大規模固有値問題の解法に関わる諸問題

吉田 大輔, 肥山 詠美子

理化学研究所
仁科加速器科学研究センター
ストレンジネス核物理研究室

量子多体問題の第一原理計算で目指すこと

“量子多体”問題

定常状態のSchrödinger方程式

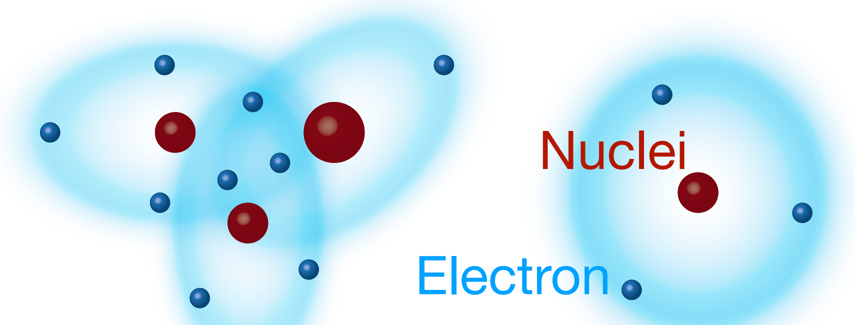
$$\hat{H}\Psi = \left(\hat{T} + \hat{V}\right)\Psi = E\Psi$$

- 束縛状態(実固有*E*状態)
- 共鳴散乱(複素固有*E*状態)

時間発展

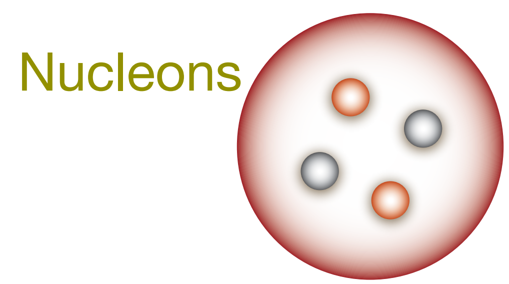
反応等

物質のスケールによっていろいろな力の場(有効場)がある



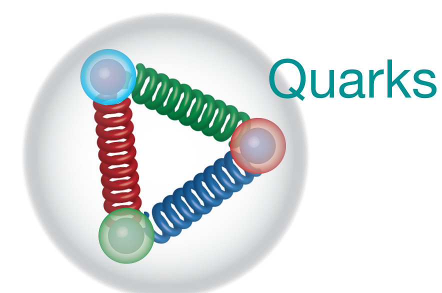
分子　**原子**

- Coulomb力 (長距離)
- スピン軌道(LS)力



原子核

- 中心力
- 短距離の強い斥力
- テンソル力(非中心)
- スピン軌道(LS)力



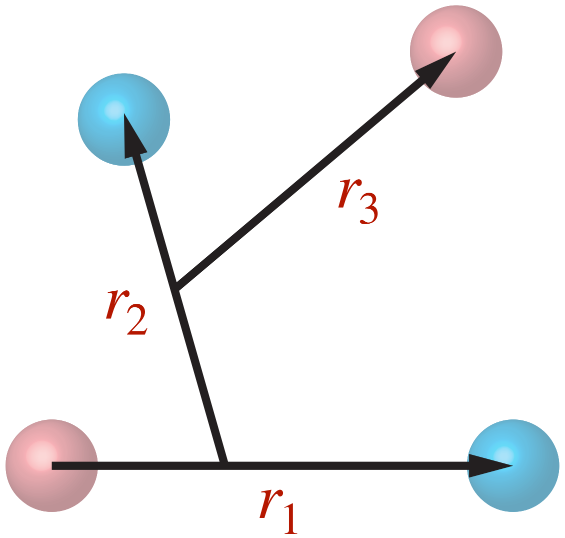
ハドロン

- クォーク模型による
  カラー閉じ込め力

変分法(非経験的手法)によって、最良のエネルギー固有値 E と固有関数 Ψ を得る！

さまざまな物理量の予測が可能：$\langle A \rangle = \int \Psi^*(x)\, \hat{A}\, \Psi(x) dx$

変分法



相対運動を記述するためには

N = 粒子数-1 (空間積分は3N)

