

数値解析と複素関数論 (5)

数値積分：全無限区間積分に対する台形則

緒方 秀教

電気通信大学 大学院情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻

2020 年 12 月 23 日 (水)

はじめに

数値積分の台形則.

- 数値積分則としては最も素朴なものである.
- しかし, 次の積分に対しては非常に有効である.
 - 周期関数である解析関数の一周期区間積分.
 - 解析関数の全無限区間積分.

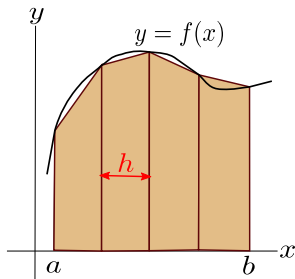
$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx.$$

今回は, 解析関数の全無限区間積分に対して何故台形則は有効か, 複素関数論の手法で説明します.

台形則による数値積分

台形則

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



積分 $\simeq$ 台形の面積の和.

数値例：台形則による数値積分

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} = 1.57079\ 63267\ 94897\ \dots$$

この積分を台形則で近似計算した（倍精度演算）。

N	積分値（台形則）	相対誤差
4	1.55000 00000 00000	1×10^{-2}
8	1.56558 82352 94118	3×10^{-3}
16	1.56949 42472 45545	8×10^{-4}
32	1.57047 08060 20695	2×10^{-4}
	...	
1024	1.57079 600890 3456	2×10^{-7}

まあ、こんなものかなあ…

全無限区間積分に対する台形則

ところが、解析関数の全無限区間積分に対しては、台形則は驚異的に高精度である。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh),$$

$|f(kh)| < \epsilon (\approx 0)$ となったら無限和を打ち切る。

全無限区間積分に対する台形則

ところが、解析関数の全無限区間積分に対しては、台形則は驚異的に高精度である。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh),$$

$|f(kh)| < \epsilon (\approx 0)$ となったら無限和を打ち切る。

(例)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} = 1.77245\ 38509\ 05516\ 02729\ 81674\ 83341 \dots$$

多倍長演算 (10 進 100 桁) で積分を計算 ($\epsilon = 10^{-100}$).

h	標本点数	相対誤差
1	35	1×10^{-4}
2^{-1}	65	1×10^{-17}
2^{-2}	125	5×10^{-69}
2^{-3}	247	7×10^{-106}

全無限区間積分に対する台形則

解析関数の全無限区間積分に対して何故台形則が有効か、
複素関数論に基づく理論誤差評価で種明かしする。

- ① 台形則の複素積分表示.
- ② 台形則の誤差の複素積分表示→理論誤差評価.
- ③ 鞍点法：複素積分の近似計算（数値積分の理論で有効）.

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \quad \text{求めたい積分}$$

$$\simeq I_h = h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh) \quad \text{台形則（刻み幅 } h\text{）}$$

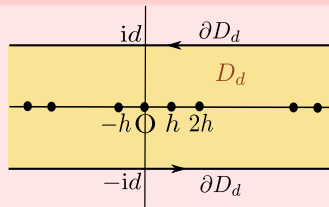
台形則の複素積分表示

定理 1: 台形則の複素積分表示

- ① $f(z)$ は帯状閉領域

$$D_d \equiv \{ z \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im} z| \leq d \}$$

($d > 0$) を含む領域で解析関数である。



- ② $f(z)$ は次の 2 条件を満たす。

$$\|f\|_d \equiv \oint_{\partial D_d} |f(z)| |dz| < \infty, \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \int_{-d}^d |f(x + iy)| dy = 0.$$

このとき、台形則は次のように複素積分表示される。

$$I_h = h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} f(z) \Psi_h(z) dz,$$
$$\Psi_h(z) = \pi \cot\left(\frac{\pi z}{h}\right).$$

