

Title	研究開発 (SX) 報告 : 固体の電子状態の研究
Author(s)	柳瀬, 章
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1987, 67, p. 81-83
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/65762">https://hdl.handle.net/11094/65762</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

# 研究開発(SX)報告

## 固体の電子状態の研究

大阪府立大学総合科学部 柳 瀬 章

### 1. 研究室？

ここ大阪府立大学に赴任してからもう5年をこえている。以前から行ってきた固体の電子状態の研究を主テーマに、研究を進めて来た。研究室のメンバーは筆者の他は修士コースの院生と卒業研究の4年生である。もちろんこのメンバーでは表題の研究を遂行するのはほとんど不可能である。東京大学物性研、大阪大学、東北大学、新潟大学の諸先生方との共同研究・共同プログラム開発が研究推進の原動力になっている。61年度の研究開発の申請を採択して頂いた。この研究はここ数年開発を続けているFLAPW (Full-potential Linearized Augmented Plane Wave) 法のプログラムの、SX用へのチューニングであった。ここではこの内容を含んだ形で固体の電子状態を計算するプログラムの開発の現状を報告する。

### 2. バンド計算

固体の形で我々が接する物質のかなりのものが結晶の形で存在する。結晶中では原子は三次元的な周期をもって配列する。一周期に含まれる原子の数は単体の金属では1個のものもあるが、数百になるものもめずらしくない。結晶内の電子状態の固有エネルギーは、この周期性から帯構造を持つことが導かれる。あたえられた結晶に対して、適当な方法で一電子ポテンシャルを決定し、電子状態の計算からこの帯構造をもとめる計算をバンド計算という。ポテンシャルの決定方法は局所密度近似法を使用した自己無撞着法が主流である。ポテンシャルの形にMT (muffin-tin) 近似を適用すると計算量は著しく減少する。この近似では結晶をMT球と呼ばれる原子核を中心とした球形の領域と、格子間領域と呼ばれるそれ以外の領域とに分け、ポテンシャルはMT球内では球対称、格子間領域では一定とする。APW (Augmented Plane Wave) 法は、このMT近似に対して1937年に、Slaterによって提案された方法で格子間領域の小さい結晶に対しては有効な方法であることが実証され、数多くの計算結果が公表されている。LAPWはこの改良型で計算機プログラムの操作性を高めている。FLAPW法は一般のポテンシャルで(MT近似を適用しないで)計算を行うもので、スーパーコンピュータの登場によって実用できるようになった。

### 3. 高速化技法

計算量の点で問題になるのはMT球内のポテンシャルの非球対称成分を扱うところである。開

発研究での努力はこの点に集中され、一応の成果はえられたと考えている。スーパーコンピューターの登場により、計算時間の中で圧倒的な比率を占めていた行列の対角化の部分が高速になると、行列を作る部分と、対角化の結果えられた固有状態から必要な情報を取り出す部分の最適化の重要性が増してきた。この最適化には、スーパーコンピューターの利用について一般にいわれている手法を使った。スーパーコンピューター時代以前からの高速化の技法であった、繰り返し使用される中間結果の有効かつ適切な保存も有効であった。ただ現在のスーパーコンピューターは、SXに限らず演算速度に比べて、記憶容量が貧弱であるため、限られた記憶容量で、できるだけ大きな実効容量（より複雑な結晶を扱う）をうるためには、以前にもまして、厳密な有効性の検討が必要であった。

行列の作成と利用は当然その次元  $n$  の二乗の計算量を必要とするはずであるが、FLAPWのプログラムでは次に述べる手法で、このかなりの部分を  $n$  の一乗の計算量にしている。

$$M_{ij} = a_i b_i c_i m_{ij} a_j b_j c_j$$

とあたえられるとき、

$$A_i = a_i b_i c_i \quad ; \quad M_{ij} = A_i m_{ij} A_j$$

とすれば6個の  $n$  の二乗個の計算は2個のそれに減少する。さらにこの考えの発展で

$$X_{ij} = \sum_k d_{ik} d_{jk}$$

と変形できる因子が行列要素に含まれる場合には、通常は右辺の形でプログラムを書くが上のことを考慮すると  $k$  の和が短いときには左辺の方が高速になる。実際FLAPWのプログラムでは球関数の加法定理で通常右辺にまとめられていたのを、左辺に変えて、高速化に成功している。もちろん  $x_{ij}$  が簡単に計算できれば右辺のほうが速いにきまっている。いまの場合右辺は球関数で漸化式で計算する必要がある。また右辺は  $n$  の二乗のオーダーの容量が必要なため、あらかじめ計算しておいて格納することが困難であるのに反して、左辺は  $n$  のオーダーでよいため格納が可能になる。スーパーコンピューターの特性を生かすための周知の技法である、最内側のDOループを長くすることもこの改良にかかわっている。行列の次元が長い繰り返しであるからこれを内側に置くことがぜひ必要である。この点でも格納が容易な左辺のほうが適合している。

以上FLAPWのプログラムの高速化のために用いた技法で、参考にさせていただけるかもしれない点にふれてみた。

全体で約2万行のFORTRANプログラムには、まだ高速化を必要とする箇所が残っている

と考えている。また現在でも新しいタイプの結晶を対象にして計算を実行すると、虫が見付かっている。プログラムの設計の精神としては、全ての結晶の電子状態が計算できることを目指している。結晶構造だけの入力で金属・合金・半導体等の物性を考える基礎を与えることができるこのプログラムを早く完成に近づけたいと考えている。

前にも述べたが現在のスーパーコンピューターはスピードにくらべて記憶容量が貧弱である。これを補う機構として、ファイル的に使用する記憶装置をスーパーコンピューターのシステムが持っているのが普通である。S XではX M Uというのがそれにあたると理解しているが大阪大学のシステムには何故か導入されていない。将来の拡張にはぜひ考慮されることをお願いしたい。

F L A P Wのプログラム全体をライブラリーに登録することは、まだ問題を残しているためはやすぎるように考えている。しかし部分的にはライブラリーにして有用なものもあると考えている。例えば空間群を処理する部分は、既に他のセンターに登録されてかなり御利用いただいている。