

漸化式と連分数 — 誤差函数の積分を例として —

京大・数理解析研 一松 信

1. 発端

Bessel 函数の漸化式

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

および、(1)を $n=0, 1$ から始めて $2, 3, \dots$ と上げたときの不安定性は、きわめて有るで、多くの研究がある。この対策として、 n が大きいときから下げる方法もあるが、また(1)を

連分数

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

に書きかえて、 $n=0$ から上げてゆくことも可能で、十分に安定である。(2)で n は整数でなくてもよい、 $n=\frac{1}{2}$ とすれば $\tan x$ になる。

最近小とした機会で、誤差函数の逐次積分の計算が必要になった。便宜上、定数係数を除いて、

$$E_0(x) = e^{-x^2}, \quad E_n(x) = \int_x^\infty E_{n-1}(t) dt \quad (3)$$

とおくことにする。 $E_1(x)$ は $\operatorname{erfc} x$ に相当する。この函数列は、つぎの漸化式をみたす: ($n \geq 1$ に対して)

$$2n E_{n+1}(x) + 2x E_n(x) - E_{n-1}(x) = 0 \quad (4)$$

この漸化式で、 $n=0, 1$ から上げてゆくと、やはり不安定性を生じ、 x が大きいほど著るしい。 $x=1$ でも、 $E_1(x)$ は 10^{-10} の誤差があると、 $E_{10}(x)$ には 10^{-7} 程度の相対誤差を生ずる(後述の慢性桁落ち)。しかし(4)を連分教

$$\frac{E_n(x)}{E_{n-1}(x)} = \frac{1}{2x} + \frac{2n}{2x} + \frac{2(n+1)}{2x} + \dots \quad (5)$$

に書きかえると、十分に安定である。じつさいには、あわれを防ぐために、 $2(n+k)$ で割って

$$\frac{E_n(x)}{E_{n-1}(x)} = \frac{1}{2x} + \frac{1}{x/n} + \frac{1/2n}{x/(n+1)} + \dots + \frac{1/2(n+k-1)}{x/(n+k)} + \dots$$

の形にして計算するとよい。^{*} x が大きいと収束が早い ($x=5$ で 12 回くらいで、 $E_{10}(x)$ まで 10 桁正しく求められる)。収束域は負の実軸を除く全複素教で、 x が 0 に近づくと、収束はおそいが、 $x=1$ くらいまでは、どうにか使える ($n=10, 10$ 桁には 110 回くらいの反復がいるが)。

この種の性質は、一般的に論ずることが可能である。

^{*} 近似分教 $\frac{P_k}{Q_k}$ の値は変化しないが、 P_k, Q_k 自体が $2^k n(n+1) \dots (n+k-1)$ で割られるので、大きくなるべきが防がれる。

2. 形式的連分数の変形

一連の函数系 $f_n(x)$ があり、これが漸化式

$$\alpha_n f_{n+1}(x) + \beta_n f_n(x) + \gamma_n f_{n-1}(x) = 0 \quad (6)$$

をみたすとする。係数は定数でなくてもよいが、整函数とする。実用上ではたいてい x の 1 次式である (n に ついても、1 次または 2 次の多項式であることが多い)。 (6) は

$$\frac{f_n(x)}{f_{n-1}(x)} = \frac{-\gamma_n}{\beta_n + \alpha_n \frac{f_{n+1}(x)}{f_n(x)}}$$

と書きかえられ、これを反復すれば、形式的に連分数

$$\frac{f_n(x)}{f_{n-1}(x)} = \frac{-\gamma_n}{\beta_n} + \frac{-\alpha_n \gamma_{n+1}}{\beta_{n+1}} + \frac{-\alpha_{n+1} \gamma_{n+2}}{\beta_{n+2}} + \dots \quad (7)$$

をうる。 (1) \rightarrow (2), (4) \rightarrow (5) は、いずれも (6) \rightarrow (7) の特別な場合である。

他の例: 本質的に J_n であるが、

$$\Psi_c(x) = {}_0F_1(;c;x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k! c(c+1)\dots(c+k-1)}$$

は、漸化式

$$x\Psi_{c+2}(x) + c(c+1)(\Psi_{c+1}(x) - \Psi_c(x)) = 0$$

をみたす。ゆえに $f_n = \Psi_{c+n}$ として、 $\alpha_n = x$, $\beta_n = -\gamma_n = (c+n)(c+n-1)$ となるので、つぎの形の連分数の公式をうる:

$$\frac{\psi_c(x)}{\psi_{c-1}(x)} = \frac{(c-1)c}{(c-1)c} + \frac{c(c+1)x}{c(c+1)} + \frac{(c+1)(c+2)x}{(c+1)(c+2)} + \dots$$

$$= \frac{1}{1} + \frac{x/(c-1)}{c} + \frac{x}{c+1} + \dots + \frac{x}{c+k} + \dots$$

