(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2012 年 6 月 28 日(28.06.2012)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2012/086023 A1

(51) 国際特許分類:
G06F 19/00 (2011.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2010/073100

(22) 国際出願日: 2010 年 12 月 22 日(22.12.2010)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 富士通株式会社(FUJITSU LIMITED) [JP/JP]; 〒2118588 神奈川県川崎市中原区上小田中４丁目１番１号 Kanagawa (JP).

(72) 発明者; および

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 高井 健太郎(TAKAI, Kentaro) [JP/JP]; 〒2118588 神奈川県川崎市中原区上小田中４丁目１番１号 富士通株式会社内 Kanagawa (JP). 諏訪 多聞(SUWA, Tamon) [JP/JP]; 〒2118588 神奈川県川崎市中原区上小田中４丁目１番１号 富士通株式会社内 Kanagawa (JP). 小笠原 圭太(OGASAWARA, Keita) [JP/JP]; 〒2118588 神奈川県川崎市中原区上小田中４丁目１番１号 富士通株式会社内 Kanagawa (JP).

(74) 代理人: 原田一男(HARADA, Kazuo); 〒1440052 東京都大田区蒲田五丁目４９番１２号 蒲田M＆M１ビル６階 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW,

[続葉有]

(54) **Title**: BUFFER REGION DETERMINATION METHOD, PROGRAM AND INFORMATION PROCESSING DEVICE

(54) 発明の名称 : バッファ領域決定方法、プログラム及び情報処理装置

[図2]

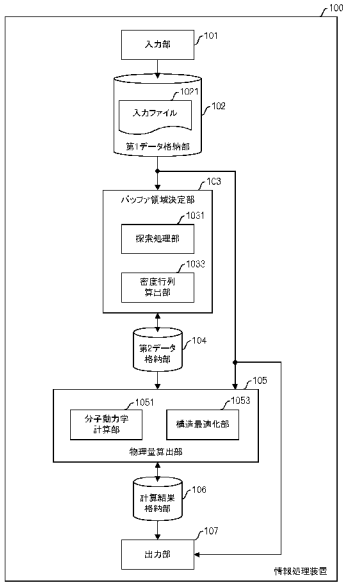


FIG. 2:
100 INFORMATION PROCESSING DEVICE
101 INPUT UNIT
102 FIRST DATA STORE UNIT
1021 INPUT FILE
103 BUFFER REGION DETERMINATION UNIT
1031 SEARCH PROCESSING UNIT
1033 DENSITY MATRIX CALCULATION UNIT
104 SECOND DATA STORE UNIT
105 PHYSICAL QUANTITY CALCULATION UNIT
1051 MOLECULAR DYNAMICS CALCULATION UNIT
1053 STRUCTURE OPTIMIZATION UNIT
106 CALCULATION RESULT STORE UNIT
107 OUTPUT UNIT

(57) **Abstract**: The objective of the present invention is to efficiently calculate a buffer region. The present method is a buffer region determination method for determining the number of atomic layers of buffer regions to be set for each of a plurality of regions acquired by partitioning a range for which the physical quantity is to be calculated thereof, the method including: a difference matrix calculation step which, for each of the plurality of regions, calculates a difference matrix between a first density matrix for a case in which the number of atomic layers of the buffer region is a first number, and a second density matrix for a case in which the number of atomic layers of the buffer region is a second number different from the first number, and stores thereof into a data store unit; and a search step which, by repeatedly executing the difference matrix calculation step while varying the first number, searches for the minimum number of atomic layers at which the value of a predetermined feature matrix element in the difference matrix stored in the data store unit is less than or equal to a reference value calculated from the specified physical quantity.

(57) 要約: 効率的にバッファ領域を算出する。本方法は、物理量を計算すべき範囲を分割することによって得られる複数の領域に各々設定すべきバッファ領域の原子層数を決定するバッファ領域決定方法であって、複数の領域の各々について、バッファ領域の原子層数が第１の数である場合における第１の密度行列と、バッファ領域の原子層数が第１の数とは異なる第２の数である場合における第２の密度行列との差の行列を算出し、データ格納部に格納する差行列算出ステップと、第１の数を変化させつつ差行列算出ステップを繰り返し実行させることにより、データ格納部に格納されている上記差の行列における所定の特徴行列要素の値が、指定された物理量から算出される基準値以下である最小の原子層数を探索する探索ステップとを含む。

WO 2012/086023 A1

MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告（条約第 21 条(3)）

明　細　書

発明の名称 ：

バッファ領域決定方法、プログラム及び情報処理装置

技術分野

[0001] 本技術は、量子論に基づく原子構造又は電子状態の計算技術に関する。

背景技術

[0002] 現在、材料学や化学から薬学や生体分野などの新規物質開発において、多くのシミュレーションが行われている。その中で、量子論に基づくシミュレーションを用いる傾向が年々高まっている。これは、すべての物は原子からできているため、開発する物質の性質を予測するためには、原子スケールでの物理現象を理解することが好ましいためである。このような開発では、実験データと比較しながらシミュレーションを行うことになる。そのためには、効率的にシミュレーションを行うためのアプリケーションが好ましい。

[0003] まず、量子論に基づいた系のエネルギー又は力の計算方法について説明する。量子論に基づいて物質の原子構造又は電子状態などのシミュレーションを行うためには、ミクロなスケールでの支配方程式であるシュレディンガー方程式を解くことになる。

[0004] [数1]

$$H\psi(\boldsymbol{r}) = \varepsilon\psi(\boldsymbol{r}) \qquad (1)$$

[0005] ここで、Ｈは系のハミルトニアン、Ψ（ｒ）が電子の波動関数、εが固有値である。

[0006] 現実の物質には多くの電子が存在している。多くの電子が含まれている系（多電子系と呼ぶ）を計算する１つの手法として、一電子近似がある。一電子近似とは、多電子系をある有効ポテンシャル中における相互作用のない電子の集まりとみなして、電子をエネルギーの低い一電子状態から順番に占有させることによって、多電子系の状態を表す近似方法である。一電子近似を用いると、電子状態は一体のシュレディンガー方程式によって表すことがで

きる。

[0007] [数2]

$$H_{eff}\varphi_n(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_n\varphi_n(\boldsymbol{r}) \qquad (2)$$

[0008] [数3]

$$H_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v_{eff}(\boldsymbol{r}) \qquad (3)$$

[0009] ここで、Ψ_{eff}（ｒ）は有効ポテンシャル、ｍは電子の質量、 ε_nはエネルギーが低い順番に並べたときのｎ番目の状態の電子の固有値、Φ_n（ｒ）はエネルギーが低い順番に並べたときのｎ番目の状態の電子の波動関数である。このように、一電子近似を用いることによって、電子状態を計算できる。

[0010] 一電子近似を用いると全系のエネルギーは、以下のように表される。

[0011] [数4]

$$E_{tot} = 2\sum_n f(\varepsilon_n)\varepsilon_n + E_{rep} \qquad (4)$$

[0012] ここで、第一項目は電子エネルギー、第二項目E_{rep}は原子核と原子核の相互作用エネルギーと第一項目の電子エネルギーを補正する項である。また、ｆ（ε_n） はフェルミ分布関数を表す。

[0013] また、原子に働く力は、全系のエネルギーであるE_{tot}を原子の位置R_Aで微分して計算することができる。

[0014] [数5]

$$\boldsymbol{F}_A = \frac{dE_{tot}}{d\boldsymbol{R}_A} = -2\sum_n f(\varepsilon_n)\frac{d\varepsilon_n}{d\boldsymbol{R}_A} - \frac{dE_{rep}}{d\boldsymbol{R}_A} \qquad (5)$$

[0015] このように算出された原子に働く力から、原子に働く力が０（実際のシミュレーションでは、パラメータとして入力した値以下）になるように原子を動かすことによって、安定な原子配置を計算することができる。これを構造最適化計算と呼ぶ。

[0016] また、求めた力から運動方程式に従って原子を動かすことによって、分子動力学計算を行うことができる。

[0017] 上で述べた電子の固有値と波動関数を求める計算方法は、計算量が原子数の三乗に比例するため、大きな系の計算には時間がかかりすぎるという問題がある。これは、計算時間の短縮が求められている、実験データと比較しながらのシミュレーションには向かない場合がある。そのため、必要な物理量だけを短時間で求める方法として、計算量が原子数に比例するオーダーN法（O（N）法、Nはシミュレーションの対象の原子の数）の開発が進められている。

[0018] 量子論を用いて原子構造又は電子状態を求めるO（N）法では、一電子の固有値と波動関数を求めずに、必要な物理量だけを求める。全系のエネルギーや原子にかかる力をO（N）法を用いて求めるときには、密度行列を導入して計算を行う。ここでは、密度行列を用いたO（N）法の理論を説明する。

