

x が小さい場合のクンマー関数 $U(a, b, x)$ の数値計算

吉田 年雄^{1,a)} 奥居 哲^{1,b)} 足達 義則^{1,c)}

受付日 2020年5月21日, 採録日 2021年1月12日

概要: $a > 0, b \geq 0$ で, $x (> 0)$ が小さい場合のクンマー関数 $U(a, b, x)$ の新しい数値計算法を述べている. $U(a, b, x)$ は $U(a, b, x) = (\pi/\sin \pi b)\{M(a, b, x)/(\Gamma(a+1-b)\Gamma(b)) - x^{1-b}M(a+1-b, 2-b, x)/(\Gamma(a)\Gamma(2-b))\}$ で定義される. 上式の $\{ \}$ の前半部と後半部の減算では, b が整数に近くないときには, 桁落ちは起こらないので, そのまま計算すればよいが, b が整数に近いときには, 桁落ちが起こり, 工夫が必要である. たとえば, $0 \leq b \leq 0.5$ の場合には, 上式の $\{ \}$ の部分は $b/(\Gamma(1+b)\Gamma(a+1-b)) + \sum_{k=1}^{\infty} \{A_k(a, b) - B_k(a, b)\}x^k$ の形で表わすことができる. ここで, $A_k(a, b)$ は 2つの項の差で表され, 特に $A_1(a, b) = a/(\Gamma(1+b)\Gamma(a+1-b)) - 1/(\Gamma(2-b)\Gamma(a))$ である. この式は, b が 0 に近いときには桁落ちが生ずるが, ガンマ関数の逆数 $1/\Gamma(1+b), 1/\Gamma(2-b), 1/\Gamma(a+1-b)$ の $b=0$ 周りのテイラー展開を用いれば, 桁落ちを回避することができる. そのため, 本論文では, プログラム実行時に, $1/\Gamma(1+b)$ や $1/\Gamma(2-b)$, さらに, 変数 a を含む $1/\Gamma(a+1-b)$ の場合でも, 必要な次数までの微分係数を能率的に求められる方法を提案している. $A_k(a, b)$ ($k \geq 2$) は $A_{k-1}(a, b)$ から漸化式を用いて計算できる. このようにして, 桁落ちを回避することにより $U(a, b, x)$ を求めている.

キーワード: クンマー関数, 合流型超幾何関数, ガンマ関数の逆数のテイラー展開

Computation of Kummer Function $U(a, b, x)$ for Small Argument x

TOSHIO YOSHIDA^{1,a)} SATOSHI OKUI^{1,b)} YOSHINORI ADACHI^{1,c)}

Received: May 21, 2020, Accepted: January 12, 2021

Abstract: Numerical method for computation of Kummer functions $U(a, b, x)$ with small argument $x (> 0, a > 0, b \geq 0)$ is proposed. The function $U(a, b, x)$ is defined as $U(a, b, x) = (\pi/\sin \pi b)\{M(a, b, x)/(\Gamma(a+1-b)\Gamma(b)) - x^{1-b}M(a+1-b, 2-b, x)/(\Gamma(a)\Gamma(2-b))\}$. When b is not near to an integer, the cancellation of significant digits does not occur by subtraction of these two parts and so we can compute the above expression as it is. However, when b is near to an integer, such cancellation occurs. For example, in case of $0 \leq b \leq 0.5$, the part $\{ \}$ of the above equation can be expressed as $b/(\Gamma(b+1)\Gamma(a+1-b)) + \sum_{k=1}^{\infty} \{A_k(a, b) - B_k(a, b)\}x^k$, where $A_k(a, b)$ is a subtraction of two terms, especially $A_1(a, b) = a/(\Gamma(1+b)\Gamma(a+1-b)) - 1/(\Gamma(2-b)\Gamma(a))$. When b is near to 0, the cancellation of significant digits occurs in this equation. By using Taylor series about $b=0$ for reciprocal gamma functions, $1/\Gamma(1+b), 1/\Gamma(2-b)$ and $1/\Gamma(a+1-b)$, such cancellation can be removed. In this paper, we describe an efficient method for the runtime computation of derivatives as much as necessary in case of $1/\Gamma(1+b), 1/\Gamma(2-b)$ and $1/\Gamma(a+1-b)$ which contains a variable a . By the recurrence, $A_k(a, b)$ ($k \geq 2$) is computed from $A_{k-1}(a, b)$. Removing the cancellation of significant digits in this way, we can compute $U(a, b, x)$.

Keywords: Kummer function, confluent hypergeometric function, Taylor expansion of reciprocal gamma function

¹ 中部大学
Chubu University, Kasugai, Aichi 487-8501, Japan

a) tyoshida67@yahoo.co.jp

b) okui@isc.chubu.ac.jp

c) adachiy@isc.chubu.ac.jp

1. はじめに

クンマー (Kummer) 関数 $U(a, b, x)$ は, そのパラメータ a と b を指定することにより, ベッセル関数, 変形ベッセ

ル関数、不完全ガンマ関数などを表すことができる広範囲で重要な関数である [1], [2], [3]. 具体的な応用例としては、波動方程式から時間依存部分を除いたヘルムホルツ方程式を回転放物面座標で表し、変数分離することにより得られる合流型超幾何微分方程式 [4] の解の計算があげられる。

Gil, Segura と Temme [5] は、 $U(a, b, z)$ に対して、 a, b, z が小さい場合の数値計算法を提案した。その適用範囲は、 $|a| \leq 1/2, |b| \leq 1/2, 0 < |z| \leq 1$ である。

本論文では、 $a > 0, b \geq 0$ で、 $x (> 0)$ が小さい場合の $U(a, b, x)$ の能率的な計算法を提案する。この場合には、Gil, Segura と Temme の方法より適用範囲が広い。 x が大きい場合の能率的な計算法については、文献 [6] を参照されたい。

クンマー関数 $U(a, b, x)$ は次式で定義される。

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

ここで、 $\Gamma(x)$ はガンマ関数である。ガンマ関数の逆数を

$$G(x) = \frac{1}{\Gamma(x)} \quad (2)$$

で表すと、よく知られているように、 $G(x)$ は整関数である (文献 [2] の記述 5.2.1)。本論文で扱う $G(x)$ の変数 x は実数全体である (文献 [1] の記述 13.1.3 参照)。 x が負の場合の $G(x)$ の値は、変数 x が、たとえば、 $-1 \leq x < 0$ のときには、漸化式 $G(x) = xG(x+1)$ ($G(x+1) : 0 \leq x+1 < 1$ での計算値) を用いて求めることができる。 $x < -1$ のときの $G(x)$ も漸化式を繰り返し用いて求められる。また、 \tilde{n} を 0 以下の整数とすると、 $G(\tilde{n}) = 0$ である。

