

課題名 (タイトル) :

オーダーN 法第一原理計算プログラムの開発と応用計算

利用者氏名 :

宮崎 剛

所属 :

和光研究所 基幹研究所 戒崎計算宇宙物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

密度汎関数法にもとづく第一原理計算手法は、その高い計算精度と汎用性の高さから、材料科学、物質科学、地球物理、表面科学などの様々な分野で大きな役割を果たしてきた。しかし、通常の計算手法では計算量が系の含む原子数 N の 3 乗に比例して急激に増大する為に、原子数が千を超える巨大系に対して第一原理計算を適用するのは大変困難である。この問題に対して我々は計算量、メモリ量が N に比例するという新しい計算手法 (オーダーN 法)、プログラムを開発することによって超大規模系の第一原理計算を実現することに成功している。本研究課題の目的は、我々が開発しているオーダーN 法第一原理計算プログラムを RICC 上で動かし、理研の研究者がオーダーN 法第一原理計算手法を用いて巨大系の計算を行うことを可能とし、技術的な支援をすることである。

2. 具体的な利用内容、計算方法

今年度は計算をする機会が無かった。計算には、理研外部からネットワークを介して接続する必要があるが、物質・材料研究機構の内部からは接続が困難であった。

3. 結果

実際には使用する機会が無かったので、特記すべき事項は無い。

4. まとめ

今年度は計算時間を使用していない。

5. 今後の計画・展望

RICC の計算機の並列化効率などを機会があれば調べる事を計画している。

ば調べる事を計画している。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

これまででは計算時間を全く使っていないが、今後は並列化効率向上などに従事する必要がある可能性がある。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

このプロジェクトは支援的な内容が強く、今年度は計算時間を全く使っていないため。

