

ベッセル関数パッケージの開発

東大 工学部 殿塚 勲 (Isao Tonozuka)
日大 理工学部 吹田 篤治 (Tokuji Suita)
東大大型センター 唐木 幸比古 (Yukihiko Karaki)

§1 はじめに

現在、東大大型計算機センターに登録されているベッセル関数ルーチンはMSLおよびMSL II (ともに日立提供) に含まれている。東大計算センターはその開設以来、計算機は3回目の機種となっているが、数学ライブラリーの中でもベッセル関数は未だ旧来のプログラムがそのまま使われているのが現状である。

我々は以前、MSLのベッセル関数ルーチンの精度や計算時間の検定を行い、そのために必要な4倍精度のプログラムを開発した。¹⁾ その後これらに基づいて、ベッセル関数 $J_n(x), Y_n(x), j_n(x), n_n(x), I_n(x), K_n(x), \sqrt{\frac{\pi}{2x}} I_{n+\frac{1}{2}}(x), \sqrt{\frac{\pi}{2x}} K_{n+\frac{1}{2}}(x)$ (以上実変数) および $J_n(z), Y_n(z), I_n(z), K_n(z)$ (以上複素変数) のプログラム・パッケージ = BESPACK

を開発し、東大大型計算機センターに登録することになったので、その特徴や計算法を報告する。

第一種ベッセル関数は変数 x または z を固定して $n \rightarrow \infty$ とすると急速に 0 になり、第二種関数は ∞ に発散する。BESSPACK においては、第一種関数は *underflow* する直前までのすべての次数のベッセル関数を求めることを、その大きな特徴とする。すなわち、 x が与えられたとき

$$|J_n(x)| \geq 10^{-78} \quad (1)$$

を満たす最大の次数 $n=N$ (図 1 の N のライン) をプログラムの中で近似式により計算して、 $n=0$ から N までのすべての次数のベッセル関数を配列型として求める。同様にして、第二種関数は

$$|Y_n(x)| \leq 10^{75} \quad (2)$$

により *overflow* する直前までの次数 $n=N$ までの関数値を配列型として計算する。

このような方式のプログラムでは、使用しない次数のベッセル関数まで求めてしまうのでやっ無駄のようであるが、 x と n を与えたときの関数値が *underflow* または *overflow* しない範囲にあることを知るだけでも一般のユーザーにとっては億劫なことと思われるし、また漸化式による第一種関数の計算においてはたいていの $J_n(x)$ を計算するよりも、むしろ

る配列型として $n=0$ から N までの関数値を一挙に求める方が能率的なのである。

§2 一種ベッセル関数の計算法

2.1 FFTを用いる方法

$J_n(x)$ はフーリエ級数

$$e^{ix \sin \theta} = \sum_n J_n(x) e^{in\theta} \quad (3)$$

のフーリエ係数であるから、FFT (高速フーリエ変換) を適用することにより、 $J_n(x)$ ($n=0, 1, 2, \dots$) を配列型として求めることができる。0 の $[0, 2\pi)$ 区間を N 等分して得た計算値を $\tilde{J}_n^{(N)}(x)$ とすると

$$\tilde{J}_n^{(N)}(x) = J_n(x) + (-1)^{N-n} J_{N-n}(x) + J_{N+n}(x) + \dots \quad (4)$$

となることは良く知られている。この右辺第二項以降は aliasing による項であり、これが誤差項となる。 $N-n \gg x$ として $J_{N-n}(x)$, $J_{N+n}(x)$ に Debye の漸近式を用いれば、高橋・森²⁾ により得られた式 (2-15) と一致する。

この方法は $J_n(x)$ の積分表示式

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ix \sin \theta - in\theta} d\theta \quad (5)$$

に台形則を適用することと等価であり、しかも周期関数の一周にわたる積分なので台形則は最適である³⁾。そのうえ誤差評価も(4)式により簡単にできる莫ですぐれた方法と思われる。しかしながら $n \geq x$ のとき $J_n(x)$ は n と共に急激に減少して 0 に近づき、これに対応して (5) 式の被積分関数は激しく振動するので、浮動小数点方式による数値計算結果は (4) 式で与えられるよりもはるかに大きな誤差を招くことになり、実用に耐えられなくなる。

