

1P07

大規模分子系の電子状態計算に向けたスケーラブルなクーロン行列計算法の開発

(東大院工) ○倉重 佑輝,* M.A. Watson, 中嶋 隆人, 平尾 公彦

* kura@qcl.t.u-tokyo.ac.jp

[序] 現在, 密度汎関数法を用いた大規模分子系の計算において最も計算時間を要する部分は, AO 基底関数の数 N に対し $O(N^4)$ で計算コストが増大するクーロン積分である. この問題に対して私たちは, $O(N)$ でクーロン積分を高速に計算する Gaussian and Finite-element Coulomb method (GFC 法)¹ という方法を開発してきた. GFC 法ではクーロンポテンシャルを一様な立方体有限要素とガウス関数からなる混合補助基底で展開し, クーロン積分を AO 基底関数と混合補助基底の重なり積分を用いて計算する. ゆえに時間のかかる二電子反発積分を全く必要とせず大幅な計算時間の短縮が可能になる. 今回は GFC 法の改良と応用について発表する予定である.

[方法] GFC 法ではクーロンポテンシャルを式(1)のように補助基底 $\xi_i(r)$ を用いて展開する. 展開係数 \mathbf{c}_i は Poisson 方程式 $-\nabla^2 v(r) = 4\pi\rho(r)$ を離散化した式(2)の線型方程式に適切な境界条件を課して解くことにより得る. そしてクーロン積分を式(3)の重なり積分より計算する.

$$v(r) = \sum_i c_i^G \xi_i^G(r) + \sum_i c_i^{FE} \xi_i^{FE}(r) \quad (1)$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{A}_{ij} = \int dr \nabla \xi_i(r) \nabla \xi_j(r), \quad \mathbf{b}_i = 4\pi \int dr \rho(r) \xi_i(r) \quad (2)$$

$$J_{pq} = \sum_i c_i^G \int dr \chi_p(r) \chi_q(r) \xi_i^G(r) + \sum_i c_i^{FE} \int dr \chi_p(r) \chi_q(r) \xi_i^{FE}(r) \quad (3)$$

補助基底の局在性から \mathbf{A} は非常に疎な行列になり、式(2)は共役勾配法を用いて効率的に解くことができる. クーロン積分に必要な重なり積分はガウス関数の局在性を反映して疎であるから積分スクリーニングが有効である. 境界値条件を評価するためには, 境界点におけるクーロンポテンシャルを解析積分により計算していたが, 境界点と分子は遠く離れているので高速多重極子展開法を用いることにより大幅に高速化することができた. 発表当日は境界値条件の計算高速化と生体分子に対する GFC 法を用いた密度汎関数法の計算パフォーマンスを発表する予定である.

¹ Y. Kurashige, T. Nakajima, and K. Hirao J. Chem. Phys. *in press*