

Theis の井戸関数値の近似計算についての一考察

1. はじめに

Theis 式あるいは井戸関数と呼ばれる指数積分関数は以下の定義である。

$$\frac{s}{Q/4\pi T} = \int_{\lambda}^{\infty} \frac{\exp(-y)}{y} dy \quad (1)$$

ここで、 $\lambda = \frac{Sr^2}{4Tt}$ 、 T : 透水量係数 [L^2/T]、 S : 貯留係数 [-]、 s : 水位低下量 [L]、 Q : 揚水流量 [L^3/T]。

この式の級数展開は次式で表すことができる(Abramowitz & Stegun, 1964)。

$$\int_{\lambda}^{\infty} \frac{\exp(-y)}{y} dy = E_1(\lambda) = -\log_e(\lambda) - \gamma - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \lambda^k}{k \cdot k!} \quad (2)$$

ここで、 γ : Euler (オイラー) 定数=0.5772156649..., (ネット上では、 γ 値は 0.5772156649015328606065120900824024310421593359399235988057672348848677267776646709369470632917467495....と紹介されている)

また、(1)および(2)式の関数は地下水学では井戸関数と呼ぶが、本報文では数学的な文献との整合を図るため、以降は主に指数積分関数と呼び、関数シンボルも E_1 と表記する。

(1)式や(2)式を実務において直接計算して値を得ることはほとんどなく、近似式や数表値($\lambda < 10$ の範囲)を活用することが一般的である。主な活用は、揚水試験結果の整理において曲線一致法を目視で用いるため、関数値に求められる精度あるいは有効桁数は、4桁もあれば十分であり、一般に与えられている数表値も6~4桁であり、これ以上の高い精度は必要ないとも言える。しかし、数値計算コードの検証などに用いられる場合には、この程度の有効桁では幾分不足することもある。加えて、昨今の計算機を用いて自動化された曲線一致法では、実用で用いる λ の範囲および井戸関数値よりも若干幅を広くもたせた評価から次第に絞り込む過程があるものであり、その観点で現行の数表が $\lambda < 10$ 程度となっていることは十分とは言えない。他に、後述する近似式の適用範囲およびその精度についてこれまで検証されてきた経緯が認められない。

以上の観点で、既存の近似式の有効性を確認し、その有用性を確認した。

2. 級数展開式の直接計算時の留意点

(2)式に着目した場合、比較的容易に計算できそうである。特に、パーソナルコンピュータ上で稼動する表計算アプリケーションを用いれば大きな苦労はないように見える。しかし、実際に試行してみると以下のような特徴が認められる。

(1) $\lambda \leq 1$ の場合

Σ 内 $\left\{ \frac{(-1)^k \lambda^k}{k \cdot k!} \right\}$ にみられる(λ^k)は k 値が大きくなるに従って、小さくなるため、総和を伴う E_1 値は確実に

収束していく。 Σ 内値は正負変動するが、大きな値から小さい値への変動となり、比較的精度良く計算できる。

(2) $\lambda > 1$ の場合

Σ 内値が最終的には収束する方向に向かうことは $\lambda \leq 1$ の場合と同様であるが、 k 値の比較的小さい範囲では、 Σ 内値は一旦大きくなり、その後、収束に向かう特性を示す。

特徴的な特性として、最終的に得られる収束値に対して累積過程で数オーダー大きな値が加算される場合がある。このため、有意な桁落ちが避けられず、 $\lambda \leq 10$ 程度が計算の限界とみられ、これを超えると信頼性が劣る結果と見られる。実用面でも、この上限が通常与えられている数表の範囲内でもある。

3. 高精度な計算

前述の結果で見られた課題は、変数 λ の適用範囲が $\lambda \leq 10$ 程度にとどまり、これを拡張できない原因が計算時の有効桁数の不足であると考えられる。

