

ラプラス逆変換の数値積分に関する一考察¹

Note on Numerical Integration of the Inverse Laplace Transform

植田芳昭² 摂南大学理工学部機械工学科
木田輝彦 大阪府立大学

UEDA, Yoshiaki Department of Mechanical Engineering,
Faculty of Science and Engineering, Setsunan University
KIDA, Teruhiko Osaka Prefecture University

Abstract

The Laplace transform is a useful tool for solving an unsteady partial differential equations. Instead, at the end of the analysis, the inverse Laplace transform of the solution is required and it unfortunately often remains in the integral representation where the integrand exhibits either a singularity or a periodicity (sometimes both) within the integral range. This study attempts to adequately arrange the integration, before the numerical quadrature, to avoid such difficult characteristics of the integrand. Within this benchmark test, some arrangements before the numerics with the use of Gaussian quadrature can be found to be effective for obtaining a nice value against an exact solution.

キーワード： ラプラス逆変換, 数値積分, 特異性, 周期性, 積分路

Keywords: inverse Laplace transform, numerical integration, singularity, periodicity, contour of integration

1. はじめに

工学的諸問題を解析するにあたって, 非定常な問題を扱う場合は多い. そのような非定常の偏微分方程式をラプラス変換を利用して解く場合, 最終的には得られた解のラプラス逆変換が必要になる. その逆変換を求めるには, 複素積分を直接積分することによって求めねばならないことがしばしば起こり, その際, 複素積分に含まれる被積分関数の分岐点に注意しながら, カット面をとる必要がある. そのようにして求められた逆変換の結果は, 積分区間に無限大を含んだ無限積分の形で表現され, その積分の値を求めるには数値積分が要求されることがほとんどである. さらに, そのようなラプラス逆変換の積分表現では, 被積分関数が積分区間内で特異性を示すこともしばしば起こる. そこで, 数値計算を行う際には, 被積分関数の特性を考慮しながら行わなければ良好な計算精度が得られない.

たとえば, 筆者が行っている過渡的流れについての特異摂動解析の際に現れるラプラス逆変換の一例として, 次のラプラス逆変換を取り上げる.

$$S_e(t, \lambda) = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{p(p+\lambda)}} \exp(-2a\sqrt{p}) \right] \quad (1)$$

¹ 【原稿受付】2017年7月17日, 【掲載決定】2017年9月15日

² 【主著者連絡先】 植田芳昭 摂南大学, 講師 e-mail: yoshiaki.ueda@mec.setsunan.ac.jp
〒572-8508 大阪府寝屋川市池田中町17-8, 摂南大学理工学部機械工学科

ただし、 \mathcal{L}^{-1} はラプラス逆変換を表し、 p は複素変数、 a および λ は正定数である。式 (1) のラプラス逆変換を畳み込みから変形すると、

$$S_e(t, \lambda) = \frac{1}{\pi} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{s(t-s)}} \exp\left(-\frac{a^2}{s} - \lambda(t-s)\right) ds = \frac{1}{\pi} \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x(1-x)}} \exp\left(-\frac{a^2}{tx} - \lambda t(1-x)\right) dx \quad (2)$$

となるが、この被積分関数は $x=1$ で $-1/2$ 乗の特異性を示すことが分かる。そのため、式 (2) の数値積分を行う際には、 $x=1$ 近傍での計算精度を確保することが重要となる。

他方、式 (1) のラプラス逆変換を直接複素積分することにより書き換えると、

$$S_e = \frac{1}{\pi} \int_0^\lambda \frac{e^{-st}}{\sqrt{s(\lambda-s)}} \cos(2a\sqrt{s}) ds - \frac{1}{\pi} \int_\lambda^\infty \frac{e^{-st}}{\sqrt{s(s-\lambda)}} \sin(2a\sqrt{s}) ds \quad (3)$$

