数値積分

桂田 祐史

2001 年 11 月 15 日, 2016 年 3 月 13 日

目 次

第1章　数値積分についての概説

よく知られているように積分の計算はむつかしい。定積分を数値的に近似計算することを**数値積分**という。

この文書では、主に 1 次元の定積分

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \quad (-\infty \le a < b \le \infty)$$

の計算法について説明する。

微分については、**合成関数の微分法**により、例えば初等関数の導関数は初等関数になるなど、機械的に計算できてしまうことが多い。特に**高速微分法** (**自動微分法**とも言う) という効率的なアルゴリズムの存在が知られている。

多次元の積分に関しては、紙と鉛筆の計算においては、Fubini の定理

$$\iint_{A\times B} f(x,y)\,dxdy = \int_B \left(\int_A f(x,y)\,dx \right) dy$$

に基づく累次積分への帰着が使われることが多いが、この手順をそのまま応用して 1 次元の数値積分を繰り返すのは良くないとされている (らしい)。

(『応用数理』に多次元の数値積分についての論説があったように思う。探し出して参考文献表に加え、できれば内容の紹介を書くこと。)

第2章　1 次元の数値積分法

(この章の内容はまだかなり不完全である。必要な場合は、杉原・室田 [1] や森 [2] などで補うこと。やるべきこととして、

(1) 補間 (ただ今書きかけ)

(2) 直交多項式

(3) ベルヌイ数と Euler-Maclaurin (少し書いてあるが、ひどい出来)

(4) 高橋・森の理論 (ただ今書きかけ)

がある。…何だ、全然足りない。重要性から言うと、高橋・森か。)

2.1　概説

Riemann 積分では積和の極限として積分を定義するわけであるが、

$$a \le a_0 < a_1 < \cdots < a_n \le b$$

のような**分点** (標本点とも言う) と、**重み** $\{w_i\}_{i=0}^n$ を取って

$$I_{n+1} = \sum_{i=0}^{n} w_i f(a_i)$$

のような和を作って積分 I を近似するのが普通である。

2.2　補間型公式

相異なる $n+1$ 点 a_i $(i = 0, 1, \cdots, n)$ を標本点とする、関数 f の補間多項式 $f_n(x)$ は [1] 次式で与えられる (Lagrange の補間公式):

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{F_n(x)}{(x-a_k)F_n'(a_k)} f(a_k), \quad F_n(x) = (x-a_0)(x-a_1)\cdots(x-a_n).$$

このとき

$$\int_a^b f_n(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} w_k f(a_k), \quad w_k = \frac{1}{F_n'(a_k)} \int_a^b \frac{F_n(x)}{x-a_k} dx.$$

この値を $I = \int_a^b f(x)dx$ の近似値として採用する公式を**補間型積分公式**と呼ぶ。

[1] f の補間多項式 $f_n(x)$ は $f_n(a_i) = f(a_i)$ $(i = 0, 1, \cdots, n)$ を満たす n 次多項式として特徴づけられる。

2.3 等間隔分点を用いる補間型積分公式

ここで述べる公式は、高等学校の数学の教科書でも説明されているポピュラーなものである (実際に参考文献にいれるべし)。

2.3.1 Newton-Cotes の公式

補間型積分公式のうちで

$$a_k = a + \frac{b-a}{n}k \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

とするのを **Newton-Cotes の公式**と総称する。

Newton-Cotes の公式で $n = 1$ である

$$T = I_2 = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right)$$

とするのを**台形則** (**trapezoidal rule**) と呼ぶ。

Newton-Cotes の公式で $n = 2$ である

$$S = I_3 = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

とするのを **Simpson 則**と呼ぶ。

次の命題は明らかである。

定理 2.3.1 被積分関数 f が n 次までの多項式のときは、n 次の Newton-Cotes の公式 I_{n+1} は正確な積分値を与える。

系 2.3.2 (1) 台形則は 1 次以下の多項式関数に関して正しい値を与える。

(2) Simpson 則は 2 次以下の多項式関数に関して正しい値を与える。

2.3.2 Maclaurin の公式

補間型積分公式のうちで

$$a_k = a + \frac{b-a}{n}\left(k - \frac{1}{2}\right) \quad (k = 1, \cdots, n)$$

とするのを **Maclaurin の公式**と総称する。

Maclaurin の公式で $n = 1$ である

$$M = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

とするのを**中点則** (**midpoint rule**) とよぶ。

台形則、シンプソン則、中点則の間には、$S = (T + 2M)/3$ という関係がある (すぐに確かめられる)。

定理 2.3.3

系 2.3.4 中点則は…

2.4 複合則

Newton-Cotes の公式にしろ、Maclaurin の公式にしろ、n が大きい公式は今ではあまり使われない (等間隔標本点に基づく補間多項式は、次数が高いとき、もとの関数をあまり良く近似しないという **Runge の現象**がある — 後述)。

実際にこれらの公式を使用するときには、与えられた積分区間 $[a,b]$ をまず m 等分して、各小区間をさらに n 等分して、前節の公式を適用することが多い。これを**複合則**と呼ぶ。

2.4.1 複合台形則

$[a,b]$ を N 等分し、小区間の端点を分点とする。すなわち

$$h = \frac{b-a}{N}, \quad x_j = a + jh \quad (j = 0, 1, \cdots, N)$$

で分点 x_j を定める。そして各小区間 $[x_{j-1}, x_j]$ で台形則を用いて計算したものを加えると、

$$\begin{aligned} T_N &= \frac{h}{2}\left[(f(x_0)+f(x_1)) + (f(x_1)+f(x_2)) + \cdots + (f(x_{N-2})+f(x_{N-1})) + (f(x_{N-1})+f(x_N))\right] \\ &= h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + \frac{1}{2}f(x_N)\right]. \end{aligned}$$

後述の Euler-Maclaurin の公式を用いると

$$T_N - I \sim \frac{h^2}{12}(f'(b) - f'(a)) - \frac{h^4}{720}(f'''(b) - f'''(a)) + \cdots$$

2.4.2 複合中点則

$[a,b]$ を N 個の小区間に等分し、各小区間の中点を分点とする。すなわち

$$h = \frac{b-a}{N}, \quad x_j = a + (j - 1/2)h \quad (j = 1, \cdots, N)$$

で分点 x_j を定める。そして各小区間で中点則を用いて計算したものを加えると、

$$M_N = h\left(f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{N-1}) + f(x_N)\right) = h\sum_{j=1}^{N} f(x_j).$$

後述の Euler-Maclaurin の公式を用いると

$$M_N - I \sim -\frac{1}{2}\cdot\frac{h^2}{12}(f'(b) - f'(a)) + \frac{7}{8}\cdot\frac{h^4}{720}(f'''(b) - f'''(a)) - \cdots$$

2.4.3 複合 Simpson 則

$[a,b]$ を m 個の小区間に分割し、各小区間で Simpson 則を用いる。$[a,b]$ の $N = 2m$ 等分点を x_j $(j = 0, 1, \cdots, N)$ とする。すなわち

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

で分点 x_j を定める。そして小区間 $[x_{2(j-1)}, x_{2j}]$ $(j = 1, 2, \cdots, m)$ で Simpson 則を用いて計算したものを加えると、

$$\begin{aligned} S_{2m} &= \frac{2h}{6}\left\{[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \cdots + \left[f(x_{2(m-1)}) + 4f(x_{2m-1}) + f(x_{2m})\right]\right\} \\ &= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{m} f(x_{2j-1}) + f(x_{2m})\right]. \end{aligned}$$

(漸近公式は？)

2.4.4 簡単な誤差解析

より一般的な誤差解析の公式が山本 [3] に載っている。

補題 2.4.1 (台形則の誤差) $f\colon [a, b] \to \mathbf{R}$ を C^2-級の関数とするとき

$$h \overset{\text{def.}}{=} b - a, \quad \varepsilon = \int_a^b f(x)\,dx - \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right)$$

とおけば、以下の (1), (2) が成り立つ。

(1) $\varepsilon = -\dfrac{1}{2}\displaystyle\int_a^b f''(x)(x-a)(b-x)\,dx.$

(2) $-\dfrac{1}{12}h^3 \max\limits_{y\in[a,b]} f''(y) \le \varepsilon \le -\dfrac{1}{12}h^3 \min\limits_{y\in[a,b]} f''(y).$

