

Miller の後退漸化式法再考

東大工学部 杉原 正顕 (Masaaki SUGIHARA)
京大数理研 室田 一雄 (Kazuo MUROTA)

1. はじめに

漸化式の最小解 (漸化式を満足する数列のうち, $n \rightarrow \infty$ での増加のしかたが最も小さいもの) を求める算法として, Miller の後退漸化式法がよく知られている. しかし, その算法を見て, 「この算法は何なのか?」, 「どうしてこのような算法を思いつくのか?」といった疑問をもったのは著者等だけではないであろう. 本稿では, Bessel 関数を最小解にもつ 3 項漸化式

$$J_{n+1}(x) - \frac{2n}{x}J_n(x) + J_{n-1}(x) = 0 \tag{1.1}$$

を例にとって, この疑問に答え, Miller の後退漸化式法は自然に思いつく素直な算法であることを示す. なお, 漸化式 (1.1) を用いて Bessel 関数 (最小解) の値を求める Miller の後退漸化式法の算法としてはいろいろな変種が知られているが [6], ここでは $J_0(x)$ の値を用いる最も簡単なつぎの算法について考えることにする.

Miller の後退漸化式法

$J_1(x), J_2(x), \dots, J_M(x)$ の近似値を求めたいとき, $N (\geq M)$ を十分大きな整数として, 後退漸化式

$$\begin{aligned} K_{N+1} &:= 0, \quad K_N := \varepsilon_M (= \text{マシンエプシロン})^*; \\ K_{n-1} &:= \frac{2n}{x}K_n - K_{n+1} \quad (n = N, N-1, \dots, 1) \end{aligned} \tag{1.2}$$

により $K_n (n = N-1, N-2, \dots, 0)$ を計算し,

$$J_n := \frac{J_0}{K_0}K_n \quad (n = 1, 2, \dots, M) \tag{1.3}$$

とする.

*注意: K_N の値は $\varepsilon_M (= \text{マシンエプシロン})$ である必要はなく, 0 以外の値なら何でもよい. K_n は一般に $n \rightarrow 0$ とともに非常に速く絶対値が大きくなるので, 普通オーバーフローを避けるために $K_N := \varepsilon_M$ とする. ¹

本稿では, まず, $J_0(x), J_1(x)$ の値から 3 項漸化式 (1.1) を前進型で用いて $J_n(x)$ を計算する算法 (この算法を前進漸化式法と呼ぶことにする)

前進漸化式法

$$\begin{aligned} J_0 &:= J_0(x), \quad J_1 := J_1(x); \\ J_{n+1} &:= \frac{2n}{x}J_n - J_{n-1} \quad (n = 1, 2, \dots) \end{aligned} \tag{1.4}$$

¹何故 Miller の後退漸化式法にマシンエプシロンといった不思議な数が出てくるのかに関して, このような注意を記していない著書が多く, Miller の後退漸化式法を不用意に不可解なものとしている.

について研究する. この算法は不安定な算法の典型例であり, この算法について研究しても実用的意味がないためかほとんどその研究がなされていないのが現状である. しかし, 本稿では, 敢えてその不安定性を正面から捕らえ, 前進漸化式法について研究する. その結果, 前進漸化式法の不安定性は, 見方を変えるとある種の安定性に対応することが分かる. そして, その知見をもとにすれば自然に後退漸化式法に辿り着くことができることが分かる.

本稿の構成は次の通りである. まず, つぎの §2 において, 前進漸化式法の不安定性について, 実験, 理論の両面から詳細に研究する. 先にも述べたように, 不安定性はある種の安定性と解釈できることが判明する. そして, §3 において, §2 で得られた結果をもとに後退漸化式法を導く. 一見不可解に見える Miller の後退漸化式法は実は非常に素直な算法であることが分かる. 最後の §4 はまとめである.

2. 前進漸化式法

2.1 前進漸化式法の不安定性

$x = 0.52359879$ とし, $J_0(x), J_1(x)$ の真値 $0.9326265674\dots, 0.2529295727\dots$ を用いて前進漸化式法 (1.4) で $J_n(x)$ ($2 \leq n \leq 10$) を計算した結果を表 1 に示す (参考のために Miller の後退漸化式法によって得られた $J_n(x)$ ($1 \leq n \leq 10$) の値も記しておく). n が大きくなるにしたがって前進漸化式法の計算値 \tilde{J}_n が全く無意味な値となっていること (=不安定性) がみてとれる.

