

連続 Euler 変換の一般化と数値積分への応用

京都大学数理解析研究所 大浦拓哉 (Takuya Ooura)
 Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University

1 はじめに

著者は, Euler 変換の連続拡張として連続 Euler 変換を提案し, 収束の遅い Fourier 積分の収束を加速させることに成功している [3]. 本稿は, その連続 Euler 変換の一般化を行い, Fourier 積分だけではなく, べきのオーダーで単調に減少する積分の収束も同時に加速させることができる新しい変換を提案し, さらに, この一般化された連続 Euler 変換を用いることで, 今まで直接計算が困難だった複雑な振動項を持つ積分が容易に計算可能となることを数値例を用いて実証するものである.

2 級数に対する変換

数列の加速法は古くから研究されていて, 級数

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \tag{1}$$

に対する線形の変換は, 一般に

$$\bar{S}_n = \sum_{k=0}^n \mu_{nk} S_k, \quad S_n = \sum_{k=0}^n a_k \tag{2}$$

であらわされる. ここで, μ_{nk} は線形変換の重みであり, 変換に応じて具体的に定まる [4]. 例として, よく知られた Euler 変換の重みは

$$\mu_{nk} = \frac{1}{2^n} \binom{n}{k} \tag{3}$$

であり, 条件 $\sum_{k=0}^n \mu_{nk} (-1 + \varepsilon)^k = (\varepsilon/2)^n$ を満たす. したがって, もし変換前の級数が交代級数でかつ, ある定数 $0 < \varepsilon < 2/3, c$ に対して $S_n - S = c(-1 + \varepsilon)^n$ のように収束するならば, 変換後は $\bar{S}_n - S = c(\varepsilon/2)^n$ となり, もとの級数よりも収束が速くなる.

また, Salzer 変換の重み [4] は

$$\mu_{nk} = (-1)^{n+k} \frac{(k + \alpha)^n}{n!} \binom{n}{k}, \quad \alpha > 0 \tag{4}$$

である. この Salzer の重みは, 条件 $\sum_{k=0}^n \mu_{nk} (k + \alpha)^{-r} = \delta_{0r}, \quad 0 \leq r \leq n$ を満たすように選ばれている. したがって, もし級数が $S_n = S + c/(n + \alpha)^r$ のように収束するならば, 変換後は正確に $\bar{S}_n = S, \quad n \geq r$ となる. この例より, Salzer 変換はべきのオーダーで収束する級数に対して利用可能であることが推測でき, また実際に応用されている.

3 積分に対する変換

積分に対する加速法は一般にはあまり研究されておらず、ここでは積分

$$I = \int_0^{\infty} f(x) dx \quad (5)$$

に対する線形の変換を、

$$\bar{I}(L) = \int_0^L \phi(L, x) I(x) dx, \quad I(L) = \int_0^L f(x) dx \quad (6)$$

と定義する。ここで、 $\phi(L, x)$ は重み関数である。また、変換 (6) は

$$\bar{I}(L) = \int_0^L w(L, x) f(x) dx, \quad w(L, x) = \int_x^L \phi(L, t) dt \quad (7)$$

と書き換えられる。後者の変換は $w(L, x)$ を前もって計算しておくことが可能となるので、数値計算上効率的になる。

まず最初の例として、Euler 変換の連続拡張を考える。連続 Euler 変換 [3] の重み関数は

$$\phi(L, x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi\sigma^2 L}} e^{-(2x-L)^2/(2\sigma^2 L)} \quad (\sigma > 0) \quad (8)$$

であり、(3) 式を二項分布の確率とみなして $n \rightarrow \infty$ での極限をとったものに相当する。この重み関数は、条件

$$\int_0^L \phi(L, x) e^{i\omega x} dx = e^{i\omega L/2} e^{-\sigma^2 \omega^2 L/8} + O(L^{-1/2} e^{-L/(2\sigma^2)})$$

を満たすことで、それを用いた変換は収束の遅い Fourier 積分を加速させることができると考えられる。実際、ある弱い条件のもとにおいて、連続 Euler 変換は、Fourier 積分 $I(L) = \int_0^L f(x) e^{i\omega x} dx$ を指数関数的に収束する積分 $|I - \bar{I}(L)| = o(\exp(-CL))$, $C > 0$ に変換することは、すでに証明されている [3]。