上式の $M(a, b, x)$ は、 $U(a, b, x)$ と同様に、クンマー関数あるいは合流型超幾何関数と呼ばれ、次式のテイラー展開で表される。

$$M(a, b, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{k!(b)_k} x^k \quad (3)$$

ただし、 $(a)_k$ はポツホハンマーの記号 (Pochhammer's symbol) で、

$$(a)_k = \frac{\Gamma(a+k)}{\Gamma(a)} = a(a+1)(a+2)\cdots(a+k-1) \quad (k \geq 1)$$

$$(a)_0 = 1$$

である。

なお、 $b < 0$ の場合は、次式により、 $a > 0, b \geq 0$ の場合に帰着する。

$$U(a, b, x) = x^{1-b} U(1+a-b, 2-b, x) \quad (4)$$

また、関数 $U(a, b, x)$ に対しては、次の漸化式

$$U(a, b+2, x) = \{(x+b)U(a, b+1, x) + (a-b)U(a, b, x)\} / x \quad (5)$$

が成り立つ。 $U(a, b+1, x)$ と $U(a, b, x)$ から、 $U(a, b+2, x)$ が求められるので、 $0 \leq b \leq 2$ での $U(a, b, x)$ を計算できればよい。

本計算法の基本式は式 (1) である。その $\{ \}$ の部分の前半部分と後半部分の減算について考えよう。

b が整数のときには、その前半部分と後半部分は同じであるので、その減算の結果は 0 となり、有効桁も 0 (全桁落ち) である。 b が整数に近いときには、その減算において桁落ちが起こるので、以下で述べるような工夫が必要である。他方、その減算において、桁落ちがないか、あるいは、桁落ちが少しあっても許容できる場合には、この減算をそのまま計算すればよい。

許容できない桁落ちの場合には、文献 [7] と同様な方法を用いて桁落ちを回避する必要がある。そのために、 b を次のように表す。

$$b = n + \beta \quad (n : 0 \text{ 以上の整数}, -0.5 < \beta \leq 0.5) \quad (6)$$

それで、ここでは、式 (6) の n が次の 3 つの場合、すなわち、

$$n = 0 \text{ の場合} \quad b = \beta \quad [0 \leq b \leq 0.5] \quad (7)$$

$$n = 1 \text{ の場合} \quad b = 1 + \beta \quad [0.5 < b \leq 1.5] \quad (8)$$

$$n = 2 \text{ の場合} \quad b = 2 + \beta \quad [1.5 < b \leq 2.5] \quad (9)$$

を考えることにする。

次の章では、式 (1) の桁落ちの有無を調べる。

2. 定義式 (1) での桁落ちの有無

式 (1) の $\{ \}$ の前半部分を p_1 、後半部分を p_2 とすると、 p_1 と p_2 の減算による桁落ちの度合 d_c は

$$d_c = \frac{\max(|p_1|, |p_2|)}{|p_1 - p_2|} \quad (10)$$

で表すことができる。以下で、 $b = 0, 1$ および 2 の周りの桁落ちの度合 d_c を調べることにする。ここでは、

$$d_c \leq 10^2 \quad (11)$$

ならば、その桁落ちは許容できるとする。

図 1 には、 $n = 0, 1$ および 2 の 3 つの場合について、 $x = 0.01, 0.1, 1$ と 2 に対して、式 (1) でそのまま計算できる範囲を示している。横軸の a は、0.05 から 4 まで、0.05 刻みで、縦軸の β は $10^{-\log_{10} 2}$ ($= 0.5$) から始めて、 $10^{-0.31}, 10^{-0.32}, \dots, 10^{-4.99}, 10^{-5}$ の順序で変えていき、桁落ちの度合 d_c が、初めて、

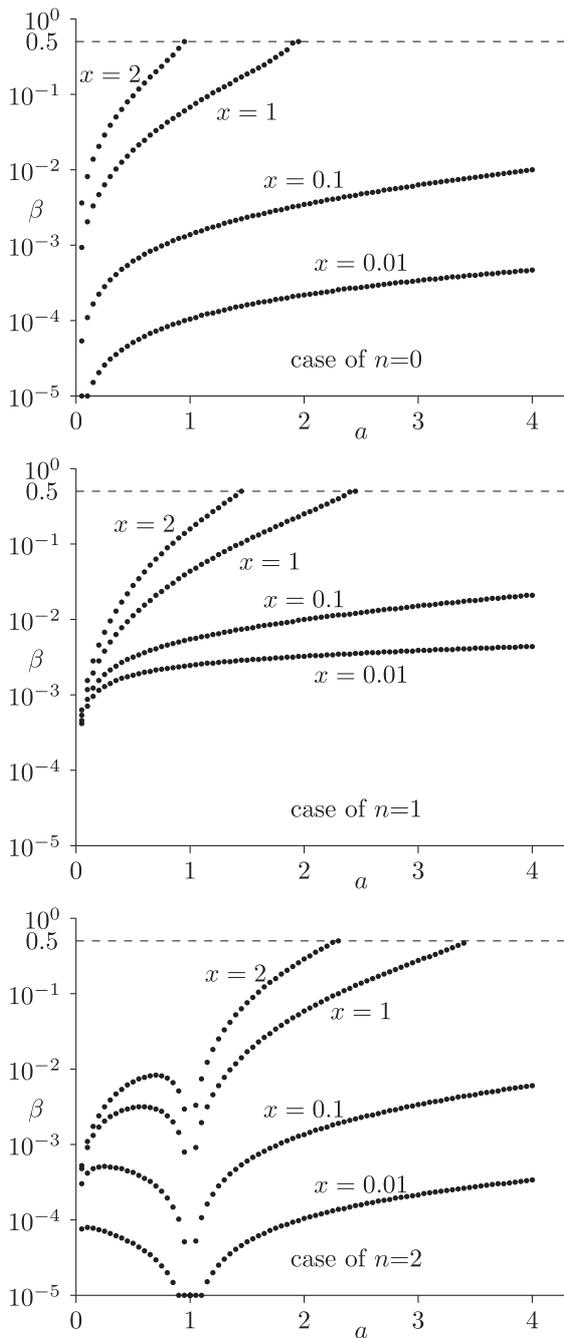


図 1 式 (1) でそのまま計算できる範囲 (破線と点線で囲まれた部分), 上から $n = 0, 1$ および 2 の場合

Fig. 1 Computable Range by Eq.(1) (between dashed line and dotted line), cases of $n = 0, 1$ and 2 from above.

$$d_c > 10^2 \tag{12}$$

となった β の値を黒丸で表している (10 進 2 桁以下の桁落ちは許容する). この図で, 破線と点線で囲まれた範囲では, 式 (1) をそのまま計算すればよい.

