Krylov 部分空間法に基づくシフト線形方程式による TDDFT の線形応答計算

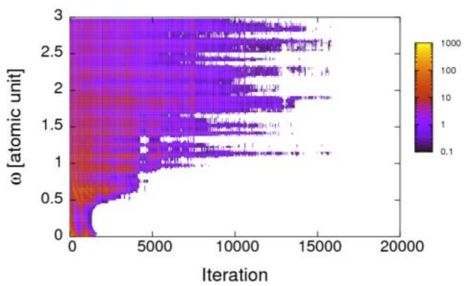
篠原 康[A,B]、二村 保則[A]、矢花 一浩[B,C]、櫻井 鉄也[A]
[A]筑波大学システム情報工学研究科、[B]筑波大学数理物質科学研究科、[C]筑波大学計算科学研究センター

本講演では量子多体系にしばしば現れる

$$(\omega-\hat{h})\psi(\omega)=V$$

の形をした線形方程式を少ない計算資源で解く解法を TDDFT の線形応答計算を例として紹介する。

TDDFT の線形応答を評価するには主に a)ハミルトニアンの対角化 b)線形方程式を解く方法 c)実時間発展の方法 d)連分数展開の方法 の四つの解法が挙げられる。これらの中で計算コスト、及び使用メモリ、計算の安定性等の観点から c)の実時間発展の方法がよく用いられる。本研究では b)の線形方程式を解く解法として Krylov 部分空間法に基づくシフト線形方程式の解法を用いる事で、計算コストが実時間発展の方法と同程度に抑えられる事を示した。この解法を用いる事で、上記の式を特定のωの値に対して解く事で、他のωに対する線形方程式の解を得る事が出来る。また、特に光吸収の断面積を物理量として得たい場合には、当解法の過程で保持する大部分の波動関数をスカラー値に出来る事に注目し、使用メモリを大幅に削減できる事を示した。これらの工夫により実時間発展の方法と比較可能な計算コスト、使用メモリ量に抑えた線形方程式の解法を開発する事に成功した。



右に窒素分子を対象に波長無限大の電場が照射された際の光吸収の断面積を求めるための線形方程式の反復回数に対するω毎の残差履歴を示す。本計算ではω=3 [a.u.]の反復計算をする事で、他のωに対しては行列ベクトル積の演算を行う事なしに残差、及び逐次近似解を求めている。$\omega=3$ [a.u.]以外の点に関しても計算が問題なくワークしている事が確認できる。

本発表では、より詳細な定式化と結果、適用範囲について議論を行いたい。