解析関数に対する求積公式の最悪誤差の下界について

合田 隆 [1], 嘉指 圭人 [2], 田中 健一郎 [3]
[1] 東京大学 大学院工学系研究科, [2] ストラスクライド大学 数学・統計学科, [3] 東京大学 大学院情報理工学系研究科
e-mail : goda@frcer.t.u-tokyo.ac.jp, y.kazashi@strath.ac.uk, kenichiro@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 概要

一般に求積公式（数値積分公式）については，真の積分値との誤差の評価が重要である．ただ，それらは通常，誤差の上界として与えられるため，公式の精度を精確に表しているとは限らず，それらの上界だけで公式同士の優劣比較を行うのは適切ではない．そこで，それらの上界がどのくらい精確であるかを判定するために，最悪誤差の下界が重要になる．本研究では，求積公式の中でも基本的かつ重要な，$(-\infty, \infty)$ 上の一次元の積分 $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\mathrm{d}x$ に対する各種の求積公式について，被積分関数 f が解析関数である場合の最悪誤差の下界を与える．求積公式としては，台形公式，適当なスケーリングを施した Gauss–Legendre 公式と Clenshaw–Curtis 公式，そして Gauss–Hermite 公式を扱う．

前述のような下界については，杉原 [1] が，被積分関数の属す関数空間にのみ依存する一般的な下界を与えている．しかし，これでは，前述のように各求積公式の精度を精確に評価するという目的にはそぐわない．本研究では，各求積公式の標本点の性質を用いて杉原による下界の導出過程を精密化し，それによって各公式の最悪誤差の下界を得た．その結果，いずれの公式の最悪誤差についても，その上界と多項式因子を除いて一致する下界が得られた．本発表は，論文 [2] の内容に基づく．

2 準備

まず，被積分関数の減衰度を指定するための関数の空間を定義する．$d > 0$ に対して $\mathcal{D}_d := \{z \in \mathbb{C} \mid |\mathrm{Im} z| < d\}$ とする．そして，$\mathcal{D}_d$ 上で正則で，条件

$$\lim_{x \to \pm\infty} \int_{-d}^{d} |\omega(x + \mathrm{i}\, y)|\,\mathrm{d}y = 0, \qquad \lim_{y \to d-0} \int_{-\infty}^{\infty} \Big(|\omega(x + \mathrm{i}\, y)| + |\omega(x - \mathrm{i}\, y)| \Big)\,\mathrm{d}x < \infty$$

を満たす関数 ω の全体を $B(\mathcal{D}_d)$ とする．関数 $\omega \in B(\mathcal{D}_d)$ が $\mathcal{D}_d$ 上で 0 にならず，実軸上で $(0, 1]$ 内の値をとるとき，ω を重み関数と呼ぶことにする．本研究では，簡単化のため，重み関数 ω は実軸上で偶関数であって $[0, \infty)$ において単調減少するものとする．以上のもとで，重み関数 ω に対し，被積分関数の属す解析関数の空間 $H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega)$ を次の式で定義する：

$$H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega) := \left\{ f : \mathcal{D}_d \to \mathbb{C} \;\middle|\; f \text{ は } \mathcal{D}_d \text{ 上で正則で } \|f\| := \sup_{z \in \mathcal{D}_d} \left| \frac{f(z)}{\omega(z)} \right| < \infty \right\}.$$

$f \in H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega)$ ならば $x \in \mathbb{R}$ に対し $|f(x)| \le \omega(x)\|f\|$ となるから，ω は f の実軸上の減衰度を指定する．$f \in H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega)$ に対する積分 $I(f) := \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\mathrm{d}x$ を近似する求積公式を

$$A_n(f) := \sum_{i=1}^{n} w_i f(\xi_i) \qquad (w_i, \xi_i \in \mathbb{R})$$

とする時，A_n の最悪誤差 $e^{\mathrm{wor}}(A_n, H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega))$ を

$$e^{\mathrm{wor}}(A_n, H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega)) := \sup_{f \in H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega),\, \|f\| \le 1} |A_n(f) - I(f)|$$

で定義する．これに対し，杉原 [1] は次の評価を与えている．

命題 1（[1, 式 (3.11), (3.13)]） 最悪誤差 $e^{\mathrm{wor}}(A_n, H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega))$ について，次の評価が成り立つ：

$$e^{\mathrm{wor}}(A_n, H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega)) \geq \int_{-\infty}^{\infty} w(x) \prod_{i=1}^{n} \left| \tanh\left(\frac{\pi}{4d}(x-\xi_i)\right)\right|^2 \mathrm{d}x.$$

