連続系アルゴリズム レポート課題5

- 宿題(レポート)
  - 提出状況に応じて，期末試験の点に最大 50 点を加算します
    - まったく提出しなくても，期末試験の点で成績が出ます
    - ただし，試験を受けなければ単位は出ません
  - プログラムだけはメールの添付ファイルで
    reiji@is.s.u-tokyo.ac.jp
    に送付してください
    - 所属学科，学年，学籍番号，氏名をメール本文に明記すること
    - メールの題名(Subject)は「連続系レポート課題第5回 提出者氏名」とすること
  - 手計算をするものや，計算結果と考察など，プログラム以外は A4 の紙(裏もつかってよい)にまとめてください
    - 所属学科，学年，学籍番号，氏名をレポートの最初に明記すること
    - 次回の講義の前に集めます
    - あるいは PDF で A4 サイズでもよい(プログラムと一緒にメールで送付してください)
    - ページ数制約を緩和しました

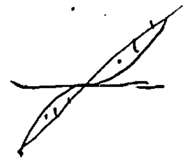
- 問題1
- 3 点の Gauss 公式を(手計算で)求めよ
  - すなわち，$p(x) = 1, x, x^2, x^3, x^4, x^5$ に対して，

$$\sum_{i=1}^{3} p(x_i) w_i = \int_{-1}^{1} p(x)dx$$

  を満たす $x_1, x_2, x_3, w_1, w_2, w_3$ を求めよ
    - x_i, w_i を原点対称に配置すれば，奇数次は自然に成立

- 問題2
- DE 公式を用いて，簡単な積分を計算せよ
  - 刻み幅 h での計算値を $J(h)$ として，横軸に h，縦軸に $J(h) - J(h/2)$ を両対数でプロットせよ
    - この資料のスライド2に似たグラフになる･･･はず
    - 以下の「使い方」をよく読んでご使用ください

積分点数，区間と幅は適当に取ればよい



分分について
考えて，奇次以外
みれてよい
$1, x^2, x^4$
のみでよ.

二重指数(DE)公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx \Rightarrow \phi(t) = \sinh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$$

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \Rightarrow \phi(t) = \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$$

$$\int_{0}^{\infty} f(x)dx \Rightarrow \phi(t) = \exp\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$$

$$\int_{0}^{\infty} f(x)e^{-x}dx \Rightarrow \phi(t) = \exp(t - e^{-t})$$

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2},\quad \cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2},\quad \tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}},\quad \coth x = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}}$$

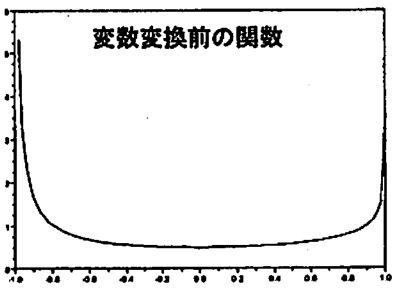
18

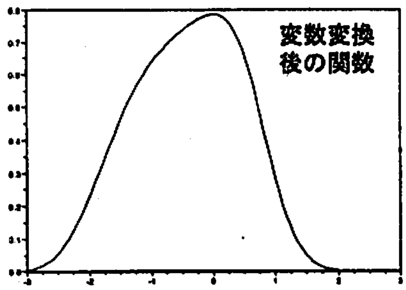
DE 変換による特異積分

森正武：数値解析（共立）p.212

- DE 変換を施すと，端点特異性は吹っ飛ぶ
- 例：

$$\int_{-1}^{1}\frac{1}{(2-x)(1+x)^{3/4}(1-x)^{1/4}}dx, \qquad \phi(t)=\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$$





±1 の付近で，桁落ちによる精度低下が起きないように，工夫が必ず必要

19

DE 公式の使用上の注意

- 桁落ちが発生しがち．
  - たとえば $\phi(t)=\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$

    では，$|t|$ が大きくなると $\varphi(t)$ は急速に±1 に近づく．たとえば $t=\pm 3$ では

    $$\varphi(t)=\pm 0.9999999999999957$$

    とかになっている．これを $x=\varphi(t)$ として

    $$\int_{-1}^{1}\frac{1}{(2-x)(1+x)^{3/4}(1-x)^{1/4}}dx$$

    とかに代入すると，$1+x$, $1-x$ は 4.3e-14 程度．
  - このとき，x の有効数字が 16 桁あっても，$1\pm x$ の有効数字は 2 桁しかない！これは桁落ちによる精度低下．積分値の精度にも影響大．
  - これは式変形で回避できる場合がある．たとえば

    $$1-\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)=\exp\left(-\frac{\pi}{2}\sinh(t)\right)/\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(t)\right)$$

