新学術領域　コンピューティクスによる物質デザイン：
複合相関と非平衡ダイナミクス

複合数理原理による
超大規模超並列電子状態計算

星 健夫 （代表者）（鳥取大学）

線形方程式
固有値問題

計算物質科学の基盤となる
超大規模系のための高速解法

張 紹良（代表者）（名古屋大学）
山本 有作（分担者）（神戸大学）
曽我部 知広（分担者）（愛知県立大学）
今堀 慎治（分担者）（名古屋大学）
宮田 考史（分担者）（名古屋大学）
杉原 正顯（連携者）（青山学院大学）

電子構造計算に現れる固有値問題の数値解法について

李東珍[1], 宮田考史[1], 曽我部知広[2], 星健夫[3], 張紹良[1]

[1]名古屋大学　[2]愛知県立大学　[3]鳥取大学

「新学術領域」コンピューティクスによる物質デザイン：
複合相関と非平衡ダイナミクス

平成 25 年度第 1 回研究会
2013 年 7 月 8 日　東京大学

目次

- ✓ はじめに
  - 固有値のニーズ
  - ニーズに対応する解法
- ✓ 本研究で扱うニーズ
  - 既存解法を用いたアプローチと問題点
- ✓ 本研究のアプローチ
- ✓ 数値実験
  - 実問題（発光ポリマ，金ナノワイヤ）への適用
- ✓ まとめと今後の課題

はじめに

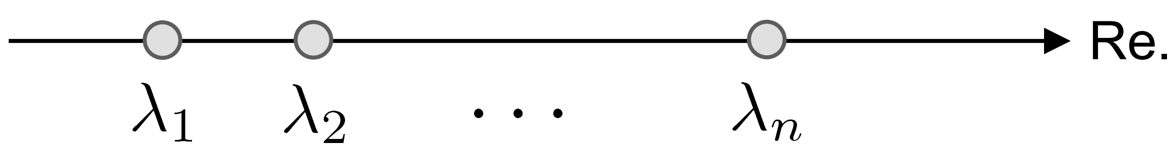
✓ 本研究で扱う問題

- 一般化固有値問題　$A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$

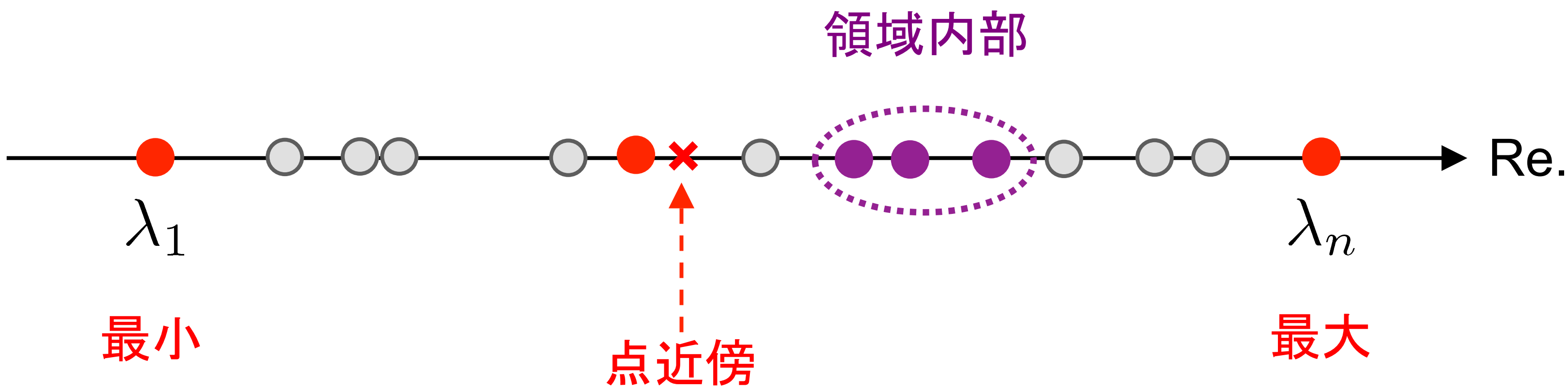
  » 入力：　行列　$A,\ B \in \mathbb{R}^{n\times n}$

