

量子統計因子を含む積分の数値計算法

教養部 横田 浩

1 はじめに

最近、初期宇宙・中性子星やクォーク・グルーオンプラズマなどの研究が盛んに行われるようになってきたことにともない、有限温度（及び有限密度）の場の理論が脚光をあびている[1]。そこでは、種々の物理量が計算されているが、一般的に積分の形で温度（並びに密度）の効果を含んでいる。残念なことに、これらは解析的に積分できないのが普通である。従って、ふるまいを調べるためには、何らかの近似を行うか、数値による議論を行うほかはない。本稿では、温度の効果を含む積分を、数値的に計算する一般的な方法を考え、より効率的な方法を検討する（簡単のため密度は考えない）。

積分は一般的に、以下のような形をしている[2]。

$$F(\xi) = \int_a^\infty \frac{f(x)}{(e^{x/\xi} \pm 1)^n} dx \quad (1)$$

ここで、 $\xi \equiv T/\mu$ (T は環境の温度； μ は考えている過程のエネルギー)であり、 n は普通には1であるが2や3をとることもある。因子

$$\frac{1}{e^{x/\xi} \pm 1} \quad (2)$$

を量子統計因子と呼ぶ。分母で‘-’の方をボーズ・アインシュタイン統計因子と呼び、‘+’の方をフェルミ・ディラック統計因子と呼ぶ。本稿では、ボーズ統計を扱うが、フェルミ統計への拡張は簡単である。

数値積分法には、いろいろな種類があるが、ここでは台形公式・ガウス公式・二重指数関数型公式 (DE公式) の3つをとりあげる[3]。以下、次節で数値積分について簡単に解説する。第3節で正確に積分可能な場合について数値積分を行う。第4節で解析的に積分不可能な例について調べる。第5節でまとめ等を行う。

本稿の計算には、奈良大学情報処理センターのACOS-430モデル70を使用した。CPU時間はすべてこのコンピュータによるものである。

2 数値積分法

本節では、数値積分について簡単な解説を行う[3]。一般に

$$S = \int_a^b f(x)dx \quad (3)$$

は $f(x) \geq 0$ ならば、図1のような範囲の面積を表す。数値積分は、この図形を短冊状に分割して、それを寄せ集めるという本来の積分の思想に戻って行うのが普通である。すなわち、積分範囲 $[a, b]$ 内に n 個の点 x_1, \dots, x_n をとり、これらの点 (分点) での関数の値 $f(x_k)$ の一次結合

$$S \cong \sum_{k=1}^n w_k f(x_k) \quad (4)$$

として、近似的に求めようというものである。ここで、分点 x_k と重み w_k の選び方によって、種々の公式 (方法) がある。分点の選び方は大きく、単純に等間隔にするものと適当に間隔を選ぶものに分けられる。台形法は等間隔に分けるもののうち最も簡単なものであり、ガウス法は巧く間隔を選ぶ代表的なものである。DE法は、原理的には台形法を使うのであるが、積分の上限・下限で急速に (指数の指数で) 0 に近づくように変数変換を行うことに特徴がある。

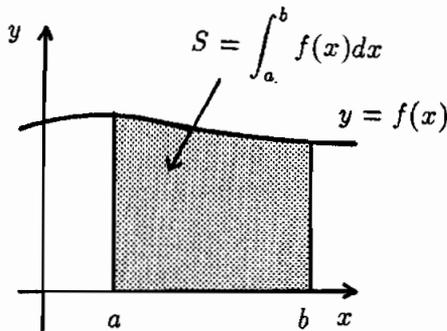


図1

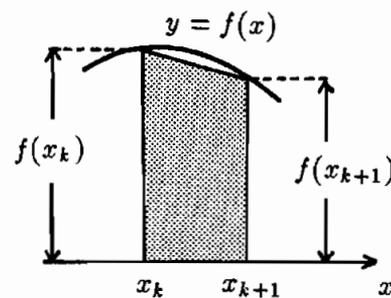


図2

2.1 台形法

まず、区間 $[a, b]$ を n 等分する。分点を $x_0 = a, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n = b$ とする。そして、小区間 $[x_k, x_{k+1}]$ の図形を台形で近似し面積を求める(図2)。即ち、

$$S_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \cong \frac{1}{2}(x_{k+1} - x_k)\{f(x_{k+1}) + f(x_k)\}$$

