

変数変換によつて得られる積分公式 (2)

東大理 高橋秀俊

京大数研 森正武

§1 無限区間への変数変換と台形則

被積分関数に $(-\infty, \infty)$ で解析的な関数 $g(u)$ をもつ積分を I とする。

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

無限区間 $(-\infty, \infty)$ において単位長さあたりの平均個数が同じである標本点分布を持つ数値積分公式のうちで I を最も良く近似するものは等間隔なきざみ巾 h の台形則 I_h である¹⁾。

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} g(nh) \quad (1-2)$$

われわれは、端点に特異性を持つ有限区間の積分

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (1-3)$$

や収束の遅い無限区間の積分に対し適当な変数変換

$$x = g(u) \quad (1-4)$$

をほどこしてそれを (1-1) の形に帰させ、それに台形則 (1-2)

を適用することにより効率の良い数値積分公式が得られることを示した²⁾。ここでは、同一の積分に対しても幾通りかの変数変換が存在し、それらの間に効率上の差異があることをみた。

この報告の目的は、与えられた積分に対して最も効率の高い変数変換、すなわち同一の精度を得るに必要な関数値の計算回数が最小の公式を定めることである。

§2 最適な変数変換

可能なあらゆる変換の中から最も良い変数変換 $x=g(u)$ を選び出すことは実際には不可能なことを考えられる。しかし被積分関数の解析的性質を手がかりとして次のようになれば定性的に最適と考えられる変換を選ぶことができる。

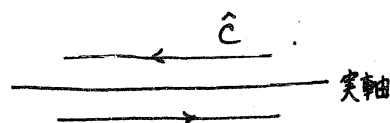
積分 (1-1) を台形則 (1-2) で近似したときの誤差 ΔI_n は次式で与えられる¹⁾。

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

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

$\hat{C}$ は右図のように実軸の上下を逆向

に走り路である。誤差の積分 ΔI_n は



積分路 $\hat{C}$ を $\hat{\Phi}(\omega)g(\omega)$ の鞍点 η を通過するようにとることによって近似的に次式で求められる (鞍点法)。

$$|\Delta I_R| \simeq \sum_{\eta} \frac{|\hat{\Phi}(\eta)g(\eta)|}{\sqrt{2\pi} \left| \frac{d^2}{d\omega^2} \log \hat{\Phi}(\omega)g(\omega) \right|_{\omega=\eta}} \quad (2-3)$$

鞍点の位置 $\omega = \eta$ は

$$\frac{d}{d\omega} \{ \hat{\Phi}(\omega)g(\omega) \} = 0 \quad (2-4)$$

から定められる。

台形則 (1-2) が効率良く行われるためには $|g(u)|$ は $u \rightarrow \pm\infty$ のとき急速に減少しているほどよいように思われる。しかし $g(u)$ の減少を急にすぎると誤差 $|\Delta I_R|$ は逆に大きくなってしまう。なぜなら、一般に解析関数 $g(\omega)$ の絶対値が実軸上で $\omega = u \rightarrow \pm\infty$ のとき急減少であるほど虚軸方向で $\omega = i\nu \rightarrow \pm i\infty$ のとき増大が急になる傾向がある。そのために (2-4) から定まる $\hat{\Phi}(\omega)g(\omega)$ の鞍点は実軸に近づき (2-3) の右辺で誤差を支配する項 $|\hat{\Phi}(\eta)g(\eta)|$ が大になる傾向があるからである。したがって $g(u)$ の $u \rightarrow \pm\infty$ における減衰の度合はあまり急にあるわけにはゆかず、どこかに最適のものがあるはずである。

$g(u)$ の $u \rightarrow \pm\infty$ での減衰を特徴づけるものとしてまず与えられた積分に $x = g(u)$ なる変数変換をほどこした結果 $g(u)$ は

$$g(u) = g_1(u) - \frac{1}{\cosh u^m}, \quad m=1, 2, 3, \dots \quad (2-5)$$

の形になったと仮定しよう。 $g_1(w)$ は $1/\cosh u^m$ に比較して全平面でおだやかな関数であるとする。このとき $\hat{g}(w)g(w)$ の根 η_k は

$$\cosh w^m = 0 \quad (2-6)$$

となる $g(w)$ の特異点のごく近くに現れるから、これを (2-6) の根で近似すると

$$\eta_k = \sqrt[m]{\frac{\pi}{2} \pm k\pi} \exp\left(\frac{\pi}{2m} i\right), \quad k=0, 1, 2, \dots \quad (2-7)$$

で与えられる。誤差に最も大きく寄与するのは実軸に最も近い $k=0$ のときの η_0 である。このとき誤差を支配する項は (2-3) より近似的に次のようになる。

$$|\Delta I_k| \simeq \exp\left(-\frac{2\pi^m}{k} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sin \frac{\pi}{2m}\right) \simeq \exp\left(-\frac{\pi^2}{mk}\right); \quad m \rightarrow \infty \quad (2-8)$$