この方法による計算結果は、 $x \leq n$ の $J_n(x)$ に対してのみ精度が保証されるので、(1) 式で与えられるすべての $J_n(x)$ の値を求めるには、やはり次の漸化式によることになる。

2.2 漸化式による方法

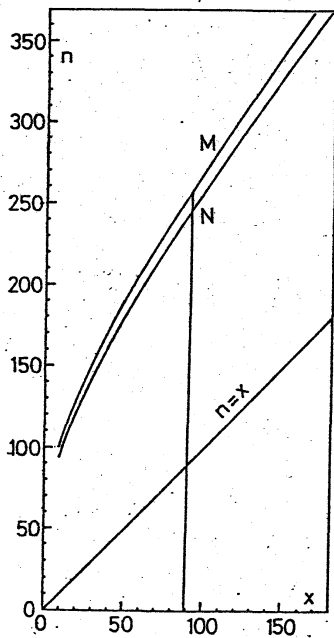


図 1

$$J_{n-1}(x) = \frac{2n}{x} J_n(x) - J_{n+1}(x) \quad (6)$$

を逆方向に用いて $J_n(x)$ を計算する方法はすでに確立されているので⁴⁾、ここでは漸化式 (6) の実行中に起こり得る *overflow* についてのみ述べる。

(1) 式で決まる N に対して、適当に

$$M > N \text{ を定めて}$$

$$\left. \begin{aligned} F_{M+1}(x) &= 0 \\ F_M(x) &= 10^{-78} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

より出発して漸化式

$$F_{n-1}(x) = \frac{2n}{x} F_n(x) - F_{n+1}(x) \quad (8)$$

を $n=0$ まで実行したおら加

$$F_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\lfloor \frac{M}{2} \rfloor} F_{2n}(x) = \alpha \quad (9)$$

を計算すると、 $J_n(x)$ の近似値は

$$J_n(x) \cong \frac{F_n(x)}{\alpha}$$

で与えられる、というのが漸化式による方法である。このとき $J_n(x)$ に対する相対誤差は

$$\left| \frac{\Delta J_n(x)}{J_n(x)} \right| \leq \left| \frac{\Delta \alpha}{\alpha} \right| + \epsilon_{M,n} \quad (10)$$

で与えられる。⁴⁾ 右辺第一項は規格化定数 α の相対誤差で

$$\left| \frac{\Delta \alpha}{\alpha} \right| \cong 2 \left| J_{M+1}(x) \right| \quad (11)$$

であり、第二項は差分方程式 (8) の解に、 $J_n(x)$ 以外に $Y_n(x)$ が含まれる割合

$$\epsilon_{M,n} \equiv \left| \frac{J_{M+1}(x) Y_n(x)}{Y_{M+1}(x) J_n(x)} \right| < \epsilon_{M,N} \quad (12)$$

である。我々の場合、(11) の値は $M > N$ より

$$\left| \frac{\Delta \alpha}{\alpha} \right| \ll 10^{-78} \quad (13)$$

なので、問題とすべき誤差は $\epsilon_{M,N}$ である。 $N \gg x$ のとき成立する関係式

$$J_N(x) Y_N(x) \approx -\frac{1}{N\pi} \quad (14)$$

を用いると

$$\epsilon_{M,N} \approx \frac{N}{M+1} \left| \frac{J_{M+1}(x)}{J_N(x)} \right|^2 \quad (15)$$

となるが、倍精度のときには $\epsilon_{M,N} \approx 10^{-18}$ 、単精度では 10^{-8} に選べば十分である。すなわち倍精度のとき

$$J_{M+1}(x) \sim 10^{-9} J_N(x) \quad (16)$$

となるような M (図1の M のライン) を用いて (7) 式から出発し、かつ N は (1) 式を満たす最大の n として決められるから、規格化定数は $\alpha \sim 10^9$ となる。これと (9) 式とから、 α に関しても $F_n(x)$ に関しても、 N を (1) により決めて (7) 式から出発する限り、 $n=0$ に至るまで overflow の恐れは無いことがわかる。この方法では N を先に定め M を後で決めるが、通常はこの順序は逆である⁴⁾