ここで、 $x_{k-1} - x_k \equiv h$ ($k = 0, \dots, n-1$) とすれば、全区間での積分 S は

$$S = \sum_{k=0}^{n-1} S_k \cong \frac{h}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right] \quad (5)$$

で求められることになる。分割幅 $h = (b-a)/n$ を小さくすれば、必要な精度で計算が可能である（実際は、コンピュータの演算や記憶の精度による限界はある）。プログラムでは、以前の計算結果を利用するために、分割幅を半分ずつにしていくのが普通である。

2.2 ガウス法

ガウス法は重みと分点 (n 個) を適当に選んで、 $f(x)$ が $(2n-1)$ 次以下の多項式のとときに積分値が正確になるようにする方法である。積分区間が $[-1, 1]$ のときは、分点がルジャンドル多項式 $P_n(x)$ の零点になるのでガウス・ルジャンドル法とも呼ばれる。すなわち、分点 x_k 、重み w_k は

$$P_n(x_k) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \Big|_{x=x_k} = 0, \quad w_k = \frac{2(1-x_k^2)}{(n+1)^2 [P_{n+1}(x_k)]^2}$$

で与えられる。本稿の計算では、 $n=10$ としている（10分点法）。尚、積分区間が $[a, b]$ のときは $[-1, 1]$ の分点 x_k 、重み w_k を用いて

$$\int_a^b f(x) dx \cong \frac{b-a}{2} \sum_{k=1}^n w_k f \left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_k \right)$$

で与えられる。もし、精度が悪ければ区間を分割して、各々の区間にこの方法を適用する。さらに、必要な精度まで分割を繰り返せばよい。ただ、台形法とは異なり以前の計算結果を利用できない。

関数のふるまいや積分範囲によっては、ガウス・ラゲール法やガウス・エルミート法なども用いることができる（付録1を参照）。

2.3 二重指数関数型法 (DE法)

(3) において、

$$a = \varphi(-\infty), \quad b = \varphi(\infty)$$

を満足するような解析的な増加関数 $\varphi(t)$ を考え、 $x = \varphi(t)$ のように変数変換し、台形公式を適用する。 $(h$ を分割幅として)

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varphi(t))\varphi'(t)dt \cong h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\varphi(kh))\varphi'(kh) \quad (6)$$

ここで、 $f(\varphi(t))\varphi'(t)$ の $t \rightarrow \pm\infty$ における減衰が

$$f(\varphi(t))\varphi'(t) \sim A \exp(-c \exp|t|) \quad (7)$$

となるように $\varphi(t)$ を選んだのが DE 法である。 $|t|$ の大きいところでの減衰が著しいので、 t の適当なところで、打ち切ることができる。つまり、(6) で和を $-N_- \leq k \leq N_+$ の範囲でのみとることができる (分点数は $N = N_+ + N_- + 1$ で与えられる)。

ここで、 $\varphi(t)$ の選び方は一通りではない。例えば、(i) $a = -1, b = 1$ のとき $\varphi(t) = \tanh(\frac{1}{2}\sin ht)$ 、(ii) $a = 0, b = \infty$ のとき $\varphi(t) = \exp(2 \sin ht)$ 、(iii) $a = -\infty, b = \infty$ のとき $\varphi(t) = \sinh(\frac{1}{2}\sin ht)$ などがある。また、 $f(x)$ の形によっては、別の選び方が効率の点でよいことがあるので関数形に応じて選ぶことが必要となる。特に、 $a = 0, b = \infty$ で、 $f(x) \sim f_1(x)e^{-x}$ ($x \rightarrow \infty$) のように指数関数的に減衰するときは、

$$\varphi(t) = \exp(t - e^{-t}) \quad (8)$$

とするのがよいことが知られている。このとき、

$$f(\varphi(t))\varphi'(t) \sim \begin{cases} f_1(\varphi) \exp(-e^t) & t \rightarrow \infty \\ f_1(\varphi) \exp(-\exp(e^{|t|})) & t \rightarrow -\infty \end{cases}$$

と期待されるふるまい (7) をする。この変換が統計因子 (2) を含む今のケースには合うことが期待される。

3 正確な値が求まる例

ここでは、正確な値が分かっているケースについて考える。具体的には、

$$\int_0^{\infty} f(x)dx = \int_0^{\infty} \frac{x}{e^{x/\xi} - 1} dx = \frac{\pi^2 \xi^2}{6} \quad (9)$$

