

誤差関数の計算表式と求値誤差

(北教大釧路) 小 原 繁

平成 15 年 7 月 23 日

1 【序】

近年のコンピュータの発達に伴ない分子軌道計算が大型分子系へ適用できるようになってきて、比較的小型の酵素について分子軌道計算が行われ報告される様になってきた。大型分子系の分子軌道計算を実行するには数値計算の精度についての吟味が不可欠で、特に電子反発積分はその個数が膨大になるにも関わらず個々の積分値の有効数字が 1 2 桁程度になっているため計算精度の不足を生じる原因になりやすい。電子反発積分の計算精度を決定している誤差関数を従来よりも高速かつ高精度に求値することを目指し、誤差関数の求値誤差と計算表式を再検討した。この結果について報告する。

次節には誤差関数に関する種々の関係式を列挙する。第三節には求値のための計算式とそのときの相対誤差、および、許容できる誤差との関係を導出したものをまとめて記す。

2 【誤差関数に関する等式】

この節には誤差関数と補誤差関数の定義とこれらの関数が満足する等式を列挙する。

誤差関数 $F_m(T)$ 、補誤差関数 $G_m(T)$ 、および、和関数 $S_m(T)$ を下記のように定義する。

$$F_m(T) \equiv \int_0^1 t^{2m} e^{-Tt^2} dt, \quad (1)$$

$$G_m(T) \equiv \int_1^\infty t^{2m} e^{-Tt^2} dt, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} S_m(T) &\equiv F_m(T) + G_m(T) \\ &= \frac{(2m-1)!!}{2(2T)^m} \sqrt{\frac{\pi}{T}}. \end{aligned} \quad (3)$$

$(T > 0, m = 0, 1, 2, \dots)$

被積分関数を吟味することにより $F_m(T)$ と $G_m(T)$ に m や T に関する以下の様な大小関係のあることが判かる。

$$F_M(T) < F_m(T), \quad (m < M) \quad (4)$$

$$G_m(T) < G_M(T), \quad (m < M) \quad (5)$$

$$F_m(T) < F_m(t), \quad (t < T) \quad (6)$$

$$G_m(T) < G_m(t). \quad (t < T) \quad (7)$$

これらの大小関係などにより $F_m(T)$ と $G_m(T)$ の値が以下の範囲になることが判かる。

$$0 < F_m(T) < F_0(T) = \frac{1}{2m+1}, \quad (8)$$

$$0 < G_m(T) < S_m(T) = \frac{(2m-1)!!}{2(2T)^m} \sqrt{\frac{\pi}{T}}, \quad (9)$$

$$0 < G_0(T) < \frac{e^{-T}}{2T}. \quad (10)$$

また、 $F_m(T)$ と $G_m(T)$ は m や T が充分大きな値のときは以下の値になる。

$$F_m(T) \rightarrow 0, \quad (m \rightarrow \infty) \quad (11)$$

$$F_m(T) \rightarrow \frac{(2m-1)!!}{2(2T)^m} \sqrt{\frac{\pi}{T}}, \quad (T \rightarrow \infty) \quad (12)$$

$$G_m(T) \rightarrow 0. \quad (T \rightarrow \infty) \quad (13)$$

$F_m(T)$ と $G_m(T)$ を T に関して微分することにより次の関係を得ることができる。

$$\frac{d}{dT} F_m(T) = -F_{m+1}(T), \quad (14)$$

$$\frac{d}{dT} G_m(T) = -G_{m+1}(T). \quad (15)$$

部分積分を行なうことにより $F_m(T)$ と $G_m(T)$ が次の漸化関係を満足していることが判かる。

$$F_m(T) = \frac{1}{2m+1} \{e^{-T} + 2TF_{m+1}(T)\}, \quad (16)$$

$$G_m(T) = \frac{1}{2T} \{e^{-T} + (2m-1)G_{m-1}(T)\}. \quad (17)$$

この漸化関係を何度か使用すると次式が得られる。

$$F_m(T) = \frac{e^{-T}}{2T} \sum_{n=1}^N a_{m,n} + a_{m,N} F_{m+N}(T), \quad (18)$$

$$G_m(T) = \frac{e^{-T}}{2T} \sum_{n=0}^N b_{m,n} + b_{m,N+1} G_{m-N-1}(T). \quad (19)$$

ここで、 $a_{m,n}$ と $b_{m,n}$ は

$$a_{m,0} \equiv 1, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} a_{m,n} &\equiv \frac{2T}{2m+2n-1} \cdot a_{m,n-1}, \\ &= \frac{2T}{2m+1} \cdot \frac{2T}{2m+3} \cdots \frac{2T}{2m+2n-1}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$b_{m,0} \equiv 1, \quad (22)$$

$$\begin{aligned} b_{m,n} &\equiv \frac{2m-2n+1}{2T} \cdot b_{m,n-1}, \\ &= \frac{2m-1}{2T} \cdot \frac{2m-3}{2T} \cdots \frac{2m-2n+1}{2T}, \end{aligned} \quad (23)$$

$(n = 1, 2, \dots)$

である。 $F_m(T)$ を T_0 における n 項の Taylor 展開で表現したときの表式は

$$F_m(T) = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(T_0 - T)^i}{i!} F_{m+i}(T_0) + R_n \quad (24)$$

