

誤差函数の逆函数の計算

京大 数理解 一松 信

0. はじめに

誤差函数の逆函数の近似式については、昨年(1970)の研究集会で戸田英雄氏の発表があったが、端の付近では精度が十分でなかった。筆者は、端の付近での特異性からみて、近似式を作ることは困難であろうと思い、能率はいくつか、Newton 法で解く手法を試み、満足できる結果をえたので、ここに報告する。あわせて誤差函数(もっと一般に不完全ガンマ函数)の計算法について、一昨年(1969)、この研究集会で発表された戸田英雄氏の指示に、補足したい。

余談ながら、近年では、函数サブルーチンは、能率よりも精度が重んじられる傾向にあり、近似式よりもむしろ互換性に富む数学的展開式のほうが重視されてきたように思われる。ある意味で「歴史はくりかえす」感があって、興味深く思われる。

1. 不完全ガンマ函数の計算法

不完全ガンマ函数 (Prym の函数)

$$(1) \quad \gamma(v, x) = \int_0^x e^{-t} t^{v-1} dt, \quad \Gamma(v, x) = \int_x^\infty e^{-t} t^{v-1} dt$$

の計算公式はいろいろある。実用上ではむしろ清野教授らが試みたように、直接数値積分をしたほうが早いように思われるが、展開式の類で、よく使われるのは、下記の諸公式である。なお γ と Γ とは、ガンマ函数 $\Gamma(v)$ を介して

$$(2) \quad \gamma(v, x) + \Gamma(v, x) = \Gamma(v)$$

で相互に結ばれる。

$$(3) \quad \gamma(v, x) = x^v \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^n}{n! (n+v)} \quad (v \neq 0, -1, -2, \dots)$$

$$(3') \quad \Gamma(-\mu, x) = - \sum_{\substack{n=0 \\ n \neq \mu}}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{n-\mu}}{n! (n-\mu)} \\ - \frac{(-1)^\mu}{\mu} \left[\log x + \gamma - \left(1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{\mu} \right) \right]$$

($\mu = 0, 1, 2, \dots$; γ は Euler の定数)

$$(4) \quad \gamma(v, x) = x^v e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{v(v+1) \dots (v+n)} \quad (v \neq 0, -1, -2, \dots)$$

$$(5) \quad \gamma(v, x) = x^v e^{-x} \left[\frac{1}{\Gamma(v)} - \frac{\Phi}{n=1} \frac{(n-1+v)x}{n+v+x} \right] \quad (\text{連分数})$$

$$(6) \quad \gamma(v, x) = x^v e^{-x} \left[\frac{1}{\Gamma(v)} + \frac{\Phi}{n=1} \left(\frac{nx}{2n+v} - \frac{(v+n)x}{2n+1+v} \right) \right]$$

$$(7) \quad \Gamma(v, x) = x^v e^{-x} \sum_{n=1}^N \frac{(v-1)(v-2)\cdots(v-n+1)}{x^n} + R$$

(漸近展開)

$$(7') \quad R = \Gamma(v) - (1-v)(2-v)\cdots(N-v) x^v \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x)^{n-N}}{n!(n+v-N)}$$

('松 式')

$$(8) \quad \Gamma(v, x) = x^v e^{-x} \left[\frac{1}{x} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n-1}{x} + \frac{n}{x} \right) \right]$$

(x ≠ 0, 負の実数, 収束)

(3) (3') は $x=0$ の近くはよいが, x が大きくなると析落ちがひどくて実用にならない. (4) のほうが適用範囲は広い. (5) は簡単だが収束は (4) と大差ない. (6) は収束は早いが計算が複雑である. したがって ($v \neq 0$, 負の整数のとき) (4) を利用するのがよいようである.

x が $+\infty$ に近いときには (7) がよい. R を整級数 (7') で表せる公式は, 広い範囲に適用できるが, 式が複雑である上に, 精度は必ずしも十分でない. それは整級数の析落ち, および $\Gamma(v)$ との差をとることによる析落ちに原因する. (このことは, 広い範囲の x について計算してみても, はいめえ痛感した.) (8) は x が 0 に近いときには悪いが, 少し大きい x に対しては, 予想以上に優秀な公式である.

