

物理における多重精度計算の一応用例

—カノニカル集団としての原子核—

佐 藤 竝†

原子核の基底および低い励起状態は殻模型で記述されてきた。それに対して、高い励起状態を記述するために導入された、原子核を温度と粒子数で表すカノニカル集団として取り扱う熱力学的模型でも基底および低い励起状態の記述が可能であることを紹介し、この模型の温度ゼロの極限を計算をするときには多重精度数値計算が必須であることを示す。そして、温度ゼロの極限でこの模型が従来の殻模型の基底状態を良く表していることを計算結果で示す。

An Application of Multi-precision Arithmetic in Physics

—Nucleus as a Canonical Ensemble—

HIROSHI SATO†

The nuclear thermodynamical quantities are studied in terms of the temperature dependent antisymmetrized density matrices of many fermions in a harmonic oscillator well. The relationship between this treatment and the conventional shell model is discussed. It is found that the multi-precision arithmetic is essential in the study of nuclear behaviors at low temperature in this model. Performing the multi-precision arithmetic, it is found that this nuclear model nicely reproduces the properties of the ground state of the nuclear shell model at zero temperature limit.

1. はじめに

多重精度数値計算法の研究は高速電子計算機の効率よい使用のため、また、計算機の性能の試験のために精力的に研究されてきた。しかし、実際の多重精度数値計算法の応用は π 等の数学定数の計算や素数判定等の計算を除くとこれといった目立った例がなく、学問的興味に限られているように思われる。特に物理の問題における応用例はほとんど見いだされていない。これらのことは、論文誌のキーワードの中に多重精度数値計算の項目がないという現状と、高速電子計算機の多重精度数値計算の使いやすいサブルーチンパッケージの不備(情報不足も含む)となって現れ、例えば、物理の研究で計算の精度(この場合4倍精度以上の精度を必要とする計算)の障壁にぶつかった物理屋は、まったくはじめから多重精度数値計算の本を頼りに必要な計算プログラムを自分で造らなければならないという現状に直面する。この論文では、その“珍しい”多重精度数値計算を必要とする物理、特に核物

理の分野での応用例を示し、多重精度数値計算が物理の問題で有用であることと、サブルーチンパッケージの充実が望まれることを述べる。

2. カノニカル集団としての原子核

従来、原子核の基底および低い励起状態の研究は原子核をエネルギーと粒子数の良い固有状態として表す殻模型でなされてきた¹⁾。これに対して、高い励起エネルギーの状態の研究では原子核を温度と粒子数(多重度)、または、温度と化学ポテンシャルで表す熱力学的模型が用いられてきた。ここで、原子核の状態のうち核子の振る舞いのみに着目すると、系は量子力学的に混合状態として記述されるので²⁾、上に述べた原子核の模型は熱統計力学的に、低い励起状態はマイクロカノニカル集団、高い励起状態はカノニカル集団、または、グランドカノニカル集団として表されてきたと言える。この三つの集団は熱統計力学的に等価であるが、原子核の低い励起状態から高い励起状態までを統一的に記述するためには、どれか一つのモデル集団を選んで、そのモデル集団の範疇で広範囲の原子核の状態を矛盾なく再現することが可能であることを示す必要がある。ところが、殻模型では粒子数が大きくなっ

† 理化学研究所放射線研究室
Radiation Laboratory, The Institute of Physical
and Chemical Research (RIKEN)

たり、高い励起状態を取り扱うときには膨大な行列の対角化が必要となり現実的でない。また、グランドカノニカル集団では閉殻核構造を表し得ない。そこで、残る可能性として、カノニカル集団を用いた熱力学的模型で低い励起状態から高い励起状態までの原子核現象をどの程度に矛盾なく再現できるのかを、調和振動子ポテンシャルを用いて調べてみることにする。

3次元調和振動子ポテンシャル $h = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}$ 中の温度 $T (=1/\beta)$ での1粒子密度行列は^{2),3)}

$$\begin{aligned} \rho^{u,1}(\bar{x}, \bar{x}'; \beta) &= \langle \bar{x} | e^{-\beta h} | \bar{x}' \rangle \\ &= \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh 2f_\beta} \right)^{3/2} \\ &\quad \cdot \exp \left\{ -\frac{m\omega}{4\hbar} [(\bar{x} + \bar{x}')^2 \tanh f_\beta \right. \\ &\quad \left. + (\bar{x} - \bar{x}')^2 \coth f_\beta] \right\} \end{aligned}$$