以上は $J_n(x)$ について述べたが、 $I_n(x)$ の場合にも M から出発して、 $n=N$ において $F_N(x) = 10^{-78}$ に規格化しなおしておけば、やはり overflow することはない。

3 オニ種ベッセル関数の計算法

$K_0(x)$ の表式

$$K_0(x) = -\left(\log\left(\frac{x}{2}\right) + \gamma\right) I_0(x) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{I_{2k}(x)}{k} \quad (17)$$

は、 $x \geq 1$ において桁落ちを生ずるので、別の計算法が必要となる。($Y_n(x)$ の (17) に対応する式は使うことができない。) ここでは積分表示式に数値積分を適用して計算する方法をとりあげる。表示式

$$K_0(x) = \int_0^{\infty} e^{-x \cosh u} du \quad (18)$$

は2重指数関数的に減衰しているので、台形則により計算するのが最適である⁵⁾。きざみ幅を h とし $u \equiv \frac{2\pi}{xh}$ とおくと、誤差 ΔI_h は高橋・森理論⁵⁾から

$$\left. \begin{aligned} \mu > 1 \text{ のとき} \quad \Delta I_h &\sim \frac{e^{-\frac{\pi^2}{h}}}{\sqrt{x}} \cos\left(\frac{2\pi}{h} \log(\mu + \sqrt{\mu^2 - 1}) - x\sqrt{\mu^2 - 1}\right) \\ \mu < 1 \text{ のとき} \quad \Delta I_h &\sim \frac{e^{-\frac{2\pi}{h} \alpha - x\sqrt{1 - \mu^2}}}{\sqrt{x}}, \quad \alpha = \sin^{-1}(\mu) \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

が得られる。(18)式に台形則を適用したときの相対誤差を図2に示す。

$\mu > 1$ のとき誤差に cosine 因子があるので、分真数とともに必ずしも単調に減少しない様子がみられる。また $K_0(x)$

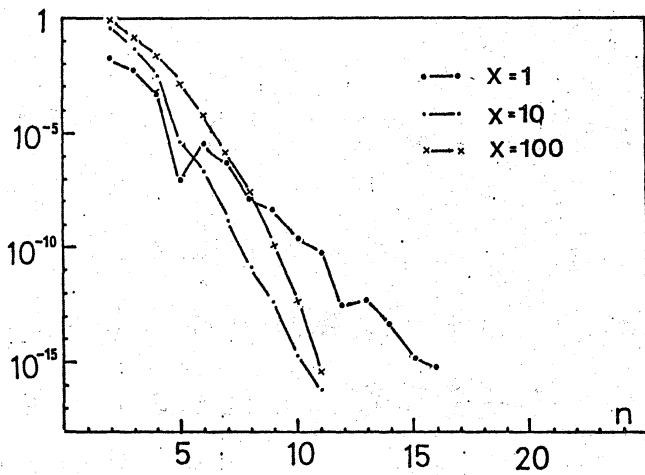


図 2

は漸近的に $\frac{e^{-x}}{\sqrt{x}}$ となる
 ので、 x が大きいとき
 相対誤差を小さくする
 ために n を小さくしな
 ければならないが、こ
 のとき (18) 式の積分の

上限 u_m も小さくてすむので、分母数はあまり増えなくてす
 む。しかし x の値により u_m の値を変えなければならぬこ
 とは実用上面倒である。

次に (18) 式を

$$K_0(x) = \frac{e^{-x}}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x(\cosh u - 1)} du$$

$$= \frac{e^{-x}}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x \sinh^2 \frac{u}{2}} du$$

と書いて、変数変換

$$2x \sinh^2 \frac{u}{2} = t^2 \quad (20)$$

を行うと積分表示式

$$K_0(x) = e^{-x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} \frac{dt}{\sqrt{2x+t^2}} \quad (21)$$

が得られる。同様に $K_1(x)$ は

$$K_1(x) = \frac{e^{-x}}{x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} t^2 \sqrt{2x+t^2} dt \quad (22)$$

