誤差関数の評価不等式

中　山　　　功

1　はじめに

誤差関数やそれに関連付けられる不完全ガンマ関数などの指数関数の積分は統計学や確率論ばかりではなく，各種の分野で頻繁に用いられる関数である．その数値計算の必要上，各種の近似式による計算法が考察されており[18, 23, 24]，計算機プログラムとして組み込まれたものを用いると，十分に精度の良い結果が得られる．これに関連して，例えば標準正規分布の裾野の確率を上限あるいは下限から高精度に評価することが求められる場合がある．特に不等式として関数値の挙動をできるだけ精密に議論しようとするとき，論文[14]でも述べられているように，それに応えられる表式があまり多くないか，あっても精度的に十分ではないと考えられることが多い．古くは Birnbaum の不等式[1, 2]とそれを拡張して無数の一連の不等式を証明して精度を高めた Shenton の論文[20]が目を引くところである．

一般的に，誤差関数の数値計算においては連分数展開を用いる方法が推奨されている[24]が，これを用いると不等式を求めることも容易で，それを応用したのが前述の Shenton の論文[20]である．筆者はこれをさらに一般化し，変形連分数の手法を用いて，連分数展開の収束を加速することにより，従来より一段と精度の高い一連の不等式を証明した[16]．また，これを別の関数に適用して，従来の計算アルゴリズムを改善する可能性を指摘し[15]，具体例として，x が大きいときの不完全ガンマ関数 $\Gamma(a, x)$ の例[17]を提示した．

この論文では，これらの考察の原点に立ち戻って，誤差関数を精密に評価する不等式に議論を限定し，実用的にさらに改良を加えた手法を考察することにする．この手法によると，低精度から高精度まで各種の精度に見合った上下限が得られるだけではなく，数値計算そのものに適用することも可能である．

以下では，まず誤差関数の各種の数値計算法を提示し，問題点を明確にする．次に，以前の論文でも紹介した一般の変形連分数による収束の加速化の考え方[11, 22]を誤差関数へ適用した例を考察し，改良された手法を議論する．さらに，この変形連分数に関する各種の不等式を導出して，関数の厳密な数値に対する上限あるいは下限を与える公式を得る．これを使用すると，低精度から高精度まで効果的なアルゴリズムを構成することができる．これらを数値計算例も交えて議論をすすめていくことにする．

2　誤差関数

まず，ここで扱う誤差関数は実数を引数にする場合のみで，

$$(2.1)\qquad G(x)=\int_x^{\infty} g(t)\,dt$$

で定義されるものを考える．ただし，被積分関数 $g(t)$ は標準正規分布の確率密度を表し，

$$(2.2)\qquad g(t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-t^2/2}$$

で与えられる．通常，誤差関数として定義される $\mathrm{erf}(x)$ や $\mathrm{erfc}(x)$ との関係は以下の通りである．

(2.3) $\quad \mathrm{erf}(x)=\dfrac{2}{\sqrt{\pi}}\displaystyle\int_0^x e^{-t^2}dt, \qquad \mathrm{erfc}(x)=1-\mathrm{erf}(x)=\dfrac{2}{\sqrt{\pi}}\displaystyle\int_x^\infty e^{-t^2}dt,$

(2.4) $\quad G(x)=\dfrac{1}{2}\,\mathrm{erfc}\left(\dfrac{x}{\sqrt{2}}\right)=\dfrac{1}{2}-\dfrac{1}{2}\,\mathrm{erf}\left(\dfrac{x}{\sqrt{2}}\right).$

また一般に，$G(-x)=1-G(x)$の関係式が成り立つので，$x>0$の範囲を考えれば十分である．このとき，この数値計算のために，多数の展開式や近似式が考察されているが[8, 9, 12, 20, 21]，プログラムの簡潔性なども考慮に入れて，xが大きい場合と小さい場合とで，次の 2 種の連分数展開を切り替えて用いる方法が推奨されている[24]．

(2.5a) $\quad G(x)=g(x)\left(\dfrac{1}{x+}\,\dfrac{1}{x+}\,\dfrac{2}{x+}\,\dfrac{3}{x+}\cdots\right),$

(2.5b) $\quad G(x)=\dfrac{1}{2}-g(x)\left(\dfrac{x}{1-}\,\dfrac{x^2}{3+}\,\dfrac{2x^2}{5-}\,\dfrac{3x^2}{7+}\cdots\right).$

ただし，上式で $\dfrac{a_1}{b_1+}\,\dfrac{a_2}{b_2+}\cdots$ は連分数展開 $\dfrac{a_1}{b_1+\dfrac{a_2}{b_2+\cdots}}$ を簡略化した書き方である．

この連分数展開を有限の項で打ち切ると，もとの関数の上限または下限を与えるようになることは，上述の形式から容易に推察される．特に (2.5a) の表式は係数が全て正の数で$x>0$の全範囲で収束し，上下限を与える式の証明も簡単である．しかしながら，x の数値によっては（特に$x\sim 1$の近辺から 0 に近付くほどに）この展開式の収束が遅くなり，実用的な精度の上下限を得るためには展開項数を膨大な数にする必要がある．そこで，この論文では (2.5a) を出発点として，この連分数展開の収束を加速化して，単一の表式で$x>0$の全範囲で実用的なレベルの上下限を与える不等式を求めることを目的として考察をすすめることにする．

3　変形連分数による収束の加速化

変形連分数の考え方と誤差関数への適用例について，論文[16]で既に詳説されているが，その重要な部分に説明を付加してここに示しておく．まず，(2.5a) の連分数の部分を次の形に書き直す．

