Precise and Fast Computation of Generalized Fermi-Dirac Integrals of Order -1/2, 1/2, 3/2, and 5/2

or

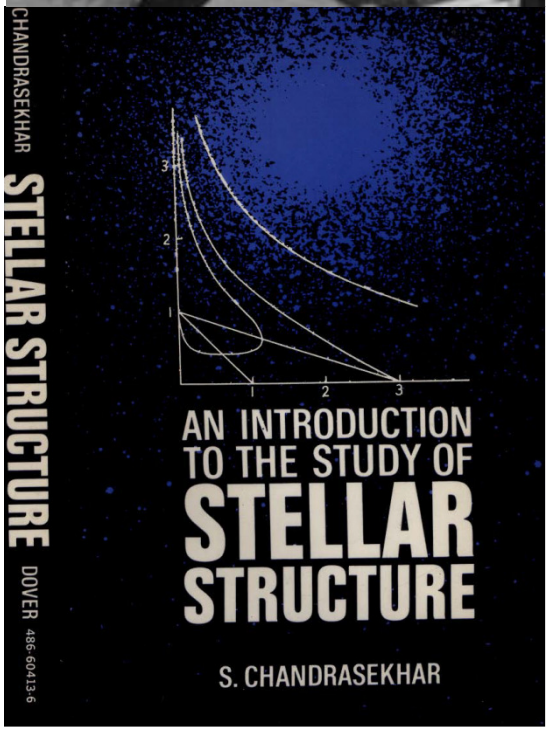
門前の小僧、習わぬ経を読む事

福島登志夫
（国立天文台）

ResearchGate Fukushima 検索

チャンドラセカール (1910-1995)

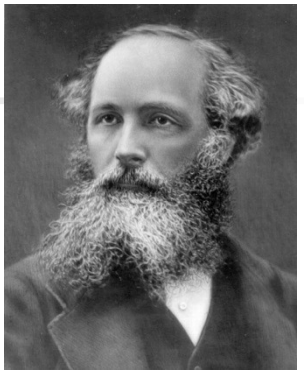
- ノーベル物理学賞 (1983)
- 白色矮星の質量限界
- Study of Stellar Structure (1939)　当時29歳
  - 古今の名著、丁寧な論理展開
- 院生の時に読んだ記憶が…



統計力学の三大分布関数

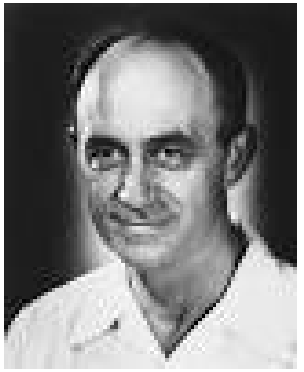
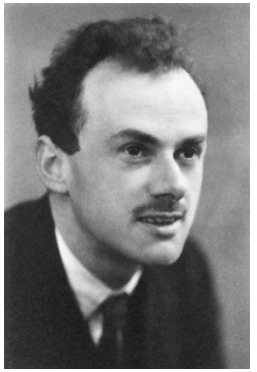
- マックスウェル・ボルツマン

$$p_{MB}(y) = \exp(-y)$$



- フェルミ・ディラック

$$p_{FD}(y) = \frac{1}{\exp(y)+1}$$

- ボーズ・アインシュタイン

$$p_{BE}(y) = \frac{1}{\exp(y)-1}$$

フェルミ粒子 状態方程式

$$\eta \equiv \frac{\mu}{k_B T}, \beta \equiv \frac{k_B T}{mc^2}$$

- 数密度、圧力、エネルギーの陰関数関係

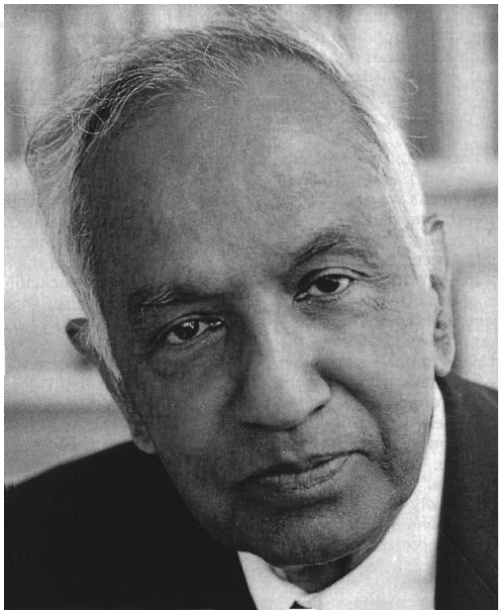
$$N = N_0 \left[\beta^{3/2} F_{1/2}(\eta, \beta) + \beta^{5/2} F_{3/2}(\eta, \beta) \right]$$

$$P = P_0 \left[\beta^{5/2} F_{3/2}(\eta, \beta) + \beta^{7/2} F_{5/2}(\eta, \beta)/2 \right]$$

$$E = E_0 \left[\beta^{5/2} F_{3/2}(\eta, \beta) + \beta^{7/2} F_{5/2}(\eta, \beta) \right]$$

