

4P111

関数型プログラミング言語による量子力学的振動状態計算法の開発

(慶大院・理工) ○菅原道彦

Quantum mechanical calculation of vibrational states by functional programming language

(Faculty of Science and Technology, Keio Univ.)

【序】近年のマルチコア CPU やネットワークで接続されたクラスターマシンの普及に伴い並行プログラミングの重要性は高まる一方である。実際に、科学技術計算用のコンピューター言語として広く用いられている FORTRAN においても数値計算を効率よく遂行する上で open-MP、MPI などの技術を駆使した並行プログラミングは不可欠なものになってきている。その一方で、従来の手続き型（及びオブジェクト指向）言語に並行計算性能を実装するためには既存のソースコードに対する追加改変を要求されがちであり、ハードウェア進化に対応するための保守に費やされる労力は少なくない。手続き型言語やオブジェクト指向言語において並行計算性の実装を難しくしている大きな要因は、状態（＝変数の値）が実行中に変化してしまう「副作用」の存在である。現在の状態にアクセスしようとする同時並行プロセスは常に慎重な同期を求められ、バグによって生じた不具合の修正にも多大な労力を要する。一方で、近年プログラミング言語の新潮流として注目を集めている関数型言語は、副作用を許さず純粋な関数のみを使用して問題を解決する。このため基本的に「副作用」は存在せず、本質的に（マルチコア上の）並行プログラミングに対する親和性が高いことが期待される。本研究では、そのような関数型言語の適用例として、振動状態の波動関数を量子力学的に計算する汎用手法を開発する。本研究では、開発言語としては Java 仮想マシン上の豊富な既存ライブラリ資源を活用できる Clojure を採用し、並行計算に適している移動最小近似 (Moving Least Square = MLS) 法を基にした数値基底関数を用いて、量子力学的振動状態計算法を開発する。

【理論】MLS 法では波動関数を大域基底系 $\{p(x)\}$ 用いて波動関数 $u(x)$ を

$$u(x) = \sum_{j=0}^m p_j(x) a_j(x) \equiv \mathbf{p}^T(x) \cdot \mathbf{a}(x) \quad (1)$$

の様に展開する。ここで、一次元の場合は $\mathbf{p}^T(x) = [1, x, x^2, \dots, x^m]$ と取ることができる。展開係数 $a_j(x)$ は移動最小 2 乗近似の概念に従い空間座標に分布させた節点 $\{x_I\} (I=1, 2, \dots, N)$ 及び節点値 $\{u_I\}$ と波動関数によって定義される離散 L2 ノルム

$$J(x) = \sum_{I=0}^N w_I(x) [\mathbf{p}^T(x) \cdot \mathbf{a}(x) - u_I]^2 \quad (2)$$

を最小化することによって決定される。 $w_I(x)$ は各節点が影響力を及ぼす範囲を設定する窓関数である。 $J(x)$ の停留値条件 $\partial J(x) / \partial \mathbf{a}$ より $\mathbf{a}(x)$ は

$$\mathbf{A}(x) \cdot \mathbf{a}(x) = \mathbf{B}(x) \cdot \mathbf{u} \quad (3)$$

なる線形方程式を解くことによって得られる。但し、

$$\mathbf{A}(x) = \sum_{I=0}^N w_I(x) \mathbf{p}(x_I) \cdot \mathbf{p}^T(x_I) \quad (4)$$

$$\mathbf{B}(x)=[w_1(x)\mathbf{p}(x_1),w_2(x)\mathbf{p}(x_2),\cdots,w_N(x)\mathbf{p}(x_N)] \quad (5)$$

$$\mathbf{u}=[u_1,u_2,\cdots,u_N] \quad (6)$$

である。線形方程式である(3)式を $\mathbf{a}(x)$ について解き、波動関数を書き表し直すと

$$u(x)=\sum_{I=0}^N\sum_{j=0}^mp_j(x)\left[\mathbf{A}^{-1}(x)\cdot\mathbf{B}(x)\right]_{jI}\equiv\sum_{I=0}^Nu_I\phi_I(x) \quad (7)$$

