近似

序

この文書は 2008 年 4 月から行なわれた学生主体の自主ゼミ, 物理数学ゼミにおいて, 山下達也が担当した「近似」に関する内容をまとめ, 電子文書化したものである. ゼミの性格上, この文書には多くの誤りが含まれていると考えられる (特に第 4 節の Global Padé 近似の話は相当胡散臭い). 従ってこの文書を読むに際しては, 性悪説の立場に立って読み進められることを強くお薦めする. また比較的単純な式変形の過程の詳細を省略していることがあるので, 各自行間を補いながら読み進められたい.

1 Taylor 展開による近似

1.1 Taylor の定理

先ずは Taylor の定理を復習する. 寺沢 (1931) ではこの定理について「微分学において最も重要な定理であって, もしこの定理なかりせば微分学の活用範囲は実に哀れなものであろう」と評している.

Taylor の定理

関数 f(x) が区間 [a,b] において n 回連続微分可能ならば, [a,b] において

$$f(x) = \sum_{n=0}^{n-1} \frac{f^{(n)}(a)}{r!} (x-a)^r + R_n$$
 (1.1)

となる. 但し R_n は剰余項と呼ばれ,

$$R_n(x) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} f^{(n)}(t) dt$$
 (1.2)

である¹⁾.

特に $n \to \infty$ のときに $R_n \to 0$ となる場合,

$$f(x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(x-a)^r}{r!} f^{(r)}(a)$$
 (1.3)

となる. (1.3) を f(x) の x=a 近傍での Taylor 級数 と呼ぶ. また a=0 の場合, Maclaurin 級数と呼ぶ.

^{1)(1.2)} の証明については付録 A を参照されたい.

1.2 収束半径

べき級数 $\sum_{r=0}^{\infty} a_r x^r$ が |x| < R で収束し, |x| > R で発散するとき, R を収束半径と言う. 収束半径は次のいずれかの方法によって求められる 2).

$$\lim_{n \to \infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| = \frac{1}{R},\tag{1.4}$$

$$\lim_{n \to \infty} (|a_n|)^{1/n} = \frac{1}{R}.$$
(1.5)

収束半径内では f(x) に関して項別微分, 項別積分することが可能である.

1.3 Taylor 展開の数学的応用例

ここでは Taylor 展開の数学的応用例を 3 つ挙げる.

(a) 近似値の計算

 $f(x)=e^x$ の x=0 近傍での Taylor 展開を利用して Napier 数 $e=2.8182818284\cdots$ の近似値を求めることができる. Taylor 展開

$$e^x = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{x^r}{r!} \tag{1.6}$$

をi次の項で打ち切ることによって得られる第i近似値を f_i とすると、

$$f_0 \simeq 1.0,$$
 $f_1 \simeq 2.0,$
 $f_2 \simeq 2.5,$
 $f_3 \simeq 2.6667,$
 $f_4 \simeq 2.7083,$
 $f_5 \simeq 2.7167,$
 $f_6 \simeq 2.7181,$
 $f_7 \simeq 2.7182, \cdots$ (1.7)

のようになる.

(b) 項別積分を用いた積分計算

例えば積分

$$I = \int_0^\infty e^{-x^2} \cos x dx \tag{1.8}$$

 $^{^{2)}(1.4),(1.5)}$ の導出方法や、各々の式はどのような場合についてうまくいくのかについては良く分からないので、要調査である.

について考える。この積分は複素積分を用いれば容易に求まるが、ここでは敢えて項別積分による解法を試みてみる。 $\cos x$ の Maclaurin 級数は

$$\cos x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} x^{2k} \tag{1.9}$$

となる. (1.9) を (1.8) に代入すると,

$$I = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \int_0^{\infty} e^{-x^2} x^{2k} dx$$
 (1.10)

となる. いま Gauss 積分

$$\int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$
 (1.11)

が既知であるとしよう. このとき部分積分により

$$\int_0^\infty e^{-x^2} x^{2n} dx = \frac{(2n)!}{4^n n!} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$
 (1.12)

が得られる. (1.12) を (1.10) に代入すると,

$$I = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{1}{4} \right)^k \tag{1.13}$$

となる. (1.6) で x = -1/4 を代入すると,

$$e^{-1/4} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{1}{4} \right)^k \tag{1.14}$$

となるので,

$$I = \frac{\sqrt{\pi}e^{-1/4}}{2} \tag{1.15}$$

が得られる.

(c) Taylor 展開による関数の振舞いの理解

例えば誤差関数

$$f(x) = \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy$$
 (1.16)

のおおよその振舞いを調べたいとしよう。我々は積分形よりも冪の扱いに慣れているであるうから、Taylor 展開で記述すれば関数の振舞いをより良く知ることが出来るようになるわけである。 f(x) の Taylor 展開は

$$f(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)k!} x^{2k+1}$$
(1.17)

で与えられる. 第 n 次の冪で打ち切ることによって得られる第 n 近似を $f_n(x)$ と表すと,

$$f_{1}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}x,$$

$$f_{3}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(x - \frac{x^{3}}{3}\right),$$

$$f_{5}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(x - \frac{x^{3}}{3} + \frac{x^{5}}{10}\right),$$

$$f_{7}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(x - \frac{x^{3}}{3} + \frac{x^{5}}{10} - \frac{x^{7}}{42}\right),$$

$$f_{9}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(x - \frac{x^{3}}{3} + \frac{x^{5}}{10} - \frac{x^{7}}{42} + \frac{x^{9}}{216}\right),$$
...
$$(1.18)$$

となる. x=0 からより離れた場所での振舞いを知りたければ, より高次の項で打ち切って やると良い.

1.4 Taylor 展開の物理的応用例

この小節では Taylor 展開の物理的応用の一例として, 振り子の単振動を取り扱う.

伸縮しない長さ L の紐に結びつけられた質量 m の質点が天井から吊されているとする. 時刻 t において紐が鉛直方向となす角を $\theta(t)$ とする. 初期時刻 t=0 において、質点を角度 θ_0 の状態から静かに手放すとき、質点がどのように運動するのかを考える. このとき質点の運動方程式は

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g\sin\theta}{L} \tag{1.19}$$

となる. 但しg は重力加速度である. また初期条件は

$$\begin{cases} \theta(t=0) = \theta_0, \\ \frac{d\theta}{dt} \Big|_{t=0} = 0 \end{cases}$$
 (1.20)

と表される. 紙と鉛筆のみで方程式 (1.19) を厳密に解くのは困難である. そこで $|\theta|\ll 1$ の場合について考え, $\sin\theta$ を Taylor 展開で近似することを考える.

$(a) \sin \theta$ を 1 次近似する場合

この場合

$$\sin \theta \simeq \theta$$
 (1.21)

となるので、方程式は

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g\theta}{L} = 0 \tag{1.22}$$

となる. (1.22) の一般解は

$$\theta(t) = A\sin\left(\sqrt{\frac{g}{L}}t\right) + B\cos\left(\sqrt{\frac{g}{L}}t\right) \tag{1.23}$$

2008/10/01(山下 達也)

となる. 但し A, B は任意定数である. ここで初期条件 (1.20) を適用すると,

$$A = 0, B = \theta_0 \tag{1.24}$$

となり,

$$\theta(t) = \theta_0 \cos\left(\sqrt{\frac{g}{L}}t\right) \tag{1.25}$$

が得られる. この振り子の振幅は $heta_0$, 周期は $2\pi\sqrt{L/g}$ である.

