



等差数列的に標本数を増す補間的自動積分法*

鳥居達生** 長谷川武光** 二宮市三**

Abstract

A generalized Chebyshev interpolation procedure increasing a fixed number of sample points at a time is developed and analysed. It is then incorporated into an efficient automatic quadrature scheme of Clenshaw-Curtis type.

1. はじめに

有限閉区間 $[-1, 1]$ で十分滑らかな関数を数値積分するとき、よく知られているように一定の標本数でも精度がよいのはガウス型公式である。標本数が異なるならば、0を除き共通する標本点はないので標本点を追加しながら積分の近似値の列をつくり、誤差を推定する自動積分法にガウス型公式は適さない。

現在、自動積分法としてよく用いられているのは、ニュートン・コーツの各種の複合則とロンバーグ法であろう。これらは補間的積分公式ではない。その意味で被積分関数の解析性をよく利用した公式とはいえない。そのため解析関数に対して精度は相対的によくない。高橋・森による二重指数関数型数値積分公式は、被積分関数が閉区間 $(-1, 1)$ で解析的ならば、標本数の増大とともに誤差が指数関数的に減少するという特長をもつ。区間の端点が特異点である特異積分に対して効果的である^{1), 2)}。しかし閉区間上で解析的で全域的に変化する関数（たとえば振動する関数）に対しては、必ずしも有効ではない。

有限閉区間上で十分滑らかな関数に対して精度のよい自動積分法は Clenshaw-Curtis 法と Patterson の方法である^{3)~5)}。標本数を $N+1$ (N は偶数) とするとき前者は N 次、後者は $3N/2+1$ 次の多項式に対して正確である。前者は誤差の推定のためだけに標本を費やすことはないで、両者の自動積分法としての

効率はほぼ互角とされている⁵⁾。ここで効率は所要の精度に対し使用した標本数で測るものとする。

効率は単に積分公式の収束性のみならず標本点の追加の仕方、収束の判定法に依存する。さらに算法の安定性と算法固有の時間（積分の計算時間から標本を求めるために要した時間を除いた時間）が問題となる。

Clenshaw-Curtis 積分法は、被積分関数のチェビシェフ補間式を積分するので数値的に安定である。積分法固有の時間も高速 cosine 変換法を用いることにより他の方法と比べ一般に考えられる程大きくない^{6), 7)}。すなわち、標本数 $N+1$ (N は 2 のべき) のとき演算回数（実数乗算）は $\frac{1}{2}N \log_2 N$ である。FFT を用いる限り、標本数は等比数列 r^n (r は 2 以上の整数) とならざるを得ないので、収束判定の最終段階で標本を無駄にする可能性が高い。この問題を解決するため、われわれは等差数列的に標本数を増す Clenshaw-Curtis 型の自動積分法を提示する。

算法の基本は次の三点である。

1) 区間 $[0, 1)$ 上に一様分布する Van der Corput 列からチェビシェフ分布する点列をつくり、これを標本点に用いる。

2) N 点ずつ標本点を追加しながら補間式の列をつくるとき、 N 項 FFT を用いる。これにより 1 点ずつ追加する場合に比べ、演算回数を約 $1/N$ に減らすことができる。

3) 定数表を用いて得られた補間式を積分する。

これによって Clenshaw-Curtis 法の特長を生かしつつ、自動積分法の効率を高めることができる。

2. 一様分布と単位円周上での補間

自然数 k の 2 進表示

* An Automatic Integration of Interpolatory Type Increasing the Sample Points with Arithmetic Progression by Tatsuo TORII, Takemitsu HASEGAWA and Ichizo NINOMIYA (Department of Information Science, Faculty of Engineering, Nagoya University).

** 名古屋大学工学部情報工学

$$k = k_1 + k_2 2 + \dots + k_n 2^{n-1}, \quad k_n = 1 \quad (1a)$$

に対し、共役な数 k^* を

$$k^* = k_1 2^{-1} + k_2 2^{-2} + \dots + k_n 2^{-n}, \quad (1b)$$

$$0^* = 0$$

で定義する。

自然数 $\{k\}$ に対し、区間 $[0, 1)$ 上に有理数 $\{k^*\}$ が組織的に構成される。この数列は、 $[0, 1)$ 上に一様分布する点列として 1935 年 Van der Corput が与えている⁹⁾。一様分布する点列は数多く知られているが、それらの中で一様性が最もよいものとされている⁹⁾。

$[0, 1)$ 上に一様分布する点列 $\{k^*\}$ を

$$\lambda_k = \exp(2\pi i k^*)$$

によって複素平面上の単位円周上にうつす。 $\{\lambda_k\}$ は単位円周上の一様分布列である。

l を n ビットの正の整数

$$l = l_1 + l_2 2 + \dots + l_n 2^{n-1}, \quad l_n = 1$$

とし、 l 次多項式

$$\omega_l(z) = \prod_{0 \leq k < l} (z - \lambda_k)$$

を定義すれば、

$$\omega_l(z) = \prod_{l_\nu \neq 0, 1 \leq \nu \leq n} (z^{2^{l_\nu-1}} + \exp(2^* \pi i l^*)) \quad (2)$$

