2E11

積分で表わされる数学関数の高精度数値計算法
―原子構造計算から数学・数値解析へのフィードバック―

石川 英明

Highly accurate, numerical methods of calculation for mathematical functions defined by integrals:　Feedback from atomic structure calculations to mathematics and numerical analysis

Hideaki Ishikawa

【序】

我々は量子力学の一分野である原子構造計算につき、高精度計算を実現するため、既存の数値計算法のみならず、新しい計算法を考案して、課題を克服してきた [1]。そのために、数学、数値解析、物理等、幅広く勉強して理解することが必要であった。これはマルチ・ディシプリン、即ち、一人一人が多方面に渡り、広い知識と深い理解を持って、課題を克服する、の一つの例である[2-4]。今回、原子構造計算で開発した計算手法を数学関数の計算に適用することにより、積分で表わされる関数を高精度で数値計算する一般的な方法を報告する。

【数学的基礎】

積分で表わされる関数の数学的基礎は、解析学でよく知られた微分積分学の基本定理、$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$、である。ここで、左辺は区間$[a,b]$における関数$f(x)$の Riemann 積分である。また、右辺は原始関数$F(x)$の両端での値の差であり、原始関数$F(x)$と導関数$f(x)$との関係は$(d/dx)F(x) = f(x)$　である[5-7]。この定理で、積分区間の上限bを変数xとすると、$F(x) = F(a) + \int_a^x f(x)dx$、或いは、積分区間の下限$a$を変数$x$とすると、$F(x) = F(b) - \int_x^b f(x)dx$。これらの$F(x)$を数値計算する一般的な方法を述べる. これは$F(x)$が初等関数で表わせない場合にも対応できる。更に、$f(x)$が数値データでのみ与えられる場合にも拡張して使える。

【方法】

<u>不定積分を直接計算する方法</u>

関数が定義されている全区間を等間隔で分割する。その一つの小さな区間(x_k, x_{k+1})における積分（単一区間の積分と呼ぶ）$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$を考える。この積分をメッシュ点での関数値のみを使って計算する[1]。隣接する$(n+1)$個の分点をとる。単一区間の積分公式は Lagrange 補間多項式を単一区間で積分することにより得られる。特に、中央の区間での Lagrange 補間は高精度であるから[8,9]、その積分も高精度である [1]。更に、その積分値の累積を計算することにより、メッシュ点x_kにおける関数値$F(x_k)$ を計算する。メッシュ点の中間の点における$F(x)$は補間により計算する。（高精度の多項式補間法は[8,9]に示されている。）更に、関数が区間$[0,\infty)$で定義されている場合、原点近傍では冪級数展開式を、無限遠点近傍では漸近級数展開式により$F(x)$を計算する。計算の際のパラメータは、分割の区間幅、数値積分公式の次数、冪級数展開を使う領域の上限の位置、漸近展開を使う領域の下限の位置、である。これらは要求精度に応じてテストをしながら決める。

<u>1 階常微分方程式を解く方法</u>

原始関数$F(x)$と導関数$f(x)$との関係式を、$F(x)$に対する微分方程式と読み替えれば、$F(x)$に関する積分の表式は微分方程式を解いた表現になっている。即ち、関数計算が微分方程式を解くことに帰着される。原始関数と導関数の関係式は、$F(x)$に対するより一般的な 1 階常微分方程式$(d/dx)F(x) = G(x, F(x))$, ここでGはx及び$F(x)$の関数である、の特殊な場合と見なすことができる。（$f(x)$はxの関数の中に含まれている。）我々はこの型の常微分方程式を高精度に解く方法、即ち、線形多段法、を既に持っている [1]。それは、与えられた分点での関数値のみを使う方法である。Dahlquist

が始め、Henrici が発展させた最良作用素の構成法[10]に基づいて、一連の高次の公式を得ている [1]。線形多段法で計算を開始するための初期値は、不定積分を直接計算する方法と同様の方法で計算する。例えば、関数が区間 $[0,\infty)$ で定義されている場合、原点近傍では冪級数展開式を、無限遠点近傍では漸近級数展開式を用いて、メッシュ点での $F(x)$ を初期値として必要な個数だけ計算する。

