非解析的な関数を用いた変数変換型数値積分公式†

西井 修††* 室田 一雄†† 伊理 正夫††

変数変換型数値積分法は，積分区間の端点に特異性をもつものを含む広い範囲の被積分関数に対して高精度の結果を与えるという特長を有している．本稿では，その変数変換関数として，一様乱数の無限加重和の確率分布関数として定義され，至る所で無限回微分可能であるが非解析的であるという「奇妙な」関数を用いた公式の性質を調べる．従来提案されてきたこの種の公式の変換関数はいずれも解析的であり，誤差評価もその変換関数の解析性を利用していた．それらの公式と本公式とを比較することによって，変数変換型公式における解析性の役割が明らかになると期待される．計算機実験の結果，本公式は，ⅰ）解析関数を積分する限りでは従来の変数変換型公式に比べて精度が劣るものの，ⅱ）$1/N$ (N: 標本点数）の多項式よりは速く誤差が減衰することが確認された．また，本公式によって多項式を積分するときの誤差が $O(\exp[-C(\log N)^2])$ (C は正定数）と表せることも理論的に示した．

1. はじめに

変数変換型数値積分公式は，定積分

$$I=\int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}\,x \tag{1.1}$$

の値を数値的に求めるときに，適当な関数 ϕ を用いて

$$x=\phi(t)\ \ (\phi(\alpha)=0,\ \phi(\beta)=1,\ \phi'(\alpha)=\phi'(\beta)=0) \tag{1.2}$$

なる変数変換を施し

$$I=\int_\alpha^\beta g(t)\,\mathrm{d}\,t,\quad g(t)=f(\phi(t))\phi'(t) \tag{1.3}$$

の形にしてから台形則を適用するものであり，少ない標本点数で高精度の近似値を与え，また被積分関数が積分区間の両端に特異性をもつ場合にも有効である[4]．$(\alpha,\beta)=(0,1)$ の場合には積分公式は

$$S_N=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N-1} f\left(\phi\left(\frac{i}{N}\right)\right)\phi'\left(\frac{i}{N}\right) \tag{1.4}$$

となる（IMT 公式[2),6)] など）．$(\alpha,\beta)=(-\infty,\infty)$ の場合には，公式は無限和

$$S_h=h\sum_{i=-\infty}^{\infty} f(\phi(ih))\phi'(ih) \tag{1.5}$$

を適当な有限項で打ち切る（DE 公式[9] はこの場合に属し，“最良”公式とされている）．公式の性能評価に際して，いずれの場合にも $g(t)$ が

$$g^{(m)}(\alpha)=g^{(m)}(\beta)=0\quad (m=0,1,\cdots) \tag{1.6}$$

を満たすことが本質的に重要な役割を果たす．

ところで，これまで提案された変数変換型公式[4] の変換関数はいずれも解析関数であり，公式の特性は変換関数の解析性に基づいた複素関数論的手法により調べられてきた．このため，変数変換型公式の有効性は f および ϕ の解析性にあると漠然と考えられていたように思われる．しかし，$g(t)$ が (1.6) を満たす C^∞ 関数であれば，Euler-Maclaurin の公式[1] により，公式誤差が $1/N$ の多項式よりも速く減衰するということは示される．そこで本稿では，一つの極端な場合として，至る所で非解析的な関数を変換関数として用いた積分公式を実際に構成して，解析性をもたない変換関数を用いてもある程度優良な特性をもつ公式が作れることを示す．また，その変換関数の値の計算に役立つ性質も調べた．

2. 非解析的変換関数 φ

本論文で用いる変換関数 φ は，以下のように，一様乱数の加重和の分布に関係して導入されたものである[3]．

U_k ($k=1,2,\cdots$) を，それぞれ [0, 1] 上の一様分布に従う独立な確率変数とし

$$X_n=\alpha\{U_n+(1-\alpha)U_{n-1}+\cdots+(1-\alpha)^{n-1}U_1\} \tag{2.1}$$

$(0<\alpha<1)$ とおく．X_n の確率分布関数 $F_n(t;\alpha)$，密度関数 $p_n(t;\alpha)$ は

$$p_1(t;\alpha)=\begin{cases}1/\alpha & (0\le t\le\alpha)\\ 0 & (t<0,\ t>\alpha),\end{cases} \tag{2.2}$$

$$p_{n+1}(t;\alpha)=\frac{1}{\alpha}\left\{F_n\left(\frac{t}{1-\alpha};\alpha\right)-F_n\left(\frac{t-\alpha}{1-\alpha};\alpha\right)\right\}\quad (n=1,2,\cdots) \tag{2.3}$$

を満たすので，順次計算することができる．それらはすべて区分的に多項式となる．ここで，$n\to\infty$ とした

---

† A Quadrature Formula Using a Nonanalytic Transformation of the Integration Variable by OSAMU NISHII, KAZUO MUROTA and MASAO IRI (Department of Mathematical Engineering and Instrumentation Physics, Faculty of Engineering, University of Tokyo).

