

課題名 (タイトル) :

計算コストが $O(N)$ となる新規長距離補正密度汎関数法の開発

利用者氏名 : ○川島 雪生

所属 : 計算科学研究機構 研究部門 平尾計算化学研究ユニット

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

化学現象の解釈や化学実験の検証に不可欠な存在となりつつある量子化学の主要理論となっているのが、密度汎関数理論(DFT)である。DFT は、化学を再現するのに必要な精度の計算を高速に行うことが出来る上、並列化効率が高く、Order-N 化 (計算時間を電子の数に比例させること) も比較的容易なアルゴリズムを用いている。2012 年に運用を開始したスーパーコンピュータ「京」の威力を発揮する手法としても期待されている。しかし、従来の DFT は、ファンデルワールス結合や電子移動励起など大規模系計算で重要である物性を再現できないという重大な問題があった。

DFT による大規模系の物性の高精度再現を可能にしたのが、平尾らが開発した長距離補正(LC)法である。超分極率や励起エネルギーなどの大規模系の物性のみならず、反応障壁など DFT 計算の問題点を解決に導いた。

LC 法は電子間相互作用 $1/r$ を誤差関数(erf)を導入し、短距離成分と長距離成分を次式のように分割する。

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1 - erf(\mu r_{12})}{r_{12}} + \frac{erf(\mu r_{12})}{r_{12}}$$

変数 r_{12} は二つの電子間距離、 μ は短距離成分と長距離成分を分割するためのパラメータである。LC 法は短距離成分には DFT の交換汎関数を用いて計算し、長距離成分には Hartree-Fock の交換積分を用いて計算する手法である。パラメータ μ が 0 の極限では DFT、 μ が無限大で波動関数理論の Hartree-Fock 法となる。

従来の DFT で取り込む事が出来なかった電子間の長距離相互作用を取り込むことに成功し、DFT 計算の様々な問題点を解決している。その一方で、Hartree-Fock 交換積分の計算が必要となるため、従来の DFT よりも計算コスト高くなってしまふ。また、DFT 法は本来、Order-N 化が容易であるが、Hartree-Fock 交換積分の Order-N 化は世界で未だ成

功例がなく、LC 法の高速な計算アルゴリズムはほとんど報告されていない。

そこで、本研究では LC 法の計算精度を維持しつつ、高速な計算を可能にする新しい LC 法の開発を行うことを目的として研究を行う。

本研究は科学研究費助成事業 (基盤研究(S)) の研究課題『密度汎関数理論の新展開』の研究テーマの一つである。

2. 利用がなかった場合の理由

今年度は現在に至るまで、主にアルゴリズムや計算プログラムの開発に取り組んでおり、RICC の計算機が必要不可欠となる応用計算を実行しなかったため、利用していない。

来年度こそは応用計算を行い、可能であればぜひ RICC のコンピュータを使わせて頂きたいと考えている。