

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

(On a Quadrature Formula Using a Nonanalytic Transformation of the Integration Variable)

東京大・工学部

西井 修 (Osamu Nishii)

筑波大・社会工学系

室田 一雄 (Kazuo Murota)

東京大・工学部

伊理 正夫 (Masao Iri)

1. はじめに

変数変換型数値積分公式は、定積分

$$I = \int_0^1 f(x) dx \quad (1.1)$$

の値を数値的に求めるときに

$$x = \varphi(t) \quad (\varphi(\alpha) = 0, \varphi(\beta) = 1, \varphi'(\alpha) = \varphi'(\beta) = 0) \quad (1.2)$$

なる変数変換を施し、

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(\varphi(t)) \varphi'(t) dt = \int_{\alpha}^{\beta} g(t) dt \quad (1.3)$$

の形にしてから台形則を適用するものであり、被積分関数が端点特異性をもつ場合にも有効である [3]。このとき t の積分範囲が有限区間になる公式と無限区間になる公式がある。

(i) 有限区間の場合

この場合、積分の端点 α, β は、 t に関する1次変換によって $\alpha=0, \beta=1$ とすることができます、それによって積分公式としての性質は全く変化しないから、以下 $\alpha=0, \beta=1$ とする。 t の区間 $[0, 1]$ を N 等分したとき、積分公式は次の形になる：

$$\begin{aligned} S_N &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} f\left(\varphi\left(\frac{i}{N}\right)\right) \varphi'\left(\frac{i}{N}\right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-1} w_i f(x_i), \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$\text{ここに } w_i = \varphi' \left(\frac{i}{N} \right), \quad x_i = \varphi \left(\frac{i}{N} \right).$$

このとき t に関する被積分関数 $g(t)$ が

$$g^{(m)}(0) = g^{(m)}(1) = 0 \quad (m=0,1,\dots) \quad (1.5)$$

をみたすならば、Euler-Maclaurinの公式により、積分誤差 $\epsilon_N = S_N - I$ は $N \rightarrow \infty$ のとき $1/N$ のいかなる多項式よりも速く減少することが期待される。

この公式の代表的なものにはIMT型公式 [1] とその改良型公式 [5] がある。

(ii) 無限区間の場合

$\alpha = -\infty, \beta = \infty$ なる無限積分に変換するものであり、 t の刻み幅を h とするとき、公式は次の形になる：

$$\begin{aligned} S_h &= h \sum_{i=-\infty}^{\infty} f(\varphi(ih)) \varphi'(ih) \\ &= h \sum_{i=-\infty}^{\infty} w_i f(x_i), \end{aligned} \quad (1.6)$$

$$\text{ここに } w_i = \varphi'(ih), \quad x_i = \varphi(ih).$$

ここで t について考えると、無限積分が収束するならば

$$g^{(m)}(-\infty) = g^{(m)}(\infty) = 0 \quad (m=0,1,\dots) \quad (1.7)$$

は自動的にみたされることになり、先と同様の理由により ϵ_h は $h \rightarrow 0$ のとき h のいかなる多項式よりも速く減少する。そのため、多項式オーダー以上の特性をもついろいろな変換公式を考えることができる。

ところで、ここで 1 つ考慮しなければならないのは、無限区間の場合には (1.6) の無限和はそれ自身厳密に計算することはできず、実際には N 項の有限和で近似しなければならないことである。それを考慮したとき分点数 N の増加に対し“最良”的誤差の減少率をもつのがDE公式 [6] である。

以上のように変数変換型公式は適当な変換関数 $\varphi(t)$ を 1 つ選ぶことによって構成できるが、ここで次の 2, 3 の点に注意したい。

*これまでに提案してきた変換関数 $\varphi(t)$ はいずれも解析関数である。

*そして、その解析性に基づき、留数定理、鞍点法といった複素関数論の成果を利用して、その公式の誤差に対する精密な評価を得ることに成功している例があった。

このような点から変数変換型公式の有効性は f および φ の解析性にあるという通念があったように思われる。しかし、以下で述べる積分公式においては、変換関数 φ は至る所非解析的である。

また、

* I M T型公式やD E公式を含め、従来知られていた変数変換型公式は、定数関数 $f(x) = 1$ に対しても、積分誤差（"固有誤差(intrinsic error)" と呼ぶ）をもつ。

このことより、変数変換型公式にとって固有誤差は不可避であるといった見方もなされたが、以下に述べる積分公式においては固有誤差は0である。（なお固有誤差に関しては [4] でより詳しい議論がなされている。）

2. 一様乱数加重和の問題

次章で与える変換関数は一様乱数の加重和分布（詳しくは [2]）から得られる。

U_k ($k=1,2,\dots$) をそれぞれ $[0,1]$ 上の一様分布にしたがう独立な確率変数とする。そのとき U_k に公比 $1-\alpha$ ($0 < \alpha < 1$) の等比数列の重みをつけて加え合わせた確率変数 X_n を考える：

$$X_n = \alpha \{ U_n + (1-\alpha) U_{n-1} + \dots + (1-\alpha)^{n-1} U_1 \}. \quad (2.1)$$

X_n の確率分布関数、密度関数をそれぞれ $F_n(t)$, $p_n(t)$ とおく。 $F_n(t)$, $p_n(t)$ は次の関係式

$$p_1(t) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha} & (0 \leq t \leq \alpha), \\ 0 & (\alpha < t \leq 1) \end{cases} \quad (2.2)$$

$$p_{n+1}(t) = \frac{1}{\alpha} \{ F_n(\frac{t}{1-\alpha}) - F_n(\frac{t-\alpha}{1-\alpha}) \} \quad (n=1,2,\dots) \quad (2.3)$$

をみたすので順次計算することができ、共に区分的な多項式となる。ここで $n \rightarrow \infty$ としたもの、即ち U_k の等比級数の確率変数を考えることができるが、その

$$\text{極限分布関数 } F(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} F_n(t), \quad (2.4)$$

$$\text{極限密度関数 } p(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} p_n(t)$$

は一体どうなるであろうか？これについては次のことがわかっている：

- ・極限 $F(t)$, $p(t)$ は存在し、共に無限回微分可能、
- ・ $p(t)$ は $[0,1]$ の無限個の点において非解析的、
- ・特に $\alpha = 1/2$ のときは $[0,1]$ のすべての点において非解析的。

3. 非解析的変換関数 φ

前章で $\alpha \in (0, 1)$ をパラメータとする関数族 $F(t), p(t)$ を考えたが、ここでは積分公式の変換関数として $\alpha = 1/2$ としたものを採用する。

U_k ($k=1, 2, \dots$) をそれぞれ $[0, 1]$ 上の一様分布に従う独立な確率変数とするときの、 $\sum_{k=1}^{\infty} U_k / 2^k$ の確率分布関数 $F(t)$ を $\varphi(t)$ とする。

