

ベッセル関数を含む半無限振動積分の自動積分

福井大工 長谷川 武光 (Takemitsu Hasegawa)
Technion-Israel Institute of Technology Avram Sidi

1 はじめに

関数 $g(x)$ を無限大で振動しない関数 (一般に、複素関数) で、大きい x に対し無限回微分可能とする。実関数 $K(x)$ と $L(x)$ を次の関係を満足する関数とする:

$$M(x) = K(x) + iL(x) = e^{ix}g(x). \quad (1.1)$$

本論文では、与えられた滑らかな関数 $f(x)$ に対して、加速法としての Sidi [31] の修正 W-変換 (W-アルゴリズム) と Hasegawa and Torii [10] による振動積分の自動積分法を組み合わせ、次の半無限振動積分

$$Q(\omega) = \int_a^\infty K(\omega t)f(t)dt = \Re \int_a^\infty M(\omega t)f(t)dt = \Re \int_a^\infty e^{i\omega t}g(\omega t)f(t)dt, \quad (1.2)$$

にたいする自動積分を構成する。特に、ベッセル関数 $K(x) = J_\nu(x)$ と $L(x) = Y_\nu(x)$ に対して、Luke [20, p.322] は次のチェビシェフ展開

$$J_\nu(x) = \left(\frac{x}{8}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(\nu)} T_{2n}(x/8), \quad |x| \leq 8, \quad \nu = 0, 1,$$

$$J_\nu(x) + i Y_\nu(x) = e^{ix} \frac{(-1)^\nu - i}{\sqrt{\pi x}} \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(\nu)} T_n^*(5/x) \quad x \geq 5, \quad \nu = 0, 1,$$

を与えている。ここで、 $T_k(x)$ と $T_k^*(x)$ は各々次数 k のチェビシェフ多項式と shifted チェビシェフ多項式である。各展開係数の値 (20 桁で) が与えられている。

いろいろな種類の振動積分を数值的に計算する問題 (自動積分法を含めて) は、多くの人によって調べられている (Longman [17, 18], Gray and Atchison [9], Levin and Sidi [15], Sidi [28, 29, 30, 31], Piessens and Haegemans [27], Toda and Ono [33], Sugihara [32], Ooura and Mori [23], Espelid and Overholt [5])。一方、ベッセル関数を含んだ無限積分 (例えば、ハンケル変換) を扱った論文として、Linz [16], Piessens and Branders [24, 25], Anderson [1], Lund [21], Lyness and Hines [22], Sidi [28] 等がある。

しかし、ベッセル関数を含む無限振動積分の自動積分法は見当たらない。QUADPACK [26] の中に、半自動積分の扱いが簡単に述べられているが、本論文で述べる方法ほど効率的ではない。

2 方法の記述

積分 (1.2) の区間 $[a, \infty)$ を $[a, c/\omega]$ と $[c/\omega, \infty)$ に分割する ($c = 5$ とおく)。

$$Q(\omega) = Q_1(\omega) + Q_2(\omega), \quad (2.1a)$$

$$Q_1(\omega) = \begin{cases} \int_a^{c/\omega} K(\omega t) f(t) dt & \text{if } a < c/\omega, \\ 0 & \text{if } a \geq c/\omega, \end{cases} \quad (2.1b)$$

$$Q_2(\omega) = \Re \int_d^\infty M(\omega t) f(t) dt, \quad d = \max(a, c/\omega). \quad (2.1c)$$

2.1 $Q_1(\omega)$ の計算

$a < c/\omega$ のとき関数 $K(\omega t)f(t)$ が区間 $[a, c/\omega]$ で滑らかであるから、クレンショウ・カーチス法 (CC 法) に高速フーリエ変換 (FFT) を組み込んで $Q_1(\omega)$ を能率的に計算できる [14]。 ω が小さいとき区間 $[a, c/\omega]$ が広くなり一度に積分 $Q_1(\omega)$ を計算することが困難になる。この場合、区間をいくつかの小区間に分割し、各々の部分区間にそれぞれ CC 法を適用する。

2.2 $Q_2(\omega)$ の計算

式 (1.1) と (2.1c) から次を得る: $Q_2(\omega) = \Re \int_d^\infty e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt$. このフーリエ積分を能率的に計算するため、Sidi の修正 W 変換 [31] を使う。 d より大きい $\sin \omega t$ の最初の零点を $x_0 = \frac{\pi}{\omega} \left(\left\lfloor \frac{\omega d}{\pi} \right\rfloor + 1 \right)$ とおき、 l 番目の零点を $x_l = x_0 + l\pi/\omega$, ($l = 1, 2, \dots$) とする。次に次式で定義される有限区間積分 $F(x_l)$ を数值的に計算できたとする (3節を参照):

$$F(x_l) = \int_d^{x_l} e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

積分 $\lim_{l \rightarrow \infty} F(x_l)$ に対して、二次元配列 $W_n^{(j)}$ を次の連立方程式を解くことにより求める。

$$F(x_l) = W_n^{(j)} + \psi(x_l) \sum_{i=0}^n \beta_i / x_l^i, \quad j \leq l \leq j + n + 1, \quad (2.3)$$

