

x が小さい場合の不完全ガンマ関数 $\Gamma(\nu, x)$ の数値計算

名古屋大学 工学部 吉田年雄
二宮市三

1. まえがき

$\nu \geq 0$ かつ正数 x が小さい場合の不完全ガンマ関数¹⁾

$$\Gamma(\nu, x) = \int_x^{\infty} e^{-u} u^{\nu-1} du \quad (1)$$

の数値計算法について述べる. 次式で定義される

$$\begin{aligned} \gamma(\nu, x) &= \int_0^x e^{-u} u^{\nu-1} du \\ &= \int_0^{\infty} e^{-u} u^{\nu-1} du - \int_x^{\infty} e^{-u} u^{\nu-1} du \\ &= \Gamma(\nu) - \Gamma(\nu, x) \end{aligned} \quad (2)$$

については, 整級数展開²⁾

$$\gamma(\nu, x) = x^{\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k! (k+\nu)} \quad (3)$$

または

$$\begin{aligned}
 \gamma(\nu, x) &= \Gamma(\nu) x^\nu e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(k+1+\nu)} \\
 &= x^\nu e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\nu(\nu+1)\cdots(\nu+k)} \quad (4)
 \end{aligned}$$

を用いれば、 x が小さい場合には、比較的容易に計算できる。
 しかし、この整級数展開により計算された $\gamma(\nu, x)$ の値を用いて、 $\Gamma(\nu, x)$ を