$\varphi(t), \varphi'(t)$ のグラフを下に示す。

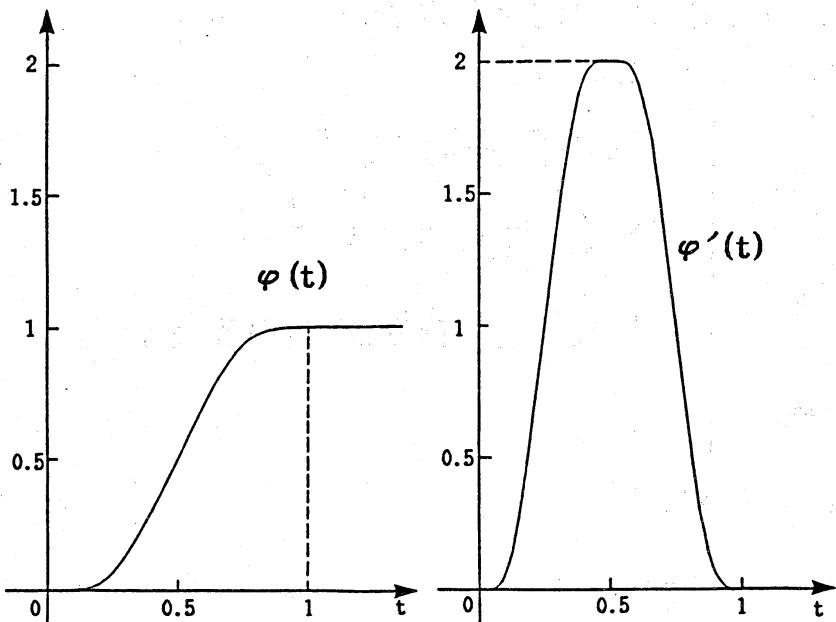


Fig.1 $\varphi(t)$ と $\varphi'(t)$ のグラフ

φ は次の基本的性質をもつ:

- $\varphi(t) = 0$ ($t \leq 0$), $\varphi(t) = 1$ ($t \geq 1$), (3.1)

- $\varphi(t) + \varphi(1-t) = 1$, (3.2)

- φ は $-\infty < t < \infty$ で無限回微分可能だが、 $0 \leq t \leq 1$ で至る所非解析的, (3.3)

- $\varphi'(t) = 2\varphi(2t)$ (0 \leq t \leq 1/2), (3.4)

これらのうち、(3.3) を除く 3 つはあきらかであろう。(3.4) は (2.3) において、極限分布の存在を仮定して代入して得られる式である。

これらの性質から次のことがいえる:

- $\varphi(t) = \int_0^{2t} \varphi(s) ds$ ($0 \leq t \leq 1/2$), (3.5)

- $\varphi^{(m)}(0) = \varphi^{(m)}(1) = 0$ ($m = 1, 2, \dots$), (3.6)

$$\circ \varphi(i/2^n) \quad (i=0,1,\dots,2^n; n=0,1,\dots) \text{ は有理数.} \quad (3.7)$$

(3.7) の証明は次の命題よりわかる。

[命題1] すべての整数 $n (\geq 0)$ について

$$\circ \varphi(2^{-2n}), \varphi(2^{-(2n+1)}) \text{ は有理数.} \quad (3.8)$$

$$\circ \varphi(2^{-2n}-t) = L_{2n}(t) - \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq 2^{-2n}) \quad (3.9)$$

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

(ただし, $L_n(t)$ は t の有理係数多項式) とかける。

注) 具体的には次のようになる。

$$\varphi(1) = 1 \quad \varphi\left(\frac{1}{16}\right) = \frac{143}{2073600} = \frac{11 \cdot 13}{2^{10} \cdot 3^4 \cdot 5^2}$$

$$\varphi\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \quad \varphi\left(\frac{1}{32}\right) = \frac{19}{33177600} = \frac{19}{2^{14} \cdot 3^4 \cdot 5^2}$$

$$\varphi\left(\frac{1}{4}\right) = \frac{5}{72} \quad \varphi\left(\frac{1}{64}\right) = \frac{1153}{561842749440} = \frac{1153}{2^{20} \cdot 3^7 \cdot 5 \cdot 7^2}$$

$$\varphi\left(\frac{1}{8}\right) = \frac{1}{288}$$

$$\varphi(1-t) = 1 - \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq 1)$$

$$\varphi\left(\frac{1}{2}-t\right) = -2t + \frac{1}{2} + \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq \frac{1}{2})$$

$$\varphi\left(\frac{1}{4}-t\right) = 4t^2 - t + \frac{5}{72} - \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq \frac{1}{4})$$

$$\varphi\left(\frac{1}{8}-t\right) = -\frac{32}{3}t^3 + 2t^2 - \frac{5}{36}t + \frac{1}{288} + \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq \frac{1}{8})$$

$$\varphi\left(\frac{1}{16}-t\right) = \frac{128}{3}t^4 - \frac{16}{3}t^3 + \frac{5}{18}t^2 - \frac{1}{144}t + \frac{143}{2073600} - \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq \frac{1}{16})$$

$$\varphi\left(\frac{1}{32}-t\right) = -\frac{4096}{15}t^5 + \frac{64}{3}t^4 - \frac{20}{27}t^3 + \frac{1}{72}t^2 - \frac{143}{1036800}t + \frac{19}{33177600} + \varphi(t)$$

$$(0 \leq t \leq \frac{1}{32})$$

$$\varphi\left(\frac{1}{64}-t\right) = \frac{131072}{45}t^6 - \frac{2048}{15}t^5 + \frac{80}{27}t^4 - \frac{1}{27}t^3 + \frac{143}{518400}t^2 - \frac{19}{16588800}t$$

$$+ \frac{1153}{561842749440} - \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq \frac{1}{64})$$

[命題1の証明]

$0 \leq t \leq 2^{-n}$ ($n=1, 2, \dots$)において次の漸化式が成り立つ:

$$\begin{aligned}\varphi(2^{-n}-t) &= \varphi(2^{-n}) - \int_{2^{-n}-t}^{2^{-n}} \varphi'(s) ds \\ &= \varphi(2^{-n}) - \int_0^t \varphi'(2^{-n}-s) ds \\ &= \varphi(2^{-n}) - \int_0^t 2\varphi(2^{-(n-1)}-2s) ds \quad (\because (3.4)) \\ &= \varphi(2^{-n}) - \int_0^{2t} \varphi(2^{-(n-1)}-s) ds.\end{aligned}\tag{3.10}$$

帰納法によって (3.8), (3.9)を証明する。

(i) $n=0$ のとき

$$\varphi(1)=1, \varphi(1/2)=1/2 \quad (\because (3.2)).$$

$$\varphi(1-t)=1-\varphi(t) \quad (0 \leq t \leq 1) \quad (\because (3.2)). \text{ また, (3.10) より}$$

$$\begin{aligned}\varphi(1/2-t) &= \varphi(1/2) - \int_0^{2t} \{1-\varphi(s)\} ds \\ &= 1/2 - 2t + \int_0^{2t} \varphi(s) ds \\ &= -2t + 1/2 + \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq 1/2) \quad (\because (3.5)).\end{aligned}$$

(ii) $n=k-1$ ($k \geq 1$) で成立しているとすると,

$$\varphi(2^{-(2k-1)}-t) = L_{2k-1}(t) + \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq 2^{-(2k-1)}) \tag{3.11}$$

$(L_{2k-1}(t)$:有理係数多項式)

