

特異に近い関数の積分に対する自動積分

福井大工 長谷川 武光 (Takemitsu Hasegawa)
名大工 鳥居 達生 (Tatsuo Torii)

1 はじめに

有限区間(ここで一般性を失うことなく $[-1, 1]$ とする)上での滑らかな関数 $f(x)$ と特異に近い関数 $K(x)$ との積の積分

$$I(f; K) \equiv \int_{-1}^1 f(x)K(x) dx, \quad (1.1)$$

の自動積分を与える. 特に, $K(x)$ が積分区間 $[-1, 1]$ の近くの実軸上に単根を持つ場合(以下の議論は $[-1, 1]$ 以外の複素平面内の単根の場合にも成り立つ)と複素共役根を持つ場合, 即ち

$$K_1(x) = 1/(x - c) \quad \text{または} \quad K_2(x) = 1/(x^2 + \delta^2), \quad -1 \leq x \leq 1, \quad (1.2)$$

に対する補間型積分による自動積分法を作成する. ここで(1.2)において $|\delta| \ll 1$, また c は区間 $[-1, 1]$ の外でしかも非常に近い値とする. 以下に説明する計算での桁落ちを避けるため $c = \delta \pm 1$ (ここで正符号には $\delta > 0$, 負の符号には $\delta < 0$ とする)と書く. もし $|\delta|$ がゼロに近いなら, (1.2) の $K_1(x)$ と $K_2(x)$ は区間 $[-1, 1]$ 上で特異に近い関数である.

特異性をもった関数の数値積分には多くの研究があるが [4], 特異に近い関数 $K_1(x)$ や $K_2(x)$ を含む積分の文献は少ない [1, 14, 15, 18]. 特に, ここで議論する積分 (1.1) に対する自動積分はほとんど見当たらない.

本方法は積分 $I(f; K = 1)$ に対するクレンショウ・カーチス法 [3] の (1.1) への拡張である [11]. 第一種チェビシェフ多項式 $T_k(x)$ を用いて, 関数 $f(x)$ を $N+1$ 個の標本点 $\cos(\pi j/N)$ ($0 \leq j \leq N$) で補間する,

$$p_N(x) = \sum_{k=0}^N a_k^N T_k(x), \quad -1 \leq x \leq 1. \quad (1.3)$$

ここで(1.3)における和のダブルプライムは初項と最後の項を $1/2$ 倍して総和することを意味する. 係数 a_k^N は高速フーリエ変換 (FFT) により能率的に計算される [2, 7, 13]. 滑らかな関数 $f(x)$ に対して, 補間多項式 p_N (1.3) は N を増すと急速に収束する.

積分 (1.1) の f の代わりに (1.3) で与えられる p_N を用いると積分の近似 $Q_N(f; K)$ が得られる

$$Q_N(f; K) \equiv \int_{-1}^1 p_N(x) K(x) dx = I(p_N; K). \quad (1.4)$$

近似 $Q_N(f; K_i)$ ($i = 1, 2$) の値を計算するため、各々の $K_i(x)$ ($i = 1, 2$) に対して

$$p_N(x) = 2K_1(x)^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} ' b_k^{(1)} T_k(x) + \tau T_N(x), \quad (1.5)$$

$$p_N(x) = 4K_2(x)^{-1} \sum_{k=0}^{N-2} ' b_k^{(2)} T_k(x) + \tau_1 T_{N-1}(x) + \tau_2 T_N(x), \quad (1.6)$$

と表す。ここでプライムは初項のみ $1/2$ 倍して総和することを意味する。すると二つの積分則 $Q_N(f; K_1)$ と $Q_N(f; K_2)$ は次のように表される

$$Q_N(f; K_1) = 4 \sum_{k=0}^{N/2-1} ' b_{2k}^{(1)} / (1 - 4k^2) + \tau \int_{-1}^1 T_N(x) K_1(x) dx, \quad (1.7)$$

$$Q_N(f; K_2) = 8 \sum_{k=0}^{N/2-1} ' b_{2k}^{(2)} / (1 - 4k^2) + \tau_2 \int_{-1}^1 T_N(x) K_2(x) dx, \quad (1.8)$$

ここで以後 N を偶数と仮定する ($\int_{-1}^1 T_{N-1}(x) K_2(x) dx = 0$ であることに注意する、これは被積分関数が奇関数であることからわかる)。

第2節で、(1.5) と (1.6) における係数 $b_k^{(1)}$ と $b_k^{(2)}$ が三項漸化式を満足することを示す。この漸化式から導かれる三重対角行列をもつ連立一次方程式を解くことにより、係数 $b_k^{(1)}$, $b_k^{(2)}$ の全てを安定に計算するアルゴリズムを与える。第3節で、Levin と Sidi[17] によるリチャードソン型の補外法 (数列加速法) を利用することにより、(1.7) と (1.8) における積分 $\int_{-1}^1 T_N(x) K_i(x) dx$ ($i = 1, 2$) の値が、能率的で数値的に安定に、求められることを示す。第4節で、近似積分 $Q_N(f; K_i)$ の誤差評価を議論する。第5節では数値例を示す。

2 係数の計算

式 (1.5) と (1.6) における係数 $b_k^{(i)}$ ($i = 1, 2$) を計算するアルゴリズムを示す。

2.1 $K_1(x)$ に対する係数 $b_k^{(1)}$ の計算

関係式

$$2x T_k(x) = T_{k+1}(x) + T_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \dots, \quad (2.1)$$

を使い (1.5) の両辺の $T_k(x)$ の係数を比較することにより、次の三項漸化式

$$b_{k+1}^{(1)} - 2c b_k^{(1)} + b_{k-1}^{(1)} = a_k^N \quad (k = 0, 1, \dots, N-1), \quad b_{N-1}^{(1)} + \tau = a_N^N / 2, \quad (2.2)$$

を得る. ここで便宜上 $b_{-1}^{(1)} = b_1^{(1)}, b_N^{(1)} = 0$ と仮定した.

