社団法人 情報処理学会 研究報告
IPSJ SIG Technical Report

2005－HPC－103 (15)
2005／8／4

漸近展開法による無限区間数値積分法

平山 弘、花井 啓助

神奈川工科大学

Taylor 級数の四則演算や関数計算は、C++言語や Fortran を使うと容易に定義できる。これを利用すると無限区間積分：$\int_a^\infty f(x)e^{-x}dx$,《ここで $f(x)$ は無限遠点でゆっくりした減少関数である》を容易に漸近級数展開することができる。この漸近展開式を使って積分値を評価する方法は、この種の積分の有力な計算法になる。

Numerical Integration Method Over Infinite Interval by Asymptotic Seires

Hiroshi Hirayama, Keisuke Hanai

Kanagawa Institute of Technology

Arithmetic operations and functions of Taylor series can be defined easily by FORTRAN 90 and C++ program language. Using this, it is shown that asymptotic expansion of the integral over infinite interval : $\int_a^\infty f(x)e^{-x}dx$, where $f(x)$ is slowly decaying function) . Evaluating this expansion gives an effective numerical integration method for this kind of integrals.

1. はじめに

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 C++言語の機能（operator overload）を使い、有限項で打ち切った Taylor 級数間の四則演算、Taylor 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 Taylor 級数展開することができる。

常微分方程式の初期値問題の解を任意次数の Taylor 級数展開の形で得ることができる。得られた Taylor 級数解を数値計算に利用すれば、任意の次数の数値計算法が得られる。

本論文では、この方法を無限区間数値積分を計算するのに利用することを提案する。この計算法を使うと、無限区間の数値積分を漸近級数に展開することができ効率的に計算できる。この方法は最初無限区間の振動型の数値積分を計算するために考案されたが、通常の無限区間積分も同様に計算できる。

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[1]を使っている。

この計算は、数値計算でよく使われる Fortran90 でも可能である。

2. Taylor 級数展開

関数を Taylor 級数展開するための基本的な考え方を説明し、その計算方法について簡単に述べる。詳しくは、Henrici[2], Rall[9]や平山等[4-8]などに述べられている。

2.1 Taylor 級数の四則演算

Taylor 級数の四則計算のプログラムは、以下のように簡単に作成することができる。平行移動によって、展開位置を原点へ移すことができるので一般性を失うことなしに、原点で展開した式だけを扱うことができる。この級数を次のように定義する。

(2.1) $$\mathrm{f}(x) = \mathrm{f}_0 + \mathrm{f}_1 x + \mathrm{f}_2 x^2 + \mathrm{f}_3 x^3 + \mathrm{f}_4 x^4 + \cdots$$

(2.2) $$\mathrm{g}(x) = \mathrm{g}_0 + \mathrm{g}_1 x + \mathrm{g}_2 x^2 + \mathrm{g}_3 x^3 + \mathrm{g}_4 x^4 + \cdots$$

(2.3) $$\mathrm{h}(x) = \mathrm{h}_0 + \mathrm{h}_1 x + \mathrm{h}_2 x^2 + \mathrm{h}_3 x^3 + \mathrm{h}_4 x^4 + \cdots$$

2.1.1 加減乗除算

$h(x)$ が $f(x)$ と $g(x)$ の和差積商のとき、f, g および h の係数は、それぞれ次のような関係になる。

(2.4) 加減算 $$\mathrm{h}(x) = \mathrm{f}(x) \pm \mathrm{g}(x) \qquad \mathrm{h}_i = \mathrm{f}_i \pm \mathrm{g}_i$$

(2.5) 乗算 $$\mathrm{h}(x) = \mathrm{f}(x)\mathrm{g}(x) \qquad \mathrm{h}_n = \sum_{k=0}^{n} \mathrm{f}_k \, \mathrm{g}_{n-k}$$