とかける。(3.5)に注意しながら、これに(3.10)を2回適用すると、

$$\begin{aligned}\varphi(2^{-2k}-t) &= \varphi(2^{-2k}) - \int_0^{2t} \{L_{2k-1}(s) + \varphi(s)\} ds \\ &= \varphi(2^{-2k}) - \int_0^{2t} L_{2k-1}(s) ds - \varphi(t) \quad (0 \leq t \leq 2^{-2k}),\end{aligned}\tag{3.12}$$

$$\begin{aligned}\varphi(2^{-(2k+1)}-t) &= \varphi(2^{-(2k+1)}) - \int_0^{2t} \{\varphi(2^{-2k}) - \int_0^{2s} L_{2k-1}(r) dr - \varphi(s)\} ds \\ &= \varphi(2^{-(2k+1)}) - 2\varphi(2^{-2k})t + \int_0^{2t} \int_0^{2s} L_{2k-1}(r) dr ds + \varphi(t) \\ &\quad (0 \leq t \leq 2^{-(2k+1)}).\end{aligned}\tag{3.13}$$

(3.12), (3.13) より、

$$L_{2k}(t) = \varphi(2^{-2k}) - \int_0^{2t} L_{2k-1}(s) ds, \tag{3.14}$$

$$L_{2k+1}(t) = \varphi(2^{-(2k+1)}) - 2\varphi(2^{-2k})t + \int_0^{2t} \int_0^{2s} L_{2k-1}(r) dr ds \tag{3.15}$$

と、かくことができる。

(3.12), (3.13)に $t=2^{-(2k+1)}$ を代入して計算すると、

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi(2^{-2k}) = \frac{2^{2k}}{2^{2k}-1} \int_0^{2^{-2k}} \{L_{2k-1}(s) - \int_0^{2s} L_{2k-1}(r) dr\} ds, \\ \varphi(2^{-(2k+1)}) = \frac{1}{2(2^{2k}-1)} \int_0^{2^{-2k}} \{L_{2k-1}(s) - 2^{2k} \int_0^{2s} L_{2k-1}(r) dr\} ds. \end{array} \right. \quad (3.16)$$

よって、 $\varphi(2^{-2k})$, $\varphi(2^{-(2k+1)})$ は有理数。また、これを (3.14), (3.15) に代入することによって $L_{2k}(t)$, $L_{2k+1}(t)$ は有理係数多項式となる。よって $n=k$ でも成立。(証終)

4. 数値積分公式としての性質

3で採用した $\varphi(t)$ 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 $\varphi'(i/N)$ ($N=2^n$) とも有理数であり、かつ実質的に同じ数表を用意すればよい。 (4.1)

・定数関数 $f(x)=1$ に対して, $\epsilon_N=0$ (N :偶数). (4.2)

[(4.2)の証明] $f(x)=1$ に対する本公式の適用は、 $\varphi'(t)$ を t の台形則で積分することに相当するが、 $t=1/2$ で分割して考えると $\varphi'(t)$ の $(1/4, 1)$, $(3/4, 1)$ に関する点対称性より $\epsilon_N=0$. (証終)

・(4.2) より $f(x)=ax+b$ に対しても $\epsilon_N=0$ (N :偶数). (4.3)

・(3.6) より 区間 $(0, 1)$ で滑らかな、即ち無限回微分可能で、かつ端点の特異性が高々代数的な可積分関数 f に対して、積分誤差 ϵ_N は $N \rightarrow \infty$ のとき、 $1/N$ のいかなる多項式よりも速く減少する。さらに、半ば理論的考察（付録2参照）と実験結果より

$$\epsilon_N = O(\exp[-C(\log N)^2]) \quad (4.4)$$

と予想されている。

5. 数表の作成

(5, 6においては4倍精度計算（計算機 HITAC M-280H, 言語 VOS3 FORTRAN77, 仮数部16進28桁切り捨て）を使用した。)

$\varphi(t)$ は関数方程式 (3.5) を満たすことを利用し、以下に述べる方法で 2^n 分点の数表を作成した。

$m=0, 1, \dots$ について、 $t : [0, 1]$ を $N=2^{m+n}$ 等分し $\varphi(t)$ の離散点 $\varphi(j/N)$ ($j=0, 1, \dots, N$) で次の計算

$\varphi^{(0)}\left(\frac{j}{N}\right) = \begin{cases} 0 & (j=0, \dots, N/2-1) \\ 1/2 & (j=N/2) \\ 1 & (j=N/2+1, \dots, N) \end{cases}$

for $\nu = 0, 1, \dots$ do
 for $j=0, \dots, N/2$ do
 $\varphi^{(\nu+1)}\left(\frac{j}{N}\right) = \frac{1}{N} \left\{ \frac{1}{2} \varphi^{(\nu)}(0) + \sum_{\xi=1}^{2j-1} \varphi^{(\nu)}\left(\frac{\xi}{N}\right) + \frac{1}{2} \varphi^{(\nu)}\left(\frac{2j}{N}\right) \right\}$
 // (3.5)の刻み幅 $2^{-(m+n)}$ の台形則近似 //
 for $j=N/2+1, \dots, N$ do
 $\varphi^{(\nu+1)}\left(\frac{j}{N}\right) = 2\varphi^{(\nu+1)}\left(\frac{1}{2}\right) - \varphi^{(\nu+1)}\left(1-\frac{j}{N}\right)$
 for $j=1, \dots, N$ do
 $\varphi^{(\nu+1)}\left(\frac{j}{N}\right) = \varphi^{(\nu+1)}\left(\frac{j}{N}\right) / \varphi^{(\nu+1)}(1)$
 // 正規化 //

(5.1)

を行なうと収束し、 φ の近似解 φ_m が得られる。ここで同じ t に関して $\varphi_m(t)$ は m が大きいほど近似度が高く、 $m \rightarrow \infty$ のとき $\varphi(t)$ に収束する。

そこで $n=8$ とし、 $m=0$ ($N=256$ 分点) から、 $m=5$ ($N=8192$ 分点) までについて φ_m を計算し、そのうちの $\varphi_0\left(\frac{i}{256}\right) \sim \varphi_5\left(\frac{i}{256}\right)$ に対して、各 i 每に m を添字とする数列 $\{\varphi_m\}_{m=0}^{\infty}$ に Romberg 補外

$$\varphi_m^{-1}\left(\frac{i}{256}\right) = \frac{1}{4-1} \{4\varphi_{m+1}\left(\frac{i}{256}\right) - \varphi_m\left(\frac{i}{256}\right)\}, \quad \begin{cases} i=0, \dots, 256 \\ m=0, \dots, 4 \end{cases} \quad (5.2)$$

