数理解析研究所講究録
990巻 1997年 92-100

合流型超幾何関数の数値計算とその応用

都田　艶子 (Tsuyako Miyakoda)
大阪大学工学部応用物理学専攻

1 はじめに

特殊関数の計算は数理物理などでよく遭遇する。Bessel関数、Gamma関数などよく出てくる関数を始めとして、それぞれの計算法は独立に発展してきた。ここで扱う合流型超幾何関数は次のKummerの方程式の1つの解として定義される。

$$zw'' + (b-z)w' - aw = 0. \tag{1}$$

次のように表される

$$U(a,b,z) = \frac{1}{\Gamma(a)}\int_0^{\infty} e^{-zt}t^{a-1}(1+t)^{b-a-1}dt \tag{2}$$

この表示は $Re(a) > 0, Re(z) > 0, b \in C$ で明らかになり立つ。a, z の他の領域には解析接続によって定義することができる。一般に，つまり一般の a と b の値に対しては $z = 0$ で特異である。

$a = 0, -1, -2, \cdots$ にたいしては $U(a,b,z)$ は Laguerre polynomials によって書かれる。

$$U(-n, \alpha+1, z) = (-1)^n n! L_n^{(\alpha)}(z) \tag{3}$$

もし $b-a-1 = n, (n = 0,1,2,\cdots)$ であるならば，それは $U(a,b,z)$ をElementary functionsに導く。(2)より

$$\begin{aligned}
U(a, a+n+1, x) &= \frac{1}{\Gamma(a)}\int_0^{\infty} e^{-xt}t^{a-1}(1+t)^n dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(a)}\sum_k \binom{n}{k}\int_0^{\infty} e^{-xt}t^{a-1}t^k dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(a)}\sum_k \binom{n}{k}\frac{1}{x^{a+k}}\Gamma(a+k)\int_0^{\infty} e^{-\zeta}(\frac{\zeta}{x})^{a+k-1}\frac{d\zeta}{x} \\
&= \sum_k \binom{n}{k}\frac{1}{x^{a+k}}\frac{\Gamma(a+k)}{\Gamma(a)}
\end{aligned}$$

一致の定理より x ー平面で一致すれば全体で一致する。ゆえに

$$U(a, a+n+1, z) = \sum_{k=0}^{n}(a)_k\binom{n}{k}z^{-a-k}$$

関数$U(a,b,z)$はKummer's equationの１つの解である。２番目の解は次の関数で示される。

$$M(a,b,z)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{(a)_n}{(b)_n}\right)\frac{z^n}{n!} \tag{4}$$

そしてこれはすべての有限なzの値に対して正則である。

2 三項漸化関係

関数$U(a,b,z)$と$M(a,b,z)$はaとbに関しては漸化式の関係を満たす。aに関しては

$$f_{a-1}+(b-2a-z)f_a+a(1+a-b)f_{a+1}=0 \tag{5}$$

これを満たすのは

$$U(a,b,z),\qquad \frac{M(a,b,z)}{\Gamma(1+a-b)} \tag{6}$$

である。bに関しては漸化式は

$$(b-a-1)f_{b-1}+(1-b-z)f_b+zf_{b+1}=0 \tag{7}$$

であり，解は

$$U(a,b,z),\qquad \frac{\Gamma(b-a)}{\Gamma(a)}M(a,b,z) \tag{8}$$

である。

これらはa,bをパラメータとする関数である。aとbの値の組み合わせによって$U(a,b,z)$は他の特殊関数を導き出す。たとえば$a=\mu+\frac{1}{2},b=2\mu+1,z=2z$とするとき

$$U(a,b,z)=\pi^{-\frac{1}{2}}e^{x}(2z)^{-\mu}K_{\mu}(z)$$

$a=-n,b=\alpha+1,z=z$のとき

$$U(a,b,z)=(-1)^n n!L_n^{\alpha}(z)$$

$a=1-\alpha,b=1-\alpha,z=z$のとき

$$U(a,b,z)=e^{z}\Gamma(\alpha,z)$$

などである。

通常それぞれの関数に応じて計算法は細かく細分されているが、三項漸化式の数値解法の立場から一般的な計算法を試みる。

3 計算法

計算法として２つの方法を試みる。

1．斉次三項漸化式にたいするアルゴリズム (Deuflhard アルゴリズム)