数値積分公式の効率の比較は、誤差を計算に要した標本点数 N の関数として表わして行わなければならない。台形則 (1-2) を打切る上限を N とすると、そこで $g(u)$ はほぼ $\exp\{-(Nh)^m\}$ となっている。打切りは当然この値と誤差 $|\Delta I_k|$ が大体等しい所でなされるべきであるから、 N は近似的に次式から定められる。

$$\exp\left(-\frac{\pi^2}{mk}\right) = \exp\{-(Nh)^m\} \quad (2-9)$$

これから n を N で表わすと次のようになる。

$$h = \left(\frac{\pi^2}{m}\right)^{\frac{1}{m+1}} N^{-\frac{m}{m+1}} \simeq N^{-\frac{m}{m+1}} ; m \rightarrow \infty \quad (2-10)$$

これを (2-8) に代入すると誤差の N 依存性が得られる。

$$|\Delta I_N| \simeq \exp\left(-\frac{\pi^2}{m} N^{\frac{m}{m+1}}\right) \quad (2-11)$$

右辺の値は標本点数 N がある程度大のときそのべき $\frac{m}{m+1}$ に大きく支配され、これは m が増すと共に増大する。しかし N を固定すると $|\Delta I_N|$ は $m \simeq \log N$ のとき次の最小値に達する。

$$|\Delta I_N|_{\min} \simeq \exp\left(-\frac{\pi^2}{\log N} N^{\frac{m}{m+1}}\right), m = \log N \quad (2-12)$$

したがって (2-5) のとき最良精度を得ようとするとき m を固定できず実用上不便である。なお有限区間の積分を変数変換した場合を考えると、(2-11) において $m=1$ および $m=2$ に相当する変換公式はそれぞれ $x = \tanh u$ ($|\Delta I_N| \simeq \exp(-CN^{\frac{1}{2}})$) および $x = \operatorname{erf} u$ ($|\Delta I_N| \simeq \exp(-CN^{\frac{2}{3}})$) である。²⁾

つぎに $u \rightarrow \pm\infty$ におけるさらに減衰の速い変換を行って $g(u)$ が

$$g(u) = g_1(u) \frac{1}{\cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u^m\right)}, m=1, 2, 3, \dots \quad (2-13)$$

となったとしよう。定数 $\frac{\pi}{2}$ をつけたのはこうすると誤差解析がやゝ容易になるからであるが、これは他の値に変えても大

きな影響はない。このとき $\hat{\Phi}(w)g(w)$ の鞍点は (2-6) と同様

$$\cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh w^m\right) = 0 \quad (2-14)$$

を満たす $g(w)$ の特異点のごく近くに現れるから、この位置を (2-14) の根で近似すると次のように求められる。

$$\eta_{k,l} = \left[\operatorname{arccosh}(1+2k) \pm i\left(\frac{\pi}{2} + l\pi\right) \right]^{\frac{1}{m}}; \quad l, k = 0, 1, 2, \dots \quad (2-15)$$

ところが $m \neq 1$ のとき大きな n に相当する $\eta_{k,l}$ はいくらでも実軸に近づくので、そのとき $|\hat{\Phi}(\eta_{k,l})|$ の値はいくらでも大きくなってしまふ。したがって (2-13) のような減衰を仮定すると $m > 1$ のとき誤差はひじょうに大きくなってしまふ。

一方 (2-13) で $m = 1$ とすると (2-15) より鞍点は実軸に平行に並び、しかも実軸からの距離はつねに $\frac{\pi}{2}$ より大である。したがって $m = 1$ のときの誤差は (2-3) より近似的に

$$|\Delta I_n| \simeq \exp\left(\frac{2\pi i}{n} \times \frac{\pi}{2} i\right) \simeq \exp\left(-\frac{\pi^2}{n}\right) \quad (2-16)$$

となる。

こうして、変換後の $g(u)$ が $u \rightarrow \pm\infty$ における減衰は

$$g(u) = g_1(u) \frac{1}{\cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)} \quad (2-17)$$

以上に速くしてはならないことがわかった。 $m = 1$ のとき

$$\exp\left(-\frac{\pi^2}{n}\right) = \exp\left(-\frac{\pi}{2} \exp u\right) \quad (2-18)$$

より n と N の関係は

$$n = \frac{1}{N} \log 2\pi N \quad (2-19)$$

となり、これより

$$|\Delta I_N| \simeq \exp\left(-\frac{\pi^2}{\log 2\pi N} N\right) \quad (2-20)$$