表 1: 漸化式による Bessel 関数値の計算 ($N = 10$)

n	$J_n(0.52359879)$		
	前進漸化式法 J_n	後退漸化式法	真値
0	9.3262654 E -01 (既知)	9.3262654 E -01 (既知)	9.326265674... E -01
1	2.5292956 E -01 (既知)	2.5292956 E -01	2.529295727... E -01
2	3.3493232 E -02	3.3493205 E -02	3.349320805... E -02
3	2.9398739 E -03	2.9396817 E -03	2.939681959... E -03
4	1.9524106 E -04	1.9306485 E -04	1.930648801... E -04
5	4.3189907 E -05	1.0132040 E -05	1.013203961... E -05
6	6.2962532 E -04	4.4281712 E -07	4.428171509... E -07
7	1.4386759 E -02	1.6581635 E -08	1.658163695... E -08
8	3.8404399 E -01	5.4315024 E -10	5.431502504... E -10
9	1.1721134 E +01	1.5811643 E -11	1.581164954... E -11
10	4.025588 E +02	4.1394788 E -13	4.142062469... E -13

(単精度計算 (2 進 24 桁 0 捨 1 入) による)

2.2 前進漸化式法の不安定性解析

2.2.1 よくある不安定性に対する説明

§2.1 に示した前進漸化式法の不安定性の説明としてよくあるのは, 初期値 \tilde{J}_0, \tilde{J}_1 に含まれる丸め誤差が拡大して $J_n(x)$ の計算値 \tilde{J}_n が全く無意味な値になってしまうというものである [1], [2], [4].

森正武著『数値解析法』[2] にそのような説明があるのでここに引用する.²

²本稿の記号に合わせるために記号を適当に変更してある.

…しかし、実際には初期値に混入した誤差が増幅されるためにそれが可能でないことが、次のようにして示される。

計算値の出発値 \tilde{J}_0 と \tilde{J}_1 は、実際の計算では厳密に正確な値を与えることはできず、必ず誤差を含む。つまり、出発値には、単に $J_0(x)$ および $J_1(x)$ に比例する成分だけでなく、誤差としては $Y_0(x)$ と $Y_1(x)$ に比例する成分も含むと考えるのが妥当である³。したがって、実際になされる演算は次のように書くことができる。

$$\begin{cases} \tilde{J}_0 = c_1 J_0(x) + d_1 Y_0(x) \\ \tilde{J}_1 = c_1 J_1(x) + d_1 Y_1(x) \end{cases} \quad (2.195)$$

$$\tilde{J}_{n+1} = \frac{2n}{x} \tilde{J}_n - \tilde{J}_{n-1}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.196)$$

c_1 はほぼ 1 である。 d_1 は c_1 に比較すれば小さな数であるが、0 ではない。簡単のために、漸化式の計算の過程で誤差が入らないと仮定する。Neumann 関数 $Y_n(x)$ も $J_n(x)$ と同じ形の漸化式をみたすので、(2.196) による計算において

$$\tilde{J}_n = c_1 J_n(x) + d_1 Y_n(x) \quad (2.197)$$

が成り立つ。この式から

$$\frac{\tilde{J}_n}{c_1} - J_n(x) = \frac{d_1}{c_1} Y_n(x) \quad (2.198)$$

が導かれるが、右辺は近似値 \tilde{J}_n/c_1 の誤差を表している。ところが、Neumann 関数 $Y_n(x)$ の漸近振舞い

$$Y_n(x) \sim -\frac{(n-1)!}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^{-n} \quad (2.199)$$

からわかるように、右辺の絶対値は、たとえ d_1/c_1 が小さくても、ある番号を過ぎたところから n の増大と共に急速に増大する。したがって、大きな n に対する $J_n(x)$ の数値計算にはこの手順は使用することはできない。

(森正武著『数値解析法』, 49 ページより)

表 2: 初期値の丸め誤差のみを考慮した説明の正否

n	$J_n(0.52359879)$	
	前進漸化式法の計算値 \tilde{J}_n	(2.197) の右辺の値
0	9.3262654 E -01(既知)	9.3262654 E -01(既知)
1	2.5292956 E -01(既知)	2.5292956 E -01(既知)
2	3.3493232 E -02	3.3493214 E -02
3	2.9398739 E -03	2.9397231 E -03
4	1.9524106 E -04	1.9352929 E -04
5	4.3189907 E -05	1.7186801 E -05
6	6.2962532 E -04	1.3471442 E -04
7	1.4386759 E -02	3.0702403 E -03
8	3.8404399 E -01	8.1957465 E -02
9	1.1721134 E +01	2.501365 E +00
10	4.025588 E +02	8.590865 E +01

いま、上記の説明が前進漸化式法の不安定性を実際に説明しているかどうかを確かめる。まず説明にある c_1, d_1 を倍精度計算で求めるとつぎのようになる。

$$c_1 = 0.999999975947453934, \quad d_1 = -1.11635208872772298 \times 10^{-9} \quad (2.1)$$

