

積分で表わされる関数の高精度数値計算法

— 量子力学の数値解析から数学・数値解析へのフィードバック —

○石川 英明

〒257-000 神奈川県秦野市鶴巻北 2-8-1-001 (UHI91261@nifty.com)

【序論】

我々は量子力学の一分野である原子構造計算につき、これまで一連の報告を行ってきた（例えば [1,2]）。高精度計算を実現するためには、既存の数値計算法で使えるもののみならず、新しい道具を作って、課題を克服してきた。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 [3-5]。今回、原子構造計算で必要に迫られて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見つけたので報告する。これは、量子力学の数値解析から数学・数値解析へのフィードバックの一例である。

【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以下の事柄にある [6-8]：

微分積分学の基本定理：区間 $[a, b]$ における（連続な）関数 $f(x)$ の定積分は両端の原始関数 $F(x)$ の値の差に等しい $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$ 。ここで、区間 $[a, b]$ における関数 $f(x)$ の定積分は、区間を微小区間に分割し、長方形の面積（縦は各微小区間内の点における関数値、横は各区間幅）の和を、全区間幅一定の条件下で、分割数を無限に増した時の極限值で定義される（Riemann 積分）

$\int_a^b f(x)dx = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^m f(\xi_i)(x_i - x_{i-1})$, $x_{i-1} \leq \xi_i \leq x_i$ 。また、関数 $f(x)$ が与えられたとき、それを導関数とする関数 $F(x)$ 、即ち、 $(d/dx)F(x) = f(x)$ 、なる $F(x)$ を $f(x)$ の原始関数（anti-derivative）と言い、積分記号を用いて、 $F(x) = \int f(x)dx$ 、と書く。即ち、原始関数は微分の逆演算として定義される。

以上のことから、積分区間の上限 b を変数 x とすると、 $F(x)$ は、定数 $F(a)$ と a から x までの定積分で与えられる $F(x) = F(a) + \int_a^x f(x)dx$ 。この $F(x)$ を数値計算する一般的な方法を以下に述べる。これは $F(x)$ が初等関数で表わせない場合、或いは $f(x)$ が数値データでのみ与えられる場合、のいずれの場合にも対応できる。

【方法】

関数が定義されている区間を n 等分する。（メッシュ点を x_j , $j = 0, 1, \dots, n$, とする。）その一つの小さな区間における積分 $\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx$ を高精度の数値積分法 [1] により計算する。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 における積分値を計算する

$$F(x_k) = F(a) + \int_a^{x_k} f(x)dx = F(a) + \sum_{j=1}^k \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx$$

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 [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。

【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[10,11]に従っている。

- (a) 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。
- (b) 初等関数で表わせない積分
誤差関数と補誤差関数、Fresnel 余弦積分、Fresnel 正弦積分、積分指数関数、積分余弦関数、積分正弦関数、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[12]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。

【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。計算の方法は多種多様にある。（膨大な数の文献がある。総合報告には、例えば、[13]がある。）現状では、種々の方法で計算できる状態になっている。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
- ・無限遠点近傍 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
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
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。新しい方法が出てくるのは中間の領域での計算法である。今回の計算法は、数値積分を使う、その際、元の被積分関数をそのまま使う、積分法が単純かつ高精度という特徴を持つ。これは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」、日本コンピュータ化学会 2010 春季年会講演予稿集。
- [2] 石川英明、「原子構造の高精度数値計算 —軽元素への適用—」、日本コンピュータ化学会 2010 秋季年会講演予稿集。
- [3] 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。
- [4] 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。
- [5] 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.
- [6] 高木貞治、「解析概論」、岩波、1961.
- [7] V. I. スミルノフ、「高等数学教程」、1、共立、1958.
- [8] 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.
- [9] H. Ishikawa, “An accurate method for numerical calculations in quantum mechanics,” *J. Phys. A* **35** (2002) 4453–4476
- [10] M. Abramowitz and I. A. Stegun, ed., *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, 1972.
- [11] 森口繁一、宇田川金久、一松信、「数学公式 III」、岩波、1960.
- [12] 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.
- [13] F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, and C. W. Clark, *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge University Press, 2010.