図 1 から分かるように, $U(a, b, x)$ は 3 つの変数をもっている, その計算の実行前に, 式 (1) でそのまま計算するか, あるいは, 本論文で提案する桁落ちを回避する方法で計算するかを振り分けることは, 実際には無理である.

そこで, 次のような計算手順を提案する.

- (a) 式 (1) の $\{ \}$ の部分の前半部分と後半部分を, それぞれ, 10^{-3} の低精度で計算する.
- (b) それらの差の計算で, $d_c < 10^2$ (桁落ちが起こらない) ならば (c) へ, そうでなければ (d) へ行く.
- (c) 式 (1) の計算を続け, 要求精度で関数値が求められるまで行う.
- (d) 本論文で提案する桁落ちを回避する方法で, 関数値を計算する. そのとき, (a) で求めたガンマ関数の計算値を再利用する.

なお, 図 1 の 1 番目のグラフ ($n = 0$ の場合) では, $a = 0$ とその近くで, 3 番目のグラフ ($n = 2$ の場合) では, $a = 1$ とその近くで, 桁落ちが起こらないことを示している. このことについては, 付録 A.1 で説明している.

以下に, 桁落ちを回避する方法を述べる.

3. 桁落ちの回避

式 (1) の $\{ \}$ の部分において, b を式 (6) の n と β で置き換えたものを $V(a, \beta, n, x)$ と表す. そのとき, $V(a, \beta, n, x)$ は次のように書き直すことができる.

$$\begin{aligned}
 V(a, \beta, n, x) &= \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+k) x^k}{\Gamma(k+n+\beta)\Gamma(k+1)\Gamma(a)\Gamma(a-n+1-\beta)} \right] \\
 &\quad - \left\{ x^{-\beta} \sum_{k=1-n}^{-1} \frac{\Gamma(a+k-\beta) x^k}{\Gamma(k+n)\Gamma(k+1-\beta)\Gamma(a)\Gamma(a-n+1-\beta)} \right. \\
 &\quad \left. + x^{-\beta} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+k-\beta) x^k}{\Gamma(k+n)\Gamma(k+1-\beta)\Gamma(a)\Gamma(a-n+1-\beta)} \right\} \tag{13}
 \end{aligned}$$

上式の $\{ \}$ の前半部分は, $n \leq 1$ のときには項は存在せず, $n \geq 2$ のときには, $k = 1-n, 2-n, \dots, -1$ の項のみ存在する. $\beta = 0$ のときには, 上式の $[\]$ の部分と $\{ \}$ の後半部分は同じになる.

以下で用いる $\phi(\beta, x)$ を次式にて定義しておく.

$$\phi(\beta, x) = \frac{x^{-\beta} - 1}{\beta} \tag{14}$$

式 (13) は, $\phi(\beta, x)$ を用いて書き換えると次式になる.

$$\begin{aligned}
 V(a, \beta, n, x) &= -x^{-\beta} \sum_{k=1-n}^{-1} \frac{\Gamma(a+k-\beta) x^k}{\Gamma(k+n)\Gamma(k+1-\beta)\Gamma(a)\Gamma(a-n+1-\beta)} \\
 &\quad + \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{\Gamma(a+k)}{\Gamma(k+n+\beta)\Gamma(k+1)\Gamma(a)\Gamma(a-n+1-\beta)} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\Gamma(a+k-\beta)}{\Gamma(k+n)\Gamma(k+1-\beta)\Gamma(a)\Gamma(a-n+1-\beta)} \right\} x^k \\
 &\quad - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\beta\phi(\beta, x) \Gamma(a+k-\beta) x^k}{\Gamma(k+n)\Gamma(k+1-\beta)\Gamma(a)\Gamma(a-n+1-\beta)} \tag{15}
 \end{aligned}$$

β が小さいときには、式 (14) の $\phi(\beta, x)$ の分子の計算で桁落ちが起こるが、 $\phi(\beta, x)$ は、関数

$$f(t) = \frac{e^t - 1}{t} \quad (16)$$

の展開式

$$f(t) = 1 + \frac{t}{2!} + \frac{t^2}{2!} + \dots \quad (17)$$

を用いれば、

$$\phi(\beta, x) = -f(-\beta \ln x) \ln x \quad (18)$$

により、桁落ちなしで求めることができる。

式 (15) の $\{ \}$ の計算においては、式 (2) で定義したガンマ関数の逆数 $G(r \pm \beta)$ ($= 1/\Gamma(r \pm \beta)$) の $\beta = 0$ 周りのテイラー展開

$$G(r \pm \beta) = G(r) \pm \frac{G^{(1)}(r)}{1!} \beta + \frac{G^{(2)}(r)}{2!} \beta^2 \pm \dots \quad (19)$$

を用いることにする (複号同順)。以下、上式を

$$\begin{aligned} G(r + \beta) &= G(r) + \beta H_p(r, \beta) \\ G(r - \beta) &= G(r) + \beta H_m(r, \beta) \end{aligned} \quad (20)$$

のように表す。ここで、

$$\begin{aligned} H_p(r, \beta) &= \frac{G^{(1)}(r)}{1!} + \frac{G^{(2)}(r)}{2!} \beta + \frac{G^{(3)}(r)}{3!} \beta^2 + \dots \\ H_m(r, \beta) &= -\frac{G^{(1)}(r)}{1!} + \frac{G^{(2)}(r)}{2!} \beta - \frac{G^{(3)}(r)}{3!} \beta^2 + \dots \end{aligned} \quad (21)$$

