

漸化式を用いる特殊関数の数値計算法

Numerical Method for Special Functions Using Recurrence Technique

吉田 年雄

Toshio Yoshida

本稿では、漸化式を用いる特殊関数の数値計算法について述べている。漸化式を用いる方法は、Miller の方法ともいわれており、漸化式の繰り返し計算の回数を予め定めておく必要がある。通常は、その回数は倍精度（10 進 16 桁程度）で関数値が求められるような数に設定されている。したがって、それはフル精度固定型である。各種の特殊関数について、この方法の説明を行っている。それに対して、任意の要求精度で、関数値を計算することができる精度更新型の Dueflhard の方法がある。この方法は、要求精度が同じならば、前述の方法と比べて、約 2 倍の計算時間がかかる。この方法の詳細な説明も行う。

キーワード： 特殊関数の数値計算法 漸化式を用いる計算法 ベッセル関数

1 クンマー関数

合流型超幾何関数はクンマー関数とも呼ばれ、各種の特殊関数を含む重要な関数である。本稿では、以下、 n は整数、 ν , x , a , b は実数とする。

このクンマー関数の微分方程式は

$$x \frac{d^2 w}{dx^2} + (b - a) \frac{dw}{dx} - aw = 0 \quad (1)$$

でる。上式は、 $x = 0$ で確定特異点、 ∞ で不確定特異点をもつ。この微分方程式の解は、第 1 種クンマー関数

$$M(a, b, x) = 1 + \frac{ax}{b} + \frac{(a)_2 x^2}{2!(b)_2} + \cdots + \frac{(a)_n x^n}{n!(b)_n} + \cdots \quad (2)$$

と第 2 種クンマー関数

$$U(a, b, x) = \frac{\Gamma(1 - b)}{\Gamma(a - b + 1)} M(a, b, x) + \frac{\Gamma(b - 1)}{\Gamma(a)} x^{1-b} M(a - b + 1, 2 - b, x) \quad (3)$$

である。ここで、 $(a)_n$ はポツホハンマーの記号

$$(a)_n = \frac{\Gamma(a + n)}{\Gamma(a)} = a(a + 1)(a + 2) \cdots (a + n - 1), \quad (a)_0 = 1 \quad (4)$$

である.

各種の特殊関数はクンマー関数の特別な場合に相当する. 例を示すと次のようになる.

$$M\left(\nu + \frac{1}{2}, 2\nu + 1, 2ix\right) = \Gamma(1 + \nu)e^{ix}\left(\frac{1}{2}x\right)^{-\nu} J_{\nu}(x) \quad (J_{\nu}(x) : \text{第 1 種ベッセル関数}) \quad (5)$$

$$M\left(\nu + \frac{1}{2}, 2\nu + 1, 2x\right) = \Gamma(1 + \nu)e^x\left(\frac{1}{2}x\right)^{-\nu} I_{\nu}(x) \quad (I_{\nu}(x) : \text{第 1 種変形ベッセル関数}) \quad (6)$$

$$M(a, a + 1, -x) = ax^{-a}\gamma(a, x) \quad (\gamma(a, x) : \text{不完全ガンマ関数}) \quad (7)$$

$$M(a, a, x) = e^x \quad (8)$$

$$M(1, 2, 2x) = \frac{e^x}{x} \sinh x \quad (9)$$

$$M\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -x^2\right) = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2x} \operatorname{erf} x \quad (\operatorname{erf} x : \text{誤差関数}) \quad (10)$$

$$U\left(\nu + \frac{1}{2}, 2\nu + 1, 2x\right) = \pi^{-\frac{1}{2}}e^x(2x)^{-\nu}K_{\nu}(x) \quad (K_{\nu}(x) : \text{第 2 種変形ベッセル関数}) \quad (11)$$

$$U\left(\nu + \frac{1}{2}, 2\nu + 1, -2ix\right) = \frac{1}{2}\pi^{\frac{1}{2}}e^{i[\pi(\nu+\frac{1}{2})-x]}(2x)^{-\nu}H_{\nu}^{(1)}(x) \quad (H_{\nu}^{(1)}(x) : \text{第 1 種ハンケル関数}) \quad (12)$$

$$U\left(\nu + \frac{1}{2}, 2\nu + 1, 2ix\right) = \frac{1}{2}\pi^{\frac{1}{2}}e^{-i[\pi(\nu+\frac{1}{2})-x]}(2x)^{-\nu}H_{\nu}^{(2)}(x) \quad (H_{\nu}^{(2)}(x) : \text{第 2 種ハンケル関数}) \quad (13)$$

