

ガンマ関数および誤差関数の初等関数近似とその最適化

大浦拓哉

1 はじめに

C. Lanczos, M. Mori はそれぞれガンマ関数, 誤差関数の複素領域での初等関数を含む有理関数近似を提案している [1, 2]. これらは少ない項数で高い精度が得られる近似であるが, さらに最適化することができることを具体的に示し, その有効性について調べる.

2 最適化する近似式について (Review)

2.1 C. Lanczos によるガンマ関数の近似

μ を正の定数とすると, 展開式

$$\Gamma(z) = \sqrt{2\pi}(z + \mu)^{z-1/2} e^{-z-\mu} A_\mu(z),$$
$$A_\mu(z) = c_0 + c_1 \frac{z-1}{z} + c_2 \frac{(z-1)(z-2)}{z(z+1)} + c_3 \frac{(z-1)(z-2)(z-3)}{z(z+1)(z+2)} + \dots \quad (1)$$

が成り立つ. ここで, 係数 c_n は漸化式

$$\sum_{j=0}^n \binom{2n}{n-j} c_j = \frac{(2n)!}{n!} \frac{e^{n+1+\mu}}{\sqrt{2\pi}(n+1+\mu)^{n+1/2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

により定まる.

2.2 展開式 (1) の特徴

1. Stirling の漸近展開とは異なりすべての $\operatorname{Re} z > 0$ で収束する.
2. N 項で打ち切ったときの右半平面での相対誤差の上限は, $\mu = N - 1/2$ と選んで N を大きくすれば指数関数的に減少する.
3. 近似式として適用する場合, 係数 c_n の符号が交互に変化し桁落が発生するので, (1) 式を通分して変形するなどの桁落ち防止対策が必要となる.

2.3 展開式 (1) の導出

まず, $\operatorname{Re} z > 1/2$, $p = z + \mu$ として,

$$\begin{aligned}\Gamma(z - 1/2) &= \int_0^\infty t^{z-3/2} e^{-t} dt \\ &= \int_0^\infty (pt)^{z-3/2} e^{-pt} p dt \\ &= (z + \mu)^{z-1/2} \int_0^\infty t^{z-3/2} e^{-(z+\mu)t} dt \\ &= (z + \mu)^{z-1/2} e^{-z-\mu} \int_0^\infty t^{z-3/2} e^{(z+\mu)(1-t)} dt\end{aligned}$$

と変形する. このとき, $e^{1-t} = v$ とおくと

$$\Gamma(z - 1/2) = (z + \mu)^{z-1/2} e^{-z-\mu} F_\mu(z), \quad (2)$$

$$F_\mu(z) = \int_0^e (v(1 - \log v))^{z-3/2} v^{\mu+1/2} dv$$

となる. さらに, $F_\mu(z)$ に対して変数変換

$$v(1 - \log v) = 1 - x^2 = \cos^2 \theta \quad (3)$$

を行う. ただしこの変換は多価なので, 連続になるように

$$\begin{cases} v = 0 \text{ のとき } x = -1, \theta = -\pi/2 \text{ に対応} \\ v = 1 \text{ のとき } x = 0, \theta = 0 \text{ に対応} \\ v = e \text{ のとき } x = +1, \theta = +\pi/2 \text{ に対応} \end{cases}$$

とすると,

$$F_\mu(z) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\theta) \cos^{2z-2} \theta d\theta, \quad (4)$$

$$f(\theta) = v^{\mu+1/2} \frac{dv}{\cos \theta d\theta} \quad (5)$$

を得る. ここで, 陰関数 (3) は微分方程式

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dx} (v^2) - (1 - x^2) \frac{d}{dx} v - 2xv = 0, \quad v(x=0) = 1$$

を満たすことに注意する. この微分方程式を解析することで $v(x)$ は $|x| < 1$ で解析的な関数で $x = -1$ に特異点を持つことがわかる. $v(\theta)$, $f(\theta)$ の特異点は $\theta = -\pi/2$ でその漸近形は

$$\begin{aligned}v(\theta) &\sim \frac{(\theta + \pi/2)^2}{-2 \log(\theta + \pi/2)}, \quad \theta \rightarrow -\pi/2 \\ f(\theta) &\sim \left(\frac{(\theta + \pi/2)^2}{-2 \log(\theta + \pi/2)} \right)^{\mu+1/2} \frac{1 - 2 \log(\theta + \pi/2)}{2 \log^2(\theta + \pi/2)}, \quad \theta \rightarrow -\pi/2\end{aligned}$$