をとりあげる。

1. 台形法

積分範囲が有限でなければならないので、以下の2通りの方法で範囲を有限にする。

(a) 積分領域を分割し、さらに変数変換をして、積分範囲を有限にする。

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \int_0^1 \left(\frac{x}{e^{x/\xi} - 1} + \frac{1}{x^3} \frac{1}{e^{1/x\xi} - 1} \right) dx \quad (10)$$

(b) 変数変換はせず、上限を関数の値が無視できる場所とする。 $f(x)$ は x の大きいところで単調減少だから

$$|f(x)| < 10^{-m} |f(0)| = 10^{-m} \xi$$

を満たす x を M とするとき (m は求める精度による)

$$\int_0^{\infty} f(x) dx \cong \int_0^M \frac{x}{e^{x/\xi} - 1} dx \quad (11)$$

として求める。

2. ガウス法

まず台形法と同じように、積分範囲を有限にする。それに、ガウス・ルジャンドル法を適用する。表1では、台形法と同様にそれぞれ(a)、(b)と表す。

そのほかに、

$$\int_0^{\infty} g(x) e^{-x} dx = \xi \int_0^{\infty} \frac{x}{1 - e^{-x}} e^{-x} dx$$

の形にできるので、ガウス・ラゲール法が使える(付録1参照)。ここでは10分点法を使用した。後でみるように[表1のガウス法(ラ)]、これは計算速度は速いが若干精度が悪い。精度を上げようとするとき分割を増やさなければならないが、ガウス・ルジャンドル法とは異なり、分点数 n を増やす以外にはない。

3. DE法

(8)の変数変換を行う。即ち、

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\exp(t - e^{-t})) (1 + e^{-t}) \exp(t - e^{-t}) dt$$

としてから、変数 t について台形法 (5) を適用する。

以上の方法による計算結果を表 1 に示す。ここでは、倍精度で計算し、有効数字 11 桁以上一致する迄の分割数と CPU 時間を示した (ガウス・ラゲール法は別)。そのため、台形法・ガウス法の (b) においては、 $m = 12$ (このとき、 $M = 32$ である) とした。

表 1 : $\xi = 1$ の場合 : $S = 1.644934066848226 \dots$

方 法	分 点 数	CPU時間 (秒)	一致する桁
台形法 (a)	131,073	53.194	11
台形法 (b)	4,194,305	838.889	11
ガウス法 (a)	320	0.554	14
ガウス法 (b)	80	0.350	12
ガウス法 (ラ)	10	0.284	8
D E 法	129	0.313	15

これにより今の例では、台形法以外は短い CPU 時間で精度のよい結果を出している。倍精度の計算では一般に有効桁数は 14-15 桁程度なので、D E 法とガウス法は十分な精度を出している。そこで、第 4 節では、D E 法とガウス法を考える。

この節では、正確に積分値が求まるので有効数字として 11 桁以上考えたが、実際の物理量においては、これらの積分を含む全体で 4-5 桁程度あればよいケースが多い*。つまり、これらの積分自身は 6-8 桁程度あれば十分であろう。

4 解析的に積分できない例

4.1 例 1

最初の例として、最も一般的に現われる積分をとりあげる。

$$F(\xi) = \int_0^{\infty} \frac{dx}{e^{x/\xi} - 1} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \quad (13)$$

この例では、 $x = 1$ で被積分関数が対数発散している。そこで、このままではいずれの公式も使えないので、積分範囲を $[0, 1]$ と $[1, \infty)$ に分割し、以下の様に変換する (3 通りが考えられる)。

*傾向を見るだけなら、3 桁もあれば十分である。

$$F(\xi) = \int_0^1 \frac{dx}{e^{x/\xi} - 1} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| + \int_0^\infty \frac{dx}{e^{(x+1)/\xi} - 1} \ln \left| \frac{2+x}{x} \right| \quad (14)$$

$$= \int_0^\infty \left(\frac{1}{(x+1)^2} \frac{1}{e^{1/(x+1)\xi} - 1} + \frac{1}{e^{(x+1)/\xi} - 1} \right) \ln \left| \frac{2+x}{x} \right| dx \quad (15)$$

$$= \int_0^1 \left(\frac{1}{e^{x/\xi} - 1} + \frac{1}{x^2} \frac{1}{e^{1/x\xi} - 1} \right) \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| dx \quad (16)$$