漸化式 (2.2) から得られる連立一次方程式を解くことにより, 係数 $b_k^{(1)}$ は数値的に安定に計算されることを次に示す. $\mathbf{b}^{(1)} = [b_0^{(1)}, b_1^{(1)}, \dots, b_{N-1}^{(1)}]^T$, $\mathbf{a}^{(1)} = [a_0^N/2, a_1^N, \dots, a_{N-1}^N]^T$ とおき $A^{(1)}$ を次のような三重対角行列を表すとしよう: $A_{0,0}^{(1)} = -c$, $A_{i,i}^{(1)} = -2c$ ($i = 1, \dots, N-1$), $A_{i,i+1}^{(1)} = A_{i+1,i}^{(1)} = 1$ ($i = 0, \dots, N-2$). すると $|c| > 1$ のとき $A^{(1)}$ が対角優位な行列であるから, ピボッティングなしで連立方程式 $A^{(1)} \mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{a}^{(1)}$ を解くことにより (1.5) の係数 $b_k^{(1)}$ は安定に得られる. このようにして得られた $b_{N-1}^{(1)}$ を (2.2) の最後の関係式に代入することで係数 τ の値も得られる.

2.2 $K_2(x)$ に対する係数 $b_k^{(2)}$ の計算

関係式 (2.1) を 2 度使うことにより

$$4x^2 T_k(x) = T_{k+2}(x) + 2T_k(x) + T_{k-2}(x), \quad k \geq 2. \quad (2.3)$$

を得る. (1.6) の右辺に (2.3) を利用して両辺の係数を比較することにより, $d = 1 + 2\delta^2$ と定義すると

$$\begin{aligned} b_{k+2}^{(2)} + 2d b_k^{(2)} + b_{k-2}^{(2)} &= a_k^N \quad (k = 0, 1, \dots, N-2), \\ b_{N-3}^{(2)} + \tau_1 &= a_{N-1}^N, \quad b_{N-2}^{(2)} + \tau_2 = a_N^N/2, \end{aligned} \quad (2.4)$$

を得る. ここで便宜上 $b_{-2}^{(2)} = b_2^{(2)}, b_{-1}^{(2)} = b_1^{(2)}, b_i^{(2)} = 0$ ($i \geq N-1$) と定義した. $\mathbf{b}^{(2)} = [b_0^{(2)}, b_2^{(2)}, \dots, b_{N-2}^{(2)}]^T$, $\mathbf{a}^{(2)} = [a_0^N/2, a_2^N, \dots, a_{N-2}^N]^T$ とおき $A^{(2)}$ を次のような三重対角行列を表すとする: $A_{0,0}^{(2)} = d$, $A_{i,i}^{(2)} = 2d$ ($i = 1, \dots, N/2-1$), $A_{i,i+1}^{(2)} = A_{i+1,i}^{(2)} = 1$ ($i = 0, \dots, N/2-2$). すると 2.1 節と同様に連立方程式 $A^{(2)} \mathbf{b}^{(2)} = \mathbf{a}^{(2)}$ を安定に解くことにより, 積分則 (1.8) に必要な係数 $b_{2k}^{(2)}$ ($k = 0, 1, \dots, N/2-1$) を得ることができる.

3 補外法の使用

Levin と Sidi [17] による補外法を利用して (1.7) と (1.8) における積分 $\int_{-1}^1 T_N(x) K_i(x) dx$ ($i = 1, 2$) を計算する方法を示す.

先ず積分 $\int_{-1}^1 T_N(x)/(x-c) dx$ の計算からはじめる. これに対しては, 次の関係が重要な役割をする (Hasegawa et al. [12, p.552]),

$$1/(x-c) = -4/(\alpha^{-1} - \alpha) \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n T_n(x), \quad |x| \leq 1, \quad |c| > 1, \quad (3.1)$$

ここで $c = (\alpha + \alpha^{-1})/2$ とおき, $|\alpha| < 1$ となる様に $\alpha = c \pm \sqrt{c^2 - 1}$ を選ぶ, すなわち

$$\begin{aligned} \alpha &= 1/(c + \sqrt{c^2 - 1}), & \text{if } c = \delta + 1 > 1, \\ \alpha &= c + \sqrt{c^2 - 1}, & \text{if } c = \delta - 1 < -1. \end{aligned} \quad (3.2)$$

定理 3.1 N を偶数とし, α が (3.2) で定義されるとする. さらに $\phi(\alpha, N)$ と $\psi(\alpha, N)$ を各々, 次で定義する:

$$\phi(\alpha, N) = \sum_{n=0}^{N/2-1} \frac{2\alpha^{2n+1}}{N-2n-1} - \alpha^N \ln\left(\frac{1+\alpha}{1-\alpha}\right), \quad (3.3)$$

$$\psi(\alpha, N) = \frac{1}{\alpha} \ln\left(\frac{1+\alpha}{1-\alpha}\right) - \sum_{n=0}^{N/2-1} \frac{2\alpha^{2n}}{2n+1}. \quad (3.4)$$

すると

$$\int_{-1}^1 \frac{T_N(x)}{x-c} dx = \phi(\alpha, N) - \alpha^{1-N} \psi(\alpha, N), \quad (3.5)$$

となる.