3 主定理

杉原 [1] は，命題 1 の評価から，公式 A_n に依存しない一般的な下界を導いている．本研究では，命題 1 の評価から，公式 A_n ごとの標本点 $\{\xi_i\}$ の性質を活かした精密な評価式を得た．

定理 2 最悪誤差 $e^{\mathrm{wor}}(A_n, H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega))$ について，次の評価が成り立つ：

$$\begin{aligned}
&e^{\mathrm{wor}}(A_n, H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega)) \\
&\geq \frac{(\tanh(1))^4}{30} \sum_{i=1}^{n-1} \omega(\max(|\xi_i|, |\xi_{i+1}|))(\xi_{i+1}-\xi_i) \min\left\{1, \left(\frac{\pi(\xi_{i+1}-\xi_i)}{4d}\right)^4\right\} \\
&\quad \times \left(\prod_{j=1}^{i-1} \left|\tanh\left(\frac{\pi}{4d}(\xi_i - \xi_j)\right)\right|^2\right) \left(\prod_{j'=i+2}^{n} \left|\tanh\left(\frac{\pi}{4d}(\xi_{i+1} - \xi_{j'})\right)\right|^2\right).
\end{aligned}$$

定理 3 最悪誤差 $e^{\mathrm{wor}}(A_n, H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega))$ について，次の評価が成り立つ：

$$\begin{aligned}
&e^{\mathrm{wor}}(A_n, H^\infty(\mathcal{D}_d, \omega)) \\
&\geq \frac{(\tanh(1))^4}{30} \xi_{\min} \min\left\{1, \left(\frac{\pi \xi_{\min}}{4d}\right)^4\right\} \exp\left(-\frac{2\pi d}{\xi_{\min}}\right) \sum_{i=1}^{n-1} \omega(\max(|\xi_i|, |\xi_{i+1}|)).
\end{aligned}$$

ここで，$\xi_{\min}$ は公式 A_n の隣り合う標本点同士の最小間隔である．

4 まとめ

台形公式，適当なスケーリングを施した Gauss–Legendre 公式と Clenshaw–Curtis 公式，Gauss–Hermite 公式に対して，それぞれの標本点の性質に応じて定理 2 または 3 を用いることで，いずれの公式の最悪誤差についても，その上界と多項式因子を除いて一致する下界が得られた．これらの結果から，杉原 [1] による台形公式の誤差の上界が多項式因子を除いては改善できないことや，Trefethen [3] が指摘した Gauss-Hermite 公式の非最適性が理論的に裏付けられることが分かった．

謝辞

第一著者は JSPS 科研費 23K03210 の支援を受けた．

参考文献

[1] M. Sugihara, Optimality of the double exponential formula — functional analysis approach —, Numer. Math., Vol. 75 (1997), 379–395.

[2] T. Goda, Y. Kazashi and K. Tanaka, How sharp are error bounds? — lower bounds on quadrature worst-case errors for analytic functions —, SIAM J. Num. Anal., to appear. (arXiv preprint arXiv:2401.07196)

[3] L. N. Trefethen, Exactness of quadrature formulas, SIAM Rev., Vol. 64 (2022), 132–150.

各種行列関数の数値計算に対する二重指数関数型数値計算公式の誤差評価

鈴木 雅人 [1], 田中 健一郎 [1]
[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科
e-mail : suzuki-masato602@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 概要

行列関数の数値計算法として数値積分を用いた手法は，並列計算性や入力行列の疎性の利用において優れており，特に二重指数関数型数値積分公式（DE 公式）を用いた計算法は高い収束性を持つ手法として提案されてきた [1, 2, 3, 4]．これらの数値計算公式の誤差解析としては，立岡らが，許容誤差を満たす精度の計算公式をアルゴリズムとして提案し，入力行列がエルミート正定値の場合の離散化誤差のオーダーを与えている（行列対数関数 [1]，行列実数乗 [2]）．一方，離散化誤差と打ち切り誤差を合わせたトータルの誤差を，定数も含めて明示的な式として導出した結果は中屋と田中の行列符号関数の場合 [3] のみにとどまっている．本講演では，[3] の議論を改良，一般化する形で，複素固有値を持つ行列も含めた一般的な形で行列対数関数，行列実数乗，行列符号関数に関して DE 公式のトータルの誤差を明示的に導出する．