1. DE法

積分範囲が $[0, \infty)$ の場合は、そのまま第3節の方法(変換(8))が使える。一方、 $[0, 1]$ では、別の変数変換を行なう必要がある。注意しなければならないのは、 $x = 1$ での発散の問題である。発散があってもDE法は使えるのであるが[†]、そのまま使うと桁落ちのために計算精度が悪くなる。そこで、精度を落とさないようにするために以下の方法を使う(下限、上限を一般化しやすいように a, b とする)。

$$S_h = h \sum_{k=-N_-}^{N_+} \hat{f} \left(\frac{b-a}{2} \varphi(kh) \right) \frac{b-a}{2} \varphi'(kh) \quad (17)$$

$$\varphi(kh) = \begin{cases} -\frac{\exp\left(+\frac{\pi}{2} \sinh(kh)\right)}{\cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh(kh)\right)}; & k < 0 \\ +\frac{\exp\left(-\frac{\pi}{2} \sinh(kh)\right)}{\cosh\left(\frac{\pi}{2} \sinh(kh)\right)}; & k \geq 0 \end{cases} \quad (18)$$

として、プログラムを作成する。ただし、

$$\hat{f}(y) = \begin{cases} f(a-y); & (-\frac{b-a}{2} < y < 0 \\ f(b-y); & 0 < y \leq \frac{b-a}{2} \end{cases}$$

ここで、 $a-y$ あるいは $b-y$ の計算は行わずに、直接 $\hat{f}(y)$ の計算をすれば、桁落ちを防ぐことができる。一般的に、量子統計を含む積分では発散を含む場合が多いので、この方法は有用であると思われる。

以上より、(14)、(15)、(16)はそれぞれ(8)+(18)、(8)、(18)の変換を行えばよい。表ではこれらをそれぞれ(a)、(b)、(c)と表す。

2. ガウス法[‡]

(14)は右辺第1項にガウス・ルジャンドル法を、右辺第2項にガウス・ラゲール法を用

[†]DE法では、変数変換で端点を $\pm\infty$ にし、二重の指数関数的な減衰をするということで有限の範囲でのみ和をとるので、余程発散が激しくない限り問題は生じない。

[‡]ガウス法では、分点が端点を含まないため、端点で被積分関数が発散していても(激しくない限り)使用できる。

いることができる。

(15)には、何れのガウス法も適用できない。

(16)は、積分範囲が有限であるので、そのままガウス・ルジャンドル法が使える。

表2に計算結果を示す。ここで、ガウス法は精度の関係から(16)にガウス・ルジャンドル法を適用した場合についてのみ示す(理由は付録1参照)。 ξ が100と0.05のときについては、漸近形(付録2参照)からの結果も併せて表に示した。もちろん、漸近形であり正確な値ではないので、計算結果と完全に一致する必要はない(計算値の方が正しい値に近い)。

これらを見ると、第3節の例:(9)のときとは違って、DE法の優位性が目立っている。ガウス(・ルジャンドル)法において、いくつかの分点数での結果を示したが分点数が増えるに従って、DE法での結果に近づいていく。一方、DE法の3つについては、ほとんど問題になるような差異は見られないので、どの方法(式)を採用してもよい。

表2:例1

(a) $\xi = 100$ のとき

方 法	計算値 $\times 10^{-2}$	分 点 数	CPU時間 (秒)
漸 近 形	4.86614388461 ...	-	-
DE法(a)	4.86614387452 ...	314	0.404
DE法(b)	4.86614387452 ...	136	0.380
DE法(c)	4.86614387455 ...	897	0.426
ガウス法	4.866141087 ...	40,960	41.730
	4.866143177 ...	163,840	166.013

(b) $\xi = 1$ のとき

方 法	計算値	分 点 数	CPU時間 (秒)
DE法(a)	2.66412208060 ...	322	0.386
DE法(b)	2.66412208060 ...	137	0.375
DE法(c)	2.66412208060 ...	449	0.425
ガウス法	2.664121265 ...	81,920	83.557
	2.664122029 ...	1,310,720	1330.791

(c) $\xi = 0.05$ のとき

方 法	計算値 $\times 10^3$	分 点 数	CPU時間 (秒)
漸 近 形	8.25249142238 ...	-	-
DE法(a)	8.25255869882 ...	474	0.411
DE法(b)	8.25255869881 ...	133	0.371
DE法(c)	8.25255869882 ...	417	0.410
ガウス法	8.25255869118 ...	20	0.302
	8.25255869808 ...	320	0.602
	8.25255869881 ...	40,960	40.874