次に、Salzer 変換の連続拡張を考える。まず (4) 式は、選点直交多項式 [2]

$$P_{n,m}(x) = \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} \binom{n+r}{r} \frac{x(x-1)\cdots(x-r+1)}{m(m-1)\cdots(m-r+1)}, \quad m \geq n > 0$$

を用いて

$$\mu_{nk} = (-1)^n \frac{(k+\alpha)^n}{n!} P_{n,n}(k) \quad (9)$$

と書き直すことができることに注目する。その場合、選点直交多項式の直交性

$$\sum_{k=0}^m P_{n,m}(k) P_{l,m}(k) = \frac{(n+m+1)!(m-n)!}{(2n+1)(m!)^2} \delta_{nl}$$

から、重みの満たす条件として $\sum_{k=0}^n \mu_{nk} (k+\alpha)^{-r} = \delta_{0r}$, $0 \leq r \leq n$ が導かれると考えることができる。このことを踏まえると、重み関数として

$$\phi(L, x) = \frac{(2N+1)!(x+\alpha)^N}{(N!)^2 L^{N+1}} P_N(2x/L - 1) \quad (10)$$

を導入することで, Salzer 変換の連続拡張が可能となることが予想できる. ここで, N はある整数で, $P_n(x)$ は Legendre 多項式である. Legendre 多項式の直交性から, この重み関数は条件

$$\int_0^L \phi(L, x)(x + \alpha)^{-r} dx = \delta_{0r}, \quad 0 \leq r \leq N$$

を満たすものである. 次の定理は, この連続 Salzer 変換がある条件下において, べきのオーダーで収束する積分を加速させることを示すものである.

定理 1 定数 $\beta \geq 0, b_r, c_r, p > 1, q > 1$ が存在して

$$I(L) = I + \begin{cases} \sum_{r=0}^{\infty} b_r (L - \beta/2)^r, & 0 \leq L \leq \beta \\ \sum_{r=1}^{\infty} \frac{c_r}{(L + \alpha)^r}, & L \geq \beta \end{cases} \quad (11)$$

かつ

$$\sum_{r=0}^{\infty} |b_r| (p\beta/2)^r = B_p < +\infty, \quad \sum_{r=1}^{\infty} \frac{|c_r|}{((\alpha + \beta)/q)^r} = C_q < +\infty \quad (12)$$

を満たすならば, $L \geq \beta$ に対して

$$|\bar{I}(L) - I| \leq (2N + 1) \left(B_p \left(\frac{8\alpha + 4(p+1)\beta}{(p-1)L} \right)^N + \frac{C_q}{q} \left(\frac{4(\alpha + \beta)}{(q-1)L} \right)^N \right) \quad (13)$$

が成り立つ.

証明 $I(L) = I + g(L)$ と置く. (6) 式と (10) 式から, 変換は

$$\bar{I}(L) = I + \frac{(2N+1)!}{(N!)^2 L^{N+1}} \int_0^L g(x)(x + \alpha)^N P_N(2x/L - 1) dx \quad (14)$$

となる. ここで, $2^n n! P_n(x) = (d/dx)^n (x^2 - 1)^n$ であるので, 部分積分より

$$\bar{I}(L) = I + \frac{(2N+1)!}{4^N (N!)^3 L} \int_0^L \frac{d^N}{dx^N} (g(x)(x + \alpha)^N) (1 - (2x/L - 1)^2)^N dx \quad (15)$$

となり, さらに

$$\frac{(2N)!}{4^N (N!)^2} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdots 2N}{2 \cdot 2 \cdot 4 \cdot 4 \cdots 2N} \leq 1$$

から,

$$|\bar{I}(L) - I| \leq (2N + 1)(U + V), \quad (16)$$

$$U = \frac{1}{N!} \max_{0 \leq x \leq \beta} \left| \frac{d^N}{dx^N} \left(\sum_{r=0}^{\infty} b_r (x - \beta/2)^r (x + \alpha)^N \right) \right| (4x/L)^N, \quad (17)$$

$$V = \frac{1}{N!} \max_{\beta \leq x \leq L} \left| \frac{d^N}{dx^N} \left(\sum_{r=1}^{\infty} \frac{c_{N+r}}{(x + \alpha)^{N+r}} (x + \alpha)^N \right) \right| (4x/L)^N \quad (18)$$

と評価できる.