ここで

$$\psi(x_l) = \int_{x_l}^{x_{l+1}} e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt = F(x_{l+1}) - F(x_l), \quad l = 0, 1, \dots, \quad (2.4)$$

であり、 β_i も未知数である。さらに、(2.4) において $F(x_{-1}) = 0$ と定義する。

連立方程式 (2.3) の解は次の W アルゴリズム [30] によって能率的に計算される。

- set $M_{-1}^{(s)} = F(x_s)/\psi(x_s)$, and $N_{-1}^{(s)} = 1/\psi(x_s)$, $s = 0, 1, \dots$,
- for $s = 0, 1, \dots$, and $p = 0, 1, \dots$, compute

$$M_p^{(s)} = (M_{p-1}^{(s)} - M_{p-1}^{(s+1)}) / (x_s^{-1} - x_{s+p+1}^{-1}),$$

$$N_p^{(s)} = (N_{p-1}^{(s)} - N_{p-1}^{(s+1)}) / (x_s^{-1} - x_{s+p+1}^{-1}),$$

and set $W_p^{(s)} = M_p^{(s)} / N_p^{(s)}$.

j を固定したとき、数列 $\{W_n^{(j)}\}_{n=0}^{\infty}$ は大変よい収束特性をもつ。近似 $W_p^{(j)}$, $j + p = n$ の中で $W_n^{(0)}$ が最良である。近似 $W_n^{(0)}$ に対する誤差推定を $|W_{n+1}^{(0)} - W_n^{(0)}|$ によって行なう。積分 $Q_2(\omega)$ は $\Re W_n^{(0)}$ によって近似される。

残った問題は (2.4) で定義された $\psi(x_j)$ を要求精度で計算することである (次節参照)。

3 有限振動積分 $\psi(x_j)$ の計算

関数 $f(t)$ が滑らかであれば、一度に数個 (例えば r 個) の積分 $\psi(x_{s+1}), \dots, \psi(x_{s+r})$ あるいは、不定積分 $\int_{x_s}^x e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt$ を計算すると能率的である。ここで $x = x_{s+i}$ ($i = 1, 2, \dots, r$) ととり、 s は任意の整数である。

整数 $m > 0$ と $\mu \geq 0$ に対して $s = m + \mu r$ と定義し、積分 $F(x_{s+l})$ の積分区間 $[d, x_{s+l}]$ ($0 < l \leq r$) を $\mu + 1$ 個の部分区間 K_q ($q = -1, 0, 1, \dots, \mu$) および $(x_s, x_{s+l}]$ に分割する: $[d, x_{s+l}] = (\cup_{q=-1}^{\mu-1} K_q) \cup (x_s, x_{s+l}]$, ここで $K_{-1} = [d, x_m]$, $K_q = (x_{m+qr}, x_{m+qr+r}]$ ($q = 0, 1, \dots$) とする。 m と r の適切な値は後で述べる。すると、 $1 \leq l \leq r$ に対して

$$F(x_{s+l}) = \sum_{q=-1}^{\mu-1} F(K_q) + \int_{x_s}^{x_{s+l}} e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt, \quad s = m + \mu r, \quad \mu = 0, 1, \dots, \quad (3.1)$$

ここで $F(K_q)$ は $F(K_q) = \int_{t \in K_q} e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt = \int_{x_{m+qr}}^{x_{m+qr+r}} e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt$ で定義される。

不定積分 $\int_{\alpha}^x e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt$ ($\alpha \leq x \leq \beta$) を近似するため、[10, 12] で与えた自動積分法をいくつか修正する。一次変換 $\phi: [\alpha, \beta] \rightarrow [-1, 1]$ を $\phi(t) = (2t - \beta - \alpha)/(\beta - \alpha)$ で定義する。非振動部分 $g(\omega t) f(t)$ をチェビシエフ多項式の有限和 $P_N(t)$ で近似する:

$$P_N(t) = p_N(\phi(t)) \equiv \sum_{k=0}^N 'a_k^N T_k(\phi(t)), \quad \alpha \leq t \leq \beta, \quad (3.2)$$

