

三項漸化式の最小解として求められる特殊関数の数値計算法 と余誤差関数の繰り返し積分への適用例

市原寛之* 足達義則* 吉田年雄†
中部大学経営情報学部* 中部大学名誉教授†

1 はじめに

三項漸化式の最小解として求められる特殊関数の数値計算法として、Miller のアルゴリズムがある [1]. このアルゴリズムを要求精度で効率よく求めるように改良したものとして、Deuffhard のアルゴリズム [2] がある. これらのアルゴリズムは、三項漸化式の最小解として求められる様々な特殊関数の計算に適用される.

本稿では、余誤差関数の繰り返し積分 $i^n \operatorname{erfc}(x)$ に、Deuffhard のアルゴリズムを適用して、要求精度で自動的に $i^n \operatorname{erfc}(x)$ を求める数値計算法を示す. 以降、本方法とはこの数値計算法を指すこととする. $i^n \operatorname{erfc}(x)$ には、Miller のアルゴリズムを適用した具体的な計算法が示されている Gautschi の論文がある [3].

本稿では、本方法と Gautschi のアルゴリズム [3] を比較し、本方法は、Gautschi のアルゴリズムより、漸化式の計算回数が少なくなり、計算時間が短くなることを示す.

2 余誤差関数の繰り返し積分 $i^n \operatorname{erfc}(x)$

余誤差関数の繰り返し積分 $i^n \operatorname{erfc}(x)$ は下の式で定義される.

$$\begin{aligned} i^{-1} \operatorname{erfc}(x) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}, \quad i^0 \operatorname{erfc}(x) = \operatorname{erfc}(x) \\ i^n \operatorname{erfc}(x) &= \int_x^\infty i^{n-1} \operatorname{erfc}(t) dt \quad (n = 1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (1)$$

A numerical method for the special function that is the minimal solution of the three term recurrence formula and numerical examples for the repeated integrals of the complementary error function Hiroyuki Ichihara*, Yoshinori Adachi*, Toshio Yoshida†

* College of Business Administration and Information Science, Chubu University

† Chubu University emeritus professor

ただし、 $\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$ である.

3 $i^n \operatorname{erfc}(x)$ に対する Miller のアルゴリズムと Gautschi のアルゴリズム

余誤差関数の繰り返し積分

$f_k(x) \triangleq i^{k-1} \operatorname{erfc}(x)$ は、漸化式

$$F_{k-1}(x) = 2xF_k(x) + 2kF_{k+1}(x) \quad (2)$$

の解である. m を適当に選ばれた正の整数とし、 α を小さな任意定数とする. 初期値を $F_{m+1}(x) = 0$, $F_m(x) = \alpha$ とし、漸化式 (2) を繰り返し計算して、 $F_{m-1}(x)$, $F_{m-2}(x)$, \dots , $F_0(x)$ を順次求める. そのとき、ある $N (< m)$ に対して、 $k = 1, \dots, N$ についての $f_k(x)$ の計算式 $f_{m,k}(x)$ は下の式で表される.

$$f_{m,k}(x) = \frac{F_k(x)}{F_0(x)} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-x^2} \quad (3)$$

上式は、繰り返し回数 m を大きくすると、精度が高くなる.

Gautschi は、文献 [3] で、この Miller のアルゴリズムに対して具体的な $i^n \operatorname{erfc}(x)$ の計算法を説明している. これは、 $i^n \operatorname{erfc}(x)$ と $i^{n-1} \operatorname{erfc}(x)$ の比を項とする漸化式を用いた計算法である. 以後、このアルゴリズムを“Gautschi のアルゴリズム”と呼ぶ. Gautschi のアルゴリズムでは、漸化式の繰り返し計算回数を、予め与えておく必要があるが、Deuffhard のアルゴリズムでは、その必要がなく、任意精度で自動的に計算値を求められることが利点である.

4 Deuffhard のアルゴリズム

余誤差関数の繰り返し積分 $i^n \operatorname{erfc}(x)$ に、Deuffhard のアルゴリズムを適用することを提案するのは、本稿が初めてである. Deuffhard のアルゴリズムは、式 (2) を満たす $F_k(x)$ に、重み

d_k を乗じた和

$$s_n = \sum_{k=0}^n d_k F_k(x), \quad d_k = \begin{cases} 0 & (k \neq n) \\ 1 & (k = n) \end{cases} \quad (4)$$

