寄 書

数値積分における特異点の除去に関して*

——Cauchy 主値積分の場合——

野田松太郎** 室田 敏 行*** 田中冨士男****

1. 序

特異点を有する関数の数値積分に関しては，古来 Kantrovich[1] その他により，特異点を除去するためのいろいろな工夫がなされている[2]．本稿では，特に Schrödinger 方程式その他の取り扱いにおいて必要な Cauchy 主値積分を能率よく求める一つの方法を提案したい．

2. 従来の方法

Schrödinger 方程式において，しばしばあらわれる主値積分は次の形をしている．

$$I=\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{f(x)}{x^2-a^2}dx \tag{1}$$

ここで，a は任意定数であり，$f(x)$ は連続関数である．ふつう，(1)式を数値的に求める場合に，半無限積分区間を有限区間 $[0, r]$ に cut-off し

$$\begin{aligned} I &\fallingdotseq \mathcal{P}\int_0^r \frac{f(x)}{x^2-a^2}dx \\ &=\int_0^r \frac{g(x)-g(a)}{x-a}dx+g(a)\mathcal{P}\int_0^r\frac{dx}{x-a} \\ &\doteq\int_0^r \frac{g(x)-g(a)}{x-a}dx+g(a)\log\frac{r-a}{a} \end{aligned} \tag{2}$$

とする．ただし，$g(x)=\dfrac{f(x)}{x+a}$ である．(2) 式はあきらかに $x=a$ で特異点を持たない．

3. 新しい方法

ここで，(1)式の半無限積分を cut-off なしに数値的に求める方法を考察する．まず，恒等式，

$$\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{dx}{x^2-a^2}=0 \tag{3}$$

に着目すると，(2) 式の導出と同様の手法で，

$$\begin{aligned} I &=\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{f(x)}{x^2-a^2}dx \\ &=\int_0^\infty \frac{f(x)-f(a)}{x^2-a^2}dx \end{aligned} \tag{4}$$

となる．明らかに (4) 式もまた，$x=a$ における特異点は消去されている．さらに，半無限区間 $[0, r]$，の積分に対して，Gauss の数値積分公式を用い，その $[-1, 1]$ の分点を u_i とすると，半無限区間の分点 x_i は

$$x_i=\frac{1+u_i}{1-u_i} \tag{5}$$

により得られるので，cut-off は不要になる．

4. 計 算 例

以下，公式 (4) を用いた計算例を示そう．

i) $f(x)=\dfrac{1}{\sqrt{x}}$

この積分は容易にでき，

$$I=\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}(x^2-1)}=-\frac{\pi}{2}\cot\frac{\pi}{4}$$

となる．これを数値的に処理するため，端点 $x=0$ の特異点を，$\sqrt{x}=t$ とおくことにより除き，さらに公式 (4) を用いると，

$$I=\int_0^\infty \frac{1}{t^2-1}\left(\frac{2}{t^2+1}-1\right)dt \tag{6}$$

となり，Gauss 数値積分公式をいくつかの分点数に対して用いた結果が表1に示されている．

---

* On Removing Singularities in the Numerical Integration ——Case of Cauchy Principal Value Integration——, by Matu-Tarow Noda (Department of Electronic Engineering, Ehime University), Toshiyuki Murota (Department of Physics, Hokkaido University) and Fujio Tanaka (Nara Technical College)

** 愛媛大学工学部
*** 北海道大学理学部
**** 奈良工業高等専門学校

表 1　$\mathscr{P}\int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x}\,(x^2-1)}$ の数値積分．Nはガウスの積分の点数

真値$=-\frac{\pi}{2}\cot\frac{\pi}{4}=-1.57080$					
N	4	6	8	10	12
結　果	−1.56863	−1.57073	−1.57079	−1.57080	−1.57080

ii）$f(x)=\sin(ax)/x$

このとき，積分値は

$$I=\mathscr{P}\int_0^\infty \frac{\sin(ax)}{x(x^2-b^2)}dx=\frac{\pi}{2b^2}(1-\cos(ab))$$

被積分関数は振動関数であるが，**表 2** のごとく結果はかなりよい．

表 2　$\mathscr{P}\int_0^\infty \frac{\sin(ax)}{x(x^2-b^2)}dx\left(=\frac{\pi}{2b^2}(1-\cos(ab))\right)$ の数値積分．Nはガウス積分の積分点数

（a）$a=2$，$b=1$ の場合　（b）$a=1$，$b=1$ の場合

N	結　果	相対誤差	N	結　果	相対誤差
4	2.38562	0.07244	4	0.68796	0.04727
6	2.30324	0.03541	6	0.73659	0.02008
8	2.18579	0.01733	8	0.71945	0.00366
10	2.27211	0.02141	10	0.72023	0.00258
12	2.19757	0.01209	12	0.71082	0.01561
真値=2.22448			真値=0.72209		

5. 附　　記

上に求めた公式（4）は，さらに広く用いることができる．

被積分関数の分母が一般に x^n-a の型を持つなら，$x^n=y^2$ として，

$$\int_0^\infty \frac{f(x)}{x^n-a}dx=\frac{2}{n}\int_0^\infty \frac{f(y^{2/n})y^{(2/n)-1}}{y^2-a}dy, \quad (7)$$

と変形することにより，公式（4）に帰着される．なお，このとき，主値積分

$$\mathscr{P}\int_0^\infty \frac{dx}{x^n-a}=0$$

が成立するのは，（3）のごとく，$n=2$ のときのみであることを注意しておく．

6. 謝　　辞

本論の作成にあたり，幾多のご助言をいただいた愛媛大学工学部の山本哲朗氏に深く感謝します．

参 考 文 献

1) Kantrovich, L. V.: "Approximate Calculation of Certain Types of Definite Integrals". Mat Sb. **41** (1934), 235～245.

2) たとえば，
Squire, W.: "Integration for Engineers and Scientists", Elsevier. (1970).
Davis, P. J. and Rabinowitz, P: "Numerical Integration", Blaisdell Pub. Co., Ma. (1967).

(昭和 46 年 4 月 2 日受付)