$$\Gamma(\nu, x) = \Gamma(\nu) - \gamma(\nu, x) \quad (5)$$

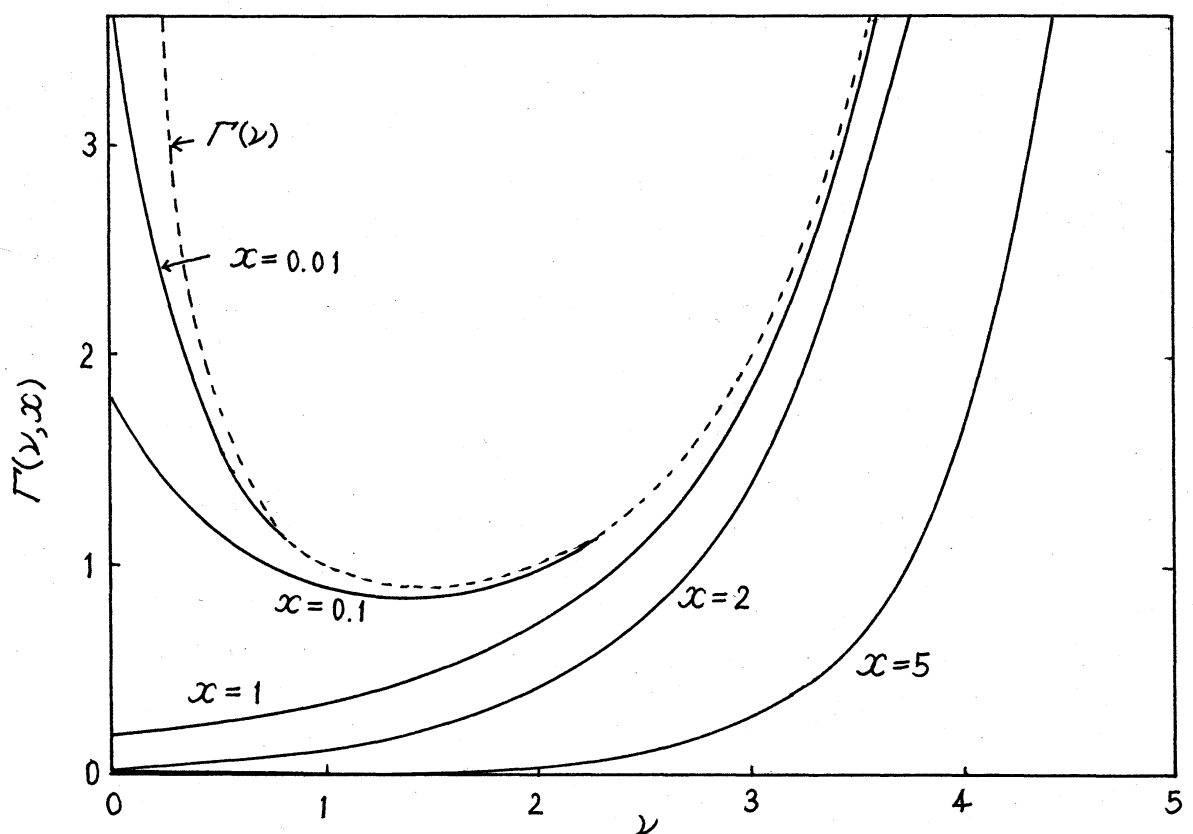


図 1 $\Gamma(\nu)$ および $\Gamma(\nu, x)$

として求めることができるのは、 ν と x の限られた範囲である。図1に、 $\Gamma(\nu)$ および色々な x に対する $\Gamma(\nu, x)$ の ν 依存性を示す。この図より、 x を固定したとき、 ν を小さくすると析落ちが生ずることがわかる。

析落ち無しに、 $\Gamma(\nu, x)$ を求める計算法としては、従来、積分表示式を数値積分する方法がある。その一例は、

$$\Gamma(\nu, x) = e^{-x} \int_0^{\infty} \frac{e^{-t}}{(x+t)^{1-\nu}} dt \quad (6)$$

を用いるものである²⁾。この方法は、指数関数、べき関数を含む被積分関数を多数回計算するために計算時間を多く要するのが欠点である。

さて、ここで、本計算法の適用範囲を求めるための条件を与えておく。関数 $F_\nu(x)$ の値の計算法が、 N 回の加算

$$F_\nu = \sum_{k=0}^N a_k \quad (7)$$

によって表わされるとする。入力および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。参考文献3)と同様な考えに基づき、この場合には、規準の絶対誤差 δ を

$$\delta = 2 \varepsilon \max \left\{ |F_\nu(x)|, \left| x \frac{dF_\nu(x)}{dx} \right| \right\} \quad (8)$$

と決め、この誤差以内で関数値 $F_\nu(x)$ が求められれば十分で

あると考える. 式(7)により, $F_\nu(x)$ 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,

$$\delta_A = \varepsilon \max \left\{ \max_k (|a_k|), \max_k (|\Delta_k|) \right\} \quad (9)$$

と与えることができる. ここで, Δ_k は加算の中間結果

$$\Delta_k = \sum_{j=0}^k a_j \quad (k=0, 1, 2, \dots, N) \quad (10)$$

である. 本稿では, $\delta_A < \delta$ すなわち

$$\max \left\{ \max_k (|a_k|), \max_k (|\Delta_k|) \right\} / \max \left\{ |F_\nu(x)|, \left| x \frac{dF_\nu(x)}{dx} \right| \right\} < 2 \quad (11)$$

が満たされるならば, 「関数値が規準誤差以内で得られる」ということにする.

2. 計算法

x が小さい場合の $\Gamma(\nu, x)$ について, 桁落ちが無く, 能率的な計算法を提案する. また, 本方法と類似の Gautschi の方法⁴⁾との比較を行う.

$\nu > 1$ の $\Gamma(\nu, x)$ は, 漸化式

$$\Gamma(1+\nu, x) = x^\nu e^{-x} + \nu \Gamma(\nu, x) \quad (12)$$

により計算できるので, $0 \leq \nu \leq 1$ とする.

式(5)は, 式(4)の右边第1式を用いて,

$$\Gamma(\nu, x) = \Gamma(\nu) e^{-x} \left\{ e^x - x^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(k+1+\nu)} \right\} \quad (13)$$

と表わされ, $e^x = \sum_{k=0}^{\infty} x^k/k!$ および $\Gamma(\nu) = \Gamma(1+\nu)/\nu$ を用いると,

$$\Gamma(\nu, x) = \Gamma(1+\nu) e^{-x} \frac{\sum_{k=0}^{\infty} x^k \left\{ \frac{1}{k!} - \frac{x^\nu}{\Gamma(k+1+\nu)} \right\}}{\nu} \quad (14)$$

が得られる. 上式は, $\nu = 0$ のとき, 不定形になる. このことからわかるように, 上式の分子の減算は, $\nu \div 0$ のとき, 式どおりに行うと桁落ちが生ずる. 本稿では, 適当に項をまとめ, 適当な工夫を行えば, $\Gamma(\nu, x)$ の値を桁落ち無しに求めることができることを示す.

ここで, $\phi(\nu, x)$ を

$$\phi(\nu, x) = \frac{1 - x^\nu}{\nu} \quad (15)$$

と定義しておく.