が成り立つ。

証明. l の 2 進展開係数の中で $l_\nu = 1$ なる番号 ν だけ考える。大ききの順に並べて隣り合う番号を便宜上 $\mu > \nu$ とする。 $\omega_l(z)$ の定義式における k の範囲を

$$K_\nu = \{l_\mu 2^{\mu-1} + \dots + l_n 2^{n-1} \leq k < l_\nu 2^{\nu-1} + \dots + l_n 2^{n-1}\}$$

と制限すれば

$$\begin{aligned} \prod_{k \in K_\nu} (z - \lambda_k) &= \prod_{0 \leq k < 2^{\nu-1}} \left(z - \exp \left(2\pi i \left(\frac{k}{2^{\nu-1}} + l_\mu 2^{-\mu} \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + \dots + l_n 2^{-n} \right) \right) \right) \\ &= z^{2^{\nu-1}} - \exp(2^* \pi i (l_\mu 2^{-\mu} + \dots + l_n 2^{-n})) \\ &= z^{2^{\nu-1}} + \exp(2^* \pi i l^*). \end{aligned}$$

各 K_ν の結果をまとめて (2) が得られる。(証明終)

z を $\lambda_i z$ と変数変換すれば

$$\omega_l(\lambda_i z) = \lambda_i^l \prod_{l_\nu \neq 0} (z^{2^{\nu-1}} + 1)$$

となるので、このことから $\omega_l(z)$ の零点が単位円周上に一様分布することがわかる。

単位円周上において

$$\begin{aligned} \max |\omega_l(z)| &= |\omega_l(\lambda_i)| \\ &= 2^{\sum l_\nu} \end{aligned} \quad (3)$$

半径 $r > 1$ の円周上において

$$\frac{\max |\omega_l(z)|}{\min |\omega_l(z)|} < \frac{r+1}{r-1} \quad (4)$$

が成り立つ。

(3) は (2) の直接的結果であるので (4) だけ示す。簡単のため $\omega_l(\lambda_i z)$ を $\omega_l(z)$ とおく。(2) を変形して

$$\omega_l(z) = (z^{2^n} - 1) / \{(z-1) \prod_{l_\nu \neq 1} (z^{2^{\nu-1}} + 1)\}.$$

したがって $|z| = r$ 上で

$$|\omega_l(z)| > (r^{2^n} - 1) / \{(r+1) \prod_{l_\nu \neq 1} (r^{2^{\nu-1}} + 1)\}$$

$$= \frac{r-1}{r+1} \prod_{l_\nu \neq 0} (r^{2^{\nu-1}} + 1)$$

$$= \frac{r-1}{r+1} \max_{|z|=r} |\omega_l(z)|.$$

(証明終)

標本点を増しながら補間式の列をつくることを補間過程という。1 点ずつ点を追加しながら補間する場合しばしばニュートン補間が用いられる。われわれは、これを拡張して各 λ_i に円周等分方程式 $z^N - \lambda_i = 0$ を対応させ、この N 個の零点を追加しながら補間式の列をつくる。この補間過程の収束性と安定性に $\omega_l(z)$ の性質 (3), (4) が重要な役割りを果たす。

補間過程の構成について述べよう。多項式 $\omega_l(z^N)$ の lN 個の零点における複素数値関数 $f(z)$ の補間式を $p_l(z)$ とする。 $z^N - \lambda_i$ の零点を標本点として追加したときの補間式 $p_{l+1}(z)$ を帰納的に定める。すなわち

$$\begin{aligned} p_0(z) &= 0, \quad \omega_0(z) = 1, \\ p_{l+1}(z) &= p_l(z) + \omega_l(z^N) \sum_{0 \leq k < N} A_{l,k} z^k \\ l &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5)$$

係数 $A_{l,k}$ は補間条件を満たさなければならない。

換言すれば、追加される N 個の標本点

$$\exp \left(\frac{2\pi i}{N} (j + l^*) \right), \quad 0 \leq j < N$$

において $f(z)$ と $p_{l+1}(z)$ が一致するように各 $A_{l,k}$ を定める。この標本点上の $f(z)$ の値を $f_{l,j}$ とおく。漸化式 (5) より $p_{l+1}(z)$ は

$$p_{l+1}(z) = \sum_{0 \leq i \leq l} \sum_{0 \leq k < N} \omega_i(z^N) A_{i,k} z^k$$

