令和3年度　卒業研究発表

漸化式を用いたウィグナーのd関数の数値計算

先進理工学科応用物理工学コース
森下研究室
1413075 齊藤佑一郎

$$d^l_{mm'}(\beta)$$

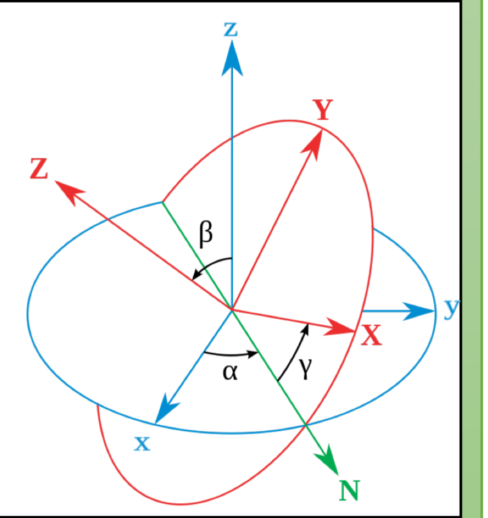
l ：角運動量の大きさ

$-l \le m, m' \le l$ ：二つの量子化軸へのlの射影

β ：回転角(オイラー角)

球面調和関数に回転行列を作用させた
場合以下のようになる

$$RY_{lm}(\boldsymbol{r}) = \sum_{m'} Y_{lm'}(\boldsymbol{r}) e^{-im'\alpha} d^l_{m'm}(\beta) e^{-im\gamma}$$



引用：
https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%AA%E3%82%A4%E3%83%A9%E3%83%BC%E8%A7%92

ウィグナーのd関数

・波動関数を回転する上で重要

・解析解は存在している

・Mathematicaで計算を行うと莫大な時間がかかる

高速、高精度で計算するプログラムを実装したい

lの最大値l_{max}とβを入力し$d^l_{mm'}(\beta)$の
$l = 0,1,2 \cdots l_{max}$，$-l \le m, m' \le l$ 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

三項の漸化式

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

d関数は三項の漸化式から計算することができる.

漸化式を用いる方向によっては結果が不安定に

$|m'|$を減らす方向で漸化式を用いて計算[1]

三項の漸化式の計算には初期値が必要

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

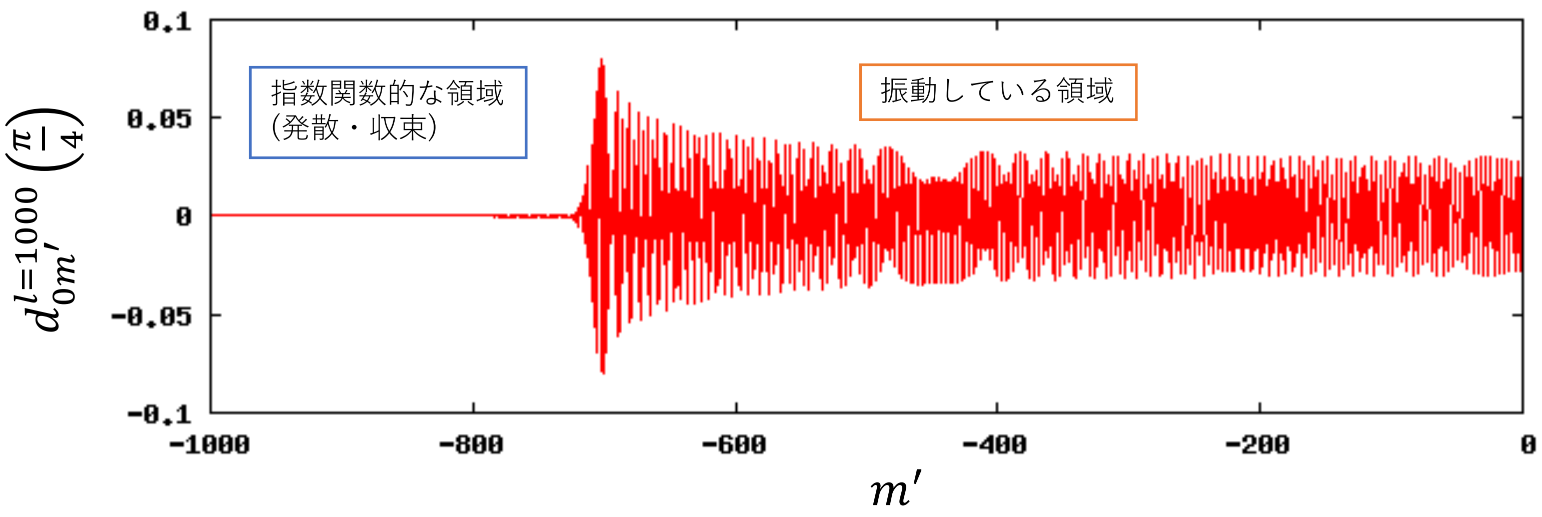
[1]に従って，この初期値を用いて計算を行なった.