表 3 : 例 2

(a) $\xi = 100$ のとき

方 法	計算値 $\times 10^{-2}$	分 点 数	CPU時間 (秒)
漸 近 形	1.53800143295 ...	-	-
D E 法(a)	1.53800142534 ...	105	0.307
D E 法(b)	1.53800142534 ...	273	0.329
D E 法(c)	1.53800142534 ...	1,655	0.521
ガウス法	1.530708110 ...	640	0.662
	1.537920837 ...	5,242,880	3094.626

(b) $\xi = 1$ のとき

方 法	計算値 $\times 10^1$	分 点 数	CPU時間 (秒)
D E 法(a)	5.86402163033 ...	69	0.299
D E 法(b)	5.86402163033 ...	385	0.344
D E 法(c)	5.86402163033 ...	325	0.370
ガウス法	5.860250782 ...	81,920	48.573
	5.863550274 ...	5,242,880	3094.632

(c) $\xi = 0.05$ のとき

方 法	計算値 $\times 10^{10}$	分 点 数	CPU時間 (秒)
漸 近 形	5.741287015 ...	-	-
D E 法(a)	5.741237510 ...	3,585	0.540
D E 法(b)	5.741237815 ...	225	0.312
D E 法(c)	5.741237823 ...	257	0.355
ガウス法	5.7034634 ...	10,240	6.069
	5.7317944 ...	163,840	93.328
	5.7395684 ...	5,242,880	2977.278

4.2 例 2

2 番目の例として

$$F(\xi) = \int_1^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x^2 - 1}} \frac{1}{e^{x/\xi} - 1} \quad (19)$$

をとりあげる。これも、いくつかの変数変換が考えられる。

$$F(\xi) = 2 \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2 + x^2}} \frac{1}{e^{(x^2+1)/\xi} - 1} dx \quad (20)$$

$$= \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{x(2+x)}} \frac{1}{e^{(x+1)/\xi} - 1} dx \quad (21)$$

$$= \int_0^1 \frac{1}{x\sqrt{1-x^2}} \frac{1}{e^{1/x\xi} - 1} dx \quad (22)$$

これら全てにおいて、DE法が使える。つまり、(20)、(21)には(8)の変換を、(22)に対しては(18)の変換をすればよい。表3では、順に(a)、(b)、(c)とした。

ガウス法については、(22)に対しては、そのままガウス・ルジャンドル法が使える。(20)、(21)に対してはそれぞれガウス・エルミート法、ガウス・ラゲール法が使用できるが、10分点法では第4.1節における例と同じく精度が期待できないので[§]、ここではガウス・ルジャンドル法のみを採用する(付録1参照)。

計算結果は表3(内容は表2と同じ)に示す。結論的には、第4.1節と変わらない(ガウス・ルジャンドル法はこの例の方が収束性が悪い)のでコメントは繰り返さない。

5. おわりに

以上本稿では、量子統計因子(2)を含む積分(1)の数値計算を、台形法・ガウス法・二重指数関数型(DE)法の3つの方法で、具体例について行い比較した。その結果、DE法がいずれにおいても最も優れていることがわかった[¶]。これは、DE法が二重指数関数的((7)を参照)に減衰するように変数変換するのであるが、量子統計因子そのものが、 $x \rightarrow \infty$ で指数関数的に減衰しているため、極めて有効に作用するためであると考えられる。これは、(1)の $f(x)$ に依存しないので、端点での発散が激しいものでない限り応用できると考えてよい。ゆえに、量子統計因子を含む積分はDE法により数値積分するのが有効であると結論付けることができるであろう。この性質は、密度(より正確には化学ポテンシャル)があっても変わらないので、有限密度の場合にもそのまま応用できる。

尚、本稿での計算では、文献[3]等を参考にして、筆者が作成したプログラムを用いて実行した(紙面の関係で、プログラムは省略する)。従って、個々にみると、計算速度の点などで最良のプログラムであるかどうかには検討の余地がある。しかしながら、ベストのプログラムを作成しても、本稿の結論は変わらないものと思われる。

最後に、数値計算のためのプログラムの作成と実行に際しての注意点について述べる。

・プログラムには、被積分関数を与える必要がある。積分の下限が0である(9)、(13)

