

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、原子数が数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通常困難である。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きた。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 CPU 時間は用いなかった。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

本研究課題による CPU 時間の消費、ジョブ投入はほとんど無かった。

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。特に、我々のプログラムを用いた共同研究にとって重要だと考えられる効率

的なオーダーN 法第一原理分子動力学手法が導入されたバージョンのコンパイルとテスト計算を行うことを計画している。入出力が少し増加したので、それに関して効率の確認をし、問題があればデバッグ作業を行う。

6. 利用がなかった場合の理由

このプロジェクトは支援的な内容が強く、ログイン、コンパイルできることが一番重要である。今年度は特に大きな問題が無かったので、時間は必要が無かった。