数表では、有効数字 6 桁から 4 桁程度である（一般に井戸関数値が小さいほど有効桁数は減少する）。 λ が小さな値では、次式で計算することが可能である。教科書にもよるが、実用上 (3) 式は $\lambda < 0.01$ で十分適用可能であり、 $\lambda < 1E-4$ で相対誤差 10 万分の 1 程度以下となる。

$$E_1(\lambda) \cong -\log_e(\lambda) - \gamma \tag{3}$$

勿論、 λ が大きな値、例えば、 $\lambda=9.9$ で $E_1(\lambda)=4.636E-6$ （あるいは $\lambda=10$ で $E_1(\lambda)=4.157E-06$ ）が数表で得られる λ の上限である。これより大きな λ （これより小さな E_1 値）の必要性があるか否かについては議論の余地がある。

現在、いくつかの高精度（有効桁を多く）維持計算方法が提案されているが、いずれも何らかの計算コードを組まねばならない。インターネットを介して利用できるものに、maxima システムがある (<http://maxima.sourceforge.net/>)。また、比較的手軽に計算できるものとして、ネット上に CASIO 計算の高精度計算サイトがある (<http://keisan.casio.jp/>)。

ここで、直接指数積分関数が扱えるものもあるが、以下の定義があることを確認しておきたい。

$$\Gamma(\nu, x) = \int_x^\infty \exp(-u) u^{\nu-1} du \tag{4}$$

この関数は、第二種不完全ガンマ関数と称され、 $\nu=0$ とすれば以下となる。

$$\Gamma(0, x) = \int_x^\infty \exp(-u) u^{-1} du \tag{5}$$

(5) 式は指数積分関数に他ならず、これを数値化することで関数値を得ることが可能である。下表にいくつかの λ に対して CASIO 計算の高度計算サイトを利用して関数値を求めた結果を示す。

表-1 指数積分関数の高度精度計算結果

λ	$\Gamma(0, \lambda) = E_1(\lambda) = W(\lambda)$	λ	$\Gamma(0, \lambda) = E_1(\lambda) = W(\lambda)$
1.0E-15	3.3961560730E+01	1.0E-02	4.0379295765E+00
1.0E-14	3.1658975637E+01	1.0E-01	1.8229239584E+00
1.0E-13	2.9356390544E+01	1.0E+00	2.1938393440E-01
1.0E-12	2.7053805451E+01	1.0E+01	4.1569689297E-06
1.0E-11	2.4751220358E+01	2.0E+01	9.8355252906E-11
1.0E-10	2.2448635265E+01	3.0E+01	3.0215520107E-15
1.0E-09	2.0146050173E+01	4.0E+01	1.0367732615E-19
1.0E-08	1.7843465089E+01	5.0E+01	3.7832640296E-24
1.0E-07	1.5540880086E+01	6.0E+01	1.4358675657E-28
1.0E-06	1.3238295893E+01	7.0E+01	5.6003062858E-33
1.0E-05	1.0935719800E+01	8.0E+01	2.2285432587E-37
1.0E-04	8.6332247046E+00	9.0E+01	9.0054740589E-42
1.0E-03	6.3315393641E+00	1.0E+02	3.6835977617E-46

筆者らは、これら計算方法を用いて、数表を改めている。

4. 近似式の考察

指数積分関数にはいくつかの近似式が提案され、実用に供している。Abromowitz and Stegun(1964)には4つの多項式形近似式が紹介されており、いくつかがわが国でも紹介されている(例えば、地盤工学会, 1991)。ここでは、その誤差精度の良好さから以下の二式について評価する (C. Hastings, Jr., 1955)。

$$E_1(\lambda) + \log_e(\lambda) = a_0 + a_1\lambda + a_2\lambda^2 + a_3\lambda^3 + a_4\lambda^4 + a_5\lambda^5 + \varepsilon(\lambda) \quad (6)$$

ただし, $0 \leq \lambda \leq 1$ $|\varepsilon(\lambda)| < 2 \times 10^{-7}$ 。

$$a_0 = -0.57721\ 566 \quad a_1 = 0.99999\ 193 \quad a_2 = -0.24991\ 055$$

$$a_3 = 0.05519\ 968 \quad a_4 = -0.00976\ 004 \quad a_5 = 0.00107\ 857$$

E.E. Allen(1954) :

$$\lambda e^\lambda E_1(\lambda) = \frac{\lambda^4 + a_1\lambda^3 + a_2\lambda^2 + a_3\lambda + a_4}{\lambda^4 + b_1\lambda^3 + b_2\lambda^2 + b_3\lambda + b_4} + \varepsilon(\lambda) \quad (7)$$

