

複素関数論と数値解析

東大理学部 高橋秀俊

物理などで出てくる計算の対象は、ほとんどいつも代数式、初等超越関数等々、一つの式であらわされる関数である。時にはそれに微分、積分の記号が入ったり、それらを係数とする微分方程式の解として与えられる関数があらわれることもあるが、それらはすべて複素関数論の対象となるところの解析関数である。実際、数学解析の応用の90%以上は解析関数を対象とするものだといえる。それにも拘らず、数値解析に関する在来の書物にのっている関数アルゴリズム、たとえば補間法、数値積分、数値微分等のほとんどが、いわゆる微積分法(calculus)言いかえれば実変数関数的な考察に終始しているのは奇妙なことである。われわれは今まで、いくつかの問題、特に数値積分について、複素関数論による方法が極めて有効であることを示して来た⁽¹⁾。以下では、複素関数論的な方法が役に立つ他の例をいくつか示し、あわせて在来

の方法の欠陥を指摘したい。

1. 複素関数を用いることの意義.

微分, 積分, 微分方程式の解等は, すべて連続変数の関数に対する操作である. 計算機, その他ディジタルな方法でこの種のものを対象として計算とする場合は, 結局何かの方法で, 有限の, 離散的な数値によって関数を近似的に表現し, 適当な理論にもとづいて, それらの数値に対する演算から, 微分, 積分等の演算の結果についての (やはり有限個のパラメーターによる) 情報を得るほかはない. そのような有限個の数値として, 離散的な変数値 (標本点) に対する関数の値 (標本値) を使う場合が多いが, 時には適当な関数系による展開係数 (たとえばベキ級数展開, フーリエ展開) を用いることもある. しかし, いずれの場合でも, 目的の関数が比較的少数のパラメーターによって, 十分高い精度であらわされるためには, その関数が適当になめらかな (自然な) 関数であることが必要になる. この点については, 多くの書物ではあまり explicit に示されていないが, しかしそれは実際の公式の誤差評価の中に implicit に示されている. 即ち, 多くの誤差評価式は問題の関数の n 次微係数 (n は使用する公式に対してきまる) の絶対値の最大値を含んでおり, した

がって、問題の関数が n 回微分可能で、かつその n 次微係数があまり大きくないということが仮定されているわけである。しかし、実際の場合、問題の関数に対する知識を、たとえば3回微分可能ではあるが4回微分可能かどうかかわらないというような形でもっていることは、極めて稀である。むしろ実際は、問題の関数は無限回微分可能というより更に強い、実軸と中に含むある領域の中で解析的という条件が、暗黙のうちに了解されているのが普通である。そして明確に定めた領域で、解析性が暗黙でなく実際に証明できる場合が多い。関数が解析的に陽に与えられている場合はもちろんであるが、それ以外でも、物性に関する例でいえば、電子装置、たとえばダイオードの電流電圧特性をあらわす関数は、実軸を中心とした幅 $2\pi kT$ (ただし k は Boltzmann 定数, T は絶対温度) の帯状領域の中では正則だと考えてよい有力な根拠がある。物質の状態関数が温度の関数としてどのような解析性を有するか、言いかえれば、どこにどのような特異点があるかは、最近の統計力学の重要な課題である。そのように、 n 回微分可能ということよりも、どの範囲で正則であるということの方が、はるかに現実的な条件の与え方であるということも、まず認識する必要がある。

このように、関数の解析性に根拠を置く立場に立てば、当

然、複素関数論、特に Cauchy の積分公式が基本的な役割を演ずることになる。以下、具体例でこのことを示そう。

2. 補間法について

補間法について考える。即ち、未知関数 $f(x)$ とその標本値

$$(1) \quad y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), \dots, y_n = f(x_n)$$