$$U(1 - a, 1 - a, x) = e^x\Gamma(a, x) \quad (\Gamma(a, x) : \text{不完全ガンマ関数}) \quad (14)$$

$$U(1, 1, -x) = -e^{-x}\operatorname{Ei}(x) \quad (\operatorname{Ei}(x) : \text{積分指数関数}) \quad (15)$$

$$U\left(-\frac{1}{2}\nu, 0, 2x\right) = \Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\nu\right)e^x k_{\nu}(x) \quad (k_{\nu}(x) : \text{Bateman 関数}) \quad (16)$$

$$U\left(-\frac{1}{2}\nu, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}x^2\right) = 2^{-\frac{1}{2}\nu}e^{x^2/4}D_{\nu}(x) \quad (D_{\nu}(x) : \text{Weber 関数}) \quad (17)$$

$$U\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x^2\right) = \pi^{\frac{1}{2}}e^{x^2}\operatorname{erfc} x \quad (\operatorname{erfc} x : \text{余誤差関数}) \quad (18)$$

2 漸化式を用いる計算法 (Miller の方法)

2.1 ベッセル関数 $J_n(x)$ の計算法 (x が小さい場合)

m を適当に選ばれた正の偶整数とし, α を小さな任意定数とする.

$$F_{m+1}(x) = 0, \quad F_m(x) = \alpha \quad (19)$$

を初期値として, n 次の第 1 種ベッセル関数 $J_n(x)$ が満足する漸化式

$$F_{k-1}(x) = (2k/x)F_k(x) - F_{k+1}(x) \quad (20)$$

を繰り返し使うことにより, $F_{m-1}(x), F_{m-2}(x), \dots, F_0(x)$ を順次, 計算する. そのとき, ある $N(< m)$ に対して, $n = 0, 1, \dots, N$ についての $J_n(x)$ の計算式

$$J_n(x) \doteq F_n(x) \left/ \sum_{k=0}^{m/2} \epsilon_k F_{2k}(x) \right. \quad (21)$$

を得ることができる. ただし,

$$\epsilon_0 = 1, \quad \epsilon_k = 2 \quad (k = 1, 2, \dots) \quad (22)$$

である。 n と x を固定したとき、この計算式の精度は m を大きくすると高くなるので、この計算式により、 $J_n(x)$ の値を能率的に求めるためには、式 (19) の m は要求精度を満たす最小の m にすることが必要である。

漸化式 (20) の一般解は

$$F_n(x) = \xi J_n(x) + \eta Y_n(x) \quad (23)$$

と表される。ここで、 $Y_n(x)$ は n 次の第2種ベッセル関数であり、 ξ と η は任意定数である。

n が0から大きくなるにつれて、 $J_n(x)$ の値は小さくなるのに対して、 $Y_n(x)$ の値は大きくなる。言い換えれば、 m を適当に大きな整数とすると、 n が m から小さくなるにつれて、 $J_n(x)$ の値は大きくなるのに対して、 $Y_n(x)$ の値は小さくなる。したがって、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{J_n(x)}{Y_n(x)} = 0 \quad (24)$$

が成り立つ。このとき、 $J_n(x)$ を漸化式 (20) の最小解といい、 $Y_n(x)$ を主要解（優勢解）という。

式 (19) より、

$$|\xi J_{m+1}(x)| = |\eta Y_{m+1}(x)| \quad (25)$$

である。そのとき、 $\xi J_m(x)$, $\xi J_{m-1}(x)$, $\dots$, $\xi J_1(x)$, $\xi J_0(x)$ のように次数が低くなると、それらの値は大きくなっていく。それとは反対に、 $\eta Y_m(x)$, $\eta Y_{m-1}(x)$, $\dots$, $\eta Y_1(x)$, $\eta Y_0(x)$ のように次数が低くなると、それらの値は小さくなっていく。漸化式の計算値は式 (23) の値（2つの成分 $\xi J_n(x)$ と $\eta Y_n(x)$ の和）であるので、次数 n が m から0に近づくほど、比例関係

$$F_n(x) \div \xi J_n(x) \quad (26)$$

が強くなる。ベッセル関数 $J_n(x)$ には、関係式

$$\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k J_{2k}(x) = 1 \quad (27)$$

