

フーリエ型積分に対する数値積分法の研究

大 浦 拓 哉

①

博士論文

フーリエ型積分に対する数値積分法の研究

1997 年

東京大学大学院  
工学系研究科物理工学専攻

大浦 拓哉

# 目次

1 はじめに	3
2 DE 変換による手法	4
2.1 変数変換型積分公式	4
2.2 Fourier 型積分に対する DE 公式	6
2.3 計算例	9
2.4 誤差解析	10
2.5 具体的な誤差評価	13
2.5.1 被積分関数に特異点がない例	13
2.5.2 被積分関数に特異点がある例	17
2.6 Fourier 型積分に対する DE 変換の改善	19
2.7 Fourier 型積分に対する DE 公式の特徴	21
3 連続版 Euler 変換による手法	22
3.1 Fourier 型積分と交代級数	22
3.2 Euler 変換の重みの連続化	22
3.3 Fourier 積分に対する連続版 Euler 変換	27
3.4 減衰の遅い関数の Fourier 変換の計算	29
3.5 誤差解析	30
3.6 重み関数の拡張と近似度の改善	33
3.7 計算例	36
3.7.1 交代級数の加算例	36
3.7.2 減衰の遅い関数の Fourier 変換への適用例	36
3.8 連続版 Euler 変換による計算法の特徴	39
4 DE 公式と連続版 Euler 変換の組み合わせ	40
4.1 DE 公式と連続版 Euler 変換の長所と短所	40
4.2 DE 公式と連続版 Euler 変換の組み合わせ	41
4.3 変数変換 (DE 変換) の選択	41
4.4 数値例および性能比較	42
4.5 自動積分ルーチンの設計と性能評価	43

目次	2
4.5.1 自動積分ルーチンの設計	43
4.5.2 自動積分ルーチンの性能評価	45
5 まとめ	48
A Fourier 型積分に対する改良版 DE 公式の誤差解析	52
A.1 被積分関数に特異点がない場合の誤差	54
A.2 被積分関数に特異点がある場合の誤差	58
B Euler 変換の重みについて	61
C 連続版 Euler 変換の誤差評価その 2	63

# Chapter 1

## はじめに

この論文で扱う問題は、収束の遅い Fourier 型積分 (振動積分), 例えば

$$I = \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{x}} \sin x \, dx \quad (1.1)$$

のような積分の計算法である。このような積分は、実用上重要な型の積分である。しかし、この型の積分は、計算が困難な積分として知られている。なぜならば、この振動積分を有限区間で打ち切って計算する場合、一般の補間型積分公式では少なくとも振動している回数分だけの関数計算が必要となるからである。例えば、積分 (1.1) を有限区間で打ち切って計算する場合、10桁の精度を得るには、計算する区間は  $(0, 10^{20}]$  としなければならない。この区間で、被積分関数は  $10^{10}$  回以上振動しているの、通常の補間型公式では計算が困難となる。

このような Fourier 型積分に対する計算法として、ある種の数値積分公式と加速法 (補外法) とを組み合わせる方法が、従来から用いられてきた。よく用いられる方法は、振動の半周期ごとに積分を分割し、その和の極限を級数の加速法を用いて計算する方法である [2], [11]。例えば、積分 (1.1) の場合、

$$I = I_0 + I_1 + I_2 + \cdots, \quad I_n = \int_{n\pi}^{(n+1)\pi} \frac{1}{\sqrt{x}} \sin x \, dx \quad (1.2)$$

を交代級数の加速法を用いて計算する。しかし、この方法は通常、加速に必要な数列の個数だけ数値積分を行わなければならない、計算回数がかなり多くなるという欠点がある。

本論文では、これらの Fourier 型積分に対する計算法として、まず独立した二つの方法を提案する。第一の方法は、変数変換のみを用いる方法で、第二の方法は、交代級数の加速法を連続化する方法である。この二つの方法は、それぞれ Fourier 型積分、減衰の遅い関数の Fourier 変換を効率よく計算できるが、実際に応用する場合、いくつかの問題点がある。そこで、まずこの二つの方法について、それぞれ改良を行い、計算効率をよくする。次に、これらの計算法を組み合わせ、より一般的な問題が扱える実用性の高い計算法を提案する。

## Chapter 2

# DE 変換による手法

### 2.1 変数変換型積分公式

変数変換型公式とは、変数変換により被積分関数を既存の積分公式の都合のよい形に変えることにより得られる公式である。一次元積分の場合、既存の積分公式として台形則が主に用いられる。理由は主に

1. 台形則は、解析的な一周期の積分あるいは全無限区間の積分に対して最適であることがわかっている [16], [5].

2. 変数変換により、一周期の積分あるいは全無限区間の積分に変換するのが容易である。である。代表的な変数変換型公式に、DE(二重指数関数型, Double Exponential の略) 公式がある。DE 公式はまた、最適な変数変換型公式として知られている [15], [6].

次に、DE 公式について説明する。DE 公式は、与えられた積分を変数変換により二重指数関数的な振舞いをする全無限区間の積分に変換 (DE 変換) し、これに台形則を適用して得られる公式である [15]。すなわち、与えられた積分

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (2.1)$$

に対して、まず変数変換

$$x = \varphi(t), \quad \varphi(-\infty) = a, \quad \varphi(\infty) = b \quad (2.2)$$

を施し、全無限区間の積分

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varphi(t)) \varphi'(t) dt \quad (2.3)$$

に変換する。ただし、 $f(x)$  は区間  $(a, b)$  で解析的であると仮定する。ここで、変数変換  $\varphi(t)$  の選び方は、被積分関数  $f(\varphi(t)) \varphi'(t)$  の減衰が二重指数関数的になるように、すなわち、例えば

$$|f(\varphi(t)) \varphi'(t)| \sim \exp(-c \exp(|t|)), \quad |t| \rightarrow \infty \quad (2.4)$$

となるように選ぶ。次に、この変換された積分に対して刻み幅  $h$  の台形則を適用し、DE 公式

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\varphi(nh))\varphi'(nh) \quad (2.5)$$

を得る。実際の計算では、無限和は有限和

$$I_h^{(N)} = h \sum_{n=-N_-}^{N_+} f(\varphi(nh))\varphi'(nh) \quad (2.6)$$

で打ち切る。ここで、 $N = N_- + N_+ + 1$  は標本数である。

この  $I_h^{(N)}$  には、離散化誤差

$$\Delta I_h = I - I_h = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varphi(t))\varphi'(t) dt - h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\varphi(nh))\varphi'(nh) \quad (2.7)$$

と打ち切り誤差

$$\epsilon_t = I_h - I_h^{(N)} = h \sum_{n=-\infty}^{-N_- - 1} f(\varphi(nh))\varphi'(nh) + h \sum_{n=N_+ + 1}^{\infty} f(\varphi(nh))\varphi'(nh) \quad (2.8)$$

とが含まれる。打ち切り誤差は、関数  $f(\varphi(t))\varphi'(t)$  の  $|t| \rightarrow \infty$  での減衰が速ければ小さくなる。一方、離散化誤差は、関数  $f(\varphi(t))\varphi'(t)$  の変化が滑らかであれば小さくなる。これらの条件は相反するものであり、最適な減衰が存在するはずである。実は、二重指数関数の減衰は、これらの誤差をともに小さくする最適な減衰なのである。

DE 公式の典型的な誤差の振舞いは、離散化誤差については

$$|\Delta I_h| = O(\exp(-c/h)), \quad h \rightarrow 0 \quad (2.9)$$

となり、全誤差については  $h$  を  $N$  に依存して適当に選べば

$$|\Delta I_h^{(N)}| = O(\exp(-cN/\log N)), \quad N \rightarrow \infty \quad (2.10)$$

となることがわかっている [15].

次に、DE 公式の具体例を以下に示す。

### 1. 有限区間

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \quad (2.11)$$

の場合、変数変換

$$x = \varphi(t) = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right) \quad (2.12)$$

により、DE 公式

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)\right) \frac{\frac{\pi}{2} \cosh nh}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)} \quad (2.13)$$

が得られる。



## 2. 半無限区間

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx \quad (2.14)$$

の場合 (ただし,  $f(x)$  は代数関数的な振舞いをする振動しない関数である), 変数変換

$$x = \varphi(t) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right) \quad (2.15)$$

により, DE 公式

$$I_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right)\right) \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh nh\right) \frac{\pi}{2} \cosh nh \quad (2.16)$$

が得られる.

これらの DE 公式の特徴として, 積分区間の端点で無限大に発散する特異点があっても, 大抵の場合問題なく計算できるということがあげられる.

しかし, この DE 公式は, 収束の遅い Fourier 型積分には適用できないことが知られている. 例えば, 収束の遅い Fourier 型積分

$$I = \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{x}} \sin x dx \quad (2.17)$$

に変換 (2.15) を施すと

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \sin\left(\exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh t\right)\right) \exp\left(\frac{\pi}{4} \sinh t\right) \frac{\pi}{2} \cosh t dt \quad (2.18)$$

となり, 変換後の被積分関数は,  $t \rightarrow \infty$  で振動しながら発散する. 積分 (2.17) と, 変数変換後の積分 (2.18) の被積分関数の図を Fig.2.1, Fig.2.2 に示す. この例以外でも, 一般に被積分関数の減衰がベキのオーダーである Fourier 型積分にこの公式を適用した場合, 誤差は小さくならないことがわかっている.

このような収束の遅い Fourier 型積分に対する従来の計算法として, この DE 公式に Richardson 加速を施す方法が知られている [17], [14], [7]. しかし, この方法は加速に必要な数列の個数だけ積分を実行しなければならず, 効率がありよくない. そこで, 単独の DE 変換を用いる効率のよい方法 [9], [8] を次の節で述べる.

## 2.2 Fourier 型積分に対する DE 公式

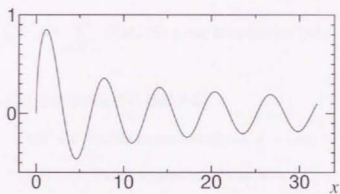
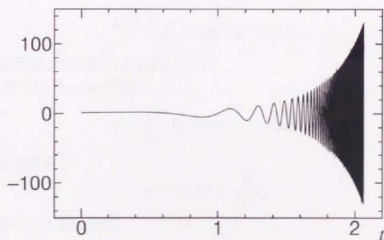
話を簡単にするため, 与えられた積分を

$$I = \int_0^{\infty} f(x) \sin \omega x dx \quad (2.19)$$

とする. これに,  $M$  をある程度大きい正の数として変数変換

$$x = M\varphi(t), \quad \varphi(-\infty) = 0, \quad \varphi(\infty) = \infty \quad (2.20)$$



Fig. 2.1: (2.17) 式の被積分関数:  $f(x) = \sin x / x^{1/2}$ Fig. 2.2: (2.18) 式の被積分関数:  $f(\varphi(t))\varphi'(t)$

を施し

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(M\varphi(t)) \sin(M\omega\varphi(t)) M\varphi'(t) dt \quad (2.21)$$

と変換する。これに、刻み幅  $h$  の台形則を適用し、公式

$$I_h = Mh \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(M\varphi(nh)) \sin(M\omega\varphi(nh)) \varphi'(nh) \quad (2.22)$$

を得る。

ここで、変数変換  $\varphi(t)$  を以下のように選択する。

$$\varphi'(t) \rightarrow 0 \text{ double exponentially as } t \rightarrow -\infty \quad (2.23)$$

$$\varphi(t) \rightarrow t \text{ double exponentially as } t \rightarrow \infty \quad (2.24)$$

すなわち、 $n \rightarrow \infty$  で  $M\omega\varphi(nh) \rightarrow M\omega nh$  となるように選択する。さらに、刻み幅  $h$  を

$$M\omega h = \pi \quad (2.25)$$

と選ぶ。これは、 $n \rightarrow \infty$  のとき標本点が被積分関数のゼロ点に二重指数関数的に近づくようにするためのものである。すなわち、このとき、 $n \rightarrow \infty$  で  $M\omega\varphi(nh)$  は  $\sin x$  のゼロ点  $n\pi$  に二重指数関数的に近づく。したがって、 $I_h$  の和の項は  $|n| \rightarrow \infty$  で二重指数関数的に減衰し、少ない計算回数で打ち切り誤差を十分小さくすることができる。また、離散化誤差についても後の誤差解析で十分小さくすることが示される。

このような変換  $\varphi(t)$  の例として

$$\varphi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2\pi \sinh t)} \quad (2.26)$$

などがある。変換 (2.26) の図を Fig.2.3 に示す。

また、 $\theta$  だけずれた Fourier 型積分

$$I = \int_0^{\infty} f(x) \sin(\omega x + \theta) dx \quad (2.27)$$

についても変数変換を

$$x = M\varphi\left(t - \frac{\theta}{M\omega}\right) \quad (2.28)$$

とすれば、同様にして DE 公式

$$I_h = Mh \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(M\varphi\left(nh - \frac{\theta}{M\omega}\right)\right) \sin\left(M\omega\varphi\left(nh - \frac{\theta}{M\omega}\right) + \theta\right) \varphi'\left(nh - \frac{\theta}{M\omega}\right) \quad (2.29)$$

が導かれる。

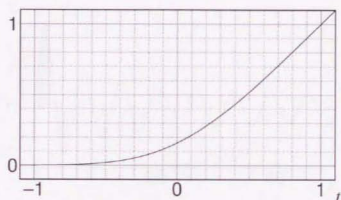


Fig. 2.3: 変数変換 (2.26) 式の図

## 2.3 計算例

積分

$$I_1 = \int_0^{\infty} \frac{\cos x}{1+x^2} dx = \frac{\pi}{2} e^{-1}$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}$$

$$I_3 = \int_0^{\infty} \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

$$I_4 = \int_0^{\infty} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

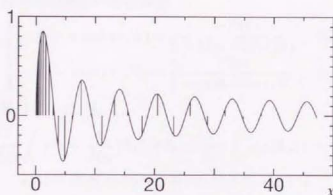
$$I_5 = \int_0^{\infty} \log x \sin x dx = -\gamma$$

に対して Fourier 型積分に対する DE 公式を適用した結果を Table 2.1 に示す。

Table 2.1: 計算結果

積分	$M = 12$		$M = 24$		$M = 48$	
	標本数	誤差	標本数	誤差	標本数	誤差
$I_1$	9	$1.3 \times 10^{-3}$	26	$1.4 \times 10^{-6}$	68	$8.4 \times 10^{-12}$
$I_2$	12	$5.4 \times 10^{-5}$	32	$3.6 \times 10^{-9}$	82	$8.6 \times 10^{-18}$
$I_3$	12	$1.6 \times 10^{-5}$	29	$9.0 \times 10^{-9}$	74	$5.8 \times 10^{-16}$
$I_4$	13	$3.6 \times 10^{-4}$	36	$4.2 \times 10^{-8}$	89	$6.7 \times 10^{-16}$
$I_5$	9	$2.4 \times 10^{-3}$	27	$6.7 \times 10^{-7}$	70	$2.3 \times 10^{-14}$

標本数は、台形則の離散化誤差と打ち切り誤差とがほぼ等しくなるところで打ち切った回数であり、誤差は絶対誤差である。

Fig. 2.4:  $I_3$ の被積分関数と標本点の位置 ( $M = 48$ )

積分  $I_3$  の被積分関数と標本点の図を Fig.2.4 に示す.

積分  $I_4$  は原点で発散する特異点をもつ例である. この計算結果より, このような特異性をもつ積分に対しても従来の DE 公式と同様に問題なく計算できるのがわかる. また, 積分  $I_5$  の被積分関数は, 発散する因子  $\log x$  をもち, 本来

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_0^{\infty} e^{-\epsilon x} \log x \sin x \, dx$$

として定義されるものである. しかし,  $I_5$  に対して直接この積分法を適用しただけで正しい結果が得られることがわかる.

## 2.4 誤差解析

Fourier 型積分に対する DE 公式

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^{\infty} f(x) \sin(\omega x + \theta) \, dx \\
 &\quad \Downarrow \text{変数変換 } x = M\varphi(t - \frac{\theta}{M\omega}) \\
 I &= \int_{-\infty}^{\infty} f(M\varphi(t - \frac{\theta}{M\omega})) \sin(M\omega\varphi(t - \frac{\theta}{M\omega}) + \theta) M\varphi'(t - \frac{\theta}{M\omega}) \, dt \\
 &\quad \Downarrow \text{刻み幅 } h \text{ の台形則, } Mh = \pi/\omega \\
 I_h &= Mh \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(M\varphi(nh - \frac{\theta}{M\omega})) \sin(M\omega\varphi(nh - \frac{\theta}{M\omega}) + \theta) \varphi'(nh - \frac{\theta}{M\omega})
 \end{aligned}$$

についての離散化誤差を評価する.