となり, $f(\theta)$ は m 次導関数 ($m = [2\mu + 1]$) が連続の周期関数である. したがって, $f(\theta)$ は Fourier 級数に展開可能であり, $[f(\theta) + f(-\theta)]/2$ とおくと, これは周期 π の偶関数であり,

$$\frac{1}{2} [f(\theta) + f(-\theta)] = \sum_{j=0}^{\infty} ' c_j \cos 2j\theta$$

と展開できる. ここで, \sum' は初項を $1/2$ 倍する和を意味する. このとき, Fourier 係数の収束のオーダーは $c_j = O(j^{-m-2})$ であり, 絶対収束する. (4) 式の $F_\mu(z)$ を Fourier 係数 c_j で表すと

$$\begin{aligned} F_\mu(z) &= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\theta) \cos^{2z-2} \theta d\theta \\ &= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{1}{2} [f(\theta) + f(-\theta)] \cos^{2z-2} \theta d\theta \\ &= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sum_{j=0}^{\infty} ' c_j \cos 2j\theta \cos^{2z-2} \theta d\theta \end{aligned}$$

となる. 積分公式

$$\begin{aligned} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos 2j\theta \cos^{2z-2} \theta d\theta &= \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(z-1/2)\Gamma(z)}{\Gamma(z+j)\Gamma(z-j)} \\ &= \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(z-1/2)}{\Gamma(z)} \frac{(z-1)(z-2)\cdots(z-j)}{z(z+1)\cdots(z+j-1)} \end{aligned}$$

を用いると,

$$F_\mu(z) = \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(z-1/2)}{\Gamma(z)} \left[\frac{1}{2} c_0 + c_1 \frac{z-1}{z} + c_2 \frac{(z-1)(z-2)}{z(z+1)} + \cdots \right] \quad (6)$$

と展開される. ここで, Fourier 係数 c_j は

$$c_j = \frac{2}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\theta) \cos 2j\theta d\theta$$

である. 展開公式

$$(e^{iz} + e^{-iz})^{2n} = 2 \sum_{j=0}^n ' \binom{2n}{n-j} \cos 2jz$$

を用いると,

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^n ' \binom{2n}{n-j} c_j &= \frac{2}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\theta) \sum_{j=0}^n ' \binom{2n}{n-j} \cos 2j\theta d\theta \\ &= \frac{2^{2n}}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\theta) \cos^{2n} \theta d\theta \end{aligned}$$

であり, (4) 式, (2) 式より

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=0}^n \binom{2n}{n-j} c_j &= \frac{2^{2n}}{\pi} F_{\mu}(n+1) \\
 &= \frac{2^{2n}}{\pi} \frac{\Gamma(n+1/2)}{(\mu+n+1)^{n+1/2} e^{-\mu-n-1}} \\
 &= \frac{(2n)!}{n!} \frac{e^{\mu+n+1}}{\sqrt{\pi}(\mu+n+1)^{n+1/2}} \tag{7}
 \end{aligned}$$

となる. (2) 式, (6) 式, (7) 式より目的の展開を得る.

2.4 M. Mori による誤差関数の近似

誤差関数

$$\begin{aligned}
 \operatorname{erfc} z &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-t^2} dt \\
 &= \frac{1}{\pi} e^{-z^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{z+it} dt, \quad \operatorname{Re} z > 0
 \end{aligned}$$

は, h を正の定数として

$$\begin{aligned}
 \operatorname{erfc} z &\approx E_h(z) + \frac{2h}{\pi} e^{-z^2} z \left[\frac{e^{-(h/2)^2}}{z^2 + (h/2)^2} + \frac{e^{-(3h/2)^2}}{z^2 + (3h/2)^2} + \frac{e^{-(5h/2)^2}}{z^2 + (5h/2)^2} + \dots \right], \\
 E_h(z) &= \begin{cases} 2/(1 + e^{2\pi z/h}) & ; \operatorname{Re} z + |\operatorname{Im} z| < \pi/h \\ 0 & ; \operatorname{Re} z + |\operatorname{Im} z| \geq \pi/h \end{cases} \tag{8}
 \end{aligned}$$

と近似される. この近似では刻み幅 h の中点公式を用いたが, M. Mori による近似では台形公式を用いている. どちらの近似も同じ形でほぼ同じ性能である.