となり、式 (3) を数値積分により計算するには、積分区間に無限大が含まれることと、被積分関数に特異性と周期関数が含まれることが問題となる。

このようなラプラス逆変換の値を数値積分により求める際に問題となる「被積分関数に含まれる特異性と周期性、および積分区間に含まれる無限大」を回避する技術的な方策について、次節では厳密解を求めることができる問題を対象として、その計算精度について検討する。ただし、本稿ではそのような数値積分に関する技術的な方策を探ることを第一義としており、収束性に関する厳密な数学的議論には踏み込まない。

2. 問題設定と厳密解

本節では、厳密解を求めることができる次のラプラス逆変換を例に挙げて、特異性と周期性を含む数値積分について検討する。

$$S_a = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{p}} \exp(-2a\sqrt{p}) \right] \quad (4)$$

ただし、 \mathcal{L}^{-1} はラプラス逆変換を表し、 p は複素変数、 a は正定数である。式 (4) のラプラス逆変換は、たとえば、岩波・数学公式 II⁽¹⁾ によると、次式のように厳密に求めることができる。

$$S_a = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{p}} \exp(-2a\sqrt{p}) \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{a^2}{t}\right) \quad (5)$$

他方、式 (4) のラプラス逆変換を、 $1/\sqrt{p}$ と $\exp(-2a\sqrt{p})$ の逆変換の畳み込みから表現すると、

$$S_a = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{p}} \exp(-2a\sqrt{p}) \right] = \frac{a}{\pi} \int_0^t \frac{\exp\left(-\frac{a^2}{s}\right)}{s\sqrt{s(t-s)}} ds \quad (6)$$

ここで、 $x = s/t$ で変数変換することにより、積分区間を 0 から 1 に変換すれば、

$$S_a = \frac{a}{\pi t} \int_0^1 \frac{\exp\left(-\frac{a^2}{tx}\right)}{x\sqrt{x(1-x)}} dx \quad (7)$$

となる。式 (7) の被積分関数 $(e^{-a^2/(tx)})/[x\sqrt{x(1-x)}]$ のグラフを描いたものが図 1 である。この被積分関数は、 $x=0$ と 1 で分母がゼロとなるが、特に、 $x=1$ で $-1/2$ 乗の特異性を示すことが、式 (7) の値を数値積分によって求める際の計算精度の低下につながり厄介となる。

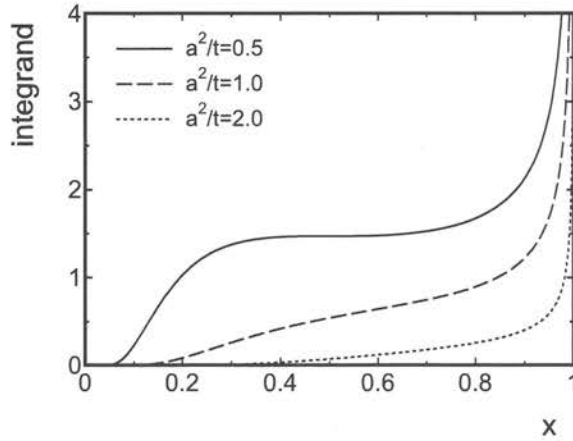


図1 式(7)の被積分関数 $\exp[-a^2/(tx)]/[x\sqrt{x(1-x)}]$

次に、式(4)のラプラス逆変換を直接複素積分することにより求めてみる。ラプラス逆変換の定義より式(4)を表現すると、

$$S_a = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{p}} \exp(-2a\sqrt{p}) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-2a\sqrt{p}} e^{pt} dp \quad (8)$$

