

Hadamard の有限部分積分の数値積分

平山 弘^{1,a)} 小宮 聖司^{1,b)}

概要：有限項で打ち切った Taylor 級数の四則演算および関数計算は、プログラミング言語を使って容易に行うことができる。C++言語や Fortran 等のオペレーター・オーバーロード機能を使えば通常の計算のように容易に計算できる。

このプログラムを使うと、これらのプログラミング言語で記述された関数は容易に Taylor 展開できる。Taylor 展開法を使うと Hadamard の有限部分積分は、解析的に計算できる複数の単純な Hadamard の有限部分積分と 1 個の Cauchy の主値積分および見かけ上の特異性を持つ正則な積分に分解できる。複数の単純な Hadamard の有限部分積分と 1 個の Cauchy の主値積分は、解析的に計算し、残りの見かけ上の特異性を持つ正則な積分を数値積分を適用して計算することによって、容易に計算できる。

キーワード：数値的 Taylor 展開、微分方程式の級数展開法、数値積分法

Numerical Integration of Hadamard Finite-part Integrals

HIROSHI HIRAYAMA^{1,a)} KOMIYA SEIJI^{1,b)}

Abstract:

The arithmetic operations and function calculations for Taylor series truncated by finite terms, can be easily defined using programming languages. Using operator overload functions such as C++ or Fortran makes it very easy to use. Using above program, functions written in these programming languages can easily be expanded into Taylor series.

Using the Taylor expansion method, Hadamard finite-part integral can be decomposed into multiple simple Hadamard finite-part integrals, simple Cauchy principal value integrals, and a regular integral with apparent singularity. Multiple Simple Hadamard finite-part integration and Cauchy principal value integral are calculated analytically. A regular integral with apparent singularity is computed by numerical a integration method. By adding the above integration results, Hadamard finite-part can be obtained.

Keywords: Numerical Taylor series, series expansion method for differential equations,

1. はじめに

有限項で打ち切った Taylor 級数の四則演算、Taylor 級数の数学関数の計算は容易に定義することができる。これを使えば、プログラムの形で与えられた数値計算用の関数を容易に Taylor 級数に展開 [2], [3] することができる。

ここで扱う Taylor 級数は、浮動小数点数を係数とする有限項で打ち切った 1 変数の Taylor 級数で、その係数を浮動小数点数の有限個の 1 次元配列として表現したものである。Taylor 展開法は、自動微分 [5], [9] の一つの実現法で、1 変数の問題では効率的な計算法である。

本論文では 2 つの型の Hadamard の有限部分積分 [4] について述べる。積分区間 $[a, b]$ 内で正則な関数を $f(x)$ 、積分区間 $[a, b]$ 内の $x = \lambda$ に n 次 ($n \geq 2$) の極を持つ関数を $g(x)$ とすると、2 つの型の Hadamard の有限部分積分は次のような積分になる。これ以降記号 f.p. は有限部分積分を表すものとする。

¹ 神奈川工科大学創造工学部自動車システム開発工学科
Department of Vehicle System Engineering, Faculty of Creative Engineering, Kanagawa Institute of Technology, Shimo-Ogino 1030, Atsugi, Kanagawa, 243-0292, Japan

a) hirayama@kanagawa-it.ac.jp

b) kom@eng.kanagawa-it.ac.jp

$$A = \text{f.p.} \int_a^b \frac{f(x)}{(x-\lambda)^n} dx \quad B = \text{f.p.} \int_a^b g(x) dx \quad (1)$$

(1) の積分 A のような有限部分積分を A 型の Hadamard の有限部分積分, 積分 B のように n 次の極を持つが A 型でない積分を B 型の Hadamard の有限部分と呼ぶ。この積分は、次のように定義される。

$$\text{f.p.} \int_a^b \frac{f(x)}{(x-\lambda)^n} := \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \{P - Q\} \quad (2)$$

ここで、 P 、 Q は

$$P = \left(\int_a^{\lambda-\epsilon} + \int_{\lambda+\epsilon}^b \right) \frac{f(x)}{(x-\lambda)^n} dx \quad (3)$$

$$Q = 2 \sum_{l=1}^{[n/2]} \frac{f(n-2l)(\lambda)}{(n-2l)!(2l-1)!} \epsilon^{-2l+1} \quad (4)$$