証明: 関係式

$$2T_n(x)T_m(x) = T_{n+m}(x) + T_{|n-m|}(x), \quad n \geq 0, \quad m \geq 0, \quad (3.6)$$

を使うと

$$2 \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n T_n(x)T_m(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha^{|n|} T_{|n+m|}(x), \quad (3.7)$$

が得られる. さて n が偶数なら, $\int_{-1}^1 T_{|n|}(x)dx = 2/(1-n^2)$, 奇数なら零, であることに注意すると (3.1) と (3.7) から

$$\begin{aligned} \frac{\alpha^{-1}-\alpha}{-2} \int_{-1}^1 \frac{T_N(x)}{x-c} dx &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha^{|n-N|} \int_{-1}^1 T_{|n|}(x)dx = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\alpha^{|2n-N|} - \alpha^{|2n+2-N|}}{2n+1} \\ &= (1-\alpha^2) \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{\alpha^{2n}}{2n+1-N} + \frac{\alpha^{2n}}{2n+N+1} \right\}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

を得る. 定理 3.1 は, 次の 2 式を (3.8) の最右辺に使うことで証明される.

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{2n+1-N} &= \sum_{n=0}^{N/2-1} \frac{\alpha^{2n}}{2n+1-N} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n+N}}{2n+1} = -\phi(\alpha, N)/(2\alpha), \\ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{2n+1+N} &= \alpha^{-N} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{2n+1} - \sum_{n=0}^{N/2-1} \frac{\alpha^{2n}}{2n+1} \right\} = \alpha^{-N} \psi(\alpha, N)/2. \quad \square \end{aligned} \quad (3.9)$$

注 1: もし $|c|$ が 1 に非常に近いと, 各々 (3.3) と (3.4) で定義された $\phi(\alpha, N)$ と $\psi(\alpha, N)$ の中の $\ln\{(1+\alpha)/(1-\alpha)\}$ の計算で, 桁落ちが起こる可能性がある. この数値的不安定性を避けるために, 次の表現を代わりに使えばよい,

$$2 \ln\left(\frac{1+\alpha}{1-\alpha}\right) = \ln\left(\frac{c+1}{c-1}\right) = \begin{cases} \ln\{\delta/(c-1)\} & \text{if } \delta < 0 \\ \ln\{(c+1)/\delta\} & \text{if } \delta > 0. \end{cases} \quad (3.10)$$

注 2: $|\alpha|^{-N}$ が大きいとき, もう一つの数値的困難が (3.4) の $\psi(\alpha, N)$ の計算で発生することがある. $M = [-N \log_{10} \alpha]$ とおくと, (3.4) の右辺の計算で M 桁以上の有効桁が失われる. この理由は次のようにして, 簡単にわかる. $N \geq 2$ なる偶数 N に対して

$$0 \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{2n+N+1} < \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{2n+1} = \frac{1}{2\alpha} \ln \left(\frac{1+\alpha}{1-\alpha} \right),$$

であるから, (3.9) より, 次の関係が導かれる,

$$0 \leq \psi(\alpha, N) / \left[(1/\alpha) \ln \{ (1+\alpha)/(1-\alpha) \} \right] < \alpha^N \leq 10^{-M}.$$

(3.4) の $\psi(\alpha, N)$ を出来るだけ正確に, 例えば計算機の丸め誤差のレベルより高々 1 桁以内で, 計算したいとしよう. さて s を高々 $s = 10$ の小さい正の数として, もし $|\alpha|^{-N} \leq s$ なら, $\psi(\alpha, N)$ は (3.4) の右辺から数値的に安定に計算できる. しかし, 条件 $|\alpha|^{-N} \leq s$ を満足しないとき, 上の注 2 で述べたように (3.4) の右辺の計算で桁落ちが発生する. この場合, 式 (3.4) を使わず, 無限級数 $\sum_{n=0}^{\infty} \alpha^{2n}/(2n+1+N)$ に戻って計算する; (3.9) を参照. これには, Levin と Sidi[17] の d -変換で $m = 1$ とおいた場合を, 加速法として利用して能率的に行なう. 具体的には, このときの変換は Sidi[19] の W -アルゴリズムとしてプログラムで実現される. われわれの計算では, 実際は Ford と Sidi[6] の計算機プログラムを使用した. 特に, このなかで $m = 1$ とし, さらにそこでの整数パラメータ INCR は必要な無限級数が高精度で計算できるよう選ぶ. すなわち, $\alpha^{\text{INCR}} \approx 0.66$ を満足するよう INCR の値をとった. ここで 0.66 は経験的に決定した. (Ford と Sidi のプログラムは, 彼らのいわゆる $W^{(m)}$ -アルゴリズムを実現したもので, $m = 1$ とすると Sidi[19] の W -アルゴリズムになる. われわれはまた, Ford と Sidi によるプログラムを容易に修正して, c が実数だけでなく複素数の場合にも対応できるように, 複素数の α に対しても有効であることを確認した.)

さて, 次に $\int_{-1}^1 T_N(x)/(x^2 + \delta^2) dx$ の計算に進もう. これは上で述べたのと同様に行なう.

