

電子構造計算に現れる固有値問題の数値解法について

A numerical approach to eigenvalue problems in electronic structure calculations

李東珍¹, 宮田考史¹, 曾我部知広², 星健夫³, 張紹良¹

D. Lee¹, T. Miyata¹, T. Sogabe², T. Hoshi³, and S.-L. Zhang¹

¹名古屋大学 ²愛知県立大学 ³鳥取大学

¹Nagoya University ²Aichi Prefectural University ³Tottori University

固有値問題が現れる応用分野は多岐に渡り、応用分野に応じて様々な固有値のニーズがある。本研究では、電子構造計算に現れる固有値問題[1,2]に焦点を当て、固有値のニーズに対応した数値解法の研究と開発に取り組む。

本研究で扱う問題は、実対称行列および実対称正定値行列の一般化固有値問題である。本問題において、固有値はすべて実数であり、エネルギー状態に対応する。物理的には、ある少数のエネルギー状態、すなわち、ある少数の固有値にのみ関心がある。そのため、必要な少数の固有値を選別し、効率的に計算可能な数値解法が必要とされている。

少数の固有値に対するニーズにも様々なものがある。例えば、「スペクトルの端に近い固有値」や、ある値（近似的な固有値）が与えられた上で「その値に近い固有値」を求めるニーズがある。このようなニーズに対しては、射影法と呼ばれる枠組みにおいて、様々な数値解法[3]が提案されており、Lanczos法のように応用分野で長い使用実績のある解法も存在する。一方、本研究で扱う固有値のニーズは、これらのニーズと異なり、次のように整理される。

固有値をその大きさによって（例えば小さい順に）番号を割り当てたとする。ここで、物理的に定まる番号が与えられた上で、「その番号を有する固有値」を求めることが、本研究で扱う固有値のニーズである。このような固有値は、（想定した番号[1,2]においては）スペクトルの端に存在しない。また、近似的な固有値を与えることも困難である。そのため、本研究で扱う固有値のニーズに対して、従来の解法を適用することは困難である。これらを踏まえ、「与えられた番号を有する固有値」を計算するため、我々が取り組んだアプローチ[4]を発表する。

[1] T. Hoshi and T. Fujiwara, Domain boundary formation in helical multishell gold nanowires, *J. Phys.: Condens. Matter* 21, 272201 (2009).

[2] T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, and S.-L. Zhang, *J. Phys.*, An order-n electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system, *J. Phys.: Condens. Matter* 24, 165502 (2012).

[3] Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst, *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A Practical Guide*, SIAM, Philadelphia, 2000.

[4] D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, and S.-L. Zhang, An interior eigenvalue problem from electronic structure calculations, submitted.