Vol.2012-HPC-134 No.3
2012/6/1

Taylor 展開法による特異性を持つ関数の数値積分法

平　山　　　弘[†1]

Taylor 級数の四則演算および関数は C++言語によって容易にできる。四則演算、関数、条件文等で記述された C++言語で定義された関数は容易に Taylor 展開できる。

これを利用して、特異性を持つ関数を解析的に計算可能な部分と数値計算が容易に部分に分けることができる。このように分割できると、多くの数値積分を使い慣れた数値積分法で計算できる。

本論文では、代数・対数型の特異性 $|x-c|^\alpha(\log|x-c|)^n$（$\alpha > -1$ の実数, $n > 0$ の整数) を持つ関数の積分、Cauchy の主値積分 $(t-c)^{-1}$、Hadamardd の有限部分 $(x-c)^{-n}$（$n > 0$ の整数) の計算を扱った。

主に二重指数型数値積分公式を使ったが他の公式でも同様の結果が得られる思われる。

Numerical Integration Method for the Function with the Singularity by Taylor Series

Hiroshi Hirayama[†1]

The arithmetic operations and functions of Taylor series can be defined by C++ language easily. The functions represented by C++ language which consist of arithmetic operations, pre-defined functions and conditional statements can be expanded in Taylor series.

The function with singularity can be divided into the function to calculate analytically and the orther function to compute numerically using Taylor series methods. If it can be divided, it is easily computable by the numerical integration method which is used to many numerical problems.

In this paper, the function with an algebra and logarithm type singularity $|x-c|^\alpha(\log|x-c|)^n$(the real number of $\alpha > -1$, and integer of $n > 0$), Cauchy principal value integration with the singularity $(x-c)^{-1}$, and Hadamard finite-part integrals with the singularity $(x-c)^{-n}$ (integer of $n > 0$) are considered.

Although the double exponential integral formula was mainly used, the same result will be obtained if other formulas are used.

1. はじめに

有限区間 $[a, b]$ 上で滑らかな関数 $f(x)$ と特異性を持つ関数 $K(x; c)$ との積の形式になっている積分[1)2)5)6)7)9)10)]

$$I(a, b, c) = \int_a^b K(x; c) f(x) dx$$

を通常の数値積分法で計算することは困難である。ここで、$K(x; c)$ は、例えば、$|x-c|^\alpha(\log|x-c|)^n$（$\alpha > -1$ の実数, $n > 0$ の整数)、Cauchy の主値 $(t-c)^{-1}$、Hadamard の有限部分 $(x-c)^{-n}$（$n > 0$ の整数) 等の特異関数である。

特異性が積分の端点にある関数については、二重指数関数型数値積分法[11)] などの変数変換型数値積分法を使うことによって、計算できる。このため、特異性が $|x-c|^\alpha(\log|x-c|)^n$（$\alpha > -1$ の実数, $n > 0$ の整数) の場合、変数変換型の数値積分公式を使った研究はほとんど無い。特異点が積分区間の内部にある場合、単純に特異点で 2 分割すれば計算できるからと思われる。

Chebyshev 級数を利用した積分法や Gauss 型数値積分法[?)] など多くの数値積分法は、特異性に応じて、数値積分の公式を構築する必要がある。このため、特異性の種類の数だけ積分用のプログラムが準備する必要があり、扱いが非常に面倒である。

本論文では、Taylor 展開を利用して、特異性のある積分を特異性はあるが解析的に計算できる部分と特異性がない（または、特異性が弱い）部分に分割し、解析的に計算できる部分は、解析的に計算し、特異性がない部分は通常の数値積分公式で計算する方法を提案する。このような関数として, 次の 3 通りの場合を考える。すなわち代数・対数特異性、Cauchy の主値積分および Hadamard の有限部分である。これらはそれぞれ次のような積分で表現できる。

