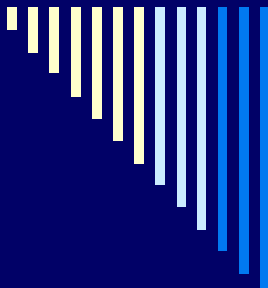



新計算手法と京速

常行真司 (東大院理)



「超」並列計算機である京速に 何を期待するか？ どうすれば有効利用できるか？

- 物性予測の精度と信頼性の向上
 - 定量性のある物性値
 - 可能性を調べつくす
(場合の数はシステムサイズとともに増える)
- 発見法的な物質シミュレーション



京速が可能にする物質科学

1. コンビナトリアル物性計算
 2. 高精度物性予測
 3. 理論物質探査, 理論物質合成
-



1. コンビナトリアル物性計算

- 既知の化合物構造から出発
- 元素置換・不純物の導入(組み合わせ)
- 多数の組み合わせに関する並列計算
 - 構造安定性計算
 - 物性計算
- 最適物質の選択

組み合わせサンプル

現状の電子状態計算手法の問題点



半導体のバンドギャップ

凝集エネルギー (× ファンデルワールス相互作用)

化学反応の活性障壁

× 系統的な精度向上



2. 高精度物性予測

- 既存の方法論(密度汎関数法)を超えた, 波動関数理論に基づく高精度計算
 - トランスコリレイティッド法 + CI
 - トランスコリレイティッド法 + DMC など

大次元行列, 多自由度
MCサンプリング

3. 理論物質探査, 理論物質合成

- 化学組成
- 温度, 圧力などの外的条件



物質構造(結晶, ガラス,
液体)とその物性

**配置空間サンプリング
条件サンプリング**

拡張アンサンブル法

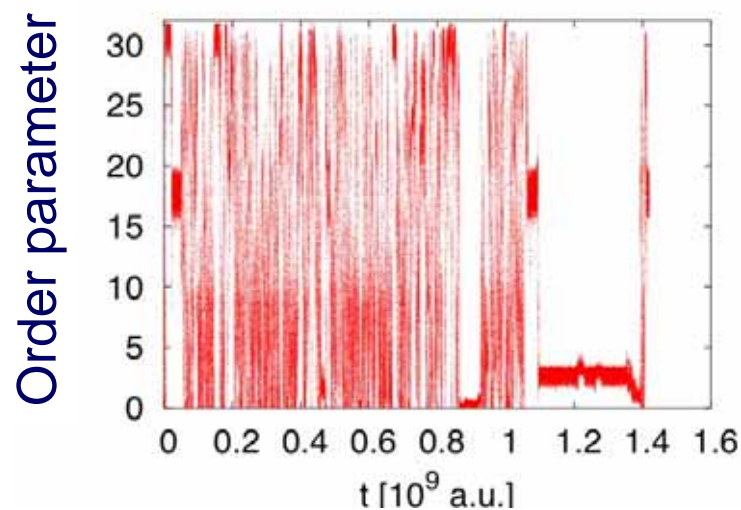
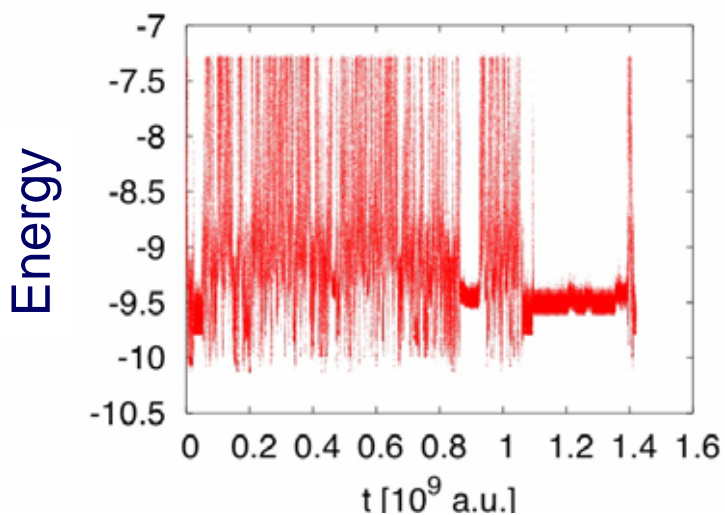