十分大きな n に対して式が次のように書けるとする.

$$M_n \mathbf{u}^{(n)} = \mathbf{r}^{(n)}$$

ここで行列 M_n，ベクトル $\mathbf{u}^{(n)}$,$\mathbf{r}^{(n)}$ は次の形である.

$$M_n = \begin{pmatrix} a_0 & b_0 & c_0 & & & & \\ & a_1 & b_1 & c_1 & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & & a_{n-1} & b_{n-1} \\ m_0 & m_1 & \cdot & \cdot & & & m_n \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{u}^{(n)} = (u_0^{(n)}, u_1^{(n)}, \cdots, u_n^{(n)})^T,$$
$$\mathbf{r}^{(n)} = (0, 0, \cdots, S)^T.$$

ξ_k $(k = 0, 1, \cdots, K)$ を与えられた係数としたときの次の有限和を求めることを目的とする。

$$S_K = \sum_{k=0}^{K} \xi_k u_k, (K < n).$$

この S_K の近似を

$$S_K^{(n)} = \sum_{k=0}^{K} \xi_k u_k^{(n)}, (K < n)$$

とする.

M_n は正則である. そこで M_n^T を以下のように下三角行列と上三角行列に分解する.

$$M_n^T = L_n R_n,$$

ここで

$$L_n = \begin{pmatrix} a_0 & & & & & & \\ b_0 & \cdot & & & & & \\ c_0 & \cdot & \cdot & & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdot & \cdot & & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & c_{n-2} & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix},$$

$$R_n = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & p_0 \\ & \cdot & & & & & p_1 \\ & & \cdot & & & & \cdot \\ & & & \cdot & & & \cdot \\ & & & & \cdot & & \\ & & & & & \cdot & \cdot \\ & & & & & \cdot & \cdot \\ & & & & & & p_n \end{pmatrix}$$

この $\{p_k\}$ は次のように計算できる.

$$p_k = \frac{m_k - b_{k-1}p_{k-1} - c_{k-2}p_{k-2}}{a_k},$$

$$p_{-1} = 0, p_0 = \frac{m_0}{a_0}, \qquad k = 1, 2, \cdots, n.$$

$$L_n \mathbf{e}^{(n)} = \mathbf{a}^{(n)},$$

$$R_n \mathbf{t}^{(n)} = \mathbf{e}^{(n)},$$

そして $\mathbf{t}^{(n)} = (P_0^{(n)}, P_1^{(n)}, \cdots, P_n^{(n)})^T$ とおくと

$$e_k = \frac{\xi_k - b_{k-1}e_{k-1} - c_{k-2}e_{k-2}}{a_k},$$

$$e_{-1} = 0., e_0 = \frac{\xi_0}{a_0}, k = 1, 2, \cdots, n.$$

であり、これより

$$P_n^{(n)} = \frac{e_n}{p_n}.$$

これは $S_K^{(n)}$ の値に一致する.

P_k と P_{k-1} の差 dP_k については次の関係が成り立つ.

$$dP_k = \frac{a_k e_k}{a_k p_k} - P_{k-1}^{(k-1)} = \frac{1}{a_k p_k}(\xi_k - m_k P_{k-1}^{(k-1)} + c_{k-1}p_{k-2}dP_{k-1}).$$

これに対する初期値は

$$dP_0 = 0, \quad P_0 = \frac{e_0}{p_0} = \frac{\xi_0}{m_0}$$

である.

$$\epsilon = |\frac{dP_k}{P_k^{(k)}}|.$$

を誤差評価として用いることができる。

2. 非斉次三項漸化式についてのアルゴリズム (長谷川のアルゴリズム)

次の三項漸化関係にたいし

$$a_k y_{k-1} + b_k y_k + c_k y_{k+1} = d_k, \quad k = 1, 2, \cdots,$$

$$\{a_k\}, \{b_k\}, \{c_k\}, \{d_k\}; \quad \text{実数} \qquad \text{または} \qquad \text{複素数},$$