2.5 近似式 (8) の特徴

1. 展開項数を N で打ち切ったときの右半平面での相対誤差は, 定数 h を $h = \sqrt{\pi/N}$ と選んで N を大きくすれば指数関数的に減少する.
2. 近似式 (8) は除去可能特異点を持つので, 実際に適用する場合には桁落ちに注意する必要がある.

2.6 近似式 (8) の導出

$$\pi e^{z^2} \operatorname{erfc} z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{z+it} dt$$

を中点公式で近似する．

$$\begin{aligned}\pi e^{z^2} \operatorname{erfc} z &= h \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(j+1/2)^2 h^2}}{z + i(j+1/2)h} + \Delta I_h \\ &= 2h \sum_{j=0}^{\infty} \frac{e^{-(j+1/2)^2 h^2}}{z^2 + (j+1/2)^2 h^2} + \Delta I_h\end{aligned}$$

ΔI_h は中点公式による離散化誤差で，中点公式の誤差の特性関数 $\Phi_h(w)$ (台形公式の誤差の特性関数を $h/2$ だけずらしたもの) を用いて以下のように書ける．

$$\begin{aligned}\Delta I_h &= \frac{1}{2\pi i} \int_C \Phi_h(w) \frac{e^{-w^2}}{z + iw} dw, \\ \Phi_h(w) &= \frac{\mp 2\pi i}{1 + \exp(\mp 2\pi iw/h)}.\end{aligned}$$

符号 \mp は $\operatorname{Im} w > 0$ のとき上， $\operatorname{Im} w < 0$ のとき下をとる．ここで，積分路 C は実軸を挟む二つの平行な直線で，内側に特異点があってはならない．しかし被積分関数は $w = iz$ に特異点を持ち，積分路の内側に特異点がある場合は留数定理によってその分を補正することができて

$$\Delta I_h = \frac{2\pi e^{z^2}}{1 + \exp(2\pi z/h)} + \frac{1}{2\pi i} \int_C \Phi_h(w) \frac{e^{-w^2}}{z + iw} dw$$

となる．鞍点法による誤差解析よりこの補正が必要なのは $\operatorname{Re} z + |\operatorname{Im} z| < \pi/h$ のときであることがわかっている．このとき $N = \lfloor \pi/h^2 - 1 \rfloor$ 項で打ち切ったときの相対誤差はほぼ $(\pi/h) \exp(-\pi^2/h^2 - 1/2)$ 程度になる．

3 ガンマ関数近似の最適化

ガンマ関数の近似式 (N は固定)

$$\Gamma(z) \approx \exp((z - 1/2) \log(z + \mu) - z - \mu) Q(z), \quad (9)$$

$$Q(z) = a_\infty + \frac{a_0}{z} + \frac{a_1}{z + b_1} + \cdots + \frac{a_{N-1}}{z + b_{N-1}} \quad (10)$$

に含まれる近似パラメタの最適化を以下のように行う．近似領域は $\operatorname{Re} z \geq 0$ (実関数近似の場合 $z \geq 0$) である．

1. 変数変換 $t = 1/(z + \alpha)$, ($\alpha > 0$) を行い，引数の領域を $\operatorname{Re} z \geq 0$ (実関数近似の場合は $z \geq 0$) から円 (線分) の領域に変換する．このとき (9) 式, (10) 式は以下ようになる．

$$\Gamma(1/t - \alpha) \approx \exp((1/t - \alpha - 1/2) \log(1/t - \alpha + \mu) - 1/t + \alpha - \mu) q(t), \quad (11)$$

$$\begin{aligned}
q(t) &= a_\infty + \frac{a_0}{1/t - \alpha} + \frac{a_1}{1/t - \alpha + b_1} + \cdots + \frac{a_{N-1}}{1/t - \alpha + b_{N-1}} \\
&= \frac{[t \text{ の } N \text{ 次多項式}]}{(1 - \alpha t)(1 - \alpha t + b_1 t) \cdots (1 - \alpha t + b_{N-1} t)}. \tag{12}
\end{aligned}$$

すなわち b_j, μ を固定すれば単なる多項式近似である。

2. (12) 式の分子以外のパラメタ b_j, μ を固定し, その分子を Taylor 級数展開 (実関数近似は Chebyshev 級数展開) により近似する. すなわち,

$$f(t) = \frac{\Gamma(1/t - \alpha) \cdot (1 - \alpha t)(1 - \alpha t + b_1 t) \cdots (1 - \alpha t + b_{N-1} t)}{\exp((1/t - \alpha - 1/2) \log(1/t - \alpha + \mu) - 1/t + \alpha - \mu)} \tag{13}$$

を t の多項式で展開する. 展開は以下のように離散 Fourier 変換 (実近似は離散コサイン変換) により数値的に行う.

