数値解析と複素関数論 (7)
数値積分：DE 公式

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 4 月 13 日（火）

前回までの復習：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．

-

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

このとき，台形則は指数関数的収束する：

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

前回までの復習：変数変換を用いた数値積分

- 台形則は解析関数の全無限区間積分に強い．
  $\rightarrow$ この事実を任意区間の積分に応用したい．
- 変数変換 $x = \psi(u)$ の利用．

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

- 変数変換の例：SE 変換（一重指数関数的変数変換）

$$\psi_{\mathrm{SE}}(u) = \tanh\frac{u}{2}, \quad \psi'_{\mathrm{SE}}(u) = \frac{1/2}{\cosh^2(u/2)},$$

$$\psi'_{\mathrm{SE}}(u) \simeq 2\exp(-|u|) \quad (\, u \to \pm\infty, \text{ 一重指数関数的減衰 }).$$

少ない標本点数 $N_+ + N_- + 1$ で台形則の無限和を打ち切れる．

今回の内容

もっと効率の良い変数変換はないか？

今回の内容

もっと効率の良い変数変換はないか？

→ DE 公式（二重指数関数型公式，double exponential formula）

H. Takahasi & M. Mori: Double exponential formulas for numerical integration, Publ. RIMS Kyoto Univ., **9** (1974) 721–741.

今回の内容

もっと効率の良い変数変換はないか？

$\to$ DE 公式（二重指数関数型公式，double exponential formula）

H. Takahasi & M. Mori: Double exponential formulas for numerical integration, Publ. RIMS Kyoto Univ., **9** (1974) 721–741.

今回の内容

1. DE 公式（公式，数値例）
2. DE 公式の最良性
3. DE 公式の使用上の注意
4. 無限区間積分に対する DE 公式

1/4 DE 公式

DE 公式（二重指数関数型公式，double exponential formula）

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

$\psi_{\mathrm{DE}}(u) = \tanh(c \sinh u)$ ($c > 0$, DE 変換（二重指数関数型変換）)

DE 公式（二重指数関数型公式，double exponential formula）

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

$\psi_{\mathrm{DE}}(u) = \tanh(c \sinh u)$ （ $c > 0$, DE 変換（二重指数関数型変換））

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\psi_{\mathrm{DE}}(kh))\psi'_{\mathrm{DE}}(kh) \quad \text{もともとは無限和}$$

$$\simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi_{\mathrm{DE}}(kh))\psi'_{\mathrm{DE}}(kh).$$

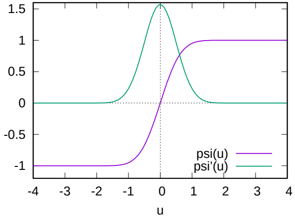
$|f(\psi_{\mathrm{DE}}(kh))\psi'_{\mathrm{DE}}(kh)| < \epsilon$（非常に小さい数）となったところで無限和を打ち切る．

DE 公式（二重指数関数型公式，double exponential formula）

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

$\psi_{\mathrm{DE}}(u) = \tanh(c \sinh u)$　($c > 0$, DE 変換（二重指数関数型変換）)

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



($c = \pi/2$)

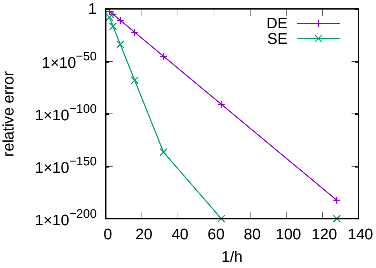
$\psi'_{\mathrm{DE}}(u)$ は二重指数関数的減衰する．

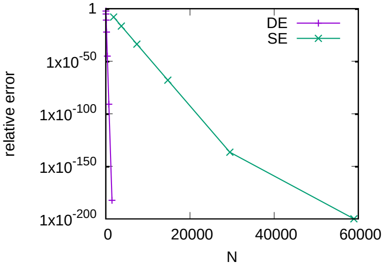
→ もっと少ない標本点数 $N_+ + N_- + 1$ で台形則の無限和を打ち切れる．