である。

3.1 $0 \leq b \leq 0.5$ の計算法

式 (7), すなわち、 $n = 0$ の場合には、式 (15) は

$$\begin{aligned} V(a, \beta, 0, x) &= \frac{\beta}{\Gamma(\beta + 1)\Gamma(a + 1 - \beta)} \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} \{A_k(a, \beta) - B_k(a, \beta)\} x^k \end{aligned} \quad (22)$$

と表すことができる。ここで、

$$\begin{aligned} A_k(a, \beta) &= \frac{\Gamma(a + k)}{\Gamma(k + \beta)\Gamma(k + 1)\Gamma(a)\Gamma(a + 1 - \beta)} \\ &- \frac{\Gamma(a + k - \beta)}{\Gamma(k)\Gamma(k + 1 - \beta)\Gamma(a)\Gamma(a + 1 - \beta)} \end{aligned} \quad (23)$$

$$B_k(a, \beta) = \frac{\beta \phi(\beta, x) \Gamma(a + k - \beta)}{\Gamma(k)\Gamma(k + 1 - \beta)\Gamma(a)\Gamma(a + 1 - \beta)} \quad (24)$$

である。

また、 $A_k(a, \beta)$ に対して、次の漸化式が成り立つ (付録 A.2 参照)。

$$A_{k+1}(a, \beta) = \frac{a + k - \beta}{k(k + 1 - \beta)} \{A_k(a, \beta) + P_k(a, \beta)\} \quad (25)$$

ここで、

$$\begin{aligned} P_k(a, \beta) &= \frac{\beta \{-k^2 - a(2k + 1) + \beta(k + 1)\} \Gamma(a + k)}{(a + k - \beta)(k + 1)\Gamma(k + 1 + \beta)\Gamma(a)\Gamma(a + 1 - \beta)} \end{aligned} \quad (26)$$

である。したがって、

$$A_1(a, \beta) = \frac{a}{\Gamma(1 + \beta)\Gamma(a + 1 - \beta)} - \frac{1}{\Gamma(2 - \beta)\Gamma(a)} \quad (27)$$

が桁落ちを回避して計算できれば、 $k \geq 2$ の $A_k(a, \beta)$ は、式 (25) を用いて求められる。そこで、 $A_1(a, \beta)$ の桁落ちを回避する計算法について考える。式 (20) を用いて、変数に β を含むガンマ関数の部分を書き換えれば、

$$\begin{aligned} A_1(a, \beta) &= a\{G(1) + \beta H_p(1, \beta)\}\{G(a + 1) + \beta H_m(a + 1, \beta)\} \\ &- \{G(2) + \beta H_m(2, \beta)\}/\Gamma(a) \\ &= a\{1 + \beta H_p(1, \beta)\}\{G(a + 1) + \beta H_m(a + 1, \beta)\} \\ &- \{1 + \beta H_m(2, \beta)\}/\Gamma(a) \\ &= \beta \left[a \left\{ \frac{H_p(1, \beta)}{\Gamma(a + 1 - \beta)} + H_m(a + 1, \beta) \right\} - \frac{H_m(2, \beta)}{\Gamma(a)} \right] \end{aligned} \quad (28)$$

が得られる。上式において、 β の 0 次の項が相殺した最後の式を用いれば、 $A_1(a, \beta)$ は桁落ちを回避して求めることができる。このように、除去可能な桁落ちを取り除く。ただし、上式には加減算があるので、わずかな桁落ちの可能性はある。

式 (22) の和は、要求精度で収束するまで繰り返して求める (3.2 節と 3.3 節の場合も同様)。

3.2 $0.5 \leq b \leq 1.5$ の計算法

式 (8), すなわち、 $n = 1$ の場合には、式 (15) は

$$V(a, \beta, 1, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \{C_k(a, \beta) - D_k(a, \beta)\} x^k \quad (29)$$

と表すことができる。ここで、

$$\begin{aligned} C_k(a, \beta) &= \frac{\Gamma(a + k)}{k!\Gamma(k + 1 + \beta)\Gamma(a)\Gamma(a - \beta)} \\ &- \frac{\Gamma(a + k - \beta)}{k!\Gamma(k + 1 - \beta)\Gamma(a - \beta)\Gamma(a)} \\ D_k(a, \beta) &= \frac{\beta \phi(\beta, x) \Gamma(a + k - \beta)}{k!\Gamma(k + 1 - \beta)\Gamma(a - \beta)\Gamma(a)} \end{aligned} \quad (30)$$

である。

また, $C_k(a, \beta)$ に対して, 次の漸化式が成り立つ.

$$C_{k+1}(a, \beta) = \frac{a+k-\beta}{(k+1-\beta)(k+1)} \{C_k(a, \beta) + Q_k(a, \beta)\} \quad (31)$$

ここで,

$$Q_k(a, \beta) = \frac{(k+1)\beta \{2(1-a) + \beta - k - 1\} \Gamma(a+k)}{(a+k-\beta)(k+1)! \Gamma(k+2+\beta) \Gamma(a) \Gamma(a-\beta)} \quad (32)$$

である. したがって,

$$C_0(a, \beta) = \frac{a-\beta}{\Gamma(1+\beta)\Gamma(a+1-\beta)} - \frac{1}{\Gamma(a)\Gamma(1-\beta)} \quad (33)$$

が桁落ちなしで計算できれば, $k \geq 1$ の $C_k(a, \beta)$ は式 (31) を用いて求められる. それで, $C_0(a, \beta)$ の計算法について考える. 式 (20) を用いて, 変数に β を含むガンマ関数の部分を書き換えれば,

$$\begin{aligned} C_0(a, \beta) &= (a-\beta)\{G(1)+\beta H_p(1, \beta)\}\{G(a+1)+\beta H_m(a+1, \beta)\} \\ &\quad - \frac{G(1)+\beta H_m(1, \beta)}{\Gamma(a)} \\ &= \beta \left[\frac{1}{\Gamma(1+\beta)} \left\{ a H_m(a+1, \beta) - \frac{1}{\Gamma(a+1-\beta)} \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{H_p(1, \beta) - H_m(1, \beta)}{\Gamma(a)} \right] \quad (34) \end{aligned}$$

が得られる. β の 0 次の項は相殺されるため, $C_0(a, \beta)$ は桁落ちを回避して求めることができる.

