数理解析研究所講究録
第553巻 1985年 159-165

正則格子による多重積分

京都大学数理解析研究所　一松　信
(Sin Hitotumatu)

要旨

森正武教授が指摘した通り、端の影響がない関数の積分では、等間隔刻みの台形公式が最も精度が高い。　同じことが高次元でも成立しそうである。　但し単純立方格子は、次元が高くなると隙間だらけになって、精度が悪い。　それよりもなるべく密な格子（できれば最密格子）を採る方がよい。

ここではその一般論と、誤差解析の方法を述べる。　このような研究は、これまでにもあるが、規則的な格子を使うことにより、誤差の奇数次の項が消えることは、注意してよいと思う。

まだ数値例が充分でない。　その上実用価値は怪しいが、24次元のLeech 格子の構成を当日話した。　この計算に手間取って、このノートは中間報告になったことをお詫びする。

なお本文は、時間に追われて、情報処理学会数値解析研究会で発表した原稿の下書きを転用したことをお断りしておく。

0．概要

端点の影響が無視できる１次元の数値積分では、森正武教授が指摘したとおり[1]、等分点の台形公式が最も精度が高い。　高次元でも同様である。

実際平面の正六角形格子Ｌ２，３次元の面心・体心立方格子、４次元のＤ４格子など、規則的な格子点を採ることにより、単純立方格子よりも少数の節点数で、精度の高い多重積分の近似値がえられる。　このことを理論と実例で示す。　併せてこれらの格子に関する興味深いと思われる性質にも言及する。

この考えは、本年(1984年)５月に数理解析研究所で開かれた研究会、及び前回のこの研究会で発表された筑波大学の杉原正顕氏の講演[2]にヒントをえたものである。　実用上では、次元は固定してよいので、各次元毎に応じて標準格子を生成するプログラムを用意すればよかろう。

1．格子の生成

まず各次元とも単純立方格子Ｓｎの生成は簡単である。　しかしこれは次元数ｎが大きくなると、頂点から中心までの距離の方が一辺よりも長くなるなど、隙間だらけである。

平面の正六角形格子Ｌ２は、ベクトル（１，０）と（1/2, √3/2）とから生成できる。

３次元の格子にすれば、すべて整数の座標にできるが（（ｘ，ｙ，ｚ）で　ｘ＋ｙ＋ｚ＝０　である点を採る）、平面上では無理数が避けられない。

３次元の面心立方格子、体心立方格子は、ともに本来の大きさを２倍して、前者は（ｘ，ｙ，ｚ）で　ｘ＋ｙ＋ｚ＝偶数　である点全体を、後者は　ｘ，ｙ，ｚ　がすべて同時に偶数かまたは同時に奇数である格子点全体を採ればよい。　(FC3, BC3と表現する.)

４次元のＤ４格子は、色々の作り方があるが、４次元の体心立方格子とするのがよい。　すなわち　（ｘ，ｙ，ｚ，ｗ）　の成分のすべてが同時に偶数かまたは同時に奇数である点全体からなる。　本来はこの半分、すなわち成分がすべて整数かまたはすべてが½の奇数倍としたものであって、これを四元数で表現したものが、いわゆるHurwitz　の整数である。[3]

実用価値は疑問かもしれないが、極めて密な８次元のＥ８格子は、（ａ１，．．．，ａ８）の成分がすべて偶数かまたはすべて奇数であって、しかもその和が４の倍数である点全体として作ることが出来る。　格子点が限られた超平面の上に落ちても、密であることと特に矛盾はしない。　なおＥ７，Ｅ６格子は、いずれもこの部分格子として作られる。

このほか２４次元空間には、極めて密なLeech　格子があるが、実用価値が疑問なので、今回は対象外とする。(付録参照)

2．計算例

極めて平凡だが、$\exp(-\|z\|^2/a)$ について計算した結果を、末尾の表1に示す。 これは原点からの距離だけの関数なので、等距離の格子点をまとめた個数を求めることにより、簡単に計算できる。 特に4次元のＤ４格子については、その個数は理論的に次の式で計算できる。[3)]