が得られる。一方 (2-5) の形の減衰を仮定したときに得られる最良精度は (2-12) であり、(2-20) はこれの $m \rightarrow \infty$ の極限である。以上から被積分関数 $g(u)$ の減衰が (2-17) あるいは

$$g(u) = g_1(u) \exp(-a \exp|u|), \quad u \rightarrow \pm\infty; a > 0 \quad (2-21)$$

となる変換が最適であることがわかった。

このような結果を与える変数変換は (2-21) にみられるように本質的に二重の指数関数から成るので、この種の変換によって得られる公式を *double exponential formula* と呼ぶことになる。

§3 double exponential formula

有限区間 $[-1, 1]$, 半無限区間 $[0, \infty)$, 無限区間 $(-\infty, \infty)$ の各々の場合について (2-21) を満たすような *double exponential formula* を与えておく。

(A) 有限区間 $[-1, 1]$

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \quad (3-1)$$

$$x = \tanh(a \sinh u), \quad a = \frac{\pi}{2} \quad (3-2)$$

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\tanh(a \sinh nh)) \frac{a \cosh nh}{\cosh^2(a \sinh nh)} \quad (3-3)$$

a として $\frac{\pi}{2}$ をとったが、これは他の値でも大きな差はない。
しかし $a < \frac{\pi}{2}$ のときは z -平面における誤差の特性関数型(2)が虚軸によって特異な挙動を示す。

(B) 半無限区間 $[0, \infty)$

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx \quad (3-4)$$

$$x = \exp(a \sinh u), \quad a = \frac{\pi}{2} \quad (3-5)$$

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\exp(a \sinh nh)) a (\cosh nh) \exp(a \sinh nh) \quad (3-6)$$

半無限区間の場合には

$$I = \int_0^{\infty} f(x) e^{-x} dx \quad (3-7)$$

の形の積分が多い。このときすでに $x \rightarrow \infty$ では指数関数の減少を $f(x)$ が示しているから、この部分はもう一段だけ指数関数を重ねれば十分である。

$$x = \exp \{ u - \exp(-u) \} \quad (3-8)$$

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\exp\{nh - \exp(-nh)\}) \{1 + \exp(-nh)\} \exp\{nh - \exp(-nh)\} \quad (3-9)$$

なお積分 (3-7) において変数変換

$$x = \log \left(\frac{2}{1 - \operatorname{erf} u} \right) \quad (3-10)$$

を行うと次の公式が得られる。

$$I_h = \frac{h}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\log \left(\frac{2}{1 - \operatorname{erf} u} \right)\right) \exp(-n^2 h^2) \quad (3-11)$$

これは $u \rightarrow \pm\infty$ のとき $g(u) \propto \exp(-u^2)$ となる例である。

(c) 無限区間 $(-\infty, \infty)$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \quad (3-12)$$

$$x = \sinh(a \sinh u), \quad a = \frac{\pi}{2} \quad (3-13)$$

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\sinh(a \sinh nh)) a \cosh nh \cosh(a \sinh nh) \quad (3-14)$$

実際に計算した積分の誤差を、標本数 N の関数として Fig. 1 図から Fig. 8 図までに示した。標本数 N としては、さきみちに対応する精度を与えるに最小限必要な数をとってある。これらの図からも double exponential formula の最適性がみてとれる。

参考までに Gauss 型公式の誤差の N に関する漸近的な依存性を記すと次の通りである。

(a) Legendre - Gauss 公式 $|\Delta I_N| \simeq \exp(-2N \log N)$

(b) Laguerre - Gauss 公式 $|\Delta I_N| \simeq \exp(-N \log 4)$

(c) Hermite - Gauss 公式 $|\Delta I_N| \simeq \exp(-N \log N)$

§ 4 半無限区間における積分に対する変数変換 $x = e^u$
積分

$$I = \int_0^{\infty} f(x) e^{-x} dx \quad (4-1)$$

を考える。 $f(x)$ は $f_1(x)$ を有理関数として

$$f(x) = f_1(x) x^{-\alpha}, \quad \alpha < 1 \quad (4-2)$$

の形をしているものとある。積分 (4-1) に対する変数変換

$$x = e^u \quad (4-3)$$

は上で述べた意味で最適ではないが、一つの利点を持っている。この変換を行うと公式

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(e^{nh}) \exp(nh - e^{nh}) \quad (4-4)$$

が得られる。この誤差は

$$\Delta I_h = I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \int_{\hat{c}} \hat{\Phi}(w) f(\exp w) \exp(w - e^w) dw \quad (4-5)$$