U の一つの項に注目すると

$$\begin{aligned} u_r &:= \frac{1}{N!} \max_{0 \leq x \leq \beta} \left| \frac{d^N}{dx^N} \left((x - \beta/2)^r (x + \alpha)^N \right) \right| \\ &= \frac{1}{N!} \max_{0 \leq x \leq \beta} \left| \frac{d^N}{dx^N} \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} (\alpha + \beta/2)^{N-k} (x - \beta/2)^{r+k} \right| \\ &\leq \sum_{k=\max(0, N-r)}^N \binom{N}{k} (\alpha + \beta/2)^{N-k} \binom{r+k}{N} (\beta/2)^{r+k-N} \end{aligned}$$

となり, ここで

$$\binom{r+k}{N} (p-1)^N \leq (1 + (p-1))^{r+k} = p^{r+k}$$

を用いると

$$\begin{aligned} u_r &\leq \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} (\alpha + \beta/2)^{N-k} (p\beta/2)^{r+k} ((p-1)\beta/2)^{-N} \\ &= \left(\frac{\alpha + (p+1)\beta/2}{(p-1)\beta/2} \right)^N (p\beta/2)^r \end{aligned}$$

と評価できる. したがって,

$$U \leq \sum_{r=0}^{\infty} |b_r| u_r (4\beta/L)^N \leq B_p \left(\frac{8\alpha + 4(p+1)\beta}{(p-1)L} \right)^N \quad (19)$$

が得られる.

V の項も同様に

$$\begin{aligned} v_r &:= \frac{1}{N!} \max_{\beta \leq x \leq L} \left| \frac{d^N}{dx^N} \left((x + \alpha)^{-N-r} (x + \alpha)^N \right) \right| (4x/L)^N \\ &= \max_{\beta \leq x \leq L} \binom{N+r-1}{N} (x + \alpha)^{-N-r} (4x/L)^N \end{aligned}$$

となり, ここで

$$\begin{aligned} \binom{N+r-1}{N} (q-1)^N &\leq (1 + (q-1))^{N+r-1} = q^{N+r-1}, \\ (x + \alpha)^{-N-r} x^N &\leq (x + \alpha)^{-r} \end{aligned}$$

を用いると,

$$v_r \leq \frac{1}{q} \left(\frac{4(\alpha + \beta)}{(q-1)L} \right)^N \frac{1}{((\alpha + \beta)/q)^{N+r}}$$

と評価でき,

$$V \leq \sum_{r=1}^{\infty} |c_{N+r}| v_r \leq \frac{C_q}{q} \left(\frac{4(\alpha + \beta)}{(q-1)L} \right)^N \quad (20)$$

が得られる. □

4 連続 Euler 変換の一般化

ここでは、連続 Euler 変換に連続 Salzer 変換の性質を持たせることを考える。これは、重み関数

$$\phi(L, x) = \frac{2^{N+1}(x+\alpha)^N}{\sqrt{2\pi N!}(\sigma^2 L)^{(N+1)/2}} h_N((2x-L)/(\sigma L^{1/2})), \quad h_n(x) = H_n(x)e^{-x^2/2} \quad (21)$$

を導入することでなされる。ここで、 $H_n(x)$ は $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} (d/dx)^n e^{-x^2/2}$ で定義される Hermite 多項式である。Hermite 多項式の直交性により、この重みは条件

$$\int_0^L \phi(L, x)(x+\alpha)^{-r} dx = \delta_{0r} + O(e^{-L/(2\sigma^2)}), \quad 0 \leq r \leq N$$