である。極限を取ると、 P の項は発散する。 P から発散する Q 項を除いた部分を Hadamard の有限部分と呼ぶ。この定義から、次の積分を計算する。

$$\text{f.p.} \int_a^b \frac{c}{(x-\lambda)^n} dx = \begin{cases} c \log \left| \frac{b-\lambda}{a-\lambda} \right| & (n=1) \\ \frac{-c}{n-1} \left(\frac{1}{(b-\lambda)^{n-1}} - \frac{1}{(a-\lambda)^{n-1}} \right) & (n \geq 2) \end{cases} \quad (5)$$

上の式は、途中の特異点を無視して、積分することに一致する。この結果から、(1) の式で、 $f(x)$ を $x = \lambda$ で次のように $n-1$ 次まで Taylor 展開する。その展開式を $f_{n-1}(x)$ とすると次のように書ける。

$$f_{n-1}(x) = f_0 + f_1(x-\lambda) + f_2(x-\lambda)^2 + \cdots + f_{n-1}(x-\lambda)^{n-1}$$

この式を、(2) に代入し、(5) の式を適用すると

$$\begin{aligned} & \text{f.p.} \int_a^b \frac{f(x)}{(x-\lambda)^n} dx \\ &= \text{f.p.} \int_a^b \frac{f_n(x)}{(x-\lambda)^n} dx + \int_a^b \frac{f(x) - f_{n-1}(x)}{(x-\lambda)^n} dx \\ &= \sum_{k=0}^{n-2} \frac{-f_k}{n-k-1} \left(\frac{1}{(b-\lambda)^{n-k-1}} - \frac{1}{(a-\lambda)^{n-k-1}} \right) \\ &+ f_{n-1} \log \left| \frac{b-\lambda}{a-\lambda} \right| + \int_a^b \frac{f(x) - f_{n-1}(x)}{(x-\lambda)^n} dx \quad (6) \end{aligned}$$

このように変形すると、通常の計算式になる。

B 型の主値積分では、その n 次の極の位置は議論を簡単にするため既知とする。部分積分を Taylor 級数を使って数値計算上の問題点を回避して計算する方法を提案する。(1) で A の積分と B の積分が同じ積分なら $f(x) = (x-\lambda)^n g(x)$ の関係が成り立つ。したがって、 $(x-\lambda)^n g(x)$ を $f(x)$ とみなし Taylor 展開すれば、(6) の式を利用して、B 型の積分も計算できる。 $f(\lambda)$ の値は、通常、 $f(\lambda) = \lim_{x \rightarrow \lambda} (x-\lambda)g(x)$ のように極限として定義されるが、Taylor 展開式を利用すると容易に計算できる。

Hadamard の有限部分積分の数値計算法の多くは、A

型に限定されていることが多い。この論文では B 型の Hadamard の有限部分積分として次の積分を扱う。これは、longman[6] の主値積分の変形したものである。

$$L = \text{f.p.} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{e^x}{(\sin x - \cos x)^2} dx,$$

この積分は B 型の Hadamard の有限部分積分でその数値計算法はあまり研究されていない。

Taylor 級数を利用して、Hadamard の有限部分積分の被積分関数を極を持つ部分と見かけ上の特異点を持つ正則な部分に分けることができる。被積分関数を数値的に分母が $x - \lambda$ である部分を分離する。分離された部分は有限部分の定義に従って解析的に計算でき、残りの正則な部分は数値積分法で計算して、積分値を計算する方法を提案する。

本計算法はこれまで知られている Hadamard の有限部分積分の計算法よりも、適用範囲が広く、ほぼ確実に計算結果を得られる方法であることを示す。

2. Taylor 級数の計算法

ここでは、関数を Taylor 級数に展開する方法を説明する。詳しくは Rall[9] および 平山等 [3] を参照せよ。

Taylor 展開式に関連した公式として、次の式がある。部分積分を繰り返すことによって、Taylor 展開式とその誤差項である積分が得られる。

$$\begin{aligned} f(x) &= f(a + (x-a)) = f(a) + \int_a^x f'(t) dt \\ &= f(a) + f'(a)(x-a) + \int_a^x (t-a) f''(t) dt \\ &= f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!} (x-a)^2 + \cdots \\ &+ \frac{f^n(a)}{n!} (x-a)^n + \int_a^x \frac{(t-a)^n}{n!} f^{(n+1)}(t) dt \quad (7) \end{aligned}$$

