

Double Exponential 変換数値積分公式
の有効性を發揮させるための注意

(電総研) 戸田英雄

(農芸高) 小野令美

1. まえおき

高橋, 森の DE 変換数値積分公式の数値実験結果と, その際気づいた注意すべき事について述べる. さらにこの公式でも出しにくい形の定積分を, DE 変換公式と補外法を用いて求めた一つの試みを述べる.

2. 数値積分公式の比較

端点で特異性のある積分の, 数値積分に有力な DE 変換公式と IMT 公式の比較に重点を置いて, 14 題のテスト問題 (そのうち 11 題は Patterson [3] から, 2 題は市田, 清野 [4] からとりあげた) で数値実験を試みた結果を表 1 にまとめる.

2-1 DE 変換公式と IMT 公式および他の公式について

DE 変換公式 [1]	IMT 公式 [2]
$I = \int_a^b f(x) dx$ $x = \phi(u)$	$I = \int_0^1 f(x) dx$ $x = \phi(u) = \frac{1}{Q} \int_0^u \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right) dt$ $Q = \int_0^1 \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right) dt$
により $I = \int_{-\infty}^{\infty} f(\phi(u)) \cdot \phi'(u) du$ に変換し, 台形則	により $I = \int_0^1 f(\phi(u)) \cdot \phi'(u) du$ に変換し, 台形則
$I_R = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\phi(nh)) \cdot \phi'(nh)$ で数値積分値を求める。	$S_n = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^{N-1} f(\phi(\frac{m}{N})) \cdot \phi'(\frac{m}{N})$ で数値積分値を求める。

DE 変換公式で, 変換に用いる $\phi(u)$ には,

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \text{ のとき}$$

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

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx \text{ のとき}$$

$$(2-2) \quad x = \phi(u) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)$$

ただし $f(x)$ が $\exp(-x)$ を含む因子を含んでいるときは

$$(2-3) \quad x = \phi(u) = \exp(u - \exp(-u))$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \text{ のとき}$$

$$(2-4) \quad x = \phi(u) = \sinh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)$$

が、それぞれ使用される。

他の公式としては、CADRE (Cautious Romberg Extrapolation Quadrature の略で、積分の区間 (a, b) を adaptive に分割して、各小区間ごとに Romberg 補外を適用する方法) と QUAD (adaptive な Gauss 積分法) を取りあげる。この二公式の結果については、=宮氏 (名大) の表を引用させていただいた。

なお、P6, P7, P8, P10, K1, K2, H1 の問題は参考のためその被積分関数 $f(x)$ と DE 変換後の $f(\phi(u)) \cdot \phi'(u)$ を図示した。

2.2 比較表について

1) 要求精度は相対誤差で $\varepsilon = 10^{-9}$ を目標とする。

2) 収束判定基準 (stopping rule) としては、数値積分の刻み中 h_i による積分値を S_i とし、 $h_{i+1} = h_i/2$ によるものを S_{i+1} とし、ある i について

$$(2-5) \quad |S_{i+1} - S_i| \leq \varepsilon \cdot |S_{i+1}|$$

を満たすとき、数値的に収束したと判定する。

3) 比較表には (2-5) による判定基準を満たすまでに必要とした関数値計算の回数と、そのときの $|S_{i+1} - S_i| / |S_{i+1}|$ の値を推定相対誤差として示してある。

表 1 テスト問題比較表

Patterson の論文の例題 (文献 [3])

	DE	IMT	CADRE	QUAD
$P_1 \int_0^1 \sqrt{x} dx = \frac{2}{3}$	44 3.3 ₁₀ -12 47 3.4 ₁₀ -12 *	127 4.9 ₁₀ -13	129 1.2 ₁₀ -10 *	361 2.2 ₁₀ -10 *
$P_2 \int_{-1}^1 (0.92 \cosh x - \cos x) dx = 1.84 \sinh 1 - 2 \sin 1$	96 1.7 ₁₀ -12 51 2.0 ₁₀ -13 *	127 2.4 ₁₀ -12	33 1.3 ₁₀ -13 *	37 2.1 ₁₀ -14 *
$P_3 \int_{-1}^1 \frac{dx}{x^4 + x^2 + 0.9} \doteq 1.5822 32964$	92 3.1 ₁₀ -11 99 3.4 ₁₀ -13 *	127 2.8 ₁₀ -13	129 4.2 ₁₀ -12 *	73 1.5 ₁₀ -12 *
$P_4 \int_0^1 x^{\frac{3}{5}} dx = \frac{2}{5}$	40 1.0 ₁₀ -11 43 1.6 ₁₀ -14 *	127 8.1 ₁₀ -13	529 2.7 ₁₀ -10 *	163 5.0 ₁₀ -12 *
$P_5 \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \log(3+2\sqrt{2}) + \pi \}$	92 2.3 ₁₀ -12 51 8.5 ₁₀ -15 *	127 5.6 ₁₀ -13	65 2.1 ₁₀ -10 *	73 0 *
$P_6 \int_0^1 \frac{2}{2 + \sin 10\pi x} dx = \frac{2}{\sqrt{3}}$	724 1.2 ₁₀ -10 387 1.4 ₁₀ -10 *	509 2.2 ₁₀ -12	785 8.4 ₁₀ -12 *	757 3.3 ₁₀ -13 *

$P_7 \int_0^1 \frac{x}{e^x - 1} dx \doteq 0.77750 \ 46341$	48 3.4 ₁₀ -12 51 2.2 ₁₀ -12 *	127 6.6 ₁₀ -13	17 2.2 ₁₀ -12 *	37 2.1 ₁₀ -14 *
$P_8 \int_{0.1}^1 \frac{\sin 100\pi x}{\pi x} dx$	620 2.5 ₁₀ -13 323 1.3 ₁₀ -12 *	509 4.1 ₁₀ -16	3505 3.2 ₁₀ -12 *	2773 5.6 ₁₀ -13 *
$P_9 \int_0^{10} \frac{50}{\pi(2500x^2+1)} dx = \frac{1}{\pi} \tan^{-1} 500$	180 2.2 ₁₀ -10 211 1.0 ₁₀ -12 *	255 1.5 ₁₀ -11	337 1.3 ₁₀ -11 *	343 3.3 ₁₀ -12 *
$P_{10} \int_0^\pi \cos(\cos x + 3\sin x + 2\cos 2x + 3\sin 2x + 3\cos 3x) dx$	186 8.6 ₁₀ -12 195 9.5 ₁₀ -13 *	127 1.2 ₁₀ -12	417 1.5 ₁₀ -12 *	343 1.0 ₁₀ -12 *
$P_{11} \int_0^1 \log x dx = -1$	44 3.9 ₁₀ -13 51 5.1 ₁₀ -14 *	127 2.0 ₁₀ -11	369 4.5 ₁₀ -9 *	415 5.7 ₁₀ -7 *

*印は日科技連松尾氏より提供され、名古屋大学=菅氏による結果

$K_1 \int_{-1}^1 \frac{2^{-\alpha}}{4^{-\alpha} + x^2} dx$ $= 2 \tan^{-1} 2^\alpha$ $\alpha = 1, 2, \dots, 31$ $\left(2 \int_0^1 \frac{2^{-\alpha}}{4^{-\alpha} + x^2} dx \right)$	$\alpha = 1$	202	2.4_{10}^{-13}	127	2.3_{10}^{-13}	49	1.2_{10}^{-7} **	63	1.6_{10}^{-8} **
	偶函数	103	1.7_{10}^{-14}	127	7.0_{10}^{-13}				
	$\alpha = 8$	24450	2.5_{10}^{-12}	1440	3.4_{10}^{-8} **	567	3.0_{10}^{-8} **
	偶函数	204	2.0_{10}^{-12}	255	2.3_{10}^{-13}				
	$\alpha = 31$
	偶函数	786	5.9_{10}^{-12}	509	5.4_{10}^{-3}				
$K_2 \int_0^1 x^\alpha dx = \frac{1}{\alpha+1}$ $\alpha = -0.1, -0.2, \dots, -0.9,$ -0.99 $\left(\int_0^\infty e^{-(1+\alpha)x} dx \right)$	$\alpha = -0.1$	53	2.1_{10}^{-14}	127	4.5_{10}^{-12}	2452	1.0_{10}^{-7} **	357	1.4_{10}^{-6} **
	$[0, \infty)$	89	7.3_{10}^{-10}						
	$\alpha = -0.8$	64	7.3_{10}^{-16}	509	5.3_{10}^{-10}	3043	2.1_{10}^{-6} **	3297	4.7_{10}^{-6} **
	$[0, \infty)$	185	1.4_{10}^{-13}						
	$\alpha = -0.9$	2013	6.2_{10}^{-10}	509	1.7_{10}^{-7}	3532	9.5_{10}^{-2} **	6699	1.2_{10}^{-4} **
	$[0, \infty)$	189	4.8_{10}^{-12}						
$H_1 \int_0^1 \log \log x dx = -\gamma$	$\alpha = -0.99$						
	$[0, \infty)$	394	2.1_{10}^{-16}						
		48	2.2_{10}^{-11}	121	3.1_{10}^{-11}				