で与えられるが、これを (4-3) の逆変換

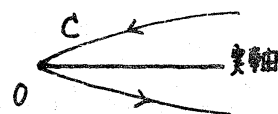
$$w = \log z \quad (4-6)$$

によって z -平面の積分に直ると次のようになる。

$$\Delta I_h = \frac{1}{2\pi i} \int_c \Phi(z) f(z) e^{-z} dz \quad (4-7)$$

$$\Phi(z) = \begin{cases} \frac{-2\pi i}{1 - z^{-\frac{2\pi i}{h}}} \simeq 2\pi i z^{\frac{2\pi i}{h}} ; \Im_m z > 0 \\ \frac{2\pi i}{1 - z^{\frac{2\pi i}{h}}} \simeq -2\pi i z^{-\frac{2\pi i}{h}} ; \Im_m z < 0 \end{cases} \quad (4-8)$$

積分路 C は右図のような路である。このとき



$$|\Phi(z)| \simeq 2\pi \left| z^{\frac{2\pi i}{h}} \right| = 2\pi \exp\left(-\frac{2\pi}{h} |\arg z|\right) \quad (4-9)$$

であるから、 $|\Phi(z)|$ は z -平面の偏角一定の直線上では値はほとんど一定である。

被積分関数の $f(z)$ が

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z f(z) = 0 \quad (4-10)$$

を満足しているとある。このとき積分路 C を次頁右上の図のように変形し、 C_1, C_2 上で $\Phi(z)$ の絶対値が一定であるこ

とを利用してこれを積分の外に出し、再び積分路を元へ戻すことによって次式を得る。

$$|\Delta I_R + \sum_j \sigma_j \Phi(\eta_j) e^{-\eta_j} \text{Res}(\eta_j)|$$

$$\simeq \frac{1}{2\pi} \{ |\Phi(C_1)| + |\Phi(C_2)| \} \times |I| \quad (4-11)$$

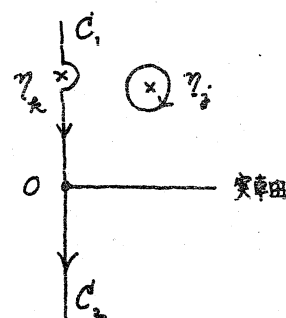
ここで $\Phi(C_1)$, $\Phi(C_2)$ は積分路 C_1 , C_2 上の $\Phi(z)$ の値で

$$|\Phi(C_1)| = |\Phi(C_2)| \simeq 2\pi \exp\left(-\frac{\pi^2}{R}\right) \quad (4-12)$$

である。また η_j は右半平面内または虚軸上にある $f(z)$ の極で、 $\text{Res}(\eta_j)$ はそこにおける $f(z)$ の留数である。 σ_j は η_j が $\text{Re } z > 0$ にあれば 1, 虚軸上にあれば $\frac{1}{2}$ とする。 $\Phi(\eta_j)$ の値は (4-8) より初等関数によって正確に計算できるから、 $f(z)$ が右半平面または虚軸上に極を持つときに現れる (4-11) の左辺の 2 項は補正項として計算値にくり入れることができる。結局 (4-11) より、どのような場合にも近似値の相対誤差が

$$\left| \frac{\Delta I_R^*}{I} \right| \simeq 2 \exp\left(-\frac{\pi^2}{R}\right) \quad (4-13)$$

であることが結論される。 ΔI^* は補正後の誤差を表わす。したがって公式 (4-4) とその補正を利用すると、(4-1) の形で定義される特殊関数 (積分指数関数, 積分三角関数など) の任意の相対精度を持つ関数値を得ることができる。



