数理解析研究所講究録 1395 巻 2004 年 190-195

部分積分法による数値積分法

平山 弘 (Hiroshi Hirayama) 神奈川工科大学工学部*
館野 裕文 (Hirobumi Tateno) 神奈川工科大学工学部†
平野 照比古 (Teruhiko Hilano) 神奈川工科大学情報学部‡

Abstract

プログラムでよく使われる演算子（+,-,*,/など）を、被演算の型が異なる場合、別の意味を与えることができる機能であるオペレーター・オーバーロード (operator overload)、引数の型が異なると別の関数の意味を与えることができるオーバーロード（overload) 機能等を使い、有限項で打ち切ったべき級数級数間の四則演算、べき級数級数の関数演算を定義することができる。この機能を使うと、プログラムの形で与えられた任意の関数をべき級数展開することができる。

この方法を常微分方程式の初期値問題に適用すると、常微分方程式の解を任意次数のべき級数展開の形で得られる。逆関数は常微分方程式の初期値問題で表すことが出来るので、逆関数も任意次数のべき級数に展開できる。

本論文では、この方法を数値積分の変数変換に適用し、計算が容易な積分に変換し、効率的に計算する方法を提案する。ここで使用したプログラミング言語は、入手が容易な C++言語を使っている。この計算は、数値計算でよく使われる Fortran90 など多くの最新の言語で利用可能である。

1 はじめに

無限区間の振動型数値積分の計算には、Hasegawa and Torii [3] などに見られるように、途中区間まで数値積分を行い、補外法によって、無限区間の積分値を求める方法と Ooura and Mori [7] の発見的な方法がよく知られている。どちらの場合も、有効に計算できるの積分は、次のように振動関数として三角関数を含む型の積分に限られる。

$$I=\int_0^\infty f(x)\sin x dx \tag{1}$$

この計算法が、三角関数の零点が規則的にあり、その値が既知であることを利用しているからである。このため、同じ無限区間の振動型積分であっても Bessel 関数 を含む積分

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

の計算には、適用するのが非常に困難である。このような問題に対しては、緒方、杉原 [6] による Ooura and Mori[7] の計算法の拡張もある。(1) の型の積分で定義される特殊関数正弦積分関数

$$S_i(x)=\int_0^x \frac{\sin t}{t}dt \tag{3}$$

*hirayama@sd.kanagawa-it.ac.jp
†994084@cce.kanagawa-it.ac.jp
‡hilano@ic.kanagawa-it.ac.jp

の数値計算には、x が大きな数のとき、漸近展開式

$$\int_x^\infty \frac{\sin t}{t}dt \approx \cos x \sum_{n=0}^{N} \frac{(-1)^n(2n)!}{x^{2n+1}} + \sin x \sum_{n=0}^{N} \frac{(-1)^n(2n+1)!}{x^{2n+2}} \tag{4}$$

を使って、計算する方法が使われている。(4) の漸近展開式は、左辺の積分を $\sin x$ と $\frac{1}{x}$ の積とみなし、部分積分を繰り返せば容易に得られる。この方法を、(1) および (2) の型の積分に適用すれば、これらの積分を計算することができると期待できる。式 (4) のような計算を行うには、(1) の の高階の微分係数を高い精度で計算する必要がある。ここで使う微分係数の計算は、C++言語や FORTRAN 90 など、最近の新しい言語の機能であるオペレーター・オーバーロード機能を使うと容易に高精度で計算することができる [2]。ここで言う高い精度の意味は、通常の関数計算と同じ程度の精度で計算することを意味する。このような高精度な微分係数計算法が存在して、はじめて (4) のような計算方法が実用的な計算法となる。この微分係数計算法を使うと、微分係数だけでなく、微分演算を含むいろいろな計算が簡単に行うことができる。本論文では、このような微分係数の計算法を利用すると、(1) および (2) のような無限区間の振動型の積分を部分積分法を使って、(1) のような漸近展開式を計算することができることを示す。さらに、その展開式を利用することによって、その積分値を容易に求めることができることを示す。この方法では、被積分関数の零点の知識を必要としないので、三角関数だけでなく、(2) のような Bessel 関数を含む積分に対しても適用できる。

2 常微分方程式の解の Taylor 級数展開

2.1 解の Taylor 級数展開

次のように $\frac{dy}{dx}$ について解かれた形になっている常微分方程式について考える。

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) \tag{5}$$

ここで、f および y は、一般にベクトルである。この微分方程式の解の Taylor 級数展開は、次に示す Picard の逐次計算法 [5] を使うことによって計算することができる。

$$y_0 = a_0, \qquad \mathbf{y}_n = \mathbf{a}_0 + \int_0^x \mathbf{f}(x, \mathbf{y}_{n-1})dx \tag{6}$$