[0019] 電子の波動関数Φ_nを局在基底で展開すると以下のように表される。

[0020] [数6]

$$\varphi_n(\boldsymbol{r}) = \sum_{i\alpha} c_{i\alpha}^n \phi_{i\alpha}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{\tau}_i) \quad (6)$$

[0021] ここで、$\phi_{i\alpha}$は局在基底、iは原子のサイト、αはある原子サイトの原子軌道を表す。また、$c^n_{i\alpha}$は$\phi_{i\alpha}$の係数である。（6）式を、ディラックが発明したブラーケットの記法を用いると以下のように表すことができる。

[0022] [数7]

$$|\varphi_n\rangle = \sum_{i\alpha} c_{i\alpha}^n |\phi_{i\alpha}\rangle \quad (7)$$

[0023] このように波動関数をある局在基底で展開すると（2）式のシュレディンガー方程式（微分方程式）を解く問題は、局在基底の係数$c^n_{i\alpha}$を求める問題（固有値問題）に置き換えることができる。具体的には、（2）式の両辺に左から$\phi^*_{j\beta}$を掛け、（6）式を代入した後に全空間で積分する。そうすると

、以下のような式が得られる。

[0024] [数8]

$$\int d\boldsymbol{r}\phi_{j\beta}^{*}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{j}\right)H_{eff}\varphi_{n}\left(\boldsymbol{r}\right)=\varepsilon_{n}\int d\boldsymbol{r}\phi_{j\beta}^{*}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{j}\right)\varphi_{n}\left(\boldsymbol{r}\right)$$

$$\sum_{i\alpha}c_{i\alpha}\int d\boldsymbol{r}\phi_{j\beta}^{*}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{j}\right)H_{eff}\phi_{i\alpha}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{i}\right)=\varepsilon_{n}\sum_{i\alpha}c_{i\alpha}\int d\boldsymbol{r}\phi_{j\beta}^{*}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{j}\right)\phi_{i\alpha}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{i}\right)$$

$$\sum_{i\alpha}c_{i\alpha}H_{j\beta,i\alpha}=\varepsilon_{n}\sum_{i\alpha}c_{i\alpha}S_{j\beta,i\alpha}\qquad(8)$$

[0025] ここで、（８）式のＨ$_{j\beta,i\alpha}$及びＳ$_{j\beta,i\alpha}$を以下のように定義する。

[0026] [数9]

$$H_{j\beta,i\alpha}=\int d\boldsymbol{r}\phi_{j\beta}^{*}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{j}\right)H_{eff}\phi_{i\alpha}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{i}\right)=\left\langle\phi_{j\beta}\left|H_{eff}\right|\phi_{i\alpha}\right\rangle$$

$$S_{j\beta,i\alpha}=\int d\boldsymbol{r}\phi_{j\beta}^{*}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{j}\right)\phi_{i\alpha}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_{i}\right)=\left\langle\phi_{j\beta}\left|\phi_{i\alpha}\right.\right\rangle\qquad(9)$$

[0027] （９）式の右辺はブラーケットの記法を用いて表したものである。

[0028] ここで、密度演算子ρ^（”^”はρの上に載せられているが、ここではこのように記するものとする。）を導入する。密度演算子は以下のように書き表すことができる。

[0029] [数10]

$$\hat{\rho}=\sum_{n}f\left(\varepsilon_{n}\right)\left|\varphi_{n}\right\rangle\left\langle\varphi_{n}\right|\qquad(10)$$

[0030] （１０）式に（７）式を代入すると、以下の式が得られる。

[0031] [数11]

$$\hat{\rho}=\sum_{i\alpha,j\beta}\rho_{i\alpha,j\beta}\left|\phi_{i\alpha}\right\rangle\left\langle\phi_{j\beta}\right|\qquad(11)$$

[0032] ここで、ρ$_{i\alpha,i\beta}$は以下のように表すことができる。

[0033] [数12]

$$\rho_{i\alpha,j\beta}=\sum_{n}f\left(\varepsilon_{n}\right)c_{i\alpha}^{n}c_{j\beta}^{n*}\qquad(12)$$

[0034] そこで、電子エネルギーを表す（４）式の右辺第一項は、（７）式を代入

して（１２）式を用いることにより、密度行列の行列要素を用いて表すことができる。

[0035] [数13]

$$2\sum_n f(\varepsilon_n)\varepsilon_n = 2\sum_n f(\varepsilon_n)\langle\varphi_n|H_{eff}|\varphi_n\rangle$$
$$= 2\sum_n f(\varepsilon_n)\left(\sum_{j\beta} c_{j\beta}^{n*}\langle\phi_{j\beta}|\right)H_{eff}\left(\sum_{i\alpha} c_{i\alpha}^{n}|\phi_{i\alpha}\rangle\right) \qquad (13)$$
$$= 2\sum_{i\alpha,j\beta}\rho_{i\alpha,j\beta}H_{j\beta,i\alpha}$$

[0036] また、（５）式で表した原子にかかる力の項の中で、電子エネルギーに関する成分は以下のように表すことができる。

[0037] [数14]

$$-2\sum_n f(\varepsilon_n)\frac{d\varepsilon_n}{d\boldsymbol{R}_A} = -2\sum_n f(\varepsilon_n)\frac{d}{d\boldsymbol{R}_A}\langle\varphi_n|H_{eff}|\varphi_n\rangle$$
$$= -2\sum_n f(\varepsilon_n)\left\{\sum_{i\alpha,j\beta} c_{j\beta}^{n*}\left(\frac{dH_{j\beta,i\alpha}}{d\boldsymbol{R}_A} - \varepsilon_n\frac{dS_{j\beta,i\alpha}}{d\boldsymbol{R}_A}\right)c_{i\alpha}^{n}\right\}$$
$$= -2\sum_{i\alpha,j\beta}\left\{\rho_{i\alpha,j\beta}\frac{dH_{j\beta,i\alpha}}{d\boldsymbol{R}_A} - \omega_{i\alpha,j\beta}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}}{d\boldsymbol{R}_A}\right\} \qquad (14)$$

ここで、$\omega_{i\alpha,i\beta}$は、エネルギー密度行列の行列要素を表す。

[0038] [数15]

$$\omega_{i\alpha,j\beta} = \sum_n f(\varepsilon_n)\varepsilon_n c_{j\beta}^{n*}c_{i\alpha}^{n} \qquad (15)$$

[0039] （１３）式と（１４）式の４つの和のインデックスのうち、α及びβは原子数に依存しない量である。また、密度演算子とエネルギー密度演算子の局在性、すなわち「ある距離以上に離れた局在基底$\phi_{i\alpha}$と$\phi_{j\beta}$を含む密度行列の行列要素$\rho_{i\alpha,j\beta}$と$\omega_{i\alpha,j\beta}$は０とみなせる」という物理的性質より、ｊの和の数は原子数によらず一定となる。従って、エネルギーや力を求めるための計算量はＯ（Ｎ）となる。

[0040] このようして求めたエネルギーや力を用いて、構造最適化や分子動力学計算を行うことができる。

[0041] エネルギーや原子にかかる力を正しく求めるには、「波動関数を求めずに、近傍に存在する２つの局在基底$\phi_{i\alpha}$と$\phi_{j\beta}$を含む密度行列の行列要素$\rho_{i\alpha,j\beta}$をいかに正しく、且つ計算量がＯ（Ｎ）となるように求めるか」が問題となる。その方法として、多くの手法がこれまでに提案されているが、ここでは、分割統治法（Divide-and-Conquer法）に注目することにする。

[0042] 分割統治法は、全系を複数の領域に分割し、分割した領域の密度行列を求め、分割した領域の密度行列を用いて分割した領域の物理量を求め、最後に各領域で求めた物理量を統合して、系全体の物理量を求める手法である。分割した領域の密度行列を求める際は、分割した領域内の原子だけではなく、分割した領域に隣接する領域（バッファ領域と呼ぶ）の原子も用いる。

[0043] 図１は、領域分割を模式的に示す図である。丸は原子を表している。外側の矩形枠が全系を表しており、通常の点線が分割した領域の境界を表している。ここで、中央の領域Ａに着目すると、領域Ａ以外で太い点線で囲まれた領域Ｂがバッファ領域である。

[0044] 具体的には、以下のように物理量を計算する。まず、密度行列の行列要素$\rho_{i\alpha,j\beta}$を以下のように書き表す。

[0045] [数16]

$$\rho_{i\alpha,j\beta}=\left(\sum_I P_{ij}^{(I)}\right)\rho_{i\alpha,j\beta}=\sum_I \rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}$$
$$\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}=P_{ij}^{(I)}\rho_{i\alpha,j\beta} \qquad (16)$$