すると $W = (\beta - \alpha)/2$, $T = (\beta + \alpha)/2$ とおき次式をえる、

$$\int_{\alpha}^x e^{i\omega t} g(\omega t) f(t) dt \sim \int_{\alpha}^x e^{i\omega t} P_N(t) dt = W \exp(i\omega T) I(\omega W, \phi(x); p_N). \quad (3.3)$$

ここで $I(\omega, x; p)$ は次で定義される:

$$I(\omega, x; p) = \int_{-1}^x e^{i\omega t} p(t) dt, \quad -1 \leq x \leq 1. \quad (3.4)$$

関数 $f(t)$ が区間 $[\alpha, \beta]$ で十分滑らかである限り、整数 r をできるだけ大きくとるほうが能率的である。このとき N を大きくすると、有限チェビシエフ級数 (3.2) は急速に収束する。数値実験の結果、 r の最適に近い選択 (すなわち、必要な標本数を最小にする) は、積分 $Q_2(\omega)$ (2.1c) の要求精度 ϵ_2 に依存して決定するのがよい。修正 W 変換の収束が大変速いので $[-\log_{10} \epsilon_2] + 2$ 個の有限積分 $\psi(x_i)$ ($-1 \leq i \leq M$) で要求精度 ϵ_2 を達成するのに十分である。このとき、経験的に (3.1) に対して $m = 2$ および $r = 3 + 0.7[-\log_{10} \epsilon_2]$ と決め

た。与えられたクラスの関数 $f(t)$ と要求精度に依存して、 m と r の最適値を決定することはまだ未解決の問題である。

次に (3.3) の右辺の不定積分、あるいは (3.4) の $I(\omega, x; p)$ (ここで $p(t)$ を (3.2) の $p_N(t)$ で置き換え) の計算法を示す。補助関数 $H(x)$ を用いて次のように表す：

$$I(\omega, x; p_N) \equiv \int_{-1}^x e^{i\omega t} p_N(t) dt = \frac{e^{i\omega x} H(x)}{i\omega}, \quad -1 \leq x \leq 1. \quad (3.5)$$

(3.5) の両辺を x で微分し $\frac{1}{i\omega} dH(x)/dx + H(x) = p_N(x)$ 、これを -1 から x まで積分し

$$\frac{H(x) - H(-1)}{i\omega} + \int_{-1}^x H(t) dt = \int_{-1}^x p_N(t) dt. \quad (3.6)$$

(3.6) を解くため、次のチェビシェフ展開をする： $H(t) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k T_k(t)$ 。これと (3.2) を (3.6) に代入すると

$$b_{k-1} + \frac{2k}{i\omega} b_k - b_{k+1} = a_{k-1}^N - a_{k+1}^N, \quad 1 \leq k. \quad (3.7)$$

をうる。便宜上 $a_k^N \equiv 0$ ($k > N$) とおく。求めたい係数 b_k は、正規化条件 $\sum_{k=0}^N (-1)^k b_k = 0$ ((3.5) において $H(-1) = 0$ でなければならないから) を満足する非同時3項漸化式 (3.7) の非優位解 (nondominant solution) [6, 19, 2] である。これを数値的に安定に計算する方法は Hasegawa and Torii [13] を参照のこと。

4 チェビシェフ級数展開と FFT

(3.2) の多項式列 $\{p_N\}$ を、修正 FFT [14] を利用して能率的で再帰的に構成する方法を示す。またこれにより要求精度で積分 $Q_2(\omega)$ (2.1c) を計算する。もちろん CC 法 [3] にも効率的に組み込まれる。

区間 $[-1, 1]$ 上の不定積分 $I(\omega, x; f)$ (3.4) およびその近似 $I_N \equiv I(\omega, x; p_N)$ を考える。非適応型自動積分法は、一般に収束する積分の近似列と適当な誤差推定法から構成される。誤差推定が停止則を満足するまで近似を反復的に計算する。近似列 $\{I_N\}$ をつくるための多項式 $p_N(t)$ (3.2) の次数 N は、倍々にするのが通常である。しかし、自動積分を効率的にするためには、要求精度を満足するまで、 N を倍々より緩やかに増大するほうがよい。Hasegawa et.al.[14] は N を 2^n の他に 3×2^n と 5×2^n と増大する方法を示した。

今後 N は2の巾乗すなわち $N = 2^n$ ($n = 2, 3, \dots$) と仮定する。5節で説明する停止則を満足するまで、有限チェビシェフ級数列 $\{p_N, p_{5N/4}, p_{3N/2}\}$, $N = 2^n$, $n = 2, 3, \dots$, を反復的に構成する方法を述べる。次式で定義される多項式 $w_{N+1}(t)$ の零点を $t_j^N = \cos(\pi j/N)$ ($0 \leq j \leq N$) とおく：