Multi Canonical method (B.A. Berg and T. Neuhaus, 1991)

Multi-Baric Multi-Thermal (H. Okumura and Y. Okamoto, 2004)

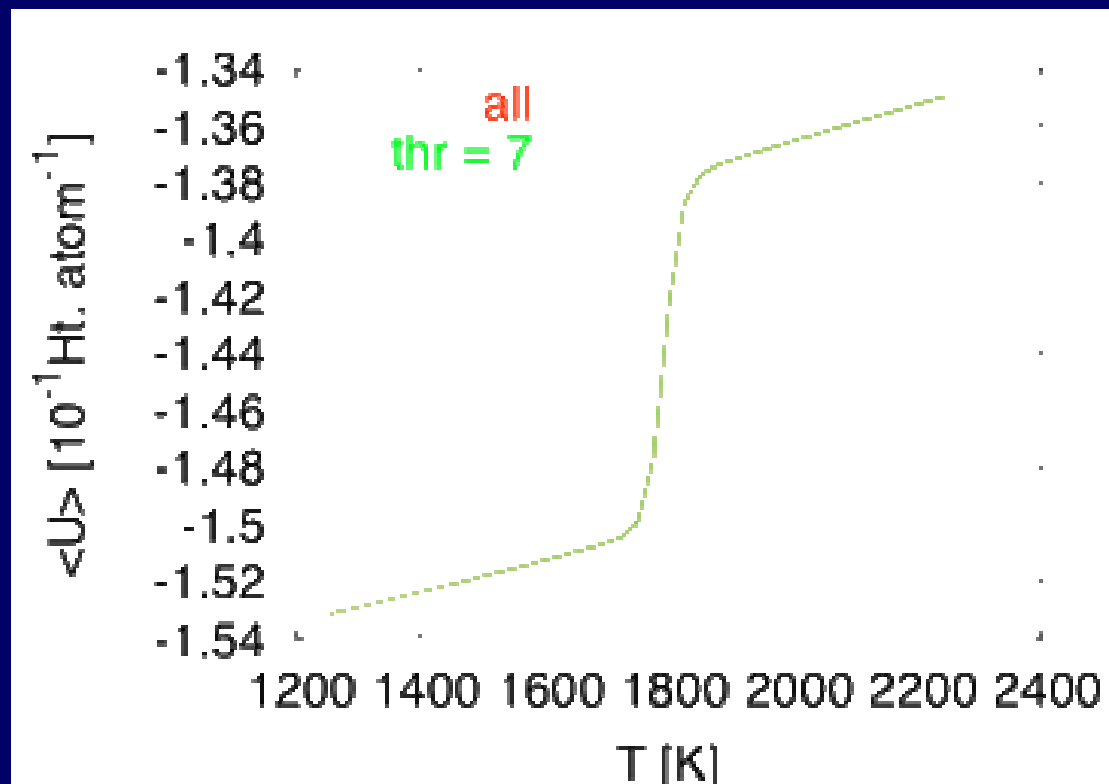
Multi-Order Multi-Thermal (Y. Yoshimoto, 2006)

Replica Exchange (K. Hukushima and K. Nemoto, 1996)