[§]ガウス・エルミート法では、付録1で示すように $\xi = 0.05$ の場合には、よい精度を与える。つまり、 $\xi < 1$ のときは有効であると思われる。

[¶] $\xi < 1$ に対しては、ガウス・エルミート法は有効であるかもしれないが、収束性を確認できないという問題がある。

のような場合においては、単純に $x = 0$ とすると分子・分母がともに 0 になり、コンピュータは「0 で割った」というメッセージを出してストップしてしまう。これを避けるためには、例えば、 $x < 10^{-12}$ (12 は必要に応じて変える) のときに $f(0)$ とするようプログラムしなければならない。ただし、これはボーズ統計の場合であってフェルミ統計のときは、(分母が 0 になることはない) のでこのような問題は生じない。

- ・同時に、統計因子部分は以下のようにする必要がある。

$$\frac{1}{e^x \pm 1} \rightarrow \frac{e^{-x}}{1 \pm e^{-x}} \quad \text{for } x > 0$$

これは、 x が大きくなると e^x がコンピュータが記憶できる最大の値を越えて、いわゆるオーバーフローを起こしてしまうからである。このとき、コンピュータはエラーを出しストップするか、記憶できる最大の値に置き換えて計算を続けるかのいずれかであるが、どちらにしても正しい結果を与えない。 e^{-x} のときはアンダーフローを起こし、一般的には 0 に置き換えて計算を続ける。この場合は、実質的な問題を生じない^{§§}。

- ・ガウス法は前に触れたように分割を増やすときに前の計算結果を利用できない。例えば、分点数が 5,242,880 のときは、はじめからこの分点数で計算すれば半分近くに CPU 時間を減らすことができる。しかし、これでは計算の収束性を確認できないという問題が起きるので、本稿の計算では分割を 2 倍にしながら計算して、一応それ以上値が変化しなくなった最小の分点数を示した。ただ 5,242,880 のときは時間の関係で収束しなくてもそこで終了させた。
- ・第 3・4 節での計算は、FORTRAN77 コンパイラの標準の仕様で行ったが、計算スピードを上げるためには、最適化 (optimization : OPT) のオプションを立てることもできる^{**}。最適化を最大の 'OPT = 3' とすると、ガウス法については同じ分点数での計算がほぼ半分の CPU 時間で行うことができる。例をあげると ($\xi = 1$ の場合について示す)、

^{§§} あえていえば、ACOS-430/70 のシステムでは、アンダーフローが生じると「警告(warning)」を発する。そのままにしておくと、warning のカウントオーバーでストップしてしまうことがあるので、オプションとして 'MASK=NOUNF' とアンダーフローの警告を無視するように指示する必要がある。無視するのが標準になっているシステムが多い。

^{**} 他のシステムでは、標準仕様が OPT = 1 か 2 というのが普通である。

	分 点 数	CPU時間 (標準→OPT = 3)
例 1	1,310,720	1330.791 → 643.036
例 2	5,242,880	3094.632 → 1530.366

しかしながら、それでもDE法の優位性は変わらない。DE法も速くなるがあまりメリットはない。

付録 1 : ガウス・ラゲール法とガウス・エルミート法

ここで、ガウス・ラゲール法とガウス・エルミート法についてコメントする。以下の表に見るように、いずれの方法も $\xi = 100$ のとき (ξ が大きいとき)、まったく異なった値になる。例 1 においては、違いがはっきりするように(14)式の右辺第 2 項の部分のみの結果を示してある。エルミート法の方 (例 2 のみ) は、 $\xi = 1$ 、 $\xi = 0.05$ のときは、精度はよいが^{††}、ラゲール法は信頼できない。尚、この表ではエルミート法の15分点も比較のために載せた。

例 1 : (14)式の右辺第 2 項

ξ	方 法	計 算 値
100.00	DE	$2.4056659 \dots \times 10^2$
	ラゲール (10分点)	$0.3235053 \dots \times 10^2$
1.00	DE	$8.0744419 \dots \times 10^{-1}$
	ラゲール (10分点)	$7.6998547 \dots \times 10^{-1}$
0.05	DE	$4.4216890 \dots \times 10^{-10}$
	ラゲール (10分点)	$4.3572804 \dots \times 10^{-10}$

