

一様な相対誤差をもつ誤差関数の計算法

筑波大学 電子・情報工学系 森 正武

§1. 誤差関数の表現と数値計算法

誤差関数

$$\operatorname{erfc} t = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_t^{\infty} e^{-s^2} ds \quad (1.1)$$

は次のように表現できることが知られている ([1], p.297).

$$\operatorname{erfc} t = \frac{2t}{\pi} e^{-t^2} \int_0^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{x^2 + t^2} dx \quad (1.2)$$

ここで、右辺の積分の部分を

$$f(t) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{x^2 + t^2} dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{x^2 + t^2} dx \quad (1.3)$$

とおく。すると、これは $\pm\infty$ で減衰の十分速い解析関数の $(-\infty, \infty)$ での積分であるから、等間隔さ h のみ幅 h をもつ次のような台形則によって精度良く近似できることが期待される。

$$f_h(t) = h \left[\frac{1}{2t^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n^2 h^2}}{(nh)^2 + t^2} \right] \quad (1.4)$$

$f(t)$ を $f_h(t)$ によって近似したために生ずる誤差は

$$\Delta f_n(t) = f(t) - f_n(t) = \frac{1}{4\pi i} \int_C \Phi_n(z) \frac{e^{-z^2}}{z^2 + t^2} dt \quad (1.5)$$

$$\Phi_n(z) = \begin{cases} \frac{-2\pi i}{1 - \exp(-\frac{2\pi i}{n}z)} ; & \text{Im } z > 0 \\ \frac{+2\pi i}{1 - \exp(+\frac{2\pi i}{n}z)} ; & \text{Im } z < 0 \end{cases} \quad (1.6)$$

で与えられる [2]. 積分路 C は実軸を上下からはさむ図 1 に示すような曲線である.

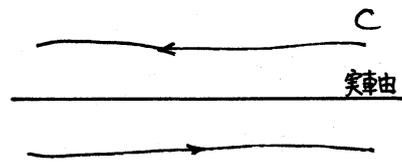


図 1

ここで、 $\text{erfc } t$ の変数 t は正の実数であるとする。もしも、誤差の積分 (1.5) の右辺の被積分関数

$$w(z) = \Phi_n(z) \frac{e^{-z^2}}{z^2 + t^2} \quad (1.7)$$

の極 $\pm it$ の位置が実軸から十分離れているならば、有理関数の部分 $1/(z^2 + t^2)$ の影響は小さいのでこの (1.7) の鞍点は近似的に

$$\Phi_n(z) e^{-z^2} \doteq \pm 2\pi i \exp\left(\pm \frac{2\pi i}{n} z - z^2\right) \quad (1.8)$$

となることがわかる。 $\exp(-\pi^2/n^2)$ の値は n が小さければひじょうに小さな値になる。したがって、台形則のきざみ幅を小さくしてもなお極 $\pm it$ の位置が上述の鞍点 $\pm \frac{\pi}{n}i$ よりも十

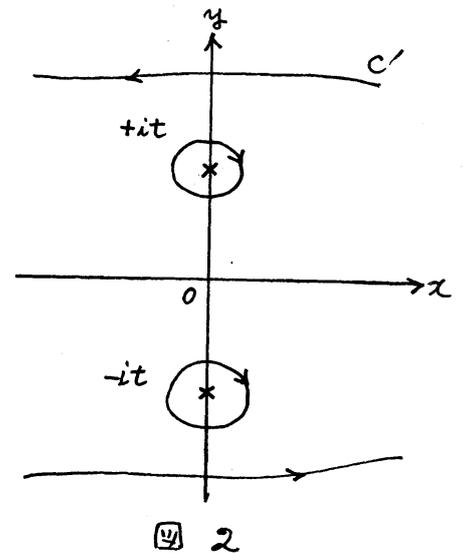
実軸から遠くになれば、すなわち

$$t \gg \frac{\pi}{\epsilon} \quad (1.9)$$

である場合には、台形和 (1.4) によって $f(t)$ の精度の高い近似値を得ることができる。

それに対して、実軸と $e^{-x^2}/(x^2+t^2)$ の極 $\pm it$ との距離が小さい場合には、この極からの寄与によって誤差の積分 $\Delta f_R(t)$ の値は大きくなるので、(1.4) の右辺をそのまま $f(t)$ の近似値として採用するのは適当ではない。ところが、(1.5) の右辺の積分は、積分路 C を図 2 に示すように極 $\pm it$ を越えて実軸から遠ざけて C' に変更することによって次のように変形することができる。

$$\Delta f_R(t) = R(t) + \frac{1}{4\pi i} \int_{C'} \Phi_R(z) \frac{e^{-z^2}}{z^2+t^2} dz \quad (1.10)$$



