数値解析と複素関数論 (6)
数値積分：変数変換の応用

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

2021 年 2 月 9 日（火）

前回の復習：全無限区間積分に対する台形則

台形則は解析関数の全無限区間積分に強い．

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{d}x \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(kh) \quad \text{高精度.}$$

- $f(z)$ は帯状閉領域

$$D_d \equiv \{\, z \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im} z| \leq d \,\} \quad (\, d > 0 \,)$$

  を含む領域で解析的である．

- $$N(f,d) \equiv \oint_{\partial D_d} |f(z)||\mathrm{d}z| < \infty, \quad \lim_{x\to\pm\infty} \int_{-d}^{d} |f(x+\mathrm{i}y)|\mathrm{d}y = 0.$$

このとき，台形則は指数関数的収束する：

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{d}x - h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh) \right| \lesssim N(f,d)\exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right).$$

今回の内容

- 「台形則は解析関数の全無限区間積分に有効である」
  この事実を任意の（有界）区間上の積分

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \quad (-\infty < a < b < +\infty :)$$

  に応用したい.
- 変数変換の利用.
- 変数変換の例：「SE 変換」
  詳細な理論誤差評価.
- 数値例.

任意の区間上の数値積分→変数変換

- 台形則は解析関数の全無限区間積分に強い．
- この事実を任意の（有界）区間上の数値積分

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \quad (-\infty < a < b < +\infty)$$

に活かせないか？

任意の区間上の数値積分→変数変換

- 台形則は解析関数の全無限区間積分に強い.
- この事実を任意の（有界）区間上の数値積分

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \quad (-\infty < a < b < +\infty)$$

に活かせないか？

変数変換というアイディア

変数変換 $x = \psi(u)$ により全無限区間積分にして，台形則を適用する.

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(u))\psi'(u)\mathrm{d}u \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh).$$

$f(\psi(u))\psi'(u)$ が全無限区間 $(-\infty, +\infty)$ で解析的なら，
高精度（指数関数的収束）が期待できる.

（注意）

以降，積分区間を $(-1, 1)$ とする．

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x.$$

任意の有界区間上の積分→ $(-1, 1)$ 上の積分にできる．

$$\int_{a}^{b} f(x)\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\xi\right)\mathrm{d}\xi.$$

変数変換の選び方

変数変換はどのようなものをとればいいだろうか？

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(u))\psi'(u)\mathrm{d}u$$
$$\simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi(kh))\psi'(kh) \overset{\star}{\simeq} h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh).$$

$\star$ 台形則の無限和を有限和に打ち切る．

$|f(\psi(kh))\psi'(kh)|$ が十分小さくなったら和を打ち切る．

$$\Downarrow$$

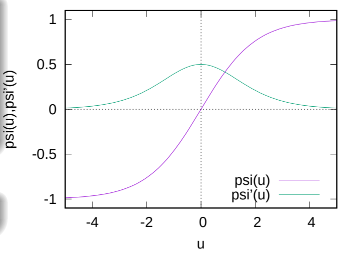
$|f(\psi(kh))\psi'(kh)|$ が遠方 $u \to \pm\infty$ で急減少 し，
少ない項数 $N_+ + N_- + 1$ で無限和を打ち切れるものがよい．

SE 変換，SE 公式

SE 変換 *

(single exponential transform)

$$\psi_{\mathrm{SE}}(u) = \tanh\frac{u}{2},$$



SE 公式 * ：SE 変換& 台形則．

* 一般的な呼称でない．

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi_{\mathrm{SE}}(u))\psi'_{\mathrm{SE}}(kh) \simeq h\sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\psi'_{\mathrm{SE}}(kh),$$

$$\psi'_{\mathrm{SE}}(u) = \frac{1/2}{\cosh^2(u/2)} \simeq 2\exp(-|u|) \quad (\ u \to \pm\infty\ ).$$

