

振動型半無限積分に対する変数変換型公式

名大理 大浦拓哉 (Takuya Ooura)
東大工 森 正武 (Masatake Mori)

1 振動型半無限積分に対する二重指数関数型公式

二重指数関数型数値積分公式(以下 DE 公式と略記する)は, 端点に特異性をもつ積分や半無限区間の積分など, 古くから広く使われてきた公式が苦手とする積分も問題なく計算してくれる [4]. しかし, この公式にも苦手な型の積分が一つあって, それは次のような減衰の遅い振動型の積分である.

$$I = \int_0^{\infty} f_1(x) \sin x dx, \quad f_1(x) = \text{減衰の遅い関数, 例えば代数関数} \quad (1)$$

このような積分に対してはいろいろな方法が知られているが, 戸田・小野 [6] および杉原 [3] による, DE 公式と補外法を組み合わせた方法も有効な積分法の一つである.

ここでは, 直接二重指数関数型変換だけを用いる新しい方法を提案する. 対象とする積分は

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx \quad (2)$$

である. ただし, λ, θ を定数, m を整数とすると, 被積分関数 $f(x)$ は

$$f(m\lambda + \theta) = 0, \quad \text{for every large integer } m \quad (3)$$

を満たすものとする. すなわち, 被積分関数は x が大きいとき周期 λ で零点をもつような関数であるとする. その位相は原点から θ だけずれていてもよい. いま, M をある程度大きい正の数として,

$$x = M\phi(t), \quad \phi(-\infty) = 0, \quad \phi(+\infty) = \infty \quad (4)$$

なる変数変換を考える. この変換により, はじめの積分は

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(M\phi(t)) M\phi'(t) dt \quad (5)$$

となる. これに刻み幅 h の台形則を適用すると

$$I_h = Mh \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(M\phi\left(nh + \frac{\theta}{M}\right)\right) \phi'\left(nh + \frac{\theta}{M}\right) \quad (6)$$

なる公式が導かれる. ここで, $\phi(t)$ として

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(t) = t \quad (7)$$

をみたす関数を選ぶ。すなわち、 $\phi(t)$ は $f(x)$ の引数 $M\phi(nh + \frac{\theta}{M})$ が $n \rightarrow \infty$ のとき $Mnh + \theta$ に近づくような関数である。さらに、ここで刻み幅 h を

$$Mh = \lambda \quad (8)$$

のように選ぶと、大きな n に対して

$$f(M\phi(nh + \frac{\theta}{M})) \simeq f(Mnh + \theta) = f(n\lambda + \theta) \simeq 0, \quad h = \frac{\lambda}{M} \quad (9)$$

が成立つ。 t を大きくするとき $\phi(t)$ が十分速く t に近づくならば、 I_h の n に関する和をあまり大きくない n のところで打ち切ることができる。

このような $\phi(t)$ として

$$x = \phi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-K \sinh t)} \quad (10)$$

をとることができる。 K はある正の定数である。この関数の微分 $\phi'(x)$ は次のようになる。

$$\phi'(t) = \frac{1 - (1 + Kt \cosh t) \exp(-K \sinh t)}{(1 - \exp(-K \sinh t))^2} \quad (11)$$

また、 $\phi(t)$ および $\phi'(t)$ の $t = -\infty, 0, +\infty$ の近くでの挙動は次のようになる。

$$\phi(t) \sim \begin{cases} |t| \exp(-\frac{K}{2} \exp(-|t|)) \sim 0 & ; t \rightarrow -\infty \\ \frac{1}{K} & ; t \rightarrow 0 \\ t & ; t \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (12)$$

$$\phi'(t) \sim \begin{cases} \frac{1}{2} K |t| \exp |t| \exp(-\frac{K}{2} \exp(-|t|)) \sim 0 & ; t \rightarrow -\infty \\ \frac{1}{2} & ; t \rightarrow 0 \\ 1 & ; t \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (13)$$

このように、この関数の微分 $\phi'(t)$ は $t \rightarrow -\infty$ において 0 に二重指数関数的に近づき、一方、関数 $\phi(t)$ 自体は $t \rightarrow +\infty$ において t に二重指数関数的に近づく。また、 $t = 0$ の近くにおいて $\phi(t)$ および $\phi'(t)$ の計算で共に桁落ちを生ずるので、実際の計算ではそれを避けるようにしなければならない。図 1 に $K = 6$ の場合の $x = \phi(t)$ のグラフを示した。