ここで、 $R(t)$ は $e^{-x^2}/(x^2+t^2)$ の単純な極 $\pm it$ からの積分への寄与で、留数定理から次のように表現することができる。

$$R(t) = -2\pi i \left[\frac{1}{4\pi i} \Phi_R(it) \frac{e^{t^2}}{2it} + \frac{1}{4\pi i} \Phi_R(-it) \frac{e^{t^2}}{-2it} \right]$$

$$= - \frac{\frac{\pi}{t} e^{t^2}}{\exp\left(\frac{2\pi t}{\epsilon}\right) - 1} \quad (1.11)$$

この $R(t)$ は簡単に計算できる量であることに注意されたい。極点を越えて実軸から遠ざけた積分路 C' に沿う積分の値は、はじめに述べた場合と同様に極点の影響が小さくなるのでやはり (1.8) を使って近似的に評価することができて、 ϵ が小さければその値は十分小さくなる。したがって、 ϵ を適当に小さくしたとき、

$$t \ll \frac{\pi}{\epsilon} \quad (1.12)$$

となる場合には、(1.11) の $R(t)$ を補正項として台形和 (1.4) に加えて

$$f_n(t) + R(t) \quad (1.13)$$

を近似値として採用するならば、これが十分精度の高い近似値となる。

極点の実軸からの距離 t が $\frac{\pi}{\epsilon}$ とほぼ等しい場合には、極点の近傍における (1.7) の $w(z)$ の挙動は少々複雑になる。しかし、この場合には (1.10) の右辺が 1 項と 2 項の大きさはオーダーとしてほぼ同程度となり、したがって補正項 $R(t)$ の値が (1.8) の値とほぼ同程度に存るから、この補正を

加えても加えなくても得られる値にオーダーとして差異はない。

以上をまとめると、 t が正の実数のときの $\operatorname{erfc} t$ の数値計算法は次のようになる。

$$\operatorname{erfc} t = \begin{cases} \frac{2t\hbar}{\pi} e^{-t^2} \left[\frac{1}{2t^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n^2\hbar^2}}{(n\hbar)^2 + t^2} \right] + \frac{2t}{\pi} e^{-t^2} E(t) ; \frac{\pi}{\hbar} < t & (1.14) \\ \frac{2t\hbar}{\pi} e^{-t^2} \left[\frac{1}{2t^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n^2\hbar^2}}{(n\hbar)^2 + t^2} \right] - \frac{2}{\operatorname{erf}\left(\frac{2\pi t}{\hbar}\right) - 1} + \frac{2t}{\pi} e^{-t^2} E(t) ; 0 < t < \frac{\pi}{\hbar} & (1.15) \end{cases}$$

ただし、 $E(t)$ は (1.5) あるいは (1.10) の右辺の 2 項の誤差の積分

$$E(t) = \frac{1}{4\pi i} \int_{\tilde{C}} \Phi_{\hbar}(z) \frac{e^{-z^2}}{z^2 + t^2} dz \quad (1.16)$$

で、積分路 \tilde{C} は補正項を加えないときは極 $\pm it$ より実軸に近く、補正項を加えるときは極 $\pm it$ より実軸から遠くにとる。

§2 誤差解析

誤差の積分 $E(t)$ の積分路を適当に定めることにより、誤差の厳密な上限を求めることができる。ここでも、 t は

$$t > 0$$

$$(2.1)$$

なる実数であると仮定しておく。

ここで、積分路 \tilde{C} を実軸から $t + \alpha$ ($-t < \alpha$, $\alpha \neq 0$) だけ離れた実軸に平行な直線にとる (図3)。

このとき、上半平面にある路に沿って

$$z = \xi + i(t + \alpha), \quad -\infty < \xi < \infty$$

(2.2)