によって近似的にあらわすことである。普通使われるのはすべて線形補間、即ち補間値 $\bar{f}(x)$ が $\bar{f} = \sum C_i(x) f(x_i)$ の形にあらわせるような方法である。最も普通なのは多項式による補間 (Lagrange 補間)、つまり $\bar{f}(x)$ を $(n-1)$ 次多項式と仮定して、(1) に合うように係数を定める方法である。標本点 $x_1, x_2, \dots, x_n$ は任意であるが、普通は等間隔にとる。他に階差表を用いる Newton の式、Stirling の式等いくつかがあるが、それらは単なる計算アルゴリズムの差であって、代数的には (つまり丸め誤差を考えなければ) Lagrange の式と同じものである。

Lagrange 補間の誤差を小さくする方向として、(1) 標本点の間隔 h を小さくすること、(2) 標本点の数 n を多くすること、の二つが考えられる。ところが h を小さくすることはいつも誤差を減らすのに有効であるが、 n を増し、 h は一定にしておくと、あるところから先は、ほとんどいつもか

え、誤差が大きくなる。得られた $\bar{f}(x)$ はもとの $f(x)$ とは似ても似つかぬ、ひどく上下に波打つ関数になる。即ち、Lagrange 補間は、関数を global に、つまり x の広い範囲に対して一つの式であらわすには、不適当である。

一方、Lagrange 補間を local に用いて、 $n=2l$ (偶数) 個の点による補間式をその中央の 1 区間の中の x に対してだけ用い、隣の区間に移る度毎に使用する標本点をいっしょにずらせる方式もある。こうして、しかも n をあまり大きくしなれば、たしかによくなるが、 x が標本点を過ぎるとき、式の切りかえのために不連続性が生じることと避けられない。

$\bar{f}(x)$ それ自身は当然そこで連続であるが、微係数 $\bar{f}'(x)$ が不連続になるのである。このような $\bar{f}'(x)$ の不連続性をなくした補間法として、いわゆる spline 補間があるが、これとてもっと高次の微係数で不連続性が起るから、小細工という感じが強い。

このような不連続性がなく、しかも global な補間式は、convolution type の式、即ち

$$(2) \quad \bar{f}(x) = \sum_n \phi(x-nh) f(nh)$$

のような形の補間式である。ここで $\phi(x)$ は

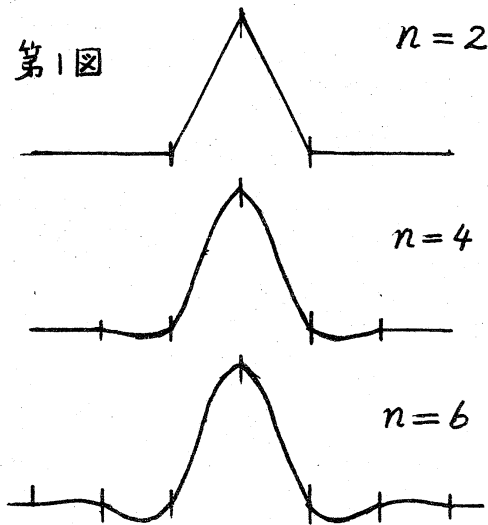
$$(3) \quad \phi(0) = 1, \quad \phi(nh) = 0 \quad (n \neq 0 \text{ の整数})$$

の条件をみたす関数であり、もし $\phi(x)$ が実軸上で解析的な

ら、 $f(x)$ も解析的、 $\phi(x)$ が n 回微分可能なら $f(x)$ も n 回微分可能となる。また、前述の、区間毎に切りかえる Lagrange 補間も、実は (2) のように書くことができるが、その場合の $\phi(x)$ は一つの解析関数ではなく、いくつかの多項式と n の倍数のところで継ぎ合わせた関数になる (第1図)。このような場合をも含め、関数 $\phi(x)$ を補間子 (interpolator) と呼ぶことにする。

