Fourier 変換の数値計算
電気通信大学 2020 年度オープンキャンパス

緒方　秀教

電気通信大学　大学院情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻

2020 年 11 月

はじめに：Fourier 変換とその数値解法

Fourier 変換

次で定義される関数変換 $f \mapsto \mathscr{F}[f]$.

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-2\pi \mathrm{i} \xi x) \mathrm{d}x.$$

- 振動・波動現象の解析で用いられる.
- 科学技術研究で重要である.
- しかし，減衰の遅い関数 $f(x)$ に対しては，
  従来の数値積分法では計算が難しい.

はじめに：Fourier 変換とその数値解法

Fourier 変換

次で定義される関数変換 $f \mapsto \mathscr{F}[f]$.

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-2\pi \mathrm{i} \xi x) \mathrm{d}x.$$

- 振動・波動現象の解析で用いられる.
- 科学技術研究で重要である.
- しかし，減衰の遅い関数 $f(x)$ に対しては，
  従来の数値積分法では計算が難しい.

本発表の目的

- Fourier 変換の数値計算に関する研究の紹介.
  複素解析関数の性質に基づく数値計算法.
- 数値解析における複素解析関数の役割について考える.

Fourier 変換：重要だけど計算は難しい

減衰の遅い関数の全無限区間積分に対する DE 公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{d}x \simeq h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\psi(kh))\psi'(kh), \quad \psi(u) = \sinh(\sinh u).$$

$$(1) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{1+x^2} = \pi (= 3.14159\,26535\,89793\ldots).$$

h	標本点数 $N_+ + N_- + 1$	計算値	誤差
1	13	$\underline{3.141}68\,64575\,30666$	3×10^{-5}
2^{-1}	21	$\underline{3.14159\,2}5866\,30724$	2×10^{-8}
2^{-2}	39	$\underline{3.14159\,26535\,8979}4$	3×10^{-16}

Fourier 変換：DE 公式では計算できない

(2) $$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos x}{1+x^2}\mathrm{d}x = \pi \mathrm{e}^{-2\pi} (= 1.15572\,73497\,90922\ldots).$$

h	標本点数 $N_+ + N_- + 1$	計算値	誤差
1	13	1.58125 37966 15643	4×10^{-1}
2^{-1}	21	1.34196 68485 53180	2×10^{-1}
2^{-2}	39	1.11369 34847 54938	4×10^{-2}
2^{-3}	73	1.26481 85622 97596	9×10^{-2}
2^{-4}	143	1.17117 00197 53101	1×10^{-2}

一向に収束しない.

Fourier 変換の数値計算

どうすれば Fourier 変換を計算できるだろうか？

Fourier 変換を次のように書き直す：

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \lim_{\epsilon \to +0} \left\{ \int_{-\infty}^{0} f(x) \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i}(\xi + \mathrm{i}\epsilon)x} \mathrm{d}x + \int_{0}^{\infty} f(x) \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i}(\xi - \mathrm{i}\epsilon)x} \mathrm{d}x \right\}$$

右辺の各積分は指数関数的減衰する因子 $\exp(-2\pi\epsilon|x|)$ を含むので，DE 公式で計算できる．

Fourier 変換の数値計算

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \lim_{\epsilon \to +0} \{\mathfrak{F}_+[f](\xi + \mathrm{i}\epsilon) - \mathfrak{F}_-[f](\xi - \mathrm{i}\epsilon)\},$$

$$\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta) = \pm \int_0^\infty f(\mp x) \mathrm{e}^{\pm 2\pi \mathrm{i}\zeta x} \mathrm{d}x \quad (\pm \operatorname{Im} \zeta > 0).$$

- $\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta)$ は上／下半平面 $\pm \operatorname{Im} \zeta > 0$ における解析関数である．
- $\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta)$ の被積分関数は指数関数的減衰する因子 $\exp(-2\pi |\operatorname{Im} \zeta| x)$ を含むので，DE 公式で計算できる．

Fourier 変換の数値計算

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \lim_{\epsilon\to+0}\left\{\mathfrak{F}_+[f](\xi+\mathrm{i}\epsilon) - \mathfrak{F}_-[f](\xi-\mathrm{i}\epsilon)\right\},$$

$$\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta) = \pm\int_0^\infty f(\mp x)\mathrm{e}^{\pm 2\pi\mathrm{i}\zeta x}\mathrm{d}x \quad (\pm\operatorname{Im}\zeta > 0).$$

