

京速計算機と

第一原理モンテカルロ法

独立行政法人 物質・材料研究機構

計算材料科学研究センター 第一原理反応グループ

JSTさきがけ

前園 涼

ナノ・バイオ分野の問題

多変数の固有値方程式

$$\hat{H} \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

演算子

固有函数

固有値...エネルギーに対応

$$\hat{H} = \hat{H}(\{\vec{r}_j, \vec{\nabla}_j\}; \{\text{外部環境}\})$$

原子核の位置 $\{\vec{R}_\alpha\}$ や外場など...

- 固有値 「エネルギー」;
 - 外部環境1 $\rightarrow E_1$
 - 外部環境2 $\rightarrow E_2$
 - \vdots
- 固有函数 「物理量平均値」

$$O \sim \int (d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N) \cdot \Psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \cdot [\hat{O}] \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

例えば原子核位置に掛かる力...

$$\vec{F}_\alpha \sim \int (d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N) \cdot \Psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{V}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; \vec{R}_\alpha, \vec{R}_b, \dots)}{\partial \vec{R}_\alpha} \right] \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

ナノ・バイオ分野の目標

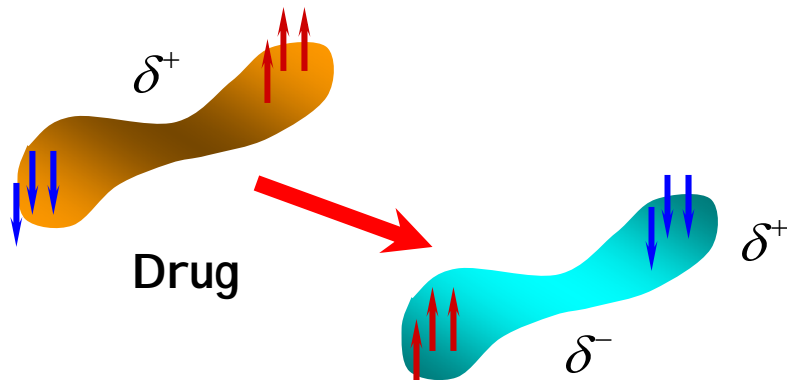
多変数の固有値方程式 $\hat{H} \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$

揺動や応答に関わるエネルギーの予見。



目的に沿った材料開発

安定構造の予見。



分子デザイン

近似的取扱い

多変数の固有値方程式 $\hat{H} \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$

「真面目に解くのは難しい」。

「平均場近似」, 「局所近似」etc...

近年分かってきた事。

ナノ・バイオ分野でしばしば破綻。

従来近似で記述し切れていない「ゆらぎ」の効果

ナノ・バイオ系での揉め事

相互作用の「ゆらぎ」がきつかるう。

(e.g. バイオ系での分子間結合、強相関係での電子状態 etc.)

従来近似理論による予見が真実か？

ゆらぎを取り入れたら融けてしまうのではないか？

ゆらぎをキチンと取り入れた計算をして、

ちゃんと確かめたい。

多體方程式の真面目な取り扱い

$$\hat{H} \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad \text{ゆらぎをキチンと取り入れた計算。}$$

昔はとてもムリだった。

最近、出来るようになってきた。

多體波動函數の時間発展を真面目に廻す！

「大きな計算機資源」

第一原理で、固體でも！

「第一原理量子モンテカルロ法」

私の扱っている手法の特徴

(第一原理量子モンテカルロ法)

- 基底状態汎用法としては最も精度が高い

(近似などについて一番文句が出ない)

~~「...近似なしに基本方程式を解く第一原理拡散量子モンテカルロ法...」~~

- 量子化学計算よりも精度が高く

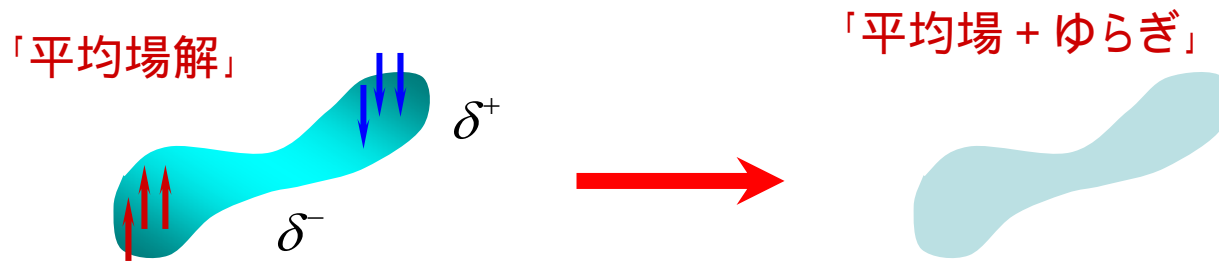
かつ、固体周期系にも適用可能。

第一原理量子モンテカルロ法

$$\hat{H} \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E \cdot \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad \text{ゆらぎをキチンと取り入れた計算。}$$

払うことの出来る最大限の努力で、

「ゆらぎ」による答の變化が生じるか？



「ゆらぎ効果」の様相。電子相關問題。

従来近似法のクセを読んで、量子デザイン法に反映。

「第一原理量子モンテカルロ法」

計算機能力が律するフロンティア

日米くらいでしか計算が廻らない！

(特に固体や大規模分子)

現状：常時投入クラスのジョブで (32pu並列、12時間クラス)

基底能計算：1000電子、1ヶ月くらい。

(more for 力、励起、應答など)

High Performance Computing Facilities...

- * **Hitachi**; SR11000
- * **Cray**; T3E, XT3
- * **SGI**; Origin2000, Origin3000, Altix.
- * **Fujitsu**; PrimePower
- * **HP**; GS320, ES40, ES45, GS1280
- * **IBM**; SP3, p690.
- * **Clusters**; Pentium3, Opteron.

機種依存しないよう大変厳しく保守されている。



最近の研究

- ナトリウム固体 (512電子の周期セル)
- ダイヤモンド固体 (1000電子の周期セル)
- NiO固体 (1024電子の周期セル)
- グリシン3量体、FMO-QMC (100電子の孤立系)

「精密計算は小規模分子だけ」という印象の払拭。

近年の状況

英米で汎用コードが発展。

(MPI実装。高い並列化率)

- 孤立系(分子科学)、周期系(固体物理学)

全て一本のコードで扱える...

- 全電子/擬ポテンシャル
- 平面波基底/Gaussian基底/局在化基底/数値基底

Q ; 次世代京速計算機のターゲットアプリとして適當か？

外國人を含んだ共同研究

國家プロジェクトとしてふさわしくない？



まとめ

- 多體電子系の従来近似に関する揉め事

ナノ・バイオ系の物性予測や理解に本質的。

- 電子相關の正攻法

計算機能力のカッティング・エッジを使って
實現可能となってきた。

「第一原理量子モンテカルロ法」

次世代京速計算機？



近年の状況

英米で汎用コードが発展。

(MPI実装。高い並列化率)

- 孤立系(分子科学)、周期系(固体物理学)

全て一本のコードで扱える...

- 全電子/擬ポテンシャル
- 平面波基底/Gaussian基底/局在化基底/数値基底

Q ; 次世代京速計算機のターゲットアプリとして適當か？

外國人を含んだ共同研究

國家プロジェクトとしてふさわしくない？

