数理解析研究所講究録
第39巻 1968年 19-32

連分数による漸近展開の総和と収束の加速について

立教大 理 数　　一松 信

§0　はしがき

合流型超幾何函数など，第1級の不確定特異点をもつ微分方程式の解になる函数の，不確定特異点のまわりでの形式的整級数解は，原則として収束半径が0で，Cauchyの意味では収束しない．しかしこれに意味をつけ，それが漸近展開としての意味をもつことは，よく知られている．

一般に整級数で表わされる函数は，連分数の形に書き直すことができ，多くの場合，連分数は，整級数で直接扱える範囲よりも広い領域で収束する．たとえば合流型超幾何函数の漸近展開のように，収束半径が0の場合でも，連分数のほうはある領域で収束することが多い．したがって，これは一種の総和法としての意義を有するし，じっさいに数値計算にも有効である．（たとえばBauerの論文）．

しかしこのような連分数は，一般に収束がおそい．とくにはじめのうちは誤差が早く減少するが，あとになるほど，そのへり方がゆるやかになり，泥沼に入りこむ．したがって実

用上には，なんらかの加速が必要になる．

講演者は，とくに特殊合流型超幾何函数として，不完全ガンマ函数と Bessel 函数について，この種の方法を数値計算に応用することを試み，加速についても考察した．しかし現在の講演者の考えでは，この種の方式にむりに加速法を適用しても，実用上の効果は疑問であり，この種の公式を使うのは，泥沼に陥らない早期に打ち切ることができる場合にのみ限定するのが，もっとも安全な実用法ではないかと思われる．

この報告の大部分は，Brookhaven 国立研究所（アメリカ，New York 州；1966年8月から1967年9月まで）に留学中に行なったものである．

§1．商差法

場所を節約するために，連分数

$$(1.1)\qquad \cfrac{a_0}{b_0+\cfrac{a_1}{b_1+\cfrac{a_2}{b_2+\cdots}}}$$

をつぎのように略記する：

$$(1.2)\qquad \frac{a_0|}{|b_0}+\frac{a_1|}{|b_1}+\frac{a_2|}{|b_2}+\cdots = \mathop{\mathrm{K}}_{i=0}^{\infty}\frac{a_i|}{|b_i}$$

さて連分数

(1.3) $$\frac{\alpha_0|}{|1} + \overset{\infty}{\underset{i=1}{\mathrm{K}}} \frac{\alpha_i x|}{|1}$$

があるとき，n項で切って整理した近似連分数を $p_n(x)/q_n(x)$ とすると，$q_n(0)=1 \neq 0$ なので，この有理函数は

(1.4) $$c_0^{(n)} + c_1^{(n)} x + c_2^{(n)} x^2 + \cdots$$

と級数に展開されるが，各kに対して $c_k^{(n)}$ $(n=0,1,2,\cdots)$ は，ある所から先は一定値 c_k となる．ゆえに(1.4) は

(1.5) $$c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots$$

に収束する．(1.5) を (1.3) に付随した整級数という．ただし (1.5) の収束半径は 0 のこともある

逆に形式的整級数 (1.5) が与えられたとき，それを付随した整級数にする連分数 (1.3) は，つぎのようにして商差法で作られる．まず順次

(1.6) $$q_n^{(1)} := c_{n+1}/c_n, \qquad e_n^{(1)} := q_{n+1}^{(1)} - q_n^{(1)}$$

$$\left.\begin{aligned} q_n^{(k)} &:= q_{n+1}^{(k-1)} e_{n+1}^{(k-1)} / e_n^{(k-1)} \\ e_n^{(k)} &:= q_{n+1}^{(k)} - q_n^{(k)} + e_{n+1}^{(k-1)} \end{aligned}\right\} \begin{aligned} &k=2,3,\cdots \\ &n=0,1,2,\cdots \end{aligned}$$

とおく，このとき

(1.7) $$\alpha_0 := c_0\,; \quad \alpha_{2k-1} := -q_0^{(k)}, \quad \alpha_{2k} := -e_0^{(k)}$$
$$(k=1,2,\cdots)$$