- 一般化フェルミ・ディラック積分 $F_k(\eta, \beta)$

一般化フェルミ・ディラック積分



- チャンドラセカール (1939)

$$F_k(\eta,\beta)=\int_0^\infty \frac{x^k\sqrt{1+(\beta/2)x}}{\exp(x-\eta)+1}dx$$

- 天体物理: k=1/2, 3/2, 5/2
- 固体物理: k=-1/2, 0, 1/2, 1, …

ηとβの範囲

- $-40 < \eta < 10^5$、反粒子(陽電子等) $\eta < 0$
- β: 天文(温度質量比)

天体	電子・陽電子	陽子・中性子
太陽表面	9.75E-7	5.31E-10
白色矮星表面	4.4E-6	2.4E-9
太陽中心部	2.65E-3	1.44E-6
Heフラッシュ	0.034	1.8E-5
Ne燃焼	0.2	1E-4
鉄の光分解	8	4E-3
超新星爆発	160	0.08

- β: 半導体
  - 非線形項の強さ

半導体	
Ge	0.0156
Si	0.0362
GaAs	0.0452
InAs	0.143
InSb	0.299

温度・密度から圧力へ

$$N(\eta) = N$$

- 温度→β, 密度→N, 未知数η
- 1. 非線形密度方程式を解いてηを求める
  - 初期推定値: 低温極限(β=0)の解など
  - 微分補正(ニュートン法など):Nのη偏微分が必要
- 2. (β, η) →　P、比熱、…
  - 注意:N,P,Eのβやηに関する偏微分係数が必要

低温極限: β=0

- 密度方程式: $N \propto F_{1/2}(\eta)$
- $F_k(\eta)$: フェルミ・ディラック積分
- 順問題: 区分ミニマックス有理近似
  - Fukushima (2015a, Appl. Math. Comp.) in printing
  - 非常に高速、ηの全領域、整数次数＋半整数次数
- 逆問題: $u=F_{1/2}(\eta)$から$\eta=H(u)$を求める
  - Fukushima (2015b, AMC) in printing
  - 区分ミニマックス有理近似: 非常に高速、全領域

$$F_k(\eta)=\int_0^\infty \frac{x^k dx}{\exp(x-\eta)+1}$$

N,P,Eのη,β偏微分計算

- 例：Nの一階偏微分

$$\frac{1}{N_0}\left(\frac{\partial N}{\partial \eta}\right)_\beta = \beta^{3/2}\frac{\partial F_{1/2}}{\partial \eta} + \beta^{5/2}\frac{\partial F_{3/2}}{\partial \eta}$$

$$\frac{1}{N_0}\left(\frac{\partial N}{\partial \beta}\right)_\eta = \frac{3}{2}\beta^{1/2}F_{1/2} + \frac{5}{2}\beta^{3/2}F_{3/2} + \beta^{3/2}\frac{\partial F_{1/2}}{\partial \beta} + \beta^{5/2}\frac{\partial F_{3/2}}{\partial \beta}$$

- 結局、一般化フェルミ・ディラック積分のη,β偏微分計算に帰着

フェルミ･ディラック積分の高速計算法

$$F_k(\eta) \approx \frac{\sum_{n=0}^{N} P_{kn}\eta^n}{\sum_{m=0}^{M} Q_{kn}\eta^m}$$

- Fukushima (2015a)
- 区分ミニマックス有理近似
- 有理次数: (3,3)-(10,10)
- 適用次数: k = 0(1)10, -9/2(1)21/2
- 区分点値: η=-2, 0, 2, 5, 10, 20, 40
- 計算時間: exp(η)の0.44-1.1倍非常に高速

一般化フェルミ・ディラック積分の従来の計算法

- 解析的：高精度計算は困難
- 数値的：（Numerical Recipe 第3版, 6.10節）
  - 二重指数型数値積分法（高橋・森、1974）
  - 半無限積分区間を2分割（分割点：$x=\eta$）
  - 低速：関数評価回数 (M=50-600)