したがって, 0 に近い ($3 \sim 5$ まで) x については (4), 中間の ($3 \sim 5$ から (7) で十分になるまで; 30 くらい) x に

ついで (8), そして x が十分大きくて, 漸近展開だけ ($R=0$ とし) 十分なときには (7), と 三本立てにするのがよいらしい. (4), (8), (7) はいずれも $x^{\nu} e^{-x}$ という共通因子を含むので, この項は前もって共通に計算できる利点がある.

なお中間の x (たとえば $x=4$) について, (4) と (8) とをあわせると, (2) から $\Gamma(\nu)$ が求められる, $\Gamma(\nu)$ の計算法としては迂遠だが, 検算用としては, 有用である. また (3) の $\mu=0$ のときと, (8) の $\nu=0$ のときから, Euler 定数 γ の計算も可能である. (これは Bernoulli の数を利用しないため, かえって有用である. いっせい Sweeney (1963) が, γ を 3566 桁計算したときには, この種の手法を使っている.)

当面の誤差函数

$$\operatorname{erfc} x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2/2} dt = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{1}{2}, \frac{x^2}{2}\right)$$

については, 公式 (4), (8) はつきのようなになる.

$$(9) \quad \frac{1}{2} - \operatorname{erfc} x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!!}$$

$$(10) \quad \operatorname{erfc} x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2} \left[\frac{1}{\sqrt{x}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n!}{\sqrt{x}} \right]$$

2. 誤差函数の逆函数の計算

もともと発端が、端(値の大きい所)にあったので、小さい引き数の精度を保つため、 erfc の形で考える。

$f(x) = \operatorname{erfc} x$ とおくと、 $y = f(x)$ を Newton 法で解く反復は

$$(11) \quad x_{n+1} = x_n + [g(x_n) - \sqrt{2\pi} y \exp(x_n^2/2)]$$

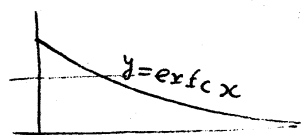
$$(10') \quad g(x) = \frac{1}{x} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n!}{x^{n+1}}$$

となる。(10)の右辺の因子が $-f'(x)$ であるのが目的の一つとこ
ろであった。) したがって連分數(10')の計算プログラムを用
意すれば、(11)で小さな y (したがって大きな x) に対する
 $y = f(x)$ の解が求められるはずである。

初期値としては、 $x_0 > 0$ なる何でもよいはずであるが、
収束を早めるために、

$$(12) \quad x_0 = \sqrt{-2 \log(\sqrt{2\pi} y / c)}$$

とした、(12)は、(10)で[]内 $=g(x)$ の値を定数 c とし
たものである。はじめ $1/c = 2$ としたが、これでは一般的に
 x_0 が大きすぎて、 x_1 が小さくなりすぎるので、後には



$1/c = 3$ とし、さらに $\left\{ \begin{array}{l} g(x) \text{ の 1 はじ} \\ \text{めの項をとって } (x_0 \text{ を求めたあと}) \end{array} \right.$
 $1/c = x_0 + 1/x_0$

を今一度 (12) に代入して x_1 とし, そこから (11) にうつった.
この方法で, $y \leq 0.01$ に対して, (11) の反復は最大 5 回
(10') は最大 25 項 の計算で, 10 桁の精度で答がえられる.

y が大きいときには, $z = \frac{1}{2} - y$ に置きかえ,

$\tilde{f}(x) = \operatorname{erf} x = z$ の形で解く. このときの反復は

$$(13) \quad x_{n+1} = x_n - [g(x_n) - \sqrt{2\pi} z \exp(x_n^2/2)],$$

$$(9') \quad g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!!}$$

となる. 初期値は $x_{-1} = 0$ からはじめた場合に相当する

$x_0 = \sqrt{2\pi} (0.5 - y)$ でもよいが, y が小さくなると反復
回数が多いため, $x_0 = 1.5 \times \sqrt{2\pi} (0.5 - y)$ とした. この因
子は 2.0 くらいにしてもよいが, そうすると y が 0.5 に近い
とき, 頁のオに入るおそれがあるので, 実験的に 1.5 とした.
 $\sqrt{2\pi} (0.5 - y)$ の値が 1.0 より小さい所では 1.0, 大きい所では
2.0 と区間を分けることも考えたが, 複雑なわりに能率の
向上はさほどでもないので, 一律に 1.5 とした. これでも,
 $y \geq 0.01$ のとき, (13) の反復は最大 6 回, (9') は 20 項で,
10 桁の精度がえられる.