2 誤差解析

例として、積分

$$I = \int_0^\infty \frac{\cos x}{1 + x^2} dx = \frac{\pi}{2e} \quad (14)$$

に変換

$$x = \frac{t}{1 - \exp(-6 \sinh t)} \quad (15)$$

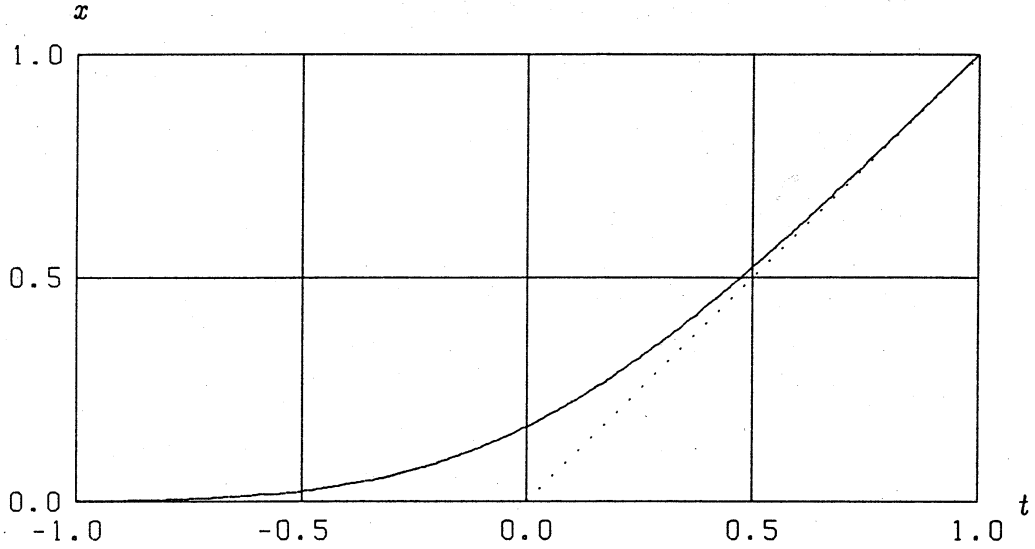


図 1: $x = \phi(t)$, $K = 6$

を適用して計算したときの絶対誤差を図 2 に示す。横軸は $M = \pi/h$ で、縦軸は絶対誤差を対数スケールで示してある。このグラフは、 C をある定数として、絶対誤差がほぼ

$$\Delta I_h = I - I_h \sim \exp\left(-\frac{C}{h}\right) \quad (16)$$

のように表せることを示している。これは、二重指数関数型公式に典型的な誤差の挙動である。

一般に、解析関数 $f(x)$ を数値積分したときの誤差 ΔI_h は、複素積分によって次の形に表現できることが知られている [5]。

$$\Delta I_h = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi_h(z) f(z) dz \quad (17)$$

$\Phi_h(z)$ は誤差の特性関数とよび、積分公式に対応して定義される。とくに、積分

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} g(t) dt \quad (18)$$

に一定刻み幅 h の台形則を適用したときの誤差は、具体的に次のように書くことができる。

$$\Delta I_h = \int_{\hat{C}} \hat{\Phi}_h(w) g(w) dw \quad (19)$$

$$\hat{\Phi}_h(w) = \begin{cases} \frac{+2\pi i}{1 - \exp(-\frac{2\pi i}{h} w)}, & \text{Im} w > 0 \\ \frac{-2\pi i}{1 - \exp(+\frac{2\pi i}{h} w)}, & \text{Im} w < 0 \end{cases} \quad (20)$$