補助定理 3.2 $|\delta| = (\alpha - \alpha^{-1})/2$ とおき, $\alpha = |\delta| - \sqrt{\delta^2 + 1}$ と選ぶ. すると次が成り立つ

$$\frac{1}{x^2 + \delta^2} = \frac{-4}{|\delta|(\alpha + \alpha^{-1})} \sum_{n=0}^{\infty} '(-\alpha^2)^n T_{2n}(x). \quad (3.11)$$

証明: 式 (3.1) で c を $i|\delta| = \{i\alpha + 1/(i\alpha)\}/2$ で置き換えると, 次式が成立する

$$\frac{1}{x - i|\delta|} = \frac{-4}{(i\alpha)^{-1} - i\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} '(i\alpha)^n T_n(x). \quad (3.12)$$

次式に (3.12) を代入するとこの補助定理は示される,

$$\frac{1}{x^2 + \delta^2} = \frac{1}{|\delta|} \Im \frac{1}{x - i|\delta|}. \quad \square$$

定理 3.3 N を偶数とし, α を補助定理 3.2 で定義されるとしよう. すると

$$\int_{-1}^1 \frac{T_N(x)}{x^2 + \delta^2} dx = \frac{1}{|\delta|} \left\{ 2\alpha \sum_{n=0}^{N/2-1} \frac{(-\alpha^2)^n}{N-2n-1} - 2\alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^2)^n}{N+2n+1} + (-\alpha^2)^{N/2} \tan^{-1} \frac{1}{|\delta|} \right\}. \quad (3.13)$$

証明: 定理 3.1 の証明と同様にして, 関係式 (3.7) と (3.11) を使うと, 次を得る,

$$\begin{aligned} \frac{|\delta|(\alpha + \alpha^{-1})}{-2} \int_{-1}^1 \frac{T_N(x)}{x^2 + \delta^2} dx &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-\alpha^2)^{|n-N/2|} \int_{-1}^1 T_{|2n|}(x) dx \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-\alpha^2)^{|n-N/2|} \left\{ \frac{1}{2n+1} - \frac{1}{2n-1} \right\} \\ &= (1 + \alpha^2) \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{(-\alpha^2)^n}{2n+1+N} + \frac{(-\alpha^2)^n}{2n+1-N} \right\}. \quad (3.14) \end{aligned}$$

(3.14) の最右辺の第二項は次の様書き換えられる:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^2)^n}{2n+1-N} = - \sum_{n=0}^{N/2-1} \frac{(-\alpha^2)^n}{N-2n-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^2)^{n+N/2}}{2n+1}. \quad (3.15)$$

式 (3.14), (3.15) および次式を使えば (3.13) が成立することが容易にわかる.

$$-2\alpha \sum_{n=0}^{\infty} (-\alpha^2)^n / (2n+1) = -2 \tan^{-1} \alpha = \tan^{-1}(1/|\delta|),$$

ここで最後の等式が成り立つことは $-1/|\delta| = 2\alpha/(1-\alpha^2)$ であることからわかる. \square

われわれの数値実験の結果から, Sidi[19] の W-アルゴリズム (INCR = 1 とおいた, すなわち Levin-変換 [16]) は, (3.13) の右辺第二項の交代級数の収束を効果的に加速することがわかる. 高々 20 項で任意の N と $|\alpha| < 1$ に対して, 倍精度の丸め誤差レベルの精度を得ることができる.

4 誤差推定

ここでは, 関数 $f(x)$ を 標本点 $\cos(\pi j/N)$ ($0 \leq j \leq N$) で補間する多項式 $p_N(x)$ に基づいた積分則 $Q_N(f; K_i) = I(p_N; K_i)$ ($i = 1, 2$) の誤差推定について述べる. この標本点はまた次の補助多項式 $\omega_{N+1}(t)$ の零点でもある

$$\omega_{N+1}(t) = T_{N+1}(t) - T_{N-1}(t) = 2(t^2 - 1) U_{N-1}(t), \quad (4.1)$$

ここで $U_k(t)$ は, $t = \cos \theta$ とおいたとき $U_k(t) = \sin(k+1)\theta / \sin \theta$ で定義される第二種チェビシェフ多項式である.

複素平面 $z = x + iy$ 内に 2 焦点 $(-1, 0)$, $(1, 0)$ をもち, ある定数 $\rho > 1$ に対して長軸と短軸の長さが各々 $a = \rho + \rho^{-1}$ と $b = \rho - \rho^{-1}$ である楕円を ε_ρ と表すことにする. 楕円 ε_ρ の内

部およびその上で関数 $f(z)$ が一価で解析的と仮定する. すると, 補間多項式 $p_N(x)$ の誤差は次の様に複素積分表示され (Elliott[5], Hasegawa and Torii[9]), さらにこれがチェビシエフ級数で展開される (Hasegawa et al.[12]):

$$f(x) - p_N(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\varepsilon_\rho} \frac{\omega_{N+1}(x) f(z) dz}{(z-x)\omega_{N+1}(z)} = \omega_{N+1}(x) \sum_{k=0}^{\infty} V_k^N(f) T_k(x). \quad (4.2)$$

式(4.2)において, 係数 $V_k^N(f)$ は次式で与えられる,

$$V_k^N(f) = \frac{1}{\pi^2 i} \oint_{\varepsilon_\rho} \frac{\tilde{U}_k(z) f(z) dz}{\omega_{N+1}(z)}, \quad k \geq 0. \quad (4.3)$$

第二種チェビシエフ関数 $\tilde{U}_k(z)$ は次で定義される,

$$\tilde{U}_k(z) = \int_{-1}^1 \frac{T_k(t) dt}{(z-t)\sqrt{1-t^2}} = \frac{\pi}{\sqrt{z^2-1} w^k} = \frac{2\pi}{(w-w^{-1})w^k}, \quad (4.4)$$

ここで $w = z + \sqrt{z^2-1}$ であり, $z \notin [-1, 1]$ に対して $|w| > 1$ である (Gautschi and Varga[8], Hasegawa et al.[12]).

