

数値積分による特殊関数の計算

東大理 高橋秀俊
京大数研 森 正武

§1 序

積分で定義される特殊関数は多いが、それらのうちには定義の積分を直接数値的に実行することによってその関数値を得ることができるものがかなりある。特に、解析的周期関数の1周期にわたる積分で定義された関数、あるいは解析関数の無限区間 $(-\infty, \infty)$ における積分で定義された関数は、この種の積分に対して最良の結果を与えるキザミ一定の台形則を適用することにより、^(1, 2), 3)精度の高い関数値を得ることができる。また簡単な変数変換によりこれらの積分に帰着できる関数に対しても同様の方法が適用できる。このような計算法は、その誤差評価と共に、既に古くから試みられている。ここでは代表的ないくつかの特殊関数に対してこの数値積分による計算法を適用し、積分誤差の特性関数¹⁾の考えに基づいてその精度を検討する。

§ 2 解析的周期関数の 1 周期にわたる積分で定義された関数
関数 $f(t)$ が、 α に關して周期 α の解析的周期関数である
 $g(x, t)$ の積分

$$f(t) = \int_0^{\alpha} g(x, t) dx \quad (2-1)$$

によって定義されているとする。区間 $[0, \alpha]$ を N 等分して、
(2-1) の積分にキガミ $h = \alpha/N$ の台形則を適用したものを
 $\tilde{f}(t)$ と記す。

$$\tilde{f}(t) = \frac{\alpha}{N} \sum_{k=0}^N ' g\left(\frac{k\alpha}{N}, t\right) \quad (2-2)$$

ただし \sum' は初項と終項には $1/2$ を乗ずることを意味する。この
とき、 $\tilde{f}(t)$ の誤差は

$$\begin{aligned} \Delta I &= f(t) - \tilde{f}(t) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_c \Phi(z) g(z, t) dz \end{aligned} \quad (2-3)$$

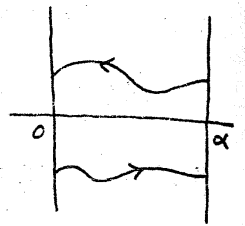
によって与えられる³⁾。ここで $\Phi(z)$ は積分の誤差の特性関数で、
次式で定義される。

$$\Phi(z) = \begin{cases} \frac{-2\pi i}{1 - e^{2\pi i z/h}} & ; \text{Im } z > 0 \\ \frac{2\pi i}{1 - e^{2\pi i z/h}} & ; \text{Im } z < 0 \end{cases} \quad (2-4)$$

積分路Cは第1図に示すような路である。

$|Im z| \gg n$ のときには $|\Phi(z)|$ は近似的に次のようになる。

$$|\Phi(z)| \approx 2\pi \exp(-2\pi |Im z|/n) \quad (2-5)$$



第1図
積分路C

誤差(2-3)の積分は、鞍点法その他場合に応じて適当な方法で近似的に評価すればよい。

[例1] Bessel 関数^{4), 5), 6), 7)}

$$J_n(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(nx - t \sin x) dx \quad (n: \text{整数}) \quad (2-6)$$

被積分関数 $\cos(nx - t \sin x)$ は、周期 π の解析的周期関数である。以下 $n \geq 0, t > 0$ と仮定する。区間 $[0, \pi]$ を N 等分してキガミ $h = \pi/N$ の台形則を適用すると

$$\tilde{J}_n(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos\left(n \frac{k\pi}{N} - t \sin \frac{k\pi}{N}\right) \quad (2-7)$$

このときの誤差は(2-3)より

$$\Delta I = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{1}{\pi} \Phi(z) \cos(nz - t \sin z) dz \quad (2-8)$$

で、また特性関数は $z = x + iy$ として

$$|\Phi(z)| = 2\pi \exp(-2N|y|) \quad (2-9)$$

で与えられる。

誤差(2-8)に鞍点法を適用してその値を近似的に求めよう。
そのためにまず $|\cos(nz - t \sin z)|$ を、その変化の急激な部分に着目しながら変形すると

$$\begin{aligned} |\cos(nz - t \sin z)| &= |\cos(nx + iny - t \sin(x + iy))| \\ &= |\cos\{(nx - t \sin x \cosh y) + i(ny + t \cos x \sinh y)\}| \\ &= \{\cos^2(nx - t \sin x \cosh y) + \sinh^2(ny + t \cos x \sinh y)\}^{1/2} \\ &\simeq \sinh |ny + t \cos x \sinh y| \\ &\simeq \frac{1}{2} \exp(|n|y| + \frac{t}{2} \cos x e^{|y|}) \end{aligned} \quad (2-10)$$