ただし, $1 \leq \lambda \leq \infty$ $|\varepsilon(\lambda)| < 2 \times 10^{-8}$ 。

$$a_1 = 8.57332\ 87401 \quad a_2 = 18.05901\ 69730 \quad a_3 = 8.63476\ 08925 \quad a_4 = 0.26777\ 37343$$

$$b_1 = 9.57332\ 23454 \quad b_2 = 25.63295\ 61486 \quad b_3 = 21.09965\ 30827 \quad b_4 = 3.95849\ 69228$$

なお, (7)式は, 次式のように書き換えた形で用いた方が計算過程で, λ が大きくなった場合, 分母および分子それぞれがオーバーフローになることで, 分数計算が不可となるのが回避できる。

$$\lambda e^\lambda E_1(\lambda) = \frac{\lambda^4 + a_1\lambda^3 + a_2\lambda^2 + a_3\lambda + a_4}{\lambda^4 + b_1\lambda^3 + b_2\lambda^2 + b_3\lambda + b_4} \frac{1/\lambda^4}{1/\lambda^4} + \varepsilon(\lambda) = \frac{1 + \frac{a_1}{\lambda} + \frac{a_2}{\lambda^2} + \frac{a_3}{\lambda^3} + \frac{a_4}{\lambda^4}}{1 + \frac{b_1}{\lambda} + \frac{b_2}{\lambda^2} + \frac{b_3}{\lambda^3} + \frac{b_4}{\lambda^4}} + \varepsilon(\lambda) \quad (8)$$

4.1 誤差の確認

ここで, 文献では誤差 $\varepsilon(\lambda)$ が $10^{-7} \sim 10^{-8}$ オーダーとなることが示されている。前項で紹介した高度計算がこれまでなしえなかったため, これまで誤差評価を行う際の正値は数表であたえられたものしかない。これと比較すると数表値は有効数字4~6桁であるため, 明らかにこれを下回る範疇にあるオーダーでこのような誤差内に収まっている判断はできない。実際に, 旧来の数表値相応の有効桁数の場合と近似式による計算結果を比較したものを図-1 および図-2 に示す。図-1 では(6)式の誤差 ε は 10^{-5} オーダー, 図-2 では(7)式のそれは 10^{-6} オーダーであり, 文献に示された誤差を上回っている。

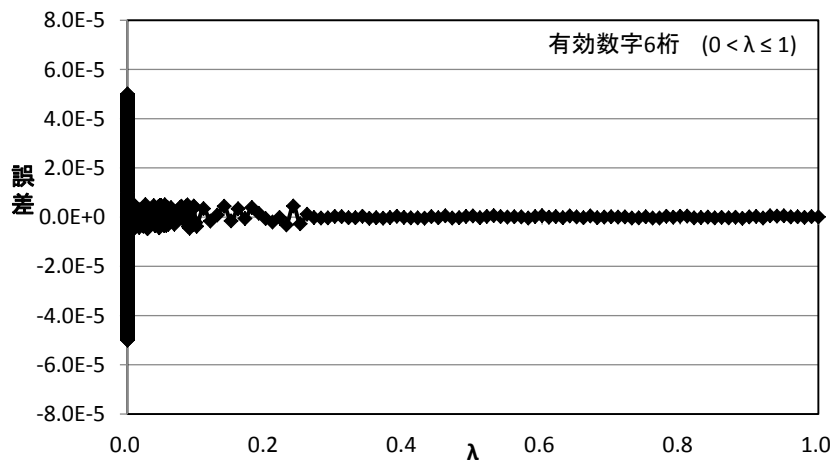


図-1 (6)式中の誤差 $\varepsilon(\lambda)$ (有効数字6桁以下, $0 < \lambda \leq 1$)