** 市田・清野氏の結果で要求精度 10^{-7}

P6

$$f(x) = \frac{2}{2 + \sin 10\pi x}$$

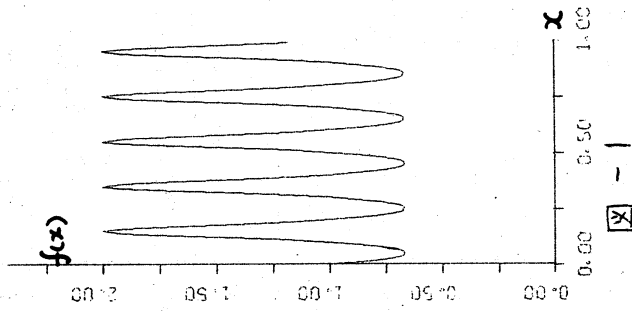
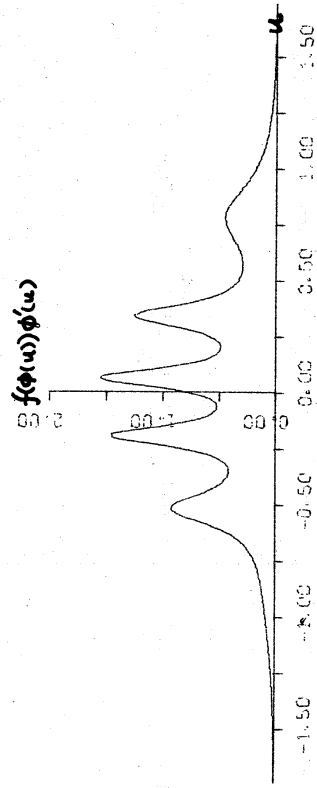


図-1

図-2 P6のDE変換後の被積分関数



P7

$$f(x) = \frac{x}{e^x - 1}$$

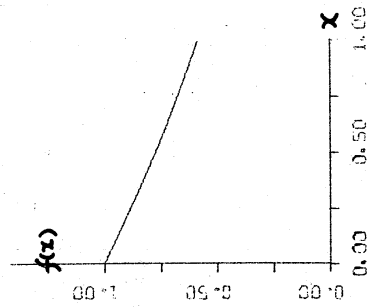
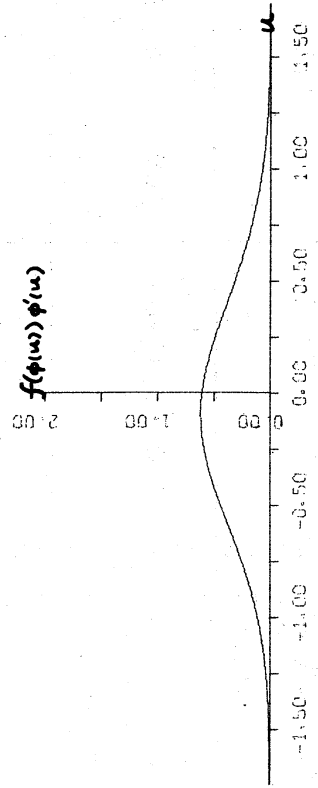


図-3

図-4 P7のDE変換後の被積分関数



P 8

$$f(x) = \frac{\sin 100\pi x}{\pi x}$$

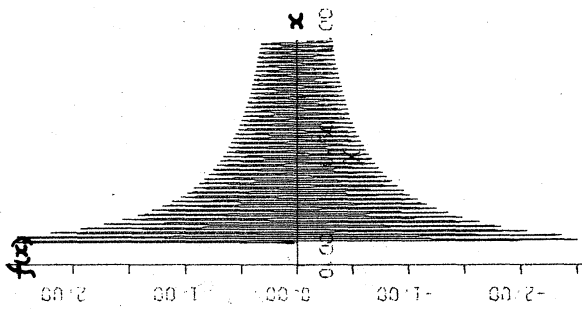
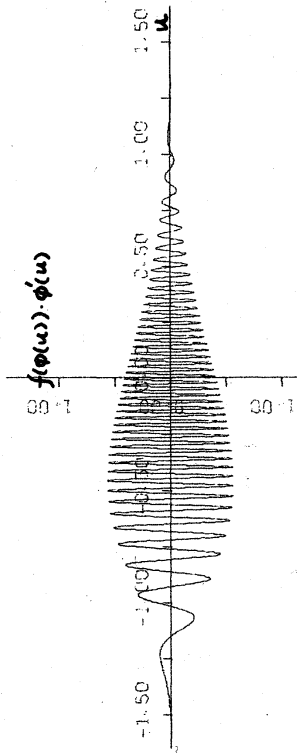


図-5

図-6 P 8 の DE 変換後の被積分関数



P 10

$$f(x) = \cos(\cos x + 3 \sin x + 2 \cos 2x + 3 \sin 2x + 3 \cos 3x)$$

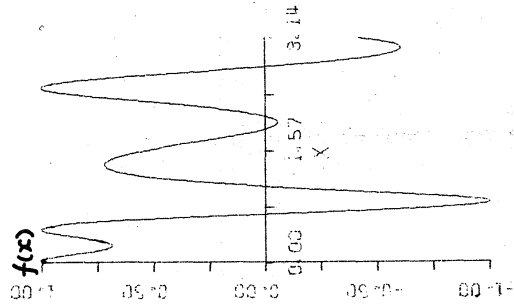
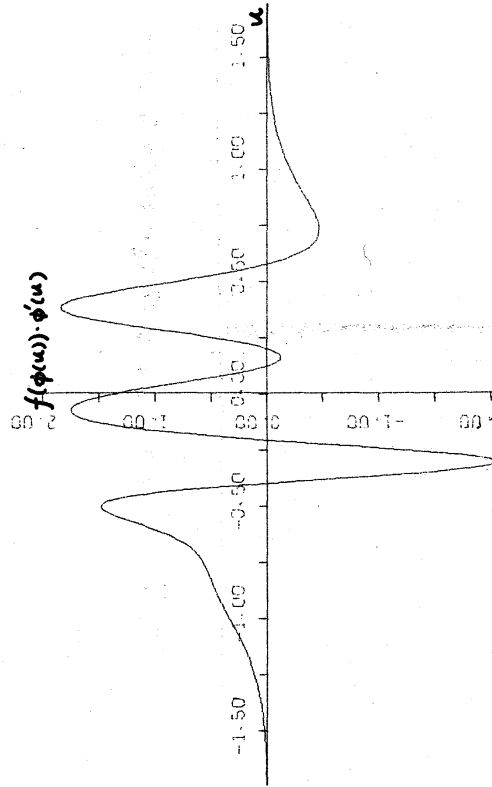


