二重指数関数型数値積分公式の理論と発展

大浦拓哉

二重指数関数型(DE)公式

DE公式とは： ある種の最適な変数変換型数値積分公式
発見者： 高橋秀俊・森正武 (1974)

有限区間のDE公式 (tanh-sinh rule):

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx h \sum_{n=-N_-}^{N_+} f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh nh\right)\right) \frac{\frac{\pi}{2}\cosh nh}{\cosh^2(\frac{\pi}{2}\sinh nh)}$$

半無限区間のDE公式：

$$\int_{0}^{\infty} f(x)dx \approx h \sum_{n=-N_-}^{N_+} f(\exp(2\sinh nh)) 2\exp(2\sinh nh)\cosh nh$$

ＤＥ公式の応用例(Mathematicaの場合)

WolframAlpha

integrate sin(x)/sqrt(ln(1+x)) from 0 to infinity

自然言語　数学入力　拡張キーボード

定積分

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin(x)}{\sqrt{\log(1+x)}}\, dx = 1.41862$$

このページをダウンロード

標準の計算時間制限を超えました...

Wolfram言語 & システム
ドキュメントセンター

WOLFRAM モノグラフ

NIntegrate積分ストラテジー

- はじめに
- 適応型ストラテジー
- 大域的適応型ストラテジー
- 局所的適応型ストラテジー
- "GlobalAdaptive"と"LocalAdaptive"
- 特異点の処理
- 二重指数関数型ストラテジー
- "Trapezoidal"ストラテジー
- 振動ストラテジー
- 有限領域振動積分
- 外挿振動ストラテジー
- 二重指数関数型振動積
- 単純モンテカルロスト
- 大域的適応型モンテカ
- "MultiPeriodic"
- プリプロセッサ
- 例題と応用

目次

ニュートン・コーツ型公式(補間型公式)

区間 $[a,b]$ の積分を N 等分して、直線で関数を近似する：

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b f(x)\,dx \\ &\approx T_N = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{n=1}^{N-1} f(a+nh) + \frac{1}{2}f(b)\right), \quad h = \frac{b-a}{N} \end{aligned}$$

— **（複合）台形則**（最も基本的な公式）

同様にして，区間を N 等分して多項式で関数を近似する
— **高次ニュートン・コーツ公式**

台形則の誤差（形式的導出）

$f(a+h)$ のテイラー展開

$$f(a+h) = f(a) + \frac{h}{1!}f'(a) + \frac{h^2}{2!}f''(a) + \cdots$$

をシフト演算子 $Ef(a) = f(a+h)$ と微分演算子 $Df(a) = f'(a)$ で表す

$$Ef(a) = f(a) + \frac{hD}{1!}f(a) + \frac{(hD)^2}{2!}f(a) + \cdots = e^{hD}f(a)$$

すなわち

$$E = e^{hD}$$

が成り立つ。

台形則の誤差（形式的導出）２

台形則の和のをシフト演算子で書き換え $E = e^{hD}$ を代入する

$$\sum_{n=0}^{N-1} f(a+nh) = \sum_{n=0}^{N-1} E^n f(a) = \frac{1-E^N}{1-E} f(a) = \frac{1-E^N}{1-e^{hD}} f(a)$$

そして $\dfrac{x}{e^x - 1} = \displaystyle\sum_{j=0}^{\infty} \frac{B_j}{j!} x^j$ で定義されるベルヌーイ数で展開する

$$\sum_{n=0}^{N-1} f(a+nh) = (E^N - 1)\left(\frac{B_0}{hD} f(a) + B_1 f(a) + \frac{B_2}{2!} h f'(a) + \cdots\right)$$

以上まとめると

$$T_N - I = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{B_{2j}}{(2j)!} h^{2j} \left(f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)\right)$$

が得られる（**オイラー・マクローリン展開**）。

ベルヌーイ数とベルヌーイ多項式

- ベルヌーイ数の定義：$\dfrac{x}{e^x - 1} = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} x^n$

  具体値：$B_0 = 1, B_1 = -\dfrac{1}{2}, B_2 = \dfrac{1}{6}, B_3 = 0, B_4 = -\dfrac{1}{30}, B_5 = 0, \cdots$