を満たすものである。また、この重み (21) は連続 Euler 変換の重み (8) の一般化でもあり、条件

$$\int_0^L \phi(L, x)e^{i\omega x} dx = \frac{1}{N!} e^{-i\omega\alpha} \frac{d^N}{d\omega^N} (\omega^N e^{i\omega(L/2+\alpha)} e^{-\sigma^2 \omega^2 L/8}) + O(e^{-L/(2\sigma^2)})$$

も満たす。したがって、この変換により、べきのオーダーで減少する積分と Fourier 積分の両方の収束の加速に成功することが期待できる。この一般化連続 Euler 変換の厳密な加速の評価は複雑になると考えられるので別の機会にし、ここでは次節でいくつかの数値例を示すことにする。

5 計算例

まず簡単な例として積分

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty \frac{x \sin x}{1+x^2} dx = \frac{\pi}{2} e^{-1} \\ I_2 &= \int_0^\infty \frac{1}{1+x^2} dx = \frac{\pi}{2} \\ I_3 &= \int_0^\infty \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

に対する計算の結果を表 1 に示す。 I_1 は収束の遅い Fourier 積分で、 I_2 はべきで収束する積分である。さらに、 I_3 は $I_3(L) = \int_e^L 1/(2x^2) dx - \int_e^L \cos(2x)/(2x^2) dx$ であり、 I_1 と I_2 の両方の性質を持つ積分である。計算方法は (7) 式を用い、重み関数 (21) の積分は

$$w(L, x) = \int_x^\infty \phi(L, t) dt - \int_L^\infty \phi(L, t) dt, \quad (22)$$

$$\int_x^\infty \phi(L, t) dt = \sum_{n=0}^N \frac{2^n (x+\alpha)^n}{\sqrt{2\pi n!} (\sigma^2 L)^{n/2}} h_{n-1}((2x-L)/(\sigma L^{1/2})) \quad (23)$$

により計算した。ここで、 $h_{-1}(x)$ を

$$h_{-1}(x) := \int_x^\infty e^{-t^2/2} dt = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{erfc}(x/\sqrt{2})$$

と定義して計算する. パラメーターは $\sigma^2 = 2, \alpha = 1.0$ と選び, 積分の計算には 160 点の Legendre-Gauss 則を用いた. 表 1 より, 連続 Euler 変換は I_1 , 連続 Salzer 変換は I_2 にしか効果がないのに対して, 一般化連続 Euler 変換はすべての積分に効果があることがわかる.

表 1: 積分 I_1, I_2, I_3 の加速例 ($\sigma^2 = 2, \alpha = 1.0$)

変換	L	N	I_1 の誤差	I_2 の誤差	I_3 の誤差
$I(L)$ (重みなし)	50	-	1.9×10^{-2}	2.0×10^{-2}	9.9×10^{-3}
$\bar{I}(L)$ (連続 Euler 変換)	50	-	3.4×10^{-7}	4.2×10^{-2}	2.1×10^{-2}
$I(L)$ (重みなし)	12	-	6.5×10^{-2}	8.3×10^{-2}	4.0×10^{-2}
$\bar{I}(L)$ (連続 Salzer 変換)	12	12	450	8.9×10^{-9}	180
$I(L)$ (重みなし)	150	-	4.6×10^{-3}	6.7×10^{-3}	3.3×10^{-3}
$\bar{I}(L)$ (一般化連続 Euler 変換)	150	5	8.2×10^{-10}	2.3×10^{-9}	2.3×10^{-9}

次に, より複雑な積分

$$I_4 = \int_0^{\infty} \frac{1}{x^2 + \cos^2 x} dx = 1.8934377747 \dots$$

$$I_5 = \int_0^{\infty} \log(1 + \sin^2 x) \log \frac{\cos^2 x + x^2}{1 + x^2} dx = -0.4080063674 \dots$$

$$I_6 = \int_0^{\infty} \frac{\exp(\sin x) - 1}{x(x + \cos x)} dx = 1.8131877148 \dots$$

に対する計算の結果を表 2 に示す. これらの積分はいずれも漸近的に Fourier 核 e^{inx} を含む項と単調にべき乗で収束する項をあわせもつ積分であり, 一般の振動積分に対する計算ルーチンが適用困難な例である. パラメーターは $N = 5, \sigma^2 = 2, \alpha = 1.0$ と選び, 積分の計算には 800 点の Legendre-Gauss 則を用いた. 表 2 より, 従来の連続 Euler 変換はこの場合まったく効果がないのに対して, 今回提案した一般化連続 Euler 変換は加速効果が現れているのがわかる.