$(b) \sin \theta$ を 3 次近似する場合

この場合

$$\sin \theta \simeq \theta - \frac{\theta^3}{6} \tag{1.26}$$

となるので、方程式は

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{L}\left(\theta - \frac{\theta^3}{6}\right) = 0\tag{1.27}$$

となる. (1.27) の両辺に $d\theta/dt$ を掛けると,

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right] = \frac{g}{L} \left[-\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \theta^2 \right) + \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{24} \theta^4 \right) \right]$$
 (1.28)

となる. (1.28) の両辺を時刻 t=0 から時刻 t まで積分すると,

$$\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 = \frac{g}{12L}(\theta^4 - 12\theta^2 + 12\theta_0^2 - \theta_0^4) \tag{1.29}$$

となる. ここで

$$a_1 + a_2 = 12, \quad a_1 a_2 = 12\theta_0^2 - \theta_0^4, \quad a_1 \le a_2$$
 (1.30)

とすると, (1.29) は

$$\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 = \frac{g}{12L} \left(\theta^2 - a_1\right) \left(\theta^2 - a_2\right) \tag{1.31}$$

と書き換えられる. 更に

$$\theta = \sqrt{a_1}\phi, \quad k^2 = \frac{a_1}{a_2}, \quad t = \sqrt{\frac{12L}{ga_2}}\tau$$
 (1.32)

と置くと、(1.31)は

$$\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2 = (1 - \phi^2)(1 - k^2\phi^2) \tag{1.33}$$

となる. 質点を手放した直後は $d\theta/dt < 0$ であるから,

$$\frac{d\tau}{d\phi} = -\frac{1}{\sqrt{(1-\phi^2)(1-k^2\phi^2)}}\tag{1.34}$$

物理数学ゼミ

近似について **6**

となる. 時刻 $t = 0(\tau = 0)$ から時刻 t まで (1.34) を積分すると,

$$\tau = -\int_{\phi_0}^{\phi} \frac{d\phi'}{\sqrt{(1 - {\phi'}^2)(1 - k^2 {\phi'}^2)}}$$
 (1.35)

となる. 但し $\phi_0=\theta_0/\sqrt{a_1}$ である. 更に $\phi=0$ となるときの au の値を au_1 とすると,

$$\tau_1 = -\int_{\phi_0}^0 \frac{d\phi'}{\sqrt{(1 - {\phi'}^2)(1 - k^2 {\phi'}^2)}}$$
 (1.36)

となり,

$$\tau_1 - \tau = \int_0^\phi \frac{d\phi'}{\sqrt{(1 - {\phi'}^2)(1 - k^2 {\phi'}^2)}} = \operatorname{sn}^{-1} \phi,$$

すなわち

$$\phi = \operatorname{sn}(\tau_1 - \tau, k) \tag{1.37}$$

となる. 但し sn は楕円関数である. (1.30) において $|\theta_0| \ll 1$ を考慮すると

$$a_1 = \theta_0^2, \quad a_2 = 12 - \theta_0^2$$
 (1.38)

となる. 従って

$$t_1 = \sqrt{\frac{12L}{ga_2}}\tau_1\tag{1.39}$$

とすると.

$$\theta(t) = \theta_0 \operatorname{sn} \left[-\sqrt{\frac{g}{L} \left(1 - \frac{\theta_0^2}{12} \right)} (t - t_1), k \right]$$
(1.40)

が得られる. この振り子の振幅は θ_0 , 周期は $4t_1$ である.

以上より振り子の運動は 1 次近似の枠組では三角関数で記述され, 3 次近似の枠組では楕円関数で記述されることが分かる.

2 漸近展開による近似

2.1 漸近冪級数

以下,守口他(1987)の漸近冪級数の定義を引用する.

数列 $\{a_n\}$ に対して関数 f(x) が

$$f(x) = a_0 + \frac{a_1}{r} + \frac{a_2}{r^2} + \dots + \frac{a_n}{r^n} + \frac{\varepsilon_n(x)}{r^n}$$
 $(n = 1, 2, \dots)$ (2.1)

と表され, また級数 $\sum_{n=0}^{\infty} a_n/x^n$ は発散するが, n を固定すると

$$\lim_{x \to \infty} \varepsilon_n(x) = 0 \tag{2.2}$$

となるとき, 級数 $\sum_{n=0}^{\infty}a_n/x^n$ を漸近冪級数と言い

$$f(x) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{x^n} \qquad (x \to \infty)$$
 (2.3)

と表す.

漸近冪級数の係数は以下の極限操作により、低次のものから順次定められる.

$$a_n = \lim_{|x| \to \infty} x^n \left[f(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{a_k}{x^k} \right].$$
 (2.4)

関数 f(x) の変数 x が十分大きいとき、漸近冪級数を有限個の項までで打ち切ったものは良い近似を与える.

また後程現れるが、漸近級数は冪級数のみとは限らず、初等関数と冪級数の積の形で与えられることもある.

2.2 漸近冪級数の例

漸近冪級数の例を3つ挙げよう. 先ず

$$f(x) = \int_0^\infty \frac{e^{-xt}}{1+t^2} dt \qquad (x > 0)$$
 (2.5)

なる関数について考える. (2.5) の漸近冪級数の各係数 a_n は部分積分を n 回実施することによって求まる. その結果

$$f(x) \sim \frac{1}{x} - \frac{2!}{x^3} + \frac{4!}{x^5} + O(x^{-7})$$
 (2.6)

が得られる.

次に

$$g(x) = \sqrt{x^2 + 2px + q} - (x+p)$$
 (2.7)

なる関数について考える (但し p, q は定数). 各係数は分子の有理化を適用することによって求まる. その結果

$$g(x) \sim \frac{1}{2}(q - p^2)\frac{1}{x} - \frac{q}{2}(q - p^2)\frac{1}{x^2} + O(x^{-3})$$
 (2.8)

が得られる.

更に

$$h(x) = \frac{1}{e^{1/x} + 1} \tag{2.9}$$

なる関数について考える. 各係数はロピタルの定理を適用することによって求まる. その 結果

$$h(x) \sim \frac{1}{2} - \frac{1}{4x} + \frac{1}{48x^3} + O(x^{-4})$$
 (2.10)

2008/10/01(山下 達也)

が得られる.

以下, $(e^{\frac{1}{x}}+1)^{-1}$ の漸近展開を第二項, 第三項で打ち切った場合に得られる近似の具体的数値を示す. 第二項まで打ち切った場合の近似であっても x>1 でかなり良い近似となっていることが分かる. x<1 では漸近展開は近似としてはほとんど用を為さないことが見てとれる.

x	0	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	∞
$(e^{\frac{1}{x}}+1)^{-1}$	0	0.119203	0.268941	0.377541	0.450166	0.475021	0.500000
$\frac{1}{2} - \frac{1}{4x}$	$-\infty$	0	0.250000	0.375000	0.450000	0.475000	0.500000
$\frac{1}{2} - \frac{1}{4x} + \frac{1}{48x^3}$	∞	0.166667	0.270833	0.377604	0.450167	0.475021	0.500000

2.3 積分形で記述される関数の漸近級数

積分形で記述される関数のうち、ある種のものについては以下の方法により漸近級数を求めることが出来る.

- 1. 被積分関数の一部を Taylor 展開し, 項別積分を実行する.
- 2. 停留位相法 (stationary phase method) を適用する.

1. 項別積分を用いる方法

以下の形式の関数については Taylor 展開および項別積分を用いることにより漸近級数を求めることが出来る.

$$f(x) = \int_0^\infty e^{-u} g(u) du, \tag{2.11}$$

(2.11) において g(u), を Taylor 展開し, 各項について積分公式

$$\int_0^\infty t^n e^{-at} dt = \frac{n!}{a^{n+1}}.$$
 (2.12)

を適用するというのがこの手法における基本的な作戦となる.

この手法に関して、2つ事例を挙げよう、先ず1つめの事例として

$$f(x) = \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2} ds$$
 (2.13)

について考える 3). 先ず $\operatorname{erf}(\infty)=1$ であることに着目すると,

$$1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-s^2} ds - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2} ds = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-s^2} ds$$
 (2.14)

 $^{3)}{
m erf}(x)$ の漸近展開の導出については、以下の文献を大いに参考にさせて頂いた. http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/ serge/asymptotic_series.pdf

となる. ここで

$$s = x\sqrt{1+t} \tag{2.15}$$

なる変数変換を行なうと、

$$\int_{x}^{\infty} e^{-s^{2}} ds = \frac{x}{2} \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-x^{2}t}}{\sqrt{1+t}} dt$$
 (2.16)

となる. 関数 $1/\sqrt{1+t}$ の Taylor 展開は

$$\frac{1}{\sqrt{1+t}} = 1 - \frac{1}{2}t + \frac{3}{8}t^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n)!}{4^n (n!)^2} t^n$$
 (2.17)

となるので

$$\int_{x}^{\infty} e^{-s^{2}} ds = \frac{x}{2} \int_{0}^{\infty} e^{-x^{2}t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n} (2n)!}{4^{n} (n!)^{2}} t^{n} dt$$

$$= \frac{x}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n} (2n)!}{4^{n} (n!)^{2}} \int_{0}^{\infty} e^{-x^{2}t} t^{n} dt \qquad (2.18)$$

となる. (2.12) を (2.18) に適用すると

$$\int_{x}^{\infty} e^{-s^{2}} ds = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n} (2n)!}{4^{n} n!} \frac{1}{x^{2n+1}}$$
 (2.19)

となる. 従って (2.13), (2.19) より

$$\operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n)!}{4^n n!} \frac{1}{x^{2n+1}}$$
 (2.20)

が得られる. 誤差関数 $\operatorname{erf}(x)$ のように漸近級数が冪だけで書けないものも存在する. 冪だけで漸近級数が記述されない例としては Bessel 関数などの特殊関数が挙げられる.

