

## 九州大学大型計算機センター国際学術共同研究による量子力学3体問題スーパーコンピューティング用ライブラリプログラムの開発と研究成果

上村, 正康  
九州大学理学研究院物理学部門

肥山, 詠美子  
高エネルギー加速器研究機構

木野, 康志  
東北大学理学研究科化学専攻

Jan, Wallenius  
スウェーデン中性子研究所

<https://doi.org/10.15017/4782079>

---

出版情報：九州大学情報基盤センター年報. 1, pp.59-63, 2001-10. 九州大学情報基盤センター  
バージョン：  
権利関係：

# 九州大学大型計算機センター国際学術共同研究による 量子力学3体問題スーパーコンピューティング用 ライブラリプログラムの開発と研究成果 Supercomputing with Library Program of Quantum Three-Body Calculations

上村 正康<sup>†</sup>      肥山 詠美子<sup>††</sup>      木野 康志<sup>\*</sup>      ヤン ワレニウス<sup>\*\*</sup>  
Masayasu Kamimura<sup>†</sup>      Emiko Hiyama<sup>††</sup>      Yasushi Kino<sup>\*</sup>      Jan Wallenius<sup>\*\*</sup>

<sup>†</sup> … 九州大学理学研究院物理学部門

<sup>†</sup> … Department of Physics, Kyushu University

<sup>††</sup> … 高エネルギー加速器研究機構

<sup>††</sup> … High Energy Accelerator Research Organization

<sup>\*</sup> … 東北大学理学研究科化学専攻

<sup>\*</sup> … Department of Chemistry, Tohoku University

<sup>\*\*</sup> … スウェーデン中性子研究所

<sup>\*\*</sup> … Institute of Neutrons, Sweden

**要旨** 九州大学大型計算機センターの「国際学術共同研究」のテーマの1つとして量子力学3体問題をスーパーコンピューターを用いて高精度・高速度に解くプログラムの開発を九大センターのライブラリ開発として行なった。この概要と、これを用いた研究成果の一端を発表した。

**Abstract** We reported some results of supercomputing with the use of a program for quantum three-body calculations which was developed by the present authors as one of the application library programs of Computer Center of Kyushu University. The program is suited for super-computing of various types of three-body systems with high precision and high speed.

## 1 はじめに

九州大学大型計算機センターの「国際学術共同研究」の制度を活用して、筆者等は、研究室を卒業し帰国した留学生や長期滞在して帰国した外国人訪問研究員と、九大センターのスーパーコンピューターを利用する共同研究を行った(1996-98)[1]。

同時に、この共同研究のテーマの1つとして、量子力学3体問題をスーパーコンピューターを用いて高精度・高速度に解く汎用プログラム開発を九大センターのライブラリ開発として行なった(1996-99)[2-5]。

このプログラムを活用したスーパーコンピューティ

ングの成果は続々と出ており、開発の中心人物であった肥山詠美子氏(九大院生→高エネルギー研助手)や木野康志氏(九大院生→東北大助手)による最近の多数回の国際会議招待講演などで発表されている。その肥山詠美子氏と木野康志氏はそれぞれ2001年の物理学会における新人賞(原子核理論関係)と若手奨励賞(原子分子関係)を受賞した。

本研究集会では、九大センターにおける上記の国際学術共同研究とライブラリ開発の経緯を報告し、研究成果としては、原子核物理学の3体問題・4体問題における大規模高速高精度計算の典型例として、反陽子

の質量決定の世界記録、粒子変換を伴う4体問題の世界初の計算成功、などについて報告した。

本稿では、我々の国際学術研究の概要とライブラリ開発の1例を記す。ライブラリを利用した成果については、文献[8-11]とその中のreferencesを参照いただきたい。