2 DE 公式による行列関数計算法

行列関数の積分表示に対して二重指数関数型変数変換を行い，台形則によって離散化，打ち切りを行った以下の公式の誤差を与える．

行列対数関数

$$\mathcal{I}_1^{N,h}(A) := \sum_{k=-N}^{N} hF_1(kh) \quad (\approx \log(A)),$$
$$F_1(x) := \phi_1'(x)(A-I)[(1+\phi_1(x))A + (1-\phi_1(x))I]^{-1}, \quad \phi_1(x) := \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(x)\right).$$

行列実数乗

$$\mathcal{I}_2^{N,h}(A) := \sum_{k=-N}^{N} hF_2(kh) \quad \left(\approx A^{\alpha} \quad (\text{ただし } 0<\alpha<1)\right),$$
$$F_2(x) := \frac{\sin(\alpha\pi)}{\alpha\pi}\phi_2'(x)A(\phi_2(x)^{1/\alpha}I + A)^{-1}, \quad \phi_2(x) := \exp\left(\frac{\alpha\pi}{2}\sinh(x)\right).$$

行列符号関数

$$\mathcal{I}_3^{N,h}(A) := \sum_{k=-N}^{N} hF_3(kh) \quad (\approx \operatorname{sign}(A)),$$
$$F_3(x) := \frac{2}{\pi}\phi_3'(x)A(\phi_3(x)^2 I + A^2)^{-1}, \quad \phi_3(x) := \exp\left(\frac{\pi}{2}\sinh(x)\right).$$

3 各公式の誤差解析

複合台形則の離散化誤差は，被積分関数の特異点と実軸との間の距離が誤差のオーダーを支配するため，$F_1(x), F_2(x), F_3(x)$ の実軸に最も近い特異点を正確に見積もることが重要である．A の固有値を複素平面上の特定の領域にあると分かったとき，この距離を補題 1 のように計算できる．

補題 1　$g_1(A) = g_2(A) = -A,\ g_3(A) = \pm A,\ c_1 = \pi,\ c_2 = c_3 = \pi/2$ と定める．各 $i = 1, 2, 3$ に対し，以下の主張が成り立つ．$m\ (\in \mathbb{N})$ 個の集合 $B_j := \left\{ r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} \;\middle|\; r \in \left[r_1^{(j)}, r_2^{(j)}\right],\ \theta \in \left[\theta_1^{(j)}, \theta_2^{(j)}\right] \right\} (j = 1, \ldots, m)$ が存在して，$g_i(A)$ の任意の固有値が和集合 $B = \bigcup_{j=1,\ldots,m} B_j$ 上に存在するとする．このとき，$F_i(x)$ の最も実軸に近い特異点と実軸の間の距離を $d_i^*(A)$ とすると，$d_i^*(A)$ の最も良い下界として，

$$d_i^*(A) \geq \min_{j=1,\ldots,m} \min_{\substack{r \in \left\{r_1^{(j)}, r_2^{(j)}\right\} \\ \theta \in \left\{\theta_1^{(j)}, \theta_2^{(j)}\right\}}} d_i(r, \theta)$$

が得られる．ただし，$d_i(r, \theta)$ は以下で定義する：

$$d_i(r, \theta) = \arccos\left(\sqrt{\frac{c_i^2 - (\log r)^2 - \theta^2 + \sqrt{[c_i^2 - (\log r)^2 - \theta^2]^2 + 4c_i^2(\log r)^2}}{2c_i^2}} \right).$$

補題 1 の $d_i^*(A)$ を使うと，トータルの誤差として以下の表現が得られる（行列符号関数は [3] 参照．d の制約が $0 < d < d_3^*(A)$ に変わるだけで同様の表示が得られる）．

定理 2（行列対数関数の誤差）　行列 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対し，$0 < \forall d < d_1^*(A),\ \exists R, C, C' > 0,$

$$\left\| \mathcal{I}_1^{N,h} - \log(A) \right\|_{\mathrm{F}} \leq \frac{n\sqrt{n}\|A - I\|_{\mathrm{F}} C \left(\sqrt{n}C' + \|A\|_{\mathrm{F}}\right)^{n-1}}{R^n} \exp\left(-\frac{2\pi d N}{\log(2dN)} \right).$$