$\psi'_{\mathrm{SE}}(u)$ は遠方で（一重）指数関数的減衰する．

→ 少ない項数 $N_+ + N_- + 1$ で台形則の無限和を打ち切れる．

SE 公式：端点特異性を持つ積分

SE 公式は端点特異性を持つ積分に対しても有効である．

$$\int_{-1}^{1} f_0(x)(1-x^2)^{\alpha-1}\mathrm{d}x \quad (\, \alpha > 0, \quad f_0(x) \text{ : } x = \pm 1 \text{ 近傍で有界}\,)$$

$$\Downarrow$$

$$\int_{-1}^{1} f_0(x)(1-x^2)^{\alpha-1}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{\mathrm{SE}}(u))\frac{1/2}{\cosh^{2\alpha}(u/2)}\mathrm{d}u$$

$$\simeq h\sum_{k=-N_-}^{N_+} f_0(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\frac{1/2}{\cosh^{2\alpha}(kh/2)}.$$

遠方で指数関数的減衰する．

SE 公式の理論誤差解析

SE 公式の誤差には 2 種類ある．

$$\left| \int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x - h \sum_{k=-N_0}^{N_0} f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\psi_{\mathrm{SE}}'(kh) \right|$$

$$\leq \underbrace{\left| \int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x - h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\psi_{\mathrm{SE}}'(kh) \right|}_{\text{(1) 離散化誤差}} + \underbrace{\left| h \sum_{|k|>N_0} f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\psi_{\mathrm{SE}}'(kh) \right|}_{\text{(2) 打切り誤差}}.$$

$*$ 簡単のため $N_+ = N_- = N_0$ とする．

1. 離散化誤差：積分を台形則（無限和）で近似することによる誤差．
   前回の動画で評価した．
2. 打切り誤差：台形則の無限和を有限和で打ち切ることによる誤差．
   今回新たに評価しなければならない．

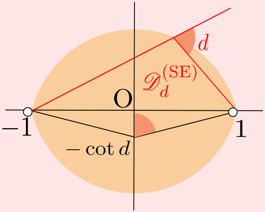
SE 公式の誤差（離散化誤差）

全無限区間積分に対する台形則の誤差評価より，次の定理を得る．

定理 1：SE 公式の誤差評価 (1)

- $f(z)$ は次の集合を含む領域で解析的である．

$$\mathscr{D}_d^{\mathrm{SE}} \equiv \left\{ z \in \mathbb{C} \;\middle|\; \left| \log\left(\frac{1+z}{1-z}\right) \right| \le d \right\} \quad (\, 0 < d < \pi \,).$$



- $f(z)$ は次を満たす．

$$\mathscr{N}_{\mathrm{SE}}(f,d) \equiv \oint_{\partial \mathscr{D}_d^{\mathrm{SE}}} |f(z)||\mathrm{d}z| < \infty,$$

$$\lim_{u \to \pm\infty} \int_{-d}^{d} |f(\psi_{\mathrm{SE}}(u+\mathrm{i}v))\psi'_{\mathrm{SE}}(u+\mathrm{i}v)|\mathrm{d}v = 0.$$

このとき，SE 公式の離散化誤差について次が成り立つ．

$$\left| \int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x - h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\psi'_{\mathrm{SE}}(kh) \right| \lesssim \mathscr{N}_{\mathrm{SE}}(f,d)\, \exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right).$$

SE 公式の誤差（打切り誤差）

SE 変換後の被積分関数は指数関数的減衰すると仮定する．

$$|f(\psi_{\mathrm{SE}}(u))\psi_{\mathrm{SE}}'(u)| \leq \frac{A/2}{\cosh^{2a}(u/2)} \quad (\, u \in \mathbb{R},\ A, a > 0 \text{ const.}\,)$$
$$\iff \quad |f(x)| \leq A(1-x^2)^{a-1} \quad (\, -1 < x < 1\,).$$