もう 1 つの例として 2.2 節で考えた (2.5) の漸近級数を項別積分により求める方法で求めてみよう. 関数 $(1+t^2)^{-1}$ の Taylor 展開は

$$\frac{1}{1+t^2} = 1 - t^2 + t^4 - \dots = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n t^{2n}$$
 (2.21)

となるので

$$\int_0^\infty \frac{e^{-xt}}{1+t^2} dt = \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \int_0^\infty e^{-xt} t^{2n} dt \qquad (x>0)$$
 (2.22)

と書き換えられる. ここで (2.12) を適用すれば

$$\int_0^\infty \frac{e^{-xt}}{1+t^2} dt = \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n (2n)!}{x^{2n+1}}$$
 (2.23)

が得られる.

2. 停留位相法を用いる方法

g(k) を k とともに激しく変化しない実関数, $\phi(x,k)$ を k とともに緩やかに変化しない実関数とする. このとき

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k)e^{i\phi(x,k)}dk$$
 (2.24)

という形の関数については、停留位相法を用いて漸近展開を得ることが出来ることが多い、

以下, 停留位相法の基本的概念について大雑把に述べる. (2.24) の被積分関数を k の関数として見たとき, g(k) は被積分関数の包絡線となっており, $e^{i\phi(x,k)}$ は振動部分となっている. $\phi(x,k)$ が k とともに緩やかに変化しない関数である場合, $e^{i\phi(x,k)}$ そして $g(k)e^{i\phi(x,k)}$ は $\partial \phi/\partial k=0$ を満たす点の近傍を除いて激しく振動する. g(k) が緩やかに変化する関数であるとき, $g(k)e^{i\phi(x,k)}$ の振動の隣り合う山と谷の高さ (深さ) はほぼ等しい. 従って激しい振動領域では, $g(k)e^{i\phi(x,k)}$ の積分寄与が隣り合う山と谷によって打ち消されてほぼゼロとなる. その結果, (2.24) は $\partial \phi/\partial k=0$ を満たす点の近傍での積分によって近似できる. すなわち $\partial \phi/\partial k=0$ を満たす k の値を k_* , 微小な正の実数を ε とすると,

$$f(x) \simeq \int_{k_* - \varepsilon}^{k_* + \varepsilon} g(k)e^{i\phi(x,k)}dk$$
 (2.25)

となる. ϕ の $k = k_*$ での 2 次の Taylor 展開を用いると, k_* が実数である場合,

$$f(x) \simeq \int_{k_*-\varepsilon}^{k_*+\varepsilon} g(k) \exp\left\{i \left[\phi(k_*) + \frac{\partial \phi}{\partial k} \Big|_{k=k_*} (k-k_*) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} \Big|_{k=k_*} (k-k_*)^2\right] 5 5 \right\} dk$$

$$\simeq \int_{k_*-\varepsilon}^{k_*+\varepsilon} g(k_*) \exp\left\{i \left[\phi(k_*) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} \Big|_{k=k_*} (k-k_*)^2\right]\right\} dk$$

$$\simeq g(k_*) \exp[i\phi(k_*)] \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{\frac{i}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} \Big|_{k=k_*} (k-k_*)^2\right\} dk \qquad (2.26)$$

となる. (2.26) は Gauss 積分に帰着することができる場合には, f(x) の漸近展開を得ることができる.

停留位相法を用いる事例として Airy 関数

$$f(x) = \operatorname{Ai}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[ix\left(k + \frac{k^3}{3x}\right)\right] dk$$
 (2.27)

の漸近展開を求めてみる 4). 但し今は x>0 の場合についてのみ考えることとする. $\mathrm{Ai}(x)$ は (2.24) において g(k)=1 , $\phi(x,k)=x(\zeta+\zeta^3/(3x))$ と置いた場合に相当する. 従って

$$\frac{\partial \phi}{\partial k} = x \left(1 + \frac{k^2}{x} \right), \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial k^2} = 2k$$
 (2.28)

となる. よって積分寄与の中心となる点は $k_*=\pm\sqrt{x}i$ となるから, (2.27), (2.28) より

$$f(x) \simeq \frac{1}{2\pi} \exp\left(\mp \frac{2}{3} x^{3/2}\right) \int_{\mp\sqrt{x}-\infty}^{\mp\sqrt{x}+\infty} \exp\left[\mp \sqrt{x} (k \mp \sqrt{x}i)^2\right] dk \tag{2.29}$$

2008/10/01(山下 達也)

 $^{^4}$ 物理学的には、Airy 関数は虹の光学理論の研究で Airy 自身によって初めて用いられたらしい.

となる. ここで $k \mp \sqrt{x}i = p$ なる変数変換を行なうと,

$$f(x) \simeq \frac{1}{2\pi} \exp\left(\mp \frac{2}{3}x^{3/2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp[\mp \sqrt{x}p^2] dp \tag{2.30}$$

となる. $k=-\sqrt{x}i$ で ϕ を展開する場合, (2.30) の右辺の積分は発散してしまうので, こちらの場合は棄却する. 従って $k=\sqrt{x}i$ で ϕ を展開すると,

$$f(x) \simeq \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\sqrt{x}p^2] dp$$
$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \quad (x > 0)$$
(2.31)

が得られる.

上記の計算では漸近展開の第一項までしか求めることが出来ない. しかし鞍部点法 (saddle point method) を適用し複素積分を実行すると, $\operatorname{Ai}(x)$ の漸近級数を求めることが出来,

$$\operatorname{Ai}(x) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n C_n \left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)^{-n} \quad (x > 0)$$
 (2.32)

となる. 但し

$$C_n = \frac{\Gamma(3n+1/2)}{54^n n! \Gamma(n+1/2)}$$
 (2.33)

である⁵⁾.

積分形で記述される関数の漸近展開の物理学への応用例としては, 山岳波 (mountain wave) の山から十分離れた所での振舞いを調べることなどに用いられる (例えば Smith (1979) などを参照).

3 Padé 近似

3.1 Padé 近似の特徴

Padé 近似(Padé approximation) とは有理関数 (rational function) で或る関数を近似すること, 又は近似したもののことを言う. Padè 近似の特徴として, 以下の 2 点が挙げられる.

- 或る関数 f(x) の Padé 近似を求める為には, f(x) の Taylor 展開を予め求めておく必要がある.
- Taylor 展開による近似の場合, 展開の中心点の近傍でしか有効でないが, 一般に Padé 近似はより広い区間で有効である.

^{5)(2.32), (2.33)} の導出については付録 B を参照されたい.

3.2 Padé 近似の定義

L, M を正の整数とする. 有理関数

$$[L, M](x) = \frac{p_0 + p_1 x + \dots + p_L x^L}{q_0 + q_1 x + \dots + q_M x^M} = \frac{\sum_{i=0}^L p_i x^i}{\sum_{i=0}^M q_i x^i}$$
(3.1)

が或る関数 f(x) に対し

$$f(0) = [L, M](0),$$

$$f'(0) = [L, M]'(0),$$

$$\cdots,$$

$$f^{(L+M)}(0) = [L, M]^{(L+M)}(0)$$
(3.2)

となるとき, [L,M](x) を f(x) の (L,M) 次の Padé 近似と言う. 逆に Padé 近似では x=0 で Taylor 展開の導関数と自身の導関数とが等しくなるように係数を定めていると言い換えることも出来る. M=0 のとき, Padé 近似は Taylor 級数を有限個で打ち切ったものと等価である. このことから Padé 近似は Taylor 展開による近似を拡張したものであると言うことが出来る. 一般に L と M の値が大きく異なると近似の精度が悪くなる傾向があるらしい. 従って一般的な状況は 3.2 小節でのみ扱い, 3.2 小節以降では L=M の場合のみ考えることとする.

[L,M](x) の未知の係数は L+M+2 個である. 一方,係数を定める為の方程式の数は (3.2) より L+M+1 個である. 一般的な連立方程式において方程式の数が未知数よりも 1 個少ない場合,未知数は一意に定まらず,それぞれの比しか求められない. しかし今考えているのは有理関数なので、各々の未知数の比が求まれば、関数自体は一意に定まることになる.