Taylor 展開 $f((t+1)/(2\alpha)) \approx \sum_{j=0}^{N'-1} r_j t^j$ の係数は

$$r_j = \text{Re} \left[\frac{1}{N'} \sum_{k=0}^{N'-1} f \left(\frac{\exp(\pi i k / N') + 1}{2\alpha} \right) \exp(-\pi i j k / N') \right],$$

Chebyshev 展開 $f((t+1)/(2\alpha)) \approx \sum_{j=0}^{N'-1} r_j T_j(t)$ の係数は

$$r_j = \frac{2}{N'} \sum_{k=0}^{N'-1} f \left(\frac{\cos(\pi(k+1/2)/N') + 1}{2\alpha} \right) \cos(\pi j(k+1/2)/N')$$

で近似する.

3. 多項式展開を N 項で打ち切ったとき $N+1$ 項目以上が誤差となる. この誤差の項を分母および他の近似パラメタの自由度分だけゼロにする (ゼロにできない場合はできるだけ小さくする). 具体的には多項式の展開係数 $r_{N+1}, r_{N+2}, \dots, r_{2N+1}$ を求めさらに分子以外のパラメータ $b_0, b_1, \dots, b_{N-1}, \mu$ に対する微分 $\partial r_j / \partial b_k, \partial r_j / \partial \mu, N+1 \leq j \leq 2N+1, 0 \leq k \leq N-1$ (Jacobi 行列) を計算して Newton 反復をする.

近似パラメータ a_j は r_j から以下のように決まる. 複素近似の場合は

$$a_j = (\alpha - b_j)^N \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{N-1} (b_k - b_j)^{-1} \sum_{k=0}^N r_k \left(\frac{\alpha + b_j}{\alpha - b_j} \right)^k,$$

$$a_\infty = \sum_{k=0}^N r_k (-1)^k$$

であり，実近似の場合は

$$a_j = (\alpha - b_j)^N \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{N-1} (b_k - b_j)^{-1} \sum_{k=0}^N r_k T_k \left(\frac{\alpha + b_j}{\alpha - b_j} \right),$$

$$a_\infty = \sum_{k=0}^N r_k T_k(-1)$$

である．この最適化でもとの近似式よりもよい近似が得られる．この近似は後の最適化を徹底した近似と比較しても非常によいものである．

4 徹底した最適化

実関数近似の場合を考え，すべての近似パラメータを c_1, c_2, \dots, c_M とする．もし $z \geq 0$ での相対誤差曲線を描かせたときに，無限遠点も含めて $M + 1$ 個の偏差点 (極大，極小点) があれば，以下のプロセスを繰り返すことで最適化を徹底することができる．

1. 相対誤差曲線の $M + 1$ 個の偏差点 x_1, x_2, \dots, x_{M+1} を求める．
2. x_1, x_2, \dots, x_{M+1} での誤差 e_1, e_2, \dots, e_{M+1} と近似パラメータ c_1, c_2, \dots, c_M に対す微係数 $\partial e_j / \partial c_k$, $1 \leq j \leq M, 1 \leq k \leq M + 1$ を求める．
3. c_1, c_2, \dots, c_M を変化させたときに近似的に

$$\begin{pmatrix} \Delta e_1 \\ \Delta e_2 \\ \vdots \\ \Delta e_{M+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial e_1 / \partial c_1 & \partial e_1 / \partial c_2 & \cdots & \partial e_1 / \partial c_M \\ \partial e_2 / \partial c_1 & \partial e_2 / \partial c_2 & \cdots & \partial e_2 / \partial c_M \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \partial e_{M+1} / \partial c_1 & \partial e_{M+1} / \partial c_2 & \cdots & \partial e_{M+1} / \partial c_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta c_1 \\ \Delta c_2 \\ \vdots \\ \Delta c_M \end{pmatrix} \quad (14)$$