(3) $\exists \xi \in (a, b)$ s.t. $\varepsilon = -\dfrac{1}{12}h^3 f''(\xi).$

証明 (1) 証明すべき式の右辺を 2 回部分積分すればよい。また (2), (3) については $(x-a)(b-x) \ge 0$ に注意すればよい。 ■

命題 2.4.2 (複合台形則の誤差) $f\colon [a, b] \to \mathbf{R}$ が C^2-級ならば、$\exists \xi \in (a, b)$ s.t.

$$I - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi), \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

ただし

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

証明 $x_j = a + jh$ $(j = 0, 1, \cdots, n)$, さらに

$$\varepsilon_j \overset{\text{def.}}{=} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx - \frac{h}{2}\left(f(x_j) + f(x_{j+1})\right).$$

とおくと

$$I - T_n = \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j.$$

ゆえに上の補題から

$$-\frac{b-a}{12}h^2 \max_{y\in[a,b]} f''(\xi) \le I - T_n \le -\frac{b-a}{12}h^2 \min_{y\in[a,b]} f''(\xi).$$

これから明らかである。 ■

以下の二つの命題もほぼ同様に証明できる。

命題 2.4.3 (複合中点則の誤差) $f\colon [a,b] \to \mathbf{R}$ が C^2-級ならば、$\exists \xi \in (a,b)$ s.t.

$$I - M_n = \frac{b-a}{24}h^2 f''(\xi), \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

ただし

$$M_n = h\sum_{j=1}^{n} f\left(a + \left(j - \frac{1}{2}\right)h\right).$$

命題 2.4.4 (複合 Simpson 則の誤差) $f\colon [a,b] \to \mathbf{R}$ が C^4-級ならば、$\exists \xi \in (a,b)$ s.t.

$$I - S_{2m} = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi), \quad h = \frac{b-a}{2m}.$$

ただし

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

2.4.5 台形則、シンプソン則、中点則の関係

次の関係式は簡単だが、計算の手間を軽減するのに極めて有用である。

$$T_{2m} = \frac{T_m + M_m}{2}, \quad S_{2m} = \frac{T_m + 2M_m}{3} = \frac{4T_{2m} - T_m}{3}.$$

2.5 Gauss 型公式

(**注意**: この節は書きかけ。)

重みも分点もすべてパラメーターとした Gauss 型の公式について説明する。これは直交多項式の零点として分点が定められ、精度が極めて高い。

ここでは区間 $[-1,1]$ の Gauss-Legendre の公式のみ。$[-1,1]$ 上の実数値連続関数の空間 $X = C[-1,1]$ に

$$\langle f, g\rangle = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)\,dx$$

で内積を導入する。

補題 2.5.1 (Legendre 多項式の直交性) n 次の Legendre 多項式を

$$p_n(x) \overset{\text{def.}}{=} \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left[(x^2-1)^n\right]$$

で定義すると、

$$\langle p_n, p_m\rangle = 0 \quad (n \neq m), \quad \langle p_n, p_n\rangle = \frac{2}{2n+1}.$$

系 2.5.2 (Legendre 多項式の漸化式)

$$(n+1)p_{n+1}(x) = (2n+1)xp_n(x) - np_{n-1}(x).$$

補題 2.5.3 (Christoffel-Darboux の定理)

$$\sum_{k=0}^{n}(2k+1)p_k(x)p_k(y) = \frac{n+1}{x-y}\begin{vmatrix} p_{n+1}(x) & p_n(x) \\ p_{n+1}(y) & p_n(y) \end{vmatrix}. \tag{2.1}$$

補題 2.5.4 (選点直交性) $p_n(x) = 0$ の根を $x_1, \cdots, x_n$ とすると、$i \neq j$ ならば、

$$\sum_{k=0}^{n-1}(2k+1)p_k(x_i)p_k(x_j) = 0.$$

定理 2.5.5 (Gauss の積分公式) $p_n(x) = 0$ の零点を節点 $x_1, \cdots, x_n$ とし、重みを

$$w_j = \frac{2}{np_n'(x_j)p_{n-1}(x_j)} \quad (j = 1, 2, \cdots, n)$$

と取ると、公式

$$\sum_{i=0}^{n} w_i f(a_i)$$

は $2n-1$ 次までの任意の多項式に対して正しい積分値を与える。

n	節点	重み
1	0	2
2	$-1/\sqrt{3}$, $1/\sqrt{3}$	1, 1
3	$-\sqrt{3/5}$, 0, $\sqrt{3/5}$	5/9, 8/9, 5/9

定理 2.5.6 () n 次 Gauss 公式

について以下のことが成り立つ。

(i) f が楕円

$$\mathcal{E}(\rho) = \{z \in \mathbf{C}; |z+1| + |z-1| = \rho + 1/\rho\}$$

(ただし $\rho > 1$) およびその内部を含む複素領域で正則のときには

$$|\text{誤差}| \leq \frac{\pi(\rho + 1/\rho)}{\rho^{2n+1}} \max_{z \in \mathcal{E}(\rho)} |f(z)| \quad (\text{十分大きい } n).$$

(ii) f が $\mathcal{E}(\rho)$ $(\rho > 1)$ およびその内部を含む複素領域で有理型であって、特異点は $\mathcal{E}(\rho)$ 上にある 1 位の極のみであるときには、

$$|\text{誤差}| \leq C/\rho^{2n} \quad (\text{十分大きい } n).$$

ただし C は f と ρ に依存する定数である。

証明

杉原・室田 [1] を見よ。 ■

2.6 Euler-Maclaurin 展開

(この節はまだたくさんの作業が必要。)

2.6.1 Darboux の公式

補題 2.6.1 (Darboux の公式) u は $\mathbf{C}$ 内の $a, z \in \mathbf{C}$ を結ぶ線分の近傍上で正則な関数、$p_n(t)$ は t の n 次多項式とするとき、

$$\begin{aligned} p_n^{(n)}(u(z)-u(a)) &= \sum_{r=1}^{n}(-1)^{r-1}(z-a)^r\left(p_n^{(n-r)}(1)u^{(r)}(z)-p_n^{(n-r)}(0)u^{(r)}(a)\right) \\ &\quad +(-1)^n(z-a)^{n+1}\int_0^1 p_n(t)u^{(n+1)}(a+t(z-a))\,dt. \end{aligned}$$

証明　積の微分法から

$$\frac{d}{dt}p_n^{(n-r)}(t)u^{(r)}(a+t(z-a)) = p_n^{(n-r+1)}(t)u^{(r)}(a+t(z-a)) + (z-a)p_n^{(n-r)}(t)u^{(r+1)}(a+t(z-a))$$

が成り立つが、この両辺に $(-1)^r(z-a)^r$ をかけて、$r=1,\cdots,n$ まで加えると

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\sum_{r=1}^{n}(-1)^r(z-a)^r p_n^{(n-r)}(t)u^{(r)}(a+t(z-a)) \\ &\quad = -(z-a)p_n^{(n)}(t)u'(a+t(z-a)) + (-1)^n(z-a)^{n+1}p_n(t)u^{(n+1)}(a+t(z-a)). \end{aligned}$$

$p_n^{(n)}(t)$ が定数 (ゆえに特に $p_n^{(n)}(0)$ に等しい) であることに注意して $t=0$ から $t=1$ まで積分すると結果を得る。 ■

2.6.2 Bernoulli 多項式

この小節の内容は森 [2] による。
実パラメーター t を持つ形式的冪級数

$$f_t(z) = \frac{ze^{tz}}{e^z-1}$$

の係数を $B_n(t)/n!$ とおこう [2]:

$$\frac{ze^{tz}}{e^z-1} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{B_n(t)}{n!}z^n \quad (|z|<2\pi).$$

[2] 分母は $z = 2n\pi i$ $(n \in \mathbf{Z})$ で 0 になるが、分子に z があるので、$z=0$ は除去可能な特異点であることに注意しよう。

