

## 対数特異性をもつ関数の不定積分に対する自動積分法†

長谷川 武光†† 鳥居 達生†††

対数特異性を含む被積分関数の有限区間  $[a, b]$  上の不定積分  $I(x, y, c) = \int_x^y f(t) \ln |t-c| dt$ ,  $a \leq x, y, c \leq b$ , の能率的な自動積分法を示す. 与えられた関数  $f(t)$  が滑らかであると,  $[a, b]$  上でのそのチェビシエフ展開の収束は速いのでこの展開を行う. 入力関数  $f(t)$  が  $N$  次多項式ならば不定積分  $I(x, y, c)$  の厳密な表式が  $N+1$  次多項式と対数関数を用いてえられる. このとき, 多項式の係数は 3 項漸化式によって効果的に計算される. 積分の誤差が極  $c$  に無関係な値で評価されることを利用して, 与えられた要求精度で一連の  $x, y, c$  の値に対する積分  $\{I(x, y, c)\}$  の近似値の組を同じ標本数で一度に求めることができる. 標本数を倍々より緩やかに増す FFT をチェビシエフ展開列の計算に組み込むことにより, 要求精度に対して無駄な標本数の節減を図った. 数値実験により, 本自動積分法は効率が高いことが示される.

### 1. はじめに

与えられた関数  $f(t)$  と特異関数  $K(t; c)$  との積のいわゆる積型積分<sup>1)-4)</sup>

$$\int_a^b f(t)K(t; c)dt, \quad a \leq c \leq b$$

の近似値を計算することは, 通常の数値積分法では困難である. ここで  $K(t; c)$  は, たとえば主値,  $1/(t-c)$ ,  $\ln |t-c|$  または  $|t-c|^\alpha$  ( $\alpha > -1$ ) 等の特異関数である. 特異点  $c$  が両端点  $a, b$  の一方に一致する場合には有効な積分則が存在するが<sup>5)</sup>, 特異点  $c$  が一般に区間  $[a, b]$  の内部にある問題は難しく, そのため積分則は少ない. この問題を扱う能率的な積分則は, それぞれの特異関数  $K(t; c)$  の性質に基づいて個別に作ることが必要になる. 主値積分については既にわれわれも発表した<sup>6)</sup>.

本論文では, 特に対数特異性を含む関数の不定積分

$$I(x, y, c) = \int_x^y f(t) \ln |t-c| dt, \quad a \leq x, y, c \leq b \quad (1)$$

に対して, 一般に上下限  $y, x$  と特異点  $c$  のいろいろな値に対する近似値の組  $\{I_N(x_i, y_j, c_k)\}$  ( $1 \leq i \leq L$ ,  $1 \leq j \leq M$ ,  $1 \leq k \leq K$ ) を能率的に求める自動積分法を示す. ここで要求絶対精度を  $\varepsilon_a$  (相対精度を  $\varepsilon_r$ ) とし,  $\varepsilon = \max(\varepsilon_a, \varepsilon_r |I(x, y, c)|)$  とおくと

$$|I(x, y, c) - I_N(x, y, c)| \leq \varepsilon \quad (2)$$

を満足する近似値  $I_N(x, y, c)$  を計算する方法を自動積分法という.

関数  $f(t)$  が十分滑らかと仮定すると, 区間  $[-1, 1]$  でのそのチェビシエフ展開の収束は速い. このため, 変数変換により区間  $[a, b]$  を  $[-1, 1]$  に移すと (1) は

$$I(x, y, c) = \alpha \left[ \ln \alpha \int_{\xi}^{\eta} g(u) du + \int_{\xi}^{\eta} g(u) \ln |u - \zeta| du \right] \quad (3)$$

となる. ここで  $g(u) = f(\alpha u + \beta)$ ,  $\alpha = (b-a)/2$ ,  $\beta = (b+a)/2$ ,  $\xi = (x-\beta)/\alpha$ ,  $\eta = (y-\beta)/\alpha$ ,  $\zeta = (c-\beta)/\alpha$  であり,  $-1 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$  となる. 式 (3) の右辺の  $g(u)$  を  $[-1, 1]$  上でのチェビシエフ多項式  $T_k(u)$  による近似

$$g(u) \sim p_N(u) = \sum_{k=0}^N a_k T_k(u), \quad -1 \leq u \leq 1 \quad (4)$$

によっておきかえると, 積分  $I(x, y, c)$  の近似

$$I_N(x, y, c) = \alpha \left[ \ln \alpha \int_{\xi}^{\eta} p_N(u) du + \int_{\xi}^{\eta} p_N(u) \ln |u - \zeta| du \right] \quad (5)$$

がえられる. ここで  $\sum^N$  は初項と末項のみ 1/2 倍して総和することを意味する. 上式の右辺の括弧内の第 1 項は項別積分によって容易に計算される.

第 2 項の積分を具体的に評価するため二つの関数  $G_{N+1}(u)$  と  $F_{N+1}(u)$  を用いて

$$\begin{aligned} & \int_{\xi}^{\eta} p_N(u) \ln |u - \zeta| du \\ &= \{G_{N+1}(\eta) - G_{N+1}(\zeta)\} \ln |\eta - \zeta| \\ & \quad - \{G_{N+1}(\xi) - G_{N+1}(\zeta)\} \ln |\xi - \zeta| \\ & \quad - \{F_{N+1}(\eta) - F_{N+1}(\xi)\} \end{aligned} \quad (6)$$

† An Automatic Scheme for Indefinite Integration of Functions with a Logarithmic Singularity by TAKEMITSU HASEGAWA (Department of Information Science, Faculty of Engineering, Fukui University) and TATSUO TORII (Department of Information Engineering, Faculty of Engineering, Nagoya University).

