

解析関数の数値積分の誤差評価

東大 理 高橋秀俊
京大 数研 森 正武

§ 1	数値積分の誤差とその特性関数 $\Phi(x)$	2
§ 2	Newton-Cotes 公式	6
§ 3	Gauss 型積分公式	8
§ 4	Radau 公式および Lobatto 公式	13
§ 5	Chebyshev 積分公式	15
§ 6	$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ を無限和で近似すること	16
§ 7	$\int_0^{\infty} f(x) dx$ を無限和で近似すること	19
§ 8	変数変換をへて導かれる積分公式 —— 伊理-森口-高沢の公式	23
§ 9	Romberg 積分	25
§ 10	誤差評価の数値例	27
§ 11	積分公式の選択について	31

§ 1 数値積分の誤差とその特性関数 $\Psi(z)$ 解析関数 $f(x)$ の積分

$$I = \int_a^b f(x) w(x) dx \quad (1-1)$$

を、分点 a_k における関数値に重み A_k を乗じて作った和

$$I_A = \sum_{k=1}^n A_k f(a_k) \quad (1-2)$$

で近似する問題は、無限遠点においてある超越関数を適当な有理関数で近似する問題におまかえられることを、前回の研究会で示した^{*}。これを以下に要約しつつさらに議論を進める。

解析関数 $f(z)$ の Cauchy の積分表示

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f(z)}{z-x} dz \quad (1-3)$$

を (1-1) に代入し積分の順序を変更すれば

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b \left\{ \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f(z)}{z-x} dz \right\} w(x) dx \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Psi(z) f(z) dz \end{aligned} \quad (1-4)$$

が得られる。ただし

$$\Psi(z) = \int_a^b \frac{w(x)}{z-x} dx \quad (1-5)$$

* 数理解析研究所講義録 91 p.119

である。積分路 C は線分 (a, b) を正の向きに1周する曲線である。 $g(x)$ を

$$g(x) = \begin{cases} w(x) & ; \quad a < x < b \\ 0 & ; \quad x < a \quad \text{or} \quad b < x \end{cases} \quad (1-6)$$

で定義すると、 $\Psi(z)$ は $g(x)$ の Hilbert 変換である。あるいはまた、 $\Psi(z)$ は超関数 (hyperfunction) $g(x)$ の定義関数 (defining function) でもある。また (1-3) を (1-2) に代入すれば

$$I_A = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Psi_A(z) f(z) dz \quad (1-7)$$

が得られる。 T は

$$\Psi_A(z) = \sum_{k=1}^n \frac{A_k}{z - a_k} \quad (1-8)$$

である。積分路 C はすべての実 a_k をかこむようにとるものとする。 (1-8) の右辺を通分すれば明らかのように

$$\Psi_A(z) = \frac{G_n(z)}{F_n(z)} \quad (1-9)$$

となる。ここで $F_n(z)$ は n 次多項式、 $G_n(z)$ は $n-1$ 次多項式である。したがって、数値積分公式 (1-2) による誤差 ΔI は

$$\begin{aligned}\Delta I &= I - I_A \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi(z) f(z) dz\end{aligned}\quad (1-10)$$

$$\Phi(z) \equiv \Psi(z) - \Psi_A(z) \quad (1-11)$$

で与えられる。ここで定義した $\Phi(z)$ は、数値積分公式のみに依存し被積分関数には依存しない関数であって、われわれはこれを積分公式 (1-2) の誤差の特性関数と名付けた。

(1-5) および (1-8) の漸近展開はそれぞれ

$$\Psi(z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{z^{r+1}} \left\{ \int_a^b x^r w(x) dx \right\} \quad (1-12)$$

$$\Psi_A(z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{z^{r+1}} \left\{ \sum_{k=1}^n A_k a_k^r \right\} \quad (1-13)$$

で与えられるから、誤差の特性関数 $\Phi(z)$ は漸近的に

$$\Phi(z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{C_r}{z^{r+1}} \quad (1-14)$$

$$C_r = \int_a^b x^r w(x) dx - \sum_{k=1}^n A_k a_k^r \quad (1-15)$$

と表わすことができる。

$f(x)$ が N またはそれ以下の次数の多項式であるとき ΔI が 0 になるためには、すなわち近似公式 (1-2) が正確な値を与

えるためには、 $\Phi(z)$ が漸近的に

$$\Phi(z) = \frac{C_{N+1}}{z^{N+2}} + \frac{C_{N+2}}{z^{N+3}} + \dots \quad (1-16)$$

となっていればよい。何故なら、このようになっていれば

$$\Delta I = \frac{C'}{2\pi i} \oint \frac{1}{z^2} dz + \frac{C''}{2\pi i} \oint \frac{1}{z^3} dz + \dots = 0 \quad (1-17)$$

が成立するからである。(1-16)がどの項から始まるか、亦なわち(1-15)の C_r がどこまで0になるかは、近似公式(1-2)の未知パラメータ A_n あるいは a_n の個数によってきまってくる。このようにして、積分 I を和 I_A で近似する問題が、超越関数 $\Psi(z)$ を無限遠点において有理関数 $\Psi_A(z) = G_n(z)/F_n(z)$ で近似する問題におきかえられることが示された。

従来の高階の微係数による積分誤差の表示は、(1-16)および導関数に対するCauchyの積分表示式から直ちに得られる。

$f(z)$ を(1-2)の公式に従って計算したときの誤差は(1-10)に示した周回積分で与えられるが、その値は $|\Phi(z)f(z)|$ の鞍点における情報によってほとんど決定してしまう。すなわち η_j を鞍点の位置とすると、 ΔI は

$$|\Delta I| \sim \frac{1}{2\pi} \sum_j |\Phi(\eta_j) f(\eta_j)| \times d_j \quad (1-18)$$

で与えられる。 d_j は積分路 C に沿って鞍点 η_j を通過するとき

の $|\Phi(z)f(z)|$ の変化の半値巾である。また、 $f(z)$ が単純な極のみを持つ有理関数である場合には、 ΔI はその極 ζ_j における $f(z)$ の留数 R_j によって正確に与えられる。

$$\Delta I = - \sum_j \Phi(\zeta_j) R_j \quad (1-19)$$

(1-18), (1-19) いずれの場合も、ふつう和 \sum_j のうちいずれか 1 項、あるいは複素共役な値における 1 組の値のみが極端に大きくなることが多く、ほとんどの場合誤差の見積りはこの特別な項の値を計算するだけで済んでしまう。

§ 2 Newton-Cotes 公式

簡単のために $a = -1$, $b = 1$ とおく。Newton-Cotes 公式においては、まず区間 $(-1, 1)$ が $n-1$ 等分され、あらかじめこの n 個の等分点 a_k として与えられる。こうすることにより n 次多項式 $F_n(z)$ がまず定められる。

$$F_n(z) = (z+1)\left(z+\frac{n-3}{n-1}\right)\left(z+\frac{n-5}{n-1}\right)\cdots\left(z-\frac{n-3}{n-1}\right)(z-1) \quad (2-1)$$

$F_n(z)$ は、 n が偶数のとき偶関数、 n が奇数のとき奇関数であることに注意しよう。 $F_n(z)$ をこのように定めた後、 z の大きい所で (1-8) の有理関数 $\Psi_n(z) = G_n(z)/F_n(z)$ が (1-5) の超越関数

$$\Psi(z) = \int_{-1}^1 \frac{dx}{z-x} = \log \frac{z+1}{z-1}$$

$$= \frac{2}{z} + \frac{2}{3z^3} + \frac{2}{5z^5} + \cdots + \frac{2}{(2m+1)z^{2m+1}} + \cdots \quad (2-2)$$

をできるだけ高次まで近似するように、あるいは今の場合未知数 A_k の個数 n に対応して、 $G_n(z)/F_n(z)$ が $\Psi(z)$ を z^{-n} まで近似するようにさせれば、重み A_k が決定される。換言すれば

$$\Phi(z) = \Psi(z) - \frac{G_n(z)}{F_n(z)} = O(z^{-n-1}) \quad (2-3)$$

あるいは

$$F_n(z)\Psi(z) - G_n(z) = O(z^{-1}) \quad (2-4)$$

を満たすように、 $n-1$ 次多項式 $G_n(z)$ を定めればよい。(2-2)

を(2-4)の左辺の $F_n(z)\Psi(z)$ に代入すると

$$F_n(z)\Psi(z) = \begin{cases} C_1 z^{n-1} + C_2 z^{n-3} + \cdots + C_{\frac{n}{2}} z + C_{\frac{n+2}{2}} z^{-1} + \cdots & ; n = \text{偶数} \\ C_1 z^{n-1} + C_2 z^{n-3} + \cdots + C_{\frac{n-1}{2}} z^2 + C_{\frac{n+1}{2}} + C_{\frac{n+3}{2}} z^{-2} + \cdots & ; n = \text{奇数} \end{cases} \quad (2-5)$$

となるから、 $n-1$ 次多項式 $G_n(z)$ はこの右辺の最初の n 項の和

$$G_n(z) = \begin{cases} C_1 z^{n-1} + C_2 z^{n-3} + \cdots + C_{\frac{n}{2}} z & ; n = \text{偶数} \\ C_1 z^{n-1} + C_2 z^{n-3} + \cdots + C_{\frac{n+1}{2}} & ; n = \text{奇数} \end{cases} \quad (2-6)$$

で与えられる。重み A_k は、こうして得られた $G_n(z)/F_n(z)$ を

$$\frac{G_n(z)}{F_n(z)} = \sum_{k=1}^n \frac{A_k}{z - a_k} \quad (2-7)$$

に従って部分分数に分解することにより具体的に求められる。

$n=2$ のとき台形則、 $n=3$ のとき Simpson 則、 $n=4$ のとき Simpson $\frac{2}{3}$ 則が得られることは明らかであろう。(2-5) 及び (2-6) から、特性関数 $\Phi(z)$ は実際には、 n が偶数なら $C \frac{z^2}{3} z^{-n-1}$ から、 n が奇数なら $C \frac{z^2}{3} z^{-n-2}$ から始まることがわかる。 $\rho = 2/(n-1)$ とするとき、台形則は $-R^2/3z^3$ から、Simpson 則は $-4R^4/15z^5$ から始まる。

実際の数値積分においては、区間 $(-1, 1)$ を適当な小区間に等分し、各小区間に単一の Newton-Cotes 公式を適用するのが普通である。Fig. 1 は $(-1, 1)$ を 4 等分し、各小区間に Simpson 則を適用したときの、誤差の特性関数 $\Phi(z)$ の絶対値および偏角を示す等高線図である。この場合関数値を計算すべき点は 9 点である。 $z = \pm i$ の近くに零点が表われる。Fig. 2 から Fig. 7 までには、区間 $(-1, 1)$ をそれぞれ 24, 12, 8, 6, 4, 3 等分し各小区間に 1 次 (台形則)、2 次 (Simpson 則)、3 次、4 次、6 次、8 次の Newton-Cotes 公式を適用したときの $|\Phi(z)|$ の等高線図である。関数値を計算するべき点の数は、いずれの場合も 25 点である。

§3 Gauss 型積分公式

Gauss 型積分公式は、Newton-Cotes 公式と異って、(1-2) の I_A が (1-1) の I を最適に近似するように、すなわち被積分関数 $f(x)$ が多項式のと看、これの次数がなるべく高いものまで積分誤差 ΔI を 0 にするように、分点 a_k および重み A_k の

両方を決めることによって得られる。換言すれば、問題は z が大きいところで $\Psi(z)$ を最も良く近似する有理式 $G_n(z)/F_n(z)$ を決定することに帰着される。この意味での超越関数 $\Psi(z)$ の有理関数近似式 $G_n(z)/F_n(z)$ は、 $\Psi(z)$ の連分数展開を n 項目で打切ることによって得られる。すなわち $\Psi(z)$ の連分数展開を

$$\Psi(z) = \frac{\delta_1}{\alpha_1 z + \beta_1 - \frac{\delta_2}{\alpha_2 z + \beta_2 - \frac{\delta_3}{\alpha_3 z + \beta_3 - \dots}}} \quad (3-1)$$

とすると、 $\Psi_A(z) = G_n(z)/F_n(z)$ は

$$\Psi_A(z) = \frac{\delta_1}{\alpha_1 z + \beta_1 - \frac{\delta_2}{\alpha_2 z + \beta_2 - \dots - \frac{\delta_n}{\alpha_n z + \beta_n}}} \quad (3-2)$$

で与えられる。

簡単な計算によって、 $\Phi(z) = \Psi(z) - \Psi_A(z)$ は

$$\Phi(z) = \frac{\delta_1 \delta_2 \dots \delta_n \delta_{n+1}}{F_n(z) \{ F_n(z) R_{n+1}(z) - \delta_{n+1} F_{n-1}(z) \}} \quad (3-3)$$

と表わされることがわかる。 $R_{n+1}(z)$ は連分数の打切りで捨てられた部分である。

$$R_{n+1}(z) = \alpha_{n+1} z + \beta_{n+1} - \frac{\delta_{n+2}}{\alpha_{n+2} z + \beta_{n+2} - \frac{\delta_{n+3}}{\alpha_{n+3} z + \beta_{n+3} - \dots}} \quad (3-4)$$

(3-3) から

$$\Phi(z) = O(z^{-2n-1}) \quad (3-5)$$

であることがわかる。すなわち $\Psi_A(z)$ は $\Psi(z)$ を z が大きいところで z^{-2n} まで近似している。従って Gauss 型公式は、 $f(x)$ が $2n-1$ 次までの多項式るとき正確な値を与える。例えば Legendre-Gauss 公式では $\Phi(z) \approx \frac{2^{2n+1}}{2n+1} \left\{ \frac{(2n)!}{n!n!} \right\}^{-2} z^{-2n-1}$ となる。

いま $n > m$ とし

$$F_{mn} \equiv \int_a^b F_m(x) F_n(x) w(x) dx = 0 \quad (3-6)$$

が成立することを示そう。実際

$$F_m(x) F_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{F_m(z) F_n(z)}{z-x} dz$$

を (3-6) に代入すれば

$$\begin{aligned} F_{mn} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C F_m(z) F_n(z) \Psi(z) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint F_m(z) F_n(z) \Phi(z) dz + \frac{1}{2\pi i} \oint F_m(z) F_n(z) dz \end{aligned} \quad (3-7)$$

となるが、右辺第2項は $F_m(z) F_n(z)$ が多項式だから 0 になる。

また右辺第1項は

$$F_m(z) F_n(z) \Phi(z) = O(z^{m-n-1}) = O(z^{-2})$$

から 0 になる。従って (3-6) が成立する。(3-6) は、 $F_n(x)$

が、区間 (a, b) において重み $w(x)$ に関して定義される直交多項式に一致することを示している。連分数の理論において、この直交多項式 $F_n(z)$ は $G_n(z)$ と共に次の形の漸化式を満足することが知られている。

$$\begin{cases} F_n(z) = (\alpha_n z + \beta_n) F_{n-1}(z) - \gamma_n F_{n-2}(z) \\ G_n(z) = (\alpha_n z + \beta_n) G_{n-1}(z) - \gamma_n G_{n-2}(z) \end{cases} \quad (3-8)$$

$$F_0(z) = 1, \quad F_1(z) = \alpha_1 z + \beta_1, \quad G_0(z) = 0, \quad G_1(z) = \gamma_1 \quad (3-9)$$