以下, (3.2) を変形して p_i , q_i に関する式を導く 6 . (3.2) をまとめて書くと

$$f^{(k)}(0) - [L, M]^{(k)}(0) = 0$$
 $(k = 0, 1, \dots, L + M)$ (3.3)

となる. いま f(x) の Taylor 展開が

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \tag{3.4}$$

と表されるものとする. (3.3), (3.4) より f(x) - [L, M](x) の Taylor 展開は

$$f(x) - [L, M](x) = \sum_{i=L+M+1}^{\infty} b_i x^i$$
(3.5)

と書ける. (3.1), (3.4) を (3.5) に代入すると

$$\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i - \frac{\sum_{i=0}^{L} p_i x^i}{\sum_{i=0}^{M} q_i x^i} = \sum_{i=L+M+1}^{\infty} b_i x^i,$$

http://next1.msi.sk.shibaura-it.ac.jp/MULTIMEDIA/numeanal2/node19.html

⁶⁾Padé 近似の係数に関する式の導出については以下のウェブサイトを参考にさせて頂いた. 数値解析入門 II 有理関数近似

すなわち

$$\left(\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i\right) \left(\sum_{i=0}^{M} q_i x^i\right) - \sum_{i=0}^{L} p_i x^i = \left(\sum_{i=L+M+1}^{\infty} b_i x^i\right) \left(\sum_{i=0}^{M} q_i x^i\right), \tag{3.6}$$

となる. (3.6) の右辺は O(L+M+1) であるので, (3.6) が成立する為には少なくとも (3.6) の左辺の次数 L+M 以下の項の係数がゼロでなければならない. ここで便宜上

$$p_i \equiv 0, \qquad (i = L + 1, L + 2, \cdots, L + M)$$
 (3.7)

$$q_i \equiv 0, \qquad (i = M + 1, M + 2, \cdots, L + M)$$
 (3.8)

と置くと、(3.6)は

$$\left(\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i\right) \left(\sum_{i=0}^{L+M} q_i x^i\right) - \sum_{i=0}^{L+M} p_i x^i = \left(\sum_{i=L+M+1}^{\infty} b_i x^i\right) \left(\sum_{i=0}^{L+M} q_i x^i\right), \quad (3.9)$$

と書き換えられる. このとき (3.9) の左辺の x^k の項の係数は

$$a_0q_k + a_1q_{k-1} + \dots + a_kq_0 - p_k = \sum_{i=0}^k a_iq_{k-i} - p_k$$
 (3.10)

となる. 従って (3.6) が満たされる為には

$$\sum_{i=0}^{k} a_i q_{k-i} - p_k = 0 \qquad (k = 0, 1, \dots, L + M)$$
(3.11)

でなければならない。 (3.11) が実際に Padé 近似を求める際に解くべき式である。 (3.11) より [L.M](x) を求めるには, f(x) の L+M 次の Taylor 展開が既知でなければならないことが分かる。

3.3 Padé 近似の例

ここでは以下の 3 つの関数の Padé 近似 [1,1](x), [2,2](x) について考える.

$$f(x) = \ln(x^2 + 1), (3.12)$$

$$g(x) = e^x, (3.13)$$

$$h(x) = e^{-x}\sin x. ag{3.14}$$

(a) $f(x) = \ln(x^2 + 1)$ の場合

f(x) の Taylor 展開は

$$f(x) = x^2 - \frac{1}{2}x^4 + O(x^6)$$
(3.15)

となる. 先ず [1,1](x) を求めよう. この場合, 解くべき連立方程式は

$$a_0q_0 - p_0 = 0,$$

$$a_0q_1 + a_1q_0 - p_1 = 0,$$

$$a_0q_2 + a_1q_1 + a_2q_0 - p_2 = 0,$$

$$a_0 = 0, \quad a_1 = 0, \quad a_2 = 1, \quad p_2 = 0, \quad q_2 = 0$$

$$(3.16)$$

となる. (3.16) を解くと

$$p_0 = 0, \quad p_1 = 0, \quad q_0 = 0$$
 (3.17)

となり,

$$[1,1](x) = 0 (3.18)$$

が得られる. 次に [2,2](x) を求める. この場合, 解くべき連立方程式は

$$a_{0}q_{0} - p_{0} = 0,$$

$$a_{0}q_{1} + a_{1}q_{0} - p_{1} = 0,$$

$$a_{0}q_{2} + a_{1}q_{1} + a_{2}q_{0} - p_{2} = 0,$$

$$a_{0}q_{3} + a_{1}q_{2} + a_{2}q_{1} + a_{3}q_{0} - p_{3} = 0,$$

$$a_{0}q_{4} + a_{1}q_{3} + a_{2}q_{2} + a_{3}q_{1} + a_{4}q_{0} - p_{4} = 0,$$

$$a_{0} = 0, \quad a_{1} = 0, \quad a_{2} = 1, \quad a_{3} = 0, \quad a_{4} = \frac{1}{2}, \quad p_{3} = p_{4} = 0, \quad q_{3} = q_{4} = 0$$

$$(3.19)$$

となる. (3.19) を解くと

$$p_0 = 0, \quad p_1 = 0, \quad p_2 = q_0, \quad q_1 = 0, \quad q_2 = \frac{1}{2}q_0$$
 (3.20)

となり,

$$[2,2](x) = \frac{2x^2}{2+x^2} \tag{3.21}$$

が得られる. $\ln(x^2+1)$ の 4 次の Taylor 展開, [1,1](x), [2,2](x) をプロットしたものを 図 1 に示す. [2,2](x) の近似精度が最も良いことが見てとれる.

(b) $g(x) = e^x$ の場合

g(x) の Taylor 展開は

$$g(x) = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{24}x^4 + O(x^5)$$
(3.22)

となる. $f(x) = \ln(x^2 + 1)$ の場合と同様の計算を行なうと

$$[1,1](x) = \frac{2+x}{2-x},\tag{3.23}$$

$$[2,2](x) = \frac{12+6x+x^2}{12-6x+x^2}$$
 (3.24)

が得られる. 一般に分母が定数ではない (1,1) 次の Padé 近似は必ず発散する点を有することに注意したい. e^x の 4 次の Taylor 展開, [1,1](x), [2,2](x) をプロットしたものを 図 2 に示す.

(c) $h(x) = e^{-x} \sin x$ の場合

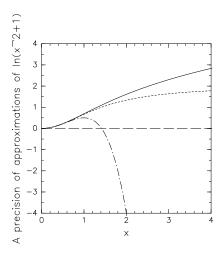


図 1: $\ln(x^2+1)$ の近似精度の比較. 実線は $\ln(x^2+1)$, 一点鎖線は 4 次の Taylor 展開, 破線は (1,1) 次の Padé 近似, 点線は (2,2) 次の Padé 近似を表す.

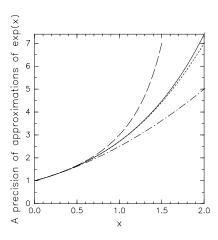


図 2: e^x の近似精度の比較. 実線は e^x , 一点鎖線は 4 次の Taylor 展開, 破線は (1,1) 次の Padé 近似, 点線は (2,2) 次の Padé 近似を表す.

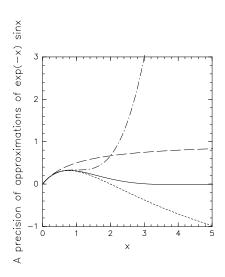


図 3: $e^{-x}\sin x$ の近似精度の比較. 実線は $e^{-x}\sin x$, 一点鎖線は 4 次の Taylor 展開, 破線は (1,1) 次の Padé 近似, 点線は (2,2) 次の Padé 近似を表す.

h(x) の Taylor 展開は

$$h(x) = x - x^2 + \frac{1}{3}x^3 + O(x^5)$$
(3.25)

となる. 従って

$$[1,1](x) = \frac{x}{1+x},\tag{3.26}$$

$$[2,2](x) = \frac{6x - 3x^2}{6 + 3x + x^2} \tag{3.27}$$

が得られる. $e^{-x} \sin x$ の 4 次の Taylor 展開, [1,1](x), [2,2](x) をプロットしたものを 図 3 に示す.

3.4 Padé 近似の数学的応用例

この小節では Padé 近似を適用して積分

$$F(k) = \int_0^\infty \frac{\sin kx}{a^2 + x^2} dx \tag{3.28}$$

の近似値を求める.