(3.1) $\quad f(x)=\dfrac{G(x)}{g(x)}=\dfrac{1}{x+}\,\dfrac{1}{x+}\,\dfrac{2}{x+}\,\dfrac{3}{x+}\cdots\dfrac{n-1}{+x+w_n}=S_n(w_n).$

ここで，$x>0$であり，$S_n(w)$は

(3.2) $\quad S_n(w)=\dfrac{1}{x+}\,\dfrac{1}{x+}\,\dfrac{2}{x+}\,\dfrac{3}{x+}\cdots\dfrac{n-1}{+x+w}$

で定義される．また，w_nは “tail” と呼ばれて連分数 (3.1) の第n項以下の寄与を示すものであり，

(3.3) $\quad w_n=\dfrac{n}{x+}\,\dfrac{n+1}{x+}\cdots$

で定義され，関係式

(3.4) $\quad w_n=\dfrac{n}{x+w_{n+1}}, \quad n=1,2,3,\cdots$

が成り立つ．連分数 (3.1) で，$w_n=0$とおくと，通常の第n項までの$f(x)$に対する近似式

(3.5) $\quad f_n=S_n(0)=\dfrac{1}{x+}\,\dfrac{1}{x+}\,\dfrac{2}{x+}\,\dfrac{3}{x+}\cdots\dfrac{n-1}{+\ x}$

が得られ，これが$n\to\infty$のとき収束することは明らかである[3, 6, 10]．また，不等式

$$(3.6)\qquad f_{2n} < f(x) < f_{2n-1},\quad n=1,2,3,\cdots$$

が成り立つことも明らかである．

この (3.5) より精度の高い近似式を得るために，(3.4) から w_n の漸近展開を導くと，次のようになる[16]．

$$(3.7)\qquad w_n \sim \sqrt{n} - \frac{x}{2} + \frac{x^2-2}{8\sqrt{n}} + \frac{x}{8n} - \frac{x^4-4x^2-4}{128n\sqrt{n}} - \frac{x^3-2x}{32n^2} + \cdots.$$

したがって，この漸近展開の第 k 項まで等しくなるような近似 $w_n^{(k)}$ を選ぶと，

$$(3.8)\qquad f_n^{(k)} = S_n(w_n^{(k)})$$

により，精度の高い近似式 $f_n^{(k)}$ が得られることが期待される．この $w_n^{(k)}$ を "modifying factor"（変形因子）と呼び，$f_n^{(k)}$ を "modified continued fraction"（変形連分数）と称する[11]．また，その加速の程度 $e_n^{(k)}$ は次式で得られる[10, 11]．

$$(3.9)\qquad e_n^{(k)} = \frac{f_n^{(k)} - f(x)}{f_n - f(x)} = \left(1 - \frac{w_n^{(k)}}{w_n}\right)\frac{h_n}{w_n^{(k)} + h_n}.$$

ただし，h_n は漸化式

$$(3.10)\qquad h_{n+1} = x + \frac{n}{h_n},\quad n=1,2,3,\cdots$$

と初期条件 $h_1 = x$ を満たすものである．

ここで，$h_1 = x > 0$ と (3.10) より，明らかに $h_n > 0$ が成り立つ．したがって，(3.9) より，$-h_n < w_n^{(k)} < 0$ を満たす変形因子 $w_n^{(k)}$ を用いると，$e_n^{(k)} > 1$ となって収束は加速されず，不適切な変形因子になることが分かる．また，$w_n^{(k)} \to -h_n$ のとき $e_n^{(k)}$ は発散して，"critical point"[5] と呼ばれるものに対応していることも分かる．一方，$0 < w_n^{(k)} < w_n$ のときは，$e_n^{(k)} < 1$ となって適切な変形因子になり，さらに，$w_n < w_n^{(k)}$ のときも，変形連分数 (3.8) が通常の連分数 (3.5) と同じ値に収束することは論文[16]で示された通りである．

この変形因子 $w_n^{(k)}$ の各種の候補を論文[16]において示したが，

$$(3.11)\qquad w_n^{(2)} = \sqrt{n + \frac{x^2}{4}} - \frac{x}{2}$$

を用いるのが Shenton の方法[20]であり，$w_n < w_n^{(2)}$ が示され，一連の不等式として，

$$(3.12)\qquad f_1^{(2)} < f_3^{(2)} < \cdots < f(x) < \cdots < f_4^{(2)} < f_2^{(2)}$$

が証明される．この特殊な場合（$f_1^{(2)}$ と $f_2^{(2)}$）が以下の Birnbaum の不等式[1, 2]である．

$$(3.13)\qquad \frac{2}{x+\sqrt{x^2+4}} < f(x) < \frac{4}{3x+\sqrt{x^2+8}}.$$

これらより優れるものとして論文[16]の中で推奨されているのが

$$(3.14)\qquad w_n^{(6)} = \sqrt{n - \frac{1}{2} + \frac{x^2}{4} + t_n(1+t_n x^2)} - \left(\frac{1}{2} - t_n\right)x,\quad t_n = \frac{1}{2(4n-2+x^2)}$$

であり，不等式

$$(3.15)\qquad w_n < \cfrac{n}{x+\cfrac{n+1}{x+w_{n+2}^{(6)}}} < w_n^{(6)},$$

$$(3.16)\qquad f_1^{(6)} < f_3^{(6)} < \cdots < f(x) < \cdots < f_4^{(6)} < f_2^{(6)}$$