  » 出力：　固有値と固有ベクトル　$\lambda \in \mathbb{C},\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$

- 固有値はすべて実数　（$A,\ B$：対称，対称正定値）



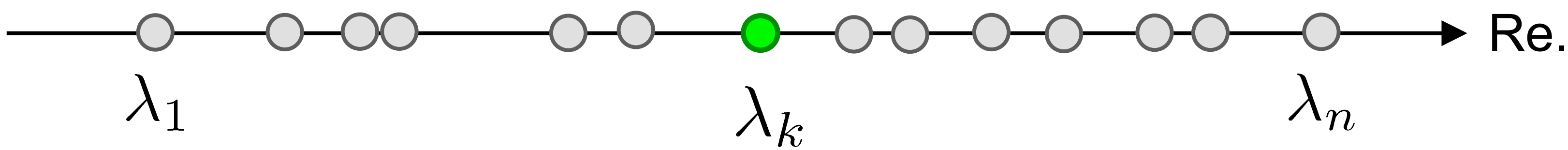
固有値のニーズと解法



ニーズ	解法
すべて	準直接法（QR，QZ）
最小，最大，点近傍	反復法（Krylov，JD）
領域内部	Sakurai-Sugiura

本研究で扱うニーズ

$\boxed{\text{ニーズ}}$ 与えられた $k \in \mathbb{N}$ に対して → k 番目の固有値 λ_k



- 必要な固有値は少数
- 最小や最大ではない $(k \neq 1, n)$
  - » 発光ポリマ $(k = 2343, n = 4686)$
  - » 金ナノワイヤ $(k = 5610, n = 9180)$
- 点や領域の指定は困難

異なるニーズ
→ アプローチは？

本研究のアプローチ

✓ 慣性と反復法の組み合わせ

(Step 1)　慣性 & 反復法

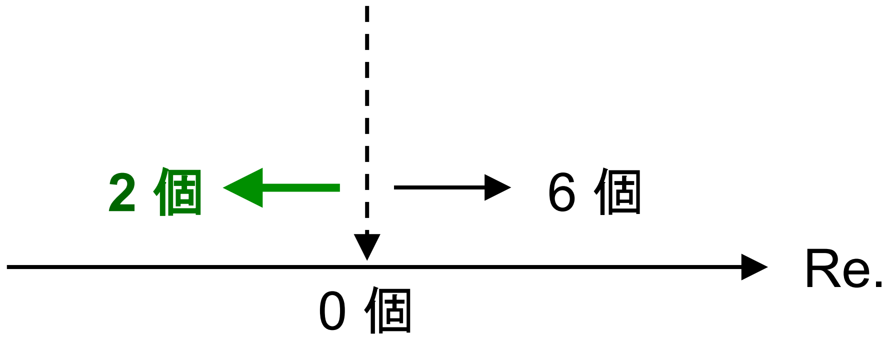
(Step 2)　慣性（二分探索）

(Step 3)　反復法

✓ 慣性とは？

与えられた $\sigma \in \mathbb{R}$ に対して → $\lambda \begin{cases} < \sigma \\ = \sigma \\ > \sigma \end{cases}$ となる λ の数