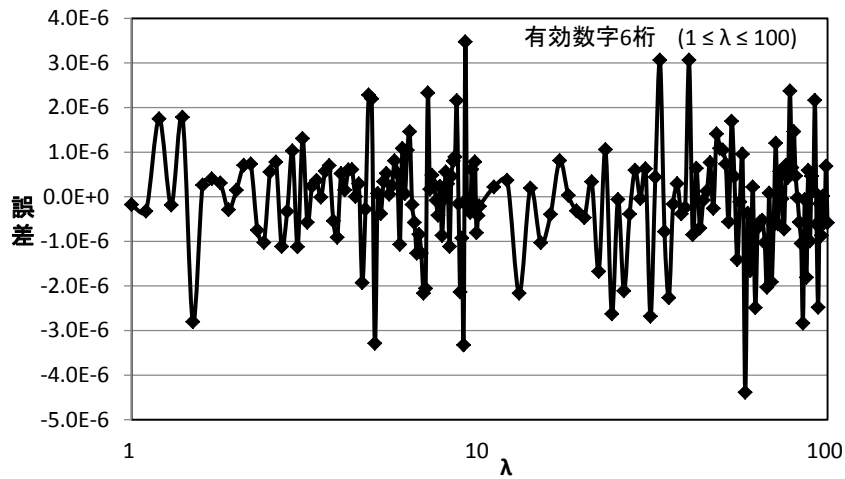


図-2 (7) 式中の誤差 $\varepsilon(\lambda)$ (有効数字 6 桁以下, $1 \leq \lambda \leq 100$)

次に、ここで先述の高精度計算によって得られた関数値を真値として比較したところ図-3 および図-4 の誤差分布を得ることが出来た。いずれも文献に示される誤差内に概ね収まっていることが確認できた。

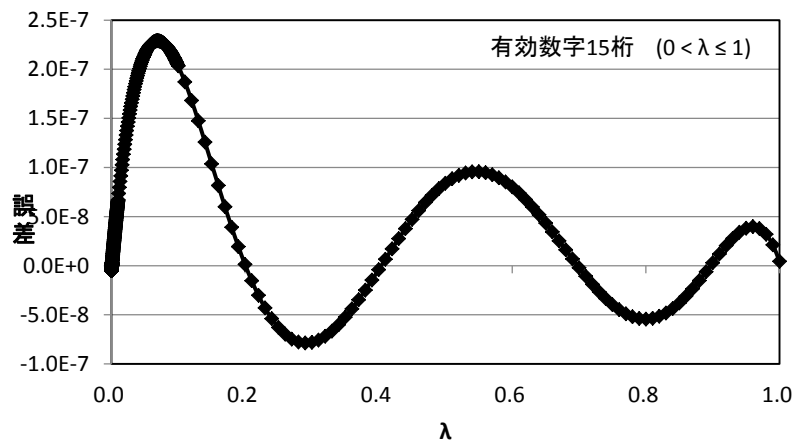


図 3 (6) 式中の誤差 $\varepsilon(\lambda)$ (有効数字 15 桁, $0 < \lambda \leq 1$)

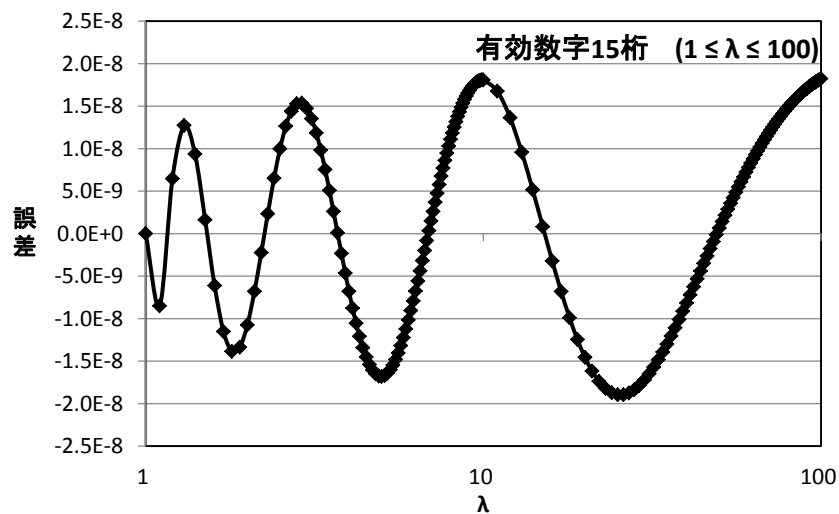


図 4 (7) 式中の誤差 $\varepsilon(\lambda)$ (有効数字 15 桁, $1 \leq \lambda \leq 100$)