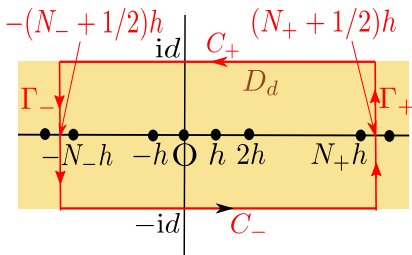
(証明) 台形則の複素積分表示

$$J \equiv \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) \Psi_h(z) dz,$$

$$\Psi_h(z) = \pi \cot\left(\frac{\pi z}{h}\right).$$

$f(z)\Psi_h(z)$ は C およびその内部において 1 位の極 $-N_-h, \dots, N_+h$ を除いて解析的であるから、留数定理により

$$J = \sum_{k=-N_-}^{N_+} \text{Res}(f\Psi_h, kh).$$



$$C = C_- + \Gamma_+ + C_+ + \Gamma_-.$$

$$\text{Res}(f\Psi_h, kh) = \lim_{z \rightarrow kh} (z - kh) f(z) \Psi_h(z) = \pi f(kh) \lim_{z \rightarrow kh} \frac{\cos(\pi z/h)}{\{\sin(\pi z/h)\}'} = hf(kh),$$

$$\therefore J = h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh).$$

(証明) 台形則の複素積分表示

$$h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) \Psi_h(z) dz,$$

$$\Psi_h(z) = \pi \cot\left(\frac{\pi z}{h}\right).$$

極限 $N_{\pm} \rightarrow \infty$ を考える. $\Gamma_{\pm}$ 上で

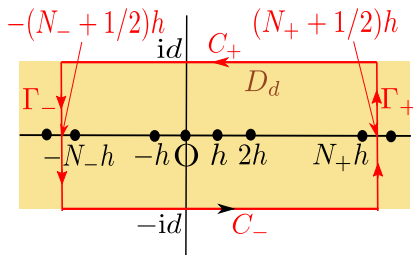
$$\begin{aligned} |\Psi_h(z)| &= \pi \left| \cot\left(\frac{\pi}{2} N_{\pm} + \frac{\pi}{h} (\operatorname{Im} z)\right) \right| \\ &\leq \pi \tanh\left(\frac{\pi}{h} |\operatorname{Im} z|\right) \leq \pi, \end{aligned}$$

そして, 仮定

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

より, $\Gamma_{\pm}$ 上の積分の寄与は消えるから,

$$h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} f(z) \Psi_h(z) dz.$$



$$C = C_- + \Gamma_+ + C_+ + \Gamma_-.$$

台形則の複素積分表示

(注意)

$$\text{条件} \quad \|f\|_d \equiv \oint_{\partial D_d} |f(z)| |dz| < \infty.$$

は、複素積分

$$I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} f(z) \Psi_h(z) dz$$

が存在するために要請した．次に注意．

$$|\Psi_h(z)| \leq \pi \coth \left(\frac{\pi d}{h} \right) \quad \text{on } \partial D_d, \quad \text{i.e.,} \quad |\operatorname{Im} z| = d$$

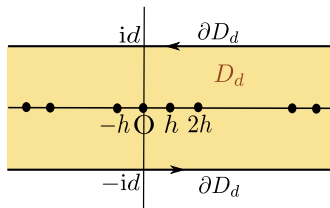
台形則の誤差の複素積分表示

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} f(z) \Psi(z) dz,$$

$$\Psi(z) = \mp i\pi \quad (\pm \operatorname{Im} z > 0),$$

$$I_h = h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} \Psi_h(z) dz,$$

$$\Psi_h(z) = \pi \cot\left(\frac{\pi z}{h}\right).$$



両者の差をとって,

定理 2: 台形則の誤差の複素積分表示

定理 1 の仮定のもとで,

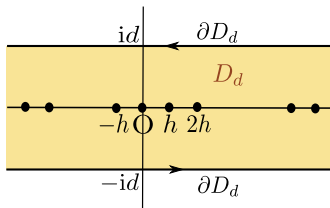
$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} f(z) \Phi_h(z) dz,$$

$$\Phi_h(z) = -\pi \frac{\exp(\pm i\pi z/h)}{\sin(\pi z/h)} \quad (\pm \operatorname{Im} z > 0).$$