はじめは, 0 に近い y に対してだけ Newton 反復を使い, あ
とは戸田氏の近似式と組合せるつもりであつたが, けつまよ
くことのついでに, 全域に対して, Newton 法によつた.

3. プログラム

参考までに、この方式で作った FUNCTION 副プログラムを掲げる。

```

1      FUNCTION RERFC(X)
2      C      THE INVERSE OF ERFC FUNCTION
3      Z = X
4      IF (Z .LE. 0.0) GO TO 900
5      IF (X .GT. 0.5) Z = 1.0-X
6      IF (Z .LE. 0.0) GO TO 901
7      P2S = 2.5066282746
8      C      P2S = SQRT(2 * PU)
9      EPS = 1.0E-8
10     IF (Z .GE. 0.01) GO TO 902
11     C      FOR SMALL X USE CONTINUED FRACTION AT INFINITY
12     Z = Z*P2S
13     G = 3.0
14     J=0
15     C      INITIAL VALUE SET AND IMPROVEMENT
16     903 Y = SQRT(-2.0*ALOG(G*Z))
17     IF (J .GT. 0) GO TO 904
18     G = Y + 1.0/Y
19     J = 1
20     GO TO 903
21     900 RERFC = 1.0E50
22     C      THE VALUE MEANS PLUS INFINITY
23     RETURN
24     901 RERFC = -1.0E50
25     C      THE VALUE MEANS MINUS INFINITY
26     RETURN
27     904 Y2 = Y*Y
28     P0 = 0.0
29     P1 = 1.0
30     Q0 = 1.0
31     Q1 = Y
32     C      THE ITERATION OF CONTINUED FRACTION
33     DO 905 J = 1,25
34     G = J
35     P = Y * P1 + G * P0
36     Q = Y * Q1 + G * Q0
37     P0 = P1
38     Q0 = Q1
39     P1 = P
40     Q1 = Q
41     905 CONTINUE

```

```

42      G = P/Q = Z*EXP(0.5 * Y2)
43      Y = Y + G
44      IF (ABS(G) .GE. EPS) GO TO 904
45      GO TO 919
46      C   FOR LARGE X USE TAYLOR SERIES
47      902 Z = P2S *(0.5 - Z)
48          Y = 1.5 * Z
49      C   INITIAL VALUE SET, THIS MAY BE Y = Z
50      913 Y 2 = Y*Y
51          G = Y
52          Q = Y
53          DO 915 J = 1,20
54              Q = Q * Y2/FLOAT(2*J+1)
55              G = G+Q
56      915 CONTINUE
57          P = G = Z*EXP(0.5*Y2)
58          Y = Y+P
59          IF (ABS(P) .GE. EPS) GO TO 913
60      919 RERFC = Y
61          IF (X .GT. 0.5) RERFC = -Y
62          RETURN
63      END

```

結果はほぼ完全に10桁の精度でえられている。精度をあげるには、EPS を小さくし、(9')、(10')の反復回数を上げればよい。なおこのプログラムでは、引き数をX、答をYとしているから、本文の公式と対照するときには注意を要する。

4. 二三の注意

1° 分点 (9)と(10)とをどこで使いわけることができるか?

戸田氏のグラフによると(また多くの実験例および理論的な評価から), (9)と(10)とを使いわけることができる分点は, 10桁の精度では, 3.0くらい, したがって逆関数でいえば, $y = 0.005$ くらいである.

(かし $\gamma(v, x)$ ないしは erf (0からの積分)の値を求めるためにはともかく, $P(v, x)$ ないしは erfc の値を求めるためには, 3.0ともなると, $P(v)$ との差による桁落ちを生じて, 十分の精度がえられない. したがって, もっと分点の x を小さくすべきである. 上の計算法そのままでは, 一見桁落ちはないように見えるが, じつは $0.5 - y$ を作る所で, 引き算の下位の桁を落とし, それだけ精度を失わせているのである. $y = 0.01$ という値も必ずしも適切ではないかもしれない. ただこれより y が小える(x がへる)と, (10)の反復回数が急に増加するので, このへんと違んだのにすぎない.

