数 値 解 析 38－7
（1991. 10. 19）

ＩＥＥＥ準基本数学関数パッケージ

二宮市三

中部大学経営情報学部

フォートランなどの科学計算プログラム言語には、多くの数学関数が組み込み関数として完備されていて、これ以上なんらの補充も改善も無用であると思われているかも知れないが、少し専門的な立場から見ると、かなりの弱点や不合理が潜んでいることがわかる。本関数パッケージは、このような欠陥を補う、基本関数に準ずる諸関数プログラムを開発収集して、大方の試用に供しようとするものである。

IEEE SEMI-ELEMENTARY MATHEMATICAL FUNCTION PACKAGE

Ichizo Ninomiya

Department of Business Administration and Information Science

Chubu University

Many mathematical function programs are provided in programming languages such as FORTRAN and there seems to be no room for further improvements or supplements. It is observed from the professional stadpoint, however, that a considerable number of drawbacks and deficiencies are existent. In the present package, 33 semi-elementary functions complementing such shortcomings are implemented for the purpose fo providing a chance of their trials.

1　ＩＥＥＥ準基本数学関数パッケージ

本パッケージはＩＥＥＥ浮動小数点方式の計算機のために、フォートラン７７言語によって書かれた３３の関数ルーチンから成り立っている。すべてのルーチンには、単精度版と倍精度版が備えられているので、ルーチンの本数は延べ６６本である。倍精度版はルーチンの名前の頭文字Ｄによって識別される。開発に用いた計算機は PC9801 および 16β、フォートランプロセッサーは、Microsoft FORTRAN と Ryan-McFarland FORTRANである。

本パッケージには、上述の関数ルーチンの精度をテストするための１８本のテストルーチンと説明用の文書ファイル README.DOC も含まれている。テストルーチンでは、単精度版は倍精度版によって、倍精度版のいくらかのものは、関連の倍精度基本関数によってテストされている。テストされていないルーチンも含めて、すべての倍精度ルーチンは別に４倍精度版によって、その精度が確認されている。以下、順を追って各関数ルーチンの意義と特徴を説明する。

2　象限三角関数、度三角関数およびその逆関数

科学計算で三角関数が利用される典型的な例は次のような場合である。周期 2π の整数分の一を増分として引数を変化させながら、正弦や余弦を含む数式を計算する。例えば、グラフィックスでは、次のようなプログラムの断片(A),(B)をよく見かける。

(A)	(B)	(C)
DT=ATAN(1.0)*8.0/64.0	TPI=3.141593*2.0	DT=4.0/64.0
DO 10 I=0,64	DO 10 I=0,64	DO 10 I=0,64
T=DT*REAL(I)	X=R*COS(TPI/64.0*I)	T=DT*REAL(I)
X=R*COS(T)	Y=R*SIN(TPI/64.0*I)	X=R*COSQ(T)
Y=R*SIN(T)	....	Y=R*SINQ(T)

さて、プログラミングの巧拙を度外視すれば、このような三角関数の使い方にはなんらの問題もないように見える。ところが、少し詳細に検討すると、実は意外に大きな無駄が行われていることがわかる。

三角関数がフォートランの組み込み関数の中で計算される仕組みは次のとおりである。与えられた引数 X から直ちに関数値を計算するのは一般に不可能で、X を一定の標準区間内の値に還元する操作、いわゆる区間縮小が必要である。この操作は周期性並びに半周期および四半周期に関する加法定理を利用して行われるが、このとき周期母数 π が誤差なしでは表されない数であることが大きな障害になっている。この障害を回避するために変数変換 T=X/Q,F(X)=FQ(T),Q=π/2 を行う。ただし F は SIN または COS を表すものとする。これは、ラヂアンに基づく2π周期の三角関数 F を、象限（あるいは直角）を角度の単位とし、4を周期とする象限三角関数 FQ に置き換えることに外ならない。例えば、正弦関数は SIN(X)=SINQ(T)=SIN(Q*T)として計算される。したがって、sin(πx/2)を計算する目的で、SIN(Q*X)と書くと実際には、SINQ(Q*X/Q)という計算が行われ無駄な二度手間を踏むことになる。著者は１５年も前からこの不合理に気付き、著者等の開発した数学ライブラリNUMPACの中にSINHP COSHPなどの名前で象限三角関数を導入して、その利用を推奨してきた。そして利用者から全面的な高い評価を得ている。ここに、改めてその合理性を強調したいと考える。象限三角関数は次のような利点を備えている。