定常状態のSchrödinger方程式

$$\hat{H}\Psi = \left(\hat{T} + \hat{V}\right)\Psi = E\Psi$$

「**完全系による展開**」を再現するような基底系を選べたなら…

永年方程式を解けば良い

$$\left(\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \cdots & H_{NN} \end{bmatrix} - E \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1N} \\ S_{21} & S_{22} & & S_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ S_{N1} & S_{N2} & \cdots & S_{NN} \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots) \\ \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots) \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

$$H_{IJ} = \int \psi_I^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots)\hat{H}\psi_J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots)\mathrm{d}\mathbf{r}$$

$$S_{IJ} = \int \psi_I^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots)\psi_J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots)\mathrm{d}\mathbf{r}$$

「**完全系による展開**」に、いかにして近づけるか

それを目指したとき、どのような問題に直面するか

変分法で「厳密」な解を得るためには ①

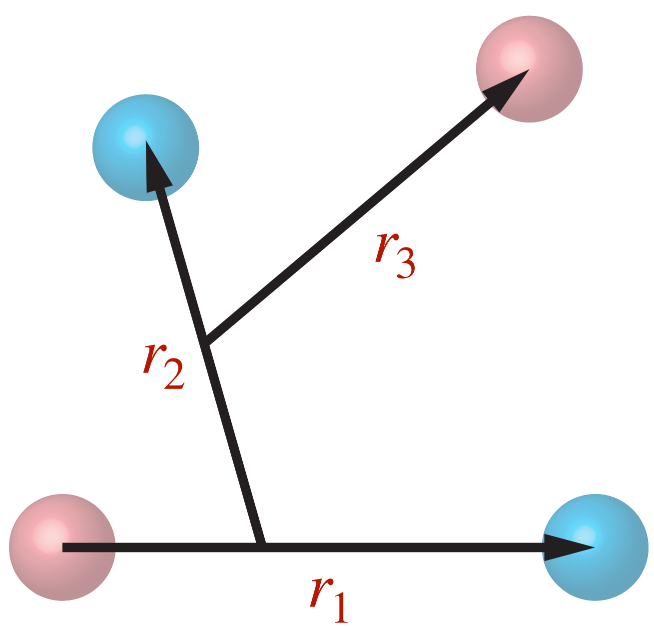
「完全系による展開」に、いかにして近づけるか

$$\Psi_{LM}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N) = \sum_{\alpha} f_\alpha \mathcal{A}_\alpha \sum_{c=1}^{N_c^\alpha} \Psi_c(\boldsymbol{r}_{c1}, \boldsymbol{r}_{c2}, \dots, \boldsymbol{r}_{cN})$$

試行波動関数

f_α Normalization factors

$\mathcal{A}_\alpha$ (anti-)symmetrization factors



変数分離

動径部分

$R(r_1, r_2, r_3, \cdots)$

角度部分

$\Theta(\hat{r}_1, \hat{r}_2, \hat{r}_3, \cdots)$

どのような動径関数で展開するか

- **調和振動(harmonic oscillator, HO)関数**

$$\psi^{\mathrm{HO}}(r_i) = h_k(r_i; r_c, \alpha)\ \exp\left(-\alpha(r_i - r_c)^2/2\right)$$

簡便であるが大きな展開が必要

- **顕に相関するガウス(explicitly-correlated Gaussian, ECG)関数**

$$\psi^{\mathrm{ECG}}(r_i) = A_\alpha \exp(-\alpha r_i^2)$$

HOより少ない展開で厳密解に近づける

「厳密」=「良い基底」で展開する

変分法で「厳密」な解を得るためには ②

「完全系による展開」に、いかにして近づけるか

$$\Psi_{LM}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N) = \sum_{\alpha} f_\alpha \mathcal{A}_\alpha \sum_{c=1}^{N_c^\alpha} \Psi_c(\boldsymbol{r}_{c1}, \boldsymbol{r}_{c2}, \ldots, \boldsymbol{r}_{cN})$$

試行波動関数

f_α Normalization factors

$\mathcal{A}_\alpha$ (anti-)symmetrization factors

変数分離

動径部分

$R(r_1, r_2, r_3, \cdots)$

角度部分

$\Theta(\hat{r}_1, \hat{r}_2, \hat{r}_3, \cdots)$

$$\Theta_{LM}(\boldsymbol{r}_c) = \left[\left[[Y_{\ell_1,m_1}(\hat{\boldsymbol{r}}_{c1})Y_{\ell_2,m_2}(\hat{\boldsymbol{r}}_{c2})]_{L_{1,2},M_{1,2}} Y_{\ell_3,m_3}(\hat{\boldsymbol{r}}_{c3})\right]_{L_{12,3},M_{12,3}} \ldots Y_{\ell_N,m_N}(\hat{\boldsymbol{r}}_{cN})\right]_{LM}$$