となる。この表示式は Hunter⁶⁾ により導かれたもので、

$K_0(x) \sim \frac{e^{-x}}{\sqrt{x}}$ の振舞をするので、因子 e^{-x} が積分の外に出ることは好都合である。また変数 x を複素変数にしたとき (18) 式は右半平面で収束するが、(21), (22) 式によれば負の実軸を除いた全平面で一様に収束する。すなわち変数変換 (20) により右半平面から負の実軸を除いた全平面に解析接続されたことになる。したがって (21), (22) の x の代りに ix とおくと関係式

$$K_n(ix) = \frac{\pi}{2} e^{-(n+1)\pi i} (J_n(x) - iY_n(x)) \quad (23)$$

により、その実部と虚部から $J_n(x)$ と $Y_n(x)$ を数値的に計算するのに便利(特に大きな x の値に対して)な式が得られる。

さらに (18) 式は x を複素変数にした場合には激しい振動のために大きな誤差を伴うが、(21), (22) 式は減衰因子が実数であるために複素変数の $K_n(z)$ の数値計算にも適している。

(21), (22) の形から Hermite-Gauss の積分公式の適用がまず考えられる。 $x=1, 10, 100$ の場合の誤差曲線(相対誤差)を図3で、 $x \geq 10$ のときにはわずかの分実数で高精度が得ら

れることは注目してよいであろう。(21)式の e^x 因子を除いた積分に N 次のHermite-Gaussの公式を用いたときの誤差

ΔI_N は

$$\Delta I_N = \frac{1}{2\pi i} \int_C \Phi_N(z) \frac{dz}{\sqrt{2x+z^2}} \quad (24)$$

であり、特性関数 $\Phi_N(z)$ は $|z| \rightarrow \infty$ のとき

$$\Phi_N(z) = \frac{\sqrt{\pi} N!}{2^N} \frac{1}{z^{2N+1}} + O\left(\frac{1}{z^{2N+3}}\right) \quad (25)$$

で与えられる。

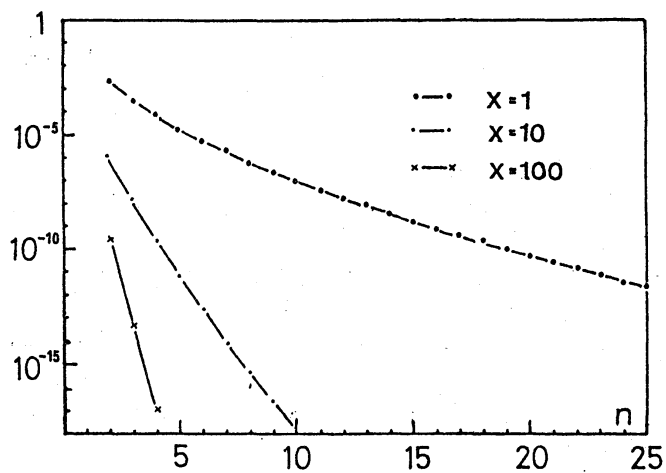


図 3

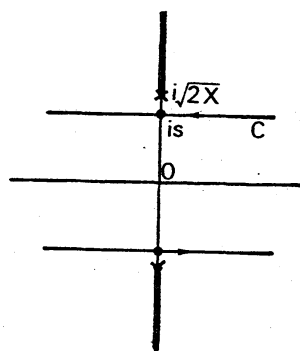


図 4

x が実数のときには虚軸上 $\pm i\sqrt{2x}$ が分岐点となるので、図4の太線のようなカットを入れて積分路 C は虚軸上の鞍点 $\pm is$ を通るように選ぶ。(24)式の $\Phi_N(z)$ として(25)式の第一項だけをとると近似的な鞍点は

$$\pm is = \pm i \sqrt{\frac{2N+1}{N+1}} x \quad (26)$$

となり、これに応じて誤差は

$$|\Delta I_N| \doteq \frac{\sqrt{2} N! (N+1)^N}{2^{N+1} ((2N+1)x)^{N+\frac{1}{2}}} \quad (27)$$

により与えられるが、これは x が大きいほど良い評価となるはずである。実際 $x=50$, $N=4$ (偶関数なので分実数は2) のとき観測された誤差 $|\Delta I|_{obs} = 6.6 \times 10^{-10}$ に対して (27) は 7.5×10^{-10} を与える。また $x=5$, $N=4$ でも $|\Delta I|_{obs} = 1.1 \times 10^{-5}$ に対して (27) 式は 2.4×10^{-5} を与えるので、誤差のオーダーの評価には十分耐える。