†† 東京大学工学部計数工学科
* 現在 (株)日立製作所中央研究所

もの，すなわち等比数列を重みとする U_k の無限加重和として定義される確率変数の極限分布関数 $F(t;\alpha)=\lim_{n\to\infty}F_n(t;\alpha)$，極限密度関数 $p(t;\alpha)=\lim_{n\to\infty}p_n(t;\alpha)$ について次のことが知られている[3]．

- ○ $F(t;\alpha)$，$p(t;\alpha)$ は存在し，無限回微分可能である．
- ○ $p(t;\alpha)$ は $[0,1]$ の無限個の点において非解析的；特に $p(t;1/2)$ は $[0,1]$ のすべての点において非解析的である．

以下では $F(t;1/2)$ を $\varphi(t)$ と書き，これを(1.2)における変数変換関数として採用する．$\varphi(t)$，$\varphi'(t)$ のグラフを図1に示す．

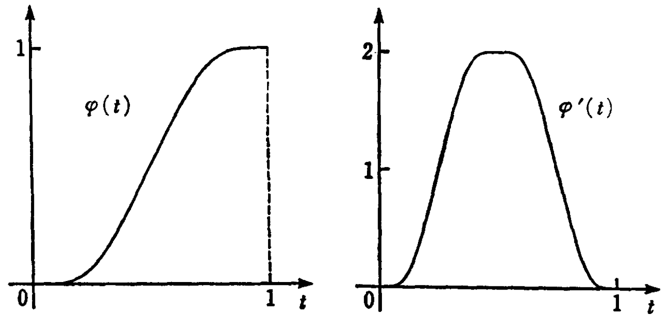


図 1 $\varphi(t)$, $\varphi'(t)$ のグラフ
Fig. 1 Outline of $\varphi(t)$ and $\varphi'(t)$.

$\varphi(t)$ は次の性質をもつ．

○ $\varphi(t)=0\ (t\le 0),\quad \varphi(t)=1\ (t\ge 1).$ (2.4)

○ $\varphi(t)+\varphi(1-t)=1.$ (2.5)

○ $-\infty<t<\infty$ で無限回微分可能であるが，$0\le t\le 1$ で至る所非解析的． (2.6)

○ $\varphi'(t)=2\varphi(2t)\quad(0\le t\le 1/2)$ (2.7)

（これは導関数が関数自身と相似な形状をもつ部分からなることを示し，$\varphi(t)$ を特徴づける最も顕著な性質である）．

○ $\varphi(t)=\int_0^{2t}\varphi(s)\,\mathrm{d}s\quad(0\le t\le 1/2).$ (2.8)

○ $\varphi^{(m)}(0)=\varphi^{(m)}(1)=0\quad(m=1,2,\cdots).$ (2.9)

○ $\varphi(i/2^n)\ (i=0,1,\cdots,2^n;\ n=0,1,\cdots)$ は有理数． (2.10)

(2.10)の成立は次の定理に依る．

定理 1 すべての整数 $n\ (\ge 0)$ について

i) $\varphi(2^{-2n})$, $\varphi(2^{-(2n+1)})$ は有理数， (2.11)

ii) $\varphi(2^{-2n}-t)=L_{2n}(t)-\varphi(t)\quad(0\le t\le 2^{-2n})$,

$\varphi(2^{-(2n+1)}-t)=L_{2n+1}(t)+\varphi(t)\quad(0\le t\le 2^{-(2n+1)})$

（ただし，$L_{2n}(t)$, $L_{2n+1}(t)$ はそれぞれ $2n$ 次，$2n+1$ 次の t の有理係数多項式） (2.12)

と表せる．

（注） (2.11)，(2.12)の具体形は次式のようになる．

$\varphi(1)=1$, $\varphi(1/2)=1/2$, $\varphi(1/4)=5/72$, $\varphi(1/8)=1/288$；

$L_0(t)=1$, $L_1(t)=-2t+1/2$, $L_2(t)=4t^2-t+5/72$,

$L_3(t)=-32/3t^3+2t^2-5/36t+1/288$.

（証明） まず，(2.7)により $0\le t\le 2^{-n}\ (n=1,2,\cdots)$ において漸化式

$$\varphi(2^{-n}-t)=\varphi(2^{-n})-\int_{2^{-n}-t}^{2^{-n}}\varphi'(s)\,\mathrm{d}s$$

$$=\varphi(2^{-n})-\int_0^{2t}\varphi(2^{-(n-1)}-s)\,\mathrm{d}s \qquad (2.13)$$

が成り立つことに注意する．n に関する帰納法によって(2.11)，(2.12)を示す．$n=0$ のときは明らか．

$n=k-1\ (k\ge 1)$ で成立しているとすると，

$$\varphi(2^{-(2k-1)}-t)=L_{2k-1}(t)+\varphi(t)\quad(0\le t\le 2^{-(2k-1)}) \qquad (2.14)$$

とかける．(2.7)に注意しながら，(2.14)に(2.13)を2回適用すると

$$\varphi(2^{-2k}-t)=\varphi(2^{-2k})-\int_0^{2t}L_{2k-1}(s)\,\mathrm{d}s-\varphi(t) \quad (0\le t\le 2^{-2k}), \qquad (2.15)$$

$$\varphi(2^{-(2k+1)}-t)=\varphi(2^{-(2k+1)})-2\varphi(2^{-2k})t+\int_0^{2t}\int_0^{2s}L_{2k-1}(r)\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}s+\varphi(t) \quad (0\le t\le 2^{-(2k+1)}) \qquad (2.16)$$

となる．(2.15)，(2.16)に $t=2^{-(2k+1)}$ を代入すると

$$\varphi(2^{-2k})=\frac{2^{2k}}{2^{2k}-1}\int_0^{2^{-2k}}\left\{L_{2k-1}(s)-\int_0^{2s}L_{2k-1}(r)\,\mathrm{d}r\right\}\mathrm{d}s,$$

$$\varphi(2^{-(2k+1)})=\frac{1}{2(2^{2k}-1)}\int_0^{2^{-2k}}\left\{L_{2k-1}(s)-2^{2k}\int_0^{2s}L_{2k-1}(r)\,\mathrm{d}r\right\}\mathrm{d}s. \qquad (2.17)$$

よって $\varphi(2^{-2k})$, $\varphi(2^{-(2k+1)})$ は有理数であり，これを(2.15)，(2.16)に代入すれば $L_{2k}(t)$, $L_{2k+1}(t)$ は有理係数多項式となる．ゆえに $n=k$ でも成立． （証終）