が成り立つものとして

$$\max_{1 \leq j \leq M+1} |e_j + \Delta e_j| \quad (15)$$

を最小にする Δc_k を求め， c_k に Δc_k を加える．

4. x_j を固定した状態で $|e_j|$ が等しくなるまで反復し，次に偏差点 x_j を計算し直して反復する (二重のループによる反復)．

この方法は， c_j に対して最大相対誤差を小さくするという非線形最適化問題を線形で近似してそれを反復する方法である．

また，(14) 式のもとで (15) 式を最小にする問題は方程式の数が未知数の数よりも多い方程式 (不整合な方程式) を残差が最小になるように解く問題である．

4.1 不整合な一次方程式の最良近似解

$m > n$ とする．方程式

$$\begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

を残差

$$\Delta = \max_{1 \leq j \leq m} |r_j|$$

が最小になるように解く問題を考える．ベクトルで書き換えると，

$$r_i(x) = (A_i, x) - b_i$$

のとき，

$$\Delta(x) = \max_{1 \leq j \leq m} |r_j(x)|$$

を最小にする問題である．ただし $A_i = (a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in})$ ， $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ で $(*, *)$ は内積である．この問題は $A_{i+m} = -A_i$ ， $b_{i+m} = -b_i$ とおいて方程式の数を倍にすれば

$$\delta(x) = \max_{1 \leq j \leq 2m} r_j(x)$$

を最小にする問題に置き換えることができる．

特徴付け定理 点 z は，原点が集合 $\{A_i : r_i(z) = \delta(z)\}$ の凸包に含まれるときに限り，関数 δ を最小にする．

補題 U を \mathbb{R}^n のコンパクトな部分集合とする．そのとき連立一次不等式 $(u, z) > 0$ ($u \in U$) が不整合 (解を持たない) であるための必要十分条件は，原点が U の凸包 $K(U)$ に含まれることである．

補題の証明 十分性: 原点が $K(U)$ に含まれると仮定する．凸包の定義より $\sum \lambda_i = 1$ なる $\lambda_i \geq 0$ と $u_i \in U$ が存在して $0 = \sum_{i=1}^m \lambda_i u_i$ が成り立つ．ゆえにあらゆる z に対して $0 = \sum_{i=1}^m \lambda_i (u_i, z)$ が成り立つ．この式はすべての $i = 1, 2, \dots, m$ に関して $(u_i, z) > 0$ は成り立たないことを意味する．

必要性: 原点が $K(U)$ に含まれないと仮定する． U のコンパクト性より $\|z\|$ が最小となる点 $z \in K(U)$ が存在する． u を U の任意の要素とする．凸性により $0 \leq \theta \leq 1$ のとき $\theta u + (1 - \theta)z \in K(U)$ ．したがって $0 \leq \|\theta u + (1 - \theta)z\|^2 - \|z\|^2 = \theta^2 \|u - z\|^2 + 2\theta(u - z, z)$ が成り立つ．しかしこの不等式は $(u - z, z) \geq 0$ でないならば小さい θ に対して成り立たない．よって $(u, z) \geq (z, z) > 0$ を得る．これは z が上の不等式の解であることを意味する．[証明終り]

定理の証明 z が δ の最小点でないと仮定する．そのときあるベクトル h に対して $\delta(z-h) < \delta(z)$ となる． $M = \{i : r_i(z) = \delta(z)\}$ とおく．そのとき $i \in M$ に対して $r_i(z-h) \leq \delta(z-h) < \delta(z) = r_i(z)$ ，すなわち $(A_i, z-h) - b_i < (A_i, z) - b_i$ が成り立つ．こうして

$$(A_i, h) > 0, i \in M.$$

ゆえに補題より原点は $\{A_i : i \in M\}$ の凸包には含まれない．

原点が $\{A_i : i \in M\}$ の凸包に含まれないと仮定する．そのとき補題より $i \in M$ に対して $(A_i, h) > 0$ を満たす h が存在する．ゆえに $\alpha = \min_{i \in M} (A_i, h)$ は正である． $i \in M$ に対する残差 $r_i(z)$ は $\lambda > 0$ に対し

$$r_i(z - \lambda h) = r_i(z) - \lambda(A_i, h) \leq \delta(z) - \lambda\alpha$$

であるから $-h$ 方向に減少する．また M の要素でない i に対する残差 $r_i(z)$ は連続性より z の近傍でも $\delta(z)$ より小さいままである．こうして z の近くに δ より小さくなる点が存在する．[証明終り]

この特徴付け定理を $\Delta(x)$ に関して書き換えると以下のようなになる．

特徴付け定理 2 $z \in \mathbb{R}^n$ を与え， $\sigma_i = \text{sgn } r_i(z)$ ， $M = \{i : |r_i(z)| = \Delta(z)\}$ とする．そのとき点 z は，原点が集合 $\{\sigma_i A_i : i \in M\}$ の凸包に含まれるときに限り，関数 Δ を最小にする．

