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

2004－ARC－157 (34)
2004－HPC－ 97 (34)
2004／3／3

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

平山 弘、黒石雅英、平野照比古

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振動型積分：$\int_0^\infty f(x)g(h(x))dx$，《ここで $f(x)$ はゆっくりした減少関数であり、 $g(x)$ は $\sin x$, $\cos x$ または $J_n(x)$ （整数次の第 1 種 Bessel 関数)ある。また $h'(x)>0$ であるとする。》を容易に漸近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 for Oscillatory Functions over Infinite Interval by Substitution Integral using Taylor Seires

Hiroshi Hirayama, Masahide Kuroishi and Teruhiko Hirano

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 for oscillatory functions over infinite interval : $\int_0^\infty f(x)g(h(x))dx$, where $f(x)$ is slowly decaying function, $g(x)$ is $\sin x$, $\cos x$ or $J_n(x)$ (the first kind Bessel function of integer order) and $h'(x)>0$, can be computed easily by substitution integral and partition integration method. 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機能、C++言語の機能（operator overload）を使い、有限項で打ち切ったべき級数級数間の四則演算、べき級数級数の関数演算を定義する。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べき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べき級数展開の形で得られる。得られたべき級数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。さらに、このべき級数展開をある次数の Padé 展開式に変形すると、任意次数の A 安定な数値計算方法[3]を与えることができる。

本論文では、この方法を偏微分方程式を解くのに利用することを提案する。この計算法を使うと、安定で高精度の計算結果を得ることができる。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. べき級数展開

関数をべき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、Rall[6]や平山等[3]などに述べられている。

2.1 べき級数級数の四則演算

べき級数級数の四則計算のプログラムは、以下のように簡単に作ることができる。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 $$\mathrm{h}(x) = \frac{\mathrm{f}(x)}{\mathrm{g}(x)}、\quad h_0 = \frac{f_0}{g_0}、\quad \mathrm{h}_n = \frac{1}{g_0}\left(\mathrm{f}_n - \sum_{k=0}^{n-1} \mathrm{h}_k \mathrm{g}_{n-k}\right) \quad (n \geq 1)$$

(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 $\dfrac{dy}{dx}$ 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[2][3]を使うことによって計算することができる。

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

ただし、(3.2)の計算ではxのn次を超えるの高次の項は省略して計算すると効率的である。

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

この微分方程式を前節で述べた方法によって解くことによって、関数$f(x)$の逆関数の Taylor 展開式を得ることがきる。

例として関数$f(x) = e^{-x} - 2x - 3$の逆関数$y = f^{-1}(x)$を求める。(3.3)から、逆関数は、次の微分方程式を満たす。

(3.4) $$\frac{dy}{dx} = -\frac{1}{e^{-x}+2} \quad 初期条件：y(-2) = 0$$

初期条件は、$f(x)$で$x = 0$を入れ、xとyを逆にすることによって、(3.4)の初期条件を得る。この微分方程式の Taylor 級数解を 7 次まで計算すると、

y=-0.333333*(x+2)+0.0185185*(x+2)^2+7.61389e20*(x+2)^3-0.000114312*(x+2)^4
+5.08053e-06*(x+2)^5+1.12901e-06*(x+2)^6-1.34405e-07*(x+2)^7

が得られる。展開式を利用すれば、$f(x) = 0$の解を計算することができる。上の展開式では、$x = 0$を代入すると、$y = -0.594203952757019$となり、約 6 桁の精度で得られる。

4. 三角関数を含む無限区間の振動型数値積分

無限区間の振動型数値積分の計算には、Hasegawa and Torii [1]などに見られるように、途中区間まで数値積分を行い、補外法によって、無限区間の積分値を求める方法と Ooura and Mori [5]の発見的な方法がよく知られている。どちらの場合も、有効に計算できるの積分は、次のように振動関数として三角関数を含む型の積分に限られる。

(4.1) $$I = \int_0^\infty f(x)\sin x dx$$

これらの計算法が、三角関数の零点が規則的にあり、その値が既知であることを利用しているからである。このため、同じ無限区間の振動型積分であっても Bessel 関数$J_n(x)$を含む積分