また，$\varphi(2^{-n})$ について次の不等式も知られている[8]：

$$2^{-n(n+1)/2}/n!\le\varphi(2^{-n})\le 2^{-n(n-1)/2}/(n+1)! \quad (n=1,2,\cdots). \qquad (2.18)$$

3. φ の関数値の計算法

2節の結果を用いれば，$\varphi(i/2^n)$ の値を厳密に計算することも可能であるが，本節では数値計算に適した

二つの方法を述べる．

3.1 離散点逐次反復法

関数方程式(2.8)を利用した方法であり，離散点 $t=j/N$ ($j=0,1,\cdots,N$; N は偶数で通常は2のべきに選ぶ) における $\varphi(t)$ の値を求める．まず，次の反復計算により $\{\varphi^{(\nu)}(j/N;\ N)\}_{\nu=0}^{\infty}$ ($j=0,1,\cdots,N$) を生成すると，この列は各 j ごとに収束し[3] $t=j/N$ における $\varphi(t)$ の近似値 $\phi(t;\ N)=\lim_{\nu\to\infty}\varphi^{(\nu)}(t;\ N)$ が得られる：

$$
\left[\begin{array}{l}
\varphi^{(0)}(j/N;\ N):=\begin{cases}0 & (j=0,\cdots,N/2-1)\\ 1/2 & (j=N/2)\\ 1 & (j=N/2+1,\cdots,N)\end{cases}\\
\textbf{for}\ \ \nu:=0,1,\cdots\textbf{do}\\
\quad\left[\begin{array}{l}
\textbf{for}\ \ j:=0,1,\cdots,N/2\ \ \textbf{do}\\
\quad \varphi^{(\nu+1)}\left(\dfrac{j}{N};\ N\right):=\dfrac{1}{N}\left\{\dfrac{1}{2}\varphi^{(\nu)}(0;\ N)+\displaystyle\sum_{\xi=1}^{2j-1}\varphi^{(\nu)}\left(\dfrac{\xi}{N};\ N\right)+\dfrac{1}{2}\varphi^{(\nu)}\left(\dfrac{2j}{N};\ N\right)\right\};\\
\quad //(2.8)\text{の台形則近似}//\\
\textbf{for}\ \ j:=N/2+1,\cdots,N\ \ \textbf{do}\\
\quad \varphi^{(\nu+1)}\left(\dfrac{j}{N};\ N\right):=2\varphi^{(\nu+1)}\left(\dfrac{1}{2};\ N\right)-\varphi^{(\nu+1)}\left(1-\dfrac{j}{N};\ N\right);\\
\textbf{for}\ \ j:=1,\cdots,N\ \ \textbf{do}\\
\quad \varphi^{(\nu+1)}\left(\dfrac{j}{N};\ N\right):=\varphi^{(\nu+1)}\left(\dfrac{j}{N};\ N\right)\Big/\varphi^{(\nu+1)}(1;\ N).\\
\quad //\text{正規化}//
\end{array}\right.
\end{array}\right.
\tag{3.1}
$$

いま，$\varphi(i/2^n)$ ($i=0,1,\cdots,2^n$) の値を求めたいとする．上の反復法を $N=2^{m+n}$ に対して行うと，$\phi_m(i/2^n)\equiv\phi(i/2^n;\ 2^{m+n})$ は m が大きいほど近似度が高く，$m\to\infty$ で真値に収束する．さらに，次の定理に示すように，m を添字とする数列 $\{\phi_m(i/2^n)\}_{m=0}^{\infty}$ に対し Romberg 補外が有効であり，$\lfloor n/2\rfloor$ 次（ただし $\lfloor\ \ \rfloor$ は Gauss の記号）の Romberg 補外値は真値に一致する．

定理 2 $\phi(i/2^n;\ N)$ ($i=0,1,\cdots,2^n$; $N=2^{m+n}$; $m=0,1,\cdots$) は i,n を固定したとき，$(1/N^2)$ の高々 $\lfloor n/2\rfloor$ 次の多項式である[7]．

（略証） まず k を奇数として $k\times k$ 行列 $\overset{(k)}{A}=(\overset{(k)}{a}_{ij})$ を次のように定義する：

$\overset{(k)}{a}_{ij}=0$ ($j>2i$), 1 ($j=2i$), 2 ($j<\min(2i,2k+2-2i)$), 3 ($j=2k+2-2i$), 4 ($j>2k+2-2i$).

また，$\overset{(k)}{A}$の要素の3，4をそれぞれ1，0におきかえて得られる行列を$\overset{(k)}{B}$と定義する．

$x_j=\phi(j/N;\ N)$ とおくと，$\boldsymbol{x}_{N-1}=(x_1,\cdots,x_{N-1})^{\mathrm{T}}$ は

$$
\left(\frac{1}{2N}\overset{(N-1)}{A}-I_{N-1}\right)\boldsymbol{x}_{N-1}+\boldsymbol{b}^{(1)}=\boldsymbol{0},
$$

$$
\text{ただし}\quad \boldsymbol{b}^{(1)}=\frac{1}{2N}(\underbrace{0,\cdots,0}_{(N/2-1)},1,\underbrace{2,\cdots,2}_{(N/2-1)})^{\mathrm{T}},
\tag{3.2}
$$