$\nu \div 0$ での桁落ちを取り除くために, $x^\nu = 1 - \nu \phi(\nu, x)$ (式(15)より)を用いて, 式(14)を変形すると,

$$\Gamma(\nu, x) = \Gamma(1+\nu) e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} x^k \frac{A_k^*(\nu) + B_k^*(\nu, x)}{\nu} \quad (16)$$

となる. ただし,

$$A_k^*(\nu) = \frac{1}{k!} - \frac{1}{\Gamma(k+1+\nu)} \quad (17)$$

$$B_k^*(\nu, x) = \frac{\nu \phi(\nu, x)}{\Gamma(k+1+\nu)} \quad (18)$$

である。上式(16)において、 $\nu \neq 0$ での桁落ちは、 $A_k^*(\nu)$ の計算すなわち式(17)の右辺の減算、および、 $\phi(\nu, x)$ の計算すなわち式(15)の分子の減算のみに現われる。 $A_k^*(\nu)$ および $\phi(\nu, x)$ は、適当な工夫を行えば、桁落ち無しに計算することができる。 $A_k^*(\nu)$ については、式(17)の右辺の第2項を $\nu = 0$ で展開し、定数項を取り除いたものにより計算すれば桁落ち無しに求めることができる。また、 $\phi(\nu, x)$ についても、式(15)の分子の x^ν を $\nu = 0$ で展開し、定数項を取り除いたものにより計算すれば桁落ち無しに求めることができる。

以上より、 $\Gamma(\nu, x)$ の計算式として、

$$\Gamma(\nu, x) = \Gamma(1+\nu) e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} \{A_k(\nu, x) + B_k(\nu, x)\} \quad (19)$$

が得られる。ただし、

$$A_k(\nu, x) = x^k \left\{ \frac{1}{\nu} \left(\frac{1}{k!} - \frac{1}{\Gamma(k+1+\nu)} \right) \right\} \quad (20)$$

$$B_k(\nu, x) = x^k \frac{\phi(\nu, x)}{\Gamma(k+1+\nu)} \quad (21)$$

である。以下に、 $A_k(\nu, x)$ および $B_k(\nu, x)$ の具体的な計算法について述べる。

$A_k(\nu, x)$ の計算 式(20)の $\{ \}$ の部分を

$$\tilde{A}_k(\nu) = \frac{1}{\nu} \left(\frac{1}{k!} - \frac{1}{\Gamma(k+1+\nu)} \right) \quad (22)$$

と表わす。 $\tilde{A}_k(\nu)$ に対して、漸化式

$$\tilde{A}_k(\nu) = \frac{1}{k+\nu} \left\{ \tilde{A}_{k-1}(\nu) + \frac{1}{k!} \right\} \quad (23)$$

が成り立つので、 $k \geq 2$ の $\tilde{A}_k(\nu) (> 0)$ は、 $\tilde{A}_1(\nu) (> 0)$ から安定に求めることができる。また、 $\tilde{A}_0(\nu) (\leq 0)$ は、 $\tilde{A}_1(\nu)$ から

$$\tilde{A}_0(\nu) = (1+\nu)\tilde{A}_1(\nu) - 1 \quad (24)$$

として求められる。したがって、 $0 \leq \nu \leq 1$ において、 $\tilde{A}_1(\nu) (= \frac{1}{\nu}(1 - \frac{1}{\Gamma(2+\nu)}))$ が所要の精度で計算できればよい。 $\tilde{A}_1(\nu)$ は、式(22)の右辺のとおり計算すると、 $\nu \div 0$ で桁落ちが生ずる。しかし、 $\tilde{A}_1(\nu)$ の値は、ガンマ関数の逆数の級数展開^{5,6)}

$$\frac{1}{\Gamma(1+\nu)} = \beta_0 + \beta_1\nu + \beta_2\nu^2 + \dots \quad (25)$$

を用い、定数部分を取り除いたもの

$$\tilde{A}_1(\nu) = \frac{1 - \sum_{k=0}^{\infty} \beta_{k+1} \nu^k}{1 + \nu} \quad (26)$$