次のような和を計算するものとする.

$$S_K = \sum_{k=0}^{K} \xi_k y_k.$$

ここで$\{y_k\}$ は条件

$$\sum_{i=0}^{\infty} m_i y_i = x^{-a} \equiv S$$

を満たす. 十分大きな n $(n > K)$ に対して, 問題を行列形式で表して次のようにする。

$$\begin{pmatrix} A^{(n)} & 0 \\ \xi^T & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{y}^{(n)} \\ S_K^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{d}^{(n)} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

ここでそれぞれの要素は

$$A^{(n)} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & & & & & & & \\ & a_2 & b_2 & c_2 & & & & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & & & & \\ & & & & & & & & & \\ & & & & a_M & b_M & c_M & & & \\ m_0 & m_1 & \cdot & \cdot & & m_M & m_{M+1} & \cdot & & m_n \\ & & & & & a_{M+1} & b_{M+1} & c_{M+1} & & \\ & & & & & & & & & \\ & & & & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{y}^{(n)} = (y_0^{(n)}, y_1^{(n)}, \cdots, y_n^{(n)})^T,$$

$$\mathbf{d}^{(n)} = (d_1, d_2, \cdots, S, 0, \cdots, 0)^T,$$

$$\xi = (\xi_0, \xi_1, \cdots, \xi_K, 0, \cdots, 0)^T.$$

である. $A^{(n)}$ を２つの部分につぎのように分解する。

$$A^{(n)} = B^{(n)} + \mathbf{e}^{(n)} \mathbf{r}^{(n)T},$$

ここで

$$\mathbf{e}^{(n)} = (e_0, e_1, \cdots, e_n)^T,$$

$$(e_k = 0 \quad (k \neq M); \quad e_M = 1)$$

$$\mathbf{r}^{(n)} = (0, \cdots, 0, m_{M+2}, \cdots, m_n)^T,$$

$$B^{(n)} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & & & & & & & & \\ & a_2 & b_2 & c_2 & & & & & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & & & & & \\ & & & & a_M & b_M & c_M & & & & \\ m_0 & m_1 & \cdot & \cdot & & m_M & m_{M+1} & & & & \\ & & & & & a_{M+1} & b_{M+1} & c_{M+1} & & & \\ & & & & & & & & & & \\ & & & & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix}.$$

そして $B^{(n)}$ を分解して次のようにする。

$$B^{(n)} = L^{(n)} R^{(n)},$$

$$L^{(n)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & & \\ & & \cdot & & & & & & \\ & & & \cdot & & & & & \\ & & & & \cdot & & & & \\ \mu_0 & \mu_1 & \cdot & & \mu_{M-1} & 1 & & & \\ & & & & & l_{M+1} & 1 & & \\ & & & & & & \cdot & \cdot & \\ & & & & & & & l_{n-1} & 1 & \\ & & & & & & & & l_n & 1 \end{pmatrix},$$

$$R^{(n)} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & & & & & & \\ & a_2 & b_2 & c_2 & & & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\ & & & & a_M & b_M & c_M & & \\ & & & & & u_M & \zeta & & \\ & & & & & & u_{M+1} & c_{M+1} & \\ & & & & & & & \cdot & \cdot \\ & & & & & & & & u_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & & & & & u_n \end{pmatrix}.$$

そして

$$L_n \mathbf{z} = \mathbf{d}^{(n)},$$

$$L_n \mathbf{h} = \mathbf{e}^{(n)},$$

$$R_n^T \mathbf{v} = \mathbf{r}^{(n)},$$

$$R_n^T \mathbf{w} = \xi$$

を順次解くことによってもとまるベクトル$\mathbf{z},\mathbf{h},\mathbf{v},\mathbf{w}$ を用いて、$\mathbf{x} = R_n\mathbf{y}^{(n)}$ とおくとき, 求める和は

$$S_K^{(n)} = \xi^T\mathbf{y}^{(n)} = \xi^T R_n^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{w}^T\mathbf{x}.$$