なる1次方程式系の解である（(3.1)は丸め誤差が発生しないと仮定すれば線型反復と考えてよい）．

(3.2)のすべての行を加えると

$$
\textstyle\sum_{j=1}^{N-1}x_j=\dfrac{N-1}{2}.
\tag{3.3}
$$

(3.2)の第 i 行と第 $(N-i)$ 行 ($i=1,\cdots,N/2$) を加えると

$$
x_i+x_{N-i}=1,
\tag{3.4}
$$

$$
x_{N/2}=1/2.
\tag{3.5}
$$

(3.4)，(3.5)を用い，(3.2)を $\boldsymbol{x}_{N/2-1}=(x_1,\cdots,x_{N/2-1})^{\mathrm{T}}$ についての問題に帰着させると

$$
\left(\frac{1}{2N}\overset{(N/2-1)}{B}-I_{N/2-1}\right)\boldsymbol{x}_{N/2-1}+\boldsymbol{b}^{(2)}=\boldsymbol{0},
$$

$$
\text{ただし}\quad \boldsymbol{b}^{(2)}=\frac{2}{N}\left(\underbrace{0,\cdots,0}_{(N/4-1)},\frac{1}{8},1,2,\cdots,\frac{N}{4}-1\right)^{\mathrm{T}}.
\tag{3.6}
$$

(3.6)の第 $(N/4+i)$ 行−第 $(N/4-i)$ 行を計算すると

$$
x_{N/4+i}-x_{N/4-i}=2i/N\quad(i=1,\cdots,N/4-1).
\tag{3.7}
$$

(3.7)を用い(3.6)を $\boldsymbol{x}_{N/4}=(x_1,\cdots,x_{N/4})^{\mathrm{T}}$ についての問題に帰着させると

$$
\left(\frac{1}{2N}\left[\begin{array}{c:c}\overset{(N/4-1)}{A} & \boldsymbol{c}\\ \hdashline \multicolumn{2}{c}{\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}}\end{array}\right]-I_{N/4}\right)\boldsymbol{x}_{N/4}+\boldsymbol{b}^{(3)}=\boldsymbol{0},
$$

$$
\text{ただし}\quad \boldsymbol{b}^{(3)}=\frac{4}{N^2}\left(\underbrace{0,\cdots,0}_{N/8},1^2,2^2,\cdots,\left(\frac{N}{8}\right)^2\right)^{\mathrm{T}},
$$

$$
\boldsymbol{c}=(\underbrace{0,\cdots,0}_{(N/8-1)},1,\underbrace{2,\cdots,2}_{(N/8-1)})^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{d}=(\underbrace{4,\cdots,4}_{(N/4-1)},2)^{\mathrm{T}}.
\tag{3.8}
$$

そのとき，(3.8)の $\sum_{i=1}^{N/4-1}$(第 i 行)$+1/2\times$(第 $N/4$ 行) を計算すると

$$
\textstyle\sum_{j=1}^{N/4-1}x_j+\dfrac{1}{2}x_{N/4}=\dfrac{N}{288}+\dfrac{1}{9N}.
\tag{3.9}
$$

(3.9)を(3.8)の第 $N/4$ 行に代入すると

$$x_{N/4}=\frac{5}{72}+\frac{2}{9N^2}. \tag{3.10}$$

(3.10)を(3.8)に代入し $x_{N/4}$ を消去すると

$$\frac{1}{2N}(\overset{(N/4-1)}{A}-I_{N/4-1})\boldsymbol{x}_{N/4-1}+\boldsymbol{b}^{(4)}=\boldsymbol{0},$$

ただし $\boldsymbol{x}_{N/4-1}=(x_1,\cdots,x_{N/4-1})^{\mathrm{T}}$,

$$\boldsymbol{b}^{(4)}=\left(\frac{5}{144N}+\frac{1}{9N^3}\right)\boldsymbol{c}+\frac{4}{N^2}\Bigl(\underbrace{0,\cdots,0}_{N/8},1^2,2^2,\cdots,\left(\frac{N}{8}-1\right)^2\Bigr)^{\mathrm{T}}. \tag{3.11}$$

ここで(3.11)と(3.2)の行列は相似になっているので，以上に述べた方法を繰り返し適用することによって1次方程式系(3.2)を規則的に解くことができ，x_i が $(1/N^2)$ の高々 $\lfloor n/2 \rfloor$ 次の多項式となることが結論できる． (証終)

上記の証明にみられるように離散点の計算においてもまた自己相似の性質が現れていることは興味深い．

3.2 関数プログラムによる方法

φ に独特な対称性を利用して関数値を計算する方法であり，任意の $t\in[0,1]$ に対して $\varphi(t)$ が高精度で計算される．(2.12)により，$0\leq t\leq 2^{-n}$ についての $\varphi(t)$ の計算は $0\leq t\leq 2^{-(n+1)}$ についての $\varphi(t)$ の計算に還元されるから，次の再帰的アルゴリズムで $\varphi(t)=\varphi(t,0)$ が計算される．

function $\varphi(t,n)$ (input: $0\leq t\leq 2^{-n}$);
　if $n\geq p$ **then return** 0;
　if $t\leq 2^{-(n+1)}$
　　then return $\varphi(t,n+1)$
　　else return $L(2^{-n}-t,n)$
　　　　　$-(-1)^n\varphi(2^{-n}-t,n+1)$. (3.12)

ここで，$L(t,n)$ は定理1における $L_n(t)$ を表す．この再帰呼び出しは $0\leq t\leq 2^{-p}$ となったときに終端するが，この終端による $\varphi(t)(0\leq t\leq 1)$ の誤差は $\varphi(2^{-p})$ 以下に抑えられる．この計算法は，実質的な計算部分である多項式 $L(t,n)$ の計算において，少なくとも $n<15$ の範囲では誤差の増幅が起こらないので，数値的に十分安定であることが観察された．例えば倍精度(16進14桁)計算の場合には，$p=9$ とおけば，関数値の誤差は打切り(終端)誤差と丸め誤差を合わせても 10^{-15} を越えない ($\varphi(1/512)\fallingdotseq 7.4\times 10^{-19}$).