連分数(7)が収束するためには、もとの函数系において、 f_{n+1}/f_n が、 $n \rightarrow +\infty$ のとき収束することが必要十分である。そのときには、 $f_0(x)$ を適当に定めて、順次 $f_n(x) = f_{n-1}(x) \times (7)$ で定めた函数系は、漸化式(6)をみたす。

例. $T_n(x)$ のみたす漸化式 $f_{n+1}(x) - 2x f_n(x) + f_{n-1}(x) = 0$. $\alpha_n = 1, \gamma_n = 1, \beta_n = -2x$. 連分数

$$\frac{1}{2x} + \frac{1}{2x} + \dots \quad \text{の収束域は, } [-1, 1] \text{ を除く全複素数}$$

平面である。 $x \geq 1$ のとき、 $x = \cosh t$ とおくと、この連分数は $x - \sqrt{x^2 - 1} = \cosh t - \sinh t = e^{-t}$ に収束する。このとき、 $f_n(x) = e^{-nt}$ である。

漸化式を工夫すると、この形で、いろいろな函数の連分数展開を、かなり統一的に導くことができる。

3. 誤差解析

大ざっぱにいうと、漸化式(6)の係数が定数 α, β, γ ならば、(6)の解は $\alpha t^2 + \beta t + \gamma = 0$ の根 λ, μ として $A\lambda^n + B\mu^n$ の形で与えられる。(重根ならば $(An+B)\lambda^n$ になる)。不安定

性の生ずる典型的な状況は、 $|\mu| < 1$, $|\lambda| > 1$ で、 $A=0$ する
 かわち $B\mu^n$ が真の解であるときで、 $f_n(x)$ の値に僅かの誤差が
 入っても、 $A \neq 0$ となり、 $A\lambda^n$ の項が $B\mu^n$ にうすかつ場合
 である。しかしたとえ $|\lambda| < 1$ でも安心できない。 $|\lambda| \gg |\mu|$
 で、 $B\mu^n$ が真の解であるときには、やはりまぎれこんで来た
 $A\lambda^n$ の項が（とくに相対誤差を考えると）大きな誤差をひ
 きおこす。(4)の状況は、これに近い。 n を定数とすると、(4)
 から定まる λ, μ は $(-x \pm \sqrt{x^2 + 2n})/2n$ であり、 $|x|$ が n にく
 らげて大きいと、ほぼ $-x/n$ と $1/2x$ になる。そして $E_n(x)$
 の値は $1/2x$ 成分であるから、当然 $n < |x|$ で不安定になる。
 $n > |x| + 1$ になれば、 $|\lambda|, |\mu| \leq 1$ となるが、その n に対する正
 確な $f_n(x)$ を再生して新たに反復しても、やはり $|\lambda| > |\mu|$ の
 ために、精密な値がえにくい。

考えてみれば、小さい量 c を、他の量 a, b の差として計算
 しようとするれば、小つうの浮動小数点演算を使う限り桁落ち
 が避けられないのは当然である。 c を精密に求めたければ、
 $a \times (\text{小さい量})$ という方式にしなければならぬ。(5)のよう
 な比の連分教に変換するのは、その点からも自然である。
 これを「慢性桁落ち」といつてもよいだろう。

一方 (1) に対しても、つねに $\lambda\mu = 1$ で、有効成分 $|\mu| < 1$ 、
 無縁成分 $|\lambda| > 1$ だから、 n の大きい方から下げると、

$|\frac{1}{\mu}| > |\frac{1}{\lambda}|$ となる、不安定性が解消する。 $|\lambda/\mu|$ が大きく不安定性がひどいほど、逆行操作は安定になる。(かし(4)では、 n がきわめて大きいときは、 $\lambda = \frac{-1}{\sqrt{2n+x^2+x}} \doteq \frac{-1}{\sqrt{2n}}$
 $\mu = \frac{1}{\sqrt{2n+x^2+x}} \doteq \frac{1}{\sqrt{2n}}$ で、ともに 1 より小さく、 $n \doteq |x|$ 付近のため、逆行操作でも不安定性は除きにくい。 $n \doteq |x|$ 付近からはじめれば、かなり安定であるが、 $E_n(x)$ の値自体をうるのが容易でなく、実用にはなりにくく思われる。