ただし，刻み幅 h は $h = \log(2dN)/N$ とする．定数 R は A のみに，C, C' は A, d のみに依存する．

定理 3（行列実数乗の誤差）　行列 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対し，$0 < \forall d < d_2^*(A),\ \exists R, C, C' > 0,$

$$\left\| \mathcal{I}_2^{N,h} - A^\alpha \right\|_{\mathrm{F}} \leq \frac{n\sqrt{n}\|A\|_{\mathrm{F}} C \left(\sqrt{n}C' + \|A\|_{\mathrm{F}}\right)^{n-1}}{R^n} \exp\left(-\frac{2\pi d N}{\log(4\pi dN/\beta)} \right).$$

ただし，$\beta := \min\{\alpha, 1 - \alpha\}$ であり，刻み幅 h は $h = \log(4\pi dN/\beta)/N$ とする．定数 R は A のみに，C は α, A, d のみに，C' は A, d のみに依存する．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 20H00581 の助成を受けた．

参考文献

[1] Fuminori Tatsuoka, Tomohiro Sogabe, Yuto Miyatake and Shao-Liang Zhang, Algorithms for the computation of the matrix logarithm based on the double exponential formula, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 373 (2020), 112396.

[2] Fuminori Tatsuoka, Tomohiro Sogabe, Yuto Miyatake, Tomoya Kemmochi and Shao-Liang Zhang, Computing the matrix fractional power based on the double exponential formula, Electron. Trans. Numer. Anal., Vol. 54 (2021), pp. 558–580.

[3] 中屋貴博, 田中健一郎, 二重指数関数型数値積分公式による行列符号関数の数値計算, 日本応用数理学会 論文誌, 31-3 (2021), pp. 105–132.

[4] Fuminori Tatsuoka, Tomohiro Sogabe, Tomoya Kemmochi and Shao-Liang Zhang, Computing the matrix exponential with the double exponential formula, arXiv preprint, 2023.

最適化手法の連続時間モデルに関する本質的な収束率の精緻化

牛山 寛生 [1], 佐藤 峻 [1], 松尾 宇泰 [1]
[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科
e-mail : ushiyama-kansei074@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 概要

最適化手法を連続時間モデルを介して導出，解析する研究が行われている．連続時間モデルを考える上で考慮すべき問題として，その収束率は時間スケール変換により自由に変更できるということがある．発表者らは以前，ある意味で本質的な収束率が時刻の定数倍を除いて一つに定まることを示したが，これは収束率が指数的であるときに手法の速さを比較できるほど充分な精度を有していない．本発表では，時刻の定数倍も含めて本質的収束レートがほぼ一つに固定できることを示す．

2 導入：本質的収束レートの意義とその問題点

最適化手法は常微分方程式 (ODE) によりモデリングでき，収束レートに関して対応関係がある．例えば，最小化問題 $\min_{x\in\mathbb{R}^d} f(x)$ に対する最急降下法 $x^{(k+1)} = x^{(k)} - h\nabla f(x^{(k)})$ は勾配流 $\dot{x} = -\nabla f(x)$ の離散化と見なすことができる．f が凸関数などの諸条件下でそれぞれの収束レートは $f(x^{(k)}) - f^\star = \mathrm{O}(1/k)$，$f(x(t)) - f^\star = \mathrm{O}(1/t)$（$f^\star$ は最適値）であり，これにも一見対応関係がある．一般に離散系たる最適化手法より，ODE の方が直感的であり，収束解析が簡単であることが多いため，「速い」ODE を見つけ出し，それを離散化することで良い最適化手法を導出しようとする試みが行われている．

しかし，ODE 同士で単純に収束レートを比較することは意味を持たない．なぜなら，ODE の時間スケールを変換（線形とは限らない）することによって，ODE の解軌道（= 最適解への収束の仕方）は変化させずに収束率を自由に変更できてしまうからである．