とすればよい．ただし (1.6) で分母は 0 にならないとする．もし (1.5) の係数から作った Hankel 行列式

$$
(1.8)\qquad \begin{vmatrix} c_n & c_{n+1} & \cdots & c_{n+k} \\ c_{n+1} & c_{n+2} & \cdots & c_{n+k+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{n+k} & c_{n+k+1} & \cdots & c_{n+2k} \end{vmatrix} \qquad \begin{matrix} k=0,1,2,\cdots \\ n=1,2,\cdots \end{matrix}
$$

がけっして 0 にならなければ，この条件はみたされる．

例1.
$$
f(x) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1-x^2}{2x}\,\mathrm{arctanh}\, x\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{x^{2i}}{4i^2-1}
$$

については，帰納法で

$$
q_n^{(k)} = \frac{(2n+2k-3)(2n+2k-1)}{(2n+4k-3)(2n+4k-1)}
$$

$$
e_n^{(k)} = \frac{2k(2k+2)}{(2n+4k-1)(2n+4k+1)}
$$

となることがわかり，連分数はつぎのようになる

$$
(1.9)\qquad f(x) = \mathop{\Phi}_{i=1}^{\infty} \frac{\alpha_i x^2 |}{| 1}
$$

$$
\alpha_1 = 1/3\,; \qquad \alpha_n = -(n^2-1)/(4n^2-1)\,, \ (n \geqq 2).
$$

例2　不完全ガンマ函数の漸近展開の剰余項

$$
\int_{\infty}^{x} e^{-t} t^{\nu-1}\,dt = x^{\nu} e^{-x} \sum_{n=1}^{N} \frac{(1-\nu)(2-\nu)\cdots(n-1-\nu)}{(-x)^n} - \frac{x^{\nu} e^{-x} (1-\nu)(2-\nu)\cdots(N-\nu)}{(-x)^N} f(x),
$$

$$
(1.10)\qquad f(x) \sim \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i-1}}{x^i} \frac{\Gamma(N+i-\nu)}{\Gamma(N+1-\nu)}, \qquad (\nu \neq 0, -1, -2, \cdots)
$$

については，帰納法で

$$q_n^{(k)} = -(N+n+k-\nu), \qquad e_n^{(k)} = -k,$$

$$\alpha_0 = 1, \quad \alpha_{2n-1} = N+n-\nu, \qquad \alpha_{2n} = n$$

となり，連分数はつぎのようになる．

$$f(x) = \frac{1|}{|x} + \sum_{i=1}^{\infty}\left[\frac{N-\nu+i|}{|1} + \frac{i|}{|x}\right] \tag{1.11}$$

(1.10) の収束半径は 0 だが，(1.11) は x ≠ 負の実数（負の実軸にきれめを入れた複素数平面）で収束する．

ただし上記の例のように，$q_n^{(k)}$, $e_n^{(k)}$ の具体的な形が簡単な式で求められるのは，むしろ例外的である．しかし (1.6), (1.7) の計算を数値的に実行して，任意の整級数 (1.5) からその連分数 (1.3) を有限項できった近似有理函数を作りだすことは容易である．(Henrici-Pfluger, Gargantini-Henrici の論文などを参照)

§2. Stieltjes 級数

実用上の多くの特殊函数の整級数 (1.5) は，いわゆる Stieltjes 級数の条件をみたす；すなわち適当な有界な広義の単調増加函数 ψ によって，Stieltjes 積分で

$$c_n = (-1)^n \int_0^{\infty} \xi^n \, d\psi(\xi) \tag{2.1}$$

と表現される．このときには (1.8) はけっして 0 にならない．さらに $|c_n|$ の増加がゆるやか（大体 $(2n)!$ 以下）で，

(2.2) $$\sum |c_n|^{-1/2n} = \infty$$

ならば，それから作った連分数は，$x \neq$ 負の実軸，で収束する．また (1.5) の収束半径が R で (2.1) がみたされれば，連分数は，x が実数のとき，$-R < x < \infty$ で収束する．

Stieltjes 級数に対しては，係数に制約がつくため，はじめの有限項だけで函数の値が評価できる．$x > 0$ ならば，近似有理函数は真値に上下から振動しながら収束するので，奇数項と偶数項とで誤差が評価できる．$x < 0$ のときには収束は単調になる．逆方向からの評価について，近年 Common らがおもしろい試みをしている．