(1.1) と (1.4) に (4.2) を使うと積分の近似 $Q_N(f; K)$ に対する誤差が得られる:

$$I(f; K) - Q_N(f; K) = I(f - p_N; K) = \sum_{k=0}^{\infty} V_k^N(f) \Omega_k^N(K), \quad (4.5)$$

ここで, $\Omega_k^N(K)$ は次で定義される

$$\Omega_k^N(K) = \int_{-1}^1 K(x) \omega_{N+1}(x) T_k(x) dx. \quad (4.6)$$

誤差評価 (4.5) では, $V_k(f)$ の他に $\Omega_k^N(K)$ の大きさに対する上限が必要になる.

$K_1(x) = 1/(x-c)$ に関して, 次の補助定理を付録 A で証明する.

補助定理 4.1 $K_1(x)$ を (1.2) で定義されるとし, $\Omega_k^N(K)$ が (4.6) によって定義されるものとする. すると $\Omega_k^N(K_1)$ は c と独立に次のように有限で抑えられる

$$|\Omega_k^N(K_1)| \leq 8. \quad (4.7)$$

注. 付録 A で与えられる補助定理 4.1 の証明から, もし α を複素数 $c \notin [-1, 1]$ に対し $|\alpha| < 1$ となるように選べば, 関係式 (4.7) は実軸上だけでなく複素平面内の任意の c の値に対しても成立することがわかる.

付録 B で, $K_2(x) = 1/(x^2 + \delta^2)$ に対する次の補助定理を証明する.

補助定理 4.2 $K_2(x)$ を (1.2) で定義されるとし, $\Omega_k^N(K)$ が (4.6) によって定義されるものとする. すると偶数 N に対して, $\Omega_k^N(K_2)$ の大きさの限界は δ と独立に次のようになる. すなわち, もし k が奇数なら

$$|\Omega_k^N(K_2)| \leq 8k/\sqrt{\delta^2+1} \leq 8k, \quad (4.8)$$

そうでないなら零である.

$f(z)$ が、楕円 ε_ρ の外部に M 個の極 z_m ($m = 1, 2, \dots, M$) とそこでの留数 $\text{Res}f(z_m)$ をもつ有理型関数、と仮定しよう. すると、(4.3) の複素積分を実行して次のようになる

$$V_k^N(f) = -\frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^M \text{Res}f(z_m) \tilde{U}_k(z_m) / \omega_{N+1}(z_m), \quad k \geq 0. \quad (4.9)$$

さて、複素数 $z = (w + w^{-1})/2 \notin [-1, 1]$, ここで $|w| > 1$, に対し $T_k(z) = (w^k + w^{-k})/2$ であることに注意すると、(4.1) から $\omega_{N+1}(z) = \sqrt{z^2 - 1}(w^N - w^{-N})$ が得られる. これと (4.4) から次式が導かれる

$$\frac{\tilde{U}_k(z)}{\omega_{N+1}(z)} = \frac{\pi}{z^2 - 1} \frac{1}{w^k (w^N - w^{-N})}.$$

(4.9) の右辺で最も主要項は、 $|z_j + \sqrt{z_j^2 - 1}| = \min_{1 \leq m \leq M} |z_m + \sqrt{z_m^2 - 1}| \equiv r > 1$ となる極 z_j からのものである. このような z_j がただ一つ存在すると仮定するならば、 $w_j = z_j + \sqrt{z_j^2 - 1}$ とすると十分大きい N に対して $V_k^N(f) \sim V_0^N(f) w_j^{-k}$ である. このことと (4.5) それに (4.7) および (4.8) を使うと、次の様に誤差が推定される

$$\begin{aligned} & |I(f; K_1) - Q_N(f; K_1)| \\ & \leq 8 \sum_{k=0}^{\infty} |V_k^N(f)| \sim 8 |V_0^N(f)| \sum_{k=0}^{\infty} r^{-k} = 8 |V_0^N(f)| \frac{r+1}{2(r-1)}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} & |I(f; K_2) - Q_N(f; K_2)| \\ & \leq \sum_{k=0}^{\infty} 8(2k+1) |V_{2k+1}^N(f)| \sim 8 |V_0^N(f)| \sum_{k=0}^{\infty} 8(2k+1) r^{-2k-1} \\ & = 8 |V_0^N(f)| \left\{ \frac{r}{r^2-1} + \frac{2r}{(r^2-1)^2} \right\} < 4 |V_0^N(f)| \frac{r^2}{(r-1)^2}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

(4.11) の最後の不等式では $r+1 > 2$ であることを使った.