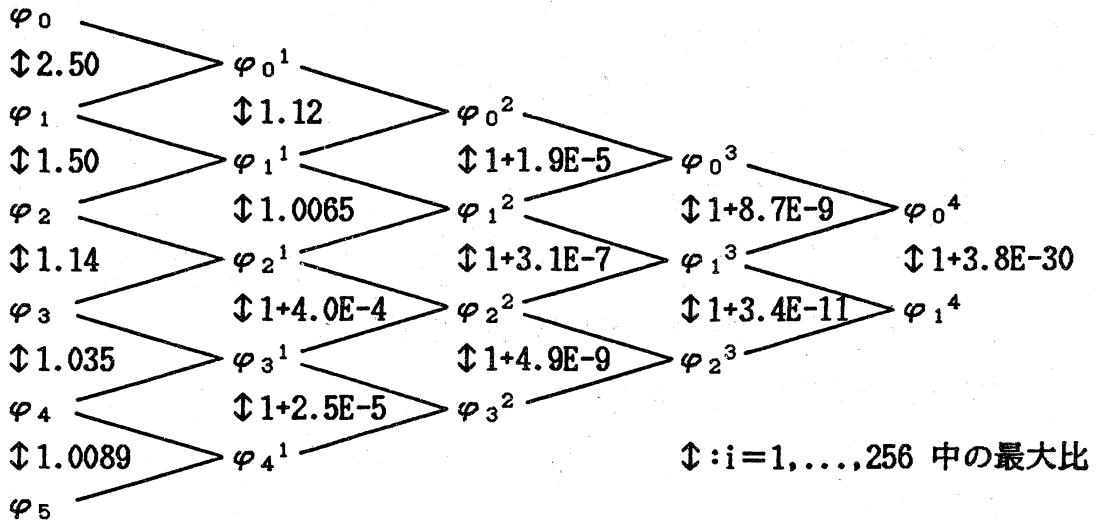
$$\varphi_m^{-r}\left(\frac{i}{256}\right) = \frac{1}{4^r-1} \{4^r \varphi_{m+r-1}\left(\frac{i}{256}\right) - \varphi_{m+r-1}\left(\frac{i}{256}\right)\}, \quad \begin{cases} i=0, \dots, 256 \\ m=0, \dots, 5-r \\ r=2, 3, 4 \end{cases} \quad (5.3)$$

を施す。すると、各 $i=1, \dots, 256$ に対する $\varphi_0^{-4}\left(\frac{i}{256}\right)$ と $\varphi_1^{-4}\left(\frac{i}{256}\right)$ の比は、最大

$1+3.8 \times 10^{-30}$ であった。そこで真値への十分な収束が得られたとし、

$\varphi_0^{-4}\left(\frac{i}{256}\right)$ を 数表として採用した。

[収束の様子]



なお、このようにして得られる近似解に関して次のことが成り立つと予想されている（証明はできていない）。

・任意の正整数 n に対し、次が成り立つ。

$N = 2^{m+n}$ として前述のように φ_m を計算したとき、その Romberg 補外値

$$\varphi_m^{[n/2]} \left(\frac{i}{2^n} \right) \quad (i=0, 1, \dots, 2^n; m=0, 1, \dots)$$

は真値 $\varphi \left(\frac{i}{2^n} \right)$ に一致する。すなわち、

$$\begin{aligned} \varphi_m \left(\frac{i}{2^n} \right) &= \varphi \left(\frac{i}{2^n} \right) + C_1(i) \left(\frac{1}{4} \right)^m + C_2(i) \left(\frac{1}{16} \right)^m + \cdots + C_{[n/2]}(i) \left(\frac{1}{4^{[n/2]}} \right)^m \\ &= \varphi \left(\frac{i}{2^n} \right) + \sum_{k=1}^{[n/2]} C_k(i) \left(\frac{1}{4} \right)^{km} \end{aligned} \quad (5.4)$$

($C_k(i)$ は m に依らない定数) となっている。

(もし、仮にこれが成立しているならば、上の $n=8$ の場合、 φ_m^4 は厳密解であるといえる。)

6. 数値実験結果

5で作成した数表を用いて、次の5つの積分に対して本数値積分公式を適用した：

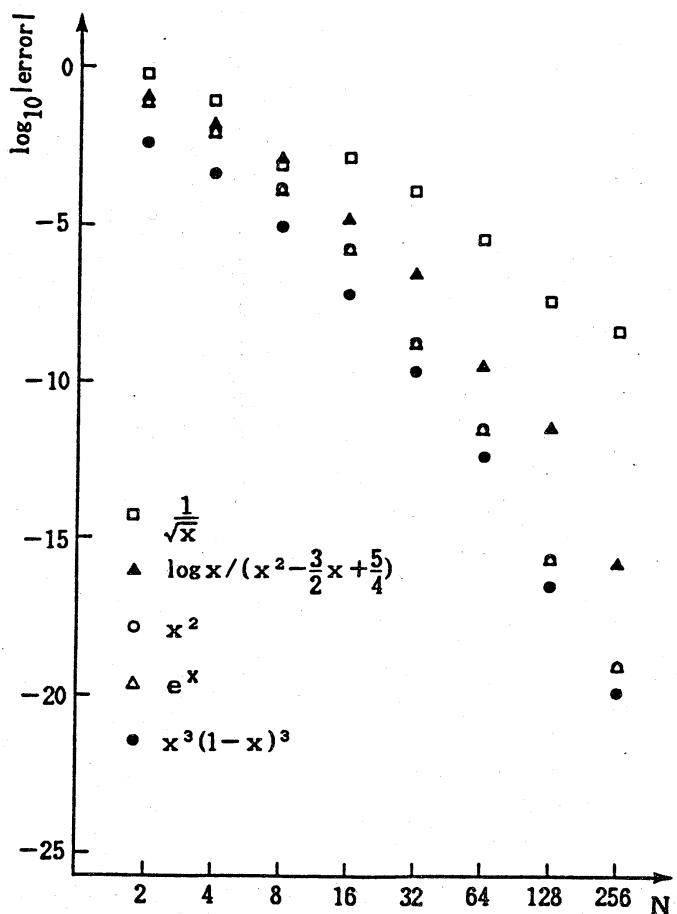


Fig.2 数値実験結果。本公式の分点数対誤差の関係

- 1) $\int_0^1 x^2 dx = 1/3,$
- 2) $\int_0^1 x^3(1-x)^3 dx = 1/140,$
- 3) $\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = 2,$
- 4) $\int_0^1 e^x dx = e-1,$
- 5) $\int_0^1 \log x / (x^2 - \frac{3}{2}x + \frac{5}{4}) dx = -1.05182\dots$

Fig.2, Fig.3 に実験結果を示す。Fig.2のグラフ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 $1/N$ の多項式オーダーよりは速く減衰していることが読みとれる。3), 5) のような端点に特異性をもつ関数でも、他の3つより結果は多少悪いが、やはり多項式オーダー以上の減衰を示している。Fig.3は本公式と、IMT型公式、DE公式との比較である。(a) ではIMT, DEに比べ明らかに誤差は大きい。(b) ではIMTとほぼ同等の結果を達成して