が成り立つので、式 (26) の比例定数を決めることができる。関係式において、 k の上限を m とすれば、

$$\sum_{k=0}^{m/2} \epsilon_k J_{2k}(x) \div 1 \quad (28)$$

となる。式 (26) を上式に代入すると、

$$\xi \div \sum_{k=0}^{m/2} \epsilon_k F_{2k}(x) \quad (29)$$

となり、計算式 (21) が得られる。

この計算法では、 $J_n(x)$ が最小解であることを示している式 (24) と比例定数を決めるための関係式 (27) の2つが重要な役割を果たしている。

2.2 変形ベッセル関数 $I_n(x)$ の計算法（ x が小さい場合）

m を適当に選ばれた正の偶整数とし、 α を小さな任意定数とする。

$$G_{m+1}(x) = 0, \quad G_m(x) = \alpha \quad (30)$$

を初期値として, n 次の第 1 種変形ベッセル関数 $I_n(x)$ が満足する漸化式

$$G_{k-1}(x) = (2k/x)G_k(x) + G_{k+1}(x) \quad (31)$$

を繰り返し使うことにより, $G_{m-1}(x), G_{m-2}(x), \dots, G_0(x)$ を順次, 計算する. そのとき, ある $N(< m)$ に対して, $n = 0, 1, \dots, N$ についての $I_n(x)$ の計算式

$$I_n(x) \doteq e^x G_n(x) \bigg/ \sum_{k=0}^m \epsilon_k G_k(x) \quad (32)$$

を得ることができる. n と x を固定したとき, この計算式の精度は m を大きくすると高くなるので, この計算式により $I_n(x)$ の値を能率的に求めるためには, 式 (30) の m は要求精度を満たす最小の m にすることが必要である.

漸化式 (31) の一般解は

$$G_n(x) = \xi I_n(x) + \eta(-1)^n K_n(x) \quad (33)$$

と表される. ここで, $K_n(x)$ は n 次の第 2 種変形ベッセル関数であり, ξ と η は任意定数である.

n が 0 から大きくなるにつれて, $I_n(x)$ の値は小さくなるのに対して, $K_n(x)$ の値は大きくなる. 言い換えれば, m を適当に大きな整数とすると, n が m から小さくなるにつれて, $I_n(x)$ の値は大きくなるのに対して, $K_n(x)$ の値は小さくなる. したがって,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{I_n(x)}{K_n(x)} = 0 \quad (34)$$

が成り立つ. よって, $I_n(x)$ は漸化式 (31) の最小解となっている.

式 (30) より,

$$|\xi I_{m+1}(x)| = |\eta K_{m+1}(x)| \quad (35)$$

である. そのとき, $\xi I_m(x), \xi I_{m-1}(x), \dots, \xi I_1(x), \xi I_0(x)$ のように次数が低くなると, それらの値は大きくなっていく. それとは反対に, $\eta K_m(x), \eta K_{m-1}(x), \dots, \eta K_1(x), \eta K_0(x)$ のように次数が低くなると, それらの値は小さくなっていく. 漸化式の計算値は式 (33) の値であるので, 次数 n が m から 0 に近づくほど, 比例関係

$$G_n(x) \doteq \xi I_n(x) \quad (36)$$

が強くなる. 変形ベッセル関数 $I_n(x)$ には, 関係式

$$\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k I_k(x) = e^x \quad (37)$$

が成り立つので, 式 (36) の比例定数を決めることができる. 関係式において, k の上限を m とすれば,

$$\sum_{k=0}^m \epsilon_k I_k(x) \doteq e^x \quad (38)$$

となる. 式 (36) を上式に代入すると,

$$\xi \doteq \sum_{k=0}^m \epsilon_k G_k(x) \quad (39)$$

となり, 計算式 (32) が得られる.

この計算法では, $I_n(x)$ が最小解であることを示している式 (34) と比例定数を決めるための関係式 (37) の 2 つが重要な役割を担っている.

2.3 ベッセル関数 $J_\nu(x)$ および変形ベッセル関数 $I_\nu(x)$ の計算法 (x が小さい場合)

ここでは、実数 ν は $0 \leq \nu < 1$ とする. $J_\nu(x)$ についての関係式は、式 (27) の代わりに、

$$\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k^{(1)} J_{\nu+2k}(x) = 1 \quad (40)$$

を用いる. ただし、

$$\epsilon_k^{(1)} = \frac{(\nu+2k)\Gamma(\nu+k)}{k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{-\nu} \quad (41)$$

である.

$$F_{\nu+m}(x) = 0, \quad F_{\nu+m-1}(x) = \alpha \quad (42)$$

を初期値として、漸化式

$$F_{\nu+k-1}(x) = \frac{2(\nu+n)}{x} F_{\nu+k}(x) - F_{\nu+k+1}(x) \quad (43)$$

を繰り返し計算すれば、 $J_\nu(x)$ の計算法は

$$J_{\nu+n}(x) \doteq \frac{F_{\nu+n}(x)}{\sum_{k=0}^{m/2} \epsilon_k^{(1)} F_{\nu+2k}(x)} \quad (44)$$

として与えられる.

