

お話：数値解析 第3回

オイラー・マクローリンの公式

長田直樹

1 はじめに

級数の和や数値積分の誤差の漸近展開を与えるオイラー・マクローリンの公式は、数値解析にとって重要な定理の一つである。今回の話は、オイラー・マクローリンの公式である。

2 ベルヌーイ数

2.1 ベキ乗和

k, n を自然数とすると、

$$\sum_{j=1}^n j^k = 1^k + 2^k + \cdots + n^k$$

の和 (ベキ乗和) を n の多項式で表す問題を考える。 $k = 1, 2, 3$ の場合は高校の数学で扱われる。

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^n j &= \frac{1}{2}n(n+1) = \frac{1}{2}(n^2 + n) \\ \sum_{j=1}^n j^2 &= \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1) \\ &= \frac{1}{3}(n^3 + \frac{3}{2}n^2 + \frac{1}{2}n) \\ \sum_{j=1}^n j^3 &= \left(\frac{1}{2}n(n+1)\right)^2 = \frac{1}{4}(n^4 + 2n^3 + n^2)\end{aligned}$$

この問題の一般的な解答を与えたのは関孝和 (せきたかかず) とヤコブ・ベルヌーイである。2 人の結果はそれぞれの没後 1712 年と 1713 年に括要算法 (かつようさんぼう) と Ars Conjectandi (推測術) で発表された。関の公式は

$$\sum_{j=1}^n j^k = \frac{1}{k+1} \sum_{j=0}^k \binom{k+1}{j} b_{j+1} n^{k+1-j} \quad (1)$$

である。ここで、

$$\binom{k+1}{j} = \frac{(k+1)k(k-1)\cdots(k+2-j)}{j!}$$

は 2 項係数、数列 $\{b_n\}$ は $n = 1, 2, \dots$ に対し漸化式

$$b_n = \left(n - \sum_{j=0}^{n-2} \binom{n}{j} b_{j+1} \right) / \binom{n}{n-1} \quad (2)$$

によって定義される。 $(m > n$ のとき $\sum_{j=m}^n$ は 0 と約束する。) 関は $b_1, b_2, b_3, \dots$ をそれぞれ、一級取数、二級取数、三級取数などと呼んだ [2, p.159]。 (2) において $n = 1, 2, 3, 4, 5$ とすると順に

$$b_1 = 1, b_2 = \frac{1}{2}, b_3 = \frac{1}{6}, b_4 = 0, b_5 = -\frac{1}{30}$$

が得られる。ベルヌーイも同じ結果を得ている。

関は、 $\sum_{j=1}^n j, \sum_{j=1}^n j^2, \dots, \sum_{j=1}^n j^{11}$ までを n の多項式として表すのに、連立 1 次方程式を立てて係数を求めたと考えられている [2, 二九三頁]。たとえば、1 から n までの 3 乗の和は n の 4 次式

$$1^3 + 2^3 + \cdots + n^3 = an^4 + bn^3 + cn^2 + dn + e$$

で表せると仮定し a, b, c, d, e を求める。 $n = 1, 2, 3, 4, 5$ とおき、

$$\begin{array}{rrrrrr} 1 & = & 1a & +1b & +1c & +1d & +1e \\ 9 & = & 16a & +8b & +4c & +2d & +1e \\ 36 & = & 81a & +27b & +9c & +3d & +1e \\ 100 & = & 256a & +64b & +16c & +4d & +1e \\ 225 & = & 625a & +125b & +25c & +5d & +1e \end{array}$$

を解くと

$$a = \frac{1}{4}, b = \frac{1}{2}, c = \frac{1}{4}, d = 0, e = 0$$

が得られる。関が取数の漸化式 (2) とベキ乗和の公式 (1) をいかにして導いたかは述べてない。これについて日本数学協会 <http://www.sugaku-bunka.org/> が関孝和没後 300 年記念懸賞問題 (締め切り 2008 年 6 月 30 日) としている。