と与えられる。ここで $f_\beta = \frac{1}{2} \beta \hbar \omega$ である。この密度行列のトレースと、それを用いて規格化された1粒子密度行列はそれぞれ

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(\rho^{u,1}) = \int d\bar{x} \rho^{u,1}(\bar{x}, \bar{x}; \beta) = F_\beta \\ &= \left(\frac{1}{2 \sinh f_\beta} \right)^3, \\ \rho^1(\bar{x}, \bar{x}'; \beta) &= \frac{1}{Z} \rho^{u,1}(\bar{x}, \bar{x}'; \beta) \end{aligned}$$

と表せる。N粒子系の場合の反対称化された密度行列は次のように表せる。

$$\begin{aligned} \rho^{u,N}(\xi_1 \dots \xi_N, \xi'_1 \dots \xi'_N; \beta) \\ = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \rho_B^N(\xi_1 \dots \xi_N, P\xi'_1 \dots P\xi'_N; \beta). \end{aligned}$$

ここで、 $(-1)^P$ は +1 が偶置換、-1 が奇置換を表す。また、右辺の最後の項は粒子識別可能な密度行列である²⁾。

$$\rho_B^N(\xi_1 \dots \xi_N, \xi'_1 \dots \xi'_N; \beta) = \prod_{i=1}^N \rho^{u,1}(\xi_i, \xi'_i; \beta).$$

ここで ξ は空間とスピン (アイソスピン) 座標を表す。この反対称化された密度行列のトレースは以下のような漸化式により計算できることがわかった⁴⁾。

$$\begin{aligned} Z_N &= \text{Tr}(\rho^{u,N}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (-1)^{n+1} H_{n,\beta} Z_{N-n} \\ &= Z_N \sum_{n=1}^N G^\beta(N, n). \end{aligned}$$

ここで、 $Z_0=1$ 、また、 $G^\beta(N, n) = (-1)^{n+1} H_{n,\beta} Z_{N-n} / NZ_N$ とする。この場合、トレースの1粒子部分は次のように表される。

$$H_{n,\beta} = \text{Tr}(\rho^{u,1}(\xi, \xi'; n\beta)) = N_\sigma F_{n,\beta}.$$

ここで、 N_σ はスピン表示では2、スピン・アイソスピン表示では4である。さらに、N粒子系中の1粒子密度小行列は以下のように表せる。

$$\rho_1^N(\xi_1, \xi'_1; \beta) = \sum_{n=1}^N \rho_1^1(\xi_1, \xi'_1; n\beta) G^\beta(N, n).$$

上の漸化式を用いたトレースの計算法は Feynman の導いた式²⁾より原子核の記述においては見通しがよく、核子数が多くなったときの計算が楽になる。

トレースの計算ができると、それを用いて以下のような種々の熱力学的量が計算できる。

ヘルムホルツの自由エネルギー：

$$F_N = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_N).$$

内部エネルギー：

$$U_N = \frac{d}{d\beta} (\beta F_N) = N \sum_{n=1}^N \frac{3}{2} \hbar \omega \coth(n f_\beta) G^\beta(N, n).$$