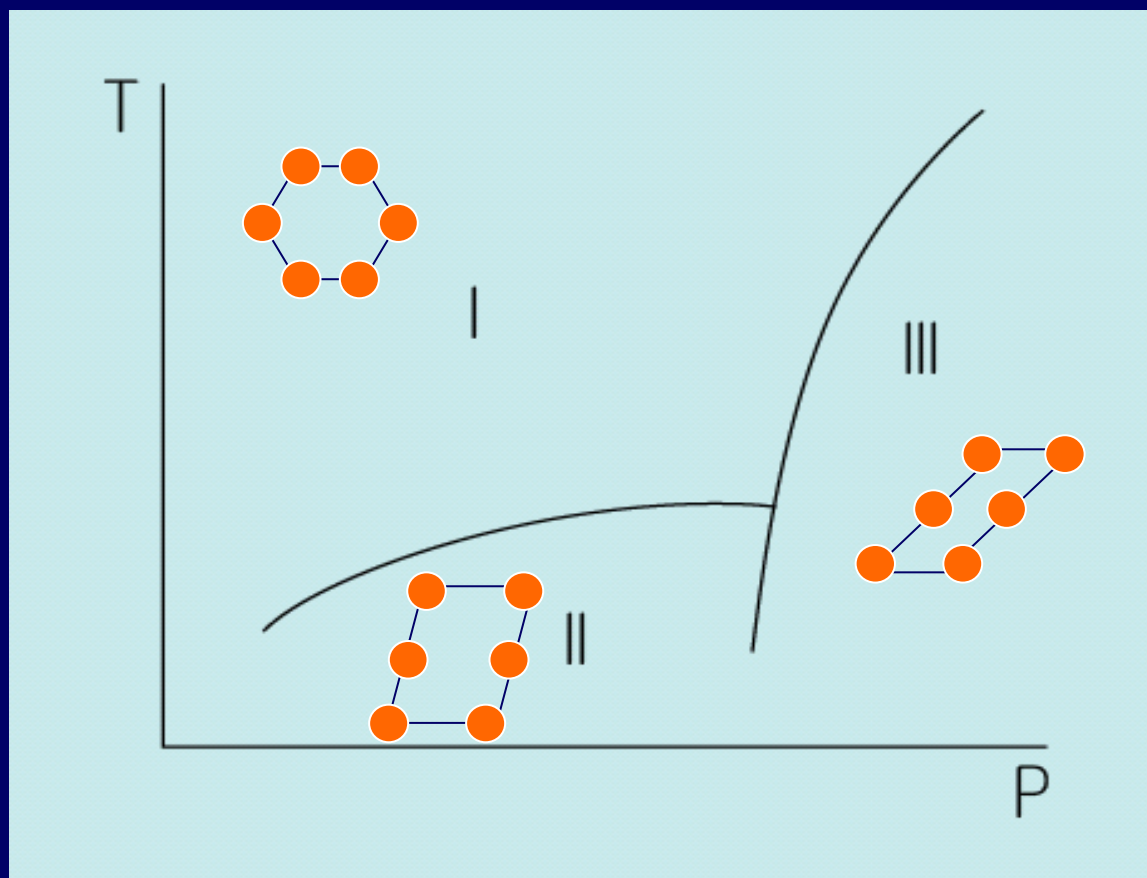


Y. Yoshimoto

拡張アンサンブル法(2)



拡張アンサンブル法(2)



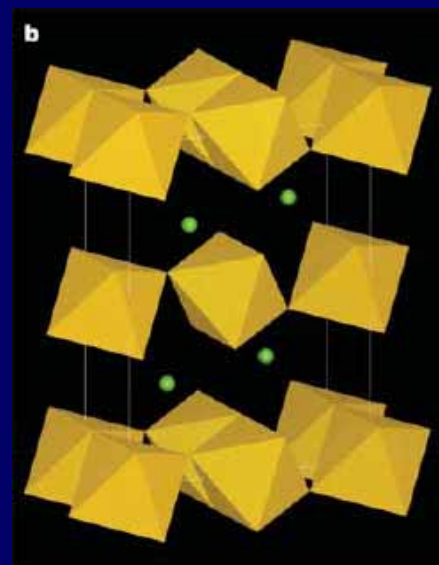
MgSiO₃ ポストペロフスカイト相



perovskite



125GPa
2500K



postperovskite

実験:

M. Murakami, K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata and Y. Ohishi,
Science 304, 855 (2004)



京速が可能にする物質科学

1発計算では結論が出ない
サンプリングが必要な
物質シミュレーション



第一原理計算の‘Grand Challenge’

- 温度や圧力による結晶構造変化を予測する。
- 温度 - 圧力相図を描く。
- 化合物の相分離を予測し、相図を描く。

- 金属 - 絶縁体転移などの電子相転移を予測する。
- (強相関電子系の) 励起スペクトルを計算する。
- 電子相転移のともなう構造相転移を予測する。

- ファン・デル・ワールス相互作用を精度良く計算する。
- 有機物分子を含む結晶の格子定数を精密に求める。

- 生体物質の構造を決める。
- 生体物質の構造変化と機能を解明する。