により計算を行えば、桁落ち無しに求めることができる。ここで、 β_k ($k=0, 1, 2, \dots$) は定数であり、特に $\beta_0=1$, $\beta_1=\gamma$ (オイラーの定数) である。しかし、能率の点では、最良近似式により、 $\tilde{A}_1(\nu)$ を計算することが好ましい。表1および表2には、それぞれ、単精度(8D)および倍精度(18D)として、 $0 \leq \nu \leq 1$ における $\tilde{A}_1(\nu)$ の最良近似多項式

$$\tilde{A}_1(\nu) \doteq \sum_{k=0}^M p_k \nu^k \quad (27)$$

の係数が示されている。

[$B_k(\nu, x)$ の計算] 式(21)の $B_k(\nu, x)$ に注目しよう。式(15)で定義されている $\phi(\nu, x)$ を2進丸め程度の精度で求めようとするとき、その右辺のとおり計算できるのは、 $x^\nu < \frac{1}{2}$ あるいは $x^\nu > 2$ のときだけである。 $\frac{1}{2} \leq x^\nu \leq 2$ すなわち $-\ln 2 \leq \nu \ln x \leq \ln 2$ のときには桁落ちが生ずる。桁落ち無しに $\phi(\nu, x)$ を求めるためには、関数

$$f(t) = \frac{e^t - 1}{t} = \frac{1}{1!} + \frac{t}{2!} + \frac{t^2}{3!} + \dots \quad (28)$$

が、 $-\ln 2 \leq t \leq \ln 2$ において、所要の精度で計算できればよい。なぜならば、 $-\ln 2 \leq \nu \ln x \leq \ln 2$ のときには、

$\phi(\nu, x)$ を

$$\phi(\nu, x) = -f(\nu \ln x) \ln x \quad (29)$$

として計算できるからである。 $f(t)$ を丸め誤差程度で計算するためには、式(28)の^{右辺}第1式のとおりに行うのではなく、右辺第2式のように、 e^t を級数展開し、析落ちする部分を取り除いたものにより行えばよい。しかし、能率の点では、最良近似式により、 $f(t)$ を計算することが好ましい。表3および表4には、それぞれ、単精度および倍精度用として、 $-\ln 2 \leq t \leq \ln 2$ における $f(t)$ の最良近似式

$$f(t) \doteq \frac{2 \sum_{k=0}^M p_k t^{2k}}{\sum_{k=0}^N q_k t^{2k} - t \sum_{k=0}^M p_k t^{2k}} \quad (30)$$

の係数が示されている。

[式(19)の適用範囲] $0 \leq \nu \leq 1$ において、 $A_0(\nu, x) \leq 0$ 、 $A_k(\nu, x) > 0$ ($k \geq 1$) であり、 $x \leq 1$ のとき、 $\phi(\nu, x) \geq 0$ したがって $B_k(\nu, x) \geq 0$ 、 $x > 1$ のとき、 $\phi(\nu, x) < 0$ したがって $B_k(\nu, x) < 0$ である。 x が十分に小さいときには、式(19)において、 $B_0(\nu, x)$ が支配的であるので、その加算では析落ちは無。ただし、 x が大きくなるにつれて、 $B_0(\nu, x)$ とは符号が逆で、絶対値が $B_0(\nu, x)$ と同程度、あるいは、そ

れより大きくなる項が現われるので、その加算では桁落ちが生ずるようになる。したがって、本方法は、 x が大きい場合には適用できない。本稿では、規準誤差以内で $\Gamma(\nu, x)$ の値が得られれば十分と考え、規準誤差以内で得ることが出来る範囲を本方法の適用範囲とする。 $\Gamma(\nu, x)$ が、 $\Gamma(\nu, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \{ \Gamma(1+\nu) e^{-x} A_k(\nu, x) + \Gamma(1+\nu) e^{-x} B_k(\nu, x) \}$ なる和で表わされるとして、その加算を式どおりの順($A_0(\nu, x)$, $B_0(\nu, x)$, $A_1(\nu, x)$, $B_1(\nu, x)$, ……の順)に行った場合について、式(11)の条件を数値的に調べた。その結果として、図2の実線以下で $\Gamma(\nu, x)$ の値を規準誤差以内で得ることが出来ることがわかった。

