日本物理学会2013年秋季大会（於 高知大学朝倉campus） 講演21aSB-6（2013年9月21日）

高スピン間の回転行列の数値評価における著しい桁落の回避方法

田嶋直樹（福井大工）

1.回転演算子の角運動量固有状態基底での表現行列（D関数）をWignerの公式で数値的に求めると、角運動量jが大きいとき著しい桁落ちが起きる。「j=1/2ないし1との角運動量合成に関連する漸化式」で求める場合も同程度の桁落ちが起きる。

2. D関数をフーリエ（有限）級数で表せば非常に大きなjでも桁落ちはほとんど起きないことを示す。

3.本講演では、フーリエ展開係数は数式処理で求めてデータファイルに書き出しておき、数値計算プログラムはそれを読み込んで使う。数値計算プログラム内で係数を計算できる桁落ちの小さい公式を考案すべく研究中。

回転行列 ($\mathcal{D}$ 関数) とは

Euler 角 ϕ, θ, ψ で指定された回転を行う演算子

$$\hat{R}(\phi,\theta,\psi) = e^{-i\phi\hat{J}_z}e^{-i\theta\hat{J}_y}e^{-i\psi\hat{J}_z}$$

の「角運動量の固有状態で構成された基底」での行列要素である。

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^j_{mk} &= \langle jm|\hat{R}(\phi,\theta,\psi)|jk\rangle = e^{-im\phi}e^{-ik\psi}d^j_{mk}(\theta),\\ d^j_{mk}(\theta) &= \langle jm|e^{-i\theta\hat{J}_y}|jk\rangle\end{aligned}$$

基底の位相の規約により $\hat{J}_y$ の行列要素は純虚数なので、$d^i_{mk}(\theta)$ は実数値をとる。

- $\mathcal{D}^j_{mk}$ の表式は Wigner による定義であり、Bohr-Mottelson はその複素共役で定義する。
  しかし、$d^j_{mk}(\theta)$ に関しては両者の定義で違いは生じない。

- $\hat{R}$ はユニタリ演算子であるから回転行列は規格化された状態間の重なりである。

$$\therefore\ |d^i_{mk}(\theta)| \leq 1$$

Wignerの公式[1]：

$$d^j_{mk}(\theta) = \sum_n (-1)^n t_n(j,m,k;\theta), \quad n : \text{integer in } [\max(0,k-m,), \min(j-m, j+k)],$$
$$t_n(j,m,k;\theta) = \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+k)!(j-k)!}}{(j-m-n)!(j+k-n)!(n+m-k)!n!} \cdot \left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{2j+k-m-2n} \cdot \left(-\sin\frac{\theta}{2}\right)^{m-k+2n},$$

この公式は j が大きい場合に著しい桁落ちが起きる。
例えば、j が整数、$\theta = \frac{\pi}{2}$, $m = k = 0$ の場合、

$$t_n\left(j,0,0;\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2^j}\left(\frac{j!}{(j-n)!n!}\right)^2,$$

となり、j が偶数なら $n = \frac{j}{2}$ で最大値

$$t_{j/2}\left(j,0,0;\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2^j}\left(\frac{j!}{(j/2)!}\right)^2 \sim \sqrt{\frac{2}{\pi j}}2^j$$

をとる。

- この巨大な値をとりうる項 t_n の差し引きとして絶対値が1以下である $d^j_{mk}(\theta)$ を求めるようとしても、$j \sim 54$ (114) で倍精度（四倍精度）浮動小数点実数の精度は完全に失われてしまう。
- Wignerの公式の基となったような (角運動量合成 $j + \frac{1}{2} = j \otimes \frac{1}{2}$, $j + 1 = j \otimes 1$ 等にかかわる）漸化式を直接用いても桁落ち問題に大幅な改善はないことが文献[2]からわかる。

[1] e.g., see M.E. Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, 1957.

[2] “Fast and accurate determination of the Wigner rotation matrices in the fast multipole method”, H. Dachsel, J. Chem. Phys., **124**, 144115 (2006)

$$d^{60}_{0,0}\left(\frac{\pi}{2}\right) =$$

0	0.000000000000000
1	-0.000000000000003
2	0.000000000002717
3	-0.000000001015688
4	0.000000206248120
5	-0.000025871764215
6	0.002173946854217
7	-0.129372020957098
8	5.678218857320146
9	-189.55436778016883*
10	4930.309105962191***
11	-101865.89061905353****
12	1698472.2456690802*****
13	-23155503.278234087******
14	260971973.171526********
15	-2454296423.2486625********
16	19413868191.71305*********
17	-130052764080.12619*********
18	742183829580.7201**********
19	-3626626801607.7295**********
20	15240899133756.482***********
21	-55295779170091.55************
22	173770413466341.4*************
23	-474337385719086.94************
24	1127374793488593.8*************
25	-2337724371777948.**************
26	4236260880810631.**************
27	-6717582411820424.**************
28	9330927610296482.**************
29	-11361319706234956.**************
30	12131364708546436.**************
31	-11361319706234956.**************
32	9330927610296482.**************
33	-6717582411820424.**************

```
    34         4236260880810631.***************
    35        -2337724371777948.***************
    36         1127374793488593.8**************
    37         -474337385719086.94*************
    38          173770413466341.4**************
    39          -55295779170091.55*************
    40           15240899133756.482************
    41           -3626626801607.7295***********
    42             742183829580.7201***********
    43            -130052764080.12619**********
    44              19413868191.71305**********
    45             -2454296423.2486625********
    46               260971973.171526*********
    47              -23155503.278234087******
    48                1698472.2456690802*****
    49               -101865.89061905353****
    50                  4930.309105962191***
    51                  -189.55436778016883*
    52                     5.678218857320146
    53                    -0.129372020957098
    54                     0.002173946854217
    55                    -0.000025871764215
    56                     0.000000206248120
    57                    -0.000000001015688
    58                     0.000000000002717
    59                    -0.000000000000003
    60                     0.000000000000000
total = d^{60}_{0,0}(pi/2)=  0.102578173008570
```

フーリエ（有限）級数による d^j_{km} の表式

Wigner の公式に現れる $\cos^n\frac{\theta}{2}\sin^m\frac{\theta}{2}$ の形をした各項は、$x=\frac{\theta}{2}$ として、三角関数の恒等式

$$\sin^2 x = -\frac{1}{2}\cos\,2x + \frac{1}{2}$$
$$\sin^3 x = -\frac{3}{4}\sin\,3x + \frac{3}{4}\sin\,x$$
$$\cdots\cdots$$
$$\cos^2 x = \frac{1}{2}\cos\,2x + \frac{1}{2}$$
$$\cos^3 x = \frac{1}{4}\cos\,3x + \frac{3}{4}\cos\,x$$
$$\cdots\cdots$$
$$\sin\mu x\;\cos\nu x = \frac{1}{2}\sin(\mu+\nu)x + \frac{1}{2}\sin(\mu-\nu)x$$

を利用すれば $\{\sin\frac{k\theta}{2},\,\cos\frac{k\theta}{2}\,|0\le k\le n+m\}$ の線形結合の形に表せることがわかる。
詳細に考察すると下記の一般式を得る。

$$d^j_{mk}(\theta) = \sum_n c^{jmk}_n \left\{\begin{array}{c}\cos\\ \sin\end{array}\right\} n\theta \quad \text{for}\;\; m-k : \left\{\begin{array}{c}\text{even}\\ \text{odd}\end{array}\right\}$$

$$\text{where}\; n = j,\, j-1,\, \cdots \left\{\begin{array}{c}0\\ \frac{1}{2}\end{array}\right\} \quad \text{for}\quad 2j : \left\{\begin{array}{c}\text{even}\\ \text{odd}\end{array}\right\}$$

$$c^{jmk}_n = \frac{1}{2\nu\pi}\int_0^{4\pi} d^j_{mk}(\theta) \left\{\begin{array}{c}\cos\\ \sin\end{array}\right\} n\theta\, d\theta \quad \text{for}\;\; m-k : \left\{\begin{array}{c}\text{even}\\ \text{odd}\end{array}\right\}$$

$$\text{where}\; \nu = \left\{\begin{array}{lll}2 & \cdots & \text{for}\; n=0\;\cap\; m-k\text{:even}\\ 1 & \cdots & \text{other wise}\end{array}\right\} \quad \text{and Wigner formula} \rightarrow d^j_{mk}$$