となる。

$\mathbf{x}$ と $S_K^{(n)}$ は次のように計算できる。

$$x_i = z_i, \quad i = 0, 1, \cdots, M-1$$

$$x_i = z_i - h_i\psi(n), \quad i = M, M+1, \cdots, n,$$

$$S_K^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} w_k x_k = \sum_{k=0}^{n} w_k z_k - \psi(n)\sum_{k=M}^{n} w_k h_k,$$

ここで

$$\psi(n) = \frac{\sum_{k=M+2}^{n} v_k z_k}{1 + \sum_{k=M+2}^{n} v_k h_k}$$

であり、Mは$A^{(n)}$に正規化条件をいれた場所に相当する行番号である。そして誤差評価に用いることのできる関係として次の式を得る。

$$S_k^{(n+1)} - S_K^{(n)} = w_{n+1}z_{n+1} - \psi(n+1)\sum_{k=M}^{n} w_k h_k + \psi(n)\sum_{k=m}^{n} w_k h^n.$$

4 数値例

例1

$a = 0.5$, $b = 1.0$ とすると

$$U(a, b, x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^x K_0(\frac{x}{2}).$$

$K_n(x)$ は修正 Bessel 関数である。 [表 1]

例2

$a = 1.0$, $b = 1.0$ とすると

$$U(a, b, x) = e^x E_1(x).$$

$E_1(x)$ は 指数積分である. [表 2]

このとき

$$u_0 = U(a, b, x),$$

であるから$\xi_0 = 1, \xi_1 = \cdots = \xi_K = 0$と設定する.

要求精度$\varepsilon = 1.0 \times 10^{-10}$としたときの計算結果とそのときの次数を示す。$M$は8としている。

5 参考文献

1. M.Abranowitz,I.A.Stegun; Handbook of Mathematical Functions, N.B.S. Applied.Math. 55,1964

2. P.Deuflhard; A Summation Technique for Minimalsolutions of Linear Homogeneous Difference Equations, Computing, 18 ,1977

3. T.Hasegawa,T.Torii; An Algorithm for Non-dominant Solutions of Linear Second-order Inhomogeneous Difference Equations,1993

4. N.M.Temme; The Numerical Computation of the confluent Hypergeometric function, Numer.Math.,41,1983

表 2: n, u_0 when the iterates terminate

x	Deuflhard method	Hasegawa's method
n	255	254
0.5	0.9229106345282770	0.9229106346185443
n	138	133
1.0	0.5963473629752007	0.5963473633133979
n	97	92
1.5	0.4482566696098103	0.4482566698781542
n	63	58
2.5	0.3035258366056196	0.3035258368054979
n	47	43
3.5	0.2308193316737722	0.2308193318195208
n	39	35
4.5	0.1866415880140926	0.1866415881215839
n	33	30
5.5	0.1568294336094458	0.1568294336769420
n	29	26
6.5	0.1353096738610594	0.1353096739252886
n	26	24
7.5	0.1190250472251179	0.1190250472554016
n	24	21
8.5	0.1062628120080425	0.1062628120600961
n	22	20
9.5	0.0959866272328522	0.0959866272578278
n	22	19
10.0	0.0915633339452413	0.0915633339783503

表 1: n, u_0 when the iterates terminate

x	Deuflhard method	Hasegawa's method
0.5	187 1.11671954169964	190 1.116719541413611
1.0	102 0.8598866403997563	101 0.8598866404805262
1.5	72 0.7292731474300193	71 0.7292731474980243
2.0	57 0.6456941486393989	55 0.6456941487594439
2.5	47 0.5860445088214320	46 0.5860445088748720
3.5	36 0.5044695995359773	35 0.5044695995788709
4.5	30 0.4498728387159404	29 0.4498728387479228
5.5	26 0.4099835491322568	25 0.4099835491581049
6.5	26 0.3791715962397347	22 0.3791715962633467
7.5	20 0.3544335627072719	20 0.3544335627072718
8.5	19 0.3339987008301853	18 0.333987008511279
9.5	17 0.3167453490483313	17 0.3167453490483313
10.0	16 0.3090673216114357	16 0.3090673215917909
10.5	16 0.3019234363861448	16 0.3019234363861448