温故知新

- ゾンマーフェルト展開：解析的
  - Sommerfeld (1927)（当時59歳）
  - Fukushima (2014a)：　高次展開
  - 高速 (M ~ 7) だが限界あり ($\eta > \eta_S \sim 8$-30)
- マクドガル・ストーナー法：数値積分
  - McDougall & Stoner (1938)：　$F_{1/2}(\eta)$
  - Fukushima (2014b): FD分布の任意積分へ拡張
  - 任意のβ、ηに適用可、まだ低速 (M ~ 100-160)

ゾンマーフェルト展開

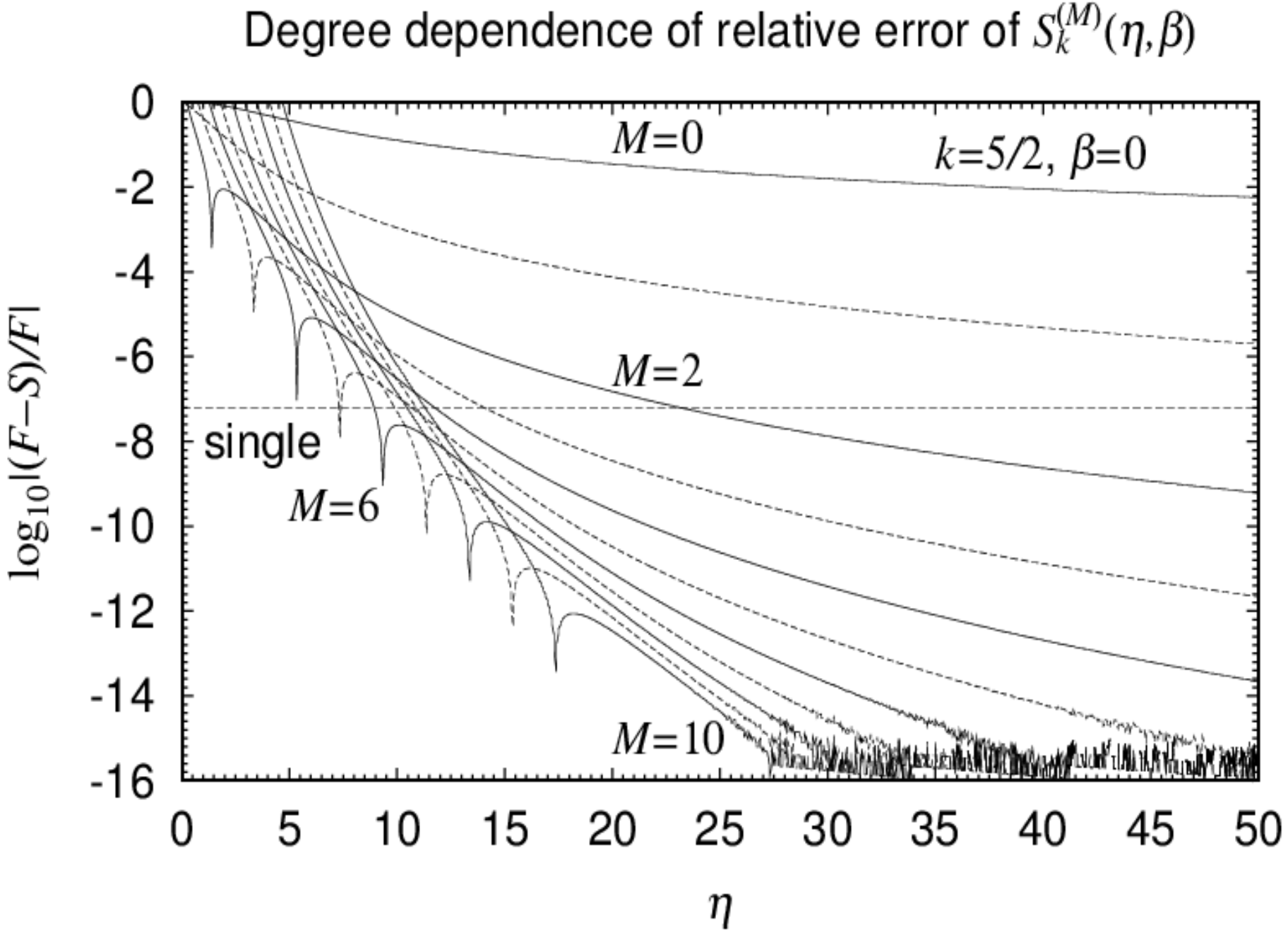
- 元論文：Sommerfeld (1928)

$$\int_0^\infty \frac{f(x)\,dx}{\exp(x-\eta)+1} \sim \int_0^\eta f(x)\,dx + 2\sum_{m=1}^{\infty} c_{2m} f^{(2m-1)}(\eta)$$