具体例

$$
\begin{aligned}
d^{\frac{7}{2}}_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}(\theta) &= 144\left(\frac{\sin^7\left(\frac{\theta}{2}\right)}{144}-\frac{\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^5\left(\frac{\theta}{2}\right)}{12}+\frac{\cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^3\left(\frac{t}{2}\right)}{8}-\frac{\cos^6\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{36}\right)\\
&= -\frac{35\,\sin\left(\frac{7\,t}{2}\right)-5\,\sin\left(\frac{5\,t}{2}\right)+15\,\sin\left(\frac{3\,t}{2}\right)-9\,\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{64}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{\frac{7}{2}}_{\frac{1}{2},-\frac{3}{2}}(\theta) &= 48\,\sqrt{15}\left(\frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^6\left(\frac{\theta}{2}\right)}{48}-\frac{\cos^3\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}{12}+\frac{\cos^5\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}{24}\right)\\
&= -\frac{7\,\sqrt{15}\,\cos\left(\frac{7\,t}{2}\right)-3\,\sqrt{15}\,\cos\left(\frac{5\,t}{2}\right)-\sqrt{15}\,\cos\left(\frac{3\,t}{2}\right)-3\,\sqrt{15}\,\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{64}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{4}_{1,-2}(\theta) &= 45\cdot 2^{\frac{9}{2}}\left(-\frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^7\left(\frac{\theta}{2}\right)}{240}+\frac{\cos^3\left(\frac{t}{2}\right)\,\sin^5\left(\frac{\theta}{2}\right)}{48}-\frac{\cos^5\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^3\left(\frac{\theta}{2}\right)}{72}\right)\\
&= \frac{7\,\sqrt{2}\,\sin\left(4\,t\right)-7\,\sqrt{2}\,\sin\left(3\,t\right)-2^{\frac{3}{2}}\,\sin\left(2\,t\right)-3\,\sqrt{2}\,\sin t+\sin(0\cdot\theta)}{32}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{4}_{2,0}(\theta) &= 288\,\sqrt{10}\left(\frac{\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^6\left(\frac{\theta}{2}\right)}{96}-\frac{\cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}{36}+\frac{\cos^6\left(\frac{\theta}{2}\right)\,\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}{96}\right)\\
&= -\frac{7\,\sqrt{10}\,\cos\left(4\,\theta\right)+0\cdot\cos(3\theta)-4\,\sqrt{10}\,\cos\left(2\,\theta\right)+0\cdot\cos(2\theta)-3\,\sqrt{10}\cos(0\theta)}{64}
\end{aligned}
$$

本研究では現在までに

- フーリエ級数展開の係数 c_n^{jmk} を数式処理で求めた。
  - 数式処理ソフト Maxima を使用した。

    これまでの約 20 年間は、もっぱら京大基研の Mathematica にお世話になりました。
  - 人間の側の手間を惜しまなければ、数式は不要で、任意長の分数計算だけで計算できる。
- 求まった係数は倍精度実数に精度を落としてデータファイルに保存した。
  - $j_{\max}$ 以下の全て（整数+半整数）の j の d^j_{mk} を表すための係数の総個数は約 $\dfrac{j^4}{2}$.

    8byte の倍精度実数なら $j_{\max} = 50$ で 25MB, $j_{\max} = 100$ で 400MB, $j_{\max} = 200$ で 6.4GB
- その係数データを読み込んで $d^j_{mk}(\theta)$ の値を倍精度実数で数値的に求めるプログラムを作成した。

- 以下では、このプログラム および

　　「Wigner 公式通りに倍精度実数で数値的に総和を計算して求めるプログラム」

の誤差を「数式処理で求めた正確な値」と比較して求め、グラフにして示す。

各 j 値に $|m|, |k| \leq j$ をみたす $(2j+1)^2$ 個の (m,k) 対があるが、対称性

$$d^j_{mk}(\theta) = (-1)^{m-k} d^j_{km}(\theta) = (-1)^{m-k} d^j_{-m,-k}(\theta) = d^j_{-k,-m}(\theta)$$

を考慮して 約 $\frac{1}{4}$ の領域 $\{(m,k) | 0 \leq m \leq j, |k| \leq m\}$ だけを示す。

$\cos\,n\theta$, $\sin\,n\theta$ の計算方法

三角関数の加法定理により計算すると計算量が少なく精度も高い:

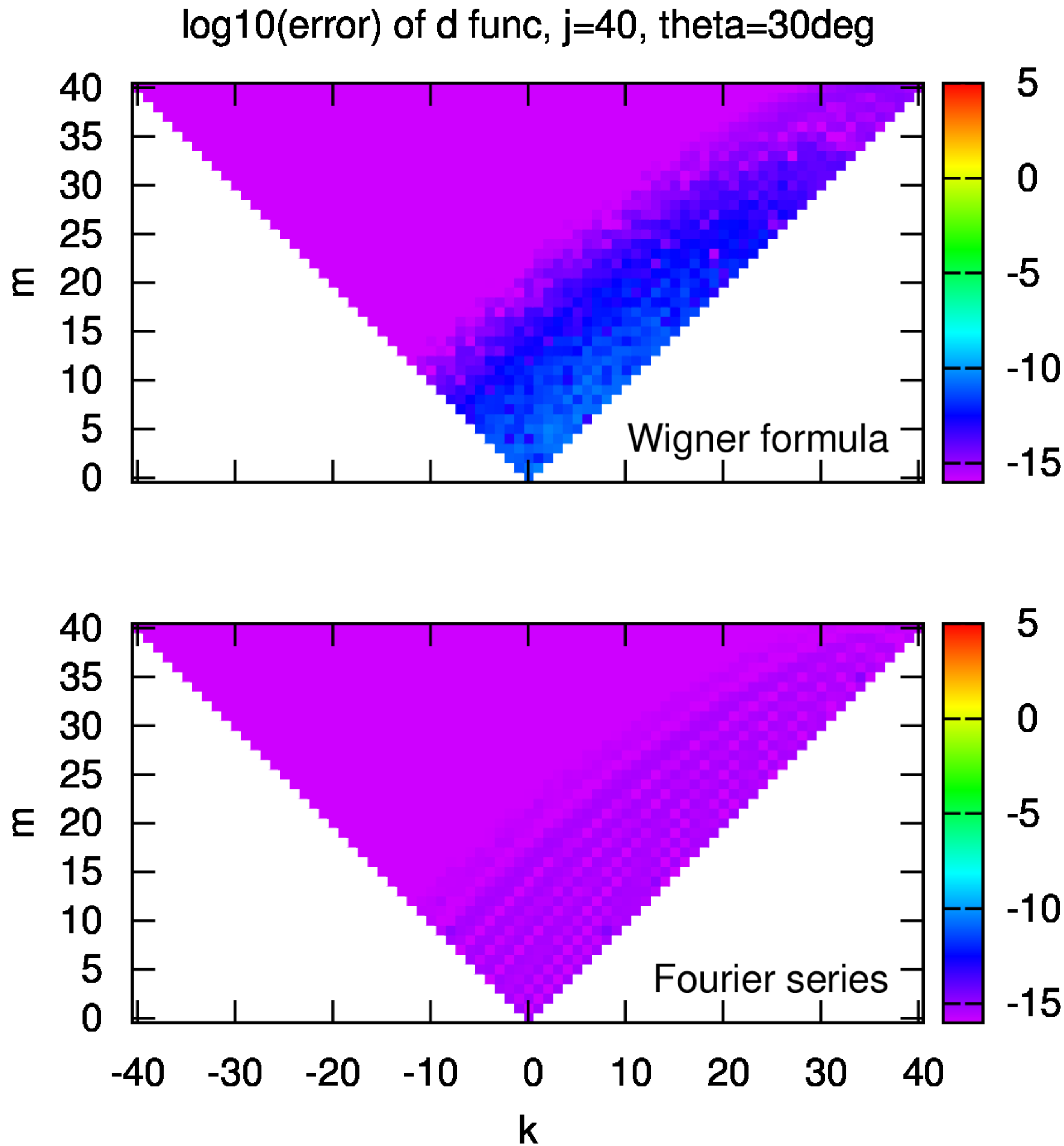
n が整数のとき

$$\begin{pmatrix} \cos\,n\theta, & -\sin\,n\theta \\ \sin\,n\theta, & \cos\,n\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\,\theta, & -\sin\,\theta \\ \sin\,\theta, & \cos\,\theta \end{pmatrix}^{n}$$