(2.6) 除算 $$\mathrm{h}(x) = \frac{\mathrm{f}(x)}{\mathrm{g}(x)}、\quad h_0 = \frac{f_0}{g_0}、\qquad \mathrm{h}_n = \frac{1}{g_0}\left(\mathrm{f}_n - \sum_{k=0}^{n-1} \mathrm{h}_k \mathrm{g}_{n-k}\right) \quad (n \geq 1)$$

(2.6)の第1式の両辺に $g(x)$ を掛け、(2.1)、(2.2)、および(2.3)を代入して、展開する。両辺の同じ次数の係数が等しいことを利用して得られる。

2.1.2 微積分演算

$h(x)$ が $f(x)$ の微積分であるとき、f および h の係数は、それぞれ次のような関係になる。

(2.7) 微分 $$\mathrm{h}(x) = \frac{d\,\mathrm{f}(x)}{dx} \qquad \mathrm{f}_m = 0, \quad \mathrm{h}_n = (n+1)\,\mathrm{f}_{n+1} \qquad (n = 0, \cdots, m-1)$$

(2.8) 積分 $$\mathrm{h}(x) = \int f(x)dx \qquad \mathrm{h}_0 = 0, \quad \mathrm{h}_n = \frac{1}{n}\mathrm{f}_{n-1} \qquad (n = 1, \cdots, m)$$

積分演算で積分定数 h_0 は任意であるが、ここでは、0と定義する。Taylor 展開式の平方根、三角関数、指数関数なども容易に計算できる。

3. 常微分方程式の解の Taylor 級数展開

3.1 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。

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

ここで、$\mathbf{y}$ および $\mathbf{f}$ 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[6][10]を使うことによって計算することができる。

(3.2) $$\mathbf{y}_0 = \mathbf{a}_0, \quad \mathbf{y}_n = \mathbf{a}_0 + \int_0^x \mathbf{f}(x, \mathbf{y}_{n-1})dx$$

3.2 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。

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

この微分方程式を(3.2)の方法で計算することによって、関数 $f(x)$ の逆関数の Taylor 展開式を得ることがきる。

4. 無限区間の数値積分

無限区間の数値積分の計算には、汎用性がある二重指数型数値積分法や計算効率の良いガウス型数値積分法などが利用されてきた。ここでは、次の形式の数値積分を主に考察する。

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

ここで、関数 $f(x)$ は、x が大きいとき、ゆっくり減少する関数で、$O(x^\alpha)$ （$O(x^\alpha)$ 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。(4.1)型の積分は、$x = t$ で分割して、次のように二つの積分の和に分割することができる。

(4.2) $$I = \int_0^t f(x)e^{-x}dx + \int_t^\infty f(x)e^{-x}dx$$

右辺の最初の積分の値は、有限区間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。

(4.3) $$\begin{aligned}\int_t^\infty f(x)e^{-x}dx &= \left[-f(x)e^{-x}\right]_t^\infty + \int_t^\infty f'(x)e^{-x}dx \\ &= f(t)e^{-t} + \int_t^\infty f'(x)e^{-x}dx\end{aligned}$$

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。

(4.4) $$\begin{aligned}\int_t^\infty f(x)e^{-x}dx = {} & f(t)e^{-t} + f'(t)e^{-t} + f''(t)e^{-t} + f'''(t)e^{-t} + \cdots \\ & + f^{(M-1)}(t)e^{-t} + \int_t^\infty f^{(M)}(x)e^{-t}dx\end{aligned}$$

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、(4.4)の右辺の積分項は、$O(t^{\alpha-M})$ 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、$M > \alpha$ のとき、$O(t^{\alpha-M})$ となる。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、(4.1)の積分の値を任意の精度で計算できる。

実際の計算では、通常の漸近級数の計算法と同様に、(4.4)の級数部分を次々計算し、項の絶対値が最も小さくなったところで計算を打ち切っている。

この計算で必要な関数 $f(x)$ の高階導関数の値を求める計算は、２節で説明した方法で、容易に高精度計算できる。

5. 変数変換による数値積分[3]