原点からの距離が$\sqrt{N}$ の格子点の個数＝　２４×Σ（Ｎの奇数の約数）

3．誤差解析

高橋－森の理論のように、多変数解析関数論の立場から解析することが今後の問題であるが、ここでは取敢えず、実変数の立場から下記のような考察をしてみる。

格子点の集合Ωにおいて、一点Ｐの勢力域　Ａ（Ｐ）とは、空間の点Ｘで、距離ＰＸが他のすべての点　$Q\ (\neq P) \in \Omega$　について、そこまでの距離ＱＸを越えないようなものの集合である。 その体積Ｖが、点Ｐによらない定数であるとき、Ωを正則格子とよぶことにする。 上記の例はすべてそうである。

Ｓｎ，Ｌ２，ＦＣ３，ＢＣ３，Ｄ４　の各格子の勢力域は、それぞれ　超立方体、正六角形、菱形十二面体、端欠八面体、４次元の正二十四胞体　である。

さてここで考える積分公式は、積分域Ｄを格子Ｌで覆い、Ｄの中の格子点Ｘでの関数値　ｆ（ｘ）の和に重みＶを掛けたものである。 これはＤを格子点の勢力域　Ａ（Ｐ）で覆い、各Ａを中心のＰで代表させたものとみなされる。 従ってこれはむしろ中点公式というべきであろう。

被積分関数を解析的であると仮定すれば、格子点で Taylor 展開ができる。 いま中心を原点Ｏとし、Ｏの勢力域Ａにおいてそれを項別積分すれば、上記の例ではすべて対称性のために、奇数次の項は０となり、次のような形に書くことができる。

$$\int f\,dx - V\cdot f(O) = \sum_{k=1}^{n} \alpha_1^{(k)} \partial^2 f/\partial x_k^2 + \sum_{k=1}^{n} \alpha_2^{(k)} \partial^4 f/\partial x_k^4 + \sum_{j,k} \beta_2^{(j,k)} \partial^4 f/\partial x_j^2 \partial x_k^2 + \cdots$$

係数の値は末尾の表2に示した。 Ｌ２格子以外は、すべて座標に対して対称なので、２次の項は Laplacean　△でまとめられる。 Ｌ２でも幸い、x^2 と y^2 の積分が互いに等しくなり、同じ形にまとめられる。 ４次の項も、Ｌ２とＤ４格子では、ちょうど　$\triangle^2$ にまとめられる。 他の場合も、近似的にそのように書くことができる。

６次の項はもはや　$\triangle^3$ の形にまとめられない。 しかし近似的にそう書くことができる。 そのような式を各格子点について作って全部を加えると、真の積分をＩ，近似式による値をＴとして、

$$I - T = V c_1 h^2 \Sigma \triangle f + V c_2 h^4 \Sigma \triangle^2 f + V c_3 h^6 \Sigma \triangle^3 f + \ldots$$

という形になる。 適当な近似値による係数 c_i の値を末尾の表3に示した。

ここで　$\Sigma \triangle f$ といった項は、それ自体が　$\triangle f$ の積分の近似値になっているから、ｆの積分を $I(f)$ というように書くとすれば、これを　$I(\triangle f)$ で近似して置換えることにより

$$I - T = b_1 h^2 I(\triangle f) + b_2 h^4 I(\triangle^2 f) + b_3 h^6 I(\triangle^3 f) + \ldots$$

$$b_1 = c_1,\ b_2 = c_2 - c_1^2,\ b_3 = c_3 - 2 c_1 c_2 + c_1^3,\ \ldots$$

と表すことができる。 ここで　$\triangle f$　の積分などは、Stokes(Green ?) の公式により、例えば平面では　$f_x\,dy - f_y\,dx$　をＤの境界に沿って線積分した値で表される。 場合によっては、この量を

直接求めて、端補正をすることも可能である。

特に前の例のような急激に減少する関数については、上の式の第一項と第二項とが互いに打ち消し合うように助変数を定めると、誤差はほぼ第三項で見積ることができる。 実際この例では、それにより誤差がかなりよく評価できる。