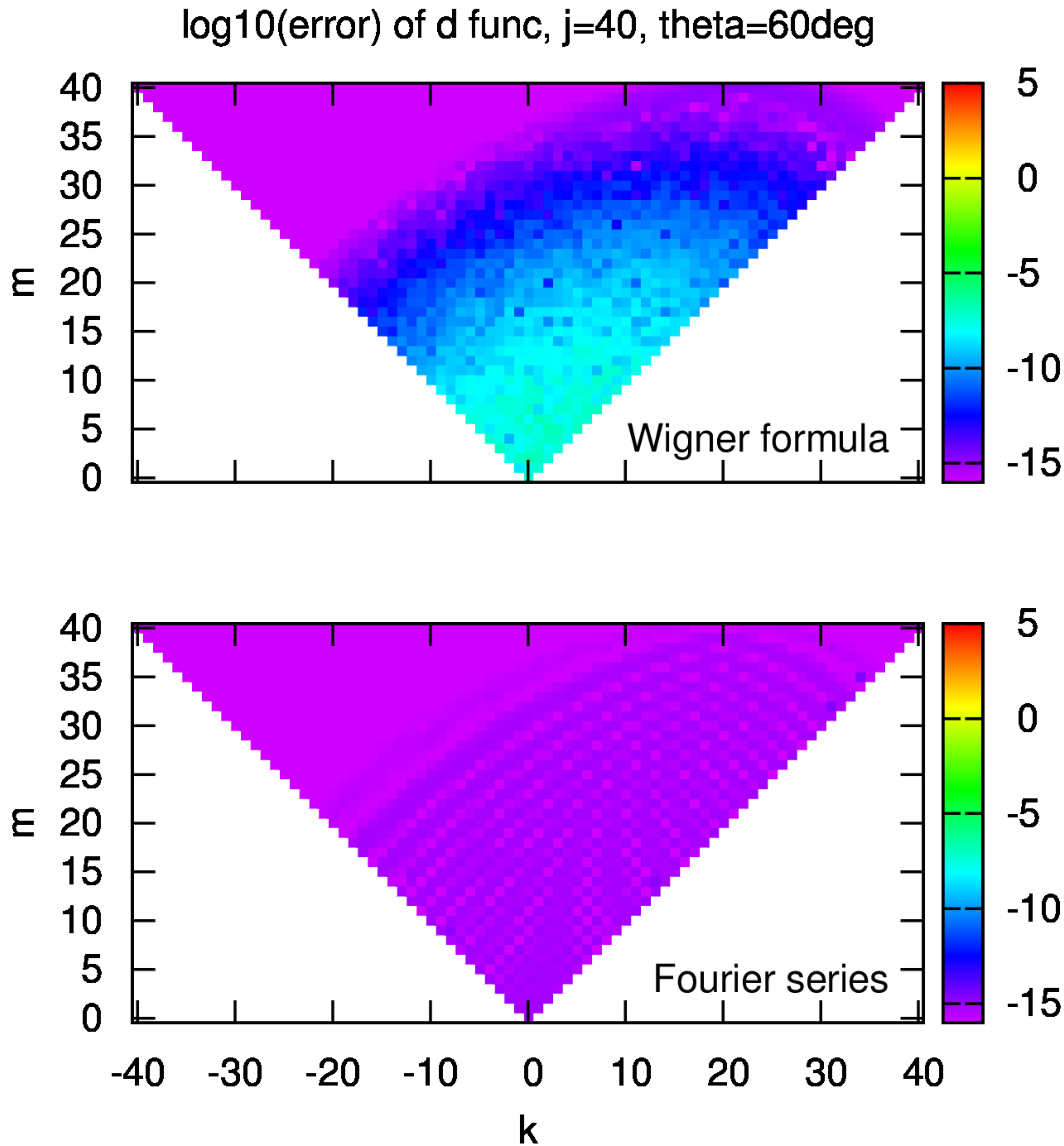
n が半整数 (=半奇数) のとき

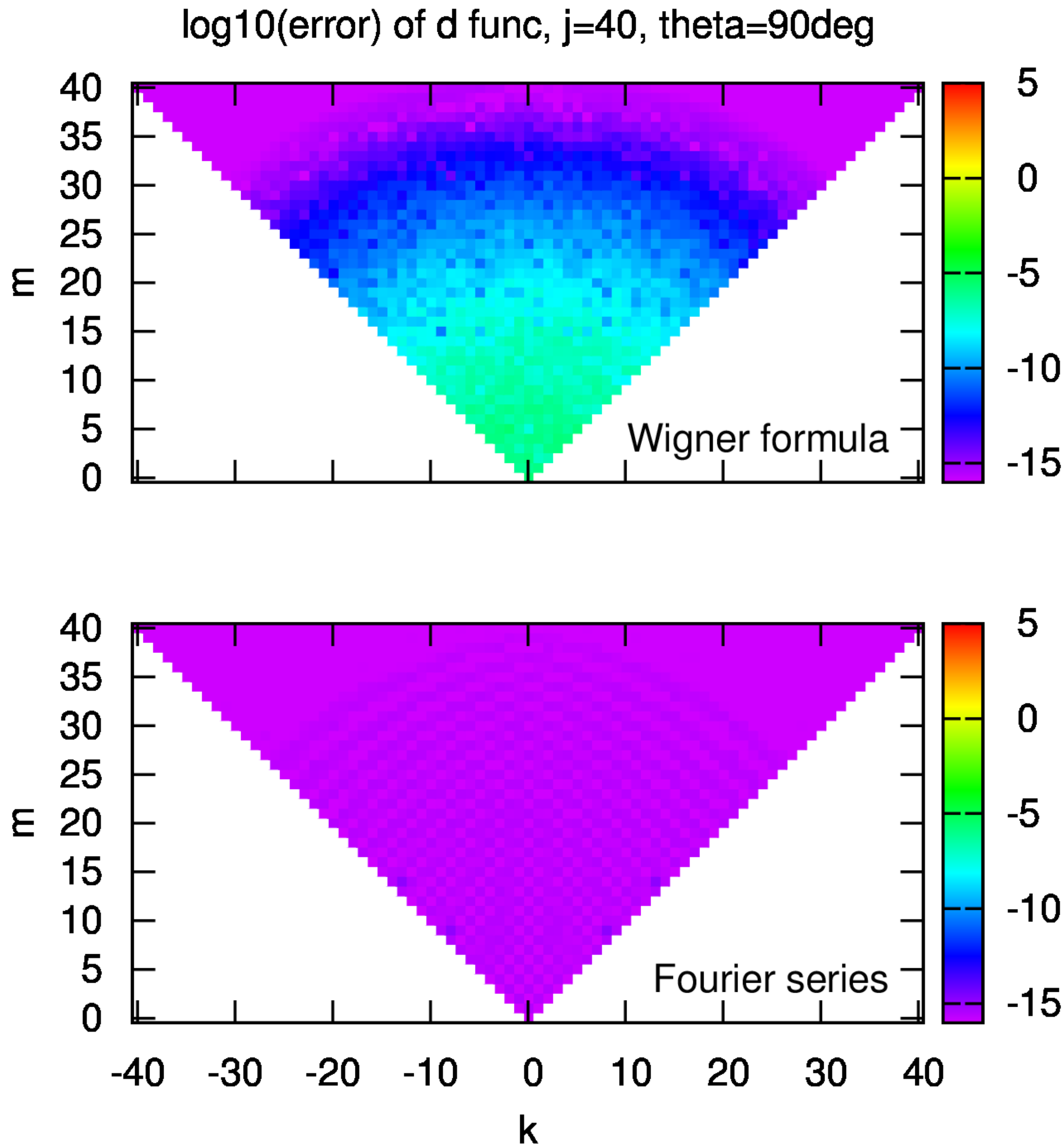
$$\begin{pmatrix} \cos\,n\theta, & -\sin\,n\theta \\ \sin\,n\theta, & \cos\,n\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\,\theta, & -\sin\,\theta \\ \sin\,\theta, & \cos\,\theta \end{pmatrix}^{n-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \cos\,\frac{\theta}{2}, & -\sin\,\frac{\theta}{2} \\ \sin\,\frac{\theta}{2}, & \cos\,\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \cos\,\theta = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} \\ \sin\,\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\,\frac{\theta}{2} \end{cases}$$