エントロピー：

$$S_N = \beta^2 \frac{d}{d\beta} F_N = \beta(U_N - F_N).$$

熱容量：

$$C_N = \frac{d}{dT} U_N = -\beta^2 \frac{d}{d\beta} U_N.$$

3. トレースの特徴

統計力学では密度行列のトレースが計算できれば原理的にはすべての物理量が計算できる。そこでトレースの特徴を調べてみる。

まず、高温の極限ではトレースは非常に簡単になり

$$Z_N \propto \frac{1}{N} H_\beta Z_{N-1} = \frac{1}{N!} (H_\beta)^N$$

と表せる。そして、そのトレースを用いて中高エネルギー原子核衝突実験で見いだされた現象を解析し、全般的にかなりうまく説明できることがわかった⁵⁾。

一方、高温の極限以外でトレースを求めるためには、上の漸化式を真面目に解かなくてはならないが、我々の興味があるのは、この模型が低温の極限で原子核の基底および低い励起状態を如何に表すかである。したがって、以下の議論では低温領域に話を限ることとする。低温の極限では、我々の見ている系が熱浴 (熱源) とは相互作用しない孤立系のように振る舞い、調和振動子ポテンシャルで解かれた殻模型 (HOSM) の基底状態と同じものになるはずである。このことを調べるためにスピン表示を用いて温度ゼロの極限での内部エネルギー U_N とエントロピー S_N の関数 \exp

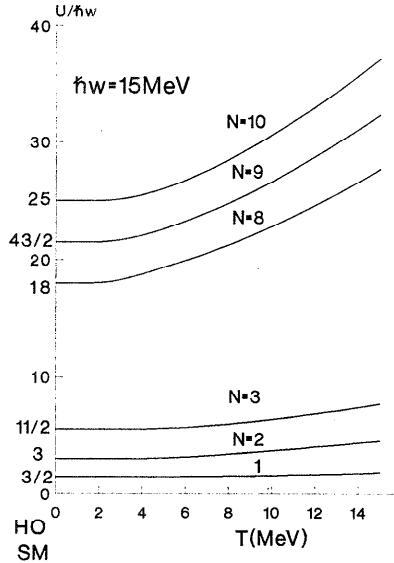


図 1 a $\hbar\omega=15\text{ MeV}$ で規格化された、内部エネルギーの温度依存性と HOSM での全エネルギーとの比較
 Fig. 1 a The temperature dependence of the internal energy for N particle systems having a HO constant $\hbar\omega=15\text{ MeV}$ and the total energy of the HO shell model. The energies are normalized by the $\hbar\omega$.

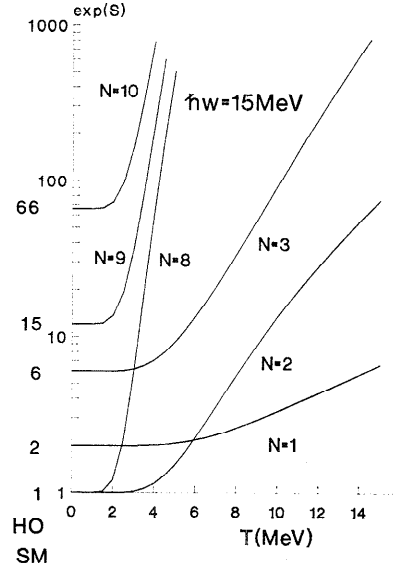


図 1 b $\exp(S_N)$ の温度依存性と HOSM での縮退度との比較, $\hbar\omega=15\text{ MeV}$ を用いた
 Fig. 1 b The temperature dependence of the exponential of the entropy for N particle systems having a HO constant $\hbar\omega=15\text{ MeV}$ and the number of available states of the HO shell model.

$\langle S_N \rangle$ を計算して図 1 a, b を得た。この図から、低温の極限では、全エネルギーに相当する U_N および基底状態の縮退度に対応する $\exp(S_N)$ は調和振動子殻模型の単粒子占有順 (1s, 1p, 2s1d...) によって期待されるものと一致することがわかる。ここで注目すべき点は、通常の電子計算機の組み込み関数 (4 倍精度までの) を用いた計算をする限り、温度 T が 1 MeV 以下の計算では $N=6$ までが限度で、それ以上の粒子数になると正しい結果が得られないことである。これは、低温領域では、上記の漸化式の計算が桁落ちの非常に激しいものになっていることによる。このことは N が魔法数の所で考えると以下のようにわかりやすく理解できる。

調和振動子殻模型では、 N 粒子系の基底状態の全エネルギーに相当する U_N は魔法数の所で近似的に $1.08 N^{4/3} \hbar\omega$ で与えられる。この場合、トレースは近似的に $\exp(-U_N \beta)$ と表せるので、例えば $T=1\text{ MeV}$ で $\hbar\omega=15\text{ MeV}$ の場合は、トレースは $\exp(-16 N^{4/3})$ となる。このトレースは $N=1$ のトレース $\exp(-22.5)$ から漸化式によって得られるので、 $N=1$ のトレースの計算においてすでに $\exp(-16 N^{4/3})$ と同じ桁数分を用意しておかなければならないことになる。ところ