台形則の理論誤差評価

$$|I - I_h| \leq \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial D_d} |f(z)| |\Phi_h(z)| |dz|,$$

$$\Phi_h(z) = -\pi \frac{\exp(\pm i\pi z/h)}{\sin(\pi z/h)} \quad (\pm \operatorname{Im} z > 0).$$



∂D_d 上 ($\operatorname{Im} z = \pm d$) で

$$|\Phi_h(z)| = 2\pi \left| \frac{e^{\pm 2\pi iz}}{1 - e^{\pm 2\pi iz}} \right| \leq 2\pi \frac{e^{-2\pi d/h}}{1 - e^{-2\pi d/h}} \simeq 2\pi \exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right),$$

$$\therefore |I - I_h| \lesssim \int_{\partial D_d} |f(z)| |dz| \times \exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right).$$

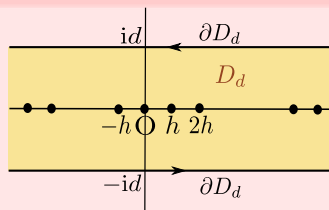
台形則の理論誤差評価

定理 3 : 台形則の理論誤差評価

- ① $f(z)$ は帯状閉領域

$$D_d \equiv \{ z \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im} z| < d \}$$

($d > 0$) を含む領域で解析関数である.



- ② $f(z)$ は次の 2 条件を満たす.

$$\|f\|_d \equiv \oint_{\partial D_d} |f(z)| |dz| < \infty, \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \int_{-d}^d |f(x + iy)| dy = 0.$$

このとき, 台形則に対する次の誤差評価が成り立つ.

$$|I - I_h| \lesssim \|f\|_d \exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right).$$

台形則は, 刻み幅 h を小さくすると指数関数的収束する.

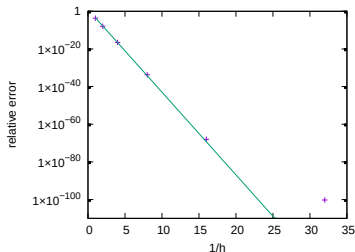
$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\cosh x} = \pi = 3.14159\ 26535\ 89793\ 23846\ 26433\ 83280 \dots$$

この積分を台形則で計算して誤差を調べた（10 進 100 桁多倍長演算）．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\cosh x} = \pi = 3.14159\ 26535\ 89793\ 23846\ 26433\ 83280 \dots$$

この積分を台形則で計算して誤差を調べた（10 進 100 桁多倍長演算）。

h	標本点数	相対誤差
1	465	2×10^{-4}
2^{-1}	927	1×10^{-8}
2^{-2}	1851	3×10^{-17}
2^{-3}	3699	2×10^{-34}
2^{-4}	7395	1×10^{-68}
2^{-5}	14785	6×10^{-101}



刻み幅 h を小さくするにつれて誤差は指数関数的に減衰する。

$$|I - I_h| = O \left[\exp \left(-\frac{c}{h} \right) \right].$$

理論誤差評価： $f(z)$ が $|\operatorname{Im} z| \leq d$ で解析関数ならば、

$$|I - I_h| = O \left[\exp \left(-\frac{2\pi d}{h} \right) \right].$$

今の数値例の場合、 $f(z) = 1/\cosh z$ は $|\operatorname{Im} z| < \pi/2$ で解析関数である.

→ $d \approx \pi/2$ ととって理論誤差評価してみる.

理論誤差評価: $f(z)$ が $|\operatorname{Im} z| \leq d$ で解析関数ならば,

$$|I - I_h| = O \left[\exp \left(-\frac{2\pi d}{h} \right) \right].$$

今の数値例の場合, $f(z) = 1/\cosh z$ は $|\operatorname{Im} z| < \pi/2$ で解析関数である.