†† 福井大学工学部情報工学科

††† 名古屋大学工学部情報工学科

と書く. すると  $G_{N+1}(u)$  と  $F_{N+1}(u)$  は微分方程式

$$\begin{aligned} G_{N+1}'(u) &= p_N(u), \\ F_{N+1}'(u) &= \{G_{N+1}(u) - G_{N+1}(\zeta)\} / (u - \zeta) \end{aligned} \quad (7)$$

を満足し,  $p_N(u)$  が  $N$  次の多項式なのでともに  $N+1$  次の多項式となる.  $N$  次多項式  $F_{N+1}'(u)$  はチェビシエフ多項式  $T_k(u)$  により

$$F_{N+1}'(u) = \sum_{k=0}^N d_k T_k(u)$$

と表すことができる. ここで  $\sum'$  は初項のみ  $1/2$  倍して総和することを意味する. チェビシエフ係数  $d_k$  は微分方程式(7)より導かれる3項漸化式

$$d_{k+1} - 2\zeta d_k + d_{k-1} = (a_{k-1}^N - a_{k+1}^N) / k \quad (8)$$

を初期値  $d_{N+1} = d_{N+2} = 0$  として逆向きに安定に計算してえられる. 便宜上(8)の右辺で  $a_k^N \equiv 0$  ( $k > N$ ) とおき  $a_k^N$  には  $1/2$  をかけておく. この  $\{d_k\}$  ( $0 \leq k \leq N$ ) を用いると, (6)の右辺の  $G_{N+1}(\eta)$ ,  $F_{N+1}(\eta)$  はそれぞれ

$$G_{N+1}(\eta) - G_{N+1}(\zeta) = (\eta - \zeta) \sum_{k=0}^N d_k T_k(\eta) \quad (9)$$

$$\begin{aligned} F_{N+1}(\eta) - F_{N+1}(\xi) \\ = \sum_{k=1}^{N+1} (d_{k-1} - d_{k+1}) / (2k) \{T_k(\eta) - T_k(\xi)\} \end{aligned} \quad (10)$$

と表される. Luke<sup>7)</sup> は下端点に対数特異性をもつ不定積分(上端点か不定)を次数  $N$  を固定したチェビシエフ展開の方法によって計算する手法を示している. したがって, 本方法は任意の位置に特異点をもつ不定積分の自動積分へ Luke の方法を拡張したことになる.

チェビシエフ展開(4)の係数  $\{a_k^N\}$  は FFT (高速フーリエ変換) を用いて能率的に計算されることは既に知られている<sup>8)</sup>. しかし近似(4)の次数  $N$  は倍々と増加されるのが通常であり, 要求精度  $\varepsilon$  に対して標本点数を無駄にすることが多かった. Bulirsch<sup>9)</sup> はロンバーグ積分に対して, 要求精度  $\varepsilon$  が与えられたときこの無駄な関数評価回数を節減するため次数  $N$  を倍々より緩く  $N = 2^{n+1}$ ,  $3 \times 2^n$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) と増すことを提案した. われわれは Van der Corput 列に基づく一様分布列<sup>10)</sup> から作られる標本点列と FFT を用いて, 次数  $N$  をこのように倍々より緩く, 平均の意味で  $\sqrt{2}$  倍的に, 増しながらチェビシエフ展開を行った<sup>11)</sup>. 第2章では, 次数  $N$  のこの数列と比べて計算の手間をほとんど増やすことなく, さらにきめ細かく  $N = 2^{n+2}$ ,  $5 \times 2^n$ ,  $3 \times 2^{n+1}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) と, 平均の意味で  $\sqrt[3]{2}$  倍的に, 増しながらチェビシエフ近似の列  $\{p_N\}$  を再帰

的に構成できることを簡略に示す<sup>12)</sup>.

第3章で述べる誤差  $|I(x, y, c) - I_N(x, y, c)|$  の推定を用いて近似多項式  $p_N(u)$  の必要な次数  $N$  が決定される. また関数  $f(t)$  が滑らかであれば積分の誤差の限界が特異点  $c$  の値に無関係に一樣に評価されることが, 第3章で示される. そこで  $\{I_N(x_i, y_j, c_k)\}$  の組に共通の誤差推定を用い, 一度のチェビシエフ展開の手間で求める近似値の組が計算できることも示す. 第4章では, 定積分でかつ特異点が端点にある場合および内部の点である場合について Piessens ら<sup>13)</sup> の方法との比較を数値例によって示す. Piessens らの方法は現在最も能率的な自動積分法の一つであるが, 区分的にチェビシエフ多項式展開を利用した適応型手法を用いているため, 滑らかな関数に対して全域的なチェビシエフ展開の収束が速いという特長が生かされない. また, 一連の特異点の値  $\{c_k\}$  に対して個別に計算しなければならないし, 不定積分も扱えない. 数値実験の結果, 関数  $f(t)$  が振動型であるか滑らかであるほど, 本方法は効率のよい自動積分法であることが示される.

