

IMT型の二重指数関数型数値積分公式について

京大 数理研 森 正武

§ 1. IMT公式と二重指数関数型公式

1969年, 伊理-森口-高沢[1]は, 端点に特異性をもつ積分を効率良く計算するために, 次のEuler-Maclaurin展開に着目して, 新しい数値積分公式を考案した.

$$(1.1) \quad \int_0^1 g(u) du = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{2} g(0) + \sum_{n=1}^{N-1} g\left(\frac{n}{N}\right) + \frac{1}{2} g(1) \right] - \sum_{r=1}^{m-1} (-1)^{r-1} \frac{B_r}{(2r)!} \frac{1}{N^{2r}} \left[g^{(2r-1)}(1) - g^{(2r-1)}(0) \right] - R_m$$

ここで B_r は Bernoulli 数, R_m は剰余項である. いま積分 $\int_0^1 g(u) du$ を計算するとして, その被積分関数 $g(u)$ の微分が端点 $u=0, 1$ において高階まで

$$(1.2) \quad g^{(m)}(1) = g^{(m)}(0) = 0, \quad m = 1, 3, 5, \dots$$

となっているとしよう. すると, $\int_0^1 g(u) du$ を台形則 (右辺才1項) で計算すれば, (1.1) の右辺才2項からわかるように, その誤差はきわめて小さくなることが期待される. この

考えに基づいて，伊理 - 森口 - 高沢は，積分

$$(1.3) \quad I = \int_0^1 f(x) dx$$

が与えられたとき，これに変数変換

$$(1.4) \quad \begin{cases} x = \phi(u) = \frac{1}{a} \int_0^u \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right) dt \\ a = \int_0^1 \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right) dt \end{cases}$$

を行った．この変換により (1.3) は

$$(1.5) \quad I = \int_0^1 g(u) du$$

$$(1.6) \quad g(u) = f(\phi(u)) \phi'(u)$$

となる． $f(x)$ が $(0, 1)$ において解析関数であるならば， $x=0, 1$ において $x^\alpha(1-x)^\beta$ ， $\alpha, \beta > -1$ のような可積分な特異性をもっているとしても， $g(u)$ は端点 $u=0, 1$ において何回でも微分ができて，その値はすべて 0 になることがわかる．変換後の積分 (1.5) に台形則を適用したのが，伊理 - 森口 - 高沢の公式 (IMT-公式 [2, 3]) である．この公式は，以後むしろ外国において実用化され [4]，その拡張が研究されている [5]．

これに対し高橋 - 森は，無限区間の積分に対して台形則が最適である [6] という事実に基づいて，各種の変数変換型の公式を提案した [2]．すなわち，与えられた積分を

$$(1.7) \quad I = \int_a^b f(x) dx$$

とするとき，区間 (a, b) を $(-\infty, \infty)$ に写像する変換

$$(1.8) \quad x = \phi(u), \quad \phi(-\infty) = a, \quad \phi(\infty) = b$$

を使って，これを

$$(1.9) \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} g(u) du$$

$$(1.10) \quad g(u) = f(\phi(u)) \phi'(u)$$

と変換して，これに等間隔さ h の幅 h の台形則を適用した．

$$(1.11) \quad I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\phi(nh)) \phi'(nh)$$

変換の関数 $x = \phi(u)$ の選び方を変えれば，はじめに与えられた同一の積分 (1.7) からいろいろな公式 (1.11) が得られる．類似の研究は Schwartz [7] も行っている．

その後，高橋-森はこれら各種の公式を比較解析し，無限和 (1.11) を有限和で近似するときを生ずる打ち切誤差を考慮に入れた上で，結局 (1.10) が $u \rightarrow \pm\infty$ のとき二重指数関数的に

$$(1.12) \quad |f(\phi(u)) \phi'(u)| \simeq \exp(-A \exp(+B|u|)) \quad , \quad |u| \rightarrow \infty$$