$I_\nu(x)$ については、関係式は、式 (37) の代わりに、

$$\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k^{(2)} I_{\nu+k}(x) = e^x \quad (45)$$

を用いる. ただし、

$$\epsilon_k^{(2)} = 2 \frac{(\nu+k)\Gamma(\nu+1)\Gamma(2\nu+k)}{k!\Gamma(2\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{-\nu} \quad (46)$$

である.

$$G_{\nu+m}(x) = 0, \quad G_{\nu+m-1}(x) = \alpha \quad (47)$$

を初期値として、漸化式

$$G_{\nu+k-1}(x) = \frac{2(\nu+k)}{x} G_{\nu+k}(x) + G_{\nu+k+1}(x) \quad (48)$$

を繰り返し計算したものを用いれば、 $I_\nu(x)$ の計算法は

$$I_{\nu+n}(x) \doteq e^x \frac{G_{\nu+n}(x)}{\sum_{k=0}^m \epsilon_k^{(2)} G_{\nu+k}(x)} \quad (49)$$

として与えられる.

2.4 余誤差関数の繰り返し積分の計算法

漸化式

$$\frac{1}{2(k+1)}y_{k-1}(x) - \frac{x}{k+1}y_k(x) - y_{k+1}(x) = 0 \quad (50)$$

の最小解 $f_n(x)$ と主要解 $g_n(x)$ は

$$f_n(x) = e^{x^2} i^n \operatorname{erfc} x, \quad g_n(x) = (-1)^n e^{x^2} i^n \operatorname{erfc}(-x) \quad (51)$$

である。ただし、

$$i^n \operatorname{erfc} x = \int_x^\infty i^{n-1} \operatorname{erfc} t dt \quad (52)$$

$$i^0 \operatorname{erfc} x = \operatorname{erfc} x \quad (53)$$

$$i^{-1} \operatorname{erfc} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (54)$$

である。この場合には、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f_n(x)}{g_n(x)} = 0 \quad (55)$$

が成り立つ。 $f_n(x)$ は最小解であるが、この場合には、式 (27) や (37) のような関係式はない。しかし、比例定数の決定は式 (54) により行うことができる。

したがって、

$$F_{m+1}(x) = 0, \quad F_m(x) = \alpha \quad (56)$$

を初期値として、漸化式 (50) を繰り返し使うことにより、 $F_{m-1}(x)$, $F_{m-2}(x)$, $\dots$, $F_0(x)$, $F_{-1}(x)$ を順次、計算したものをを用いれば、ある $N(< m)$ に対して、 $n = 0, 1, \dots, N$ についての $i^n \operatorname{erfc} x$ の計算式は

$$i^n \operatorname{erfc} x = \frac{2e^{-x^2} F_n(x)}{\sqrt{\pi} F_{-1}(x)} \quad (57)$$

として与えられる。

2.5 不完全ガンマ関数 $\gamma(\nu, x)$ の計算法 (x が小さい場合)

不完全ガンマ関数の積分表示式は

$$\gamma(\nu, x) = \int_0^x t^{\nu-1} e^{-t} dt \quad (58)$$

である。不完全ガンマ関数 $\gamma(\nu, x)$ は、漸化式

$$F_{k-1}(x) = \frac{\nu + k + x}{(\nu + k - 1)x} F_k(x) - \frac{1}{(\nu + k - 1)x} F_{k+1}(x) \quad (59)$$

を満足する。この漸化式の最小解は $\gamma(\nu, x)$ であり、主要解は $\Gamma(\nu, x) = \int_x^\infty t^{\nu-1} e^{-t} dt$ である。

不完全ガンマ関数 $\gamma(\nu, x)$ には、つぎの関係式

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\gamma(\nu + k, x)}{k!} = \frac{x^\nu}{\nu} \quad (\nu > 0) \quad (60)$$

が成り立つ。したがって、不完全ガンマ関数 $\gamma(\nu, x)$ の計算式は

$$\gamma(\nu + n, x) \doteq \frac{x^\nu F_n(x)}{\nu \sum_{k=0}^n \frac{F_k(x)}{k!}} \quad (61)$$

として与えられる。

2.6 第1種クンマー関数 $M(a, b + n, x)$ の計算法³⁾ (x が小さい場合)