[0046] ここで、Ｉは分割した領域のインデックスである。

[0047] ここで、$P^{(I)}_{ij}$を以下のように定義する。

[0048] [数17]

$$\sum_I P_{ij}^{(I)}=1 \qquad (17)$$

[0049] [数18]

$$P_{ij}^{(I)}=\begin{cases}1 & (i\in I \quad and \quad j\in I)\\ 0.5 & (i\in I \quad or \quad j\in I)\\ 0 & (i\notin I \quad and \quad j\notin I)\end{cases} \qquad (18)$$

[0050] すなわち、局在基底$\phi_{i\alpha}$と$\phi_{j\beta}$が両方とも分割した領域（図１の中央の領域）にある場合は、係数「１」を掛け、片方のみ分割した領域にある場合は、０．５を掛け、両方とも分割した領域にない場合は、密度行列を０とする。

[0051] そして、分割した領域の密度行列の成分を求めるために、図１の領域Ａ及びＢを抜き出し、その領域に含まれる局在基底を用いて（９）式のように行列成分を求める。具体的な式は以下のとおりである。

[0052] [数19]

$$H_{j\beta,i\alpha}^{(I)}=\int d\boldsymbol{r}\phi_{j\beta}^{(I)*}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_j\right)H_{eff}\phi_{i\alpha}^{(I)}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_i\right)=\left\langle\phi_{j\beta}^{(I)}\middle|H_{eff}\middle|\phi_{i\alpha}^{(I)}\right\rangle$$
$$S_{j\beta,i\alpha}^{(I)}=\int d\boldsymbol{r}\phi_{j\beta}^{(I)*}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_j\right)\phi_{i\alpha}^{(I)}\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\tau}_i\right)=\left\langle\phi_{j\beta}^{(I)}\middle|\phi_{i\alpha}^{(I)}\right\rangle \qquad (19)$$

[0053] そして、（１９）式を用いて各領域の固有値問題を解く。

[0054] [数20]

$$\sum_{i\alpha}c_{i\alpha}^{(I)}H_{j\beta,i\alpha}^{(I)}=\varepsilon_n^{(I)}\sum_{i\alpha}c_{i\alpha}^{(I)}S_{j\beta,i\alpha}^{(I)} \qquad (20)$$

[0055] 各領域の固有値問題を解いて求めた波動関数を用いると、分割した領域の密度行列の成分は任意のフェルミエネルギーに対して、以下のように表される。

[0056] [数21]

$$\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\approx P_{ij}^{(I)}\sum_n f\left(\varepsilon_n^{(I)}\right)c_{i\alpha}^{(I)}c_{j\beta}^{n(I)*} \qquad (21)$$

[0057] ここで注意すべき点は、分割した領域に対して固有値問題を解いたので、（２１）式の密度行列の要素は近似した物理量という点である。もちろん、バッファ領域として全系を含むようにとれば、密度行列の要素は厳密な物理

量となる。

[0058] エネルギーなどの物理量を計算するためには、フェルミ分布関数に現れるフェルミエネルギーを求めることになる。フェルミエネルギーは、「全系の電子数Ｎが一定」という下記の条件から求めることができる。

[0059] [数22]

$$
\begin{aligned}
N &= 2\sum_{n} f\left(\varepsilon_n\right)\left\langle\varphi_n\middle|\varphi_n\right\rangle \\
&= 2\sum_{n} f\left(\varepsilon_n\right)\left(\sum_{j\beta} c_{j\beta}^{n*}\left\langle\phi_{j\beta}\right|\right)\left(\sum_{i\alpha} c_{i\alpha}^{n}\left|\phi_{i\alpha}\right\rangle\right) \\
&= 2\sum_{i\alpha,j\beta}\sum_{n} f\left(\varepsilon_n\right) c_{i\alpha}^{n} c_{j\beta}^{n*}\left\langle\phi_{j\beta}\middle|\phi_{i\alpha}\right\rangle \\
&= 2\sum_{i\alpha,j\beta} \rho_{i\alpha,j\beta}\left\langle\phi_{j\beta}\middle|\phi_{i\alpha}\right\rangle \\
&\approx 2\sum_{i\alpha,j\beta}\sum_{I} \rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\left\langle\phi_{j\beta}\middle|\phi_{i\alpha}\right\rangle \\
&= 2\sum_{I}\left(\sum_{i\alpha,j\beta} P_{ij}^{(I)}\sum_{n} f\left(\varepsilon_n^{(I)}\right) c_{i\alpha}^{n(I)} c_{j\beta}^{n(I)*}\left\langle\phi_{j\beta}^{(I)}\middle|\phi_{i\alpha}^{(I)}\right\rangle\right) \qquad (22)
\end{aligned}
$$

[0060] フェルミ分布関数ｆ（$\varepsilon_n^{(I)}$）は、以下のように表される。

[0061] [数23]

$$
f\left(\varepsilon_n^{(I)}\right) = \frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{\varepsilon_n^{(I)} - \varepsilon_F}{k_B T}\right)} \qquad (23)
$$

[0062] （２３）式におけるε_Fがフェルミエネルギーである。

[0063] フェルミエネルギーを決定する際、全系の電子数を求める必要があるので、各領域の電子数のデータを通信する必要がある。

[0064] （２１）式と（２２）式で決定したフェルミエネルギーを用いると、（１３）式は以下のように表すことができる。

[0065]

[数24]

$$2\sum_{n} f\left(\varepsilon_n\right)\varepsilon_n = 2\sum_{i\alpha,j\beta}\rho_{i\alpha,j\beta}H_{j\beta,i\alpha} \approx 2\sum_{I}\left(\sum_{i\alpha,j\beta}\rho^{(I)}_{i\alpha,j\beta}H^{(I)}_{j\beta,i\alpha}\right) \qquad (24)$$

[0066] また、（14）式は、以下のように変形される。

[0067] [数25]

$$-2\sum_{n} f\left(\varepsilon_n\right)\frac{d\varepsilon_n}{d\boldsymbol{R}_A} = -2\sum_{i\alpha,j\beta}\left\{\rho_{i\alpha,j\beta}\frac{dH_{j\beta,i\alpha}}{d\boldsymbol{R}_A} - \omega_{i\alpha,j\beta}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}}{d\boldsymbol{R}_A}\right\}$$
$$\approx -2\sum_{I}\left[\sum_{i\alpha,j\beta}\left\{\rho^{(I)}_{i\alpha,j\beta}\frac{dH^{(I)}_{j\beta,i\alpha}}{d\boldsymbol{R}_A} - \omega^{(I)}_{i\alpha,j\beta}\frac{dS^{(I)}_{j\beta,i\alpha}}{d\boldsymbol{R}_A}\right\}\right] \qquad (25)$$

[0068] ここで、$\omega^{(I)}{}_{i\alpha,j\beta}$は、以下のとおりである。

[0069] [数26]

$$\omega^{(I)}_{i\alpha,j\beta} = \sum_{n} f\left(\varepsilon^{(I)}_n\right)\varepsilon^{(I)}_n c^{n(I)*}_{j\beta} c^{n(I)}_{i\alpha} \qquad (26)$$

[0070] 以上のように、（１）分割した領域内に含まれる局在基底を用いて固有値問題における行列要素を計算し、（２）各領域において固有値問題を解き任意のフェルミエネルギーに対する密度行列を求め、（３）全電子数は一定という条件からフェルミエネルギーを決定し、（４）各領域の密度行列から物理量を計算し、（５）その和を取ることによって全系の物理量を計算する。

[0071] この際留意すべき点は、局在基底$\phi_{i\alpha}$と$\phi_{j\beta}$を含む密度行列の行列要素$\rho_{i\alpha,j\beta}$は、局在基底が近傍にある場合には値を持つため、分割した領域の端（例えば図１における領域Ａの外枠内側近傍）の密度行列の行列要素を求めるために、バッファ領域（図１の領域Ｂ）を用意することになる点である。

[0072] バッファ領域の広さは、計算する系によって、求めるべき物理量が十分な精度で求められるように設定しなければならない。通常は、手動でバッファ領域の広さを決定する。また、バッファ領域の大きさが十分であるかを判断するために、全系における特定の物理量を計算することになる。特定の物理

量とは、エネルギーや原子にかかる力である。従って、バッファ領域の大きさを変えながらその都度特定の物理量を求め、特定の物理量が十分な精度で求まった場合におけるバッファ領域の大きさを採用する。

[0073] 実際には、安定した原子構造を計算したり、原子の移動を計算したりするため、上で述べたように全系の物理量の計算を実施することになるが、バッファ領域の大きさを決定するためだけにも特定の物理量の計算をも行わなければならず、時間が掛ってしまうという問題がある。また、バッファ領域の広さを人手で調節しながら決定するのでは、効率的にバッファ領域の広さを決定できない。

先行技術文献

特許文献

[0074] 特許文献1：特開平９－９７２７８号公報

非特許文献

[0075] 非特許文献1：W. Kohn, Int. J. Quart. Chem. 56 (1995) 299

非特許文献2：W. Yang, Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 1438

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0076] 従って、本技術の目的は、一側面として、効率的にバッファ領域を算出するための技術を提供することである。