式(8)の被積分関数は、 $p=0$ を分岐点として持っているので、負の実軸に沿ってカットを入れる。この複素積分はBromwich積分と呼ばれ、図2の積分路に沿って、コーシーの積分定理を適用することにより求められる。つまり、 $\int_{IA} + \int_{AB} + \int_{BC} + \int_{CD} + \int_{DEF} + \int_{FG} + \int_{GH} + \int_{HI} = 0$ において、 $R \rightarrow \infty$ と $\delta \rightarrow 0$ の極限をとれば、 \int_{AB} 、 \int_{BC} 、 \int_{DEF} 、 \int_{GH} 、 \int_{HI} の積分は全てゼロに収束するので、 $\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} = \int_{IA} = -\int_{CD} - \int_{FG}$ となる。まず、CD上での積分について考える。CD上では、複素変数 p は $p = se^{i\pi}$ と表されるので、 $\sqrt{p} = i\sqrt{s}$ であることに注意して、

$$\int_{CD} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-2a\sqrt{p}} e^{pt} dp = \int_0^\infty \frac{i}{\sqrt{s}} [-\cos(2a\sqrt{s}) + i\sin(2a\sqrt{s})] e^{-st} ds \quad (9)$$

一方、FG上では、複素変数 p は $p = se^{-i\pi}$ と表されるので、 $\sqrt{p} = -i\sqrt{s}$ であることに注意して、

$$\int_{FG} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-2a\sqrt{p}} e^{pt} dp = \int_0^\infty \frac{i}{\sqrt{s}} [-\cos(2a\sqrt{s}) - i\sin(2a\sqrt{s})] e^{-st} ds \quad (10)$$

以上から、式(8)の複素積分は次式のように記述できる。

$$S_a = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{p}} \exp(-2a\sqrt{p}) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-2a\sqrt{p}} e^{pt} dp = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{s}} \cos(2a\sqrt{s}) e^{-st} ds \quad (11)$$

簡単化のため、 $y = 2a\sqrt{s}$ で変数変換すると、結局、式(8)のラプラス逆変換は次式のように記述される。

$$S_a = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{p}} \exp(-2a\sqrt{p}) \right] = \frac{1}{\pi a} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{t}{4a^2} y^2\right) \cos y dy \quad (12)$$

図3は式(12)の被積分関数 $(e^{-(t/4a^2)y^2} \cos y)$ のグラフを描いたものである。式(12)は、積分区間に無限大を含むことと、被積分関数が 2π の周期性をもつことが、数値積分をする上での厄介な特徴である。これらの点に注意しつつ、次節では式(7)と式(12)に基づいた計算精度の良好な数値積分の方策について、式(5)の厳密解と比較することにより検討する。