漸化式

$$(b + k - a - 1)y_{k-1}(x) + (1 - b - k - x)y_k(x) + xy_{k+1}(x) = 0 \quad (62)$$

は、次式で表される最小解 $f_n(x)$ と主要解 $g_n(x)$ をもつ。

$$f_n(x) = \frac{\Gamma(b + n - a)}{\Gamma(b + n)} M(a, b + n, x), \quad g_n(x) = U(a, b + n, x) \quad (63)$$

$M(a, b, x)$ の積分表示

$$\frac{\Gamma(b - a)\Gamma(a)}{\Gamma(b)} M(a, b, x) = \int_0^1 e^{xt} t^{a-1} (1 - t)^{b-a-1} dt \quad (64)$$

を用いれば、

$$\begin{aligned} \Gamma(a) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(b - a + k)}{\Gamma(b + k)} M(a, b + k, x) &= \int_0^1 e^{xt} t^{a-1} (1 - t)^{b-a-1} \sum_{k=0}^{\infty} (1 - t)^k dt \\ &= \int_0^1 e^{xt} t^{a-2} (1 - t)^{b-a-1} dt \\ &= \frac{\Gamma(b - a)\Gamma(a - 1)}{\Gamma(b - 1)} M(a - 1, b - 1, x) \end{aligned} \quad (65)$$

と表される。

上式で、 $a = 2$, $b = 3$ とすると、関係式

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k + 1)(k + 2)} M(2, 3 + k, x) = \frac{2e^{\frac{x}{2}}}{x} \sinh \frac{x}{2} \quad (66)$$

が得られる。したがって、 $M(2, 3 + n, x)$ は、漸化式を用いる方法で計算できる。

$$F_{m+1}(x) = 0, \quad F_m(x) = \alpha \quad (67)$$

を初期値として、漸化式 (62) を繰り返し使うことにより、 $F_{m-1}(x)$, $F_{m-2}(x)$, $\dots$, $F_0(x)$ を順次、計算したものを
を用いれば、ある $N(< m)$ に対して、 $n = 0, 1, \dots, N$ についての $M(2, 3 + n, x)$ の計算式は

$$M(2, 3 + n, x) \doteq \frac{2e^{\frac{x}{2}}}{x} \sinh \frac{x}{2} \frac{F_n(x)}{\sum_{k=0}^n \frac{F_k(x)}{(k + 1)(k + 2)}} \quad (68)$$

として与えられる.

また, $a = b$ のとき, $M(a, a, x) = e^x$ であるので, $M(a, a + n, x)$ の計算式は

$$M(a, a + n, x) \doteq \frac{e^x F_n(x)}{F_0(x)} \quad (69)$$

として与えられる.

2.7 第2種クンマー関数 $U(a + n, b, x)$ の計算法³⁾ (x が大きい場合)

漸化式

$$(a + k - 1)y_{k-1}(x) + (b - x - 2a - 2k)y_k(x) + (k + a + 1 - b)y_{k+1}(x) = 0 \quad (70)$$

は, 次式で表される最小解 $f_n(x)$ と主要解 $g_n(x)$ をもつ.

$$f_n(x) = \frac{\Gamma(a + n)}{\Gamma(a)} U(a + n, b, x), \quad g_n(x) = \frac{\Gamma(a + n)}{\Gamma(a + n + 1 - b)} M(a + n, b, x) \quad (71)$$

$U(a + k, b, x)$ の積分表示式を用いると,

$$\Gamma(a + k)U(a + k, b, x) = \int_0^\infty e^{-xt} t^{a+k-1} (1+t)^{b-a-k-1} dt \quad (72)$$

が得られる. $\epsilon_k^{(u)}$ を

$$\epsilon_k^{(u)} = \frac{(a - b + 1)_k}{k!} = \frac{\Gamma(a - b + 1 + k)}{k! \Gamma(a - b + 1)} \quad (73)$$

と置く. そのとき, 式 (72) に $\epsilon_k^{(u)}$ を乗じ, k についての和を取ると,

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k^{(u)} \Gamma(a + k) U(a + k, b, x) &= \int_0^\infty e^{-xt} t^{a-1} (1+t)^{b-a-1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a - b + 1)_k}{k!} \left(\frac{t}{1+t} \right)^k dt \\ &= \int_0^\infty e^{-xt} t^{a-1} (1+t)^{b-a-1} \left(1 - \frac{t}{1+t} \right)^{-a+b-1} dt \\ &= \int_0^\infty e^{-xt} t^{a-1} dt \\ &= \Gamma(a) x^{-a} \end{aligned} \quad (74)$$