Stieltjes 級数の連分数展開の誤差については，最近 Henrici – Pfluger が，きわめて詳しい評価を与えている．

$a_n \geqq 0$ のとき，連分数

$$\mathop{\mathrm{K}}_{n=1}^{\infty} \frac{a_n/x|}{|1} = \mathop{\mathrm{K}}_{n=1}^{\infty}\left[\frac{a_{2n-1}|}{|x} + \frac{a_{2n}|}{|1}\right]$$

の第 n 近似連分数を w_n とすれば，$x \neq$ 負の実数のとき

(2.3) $$|w_{n+1} - w_n| \leqq \mathbb{K} \prod_{k=2}^{n+1} \left(1 + 2\xi\, a_k^{-1/2}\right)^{-1/2}$$

ここに

$$\mathbb{K} \equiv \frac{a_1 a_2^{1/4}}{|x|^{1/2}\xi}\left[\frac{a_2^{1/2} + 2\xi}{a_2 + |x|}\right], \quad \xi = \mathrm{Re}\sqrt{x} > 0$$

$x>0$ で x がきわめて大きいときには，$\mathbb{K}$ は $|x|^{-3/2}$ のオーダーである．(2.3) の右辺の積の項は

$$(2.4) \qquad \left[1+2\xi(a_2 \cdots a_{n+1})^{-1/2n}\right]^{-n/2}$$

でおさえられ，多くの場合，これでも誤差の主要項のオーダーは正しい．しかし前の例のように a_n が n の1次式で与えられるときには，和を積分と比較することにより，さらによい評価がえられる．

例3

一例として，第2種変形 Bessel 函数 $\mathbb{K}_\nu(x)$ について，公式

$$\frac{\mathbb{K}_\nu(x)}{\mathbb{K}_{\nu+1}(x)} = 1 + \mathop{\Phi}_{n=1}^{\infty}\left[\frac{2n-3-2\nu|}{|\ 2x} + \frac{2n+2\nu+1|}{|\ 2}\right]$$

$$= 1 - \frac{\nu+1/2}{x+x\varphi(x)} \ ;$$

$$\varphi(x) = \mathop{\Phi}_{n=1}^{\infty}\left[\frac{(n+\nu+1/2)/2|}{|\ x} + \frac{(n-\nu-1/2)/2|}{|\ 1}\right]$$

に応用してみる．(Hitotumatu §2 [4])．$-1/2<\nu<1/2$ のときに，$\varphi(x)$の連分数に適用すると，

$$(2.5) \quad \begin{aligned} |w_{2n+1}-w_{2n}| &\leqq \mathbb{K}\, C\, A_n B_n/A_1 B_1 \qquad (n\geqq 1) \\ |w_{2n}-w_{2n-1}| &\leqq \mathbb{K}\, C\, A_{n-1} B_n/A_1 B_1 \qquad (n\geqq 2) \end{aligned}$$

$$C = \left(1+2\xi\sqrt{\frac{8}{2\nu+7}}\right)^{-1/2}\left(1+2\xi\sqrt{\frac{8}{3-2\nu}}\right)^{-1/2}$$

$$A_n = \frac{\left(n+\frac{\nu}{2}+\frac{3}{4}\right)^{(n+\frac{\nu}{2}+\frac{5}{4})/4} \exp\left(-\xi\sqrt{2n+\nu+3/2}\right)}{\left(\sqrt{n+\frac{\nu}{2}+\frac{3}{4}}+2\sqrt{2}\,\xi\right)^{(n+\frac{\nu}{2}+\frac{5}{4}-8\xi^2)/2}}$$

$$B_n = \frac{\left(n-\frac{\nu}{2}-\frac{1}{4}\right)^{\left(n-\frac{\nu}{2}+\frac{1}{4}\right)/4} \exp\left(-\xi\sqrt{2n-\nu-1/2}\right)}{\left(\sqrt{n-\frac{\nu}{2}-\frac{1}{4}}+2\sqrt{2}\,\xi\right)^{\left(n-\frac{\nu}{2}+\frac{1}{4}-8\xi^2\right)}}$$