(3.28) の被積分関数は奇関数である為,複素積分を利用して積分値を求めることが出来ない. そこで $\sin kx$ に Padé 近似を適用して F(k) の近似値を求めてみる.以下, $\sin kx$ の Padé 近似 [2,2](x) を求める. $\sin kx$ の 4 次 の Taylor 展開は

$$\sin kx \simeq kx - \frac{1}{3}(kx)^3 \tag{3.29}$$

となる. (3.29) より

$$\sin kx \simeq [2, 2](x) = \frac{3kx}{3 + (kx)^2} \tag{3.30}$$

が得られる. (3.30) を (3.28) に適用すると

$$F(k) \simeq 3k \int_0^\infty \frac{x}{(a^2 + x^2)(3 + k^2 x^2)} dx \tag{3.31}$$

となる. $k \neq \pm \sqrt{3}/a$ のとき

$$F(k) \simeq \frac{3k}{3 - k^2 a^2} \int_0^\infty \left(\frac{x}{a^2 + x^2} - \frac{k^2 x}{3 + k^2 x^2} \right) dx$$

$$= \frac{3k}{3 - k^2 a^2} \int_0^\infty \left\{ \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2} \ln(a^2 + x^2) \right] - \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2} \ln(3 + k^2 x^2) \right] \right\} dx$$

$$= \frac{3k}{2(3 - k^2 a^2)} \left[\ln \left(\frac{a^2 + x^2}{3 + k^2 x^2} \right) \right]_{x=0}^{x=\infty}$$

$$= -\frac{3k}{2(3 - k^2 a^2)} \ln \left(\frac{a^2 k^2}{3} \right)$$
(3.32)

となる. 一方 $k=\pm\sqrt{3}/a$ のとき

$$F(k) \simeq ka^{2} \int_{0}^{\infty} \frac{x}{(a^{2} + x^{2})^{2}} dx$$

$$= -\frac{ka^{2}}{2} \left[\frac{1}{a^{2} + x^{2}} \right]_{x=0}^{x=\infty}$$

$$= \pm \frac{\sqrt{3}}{2a}$$
(3.33)

となる. 以上をまとめると

$$F(k) = \begin{cases} -\frac{3k}{2(3-k^2a^2)} \ln\left(\frac{a^2k^2}{3}\right), & (k \neq \pm\sqrt{3}/a) \\ \pm\frac{\sqrt{3}}{2a} & (k = \pm\sqrt{3}/a) \end{cases}$$
(3.34)

となる. ここでロピタルの定理より

$$\lim_{k \to \pm \sqrt{3}/a} -\frac{3k}{2(3-k^2a^2)} \ln\left(\frac{a^2k^2}{3}\right) = \lim_{k \to \pm \sqrt{3}/a} \frac{3\ln\left(\frac{a^2k^2}{3}\right) + 6}{4a^2k} = \pm \frac{\sqrt{3}}{2a}$$
(3.35)

となるので, F(k) は $k=\pm\sqrt{3}/a$ において連続であることが分かる. またロピタルの定理を用いると

$$\lim_{k \to 0} F(k) = 0, (3.36)$$

$$\lim_{k \to \pm \infty} F(k) = 0 \tag{3.37}$$

であることも分かる. 従って F(k) の概形を描くと, 図 4 の如くとなる.

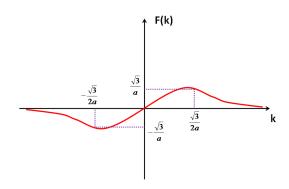


図 4: F(k) の近似値の概形.

3.5 Padé 近似の物理的応用例

この小節では Padé 近似の物理的応用例の一例として, 水面波の波長の近似値計算 (Hunt, 1979) を取り扱う. 空間座標 x, 時刻 t における水面波の解が $e^{i(kx-\omega t)}$ に比例すると仮定すると, 波数 k と角振動数 ω の間の関係式 (分散関係式) として

$$\omega^2 = gk \tanh(kh) \tag{3.38}$$

が得られる $^{7)}$. ここで g は重力加速度, h は水深である. また $\tanh(kh)$ は双曲線関数の 1 つであり

$$\tanh(kh) = \frac{\sinh(kh)}{\cosh(kh)} = \frac{e^{kh} - e^{-kh}}{e^{kh} + e^{-kh}}$$
(3.39)

である. 波長を λ , 周期を T とすると $k=2\pi/\lambda$, $\omega=2\pi/T$ なので, (3.38) は

$$\lambda = \frac{gT^2}{2\pi} \tanh\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right) \tag{3.40}$$

と書き換えられる. (3.40) において周期 T, 水深 h が既知である場合の波長 λ を求めてみよう. (3.40) は超越方程式 (transcendal equation) なので、厳密な解析解を得ることは困難である. この場合、グラフを用いて解のおおよその値を求めたり、Newton-Raphson 法で逐次近似を行なって近似解を求めるといった解法が考えられる. 今回は $\tanh(2\pi h/\lambda)$ に Padé 近似を適用することにより (3.40) の近似解を求めることとしよう.

計算の便宜の為に

$$\xi = \frac{2\pi h}{\lambda} \tag{3.41}$$

と置くと (3.40) は

$$\frac{1}{\xi} = \frac{gT^2}{4\pi^2 h} \tanh \xi \tag{3.42}$$

2008/10/01(山下 達也)

⁷⁾(3.38) の導出に関しては巽 (1982) などの流体力学の教科書を参照されたい.

となる. 以下, $\tanh \xi$ の Padé 近似 $[2,2](\xi)$ を求める. 先ず

$$f(\xi) = \tanh \xi \tag{3.43}$$

と置き, f(x) の 4 次の Taylor 展開を求める. (3.43) を繰り返し微分することにより

$$f^{(1)}(\xi) = \frac{d}{d\xi} \left(\frac{e^{\xi} - e^{-\xi}}{e^{\xi} + e^{-\xi}} \right) = 1 - f(\xi)^{2},$$

$$f^{(2)}(\xi) = -2f(\xi)f^{(1)}(\xi) = -2f(\xi)[1 - f(\xi)^{2}],$$

$$f^{(3)}(\xi) = -2f^{(1)}(\xi) + 6f^{(1)}(\xi)f(\xi)^{2} = -2[1 - f(\xi)^{2}][1 - 3f(\xi)^{2}],$$

$$f^{(4)}(\xi) = 4f(\xi)f^{(1)}(\xi)[1 - 3f(\xi)^{2}] + 12[1 - f(\xi)^{2}]f(\xi)f^{(1)}(\xi)$$

$$= 8f(\xi)[1 - f(\xi)^{2}][2 - 3f(\xi)^{2}]$$
(3.44)

が得られる. 従って

$$f(0) = 0, \quad f^{(1)}(0) = 1, \quad f^{(2)}(0) = 0, \quad f^{(3)}(0) = -2, \quad f^{(4)}(0) = 0$$
 (3.45)

となるので,

$$f(\xi) = \xi - \frac{1}{3}\xi^3 + O(\xi^5) \tag{3.46}$$

が得られる. (3.46) より

$$f(\xi) \simeq [2,2](\xi) = \frac{3\xi}{3+\xi^2}$$
 (3.47)

となる. (3.47) を (3.42) に代入すると

$$\frac{1}{\xi} = \frac{gT^2}{4\pi^2 h} \frac{3\xi}{3+\xi^2},$$

すなわち

$$\xi = \sqrt{\frac{12\pi^2 h}{3qT^2 - 4\pi^2 h}} \tag{3.48}$$

となる. (3.48) を λ について整理すると

$$\lambda = 2\pi h \sqrt{\frac{3gT^2 - 4\pi^2 h}{12\pi^2 h}} \tag{3.49}$$

が得られる.

例えば h = 100 [m], T = 20 [s] の場合, (3.49) より $\lambda \simeq 510.30$ [m] となる. このとき

$$\frac{gT^2}{2\pi}\tanh\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right) = 525.87 \quad [m] \tag{3.50}$$

となり,

$$\left|\lambda - \frac{gT^2}{2\pi} \tanh\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right)\right| \simeq 15.57 \quad [m]$$
 (3.51)

であるので、相対誤差は3%程度と見積もられる.

4 Global Padé 近似

4.1 Global Padé 近似の定式化

第 3 節で見たように、一部の例外を除いて Padé 近似は Taylor 展開による近似よりも良い精度で関数を記述することが出来る。しかし x=0 から十分離れた点では、Padé 近似はもはや有効な近似とはならない。 Winitzki(2003) によると、x=0 近傍での Taylor 展開並びに漸近級数が既知である場合、区間 $[0,\infty]$ で有効な Padé 近似を得ることが出来る。 Winitzki(2003) ではこの無限領域で有効な Padé 近似を通常の Padé 近似と区別して Global Padé 近似(Global Padé approximant) と呼んでいる。 Global Padé 近似の基本的概念は Padé 近似とほぼ同様である。 即ち、x=0 では Taylor 展開の導関数と合うように、 $x=\infty$ では漸近級数の導関数と合うように有理関数の係数を定めることにより Global Padé 近似が得られる。

Padé 近似では分子と分母の次数が等しい場合を考えてきたが、Global Padé 近似においても分子と分母の次数が等しい場合のみを考えることとする。 いま関数 f(x) の (L,L) 次の Global Padé 近似を

$$G[L](x) = \frac{p_0 + p_1 x + \dots + p_L x^L}{q_0 + q_1 x + \dots + q_L x^L} = \frac{\sum_{i=0}^L p_i x^i}{\sum_{i=0}^L q_i x^i}$$
(4.1)

と表すことにする。このとき未知の係数は 2L+2 個であるので、これらを定めるには Padé 近似のときと同様に 2L+1 個の方程式が必要となる。上で述べたように Global Padé 近似 では x=0 と $x=\infty$ の 2 点で導関数を一致させる。従って導関数の一致のさせ方は一意 ではなく、2L+2 通りの組み合わせが考えられる。 x=0、 $x=\infty$ のどちらか 1 点において のみ高次の導関数まで一致させたとすると、もう一方の点近傍でのずれが大きくなり、近似 精度が下がると考えられる。従って、より精度の高い Global Padé 近似を得るためには次のいずれかの方法を採れば良いと考えられる。

- ullet x=0 で L 次の導関数まで一致させ, $x=\infty$ で L-1 次の導関数まで一致させる.
- x=0 で L-1 次の導関数まで一致させ, $x=\infty$ で L 次の導関数まで一致させる.

