数値計算

数値積分

一般論，Newton-Cotes型公式

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

$w(x)$：密度関数

有限個の零点を除いて $[a, b]$ で $w(x) > 0$

$$\int_a^b x^k w(x)\, dx > 0 \quad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

数値積分公式の一般形

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

$$\left\{ \begin{array}{ll} x_1, x_2, \cdots, x_n \in [a, b] & \underline{\text{標本点}} \\ w_1, w_2, \cdots, w_n > 0 & \underline{\text{重み}} \end{array} \right.$$

補間型公式

$$f(x) \simeq f_n(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \frac{W_n(x)}{W_n'(x_k)(x - x_k)} \quad \left(W_n(x) = \prod_{k=1}^{n} (x - x_k) \right)$$

を積分して得られる公式

$$I \simeq I_n = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k), \quad w_k = \int_a^b \frac{W_n(x) w(x)}{W_n'(x_k)(x - x_k)}\, dx.$$

Newton-Cotes公式 … $w(x) \equiv 1$，等間隔標本点Lagrange補間から得られる数値積分公式

- $n = 2$ … 台形則

$$\int_a^b f(x)\, dx \simeq \frac{h}{2} \{ f(a) + f(b) \}, \quad h = b - a.$$

- $n = 3$ … Simpson則

$$\int_a^b f(x)\, dx \simeq \frac{h}{3} \left\{ f(a) + 4 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right\}, \quad h = \frac{b-a}{2}.$$

通常は積分区間を細分して各小区間上の積分に上記公式をあてはめる．

(台形則) $$\int_a^b f(x)\, dx \simeq h \left\{ \frac{1}{2} f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(a + kh) + \frac{1}{2} f(b) \right\}, \quad h = \frac{b-a}{n}$$

(Simpson則)

$$\int_a^b f(x)\, dx \simeq \frac{h}{3} \left\{ f(a) + 4 \sum_{k=1}^{n} f(a + (2k-1)h) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(a + 2kh) + f(b) \right\}, \quad h = \frac{b-a}{2n}$$

変数変換型数値積分公式

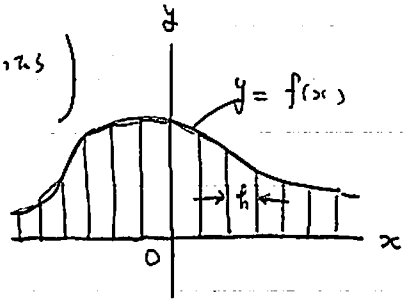
全無限区間積分に対する台形則

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

$$\simeq I_h \equiv h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh)$$

$$\simeq I_h^{(N_1,N_2)} \equiv h \sum_{k=-N_1}^{N_2} f(kh)$$

($|f(kh)| \leq \varepsilon$ となったら 和をうちきる.)



f(z) が実軸近傍で正則であるとき, 台形則の精度は高い.

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

$h = 0.5$ のときの相対誤差 : 0.0 (倍精度計算)

$N_1 = 12$, $N_2 = 12$, $N_1 + N_2 + 1 = 25$

任意区間 (a, b) $(-\infty < a < b < +\infty)$ 上の積分に上の事実を応用したい.

↓

変数変換 $x = \psi(t)$ により $(-\infty, +\infty)$ 上の積分に書き直し
台形則を適用する.

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(t))\,\psi'(t)\,dt$$

$$\simeq I_h \equiv h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi(kh))\,\psi'(kh)$$

$$\simeq I_h^{(N_1,N_2)} \equiv h \sum_{k=-N_1}^{N_2} f(\psi(kh))\,\psi'(kh).$$

※. 以降, $(a, b) = (-1, 1)$ とする. $\left(\int_a^b f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\xi\right) \frac{b-a}{2}\,d\xi \right)$

・ SE変換 (single exponential transform) … 一般的な呼び名ではない.

$$\psi(t) = \psi_{SE}(t) \equiv \tanh t$$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi_{SE}(t))\,\psi'_{SE}(t)\,dt \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi_{SE}(kh))\,\psi'_{SE}(kh)$$

$$\simeq h \sum_{k=-N_1}^{N_2} f(\psi_{SE}(kh))\,\psi'_{SE}(kh).$$

$$\psi_{SE}'(t) = \mathrm{sech}^2(t) \simeq 4\exp(-|t|) \quad (t \to \pm\infty)$$

$\Downarrow$

→ 小さい N_1, N_2 で無限和を打ち切る.