課題を解決するための手段

[0077] 本バッファ領域決定方法は、物理量を計算すべき範囲を分割することによって得られる複数の領域に各々設定すべきバッファ領域の原子層数を決定するバッファ領域決定方法であって、（Ａ）複数の領域の各々について、バッファ領域の原子層数が第１の数である場合における第１の密度行列と、バッファ領域の原子層数が第１の数とは異なる第２の数である場合における第２の密度行列との差の行列を算出し、データ格納部に格納する差行列算出ステップと、（Ｂ）第１の数を変化させつつ差行列算出ステップを繰り返し実行

させることにより、データ格納部に格納されている上記差の行列における所定の特徴行列要素の値が、指定された物理量から算出される基準値以下である最小の原子層数を探索する探索ステップとを含む。

図面の簡単な説明

[0078] [図1]図１は、バッファ領域を説明するための図である。

[図2]図２は、本実施の形態における情報処理装置の機能ブロック図である。

[図3]図３は、本実施の形態におけるメインの処理フローを示す図である。

[図4]図４は、探索処理の処理フローを示す図である。

[図5]図５は、探索処理の説明のための図である。

[図6]図６は、探索処理の処理フローを示す図である。

[図7]図７は、探索処理の処理フローを示す図である。

[図8]図８は、構造最適化処理の処理フローを示す図である。

[図9]図９は、分子動力学計算の処理フローを示す図である。

[図10]図１０は、コンピュータの機能ブロック図である。

発明を実施するための形態

[0079] 本技術の一実施の形態に係る情報処理装置１００の機能ブロック図を図２に示す。本情報処理装置１００は、入力部１０１と、第1データ格納部１０２と、バッファ領域決定部１０３と、第２データ格納部１０４と、物理量算出部１０５と、計算結果格納部１０６と、出力部１０７とを有する。

[0080] 第１データ格納部１０２には、以下で説明する処理に用いる入力ファイル１０２１が格納される。バッファ領域決定部１０３は、探索処理部１０３１と密度行列算出部１０３３とを有し、入力ファイル１０２１に含まれるデータを用いて処理等を実施する。第２データ格納部１０４は、バッファ領域決定部１０３の処理結果を格納する。物理量算出部１０５は、分子動力学計算部１０５１と構造最適化部１０５３とを有し、第１データ格納部１０２及び第２データ格納部１０４に格納されているデータを用いて処理を実施し、処理結果を計算結果格納部１０６に格納する。出力部１０７は、第１データ格納部１０２に格納されているデータに従って、計算結果格納部１０６に格納

されているデータを、出力装置（例えば表示装置、印刷装置、場合によってはネットワークに接続されている他のコンピュータなど）に出力する。

[0081] 次に、図２に示した情報処理装置１００の動作について図３乃至図９を用いて説明する。入力部１０１は、ユーザからの入力を受け付けて、入力ファイル１０２１を第１データ格納部１０２に格納する。場合によっては、ユーザからの指示に応じて、ネットワークに接続されている他のコンピュータに格納されている入力ファイル１０２１を第１データ格納部１０２に格納する。

[0082] 入力ファイル１０２１には、例えば、以下のようなデータが格納される。

（１）計算条件

（２）初期原子配置

（３）セルの情報（格子定数ａと単位格子ベクトル）

（４）物質のバンドギャップE_{gap}

（５）領域のｘ、ｙ及びｚ方向の分割数

（６）計算精度の判定条件（エネルギー又は力）の選択

（７）エネルギーの計算精度ΔE_{input}又は力の計算精度ΔF_{input}

[0083] また、計算条件には、以下のようなデータを含む。

・計算する系の初期温度、最終温度、初期圧力、最終圧力（温度制御や圧力制御を行うときに用いられるパラメータ（分子動力学計算を行う場合））

・原子数

・原子種の数

・ＭＤ（Molecular Dynamics）最大ステップ数（分子動力学計算時）、又は構造最適化の最大回数（構造最適化時）

・出力データの詳細度など

[0084] そして、バッファ領域決定部１０３は、第１データ格納部１０２から入力ファイルを読み出す（ステップＳ１）。そして、バッファ領域決定部１０３は、初期原子配置で特定される領域全体を、領域のｘ、及びｚ方向の分割数に従って領域分割処理を実施する（ステップＳ３）。この領域分割処理では

、単位格子ベクトルを用いてｘ、ｙ及びｚのそれぞれについて等間隔に分割するが、この処理自体はよく知られたものであるから、詳細な説明については省略する。

[0085] そして、探索処理部１０３１及び密度行列算出部１０３３は、バッファ領域の原子層数についての探索処理を実施する（ステップＳ５）。この探索処理については、図４乃至図７を用いて説明する。

[0086] まず、探索処理部１０３１は、バッファ領域の原子層数の初期値i_0を算出し、例えばメインメモリなどの記憶装置に格納する（ステップＳ１１）。初期値i_0については、以下の式に基づき算出する。

[0087] [数27]

$$\rho(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \approx \exp\left(-K\left|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right|\right)$$

[0088] この式において｜ｒ－ｒ’｜が、求めるべきバッファ領域の原子層数の初期値となる。また、Ｋは、以下のように算出される。

[0089] [数28]

$$(a)\quad K = C_{TB}\sqrt{E_{gap}}$$

$$(b)\quad K = C_{WB}aE_{gap}$$

[0090] （ａ）は原子間の結合が強い場合（例えば半導体など）の式であり、係数C_{TB}は、例えば１程度の値である。（ｂ）は原子間の結合が弱い場合（例えば金属）の式であり、係数C_{WB}は、例えば１程度の値である。格子定数ａは、入力ファイル１０２１に含まれている値を用いる。バンドギャップE_{gap}についても、入力ファイル１０２１に含まれる値を用いる。そして、$\rho(|r-r'|)$にはほぼ10^{-5}程度として設定し、｜ｒ－ｒ’｜を算出する。このようにすれば、原子間の相互作用が無視できる程度の値（10^{-5}）になるようなバッファ領域の原子層数｜ｒ－ｒ’｜が得られるようになる。

[0091] そして、探索処理部１０３１は、ｉに初期値i_0を設定する（ステップＳ１３）。その後、探索処理部１０３１は、密度行列算出部１０３３に、密度行

列$\rho_i^{(I)}=\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),before}$の算出処理を領域毎に実施させ、密度行列$\rho_i^{(I)}$を例えば第２データ格納部１０４に格納させる（ステップＳ１５）。

[0092] 密度行列ρ_iの算出処理については、（１９）式乃至（２４）式に従って行われる。すなわち、固有値問題を解く処理を実施することになる。固有値問題を解く際の途中のデータについても例えば第２データ格納部１０４に格納しておく。ハミルトニアン$H^{(I)}$及び重なり積分行列$S^{(I)}$もこれらの式を解く際に算出され、後に少なくとも一部の行列要素については再度使用されるので、第２データ格納部１０４に格納される。さらに、フェルミエネルギーε_Fについても算出される。このステップの演算処理については、よく知られているので、これ以上述べない。

[0093] 次に、探索処理部１０３１は、バッファ領域の原子層数ｉを１層増加させ（ステップＳ１７）、密度行列算出部１０３３に、密度行列$\rho_{i+1}^{(I)}$（$=\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),after}$）の算出処理を領域毎に実施させ、密度行列$\rho_{i+1}^{(I)}$を例えば第２データ格納部１０４に格納させる（ステップＳ１９）。ハミルトニアン$H^{(I)}$及び重なり積分行列$S^{(I)}$については、不足する行列要素を算出すればよい。また、フェルミエネルギーについては再度算出する。

[0094] その後、探索処理部１０３１は、各領域について差行列$\Delta\rho^{(I)}=\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}$を算出し、例えば第２データ格納部１０４に格納する（ステップＳ２１）。具体的には、以下の式にて算出される。

$$\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}=\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),after}-\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),before}$$

[0095] そして、探索処理部１０３１は、第２データ格納部１０４に格納されている差行列$\Delta\rho^{(I)}=\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}$のうち特徴となる行列要素$\Delta\rho=\Delta\rho_{i0\alpha0,j0\beta0}^{(I)}$を特定する（ステップＳ２３）。そして、探索処理部１０３１は、$\Delta\rho$が、計算精度として指定された物理量から算出される基準値以下であるか判断する（ステップＳ２５）。

[0096] ステップＳ２３及びＳ２５の処理について、（Ａ）エネルギーΔE_{input}が計算精度として指定された場合、（Ｂ）力ΔF_{input}が計算精度として指定された場合に分けて説明する。

