STICHTING
MATHEMATISCH CENTRUM
2e BOERHAAVESTRAAT 49
AMSTERDAM

ZW 1959 - 005

Voordracht in de serie
"Elementaire onderwerpen vanuit hoger standpunt belicht"

Prof.dr. H.R. van der Vaart

15 april 1959

Fourier-integralen en numerieke integratie-methoden rond de boldriehoek

1959

Voordracht in de serie

"Elementaire onderwerpen vanuit hoger standpunt belicht"

door

Prof.Dr H.R. van der Vaart

15 april 1959

Fourier-integralen en numerieke integratie-methoden rond de boldriehoek.

§ 1. Zij
$$X = \{ x : -\infty < x < +\infty \}$$
$$X^+ = \{ x : x = u + iv_o,\ -\infty < u < +\infty,\ v_o > 0 \}$$
$$X^- = \{ x : x = u + iv_o,\ -\infty < u < +\infty,\ v_o < 0 \},$$

waar v_o een willekeurig vast getal is, dat aan de beschreven voorwaarden voldoet, dan is

$$\int_X e^{-\frac{1}{2}cx^2 + iyx}\, dx = \sqrt{\frac{2\pi}{c}}\ e^{-\frac{1}{2}y^2/c}\ , \tag{1a}$$

terwijl wegens Cauchy

$$\int_{X^+} e^{-\frac{1}{2}cx^2 + iyx}\, dx = \int_{X^-} e^{-\frac{1}{2}cx^2 + iyx} dx = \int_X e^{-\frac{1}{2}cx^2 + iyx} dx \tag{1b}$$

Uit (1a) en (1b) volgt

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi c}} \int_{\omega}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}y^2/c}\, dy = \frac{i}{2\pi} \int_{X^+} \frac{e^{-\frac{1}{2}cx^2 + i\omega x}}{x}\, dx\ , \tag{1c}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi c}} \int_{-\infty}^{\omega} e^{-\frac{1}{2}y^2/c}\, dy = \frac{1}{2\pi i} \int_{X^-} \frac{e^{-\frac{1}{2}cx^2 + i\omega x}}{x}\, dx\ . \tag{1d}$$

Gevolg:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi c}} \int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}y^2/c}\, dy = \frac{i}{2\pi} \int_{X^+} \frac{e^{-\frac{1}{2}cx^2}}{x}\, dx = \frac{1}{2\pi i} \int_{X^-} \frac{e^{-\frac{1}{2}cx^2}}{x} dx\ . \tag{1e}$$

§ 2. Laten X_j, X_j^+, X_j^- zijn gedefinieerd analoog aan X, X^+, X^- in § 1, en zij $\mathcal{X}$ het Cartesiaanse product:

$$\mathcal{X} = \prod_{i=1}^{n} X_j \ ,$$

$$\mathcal{X}^+ = \prod_{i=1}^{n} X_j^+$$

$$\mathcal{X}^- = \prod_{i=1}^{n} X_j^- \quad .$$

Uiteraard zouden we ook producten kunnen beschouwen, waarvan sommige factoren X_j^+, sommige X_j^- zijn. Zij de matrix

$$C = \| c_{ij} \| \begin{matrix} i=1\ldots n \\ j=1\ldots n \end{matrix}$$

positief definiet met $c_{ii}=1$ $(i=1,\ldots,n) \Longrightarrow c_{ij} < 1$ $(i \neq j=1,\ldots,n)$, en zij $|C|$ zijn determinant, dan is

$$\int_{\mathcal{X}} e^{-\frac{1}{2}\mathfrak{x}'C\mathfrak{x}+i\mathfrak{y}'\mathfrak{x}}\, d\mathfrak{x} = (2\pi)^{n/2} \cdot |C|^{-\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{1}{2}\mathfrak{y}'C^{-1}\mathfrak{y}} \qquad (2a)$$

Hierbij zijn $\mathfrak{x}$ en $\mathfrak{y}$ $n \times 1$ matrices (kolom-vectoren). Juist als in § 1, kan hier $\mathcal{X}$ vervangen worden door $\mathcal{X}^+$ of $\mathcal{X}^-$ of één van de boven aangeduide mengvormen. Hier wordt uitsluitend $\mathcal{X}^+$ beschouwd.