・もっと良い変数変換はないか？

<u>DE変換</u> (double exponential transform)

$$\cancel{\psi_{DE}(t) = \tanh(c \sinh t) \quad (c>0 \ \text{const.})}$$

* c は, 理論的には $c = \frac{\pi}{2}$ が最適である(厳密に定めなくてもよい).

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi_{DE}(t))\,\psi_{DE}'(t)\,dt$$

$$\simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi_{DE}(kh))\,\psi_{DE}'(kh)$$

$$\simeq h \sum_{k=-N_1}^{N_2} f(\psi_{DE}(kh))\,\psi_{DE}'(kh) \quad \cdots \underline{\text{DE公式}} \quad ①$$

$$\psi_{DE}'(t) = \frac{c\cosh t}{\cosh^2(c\sinh t)} \simeq 4c\exp(|t| - c\exp|t|) \quad (t \to \pm\infty)$$

… $t \to \pm\infty$ で二重指数関数的に減衰

⟶ もっと小さい N_1, N_2 で無限和を打ち切れる.

DE公式は端点に特異性をもつ積分に有効である.

$$\int_{-1}^{1} f_0(x)(1-x)^{\alpha-1}(1+x)^{\beta-1}\,dx \quad (\alpha, \beta > 0, \ f_0(x) : x \to \pm 1 \text{ で有界})$$

変数変換 $x = \psi_{DE}(t)$ を行うと,

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{DE}(t)) \left\{\frac{\exp(-c\sinh t)}{\cosh(c\sinh t)}\right\}^{\alpha-1} \left\{\frac{\exp(c\sinh t)}{\cosh(c\sinh t)}\right\}^{\beta-1} \frac{c\cosh t}{\cosh^2(c\sinh t)}\,dt$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{DE}(t)) \underbrace{\frac{c\cosh t \, \exp((\beta-\alpha)c\sinh t)}{\cosh^{\alpha+\beta}(c\sinh t)}}_{}\,dt$$

$0<\alpha, \beta<1$ のときも, この項は $t \to \pm\infty$ で減衰する.

しかし、DE公式のプログラム① に直接 $f(x) = f_0(x)(1-x)^{\alpha-1}(x+1)^{\beta-1}dx$ をつっこんではならない。

$\because \quad 1 \mp x = 1 \mp \tanh(c \sinh t) = \underbrace{1 - (\text{1に非常に近い数})}_{\text{桁落ちで精度が悪くなる.}}$

↓

$\alpha-1$乗 / $\beta-1$乗 すると、$0<\alpha, \beta<1$ の場合、
精度の悪い非常に大きい数となる。

次のようにプログラミングする。

$$\int_{-1}^{1} f_0(x)(1-x)^{\alpha-1}(1+x)^{\beta-1}dx$$

$$\simeq h\sum_{k=-N_1}^{N_2} f_0(\phi_{DE}(kh)) \frac{c\cosh(kh)\exp((\beta-\alpha)c\sinh(kh))}{\cosh^{\alpha+\beta}(c\sinh(kh))}.$$

無限区間積分に対する DE公式

$$\int_0^\infty f(x)\,dx \quad (f(x) : x \to +\infty \text{ で } x \text{ のべきで減衰})$$

$$\to \quad \phi(t) = \exp\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$$

$$\int_0^\infty f_1(x)\, e^{-x}\,dx$$

$$\to \quad \phi(t) = \exp(t - \exp(-t)).$$

$$\int_{-\infty}^\infty f(x)\,dx \quad (f(x) : x \to \pm\infty \text{ で } x \text{ のべきで減衰})$$

$$\to \quad \phi(t) = \sinh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right).$$