これが $|y| \rightarrow \infty$ と共に急激に増大するのは $\cos x = \pm 1$ のときである。 $\cos x = 1$ のとき、すなわち $x = 0$ のとき、 ΔI の被積分関数の絶対値は

$$\frac{1}{\pi} |\Phi(z) \cos(nz - t \sin z)| \simeq \exp(- (2N - n)|y| + \frac{t}{2} e^{|y|})$$

となるから、これを $|y|$ に関して微分して0とおくと鞍点の位置が求まる。

$$e^{|y|} = \frac{2}{t} (2N - n) \quad \therefore |y| = \log \frac{2}{t} (2N - n) \quad (2-11)$$

$\cos x = -1$ のとき、すなわち $x = \pi$ のときも同様にして

$$|y| = \log \frac{2}{t} (2N + n) \quad (2-12)$$

したがって ΔI の被積分関数の鞍点は

$$\pm i \log \frac{2}{t} (2N - n), \quad \pi \pm i \log \frac{2}{t} (2N + n) \quad (2-13)$$

の4箇所が存在する。積分路 C は才2図に示すようにこれら

の真を通過するようにとる。真 $i \log \frac{z}{t} (2N-n)$ の付近では

$$\frac{1}{\pi} |\Phi(z) \cos(nz - t \sin z)| \\ \approx \exp\left\{-(2N-n) \log \frac{z}{t} + (2N-n) \cos x\right\}$$

となるが、 $2N-n$ が十分大であれば

$\exp\{(2N-n) \cos x\}$ は $x=0$ から離れれば急速に小さくなるから、上の値は $x=0$ の近くで

$$\approx \left\{ \frac{t}{2(2N-n)} \right\}^{2N-n} \exp\left\{(2N-n) \left(1 - \frac{1}{2}x^2\right)\right\}$$

となる。したがって、この部分の積分 (2-8) に対する寄与は近似的に

$$\frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{et}{2(2N-n)} \right\}^{2N-n} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{2N-n}{2}x^2\right) dx = \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{2\pi}{2N-n}} \left\{ \frac{et}{2(2N-n)} \right\}^{2N-n} \quad (2-14)$$

で与えられる。他の3個の真からの寄与も同様に計算することができる。結局誤差 $|\Delta I|$ は

$$|\Delta I| \approx \frac{i}{\sqrt{2\pi(2N-n)}} \left\{ \frac{et}{2(2N-n)} \right\}^{2N-n} + \frac{1}{\sqrt{2\pi(2N+n)}} \left\{ \frac{et}{2(2N+n)} \right\}^{2N+n} \quad (2-15)$$

によって表わされる。 $n=0$ のとき以外は第2項は第1項に比較して無視することができる。

Simpson 則および Filon の公式に対し、これも同様な誤差評価式を導くことができる。

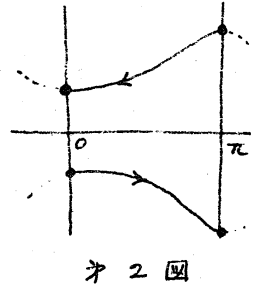


図 2

Simpson 則 ($n=0$ のときは 2 倍する)

$$|\Delta I_S| \approx \frac{1}{3\sqrt{2\pi(N-n)}} \left\{ \frac{et}{2(N-n)} \right\}^{N-n} \quad (2-16)$$

Filon の公式 (α, β は文献 8 を参照のこと)

$$|\Delta I_F| \approx \frac{1-(\alpha+\beta)/2}{\sqrt{2\pi n}} \left\{ \frac{et}{2n} \right\}^n + \frac{(\alpha-\beta)/2}{\sqrt{2\pi(N-n)}} \left\{ \frac{et}{2(N-n)} \right\}^{N-n} \quad (2-17)$$