この式は関数 $f(x)$ の x に $a + (x-a)$ を代入し展開することによって、Taylor 展開式が計算できることがわかる。 $a + (x-a)$ は x を点 $x = a$ で Taylor 展開したものである。(7) の式に x に $x+a$ に変換すると次の式が得られる。

$$\begin{aligned} f(a+x) &= f(a) + \int_0^x f'(t+a) dt \\ &= f(a) + f'(a)x + \frac{f''(a)}{2!} x^2 + \cdots \\ &+ \frac{f^n(a)}{n!} x^n + \int_0^x \frac{(x-t)^n}{n!} f^{(n+1)}(t+a) dt \quad (8) \end{aligned}$$

もし Taylor 級数の四則演算が定義され、関数が四則演算で定義されていれば、 $f(x)$ の x に $a+x$ を代入することによって、Taylor 展開式得られる。

展開位置が同じ Taylor 級数間の演算は、一般性を失うことなく、原点で展開された Taylor 級数であると仮定することができる。Taylor 級数の展開位置は、平行移動により任意の位置に移動できるため、原点で展開された Taylor

級数のみを考慮すれば十分である。 n 次の Taylor 級数を次のように定義する。

$$f(x) = f_0 + f_1x + f_2x^2 + f_3x^3 + f_4x^4 \cdots + f_nx^n \quad (9)$$

$$g(x) = g_0 + g_1x + g_2x^2 + g_3x^3 + g_4x^4 \cdots + g_nx^n \quad (10)$$

$$h(x) = h_0 + h_1x + h_2x^2 + h_3x^3 + h_4x^4 \cdots + h_nx^n \quad (11)$$

2.1 Taylor 級数の四則演算

n 次の Taylor 級数の四則演算プログラムは容易に作成できる。以下の公式は、原点で展開された級数だけでなく、任意の点で展開された Taylor 級数でも有効である。

(1) 加減算 $h(x) = f(x) \pm g(x)$

$h(x) = f(x) \pm g(x)$ となるので、この式に (9) の $f(x)$ 、(10) の $g(x)$ および (11) の $h(x)$ を代入し、同じ次数の係数を等しいとすると次の関係式が得られる。

$$h_j = f_j \pm g_j (j = 0, \dots, n)$$

(2) 乗算 $h(x) = f(x)g(x)$

$h(x) = f(x)g(x)$ となるので、この式に (9) の $f(x)$ 、(10) の $g(x)$ および (11) の $h(x)$ を代入し、同じ次数の係数を等しいとすると次の関係式が得られる。

$$h_j = \sum_{k=0}^j f_k g_{j-k} (j = 0, \dots, n)$$

(3) 除算 $h(x) = \frac{f(x)}{g(x)}$

$h(x) = \frac{f(x)}{g(x)}$ であるから、この式に (9) の $f(x)$ 、(10) の $g(x)$ および (11) の $h(x)$ を代入し、同じ次数の係数を等しいと置く。 $g_0 \neq 0$ ならば、次のように $h(x)$ の係数が計算できる。

$$h_0 = \frac{f_0}{g_0}, \quad h_j = \frac{1}{g_0} \left(f_j - \sum_{k=0}^{j-1} h_k g_{j-k} \right) \quad (j \geq 1)$$

もし $f_i = g_i = 0$ ($i = 0, \dots, j$) ならば、分子と分母を x^{j+1} で割り、その式を上の計算式で除算を行うことができる。

(4) 逆数 $h(x) = \frac{1}{f(x)} = \text{rcp}(f(x))$

逆数を $h(x)$ とすると $h(x) = \frac{1}{f(x)}$ である。これから、 $h(x)f(x) = 1$ となる。この式に (9) と (11) を代入し展開し、同じ次数の係数を等しいと置く。 $g_0 \neq 0$ ならば、逆数の係数は次の式によって計算することができる。

$$h_0 = \frac{1}{f_0}, \quad h_n = -\frac{1}{f_0} \sum_{k=0}^{n-1} h_k f_{n-k} \quad (k = 1, \dots, m)$$

これを使えば、多くの関数を展開することができる。四則演算だけでなく、多くの関数も原理的には計算可能である。

2.2 Taylor 級数の数学関数計算

多くの基本関数は、単純な微分方程式を満たす。この微分方程式を利用することにより、Taylor 級数の関数を容易に計算できる。

(1) 指数関数 $h(x) = e^{f(x)}$

もし $h(x) = e^{f(x)}$ ならば、次の微分方程式を満たす。

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

(9) と (11) をこの微分方程式に代入し、同じ次数の係数を比較すると次の関係式が得られる。

$$h_0 = e^{f_0}, \quad h_j = \frac{1}{j} \sum_{k=1}^j k h_{j-k} f_k \quad (j \geq 1)$$