## 2 九大計算センター国際学術共同研究

「大型計算機センターを利用する国際学術共同研究」という新しい制度(有川節夫、広報 Vol.28, No.2, p.71)が平成7年度から始まった。我々の研究室(九州大学理学部物理学科原子核理論研究室)は当初からこれに参加した。この「国際学術共同研究」制度の目的は、大型計算機センターの高機能・高速な計算機資源を積極的に活用した、(1)本格的なソフトウェアの国際共同研究開発、(2)データベースの国際共同構築と利用、(3)日本人研究者の主導による新しい形の国際共同研究、(4)帰国留学生の指導、(5)帰国留学生・訪問研究員との共同研究の継続、(6)大型計算機センターの優れた計算機資源に接する機会の提供、などであり、新しい形の日本からの「国際貢献」の可能性が期待されている。この制度は、全国の大型計算機センターに先駆けて、九州大学大型計算機センターが企画した画期的なものであり、我々の研究室は大いに共鳴・賛同した。平成7-12年度の間に4回応募した計画が採択された。参加者は国外から6名、当研究室から4名であった。研究代表者の管理のもとに、参加者全員に共同研究のための計算機利用課題番号が与えられ、利用負担金が援助されている。4ヶ国の研究者との間で、それぞれ独立な4つの共同研究が進行した。その中の一つが、3体系理論計算の汎用コード作成およびミューオン触媒核融合の研究であった。参加者は、Jan Wallenius(スウェーデン、ウプサラ大学量子化学教室大学院生)、上村正康、肥山詠美子、木野康志であった。平成6年度の九大理学部「訪問研究員」(6ヶ月)であったWallenius氏は帰国後も九大グループとの共同研究を継続している。ミューオン分子の生成、構造、分子内核融合、粒子放出崩壊などの一連の過程を、3、4体系の束縛・散乱問題として研究すること、また、励起状態ミューオン分子を経由する新しいミューオン触媒核融合サイクルの理論的研究を行うこと、さらに、この研究を一般化させ、3体系理論計算の汎用プログラムを作成すること、が目的であった。

スウェーデンのWallenius氏は、九大センターのsupercomputerにtelnetで接続し大量の計算を行っている。計算機がすいている日本の深夜・早朝が逆に向こうの働きやすい時間帯に当たり、大いに能率が上がったことである。九大センターの24時間運転が意外なところで貢献している。彼はこの研究成果により昨年5月ウプサラ大学より博士学位を得た。Physical Review誌(Vol.A54, 1996, p.1171)に論文が掲載され、本制度がacknowledgeされている。また、本研究の一環として、上村、肥山、Walleniusにより、ミューオン分子の3体計算の汎用コードが作成され、1996年、九大センターのライブラリプログラムとして登録された[2]。1997, 1998, 1999年にはさらに、一般3体系、3核子系のプログラムが登録された[3-5]。

## 3 九大センター応用ライブラリプログラム開発

原子核や原子・分子などにおける3体系束縛状態を非常に厳密に解く方法として、「ヤコビー座標系ガウス型基底関数による組み替えチャンネル結合変分法」[6,7]が、九州大学理学部原子核理論研究室によって提唱・開発され、多くの成果を上げてきた。用いる基底関数が物理的に優れているという特徴の他に、その関数形を利用して、大量の行列要素が、vector processorの利点を極限まで活かして計算されているという特徴がある。その計算法に基づくプログラムを、九州大学大型計算機センターの応用ライブラリプログラムとして、シリーズで開発・公開している[2-5]。本稿では、その第2弾として、発表された「任意の形をした中心力ポテンシャル(スピン非依存)による3体系の汎用コード」(Three-Body Systems 2、略称TBS2)の概要を説明しておく。

3体系束縛状態を解くために、波動関数を3体系のガウス型基底関数系によって展開する。この基底関数系によるハミルトニアン(運動エネルギーと2体中心力ポテンシャルの和)の行列要素とoverlap行列要素を計算し、一般固有値問題を解いて固有値(エネルギー)と固有ベクトル(展開係数)を求めるのが本プログラムの役割である。運動エネルギーの行列要素は解析積分が可能であるが、ポテンシャルについては、調和振動子型、ガウス型、湯川型、クーロン型のときのみ可能である。本プログラムは、それ以外の一般的な形を