図-7

図-8 P 10 の DE 変換後の被積分関数



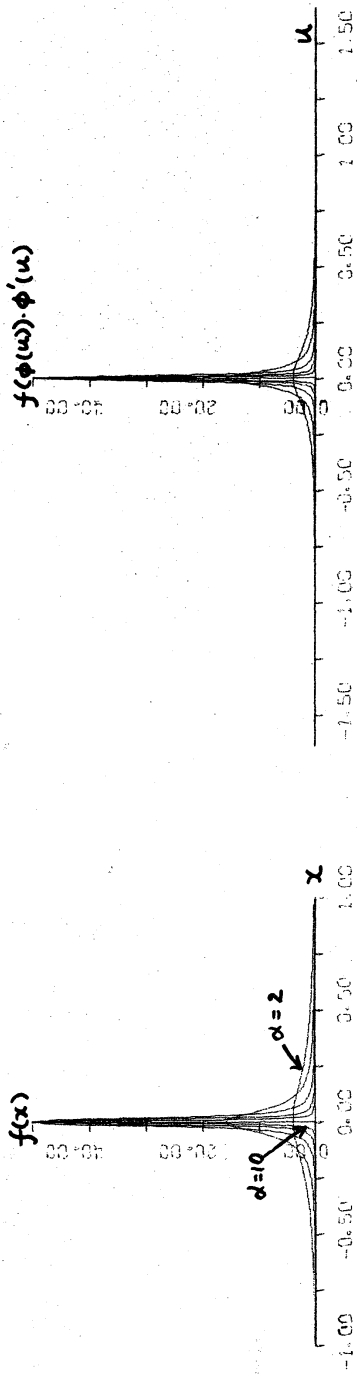


図-9

K1

$$f(x) = \frac{2^{-\alpha}}{4^{-\alpha} + x^2}$$

$\alpha = 2, 4, 6, 8, 10$

図-10-1 K1のDE変換後の被積分関数

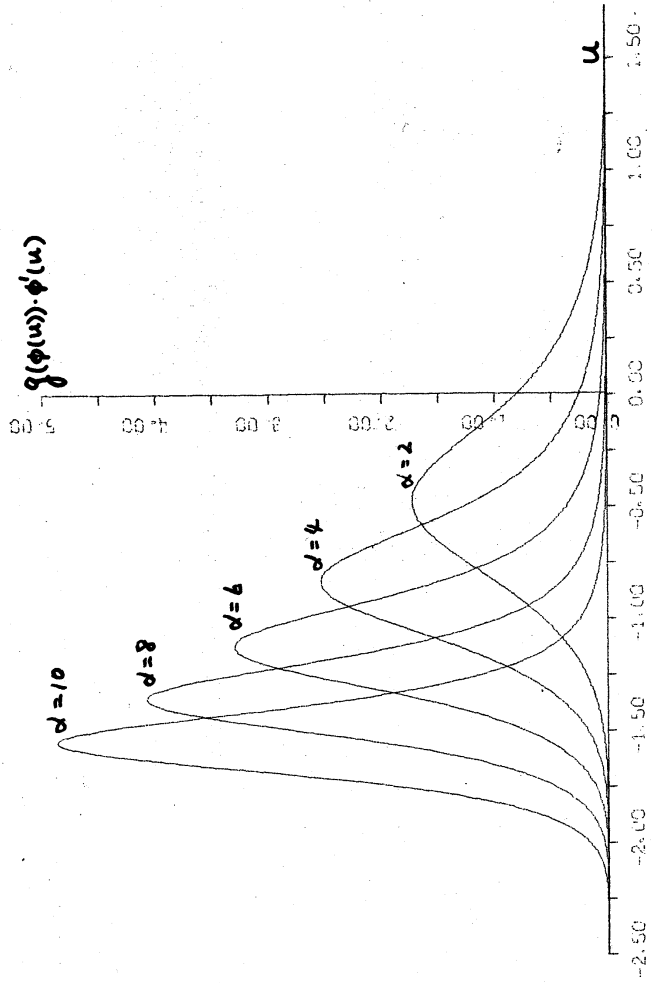
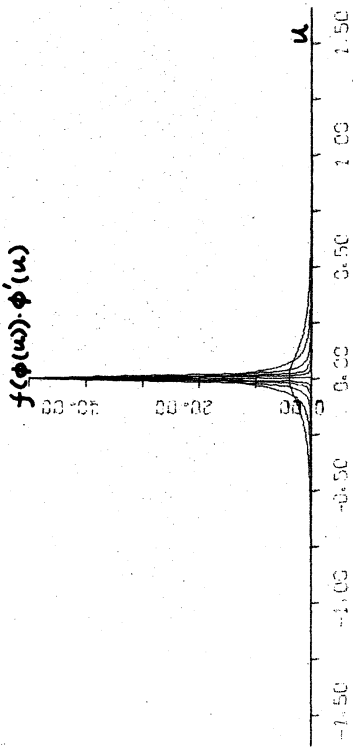


図-10-2 K1'のDE変換後の被積分関数

K1'

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = 2 \int_0^1 f\left(\frac{x+1}{2}\right) dx$$

$$= \int_{-1}^1 g(x) dx$$

K2

$$f(x) = x^d, \quad d = -0.1, -0.9$$

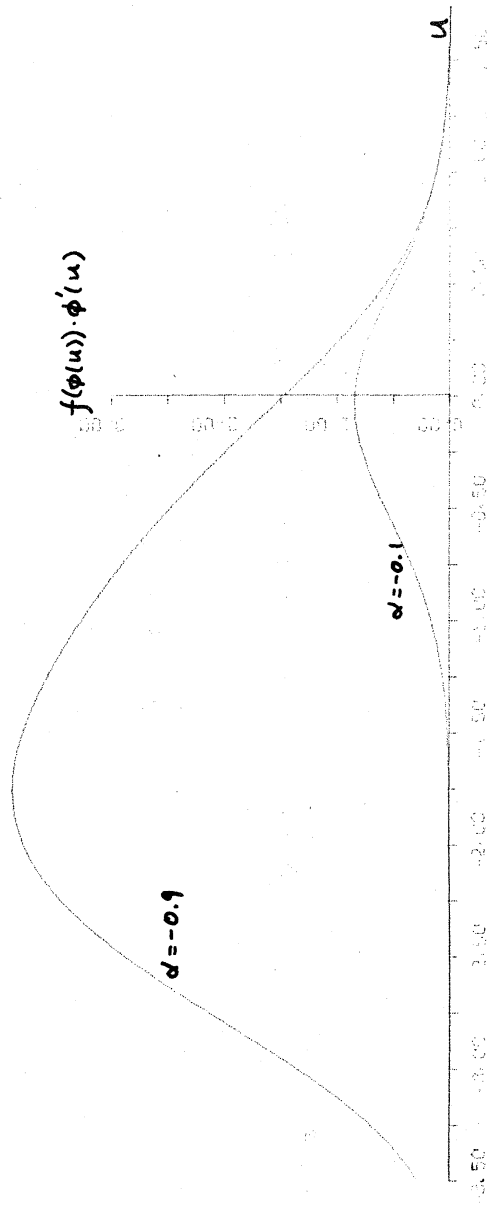
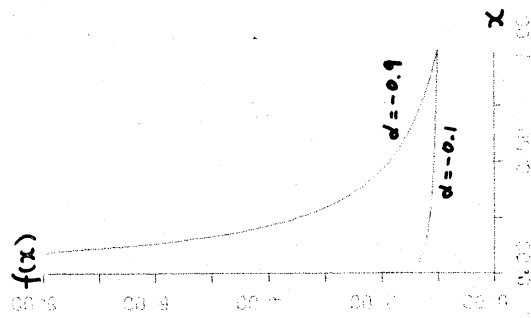


図-11

図-12 K2 の 変換後の被積分関数

H1

$$f(x) = \log |\log x|$$

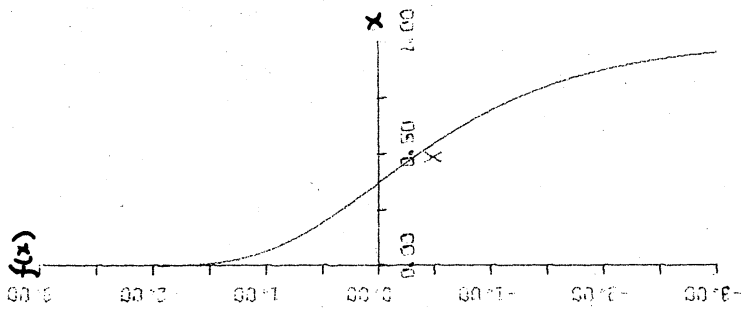


図 - 13

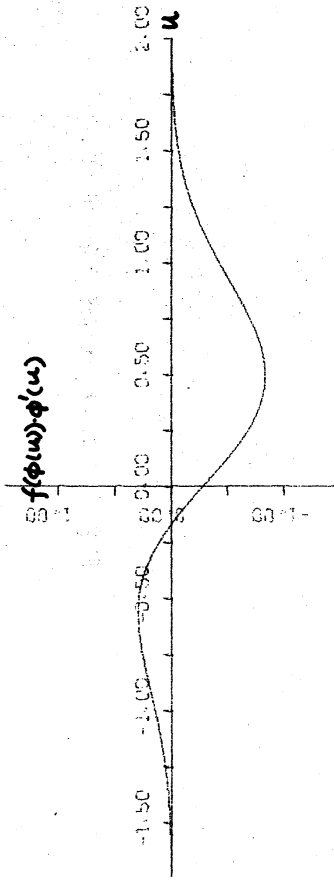


図-14-1 H1 の DE 変換後の被積分関数

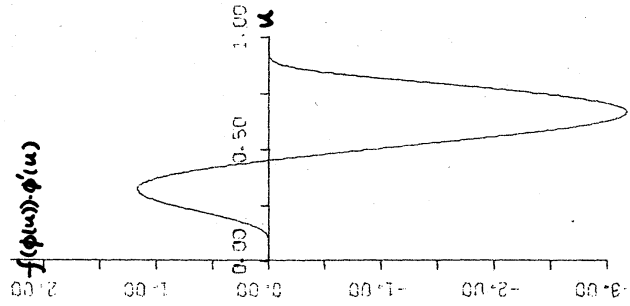


図-14-2 H1 の IMT 変換後の被積分関数

H1'

$$\int_0^1 \log|\log x| dx = \int_0^{\infty} e^{-x} \log x dx = \int_0^{\infty} f(x) dx$$

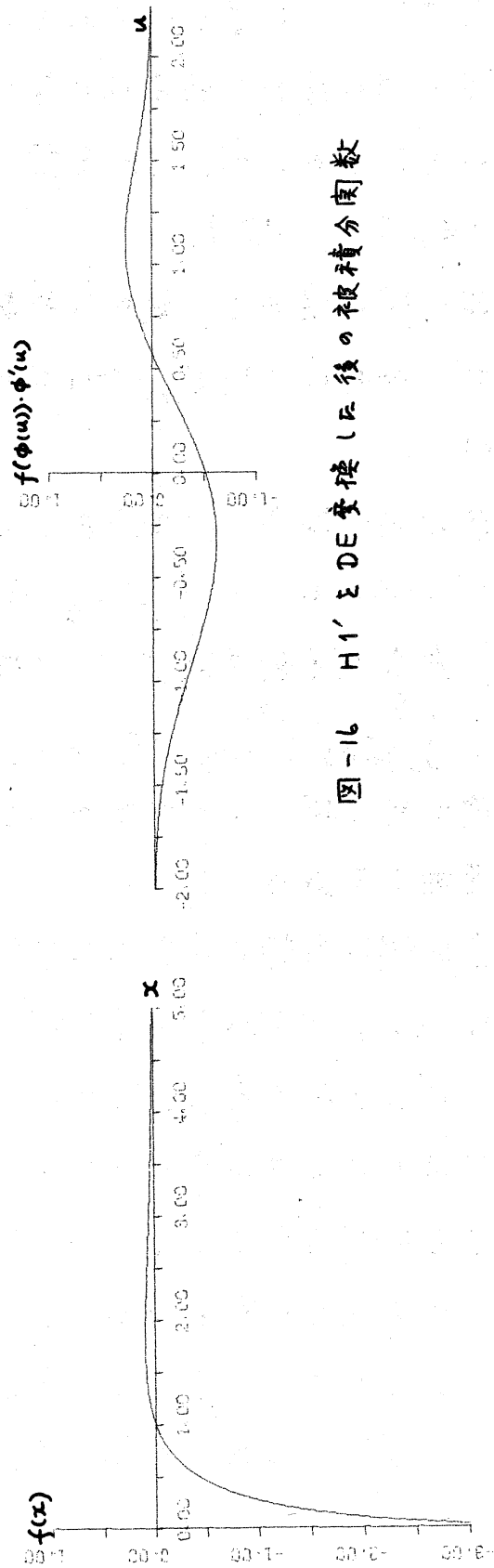


图-16 H1' と DE 変換 (E 後) の被積分関数

图-15

表 1 から次のことが裏づけられる。

i) 有限区間の積分で特異性のないものは CADRE や QUAD が有利であるが，DE 変換公式でもやや不利な程度である (P2, P5, P7)。

ii) 有限区間の積分で，端点に特異性のあるものは，DE 変換公式が圧倒的に有利で，IMT 公式はこれに次ぐ (P1, P4, P11)。

iii) 無限区間の積分で，無限遠で正則でないものは，DE 変換公式が有利である ($\int_0^{\infty} e^{-x} \log x dx$ 等)。無限遠で正則なものは，適当な変数変換で i) に帰着できる (たとえば $\int_0^{\infty} \frac{dx}{1+x^4} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos^2 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta} d\theta$ 等)，しかしもとの関数に直接 DE 変換公式を用いてもやや不利な程度である。(この例は表 1 には省略してある。)