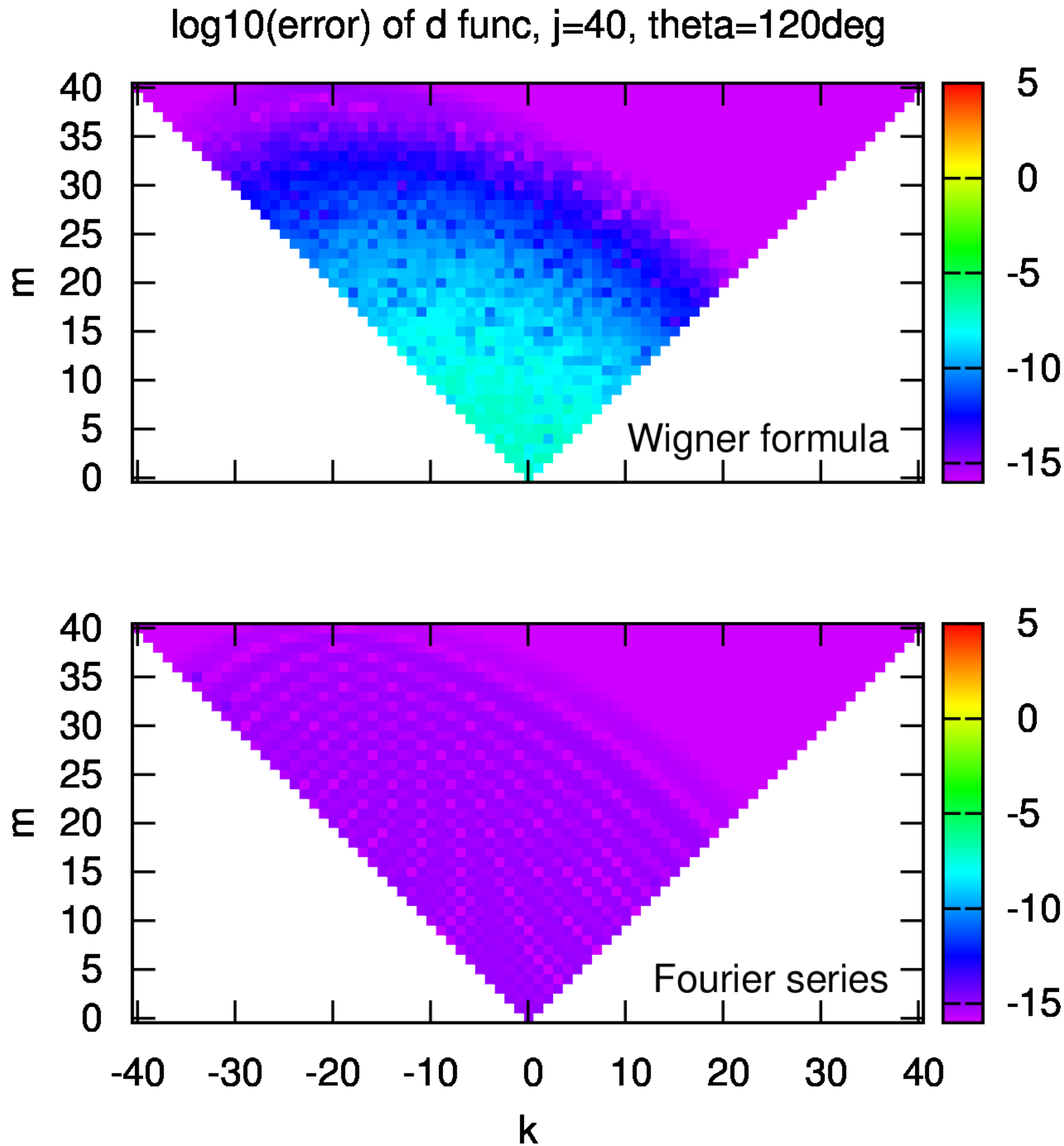
一方、$n\theta$ の値を計算してからそれを関数 sin, cos に渡す計算方法では、
sin,cos を n 回ずつ呼ぶため計算時間が長くなることに加えて、
$|n\theta| > \frac{\pi}{4}$ ならば、$\frac{\pi}{2}$ の整数倍を差し引いてそれを $[-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}]$ に還元する際に桁落ちが生じる。
加法定理の適用を n 回繰り返して生じる数値誤差は、この桁落ちより小さい。

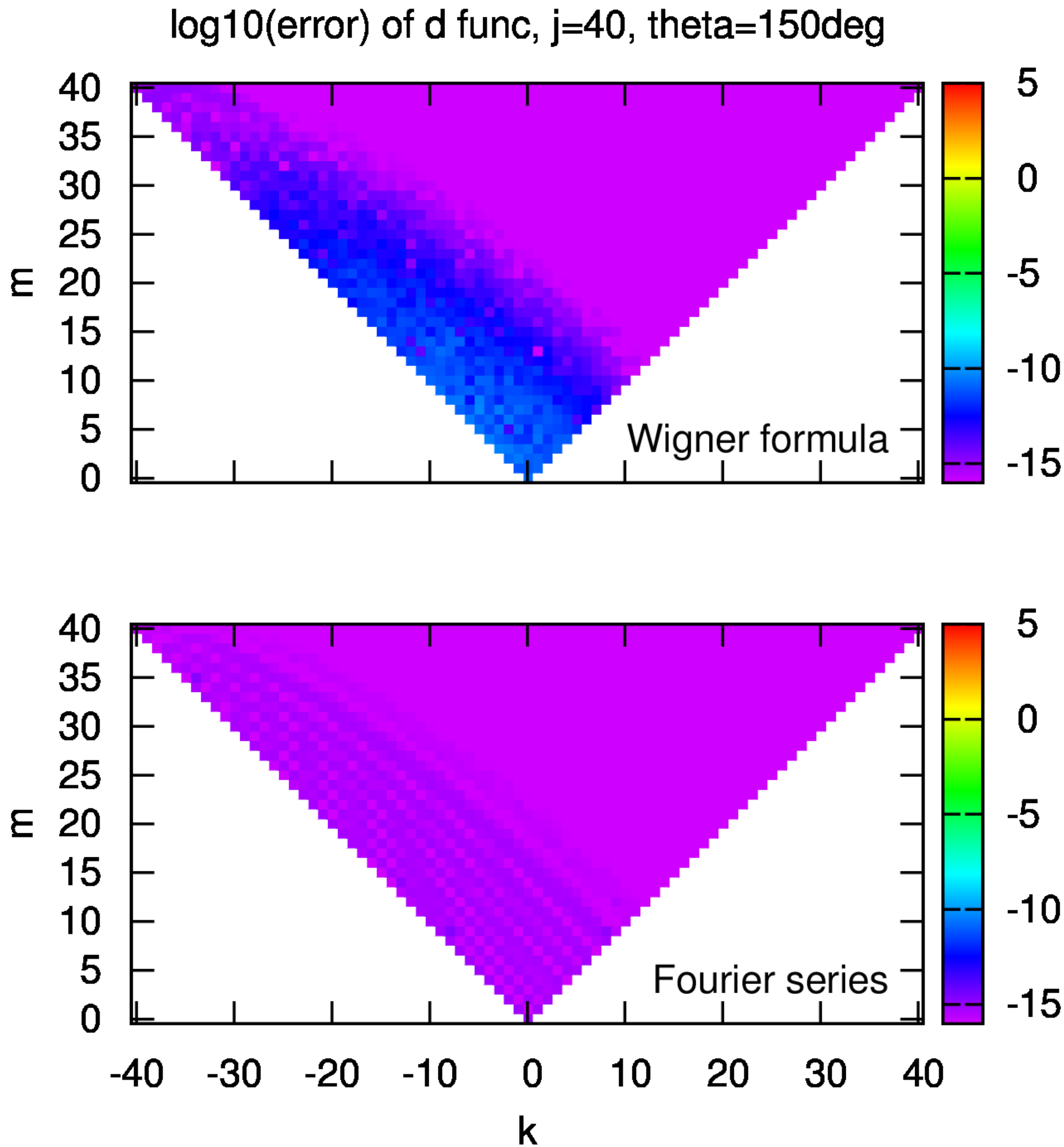


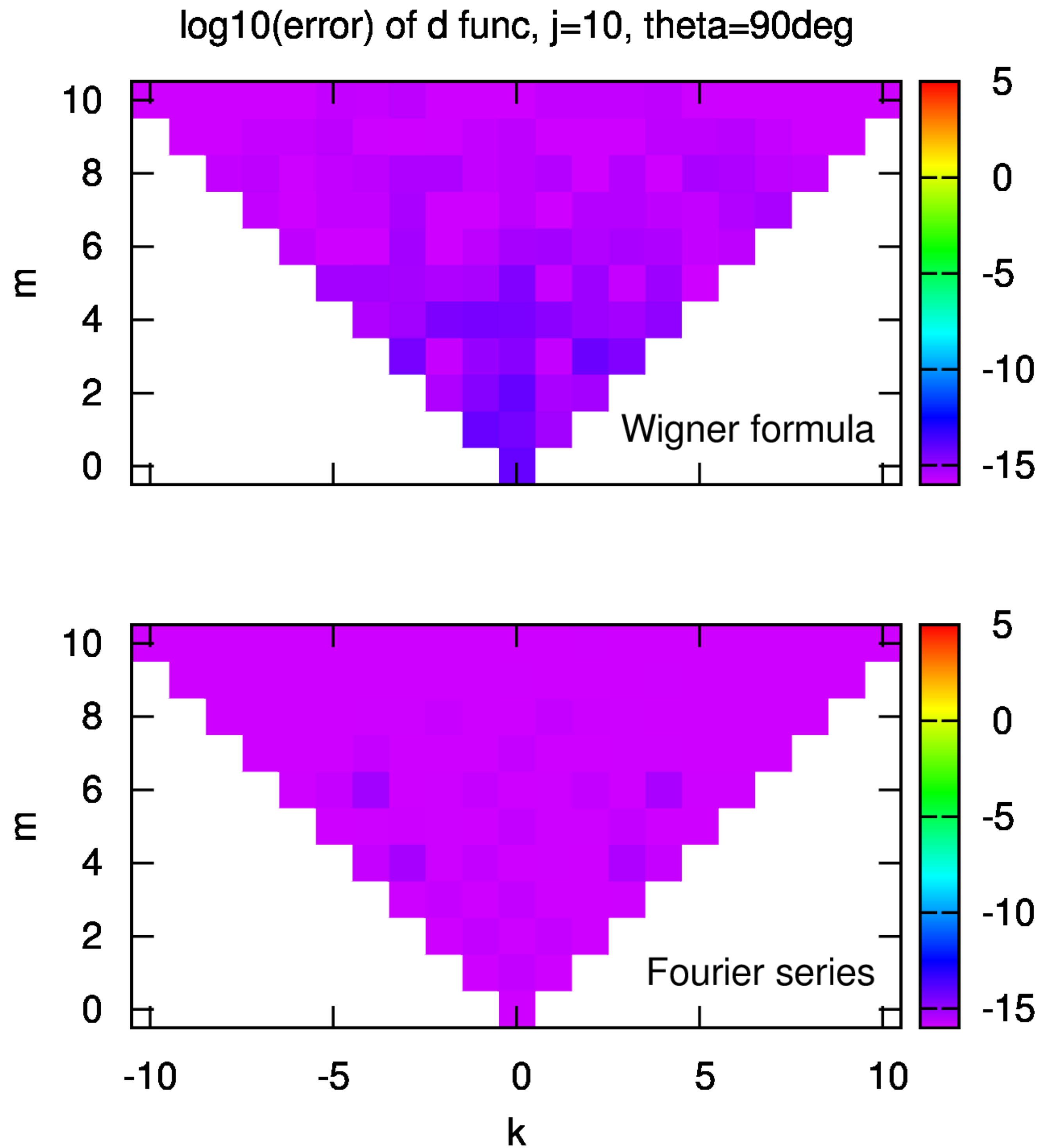
log10(error) of d func, j=40, theta=30deg
m
40
35
30
25
20
15
10
5
0
Wigner formula
5
0
-5
-10
-15
Fourier series
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
k