角運動量 $M(L)$ の固有状態として許されるような球面調和関数のカップリングで展開

特殊関数積分のアプローチは、多体への拡張が困難(ボトルネック)

Gaussian lobe関数を用いる展開法により、**多体の積分**が可能になった.

$$N_{n\ell}\, r_i^\ell\, e^{-\nu_n r_i^2} Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}}_i) = N_{n\ell} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{(\nu_n \varepsilon_i)^\ell} \sum_{k=1}^{K} C_{\ell m,k}\, e^{-\nu_n (\boldsymbol{r}_i - \varepsilon_i \boldsymbol{D}_{\ell m,k})^2}$$

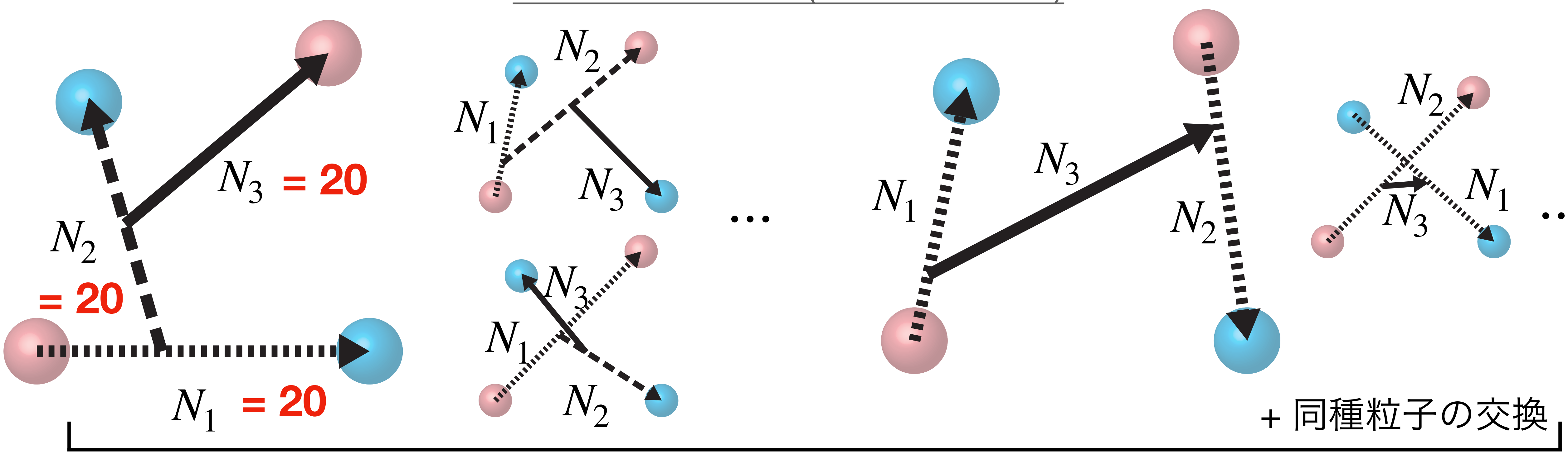
任意の粒子数でハミルトニアン行列 $H_{IJ} = \int \psi_I^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots) \hat{H} \psi_J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots) d\mathbf{r}$ が生成可能

「厳密な」解に辿り着くために必要な基底関数系の次元

動径波動関数

- 粒子数-1 個の相対座標
- 座標系の取り方 (生成・解離過程を適切に記述する)

N = 4 体問題の例 (3個の相対座標)



$N_{\rm channel}$ ~ 80

粒子数、粒子種に依る

$$N_{\rm basis} \sim N_{\rm channel} \times N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$$