先ず x=0 で L 次の導関数まで一致させ, $x=\infty$ で L-1 次の導関数まで一致させる場合について考えよう. この場合は

$$f^{(k)}(0) - G^{(k)}(0) = 0, \quad (k = 0, 1, \dots, L)$$
 (4.2)

$$f^{(k)}(\infty) - G^{(k)}(\infty) = 0, \quad (k = 0, 1, \dots, L - 1)$$
 (4.3)

を満たすように係数を定める. 3.2 節と同様の議論を行なうと, (4.2) より L+1 個の方程式

$$\sum_{i=0}^{k} a_i q_{k-i} - p_k = 0 \quad (k = 0, 1, \dots, L)$$
(4.4)

が得られる. 但し a_i は f(x) の Taylor 展開における i 次の展開係数である. 次に (4.3) より係数に関する方程式を導く. f(x) の漸近級数が

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{b_i}{x^i} \tag{4.5}$$

と表されるものとする. (4.3) より f(x) - G[L](x) の漸近級数は

$$f(x) - G[L](x) = \sum_{i=L}^{\infty} \frac{c_i}{x^i}$$

$$(4.6)$$

と書ける. (4.1) の分母, 分子を x^L で割ると

$$G[L](x) = \frac{\sum_{i=0}^{L} p_i x^{i-L}}{\sum_{i=0}^{L} q_i x^{i-L}} = \frac{\sum_{j=0}^{L} p_{L-j}/x^j}{\sum_{j=0}^{L} q_{L-j}/x^j}$$
(4.7)

となる. (4.5), (4.7) を (4.6) に代入すると

$$\left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{b_i}{x^i}\right) \left(\sum_{j=0}^{L} \frac{q_{L-j}}{x^j}\right) - \sum_{j=0}^{L} \frac{p_{L-j}}{x^j} = \sum_{i=L}^{\infty} \frac{c_i}{x^i}$$
(4.8)

となる. (4.8) が恒等的に成立するためには (4.8) の左辺の次数 L-1 以下の係数がゼロでなければならない. このとき (4.8) の左辺の x^{-k} の項の係数は

$$b_0 q_{L-k} + b_1 q_{L-k+1} + \dots + b_k q_L - p_{L-k} = \sum_{i=0}^k b_i q_{L-k+i} - p_{L-k}$$
(4.9)

となる. 従って (4.8) が満たされるためには

$$\sum_{i=0}^{k} b_i q_{L-k+i} - p_{L-k} = 0 \quad (i = 0, 1, \dots, L-1)$$
(4.10)

でなければならない. 以上より L 次の導関数まで一致させ, $x=\infty$ で L-1 次の導関数まで一致させる場合には (4.4), (4.10) を解くことにより Global Padé 近似が得られる.

x=0 で L-1 次の導関数まで一致させ, $x=\infty$ で L 次の導関数まで一致させる場合についても同様の議論により、以下の方程式が得られる.

$$\sum_{i=0}^{k} a_i q_{k-i} - p_k = 0, \quad (k = 0, 1, \dots, L - 1)$$
(4.11)

$$\sum_{i=0}^{k} b_i q_{L-k+i} - p_{L-k} = 0. \quad (i = 0, 1, \dots, L)$$
(4.12)

4.2 Global Padé 近似の具体例

4.2 小節では以下の 2 つの関数の Global Padé 近似 G[2](x) について考える.

$$f(x) = \ln\left(\frac{x^2 + 2}{x^2 + 1}\right),\tag{4.13}$$

$$g(x) = \operatorname{erf} x = \int_0^x e^{-u^2} du.$$
 (4.14)

(a) $f(x) = \ln[(x^2 + 2)/(x^2 + 1)]$ の場合

(4.13) の Taylor 展開, 漸近級数はそれぞれ

$$f(x) = \ln 2 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{3}{8}x^4 + O(x^6), \tag{4.15}$$

$$f(x) = \frac{1}{x^2} - \frac{3}{2} \frac{1}{x^4} + O(x^{-6})$$
(4.16)

となる. x=0 で 2 次の導関数まで一致させ, $x=\infty$ で 1 次の導関数まで一致させる場合の Global Padé 近似を $G_{21}[2](x)$, x=0 で 1 次の導関数まで一致させ, $x=\infty$ で 2 次の導関数まで一致させる場合の Global Padé 近似を $G_{12}[2](x)$ とする. $G_{21}[2](x)$ に対する連立方程式は

$$a_{0}q_{0} - p_{0} = 0,$$

$$a_{0}q_{1} + a_{1}q_{0} - p_{1} = 0,$$

$$a_{0}q_{2} + a_{1}q_{1} + a_{2}q_{0} - p_{2} = 0,$$

$$b_{0}q_{2} - p_{2} = 0,$$

$$b_{0}q_{1} + b_{1}q_{2} - p_{1} = 0,$$

$$a_{0} = \ln 2, \quad a_{1} = 0, \quad a_{2} = -\frac{1}{2}, \quad b_{0} = 0, \quad b_{1} = 0, \quad b_{2} = 1$$

$$(4.17)$$

となる. (4.17) を解くことにより

$$G_{21}[2](x) = \frac{2(\ln 2)^2}{2\ln 2 + x^2} \tag{4.18}$$

が得られる. 一方 $G_{12}[2](x)$ に対する連立方程式は

$$a_{0}q_{0} - p_{0} = 0,$$

$$a_{0}q_{1} + a_{1}q_{0} - p_{1} = 0,$$

$$b_{0}q_{2} - p_{2} = 0,$$

$$b_{0}q_{1} + b_{1}q_{2} - p_{1} = 0,$$

$$b_{0}q_{0} + b_{1}q_{1} + b_{2}q_{2} - p_{2} = 0,$$

$$a_{0} = \ln 2, \quad a_{1} = 0, \quad a_{2} = -\frac{1}{2}, \quad b_{0} = 0, \quad b_{1} = 0, \quad b_{2} = 1$$

$$(4.19)$$

となる. (4.19) を解くことにより

$$G_{12}[2](x) = \frac{\ln 2}{1 + \ln 2x^2} \tag{4.20}$$

が得られる. また通常の (2,2) 次の Padé 近似 [2,2](x) は

$$[2,2](x) = \frac{4\ln 2 + (3\ln 2 - 2)x^2}{4 + 3x^2}$$
(4.21)

となる. 図 5 に $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)]$, [2,2](x), $G_{21}[2](x)$, $G_{12}[2](x)$ をプロットしたものを示す. $G_{21}[2](x)$, $G_{12}[2](x)$ は至る所で $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)]$ と近接しており, 精度良い近似となっていることが窺える. [2,2](x), $G_{21}[2](x)$, $G_{12}[2](x)$ の近似精度をより詳しく見るために, $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)]$ との差を 図 6 に示した. $G_{12}[2](x)$ の相対誤差が最も小さいことが分かる.

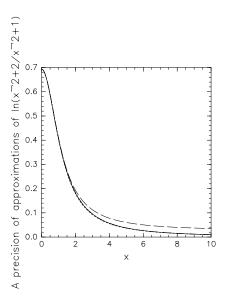


図 5: $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)]$ の近似精度の比較. 実線は $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)]$, 破線は [2,2](x), 点線は $G_{21}[2](x)$, 一点鎖線は $G_{12}[2](x)$ を表す.

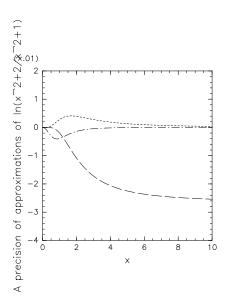


図 6: $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)]$ の近似精度の比較. 破線は $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)] - [2,2](x)$, 点線は $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)] - G_{21}[2](x)$, 一点鎖線は $\ln[(x^2+2)/(x^2+1)] - G_{12}[2](x)$ を表す.