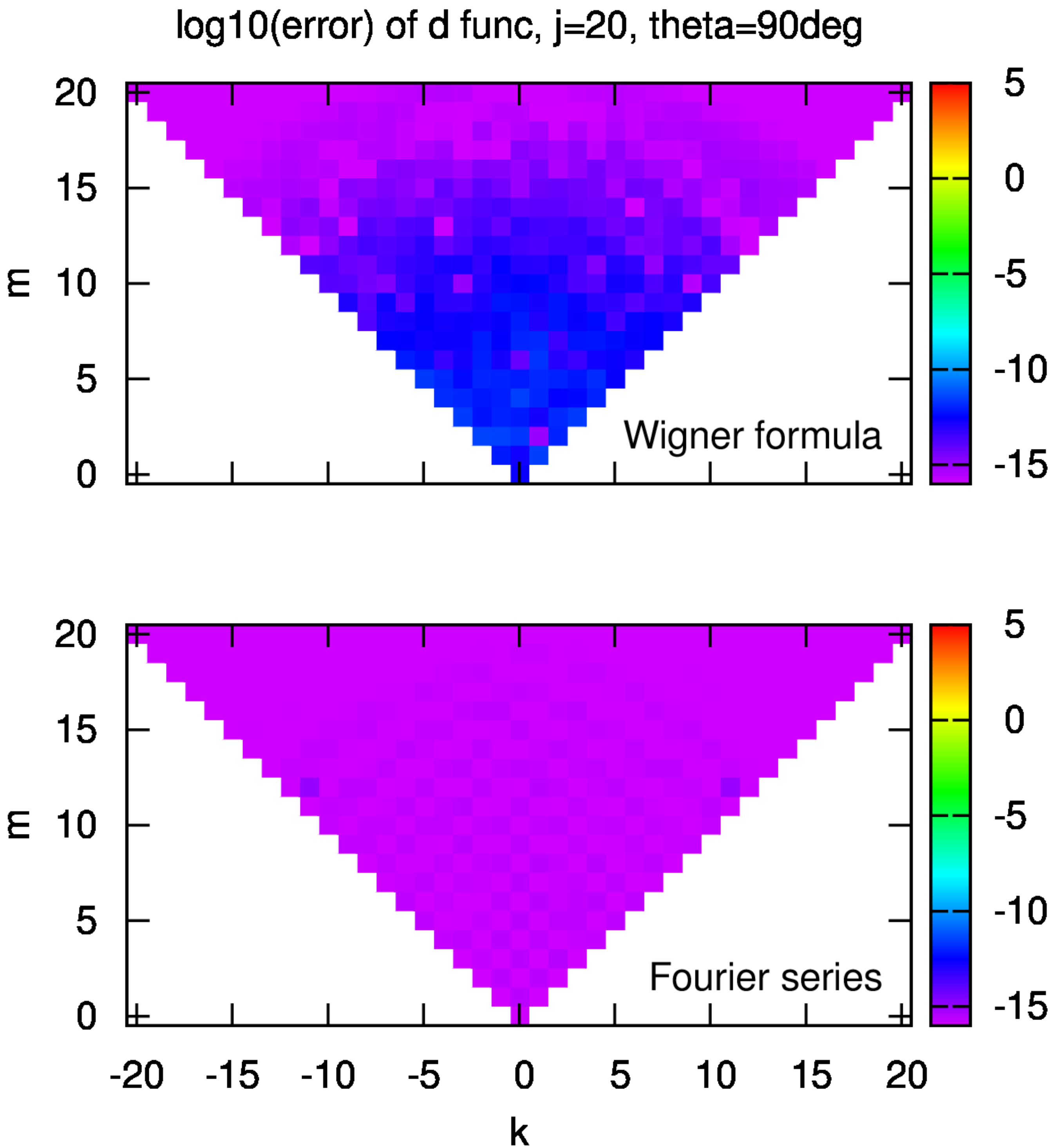

log10(error) of d func, j=40, theta=60deg
Wigner formula
Fourier series
m
k
40
35
30
25
20
15
10
5
0
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
5
0
-5
-10
-15


log10(error) of d func, j=40, theta=90deg
Wigner formula
Fourier series
m
k
40
35
30
25
20
15
10
5
0
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
5
0
-5
-10
-15

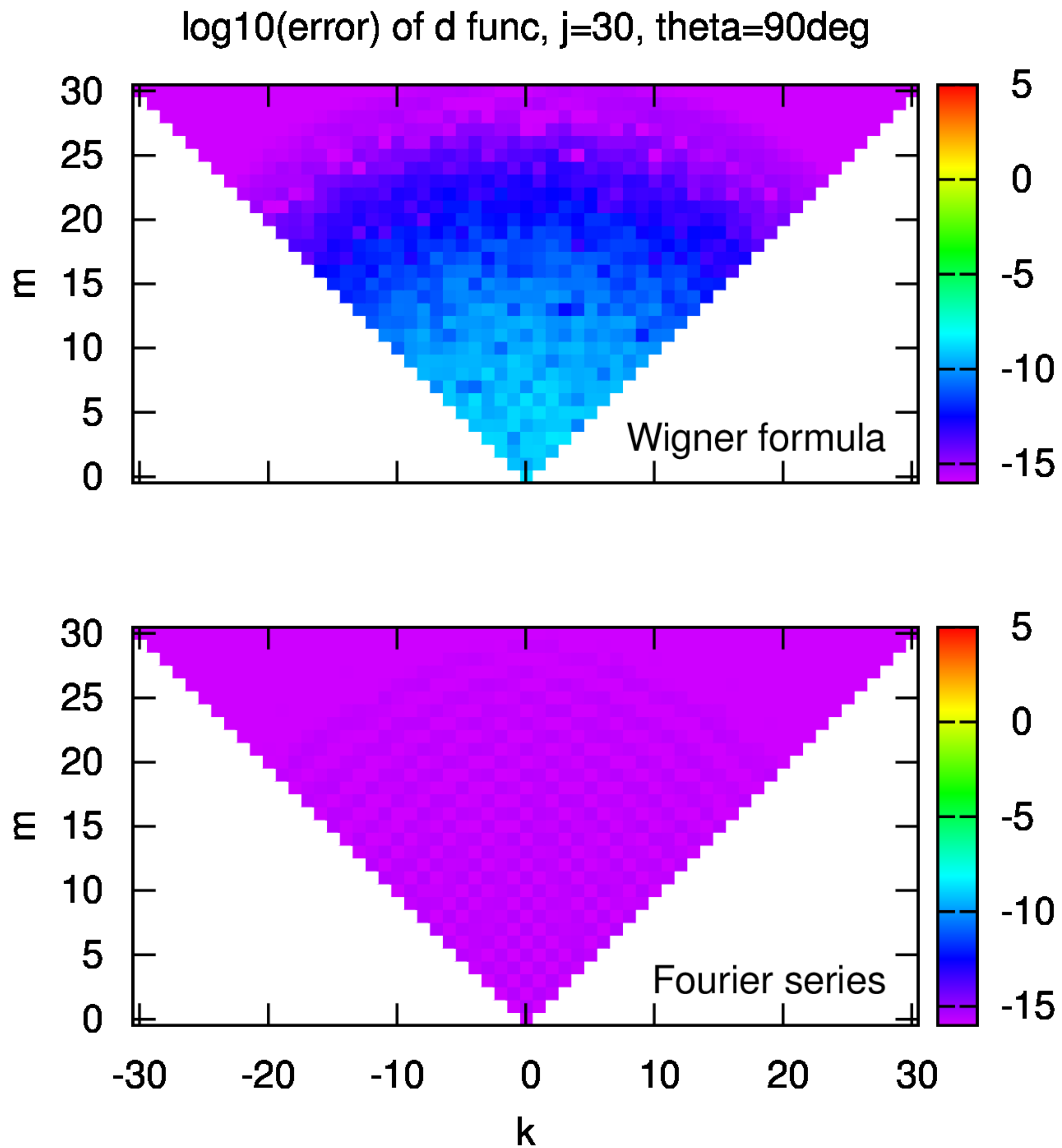

log10(error) of d func, j=40, theta=120deg
m
k
Wigner formula
Fourier series
40
35
30
25
20
15
10
5
0
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
5
0
-5
-10
-15


log10(error) of d func, j=40, theta=150deg
Wigner formula
Fourier series
m
k
40
35
30
25
20
15
10
5
0
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
5
0
-5
-10
-15

