

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 戎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 に比例するという計算手法 (オーダー N 法) を用いた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するための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

今年度は実際に計算をする機会は無かった。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る。理研で当該プログラムを用いた共同研究は引き続き行われている。

3. 結果

この研究課題を用いた計算機使用は無かった。

4. まとめ

5. 今後の計画・展望

当該プログラムの最新バージョンを RICC の計算機上で動作確認を行い、問題があればデバッグ作業を行う。また、機会があれば RICC での並列化効率向上に対する研究を行う。

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

これまでは計算時間を全く使っていない。今後はデバッグ作業や、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. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

8. 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。