³ $Y_n(x)$ は Neumann 関数を表す。Neumann 関数は 3 項漸化式 (1.1) を満たす解で、Bessel 関数とは独立なものである。

この値を用いて、等式 (2.197) が成立しているかどうかをみる。結果は表 2 のようになり、等式が成り立っていないことがわかる。したがって、先の説明は現実の現象を説明していないことになる。説明のなかに「簡単のために、漸化式の計算の過程で誤差が入らないと仮定する」とあるが、この仮定が現実を反映した仮定でないためにこのようなことが起きたと考えられる。計算の過程での誤差が問題となるわけである。⁴

2.2.2 探索的データ解析

前進漸化式法の不安定性を説明するためには、初期値の丸め誤差のみならず、計算の過程で発生する誤差も考慮に入れた理論をつくらなければならないことが判明した。ここでは、理論構築のためのヒントを得るために、実際に得られた前進漸化式法の計算値 \tilde{J}_n を詳細に解析する。

まず、前進漸化式法による計算値 \tilde{J}_n の漸近的振舞いを調べてみる。§2.2.1 に引用した初期値の丸め誤差のみを考慮した場合には

$$\begin{aligned}\tilde{J}_n &\sim d_1 Y_n(x) \\ &= -1.1163520 \cdots \times 10^{-9} Y_n(x)\end{aligned}\quad (2.2)$$

となるが ((2.197), (2.1) 参照), 計算過程で発生する誤差がある場合でも同様に $\tilde{J}_n \sim c Y_n(x)$ となることを期待して、 $\tilde{J}_n/Y_n(x)$ を計算してみる。結果は表 3 の第 1 列のようになり

$$\tilde{J}_n \sim -5.2311074 \cdots \times 10^{-9} Y_n(x)\quad (2.3)$$

が成立していることがわかる。

表 3: 前進漸化式法の計算値 \tilde{J}_n の解析

n	\tilde{J}_n/Y_n	c_n	d_n	$(c_n J_n)/(d_n Y_n)$
0	-2.272097			
1	-1.7874778 E -01	1.0000000 E -00	-1.1163521 E -09	1.6011776 E +08
2	-6.7060726 E -03	9.9999994 E -01	-5.1009654 E -09	1.3146665 E +06
3	-8.0018609 E -05	9.9999994 E -01	-5.2279245 E -09	1.5305000 E +04
4	-4.6931427 E -07	9.9999988 E -01	-5.2310985 E -09	8.871620 E +01
5	-6.8344104 E -09	9.9999988 E -01	-5.2311074 E -09	3.0649399 E -01
6	-5.2347886 E -09	9.9999994 E -01	-5.2311074 E -09	7.0379757 E -04
7	-5.2311134 E -09	9.9995207 E -01	-5.2311074 E -09	1.1525084 E -06
8	-5.2311074 E -09	1.0024166 E +00	-5.2311074 E -09	1.4177094 E -09
9	-5.2311074 E -09	-2.2622120 E +01*	-5.2311074 E -09	-3.0516931 E -11*
10	-5.2311080 E -09	-2.5654360 E +04*	-5.2311080 E -09	-2.6396626 E -11*

(倍精度計算 (2 進 53 桁 0 捨 1 入); * は正しい値が得られていないことを示す。)

では、漸近式 (2.3) に現れる係数「 $-5.2311074 \cdots \times 10^{-9}$ 」は何なのであろうか? 先の初期値の丸め誤差のみを考慮した場合、漸近式 (2.2) に現れる係数「 $-1.1163520 \cdots \times 10^{-9}$ 」は \tilde{J}_0, \tilde{J}_1 を 3 項漸化式の独立な解系 $\{J_k(x)\}_k, \{Y_k(x)\}_k$ で展開したときの $\{Y_k(x)\}_k$ の係数であった ((2.195) 参照)。ここでも、その真似をして、 $\tilde{J}_{n-1}, \tilde{J}_n$ を $\{J_k(x)\}_k, \{Y_k(x)\}_k$ で展開したときの

⁴ もっとも「初期値に入った非常に小さな丸め誤差が拡大して悪さをするような計算過程において計算途中の計算誤差が悪さをしないわけがない。」と考えるのが自然であろう。

係数 c_n, d_n , つまり, 方程式

$$\begin{cases} \tilde{J}_{n-1} = c_n J_{n-1}(x) + d_n Y_{n-1}(x) \\ \tilde{J}_n = c_n J_n(x) + d_n Y_n(x) \end{cases}$$