下表に次の二つの関数を積分したときの相対誤差 $|\Delta I_R|/|I|$ を示す。括弧内の値は計算に要した標本点数である。

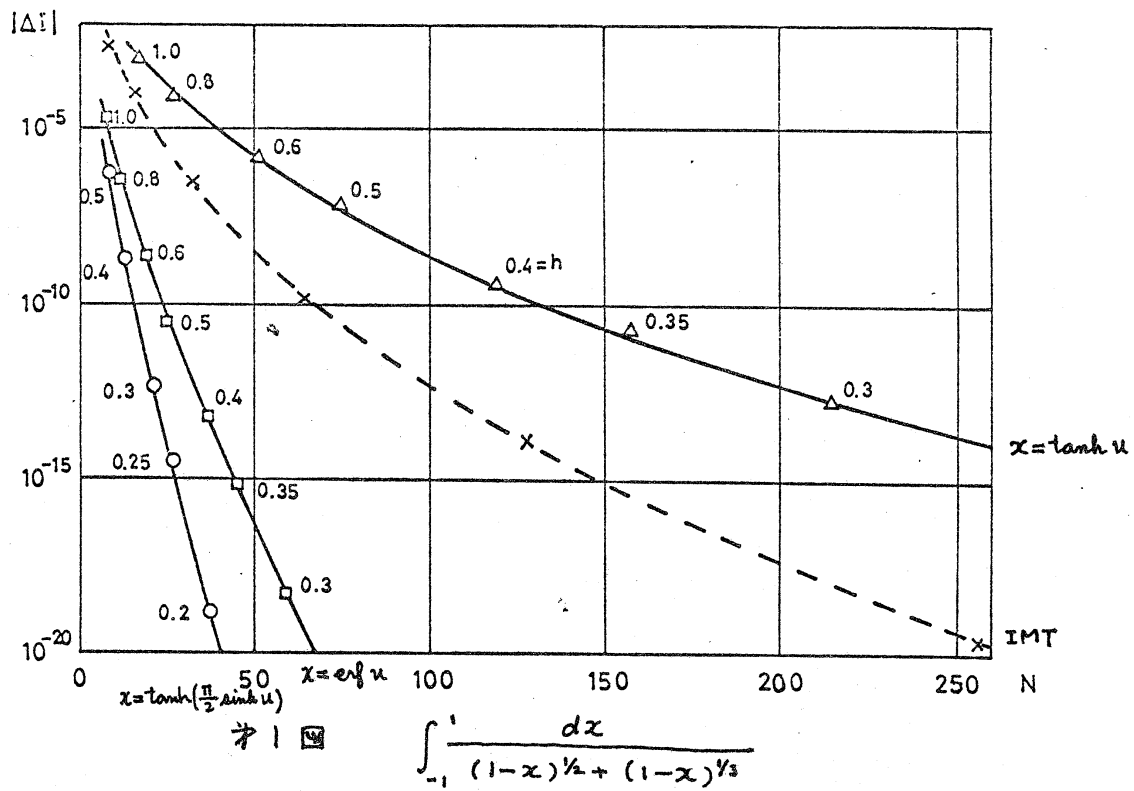
$$(I) \text{ 積分指数関数 } e^{-x} \int_0^{\infty} \frac{e^{-x}}{x+p} dx, p=1.0 \quad (4-14)$$

$$(II) \text{ 積分三角関数の補助関数 } p \int_0^{\infty} \frac{e^{-x}}{x^2+p^2} dx, p=1.0 \quad (4-15)$$

n	$2eAp(-\frac{\pi^2}{n})$	相対誤差 $ \Delta I_R / I $	
		(I)	(II)
0.25	1.39×10^{-17}	2.01×10^{-18} (196)	3.58×10^{-17} (174)
0.5	5.56×10^{-9}	5.09×10^{-9} (54)	1.34×10^{-8} (50)
0.75	3.70×10^{-6}	4.50×10^{-6} (27)	1.03×10^{-5} (24)
1.0	1.00×10^{-4}	1.52×10^{-5} (19)	2.52×10^{-4} (16)

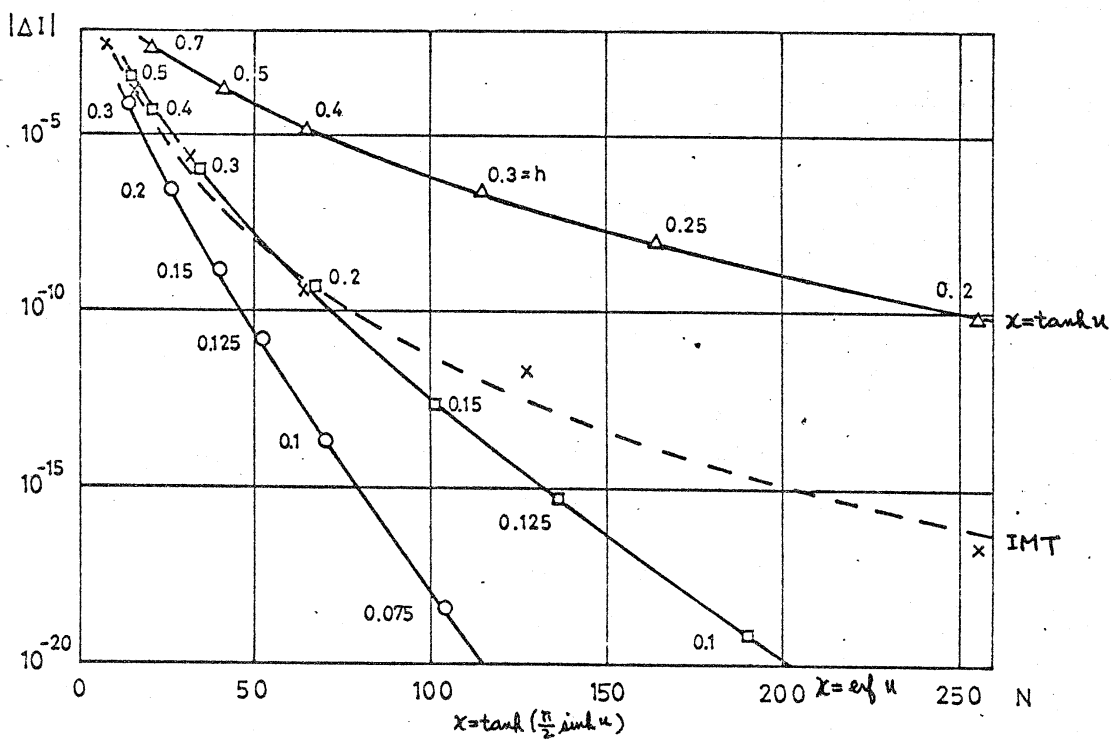
[参考文献]

- 1) H. Takahasi and M. Mori: Report of the Computer Centre, Univ. of Tokyo, 3 (1970), 41-108.
- 2) 高橋・森: 京都大学数理解析研究所講究録 149 (1972), 93-110.