(4.2) $$I = \int_0^\infty f(x)J_n(x)dx$$

の計算には、適用するのが非常に困難である。この問題に対しては、緒方、杉原[4]による Ooura and Mori[5]の計算法の拡張もある。

(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の形に変形することができる。

(4.3) $$I=\int_0^t f(x)\sin x dx+\int_t^\infty f(x)\sin x dx$$

右辺の最初の積分の値は、通常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。

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

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。

(4.5) $$\begin{aligned}\int_t^\infty f(x)\sin x dx &= f(t)\cos t-f'(t)\sin t-f''(t)\cos t+f'''(t)\sin t+\cdots\\ &\quad +f^{(M-1)}(t)\sin(x+\frac{M\pi}{2})+\int_t^\infty f^{(M)}(x)\sin(x+\frac{M\pi}{2})dx\end{aligned}$$

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、(4.5)の右辺の積分項は、$O(t^{\alpha-M+1})$ 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、$O(t^{\alpha-M+1})$ となることになる。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。

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、平山[3]で使われている計算法の特別な場合であるから、これを使って、簡単に高精度で計算できる。

式(4.3)、(4.4)、(4.5)は、正弦関数（$\sin x$）だけでなく余弦関数（$\cos x$）に対しても同様な公式が成り立つので、$I=\int_0^\infty f(x)\cos x dx$ の積分値も同様に計算できる。

5. Bessel 関数を含む無限区間振動型積分の計算法

部分積分によって、級数展開する方法は、振動型の Bessel 関数を含む積分に対しても適用できる。以下にその手順を示す。積分

(5.1) $$I=\int_0^\infty f(x)J_n(x)dx$$ （$J_n(x)$ は第 1 種 Bessel 関数、n は整数）

について論じる。(5.1)は、$x=t$ で分割して、二つの積分の和の形に変形する。

(5.2) $$I=\int_0^t f(x)J_n(x)dx+\int_t^\infty f(x)J_n(x)dx$$

右辺の最初の積分は、通常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、級数展開する。Bessel 関数の積分公式[1]

(5.3) $$\int x^n J_{n-1}(x)dx=x^n J_n(x)$$

を利用して、次のように変形することができる。

(5.4) $$\begin{aligned}\int_t^\infty f(x)J_n(x)dx &= \left[f(x)J_{n+1}(x)\right]_t^\infty+\int_t^\infty \frac{d}{dx}\left(x^{-n-1}f(x)\right)x^{n+1}J_{n+1}(x)dx\\ &= -f(t)J_{n+1}(t)+\int_t^\infty \frac{d}{dx}\left(x^{-n-1}f(x)\right)x^{n+1}J_{n+1}(x)dx\end{aligned}$$

この操作を M 回繰り返し行うと、

$$
(5.5)\quad \begin{aligned}\int_t^{\infty} f(x)J_n(x)dx &= \sum_{k=1}^{M}\left[(-1)^k\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^{k-1}\left(x^{-n-1}f(x)\right)x^{n+k}J_{n+k}(x)\right]_{x=t}\\ &+ (-1)^M\int_t^{\infty}\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^{M}\left(x^{-n-1}f(x)\right)x^{n+M+1}J_{n+M}(x)dx\end{aligned}
$$

三角関数の含む振動型積分と同様に、Bessel 関数を含む振動型積分も高精度で計算できる。

6. 変数変換による数値積分

6.1 三角関数を含む積分

次のよう無限区間の振動型積分を考える。

$$
(6.1)\qquad I=\int_0^{\infty} f(x)\sin(g(x))dx
$$

$t=g(x)$ 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。

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

逆関数が解析的に閉じた形で求められる場合は、(6.2)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。

$$
(6.3)\qquad I=\int_0^{a} f(x)\sin(g(x))dx+\int_a^{\infty} f(x)\sin(g(x))dx
$$

(6.3)の積分第二項で、$t=g(x)$ と置けば、(6.3)の第二項は

$$
(6.4)\qquad I=\int_b^{\infty} h(t)\sin t dt,\quad b=a\log(1+a)、\quad h(t)=f(g^{-1}(t))\frac{d}{dt}g^{-1}(t)
$$