ただし、(6) の計算では x の n 次を超えるの高次の項は省略して計算すると効率的である。

2.2 逆関数の Taylor 級数展開の計算

関数の逆関数の Taylor 展開法については昔から知られている。$y = f(x)$ の逆関数は、$x = f(y)$ と書けるので、両辺を x で微分することによって、逆関数の微分方程式を得ることができる。

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{f'(y)} \tag{7}$$

この微分方程式を前節で述べた方法によって解くことによって、関数 $f(x)$ の逆関数の Taylor 展開式を得ることがきる。前節の方法を使えば、微分方程式の解すなわち逆関数の Taylor 展開式を得ることができる。例として関数 $f(x9 = e^{-x} - 2x - 3$ の逆関数 $y = f^{-1}(x)$ を求める。(7) から、逆関数は、次の微分方程式を満たす。

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{1}{e^{-x} + 2} \tag{8}$$

初期条件は、$y(-2)=0$ である。この条件は $f(x)$ で $x=0$ を入れ、x と y を逆にすることによって、(8) の初期条件を得る。この微分方程式の Taylor 級数解を 7 次まで計算すると、

```
y=-0.333333*(x+2)+0.0185185*(x+2)^2+7.61389e20*(x+2)^3-0.000114312*(x+2)^4
+5.08053e-06*(x+2)^5+1.12901e-06*(x+2)^6-1.34405e-07*(x+2)^7
```

が得られる。

3 無限区間振動型積分の計算法

無限区間振動型積分は、通常の数値積分法（ガウス型積分法、二重指数型積分法など）では計算が難しい問題である。

3.1 三角関数を含む無限区間振動型積分の計算法

ここでは、三角関数を含む無限区間の振動型積分

$$I=\int_0^\infty f(x)\sin x dx \tag{9}$$

について論じる。ここで、関数 $f(x)$ は、ゆっくり減少する関数で、x が大きいとき、$O(x^\alpha)(\alpha<0)$（$O(x^\alpha)$ はオーダを表す Landau の記号）であるとする。さらに、n 階導関数 $f^{(n)}(x)$ は、x が大きいとき、$O(x^{\alpha-n})$ であるとする。この条件は、多くのゆっくり減少する関数に当てはまる条件である。(9) は、$x=t$ で分割して、次のように二つの積分の和の形に変形することができる。

$$I=\int_0^t f(x)\sin x dx+\int_t^\infty f(x)\sin x dx \tag{10}$$

右辺の最初の積分の値は、通常の数値積分法を使って計算できる。第二項の積分は、部分積分法を使って、次のように変形することができる。

$$\begin{aligned}\textstyle\int_t^\infty f(x)\sin x dx &= [-f(x)\cos x]_t^\infty+\textstyle\int_t^\infty f'(x)\cos x dx\\ &= f(t)\cos t+\textstyle\int_t^\infty f'(x)\cos x dx\end{aligned} \tag{11}$$

この操作を M 回繰り返すと、次のような展開式が得られる。

$$\begin{aligned}&\textstyle\int_t^\infty f(x)\sin x dx=f(t)\cos t-f'(t)\sin t-f''(t)\cos t+f'''(t)\sin t+\cdots\\ &+f^{(M-1)}(t)\sin(x+\tfrac{M\pi}{2})+\textstyle\int_t^\infty f^{(M)}(x)\sin(x+\tfrac{M\pi}{2})dx\end{aligned} \tag{12}$$

関数 $f(x)$ の導関数 $f^{(n)}(x)$ は、仮定により、x が大きいとき、$O(x^{\alpha-n})$ となるので、(12) の右辺の積分項は、$O(t^{\alpha-M+1})$ となる。この積分項は、第 M 項まで計算したときの打切り誤差となるので、誤差は、$O(t^{\alpha-M+1})$ となることになる。この誤差項は、t を十分大きな値にすれば、原理的には、いくらでも小さな値にすることができるので、この方法によって、(11) の積分の値を任意の精度で計算できる。この計算で必要な関数 $f(x)$ の導関数の値を求める計算は、平山 [4] で使われている計算法の特別な場合であるから、これを使って、簡単に高精度で計算できる。この計算が精度良く計算できないならば、この計算方法は無意味となる。数値微分法では、微分係数の高精度計算は困難であるため、これらの計算法が、これまであまり使われなかった理由と思われる。式 (10)、(11)、(12) は、正弦関数（$\sin x$）だけでなく余弦関数（$\cos x$）

