J101a　Sommerfeld 展開の打ち切りによる一般化 Fermi-Dirac 積分の解析的計算

福島登志夫 (国立天文台)

一般化 Fermi-Dirac 積分は天体物理学・固体物理学で多用される特殊関数であり、以下のように定義される。

$$F_k(\eta,\beta) \equiv \int_0^\infty \frac{x^k\sqrt{1+(\beta/2)x}}{\exp(x-\eta)+1}dx \quad (k>-1;\ -\infty<\eta<\infty;\ \beta\geq 0)$$

ここに $\eta \equiv \mu/(k_B T)$ は正規化された化学ポテンシャル、$\beta \equiv k_B T/(mc^2)$ は相対論パラメータである。任意の β に対し、$\eta > 0$ の場合の $F_k(\eta,\beta)$ の高精度計算は $x = \eta$ で積分区間を分けた数値積分が定石 (Press et al., 2007, §6.10) であるが計算に時間がかかる。Sommerfeld 展開を適当な次数で打ち切ることにより、η がある程度大きい場合の同積分の実用的計算法を実現した (Fukushima, 2014, Appl. Math. Comp., 234, 417) ので報告する。まず、展開の主要項は $\beta\eta$ が小さい (< 0.3) 場合でも桁落ちしないように 12-14 次の区分近似多項式と定義式の組み合わせで表現し、高次項の算出に必要な $x^k\sqrt{1+(\beta/2)x}$ の高階微分は多項式と平方根だけで陽的に計算する。実用上重要な k の値 $-1/2$, 1/2, 3/2, 5/2 に対し、展開次数を (i)7 次とすると η が 13.5, 12.0, 10.9, 9.9 より大きければ 8 桁の精度が、(i)10 次とすると η が 36.8, 31.6, 30.7, 26.6 より大きければ 15 桁の精度が任意の β に対して保証される。計算は全て解析的なので非常に速く、被積分関数の評価回数に換算して 4.9 ないし 6.7 回となる。この結果、η が上記の値より大きい場合、数値積分に比して 10-80 倍の高速化が実現された。論文のプレプリント及び Fortran による数値計算プログラム並びに出力サンプルは以下の WEB サイトから無料で入手可能である。

`https://www.researchgate.net/profile/Toshio_Fukushima/`