から決まる c_n, d_n を調べてみる. 結果は表 3 の第 2, 3 列のようになり, $n \geq 5$ に対して c_n, d_n の値は安定しており,

$$c_n \approx 1, \quad d_n \approx -5.2311074 \times 10^{-9} \quad (2.4)$$

となっていることがわかる. この結果からすれば漸近式 (2.3) の成立は明らかである. また, $n \geq 5$ に対して c_n, d_n の値は安定していることから,

$$\begin{aligned} J_n^{(5)} &= c_5 J_n + d_5 Y_n \\ &= 0.999999876525611286 J_n - 5.23110746093993439 \times 10^{-9} Y_n \\ &(\quad = \tilde{J}_4, \tilde{J}_5 \text{ を初期値とし厳密に漸化式を満足する数列} \quad) \end{aligned} \quad (2.5)$$

とするとき,

$$\tilde{J}_n \approx J_n^{(5)} \quad (n \geq 6) \quad (2.6)$$

となっていることが期待される. 実際に $J_n^{(5)}$ の値を計算し, \tilde{J}_n と比較した結果を表 4 に示す. 期待通り (2.6) が成立していることがわかる.

表 4: 計算値 \tilde{J}_n およびその推定値 $J_n^{(5)}$ ($N = 10$)

n	$J_n(0.52359879)$	
	計算値 \tilde{J}_n	推定値 $J_n^{(5)}$ ((2.5) 参照)
0	9.3262654 E -01(既知)	
1	2.5292956 E -01(既知)	
2	3.3493232 E -02	
3	2.9398739 E -03	
4	1.9524106 E -04	1.9524106 E -04(既知)
5	4.3189907 E -05	4.3189907 E -05(既知)
6	6.2962532 E -04	6.2962532 E -04
7	1.4386759 E -02	1.4386759 E -02
8	3.8404399 E -01	3.8404399 E -01
9	1.1721134 E +01	1.1721132 E +01
10	4.025588 E +02	4.025588 E +02

では c_n, d_n の値が安定し始める $n = 5$ の「5」は何なのであろうか? 各 n に対して $|c_n J_n(x)| / |d_n Y_n(x)|$ を計算してみた結果を表 3 の第 4 列に記す. この結果から, 「5」は $\tilde{J}_n = c_n J_n(x) + d_n Y_n(x)$ において $d_n Y_n(x)$ が主要項となる, つまり, $|d_n Y_n(x)| \gg |c_n J_n(x)|$ となる n であることがわかる.

以上, 数値実験のデータ解析から得られた結果をまとめると

—数値実験からの帰結—

$\tilde{J}_n, c_n, d_n, J_n^{(m)}$ はそれぞれつぎのように定義された数であるとする.

- \tilde{J}_n : 前進漸化式によって丸め誤差を伴う演算を用いて計算された値
- c_n, d_n : $\tilde{J}_{n-1}, \tilde{J}_n$ を $\{J_k(x)\}_k, \{Y_k(x)\}_k$ で展開したときの係数,

つまり, つぎの方程式から決まる定数

$$\begin{cases} \tilde{J}_{n-1} &= c_n J_{n-1}(x) + d_n Y_{n-1}(x) \\ \tilde{J}_n &= c_n J_n(x) + d_n Y_n(x) \end{cases}$$

• $J_n^{(m)} = c_m J_n(x) + d_m Y_n(x)$

(= $\tilde{J}_{m-1}, \tilde{J}_m$ を初期値とし前進漸化式を厳密に満たす数列)

このとき, n_0 を $|d_{n_0} Y_{n_0}(x)| \gg |c_{n_0} J_{n_0}(x)|$ となる自然数とすると

$$\tilde{J}_n \approx J_n^{(n_0)} \quad (n \geq n_0 + 1)$$

が成り立つ.

2.2.3 前進漸化式法の不安定性に関する理論

ここでは, §2.2.2 で得られた数値実験からの帰結を理論的に証明する.

まず, 前進漸化式法において \tilde{J}_n を計算する過程で発生する誤差を δ_n とする:

$$\tilde{J}_n = \frac{2(n-1)}{x} \tilde{J}_{n-1} - \tilde{J}_{n-2} + \delta_n \quad (n = 2, 3, \dots).$$

そして, その大きさに関して

$$|\delta_n| \leq c \varepsilon_M |\tilde{J}_n| \quad (n = 2, 3, \dots) \quad (2.7)$$

(ε_M はマシンエプシロン, c は定数) を仮定する. このとき次の定理が証明される.