iv) 積分区間の内部で特異点が実軸に近い所にあるものは (たとえば K1) CADRE や QUAD でも出しにくいが，DE 変換公式は不利である。しかしその点で分割すると，他の公式では出しにくさは変わらないが，DE 変換公式は ii) に帰着できるので有利である。

v) P6 のような周期関数では，積分区間がちょうど周期の整数倍であるときには単純な台形則が一番よいが，整数倍でないときは台形則はだめで DE 変換公式がよい。

3. DE変換公式の使用上の注意

DE変換公式を有効ならしめるためには、使用上=三の注意が必要である。

3.1 析落ち防止変換

問題が $I = \int_{-1}^1 f(x) dx$ の場合で、 $f(x)$ の分母に $1+x$ や $1-x$ の因子を含むとき (たとえば $1/\sqrt{1-x^2}$ や $1/\sqrt{\tan \frac{\pi}{4}(1+x)}$) には、 $x \rightarrow \pm 1$ のところで析落ちして、分母の値が非常に小さくなり、しかも $f(x)$ の値は非常に大きくなる。この場合には [1] p735 に指摘されているように、次のような析落ち防止を行わなければならない。問題の積分を

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-1}^0 f(x) dx + \int_0^1 f(x) dx = I_1 + I_2$$

と分けて、

i) $-1 \leq x < 0$ の範囲で

$$(3-1) \quad -t = 1+x = 1 + \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right) = \frac{\exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)}{\cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)}$$

で DE 変換を行ない

$$I_1 = \int_{-1}^0 f(-1-t) dt = \int_{-\infty}^0 f(-1-t(u)) \cdot \frac{\frac{\pi}{2} \cosh u}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)} du$$

とする。

ii) $0 \leq x \leq 1$ の範囲で

$$(3-2) \quad t = 1-x = 1 - \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right) = \frac{\exp\left(-\frac{\pi}{2} \sinh u\right)}{\cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)}$$

で DE 変換を行ない

$$I_2 = \int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 f(1-t) dt = \int_0^\infty f(1-t(u)) \cdot \frac{\frac{\pi}{2} \cosh u}{\cosh^2(\frac{\pi}{2} \sinh u)} du$$

とする。積分 $\int_{-1}^1 1/\sqrt{1-x^2} dx$ 等でその効果は著しい。

3.2 c を定数とするとき、区間 $(0, c)$ での積分の場合

$$(3-3) \quad \int_0^c f(x) dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{c(1+x)}{2}\right) \cdot \frac{c}{2} dx$$

と変換すると、 $1+x$ の因子が必ずでてくる。さらに桁落ち防止の変換を行なう必要があるとき、汎用のプログラム等で、機械的に (3-3) を組み込み、さらに (3-1) と (3-2) を機械的に組み込むようにすると、たとえばもし user の $f(x)$ に $c-x$ の因子がある場合は、新しい桁落ち現象がでてくる。すなわち

$$c-x \xrightarrow{(3-3) \text{ で}} c - c \cdot \frac{1+x}{2} \xrightarrow{(3-2) \text{ で}} c - c \cdot \frac{2-t}{2}$$

と機械的に処理されてしまうためである。最後の $c - c \cdot \frac{2-t}{2}$ は当然 $\frac{c}{2}t$ としなければならない。これは user が $f(x)$ で書かねばならないことで、汎用のプログラムでは面倒をみきれない。これが面倒ならば、適当な変換 (たとえば $x=e^{-t}$) により区間 $(0, \infty)$ の積分に変換すれば (2-2) あるいは

(2-3) の DE 変換公式が使える (3.1 を考えなくてよい)。

たとえば K2 の問題

$$I = \int_0^1 x^\alpha dx, \quad \alpha = -0.1, -0.2, \dots, -0.9$$

で, (2-1) の DE 変換で桁落ち防止をしたときの関数副プログラムと, $\alpha = A = -0.1, -0.8, -0.9$ の場合の結果の出力を図-17 に示す. $\alpha = -0.9$ になると, べき乗の所でエラーが出る. これに対して $x = \exp(-t)$ で変数変換をして

$$I = \int_0^\infty \exp(-(\alpha+1)t) dt$$

に (2-2) の DE 変換を行なったときの出力が図-18 K2' である. この場合には $\alpha = -0.99$ でも求めることができる.

同様に H1 の問題

$$I = \int_0^1 \log |\log x| dx$$

で, (2-1) の DE 変換で桁落ち防止をしたときの出力を図-19 H1 に示す. これに対して $x = e^{-t}$ で変数変換し

$$I = \int_0^\infty \exp(-t) \cdot \log t dt$$

に (2-3) で DE 変換したときの出力を図-20 H1' に示す.

H1' の方が関数計算の手間はかかるが精度はよく出ることがわかる. また H1 は最初の刻み巾が 0.5 ではエラーが出る. これについては次に述べる.

$$K_2 \int_0^{\infty} \exp(-(\alpha+i)t) dt$$

$$\alpha = -0.1, -0.8, -0.9$$

```

1  DOUBLE PRECISION FUNCTION G(U)
2  DOUBLE PRECISION A,U
3  COMMON A
4  G = DEXP(-(A+1,000)*U)
5  RETURN
6  END

```

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-14 HO = 0.50000

A = -0.100

0.50000	4	8	1,107950083235045	0.2846E-02
0.25000	7	16	1,111112682636480	0.1414E-05
0.12500	13	32	1,11111111921789	0.7296E-09
0.62500E-01	26	63	1,111111111111111	

S = 1.111111111111111 ER = 0.3311E-16 TRUE VALUE 1.111111111111111 ERROR -0.1952E-16

A = -0.800

0.50000	4	8	4,880137872338231	0.2351E-01
0.25000	8	16	4,997646701072156	0.4709E-03
0.12500	16	31	5,000001312529427	0.2625E-06
0.62500E-01	31	62	4,999999999999320	0.1359E-12
0.31250E-01	62	123	5,000000000000000	

S = 5.000000000000000 ER = 0.1526E-16 TRUE VALUE 5.000000000000000 ERROR -0.5967E-16

A = -0.900

0.50000	5	8	10,09855966703173	0.8565E-02
0.25000	9	16	10,01279650989593	0.1279E-02
0.12500	17	31	10,00000493438607	0.4934E-06
0.62500E-01	33	62	9,999999999951677	0.4832E-11
0.31250E-01	66	123	10,000000000000000	

S = 9.999999999999999 ER = 0.3542E-16 TRUE VALUE 10.000000000000000 ERROR -0.5412E-16

$$H1 \int_0^1 \log|\log x| dx$$

```

C---FUNC---
1  DOUBLE PRECISION FUNCTION- G(U)
2  DOUBLE PRECISION      U,T
3  IF(U) 1,2,2
4  T = -U * 0.5D0
5  GO TO 3
6  T = (2.0D0 - U) * 0.5D0
7  CONTINUE
8  G = 0.5D0 * DLOG(DABS(DLOG(T)))
9  RETURN
10 END
    
```

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-11 H0 = 0.25000
 0.25000 13 -0.5772156649014750
 S = -0.5772156649015324 ER = 0.9944E-13 TRUE VALUE = -0.5772156649015328608 ERROR = -0.8648E-15

19

$$H1' \int_0^\infty e^{-t} \log t dt$$

```

C---FUNC-----
1  DOUBLE PRECISION FUNCTION G(U)
2  DOUBLE PRECISION      U,T
3  G = DLOG(U)*DEXP(-U)
4  RETURN
5  END
    
```

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-14 H0 = 0.50000
 0.50000 8 -0.5772157817555978
 0.25000 15 -0.5772156649015316 0.2024E-06
 0.12500 30 -0.5772156649015329 0.2175E-14
 S = -0.5772156649015328 ER = 0.2104E-16 TRUE VALUE = -0.5772156649015328608 ERROR = -0.2254E-16

20 H 1'

3.3 最初の刻み中 h_0 について

DE 変換公式のプログラムでは, h_0 と ε を適当に与えて, たとえば (2-1) の場合

$$S = f(0), \quad T_n = f(\tanh(\frac{\pi}{2} \sinh nh)) \cdot \frac{\cosh nh}{\cosh^2(\frac{\pi}{2} \sinh nh)}$$

