

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

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 戎崎計算宇宙物理研究室

報告内容

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。理研で本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

この研究課題による計算機使用は無かった。

4. まとめ

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使用していない。

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 の計算機上に導入する。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使っていない。プログラムに関する議論、質問に対応している。今後も支援を続け、最新バージョンに対するデバッグ作業などを行う。また、並列化効率向上などに従事する可能性がある。

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使っていないため。