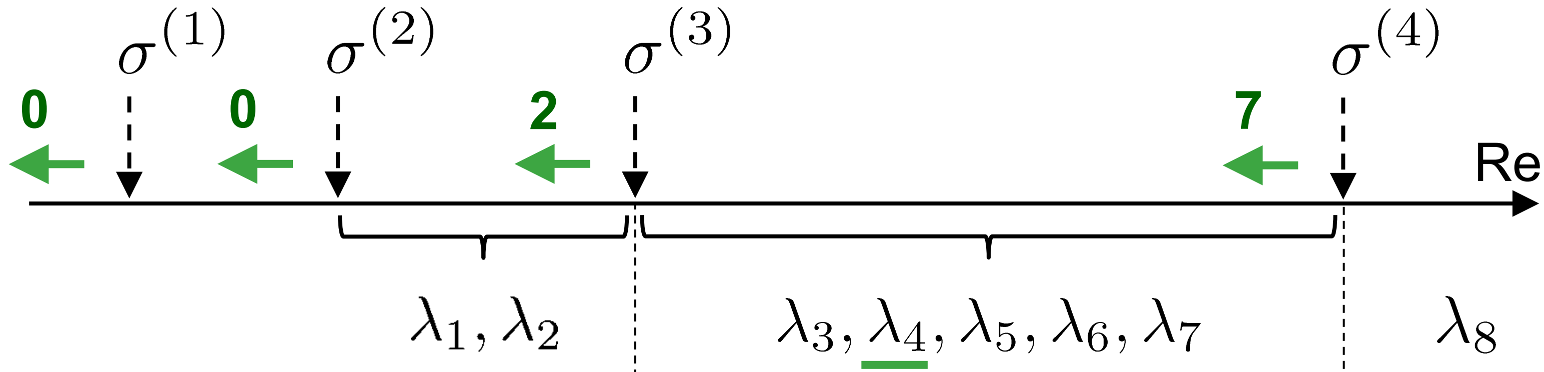
（ λ の値は分からない）



慣性の利用　$(n = 8, k = 4)$

(Step 1)

？

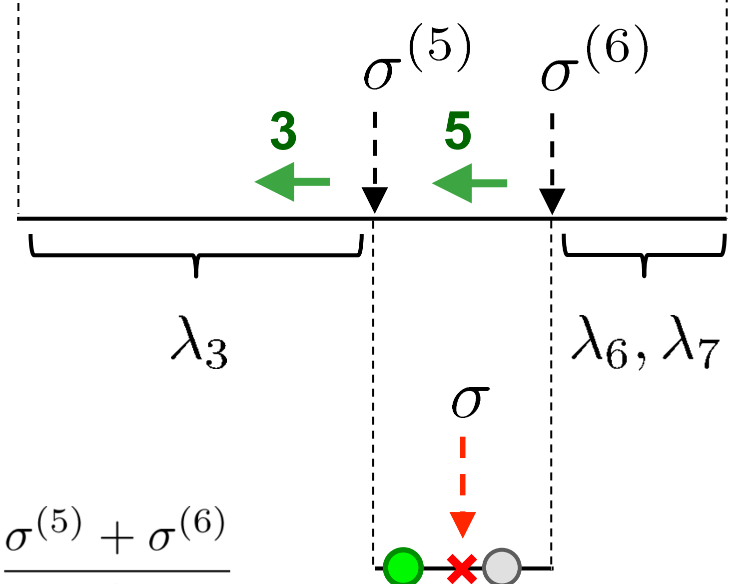


(Step 2)

慣性(二分探索)

$$\sigma^{(5)} = \frac{\sigma^{(3)} + \sigma^{(4)}}{2}$$

$$\sigma^{(6)} = \frac{\sigma^{(5)} + \sigma^{(4)}}{2}$$



区間内の固有値数

m 個以下

(Step 3)