2.2 ベルヌーイ数

取数 $\{b_n\}$ の添字を 1 つ小さくし、 b_2 のみ符号を変えた

$$B_0 = b_1 = 1, \quad B_1 = -b_2 = -\frac{1}{2}, \quad B_{n-1} = b_n \quad (n \geq 3)$$

はベルヌーイ数と呼ばれている。ベルヌーイ数を非負にするため $|B_{2n}|$ を B_{2n} と書く流儀や、奇数番目を飛ばし $|B_{2n}|$ を B_n と書く流儀などがあるので注意が必要である。

漸化式 (2) をベルヌーイ数を用い ($B_1 = -1/2$ に注意して) 書き直すと、

$$\begin{cases} B_0 = 1 \\ \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} B_k = 0, \quad n = 2, 3, \dots \end{cases} \quad (3)$$

となる。以下では、(3) をベルヌーイ数の定義とする。ベルヌーイ数の最初の 16 項は次のようになる。

n	0	1	2	3	4	5	6	7
B_n	1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}$	0	$-\frac{1}{30}$	0	$\frac{1}{42}$	0
n	8	9	10	11	12	13	14	15
B_n	$-\frac{1}{30}$	0	$\frac{5}{66}$	0	$-\frac{691}{2730}$	0	$\frac{7}{6}$	0

上記の表から 3 以上の奇数番目の値は 0 になることが予想されるが、命題 3 で証明を与える。ベルヌーイ数の絶対値は余り大きくならないようにも見えるがこれは正しくない。リーマンゼータ関数

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}$$

の正の偶数点での値

$$\zeta(2m) = (-1)^{m-1} (2\pi)^{2m} \frac{B_{2m}}{2(2m)!} \quad (4)$$

(たとえば [1, p.136] [4, p.236] を見よ) と $\zeta(2m) > 1$ から

$$|B_{2m}| = \frac{2(2m)! \zeta(2m)}{(2\pi)^{2m}} > \frac{2(2m)!}{(2\pi)^{2m}}$$

が成り立つ。右辺は $m \rightarrow \infty$ のとき急速に大きくなる。また、 $\zeta(2m)$ は m に関し単調減少だから

$$1 < \zeta(2m) < \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} < 2$$

より、

$$\left| \frac{B_{2m}}{(2m)!} \right| < \frac{4}{(2\pi)^{2m}}$$

が成り立つので、

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{B_{2m}}{(2m)!} = 0$$

となる。

また (4) より、 $(-1)^{m-1} B_{2m} > 0$ がいえる。

3 ベルヌーイ多項式

ベルヌーイ多項式 $\{B_n(t)\}$ ($n = 0, 1, \dots$) は

$$B_n(t) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} B_k t^{n-k} \quad (5)$$

によって定義する。ここで、 $\{B_n\}$ は (3) で定義したベルヌーイ数である。

最初の 4 つは次のようになる。

$$\begin{aligned} B_0(t) &= 1 \\ B_1(t) &= t - \frac{1}{2} \\ B_2(t) &= t^2 - t + \frac{1}{6} \\ B_3(t) &= t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{1}{2}t \end{aligned}$$

(5) の両辺を微分すると

$$\begin{aligned} B'_n(t) &= \sum_{k=0}^n (n-k) \binom{n}{k} B_k t^{n-1-k} \\ &= n \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n-1)!}{k!(n-1-k)!} B_k t^{n-1-k} \\ &= n B_{n-1}(t), \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (6)$$

(5) で $t = 0$ とおくと、

$$B_n(0) = B_n, \quad n = 0, 1, \dots \quad (7)$$

(5) で $t = 1$ とおくと、(3) より、

$$\begin{aligned} B_0(1) &= B_0, \quad B_1(1) = \frac{1}{2} = -B_1 \\ B_n(1) &= B_n, \quad n = 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (8)$$