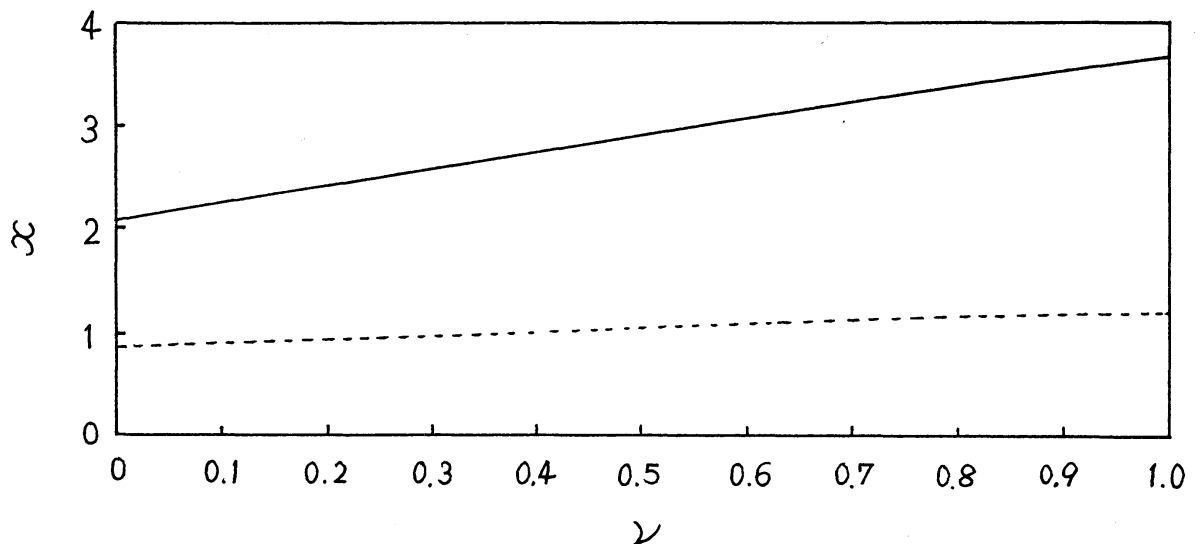


図2 式(19)の適用範囲(実線以下)
および 式(31)の適用範囲(点線以下)

式(19)を構成している項は、 n が大きくなるにつれて十分に小さくなるので、要求精度内に収束するまで取る項は、それほど多くは必要としない。たとえば、 $x=1$ のとき、式(19)の n は、単精度では、13~14まで、倍精度では、21~23まで取れば、その精度内に収束している。

〔Gautschiの方法および適用範囲〕筆者は、本計算法を作成した後で、類似の方法として、Gautschiの方法⁴⁾があることを知った。それは、式(5)の $\gamma(\nu, x)$ として、式(4)の展開ではなく、式(3)の展開を用いたものであり、次式で表わされる。

$$\begin{aligned}\Gamma(\nu, x) &= \Gamma(\nu) - x^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k!(k+\nu)} \\ &= \Gamma(\nu) - \frac{x^\nu}{\nu} - x^\nu \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k!(k+\nu)} \\ &= \Gamma(\nu) - \frac{1}{\nu} + \phi(\nu, x) - x^\nu \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k!(k+\nu)} \quad (31)\end{aligned}$$

上式において、 $\phi(\nu, x)$ は前述の方法により計算することができる。 $\Gamma(\nu) - \frac{1}{\nu}$ は、

$$\Gamma(\nu) - \frac{1}{\nu} = \frac{\Gamma(1+\nu)}{\nu} \left\{ 1 - \frac{1}{\Gamma(1+\nu)} \right\} \quad (32)$$

と表わされるので、前とほぼ同様な方法で計算することがで

きる. Gautschiの方法は, このように計算を行うものであるが(ただし, 最良近似式は使用していない), 関数 $\Gamma(x) - \frac{1}{x}$ についても, 最良近似式により計算することにすれば, $\Gamma(1+x)$ の計算が不要となる. 上式(31)の方法は, 式(19)の方法と比較して, e^{-x} の計算が不要であるという長所をもっている. しかし, この方法に対して, 式(11)の条件を数値的に調べ, 適用範囲を求めると, 図2の点線以下であり, 式(19)の方法と比べて, 適用範囲が狭いという欠点をもっている. したがって, 能率の観点から, 領域により, 両者の方法を使い分けることが好ましい. 図2の点線を直線で近似して,

$$x = 0.35x + 0.85 \quad (33)$$

を境界として, その下では式(31)の方法, その上では式(19)の方法を用いるのがよいと考えられる.