1/4 DE 公式：数値例

$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} = 1.57079\,63267\,94896\,61923\,13216\,91640\ldots$$

多倍長（10 進 200 桁）演算．$|f(kh)| < 10^{-200}$ で無限和打ち切り．





相対誤差のグラフ

横軸：$1/h$　　　　横軸：標本点数

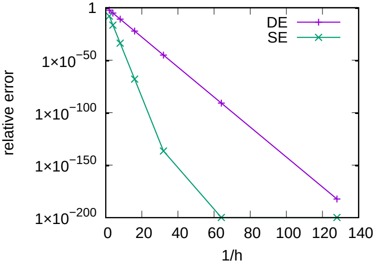
DE 変換 ：$\psi_{\mathrm{DE}}(u) = \tanh(c \sinh u)$　$(\,c = \pi/2\,)$,

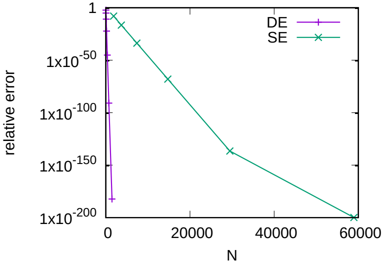
SE 変換 ：$\psi_{\mathrm{SE}}(u) = \tanh(u/2)$.

1/4 DE 公式：数値例

$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} = 1.57079\,63267\,94896\,61923\,13216\,91640\ldots$$

多倍長（10 進 200 桁）演算．$|f(kh)| < 10^{-200}$ で無限和打ち切り．





相対誤差のグラフ

横軸：$1/h$　　横軸：標本点数

DE 公式は，SE 公式に比べてはるかに少ない標本点数で積分値を計算できる．

1/4 DE 公式

DE 公式は端点特異性をもつ積分に有効である.

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} f_0(x)(1+x)^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1} \quad (\,\alpha, \beta > 0\,).$$

1/4 DE 公式

DE 公式は端点特異性をもつ積分に有効である．

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} f_0(x)(1+x)^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1} \quad (\,\alpha, \beta > 0\,).$$

$f(x) = f_0(x)(1-x^2)^{-1/2}$ の場合

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\tanh(c\sinh u))\underbrace{(1-\tanh^2(c\sinh u))^{-1/2}}_{\cosh(c\sinh u)}\frac{c\cosh u}{\cosh^2(c\sinh u)}\mathrm{d}u$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\tanh(c\sinh u))\frac{c\cosh u}{\cosh(c\sinh u)}\mathrm{d}u.$$

$f(x)$ が端点 $x = \pm 1$ にベキ的特異性をもっても，
DE 変換変換後の被積分関数は指数関数的減衰する．

1/4 DE 公式

DE 公式は端点特異性をもつ積分に有効である．

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} f_0(x)(1+x)^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1} \quad (\,\alpha,\beta>0\,).$$

一般の場合

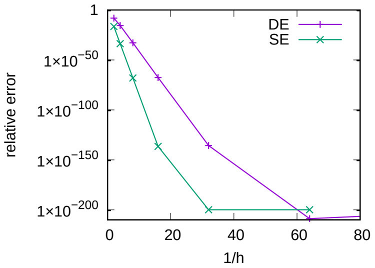
$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x &= \int_{-1}^{1} f_0(x)(1+x)^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}\mathrm{d}x\\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{\mathrm{DE}}(u))\frac{c\cosh u\exp(c(\alpha-\beta)\sinh u)}{\cosh^{\alpha+\beta}(c\sinh u)}.\end{aligned}$$

