台形公式での円周率の計算：数値誤差の複素関数論

中嶋 慧

January 15, 2021

Abstract

$$S(h) := h \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-(nh)^2) \tag{0.1}$$

とすると、$S(0) := \lim_{h\to+0} S(h) = \sqrt{\pi}$ であり、$S(10^{-5})$ は 420 億桁以上 $S(0)$ と一致する。台形公式での誤差は通常 h^2 のオーダーであり、この異常な精度は説明が付かない。このノートでは、複素関数論を用いてこれを説明する。

1 一般論

$f(z)$ は、$(-\infty,\infty)$ で積分可能で、実軸全体を含む領域で正則とする。このとき、

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} dx\ f(x), \tag{1.1}$$

$$A(h) := h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh) \tag{1.2}$$

とすると、

$$\begin{aligned}\Delta(h) &:= I - A(h)\\ &= \frac{1}{i2\pi}\int_C \Psi_h(z) f(z)\end{aligned} \tag{1.3}$$

となる [1]。ここで、C は十分小さい $\varepsilon(>0)$ に対して、$-\infty - i\varepsilon$ から $+\infty - i\varepsilon$ までの直線 C_-^ε から $-\infty + i\varepsilon$ から $+\infty + i\varepsilon$ までの直線 C_+^ε を引いたもの ($C = C_-^\varepsilon - C_+^\varepsilon$) である。また、

$$\Psi_h(z) := -i\pi \mathrm{sgn}(\mathrm{Im}(z)) - \pi \cot\frac{\pi z}{h} \tag{1.4}$$

である。ここで、sgn(x) は符号関数で、$x>0$ なら 1, $x<0$ なら -1 である。(1.3) を示すには、

$$\pi\cot\frac{\pi z}{h} = h\Big[\frac{1}{z} + \sum_{n=1}^{\infty}\Big(\frac{1}{z-nh} + \frac{1}{z+nh}\Big)\Big] \tag{1.5}$$

と、

$$\Delta = \lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{2}\Big[\int_{C_-^\varepsilon} dz\ f(z) + \int_{C_+^\varepsilon} dz\ f(z)\Big] - \frac{1}{i2\pi}\int_C dz\ \pi\cot\frac{\pi z}{h} f(z) \tag{1.6}$$

を用いれば良い。

2　$f(x) = \exp(-x^2)$ の場合

さて、$f(x) = \exp(-x^2)$ の場合、$I = S(0)$, $A(h) = S(h)$ となる。Δ を計算するために、経路 C を変更し、鞍点法を用いる。

2.1　鞍点法

鞍点法を説明する積分

$$I := \int_C dz\ e^{g(z)} F(z) \tag{2.1}$$

とする。$g(z)$ は $z = z_0$ で $g'(z_0) = 0$, $g''(z_0) \neq 0$ となるとする。$z = x + iy$, $u(x, y) = \mathrm{Re}(g(z))$ とすると、曲面 $u = u(x, y)$ は z_0 では水平になるが、ある方向では極大, ある方法では極小となる。そのため z_0 を鞍点という。$z = z_0$ を通り、$z = z_0$ から最も急に降下する方向を取る。そのような曲線を最急降下線という。最急降下線に沿って上の積分を実行すると、

$$I \approx \frac{\sqrt{2\pi} F(z_0) e^{g(z_0)} e^{i\alpha}}{|g''(z_0)|^{1/2}} \tag{2.2}$$

となる。ここで、α は $z = z_0$ での最急降下線と実軸とのなす角である。この方法を鞍点法や最急降下線法と言う。

2.2　誤差の評価

まず $y = \mathrm{Im}(z) > 0$ の積分 $\Delta_+(h)$ を考える。このとき、

$$\begin{aligned} \Psi_h(z) &= -i2\pi \frac{1}{1 - e^{-i2\pi z/h}} \\ &= -i2\pi \frac{1}{1 - e^{2\pi y/h} e^{-i2\pi x/h}} \end{aligned} \tag{2.3}$$

である。$x = \mathrm{Re}(z)$ である。よって、$y \gg h$ では、

$$\Psi_h(z) \approx i2\pi e^{i2\pi z/h} \tag{2.4}$$

である。今、$y > 0$ で、

$$\Psi_h(z) =: i2\pi e^{i2\pi z/h} \psi_h(z), \tag{2.5}$$

$$g(z) := i2\pi \frac{z}{h} - z^2 \tag{2.6}$$

とすると、$F(z) = \psi_h(z) \approx 1$ に対して鞍点法が使える。鞍点は、

$$z_0 = \frac{i\pi}{h} \tag{2.7}$$

である。また、

$$g(z_0) = -\frac{\pi^2}{h^2}, \tag{2.8}$$

$$g''(z_0) = -2 \tag{2.9}$$

である。よって、

$$\begin{aligned}\Delta_+(h) &\approx \frac{\sqrt{2\pi}e^{-\frac{\pi^2}{h^2}}e^{i\alpha_+}}{|-2|^{1/2}} \\ &= \sqrt{\pi}\exp\Big(-\frac{\pi^2}{h^2}\Big)e^{i\alpha_+}\end{aligned} \tag{2.10}$$

である。ここで、

$$e^{i\alpha_+} = -1 \tag{2.11}$$

であるから、

$$\Delta_+(h) \approx -\sqrt{\pi}\exp\Big(-\frac{\pi^2}{h^2}\Big) \tag{2.12}$$

である [1]。

$y < 0$ の積分 $\Delta_-(h)$ も同様にして、

$$\Delta_-(h) \approx -\sqrt{\pi}\exp\Big(-\frac{\pi^2}{h^2}\Big) \tag{2.13}$$

となるので、

$$\Delta(h) = -2\sqrt{\pi}\exp\Big(-\frac{\pi^2}{h^2}\Big) \tag{2.14}$$

となる。よって、

$$S(h) \approx \sqrt{\pi} + 2\sqrt{\pi}\exp\Big(-\frac{\pi^2}{h^2}\Big) \tag{2.15}$$

となる。また、

$$\log_{10}|\Delta(h)| \approx -\frac{\pi^2\log_{10}e}{h^2} \approx -\frac{4.286}{h^2} \tag{2.16}$$

であり、$h = 10^{-5}$ で、$S(h)$ は約 428.6 億桁の精度で $\sqrt{\pi}$ に一致する。

3　ポアソン和公式

$f(x)$ のフーリエ変換を

$$\tilde{f}(k) := \int_{-\infty}^{\infty} dx\ f(x)e^{i2\pi kx} \tag{3.1}$$

とすると、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) \tag{3.2}$$

である (ポアソン和公式)。$f_h(x) = h\exp(-(hx)^2)$ とすると、

$$\tilde{f}_h(k) = \sqrt{\pi}\exp\Big(-\frac{\pi^2}{h^2}k^2\Big) \tag{3.3}$$

であるから、

$$\begin{aligned} S(h) &= h\sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-(nh)^2) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi}\exp\Big(-\frac{\pi^2}{h^2}k^2\Big) \\ &= \sqrt{\pi} + 2\sqrt{\pi}\sum_{k=1}^{\infty} \exp\Big(-\frac{\pi^2}{h^2}k^2\Big) \end{aligned} \tag{3.4}$$

となる。
　一般に、

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} dx\ f(x), \quad A(h) := h\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nh) \tag{3.5}$$

とすると、

$$A(h) = I + \sum_{k\neq 0} \tilde{f}\Big(\frac{k}{h}\Big) \tag{3.6}$$

である。

References

[1] 一松信『留数解析』(共立出版, 1979)