が成り立つ．なお，従来の (3.5) の連分数では，$x>0$ として考察する必要があるが，(3.14) などを用いた (3.8) の変形連分数では，$x=0$ で異常性を生じないので，それを含めて $x\geq 0$ として考察することも可能である．この変形因子 $w_n^{(6)}$ と変形連分数 $f_n^{(6)}$ を用いた数値計算により，$n=20$ のとき，$x>0$ の全変数領域で 10^{-6} 以下の相対誤差であり，誤差関数の数値計算としても実用的なレベルで使用可能になることが論文[16] で述べられている．また，(3.14) を簡略化した次式も推奨されている．

$$(3.17)\qquad w_n^{(6')} = \sqrt{n-\frac{1}{2}+\frac{x^2}{4}+t_n} - \left(\frac{1}{2}-t_n\right)x.$$

これらを改良して，さらに高精度に評価可能な式を求めようとすると，(3.14) や (3.17) の近似では，$x<1$ の範囲で n を増加させたとき，精度の改善は遅々としたもので，実用的なアルゴリズムにはほど遠い．そこで，むしろ $x=0$ の近傍で良好となる近似を考察し，(3.7) の漸近展開とは別の考え方で，w_n の近似形を導く手法を以下の章で考察することにする[15]．

4　w_n の満たす微分方程式と不等式

まず，w_n の積分表示を考察する[20]．

$$(4.1)\qquad w_n = \frac{\int_x^\infty (t-x)^n g(t)\,dt}{\int_x^\infty (t-x)^{n-1} g(t)\,dt} = \frac{\int_0^\infty t^n e^{-xt} g(t)\,dt}{\int_0^\infty t^{n-1} e^{-xt} g(t)\,dt}.$$

これは $x>0$ で (3.3) と一致し，$x\leq 0$ でも定義され，(3.4) を満たしている．これを微分すると，

$$(4.2)\qquad \frac{dw_n}{dx} = w_n^2 - w_n w_{n+1} = -K_n$$

が成り立つことが示される．ただし，

$$(4.3)\qquad K_n \equiv w_n(w_{n+1}-w_n) = n - w_n(w_n+x)$$

である[16]．したがって，(4.2) を近似的に解いた解は，変形因子の有力な候補の 1 つである．

ここで，論文[16] において示されている不等式より，次式が成立することが示される．

$$(4.4)\qquad \frac{dw_n}{dx} = -K_n < -\frac{1}{2} + \frac{1+x^2+2xw_n}{8n-4+2x^2} \qquad (x\geq 0).$$

したがって，

$$(4.5)\qquad \frac{1}{(4n-2+x^2)^{1/2}}\frac{dw_n}{dx} - \frac{xw_n}{(4n-2+x^2)^{3/2}} < -\frac{1}{2(4n-2+x^2)^{1/2}} + \frac{1+x^2}{2(4n-2+x^2)^{3/2}}$$

より，

$$(4.6)\qquad \frac{d}{dx}\frac{w_n}{(4n-2+x^2)^{1/2}} < -\frac{1}{2(4n-2+x^2)^{1/2}} + \frac{1+x^2}{2(4n-2+x^2)^{3/2}}$$

が導かれる．ここで $x\to 0$ のときの w_n を考えて $w_n\to\gamma_0$ とすると，(4.6) の各辺を 0 から x まで積分することにより，$x>0$ では次の不等式が成り立つことが示される．

$$(4.7)\qquad \frac{w_n}{(4n-2+x^2)^{1/2}}-\frac{\gamma_0}{(4n-2)^{1/2}}<-\frac{x}{2(4n-2+x^2)^{1/2}}\left(1-\frac{1}{4n-2}\right).$$

ただし，

$$(4.8)\qquad \gamma_0=\sqrt{2}\,\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\Big/\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)$$

である．したがって，$x>0$ において次の不等式が成り立つことが示される．

$$(4.9)\qquad w_n<\sqrt{\gamma_0^2\left(1+\frac{x^2}{4n-2}\right)}-\frac{x}{2}\left(1-\frac{1}{4n-2}\right).$$

この右辺は (3.14) や (3.17) と類似の表式であり，(3.7) で $x\to 0$ とした γ_0 の漸近展開を用いて，w_n の漸近展開 (3.7) と比較することができる．簡単な計算により，第 5 項の $n^{-3/2}$ の項まで一致していることが確かめられる．論文[16]での近似とも類似しているが別の形をしているので，ここで (4.9) の右辺を $w_n^{(5')}$ と定義しておくことにする．したがって，これを用いた変形連分数 $f_n^{(5')}$ も (3.16) と同類の不等式

$$(4.10)\qquad f_{2n-1}^{(5')}<f(x)<f_{2n}^{(5')}$$

を満たしており，論文[16]と同様に，上下限を与える表式が得られることになる．前述の $f_n^{(6)}$ や $f_n^{(6')}$ と比較すると，大きい x のときは精度的に劣ると推察されるが，小さい x では，$x\to 0$ のとき (4.9) の不等式が等式に近付いて，精度が逆に高くなると予想される．この数値計算例は次章以降で比較・検討することにする．