となる. したがって, 関係式

$$\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k^{(u)} f_k(x) = x^{-a} \quad (75)$$

が成り立つ. したがって, $U(a + k, b, x)$ は, 漸化式を用いる方法で計算できる.

$$G_{m+1}(x) = 0, \quad G_m(x) = \alpha \quad (76)$$

を初期値として, 漸化式 (70) を繰り返し使うことにより, $G_{m-1}(x)$, $G_{m-2}(x)$, $\dots$, $G_0(x)$ を順次, 計算したものをいれば, ある $N(< m)$ に対して, $n = 0, 1, \dots, N$ についての $f_n(x)$ の計算式は

$$f_n(x) \doteq x^{-a} \frac{G_n(x)}{\sum_{k=0}^m \epsilon_k^{(u)} G_k(x)} \quad (77)$$

として与えられる. 本方法は文献¹⁰⁾とは別法である.

2.8 変形ベッセル関数 $K_\nu(x)$ の計算法 (x が大きい場合)

$K_\nu(x)$ については,

$$K_{-\nu}(x) = K_\nu(x) \quad (78)$$

であるので, $\nu \geq 0$ の場合のみ考えればよい.

ν の整数部分を n ($n = 0, 1, \dots$), 小数部分を μ ($0 \leq \mu < 1$) として, $\nu = n + \mu$ のように表す. $\nu \geq 2$ の場合には, $K_\mu(x)$ と $K_{\mu+1}(x)$ を計算し, 漸化式

$$K_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x} K_\nu(x) + K_{\nu-1}(x) \quad (79)$$

により求めることができる.

$K_\mu(x)$ と $K_{\mu+1}(x)$ は, クンマー関数 $U(a, b, x)$ を用いて,

$$K_\mu(x) = \sqrt{\pi} e^{-x} (2x)^\mu U\left(\mu + \frac{1}{2}, 2\mu + 1, 2x\right) \quad (80)$$

$$K_{\mu+1}(x) = \sqrt{\pi} e^{-x} (2x)^{\mu+1} U\left(\mu + \frac{3}{2}, 2\mu + 3, 2x\right) \quad (81)$$

と表すことができる. これらは前述の $U(a + n, b, x)$ の計算法の特別な場合で, 式 (80) については, 漸化式は

$$\left(\mu - \frac{1}{2} + k\right) y_{k-1}(x) - (2x + 2k) y_k(x) + \left(-\mu + \frac{1}{2} + k\right) y_{k+1}(x) = 0 \quad (82)$$

となる. この漸化式は, 次式で表される最小解 $f_n(x)$ と主要解 $g_n(x)$ をもつ.

$$f_n(x) = \frac{\Gamma\left(\mu + \frac{1}{2} + n\right)}{\Gamma\left(\mu + \frac{1}{2}\right)} U\left(\mu + \frac{1}{2} + n, 2\mu + 1, 2x\right) \quad (83)$$

$$g_n(x) = \frac{\Gamma\left(\mu + \frac{1}{2} + n\right)}{\Gamma\left(-\mu + \frac{1}{2} + n\right)} M\left(\mu + \frac{1}{2} + n, 2\mu + 1, 2x\right) \quad (84)$$

$\epsilon_k^{(\kappa)}$ を

$$\epsilon_k^{(\kappa)} = \frac{\Gamma\left(-\mu + \frac{1}{2} + k\right)}{k! \Gamma\left(-\mu + \frac{1}{2}\right)} \quad (85)$$

と置く. そのとき, 積分表示式

$$\Gamma\left(\mu + \frac{1}{2} + k\right) U\left(\mu + \frac{1}{2} + k, 2\mu + 1, 2x\right) = \int_0^\infty e^{-2xt} t^{\mu - \frac{1}{2} + k} (1+t)^{\mu - \frac{1}{2} - k} dt \quad (86)$$

に $\epsilon_k^{(\kappa)}$ を乗じて, k についての和を取ると,

$$\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k^{(\kappa)} f_k(x) = \Gamma\left(\mu + \frac{1}{2}\right) \quad (87)$$

が得られる.

$$G_{m+1}(x) = 0, \quad G_m(x) = \alpha \quad (88)$$

を初期値として、漸化式 (82) を繰り返し使うことにより、 $G_{m-1}(x)$, $G_{m-2}(x)$, $\dots$, $G_0(x)$ を順次、計算したものをいれれば、 $f_0(x)$ の計算式

$$f_0(x) \doteq x^{-\mu-\frac{1}{2}} \frac{G_0(x)}{\sum_{k=0}^m \epsilon_k^{(\kappa)} G_k(x)} \quad (89)$$