4. $x=0$ の近くの $E_n(x)$ の計算

標題の議論は以上につまらぬが、 $E_n(x)$ 自体の計算で、 $x=0$ に近い所では、連分数(5)の収束がおそくて、この方式では計算が困難になるので、一言する。実用上には、たぶんづき的方式がよいと思われる:

$$1^\circ E_1(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \int_0^x e^{-t^2} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - e^{-x^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k x^{2k+1}}{(2k+1)!!} \quad (8)$$

を求める。 x が 0 にごく近ければ、直接

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{k! (2k+1)}$$

とするほうが早い。

2° 漸化式(4)で順次 $E_n(x)$ を求める。

ただしこの結果は、絶対誤差でみる限りは、十分の精度をもつが、相対誤差については、慢性的の桁落ちの波及は防げないので、ある程度桁数を多くとる。

$$e_0(x) = e^{-x^2}, \quad e_n(x) = \int_0^x e_{n-1}(t) dt$$

とすると, $e_n(x)$ は, γ 級数展開

$$\begin{aligned} e_n(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{2k+n}}{k! (2k+1)(2k+2)\cdots(2k+n)} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (2k)! x^{2k+n}}{k! (2k+n)!} \end{aligned} \quad (9)$$

をもつ. 一方 e_n と E_n とは, 次の関係式で結ばれる.

$$e_n(x) + (-1)^{n+1} E_n(x) = \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^k a_k}{(n-k)!} x^{n-k} \quad (10)$$

$$= 1 = a_n = E_n(0) = \begin{cases} 1/2^{k/2} (k-1)!! & k \text{ 偶数} \\ \sqrt{\pi}/2^{(k+1)/2} (k-1)!! & k \text{ 奇数} \end{cases}$$

で, これは $a_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$, $a_2 = \frac{1}{2}$ から漸化式 $a_n = \frac{a_{n-2}}{2(n-1)}$ で

安定に計算できる. また $n=0$ のときは (10) の右辺は 0 とする. (したがって (10) の右辺の多項式と (9) を求めて差をとれば, $E_n(x)$ が求められる. しかし n が大きいと, 差をとるときの桁落ちが生じて, x が少し大きいと, 十分な精度がでない.

10桁くらいならば, $0 \leq x < 1$ ではこの式, $x \geq 1$ では連分教によつて (さらに x が極度に大きいときは, $E_n(x)$ の直接の漸近展開で), 一応計算できたが, $x=1$ 付近の精密な値には, なお問題がある. $(x-t)^n E_0(x)$ の積分の形に直して, 有限区間の数値積分を実行することも考えたが, まだ十分に検討していない.

付記 $E_n(x)$ で x が小さいとき、漸化式で計算した値の相対誤差が、次第に増加するのは、不安定性というよりも、むしろ当然のことであった。これがませば、 $E_n(x)$ の値自体が (x が少し大きくと、ほぼ $\frac{1}{2x}$ 程度に) 減少してゆく。したがって、絶対誤差が前のままだと、相対誤差は自然にますます大きくなる。じつさいには、誤差が打ち消しあって、絶対誤差も少しづつ減少している。値が次第に小さくなる列を、加減算形式の漸化式で計算することは、本質的に精度を悪くする算法であり、不安定性以前の問題であった。

$E_n(x)$ の $x=1$ の付近の値については、整級数によるよりも、倍長演算による漸化式のほうが、まだしも実用的のようである。(4) は (1) と違って、ずっと先へゆけば安定になる性格なので、長桁計算によって、破局をおくらせ、安定になるまでもちこたえることは、意味がある。——これに対して先へゆくほど不安定性がひどくなる (1) については、破局をいくらもおくらせるだけの長桁計算は、事實上無意味であり、逆行算法が有力と思われる。

文 献

- 西村綱子, 誤差関数とその累次積分の計算について,
情報処理学会第12回大会 1971年12月2日, 予稿集 p.157-8
- C.W.Clenshaw, Chebyshev series for mathematical functions,
NPL, Math. Tables, vol. 5 (1962), p.1-28.
- A.N.Khovanskii, The application of continued fractions and their
generalizations to problems in approximation theory, (英訳)
Noordhoff, 1963.
- S.Hitotumatu, On the numerical computation of Bessel functions
through continued fraction, Comm. Math. Univ. St. Paul,
16 (1968), 89-113.