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

ここで $U_{N-1}(t)$ は第2種チェビシェフ多項式 $U_{N-1}(t) = \sin(N\theta)/\sin\theta$, $t = \cos\theta$ である。
 $p_N(t)$ が標本点 t_j^N で $f(t)$ を補間するように $p_N(t)$ の係数 a_k^N が決定される:

$$a_k^N = \frac{2}{N} \sum_{j=0}^N f(\cos \pi j/N) \cos(\pi k j/N), \quad 0 \leq k \leq N. \quad (4.2)$$

(4.2) の右辺は実数データの FFT [7] により効率的に計算されることが知られている。

整数 $\sigma = 2, 4$ に対し、 $\{v_j^{N/\sigma}\}$ ($0 \leq j < N/\sigma$) を $T_N(t)$ の零点集合の部分集合とする、
 特に $T_{N/\sigma}(t) - \cos 3\pi/(2\sigma)$ の N/σ 個の零点の集合に一致するよう選ぶ。このとき $w_{N+1}(t)$
 (4.1) の零点の他に標本点 $v_j^{N/\sigma}$, $0 \leq j < N/\sigma$ ($\sigma = 2, 4$) で $f(t)$ を補間する多項式 $p_{N+N/\sigma}(t)$
 ($\sigma = 2, 4$) を、次のニュートン形式で表す:

$$p_{N+N/\sigma}(t) - p_N(t) = -w_{N+1}(t) \sum_{k=1}^{N/\sigma} B_k^{N/\sigma} U_{k-1}(t) = \sum_{k=1}^{N/\sigma} B_k^{N/\sigma} \{T_{N-k}(t) - T_{N+k}(t)\}. \quad (4.3)$$

係数 $\{B_k^{N/\sigma}\}$ は次の補間条件を満足するよう決められる

$$f(v_j^{N/\sigma}) = p_{N+N/\sigma}(v_j^{N/\sigma}), \quad 0 \leq j < N/\sigma, \quad \sigma = 2, 4.$$

実際、係数 $B_k^{N/\sigma}$ は FFT を利用して能率的に計算される。 $p_{5N/4}(t) - p_N(t)$ に対する $N/4$
 個の標本点 $\{v_j^{N/4}\}$ ($0 \leq j < N/4$) が、 $p_{3N/2}(t) - p_N(t)$ に対する $N/2$ 個の標本点集合
 $\{v_j^{N/2}\}$ ($0 \leq j < N/2$) に含まれ、さらにこの集合は $p_{2N}(t) - p_N(t)$ に対する N 個の標本
 点集合、即ち $T_N(t)$ ($= w_{2N+1}(t)/\{2w_{N+1}(t)\}$) の零点集合に含まれることに注意する。こ
 の事実から、FFT を利用して数列 $\{p_{3m}, p_{4m}, p_{5m}\}$ ($m = 2^n, n = 1, 2, \dots$) を反復的に計算
 するアルゴリズムがえられる。詳細は [14] を参照のこと。

5 誤差評価

積分 $I(\omega, x, f)$ (3.4) に対する近似 $I(\omega, x; p_{N+mN/4})$ ($m = 0, 1, 2$)、ここで $p_{N+mN/4}(t)$
 ($m = 0, 1, 2$) は (3.2) と (4.3) で与えられる、の打ち切り誤差を評価する。

複素平面 $z = x + iy$ 上の楕円で、焦点が $(-1, 0)$ と $(1, 0)$ 、長軸と短軸長さの半分が各々
 $a = (\rho + \rho^{-1})/2$ と $b = (\rho - \rho^{-1})/2$ であるものを ε_ρ と表す。ここで、定数 $\rho > 1$ 。さて、
 $f(z)$ が ε_ρ 内および周上で一価かつ解析的と仮定する。すると、補間多項式 $p_N(t)$ の誤差は
 次の複素積分で表わされる [4], [11]、

$$f(t) - p_N(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\varepsilon_\rho} \frac{w_{N+1}(t) f(z) dz}{(z-t) w_{N+1}(z)} = w_{N+1}(t) \sum_{k=0}^{\infty} V_k^N(f) T_k(t). \quad (5.1)$$

ここで係数 $V_k^N(f)$ は次式で与えら、

$$V_k^N(f) = \frac{1}{\pi^2 i} \oint_{\varepsilon_\rho} \frac{\tilde{U}_k(z) f(z) dz}{w_{N+1}(z)}, \quad k \geq 0, \quad (5.2)$$

$\tilde{U}_k(z)$ は次で定義される第2種チェビシェフ関数

$$\tilde{U}_k(z) = \int_{-1}^1 \frac{T_k(t) dt}{(z-t)\sqrt{1-t^2}} = \frac{\pi}{\sqrt{z^2-1} u^k} = \frac{2\pi}{(u-u^{-1})u^k}, \quad (5.3)$$