## 2. $\sqrt[3]{2}$ 倍的に項数を増すチェビシエフ展開

次数  $N$  を  $2^{n+2}$ ,  $5 \times 2^n$ ,  $3 \times 2^{n+1}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) と増すチェビシエフ展開(4)の列の作り方を示す.  $N = 2^n$  と仮定する.  $N+1$  次多項式  $\omega_{N+1}(u)$  を

$$\omega_{N+1}(u) = T_{N+1}(u) - T_{N-1}(u) \quad (11)$$

で定義すると, チェビシエフ展開(4)が  $\omega_{N+1}(u)$  の零点  $u_j = \cos \pi j / N$ ,  $0 \leq j \leq N$ , 上で  $g(u)$  の補間式となるように離散型フーリエ係数  $a_k^N$  は決定される.

$$g(u_j) = \sum_{k=0}^N a_k^N T_k(u_j), \quad 0 \leq j \leq N$$

したがって

$$a_k^N = \frac{2}{N} \sum_{j=0}^N g(u_j) T_k(u_j), \quad 0 \leq k \leq N. \quad (12)$$

次に(12)の右辺が与えられたとして  $N/4$  個の標本点

$$v_j = \cos \{8\pi(j+1/16)/N\}, \quad 0 \leq j < N/4 \quad (13)$$

すなわち  $T_{N/4}(v_j) - \cos \pi/8 = 0$  を追加して  $N+N/4$  次チェビシエフ展開

$$\begin{aligned} p_{N+N/4}(u) &= \sum_{k=0}^N a_k^N T_k(u) \\ &+ \sum_{k=1}^{N/4} b_k \{T_{N-k}(u) - T_{N+k}(u)\} \end{aligned} \quad (14)$$

を作る. 補間条件

$$g(v_j) = p_{N+N/4}(v_j), \quad 0 \leq j < N/4$$

から係数  $b_k$  が決定される.

さらに  $N/4$  個の標本点

$$w_j = \cos \{8\pi(j+9/16)/N\}, \quad 0 \leq j < N/4 \quad (15)$$

すなわち  $T_{N/4}(w_j) + \cos \pi/8 = 0$  を追加すると

$$\begin{aligned} & 2 \left\{ T_{N/4}(u) - \cos \frac{\pi}{8} \right\} \\ & \times \left\{ T_{N/4}(u) + \cos \frac{\pi}{8} \right\} \\ & = T_{N/2}(u) - \cos \frac{\pi}{4} \quad (16) \end{aligned}$$

であるから、 $N+N/2$  次チェビシェフ展開

$$\begin{aligned} p_{N+N/2}(u) & = \sum_{k=0}^N a_k T_k(u) \\ & + \sum_{k=1}^{N/2} B_k \{T_{N-k}(u) - T_{N+k}(u)\} \quad (17) \end{aligned}$$

が作られる。このとき補間係数  $B_k$  は(16)の零点  $\{\cos 4\pi(j+1/8)/N\}$

( $0 \leq j < N/2$ ) すなわち  $\{v_j\}$  と  $\{w_j\}$  ( $0 \leq j < N/4$ )、上で  $p_{N+N/2}(u)$  が  $g(u)$  の補間式となるように決定される。

この後、 $T_{N/2}(u) + \cos(\pi/4) = 0$  の  $N/2$  個の根を標本点として追加すると

$$\begin{aligned} \omega_{2N+1}(u) & = 4\omega_{N+1}(u) \left\{ T_{N/2}(u) - \cos \frac{\pi}{4} \right\} \\ & \times \left\{ T_{N/2}(u) + \cos \frac{\pi}{4} \right\} \quad (18) \end{aligned}$$

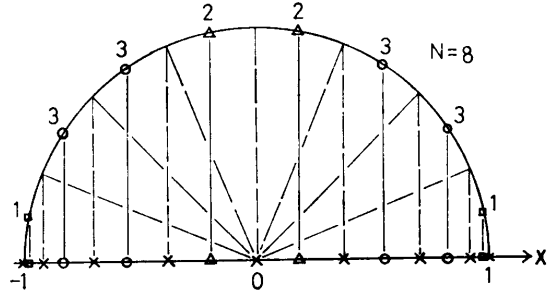
であるから倍の次数  $2N$  次のチェビシェフ展開(4)がえられる。以上の手順を繰り返すことにより、平均的に公比  $\sqrt[3]{2}$  の等比数列的に次数  $N$  を増すチェビシェフ展開の列が構成される。図1に  $N=8$  の場合の標本点列(11), (13), (15)および関係(18)が示される。

### 3. 積分の誤差評価

$N=2^n$  と仮定する。チェビシェフ補間(4)の誤差は複素積分表示を用いて

$$\begin{aligned} g(u) - p_N(u) & = \frac{1}{2\pi i} \omega_{N+1}(u) \oint_{C_\rho} g(z) / \{(z-u)\omega_{N+1}(z)\} dz \quad (19) \end{aligned}$$

と表される。ここで積分路  $C_\rho$  は複素平面内の実軸上の2点  $-1, 1$  を焦点とする楕円



$$\begin{aligned} \square; & T_{N/4}(u) - \cos \frac{\pi}{8} = 0 \\ \Delta; & T_{N/4}(u) + \cos \frac{\pi}{8} = 0 \\ \circ; & T_{N/2}(u) + \cos \frac{\pi}{4} = 0 \\ & \times; T_{N+1}(u) - T_{N-1}(u) = 0 \end{aligned}$$

図1  $N=8$  の標本点の配置

$N+1 (=9)$  点 ( $\times$ 印) が与えられた後、単位円周上の番号1 ( $\square$ 印), 2 ( $\Delta$ 印), 3 ( $\circ$ 印) の順に点を追加して  $2N+1 (=17)$  点の点列が  $[-1, 1]$  上に作られてゆく。

Fig. 1 Arrangement of Sample Points for  $N=8$ .

