

周回積分の数値積分

平 山 弘^{†1}

有限区間の積分は、関数論の Cauchy の積分表示を使うと、周期関数の一周に渡る積分に変形できる。この周期関数の積分に台形公式を適用することによって、高性能の数値積分公式が得られる。

この積分の積分路を円にするため、Joukowski 変換を利用した。このように積分路を円にすると、誤差解析が容易になる。標本点数 N が十分大きな数値であるとき、積分の誤差 E は、 $E = ae^{-bN}$ (ここで a と b は正の定数とする。) となり、高性能な数値積分公式になることがわかる。この誤差評価式から、効率的に積分をするために、積分区間を分割する方法を提案する。

Numerical Integration Method for Contour Integral

HIROSHI HIRAYAMA^{†1}

The integral of analytical function over a finite interval can be transformed into a contour integral by means of Cauchy's integral representation. The direct application of trapezoidal rule to this contour integral gives an effective method of numerical numerical integration.

We propose the integration method to take a circular contour as that of this integration by Joukowski's transformation. It is shown that the error of this numerical integration method is ae^{-bN} as the sampling number N tends large number. where a and b are positive constants.

From this error evaluation formula, in order to efficiently integration, we propose a method of dividing the interval of integration.

1. はじめに

台形公式の誤差評価式とみなすことができる公式として、Euler-Maclaurin の総和公式がある。この公式は長田^{?)} やいろいろな文献^{?)?)?)} 等で紹介されている。

$$h \left\{ \frac{1}{2} f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(a + kh) + \frac{1}{2} f(b) \right\} - \int_a^b f(x) dx \\ = \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} \{ f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \} + R_m \quad (1)$$

ここで、 B_n は Bernoulli 数 (Bernoulli Number)、 $h = \frac{b-a}{n}$ であり、

$$|R_m| \leq \frac{h^{2m+2} |B_{2m+2}|}{(2m+2)!} \int_a^b |f^{(2m+2)}(t)| dt \quad (2)$$

である。

この公式から容易にわかるように、

$$f^{(k)}(a) = f^{(k)}(b) \quad (k = 0, 1, \dots, m) \quad (3)$$

であるならば、台形公式は、積分を高精度で近似することになる。

この公式から、(3) を満たすようにした公式として、伊理・森口・高沢の公式 (IMT 公式) および高橋・森の二重指数関数型数値積分公式 (DE 公式)^{?)} が有名である。これらの公式は、変数変換を行い積分区間の両端で微係数を含めて、急減少関数に変形し、(3) の条件を満たさせるものである。これらの数値積分法は、変数変換後の積分区間が有限区間、無限区間の違いがあるが、積分区間の両端で関数値や微係数を共に急減少させゼロに近付けるため、(3) の条件が任意の m について自動的に満たされる。

(3) の条件を満たすのは、 $f(x)$ が周期関数で、その自然数倍の周期に渡る積分である。特に一周に渡る積分は効率的に計算できる。被積分関数数を何らかの方法で、周期関数に変形し、その積分に台形公式を適用すれば、高精度の数値積分公式になると期待できる。ここでは、関数を複素数まで拡張し、この条件を満たすように周回積分に変形する数値積分公式を提案する。このようにすれば、非常に効率的な数値積分公式が得られることを示す。

周回積分に変形された積分は、変形可能な閉じた積分路を含むが、ここでは簡単化のために円に限定する。一般に積分路を円にすることはできないが、積分区間を区間 $[-1, 1]$ になるように変数変換し、さらに、Joukowski 変換 ($w = \frac{1}{2}(z + \frac{1}{z})$) を行えば、原点を中心とする円を積分路にとることができる。

^{†1} 神奈川工科大学

Kanagawa Institute of Technology

積分路を円に限定すると、この積分の誤差評価も容易である。誤差 E は分割数 N が十分大きいとき、

$$E = a\left(\frac{1}{R}\right)^N = ae^{-bN} \quad b = \log R \quad (4)$$

ここで、 R は、変数変換後の関数 $f(x)$ の特異点と原点までの距離である。この式からわかるように、数値積分の誤差は分割数 N の指数関数的に減少していることがわかる。他の有力な計算法より効率的な計算法であることがわかる。