定理 1 いま $n \geq n_0 + 1$ に対して

$$\left| \frac{c_{n_0} J_n(x)}{d_{n_0} Y_n(x)} \right| \leq \gamma (< 1) \quad (2.8)$$

が成り立っているとす. このとき $n \geq n_0 + 1$ に対して

$$\tilde{J}_n = J_n^{(n_0)} (1 + R_n), \quad |R_n| \leq \frac{A((1 - cB\varepsilon_M)^{-(n-n_0)} - 1)}{1 - \gamma} \quad (2.9)$$

が成り立つ. ここで

$$A = \max_{m \leq n} |\alpha_n^m|, \quad B = \max\{A, 2\}$$

である.⁵ ただし

$$\alpha_n^m = \frac{1 - \frac{Y_{m-1} J_n}{J_{m-1} Y_n}}{1 - \frac{Y_{m-1} J_m}{J_{m-1} Y_m}}$$

(証明) \tilde{J}_n ($n \geq n_0 + 1$) は, $J_n^{(n_0)}$, および, 計算過程での発生誤差 δ_n ($n \geq n_0 + 1$) を用いて

$$\tilde{J}_n = J_n^{(n_0)} + \sum_{m=n_0+1}^n a_n^m \delta_m \quad (n \geq n_0 + 1) \quad (2.10)$$

⁵ A の値は有界である (証明は [5] を参照せよ).

と表わされる。ここで

$$a_{m-1}^m = 0, \quad a_m^m = 1, \quad a_{n+1}^m = \frac{2n}{x} a_n^m - a_{n-1}^m \quad (n = m, m+1, \dots)$$

である。

いま a_n^m は

$$a_n^m = \frac{\begin{vmatrix} J_n & J_{m-1} \\ Y_n & Y_{m-1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} J_m & J_{m-1} \\ Y_m & Y_{m-1} \end{vmatrix}} = \frac{Y_n}{Y_m} \frac{1 - \frac{Y_{m-1} J_n}{J_{m-1} Y_n}}{1 - \frac{Y_{m-1} J_m}{J_{m-1} Y_m}} = \frac{Y_n}{Y_m} \alpha_n^m$$

と表現できることに注意して, (2.10) を発生誤差に関する仮定 (2.7) に代入すると

$$\begin{aligned} |\delta_n| &\leq c\epsilon_M (|J_n^{(n_0)}| + \sum_{m=n_0+1}^n \left| \frac{Y_n}{Y_m} \right| |\alpha_n^m| |\delta_m|) \\ &\leq c\epsilon_M ((1+\gamma)|d_{n_0} Y_n| + A \sum_{m=n_0+1}^n \left| \frac{Y_n}{Y_m} \right| |\delta_m|) \\ &\leq cB\epsilon_M (|d_{n_0} Y_n| + \sum_{m=n_0+1}^n \left| \frac{Y_n}{Y_m} \right| |\delta_m|) \end{aligned}$$

が導かれる。ただし, 2番目の不等式でつぎの評価式を用いる。

$$|J_n^{(n_0)}| \left(= |c_{n_0} J_n(x) + d_{n_0} Y_n(x)| = \left| 1 + \frac{c_{n_0} J_n(x)}{d_{n_0} Y_n(x)} \right| |d_{n_0} Y_n| \right) \leq (1+\gamma) |d_{n_0} Y_n|.$$

いま導かれた不等式の両辺を $|d_{n_0} Y_n|$ で割って

$$\frac{|\delta_n|}{|d_{n_0} Y_n|} \leq cB\epsilon_M \left(1 + \sum_{m=n_0+1}^n \frac{|\delta_m|}{|d_{n_0} Y_m|} \right) \quad (n \geq n_0 + 1)$$

が得られるが, この不等式より数学的帰納法 ($n = n_0 + 1, n_0 + 2, \dots$ とする) によって

$$\frac{|\delta_n|}{|d_{n_0} Y_n|} \leq \frac{cB\epsilon_M}{(1 - cB\epsilon_M)^{n-n_0}} \quad (n \geq n_0 + 1)$$

が示される (ただし, $|cB\epsilon_M| < 1$ を仮定している)。したがって, 結局, 発生誤差 δ_n の大きさはつぎのように評価されることになる。

$$|\delta_n| \leq |d_{n_0} Y_n| \frac{cB\epsilon_M}{(1 - cB\epsilon_M)^{n-n_0}} \quad (n \geq n_0 + 1). \quad (2.11)$$

いま, (2.10) より \tilde{J}_n は

$$\tilde{J}_n = J_n^{(n_0)} (1 + R_n), \quad R_n = \sum_{m=n_0+1}^n a_n^m \delta_m / J_n^{(n_0)}$$