→ $d \approx \pi/2$ ととって理論誤差評価してみる.

$$|I - I_h| = \begin{cases} O[(5.17 \times 10^{-5})^{1/h}] & (\text{理論}) \\ O[(4.05 \times 10^{-5})^{1/h}] & (\text{実験}). \end{cases}$$

理論誤差評価は数値実験結果とよく符合する.

台形則が全無限区間積分に強い理由

$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} f(z) \Phi_h(z) dz,$$

$$|\Phi_h(z)| \simeq 2\pi \exp\left(-\frac{2\pi}{h} |\operatorname{Im} z|\right).$$

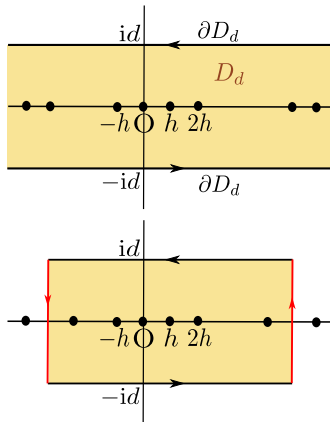
$\Phi_h(z)$ は実軸から離れると急減少する.

有限区間積分の場合, 誤差の複素積分表示における積分路は右図のとおり.

左右両端の積分路の寄与が小さくならない.
→ 誤差は小さくならない.

全無限区間積分の場合, 左右両端の積分路がないので, 台形則の誤差は小さくなる.

* このあたりの事情は, 周期関数積分の場合と同様.



鞍点法による複素積分表示の近似計算

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} = 1.77245\ 38509\ 05516\ 02729\ 81674\ 83341 \dots$$

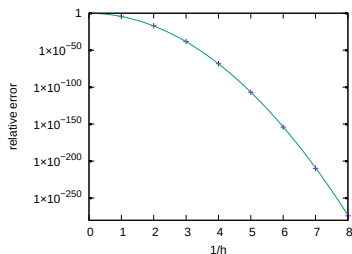
台形則で積分を近似計算した（10 進 500 桁多倍長演算）.

鞍点法による複素積分表示の近似計算

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} = 1.77245\ 38509\ 05516\ 02729\ 81674\ 83341 \dots$$

台形則で積分を近似計算した（10 進 500 桁多倍長演算）。

h	標本点数	相対誤差
1	71	1×10^{-4}
1/2	139	1×10^{-17}
1/3	207	3×10^{-39}
1/4	275	5×10^{-69}
1/5	343	1×10^{-107}
1/6	411	1×10^{-154}
1/7	479	2×10^{-210}
1/8	547	1×10^{-274}



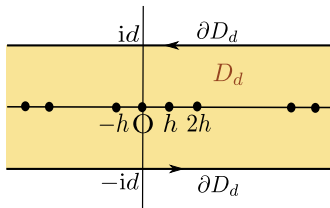
- 定理： $f(z)$ が $|\operatorname{Im} z| \leq d$ で解析的なら，誤差 $= O[\exp(-2\pi d/h)]$
 $f(z)$ が整関数なら， d の値はどう取るのか？
- グラフ： 誤差 $= O[\exp(-c/h^2)]$ っぽい。

整関数に対する台形則

$f(z)$ が $|\operatorname{Im} z| \leq d$ で解析関数なら,

$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} f(z) \Phi_h(z) dz,$$

$$\Phi_h(z) = -\pi \frac{\exp(\pm i\pi z/h)}{\sin(\pi z/h)} \quad (\pm \operatorname{Im} z > 0).$$

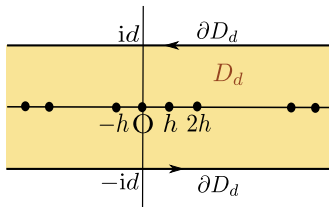


整関数に対する台形則

$f(z)$ が $|\operatorname{Im} z| \leq d$ で解析関数なら,

$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D_d} f(z) \Phi_h(z) dz,$$

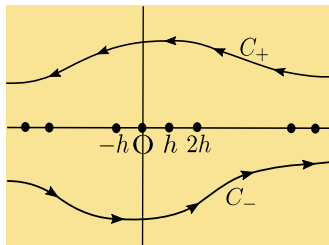
$$\Phi_h(z) = -\pi \frac{\exp(\pm i\pi z/h)}{\sin(\pi z/h)} \quad (\pm \operatorname{Im} z > 0).$$



$f(z)$ が整関数なら,

$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_+ + C_-} f(z) \Phi_h(z) dz.$$

積分路 $C_{\pm}$ は上／下半平面内で自由にとれる.