(21), (22) 式に直接台形則を適用した場合の誤差評価は Hunter 自身が行っているので、⁶⁾ ここでは観測された相対誤差を図5に示すにとどめる。 x が小さいとき精度が良くない

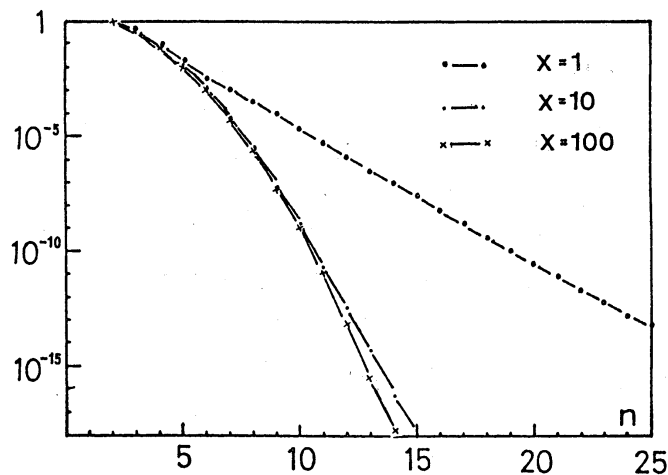


図5

の位置も実軸に近づくためである。

ことは Hermite-Gauss を用いたときと同様であるが、これは x が小さいとき分岐点 $\pm i\sqrt{2x}$ が実軸に近づき、積分路 C はこれにはさまれた領域を通るので鞍点

次に (21), (22) 式に変数変換

$$x^2 = \pi \sinh^2 \frac{S}{2}$$

を行って 2 重指数関数型に変換する。

$$K_0(x) = e^{-x} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\pi} \cosh \frac{S}{2}}{\sqrt{2x + \pi \sinh^2 \frac{S}{2}}} e^{-\pi \sinh^2 \frac{S}{2}} dS \quad (28)$$

$$K_1(x) = \frac{e^{-x}}{x} \int_0^{\infty} \pi \sqrt{\pi} \sinh^2 \frac{S}{2} \cosh \frac{S}{2} \sqrt{2x + \pi \sinh^2 \frac{S}{2}} e^{-\pi \sinh^2 \frac{S}{2}} dS \quad (29)$$

(28), (29) 式に台形則を適用することは高橋・森理論における最適の数値積分公式に対応するが、その他に x の値が小さくても、 $x > \frac{\pi}{2}$ であれば分岐点の位置が $\pi i \pm 2 \log(\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 1})$, $\lambda = \sqrt{\frac{2x}{\pi}}$ となり、実軸から π だけ離れるという利点が生ずる。(図 6 参照) そして近似的な鞍点は $u = \frac{4}{\pi} > 1$ とすると

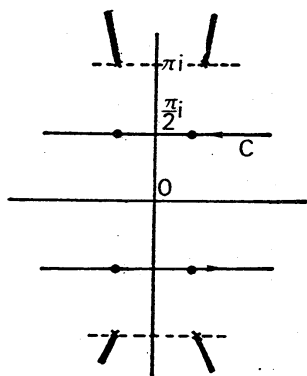


図 6

$\frac{\pi}{2} i \pm \log(u + \sqrt{u^2 - 1})$ となるので、誤差は因子 $e^{-\frac{\pi^2}{4}}$ により支配される。(28) 式を台形則により計算したときの相対誤差が図 7 で、この図に見られるように、 x の値によらずほとんど同じ誤差曲線を示すこと、そして x の値によらずに積分の上限 S_m を同一に