4. 数値積分公式としての性質

2章の $\varphi(t)$ を用いた数値積分公式は次の性質をもつ．

- 分点 $\varphi(i/N)$，重み $\varphi'(i/N)$ $(N=2^n)$ は有理数であり，かつ両者は実質的に同一の数表を用意すればよい．
- 定数関数 $f(x)=1$ に対して公式誤差 $\varepsilon_N=S_N-I$ は Nが偶数のとき0である． (4.1)

(証明) $f(x)=1$ に対する本公式の適用は，$\varphi'(t)$ を t を変数とする台形則で積分することに等しい．$\varphi'(t)$ の $0\leq t\leq 1/2$ の部分，$1/2\leq t\leq 1$ の部分の，それぞれ$(1/4,1)$，$(3/4,1)$に関する点対称性より $\varepsilon_N=0$. (証終)

IMT, DE 等の従来の変数変換型公式は定数関数に対し"固有誤差 (intrinsic error)"と呼ばれる積分誤差をもつが，本公式は固有誤差を伴わない公式のひとつである (Murota[5] も参照)．(4.1)より

- $f(x)=ax+b$ に対して $\varepsilon_N=0$ (N: 偶数) である． (4.2)

(2.9)より

- 区間(0,1)において無限回微分可能でかつ端点の特異性が高々代数的であるような可積分関数fに対して，積分誤差 ε_N は $N\to\infty$ のとき $1/N$のいかなる多項式よりも速く減少する．特に多項式関数fを積分するとき，誤差は

$$\varepsilon_N=O\left(N\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log N)^2\right]\right) \tag{4.3}$$

である(6章においてこの証明を行う)．

5. 計算機実験

次の5個の被積分関数の積分(1.1)に対し，変換 $x=\varphi(t)$ を用いた数値積分公式を適用した．

$f_1(x)=x(1-x)$, $I_1=1/6$.
$f_2(x)=1/\sqrt{x}$, $I_2=2$.
$f_3(x)=\log x$, $I_3=-1$.
$f_4(x)=\exp x$, $I_4=\mathrm{e}-1$.
$f_5(x)=\varphi(2x/3)$, $I_5=0.270247672202222286043\cdots$.

なお，計算は東京大学大型計算機センター HITAC M-280H, FORTRAN 77, 4倍精度(仮数部16進28桁切捨て)で行った．

図2，3に非解析的変換関数を用いた公式の分点数と誤差の関係を示す．図2においてグラフが上に凸な傾向を示していることにより，誤差が $1/N$ の多項式

より速く減衰していることが読みとれる．f_2, f_3 のように端点に特異性をもつ関数に対しても，多項式より速い減少を示している．図 3 は本変換を 2 回反復適用した公式（すなわち $x=\varphi(\varphi(t))$ なる変換）の結果である．図 2 に比べて関数による誤差の減衰度の差が見られなくなっているが，変換の反復による全般的な改良はみられない．

図 4 は本公式（$x=\varphi(t)$）と他の変数変換型公式との比較である．端点特異性をもつ関数の例(a)では，他公式に比べ本公式は劣る．整関数の例(b)では，DE 以外の公式とほぼ同等の結果を達成しているが，Nが大きいときグラフの傾き（誤差の減少率）に差が認められる．(a)，(b)の両者においては，Nが十分大なるとき，本公式の誤差は他公式の誤差に比べ高々定数

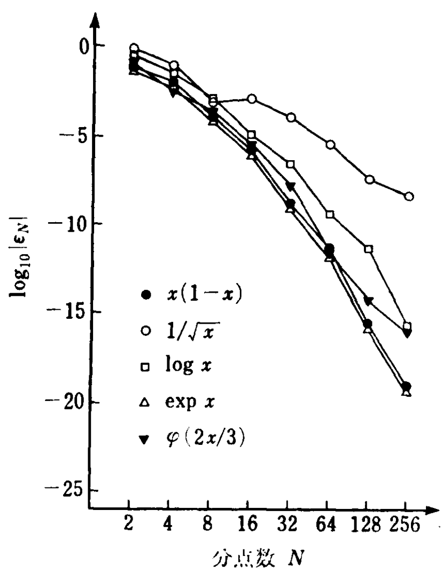


図 2 分点数と誤差の関係——変数変換 $x=\varphi(t)$ による積分公式

Fig. 2 Formula with single transformation of φ.

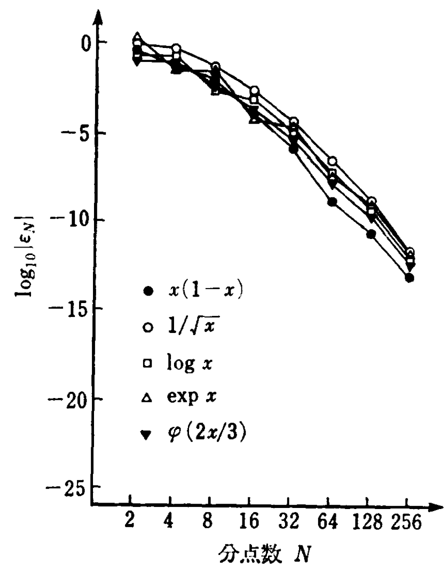
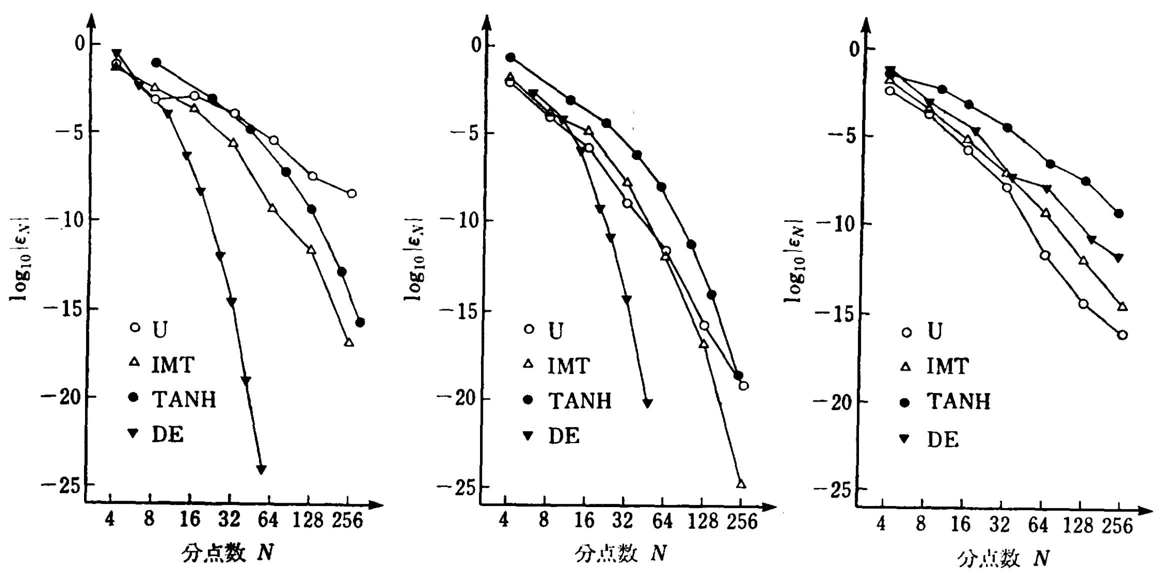