これらのことから、比較対象とする関数値に、より高い精度のものを用いることで、近似式(6)および(7)式(あるいは(7')式)はいずれも適切に計算されていることが確認できる。さらに、数表では $\lambda \leq 10$ 程度までしか確認できないが、これを超える100までの比較でも文献にある精度を有することが確認できた。これを超える範囲での適合性を確認する必要性も検討すべきであるが、図-4の傾向から100を超える範囲ではこれまで確認した誤差範囲を超過する可能性があるようだ。

なお、(6)式は $|\epsilon(\lambda)| < 2.2 \times 10^{-7}$ である。文献値との差異が出ているが、真値とした関数値が文献作成当時と同じとはいえないため、整合は望めないが、適用性を左右する差異ではない。

4.2 近似式の再評価

ここで、図-3、図-4をみると、誤差は正負を比較的規則的に繰り返す傾向を示し、誤差0となるポイントが明確に見られる。このことから、近似式の各係数項の評価方法について推定してみる。(6)式や(7)式の出典は参考文献として示されているが、係数 a や b 値の転記間違いがないかの確認に用いる程度であり、具体的にどのようにして近似式の係数値を得たのか追いかけたものはみられない。例えば、Allen(1954)では結果のみの紹介しかない。Hastings(1955)では算定方法について説明されている。これらの情報に基づき、ここではこれらの近似式の再評価を試みる。

1) $\lambda \leq 1$ の場合

まず、(6)式を以下の標記に書き換える。

$$a_0 + \lambda a_1 + \lambda^2 a_2 + \lambda^3 a_3 + \lambda^4 a_4 + \lambda^5 a_5 = E_1(\lambda) + \log_e(\lambda) \quad (9)$$

ここでは、 $\lambda - E_1(\lambda)$ は真値から与えられると考えると、変量は $a_0 \sim a_5$ と見ることができる。さらに、この式形は(2)式において $\lambda \rightarrow 0$ とすると以下となる。

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \{E_1(\lambda) + \log_e(\lambda)\} = -\gamma \quad (10)$$

これを(9)式と比較すれば、 $a_0 = -\gamma$ と定義でき、(9)式は以下とした。

$$\lambda a_1 + \lambda^2 a_2 + \lambda^3 a_3 + \lambda^4 a_4 + \lambda^5 a_5 = E_1(\lambda) + \log_e(\lambda) + \gamma \quad (11)$$

(11)式に対して係数項 a_i を求める方法は最小二乗近似など考えられるが、Hastings(1955)では、変量となる係数項の数個の λ と $E_1(\lambda)$ の組み合わせを用意し、(11)式にこれを代入することで、1次多元連立方程式を立て、これを解く方法を示している。このようにして、Hastings(1955)には(6)式の係数値は示されているが、どのような組み合わせに対してこれら係数値を得たのかは記されていない。

ここで、図-3をみると、誤差が0となる(あるいは0に近づく)ところが、(11)式の連立方程式を解くために使われたポイントを示すと見ることが出来るだろう。ここでは、誤差が0あるいは0に近いポイントを5点抽出し、これに対して係数 a_i を求めた。

$[\lambda, W(\lambda), W(\lambda) + \log_e(\lambda) + \gamma]$ の組み合わせは以下である。

[0.2, 1.22265054418389E+0, 1.90428291749790E-01]

[0.4, 7.02380118865662E-01, 3.63305046991507E-01]

[0.7, 3.73768843233509E-01, 5.94309559294777E-01]

[0.9, 2.60183939325999E-01, 7.32039083668173E-01]

[1.0, 2.19383934395520E-01, 7.96599594395520E-01]

得られた係数は以下である。

$a_1 = 9.99991994436042E-01, \quad a_2 = -2.49910992630962E-01, \quad a_3 = 5.52005668885442E-02$