選んでよいことは、実際の数値計算の上からも便利である。

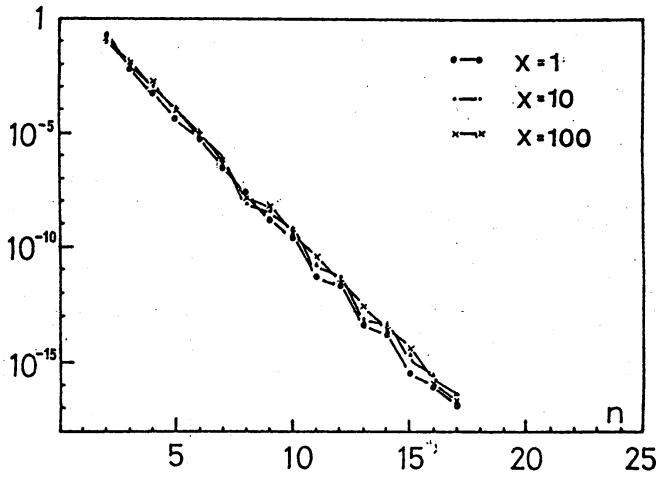


図 7

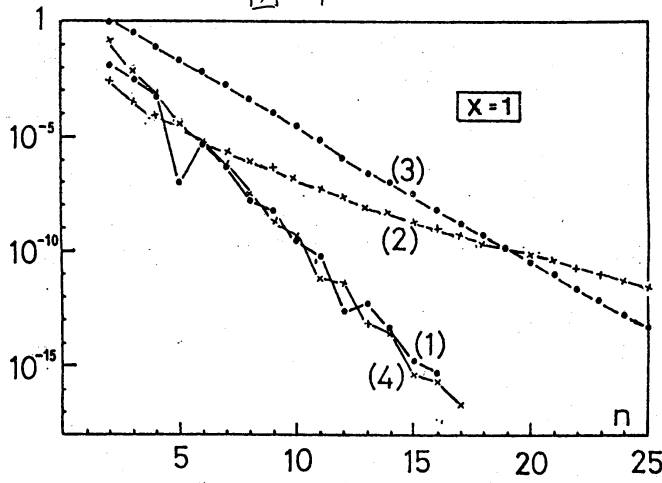


図 8

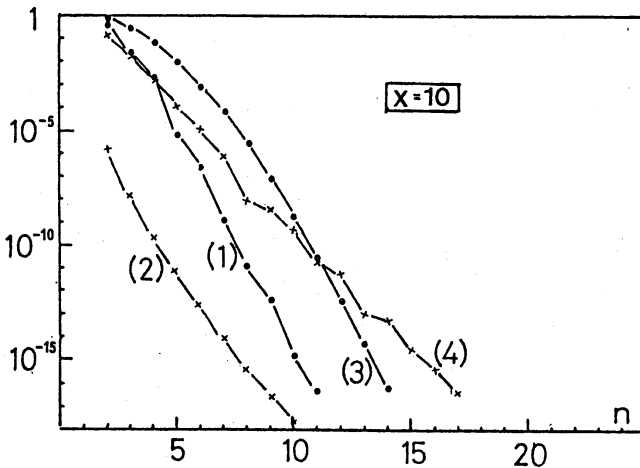


図 9

以上 $K_0(x), K_1(x)$ を計算するための4つの方法、すなわち

[1] (18)式に台形則

[2] (21), (22)式に

Hermite-Gauss 公式

[3] (21), (22)式に台形則

[4] (28), (29)式に台形則

の中で、最も効率の良い計算法を選ぶために $x=1$ と $x=10$ の各々について4つの方法による誤差曲線(相対誤差)を描いたのが図8と図9である。これらの図から $1 \leq x < 10$ の場合には [4] の方法、

$x \geq 10$ では方法(2)を採用することが、分位数が少なくて済むことがわかる。

$x < 1$ に対しては(17)式により $K_0(x)$ を計算する。

なお(21), (22)式に Hermite-Gauss 公式を用いる方法(2)は大きな x に対してきわめてわずかな分位数で高精度が得られるが、これと通常の漸近展開を比較したのが図10である