$A, B > 0$

のように減衰するような変換が最適公式を与えることを明らかにした [8]．このようにして得られる公式を総称して，二重指数関数型公式 (double exponential formula) と呼ぶ．例

えば、積分 $\int_{-1}^1 f(x) dx$ に対しては変換

$$(1.13) \quad x = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)$$

が二重指数関数型公式を与える。

近似積分を計算するのに実際必要な被積分関数の評価回数
(可なりち分点数) を N とすると、漸近的な誤差表示式は、
IMT 公式の場合

$$(1.14) \quad |\Delta I_{\text{IMT}}| \simeq \exp(-C_1 \sqrt{N})$$

であり、二重指数関数型公式 (DEF) の場合には

$$(1.15) \quad |\Delta I_{\text{DEF}}| \simeq \exp(-C_2 N / \log N)$$

の形になることが理論的解析によってわかっている。したがって比較的大きな N を必要とする高精度計算においては、IMT 公式より二重指数関数型公式の方が同一の N ではるかに高精度の結果を与えることが期待されるが、これは実際計算によっても確かめられている [8]。

§2. IMT 型二重指数関数型公式

IMT 公式は有限個の標本点をもつという長所をもつが、一方精度および公式の標本点と重みの計算のしやすさという点では二重指数関数型公式の方が優れている。それでは両者の長所を兼ね備えたような公式は存在しないだろうか？ 実

はどのような公式，つまり有限個の標本値をもち，精度は二重指数関数型公式程度で，しかも標本値および重みの計算が容易である公式を作ることができるのである。まず，標本値の計算で(1.4)のような積分計算を避けるためには，(1.4)の代りに例えば変換(区間 $(-1,1)$ の積分の場合)

$$(2.1) \quad x = \phi(u) = \tanh\left(\frac{\pi}{2}\left(\frac{1}{1-u} - \frac{1}{1+u}\right)\right)$$

を採用すればよい。これによってIMT公式とほぼ同等の公式が得られる。しかしこの公式の誤差の漸近挙動は依然(1.14)の程度である。これをさらに二重指数関数型にするには次のようにすればよい。

ここではとくに区間 $(-1,1)$ における積分

$$(2.2) \quad I = \int_{-1}^1 f(x) dx$$

を考えることにしよう。 $f(x)$ は $(-1,1)$ で解析的で， ± 1 には可積分な代数的あるいは対数的特異性をもっていてよいものとする。このとき変換

$$(2.3) \quad x = \phi(u) = \tanh\left(A \sinh B \left(\frac{1}{1-u} - \frac{1}{1+u}\right)\right), \quad A, B > 0$$

を考えると，これは $(-1,1)$ を $(-1,1)$ 自身に写像し，(2.2)は

$$(2.4) \quad I = \int_{-1}^1 g(u) du$$

$$(2.5) \quad g(u) = f(\phi(u)) \phi'(u)$$

となる。区間 $(-1, 1)$ を N 等分して (2.4) に台形則を適用すれば、近似積分公式

$$(2.6) \quad I_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N-1} f(\phi(nh)) \phi'(nh)$$

が得られる。

端点 $u = \pm 1$ で $g(u)$ の微分が高階まですべて 0 になり、かつ標本点数が有限であるという意味で (2.6) は IMT 公式に似ており、また $u \rightarrow \pm 1$ における減衰の仕方が近似的に二重指数関数的であるという意味で二重指数関数型公式に似ている。そこでこの公式を IMT 型二重指数関数型公式 と呼ぶことにしよう。標本数および重みが、四則演算と指数関数の有限回の組合せだけによって計算できることは明らかであろう。

公式 (2.6) の誤差解析を行っておこう。 $f(x)$ が $(-1, 1)$ において解析的であるとすると、(2.6) の誤差は

$$(2.7) \quad \Delta I_N = I - I_N = \frac{1}{2\pi i} \int_{\hat{C}} \hat{\Phi}_N(w) g(w) dw$$