したポテンシャルの場合に使えるのがセールスポイントであり、適用範囲が非常に広がる。

この一般化のためには、2粒子間の動径座標（ポテンシャルの座標）についての1重の精密数値積分を多数回行うプログラミングをする必要があり、これがネックの1つとなる可能性があった。しかし、本プログラムにおいては、ガウス型基底関数の特徴（サイズパラメータを変化させて関数系を作る）を生かした巧みな内挿法を開発した結果、行列要素積分を高速・高精度に行うことが可能となった。解析積分の速度・精度とほとんど変わらないので、調和振動子型、ガウス型、湯川型、クーロン型の場合も本プログラムを利用して差し支えない。3体系の行列要素計算は、6重の積分より成り、多重積分を解析的に行うには（上記の場合、1重の数値積分が残る）、一般には複雑な角運動量代数計算が必要であって、ノート作りが非常に煩雑である。これを、筆者らが開発した Infinitesimally-shifted Gaussian-Lobe basis functions [8,9] を使って、ガウス型基底関数を表現することにより克服している。この表現方法は、ポテンシャルがスピンや運動量・角運動量に依存する複雑な場合 [3-5] において一層威力を発揮する。

本プログラムは2つの部分より構成される。1つは、利用者が用意するポテンシャルの FUNCTION プログラムである。もう1つは、メインプログラムを含むその他のすべてのプログラムである（これが九大センターの UXP のライブラリプログラムとして用意される）。利用者は、これらを合体させて計算を実行する。または、本ライブラリプログラムのフォートソースを公開しているので、それを取り寄せ、ポテンシャルの FUNCTION プログラムと合体させて、全体を自分自身のコンプリート プログラムとして計算を実行する。

本プログラムでは、原子核の3体系を想定している。ポテンシャルの数値積分を原子核の単位系に適合させているからである。その他の、原子・分子などの中心力3体系の場合は、本プログラムのソースを取り寄せて、単位系と数値積分範囲の変更を行えばよい。

本計算法は応用が広く、各種の3体系に適用可能だが、いかなる3体系にも絶え得る汎用プログラムを目指す、余りにも煩雑となって能率的でなく、ミスも起こり易い。特殊な系に適用したい場合は、むしろ、利用者が、本ライブラリプログラムのソースを取り寄

せて、各自の具体的な3体系に合わせて、自由に（主としてメイン）プログラムを書き換えて使用して構わない。

#### 物理量の定義

3個の粒子に1、2、3という名前をつける。本プログラムではスピンを陽には考えない。3組のヤコビー座標系を設定する [7] (粒子1、2、3に関して cyclic になっている)。粒子の対称性について、つぎの3通りを考える。(a) 3個の粒子とも別粒子。

(b) 2個の粒子が同種粒子で空間部分が対称。この2個は必ず、粒子1と2に設定する。

(c) 3個の粒子とも同種粒子で空間部分が対称。

3体系のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla_{r_c}^2 - \frac{\hbar^2}{2M_c} \nabla_{R_c}^2 + V_1(r_1) + V_2(r_2) + V_3(r_3).$$

ポテンシャル  $V_1(r_1), V_2(r_2), V_3(r_3)$  の関数形は、利用者が FUNCTION プログラムで任意に設定する（後述）。クーロンポテンシャルもそれに含める（従って、粒子の電荷は入力データには打ち込まない）。

チャネル  $c$  の3体ガウス型基底関数を

$$\Phi_{JM, \alpha_c}^{(c)} = \phi_{i_c}^{(c)}(r_c) \chi_{L_c I_c}^{(c)}(R_c) [Y_{l_c}(r_c) \otimes Y_{L_c}(R_c)]_{JM} \\ (\alpha_c \equiv JM, l_c L_c i_c I_c).$$

と定義する。動径のガウス型関数は（添字  $c$  を略して）

$$\phi_{li}(r) = N_{li} r^l \exp\left\{-\left(\frac{r}{\bar{r}_i}\right)^2\right\},$$

$$\chi_{LI}(R) = N_{LI} R^L \exp\left\{-\left(\frac{R}{\bar{R}_I}\right)^2\right\}$$