例 2 : (19) 式

ξ	方 法	計 算 値
100.00	DE	$1.5380014 \dots \times 10^2$
	ラゲール (10分点)	$0.1626332 \dots \times 10^2$
	エルミート (10分点)	$0.7952850 \dots \times 10^2$
	エルミート (15分点)	$4.0229639 \dots \times 10^2$
1.00	DE	$5.8640216 \dots \times 10^{-1}$
	ラゲール (10分点)	$4.7331209 \dots \times 10^{-1}$
	エルミート (10分点)	$5.8579751 \dots \times 10^{-1}$
	エルミート (15分点)	$5.8648804 \dots \times 10^{-1}$
0.05	DE	$5.7412378 \dots \times 10^{-10}$
	ラゲール (10分点)	$4.8554588 \dots \times 10^{-10}$
	エルミート (10分点)	$5.7412378 \dots \times 10^{-10}$
	エルミート (15分点)	$5.7412378 \dots \times 10^{-10}$

^{††}特に、 $\xi = 0.05$ では、ガウス・ルジャンドル法より、はるかによい結果を与えている。

ここで、参考ために、両方法の分点と重みを与える。

・ガウス・ラゲール法

$$\int_0^{\infty} f(x)e^{-x} dx \cong \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

分点 x_k は、ラゲール多項式 $L_n(x)$ の零点である。

$$L_n(x_k) = \frac{1}{n!} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) \Big|_{x=x_k} = 0, \quad w_k = \frac{1}{x_k [L'_n(x_k)]^2}$$

・ガウス・エルミート法

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-x^2} dx \cong \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

分点 x_k は、エルミート多項式 $H_n(x)$ の零点である。

$$H_n(x_k) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \Big|_{x=x_k} = 0, \quad w_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H_{n+1}(x_k)]^2}$$

付録 2 : (13)・(19) 式の漸近形

ここでは、比較の参考のため (13)・(19) 式の ξ の値が大きいときと小さいときの漸近形を与える。

$$\int_0^{\infty} \frac{dx}{e^{x/\xi} - 1} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| = \begin{cases} \frac{\pi^2}{3} \xi^2 + \frac{2\pi^4}{45} \xi^4 + \frac{16\pi^6}{315} \xi^6 + \dots & (\xi \rightarrow 0) \\ \frac{\pi^2}{2} \xi - \ln(2\pi\xi) + \gamma_E - 1 + \dots & (\xi \rightarrow \infty) \end{cases}$$

$$\int_1^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x^2-1} e^{x/\xi} - 1} = \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi\xi}{2}} e^{-1/\xi} \left(1 - \frac{1}{8}\xi + \frac{9}{128}\xi^2 + \dots \right) + \dots & (\xi \rightarrow 0) \\ \frac{\pi}{2} \xi - \frac{1}{2} \ln(4\pi\xi) + \frac{1}{2} \gamma_E + \dots & (\xi \rightarrow \infty) \end{cases}$$

ここで、 $\gamma_E = 0.577215664901532 \dots$ はオイラー定数である。

参考文献

- [1] “*Thermal Field Theories*”, *Proceedings of the 2nd Workshop on Thermal Field Theories and Their Applications* (Tsukuba University, July 1990), edited by H. Ezawa, T. Arimitsu and Y. Hashimoto (Elsevier, Amsterdam, 1991); および、これらの中で引用されている論文.
- [2] 例えば (これらの中で引用されている論文の中にも例が載っている)
H. Nakkagawa, A. Niégawa, H. Yokota: “Non-Abelian gauge couplings at finite temperature in the general covariant gauge”, *Phys. Rev. D***38**, 2566-2578 (1988).
N. Ashida, A. Niégawa, H. Nakkagawa, H. Yokota: “Real-time non-Abelian gauge coupling at finite temperature : Temperature and vertex-configuration dependences ”, *Phys. Rev. D***44**, 473-487 (1991).
- [3] 数値積分についての解説はたくさんあるが、例えば
戸田英雄、小野令美共著: “入門 数値計算 - チャートによる解説とプログラム - ”, オーム社 (1983) の「4章. 数値積分」(pp. 45-78).
渡部力、名取亮、小国力監修: “Fortran77 による数値計算ソフトウェア”, 丸善 (1989) の「14. 数値積分」(杉原正顕、森正武共著: pp. 194-220).
特に、DE公式については、森正武著: “FORTRAN77 数値計算プログラミング (増補版)”, 岩波書店 (1988) の「11. DE公式による数値積分」(pp. 168-186)に詳しい.