    なので，x が 1 の近くでは，この式を $1-x$ に代入．これで倍精度の精度一杯まで有効数字が確保可．
  - 同様にして，x が −1 の近くでは，$1+x$ を変形して桁落ちのない形に書きかえる．
- 範囲の「自動」設定
  - 例：うえのスライドの右図
  - -3 以下，および 2 以上では，関数値の絶対値がものすごく速く（二重指数関数的に）減少する
  - 関数値の絶対値が積分値の 10^{-16} 以下になるような範囲については，その範囲（無限）を積分しても倍精度の数値にはまったく貢献しない
  - 仮に刻み幅 $h=1$ とする．まず x が {-3, -2, -1, 0, 1, 2} での関数値 $f(\varphi(x))\varphi'(x)$ を使って，積分の粗い近似値 I を出す
  - $x=3, 4, 5\ldots$ として，$|f(\varphi(x))\varphi'(x)|\geqq\varepsilon|I|$ であれば I に足しこんでいく．$|f(\varphi(x))\varphi'(x)|<\varepsilon|I|$ となったら，それ以上の x の範囲は無視．$x<-3$ も同様に．
- 刻み幅 h の「自動」設定
  - まず適当な刻み幅（たとえば $h=0.5$）でスタートする．上記の範囲自動設定を使って積分の近似値を計算する．
  - 次に，刻み幅を半分（たとえば $h=0.25$）とする．すると新しく計算すべき積分点は $h=0.5$ のときの積分点の間に 1 つずつとなる．
  - ある刻み幅と，その倍の刻み幅での積分値を比較し，差が丸め誤差レベルになったら終了する．

Euler-Maclaurin 展開

森正武：数値解析（共立）5.3 節

- 被積分関数が十分な回数連続微分可能なら台形公式の誤差は次のように漸近展開される

$$I_N - I = \frac{B_2}{2!}h^2\left(f'(b) - f'(a)\right) + \frac{B_4}{4!}h^4\left(f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right) + \cdots + \frac{B_{2k}}{(2k)!}h^{2k}\left(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right) + h^{2k+1}\int_a^b \overline{P}_{2k+1}\left(l\frac{x-a}{b-a}\right)f^{(2k+1)}(x)dx$$

漸近展開：一般に収束はせず，途中で打ち切った方が誤差が小さい

  - 両端点の奇数回微分の差で展開できる
  - 周期積分や無限積分では非常に高精度

周期積分・無限積分での台形則

- $f(z)$ が $|\,\mathrm{Im}\,z\,| < s$ で正則で，周期 p を持つとき，$0 < t < s$ に対し

P. J. Davis and P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration, Academic Press

$$\left|I_h - \int_a^{a+p} f(x)dx\right| \le 2p \max_{z=x+it}|f(z)| \frac{\exp(-2\pi t/h)}{1-\exp(-2\pi t/h)}$$

- $f(z)$ が $|\,\mathrm{Im}\,z\,| < s$ で正則のとき，$0 < t < s$ に対し

$$\left|I_h - \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx\right| \le 2\int_{-\infty}^{\infty}|f(x+it)|dx \frac{\exp(-2\pi t/h)}{1-\exp(-2\pi t/h)}$$

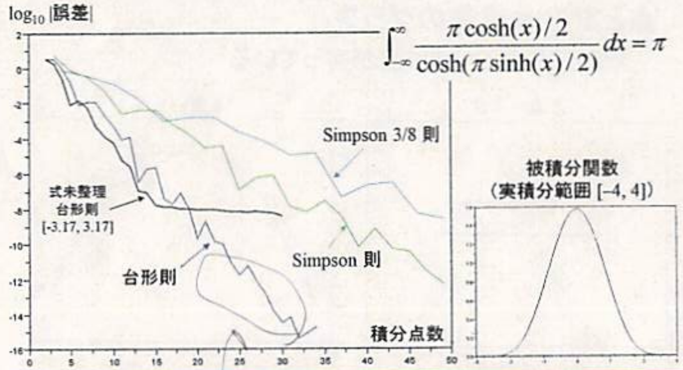
- いずれも，h に対して指数関数的に誤差が減少
  - あらゆる数値積分公式の中で，台形則が最適

森正武：数値解析と複素関数論，筑摩書房

複合台形則の最適性

杉原正顯・室田一雄：数値計算法の数理（岩波），p. 237 の例題の式を整理したもの

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi\cosh(x)/2}{\cosh(\pi\sinh(x)/2)}dx = \pi$$