- 致命的欠点：発散級数

$$c_n \equiv \left(1-2^{1-n}\right)\zeta(n)$$

- 修正論文：Fukushima (2014a, AMC)
  - 適当な打ち切りで効果的収束
  - 高速だが、ηの値に適用限界あり


Degree dependence of relative error of $S_k^{(M)}(\eta,\beta)$
k=5/2, β=0
M=0
M=2
M=6
M=10
single
$\log_{10}|(F-S)/F|$
η
0
-2
-4
-6
-8
-10
-12
-14
-16
0
5
10
15
20
25
30
35
40
45
50

マクドガル・ストーナー法

- 元論文：McDougall & Stoner (1938)

$$\int_0^{\infty} \frac{f(x)\,dx}{\exp(x-\eta)+1} = \int_0^{\eta} f(x)\,dx + \int_0^{\eta} \frac{\Delta f(z,\eta)\,dx}{\exp(z)+1} + \int_{\eta}^{\infty} \frac{f(z+\eta)\,dx}{\exp(z)+1}$$

- 巧妙な書き換え

$$\Delta f \equiv f(\eta+z) - f(\eta-z)$$

  - 第２項／第１項：ηのべき乗で減少
  - 第３項／第１項：ηの指数関数で減少

- 応用論文：Fukushima (2014b, AMC)

新しい解析的計算法

- 一般化因子を
  ミニマックス多項式近似

$$\sqrt{1+\frac{x}{2}} \approx \sum_{j=0}^{J} g_j x^j$$

- フェルミ･ディラック積分の多項式で近似可

$$F_k(\eta,\beta) \approx \sum_{j=0}^{J} g_j \beta^j F_{k+j}(\eta)$$

$$F_k(\eta) = F_k(\eta,0)$$

- 長所：並列計算可、偏微分の自動計算
- 限界：$\beta < \beta_S$

偏微分の解析計算

- 自明なβ偏微分

$$\frac{\partial F_k(\eta,\beta)}{\partial \beta} \approx \sum_{j=1}^{J} j g_j \beta^{j-1} F_{k+j}(\eta)$$