係数  $N$  は規格化定数、 $\langle \phi_{li} | \phi_{li} \rangle = N_{li}^{-2}$ 。ガウス関数の range は、等比級数として

$$\bar{r}_i = \bar{r}_1 a^{i-1} \quad (i = 1 \sim n),$$

$$\bar{R}_I = \bar{R}_1 A^{I-1} \quad (I = 1 \sim N).$$

で与える [1,2]。

全系の波動関数は、上記の粒子の対称性 (a), (b), (c) に対応して、

$$\Psi_{JM} = \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1}^{(1)} \Phi_{\alpha_1}^{(1)} + \sum_{\alpha_2} A_{\alpha_2}^{(2)} \Phi_{\alpha_2}^{(2)} + \sum_{\alpha_3} A_{\alpha_3}^{(3)} \Phi_{\alpha_3}^{(3)},$$

$$\Psi_{JM} = \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1} (\Phi_{\alpha_1}^{(1)} + (-)^{l_1} \Phi_{\alpha_1}^{(2)}) + \sum_{\alpha_3} A_{\alpha_3} \Phi_{\alpha_3}^{(3)},$$

$$\Psi_{JM} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} (\Phi_{\alpha}^{(1)} + \Phi_{\alpha}^{(2)} + \Phi_{\alpha}^{(3)})$$

と表現される。(b) 式の  $(-)^{l_1}$  の phase は、ベクトル  $r_1$  と  $r_2$  の向きの違いを補正して粒子 1 と 2 の空間部分を対称にするために入れてある。対称化のため、(b) 式では、 $\alpha_3$  中の  $l_3$  は偶数である。同じく、(c) 式では、 $\alpha$  中の  $l$  は偶数である。

シュレーディンガー方程式

$$(H - E)\Psi_{JM} = 0$$

を、通常のように、レイリーリッツの変分法で解き (大次元行列の一般固有値問題となる)、波動関数の未知係数  $A_{\alpha}$  と固有エネルギー  $E$  を決定する。

### 入力データの意味

コンプリート プログラムであるので、利用者はジョブコントロールファイルと入力データファイルを作り、バッチジョブとしてサブミットする。

チャンネル番号  $c$ 、角運動量  $l_c$  と  $L_c$  を指定したワンセット  $(c, l_c, L_c)$  を 1 つの "configuration" と呼ぶことにする。それぞれの configuration に対して、ガウス基底関数の項数  $(n, N)$  と range の下限  $(r_1, R_1)$  と上限  $(r_n, R_N)$  を入力データとして与える必要がある。range の単位は fm である。

フォートラン プログラム (ソースを公表) に用いられている入力用変数名の意味は次のとおり。

AM1,AM2,AM3 : 粒子 1, 2, 3 の質量数

IENERG : エネルギーを求める固有状態の数、下から数えて 200 以下

IVECT : 波動関数ベクトルを出力する固有状態の数 (IVECT は IENERG 以下)

ISYM : 粒子の対称性。(a):ISYM=1, (b):ISYM=2, (c):ISYM=3

J : 全角運動量 (4 以下)

NCONF : 採用する configuration の数 (24 以下)

IPARI: 状態のパリティ指定。+パリティ: IPARI=1, -パリティ: IPARI=-1.

ICHAN(i) : i-th configuration のチャンネル番号  $c = 1, 2, 3$  (対称性条件に留意)

LSM(i) : i-th configuration のガウス関数の  $l_c$  (4 以下)

LLG(i) : 同じく  $L_c$  (4 以下)

ISMAX(i) : 同じく  $n$  (30 以下)

ILMAX(i) : 同じく  $N$  (30 以下)

RSMIN(i) : 同じく  $\bar{r}_1$  (fm)

RSMAX(i) : 同じく  $\bar{r}_n$  (fm)

RLMIN(i) : 同じく  $\bar{R}_1$  (fm)

RLMAX(i) : 同じく  $\bar{R}_N$  (fm)

3 粒子の対称性が (b):ISYM=2 の場合は、チャンネル  $c=1,3$  の configuration についてのみ入力し、 $c=2$  については不要なので入力しない (すればエラーとなって計算しない)。また、対称性が (c):ISYM=3 の場合は、 $c=1$  についてのみ入力し、 $c=2,3$  については不要なので入力しない (すればエラーとなって計算しない)。