解析的な補間子として代表的なものは

$$(4) \quad \phi(x) = \frac{h}{\pi x} \sin \frac{\pi x}{h}$$



である。これは情報理論で基本的な役割を演ずる Shannon の補間式を与える。これは実は Lagrange の式で $n \rightarrow \infty$ とした極限でもあり、更に、self-consistent な補間式であるという重要な特徴がある。補間式が self-consistent であるとは、この式で補間して得た関数について、同じ間隔でとった新しい標本点の組によって再び補間をするとき、前と同じ関数を得られること、つまり、任意の δ について

$$(5) \quad f(x) = \sum \phi(x - nh + \delta) f(nh - \delta)$$

が成り立つことである。

ところが Shannon の補間式は、残念なことに、級数の収束が甚だしく悪いために、数値計算のアルゴリズムとしてはまず実用にならない。そこでわれわれの問題は、self-consistency か何かは多少ギセイにしても、実用上は不連続性のあらわれない、しかも収束の速い convolution-type の補間式をさがすことである。その際、誤差評価に Cauchy の積分定理が使われる。

2.1 新しい補間式

まず、(4) のような補間子による補間式の値とその誤差はいずれも複素積分

$$(6) \quad \frac{\sin(\pi x/h)}{2\pi i} \int_C \frac{f(z) dz}{(z-x) \sin(\pi z/h)}$$

で与えられる。ここで、被積分関数の特異点は、 $f(z)$ の特異点のほかに $z=x$, nh ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) の単純な極があり、積分路 C が x を正の向きにまわれば $f(x)$ 自身、 nh の極全部を正の向きにまわれば $-f(x)$ になることがわかる。したがって、この両方の極をまわる積分が、誤差

$$\Delta(x) = f(x) - \bar{f}(x)$$

を与える。もし $f(z)$ が特異点をもたず、しかも x が実軸から遠ざかるときは

$$(7) \quad f(z) = o(e^{\frac{\pi}{h} |\operatorname{Im} z|})$$

であるなら、積分(6)は、積分路を実軸から十分遠くへもって行くことによって $\rightarrow 0$ となり、したがって誤差 $\Delta(z)=0$ である。(7)の条件は実は通信理論において $f(x)$ が band-limited であるという条件と等価であって、これはまた $f(x)$ の滑らかさに対する要請の、一つの形である。

さて、補間式の収束をよくするために、補間子として(4)を変更した

$$(8) \quad \phi(x) = \frac{\sin(\pi x/h)}{\pi x/h} \psi(x)$$

を考える。ここで $\psi(x)$ は $\psi(0)=1$ をみたすある解析関数で、収束をよくする目的を達するためには当然 $|x|$ が大きくなるとき $\psi(x)$ は急速に 0 に近づくものでなければならぬ。この場合の誤差は

$$(9) \quad \Delta(z) = \frac{\sin(\pi x/h)}{2\pi i} \int_C \frac{\psi(x-z) f(z) dz}{(z-x) \sin(\pi z/h)}$$

となることがわかる。

$$[例] 1 \quad \psi(x) = e^{-ax^2/2h^2}$$

この場合、 $\psi(x-z)$ は z の虚軸方向で急激に増大するから、(9)の積分路を無限に遠くへもって行くことはできない。実際は、 $\psi(x-z)/\sin \frac{\pi z}{h}$ の鞍点が $z = x \pm i \frac{h\pi}{a}$ のところにあるので、 $f(z)$ の方があまり急に変化しないなら、積分路をこのあたりを通過するように選ぶと、誤差 $\Delta(x)$

は $e^{-\pi^2/2a} |f(x - i \frac{h\pi}{a})|$ のオーダーとなる。したがって、たとえば a を $1/4$ にとれば、 $e^{-\pi^2/2a} \approx e^{-20} \approx 10^{-8.7}$ となって、単精度計算には十分な精度が得られる。

