

# **多倍長計算手法**

---

**平成26年度第2四半期**

## **目次**

- 1. はじめに**
- 2. 数値積分の注意事項**
- 3. 3次元反復法の反復回数**
  - 3.1 bcg法**
  - 3.2 cgs法**
- 4. Hadamard積分**
- 5.量子モンテカルロ法による物性スペクトル計算**
  - 5.1 指数部11ビットの限界について**
  - 5.2 188倍精度演算結果**

## 1.はじめに

数値積分では、積分計算そのものにデータ形式に依存するものがあり、また数学的には発散する積分値列をある範囲内でしか適用できないものがあります。この資料ではこれらをまとめた結果を記載しています。

また量子モンテカルロ法によるスペクトル計算で物理的に有効とするためにはパラメータの設定である条件がつきます。この条件下では lee754-2008データ形式での限界が存在します。前四半期では実行時間の関係で粒子数 $N=20$ としていましたが、本来の $N=100$ での計算を実施し、 $N=20$ との差を求めました。

## 2.数値積分の注意事項

物理, 数学と計算機シミュレーションには以下の差が生じます。

端点特異点があり、積分値が有限の場合

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx = 2 \quad \text{この場合, 計算機による結果の精度}$$

は, 積分区間 $[\varepsilon, 1]$ の $\varepsilon$ の値に依存します。

$$\int_0^1 \frac{1}{x} dx = \infty \quad \text{この場合, 端点特異点があり、積分値が無限ですが}$$

計算機による結果は有限値で積分区間 $[\varepsilon, 1]$ の $\log(\frac{1}{\varepsilon})$

となります。(相対誤差1%以下).

$$I = \int_0^1 \frac{1}{xM^2 + (1-x)\lambda^2} dx = \frac{1}{M^2 - \lambda^2} \log\left(\frac{M^2}{\lambda^2}\right) \text{の計算は}$$

計算機による結果は, 積分区間 $[\varepsilon, 1 - \varepsilon]$ の $\varepsilon$ の値に依存し

精度の良い結果を得るには $\varepsilon \ll \frac{M^2}{\lambda^2}$ が必要となります。

$$\text{相対誤差は } I_0 = \int_{\varepsilon}^1 \frac{1}{xM^2 + (1-x)\lambda^2} dx = \frac{1}{M^2 - \lambda^2} \log\left(\frac{M^2}{(M^2 - \lambda^2)\varepsilon + \lambda^2}\right)$$

とIの値から求まります。

$$\lambda = 0 \text{ では, } \frac{1}{M^2} \log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$$

$$\lambda \neq 0 \text{ では } \frac{|I_0 - I|}{|I|} = \frac{\log(1 - \varepsilon + \frac{M^2}{\lambda^2} \varepsilon)}{\log(\frac{M^2}{\lambda^2})} \approx \frac{\frac{M^2}{\lambda^2} \varepsilon}{\log(\frac{M^2}{\lambda^2})}$$

$M = 100, \lambda = 10^{-30}, \varepsilon = 10^{-75}$  で相対誤差 $6.8 \times 10^{-14}$

$\varepsilon = 10^{-64}$  で相対誤差0.0047,  $\varepsilon = 10^{-60}$  で相対誤差0.0625

となります。

いくつかの計算例をこの後に記しました。

## 数值積分計算

$$\int_0^1 \frac{1}{x} dx = \infty$$

変数変換区間 $[\varepsilon, 1 - 2^{-113}]$

$$\varepsilon = 10^{-n}$$

相对誤差：積分値と $\log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$

n	値	相对誤差
10	0.233407086667097208D+02	0.7842D-02
20	0.465749122722682359D+02	0.7790D-02
30	0.699614108793860793D+02	0.7780D-02
40	0.927039011434535996D+02	0.7776D-02
50	0.115383602996870176D+03	0.7775D-02
60	0.139187256757241709D+03	0.7774D-02
70	0.162731950845788508D+03	0.7773D-02
80	0.184403258404195498D+03	0.7773D-02
90	0.208959620523617147D+03	0.7773D-02
100	0.233113889859605513D+03	0.7773D-02

### 数值積分計算

$$\int_0^1 \frac{1}{xM^2 + (1-x)\lambda^2} dx = \frac{1}{(M^2 - \lambda^2)} \log\left(\frac{M^2}{\lambda^2}\right)$$