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)

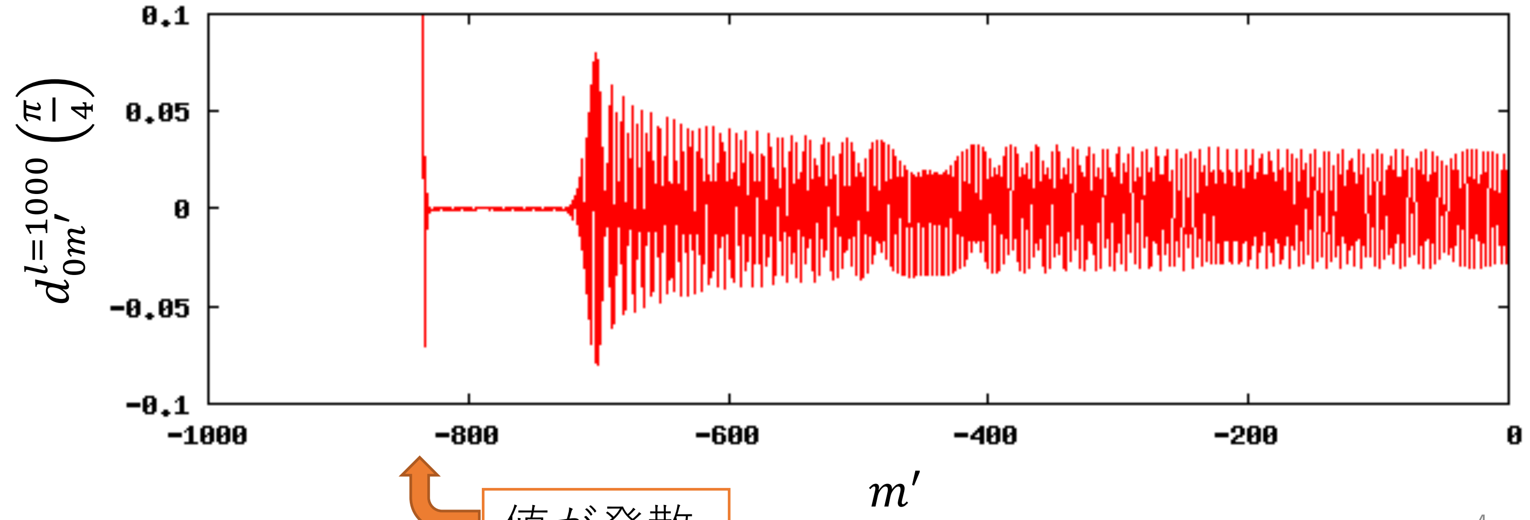
右図のように$d^l_{mm'}(\beta)$には振動している領域と指数関数的な領域が存在する.

計算方向($|m'|$減少)