図 3 分点数と誤差の関係——変数変換 $x=\varphi(\varphi(t))$ による積分公式

Fig. 3 Formula with double transformation of φ.



(a) $f(x)=1/\sqrt{x}$ (b) $f(x)=\exp x$ (c) $f(x)=\varphi(2x/3)$

図 4 分点数と誤差の関数——本公式（U）と他公式との比較

Fig. 4 Comparison with other formulas. (This formula denoted by U.)

倍の大きさであるとはいえないと予想できる．他方，非解析関数の例(c)においては，本公式の方が勝っている．解析的被積分関数に対する性能のよい公式ほど被積分関数の非解析性の影響を強く受けている．

非解析的な C^{∞} 関数による変数変換を用いてもある程度優良な公式を作りうるという1章での言明は，以上によってほぼ実証されたといってよかろう．

6. 誤差評価

$x:(0,1)\to t:(0,1)$ と変換する変数変換型公式(1.4)において，積分誤差 $\varepsilon_N=S_N-I$ は，変換後の被積分関数の Fourier 係数

$$C_N(f)=\int_0^1 f(\phi(t))\phi'(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi Nt)\,\mathrm{d}\,t \qquad (6.1)$$

$(\mathrm{i}=\sqrt{-1})$ を用いて

$$\varepsilon_N(f)=2\,\mathrm{Re}\left(\sum_{p=1}^{\infty}C_{pN}(f)\right)\fallingdotseq 2\,\mathrm{Re}\,C_N(f) \qquad (6.2)$$

と表現される．以下の補題1，2，3により，次の誤差評価を得る．

定理 3 変数変換 $x=\varphi(t)$ による N 点公式の多項式関数の積分誤差 ε_N に対し(4.3)が成立する．

以下，本公式に対する $C_k(x^m)\ (m=0,1,\cdots)$ を

$$C_k^m\equiv\int_0^1(\varphi(t))^m\varphi'(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t \qquad (6.3)$$

とし，$C_k\equiv C_k^0$ とおく．以下の議論では添字 k は実数値をとりうるものとする．

補題 1 すべての実数 k に対し

$$|C_k|\le\exp\left(\frac{1}{\mathrm{e}\log 2}\right)\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log(|k|+1))^2\right]. \qquad (6.4)$$

(証明) $|C_k|=|C_{-k}|$ であるので，以下 $k\ge 0$ と仮定する．$0\le k\le 1$ のときは $|C_k|\le 1$ より成立．

$k>1$ のとき，(2.1)から

$$C_k=\exp(\mathrm{i}\,\pi k)\prod_{j=1}^{\infty}\frac{\sin(\pi k/2^j)}{\pi k/2^j}. \qquad (6.5)$$

$|\sin x/x|\le 1$ であるから，(6.5)で $n=\lfloor\log_2 k\rfloor+1$ として

$$|C_k|\le\prod_{j=1}^{n}\frac{|\sin(\pi k/2^j)|}{\pi k/2^j}\le\prod_{j=1}^{n}\frac{2^j}{\pi k}$$

$$\le\frac{2^{n(n+1)/2}}{\pi^n 2^{n(n-1)}}\quad(k\ge 2^{n-1})$$

$$=\exp\left[-\frac{\log 2}{2}n^2+\left(\frac{3\log 2}{2}-\log\pi\right)n\right]$$

$$\le\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log k)^2+\left(\frac{3}{2}-\frac{\log\pi}{\log 2}\right)\log k\right]$$

$$(n\ge\log k/\log 2)$$

$$\le\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log k)^2\right]$$

$$\le\exp\left(\frac{1}{\mathrm{e}\log 2}\right)\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log(k+1))^2\right]. \qquad (6.6)$$

ただし，次の関係を使った：

$$(\log(k+1))^2-(\log k)^2\le 2/\mathrm{e}\quad(k\ge 0). \qquad (6.7)$$

(証終)

補題 2

$$D_k\equiv\int_0^1 t\varphi'(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t \qquad (6.8)$$

とおくと，すべての実数 k に対し

$$|D_k|\le\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log(|k|+1))^2\right]. \qquad (6.9)$$