(b) $g(x) = \operatorname{erf}(x)$ の場合

Winitzki(2003) では Global Padé 近似の特殊な例として $\operatorname{erf}(x)$ を取り扱っている. $\operatorname{erf}(x)$ の 漸近級数は

$$g(x) = \operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{e^{-x^2}}{x\sqrt{\pi}} \left[1 - \frac{1}{2x} + \frac{3}{4x^4} + O(x^{-6}) \right]$$
(4.22)

と表される. 4.1 節の結果を用いる為には、漸近級数は冪級数の形でなければならない. しかし (4.22) において e^{-x^2} の漸近冪級数を得ることは困難である. そこで (4.22) の漸近冪級数の部分を

$$h(x) = 1 - \frac{1}{2x} + \frac{3}{4x^4} + O(x^{-6})$$
(4.23)

と置き, h(x) を有理関数で近似することにより, 拡張された Global Padé 近似を得ることとする. h(x) の Taylor 展開は $\operatorname{erf}(x)$ 及び e^{-x^2} を Taylor 展開することにより

$$h(x) = \sqrt{\pi}x - 2x^2 + \sqrt{\pi}x^3 - \frac{4}{3}x^4 + O(x^5)$$
(4.24)

と求まる. x=0 で 2 次の導関数まで一致させ、 $x=\infty$ で 1 次の導関数まで一致させる場合の h(x) の Global Padé 近似を $G_{21}[2](x)$, x=0 で 1 次の導関数まで一致させ、 $x=\infty$ で 2 次の導関数まで一致させる場合の h(x) の Global Padé 近似を $G_{12}[2](x)$ とすると、それぞれ

$$G_{21}[2](x) = \frac{\sqrt{\pi}x + (\pi - 2)x^2}{1 + \sqrt{\pi}x + (\pi - 2)x^2},$$
(4.25)

$$G_{12}[2](x) = \frac{\sqrt{\pi}x + 2x^2}{1 + \sqrt{\pi}x + 2x^2}$$
(4.26)

となる.

5 まとめ

本文書では Taylor 展開による近似, 漸近展開による近似, Padé 近似, Global Padé 近似について取り扱った. これらの近似の性質を表でまとめることにより, 本文書の本文の結びとさせて頂く.

近似法	有効範囲	計算量	物理的応用例	
Taylor 展開	狭い	少ない	単振り子振動	
漸近展開	広い	それなりに多い	山岳波	
Padé 近似	それなりに広い	多(1	水面波波長計算	
Global Padé 近似	非常に広い	非常に多い	未確認	

付録 A: (1.2) の導出

本付録では (1.1) より (1.2) を導く. (1.1) を R_n について変形すると

$$R_n(x) = f(x) - \sum_{r=0}^{n-1} \frac{f^{(n)}(a)}{r!} (x - a)^r$$
(A.1)

となる. 一般に或る関数 g(x) に関して

$$g(x) = \frac{d}{dx} \int_{a}^{x} g(t)dt \tag{A.2}$$

が成り立つので,

$$R_{n}(x) = \frac{d}{dx} \left[\int_{a}^{x} \left\{ f(t) - \sum_{r=0}^{n-1} \frac{f^{(n)}(a)}{r!} (t-a)^{r} \right\} dt \right]$$

$$= \frac{d}{dx} \left[\int_{a}^{x} f(t) dt - \sum_{r=0}^{n-1} \int_{a}^{x} \frac{f^{(n)}(a)}{r!} (t-a)^{r} dt \right]$$

$$= \frac{d}{dx} \left[\int_{a}^{x} f(t) dt - \sum_{r=0}^{n-1} \frac{f^{(n)}(a)}{(r+1)!} (t-a)^{r+1} \right]$$
(A.3)

となる. ここで $\int_a^x f(t) dt$ について部分積分を繰り返し行なうと

$$\int_{a}^{x} f(t)dt = [(t-x)f(t)]_{t=a}^{t=x} - \int_{a}^{x} (t-x)f^{(1)}(t)dt
= (x-a)f(a) - \int_{a}^{x} (t-x)f^{(1)}(t)dt
= (x-a)f(a) - \left[\frac{1}{2}(t-x)^{2}f^{(1)}(t)\right]_{t=a}^{t=x} + \int_{a}^{x} \frac{1}{2}(t-x)^{2}f^{(2)}(t)dt
= \cdots
= (x-a)f(a) + \frac{1}{2!}(x-a)^{2}f^{(1)}(a) + \frac{1}{3!}(x-a)^{3}f^{(2)}(a)
+ \cdots + \frac{1}{n!}(x-a)^{n}f^{(n-1)}(a) + \frac{(-1)^{n}}{n!}\int_{a}^{x}(x-t)^{n}f^{(n)}(t)dt
= \sum_{x=0}^{n-1} \frac{f^{(r)}(a)}{(r+1)!}(x-a)^{r+1} + \frac{1}{n!}\int_{a}^{x}(t-x)^{n}f^{(n)}(t)dt \tag{A.4}$$

となる. よって (A.3), (A.4) より

$$R_n = \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{n!} \int_a^x (t - x)^n f^{(n)}(t) dt \right]$$
 (A.5)

となる. ここで二項展開

$$(x-t)^n = \sum_{k=0}^n {}_n C_k x^k (-t)^{n-k}$$
(A.6)

を用いると

$$R_{n} = \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{n!} \int_{a}^{x} \left\{ \sum_{k=0}^{n} {}_{n} C_{k} x^{k} (-t)^{n-k} \right\} f^{(n)}(t) dt \right]$$

$$= \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} {}_{n} x^{k} \int_{a}^{x} {}_{n} C_{k} (-t)^{n-k} f^{(n)}(t) dt \right]$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} \frac{d}{dx} \left(x^{k} \right) \int_{a}^{x} {}_{n} C_{k} (-t)^{n-k} f^{(n)}(t) dt$$

$$+ \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} {}_{n} x^{k} \frac{d}{dx} \left[\int_{a}^{x} {}_{n} C_{k} (-t)^{n-k} f^{(n)}(t) dt \right]$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} \frac{d}{dx} \left(x^{k} \right) \int_{a}^{x} {}_{n} C_{k} (-t)^{n-k} f^{(n)}(t) dt$$

$$+ \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} {}_{n} x^{k} {}_{n} C_{k} (-x)^{n-k} f^{(n)}(x)$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} \frac{d}{dx} \left(x^{k} \right) \int_{a}^{x} {}_{n} C_{k} (-t)^{n-k} f^{(n)}(t) dt$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n-1} (k+1) x^{k} \int_{a}^{x} {}_{n} C_{k+1} (-t)^{n-k-1} f^{(n)}(t) dt$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n-1} (k+1) x^{k} \int_{a}^{x} \frac{n}{k+1} {}_{n-1} C_{k} (-t)^{n-k-1} f^{(n)}(t) dt$$

$$= \frac{1}{(n-1)!} \int_{a}^{x} \sum_{k=0}^{n-1} \left\{ {}_{n-1} C_{k} x^{k} (-t)^{n-k-1} \right\} f^{(n)}(t) dt$$

$$= \frac{1}{(n-1)!} \int_{a}^{x} (x-t)^{n-1} f^{(n)}(t) dt$$
(A.7)

となり、(1.2) が示された.

付録 B: (2.32), (2.33) の導出

本付録では Airy 関数

$$f(x) = \operatorname{Ai}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[ix\left(k + \frac{k^3}{3x}\right)\right] dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i\phi(x, k)\right] dk \quad (x > 0)$$
(B.1)

に鞍部点法を適用して、(2.32) および (2.33) を導出する。 2.3 節の停留位相法では停留点,即ち $\partial \phi/\partial k=0$ を満たす点を求め、その点近傍での積分寄与を求めることで $\mathrm{Ai}(x)$ の漸近形 (2.31) を得た。鞍部点法では $\partial \phi/\partial k=0$ を満たす点を求め、その点を通る経路での複素積分を考える。 Cauchy-Riemann の微分方程式より、複素関数の停留点は極値とはならず、鞍部点となる。 鞍部点法の名前は鞍部点を通る経路で積分を行なうことに由来する。 更に鞍部点法ではより精密な漸近展開を得る為に、複素積分の経路として ϕ に関する 最急降下線 (path of the steepest descent) を選択すると言う工夫を行なう。 ϕ の最急降下線とは、鞍部点から見て最も急激に減少するような曲線のことを指す。 積分経路に最急降下線を選ぶことにより、積分に寄与する区間を最も短くすることが出来、その結果精度良い漸近展開を得られると期待される。