### 出力データ

固有エネルギーと波動関数ベクトルが主たる計算出力である。固有エネルギーは 3 体の breakup threshold から計ってある。

出力データは次のように並ぶ。

- 1) AM1, AM2, AM3 の出力
- 2) IENERG, IVECT, ISYM の出力
- 3) NCONF, J, IPARI の出力
- 4) ICHAN(i), LSM(i), LLG(i), ISMAX(i), RSMIN(i), RSMAX(i),  
ILMAX(i), RLMIN(i), RLMAX(i), i=1-NCONF の出力
- 5) 基底関数の総数 NOMAX と行列要素の総数 NAA-MAX
- 6) 行列要素の計算時間 (秒)
- 7) エネルギー固有値 (下から IENERG 個)
- 8) 固有値問題を解くのに要した時間 (秒)
- 9) 波動関数の係数ベクトルの出力 (IVECT>0 のとき)。

### ジョブ制御文 (バッチリクエスト文) の作り方

本ライブラリプログラムは UXP 上で利用できる。このプログラムのオブジェクト ファイルが tbs2.o という名前で登録されている。これと、利用者が用意す

るポテンシャルのプログラムが入ったファイル（例えば、pot.fとする）とを合体させた実行ファイル（例えば、tbs2.xとする）を発生させ、かつ、これを実行するバッチリクエストファイル（例えば、tbs2.vpとする）を作成する。これらの利用者ファイルがあるディレクトリをmydirとすると、tbs2.vpの中身は次のようになる。

```
#
cd mydir
firt -Ob -Ps -Wv, -m3 -o tbs2.x tbs2.o pot.f
-lssl2vp
tbs.x < input.d > output.d
```

入力データはinput.dに書き込む。出力データはoutput.dに書かれる。  
これを、例えば

```
kyu-cc% qsub -q s tbs2.vp
```

とサブミットする。

もちろん、公開されているソースファイルを取り寄せ、ポテンシャル用ファイルと合体させて、すべてを手元で行ってもよい。

#### 例題、計算時間

この方法は変分法であるので、基底関数（試行関数）のパラメータについて、いくつかのセットで計算し、エネルギーの収束を見ることになる。したがって、1つのパラメータセットについて十分に高速である必要があるが、本計算法はそれを満足している。

利用者の参考になるよう、標準的な入力データ、ポテンシャルプログラムとして、原子核の3核子間に調和振動子ポテンシャルが働く場合のものを、本ソースプログラムの最終部に、コメント行の形で付けてある（左端のCの字を削除して全体を一字分左に寄せる）。テストケースとして使ってみるとよい。計算結果が、さらにその後にコメント行として付けてある。解析積分可能な調和振動子ポテンシャルであることを意識せず、数値積分が行われている。 $J=2$ 状態について(ENERG=20, IVECT=0, ISYM=3)、基底関数の総数NOMAX=312で、VPPを使い、パラメータの1セット当たり、行列要素計算に12秒、一般化固有値問題の解に0.7秒である。行列要素計算の大部分は、ポテンシャル数値積分内挿のための準備計算であるので、基底関数総数NOMAXが増えても増加率は鈍い。一

般化固有値問題の時間はNOMAXのほぼ3乗で増加する。

## 4 参考文献

- [1] 高田健次郎、上村正康、九州大学大型計算機センター広報、Vol.30, No.2 (1997) 48
- [2] 上村正康、肥山詠美子、木野康志、J. Wallenius, 九州大学大型計算機センター広報、Vol.29, No.2, (1996) 78
- [3] 肥山詠美子、上村正康、木野康志、J. Wallenius, 九州大学大型計算機センター広報、Vol.30, No.2 (1997), 117
- [4] 肥山詠美子、上村正康、木野康志、J. Wallenius, 九州大学大型計算機センター広報、Vol.31, No.4 (1998), 199
- [5] 肥山詠美子、上村正康、九州大学大型計算機センター広報、Vol. 32, No.4 (1999), 188
- [6] M. Kamimura, Phys. Rev. A38 (1988), 621.
- [7] H. Kameyama, M. Kamimura and Y. Fukushima, Phys. Rev. C40(1989), 974.
- [8] E. Hiyama and M. Kamimura, Nucl. Phys.A588 (1995) 35c.
- [9] E. Hiyama et al. Phys. Rev. C53 (1996),2075.
- [10] E. Hiyama et al, Phys. rev. Lett. 85 (2000) 270.
- [11] Y. Kino et al. Phys. Rev. A63 (2001), 012518.