$\lambda = 10^{-m}$ , 変数変換区間  $[\varepsilon, 1 - \varepsilon]$

$\varepsilon = 10^{-n}$ ,  $h = 0.5^6$ ,  $M = 100$

m=30

n	0.147365445951618924Q-01	相对誤差
10	0.231574255058770234Q-02	0.8429Q+00
20	0.462116366109607907Q-02	0.6864Q+00
30	0.694164160806739548Q-02	0.5290Q+00
40	0.919820579107975093Q-02	0.3758Q+00
50	0.114485346609728248Q-01	0.2231Q+00
60	0.138103737135693498Q-01	0.6285Q-01
70	0.147363376638424290Q-01	0.1404Q-04
80	0.147363377222335175Q-01	0.1404Q-04
90	0.147363377222335175Q-01	0.1404Q-04
100	0.147363377222335175Q-01	0.1404Q-04

### 数值積分計算

$$\int_0^1 \frac{1}{xM^2 + (1-x)\lambda^2} dx = \frac{1}{(M^2 - \lambda^2)} \log\left(\frac{M^2}{\lambda^2}\right)$$

$\lambda = 10^{-m}$ , 変数変換区間  $[\varepsilon, 1 - \varepsilon]$

$\varepsilon = 10^{-n}$ ,  $h = 0.5^7$ ,  $M = 100$

m=30

n	0.147365445951618924Q-01	相对誤差
10	0.232490670862570827Q-02	0.8422Q+00
20	0.463932744416145133Q-02	0.6852Q+00
30	0.696889134800300170Q-02	0.5271Q+00
40	0.923429795271255545Q-02	0.3734Q+00
50	0.114934474803299206Q-01	0.2201Q+00
60	0.138645380792536845Q-01	0.5917Q-01
70	0.147365445968630811Q-01	0.1154Q-09
80	0.147365446342540534Q-01	0.2653Q-08
90	0.147365446342540535Q-01	0.2653Q-08
100	0.147365446342540535Q-01	0.2653Q-08

### 数值積分計算

$$\int_0^1 \frac{1}{xM^2 + (1-x)\lambda^2} dx = \frac{1}{(M^2 - \lambda^2)} \log\left(\frac{M^2}{\lambda^2}\right)$$

$\lambda = 10^{-m}$ , 変数変換区間  $[\varepsilon, 1 - \varepsilon]$

$\varepsilon = 10^{-n}$ ,  $h = 0.5^8$ ,  $M = 100$

m=30		
n		相对誤差
10	0.232949769142978581Q-02	0.8419Q+00
20	0.464842710263577845Q-02	0.6846Q+00
30	0.698254290616501867Q-02	0.5262Q+00
40	0.925237939730574551Q-02	0.3721Q+00
50	0.115159479054159220Q-01	0.2185Q+00
60	0.138916715932203850Q-01	0.5733Q-01
70	0.147365445665596625Q-01	0.1941Q-08
80	0.147365445951618909Q-01	0.9727Q-16
90	0.147365445951618910Q-01	0.9649Q-16
100	0.147365445951618910Q-01	0.9649Q-16

### 数值積分計算

$$\int_0^1 \frac{1}{xM^2 + (1-x)\lambda^2} dx = \frac{1}{(M^2 - \lambda^2)} \log\left(\frac{M^2}{\lambda^2}\right)$$

$\lambda = 10^{-m}$ , 変数変換区間  $[\varepsilon, 1 - \varepsilon]$

$\varepsilon = 10^{-n}$ ,  $h = 0.5^9$ ,  $M = 100$

m=30		
n		相对誤差
10	0.233179540879295303Q-02	0.8418Q+00
20	0.465298137363800405Q-02	0.6843Q+00
30	0.698937535733912137Q-02	0.5257Q+00
40	0.926142896060555719Q-02	0.3715Q+00
50	0.115272091218842446Q-01	0.2178Q+00
60	0.139052511237161374Q-01	0.5641Q-01
70	0.147365445704516375Q-01	0.1677Q-08
80	0.147365445951618924Q-01	0.6627Q-18
90	0.147365445951618924Q-01	0.1458Q-28
100	0.147365445951618924Q-01	0.1470Q-30

## 数値積分計算

$$\int_0^1 \frac{1}{xM^2 + (1-x)\lambda^2} dx = \frac{1}{(M^2 - \lambda^2)} \log\left(\frac{M^2}{\lambda^2}\right)$$