Nu is, om een voorbeeld te noemen

$$\frac{i^2}{(2\pi)^n} \int_{\mathcal{X}^+} \frac{e^{-\frac{1}{2}\mathfrak{x}'C\mathfrak{x}+i\mathfrak{o}'\mathfrak{x}}}{x_h x_j}\, d\mathfrak{x} = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \cdot |C|^{-\frac{1}{2}} \int_{\omega_h}^{\infty} dy_h \int_{\omega_j}^{\infty} dy_j \cdot e^{-\frac{1}{2}\mathfrak{o}'C^{-1}\mathfrak{o}} . \qquad (2b)$$

Hierbij is $\mathfrak{o} = \| \omega_j \|$ $j=1\ldots n$ een kolom-vector en in de exponent van het rechterlid hebben we gemakshalve geen poging gedaan om expliciet aan te geven dat ω_h en ω_j door y_h en y_j vervangen moeten worden. Blijkbaar is

$$\frac{i^n}{(2\pi)^n} \int_{\mathcal{X}^+} \frac{e^{-\frac{1}{2}\mathfrak{x}'C\mathfrak{x}}}{x_1 x_2 \ldots x_n}\, d\mathfrak{x} = (2\pi)^{-n/2} |C|^{-\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} dy_1 \ldots \int_0^{\infty} dy_n e^{-\frac{1}{2}\mathfrak{y}'C^{-1}\mathfrak{y}} . \qquad (2c)$$

§ 3. Het rechterlid van (2c) staat in nauw verband met de inhoud $S(r)$ van het gebied

$$\left.\begin{aligned} \mathfrak{z}'\mathfrak{z} &= r^2 \\ B\mathfrak{z} &\geqslant 0 \end{aligned}\right\} \tag{3a}$$

Hier is $\mathfrak{z} = \|z_k\|^{k=1\ldots n}$ een kolom-vector en B een $n \times n$ matrix van rang n, die voldoet aan $BB'=C$. Het teken $\geqslant$ in (3a) betekent, dat alle componenten van $B\mathfrak{z}$ onderworpen zijn aan de voorwaarde dat ze positief zijn. Het door (3a) gedefinieerde gebied is voor n=2 een cirkelsector, voor n=3 een boldriehoek. Gelijk bekend, is

$$S(\rho) = \rho^{n-1}\, S(1) \; . \tag{3b}$$

Stel $B\mathfrak{z} = \eta$ en zij $f(r^2)$ een functie zo dat $\int_0^\infty f(\rho^2)\rho^{n-1}d\rho$ convergeert, dan is wegens $BB'=C$:

$$S(1)\int_0^\infty f(\rho^2)\rho^{n-1}\, d\rho = \int_0^\infty f(\rho^2)S(\rho)d\rho =$$

$$= \int_{B\mathfrak{z} \geqslant 0} f(\mathfrak{z}'\mathfrak{z})d\mathfrak{z} = |B|^{-1} \int_{\eta \geqslant 0} f(\eta' B'^{-1}B^{-1}\eta)d\eta =$$

$$= |C|^{-\frac{1}{2}} \int_{\eta \geqslant 0} f(\eta' C^{-1}\eta)\, d\eta \quad . \tag{3c}$$

Met $f(r^2)=e^{-\frac{1}{2}r^2}$ levert dit op, dat het rechterlid van (2c) gelijk is aan

$$(2\pi)^{-\frac{n}{2}}\, S(1)\cdot 2^{\frac{n}{2}-1}\, \Gamma(\tfrac{n}{2}) \; . \tag{3d}$$