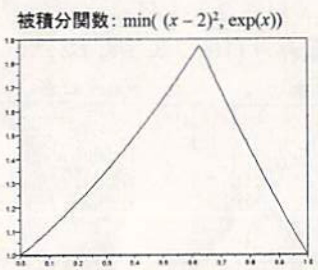


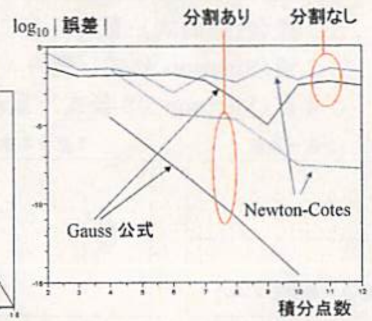
注：点数ごとに積分範囲を設定すれば，各点数での精度はもっと高くなる

周期，無限

不連続点の存在

- 不連続点で分割してから積分すること





台形則の誤差は O(h^2)

- $f(x)$ の原始関数を $F(x)$ として Taylor 展開

$$F(x_{i+1}) = F(x_i) + hf(x_i) + \frac{h^2}{2} f'(x_i) + O(h^3 f'')$$

$$F(x_i) = F(x_{i+1}) - hf(x_{i+1}) + \frac{h^2}{2} f'(x_{i+1}) + O(h^3 f'')$$

- これらの差を取って 1/2 をかけると

$$F(x_{i+1}) - F(x_i) = \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) + \frac{h^2}{4}\left(f'(x_i) - f'(x_{i+1})\right) + O(h^3 f'')$$

- あとは$f'(x_{i+1}) = f'(x_i) + O(hf'')$　を用いれば

$$F(x_{i+1}) - F(x_i) = \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) + O(h^3 f'')$$

別の証明

- 2回部分積分をすると

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \int_0^h f(x_i + t)dt = \left[(t+A)f(x_i+t)\right]_0^h - \int_0^h (t+A) f'(x_i+t)dt$$

$$= \left[(t+A)f(x_i+t)\right]_0^h - \left[\left(\frac{(t+A)^2}{2} + B\right) f'(x_i+t)\right]_0^h + \int_0^h \left(\frac{(t+A)^2}{2} + B\right) f''(x_i+t)dt$$

- $A = -h/2$ および $B = -h^2/8$ とすれば

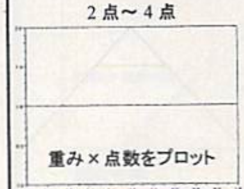
$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) + \int_0^h \left(\frac{(t+h/2)^2}{2} + \frac{h^2}{8}\right) f''(x_i+t)dt$$

だが, $\int_0^h \frac{(t+h/2)^2}{2} + \frac{h^2}{8} dt = -\frac{h^3}{12}$　となる

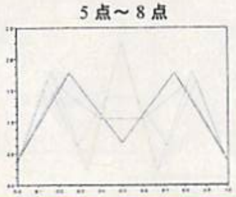
Newton-Cotes 系の高次公式

- 両端を含む等間隔点
  - 2 点（台形公式）: 重み = [1/2, 1/2]
  - 3 点（Simpson 公式）: 重み = [1/6, 2/3, 1/6]
  - 4 点（Simpson 3/8 公式）: 重み = [1/8, 3/8, 3/8, 1/8]