この $B_n(t)$ は t についての n 次多項式になるが、これを n 次の **Bernoulli 多項式**と呼び、

$$B_n \overset{\text{def.}}{=} B_n(0) \quad (n = 0, 1, \cdots)$$

を **Bernoulli 数**と呼ぶ。

$$B_0 = 1, \quad B_1 = \frac{1}{2}, \quad B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_3 = 0, \quad B_4 = -\frac{1}{30}, \cdots.$$

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

注意 2.6.2 (異なる流儀) 上に書いた Beronoulli 数の定義は、関孝和 (1642–1708) や Jakob Bernoulli (1654–1705) の定義と一致するが、それとは異なる流儀もある。

1. B_1 の符号だけが異なるもの ($B_1 = -1/2$)。
   実はこの流儀で書いてある本の方が多いとか。どちらを採用しても B_n を $(-1)^n B_n$ で置き換えることで、他方に移る。

2. 奇数番目を飛ばす。

補題 2.6.3 (荒川・伊吹山・金子 [4] から)

(1) (B_j を求めるために使える漸化式)

$$\sum_{j=0}^{k} \binom{k+1}{j} B_j = k+1 \quad (k = 0, 1, 2, \cdots).$$

最初のいくつかを書いておくと、

$$\begin{aligned} 1 &= B_0, \\ 2 &= B_0 + 2B_1, \\ 3 &= B_0 + 3B_1 + 3B_2, \\ 4 &= B_0 + 4B_1 + 6B_2 + 4B_3, \\ 5 &= B_0 + 5B_1 + 10B_2 + 10B_3 + 5B_4, \\ &\vdots \end{aligned}$$

(2) $B_1 = 1/2$ を除き、奇数番目は 0 である: $B_{2\ell+1} = 0$ ($\ell \in \mathbf{N}$).

(3) $B_n(1) = B_n(0) = B_n$ ($n \geq 0$). (ただし B_1 については流儀に依存する。)

(4) (関・Bernoulli の公式)

$$\sum_{i=1}^{n} i^k = \sum_{j=0}^{k} \binom{k}{j} B_j \frac{n^{k+1-j}}{k+1-j}.$$

(5) $S_k(n)$ を

$$S_k(n) = \sum_{i=1}^{n} i^k$$

で定めると n の $k+1$ 次多項式になるので、自然に実変数関数に拡張できるが、

$$B_k(x) = S_k'(x-1).$$

さらに

$$B_k(x+1) - B_k(x) = kx^{k-1}, \quad B_k'(x) = B_{k-1}(x).$$

(6) $B_n(x)$ は

$$\int_x^{x+1} B_n(y)dy = x^n$$

を満たす唯一の多項式。

(7) (Bernoulli 数による表示)

$$B_n(x) = \sum_{j=0}^{n} (-1)^j \binom{n}{j} B_j x^{n-j}.$$

(8) k を 2 以上の偶数とするとき

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^k} = -\frac{1}{2} \frac{B_k}{k!} (2\pi i)^k.$$

2.6.3 Euler-Maclaurin 展開

定理 2.6.4 (Euler-Maclaurin 展開) f が $[a,b]$ で C^{2m}-級であれば、

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= h\left(\frac{1}{2}f(a)+\sum_{k=1}^{n-1}f(a+kh)+\frac{1}{2}f(b)\right)\\ &\quad -\sum_{r=1}^{m}\frac{h^{2r}B_{2r}}{(2r)!}\left(f^{(2r-1)}(b)-f^{(2r-1)}(a)\right)+R_m,\\ R_m &= \frac{h^{2m+1}}{(2m)!}\int_0^1 B_{2m}(t)\left(\sum_{k=0}^{n-1}f^{(2m)}(a+kh+ht)\right)dt,\quad h=(b-a)/n.\end{aligned}$$

ただし B_n は Bernoulli の数である。

2.7 周期関数の 1 周期上の数値積分

この節では「複合」という接頭辞を省いて単に、台形則、中点則、Simpson 則と呼ぶ。

$f\colon \mathbf{R}\to\mathbf{R}$ が周期 $b-a$ の周期関数である場合、1 周期にわたる積分

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

を台形則で計算することを考える。台形則の公式は

$$T_n=h\left(\frac{1}{2}f(a)+\sum_{j=1}^{n-1}f(a+jh)+\frac{1}{2}f(b)\right)$$

であったが、$f(a)=f(b)$ に注意すると

$$T_n=h\sum_{j=0}^{n-1}f(a+jh)=h\sum_{j=1}^{n}f(a+jh)$$

とも表せる。(この式からも容易にわかるように、周期関数の 1 周期にわたる積分を計算する場合、台形則と中点則は本質的には同じものである。)

f が C^{2m}-級ならば Euler-Maclaurin の公式から、

$$I-T_n=R_m=\frac{h^{2m+1}}{(2m)!}\int_0^1 B_{2m}(t)\left(\sum_{k=0}^{n-1}f^{(2m)}(a+kh+ht)\right)dt,\quad h=(b-a)/n$$

であるから、高精度であることが期待できる。

実際に被積分関数の計算回数をそろえて比較すると、台形則は Simpson 則よりもはるかに高精度の値が得られることが多い。

2.8 解析関数の R 全体における定積分

$f\colon \mathbf{R}\to\mathbf{R}$ が解析関数であるとする (つまり $\mathbf{R}\subset\mathbf{C}$ と見なしたとき、f は $\mathbf{C}$ における $\mathbf{R}$ の近傍で正則な関数に拡張できる)。このとき

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

を数値積分することを考える。

$h > 0$ を刻み幅とする台形公式を

$$T_h \overset{\text{def.}}{=} h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh)$$

で定義する。実際の計算では十分大きな N を取って

$$T_{h,N} \overset{\text{def.}}{=} h \sum_{n=-N}^{N} f(nh)$$

で T_h の代用とする。

ある意味で台形公式は最適な公式であることが証明できる。

次の二つの命題の証明は杉原・室田 [1]

定理 2.8.1 () $\mathcal{D}(d) = \{z \in \mathbf{C}; |\Im z| < d\}$ で正則な関数 f が、次の二条件を満足する。

(i) $\forall c \in (0, d)$ に対して、

$$\Lambda(f, c) \overset{\text{def.}}{=} \int_{\mathbf{R}} (|f(x - ic)| + |f(x + ic)|)\, dx$$

が存在し、極限

$$\Lambda(f, d - 0) \overset{\text{def.}}{=} \lim_{c \uparrow d} \Lambda(f, c)$$

が有限確定であるとする。

(ii) $\forall c \in (0, d)$ に対して、

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

このとき、任意の $h > 0$ に対して、

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

(ここに π を 240 億桁近似するという、一見不思議な公式を！)

2.9 2 重指数関数型公式

2.9.1 基本的なアイディア

高橋秀俊, 森正武の研究として名高い **2 重指数関数型積分公式** (**double exponential formula**) を解説する。

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

に

$$a = \lim_{t \to -\infty} \varphi(t), \quad b = \lim_{t \to \infty} \varphi(t)$$

を満足する滑らかな単調増加関数 $\varphi\colon \mathbf{R} \to (a, b)$ を用いて変数変換

$$x = \varphi(t)$$

を施すと

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

この積分に台形公式を適用すると

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

φ をどう選択するのが良いだろうか？話を簡単にするために h は固定しておくことにする。I_h は無限和なので、実際の計算では

$$I_{h,N} = h \sum_{n=-N}^{N} f(\varphi(nh))\varphi'(nh).$$

で代用することを考えると、

$$\varepsilon_{\mathrm{t}} \overset{\text{def.}}{=} I_h - I_{h,N}$$

という誤差 (「項の打ち切り誤差」) を小さくしたいが、そのためには $|t| \to \infty$ とするとき、$\varphi(t)$ は速く 0 に減衰することが望まれる。ところがあまり急激に $\varphi(t)$ が減衰すると、刻み幅 h が相対的に大きくなり、逆に精度が落ちると考えられる。離散化誤差

$$\Delta I_h \overset{\text{def.}}{=} I - I_h$$

と ε_{t} がほぼ等しくなるところで無限和を切ると仮定して解析を行うと、

$$\varphi'(t) \fallingdotseq \exp(-C\exp|t|) \quad (|t| \to \infty) \tag{2.2}$$

の形であるときにある意味で最適な公式が得られる (高橋秀俊&森正武) [3]。

念のため: (2.2) はもちろん

$$\lim_{t\to\infty} \varphi'(t) = 0 \quad \text{(収束が非常に速い)}$$

を意味するが、それから $\varphi(t)$ が $t \to -\infty, \infty$ のとき $\varphi(a), \varphi(b)$ に急速に近づくことにもなる。