After  $N+1 (=9)$  points denoted by crosses were given, each set of points denoted by rectangles, triangles and circles, respectively is consecutively added according to the order above the unit circle to generate  $2N+1 (=17)$  sample points over the range  $[-1, 1]$ .

$$C_\rho: |z + \sqrt{z^2 - 1}| = \rho, \quad \rho > 1$$

であって、その内部に  $g(z)$  の極を含まぬようにとる。同様に、 $N+N/4$  次および  $N+N/2$  次チェビシェフ補間の誤差はそれぞれ

$$\begin{aligned} g(u) - p_{5N/4}(u) & = \frac{1}{2\pi i} \omega_{N+1}(u) \left\{ T_{N/4}(u) - \cos \frac{\pi}{8} \right\} \\ & \times \oint_{C_\rho} g(z) / \left[ (z-u)\omega_{N+1}(z) \right. \\ & \left. \times \left\{ T_{N/4}(z) - \cos \frac{\pi}{8} \right\} \right] dz \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g(u) - p_{3N/2}(u) & = \frac{1}{2\pi i} \omega_{N+1}(u) \left\{ T_{N/2}(u) - \cos \frac{\pi}{4} \right\} \\ & \times \oint_{C_\rho} g(z) / \left[ (z-u)\omega_{N+1}(z) \right. \\ & \left. \times \left\{ T_{N/2}(z) - \cos \frac{\pi}{4} \right\} \right] dz \quad (21) \end{aligned}$$

と表される。

さて複素数  $z \in [-1, 1]$  に対して恒等式

$$\frac{1}{z-u} = \frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{U}_n(z) T_n(u) \quad (22)$$

ただし

$$\begin{aligned} \tilde{U}_n(z) & = \int_{-1}^1 T_n(u) / \{(z-u)\sqrt{1-u^2}\} du \\ & = \pi / \{w^n \sqrt{z^2 - 1}\} \end{aligned}$$

$$w = z + \sqrt{z^2 - 1}, \quad |w| > 1 \quad (23)$$

を(19)に代入すると

$$q(u) - p_N(u) = \omega_{N+1}(u) \sum_{n=0}^{\infty} V_n^N T_n(u) \quad (24)$$

をうる。ここで

$$V_n^N = \frac{1}{\pi^2 i} \int_{C_p} \tilde{U}_n(z) g(z) / \omega_{N+1}(z) dz. \quad (25)$$

式(3), (5)および(24)より  $p_N(u)$  を用いた積分の近似値  $I_N(x, y, c)$  の誤差は

$$\begin{aligned} & |I(x, y, c) - I_N(x, y, c)| \\ & \leq 2\alpha |\eta - \xi| [|\ln \alpha| + 1 - \ln(|\eta - \xi|/2)] \\ & \times \sum_{n=0}^{\infty} |V_n^N| \quad (26) \end{aligned}$$

となる。ここで  $\int_{\xi}^{\eta} |\ln|u - \zeta|| \cdot du \leq |\eta - \xi| [1 - \ln(|\eta - \xi|/2)]$  ( $-1 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$ ) を用いた。式(25)と同様に  $V_n^{N+N/4}$  と  $V_n^{N+N/2}$  を

$$\begin{aligned} V_n^{N+N/4} &= \frac{1}{\pi^2 i} \int_{C_p} \tilde{U}_n(z) g(z) / [\omega_{N+1}(z) \\ & \times \{T_{N/4}(z) - \cos \pi/(2l)\}] dz \quad (27) \end{aligned}$$

ここで  $l=2$  または  $4$

によって定義する。すると  $N+N/4$  次および  $N+N/2$  次の補間式を用いた積分の近似値  $I_{N+N/4}(x, y, c)$  および  $I_{N+N/2}(x, y, c)$  の誤差はそれぞれ, (3), (5), (20), (21)および(27)を用いて

$$\begin{aligned} & |I(x, y, c) - I_{N+N/4}(x, y, c)| \\ & \leq 2 \left(1 + \cos \frac{\pi}{2l}\right) \\ & \times \alpha \left[ |\ln \alpha| + 1 - \ln \frac{|\eta - \xi|}{2} \right] \sum_{n=0}^{\infty} |V_n^{N+N/4}|, \\ & \quad l=2 \text{ または } 4 \quad (28) \end{aligned}$$

と表される。

簡単のため  $g(z)$  が楕円  $C_p$  の外側に  $J$  個の一位の極  $z_j$  ( $j=1, 2, \dots, J$ ) をもつ有理関数と仮定する。(25)の右辺の複素積分を実行して

$$V_n^N = -\frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^J \tilde{U}_n(z_j) \text{Res } g(z_j) / \omega_{N+1}(z_j) \quad (29)$$