が、実際に我々が最も興味のあるのは、この模型が、原子核の基底および低い励起状態を表すものとして、温度を変数として核分裂現象をどこまで説明できるかという核物理の問題である。したがって、どうしても $T=0.25\text{ MeV}$ で $N=150$ くらいまでの計算が必要になる。その場合、トレースの計算には常に上で述べたような桁落ちの問題が絡んでくる。そのために種々の解析的方法や大きな桁落ちを避ける可能性を試したが、温度を変数とするトレースの振る舞いを調べるためには大型電子計算機による多重精度数値計算以外のどのような試みも現実的ではなかった。(例えば、REDUCE を用いて数式処理を試したところ $N=10$ くらいでメモリーがパンクしてしまう。) すなわち、この模型では有効数字千桁の高速数値演算プログラムが必須となっている。

4. 多重精度数値計算

上で述べた漸化式を用いてトレースを計算するためには、高速の多重精度の四則演算と多重精度の \exp 関数の値を求めるプログラムが必要となるので、Knuth のテキストに従って四則演算のプログラムを造り⁶⁾、テイラー展開で \exp 関数の値を求めることにした。実

表 1 和 $X=X+Y$ に関する算法の例
Table 1 Examples of codes for the summation $X=X+Y$.

Case 1
<pre> I1=0 DO 100 NY=NYDMIN, NYDMAX I2=IX(NY)+IY(NY)-I1 I1=-ISHFT((IMAX-I2-1), -31) IX(NY)=I2-IAND(I1, IMAX) 100 CONTINUE </pre>
Case 2
<pre> A1=0. D0 DO 100 NY=NYDMIN, NYDMAX A2=AX(NY)+AY(NY)+A1 A1=0. 5D0+SIGN(0. 5D0, A2-AMAX) AX(NY)=A2-AMAX*A1 100 CONTINUE </pre>

IMAX と AMAX は 10^8 に取り、固定小数点法を用いた。端の処理の部分は除いている。Y (IY および AY) の配列のうち NYDMIN から NYDMAX の部分以外はすべてゼロであるとする。IAND と SIGN は組み込み関数である。

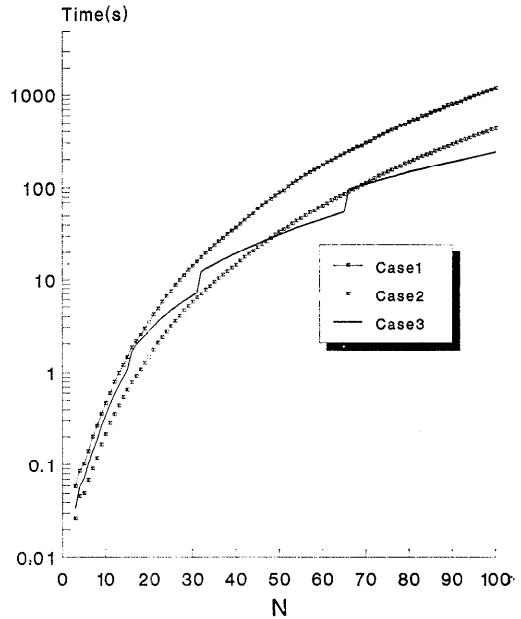


図 2 数値計算時間の粒子数依存性, Case 1, 2, 3 の説明は本文参照

Fig. 2 The particle number dependence of the calculational time in second. The cases 1, 2, and 3 are described in the text.