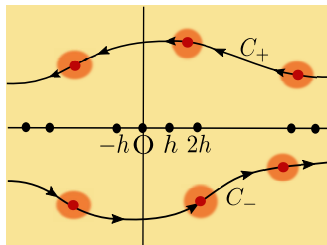
では, 積分路 $C_{\pm}$ をどのようにとるか?

整関数に対する台形則

$f(z)$ が整関数なら,

$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_+ + C_-} f(z) \Phi_h(z) dz.$$

積分路 $C_{\pm}$ は上／下半平面内で自由にとれる.



少数個の点の近傍が積分に大きく寄与するような積分路をとる.



鞍点法

次の複素積分の近似計算を考える.

$$\int_C \exp g(z) dz, \quad g(z) : \text{解析関数}.$$

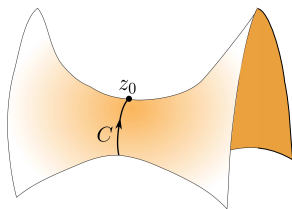
- $g(z)$ の鞍点 (saddle point)

$g'(z_0) = 0$ なる点 z_0 .

$$g(z) = g(z_0) + \frac{1}{2}g''(z_0)(z - z_0)^2 + \cdots$$

- 積分路 C のとり方.

- 鞍点 z_0 を通る.
- z_0 から離れると $|g(z)|$ は急減少
(直交方向は $|g(z)|$ は急増大).



$$\int_C \exp g(z) dz, \quad z_0 : \text{鞍点} (g'(z_0) = 0),$$
$$g(z) = g(z_0) + \frac{1}{2}g''(z_0)(z - z_0)^2 + \cdots.$$

鞍点 z_0 近傍で積分路 C を直線状にとる: $z = z_0 + e^{i\alpha}r$ ($r \in \mathbb{R}$).

$$\alpha = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} \arg g''(z_0) \quad \text{ととる.}$$

$$g(z) \simeq g(z_0) - \frac{1}{2}|g''(z_0)|r^2 \quad (z_0 \text{ 近傍}),$$

$$\int_{z_0 \text{ 近傍}} \exp g(z) dz \simeq e^{i\alpha} \exp g(z_0) \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{1}{2}|g''(z_0)|r^2 \right) dr$$

(Gaussian の積分, z_0 から遠い所は寄与しない)

$$= e^{i\alpha} \exp g(z_0) \sqrt{\frac{2\pi}{|g''(z_0)|}}.$$

鞍点法による複素積分表示の近似計算

$$\int_C \exp g(z) dz.$$

積分路 C を次のようにとる.

- $g(z)$ のすべての鞍点 z_k ($g'(z_k) = 0$) を通る.
- 各鞍点 z_k について, z_k から離れると $|g(z)|$ は急減少する.

このように C をとれば, すべての鞍点 z_k について, 前頁で求めた鞍点近傍からの寄与を求めてそれらを足し合わせれば, 求める積分が得られる.

鞍点法

$$\int_C \exp g(z) dz \simeq \sum_k e^{i\alpha_k} \exp g(z_k) \sqrt{\frac{2\pi}{|g''(z_k)|}},$$

$$z_k : g(z) \text{ の鞍点 } (g'(z_k) = 0),$$

$$\alpha_k = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} \arg g''(z_k).$$

鞍点法による台形則の誤差評価

鞍点法を台形則の誤差の複素積分表示に適用する.

被積分関数: $f(x) = \exp \varphi(x)$ とおく.