を計算し, $S = S + T_n$ として

$$(3-4) \quad |T_n| \leq |S| \cdot \max(\varepsilon \times 10^{-2}, 10^{-6})$$

まで正負両側に加えている。

ところで, FACOM 230-75 (FORTRAN の 2 倍桁演算) では,

$$(3-5) \quad |x| \leq 0.4304 \times 10^{-18}$$

で $1 \pm |x| = 1$ となってしまふ。DE 変換で

$x = \tanh(\frac{\pi}{2} \sinh u)$ を用いるときには

$$(3-6) \quad |u| \leq 3.32$$

でないとき $1 \pm \tanh(\frac{\pi}{2} \sinh u) = 0$ になる。

たとえば P7 の場合

$$\begin{aligned} I &= \int_0^1 \frac{x}{e^x - 1} dx = \int_{-1}^1 \frac{\frac{1+x}{2}}{e^{\frac{1+x}{2}} - 1} \cdot \frac{1}{2} dx \\ &= \int_{-1}^0 \frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{-t}{2}}{e^{\frac{-t}{2}} - 1} dt + \int_0^1 \frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{2-t}{2}}{e^{\frac{2-t}{2}} - 1} dt \end{aligned}$$

で刻み中 h_0 ではじめるとき

$$(3-7) \quad -t = 1 + \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh_0\right) = 0$$

となる境界線より手前で (3-4) を満たさねばならない。

ε が適当であれば、それに応じて h_0 を小さくすれば、そろりそろりと境界線に近づく感じで、足を踏み出すことは防げる。 $h_0 = 0.5$ では失敗し、 $h_0 = 0.25$ では成功する。

また H1 の場合

$$\begin{aligned} I &= \int_0^1 \log|\log x| dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \log\left|\log \frac{1+x}{2}\right| dx \\ &= \int_{-1}^0 \frac{1}{2} \log\left|\log \frac{-t}{2}\right| dt + \int_0^1 \frac{1}{2} \log\left|\log \frac{2-t}{2}\right| dt \end{aligned}$$

のときも同様で、

$$(3-8) \quad t = 1 - \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh_0\right) = 0$$

となる境界線を踏み出さないように ε に応じて h_0 を小さくする。 $h_0 = 0.5$ では失敗し $h_0 = 0.25$ ではうまくいく。

$$P7 \quad \int_0^1 \frac{x}{e^x - 1} dx \quad \text{で } H_0 = 0.5 \text{ の場合 (P7-1) と}$$

$$H_0 = 0.25 \text{ の場合 (P7-2), H1 } \int_0^1 \log|\log x| dx \text{ で}$$

$H_0 = 0.5$ の場合 (H1-1) と $H_0 = 0.25$ の場合 (H1-2) の出力を図-21に示す。

P7-1

HO = 0.50000

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-14

FT957W ERROR AT(020531) DIVIDE CHECK

刻み中尺:	正の側の回数計算の回数	負の側	数値積分値 S:	IS:-Si-1/IS:1
0.50000	7	7	0.7774990274260581	
0.25000	13	13	0.7775046341101479	0.7211E-05
0.12500	26	26	0.7775046341122483	0.2701E-11

S = 0.7775046341122483 ER = 0.1314E-16

P7-2

HO = 0.25000

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-14

0.25000	13	13	0.7775046341101479	
0.12500	26	26	0.7775046341122483	0.2701E-11

S = 0.7775046341122483 ER = 0.1358E-16

22

H1-1

HO = 0.50000

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-11

FT911W ERROR AT(020621)	DLOG	ARG= 0.0	(ARG.LE.0)	RESULT=(MIN VALUE)
FT911W ERROR AT(020621)	DLOG	ARG= 0.0	(ARG.LE.0)	RESULT=(MIN VALUE)
0.50000	6	7	-0.2026589570990376E+56	

H1-2

HO = 0.25000

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-11

0.25000	13	13	-0.5772156649014750	
S = -0.5772156649015324	ER = 0.9944E-13	TRUE VALUE	-0.5772156649015328608	ERROR -0.8648E-15

[X] -21 問題 P7 と H1 の 出方

3.4 収束判定基準について

DE 変換公式では、刻み中を h とするときの誤差 ΔI_h が

$$(3-9) \quad \Delta I_h \simeq \exp\left(-\frac{A}{h}\right)$$

で与えられる ([5] p265 参照) ので、

$$(3-10) \quad \left|\Delta I_{\frac{h}{2}}\right| \simeq \left|\Delta I_h\right|^2$$

となり、 h を半分になると有効桁が 2 倍になる。したがって P8 や P10 のような被積分関数が振動するなど特に性質が悪い問題でなければ、(2-5) による判定基準より一回前までで要求精度が得られる。したがって ε を要求精度とすれば

$$\left|S_{i+1} - S_i\right| \leq \sqrt{\varepsilon} \left|S_{i+1}\right|$$

で止めて S_{i+1} の値を答とすればよいことになる。

しかし P8 や P10 のような問題では (2-5) にさらに

$$(3-11) \quad \left|S_{i+2} - S_{i+1}\right| \leq \varepsilon \cdot \left|S_{i+2}\right|$$

を判定基準につけ加えれば安全と思う。

P6, P8, P10 の出力を図 -22 に示す。

P6

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-14 HO = 0.50000

0.50000	7	1.145065201836647	0.3215E-01
0.25000	13	1.109398079973005	0.6951E-02
0.12500	26	1.101740303515750	0.4805E-01
0.62500E-01	52	1.157349192484848	0.2285E-02
0.31250E-01	103	1.154711000023246	0.9060E-05
0.15625E-01	205	1.154700538516411	0.1188E-09
0.78125E-02	409	1.154700538379251	

S = 1.154700538379251 ER = 0.7079E-17 TRUE VALUE 1.154700538379251529 ERROR -0.5033E-16

P8

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-14 HO = 0.50000

0.50000	6	0.2455391953890915	0.6189E-01
0.25000	11	0.2312281657296014	0.1053E+01
0.12500	22	0.1126117247672289	0.8368E+00
0.62500E-01	44	0.6130785022273157E-01	0.5753E+00
0.31250E-01	87	0.3891818870620057E-01	0.3277E+01
0.15625E-01	173	0.9098637539166843E-02	

S = 0.9098637539166843E-02 ER = 0.3978E-16

P10

ERROR REQUIREMENT 0.1000E-14 HO = 0.50000

0.50000	7	1.873635947230349	0.1294E+01
0.25000	14	0.8168465615955236	0.2712E-01
0.12500	27	0.8396163176771946	0.1121E-02
0.62500E-01	53	0.8386763427025238	0.9651E-11
0.31250E-01	105	0.8386763426944296	

S = 0.8386763426944296 ER = 0.3249E-17

図-22 刻み中長を半分にしたときの収束の状態が不規則なことを示す例

4. DE 変換公式でも求められない積分について

以上述べたように DE 変換公式は非常に強力な道具であるが、それでも求められない場合がある。

4.1 計算機の数値表現で、その指数部が 9 ビット以下であるための制約

たとえば IMT 公式の分点を求める積分

$$\begin{aligned} I &= \int_0^t \exp\left(-\frac{1}{x} - \frac{1}{1-x}\right) dx \\ &= t \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{te^{-x}}\right) \cdot \exp\left(-\frac{1}{1-te^{-x}}\right) \cdot \exp(-x) dx \end{aligned}$$

で、 $t = \frac{3}{512}, \frac{2}{512}, \frac{1}{512}$

の場合は、 I の値が 10^{-58} よりさらに小さいので、指数部が 9 ビットの機械では表現できない。またこのため関数ルーチンも制約を受けて、今の例において (2-3) の DE 変換公式

$$x = \exp(mh - \exp(-mh))$$

を用いると、 I の値自身が非常に小さいので $mh \leq 3.32$ では (3-3) の判定基準を満たさない。 $t = 3/512$ の場合でも $mh = 5.5$ ぐらいとなり、 $x = 243.7$ となるので $e^{-x} = 0$ となる。したがって $\exp\left(-\frac{1}{te^{-x}}\right)$ で計算すると

DIVIDE CHECK となり, $\exp(-\frac{e^x}{t})$ で計算すると引数の所で OVER FLOW となってしまう.

この種の場合は, 特別に用意した多倍長計算ルーチン [6] (指数部が 10 進法で 10 桁) が有効である.

4.2 $\int_0^{\infty} f(x) dx$, $f(x)$ が \equiv 角関数 \times 代数関数の場合
この種の型の数値積分の一つの方法として,

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

$$(4-2) \quad I(a_m) = \int_0^{\infty} \exp(-a_m x) \cdot f(x) dx$$

$$a_m = \frac{1}{2^n}, \quad (n = n_1, n_2, \dots, n_k)$$

を考え, $I(a_m)$ の値を DE 変換公式で求め, これら長個の値から $a_m \rightarrow 0$ への補外を行なう方法である. このとき,

$$(4-3) \quad I(a_m) = \frac{1}{a_m} \int_0^{\infty} e^{-t} f\left(\frac{t}{a_m}\right) dt$$

と変形して, e^{-t} の因数のあるときに用いる DE 変換公式

(2-3) を用いた方がよい. a_m のとり方は,

- i) 長の個数が一定のときは a_m は小さい方がよい.
- ii) a_m が区間 $[2^{-A}, 2^{-B}]$ と固定されているときは長の個数は多い方がよい.