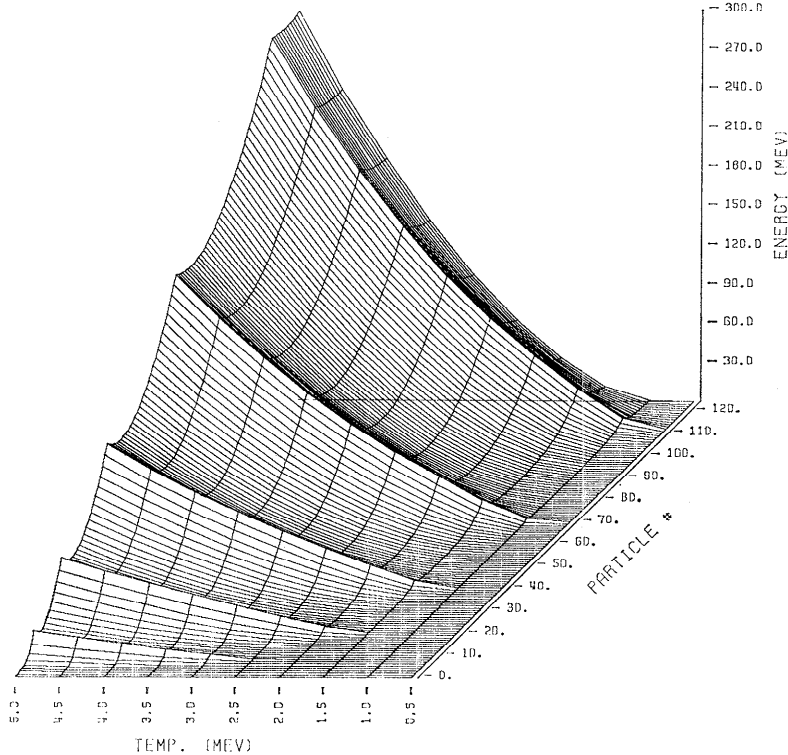


図 3 励起エネルギー $(U_N(T) - U_N(0))$ の粒子数と温度依存性, $\hbar\omega = 41(2N)^{-1/3}$ MeV と置いた (以下図 4, 5 でも同様の $\hbar\omega$ をとる)

Fig. 3 The particle number and temperature dependence of the excitation energy $E(U_N(T) - U_N(0))$ having a HO constant $\hbar\omega = 41(2N)^{-1/3}$ MeV.

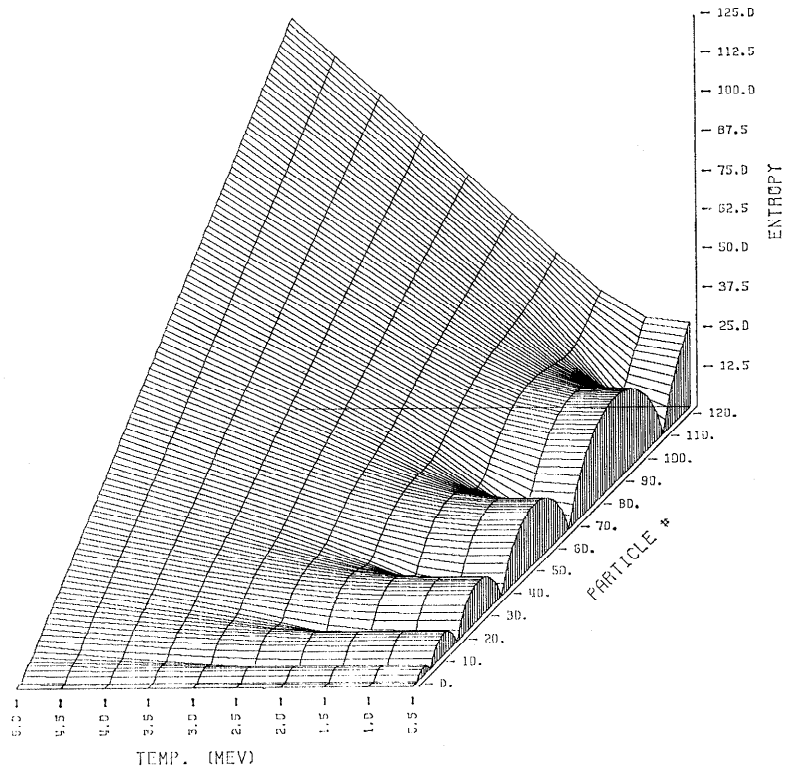


図4 エントロピーの粒子数と温度依存性

Fig. 4 The particle number and temperature dependence of the entropy having a HO constant $\hbar\omega = 41(2N)^{-1/3}$ MeV.