2. 周回積分への変形

関数 $f(x)$ が実軸上の有限区間 $[a, b]$ を含む複素平面上的領域 D で正則であるとする。このとき、領域 D 上の点 x の近傍で、次のように Cauchy の積分表示が可能である。

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_c \frac{f(z)}{z-x} dz \quad (5)$$

ここでは、積分路 c は点 x を含む D 内の閉曲線である。したがって、区間 $[a, b]$ の積分は、次のようになる。

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \frac{1}{2\pi i} \int_c f(z) \left[\int_a^b \frac{dx}{z-x} \right] dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_c \log \left(\frac{z-a}{z-b} \right) f(z) dz \end{aligned} \quad (6)$$

積分区間内で特異性を持つ場合、被積分関数は、次のように表現する。

$$f(x) = w(x)g(x) \quad (7)$$

ここで、 $w(x)$ は特異性を持つ部分、 $g(x)$ は積分区間に内で正則な部分である。 $w(x)$ と $g(x)$ の選び方は一意性はないが、以下の議論ではどのようにとっても問題はない。Cauchy の積分表示から、次のようになる。

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \int_a^b w(x) \frac{1}{2\pi i} \int_c \frac{g(z)}{z-x} dz dx \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_c g(z) \left[\int_a^b \frac{w(x)}{z-x} dx \right] dz \end{aligned} \quad (8)$$

[と] で囲んだ部分は、関数 $w(x)$ の有限 Hilbert 変換と呼ばれる。有限 Hilbert 変換例^{?)} を表 1 に示す。

ここで、 $\Gamma(x)$ はガンマ関数、 $F(a, b; c; x)$ は Gauss の超幾何関数である。有限 Hilbert 変換表の上の 2 つは、超幾何関数を使った 3 番目の特別な場合である。

表 1 有限 Hilbert 変換表

区間	関数	Hilbert 変換
$[a, b]$	1	$\log \left(\frac{z-a}{z-b} \right)$
$[0, 1]$	$\frac{1}{\sqrt{x}}$	$\frac{1}{\sqrt{z}} \log \left(\frac{\sqrt{z}+1}{\sqrt{z}-1} \right)$
$[0, 1]$	$x^a(1-x)^b$	$\frac{\Gamma(a+1)\Gamma(b+1)}{\Gamma(a+b+2)} \frac{1}{z} F \left(a+1, 1; a+b+2; \frac{1}{z} \right)$
$[0, 1]$	$\log x$	$-\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2 z^k}$

(9) のように変形された積分では、被積分関数の積分区間内の特異性は、Hilbert 変換の中に取り込まれるため、この積分には、特異性はなくなる。

3. 誤差解析

台形公式を使って、周回積分の値を計算したときの誤差を求める。周回積分に変形された積分は次のような形で表される。

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int f(z) dz \quad (9)$$

ここで、 $f(z)$ は、次のように Laurent 展開する。

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k + \sum_{k=1}^{\infty} a_{-k} z^{-k} \quad (10)$$

(10) の第 1 項を (9) の式に代入し積分すると、積分 I_1 は、原点を中心とした半径 r の円を積分路にとり、 N 等分に分割し、台形公式を適用して計算すると

$$I_1 = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+1} \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(k+1)hj} \right\} \quad (11)$$

ここで、 $h = 2\pi/N$ である。積分路の近くに特異点がある場合、Jukowski 変換 $z = \frac{1}{2}(w + \frac{a^2}{w})$ と変数変換すれば、常に積分路を円にとることができる。(11) の $\{ \}$ の中の和を S_N とする