ただし γ_1 は次式で与えられる。

$$\gamma_1 = \alpha_1 \int_a^b w(x) dx \quad (3-10)$$

通常よく表われる積分公式に対しては、この関係が知られているので、連分数展開 (3-1) を求めることは容易である。(3-2) を通分して、部分分数に分解すれば、分母 a_k および重み A_k が得られる。よく知られている Gauss 型積分公式に対する連分数展開を以下に示そう。

(3-a) Legendre-Gauss 公式 $a = -1, b = 1, w(x) = 1$

$$\Psi(z) = \log \frac{z+1}{z-1} \quad (3-11)$$

$$= \frac{2}{z - \frac{1^2}{3z - \frac{2^2}{5z - \dots - \frac{(n-1)^2}{(2n-1)z - \dots}}} \quad (3-12)$$

(3-b) Laguerre-Gauss 公式 $a=0, b=\infty, w(x)=e^{-x}$

$$\Psi(z) = e^{-z} \int_{-\infty}^z \frac{e^s}{s} ds \quad (3-13)$$

$$= \frac{1}{z-1 - \frac{1^2}{z-3 - \frac{2^2}{z-5 - \dots - \frac{(n-1)^2}{z-(2n-1) - \dots}}} \quad (3-14)$$

$a=0, b=\infty, w(x)=x^\alpha e^{-x}$ ($\alpha > -1$) のときは

$$\Psi(z) = \Gamma(\alpha+1) z^\alpha e^{-z} \int_{-\infty}^z \frac{e^s}{s^{\alpha+1}} ds \quad (3-15)$$

$$= \frac{\Gamma(\alpha+1)}{z-(\alpha+1) - \frac{1 \cdot (\alpha+1)}{z-(\alpha+3) - \frac{2 \cdot (\alpha+2)}{z-(\alpha+5) - \dots - \frac{(n-1)(\alpha+n-1)}{z-(\alpha+2n-1) - \dots}}} \quad (3-16)$$

(3-c) Hermite-Gauss 公式 $a=-\infty, b=\infty, w(x)=e^{-x^2}$

$$\Psi(z) = 2\sqrt{\pi} e^{-z^2} \int_{i\infty}^z e^{s^2} ds \quad (3-17)$$

$$= \frac{2\sqrt{\pi}}{2z - \frac{2}{2z - \frac{4}{2z - \dots - \frac{2(n-1)}{2z - \dots}}} \quad (3-18)$$

(3-d) Chebyshev-Gauss 公式 $a=-1, b=1, w(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

$$\Psi(z) = \frac{\pi}{\sqrt{z^2-1}} \quad (3-19)$$

$$= \frac{\pi}{z - \frac{1}{2z - \frac{1}{2z - \dots - \frac{1}{2z - \dots}}} \quad (3-20)$$

(3-e) Jacobi-Gauss 公式 $a=-1, b=1, w(x)=(1-x)^\alpha(1+x)^\beta$

$$\Psi(z) = \int_{-1}^1 \frac{(1-x)^\alpha (1+x)^\beta}{z-x} dx \quad (3-21)$$

$$= \frac{\gamma_1}{\alpha_1 z + \beta_1 - \frac{\gamma_2}{\alpha_2 z + \beta_2 - \dots - \frac{\gamma_n}{\alpha_n z + \beta_n - \dots}}} \quad (3-22)$$

$$\gamma_1 = 2^{\alpha+\beta} (\alpha+\beta+2) B(\alpha+1, \beta+1) \quad (B \text{ は Beta 関数}) \quad (3-23)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha_n &= \frac{(2n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta-1)}{2n(n+\alpha+\beta)} \\ \beta_n &= \frac{(\alpha^2-\beta^2)(2n+\alpha+\beta-1)}{2n(n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta-2)} \\ \gamma_n &= \frac{(n+\alpha-1)(n+\beta-1)(2n+\alpha+\beta)}{n(n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta-2)} \end{aligned} \right\} \quad (3-24)$$

Fig. 8 から Fig. 12 までに、分点 が 9 点 のときの各種の Gauss 型公式に対する $|\Psi(z)|$ の等高線図を示す。ただし Fig. 12 の Jacobi-Gauss 公式は $\alpha=0, \beta=1/2$ の場合のものである。

§4 Radau 公式および Lobatto 公式

(4-a) Radau 公式

Radau 公式は唯一つの分点 a_1 があらかじめ -1 に定められているという点を除いて、Legendre-Gauss 公式とほとんど同様である。この場合の $\Psi_n(z) = G_n(z)/F_n(z)$ は

$$\frac{G_n(z)}{F_n(z)} = \frac{u_{n-1}(z)}{(z+1)p_{n-1}(z)} \quad (4-1)$$

で与えられる。ただし $p_{n-1}(z), u_{n-1}(z)$ は共に $n-1$ 次の多項式である。従って分臭 $a_k (k=2, 3, \dots, n)$ および重み A_k は、超越関数 $\Psi(z) = \log \frac{z+1}{z-1}$ を z の大きい所で $G_n(z)/F_n(z)$ で最も良く近似することによって、可なり関数

$$\Psi_1(z) = (z+1) \log \frac{z+1}{z-1} \quad (4-2)$$

を有理関数 $u_{n-1}(z)/p_{n-1}(z)$ で最も良く近似することによって定められる。 $\Psi_1(z)$ は

$$\Psi_1(z) = z + \int_{-1}^1 \frac{1+x}{z-x} dx \quad (4-3)$$

と書けるが、右辺の 2 項は $(-1, 1)$ において重み $1+x$ に関して定義される直交多項式 (Jacobi 多項式) と関連づけて容易に連分数展開が得られる。結果は次のようになる。

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= \log \frac{z+1}{z-1} \\ &= \frac{1}{z+1} \left(z + \frac{0}{3z-1} - \frac{10}{15z-1} - \dots - \frac{\gamma_{n-1}}{\alpha_{n-1}z + \beta_{n-1}} - \dots \right) \quad (4-4) \end{aligned}$$

$$\alpha_m = 4m^2 - 1, \beta_m = -1, \gamma_m = m(m-1)(2m+1)(2m-3) \quad (m \neq 1) \quad (4-5)$$

(4-b) Lobatto 公式

Lobatto 公式では 2 つの分臭 $a_1 = -1, a_n = 1$ があらかじめ定め

られている。この場合の $\Psi_n(z) = G_n(z)/F_n(z)$ は

$$\frac{G_n(z)}{F_n(z)} = \frac{v_{n-1}(z)}{(z^2-1)q_{n-2}(z)} \quad (4-6)$$

で与えられる。ただし $q_{n-2}(z)$, $v_{n-1}(z)$ はそれぞれ $n-2$ 次, $n-1$ 次の多項式である。Radau 公式の場合と全く同様にして分点 a_k ($k=2, 3, \dots, n-1$) および重み A_k は、超越関数

$$\Psi_2(z) = (z^2-1) \log \frac{z+1}{z-1} \quad (4-7)$$

を有理関数 $v_{n-1}(z)/q_{n-2}(z)$ で最も良く近似することによって定められる。連分数展開で表わした結果は次の通りである。

$$\Psi(z) = \frac{1}{z^2-1} \left(2z - \frac{4}{3z - \frac{3}{5z - \frac{8}{7z - \dots - \frac{\gamma_{n-2}}{\alpha_{n-2}z + \beta_{n-2} - \dots}}} \right) \quad (4-8)$$

$$\alpha_m = 2m+1, \quad \beta_m = 0, \quad \gamma_m = m^2-1 \quad (m \neq 1) \quad (4-9)$$

Fig. 13 は 9 点 Lobatto 公式に対する $|\Psi(z)|$ の等高線図である。

§ 5 Chebyshev 積分公式

Chebyshev 公式は、重み A_k ($k=1, 2, \dots, n$) をすべて等しくするという条件の下で $G_n(z)/F_n(z)$ が $\Psi(z) = \log \frac{z+1}{z-1}$ を z が大きいところで最適に近似するように分点 a_k を定めたものである。従って今の場合 $G_n(z)/F_n(z)$ は

$$\frac{G_n(z)}{F_n(z)} = A \sum_{k=1}^n \frac{1}{z - a_k} = \frac{AF'_n(z)}{F_n(z)} \quad (5-1)$$

と表わされる。未知数は1個の重み A および n 個の分枝 a_k ($k=1, 2, \dots, n$)、合計 $n+1$ 個あるから、これによって (5-1) が $\psi(z)$ を z^{-n-1} まで近似するよりにすることができる。従って

$$\log \frac{z+1}{z-1} - A \frac{F'_n(z)}{F_n(z)} = O(z^{-n-2}) \quad (5-2)$$

$\frac{1}{2}$ の係数を 0 とおくことによって直ちに $A = \frac{2}{n}$ を得る。(5-2)

の両辺を z に関して z から ∞ まで積分した後、 $F_n(z)$ について解けば

$$\left\{ \frac{(z+1)^{z+1}}{(z-1)^{z-1}} \right\}^{\frac{n}{2}} e^{-n} = F_n(z) + \frac{C_1'}{z} + \frac{C_2'}{z^2} + \dots \quad (5-3)$$

が得られる。以上から $F_n(z)$ は、(5-3) の左辺の超越関数のべき級数展開の最初の $n+1$ 項の和によって与えられることがわかる。

Fig. 14 に 9 点 Chebyshev 公式の $|\psi(z)|$ の等高線図を示す。

§ 6 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ を無限和で近似すること

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \quad (6-1)$$

を、間隔 h で等間隔にとった分枝における無限個の関数値の和

$$I_A = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh) \quad (6-2)$$

で近似する問題を考える。\$f(x)\$は\$|x|\$の大きい所で十分速やかに0になるものと仮定する。この和のとり方は台形則である。

(6-1)に対して\$\Psi(z)\$は

$$\Psi(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{z-x} = \begin{cases} -\pi i & ; \text{Im } z > 0 \\ +\pi i & ; \text{Im } z < 0 \end{cases} \quad (6-3)$$

で与えられ、一方(6-2)に対して\$\Psi_A(z)\$は

$$\Psi_A(z) = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z-nh} = \pi \cot \frac{\pi z}{h} \quad (6-4)$$

で与えられる。従って誤差の特性関数は

$$\Phi(z) = \begin{cases} -\pi \left(\cot \frac{\pi z}{h} + i \right) \\ -\pi \left(\cot \frac{\pi z}{h} - i \right) \end{cases} \quad (6-5)$$

で与えられる。ところが

$$\cot \frac{\pi z}{h} \pm i = \frac{\pm 2i}{1 - \exp(\mp 2\pi i z/h)} \quad (6-6)$$

であるから、\$h \ll |\text{Im } z|\$のとき

$$|\Phi(z)| \sim 2\pi \exp(-2\pi |\text{Im } z|/h) \quad (6-7)$$

となる。それ故、 $|\Phi(z)|$ の等高線図は実軸のごく近くを除いて実軸に平行な直線から成ることがわかる。

Fig. 15 に $h=1.0$ の場合の $|\Phi(z)|$ の等高線図を示した。

$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ の場合、Newton-Cotes 公式のうちで台形公式が最も真の積分値に近い値を与えることを示すことができる。例えば Simpson 則を適用した場合を考えてみよう。

$$\begin{aligned} I_A &= \frac{2h}{3} \sum_{m=-\infty}^{\infty} f(2mh) + \frac{4h}{3} \sum_{m=-\infty}^{\infty} f(2mh+h) \\ &= \frac{4h}{3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh) - \frac{h}{3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh'), \quad h'=2h \end{aligned} \quad (6-8)$$

従ってこれに対応して

$$\Phi_A(z) = \frac{4\pi}{3} \cot \frac{\pi z}{h} - \frac{\pi}{3} \cot \frac{\pi z}{2h} \quad (6-9)$$

が得られるが、このとき $|\Phi(z)|$ は (6-7) と同様に $h \ll |z|$ だと

$$|\Phi(z)| \sim \frac{2\pi}{3} \exp(-2\pi |z|/h) + \frac{2\pi}{3} \exp(-\pi |z|/h) \quad (6-10)$$

となる。ところが第1項は第2項に比べ明らかに無視することができる。結局 $h \ll |z|$ のとき

$$|\Phi(z)| \sim \frac{2\pi}{3} \exp(-\pi |z|/h) \quad (6-11)$$

これを (6-7) と比較すれば、台形則の方が誤差の小さいことは明らかである。Simpson 則では、間隔が h より粗い $2h$ で

の和の効果が現われ、これが誤差を大きくするものと考えられる。より高次の *Newton-Cotes* 公式では事情はさらに悪くなることは明らかであろう。例えば $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} = 1.772453\dots$ を間隔 $h=1.0$ で数値積分したときの誤差は、台形則で 1.8×10^{-4} であるのに対し、*Simpson* 則では 1.0×10^{-4} 、4 次の公式では 1.7×10^{-4} 程度になる。

§ 7 $\int_0^{\infty} f(x) dx$ を無限和で近似すること

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx \quad (7-1)$$

を台形則

$$I_A = \frac{h}{2} f(0) + h \sum_{n=1}^{\infty} f(nh) \quad (7-2)$$

で近似する問題をまず考えよう。 $f(x)$ は x の大きいところで十分速やかに 0 になるものと仮定する。今の場合 (7-1) の I に対して $\Psi(x)$ を計算しようとしても、積分 $\int_0^{\infty} \frac{dx}{x-x}$ が発散してしまう。しかし (7-1) の積分の上限を Nh で打切ったもの、および (7-2) の和の上限を N で打切ったものの誤差の特性関数を作り、しかる後 $N \rightarrow \infty$ の極限をとればこの問題に対する誤差の特性関数 $\Phi(x)$ を得ることが出来る。

$$\begin{aligned}
\Phi(z) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\int_0^{Nh} \frac{dx}{z-x} - h \left\{ \frac{1}{2z} + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{z-nh} + \frac{1}{2(z-Nh)} \right\} \right] \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \log \frac{z}{z-Nh} - \frac{h}{2z} + \psi\left(N - \frac{z}{h}\right) - \psi\left(1 - \frac{z}{h}\right) - \frac{h}{2(z-Nh)} \right\} \\
&= \log\left(-\frac{z}{h}\right) - \frac{h}{2z} - \psi\left(1 - \frac{z}{h}\right) + \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ -\log\left(N - \frac{z}{h}\right) + \psi\left(N - \frac{z}{h}\right) + \frac{1}{2\left(N - \frac{z}{h}\right)} \right\}
\end{aligned}$$