次のよう無限区間の積分を考える。

(5.1)
$$I=\int_0^\infty f(x)e^{-g(x)}dx$$

$t=g(x)$ と置き換えれば、(4.1)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。

(5.2)
$$I=\int_0^\infty f(g^{-1}(t))e^{-t}\frac{d}{dt}\left(g^{-1}(t)\right)dt$$

逆関数が解析的に閉じた形で求められる場合は、(5.2)式は、解析的に閉じた関数になり、(4.1)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。

(5.3)
$$I=\int_0^a f(x)e^{-g(x)}dx+\int_a^\infty f(x)e^{-g(x)}dx$$

(5.3)の積分第二項で、$t=g(x)$ と置けば、(5.3)の第二項は

(5.4)
$$I=\int_b^\infty h(t)e^{-t}dt,\quad b=g(a)、\ h(t)=f(g^{-1}(t))\frac{d}{dt}g^{-1}(t)$$

となる。このように多くの数値積分は、(4.1)の形式で表現できる。

6. 数値例

次のような無限区間数値積分[3]を計算する。

（１）$\int_0^\infty \frac{x}{1+x+x^2+x^3}dx$　（２）$\int_0^1 xe^{-x}dx$　（３）$\int_0^\infty \frac{e^{-x}}{1+x}dx$

（４）$\int_2^\infty \frac{x}{e^x-1}dx$　（４）$\int_1^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}(1+x)}$　（６）$\int_1^\infty (1+x)^{-x}dx$

（１）の問題は、無限遠点で次のように $\frac{1}{x}$ の Taylor 級数に展開できる。

$$\frac{x}{1+x+x^2+x^3}=\frac{1}{x^2}-\frac{1}{x^3}+\frac{1}{x^6}-\frac{1}{x^7}+\cdots$$

これを利用して容易に数値積分できる。上の展開式は $t=\frac{1}{x}$ とおけば、通常の原点における計算と同じように展開できる。この展開式を積分し、区間 $[10,\infty]$ に渡る積分値を計算できる。残りの区間[0,10]に渡る積分をこれまでの手法[4]で計算することができる。要求精度１４桁で計算すると積分値は 0.785398163397448 となる。この方法は効率的であるが、計算できる関数が少ない。

（２）の問題は、$f(x)=x$と置くと、Taylor 展開式は有限項で終わるので容易に計算できる。(4.2)で$t=0$とおいて容易に計算できる。計算結果は 1.00000000 となる。

（３）４節の方法が直接利用できる例である。$t=15$とおいて計算できる。$t=15$における$f(x)$の Taylor 展開は次のようになる。ここでは、７次まで示している。

0.0625-0.00390625*(x-15)+0.000244141*(x-15)^2-1.52588e-05*(x-15)^3
+9.53674e-07*(x-15)^4-5.96046e-08*(x-15)^5+3.72529e-09*(x-15)^6-2.32831e-10*(x-15)^7

要求精度１４桁の精度で計算すると、0.596347362323204 となる。

（４）この式の被積分関数は

$$\frac{xe^x}{e^x-1}e^{-x}=(15+0.999996(x-15)+1.98837\times10^{-6}(x-15)^2+\cdots)e^{-x} \tag{6.1}$$

と変形できるので、これも４節の方法が直接利用できるため容易に計算でき、14 桁の要求精度で計算すると 0.431039497628625 の結果が得られる。

（５）この式を変数変換$x=e^{2t}$すると

$$\int_1^\infty \frac{1}{\sqrt{x}(1+x)}dx=\int_0^\infty \frac{e^{2t}}{1+e^{2t}}e^{-t}dt \tag{6.2}$$

となるので、容易に計算でき、14 桁の要求精度で計算すると 0.134517995374441 の結果が得られる。解析的方法で(4.1)の積分に変換出来る例である。

（６）この式は５節の方法で計算できる。つぎのように変形される。

$$\int_1^\infty (1+x)^{-x}dx=\int_1^\infty e^{-x\log(1+x)}dx \tag{6.3}$$

ここで$t=x\log(1+x)$と変数変換すると

$$\int_1^\infty (1+x)^{-x}dx=\int_1^a (1+x)^{-x}dx+\int_{a\log(a+1)}^\infty \frac{d}{dt}g^{-1}(t)e^{-t}dt \qquad ここで g(x)=x\log(1+x) \tag{6.4}$$