これらから容易にわかるように、この計算に台形則以外の公式は使うべきではない。

数値例として、区間 $[0, \pi]$ を 16 等分 ($N=16$) して $J_4(5) = 0.39123\dots$ を計算した場合の (2-15) ~ (2-17) による推定誤差と実際の計算誤差を表 1 に示す。

表 1	公式	推定誤差	計算誤差
$[0, \pi]$ を 16 等分して	台形則	4.6×10^{-19}	3.7×10^{-19}
$J_4(5)$ を計算したときの誤差	Simpson 則	4.2×10^{-5}	2.5×10^{-5}
	Filon の公式	1.0×10^{-2}	2.4×10^{-3}

[例 2] 完全楕円積分⁵⁾

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 x}}, \quad (k < 1) \quad \text{表 1 種} \quad (2-18)$$

$$E(k) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1-k^2 \sin^2 x} dx, \quad (k < 1) \quad \text{表 2 種} \quad (2-19)$$

これらの積分の被積分関数は周期 π の解析的周期関数であるが、偶関数であるからその積分を半周期に限っても差支えない。区間 $[0, \pi/2]$ を N 等分してキガミ $h = \pi/2N$ の台形則を適用する。

$$\tilde{K}(k) = \frac{\pi}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \frac{k\pi}{2N}}} \quad (2-20)$$

$$\tilde{E}(k) = \frac{\pi}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \sqrt{1-k^2 \sin^2 \frac{k\pi}{2N}} \quad (2-21)$$

このときの誤差はそれぞれ

$$\Delta I_k = \frac{1}{2\pi i} \int_c \Phi(z) \frac{1}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 z}} dz \quad (2-22)$$

$$\Delta I_E = \frac{1}{2\pi i} \int_c \Phi(z) \sqrt{1-k^2 \sin^2 z} dz \quad (2-23)$$

で与えられる。特性関数 $\Phi(z)$ は次のようになる。

$$|\Phi(z)| \approx 2\pi \exp(-4N|y|) \quad (2-24)$$

いまの場合、被積分関数は2価関数で、その分岐点は

$$\sin z_{\pm} = \pm 1/k$$

より、

$$z_{\pm} = \frac{\pi}{2} \pm i \arccos \frac{1}{k} = \frac{\pi}{2} \pm i \log \left(\frac{1}{k} + \sqrt{\frac{1}{k^2} - 1} \right) \quad (2-25)$$

に存在する。そこで、被積分関数を1価に保つたために、 z -平面において cut を次の図のように入れ、積分路 c を次のよう

にとる。このとき、分岐点 z_{\pm} を半周する積分路からの寄与は、その半円の半径を小さくすれば (2-22), (2-23) 共 0 になる。

また分岐点から離れれば、 $|z|$ の急激な減衰のために被積分関数の値は急速に

0 になる。分岐点の近くでは Taylor 展開により (cut に沿って)

$$|1 - k^2 \sin^2 z| = k^2 \cosh^2 y - 1$$

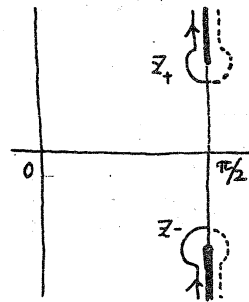
$$\approx k^2 \sinh 2y_0 (y - y_0), \quad y_0 = \pm \log \left(\frac{1}{k} + \sqrt{\frac{1}{k^2} - 1} \right) \quad (2-26)$$

となるから、誤差、可なり (2-22), (2-23) の積分はそれぞれ次のように評価できる。

$$\begin{aligned} |\Delta I_K| &\approx 2 \times \frac{1}{2\pi} \times \frac{1}{k \sqrt{\sinh 2y_0}} \int_{y_0}^{\infty} \exp(-4Ny) \frac{1}{\sqrt{y - y_0}} dy \\ &= \frac{1}{\pi k \sqrt{\sinh 2y_0}} \exp(-4Ny_0) \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-4Nt} dt \\ &= \frac{\sqrt{\pi/2N}}{\sqrt{1-k^2}} \exp \left\{ -4N \log \left(\frac{1}{k} + \sqrt{\frac{1}{k^2} - 1} \right) \right\} : \text{オ 1 種} \quad (2-27) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\Delta I_E| &\approx \frac{k \sqrt{\sinh 2y_0}}{\pi} \exp(-4Ny_0) \int_0^{\infty} \sqrt{t} e^{-4Nt} dt \\ &= \frac{\sqrt{1-k^2} (\pi/2N)^{3/2}}{2\pi} \exp \left\{ -4N \log \left(\frac{1}{k} + \sqrt{\frac{1}{k^2} - 1} \right) \right\} : \text{オ 2 種} \quad (2-28) \end{aligned}$$