と、等比数列であることを利用すると

$$S_N = \frac{e^{i(k+1)Nh} - 1}{e^{i(k+1)h} - 1} \quad (12)$$

$(k+1)h = (k+1)2\pi/N$ が 2π の倍数であるとき、すなわち $k+1$ が N の倍数であるとき、(12) の分母は 0 となるため、この式は意味を持たない。この場合、(11) の定義式に戻って計算する。定義式に戻って計算すると、各項は 1 となるので、 $S = N$ となる。それ以外は、(12) の分子は $i(k+1)N2\pi/N = 2\pi(k+1)i$ となり、分子は 0 となるため、 $S = 0$ となる。したがって、 $k+1$ が N の倍数になる場合だけの和をとると、次のようになる。

$$I_1 = \sum_{m=1}^{\infty} a_{mN-1} r^{mN} \quad (13)$$

ここで

$$a_{mN-1} = \frac{1}{2\pi i} \int_c \frac{f(z)}{z^{mN}} dz \quad (14)$$

であることから、(13) は、次のようになる。

$$I_1 = \frac{1}{2\pi i} \int_c f(z) \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{r}{z}\right)^{mN} dz = \frac{1}{2\pi i} \int_c \frac{\left(\frac{r}{z}\right)^N f(z)}{1 - \left(\frac{r}{z}\right)^N} dz \quad (15)$$

(10) の第 1 項は正則関数だから、その値は Cauchy の定理により 0 になる。したがって、(15) が (10) の第 1 項から生じる誤差となる。(15) の積分を評価するために、原点を中心とした半径 $R_1 (> r)$ の円周上での積分を考える。この円周上での関数 $f(x)$ の最大値を M_1 とすると

$$E_1 = |I_1| \leq \frac{R_1 \left(\frac{r}{R_1}\right)^N}{1 - \left(\frac{r}{R_1}\right)^N} M_1 < r M_1 \left(\frac{r}{R_1}\right)^{N-1} \quad (16)$$

(16) の半径 R_1 は、(14) の条件を満たすものであれば、どのようにも選ぶことができる。(16) の式を見ると R_1 はできるだけ大きくすれば、誤差は小さくなる。 R_1 の最大値は、(14) から、 $f(z)$ の原点に最も近い特異点までの距離となる。

(10) の第 2 項についても同様な誤差評価が可能である。この第 2 項の積分は、原点を中心とした半径 r の円を積分路にとり、 N 等分に分割し、台形公式を適用して計算する。 z^{-1} の項の部分は (9) の積分値 I と一致するので、それ以外の部分を I_2 とすると

$$I_2 = \frac{1}{N} \sum_{k=2}^{\infty} a_{-k} r_2^{-k+1} \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(-k+1)hj} \right\} \quad (17)$$

積分を誤差を評価するために、原点を中心とした半径 $R_2 (< r)$ の円周上での積分を考える。

この円周上での関数 $f(x)$ の最大値を M_2 とすると

$$E_2 = |I_2| \leq \frac{R_2 \left(\frac{R_2}{r}\right)^N}{1 - \left(\frac{R_2}{r}\right)^N} M_2 < R_2 M_2 \left(\frac{R_2}{r}\right)^{N-1} \quad (18)$$

したがって、誤差 E は

$$E = E_1 + E_2 \leq r M_1 \left(\frac{r}{R_1}\right)^{N-1} + R_2 M_2 \left(\frac{R_2}{r}\right)^{N-1} \quad (19)$$

上の式が最小になるのは、相加相乗平均の不等式 ($A + B \geq 2\sqrt{AB}$) から、等式が成り立つとき誤差が最小になる。等式が成り立つのは $A = B$ のときだから、 $r = \sqrt{R_1 R_2}$ とき誤差が最小になる。このとき誤差は、次のようになる。

$$E = a \left(\frac{R_2}{R_1}\right)^{2N} \quad a = (M_1 + M_2) \sqrt{M_1 M_2} \quad (20)$$

積分区間を $[-1, 1]$ と規格化すると、 $R_2 = 1$ となる。 R_1 を R と置くと、(20) は、次のように書ける。

$$E = a \left(\frac{1}{R}\right)^{2N} = a e^{-bN} \quad b = 2 \log R \quad (21)$$