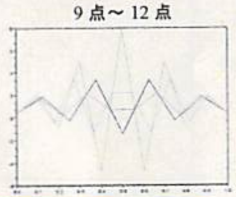
2 点～ 4 点



5 点～ 8 点



9 点～ 12 点

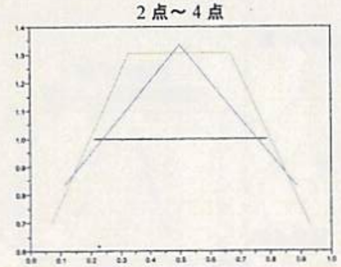


高次の公式では負の重みが発生・・・正の値の関数の積分が負になることがある！

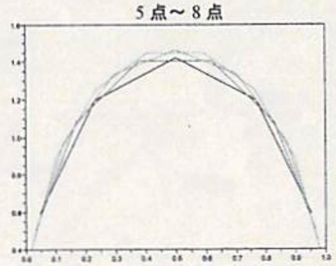
Gauss 公式の安定性

- 点と重み × 点数のグラフ
  - 常に正の重み；端に点が寄っている

2 点～ 4 点



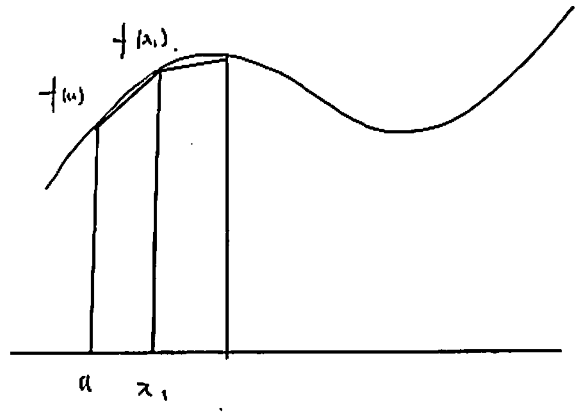
5 点～ 8 点



連続系アルゴリズム 11/14

数値積分

台形則.



$$\text{(斜線部)} = h \cdot \frac{f(a)+f(a+h)}{2}$$

$$x_i = a + ih$$

$$h = \frac{b-a}{N}$$

$$I_N = h\left(\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \cdots + f(x_{N-1}) + \frac{1}{2}f(x_N)\right)$$

誤差 $O(h^2)$.

積分公式の形

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

x_i : 標本点
w_i : 重み
→ 公式を決める.

d次の積分公式

d次以下の多項式が(丸め誤差は別にして)
正確に積分できる.
(d+1次で正確に積分できない多項式)

n個の標本点 $\{x_i\}_{i=1}^{n}$ から n-1 次の
補間多項式がある.

$$p_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} w_i(x) f(x_i)$$

$$w_i := \int_a^b w_i(x)\,dx \quad \text{これは解析的に計算.}$$

$$I_n = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i).$$

それを積分すれば, n-1 次の積分公式になる.

このタイプの公式をみていく.

Newton - Cotes 公式.

基本的に等間隔にとる.

中点則

台形則

Simpson 則

次数 d.

n が奇数　n 次

n が偶数　$n-1$ 次

2点の台形則 → 1次

1点の中点則 → 1次

※ 左右対称な点の位置をとるなら
奇数次の項は自動的に消える.

Newton-Cotes 公式,
高次の公式は不安定.

Gauss 公式.

直交多項式 $P_n(x)$ の n 個の零点を分点
$f(x)$ を補間した多項式 $f_n(x)$ とする.

$$f_n(x) = \sum_{i=0}^{n-1} c_i P_i(x).$$

$$\underbrace{\int_a^b f_n(x)\, w(x)\, dx}_{\text{積分値}} = (f_n, P_0) = c_0 (P_0, P_0).$$

直交なので消えるもんね.

離散直交性.

$$\int_a^b P_\ell(x) P_m(x) w(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} P_\ell(x_i) P_m(x_i) w_i$$

$$= (P_\ell, P_m).$$

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n} f(x_i) w_i}_{\text{公式}} = \sum_{i=1}^{n} f_n(x_i) P_0(x_i) w_i = c_0 (P_0, P_0)$$

直交性.

定理 n次の Gauss 公式は $2n-1$ 次.

∵) $S(x)$ は $2n-1$ 次多項式. $R_n(x)$ で割って, 　n次の直交多項式.

$$S(x) = \underbrace{q(x)}_{n-1\text{次}} R_n(x) + \underbrace{r(x)}_{n-1\text{次以下}}$$

$$\int_a^b S(x)w(x)dx = \int_a^b q(x)R_n(x)w(x)dx + \int_a^b r(x)w(x)dx$$

右辺第1項は $(q, R_n) = 0$. 　($n-1$次 と n次の R の直交)

また, $R_n(x_i) = 0$ より, $S(x_i) = r(x_i)$.

$$\int_a^b S(x)w(x)dx = \int_a^b r(x)w(x)dx$$

$$= \sum_{i=1}^{n} r(x_i)w_i = \sum_{i=1}^{n} S(x_i)w_i \quad)$$

全 $2n-1$次 多項式で 成立する形になっている)

Euler-Maclaurin展開.

$f^{(2k+1)}(b) - f^{(2k+1)}(a)$ の形.

両端の微分が等しいとき.

ex. $f'(b) = f'(a)$ なら,

誤差は $O(h^2)$ でなく,

$f''(b) = f''(a)$ なら $O(h^4)$.

⋮

周期関数, 無限積分 では

この性質 があるので, 非常に高精度になる)

変数変換.

$$\int f(x)\,dx = \int f(\phi(t))\,\phi'(t)\,dt.$$

DE公式 変換で無限積分になる.

(cf. p7. 使用上に注意あり.)