2.9.2 具体的な積分公式

有限区間上の積分

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

に対しては

$$\varphi(t) \overset{\text{def.}}{=} \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right) \quad (t \in \mathbf{R})$$

とおいて、変数変換 $x = \varphi(t)$ を施す。

$$\varphi'(t) = \frac{\pi}{2}\frac{\cosh t}{\cosh^2(\pi/2\sinh t)}$$

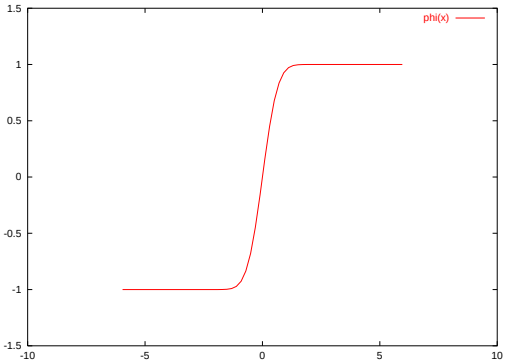
であり、もちろん

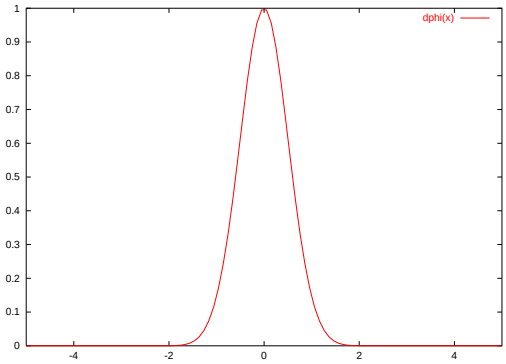
$$\lim_{t\to\pm\infty} \varphi(t) = \pm 1 \quad \text{(複号同順)}, \qquad \lim_{t\to\pm\infty} \varphi'(t) = 0.$$

念のため公式を書いておくと

$$I_h = \frac{\pi}{2}h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh nh\right)\right)\frac{\cosh nh}{\cosh^2(\pi/2\sinh nh)}.$$

[3] その後、杉原正顯氏によって、この最適性は定理の形で厳密に述べられるようになった。





R 上の減衰の緩い関数の積分

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

において、$x \to \infty$ のとき f の減衰が「緩い」、例えば

$$\exists r > 1 \quad \text{s.t.} \quad f(x) \sim \frac{C}{|x|^r}$$

のような代数的な減衰の場合は、直接台形則を適用するのではなく、

$$\varphi(t) = \sinh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$$

とおいて、変数変換 $x = \varphi(t)$ を施すことで、効率の良い公式が得られる。

$$\lim_{t\to\pm\infty} \varphi(t) = \pm\infty \quad \text{(複号同順)}.$$

この場合は、$t \to \pm\infty$ のとき $\varphi'(t)$ は 減衰しないが、$f(\varphi(t))\varphi'(t)$ は二重指数関数的に減衰する。
念のため公式を書いておくと

$$I_h = \frac{\pi h}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\sinh\left(\frac{\pi}{2}\sinh nh\right)\right)\cosh nh\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh nh\right).$$

半無限区間上の減衰の緩い関数の積分

$$I = \int_{0}^{\infty} f(x)\,dx$$

において f の減衰が代数的な場合は、

$$\varphi(t) \overset{\text{def.}}{=} \exp(\pi\sinh t) \quad (t \in \mathbf{R})$$

とおいて、変数変換 $x = \varphi(t)$ を施す。

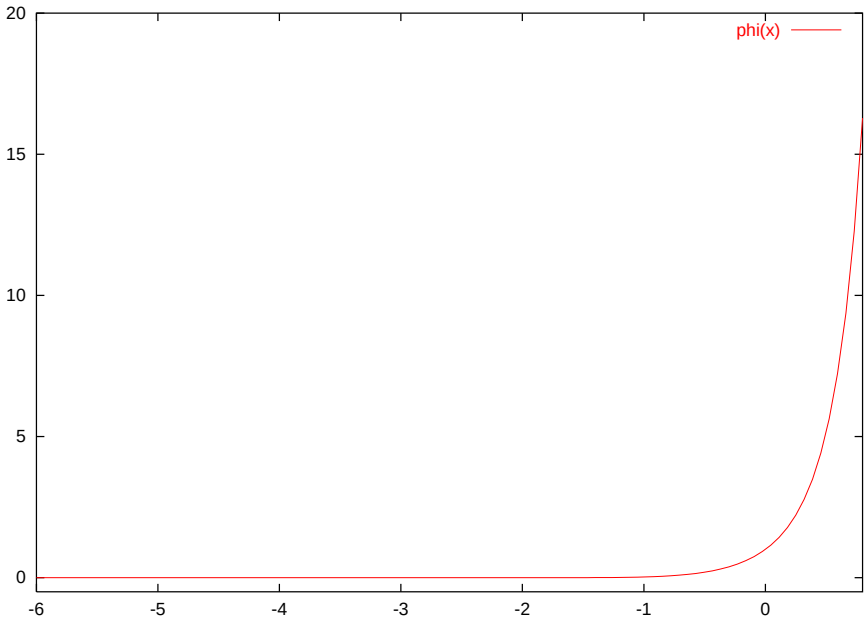
$$\varphi'(t) = \pi\exp(\pi\sinh t)\cosh t$$

であり、

$$\lim_{t\to-\infty}\varphi(t) = 0, \quad \lim_{t\to\infty}\varphi(t) = \infty, \quad \lim_{t\to-\infty}\varphi'(t) = 0.$$

$t \to \infty$ のとき $\varphi'(t)$ は 減衰しないが、$f(\varphi(t))\varphi'(t)$ は二重指数関数的に減衰する。
念のため公式を書いておくと

$$I_h = \pi h\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\exp(\pi\sinh nh))\exp(\pi\sinh nh)\cosh nh.$$



一重指数関数的な減衰をする関数の積分

例えば

$$I = \int_0^\infty f(x)\,dx$$

において、

$$f(x) \sim f_1(x)e^{-x} \quad (x \to \infty), \quad (f_1(x) \text{ は減衰が代数的か、あるいは単に有界で減衰しない})$$

のような場合、

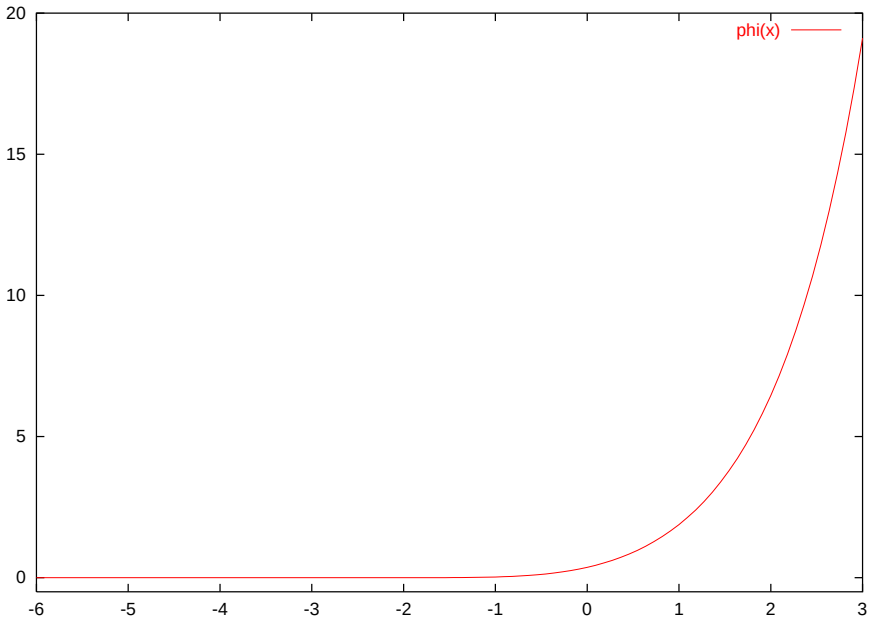
$$\varphi(t) = \exp(t - \exp(-t))$$

とおいて、変数変換 $x = \varphi(t)$ を施してから台形公式を適用する。

$$\lim_{t\to-\infty} \varphi(t) = 0, \quad \lim_{t\to\infty} \varphi(t) = \infty, \quad \lim_{t\to-\infty} \varphi'(t) = 0.$$