§ 4. Om de inhoud van cirkelsector of boldriehoek of hun meerdimensionale generalisaties te berekenen, moet dus het linkerlid van (2c) herleid worden. Dit gebeurt met behulp van

$$\frac{e^{-c_{12}x_1x_2}-1}{x_1x_2} = -\int_0^{c_{12}} d\gamma_{12}\, e^{-\gamma_{12}x_1x_2} \tag{4a}$$

en Fubini. Voor n=2 geeft dit

$$\frac{1}{2\pi}\,\frac{1}{\sqrt{1-c_{12}^2}}\int_0^\infty dy_1\int_0^\infty dy_2\; e^{-\frac{1}{2}\eta' C^{-1}\eta} =$$

$$-\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\mathcal{X}^+} e^{-\frac{1}{2}(x_1^2+x_2^2)}\cdot\frac{e^{-c_{12}x_1x_2}-1}{x_1x_2} - \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\mathcal{X}^+}\frac{e^{-\frac{1}{2}(x_1^2+x_2^2)}}{x_1x_2}\,dx_1dx_2 =$$

$$= +\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{c_{12}} d\gamma_{12}\int_{\mathcal{X}} e^{-\frac{1}{2}(x_1^2+x_2^2+\gamma_{12}x_1x_2)}\,dx_1dx_2$$

$$-\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\mathcal{X}^+}\frac{e^{-\frac{1}{2}(x_1^2+x_2^2)}}{x_1x_2}\,dx_1dx_2 \quad . \qquad (4b)$$

Op de eerste term kan nu (2a) worden toegepast, op de tweede echter (1c) (wegens de verdwijning van een van het product x_1x_2 afhangende factor). Hiermee wordt (4b) gelijk aan

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{c_{12}}\frac{d\gamma_{12}}{\sqrt{1-\gamma_{12}^2}}\;e^0 + \frac{1}{4} = \frac{1}{2\pi}\,\text{arc sin}\,c_{12} + \frac{1}{4}\,. \qquad (4c)$$

Blijkens het slot van § 3 is de lengte van een cirkelboog gelijk aan 2π x dit resultaat, dus

$$\text{arc sin}\,c_{12} + \frac{\pi}{2}\,,$$ gelijk behoort.

§ 5. Voor meer dimensies treedt een belangrijke vereenvoudiging op voor matrices C met de eigenschap

$$c_{ij} = 0 \text{ als } |i-j| > 1\,, \qquad (5a)$$

zgn. Jacobi matrices. De methode van § 4 leidt er namelijk toe, dat c_{ij} in $e^{-\frac{1}{2}\chi C \chi}$ voor bepaalde i en j door **0** wordt vervangen, waarna (2a) of (2b) wordt toegepast. Deze formules gelden echter slechts als C positief definiet is. Nu geldt voor een willekeurige positief definiete matrix niet, dat zij na vervanging van c_{ij} door **0** nog positief definiet is, maar wel voor een Jacobi matrix. Daar voor elke twee willekeurige positief definiete matrices C_1 en C_2 geldt, dat $tC_1+(1-t)C_2$ ook positief definiet is, zijn Jacobi matrices positief definiet in het gehele $(c_{12}, c_{13}, \ldots, c_{n-1n})$ - gebied, waarover bij de methode van § 4 geintegreerd moet worden. De oplossing van het probleem komt dan neer op de triviale gelijkheid (5b):

Schrijf $e^{-c_{ij}x_i x_j} = b_{ij}$ en $a_{ij} = e^{-c_{ij}x_i x_j} - 1$,

dan is $b_{ij} = a_{ij} + 1$ en

$$
\begin{aligned}
b_{12}b_{23}b_{34} &= a_{12}b_{23}b_{34} + b_{23}\, b_{34} \\
&= a_{12}b_{23}a_{34} + a_{12}b_{23} + a_{23}b_{34} + b_{34} \\
&= a_{12}b_{23}a_{34} + a_{12}b_{23} + a_{23}b_{34} + a_{34} + 1 \qquad (5b)
\end{aligned}
$$