で、 $z \notin [-1, 1]$ に対して $u = z + \sqrt{z^2-1}$ ($|u| > 1$) である。

式(3.4)に(5.1)を使うと、近似積分 $I(\omega, x; p_N)$ の誤差は

$$I(\omega, x; f) - I(\omega, x; p_N) = I(\omega, x; f - p_N) = \sum_{k=0}^{\infty} V_k^N(f) \Omega_k^N(x), \quad (5.4)$$

ここで $\Omega_k^N(x)$ は定義され、さらに $|x| \leq 1$ に対して N, k, ω および x に独立に $|\Omega_k^N(x)| \leq 4$ である事がわかる。

$f(z)$ が、 ε_ρ の外部に M 個の単根 z_m ($m = 1, 2, \dots, M$) と、そこでの留数 $\text{Res}f(z_m)$ をもつ有理型関数と仮定する。すると(5.2)の複素積分を実行して

$$V_k^N(f) = \frac{1}{\pi^2 i} \oint_E \frac{\tilde{U}_k(z) f(z) dz}{w_{N+1}(z)} = \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^M \text{Res}f(z_m) \tilde{U}_k(z_m)/w_{N+1}(z_m), \quad k \geq 0, \quad (5.5)$$

ここで E は ± 1 に焦点をもつ楕円で、極 z_m ($m = 1, 2, \dots, M$) が E 内にあり、 $f(z)$ のその他の特異性が存在しないようなものである。複素数 $z = (u + u^{-1})/2 \notin [-1, 1]$ 、ここで $|u| > 1$ 、に対して $T_k(z) = (u^k + u^{-k})/2$ であることに注意すると、(4.1) から $w_{N+1}(z) = \sqrt{z^2-1}(u^N - u^{-N})$ がえられ、(5.3)と結合して次式が導かれる： $\tilde{U}_k(z)/w_{N+1}(z) = \pi/\{(z^2-1)u^k(u^N - u^{-N})\}$ 。(5.5)の右辺で最も大きい項は極 z_j 、ここで $|z_j + \sqrt{z_j^2-1}| = \min_{1 \leq m \leq M} |z_m + \sqrt{z_m^2-1}| \equiv r > 1$ 、からのものである。そのような z_j が唯一つ存在すると仮定すると、十分大きい N に対して $V_k^N(f) \sim V_0^N(f)u_j^{-k}$ 、ここで $u_j = z_j + \sqrt{z_j^2-1}$ である。このことと(5.4)から次の誤差推定がえられる：

$$|I(\omega, x; f - p_N)| \leq 4 \sum_{k=0}^{\infty} |V_k^N(f)| \sim 4|V_0^N(f)| \sum_{k=0}^{\infty} r^{-k} = 4|V_0^N(f)| \frac{r+1}{2(r-1)}. \quad (5.6)$$

さて $|V_0^N(f)|$ を、多項式 $p_N(t)$ の計算された係数 a_k^N を用いて表現したい。Elliott [4] は次の関係を与えている： $a_k^N = 2/(\pi i) \oint_{\varepsilon_\rho} T_{N-k}(z) f(z)/w_{N+1}(z) dz$ ($0 \leq k \leq N$)。複素積分を実行して、その結果を(5.5)と比較すると極 z_m が実軸上の区間 $[-1, 1]$ に近くない限り、関係 $|V_0^N| \sim |a_N^N| r/(r^2-1)$ と $|a_k^N| \sim r|a_{k+1}^N|$ がえられる。これらと(5.6)から、打ち切り誤差 $|I(\omega, x; f - p_N)|$ の推定 R_N は(定数 r は $\{a_k^N\}$ の漸近的振舞から推定できる [14])

$$R_N = 4(|a_N^N|/2) r/(r-1)^2. \quad (5.7)$$

同様にして、近似積分 $I(\omega, x; p_{N+N/\sigma})$ ($\sigma = 2, 4$) の打ち切り誤差の推定 $R_{N+N/\sigma}$ は

$$R_{N+N/\sigma} = 8(1 + |\cos 3\pi/(2\sigma)|) |B_{N/\sigma}^{N/\sigma}| r/(r-1)^2. \quad (5.8)$$

関係式 (5.7) と (5.8) から誤差は ω の値に無関係に推定できることがわかる。従って非振動積分 $I(0, 1; f) = \int_{-1}^1 f(t) dt$ に対する積分則 $I(0, 1; p_{N+mN})$ ($m = 0, 1, 2$) の誤差も、各々 (5.7) と (5.8) によって推定できる。次節では、誤差推定 (5.7) と (5.8) を使って $Q(\omega)$ に対する自動積分の停止則を導く。