と表わされる。

$\{f_{l,i}\}$ に対する N 項離散型フーリエ変換を一時的に

$$A_k = \frac{1}{N} \sum_{0 \leq j < N} f_{l,j} \exp \left(-\frac{2\pi i}{N} k(j + l^*) \right)$$

$$0 \leq k < N \quad (6)$$

とおく. 以上二点と補間条件より $A_{i,k}$ は

$$A_k = \sum_{0 \leq i \leq l} \omega_i(\lambda_i) A_{i,k}$$

を満たさなければならない. したがって

$$A_{i,k} = \frac{A_k}{\omega_i(\lambda_i)} - \sum_{0 \leq i' < l} \frac{\omega_{i'}(\lambda_{i'})}{\omega_i(\lambda_i)} A_{i',k} \quad (7)$$

この式は, k を固定すればニュートン補間の差分商の計算と同じである. N を 2 のべきとし (6) に FFT に用いるならば $p_i(z)$ のために必要な複素乗算回数は, 約

$$\frac{1}{2} l N (\log_2 N + l) \quad (8)$$

である. l が十分大ならば, 演算回数は 1 点ずつ追加する場合に比べ $1/N$ に減る.

補間式の剰余項について述べる. 簡単のため $f(z)$ は単位円周板 $|z| \leq 1$ 上で解析的とする. 適当に $r > 1$ をとれば $f(z)$ は, $|z| \leq r$ 上で解析的としてよいので, よく知られた複素積分表示により

$$f(z) - p_i(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{|\zeta|=r} \frac{\omega_i(z^N)}{(\zeta - z)\omega_i(\zeta^N)} f(\zeta) d\zeta.$$

z は単位円周上の点で, $M(r)$ を半径 r の円周上で $|f(\zeta)|$ の最大値とすれば, (3), (4) より

$$|f(z) - p_i(z)| < 2\Delta l \cdot \frac{r}{r-1} \frac{r^{N+1} M(r)}{r^{N-1} - 1} \quad (9)$$

が成り立つ. したがって, N を固定し l を増せば, $p_i(z)$ の誤差は指数関数的 $O(r^{-lN})$ に減少する. $f(z)$ の性質に応じ留数定理や鞍点法を用いれば, さらに精密な誤差評価ができる²⁾.

3. チェビシエフ分布と有限区間上での補間

単位円周上に一様分布する点列を実軸上の区間 $[-1, 1]$ に射影した点列はチェビシエフ分布するという. これを標本点とする補間式を一般化されたチェビシエフ補間式とよぶことにする. 一様分布の点列のつくり方に対応してチェビシエフ分布する点列のつくり方も数多く考えられるが, われわれは一様性の最もよい Van der Corput 列から次のようにしてつくる.

n ビットの自然数 k に対し

$$\alpha_k = (k + 2^{n-1})^* \\ = k_1 2^{-1} + k_2 2^{-2} + \dots + k_{n-1} 2^{-n+1} + 2^{-n-1} \quad (10)$$

を定義する.

$\{\alpha_k\}$ は $(0, 1)$ 上に一様分布する.

単位円周上の点列 $\{\exp(2\pi i k^*)\}$ は原点および実軸に関して対称である (Fig. 1). これに対し $\{\exp(2\pi i \alpha_k)\}$

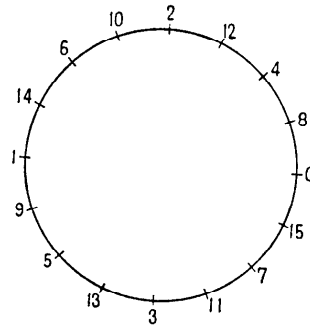


Fig. 1 Uniform distribution on the circle: $\exp(2\pi i k^*)$

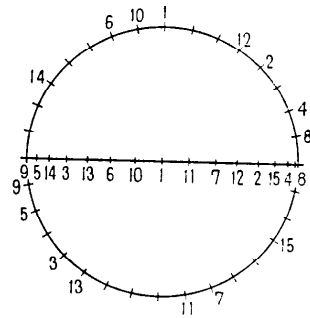


Fig. 2 Chebyshev distribution: $\cos 2\pi \alpha_k$

は原点に関して対称, 実軸に関して非対称である. したがって, これを実軸上に射影した点列

$$x_k = \cos 2\pi \alpha_k, \quad k=1, 2, \dots$$

はチェビシエフ分布し互いに相異なる (Fig. 2).

こうしてつくった $l-1$ 個の点 $x_k, 1 \leq k < l$ を零点とする多項式を

$$\tilde{\omega}_{l-1}(x) = 2^{l-1} \prod_{1 \leq k < l} (x - x_k)$$

とおく. $\omega_l(x)$ の表示 (2) の導出と同様にして

$$\tilde{\omega}_{l-1}(x) = 2\Delta l \cdot U_{2^{n-1}-1}(x) \cdot \prod_{l, \nu \neq 0} \{T_{2^{\nu-1}}(x) + T_{2^{\nu-1}}(x_l)\} \quad (11)$$

ただし ν の動く範囲は $1 \leq \nu < n$

を得る. ここで $T_\nu(x), U_\nu(x)$ は, k 次の第 1 種, 第 2 種チェビシエフ多項式である.