$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots$ の x に $f(x)$ を代入しても、計算できるが上の漸化式を計算する方法は、効率的に計算できる。定数項だけを計算することを考える。

$$h_0 = 1 + f_0 + \frac{f_0^2}{2!} + \frac{f_0^3}{3!} + \cdots$$

f_0 が小さい数値ならば効率的に計算できるが、5 とか 10 程度以上の数値だとすると値が収束するまで計算しなければならないなど非効率的である。また、-5 とか -10 程度以下の数値だとすると桁落ちが生じ、計算効率だけでなく計算精度も悪くなる。この定数項はプログラミング言語に準備されている指数関数を使って $\exp(f_0)$ と計算すべきである。1 次の項の係数は、定数項と同じ方法でも計算できるが、指数関数は微分方程式を満たすため、係数間には漸化式が成り立つ。 $h_1 = h_0 f_1$ の関係式から容易に計算できる。

n 次の項の係数も $(n-1)$ 次以下の項の係数から、係数間に成り立つ漸化式を利用して容易に計算できる。この性質は、以下の多くの関数で成り立つ。

(2) 対数関数 $h(x) = \log f(x)$

もし $h(x) = \log f(x)$ ならば、次の微分方程式を満たす。

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

(9) と (11) をこの微分方程式に代入し、同じ次数の係数を比較すると次の関係式が得られる。この式から、次のような関係式が得られる。

$$h_0 = \log f_0, \quad h_j = \frac{1}{j f_0} \left(n f_j - \sum_{k=1}^{j-1} k h_k f_{j-k} \right), \quad (j = 1, \dots, m)$$

(3) べき乗関数 $h(x) = f(x)^\alpha$ (α は定数)

もし $h(x) = f(x)^\alpha$ (α は定数) ならば、次の微分方程式を満たす。

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

(9) と (11) をこの微分方程式に代入し、同じ次数の係数を比較すると次の関係式が得られる。

$$h_0 = f_0^\alpha, \quad h_j = \frac{1}{j f_0} \sum_{k=1}^j (k(\alpha+1) - j) f_k h_{j-k} \quad (j \geq 1)$$

$\alpha = \frac{1}{2}$ とすると平方根を計算できる。

(4) 三角関数 $g(x) = \sin f(x)$, $h(x) = \cos f(x)$

もし $g(x) = \sin f(x)$, $h(x) = \cos f(x)$ ならば、次の連立微分方程式を満たす。

$$\begin{aligned} \frac{dg(x)}{dx} &= h(x) \frac{df(x)}{dx} \\ \frac{dh(x)}{dx} &= -g(x) \frac{df(x)}{dx} \end{aligned}$$

(9)、(10) と (11) をこの微分方程式に代入し、同じ次数の係数を比較すると次の関係式が得られる。

$$\begin{aligned} g_0 &= \sin f_0, & g_j &= \frac{1}{j} \sum_{k=1}^j k h_{j-k} f_k \\ h_0 &= \cos f_0, & h_j &= -\frac{1}{j} \sum_{k=1}^j k g_{j-k} f_k \quad (j = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

三角関数は、このように $\sin$ 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。 $\sin$ と $\cos$ を同時に計算する関数 $\sin_cos(x,s,c)$ を準備すると便利である。 $\tan$ はこのようにして得られた $\sin$ と $\cos$ の Taylor 級数をわり算することによって得る。この事情は、以下の双曲線関数 $\sinh$ と $\cosh$ の場合も同様である。

(5) 微分 $h(x) = \frac{df(x)}{dx}$

$h(x) = \frac{df(x)}{dx}$ のとき、次のような関係式が得られる。

$$h_n = 0, \quad h_j = (j+1) f_{j+1} \quad (j = 0, \dots, n)$$

このように、最高次数の係数 h_n は、0 とする。

(6) 積分 $h(x) = \int_0^x f(t) dt$

$h(x) = \int_0^x f(t) dt$ のとき次のような関係式が得られる。

$$h_0 = 0, \quad h_j = \frac{1}{j} f_{j-1} \quad (j = 1, \dots, n)$$

定数項は、積分定数なので、任意で良いが、ここで作成したプログラムでは、0 とする。

(7) 逆三角関数

逆三角関数には次の 3 関数がある。

$$h(x) = \sin^{-1} f(x) = \text{asin}(f(x))$$

$$h(x) = \cos^{-1} f(x) = \text{acos}(f(x))$$

$$h(x) = \tan^{-1} f(x) = \text{atan}(f(x))$$

これらの関数を微分すると、次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \sin^{-1} f(x) &= \frac{f'(x)}{\sqrt{1-f(x)^2}} \\ \frac{d}{dx} \cos^{-1} f(x) &= -\frac{f'(x)}{\sqrt{1-f(x)^2}} \\ \frac{d}{dx} \tan^{-1} f(x) &= \frac{f'(x)}{1+f(x)^2} \end{aligned}$$