さて、 $|V_0^N(f)|$ を補間多項式 $p_N(x)$ の実際に計算される係数 a_k^N を用いて表そう. Elliott[5] は次の関係を示した

$$a_k^N = \frac{2}{\pi i} \oint_{\varepsilon_\rho} \frac{T_{N-k}(z) f(z)}{\omega_{N+1}(z)} dz, \quad 0 \leq k \leq N.$$

複素積分を実行し、その結果を (4.9) と比較すると、十分大きい N に対して関係 $|V_0^N| \sim |a_N^N| r / (r^2 - 1)$ と $|a_k^N| \sim r |a_{k+1}^N|$ が成り立つ. この関係と (4.10) から次のように $Q_N(f; K_1)$ に対する誤差推定を得る

$$E_N(f; K_1) = \left(|a_N^N| / 2 \right) \frac{8r}{(r-1)^2}. \quad (4.12)$$

定数 r は $\{a_k^N\}$ の漸近的振舞いから推定される (Hasegawa et al.[12]). 同様に、 $K_2(x)$ に対して (4.11) から次を得る

$$E_N(f; K_2) = \left(|a_N^N| / 2 \right) \frac{2r^3}{(r-1)^3}. \quad (4.13)$$

近似 $Q_N(f; K_1)$ と $Q_N(f; K_2)$ に対する各々の誤差推定 (4.12), (4.13) が δ の値に無関係であることを強調したい。このことは、もし停止則 (4.12)(または (4.13)) を満足したら、 δ の色々な値に対する積分値 $I(f; K_1)$ (または $I(f; K_2)$) の組に共通に近似多項式 $p_N(x)$ を使うことができることを意味する。

ところで、非適応型の自動積分法は一般的に、停止則を満足するまで積分 $I(f; K)$ に収束してゆく近似列 $\{Q_N\}$ に基づいて作られる。この近似数列 $\{Q_N(f; K)\}$ (1.4) を生成するために、多項式 $p_N(x)$ (1.3) の次数 N を倍々と増大させることが簡単な方法として通常行なわれてきた (Gentleman[7], Branders and Piessens[2])。しかし、自動積分法の効率を高めるには、 N を倍々よりもっとゆっくり増大させ、停止則をチェックする機会をふやすことが重要である。このためには Hasegawa et al.[13] が示したように、次数 N を次のようによりゆっくり増大させ

$$N = 6, 8, 10, \dots, 3 \times 2^n, 4 \times 2^n, 5 \times 2^n, \dots, \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

そして高速フーリエ変換 (FFT) を利用して、多項式列 $\{p_N\}$ を生成する; 積型積分法への FFT の適用例について Hasegawa and Torii[10] も参照。

5 数値例

本方法を用いて次の積分を計算する

$$(P1) \quad \int_{-1}^1 f(x)/(x-c) dx, \quad c = -1 - \delta, \quad \delta = 10^{-1}, 10^{-3}, \dots, 10^{-9},$$

$$(P2) \quad \int_{-1}^1 f(x)/(x^2 + \delta^2) dx, \quad \delta = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-5},$$

ここで $f(x)$ としてチェビシエフ級数展開がわかっている次の関数を選ぶ

$$f(x) = \frac{1 - a^2}{1 - 2ax + a^2} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} a^n T_n(x), \quad |a| < 1.$$

もしパラメータ a の絶対値が 1 に近いと、 $f(x)$ に対するチェビシエフ級数の収束が遅く、したがって本方法による積分 (P1) と (P2) の計算は困難になる。ここでは $(a+a^{-1})/2 = 1+5^{-2}$ を満足し $a < 1$ であるような a の値を選ぶ。表 1 に、要求相対精度 $\epsilon_r = 10^{-6}$ と 10^{-10} に対して、使用された関数評価回数 $N+1$ (= 多項式 $p_N(x)$ によって $f(x)$ を補間するために使われた標本点数) とそのときの実際の相対誤差を示す。問題 (P1) は $|c| > 1$ のとき厳密には特異関数ではないので公平ではないが、参考のために、端点に特異性のある関数に有効な二重指数変換型公式 (Takahasi and Mori[20]) による結果 (名古屋大学大型計算機センターのプログラムパッケージ NUMPAC の中の DEFIND を使った) をカッコの中に示す。

表 1: Performance of the present method for the integrals (P1) $\int_{-1}^1 f(x)/(x-c) dx$, $c = -1 - \delta$, and (P2) $\int_{-1}^1 f(x)/(x^2 + \delta^2) dx$, where $f(x) = (1 - a^2)/(1 - 2ax + a^2)$ with a satisfying $(a + a^{-1})/2 = 1 + 5^{-2}$ and $0 < a < 1$. The numbers of function evaluations $N + 1$ required to satisfy the requested relative tolerances $\epsilon_r = 10^{-6}$ and 10^{-10} are listed in the fourth and sixth columns, respectively. For comparison with the double exponential formula (DE) due to Takahasi and Mori, in the parentheses are given results obtained using DEFIND, a FORTRAN program based on the DE formula, in NUMPAC.