と表現できるが, R_n を (2.11) を用いて評価すると

$$\begin{aligned} |R_n| &\leq \sum_{m=n_0+1}^n |a_n^m| |\delta_m| / |J_n^{(n_0)}| \\ &\leq \sum_{m=n_0+1}^n A \left| \frac{Y_n}{Y_m} \right| |d_{n_0} Y_m| \frac{cB\epsilon_M}{(1 - cB\epsilon_M)^{m-n_0}} / |J_n^{(n_0)}| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= A|d_{n_0}Y_n|((1-cB\varepsilon_M)^{-(n-n_0)}-1)/|J_n^{(n_0)}| \\
&\leq \frac{A((1-cB\varepsilon_M)^{-(n-n_0)}-1)}{1-\left|\frac{c_{n_0}J_n(x)}{d_{n_0}Y_n(x)}\right|} \\
&\leq \frac{A((1-cB\varepsilon_M)^{-(n-n_0)}-1)}{1-\gamma}
\end{aligned}$$

となり、示すべき結果を得る。 ■

注意: 証明において、初期値 \tilde{J}_0, \tilde{J}_1 が $J_0(x), J_1(x)$ の近似値であることはどこにも使用していない。従って、この定理は初期値 \tilde{J}_0, \tilde{J}_1 が任意の値である前進漸化式法について成り立つ。以下、前進漸化式法において初期値 \tilde{J}_0, \tilde{J}_1 は任意の値を許すものとする。

定理は、仮定 (2.8) が成り立つとき、 $n-n_0$ があまり大きくなければ、 $(1-cB\varepsilon_M)^{-(n-n_0)}-1 \approx cB(n-n_0)\varepsilon_M$ となり、

$$\tilde{J}_n \approx J_n^{(n_0)}$$

が成り立つことを示しており、先に得られた数値実験からの帰結を理論的に証明したものと言える。

また、仮定 (2.8) は、 $J_n(x), Y_n(x)$ が漸近的に

$$J_n(x) \sim \frac{1}{n!} \left(\frac{x}{2}\right)^n, \quad Y_n(x) \sim -\frac{(n-1)!}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^{-n} \quad (n \rightarrow \infty) \quad (2.12)$$

と振る舞うことから、初期値 \tilde{J}_0, \tilde{J}_1 がどのような値であっても ($\tilde{J}_0 = 0, \tilde{J}_1 = 0$ は除く)、十分大きな n_0 に対して満たされることがわかる。したがって、前進漸化式法においては、初期値 \tilde{J}_0, \tilde{J}_1 がどのような値であっても ($\tilde{J}_0 = 0, \tilde{J}_1 = 0$ は除く)、十分大きな n に対して (ただし $n-n_0$ があまり大きくないとする)

$$\begin{aligned}
\tilde{J}_n &\approx J_n^{(n_0)} \\
&\sim d_{n_0}Y_n(x)
\end{aligned} \quad (2.13)$$

となることがわかる。これは、ある意味で前進漸化式法の“安定性”を表していると言える。

3. 前進漸化式法から後退漸化式法へ

3.1 後退漸化式法の直観的導出

前進漸化式法の解析から、前進漸化式法が“安定”であること、すなわち、初期値 \tilde{J}_0, \tilde{J}_1 がどのような値であっても ($\tilde{J}_0 = 0, \tilde{J}_1 = 0$ は除く)、十分大きな n に対して

$$\tilde{J}_n \propto Y_n(x) \quad (3.1)$$

となることが分かった。ここで、 $Y_n(x)$ は前進漸化式 (1.4) の“最大解” (漸化式を満足する数列のうち、 $n \rightarrow \infty$ での増加のしかたが最も大きいもの)⁶であることに注意すれば、この前進漸化式の“安定性”から、一般の3項漸化式についてその“安定性”、つまり、初期値がどのような値

⁶最大解は、定数倍を除いて一意である最小解と異なり、一意性がないので、数学的に明確な概念ではないが、感覚的には理解できる概念であろう。

であっても、その計算値は十分大きな n に対して 3 項漸化式の“最大解”に比例するであろうことが予想される。このように予想してしまえば、後退漸化式法の核心部分は極々素直に導かれる。実際、前進漸化式 (1.4) を後退漸化式 (1.2) に書き換えれば、後退漸化式の“最大解”は前進漸化式の最小解 $J_n(x)$ となるので、後退漸化式においては、初期値 $\widetilde{K}_{N+1}, \widetilde{K}_N$ がどのような値であっても ($\widetilde{K}_{N+1} = 0, \widetilde{K}_N = 0$ は除く)、 N が十分大きければ、

$$\widetilde{K}_n \propto J_n(x) \quad (n \ll N) \quad (3.2)$$

となることが予想される。(3.2) の比例定数は、 $J_0(x)$ の真値がわかっているならば、 $\widetilde{K}_0/J_0(x)$ で求めることができるから、 $J_n(x)$ ($n \ll N$) の値は $(\widetilde{K}_0/J_0(x))^{-1} \widetilde{K}_n$ つまり (1.3) によって求められることになる。