$t \to \pm\infty$ のとき $\varphi'(t)$ は 減衰しないが、$f(\varphi(t))\varphi'(t)$ は二重指数関数的に減衰する。

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\exp(nh - \exp(-nh))\right)\left(1 + \exp(-nh)\right)\exp(nh - \exp(-nh)).$$



2.9.3 基本的な性質

- 端点における特異性に強い。例えば次のような積分でも大丈夫。

$$I = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\, dx$$

- (誤差の性質)

$$\Delta I_h \sim \exp\left(-\frac{C}{h}\right).$$

これから

$$\Delta I_{h/2} \sim \exp\left(-\frac{2C}{h}\right) \sim (\Delta I_h)^2.$$

つまり刻み幅を半分にすると、結果の有効桁数が 2 倍になる。

- Simpson 則などと比べて桁違い
  - 同じ手間で何桁も良い
  - 同じ桁数を得るのに手間が桁違い
- Gauss 型公式と比べても
  - 自動積分が出来るのは有利
  - 分点や重みが計算しやすい
- 低次の多項式に対しても誤差が 0 とはならない (**固有誤差**)。
- アンダーフロー、オーバーフローが起こりやすく、使用上の注意が必要

2.10 計算例

以下 C 言語で書いたプログラムとその実行結果を示す。
プログラム例が見たければ、森 [5] を勧める。

2.10.1 以下のプログラムで共通して用いる関数の定義

nint.h

```
/*
 * nint.h --- 複合台形則, 複合中点則, 複合 Simpson 則
 */

typedef double rrfunction(double);

double trapezoidal(rrfunction, double, double, int);
double midpoint(rrfunction, double, double, int);
double simpson(rrfunction, double, double, int);
```

nint.c

```
/*
 * nint.c --- 複合台形則, 複合中点則, 複合 Simpson 則
 *
 *  コンパイル: gcc -c nint.c
 */

#include <math.h>
#include "nint.h"

/* 関数 f の [a,b] における積分の複合台形則による数値積分 T_m */
double trapezoidal(rrfunction f, double a, double b, int m)
{
  int j;
  double h = (b - a)/ m, T = (f(a) + f(b)) / 2;
  for (j = 1; j < m; 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中点則による数値積分 M_m */
double midpoint(rrfunction f, double a, double b, int m)
{
  int j;
  double h = (b - a) / m, C = 0.0;
  for (j = 1; j <= m; j++) C += f(a + (j - 0.5) * h);
  C *= h;
  return C;
}

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

nint.c をコンパイルして nint.o を作っておく。

nint.o の作り方

```
gcc -O -c nint.c
```

2.10.2 台形則と中点則の関係

例 2.10.1

$$\int_1^2 \frac{dx}{x} = \log 2$$

の計算を通して、$T_{2m} = (T_m + M_m)/2$ という関係が成り立つことの確認をしてみよう。

nint0.c

```
/*
 * nint0.c --- 複合台形則 T_m, 複合中点則 M_m について
 *               T_{2m} = (T_m+M_m)/2
 *             が成り立つことの確認 (f(x)=1/x の [1,2] における定積分)
 *
 *  コンパイル: gcc -o nint0 nint0.c nint.o
 *    ただし nint.o は gcc -c nint.c として準備しておく。
 */

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include "nint.h"

rrfunction f;

int main()
{
  int m;
  double Tm, Mm, T2m, mean;

  printf("#   m\t 台形則 Tm\t 中点則 Mm\t(Tm+Mm)/2\t\tT_{2m}\t\t 差\n");
  for (m = 1; m <= (1 << 16); m *= 2) {
    /* Tm: 台形則, Mm: 中点則, S: Simpson 則 */
    Tm = trapezoidal(f, 1.0, 2.0, m);
    T2m = trapezoidal(f, 1.0, 2.0, 2 * m);
    Mm = midpoint(f, 1.0, 2.0, m);
    mean = (Tm + Mm) / 2;
    printf("%5d %18.15f%18.15f %18.15f%18.15f %e\n",
           m, Tm, Mm, T2m, mean, fabs(T2m - mean));
  }
  return 0;
}

/* 被積分関数 */
double f(double x)
{
  return 1 / x;
}
```

nint0 の実行結果

```
#   m   台形則 Tm         中点則 Mm         (Tm+Mm)/2              T_{2m}          差
    1  0.750000000000000 0.666666666666667  0.708333333333333 0.708333333333333 0.000000e+00
    2  0.708333333333333 0.685714285714286  0.697023809523809 0.697023809523809 0.000000e+00
    4  0.697023809523809 0.691219891219891  0.694121850371850 0.694121850371850 0.000000e+00
    8  0.694121850371850 0.692660554043203  0.693391202207527 0.693391202207527 1.110223e-16
   16  0.693391202207527 0.693025214330971  0.693208208269249 0.693208208269249 1.110223e-16
   32  0.693208208269249 0.693116669497558  0.693162438883403 0.693162438883403 1.110223e-16
   64  0.693162438883403 0.693139551572812  0.693150995228108 0.693150995228108 3.330669e-16
  128  0.693150995228108 0.693145273236777  0.693148134232443 0.693148134232442 8.881784e-16
  256  0.693148134232443 0.693146703724379  0.693147418978410 0.693147418978411 1.332268e-15
  512  0.693147418978410 0.693147061350755  0.693147240164583 0.693147240164582 6.661338e-16
 1024  0.693147240164583 0.693147150757630  0.693147195461108 0.693147195461106 1.887379e-15
 2048  0.693147195461108 0.693147173109364  0.693147184285235 0.693147184285236 1.332268e-15
 4096  0.693147184285235 0.693147178697300  0.693147181491270 0.693147181491268 2.442491e-15
 8192  0.693147181491270 0.693147180094283  0.693147180792774 0.693147180792776 1.887379e-15
16384  0.693147180792774 0.693147180443531  0.693147180618150 0.693147180618153 2.886580e-15
32768  0.693147180618150 0.693147180530836  0.693147180574505 0.693147180574493 1.176836e-14
65536  0.693147180574505 0.693147180552671  0.693147180563600 0.693147180563588 1.265654e-14
```

当然のことながら、丸め誤差の程度で一致する (実験に用いた C 言語処理系の double の精度は 10 進 16 桁程度)。

2.10.3　台形則, 中点則, Simpson 則の比較

例 2.10.2 (滑らかな関数の積分) やはり

$$I = \int_1^2 \frac{dx}{x} = \log 2 = 0.69314718\cdots$$

を、3 つの方法で計算して、結果を比較する。

誤差の表

# N	台形則の誤差	中点則の誤差	Simpson 則の誤差
1	-5.685282e-02	2.648051e-02	-1.297264e-03
2	-1.518615e-02	7.432895e-03	-1.067877e-04
4	-3.876629e-03	1.927289e-03	-7.350095e-06
8	-9.746698e-04	4.866265e-04	-4.722595e-07
16	-2.440216e-04	1.219662e-04	-2.972988e-08
32	-6.102771e-05	3.051106e-05	-1.861510e-09
64	-1.525832e-05	7.628987e-06	-1.163973e-10
128	-3.814668e-06	1.907323e-06	-7.275514e-12
256	-9.536725e-07	4.768356e-07	-4.551914e-13
512	-2.384185e-07	1.192092e-07	-2.797762e-14
1024	-5.960464e-08	2.980232e-08	-2.220446e-15
2048	-1.490116e-08	7.450581e-09	-2.220446e-16
4096	-3.725290e-09	1.862645e-09	2.220446e-16
8192	-9.313247e-10	4.656625e-10	2.220446e-16
16384	-2.328292e-10	1.164144e-10	-1.110223e-16
32768	-5.820444e-11	2.910883e-11	4.329870e-15
65536	-1.455958e-11	7.274403e-12	-3.663736e-15

数表では今一つ分かりにくいでの、両側対数グラフにプロットしてみる。ここで用いているグラフ描画ソフト gnuplot については、

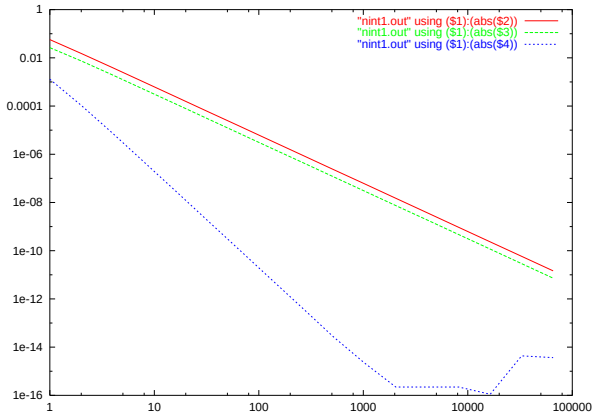
http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/howto/index.html#gnuplot

特に

『gnuplot 入門』 by 桂田祐史

http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/howto/intro-gnuplot/

を参照せよ。



gnuplot 用プログラム show_error1.gp