ここでは、この式の b を収束率と呼ぶことにする。この数値は正の実数である。収束率が大きい場合、計算が容易な積分で、小さい場合計算が難しい積分となる。積分区間を 2 分割したとき、分割した各積分の収束率が元の積分の収束率の 2 倍以上になるならば、分割したほうが効率的に計算できる。

4. 数 値 例

4.1 積分区間以外特異点がない問題

$$I_1 = \int_0^1 \log x dx = -1$$

これは、非常に大きな円を積分路にとると精度の良い値が得られる。 $R = 10$ 、 $R = 1000$ 、 $R = 100000$ と選び、分割数が 1 から 10 程度まで計算した。もかなり良い計算結果が得られる。以下の表 2 に分割数 1 から 10 程度までの結果を示す。計算は 4 倍精度で計算した。この問題は、 R を大きくすれば、いくらでも効率的に計算できるので収束率は無限大となる問題である。この結果は、理論と非常によく合うことがわかる。

この問題では、標本点が 1 個でも計算できる。これは、 $\log x$ の Hilbert 変換の Laurent 展開の正の次数の係数がすべてゼロであるからである。もし、問題が $p_n(x)$ を n 次の多項式としたとき、被積分関数が $p_n(x) \log x$ であるとき、Laurent 展開式は、 n 次を超える次数の係数はゼロであるから、 n 個の標本点を取り、十分大きな半径の積分路で計算すれば、

非常に精度の良い計算ができる。ここで、関数の共役性を使って積分すれば、 n 個の標本点でその約 2 倍の $2n - 1$ の次数の持つ多項式まで正確に計算できる。これはガウス型数値積分公式と似た性質である。

表 2 $I = \int_0^1 \log x dx$ の誤差

半径 R	分割数 N	誤差 E	E_N/E_{N-1}
10	1	0.24×10^{-1}	
	2	0.11×10^{-2}	0.46×10^{-1}
	3	0.42×10^{-4}	0.38×10^{-1}
	4	0.19×10^{-5}	0.45×10^{-1}
	5	0.80×10^{-7}	0.42×10^{-1}
	6	0.37×10^{-8}	0.46×10^{-1}
	7	0.16×10^{-9}	0.46×10^{-1}
	8	0.78×10^{-11}	0.49×10^{-1}
	9	0.35×10^{-12}	0.49×10^{-1}
	10	0.17×10^{-13}	0.49×10^{-1}
1000	1	0.25×10^{-3}	
	2	0.11×10^{-6}	0.44×10^{-1}
	3	0.42×10^{-10}	0.38×10^{-1}
	4	0.19×10^{-13}	0.45×10^{-1}
	5	0.80×10^{-17}	0.42×10^{-1}
	6	0.37×10^{-20}	0.46×10^{-1}
	7	0.16×10^{-23}	0.43×10^{-1}
	8	0.77×10^{-27}	0.48×10^{-1}
	9	0.35×10^{-30}	0.45×10^{-1}
100000	1	0.25×10^{-3}	
	2	0.11×10^{-6}	0.44×10^{-5}
	3	0.42×10^{-10}	0.38×10^{-5}
	4	0.19×10^{-13}	0.45×10^{-5}
	5	0.80×10^{-17}	0.42×10^{-5}

4.2 積分区間から少し離れたところに特異点がある問題

$$I_1 = \int_0^1 \frac{x}{e^x - 1} dx$$

この被積分関数の特異点は、 $e^{2\pi i}$ であり、かなり積分区間から離れている。この積分は、

かなり計算しやすいと考えられる。積分区間が $[0, 1]$ であることと、特異点の位置から、最良の積分路の半径は $R = 5.025$ で収束率は 1.61 で 1 個分割数を増やすと 10 進数で約 0.7 桁精度が増すことがわかる。分割数を 2 から 16 までの計算結果を表 3 示す。二重指数型数値積分法で計算すると、 $N = 48$ で $E = 3.4 \times 10^{-12}$ となり効率的に計算できる。

