

Problém vlastních čísel symetrických řídkých matic v souvislosti s výpočty elektronových stavů

Matyáš Novák

Diplomová práce, MFF UK 2012, 95 stran.

Obsah

Numerické výpočty pomocí DFT (density functional theory) se čím dál tím více uplatňují nejen ve fyzice, ale též v kvantové chemii a dokonce v materiálovém inženýrství při studiu materiálových vad (dislokací), šíření trhlin či alespoň nepřímo, upřesňováním tvaru potenciálů vystupujících v atomistických simulacích a molekulární dynamice. Je proto chvályhodné, že si autor předložené diplomové práce vybral právě toto hypermoderní téma.

V první části jsou přehledně shrnuty základní rovnice kvantové mechaniky, tj. Kohnova-Shamova rovnice a její obohacení o pseudopotenciálový funkcionál, zahrnující akci slaběji interagujících částic a relativistické efekty. Pseudopotenciál je vyjádřen v separabilním tvaru, což je důležité pro následnou diskretizaci MKP. Ta je standardní.

Druhá část, fakticky těžiště práce, se věnuje řešení zobecněného problému vlastních čísel. Svěbytnost úlohy je charakterizována ztrátou řídkosti matic v důsledku načtení korekčních členů od pseudopotenciálu. Jedná se o korekci o nízké hodnotě (tzv. k -rank update s nízkým k), což znamená, že namísto explicitního sestavení matice je výhodné upravit jen její násobení. Jako metoda řešení byla z několika možností zvolena bloková Lanczosova metoda.

Ve třetí části je popsáno řešení dvou testovacích příkladů: výpočtu struktury atomu dusíku a dvouatomové molekuly téhož prvku. Autor se zde zaměřil na detailní prověření implementace a efektivity paralelizace. Ačkoliv zde pochopitelně zůstává mnoho prostoru pro další výzkum a programování, z přiložených výsledků plyne dobré zvládnutí a porozumění problematice.

Závěr: Vynikající diplomová práce s přesahem do několika oborů: fyziky, numerické matematiky a programování. Jednoznačně doporučuji k obhajobě.

Otázky a poznámky

1. Obvyklým nedostatkem DP a někdy i disertačních prací je nejasné odlišení vlastního přínosu od převzatých poznatků. V daném případě se to týká vytvoření formulace se separabilním pseudopotenciálem (původní autor J. Vackář), použití řešičů z knihoven (J. Dongarra) a zabudování modulu do MKP prostředí (R. Cimrman). Mohl by autor DP upřesnit svůj konkrétní přínos v těchto oblastech?
2. Mocninná metoda je známá v inženýrských aplikacích jako vektorová iterace, případně inverzní vektorová iterace, vyskytuje se vždy v blokové formě a efektivně se kombinuje s Ritzovou minimalizací (nikdy ne s GS ortogonalizací!). Zejména v této verzi mluvíme o iteraci podprostoru – viz např. K.J. Bathe – kniha doporučená v zadání DP. Osobně mám s tímto algortimem pro řešení zobecněných problémů velkého rozsahu dobré zkušenosti, což je i potvrzeno jeho značným rozšířením v komerčních kódech. Dnes se jedná dokonce o standardní postup, možná frekventovanější než Lanczosova metoda (alespoň v praktických aplikacích).

Nerozumím proto kritice na str. 42 a ani celkové hodnocení této metody v DP mi nepřipadá příliš kvalifikované. Co např. znamená poznámka o náročnosti násobení matice vektorem?

3. Testovací příklad. Bylo by zajímavé doplnit porovnání vypočtených energií a rozložení nábojové hustoty s "oficiálním řešením," které je tabelováno v normách. Autorův poznatek, že volba startovacích vektorů příliš neovlivňuje rychlost konvergence mohu jen potvrdit. Právě z tohoto důvodu se často používají náhodná čísla, a to i při restartech. Jako prakticky důležitější se jeví celkové robustnost implementace a boj se ztrátou ortogonality.
4. Lingvistická poznámka: Chybné skloňování, jako např. Kohn-Shamova rovnice, Gram-Schmidtova ortogonalizace apod. Nadměrné používání archaické předložky "dle." "Sít s uniformní hustotou nodů" zní přímo odporně a pro mě nepochopitelně. Proč ne pravidelná či strukturovaná síť a proč ne "uzly"? Jinak je však DP psána celkem dobrou češtinou, což je dnes bohužel spíš výjimečné.

V Praze, dne 13. května 2012

Ing. Jiří Plešek, CSc.,

Ústav termomechaniky AV ČR