†1 神奈川工科大学
Kanagawa Institute of Technology

$$I_1 = \int_a^b |x-c|^{\alpha} (\log|x-c|)^n f(x)dx \tag{1}$$

$$I_2 = p.v. \int_a^b \frac{f(x)}{x-c} dx \tag{2}$$

$$I_3 = f.p. \int_a^b \frac{f(x)}{(x-c)^n} \tag{3}$$

について述べる。ここで、n は非負の整数、α は実数で $\alpha > -1$ である。

2. Taylor 級数演算

関数を Taylor 展開するための基本的な考え方[8] を説明し、その計算方法について簡単に述べる。

Taylor 級数の演算は、平行移動によって中心位置を任意の位置へ移すことができるので、一般性を失うことなしに、任意点を中心とした Taylor 級数を扱うことができる。ここでは原点を中心とした Taylor 級数を考え、次のように定義する。

$$f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + f_3 x^3 + f_4 x^4 \cdots \tag{4}$$

$$g(x) = g_0 + g_1 x + g_2 x^2 + g_3 x^3 + g_4 x^4 \cdots \tag{5}$$

$$h(x) = h_0 + h_1 x + h_2 x^2 + h_3 x^3 + h_4 x^4 \cdots \tag{6}$$

2.1 Taylor 級数の四則演算

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

$$h(x) = f(x) \pm g(x) \quad h_i = f_i \pm g_i \tag{7}$$

$$h(x) = f(x)g(x) \qquad h_i = \sum_{j=0}^{i} f_j g_{i-j} \tag{8}$$

$$h(x) = \frac{f(x)}{g(x)}$$

$$h_0 = \frac{f_0}{g_0}, \qquad h_i = \frac{1}{g_0}\left(f_i - \sum_{j=0}^{i-1} h_j g_{i-j}\right) \tag{9}$$

2.2 逆　　数

逆数の係数は次の式によって計算することができる。

$$h(x) = \frac{1}{f(x)}$$

$$h_0 = \frac{1}{f_0}, \quad h_i = -\frac{1}{f_0}\sum_{j=0}^{i-1} h_j f_{i-j} \tag{10}$$

2.3 二　　乗

Taylor 級数の二乗の計算には次のような関係式が成り立つ。この式によって、二乗の計算は乗算に比べ約二倍の速さで計算することができる。

$$h(x) = (f(x))^2 \tag{11}$$

係数が奇数の場合と偶数の場合に分けて考えれば

$$h_i = \begin{cases} 2\sum_{\mathrm{j=0}}^{\frac{\mathrm{i}-1}{2}} f_j f_{i-j} & i : odd \\ (f_{\frac{i}{2}})^2 + 2\sum_{\mathrm{j=0}}^{\frac{\mathrm{i}}{2}-1} f_j f_{i-j} & i : even \end{cases} \tag{12}$$

となり、これらを繰り返し計算する。

2.4 微積分演算

n 次までの Taylor 級数において $h(x)$ が $f(x)$ の微積分であるとき、$f(x)$ および $h(x)$ の係数は、それぞれ次のような関係になる。

$$h(x) = \frac{df(x)}{dx} \quad h_n = 0,\ h_i = (i+1)f_{i+1} \quad (i = 0, \cdots, n-1) \tag{13}$$

$$h(x) = \int_0^x f(t)dt \quad h_0 = 0,\ h_i = \frac{1}{i} f_{i-1} \quad (i = 1, \cdots, n) \tag{14}$$

2.5 指 数 関 数

指数関数は

$$h(x) = e^{f(x)} \tag{15}$$

とおくと

$$\frac{dh(x)}{dx} = h\frac{df(x)}{dx} \tag{16}$$

Vol.2012-HPC-134 No.3
2012/6/1

を満たす。両辺を Taylor 級数の演算にしたがって解いていき、係数を比較することによって、次のような関係が得られる。

$$h_0 = e^{f_0}, \quad h_i = \frac{1}{i}\sum_{j=1}^{i} j h_{i-j} f_j \tag{17}$$

Taylor 級数の指数関数計算の中には、指数関数の計算は一回しか入らないので、通常の四則演算と比べて計算コストはそれほど大きく違わない。このことは、対数関数や三角関数などでも同様である。