このように，微分方程式 (4.2) を解いて，w_n の $x=0$ 近傍で精度の高い近似解を得ると，それを用いた変形連分数も，$x=0$ の近傍で精度の高い結果を与えることになる．逆に x の大きい範囲では（例えば $x\geq 2$），精度的に劣る近似の $w_n\cong 0$ を用いて従来の通常の連分数 (3.5) によっても，十分な精度の結果が得られるので，例えば $0<x<2$ で (4.2) の高精度の近似解 w_n を求めて，それを変形因子として用いた変形連分数を考察すると，それを $x\geq 2$ にも拡張して用いることにより，$x>0$ の全範囲で良好な結果を得ることができると予想される．この目的のために，次章では，基本的な Taylor 展開とそれに関連した不等式を用いて，微分方程式 (4.2) のさらに精度の高い近似解を求めることを考える．

5　不等式を満たす近似

前章では w_n の満たす微分方程式 (4.2) より不等式 (4.9) を導出し，$x>0$ の全範囲で良好な近似を解析的に得た．これを用いると，誤差関数の上下限を与える不等式を求めることが可能になる．しかしながら，後述の数値計算例に見られるように，$0<x<1$ では 10^{-10} 以下の相対誤差にするには項数 n を相当な数にする必要があり，実用的な限界に近いと言える．この精度を高めるために，ここでは別の近似による接近手法を試みることにする．まず，最も単純な Taylor 展開を利用して，必ずしも不等式を満たすとは限らないが，誤差の絶対値を小さくすることが可能な方法を考える．

まず，微分方程式 (4.2) の解として，

$$(5.1)\qquad w_n=\sum_{j=0}^{\infty}\gamma_j x^j$$

の形式に展開できるものを考察する．これを (4.2) に代入すると，次の関係式が得られる．

$$(5.2)\qquad \gamma_0=\sqrt{2}\,\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\Big/\Gamma\left(\frac{n}{2}\right),\quad \gamma_1=\gamma_0^2-n,\quad j\gamma_j=\gamma_{j-2}+\sum_{i=0}^{j-1}\gamma_i\gamma_{j-1-i}\quad (j\geq 2).$$

したがって，n を与えると逐次に機械的に係数 γ_j を求めることが可能であり，$\gamma_k x^k$ の項までで近似した近似解を

$u_n^{(k)}$ と書くと，これを用いた変形連分数 $S_n(u_n^{(k)})$ は $x=0$ の近傍で特に良好な近似となり，目標に近いものが得られることになる．また，(3.7) の漸近展開の形から推察されるように，k が大きいと，n の漸近展開の面でも高次の近似になっていることが言える．すなわち，γ_0^2 の連分数展開式[13)]

$$(5.3)\qquad \gamma_0^2=2\left[\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\Big/\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\right]^2=n-\frac{1}{2}+\frac{1/2}{4n-2\,+}\,\frac{3^2}{4n-2\,+}\,\frac{5^2}{4n-2\,+}\cdots$$

と (5.2) を利用して，γ_0～γ_7 の n に関する漸近展開を求めてみると，$v=n-1/2$ を定義して，n の代わりに v の展開で考えると，以下のように簡単な形式になり，(3.7) と対応させることも容易になる．

$$(5.4)\qquad \begin{aligned}
&\gamma_0\sim\sqrt{v}+\frac{1}{16v\sqrt{v}}-\frac{19}{512v^3\sqrt{v}}+\frac{631}{8192v^5\sqrt{v}}+\cdots, &&\gamma_1\sim-\frac{1}{2}+\frac{1}{8v}-\frac{9}{128v^3}+\frac{306}{2048v^5}+\cdots,\\
&\gamma_2\sim\frac{1}{8\sqrt{v}}-\frac{1}{16v^2\sqrt{v}}+\frac{575}{4096v^4\sqrt{v}}+\cdots, &&\gamma_3\sim-\frac{1}{32v^2}+\frac{21}{256v^4}-\frac{3225}{8192v^6}+\cdots,\\
&\gamma_4\sim-\frac{1}{128v\sqrt{v}}+\frac{65}{2048v^3\sqrt{v}}-\frac{11363}{65536v^5\sqrt{v}}+\cdots, &&\gamma_5\sim\frac{1}{128v^3}-\frac{57}{1024v^5}+\cdots,\\
&\gamma_6\sim\frac{1}{1024v^2\sqrt{v}}-\frac{105}{8192v^4\sqrt{v}}+\cdots, &&\gamma_7\sim-\frac{1}{512v^4}+\frac{15}{512v^6}+\cdots.
\end{aligned}$$

したがって，$u_n^{(k)}$ は $k=2$ とすると第 4 項の n^{-1} の項まで，$k=4$ とすると第 6 項の n^{-2} の項まで (3.7) と一致しており，n の漸近展開の面でも良好な近似になっている．

しかしながら，(5.1) の展開形のままで近似する形では，x が大きくなると変形因子 $u_n^{(k)}$ が $u_n^{(k)}<0$ となる場合があり，前述のように加速の程度 (3.9) が $e_n^{(k)}>1$ となって，不適切な変形因子となる可能性がある．そこで，これを改良して，(5.1) の展開と類似のもので，w_n に対する不等式を満たし，収束性を満足する近似式を求めることを試みる．まず，w_n の高階微分を考えてみると，付録 A より，$x\geq 0$ のとき，

$$(5.5)\qquad w_n''>0$$

が証明される．また，同様な手法により（証明の詳細は省略する），

$$(5.6)\qquad w_n'''<0$$

が証明されるので，$x>0$ のとき，

$$(5.7)\qquad u_n^{(1)}=\gamma_0+\gamma_1 x<w_n<\gamma_0+\gamma_1 x+\gamma_2 x^2=u_n^{(2)}$$