反復法（点近傍）

$$\sigma = \frac{\sigma^{(5)} + \sigma^{(6)}}{2}$$

反復法の利用 @ Step 1

① どこから始める？

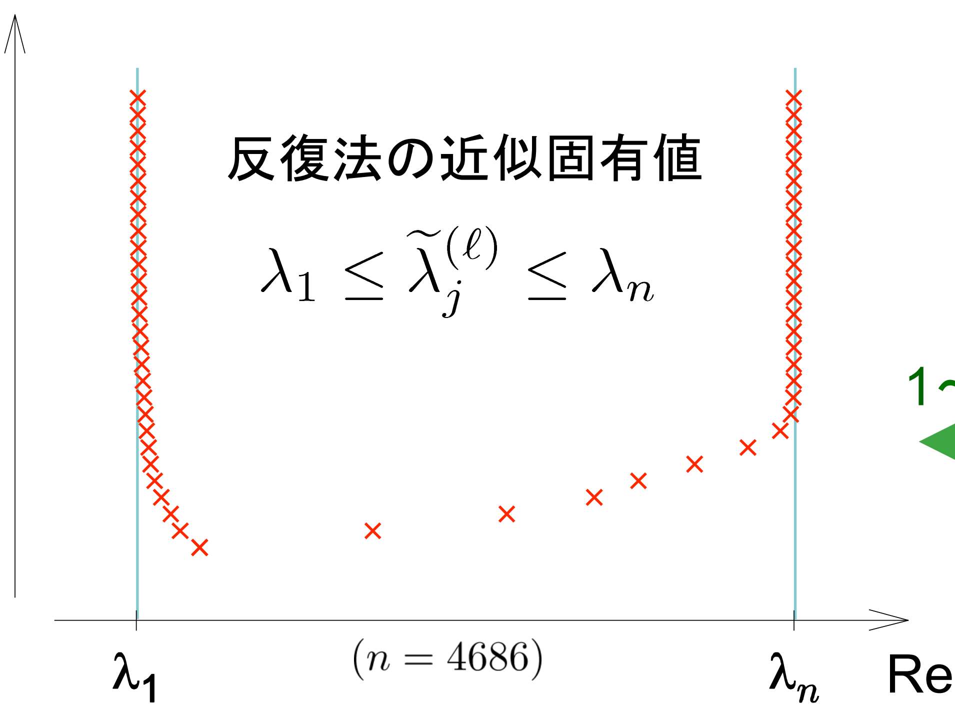
② 次の点はどこに？

③ いつかは λ_k を含む？

ℓ : 反復回数

反復法の近似固有値

$$\lambda_1 \le \widetilde{\lambda}_j^{(\ell)} \le \lambda_n$$



$$\sigma^{(\ell)} = \begin{cases} \widetilde{\lambda}_j^{(\ell)} & (\ell : \mathrm{odd}) \\ \dfrac{\sigma^{(\ell-1)} + \widetilde{\lambda}_j^{(\ell)}}{2} & (\ell : \mathrm{even}) \end{cases}$$
$$j \in \{1, \ell\}$$

1〜n

① 初期近似固有値

② 1 反復後の近似固有値を活用

③ 多くても $\ell = n$ で含む

数値実験

- 計算機環境: Intel Xeon 5960 (3.4 GHz), Fotran 倍精度演算

- 発光ポリマ $(k = 2343, n = 4686)$

解法	計算された固有値(16桁)	計算時間(秒)
QR 法	-0.42587755479569 50	59.1
本研究	-0.42587755479569 62	34.6

Step	計算:回数	(秒)
1	反復法:2 慣性:2	0.2 9.0
2	慣性:4	18.1
3	分解:1 反復法:63	4.5 2.8

- 金ナノワイヤ $(k = 5610, n = 9180)$

解法	計算された固有値(16桁)	計算時間(秒)
QR 法	0.1305388835941 169	408
本研究	0.1305388835941 206	308

Step	計算:回数	(秒)
1	反復法:2 慣性:2	1 65
2	慣性:6	196
3	分解:1 反復法:37	33 13

まとめと今後の課題

✓ まとめ

- 電子構造計算に現れる固有値問題に対して
  - » 固有値のニーズを整理（k 番目の固有値）
  - » 慣性と反復法を組み合わせたアプローチ

- 数値実験の結果
  - » 必要な固有値を QR 法よりも少ない計算時間で得られた

✓ 今後の課題

- 慣性計算の高速化（近似計算, GPU の利用）
- 大規模問題への適用と性能評価