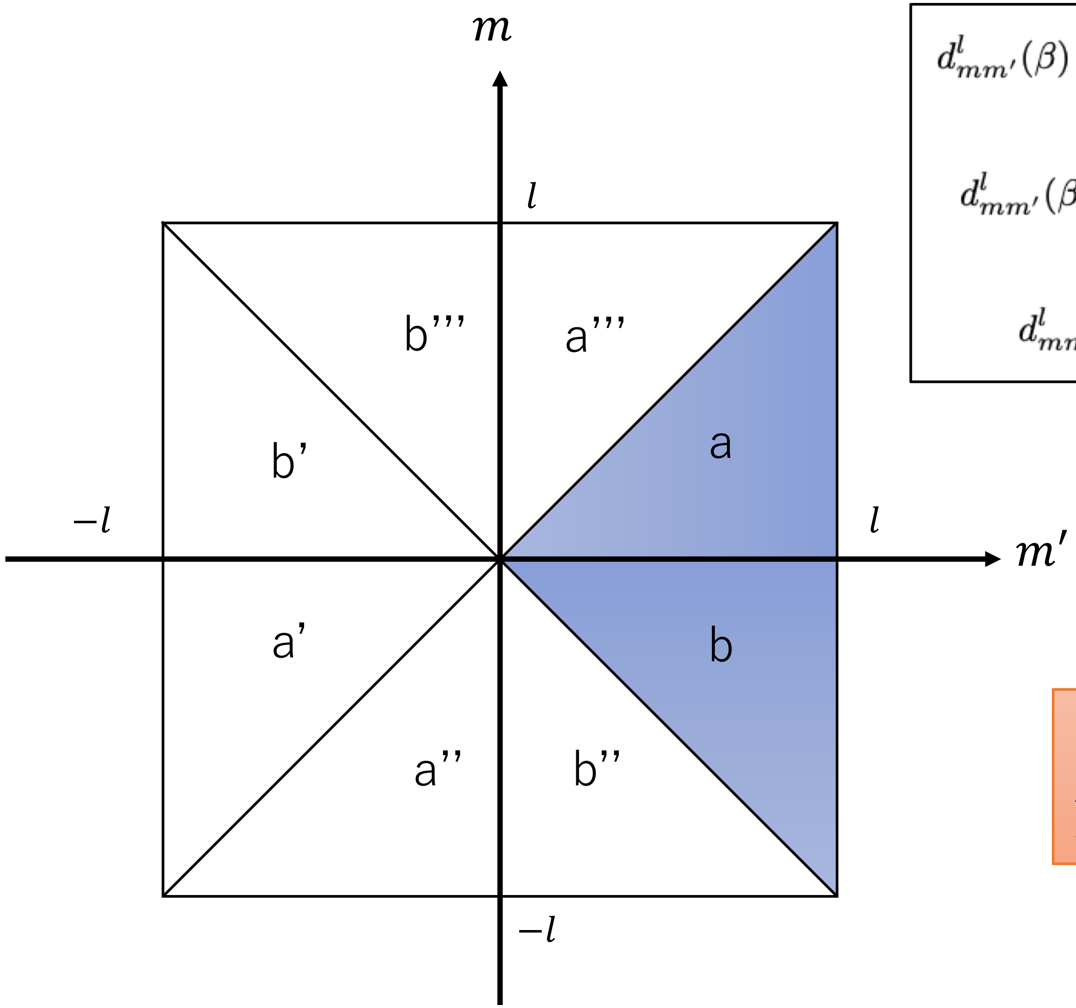
$|m'|$を増やしていった場合，指数関数的な領域に変わる際に漸化式の計算で生じるごく僅かな誤差によって値が増大してしまう恐れがある.

計算方向($|m'|$増加)



値が発散

対称性の利用



$$d^l_{mm'}(\beta) = (-1)^{m-m'} d^l_{-m-m'}(\beta)$$

$$d^l_{mm'}(\beta) = (-1)^{m-m'} d^l_{m'm}(\beta)$$

$$d^l_{mm'}(\beta) = d^l_{-m'-m}(\beta)$$

$$a' = (-1)^{m-m'} a$$

$$a'' = a$$

$$a''' = (-1)^{m-m'} a$$

$$b' = (-1)^{m-m'} b$$

$$b'' = b$$

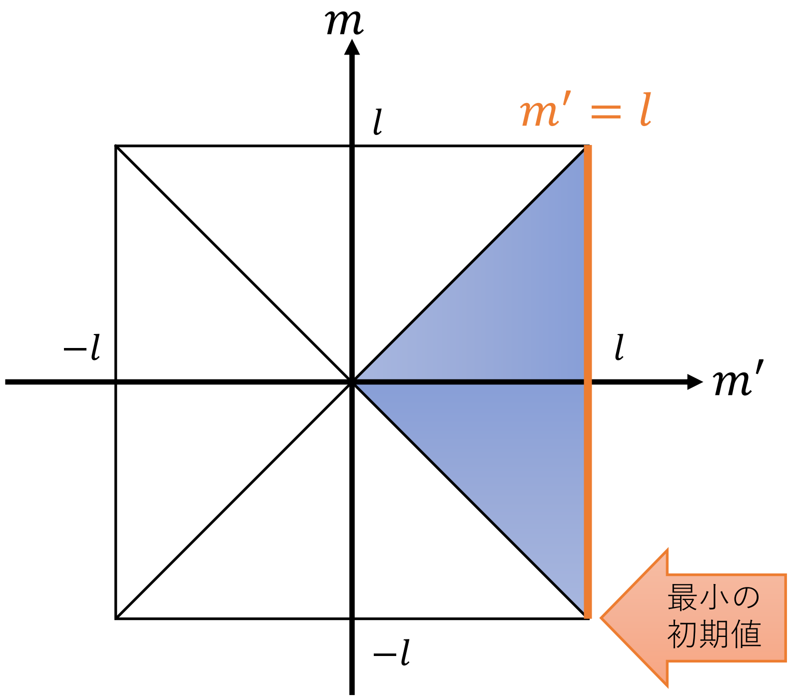
$$b''' = (-1)^{m-m'} b$$

計算範囲を青色で塗られた部分のみに
減らすことで計算時間を短縮を行なった.