$\lambda = 10^{-m}$ , 変数変換区間  $[\varepsilon, 1 - \varepsilon]$

$\varepsilon = 10^{-n}$ ,  $h = 0.5^{10}$ ,  $M = 100$

m=30		
n		相対誤差
10	0.233294482396574749Q-02	0.8417Q+00
20	0.465525961958223562Q-02	0.6841Q+00
30	0.699279325095223009Q-02	0.5255Q+00
40	0.926595595250995594Q-02	0.3712Q+00
50	0.115328424811043277Q-01	0.2174Q+00
60	0.139120440781553936Q-01	0.5595Q-01
70	0.147365445722666186Q-01	0.1554Q-08
80	0.147365445951618924Q-01	0.6081Q-18
90	0.147365445951618924Q-01	0.1329Q-28
100	0.147365445951618924Q-01	0.1960Q-31

以上の例から  $h = 0.5^6$ ,  $\lambda = 10^{-30}$  の場合  $\varepsilon = 10^{-100}$  程度必要になります。これは一次元の例ですが多次元や被積分関数が  $\frac{1}{D^n}$  の場合, dd形式(指数部11ビット)では,  $\varepsilon = 10^{-50}$  程度しか取れない場合が多々発生します。

## 3.3次元反復法の反復回数

問題は3次元ポアソン方程式

$$\Delta u + R \frac{\partial u}{\partial x} = -f$$

領域 $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$

解析解 $u(x, y, z) = e^{xyz} \times \sin(\pi x) \times \sin(\pi y) \times \sin(\pi z)$

非対称問題。

解法

bcg(biconjugate gradient)法

$$R = 100, n_x = n_y = n_z = 129$$

cgs(conjugate gradient square)法

$$R = 100, n_x = n_y = n_z = 113$$

収束判定値は共役残差 $10^{-12}$

初期値 $u(x, y, z) = 0$

**反復回数10000まででは、  
bcg法は倍精度演算、  
cgs法は4倍精度演算まで収束しません。**



## 3.1 bcg法

### bcg法反復回数一覧

演算精度	SR16000	x5570	E5-2670	Phi5110P
3倍精度		482		
4倍精度	316	308	308	314
5倍精度		317		
6倍精度		317		
7倍精度		317		
8倍精度		317		

**性能面からは4倍精度演算が最も適していると言えます。**

## 3.2 cgs法

cgs法反復回数一覧表

演算精度	SR16000	x5570	E5-2670	Phi5110P
5倍精度		373	368	368
6倍精度	281	237	240	240
7倍精度		217	217	217
8倍精度	217	217	217	217

(注)

1. 赤字はその計算機で最も性能がよかったもの。
2. 6倍精度の有効ビット数はSR16000は159ビット, 他は177ビット
3. E5-2670, Phi5110Pでは内積部分に無限精度演算を適用しています。

**性能面からは6倍精度演算が最も適していると言えます。**

#### 4.Hadamard積分

ループ積分では内部特異点がある場合と端点特異点がある場合があるが、両方含む場合の計算は以下の資料をもとに問題を作成し精度の検証を行った。

#### 数理解析研究所講究録第791巻

1992年 206 – 219

#### Hadamard有限部分積分に対するDE公式

緒方秀教, 杉原正顯, 森正武 : 東京大学工学部物理工学科

P.215

$$\text{f.p.} \int_{-1}^1 \frac{F(x)}{(x-\lambda)^2} dx, F(z) = (1-z)^{\frac{1}{4}} (1+z)^{\frac{-1}{4}} \quad (46)$$

$$\text{厳密値} = -\frac{\pi}{2} (1+\lambda)^{\frac{-5}{4}} (1-\lambda)^{\frac{-3}{4}} \quad (47)$$

を変形し,

端点( $x = 0$  or  $x = 1$ )と内部特異点を持つ例題を作成して

DE + eps 算法を検証しました。

厳密値の計算は以下の通り。

$$F_1(z) = z^{\frac{-1}{n}} (1-z)^{\frac{1}{n}} \quad t = \left(\frac{1-z}{z}\right)^{\frac{1}{n}}, c = \frac{1-\lambda}{\lambda}$$

$$F_2(z) = z^{\frac{1}{n}} (1-z)^{\frac{-1}{n}} \quad t = \left(\frac{z}{1-z}\right)^{\frac{1}{n}}, c = \frac{\lambda}{1-\lambda}$$

