

氏名 齊藤 佑一郎 学籍番号 1413075

題目 漸化式を用いたウィグナーの d 関数の数値計算

要旨 指導教員氏名 森下 亨

目的

波動関数を回転する上でウィグナーの d 関数($d_{mm'}^l(\beta)$, ここで l は角運動量の大きさ, $-l \leq m, m' \leq l$ は二つの量子化軸への射影, β は回転角)の計算が重要である. d 関数は解析解が存在するものの, その具体的な数値の計算には多くの時間が必要である. 本研究の目的は d 関数を高速, 高精度で計算するためのプログラムの実装をすることである.

理論

本研究では文献 [1] で提案された m' についての三項の漸化式 (1) に式 (2) で与えられる初期値を代入して計算する方法を用いた.

$$\frac{-m+m'\cos\beta}{\sin\beta}d_{mm'}^l(\beta) = \frac{1}{2}\sqrt{(l+m')(l-m'+1)}d_{mm'-1}^l(\beta) + \frac{1}{2}\sqrt{(l-m')(l+m'+1)}d_{mm'+1}^l(\beta) \quad (1)$$

$$d_{m,l}^l(\beta) = \sqrt{(2l)!/(l+m)!(l-m)!} \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{l+m} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{l-m} \quad (2)$$

漸化式では m' の値を増加させるか減少させるか選択できるが, $|m'|$ を増加させた場合では $|m'|$ が大きいとき値が指数関数的に増大してしまい計算が不安定になるので, [1]に従って $|m'| = l$ から $|m'|$ を減少させた. l の最大値 l_{max} と β を入力し, $d_{mm'}^l(\beta)$ の $l = 0, 1, 2, \dots, l_{max}$, $|m|, |m'| \leq l$ での数値を 4 倍精度で計算する FORTRAN のプログラムを実装した. また, d 関数の持つ m と m' についての対称性を用いて計算量を減らし, 計算時間の短縮を行なった.

結果

まず, $\beta = \pi/4$, $l = 1000$, $-l \leq m, m' \leq l$ の場合について精度の検証を行なった. 本研究のプログラムによる d 関数の絶対値の計算結果を m と m' の関数として図 1 に示す.

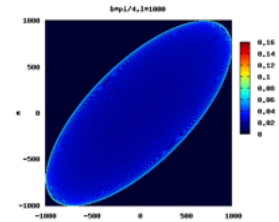


図 1 $\beta = \pi/4, l = 1000$ における d 関数の絶対値

Mathematica の計算結果と本研究のプログラムによる計算結果を比較し, 相対誤差は 10^{-27} 以下であることを確かめた. Mathematica では 1 日程度の計算時間を必要としていたが, 本研究のプログラムを用いた場合数分で計算が完了し, 高速で計算ができることを確かめた. また, $l = 0, \dots, l_{max} = 1000$ についての計算時間は数十分であった.

本研究での 4 倍精度での計算では, 表現できる正の最小値は 3.3621×10^{-4932} であり, これより小さい数を初期値とすることはできない. l, β を固定した場合, 初期値は $m = -l$ のときに絶対値が最小で, $d_{-l,-l}^l(\beta) = (\sin(\beta/2))^{2l}$ となる. よってこの方法では l に対して計算可能な β には下限がある. (表 1)

表 1 l に対して計算可能な β の下限と誤差評価に用いた β

l	1000	100	10
β の下限	6.8×10^{-3}	4.4×10^{-25}	5.3×10^{-247}
誤差評価に用いた β	7.1×10^{-3}	6.3×10^{-25}	2.0×10^{-245}

そこで l に対して β の下限より少し大きな値として, 初期値を 10^{-4900} としたときの β (表 1 下段)を用いて誤差評価を行った. そしてこれらの β について, すべての m, m' についての誤差が 10^{-27} 以下であり, 漸化式の計算が安定して実行できることを確認した. β がさらに小さい場合の計算を行えるようにすることは今後の課題である.

参考文献

[1] G. Prézeau and M. Reinecke. "ALGORITHM FOR THE EVALUATION OF REDUCED WIGNER MATRICES". The Astrophysical Journal Supplement Series, Volume 190, Number 2, pp.267-274 (2010)