この定理より $m = n + 1$ の場合何らかの方法で

1. $r_i(x) = \sigma_i \varepsilon$
2. $0 \in K\{\sigma_1 A_1, \dots, \sigma_{n+1} A_{n+1}\}$

となる点 x と符号 $\sigma_i = \pm 1$ と ε を発見できればそれは求めるべき解である．ガンマ関数の最適化の場合には第一近似での偏差点での符号があらかじめわかっているため普通の連立一次方程式を解く手間で容易に求めることができる．

4.2 徹底した最適化の問題点

この徹底した最適化では，単なる多項式近似とは異なり初等関数を含む有理関数の近似なので最良近似が存在してその近似が得られるという保証は何もない(実際，収束しなかったり local minimum に収束したりすることがある)．しかしうまく初期値を選べば最良と思われる近似に収束するようである．

5 誤差関数近似の最適化

誤差関数の場合も近似式

$$\operatorname{erfc} z \approx E_{\alpha,\beta}(z) + e^{-z^2} z \left[\frac{a_0}{z^2 + b_0} + \frac{a_1}{z^2 + b_1} + \cdots + \frac{a_{N-1}}{z^2 + b_{N-1}} \right],$$

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \begin{cases} 2/(1 + e^{\alpha z}) & ; \operatorname{Re} z + |\operatorname{Im} z| < \beta \\ 0 & ; \operatorname{Re} z + |\operatorname{Im} z| \geq \beta \end{cases}$$

をガンマ関数と同じ方法で最適化することができる。ただし $E_{\alpha,\beta}(z)$ が不連続になるなどの理由で複素関数近似の場合は近似領域を分割する必要がある。このため最適化の比較は実近似のみで行った。

6 最適化の例

6.1 最適化の効果

最適化の効果を表 1, 表 2, 表 3 に示す。

表 1: 複素ガンマ関数近似の $\operatorname{Re} z > 0$ での相対誤差上限の比較

	$N = 2$	$N = 4$	$N = 8$
最適化前	7.3×10^{-5}	5.4×10^{-8}	5.7×10^{-14}
最適化後	5.0×10^{-7}	1.4×10^{-10}	3.2×10^{-19}

表 2: 実ガンマ関数近似の $z > 0$ での相対誤差上限の比較

	$N = 2$	$N = 4$	$N = 8$
最適化前	6.7×10^{-5}	5.4×10^{-8}	5.7×10^{-14}
最適化後	3.2×10^{-8}	5.6×10^{-13}	8.0×10^{-24}

表 3: 実誤差関数近似の $z > 0$ での相対誤差上限の比較

	$N = 2$	$N = 4$	$N = 8$
最適化前	9.9×10^{-3}	2.5×10^{-5}	1.2×10^{-10}
最適化後	9.8×10^{-5}	7.1×10^{-9}	3.7×10^{-17}

6.2 最適化した近似式の例

実ガンマ関数近似：

$$\Gamma(x) \approx \left(\left(\left(\cdots \left(a'_{N-1} / (x + b_{N-1}) + \cdots a'_1 \right) / (x + b_1) + a'_0 \right) / x + a'_\infty \right) \right) \cdot \exp((x - 0.5) \log(x + \mu) - x), \quad 0 < x < \infty$$

$N = 2$ のとき，相対誤差の上限 = $3.113E - 08$

$$\begin{aligned} \mu &= 2.102394798991390E + 00 \\ a'_\infty &= 3.062185443705942E - 01 \\ a'_0 &= 1.024166094985555E + 00 \\ a'_1 &= 4.258010456317367E - 01 \\ b_1 &= 1.000008131602802E + 00 \end{aligned}$$

$N = 6$ のとき，相対誤差の上限 = $2.092E - 18$

$$\begin{aligned} \mu &= 6.0975075753906857609437558E + 00 \\ a'_\infty &= 5.6360656189756064967977564E - 03 \\ a'_0 &= 1.2242597732687991784645973E - 01 \\ a'_1 &= 8.5137081316503418312411656E - 01 \\ a'_2 &= 2.2502304753561816836695856E + 00 \\ a'_3 &= 2.0962955353894997733869983E + 00 \\ a'_4 &= 5.0219722703392090725884168E - 01 \\ a'_5 &= 1.1240582657165407383437999E - 02 \\ b_1 &= 1.0000000000006553243170562E + 00 \\ b_2 &= 1.9999999996201023058065171E + 00 \\ b_3 &= 3.0000000467265241458431618E + 00 \\ b_4 &= 3.9999966300007508932097016E + 00 \\ b_5 &= 5.0003589884831925541613237E + 00 \end{aligned}$$