と表わすことができる。積分路 $\hat{C}$ は Fig. 1 のような曲線で、内部に $g(w)$ の特異点を含まないようにとる。いまの場合、 ± 1 において被積分関数

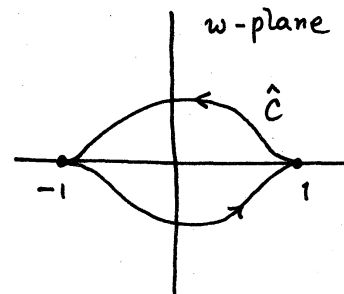


Fig. 1. 積分路 $\hat{C}$

がそのすべての微分も含めて0になるので、これを周期関数の1周期 $(-1, 1)$ にわたる積分と解釈することができる。したがって、誤差の特性関数 $\hat{\Phi}_N(w)$ は次の形で与えられる[9, p.251].

$$(2.8) \quad \hat{\Phi}_N(w) = \begin{cases} \frac{-2\pi i}{1 - \exp(-\frac{2\pi i}{h}w)} & ; \operatorname{Im} w > 0 \\ \frac{+2\pi i}{1 - \exp(+\frac{2\pi i}{h}w)} & ; \operatorname{Im} w < 0 \end{cases}$$

$$(2.9) \quad h = \frac{2}{N}$$

変数変換型の公式は、補間型公式と異り、一般に定数関数を積分しても誤差を生ずる。この誤差を公式の "*intrinsic error*" と呼ぶことにしよう。積分端点に特異性があるときは *intrinsic error* はこの特異性と本質的な関係をもつので、これを調べるために被積分関数の形を

$$(2.10) \quad f(x) = (1-x^2)^\alpha, \quad \alpha > -1$$

のように仮定しよう。このとき

$$(2.11) \quad g(w) = AB \cosh^{-2(1+\alpha)} \left(A \sinh \frac{2Bw}{1-w^2} \right) \cosh \left(\frac{2Bw}{1-w^2} \right) \frac{2(1+w^2)}{(1-w^2)^2}$$

となる。誤差の周回積分(2.7)の計算に鞍点法を適用するために $g(w)\hat{\Phi}_N(w)$ の鞍点を探すわけであるが、この鞍点は実軸および虚軸に関して対称に存在することは明らかであるので、いま第1象限($\operatorname{Re} w \geq 0, \operatorname{Im} w > 0$)を考えることにしよう。また、標本数 N は十分大であるとして、 $\operatorname{Im} w > 0$ において

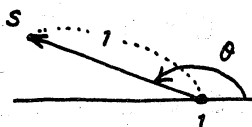
$$(2.12) \quad \hat{\Phi}_N(w) \simeq 2\pi i \exp\left(\frac{2\pi i}{\epsilon} w\right), \quad \epsilon = \frac{2}{N}$$

を使う。ところで、 $g(w)$ の鞍点はその特異点と密接に関連している。 $g(w)$ の特異点 p_k , すなわち $\cosh\left(A \sinh \frac{2Bw}{1-w^2}\right) = 0$ を満足する点は無数個存在し、例えば $A = \frac{\pi}{2}$ のときその一部分が

$$(2.13) \quad p_k = (\sqrt{B^2 + S_k^2} - B)/S_k, \quad S_k = \frac{\pi}{2}i + \operatorname{arccosh}(2k+1), \quad k=0, 1, \dots$$