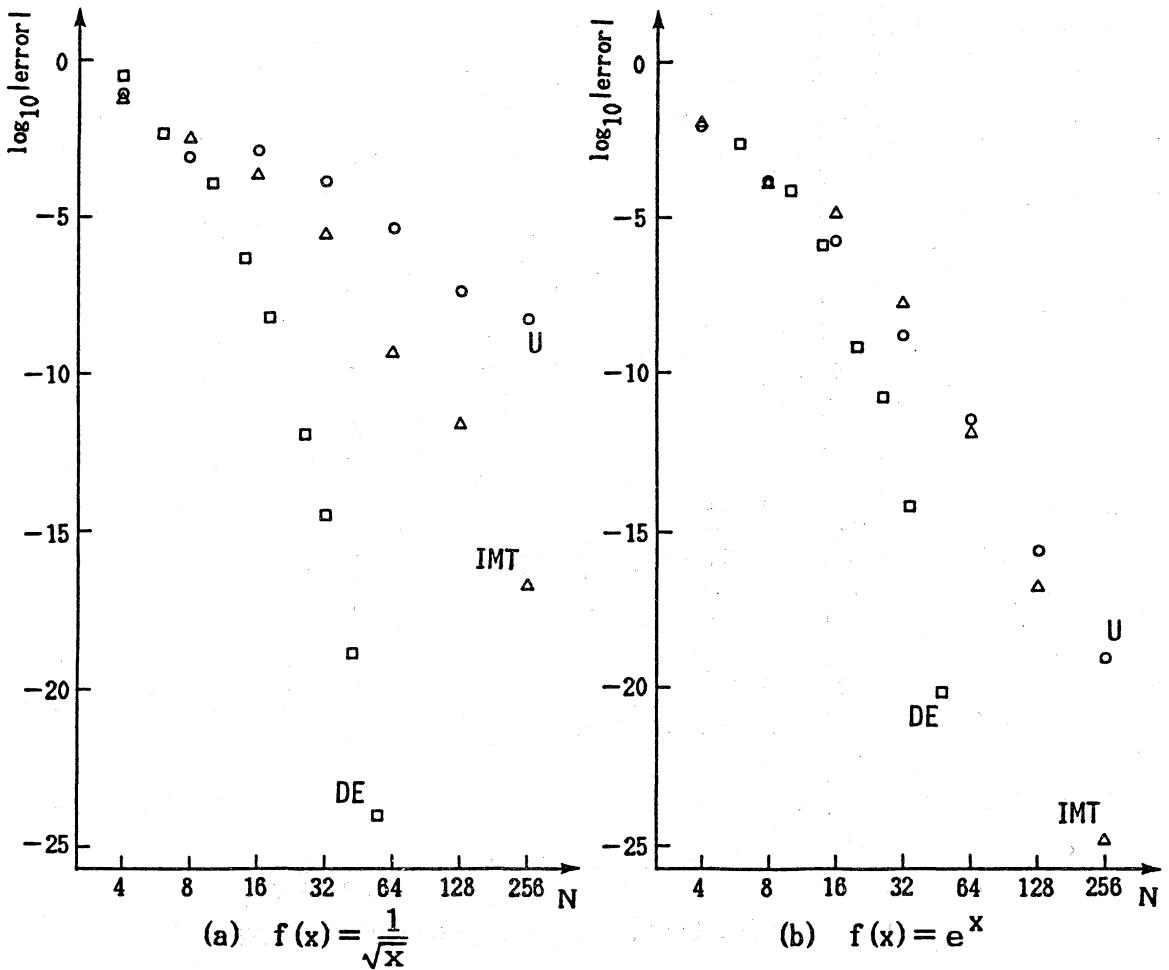


Fig.3 数値実験結果. IMT公式, DE公式との比較 (本公式をUで示す)

$$\text{IMT: } \varphi(t) = \frac{1}{Q} \int_0^t \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right) dt$$

$$Q = \int_0^1 \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right) dt \quad t: [0, 1]$$

$$\text{DE: } \varphi(t) = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right) + \frac{1}{2} \quad t: (-\infty, \infty)$$

いるが、 N が大きい方では差が生じる。どちらの場合も N が十分大なるときの誤差は、IMT, DEと比べ定数倍という以上に大きいと予想できる。

7. むすび

以上のように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た。これによって解析関数でない変換関数を用いることの可能性が示された。ただし、

積分公式の性能は、すぐれた変数変換型公式と比べて劣っている。これが非解析性のためなのかどうかはまだ何ともいえないが、 α を $1/2$ 以外の値に変えたり、または変換の繰り返し適用などの手法によって、非解析的でありながら少なくともここで示したものよりは良い特性をもつ公式をつくることができるのではないかと考えている。

謝辞

筑波大学電子情報工学系の杉原正顕博士には貴重な助言を頂いた。ここに感謝します。

なお、本研究の一部は文部省科学研究費の援助にて行なった。

参考文献

- [1] 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 (1970), pp.82-118.
- [2] K. Kabaya and M. Iri: Sum of uniformly distributed random variables and a family of nonanalytic functions. *Research Memorandum RMI 86-01*, Department of Mathematical Engineering and Instrumentation Physics, University of Tokyo, 1986.
- [3] M. Mori: Quadrature formulas obtained by variable transformation and the DE-rule. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol.12&13 (1985), pp.119-130.
- [4] K. Murota: IMT-type quadrature formulas free from intrinsic errors. 京都大学数理解析研究所共同研究集会「並列数値計算アルゴリズムとその周辺」(1985-11-21). 本講究録に収録予定
- [5] K. Murota and M. Iri: Parameter tuning and repeated application of the IMT-type transformation in numerical quadrature. *Numerische Mathematik*, Vol.38 (1982), pp.347-363.
- [6] H. Takahasi and M. Mori: Double exponential formulas for numerical integration. *Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University*, Vol.9 (1974), pp.721-741.

付録1. $\varphi(2^{-n})$ に関する不等式

本文の「 $\varphi(i/2^n)$ は有理数」の証明の中で、われわれは $\varphi(2^{-n})$ を帰納的に与える方法を示した((3.11)~(3.16))。ゆえに $\varphi(2^{-n})$ の簡単な表式があるのではないかと考えられる。その表式は得ることができなかったが、その代りとして $\varphi(2^{-n})$ のおよその大きさを与える簡易な不等式を以下に与えておく。

- $\varphi(2^{-n}) \quad (n=1,2,\dots)$ は次の不等式をみたす:

$$\frac{2^{-n(n+1)/2}}{n!} \leq \varphi(2^{-n}) \leq \frac{2^{-n(n-1)/2}}{(n+1)!}. \quad (\text{A.1.1})$$

[(A.1.1)の証明] (3.4)を $(n-1)$ 回適用することにより

$$\varphi^{(n-1)}(t) = 2^{n(n-1)/2} \varphi(2^{n-1}t) \quad (0 \leq t \leq 2^{-(n-1)}). \quad (\text{A.1.2})$$

また

$$\varphi(t) \leq 2t^2 \quad (0 \leq t \leq 1/2). \quad (\text{A.1.3})$$

($\because \varphi(t) \leq t \quad (0 \leq t \leq 1/2), \quad \varphi(t) \geq t \quad (1/2 \leq t \leq 1)$ から容易に得られる.)

$$\varphi(t) \geq 2t - 1/2 \quad (0 \leq t \leq 1/2). \quad (\text{A.1.4})$$

($\because \psi(t) = \varphi(t) - (2t - 1/2)$ は $\psi(1/2) = 0, \psi'(t) = \varphi'(t) - 2 \leq 0.$)

(A.1.3)を(A.1.2)に代入すると

$$\begin{aligned} \varphi^{(n-1)}(t) &\leq 2^{n(n-1)/2} \cdot 2 \cdot (2^{n-1}t)^2 \\ &= 2^{n(n+3)/2} \frac{1}{2!} t^2 \quad (0 \leq t \leq 2^{-n}). \end{aligned} \quad (\text{A.1.5})$$