$f(x)$ は端点 $x = \pm 1$ にベキ的特異性を持ってもよい．

打切り誤差の評価：

$$\begin{aligned}
\left| h \sum_{|k|>N_0} f(\psi_{\mathrm{SE}})(kh))\psi_{\mathrm{SE}}'(kh) \right| &\leq Ah \sum_{k=N_0+1}^{\infty} \frac{1}{\cosh^{2a}(kh/2)} \leq A \int_{N_0 h}^{\infty} \frac{\mathrm{d}u}{\cosh^{2a}(u/2)} \\
&\leq 2^{2a} A \int_{N_0 h}^{\infty} \exp\left(-au\right) \mathrm{d}u \\
&= \frac{2^{2a}A}{a} \exp\left(-aN_0 h\right) \simeq \frac{2^{2a}A}{a} \exp\left(-\frac{a}{2}Nh\right)
\end{aligned}$$

（$N = 2N_0 + 1$：全標本点数）．

SE 公式の理論誤差解析

定理 2：SE 公式の誤差評価 (2)

$f(z)$ は定理 1 の条件に加えて次の条件を満たすとする：

$$|f(x)| \leq A(1-x^2)^{a-1} \quad (\,-1 < x < 1, \quad A, a > 0 \quad \text{const.}\,).$$

このとき，SE 公式の誤差について次が成り立つ．

$$\left| \int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x - h \sum_{k=-N_0}^{N_0} f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\psi'_{\mathrm{SE}}(kh) \right|$$

$$\lesssim \mathcal{N}_{\mathrm{SE}}(f,d) \exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right) + \frac{2^{2a}A}{a} \exp\left(-\frac{a}{2}Nh\right)$$

$$(\,N = 2N_0 + 1\,).$$

SE 公式の理論誤差解析

SE 公式は独立な 2 つのパラメータをもつ.

- 台形則の刻み幅 h.
- 標本点数 N.

$$\text{SE 公式の誤差} = C_1 \exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right) + C_2 \exp\left(-\frac{a}{2}Nh\right).$$

N と h の関係をうまく定めて，誤差が小さくなるようにしたい.

N を固定して h を動かすと,

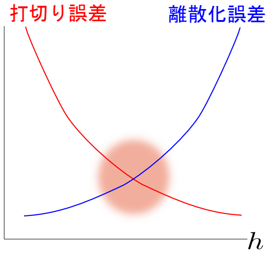
- 離散化誤差 $\mathrm{O}\left[\exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right)\right]$　h を小さくすると減少する.
- 打切り誤差 $\mathrm{O}\left[\exp\left(-\frac{a}{2}Nh\right)\right]$　h を小さくすると増大する.

SE公式の理論誤差解析

大雑把に考えて,

$$\text{離散化誤差} \approx \text{打切り誤差}$$

となるように h と N の関係を定めると,
全体の誤差は最小に近くなるだろう.



$$\text{離散化誤差} = \mathrm{O}\left[\exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right)\right], \quad \text{打切り誤差} = \mathrm{O}\left[\exp\left(-\frac{a}{2}Nh\right)\right],$$

$$\frac{2\pi d}{h} = \frac{a}{2}Nh, \quad \therefore \quad h = \sqrt{\frac{4\pi d}{aN}},$$

$$2\text{つの誤差} = \mathrm{O}\left[\exp\left(-\sqrt{\pi d a}\sqrt{N}\right).\right].$$

SE 公式の理論誤差解析

定理 3：SE 公式の誤差評価 (3)

$f(z)$ は定理 1，2 の条件を満たすとする．
このとき，SE 公式の誤差について次が成り立つ：

$$\left| \int_{-1}^{1} f(x) \mathrm{d}x - h \sum_{k=-N_0}^{N_0} f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh)) \psi'_{\mathrm{SE}}(kh) \right| \lesssim C \exp\left(-c\sqrt{N}\right)$$

$$(\ C, c > 0 \quad \text{const.}\ ),$$

ただし，標本点数 N に対し台形則の刻み幅 h は次で与えるとする．

$$h = \sqrt{\frac{4\pi d}{aN}}$$

$*$ 実際の数値積分計算では，離散化誤差 $\approx$ 打切り誤差 とするわけではないので，上の誤差評価は必ずしも成立しない．

数値例

$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{1+x^2} = \frac{\pi}{2}.$$

次の 2 つの数値積分則で計算し，誤差を比較した．

- SE 公式．

  $|f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\psi'_{\mathrm{SE}}(kh)| < 10^{-100}$ なる項で無限和を打ち切る．

