

Title	Development of a first-principles code for large super-cells based on the screened KKR method
Author(s)	土居, 抄太郎
Citation	大阪大学, 2013, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/60112">https://hdl.handle.net/11094/60112</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	と い しょう たろう 土 居 抄 太 郎
博士の専攻分野の名称	博 士 (理学)
学位記番号	第 2 5 8 1 9 号
学位授与年月日	平成 25 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 理学研究科物理学専攻
学位論文名	Development of a first-principles code for large super-cells based on the screened KKR method (大規模スーパーセルを対象とした遮蔽 KKR 法に基づく第一原理計算コードの開発)
論文審査委員	(主査) 教授 小川 哲生 (副査) 教授 田島 節子 准教授 キース スレヴィン 准教授 浅野 建一 助教 小倉 昌子

論 文 内 容 の 要 旨

KKR Green 関数法は全電子第一原理電子状態計算法の一つであり、Kohn-Sham 方程式を自己無撞着に解く際に、一電子方程式の固有値問題を解く代わりに対応する Green 関数を直接計算して複素エネルギー積分を実行することによって電荷密度を高精度かつ効率的に構築することを特徴とする。

一電子 Green 関数は任意の参照系を元に Dyson 方程式を解くことで計算される。ここで参照系は結晶と同様の格子構造を持つ各格子点上に異なるポテンシャル散乱体が並ぶ系として定義される。Dyson 方程式を解く問題はユニットセル中の原子数  $N$  に比例する次元を持つ複素正方行列の逆行列計算に帰着する。通常の KKR 法では、ポテンシャル散乱体が全く存在しない自由空間を参照系として採用するが、逆行列計算に  $LU$  分解を用いる限り  $O(N^3)$  の計算量が必要とされるため、 $N$  を大きくすると計算量が劇的に増大する。

この困難を克服するために遮蔽 KKR の概念が 1995 年に提案された。遮蔽 KKR 法では斥力マフィンティンポテンシャルが格子点に並んだ系を参照系として採用する。このような参照系では、Green 関数が斥力ポテンシャルの高さよりも十分に低いエネルギー領域において実空間で指数関数的に減衰するため、精度を損なう事無く長距離相関を無視することが正当化される。それに伴い逆行列を計算すべき行列が、零要素が支配的となる疎行列となり、高速な疎行列ソルバと組み合わせることで計算効率が大幅に改善されることが期待される。遮蔽 KKR 法は、提案以来、主にユニットセルが一次元方向にのみ拡張された多層膜系に対して適用されてきた。多層膜系では疎行列パターンが特に単純なブロック三重対角の形になるために、 $LU$  分解を用いて自己無撞着計算を進めるための計算コストが厳密に層の厚さに比例し、1 万層を超える多層膜の電子状態計算を今日のデスクトップ PC 上で手軽に実行することが可能となった。

多層膜系を超えて、三次元方向に拡張されたより複雑かつ一般的な系を対象として遮蔽 KKR 法を適用することが望まれる。このような一般大規模スーパーセルに対しては一般非 Hermite ブロック疎行列を扱う必要がある。疎行列ソルバとしては、 $LU$  分解に代表される直接法よりも、大規模疎行列係数連立一次方程式の解法として広く用いられている反復法が適している。更に反復法を用いた場合、逆行列の各列ベクトルが独立に計算され

るために並列化が容易である。

我々は大規模スーパーセルを対象としたフルポテンシャル遮蔽 KKR 法に基づく第一原理計算コードを開発した。Dyson 方程式は反復法により解かれ、スーパーセル中の原子数に関して MPI 並列化されている。種々のテスト計算を通じて、我々のコードの信頼性及び高い並列化効率を示された。我々のコードを用いることにより、数千原子を含むスーパーセルを対象とした全電子レベルの第一原理電子状態計算を非常に高速かつ高精度に実行することが可能となる。

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

学位申請者は固体の電子状態を密度汎関数法に基づいて計算するための手法の一つである遮蔽 KKR グリーン関数法を大規模系に適用することを可能にする手法について検討を行い、それにもとづいて 3 次元オーダー  $N$  遮蔽 KKR グリーン関数法を進展させ、その計算機コード化を行った。

遮蔽 KKR グリーン関数法はユーリッヒのグループによって提案された方法であり、系の電子状態に対するグリーン関数を決めるダイソン方程式に現れる参照系として自由空間を用いず、一定斥力ポテンシャル系を用いる方法である。これによってダイソン方程式に現れる構造グリーン関数は、占有エネルギーバンド領域においては指数関数的に減衰する伝搬関数となり、実空間表示でのダイソン方程式は短距離化する。この方法を用いると電子系の 2 次元方向には周期性を有するが、1 次元方向には任意の原子配列を許す系に対しては、計算精度を犠牲にすることなくオーダー  $N$  計算 (計算量が原子の個数  $N$  に比例する計算) が可能であることが示されており、実際に積層構造をもつ系の計算に適用されてきた。しかし、同じ手法を 3 次元的に任意の構造を持った系に適用しようとすると、扱わなければならない行列 ( $N$  次元エルミート正方行列) が疎行列であることは積層構造の場合と同様ではあるが、その疎行列構造は直接法によってオーダー  $N$  計算が可能となるものではない。したがって、遮蔽 KKR グリーン関数法は大きな可能性を秘めた方法では有るが、その適用は特殊なものに限られてきた。これに対して、最近ユーリッヒのグループは直接法を用いずに反復法を用いることによって、3 次元一般構造についてもオーダー  $N$  計算が可能になることを指摘し、それに対するテスト計算が行われた。

学位申請者はこのことに注目し、これまで用いてきた遮蔽 KKR グリーン関数法に反復法を導入すること、さらにフルポテンシャル KKR グリーン関数法を導入することによって、計算能力を著しく高めることを考えた。具体的にはこれまでの遮蔽 KKR グリーン関数法計算アルゴリズムの一般化、フルポテンシャルコードの導入、ダイソン方程式をとくための効率の良い反復法およびそのためのプレコンディショニング、松原グリーン関数の導入による  $k$  点サンプリングの高精度化、計算機高度の超並列化を行い、最終的に非常に完成度の高い、これまでにない大規模系第一原理計算のためのシステムを作り上げた。

これらのコードを用いて様々なテスト計算を行うとともに、並列計算もを行い、その結果理想的なオーダー  $N$  性能および並列化性能が示されることを実証した。これらの結果はデバイスサイズの大規模構造の電子構造シミュレーションが第一原理的に行えるようになることを意味し、京速計算機と組み合わせることによる物質科学における新たな展開を期待させるものである。よって、本論文は博士 (理学) の学位論文として十分価値あるものと認める。