$\varphi^{(m)}(0) = 0 \quad (m=0,1,\dots)$ であるから、0を下端にして (A.1.5)を $(n-1)$ 回積分すると

$$\varphi(t) \leq 2^{n(n+3)/2} \frac{1}{(n+1)!} t^{n+1} \quad (0 \leq t \leq 2^{-n}). \quad (\text{A.1.6})$$

$t=2^{-n}$ とし (A.1.1)の右側の不等式を得る。

もう1つの不等式も同様である。(A.1.4)を(A.1.2)に代入すると

$$\begin{aligned} \varphi^{(n-1)}(t) &\geq 2^{n(n-1)/2} (2^n t - 1/2) \\ &= 2^{n(n+1)/2} \left(t - \frac{1}{2^{n+1}}\right) \quad (0 \leq t \leq 2^{-n}). \end{aligned} \quad (\text{A.1.7})$$

$\varphi^{(m)}(2^{-(n+1)}) \geq 0 \quad (m=0,1,\dots,n-2)$ であるから、 $2^{-(n+1)}$ を下端にして (A.1.7)を $(n-1)$ 回積分すると

$$\varphi(t) \geq 2^{n(n+1)/2} \frac{1}{n!} \left(t - \frac{1}{2^{n+1}}\right)^n \quad (2^{-(n+1)} \leq t \leq 2^{-n}). \quad (\text{A.1.8})$$

$t=2^{-n}$ とし (A.1.1)の左側の不等式を得る。(証終)

付録2. 多項式に対する積分誤差の評価

$x : [0, 1] \rightarrow t : [0, 1]$ と変換する変数変換型公式において、 $t : [0, 1]$ を k 等分したときの f の積分誤差は、変換後の被積分関数のフーリエ係数

$$c_k = \int_0^1 f(\varphi(t)) \varphi'(t) \exp(i2\pi kt) dt \quad (k: 整数; i^2 = -1) \quad (\text{A.2.1})$$

を用いて

$$\begin{aligned} \epsilon_k(f) &= 2\operatorname{Re}\left(\sum_{p=1}^{\infty} c_{pk}\right) \\ &\doteq 2\operatorname{Re}(c_k) \end{aligned} \quad (\text{A.2.2})$$

と表現される（詳しくは [1] などを参照されたい）。

以下では、 $f(x)=1$ および x^m ($m=0, 1, \dots$) についての本公式の c_k を

$$C_k \equiv \int_0^1 \varphi'(t) \exp(i2\pi kt) dt, \quad (\text{A.2.3})$$

$$C_k^m \equiv \int_0^1 (\varphi(t))^m \varphi'(t) \exp(i2\pi kt) dt \quad (\text{A.2.4})$$

とかく。 C_k の減衰度、 C_k^m の減衰度をそれぞれ定理1、定理2で論じる。

定理1. $k=0, 1, \dots$ に対し

$$|C_k| \leq \exp\left(\frac{1}{e \log 2}\right) \exp\left[-\frac{1}{2 \log 2} (\log(k+1))^2\right]. \quad (\text{A.2.5})$$

[定理1の証明]

$$k=0 \text{ のとき } C_0 = \int_0^1 \varphi'(t) dt = 1 \text{ より自明。}$$

$k \geq 1$ のとき φ が一様分布のコンボリューションなることより

$$C_k = \exp(i\pi k) \prod_{j=1}^{\infty} \frac{\sin(\pi k/2^j)}{\pi k/2^j}. \quad (\text{A.2.6})$$

$$\begin{aligned} \therefore |C_k| &= \prod_{j=1}^{\infty} \frac{|\sin(\pi k/2^j)|}{\pi k/2^j} \\ &\leq \prod_{j=1}^n \frac{|\sin(\pi k/2^j)|}{\pi k/2^j} \quad (\text{ただし, } n = [\log_2 k] + 1) \end{aligned}$$

$$\leq \prod_{j=1}^n \frac{2^j}{\pi k}$$

$$\leq \frac{2^{n(n+1)/2}}{\pi^n 2^{n(n-1)}} \quad (\because k \geq 2^{n-1})$$

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

$$\leq \exp\left[-\frac{1}{2 \log 2} (\log k)^2 + \frac{(3 - \frac{\log \pi}{\log 2}) \log k}{2}\right] \quad (\because n \geq \frac{\log k}{\log 2})$$

$$\begin{aligned}
 &\leq \exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log k)^2\right] \\
 &\leq \exp\left(\frac{1}{e\log 2}\right) \exp\left[-\frac{1}{2\log 2}(\log(k+1))^2\right] \\
 &(\because (\log(k+1))^2 - (\log k)^2 \leq \frac{2}{e}). \quad (\text{証終})
 \end{aligned}$$

上記の C_k に対する評価から、[4] の Prop.A.1 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。

定理2.

$$D_k \equiv \int_0^1 t \varphi'(t) \exp(i2\pi kt) dt \quad (k: \text{整数}) \quad (\text{A.2.7})$$

とおく。ある正定数 A, B が存在して

$$|C_k| \leq A \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \quad (k: \text{整数}), \quad (\text{A.2.8})$$

$$|D_k| \leq A \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \quad (k: \text{整数}) \quad (\text{A.2.9})$$

ならば

$$\begin{aligned}
 |C_{k^m}| &\leq A_m |k| \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \quad (\text{A.2.10}) \\
 &\quad (k: 0 \text{ でない整数}; m=0,1,\dots).
 \end{aligned}$$

ただし A_m は次の漸化式で定める：

$$A_0 = A,$$

$$\begin{aligned}
 A_{m+1} &= A \left\{ \frac{3}{2} + A_m \frac{m+1}{2\pi} \left(\exp(B \frac{e-2}{e}) + 2\sqrt{\frac{\pi}{B}} \exp(\frac{1}{4B}) \right) \right\} \\
 &\quad (m=0,1,\dots). \quad (\text{A.2.11})
 \end{aligned}$$

[定理2の証明]

$$a_{k^m} \equiv \int_0^1 (\varphi(t)^m - t) \exp(i2\pi kt) dt \quad (k: \text{整数}; m=1,2,\dots) \quad (\text{A.2.12})$$

とおく。容易にわかるように

$$-1/2 \leq a_{0^m} \leq 0, \quad (\text{A.2.13})$$

$$C_{k^{m+1}} = D_k + a_{0^{m+1}} C_k - \sum_{j \neq 0} \frac{m+1}{2\pi j} C_{j^m} C_{k-j} \quad (\text{A.2.14})$$

である ([4] の(A.10), (A.12) 式).