- 従来の台形則

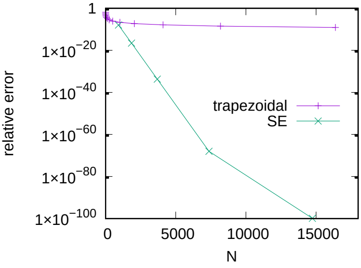
$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \simeq h\left\{\frac{1}{2}f(-1) + \sum_{k=1}^{N-1} f(-1+kh) + \frac{1}{2}f(1)\right\} \quad \left(h = \frac{2}{N}\right).$$

多倍長演算（10 進 100 桁），exflib を使用．

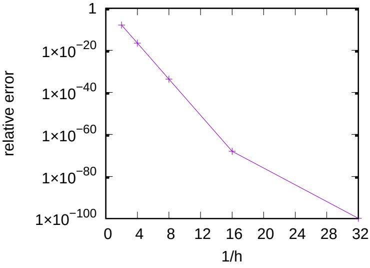
exflib の使い方（C++の場合）

http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib/exflib-gsc.html

数値例



(a) 標本点数 N に対する誤差の変化



(b) 刻み幅の逆数 $1/h$ に対する誤差の変化

- SE 公式は通常の台形則に比べて極めて効率的である．
- SE 公式の誤差は $1/h$ に対して指数関数的減衰する．

$$\text{離散化誤差} = \mathrm{O}\left[\exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right)\right], \quad \text{打切り誤差} \approx 0.$$

数値例

積分区間端点にベキ的特異性をもつ積分

$$\int_{-1}^{1} f_0(x)(1-x^2)^{a-1}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{\mathrm{SE}}(u))\frac{1/2}{\cosh^{2a}(u/2)}\mathrm{d}u.$$

$*$ あらかじめ「手計算」で右辺の形に書き直してから数値計算する．

桁落ち↓ を避けるため．

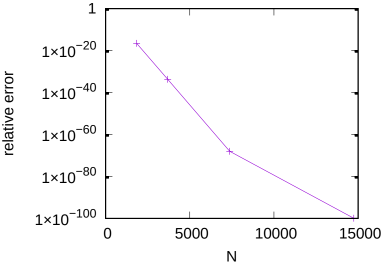
1 −（1 に非常に近い数）=（有効桁数の落ちた数）．

次の積分を SE 公式で計算して，誤差を調べた．

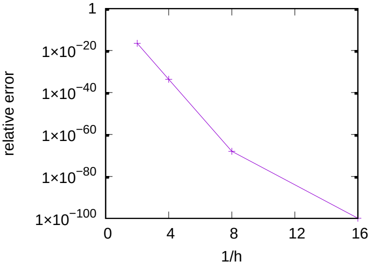
$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}} = \pi.$$

$|f(\psi_{\mathrm{SE}}(kh))\psi'_{\mathrm{SE}}(kh)| < 10^{-100}$ なる項で無限和を打ち切る．

数値例



(a) 標本点数 N に対する誤差の変化



(b) 刻み幅の逆数 $1/h$ に対する誤差の変化

- SE 公式の誤差は $1/h$ に対して指数関数的減衰する．

$$\text{離散化誤差} = \mathrm{O}\left[\exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right)\right], \quad \text{打切り誤差} \approx 0.$$

まとめ

- 台形則：全無限区間上の解析関数の積分に有効.
- 変数変換により，任意の区間上の積分を精度良く計算できる.
- （具体例）SE 変換.
  詳細な理論誤差評価（離散化誤差＋打切り誤差）.

次回の予定

- DE 公式（二重指数関数型数値積分公式）.
  DE 変換（二重指数関数型変換）：最適な変数変換.