この問題に対し，発表者らは以前，「本質的収束レート」を定義し，収束レートの上記の不定性の排除を試みた [1]．これは，時間スケール変換で移り合える ODE たちを同値類としてまとめ，この同値類に対し，ODE の離散化時の安定性の意味で適切な時間スケールを一つ定めることで得られるものである．この時間スケールの ODE の収束レートは以下の意味で「本質的」である．適切な時間スケールの ODE を固定刻み幅で離散化することと，その ODE を時間スケール変換により加速または減速し，それを可変刻み幅で離散化することを考える．このとき，刻み幅が線形安定性解析に由来する制約を守っている限り，同じステップ数で辿り着ける時刻は，後者が前者を抜かすことはないことを示せる．本質的収束レートにより ODE の収束レート同士で意味のある比較をすることが可能になる．例えば L-平滑凸関数に対する勾配流と加速勾配流 $\ddot{x} + \frac{3}{t}\dot{x} + \nabla f(x) = 0$ の本質的収束レートはそれぞれ $\mathrm{O}(1/t), \mathrm{O}\bigl(1/t^2\bigr)$ となり，本質的収束レートの意味で後者の方が速いことがわかる．これらのレートは離散系の最急降下法，加速勾配法（レート $\mathrm{O}\bigl(1/k^2\bigr)$）と対応している．

しかし，上記の適切な時間スケールには定数倍スケーリングの自由度がある．これは，収束レートが指数関数であるときなどに問題となる．例えば，強凸関数に対する最急降下法と加速勾配法は共 $\mathrm{O}\bigl(\mathrm{e}^{-ak}\bigr)$ の形の収束レートをもち，両者の違いは定数 a に現れる．また，それらの連続時間モデルの収束レートも $\mathrm{O}(\mathrm{e}^{-at})$ の形であるため，定数倍時間スケーリングの自由度のある本質的収束レートでは両者の速さを比較できない．そこで本発表では，本質的収束レートを再定義し，この自由度を

取り除くことを考える．

3　本質的収束レートの再定義

以下では連続時間モデルとして 1 階の ODE $\dot{y}(t)=g(y,t)$ を考える．最小化する関数を f とし，それに対する最適化手法のモデルとしてふさわしい，つまり $f(y(t))$ が最適値に収束するような右辺ベクトル場 g を集めたものを $\mathcal{G}$ と書く．連続時間モデルは 2 階以上の ODE であることもあるが，それらに対しては補助変数を導入し，上の 1 階の形に書き直すことにする．以降では目的関数 f や ODE の初期値 y_0 は固定して考える（本予稿では定義しないが，最悪ケースの本質的収束レートを考えるときにこれらを動かす）．また，時間スケーリング関数とは微分可能な単調増加関数 $\alpha\colon \mathbb{R}_{\geq 0}\to\mathbb{R}_{\geq 0}$ を指すものとする．行列のスペクトル半径は ρ で表す．

定義 3.1. $g_1,g_2\in\mathcal{G}$ に対し，同一の初期点 y_0 による 2 つの ODE $\dot{y}_1(t)=g_1(y_2,t),\dot{y}_2(t)=g_2(y_2,t)$ を考える．時間スケーリング関数 $\alpha(t)$ が存在し，これらの ODE の解 y_1,y_2 が $y_2(t)=y_1(\alpha(t))$ を満たすとき，$g_1\sim g_2$ と表す．この $\sim$ は $\mathcal{G}$ の中の同値関係になっており，$g\in\mathcal{G}$ の同値類を $[g]$ と表す．

定義 3.2. $g\in[g]$ に対応する ODE $\dot{y}=g(y,t),y(0)=y_0$ の解 y に対し，$\lim_{t\to\infty}\rho(\partial g(y,t)/\partial y)=c$ $(c>0)$ が成立するとき，この $g\in[g]$ を $[g]$ の c-代表元と呼ぶ．さらに，この y により $f(y(t))-f^\star=\Theta(\beta_0(t))$ が成立しているとき，$\beta(t)=\beta_0(t/c)$ を $[g]$ の本質的収束レートという．

本質的収束レートは c-代表元の取り方や，c の値によらず，以下の命題の意味で一意に定まる．

命題 3.3. g_1[resp. g_2] を $[g]$ の c_1[resp. c_2]-代表元，y_1[resp. y_2] を対応する ODE の解とし，$f(y_1(t))-f^\star=\Theta(\beta_1(t))$[resp. $f(y_2(t))-f^\star=\Theta(\beta_2(t))$] が成立しているとする．このとき，任意の $a<1$ に対し，$\beta_1(t/c_1)=\mathrm{O}(\beta_2(at/c_2)),\beta_2(t/c_2)=\mathrm{O}(\beta_1(at/c_1))$ が成立する．