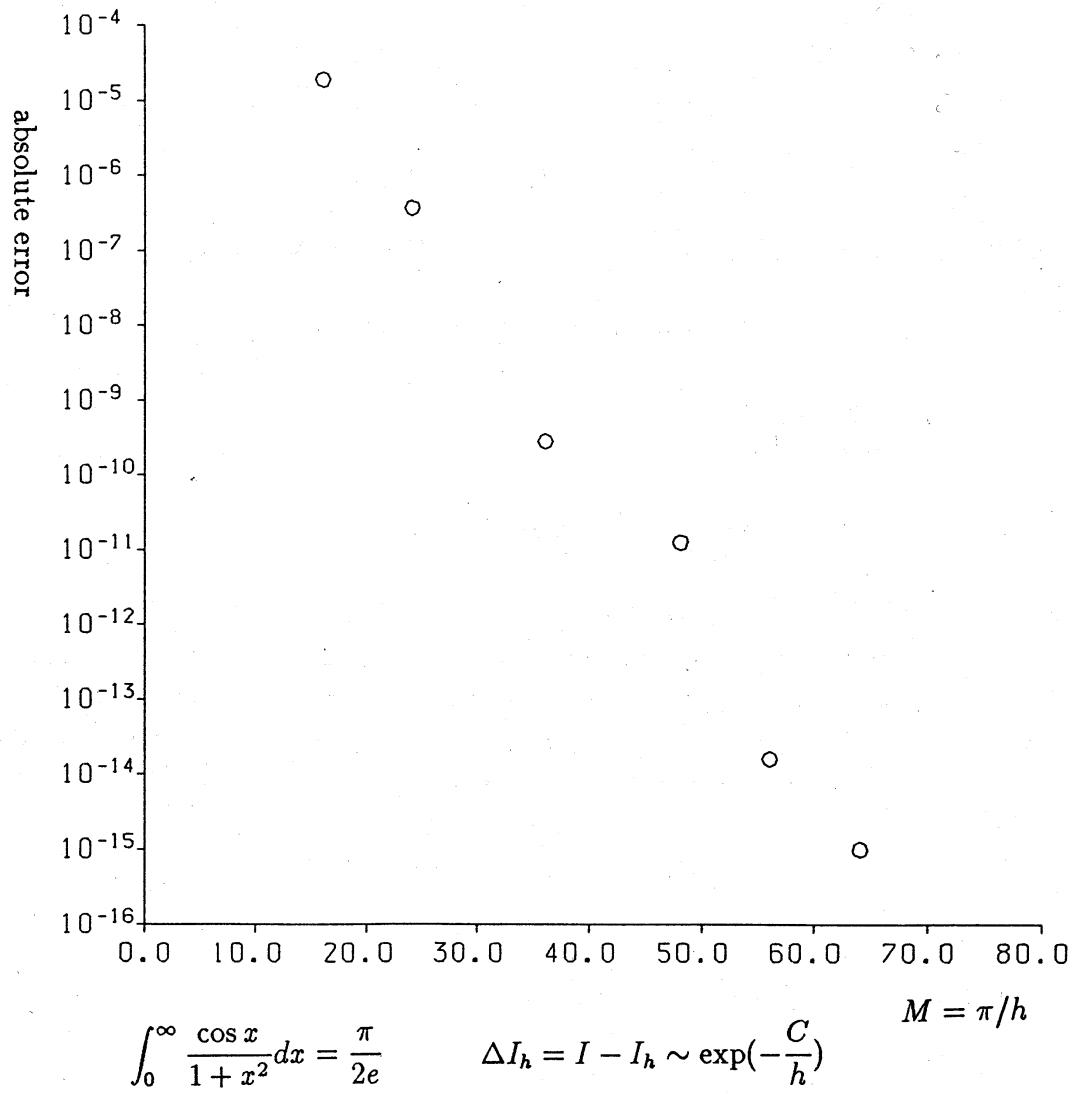


図 2: 誤差の刻み幅依存性 (K=6) .

積分路 $\hat{C}$ は実軸の上側を負の向きに、下側を正の向きに走る路で、 $\hat{C}$ と実軸の間に被積分関数の特異点が存在しないようにとる。したがって、ここで対象としている積分

$$I = \int_0^\infty f(x) dx \quad (21)$$

を $x = M\phi(w)$ によって変換してから台形則を適用した公式 (6) の誤差は

$$\begin{aligned} \Delta I_h &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\hat{C}} \hat{\Phi}_h(w) f(M\phi(w)) M\phi'(w) dw \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_C \Phi_h(z) f(z) dz, \quad z = M\phi(w) \end{aligned} \quad (22)$$

となる。この公式の誤差の特性関数 $\Phi_h(z)$ と (20) の誤差の特性関数 $\hat{\Phi}_h(w)$ は

$$\Phi_h(z) = \Phi_h(M\phi'(w)) = \hat{\Phi}_h(w) \quad (23)$$

なる関係で結び付けられている。

w 平面の実軸から離れると

$$\frac{1}{2\pi} |\hat{\Phi}_h(w)| \simeq \exp\left(-\frac{2\pi}{h} |\operatorname{Im} w|\right) \quad (24)$$

であるから、 $|\hat{\Phi}_h(w)|/2\pi$ の等高線図は実軸に平行な直線群から成ることがわかる。

図 3 に、 z 平面における $|\Phi_h(z)|/2\pi$ の等高線図を示した。この図は、 w 平面における上記の直線群を $z = \phi(w)$ によって実際にコンピュータで z 平面に写像して描いたものである。変換 $z = \phi(w)$ は $\operatorname{Re} w$ が大きいとき $z \sim w$ となるので、 $|\Phi_h(z)|/2\pi$ の等高線図も $\operatorname{Re} z$ が大きいときやはり実軸に平行な直線群に近づく。すなわち、

$$\frac{1}{2\pi} |\Phi_h(z)| \sim \exp\left(-\frac{2\pi}{h} |\operatorname{Im} z|\right) \quad (25)$$