ここで  $\text{Res } g(z_j)$  は  $z_j$  における留数である。したがって  $r = \min_j |z_j + \sqrt{z_j^2 - 1}| (> 1)$  とおくと  $\rho$  の上限は  $r$  となり  $|V_n^N| \sim |V_0^N| r^{-n}$ , これを(26)に代入すると

$$\begin{aligned} & |I(x, y, c) - I_N(x, y, c)| \\ & \leq \alpha |\eta - \xi| \left[ |\ln \alpha| + 1 - \ln \frac{|\eta - \xi|}{2} \right] \\ & \times |V_0^N| (r+1)/(r-1). \quad (30) \end{aligned}$$

この  $|V_0^N|$  を実際に計算されるチェビシェフ係数  $a_n^N$  を用いて表そう。Elliott<sup>(14)</sup> は

$$a_n^N = \frac{2}{\pi i} \int_{C_p} T_{N-n}(z) g(z) / \omega_{N+1}(z) dz \quad (31)$$

を示した。右辺の複素積分を実行し(29)と比較すると  $|V_0^N| \sim |a_N^N| r/(r^2-1)$  であるから(30)より誤差推定として

$$\begin{aligned} & |I(x, y, c) - I_N(x, y, c)| \\ & \leq \alpha |\eta - \xi| \left[ |\ln \alpha| + 1 - \ln \frac{|\eta - \xi|}{2} \right] \\ & \times |a_N^N| r/(r-1)^2 \quad (32) \end{aligned}$$

がえられる。実際には  $r$  は  $\{a_n^N\}$  の漸近的振舞いから推定される。これで実際に計算される量  $a_n^N$  から(32)によって誤差  $|I(x, y, c) - I_N(x, y, c)|$  が推定される。

一方, (14)および(17)の係数  $b_n$  と  $B_n$  はそれぞれ

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{-1}{\pi i} \int_{C_p, \omega_{N+1}(z)} \frac{T_{N/4-n}(z) g(z) dz}{\{T_{N/4}(z) - \cos \pi/8\}}, \\ & \quad 1 \leq n \leq \frac{N}{4} \quad (33) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_n &= \frac{-1}{\pi i} \int_{C_p, \omega_{N+1}(z)} \frac{T_{N/2-n}(z) g(z) dz}{\{T_{N/2}(z) - \cos \pi/4\}}, \\ & \quad 1 \leq n \leq \frac{N}{2} \quad (34) \end{aligned}$$

と表される。ここで式(33)の右辺において  $n=N/4$  の場合のみ  $1/2$  倍し, (34)では  $n=N/2$  の場合のみ右辺を  $1/2$  倍する。式(34)については文献15)参照。式(33)は(34)の場合と全く同様に導かれる。式(27), (33)および(34)の右辺の複素積分を実行し比較することにより  $|V_0^{N+N/4}| \sim 4|b_{N/4}| r/(r^2-1)$ ,  $|V_0^{N+N/2}| \sim 4|B_{N/2}| r/(r^2-1)$  をうる。これらを(28)に代入すると  $p_{5N/4}(u)$ ,  $p_{3N/2}(u)$  を用いた積分の誤差はそれぞれ

$$\begin{aligned} & |I(x, y, c) - I_{5N/4}(x, y, c)| \\ & \leq 4 \left(1 + \cos \frac{\pi}{8}\right) \alpha |\eta - \xi| \\ & \times \left[ |\ln \alpha| + 1 - \ln \frac{|\eta - \xi|}{2} \right] |b_{N/4}| r/(r-1)^2 \quad (35) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & |I(x, y, c) - I_{3N/2}(x, y, c)| \\ & \leq 4 \left(1 + \cos \frac{\pi}{4}\right) \alpha |\eta - \xi| \\ & \times \left[ |\ln \alpha| + 1 - \ln \frac{|\eta - \xi|}{2} \right] |B_{N/2}| r/(r-1)^2 \quad (36) \end{aligned}$$

によって評価される。誤差評価(32), (35)および(36)

は特異点  $c$  には依存しないで一様な上限を与えていることがわかる。

さて積分の上下限  $y, x$  および特異点  $c$  のいろいろな値  $(x_i, y_j, c_k)$ ,  $(1 \leq i \leq L, 1 \leq j \leq M, 1 \leq k \leq K)$  に対する近似値がそれぞれ (2) を満足するような共通のチェビシェフ補間式の次数を誤差評価 (32), (35) および (36) を用いて次のように決定する。いま各  $x_i, y_j$  と  $c_k$  に対して  $\varepsilon_{i,j,k}$  を

$$\varepsilon_{i,j,k} = \max(|I(x_i, y_j, c_k)| \varepsilon_r, \varepsilon_a) \quad (37)$$

によって定義し、収束判定定数  $E$  を

$$E = \min_{i,j,k} \left\{ \varepsilon_{i,j,k} / \left[ |\alpha| |\eta_j - \xi_i| \times \left( |\ln \alpha| + 1 - \ln \frac{|\eta_j - \xi_i|}{2} \right) \right] \right\} \quad (38)$$