定数項を考慮して、積分すると次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \sin^{-1} f(x) &= \sin^{-1} f_0 + \int_0^x \frac{f'(t)}{\sqrt{1-f(t)^2}} dt \\ \cos^{-1} f(x) &= \cos^{-1} f_0 - \int_0^x \frac{f'(t)}{\sqrt{1-f(t)^2}} dt \\ \tan^{-1} f(x) &= \tan^{-1} f_0 + \int_0^x \frac{f'(t)}{1+f(t)^2} dt \end{aligned}$$

他の数学関数についても、同様な微分方程式が得られる場合がある。得られた微分方程式から、Taylor 級数の数学関数を計算することができる。

これらの計算式から分かるように、 n 次の Taylor 級数が与えられれば、それらの級数の加減乗算、指数対数関数、三角関数等が n 次まで正確に計算できる。

2.3 ゼロ割を含む計算

次の関数を $x = 0$ で Taylor 展開する。

$$f(x) = \frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} x^n \quad (12)$$

ここで、 B_n はベルヌ-イ数 (Bernoulli number) である。単純に $f(0)$ とすると、分子分母共にゼロとなるため、ゼロ割が生じ Taylor 展開式の定数項は計算出来ない。このような場合にも Taylor 級数として計算すれば、容易に計算出来る。(12) は、次のように、分子と分母に分けて Taylor 展開すると次のようになる。

$$f(x) = \frac{x}{e^x - 1} = \frac{x}{x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots}$$

分子と分母を x で割ると次のようになる。

$$f(x) = \frac{x}{e^x - 1} = \frac{1}{1 + \frac{x}{2!} + \frac{x^2}{3!} + \dots}$$

この式から、 $f(0) = 1$ が得られる。Taylor 級数の割り算を行うことによって、 $f(x)$ の Taylor 展開式が得られる。この場合、計算次数が 10 次ならば、得られる Taylor 級数の次数は 10 次の式として得られるが、最後の 10 次の係数は精度は悪くなる。これは、分子と分母を x で割る演算は、分子、分母ともに 1 次だけ次数低下が生じる。次数低下が起こっている Taylor 展開式同士の割り算の結果は、次数低下した結果になるためである。

C++ 言語用のプログラムは以下のようになる。

```
1 : #include "taylor_template.h"
2 : typedef taylor_template<double> taylor ;
3 : int main()
4 : {
5 :     taylor x, y ;
6 :     x = taylor( 0.0, 0.0, 1.0);
7 :     y = x/(exp(x)-1) ;
8 :     cout << y << endl ;
```

9 : }

ここで、コンストラクター $\text{taylor}(a, b, c)$ は $b+c(x-a)$ を定義する。この計算では、除算演算で分子と分母の Taylor 級数の定数項がゼロになるので、分子と分母を x で割ってから除算を行っている。(12) の $f(x)$ を $x=0$ で Taylor 展開し 10 次まで表示すると以下ようになる。係数の絶対値が 10^{-10} 以下のものはゼロとして、表示しないと以下のようになる。

$$1-0.5*x+0.0833333*x^2-0.00138889*x^4+3.30688e-05*x^6-8.2672e-07*x^8+2.08768e-08*x^{10}$$

この計算は、分数を使うと厳密に計算できる。以下にその結果を示す。

$$1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} - \frac{x^4}{720} + \frac{x^6}{30240} - \frac{x^8}{1209600} + \frac{x^{10}}{47900160}$$

これから、次のベルヌーイ数が得られる。 $B_0 = 1, B_1 = -\frac{1}{2}, B_2 = \frac{1}{6}, B_3 = 0, B_4 = -\frac{1}{30}, B_5 = 0, B_6 = \frac{1}{42}, B_7 = 0, B_8 = -\frac{1}{30}, B_9 = 0, B_{10} = \frac{5}{66}$

3. Hadamard の有限部分の計算

次の A 型の Hadamard の有限部分積分を考える。

$$I = \text{f.p.} \int_a^b \frac{f(x)}{(x-\lambda)^n} dx \quad (13)$$

ここで、 $a < \lambda < b$, $f(x)$ は、積分区間では端点を除いて正則であるとする。 n は正の整数とする。関数 $f(x)$ を $x = \lambda$ で $n-1$ 次まで Taylor 展開する。

$$f_{n-1}(x) = f_0 + f_1(x-\lambda) + \cdots + f_{n-1}(x-\lambda)^{n-1} \quad (14)$$