2.6 対数関数

対数関数は

$$h(x) = \log f(x) \tag{18}$$

のとき、この関数は次の微分方程式を満たす。

$$f(x)\frac{dh(x)}{dx} = \frac{df(x)}{dx} \tag{19}$$

この式から、指数関数の計算の場合と同様な方法で、次のような関係式が得られる。

$$\begin{aligned} h_0 &= \log f_0, \\ h_i &= \frac{1}{i f_0}\left(i f_i - \sum_{j=1}^{i-1} j h_j f_{i-j} \right) \end{aligned} \tag{20}$$

2.7 べき乗

べき乗は、α を定数として

$$h(x) = f(x)^{\alpha} \tag{21}$$

のとき、つぎの微分方程式を満たす。

$$f(x)\frac{dh(x)}{dx} = \alpha h(x)\frac{df(x)}{dx} \tag{22}$$

この式の両辺の係数を比較することで次の関係式が得られる。

$$\begin{aligned} h_0 &= f_0^{\alpha}, \\ h_i &= \frac{1}{i f_0}\sum_{j=1}^{i} \{(\alpha+1)j - i\} f_j h_{i-j} \end{aligned} \tag{23}$$

2.8 三角関数

三角関数

$$g(x) = \sin f(x), \quad h(x) = \cos f(x) \tag{24}$$

は、次の微分方程式を満たす

$$\frac{dg(x)}{dx} = h(x)\frac{df(x)}{dx}, \quad \frac{dh(x)}{dx} = -g(x)\frac{df(x)}{dx} \tag{25}$$

この式から、係数に対する次のような関係式が得られる。

$$\begin{aligned} g_0 &= \sin f_0, & h_0 &= \cos f_0 \\ g_i &= \frac{1}{i}\sum_{j=1}^{i} j f_j h_{i-j}, & h_i &= -\frac{1}{i}\sum_{j=1}^{i} j f_j g_{i-j} \end{aligned} \tag{26}$$

三角関数は、sin と cos を同時に計算すると、計算式が単純で見易い公式となる。これは sinh や cosh の場合も同様である。

3. 特異性のある関数の分割

関数 $f(x)$ の Taylor 展開式は容易に計算でき[8]、特異点 $x = c$ で m 次まで Taylor 展開した式を次のように置く。

$$f(x) \approx f_0 + f_1(x-c) + f_2(x-c)^2 + \cdots + f_n(x-c)^m \tag{27}$$

この式を利用すると、特異性のある被積分関数を特異性はあるが解析的に計算できる部分と特異性がない（または、特異性が弱い）部分に分割できる。

3.1 代数・対数型特異性のある関数

代数・対数型特異性のある関数 (2) は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_a^b |x-c|^{\alpha} (\log|x-c|)^n (f_0 + f_1(x-c) + \cdots + f_m(x-c)^m) dx \\ &+ \int_a^b |x-c|^{\alpha} (\log|x-c|)^n (f(x) - \{f_0 + f_1(x-c) + \cdots + f_m(x-c)^m\}) dx \end{aligned} \tag{28}$$

上式 (28) の最初の積分は、次の上段の式 (29) を使って、対数項 $(\log|x-x|)^n$ の次数を下げて、対数項を無くし、次の下段の式 (30) 式を使って解析的に計算できる。

$$\int_a^b |x-c|^{\alpha}(x-c)^m(\log|x-c|)^n dx = \left[\frac{|x-c|^{\alpha}(x-c)^{m+1}}{\alpha+m+1}(\log|x-c|)^n\right]_a^b - \frac{n}{\alpha+m+1}\int_a^b |x-c|^{\alpha}(x-c)^m(\log|x-c|)^{n-1}dx \quad (29)$$

$$\int_a^b |x-c|^{\alpha}(x-c)^m dx = \left[\frac{|x-c|^{\alpha}(x-c)^{m+1}}{\alpha+m+1}\right]_a^b \quad (30)$$

式 (28) の第 2 項の被積分関数は、

$$\begin{aligned}&|x-c|^{\alpha}(\log|x-c|)^n(f(x)-\{f_0+f_1(x-c)+\cdots+f_m(x-c)^m\})\\&\quad = |x-c|^{\alpha}(\log|x-c|)^n O((x-c)^{m+1})\end{aligned}$$