になる。ここで、 R_n は剰余項であり

$$R_n = \frac{(T_0 - T)^n}{n!} F_{m+n}(\xi), \quad (25)$$

$$\xi \equiv T_0 + \theta(T - T_0), \quad (0 < \theta < 1) \quad (26)$$

を表す。また、 n 個の T の値 ($T_1, T_2, \dots, T_i, \dots, T_n$) における誤差関数の値 $F_m(T_i)$ を使って $F_m(T)$ の Lagrange 補間の表式を得ることができる。

$$F_m(T) = \sum_{i=1}^n F_m(T_i) N_i(T) + Q_n(T), \quad (27)$$

ここで、 $N_i(T)$ は

$$N_i(T) = \prod_{j=1(j \neq i)}^n \frac{T - T_j}{T_i - T_j}. \quad (28)$$

を表し、 $Q_n(T)$ は剰余項

$$Q_n(T) = \pi_n(T) \frac{(-1)^n F_{m+n}(\xi)}{n!}, \quad (29)$$

$$\pi_n(T) = \prod_{j=1}^n (T - T_j), \quad (30)$$

$$T_1 < \xi < T_n \quad (31)$$

を表す。もし、分点 T_i として、Chebyshev 多項式 $T_n(\cos \theta) = \cos n\theta$ の零点

$$T_i = \frac{T_1 + T_n}{2} + \frac{T_n - T_1}{2 \cos(\pi/2n)} \cos \left(\frac{n - k + 1/2}{n} \pi \right), \quad (32)$$

$$k = 1, 2, \dots, n$$

を選んだ場合、この Lagrange 補間のことを特に Chebyshev 補間と呼ぶ。

3 【計算表式と相対誤差】

誤差関数に解析的な計算表式が無いので誤差関数の値を計算するには何らかの近似式を使うことになる。前節の等式に基づいた計算表式とその相対誤差 ϵ 、および、許容できる誤差 σ との関係はこの節に列挙する。

(19) 式の第一項により $G_m(T)$ を計算し、この値を $S_m(T)$ から差し引くことにより $F_m(T)$ を計算することができる。

$$F_m(T) \approx S_m(T) - \frac{e^{-T}}{2T} \sum_{n=0}^{m-1} b_{m,n} \quad (33)$$

この場合の相対誤差 ϵ と許容誤差 σ の関係は

$$\epsilon = \frac{b_{m,m} G_0(T)}{F_m(T)} < \frac{(2m-1)!! e^{-T}}{(2T)^{m+1} F_m(T)} \leq \sigma. \quad (34)$$

になる。この式 [(34) 式] から 44 以上の T 値において (33) 式で $F_m(T)$ を計算すると相対誤差が 10^{-20} 以下になることが判かった。

44 以下の T 値における $F_m(T)$ の計算には (18) 式の第一項を使うことができる。

$$F_m(T) \approx \frac{e^{-T}}{2T} \sum_{n=1}^N a_{m,n} \quad (35)$$

この場合の相対誤差 ϵ と許容誤差 σ の関係は

$$\epsilon = \frac{a_{m,N} F_{m+N}(T)}{F_m(T)} \leq \sigma \quad (36)$$

になる。

この関係式は、予め計算してある誤差関数の値から相対誤差を算出するためには役立つが、許容誤差以内に誤差関数の値を計算するには N をどのような値にすればよいかを決めるためには役立ちにくい。このための関係式を相対誤差 ϵ の表式 [(36) 式] に (8) 式と (18) 式を代入して変形することにより以下のように導出することができた。

$$a_{m,N} \leq 2\sigma T e^T \sum_{n=1}^N a_{m,n}. \quad (37)$$

$F_m(T)$ を T_0 における n 項の Taylor 展開で表現したとき

$$F_m(T) \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(T_0 - T)^i}{i!} F_{m+i}(T_0) \quad (38)$$

相対誤差 ϵ は

$$\epsilon = \frac{|R_n|}{F_m(T)} = \frac{|T_0 - T|^n F_{m+n}(\xi)}{n! F_m(T)} \quad (39)$$

になる。Taylor 展開における T_0 のグリット幅を w とし

$$T = T_0 + w \quad (40)$$

相対誤差 ϵ が許容誤差 σ 以内であるという条件を満たすグリット幅 w の表式として次式を得ることができた。

$$|w| \leq \frac{\sigma n! F_m(T_0)}{F_{m+n}(T_0 - |w|)} \quad (41)$$

Lagrange 補間式で $F_m(T)$ を計算したときの

$$F_m(T) \approx \sum_{i=1}^n F_m(T_i) N_i(T) \quad (42)$$

相対誤差 ϵ は

$$\epsilon = \frac{|Q_n|}{F_m(T)} = \frac{|\pi_n(T)| F_{m+n}(\xi)}{n! F_m(T)} \quad (43)$$

になる。 $\pi_n(T)$ の大まかな見積りとして区間幅 $(T_n - T_1)$ の n 乗を用いると

$$\epsilon < \frac{|T_n - T_1|^n F_{m+n}(\xi)}{n! F_m(T)} \quad (44)$$

右辺は (39) 式の右辺と同形になる。区間幅 $(T_n - T_1)$ を w で表わすと、許容誤差と w の関係は Taylor 展開の時と同じ関係になることが判かった。

以上の計算表式と相対誤差の詳細については当日発表する。