(証明) $|D_k|=|D_{-k}|$ であるので，以下 $k\ge 0$ と仮定する．$\varphi(t)$ の性質(2.5)，(2.7)を利用し，D_k, C_k についての関係式

$$\begin{aligned}
&\mathrm{i}\,2\pi kD_k\\
&=\mathrm{i}\,2\pi k\int_0^1 t\varphi'(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t\\
&=[t\varphi'(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)]_0^1\\
&\quad-\int_0^1\{\varphi'(t)+t\varphi''(t)\}\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t\\
&=-C_k-\int_0^{1/2}t\varphi''(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t\\
&\quad+\int_0^{1/2}(t+1/2)\varphi''(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi k(t+1/2))\,\mathrm{d}\,t\\
&\qquad(\varphi''(t)=-\varphi''(t-1/2)\ (1/2\le t\le 1))\\
&=-C_k+\{\exp(\mathrm{i}\,\pi k)-1\}\int_0^1 s\varphi'(s)\exp(\mathrm{i}\,\pi ks)\,\mathrm{d}\,s\\
&\quad+\exp(\mathrm{i}\,\pi k)\int_0^1\varphi'(s)\exp(\mathrm{i}\,\pi ks)\,\mathrm{d}\,s\\
&\qquad(s=2t,\ \varphi''(t)=4\varphi'(2t)\ (0\le t\le 1/2)).
\end{aligned}$$

すなわち

$$D_k=\frac{\{\exp(\mathrm{i}\,\pi k)-1\}D_{k/2}-C_k+\exp(\mathrm{i}\,\pi k)C_{k/2}}{\mathrm{i}\,2\pi k}\quad(k\neq 0) \qquad (6.10)$$

が得られる．$0\le k\le(\sqrt{5}-1)2^m$ での(6.9)の成立を m に関する帰納法で証明する．$m=0$ のときは $|D_k|\le 1/2$ より成立．ある $m\ (\ge 0)$ で成立するとき，$(\sqrt{5}-1)2^m\le k\le(\sqrt{5}-1)2^{m+1}$ に対し

$$|D_k|\le\frac{|D_{k/2}|}{\pi k}+\frac{|C_k|}{2\pi k}+\frac{|C_{k/2}|}{2\pi k} \qquad (6.11)$$

となる．(6.11)の右辺の(第1項)＋(第3項)は(6.4)，(6.9)を使い(6.7)に注意すると

$$
\begin{aligned}
&|D_{k/2}|/(\pi k)+|C_{k/2}|/(2\pi k)\\
&\le\frac{1}{\pi k}\left\{1+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{1}{\mathrm{e}\log 2}\right)\right\}\\
&\quad\times\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}\left(\log\left(\frac{k}{2}+1\right)\right)^2\right]\\
&\le\frac{1}{\pi k}\left\{1+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{1}{\mathrm{e}\log 2}\right)\right\}\\
&\quad\times\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}\left(\log\frac{k}{2}\right)^2\right]\\
&=\frac{1}{\sqrt{2}\,\pi}\left\{1+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{1}{\mathrm{e}\log 2}\right)\right\}\\
&\quad\times\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log k)^2\right]\\
&\le\frac{1}{\sqrt{2}\,\pi}\exp\left(\frac{1}{\mathrm{e}\log 2}\right)\left\{1+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{1}{\mathrm{e}\log 2}\right)\right\}\\
&\quad\times\exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log(k+1))^2\right] \qquad (6.12)
\end{aligned}
$$

となる．(6.11)の右辺に(6.4)，(6.12)を代入すると，$m+1$ での(6.9)の成立が示される． (証終)

以上の評価から，Murota[5] と同様の方針により次のような C_k^m の評価が導かれる．

補題 3 ある正定数 A, B に対して

$$|C_k|\le A\exp[-B(\log(|k|+1))^2], \qquad (6.13)$$

$$|D_k|\le A\exp[-B(\log(|k|+1))^2] \qquad (6.14)$$

がすべての整数 k に対して成立するならば，0でない任意の整数 k と $m=0,1,\cdots$ に対して

$$|C_k^m|\le A_m|k|\exp[-B(\log(|k|+1))^2]. \qquad (6.15)$$

ただし，A_m は次の漸化式で定める：

$$A_0=A,$$

$$A_{m+1}=A\left[\frac{3}{2}+A_m\frac{m+1}{2\pi}\left\{\exp\left(B\frac{\mathrm{e}-2}{\mathrm{e}}\right)+2\sqrt{\frac{\pi}{B}}\exp\left(\frac{1}{4B}\right)\right\}\right] \quad (m=0,1,\cdots). \qquad (6.16)$$

(証明)

$$a_k^m\equiv\int_0^1\{(\varphi(t))^m-t\}\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t \quad (m=1,2,\cdots) \qquad (6.17)$$

とおく．容易にわかるように

$$-1/2\le a_0^m\le 0, \qquad (6.18)$$

$$a_k^m=-\frac{m}{\mathrm{i}\,2\pi k}C_k^{m-1} \quad (k:\ 0\ \text{でない整数}) \qquad (6.19)$$

である．また，すべての整数 k と $m=0,1,\cdots$ に対して

$$
\begin{aligned}
C_k^{m+1}&=\int_0^1(\varphi(t))^{m+1}\varphi'(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t\\
&=\int_0^1\{(\varphi(t))^{m+1}-t\}\varphi'(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t\\
&\quad+\int_0^1 t\varphi'(t)\exp(\mathrm{i}\,2\pi kt)\,\mathrm{d}\,t\\
&=\sum_{j=-\infty}^{\infty}a_j^{m+1}C_{k-j}+D_k\\
&=D_k+a_0^{m+1}C_k-\sum_{j\ne 0}\frac{m+1}{\mathrm{i}\,2\pi j}C_j^mC_{k-j} \qquad (6.20)
\end{aligned}
$$

が成立する．以下，mに関する帰納法によって(6.15)を証明する．$m=0$ のときは(6.13)により成立．

ある m (≥ 0) に対して成立するとき，(6.20)により

$$|C_k^{m+1}|\le|D_k|+|a_0^{m+1}C_k|+\frac{m+1}{2\pi}\sum_{j\ne 0}\frac{1}{|j|}|C_j^mC_{k-j}|. \qquad (6.21)$$