のように並ぶ。これらは $\epsilon = \infty$ の (2.3) による像になっている。

Fig. 2 に $A=B=\frac{\pi}{2}$, $\alpha=0$, $N=40$ の場合の $|\hat{\Phi}_N(w)g(w)|$ の等高線図と共に p_k の位置を示した。 $g(w)$ の特異点はこの他にも存在するが、実軸の近くに存在し誤差に大きく寄与するのはこの点列だけである。 p_0 だけは離れて存在するが、他の $p_1, p_2, \dots$ の列は点 $w=1$ に向って密に並んでおり、この点列の少し実軸側に鞍点が現れることが期待される。そこで $w=1$ を中心とする極座標を使って

$$w = 1 + re^{i\theta}$$


と置いて

$$(2.14) \quad \frac{d}{dw} \hat{\Phi}_N(w) g(w) = 0$$

を満たす点を探すと、上述の鞍点 S が

$$(2.15) \quad \begin{cases} r \simeq \frac{B}{\sigma} \left[1 - \frac{2}{\sigma+2} \log \frac{B}{\sigma} \right] \\ \theta \simeq \pi - \frac{\pi}{2} \frac{1}{\frac{B}{r} + 2} \end{cases}$$

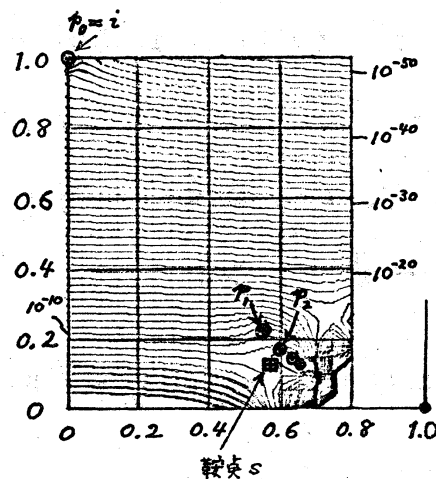


Fig. 2

$|\hat{\Phi}_N(w)g(w)|$ の等高線図

$$(2.16) \quad \sigma = \log \frac{\pi N}{AB(1+\alpha)} + \frac{\pi}{4}$$

に存在することがわかる。他の三つの象限に存在する対応する鞍点も考慮に入れ、鞍点法の公式[9, p.184]を利用すると、これらの鞍点からの誤差への寄与 $|\Delta I_N|$ は次のようになることがわかる。

$$(2.17) \quad |\Delta I_N| \simeq \frac{4\sqrt{\pi N}}{r} \exp\left(-\frac{\pi^2 B N}{2\sigma^2} \left[1 + \frac{2}{\sigma+2} \log \frac{\sigma}{B}\right]^2\right)$$

例えば、 $A=B=\frac{\pi}{2}$, $\alpha=0$, $N=40$ のとき、鞍点 S は $r \simeq 0.4421$, $\pi-\sigma \simeq 0.283 = 16.2^\circ$ に存在 (Fig. 2 参照) し、 $|\Delta I_N| \simeq 2.1 \times 10^{-9}$ となる。実測誤差は 1.9×10^{-9} である。 N が十分大きいとき $\sigma \simeq \log N$ となるので、(2.17) は漸近的に次のようになる。

$$(2.18) \quad |\Delta I_N| \simeq \exp\left(-C \frac{N}{(\log N)^2}\right), \quad N \rightarrow \infty$$

この (2.17) の結果だけから見ると、 B を大きくとることが有利に思えるが、実は B を大きくとると上述の特異点のうちの p_0 から誤差への寄与が著しく大きくなってしまふ。いま $A = \frac{\pi}{2}$ とすると

$$(2.19) \quad p_0 = \frac{2}{\pi} i \left(B - \sqrt{B^2 - \frac{\pi^2}{4}} \right)$$

となるが、これは B が $\frac{\pi}{2}$ から増すと共に急速に原点に近づく。 $B = \frac{\pi}{2}$ のときは $p_0 = i$ でありその影響は S に比べて全く

無視できるが、例えば $B = \pi$ となると $p_0 = (2 - \sqrt{3})i \simeq 0.27i$ となって $|\hat{\Phi}_N(p_0)|$ の値が著しく大きくなってしまふ。したがって B を大きくすることは有利でなく、 s と p_0 双方からの寄与を考慮すれば、結局 $B = \frac{\pi}{2}$ あたりが適当な値であることがわかる。 $A = B = \frac{\pi}{2}$ のときは、結論として (2.17) が *intrinsic error* を表わしていることになる。