4. 討論

正則格子による数値積分は、決して新しいものではなく、多くの文献がある。[4),5)] 対称性により誤差が打ち消し合うことも、よく知られている。 単純立方格子よりも粗い刻みで同じ精度がえられるという意味で、優れているといえるが、次元が低いときにはその差はそれ程大きくない。 しかしランダムな点列を採るよりも、規則的に採る方が有利である。

exp のような特別な関数についてはＥ８格子を使うと、Ｓ８よりも 1/256 の手間で同じ精度がえられたが、実用価値は怪しい。 しかし有限群や整数論との関連など思い掛けない関連があることは興味深い。

今後その実用化と、できれば複素解析的な誤差解析を考えてみたい。

［文献］

[1] M.Mori, On the superiority of the trapezoidal rule for the integration of periodic analytic functions, Mem. Num. Math. 1,1974,p.11-20.

[2] M.Sugihara,Lectures at RIMS & NA 9,1984 June.

[3] A.Hurwitz,Vorlesungen über Zahlentheorie der Quaternionen,Springer,1919.

[4] Hua Loo Keng - Wang Yuan （華羅庚・王元）Applications of number theory to numerical analysis, Springer,1981.

[5] W.Gautschi, Multidimensional Euler enumeration formulas and numerical cubuture, Numerical Integration (G.Hammerlin ed.)p.77-88, Birkhauser Verlag,1982.

[付録]

表 1. $I = \frac{1}{c}\int \exp(-\|x\|^2/a)\,dx$

	h	c	a	限界	計算値	理論値
S2	1	4	1	50	0.785555285870	0.78539816388 = $\pi/4$
		8	2	100	0.785398171805	〃
L2	1	6	1	50	0.604604383372	0.60459878807 8 = $\pi/3\sqrt{3}$
		12	2	100	0.604598788080	〃
FC3	$\sqrt{2}$	12	4	100	1.85610833222	1.85610933228 = $\pi^{3/2}/3$
BC3	$\sqrt{2}$	8	4	100	1.38208204382	1.38208188921 = $\pi^{3/2}/4$
D4	2	24	4	100	0.82246708606 6	0.822467033424 = $\pi^2/12$
E8	$2\sqrt{2}$	240	4	100	0.405671459469	0.405871212642 = $\pi^4/240$
		3840	8	300	0.405871212642	〃

表 2. 格子に関する定数

次元	記号	V	α_1	α_2	β_2	α_3	β_3	γ_3
1	L1	h	$\frac{1}{12}h^3$	$\frac{1}{80}h^5$	—	$\frac{1}{488}h^7$	—	—
2	S2	h^2	$\frac{1}{12}h^4$	$\frac{1}{80}h^6$	$\frac{1}{144}h^6$	$\frac{1}{488}h^8$	$\frac{1}{960}h^8$	—
2	L2	$\frac{\sqrt{3}}{2}h^2$	$\frac{5\sqrt{3}}{144}h^4$	$\frac{7\sqrt{3}}{1440}h^6$	$\frac{7\sqrt{3}}{4320}h^6$	$81s$　$85s$	$\frac{93}{5}s$　$\frac{73}{5}s$	$\left(s=\frac{\sqrt{3}h^8}{96768}\right)$
3	FC3	$2h^3$	$\frac{1}{4}h^5$	$\frac{1}{40}h^7$	$\frac{7}{360}h^7$	$\frac{85}{2688}h^9$	$\frac{31}{8064}h^9$	$\frac{37}{24192}h^9$
3	BC3	$4h^3$	$\frac{19}{24}h^5$	$\frac{89}{240}h^7$	$\frac{71}{720}h^7$	$\frac{1237}{5376}h^9$	$\frac{463}{13440}h^9$	$\frac{457}{69120}h^9$
4	D4	$8h^4$	$\frac{26}{15}h^6$	$\frac{6}{7}h^8$	$\frac{2}{7}h^8$	$\frac{173}{315}h^{10}$	$\frac{116}{945}h^{10}$	$\frac{19}{630}h^{10}$

