

大規模行列の固有値問題 ～厳密対角化からモンテカルロ計算まで～



教授 本間 道雄

概要

○原子や原子核などの量子多体系の性質を調べることは、多くの場合、その系に対応する行列の固有値を調べる数学的な問題に帰着される。この行列のサイズは、システムの構成要素の自由度が増えるにしたがって急激に増大する。コンピュータ技術の進展により、現代ではパソコン上でも10億次元程度の行列の固有値をいくつか求めることができるようになった。しかし、多くの興味ある問題に現れる行列は桁違いに大きく、スーパーコンピュータでも扱うことができないのが現状である。

○本研究は、量子多体系に対応する巨大な行列の固有値を、なるべく高い精度で求めることを目指している。その実現のためには、効率の良い並列計算アルゴリズムと、適切な誤差評価が必要である。そのひとつの可能性として、対角化計算に確率論的な手法を導入した近似計算法を開発している。

実用化の可能性

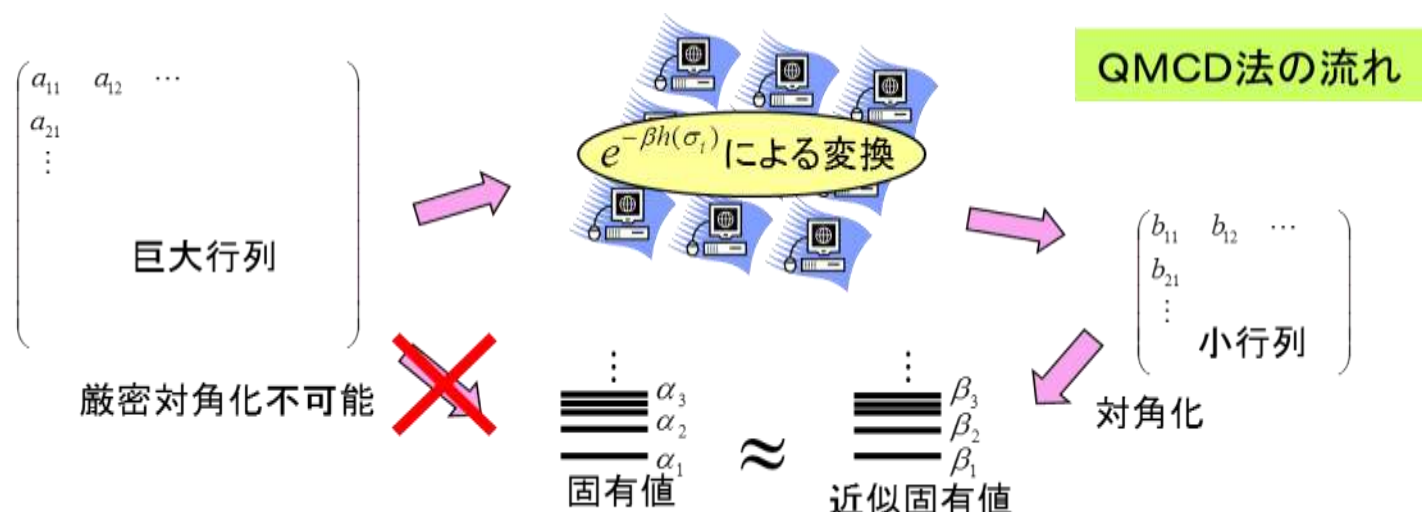
○QMC D (Quantum Monte Carlo Diagonalization) 法は、固有値の射影演算子に基づくモンテカルロ並列計算により、量子多体系の巨大行列を小行列に変換して固有値を計算する方法であり、いままでに原子核の構造計算に応用されたが、他のシステムにも適用可能かもしれない。

UBICからのメッセージ

○物質の微視的な構造を求める際にエネルギースペクトルの解析が行われます。この解析のために行列の固有値が必要となります。10億行10億列の行列の固有値は10億個ありますが、多くの場合、興味ある固有値はそのうちの数十個です。

○この研究では、巨大行列を小行列に変換し、興味ある少数個の固有値を近似的に求めます。必要な場合には、求めた固有値の精度を別の手段で上げることも行われます。

研究概要図



巨大システムの解析が可能に