[0097] （ａ）エネルギーΔE_{input}の場合

バッファ領域の原子層を変化させる前と変化させた後の電子系のエネルギーは（２４）式から以下のようになる。

[0098] [数29]

$$E_{el}^{before} = 2\sum_{I}\left(\sum_{i\alpha,j\beta}\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),before}H_{j\beta,i\alpha}^{(I)}\right)$$
$$E_{el}^{after} = 2\sum_{I}\left(\sum_{i\alpha,j\beta}\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),after}H_{j\beta,i\alpha}^{(I)}\right) \qquad (27)$$

[0099] そうすると、バッファ領域の原子層を変化させる前と変化させた後のエネルギーの差は、以下のように表される。

[0100] [数30]

$$\Delta E_{el} = 2\sum_{I}\left(\sum_{i\alpha,j\beta}\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}H_{j\beta,i\alpha}^{(I)}\right) \qquad (28)$$

[0101] さらに、（２８）式の絶対値の上限は、以下のように表される。

[0102] [数31]

$$\begin{aligned}\max\left|\Delta E_{el}\right| &\le 2\sum_{I}\left(\sum_{i\alpha,j\beta}\left|\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}H_{j\beta,i\alpha}^{(I)}\right|\right)\\ &\le 2\sum_{I}\left(\max_{i\alpha,j\beta}\left|\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}H_{j\beta,i\alpha}^{(I)}\right|\times N_{element}^{(I)}\right)\\ &= 2\sum_{I}\left(\Delta\rho_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0}^{(I)}H_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}^{(I)}N_{element}^{(I)}\right) \qquad (29)\\ &\le 2\max_{I}\left(\Delta\rho_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0}^{(I)}H_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}^{(I)}N_{element}^{(I)}\right)\times N_{divide}\\ &= 2\Delta\rho_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0}^{(I_0)}H_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}^{(I_0)}N_{element}^{(I_0)}N_{divide}\end{aligned}$$

[0103] ここで、$N^{(I)}_{element}$は、差行列$\Delta\rho^{(I)}$の非零成分の数とハミルトニアン$H^{(I)}$の非零成分の数のうち、大きい方の値である。また、N_{divide}は領域数である。さらに、$i0\alpha0$, $j0\beta0$は、$\Delta\rho^{(I)}$と$H^{(I)}$の行列積の最大ノルムを与える行列要素の列要素番号と行要素番号である。I_0は（２９）式の４行目において最大

値を与える領域のインデックス値（すなわち識別子）である。

[0104] （２９）式により、入力したエネルギーの精度ΔＥ$_{input}$を満たすためには以下の式を満たせばよい。

[0105] [数32]

$$\Delta E_{input} \geq \max\left|\Delta E_{el}\right| = 2\Delta\rho^{(I_0)}_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0} H^{(I_0)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0} N^{(I_0)}_{element} N_{divide} \qquad (30)$$

[0106] そのため、入力したエネルギーの精度ΔＥ$_{input}$を保つ条件は以下のとおりである。

[0107] [数33]

$$\Delta\rho \equiv \Delta\rho^{(I_0)}_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0} \leq \frac{\Delta E_{input}}{2H^{(I_0)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0} N^{(I_0)}_{element} N_{devide}} \qquad (31)$$

[0108] 従って、ステップＳ２３及びＳ２５のために以下の処理を実施する。

（１）各領域Ｉについて、差行列Δρ$^{(I)}$とハミルトニアンＨ$^{(I)}$との行列積において最大ノルムを与える行列要素の列のインデックス値ｉ０α０及び行のインデックス値ｊ０β０を特定する。

（２）各領域Ｉについて、差行列Δρ$^{(I)}$の非零成分の数とハミルトニアンＨ$^{(I)}$の非零成分の数とのうち大きい方の値Ｎ$^{(I)}_{element}$を特定する。

（３）差行列Δρ$^{(I)}$におけるｉ０α０列ｊ０β０行成分値Δρ$^{(I)}_{i0\alpha0,\,j0\beta0}$と、ハミルトニアンＨ$^{(I)}$におけるｉ０α０行ｊ０β０列成分値Ｈ$^{(I)}_{j0\beta0,\,i0\alpha0}$と、Ｎ$^{(I)}_{element}$との積が最大となる領域のインデックス値Ｉ$_0$を特定する。

[0109] （１）を実施すれば、ステップＳ２３で、Δρ$^{(I)}_{i0\alpha0,\,j0\beta0}$を特定することができる。

[0110] （２）及び（３）を実施すれば、（３１）式の右辺（すなわち基準値）を算出することができるので、ステップＳ２３において（３１）式の条件を満たすか判断することができる。

[0111] （Ｂ）力ΔＦ$_{input}$の場合

バッファ領域の原子層を変化させる前と変化させた後の電子系の力は（２５）式から以下のように表される。

[0112] [数34]

$$\boldsymbol{F}_{el}^{before} = -2\sum_{I}\left[\sum_{i\alpha,j\beta}\left\{\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),before}\frac{dH_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A} - \omega_{i\alpha,j\beta}^{(I),before}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right\}\right] \quad (32)$$

[0113] [数35]

$$\boldsymbol{F}_{el}^{after} = -2\sum_{I}\left[\sum_{i\alpha,j\beta}\left\{\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),after}\frac{dH_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A} - \omega_{i\alpha,j\beta}^{(I),after}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right\}\right] \quad (33)$$

[0114] そうすると、原子層を変化させる前と後との力の差の絶対値は以下のように表される。

[0115] [数36]

$$\left|\Delta\boldsymbol{F}_{el}\right| = \left|2\sum_{I}\left[\sum_{i\alpha,j\beta}\left\{\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\frac{dH_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A} - \Delta\omega_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right\}\right]\right| \quad (34)$$

[0116] この力の差の絶対値の上限は以下のように表される。

[0117] [数37]

$$\begin{aligned}
\left|\Delta\boldsymbol{F}_{el}\right| &\le 2\sum_{I}\left[\sum_{i\alpha,j\beta}\left|\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\frac{dH_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A} - \Delta\omega_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] \\
&\le 2\sum_{I}\left[\sum_{i\alpha,j\beta}\left|\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\frac{dH_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right| + \left|\Delta\omega_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] \\
&\le 2\sum_{I}\left[\sum_{i\alpha,j\beta}\left|\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\right|\left|\frac{dH_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right| + \left|\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\right|\left|\Delta\varepsilon_{\max}^{(I)}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] \\
&\le 2\sum_{I}\sum_{i\alpha,j\beta}\left|\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}\right|\left[\left|\frac{dH_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right| + \left|\Delta\varepsilon_{\max}^{(I)}\frac{dS_{j\beta,i\alpha}^{(I)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] \\
&\le 2\left|\Delta\rho_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0}^{(I_0)}\right|\left[\left|\frac{dH_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}^{(I_0)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right| + \left|\Delta\varepsilon_{\max}^{(I_0)}\frac{dS_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}^{(I_0)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] N_{element}^{(I_0)} N_{divide}
\end{aligned} \quad (35)$$

[0118] なお、R_Aは原子の座標値を表す。また、$N^{(I)}_{element}$は、差行列$\Delta\rho^{(I)}$の非零成分の数とハミルトニアン$H^{(I)}$の非零成分の数のうち、大きい方の値である。また、N_{divide}は領域数である。さらに、ｉ0α0，ｊ0β0は、$\Delta\rho^{(I)}$と$H^{(I)}$の行列積の最大ノルムを与える行列要素の列要素番号と行要素番号である。I_0は（２９）式の４行目において最大値を与える領域のインデックス値（すなわち識別子）である。さらに、$\varepsilon_{max}^{(I)}$は、各領域で固有値問題を解いたときの固有値のうち「各領域内の電子数／２」番目の固有値である。さらに、$\varepsilon_{max}^{(I0)}$は、領域I_0の$\varepsilon_{max}^{(I)}$である。

[0119] （３５）式から、入力された力の精度ΔF_{input}を満たすためには以下の式を満たせばよい。

[0120] [数38]

$$\left|\Delta \boldsymbol{F}_{input}\right| \geq \max\left|\Delta \boldsymbol{F}_{el}\right|$$
$$= 2\left|\Delta\rho^{(I_0)}_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0}\right|\left[\left|\frac{dH^{(I_0)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}}{d\boldsymbol{R}_A}\right| + \left|\Delta\varepsilon^{(I_0)}_{\max}\frac{dS^{(I_0)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] N^{(I_0)}_{element} N_{divide} \quad (36)$$

[0121] そのため、入力した力の精度ΔF_{input}を保つ条件は以下のとおりである。

[0122] [数39]

$$\Delta\rho \equiv \Delta\rho^{(I_0)}_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0}$$
$$\leq \frac{\left|\Delta \boldsymbol{F}_{input}\right|}{2\left[\left|\frac{dH^{(I)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}}{d\boldsymbol{R}_A}\right| + \left|\Delta\varepsilon^{(I_0)}_{\max}\frac{dS^{(I_0)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] N^{(I_0)}_{element} N_{divide}} \quad (37)$$