- ベルヌーイ多項式の定義：$\dfrac{xe^{tx}}{e^x - 1} = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n(t)}{n!} x^n$

  性質：$B_n(t) = \displaystyle\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} B_k t^{n-k} \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$

  $B_n(0) = B_n(1) = B_n \qquad n = 2, 3, 4, \ldots$

  $B_n'(t) = nB_{n-1}(t) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$

台形則の誤差（精密化）３

ステップ１（$g(x) = f(a + nh + hx)$と置く）

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 g(x)\,dx &= \int_0^1 B_1'(x)g(x)\,dx \\
&= \frac{1}{2}(g(0) + g(1)) - \int_0^1 B_1(x)g'(x)\,dx
\end{aligned}
$$

ステップ２

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 B_1(x)g'(x)\,dx &= \int_0^1 \frac{B_2'(x)}{2!}g'(x)\,dx \\
&= \frac{B_2}{2!}\Big(g'(1) - g'(0)\Big) - \int_0^1 \frac{B_2(x)}{2!}g''(x)\,dx
\end{aligned}
$$

この部分積分を$2m$ステップ繰り返してnで和を取ると精密化されたオイラー・マクローリン展開が得られる。

台形則の誤差（精密化）4

定理（オイラー・マクローリン展開） $f(x)$ が $[a,b]$ で C^{2m} 級のとき

$$T_N - I = \sum_{j=1}^{m} \frac{B_{2j}}{(2j)!} h^{2j} \left(f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a) \right) + R_{2m},$$

$$R_{2m} = -\frac{h^{2m}}{(2m)!} \int_0^h B_{2m}\left(\frac{x}{h}\right) \sum_{n=0}^{N-1} f^{(2m)}(a + nh + x)\, dx$$

が成り立つ。

オイラー・マクローリン展開の応用例

平方数の逆数和（バーゼル問題）の数値計算例を考える。

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = s_1 + s_2$$

s_1は初項から9項目までの和でありそのまま計算し、s_2は10項目以降の和でありオイラー・マクローリン展開$m = 4$で近似すると

$$s_2 = \sum_{n=10}^{\infty} \frac{1}{n^2} \approx \int_{10}^{\infty} \frac{dx}{x^2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{10^2} + \sum_{j=1}^{4} \frac{B_{2j}}{(2j)!} \frac{(2j)!}{10^{2j+1}}$$

$$\begin{aligned} s_1 + s_2 &\approx 1.64493406684749 \\ \frac{\pi^2}{6} &\approx 1.64493406684823 \end{aligned}$$

シンプソン則

３点$(0, f(0))$，$(h', f(h'))$，$(2h', f(2h'))$を通る放物線の面積が

$$\frac{h'}{3}\Big(f(0) + 4f(h') + f(2h')\Big)$$

であることを考慮して区間$[a, b]$の積分を$2N$等分して、放物線で近似すると

（複合）シンプソン則

$$S_N = \frac{h'}{3}\left(f(a) + 4\sum_{n=0}^{N-1} f(a + 2nh' + h') + 2\sum_{n=1}^{N-1} f(a + 2nh') + f(b)\right)$$

が得られる。ここで$h' = (b - a)/(2N)$

シンプソン則の誤差

シンプソン則は台形則 T_N と T_{2N} の組み合わせで

$$S_N = \frac{4T_{2N} - T_N}{3}$$

とあらわされ、その誤差はオイラー・マクローリン展開

$$\begin{aligned} T_N &= I + ch^2 + O(h^4) = I + 4ch'^2 + O(h'^4) \\ T_{2N} &= I + ch'^2 + O(h'^4) \end{aligned}$$

から h'^2 のオーダーの項が消えて

$$S_N - I = O(h'^4) \quad h' \to 0$$

となる。

ロンバーグ積分法

シンプソン則の誤差を詳しく表示すると

$$S_N = \frac{4T_{2N} - T_N}{3} = I + c_4 h'^4 + c_6 h'^6 + \cdots$$

そして

$$S_{2N} = I + c_4 \frac{h'^4}{2^4} + c_6 \frac{h'^6}{2^6} + \cdots$$

と組み合わせて

$$S_N^{(2)} = \frac{16 S_{2N} - S_N}{15} = I + c'_6 h'^6 + c'_8 h'^8 + \cdots$$

この操作（リチャードソン補外）を繰り返して得られる算法：**ロンバーグ積分法**

ガウス型公式(より高精度の補間型公式)