ただし ψ は

$$\psi(\zeta) = \frac{\Gamma'(\zeta)}{\Gamma(\zeta)} \quad (7-3)$$

で定義される psi 関数である。しかるにその大きいところで

$$\psi(\zeta) \sim \log \zeta - \frac{1}{2\zeta} \quad (7-4)$$

が成立するので結局

$$\begin{aligned}
\Phi_x(z, h) \equiv \Phi(z) &= \log\left(-\frac{z}{h}\right) - \frac{h}{2z} - \psi\left(1 - \frac{z}{h}\right) \\
&= \log\left(-\frac{z}{h}\right) + \frac{h}{2z} - \psi\left(-\frac{z}{h}\right) \quad (7-5)
\end{aligned}$$

となる。 $h \ll |z|$ のとき、 ψ の漸近展開から次式を得る。

$$\begin{aligned}
\Phi(z) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1} B_n h^{2n}}{2n z^{2n}} \quad (B_n \text{ は Bernoulli 数}) \\
&= \frac{1}{12} \left(\frac{h}{z}\right)^2 - \frac{1}{120} \left(\frac{h}{z}\right)^4 + \frac{1}{252} \left(\frac{h}{z}\right)^6 - \dots \quad (0 < \arg z < 2\pi) \quad (7-6)
\end{aligned}$$

psi 関数の reflection rule

$$\psi(1-\zeta) - \psi(\zeta) = \pi \cot \pi \zeta \quad (7-7)$$

より、(7-5)はまた

$$\Phi(z) = \log\left(-\frac{z}{h}\right) - \frac{h}{2z} - \psi\left(\frac{z}{h}\right) - \pi \cot \frac{\pi z}{h} \quad (7-8)$$

とも書けるが、これより $h \ll |\operatorname{Im} z| \ll \operatorname{Re} z$ のとき

$$|\Phi(z)| \sim 2\pi \exp(-2\pi |\operatorname{Im} z| / h) \quad (7-9)$$

を得る。従って今の場合の $|\Phi(z)|$ の等高線図は、(7-6)に対応する原点を中心とする同心円から成る部分と、(7-9)に対応する実軸の正の部分の近くに現われる実軸に平行な直線から成る部分に分けられる。

台形則(7-2)の代りにより高次のNewton-Cotes公式を採用した場合の特性関数は、台形則において(7-5)に得られた $\Phi_n(z, h)$ の h の異なるものの1次結合によって表わされる。例えばSimpson則の場合には

$$\Phi(z) = \frac{4}{3}\Phi_2(z, h) - \frac{1}{3}\Phi_2(z, 2h) \quad (7-10)$$

$$= \log\left(-\frac{z}{h}\right) + \frac{1}{3}\log 2 + \frac{h}{3z} - \frac{4}{3}\psi\left(-\frac{z}{h}\right) + \frac{1}{3}\psi\left(-\frac{z}{2h}\right) \quad (7-11)$$

となる。 $h \ll |z|$ のとき

$$\begin{aligned} \Phi(z) &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n 2(2^{2n-2}-1)B_n h^{2n}}{3n z^{2n}} \\ &\sim \frac{1}{30}\left(\frac{h}{z}\right)^4 - \frac{5}{63}\left(\frac{h}{z}\right)^6 + \dots \quad (0 < \arg z < 2\pi) \end{aligned} \quad (7-12)$$

$h \ll |\operatorname{Im} z| \ll \operatorname{Re} z$ のとき

$$|\Phi(z)| \sim \frac{2\pi}{3} \exp(-\pi |\operatorname{Im} z| / h) \quad (7-13)$$

Fig.16 は $h=0.1$ の場合の Simpson 則の $|\Phi(z)|$ の等高線図である。

Fig.16 を見ると、同心円領域と平行線領域との境界がかなりはっきりしていることがわかる。この境界は (7-12) の絶対値と (7-13) とを等置することによって得られる軌跡で近似的に与えられる。すなわち

$$\frac{1}{30} \left(\frac{h}{|z|} \right)^4 = \frac{2\pi}{3} \exp(-\pi |\operatorname{Im} z| / h) \quad (7-14)$$

さらに $x = \operatorname{Re} z / h$, $y = \operatorname{Im} z / h$ とおくと、(7-14) はまた

$$\frac{1}{30} \frac{1}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{2\pi}{3} \exp(-\pi y) \quad (7-15)$$

とも書ける。(7-15) は h に依存しない曲線を与えることがわかる。Fig.17 に、このようにして得た 1 次 (台形則), 2 次 (Simpson 則), 4 次, 6 次の Newton-Cotes 公式に対する境界線を示す。この図から任意の h に対するこれら 4 つの公式の $|\Phi(z)|$ の等高線図の概形が得られることは明らかである。言い換えれば、この図から z -平面上の任意の点における $|\Phi(z)|$ の値を求めることができる。また、 m 次の公式に対する曲線より下側の部分 (実軸に近い方の部分), すなわち平行線部分に

においては、 m 次の公式が m 次以上の公式より高精度の結果を与えることは§6の議論から明らかであろう。

§8 変数変換をへて導かれる積分公式—伊理・森口・高沢の公式

$$I = \int_a^b f(x)w(x)dx \quad (8-1)$$

に変数変換

$$x = \varphi(t) \quad (8-2)$$

を行うと

$$I = \int_c^d g(t)dt \quad (8-3)$$

$$g(t) = f(\varphi(t))w(\varphi(t))\varphi'(t) \quad (8-4)$$

となる。変数 t の変域 (c, d) は、変換 (8-2) により変数 x の変域 (a, b) に対応するものと仮定する。さて、ここで積分 (8-3) に対して、ある既知の積分公式を適用しよう。

$$I_A = \sum_{k=1}^n A_k g(a_k) \quad (8-5)$$

これをもとの変数に戻すと

$$I_A = \sum_{k=1}^n B_k f(b_k) \quad (8-6)$$

$$A_k = \varphi(a_k), \quad B_k = A_k w(\varphi(a_k)) \varphi'(a_k) \quad (8-7)$$

が得られる。公式(8-6)に対応する誤差の特性関数 $\Phi(z)$ は次式で与えられる。

$$\Phi(z) = \int_a^b \frac{w(x)}{z-x} dx - \sum_{k=1}^n \frac{A_k w(\varphi(a_k)) \varphi'(a_k)}{z - \varphi(a_k)} \quad (8-8)$$

$$= \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{z^{r+1}} \left[\int_a^b w(x) x^r dx - \sum_{k=1}^n A_k w(\varphi(a_k)) \varphi'(a_k) \{\varphi(a_k)\}^r \right] \quad (8-9)$$

前回の研究会において、積分

$$I = \int_0^1 f(x) dx \quad (8-10)$$

に変数変換

$$\left. \begin{aligned} x = \varphi(t) &= \int_0^t \varphi'(\tau) d\tau \\ \varphi'(t) &= \frac{1}{Q} \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right), \quad Q = \int_0^1 \varphi'(\tau) d\tau \end{aligned} \right\} \quad (8-11)$$

を行い、さらに(8-3)に台形則を適用して得られる新しい公式が伊理・森口・高沢によって発表された^{*}。この公式では展開(8-9)の各係数は一様に小さくなっていると考えられるが、一方 $1/z$ の係数も0にならず、 $f(x)=1$ のような定数関数の積分においてもある程度の誤差を生ずる。

Fig. 18 に $n=7$ の場合の $|\Phi(z)|$ の等高線図を示す。

* 数理解析研究所講究録 91 p. 82

§9 Romberg 積分

簡単のために積分区間を $(-1, 1)$ とする。Romberg 積分とは、良く知られているように、計算機での計算に便利な次のような手順に従って積分

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \quad (9-1)$$

を近似的に実行する方法のことである。まず区間 $(-1, 1)$ を 2^k 等分し (9-1) に対して台形則を適用する。 $h = 2/2^k$ とおくと

$$T_0^{(k)} \equiv \frac{h}{2} f(-1) + h f(-1+h) + \dots + h f(1-h) + \frac{h}{2} f(1) \quad (9-2)$$

次に、引続く $T_{\ell}^{(k)}$ があらかじめ定めておいた精度内で一致するまで次の漸化式に従って計算をくり返す。

$$T_{\ell}^{(k)} = \frac{4^{\ell} T_{\ell-1}^{(k+1)} - T_{\ell-1}^{(k)}}{4^{\ell} - 1} \quad (9-3)$$

そこで (9-2) および (9-3) に対応して

$$\Psi_0^{(k)}(z) = \frac{1}{2} \frac{h}{z+1} + \frac{h}{z+1-h} + \dots + \frac{h}{z-1+h} + \frac{1}{2} \frac{h}{z-1} \quad (9-4)$$

$$\Psi_{\ell}^{(k)}(z) = \frac{4^{\ell} \Psi_{\ell-1}^{(k+1)}(z) - \Psi_{\ell-1}^{(k)}(z)}{4^{\ell} - 1} \quad (9-5)$$

を定義する。もし m ステップを経て計算を中止したとすればそのときの誤差の特性関数 $\Phi_m^{(k)}(z)$ は

$$\Phi_m^{(k)}(z) = \log \frac{z+1}{z-1} - \Psi_m^{(k)}(z) \quad (9-6)$$

で与えられることは明らかである。

$\Psi_0^{(k)}(z)$ の漸近展開は

$$\begin{aligned} \Psi_0^{(k)}(z) &= \sum_{r=0}^{\infty} \frac{h^r}{z^{r+1}} \left\{ \frac{(-1)^r}{2} + (-1+h)^r + \cdots + (1-h)^r + \frac{(1)^r}{2} \right\} \\ &= \frac{2}{z} + \frac{2}{z^3} \left(\frac{1}{3} + B_1 h^2 \right) + \frac{2}{z^5} \left(\frac{1}{5} + 2B_1 h^2 - B_2 h^4 \right) + \cdots \\ &\quad \cdots + \frac{2}{z^{2m+1}} \left\{ \frac{1}{2m+1} + \sum_{r=1}^m (-1)^{r-1} \frac{(2m)! B_r h^{2r}}{(2r)!(2m-2r+1)!} \right\} + \cdots \quad (9-7) \end{aligned}$$

ところで、(9-2) および (9-3) より $T_m^{(k)}$ は台形則 $T_0^{(k+j)}$ ($j=0,1,\dots,m$) の1次結合で表わされることがわかる。これを $\Psi_m^{(k)}(z)$ と記せば

$$\Psi_m^{(k)}(z) = \sum_{j=0}^m A_j \Psi_0^{(k+j)}(z) \quad (9-8)$$

われわれの原理からいえば、Romberg 積分公式とは、 $\Psi_m^{(k)}(z)$ が超越関数

$$\log \frac{z+1}{z-1} = \frac{2}{z} + \frac{2}{3z^3} + \frac{2}{5z^5} + \cdots + \frac{2}{(2m+1)z^{2m+1}} + \cdots \quad (9-9)$$

を z の大きいところで最も良く近似するように (9-8) の係数 A_j を定めて得られるものである。

こうして A_j を定めると、 $\Phi_m^{(k)}(z)$ の漸近展開において $1/z^\nu$ ($\nu \leq 2m+1$) に比例する項はすべて 0 になり、さらに残る $1/z^\nu$ ($\nu > 2m+1$) なる項の係数においても h^μ ($\mu \leq 2m$) に比例する部分

はすべて0になる。従って $\Phi_m^{(k)}(z)$ は次のようになる。

$$\Phi_m^{(k)}(z) \sim c h^{2m+2} / z^{2m+3} + \dots \quad (h = 2 / 2^{k+m}) \quad (9-10)$$

$T_m^{(k)}$ においては分点の総数が $2^{m+k}+1$ 個、出発の基本区間の数が 2^k 個であると考えることができる。そこでこれと同じ条件を持つ 2^m 次の Newton-Cotes 公式と比較すると、後者では

$$\Phi(z) \sim c' h^{2m+3} / z^{2m+3} + \dots \quad (9-11)$$

となる。従って $T_1^{(k)}$ と $T_2^{(k)}$ とはそれぞれ Simpson 則と4次の公式とに対応しているが、 $m > 2$ については両者の間に直接の対応関係は無い。

Fig. 19, 20, 21 に $T_5^{(0)}$, $T_4^{(1)}$, $T_3^{(2)}$ に対する $|\Phi(z)|$ の等高線図を示す。区間 $(-1, 1)$ はいずれの場合も $2^5 = 32$ 等分され、33点における関数値が計算される。

§ 10 誤差評価の数値例

2, 3 の例に対してわれわれの誤差評価の方法を適用してみよう。

$$(10-a) \quad f(x) = e^{5x} \quad (10-1)$$

$$I = \int_{-1}^1 e^{5x} dx = \frac{1}{5} (e^5 - e^{-5}) = 29.68128 \ 42331 \dots \quad (10-2)$$

(10-a-1) 25点 Simpson 則

Fig. 3の $|\Phi(z)|$ と、 $|f(z)| = e^{5\operatorname{Re}z}$ の複素平面での変化を見れば、 $|\Phi(z)e^{5z}|$ の鞍点が実軸の正の部分に現われることは明らかであろう。実軸上の2,3点で $|\Phi(z)e^{5z}|$ の値を概算してみると、鞍点の位置はほゞ $z \sim 1.8$ であることがわかる。(1-10)の積分路Cとしては $z=1.8$ を実軸に垂直に通過するものをとる。するとこの路に沿って $|f(z)| = e^{5 \times 1.8} = 8.1 \times 10^3$ は定数であるから $|\Phi(z)e^{5z}|$ の変化の半値巾は $|\Phi(z)|$ の変化だけからきまり、Fig. 3より半値巾は約1.0であることがわかる。また $|\Phi(1.8)| \sim 5 \times 10^{-6}$ であるから、(1-18)より誤差は

$$|\Delta I_{\text{est}}| \sim \frac{1}{2\pi} \times (5 \times 10^{-6}) \times (8 \times 10^3) \times 1 \sim 6 \times 10^{-3} \quad (10-3)$$

実際に25点 Simpson 則を使って $f(x) = e^{5x}$ を積分すると

$$I_A = 29.68615 \dots \quad (10-4)$$

従って誤差は

$$|\Delta I_{\text{obs}}| \sim 4.8 \times 10^{-3} \quad (10-5)$$

となり(10-3)の評価と良く一致している。

(10-a-2) 9点 Legendre-Gauss 公式

Fig. 8の $|\Phi(z)|$ と、 $|f(z)| = e^{5\operatorname{Re}z}$ の変化から、 $|\Phi(z)e^{5z}|$ の鞍点は前例と同様実軸の正の部分に現われることがわかる。もし鞍点が原点からかなり遠くに現われるとすれば $|\Phi(z)|$ はその辺で

$$|\Phi(z)| \propto z^{-2n-1} = z^{-19} \quad (n=9) \quad (10-6)$$

と近似することができる。従ってこの場合の鞍点は

$$\frac{d}{dz} |\Phi(z)f(z)| = C \frac{d}{dz} z^{-19} e^{5z} = 0 \quad (10-7)$$

から得られ、結果は $z=3.8$ である。この位置においては確かに (10-6) が成立している。 $f(3.8) = e^{5 \times 3.8} \sim 1.8 \times 10^8$, $|\Phi(3.8)| \sim 2 \times 10^{-16}$; 前例と同様にして半値巾は約 2 と見積られるから (1-18) より

$$|\Delta I_{\text{est}}| \sim \frac{1}{2\pi} \times (2 \times 10^{-16}) \times (1.8 \times 10^8) \times 2 \sim 1 \times 10^{-8} \quad (10-8)$$