【計算対象】

計算した関数は以下の通りである。関数の定義は[11,12]に従っている。

□積分が初等関数で表わせる、或いは初等関数となるもの

・指数関数、対数関数、逆三角関数（特に逆正接関数）

これらは、コンパイラの組み込み関数を利用して、計算精度の評価を行った。

□初等関数で表わせない積分

・誤差関数、Fresnel 積分、積分指数関数、積分余弦及び正弦関数、不完全ガンマ関数

これらの関数は他の計算法によるプログラム[13]を利用して、計算精度の評価を行った。

【結果】

倍精度演算で倍精度目一杯の計算精度を得た。計算結果は講演で述べる。

【議論】

既存の方法との関係を述べる。関数計算は過去数世紀にわたり調べられてきた。総合報告には、例えば、[11,14]がある。今では種々の計算方法がある。典型的には区間で分けて、それぞれの区間で適切な計算法を使って計算する：

◇原点近傍　　　・冪級数展開を使う
◇限遠点近傍　　・漸近展開を使う
◇中間の領域　　・連分数展開を使う。漸近展開の領域から更に内側へ計算可能な領域を広げる
　　　　　　　　・数値積分を使う
　　　　　　　　　・元の被積分関数をそのまま使う
　　　　　　　　　　・Romberg 積分、Gauss 型公式、等を使う
　　　　　　　　　　・単一区間の積分とその累積を計算する
　　　　　　　　　・積分の表式を変換してから積分する
　　　　　　　　　　・無限区間の積分に変形して台形公式を使う
　　　　　　　・1 階常微分方程式を解く
　　　　　　　・多項式近似（全区間をいくつかの区間に分割し、その区間で近似式を作る）を使う
　　　　　　　　・最大誤差を最小にする近似法（Chebyshev 近似）を使う
　　　　　　　　・Taylor 級数展開法（展開係数（高階微分）を数値で求めて表で持つ）を使う
　　　　　　　・有理多項式近似を使う

冪級数展開と漸近展開は確立された方法である。新しい方法は中間の領域での計算法で出て来る。今回の計算法は、数値積分を使う方法（単一区間の積分とその累積を計算する）と 1 階常微分方程式を解く方法である。これらは単純かつ高精度という特徴を持ち、適用性が広いというメリットがある。

【参考文献】

[1] 石川英明、「原子構造の高精度数値計算法」、unpublished.　[2] 石川英明、「応用数理と計算科学における理論と応用の融合に向けての提言」、in 「数理解析研究所講究録」、出版予定.　[3] 石川英明、「量子力学における高精度数値計算法―計算科学と応用数理の融合とマルチ・ディシプリンの推進」、投稿中.　[4] 石川英明、「量子力学と数値解析　－物質科学の基礎理論と数値解析の融合－」、in 「研究集会報告集、第 13 回　常微分方程式の数値解法をその周辺」、幸谷智紀（編）、2014 年, pp. 1-12.　[5] 高木貞治、「解析概論」、岩波、1961.　[6] V. I. スミルノフ、「高等数学教程」、1、共立、1958.　[7] E. ハイラー、G. ヴァンナー、「解析教程」（上、下）、シュプリンガー・ジャパン、2006.　[8] H. Ishikawa, J. Phys. A 35 (2002) 4453–4476.　[9] H. Ishikawa, J. Comput. Chem. Jpn 6 (2007), 199-216.　[10] P. Henrici, *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*, Wiley, New York, 1968.　[11] M. Abramowitz and I. A. Stegun, ed., *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, 1972.　[12] 森口繁一、宇田川金久、一松信、「数学公式 III」、岩波、1960.　[13] 渡辺力、名取亮、小国力、「Fortran77 による数値計算ソフトウェア」、丸善、1989.　[14] F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, and C. W. Clark, *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge University Press, 2010.