誤差の積分 (2.7) を (2.3) によつて変換すると、 z -平面における誤差の特性関数が得られる。

$$(2.20) \quad \Delta I_N = \frac{1}{2\pi i} \int_c \Phi_N(z) f(z) dz$$

$$(2.21) \quad \Phi_N(z) = \Phi_N(\phi(w)) = \hat{\Phi}_N(w)$$

$|\Phi_N(z)|$ の等高線図は

$$(2.22) \quad \frac{1}{2\pi} |\hat{\Phi}_N(w)| \simeq \exp\left(-\frac{2\pi}{\hbar} |I_m w|\right) = \varepsilon$$

を満たす w -平面内の直線

$$(2.23) \quad |I_m w| = -\frac{\hbar}{2\pi} \log \varepsilon = \frac{1}{\pi N} \log \frac{1}{\varepsilon}$$

の

$$(2.24) \quad z = \phi(w)$$

による z -平面における像を描くことによつて得ることができる。Fig. 3 に $A = B = \frac{\pi}{2}$ の場合の公式 (2.6) の $\frac{1}{2\pi} |\Phi_N(z)|$

を示した。この図は $N=32$ の場合のものであるが、実はこれは他の N ($N=2^m$, $m=1, 2, 3, \dots$) の場合にも利用することができる。いま $\varepsilon = 10^{-M}$ とおくと、(2.23)は

$$(2.25) \quad |I_m \omega| = \frac{M \log 10}{\pi N}$$

となる。したがって、標本点数 N を2倍の $2N$ にしたときには、同一の等高線を 10^{-2M} のものであるとみなせばよい。つまり、例えば Fig. 3 の 10^{-16} の等高線は、 $N=64$ の場合には 10^{-32} 、 $N=16$ の場合には 10^{-8} と読めばよい。比較のために、Fig. 4 に $h = \frac{1}{4}$ の場合の本来の二重指数関数型公式の誤差の特性関数 $\frac{1}{2\pi} |\Phi_h(z)|$ の等高