なお、数値積分の際に用いる求積法には、シンプソン則と40点のガウス求積法を用いる⁽²⁾。シンプソン則の計算では、積分区間を40分割する。

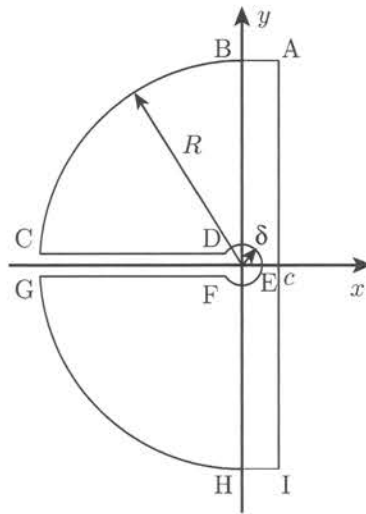


図2 積分路

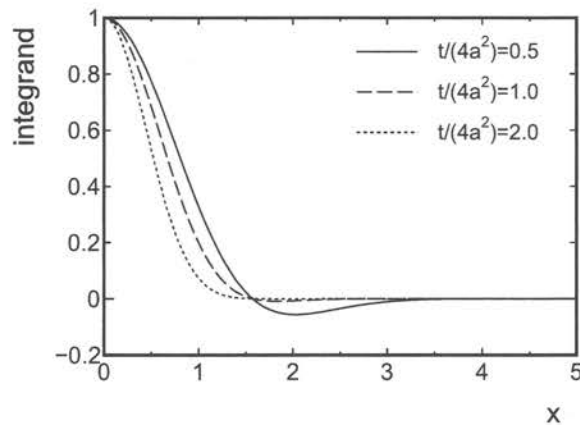


図3 式(12)の被積分関数 $\exp[-\{t/(4a^2)\}y^2] \cos y$

2-1 ケース1: 式(7)に基づく数値積分

まずは、式(7)の被積分関数が $x=1$ で $-1/2$ 乗の特異性を示すことを考慮して ($x \rightarrow 0$ では、収束性の差はあれども、 $a^2/t \gg x$ ならば、分子・分母ともゼロに収束する)[†]、 $x = \sin^2 \theta$ で変数変換する。

$$S_a = \frac{2a}{\pi t} \int_0^{\pi/2} \frac{e^{-a^2/(t \sin^2 \theta)}}{\sin^2 \theta} d\theta \quad (13)$$

この変数変換により、 $\theta \rightarrow 0$ のとき、式(13)の被積分関数は $a^2/t \gg \sin^2 \theta$ であれば、分子・分母ともゼロに収束することに注意されたい。

図4は、式(13)をガウス求積法とシンプソン則で数値計算した結果について、式(5)の厳密解と併せて比較したものである。この図から、 $\eta = a/\sqrt{t} \ll 1$ において、式(13)の被積分関数の分子が分母

[†]実際の数値積分では x の値がゼロやゼロに非常に近い値を必要とする。この場合、もし a^2/t の値が非常に小さくなると、数値積分において、 x のゼロ近傍での値をどのように計算するかが問題となる。

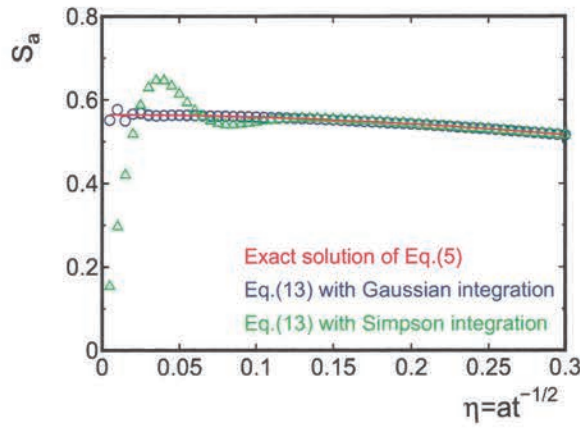


図4 ケース1による数値計算結果の比較

の $\lim_{\theta \rightarrow 0} \sin^2 \theta$ と同じオーダーでゼロに収束せず、被積分関数の勾配が大きくなってしまい、それが誤差となって現れていることが分かる。なお、シンプソン則よりもガウス求積法の方が計算精度は良好であることが確認できる。

2-2 ケース2：式(7)に基づく数値積分

式(7)において、 $X = 1/x$ で変数変換すると、

$$S_a = \frac{a}{\pi t} \int_1^\infty \frac{\exp\left(-\frac{a^2}{t}X\right)}{\sqrt{X-1}} dX \quad (14)$$

この式(14)の被積分関数も式(7)と同じく、 $X = 1$ で $-1/2$ 乗の特異性を示している。式(14)の積分区間を $X = 5$ で二つに分割すると、

$$S_a = \frac{a}{\pi t} \left(\int_1^5 + \int_5^\infty \right) \frac{\exp\left(-\frac{a^2}{t}X\right)}{\sqrt{X-1}} dX \quad (15)$$

ここで、式(15)の右辺第一項に関しては $y^2 = X - 1$ で、右辺第二項に関しては $y = (a^2/t)X$ で変数変換すると、

$$S_a = \frac{2a}{\pi t} \int_0^2 \exp\left(-\frac{a^2}{t}(1+y^2)\right) dy + \frac{1}{\pi\sqrt{t}} \int_{5a^2/t}^\infty \frac{\exp(-y)}{\sqrt{y-a^2/t}} dy \quad (16)$$