この公式の誤差は台形則の誤差の特性関数

$$\Phi_h(z) = \begin{cases} -\pi i - \pi \cot(\pi z/h) = \frac{-2\pi i}{1 - \exp(-2\pi i z/h)}, & \text{Im } z > 0 \\ +\pi i - \pi \cot(\pi z/h) = \frac{+2\pi i}{1 - \exp(+2\pi i z/h)}, & \text{Im } z < 0 \end{cases} \quad (2.30)$$

を用いて次のように書ける [16], [5].

$$\Delta I_h = \frac{1}{2\pi i} \int_C g(z - \frac{\theta}{M\omega}) \Phi_h(z) dz = \frac{1}{2\pi i} \int_C g(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M\omega}) dz \quad (2.31)$$

$$g(z) = f(M\varphi(z)) \sin(M\omega\varphi(z) + \theta) M\varphi'(z) \quad (2.32)$$

ここで、積分路  $C$  は Fig. 2.5 に示すような実軸から  $d$  だけ離れた直線である。ただし、関数  $g(z)$  は二つの積分路を挟む領域で正則で、条件

$$\int_{-d}^d |g(x + iy)| dy \rightarrow 0, \quad |x| \rightarrow \infty \quad (2.33)$$

を満たすと仮定している。

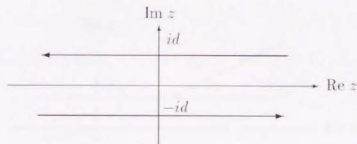


Fig. 2.5: 積分路  $C$

次に、 $z = x \pm id$ ,  $x \rightarrow \infty$  とすると

$$|\sin(M\omega\varphi(z) + \theta) M\varphi'(z)| \simeq \frac{M}{2} \exp(+\pi d/h) \quad (2.34)$$

$$|\Phi_h(z + \frac{\theta}{M\omega})| \simeq 2\pi \exp(-2\pi d/h) \quad (2.35)$$

となることに注意して、 $\Delta I_h$  を評価する。

$$\begin{aligned} \Delta I_h &= \frac{1}{2\pi i} \int_C g(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M\omega}) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M\omega}) dz + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} g(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M\omega}) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M\omega}) dz + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} g_1(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M\omega}) dz \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_3} g_2(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M\omega}) dz \end{aligned} \quad (2.36)$$

ここで

$$\begin{aligned} g(z) &= f(M\varphi(z)) \sin(M\omega\varphi(z) + \theta) M\varphi'(z) \\ &\rightarrow 0 \text{ double exponentially as } \operatorname{Re} z \rightarrow -\infty \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$g_2(z) = f(Mz) \sin(M\omega z + \theta) M \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} g_1(z) &= g(z) - g_2(z) \\ &\rightarrow 0 \text{ double exponentially as } \operatorname{Re} z \rightarrow +\infty \end{aligned} \quad (2.39)$$

であり, 積分路  $C_1, C_2, C_3$  は被積分関数が正則な領域で Fig. 2.6 のように変形する. 要するに  $\operatorname{Re} z$  が正のところの積分を二つに分けて評価する. 関数  $g(z)$  は, 実軸に平行に  $\operatorname{Re} z \rightarrow -\infty$  とすると, 二重指数関数的に減衰する関数である. 関数  $g_1(z)$  も  $\operatorname{Re} z \rightarrow \infty$  で二重指数関数的に減衰する関数である. 関数  $g_2(z)$  は逆に, 実軸に平行に  $\operatorname{Re} z \rightarrow \infty$  とすると減衰は非常に遅い関数であるが, 虚軸方向には指数関数的に減衰する関数である. 積分路  $C_3$  を実軸から遠ざけるように変形する理由は, 積分路  $C_3$  からの誤差の寄与を小さく抑えるためである.

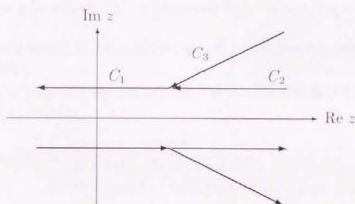


Fig. 2.6: 積分路  $C$

ただし, この積分の変形は以下の条件を仮定して行った.

- 関数  $g_2(z)$  は, 積分路  $C_3$  と実軸を挟む領域で正則である.
- $x \rightarrow +\infty$  で

$$\int_d^\infty |g_2(x \pm iy) \Phi_h(x \pm iy)| dy \rightarrow 0$$

を満たす.

## 2.5 具体的な誤差評価

ここでは、変数変換を

$$x = M\varphi(t - \frac{\theta}{M}), \quad \varphi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2\pi \sinh t)} \quad (2.40)$$

と選んだときの Fourier 型積分

$$I = \int_0^\infty f(x) \sin(x + \theta) dx \quad (2.41)$$

に対する DE 公式の離散化誤差を、具体的な  $f(x)$  について評価する。離散化誤差の評価は、前節の複素積分を用いて行う。

評価を行う準備として  $\varphi(z)$  の特異点の位置を調べる。 $\varphi(z)$  の特異点は、 $z \neq 0$  かつ

$$\sinh z = in, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.42)$$

を満たす点である。したがって、実軸に近い特異点は

$$z = \pm \frac{\pi}{2}i + \cosh^{-1} n, \quad \pm \frac{\pi}{2}i - \cosh^{-1} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.43)$$

となり、実軸から  $\pi/2$  離れたところに帯状にならぶ。したがって、積分路  $C_1, C_2$  は実軸から  $\pi/2$  以上離せない。

次に、 $\varphi(x \pm id)$ ,  $\varphi'(x \pm id)$ ,  $\Phi_h(x \pm id)$ , ( $0 < d < \pi/2$ ) の振舞いを調べると、次のようになることがすぐにわかる。

$$\begin{aligned} |\varphi(x \pm id)| &\leq \frac{|x| + d}{|1 - \exp(-2\pi \cos d \sinh x)|} \\ &= O(-x \exp(-\pi \cos d \exp(-x))), \quad x \rightarrow -\infty \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$|\varphi(x \pm id)| \geq \frac{|x|}{1 + \exp(-2\pi \cos d \sinh x)} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} |\varphi'(x \pm id)| &\leq \frac{\exp(2\pi \cos d \sinh x) + 1 + 2\pi(|x| + d) \cosh x}{\exp(2\pi \cos d \sinh x) + \exp(-2\pi \cos d \sinh x) - 2} \\ &= O(-x \exp(-x - \pi \cos d \exp(-x))), \quad x \rightarrow -\infty \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$|\Phi_h(x \pm id)| \leq \frac{2\pi \exp(-2Md)}{1 - \exp(-2Md)}, \quad M = \pi/h \quad (2.47)$$

## 2.5.1 被積分関数に特異点がない例

複素平面上で被積分関数に特異点がない積分

$$I_1 = \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx \quad (2.48)$$



に対して DE 公式を適用したときの離散化誤差を複素積分により評価すると

$$\begin{aligned}\Delta I_h &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h(z) dz + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} g_1(z) \Phi_h(z) dz \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_3} g_2(z) \Phi_h(z) dz\end{aligned}\quad (2.49)$$

となる。ここで

$$\varphi(z) = z + \varphi(-z) \quad (2.50)$$

が成り立つことに注意すると

$$g(z) = \frac{\varphi'(z)}{\varphi(z)} \sin(M\varphi(z)) \quad (2.51)$$

$$g_2(z) = \frac{1}{z} \sin(Mz) \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned}g_1(z) &= g(z) - g_2(z) \\ &= \frac{1 - \varphi'(-z)}{z + \varphi(-z)} \sin(Mz + M\varphi(-z)) \\ &\quad - \frac{1}{z} \sin(Mz)\end{aligned}\quad (2.53)$$

となる。ここで、積分路  $C_1$ ,  $C_2$  を実軸から  $d$  ( $0 < d < \pi/2$ ) だけ離し,  $C_1$ ,  $C_2$  の境界点を  $R \pm id$  とする。また、積分路  $C_3$  の傾きを  $\delta$  とする。積分は実軸に対して対称なので、 $\operatorname{Im} z > 0$  の積分だけで評価すると

$$\begin{aligned}|\Delta I_h| &\leq \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^R |g(x+id) \Phi_h(x+id)| dx + \frac{1}{\pi} \int_R^{\infty} |g_1(x+id) \Phi_h(x+id)| dx \\ &\quad + \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{\pi} \int_R^{\infty} |g_2(x+id+i\delta(x-R)) \Phi_h(x+id+i\delta(x-R))| dx \\ &\leq \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^R |g(x+id) \Phi_h(x+id)| dx + \frac{2R}{\pi} \max_{-R \leq x \leq R} |g(x+id) \Phi_h(x+id)| \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \int_R^{\infty} |g_1(x+id) \Phi_h(x+id)| dx \\ &\quad + \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{\pi} \int_R^{\infty} |g_2(x+id+i\delta(x-R)) \Phi_h(x+id+i\delta(x-R))| dx\end{aligned}\quad (2.54)$$

となる。ここで、 $M$  は十分大きいと仮定し、 $R$  は  $M$  に依存して

$$R = \log M \quad (2.55)$$

となるように選ぶ。また、 $d$  は方程式

$$\varphi'(z) = 2 \quad (2.56)$$

の上半平面の実軸に最も近い解の虚部に選ぶ. 具体的には

$$z = 0.41731 \dots + 0.86822 \dots i \quad (2.57)$$

$$d = 0.86822 \dots \quad (2.58)$$

である. このように選ぶ理由は, (2.54) 式の第二項からの寄与を小さくするためである. (2.54) 式の第一項からの寄与は

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-R} |g(x+id)\Phi_h(x+id)| dx \\ & \leq \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-R} \frac{|\varphi'(x+id)|}{|\varphi(x+id)|} |\sin(M\varphi(x+id))| dx \cdot \frac{2\pi \exp(-2Md)}{1 - \exp(-2Md)} \end{aligned} \quad (2.59)$$

となる.  $x \leq -R$  で  $|M\varphi(x+id)|$  は十分小さい定数で抑えられるので, 十分大きい  $A_1$  に対して

$$\frac{|\sin(M\varphi(x+id))|}{|\varphi(x+id)|} \leq A_1 M \quad (2.60)$$

が成り立つ. また,  $x \rightarrow -\infty$  で  $|\varphi'(x+id)| = O(-x \exp(-x - \pi \cos d \exp(-x)))$  なので

$$\int_{-\infty}^{-R} |\varphi'(x+id)| dx < +\infty \quad (2.61)$$

となる. したがって

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-R} |g(x+id)\Phi_h(x+id)| dx \\ & \leq A'_1 M \frac{2\pi \exp(-2Md)}{1 - \exp(-2Md)} \\ & = O(M \exp(-2Md)), \quad M \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.62)$$

となる.

(2.54) 式の第二項からの寄与は

$$\begin{aligned} & \frac{2R}{\pi} \max_{-R \leq x \leq R} |g(x+id)\Phi_h(x+id)| \\ & \leq 4R \max_{-R \leq x \leq R} \frac{|\varphi'(x+id)|}{|\varphi(x+id)|} \exp(M|\operatorname{Im} \varphi(x+id)|) \\ & \quad \cdot \frac{\exp(-2Md)}{1 - \exp(-2Md)} \end{aligned} \quad (2.63)$$

となる. ここで,  $|x| \rightarrow \infty$  で

$$\frac{|\varphi'(x+id)|}{|\varphi(x+id)|} = O(\exp(|x|)) \quad (2.64)$$

となるので,  $R \rightarrow \infty$  で

$$\max_{-R \leq x \leq R} \frac{|\varphi'(x+id)|}{|\varphi(x+id)|} = O(\exp(R)) \quad (2.65)$$

が成り立つ. したがって

$$\begin{aligned} \frac{2R}{\pi} \max_{-R \leq x \leq R} |g(x+id)\Phi_h(x+id)| \\ = O(R \exp(R) \exp(-A_2 M)) \\ = O(M \log M \exp(-A_2 M)), \quad M \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.66)$$

$$A_2 = \inf_{-\infty < x < \infty} (2d - |\operatorname{Im} \varphi(x+id)|) \quad (2.67)$$

となる.  $A_2$  を数値的に求めると

$$A_2 = 0.73941 \dots \quad (2.68)$$

である.

(2.54) 式の第三項からの寄与は

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_R^\infty |g_1(x+id)\Phi_h(x+id)| dx \\ \leq 2 \int_R^\infty |g_1(x+id)| dx \cdot \frac{\exp(-2Md)}{1 - \exp(-2Md)} \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} g_1(z) &= \frac{1 - \varphi'(-z)}{z + \varphi(-z)} \sin(Mz + M\varphi(-z)) \\ &\quad - \frac{1}{z} \sin(Mz) \end{aligned} \quad (2.70)$$

となる.  $x \geq R$  で  $|M\varphi(-x-id)|$  は十分小さい定数で抑えられるので, 十分大きい  $A_3$  に対して

$$|g_1(x+id)| \leq A_3 \frac{1}{x} |\varphi'(-x-id)| \exp(Md) \quad (2.71)$$

が成り立つ. したがって

$$\frac{1}{\pi} \int_R^\infty |g_1(x+id)\Phi_h(x+id)| dx = O(\exp(-Md)), \quad M \rightarrow \infty \quad (2.72)$$

となる.

(2.54) 式の第四項からの寄与は

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{\pi} \int_R^\infty |g_2(x+id+i\delta(x-R))\Phi_h(x+id+i\delta(x-R))| dx \\ \leq 2\sqrt{1+\delta^2} \int_R^\infty \frac{\exp(Md+M\delta(x-R)) \exp(-2Md-2M\delta(x-R))}{x} dx \\ = O(\exp(-Md)), \quad M \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.73)$$

となる.

以上まとめると, 離散化誤差は  $h \rightarrow 0$  で

$$\begin{aligned} |\Delta I_h| &= O(M \log M \exp(-A_2 M)) \\ &= O\left(\frac{\log h^{-1}}{h} \exp\left(-\frac{C}{h}\right)\right), \quad C = 2.322 \dots \end{aligned} \quad (2.74)$$

となる. これは, DE 公式の典型的な誤差の振舞いと一致する.

### 2.5.2 被積分関数に特異点がある例

複素平面上で被積分関数に特異点がある積分

$$I_2 = \int_0^\infty \frac{\cos x}{1+x^2} dx \quad (2.75)$$

( $\pm i$  に特異点がある例) に対して DE 公式を適用したときの離散化誤差を複素積分により評価すると

$$\begin{aligned} \Delta I_h &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h(z + \frac{\pi}{2M}) dz + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} g_1(z) \Phi_h(z + \frac{\pi}{2M}) dz \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_3} g_2(z) \Phi_h(z + \frac{\pi}{2M}) dz \end{aligned} \quad (2.76)$$

となる. ここで

$$g(z) = \frac{M\varphi'(z)}{1 + (M\varphi(z))^2} \cos(M\varphi(z)) \quad (2.77)$$

$$g_2(z) = \frac{M}{1 + (Mz)^2} \cos(Mz) \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned} g_1(z) &= \frac{M - M\varphi'(-z)}{1 + (Mz + M\varphi(-z))^2} \cos(Mz + M\varphi(-z)) \\ &\quad - \frac{M}{1 + (Mz)^2} \cos(Mz) \end{aligned} \quad (2.79)$$

である.

次に,  $M\varphi(z) = \pm i$  に対応する  $g(z)$  の特異点について考える. この特異点は

$$\varphi(z) = \frac{\pm i}{M} \quad (2.80)$$

すなわち

$$-2\pi \sinh z = \log\left(1 - \frac{Mz}{\pm i}\right) \quad (2.81)$$

を満たす. これを解けば, 写される特異点がわかる. そこで, (2.81) 式を変形して

$$z = \sinh^{-1}\left(-\frac{1}{2\pi} \log\left(1 - \frac{Mz}{\pm i}\right)\right) \quad (2.82)$$

とし, (2.82) 式に (2.82) 式を繰り返し代入し,  $M \rightarrow \infty$  での漸近項を整理し, 実軸に最も近い特異点  $z_p$  を求めると

$$z_p = -\log\left(\frac{1}{\pi} \log M\right) - \frac{\log \log\left(\frac{1}{\pi} \log M\right)}{\log M} + \frac{\pm \frac{\pi}{2} i}{\log M} + O\left(\frac{(\log \log\left(\frac{1}{\pi} \log M\right))^2}{(\log M)^2}\right) \quad (2.83)$$

となる. したがって, 積分路  $C_1$  は実軸から  $(\pi/2)/\log M$  の距離以上は離れない.

次に, 積分路  $C_1$  を実軸とこの特異点との間を通る曲線に変形し, 積分路  $C_2$  を前小節と同様に実軸から  $d$  だけ離れた直線とする.  $C_1, C_2$  の境界点を前と同様に  $R \pm id$  として評価すると

$$\begin{aligned} |\Delta I_h| \leq & \left| \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h\left(z + \frac{\pi}{2M}\right) dz \right| \\ & + \frac{1}{\pi} \int_R^\infty |g_1(x+id) \Phi_h(x+id + \frac{\pi}{2M})| dx \\ & + \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{\pi} \int_R^\infty |g_2(x+id + i\delta(x-R)) \\ & \quad \Phi_h(x+id + i\delta(x-R) + \frac{\pi}{2M})| dx \end{aligned} \quad (2.84)$$

となる.