一方実際に 9 点 Legendre-Gauss 公式を使って e^{5x} を積分すると

$$I_A = 29.68128 \ 42216 \dots \quad (10-9)$$

が得られるから、その誤差は

$$|\Delta I_{\text{obs}}| \sim 1.0 \times 10^{-8} \quad (10-10)$$

で、われわれの評価と一致する。

$$(10-8) \quad f(x) = \frac{1}{(x-2)(x^2+1)} \quad (10-11)$$

$$I = \int_{-1}^1 \frac{dx}{(x-2)(x^2+1)} = -\frac{1}{5} (\log e^3 + \pi) = -0.84804 \ 09884 \dots \quad (10-12)$$

(10-8-1) 25 点 Simpson 則

被積分関数 (10-11) は $z=2, \pm i$ に単純な極を持っている。先にこれらの極における留数を計算しておく

$$z=2: R_2 = 1/5 = 0.2, \quad |R_2| = 0.2 \quad (10-13)$$

$$z=\pm i: R_{\pm i} = \frac{-1 \pm 2i}{10}, \quad |R_{\pm i}| = \frac{\sqrt{5}}{10} \sim 0.22 \quad (10-14)$$

留数の値はいずれの極のものもほぼ同じ程度の値であるから、積分の誤差に対する寄与の大小は各極の位置における $|\Phi(z)|$ の値だけからきまると考えてよい。Fig. 3 においては

$$|\Phi(2)| \sim 1.8 \times 10^{-6}, \quad |\Phi(\pm i)| \sim 1 \times 10^{-7} \quad (10-15)$$

であるから、 $z=2$ における極からの寄与の方が $z=\pm i$ からのものよりずっと大きい。従って (1-19) より

$$|\Delta I_{est}| \sim (1.8 \times 10^{-6}) \times 0.2 = 3.6 \times 10^{-7} \quad (10-16)$$

実際に 25 点 Simpson 則を使って積分を実行すると

$$I_A = -0.84804 \ 12981 \dots \quad (10-17)$$

が得られるから、その誤差は

$$|\Delta I_{obs}| \sim 3.1 \times 10^{-7} \quad (10-18)$$

で (10-16) と良く一致する。

(10-8-2) 9 点 Legendre - Gauss 公式

$$|\Phi(2)| \sim 1 \times 10^{-10}, \quad |\Phi(\pm i)| \sim 3 \times 10^{-7} \quad (10-19)$$

が Fig. 8 から得られるから、今度は 25 点 Simpson 則の場合と逆に $z=\pm i$ における極からの寄与の方が $z=2$ からのものよりずっと大きくなる。従って (1-19) より

$$|\Delta I_{est}| \sim 2 \times (3 \times 10^{-7}) \times 0.22 \sim 1.3 \times 10^{-7} \quad (10-20)$$

一方実際 9 点 Legendre - Gauss 公式で積分を実行すると

$$I_A = -0.84804 \ 11200 \dots \quad (10-21)$$

となるから、誤差は

$$|\Delta I_{obs}| \sim 1.3 \times 10^{-7} \quad (10-22)$$

で、われわれの評価(10-20)と一致する。

§11 積分公式の選択について

われわれの方法は、数値積分の誤差評価のために使えるだけでなく、各種の $|\Phi(x)|$ の等高線図を比較することによって被積分関数 $f(x)$ および要求される精度に応じた最適の積分公式を選択することができる。

(11-a) Gauss 型公式と Newton-Cotes 公式

Fig. 8とFig.1あるいはFig.3とを比較すると、分点の数が等しい場合はもちろん、Simpson則の分点の方がかなり多くなってLegendre-Gauss公式の方が優れていることは明らかである。何故なら図のほとんど全域にわたってSimpson則の $|\Phi(x)|$ の値よりLegendre-Gauss公式の $|\Phi(x)|$ の値の方が小さいからである。しかし $f(x)$ の極、あるいは $|\Phi(x)f(x)|$ の鞍点が虚軸の近く、それも線分 $(-1, 1)$ からあまり離れていない所に現われる場合は別である。このあたりではSimpson則の $|\Phi(x)|$ の挙動はかなり複雑であり、Legendre-Gauss公式の $|\Phi(x)|$ より小さくなっている部分がなくみられる。またSimpson則では $x=\pm i$ の近くに零点が現われるのは注目に値する。

次にNewton-Cotes公式の間の比較を試みよう。

$$(11-b) \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$$

無限区画 $(-\infty, \infty)$ における積分においては、実軸上における分点 a_k の分布の密度が一定の場合、すべての近似積分公式のうちで、台形則（一様な重みで和をとる最も単純な公式）が最良の結果を与えることを証明することができる。この詳細については、いずれ別に報告したい。とにかく、この積分の場合には、Simpson則を使うことは無駄であるばかりでなく、かえって精度を悪くする。Romberg積分も不適である。

$$(11-c) \int_0^{\infty} f(x) dx$$

$f(z)$ の極が、左半平面、あるいは右半平面でも虚軸に近い部分に存在する場合には、Newton-Cotes 公式の次数が高ければ高い程良い精度の結果を与える。しかし正の実軸にかなり近い所に特異点が位置する場合は、低次の公式の方が良くなる。

$$(11-d) \int_{-1}^1 f(x) dx$$

Newton-Cotes 公式に関して、 $2m$ 次の公式と $2m+1$ 次の公式とはほとんど同じ精度の結果を与えるという事実は良く知られている。Fig. 3 と Fig. 4 を比較すると、図全域にわたって Simpson 則の $|\Phi(z)|$ の方が Simpson $3/8$ 則の $|\Phi(z)|$ より小さいので、後者の公式は使用しない方が賢明である。以下の議論では $2m$ 次の公式（台形則だけは例外）だけを取上げる。

Fig.2 から Fig.7 までを比較すると、Newton-Cotes 公式の $|\Phi(z)|$ は虚軸の近くで特異な挙動を示すことがわかる。Fig. 22 に各図の $|\Phi(z)|$ の虚軸上の値 $|\Phi(iy)|$ を示す。

まず関数 $f(x) = \alpha / (x^2 + \alpha^2)$ を数値積分したときの誤差 $|\Delta I|$ は $|\Phi(i\alpha)|$ で与えられることに注意しよう。これは (1-19) より明らかである。従って Fig. 22 は極が $\pm i\alpha$ に存在するような関数を数値積分したときの誤差を示すものであると考えよう。もし極が正確に $\pm i\alpha$ に存在することがあらかじめわかっているならば、Fig. 22 において $y = \alpha$ から縦軸に平行な直線を引いたとき最も下で交わる曲線に対応する次数の公式を使うことによって最高の精度をもつ結果を得ることは明らかである。しかし通常特異点の位置を正確に知ることは困難な場合が多い。

しかしながら実は虚軸に近い所に特異点が存在するということがわかれば、要求される精度を与える最適の公式をこの図から選択することができる。以下にそれを示そう。要求される精度を δ とする。Fig. 22 の縦軸の δ のところから横軸に平行に直線を引くと、最初に（すなわち最も左側で）いずれかの曲線と交わるであろう。その曲線に対応する次数を n とする。すると n 次の公式が最適の公式、あるいは最適に近い公式である。何故なら、もしこの n 次の公式を使って要求された精度が一度で得られたならばこの公式が最適なこと

明白である。もし得られなければ積分の間隔を小さくして再び n 次の公式を適用する。このように間隔を小さくしながら積分をくり返せば、いつかは精度 δ が得られることは明らかである。“ある段階で精度 δ を持つ結果に到達したとしよう。このとき分点の数は 25 よりずっと多くなってはいるであろうが Fig. 22 と同じような図が得られる。この図においては曲線は Fig. 22 と比較して全体に左側にずれたものになっているであろう。この新しい図において Fig. 22 でやったと同じように縦軸の δ のところから出発して横軸に平行に直線を引けば、この直線は多分 Fig. 22 で選んだ n 次の公式の曲線と最初に交わるであろう。あるいは最初ではなくとも少くともかなり初めの方の順番で交わるであろう。従ってこの段階でも n 次の公式は依然として最適の公式、あるいは少くとも最適に近い公式であるに違いない。こうして Fig. 22 から最適の公式を選択することが示された。

Fig. 22 から、 $\delta = 10^{-5}$ 程度の結果を期待する場合は Simpson 則でよいが、 $\delta = 10^{-9}$ 程度を期待するなら 6 次の公式がよいことがわかる。もし $\delta = 10^{-3}$ 程度でよければ台形則が最良である!!

$f(z)$ の極が $|\operatorname{Re} z| > 1$ なる領域に存在する場合には、次数の高い Newton-Cotes 公式程良い精度の結果を与えることは、Fig. 2 から Fig. 7 までを比較すれば明らかであろう。

(11-e) Romberg 積分と Newton-Cotes 公式

前述したように、 $T_0^{(k)}$, $T_1^{(k)}$, $T_2^{(k)}$ はそれぞれ1次、2次、4次の Newton-Cotes 公式に一致している。これ以上の次数になると $|\Phi(z)|$ の等高線図は又の大きな所で Newton-Cotes 公式の方がずっと速やかに小さくなる。しかし、それ故 Newton-Cotes 公式が良いというのはあくまで原理上の話であって、実際には任意の次数の Newton-Cotes 公式の重みを与えることはほとんど不可能であろう。Newton-Cotes 公式のような意味での最適性は持っていないが、Romberg 積分は1ステップ進むとその誤差は $n^m \rightarrow n^{m+2}$ のように減少するから、例えば Simpson 則でただ積分間隔を $1/2$ にするよりはずっと精度は良くなる。プログラミングの容易さから見ても、現在広く用いられていると考えられる Simpson 則は近い将来 Romberg 積分にとって代られるであろう。

Fig. 19, 20, 21 を比較すると $(-1, 1)$ を何等分したところの台形則から始めるかによって $|\Phi(z)|$ の挙動はかなり異ってくるのがわかる。2点 -1 および 1 のみの台形則 $T_0^{(0)}$ から始めると、又の大きい所で最も小さな値を持つ全平面においてほぼ均一な等高線図が得られるが、その他の場合は Newton-Cotes 公式に見られたような独特の挙動が特に虚軸の近くにおいて見られる。虚軸に近い所では $T_5^{(0)}$ より $T_4^{(1)}$ の $|\Phi(z)|$ の方が値が小さい。従って虚軸の近くに特異点を持つ関数を積分するには $T_0^{(1)}$ から出発するのがよいであろう。Fig. 23 に $T_5^{(0)}$, $T_4^{(1)}$, $T_3^{(2)}$, $T_2^{(3)}$, $T_1^{(4)}$, $T_0^{(5)}$ の $|\Phi(z)|$ の虚軸上の値を示した。Fig. 22 と同様、これから最適の公式を選択することができる。

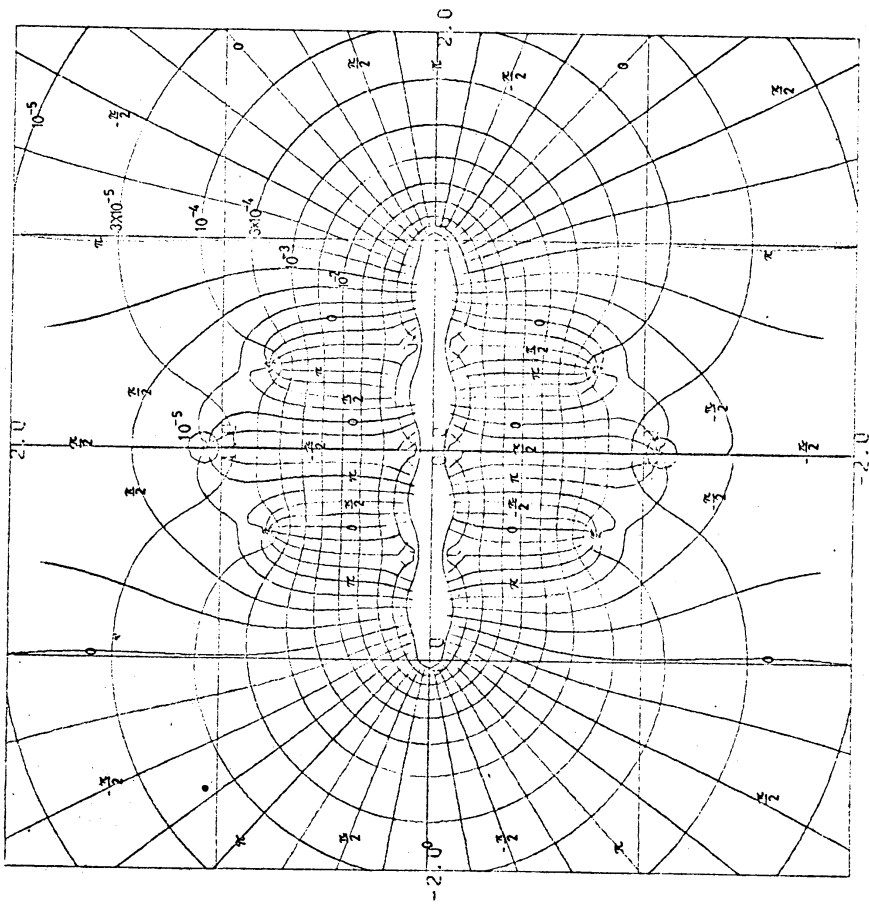


Fig. 1 9次 Simpson 則の $|\Phi(x)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