離散化時の安定性を考慮することで，本質的収束レートは「本質的」であると言える．このことを述べるための定理の設定を説明する．$[g]$ の 1-代表元 g_0 が存在すると仮定する．以下では $\dot{\alpha}$ が単調な時間リスケーリング α のみを考え，このような α で g_0 を時間リスケーリングして得られるベクトル場を $\tilde{g}$ と書く．この $\tilde{g}$ を刻み幅 h_k で離散化することを考える（$t_k\coloneqq\sum_{i=1}^k h_i$ とする）．また簡単のため，任意の $t\geq 0$ で $\rho(\partial g_0(y,t)/\partial y)>0$ を仮定する．

定理 3.4. 安定領域が有界で時間変化しない数値解法を考え，その安定領域内の点の原点との距離の最大値を r とする．$\tilde{g}$ を，$h_k\frac{\partial\tilde{g}}{\partial y}(y^{(k-1)},t_{k-1})$ の全ての固有値が安定領域に収まるような刻み幅で離散化する．このとき，$\alpha(t_k)-\alpha(t_0)\leq rk+\mathrm{o}(k)$ が成立する．

左辺の $\alpha(t_k)-\alpha(t_0)$ は，k ステップの内に $\tilde{g}$ の世界で進んだ時間を g_0 の世界で進んだ時間に換算した量である．右辺の rk は g_0 を線形安定性を満たす最大の固定刻み幅 r で k ステップ離散化したときに進んだ時間である．この定理は g_0 を加速または減速した $\tilde{g}$ を可変刻み幅で離散化しても，g_0 を固定刻み幅で離散化したときより速い収束レートは得られないことを示唆している．

本質的収束レートにより L-平滑 μ-強凸関数に対する勾配流と加速勾配流 $\ddot{x}+2\sqrt{\mu}\dot{x}+\nabla f(x)=0$ の（最悪ケース）本質的収束レートはそれぞれ $\mathrm{O}\left(e^{-\frac{\mu}{L}t}\right)$，$\mathrm{O}\left(e^{-\sqrt{\frac{\mu}{L}}t}\right)$ となり，両者を区別できる．

参考文献

[1] Ushiyama, K., Sato, S., and Matsuo, T. Essential convergence rate of ordinary differential equations appearing in optimization. *JSIAM Lett.*, 14:119–122, 2022.

数値積分に対する DE 公式と IMT 型公式との関係について

緒方　秀教 [1]
電気通信大学大学院情報理工学研究科　情報・ネットワーク工学専攻
e-mail：hidenori.ogata@uec.ac.jp

1　概要

数値積分に対する代表的な変数変換型公式として知られる DE 公式と IMT 型公式（正確には IMT 型 DE 公式）の間の関係について述べる。実は両者は互いに無関係の公式ではなく、IMT 型公式においてある種の極限を取ると DE 公式が得られることを示す。

2　DE 公式と IMT 型 DE 公式

ここでは有限区間上の積分を考える．一般性を失うことなく積分区間を $(-1, 1)$ としてよい．したがって，次の積分を考えることにする．

$$\mathscr{I}[f] := \int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x. \tag{1}$$

積分 (1) に対する DE 公式 [1] は次で与えられる（h, A は正のパラメータである）．

$$\mathscr{I}[f] \simeq \mathscr{I}_N^{\mathrm{DE}}[f] := h \sum_{k=-N}^{N} f(\varphi_{\mathrm{DE}}(kh))\varphi'_{\mathrm{DE}}(kh), \quad \varphi_{\mathrm{DE}}(u) = \tanh(A \sinh u). \tag{2}$$

この公式はもとの積分 (1) に DE 変換 $x = \varphi_{\mathrm{DE}}(u)$ を施して全無限区間積分にしてメッシュ幅 h の台形則（を有限項で打ち切ったもの）を適用して得られる．台形則は解析関数の全無限区間に対して有効なので，積分区間 $(-1, 1)$ 上の解析関数に対して精度がよい．実際，DE 公式は誤差 $= \mathrm{O}[\exp(-cN/\log N)]$（$c$ は正の定数）と高精度である．

一方，積分 (1) に対する変数変換が多項式として，DE 公式より前に IMT 公式 [2] が考案されていた．その改良版である IMT 型 DE 公式 [3] は次で与えられる（A, B は正の定数）．

$$\mathscr{I}[f] \simeq \mathscr{I}_N^{(\mathrm{IMT-DE})}[f] := h \sum_{k=-N+1}^{N-1} f(\varphi_{\mathrm{IMT-DE}}(kh))\varphi'_{\mathrm{IMT-DE}}(kh), \tag{3}$$
$$h = \frac{1}{N}, \quad \varphi_{\mathrm{IMT-DE}}(u) := \tanh\left[A \sinh B \left(\frac{1}{1-u} - \frac{1}{1+u}\right)\right].$$