以下、帰納法によって(A.2.10)を証明する。 $m=0$ のときは (A.2.8) により成立する。

ある $m (\geq 0)$ で成立しているとするとき、(A.2.14) により

$$|C_{k^{m+1}}| \leq |D_k| + |a_{0^{m+1}} C_k| + \frac{m+1}{2\pi} \sum_{j \neq 0} \frac{1}{|j|} |C_{j^m} C_{k-j}|. \quad (\text{A.2.15})$$

ここで、第1項、第2項は (A.2.9), (A.2.13)により

$$|D_k| \leq A \exp[-B(\log(|k|+1))^2], \quad (A.2.16)$$

$$\begin{aligned} |a_0^{m+1} C_k| &\leq \frac{1}{2} |C_k| \\ &\leq \frac{1}{2} A \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \end{aligned} \quad (A.2.17)$$

とおさえられる。第3項については、 $k \neq 0$ のとき

$$\begin{aligned} &\sum_{j \neq 0, j \neq k} \frac{1}{|j|} |C_j|^m |C_{k-j}| \\ &\leq \sum_{j \neq 0} A_m \exp[-B(\log(|j|+1))^2] A \exp[-B(\log(|k-j|+1))^2] \\ &= A_m A \sum_{j=1}^{|k|} \exp[-B(\log(j+1))^2] \exp[-B(\log(|k|-j+1))^2] \\ &\quad + 2 A_m A \sum_{j=1}^{\infty} \exp[-B(\log(j+1))^2] \exp[-B(\log(|k|+j+1))^2] \\ &\leq A_m A \sum_{j=1}^{|k|} \exp[-B\{(\log(j+1))^2 + (\log(|k|-j+1))^2\}] \\ &\quad + 2 A_m A \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \int_1^\infty \exp[-B(\log x)^2] dx \end{aligned} \quad (A.2.18)$$

$$\begin{aligned} &\leq A_m A |k| \exp(B \frac{e-2}{e}) \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \\ &\quad + 2 A_m A \sqrt{\frac{\pi}{B}} \exp(\frac{1}{4B}) \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \end{aligned} \quad (A.2.19)$$

$$= A_m A \{ |k| \exp(B \frac{e-2}{e}) + 2 \sqrt{\frac{\pi}{B}} \exp(\frac{1}{4B}) \} \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \quad (A.2.20)$$

とおさえられる。ここで (A.2.18) と (A.2.19) の間で次の関係を使った:

$$\circ (\log(j+1))^2 + (\log(|k|-j+1))^2 \geq (\log(|k|+1))^2 - \frac{e-2}{e} \quad (1 \leq j \leq |k|; j, k: \text{整数})$$

$$(\because f(x) = (\log(x+1))^2,$$

$$g(x) = \begin{cases} \frac{2}{e}x + \frac{2-e}{e} & (0 \leq x < e-1) \\ (\log(x+1))^2 & (x \geq e-1) \end{cases}$$

とすると、 $g(x)$ は凹関数で $f(x) \geq g(x)$ ($x \geq 0$).

$|k| \geq e-1$ のとき

$$\begin{aligned} &(\log(j+1))^2 + (\log(|k|-j+1))^2 = f(j) + f(|k|-j) \\ &\geq g(j) + g(|k|-j) \geq g(0) + g(|k|) = (\log(|k|+1))^2 - \frac{e-2}{e}. \end{aligned}$$

$|k| < e-1$ のとき $|k|=1$ ゆえ自明.),

$$\begin{aligned}
 & \circ \int_1^\infty \exp[-B(\log x)^2] dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2B}} \exp\left(\frac{1}{4B}\right) \int_{-1/\sqrt{2B}}^\infty \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) du \quad (u = \sqrt{2B}(\log x - \frac{1}{2B})) \\
 &\leq \sqrt{\frac{\pi}{B}} \exp\left(\frac{1}{4B}\right).
 \end{aligned}$$

(A.2.15) に (A.2.16), (A.2.17), (A.2.20) を代入すると, $k \neq 0$ のとき

$$\begin{aligned}
 |C_{k^{m+1}}| &\leq A \left\{ \frac{3}{2} + A_m \frac{m+1}{2\pi} \left(|k| \exp\left(B \frac{e-2}{e}\right) + 2 \sqrt{\frac{\pi}{B}} \exp\left(\frac{1}{4B}\right) \right) \right\} \\
 &\quad \times \exp[-B(\log(|k|+1))^2] \\
 &\leq A_{m+1} |k| \exp[-B(\log(|k|+1))^2]. \tag{A.2.21}
 \end{aligned}$$

ゆえに (A.2.10) は, $m+1$ でも成立. (証終)

付録3. 256分点の数表

$\varphi\left(\frac{i}{256}\right)$ ($i=0, 1, \dots, 128$) を掲載する。

$$\varphi\left(\frac{i}{256}\right) = 1 - \varphi\left(1 - \frac{i}{256}\right) \quad (i=129, \dots, 256),$$

$$\varphi'\left(\frac{i}{256}\right) = \varphi'\left(1 - \frac{i}{256}\right) = 2\varphi\left(\frac{2i}{256}\right) \quad (i=0, \dots, 128)$$

であることに注意. 数表において

PHI(T): Romberg補外法によって求めた φ_0^4 .

DENOM*PHI(T): 「分母」 $\times \varphi_0^4$ を四捨五入によって整数化したもの
(ただし「分母」 = $704200217922109440000 = 2^{36} \cdot 3^9 \cdot 5^4 \cdot 7^2 \cdot 17$).