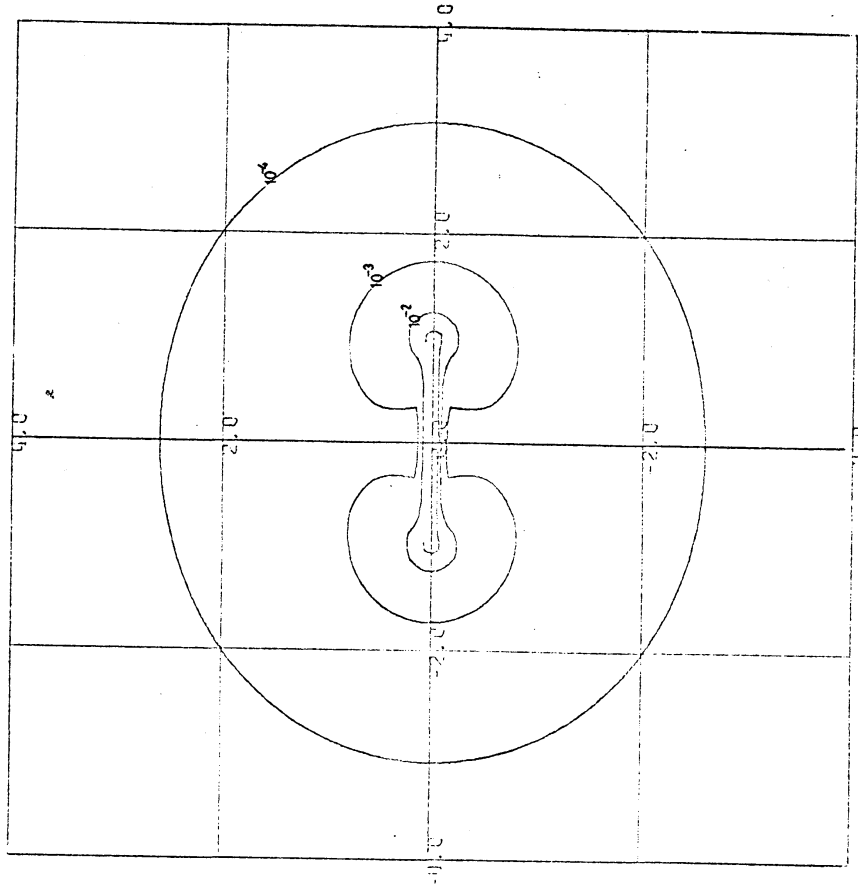


Fig. 2 25次 Newton-Cotes 公式
 (台形則) の $|\Phi(x)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

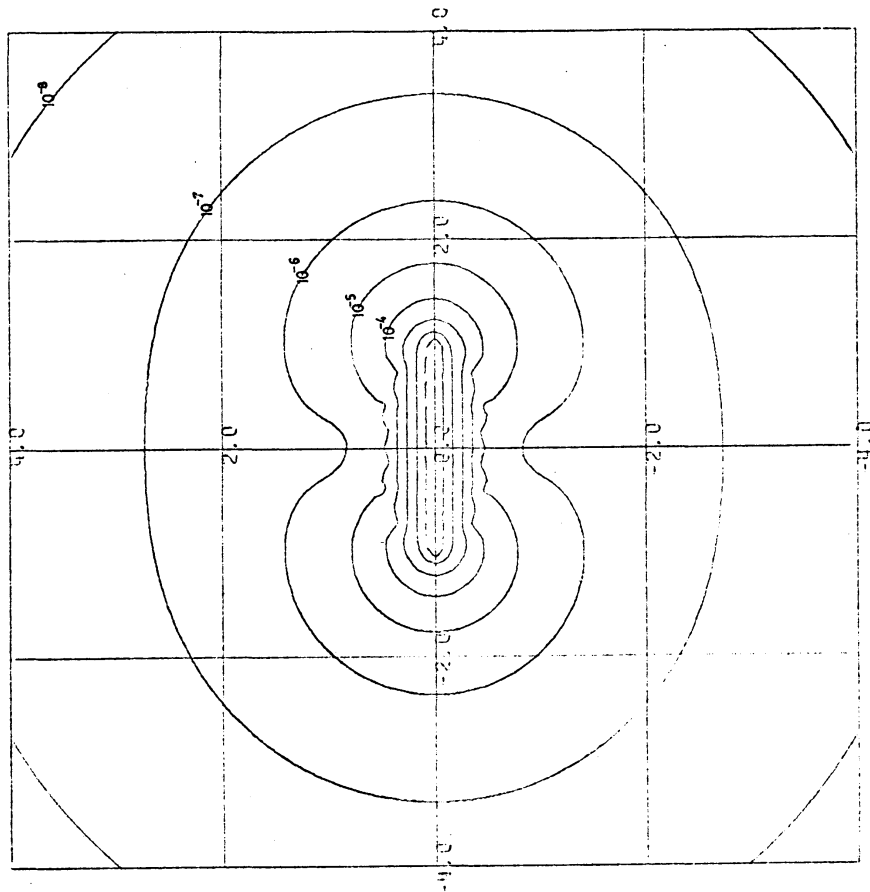


Fig. 4 25 次 3 次 Newton-Cotes 公式
(Simpson 3/8 則) の $|\Phi(z)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

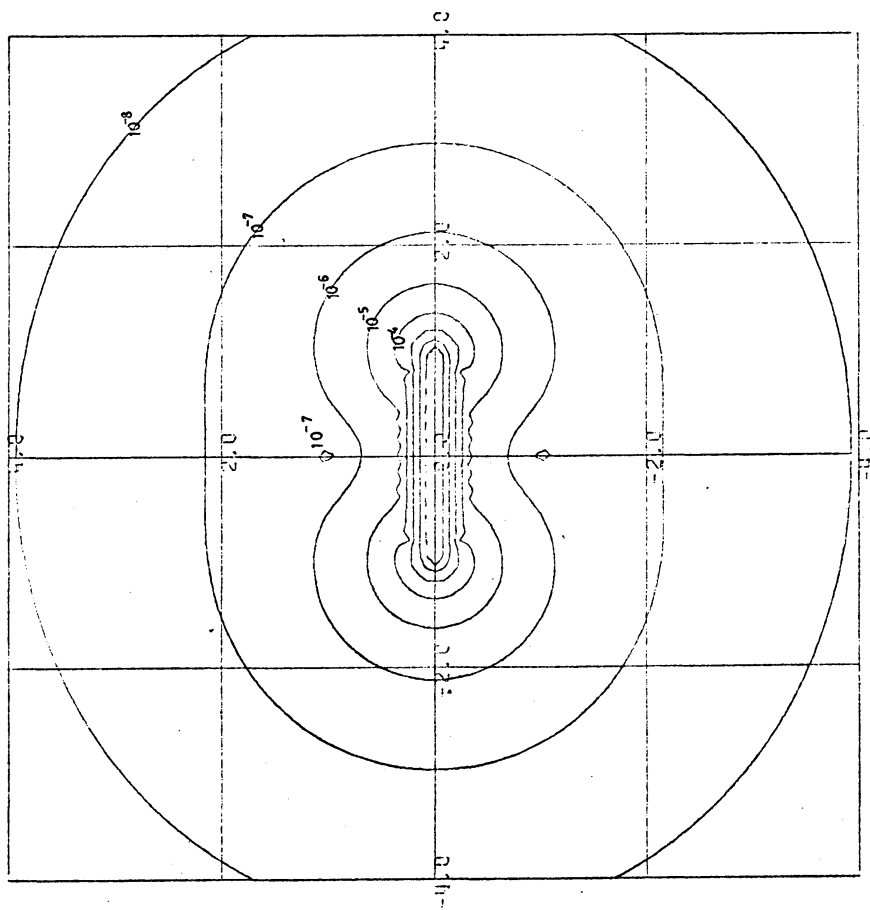


Fig. 3 25 次 2 次 Newton-Cotes 公式
(Simpson 則) の $|\Phi(z)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