表 3　誤差項に関する定数

記号	$c_1 = b_1$	c_2	c_3	b_2	b_3
L1	$\frac{1}{24}$	$\frac{1}{1920}$ *	$\frac{1}{322560}$	$-\frac{7}{5760}$	$\frac{13}{241920}$
S2	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{1440}$	$\frac{1}{193536}$	$-\frac{1}{160}$	$\frac{151}{322560}$
L2	$\frac{5}{144}$	$\frac{7}{17280}$ *	$\frac{83}{34836480}$	$-\frac{83}{103680}$	$\frac{421}{26127360}$
FC3	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{720}$	$\frac{1}{60480}$	$-\frac{29}{11520}$	$\frac{337}{3870720}$
BC3	$\frac{19}{192}$	$\frac{1}{288}$	$\frac{1}{15840}$	$-\frac{233}{36864}$	$\frac{134301}{389283840}$
D4	$\frac{13}{120}$	$\frac{1}{224}$ *	$\frac{1}{10080}$	$-\frac{733}{100800}$	$\frac{697}{1728000}$

c_2の＊は，正確に4次の項が $c_2 \cdot \Delta^2 f(0)$ となることを表す。他は平均をとった近似値である。

付録．Leech格子の構成

24次元の Leech格子の構成には色々の方法があるが、差し当たっては格子点の個数だけで充分なので、次のように標準化して作ることにする。 この構成によると、出来上がった各格子点 $(a_1,\ldots,a_{24})$ の原点からの距離の平方は、常に16の整数倍 16r である。 この r を（平方根でなく、それ自体を）その点のノルムとよぶ。

Leech 格子の点は、成分のすべてが奇数である奇点と、すべてが偶数である偶点とに大別される。 両者は多少構成法が異るので、別々に論ずることとする。

I．奇点　成分はすべて奇数であり、さらに 1,7,9,...といった 8n±1 の型の奇数と、 3,5,11,13,...といった 8n±3 の型 の奇数との各々が、それぞれ奇数個ずつある。（この性質は、距離の平方が 16 の倍数とすれば、自動的に満たされるが、もしも点の方を先に作るならば、制限として予め加えておいた方がよい。）

ノルムが rである点 $(a_1,\ldots,a_{24})$ と同類の点の個数は、成分の絶対値を並べ変えた組合せの各々について、適当に合計 4096 (=2↑12) 通りに符号を付けたもの全体である。 したがってこの成分の絶対値のうち、同一の値をもつものがそれぞれ $\alpha_1,\ldots,\alpha_\ell$ 個ずつあるもの（$\alpha_1+\ldots+\alpha_\ell=24$）とすれば、C(n,k)を二項係数としたとき、その総数は

$$4096 \times 24!/\alpha_1!\ldots\alpha_\ell! = (2\uparrow 12) \times C(24,\alpha_1)C(24-\alpha_1,\alpha_2)\ldots C(24-\alpha_1\ldots-\alpha_{\ell-1},\alpha_\ell)$$

と表される。 これを同じノルムをもつ点のパタンについてすべて合計すればよい。

II．偶点　便宜上次の５種に分けて論ずる。

A．成分は 12 個が 2の奇数倍、他の 12 個が 4の倍数であり、各々の中での組合せは任意に許される。 但し各々の成分のくるべき位置は、合計 2576=7x16x23 通りの組に限定される。

符号は 4の倍数については任意だが、 2の奇数倍の方は一つを除いて他を決めると、残りの符号が自動的に決るという性質がある。（この性質は以下の偶点全部に共通である。） したがって後者についてはこの場合、 $2048=2^{11}$ 通りが許される。 結局成分の絶対値の内、0 がα_0 個、 0でない 4の倍数がそれぞれ$\alpha_1,\ldots,\alpha_\ell$ 個、 2の奇数倍がそれぞれ $\beta_1,\ldots,\beta_m$ 個あるとすると（$\alpha_0+\alpha_1+\ldots+\alpha_\ell=12$, $\beta_1+\ldots+\beta_m=12$）、同類の点の個数は、

$$2576 \times (2\uparrow(23-\alpha_0)) \times (12!/\alpha_0!\alpha_1!\ldots\alpha_\ell!) \times (12!/\beta_1!\ldots\beta_m!)$$