この変換により、式(16)において、 $5a^2/t \ll 1$ でない限り（式(16)の右辺第二項の分母が積分下限で $2a/\sqrt{t}$ であることに注意）、被積分関数の急勾配を回避できていることが分かる。なお、式(16)の右辺第二項の積分は、 $\eta = y - 5a^2/t$ で変数変換することにより、積分区間の始点をゼロからにすれば、Laguerre の求積法⁽²⁾を用いて数値積分することが可能となる。

$$\frac{1}{\pi\sqrt{t}} \int_{5a^2/t}^\infty \frac{\exp(-y)}{\sqrt{y-a^2/t}} dy = \frac{\exp(-5a^2/t)}{\pi\sqrt{t}} \int_0^\infty \frac{\exp(-\eta)}{\sqrt{\eta+4a^2/t}} d\eta \quad (17)$$

図5は、式(16)をガウス求積法とシンプソン則で数値計算した結果について、式(5)の厳密解と併せて比較したものである。なお、図5の青点の結果は、式(16)の右辺第一項をガウス求積法で数値計算し、右辺第二項を式(17)に対して15点のLaguerreの求積法⁽²⁾で数値計算している。他方、式(16)

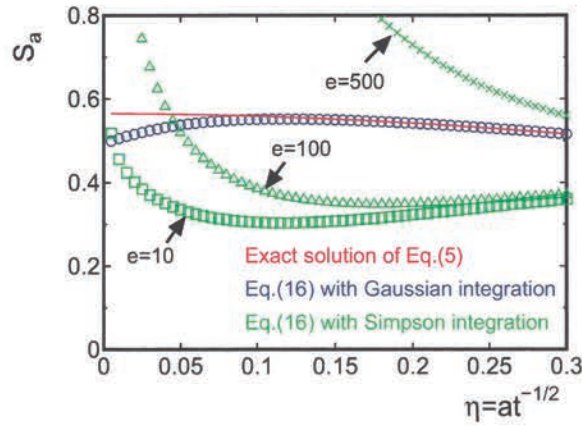


図5 ケース2による数値計算結果の比較

をシンプソン則で数値計算する場合（図5の緑点），右辺第二項の積分区間上限に含まれる無限大の扱いが厄介である．本計算では，右辺第二項の積分 $\int_{5a^2/t}^{\infty}$ を $\lim_{e \rightarrow \infty} \int_{5a^2/t}^e$ としておき，実際の数値計算の際には， e の値を 10, 100, 500 と変えて行った．シンプソン則で数値計算する際には，積分区間の分割数は 40 分割で一定にしているのて， e の値を大きくして積分範囲を広げるほど，分解能は低下してしまう．

図5の結果から，シンプソン則よりもガウス求積法の方が数値計算結果は良好であるものの， $a^2/t \rightarrow 0$ のとき，点 $5a^2/t$ が特異点 a^2/t に近づくため，原点近傍で計算精度が保たれていないことが確認できる．

2-3 ケース3：式(12)に基づく数値積分

式(12)の被積分関数には，周期が 2π の三角関数が含まれているので，積分領域を周期 2π に収まるように設定して計算すればよい．そこで， $a_k = 2\pi k$ （ただし， $k = 0, 1, 2, \dots, N$ ）と定義すれば，

$$S_a = \frac{1}{\pi a} \sum_{k=0}^N \int_{a_k}^{a_{k+1}} \exp\left(-\frac{t}{4a^2} y^2\right) \cos y \, dy \quad (18)$$

図6は，式(18)をガウス求積法とシンプソン則で数値計算した結果について，式(5)の厳密解と併せて比較したものである．なお，図6では， $N = 200$ として数値計算している．この手法でも，ガウス求積法の方がシンプソン則よりも数値計算結果は良好であるが， $\eta = a/\sqrt{t} \ll 1$ において誤差が確認される．