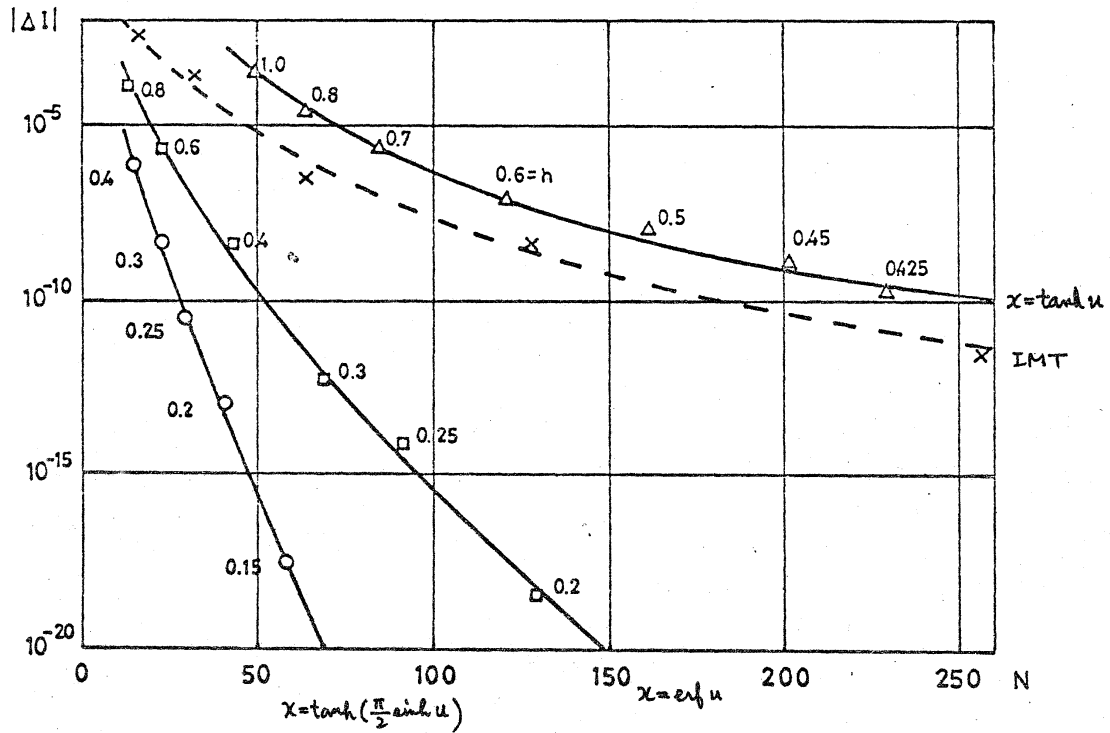


2

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{(1+x^2)\sqrt{1-x^2}}$$

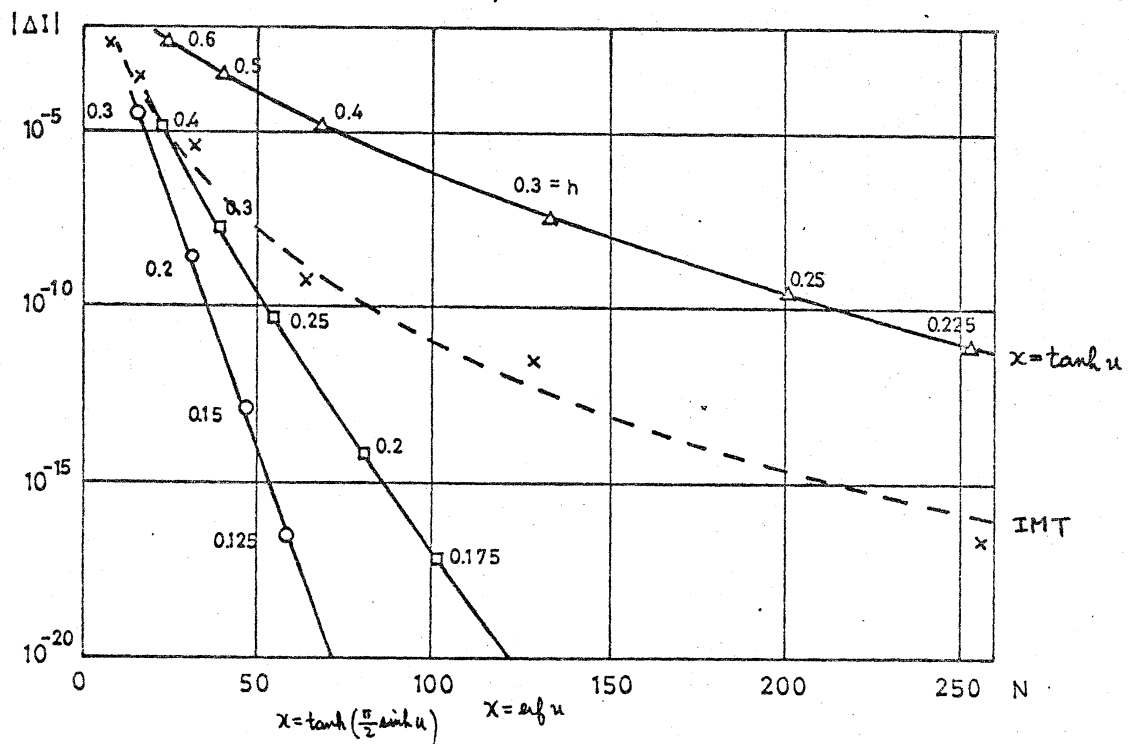


第3图 $\int_{-1}^1 \frac{dx}{(1-x)^{1/4} (1+x)^{3/4} (x-2)}$