$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_+ + C_-} \exp \varphi(z) \Phi_h(z) dz,$$

$$\Phi_h(z) = -\pi \frac{\exp(\pm i\pi z/h)}{\sin(\pi z/h)} \simeq 2\pi i \exp\left(\pm i \frac{2\pi z}{h}\right) \quad (\pm \operatorname{Im} z > 0),$$

$$\therefore I - I_h \simeq \int_{C_+} \exp\left(\varphi(z) + \frac{2\pi i}{h} z\right) dz + \int_{C_-} \exp\left(\varphi(z) - \frac{2\pi i}{h} z\right) dz.$$

$$g(z) = \varphi(z) \pm \frac{2\pi i}{h} z \quad \text{の鞍点 } z_0 : \varphi'(z_0) = \mp \frac{2\pi i}{h}.$$

鞍点法による台形則の誤差評価

鞍点法を台形則の誤差の複素積分表示に適用する.

被積分関数: $f(x) = \exp \varphi(x)$ とおく.

$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_+ + C_-} \exp \varphi(z) \Phi_h(z) dz,$$

$$\Phi_h(z) = -\pi \frac{\exp(\pm i\pi z/h)}{\sin(\pi z/h)} \simeq 2\pi i \exp\left(\pm i \frac{2\pi z}{h}\right) \quad (\pm \operatorname{Im} z > 0),$$

$$\therefore I - I_h \simeq \int_{C_+} \exp\left(\varphi(z) + \frac{2\pi i}{h} z\right) dz + \int_{C_-} \exp\left(\varphi(z) - \frac{2\pi i}{h} z\right) dz.$$

$$g(z) = \varphi(z) \pm \frac{2\pi i}{h} z \quad \text{の鞍点 } z_0 : \varphi'(z_0) = \mp \frac{2\pi i}{h}.$$

整関数に対する台形則の鞍点法による理論誤差評価

$$|I - I_h| \simeq \sum_k \sqrt{\frac{2\pi}{|\varphi''(z_k)|}} \exp\left(\operatorname{Re} \varphi(z_k) - \frac{2\pi}{h} |\operatorname{Im} z_k|\right),$$

$$z_k : \varphi'(z_k) = \pm \frac{i\pi}{h} \quad (\pm \operatorname{Im} z_k > 0).$$

鞍点法による複素積分表示の近似計算

積分 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$ ($\varphi(x) = -x^2$) の場合,

$$\text{鞍点} \left(\varphi'(z_0) = -2z_0 = \mp \frac{2\pi i}{h} \text{ の解} \right) : z_0 = \pm \frac{i\pi}{h}.$$

$\Downarrow$

$$|I - I_h| \simeq 2\sqrt{\pi} \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right).$$

鞍点法による複素積分表示の近似計算

積分 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$ ($\varphi(x) = -x^2$) の場合,

$$\text{鞍点} \left(\varphi'(z_0) = -2z_0 = \mp \frac{2\pi i}{h} \text{ の解} \right) : z_0 = \pm \frac{i\pi}{h}.$$

$\Downarrow$

$$|I - I_h| \simeq 2\sqrt{\pi} \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right).$$

$$|I - I_h| = \begin{cases} O[(5.17 \times 10^{-5})^{1/h^2}] & (\text{理論}) \\ O[(5.45 \times 10^{-5})^{1/h^2}] & (\text{実験}). \end{cases}$$

鞍点法による理論誤差評価は数値実験結果とよく符合する。

- 解析関数に対する全無限区間積分：台形則は強い.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh),$$

- 複素積分を用いた理論誤差評価.

$$I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) \Phi_h(z) dz, \quad |\Phi_h(z)| \simeq 2\pi \exp\left(-\frac{2\pi}{h} |\operatorname{Im} z|\right).$$

- 帯状領域 $|\operatorname{Im} z| \leq d$ で解析関数 $\rightarrow$ 誤差 $= O[\exp(-c/h)]$.
- 整関数 $\rightarrow$ 鞍点法
- 理論誤差評価は数値実験結果とよく符合する.

次回からは、DE 公式（変数変換型数値積分公式）に入ります.