- $\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta)$ は上／下半平面 $\pm\operatorname{Im}\zeta > 0$ における解析関数である．
- $\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta)$ の被積分関数は指数関数的減衰する因子 $\exp(-2\pi|\operatorname{Im}\zeta|x)$ を含むので，DE 公式で計算できる．

Fourier 変換の数値計算法

1. 上／下半平面 $\pm\operatorname{Im}\zeta > 0$ で解析関数 $\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta)$ を DE 公式で計算する．
2. 解析関数 $\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta)$ を実軸 $\mathbb{R}$ 上に解析接続する（定義域を延長する）．
3. Fourier 変換 $\mathscr{F}[f](\xi) = \mathfrak{F}_+[f](\xi+\mathrm{i}0) - \mathfrak{F}_-[f](\xi-\mathrm{i}0)$ を得る．

Fourier 変換の計算法

1. 上／下半平面 $\pm \mathrm{Im}\,\zeta > 0$ で解析関数 $\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ を計算する.

$$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta) = \pm \int_0^{\infty} f(\mp x) \mathrm{e}^{\pm 2\pi \mathrm{i} \zeta x} \mathrm{d}x \quad (\pm \mathrm{Im}\,\zeta > 0).$$

点 $\zeta_0^{(\pm)}$ ($\pm \mathrm{Im}\,\zeta_0^{(\pm)} > 0$) を適当に取り，$\zeta_0^{(\pm)}$ における $\mathfrak{F}_{\pm}(\zeta)$ の Taylor 級数を求める.

$$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(\pm)} (\zeta - \zeta_0^{(\pm)})^n,$$

$$c_n^{(\pm)} = \pm \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} (\pm 2\pi \mathrm{i} x)^n f(\mp x) \mathrm{e}^{\pm 2\pi \mathrm{i} \zeta_0^{(\pm)} x} \mathrm{d}x \quad (n = 0, 1, 2, \ldots).$$

被積分関数は指数関数的減衰する因子 $\exp(-2\pi |\mathrm{Im}\,\zeta_0^{(\pm)}| x)$ を含むので，DE 公式で計算できる.

Fourier 変換の数値計算

Fourier 変換の計算法

2. 解析関数 $\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ を実軸 $\mathbb{R}$ 上に解析接続する（定義域を延長する）.
3. Fourier 変換 $\mathscr{F}[f](\xi) = \mathfrak{F}_{+}[f](\xi + \mathrm{i}0) - \mathfrak{F}_{-}[f](\xi - \mathrm{i}0)$ を得る.

前項で求めた Taylor 級数を連分数に変換して解析接続を行う

- 一般に連分数関数は収束域が広い.
- Taylor 級数→連分数：「商差法」を用いる.

$$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta) = \cfrac{a_0^{(\pm)}}{1 + \cfrac{a_1^{(\pm)}(\zeta - \zeta_0^{(\pm)})}{1 + \cfrac{a_2^{(\pm)}(\zeta - \zeta_0^{(\pm)})}{1 + \ddots}}}.$$

$$\Downarrow$$

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \mathfrak{F}_{+}[f](\xi + \mathrm{i}0) - \mathfrak{F}_{-}[f](\xi - \mathrm{i}0).$$

（余談）$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ の Taylor 係数の計算.

$$c_n^{(\pm)} = \pm\frac{1}{n!}\int_0^{\infty}(\pm 2\pi \mathrm{i} x)^n f(\mp x)\mathrm{e}^{\pm 2\pi \mathrm{i}\zeta_0^{(\pm)}x}\mathrm{d}x \quad (\, n = 0, 1, 2, \ldots\,).$$

とくに $\zeta_0^{(\pm)}$ を純虚数 $\pm\mathrm{i}\eta_0^{(\pm)}$ ($\eta_0^{(\pm)} > 0$) にとると,

$$c_n^{(\pm)} = \pm\frac{1}{n!}\int_0^{\infty}(\pm 2\pi \mathrm{i} x)^n f(\mp x)\mathrm{e}^{-2\pi\eta_0^{(\pm)}x}\mathrm{d}x \quad \text{Laplace 変換！}$$