とおく。ここで  $\xi_i = (x_i - \beta) / \alpha$ ,  $\eta_j = (y_j - \beta) / \alpha$  であり、常に  $E \geq \left\{ \min_{i,j,k} \varepsilon_{i,j,k} \right\} / \left[ (b-a) \left( \ln \frac{b-a}{2} + 1 \right) \right]$  が成り立つ。するとチェビシェフ補間式の次数のタイプが  $N, 5N/4$  または  $3N/2$  (ただし  $N=2^n$ ) に応じて、次のそれぞれの収束判定

$$\begin{aligned} |a_N|^N |r/(r-1)|^2 &\leq E \\ 4 \left( 1 + \cos \frac{\pi}{8} \right) |b_{N/4}| |r/(r-1)|^2 &\leq E \\ 4 \left( 1 + \cos \frac{\pi}{4} \right) |B_{N/2}| |r/(r-1)|^2 &\leq E \end{aligned} \quad (39)$$

を満足する最小の次数を決定すれば十分である。(37) の右辺に現れる積分  $I(x_i, y_j, c_k)$  は、実際上その値のオーダーのみわかればよいので、以上の収束判定を満足するまでの途中にえられる低次のチェビシェフ補間式を用いて近似しておけばよい。

以上の誤差評価では、理論的には関数  $f(x)$  が有理関数であることを仮定していた。しかし実験によれば、積分区間上で関数  $f(t)$  に  $C^{(4)}$  程度以上の滑らかさがあれば、本方法は信頼性を失うことはない。

#### 4. 数値例

次の5種類の異なったタイプの関数  $f(t)$  に対して積分(1)を計算し、Piessens ら<sup>13)</sup> のプログラム QUADPACK と性能を比較した。対数特異点が区間の端点および内点である場合について、それぞれ QUADPACK 中のサブルーチン QAWS と QAGP を用いた。QAGP は区間内の特異点の性質を対数と限定せず一般的である。そこで対数特異性に限定して本方法と性能を比較すると QAGP は不利になる。しかし、特異点の位置の知識を利用しながら内点特異性

を扱う能率的な自動積分法は他に見あたらないので、あえてこの QAGP を比較の対象とした。QUADPACK 中のプログラムはいずれも定積分のみを対象としている。

- i)  $\int_{-1}^1 e^{\alpha(t-1)} \ln |t-c| dt$
- ii)  $\int_{-1}^1 (t^2 + \alpha^2)^{-1} \ln |t-c| dt$
- iii)  $\int_0^1 e^t \cos 2\pi \alpha t \ln |t-c| dt$
- iv)  $\int_0^1 \left\{ (1-\alpha^2)/(1-2\alpha t + \alpha^2) \right\} \ln |t-c| dt, \quad |\alpha| < 1$
- v)  $\int_0^1 \sqrt{e^t - 1} \ln |t-c| dt.$

問題 i) ~ v) の  $f(t)$  はそれぞれ滑らか型、ピーク型、振動型、積分区間の外に特異点をもつ型および微係数が端点で特異な型である。積分 i), iii), iv) はパラメータ  $\alpha$  が大きいほど困難な問題である。積分 ii) は  $|\alpha|$  が小さいほど難しい。問題 i) ~ iv) に対して 2

表 1 積分  $\int_{-1}^1 e^{\alpha(t-1)} \ln |t-c| dt$  に対する本方法と QUADPACK との性能比較

表中の数値は要求相対精度  $\varepsilon_r = 10^{-6}, 10^{-10}$  を達成するために要する標本数を表す。星印の数値は QUADPACK 中のプログラム QAGP による結果である。

Table 1 Comparison of the performances of the present method and QUADPACK for

$$\int_{-1}^1 e^{\alpha(t-1)} \ln |t-c| dt.$$

The values in the Table indicate the number of sample points required to satisfy the requested relative tolerances  $\varepsilon_r = 10^{-6}$  and  $10^{-10}$ . The values with asterisk are the results by the program QAGP in QUADPACK.

$\alpha$	$c$	$\varepsilon_r = 10^{-6}$		$\varepsilon_r = 10^{-10}$	
		本方法	QUADPACK	本方法	QUADPACK
4	-1.0	17	40	21	40
	-0.4	17	462*	21	630*
	0.2	17	462*	21	630*
	1.0	17	40	21	40
8	-1.0	21	40	33	70
	-0.4	21	462*	33	630*
	0.2	21	462*	33	630*
	1.0	21	40	33	80
16	-1.0	33	70	41	100
	-0.4	33	126*	41	462*
	0.2	33	252*	41	546*
	1.0	33	80	41	150

表 2 積分  $\int_{-1}^1 (t^2 + \alpha^2)^{-1} \ln |t-c| dt$  に対する本方法と QUADPACK との性能比較

Table 2 Comparison of the performances of the present method and QUADPACK for  $\int_{-1}^1 (t^2 + \alpha^2)^{-1} \ln |t-c| dt$ .

$\alpha$	$c$	$\epsilon_r = 10^{-6}$		$\epsilon_r = 10^{-10}$	
		本方法	QUADPACK	本方法	QUADPACK
1	-1.0	21	40	33	70
	-0.4	21	462*	33	630*
	0.2	21	462*	33	630*
	1.0	21	40	33	70
1/4	-1.0	81	100	129	170
	-0.4	81	462*	129	714*
	0.2	81	462*	129	714*
	1.0	81	100	129	170
1/8	-1.0	161	230	257	230
	-0.4	161	546*	257	840*
	0.2	161	546*	257	798*
	1.0	161	230	257	230

表 3 積分  $\int_0^1 e^t \cos(2\pi\alpha t) \ln |t-c| dt$  に対する本方法と QUADPACK との性能比較

Table 3 Comparison of the performances of the present method and QUADPACK for  $\int_0^1 e^t \cos(2\pi\alpha t) \ln |t-c| dt$ .

