数理解析研究所講究録
第 129 巻 1971 年 132-143

誤差函数の逆函数の計算

京大 数理研　　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，能率はよくないが，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，補足をしたい．

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

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 $\Gamma(\nu)$ を介して

(2) $\gamma(\nu, x) + \Gamma(\nu, x) = \Gamma(\nu)$

で相互に結ばれる.

(3) $\gamma(\nu, x) = x^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^n}{n!\,(n+\nu)} \qquad (\nu \neq 0, -1, -2, \cdots)$

(3′) $\Gamma(-\mu, x) = -\sum_{\substack{n=0 \\ n \neq \mu}}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{n-\mu}}{n!\,(n-\mu)}$

$$- \frac{(-1)^\mu}{\mu}\left[\log x + \gamma - \left(1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{\mu}\right)\right]$$

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

(4) $\gamma(\nu, x) = x^\nu e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\nu(\nu+1)\cdots(\nu+n)} \qquad (\nu \neq 0, -1, -2, \cdots)$

(5) $\gamma(\nu, x) = x^\nu e^{-x}\left[\frac{1|}{|\nu} - \underset{n=1}{\overset{\infty}{\Phi}} \frac{(n-1+\nu)\, x|}{|n+\nu+x}\right]$ (連分数)

(6) $\gamma(\nu, x) = x^\nu e^{-x}\left[\frac{1|}{|\nu} + \underset{n=1}{\overset{\infty}{\Phi}}\left(\frac{n x|}{|2n+\nu} - \frac{(\nu+n)\, x|}{|2n+1+\nu}\right)\right]$

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

(漸近展開)

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

(‘一松公式’)

(8) $$\Gamma(\nu, x) = x^{\nu} e^{-x} \left[\frac{1|}{|x} + \mathop{\Phi}_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n-a|}{|1} + \frac{n|}{|x} \right) \right]$$

($x \neq 0$, 負の実数, で収束)

(3) (3') は $x=0$ の近くはよいが, x が大きくなると桁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 ($\nu \neq 0$, 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 を級数 (7') でおさえる公式は, 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. それは級数の桁落ち, および $\Gamma(\nu)$ との差をとることによる桁落ちに原因する. (このことは, 広い範囲の x について計算してみて, はじめて痛感した.) (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 (3〜5 まで) x については (4), 中間の (3〜5 から (7) で十分になるまで; 30 くらい) x に

ついては(8)，そしてxが十分大きくて，漸近展開だけで(R=0として)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の数を要しないため，かえって有用である．じっさいSweeney (1963)が，γを3566桁計算したときには，この種の方法を使っている．)

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)はつぎのようになる．

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

(10) $$\operatorname{erfc} x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2}\left[\frac{1|}{|x} + \mathop{\Phi}_{n=1}^{\infty}\frac{n|}{|x}\right]$$

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。

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

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

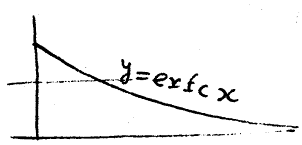
(10') $$g(x) = \frac{1|}{|x} + \mathop{\mathrm{K}}_{n=1}^{\infty} \frac{n|}{|x}$$

となる。((10)の右辺の因子が $-f'(x)$ であるのが目のつけどころであった。) したがって連分数(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、$x_0 > 0$ なら何でもよいはずであるが、収束を早めるために、

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

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（x_0 を求めたあと）$g(x)$ のはじめの項をとって

$$1/c = x_0 + 1/x_0$$

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，$y \leqq 0.01$ 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，$z = \frac{1}{2} - y$ におきかえ，

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

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

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

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ので，$x_0 = 1.5 \times \sqrt{2\pi}(0.5 - y)$ 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，負の方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，繁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，$y \geqq 0.01$ 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ったが，けっきょくことのついでに，全域に対して，Newton法によった．

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。

```
      FUNCTION RERFC(X)
C     THE INVERSE OF ERFC FUNCTION
      Z = X
      IF (Z .LE. 0.0) GO TO 900
      IF (X .GT. 0.5) Z = 1.0-X
      IF (Z .LE. 0.0) GO TO 901
      P2S = 2.5066282746
C     P2S = SQRT(2 * PU)
      EPS = 1.0E-8
      IF (Z .GE. 0.01) GO TO 902
C     FOR SMALL X USE CONTINUED FRACTION AT INFINITY
      Z = Z*P2S
      G = 3.0
      J=0
C     INITIAL VALUE SET AND IMPROVEMENT
  903 Y = SQRT(-2.0*ALOG(G*Z))
      IF (J .GT. 0) GO TO 904
      G = Y + 1.0/Y
      J = 1
      GO TO 903
  900 RERFC = 1.0E50
C     THE VALUE MEANS PLUS INFINITY
      RETURN
  901 RERFC =-1.0E50
C     THE VALUE MEANS MINUS INFINITY
      RETURN
  904 Y2 = Y*Y
      P0 = 0.0
      P1 = 1.0
      Q0 = 1.0
      Q1 = Y
C     THE ITERATION OF CONTINUED FRACTION
      DO 905 J = 1,25
      G = J
      P = Y * P1 + G * P0
      Q = Y * Q1 + G * Q0
      P0 = P1
      Q0 = Q1
      P1 = P
      Q1 = Q
  905 CONTINUE
```

```
      G = P/Q - Z*EXP(0.5 * Y2)
      Y = Y + G
      IF (ABS(G) .GE. EPS) GO TO 904
      GO TO 919
C     FOR LARGE X USE TAYLOR SERIES
  902 Z = P2S *(0.5 - Z)
      Y = 1.5 * Z
C     INITIAL VALUE SET, THIS MAY BE Y = Z
  913 Y 2 = Y*Y
      G = Y
      Q = Y
      DO 915 J = 1,20
      Q = Q * Y2/FLOAT(2*J+1)
      G = G+Q
  915 CONTINUE
      P = G - Z*EXP(0.5*Y2)
      Y = Y-P
      IF (ABS(P) .GE. EPS) GO TO 913
  919 RERFC = Y
      IF (X .GT. 0.5) RERFC = -Y
      RETURN
      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としてあるから, 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べきか?

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)とを使いわけるべき分点は,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.

しかし$\gamma(\nu, x)$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,$\Gamma(\nu, x)$ないしはerfcの値を求めるためには,3.0ともなると,$\Gamma(\nu)$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,引き数の下位の桁をおとし,それだけ精度を失な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がふえる(xがへる)と,(10′)の反復回数が急に増加するので,このへんを選んだのにすぎない.

2°. 反復回数 前記のプログラムでは,(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さ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，g 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，連分数(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法にきりかえることは，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を，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

$$(14)\qquad \mathrm{erfc}\, x \fallingdotseq \frac{1}{2} e^{-x^2/\pi}$$

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，渋谷政昭

(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，これからみつもった初期値は，多くの点で真値の1.5〜2倍で，大きすぎる．前記のような手のこんだ初期値を工夫したのも，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，使いわ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，$y=\mathrm{erfc}(x)$ 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どうかまだ吟味していない．

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 の逆函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月ごろ刊行予定），

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