がえられる．(ξは前と同じ)．これはかなりこみいっているが，この主要項は

$$A_n/A_1 \doteqdot (en)^{2\xi^2}\left(e^{-2\sqrt{2}\,\xi}\right)^{\sqrt{n+\frac{\nu}{2}+\frac{3}{4}}}\,(1+o(1))$$

である．これに対して (2.4) からみつもると，主要項が

$$\left(e^{-\xi\sqrt{2e}}\right)^{\sqrt{n}}$$

となり，少し悪くなる（つまりべき指数の係数の 2 が $\sqrt{e} \doteqdot 1.65$ でおきかえられる）．いずれにせよ，(2.3) の誤差のへり方は'1/2－位'

$$C\,\varepsilon^{\sqrt{n}} \tag{2.6}$$

の形であるから，はじめは調子がよいが，たちまち泥沼に入りこむ．

Henrici 自身の求めたガンマ函数の Stirling の公式の漸近級数については，もっとひどくて，誤差のへり方は

$$C\,\varepsilon^{\log n}$$

のオーダーにすぎない．しかしはじめの数個の Bernoulli 数が'異常に'小さいので，はじめの3〜4項まででやめると，'予想外'によい精度がえられる．——これは，はじめが好調だというので，調子にのって深入りしてはいけない，というよい例である．

§3 収束の加速

このように漸近展開の連分数展開は収束がおそいので、実用上には、なんらかの加速を考えるほうがよい

いま真値 v に収束する数列 a_n があり、誤差が真に(2.6)で与えられるとすれば

$$(3.1)\quad \begin{cases} a_{n-1} = v + c\,\varepsilon^{\sqrt{n-1}} \\ a_n = v + c\,\varepsilon^{\sqrt{n}} \\ a_{n+1} = v + c\,\varepsilon^{\sqrt{n+1}} \end{cases}$$

である。これから v を求めることを考えよう。

$$\sqrt{n-1} = k,\quad \sqrt{n} = l,\quad \sqrt{n+1} = m$$

とおく。2階差分

$$\delta = (l-k) - (m-l)$$

が k, l, m にくらべて十分に小とすれば(いまの場合はそうなる)、(3.1)から

$$(3.2)\quad \rho = \frac{a_{n+1} - a_n}{a_n - a_{n-1}} = \varepsilon^{m-l} \cdot \Delta$$

$$\Delta = 1 - \frac{1 - \varepsilon^{\delta}}{1 - \varepsilon^{l-k}}$$

となる。(3.2)自身は正確な式である。ここで修正係数Δをなんらかの方法で推定することができれば、これから

$$(3.3)\qquad v = a_{n+1} - \frac{(a_{n+1}-a_n)^2}{(a_{n+1}-a_n)-\Delta(a_n-a_{n-1})}$$

をうる．とくに $\delta=0$，$\Delta=1$ のときには，(3.3) は

$$v = a_{n+1} - \frac{(\Delta a_n)^2}{(\Delta^2 a_{n-1})} \qquad (\Delta \text{は差分})$$

となる．これはAitkenの公式として周知のものである．じっさい線型収束（ε_nがほぼ等比級数になる）のとき，この方法は，おどろくほど反復回数をへらす役にたつ．

ところで当面の目的には　$\Delta=1$ としてはあまりよくない．それよりも主要項をとって

$$(3.4)\qquad 1-\Delta \fallingdotseq \frac{1-\alpha}{1-\alpha^\lambda},$$

$$\alpha = \varepsilon^{\sqrt{n}/(4n^2-5/4)}, \quad \lambda = (4n^2-5/4)/(2n-1/2)$$

とし，$\alpha\to1$ とした極限の Δ_1 またはその近似値 Δ_1'：

$$\Delta_1 = \frac{16n^2-8n-3}{16n^2-5} \fallingdotseq \frac{4n-1}{4n+1} = \Delta_1'$$

を使うほうがまだよい．あるいは α の近似値として

$$\alpha \fallingdotseq \left[\left(1+\frac{2}{4n-1}\right)\rho\right]^{1/(2n-1/2)}$$

あるいは　$$\alpha \fallingdotseq \left[\frac{\rho^{1-1/4n}(1-\rho^{1+1/2n})}{1-\rho}\right]^{1/2n}$$

などを使うほうが　ましである．これによる Δ をそれぞれ Δ_2, Δ_3

と書くことにする.