となる。 $\phi_I(x)$ を節点 I に付随する基底関数、節点値 $\{u_I\}$ を展開係数としてみなすことにより、(6)式を通常の基底関数展開ととらえることができる。ここで、変分原理を適用するとシュレディンガー方程式は一般固有値問題

$$(\mathbf{K}+\mathbf{V})\cdot\mathbf{c}=\mathbf{E}\mathbf{S}\cdot\mathbf{c} \quad (8)$$

に帰着される。ここで、 $(\mathbf{S})_{IJ}=\int dx\phi_I(x)\phi_J(x)$ 、 $(\mathbf{K})_{IJ}=-(\hbar^2/2m)\int dx\phi_I(x)\nabla^2\phi_J(x)$ 、 $(\mathbf{V})_{IJ}=\int dx\phi_I(x)V(x)\phi_J(x)$ は、それぞれ座標軸上の等間隔グリッド点の和として数値的な近似値として求めている。グリッド点の数は節点の数 N と独立に取ることが可能であり、この離散和の計算は本質的に並行計算が可能であることに注意したい。

【応用】上記の様に開発された MLS 数値基底を一次元の二重井戸型ポテンシャル問題に適用した。使用したポテンシャル関数は

$$V(x)=3\delta x^4+4\delta(\alpha-1)x^3-6\delta\alpha x^2+1 \quad (9)$$

で、パラメータは $\alpha=0.98$, $\delta=1/(2\alpha+1)$ で

ある(右図)。節点数 $N=23$ で MLS 基底を

用いて計算された値と正確解(グリッド数

350のグリッド法による解)との比較を表1

に示す。比較的少ない基底数で、計算が困難

であると想定される二つの井戸に非局在化

した波動関数の固有値(量子数)及び固有関

数が正確に求められている。この理由は、

MLS 基底はグリッドの様な局所的情報を詳細に表現できる

基底であるという面に加えて、区分的に定義されているグリ

ッド基底等と比べて高次微分の数値精度が高いため運動

エネルギーが正確に評価されるためである。運動エネルギー

が比較的大きい激しく振動する波動関数の表現に優れて

いるという部分は、節点値に関数曲線が引っ張られること

によって、なめらかに波動関数が表現されるといった MLS

の描像からも直感的に理解できる。変分計算以外のアプロ

ーチとして、並列計算に適している遺伝的アルゴリズムと

の組み合わせることによって高励起状態解析に応用した結

果についても発表する。

【参考文献】 M.Sugawara Chem. Phys. Lett. 314 (1999) 522

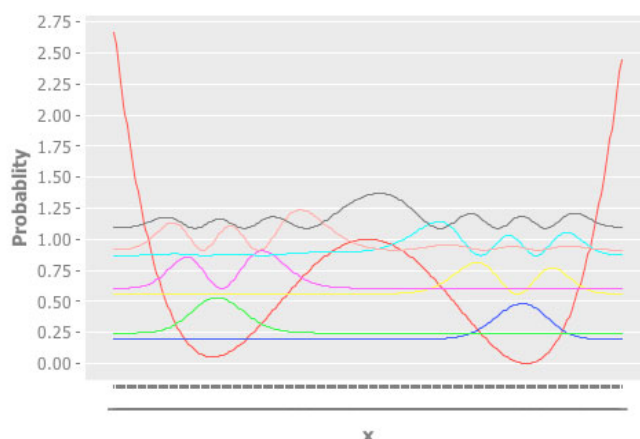


図1 ポテンシャルと固有振動波動関数

表1 計算された固有値の比較

量子数 (n)	計算値 (固有値)	正確解
0	0.194939	0.194985
1	0.245200	0.245240
2	0.559831	0.560280
3	0.604803	0.605107
4	0.869379	0.879071
5	0.912913	0.914110
6	1.088541	1.091204