$\alpha$	$c$	$\epsilon_r = 10^{-6}$		$\epsilon_r = 10^{-10}$	
		本方法	QUADPACK	本方法	QUADPACK
8	0.0	49	240	65	490
	0.3	49	672*	65	840*
	0.6	49	672*	65	840*
	1.0	49	240	65	490
16	0.0	81	490	97	980
	0.3	81	924*	97	1176*
	0.6	81	840*	97	1092*
	1.0	81	490	97	950
32	0.0	129	980	161	1950
	0.3	129	1386*	161	1596*
	0.6	129	1428*	161	1596*
	1.0	129	980	161	1920

種類の要求相対精度  $\epsilon_r = 10^{-6}, 10^{-10}$  の下でパラメータ  $\alpha$  を 3 通りに変えて計算するのに要する標本数を表 1~4 に示す。問題 v) の結果は表 5 に示される。表 1~5 において、本方法は各パラメータ  $\alpha$  の値に対してそれぞれ四つの特異点  $c$  の値に対応する積分値の組を、共通の関数評価回数 (= 標本数) を用いて一度に求めている。表 1~5 より、本方法は対数特異点を内点にもつ (1) のタイプの積分に対して、関数  $f(t)$  が

表 4 積分  $\int_0^1 \frac{1-\alpha^2}{1-2\alpha t+\alpha^2} \ln |t-c| dt$  に対する本方法と QUADPACK との性能比較

Table 4 Comparison of the performances of the present method and QUADPACK for  $\int_0^1 \frac{1-\alpha^2}{1-2\alpha t+\alpha^2} \ln |t-c| dt$ .

$\alpha$	$c$	$\epsilon_r = 10^{-6}$		$\epsilon_r = 10^{-10}$	
		本方法	QUADPACK	本方法	QUADPACK
0.8	0.0	65	130	97	160
	0.3	65	504*	97	798*
	0.6	65	504*	97	798*
	1.0	65	120	97	200
0.9	0.0	129	190	193	220
	0.3	129	840*	193	1008*
	0.6	129	672*	193	966*
	1.0	129	200	193	280
0.95	0.0	257	220	513	280
	0.3	257	1050*	513	1260*
	0.6	257	924*	513	1134*
	1.0	257	280	513	360

表 5 積分  $\int_0^1 \sqrt{e^t-1} \ln |t-c| dt$  に対する本方法と QUADPACK との性能比較

Table 5 Comparison of the performances of the present method and QUADPACK for  $\int_0^1 \sqrt{e^t-1} \ln |t-c| dt$ .

$c$	$\epsilon_r = 10^{-6}$		$\epsilon_r = 10^{-10}$	
	本方法	QUADPACK	本方法	QUADPACK
0.0	65	40	1025	200
0.3	65	462*	1025	630*
0.6	65	462*	1025	630*
1.0	65	40	1025	40

滑らか型か振動型である場合とくに能率の高い自動積分法であることがわかる。

問題 iii) に対して  $\epsilon_r = 10^{-10}$  で 100 個の特異点  $c_i = (i-1)/100$  ( $1 \leq i \leq 100$ ) に対する近似値の組を本方法で一度に計算するのに要する時間と、各  $c_i$  に対して別々に 100 回独立に積分値を計算するために要する時間との比率は約 1/5 であった。この比率は関数  $f(t)$  を評価する手間が大きくなるほど小さくなる。

これまで定積分の数値例を示してきたが、次に不定積分のテスト例を与える。テスト問題として

$$I_{ij} = \int_{x_i}^{x_j} \frac{\ln |t-c| dt}{(t+\alpha)^2} = \frac{1}{c+\alpha} \left[ \frac{(c-x_i) \ln |c-x_i|}{x_i+\alpha} \right]$$

$$+ \frac{(y_j - c) \ln |y_j - c|}{y_j + \alpha} + \ln \left| \frac{x_i + \alpha}{y_j + \alpha} \right|,$$

$$\alpha = 1/4, \quad c = 5.0, \quad 0 \leq x_i, y_j \leq 10 \quad (40)$$

をとり上げる。下限と上限をそれぞれ3種類  $x_i = 2(i-1)/100$  ( $i=1, 2, 3$ ),  $y_j = 10 - 2(j-1)/100$  ( $j=1, 2, 3$ ), とする。要求相対精度を  $\varepsilon_r = 10^{-9}$  とし計算する。前章までに述べた方法に従って区間  $[0, 10]$  上で一度だけチェビシェフ展開を行い九つの  $I_{ij}$  の近似値の組を計算するのに要する時間と、(40)を各  $[x_i, y_j]$  上の定積分とみなして独立に積分値を9回計算する時間との比率は約1/2であった。不定積分を扱うため、本方法では一般に与えられた各区間  $[x_i, y_j]$  ( $1 \leq i \leq L, 1 \leq j \leq M$ ) をその部分区間として含む一番大きい区間  $J = [\min_i x_i, \max_j y_j]$  上で関数  $f(t)$  をチェビシェフ展開している。一般にチェビシェフ展開はその区間  $J$  が小さいほど収束が速い。そこで各区間  $[x_i, y_j]$  ( $c \in J$ ) の多くが  $J$  よりかなり小さいとき、それぞれの  $[x_i, y_j]$  上の積分を個々の定積分とみなして独立に計算した方が能率的となる場合もある。