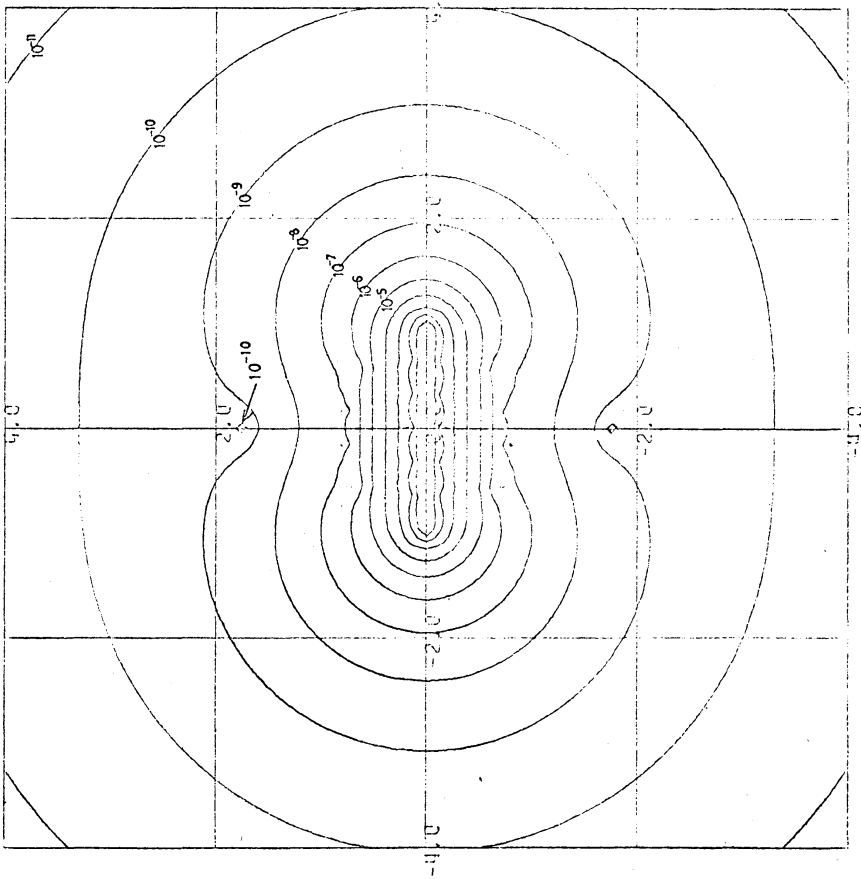


Fig. 5 25点 4次 Newton-Cotes 公式の |E(x)|

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

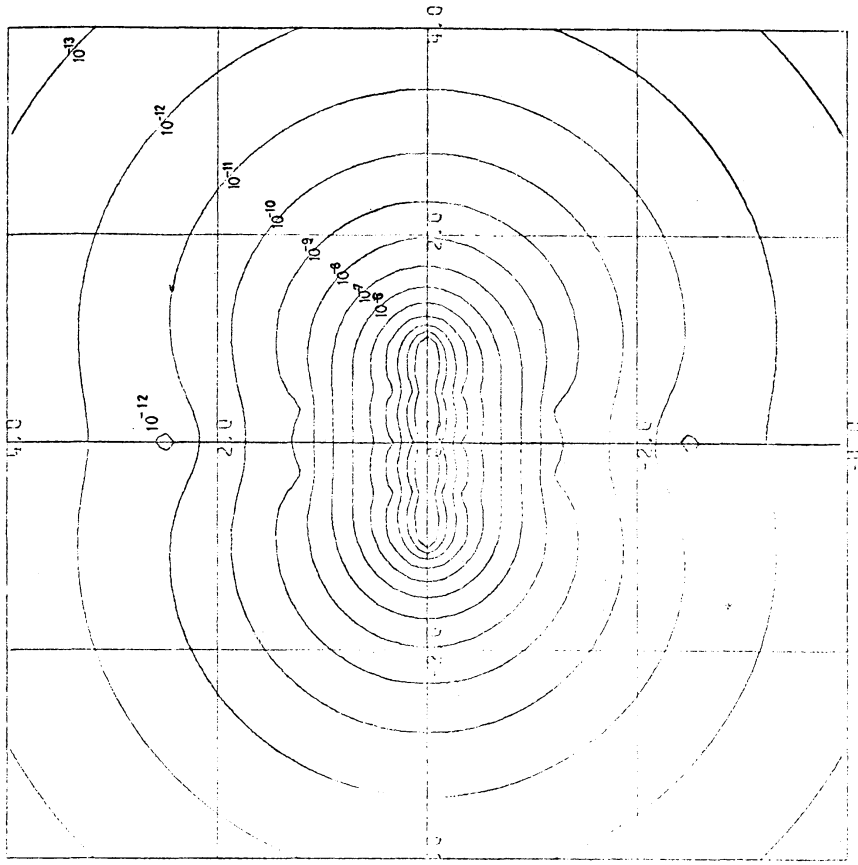


Fig. 6 25点 6次 Newton-Cotes 公式の |E(x)|

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

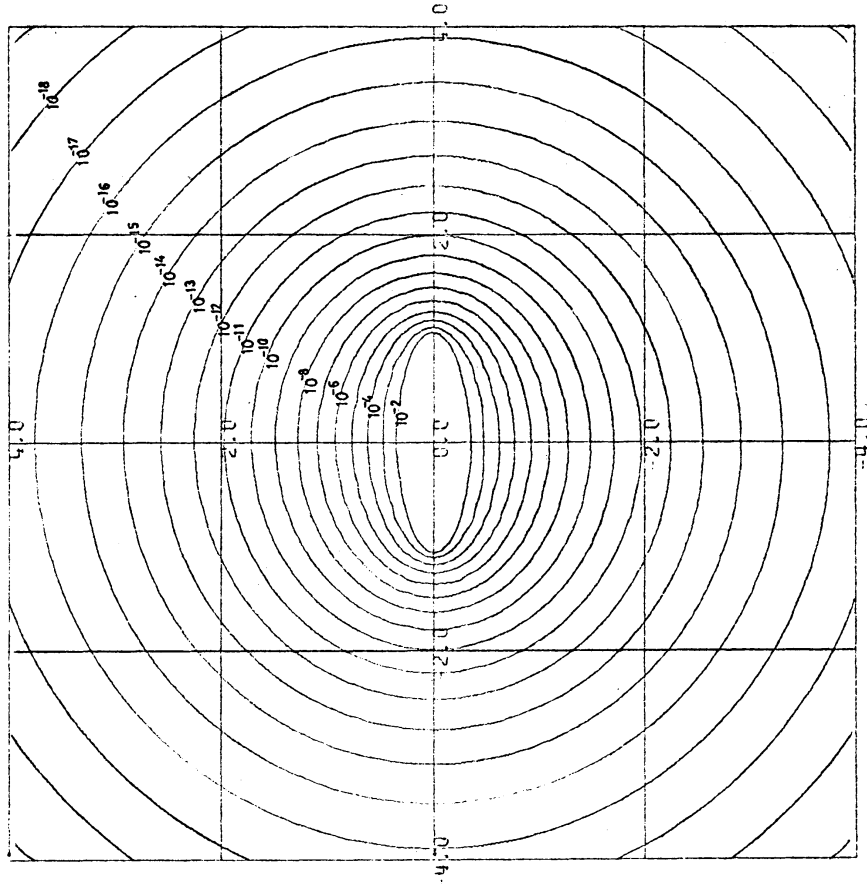


Fig. 8 9次 Legendre-Gauss 公式の |重根|

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

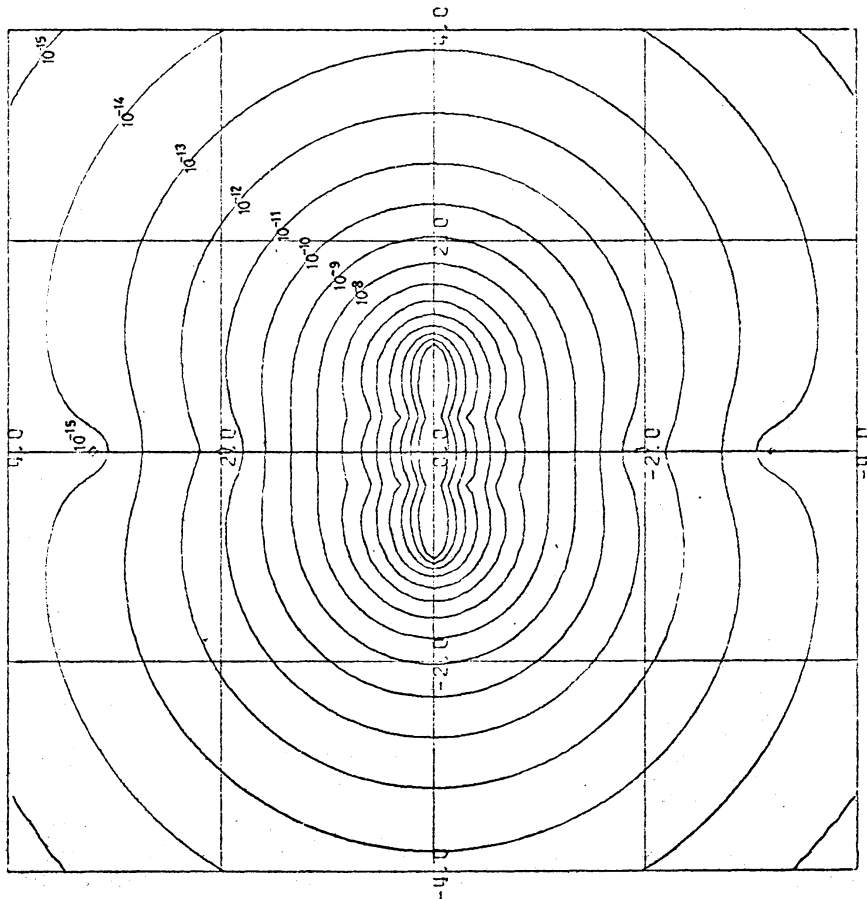


Fig. 7 25次 Newton-Cotes 公式の |重根|

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

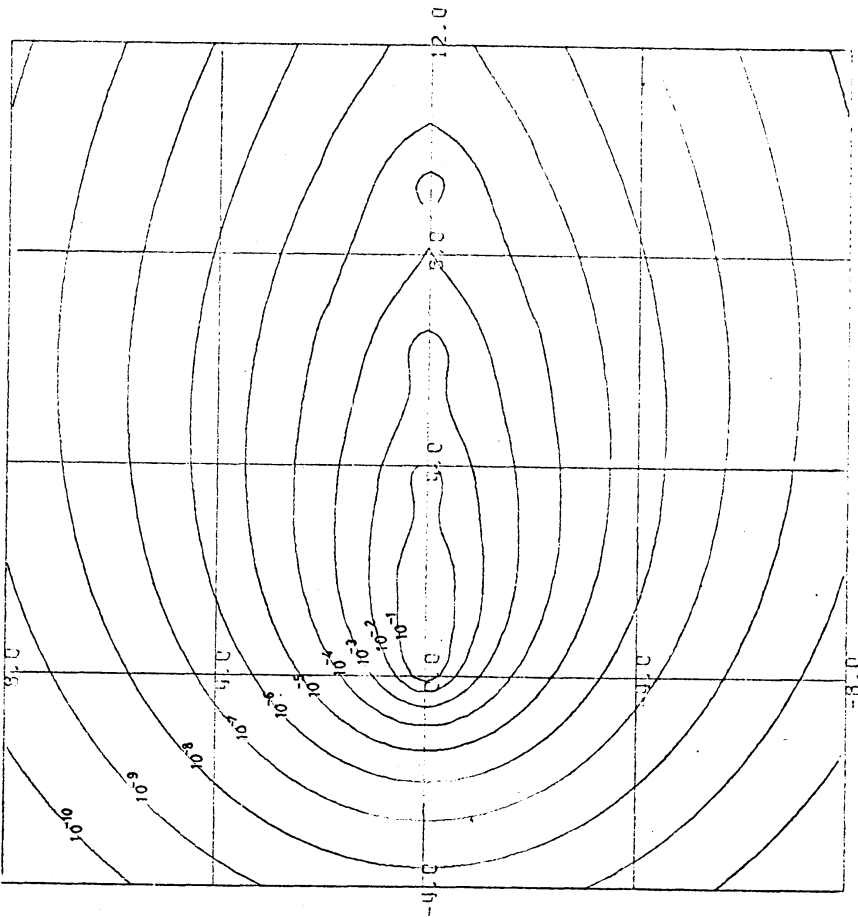


Fig. 9 4次 Laguerre-Gauss 公式の |Φ(x)|

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

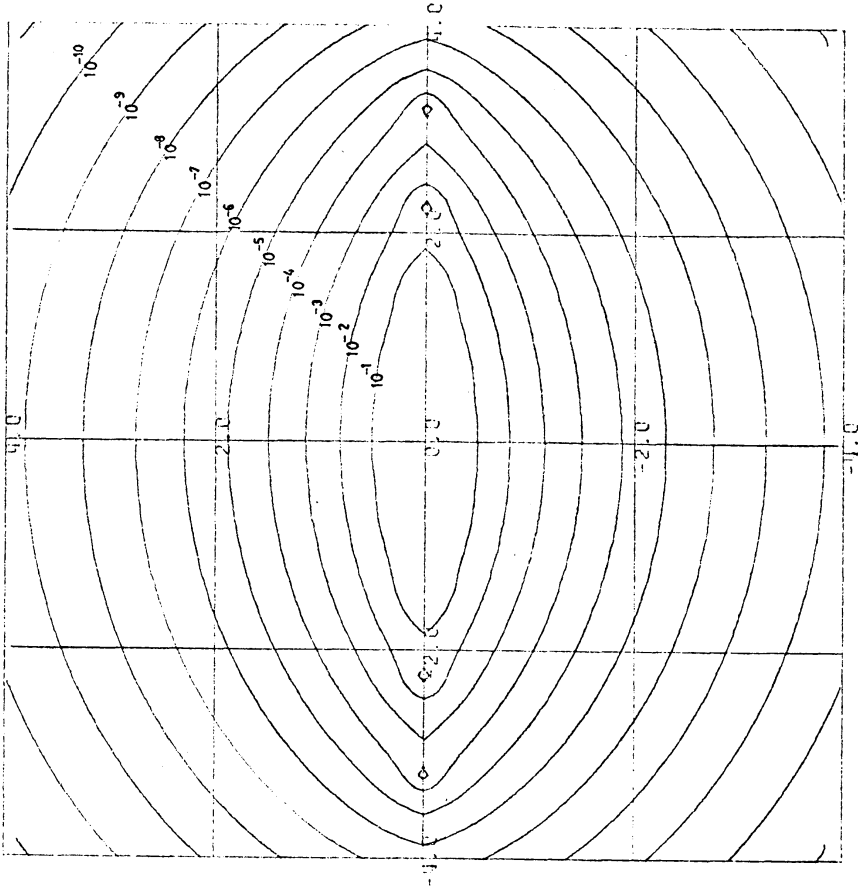


Fig. 10 9次 Hermite-Gauss 公式の |Φ(x)|

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-x^2} dx$$

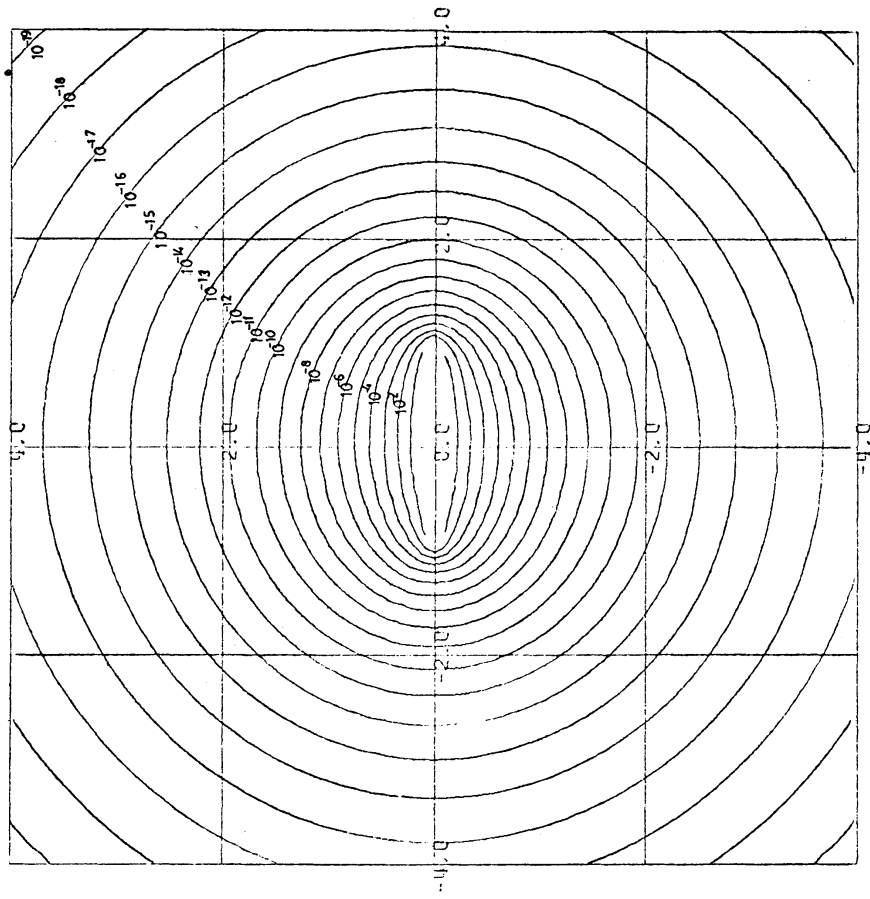


Fig. 12 9次 Jacoby-Gauss 公式の |重(z)|

$$\int_{-1}^1 f(x) \sqrt{1-x^2} dx$$

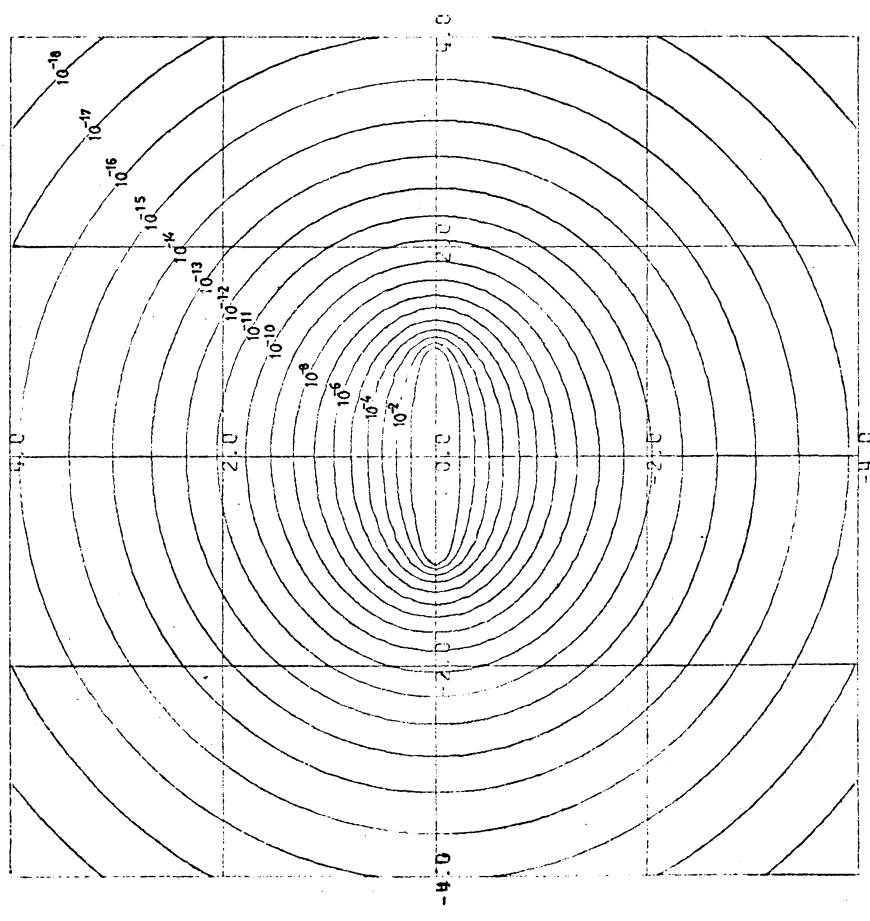


Fig. 11 9次 Chebyshev-Gauss 公式の |重(z)|

$$\int_{-1}^1 f(x) / \sqrt{1-x^2} dx$$

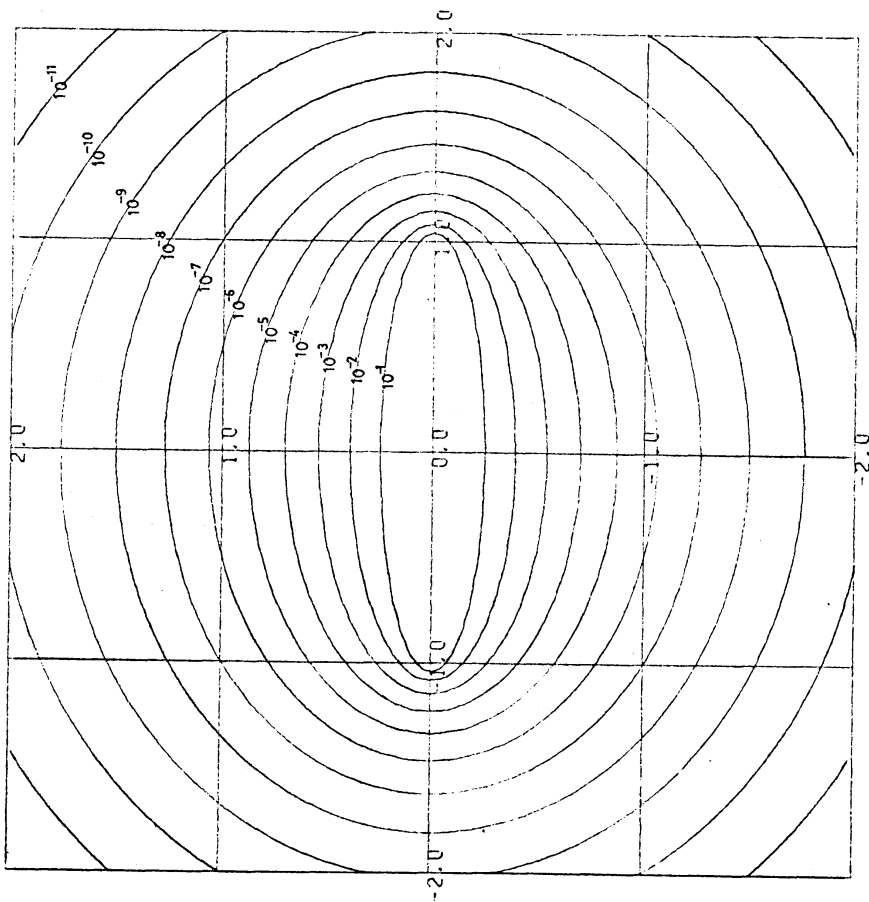


Fig.13 9点 Lobatto 公式の $|\Phi(\xi)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