もちろんじっさいには(3.1)は正確ではないが,(3.3)によって v を計算すると,ずっと真値に近いことが予想される.

上記の変形として,4つの連接した値 $a_{n-1}, a_n, a_{n+1}, a_{n+2}$ から

$$v = a_{n+2} - \frac{(a_{n+2}-a_{n+1})(a_{n+2}-a_n)}{(a_{n+2}-a_{n+1}) - \Delta(a_n - a_{n-1})}$$

$$\Delta = 1 - \frac{1-\varepsilon^{-\sqrt{n+2}+\sqrt{n+1}+\sqrt{n}-\sqrt{n-1}}}{1-\varepsilon^{\sqrt{n}-\sqrt{n-1}}} \doteqdot \frac{n}{n+1}$$

を使う方法もある.線型収束なら,$\Delta=1$ としてよい.

例4 不完全ガンマ函数の $v=0.5$ の場合(確率積分)について,その漸近展開で $x=1.0$ のときを実験してみる.

a_n は n 項までとった近似連分数の値を示す:

a_3	−0.27832 21014	
a_4	−0.27864 68689	
a_5	−0.27874 64214	
a_6	−0.27878 13860	
ρ	0.306535	a_3, a_4, a_5 による
Δ_1'	0.882353	
Δ_2	0.811618	
Δ_3	0.819785	

Δ_1' による加速値	-0.2787994150
4点加速値	-0.2788023037
真値	-0.2788055853

このときの ε はほぼ 1.4×10^{-2} 程度で，かなり大きい．Δ_1' による加速値はかなり粗雑だが，それでも a_7 に匹敵し，$a_3\sim a_6$ による4点加速値は a_9 に匹敵する．

Δ の近似推算法はいろいろあるが，Δ_1' がむしろ大きすぎる以外は，いずれもほぼ似た値になる．実用的には，Δ_2 か，あるいはそれを簡略化した

$$\Delta_2' = \rho^{1/2n}\,\frac{1-\rho^{1-1/4n}}{1-\rho^{1+1/4n}}$$

で十分のようである．

参考文献

§1. (一般的なもの)

1. O. Perron, Die Lehrbuch von den Kettenbrüchen, Teubner 1929; 3版 1957 (Chelsea 社の複刻あり)

2. H. S. Wall, Analytic theory of continued fractions, von Nostrand 1948; Chelsea reprint 1967.

3. A. W. Khovanskii (P. Wynn 訳), The application of continued fractions and their generalizations to problems in approximation theory, van Nordhoff, 1963.

4. P. Henrici, Some applications of the quotient-difference algorithm, Proc. 15th Symp. on App. Math., Amer. Math. Soc. 1963, 159–183.

5. H. Rutishauser, Anwendungen des Quotienten-Differenzen-Algorithmus, Z.A.M.P. 5 (1954) 496–507

6. F. L. Bauer, Nonlinear Sequence Transformations, H. L. Garabedian 編, Approximation of Functions, Elsevier, 1965, 134–151

§2.

1 P. Henrici, Error bounds for computations with continued fractions, L. B. Rall 編, Errors in digital computations, vol 2. John Wiley & Sons, 1965, 39–53

2. Henrici-Pfluger, Truncation error estimates for Stieltjes fractions, Num. Math. 9 (1966), 120−138

3. Gargantini-Henrici, A continued fraction algorithm for the computation of higher transcendental functions in the complex plane, Math. Comp. 21 (1967), 18−29

4. S. Hitotumatu, On the numerical computation of Bessel functions through continued fraction, BNL Tech. Report, AMD455, 1967 — 立教大学数学雑誌(1968)に発表予定.

§3.

1. Aitken, On Bernoulli's numerical solution of algebraic equation, Proc. Royal Soc. Edinburgh, A46 (1926), 289−305

2. Hitotumatu, On a method of acceleration of convergence, Publ. RIMS, Kyoto Univ. A3 (1967) 1−10

3. Hitotumatu, On the numerical computation of incomplete gamma function, Comm. Math. St. Paul. 15 (1967), 91−108