この場合、補間式の方は、 $e^{-\frac{a(x-nh)^2}{2h^2}} \approx e^{-\frac{n^2a}{2}} \approx e^{-20}$ になるあたりの項までをとるとすると、 $n = \pm 13$ までとればよいことになる。もちろんこれは $f(z)$ の方がおとなしい関数で、虚軸方向であまり速く増大しないとした場合である。そうでない場合は a をもっと小さくする必要があり、したがって必要な項数はもっと多くなる。

$$[191] \quad 2 \quad \psi(x) = \cos^m(\alpha\pi x/h) \quad |\alpha| \ll 1$$

この $\psi(x)$ は x に対して周期的で、 $x \rightarrow \infty$ で 0 にならない。しかし、途中で $\frac{\alpha x}{h} = \text{半整数}$ となる附近では非常に小さくなるから、級数をそこで打ち切ってしまうと、誤差の小さい補間ができる。

この $\psi(x)$ の特徴は、 $0 < m\alpha < k < 1$ であるとき、 $f(z)$ が十分におだやかな関数 ($\frac{1-k}{2h}$ に band-limited) であれば、補間が self-consistent だということである。

3. ベキ級数展開について

関数を離散的なパラメーターであらわす他の重要な方法である級数展開、特にベキ級数展開について考える。ベキ級数展開は、多くの重要な関数が具体的に与えられた簡単な展開係数をもつという大きな利点があるが、その欠点は、収束の範囲が複素平面上の円内に限定され、その外では、たとえ関数自体は全く滑らかに変わっていても、級数は収束しないことである。これに対する一つの対策は、幾つかの点を中心としたベキ級数を用意して、それで必要な領域をカバーすることである。原点を順次移しながら、新しいベキ級数を生成するのは、いわゆる解析接続を行なうことにほかならない。ところが解析接続は複素関数の理論のために生まれたものであって、これを実際の数値的アルゴリズムとして用いようと思おうと困難に逢着する。それは新しい級数をたとえば第 n 項まで求めようと思うと、古い方の級数は n よりはるかに多い項数求めなければならず、そのような手続きを何段階か行なう場合、はじめの方は非常に高い項まで求めなくては必要があり、しかも、何項まで求めればよいかが、あらかじめ知り難いという点である。そのほか、甚だしい折落ちも予想される。

ここでのべる方法は、この解析接続の概念を拡張して、

$$(10) \quad f(z) = \sum a_n x^n$$

において, x を新しい変数のもっと一般的な関数

$$(11) \quad x = \phi(u) = \sum b_n u^n$$

と置くことにより, 変数変換を行なった関数

$$(12) \quad f(x) = f(\phi(u)) = g(u) = \sum c_n u^n$$

をつくることである. ここで $\{a_n\}, \{b_n\}$ から $\{c_n\}$ を求めるアルゴリズムは存在するが, 一般には解析接続での原点の移動と同じ問題が生ずる. しかし, 特に

$$(13) \quad b_0 = 0 \quad \text{即ち} \quad \phi(0) = 0$$

つまり $\phi(u)$ の級数が u^1 の項からはじまる場合を考えると, そのときは c_n は $a_0, a_1, \dots, a_n, b_1, b_2, \dots, b_n$ だけから有限な式で与えられる. それは (10), (11) をそれぞれ n 次の項で打ち切って多項式と見做したのと同じであるから, 多項式に関する演算として容易に書き下すことができる.

このようにして得られた $g(u)$ のべき級数は, u 平面上での一つの円を収束範囲としてもつ. これをもとの x 平面に写像してみれば, それは当然 $f(x)$ の級数の収束円とは異なるものになり, 多くの場合, もとの級数の収束しない領域で新しい級数が収束することがある. $\phi(u)$ の選択をうまくやると, x の非常に広い範囲に対して $g(u)$ の級数が収束するようにできる. $g(u)$ の級数の x 平面上での収束領域はいろいろの形をしてゐるが, 一般にはその中に $f(x)$ の特異

点は含まれないのは当然である。したがって、 $f(x)$ の特異点をうまく避けてアナーバのようにのびた収束域をもつような変換関数 $\phi(u)$ を探すことがよいわけである。