筆者らは, 関数 $\Gamma(x) - \frac{1}{x}$ に対して, 最良近似式を新たに作成した. 表5および表6には, それぞれ, 単精度および倍精度用として, $0 \leq x \leq 1$ における最良近似式

$$\Gamma(x) - \frac{1}{x} \doteq (x-1) \frac{\sum_{k=0}^M p_k x^k}{\sum_{k=0}^N q_k x^k} \quad (34)$$

の係数が示されている.

3. むすび

以上において、 x が小さい場合の不完全ガンマ関数 $\Gamma(\nu, x)$ の計算法を述べた。本方法の適用範囲より大きい x に対しては、連分数展開、 ϵ 法などを使って計算することが必要になるであろう。ただし、それらは、 x が小さければ小さいほど計算量を多く要するので、 x が小さい場合の方法は、その適用範囲が広いことが好ましいと考えられる。本稿で提案した方法は、Gautschiの方法と比べて、適用範囲が広いのが特長である。

なお、本稿で示した相対誤差規準に関する最良近似式は、Remesの算法により、名古屋大学大型計算機センター・FACOM M-200の4倍精度演算を用いて求めたものである。

おわりに、日頃ご討論頂く本学鳥居達生助教授に感謝します。

参考文献

- 1) 森口繁一，宇田川銑久，一松信：数学公式Ⅲ，岩波全書，p.14(1968)。
- 2) 山内二郎，宇野利雄，一松信：電子計算機のための数値計算法Ⅲ，pp.132-165(1972)。
- 3) 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.(掲載予定)

- 4) Gautschi, W. : A computational Procedure for Incomplete Gamma Functions, ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.5, No.4, pp.466-481(1979).
- 5) National Bureau of Standards : Handbook of Mathematical Functions, Appl.Math.ser.55, p.256, U.S.Government Printing Office, Washington D.C.(1964).
- 6) Clenshaw, C.W. : Mathematical Tables, Vol.5, Chebyshev Series for Mathematical Functions, p.8, Her Majesty's Stationary Office(1962).

表1 式(27)の P_k

k	P_k
0	0.4227843367E+00
1	0.2330935111E+00
2	-0.1910860748E+00
3	0.2450988045E-01
4	0.1782343341E-01
5	-0.8433570447E-02
6	0.1343876949E-02
7	-0.3539149073E-04

表2 式(27)の P_k

k	P_k
0	0.42278433509846713943D+00
1	0.23309373642178672247D+00
2	-0.19109110138768983862D+00
3	0.24552490005342962102D-01
4	0.17645244551167355433D-01
5	-0.80232730333426101161D-02
6	0.80432985421792289735D-03
7	0.36083743099461679035D-03
8	-0.14559479503668605161D-03
9	0.17542431684690205317D-04
10	0.25954039665780655671D-05
11	-0.13473010098429928609D-05
12	0.21424667777995830582D-06
13	-0.60233164741547692619D-08
14	-0.33547807380399014396D-08
15	0.45087042266736647089D-09

表3 式(30)の p_k および q_k

k	p_k
0	0.8432691503E+03
1	0.2005436580E+02

k	q_k
0	0.1686538301E+04
1	0.1806535880E+03
2	0.1000000000E+01

表4 式(30)の p_k および q_k

k	p_k
0	0.15462037735227156105D+06
1	0.49551922829320590030D+04
2	0.27015176165734808206D+02
3	0.17839106920989440594D-01

k	q_k
0	0.30924075470454312210D+06
1	0.35680447457909378169D+05
2	0.45039468461939214765D+03
3	0.10000000000000000000D+01

表5 式(34)の p_k および q_k

k	p_k
0	0.2420720143E+03
1	0.9629064013E+02

k	q_k
0	0.4193787984E+03
1	0.4660441736E+03
2	-0.2759634837E+02
3	-0.6664699134E+02
4	0.8140128112E+01
5	0.1000000000E+01

表6 式(34)の p_k および q_k

k	p_k
0	0.39499280732183979287D+04
1	0.19640395263358966717D+04
2	0.87806575431475663232D+01
3	-0.19880603573582771847D+02
4	0.19762497878170774127D+02
5	-0.48475260097283088801D+00
6	0.51523470500891442895D-01

k	q_k
0	0.68430715127806096653D+04
1	0.82851049444526584499D+04
2	0.50639018036771012787D+02
3	-0.13497560097859397774D+04
4	0.12571163174043582291D+03
5	0.67454664089075567912D+02
6	-0.15618500055292796447D+02
7	0.10000000000000000000D+01