が成り立つ．左辺の $u_n^{(1)}$ は x が大きくなると $u_n^{(1)}<0$ となり，変形連分数としては不適切であるが，右辺については，$u_n^{(2)}>w_n>0$ であるので，論文[16)] の $w_n^{(6)}$ などと同様に，変形連分数の収束が示され，適切な変形因子になる．

しかしながら，これを続けて w_n の 4 階微分以降を考えると，数値計算の結果では定符号が示されず，適切な変形因子を求めることは簡単ではない．そこで，最初の微分方程式 (4.2) に戻って考えてみると，これは言わゆる可積分系に関連するもので，微差分バーガース方程式と呼ばれて議論されているものと同一であることが分かる[7)]．特に，ここでの解 w_n はこの微分方程式の特別な初期条件での解であり，付録 A で示されているように，特別な関係式が多数存在する．これらを用いて，上述の (5.5), (5.6) から出発して，もっと精度の高い近似式を導くことを試みる．

まず，(5.5) と付録で定義された $Z_n=2w_n+x$ とその微分に関する関係式 (A.4) より，

$$(5.8)\qquad 2w_n''=Z_n''=Z_nZ_n'-x>0$$

であるから，これを積分することにより，次の不等式が導かれる．

(5.9) $\quad Z_n^2 - x^2 > 4\gamma_0^2.$

したがって，

(5.10) $\quad w_n > \dfrac{1}{2}\sqrt{4\gamma_0^2 + x^2} - \dfrac{x}{2} \qquad (x > 0)$

となり，別の不等式が得られることが分かる．この右辺は (5.7) の $u_n^{(1)}$ とは違って正の定符号であり，適切な変形因子となる．(5.4) を用いて (3.7) と比較すると，第 3 項の $n^{-1/2}$ の項まで一致しており，$w_n^{(3)}$ と定義して次章での数値計算の比較対象の一例として考察する．ここで，簡単な $n = 1, 2$ の場合を考えて，変形連分数 (3.8) に代入すると，$f(x)$ に対する以下の不等式が得られる．

(5.11) $\quad \dfrac{\pi}{(\pi-1)x + \sqrt{x^2 + 2\pi}} < f(x) < \dfrac{2}{x + \sqrt{x^2 + 8/\pi}}.$

この下限は Boyd[4] の求めたものと，また上限は Pollak[19] の求めたものと一致していることが分かる．さらに大きな n の場合を考えると，より精密な評価式が得られることになる．

次に，(5.6) と付録で用いた関係式 (A.4) などより，

(5.12) $\quad 2w_n''' = Z_n''' = Z_n Z_n'' + Z_n'^2 - 1 = Z_n'(Z_n^2 + Z_n') - (1 + xZ_n) < 0$

が成り立つことを用いると，以下のように別の不等式が得られる．まず，$(1 + xZ_n)/Z_n'$ の微分を考えると，

(5.13)
$$\frac{d}{dx}\frac{1+xZ_n}{Z_n'} = \frac{Z_n}{Z_n'} + x - \frac{(1+xZ_n)Z_n''}{Z_n'^2} = \frac{Z_n}{Z_n'} + x - \frac{(1+xZ_n)Z_n}{Z_n'} + \frac{(1+xZ_n)x}{Z_n'^2}$$
$$= x + \frac{(1 + xZ_n - Z_n^2 Z_n')x}{Z_n'^2}$$

のように変形できる．したがって，(5.12) の不等式を用いると，

(5.14) $\quad \dfrac{d}{dx}\dfrac{1+xZ_n}{Z_n'} > 2x$

が成り立つので，これを $x \to 0$ のとき $Z_n' \to 1 + 2\gamma_1$ の初期条件のもとで積分すると，

(5.15) $\quad \dfrac{1+xZ_n}{Z_n'} > x^2 + \dfrac{1}{1+2\gamma_1}$

になる．これを w_n，K_n を用いた形に書き直すと，(4.4) と類似のものになり，

(5.16) $\quad K_n > \dfrac{1}{2} - \dfrac{1 + x^2 + 2xw_n}{2[(1+2\gamma_1)^{-1} + x^2]}$

が得られる．これは (4.4) から (4.9) を導いたものと同様に積分できて，(4.9) の右辺の $4n-2$ を $(1+2\gamma_1)^{-1}$ に置き換えて，次の不等式が得られる．

(5.17) $\quad w_n < \sqrt{\gamma_0^2[1 + (1+2\gamma_1)x^2]} + \gamma_1 x \qquad (x > 0).$

(5.4) の関係を利用して，n の漸近展開で考えると，第 5 項の $n^{-3/2}$ の項まで (3.7) と一致していることが確かめられる．(5.17) より，この近似を用いた変形連分数が収束することも明らかであり，$w_n^{(5'')}$ と定義して次章で数値計算例を比較・検討することにする．

ここで，簡単な計算により，$w_n < w_n^{(5'')} < u_n^{(2)}$ が示され，$w_n^{(5'')}$ は (5.7) の $u_n^{(2)}$ よりも優れた近似となっていること

が言える．最終的に，上述の一連の近似の中で，変形因子 $w_n^{(5'')}$ と変形連分数 $S_n(w_n^{(5'')})$ が最も高精度のものになることが推察される．さらに詳細な比較・検討をするために，次の章ではいくつかの数値計算例を交えて議論をすすめていくことにする．