注意: 前進漸化式の反復、および、後退漸化式の反復を行列形で書くと

$$\begin{pmatrix} J_{n+1} \\ J_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2n/x & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_n \\ J_{n-1} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} K_n \\ K_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2n/x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{n+1} \\ K_n \end{pmatrix}$$

となるが

$$\begin{pmatrix} 2n/x & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2n/x \end{pmatrix}$$

であるから、前進漸化式は“べき乗法的算法”であり、これに対して、後退漸化式は“逆反復法的算法”であるとみることができる。このような見方をすれば、前進漸化式によって“最大解”が得られ、後退漸化式によって最小解が得られるであろうことは直観的には納得できる。

3.2 直観的導出の理論的正当化 (後退漸化式法の理論誤差解析)

§3.1 において、3 項漸化式の“最大解”といった概念を用いて、“漸近式” (3.2) が成り立つことを予想し、後退漸化式法を直観的に導出した。ここでは、理論的に厳密な形で“漸近式” (3.2) が成り立つことを示し、先の後退漸化式法の直観的導出が理論的にも正当化されることを示す。

そのために、前進漸化式に対する定理 1 に対応する結果が後退漸化式に対しても成り立つことを示す。

まず、 $\widetilde{K}_n, c'_n, d'_n, K_n^{(m)}$ はそれぞれつぎのように定義された数であるとする。

• \widetilde{K}_n : 後退漸化式 (初期値 $\widetilde{K}_{N+1}, \widetilde{K}_N$ は任意とする) によって丸め誤差を伴う演算を用いて計算された値

• c'_n, d'_n : $\widetilde{K}_{n+1}, \widetilde{K}_n$ を $\{Y_k(x)/Y_N(x)\}_k, \{J_k(x)/J_N(x)\}_k$ で展開したときの係数、つまり、つぎの方程式から決まる定数

$$\begin{cases} \widetilde{K}_{n+1} &= c'_n(Y_{n+1}(x)/Y_N(x)) + d'_n(J_{n+1}(x)/J_N(x)) \\ \widetilde{K}_n &= c'_n(Y_n(x)/Y_N(x)) + d'_n(J_n(x)/J_N(x)) \end{cases}$$

• $K_n^{(m)} = c'_m(Y_n(x)/Y_N(x)) + d'_m(J_n(x)/J_N(x))$

(= $\widetilde{K}_{m+1}, \widetilde{K}_m$ を初期値とし後退漸化式を厳密に満たす数列)

また、後退漸化式において \widetilde{K}_n を計算する過程で発生する誤差を δ'_n とする:

$$\widetilde{K}_n = \frac{2(n+1)}{x} \widetilde{K}_{n+1} - \widetilde{K}_{n+2} + \delta'_n \quad (n = N-1, N-2, \dots, 0).$$

そして、その大きさに関して

$$|\delta'_n| \leq c' \varepsilon_M |\widetilde{K}_n|$$

(ε_M はマシンエプシロン, c' は定数) を仮定する. このとき次の定理が成り立つ (証明は定理 1 と同様にできるので省略する).

定理 2 いま, $n \leq n_0 - 1$ に対して

$$\left| \frac{c'_{n_0}(Y_n(x)/Y_N(x))}{d'_{n_0}(J_n(x)/J_N(x))} \right| \leq \gamma' (< 1) \quad (3.3)$$

が成り立っているとする. このとき $n \leq n_0 - 1$ に対して

$$\widetilde{K}_n = K_n^{(n_0)}(1 + R'_n), \quad |R'_n| \leq \frac{A'((1 - c'B'\varepsilon_M)^{n-n_0} - 1)}{1 - \gamma'} \quad (3.4)$$

が成り立つ. ここで

$$A' = \max_{n \leq m} |\alpha'^m_n|, \quad B' = \max\{A', 2\}$$

である.⁷ ただし

$$\alpha'^m_n = \frac{1 - \frac{J_{m+1}Y_n}{Y_{m+1}J_n}}{1 - \frac{J_{m+1}Y_m}{Y_{m+1}J_m}}$$

いま, $J_n(x), Y_n(x)$ の漸近的振舞い (2.12) より, 定理 2 の仮定 (3.3) は, 初期値 $\widetilde{K}_{N+1}, \widetilde{K}_N$ がどのような値であっても ($\widetilde{K}_{N+1} = 0, \widetilde{K}_N = 0$ は除く), N が十分大きく, $n_0 \ll N$ ならば, 満たされることがわかる. 従って, 後退漸化式においては, 初期値 $\widetilde{K}_{N+1}, \widetilde{K}_N$ がどのような値であっても ($\widetilde{K}_{N+1} = 0, \widetilde{K}_N = 0$ は除く), N が十分大きければ,

$$\begin{aligned} \widetilde{K}_n &\approx K_n^{(n_0)} \\ &\sim d'_{n_0} J_n(x)/J_N(x) \quad (n \ll N) \end{aligned} \quad (3.5)$$

となることがわかる. これは“漸近式” (3.2) が理論的に厳密な意味で成り立つこと示しており, これによって, 先の後退漸化式法の直観的導出が理論的にも正当化されたことになる.