2° 反復回数 前記の7°ログラムでは, (9)は 20回, (10)は 25回と反復回数をきめてある. 項を毎回評価してゆくのは, サブルーチンとしては非能率的である. しかし反復回数を, x の範囲に応じて, ごく簡単な近似式でおおえるようにすることは, 実用上考えてもよい手法である.

3.° 漸近展開 上記のプログラムでは、 $g(x)$ の計算に、漸近展開は利用していない。それは実用上 10 桁の精度で漸近展開の使えるのが、 $x^2/2 > 26$ ($x > 7.3$) であり、 y の値に直すと 10^{-11} 以下の範囲であって、無意味に近いことと、連分教(10')でも計算の手間はかかるが、さしつかえはないからである。ただし分子、分母にあふれを生ずる危険性があるので、反復回数を修正したほうがよいかもしれない。

4.° 逐次代入 上記の公式(12)において、 $c = 1/g(x)$ であるから、 x_0 を右辺の $g(x)$ に代入して、この逐次代入で計算する方法も考えられる。しかし収束が Newton 法よりおそいので採用しなかった。とはいえ、 $g(x)$ の項数をおとし、この逐次代入をもう二三回反復してから Newton 法に移りかえることは、複雑になるが考えられる手法である。

以下は講演のあとの討論で論ぜられたことである：

5.° 初期値 誤差函数を 2 乗し、2 変数の正方形での積分と、同じ面積の円での積分でおきかえると、Williams の公式(の初項)に相当する近似式をうる。具体的には

$$(14) \quad \operatorname{erfc} x \doteq \frac{1}{2} e^{-x^2/\pi}$$

となる。(14) は簡単な割りに精度の高い公式として有名である。これを初期値に利用しては、という御注意を、流谷政昭

(IBM), 戸田英雄(電技総研)両氏からいただいたが, ため
 してみた限りでは有用ではなかった. 反復回数が多く, とく
 に y が小さいときには, 10回もかかる. (14) は絶対誤差は小
 さいが, 函数値自体が小さくて相対誤差は意外に大きい. (14)
 の左辺と右辺とで1桁近く違うときがあり, これからみつ
 った初期値は, 多くの点で真値の1.5~2倍で, 大きすぎる.
 前記のような x のこんな初期値と工夫したのも, このよう
 な簡単な近似式では思わしくなかったからにほかならない.
 ということは, 近似式の精度は, 目的に応じて考えて, 使い
 分けなければいけない, ということであろう.

6° 微分方程式 吉沢正(東大データ処理センター)から,
 $y = \operatorname{erfc}(x)$ の逆関数は, $dy/dx = z$ として

$$\begin{cases} dx/dy = 1/z \\ dz/dy = -x \end{cases}$$

という連立常微分方程式を y について解くことであるとの御
 注意を受けた. $x=0$ の近くは, $y=0.5$ のとき $x=0$, z
 $= -1/\sqrt{2\pi}$ という初期値でうまくゆく. (しかし当面ほしいの
 は, $y=0$ のとき, $x=\infty$, $z=0$ ($1/z=\infty$) という特異
 点からの初期値問題であるから, 常微分方程式の数値解法と
 しても特別の技巧がいりそうで 高精度計算が可能かな
 まで吟味している).

このように、まだいろいろの着想が考えられるが、上記の方法で一応満足できる erfc の逆関数のプログラムが作られたので、この機会に報告する次第である。なおこの内容は、

山内二郎・宇野利雄・一松信編、電子計算機のための数値計算法Ⅲ，培風館，近刊（1971年12月7頁刊行予定），

第9章 誤差関数（とその逆関数），の一部として，発表する予定である。

参考文献

戸田英雄・竹内寿一郎，確率積分の逆関数について，

—数値解析の基礎理論— 数理解析研究所講究録

No. 107. (1971年1月発行)，p. 22—39