これより次の不等式が成立する.

$$|\tilde{\omega}_{l-1}(\cos \theta) \sin \theta| \leq 4\Delta l. \quad (12)$$

$l=2^n$ ならば等号で成立する.

単位円周上の点 $\exp(2\pi i l^*)$ において $|\omega_l(z)|$ は最大値をとったが, 一般に $\theta=2\pi \alpha_l$ は $\tilde{\omega}_{l-1}(\cos \theta) \sin \theta$

の極値ではない。実例は容易につくれる。

つぎにパラメータ α を含む高速 cosine 変換法について述べる。 α を 1 より小なる正数とする。 $N-1$ 次の cosine 級数

$$t(\theta) = \frac{1}{2}a_0 + a_1 \cos \theta + \dots + a_{N-1} \cos(N-1)\theta$$

$$= \sum'_{0 \leq k < N} a_k \cos k\theta$$

の N 個の標本

$$t_{j+\alpha} = t\left(\frac{2\pi}{N}(j+\alpha)\right), \quad 0 \leq j < N$$

から係数 a_k を求める。これに N 項の実数型 FFT を形式的に適用して

$$A_k = \frac{1}{N} \sum_{0 \leq j < N} t_{j+\alpha} \exp\left(-\frac{2\pi i}{N}k(j+\alpha)\right)$$

$$0 \leq k < N \quad (13)$$

とおく。入力データの実数性より出力データはエルミート対称となる。

$$A_{N-k} = \bar{A}_k \exp(-2\pi i\alpha), \quad 0 \leq k \leq N$$

ただし $A_N = A_0 \exp(-2\pi i\alpha)$ 。

この事実と三角関数の選点直交関係より

$$a_k = -\frac{2}{\sin 2\pi\alpha} \operatorname{Im} \bar{A}_{N-k}, \quad 0 \leq k \leq N \quad (14)$$

が得られる。 $\operatorname{Im} z$ は z の虚数部。

N が 2 のべきならば、 N 項 cosine 変換のために必要な複素数乗算回数は N 項の実数型 FFT と同じく $\frac{1}{4}N \log_2 N$ である。

以上を準備して、区間 $[1, -1]$ で滑らかな関数 $f(x)$ の一般化されたチェビシェフ補間を行う。 lN 次の多項式 $\tilde{w}_l(T_N(x))$ の零点集合を補間点とする $f(x)$ の補間式を $p_l(x)$ で表わし、これがしたがう漸化式を

$$p_0(x) = 0, \quad \tilde{w}_0(x) = 1,$$

$$p_l(x) = p_{l-1}(x) + \tilde{w}_{l-1}(T_N(x)) \cdot \left\{ \sum'_{0 \leq k < N} A_{l,k} T_k(x) \right\}$$

$$l = 1, 2, \dots \quad (15)$$

とおく。係数 $A_{l,k}$ を定めるために追加する N 個の点は、 $T_N(x) - x_l$ の零点であるから

$$x_{j+\alpha_l} = \cos\left(\frac{2\pi}{N}(j+\alpha_l)\right), \quad 0 \leq j < N$$

となる。 l 段階で $p_l(x)$ は補間条件

$$p_l(x_{j+\alpha_l}) f_{j+\alpha_l} \equiv f(x_{j+\alpha_l}), \quad 0 \leq j < N$$

を満たさなければならない。(13), (14) における α として α_l をとり $\{f_{j+\alpha_l}\}$ に N 項 cosine 変換をほどし、一時的に $\{A_k\}$ とおけば

$$A_k = \sum_{1 \leq i \leq l} \tilde{w}_{i-1}(\cos 2\pi\alpha_i) A_{i,k} \quad (16)$$

が成立しなければならない。これより係数 $A_{i,k}$ を次の漸化式で求める。

$$B_{l-1} = A_k - A_{l,k},$$

$$B_i = \frac{B_{i+1}}{2(\cos 2\pi\alpha_i - \cos 2\pi\alpha_{l-i-1})} - A_{l-i,k},$$

$$i = l-2, l-3, \dots, 1,$$

$$A_{i,k} = \frac{B_i}{2(\cos 2\pi\alpha_i - \cos 2\pi\alpha_{i-1})},$$

$$k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (17)$$

ここで B_i は k に依存するが、 k を固定したときの中間結果であるので k を省略した。上式は $l-1$ 階差分商を k 個計算しているにすぎない。

以上によって $f(x)$ の一般化されたチェビシェフ補間式

$$p_l(x) = \sum_{1 \leq i \leq l} \sum'_{0 \leq k < N} A_{i,k} T_k(x) \tilde{w}_i(T_N(x)) \quad (18)$$

