漸化式における誤差の伝播

漸化式の各計算ステップでは丸め誤差が発生し，これがいろいろな形で最終結果に影響を及ぼす．これを**誤差の伝播**と呼ぶ．Bessel 関数の計算を例としてこれを述べる．

前進漸化式の不安定性

Bessel 関数 $J_n = J_n(x)$ は，漸化式

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

を満たすことが知られている．$x = \alpha = 0.52359879$ とし，$J_0(\alpha) = 0.9326265674\cdots$, $J_1(\alpha) = 0.2529295727\cdots$ が既知であるとして，$J_6(\alpha)$ $(= 4.428171509\cdots \times 10^{-7})$ の値を計算しよう．

式 (1) を前進漸化式

$$J_{n+1} = -J_{n-1} + \frac{2n}{x} J_n \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{2}$$

に書換え，$J_0(\alpha)$，$J_1(\alpha)$ を初期値として，2 進 24 桁 0 捨 1 入で $J_n(\alpha)$ $(n = 2, 3, \cdots)$ を計算していくと，表 1 の欄 (F) のようになる．n が大きいときは無意味な出力結果が得られている．

表 1: 漸化式による Bessel 関数値の計算 $(N = 10)$

n	$J_n(0.52359879)$		
	(F) 前進漸化式	(B) 後退漸化式	真値
0	0.93262654 (既知)	0.93262654 (既知)	9.326265674$\cdots$ E -01
1	0.25292956 (既知)	2.5292956 E -01	2.529295727$\cdots$ E -01
2	3.3493214 E -02	3.3493205 E -02	3.349320805$\cdots$ E -02
3	2.9397267 E -03	2.9396817 E -03	2.939681959$\cdots$ E -03
4	1.9357481 E -04	1.9306485 E -04	1.930648801$\cdots$ E -04
5	1.7878304 E -05	1.0132040 E -05	1.013203961$\cdots$ E -05
6	1.4787563 E -04	4.4281712 E -07	4.428171509$\cdots$ E -07
7	3.3711817 E -03	1.6581635 E -08	1.658163695$\cdots$ E -08
8	8.9990878 E -02	5.4315024 E -10	5.431502504$\cdots$ E -10
9	2.746548	1.5811643 E -11	1.581164954$\cdots$ E -11
10	94.32936	4.1394788 E -13	4.142062469$\cdots$ E -13

(2 進 24 桁 0 捨 1 入による)

表 2: 拡大係数 a_n^m ($x = 0.52359879$ のとき)

$n\backslash m$	0	1	2	3	4	5	6
0	1.00						
1	0.00	1.00					
2	-1.00	3.81	1.00				
3	-7.63	28.18	7.63	1.00			
4	-86.54	319.10	86.54	11.45	1.00		
5	-1314.61	4847.38	1314.61	174.08	15.27	1.00	
6	-25020.79	92259.12	25020.79	3313.28	290.80	19.09	1.00

この現象は，漸化式の各段の計算で生じた丸め誤差が拡大して伝播していくことに起因するものであり，つぎのように説明できる．J_n の計算値を $\tilde{J}_n$ とし，発生誤差 δ_n を

$$\begin{aligned} \tilde{J}_n &= J_n + \delta_n \qquad (n = 0, 1); &(3)\\ \tilde{J}_{n+1} &= -\tilde{J}_{n-1} + \frac{2n}{x}\tilde{J}_n + \delta_{n+1} \qquad (n = 1, 2, \cdots) &(4)\end{aligned}$$

で定義すると，$\tilde{J}_n$ に含まれる誤差 $\Delta_n = \tilde{J}_n - J_n$ は，

$$\Delta_0 = \delta_0,\ \Delta_1 = \delta_1; \quad \Delta_{n+1} = -\Delta_{n-1} + \frac{2n}{x}\Delta_n + \delta_{n+1} \quad (n = 1, 2, \cdots) \tag{5}$$

を満たす．これより，

$$\Delta_n = \sum_{m=0}^{n} a_n^m \delta_m \tag{6}$$

の形になることが分かる．ここの係数 a_n^m を拡大係数と呼ぼう．この式を Δ_n の漸化式に代入すると，拡大係数 a_n^m の満たすべき漸化式

$$a_{m-1}^m = 0, a_m^m = 1; \quad a_{n+1}^m = -a_{n-1}^m + \frac{2n}{x}a_n^m \quad (n = m, m+1, \cdots) \tag{7}$$

が得られる．例えば，$x = \alpha = 0.52359879$ のときに拡大係数 a_n^m は表 2 のようになる．発生誤差 δ_n は $\tilde{J}_n$ に対してマシンエプシロン程度の大きさであるが，これがこのように大きく拡大されるのである．一方，J_n の方は n が大きくなるにつれて 0 に近づくので，結局，計算値は殆ど誤差だけになって無意味な値となっている．

このように丸め誤差が拡大しながら伝播していくような算法は，不安定な算法と呼ばれ，実用にならない．数値計算法の設計・選択に際しては，演算回数だけでなく，誤差の伝播にも配慮する必要がある．

後退漸化式による計算法

そこで，J_n を安定に精度よく計算するために，次のような算法が知られている．これは，漸化式 (1) が斉次であることと十分大きい n に対して J_n が殆ど 0 になることとを利用して，漸化式 (1) を n を減らしながら逆向きに使うものである．$s\ (\neq 0)$ を (後に定める) スケール因子とすると，

$$K_n = J_n / s \tag{8}$$

も漸化式 (1) を満たす．十分大きい数 N に対して K_{N+1} を 0 で近似し，スケール因子 s を $K_N = 1$ となるように選ぶと，次のような**後退漸化式**を利用した算法が得られる[1]:

$$
\begin{aligned}
K_{N+1} &= 0, \quad K_N = 1; \\
K_{n-1} &= -K_{n+1} + \frac{2n}{x} K_n \qquad (n = N, N-1, \ldots, 1), \\
s &= J_0 / K_0, \quad J_n = s K_n.
\end{aligned} \tag{9}
$$

$N = 10$ として計算した結果を表 1 の欄 (B) に示す．

このような後退漸化式による計算法は，**Miller の方法**とも呼ばれ，Bessel 関数に限らず一般に，与えられた漸化式の**最小解** (漸化式を満たす数列のうち，$n \to \infty$ での増加のしかたが最も小さいもの) を求める場合に有効であることが多い．

後退漸化式 (9) に基づく J_n の計算値には，$K_{N+1} = 0$ とおいたことによる打ち切り誤差 (公式誤差) と丸め誤差の両方が含まれているが，打ち切り誤差の影響は漸化式計算の過程で急激に減少し，しかも，丸め誤差の伝播に関する不安定現象を呈さないことを示すことができる．

[本資料は，杉原正顯, 室田一雄：数値計算法の数理, 岩波書店, 1994 の §2.3 に基づく．]

以上 (2013-10-07)

[1]通常は，Bessel 関数に固有の関係式 $1 = J_0 + 2\sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}$ を利用して，$1/s = K_0 + 2\sum_{n=1}^{[N/2]} K_{2n}$ から s を定める．