であるから

$$|z^2 + t^2| = |z - it| \cdot |z + it| = |\xi + i\alpha| \cdot |\xi + i(2t + \alpha)|$$

$$\geq |\alpha| \cdot (2t + \alpha) \quad (2.3)$$

が成り立つ。したがって、この路に沿う積分 (1.5) あまりは

(1.10) の右辺の2項の絶対値は

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-2\pi i}{1 - \exp\left(\frac{2\pi i}{h}\xi\right) \exp\left(\frac{2\pi i}{h}(t+\alpha)\right)} \times \frac{\exp\left(-\xi^2 + (t+\alpha)^2 - 2i(t+\alpha)\xi\right)}{\{\xi + i(t+\alpha)\}^2 + t^2} d\xi \right| \\ & \leq \frac{\exp(t+\alpha)^2}{2 \left\{ \exp\left(\frac{2\pi}{h}(t+\alpha)\right) - 1 \right\} \{|\alpha|(2t+\alpha)\}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \\ & = \frac{\sqrt{\pi}}{2|\alpha|(2t+\alpha)} \frac{\exp(t+\alpha)^2}{\exp\left(\frac{2\pi}{h}(t+\alpha)\right) - 1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2|\alpha|(2t+\alpha)} \frac{\exp\left(t+\alpha - \frac{\pi}{h}\right)^2}{1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{h}(t+\alpha)\right)} \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right) \end{aligned}$$

(2.4)

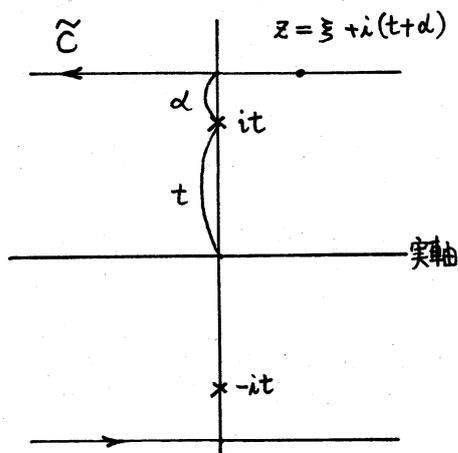


図 3

となる。ただし、 h は $\exp(2\pi(t+\alpha)/h) > 1$ が満たされるように十分小さくとるものとする。下半平面の積分路も同様に上半平面と対称にとると、結局誤差の積分 $E(t)$ は次のように評価することができる。

$$|E(t)| \leq \frac{\sqrt{\pi}}{|\alpha|(2t+\alpha)} \frac{\exp(t+\alpha - \frac{\pi}{h})^2}{1 - \exp(-\frac{2\pi}{h}(t+\alpha))} \exp(-\frac{\pi^2}{h^2}) \quad (2.5)$$

この不等式は、 $\alpha > -t$ ($\alpha \neq 0$) なる任意の α について成り立つものである。 α をうまく選んで右辺を小さくすることができれば、それだけ精密な評価が得られることになる。

まず、 $t \neq \frac{\pi}{h}$ として $\alpha = \frac{\pi}{h} - t$ とおくと、誤差評価

$$|E(t)| \leq \frac{\sqrt{\pi}}{|t^2 - (\frac{\pi}{h})^2|} \frac{1}{1 - \exp(-\frac{2\pi^2}{h^2})} \exp(-\frac{\pi^2}{h^2}) \quad (2.6)$$

が得られる。右辺の最後の $\exp(-\pi^2/h^2)$ は h が小さくなるにつれてひじょうに小さな数となる。

この式は明らかに $t = \frac{\pi}{h}$ のときには使えない。これは積分路 \tilde{c} をちょうど極 $\pm t$ を通るように選んだ場合に相当する。そこで、 $t = \frac{\pi}{h}$ のときには積分路 \tilde{c} を極 $\pm t$ を避けるように少しずらして $\alpha = \frac{\pi}{h} - t + \frac{1}{\sqrt{2}}$ にとる。すると、 $E(t)$ が次のように評価されることがわかる。

$$|E(t)| \leq \frac{\sqrt{\pi}}{|t^2 - (\frac{\pi}{h} + \frac{1}{\sqrt{2}})^2|} \frac{\exp(\frac{1}{2})}{1 - \exp(-\frac{2\pi}{h}(\frac{\pi}{h} + \frac{1}{\sqrt{2}}))} \exp(-\frac{\pi^2}{h^2}) \quad (2.7)$$