に対しても同様な公式が成り立つので、$I = \int_0^\infty f(x)\cos x dx$ の積分値も同様に計算できる。以下に、その展開式を示す。

$$\begin{aligned}&\int_t^\infty f(x)\cos x dx = -f(t)\sin t - f'(t)\cos t + f''(t)\sin t + f'''(t)\cos t + \cdots \\ &+f^{(M-1)}(t)\cos(x+\tfrac{M\pi}{2}) + \int_t^\infty f^{(M)}(x)\cos(x+\tfrac{M\pi}{2})dx\end{aligned} \tag{13}$$

この式からわかるように、$\sin t = 0$ 、$\cos t = 0$ になる t をとれば、(13) 式は単純になる。しかし、このようにt を選んでも、計算量は微分係数間の加減算が若干少なくなる程度で、微分係数の計算そのものがなくならないため、その効果はほとんどない。

3.2 Bessel 関数を含む無限区間振動型積分の計算法

部分積分によって、級数展開する方法は、振動型の Bessel 関数を含む積分に対しても適用できる。以下にその手順を示す。積分

$$I = \int_0^\infty f(x)J_n(x)dx \tag{14}$$

について論じる。(14) は、$x = t$ で分割して、二つの積分の和の形に変形する。

$$I = \int_0^t f(x)J_n(x)dx + \int_t^\infty f(x)J_n(x)dx \tag{15}$$

右辺の最初の積分は、通常の数値積分法を使って計算できる。第二項の積分は、部分積分法を使って、級数展開する。Bessel 関数の積分公式 [1]

$$\int x^n J_{n-1}(x)dx = x^n J_n(x) \tag{16}$$

を利用して、次のように変形することができる。

$$\begin{aligned}\int_t^\infty f(x)J_n(x)dx &= [f(x)J_{n+1}(x)]_t^\infty + \int_t^\infty \tfrac{d}{dx}\left(x^{-n-1}f(x)\right)x^{n+1}J_{n+1}(x)dx \\ &= -f(t)J_{n+1}(t) + \int_t^\infty \tfrac{d}{dx}\left(x^{-n-1}f(x)\right)x^{n+1}J_{n+1}(x)dx\end{aligned} \tag{17}$$

この操作を M 回繰り返し行うと、

$$\begin{aligned}\int_t^\infty f(x)J_n(x)dx &= \sum_{k=1}^{M}\left[(-1)^k\left(\tfrac{1}{x}\tfrac{d}{dx}\right)^{k-1}\left(x^{-n-1}f(x)\right)x^{n+k}J_{n+k}(x)\right]_{x=t} \\ &+ (-1)^M\int_t^\infty\left(\tfrac{1}{x}\tfrac{d}{dx}\right)^M\left(x^{-n-1}f(x)\right)x^{n+M+1}J_{n+M}(x)dx\end{aligned} \tag{18}$$

三角関数の含む振動型積分と同様に、Bessel 関数を含む振動型積分も高精度で計算できる。

4 変数変換による数値積分

4.1 三角関数を含む積分

次のよう無限区間の振動型積分を考える。

$$I = \int_0^\infty f(x)\sin(g(x))dx \tag{19}$$

$t = g(x)$ と置き換えれば、(9) の型の積分になり、容易に積分できる。このような置き換えを行うと、次のようになる。

$$I = \int_0^\infty f(g^{-1}(t))\sin(t)\frac{d}{dt}\left(g^{-1}(t)\right)dt \tag{20}$$

逆関数が解析的に閉じた形で求められる場合は、(20) 式は、解析的に閉じた関数になり、(9) の型の積分になるので、4 節で述べた計算法を適用して計算できる。一般に、逆関数は解析的に閉じた形で求められないので、Taylor 展開式を利用した計算方法が] 有効な計算法になる。この積分を $x=a$ を境界にして、二つの部分に分ける。

$$I=\int_0^a f(x)\sin(g(x))dx+\int_a^\infty f(x)\sin(g(x))dx \tag{21}$$

(21) の積分第二項で、$t=g(x)$ と置けば、(21) の第二項は

$$I=\int_b^\infty h(t)\sin tdt,\quad b=a\log(1+a),\quad h(t)=f(g^{-1}(t))\frac{d}{dt}g^{-1}(t) \tag{22}$$