2-4 ケース4：式(12)に基づく数値積分

式(12)の積分区間を有限にするために，式(11)で $\xi = e^{-st}$ として変数変換すると，

$$S_a = \frac{1}{\pi\sqrt{t}} \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{-\log \xi}} \cos\left(\frac{2a}{\sqrt{t}} \sqrt{-\log \xi}\right) d\xi \quad (19)$$

式(19)は， $\xi = 1$ で $-1/2$ 乗の特異性を示すので，

$$S_a = \frac{1}{\pi\sqrt{t}} \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{-\log \xi}} \left[\cos\left(\frac{2a}{\sqrt{t}} \sqrt{-\log \xi}\right) - 1 \right] d\xi + \frac{1}{\pi\sqrt{t}} \int_0^1 \frac{d\xi}{\sqrt{-\log \xi}} \quad (20)$$

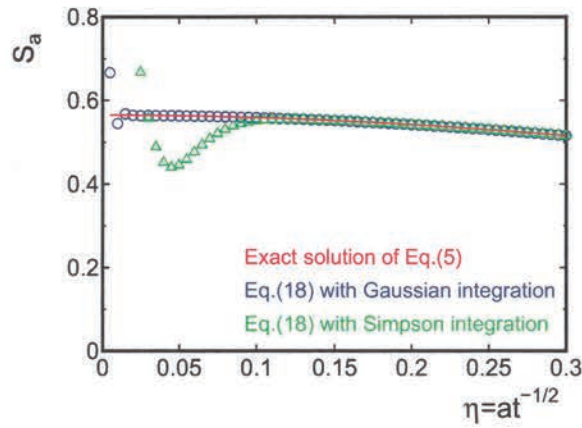


図 6 ケース 3 による数値計算結果の比較

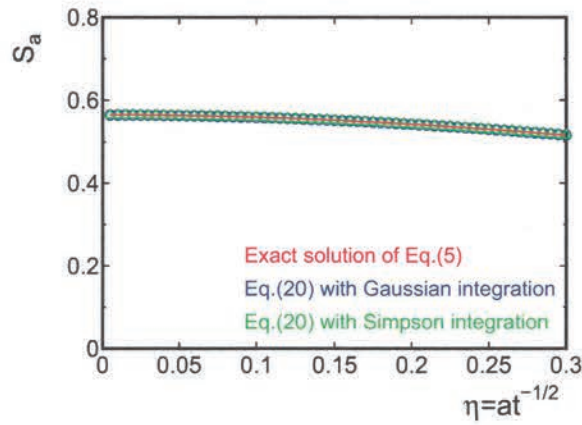


図 7 ケース 4 による数値計算結果の比較

のように変形しておく。このとき、式 (20) の右辺第一項は $\xi = 1$ で分子・分母ともゼロに収束することに注意されたい。また、右辺第二項の積分は次式のように求められる。

$$\frac{1}{\pi\sqrt{t}} \int_0^1 \frac{d\xi}{\sqrt{-\log \xi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \quad (21)$$

図 7 は、式 (20) をガウス求積法とシンプソン則で数値計算した結果について、式 (5) の厳密解と併せて比較したものである。この方法による数値計算結果は、シンプソン則およびガウス求積法ともに非常に良好であることが確認できる。なお、図 7 では、ガウス求積法の結果とシンプソン則の結果が一致しているため、青点が緑点に隠れてしまっていることに注意されたい。

3. おわりに

非定常の偏微分方程式をラプラス変換を用いて解く場合、最終的にはラプラス逆変換が必要となるが、その逆変換は直接積分によって求めなくてはならないことがしばしば起こる。そのような直接積分によって表現される逆変換は、通常、積分区間に無限大を含んだ形で記述され、さらに積分区間の内部に特異性が現れることもしばしばである。そのようなラプラス逆変換の積分表現の値を数値積分によって見積もる場合、その被積分関数の特性を考慮した方策が必要となる。