6 停止則

自動積分法の効率は、適当な積分則の選択の他に適切な誤差推定に基づいた停止則に依存する。(2.1) から積分 $Q(\omega)$ を 2 つの積分、 $[a, c/\omega]$ 上の $Q_1(\omega)$ と $[c/\omega, \infty)$ 上の $Q_2(\omega)$ 、に分割したことを思い出そう。両積分に各々要求精度 ϵ_1 と ϵ_2 を割り当て、全体の積分 $Q(\omega)$ に対する精度 $\epsilon = \epsilon_1 + \epsilon_2$ をできるだけ少ない標本点数で達成したい。このため、積分 $Q_1(\omega)$ と $Q_2(\omega)$ の要求精度 ϵ_1 と ϵ_2 の適切な値を決定しなければならない。数値実験の結果、 $\epsilon_1 = \epsilon/20$ および $\epsilon_2 = 19\epsilon/20$ と選ぶ。

さらに無限積分 $Q_2(\omega)$ (2.1c) が、有限積分 $F(x_i)$ ($i = -1, 0, 1, \dots$), (2.2) あるいは (3.1) の $F(x_{s+l})$ に対する近似と修正 W 変換を用いて、効率的に近似されることを見て来た。次の問題は、各区間 K_q 上の積分 $F(K_q)$ ($q = -1, 0, 1, \dots$) (3.1) に要求精度を割り当てる方法である。一般的に、 $Q_2(\omega)$ に対する割り当てられた要求精度 ϵ_2 を達成するために、修正 W 変換で必要となる積分 $F(K_q)$ ($q = -1, 0, 1, \dots$) の数がいくつかを、前もって知ることは困難である。しかし数値実験の結果から、幅広いクラスの収束する無限振動積分を修正 W 変換が大変速く収束する数列に変換するので、精度 ϵ_2 を達成するのに 2 つあるいは高々 3 つの区間 K_q ($q = -1, 0 \text{ or } 1$) で十分であることがわかる (K_q を ϵ_2 に依存して決定したことに注意する)。

上記のことから、 K_q ($q = -1, 0, 1, \dots$) 上の各積分 $F(K_q)$ に割り当てる要求精度を経験的に以下のように決定する。 $Q_2(\omega)$ の関数 $f(x)$ が、無限大で収束の遅い滑らかな関数と仮定し、3 つの積分区間 K_q ($q = -1, 0, 1$) で十分であるとする。このとき、各積分 $F(K_q)$ ($q = -1, 0, 1$) に要求精度 $\epsilon_2/3$ を割り当てる。

7 数値例

ベッセル関数 $J_0(\omega x)$ あるいは $J_1(\omega x)$ を含んだ次の積分 [8, p.682, p.686, p.712] に対して、本方法の性能をテストする。ここで、パラメータ a の 2 種類の値、振動数 ω の 3 種類の値に対してテストした。

$$\begin{aligned} \text{(A)} \quad & \int_0^\infty J_0(\omega x) x / (x^2 + a^2)^{1/2} dx = \exp(-a\omega) / \omega, \quad a = 1, 1/8, \\ \text{(B)} \quad & \int_0^\infty J_0(\omega x) \exp(-ax) dx = 1 / (a^2 + \omega^2)^{1/2}, \quad a = 1, 4, \\ \text{(C)} \quad & \int_0^\infty J_1(\omega x) x^2 / (x^2 + a^2)^{3/2} dx = \exp(-a\omega), \quad a = 1, 1/8, \end{aligned}$$

表 1: 積分 $\int_0^\infty J_0(\omega x) f(x) dx$ と $\int_0^\infty J_1(\omega x) f(x) dx$ に対する本方法の性能 要求精度 $\epsilon_a = 10^{-6}$ 、 10^{-12} を満たすために必要な標本数 N を 5 番目と 8 番目の欄に示す。Sidi の修正 W 変換に使用される半周期積分の数 M を 7 番目と最後の欄に示す。