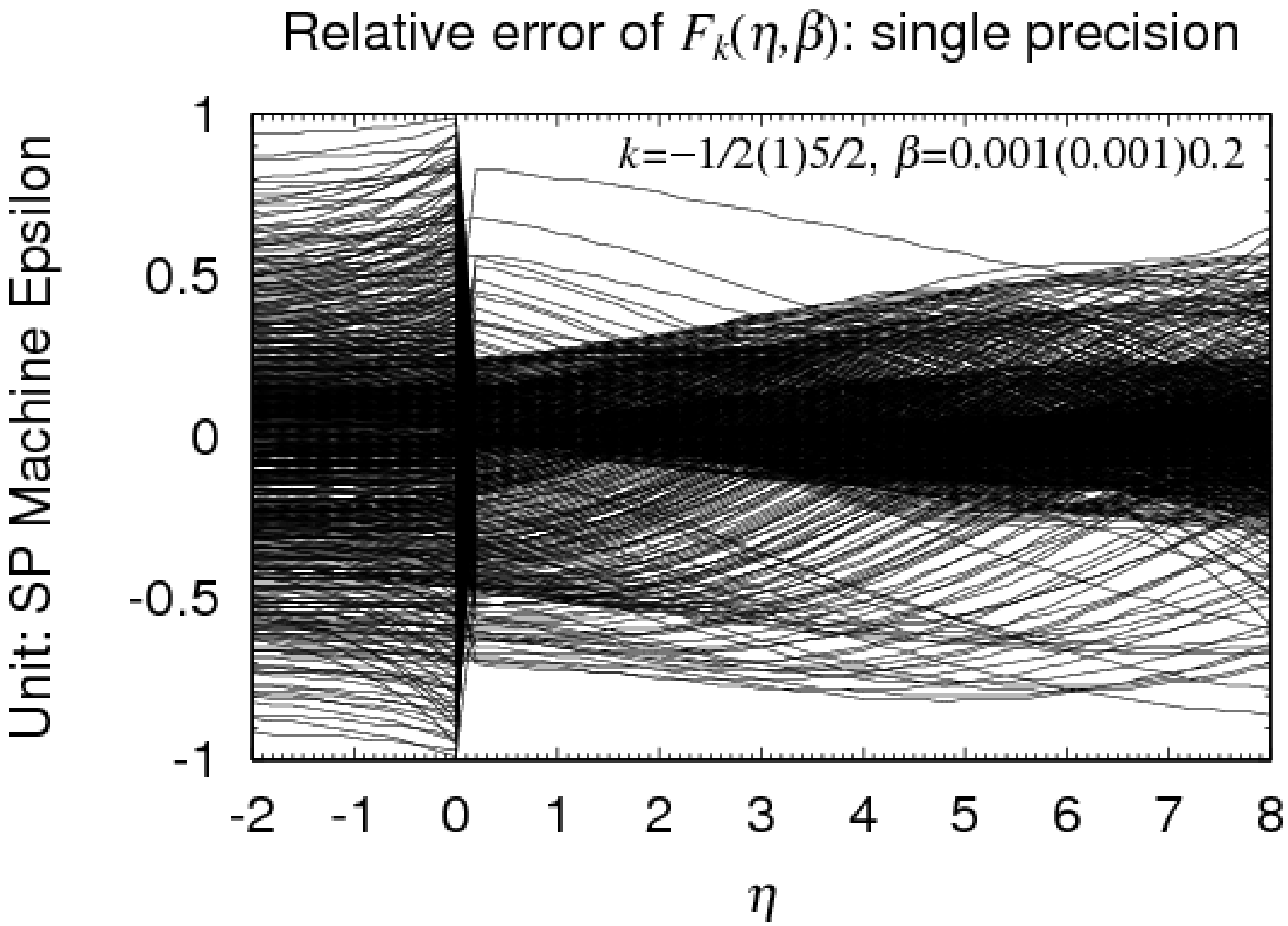
- フェルミ・ディラック積分の微分公式

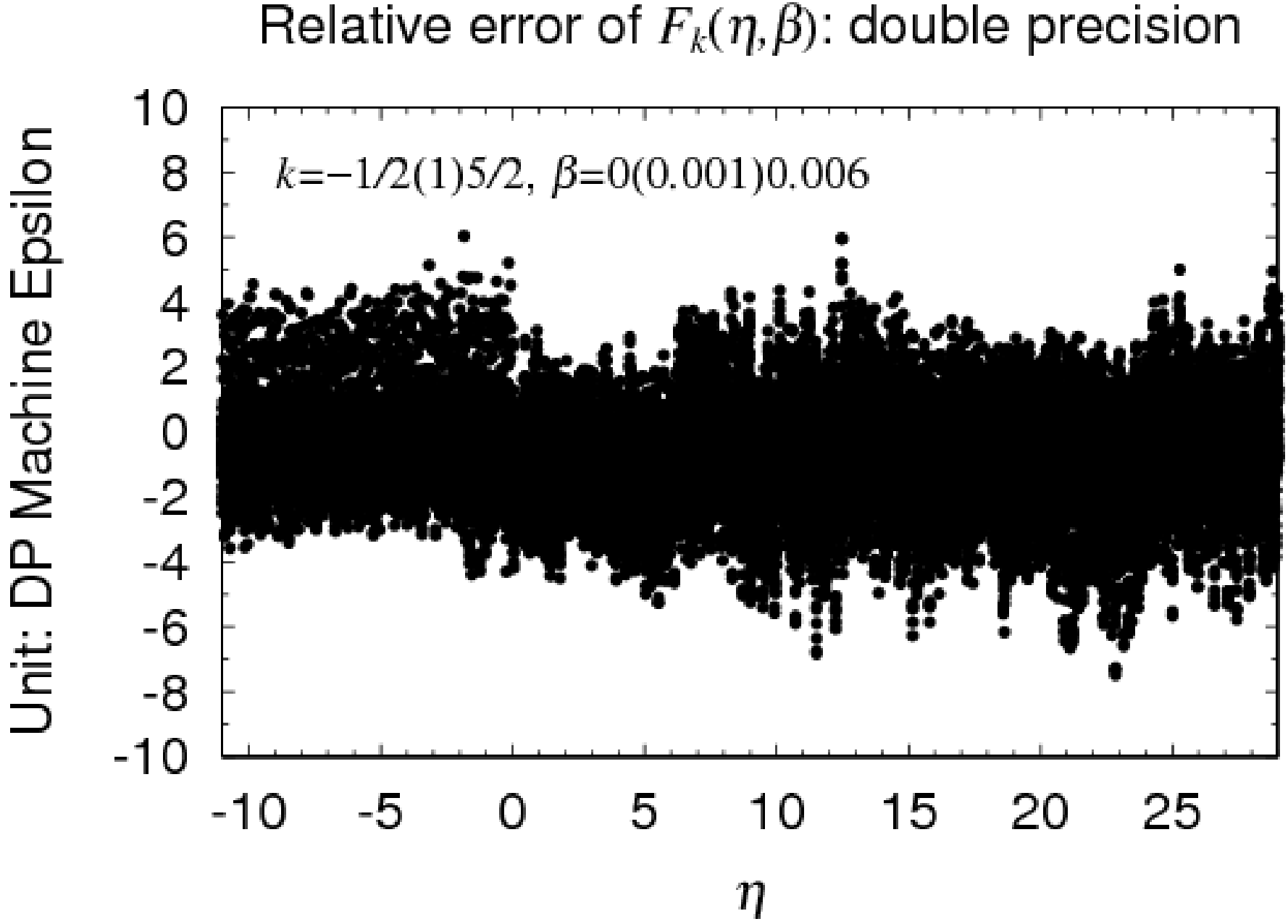
$$\frac{dF_k(\eta)}{d\eta} = kF_{k-1}(\eta)$$