Kernel	δ	Integral	$\epsilon_r = 10^{-6}$		$\epsilon_r = 10^{-10}$	
			$N + 1$	rel. error	$N + 1$	rel. error
(P1)	10^{-1}	0.9312353352842176	81	4.4×10^{-14}	129	2.4×10^{-16}
			(51	1.7×10^{-13})	(99	3.0×10^{-13})
	10^{-3}	1.614183676209688	81	2.5×10^{-13}	129	7.5×10^{-15}
			(99	5.3×10^{-12})	(107	1.2×10^{-13})
	10^{-5}	2.259747378656229	81	2.7×10^{-12}	129	1.7×10^{-13}
			(99	3.5×10^{-10})	(211	6.2×10^{-13})
	10^{-7}	2.904610429829376	81	2.5×10^{-12}	129	3.4×10^{-13}
			(107	2.2×10^{-9})	(211	3.4×10^{-11})
	10^{-9}	3.549463373040791	81	2.2×10^{-12}	129	6.5×10^{-13}
			(195	2.3×10^{-8})	(419	3.4×10^{-9})
(P2)	10^{-1}	9.036374996394963	65	1.6×10^{-11}	97	5.0×10^{-14}
	10^{-2}	86.77130148474870	49	2.2×10^{-7}	81	7.2×10^{-12}
	10^{-3}	863.3905529268949	41	1.1×10^{-7}	81	1.3×10^{-12}
	10^{-4}	8629.511724492017	33	8.1×10^{-8}	65	9.9×10^{-12}
	10^{-5}	86290.71632907673	21	3.5×10^{-7}	65	1.0×10^{-12}

A 補助定理 4.1 の証明

補助定理 4.1 を証明する. 式 (3.1), (3.6) および (3.7) を用いると, 次が得られる

$$\begin{aligned}
 (\alpha - \alpha^{-1}) \frac{T_{N+1}(x) T_k(x)}{x - c} &= 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha^{|n|} T_{|n+N+1|}(x) T_k(x) \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha^{|n|} \{T_{|n+N+1|+k}(x) + T_{|n+N+1|-k}(x)\} \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha^{|n|} \{T_{|n+N+1+k|}(x) + T_{|n+N+1-k|}(x)\}. \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

同様にして

$$(\alpha - \alpha^{-1}) \frac{T_{N-1}(x) T_k(x)}{x - c} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha^{|n+2|} \{T_{|n+N+1+k|}(x) + T_{|n+N+1-k|}(x)\}, \quad (\text{A.2})$$

となる. (4.6) に (4.1), (A.1) および (A.2) を使うと

$$(\alpha - \alpha^{-1}) \Omega_k^N(K_1) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\alpha^{|n|} - \alpha^{|n+2|}) \int_{-1}^1 \{T_{|n+N+1+k|}(x) + T_{|n+N+1-k|}(x)\} dx.$$

が得られる. もし $n+1 \neq 0$ なら $|\alpha^{|n|} - \alpha^{|n+2|}| = |\alpha - \alpha^{-1}| |\alpha|^{|n+1|}$, そうでないとき零であることを使うと, 次が得られる

$$|\Omega_k^N(K_1)| \leq \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\alpha|^{|n+1|} \left| \int_{-1}^1 \{T_{|n+N+1+k|}(x) + T_{|n+N+1-k|}(x)\} dx \right|. \quad (\text{A.3})$$

$|\alpha| < 1$ であり, さらに n が偶数なら $\int_{-1}^1 T_{|n|}(x) dx = 2/(1-n^2)$, そうでないとき零であるという事実を (A.3) に使うと, 次のようになる

$$|\Omega_k^N(K_1)| \leq 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{2}{|1-4n^2|} = 8,$$

これで補助定理 4.1 が示された.

B 補助定理 4.2 の証明

補助定理 4.2 を証明する. k が偶数なら $\Omega_k^N(K_2) = 0$ であることは, 被積分関数が奇関数であることから自明である. k が奇数のときをここで示す. (4.1) と (4.6) から

$$|\Omega_k^N(K_2)| \leq |F_k^{N+1}(K_2)| + |F_k^{N-1}(K_2)|,$$

を得る, ここで

$$F_k^{N\pm 1}(K_2) = \int_{-1}^1 T_{N\pm 1}(x) T_k(x) K_2(x) dx, \quad (\text{B.1})$$

と定義した. (4.8) を確かめるには, 次のことを示せば十分である

$$|F_k^{N\pm 1}(K_2)| \leq 4k/\sqrt{\delta^2 + 1}. \quad (\text{B.2})$$

ここでは $F_k^{N+1}(K_2)$ の場合だけについて (B.2) を確かめる. $F_k^{N-1}(K_2)$ の場合も同様にして示される.

(A.1) の導出と同様にして, (3.6), (3.7) と (3.11) を使うと

$$\begin{aligned} -|\delta|(\alpha + \alpha^{-1}) \frac{T_{N+1}(x)T_k(x)}{x^2 + \delta^2} &= 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-\alpha^2)^{|n|} T_{|2n+N+1|}(x) T_k(x) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-\alpha^2)^{|n|} \{T_{|2n+N+1+k|}(x) + T_{|2n+N+1-k|}(x)\} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{(-\alpha^2)^{|n-k|} + (-\alpha^2)^{|n|}\} T_{|2n+N+1-k|}(x), \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

が得られる. $\int_{-1}^1 T_{|2n|}(x) dx = 2/(1 - 4n^2)$ であることに注意すると (B.1) と (B.3) から, 奇数の k と偶数の N に対して次を得る

$$-|\delta|(\alpha + \alpha^{-1})F_k^{N+1}(K_2) = 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-\alpha^2)^{|n-k|} + (-\alpha^2)^{|n|}}{1 - (2n + N - k + 1)^2}. \quad (\text{B.4})$$

$N + 1$ の場合に (B.2) を証明するには, (B.4) において次のことを示せばよい

$$\left|(-\alpha^2)^{|n-k|} + (-\alpha^2)^{|n|}\right| \leq (1 - \alpha^2)k = -\alpha(\alpha - \alpha^{-1})k = -2\alpha|\delta|k, \quad (\text{B.5})$$