以下, $\phi(x,k)$ の最急降下線 C を求める. (B.1) を評価する為には, 複素周回積分の経路として実軸と最急降下線と半径無限大の円周の一部を組み合わせた経路をとるのが適当であろう. ϕ の鞍部点は 2.3 節で求めたように $k=\pm\sqrt{x}i$ である. 鞍部点を通る最急降下線を考えているので, 経路は複素上半面上または複素下半面上にとることになる. この際問題となるのは, 円周上での積分がゼロとなるかどうかである. ここで

$$k = Re^{i\theta} \tag{B.2}$$

と置くと、(B.1) の被積分関数

$$\exp\left[ix\left(k + \frac{k^3}{3x}\right)\right] = \exp\left[ix\left(Re^{i\theta} + \frac{R^3}{3x}e^{3i\theta}\right)\right]$$
$$= \exp\left[-xR\sin\theta - R^3\sin3\theta\right]\exp\left[ixR\cos\theta + iR^3\cos3\theta\right]$$
(B.3)

となる. $R \to \infty$ のとき被積分関数がゼロとなる為には, $\sin \theta > 0$ かつ $\sin 3\theta > 0$ でなければならない. 即ち積分経路は上半面上の

$$\frac{2n\pi}{3} < \theta < \left(\frac{1}{3} + \frac{2n}{3}\right)\pi\tag{B.4}$$

を満たす領域内になければならない. よって $k=\sqrt{x}i$ を通る最急降下線を考えれば良い. $k=\sqrt{x}i$ 近傍における ϕ の 2 次の Taylor 展開を考えると,

$$\exp\left[ix\left(k + \frac{k^3}{3x}\right)\right] \simeq e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}}e^{-\sqrt{x}(k - \sqrt{x}i)^2}$$
(B.5)

となる. ここで

phys-math-approx.tex

$$k - \sqrt{x}i = \rho e^{i\xi} \tag{B.6}$$

2008/10/01(山下 達也)

と置くと.

$$\exp\left[ix\left(k + \frac{k^3}{3x}\right)\right] \simeq e^{-\frac{2}{3}x^{3/2} - \sqrt{x}\rho\cos 2\xi} e^{-i\sqrt{x}\rho\sin 2\xi}$$
(B.7)

となる. (B.7) において $e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}-\sqrt{x}\rho\cos2\xi}$ は包絡線を相当し, $e^{-i\sqrt{x}\rho\sin2\xi}$ は振動部分に相当する. 積分寄与を考える上では, 包絡線に関する最急降下線を求めるのが適切であろう. 鞍部点 $k=\sqrt{x}i$ において包絡線が空間的に最も激しく変化する方向は

$$\cos 2\xi = \pm 1, \quad \sin 2\xi = 0 \tag{B.8}$$

を満たす方向である. $\cos 2\xi = -1$, 即ち $\xi = (n+1/2)\pi$ を満たす方向は最も急激に増加する方向であり, $\cos 2\xi = 1$, 即ち $\xi = n\pi$ を満たす方向は最も急激に減少する方向である. (B.7) の振動部分を取り出すと, 最急降下線の満たす関係式

$$-\frac{1}{3}(\text{Re}k)^2 + (\text{Im}k)^2 = x$$
 (B.9)

が得られる. (B.9) より、最急降下線は鞍部点において実軸に平行な直線を接線とする双曲線であることが分かる. (B.9) を Rek で偏微分すると.

$$\frac{\partial \operatorname{Im}k}{\partial \operatorname{Re}k} = \frac{1}{3} \frac{\operatorname{Re}k}{\operatorname{Im}k} \tag{B.10}$$

となる. また (B.9) より

$$\frac{\mathrm{Re}k}{\mathrm{Im}k} = \sqrt{3\left[1 - \frac{x}{(\mathrm{Im}k)^2}\right]} \tag{B.11}$$

となるので

$$\frac{\partial \operatorname{Im}k}{\partial \operatorname{Re}k} = \sqrt{\frac{1}{3} \left[1 - \frac{x}{(\operatorname{Im}k)^2} \right]}$$
 (B.12)

となる. $\operatorname{Re}k \to \pm \infty$ の極限をとると $\operatorname{Im}k \to \infty$ であるので,

$$\frac{\partial \mathrm{Im}k}{\partial \mathrm{Re}k} \to \frac{1}{\sqrt{3}}$$
 (Re $k \to \infty$) (B.13)

が得られる. (B.13) より最急降下線の無限遠での偏角は $\pi/6$ となることが分かる. 従って、最急降下線と実軸と半径無限遠の円周の一部から成る閉曲線を考えたとき、円周での積分は (B.4) よりゼロに収束することになる. 以上より

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[ix\left(k + \frac{k^3}{3x}\right)\right] dk = \frac{1}{2\pi} \int_{C} \exp\left[ix\left(k + \frac{k^3}{3x}\right)\right] dk \quad (x > 0) \quad (B.14)$$

となる. 但しC は (B.9) を満たす最急降下線である. ここで

$$s = k - \sqrt{x}i\tag{B.15}$$

なる変数変換を行なうと,

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \int_{C'} \exp\left[-\sqrt{x}s^2 + \frac{s^3}{3}i\right] ds \quad (x > 0)$$
 (B.16)

2008/10/01(山下 達也)

となる. 但し C' は

$$-\frac{1}{3}(\text{Re}s)^2 + (\text{Im}s + \sqrt{x})^2 = x$$
 (B.17)

を満たす双曲線である. C' は最急降下線であるので, $x\gg 1$ のとき (B.16) の積分は鞍部点 s=0 近傍での積分で近似することが出来る. また s=0 において実軸が最急降下線の接線となっていることに着目すると

$$f(x) \simeq \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \exp\left[-\sqrt{x}s^2 + \frac{s^3}{3}i\right] ds$$

$$= \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \exp\left[-\sqrt{x}s^2\right] \cos\left(\frac{s^3}{3}i\right) ds$$

$$\simeq \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\sqrt{x}s^2\right] \cos\left(\frac{s^3}{3}\right) ds$$

$$= \frac{1}{2\pi} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} \cos\left(\frac{1}{3x^{3/4}}t^3\right) dt \qquad (B.18)$$

となる. Taylor 展開

$$\cos(az) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(az)^{2n}}{(2n)!}$$
(B.19)

を適用し,(1.12)を用いると,

$$f(x) \simeq \frac{1}{2\pi} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{1}{3x^{3/4}}t^3\right)^{2n} dt$$

$$= \frac{1}{2\pi} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{1}{3x^{3/4}}\right)^{2n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} t^{6n} dt$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{1}{3x^{3/4}}\right)^{2n} \frac{(6n)!}{4^{3n}(3n)!}$$
(B.20)

となる. ここで

$$\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4^n} \frac{(2n)!}{n!},\tag{B.21}$$

$$\Gamma\left(3n + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4^{3n}} \frac{(6n)!}{(3n)!} \tag{B.22}$$

が成り立つことに着目すると

$$f(x) \simeq \frac{1}{2\sqrt{\pi}} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} x^{3/2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\Gamma(3n+1/2)}{54^n n! \Gamma(n+1/2)} \left(\frac{2}{3} x^{3/2}\right)^{-n} \quad (x > 0)$$
(B.23)

が得られる.

参考文献

Abramowitz, M., Stegun, I. A., 1964: Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables. Dover, 1046 pp

Hunt, J. N. 1979: Direct solution of wave dispersion equation. Journal of the Waterway Port Coastal and Ocean Division, **105**, 457–459

National Institutues of Stanfords and Technology, 2008 : NIST Digital Library of Mathematical Functions.

http://dlmf.nist.gov/

Smith, R. B. 1979 : The influence of mountains on the atmosphere. Advances in geophysics, 21 87 – 230

Winitzki, S., 2006: Introduction to asymptotic series.

http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/ serge/asymptotic_series.pdf

Winitzki, S., 2003: Uniform approximations for transcendal functions. Lecture Notes in Computer Science, **2667**, 780–789

巽友正, 1982: 流体力学, 培風館, 454 pp

寺沢寛一, 1931: 自然科学者のための数学概論, 岩波書店, 762 pp

西本敏彦, 1998: 超幾何·合流型超幾何微分方程式, 共立出版, 186 pp

守口繁一, 一松 信, 宇田川 金圭久, 1987: 岩波数学公式 (級数・フーリエ解析), 岩波書店, 340 pp

横田寿, 2004: 数值解析入門 II 有理関数近似

http://next1.msi.sk.shibaura-it.ac.jp/MULTIMEDIA/numeanal2/node19.html

蓬田清, 2007: 演習形式で学ぶ特殊関数・積分変換入門, 共立出版, 294 pp