が得られ、それを計算すれば、式 (80) より $K_\mu(x)$ を求めることができる。次に、 μ を $\mu+1$ に置き換えて、同様な計算を行えば、式 (81) より $K_{\mu+1}(x)$ を求めることができる。

本方法は文献⁷⁾とは別法である。

3 Deuflhard の方法

これまで述べた計算法は、 $F_{m+1}(x) = 0$, $F_m(x) = \alpha$ を初期値として、漸化式を繰り返しを始めた。漸化式の繰り返し回数 m は予め決めておかなければならない。この計算法は、繰り返し回数 m を増やすと、精度は高くなる。能率的な計算のためには、要求精度を達成する最小の繰り返し回数に決めておくのがよい。そのために、 x の区間を数区間に分け、それぞれの区間で繰り返し回数 m を x の 1 次式の近似式で与えておく。ライブラリ（コンパイラに付属の関数計算プログラムや市販のプログラム・パッケージのプログラム）の関数では、通常、倍精度（10 進 16 桁程度）あるいは単精度（10 進 7 桁程度）で関数値を求めることができる繰り返し回数に設定されている。その意味で、フル精度固定型ということができる。ライブラリの中でも、数値積分のプログラムは、要求精度を指定するものがほとんどであり、関数の場合とは対照的である。以下では、要求精度で関数値を計算できる方法を説明する。

さて、ここでは、3 項漸化式

$$a_k(x)T_k + b_k(x)T_{k+1} + c_k(x)T_{k+2} = 0 \quad (90)$$

の最小解 $\{P_k\}$ ($\{P_k\}$ と線形独立である $\{Q_k\}$ に対して、 $\lim_{k \rightarrow \infty} P_k/Q_k = 0$ であるもの) について、重み d_k ($k = 0, 1, \dots, n$) つきの和

$$s_n = \sum_{k=0}^n d_k P_k \quad (91)$$

を任意の精度で求めることができる Dueflhard の方法^{2, 5)}を説明する。 $m(> n)$ を適当な整数とする。

3 項漸化式に対するミラーの方法は次の $m+1$ 元の連立 1 次方程式を解くことと同じであることに注意しよう。

$$\begin{aligned} a_k(x)P_k + b_k(x)P_{k+1} + c_k(x)P_{k+2} &= 0 \quad (k = 0, 1, \dots, m-2) \\ a_{m-1}(x)P_{m-1} + b_{m-1}(x)P_m &= 0 \\ \sum_{k=0}^m \epsilon_k P_k &= \gamma \end{aligned} \quad (92)$$

以下で、正方行列とベクトルは $m+1$ 次とする。上の連立 1 次方程式は

$$M\mathbf{p} = \mathbf{r} \quad (93)$$

と書くことができる。ここで、

$$M = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & c_0 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{m-2} & b_{m-2} & c_{m-2} \\ & & & a_{m-1} & b_{m-1} \\ \epsilon_0 & \cdots & \cdots & \cdots & \epsilon_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{bmatrix} P_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ P_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ \gamma \end{bmatrix} \quad (94)$$

である。 $\mathbf{d}$ を

$$\mathbf{d} = (d_0, d_1, \dots, d_n, 0, \dots, 0)^T \quad (95)$$

とする。そのとき、

$$M^T \mathbf{u} = \mathbf{d} \quad (96)$$

といて、 $\mathbf{u} = (u_0, u_1, \dots, u_m)^T$ を定義する。式 (91) より、 s_n は

$$s_n = \mathbf{d}^T \mathbf{p} = \mathbf{d}^T M^{-1} \mathbf{r} = (M^{-T} \mathbf{d})^T \mathbf{r} = \mathbf{u}^T \mathbf{r} = \gamma u_m \quad (97)$$

と表されるので、 u_m を求めればよい。式 (96) を解くために、 M^T を LU 分解する。

$$M^T = LU \quad (98)$$

ここで、

$$L = \begin{bmatrix} a_0 & & & & \\ b_0 & \ddots & & & \\ c_0 & \ddots & a_{m-2} & & \\ & \ddots & b_{m-2} & a_{m-1} & \\ & & c_{m-2} & b_{m-1} & a_m \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 1 & & & & f_0 \\ & \ddots & & & \vdots \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & 1 & \vdots \\ & & & & f_m \end{bmatrix} \quad (99)$$