なぜなら

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} 2/|1 - (2n + N - k + 1)^2| = \sum_{n=-\infty}^{\infty} 2/|1 - 4n^2| = 4,$$

そして $\alpha + \alpha^{-1} = -2\sqrt{1 + \delta^2}$ であるから. $-1 \leq \alpha \leq 0$ であり, 奇数の k に対して

$$1 + (-\alpha^2)^k = 1 - \alpha^{2k} = (1 - \alpha^2)(1 + \alpha^2 + \cdots + \alpha^{2(k-1)}) \leq -2\alpha|\delta|k,$$

であることを利用して (B.5) を示そう. $0 < k \leq n$ の場合を示すの容易である, このとき

$$\left|(-\alpha^2)^{|n-k|} + (-\alpha^2)^{|n|}\right| = \left|(-\alpha^2)^{n-k}\right| (1 - \alpha^{2k}) \leq 1 - \alpha^{2k}.$$

同様に, $n \leq 0$ に対して

$$\left|(-\alpha^2)^{|n-k|} + (-\alpha^2)^{|n|}\right| = |\alpha^{-2n}|(1 - \alpha^{2k}),$$

となる. $0 < n < k/2$ のとき,

$$\left|(-\alpha^2)^{|n-k|} + (-\alpha^2)^{|n|}\right| = \left|(-\alpha^2)^n\right| (1 - \alpha^{2(k-2n)}) \leq (1 - \alpha^2)(k - 2n) < (1 - \alpha^2)k,$$

であることがわかり, 一方, $k/2 < n < k$ のとき

$$\left|(-\alpha^2)^{|n-k|} + (-\alpha^2)^{|n|}\right| = \left|\alpha^{2(k-n)}\right| \left(1 - \alpha^{2(2n-k)}\right).$$

謝辞

著者の一人(T.H.)は, オーベルポルフアハ数学研究所(ドイツ)での「数値積分」研究集会(1992年11月8日-14日)において, 有益なコメントに対し Prof. Avram Sidi (Technion, Haifa) に感謝します.

参考文献

- [1] B. Bialecki, A modified Sinc quadrature rule for functions with poles near the arc of integration, *BIT* **29** (1989) 464-476.
- [2] M. Branders, and R. Piessens, An extension of Clenshaw-Curtis quadrature, *J. Comp. Appl. Math.* **1** (1975) 55-65.
- [3] C. W. Clenshaw and A. R. Curtis, A method for numerical integration on an automatic computer, *Numer. Math.* **2** (1960) 197-205.
- [4] P. J. Davis and P. Rabinowitz, *Methods of Numerical Integration, 2nd ed.* (Academic Press, Orlando, 1984). ISBN 0-12-206360-0.
- [5] D. Elliott, Truncation errors in two Chebyshev series approximations, *Math. Comp.* **19** (1965) 234-248.
- [6] W. F. Ford and A. Sidi, An algorithm for a generalization of the Richardson extrapolation process, *SIAM J. Numer. Anal.* **24** (1987) 1212-1232.
- [7] W. M. Gentleman, Implementing Clenshaw-Curtis quadrature II. Computing the cosine transformation, *Comm. ACM* **15** (1972) 343-346.
- [8] W. Gautschi and R. S. Varga, Error bounds for Gaussian quadrature of analytic functions, *SIAM J. Numer. Anal.* **20** (1983) 1170-1186.
- [9] T. Hasegawa and T. Torii, An automatic quadrature for Cauchy principal value integrals, *Math. Comp.* **56** (1991) 741-754.
- [10] T. Hasegawa and T. Torii, Application of a modified FFT to product type integration *J. Comp. Appl. Math.* **38** (1991) 157-168.

- [11] T. Hasegawa and T. Torii, Numerical integration of nearly singular functions, *Numerical Integration IV*, Brass, H. and Hämmerlin, G. eds., ISNM 112 (Birkhäuser Verlag, Basel, 1993) 175–188. ISBN 3-7643-2922-X and 0-8176-2922-X.
- [12] T. Hasegawa, T. Torii, and I. Ninomiya, Generalized Chebyshev interpolation and its application to automatic quadrature, *Math. Comp.* **41** (1983) 537–553.
- [13] T. Hasegawa, T. Torii, and H. Sugiura, An algorithm based on the FFT for a generalized Chebyshev interpolation, *Math. Comp.* **54** (1990) 195–210.
- [14] F. G. Lether, Subtracting out complex singularities in numerical integration, *Math. Comp.* **31** (1977) 223–229.
- [15] F. G. Lether, Modified quadrature formulas for functions with nearby poles, *J. Comp. Appl. Math.* **3** (1977) 3–9.
- [16] D. Levin, Development of non-linear transformations for improving convergence of sequences, *Internat. J. Comput. Math.* **B3** (1973) 371–388.
- [17] D. Levin and A. Sidi, Two new classes of nonlinear transformations for accelerating the convergence of infinite integrals and series, *Appl. Math. Comp.* **9** (1981) 204–215.
- [18] G. Monegate, Quadrature formulas for functions with poles near the interval of integration, *Math. Comp.* **47** (1986) 301–312.
- [19] A. Sidi, An algorithm for a special case of a generalization of the Richardson extrapolation process, *Numer. Math.* **39** (1982) 299–307.
- [20] H. Takahasi and M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, *Publ. Res. Inst. Math. Ser.* **9** (1974) 721–741.