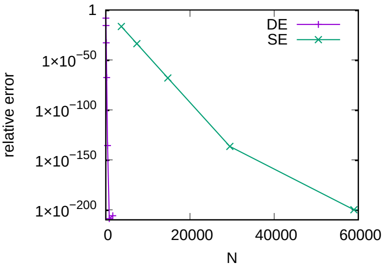
$f(x)$ が端点 $x=\pm 1$ にベキ的特異性をもっても，
DE 変換変換後の被積分関数は指数関数的減衰する．

1/4 DE 公式：数値例

$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}} = \pi = 3.14159\,26535\,89793\,23846\,26433\,83280\ldots$$

多倍長（10 進 200 桁）演算．$|f(kh)| < 10^{-200}$ で無限和打ち切り．





相対誤差のグラフ

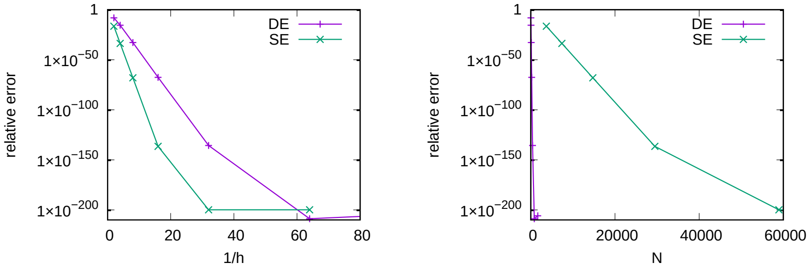
横軸：$1/h$ 　　　　横軸：標本点数

DE 変換 ：$\psi_{\mathrm{DE}}(u) = \tanh(c \sinh u) \quad (\, c = \pi/2\,)$,

SE 変換 ：$\psi_{\mathrm{SE}}(u) = \tanh(u/2)$.

$$\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}} = \pi = 3.14159\,26535\,89793\,23846\,26433\,83280\ldots$$

多倍長（10 進 200 桁）演算．$|f(kh)| < 10^{-200}$ で無限和打ち切り．



相対誤差のグラフ

横軸：$1/h$　　横軸：標本点数

DE 公式は，SE 公式に比べてはるかに少ない標本点数で積分値を計算できる．

2/4 DE 公式の最良性

DE 変換は最良な変数変換である．

- $\psi'(u)$ がこれ以上速く減衰するような変数変換（三重指数関数型変換，…）を使っても，効率は上がらない．
- 理論的証明．

  M. Sugihara: Optimality of the double exponential formula — functional analyris approach —, Numer. Math. **75** (1997) 379–395.

DE 変換は最良な変数変換である.

「三重指数関数数型変換」をやってみても精度は上がらない.

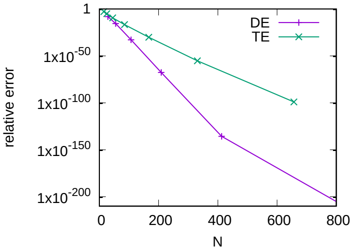
DE 変換および
TE（三重指数関数数型）変換

$$x = \tanh(c\sinh(\sinh u))$$

を用いて積分

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

を計算した結果.



縦軸： 相対誤差
横軸： 標本点数

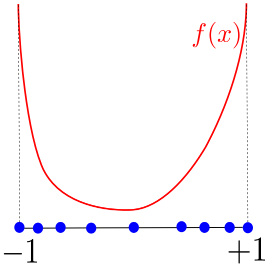
2/4 DE 公式の最良性

DE 変換が最良であることの直感的理解.

- $\psi'(u)$ が急減衰するほど，標本点 $\psi(kh)$ は積分端点 $x=\pm1$ の近くに密集する.
- あまり $\psi'(u)$ を急減衰させると，積分区間 $(-1,1)$ の中央あたりの標本点分布がスカスカになる.

  $\to$ 被積分関数 $f(x)$ の情報がうまく拾えない.
- 何処かに $\psi'(u)$ の急減衰の速さが最適なところがある.

  ... それが DE 変換.