不等式 (2.6) は $t \neq \frac{\pi}{h}$, 不等式 (2.7) は $t \neq \frac{\pi}{h} + \frac{1}{\sqrt{2}}$ であり
 さえすれば成立するものである。したがって、 $0 < t$ なる t
 の全域にわたっての誤差評価は、いずれにせよ (2.6) の右辺
 と (2.7) の右辺のうちの小さい方によって上から評価される
 ことになる。不等式 (2.6) と (2.7) が等しくなる点を β とす
 ると、 β は

$$\beta = \left[\frac{1}{1+\lambda} \left\{ \left(\frac{\pi}{h} + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 + \lambda \left(\frac{\pi}{h} \right)^2 \right\} \right]^{1/2} \quad (2.8)$$

で与えられる。ただし、

$$\lambda = \frac{1 - \exp\left(-\frac{2\pi^2}{h^2}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{h} \left(\frac{\pi}{h} + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)\right)} \exp\left(\frac{1}{2}\right) \quad (2.9)$$

である。よして、 $t < \beta$ では (2.7) の右辺の方が小さく、一
 方 $\beta < t$ では (2.6) の右辺の方が小さくなる。すなわち、

$\operatorname{erfc} t$ を (1.14) あるいは (1.15) によって計算したときの絶
 対誤差は、

$$\begin{cases} t < \beta \text{ のとき (2.7)} \\ t \geq \beta \text{ のとき (2.6)} \end{cases}$$

によって評価できる。

つぎに、(1.14) あるいは (1.15) によって $\operatorname{erfc} t$ を計算す
 るときの相対誤差を調べよう。 $\operatorname{erfc} t$ の計算と $f(t)$ の計算

では相対誤差は等しいから、 $f(t)$ の計算の相対誤差、すなわち

$$\varepsilon(t) = \frac{E(t)}{f(t)} \quad (2.10)$$

について考える。 $f(t)$ 自身の大きさについて、実は不等式

$$\frac{1}{f(t)} < \frac{1}{\sqrt{\pi}} t(t + \sqrt{t^2 + 2}) \quad (2.11)$$

が成り立つことがわかっている ([1], p.298. 付録参照)。したがって、相対誤差 $\varepsilon(t)$ に関して

$$|\varepsilon(t)| < \frac{1}{\sqrt{\pi}} t(t + \sqrt{t^2 + 2}) E(t) \quad (2.12)$$

が成立する。いま、(2.12)の右辺の t による変化を見るために

$$g_1(t) = \frac{t(t + \sqrt{t^2 + 2})}{t^2 - \left(\frac{\pi}{2}\right)^2} \quad (2.13)$$

とおくと、 $\beta \leq t$ において $g_1(t)$ は単調減少し、 $t = \beta$ において最大値 $g_1(\beta)$ をとる。一方、

$$g_2(t) = \frac{t(t + \sqrt{t^2 + 2})}{\left(\frac{\pi}{2} + \frac{1}{2}\right)^2 - t^2} \quad (2.14)$$

とおくと、 $0 < t \leq \beta$ において $g_2(t)$ は単調増大し、 $t = \beta$ において最大値をとる。したがって、両者を併せ考えると、

(2.12) の右辺は $t = \beta$ において最大値をとることがわかる。こうして、相対誤差 $\varepsilon(t)$ に関する次のような評価が導かれた。

$$|\varepsilon(t)| < \frac{\beta(\beta + \sqrt{\beta^2 + 2})}{\{\beta^2 - (\frac{\pi}{n})^2\} \{1 - \exp(-\frac{2\pi^2}{n^2})\}} \exp(-\frac{\pi^2}{n^2}) \quad (2.15)$$

右辺は t を含まない一様な評価になっている。 β は例えば、 $n = 0.5$ のとき $\beta = 6.56$ 程度の値になる。

実際の二三の計算値の相対誤差と、(2.15) による相対誤差の理論的上限とを次に示す。

n	相対誤差の 理論的上限	計算値の相対誤差 (*補正項付)				計算の項数 n
		$t = 0.1$	$t = 1.0$	$t = 3.0$	$t = 10.0$	
0.75	4.0×10^{-7}	* 1.6×10^{-10}	* 3.5×10^{-9}	* 4.1×10^{-8}	5.8×10^{-8}	6
1.0	6.8×10^{-4}	* 5.8×10^{-7}	* 1.3×10^{-5}	* 2.2×10^{-4}	1.1×10^{-4}	4