I	T	PHI(T)	DENOM*PHI(T)
0	0.0	0.0	0
1	0.00390625	0.22953031806343213176E-14	1616353
2	0.00781250	0.32426777809554355864E-11	2283494400
3	0.01171875	0.15572462838846988047E-09	109661317247
4	0.01562500	0.20521756330382804699E-08	1445142528000
5	0.01953125	0.13767291501632767238E-07	9694929675647
6	0.02343750	0.61167910254700322720E-07	43074455731200
7	0.02734375	0.2064031606244547548E-06	145349150691553
8	0.03125000	0.57267554012345679012E-06	403278240153600
9	0.03515625	0.13727372788211353200E-05	966681890895647
10	0.03906250	0.29385498963376993686E-05	2069327477376000
11	0.04296875	0.57509437588380542505E-05	4049815848231553
12	0.04687500	0.10468114442808319744E-04	7371648471859200
13	0.05078125	0.17950393813124492992E-04	12640671234989953
14	0.05468750	0.29278740171553507625E-04	20618095209292800
15	0.05859375	0.45766050430639869948E-04	32228462686690847
16	0.06250000	0.68962191358024691358E-04	48563190182707200
17	0.06640625	0.10065530553046625884E-03	70881488089570847
18	0.07031250	0.14287194763683128540E-03	100610456660812800
19	0.07421875	0.19787694817510365966E-03	139344990026669953
20	0.07812500	0.26817210749836387530E-03	188846856540979200
21	0.08203125	0.35649116457046999869E-03	251041155777831553
22	0.08593750	0.46578848479217103270E-03	328008352496256000
23	0.08984375	0.59922056985260585754E-03	421971255873615647
24	0.09375000	0.76012128665123456790E-03	535277575707033600
25	0.09765625	0.95197337093406195448E-03	670379855267811553
26	0.10156250	0.11783787677366435892E-02	829814585034931200
27	0.10546875	0.14430289718270919105E-02	1016181316428555647
28	0.10937500	0.17496765313422997049E-02	1232122594664448000
29	0.11328125	0.21021102767098714440E-02	1480306514955397247
30	0.11718750	0.25041368304996222254E-02	1763413701744614400
31	0.12109375	0.29595692952496911365E-02	2084129342670416353
32	0.12500000	0.3472222222222222222E-02	2445139645562880000
33	0.12890625	0.40459103054447533079E-02	2849130918787503647
34	0.13281250	0.46844482389448222190E-02	3298789470709785600
35	0.13671875	0.53916505739845730004E-02	3796801509159802753
36	0.14062500	0.61713304131021447395E-02	4345852221775872000
37	0.14453125	0.70272943788673525339E-02	4948622233001204353
38	0.14843750	0.79633313017078008552E-02	5607779638048588800
39	0.15234375	0.89831937297603824900E-02	6325966982133788447
40	0.15625000	0.10090573157793209877E-01	7105783816676966400
41	0.16015625	0.11289071530841838587E-01	7949766632157104353
42	0.16406250	0.12582171584652273412E-01	8860367971845504000
43	0.16796875	0.13973207186123974446E-01	9839935545539288447
44	0.17187500	0.15465334836946080569E-01	10890692162415820800
45	0.17578125	0.17061508902519340785E-01	12014718287234130047
46	0.17968750	0.18764463121807613159E-01	13213939019568307200
47	0.18359375	0.20576699295163978186E-01	14490116127772189153
48	0.18750000	0.22500482253086419753E-01	15844844505976012800
49	0.19140625	0.24537838550263804574E-01	17279551254433309153
50	0.19531250	0.26690556329272890937E-01	18795495583536307200
51	0.19921875	0.28960185456881319951E-01	20393768909800530047
52	0.20312500	0.31348038830001636125E-01	22075295775517900800
53	0.20703125	0.33855197406935606390E-01	23840837391760088447
54	0.21093750	0.36482521519548106745E-01	25690999604413824000
55	0.21484375	0.39230669363415623309E-01	27626245914947504353
56	0.21875000	0.42100121768904320988E-01	29646914924209766400
57	0.22265625	0.45091210697533819990E-01	31753240399575068447
58	0.22656250	0.48204148901534189744E-01	33945372161210188800
59	0.23046875	0.51439059583402942812E-01	36223396968340724353
60	0.23437500	0.54796004892268811406E-01	38587358586396672000
61	0.23828125	0.58275010694969816056E-01	41037275230811002753
62	0.24218750	0.61876085066201766663E-01	43573152587786265600
63	0.24609375	0.65599229600692149141E-01	46194991780329903647

I	T	PHI(T)	DENOM*PHI(T)
64	0.25000000	0.6944444444444444444E-01	48902792911257600000
65	0.25390625	0.73411729600692149141E-01	51696555982846383647
66	0.25781250	0.77501085066201766663E-01	54576280992819225600
67	0.26171875	0.81712510694969816056E-01	57541967838360442753
68	0.26562500	0.86046004892268811406E-01	60593615396462592000
69	0.26953125	0.90501559583402942812E-01	63731217980923124353
70	0.27343750	0.95079148901534189744E-01	66954757376309068800
71	0.27734375	0.99778710697533819990E-01	70264189817190428447
72	0.28125000	0.10460012176890432099E+00	73659428544341606400
73	0.28515625	0.10954316936341562331E+00	77140323737595824353
74	0.28906250	0.11460752151954810675E+00	80706641629578624000
75	0.29296875	0.11979269740693560639E+00	84358043619441368447
76	0.29687500	0.12509803883000163612E+00	88094066205715660800
77	0.30078125	0.13052268545688131995E+00	91914103542514770047
78	0.30468750	0.13606555632927289094E+00	95817394418767027200
79	0.30859375	0.14172533855026380457E+00	99803014292180509153
80	0.31250000	0.14750048225308641975E+00	103869871746239692800
81	0.31640625	0.15338919929516397819E+00	108016707570552349153
82	0.32031250	0.15938946312180761316E+00	112242094664864947200
83	0.32421875	0.16549900890251934078E+00	116544438135047250047
84	0.32812500	0.17171533483694608057E+00	120921976212745420800
85	0.33203125	0.17803570718612397445E+00	125372783798385368447
86	0.33593750	0.18445717158465227341E+00	129894780427208064000
87	0.33984375	0.19097657153084183859E+00	134485743290036144353
88	0.34375000	0.19759057315779320988E+00	139143324677072486400
89	0.34765625	0.20429569372976038249E+00	143865072045045788447
90	0.35156250	0.21108833130170780086E+00	148648448903477068800
91	0.35546875	0.21796479437886735253E+00	153490855700946164353
92	0.35937500	0.22492133041310214474E+00	158389649892237312000
93	0.36328125	0.23195415057398457300E+00	163342163382137722753
94	0.36718750	0.23905944823894482222E+00	168345715546204185600
95	0.37109375	0.24623341030544475331E+00	173397621196798383647
96	0.37500000	0.25347222222222222222E+00	178495194126090240000
97	0.37890625	0.26077206929524969114E+00	183635748025714256353
98	0.38281250	0.26812913683049962223E+00	188816596587304934400
99	0.38671875	0.27553961027670987144E+00	194035053603032197247
100	0.39062500	0.28299967653134229970E+00	199288433885257728000
101	0.39453125	0.29050552897182709191E+00	204574056809538315647
102	0.39843750	0.29805337876773664359E+00	209889254280661171200
103	0.40234375	0.30563947337093406195E+00	215231383753410531553
104	0.40625000	0.31326012128665123457E+00	220597845676366233600
105	0.41015625	0.32091172056985260586E+00	225986103559049295647
106	0.41406250	0.32859078848479217103E+00	231393704858188416000
107	0.41796875	0.33629399116457047000E+00	236818301863986471553
108	0.42187500	0.34401817210749836388E+00	242257671767266099200
109	0.42578125	0.35176037694817510366E+00	247709734103268269953
110	0.42968750	0.35951787194763683129E+00	253172563772418892800
111	0.43359375	0.36728815530553046626E+00	258644399006364130847
112	0.43750000	0.37506896219135802469E+00	264123644910973747200
113	0.44140625	0.38285826605043063987E+00	269608874385994210847
114	0.44531250	0.39065427874017155351E+00	275098828221033292800
115	0.44921875	0.39845545039381312449E+00	280592414999575469953
116	0.45312500	0.40626046811444280832E+00	286088710179328819200
117	0.45703125	0.41406825094375883805E+00	291586952549221671553
118	0.46093750	0.42187793854989633770E+00	297086536263367296000
119	0.46484375	0.4296887273727882114E+00	302586997820297295647
120	0.46875000	0.43750057267554012346E+00	308087998619163033600
121	0.47265625	0.44531270640316062445E+00	313589304892590051553
122	0.47656250	0.45312506116791025470E+00	319090766820411571200
123	0.48046875	0.46093751376729150163E+00	324592297643401995647
124	0.48437500	0.46875000205217563304E+00	330093853596131328000
125	0.48828125	0.47656250015572462839E+00	335595416463166597247
126	0.49218750	0.48437500000324267778E+00	341096980558305254400
127	0.49609375	0.49218750000000229530E+00	346598544758539856353
128	0.50000000	0.50000000000000000000E+00	352100108961054720000

DENOM = 704200217922109440000 = 2^36 3^9 5^4 7^2 17