(2.84) 式の第一項からの寄与は鞍点法より

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h\left(z + \frac{\pi}{2M}\right) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} \frac{M\varphi'(z)}{1 + (M\varphi(z))^2} \cos(M\varphi(z)) \Phi_h\left(z + \frac{\pi}{2M}\right) dz \\ &\simeq \frac{1}{2} \int_{C_1} \mp \exp(\eta(z)) dz \\ &\simeq \operatorname{Re} \frac{\sqrt{2\pi} \exp(\eta(z_s))}{\sqrt{-\eta''(z_s)}} \end{aligned} \quad (2.85)$$

ここで,  $\eta(z)$  は

$$\eta(z) = \log \frac{M\varphi'(z)}{1 + (M\varphi(z))^2} \pm iM(2z - \varphi(z)) \quad (2.86)$$

であり, 複号は  $\operatorname{Im} z > 0$  で上側,  $\operatorname{Im} z < 0$  で下側の符号をとる.  $z_s$  は特異点  $z_p$  の近くにある鞍点で,  $\eta'(z) = 0$  の解である. 具体的には

$$z_s = z_p \mp \frac{i}{2M} + O\left(\frac{\log M}{M^2}\right) \quad (2.87)$$

である. これを (2.85) 式に代入して

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h\left(z + \frac{\pi}{2M}\right) dz \right| \\ &= O(\exp(-2M|\operatorname{Im} z_s|)) \\ &= O(\exp(-\frac{(\pi - \varepsilon)M}{\log M})), \quad M \rightarrow \infty, \quad \varepsilon > 0 \end{aligned} \quad (2.88)$$

となる.

(2.84) 式の第二, 第三項からの寄与は前小節と同様に評価することができ  $O(\exp(-Md))$  となる.

したがって, 離散化誤差は  $h \rightarrow 0$  で

$$\begin{aligned} |\Delta I_h| &= O(\exp(-\frac{(\pi - \varepsilon)M}{\log M})) \\ &= O(\exp(-\frac{\pi^2 - \varepsilon}{h \log(\pi/h)})) \end{aligned} \quad (2.89)$$

となる. この評価は, DE 公式の典型的な誤差の振舞いの精度よりも少し悪くなる.

## 2.6 Fourier 型積分に対する DE 変換の改善

DE 公式の典型的な誤差の振舞いは, 刻み幅  $h \rightarrow 0$  に対して  $O(\exp(-c/h))$  となる. しかし, Fourier 型積分に対する DE 公式の場合, 前節でみたように, 被積分関数によっては誤差の振舞いは  $O(\exp(-c/(h \log h^{-1})))$  となり, 精度が少し悪くなることもある. そこで, 被積分関数に特異点があっても精度が悪くならない以下の DE 変換を提案する.

$$x = M\varphi_{\alpha, \beta}(t) \quad (2.90)$$

$$\varphi_{\alpha, \beta}(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2t - \alpha(1 - e^{-t}) - \beta(e^t - 1))} \quad (2.91)$$

ただし,  $\beta$  は正定数,  $\alpha$  は  $M$  に依存する正数で, 十分小さいと仮定する. この変換の目的は, 変換によって写像される特異点の位置を実軸からできるだけ離すことにある.

次に, この変換の有効性を確かめる. そこで, 被積分関数  $f(\zeta)$  の特異点を  $\zeta_p$  とし, この変換  $\zeta = M\varphi_{\alpha, \beta}(z)$  により, 特異点  $\zeta_p$  の写される点を調べる.

$$\begin{aligned} \frac{\zeta_p}{M} &= \varphi_{\alpha, \beta}(z) \\ &\sim -z \exp(2z + \alpha(1 - e^{-z}) + \beta(e^z - 1)) \end{aligned} \quad (2.92)$$

ここで,  $|\alpha(1 - e^{-z})|$  が十分小さいと仮定すると

$$\frac{\zeta_p}{M} \sim -z \exp(2z - \beta) \quad (2.93)$$

となり, これを解けば, 写される特異点がわかる. (2.93) 式を変形すると

$$z \sim \frac{1}{2} \log \frac{\zeta_p}{M} - \frac{1}{2} \log(-z) + \frac{\beta}{2} \quad (2.94)$$

となり, (2.94) 式に (2.94) 式を繰り返し代入することで, 写される (実軸に近い) 特異点  $z_p$  は

$$\begin{aligned} z_p &= \left(-\frac{1}{2} \log \frac{M}{|\zeta_p|} + O(\log \log M)\right) \\ &\quad + i\left(\frac{1}{2} \arg \zeta_p + O\left(\frac{1}{\log M}\right)\right) \end{aligned} \quad (2.95)$$

となる。したがって、前節の誤差評価の (2.36) 式の第一項からの寄与は  $O(\exp(-c/h))$  となり、DE 公式の典型的な誤差の振舞いとなる。

ただし、 $\alpha$ は

$$|\alpha(1 - e^{-\beta})| \sim \alpha \sqrt{|M/(2\zeta_p)| \log |M/\zeta_p|}$$

が十分小さくなるように選ばなければならない。実際の計算では、数値実験より

$$\alpha = O(1/\sqrt{M \log M}), \quad M \rightarrow \infty \quad (2.96)$$

のオーダーで選べばよいことがわかっていて、具体的な計算では

$$\alpha = \beta / \sqrt{1 + M \log(1 + M)/(4\pi)} \quad (2.97)$$

と選ぶことにする。このとき、前節の積分  $I_1$ ,  $I_2$  の打ち切り誤差を含めた全誤差は、標本数  $N$  に対して  $\exp(-\frac{cN}{\log N})$  となり、この誤差も DE 公式の典型的な誤差の振舞いと一致する。Appendix A にこの変換による公式の誤差解析の詳細を示した。

次に、積分

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2} \\ I_2 &= \int_0^\infty \frac{\cos x}{1+x^2} dx = \frac{\pi}{2} e^{-1} \end{aligned}$$

に対して、 $\beta = 0.25$  と選び計算を行った例を Fig. 2.7 に示す。図の横軸は標本数で、縦軸は絶対誤差である。比較のために、改良前の変換 (2.26) による計算結果を点線で示す。

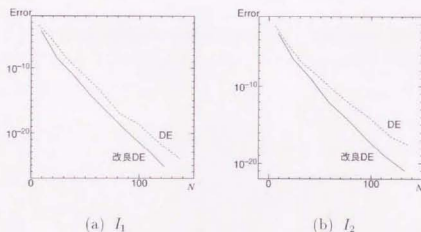


Fig. 2.7:  $I_h^{(N)}$  の誤差

この例より、改良した変換 (2.91) は、もとの変換 (2.26) よりも、桁数にして 1 割から 2 割程度精度がよくなるのがわかる。



## 2.7 Fourier 型積分に対する DE 公式の特徴

Fourier 型積分に対する DE 公式の特徴をまとめると以下ようになる。

1. 収束の遅い Fourier 型積分を効率よく (従来の振動しない関数に対する DE 公式と同程度の効率で) 計算することができる。
2. 従来の DE 公式と同様に積分区間の端点の特異性に強い。
3. 振動しながら発散する積分も補外なしで直接計算できる。
4.  $x = M\varphi(t)$ ,  $M = \pi/(\omega h)$  という変換を行っているため、刻み幅を半分にしたとき前段の結果を使えない。したがって、自動積分のルーチンに適用した場合、効率が多少悪くなる。
5. 被積分関数の振動周期と位相があらかじめわかってないと計算できない。
6. 減衰の遅い関数の Fourier 変換を計算する場合、 $\omega$  を変更すると、分点が変わるので関数計算をやり直さなければならない。

## Chapter 3

### 連続版 Euler 変換による手法

#### 3.1 Fourier 型積分と交代級数

交代級数

$$\begin{aligned} S &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n f(n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\pi n} f(n) \end{aligned} \quad (3.1)$$

を連続化したものは、Fourier 積分

$$I = \int_0^{\infty} e^{i\pi x} f(x) dx \quad (3.2)$$

であると考えることができる。そこで、交代級数の加速法の一つである Euler 変換について考え、その加速法を連続化することで収束の遅い Fourier 型積分に適用することを考える。

#### 3.2 Euler 変換の重みの連続化

交代級数

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n a_n \quad (3.3)$$

を考える。一般に、この級数の Euler 変換は

$$S_{\text{Euler}} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{1}{2}\right)^n a_0, \quad (\Delta a_n \equiv a_{n+1} - a_n) \quad (3.4)$$

で表される。また、Euler 変換された級数を  $N$  項で打ち切った和は、次のように表すこともできる [18]。

$$\begin{aligned} S_{\text{Euler}}^{(N)} &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \left(-\frac{1}{2}\Delta\right)^n a_0 \\ &= \sum_{m=0}^{N-1} w_m^{(N)} (-1)^m a_m \end{aligned} \quad (3.5)$$

ここで、 $w_m^{(N)}$  は Euler 変換の重みで

$$w_m^{(N)} = \sum_{n=m+1}^N \frac{1}{2^N} \binom{N}{n} \quad (3.6)$$

である。この式の導出は Appendix B に示した。

ここで  $N \rightarrow \infty$  での  $w_m^{(N)}$  の振舞いを調べる。 $w_m^{(N)}$  は二項分布の上側確率と考えられるので、中心極限定理より

$$\begin{aligned} w_m^{(N)} &\sim \int_{m+1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot N/4}} e^{-(x-N/2)^2/(2N/4)} dx, \quad N \rightarrow \infty \\ &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{m/\sqrt{N/2}-\sqrt{N/2}}^{\infty} e^{-t^2} dt \end{aligned} \quad (3.7)$$

となる。したがって  $N \rightarrow \infty$  のときの  $w_m^{(N)}$  の振舞いは次のようになることがわかる。

$$w_m^{(N)} \sim \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(m/\sqrt{N/2} - \sqrt{N/2}), \quad N \rightarrow \infty \quad (3.8)$$

$$\operatorname{erfc}(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt$$

そこで、 $p, q$  を  $N$  に依存する正の数として、連続な重み関数

$$w(x; p, q) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(x/p - q) \quad (3.9)$$

を導入する (より一般の重み関数は 3.6 節で議論する)。

次に、Euler 変換の離散的な重み  $w_m^{(N)}$  の代わりに、この連続な重み関数  $w(x; p, q)$  を用いても、交代級数の加速ができることを示す。

**定理 1**  $w(x; p, q) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(x/p - q)$  ( $p, q$  はある正の数) とし、 $f(z)$  が領域  $|\arg(z+1/2)| \leq \delta$  ( $\delta$  はある正の数で  $\delta < \pi/4$  と仮定する) で正則で、その領域で  $|f(z)| \leq M$  かつ

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \max_{|\theta| \leq \delta} |f(R - 1/2 + iR \tan \theta)| = 0$$

を満たすならば

$$\left| \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n f(n) - \sum_{n=0}^{\infty} w(n; p, q) (-1)^n f(n) \right| < \frac{M\sqrt{1+\alpha^2}}{1-e^{-\pi\alpha/2}} \left( \frac{\sqrt{\pi}p}{\sqrt{1-\alpha^2}} e^{(q'-\pi\alpha p/2)^2/(1-\alpha^2)} + \frac{2}{\pi\alpha} e^{(q'-\pi\alpha p)q'} \right) e^{-q'^2} \quad (3.10)$$

が成り立つ。ただし、 $q' = q + 1/(2p)$ 、 $\alpha = \tan \delta$  である。

証明

$$S^{(N)} = \sum_{n=0}^{N-1} (-1)^n f(n) \quad (3.11)$$

$$S_w^{(N)} = \sum_{n=0}^{N-1} w(n; p, q) (-1)^n f(n) \quad (3.12)$$

とする。誤差  $S^{(N)} - S_w^{(N)}$  は留数定理より

$$S^{(N)} - S_w^{(N)} = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{\pi}{\sin \pi z} (1 - w(z; p, q)) f(z) dz \quad (3.13)$$

と書ける。ただし、積分路  $C$  は Fig.3.1 に示すものである。

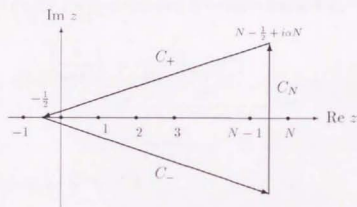


Fig. 3.1: 積分路  $C$

よって、この誤差は不等式

$$|S^{(N)} - S_w^{(N)}| \leq \frac{1}{2\pi} \int_C \left| \frac{\pi}{\sin \pi z} \right| \cdot |1 - w(z; p, q)| \cdot |f(z)| \cdot |dz| \quad (3.14)$$

で抑えられ、この式を評価することで求める結果が得られる。

そこで、まず複素平面上での誤差関数の振舞いを調べておく。誤差関数の定義より

$$\begin{aligned} 1 - \frac{1}{2}\operatorname{erfc}(z) &= 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-(t+z)^2} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{-(t+z)^2} dt \end{aligned} \quad (3.15)$$

であるので、絶対値をとって評価することにより

$$\left| 1 - \frac{1}{2}\operatorname{erfc}(z) \right| \leq \begin{cases} 1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} |e^{-t^2 - z^2}| dt = 1 + \frac{1}{2}|e^{-z^2}|, & \operatorname{Re} z \geq 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 |e^{-t^2 - z^2}| dt = \frac{1}{2}|e^{-z^2}|, & \operatorname{Re} z < 0 \end{cases} \quad (3.16)$$

を得る。

この結果を用いて、(3.14) 式の  $C_N$  からの寄与を評価すると、次のようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_{C_N} \left| \frac{\pi}{\sin \pi z} \right| \cdot |1 - w(z; p, q)| \cdot |f(z)| \cdot |dz| \\ & < \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi}{\cosh \pi y} dy \cdot \left( 1 + \frac{1}{2} e^{-((N-1/2)/p-q)^2 + (N \tan \delta/p)^2} \right) \\ & \quad \cdot \max_{|\theta| \leq \delta} |f(N-1/2 + iN \tan \theta)| \\ & \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (3.17)$$

次に、(3.14) 式の  $C_+$  上 ( $z = t - 1/2 + i\alpha t$ ) からの寄与を評価する。まず  $|\pi/\sin \pi z|$  については

$$\begin{aligned} \left| \frac{\pi}{\sin \pi z} \right| &= \frac{2\pi}{|1 - e^{2\pi i z}|} |e^{\pi i z}| \\ &\leq \frac{2\pi}{1 + e^{-2\pi \alpha t} \cos 2\pi t} e^{-\pi \alpha t} \\ &< \frac{2\pi}{1 - e^{-\pi \alpha/2}} e^{-\pi \alpha t} \end{aligned} \quad (3.18)$$

となり、次に  $|1 - w(z; p, q)|$  については

$$\begin{aligned} |1 - w(z; p, q)| &= \left| 1 - \frac{1}{2}\operatorname{erfc}((t-1/2)/p - q + i\alpha t/p) \right| \\ &\leq \begin{cases} 1 + \frac{1}{2} e^{-(t/p-q')^2 + (\alpha t/p)^2}, & t \geq pq' \\ \frac{1}{2} e^{-(t/p-q')^2 + (\alpha t/p)^2}, & t < pq' \end{cases} \end{aligned} \quad (3.19)$$

となる。ただし、 $q' = q + 1/(2p)$ 、 $\alpha = \tan \delta$  である。したがって、 $C_+$  からの寄与は次のようになる。

$$\frac{1}{2\pi} \int_{C_+} \left| \frac{\pi}{\sin \pi z} \right| \cdot |1 - w(z; p, q)| \cdot |f(z)| \cdot |dz|$$

$$\begin{aligned}
&< \frac{1}{2\pi} \frac{2\pi}{1-e^{-\pi\alpha/2}} \left( \int_0^\infty e^{-\pi\alpha t} \frac{1}{2} e^{-(t/p-q)^2 + (\alpha t/p)^2} M\sqrt{1+\alpha^2} dt \right. \\
&\quad \left. + \int_{pq}^\infty e^{-\pi\alpha t} M\sqrt{1+\alpha^2} dt \right) \\
&< \frac{M\sqrt{1+\alpha^2}}{1-e^{-\pi\alpha/2}} \left( \frac{\sqrt{\pi}p}{2\sqrt{1-\alpha^2}} e^{(q'-\pi\alpha p/2)^2/(1-\alpha^2)} + \frac{1}{\pi\alpha} e^{(q'-\pi\alpha p)q'} \right) e^{-q'^2} \quad (3.20)
\end{aligned}$$

(3.14) 式の  $C_-$  からの寄与は  $C_+$  からの寄与とまったく同じになることがわかる。したがって

$$\begin{aligned}
|S^{(\infty)} - S_w^{(\infty)}| &= \lim_{N \rightarrow \infty} |S^{(N)} - S_w^{(N)}| \\
&< \frac{M\sqrt{1+\alpha^2}}{1-e^{-\pi\alpha/2}} \left( \frac{\sqrt{\pi}p}{\sqrt{1-\alpha^2}} e^{(q'-\pi\alpha p/2)^2/(1-\alpha^2)} + \frac{2}{\pi\alpha} e^{(q'-\pi\alpha p)q'} \right) e^{-q'^2} \quad (3.21)
\end{aligned}$$