である。 $\mathbf{f} = (f_0, f_1, \dots, f_m)^T$ とおき、式 (98) の M^T の m 列に注目すると、

$$L\mathbf{f} = \boldsymbol{\epsilon} \quad (100)$$

が成り立つことが分かる。ただし、 $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon_0, \epsilon_1, \dots, \epsilon_m)^T$ である。上式を解くと、 $f_0, f_1, \dots, f_m$ が求められる。

$$\mathbf{e} = U\mathbf{u} \quad (101)$$

のように、 $\mathbf{e} = (e_0, e_1, \dots, e_m)^T$ を定義すると、上式より、

$$e_m = f_m u_m \quad (102)$$

が得られる。

$$L\mathbf{e} = \mathbf{d} \quad (103)$$

を解いて、 e_m を求めると、式 (102) より、 u_m が決まる。したがって、 s_n の近似値 $s_n^{(m)}$ を求めるアルゴリズムは、式 (100)、(103) と式 (97) より次のように表される。

$$\begin{aligned} f_{-1} &= 0, \quad f_0 = \frac{\epsilon_0}{a_0}, \quad e_{-1} = 0, \quad e_0 = \frac{d_0}{a_0} \\ &(\text{for } k = 1, 2, \dots, m) \{ \\ &\quad f_k = (\epsilon_k - b_{k-1}f_{k-1} - c_{k-2}f_{k-2})/a_k \\ &\quad e_k = (d_k - b_{k-1}e_{k-1} - c_{k-2}e_{k-2})/a_k \\ &\} \\ s_n^{(m)} &= \gamma \frac{e_m}{f_m} \end{aligned} \quad (104)$$

このアルゴリズムでは、1 回の反復で 2 つの漸化式の計算が必要である。また、上述の行列とベクトルは $m+1$ 次であるが、次元を 1 つ増やすには、上のアルゴリズムで、そのまま k の繰り返しをもう 1 回追加すればよい。したがって、 e_k/f_k が所要の精度内に収束するまで、 k の繰り返しを行えばよい。

2. の「漸化式を用いる計算法 (Miller の方法)」で述べた関数については、Deuffhard の方法を適用することができる。Deuffhard の方法は、任意の要求精度で関数値を求めることができるが、計算時間は約 2 倍になる。しかし、要求精度が低くてよい場合には、この方法が有利になる。

4 おわりに

本稿では、特殊関数の数値計算法として、漸化式を用いる方法（Millerの方法）について説明した。さらに、この漸化式を用いる方法を行列表示し、精度更新型にして、任意の要求精度で関数値を計算できる Dueflhard の方法についても説明した。

参考文献

- [1] Abramowitz, M., Stegun, I.A., Handbook of Mathematical Functions, Dover(1970).
- [2] Deuffhart, P., A Summation Technique for Minimal Solutions of Linear Homogeneous Difference Equations, Computing, 18, pp.1-13(1977).
- [3] Temme, N.M., Special Functions, An Introduction to the Classical Functions of Mathematical Physics, John Wiley & Sons(2007).
- [4] 二宮市三編, 数値計算のつぼ (第3章 吉田年雄: 関数の計算), 共立出版, 東京, pp.23-35(2004).
- [5] 二宮市三編, 数値計算のわざ (第2章 吉田年雄: Bessel 関数の計算法), 共立出版, 東京, pp.21-41(2006).
- [6] 吉田年雄, 二宮市三, x が小さい場合の変形ベッセル関数 $K_\nu(x)$ の数値計算, 情報処理学会論文誌, 21, pp.238-245(1980).
- [7] 吉田年雄, 二宮市三, x が大きい場合の変形ベッセル関数 $K_\nu(x)$ の数値計算, 情報処理学会論文誌, 22, 312-319(1981).
- [8] 吉田年雄, 二宮市三, x が小さい場合の不完全ガンマ関数 $\Gamma(\nu, x)$ の数値計算, 情報処理学会論文誌, 23, pp.522-303(1982).
- [9] 吉田年雄, 二宮市三, x が大きい場合の不完全ガンマ関数 $\Gamma(\nu, x)$ の数値計算, 情報処理学会論文誌, 25, 306-312(1984).
- [10] 吉田年雄, τ 法による x が大きい場合のクンマー関数 $U(a, b, x)$ の数値計算, 情報処理学会論文誌, 36, 1995-2342(1995).
- [11] 吉田年雄, 漸化式を用いるベッセル関数 $J_\nu(x)$ の数値計算法の別法の誤差解析, 情報処理学会論文誌, 38, 933-943(1997).



吉田年雄

工学部情報工学科教授

数値計算法の研究, 開発

特殊関数の数値計算法

ベッセル関数の数値計算法

級数の和の公式の研究