を任意精度で算出できる。また、

$$f_0(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (5)$$

であるので、

$$F_0(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (6)$$

とする。したがって

$$\sum_{k=0}^m \epsilon_k F_k(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}, \quad \epsilon_k = \begin{cases} 1 & (k = 0) \\ 0 & (k \neq 0) \end{cases} \quad (7)$$

と表される。Deuffhard のアルゴリズムは、用いる漸化式 (2) と式 (7) を行列表現したものを解くことと同じである。

本方法における、 $i^n \operatorname{erfc}(x)$ の計算手順を文献 [4] を参考にして、簡潔に述べる。

$$p_{-1} = q_{-1} = s_0 = 0, \quad p_0 = 1, \quad q_0 = d_0 \quad (8)$$

を初期値として、下の 2 つの漸化式を $k = 1, 2, \dots, n, \dots$ と繰り返す。

$$\begin{cases} p_k = \epsilon_k + 2xp_{k-1} + 2(k-1)p_{k-2} \\ q_k = d_k + 2xq_{k-1} + 2(k-1)q_{k-2} \\ s_k = (2/\sqrt{\pi}) \cdot e^{-x^2} \cdot (q_k/p_k) \end{cases} \quad (9)$$

ただし、この繰り返しは n 回以上とし、 s_k が要求相対精度に達するまで行う。

Deuffhard のアルゴリズムは、漸化式を計算する繰り返し回数をあらかじめ与えておく必要がなく、任意精度で自動的に $i^n \operatorname{erfc}(x)$ を計算できることが利点である。

5 数値例

Gautschi のアルゴリズムと Deuffhard のアルゴリズムで、 $i^n \operatorname{erfc}(x)$ を計算したときの計算値とその真値との相対誤差、漸化式の計算回数を表 1 に示す。真値は Deuffhard のアルゴリズムを 4 倍精度演算で求めた十分に精度の高いものを採用する。また、Gautschi のアルゴリズムと Deuffhard のアルゴリズムで、 $i^n \operatorname{erfc}(x)$ を計算したときの計算時間の比較を表 2 に示す。

表 1 と表 2 から、計算値が求まるまでの漸化式の計算回数は、Gautschi のアルゴリズムよ

表 1 各計算法による $i^2 \operatorname{erfc}(x)$ の数値例 (倍精度演算, 要求相対精度: 10^{-14})

x	A	$i^2 \operatorname{erfc}(x)$	RE	NR
2	D	1.914110303103206d-04	3.12d-15	116
	G	1.914110303103212d-04	-3.55d-17	128
5	D	1.402921518577516d-14	3.15d-15	40
	G	1.402921518577517d-14	2.47d-15	48
10	D	5.095300207451738d-48	9.54d-15	26
	G	5.095300207451738d-48	9.54d-15	63
15	D	7.926822753160880d-103	1.29d-14	22
	G	7.926822753160883d-103	-1.31d-14	30
20	D	3.351531082930385d-179	3.86d-14	20
	G	3.351531082930384d-179	3.88d-14	30

※ A: Algorithm, RE: Relative Error

NR: Number of Calculations for Recurrence Formula

D: Deuffhard のアルゴリズム, G: Gautschi のアルゴリズム

表 2 2 つの方法による $i^n \operatorname{erfc}(x)$ の計算時間の比較 (倍精度演算, 要求相対精度: 10^{-14})

n	x	A	CT (μs)	n	x	A	CT (μs)
1	2	D	1.5	1	5	D	1.5
		G	3.1			G	3.1
2	2	D	1.5	5	5	D	1.5
		G	3.1			G	4.6
7	2	D	3.1	7	5	D	3.1
		G	4.6			G	4.6

※ CT: Calculation Time, 他の表記は表 1 を参照

り、Deuffhard のアルゴリズムの方が少なくなり、計算値が求まるまでの計算時間は、Gautschi のアルゴリズムより、Deuffhard のアルゴリズムの方が短くなるのがわかる。

参考文献

- [1] Gautschi, W.: Computational Aspects of Three-Term Recurrence Relations, *SIAM Review*, Vol. 9, No.1, pp. 24–82 (1967).
- [2] Deuffhard, P.: A Summation Technique for Minimal Solutions of Linear Homogeneous Difference Equations, *Computing*, Vol. 18, No. 1, pp. 1–13 (1977).
- [3] Gautschi, W.: Evaluation of Repeated Integrals of the Coerror Function, *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, Vol. 3, No. 3, pp. 240–252 (1977).
- [4] 二宮市三, 吉田年雄, 長谷川武光, 秦野甯世, 杉浦洋, 櫻井鉄也, 細田陽介: 数値計算のわざ, pp. 21–41, 共立出版 (2006).