## 5. おわりに

対数特異性を含む関数の有限区間内での不定積分の自動積分法を示した。入力関数を与えられた有限区間上でFFTを利用してチェビシェフ展開している。積分の誤差が特異点  $c$  の位置に無関係な値で評価されるので、与えられた要求精度に対して不定積分の上下限と特異点のいろいろな値に対する近似値の組を同じ標本点数で一度に効果的に計算できるようにした。不定積分を評価するアルゴリズムとして3項漸化式が有効に利用されている。定積分の問題に対して、従来のPiessensらの方法と比較し、 $f(t)$  が振動型か滑らかであるほど本方法は能率の高い手法であることが数値例により示された。

区間の内部に代数特異性  $|t-c|^\alpha$  ( $\alpha > -1$ ) をもつ関数の不定積分に本手法を拡張することは今後の課題である。FFTを用いて  $\sqrt[3]{2}$  倍的に標本数を増しながらチェビシェフ展開を行う算法の詳細は別に発表する予定である。

## 参 考 文 献

- 1) Elliott, D. and Paget, D. F.: Product-Integration Rules and Their Convergence, *BIT*, Vol. 16, pp. 32-40 (1976).
- 2) Sloan, I. H. and Smith, W. E.: Product-Integration with the Clenshaw-Curtis and Related

points: Convergence Properties, *Numer. Math.*, Vol. 30, pp. 415-428 (1978).

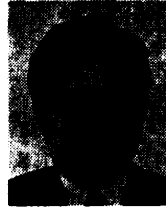
- 3) Sloan, I. H. and Smith, W. E.: Product Integration with the Clenshaw-Curtis Points: Implementation and Error Estimates, *Numer. Math.*, Vol. 34, pp. 387-401 (1980).
- 4) Rabinowitz, P.: Numerical Integration in the Presence of an Interior Singularity, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol. 17, No. 1 & 2, pp. 31-41 (1987).
- 5) Davis, P. J. and Rabinowitz, P.: *Methods of Numerical Integration*, Academic Press, Orlando (1984).
- 6) 長谷川武光, 鳥居達生: コーシーの主値積分に対する自動積分法, 情報処理学会論文誌, Vol. 25, No. 5, pp. 857-863 (1984).
- 7) Luke, Y. L.: *Algorithms for the Computation of Mathematical Functions*, Academic Press, New York (1977).
- 8) Gentleman, W. M.: Implementing Clenshaw-Curtis Quadrature, II Computing the Cosine Transformation, *Comm. ACM*, Vol. 15, No. 5, pp. 343-346 (1972).
- 9) Bulirsch, R.: Bemerkung zur Romberg-Integration, *Numer. Math.*, Vol. 6, pp. 6-16 (1964).
- 10) Hasegawa, T., Torii, T. and Ninomiya, I.: Generalized Chebyshev Interpolation and Its Application to Automatic Quadrature, *Math. Comput.*, Vol. 41, No. 164, pp. 537-553 (1983).
- 11) 鳥居達生, 長谷川武光: 標本点数を低倍率で漸増させる実関数のFFT, 情報処理学会論文誌, Vol. 24, No. 3, pp. 343-350 (1983).
- 12) 長谷川武光, 鳥居達生: 対数核を含む不定積分の自動積分法, 京都大学数理解析研究所講究録, No. 613, pp. 204-219 (1987).
- 13) Piessens, R., deDoncker, E., Überhuber, C. W. and Kahaner, D. K.: *QUADPACK A Subroutine Package for Automatic Integration*, Springer-Verlag, Berlin (1983).
- 14) Elliott, D.: Truncation Errors in Two Chebyshev Series Approximations, *Math. Comput.*, Vol. 9, pp. 234-248 (1965).
- 15) 長谷川武光, 鳥居達生: 激しい振動積分の自動積分法, 情報処理学会論文誌, Vol. 25, No. 1, pp. 116-124 (1984).

(昭和62年5月11日受付)

(昭和62年7月9日採録)

**長谷川武光 (正会員)**

昭和 19 年生。昭和 42 年名古屋大学工学部応用物理学科卒業。昭和 47 年同大学院博士課程修了。工学博士。昭和 47 年より昭和 57 年まで名古屋大学工学部勤務。昭和 57 年福井大学工学部情報工学科講師。現在同学科助教授。数学ソフトウェア、とくに数値積分法の研究開発に従事。日本物理学会会員。

**鳥居 達生 (正会員)**

昭和 9 年熊本県生。昭和 32 年九州工業大学電気工学科卒業。同年新日本窒素肥料(株)就職。昭和 39 年同社退職。同年大阪大学工学部助手(応用物理学科)。昭和 50 年名古屋大学工学部情報工学科講師。助教授を経て昭和 60 年教授。数値解析、数学ソフトウェアの研究に従事。とくに FFT を基礎に関数近似、数値積分について研究している。