が得られたことになる。

lN 個の係数 $A_{i,k}$ のために必要な実数乗除算の回数は

$$lN \left(\log_2 N + \frac{1}{2} \right) \quad (19)$$

である。

閉区間 $[-1, 1]$ の上で $f(x)$ が解析的ならば、 z -平面上の 1, -1 を焦点とする適当な楕円

$$\frac{x^2}{\frac{1}{4}\left(r + \frac{1}{r}\right)^2} + \frac{y^2}{\frac{1}{4}\left(r - \frac{1}{r}\right)^2} \leq 1, \quad r > 1$$

の上で解析的としてよい。この境界を C とすれば、一般化されたチェビシェフ補間式の剰余項は

$$f(x) - p_l(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{\tilde{w}_l(T_N(x))}{(z-x)\tilde{w}_l(T_N(z))} f(z) dz$$

と積分表示される。(12)より $[-1, 1]$ 上で $\tilde{w}_l(T_N(x))$ は、高々 $O(l^2)$ であり、 $T_k(z)$, $U_k(x)$ は C において $O(r^N)$ であるから l^2 を r^{lN} に対して無視するならば、

$$|f(x) - p_l(x)| = O(r^{-lN}) \quad (20)$$

となり。誤差は指数関数的に減少する。

古典的チェビシェフ補間式の剰余項は、 $f(z)$ の解析的性質に応じ留数定理や鞍点法を用い調べられている¹⁰⁾。

一般化されたチェビシェフ補間式の剰余項は、それより大きくなるが、標本数を増したときの漸近的傾向は (20) の意味で同じである。

Table 1 Weights $w_{l,k}$ ($N=8$)

$l \backslash k$	0			2			4			6		
1	1.00000	00000	E 00	-6.66667	66666	E-01	-1.33333	33333	E-01	-5.71428	57143	E-02
2	-3.17460	31746	E-02	-7.73448	77345	E-02	-1.47319	34732	E-01	-6.76923	07692	E-01
3	2.03705	25314	E 00	-1.24039	95195	E 00	-7.73241	93002	E-02	8.16685	27483	E-01
4	-3.52242	92616	E-02	-8.44486	27057	E-02	-1.54866	15706	E-01	-6.85339	72149	E-01
5	2.04744	46973	E 00	-1.21414	56344	E 00	-2.25701	36495	E-02	1.09902	23905	E 00
6	-1.84064	33758	E-02	-4.48855	42029	E-02	-8.57413	93715	E-02	-3.95723	29766	E-01
7	1.15412	58661	E 00	-8.22288	07367	E-01	-2.29267	43490	E-01	-3.78365	18708	E-01
8	-3.71130	32887	E-02	-8.82498	71846	E-02	-1.58759	77887	E-01	-6.89337	69658	E-01
9	2.05097	82243	E 00	-1.20550	58581	E 00	-5.97795	88601	E-03	1.17587	12489	E 00
10	-5.39804	11991	E-03	-1.29279	72933	E-02	-2.36530	48501	E-02	-1.04412	69595	E-01
11	2.99609	40034	E-01	-2.13806	08568	E-01	-5.64059	93537	E-02	-6.63971	25547	E-02
12	-2.04957	45776	E-02	-4.91852	73722	E-02	-9.04244	53061	E-02	-4.01118	58453	E-01
13	1.18441	34896	E 00	-7.47160	75253	E-01	-7.95025	33644	E-02	3.48696	50191	E-01
14	-5.47339	04884	E-02	-1.32002	26631	E-01	-2.45650	37067	E-01	-1.10410	37178	E 00
15	3.12768	28208	E 00	-2.42339	14496	E 00	-8.90286	24748	E-01	-2.08314	43088	E 00
16	-3.80810	34484	E-02	-9.01891	08384	E-02	-1.60708	75583	E-01	-6.91303	04336	E-01
17	2.05198	51656	E 00	-1.20308	88063	E 00	-1.53242	26639	E-03	1.19559	32357	E 00
18	-1.43267	15989	E-03	-3.40430	31987	E-03	-6.11405	92487	E-03	-2.65040	40456	E-02
19	7.57260	10680	E-02	-5.36736	57253	E-02	-1.34231	03943	E-02	-1.19989	06626	E-02
20	-5.66837	15982	E-03	-1.34718	20810	E-02	-2.42065	58511	E-02	-1.04982	65190	E-01
21	3.06313	84418	E-01	-1.92864	53250	E-01	-1.76842	68189	E-02	1.06280	89802	E-01
22	-1.35161	97232	E-02	-3.21353	63831	E-02	-5.77925	66509	E-02	-2.50860	74152	E-01
23	6.98907	97308	E-01	-5.51380	31511	E-01	-2.04887	20835	E-01	-4.52036	47257	E-01
24	-2.16639	97770	E-02	-5.15419	44159	E-02	-9.28426	55525	E-02	-4.03642	89175	E-01
25	1.19717	10038	E 00	-7.16321	26088	E-01	-2.18194	95096	E-02	6.09039	35090	E-01