§ 6. De methode van § 4 gaat door als de vector o in

$$\frac{i^n}{(2\pi)^n} \int_{\mathfrak{x}^+} \frac{e^{-\frac{1}{2}\mathfrak{x}'C\mathfrak{x}+io'\mathfrak{x}}}{x_1 x_2 \ldots x_n}\, d\mathfrak{x} \cdot = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \cdot \frac{1}{|C|^{-1/2}} \int_{\eta \geqslant 0} e^{-\frac{1}{2}\eta' C^{-1}\eta}\, d\eta \qquad (6a)$$

niet de nulvector is. Voor $n=2$ komt er het langs minder doorzichtige weg door Owen (1956) verkregen resultaat

$$\frac{1}{2\pi\sqrt{1-c_{12}^2}} \int_{\omega_1}^{\infty} dy_1 \int_{\omega_2} dy_2\, e^{-\frac{1}{2}\eta' C^{-1}\eta} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{c_{12}} \frac{d\gamma_{12}}{\sqrt{1-\gamma_{12}^2}}\, e^{-\frac{1}{2}o'C^{-1}o} +$$

$$+ \frac{1}{2\pi} \int_{\omega_1}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}y_1^2}\, dy_1 \int_{\omega_2}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}y_2^2}\, dy_2 \qquad (6b)$$

waar in C^{-1} c_{12} door γ_{12} vervangen gedacht moet worden.

§ 7. Formule (6b) is zeer geschikt voor numerieke berekening, die echter met een voor de meeste statistische doeleinden bevredigende nauwkeurigheid op eenvoudiger wijze kan geschieden dan door Owen gedaan is. Hiervan zal een voorbeeld worden gegeven.
Ook zal een voorbeeld worden gegeven van een zeer snelle berekening van de inhoud van een 4-dimensionaal bolsimplex.

Voor niet-Jacobi matrices kan men de in § 5 beschreven moeilijkheden het best oplossen door te schrijven

$$\exp\left[-\sum_{i<j} c_{ij}x_ix_j\right] = \exp\left[-\sum_{i<j} c_{ij}x_ix_j\right] - 1 + 1 =$$

$$= -\int_0^1 (x_1x_2c_{12}+x_1x_3c_{13}+x_2x_3c_{23})\exp -t\sum_{i<j} c_{ij}x_ix_j\Big]\,dt + 1. \qquad (7)$$

Dit komt neer op integratie langs een lijn L in de $(c_{12}, c_{13}, \dots, c_{n-1n})$-ruimte in de trant van Plackett (1954), maar uitgevoerd aan de Fourier-getransformeerde en daarom directer. Bovendien worden de formules aesthetischer omdat de lijn L in de oorsprong van de $c_{ij}(i < j)$-ruimte begint.

Literatuur

OWEN, D.B. (1956), Tables for computing bivariate normal distributions. Am.Math.Stat.27, p.1075-1090.

PLACKETT, R.L. (1954), A reduction formula for normal multivariate integrals. Biometrika 41, p.351-360.

VAART, H.R. van der (1953), The content of certain spherical polyhedra for any number of dimensions. Experientia 9, p.88-89.

VAART, H.R. van der (1955), The content of some classes of non-euclidean polyhedra for any number of dimensions, with several applications. I and II. Proc.Kon.Ned.Akad.Wetensch. Amsterdam, ser.A, 58, p.199-209 and 210-221 (Also Indag. Math.17, 199-209, 210-221).

VAART, H.R. van der (1958), A few remarks concerning the appraisal of errors in the numerical integration of functions with known Taylor expansion, exemplified by some integrals connected with the multinormal distribution. Report SRC-80530Vg1 of the Statistical Research Center, the University of Chicago, 21 p.