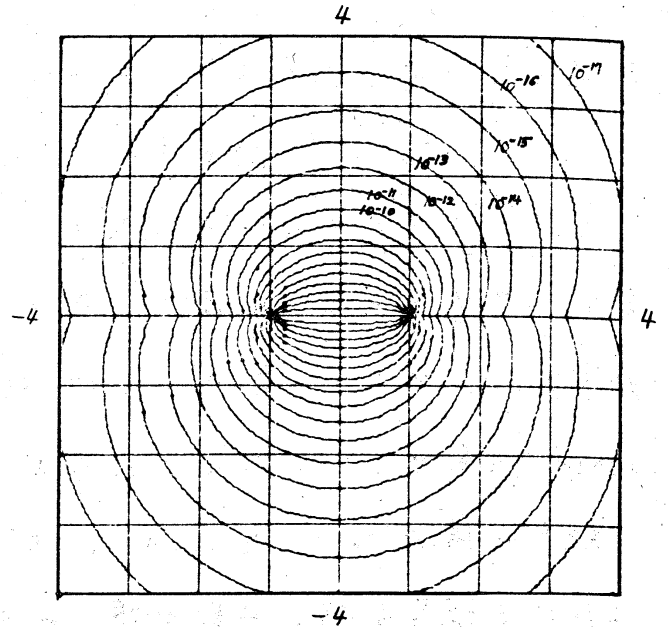


Fig. 3 IMT型二重指数関数型公式の誤差の特性関数 $\frac{1}{2\pi} |\Phi_N(z)|$ $N=32$

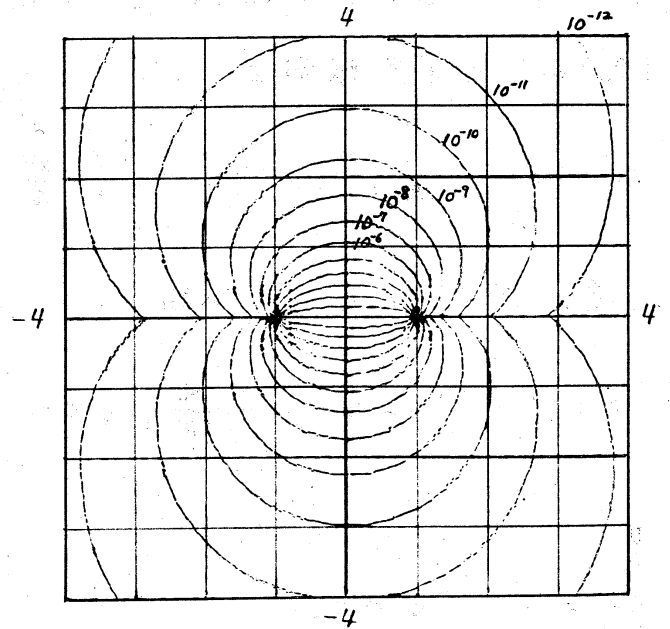


Fig. 4 二重指数関数型公式の誤差の特性関数 $\frac{1}{2\pi} |\Phi_h(z)|$ $h = \frac{1}{4}$

線図を示した。この図も上と同様他の n ($n = 1/2^m, m = 1, 2, \dots$) の場合にも利用できる。これらの図は、 $f(z)$ が $z = \pm 1, \infty$ 以外に特異点をもつ場合の誤差解析に実際役に立つ。

§ 3. 公式の比較と数値例

IMT 型二重指数関数型公式 ($A=B=\pi$) および本来の二重指数関数型公式によって、次の関数を積分した結果を Fig. 5 に示す。

$$(3.1) \quad f(x) = (1-x^2)^\alpha, \quad \alpha = \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}$$

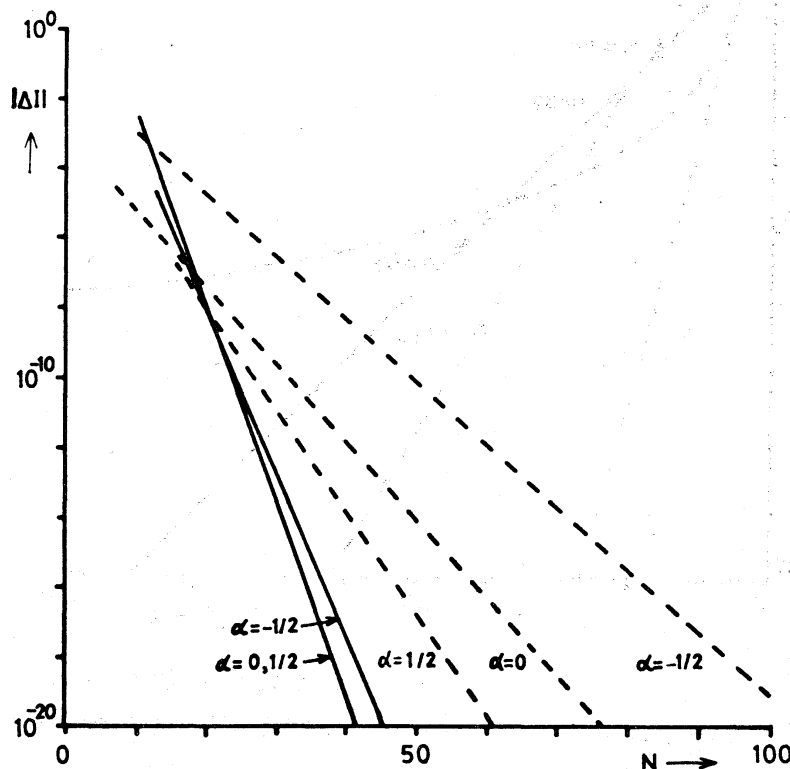


Fig. 5 $\int_{-1}^1 (1-x^2)^\alpha dx, \alpha = \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}$ の積分誤差