$f(x)$	a	ω	Integral	$\epsilon_a = 10^{-6}$			$\epsilon_a = 10^{-12}$		
				N	error	M	N	error	M
(A)	1	1	$3.678794411714423 \times 10^{-1}$	37	7×10^{-8}	7	87	1×10^{-13}	11
		5	$1.347589399817093 \times 10^{-3}$	39	2×10^{-8}	7	71	5×10^{-15}	12
		9	$1.371220045407551 \times 10^{-5}$	33	1×10^{-8}	7	59	2×10^{-16}	13
	1/8	1	$8.824969025845955 \times 10^{-1}$	83	1×10^{-9}	7	171	4×10^{-14}	11
		5	$1.070522857037980 \times 10^{-1}$	51	1×10^{-8}	6	83	5×10^{-14}	10
		9	$3.607249637314997 \times 10^{-2}$	35	2×10^{-8}	6	83	7×10^{-14}	10
	J_0	1	0.7071067811865476	37	2×10^{-7}	4	67	9×10^{-16}	7
		5	0.1961161351381840	33	2×10^{-8}	5	51	1×10^{-14}	9
		9	0.1104315260748465	31	2×10^{-9}	6	45	3×10^{-16}	10
		1	0.2425356250363330	35	6×10^{-10}	4	59	3×10^{-16}	4
		5	0.1561737618886061	35	8×10^{-8}	4	71	8×10^{-17}	7
		9	0.1015346165133619	33	1×10^{-8}	5	59	7×10^{-17}	8
(C)	1	1	$3.678794411714423 \times 10^{-1}$	55	3×10^{-8}	6	95	2×10^{-15}	11
		5	$6.737946999085467 \times 10^{-3}$	39	2×10^{-8}	7	71	1×10^{-14}	12
		9	$1.234098040866796 \times 10^{-4}$	37	5×10^{-8}	7	67	2×10^{-14}	13
	1/8	1	0.8824969025845955	89	2×10^{-8}	6	215	1×10^{-15}	11
		5	0.5352614285189903	57	3×10^{-8}	6	99	1×10^{-13}	11
		9	0.3246524673583497	47	3×10^{-8}	6	87	4×10^{-14}	11
	J_1	1	$3.535533905932737 \times 10^{-1}$	39	4×10^{-9}	5	75	0	8
		5	$3.771464137272770 \times 10^{-2}$	37	2×10^{-10}	6	51	4×10^{-15}	9
		9	$1.212053334967828 \times 10^{-2}$	37	2×10^{-8}	5	45	3×10^{-14}	9
	(D)	1	$1.426680147272547 \times 10^{-2}$	43	2×10^{-12}	4	59	6×10^{-17}	4
		5	$1.904558071812269 \times 10^{-2}$	37	2×10^{-9}	5	71	4×10^{-18}	8
		9	$9.420737614641827 \times 10^{-3}$	37	9×10^{-10}	5	59	5×10^{-16}	8

$$(D) \quad \int_0^\infty J_1(\omega x) x \exp(-ax) dx = \omega / (a^2 + \omega^2)^{3/2}, \quad a = 1, 4.$$

表 1 に要求精度 $\epsilon_a = 10^{-6}$ 、 10^{-12} を達成するために必要な関数計算回数と、そのときの実際の誤差を示す。区間内 $[5/\omega, \infty)$ で修正 W 変換に使用された半周期積分 $\psi(x_i)$ (2.4) の数を、'M' の下の欄に示す。表 1 から 3 節で述べたことが確かめられる。すなわち、修正 W 変換が大変速く収束するので、要求精度 $\epsilon_a (= 20\epsilon_2/19)$ を達成するのに、 $[-\log_{10} \epsilon_2] + 2$ 個の積分 $\psi(x_i)$ で十分である。

本方法の性能を比較するため、ベッセル関数を含む積分の自動積分を他に探すのは困難である。しかし QUADPACK [26, p.118] の中の例では、積分

$$\int_0^\infty J_0(x) (1 - e^{-x}) / [x \log(1 + \sqrt{2})] dx = 1$$

を計算するためにルーチン DQAGS, DQEXT (ϵ -algorithm) と ZEROJN (ベッセル関数 $J_n(x)$)

の l 個の正の零点) を組み合わせて使用している。精度 10^{-12} を達成するのに必要な標本数は、QUADPACK と本方法でそれぞれ 399 と 71 である。