が得られる。

[証明終り]

定理 1 より,  $p, q$  を  $q \simeq q' = \pi\alpha p/2$  となるように選んだときの  $S_w^{(\infty)}$  の誤差は

$$|S^{(\infty)} - S_w^{(\infty)}| < \frac{M\sqrt{1+\alpha^2}}{1-e^{-\pi\alpha/2}} \left( \frac{\sqrt{\pi}p}{\sqrt{1-\alpha^2}} + \frac{2}{\pi\alpha} \right) e^{-q^2} \quad (3.22)$$

となる。これには級数  $S_w^{(\infty)}$  を  $N$  項で打ち切った和  $S_w^{(N)}$  の誤差は含まれていない。 $w(n; p, q)$  の振舞いは  $n$  の大きいところで  $w(n; p, q) \leq \frac{1}{2} \exp(-(n/p - q)^2)$  となるので、この打ち切り誤差を十分小さくするには、打ち切る項数  $N$  は

$$N \simeq 2pq \simeq \frac{4}{\pi\alpha} q^2 \quad (3.23)$$

とすればよい。このときの  $S_w^{(N)}$  の全誤差は

$$\begin{aligned}
|S^{(\infty)} - S_w^{(N)}| &\leq |S^{(\infty)} - S_w^{(\infty)}| + \sum_{n=N}^\infty |w(n; p, q)(-1)^n f(n)| \\
&\leq |S^{(\infty)} - S_w^{(\infty)}| + \frac{M}{2} \sum_{n=N}^\infty \exp(-(n/p - q)^2) \\
&= O(c(\alpha) p e^{-q^2}) \\
&= O(c(\alpha) \sqrt{N} e^{-\pi\alpha N/4}), \quad N \rightarrow \infty \quad (3.24)
\end{aligned}$$

となる ( $c(\alpha)$  は  $\alpha$  に依存する数)。要するに、もとの級数の収束がどんなに遅くても、連続な重みの Euler 変換  $S_w^{(N)}$  は、パラメータ  $p, q$  を  $N$  に依存して適当に選べば、計算項数  $N$  の関数として指数関数的に極限値に収束させることができるのである。

実際の計算での  $p, q$  の決め方は、まず  $e^{-q^2}$  が許容誤差になるように  $q$  を定め、次に  $p$  を適当に定める。もし  $f(z)$  の解析的な領域がわかっていれば  $\alpha$  の上限が定まるので最小の  $p$  を決めることができる。 $\alpha$  の上限がわからない場合でも、その上限が 0 でなければ十分

小さな任意の  $\alpha$  に対して定理 1 は満たされるので,  $p$  は適当に大きく定めればよい. しかし,  $p$  をあまり大きく定めると打ち切る項数  $N \simeq 2pq$  が大きくなり, 効率が悪くなるので, 異なる  $p$  についての計算結果の差分をとることで誤差を推定しながら適応的に定めるようにするとよい.

### 3.3 Fourier 積分に対する連続版 Euler 変換

Fourier 型積分

$$I = \int_0^\infty f(x) e^{i\omega x} dx \quad (3.25)$$

( $\omega > 0$  と仮定) に対する連続版 Euler 変換を

$$I_w^{(L)} = \int_0^L w(x; p, q) f(x) e^{i\omega x} dx \quad (3.26)$$

で定義する. ここで,  $w(x; p, q)$  は前節の連続な重み関数で,  $p, q$  は, 積分を打ち切る区間  $L$  および  $\omega$  に依存して定める.

次に, この連続版 Euler 変換は, 被積分関数の減衰がきわめて遅くても, 有限の区間  $L$  に対して指数関数的に積分値を  $I$  に収束させることができることを示す.

定理 2  $w(x; p, q) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(x/p - q)$  ( $p, q$  はある正の数) とし, 関数  $f(z)$ ,  $g(z; \omega)$  が領域  $0 \leq \arg(z - r) \leq \delta$  ( $r$  はある実数,  $\omega, \delta$  はある正の数で  $\delta < \pi/4$  と仮定する) で正則で, その領域で  $|f(z)| \leq M_1$ ,  $|g(z; \omega)| \leq M_2 |e^{i\omega z}|$  かつ

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \max_{0 \leq \theta \leq \delta} |f(R + r + iR \tan \theta)| = 0$$

を満たすならば

$$\begin{aligned} & \left| \int_r^\infty f(x) g(x; \omega) dx - \int_r^\infty w(x; p, q) f(x) g(x; \omega) dx \right| \\ & \leq M_1 M_2 \sqrt{1 + \alpha^2} \left( \frac{\sqrt{\pi} p}{2\sqrt{1 - \alpha^2}} e^{(q' - \omega \alpha p/2)^2 / (1 - \alpha^2)} + \frac{1}{\omega \alpha} e^{(q' - \omega \alpha p) q'} \right) e^{-q'^2} \end{aligned} \quad (3.27)$$

が成り立つ. ただし,  $q' = q - r/p$ ,  $\alpha = \tan \delta$  である.

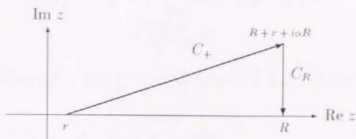
証明

積分

$$\begin{aligned} \Delta I_w^{(R)} &= \int_r^{r+R} f(x) g(x; \omega) dx - \int_r^{r+R} w(x; p, q) f(x) g(x; \omega) dx \\ &= \int_r^{r+R} (1 - w(x; p, q)) f(x) g(x; \omega) dx \end{aligned} \quad (3.28)$$

において, 積分路  $(r, r + R)$  を正則な領域の範囲で, Fig. 3.2 のような  $C_+$ ,  $C_R$  に変形する.



Fig. 3.2: 積分路  $C_+ + C_R$ 

このとき

$$\begin{aligned} |\Delta I_w^{(R)}| &= \left| \int_{C_+ + C_R} (1 - w(z; p, q)) f(z) g(z; \omega) dz \right| \\ &\leq \int_{C_+ + C_R} |1 - w(z; p, q)| \cdot |f(z)| \cdot |g(z; \omega)| \cdot |dz| \end{aligned} \quad (3.29)$$

が成り立ち、定理1と全く同じ考え方でこの積分を評価することにより、求める結果が得られる。 [証明終り]

この定理で  $r = 0$  とおけば、Fourier 型積分 (3.25) に対する近似

$$I_w = \int_0^\infty w(x; p, q) f(x) e^{i\omega x} dx \quad (3.30)$$

の誤差は、 $p, q$ を

$$q = \omega \alpha p / 2 \quad (3.31)$$

となるように選べば

$$|I - I_w| < M_1 \sqrt{1 + \alpha^2} \left( \frac{\sqrt{\pi} p}{2\sqrt{1 - \alpha^2}} + \frac{1}{\omega \alpha} \right) e^{-q^2} \quad (3.32)$$

となることがわかる。要するにこれは、被積分関数に単に  $w(x; p, q)$  を乗するだけの操作で、積分値を近似的に保ったままで、収束のきわめて遅い積分  $I$  から収束のきわめて速い積分  $I_w$  に変換できることを意味する。

$w(x; p, q)$  の収束は  $x$  大きいところで  $w(x; p, q) \leq \frac{1}{2} \exp(-(x/p - q)^2)$  となる。したがって、連続版 Euler 変換の打ち切りは

$$L = 2pq = \frac{4}{\omega \alpha} q^2 \quad (3.33)$$

とすれば、打ち切りの誤差は

$$|I_w - I_w^{(L)}| \leq \int_L^\infty |w(x; p, q) f(x) e^{i\omega x}| dx$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{M_1}{2} \int_{2pq}^{\infty} \exp(-(x/p-q)^2) dx \\
&\leq \frac{\sqrt{\pi} M_1 p}{4} e^{-q^2}
\end{aligned} \tag{3.34}$$

となり, (3.32) 式の右辺と同じオーダーにすることができる. このとき, 連続版 Euler 変換の全誤差は

$$\begin{aligned}
|I - I_w^{(L)}| &\leq |I - I_w| + |I_w - I_w^{(L)}| \\
&< M_1 \left( \frac{\sqrt{\pi}\sqrt{1+\alpha^2}p}{2\sqrt{1-\alpha^2}} + \frac{\sqrt{\pi}p}{4} + \frac{\sqrt{1+\alpha^2}}{\omega\alpha} \right) e^{-q^2} \\
&= O(c(\omega, \alpha)\sqrt{L}e^{-\omega\alpha L/4}), \quad L \rightarrow \infty
\end{aligned} \tag{3.35}$$

となる ( $c(\omega, \alpha)$  は  $\omega, \alpha$  に依存する数).

また, この方法は Fourier 変換だけでなく, Bessel 関数のように漸近的に  $e^{i\omega x}$  のように振舞う振動項を持つ関数の積分に対しても有効である.

$p, q$  の定め方は交代級数の場合と同様で, まず  $e^{-q^2}$  が許容誤差になるように  $q$  を定め, 次に  $p$  を適当に定める. 計算する  $\omega$  の最小値を  $\omega_{min}$ ,  $\alpha$  の上限を  $\alpha_{sup}$  とすれば

$$p = \frac{2}{\omega_{min}\alpha_{sup}} q \tag{3.36}$$

と選べばよいが,  $\alpha_{sup}$  がわからない場合は  $p$  は十分大きく定めればよい.

### 3.4 減衰の遅い関数の Fourier 変換の計算

$f(x)$  の Fourier 変換

$$F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx \tag{3.37}$$

を計算することを考える. ただし,  $f(x)$  は  $|x| \rightarrow \infty$  で非常に減衰の遅い関数である. まず, この積分に対して, 連続版 Euler 変換を適用し

$$F_w^{(L)}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-L_-}^{L_+} w(|x|; p, q) f(x) e^{-i\omega x} dx \tag{3.38}$$

とする. 次に,  $F_w^{(L)}(\omega)$  を等間隔  $h$  で離散化を行い,

$$F_w^{(N, h)}(\omega) = \frac{h}{2\pi} \sum_{n=-N_-}^{N_+} w(|nh|; p, q) f(nh) e^{-i\omega nh} \tag{3.39}$$

( $N_{\pm} = \lfloor L_{\pm}/h \rfloor$ ) として計算する. パラメータ  $p, q$  を固定すれば, この計算は FFT を用いることができる.

## 3.5 誤差解析

(3.39) 式には以下の誤差が含まれる.

1.  $F(\omega)$  を  $F_w^{(L)}(\omega)$  で近似した誤差

2.  $F_w^{(L)}(\omega)$  を  $F_w^{(N,h)}(\omega)$  で近似した誤差

第1の誤差は, 積分区間を  $(-\infty, 0)$  と  $(0, \infty)$  に分けることで, 連続版 Euler 変換の誤差で評価することができ, これは (3.35) 式により与えられている.

第2の誤差は, 台形則 (矩形則) の離散化誤差で, 台形則の誤差の特性関数を用いて評価することができる. その準備として, まず重み関数  $w(|x|; p, q)$  を以下の正則な重み関数

$$\begin{aligned}\hat{w}(x; p, q) &\equiv w(x; p, q) + w(-x; p, q) - 1 \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{x/p-q}^{x/p+q} e^{-t^2} dt\end{aligned}\quad (3.40)$$

で近似することを考える. このときの誤差は

$$\begin{aligned}|w(|x|; p, q) - \hat{w}(x; p, q)| &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{|x|/p+q}^{\infty} e^{-t^2} dt \\ &\leq \frac{1}{2} e^{-q^2}\end{aligned}\quad (3.41)$$

で抑えられる. この誤差は, 第1の誤差と同じ程度であることがわかる. そこで,  $w(|x|; p, q)$  を  $\hat{w}(x; p, q)$  に置き換えて, 離散化誤差を評価する.

**定理 3** 関数  $g(z)$  が領域  $|\operatorname{Im} z| \leq d$  ( $d$  はある正の数) で正則で, その領域で  $|g(z)| \leq \hat{M}$  を満たし, さらに任意の  $|y| \leq d$  で

$$\begin{aligned}|g(-(N_- + 1/2)h + iy)| &\leq \hat{\varepsilon}_- \\ |g((N_+ + 1/2)h + iy)| &\leq \hat{\varepsilon}_+\end{aligned}$$

を満たすならば

$$\begin{aligned}&\left| \int_{-(N_- + 1/2)h}^{(N_+ + 1/2)h} g(x) e^{i\omega x} dx - h \sum_{n=-N_-}^{N_+} g(nh) e^{i\omega nh} \right| \\ &< \frac{2 \cosh(\omega d)}{\exp(2\pi d/h) - 1} \hat{M} L + \left( \frac{1 - e^{-(2\pi/h - \omega)d}}{2\pi/h - \omega} + \frac{1 - e^{-(2\pi/h + \omega)d}}{2\pi/h + \omega} \right) \hat{\varepsilon}\end{aligned}\quad (3.42)$$

が成り立つ. ただし,  $L = (N_- + N_+ + 1)h$ ,  $\hat{\varepsilon} = \hat{\varepsilon}_- + \hat{\varepsilon}_+$  である.

**証明**

積分を等間隔の台形則 (矩形則) で離散化した誤差は, 台形則の誤差の特性関数

$$\Phi_h(z) = \begin{cases} -\pi i - \pi \cot(\pi z/h) = \frac{-2\pi i}{1 - \exp(-2\pi i z/h)}, & \operatorname{Im} z > 0 \\ +\pi i - \pi \cot(\pi z/h) = \frac{+2\pi i}{1 - \exp(+2\pi i z/h)}, & \operatorname{Im} z < 0 \end{cases}\quad (3.43)$$

を用いて

$$\begin{aligned} & \int_{-(N_-+1/2)h}^{(N_++1/2)h} g(x) e^{i\omega x} dx - h \sum_{n=-N_-}^{N_+} g(nh) e^{i\omega nh} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_N} \Phi_h(z) g(z) e^{i\omega z} dz \end{aligned} \quad (3.44)$$

と表される [16], [5]. ただし, 積分路  $C_N$  は Fig. 3.3 に示すような,  $C_+$ ,  $C_{+d}$ ,  $C_-$ ,  $C_{-d}$  かなる閉じた路である.

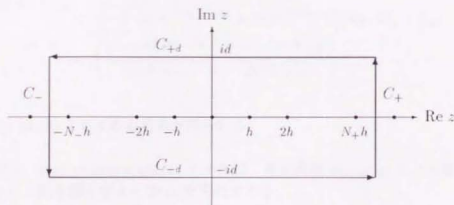


Fig. 3.3: 積分路  $C_N$

そこで, (3.44) 式の評価を行う.

$$\left| \frac{1}{2\pi i} \int_{C_N} \Phi_h(z) g(z) e^{i\omega z} dz \right| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{C_N} |\Phi_h(z) e^{i\omega z}| \cdot |g(z)| \cdot |dz| \quad (3.45)$$

まず,  $C_{\pm d}$  からの寄与を調べるために  $z = x \pm id$  とおくと

$$\begin{aligned} |\Phi_h(x \pm id) e^{i\omega(x \pm id)}| &= \frac{2\pi e^{\mp\omega d}}{|1 - \exp(2\pi d/h \mp 2\pi i x/h)|} \\ &\leq \frac{2\pi e^{\mp\omega d}}{\exp(2\pi d/h) - 1} \end{aligned} \quad (3.46)$$

であり, したがって

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_{C_{+d} + C_{-d}} |\Phi_h(z) e^{i\omega z}| \cdot |g(z)| \cdot |dz| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \left( \frac{2\pi e^{+\omega d}}{\exp(2\pi d/h) - 1} + \frac{2\pi e^{-\omega d}}{\exp(2\pi d/h) - 1} \right) \hat{M}L \\ &\leq \frac{2 \cosh(\omega d)}{\exp(2\pi d/h) - 1} \hat{M}L \end{aligned} \quad (3.47)$$

となる.

次に,  $C_{\pm}$ からの寄与は,  $z = (n+1/2)h \pm iy$  ( $n$  は整数,  $y > 0$ ) とおくと

$$\begin{aligned} |\Phi_h((n+1/2)h \pm iy)e^{i\omega((n+1/2)h \pm iy)}| &= \frac{2\pi e^{\mp\omega y}}{1 + \exp(2\pi y/h)} \\ &< 2\pi e^{-(2\pi/h \pm \omega)y} \end{aligned} \quad (3.48)$$

であるので

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{C_+ + C_-} |\Phi_h(z)e^{i\omega z}| \cdot |g(z)| \cdot |dz| \\ &< \frac{1}{2\pi} \int_0^d (2\pi e^{-(2\pi/h - \omega)y} + 2\pi e^{-(2\pi/h + \omega)y}) dy \cdot (\hat{\varepsilon}_- + \hat{\varepsilon}_+) \\ &= \left( \frac{1 - e^{-(2\pi/h - \omega)d}}{2\pi/h - \omega} + \frac{1 - e^{-(2\pi/h + \omega)d}}{2\pi/h + \omega} \right) \hat{\varepsilon} \end{aligned} \quad (3.49)$$

となる.