6　数値計算例

まず，ここで紹介する数値計算で用いる近似をまとめて記しておくことにする．

(a) $$w_n^{(2)}=\sqrt{n+\frac{x^2}{4}}-\frac{x}{2},$$

(b) $$w_n^{(3')}=\sqrt{\gamma_0^2+\frac{x^2}{4}}-\frac{x}{2},$$

(c) $$w_n^{(6)}=\sqrt{n-\frac{1}{2}+\frac{x^2}{4}+t_n(1+t_nx^2)}-\left(\frac{1}{2}-t_n\right)x,\ t_n=\frac{1}{2(4n-2+x^2)},$$

(d) $$w_n^{(5')}=\sqrt{\gamma_0^2\left(1+\frac{x^2}{4n-2}\right)}-\frac{x}{2}\left(1-\frac{1}{4n-2}\right),$$

(e) $$w_n^{(5'')}=\sqrt{\gamma_0^2[1+(1+2\gamma_1)x^2]}+\gamma_1 x,$$

(f) $$w_n^{(8)}=u_n^{(6)}=\gamma_0+\gamma_1x+\gamma_2x^2+\gamma_3x^3+\gamma_4x^4+\gamma_5x^5+\gamma_6x^6.$$

ここで，近似 (f)は単なる Taylor 展開の x^6 の項までの近似で，不等式を満たすかどうかは不明であるが，誤差の比較を含めて検討してみることにする．

また，$w_n=0$ とおいた従来の最も単純な近似を (0) とする．近似 (0) と上述の近似 (a) ～ (f)による変形連分数について，いくつかの数値 x, n に対して，誤差と項数 n との関係に着目して表の形にまとめたものが表１，２である．まず，表１は $x=0.2$ のときの代表例であるが，別の x のときもほぼ同様で，誤差が手法 (a) から (f)にかけて減少傾向にあり，w_n に対する不等式の成立も確かめられる．近似 (f)についても，解析的な証明はないが，数値計算上では $n\geq 2$ のとき $w_n< w_n^{(8)}$ を満たしているように見える．次に表２より，同程度の精度となるために必要な項数を比較すると，手法 (c) を除いて (a) から (f)にかけて減少していることが分かる．手法 (c) について

表１．各種のパラメータ n の数値に対する相対誤差 $(f_n^{(k)}/f-1)$ の表，ただし，$\{f_n^{(k)}\}$ は(0)，(a)～(f)による近似値であり，$x=0.2$ としている．

n	(0)	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)
1	3.65E＋00	−1.59E−01	2.80E−02	−8.82E−02	−2.76E−02	−1.52E−04	2.44E−10
2	−8.21E−01	8.21E−02	−7.84E−03	4.44E−03	1.83E−03	3.29E−05	1.93E−10
3	2.12E＋00	−4.70E−02	3.59E−03	−7.56E−04	−3.76E−04	−1.13E−05	−6.20E−11
4	−7.11E−01	3.31E−02	−2.01E−03	2.16E−04	1.21E−04	5.00E−06	2.12E−11
5	1.52E＋00	−2.37E−02	1.28E−03	−8.17E−05	−5.04E−05	−2.59E−06	−8.28E−12
10	−5.10E−01	8.37E−03	−2.92E−04	3.98E−06	3.21E−06	3.00E−07	3.07E−13
15	6.20E−01	−4.19E−03	1.17E−04	−6.70E−07	−6.26E−07	−7.95E−08	−3.78E−14
20	−3.34E−01	2.48E−03	−5.88E−05	1.86E−07	1.93E−07	2.99E−08	8.15E−15
25	3.63E−01	−1.60E−03	3.37E−05	−6.82E−08	−7.65E−08	−1.37E−08	−2.41E−15

表2．与えられた精度εに対して，$|f_n^{(k)}/f-1|<\varepsilon$となる項数$n$の表，ただし，$\{f_n^{(k)}\}$は各種の$x$のときの(0)，(a)〜(f)による近似値である．

x	ε	(0)	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)
0.1	1.0E－07	＞200	＞200	＞200	25	23	9	1
	1.0E－11	＞200	＞200	＞200	197	＞200	154	1
	1.0E－15	＞200	＞200	＞200	＞200	＞200	＞200	14
0.5	1.0E－07	＞200	111	60	18	21	17	2
	1.0E－11	＞200	＞200	＞200	77	91	85	13
	1.0E－15	＞200	＞200	＞200	＞200	＞200	＞200	48
1	1.0E－07	81	38	27	13	15	14	5
	1.0E－11	184	105	80	41	48	46	17
	1.0E－15	＞200	＞200	169	93	108	107	43
2	1.0E－07	24	14	13	9	10	10	7
	1.0E－11	53	35	31	21	24	24	15
	1.0E－15	91	64	58	40	46	45	30

は，$x=0.5$近辺より上の数値では (d)，(e) よりも優れたものとなり，xが大きいときの解析的な考察の結果と一致する．また，手法 (f)については，不等式を満たすかどうかは解析的には明らかではないが，加速の程度は際立っており，通常の数値計算としても使用可能なほどであることが分かる．

次に，上述の数値計算をさらに詳しく繰り返し，パラメータx，nと誤差との関係を詳細に調べてみた結果をまとめると次のようになる．まず，解析的に証明可能な不等式を満たす (a) 〜 (e) の中で最も実用性が高いと感じられる近似 (e) では，$n=156$とすると，$x>0$の全範囲で，相対誤差を10^{-11}以下にすることができる．また，(f)の近似では，$n=48$とすると10^{-15}以下の相対誤差にすることができる．さらに，10^{-7}程度の低い精度で良ければ，(e) では$n=17$，(f) では$n=7$とすれば良いことも分かる．これらの結果を利用すると，低精度から高精度まで効果的なアルゴリズムを構成することができると考えられる．