この方法でうまくいった数値例をあげる.

$$\text{例 1} \quad \int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}, \quad I(a_m) = \int_0^{\infty} e^{-t} \frac{\sin\left(\frac{t}{a_m}\right)}{t} dt$$

$$a_m = 2^{-n} \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 9)$$

$$\text{例 2} \quad \int_0^{\infty} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}, \quad I(a_m) = \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{a_m}} \cdot e^{-t} \cdot \frac{\cos\left(\frac{t}{a_m}\right)}{\sqrt{t}} dt$$

$$a_m = 2^{-n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots, 10)$$

$$\text{例 3} \quad \int_0^{\infty} \sin x^p dx = \Gamma\left(1 + \frac{1}{p}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2p}\right), \quad p = 2, 3, 5$$

$$I(a_m) = \int_0^{\infty} \frac{1}{a_m} \cdot e^{-t} \cdot \frac{\sin \frac{t}{a_m}}{p \cdot \left(\frac{t}{a_m}\right)^{\frac{p-1}{p}}} dt$$

$$a_m = 2^{-n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots, 10)$$

$$\text{例 4} \quad \int_0^{\infty} \frac{\cos px - \cos qx}{x} dx = \log \left| \frac{q}{p} \right|, \quad p=1, q=2$$

$$I(a_m) = - \int_0^{\infty} 2 e^{-t} \cdot \frac{\sin \frac{p+q}{2a_m} t \cdot \sin \frac{p-q}{2a_m} t}{t} dt$$

$$a_m = 2^{-n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots, 10)$$

例1 $f(x) = \frac{\sin x}{x}$ について, $f(x)$ を 図-23 に, これを $x = \phi(u) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh u\right)$ で DE 変換した $f(\phi(u)) \cdot \phi'(u)$ を 図-24 に示す.

さらに $f(x) = e^{-ax} \frac{\sin x}{x}$ とし, これを (2-3) で DE 変換したときの $f(x)$ と $f(\phi(u)) \cdot \phi'(u)$ を 図-25 と 図-26 に示す.

また, $f(x) = e^{-x} \frac{\sin \frac{x}{a}}{x}$ $a = \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}, \frac{1}{128}$ を

図-27 に, それぞれを DE 変換したものを 図-28 に, UNIVAC 1108 の端末で TSS により試みた出力を 図-29 に与える.

なお, 例2, 例3, 例4については, 補外の結果の出力を 図-30 に示す.

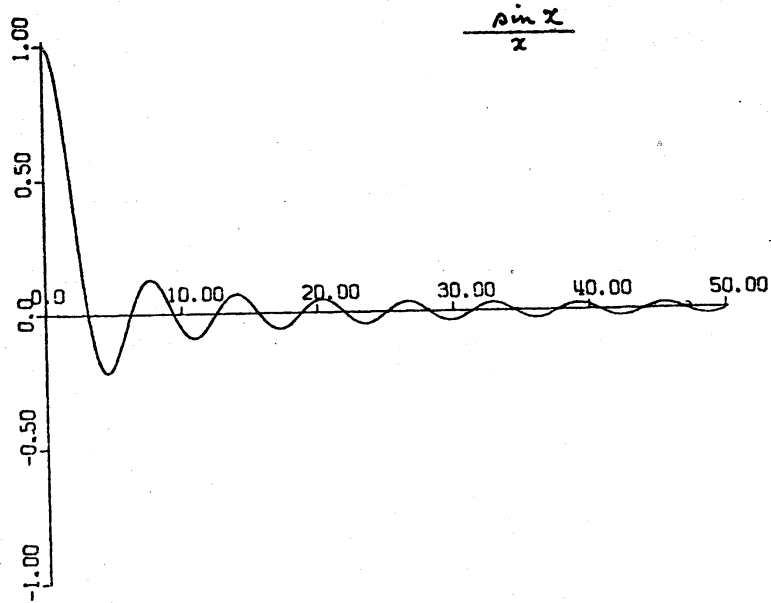


図 - 23

$\frac{\sin x}{x}$ に $x = \exp(\frac{\pi}{2} amhu)$ の変換を行なったときの被積分関数

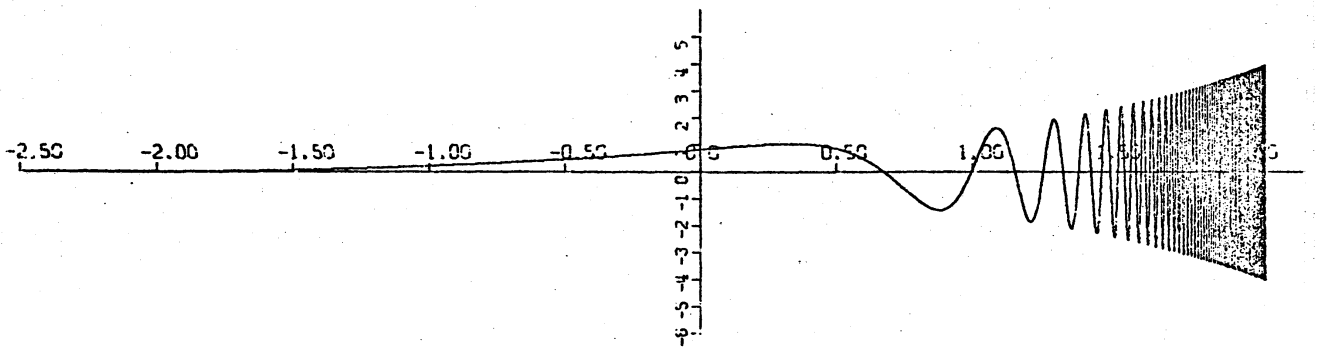
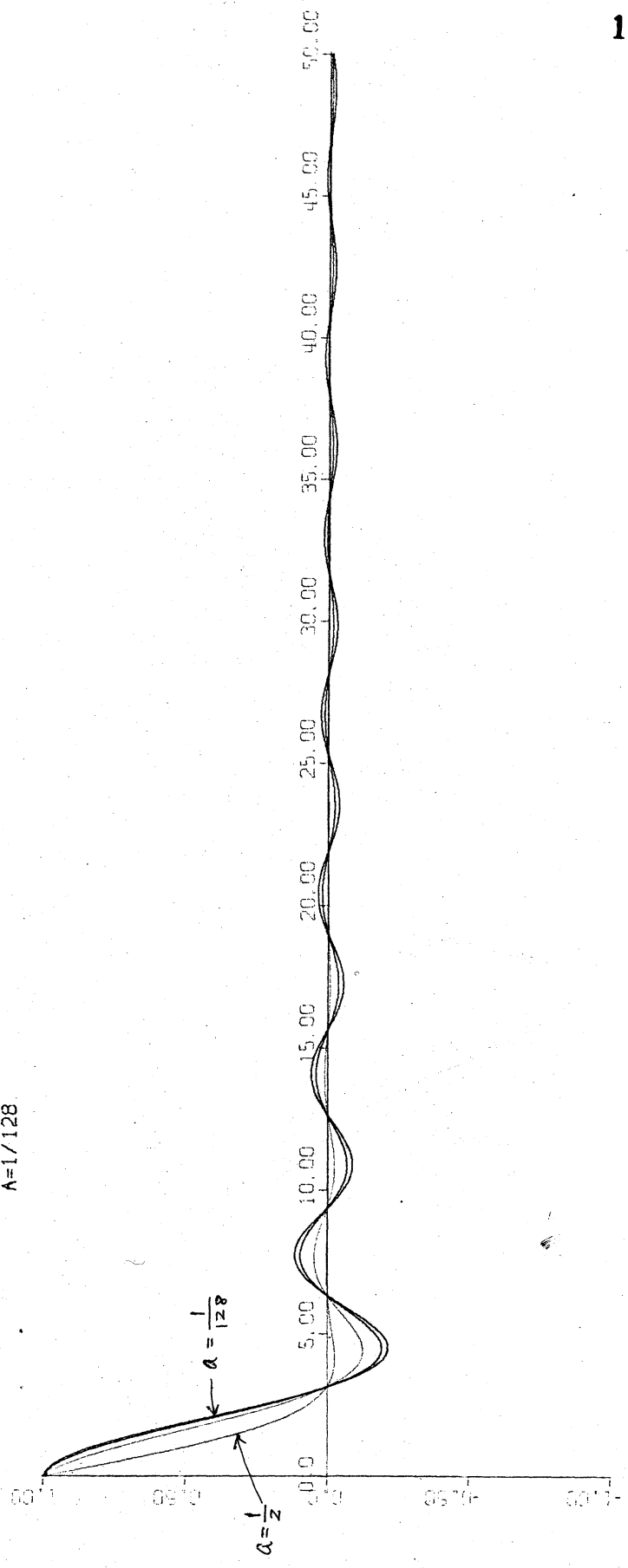