$a_4 = -9.76073085870155E-03, \quad a_5 = 1.07875656061651E-03$

$a_0 = -\gamma$

ここでは、(6)式に示した文献値(Allen, 1954)と比較しても非常に高い再現性であると言える (a_0 は設定値： $a_0 = -\gamma$, これは文献値とも合致している)。また、ここで求めた新たな係数値による近似式の誤差は以下となった。

$$\lambda \leq 1 \text{ の場合 : } |\varepsilon| \leq 2.31263353356326\text{E-}07$$

2) $\lambda \geq 1$ の場合

$\lambda \geq 1$ のケースも、同様に実施した。ここでは、先のケースと式形が異なるため、(8)式に以下の書き換えを実施した。

$$f(\lambda) = \frac{1 + \frac{a_1}{\lambda} + \frac{a_2}{\lambda^2} + \frac{a_3}{\lambda^3} + \frac{a_4}{\lambda^4}}{1 + \frac{b_1}{\lambda} + \frac{b_2}{\lambda^2} + \frac{b_3}{\lambda^3} + \frac{b_4}{\lambda^4}} \quad \text{また, } f(\lambda) = \lambda e^\lambda E_1(\lambda)$$

これを整理する。

$$\begin{aligned} 1 + \frac{a_1}{\lambda} + \frac{a_2}{\lambda^2} + \frac{a_3}{\lambda^3} + \frac{a_4}{\lambda^4} &= \left(1 + \frac{b_1}{\lambda} + \frac{b_2}{\lambda^2} + \frac{b_3}{\lambda^3} + \frac{b_4}{\lambda^4}\right) \cdot f(\lambda) \\ 1 + \left(\frac{1}{\lambda}\right)a_1 + \left(\frac{1}{\lambda^2}\right)a_2 + \left(\frac{1}{\lambda^3}\right)a_3 + \left(\frac{1}{\lambda^4}\right)a_4 &= f(\lambda) + \left(\frac{f(\lambda)}{\lambda}\right)b_1 + \left(\frac{f(\lambda)}{\lambda^2}\right)b_2 + \left(\frac{f(\lambda)}{\lambda^3}\right)b_3 + \left(\frac{f(\lambda)}{\lambda^4}\right)b_4 \\ \left(\frac{1}{\lambda}\right)a_1 + \left(\frac{1}{\lambda^2}\right)a_2 + \left(\frac{1}{\lambda^3}\right)a_3 + \left(\frac{1}{\lambda^4}\right)a_4 + \left(\frac{-f(\lambda)}{\lambda}\right)b_1 + \left(\frac{-f(\lambda)}{\lambda^2}\right)b_2 + \left(\frac{-f(\lambda)}{\lambda^3}\right)b_3 + \left(\frac{-f(\lambda)}{\lambda^4}\right)b_4 &= f(\lambda) - 1 \end{aligned} \quad (12)$$

上式に対して、前述と同様の考え方で、以下の組み合わせを選定した。

$$\begin{aligned} &[\lambda, W(\lambda), f(\lambda) - 1] \\ &[1.0, 2.19383934395520\text{E-}01, -4.03652637676807\text{E-}01] \\ &[1.2, 1.58408436851461\text{E-}01, -3.68878561726265\text{E-}01] \\ &[1.5, 1.00019582406631\text{E-}01, -3.27614996062637\text{E-}01] \\ &[2.2, 3.71911370519324\text{E-}02, -2.61568869303412\text{E-}01] \\ &[3.7, 5.44782465677045\text{E-}03, -1.84705658627106\text{E-}01] \\ &[6.9, 1.29282683598470\text{E-}04, -1.14840827107748\text{E-}01] \\ &[15, 1.91862789214786\text{E-}08, -5.91958133888648\text{E-}02] \\ &[49, 1.04898116423680\text{E-}23, -1.96223921726998\text{E-}02] \end{aligned}$$

(7)式の再評価として得られた係数は以下である。

$$\begin{aligned} a_1 &= 8.57188926581875\text{E+}00 \\ a_2 &= 1.80563021572016\text{E+}01 \\ a_3 &= 8.63744113341090\text{E+}00 \\ a_4 &= 2.68268499887199\text{E-}01 \\ a_1 &= 9.57188279383990\text{E+}00 \\ a_2 &= 2.56288068757276\text{E+}01 \\ a_3 &= 2.11009593348717\text{E+}01 \\ a_4 &= 3.96113735828840\text{E+}00 \end{aligned}$$