とすると,

$$I_1 = \int_0^1 \frac{F_1(x)}{(x-\lambda)^2} dx = \frac{1}{\lambda^2} \int_0^{\infty} \frac{1}{t^n - c} dt$$

$$I_2 = \int_0^1 \frac{F_2(x)}{(x-\lambda)^2} dx = \frac{1}{(1-\lambda)^2} \int_0^{\infty} \frac{1}{t^n - c} dt$$

$$n = 2 \text{ の場合 } \int_0^{\infty} \frac{1}{t^n - c} dt = 0 \text{ から } I_1 = I_2 = 0$$

$$n = 3 \text{ の場合 } \int_0^{\infty} \frac{1}{t^n - c} dt = \frac{1}{c^{\frac{2}{3}}} \int_0^{\infty} \frac{1}{t^3 - c} dt = -\frac{\pi}{3\sqrt{3}} \frac{1}{c^{\frac{2}{3}}}$$

$$n = 4 \text{ の場合 } \int_0^{\infty} \frac{1}{t^n - c} dt = \frac{-1}{2c^{\frac{1}{2}}} \int_0^{\infty} \frac{1}{t^4 - c} dt = -\frac{\pi}{4} \frac{1}{c^{\frac{3}{4}}}$$

## 厳密解の計算例

$$I_2 = \int_0^1 \frac{(1-x)^{\frac{-1}{4}} x^{\frac{1}{4}}}{(x-\lambda)^2} dx$$

$$t = \left(\frac{x}{1-x}\right)^{\frac{1}{4}}, x = \frac{t^4}{t^4+1}, dx = \frac{4t^3}{(t^4+1)^2}$$

$$x - \lambda = \frac{(1-\lambda)t^4 - \lambda}{t^4 + 1} \text{ より}$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} \frac{4t^4}{((1-\lambda)t^4 - \lambda)^2} dt = \frac{1}{(1-\lambda)^2} \int_0^{\infty} \frac{4t^4}{(t^4 - c)^2} dt \quad (c = \frac{\lambda}{1-\lambda})$$

$$E = \int_0^{\infty} \frac{4t^4}{(t^4 - c)^2} dt = \int_0^{\infty} \frac{4}{(t^4 - c)} dt + \int_0^{\infty} \frac{4c}{(t^4 - c)^2} dt$$

$$\int \frac{1}{(t^4 - c)^2} dt = \frac{-t}{4c(t^4 - c)} - \frac{3}{4c} \int \frac{1}{t^4 - c} dt \text{ から}$$

$$E = \frac{-t}{t^4 - c} \Big|_{t=0}^{t=\infty} + \int_0^{\infty} \frac{1}{t^4 - c} dt = \int_0^{\infty} \frac{1}{t^4 - c} dt$$

$$I_1 = \int_0^1 \frac{(1-x)^{\frac{1}{4}} x^{\frac{-1}{4}}}{(x-\lambda)^2} dx \text{ でも,}$$

$$t = \left(\frac{1-x}{x}\right)^{\frac{1}{4}}, x = \frac{1}{t^4+1}, dx = -\frac{4t^3}{(t^4+1)^2}$$

$$x - \lambda = \frac{-\lambda(t^4+1) + 1}{t^4+1} \text{ より}$$

$$I_1 = \int_0^{\infty} \frac{4t^4}{(1-\lambda t^4 - \lambda)^2} dt = \frac{1}{\lambda^2} \int_0^{\infty} \frac{4t^4}{(t^4 - c)^2} dt \quad (c = \frac{1-\lambda}{\lambda}) \text{ となり,}$$

$I_1, I_2$  はともに  $E$  を計算すれば良い事になります。

$$E = \int_0^{\infty} \frac{1}{t^4 - c} dt = \frac{1}{2\sqrt{c}} \left[ \int_0^{\infty} \frac{1}{t^2 - \sqrt{c}} dt - \int_0^{\infty} \frac{1}{t^2 + \sqrt{c}} dt \right] = -\frac{1}{2\sqrt{c}} \int_0^{\infty} \frac{1}{t^2 + \sqrt{c}} dt$$

$$t = c^{\frac{1}{4}} y, dt = c^{\frac{1}{4}} dy \text{ から } E = -\frac{1}{2\sqrt{c}} \int_0^{\infty} \frac{1}{c^{\frac{1}{4}}(y^2 + 1)} dy = -\frac{\pi}{4c^{\frac{3}{4}}}.$$