[0123] 従って、ステップＳ２３及びＳ２５のために以下の処理を実施する。

（１）各領域Ｉについて、差行列$\Delta\rho^{(I)}$とハミルトニアン$H^{(I)}$との行列積において最大ノルムを与える行列要素の列のインデックス値ｉ0α0及び行のインデックス値ｊ0β0を特定する。

（２）各領域Ｉについて、差行列$\Delta\rho^{(I)}$の非零成分の数とハミルトニアン$H^{(I)}$の非零成分の数とのうち大きい方の値$N^{(I)}_{element}$を特定する。

（３）差行列$\Delta\rho^{(I)}$における$i0\alpha0$列$j0\beta0$行成分値$\Delta\rho^{(I)}_{i0\alpha0,j0\beta0}$と、ハミルトニアン$H^{(I)}$における$i0\alpha0$行$j0\beta0$列成分値$H^{(I)}_{j0\beta0,i0\alpha0}$と、$N^{(I)}_{element}$との積が最大となる領域のインデックス値$I_0$を特定する。

[0124] （１）を実施すれば、ステップＳ２３で、$\Delta\rho^{(I)}_{i0\alpha0,j0\beta0}$を特定することができる。

[0125] （２）及び（３）を実施すれば、固有値問題を解く際に得られたデータから（３７）式の各要素を抽出することができるので、（３７）式の右辺（すなわち基準値）を算出することもできる。従って、ステップＳ２３において（３７）式の条件を満たすか判断することができる。

[0126] ここまでの処理を模式的に示すと図５のようになる。図５の（ａ）では、分割領域Ａに対して、最初にバッファ領域Ｃを設定している。そして、図５の（ｂ）で示すように、１層だけバッファ領域を拡張してバッファ領域Ｄを設定する。この際に、（３１）式又は（３７）式のような条件を、（ａ）の場合の密度行列と（ｂ）の場合の密度行列の差の行列における特徴的な行列要素値が満たしているか判断している。

[0127] ステップＳ２５において$\Delta\rho$が、指定物理量から算出される基準値以下であると判断されると、バッファ領域の原子層数の初期値は大きすぎたということで端子Ａから図６の処理フローに移行する。一方、ステップＳ２５において$\Delta\rho$が、指定物理量から算出される基準値を超えていると判断されると、バッファ領域の原子層数の初期値は小さすぎたということで端子Ｂから図７の処理フローに移行する。

[0128] 図６の処理フローの説明に移行して、探索処理部１０３１は、原子層数ｉを１デクリメントする（ステップＳ２７）。すなわち、バッファ領域の原子層数を１削減する。例えば、バッファ領域を図５の（ｂ）から（ａ）に変化させる場合を考える。

[0129] そして、探索処理部１０３１は、バッファ領域の原子層数を１削減した状態において、密度行列算出部１０３３に密度行列ρ_{i-1}の算出処理を領域毎に実施させ、密度行列$\rho_{i-1}^{(I)}$（$=\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),after}$）を例えば第２データ格納部１０４

に格納させる（ステップＳ３１）。この処理は、ステップＳ１９とほぼ同様である。但し、バッファ領域が狭くなる場合には、ハミルトニアン$H^{(I)}$及び重なり積分行列$S^{(I)}$については、既に計算済みの行列要素を用いることができる。すなわち、第２データ格納部１０４に格納されているデータを利用する。フェルミエネルギーについては再度算出する。

[0130] そして、探索処理部１０３１は、各領域について差行列$\Delta\rho^{(I)}_{-}$（$=\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}$）を算出し、例えば第２データ格納部１０４に格納する（ステップＳ３３）。$\rho_{i}^{(I)}=\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),before}$として、ステップＳ２１と同様の演算を実施する。

[0131] そして、探索処理部１０３１は、第２データ格納部１０４に格納されている差行列$\Delta\rho^{(I)}_{-}$（$=\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}$）のうち特徴となる行列要素$\Delta\rho_{-}$（$=\Delta\rho_{i0\alpha0,j0\beta0}^{(I)}$）を特定する（ステップＳ３５）。このステップでもステップＳ２３と同様の演算を実施する。その後、探索処理部１０３１は、$\Delta\rho_{-}$が、計算精度として指定された物理量から算出される基準値以下であるか判断する（ステップＳ３７）。このステップにおいても、ステップＳ２５と同様の演算により基準値を算出した上で、$\Delta\rho_{-}$と比較を行う。

[0132] $\Delta\rho_{-}$が、基準値以下である場合には（ステップＳ３７：Ｙｅｓルート）、まだバッファ領域が広すぎるので、ステップＳ２７に戻る。一方、$\Delta\rho_{-}$が、基準値を超えた場合には（ステップＳ３７：Ｙｅｓルート）、バッファ領域を１原子層狭くしすぎたということで、探索処理部１０３１は、（ｉ＋１）をバッファ領域の原子層数として決定し、第２データ格納部１０４に格納する（ステップＳ３９）。そして元の処理に戻って、バッファ領域決定部１０３の処理を終了する。

[0133] このようにすれば、バッファ領域の原子層数を変化させる前の密度行列と後の密度行列との差の行列における特徴的な行列要素値が、計算精度として指定された物理量から算出される基準値以下という条件を満たす最小の原子層数を特定することができる。

[0134] 次に、端子Ｂ以降の処理を図７を用いて説明する。図７で説明する処理は、図５の（ａ）から（ｂ）のようにバッファ領域の広さを広げてゆく処理で

ある。まず、探索処理部１０３１は、原子層数ｉを１インクリメントする（ステップＳ４１）。そして、探索処理部１０３１は、バッファ領域の原子層数を１増加した状態において、密度行列算出部１０３３に密度行列ρ_{i+1}の算出処理を領域毎に実施させ、密度行列$\rho_{i+1}^{(I)}$（＝$\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),after}$）を例えば第２データ格納部１０４に格納させる（ステップＳ４３）。この処理は、ステップＳ１９とほぼ同様である。但し、バッファ領域が広くなるので、ハミルトニアン$H^{(I)}$及び重なり積分行列$S^{(I)}$については、新たに追加された領域に含まれる原子について不足する行列要素を追加で算出し、既に算出されているものについてはそのまま使用する。フェルミエネルギーについては再度算出する。

[0135] そして、探索処理部１０３１は、各領域について差行列$\Delta\rho_{+}^{(I)}$（＝$\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}$）を算出し、例えば第２データ格納部１０４に格納する（ステップＳ４５）。$\rho_{i}^{(I)}$＝$\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I),before}$として、ステップＳ２１と同様の演算を実施する。

[0136] そして、探索処理部１０３１は、第２データ格納部１０４に格納されている差行列$\Delta\rho_{+}^{(I)}$（＝$\Delta\rho_{i\alpha,j\beta}^{(I)}$）のうち特徴となる行列要素$\Delta\rho_{+}$（＝$\Delta\rho_{i0\alpha0,j0\beta0}^{(I)}$）を特定する（ステップＳ４７）。このステップでもステップＳ２３と同様の演算を実施する。その後、探索処理部１０３１は、$\Delta\rho_{+}$が、計算精度として指定された物理量から算出される基準値以下であるか判断する（ステップＳ４９）。このステップにおいても、ステップＳ２５と同様の演算により基準値を算出した上で、$\Delta\rho_{+}$と比較を行う。

[0137] $\Delta\rho_{+}$が、基準値を超えている場合には（ステップＳ４９：Ｎｏルート）、まだバッファ領域が狭いので、ステップＳ４１に戻る。一方、$\Delta\rho_{+}$が、基準値以下になった場合には（ステップＳ４９：Ｙｅｓルート）、探索処理部１０３１は、ｉをバッファ領域の原子層数として決定し、第２データ格納部１０４に格納する（ステップＳ５１）。そして元の処理に戻って、バッファ領域決定部１０３の処理を終了する。

[0138] このようにすれば、バッファ領域の原子層数を変化させる前の密度行列と後の密度行列との差の行列における特徴的な行列要素値が、計算精度として

指定された物理量から算出される基準値以下という条件を満たす最小の原子層数を特定することができる。

[0139] 以上のような処理を実施することで、バッファ領域の適切な原子層数を算出することができる。すなわち、これから計算する物理量の計算精度を維持しつつ、最も狭いバッファ領域が得られたことになる。最も狭いバッファ領域であれば、計算精度を維持しつつ計算量を削減できることになる。なお、密度行列から物理量を算出することがないので、上で述べたような繰り返し処理を実施したとしても、その分だけ計算量を削減することができている。また、自動で計算できているため、ユーザのスキルなどに依存せず効率的にバッファ領域の原子層数が得られている。

[0140] なお、上ではコンピュータ１台で処理を実施する例を示したが、領域毎に行う演算については複数のプロセッサ（すなわちＣＰＵ：Central Processing Unit）又は複数のコンピュータで並列して演算することも可能である。