(1) 変数変換　T=X/Q は引数 X の誤差の程度以内に関数値の誤差を抑えるために、X の精度よりも高い精度（単精度では倍精度、倍精度では３倍または４倍精度）で行われる。従って、単精度の場合はともかくも倍精度の場合には、必要な計算量は、関数の総計算量の２０乃至３０％程度にもなる。象限三角関数では、この部分が全く省略できるので、その分だけ計算時間が節約できる。

(2) 同じ理由で精度が良く、周期性が厳格に保たれる。例えば、N を整数とするき、SINQ(2*N) と COSQ(2*N+1)　は厳密に 0 となる。筆者は、かって、被積分関数が非有界でしかも積分可能な、半無限積分を数値計算するという難問に挑戦したことがある。そのとき被積分関数に含まれる正弦関数を象限正弦関数に変換したことが解決の手がかりとなった。

(3) 三角関数から象限三角関数に切り替えるのに、殆ど抵抗がない。角度の単位をラヂアンから象限に変えるだけでよいからである。たとえば、プログラム(A)は(C)のような簡潔な形に書き換えられる。(A) の 2π　ラヂアンが、(C) では 4 象限になっている。

(4) 象限三角関数ルーチンを作るのに特別の努力を要しない。従来の三角関数ルーチンから、変換 T=X/Q の部分を取り去るだけでよい。

以上の理由から、引数に π　を含む三角関数の計算には、絶対に象限三角関数を使うべきである。これによって、科学計算の多くの場面で、面倒で無駄な π の計算を追放できるが、さらにこの趣旨を徹底するには、逆三角関数の値を象限単位で与える、逆象限三角関数の導入が必要である。

角度の単位として、度(DEGREE)を用いる三角関数は、周期が誤差を含まない整数で表される点で象限三角関数と同様の合理性を有し、実際かからの要求も多いので、その逆関数とともに、含められている。

3　2底指数関数と2底対数関数

科学計算で指数関数が使われる典型的な例は次のとおりである。時間 t と時定数 T から減衰律 exp(-t/T) を計算し、空間変数 x と定数 A から 拡散律 $\exp(-(x/A)^2)$ を計算する。定数 T と A は計算を無次元化するための時間と長さの単位の役目を果たしている。実験物理学者は、さらに直感的な量、すなわち、T の代わりに半減期　H=Tln(2) を、A の代わりに半値幅 $B=A\ln(2)^{1/2}$ を用いることを好む。これらを始めから無次元化の単位として用いることは極めて自然であって、これを妨げる理由はどこにもない。果たして、

$$\exp(-t/T)=\exp2(-t/H),\ \exp(-(x/A)^2)=\exp2(-(x/B)^2),\ \exp2(x)=2{*}{*}x$$

となって、２底指数関数が現れる。もともと指数関数は組み込み関数の内部では、変数変換 T=X/ln(2) を通じて EXP(X)=EXP2(T) と２底指数関数によって計算されているので、新関数 EXP2 の導入によって、変換 T=X/ln(2) に要するかなりの計算量を節約することができる。２底指数関数は象限三角関数と同様に多くの利点を備えているが、その詳細を述べるのは省略する。２底指数関数とともに当然その逆関数の２底対数関数も導入されるべきである。

4　EXPM1 と　ALOG1P

EXP(X)-1 とその逆関数 LOG(1+X) を　X=0.0 の近傍で精度よく計算することは、従来の組み込み関数を用いたのでは、桁落ちのために全く不可能である。これらの関数を専門の近似式で計算する、標題の新関数が是非とも必要である。

5 逆双曲線関数

逆双曲線関数は、簡単な有理関数や2次無理関数の不定積分として、頻繁に用いられる重要な関数であるにもかかわらず、対数関数で表されることを理由に、組み込み関数には含まれていない。しかし、これらの関数も、原点の付近では桁落ちのために精度を確保することは極めて困難である。やはり、専門の新関数が必要である。