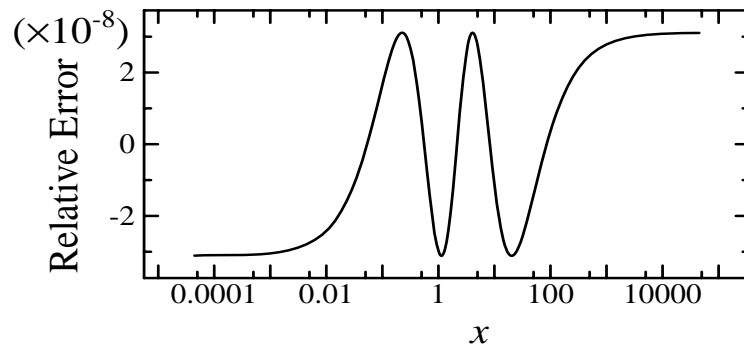


図 1: 実ガンマ関数近似の誤差曲線 ($N = 2$)

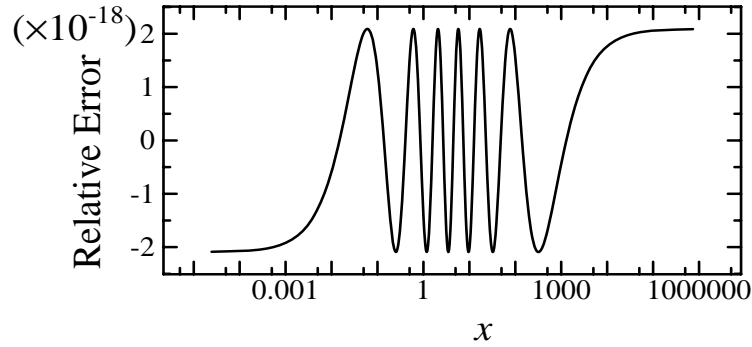


図 2: 実ガンマ関数近似の誤差曲線 ($N = 6$)

複素ガンマ関数近似 :

$$\Gamma(z) \approx \left(\left(\left(\cdots \left(\frac{a'_{N-1}}{z + b_{N-1}} + \cdots a'_1 \right) / (z + b_1) + a'_0 \right) / z + a'_\infty \right) \cdot \exp((z - 0.5) \log(z + \mu) - z), \quad \operatorname{Re} z > 0 \right.$$

$N = 3$ のとき, 相対誤差の上限 = $5.815E - 09$

$$\begin{aligned} \mu &= 3.18354207508418122E + 00 \\ a'_\infty &= 1.03871207566170148E - 01 \\ a'_0 &= 7.00359328532013921E - 01 \\ a'_1 &= 9.80795501986192213E - 01 \\ a'_2 &= 2.06175751698195615E - 01 \\ b_1 &= 1.00000099275106937E + 00 \\ b_2 &= 1.99987038236369488E + 00 \end{aligned}$$

$N = 7$ のとき, 相対誤差の上限 = $5.07E - 17$

$$\begin{aligned} \mu &= 7.317906324470162026819443E + 00 \\ a'_\infty &= 1.663273232565974182142475E - 03 \\ a'_0 &= 5.076004359575930457423196E - 02 \\ a'_1 &= 5.350122831090433330500745E - 01 \\ a'_2 &= 2.405119690852417125798529E + 00 \\ a'_3 &= 4.626248806338911199619969E + 00 \\ a'_4 &= 3.364154380641353241118667E + 00 \\ a'_5 &= 6.714545203979337464953148E - 01 \\ a'_6 &= 1.490972371367227982475937E - 02 \\ b_1 &= 9.99999999999757532664132E - 01 \\ b_2 &= 2.000000000006038505002469E + 00 \\ b_3 &= 2.999999999449155337987314E + 00 \\ b_4 &= 4.000000030168016805150929E + 00 \\ b_5 &= 4.999998579824340250031333E + 00 \\ b_6 &= 6.000098577403124287152078E + 00 \end{aligned}$$

実誤差関数近似：

$$\operatorname{erfc} x \approx E(x) + x \exp(-x^2) \sum_{n=0}^{N-1} a_n / (x^2 + b_n), \quad -\infty < x < \infty,$$

$$E(x) = \begin{cases} 2/(1 + \exp(\alpha x)) & ; x < \beta \\ 0 & ; x \geq \beta \end{cases}$$