式 (3.47), (3.49) より求める結果が得られる.

[証明終り]

この定理で,  $g(x) = \hat{w}(x; p, q)f(x)$  とすれば, 重み関数  $\hat{w}(x; p, q)$  による離散化誤差の評価が得られ, 刻み幅  $h$  が  $h < 2\pi/\omega$  を満たすとき,

$$|\hat{F}_w^{(L)}(\omega) - \hat{F}_w^{(N,h)}(\omega)| < \frac{ML}{\pi} \cdot \frac{\exp(\omega d - 2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} + \frac{d}{\pi} \hat{\varepsilon} \quad (3.50)$$

となることがわかる. ただし,  $\hat{F}_w^{(L)}(\omega)$ ,  $\hat{F}_w^{(N,h)}(\omega)$  はそれぞれ (3.38) 式, (3.39) 式の  $w(x; p, q)$  を  $\hat{w}(x; p, q)$  で置き換えたものである.

以上,  $F_w^{(N,h)}(\omega)$  に含まれる誤差の評価をまとめると

$$|F(\omega) - F_w(\omega)| < \frac{M}{\pi} \left( \frac{\sqrt{2\pi}p}{2\sqrt{1-\alpha^2}} e^{(q-\omega\alpha p/2)^2/(1-\alpha^2)} + \frac{\sqrt{2}}{\omega\alpha} e^{(q-\omega\alpha p)q} \right) e^{-q^2} \quad (3.51)$$

$$|F_w(\omega) - F_w^{(L)}(\omega)| \leq \frac{Mp}{4\sqrt{\pi}} e^{-q^2} \quad (3.52)$$

$$|\hat{F}_w^{(L)}(\omega) - \hat{F}_w^{(N,h)}(\omega)| < \frac{ML}{\pi} \cdot \frac{\exp(\omega d - 2\pi d/h)}{1 - \exp(-2\pi d/h)} + \frac{d}{\pi} \hat{\varepsilon} + \frac{ML}{2\pi} e^{-q^2} \quad (3.53)$$

となる. (3.52) 式は  $L = 2pq$  と仮定し, (3.34) 式より評価した. また, (3.53) 式の右辺第三項は  $w(x)$  を  $\hat{w}(x)$  に置き換えた誤差である.

一般に, 解析的な関数の Fourier 変換は,  $\omega$  を大きくすると急激に値が減少することが知られていて, とくに定理 3 の条件のもとでは,  $\exp(-\omega d)$  のオーダーで減少する. したがって,  $\omega$  が大きい場合では相対誤差で評価すべきで, このときの相対誤差は, ここで評価した絶対誤差に比べて  $\exp(\omega d)$  倍程度大きくなる.

次に,  $p, q, h$  を固定して  $\omega$  を変化させたときの誤差の評価の振舞いを調べる. ここで, 打ち切り誤差に相当する  $\varepsilon$  は, 条件  $L = 2pq$  のもとでは  $\exp(-q^2)$  程度であり, 十分小さいと仮定しておく.  $\omega$  を小さくした場合, (3.51) 式より  $\omega$  が  $2q/(p\alpha_{\sup})$  以下で誤差の評価が悪くなり,  $\omega = 0$  でもはや近似は保証されなくなる. 被積分関数の減衰が遅く絶対可積分でない場合は  $\omega = 0$  で積分値が発散するので, これは当然である. 一方  $\omega$  を大きくした場合, (3.53) 式より誤差の評価は指数関数的に増大し, 相対誤差を考慮すると,  $\omega > \pi/h$  でもはや近似は保証されなくなる. これは標準化定理より明らかなことである. したがってパラメータを固定した場合, 計算できる  $\omega$  の範囲には限界があることがわかる.

### 3.6 重み関数の拡張と近似度の改善

定理 1.2 の証明より, 関数  $w(x; p, q)$  は  $\frac{1}{2}\operatorname{erfc}(x/p - q)$  である必要はなく, 任意の  $\alpha > 0$  に対して以下の条件を満たす整関数  $\phi(t)$  および適当な正の数  $p, q$  を用いて

$$w(x; p, q) = \int_{x/p-q}^{\infty} \phi(t) dt \quad (3.54)$$

と拡張できる.

1.  $\phi(t) \rightarrow 0, \quad t \rightarrow \pm\infty$

2.  $\int_{-\infty}^{\infty} \phi(t) dt = 1$

3. 十分大きな  $p, q$  に対して

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \max_{0 \leq \theta \leq \alpha} |\phi((1 \pm i\theta)t/p - q)| e^{-\pi\theta t} < \infty$$

4. ある  $\lambda > 0$  に対して

$$\lim_{\lambda p = q \rightarrow \infty} \max_{0 \leq \theta \leq \alpha} \int_0^{\infty} |\phi((1 \pm i\theta)t/p - q)| e^{-\pi\alpha t} dt = 0$$

これらの条件を満たしていれば, 定理 1 の証明において  $|1 - w(z; p, q)|$  の評価を

$$|1 - w(z; p, q)| \leq \left| \int_{-\infty}^{x/p-q} \phi(t) dt \right| + \int_{x/p-q}^{z/p-q} |\phi(t)| \cdot |dt|, \quad x = \operatorname{Re} z \quad (3.55)$$

に変更することにより,  $\lambda p = q' \rightarrow \infty$  で  $|S^{(\infty)} - S_w^{(\infty)}| \rightarrow 0$  となることが, 同様にして導かれる (定理 2 についても同様にしても変更できる). ここで問題となるのは  $S_w^{(\infty)}$  の近似の度合である. そこで, 近似度をよくするような  $\phi(t)$  の選び方について次に述べる.



まず,  $p, q$  を固定したときの定理 1 での積分路  $C_{\pm}$  からの誤差の主要項は

$$\max_{0 \leq \theta \leq \alpha} \int_0^{\infty} |\phi((1 \pm i\theta)t/p - q)| e^{-\pi\alpha t} dt$$

である。その寄与は  $\text{Im } z \rightarrow \infty$  での  $|\phi(z)|$  の発散のオーダー (位数) に依存し、位数を小さくすれば、この誤差の寄与も小さくなる。しかしこれには限界があることが次のようにしてわかる。

簡単化のため、 $\phi(z)$  は偶関数で、ある整数  $\psi(z)$  により  $\phi(z) = \psi(z^2)$  で表されると仮定する。このとき、 $\psi(z)$  の位数をできるだけ小さくすればよいわけであるが、位数が  $1/2$  より小さい整数は、適当な増加数列  $r_n \rightarrow \infty$  に対して  $\lim_{n \rightarrow \infty} \min_{|z|=r_n} |\psi(z)| = \infty$  となることがわかっている (Wiman の定理 [1] より)。すなわち位数が  $1/2$  よりも小さい整数は条件 1.2 を満たさない。したがって、限界の  $\psi(z)$  は、位数が  $1/2$  となる漸近的に  $\exp(|z|^{1/2+\epsilon})$  のオーダーで発散する関数であることがわかる。

このような、位数が  $1/2$  の関数の具体例として  $\psi(z) = \sin \sqrt{z}/(\pi \sqrt{z})$  がある。しかしこの例は、 $\phi(z)$  が実軸上で  $e^{-z^2}$  のように指数関数的に減少しないため、打ち切り誤差を小さくできず実用にはならない。しかし少し工夫をすれば、原点近傍で  $e^{-z^2}$  のような振舞いをする実用的な関数  $\phi(z)$  の例は、以下のようにして作ることができる。

$$\phi(z) = \frac{u(\beta^2 - z^2)}{\int_{-\infty}^{\infty} u(\beta^2 - t^2) dt} \quad (3.56)$$

ここで、 $u(z)$  は、負の実軸方向で減少し、その他の方向で主に  $\exp(\sqrt{z})$  のように振舞う位数  $1/2$  の整数関数で、 $\beta$  はある程度大きな正の数である。このような  $u(z)$  の例として

$$u(z) = I_0(\sqrt{z}) \quad (3.57)$$

$$u(z) = \frac{\sinh \sqrt{z}}{\sqrt{z}} \quad (3.58)$$

$$u(z) = \frac{I_1(\sqrt{z})}{\sqrt{z}} \quad (3.59)$$

$$u(z) = \frac{\cosh \sqrt{z}}{(\pi/2)^2 + z} \quad (3.60)$$

などが考えられる。

これらの例の場合、 $\phi(z)$  の実軸での振舞いは、 $|z| \leq \beta$  で指数関数的、 $|z| \geq \beta$  で三角関数/代数関数的となる。 $w(x; p, q)$  の振舞いも同様に、区間  $p(q - \beta) \leq x \leq p(q + \beta)$  で指数関数的、その他の区間で三角関数/代数関数的となる。したがって、連続版 Euler 変換の積分は、この区間の境界で打ち切る (すなわち  $L = p(q + \beta)$  とする) のが適当である。この場合の打ち切り誤差のオーダーは以下のように表される。

**定理 4** 関数  $f(z)$ ,  $w(x; p, q)$  が領域  $0 \leq \arg(z - L) \leq \delta$  ( $L$ ,  $\delta$  はある正の数) で正則で、その領域で  $|f(z)| \leq M$ ,  $|w(x; p, q)| \leq \varepsilon \exp(\mu |\text{Im } z|)$  ( $0 < \mu < \omega$ ) かつ

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \max_{0 \leq \theta \leq \delta} |f(R + L + iR \tan \theta)| = 0$$



を満たすならば

$$\left| \int_L^\infty w(x; p, q) f(x) e^{i\omega x} dx \right| \leq \frac{M\varepsilon}{(\omega - \mu) \sin \delta} \quad (3.61)$$

が成り立つ.

証明

積分路を正則な領域の範囲で以下のように変形する.

$$\begin{aligned} \int_L^{L+R} w(x; p, q) f(x) e^{i\omega x} dx &= \int_L^{L+R+iR \tan \delta} w(z; p, q) f(z) e^{i\omega z} dz \\ &\quad - \int_{L+R}^{L+R+iR \tan \delta} w(z; p, q) f(z) e^{i\omega z} dz \end{aligned} \quad (3.62)$$

第1項目の積分からの寄与は

$$\begin{aligned} \left| \int_L^{L+R+iR \tan \delta} w(z; p, q) f(z) e^{i\omega z} dz \right| &\leq \int_0^R \varepsilon e^{\mu t \tan \delta} \cdot M \cdot e^{-\omega t \tan \delta} \frac{dt}{\cos \delta} \\ &< \frac{M\varepsilon}{(\omega - \mu) \sin \delta} \end{aligned} \quad (3.63)$$

となり, 第2項目の積分からの寄与は

$$\begin{aligned} &\left| \int_{L+R}^{L+R+iR \tan \delta} w(z; p, q) f(z) e^{i\omega z} dz \right| \\ &\leq \int_0^{R \tan \delta} \varepsilon e^{\mu y} \cdot \max_{0 \leq \theta \leq \delta} |f(R+L+iR \tan \theta)| \cdot e^{-\omega y} dy \\ &\rightarrow 0, \quad R \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (3.64)$$

となる.

[証明終り]

定理4は,  $w(x; p, q)$  の減衰がきわめて遅い場合でも, ある条件を満たせば打ち切り誤差を小さくすることができるとを保証するものである. 例えば,  $u(z) = I_0(\sqrt{z})$  と選んだ場合の重み関数は

$$w(x; p, q) = \frac{1}{2 \cosh \beta} \int_{x/p-q}^\infty I_0(\sqrt{\beta^2 - t^2}) dt \quad (3.65)$$

となり,  $x \rightarrow \infty$  の漸近形は

$$w(x; p, q) \sim \frac{1}{2 \cosh \beta} \sqrt{\frac{2}{\pi(x/p-q)}} \cos(x/p-q-3\pi/4) \quad (3.66)$$

となる. したがって, この場合,  $\beta$  を大きくしたときの打ち切り誤差のオーダーは条件  $1/p < \omega$  を満たすならば定理4より  $\exp(-\beta)$  に比例する程度になる.

重み関数(3.65)はまた, Fourier変換による誤差解析より, 準最適な重み関数であることもわかっている. Fourier変換による誤差解析を Appendix Cに示した. Fourier変換による誤差の項を2乗ノルムで小さくする重み関数は, 回転楕円体波動関数(Spheroidal Wave Function)の積分で表されることが示されるが, 関数  $I_0(\sqrt{\beta^2 - t^2})$  は回転楕円体波動関数の近似関数であることがわかっている[10], [1].

### 3.7 計算例

#### 3.7.1 交代級数の加速例

交代級数

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n+1} = \log 2$$

を

1. Euler 変換

$$S_{\text{Euler}}^{(N, N_0)} = \sum_{m=0}^{N_0-1} (-1)^m a_m + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-N_0-1} \left(-\frac{1}{2}\Delta\right)^n a_{N_0}$$

2. 連続な重みの Euler 変換

$$S_w^{(N)} = \sum_{n=0}^{N-1} w(n; p, q) (-1)^n a_n$$

によって計算した結果を Table 3.1 に示す.

Table 3.1: 交代級数  $S$  の計算結果

		$N$	絶対誤差
1.	Euler 変換, $N_0 = 7$	21	$1.8 \times 10^{-11}$
2.	$w(x; p, q) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(x/2.5 - 4.2)$	21	$6.1 \times 10^{-9}$
	$w(x; p, q) = \frac{1}{2 \cosh \beta} \int_{2\beta x/N-\beta}^{\infty} I_0(\sqrt{\beta^2 - t^2}) dt, \beta = 33$	21	$2.9 \times 10^{-16}$

Euler 変換としては、いわゆる遅延 Euler 変換 [13] を使っている。Euler 変換を開始する項  $N_0$  およびパラメータ  $p, q$  は精度が高くなるように選んである。Euler 変換の連続版で関数  $w(x; p, q) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(x/p - q)$  を用いると、結果の精度は通常の Euler 変換より少し悪くなる。一方、近似を良くするように選んだ関数  $w(x; p, q) = \frac{1}{2 \cosh \beta} \int_{2\beta x/N-\beta}^{\infty} I_0(\sqrt{\beta^2 - t^2}) dt$  による結果は、通常の Euler 変換より確かに精度が良くなることがわかる。

#### 3.7.2 減衰の遅い関数の Fourier 変換への適用例

$f(x)$  の Fourier 変換

$$F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx \quad (3.67)$$

を連続版 Euler 変換により

$$F_w^{(L)}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-L}^L w(|x|; p, q) f(x) e^{-i\omega x} dx \quad (3.68)$$

で近似し

$$F_w^{(N,h)}\left(\frac{2\pi}{Nh}k\right) = \frac{h}{2\pi} \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} w(|nh|; p, q) f(nh) e^{-2\pi i n k / N} \quad (3.69)$$

により離散化を行う。用いる重み関数は

$$\begin{aligned} w_1(x; p, q) &= \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(x/p - q) \\ w_2(x; p, q, \beta) &= \frac{1}{2 \cosh \beta} \int_{x/p-q}^{\infty} I_0(\sqrt{\beta^2 - t^2}) dt \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \cosh \beta} \int_0^{x/p-q} \cosh(\beta \cos \theta) \frac{\sin((x/p-q) \sin \theta)}{\sin \theta} d\theta \end{aligned}$$

の2種類とし、次の関数に対して (3.69) 式により計算を行った例を Fig.3.4, Fig.3.5, Fig.3.6 に示す。

$$\begin{aligned} f_1(x) &= \frac{1}{1+x^2}, \quad (F_1(\omega) = \frac{1}{2} e^{-|\omega|}) \\ f_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}, \quad (F_2(\omega) = \frac{1}{\pi} K_0(|\omega|)) \end{aligned}$$

標本数、刻み幅は  $N = 512$ ,  $h = 0.125$  と選び,  $w_1(x; p, q)$  のパラメータは  $p = 3.0$ ,  $q = 5.4$  ととり,  $w_2(x; p, q, \beta)$  のパラメータは  $p = 0.43$ ,  $q = 37$ ,  $\beta = 33$  とし, 計算を行った。比較のために,  $w(x; p, q)$  を用いずに直接計算を行ったときの誤差を Fig.3.7 に示す。

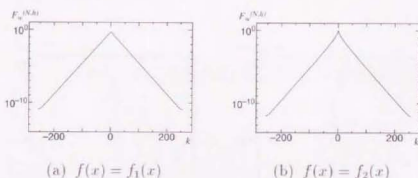


Fig. 3.4:  $F_w^{(N,h)}\left(\frac{2\pi}{Nh}k\right)$  の計算結果,  $N = 512$ ,  $h = 0.125$ ,  $w(x; p, q) = w_1(x; p, q)$ ,  $p = 3.0$ ,  $q = 5.4$