4. 自動積分法

区間 $[-1, 1]$ で解析的な関数 $f(x)$ を前述した方法で展開して

$$f(x) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum'_{0 \leq k < N} A_{l,k} T_k(x) \tilde{w}_{l-1}(T_N(x)) \quad (21)$$

とする。右辺の級数は一様収束するので項別積分できる。 N が偶数のとき、 k の偶数、奇数に応じて右辺各項は、偶関数、奇関数となるので $f(x)$ の偶数番号の係数 $A_{l,2k}$ 、 $0 \leq k < N/2$ だけ求めればよい。そこで

$$w_{l+1,2k} = \int_{-1}^1 \tilde{w}_l(T_N(x)) T_{2k}(x) dx \quad (22)$$

$$0 \leq k < N/2, l=0, 1, 2, \dots$$

とおく。これは次の漸化式で計算すればよい。

$$w_{l+1,2k} = \frac{2}{1-4k^2}, \quad 0 \leq k < \frac{mN}{2},$$

$$w_{l+1,2k} = w_{l,N+2k} + w_{l,|N-2k|} - 2x_l w_{l,2k},$$

$$0 \leq k < (m-l)N/2, 1 \leq l < m \quad (23)$$

m は必要に応じて大きくとればよい。

したがって

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{l=1}^{\infty} \sum'_{0 \leq k < N/2} A_{l,2k} w_{l,2k}.$$

実用的見地からすれば、追加する点の個数 N とし

て 8, 12, 16 をとるのがよいであろう。単精度の場合 $N=8$ 、倍精度用には $N=16$ とするのが適当であろう。

N がこの程度なら殊更 FFT を強調することはない。

積分の定数表として標本点の座標

$$\left\{ \cos \frac{2\pi}{N}(j+\alpha_l); 0 \leq j < \frac{N}{2}, 1 \leq l < m \right\}$$

と重み係数

$$\left\{ w_{l,2k}; 0 \leq k < \frac{N}{2}, 1 \leq l < m \right\}$$

が必要である。前者は省略し、後者については $N=8$ の場合を Table 1 に示す。 $N=16$ の場合、定数表が大きくなるのでチェック用にその一部を掲げるに止める (Table 2 (次頁参照))。これら定数表は 4 倍精度 (42 桁) で計算し単精度用、倍精度用に丸めたものである。ただし Table 1, 2 における各 $w_{l,0}$ は 1/2 倍されている。したがって

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{l=1}^{\infty} \sum'_{0 \leq k < N/2} A_{l,2k} w_{l,2k} \quad (24)$$

を用いればよいことになる。

自動積分法の特長は要求される精度に応じ誤差を推定しつつ標本数を“自動的に”決定するところにある。

自動積分法の信頼性は、収束の判定法にかかってい

Table 2 Weights $w_{l,k}(N=16)$

$l \backslash k$	0				2				14						
1	1.00000	00000	00000	00000	E 00	-6.66666	66666	66666	66666	E -01...	-1.02564	10256	41025	64103	E -02
2	-7.84313	72549	01960	78431	E -03	-1.64483	60720	80654	12400	E -02...	-6.66891	36077	12272	89581	E -01
3	2.09913	68368	64337	31037	E 00	-1.31402	61343	59326	17970	E 00...	9.18304	83670	21062	96391	E -01
⋮															
24	-5.36054	02520	71751	49636	E -03	-1.11736	23721	76255	85925	E -02...	-3.93702	85165	69097	76764	E -01
25	1.17788	18204	67371	84655	E 00	-7.67690	62285	56324	79894	E -01...	6.72129	78511	37118	23644	E -01

る。打ち切り誤差と丸め誤差（計算誤差）を機械的に識別し両者が同程度になったとき演算を停止することが望ましい。しかしながら一般に両者を厳密に評価することはむづかしい。以下に述べる収束判定法も多分に経験的である。

演算桁数は l ビットとする。 l 段階における収束の判定定数を

$$\varepsilon_l = l \cdot 2^{-(l-\varepsilon_0)} \|f\| \quad (25)$$

にとる。 ε_0 は、関数 $f(x)$ の計算誤差と N に依存するが N が 8 ないし 16 位であれば、 ε_0 として 4 ないし 6 位が適当であろう。 N 項 FFT を用いているので伝播誤差が N に依存する度合いは低いと考えられる。