数値例をオ 2 表に示す。



オ 3 図

表 2 完全楕円積分の計算の誤差

	N	推定誤差	計算誤差
$K(0.5)$ $= 1.6857\dots$	4	4.6×10^{-10}	4.68×10^{-10}
	8	2.3×10^{-19}	2.35×10^{-19}
$E(0.5)$ $= 1.4674\dots$	4	2.9×10^{-11}	2.70×10^{-11}
	8	7.4×10^{-21}	6.78×10^{-21}
$K(\sqrt{0.75}) = 2.1565\dots$	8	1.4×10^{-8}	1.44×10^{-8}
$E(\sqrt{0.75}) = 1.2110\dots$	8	2.2×10^{-10}	2.34×10^{-10}

§ 3 解析関数の無限区間 $(-\infty, \infty)$ における積分で定義された関数

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x, t) dx \quad (3-1)$$

に対してキザミの台形則を適用する。

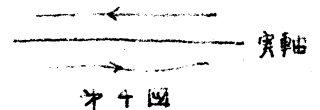
$$\tilde{f}(t) = t \sum_{n=-\infty}^{\infty} g(nt, t) \quad (3-2)$$

このときの誤差およびその特性関数は次のように与えられる。²⁾

$$\Delta I = f(t) - \tilde{f}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_c \Phi(z) g(z, t) dz \quad (3-3)$$

$$|\Phi(z)| \approx 2\pi \exp(-2\pi |y|/t), \quad |y| \gg t \quad (3-4)$$

積分路 C は図 4 に示すような路である。



[例3] 誤差関数⁴⁾

$$\operatorname{erfc} t = \frac{2t}{\pi} e^{-t^2} \int_0^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{x^2 + t^2} dx \quad (t > 0) \quad (3-5)$$

右辺の積分の被積分関数は偶関数であるから、最良の公式としてキガミルの台形則が適用できる。右辺の積分

$$f(t) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{x^2 + t^2} dx \quad (3-6)$$

をキガミルの台形則で積分したものを $\tilde{f}(t)$ とおく。

$$\tilde{f}(t) = h \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-n^2 h^2}}{(nh)^2 + t^2} \quad (3-7)$$

まず、 h があまり大ではない場合を考えよう。キガミルは $h < \pi/t$ を満足する位小さくとるものとする。このとき誤差は次のようになる。

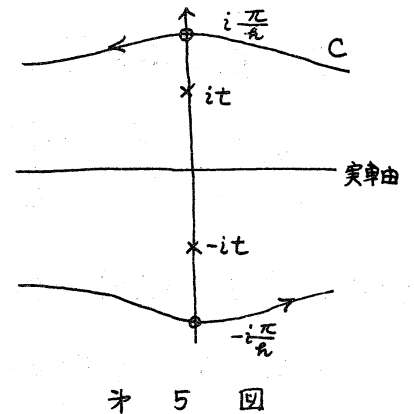
$$\Delta I = f(t) - \tilde{f}(t) = \frac{1}{4\pi i} \int_C \Phi(z) \frac{e^{-z^2}}{z^2 + t^2} dz = \Delta I_1 + \Delta I_2 \quad (3-8)$$

$$\Delta I_1 = -\frac{\pi}{t} \operatorname{erfc} t^2 / \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{2\pi t}{h} \right) - 1 \right\} \quad \left(\sim e^{t^2} \operatorname{erfc} \left(-\frac{2\pi}{h} t \right) \right) \quad (3-9)$$

$$|\Delta I_2| \sim \operatorname{erfc} \left(-\frac{\pi^2}{h^2} \right) \quad (3-10)$$