際のトレースは、 $Z_N = \frac{(H_\beta)^N}{N!} z_N$ とおき、 z_N についての漸化式を計算して求めた。また、有効数字の最大桁は $1.5 \log_{10}(e) N_T f_\beta + 30$ とおいて計算した。ここで、 N_T は調和振動子殻模型の全エネルギーを $N_T \hbar\omega$ として決めるものとする。

まず、整数型の変数を用いた 10^8 進法による多重精度計算から始めた (Case 1)。この場合加減算は整数型で、乗除算は整数型と実数型の混合した方法を用いた。しかし、大型電子計算機の FORTRAN の浮動小数点計算の最適化を考慮すると、すべて実数型の変数を用いた 10^8 乗進法による計算のほうが速いことに気付き変更した (Case 2)。また、変数のゼロ置きにかかる無駄な時間は無視できないほど大きいので、Case 1 では、配列のある整数型変数を一つの文字型変数で呼び、その文字型変数をゼロ置きし、配列のある整数型変数に戻すというサブルーチンでゼロ置きを行った*。しかし、Case 2 に変更するとき演算のサブルーチンを工夫することによりゼロ置きの部分を可能

な限り減らした。表 1 に、端の処理を除く和 $X = X + Y$ に関する算法の例を示した。次に、高速フーリエ変換 (FFT) を用いた計算と比較するために、最近平山弘氏が開発された FFT を用いた多重精度数値計算のプログラム MPPACK⁷⁾ の掛け算の部分を用いて比較計算した (Case 3)。この場合 10^6 乗進法の実数型変数で計算することになる。FFT を用いない場合と用いた場合の各 N に対してかかる計算時間を理研の FACOM M380 を用いて比較したものを図 2 に示す。ここで FFT の計算で $N=16, 32, 66$ の所に見られる Jump は、FFT の計算が最大桁数を 2 進法に従って取るために起こる Jump である。この図からわかるように大きな N に対して FFT を用いたもののほうが速くなる。そのため、現在は、FFT を必要に応じて用いるプログラムにして計算を行っている。

* このことを教えてくださった千葉庫三氏に感謝いたします。

5. 計算結果

$N=125$ までの内部エネルギーとエントロピーの粒子数および温度依存性を鳥瞰図として図3, 4にまとめた. 温度ゼロの極限では調和振動子殻模型で得られる魔法数の分布と基底状態の全エネルギーとその縮退度に完全に一致していることがわかった. このように, このカノニカル集団は低温の極限で殻模型に一致する. また, このエントロピーの計算を用いて原子核の単位密度を調べると実験の傾向を再現することがわかった⁴⁾. そして, 1粒子当たりの熱容量の温度・質量数依存性を調べるにより, 有名なフェルミ分布を用いるグランドカノニカル集団がどこまで使えるのかという議論ができることがわかった. これらの計算で最も時間がかかるのは当然のように乗算と除算であるが, 64または128ビットの整数処理が可能になれば, 基本となる進数を大きく取ることができる分計算が速くなる. また, FFTを用いた計算でも基本に取る進数を大きく取ることができるようになり計算がずっと速くなるのが期待されるので, 64さらには128ビッ

ト処理マシンの登場が待たれる.

次に, この模型を拡張して変形核の場合を調べてみた⁹⁾. 今, 核子が回転楕円型対称性を持った調和振動子ポテンシャル

$$h = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}(\omega_3^2 z^2 + \omega_1^2(x^2 + y^2)),$$

$$\omega_{\perp} = \omega_0 \eta^{1/3}, \quad \omega_3 = \omega_0 \eta^{-2/3} \quad \text{and} \quad \eta = \frac{3+\delta}{3-2\delta},$$

の中を動きまわっていると仮定する. ここで ω_0 は球形の場合の調和振動子パラメタである. この場合, 規格化されていない1粒子密度行列のトレースは

$$Z = \frac{1}{2 \sinh f_{3\beta}} \left(\frac{1}{2 \sinh f_{\perp\beta}} \right);$$

$$f_{3\beta} = \frac{\beta \hbar \omega_3}{2} \quad \text{and} \quad f_{\perp\beta} = \frac{\beta \hbar \omega_{\perp}}{2},$$

で与えられる. 規格化されていない1粒子密度行列のトレース以外の取扱いは第2章で述べたものと同じになる. この1粒子密度行列のトレースの式を用いて, 温度 $T=0.25$ MeV の場合のエントロピーの粒子数および変形度依存性を計算して, 鳥瞰したものが図5である.