ガウス型公式：

$$\int_a^b w(x)f(x)\,dx \approx \sum_{n=0}^{N-1} w_n f(a_n)$$

ただし、$f(x)$ が $2N-1$ 次以下の多項式のとき、この公式が**等式**となるように標本点 $\{a_n\}$ と重み $\{w_n\}$ を定める。

ルジャンドル・ガウス則：($[a,b]=[-1,1]$, $w(x)=1$ の場合)

・a_n ：ルジャンドル多項式 $P_N(x)$ の零点

・$w_n = 2(1-a_n^2)/(NP_{N-1}(a_n))^2$

$\Rightarrow$ $2N-1$ 次以下の多項式に対して正確な積分値を与える

ルジャンドル・ガウス則の誤差

$f(x)$ が実区間 $[-1,1]$ を含む複素領域で正則ならばコーシーの積分公式より

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx - \sum_{n=1}^{N} f(a_n)w_n = \frac{1}{2\pi i}\oint_C f(z)\Phi(z)dz,$$

$$\Phi(z) = \log\frac{z+1}{z-1} - \sum_{n=1}^{N}\frac{w_n}{z-a_n}$$

が得られ、連分数

$$\log\frac{z+1}{z-1} = \cfrac{2}{z - \cfrac{1^2}{3z - \cfrac{2^2}{5z - \ddots}}}$$

を N で打ち切った有理関数近似がルジャンドル・ガウス則に相当

ルジャンドル・ガウス則の誤差２

$$\begin{aligned}
\Phi(z) &= \log\frac{z+1}{z-1} - \cfrac{2}{z - \cfrac{1^2}{3z - \cfrac{2^2}{5z - \ddots - \cfrac{(N-1)^2}{(2N-1)z}}}} \\
&= \log\frac{z+1}{z-1} - \frac{2W_{N-1}(z)}{P_N(z)} \\
&= \frac{2Q_N(z)}{P_N(z)} \sim \frac{2^{2N+1}}{2N+1}\binom{2N}{N}^{-2} z^{-2N-1} \qquad |z| \to \infty
\end{aligned}$$

ガウス型公式の種類

ルジャンドル・ガウス則 ： $\displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)\,dx,$ 　ルジャンドル多項式

チェビシェフ・ガウス則 ： $\displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\,dx,$ 　チェビシェフ多項式

ラゲール・ガウス則 ： $\displaystyle\int_{0}^{\infty} f(x)e^{-x}\,dx,$ 　ラゲール多項式

エルミート・ガウス則 ： $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-x^2}\,dx,$ 　エルミート多項式

様々な積分公式の誤差

台形則	：	$O(N^{-2})$
シンプソン則	：	$O(N^{-4})$
ニュートン・コーツm＋１点則	：	$O(N^{-2m+2})$
ロンバーグ積分法	：	$O(N^{-C\log N})$
ガウス型公式	：	$O(e^{-CN})$
クレーンショー・カーチス則	：	$O(e^{-CN})$
DE公式	：	$O(e^{-CN/\log N})$

様々な積分公式の計算量1

M 桁得るために必要な関数計算回数

$$
\begin{array}{rcl}
\text{台形則} & : & O(10^{M/2}) \\
\text{シンプソン則} & : & O(10^{M/4}) \\
\text{ニュートン・コーツ}\,m+1\,\text{点則} & : & O(10^{M/(2m-2)}) \\
\text{ロンバーグ積分法} & : & O(e^{C\sqrt{M}}) \\
\text{ガウス型公式} & : & O(M) \\
\text{クレーンショー・カーチス則} & : & O(M) \\
\text{DE公式} & : & O(M\log M)
\end{array}
$$

様々な積分公式の計算量２

M 桁得るために必要な重みと標本点の計算量（乗算回数）

台形則	：	$O(1)$
シンプソン則	：	$O(1)$
ニュートン・コーツ $m+1$ 点則	：	$O(1)$
ロンバーグ積分法	：	$O(\sqrt{M})$
ガウス型公式	：	$O(M^2)$
クレーンショー・カーチス則	：	$O(M \log M)$
DE公式	：	$O(M(\log M)^2)$