計算は仮数部が53ビットの倍精度(有効桁数は約16桁)で行った。打ち切りに関するパラメータは14桁程度になるように選んである。結果の図より、誤差の振舞いは  $|\omega|$  ( $\omega = \frac{2\pi}{Nh}k$  である) が小さいところで精度が悪くなり、一方、 $|\omega|$  が大きいところで指数関数的に誤差が大きくなるのがわかる。この結果は理論的な誤差評価とはほぼ一致している。また  $w_1(x; p, q)$  を用いるよりも  $w_2(x; p, q, \beta)$  を用いる方が小さい  $|\omega|$  での精度が良くなり、計算できる  $\omega$  の範囲が広くなることがわかる。

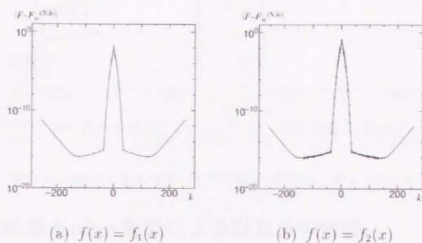


Fig. 3.5:  $F_w^{(N,h)}(\frac{2\pi}{Nh}k)$  の誤差,  $N = 512$ ,  $h = 0.125$ ,  $w(x;p,q) = w_1(x;p,q)$ ,  $p = 3.0$ ,  $q = 5.4$

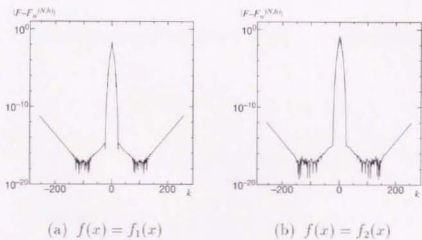
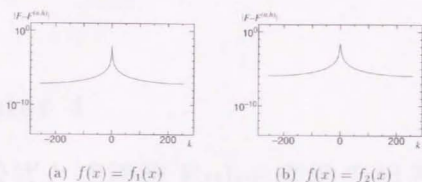


Fig. 3.6:  $F_w^{(N,h)}(\frac{2\pi}{Nh}k)$  の誤差,  $N = 512$ ,  $h = 0.125$ ,  $w(x;p,q) = w_2(x;p,q,\beta)$ ,  $p = 0.43$ ,  $q = 37$ ,  $\beta = 33$

Fig. 3.7: 重み関数を用いない  $F^{(N,h)}(\frac{2\pi}{N}k)$  の誤差,  $N = 512$ ,  $h = 0.125$ 

### 3.8 連続版 Euler 変換による計算法の特徴

連続版 Euler 変換は、被積分関数にある種の性質を満たす重み関数を掛けることにより、近似的に積分値を保ったまま被積分関数の減衰を速くすることができる。したがって、等間隔の刻み幅の台形則を適用した場合、FFT が直接利用できて、減衰の遅い関数の Fourier 変換を効率よく計算することができるという利点がある。また、Bessel 関数などの三角関数以外の振動項を含む積分に対しても有効である。しかし、単に一つの  $\omega$  の Fourier 積分を計算するという目的ならば、ここで提案した方法は、Fourier 型積分に対する DE 公式と比較して効率が良くない。

## Chapter 4

# DE 公式と連続版 Euler 変換の組み合わせ

### 4.1 DE 公式と連続版 Euler 変換の長所と短所

Fourier 型積分に対する DE 公式の長所と短所として

- 長所：収束の遅い Fourier 型積分を効率よく計算することができる。
- 短所 1：等間隔にゼロ点をもつ関数の振動積分にしか適用できず、さらに、その周期と位相があらかじめわかっていなければならない。
- 短所 2：自動積分での、次第に精度を向上するプロセスで、前段の結果を用いることができます、その場合、効率が多少悪くなる。

などがある。

連続版 Euler 変換の長所と短所として

- 長所 1：振動周期がわからない積分や、振動周期が等間隔でない積分に対して適用できる。
- 長所 2：等間隔の台形則で離散化する場合、FFT が利用できて、減衰の遅い関数の Fourier 変換を効率よく計算することができる。
- 短所：単独の振動積分を計算するという目的ならば、等間隔の台形則で直接離散化する方法は効率があまりよくない。

などがある。

そこで、Fourier 型積分に対する DE 公式と連続版 Euler 変換とをうまく組み合わせることで、互いの欠点を補うことを考える。

## 4.2 DE 公式と連続版 Euler 変換の組み合わせ

減衰の遅い振動項を含む積分

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx \quad (4.1)$$

を、以下の方法で近似計算する。

まず、連続版 Euler 変換の重み関数を用いて

$$I_w = \int_0^{\infty} w(x; p, q) f(x) dx \quad (4.2)$$

で近似する。次に、Fourier 型積分に対する DE 変換  $x = M\varphi(t)$ ,  $\varphi(t) \rightarrow 0$  as  $t \rightarrow -\infty$ ,  $\varphi(t) \rightarrow l$  as  $t \rightarrow \infty$  により

$$I_w = \int_{-\infty}^{\infty} w(M\varphi(t); p, q) f(M\varphi(t)) M\varphi'(t) dt \quad (4.3)$$

と変数変換し、これに刻み幅  $h$  の台形則を適用し

$$I_{w,h} = Mh \sum_{n=-\infty}^{\infty} w(M\varphi(nh); p, q) f(M\varphi(nh)) \varphi'(nh) \quad (4.4)$$

により計算する。

この方法は、被積分関数  $f(x)$  の  $x \rightarrow \infty$  での減衰を連続版 Euler 変換の重み関数を用いて速くするため、単独の Fourier 型積分に対する DE 公式での標本点を被積分関数のゼロ点に近付けるための条件は必要ない。したがって、 $M$  と  $h$  は自由に選ぶことができ、変数変換  $\varphi(t)$  の  $t \rightarrow \infty$  での振舞いも自由に選ぶことができる。

## 4.3 変数変換 (DE 変換) の選択

Fourier 型積分に対する DE 変換の具体例として

$$\varphi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2\pi \sinh t)} \quad (4.5)$$

またはその改良版

$$\varphi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2t - \mu(1 - \exp(-t)) - \nu(\exp(t) - 1))} \quad (4.6)$$

などが考えられる。しかし、ここでは連続版 Euler 変換の加速を行うため、単独の Fourier 型 DE 公式での標本点を被積分関数のゼロ点に近付けるための条件、すなわち、 $t \rightarrow \infty$  で二重指数関数的に  $\varphi(t) \rightarrow l$  となる条件は必要ない。したがって、例えば

$$\varphi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2t - \mu(1 - \exp(-t)))} \quad (4.7)$$

のように  $t \rightarrow \infty$  で一重指数関数的に  $\varphi(t) \rightarrow l$  となる変換も有効である。



## 4.4 数値例および性能比較

ここでの計算では、変数変換は

- 変数変換 1:

$$\varphi_1(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2t - 2\mu \sinh t)}$$

- 変数変換 2:

$$\varphi_2(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2t - \mu(1 - \exp(-t)))}$$

を用い、重み関数は

- 重み 1:

$$w_1(x; p, q) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(x/p - q)$$

- 重み 2:

$$\begin{aligned} w_2(x; p, q) &= \frac{1}{2 \cosh \beta} \int_{x/p-q}^{\infty} I_0(\sqrt{\beta^2 - t^2}) dt \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \cosh \beta} \int_0^{\pi/2} \cosh(\beta \cos \theta) \frac{\sin((x/p - q) \sin \theta)}{\sin \theta} d\theta \end{aligned}$$

を用いる.

テストする積分は

- 積分 1:

$$I_1 = \int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx$$

- 積分 2:

$$I_2 = \int_0^{\infty} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx$$

- 積分 3:

$$I_3 = \int_0^{\infty} \frac{\cos x}{1+x^2} dx$$

- 積分 4:

$$I_4 = \int_0^{\infty} J_0(x) dx$$

である.

パラメータの選択は,  $Mh$  が被積分関数のゼロ点の周期と一致しないように  $M = 20$ ,  $h = \pi/21$  と固定し計算を行った. 変数変換のパラメータは, 変換 1 の場合は  $\mu = 0.15$ , 変換 2 の場合は  $\mu = 0.15$  とし, 重み関数のパラメータは, 重み 1 の場合は  $p = 11$ ,  $q = 6.2$ , 重み 2 の場合は  $p = 1.4$ ,  $q = \beta = 42$  と選んだ. これらのパラメータは, 誤差評価で得られ

た結果から、精度が  $10^{-16}$  程度になるように定めた値である。参考のため、単独の Fourier 型積分に対する DE 公式による計算も行った。この場合の変数変換は、変換 1 を選び、パラメータは、 $M = 21$ ,  $h = \pi/21$ ,  $\mu = 0.15$  と選び、積分 1, 2, 3 について計算を行った。これらの結果を Table 4.1, Table 4.2 に示す。

計算回数  $N$  は、台形則の離散化誤差と連続版 Euler 変換の誤差との和が打ち切り誤差とほぼ等しくなるところで打ち切った回数であり、誤差  $E$  は絶対誤差である。性能の比較は  $-\log_{10} E/N$  すなわち、一点あたり何桁の計算ができるかという値で行う。

Table 4.1: 計算結果

	$I_1$			$I_2$		
	$N$	誤差: $E$	$-\log_{10} E/N$	$N$	誤差: $E$	$-\log_{10} E/N$
変換 1, 重み 1	78	$1.0 \times 10^{-16}$	0.205	83	$1.0 \times 10^{-14}$	0.168
変換 2, 重み 1	84	$6.3 \times 10^{-17}$	0.193	88	$6.4 \times 10^{-15}$	0.161
変換 1, 重み 2	77	$5.3 \times 10^{-19}$	0.237	81	$1.9 \times 10^{-17}$	0.207
変換 2, 重み 2	81	$1.3 \times 10^{-20}$	0.246	87	$3.2 \times 10^{-19}$	0.213
単独 DE	72	$6.4 \times 10^{-18}$	0.239	78	$1.9 \times 10^{-17}$	0.214

Table 4.2: 計算結果

	$I_3$			$I_4$		
	$N$	誤差: $E$	$-\log_{10} E/N$	$N$	誤差: $E$	$-\log_{10} E/N$
変換 1, 重み 1	74	$7.7 \times 10^{-14}$	0.177	78	$7.4 \times 10^{-15}$	0.181
変換 2, 重み 1	80	$3.7 \times 10^{-15}$	0.180	82	$5.3 \times 10^{-15}$	0.174
変換 1, 重み 2	71	$8.2 \times 10^{-14}$	0.184	76	$1.2 \times 10^{-17}$	0.223
変換 2, 重み 2	77	$3.9 \times 10^{-15}$	0.187	81	$1.5 \times 10^{-19}$	0.232
単独 DE	67	$7.1 \times 10^{-14}$	0.196	-	-	-

この結果より、重み 2 を用いた結果は重み 1 を用いた結果よりも効率がよくなることがわかる。単独の Fourier 型積分に対する DE 公式と比較して、この方法の効率は同程度あるいは少し悪くなる程度である。

## 4.5 自動積分ルーチンの設計と性能評価

### 4.5.1 自動積分ルーチンの設計

自動積分とは、被積分関数、積分区間、許容誤差、最大計算回数などを与えると、許容誤差を満たす積分の近似値を与えるか、何らかのエラーメッセージを返す計算ルーチンのことである。

前節の計算結果より、この Fourier 型積分に対する DE 公式と連続版 Euler 変換とを組み合わせる方法は、 $M$ ,  $h$  を独立に選ぶことができることがわかる。したがって、刻み幅  $h$

に対して  $M$  を固定することができて、自動積分の次第に精度を向上するプロセスで  $h$  を半分にしたときの前段の結果が利用できることがわかる。また、振動周期のわからない積分や、Bessel 関数を含むような振動周期が等間隔でない積分に対しても適用可能である。

自動積分の具体的な計算手順は以下になる。与えられているものは、被積分関数  $f(x)$ 、漸近的な振動周波数  $\omega$  (わからない場合は適当に定める)、許容誤差、最大計算回数とし、積分区間は  $(0, \infty)$  とする。

1. 単独の Fourier 型積分に対する DE 公式を用いた場合の半経験的な誤差が、許容誤差の平方根程度になるように  $M, h$  を定める。この後  $M$  は固定する。
2. 連続版 Euler 変換の重み関数  $w(x; p, q)$  のパラメータ  $p, q$  を、半経験的な誤差が許容誤差程度になるように定める。
3. Fourier 型積分に対する DE 公式と連続版 Euler 変換とを組み合わせる方法

$$I_{w,h} = Mh \sum_{n=-\infty}^{\infty} w(M\varphi(nh); p, q) f(M\varphi(nh)) \varphi'(nh)$$

により計算する。ここで、無限和は、和の項の値が許容誤差以下に達するところで打ち切る。

4. 刻み幅  $h$  を半分にして、3. の計算を行う。このとき、前段の結果を利用して効率的に計算を行う。
5. 台形則の誤差の振舞い  $\Delta I_{w,h} = O(\exp(-c/h))$  を利用して、前段の結果  $I_{w,2h}$  と現在の結果  $I_{w,h}$  から誤差を推定する。この推定誤差 (絶対誤差) は  $|I_{w,h} - I_{w,2h}|^2 / |I_{w,h}|$  である。推定誤差が許容誤差よりも大きい場合は 4. に戻る。
6. 連続版 Euler 変換の重みのパラメータ  $p$  の値を適当に増加させ、3. の計算を行う。このとき、前段の結果を利用して効率的に計算を行う。
7. 前段の結果 ( $p$  を増加する前の結果) と現在の結果の差をとり、連続版 Euler 変換の推定誤差とする。推定誤差が許容誤差よりも大きい場合は 6. に戻る。

実際の自動積分プログラムでは、変数変換は

$$\varphi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2t - \mu(1 - \exp(-t)))} \quad (4.8)$$

とし、重み関数は

$$\begin{aligned} w(x; p, q) &= \frac{1}{2 \cosh \beta} \int_{x/p-q}^{\infty} I_0(\sqrt{\beta^2 - t^2}) dt \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \cosh \beta} \int_0^{\pi/2} \cosh(\beta \cos \theta) \frac{\sin((x/p-q) \sin \theta)}{\sin \theta} d\theta \end{aligned} \quad (4.9)$$

とした。刻み幅  $h$  の初期値  $h_0$  は

$$h_0 = \frac{9}{1 - \log \epsilon} \quad (4.10)$$

と選び、パラメータ  $M$ ,  $\mu$ ,  $\beta$ ,  $q$  および  $p$  の初期値  $p_0$  は

$$M = \frac{\pi}{h_0 \omega} \quad (4.11)$$

$$\mu = 0.25 / \sqrt{1 + M \log(1 + M) / (4\pi)} \quad (4.12)$$

$$\beta = 1 - \log \frac{\epsilon}{1 - \log \epsilon} \quad (4.13)$$

$$q = 2 + \beta \quad (4.14)$$

$$p_0 = \frac{1}{\omega} \quad (4.15)$$

と選んだ。ここで、 $\epsilon$  は許容相対誤差である。また、 $p$  の増加法は、奇数回の反復では 1.03 倍とし、偶数回の反復では 1.4 倍とした。

次に、この自動積分ルーチンと他の自動積分ルーチンとの性能比較を行う。

#### 4.5.2 自動積分ルーチンの性能評価

計算する積分は

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty e^{-x} \cos x \, dx = \frac{1}{2} \\ I_2 &= \int_0^\infty \frac{x \sin x}{1+x^2} \, dx = \frac{\pi}{2} e^{-1} \\ I_3 &= \int_0^\infty \frac{\cos x}{1+x^2} \, dx = \frac{\pi}{2} e^{-1} \\ I_4 &= \int_0^\infty \log \frac{4+x^2}{1+x^2} \cos x \, dx = \pi(e^{-1} - e^{-2}) \end{aligned}$$

である。結果は Table 4.3, Table 4.4 に示す。

Table 4.3: 計算結果 (許容誤差 =  $10^{-6}$ )

integral	present routine		Hasegawa-Torii		QUADPACK	
	N	Error	N	Error	N	Error
$I_1$	27	$1 \times 10^{-7}$	33	$3 \times 10^{-9}$	150	$3 \times 10^{-16}$
$I_2$	36	$9 \times 10^{-9}$	45	$1 \times 10^{-6}$	385	$3 \times 10^{-9}$
$I_3$	41	$2 \times 10^{-8}$	57	$1 \times 10^{-8}$	335	$7 \times 10^{-10}$
$I_4$	41	$4 \times 10^{-8}$	49	$4 \times 10^{-8}$	335	$2 \times 10^{-9}$

Hasegawa-Torii とあるのは [3] による結果である。QUADPACK とあるのは数値積分パッケージ QUADPACK 中のルーチン DQAWF[12] を用いた結果で、[3] に示されてい

Table 4.4: 計算結果 (許容誤差 =  $10^{-12}$ )

integral	present routine		Hasegawa-Torii		QUADPACK	
	N	Error	N	Error	N	Error
$I_1$	51	$3 \times 10^{-15}$	61	$5 \times 10^{-16}$	280	$5 \times 10^{-12}$
$I_2$	70	$2 \times 10^{-14}$	94	$4 \times 10^{-15}$	700	$8 \times 10^{-13}$
$I_3$	79	$1 \times 10^{-15}$	93	$1 \times 10^{-13}$	675	$3 \times 10^{-13}$
$I_4$	79	$4 \times 10^{-14}$	94	$1 \times 10^{-14}$	670	$7 \times 10^{-13}$

る.  $N$  は被積分関数の評価回数で, Error は絶対誤差である. 許容誤差限界は,  $10^{-6}$  または  $10^{-12}$  で, Hasegawa-Torii, QUADPACK は絶対誤差で, 本ルーチンは相対誤差で与えている.