7　まとめ

前章までで明らかにされたように，誤差関数の連分数 (2.5a) が変形因子$w_n^{(k)}$を用いることにより加速化され，不等式を満たす評価式として有効なものとして機能することが示された．ここでの推奨例としては，$x>0$の全範囲で有効なものを考えて，(e) の近似を用いた変形連分数$S_n(w_n^{(5'')})$を使用するもので，連分数の計算にはかなりの項数（10^{-11}の相対誤差で，$n=156$）を必要とするが，計算機用のプログラムとしては項数の繰り返しを制御するだけの単純なものになる．従来で最も精度が高いと考えられたShentonの近似（6章の (a) の近似に対応する）に比べても相当な改善となっていることが分かる．また，項数nとそのときの係数γ_0などを変更すれば，精度の異なる場合にも対応できるものであり（10^{-7}の相対誤差で，(e) のとき$n=17$），不等式による上限下限を求めるだけではなく，数値計算そのものにも使用可能なほどで，実用性が高いと考えられる．また，(f)の近似はさらに誤差を小さくすることが可能で，数値計算上では上下限を正しく与えているものと推察されるが，解析的な証明は未完成であり，これは今後の課題である．

最後に，ここでの変形連分数による収束の加速化の考え方は誤差関数以外にも不完全ガンマ関数などの他の関数にも適用できる可能性があることは以前の論文[17)]でも指摘した通りである．また，ここで示したように，厳密な関数値の満たす不等式を求めて，理論的に高精度の上下限を求めながらの数値計算を可能にする手法も他の関数に応用できると考えられる．もっと広範囲の分野で，この論文で考察された手法が応用されるようになること

を今後さらに期待したい.

参考文献

1) Birnbaum, Z. W., An inequality for Mill's ratio, Ann. Math. Stat., **13** (1942), 245–246.
2) Birnbaum, Z. W., Effect of linear truncation on a multinormal population, Ann. Math. Stat., **21** (1950), 272–279.
3) Bowman, K. O. and Shenton, L. R., Continued Fractions in Statistical Applications, Marcel Dekker, New York, 1989.
4) Boyd, A. V., Inequalities for Mills' ratio, Rep. Stat. Appl. Res., JUSE, **6** (1959), 44–46.
5) Hayden, T. L., Continued fraction approximation to functions, Numer. Math., **7** (1965), 292–309.
6) Henrici, P., Applied and Computational Complex Analysis Vol. 2, John Wiley, New York, 1977.
7) 広田良吾，直接法によるソリトンの数理，岩波書店，東京，1992.
8) Hitotumatu, S., On the numerical computation of incomplete gamma function, Comm. Math. Univ. St. Paul., **15** (1967), 91–108.
9) Jacobsen, L., Jones, W. B. and Waadeland, H., Further results on the computation of incomplete gamma functions, Analytic Theory of Continued Fractions II (ed. Thron, W. J.), Springer-Verlag, New York, 1986, 67–89.
10) Jones, W. B. and Thron, W. J., Continued Fractions: Analytic Theory and Applications, Cambridge University Press, New York, 1984.
11) Jones, W. B. and Thron, W. J., Continued fractions in numerical analysis, Continued Fractions and Padé Approximants (ed. Brezinski, C.), North-Holland, Amsterdam, 1990, 169–256.
12) Kerridge, D. F. and Cook, G. W., Yet another series for the normal integral, Biometrika, **63** (1976), 401–403.
13) Lange, L. J., Continued fraction representations for functions related to the gamma function, Continued Fractions and Orthogonal Functions: Theory and Applications (eds. Cooper, S. C. and Thron, W. J.), Marcel Dekker, New York, 1994, 233–279.
14) 松縄規，武井智裕，不完全ガンマ関数比の評価不等式，統計数理，**47**（1999），119–142.
15) 中山功，連分数展開の収束の加速法と確率分布関数，数理解析研究所講究録，**933**（1995），61–72.
16) Nakayama, I., Accelerating convergence of the continued fraction for the normal integral, Japan J. Indust. Appl. Math., **17** (2000), 1–14.
17) 中山功，$x \geq 1$ のときの不完全ガンマ関数 $\Gamma(a, x)$ の数値計算，日本応用数理学会論文誌，**10**（2000），1–20.
18) 大野豊，磯田和男監修，新版数値計算ハンドブック，オーム社，東京，1990.
19) Pollak, H. O., A remark on "Elementary inequalities for Mills' ratio" by Y. Komatsu, Rep. Stat. Appl. Res., JUSE, **4** (1956), 110.
20) Shenton, L. R., Inequalities for the normal integral including a new continued fraction, Biometrika, **41** (1954), 177–189.
21) 柴田義貞，正規分布　特性と応用，東京大学出版会，東京，1981.
22) Thron, W. J. and Waadeland, H., Modifications of continued fractions, a survey, Analytic Theory of Continued Fractions (eds. Jones, W. B., Thron, W. J. and Waadeland, H.), Springer-Verlag, New York, 1982, 38–66.
23) 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，東京，1972.
24) 山内二郎編，統計数値表，日本規格協会，東京，1977.