§3 複素変数の場合の計算

これまでの議論の中では、本質的に t が実数であるという条件は (2.11) を除いて使っていない。したがって、上述したアルゴリズムは原理的には t をそのまま複素数とみなすことにより、複素変数に対する $\operatorname{erfc} t$ の計算に使用することができる。すなわち、(1.14) および (1.15) は補正項を含めて単純に t を複素変数とみなして計算を実行するだけで、精度の高

い結果を得ることが出来る。ただし、(1.11)の補正項は、 $\text{Re } t > 0$ の場合に成立するものであり、その絶対値が誤差の積分 $E(t)$ の絶対値よりも大きい場合に加えればよい。

図4は、 $t = 1+i$, $\epsilon = 1.0$ の場合の(1.5)の右辺の被積分関数

$$w(z) = \Phi_{\epsilon}(z) \frac{e^{-z^2}}{z^2 + t^2} \quad (3.1)$$

の絶対値の等高線図である。この関数の鞍点がほぼ $\pm \frac{\pi}{\epsilon} i$ のところに存在していることが見てとれる。前節の誤差解析からも明らかのように、極 $\pm it$ が鞍点に極端に近くないかぎり、

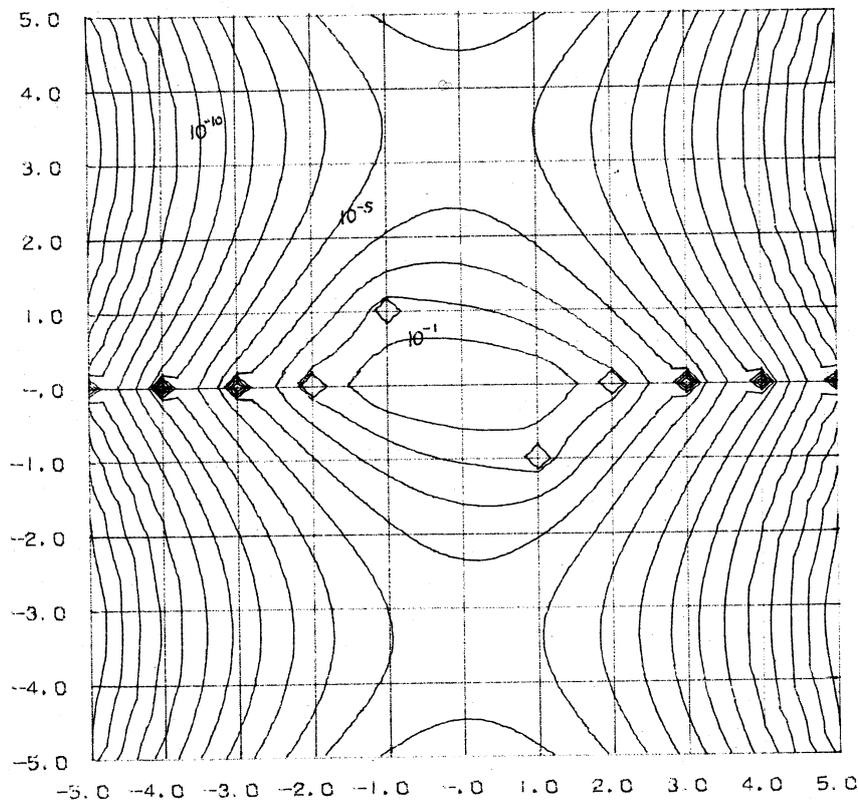


図4

(1.16) の誤差積分 $E(t)$ の絶対値の大きさはほぼ $\exp(-\pi^2/h^2)$ の程度となる。これはオーダーとしては四の鞍点の位置における $w(z)$ の値とほぼ等しい。一方、補正項 $R(t)$ の値は (1.11) よりほど

$$\left| \exp\left(t^2 - \frac{2\pi t}{h}\right) \right| = \exp\left(\tau^2 - \sigma^2 - \frac{2\pi\tau}{h}\right), \quad t = \tau + i\sigma \quad (3.2)$$