3.3 $1.5 \leq b \leq 2.5$ の計算法

式 (9), すなわち, $n = 2$ の場合には, 式 (15) は

$$V(a, \beta, 2, x) = x^{-1-\beta} \frac{\beta}{\Gamma(a)\Gamma(1-\beta)} + \sum_{k=0}^{\infty} \{E_k(a, \beta) - F_k(a, \beta)\} x^k \quad (35)$$

と表すことができる. ここで,

$$\begin{aligned} E_k(a, \beta) &= \frac{\Gamma(a+k)}{k! \Gamma(k+2+\beta) \Gamma(a) \Gamma(a-1-\beta)} \\ &\quad - \frac{\Gamma(a+k-\beta)}{\Gamma(k+1-\beta)(k+1)! \Gamma(a) \Gamma(a-1-\beta)} \\ F_k(a, \beta) &= \frac{\beta \phi(\beta, x) \Gamma(a+k-\beta)}{\Gamma(k+1-\beta)(k+1)! \Gamma(a) \Gamma(a-1-\beta)} \quad (36) \end{aligned}$$

である.

また, $E_k(a, \beta)$ に対して, 次の漸化式が成り立つ.

$$E_{k+1}(a, \beta) = \frac{a+k-\beta}{(k+1-\beta)(k+2)} \{E_k(a, \beta) + R_k(a, \beta)\} \quad (37)$$

ただし,

$$R_k(a, \beta) = \frac{-\beta \{(k+1)^2 + (a-1)(2k+3) - (k+1)\beta\} \Gamma(a+k)}{(a+k-\beta)(k+1)! \Gamma(k+3+\beta) \Gamma(a) \Gamma(a-1-\beta)} \quad (38)$$

である. したがって,

$$\begin{aligned} E_0(a, \beta) &= \frac{1}{\Gamma(2+\beta)\Gamma(a-1-\beta)} - \frac{a-1-\beta}{\Gamma(a)\Gamma(1-\beta)} \\ &= \frac{(a-\beta)(a-1-\beta)}{\Gamma(2+\beta)\Gamma(a+1-\beta)} - \frac{a-1-\beta}{\Gamma(a)\Gamma(1-\beta)} \quad (39) \end{aligned}$$

が桁落ちなしで計算できれば, $k \geq 1$ の $E_k(a, \beta)$ は式 (37) を用いて求められる. それで, $E_0(a, \beta)$ の計算法について考える. 式 (19) で表されるガンマ関数の逆数のテイラー展開は $r < 1$ では収束は遅いので, 上式の後者の式を使う. 式 (20) を用いて, 変数に β を含むガンマ関数の部分を書き換えれば,

$$\begin{aligned} E_0(a, \beta) &= (a-\beta)(a-1-\beta)\{G(2)+\beta H_p(2, \beta)\}\{G(a+1) \\ &\quad +\beta H_m(a+1, \beta)\} - \frac{(a-1-\beta)\{G(1)+\beta H_m(1, \beta)\}}{\Gamma(a)} \\ &= \beta \left[\frac{1}{\Gamma(2+\beta)} \left\{ a(a-1)H_m(a+1, \beta) + \frac{\beta-2a+1}{\Gamma(a+1-\beta)} \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\Gamma(a)} \left\{ (a-1)(H_p(2, \beta) - H_m(1, \beta)) + \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \right\} \right] \quad (40) \end{aligned}$$

が得られる. β の 0 次の項は相殺されるため, $E_0(a, \beta)$ は桁落ちを回避して求めることができる.

3.4 $\beta = 0$, すなわち, $b = n$ の場合での使用

上述した計算法では, 式 (1) の $\{ \}$ の部分である $V(a, \beta, n, x)$ を求めている. そのとき, $V(a, \beta, n, x)$ は

$$V(a, \beta, n, x) = \beta W(a, \beta, n, x) \quad (41)$$

の形で表され, 実際の計算では, $W(a, \beta, n, x)$ を求めている. それで, $\beta W(a, \beta, n, x)$ に $\pi / \sin \pi b = \Gamma(b)\Gamma(1-b)$ を掛ければ, $U(a, n + \beta, x)$ が求められることになる. たとえば, $n = 0$ のときには,

$$\begin{aligned} U(a, \beta, x) &= \beta W(a, \beta, 0, x) \Gamma(\beta) \Gamma(1-\beta) \\ &= W(a, \beta, 0, x) \Gamma(1+\beta) \Gamma(1-\beta) \quad (42) \end{aligned}$$

となり, $\beta \rightarrow 0$ とすれば, $U(a, 0, x)$ は

$$U(a, 0, x) = W(a, 0, 0, x) \tag{43}$$

として得られる. 式 (28) の $A_1(a, \beta)$ の表式中の $H_p(1, \beta)$, $H_m(a+1, \beta)$ および $H_m(2, \beta)$ は, 式 (21) により計算できるが, $\beta=0$ であるので, ここでは, 初項のみの計算で済むため, $\beta \neq 0$ の場合と比べて能率的に計算できる. このように, 本方法は, β が 0 かどうかにかかわらず用いることができる.

別法として, b が 1 以上の整数のときには, 文献 [1] の公式 13.1.6

$$U(a, m+1, x) = \frac{(-1)^{m+1}}{m! \Gamma(a-m)} \left[M(a, m+1, x) \log x + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k x^k}{(m+1)_k k!} \{ \psi(a+k) - \psi(1+k) - \psi(1+m+k) \} \right] + \frac{(m-1)!}{\Gamma(a)} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{(a-m)_k x^{k-m}}{(1-m)_k k!} \tag{44}$$

を使うことができる. ただし, m は 0 以上の整数である. $\psi(x)$ はプサイ関数 (ディガンマ関数) であり, 4 章でも扱う.

両者の計算とも, 対数の計算は 1 回, プサイ関数の計算は 3 回である. 上式は, m が 0 以上の整数のときに有効な式であるので, $U(a, n, x)$ の計算では, n は 1 以上で使用でき, $n=0$ のときには, 式 (4) を用いてから上式を使えばよい. 本方法は, 上で示したように, $n=0$ 以上で使うことができる.

3.5 必要な Taylor 展開とガンマ関数の変数の負対応化

式 (28), (34) と (40) から, $G(1 \pm \beta) (= 1/\Gamma(1 \pm \beta))$, $G(2 \pm \beta) (= 1/\Gamma(2 \pm \beta))$ および $G(a+1-\beta) (= 1/\Gamma(a+1-\beta))$ の $\beta=0$ 周りのテイラー展開が必要であることが分かる.