付録 A　$w_n'' > 0$ の証明

以下では $x \geq 0$ を仮定する．まず，

(A.1)　$Z_n \equiv 2w_n + x$

を定義すると，(3.4)，(4.2)，(4.3) を用いて，

(A.2)　$Z_n' = 1 - 2K_n$,

(A.3)　$Z_n^2 = 4n - 2 + x^2 + 2Z_n'$

が示される．また，(A.3) を微分することにより，Z_n'' に関する以下の関係式が得られる．

(A.4)　$Z_n'' = Z_n Z_n' - x$.

一方，論文[16]の Appendix で考察した $Z_n' = 1 - 2K_n$ に関する漸化式を書き換えると，

(A.5) $\quad Z'_{n+2} - Y_n^2 Z'_n = -(Y_n - 1)^2$

となる．ただし，Y_nは次式で定義される．

(A.6) $\quad Y_n \equiv \dfrac{w_{n+2} + x}{w_n}.$

これらに対し，論文[16]で示された重要な性質で以降の証明に必要なものを以下に記す．

(A.7) $\quad 0 < w_n < w_{n+2}, \quad Y_n > 1,$

(A.8) $\quad 0 < Z_n' < 1, \quad 0 < 2K_n < 1.$

ここで，(A.5) をさらに微分すると，Z_n''に関する漸化式が以下のように得られる．

(A.9) $\quad Z''_{n+2} - Y_n^2 Z''_n = 2Y_n'(Y_n Z_n' - Y_n + 1).$

この右辺が負になることを示すために，まず，

(A.10) $\quad Z_n' < \dfrac{Y_n - 1}{Y_n + 1} < \dfrac{Y_n - 1}{Y_n}$

を証明することを試みる．そのために，(A.5) を用いて，

(A.11) $\quad Z'_{n+2} - \dfrac{Y_{n+2} - 1}{Y_{n+2} + 1} - Y_n^2\left(Z_n' - \dfrac{Y_n - 1}{Y_n + 1}\right) = \dfrac{Y_n - 1}{Y_n + 1} - \dfrac{Y_{n+2} - 1}{Y_{n+2} + 1} = \dfrac{2(Y_n - Y_{n+2})}{(Y_n + 1)(Y_{n+2} + 1)}$

を考察する．ここで，(A.6) と (3.4) を用いると，Y_nに関する以下の 2 通りの表式が得られる．

(A.12) $\quad Y_n = \dfrac{(w_{n+1} + x)(w_{n+2} + x)}{w_n(w_{n+1} + x)} = \dfrac{n + 1 + x(w_{n+2} + x)}{n},$

(A.13) $\quad Y_n = \dfrac{w_{n+1}(w_{n+2} + x)}{w_n w_{n+1}} = \dfrac{n + 1}{n - xw_n}.$

これらを用いると，

(A.14) $\quad Y_n - Y_{n+2} = \dfrac{1 + xw_{n+2} + x^2}{n} - \dfrac{1 + xw_{n+2}}{n + 2 - xw_{n+2}} = \dfrac{2 + xw_{n+2} + x^2 K_{n+2}}{n(n + 2 - xw_{n+2})} > 0$

より，(A.7) を考慮すると，(A.11) は正値をとることが分かる．したがって，

(A.15) $\quad Z'_{n+2} - \dfrac{Y_{n+2} - 1}{Y_{n+2} + 1} > Y_n^2\left(Z_n' - \dfrac{Y_n - 1}{Y_n + 1}\right)$

となる．この不等式を繰り返すことにより，次の不等式が成り立つことが分かる．

(A.16) $\quad \left(Z_n' - \dfrac{Y_n - 1}{Y_n + 1}\right) < \left(Z'_{n+2N+2} - \dfrac{Y_{n+2N+2} - 1}{Y_{n+2N+2} + 1}\right) \displaystyle\prod_{j=0}^{N} Y_{n+2j}^{-2}.$

これより，(A.12) より示される不等式

(A.17) $\quad Y_k^{-1} = \dfrac{k}{k + 1 + x(w_{k+2} + x)} \leq \dfrac{k}{k + 1}$

を用いて，$N \to \infty$のとき，

(A.18) $\quad 0 < \displaystyle\prod_{j=0}^{N} Y_{n+2j}^{-2} \leq \prod_{j=0}^{N}\left(\frac{n + 2j}{n + 2j + 1}\right)^2 = \left[\frac{\Gamma(N + 1 + n/2)\Gamma((n + 1)/2)}{\Gamma(N + 1 + (n + 1)/2)\Gamma(n/2)}\right]^2 \to 0$

であり，$Z_n'-(Y_n-1)/(Y_n+1)$ は (A.7), (A.8) より有界であるので，(A.16) の右辺は 0 に収束する．したがって，

(A.19) $\quad Z_n'<\dfrac{Y_n-1}{Y_n+1}$

であり，(A.10) の右側の不等式が成り立つのも明らかであるので，(A.9) の右辺は負になり，$Z''_{n+2}< Y_n^2 Z_n''$ となる．よって，次式が証明される．

(A.20) $\quad \dfrac{Z''_{n+2}}{Z_{n+2}}<\left(Y_n^2\dfrac{Z_n}{Z_{n+2}}\right)\dfrac{Z_n''}{Z_n}.$

ここで，$Y_n^2 Z_n/Z_{n+2}\geq Y_n$ が成り立つので，(A.15) ～ (A.19) の導出と同様な考察により，Z_n''/Z_n が有界であることを考慮して，

(A.21) $\quad Z_n''>0$

が証明される．さらに，Z_n の定義 (A.1) により，$Z_n''=2w_n''$ であるから，$w_n''>0$ が証明される．