となり、m 回以上微分可能になり、かなり滑らかな関数となる。m を十分大きく取ると、多くの数値積分公式がこの第 2 項の積分に適用できるようになる。

第 2 項の被積分関数は $x=c$ 付近で、桁落ちが生じ、高精度計算が困難になる。この場合、Taylor 展開式を十分高次の項まで計算し、次の式の右辺を計算することによって高精度の計算が可能である。

$$\begin{aligned}&f(x)-\{f_0+f_1(x-c)+\cdots+f_m(x-c)^m\\&\quad = f_{m+1}(x-c)^{m+1}+f_{m+2}(x-c)^{m+2}+\cdots+f_{m+k}(x-c)^{m+k}+\cdots\end{aligned}$$

3.2 Cauchy の主値積分

Cauchy の主値積分は、次のように変形できる。

$$p.v.\int_a^b \frac{f(x)}{x-c}dx = \lim_{\varepsilon\to 0+}\left(\int_a^{c-\varepsilon}+\int_{c+\varepsilon}^b\right)\frac{f(x)}{x-c}dx \quad (31)$$

$$= p.v.\int_a^b \frac{f_0}{x-c}dx + \int_a^b \frac{f(x)-f_0}{x-c}dx \quad (32)$$

$$= f_0\log\left|\frac{b-c}{a-c}\right| + \int_a^b \frac{f(x)-f_0}{x-c}dx \quad (33)$$

この式変形によって、Cauchy の主値の計算には完全に特異性がなくなっていることに注意する必要がある。代数・対数特異点では、特異性の少ない積分に変形は可能であったが、完全に特異性をなくすことは出来なかった。右辺第 2 項の被積分関数は、$x=c$ 付近でそのままの計算式では桁落ちが生じ、高精度計算が難しいが、Taylor 展開式を利用して次のように変形すれば、容易に高精度計算が可能である。

$$\frac{f(x)-f_0}{x-c} = f_1 + f_2(x-c) + f_3(x-c)^2 + \cdots$$

特異性が完全になくなっているので、どのような数値積分公式も使える。

3.3 Hadamard の有限部分

Hadamard の有限部分も Cauchy の主値積分と同様に次のように通常の積分に変形できる。

$$\begin{aligned}f.p.\int_a^b \frac{f(x)}{(x-c)^n}dx &= f.p.\int_a^b \sum_{k=0}^{n-1}\frac{f_k}{(x-c)^{n-k}}dx\\&\quad + \int_a^b \frac{1}{x-c}\left(f(x)-\sum_{k=0}^{n-1}f_k(x-c)^k\right)dx\\&= \sum_{k=0}^{n-2}\frac{f_k}{n-k+1}\left(\frac{1}{(a-c)^{n-k+1}}-\frac{1}{(b-c)^{n-k+1}}\right)\\&\quad + f_{n-1}\log\left|\frac{b-c}{a-c}\right| + \int_a^b \frac{1}{x-c}\left(f(x)-\sum_{k=0}^{n-1}f_k(x-c)^k\right)dx\end{aligned}$$

この式からわかるように、Cauchy の主値の計算と同様に積分からは完全に特異性がなくなっていることに注意が必要である。これを使えば、通常の数値積分公式を使って容易に計算できる。最後の項の被積分関数は $x=c$ 付近で桁落ちが生じるが、Cauchy の主値の計算の場合と同様に高次の Taylor 展開式を使えば、桁落ちのない計算が可能である。

4. 数　値　例

4.1 代数・対数型特異性のある関数

代数的および対数的な特異性を持つ関数の数値積分の例を扱っている文献等が見つからなかったので、ここでは簡単な例を挙げる。

$$\int_{-1}^1 \frac{\log|x|}{\sqrt{|x|}}e^x dx = -8.164181664132062366 \quad (34)$$

関数 e^x を $x=0.0$ で Taylor 展開し 9 次まで表示すると次の様になる。

$$\begin{aligned}e^x &= 1+x+0.5x^2+0.166667x^3+0.0416667x^4+0.00833333x^5\\&\quad +0.00138889x^6+0.000198413x^7+2.48016e-05x^8+2.75573e-06x^9\end{aligned}$$