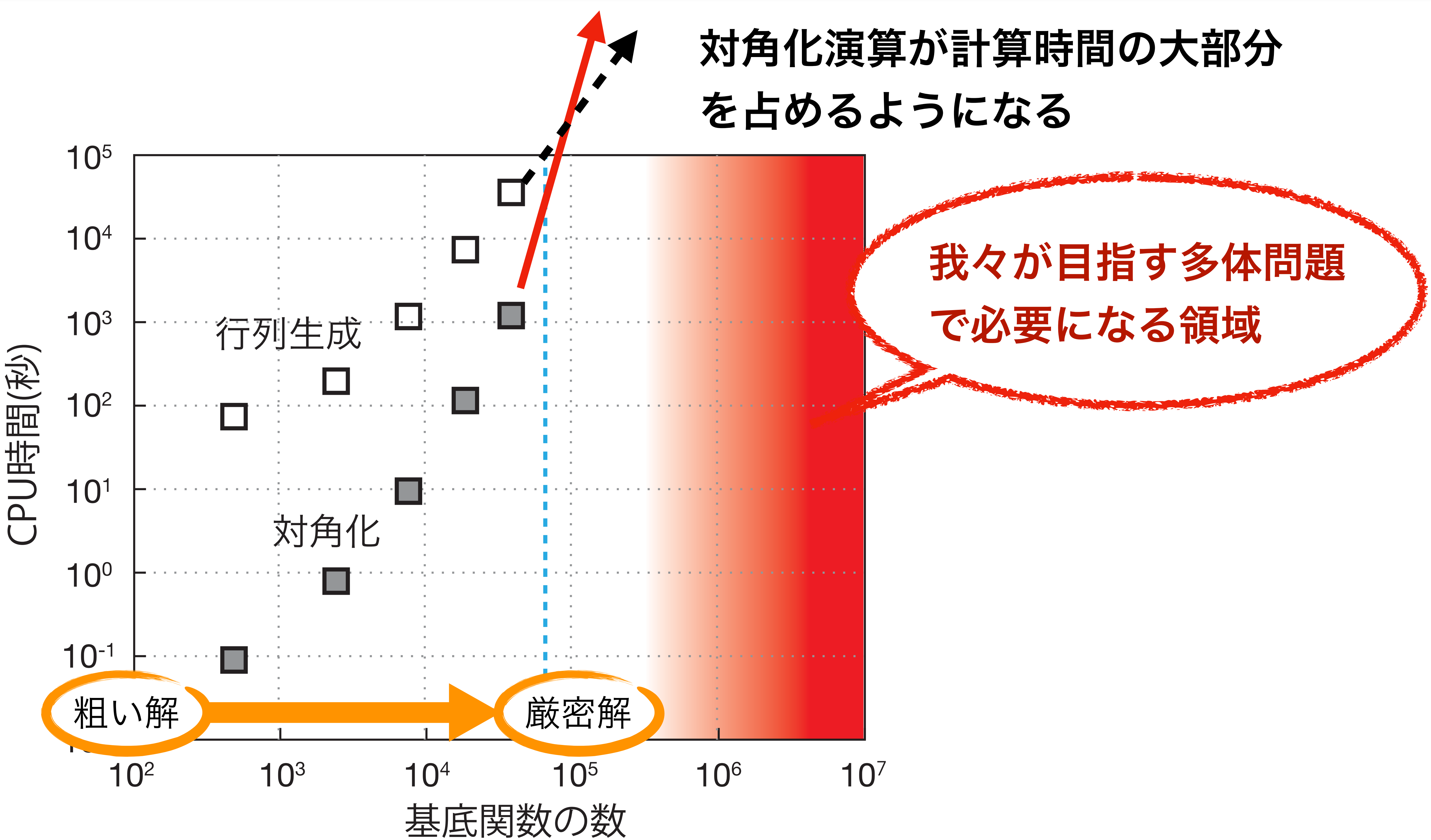
= 640,000

$$N_{\rm basis} \sim \boxed{N_{\rm channel}} \times \prod_{i=1}^{N-1} \boxed{N_i}$$

N (-body)	# channels	# basis	Total
3	~ 30	20	10^4-10^5
5	~ 130	20	10^6-10^7
8	~ 1000	20	**> 10^{10}**

Warning!

「厳密な」解に辿り着くための計算要件



* スーパーコンピュータシステムITO(九州大学 情報基盤研究開発センター),
1 node, 36 core, 168 GB.