(14) の式を (13) の式に代入すると

$$\begin{aligned} I &= \sum_{k=0}^{n-2} \text{f.p.} \int_a^b \frac{f_k}{(x-\lambda)^{n-k}} dx + \text{p.v.} \int_a^b \frac{f_{n-1}}{x-\lambda} dx \\ &+ \int_a^b \frac{f(x) - f_{n-1}(x)}{(x-\lambda)^n} dx \\ &= \sum_{k=0}^{n-2} \frac{f_k}{n-k-1} \left(\frac{1}{(a-\lambda)^{n-k-1}} - \frac{1}{(b-\lambda)^{n-k-1}} \right) \\ &+ f_{n-1} \log \left| \frac{b-\lambda}{a-\lambda} \right| + \int_a^b \frac{f(x) - f_{n-1}(x)}{(x-\lambda)^n} dx \quad (15) \end{aligned}$$

ここで、p.v. は、Cauchy の主値積分を意味する。(15) の式の最後の積分は、端点を除く積分区間内で正則であるが、見かけ上の特異点 $x = \lambda$ があるため、ゼロ割りが起こり計算ができない。ゼロ割りが起こらなくても、見かけ上の特異点 $x = \lambda$ の近くでは、計算精度の低下が生じる。この場合、 $f(x)$ の Taylor 展開式をさらに高次の m 次まで展開する。その結果を積分項の被積分関数に代入すると

$$\frac{f(x) - f_{n-1}(x)}{(x-\lambda)^n} = \begin{cases} \sum_{k=0}^{m-n} f_{k+n}(x-\lambda)^k & |x-\lambda| < \epsilon \\ \frac{f(x) - f_{n-1}(x)}{(x-\lambda)^n} & |x-\lambda| \geq \epsilon \end{cases} \quad (16)$$

ここで、 ϵ は、(16) の Taylor 展開式が収束する範囲となる。これまでの Hadamard の有限部分積分の計算法は、数値積分する方法に依存していたが、本計算法は、数値積分法に依存しないので、この問題に適切な数値積分法を選ぶことができる。誤差解析は、選んだ数値積分法の誤差解析が適用できる。

次に B 型の Hadamard の有限部分積分を考える。簡単化のため特異点 $x = \lambda$ と次数 n は既知とする。

$$I = \text{f.p.} \int_a^b g(x) dx \quad (17)$$

ここで、 $a < \lambda < b$, $g(x)$ は、積分区間では端点と $x = \lambda$ を除いて正則であるとする。 n は正の整数とする。 $g(x)$ の積分区間内の特異点と次数は既知なので、 $(x-\lambda)^n g(x)$ は $x = \lambda$ で正則なので、 $x = \lambda$ で Taylor 展開する。通常多くの関数で Taylor 展開の計算ができる。 $f(x) = (x-\lambda)^n g(x)$ と置くと、A 型の Hadamard の有限部分と同様に計算できる。

4. Hadamard の有限部分の数値計算例

4.1 特異点が $(x-\lambda)^{-n}$ の形になっている Hadamard の有限部分積分

ここでは、例として、厳密な値が知られている [1], [7]、次の Hadamard の有限部分積分を行う。

$$\begin{aligned} I &= \text{f.p.} \int_{-1}^1 \frac{(1-x)^{1/4}(1+x)^{-1/4}}{(x-\lambda)^2} dx \\ &= -\frac{\pi}{2}(1+\lambda)^{-5/4}(1-\lambda)^{-3/4} \quad (18) \end{aligned}$$

この時、分子 $f(x) = (1-x)^{1/4}(1+x)^{-1/4}$ で分母は $(x-\lambda)^2$ である。ここで、 $\lambda = 0.1$ とする。分子 $f(x)$ を、 $x = \lambda = 0.1$ で Taylor 展開する。20 次まで計算し、10 次まで表示すると次のようになる。

$$\begin{aligned} f(x) &= 0.95107-0.480338*(x-0.1)+0.0727785*(x-0.1)^2 \\ &-0.164181*(x-0.1)^3+0.0326109*(x-0.1)^4 \\ &-0.0975269*(x-0.1)^5+0.0137508*(x-0.1)^6 \\ &-0.0689768*(x-0.1)^7+0.00257903*(x-0.1)^8 \\ &-0.0538721*(x-0.1)^9-0.00499005*(x-0.1)^{10} \end{aligned}$$