(3-9) で与えた ΔI_1 は、(3-8) の被積分関数 $\Phi(z) e^{-z^2} / (z^2 + t^2)$ の極 $z = \pm it$ における留数から正確に計算されたものである。

(3-10) の ΔI_2 は、積分路 C を、 e^{-z^2} の虚軸に沿う急激な増加に起因する鞍点を通過させて近似的に得たものである。この鞍点の位置は $z = \pm i \frac{\pi}{h}$ であるから、 $t < \frac{\pi}{h}$ である限りこれらは極 $\pm it$ よりも実



* 5 回

軸から離れて存在する (*5回)。したがって、積分路 C を変形する際、極 $\pm it$ からの寄与が入ってくるわけである。

$|\Delta I_2|$ は、キガミ h が十分小であれば非常に小さい数であるから、 ΔI_1 を補正項として $\operatorname{erfc} t$ の近似計算の中にくり込めば高精度の結果が得られる。

$$\operatorname{erfc} t \sim \frac{2t}{\pi} e^{-t^2} h \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-n^2 h^2}}{(nh)^2 + t^2} - \frac{2}{\exp\left(\frac{2\pi t}{h}\right) - 1} \quad (3-11)$$

また

$$|\Delta I_1| \sim \exp(t^2) \exp\left(-\frac{2\pi}{h} t\right) \geq \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right) \sim |\Delta I_2| \quad (3-12)$$

であるから、 $t < \pi/h$ である限りこの補正は常に意味がある。

上に与えた近似式の絶対誤差はほぼ $\frac{2t}{\pi} e^{-t^2} \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right) \sim e^{-t^2} \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right)$ であるが、 $\operatorname{erfc} t$ 自身は近似的に $\operatorname{erfc} t \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} t} e^{-t^2} \sim e^{-t^2}$ と表わされるから、相対誤差はほぼ

$$|\Delta I_r| \sim \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right) \quad (3-13)$$

で与えられる。

つぎに、 ϵ が比較的大きい場合には上述の補正は不要である。なぜなら、キザミ h を適当にとったとき、 $\epsilon \geq \pi/h$ であれば被積分関数の極 $\pm i\epsilon$ は鞍点 $\pm i\pi/h$ より実軸から離れて存在する。したがって、積分路 C をこの鞍点を通るようにとれば(3-7)の誤差は ΔI_2 のみで与えられ、(3-9)の ΔI_1 の項は現われない。相対誤差はやはり(3-13)で与えられる。

いずれの場合にも、要請する精度を $10^{-m} = e^{-2.3m}$ とすると、必要なキザミ h は $h = \pi/\sqrt{2.3m}$ で与えられる。また積分の上限の打切は $e^{-x^2} \sim e^{-2.3m}$ より $x \sim \sqrt{2.3m}$ 程度で行えばよいかから、結局必要な分点数 N はほぼ

$$N \sim \frac{x}{h} + 1 \sim \frac{2.3m}{\pi} + 1 \quad (3-14)$$

である。相対精度を 10^{-8} とすると $N \sim 7$ 、 10^{-16} とすると $N \sim 12$ 程度である。

なお、 $e^{-n^2 h^2}$ の計算は次に示すように樹算のみにより実行できる。あらかじめ $a = e^{-h^2}$ を与えておき、 $b = a^2$ 、 $u_1 = a$ 、 $v_1 = a$ とおく。以下 $u_{n+1} = b \times u_n$ 、 $v_{n+1} = u_{n+1} \times v_n$ を計算すれば $v_{n+1} = e^{-n^2 h^2}$ である。

オ3表にキガミ $k=0.5$ の場合の数値例を示す。

オ3表	$\operatorname{erfc} t$ の計算誤差	$k=0.5$	$\exp(-\frac{\pi^2}{k^2}) \sim 10^{-17}$		
t	$\operatorname{erfc} t$	絶対誤差	相対誤差	分位数 N	補正項
0.5	4.795×10^{-1}	7.7×10^{-20}	1.6×10^{-19}	13	有
1.0	1.573×10^{-1}	7.5×10^{-20}	4.8×10^{-19}	"	"
2.0	4.678×10^{-3}	8.2×10^{-21}	1.8×10^{-18}	"	"
3.0	2.209×10^{-5}	9.2×10^{-23}	4.2×10^{-18}	"	"
4.0	1.542×10^{-8}	1.4×10^{-25}	9.1×10^{-18}	"	"
5.0	1.537×10^{-12}	3.1×10^{-29}	2.0×10^{-17}	"	"
6.0	2.152×10^{-17}	1.2×10^{-33}	5.6×10^{-17}	"	"
7.0	4.184×10^{-23}	2.1×10^{-39}	5.0×10^{-17}	"	無
10.0	2.088×10^{-45}	4.8×10^{-62}	4.2×10^{-17}	"	"