```
# show_nint1.gp --- gnuplot 用プログラム
#   ./nint1 > nint1.out として作ったデータを読んでグラフを描く
#   結果を nint1.eps に出力
set logscale xy
plot "nint1.out" using ($1):(abs($2)) with lines, \
     "nint1.out" using ($1):(abs($3)) with lines, \
     "nint1.out" using ($1):(abs($4)) with lines
pause -1 "終了するにはリターンを押してください"
set term postscript eps color
set output "nint1.eps"
replot
```

nint1.c

```
/*
 * nint1.c --- 1/x の [1,2] における定積分を
 *           複合台形則，複合中点則，複合 Simpson 則で計算して誤差を比較
 *
 *  コンパイル: gcc -o nint1 nint1.c nint.o -lm
 *    ただし nint.o は gcc -c nint.c として準備しておく。
 */

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include "nint.h"

rrfunction f;

int main()
{
  int N;
  double I = log(2.0), Tm, Mm, S2m;

  printf("#   N   台形則の誤差   中点則の誤差   Simpson 則の誤差\n");
  for (N = 1; N <= (1 << 16); N *= 2) {
    /* Tm: 台形則, Mm: 中点則, S2m: Simpson 則 */
    Tm = trapezoidal(f, 1.0, 2.0, N);
    Mm = midpoint(f, 1.0, 2.0, N);
    S2m = (Tm + 2 * Mm) / 3;
    printf("%5d\t%e\t%e\t%e\n", N, I - Tm, I - Mm, I - S2m);
  }
  return 0;
}

/* 被積分関数 */
double f(double x)
{
  return 1 / x;
}
```

これから

$$|I - S_{2m}| \ll |I - T_m|, |I - M_m|.$$

より詳しくは

$$I - T_m = O\left(\frac{1}{m^2}\right), \quad I - M_m = O\left(\frac{1}{m^2}\right), \quad I - S_{2m} = O\left(\frac{1}{m^4}\right)$$

という挙動を示していることが分る。また

$$(I - T_m) : (I - M_m) \fallingdotseq 2 : (-1)$$

となっていることも分かる。 ■

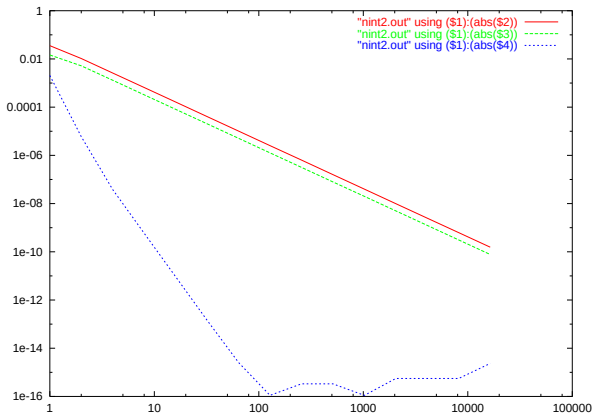
例 2.10.3 (Simpson 則がやけに高精度な例)

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$$

に対して $|I - S_n|$ は異常に小さくなることが知られている。

誤差の表

# N	台形則の誤差	中点則の誤差	Simpson 則の誤差
1	3.539816e-02	-1.460184e-02	2.064830e-03
2	1.039816e-02	-5.190072e-03	6.006535e-06
4	2.604046e-03	-1.301966e-03	3.778277e-08
8	6.510398e-04	-3.255190e-04	5.912427e-10
16	1.627604e-04	-8.138018e-05	9.239165e-12
32	4.069010e-05	-2.034505e-05	1.442180e-13
64	1.017253e-05	-5.086263e-06	2.553513e-15
128	2.543132e-06	-1.271566e-06	-1.110223e-16
256	6.357829e-07	-3.178914e-07	3.330669e-16
512	1.589457e-07	-7.947286e-08	-3.330669e-16
1024	3.973643e-08	-1.986821e-08	1.110223e-16
2048	9.934108e-09	-4.967053e-09	5.551115e-16
4096	2.483527e-09	-1.241763e-09	5.551115e-16
8192	6.208802e-10	-3.104410e-10	-5.551115e-16
16384	1.552228e-10	-7.760781e-11	2.331468e-15



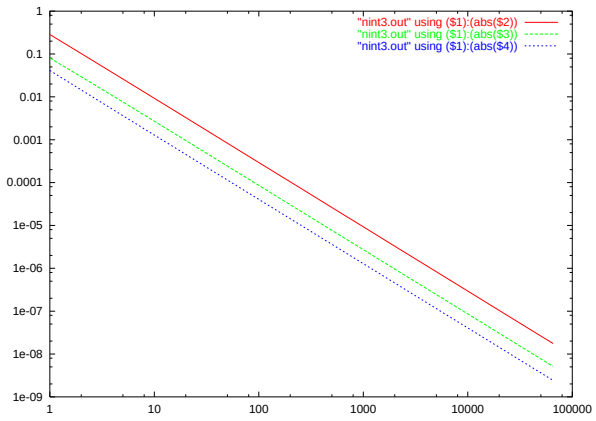
例 2.10.4 (積分区間に特異点が含まれる例) 積分区間に特異点を含む定積分

$$I = \int_0^1 \sqrt{1-x^2}\, dx$$

に対しては、複合台形則、複合中点則、複合 Simpson 則のいずれも低い精度しかでない。

誤差の表

# N	台形則の誤差	中点則の誤差	Simpson 則の誤差
1	2.853982e-01	-8.062724e-02	4.138123e-02
2	1.023855e-01	-2.944367e-02	1.449937e-02
4	3.647090e-02	-1.058414e-02	5.100871e-03
8	1.294338e-02	-3.773569e-03	1.798746e-03
16	4.584904e-03	-1.339789e-03	6.351089e-04
32	1.622558e-03	-4.746873e-04	2.243944e-04
64	5.739352e-04	-1.680046e-04	7.930866e-05
128	2.029653e-04	-5.942998e-05	2.803511e-05
256	7.176766e-05	-2.101722e-05	9.911071e-06
512	2.537522e-05	-7.431692e-06	3.503944e-06
1024	8.971763e-06	-2.627674e-06	1.238805e-06
2048	3.172045e-06	-9.290536e-07	4.379792e-07
4096	1.121496e-06	-3.284755e-07	1.548482e-07
8192	3.965100e-07	-1.161346e-07	5.474696e-08
16384	1.401877e-07	-4.105994e-08	1.935595e-08
32768	4.956389e-08	-1.451691e-08	6.843354e-09
65536	1.752349e-08	-5.132508e-09	2.419491e-09



例 2.10.5 解析的周期関数の数値積分を見てみよう。n 次の第 1 種 Bessel 関数 $J_n(x)$ は

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \cos(nt - x\sin t)\,dt$$

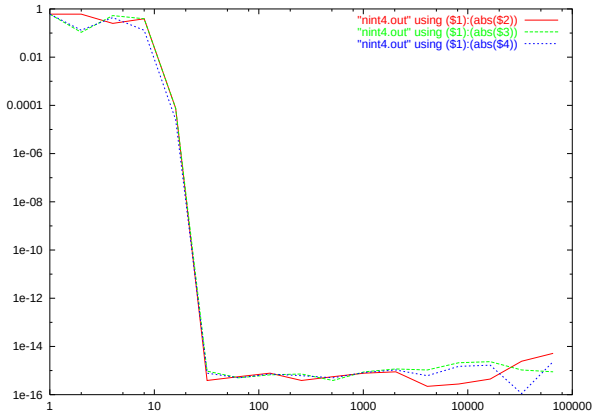
と積分表示できるが、これは解析的周期関数の一周期に渡る積分だから、台形則で非常に精密に計算できるはずである。$n = 4$, $x = 5$ のときの値、すなわち $J_4(5)$ の値を見てみよう。

nint4.c