計算結果の表示は 6 桁の精度であるが、実際は倍精度浮動小数点の精度で計算されている。この計算結果を (19) に代入する。ただし、 $f_1(x) = 0.95107 - 0.480338(x - 0.1)$ とする。(15) のように変形すると次のようになる。

$$\begin{aligned} I &= \text{f.p.} \int_{-1}^1 \frac{0.95107}{(x-\lambda)^2} dx + \text{p.v.} \int_{-1}^1 \frac{-0.480338}{x-\lambda} dx \\ &+ \int_{-1}^1 \frac{f(x) - f_1(x)}{(x-0.1)^2} dx \\ &= 0.95107 \left(\frac{1}{-1-0.1} - \frac{1}{1-0.1} \right) - 0.480338 \log \left| \frac{1-0.1}{-1-0.1} \right| \\ &+ \int_{-1}^1 \frac{f(x) - f_1(x)}{(x-0.1)^2} dx \\ &= -1.82496 + \int_{-1}^1 \frac{f(x) - f_1(x)}{(x-0.1)^2} dx \quad (19) \end{aligned}$$

(19) の最後の積分の被積分関数は、 $x = 0.1$ でゼロ割が生じ計算できなくなる。 $x = 0.1$ 付近では精度よく計算できない問題がある。このため (15) のように変形する。 $|x - 0.1| < 0.0588$ のとき

$$\begin{aligned} \frac{f(x) - f_1(x)}{(x - 0.1)^2} &= 0.0727785 - 0.164181(x - 0.1) \\ &+ 0.0326109(x - 0.1)^2 - 0.0975269(x - 0.1)^3 \\ &+ 0.0137508(x - 0.1)^4 - 0.0689768(x - 0.1)^5 \\ &+ 0.00257903(x - 0.1)^6 - 0.0538721(x - 0.1)^7 \\ &- 0.00499005(x - 0.1)^8 \end{aligned} \quad (20)$$

$|x - 0.1| \geq 0.0588$ のとき

$$\frac{f(x) - f_1(x)}{(x - 0.1)^2} = \frac{f(x) - (0.95107 - 0.480338(x - 0.1))}{(x - 0.1)^2} \quad (21)$$

(19) の積分を被積分関数の分子を $x = 0.1$ で Taylor することによって、(19) の形に変形できる。(19) の式に現れる積分を数値積分によって計算し値を求める。この積分は $x = 0.1$ が見かけ上の特異点となるので、被積分関数は見かけ上の特異点付近では、その関数の Taylor 展開を使って計算し、それ以外の点では、見かけ上の特異点の特異点の影響は少ないので、被積分関数を計算する。このように定義されている被積分関数は積分区間の端点で特異性を持つので本計算では oura の二重指数型数値積分法 (DE 法) のプログラム [8] を使って計算した。この問題の性能評価を表 1 に示す。本方法は 20 次の Taylor 展開を使って要求精度 10^{-9} として計算した。この表に現れていないが、Taylor 展開法を利用するためには関数を Taylor 展開する必要がある。この Taylor 展開するための時間が必要である。

4.2 特異点が陽的に現れていない Hadamard の有限部分積分

次のような Hadamard の有限部分積分を計算することを考える。

$$L = \text{f.p.} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{e^x}{(\sin x - \cos x)^2} dx \quad (22)$$

特異点は $x = \frac{\pi}{4}$ であるが容易にわかる。

$$f(x) = (x - \frac{\pi}{4})^2 \frac{e^x}{(\sin x - \cos x)^2} \quad (23)$$

この $f(x)$ を $x = \frac{\pi}{4}$ で Taylor 展開する。20 次で計算すると 18 次まで正しい結果の 20 次の Taylor 展開が得られる。(24) の計算で分子と分母ともに定数項と 1 次の項が 0 となるため、分子と分母を x^2 で割る。分子と分母共に 18 次の Taylor 展開式となる。その割り算の結果は 18 次の Taylor 展開式となる。得られる 20 次の Taylor 展開式は 19 次と 20 次の係数が 0 とした時の割り算結果になる。この計算結果を 8 次まで示すと次のようになる。ただし、展開位置の 0.785398 を $\frac{\pi}{4}$ に置き換えている。

$$\begin{aligned} f(x) &= 1.09664 + 1.09664(x - \frac{\pi}{4}) + 0.913867(x - \frac{\pi}{4})^2 \\ &+ 0.54832(x - \frac{\pi}{4})^3 + 0.301576(x - \frac{\pi}{4})^4 \\ &+ 0.143172(x - \frac{\pi}{4})^5 + 0.0649135(x - \frac{\pi}{4})^6 \\ &+ 0.0270534(x - \frac{\pi}{4})^7 + 0.0110081(x - \frac{\pi}{4})^8 \end{aligned}$$