が成り立つ。図 3 にもその様子が現れている。

DE 公式の誤差の要因は、誤差の積分表示 (22) において、

1. $\operatorname{Re} w$ が負で大きいところからの寄与
2. $\operatorname{Re} w$ が正で大きいところからの寄与
3. 被積分関数 $f(x)$ の特異点からの寄与

の三つに大別することができる。第 1 と第 3 の要因は従来の DE 公式の場合と本質的に同じで、要するに (20) よりほぼ $\exp(-C/h)$ に比例する。問題は第 2 の要因である。従来の DE 公式が $\sin$, $\cos$ を含む半無限区間の積分を苦手とした理由もここにある。ところがいまの場合、誤差の特性関数は (25) のような挙動を示すので、 $f(x)$ に $\sin \omega x$ や $\cos \omega x$ が含まれていても $|\omega| < 2\pi/h$ であるかぎり、 $|\Phi_h(z)f(z)|$ は z が実軸から離れるとき十分速

$$\frac{1}{2\pi}|\Phi_h(z)|, \quad z = \phi(w) = \frac{w}{1 - \exp(-6 \sinh w)}, \quad M = 64, \quad h = \frac{\pi}{M}$$

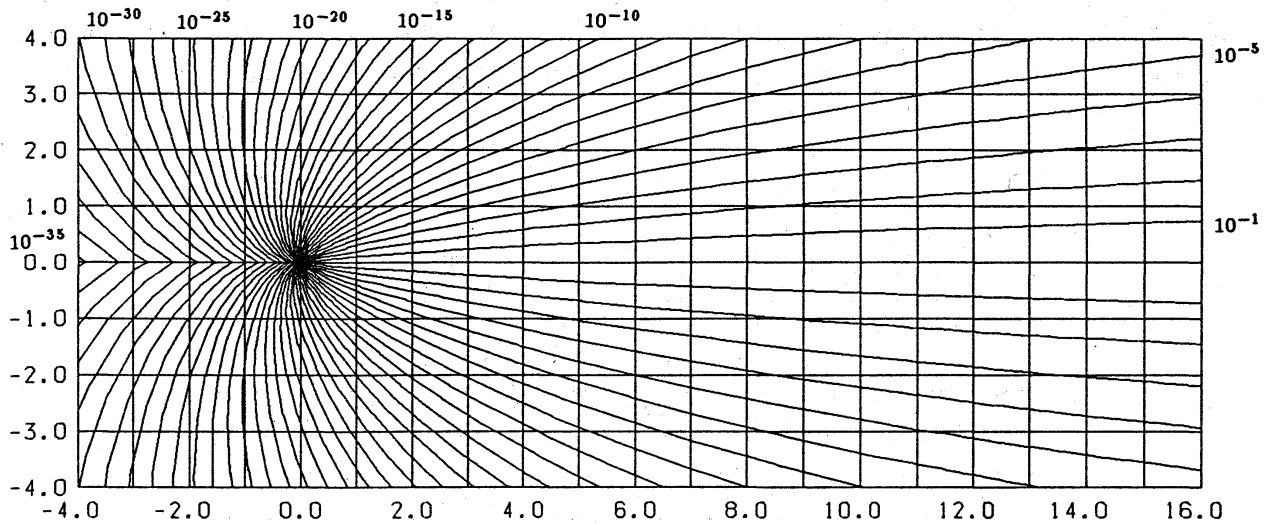


図 3: 誤差の特性関数.

く減衰する. したがって, (22) の積分路 C を十分実軸から離してとることができ, 結局誤差は $\exp(-C/h)$ に比例することになるのである.

ただし, ここでは x が正で大きいところでの $f(x)$ の減衰は遅いと仮定しているのので, 他に何も条件がなければ積分の分点はきわめて多くとらなければならことになる. ところが, いまの場合, x が正で大きいところでは分点が $\sin$ あるいは $\cos$ の零点に二重指数関数的に近づくのでそれより大きいところでの計算は不要になり, 結局比較的少ない分点数で計算を打ち切ることができ, したがって結論として効率は DE 公式と同じになるのである.