```
/*
 * nint4.c --- 解析的周期関数の数値積分
 *
 *  n 次の第一種 Bessel 関数 J_n(x) は
 *
 *            1    π
 *    J_n(x)=---∫   cos (n t - x sin t) dt
 *           2π  -π
 *
 * と積分表示できるが、これは解析的周期関数だから、台形則で非常に
 * 精密に計算できるはずである。
 *
 * UNIX の数学関数ライブラリィには jn(int,double) という名前で関数が
 * 用意されているので、これと比較してみる。
 *
 *  コンパイル: gcc -o nint4 nint4.c nint.o -lm
 *    ただし nint.o は gcc -c nint.c として準備しておく。
 */

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include "nint.h"

rrfunction f;

/* n 次の Bessel 関数の x での値に注目 */
int n;
double x;

/* 被積分関数 */
double f(double t)
{
  return cos(n * t - x * sin(t));
}

int main()
{
  int m;
  double pi = 4.0 * atan(1.0), I, T, M, S;

  /* J4(5) */
  n = 4; x = 5.0;

  /* ライブラリィ関数 */
  I = jn(n, x);

  printf("# 解析的周期関数 cos(%d t - %g sin t) の [-π, π] における積分\n",
 n, x);
  printf("# 複合台形則 T_m, 複合中点則 M_m, 複合 Simpson 則 S_{2m} の誤差\n");
  printf("    m         I-T_m          I-M_m         I-S_{2m}\n");
  for (m = 1; m <= (1 << 16); m *= 2) {
    /* T: 台形則, M: 中点則, S: Simpson 則 */
    T = trapezoidal(f, - pi, pi, m) / (2 * pi);
    M = midpoint(f, - pi, pi, m) / (2 * pi);
    S = (T + 2 * M) / 3;
    printf("  %5d\t%14e\t%14e\t%14e\n", m, I - T, I - M, I - S);
  }
  return 0;
}
```

誤差の表

```
# 解析的周期関数 cos(4 t - 5 sin t) の [-π , π] における積分
# 複合台形則 T_m, 複合中点則 M_m, 複合 Simpson 則 S_{2m} の誤差
    m         I-T_m          I-M_m          I-S_{2m}
    1  -6.087676e-01   -6.087676e-01   -6.087676e-01
    2  -6.087676e-01    1.075702e-01   -1.312091e-01
    4  -2.505987e-01   -5.321711e-01   -4.383136e-01
    8  -3.913849e-01    3.912324e-01    1.303599e-01
   16  -7.627816e-05    7.627816e-05    2.542605e-05
   32  -3.885781e-16   -9.436896e-16   -7.771561e-16
   64  -5.551115e-16   -4.996004e-16   -4.996004e-16
  128  -7.771561e-16   -6.661338e-16   -7.216450e-16
  256  -3.885781e-16   -7.216450e-16   -6.106227e-16
  512  -5.551115e-16   -3.885781e-16   -4.996004e-16
 1024  -7.771561e-16   -8.881784e-16   -8.326673e-16
 2048  -8.881784e-16   -1.165734e-15   -1.054712e-15
 4096   2.220446e-16   -1.054712e-15   -6.106227e-16
 8192  -2.775558e-16   -2.109424e-15   -1.498801e-15
16384  -4.440892e-16   -2.331468e-15   -1.665335e-15
32768  -2.442491e-15    1.054712e-15   -1.110223e-16
65536  -5.162537e-15   -8.881784e-16   -2.331468e-15
```



かなり小さな分割数 m に対して非常に高精度の値が得られている。$m = 32$ のとき、複合台形則 T_{32}, 複合中点則 M_{32} ともに 10^{-16} 程度と double 型の計算精度一杯の値が得られている (実は丸め誤差がなければ 3.7×10^{-19} 程度の値であるとか)。一方で複合 Simpson 則 S_{32} については $I - S_{32} \fallingdotseq 2.5 \times 10^{-5}$ であまり精度が出ていない。(グラフでは同じ m について T_m, M_m, S_{2m} を比較しているので同程度の精度に見えるが、本来は被積分関数の計算回数を揃えて比較すべきであろう。そうすると Simpson 則は他の二つの方法に比べて見劣りすることが分る。)

2.10.4 数直線上の解析関数の数値積分

例 2.10.6 確率積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, dx = \sqrt{\pi}$$

は数直線上の解析関数だから台形則で高精度に計算できるはず。

nint5.c

```
/*
 * nint5.c --- 確率積分
 *          ∞
 *    I = ∫   exp(-x^2)dx = √π
 *        -∞
 * は R 上の解析関数の積分だから、台形則
 *             ∞
 *    T_h = h Σ    f(n h)              (ただし f は被積分関数)
 *           n=-∞
 * あるいは、その打ち切り
 *                N
 *    T_{h,N} = h Σ    f(n h)
 *               n=-N
 * で非常に精密に計算できるはずである。
 *
 *  コンパイル: gcc -o nint5 nint5.c -lm
 */

#include <stdio.h>
#include <math.h>

typedef double rrfunction(double);
rrfunction f;
double trapezoidal2(rrfunction, double, int);

/* 被積分関数 */
double f(double x)
{
  return exp(- x * x);
}

int main()
{
  int m, N;
  double pi, I, h, T;

  /* 円周率, 確率積分の真値 */
  pi = 4.0 * atan(1.0); I = sqrt(pi);

  printf(" m      h              I-T\n");
  for (m = 1; m <= (1 << 2); m *= 2) {
    h = 1.0 / m;
    /* [-6,6] で打ち切る */
    N = m * 6;
    T = trapezoidal2(f, h, N);
    printf("%2d\t%g\t%14e\n", m, h, I - T);
  }
  return 0;
}

double trapezoidal2(rrfunction f, double h, int N)
{
  int j;
  double T = 0.0;
  for (j = - N; j <= N; j++) T += f(j * h);
  T *= h;
  return T;
}
```

誤差の表

```
m      h             I-T
1      1        -1.833539e-04
2      0.5      -2.220446e-16
4      0.25     -4.440892e-16
```

2.10.5 DE 公式

例 2.10.7 (端点の特異性くらい何でもない)

$$I = \int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2}\, dx = \frac{\pi}{2}, \quad J = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\, dx = \pi.$$

誤差の表