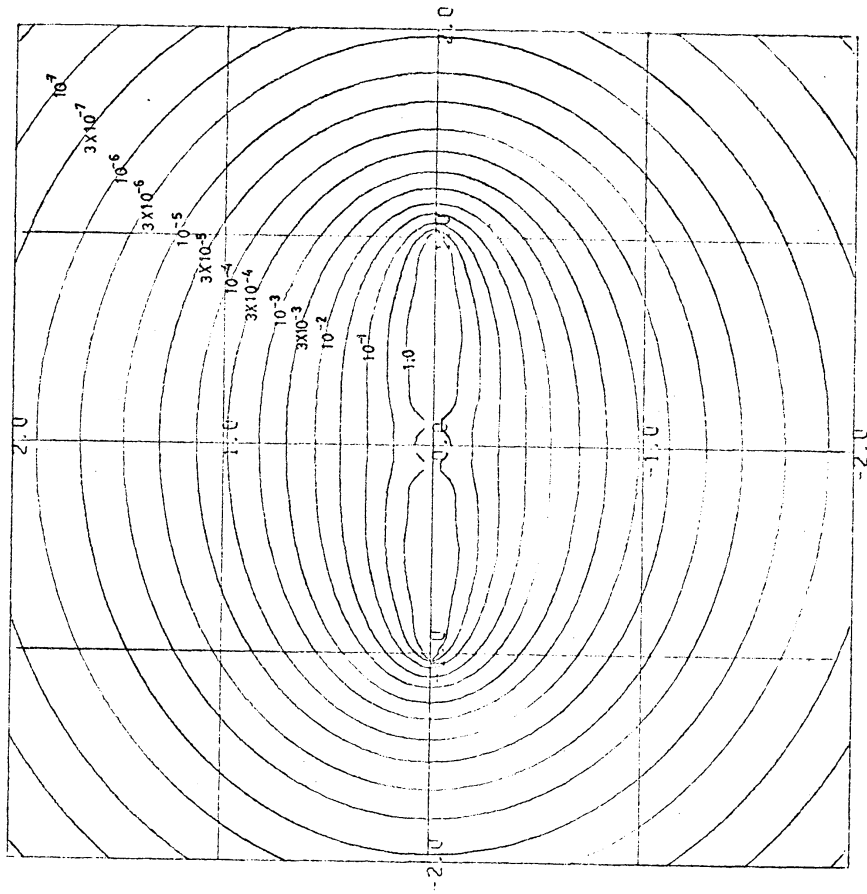


Fig.14 9点 Chebyshev 公式の $|\Phi(\xi)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

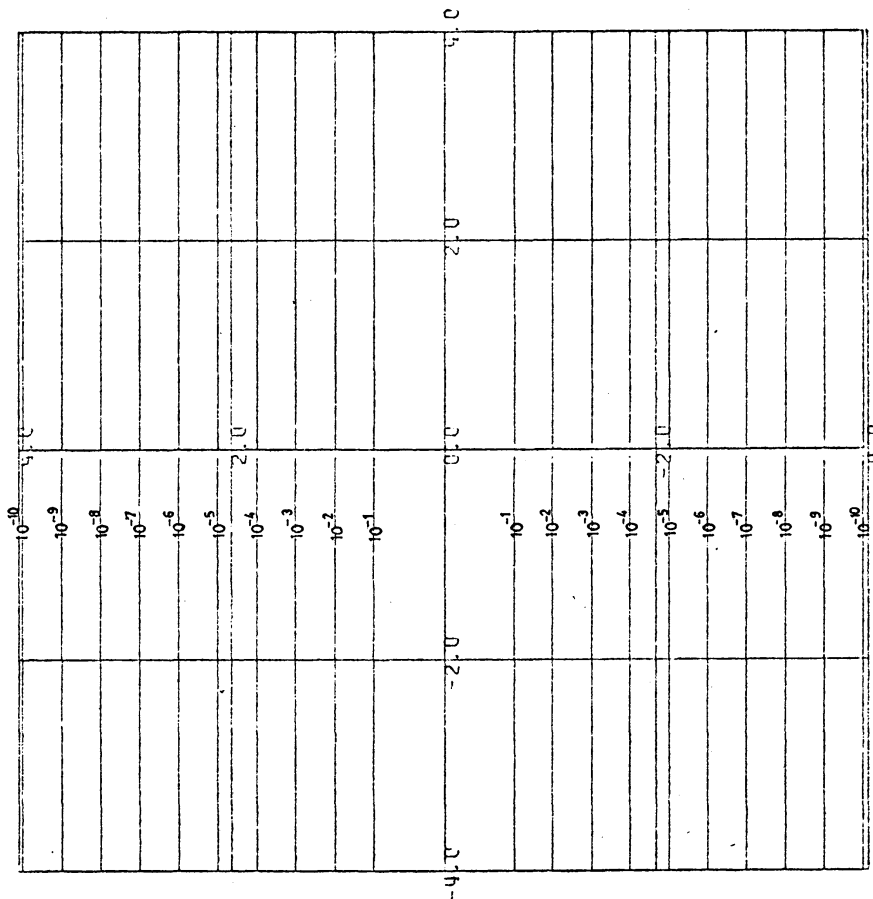


Fig.15 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ を台形則で積分したときの $|\Phi(x)|$, $h=1.0$

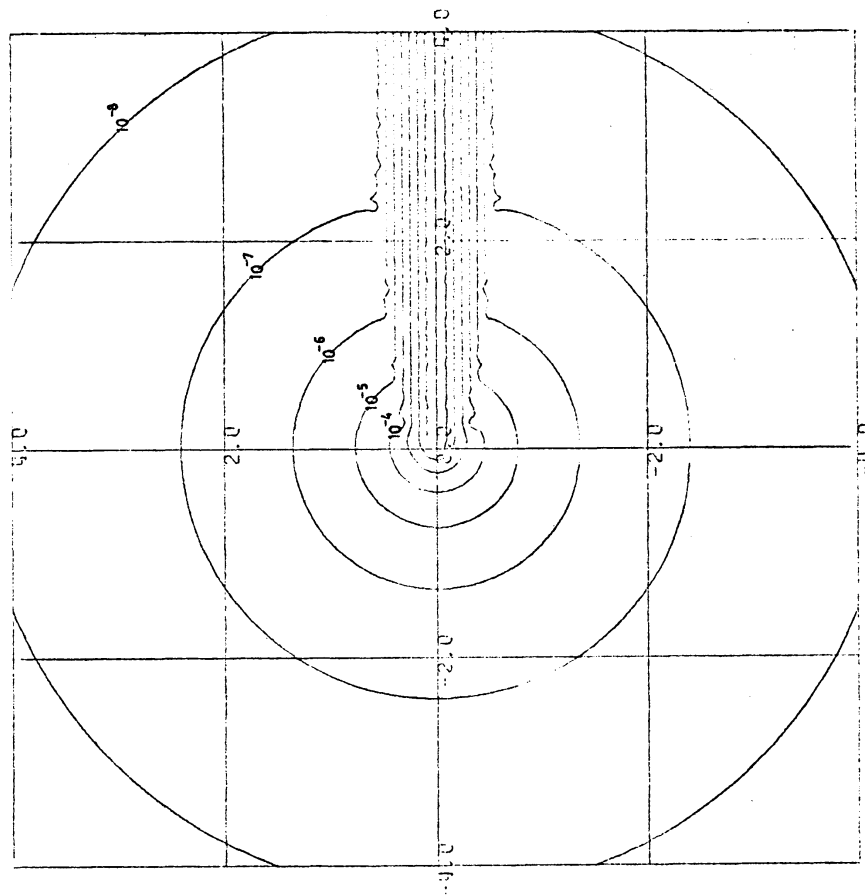


Fig.16 $\int_0^{\infty} f(x) dx$ を Simpson 則で積分したときの $|\Phi(x)|$, $h=0.1$

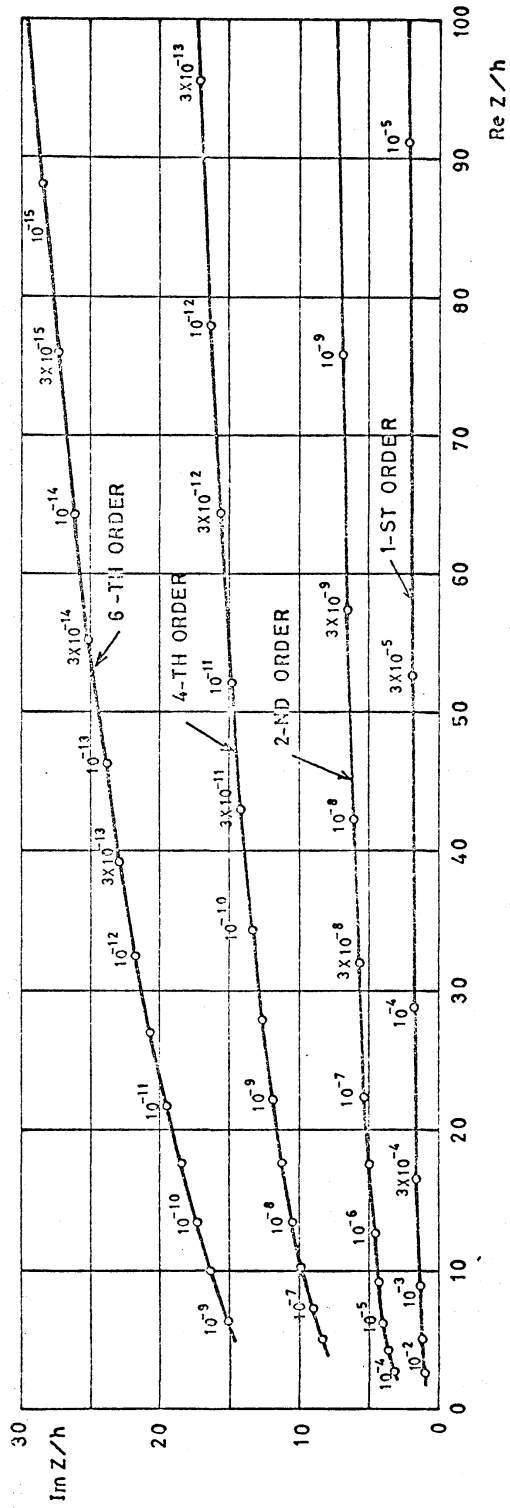


Fig.17 積分 $\int_0^{\infty} f(z) dz$ を 1, 2, 4, 6 次の Newton-Cotes 公式で

近似したときの (重則) の等高線図の同心円領域と平,

行線領域の境界線

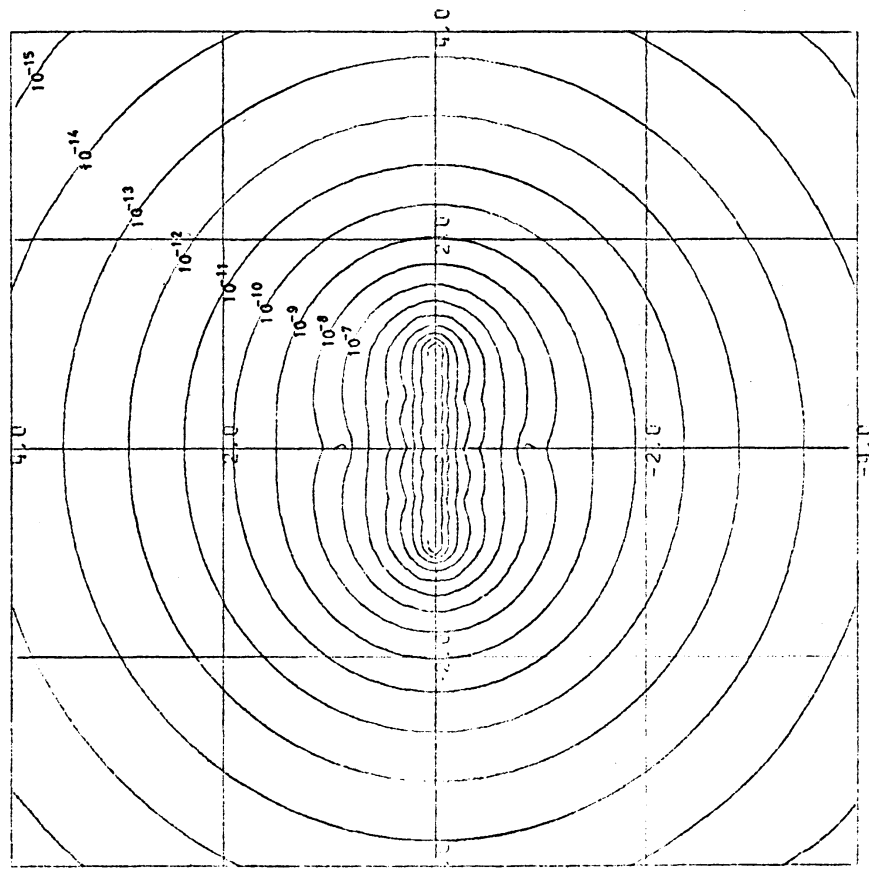


Fig.19 Romberg 積分 $T_5^{(6)}$ の $|\Phi(x)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