例.

$$\phi_1(u) = \frac{2u}{1+u}, \quad \phi_2(u) = \frac{4u}{(1+u)^2}$$

$$\phi_3(u) = \frac{8u(1+u^2)}{(1+u)^4}$$

これらはいずれも

$$(14) \quad 1-x = \left(\frac{1-u}{1+u}\right)^k \quad k=1, 2, 4$$

から得られた変換である。すべて $\phi(1) = 1$ 、つまり、0だけでなく1の点をも動かさない変換である。更に $x = \infty$ は $u = -1$ に対応する。

いま $f(x)$ が $x = 1, \infty$ にだけ特異点(分岐点でもよい)をもつとする。すると $g(u)$ の特異点は1, -1にあり、したがって収束半径は1。これを x 平面に戻すと、 ϕ_1 では $\operatorname{Re} x = 1$ の虚軸に平行な直線より左側の半平面。

ϕ_2 では、 $x = 1$ から $+\infty$ まで実軸上に切断線を入れた全平面。 ϕ_3 では、上述の切断線を越えてリーマン面の裏側へまわって、そこで $x = 1$ から負の側へ $-\infty$ に達する切断線にぶつかるまでの、2重になった全平面で収束する。

(14) で k を 4 より大きくすると, u 平面上で単位円の内部に特異点があられれて, 収束半径が 1 より小さくなるので, あまり有利でない. そのような欠点のない変換は, 楕円関数の Landen 変換に相当するものである. そのようなものの極限として得られる最適の変換は, 楕円 modular 関数

$$(15) \quad x = \phi_4(u) \equiv \frac{16u(1+u^2+u^6+u^{12}+\dots)^4}{(1+2u+2u^4+2u^9+\dots)^4}$$

によって与えられる. これによる対応は

$$\begin{aligned} \phi(0) &= 0, \quad \phi(1) = 1, \quad \phi(-1) = \infty, \quad \phi(-e^{-\pi}) = -1, \\ \phi(e^{-\pi}) &= 1/2 \end{aligned}$$

であり, u 平面の単位円は x 平面を $1, \infty$ を除いて全部無限に多重に覆いつくす.

3.1 解析接続としての変数変換

この種の変数変換は, 級数の収束範囲をひろげると同時に, 収束の悪い級数の収束をはやくする. したがって, 収束しない級数の和を求めるいわゆる総和法として, および級数の収束の加速法として, 応用の範囲が広い.

これはまた, 解析接続の一種と考えることもできる. この方法を使って, ベキ級数で定義された関数, たとえば

$$\zeta(x, s) = \sum_{n=1}^{\infty} x^n / n^s$$

のリーマン面の裏側の遠くの方までの様子をうかがい知るこ

ともできる。原点 $x=0$ が $u=0$ となって動かさないのは一つの制約ではあるが、それ以外の点では $\phi(u)$ は全く自由に選べるから、原理的にはどこまででも収束範囲をのばすことができる。普通の解析接続と違って1段ですむところが特徴である。もちろん変換を何回も重ねて実行してもよいが、同じ効果と一つの変換でやっても得られるから、普通の解析接続のように何段階にも分ける意味はない。しかし、この変数変換法を用いても、やはり遠くの方に触手をのばした場合 $|u|$ の値が収束半径に非常に近くなって、級数の収束は悪くなることを承知している必要がある。

文 献

- (1) H. Takahasi & M. Mori:

Error Estimation in the Numerical Integration of
Analytic Functions, Report of the Computer Centre,
Univ. of Tokyo 3 (1970) 41-108;

Estimation of Errors in the Numerical Quadrature of
Analytic Functions, Applicable Analysis 1 (1971)
201-229;

Quadrature Formulas Obtained by Variable Transformation,
Numerische Mathematik 21 (1973) 206-219;

Double Exponential Formulas for Numerical Integration,
Publ. of RIMS, Kyoto Univ. 9 (1974) 721-741.