この結果を利用し、二重指数型数値積分法で、積分を計算すると標本点数 31 で、積分の値

が 2.68e-11 となった。それに解析計算部分を加えると-8.164181664132062366 という結果になった。

この問題では、20 次の Taylor 展開式を利用して計算した。20 次の Taylor 展開式を利用すれば、微分係数が 20 次程度まで被積分関数が連続であることから、倍精度の計算では十分であると推測して計算を試みた。問題にもよるが、通常倍精度の計算では 20 次程度の連続性があれば、多くの数値積分をフルに活用できる。

4.2 Cauchy の主値積分

Cauchy の主値積分の例として長谷川等[7] の例を計算する。

$$\int_{-1}^{1} \frac{e^{4(x-1)}}{x-\frac{1}{2}} dx = 0.670531441650725646 \tag{35}$$

この式の $e^{4(x-1)}$ を $x = 0.5$ で、Taylor 展開し、8 次まで表示すると

$$\begin{aligned} e^{4(x-1)} &= 0.135335 + 0.541341(x-0.5) + 1.08268(x-0.5)^2 \\ &+ 1.44358(x-0.5)^3 + 1.44358(x-0.5)^4 + 1.15486(x-0.5)^5 \\ &+ 0.769907(x-0.5)^6 + 0.439947(x-0.5)^7 + 0.219974(x-0.5)^8 \end{aligned}$$

Taylor 展開は 20 次まで計算し利用した。数値積分の部分は二重指数関数型数値積分公式で計算した。このとき標本点数は 132 で積分値は 0.819212 であった。結果として 0.670531441650725646 が得られた。

長谷川等の専用の数値積分法と比較すると、あまり良い結果ではないが、他の専用数値積分と同程度の性能を発揮すると思われる。

5. まとめ

ここでは、Taylor 展開式を利用して、特異性のある積分を解析的に計算できる部分と数値積分が容易な部分に分ける方法を提案した。

このように変換すると、自分の好みに合った数値積分法でいろいろな特異性を持つ関数を容易に数値積分が可能で誤差評価も利用した数値積分法の誤差評価になる。

ここでは主に二重指数型数値積分公式を使い、いろいろな数値積分の計算を試みたが、他の数値積分法ではあまり利用していないので、今後いろいろな数値積分法を試みる予定である。

参考文献

1) Bialecki B.,A Sinc quadrature rule for Hadamard finite-part integral, Numer. Math 57(1990), 263–269
2) Bialecki B., A Sinc-Hunter quadrature rule for Cauchy principal value integrals, Math. Comput. 55(1990), 665–681
3) Davis P.J., Rabinwitz 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, (1981)
4) Elliott D., Gauss type quadrature rule for Cauchy principal value integrals, Math. Comput 33(1979), 301–309
5) 長谷川武光, 鳥居達生, 対数特異性をもつ関数の不定積分に対する自動積分法, 情報処理学会論文誌 28(1987), 907–914
6) 長谷川武光, 鳥居達生, べき型特異性をもつ関数の不定積分に対する自動積分法, 日本応用数理学会論文誌 1(1991), 1–11
7) 長谷川武光, 鳥居達生, コーシーの主値積分に対する自動積分法, 情報処理学会誌,25(1984),857–913
8) 平山, 舘野, 浅野, 川口, Taylor 級数演算ライブラリの使用法, 東北大学情報シナジーセンター大規模科学計算システム広報 SENAC, 40(2007) 29–68
9) 緒方秀教, 杉原正顯, 森正武,Cauchy の主値及び Hadamard の有限部分積分に対する DE 公式, 日本応用数理学会論文誌 3(1993), 309–322
10) Paget D. F., Numerical evaluation of Hadamard finite-part integrals, Numer. Math 36(1981), 447–453
11) Takahasi, H. and Mori, M., Double exponential formula for numerical integration, *Publ. RIMS*, Kyoto Univ.,9(1974),121–141