[0141] さらに、上で述べた処理フローでは、原子層数を１つずつ変化させているが、必ずしも１に限定されるものではなく、他の値ずつ変化させるようにしても良い。単純増加又は減少ではなく、増減させながら収束させるようにしても良い。

[0142] なお、この後、このようにして得られたバッファ領域を用いて物理量算出部１０５による処理が行われる。物理量算出部１０５の処理については、従来と同様であるから、簡単に説明しておく。

[0143] まず、構造最適化部１０５３等による、原子構造の最適化のための処理を、図８を用いて説明する。まず、構造最適化部１０５３は、第１データ格納部１０２から入力ファイル１０２１を読み出すと共に、第２データ格納部１０４に格納されているバッファ領域の原子層数を読み出す（ステップＳ１０１）。

[0144] そして、構造最適化部１０５３は、初期原子配置で特定される領域全体を、領域のｘ、及びｚ方向の分割数に従って領域分割処理を実施する（ステップＳ１０３）。この領域分割処理では、単位格子ベクトルを用いてｘ、ｙ及

びｚのそれぞれについて等間隔に分割するが、この処理自体はよく知られたものであるから、詳細な説明については省略する。

[0145] 以下の処理については、複数のプロセッサなどで並列実施する場合を想定して説明する。よって、領域分割後の各領域に属する原子のデータを、担当するプロセッサ等に配布する。なお、構造最適化部１０５３は、複数のプロセッサ等の管理を行う処理部であっても良い。

[0146] そして、第２データ格納部１０４に格納されているバッファ領域の原子層数に従って、各確定バッファ領域内にある原子のデータを、複数のプロセッサ等で交換する（ステップＳ１０５）。その後、複数のプロセッサ等は、領域毎に、近傍原子を探索する処理を実施して（ステップＳ１０７）、領域毎に固有値問題を解く処理を実施する（ステップＳ１０９）。（１９）式乃至（２１）式についての演算を、各プロセッサで、担当領域について実施する。

[0147] さらに、構造最適化部１０５３等は、固有値問題の解を用いてフェルミエネルギーを算出する（ステップＳ１１１）。（２２）式及び（２３）式に基づき、固有値問題の解を用いて反復法によってフェルミエネルギーε_Fを算出する。

[0148] そして、構造最適化部１０５３等は、各領域の密度行列を算出する（ステップＳ１１３）。（２４）式に従って密度行列を算出する。その後、構造最適化部１０５３は、各領域の密度行列を用いて全系の物理量を算出する（ステップＳ１１５）。（２５）式によって電子エネルギーが算出され、（５）式によって原子にかかる力が算出される。

[0149] そして、構造最適化部１０５３等は、原子にかかる力が設定した値より大きいか判断する（ステップＳ１１７）。すなわち、安定的に原子が配置されているかを判断する。なお、何回ステップＳ１０５乃至Ｓ１１５を繰り返し実施しても安定的に原子が配置されていることにならない場合もあるので、その場合には入力ファイル１０２１に設定されている回数を超えて繰り返しているかをも判断する。

[0150] 原子にかかる力が設定した値より大きい場合には、構造最適化部１０５３等は、現在の原子位置を、ステップＳ１１５で算出された力に応じて移動させる構造最適化を実施し、構造最適化部１０５３は、現在の原子配置についてのデータを計算結果格納部１０６に格納する（ステップＳ１１９）。この構造最適化処理の結果、領域をまたいで移動する原子も存在するので、領域をまたいで移動した原子を、複数のプロセッサ間で交換する（ステップＳ１２１）。そして、ステップＳ１０５に戻る。

[0151] 一方、原子にかかる力が設定した値以下である場合又は繰り返し回数が設定回数を超えている場合には、出力部１０７は、入力ファイル１０２１に含まれる設定に従って、計算結果格納部１０６に格納されている最新の原子配置についてのデータを出力装置等に出力する（ステップＳ１２３）。

[0152] このように、バッファ領域の原子層数のデータを用いて構造最適化処理を実施することができる。

[0153] また、分子動力学計算部１０５１等による、分子動力学のための処理を、図９を用いて説明する。まず、分子動力学計算部１０５１は、第１データ格納部１０２から入力ファイル１０２１を読み出すと共に、第２データ格納部１０４に格納されているバッファ領域の原子層数を読み出す（ステップＳ２０１）。

[0154] そして、分子動力学計算部１０５１は、初期原子配置で特定される領域全体を、領域のｘ、ｙ及びｚ方向の分割数に従って領域分割処理を実施する（ステップＳ２０３）。この領域分割処理では、単位格子ベクトルを用いてｘ、ｙ及びｚのそれぞれについて等間隔に分割するが、この処理自体はよく知られたものであるから、詳細な説明については省略する。

[0155] 以下の処理については、複数のプロセッサなどで並列実施する場合を想定して説明する。よって、領域分割後の各領域に属する原子のデータを、担当するプロセッサ等に配布する。なお、分子動力学計算部１０５１は、複数のプロセッサ等の管理を行う処理部であっても良い。

[0156] そして、第２データ格納部１０４に格納されているバッファ領域の原子層

数に従って、各確定バッファ領域内にある原子のデータを、複数のプロセッサ等で交換する（ステップＳ２０５）。その後、複数のプロセッサ等は、領域毎に、近傍原子を探索する処理を実施して（ステップＳ２０７）、領域毎に固有値問題を解く処理を実施する（ステップＳ２０９）。（１９）式乃至（２１）式についての演算を、各プロセッサで、担当領域について実施する。

[0157] さらに、分子動力学計算部１０５１等は、固有値問題の解を用いてフェルミエネルギーを算出する（ステップＳ２１１）。（２２）式及び（２３）式に基づき、固有値問題の解を用いて反復法によってフェルミエネルギーε_Fを算出する。

[0158] そして、分子動力学計算部１０５１等は、各領域の密度行列を算出する（ステップＳ２１３）。（２４）式に従って密度行列を算出する。その後、分子動力学計算部１０５１は、各領域の密度行列を用いて全系の物理量を算出する（ステップＳ２１５）。（２５）式によって電子エネルギーが算出され、（５）式によって原子にかかる力が算出される。

[0159] その後、分子動力学計算部１０５１等は、ステップＳ２１５で算出された原子にかかる力と単位タイムステップとから運動方程式により原子を移動させ、移動後の原子の座標値などを第２データ格納部１０４に格納する（ステップＳ２１７）。

[0160] そして、分子動力学計算部１０５１等は、時間が、入力ファイル１０２１において設定されている最大タイムステップ以上経過したか判断する（ステップＳ２１９）。最大タイムステップ以上経過していない場合には、ステップＳ２１７の結果として、領域をまたいで移動する原子も存在するので、領域をまたいで移動した原子を、複数のプロセッサ間で交換する（ステップＳ２２１）。そして、ステップＳ２０５に戻る。

[0161] 一方、時間が、設定された最大タイムステップ以上経過した場合、出力部１０７は、入力ファイル１０２１に含まれる設定に従って、計算結果格納部１０６に格納されている各タイムステップにおける原子の座標データを出力

装置等に出力する（ステップＳ２２３）。

[0162] このように、バッファ領域の原子層数のデータを用いて分子動力学の計算を実施することができる。

[0163] このような処理を実施することで、新材料・デバイス開発において、実験結果とシミュレーション結果を照らし合わせた開発効率が向上する。具体的には、目的とする材料を得るための温度や圧力、材料の組成比を決定するための指針をシミュレーション結果から得る際、その開発速度を向上させることができる。これは、開発時間と経費の削減、開発による環境負荷の低減につながる。

[0164] 以上本技術の実施の形態を説明したが、本技術はこれに限定されるものではない。例えば、図２に示した機能ブロック図は一例であって、必ずしも実際のプログラムモジュール構成と一致しない場合がある。処理フローについても、各領域について実施する部分については、上で述べたように複数のプロセッサやコンピュータで分担して実行するようにしても良い。

[0165] なお、本技術によれば、上で述べたバッファ領域の決定方法は、量子論を用いた分割統治法であれば、どんな手法にも対応することが出来る。例えば、第一原理計算、タイトバインディング計算に適用することができる。

[0166] なお、上で述べた情報処理装置１００は、コンピュータ装置であって、図１０に示すように、メモリ２５０１とＣＰＵ２５０３とハードディスク・ドライブ（ＨＤＤ）２５０５と表示装置２５０９に接続される表示制御部２５０７とリムーバブル・ディスク２５１１用のドライブ装置２５１３と入力装置２５１５とネットワークに接続するための通信制御部２５１７とがバス２５１９で接続されている。オペレーティング・システム（ＯＳ：Operating System）及び本実施例における処理を実施するためのアプリケーション・プログラムは、ＨＤＤ２５０５に格納されており、ＣＰＵ２５０３により実行される際にはＨＤＤ２５０５からメモリ２５０１に読み出される。ＣＰＵ２５０３は、アプリケーション・プログラムの処理内容に応じて表示制御部２５０７、通信制御部２５１７、ドライブ装置２５１３を制御して、所定の動作