図 - 24

- $\Lambda=1/2$
- $\Lambda=1/8$
- $\Lambda=1/32$
- $\Lambda=1/128$

$$e^{-ax} \sin x$$



$$e^{-ax} \sin x \frac{dx}{x} \quad \text{if } x = \exp(u - \exp(-u))$$

A=1/2
A=1/8
A=1/32
A=1/128

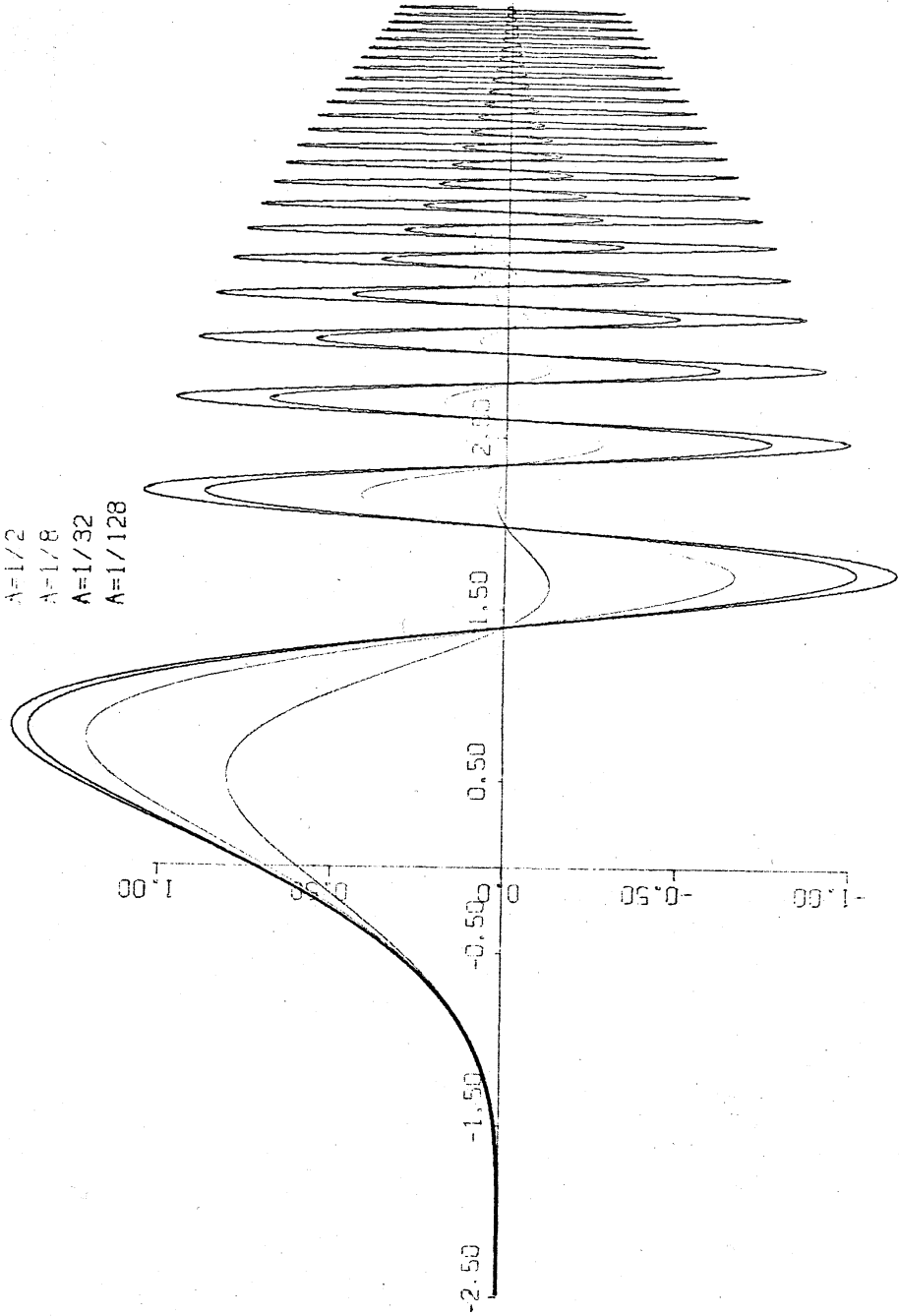


图 - 26

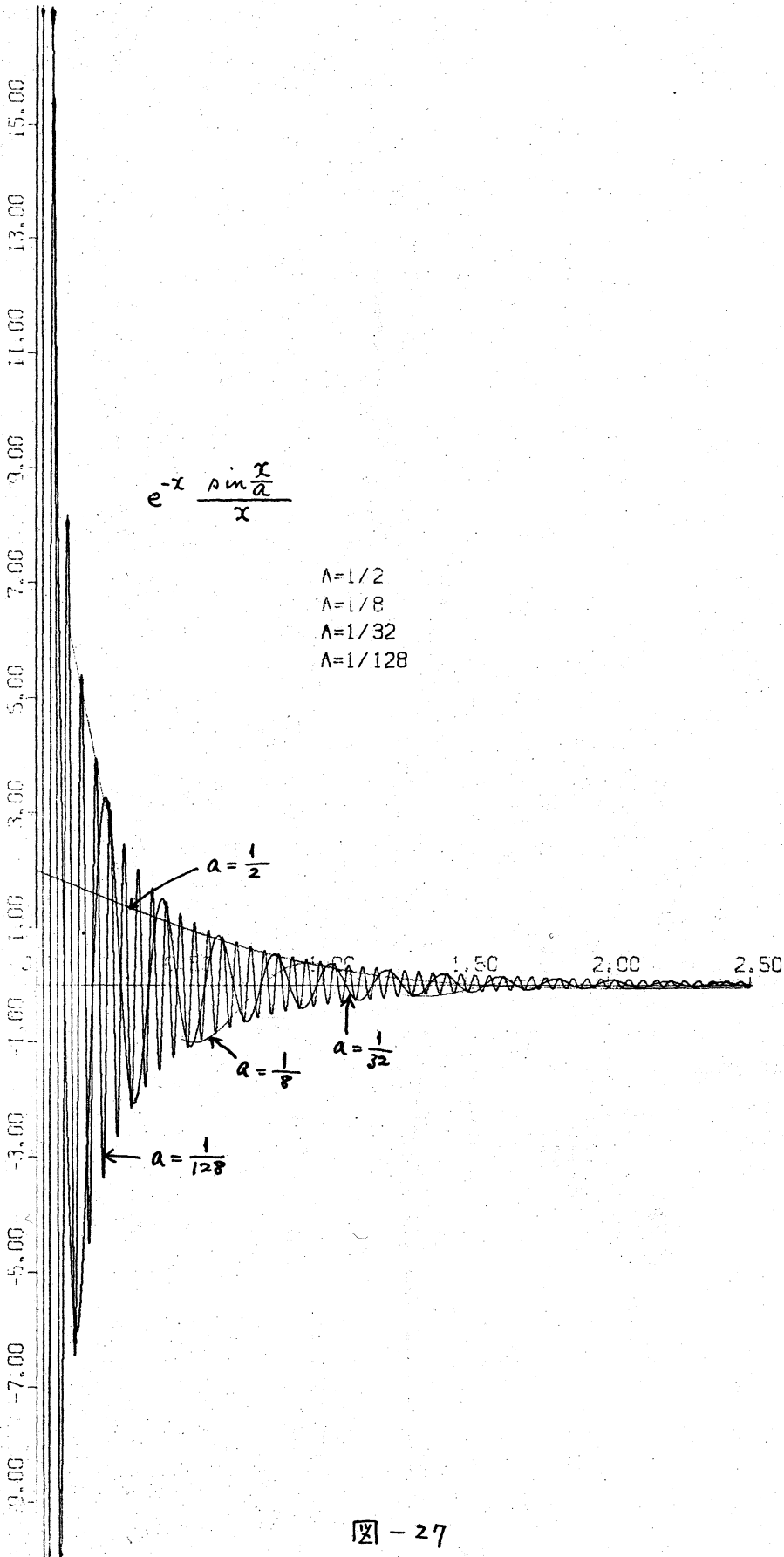
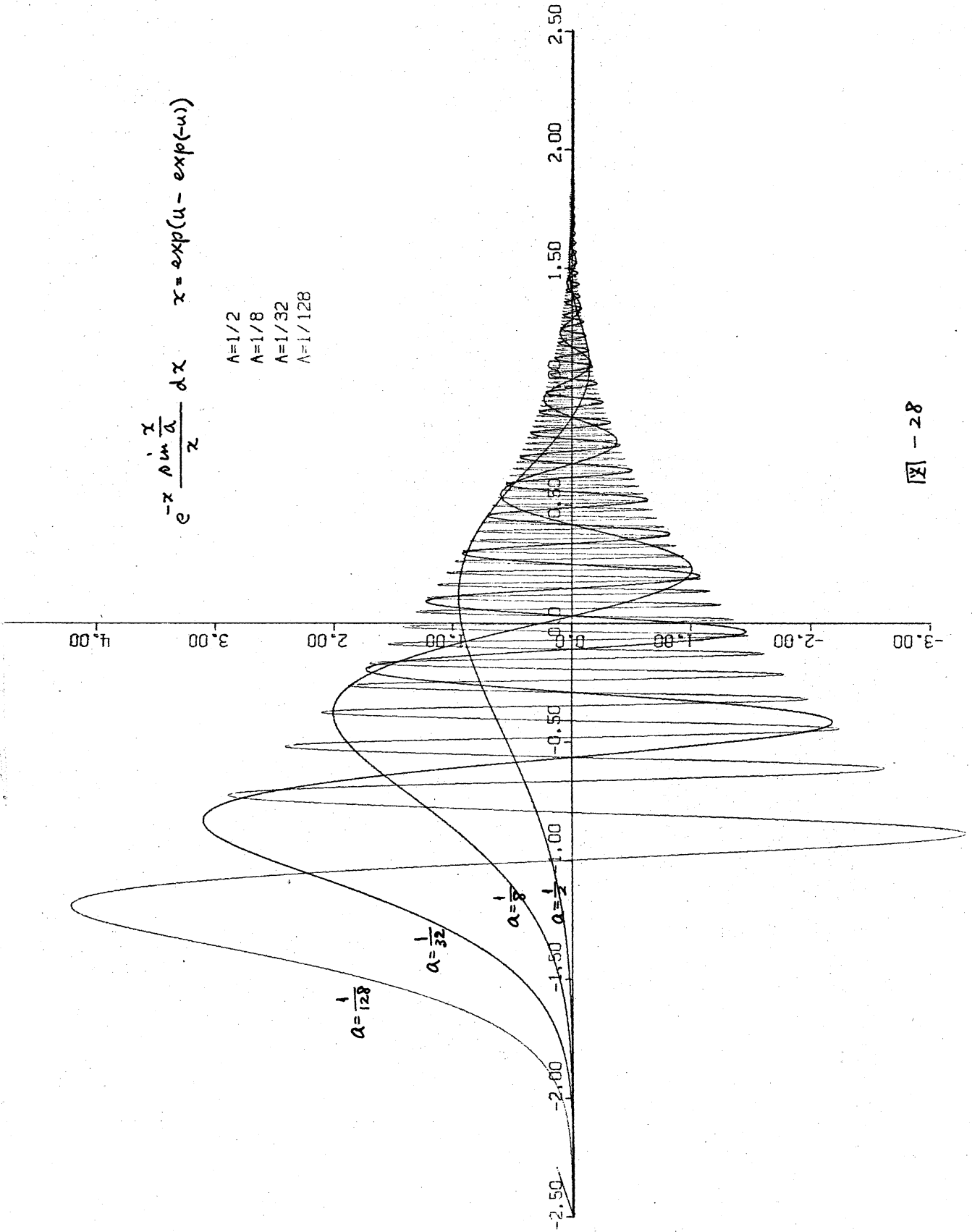