計算可能な範囲

4倍精度で表現できる正の最小値は 3.3621×10^{-4932}

初期値： $d^{l}_{m,l}(\beta)=\sqrt{(2l)!/(l+m)!(l-m)!}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{l+m}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{l-m}$



初期値はl,m,βに依存しており，その値が4倍精度で表現不可能な値になると計算が行えない．
($|m'|$を減らす方向で計算するため$m'=l$)
初期値は$m=-l$のとき最小となる．

lを固定した場合，この計算方法では計算可能なβに下限が存在する

l	1000	100	10
β の下限	6.8×10^{-3}	4.4×10^{-25}	5.3×10^{-247}

結果

計算精度

・$l = 1000,\ \beta = \frac{\pi}{4}$の場合，Mathematicaの計算結果との**相対誤差は10^{-27}以下**.

・ βに関して，計算可能な下限値に近い値の(下表)での誤差評価も行なったが**相対誤差は10^{-27}以下**だった.

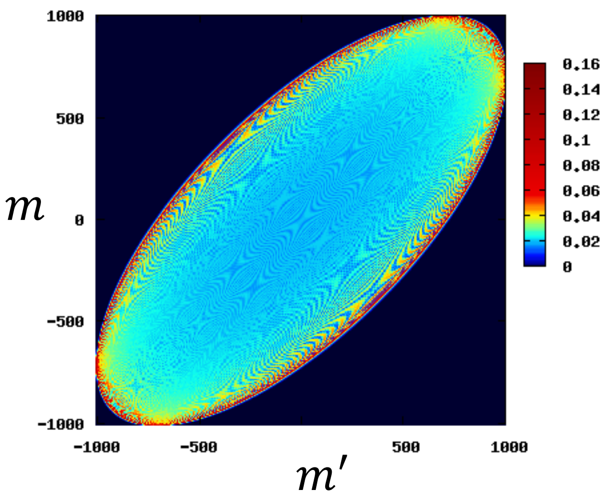
計算時間

・ $l = 1000$ の場合，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では**数分**で計算が完了した.

・$l = 0,1,2 \ldots l_{max} = 1000$の場合，Mathematicaは**数週間**，本研究は**数十分**で計算が完了した.

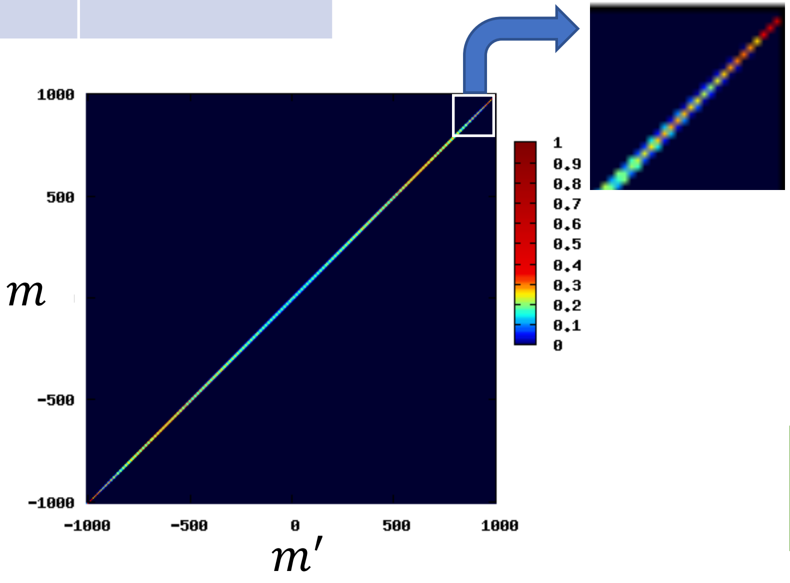
l	1000	100	10
誤差評価に用いたβ	7.1×10^{-3}	6.3×10^{-25}	2.0×10^{-245}

(初期値が10^{-4900}程度になるβ)



$l = 1000$，$\beta = \pi/4$におけるd関数の絶対値

β減少



$l = 1000$，$\beta = 0.01$におけるd関数の絶対値

βが小さい＝回転が少ない

↓

d関数は対角的($m' = m$)に漸近する

↓

対角でない部分は指数関数的になり計算が困難

まとめ

- $|m'|$を減少させる方向で三項の漸化式を用いることで値が発散することなく計算を行うことができた.
- 一定のβまでならば相対誤差10^{-27}以下の精度で計算を行うことのできるプログラムを実装できた.
- βがさらに小さい値においても高速，高精度での計算を行えるようにすることは今後の課題である.