—— 二重指数関数型公式 --- IMT型二重指数関数型公式

$g(u)$ の減衰は一般に急激であるので、実際には $x = \pm 1$ にごく近い標本点を使わない。図の標本点数 N は、この点を考慮して実際に計算に使った数を示してある。以下の例も同様である。上図の誤差は *intrinsic error* であり、IMT型=重指数関数型公式の場合には、この図の結果は (2.17) と良く一致している。

Fig. 6 は次の関数を積分したときの誤差である。

$$(3.2) \quad f(x) = \frac{1}{1+x^2}$$

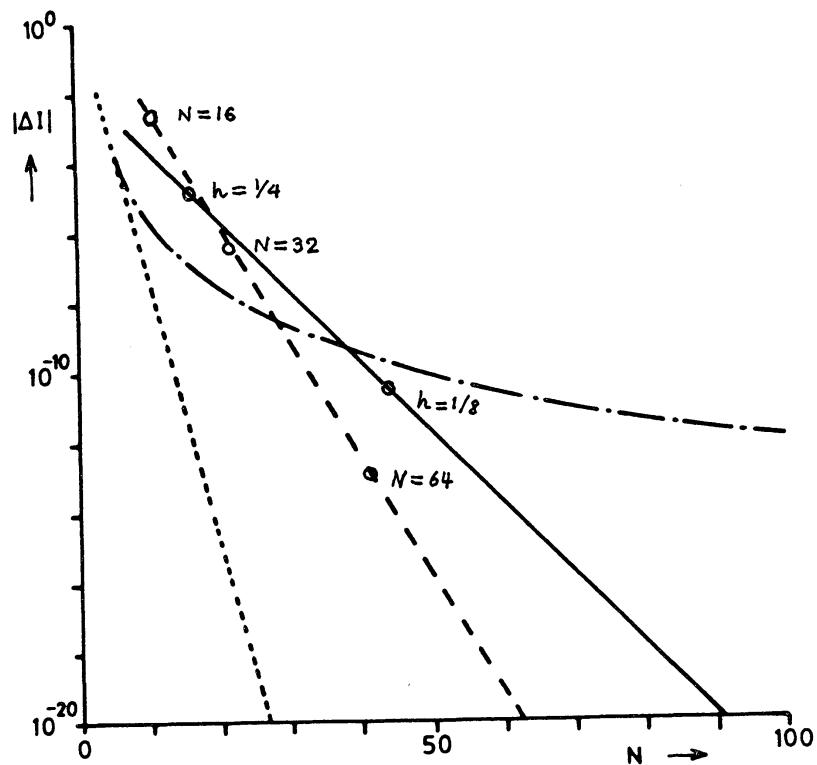


Fig. 6

$\int_{-1}^1 \frac{dx}{1+x^2}$ の積分誤差

- 二重指数関数型公式
- IMT型=重指数関数型公式
- Gauss 公式
- . - . Simpson 則

このときの誤差は Fig. 3 および Fig. 4 を利用して理論的に推定することができる。Fig. 5 と Fig. 6 を比較すると、端点に特異性のある積分に対しては本来の二重指数関数型公式が、端点には特異性がなく π -平面内の他の点に特異性をもつ積分には IMT 型二重指数関数型公式が良い結果を与えている。これは前者が端点附近に密に標本点をもち、後者は相対的に区間の内部に標本点を密にもつことから直観的にも理解できよう。