3.3 初期値について

これまで後退漸化式法の初期値について議論してこなかったが, 定理 2 を援用することによって初期値の良し悪しを議論できるので, ここでは初期値について考えることにする.

もちろん, 最良の初期値は

$$K_{N+1} = J_{N+1}, \quad K_N = J_N$$

であるが, しかし, J_{N+1}, J_N の値がわかっているといった状況は想定しにくい. そこで, 次善の策として, N が大きいとき

$$J_{N+1}(x) \approx 0, \quad J_N(x) \approx 0, \quad |J_{N+1}(x)| \ll |J_N(x)|$$

⁷ A' の値は有界である (証明は [5] を参照せよ).

であることから, $J_{N+1}(x)$, $J_N(x)$ の近似値として 0, $\varepsilon_M (= \text{マシンエプシロン})$ をとり,

$$K_{N+1} = 0, \quad K_N = \varepsilon_M (= \text{マシンエプシロン}) \quad (3.6)$$

とすることが考えられる.⁸ このとき, $n \ll N$ でなく, n が N に非常に近い値から

$$\widetilde{K}_n \propto J_n(x)$$

となる可能性が高いこと—つまりこの初期値が非常によいものであること—がつぎのようにしてわかる. まず, $n_0 = N$ とした定理 2 の仮定 (3.3) は

$$\left| \frac{c'_N(Y_n(x)/Y_N(x))}{d'_N(J_n(x)/J_N(x))} \right| = \left| \frac{Y_n(x)/Y_{N+1}(x)}{J_n(x)/J_{N+1}(x)} \right|$$

と書けるが, $J_n(x)$, $Y_n(x)$ の漸近評価 (2.12) からすると, この値はかなり小さな値となると思われる. 従って, $n_0 = N$ に対して定理 2 の仮定 (3.3) が満たされ,

$$\widetilde{K}_n \approx K_n^{(N)} \quad (n = N, N-1, \dots, 0)$$

となることが期待される. また,

$$K_n^{(N)} \propto J_n(x) - \frac{J_{N+1}(x)}{Y_{N+1}(x)} Y_n(x)$$

であり, 最右辺第 2 項は n の減少とともに非常に速く 0 に収束するので, 非常に速く $\widetilde{K}_n \propto J_n(x)$ となる. 従って, n が N に非常に近い値から $\widetilde{K}_n \propto J_n(x)$ となるわけである. 初期値 (3.6) は, 後退漸化式法で実際に用いられているものであるが, 以上の議論より非常によい初期値であることがわかる.

4. まとめ

本稿では, 前進漸化式法の不安定性について, 実験, 理論の両面から詳細に解析し, 前進漸化式法の示す不安定性はある種の安定性と解釈できることを証明した. そして, そこで得られた知見をもとに後退漸化式法を直観的に導き, その直観が理論的にも正当化できることを証明し, 後退漸化式法の理論的基礎を与えた. 本稿で与えた前進漸化式, 後退漸化式の解析は丸め誤差を正面から扱っている点で新しいものと思われる.⁹

参考文献

- [1] W. Gautschi: Computational aspects of three-term recurrence relations, *SIAM Review*, Vol. 9 (1967), pp. 24-82.
- [2] 森正武: 数値解析法, 朝倉現代物理学講座 7, 朝倉書店, 1984 (特に pp. 48-51).
- [3] F. W. J. Olver: Error bounds for linear recurrence relations, *Mathematics of Computations*, Vol. 50 (1988), pp. 481-499.
- [4] 新谷尚義: 数値計算 I—線形計算—, 朝倉書店, 1967 (特に pp. 15-17).
- [5] 杉原正顯, 室田一雄: 数値計算法の数理, 岩波書店, 1994 (特に pp. 20-28).
- [6] 山内二郎, 宇野利雄, 一松信 共編: 電子計算機のための数値計算法 III, 培風館, 1972 (特に第 10 章).

⁸以下の議論は K_N が 0 以外の任意の実数であっても同様に成り立つので, $K_N = \varepsilon_M$ である必要はない. p.1 の注意も参照せよ.

⁹[3] に本稿で与えた解析にかなり近いものが与えられている.