となる。次のよう無限区間の振動型積分を考える。

$$I=\int_0^\infty \frac{\sin(x\log(1+x))}{x+1}dx \tag{23}$$

$t=x\log(1+x)$ と置き換えれば、(9) の型の積分になり容易に積分できる。この積分を $x=a$ を境界にして、二つの部分に分ける。

$$I=\int_0^a \frac{\sin(x\log(1+x))}{x+1}dx+\int_a^\infty \frac{\sin(x\log(1+x))}{x+1}dx \tag{24}$$

(24) の積分第二項で、$t=g(x)=x\log(1+x)$ と置けば、(24) の第二項は

$$I=\int_b^\infty f(t)\sin tdt,\quad b=a\log(1+a),\quad f(t)=\frac{\frac{d}{dt}g^{-1}(t)}{g^{-1}(t)+1} \tag{25}$$

となる。(25) の積分は、Taylor 展開を利用した方法で計算できる。このためには、(25) 式の $f(t)$ を Taylor 展開しなければならない。逆関数の Taylor 展開は、3.2 で与えたように簡単にでき、その微分も容易にできるので、(25) 式の $f(t)$ も容易に Taylor 展開できる。(20) 式の第一項の積分は、変数変換を行う意味がないので、変数変換しないで、そのまま数値積分する。特異点などがなければ、Gauss 型数値積分法等を使って積分できる。(24) の式では、$a=13$ として、$g(x)$ を Taylor 展開すると

```
34.3077+3.56763*(x-a)+0.0382653*(x-a)^2-0.000971817*(x-a)^3
```

この関数の逆関数 $g^{-1}(t)$ を $t=(b=g(a)=34.3077)$ 点で Taylor 展開すると

```
13+0.280298*(t-b)-0.000842687*(t-b)^2+1.10657e-005*(t-b)^3
```

この式から、(25) 式の $f(t)$ の Taylor 展開は

```
0.0200213-0.000521236*(t-b)+1.40122e-05*(t-b)^2-3.82616e-07*(t-b)^3
```

となる。この結果を (25) 式に代入し、(24) 式の第二項を積分する。(24) 式の第一項の積分は、標本点を 80、100 個使う Gauss 型数値積分公式を利用した。これらの結果から、 $I=0.437992011202960$ が得られる。確認のため、$a=14$ として計算し、同じ結果が得られることを確認している。

4.2 Bessel 関数を含む積分

次のような積分を考える。

$$I=\int_0^\infty \frac{x\,J_0(x\log(1+x))}{x^2+1}dx \tag{26}$$

(26) の積分も次のように二つに分割し、Taylor 展開を使った方法で計算できる。

$$I = \int_0^a \frac{xJ_0(x\log(1+x))}{x^2+1}dx + \int_a^\infty \frac{xJ_0(x\log(1+x))}{x^2+1}dx \tag{27}$$

$a = 25$ と置くと、$I = 0.510502342713232$ となる。前節と同様に確認のため、a を $20 \leq a \leq 35$ の範囲で計算すると、最後の二桁を除いて一致した。このように Bessel 関数を含む場合でも容易に計算できることがわかる。

5 おわりに

Taylor 展開式の係数は、差分法と異なり、数式処理的計算法によって高精度で計算できるため、その式をさらに計算に利用することが可能である。その特性を利用して、Taylor 展開式を使って、変数変換を行い数値積分する方法を提案し、その方法が有効であるのことを示した。この方法は、他の数式処理と異なり厳密な計算を行わないため、通常の数値積分と同程度の時間で計算できる。

6 参考文献

参 考 文 献

[1] P.J.Davis P.Rabinwitz(森 正武訳), 計算機による数値積分法, 日本コンピュータ協会, 1981

[2] Ellis M. A. and Stroustrup B., The Annotated C++ Reference Manual, Addison-Wesley,1990

[3] Hasegawa T. and Torii T., Indefinite integration of oscillatory functions by the Chebyshev series expansion, J. Comput. Appl. Math., 17(1987), 21–29

[4] 平山, 小宮, 佐藤, Taylor 級数法による常微分方程式の解法, 日本応用数理学会論文誌, vol.12, pp. 1–8(2002)

[5] Hirayama H., Numerical Technique for Solving an Ordinary Differrential Equation by Picard's Methods, Integral Methods in Science and Engineering/Editor P. Schiavone, C. Constanda, A. Mioduchowski, Birkhauser, Berlin(2002), 111–116

[6] 緒方秀教、杉原正顕, Bessel 関数の零点を標本点に持つ補間および数値積分公式, 日本応用数理学会論文誌, 6(1996), 39–66

[7] Ooura T. and Mori M., The double exponential formula for oscillatory functions over half infinite interval, J. Comput. Appl. Math., 38(1991), 353–360