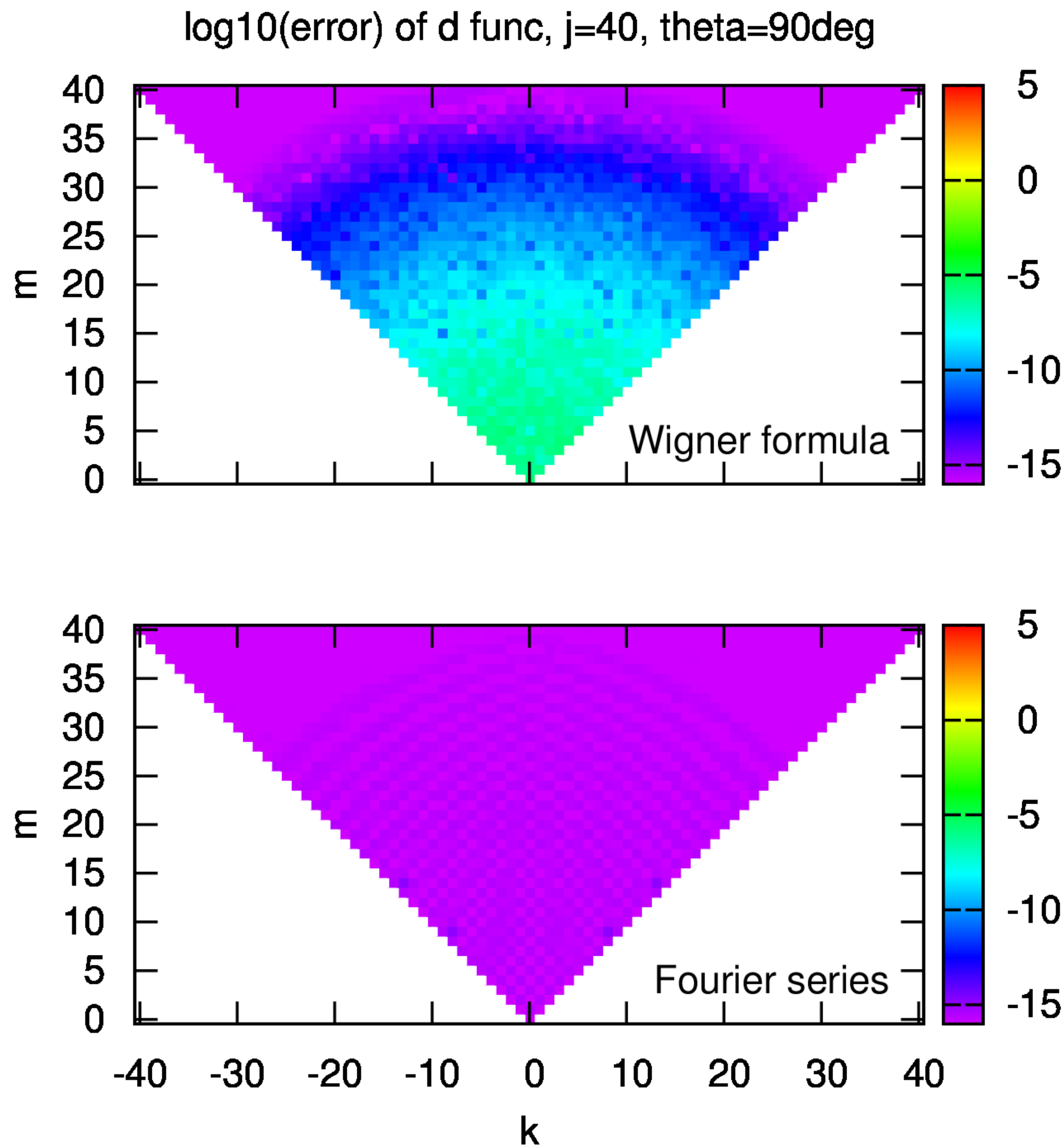

log10(error) of d func, j=10, theta=90deg
Wigner formula
Fourier series
m
k
10
8
6
4
2
0
-10
-5
0
5
10
5
0
-5
-10
-15

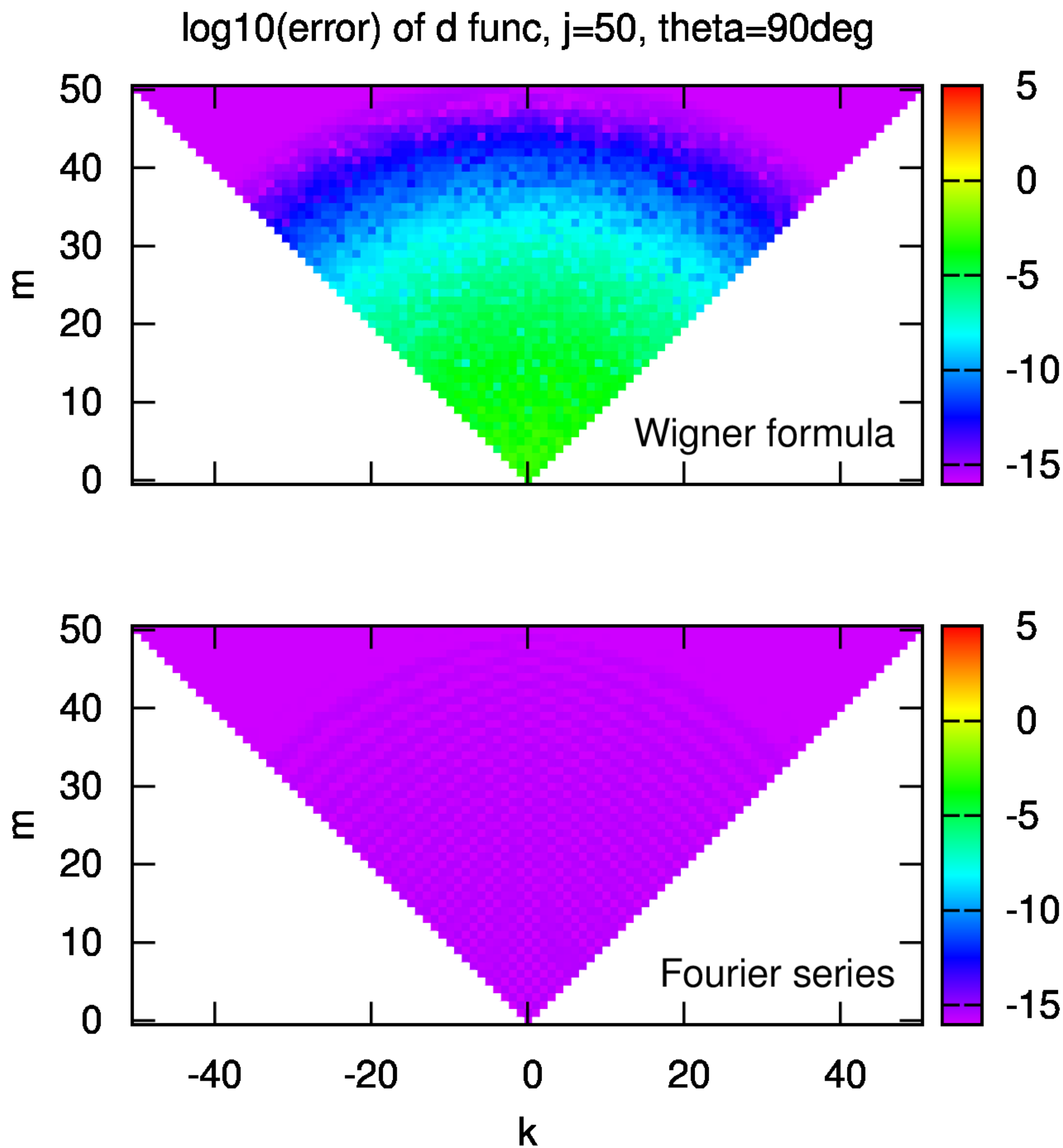


log10(error) of d func, j=20, theta=90deg
Wigner formula
Fourier series
m
k
20
15
10
5
0
-20
-15
-10
-5
0
5
10
15
20
5
0
-5
-10
-15