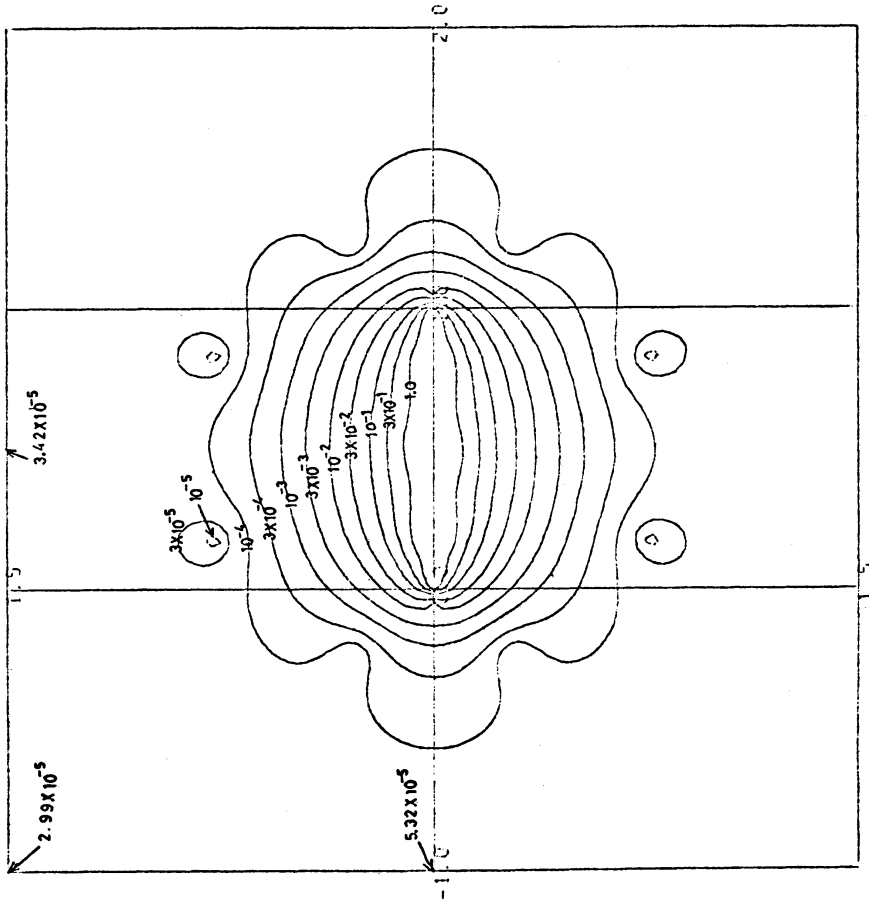


Fig.18 伊藤・森口・高次の公式の $|\Phi(x)|$
 $\int_0^1 f(x) dx$

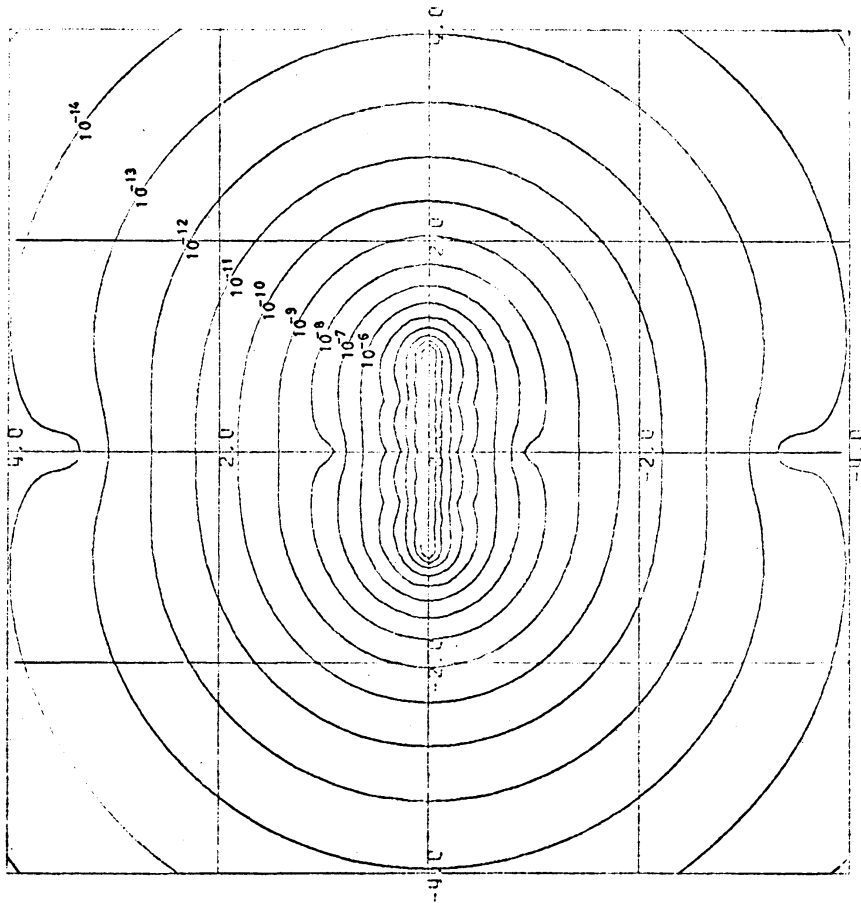


Fig.20 Romberg 積分 $T_4^{(4)}$ の $|R(z)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

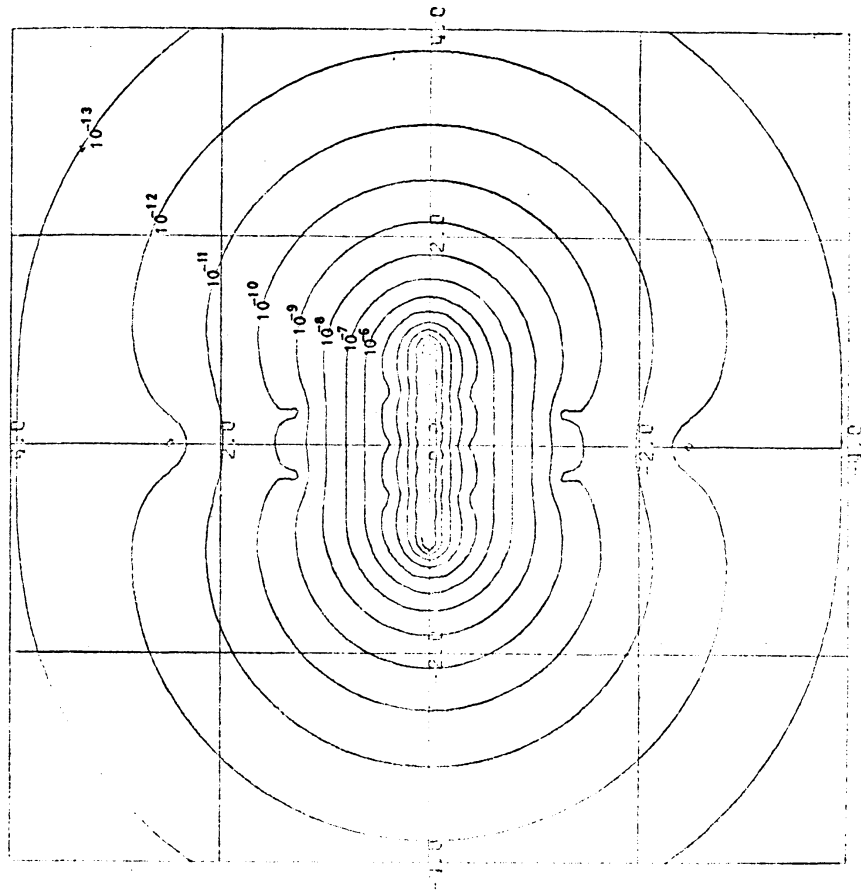


Fig.21 Romberg 積分 $T_3^{(3)}$ の $|R(z)|$
 $\int_{-1}^1 f(x) dx$

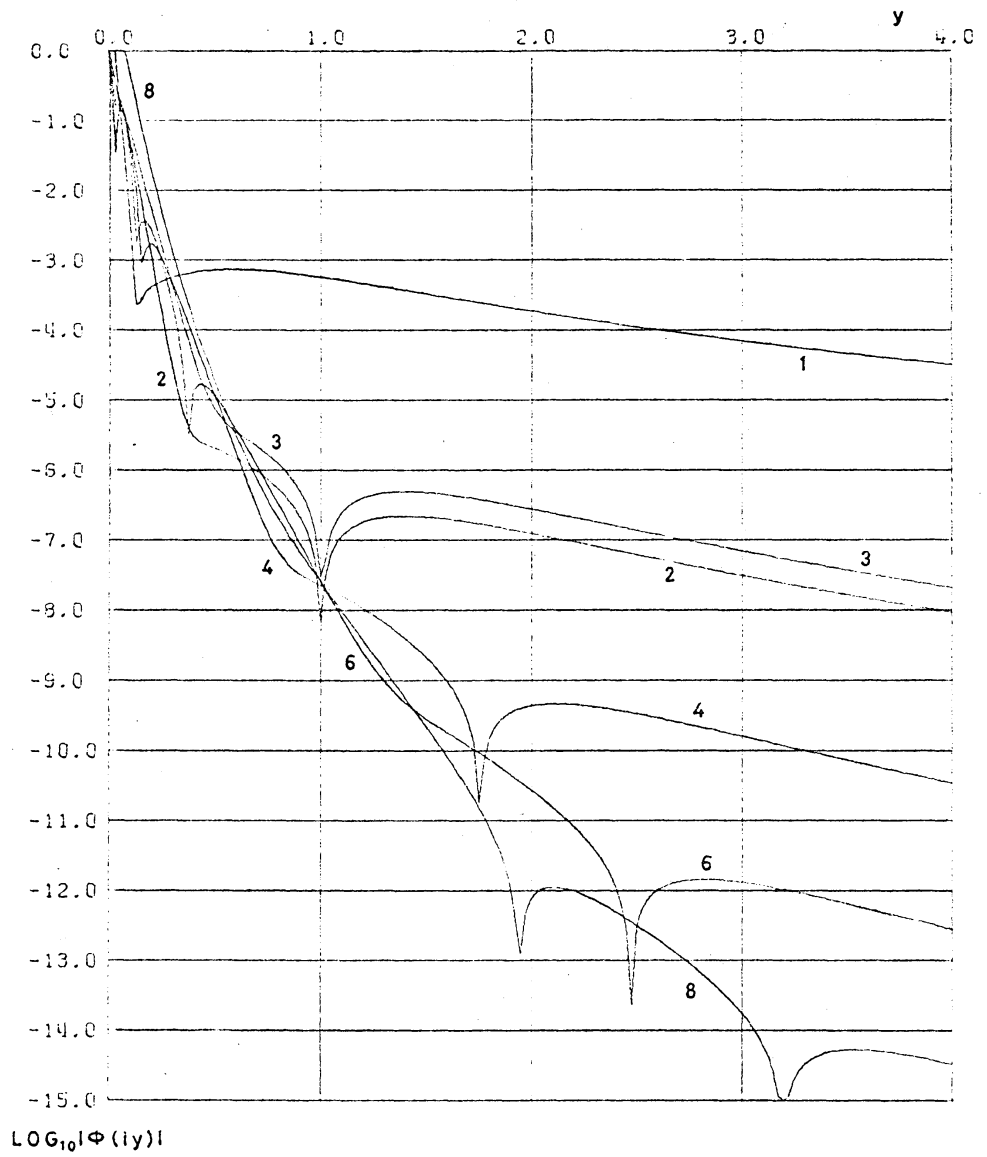


Fig. 22

25 点 Newton-Cotes 公式の $|\Phi(z)|$ の
虚軸上の値 (曲線に附けた値は公式の次数)

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

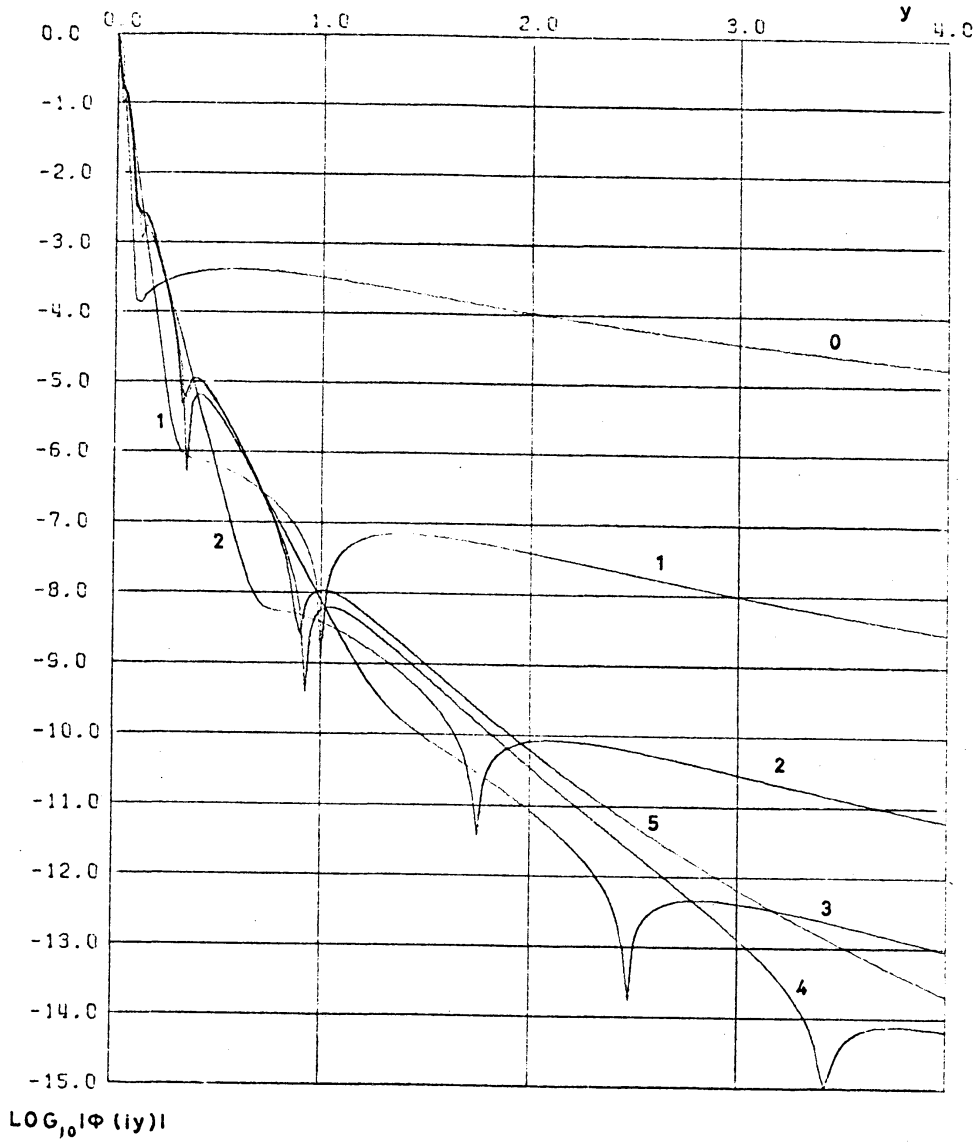


Fig. 23 Romberg 積分公式の $|\Phi(z)|$ の虚軸上の値

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

- | | | |
|-----------------|-----------------|-----------------|
| 5 : $T_5^{(0)}$ | 4 : $T_4^{(1)}$ | 3 : $T_3^{(2)}$ |
| 2 : $T_2^{(3)}$ | 1 : $T_1^{(4)}$ | 0 : $T_0^{(5)}$ |

資 料 文 獻

(1) 高橋秀俊—森正武，解析関数の数值积
分の誤差評価，京都大学数理解研講究録

115 (1971) — [原文写的是 1791. 是否印誤?], ~~115~~

(2) 高橋秀俊—森正武，数理解析研講究録

149 (1972)

(3) 同上 172 (1973).

(4) 森正武，数值解析と複素関数論，筑摩
書房，1975.

上述四份文献，麻烦你想办法给寻到。

梁世安 上

“数值解析”

梁世安