また, 式 (30) と (32) において, $\Gamma(a-\beta)$ の計算では, 引数 $a-\beta$ が負になる可能性もある (式 (6) より, $-0.5 < \beta \leq 0.5$). それで, 使用するコンパイラに付属するガンマ関数のプログラムが引数の負対応化されていない場合には, $\Gamma(a-\beta) = \Gamma(a+1-\beta)/(a-\beta)$ と変形して行うとよい. 式 (36) と (38) においても, $\Gamma(a-1-\beta) = \Gamma(a+1-\beta)/((a-\beta)(a-1-\beta))$ として計算を行うとよい.

4. ガンマ関数の逆数のテイラー展開の係数の計算方法

ガンマ関数の逆数のテイラー展開を計算するためには, 要求精度を満足する次数までの微分係数が必要となる. ガンマ関数の逆数のテイラー展開は, 文献 [1] の数表 6.1.34 に, $1/\Gamma(\beta)$ の $\beta=0$ 周りのテイラー展開

$$G(\beta) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \beta^k \tag{45}$$

の係数が載せられている. 上式の両辺を β で割ると, $1/\Gamma(1+\beta)$ の $\beta=0$ 周りのテイラー展開

$$G(1+\beta) = \frac{1}{\Gamma(1+\beta)} = \sum_{k=0}^{\infty} c_{k+1} \beta^k \tag{46}$$

が得られる. この展開に限っては, ゼータ関数の $\zeta(2), \dots, \zeta(k-1)$ の値を計算して求めれば, それを用いて係数 c_k を定めることができる. 実際に, このプログラムを作り, 以下で述べる本論文の方法と計算時間を比較すると, 本論文の方法の方が能率的であることが分かった.

また, $G(2+\beta)$ のテイラー展開が必要なときには, 上式 (46) に, $1/(1+\beta)$ のテイラー展開を掛け, 同じベキを集めれば得られる.

変数 r が正の実数の場合の

$$G(r+\beta) = \frac{1}{\Gamma(r+\beta)} \tag{47}$$

に対して, プログラムの実行時に, $\beta=0$ 周りのテイラー展開の係数を必要な次数まで計算できる方法を述べる.

文献 [8] には, ポリガンマ関数 [9] から, ガンマ関数 $\Gamma(r)$ に対して, 必要な次数までの微分係数を求める方法が述べられている. それを参考にすれば, ガンマ関数の逆数 $G(r) (= 1/\Gamma(r))$ に対して, ポリガンマ関数から, 必要な次数までの微分係数を求める方法に書き直すことができる (その文献の $\Gamma^{(k)}(r) = \Gamma(r) D_k(r)$ の代わりに, $G^{(k)}(r) = -G(r) D_k(r)$ を用いる). 誌面の都合で, その方法の詳細な記述は省略するが, 次数が n までの微分係数 $G^{(n)}(r)$ を計算するための乗算回数は $(1/6)n^3 + (5/6)n - 1$ である.

次に, その方法より計算回数が少ない方法を提案する. これは, 現時点で, 微分係数 $G^{(n)}(r)$ を最も能率的に求めることができる方法である.

ここで用いるポリガンマ関数 $\psi^{(n)}(r)$ は

$$\psi^{(n)}(r) = \frac{d^n}{dx^n} \psi(r) \tag{48}$$

と定義される. ただし, $\psi(r)$ はプサイ関数あるいはディガンマ関数と呼ばれ,

$$\psi(r) = \frac{\Gamma^{(1)}(r)}{\Gamma(r)} \tag{49}$$

である. 式 (48) において, $n=1$ のとき, $\psi^{(1)}(r)$ はトリガンマ関数, $n=2$ のとき, $\psi^{(2)}(r)$ はテトラガンマ関数, $n=3$ のとき, $\psi^{(3)}(r)$ はペンタガンマ関数, ... と呼ばれる.

式 (2) の両辺を微分すると,

$$G^{(1)}(r) = -\frac{\Gamma^{(1)}(r)}{\Gamma(r)^2} = -\frac{\psi(r)}{\Gamma(r)} = -G(r)\psi(r) \tag{50}$$

が得られる。上式の両辺を n 回微分すると、

$$G^{(n+1)}(r) = - \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} G^{(i)}(r) \psi^{(n-i)}(r) \quad (51)$$

となる。積の n 回微分では、ライプニッツの公式を用いている。 $G^{(0)}(r) = G(r)$, $\psi^{(0)}(r) = \psi(r)$ である。

この式 (51) を用いる方法では、次数が n までの微分係数 $G^{(n)}(r)$ を計算するための乗算回数は $(1/2)(n^2 + n)$ で済む。

式 (21) の右辺の計算では、初項、第 2 項、 \dots と順次、加えて、要求精度に収束するまで和を求めることが必要である。そのための具体的な計算手順を次に説明しよう。

まず、 $G(r) = 1/\Gamma(r)$ を計算し、たとえば、配列の要素 $g(0)$ に入れる。次いで、 $\psi(r)$ を後述の方法で求め、たとえば、配列の要素 $\psi(0)$ に入れ、 $-g(0)*\psi(0)$ を計算し、配列の要素 $g(1)$ に入れる。次に、 $\psi^{(1)}(r)$ を求め、 $\psi(1)$ に入れる。 $-g(0)*\psi(1)-g(1)*\psi(0)$ (式 (51) の $n=1$ の場合) を計算し、 $g(2)$ に入れる。この手順を必要なだけ続ける。

ポリガンマ関数の計算には、Bowman [10] によるプログラム (FORTRAN) を用いる。ただし、それを呼び出すごとに、 $\psi^{(n)}(r)$ の n が 1 だけ大きいものを出力するように書き直している。このようにしたプログラムを用いれば、上述の手順により、必要な次数までの微分係数を求めることができる。それで、式 (21) の級数の値を要求精度で計算することができる。

いうまでもないが、式 (21) の変数 r に変数 a (文字通りの変数で、いろいろな値が実行時に定められる) を含む場合でも、その r に対応した微分係数 $G^{(1)}(r)$, $G^{(2)}(r)$, $G^{(3)}(r), \dots$ を上で説明した方法で計算できる。式 (21) の変数 r に a を含まない場合、すなわち、定数の場合には、 $G^{(1)}(r)$, $G^{(2)}(r)/2!$, $G^{(3)}(r)/3!$, \dots を必要と思われる次数まで、あらかじめ、計算しておき、プログラムの DATA 文にしておくことと能率的である。