計算は倍精度演算で行なった。

参考文献

- [1] Anderson, W. L. Fast Hankel transform using related and lagged convolutions. *ACM Trans. Math. Softw.* 8, 4 (December 1982), 344–368.
- [2] Cash, J. R., and Zahar, R. V. M. A unified approach to recurrence algorithms. In *Approximation and Computation : A Festschrift in Honor of Walter Gautschi*, pages 97–120. Birkhäuser, Boston, 1994. R. V. M. Zahar, ed.
- [3] Clenshaw, C. W., and Curtis, A. R. A method for numerical integration on an automatic computer. *Numer. Math.* 2 (1960), 197–205.
- [4] Elliott, D. Truncation errors in two Chebyshev series approximations. *Math. Comp.* 19 (1965), 234–248.
- [5] Espelid, T. O., and Overholt, K. J. DQAINF: an algorithm for automatic integration of infinite oscillating tails. *Numerical Algorithms* 8 (1994), 83–101.
- [6] Gautschi, W. Computational aspect of three-term recurrence relations. *SIAM Rev.* 9 (1967), 24–82.
- [7] Gentleman, W. M. Implementing Clenshaw–Curtis quadrature II. Computing the cosine transformation. *Comm. ACM* 15 (1972), 343–346.
- [8] Gradshteyn, I. S., and Ryzhik, I. M. *Table of Integrals, Series, and Products*, translated by Jeffrey, A. Academic Press, New York, 1980.
- [9] Gray, H. L., and Atchison, T. A. Nonlinear transformations related to the evaluation of improper integrals I. *SIAM J. Numer. Anal.* 4 (1967), 363–371.
- [10] Hasegawa, T., and Torii, T. Indefinite integration of oscillatory functions by the Chebyshev series expansion. *J. Comput. Appl. Math.* 17 (1987), 21–29.
- [11] Hasegawa, T., and Torii, T. An automatic quadrature for Cauchy principal value integrals. *Math. Comp.* 56 (1991), 741–754.
- [12] Hasegawa, T., and Torii, T. Application of a modified FFT to product type integration. *J. Comput. Appl. Math.* 38 (1991), 157–168.
- [13] Hasegawa, T., and Torii, T. An algorithm for nondominant solutions of linear second-order inhomogeneous difference equations. *Math. Comp.* 64 (1995), 1199–1214.
- [14] Hasegawa, T., Torii, T., and Sugiura, H. An algorithm based on the FFT for a generalized Chebyshev interpolation. *Math. Comp.* 54 (1990), 195–210.
- [15] Levin, D., and Sidi, A. Two new classes of nonlinear transformations for accelerating the convergence of infinite integrals and series. *Appl. Math. Comp.* 9 (1981), 204–215.

- [16] Linz, P. A method for computing Bessel function integrals. *Math. Comp.* 26 (1972), 509–513.
- [17] Longman, I. M. Tables for rapid and accurate numerical evaluation of certain infinite integrals involving Bessel functions. *MTAC* 11 (1957), 166–180.
- [18] Longman, I. M. A method for the numerical evaluation of finite integrals of oscillatory functions. *Math. Comp.* 14 (1960), 53–59.
- [19] Lozier, D. W. Numerical solution of linear difference equations, report NBSIR 80-1976. NBS, Washington, 1980.
- [20] Luke, Y. L. *Mathematical Functions and Their Approximations*. Academic Press, New York, 1975.
- [21] Lund, J. Bessel transforms and rational extrapolation. *Numer. Math.* 47 (1985), 1–14.
- [22] Lyness, J., and Hines, G. Algorithm 639, To integrate some infinite oscillating tails. *ACM Trans. Math. Softw.* 12, 1 (March 1986), 24–25.
- [23] Ooura, T., and Mori, M. The double exponential formula for oscillatory functions over the half infinite interval. *J. Comput. Appl. Math.* 38 (1991), 353–360.
- [24] Piessens, R., and Branders, M. Approximation for Bessel functions and their application in the computation of Hankel transforms. *Comp. Maths. Appls.* 8 (1982), 305–311.
- [25] Piessens, R., and Branders, M. Modified Clenshaw–Curtis method for the computation of Bessel function integrals. *BIT* 23 (1983), 370–381.
- [26] Piessens, R., deDoncker–Kapenga, E., Überhuber, C. W., and Kahaner, D. K. *QUAD-PACK, A Subroutine Package for Automatic Integration*. Springer, Berlin, 1983.
- [27] Piessens, R., and Haegemans, A. Algorithm 22, Algorithm for the automatic integration of highly oscillatory functions. *Computing* 13 (1974), 183–193.
- [28] Sidi, A. Extrapolation methods for oscillatory infinite integrals. *J. Inst. Math. Applics.* 26, 1 (1980), 1–20.
- [29] Sidi, A. The numerical evaluation of very oscillatory infinite integrals by extrapolation. *Math. Comp.* 38 (1982), 517–529.
- [30] Sidi, A. An algorithm for a special case of a generalization of the Richardson extrapolation process. *Numer. Math.* 38 (1982), 299–307.
- [31] Sidi, A. A user-friendly extrapolation method for oscillatory infinite integrals. *Math. Comp.* 51 (1988), 249–266.
- [32] Sugihara, M. Methods of numerical integration of oscillatory functions by the DE-formula with the Richardson extrapolation. *J. Comput. Appl. Math.* 17 (1987), 47–68.
- [33] Toda, H., and Ono, H. Some remarks for efficient usage of the double exponential formulas. *Kokyuroku RIMS, Kyoto Univ.* 339 (1978), 74–109 (in Japanese).