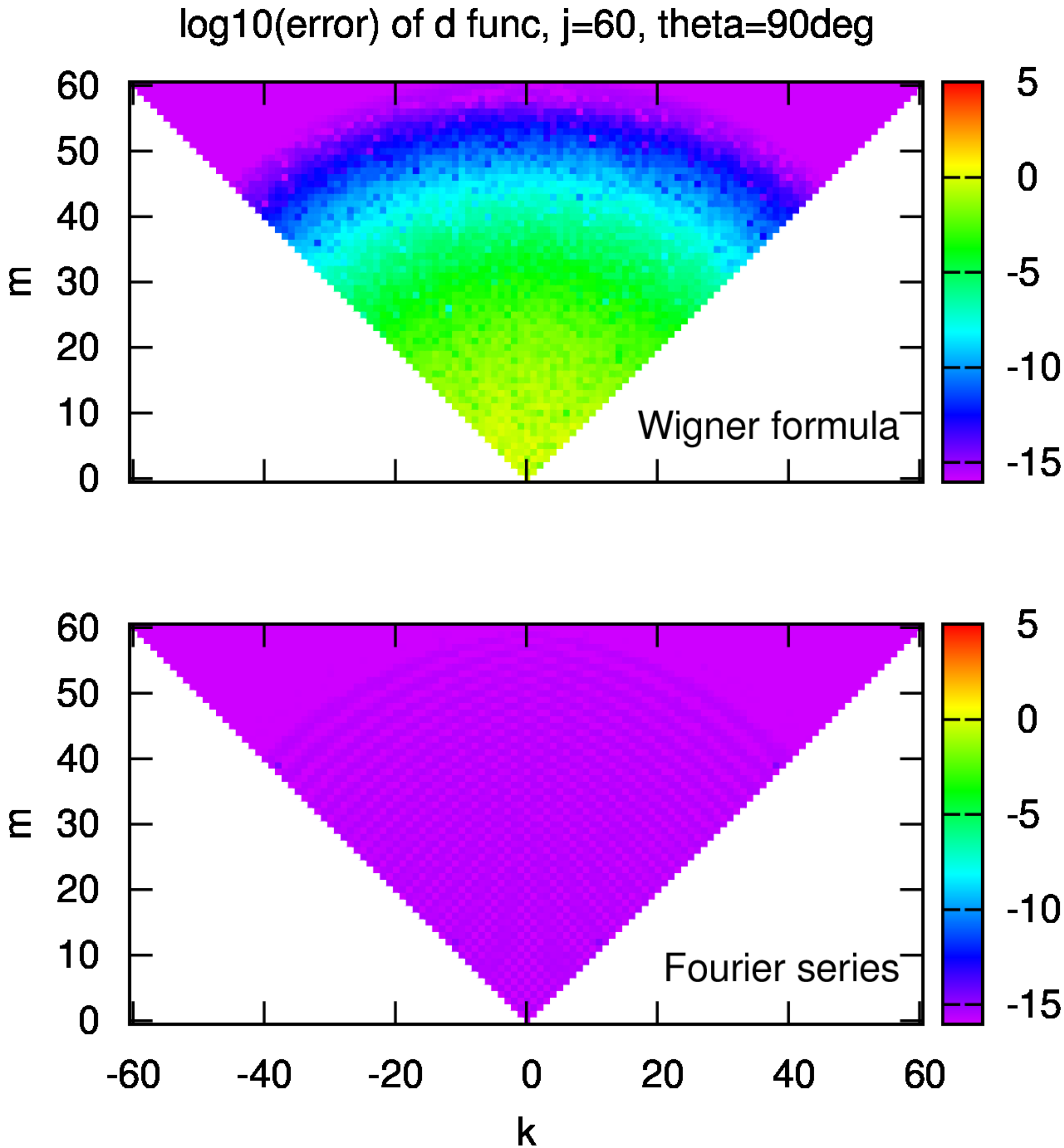


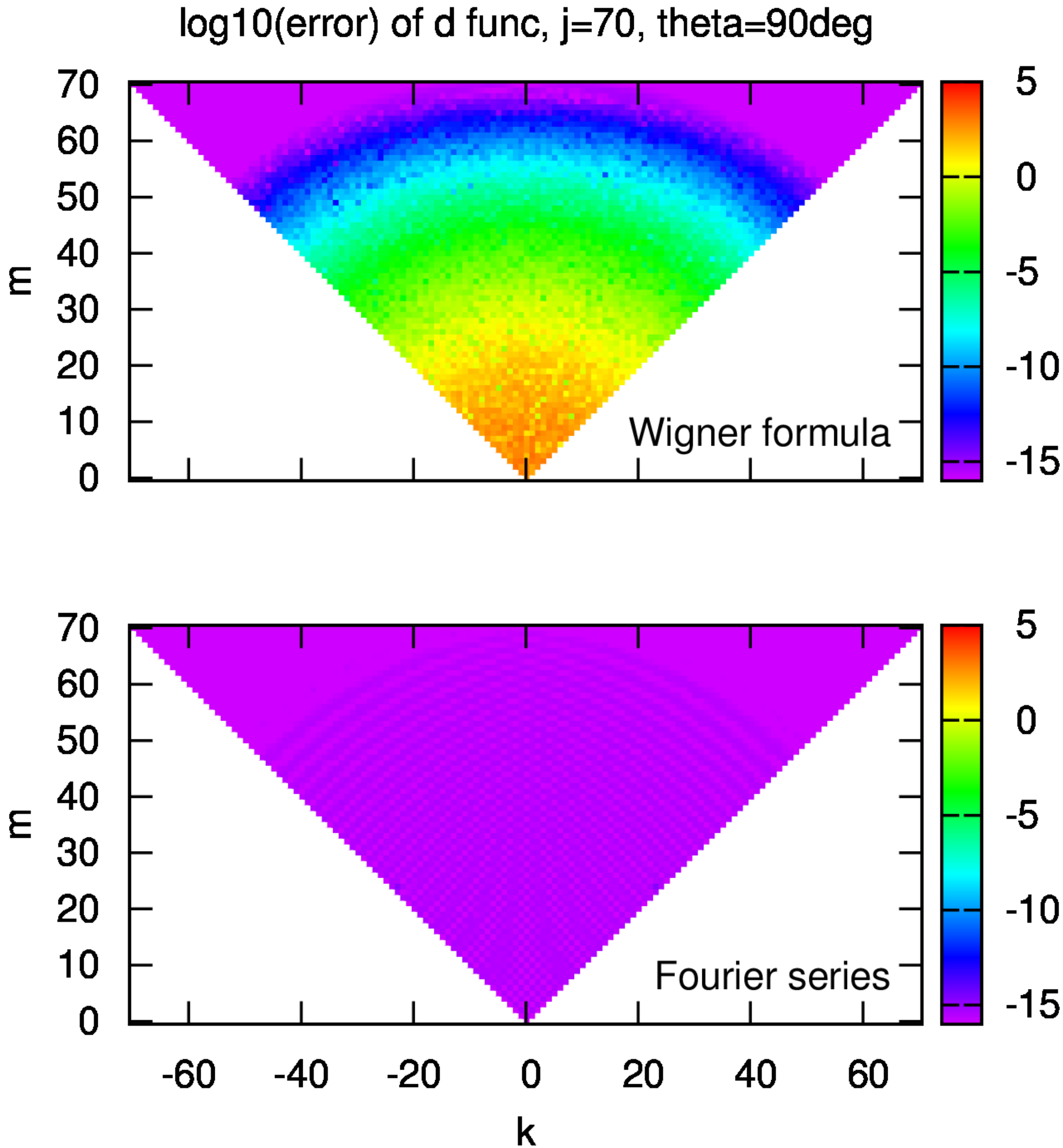
log10(error) of d func, j=30, theta=90deg
m
k
Wigner formula
Fourier series
30
25
20
15
10
5
0
-30
-20
-10
0
10
20
30
5
0
-5
-10
-15