セミノルム $\|f\|$ は、標本点における関数値の最大絶対値で定義する。補間点はチェビシェフ分布するので、われわれの補間過程は準安定である¹³⁾。伝播誤差が l とともにどのようなオーダーで増大するか、さらに詳しい議論が必要となるところであるが、 $O(l)$ と仮定した。

l 段階における打ち切り誤差を一般化されたチェビシェフ展開における末尾の 2 項の係数の絶対値和で推定する。

$$e_l^{(N)} = |A_{l,N-4}| + |A_{l,N-2}| \quad (26)$$

打ち切り誤差が、丸め誤差のレベルに減ったと考えられるときに演算を停止する。すなわち

$$\left. \begin{aligned} e_{l-1}^{(N)} < 2^{N/2} \varepsilon_l \\ e_l^{(N)} < \varepsilon_l \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

を同時に満たすまで l を増す。収束判定は、自動積分法としての信頼性を増すために二段構えとした。同時に 1 段階目の収束判定を若干ゆるくし無駄な標本を追加する可能性を少なくした。

5. 数値例

被積分関数として、チェビシェフ級数展開が解析的に求まるものをとれば、理論と実験の対比が行いやすい。

例 1.

$$\int_{-1}^1 \frac{1-t^2}{1-2xt+t^2} dx = \frac{1-t^2}{t} \log \frac{1+t}{1-t}$$

$$\frac{1-t^2}{1-2xt+t^2} = 2 \sum_{k=0}^{\infty} t^k T_k(x) \quad (28)$$

例 2.

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{a^2+x^2} = \frac{2}{a} \tan^{-1} \frac{1}{a}$$

$$\frac{1}{a^2+x^2} = \frac{2}{a\sqrt{1+a^2}} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (a+\sqrt{1+a^2})^{-2k} T_{2k}(x) \quad (29)$$

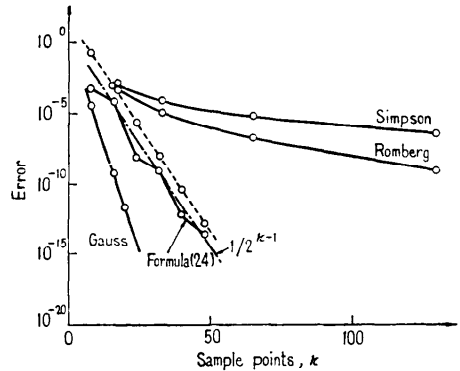
例 3.

$$\int_{-1}^1 \cos ax dx = \frac{2}{a} \sin a$$

$$\cos ax = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k J_{2k}(a) T_{2k}(x) \quad (30)$$

$J_k(a)$ は k 次の第 1 種ベッセル関数。

例 1, 2, 3 の被積分関数は、実軸上に極をもつ有理式、実軸上で解析的な有理式および整関数の代表として採用した。標本数の増加とともに積分の誤差およびチェビシェフ展開係数が減少してゆく状況を Fig. 3, 4, 5 (次頁参照) にそれぞれ示した。標本数を lN



--- Error estimated by (26) in the case $N=8$
 - - - Coefficients of Chebyshev expansion of integrand

Fig. 3 Computed error of $\int_{-1}^1 (1-t^2)/(1-2xt+t^2) dx$, $t=1/2$

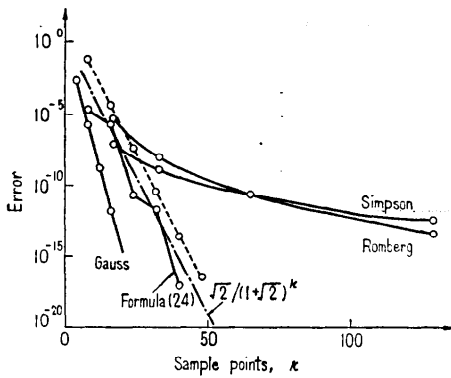


Fig. 4 Computed error of $\int_{-1}^1 1/(1+x^2) dx$

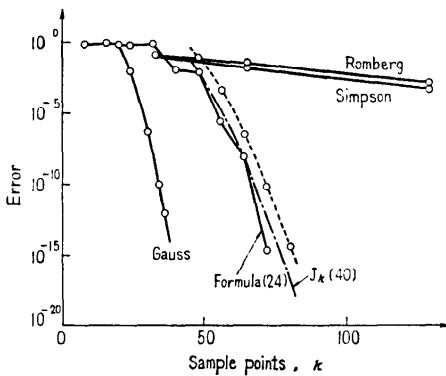


Fig. 5 Computed error of $\int_{-1}^1 \cos 40x dx$

($N=8$) として、 $l=1, 2, \dots$ と等差数列的に標本数を増やすとき、 l の奇数、偶数に応じてジグザグに誤差は減少しているが、傾向としてチェビシェフ展開係数と同じオーダーである。また打ち切り誤差の推定 (26) が妥当であることもこれらの例は示している。