5. 適用範囲

まず、本計算法の適用範囲を求めるための基準を与えておく。関数 $f_k(x)$ の値の計算法が、 N 回の加算

$$f = \sum_{k=0}^N t_k \quad (52)$$

によって表されるとする。 t_k と演算の有効桁数は一定であるとし、その相対精度を ε とする。文献 [7] と同様な考えに基づき、この場合には、基準の絶対誤差 δ を

$$\delta = r\varepsilon \max \left\{ |f(x)|, \left| x \frac{df(x)}{dx} \right| \right\} \quad (53)$$

と定め、この誤差以内で関数値 $f(x)$ が求められれば十分であると考えられる。 r は ε の r 倍の誤差を許すことを意味する。式 (52) により、 $f(x)$ の値を求めるとき、その絶対誤

差の絶対値の上限の近似値 δ_A は

$$\delta_A = \varepsilon \max \left\{ \max_k (|t_k|), \max_k (|s_k|) \right\} \quad (54)$$

として与えることができる。ここで、 s_k は加算の中間結果

$$s_k = \sum_{i=0}^k t_i \quad (k = 0, 1, 2, \dots, N) \quad (55)$$

である。 s_N は関数値 f になる。本論文では、 $\delta_A < \delta$ すなわち

$$\frac{\max \left\{ \max_k (|t_k|), \max_k (|s_k|) \right\}}{\max \left\{ |f(x)|, \left| x \frac{df(x)}{dx} \right| \right\}} < r \quad (56)$$

が満たされるならば、「関数値が基準誤差以内で得られる」ということにする。

式 (22) の計算について考察しよう。 $A_1(a, \beta)$ は、 β が小さいときには、そのまま式 (27) を計算すれば、大きな桁落ちを起こす。それで、そこでは、式 (28) により計算すれば、桁落ちは回避される (除去可能な桁落ちは取り除くことができる)。ただし、その式での 3 つの加減算、式 (22) での $A_1(a, \beta)$ と $B_1(a, \beta)$ の減算、 $k \geq 2$ での和の計算 ($A_k(a, \beta)$ と $B_k(a, \beta)$ の減算とその結果に x^k を掛けたものの和)、式 (25) での $A_k(a, \beta)$ と $P_k(a, \beta)$ の加算などにおいて、わずかな桁落ちの可能性はある。

テイラー展開により、関数値を計算する場合、たとえば、 $\sin x$ の場合には、そのテイラー級数は、 x が大きいときには途中の項の絶対値が大きくなり、その後、減少し収束する。そのとき、大きいものから小さいものを作り出す計算があるので、桁落ちが起こり、良い精度で関数値を得ることができない。本計算法の場合にも、それと同様なことが起こる。式 (29) と (35) についても同様である。

また、 x が小さくても、 a が大きくなると、同様に途中の項が大きくなり、その後、減衰する。それで、そのときには、桁落ちが起き、良い精度で関数値を求めることができない。

本論文では、加減算において多少の桁落ちが起っても、前述の基準誤差以内で関数値が求められればよいと考える。式 (52) の形にするため、式 (22) の場合には、

$$V(a, \beta, 0, x) = \frac{\beta}{\Gamma(\beta + 1)\Gamma(a + 1 - \beta)} + \sum_{k=1}^{\infty} \{ A_k(a, \beta)x^k - B_k(a, \beta)x^k \} \quad (57)$$

の形として計算する。ただし、 $A_1(a, \beta)$ については、

$$A_1(a, \beta) = \frac{\beta a H_p(1, \beta)}{\Gamma(a + 1 - \beta)} + \beta a H_m(a + 1, \beta) - \frac{\beta H_m(2, \beta)}{\Gamma(a)} \quad (58)$$

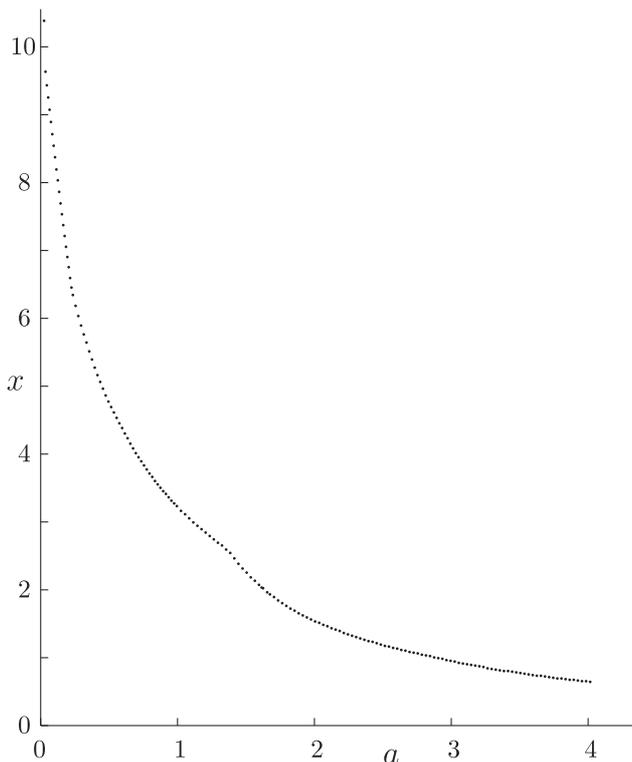


図 2 適用範囲 (点線の下側)
Fig. 2 Application range.

として計算を行う。式 (29) と (35) についても同様にして行う。このようにして、計算の途中で起こる桁落ちを考慮に入れ、計算法の適用範囲を求めている。

本計算法では、文献 [7] の場合と比べ、演算回数が多いので、式 (56) の r を 10^2 とする。これは、10 進 2 桁程度の桁落ちを許容することを意味する。

図 2 には、0.01 から 0.01 刻みで 4 までの a に対して、 x を 0.01 から 0.01 刻みで 20 まで変えたとき、式 (56) を満たさなくなった初めての x を点で示している。ただし、そのつど、 b を 0.1, 0.001, 0.1, 0.3, 0.51, 0.7, 1, 1.001, 1.1, 1.3, 1.499, 1.7, 2, 2.001, 2.1, 2.3, 2.499 と変えたときの誤差の最大値を用いている。この点線の下側が、「関数値が基準誤差以内で得られる」領域であり、本方法の適用範囲である。ここでは、丸め誤差を無視しているが、実際の計算では丸め誤差があるので、基準誤差より誤差は少し大きくなると考えられる。4 倍精度で計算したものとの比較により、この点線の下側の領域では、実際の倍精度演算の結果は 10^{-12} の精度より高いことを確認した。また、 a が 1 から 3 までの適用範囲内での平均の精度は 1.99×10^{-14} であった (計算した a, b と x の値は図 2 と同じ)。