表 3 $I = \int_0^1 \frac{x}{e^x - 1} dx$ の値と誤差

分割数 N	積分値 I	誤差 E
3	0.7741952213401221	0.11
4	0.7776090092895461	0.39×10^{-2}
5	0.7775008493325695	0.11×10^{-3}
6	0.7775047575949214	0.39×10^{-5}
7	0.7775046301103593	0.13×10^{-6}
8	0.7775046342247294	0.41×10^{-8}
9	0.7775046341095238	0.12×10^{-9}
10	0.7775046341122789	0.28×10^{-11}
11	0.7775046341122500	0.29×10^{-13}
12	0.7775046341122481	0.19×10^{-14}
13	0.7775046341122483	0.20×10^{-15}
14	0.7775046341122483	0.12×10^{-16}
15	0.7775046341122483	0.66×10^{-18}
16	0.7775046341122483	0.32×10^{-19}

4.3 積分区間の近くに特異点がある問題

$$I_2 = \int_0^1 \frac{2dx}{2 + \sin 10\pi x} dx = \frac{2}{\sqrt{3}}$$

積分区間が $[0, 1]$ であることと、特異点の位置から、最良の積分路の半径は $R = 1.043$ で収束率は 0.042 で 1 個分割数を増やすと 10 進数で約 0.02 桁精度が増すことがわかる。かなり計算しにくい問題である。分割数を 20 から 20 毎に 260 までと 277 の計算結果を表?? 示す。二重指数型数値積分法で計算すると、 $N = 387$ で $E = 1.4 \times 10^{-10}$ となり同等程度の効率で計算できる。

4.4 他の数値積分法との比較

数値例で挙げた問題などを他の方法との比較行った。その結果を表??に示す。本方法以

表 4 $I = \int_0^1 \frac{2dx}{2 + \sin 10\pi x}$ の値と誤差

分割数 N	積分値 I	誤差 E
20	1.1515334336915164	0.20×10^{-01}
40	1.1564109105282511	0.73×10^{-02}
60	1.1525970696932327	0.23×10^{-02}
80	1.1554287547872820	0.13×10^{-02}
100	1.1546929149920257	0.33×10^{-04}
120	1.1547052168677036	0.13×10^{-04}
140	1.1547089211255855	0.13×10^{-04}
160	1.1546995407043144	0.23×10^{-05}
180	1.1547006928950404	0.33×10^{-06}
200	1.1547005770333518	0.53×10^{-07}
220	1.1547005200911238	0.33×10^{-07}
240	1.1547005409527808	0.53×10^{-08}
260	1.1547005381889019	0.53×10^{-09}
277	1.1547005384129454	0.63×10^{-12}

外は、二宮⁷⁾からの引用である。本方法では、複素共役の関係式を利用して関数計算回数を約半数になるようにしてある。本計算はすべて複素数で計算しているため、標本点数は少ない場合でも、計算時間は多くなる可能性がある。区間幅が広い場合、DE 公式と比較した場合、あまり良い性能が発揮できない。このような場合、積分区間を分割して計算したほうが効率的である。

表 5 いろいろな積分法との比較

No.	積分区間	被積分関数	本方法	DE	IMT
1	[0,1]	$\sqrt{x}$	1.0×10^{-12} 14	3.3×10^{-12} 44	4.9×10^{-13} 128
2	[0,1]	$\frac{2}{2+\sin(10\pi x)}$	6.3×10^{-13} 277	1.4×10^{-10} 387	2.2×10^{-12} 509
3	[0,1]	$\frac{x}{e^x-1}$	3.2×10^{-20} 16	3.4×10^{-12} 48	6.6×10^{-13} 127
4	[0,10]	$\frac{50}{\pi(2500x^2+1)}$	2.2×10^{-13} 396	1.0×10^{-12} 211	1.5×10^{-11} 255
5	[0,1]	$\log x$	4.2×10^{-15} 3	3.9×10^{-13} 44	2.0×10^{-11} 127