表 2: 積分 I_4, I_5, I_6 の加速例 ($N = 5, \sigma^2 = 2, \alpha = 1.0$)

変換	L	I_4 の誤差	I_5 の誤差	I_6 の誤差
$I(L)$ (重みなし)	150	6.7×10^{-3}	1.8×10^{-3}	1.8×10^{-3}
$\bar{I}(L)$ (連続 Euler 変換)	150	1.4×10^{-2}	3.7×10^{-3}	3.6×10^{-3}
$\bar{I}(L)$ (一般化連続 Euler 変換)	150	2.8×10^{-9}	8.1×10^{-10}	2.7×10^{-9}

さらに応用例として, レーザーの高調波発生 of 物理モデル [1] で現れる積分の一つ

$$I_7 = \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{a + ix} \right)^{3/2} \exp \left(-ib \frac{4 \sin^2(x/2)}{x} - icx \right) J_{\nu} \left(b \left(\sin x - \frac{4 \sin^2(x/2)}{x} \right) \right) dx$$

$$a = 1/15, b = 16, c = 0, \nu = 16$$

を計算し, 従来の方法と実行時間を比較した結果を表 3 に示す. 計算環境は CPU が Intel Xeon 2.4GHz でコンパイラが Intel Fortran Compiler 6.0 for Linux である. この積分は,

減衰の項が $O(x^{-3/2})$ なので、計算に用いた重み関数は、べきを $1/2$ だけずらして $\phi(L, x) = d_N(x + \alpha)^{N-1/2} h_N((2x - L)/(\sigma L^{1/2}))$ とした。ここで、 d_N は正規化定数で $w(L, 0) = 1$ となるように定めている。この積分では台形則にとって高精度を与える条件がそろっているため、刻み幅 0.05 の台形則を用いて計算した。比較のために、本方法に加えて、従来の重みを用いない方法と、積分区間を $[2^m \pi, 2^{m+1} \pi]$ づつ分割して ε 加速を行う方法 (この方法は $c = 0$ のときのみ可能) でそれぞれ計算させた。比較の結果、一般化連続 Euler 変換を用いる方法は従来の方法と比べて、非常に高速で効率の良いものであることがわかる。

表 3: I_7 の計算例 ($N = 8, \sigma^2 = 2.5, \alpha = 1.0$)

変換	L	相対誤差	CPU 時間
重みなし (従来)	3×10^8	2.9×10^{-4}	4.2 時間
積分分割 + ε 加速	2.6×10^4	7.5×10^{-10}	1.3 秒
一般化連続 Euler 変換	300	6.6×10^{-10}	0.015 秒

6 まとめ

本稿では、Salzer 変換の連続拡張として連続 Salzer 変換を導き、それをもとにして連続 Euler 変換の一般化を行った。そして、この一般化連続 Euler 変換は、Fourier 積分だけでなく、べきのオーダーで単調に減少する積分の収束も同時に加速させることができる変換であることを示した。さらに、この変換は、よく知られた基本的な積分則と組み合わせるだけで、複雑な振動項を持つ積分を高速かつ高精度に計算させることが可能であることをも実証した。

参考文献

- [1] M. Lewenstein, P. Balcou, M. Ivanov, and P. Corkum, Theory of High-harmonic Generation of Low-frequency Laser Fields, Phys. Rev. A, 49, 1994, 2117–2132.
- [2] 森口繁一, 宇田川銑久, 一松信, 岩波 数学公式 III, 岩波書店, 1960.
- [3] T.Ooura, A Continuous Euler Transformation and its Application to the Fourier Transform of a Slowly Decaying Function, J. Comput. Appl. Math., 130, 2001, 259–270.
- [4] Jet Wimp, Sequence Transformations and their Applications, Academic Press, 1981.