```
test1 (sqrt(1-x^2) の積分)
 h=1.000000, I_h=       1.7125198292703636, I_h-I=1.417235e-01
 h=0.500000, I_h=       1.5709101233831164, I_h-I=1.137966e-04
 h=0.250000, I_h=       1.5707963267997540, I_h-I=4.857448e-12
 h=0.125000, I_h=       1.5707963267948970, I_h-I=4.440892e-16
 h=0.062500, I_h=       1.5707963267948970, I_h-I=4.440892e-16
 h=0.031250, I_h=       1.5707963267948954, I_h-I=-1.110223e-15
 h=0.015625, I_h=       1.5707963267948979, I_h-I=1.332268e-15
 h=0.007812, I_h=       1.5707963267948957, I_h-I=-8.881784e-16
 h=0.003906, I_h=       1.5707963267948959, I_h-I=-6.661338e-16
 h=0.001953, I_h=       1.5707963267948954, I_h-I=-1.110223e-15
test2 (1/sqrt(1-x^2) の積分)
 h=1.000000, I_h=       3.1435079763395435, I_h-I=1.915323e-03
 h=0.500000, I_h=       3.1415926717394895, I_h-I=1.814970e-08
 h=0.250000, I_h=       3.1415926194518016, I_h-I=-3.413799e-08
 h=0.125000, I_h=       3.1415926318228000, I_h-I=-2.176699e-08
 h=0.062500, I_h=       3.1415926343278695, I_h-I=-1.926192e-08
 h=0.031250, I_h=       3.1415926326210664, I_h-I=-2.096873e-08
 h=0.015625, I_h=       3.1415926323669550, I_h-I=-2.122284e-08
 h=0.007812, I_h=       3.1415926327540102, I_h-I=-2.083578e-08
 h=0.003906, I_h=       3.1415926312582481, I_h-I=-2.233155e-08
 h=0.001953, I_h=       3.1415926319069580, I_h-I=-2.168284e-08
```

nint6.c

```
/*
 * nint6.c --- DE 公式
 *
 *          1      2 (1/2)
 *  I1 = ∫    (1-x )     dx = π/2
 *        -1
 *
 *          1      2 (-1/2)
 *  I2 = ∫    (1-x )      dx = π
 *        -1
 *
 *  いずれも端点に特異性があって、古典的な数値積分公式はうまく行かない。
 *  double exponential formula (DE 公式) ならばうまく計算できる。
 *
 *  コンパイル: gcc -o nint6 nint6.c -lm
 *
 *  学生 (横山和正君) の指摘により少し修正を加える (2004/1/15)。
 */
```

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

typedef double rrfunction(double);

double debug = 0;
double pi, halfpi;

/* φ */
double phi(double t)
{
  return tanh(halfpi * sinh(t));
}

/* 2乗 */
double sqr(double x) { return x * x; }

/* φ' */
double dphi(double t)
{
  return halfpi * cosh(t) / sqr(cosh(halfpi * sinh(t)));
}

/* DE 公式による (-1,1) における定積分の計算 */
double de(rrfunction f, double h, double N)
{
  int n;
  double t, S, dS;
  S = f(phi(0.0)) * dphi(0.0);
  for (n = 1; n <= N; n++) {
    t = n * h;
    dS = f(phi(t)) * dphi(t) + f(phi(-t)) * dphi(- t);
    S += dS;
    if (fabs(dS) < 1.0e-16) {
      if (debug)
        printf("\tde(): n=%d, |t|=%g, fabs(dS)=%g\n", n, t, fabs(dS));
      break;
    }
  }
  return h * S;
}

/* テスト用の被積分関数 その1 */
double f1(double x)
{
  return sqrt(1 - x * x);
}

/* テスト用の被積分関数 その2 */
double f2(double x)
{
  if (x >= 1.0 || x <= -1.0) return 0; else return 1 / sqrt(1 - x * x);
}

void test(rrfunction f, double exact)
{
  int m, N;
  double h, IhN;

  /* |t|≦ 10 まで計算することにする */
  h = 1.0; N = 10;
  /* h を半分, N を倍にして double exponential formula で計算してゆく */
  for (m = 1; m <= 10; m++) {
```

```
    IhN = de(f, h, N);
    printf("h=%f, I_h=%25.16f, I_h-I=%e\n", h, IhN, IhN - exact);
    h /= 2; N *= 2;
  }
}

int main(int argc, char **argv)
{
  if (argc >= 2 && strcmp(argv[1], "-d") == 0)
      debug = 1;
  pi = 4.0 * atan(1.0); halfpi = pi / 2;

  printf("test1 (sqrt(1-x^2) の積分)\n");
  test(f1, halfpi);

  printf("test2 (1/sqrt(1-x^2) の積分)\n");
  test(f2, pi);

  return 0;
}
```

第3章　山本第7章「数値積分」から抜き書き

3.1　数値積分公式

積分

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

を求めるための近似公式[1]は、通常次の形である。

$$I_n(f) = \alpha_1 f(x_1) + \cdots + \alpha_n f(x_n) \quad (n \text{ 点公式}). \tag{3.1}$$

ここで α_j は定数, x_j は区間 $[a,b]$ における相異なる分点である。この公式による誤差を $E_n(f) \overset{\text{def.}}{=} I(f) - I_n(f)$ で表わし、条件

$$E_n(x^k) = 0 \quad (k = 0, 1, 2, \cdots, m)$$

が成り立つとき、公式 (3.1) は少なくとも m 次の精度を持つという。また

$$E_n(x^k) = 0 \quad (k = 0, 1, 2, \cdots, m), \quad E_n(x^{m+1}) \neq 0$$

が成り立つとき、公式 (3.1) は (ちょうど) m 次の精度を持つ、(ちょうど) m 次の積分公式であるという。

明らかに、ちょうど m 次の積分公式を用いるとき、高々 m 次の多項式 $f(x)$ について $E_n(f) = 0$, また $m+1$ 次の任意の多項式 $g(x)$ に対して、$E_n(g) \neq 0$ である。

n 点近似公式の作り方

$[a,b]$ 上に n 個の分点 $a \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_n \leq b$ を取り、それらに関する $n-1$ 次補間多項式を $p_{n-1}(x)$ とする。Lagrange の公式を用いて表わせば、

$$p_{n-1}(x) = \sum_{j=1}^{n} \ell_j^*(x) f(x_j), \quad \ell_j^*(x) = \prod_{i=1, i\neq j}^{n} \left(\frac{x - x_i}{x_j - x_i} \right).$$

多項式であることから、$I(p_{n-1})$ は簡単に表現できる。

$$I(p_{n-1}) = \int_a^b p_{n-1}(x)\, dx = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j f(x_j), \quad \alpha_j = \int_a^b \ell_j^*(x)\, dx.$$

そこで、$I(f)$ の近似として $I(p_{n-1})$ を採用してみると、これは確かに (3.1) の形をしていて、

$$\begin{aligned} F_n(f) &= I(f) - I_n(f) = \int_a^b \left(f(x) - p_{n-1}(x) \right) dx \\ &= \int_a^b (x - x_1) \cdots (x - x_n) f[x_1, \cdots, x_n, x] dx. \end{aligned}$$

[1] ある程度一般の f が与えられるものであると仮定している。

さらに f が $[a,b]$ において C^n-級ならば、

$$\exists \xi = \xi(x) \in (a,b) \quad \text{s.t.} \quad E_n(f) = \frac{1}{n!} \int_a^b (x - x_1) \cdots (x - x_n) f^{(n)}(\xi(x))\, dx.$$

特に $f(x) = x^k$ $(0 \leq k \leq n-1)$ ならば $f^{(n)}(x) \equiv 0$ であるから、$E_n(f) = 0$. つまり、これは少なくとも $n-1$ 次の公式である。

第4章　TO DO LIST

- 直交多項式の理論
- Gauss 型公式
- 高橋・森の誤差解析理論
- 杉原の DE 公式の最適性定理
- 多次元数値積分

森 [5]
Davis-Rabinowitz [6]
森・名取・鳥居 [7]
Davis-Rabinowitz [6]
山本 [3]
荒川・伊吹山・金子 [4]

関連図書

[1] 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).

[2] 森正武(まさたけ)：数値解析, 共立出版 (1973), 第 2 版が 2002 年に出版された。

[3] 山本哲朗(てつろう)：数値解析入門 [新訂版], サイエンス社 (2003), 1976 年初版発行の定番本の待望の改訂版.

[4] 荒川恒男, 伊吹山知義, 金子昌信：ベルヌーイ数とゼータ関数, 牧野書店 (2001).

[5] 森正武：FORTRAN 77 数値計算プログラミング, 岩波書店 (1990).

[6] Davis, P. J. and Rabinowitz, P.: *Methods of numerical integration*, Academic Press (1975, 1984), 初版の邦訳: 森正武訳, 計算機による数値積分法, 日本コンピュータ協会, 1980.

[7] 森 正武・名取 亮・鳥居達三：数値計算, 岩波講座・情報科学, 岩波書店 (1982), 4 章が森正武「数値積分」.