§4 積分に変数変換を行ってから台形則を適用して計算される関数

定義の積分

$$f(z) = \int_a^b g(x, z) dx \quad (4.1)$$

に適当な変数変換

$$x = g(u), \quad (4.2)$$

を行うことにより、これを解析的周期関数の1周期にわたる積分、あるいは無限区間 $(-\infty, \infty)$ における解析関数の積分に

帰着できる場合には、この変換した結果に台形則を適用して関数値を計算することができる。⁹⁾

[例4] Beta 関数

$$B(p, q) = \int_0^1 t^{p-1} (1-t)^{q-1} dt = \frac{1}{2^{p+q-1}} \int_{-1}^1 (1-x)^{p-1} (1+x)^{q-1} dx \quad (4-3)$$

積分変数に

$$x = \operatorname{erf} u \quad (4-4)$$

なる変数変換を行えば、(4-3)は

$$B(p, q) = \frac{1}{2^{p+q-2} \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-u^2}}{(1-\operatorname{erf} u)^{1-p} (1+\operatorname{erf} u)^{1-q}} du \quad (4-5)$$

となる。これにキガミ丸の台形則を適用したときの誤差は近似的に

$$\varepsilon(h) \simeq 2\pi \exp(-12.5/h)$$

で与えられる。⁴⁾

表4表に $h=0.5$ のときの数値例を示す。積分(4-5)の上限の打ち切りの値 u_{∞} は、ほぼ $\varepsilon(h) \simeq \exp(-\gamma u_{\infty}^2)$, $\gamma = \min(p, q)$ で与えられる。また標本数 N は $N = 2u_{\infty}/h$ である。

表 4 表 $B(p, q)$ の計算の誤差

p	q	$B(p, q)$	計算誤差	N
0.25	0.25	7.4162...	8.7×10^{-11}	40
0.25	0.5	5.2441...	1.3×10^{-10}	40
0.25	1.0	4.0000...	1.0×10^{-10}	40
0.25	1.25	3.7081...	4.3×10^{-11}	40
0.5	0.5	3.1415...	1.0×10^{-10}	29
1.25	1.25	6.1802...	3.7×10^{-11}	23

$$\varepsilon(0.5) = 2\pi \exp(-25) \approx 8.7 \times 10^{-11}$$

参考文献

- 1) 高橋・森：解析関数の数値積分の誤差評価：京都大学数理解析研究所講究録 115, p.222-269.
- 2) H. Takahasi and M. Mori: Error Estimation in the Numerical Integration of Analytic Functions: Report of the Computer Centre, University of Tokyo, 3 (1970), 47-108.
- 3) 森：Fourier係数の数値計算とその誤差解析：日本数学会 1971年秋季応用数学会分科会講演予稿 p.117-129
- 4) H. Fettis: Numerical Calculation of Certain Definite Integrals by Poisson's Summation Formula: MITAC, 9 (1955), 85-92.

- 5) Y. Luke : Simple Formulas for the Evaluation of Some Higher Transcendental Functions : J. Math. and Phys. 34(1956), 298-307.
- 6) J. Imhof : Remarks on Quadrature Formulas : J. Soc. Indust. Appl. Math., 11 (1963), 336-341.
- 7) J. McNamee : Error Bounds for the Evaluation of Integrals by the Euler-Maclaurin Formula and by Gauss-Type Formulae : Math. Comp., 18 (1964), 368-381.
- 8) L. Filon : On a Quadrature Formula for Trigonometric Integrals : Proc. Roy. Soc. Edin., 49 (1928), 38-47.
- 9) 高橋・森 : 変数変換によつて得られる積分公式 : 本講究録