3/4 DE 公式の使用上の注意

端点特異性を持つ積分を DE 公式で計算する場合,
桁落ち対策をしなければならない.

3/4 DE 公式の使用上の注意

端点特異性を持つ積分を DE 公式で計算する場合，
桁落ち対策をしなければならない．

$$\int_{-1}^{1} f_0(x)(1-x^2)^{-1/2}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{\mathrm{DE}}(u))(1-\psi_{\mathrm{DE}}(u)^2)^{-1/2}\psi'_{\mathrm{DE}}(u)\mathrm{d}u$$
$$\simeq h\sum_{k=-N_-}^{N_+} f_0(\psi_{\mathrm{DE}}(kh))(1-\psi_{\mathrm{DE}}(kh)^2)^{-1/2}\psi'_{\mathrm{DE}}(kh),$$

$$\psi_{\mathrm{DE}}(kh) = \tanh(c\sinh kh) \to \pm 1 \quad (\, k \to \pm\infty,\ \text{急接近}\,).$$

$|k|$ が大きいとき，

$$1-\psi_{\mathrm{DE}}(kh)^2 = 1-(1\ \text{に非常に近い数})$$
$$= (\text{有効桁数の小さい，非常に小さい数}).$$

$(1-\psi_{\mathrm{DE}}(kh)^2)^{-1/2}$ は有効桁数の小さい非常に大きい数となり，
数値積分の精度が落ちる．

$$
\begin{aligned}
&\int_{-1}^{1} f_0(x)(1-x^2)^{-1/2}\mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{\mathrm{DE}}(u))(1-\tanh^2(c\sinh u))^{-1/2}\frac{c\cosh u}{\cosh^2(c\sinh u)}\mathrm{d}u \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{\mathrm{DE}}(u))\frac{c\cosh u}{\cosh(c\sinh u)}\mathrm{d}u,
\end{aligned}
$$

$$
\int_{-1}^{1} f_0(x)(1-x^2)^{-1/2}\mathrm{d}u \simeq h\sum_{k=-N_-}^{N_+} f_0(\psi_{\mathrm{DE}}(kh))\frac{c\cosh(kh)}{\cosh(c\sinh(kh))}. \quad (1)
$$

(1) 右辺の計算では桁落ちが生じない.

- あらかじめ積分を (1) 右辺の形に手計算で直してから, 数値計算をする.
- コンピュータに "1 − (1 に非常に近い数)" の計算をさせない.

3/4 DE 公式の使用上の注意

一般の場合

$$
\begin{aligned}
&\int_{-1}^{1} f_0(x)(1+x)^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}\mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\psi_{\mathrm{DE}}(u))\frac{c\cosh u \exp(c(\alpha-\beta)\sinh u)}{\cosh^{\alpha+\beta}(c\sinh u)}\mathrm{d}u \\
&\simeq h\sum_{k=-N_-}^{N_+} f_0(\psi_{\mathrm{DE}}(kh))\frac{c\cosh kh \exp(c(\alpha-\beta)\sinh kh)}{\cosh^{\alpha+\beta}(c\sinh kh)}
\end{aligned}
$$

コンピュータプログラムには最右辺の形で数値積分公式を書く.

DE 変換 $\psi_{\mathrm{DE}}(u) = \tanh(c \sinh u)$ の係数 c.

$$c = \frac{\pi}{2} \text{ が最適である.}$$

（理由）全無限区間積分に対する台形則.

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(u)\mathrm{d}u \simeq h \sum_{k=-\infty}^{\infty} g(kh).$$

- $g(w)$ が $|\operatorname{Im} w| \leq d$ で正則, etc. ならば, 誤差 $= \mathrm{O}\left[\exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right)\right]$.
- 帯幅 $2d$ が大きいほど（$g(w)$ が正則である範囲が広いほど）精度が良い.
- $g(w) = f(\psi_{\mathrm{DE}}(w))\psi'_{\mathrm{DE}}(w)$ が正則である帯状領域 $|\operatorname{Im} w| \leq d$ ができるだけ広くなるように c をとると, $c = \pi/2$ が最適であることがわかる.