ここで，上式の第3項は $k\ne 0$ のとき

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j\ne 0}\frac{1}{|j|}|C_j^mC_{k-j}|\\
&\le\sum_{j\ne 0}A_m\exp[-B(\log(|j|+1))^2]\\
&\quad\times A\exp[-B(\log(|k-j|+1))^2]\\
&\le A_mA\sum_{j=1}^{|k|}\exp[-B\{(\log(j+1))^2\\
&\qquad+(\log(|k|-j+1))^2\}]\\
&\quad+2A_mA\exp[-B(\log(|k|+1))^2]\\
&\qquad\times\int_1^\infty\exp[-B(\log x)^2]\,\mathrm{d}\,x\\
&\le A_mA\left\{|k|\exp\left(B\frac{\mathrm{e}-2}{\mathrm{e}}\right)+2\sqrt{\frac{\pi}{B}}\exp\left(\frac{1}{4B}\right)\right\}\\
&\quad\times\exp[-B(\log(|k|+1))^2] \qquad (6.22)
\end{aligned}
$$

と抑えられる．ただし，最後に次の関係を使った：

$$(\log(j+1))^2+(\log(|k|-j+1))^2$$
$$\ge(\log(|k|+1))^2-(\mathrm{e}-2)/\mathrm{e} \quad (1\le j\le|k|)$$

($(\log(x+1))^2$ は $x\ge\mathrm{e}-1$ で凹関数)，

$$\int_1^\infty\exp[-B(\log x)^2]\,\mathrm{d}\,x\le\sqrt{\pi/B}\exp(1/(4B)) \quad (B>0)$$

($u=\sqrt{2B}(\log x-1/(2B))$ と変数変換する)．

(6.21)に(6.13)，(6.14)，(6.18)，(6.22)を代入すると $m+1$ における(6.15)の成立が示される．(証終)

7. むすび

非解析的な関数を用いた変数変換型数値積分公式を

構成し，その性質を調べ，既存の解析的関数を用いた同種公式との比較をした．この公式は，通常の解析関数を積分する場合には DE 公式等のすぐれた変数変換型公式に劣るが，非解析関数を積分する場合には従来の公式より勝る場合もみられた．本論文の結果は，一般にはあまり意識されていない（非解析関数まで含めた）C^{∞} 関数族に対する優良公式を考える上で，一つの手がかりを与えるものであるといえよう．

謝辞 筑波大学電子・情報工学系（現一橋大学経済学部）の杉原正顯博士には定理 3 の証明に関して貴重な御助言を頂いた．査読者の方には証明の詳細を読んでいただき，多くの誤りを指摘していただいた．感謝いたします．

参 考 文 献

1) Davis, P. J. and Rabinowitz, P.: *Methods of Numerical Integration*, 2nd ed., Academic Press, Orlando (1984).
2) 伊理正夫，森口繁一，高澤嘉光：ある数値積分公式について，京都大学数理解析研究所講究録，No. 91, pp. 82-118 (1970).（英訳：Iri, M., Moriguti, S. and Takasawa, Y.: On a Certain Quadrature Formula, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 17, pp. 3-20 (1987).）
3) Kabaya, K. and Iri, M.: Sum of Uniformly Distributed Random Variables and a Family of Nonanalytic C^{∞}-functions, *Japan J. Appl. Math.*, Vol. 4, No. 1, pp. 1-22 (1987).
4) Mori, M.: Quadrature Formulas Obtained by Variable Transformation and the DE-rule, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 12 & 13, pp. 119-130 (1985).
5) Murota, K.: IMT-type Quadrature Formulas Free from Intrinsic Errors, 京都大学数理解析研究所講究録，No. 585, pp. 195-206 (1986).
6) Murota, K. and Iri, M.: Parameter Tuning and Repeated Application of the IMT-type Transformation in Numerical Quadrature, *Numer. Math.*, Vol. 38, pp. 347-363 (1982).
7) 西井 修：非解析的な関数を用いた変数変換型数値積分公式，東京大学大学院工学系研究科計数工学専門課程修士論文 (1987).
8) 西井 修，室田一雄，伊理正夫：非解析的な関数を用いた変数変換型数値積分公式について，京都大学数理解析研究所講究録，No. 585, pp. 176-194 (1986).
9) Takahasi, H. and Mori, M.: Double Exponential Formulas for Numerical Integration, *Publ. Res. Inst. Math. Sci., Kyoto Univ.*, Vol. 9, No. 3, pp. 721-741 (1974).

（昭和 62 年 2 月 3 日受付）
（昭和 62 年 5 月 13 日採録）

西井 修（正会員）
昭和 60 年東京大学工学部計数工学科卒業．昭和 62 年同大学院修士課程修了．現在，（株）日立製作所中央研究所に勤務．数値計算のアルゴリズムに興味をもつ．

室田 一雄（正会員）
昭和 53 年東京大学工学部計数工学科卒業．昭和 55 年同大学院修士課程修了．同年東京大学計数工学科助手．昭和 58 年筑波大学社会工学系講師．昭和 61 年東京大学計数工学科助教授，現在に至る．工学博士．数値計算法，グラフ・マトロイド理論などの研究に従事．著書：Systems Analysis by Graphs and Matroids—Structural Solvability and Controllability, Springer, 1987.

伊理 正夫（正会員）
昭和 8 年生．昭和 30 年東京大学工学部応用物理学科（数理工学専修）卒業．昭和 35 年同大学院博士課程修了．工学博士．九州大学工学部助手，助教授（通信工学科），東京大学助教授（工学部計数工学科）を経て，現在同大教授．回路，グラフ，数値計算，言語などの研究，教育に従事．昭和 40 年松永賞受賞．著書「Network Flow, Transportation and Scheduling」など．