となる。したがって、補正を加えるべき範囲は、 $\tau = \operatorname{Re} t > 0$ のとき近似的に $\exp(\tau^2 - \sigma^2 - 2\pi\tau/h) > \exp(-\pi^2/h^2)$, すなわち

$$0 < \tau < \pm\sigma + \frac{\pi}{h} \quad (3.3)$$

で表される。つまり、虚軸上の点 $\pi i/h$ を通り実軸と 45° をなす二本の直線と実軸とで囲まれる三角形の内部に $t = \tau - i\sigma$ が入るとき、あるいは同じことであるが、 $\operatorname{Re} t < 0$ の場合も含めて、 $t = \tau + i\sigma$ が図5の正方形の内部に入るとき補正を加え、入らないときには補正を加える必要はない。

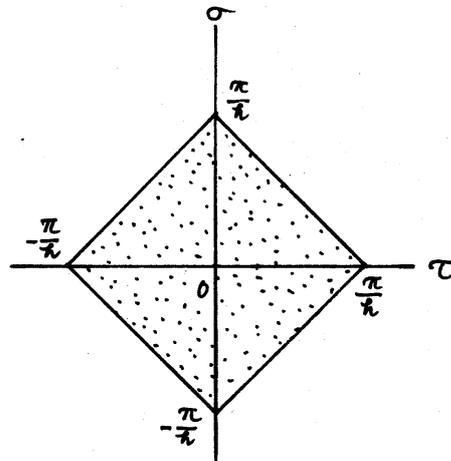


図 5

複素数に対する $\operatorname{erfc} t$ に関しては、実数値自身に対する (2.11) のような評価が得られていないので、相対誤差について

て厳密な評価式を得ることができない。しかし、 n を適当に小さくし、必要ならば補正を加えるならば、精度の高い結果を得ることができるとであろう。次に二三の計算値の相対誤差を示す。

n	計算値の相対誤差の絶対値 (*補正項付)				計算の項数 n
	$t=0.1+i$	$t=1+i$	$t=3+i$	$t=10+i$	
0.75	* 4.1×10^{-8}	* 5.4×10^{-9}	* 3.9×10^{-8}	4.8×10^{-8}	6
1.0	* 9.4×10^{-8}	* 2.0×10^{-5}	* 1.8×10^{-4}	1.0×10^{-4}	4

局所的にはここに示した方法より効率の良い方法があるかもしれない。しかし、実変数についてだけでなく、複素変数についても単一の公式でしかも比較的少ない計算の手間で十分な相対精度が得られる点にこの方法の特徴がある。

参考文献

- [1] M.A. Abramowitz and I. A. Stegun, ed., Handbook of Mathematical Functions, Nat. Bur. Stand. Appl. Math. Ser. No. 55. U.S. Govt. Printing Office, 1964, Dover, 1965.
- [2] 森正武, 数値解析と複素関数論, 筑摩書房, 1975, p.240

付録 不等式 (2.11) の証明

研究集会 (1981.11.19~21) 終了後、東大工学部室田一雄氏から不等式 (2.11) の簡潔な証明が寄せられたので、ここに掲げておく。

不等式 (2.11) は

$$g(t) \equiv e^{t^2} \int_t^{\infty} e^{-x^2} dx - \frac{\sqrt{t^2+2} - t}{2} > 0, \quad t > 0 \quad (\text{A.1})$$

と同値であるから、これを証明する。 $g(t)$ に関して

$$g(0) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{1}{\sqrt{2}} > 0, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} g(t) = 0 \quad (\text{A.2})$$

が成り立つ。一方、 $g'(t)$ を計算すると

$$\begin{aligned} g'(t) &= 2te^{t^2} \int_t^{\infty} e^{-x^2} dx - 1 - \frac{1}{2} \left\{ \frac{t}{\sqrt{t^2+2}} - 1 \right\} \\ &\leq 2te^{t^2} \int_t^{\infty} e^{-x^2} dx - 1 - \left\{ 2t \frac{\sqrt{t^2+2} - t}{2} - 1 \right\} = 2tg(t), \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

すなわち、 $g'(t) \leq 2tg(t)$ が成立する。ある $t (> 0)$ において $g(t) < 0$ になったとすると、 $g'(t) \leq 2tg(t)$ よりその点で $g'(t) < 0$ と存するが、一方、 $t \rightarrow \infty$ で $g(t) \rightarrow 0$ と存するからこれは矛盾である。したがって、 $g(t) \geq 0$ である。ただし、この等号も上と同じ議論により取除くことができるから、結局 $g(t) > 0$ が結論される。 [証明終]