最後に、Fig. 7 に

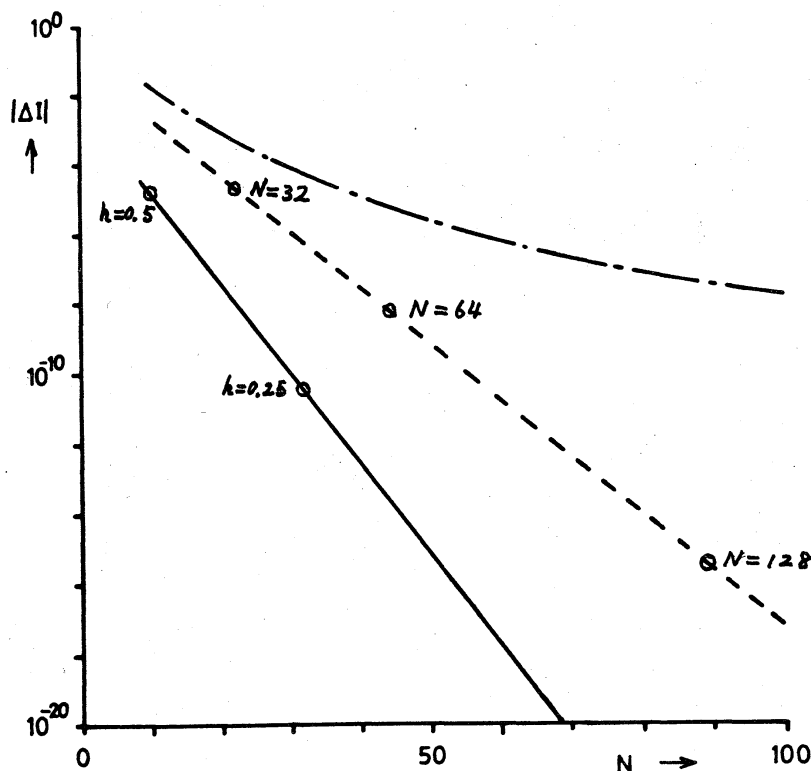


Fig. 7

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

—— 二重指数関数型公式
 - - - - IMT 型二重指数関数型公式
 - · - · - IMT 公式

$$(3.3) \quad f(x) = \frac{1}{(x-2)(1-x)^{1/4}(1+x)^{3/4}}$$

を積分した結果の誤差を示しておく。本来の二重指数関数型公式では真 $z=2$ における極からの寄与が大きいことがFig. 4からわかる。それに対して、IMT型二重指数関数型公式では *intrinsic error* の影響の方がはるかに大きい。

結論としては、端点に特異性をもつ積分には二重指数関数型公式が最も効率的であるということができよう。一般の場合、つまり端点に特異性をもつ積分、もたない積分を同時にいろいろ計算する場合には、IMT型二重指数関数型公式を使うのも一策である。しかし、被積分関数の解析的性質がある程度わかっている場合には、それに適した積分公式を使いわけることが、結局は最も賢明なやり方であるといえよう。

参考文献

- [1] 伊理 - 森口 - 高沢, ある数値積分公式について, 数理解析研究所講究録 91 (1970), 82-118.
- [2] H. Takahasi and M. Mori, Quadrature formulas obtained by variable transformation, Numer. Math. 21 (1973), 206-219.
- [3] P. J. Davis and P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration, Academic Press, 1975, p. 114.
- [4] E. de Doncker and R. Piessens, Automatic computation of

integrals with singular integrand, over a finite or infinite range, Report TW 22, 1975, Applied Mathematics and Programming Division, Katholieke Universiteit Leuven.

- [5] V. A. Dixon, Numerical quadrature, a survey of the available algorithms, Software for Numerical Mathematics, D. J. Evans ed., Academic Press, 1974.
- [6] H. Takahasi and M. Mori, Error estimation in the numerical integration of analytic functions, Report of the Computer Centre, Univ. of Tokyo, 3 (1970), 41-108.
- [7] C. Schwartz, Numerical integration of analytic functions, J. Comp. Phys. 4 (1969), 19-29.
- [8] H. Takahasi and M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, Publ. RIMS, Kyoto Univ., 9 (1974), 721-741.
- [9] 森, 数值解析と複素関数論, 筑摩書房, 1975.