したがって、 $B_n(1)$ は関数の取数 b_{n+1} に一致する。

4 母関数の利用

数列 $\{a_n\}$ が

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{x^n}{n!}$$

の係数により与えられるとき、 $F(x)$ を数列 $\{a_n\}$ の母関数 (生成関数) という。同様に、関数列 $\{f_n(t)\}$ が

$$F(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(t) \frac{x^n}{n!}$$

の係数により与えられるとき、 $F(t, x)$ を関数列 $\{f_n(t)\}$ の母関数という

多くのテキストではベルヌーイ数とベルヌーイ多項式は母関数を用いて

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{x^n}{n!} \quad (9)$$

$$\frac{xe^{tx}}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(t) \frac{x^n}{n!} \quad (10)$$

により定義している。

(9)(10) の級数は、複素変数の収束半径 2π のべき級数と考えてもいいし、(9) を有理数体 $\mathbb{Q}$ 上の形式的べき級数、(10) を多項式環 $\mathbb{Q}[t]$ 上の形式的べき級数、と考えてもよい。いずれの場合も分配法則が使える。

命題 1 (3) で定義したベルヌーイ数は

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{x^n}{n!}$$

を満たす。

証明 $e^x - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} x^n/n!$ より

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{x^n}{n!} \right) \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \right) = x$$

を示せばよい。漸化式 (3) を用いると

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{B_k}{k!(n-k)!} x^n \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} B_k \right) \frac{x^n}{n!} = x \end{aligned}$$

となり証明が完成した。□

命題 2 (5) で定義したベルヌーイ多項式は

$$\frac{xe^{tx}}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(t) \frac{x^n}{n!}$$

を満たす。

証明 命題 1 を用いて (10) の左辺を展開する。

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \left(\sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{x^n}{n!} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(tx)^n}{n!} \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} B_k t^{n-k} \right) \frac{x^n}{n!} \quad (11) \end{aligned}$$

(11) と (10) の $x^n/n!$ の係数を等置し証明が完成。□

5 ベルヌーイ多項式の性質

オイラー・マクローリンの公式の証明で必要となる性質を挙げておく。

命題 3 ベルヌーイ数とベルヌーイ多項式に対し以下が成立する。

1. $B_n(1-t) = (-1)^n B_n(t)$, $n = 0, 1, \dots$
2. $B_{2n+1} = 0$, $n = 1, 2, \dots$
3. $B_n(1/2) = (2^{1-n} - 1)B_n$, $n = 0, 1, \dots$

証明 1. 母関数 (10) において

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} B_n(1-t) \frac{x^n}{n!} &= \frac{xe^{(1-t)x}}{e^x - 1} = \frac{(-x)e^{t(-x)}}{e^{-x} - 1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} B_n(t) \frac{(-x)^n}{n!} \end{aligned}$$

よりいえる。

2. 1 および (7)(8) を用いて容易に証明できる。
3. (9)(10) を用いる。[証明を完成せよ。] □

命題 4 $n = 1, 2, \dots$ に関し次が成り立つ。

1. $B_{2n+1}(t)$ の $[0, 1]$ における零点は $0, 1/2, 1$ のみである。
2. $[0, 1]$ において $|B_{2n}(t)| \leq |B_{2n}|$

証明 1 は n に関する数学的帰納法、2 は 1 を用いる。[証明を完成せよ。] □

6 オイラー・マクローリンの公式

L. オイラーは、級数の和 $\sum_{k=1}^n f(k)$ を研究する過程で、オイラー・マクローリンの公式 (オイラー・マクローリンの総和公式ともいう) を発見した。発見は 1732 年、発表は 1738 年である。1742 年に C. マクローリンも独立に発表している。[1, pp.143-145][5, p.127] この公式は、数値解析にとっては数値積分の誤差を与える重要な公式になる。

関数 $f(x)$ は区間 $[a, b]$ で連続であるとする。 $[a, b]$ を n 等分し、 $h = (b-a)/n$, $x_j = a + jh$, ($j = 0, \dots, n$),

$$T_n = h \left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + \frac{1}{2}f(x_n) \right]$$