3体問題でのベンチマークデータ

高速な大規模行列(10^{10}次元以上)の対角化が必要

"量子多体"問題

定常状態のSchrödinger方程式

$$\hat{H}\Psi = \left(\hat{T} + \boxed{\hat{V}}\right)\Psi = E\Psi$$

束縛状態(実固有E状態)

共鳴散乱(複素固有E状態)

時間発展

反応等

$$\left(\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \cdots & H_{NN} \end{bmatrix} - E \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1N} \\ S_{21} & S_{22} & & S_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ S_{N1} & S_{N2} & \cdots & S_{NN} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots) \\ \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots) \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

計算要件

✔ 対称(定常状態)、複素固有値問題(共鳴状態)→ 非対称

✔ 基本的には密(dense)行列

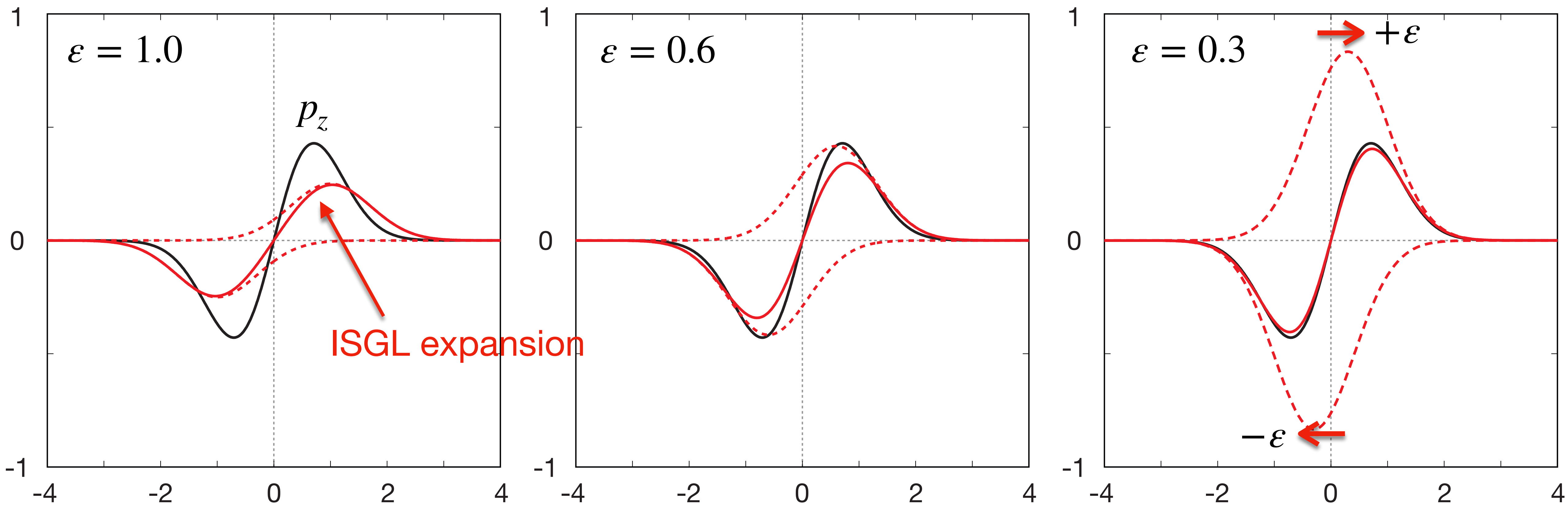
✔ 8-byte integer 長の大きな配列 + 演算領域が必要

✔ 最低固有値から数〜20個程度(?)、
固有値・固有ベクトルを得られればよい

- **並列版対角化アルゴリズムが必要**
- **"条件数"問題はクリアできる？**

無限小変位ガウスローブ (Infinitesimally-Shifted Gaussian Lobe) 法

$$N_{n\ell}\, r_i^{\ell}\, \mathrm{e}^{-\nu_n r_i^2}\, Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}}_i) \;=\; N_{n\ell} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{(\nu_n \varepsilon_i)^{\ell}} \sum_{k=1}^{K} C_{\ell m,k}\, \mathrm{e}^{-\nu_n \left(\boldsymbol{r}_i - \varepsilon_i \boldsymbol{D}_{\ell m,k}\right)^2}$$



p_z 型関数の例

$$\psi_{\ell=1,m=0}(z) = z\exp(-\alpha z^2) \sim \frac{1}{4\pi\alpha}\left[\exp\left(-\alpha(z-\varepsilon)^2\right) - \exp\left(-\alpha(z+\varepsilon)^2\right)\right]$$

微小変位ローブ関数をそのまま積分すると桁落ちするが、
級数展開を応用することにより解析的な積分が可能.