次に, 以下の積分について, 本ルーチンを用いて計算を行った.

$$\begin{aligned}
 I_5 &= \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2} \\
 I_6 &= \int_0^\infty \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \\
 I_7 &= \int_0^\infty \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \\
 I_8 &= \int_0^\infty \log x \sin x dx = -\gamma \\
 I_9 &= \int_0^\infty \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} J_0(x) dx = e^{-1} \\
 I_{10} &= \int_0^\infty J_0(\sqrt{1+x^2}) dx = \cos 1 \\
 I_{11} &= \int_0^\infty J_0(\sqrt{2x+x^2}) dx = e^{-1} \\
 I_{12} &= \int_0^\infty \log x J_0(x) dx = -\gamma - \log 2
 \end{aligned}$$

結果を Table 4.5 に示す.

許容誤差は相対誤差として与えている.  $N$  は被積分関数の評価回数で, Error は結果の絶対誤差である.

$I_7, I_8, I_{12}$  は積分区間の端点で発散する特異性をもつ積分で,  $I_8$  は  $x \rightarrow \infty$  で被積分関数が振動しながら発散する積分である.  $I_9, I_{10}, I_{11}, I_{12}$  は Bessel 関数を含む振動周期が等間隔でない積分である. これらの積分に対して, 本ルーチンは問題なく適用できることがわかる.

## Chapter 5

## まとめ

Table 4.5: 計算結果

integral	許容誤差 = $10^{-6}$		許容誤差 = $10^{-12}$	
	$N$	Error	$N$	Error
$I_5$	40	$1.0 \times 10^{-8}$	80	$3.3 \times 10^{-15}$
$I_6$	38	$2.3 \times 10^{-8}$	76	$4.6 \times 10^{-15}$
$I_7$	45	$9.3 \times 10^{-9}$	85	$3.1 \times 10^{-15}$
$I_8$	40	$3.6 \times 10^{-8}$	74	$3.9 \times 10^{-15}$
$I_9$	39	$1.5 \times 10^{-9}$	75	$3.5 \times 10^{-15}$
$I_{10}$	43	$6.2 \times 10^{-9}$	79	$4.0 \times 10^{-15}$
$I_{11}$	43	$9.0 \times 10^{-9}$	79	$7.7 \times 10^{-16}$
$I_{12}$	43	$6.8 \times 10^{-9}$	81	$3.0 \times 10^{-14}$



## Chapter 5

### まとめ

本論文では、収束の遅い Fourier 型積分や、漸近的に  $\exp(i\omega x)$  という項をもつ振動積分に対する積分法をいくつか提案し、議論を行った。

最初に提案した方法は、Fourier 型積分に対する DE 公式で、標本点が被積分関数のゼロ点に近付くような DE 変換を用いる計算法である。この方法は、従来の方法と比較して Fourier 型積分を効率よく計算できる方法であるが、さらに改良を行い、振動しない積分に対する DE 公式と同じ誤差の振舞いをする変数変換を新たに提案した。

次に提案した方法は、連続版 Euler 変換による方法で、減衰の遅い関数の Fourier 変換を FFT を用いて効率よく計算することができる。この方法に対しても、性能をよくする重み関数の解析を行い、改良を行った。

これらの二つの方法には、互いに相反する長所と短所がある。そこで、この二つの方法を組み合わせ、より実用的な計算法を提案した。この組み合わせた方法は、Bessel 関数などを含む振動が等間隔でない積分や、振動周期がわからない積分に対して適用することができる。また、実際の自動積分ルーチンでの精度を次第に向上するプロセスで、前段の結果が利用できるため、この場合、効率をさらによくすることができる。

一般に、収束の遅い振動積分あるいは減衰の遅い関数の Fourier 変換の計算を行う場合には特別な工夫が必要で、普通の数値積分と比較して計算量が多くなるという難点がある。ここで提案した方法は、これらの Fourier 型積分を普通の積分とほぼ同程度の手間で行って計算でき、この難点を打破するものである。



## 謝辞

本研究を進めるに当たり、森正武教授には、有益な御指導を賜りました。ここに感謝の意を込めて深く御礼を申し上げます。また、研究に関する内容に関しては、森正武教授、杉原正顕助教授をはじめとして、助手の降旗大介氏、緒方秀教氏、大学院生の岡野大君、松尾宇泰君に常日頃から様々な討論に時間を差いて頂き、有難うございました。

## Bibliography

- [1] R.P.Boas, *Entire Functions*, Academic Press, 1954.
- [2] P.J.Davis and P.Rabinowitz, *Methods of numerical integration (second edition)*, Academic Press, 1984.
- [3] T.Hasegawa and T.Torii, *Indefinite integration of oscillatory functions by the Chebyshev series expansion*, Journal of Computational and Applied Mathematics 17 (1987), pp. 21-29.
- [4] J.F.Kaiser, *Nonrecursive digital filter design using the  $I_0 - \sinh$  window function*, Proc. IEEE International Symposium on Circuits and Systems, 1974.
- [5] 森正武, 数値解析と複素関数論, 筑摩書房, 1975.
- [6] M.Mori, *Developments in the double exponential formulas for numerical integration*, Proceedings of the International Congress of Mathematicians, Kyoto 1990, Springer-Verlag, 1991, pp. 1585-1594.
- [7] M.Mori, *The double exponential formulas for numerical integration over the half infinite interval*, in Numerical Mathematics Singapore 1988, ed. R.P.Agarwal et al., International Series of Numerical Mathematics 86 (1988), pp. 367-379.
- [8] M.Mori and T.Ooura, *Double exponential formulas for Fourier type integrals with a divergent integrand*, in Numerical Mathematics, ed. R.P.Agarwal, World Scientific Series in Applicable Analysis, 2 (1993), pp. 301-308.
- [9] T.Ooura and M.Mori, *The double exponential formula for oscillatory functions over the half infinite interval*, Journal of Computational and Applied Mathematics 38 (1991), pp. 353-360.
- [10] A.V.Oppenheim and R.W.Schafer, *Digital signal processing*, Prentice-Hall, 1975.
- [11] 長田直樹, 数値微分積分法, 現代数学社, 1987.
- [12] R.Piessens, E.de Doncker-Kapenga, C.W.Überhuber and D.K.Kahaner, *QUADPACK - A Subroutine Package for Automatic Integration*, Springer-Verlag, 1983.

- [13] 杉原正顯, 室田一雄, 数値計算法の数理, 岩波書店, 1995.
- [14] M.Sugihara, *Methods of numerical integration of oscillatory functions by the DE-formula with the Richardson extrapolation*, Journal of Computational and Applied Mathematics 17 (1987), pp. 47-68.
- [15] H.Takahasi and M.Mori, *Double exponential formulas for numerical integration*, Pub. RIMS, Kyoto Univ. 9 (1974), pp. 721-741.
- [16] H.Takahasi and M.Mori, *Error estimation in the numerical integration of analytic functions*, Rep. Comput. Centre Univ. Tokyo 3 (1970), pp. 41-108.
- [17] H.Toda and H.Ono, *Some remarks for efficient usage of the double exponential formulas*, Kokyuroku RIMS, Kyoto Univ. 339 (1978), pp. 74-109. (In Japanese)
- [18] J.Wimp, *Sequence transformations and their applications*, Academic Press, 1981.

## Appendix A

### Fourier 型積分に対する改良版 DE 公式 の誤差解析

ここでは、変数変換

$$x = M\varphi_{\alpha,\beta}(t + \frac{\theta}{M\omega}) \quad (\text{A.1})$$

$$\varphi_{\alpha,\beta}(t) = \frac{t}{1 - \exp(-2t - \alpha(1 - e^{-t}) - \beta(e^t - 1))} \quad (\text{A.2})$$

を用いたときの Fourier 型積分に対する DE 公式の誤差について考える。ただし、 $\alpha, \beta$  は 2.6 節より

$$\alpha = \beta/\sqrt{1 + M \log(1 + M)/(4\pi)} \quad (\text{A.3})$$

$$\beta = 0.25 \quad (\text{A.4})$$

と選ぶ。

Fourier 型積分

$$I = \int_0^\infty f(x) \sin(x + \theta) dx \quad (\text{A.5})$$

に対する DE 公式の離散化誤差は 2.4 節より

$$\begin{aligned} \Delta I_h = & \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M}) dz + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} g_1(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M}) dz \\ & + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_3} g_2(z) \Phi_h(z + \frac{\theta}{M}) dz \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

となる。ここで

$$\varphi_{\alpha,\beta}(z) = z + \varphi_{\beta,\alpha}(-z) \quad (\text{A.7})$$

が成り立つことに注意すると

$$g(z) = f(M\varphi_{\alpha,\beta}(z)) \sin(M\varphi_{\alpha,\beta}(z) + \theta) M\varphi'_{\alpha,\beta}(z) \quad (\text{A.8})$$

$$g_2(z) = f(Mz) \sin(Mz + \theta) M \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned}
 g_1(z) &= g(z) - g_2(z) \\
 &= f(Mz + M\varphi_{\beta,\alpha}(-z)) \sin(Mz + M\varphi_{\beta,\alpha}(-z) + \theta) (M - M\varphi'_{\beta,\alpha}(-z)) \\
 &\quad - f(Mz) \sin(Mz + \theta) M
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

である。積分路  $C_1, C_2, C_3$  は被積分関数が正則な領域で Fig. 2.6 のようにとる。

次に、変換  $\varphi_{\alpha,\beta}(z)$  の特異点について調べる。

**定理 A1** 関数  $\varphi_{\alpha,\beta}(z) = \frac{z}{1 - \exp(-2z - \alpha(1 - e^{-z}) - \beta(e^z - 1))}$ , ( $0 \leq \alpha \leq \beta \leq 1$ ) は領域  $|\operatorname{Im} z| \leq \pi/2$  で特異点をもたない。

**証明**

関数  $\varphi_{\alpha,\beta}(z)$  が領域  $|\operatorname{Im} z| \leq \pi/2$  で特異点をもつと仮定する。特異点は  $z \neq 0$  かつ

$$2z + \alpha(1 - e^{-z}) + \beta(e^z - 1) = 2\pi in, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \tag{A.11}$$

を満たす点である。そこで、まず  $z = x + iy$  とおき (A.11) 式の実部を調べる。

$$2x + \alpha(1 - e^{-x} \cos y) + \beta(e^x \cos y - 1) = 0 \tag{A.12}$$

(A.12) 式の左辺は  $x$  の関数として見た場合、 $x = -\infty$  で  $-\infty$ ,  $x = \infty$  で  $\infty$  となる単調増加関数である。また、 $x = \beta - \alpha$  で 0 以上、 $x = 0$  で 0 以下の値をもつ。したがって、(A.12) 式が成り立つ  $x$  の範囲は

$$0 \leq x \leq \beta - \alpha \leq 1 \tag{A.13}$$

である。一方、(A.11) 式の虚部は

$$2y - \alpha e^{-x} \sin y + \beta e^x \sin y = 2\pi n \tag{A.14}$$

である。(A.14) 式の左辺は  $y$  の関数として見た場合、 $|y| \leq \pi/2$  で単調増加となる関数で、最大値は

$$\pi - \alpha e^{-x} + \beta e^x \leq \pi + e < 2\pi$$

で、最小値は

$$-\pi + \alpha e^{-x} - \beta e^x \geq -(\pi + e) > -2\pi$$

である。また、(A.12) 式と条件  $z \neq 0$  より  $y \neq 0$  なので、(A.14) 式の左辺は 0 にはならない。したがって、(A.14) 式は成り立たない。 [証明終り]

この定理より、積分路  $C_1, C_2$  を実軸から  $\pi/2$  の距離まで離して離散化誤差を評価する。そこで、 $\varphi_{\alpha,\beta}(x \pm \frac{\pi}{2}i)$ ,  $\varphi'_{\alpha,\beta}(x \pm \frac{\pi}{2}i)$ ,  $\Phi_h(x \pm \frac{\pi}{2}i)$  の振舞いについて調べると、次のようになることがすぐにわかる。

$$|\varphi_{\alpha,\beta}(x \pm \frac{\pi}{2}i)| \leq \frac{|x| + \frac{\pi}{2}}{|1 - \exp(-2x - \alpha + \beta)|}$$

$$= O(-x \exp(2x)), \quad x \rightarrow -\infty \quad (\text{A.15})$$

$$|\varphi_{\alpha,\beta}(x \pm \frac{\pi}{2}i)| \geq \frac{|x|}{1 + \exp(-2x - \alpha + \beta)} \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} |\varphi'_{\alpha,\beta}(x \pm \frac{\pi}{2}i)| &\leq \frac{\exp(2x + \alpha - \beta) + 1 + (|x| + \frac{\pi}{2})(2 + \alpha e^{-x} + \beta e^x)}{\exp(2x + \alpha - \beta) + \exp(-2x - \alpha + \beta) - 2} \\ &= O(-x \exp(x)), \quad x \rightarrow -\infty \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$|\Phi_h(x \pm \frac{\pi}{2}i)| \leq \frac{2\pi \exp(-\pi M)}{1 - \exp(-\pi M)}, \quad M = \pi/h \quad (\text{A.18})$$

次に、具体的な積分の誤差評価を行う。

### A.1 被積分関数に特異点がない場合の誤差

複素平面上で被積分関数に特異点がない積分

$$I = \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx \quad (\text{A.19})$$

に対して改良版 DE 公式を適用したときの誤差を調べる。

まず、離散化誤差は

$$\begin{aligned} \Delta I_h &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h(z) dz + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} g_1(z) \Phi_h(z) dz \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_3} g_2(z) \Phi_h(z) dz \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$$g(z) = \frac{\varphi'_{\alpha,\beta}(z)}{\varphi_{\alpha,\beta}(z)} \sin(M \varphi_{\alpha,\beta}(z)) \quad (\text{A.21})$$

$$g_2(z) = \frac{1}{z} \sin(Mz) \quad (\text{A.22})$$

$$\begin{aligned} g_1(z) &= \frac{1 - \varphi'_{\beta,\alpha}(-z)}{z + \varphi_{\beta,\alpha}(-z)} \sin(Mz + M \varphi_{\beta,\alpha}(-z)) \\ &\quad - \frac{1}{z} \sin(Mz) \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

である。ここで、積分路  $C_1, C_2$  を実軸から  $\pi/2$  だけ離し、 $C_1, C_2$  の境界点を  $R \pm \frac{\pi}{2}i$  とし、積分路  $C_3$  の傾きを  $\delta$  とする。積分は実軸に対して対称なので、 $\text{Im } z > 0$  の積分だけで評価すると

$$\begin{aligned} |\Delta I_h| &\leq \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^R |g(x + \frac{\pi}{2}i) \Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| dx + \frac{1}{\pi} \int_R^\infty |g_1(x + \frac{\pi}{2}i) \Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| dx \\ &\quad + \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{\pi} \int_R^\infty |g_2(x + \frac{\pi}{2}i + i\delta(x-R)) \Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i + i\delta(x-R))| dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-R} |g(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| dx + \frac{2R}{\pi} \max_{-R \leq x \leq R} |g(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| \\
&\quad + \frac{1}{\pi} \int_R^{\infty} |g_1(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| dx \\
&\quad + \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{\pi} \int_R^{\infty} |g_2(x + \frac{\pi}{2}i + i\delta(x-R))\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i + i\delta(x-R))| dx
\end{aligned} \tag{A.24}$$

となる。ここで、 $M$ は十分大きいと仮定し、 $R$ は $M$ に依存して

$$R = \log M \tag{A.25}$$

となるように選ぶ。

(A.24) 式の第一項からの寄与は

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-R} |g(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| dx \\
&\leq \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-R} \frac{|\varphi'_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|}{|\varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|} |\sin(M\varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i))| dx \cdot \frac{2\pi \exp(-\pi M)}{1 - \exp(-\pi M)}
\end{aligned} \tag{A.26}$$

となる。 $x \leq -R$ で $|M\varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|$ は十分小さい定数で抑えられるので、十分大きい $A_1$ に対して

$$\frac{|\sin(M\varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i))|}{|\varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|} \leq A_1 M \tag{A.27}$$

が成り立つ。また、 $x \rightarrow -\infty$ で $|\varphi'_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)| = O(-x \exp(x))$ なので

$$\int_{-\infty}^{-R} |\varphi'_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)| dx < +\infty \tag{A.28}$$

となる。したがって

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-R} |g(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| dx \\
&\leq A'_1 M \frac{2\pi \exp(-\pi M)}{1 - \exp(-\pi M)} \\
&= O(M \exp(-\pi M)), \quad M \rightarrow \infty
\end{aligned} \tag{A.29}$$

となる。

(A.24) 式の第二項からの寄与は

$$\begin{aligned}
&\frac{2R}{\pi} \max_{-R \leq x \leq R} |g(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| \\
&\leq 4R \max_{-R \leq x \leq R} \frac{|\varphi'_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|}{|\varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|} \exp(M|\operatorname{Im} \varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|) \\
&\quad \cdot \frac{\exp(-\pi M)}{1 - \exp(-\pi M)}
\end{aligned} \tag{A.30}$$



となる. ここで,  $|x| \rightarrow \infty$  で

$$\frac{|\varphi'_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|}{|\varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|} = O(\exp(|x|)) \quad (\text{A.31})$$

となるので,  $R \rightarrow \infty$  で

$$\max_{-R \leq x \leq R} \frac{|\varphi'_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|}{|\varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|} = O(\exp(R)) \quad (\text{A.32})$$

が成り立つ. したがって

$$\begin{aligned} & \frac{2R}{\pi} \max_{-R \leq x \leq R} |g(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| \\ &= O(R \exp(R) \exp(-A_2 M)) \\ &= O(M \log M \exp(-A_2 M)), \quad M \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

$$A_2 = \inf_{\substack{-\infty < \alpha < \infty \\ 0 < \alpha < \beta}} (\pi - |\operatorname{Im} \varphi_{\alpha,\beta}(x + \frac{\pi}{2}i)|) \quad (\text{A.34})$$

となる.  $A_2$  を数値的に求めると

$$A_2 = 1.51268 \dots \quad (\text{A.35})$$

である.