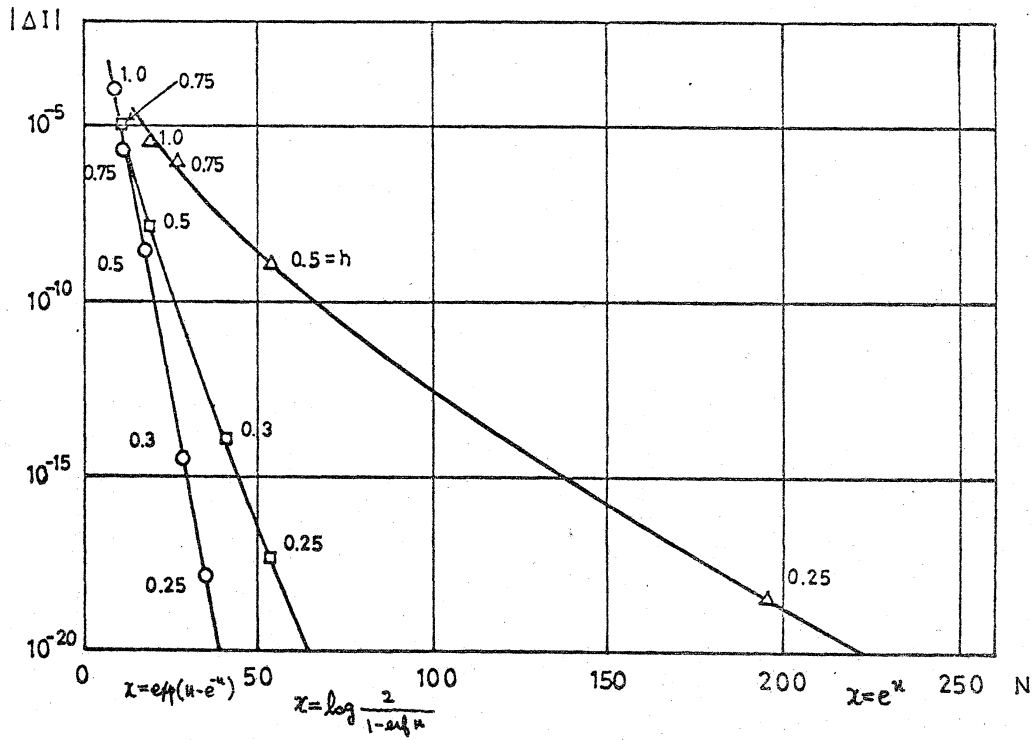


第4图 $\int_{-1}^1 \frac{\cos \pi x}{\sqrt{1-x}} dx$

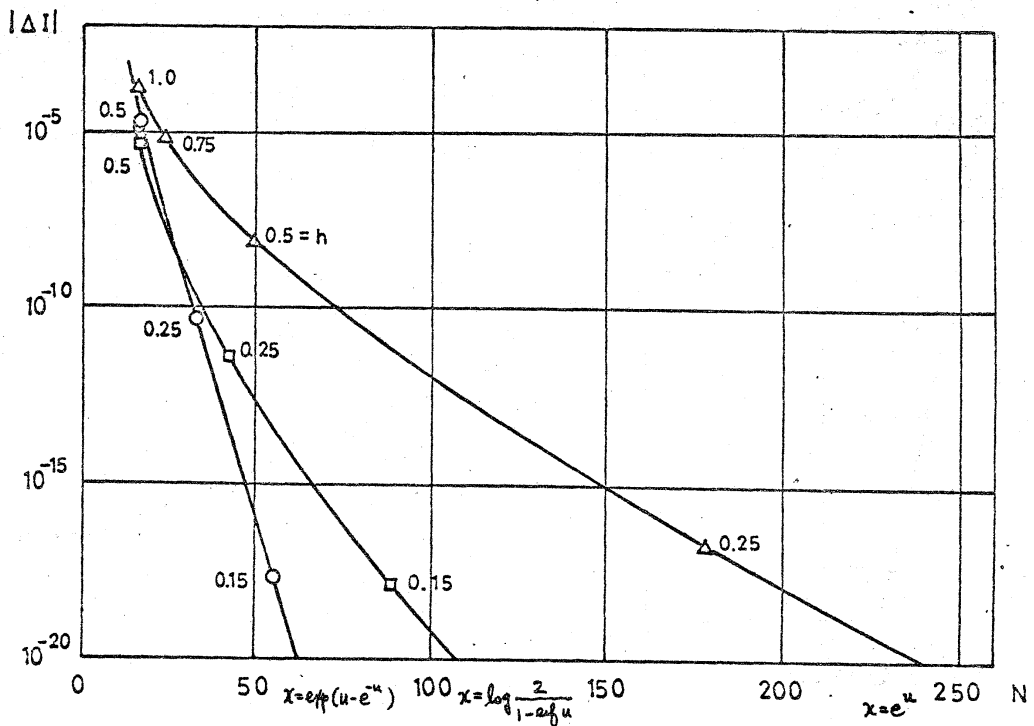
TXACS



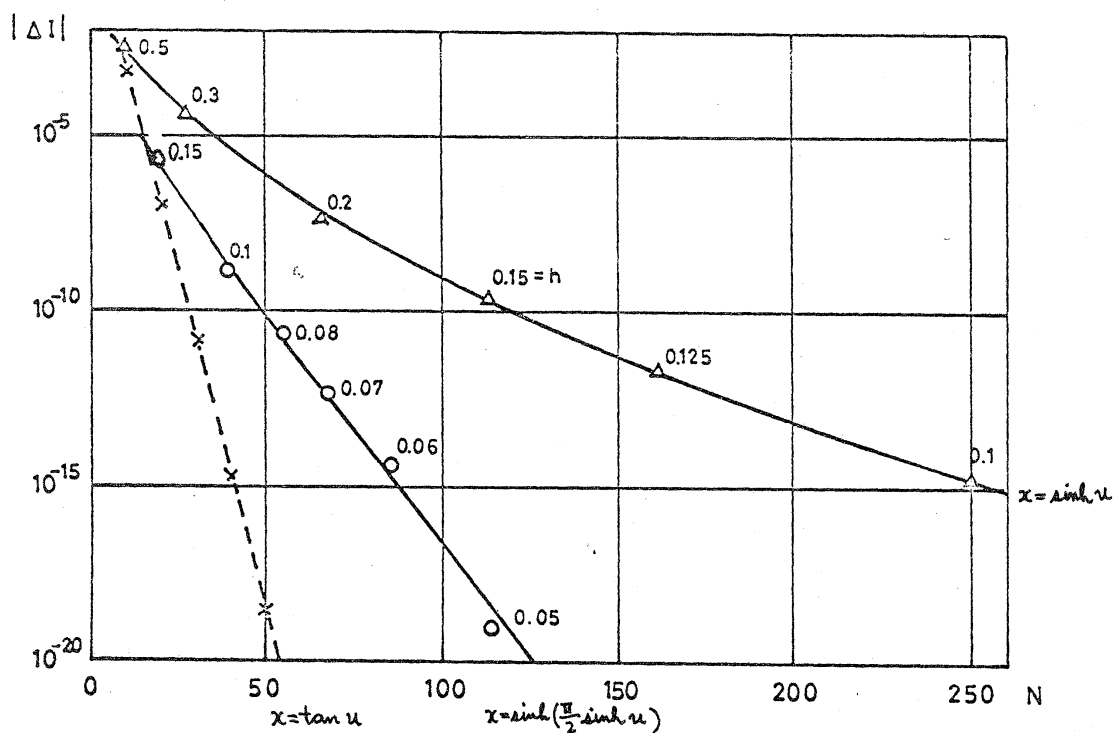
第 5 圖 $e^{-x} \int_0^{\infty} \frac{e^{-x}}{1+x} dx$



第 6 圖 $\int_0^{\infty} \frac{e^{-x}}{1+x^2} dx$



$$\text{第 7 回} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{1+x^4}$$



$$\text{第 8 回} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{5/4}}$$