とおく。 T_n を複合台形公式という。

定理 1 (オイラー・マクローリンの公式) 関数 $f(x)$ は区間 $[a, b]$ で C^{2m+2} 級であるとする。

$$\begin{aligned} T_n - \int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)] \\ &\quad + O(h^{2m+2}), \quad (h \rightarrow +0) \end{aligned} \quad (12)$$

証明 $j = 0, \dots, n-1 : k = 1, \dots, m+1$ に対し

$$I_{j,k} = \frac{1}{(2k)!} \int_0^h B_{2k} \left(\frac{t}{h} \right) f^{(2k)}(x_j + t) dt$$

とおく。 $k = 1$ のとき部分積分を用いて

$$\begin{aligned} I_{j,1} &= \frac{1}{2!} \int_0^h \left(\frac{t^2}{h^2} - \frac{t}{h} + B_2 \right) f''(x_j + t) dt \\ &= \frac{B_2}{2!} [f'(x_{j+1}) - f'(x_j)] - \frac{1}{2h} [f(x_{j+1}) + f(x_j)] \\ &\quad + \frac{1}{h^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(t) dt \end{aligned} \quad (13)$$

となる。 (13) を $j = 0, \dots, n-1$ について加えると

$$\sum_{j=0}^{n-1} I_{j,1} = \frac{B_2}{2!} [f'(b) - f'(a)] - \frac{1}{h^2} T_n + \frac{1}{h^2} \int_a^b f(t) dt \quad (14)$$

$k = 2, \dots, m+1$ のとき

$$\begin{aligned} B'_k(t) &= kB_{k-1}(t), B_{2k}(1) = B_{2k}(0) = B_{2k}, \\ B_{2k-1}(1) &= B_{2k-1}(0) = 0 \end{aligned}$$

に注意すると、

$$\begin{aligned} I_{j,k} &= \frac{1}{(2k)!} \left[B_{2k} \left(\frac{t}{h} \right) f^{(2k-1)}(x_j + t) \right]_0^h \\ &\quad - \frac{1}{(2k-1)!h} \int_0^h B_{2k-1} \left(\frac{t}{h} \right) f^{(2k-1)}(x_j + t) dt \\ &= \frac{B_{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(x_{j+1}) - f^{(2k-1)}(x_j)] + \frac{1}{h^2} I_{j,k-1} \end{aligned}$$

よって、

$$I_{j,k-1} = h^2 I_{j,k} - \frac{B_{2k} h^2}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(x_{j+1}) - f^{(2k-1)}(x_j)] \quad (15)$$

となる。 (14) と (15) より、

$$\begin{aligned} T_n - \int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=1}^{m+1} \frac{B_{2k} h^{2k}}{(2k)!} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)] + R_{m+1} \end{aligned}$$

がいえる。 $R_{m+1} = -h^{2m+2} \sum_{j=0}^{n-1} I_{j,m+1}$ である。

$$\begin{aligned} R_{m+1} &= -\frac{h^{2m+2}}{(2m+2)!} \int_0^h B_{2m+2} \left(\frac{t}{h} \right) \sum_{j=0}^{n-1} f^{(2m+2)}(x_j + t) dt \end{aligned}$$

だから、命題 4 より

$$|R_{m+1}| \leq \frac{h^{2m+2} |B_{2m+2}|}{(2m+2)!} \int_a^b |f^{(2m+2)}(t)| dt$$

$f^{(2m+2)}(x)$ は $[a, b]$ で連続だから

$$R_{m+1} = O(h^{2m+2}), \quad (h \rightarrow +0)$$

よって

$$\begin{aligned} T_n - \int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)] \\ &\quad + O(h^{2m+2}), \quad (h \rightarrow +0) \end{aligned}$$

証明が完成した。 $\square$

(12) において $m \rightarrow \infty$ として得られる展開

$$\begin{aligned} T_n - \int_a^b f(x)dx &\sim \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)] \end{aligned} \quad (16)$$