(A.24) 式の第三項からの寄与は

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi} \int_R^\infty |g_1(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| dx \\ & \leq 2 \int_R^\infty |g_1(x + \frac{\pi}{2}i)| dx \cdot \frac{\exp(-\pi M)}{1 - \exp(-\pi M)} \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

$$\begin{aligned} g_1(z) &= \frac{1 - \varphi'_{\beta,\alpha}(-z)}{z + \varphi_{\beta,\alpha}(-z)} \sin(Mz + M\varphi_{\beta,\alpha}(-z)) \\ &\quad - \frac{1}{z} \sin(Mz) \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

となる.  $x \geq R$  で  $|M\varphi_{\beta,\alpha}(-x - \frac{\pi}{2}i)|$  は十分小さい定数で抑えられるので, 十分大きい  $A_3$  に対して

$$|g_1(x + \frac{\pi}{2}i)| < A_3 \frac{1}{x} |\varphi'_{\beta,\alpha}(-x - \frac{\pi}{2}i)| \exp(\frac{\pi}{2}M) \quad (\text{A.38})$$

が成り立つ. したがって

$$\frac{1}{\pi} \int_R^\infty |g_1(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i)| dx = O(\exp(-\frac{\pi}{2}M)), \quad M \rightarrow \infty \quad (\text{A.39})$$

となる.

(A.24) 式の第四項からの寄与は

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{\pi} \int_R^\infty |g_2(x + \frac{\pi}{2}i + i\delta(x-R))\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i + i\delta(x-R))| dx \\ & \leq 2\sqrt{1+\delta^2} \int_R^\infty \frac{\exp(\frac{\pi}{2}M + M\delta(x-R)) \exp(-\pi M - 2M\delta(x-R))}{x(1 - \exp(-\pi M))} dx \\ & = O(\exp(-\frac{\pi}{2}M)), \quad M \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

となる.

以上まとめると, 離散化誤差は  $h \rightarrow 0$  で

$$\begin{aligned} |\Delta I_h| &= O(M \log M \exp(-A_2 M)) \\ &= O\left(\frac{\log h^{-1}}{h} \exp(-\frac{C}{h})\right), \quad C = 4.752 \dots \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

となる.

次に, DE 公式の無限和を  $N$  項で打ち切った打ち切り誤差について考える. 負の項についての打ち切り誤差は

$$\begin{aligned} |\varepsilon_{t-}| &\leq h \sum_{n=-\infty}^{-N_- - 1} \frac{|\sin(M\varphi_{\alpha,\beta}(nh))|}{|M\varphi_{\alpha,\beta}(nh)|} |M\varphi'_{\alpha,\beta}(nh)| \\ &\leq Mh \sum_{n=-\infty}^{-N_- - 1} \varphi'_{\alpha,\beta}(nh) \\ &\leq M \int_{-\infty}^{-N_- h} \varphi'_{\alpha,\beta}(x) dx \\ &= M\varphi_{\alpha,\beta}(-N_- h) \\ &= O(M \exp(-\alpha e^{N_- h})), \quad N_- \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

となり, 正の項についての打ち切り誤差は

$$\begin{aligned} |\varepsilon_{t+}| &\leq h \sum_{n=N_+ + 1}^\infty \frac{|\sin(M\varphi_{\alpha,\beta}(nh))|}{|M\varphi_{\alpha,\beta}(nh)|} |M\varphi'_{\alpha,\beta}(nh)| \\ &\leq h \sum_{n=N_+ + 1}^\infty \frac{M(\varphi_{\alpha,\beta}(nh) - nh)}{Mnh} M \\ &\leq Mh \sum_{n=N_+ + 1}^\infty \frac{\varphi_{\beta,\alpha}(-nh)}{nh} \\ &\leq M \int_{N_+ h}^\infty \frac{\varphi_{\beta,\alpha}(-x)}{x} dx \\ &= O(M \exp(-\beta e^{N_+ h})), \quad N_+ \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

となる. この打ち切り誤差を離散化誤差と同程度にするには

$$N_- = \frac{1}{h} \log \frac{C}{\alpha h} \quad (\text{A.44})$$

$$N_+ = \frac{1}{h} \log \frac{C}{\beta h} \quad (\text{A.45})$$

とすればよく, このときの全打ち切り誤差は

$$\begin{aligned} |\varepsilon_t| &= |\varepsilon_{t-} + \varepsilon_{t+}| \\ &= O(M \exp(-\frac{C}{h})) \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

となる. このときの  $h$  と  $N$  の関係は

$$\begin{aligned} N &= N_- + N_+ + 1 \\ &= \frac{2}{h} \log \frac{C}{h} - \frac{1}{h} \log \alpha \beta + 1 \\ &= \frac{5}{2h} \log \frac{C}{h} + \frac{1}{2h} \log \log h^{-1} + O(\frac{1}{h}) \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

となり,  $h$  について解くと

$$h = \frac{5 \log N}{2 N} + O(\frac{\log \log N}{N}) \quad (\text{A.48})$$

となる. したがって, 全誤差は

$$\begin{aligned} |\Delta I_h + \varepsilon_t| &= O(M \log M \exp(-\frac{C}{h})) \\ &= O(\exp(-C' \frac{N}{\log N})) \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

( $0 < C' < \frac{2}{5}C$ ,  $C = 4.752 \dots$ ) となる.

## A.2 被積分関数に特異点がある場合の誤差

複素平面上で被積分関数に特異点がある積分

$$I = \int_0^\infty \frac{\cos x}{1+x^2} dx \quad (\text{A.50})$$

に対して改良版 DE 公式を適用したときの誤差を調べる.

まず, 離散化誤差は

$$\begin{aligned} \Delta I_h &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} g(z) \Phi_h(z + \frac{\pi}{2M}) dz + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} g_1(z) \Phi_h(z + \frac{\pi}{2M}) dz \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_3} g_2(z) \Phi_h(z + \frac{\pi}{2M}) dz \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

で与えられる。ただし

$$g(z) = \frac{M\varphi'_{\alpha,\beta}(z)}{1 + (M\varphi_{\alpha,\beta}(z))^2} \cos(M\varphi_{\alpha,\beta}(z)) \quad (\text{A.52})$$

$$g_2(z) = \frac{M}{1 + (Mz)^2} \cos(Mz) \quad (\text{A.53})$$

$$g_1(z) = \frac{M - M\varphi'_{\beta,\alpha}(-z)}{1 + (Mz + M\varphi_{\beta,\alpha}(-z))^2} \cos(Mz + M\varphi_{\beta,\alpha}(-z)) \\ - \frac{M}{1 + (Mz)^2} \cos(Mz) \quad (\text{A.54})$$

である。

次に、 $M\varphi_{\alpha,\beta}(z) = \pm i$  に対応する  $g(z)$  の特異点について考える。この特異点  $z_p$  は

$$\varphi_{\alpha,\beta}(z) = \frac{\pm i}{M} \quad (\text{A.55})$$

すなわち

$$-2z - \alpha(1 - e^{-z}) - \beta(e^z - 1) = \log(1 - \frac{Mz}{\pm i}) \quad (\text{A.56})$$

を満たす。これを、(2.83) 式の導出と同様の方法で解くと

$$z_p = -\frac{1}{2} \log\left(\frac{M}{2} \log M\right) + z_0 + O\left(\frac{\log \log M}{\log M}\right), \quad M \rightarrow \infty \quad (\text{A.57})$$

となる。ただし、 $z_0$  は

$$-2z_0 + \beta(\sqrt{2\pi}e^{-z_0} + 1) \pm \log i = 0 \quad (\text{A.58})$$

の解である。領域  $|\operatorname{Im} z| \leq \pi/2$  内の解は数値的に

$$z_0 = 0.308649 \dots \pm 0.646731 \dots i \quad (\text{A.59})$$

である。

次に、積分路  $C_1, C_2$  を実軸から  $\pi/2$  だけ離し、 $C_1, C_2$  の境界点を  $R \pm \frac{\pi}{2}i$  として、前と同様に  $\operatorname{Im} z > 0$  の積分だけで評価すると

$$|\Delta I_h| \leq |2\operatorname{Res}(z_p; g(z)\Phi_h(z + \frac{\pi}{2M}))| \\ + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^R |g(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i + \frac{\pi}{2M})| dx \\ + \frac{1}{\pi} \int_R^{\infty} |g_1(x + \frac{\pi}{2}i)\Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i + \frac{\pi}{2M})| dx \\ + \frac{\sqrt{1+\delta^2}}{\pi} \int_R^{\infty} |g_2(x + \frac{\pi}{2}i + i\delta(x-R)) \\ \Phi_h(x + \frac{\pi}{2}i + i\delta(x-R) + \frac{\pi}{2M})| dx \quad (\text{A.60})$$

となる.

(A.60) 式の第一項からの寄与は

$$\begin{aligned}
 & |2\text{Res}(z_p; g(z)\Phi_h(z + \frac{\pi}{2M}))| \\
 &= |2 \frac{\cosh 1}{2i} \Phi_h(z_p + \frac{\pi}{2M})| \\
 &\leq 2\pi \cosh 1 \frac{\exp(-2M|\text{Im } z_p|)}{1 - \exp(-2M|\text{Im } z_p|)} \\
 &= O(\exp(-\frac{2\pi}{h}|\text{Im } z_p|)) \\
 &= O(\exp(-\frac{D}{h})), \quad h \rightarrow 0
 \end{aligned} \tag{A.61}$$

となる. ただし

$$0 < D < 2\pi|\text{Im } z_0| = 4.063 \dots \tag{A.62}$$

である.

第二, 第三, 第四項の寄与は A.1 節の場合と同様に評価することができ

$$O(\frac{\log h^{-1}}{h} \exp(-\frac{C}{h})), \quad C = 4.752 \dots$$

となる.

したがって, 離散化誤差は  $h \rightarrow 0$  で

$$|\Delta I_h| = O(\exp(-\frac{D}{h})), \quad 0 < D < 4.063 \dots \tag{A.63}$$

となる.

打ち切り誤差も A.1 節の場合と同様に評価することができる. その結果を使って離散化誤差と打ち切り誤差を等置すれば

$$N_- = \frac{1}{h} \log \frac{D}{\alpha h} \tag{A.64}$$

$$N_+ = \frac{1}{h} \log \frac{D}{\beta h} \tag{A.65}$$

となり, 全打ち切り誤差は

$$|\varepsilon_i| = O(M \exp(-\frac{D}{h})) \tag{A.66}$$

となる. したがって, 全誤差は

$$\begin{aligned}
 |\Delta I_h + \varepsilon_i| &= O(M \exp(-\frac{D}{h})) \\
 &= O(\exp(-D' \frac{N}{\log N}))
 \end{aligned} \tag{A.67}$$

( $0 < D' < \frac{2}{5}D$ ,  $D < 4.063 \dots$ ) となる.

## Appendix B

### Euler 変換の重みについて

ここでは、交代級数

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n a_n \quad (\text{B.1})$$

に対する Euler 変換

$$S_{\text{Euler}} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{1}{2}\Delta\right)^n a_0, \quad (\Delta a_n \equiv a_{n+1} - a_n) \quad (\text{B.2})$$

を  $N$  項で打ち切った和の各項に対する線形の重みを求める。そこで、(B.2) 式を  $N$  項で打ち切ったものを考える。

$$\begin{aligned} S_{\text{Euler}}^{(N)} &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \left(-\frac{1}{2}\Delta\right)^n a_0 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^n \frac{1}{2^m} \binom{n}{m} (-1)^m a_m \\ &= \sum_{m=0}^{N-1} w_m^{(N)} (-1)^m a_m \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

ここで  $w_m^{(N)}$  は、Euler 変換の重みで

$$w_m^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{n=m}^{N-1} \frac{1}{2^n} \binom{n}{m} \quad (\text{B.4})$$

である。さらに  $w_m^{(N)}$  を変形して

$$w_m^{(N)} = \sum_{n=m}^{N-1} \frac{1}{2^n} \binom{n}{m} - \sum_{n=m+1}^N \frac{1}{2^n} \binom{n-1}{m}$$

とし、関係式  $\binom{n}{m} = \binom{n-1}{m} + \binom{n-1}{m-1}$  を用いると

$$w_m^{(N)} = \sum_{n=m}^N \frac{1}{2^n} \binom{n-1}{m-1} - \frac{1}{2^N} \binom{N}{m}$$

$$= u_{m-1}^{(N)} - \frac{1}{2^N} \binom{N}{m}$$

となる。したがって

$$\begin{aligned} u_m^{(N)} &= 1 - \sum_{n=0}^m \frac{1}{2^N} \binom{N}{n} \\ &= \sum_{n=m+1}^N \frac{1}{2^N} \binom{N}{n} \end{aligned} \tag{B.5}$$

である。



## Appendix C

### 連続版 Euler 変換の誤差評価その 2

ここでは,  $f(x)$  の Fourier 変換

$$F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx \quad (C.1)$$

に対して, 連続版 Euler 変換を適用し

$$F_{\hat{w}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{w}(x; p, q) f(x) e^{-i\omega x} dx \quad (C.2)$$

$$\hat{w}(x; p, q) = \int_{x/p-q}^{x/p+q} \phi(t) dt \quad (C.3)$$

と近似したときの誤差を調べる.

(C.2) 式は  $f(x)$ ,  $\hat{w}(x; p, q)$  の Fourier 変換の畳み込み

$$F_{\hat{w}}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{W}(\omega - \omega') F(\omega') d\omega' \quad (C.4)$$

で表される. ここで,  $\hat{W}(\omega)$  は  $\hat{w}(x; p, q)$  の Fourier 変換で

$$\begin{aligned} \hat{W}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{w}(x; p, q) e^{-i\omega x} dx \\ &= \frac{\sin(pq\omega)}{\pi\omega} 2\pi\Phi(p\omega) \end{aligned} \quad (C.5)$$

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) e^{-i\omega x} dx \quad (C.6)$$

となる. (C.4) 式に (C.5) 式を代入すると

$$F_{\hat{w}}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega') \frac{\sin(pq(\omega - \omega'))}{\pi(\omega - \omega')} 2\pi\Phi(p(\omega - \omega')) d\omega' \quad (C.7)$$

となる. これは (連続版)sinc 近似である.  $F(\omega)$ ,  $\Phi(\omega)$  が解析的で滑らかな関数ならば,  $F_{\hat{w}}(\omega)$  は  $F(\omega)$  のよい近似となることがわかっている.

$f(z)$  が  $|\arg(\pm z)| \leq \delta$  なる領域で正則で、この領域で  $|f(z)| \leq M$ ,  $\lim_{|z| \rightarrow \infty} |f(z)| = 0$  ならば  $F(\omega)$  は原点以外の実軸近傍で解析的になることがわかっている。しかし、 $f(x)$  の  $|x| \rightarrow \infty$  での減衰は非常に遅いので、 $F(\omega)$  は原点に何らかの特異性をもつ。  $F(\omega)$  を (C.7) 式で近似するとき、 $2\pi\Phi(p(\omega - \omega'))$  という項は、この原点の特異性を減衰させて無視させるという意味をもつ。