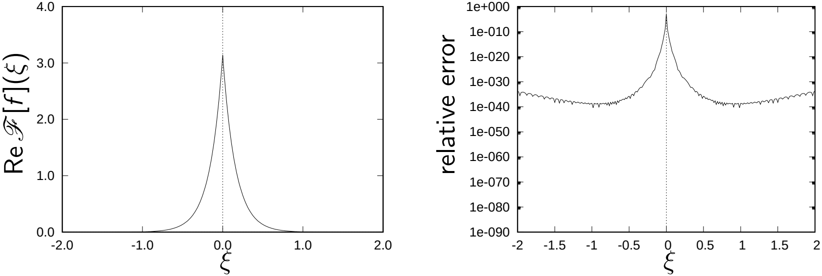
Laplace 変換の計算によって Fourier 変換が求められる.

Fourier 変換の数値計算：数値例

$$\begin{aligned}
&(1) \quad \mathscr{F}[(1+x^2)^{-1}](\xi) = \pi \mathrm{e}^{-2\pi|\xi|}, \\
&(2) \quad \mathscr{F}[\tanh(\pi x)](\xi) = -\mathrm{i}\,\mathrm{cosech}(\pi\xi), \\
&(3) \quad \mathscr{F}[\log|x|](\xi) = -\gamma\delta(\xi) - \frac{1}{2|\xi|}.
\end{aligned}$$

- 本研究の方法で Fourier 変換 $\mathscr{F}[f](\xi)$ を計算し，誤差を調べた．
- 多倍長演算（10 進 100 桁）．
- 次の論文から結果を引用．
  H. Ogata: Numerical calculation of Fourier transforms based on hyperfunction theory, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **378** (2020) 112921, DOI: 10.1016/j.cam.2020.112921

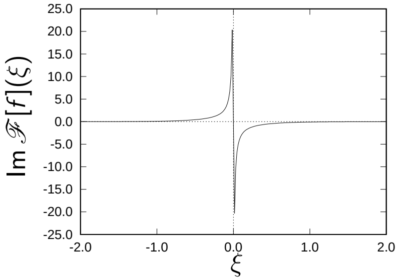
Fourier 変換の数値計算：数値例



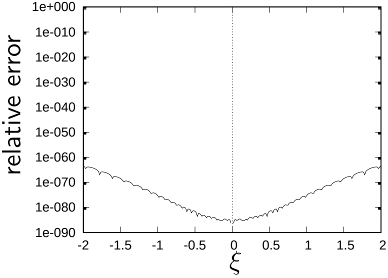
$\mathrm{Re}\,\mathscr{F}[f](\xi)$ relative error

$$(1)\ f(x) = (1+x^2)^{-1},\ \mathscr{F}[f](\xi) = \pi \mathrm{e}^{-2\pi|\xi|}.$$

Fourier 変換の数値計算：数値例

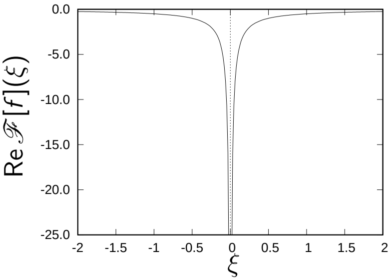


$\mathrm{Im}\,\mathscr{F}[f](\xi)$

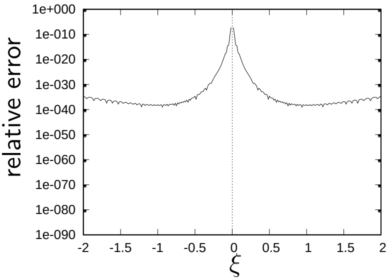


relative error

(2) $f(x) = \tanh(\pi x)$, $\mathscr{F}[f](\xi) = -\mathrm{i}\,\mathrm{cosech}(\pi\xi)$.



$\mathrm{Re}\,\mathscr{F}[f](\xi)$



relative error

$$(3)\ f(x) = \log|x|,\ \mathscr{F}[f](\xi) = -\gamma\delta(\xi) - \frac{1}{2|\xi|}.$$

以上の数値例から，本方法の有効性が示された．

Fourier 変換の数値計算：数値例（比較実験）

- 既存の方法との比較.
  - （杉原）Richardson 補外& DE 公式.
  - （大浦・森）振動積分に特化した DE 公式.
- $\mathscr{F}[f](\xi = 1)$ を計算した.
- ϵ：相対誤差，N：関数 $f(x)$ の計算回数.

