4P110

スクリプト言語を利用したハミルトニアン行列利用環境の開発

(九大情基センター[a], 九州先端研[b], JST-CREST[c])

○本田宏明[a,c], 眞木淳[b], 野呂武司

Development of Hamiltonian matrix generation and programming environment by script language

(Kyushu Univ.[a], ISIT[b], CREST-JST[c])

○ Hiroaki Honda[a,c], Jun Maki[b], Takeshi Noro

【はじめに】

現在標準的に利用されている種々の分子軌道法計算プログラムでは SCF から電子相関計算に至るまでの様々な物性計算が利用可能である．しかしながら全体で数百万行に達するプログラムも有り，内部実装の詳細なドキュメントが公開されていない場合が多い．そのためプログラムソース中にのみ記述されている各種データのデータ構造や定義箇所，変更箇所やその条件を正確に把握する事が難しく，密度行列やフォック行列といった基本的なデータについても利用方法を独習し自身のアイデアを実装することは困難であることが多い．このような状況において，実装コード量の減少を期待した Python プログラミング言語による実装 [1] も既に公開されており，分子軌道法プログラムの実装の学習を促進させる試みも進んではいるが，現状では内部の各種データがプログラム学習者に把握しやすい形で実装されているとまでは言えない．

これまで我々はスクリプト言語の一つである Ruby を利用し，逐次実行においては対話型プログラムが実行可能であり，並列計算については計算機センターでも利用可能な SCF プログラムを開発している [2]．その続きとして本研究では，同じく Ruby 言語を利用しハミルトニアン行列について対話型の計算も可能な逐次実行のプロトタイププログラムを作成することを目的をした．またハミルトニアン行列生成アルゴリズムとして，佐々木による原子に対する表式 [3] を C_1 対称性の系に適用した Configuration State Function (CSF) ベースの多電子行列要素計算表式と Distinct Row Table (DRT) の利用を組み合わせた方法を用いる．

【Ruby 言語を用いたプログラム開発】

Ruby はオブジェクト指向をベースとした動的型付けの汎用プログラミング言語であり，型宣言やメモリの動的確保，開放処理を明示的に記述する必要がなく，組み込みの配列クラスや文字列クラス等の数値計算や文字列の取扱いに必要となる定型の処理が予め用意されている．そのため，他のスクリプト言語と同様に Fortran や C 言語といったコンパイラ言語と比較して記述に必要なプログラムコード量が減少するため，より容易に記述することが可能である．

一方，動的型付けのスクリプト言語による実装では通常のコンパイラ言語によるプログラム実装と比較して種々の原因により実行速度が遅くなる事が知られている．そのためプログラム作成の際に，1. 配列を利用する箇所については数値計算用配列ライブラリ [4] の利用，2. 行列計算については Lapack ライブラリ等の Ruby からの利用，3. 分子積分や Wigner 係数の計算については，C/Fortran による Ruby からも利用可能なライブラリの作成，の工夫を行った．

【ハミルトニアン行列要素の計算方法】

今回は佐々木による CSF 間の行列要素計算表式を利用した．この方法では (非) アーベル点群もしくは原子に対する回転群やスピン回転群，準スピン回転群に対する 3 種類の同時な既約表現となる

CSF ならびにスピンを含めた演算子を取り扱うことが可能である．これらの対称性を満たす生成消滅テンソル演算子からなる多電子のテンソル演算子積の和に対する全対称表現として CSF 間行列要素を表し，この演算子積に対しテンソル演算子の recoupling による簡約手法を適用する．その結果，CSF 間のエネルギー表式は軌道殻毎の寄与の積として表現され，複数の行列要素に対して同じ寄与をするエネルギー表式を 1 回の評価で済ますことが自然に出来る．また，演算子としてスピン量子数が変化する場合も取扱い可能であるといった特徴を持つ．ただ本研究では，一般の多原子分子を対象とするためスピン対称性のみ考慮した．

【分子積分や Wigner 係数の計算ライブラリの開発】

ハミルトニアン行列の計算には，積分変換された分子積分ならびに recoupling 処理に必要な Wigner 6j, 9j 係数の計算が必要である．原子軌道の分子積分については，ガウス型関数の重なり積分や運動エネルギー積分，核引力積分，電子反発積分を対象として，積分プログラム部分のみで配布可能なライブラリとして開発を行なっている．現状では C 言語実装の分子積分や Wigner 係数プログラムを C/Fortran/Ruby 言語から利用可能としている．

【対話型の分子軌道法計算手法の実装】

通常の計算では，内部の種々の計算は暗黙的に連続して行なわれる．この場合，プログラムを理解するためには，内部の処理の確認に加え利用しているデータ構造についても理解する必要がある．また，プログラム実行中にユーザからデータ内容の変更を試みることは不可能である．これに対し，前回の SCF プログラムに引き続きプログラムの対話型実行をサポートすることとした．具体的には Ruby 言語のクラスの動作を一部変更することで，変数値だけでなく予めプログラム内に記述しておいたデータ構造等のコメント情報をクラスインスタンス毎に表示出来るようにし，実行中にもユーザの準備したプログラムのデータと値を差し替えることを可能とする試みを行っている．

【プログラム実装】

ハミルトニアン行列計算の実装として計算規模や使用可能なメモリ量に依存した種々のアルゴリズムが存在し，本研究の目的としては学習者がそれらのアルゴリズムを種々実装可能とする環境を提供することであるが，今回はそのプロトタイプとして CSF 選択を行わない DRT を使用し，インコアの分子軌道分子積分とハミルトニアン行列について全ての行列要素を予め作成するアルゴリズムについてプログラムの開発を行っている．プログラムのコアとなる loop-driven アルゴリズム内の行列要素の積を計算する基本アルゴリズムについては Kamuy CI プログラム [5] における内部実装を参考にした．

本研究で開発中のハミルトニアン行列の利用環境の開発進捗等については当日報告する．

【謝辞】

本研究の一部は JST-CREST の研究課題「省メモリ技術と動的最適化技術によるスケーラブル通信ライブラリの開発」の支援を受けております．

【参考文献】

[1] “PyQuante: Python Quantum Chemistry,” [On line]. Available: http://pyquante.sourceforge.net/.

[2] 本田 他, 分子科学討論会 2013, 3P098.

[3] F. Sasaki, *Int. J. Quant. Chem.*, Vol.8, pp.605-617, 1974.,
F. Sasaki *et al.*, *Modern Techniques in Computational Chemistry: MOTECC-90*, IBM, pp.181-234.

[4] “Numerical Ruby NArray,” [On line]. Available: http://narray.rubyforge.org/index.html.ja.

[5] F. Sasaki *et al.*, *Theor. Chim. Acta*, Vol.72, pp.123-138, 1987.