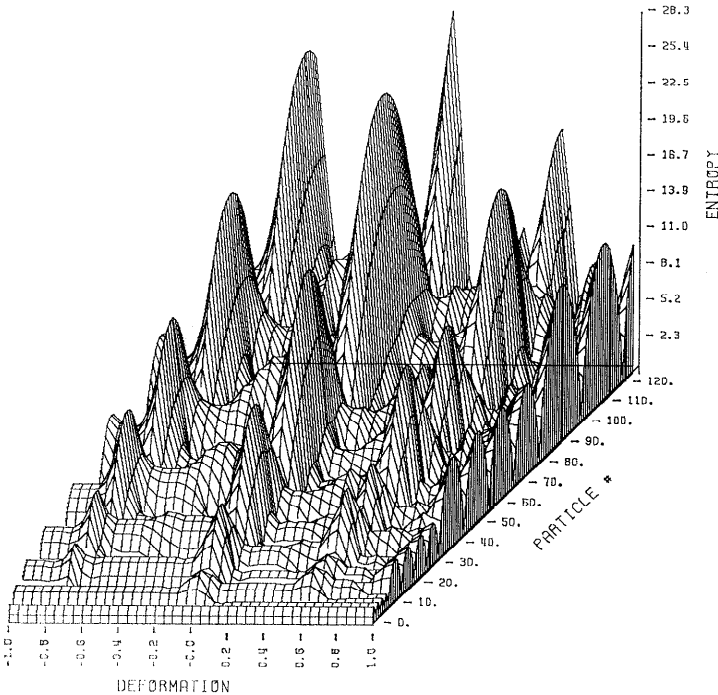


図5 温度 $T=0.25$ MeV におけるエントロピーの粒子数と変形パラメータ δ 依存性
 Fig. 5 The particle number and deformation parameter δ dependence of the entropy at $T=0.25$ MeV having a HO constant $\hbar\omega = 41(2N)^{-1/3}$ MeV.

この図は, 核分裂の研究でよく引用されるストラチンスキーダイヤグラム⁹⁾をスピンや軌道角運動量依存性と残留2体相互作用を除いた場合に対応する. ここで注目すべき点は: ストラチンスキーの取扱いは, 原子核の液滴模型に殻効果を取り入れることに基づくが, 我々の模型の場合は, そのような作意的なことをしなくてもエネルギーや単位密度に殻効果が自動的に入ってくることになる. したがって, スピンと軌道角運動量依存性を入れたニルソンポテンシャルと残留相互作用を考慮した計算に拡張すれば, この模型でストラチンスキーダイヤグラムの一般化が可能になる. ただ問題なのは, 例えば図5において, $N=125$ の近傍の核で変形を -1 から $+1$ まで 0.1 おきに計算する場合, 東大原子核研究所の FACOM M 780 で一昼夜かけても終わらないくらい計算時間がかかることである. したがって, 一般化のためにはもっと速い多

重精度数値演算のプログラム開発が必要である。

6. おわりに

原子核を温度と粒子数で表すカノニカル集団として取り扱う熱力学的模型は、原子核の高い励起状態の現象を説明するために導入された。一方、この模型を従来の殻模型で議論されてきた低温領域に延長する場合には、正しい反対称化と、多重精度数値計算が必須となる。そして、多重精度数値計算を遂行すると、温度ゼロの極限でこの模型が従来の殻模型の基底状態と一致することがわかった。このように、原子核をカノニカル集団として取り扱う熱力学的模型は原子核の基底および低い励起状態から高い励起状態までの広範囲の現象を矛盾なく表すことが可能である。その意味からこのモデル集団は従来の殻模型よりも進んだものであるといえる。現在、核分裂をこのモデル集団で研究するために、3次元調和振動子ポテンシャルの代わりに、ニルソンポテンシャルと残留相互作用を考慮に入れた模型での計算に拡張中である。また、逆ラプラス変換によって殻模型との直接比較をするために、複素数の多重精度数値演算のプログラムを開発して、どのような積分の方法が最も良いかを研究中である。