- η偏微分

$$\frac{\partial F_k(\eta,\beta)}{\partial \eta} \approx \sum_{j=0}^{J} (k+j) g_j \beta^{j} F_{k+j-1}(\eta)$$

- 長所：繰り返し適用可、並列計算可


Relative error of $F_k(\eta,\beta)$: single precision
k=−1/2(1)5/2, β=0.001(0.001)0.2
Unit: SP Machine Epsilon
1
0.5
0
-0.5
-1
-2
-1
0
1
2
3
4
5
6
7
8
η


Relative error of $F_k(\eta,\beta)$: double precision
k=−1/2(1)5/2, β=0(0.001)0.006
Unit: DP Machine Epsilon
10
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
-10
-10
-5
0
5
10
15
20
25
η

計算時間の比較

- 倍精度計算、インテル Fortran 12.1
- μs @ Intel Core i7-4600U

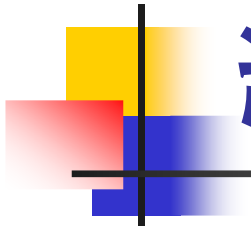
k	数値積分	新方法
1/2	21.7	0.170
1/2, 3/2	40.3	0.174
1/2, 3/2, 5/2	60.5	0.176

新方法の守備範囲

天体	電子・陽電子	陽子・中性子
太陽表面	9.75E-7	5.31E-10
白色矮星表面	4.4E-6	2.4E-9
太陽中心部	2.65E-3	1.44E-6
Heフラッシュ	0.034	1.8E-5
Ne燃焼	0.2	1E-4
鉄の光分解	8	4E-3
超新星爆発	160	0.08

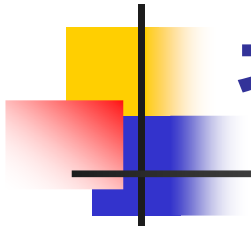
半導体	
Ge	0.0156
Si	0.0362
GaAs	0.0452
InAs	0.143
InSb*	0.299

***： 6ケタ精度**



結論

- 手法
  - 一般化因子をミニマックス近似
  - フェルミ・ディラック積分の多項式に帰着
- 性能
  - 単精度：近似次数 8, $\beta < 0.21$, $\eta < \eta_S \sim 8$
  - 倍精度：近似次数 7, $\beta < 0.0040$, $\eta < \eta_S \sim 30$
  - 数値積分に比べて70-450倍の加速
- 宿題: 大きいβ、小さいηの場合



参考文献

- Sommerfeld, 1927, Z. Phys., 47: 1-32
- McDougall & Stoner, 1938, Phil. Trans. R. Soc. London Ser. A, 237: 67-104
- Fukushima, 2014a, Appl. Math. Comp., 234: 417-433
- Fukushima, 2014b, Appl. Math. Comp., 238: 485-510
- Fukushima, 2015a, Appl. Math. Comp., in printing
- Fukushima, 2015b, Appl. Math. Comp., in printing
- Fukushima, 2015c, Appl. Math. Comp., submitted

ResearchGate Fukushima 検索

Fortran プログラム、論文PDFなど入手可能