图 - 27

$$e^{-x} \sin \frac{x}{a} dx \quad x = \exp(u - \exp(-u))$$

- $\Lambda = 1/2$
- $\Lambda = 1/8$
- $\Lambda = 1/32$
- $\Lambda = 1/128$



>> RUN
DO YOU WANT A GLOBAL SCAN? >N
COMPILING...

PLEASE TYPE IN KK HO EPS A
) 10. G. 12500. 1. 00-13. A. ---1. 000

.12500+000	29	28	.7853981633974478+000	
.1000000000+001			.7853981633974480+000	.2573-15
.12500+000	29	28	.1107148717756709+001	
.62500-001	57	56	.1107148717794090+001	.338-10
.2000000000+001			.1107148717794090+001	.1755-15
.12500+000	28	29	.1325817419375763+001	
.62500-001	56	57	.1325817663676072+001	.184-06
.31250-001	112	113	.1325817663668032+001	.606-11
.4000000000+001			.1325817663668032+001	.1308-15
.12500+000	28	29	.1448155520568776+001	
.62500-001	56	57	.1446440866943327+001	.119-02
.31250-001	111	113	.1446441332246152+001	.322-06
.15625-001	221	225	.1446441332248135+001	.137-11
.8000000000+001			.1446441332248135+001	.3238-16
.12500+000	28	29	.1470443075040248+001	
.62500-001	56	57	.1509147333229970+001	.256-01
.31250-001	112	113	.1508375818557526+001	.511-03
.15625-001	223	225	.1508377516801302+001	.113-05
.78125-002	445	449	.1508377516798938+001	.157-11
.1600000000+002			.1508377516798937+001	.1955-15
.12500+000	28	29	.1382641004327049+001	
.62500-001	56	58	.1548921008201269+001	.107+00
.31250-001	111	115	.1538954180319308+001	.648-02
.15625-001	221	229	.1539557665164286+001	.392-03
.78125-002	441	457	.1539556493364617+001	.761-06
.3200000000+002			.1539556493364628+001	.7264-14
.12500+000	28	29	.1429390623081529+001	
.62500-001	56	58	.1665064437193054+001	.142+00
.31250-001	111	115	.1535388147664309+001	.845-01
.15625-001	221	229	.1555503556417019+001	.129-01
.78125-002	441	457	.1555173178774696+001	.212-03
.39063-002	881	913	.1555172598172392+001	.373-06
.19531-002	1761	1825	.1555172598174419+001	.130-11
.6400000000+002			.1555172598174418+001	.2499-15
.12500+000	28	29	.1895917999406308+001	
.62500-001	56	58	.1520296603363196+001	.247+00
.31250-001	112	115	.1647920201404029+001	.774-01
.15625-001	223	229	.1573781058124001+001	.471-01
.78125-002	445	457	.1563091824236329+001	.684-02
.39063-002	889	913	.1562983617218851+001	.692-04
.19531-002	1777	1825	.1562983985735704+001	.236-06
.97656-003	3553	3649	.1562983985734793+001	.583-12
.1280000000+003			.1562983985734792+001	.4373-15
.12500+000	28	30	.1159244493115114+001	
.62500-001	56	59	.1200497111596930+001	.344-01
.31250-001	111	117	.1625083080804596+001	.261+00
.15625-001	221	233	.1530516196591192+001	.618-01
.78125-002	441	465	.1560793829315039+001	.194-01
.39063-002	881	929	.1566788193640254+001	.383-02
.19531-002	1761	1857	.1566890292230279+001	.652-04
.97656-003	3521	3713	.1566890096662145+001	.125-06
.48828-003	7041	7425	.1566890096662928+001	.500-12
.2560000000+003			.1566890096662927+001	.8071-15
.12500+000	28	30	.1734670162339282+001	
.62500-001	56	59	.1545118887776939+001	.123+00
.31250-001	112	117	.1741595516507342+001	.113+00
.15625-001	223	233	.1573909640996371+001	.107+00
.78125-002	445	465	.1578088095490220+001	.265-02
.39063-002	889	929	.1571911443268816+001	.393-02
.19531-002	1777	1857	.1568622359587225+001	.210-02
.97656-003	3553	3713	.1568843248958038+001	.141-03
.48828-003	7105	7425	.1568843204278972+001	.285-07
.24414-003	14209	14849	.1568843204278415+001	.355-12
.5120000000+003			.1568843204278412+001	.1565-14

PLEASE TYPE IN KK HO EPS A
) EOF

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

☒ - 29

$$I_a = \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-t} \frac{\cos(\frac{t}{a})}{\sqrt{t}} dt$$

a	I
.5000000	.1425931792522394+001
.2500000	.1326154997659009+001
.1250000	.1252902654547639+001
.0625000	.1252999410027345+001
.0312500	.1253313363691693+001
.0156250	.1253314302890013+001
.0078125	.1253314137444917+001
.0039063	.1253314137311113+001
.0019531	.1253314137315407+001
.0009766	.1253314137315530+001

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

$$I_a = \int_0^{\infty} \frac{1}{a} e^{-t} \frac{\sin \frac{t}{a}}{3 \cdot (\frac{t}{a})^{\frac{2}{3}}} dt$$

.5000000	.3103638105920396+000
.2500000	.4457995942733615+000
.1250000	.4485991690572250+000
.0625000	.4465177785508018+000
.0312500	.4464869031016973+000
.0156250	.4464897422836874+000
.0078125	.4464897560589779+000
.0039063	.4464897557849941+000
.0019531	.4464897557846184+000
.0009766	.4464897557846165+000

$$\int_0^{\infty} \sin x^3 dx = \Gamma(\frac{4}{3}) \sin \frac{\pi}{6}$$

$$I_a = -2 \int_0^{\infty} e^{-t} \frac{\sin \frac{3}{2a} t \cdot \sin \frac{-1}{2a} t}{t} dt$$

1.0000000	.4591453659370772+000
.5000000	.7656300656850324+000
.2500000	.7171715914761429+000
.1250000	.6926407053285962+000
.0625000	.6930209438987198+000
.0312500	.6931474037494959+000
.0156250	.6931472250515191+000
.0078125	.6931471805590058+000
.0039063	.6931471805583915+000
.0019531	.693147180559361+000

$$\int_0^{\infty} \frac{\cos x - \cos 2x}{x} dx = \log 2$$

5. 結論

4章であげた特殊な例を除いては、多くの場合数値積分公式として DE 変換は非常に強力といえる。特に (c, ∞) や $(-\infty, \infty)$ の区間の積分にはまずこれと利用することを奨める。また、たとえば数理統計学の確率分布のライブラリルーテン等では、下午の展開法より DE 変換公式を用いた方がよい場合があることも経験している。

参 考 文 献

- [1] Takahasi, H. and Mori, M., Double Exponential Formulas for Numerical Integration, Publications of the Research Institute for Math. Sciences Kyoto Univ. Vol. 9, No. 3, 1974.
- [2] Iri, M., Moriguti, S. and Takasawa, Y., On a Certain Quadrature Formula (in Japanese), "kokyuroku" of the Research Institute for Math. Sciences, Kyoto Univ., No.91 (1970),82-118.
- [3] T.N.L. Patterson, Algorithm 468 Algorithm for Automatic Numerical Integration Over a Finite Interval D1, Communications of the ACM, November 1973, Vol. 16, No. 11.
- [4] 市田浩三, 清野武, 自動積分について, 京都大学数理解析研究所研究集会 (高橋秀俊) 予稿集, 1975年11月.
- [5] 森正武, 数値解析と複素関数論, 筑摩書房.
- [6] 小野令美, 戸田英雄, 多倍長計算プログラムとその応用例, (電総研彙報に投稿中).