これから

$$I_1 = -\frac{\pi}{4} \lambda^{\frac{-5}{4}} (1-\lambda)^{\frac{-3}{4}}, I_2 = -\frac{\pi}{4} \lambda^{\frac{-3}{4}} (1-\lambda)^{\frac{-5}{4}} \text{ となります。}$$













## 5.量子モンテカルロ法による物性スペクトル計算

量子モンテカルロ法では,安定した計算を行うには $L$ は $L = 20 \times \beta$ の関係が満たされている事が必要になります。

$U = 10$ ではプログラムを実行中に変数がとる値の最大値は

$e^{\sqrt{200} \times \beta}$ となり,指数部が11ビットだと

$\beta < 50.14$ ,15ビットだと $\beta < 802.978$

となります。

また粒子数 $N$ は100程度が必要となります。

# 5.1 指数部が11ビットの限界について

量子モンテカルロ法

$\beta = \text{可変}, L = 20 \times \beta, U = 10$

倍精度の最大値  $1.7976931348623157E + 0308$

$l = 980$

$\text{beta} = 49.0000000000000000000000000000000000$

$\text{ispin} = 1$

$\text{QDR} = 1.785864139172194426883476026500380E + 0303$

$I + \text{QDR} = 1.785864139172194426883476026500380E + 0303$

$\text{ispin} = 2$

$\text{QDR} = 1.016926695260681160826110539840909E + 0304$

$I + \text{QDR} = 1.016926695260681160826110539840909E + 0304$

$l = 1000$

$\text{beta} = 50.0000000000000000000000000000000000$

$\text{spin} = 1$

$\text{QDR} = 2.862712242794756891557352959861312E + 0309$

$I + \text{QDR} = 2.862712242794756891557352959861312E + 0309$

$\text{ispin} = 2$

$\text{QDR} = 1.651604970572476540194914368437567E + 0310$

$I + \text{QDR} = 1.651604970572476540194914368437567E + 0310$

$\beta = 49.6$     OK,  $\beta = 49.7$     NG

I = 992  
beta = 49.60000000000000000000000000000000

ispin = 1  
QDR = 9.436165589130513054255944449201070E + 0306  
I + QDR = 9.436165589130513054255944449201070E + 0306

ispin = 2  
QDR = 5.415677874136262454106581048120274E + 0307  
I + QDR = 5.415677874136262454106581048120274E + 0307

I = 994  
beta = 49.70000000000000000000000000000000

ispin = 1  
QDR = 3.938127827940264707461183253762617E + 0307  
I + QDR = 3.938127827940264707461183253762617E + 0307

ispin = 2  
QDR = 2.263160356072587757351389081936904E + 0308  
I + QDR = 2.263160356072587757351389081936904E + 0308

I = 996  
beta = 49.80000000000000000000000000000000

ispin = 1  
QDR = 1.643557573940390154190429173363875E + 0308  
I + QDR = 1.643557573940390154190429173363875E + 0308

ispin = 2  
QDR = 9.457544390246214860747340892604545E + 0308  
I + QDR = 9.457544390246214860747340892604545E + 0308

I = 998  
beta = 49.90000000000000000000000000000000

ispin = 1  
QDR = 6.859317195871621637905579118618770E + 0308  
I + QDR = 6.859317195871621637905579118618770E + 0308

ispin = 2  
QDR = 3.952228149418581143027425919256247E + 0309  
I + QDR = 3.952228149418581143027425919256247E + 0309

## 5.2 188倍精度演算結果

188倍精度演算で粒子数 $N=100$ で実行出来たのでこれまでの結果と合わせてまとめて記載しました。

### 量子モンテカルロ法 精度調査一覧

演算精度	$\beta$	L	最小値		
			理論値	実測値(N=20)	実測値(N=100)
68倍精度	100	2000	0.567D-307	0.330D-307	0.330D-307
128倍精度	180	3600	0.120D-552	0.514D-553	0.512D-553
188倍精度	250	5000	0.130D-767	0.476D-768	0.468D-768

**N=20とN=100での実測値では大きな差は見られません。**