6. おわりに

$a > 0, b \geq 0$ で、 $x (> 0)$ が小さい場合のクンマー関数 $U(a, b, x)$ の新しい数値計算法を述べた。ただし、 a と x の適用範囲を図 2 に示した。式 (1) で定義される $U(a, b, x)$

は、 b が整数のときには、 $\{ \}$ の前半部分と後半部分が同じになる。 b が整数に近いときには、その前半部分と後半部分の減算で桁落ちが起こる。それで、ガンマ関数の逆数のテイラー展開を用いることにより、除去可能な桁落ちを取り除いた。プログラムの実行時に、ガンマ関数の逆数に対して、必要な次数までの微分係数を能率的に計算できる方法を提案した。

参考文献

- [1] Abramowitz, M. and Stegun, I.A.: *Handbook of Mathematical Functions*, pp.504–515, Dover Publications (1972).
- [2] Olver, F.W.J., Lozier, D.W., Boisvert, R.F. and Clark, C.W.: *NIST Handbook of Mathematical Functions*, pp.321–334, Cambridge University Press (2010).
- [3] Temme, N.M.: *Special Functions, An Introduction to the Classical Functions of Mathematical Physics*, pp.171–177, John Wiley & Sons (1996).
- [4] Arscott, F.M. and Darai, A.: Curvilinear Co-ordinates Systems in which the Helmholtz Equation Separates, *IMA Journal of Applied Mathematics*, Vol.27, pp.33–70 (1981).
- [5] Gil, A., Segura, J. and Temme, N.M.: Computing the Kummer function $U(a, b, z)$ for small values of the arguments, *Applied Mathematics and Computation*, Vol.271, pp.532–539 (2015).
- [6] 吉田年雄, 奥居 哲: 漸化式を用いるクンマー関数 $U(a, b, x)$ の数値計算法と打ち切り誤差, *情報処理学会論文誌*, Vol.61, No.6, pp.1125–1133 (2020)
- [7] 吉田年雄, 二宮市三: x が小さい場合のベッセル関数 $Y_\nu(x)$ の数値計算, *情報処理学会論文誌*, Vol.23, No.3, pp.296–303 (1982).
- [8] Erlandson, E.: Computing Derivatives of the Gamma Function (2016), available from (<http://erikerlandson.github.io/blog/2016/06/15/computing-derivatives-of-the-gamma-function/>).
- [9] Abramowitz, M. and Stegun, I.A.: *Handbook of Mathematical Functions*, pp.258–260, Dover Publications (1972).
- [10] Bowman, K.O.: Computation of the Polygamma Functions, *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, Vol.13, pp.409–415 (1984).

付 録

A.1 $(n, a) = (0, 0)$ と $(n, a) = (2, 1)$ のとき、桁落ちが起こらないことの説明

式 (22) に着目しよう。式 (25), (26) と (28) より、 $A_k(a, \beta)$ は β を含む。式 (24) の $B_k(a, \beta)$ も β を含む。それで、式 (22) は、

$$V(a, \beta, 0, x) = \frac{\beta}{\Gamma(\beta + 1)\Gamma(a + 1 - \beta)} + \frac{\beta Y_0(a, \beta, x)}{\Gamma(a)}$$

の形で表される。上式に $\pi/\sin(\pi\beta)=\Gamma(\beta)\Gamma(1-\beta)$ を掛けた式において、 $a = 0$ と置くと、

$$U(0, \beta, x) = 1 \tag{A.1}$$

が得られる。このときには、桁落ちは起こらない。

次に、式 (35) に着目する。上と同様に、

$$V(a, \beta, 2, x) = x^{-1-\beta} \frac{\beta}{\Gamma(a)\Gamma(1-\beta)} + \frac{\beta Y_2(a, \beta, x)}{\Gamma(a-1-\beta)}$$

の形として表される。上式に $\pi/\sin(\pi(2+\beta))=\Gamma(2+\beta)\Gamma(1-\beta)/(\beta(1+\beta))$ を掛けた式において、 $a=1$ と置き、 $\beta \rightarrow 0$ とすると、

$$U(1, 2, x) = x^{-1} \quad (\text{A.2})$$

が得られる。このときには、桁落ちは起こらない。

A.2 漸化式 (25) の導出

$$A_{k+1}(a, \beta) = T_k(a, \beta) \{A_k(a, \beta) + P_k(a, \beta)\} \quad (\text{A.3})$$

において、 $T_k(a, \beta)$ と $P_k(a, \beta)$ を決めればよい。まず、 $A_k(a, \beta)$ の表式 (式 (23)) 右辺の後ろの項に $T_k(a, \beta)$ を掛けたものが $A_{k+1}(a, \beta)$ の表式 (式 (23)) で、 $k \rightarrow k+1$ の右辺の後ろの項と同じになるように $T_k(a, \beta)$ を決める。そのとき、 $P_k(a, \beta)$ は $A_{k+1}(a, \beta)$ の右辺の前の項を $T_k(a, \beta)$ で割ったものから $A_k(a, \beta)$ の右辺の前の項を引いたものとして得られる。



足達 義則 (正会員)

1953年生。1976年名古屋大学理学部数学科卒業。工学博士(東北大学)。同年名古屋工業大学助手。1988年中部大学講師。1990年同助教授。1996年同教授。2018年同経営情報学部長。2020年同学長補佐・図書館長。



吉田 年雄 (正会員)

1944年生。1968年慶應義塾大学工学部電気工学科卒業。1973年名古屋大学大学院工学研究科博士課程単位取得満期退学。工学博士。同年名古屋大学助手。1985年同講師。1986年中部大学助教授。1990年同教授。2005年同情報科学研究所長(～2014年3月)。2015年同名誉教授。



奥居 哲

1967年生。1995年筑波大学大学院博士課程工学研究科電子・情報工学専攻修了。博士(工学)。1996年三重大学工学部情報工学科助手。1999年同講師。2001年中部大学工学部情報工学科准教授。オートマトン、単一化、書換え系、関数論理型言語に関する研究に従事。