3 数値例

最初に, ここで提案した新しい DE 公式とこれまでに知られている他の公式とを比較するために, 次の積分を例として取り上げる.

$$I_1 = \int_0^\infty e^{-x} \cos x dx = 1$$

$$I_2 = \int_0^\infty \frac{x \sin x}{1+x^2} dx = \frac{\pi}{2e}$$

$$I_3 = \int_0^\infty \frac{\cos x}{1+x^2} dx = \frac{\pi}{2e}$$

$$I_4 = \int_0^\infty \log \frac{x^2 + 4}{x^2 + 1} \cos x dx = (e^{-1} - e^{-2})\pi$$

プログラムは、絶対誤差許容限界 ε を与えたときそれに応じて M すなわち $h = \pi/M$ を自動的に選択して積分を計算するようになっている。また、変換 (10) のパラメーター K は 6 に固定して計算する。結果は次のようになる。 N は被積分関数の評価回数である。

$\varepsilon = \text{absolute error tolerance} = 10^{-6}$						
	present DE		Hasegawa-Torii		QUADPACK	
integral	N	error	N	error	N	error
I_1	22	1×10^{-8}	33	3×10^{-9}	150	3×10^{-16}
I_2	24	3×10^{-7}	45	1×10^{-6}	385	3×10^{-9}
I_3	28	4×10^{-7}	57	1×10^{-8}	335	7×10^{-10}
I_4	29	1×10^{-7}	49	4×10^{-8}	335	2×10^{-9}

$\varepsilon = \text{absolute error tolerance} = 10^{-12}$						
	present DE		Hasegawa-Torii		QUADPACK	
integral	N	error	N	error	N	error
I_1	54	4×10^{-14}	61	5×10^{-16}	280	5×10^{-12}
I_2	71	2×10^{-14}	94	4×10^{-15}	700	8×10^{-13}
I_3	83	2×10^{-14}	93	1×10^{-13}	675	3×10^{-13}
I_4	84	1×10^{-13}	94	1×10^{-14}	670	7×10^{-13}

Hasegawa-Torii とあるのは [1] による結果であり、また QUADPACK とあるのは数値積分パッケージ QUADPACK の中にある DQAWF[2] を使ったやはり [1] の中の結果である。いずれの例でも、われわれの方法によって最も効率良く計算が行われている。

次に、何らかの特異性をもつ例として、次の四つの積分を計算してみた。

$$I_5 = \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}$$

$$I_6 = \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{x}} \sin x dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

$$I_7 = \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{x}} \cos x dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

$$I_8 = \int_0^\infty \sin x \log x dx = -\gamma$$

結果は次のようになる。 ε は絶対誤差許容限界である。また、 N は被積分関数の評価回数である。

	$\varepsilon = 10^{-6}$		$\varepsilon = 10^{-12}$	
integral	N	error	N	error
I_5	30	6×10^{-9}	86	9×10^{-14}
I_6	28	4×10^{-9}	82	4×10^{-14}
I_7	35	3×10^{-8}	99	6×10^{-14}
I_8	29	3×10^{-7}	80	1×10^{-12}

I_5 は原点が除去可能な特異点である例で、この積分は他の方法でも容易に計算できるであろう。 I_6 と I_7 は x の大きいところで減衰の遅い例で、しかも I_7 は原点に特異性をもつ。われわれの公式は原点側では本質的に DE 公式なので、 I_7 のような積分でも問題なく計算できる。 I_8 の被積分関数は発散する因子 $\log x$ をもち、これは本来

$$\lim_{z \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-zx} \sin x \log x dx \quad (26)$$

として定義されるものである。しかし、発散のことに気づかずに I_8 に直接われわれの方法を適用しても簡単に正しい結果を得ることができる。

参考文献

- [1] T.Hasegawa and T.Torii, Indefinite integration of oscillatory functions by the Chebyshev series expansion, J. Comput. Appl. Math. **17** (1987) 21-29.
- [2] R.Piessens, E.deDoncker-Kapenga, C.W.Überhuber and D.K.Kahaner, QUADPACK A Subroutine Package for Automatic Integration, 1983, Springer-Verlag.
- [3] M.Sugihara, Methods of numerical integration of oscillatory functions by the DE-formula with the Richardson extrapolation, J. Comput. Appl. Math. **17** (1987) 47-68.
- [4] H.Takahasi and M.Mori, Double exponential formulas for numerical integration, Publ. RIMS, Kyoto Univ. **9** (1974), 721-741.
- [5] H.Takahasi and M.Mori, Error estimation in the numerical integration of analytic functions, Report Comput. Centre, Univ. Tokyo, **3** (1970), 41-108.
- [6] 戸田英雄・小野令美, Double Exponential 変換積分公式の有効性を発揮させるための注意, 京都大学数理解析研究所講究録, No.339, 1978, 74-109.