(15) のように変形すると次のようになる。ここで $f_1(x) = 1.09664 + 1.09664(x - \frac{\pi}{4})$ とすると

$$\begin{aligned} L &= \text{f.p.} \int_{-1}^1 \frac{1.09664}{(x - \frac{\pi}{4})^2} dx + \text{p.v.} \int_{-1}^1 \frac{1.09664}{x - \frac{\pi}{4}} dx \\ &+ \int_{-1}^1 \frac{f(x) - f_1(x)}{(x - \frac{\pi}{4})^2} dx \\ &= 1.09664 \left(\frac{1}{-\frac{\pi}{4}} - \frac{1}{\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}} \right) + 1.09664 \log \left| \frac{\frac{\pi}{2} - 0.1}{-0.1} \right| \\ &+ \int_{-1}^1 \frac{f(x) - f_1(x)}{(x - \frac{\pi}{4})^2} dx \\ &= -5.11593 + \int_{-1}^1 \frac{f(x) - f_1(x)}{(x - \frac{\pi}{4})^2} dx \end{aligned} \quad (24)$$

要求精度 10^{-9} で計算計算した。標本点数 33、積分値 L は -3.574640574290993 、この値は要求精度 10^{-10} の時の数値を真値と仮定すると絶対誤差は $2.9e - 13$ 、相対誤差は $8.2e - 14$ であった。標本点数 33 個の中の 33 個は Taylor 展開式を利用して関数値を計算している。

5. 終わりに

Taylor 展開を数值的に行う方法を簡単に説明した。この方法を利用すれば、解析的には非常に難しいと思われる B 型の積分の被積分関数も容易に Taylor 展開ができる。Taylor 級数を利用すると Hadamard の有限部分積分を解析的に計算することができる特異性を持つ部分と特異性を持たない積分に分割できる。特異性を持たない積分は、見かけ上の特異点を持つため見かけ上の特異点で Taylor 展開し、見かけ上の特異点を除去可能である。

このように変形できれば、いろいろな数値積分法が計算手段として利用できる。これまでの研究では、積分法が決まっている場合が多いが本方法では、いろいろな数値積分法が使える。

計算性能については、計算法が異なるために、厳密な比較は不可能であるが、これまでの研究された手法と同等以上の性能があると思われる。

参考文献

- [1] Bialecki B., A Sinc quadrature rule for Hadamard finite-part integral, Numer. Math 57(1990), 263–269.
- [2] 平山弘, 小宮聖司, 佐藤創太郎, 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), 1–8.
- [3] 平山弘, 館野裕文, 浅野直之, 川口隆史, 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.
- [4] Johan DeKlerk, Cauchy principal value and hypersingular integrals, AIP Conference Proceedings, 1389(2011),

表 1 Taylor 展開法、緒方の方法 (DE rule)、Bialecki の方法の性能比較

λ	exact	Taylor		DE rule		Bialecki	
		N_{total}	$ error $	N_{total}	$ error $	N_{total}	$ error $
-0.3	-2.015068	37	0.13e-14	56	0.6e-13	145	0.1e-12
0.0	-1.570796	37	0.65e-14	56	0.5e-14	74	0.9e-14
0.1	-1.509027	37	0.54e-14	56	0.1e-13	145	0.2e-13
0.9	-3.959842	35	0.17e-13	56	0.2e-13	149	0.2e-10
0.999	-117.517863	71	0.24e-12	114	0.3e-08	165	0.2e-07

456–459 ; <https://doi.org/10.1063/1.3636762>.

- [5] 久保田光一, 伊理正夫, アルゴリズムの自動微分と応用, コロナ社, 東京, 1998.
- [6] Longman I. M., On numerical evaluation of Cauchy principal values of integrals, MTAC, 12(1958), 205–207.
- [7] 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, 日本応用数学会論文誌, 3(1993), 309–322.
- [8] T. Ooura, Ooura's Mathematical Software Packages, <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~ooura/>
- [9] Rall, L.B., Automatic Differentiation-Technique and Applications, Lecture Notes in Computer Science, Vol.120, Springer-Verlag, New York(1981)