$N = 4$ のとき，相対誤差の上限 = $7.073E - 09$

$$\alpha = 9.2088871045460211E + 00$$

$$\beta = 5.0725473171624327E + 00$$

$$a_0 = 3.8664221739686797E - 01$$

$$a_1 = 1.5243017675919252E - 01$$

$$a_2 = 2.3814912488843075E - 02$$

$$a_3 = 1.3022729124288807E - 03$$

$$b_0 = 1.1638196508217325E - 01$$

$$b_1 = 1.0475380173789841E + 00$$

$$b_2 = 2.9213215631713289E + 00$$

$$b_3 = 6.0260843416158831E + 00$$

$N = 8$ のとき，相対誤差の上限 = $3.639E - 17$

$$\alpha = 1.269748999651156838985811E + 01$$

$$\beta = 6.103997330986881994334338E + 00$$

$$a_0 = 2.963168851992273778336357E - 01$$

$$a_1 = 1.815811251346370699640955E - 01$$

$$a_2 = 6.818664514249394930148282E - 02$$

$$a_3 = 1.569075431619667090378092E - 02$$

$$a_4 = 2.212901166815175728291522E - 03$$

$$a_5 = 1.913958130987428643791697E - 04$$

$$a_6 = 9.710132840105516234434841E - 06$$

$$a_7 = 1.666424471743077527468010E - 07$$

$$b_0 = 6.121586444955387580549294E - 02$$

$$b_1 = 5.509427800560020848936831E - 01$$

$$b_2 = 1.530396620587703969527527E + 00$$

$$b_3 = 2.999579523113006340465739E + 00$$

$$b_4 = 4.958677771282467011450533E + 00$$

$$b_5 = 7.414712510993354068147575E + 00$$

$$b_6 = 1.047651043565452375901435E + 01$$

$$b_7 = 1.484555573455979566646185E + 01$$

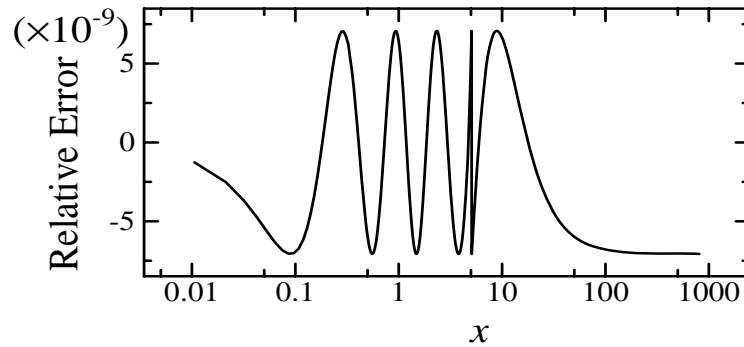


図 3: 実誤差関数近似の誤差曲線 ($N = 4$)

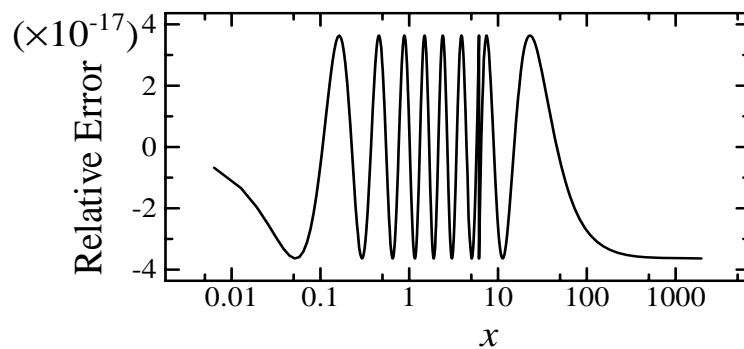


図 4: 実誤差関数近似の誤差曲線 ($N = 8$)

7 まとめ

1. この最適化を行うことで同じ項数で 5 割程度の桁数を稼ぐことができることがわかった。
2. Taylor 展開または Chebyshev 展開での誤差の項を近似パラメータの自由度分だけ消去するという最適化は汎用性が高いことより他の初等関数を含む有理関数近似にも適用できると思われる。

参考文献

- [1] C. Lanczos, A Precision Approximation of the Gamma Function, J. SIAM Numer. Anal. Ser. B, Vol.1, 1964.
- [2] M. Mori, A Method for Evaluation of the Error Function of Real and Complex Variable with High Relative Accuracy, Publ. RIMS, Kyoto Univ. vol.19, 1983.