この公式はもとの積分 (1) に対し IMT 型 DE 変換 $x = \varphi_{\mathrm{IMT-DE}}(u)$ を施して区間 $(-1, 1)$ 上の積分にして台形則を適用して得られる．$f(x)$ が積分区間 $(-1, 1)$ 上の解析関数ならば，変数変換後の被積分関数 $g(u) := f(\varphi_{\mathrm{IMT-DE}}(u))\varphi'(u)$ は $g^{(n)}(\pm 1) = 0$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ を満たすので，Euler-Maclaurin 公式より IMT 型 DE 公式の精度がよい．実際，IMT 型 DE 公式は 誤差 $= \mathrm{O}[\exp(-c'N/\log^2 N)]$（$c'$ は正の定数）と高精度である．

3　IMT 型 DE 公式の極限としての DE 公式

DE 公式はもとの積分を全無限区間積分に変換する一方，IMT 型 DE 公式は有限区間積分に変換する．そして，各公式が高精度である理由も異なる．そのことから両公式は互いに無関係であるよう

に一見思える．ところが，実は両者は関係があり，IMT 型 DE 公式に対しある種の極限操作を行うことにより DE 公式が得られるのである．それをこれから示す．

IMT 型 DE 公式は変数変換で積分区間を $(-1,1)$ とするが，その代わりに，積分区間が $(-a,a)$ ($a>0$) となるように公式を書き換える．すると次のようになる．

$$\mathscr{I}[f] \simeq \mathscr{I}_{N,a}^{(\mathrm{IMT-DE})}[f] := h \sum_{k=-N+1}^{N-1} f(\varphi_{\mathrm{IMT-DE},a}(kh))\varphi'_{\mathrm{IMT-DE},a}(kh), \tag{4}$$

$$h = \frac{a}{N}, \quad \varphi_{\mathrm{IMT-DE},a}(u) := \tanh\left[A \sinh \frac{2Bu}{a^2-u^2}\right]. \tag{5}$$

ここで $B = a^2/2$ とし，$h = a/N =$ 一定 としたまま極限 $a \to \infty$, $N \to \infty$ を取ると，IMT 型 DE 公式 (4,5) は DE 公式 (2) となる．つまり，IMT 型 DE 公式で変数変換後の積分区間を無限大とした極限が DE 公式なのである．

4　Sinc 近似を用いた数値計算について

変数変換に基づく計算技法は現在，数値積分以外の様々な数値計算で用いられている．DE 変換は，Sinc 近似 [4] という関数近似と組み合わせて，数値不定積分 [5] などの数値計算に応用されている．一方，IMT 型 DE 変換については，最近，周期関数に対する Sinc 近似 [6] と組み合わせればいろいろな数値計算に応用できることがわかった．そして，常微分方程式の数値解法 [7] などに応用されている．これらの数値計算法に関しては，周期関数に対する Sinc 近似で周期を無限大とした極限を取れば Sinc 近似が得られる．つまり，DE 変換を用いた数値計算法全般が IMT 型 DE 変換を用いた数値計算法の極限とみなせるのである．

謝辞　本研究は科研費 24K06840 の助成を受けている．

参考文献

[1] H. Takahasi and M. Mori, Double exponential formula for numerical integration, Publ. RIMS, Kyoto Univ., 9(1974), 721–741.

[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，91(1970)，82–118.

[3] M. Mori, An IMT-type double exponential formula for numerical integratoin, Publ. RIMS, Kyoto Univ., 14(1978), 713–729.

[4] F. Stenger, Numerical Methods Based on Sinc and Analytic Functions, Springer-Verlag, New York, 1993.

[5] M. Muhammad and M. Mori, Double exponential formulas for numerical indefinite integration, J. Comput. Appl. Math., 161(2003), 431–448.

[6] F. Stenger, B. Baker, C. Brewer, G. Hunter, S. Kaputerko and J. Shepherd, Periodic approximation based on Sinc, Int. J. Pure Appl. Math., 49(2008), 63-72.

[7] 緒方秀教，IMT-DE 型数値不定積分を用いた常微分方程式初期値問題の数値解法，日本応用数理学会論文誌，33(2023), 36–65.