参考までに、ガウス、シンプソン、ロンバーグの各方法による計算結果を図示した。ガウス型公式は自動積分法に適さないの、これを除外すれば、われわれの方法は総じて被積分関数が全域的に変化する関数に適している。この意味で Clenshaw-Curtis 法と同じ特長をもつ。

効率を一定精度のために要する標本数だけで測るならば標本数を小刻みに増やすことが望ましい。同時に収束判定が適確でなければ信頼性に欠けることになる。この二つの条件を完全に満たすことは、数値積分法の制約から本質的に不可能である。われわれはチェビシェフ分布となるよう標本数を等差数列的に増し、収束

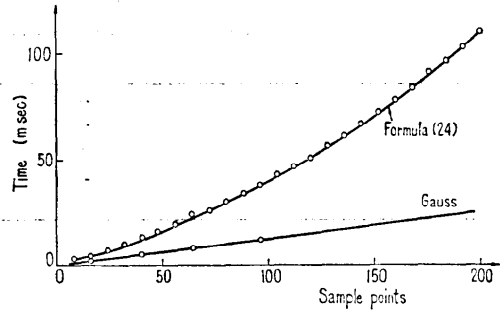


Fig. 6 Computed time of integration (31) in the case $N=8$ (FACOM 230-38)

判定を二段構えとすることにより信頼性を損うことなく効率 (経済性) を高めることができた。

しかしながら積分法が複雑となるならば、標本数だけで費用を見積るのは一面的である。自動積分法固有の時間を考慮する必要がある。そこで標本の計算にほとんど手間を要しない単位関数の積分

$$\int_{-1}^1 U\left(x-\frac{1}{2}\right) dx = \frac{1}{2},$$

$$U(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \quad (31)$$

によって時間を測定した (Fig. 6)。使用した計算機は FACOM 230-38 である。標本数を lN とするとき、ガウス型公式の演算回数が $lN/2$ であるのに対して、われわれの方法は

$$\frac{1}{4} lN(2 \log_2 N + l) \quad (32)$$

である。Fig. 6 から明らかなようにステップ数 l が大きくなる程不利となるので $l \leq 25$ (標本数で 200) と制限した。単精度演算で標本数が 200 を越すような問題であれば、被積分関数は、何らかの意味で特異性をもつものと推定されるので、他の適当な方法 (高橋、森の変数変換、ニュートン・コーツの各種の複合則など) に早目に切り換えた方がよいからである。どのような自動積分法でも、それに適さない例が存在する。適・不適をなるべく早期に判別し、無駄な計算を避けることも自動積分法が備えるべき一つの条件であろう。

本論文で提示した自動積分法は、一般化されたチェビシェフ補間式の積分であり、Clenshaw-Curtis 法の一つの拡張である。等差数列的に標本数を増す Clenshaw-Curtis 型積分法とよぶこともできよう。

プログラムは、名古屋大学大型計算機センターのライブラリーとして登録されている。

参 考 文 献

- 1) H. Takahashi and M. Mori: Quadrature Formulas Obtained by Variable Transformation, *Numer. Math.*, Vol. 21, pp. 206~219 (1973).
- 2) 森 正武: 数値解析と複素関数論, 第7章, 筑摩書房 (1975).
- 3) C. W. Clenshaw and A. R. Curtis: A Method for Numerical Integration on an Automatic Computer, *Numer. Math.*, Vol. 2, pp. 197~205 (1960).
- 4) T. N. L. Patterson: The Optimum Addition Points to Quadrature Formulae, *Math. Comp.*, Vol. 22, pp. 847~856 (1968).
- 5) V. A. Dixon: A Numerical Quadrature, A Survey of the Available Algorithm, *Software for Numerical Mathematics*-edited by D. J. Evans, pp. 105~137, Academic Press, London and New York (1974).
- 6) W. M. Gentleman: Implementing Clenshaw-Curtis Quadrature I, II, *CACM*, Vol. 15, pp. 337~342, 343~346 (1972).
- 7) 鳥居達生: 高速 sine 変換, cosine 変換とその数値積分への応用, *情報処理*, Vol. 15, pp. 670~679 (1974).
- 8) J. G. Van der Corput: Verteilungsfunktionen I-VIII, *Proc. Acad. Amsterdam*, Vol. 38, pp. 813~821, 1058~1066 (1935), Vol. 39, pp. 10~19, 19~26, 149~153, 339~344, 489~494, 579~590 (1936).
- 9) L. Kuipers and H. Niederreiter: Uniform Distribution of Sequences, Chap. 2, John Wiley and Sons, Inc., New York (1974).
- 10) D. Elliot: Truncation Error in Two Chebyshev Series Approximations, *Math. Comp.*, Vol. 19, pp. 234~248 (1965).
- 11) 鳥居達生: 準安定な補間過程の一構成法, *情報処理*, Vol. 9, pp. 197~204 (1968).

(昭和52年3月28日受付)