と表される。 これを可能なパタンすべてについて求めて、加えればよい。 なおこの型はノルムが３以上の場合に限る。

（注．↑は累乗のつもり； 2↑11 は 2^{11} を表す）

Ｂ．成分は 8個が 2の奇数倍、他の 16 個が 4の倍数である。 各々の成分のくるべき位置の組合せが、759=3x11x23 通りであること以外の諸性質は、Aのと同様である。 α_i，β_j を上と同様の意味とすると（但し $\alpha_0+\alpha_1+\ldots+\alpha_l=16$，$\beta_1+\ldots+\beta_m=8$），同類の点の数は

$$759\times(2\uparrow(23-\alpha_0))\times(16!/\alpha_0!\,\alpha_1!\ldots\alpha_l!)\times(8!/\beta_1!\ldots\beta_m!)$$

である。 これを可能なパタンすべてについて求めて加える。

Ｃ．成分は 16個が 2の奇数倍、他の 8個が 4の倍数である。 ノルムが 4以上の場合に限ることを除いて、他の性質はＢの場合と同様であり、同類の点の個数は次の式で表される。($\alpha_0+\alpha_1+\ldots+\alpha_l=8$，$\beta_1+\ldots+\beta_m=16$)

$$759\times(2\uparrow(23-\alpha_0))\times(8!/\alpha_0!\,\alpha_1!\ldots\alpha_l!)\times(16!/\beta_1!\ldots\beta_m!)\,.$$

Ｄ．以下の二種はノルムが偶数のときに限る。 まずここで扱うのは、成分がすべて 4の倍数で、しかもそれらの和が 8の倍数である組からなるものである。 符号は任意に許される。 従って同類の点の個数は次のようになる。

$$(2\uparrow(24-\alpha_0))\times 24!/\alpha_0!\,\alpha_1!\ldots\alpha_l!$$

Ｅ．これはノルムが６以上の場合に限る。 すべての成分が 2の奇数倍である。 符号は一つを除いて任意に許される。 同類の点の個数は次のようになる。

$$(2\verb|^|23)\times 24!/\beta_1!\ldots\beta_m!$$

例．r=0 : 1 個　　r=1 : 0 個　　（これらはむしろ例外）

r=2　奇点 (3,1,...,1): (2↑12)x24=98304

　　偶点 (4,4,0,...,0): 24x23x2=1104; (2,..,2(8 個),0,...,0): 759x(2↑7)=97152

合計　196560=(2↑4)x(3↑3)x5x7x13=48x4095=3x(2↑16)x(1-2↑(-12))

r=3　奇点(5,1,...,1):(2↑12)x24，(3,3,3,1,...,1):(2↑12)x4x23x22　小計2↑23

　　偶点(2,...,2(12 個)0,...,0): 2576x(2↑11),(2,...,2(8 個),4,0,...,0):

　　759x(2↑7)x16x2，　小計 (2↑12)x23x89=(2↑12)x2047

合計　(2↑12)x4095=(256/3)x196560

同様に求めたところ、 r=4 では 196560x2025，r=5 では 196560x23552,((2↑10)x23に当る) r=6では 196560x175100 ,r=7では 196560x(3^4)x(2^9)x23 をえた。

問題：１．ノルムｒを与えて、その値をもつ格子点の総数（欲をいえば、奇点と偶点のそれぞれの個数）を求めよ。差し当たってｒ＝５０位までほしい。

２．次のことが成立するだろうか？

（ａ）ｒ＝３を除いて、総数は 196560 $=2^4\times3^3\times5\times7\times13$の倍数であるか？　(否)(r=9では

（ｂ）ｒが奇数のときには、奇点と偶点の数の比が、 2048:2047 になるだろうか？ さらに偶点の内、Ａ型の数とＢ及びＣ型の和との比が 56:33 になるだろうか？

（これもｒが大きくなると怪しい）