5. 積分区間分割による計算効率化

被積分関数の特異点が積分区間の近いところにあると非常に効率の悪い計算になる。この場合、特異点の近くで積分区間を分割すると、効率的になることがある。分割しないで高精度で計算しようとしたとき、2つ以上に積分区間を分割し、それぞれを同じ高精度で計算する。このときの関数計算回数の合計が元の積分の関数計算回数より少なくなる場合がある。同じ計算回数でも精度が良く計算できる場合もある。

収束率は、特異点が積分路の近くにあるとき、およそ積分区間の中心から特異点までの距離を積分区間の長さで割った値の対数である。上の例題で扱った次の積分を考える。

$$I = \int_0^{10} \frac{50}{\pi(2500x^2+1)} dx = \frac{\tan^{-1} 500}{\pi} \quad (22)$$

これを同じ程度の収束性を持つ積分に分割する。分割する点の座標を $x = a$ とするとおよそ次の式が成り立つ。

$$\frac{1/50 + a/2}{a} = \frac{1/50 + a + (10-a)/2}{10-a}$$

これを解き、正の数を選ぶと次のようになる。

$$a = \frac{\sqrt{501}-1}{50} = 0.42766058571199$$

この数値を使って、積分を分割すると区間 $[0, a]$ の積分は標本点数 101 個で、誤差は 3.8×10^{-14} となり区間 $[a, 10]$ の積分は標本点数 101 個で、誤差は 4.4×10^{-19} となった。合わせると標本点数 202 個で、誤差は 3.8×10^{-14} となる。分割しない場合、標本点数 396 個、誤差は 2.2×10^{-13} だから標本点数も少なくなり、精度が向上していることがわかる。

さらに次の積分を計算することを考える。

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{x+1/50} = \log 51 \quad (23)$$

これを、 $[0, a]$ と $[a, 1]$ の区間に分けて、積分を計算する。二つの積分が同程度の収束率の場合、効率的になるので

$$\frac{1/50 + a/2}{a} = \frac{1/50 + a + (1-a)/2}{1-a}$$

これを解くと 2 個の解が得られる。その中から正の数の方を選ぶと、約 $a = 0.1228285$ となる。このように分割しガウスの数値積分公式を使って計算する。区間 $[0, 1]$ の積分に対しては、20 点のガウス型数値積分公式を適用する。区間 $[0, 0.122]$ と区間 $[0.122, 1]$ の積分に対しては、それぞれ 10 点のガウス型数値積分公式を適用する。区間を分割しない場合、20 点で誤差は 5.74×10^{-5} 二つに積分区間を分割した場合、合計 20 点で誤差は 8.12×10^{-7} となった。このように、周回積分だけでなく、ガウス型数値積分等でも区間分割が有効であ

ることがわかる。

6. ま と め

有限区間の積分は、Cauchy の積分表示を使うと、周期関数の 1 周期に渡る積分に変換できる。周期関数の 1 周期に渡る積分は、台形公式を使って効率的に計算できることが知られているので、この変換によって効率的に数値積分の計算できる。被積分関数が特異点を持たないとき、積分路の半径は大きく取れるので非常に効率的に計算できる。

被積分関数の特異点が知られているとき、積分の収束率が推定でき、計算の難しさが定義できる。この数値を利用して、積分区間を複数に分割すれば、トータルとして効率的に計算できる場合がある。特に収束率が小さい場合有効である。

参 考 文 献

- 1) Abramowitz M. and Stegun I.A., Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, (1970)
- 2) 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)
- 3) 今井功: 応用超関数論 I, II, サイエンス社, 1981
- 4) 二宮市三, 適応型ニュートン・コーツ積分法の改良, 情報処理学会誌,21(1980),504-513.
- 5) 長田直樹, お話:数値解析第3回 オイラー・マクローリンの公式, <http://www.cis.twcu.ac.jp/osada/riki/riki2008-7.pdf>
- 6) 篠原能材, 数値解析の基礎, 7 章, 日新出版, (1978)
- 7) 杉原, 室田, 数値計算法の数理, 12 章, 岩波書店, (2007)