（補足事項）DE 公式の理論誤差評価

$$\left|\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x - h\sum_{k=-N_0}^{N_0} f(\psi_{\mathrm{DE}}(kh))\psi'_{\mathrm{DE}}(kh)\right| \quad \ldots \text{DE 公式の誤差}$$

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

$=:$ 離散化誤差 $+$ 打切り誤差.

- 離散化誤差：$\mathrm{O}\left[\exp\left(-\frac{2\pi d}{h}\right)\right]$.
- 打切り誤差：$\mathrm{O}[\exp(-\alpha\exp Nh)]$ $\quad(\alpha > 0：\text{const.})$
- 離散化誤差 $\approx$ 打切り誤差，となるように，標本点数 $N(=2N_0+1)$ に対し刻み幅 h を取れば，

$$\text{DE 公式の誤差} = \mathrm{O}\left[\exp\left(-\text{const.}\times\frac{N}{\log N}\right)\right].$$

4/4 無限区間積分に対する DE 公式

$$\int_0^\infty f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^\infty f(\psi(u))\psi'(u)\mathrm{d}u \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh).$$

無限区間積分に対する DE 公式

$$\int_0^\infty f(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^\infty f(\psi(u))\psi'(u)\mathrm{d}u \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh).$$

- $f(x)$ がベキ的減衰：$f(x) = \mathrm{O}(|x|^{-\alpha}) \quad (\, x \to +\infty,\ \alpha > 1\,)$.

$$\psi(u) = \exp(2\sinh u).$$

- $f(x)$ が指数関数的減衰：$f(x) = \mathrm{O}[\exp(-x)] \quad (\, x \to +\infty\,)$.

$$\psi(u) = \exp(u - \exp(-u)).$$

$*$ 前項の変換では被積分関数が三重指数関数的減衰になってしまう.

- $f(x)$ が Gaussian で減衰：$f(x) = \mathrm{O}[\exp(-x^2)] \quad (\, x \to +\infty\,)$.

$$\psi(u) = \exp\left(\frac{u}{2} - \exp(-u)\right).$$

4/4 無限区間積分に対する DE 公式

減衰の遅い振動関数の無限区間積分（Fourier 変換）に対しては（上記の）DE 公式は有効でない．

$$\int_0^{\infty} f_0(x)\sin(\omega x+\beta)\mathrm{d}x, \quad f_0(x) = \mathrm{O}(|x|^{-\alpha}) \quad (\, x \to +\infty \,).$$

4/4 無限区間積分に対する DE 公式

減衰の遅い振動関数の無限区間積分（Fourier 変換）に対しては（上記の）DE 公式は有効でない．

$$\int_0^\infty f_0(x)\sin(\omega x+\beta)\mathrm{d}x, \quad f_0(x)=\mathrm{O}(|x|^{-\alpha}) \quad (\, x\to+\infty\,).$$

- 振動積分に特化した DE 公式.
  - T. Ooura & M. Mori: The double exponential formula for oscillatory functions over the half infinite interval, J. Comput. Appl. Math., **38** (1991) 353–360.
  - T. Ooura & M. Mori: A robust double exponential formula for Fourier type integrals, J. Comput. Appl. Math., **112** (1999) 229–241.
- 佐藤超函数論的手法.
  - H. Ogata: Numerical calculation of Fourier transforms based on hyperfunction theory, J. Comput. Appl. Math., **378** (2020) 112921.

まとめ

- DE 公式
  - DE 変換：被積分関数が二重指数関数的減衰するような変数変換.
  - 端点特異性を持つ積分に対しても有効である.
  - 最適な変数変換.
- DE 公式は，端点特異性を持つ積分を計算する場合，桁落ち対策をしなければならない.
- 無限区間積分に対する DE 公式.