Fourier 変換の数値計算：数値例（比較実験）

- 既存の方法との比較.
  - （杉原）Richardson 補外& DE 公式.
  - （大浦・森）振動積分に特化した DE 公式.
- $\mathscr{F}[f](\xi = 1)$ を計算した.
- ϵ：相対誤差，N：関数 $f(x)$ の計算回数.

$f(x)$		(1) $(1+x^2)^{-1}$	(2) $\tanh(\pi x)$	(3) $\log\|x\|$
本方法	ϵ	3×10^{-39}	5×10^{-76}	9×10^{-39}
	N	1242	1202	1252
杉原	ϵ	1.4×10^{-19}	9×10^{-20}	4×10^{-20}
	N	27072	53114	35280
大浦・森	ϵ	7×10^{-63}	5×10^{-57}	1×10^{-69}
	N	1690	1618	1698

既存の方法と比べて，本方法は有効であることがわかる.

Fourier 変換計算と複素解析関数

Fourier 変換の数値計算法の話を整理する．

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}\xi x}\mathrm{d}x = \mathfrak{F}_{+}[f](\xi + \mathrm{i}0) - \mathfrak{F}_{-}[f](\xi - \mathrm{i}0),$$

$$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta) = \pm\int_{0}^{\infty} f(\mp x)\mathrm{e}^{\pm 2\pi\mathrm{i}\zeta x}\mathrm{d}x \quad (\pm\operatorname{Im}\zeta > 0).$$

Fourier 変換の計算法

1. 実関数 $\mathscr{F}[f](\xi)$ よりも複素解析関数 $\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ ($\pm\operatorname{Im}\zeta > 0$) が計算しやすいので，$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ を上／下半平面 $\pm\operatorname{Im}\zeta > 0$ で計算する．
2. 前項で求めた複素関数 $\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ を実軸 $\mathbb{R}$ 上に解析接続して，Fourier 変換 $\mathscr{F}[f](\xi)$ を求める．
3. これが可能なのは，$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ が複素解析関数であるからである．

Fourier 変換計算と複素解析関数

ところで，複素解析関数（正則関数）とは何だったか？

- 複素関数 $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$（複素数変数，複素数値）.
- 複素関数として微分可能.

$$\frac{\mathrm{d}f(z)}{\mathrm{d}z} = \lim_{h\to 0} \frac{f(z+h)-f(z)}{h} \quad \text{この極限が存在する.}$$

- 上の極限は，h が複素平面内のどの方向を取ろうとも，同一の値になる.

$$\lim_{\Delta x\to 0} \frac{f(z+\Delta x)-f(z)}{\Delta x} = \lim_{\Delta y\to 0} \frac{f(z+\mathrm{i}\Delta y)-f(z)}{\mathrm{i}\Delta y}$$

($\to$ Cauchy-Riemann の関係式).

例えば，$\mathrm{Re}\, z = x$, $\mathrm{Im}\, z = y$, $|z|$ は複素解析関数でない.

複素解析関数は，遠く離れた 2 点での値が密接に結びついている．

- Cauchy の積分定理

$$\oint_C f(z)\mathrm{d}z = 0 \quad (\, C \text{ : 閉積分路 }).$$

- 留数定理（→実積分の計算への応用）．

Fourier 変換計算と複素解析関数

複素解析関数は，遠く離れた 2 点での値が密接に結びついている．

- Cauchy の積分定理

$$\oint_C f(z)\mathrm{d}z = 0 \quad (\ C\ :\ \text{閉積分路}\ ).$$

- 留数定理（→実積分の計算への応用）．

Fourier 変換計算の話に戻ると，

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \mathfrak{F}_+[f](\xi + \mathrm{i}0) - \mathfrak{F}_-[f](\xi - \mathrm{i}0).$$

- $\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta)$：上／下半平面 $\pm\,\mathrm{Im}\,\zeta > 0$ における複素解析関数.
- $\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta)$：実軸上よりも複素平面での方が計算しやすい.
- 複素平面上の点における値から，
  実軸上の値 $\mathfrak{F}_\pm[f](\xi \pm \mathrm{i}0)$ を読み取った.