本稿は、厳密解の与えられている $\mathcal{L}^{-1}[(1/\sqrt{p}) \exp(-2a\sqrt{p})]$ を一例にとり、被積分関数が特異性を有するラプラス逆変換の積分表現を数値計算によって求めるための技術的な方策について検討したものである。その際、ラプラス逆変換の積分表現として、畳み込みによる表現と、ラプラス逆変換の直接複素積分による表現の両面から数値計算を試みた。得られた知見は次のとおりである。

- どの方策においても、数値積分を行う際はシンプソン則よりもガウス求積法の方が良好な結果が得られた。
- 積分区間内で、被積分関数が特異性を示す場合、分子・分母ともゼロに収束するような式変形を施す方が数値計算精度は改善される。
- ラプラス逆変換を直接積分によって求めた場合、積分区間に無限大が含まれてしまい、これにより数値積分の計算精度が低下してしまう。そこで、 $\eta = e^{-st}$ の変数変換を行うことにより、積分区間を有限に抑えることが可能になる。
- 被積分関数に周期関数が含まれている場合、周期毎に求積する方が計算精度は良好である。
- 本稿で試行した方策のなかでは、ケース 4 が最も良好な数値計算結果が得られた。これは上述のすべての方策を含んだ手法である。

以上の考察から、式 (3) のラプラス逆変換の値を数値的に求める場合には次のような方策をとれば良いことになる。式 (3) の右辺第二項の積分を $\eta = e^{-st}$ で変数変換して、その被積分関数が $\eta = e^{-\lambda t}$ で $-1/2$ 乗の特異性を示すことに注意すると、式 (3) の右辺第二項は次式のように整理すれば良いことが分かる。

$$\begin{aligned} \text{Second term of Eq.(3)} &= -\frac{1}{\pi} \int_0^{e^{-\lambda t}} \frac{1}{\sqrt{-\log \eta(-\log \eta - \lambda t)}} \left[\sin \left(\frac{2a}{\sqrt{t}} \sqrt{-\log \eta} \right) - \sin(2a\sqrt{\lambda}) \right] d\eta \\ &\quad - \frac{1}{\pi} \sin(2a\sqrt{\lambda}) \int_0^{e^{-\lambda t}} \frac{d\eta}{\sqrt{-\log \eta(-\log \eta - \lambda t)}} \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_0^{e^{-\lambda t}} \frac{1}{\sqrt{-\log \eta(-\log \eta - \lambda t)}} \left[\sin \left(\frac{2a}{\sqrt{t}} \sqrt{-\log \eta} \right) - \sin(2a\sqrt{\lambda}) \right] d\eta \\ &\quad - \frac{2}{\pi} e^{-\lambda t} \sin(2a\sqrt{\lambda}) \int_0^\infty \frac{e^{-X^2}}{\sqrt{X^2 + \lambda t}} dX \end{aligned} \quad (22)$$

なお、式 (22) の右辺第二項の数値積分には Hermite の求積法⁽²⁾ を用いればよい。また、式 (3) の右辺第一項の積分は、 $s = \lambda \sin^2 \theta$ で変数変換すると、次式のように $s = \lambda$ での特異性を回避することができる。

$$\text{First term of Eq.(3)} = 2 \int_0^{\pi/2} e^{-\lambda t \sin^2 \theta} \cos(2a\sqrt{\lambda} \sin^2 \theta) d\theta \quad (23)$$

結局、式 (3) のラプラス逆変換の値は、式 (22) の右辺第一項と式 (23) をガウスの求積法で計算し、式 (22) の右辺第二項を Hermite の求積法で計算して求めれば良いことになる。

参考文献

- (1) 森口繁一他, 「岩波 数学公式 II (級数・フーリエ解析)」, 岩波書店, (1957).
- (2) Abramowitz, M. and Stegun, I.A., "Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables," Dover, (1965).