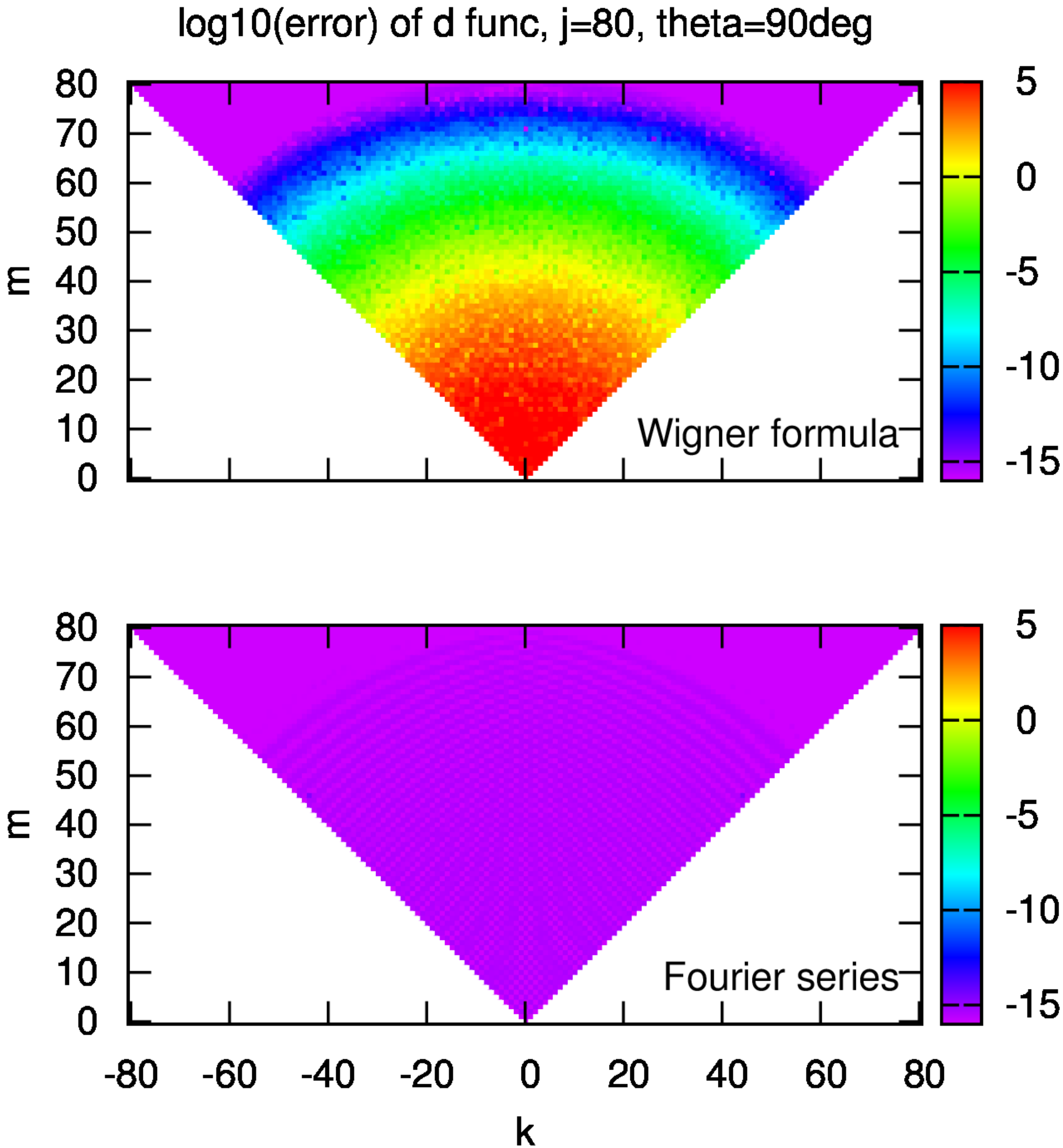

log10(error) of d func, j=40, theta=90deg
Wigner formula
Fourier series
m
k
40
35
30
25
20
15
10
5
0
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
5
0
-5
-10
-15

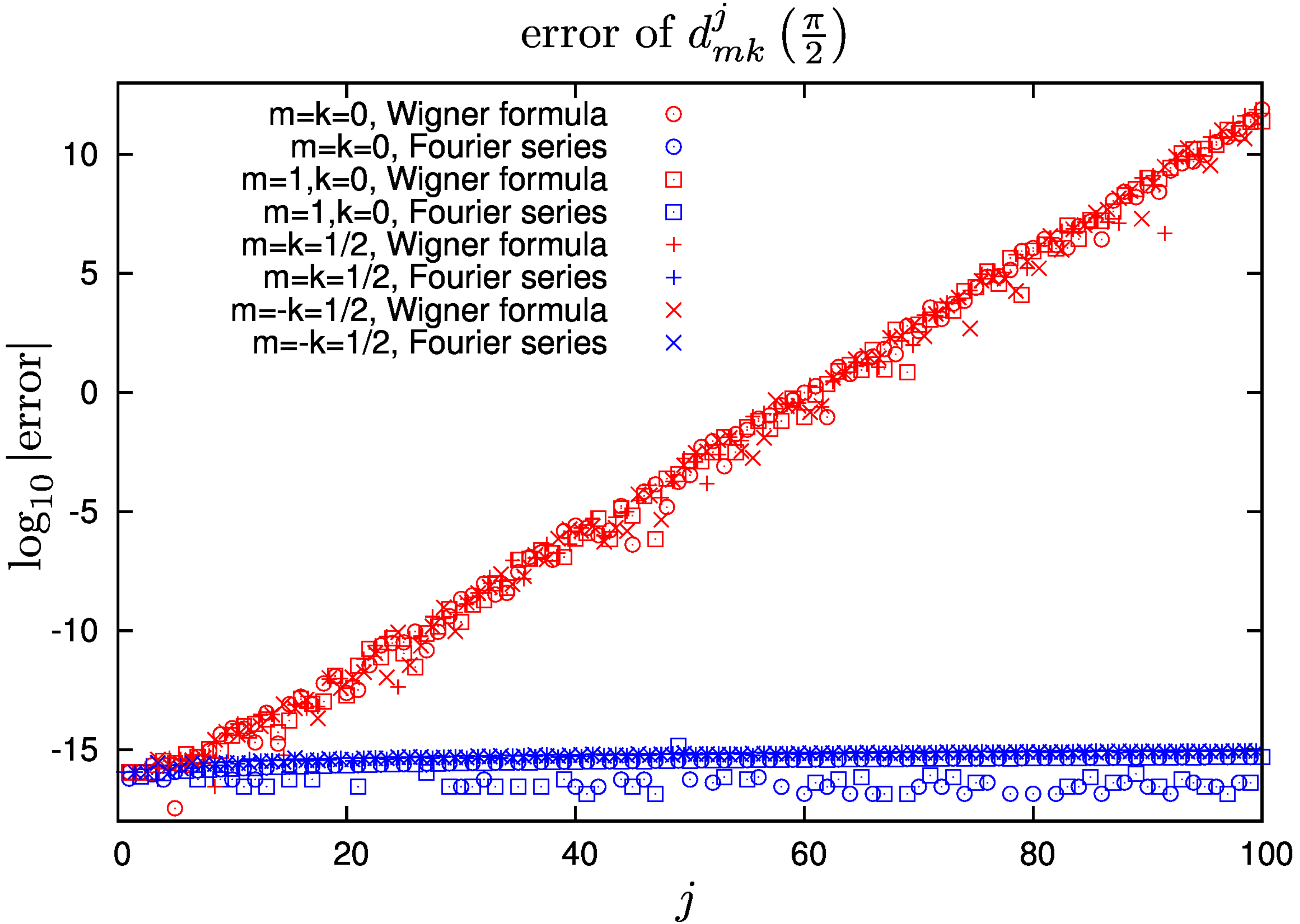


log10(error) of d func, j=50, theta=90deg
50
40
30
20
10
0
m
Wigner formula
5
0
-5
-10
-15
50
40
30
20
10
0
m
Fourier series
5
0
-5
-10
-15
-40
-20
0
20
40
k


log10(error) of d func, j=60, theta=90deg
m
k
Wigner formula
Fourier series
60
50
40
30
20
10
0
-60
-40
-20
0
20
40
60
5
0
-5
-10
-15


log10(error) of d func, j=70, theta=90deg
70
60
50
40
30
20
10
0
m
Wigner formula
5
0
-5
-10
-15
Fourier series
-60
-40
-20
0
20
40
60
k


log10(error) of d func, j=80, theta=90deg
m
80
70
60
50
40
30
20
10
0
Wigner formula
5
0
-5
-10
-15
Fourier series
-80
-60
-40
-20
0
20
40
60
80
k



error of $d^j_{mk}\left(\frac{\pi}{2}\right)$
m=k=0, Wigner formula
m=k=0, Fourier series
m=1,k=0, Wigner formula
m=1,k=0, Fourier series
m=k=1/2, Wigner formula
m=k=1/2, Fourier series
m=-k=1/2, Wigner formula
m=-k=1/2, Fourier series
$\log_{10}|\text{error}|$
10
5
0
-5
-10
-15
0
20
40
60
80
100
j

まとめ

1.回転演算子の角運動量固有状態基底での表現行列（D関数）をWignerの公式で数値的に求めると、角運動量jが大きいとき著しい桁落ちが起きる。
j=1/2ないし1との角運動量合成に関連する漸化式で求める場合も桁落ちに大幅な改善は見られない。

2. D関数をフーリエ（有限）級数で表せば非常に大きなjでも桁落ちはほとんど起きないことを示した。

3.本講演では、フーリエ 展開係数は数式処理で求めてデータファイルに書き出しておき、数値計算プログラムはそれを読み込んで使った。現在、数値計算プログラム内で係数を計算できる桁落ちの小さい公式を考案すべく研究を継続中である。

4. 関数値が非常に小さい場合に限り、Wigner公式のほうが誤差が小くなることがある。あらゆる用途を想定して、最終的には引数によってはWigner公式に切り換えるようプログラムを改良すべきである。