最後に、核物理の研究においては、大規模な行列の対角化、漸化式、積分、微分方程式の解法等を数値計算で求める問題が多いが、その時よく計算精度の問題（4倍精度以上の精度を必要とする計算）にぶつかる。通常は、多重精度数値演算のプログラムを造るのが大変なので、高速電子計算機の組み込み関数の精度の範囲で如何にうまく近似するか、あるいはあきらめるか等の方法で逃げるしかない。しかし、汎用性があり簡単に使える速いコンパクトな多重精度値計算のサブルーチン・パッケージがあれば、数値計算に悩んだり、時間を浪費することなく研究を進めることができる。そのような多重精度数値計算のサブルーチン・パッケージの完備を切に願うものである*。

謝辞 この計算は東大核研の FACOM M 780 および、理研の FACOM M 380 を用いて行った。計算の際に有益な助言をしていただいた故五十嵐正道氏、高

橋良雄氏、佐々木建昭氏、ならびに FFT を用いた多重精度数値計算プログラム MPPACK の使用を許可しお送り載いた平山弘氏に心から感謝いたします。また、理研放射線研究室の石原正泰主任研究員の励ましに感謝します。

参考文献

- 1) Bohr, A. and Mottelson, B.: *Nuclear Structure*, Vol. 1, Benjamin, New York (1969).
- 2) Feynman, R. P.: *Statistical Mechanics: A Set of Lectures*, Benjamin, Reading, Mass. (1972).
- 3) 久保亮五 (編): 大学演習熱学・統計力学, 裳華房 (1961).
- 4) Sato, H.: Nucleus as a Canonical Ensemble: Entropy and Level Density at Low Temperature, *Phys. Rev.*, C 36, p. 785 (1987).
- 5) Sato, H.: Nucleus as a Canonical Ensemble: d/p Ratio and Entropy at High Temperature, *Phys. Rev.*, C 36, p. 794 (1987).
- 6) Knuth, D. E. (中川圭介 (訳)): 準数値算法/算術演算サイエンス社, 東京 (1981).
- 7) 平山 弘: 多倍長浮動小数点演算プログラムの開発, 神奈川工科大学研究報告 B 理工編第 13 号, pp. 1-6 (1989), ならびに, 平山 弘: FORTRAN のための精度拡張サブルーチン, 情報処理学会研究報告, 数値解析, 32-2 (1990).
- 8) Sato, H.: *Proceedings of the Symposium on Group Theory and Special Symmetries in Nuclear Physics*, Univ. of Michigan, Sep., pp. 19-21, 1991, World Scientific (1992).
- 9) Bohr, A. and Mottelson, B.: *Nuclear Structure*, Vol. 2, Benjamin, Reading, Mass. (1975).

(平成 4 年 4 月 1 日受付)

(平成 4 年 12 月 10 日採録)

佐藤 竝 (正会員)



昭和 20 年生。昭和 42 年大阪大学理学部物理学卒業。昭和 44 年同大学大学院理学研究科修士課程修了。昭和 50 年ラトガース大学で Ph. D (物理学) 取得。ミシガン大学、ラトガース大学、ブルックリン・ニューヨーク市立大学、東京大学原子核研究所等の研究員を経て、平成元年より理化学研究所放射線研究室の研究嘱託。成蹊大学工学部・法政大学経営学部の非常勤講師。原子核理論の立場から、電子計算機を用いて、原子核という名のつく幅広い分野の研究に従事。日本物理学会会員。

* 多重精度数値計算のパッケージとして、Brent の MP (Brent, R. P., *ACM TOMS*, Vol. 4, No. 1, pp. 57-70 (Mar. 1978)), と Smith の FM (Smith, D. M., *ACM TOMS*, Vol. 17, No. 2, pp. 273-283 (June 1991)), ならびに REDUCE の BigFloat 等があり、これらのパッケージおよび平山弘氏の MPPACK によりこの議論の一部は満たされるが、核分裂への応用にはまだ十分でない。レフェリー氏のご指摘に感謝します。