となる。$a=20$とすると、関数$g(x)$は$x=20$で Taylor 展開できる。最初の８次までの Taylor 展開式を示すと次のようになる。

60.8904+3.9969*(x-a)+0.0249433*(x-a)^2-0.000413922*(x-a)^3+1.02838e-05*(x-a)^4
-3.06065e-07*(x-a)^5+1.0105e-08*(x-a)^6-3.56927e-10*(x-a)^7+1.32195e-11*(x-a)^8

この関数の逆関数$g^{-1}(x)$も$x=b=20\log 21=60.8904$において Taylor 展開できる。８次までの Taylor 展開式は、つぎのようになる。

20+0.250194*(x-b)-0.000390646*(x-b)^2+2.84179e-06*(x-b)^3-2.75054e-08*(x-b)^4
+3.04913e-10*(x-b)^5-3.66205e-12*(x-b)^6+4.63762e-14*(x-b)^7-6.09875e-16*(x-b)^8

これを利用して、積分すると積分値は 1.123355171926368 となる。

7. 結論

数値例（１）のように、無限遠点で Taylor 展開できる関数ならば容易に計算できる。しかしながら、多くの無限区間積分は、無限遠点が特異点となっており、Taylor 展開することができない。本論文では(4.1)の形式の無限区間積分に限定して計算しているが、このように限定しても、変数変換によって多くの積分が、(4.1)の形式に変形することができるため、それほど大きな制約とはならない。数値例（６）のように解析的に閉じた形にはならないが級数展開式としては多くの積分がこの形に変形できる。

この計算法で問題となるのは(4.2)でtで表されている積分の分割点をどのように選

ぶかである。経験的にはtは 10～30 程度数値を選べば、倍精度計算で十分な精度が確保できる。厳密には(4.4)式の右辺の積分項が十分小さくなれば、その程度の精度で計算できるが、実際に Taylor 展開をしてみないとこの積分項がどの程度の大きさになるかわからない点が問題である。

この計算法は複雑で計算時間がかかる用に思えるが、多くの時間は、(4.2)式の右辺第一項の積分の計算に費やす。この部分は通常の有限区間の数値積分であるから高速な積分法を選べばかなり短時間で計算できる。(4.2)の第二項は、関数を 1 回だけ Taylor 級数に展開するだけであるから、それほど大きな時間はかからないと推測される。変数変換を行う場合でも、変数変換は 1 回だけの計算であるから問題になるほど計算時間がかかることはないと思われる。

この計算方法は、Fourier 変換などに現れる無限区間振動型積分法と同様な計算法[5]である。振動型特有の計算方法として考案されたものであるが、通常の無限区間の積分も同様な方法で効率的に計算できることを示した。

参考文献

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

[2] Henrici, P., Applied Computational Complex Analysis, Vol. 1, John Wiely & Sons, New York,Chap. 1, 1974

[3]Davis P. J. , Rabinowitz P. (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、東京(1980)

[4] 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)

[5]. 平山　弘, " 部分積分法による半無限区間振動型積分の数値計算法",日本応用数理学会論文誌, Vol. 7, No.2, pp. 131-138, 1997

[6] 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, 12(2002), pp. 1-8

[7] 平山、黒石、平野 、 ” Taylor 展開を利用した変数変換による無限区間振動型関数の数値積分”，情報処理学会研究報告、No. 20, pp. 199-204(2004)

[8] 平山、金子、花井 、 ” Taylor展開を利用した高精度数値積分法”，情報処理学会研究報告、No. 19, pp. 151-156(2005)

[9] Rall,L. B. , Automatic Differentiation-Technique and Applications, Lecture Notes in Computer Science, Vol.120, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York(1981)

[10] 佐野理, キーポイント微分方程式, 岩波書店, 東京(1993)