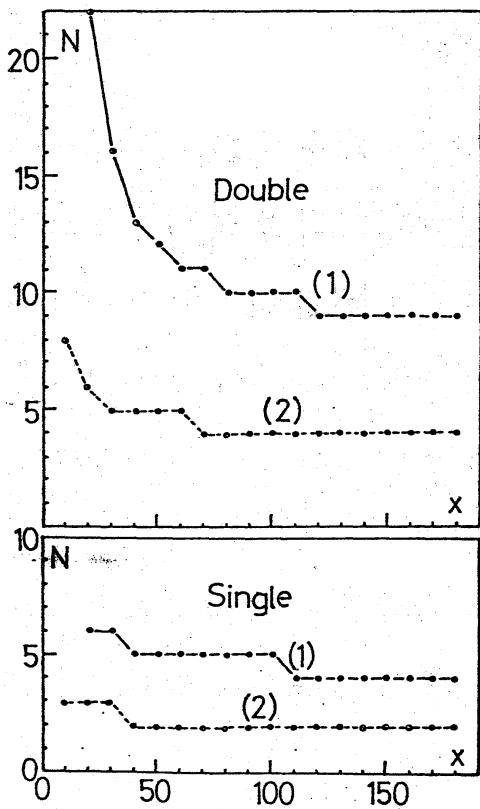


図 10

すなわち、 $K_0(x), K_1(x)$ の値を倍精度 (double) および単精度 (single) で得るために必要な漸近展開の項数が(1)で、Hermite-Gauss による分位数が(2)である。

さらに(23)式と(21), (22)式から $J_0(x), Y_0(x)$ などに対しても同様の比較ができる。結果は $K_0(x), K_1(x)$ の場合(図10)とほぼ同じなので省略する。

§4 複素変数のベッセル関数の計算法

複素変数のオーソドックスなベッセル関数 $J_n(z)$ や $I_n(z)$ は実変数の場合と同様に漸化式を用いて計算することができる。⁸⁾ ここ

では漸化式

$$J_{n-1}(z) = \frac{2n}{z} J_n(z) - J_{n+1}(z) \quad (30)$$

を $J_n(z) = u_n + i v_n$, $z = x + iy$ とおいて実部 u_n と虚部 v_n がカップルした形の漸化式

$$\left. \begin{aligned} u_{n-1} &= 2n(Su_n - \tau v_n) - u_{n+1} \\ v_{n-1} &= 2n(\tau u_n + Sv_n) - v_{n+1} \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

$$S = \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad \tau = -\frac{y}{x^2 + y^2}$$

を用いる。これによれば実数計算だけで複素変数のベッセル関数を求めることが出来る。現在の多くの計算機は主として実数計算に注意を払い、複素計算はやや閑却視されている向きがあるために、このような工夫だけで $\sim 40\%$ 余りも計算速度を上げることが出来る。(HITAC-M200Hの場合)

才二種の変形ベッセル関数 $K_n(z)$ の計算には積分表示 (21), (22) および (28), (29) に対して、実数の場合と同様の数値積分公式を用いることが出来る。

$Y_n(z)$ の計算には関係式

$$Y_n(z) = iJ_n(z) - \frac{2}{\pi} e^{-\frac{\pi}{2}i} K_n(-iz) \quad (32)$$

により $J_n(z)$ と $K_n(-iz)$ を用いて計算できる。

参考文献

- 1) 殿塚・吹田・鷹木: Bessel 関数ル-4 ンの検定: 東大大型計算機センターニュース, Vol. 13. No. 7 (1981), 51-65
- 2) 高橋・森: 数値積分による特殊関数の計算: 京大数理解析研究所講究録, 149 (1972), 130-145
- 3) 森 正 武: 数値解析と超函数論: 京大数理解析研究所講究録, 145 (1972), 1-11
- 4) 牧之内三郎: 漸化式を用いる $J_\nu(x)$ の近似計算: 情報処理 6 (1965), 194-201 : 漸化式を用いる $I_\nu(x)$ の近似計算: 情報処理 6 (1965), 247-252
- 5) 高橋・森: 変数変換によつて得られる積分公式 (2): 京大数理解析研究所講究録, 172 (1973), 88-104
- 6) D. B. Hunter: The Calculation of Certain Bessel Functions: Math. Comp. 18 (1964), 123-128
- 7) H. Takahasi and M. Mori: Error Estimation in the Numerical Integration of Analytic Functions: Report of the Computer Centre University of Tokyo, Vol. 3, Nos. 1-2 (1970), 41-108
- 8) 吉田・浅野・梅野・三木: 漸化式を用いる複素変数のベッセル関数 $I_n(z)$ の数値計算: 情報処理 14 (1973), 23-29