をオイラー・マクローリン展開という。 $k \rightarrow \infty$ のとき $B_{2k}/(2k)! \rightarrow 0$ であるが、 $B_{2k}(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a))/(2k)!$ は必ずしも 0 に収束しないのでオイラー・マクローリン展開は漸近展開である。

7 数値積分への応用

オイラー・マクローリンの公式を数値積分 $\int_a^b f(x)dx$ の誤差の漸近展開を与える公式とみなすと、台形公式の重要な性質が導かれる。記号は前節と同じものを用いる。コンパイラ gcc 4.1.2 による倍精度計算を行った。

7.1 通常の定積分

$f'(a) \neq f'(b)$ のときは、誤差は

$$T_n - \int_a^b f(x)dx = \frac{B_2 h^2}{2} [f'(b) - f'(a)] + O(h^4) \quad (17)$$

である。

例 1 $I = \int_0^1 e^x dx = e - 1$ を複合台形公式 T_n ($n = 1, 2, 4, 8, \dots, 128$) により計算した誤差と (17) の右辺主要項の値は表 1 のようになる。

表 1: $I = \int_0^1 e^x dx$		
n	$T_n - I$	$\frac{B_2 h^2}{2} (f'(b) - f'(a))$
1	1.408591×10^{-1}	1.431902×10^{-1}
2	3.564926×10^{-2}	3.579754×10^{-2}
4	8.940076×10^{-3}	8.94938×10^{-3}
8	2.236764×10^{-3}	2.237346×10^{-3}
16	5.593001×10^{-4}	5.593365×10^{-4}
32	1.398319×10^{-4}	1.398341×10^{-4}
64	3.495839×10^{-5}	3.495853×10^{-5}
128	8.739624×10^{-6}	8.7396333×10^{-6}

分割数を 2 倍にすると誤差は $1/4$ になっている。 $n = 128$ のとき、右辺主要項は左辺と 5 桁一致している。

7.2 周期関数

周期 $b - a$ の周期関数 $f(x)$ が $[a, b]$ において C^∞ のときは

$$f^{(2k-1)}(a) = f^{(2k-1)}(b), \quad k = 1, 2, \dots$$

となるので、オイラー・マクローリンの公式から

$$T_n - I \sim 0 \quad (18)$$

がいえる。 $T_n - I$ は $h \rightarrow +0$ (言い換え、 $n \rightarrow \infty$) のとき前号の例 4 と同様に漸近展開が 0 になるということである。すなわち、任意の自然数 k に対し、

$$T_n - I = O(h^{2k}), \quad (h \rightarrow +0)$$

が成り立つので、 h が 1 より小さくなると急速に 0 に近づく。

例 2 $I = \int_0^{2\pi} e^{\sin x} dx = 7.954926521012844863$ を複合台形公式により計算した結果と誤差は表 2 のようになる。 $h = \pi/8 \doteq 0.3927$ で 15 桁以上の精度を得ている。

表 2: $I = \int_0^{2\pi} e^{\sin x} dx$			
n	h	T_n	$T_n - I$
1	6.2832	6.283185307179585	-1.6717
2	3.1416	6.283185307179586	-1.6717
4	1.5708	7.989323439822037	3.44×10^{-2}
8	0.7854	7.954927772701776	1.25×10^{-6}
16	0.3927	7.954926521012844	-8.88×10^{-16}

オイラー・マクローリンの公式は、数値積分に多くの応用を持っている。数値積分については回を改めて話す。

参考文献

- [1] ブルバキ数学原論 実 1 変数関数 (基礎理論)2、東京図書、1969
- [2] 平山・下平・広瀬共編、関孝和全集、大阪教育図書、1974
- [3] 長田直樹、数値微分積分法、現代数学社、1987

- [4] 高木貞治、解析概論改訂第 3 版、岩波書店、1961
- [5] E.T. Whittaker and G.N. Watson, A Course of Modern Analysis, 4th ed. Cambridge UP, 1927.

(おさだなおき/東京女子大学)