Fourier 変換の計算：佐藤超函数論との関連

佐藤超函数論

- 佐藤幹夫，1958 年.
- 複素関数論に基づく一般化関数論.
- 超函数 (hyperfunction) とよばれる一般化関数 $f(x)$ は
  ある複素解析関数 $F(z)$ の実軸 $\mathbb{R}$ 上の境界値の差で表される.

  $$f(x) = [F(z)] := F(x + \mathrm{i}0) - F(x - \mathrm{i}0).$$

  $F(z)$: 超函数 $f(x)$ の定義関数.

$*$ 超函数には Schwartz による流儀もある (distribution).

超函数の例

- Dirac のデルタ関数 $\delta(x)$.

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty & (\ x = 0\ ) \\ 0 & (\ x \neq 0\ ), \end{cases} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)\mathrm{d}x = f(a).$$

$$\delta(x) = \left[\frac{-1}{2\pi\mathrm{i}z}\right] = -\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\left(\frac{1}{x+\mathrm{i}0} - \frac{1}{x-\mathrm{i}0}\right).$$

- Heaviside のステップ関数 $Y(x)$.

$$Y(x) = \begin{cases} 1 & (\ x > 0\ ) \\ 0 & (\ x < 0\ ). \end{cases}$$

$$Y(x) = \left[-\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\log(-z)\right].$$

$*$ 複素対数関数 $\log z$ は主値（$\log x \in \mathbb{R}$ $(x > 0)$ なる分枝）をとる.

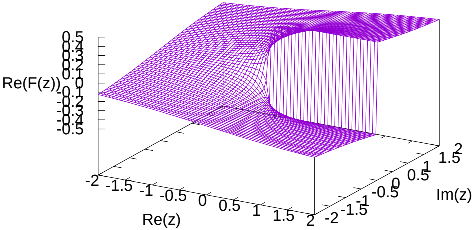
ステップ関数 $Y(x)$ の定義関数

$$F(z) = -\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \log(-z)$$

のグラフ．実軸 $\mathbb{R}$ 上の境界値の差

$$F(x+\mathrm{i}0) - F(x-\mathrm{i}0)$$

がステップ関数 $Y(x)$ を表していることがわかる．



Fourier 変換の数値計算との関連.

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \mathfrak{F}_+[f](\xi + \mathrm{i}0) - \mathfrak{F}_-[f](\xi - \mathrm{i}0),$$

$$\mathfrak{F}_\pm[f](\zeta) = \pm \int_0^\infty f(\mp x)\mathrm{e}^{\pm 2\pi \mathrm{i}\zeta x}\mathrm{d}x \quad (\pm \operatorname{Im}\zeta > 0).$$

複素解析関数の実軸上の境界値の差！

Fourier 変換の計算：佐藤超函数論との関連

Fourier 変換の数値計算との関連.

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \mathfrak{F}_{+}[f](\xi + \mathrm{i}0) - \mathfrak{F}_{-}[f](\xi - \mathrm{i}0),$$

$$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta) = \pm \int_{0}^{\infty} f(\mp x)\mathrm{e}^{\pm 2\pi \mathrm{i}\zeta x}\mathrm{d}x \quad (\,\pm \operatorname{Im}\zeta > 0\,).$$

複素解析関数の実軸上の境界値の差！

Fourier 変換の計算：佐藤超函数論との関連

- Fourier 変換 $\mathscr{F}[f](\xi)$ は $\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ ($\pm \operatorname{Im}\zeta > 0$) を定義関数とする超函数である.
- 今回示した Fourier の数値計算法は，佐藤超函数論における Fourier 変換の定義をなぞったものである.

まとめ

- Fourier 変換
$$\mathscr{F}[f](\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}\xi x}\mathrm{d}x.$$
実は数値計算が難しい.

- （Fourier 変換の数値計算）
$$\mathscr{F}[f](\xi) = \mathfrak{F}_{+}[f](\xi + \mathrm{i}0) - \mathfrak{F}_{-}[f](\xi - \mathrm{i}0),$$
$\mathfrak{F}_{\pm}[f](\zeta)$ ： 上／下半平面 $\pm \mathrm{Im}\,\zeta > 0$ での解析関数.

実数の世界では計算が難しいものを
複素数の世界で計算して，実数の世界に戻した（解析接続）.

- こんな事ができるのは，複素解析関数は離れた 2 点の値が密接に結びついているからである.
- 佐藤超函数論との関連.