ここで求めた新たな係数値による近似式の誤差を以下に示す。

$$\lambda \geq 1 \text{ の場合 : } |\varepsilon| \leq 1.85629401849852\text{E-}08$$

このケースでも、非常によい近似を見せた。

5. まとめ

Theis の井戸関数である指数積分関数の既存の近似式(Allen,1955, Hastings,1955)の適用性を評価し、以下を確認した。

- 1) 数表が紹介されているが、 λ の上限は 10 までであったものが、これを超えて、100 までの値を評価できることを確認した。また、下限については本文中の(3)式で計算できることは周知である。
- 2) 既存の近似式による結果と高度計算による関数値を比較し、近似式の妥当性を確認した。
- 3) 妥当性確認の過程において、近似式の係数項の算定方法を推定し、既存近似式と遜色ない係数値が算定できることを確認した。
- 4) 既存の近似式の精度向上の方策を提案し、その結果を確認した。
- 5) これらの検討により、既存の近似式で数表の代替とすることは十分可能であり、一般に紙面の都合もあって印字桁数を削減せざるを得ない状況と比較して、これらの近似式の方がより高精度の計算結果を示すことができる。このことは、昨今の計算機器および計算アプリケーションの普及状況を鑑みれば、近似式のみでの記載で文献資料は十分であると判断した。

まとめると以下のように、誤差値と適用範囲に若干の補正を提案するものの、既往の文献値での活用で何ら問題はない。

$$E_1(\lambda) + \log_e(\lambda) = a_0 + a_1\lambda + a_2\lambda^2 + a_3\lambda^3 + a_4\lambda^4 + a_5\lambda^5 + \varepsilon(\lambda) \quad (6)$$

ただし、 $0 \leq \lambda \leq 1$ $|\varepsilon(\lambda)| < 2.2 \times 10^{-7}$

$$a_0 = -0.57721\ 566 \quad a_1 = 0.99999\ 193 \quad a_2 = -0.24991\ 055 \\ a_3 = 0.05519\ 968 \quad a_4 = -0.00976\ 004 \quad a_5 = 0.00107\ 857$$

$$\lambda e^\lambda E_1(\lambda) = \frac{\lambda^4 + a_1\lambda^3 + a_2\lambda^2 + a_3\lambda + a_4}{\lambda^4 + b_1\lambda^3 + b_2\lambda^2 + b_3\lambda + b_4} + \varepsilon(\lambda) \quad (7)$$

ただし、 $1 \leq \lambda \leq 100$ $|\varepsilon(\lambda)| < 2 \times 10^{-8}$

$$a_1 = 8.57332\ 87401 \quad a_2 = 18.05901\ 69730 \quad a_3 = 8.63476\ 08925 \quad a_4 = 0.26777\ 37343 \\ b_1 = 9.57332\ 23454 \quad b_2 = 25.63295\ 61486 \quad b_3 = 21.09965\ 30827 \quad b_4 = 3.95849\ 69228$$

最後に特筆しておきたいことがある。ここで示した近似式は 1950 年代に公開されたものである。現在よりも計算技術を支援する環境は格段に劣悪であったことは容易に推定できる。そのような状況の中で、現代にも通用する近似式の誘導がなされたことに驚愕し、その功績に大なる敬意を払うものである。

【参考文献】

- 1) Abramowitz, M. and Stegun, I.A.: Handbook of mathematical functions, Dover, Chapter 5~6., 1964.
- 2) Allen, E.E. : Note 169, MTAC 8,240., 1954.
- 3) Hastings, C. Jr. : Approximations for digital computers, Princeton Univ. Press, Princeton, N.J., 1955.
竹内均訳：電子計算機のための近似計算法，東京図書，207p., 1973.
- 4) 地盤工学会（旧土質工学会）編：根切り工事と地下水，現場技術者のための土と基礎シリーズ 19，土質工学会，p.352., 1991.