6 立方根と逆数平方根

立方根の必要性はいうまでもない。逆数平方根は分子力学等の分野でポテンシアルや粒子間力の計算に多用されること、平方根を経由しないで直接しかも除算なしで計算されることの二つの理由から、当然導入されるべきである。本パッケージに組み込まれたこれらの関数ルーチンは、如何なる引数に対しても、単精度版では1回、倍精度版では2回のニュートン法の反復しか要しない、極めて高性能のものである。

7 ガンマ関数と関連関数

ガンマ関数とその対数は、特殊関数の係数などによく現れるので、初等関数に次いで有用な関数である。この理由によって、これらの関数を組み込み関数に取り入れている大型機もある。さらに、ガンマ関数の逆数は至るところ正則ないわゆる整関数であり、しかも特殊関数の係数としては、むしろこの形で現れることが多いので、新関数として導入する十分の理由がある。階乗関数はガンマ関数の整数引数に対する値として与えられるが、引数の増大にともなって、急激に増大し、忽ちオーバーフロー限界に達するので、意味のある関数値は非常に少ない。従って、本パッケージでは、全く計算を要しない、表関数となっている。

8 誤差関数、累積正規分布関数および補関数

これらの関数が、拡散現象の研究や統計学の計算に不可欠の関数であることは、いうまでもない。本パッケージにおけるこれらの関数ルーチンは合理的な領域分割と適切な近似式を採用した斬新なものである。

9 全般に対する注意事項

本パッケージの関数ルーチンでは、アルゴリズム、領域分割、最良近似式の選択に細心の注意を払い、精度の確保、桁落ちの回避、計算速度の増進に努力した。

定義域外の引数や、三角関数に対する絶対値の大きな引数のように、数値的に無意味な引数が用いられたときには、簡潔なエラーメッセージを出して、その旨を利用者に知らせるようになっている。

本パッケージは IEEE 方式の計算機のために書かれており、精度確保と速度向上のためにその実数の内部構造の特徴を全面的に利用している。従って、一部の関数を除いて、殆ど全ての関数が、IBM 方式など他の方式の計算機では、正しく働かない。ところが、IEEE 方式の計算機でも、ある種の計算機では、

倍精度版のいくらかの関数ルーチンが誤動作することがある。これは、計算機によって、倍精度実数の前半と後半の4バイトのメモリへの割付の順番が異なるからである。本パッケージでは、前半すなわち、指数部を含む部分が、連続する8バイトの後半の4バイトに割り付けられるものと仮定して、コーディングしている。従って、障害の発生する計算機に対しては、プログラムの一部を次ぎのように修正すればよい。すなわち、倍精度実数の前半を操作している、これと EQUIVALENCEで結ばれた、4バイト整数配列の添字を、2から1に変更する。

最適化を行っているコンパイラーでは、関数によって、誤動作をしたり、著しく精度の悪いオブジェクトを出してくることがある。このようなコンパイラーに対しては、最適化を抑制するオプションを常用するのが安全である。

本パッケージは著者が長年の蓄積と経験に基づいて、細心の配慮のもとに作成したものであるが、思いがけない誤謬や欠陥が全くないとは言い切れない。利用者の方でなんらかの異常や障害を発見された場合は、細大もらさず、即刻当方に連絡されるよう切望する。

10 結言

本パッケージに含まれる諸関数の機能を最大限に発揮するためには、これらの関数が単にライブラリプログラムとして提供されるのでは万全でない。どうしても、フォートランなどの科学計算向け言語の標準規格の組み込み関数として、提供されなければならない。著者が本パッケージを作成して、大方の試用に供するのは、その日が一日も早く実現することを希求するからに外ならない。数値計算に関心の有る有識者各位の御賛同と御援助を切にお願いする次第である。

参考文献

[1] 二宮市三,数学ソフトウェアの現状と問題点，情報処理，23,No.2,(1982),109-117.

[2] 二宮市三,関数ソフトウェア,数値解析研究会資料 1-4,情報処理学会,1982,1-6.

[3] 二宮市三,秦野やす世,数学ライブラリ NUMPAC, 情報処理,26,No.9,(1985),1033-1042.

[4] 二宮市三,加速法による数値積分の計算の一例,数理解析研究所講究録,585,京都大学数理解析研究所,1986,223-239.