$

を DE 公式で計算すると

```
% ./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)

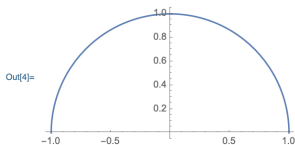
$N = 24$ (49 項) のときに、使用している浮動小数点数 (10 進 16 桁弱) の精度の近似値が得られた (実は $N = 18$ で $I - I_{h,N} \doteq 2.22 \times 10^{-16}$)。

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

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

```
In[2]:= phi1[t_] := Tanh[Pi/2 Sinh[t]]  
          [双…] [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]
```

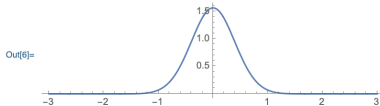


図 5: $f(x) = \sqrt{1-x^2}$ と変数変換後 $f(\varphi_1(t))\varphi_1'(t)$ のグラフ

直観的に分かる？

5.10.5 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 ($x \equiv \pm 1$ 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。

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

```
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]=

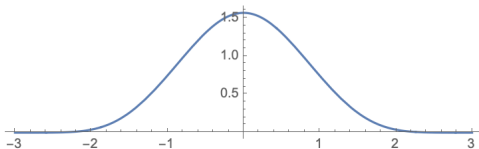


図 6: $f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ の場合の変数変換後の $f(\varphi_1(t))\varphi_1'(t)$ のグラフ

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

§5.9 「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。

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、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 , \dots 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 I

私はモンテカルロ法については、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 [2], 森 [5] をお勧めする。(以下は関数論としては脱線かも) Haselgrove の方法は、杉原・室田両氏の論文 [4] で、とても使いやすく改良された。優良格子点法については、Niederreiter [6] も見るとよい。

- [1] 桂田祐史：数値積分解説, <http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/complex2/numerical-integration-2017.pdf> (2017).
- [2] 杉原正顯^{まさあき}, 室田一雄^{むろた}：数値計算法の数理, 岩波書店 (1994).
- [3] Haselgrove, C. B.: A Method for Numerical Integration, *Mathematics of Computation*, Vol. 15, No. 76, pp. 323–337 (1961).
- [4] Sugihara, M. and Murota, K.: A Note on Haselgrove's Method for Numerical Integration, *Mathematics of Computation*, Vol. 39, No. 160, pp. 549–554 (1982).
- [5] 森正武^{まさたけ}：数値解析 第2版, 共立出版 (2002/2/25), 第1版は1973年に出版された。

- [6] Niederreiter, H.: 数論の応用, 数学セミナー, 1984年11月号, pp. 90–96 (1984).