となる。次のよう無限区間の振動型積分を考える。

$$
(6.5)\qquad I=\int_0^{\infty}\frac{\sin(x\log(1+x))}{x+1}dx
$$

$t=x\log(1+x)$ 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。この積分を $x=a$ を境界にして、二つの部分に分ける。

$$
(6.6)\qquad I=\int_0^{a}\frac{\sin(x\log(1+x))}{x+1}dx+\int_a^{\infty}\frac{\sin(x\log(1+x))}{x+1}dx
$$

(6.6)の積分第二項で、$t=g(x)=x\log(1+x)$ と置けば、(6.6)の第二項は

$$
(6.7)\qquad I=\int_b^{\infty} f(t)\sin t dt,\quad b=a\log(1+a)、\quad f(t)=\frac{\frac{d}{dt}g^{-1}(t)}{g^{-1}(t)+1}
$$

となる。

(6.7)の積分は、Taylor 展開を利用した方法で計算できる。このためには、(6.7)式の $f(t)$ を Taylor 展開しなければならない。逆関数の Taylor 展開は、3.2 で与えたように簡単にでき、その微分も容易にできるので、(6.7)式の $f(t)$ も容易に Taylor 展開できる。(6.2)式の第一項の積分は、変数変換を行う意味がないので、変数変換しないで、そのまま数値積分す

る。特異点などがなければ、Gauss 型数値積分法等を使って積分できる。(6.6)の式では、$a=13$として、$g(x)$を Taylor 展開すると

$g(x)$=34.3077+3.56763*(x-a)+0.0382653*(x-a)^2-0.000971817*(x-a)^3+3.6877e-005*(x-a)^4

この関数の逆関数$g^{-1}(t)$を$t=(b=g(a)=34.3077)$点で Taylor 展開すると

$g^{-1}(t)$=13+0.280298*(t-b)-0.000842687*(t-b)^2+1.10657e-005*(t-b)^3-1.92062e-007*(t-b)^4

この式から、(6.7)式の$f(t)$の Taylor 展開は

0.0200213-0.000521236*(t-b)+1.40122e-05*(t-b)^2-3.82616e-07*(t-b)^3+1.05501e-08*(t-b)^4

となる。この結果を(6.7)式に代入し、(6.6)式の第二項を積分する。(6.6)式の第一項の積分は、標本点を 80、100 個使う Gauss 型数値積分公式を利用した。これらの結果から、$I=$ 0.437992011202960が得られる。確認のため、$a=14$として計算し、同じ結果が得られることを確認している。

6.2 Bessel 関数を含む積分

次のような積分を考える。

$$I=\int_0^\infty \frac{x\,J_0(x\log(1+x))}{x^2+1}dx \tag{6.8}$$

(6.8)の積分も次のように二つに分割し、Taylor 展開を使った方法で計算できる。

$$I=\int_0^a \frac{xJ_0(x\log(1+x))}{x^2+1}dx+\int_a^\infty \frac{xJ_0(x\log(1+x))}{x^2+1}dx \tag{6.9}$$

$a=25$と置くと、$I=$ 0.510502342713232 となる。前節と同様に確認のため、aを$20 \le a \le 35$の範囲で計算すると、最後の二桁を除いて一致した。このように Bessel 関数を含む場合でも容易に計算できることがわかる。

7. おわりに

Taylor展開式の係数は、高精度で計算できるため、その式をさらに計算に利用することが可能である。その特性を利用して、Taylor展開式を使って、変数変換を行い数値積分する方法を提案し、その方法が有効であるのことを示した。

参考文献

[1] Hasegawa T. and Torii T., Indefinite integration of oscillatory functions by the Chebyshev series expansion, J. Comput. Appl. Math., 17(1987), 21-29

[2] 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)

[3] 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

[4] 緒方秀教、杉原正顕, Bessel 関数の零点を標本点に持つ補間および数値積分公式, 日本応用数理学会論文誌, 6(1996), 39-66

[5] Ooura T. and Mori M., The double exponential formula for oscillatory functions over half infinite interval, J. Comput. Appl. Math., 38(1991), 353-360

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