を行わせる。また、処理途中のデータについては、主としてメモリ２５０１に格納されるが、ＨＤＤ２５０５に格納されるようにしてもよい。本技術の実施例では、上で述べた処理を実施するためのアプリケーション・プログラムはコンピュータ読み取り可能なリムーバブル・ディスク２５１１に格納されて頒布され、ドライブ装置２５１３からＨＤＤ２５０５にインストールされる。インターネットなどのネットワーク及び通信制御部２５１７を経由して、ＨＤＤ２５０５にインストールされる場合もある。このようなコンピュータ装置は、上で述べたＣＰＵ２５０３、メモリ２５０１などのハードウエアとＯＳ及びアプリケーション・プログラムなどのプログラムとが有機的に協働することにより、上で述べたような各種機能を実現する。

[0167] 以上述べた本実施の形態をまとめると、以下のようになる。

[0168] 本バッファ領域決定方法は、物理量を計算すべき範囲を分割することによって得られる複数の領域に各々設定すべきバッファ領域の原子層数を決定するバッファ領域決定方法であって、（Ａ）複数の領域の各々について、バッファ領域の原子層数が第１の数である場合における第１の密度行列と、バッファ領域の原子層数が第１の数とは異なる第２の数である場合における第２の密度行列との差の行列を算出し、データ格納部に格納する差行列算出ステップと、（Ｂ）第１の数を変化させつつ差行列算出ステップを繰り返し実行させることにより、データ格納部に格納されている上記差の行列における所定の特徴行列要素の値が、指定された物理量から算出される基準値以下である最小の原子層数を探索する探索ステップとを含む。

[0169] このように密度行列に着目して実際に物理量を計算することなくバッファ領域の原子層数の適切な値を高速に算出することができるようになる。

[0170] なお、上で述べた探索ステップが、（Ｂ１）複数の領域Ｉの各々について、上記差の行列$\Delta\rho^{(I)}$とハミルトニアン$H^{(I)}$との行列積において最大ノルムを与える行列要素の列のインデックス値$i_0\alpha_0$及び行のインデックス値$j_0\beta_0$を特定するステップと、（Ｂ２）複数の領域Ｉの各々について、差の行列$\Delta\rho^{(I)}$の非零成分の数とハミルトニアン$H^{(I)}$の非零成分の数とのうち大きい方の値Ｎ

$^{(I)}{}_{element}$を特定するステップと、（Ｂ３）上記差の行列Δρ$^{(I)}$における$i_0\alpha_0$列$j_0\beta_0$行成分値Δρ$^{(I)}{}_{i0\alpha0,\,j0\beta0}$と、ハミルトニアンＨ$^{(I)}$における$i_0\alpha_0$行$j_0\beta_0$列成分値Ｈ$^{(I)}{}_{j0\beta0,\,i0\alpha0}$と、値Ｎ$^{(I)}{}_{element}$との積が最大となる領域の識別子Ｉ$_0$を特定するステップと、（Ｂ４）指定された物理量であるエネルギーΔＥ$_{input}$と複数の領域の数Ｎ$_{divide}$とから、

[数40]

$$\Delta\rho^{(I_0)}_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0} \le \frac{\Delta E_{input}}{2H^{(I_0)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0} N_{element} N_{divide}}$$

を満たしているか判断するステップとを含むようにしてもよい。エネルギーの計算精度が指定された場合にも対処可能である。

[0171] さらに、上で述べた探索ステップが、（Ｂ５）複数の領域Ｉの各々について、上記差の行列Δρ$^{(I)}$とハミルトニアンＨ$^{(I)}$との行列積において最大ノルムを与える行列要素の列のインデックス値$i_0\alpha_0$及び行のインデックス値$j_0\beta_0$を特定するステップと、（Ｂ６）複数の領域Ｉの各々について、上記差の行列Δ$^{(I)}$の非零成分の数とハミルトニアンＨ$^{(I)}$の非零成分の数とのうち大きい方の値Ｎ$^{(I)}{}_{element}$を特定するステップと、（Ｂ７）上記差の行列Δρ$^{(I)}$における$i_0\alpha_0$列$j_0\beta_0$行成分値Δρ$^{(I)}{}_{i0\alpha0,\,j0\beta0}$と、ハミルトニアンＨ$^{(I)}$における$i_0\alpha_0$行$j_0\beta_0$列成分値Ｈ$^{(I)}{}_{j0\beta0,\,i0\alpha0}$と、値Ｎ$^{(I)}{}_{element}$との積が最大となる領域の識別子Ｉ$_0$を特定するステップと、（Ｂ８）指定された物理量である力ΔＦ$_{input}$の絶対値と複数の領域の数Ｎ$_{divide}$と重なり積分行列Ｓ$^{(I)}$における$i_0\alpha_0$行$j_0\beta_0$列成分値Ｓ$^{(I)}{}_{j0\beta0,\,i0\alpha0}$と領域Ｉ$_0$における（電子数／２）番目の固有値$\varepsilon_{max}{}^{I}$と原子の座標Ｒ$_A$とから、

[数41]

$$\Delta\rho^{(I_0)}_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0} \le \frac{\left|\Delta \boldsymbol{F}_{input}\right|}{2\left[\left|\frac{dH^{(I_0)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}}{d\boldsymbol{R}_A}\right| + \left|\Delta\varepsilon_{\max}\frac{dS^{(I_0)}_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] N_{element} N_{divide}}$$

を満たしているか判断するステップとを含むようにしてもよい。力の計算精度が指定された場合にも対処可能である。

[0172] さらに、第１の数の初期値についての第１の密度行列と第１の数の初期値に１を加えた値についての第２の密度行列との差の行列における所定の特徴行列要素の値が、基準値以下であれば探索ステップにおいて第１の数を増加させ、基準値を超える場合には探索ステップにおいて第１の数を減少させるようにしてもよい。このようにすれば、効率的にバッファ領域の原子層数を特定できる。

[0173] なお、上で述べたような処理をコンピュータに実施させるためのプログラムを作成することができ、当該プログラムは、例えばフレキシブル・ディスク、ＣＤ－ＲＯＭなどの光ディスク、光磁気ディスク、半導体メモリ（例えばＲＯＭ）、ハードディスク等のコンピュータ読み取り可能な記憶媒体又は記憶装置に格納される。なお、処理途中のデータについては、ＲＡＭ等の記憶装置に一時保管される。

請求の範囲

[請求項1] 物理量を計算すべき範囲を分割することによって得られる複数の領域に各々設定すべきバッファ領域の原子層数を決定させる処理を、コンピュータに実行させるプログラムであって、

前記複数の領域の各々について、前記バッファ領域の原子層数が第１の数である場合における第１の密度行列と、前記バッファ領域の原子層数が前記第１の数とは異なる第２の数である場合における第２の密度行列との差の行列を算出し、データ格納部に格納する差行列算出ステップと、

前記第１の数を変化させつつ前記差行列算出ステップを繰り返し実行させることにより、前記データ格納部に格納されている前記差の行列における所定の特徴行列要素の値が、指定された物理量から算出される基準値以下である最小の原子層数を探索する探索ステップと、

を実行させるためのプログラム。

[請求項2] 前記探索ステップが、

前記複数の領域Ｉの各々について、前記差の行列$\Delta\rho^{(I)}$とハミルトニアン$H^{(I)}$との行列積において最大ノルムを与える行列要素の列のインデックス値$i_0\alpha_0$及び行のインデックス値$j_0\beta_0$を特定するステップと、

前記複数の領域Ｉの各々について、前記差の行列$\Delta\rho^{(I)}$の非零成分の数と前記ハミルトニアン$H^{(I)}$の非零成分の数とのうち大きい方の値$N^{(I)}_{element}$を特定するステップと、

前記差の行列$\Delta\rho^{(I)}$における$i_0\alpha_0$列$j_0\beta_0$行成分値$\Delta\rho^{(I)}_{i0\alpha0,j0\beta0}$と、前記ハミルトニアン$H^{(I)}$における$i_0\alpha_0$行$j_0\beta_0$列成分値$H^{(I)}_{j0\beta0,i0\alpha0}$と、前記値$N^{(I)}_{element}$との積が最大となる領域の識別子$I_0$を特定するステップと、

前記指定された物理量であるエネルギーΔE_{input}と前記複数の領域の数N_{divide}とから、

[数42]

$$\Delta\rho_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0}^{(I_0)} \leq \frac{\Delta E_{input}}{2H_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}^{(I_0)} N_{element} N_{divide}}$$

を満たしているか判断するステップと、

を含む請求項１記載のプログラム。

[請求項3] 前記探索ステップが、

前記複数の領域Ｉの各々について、前記差の行列Δρ$^{(I)}$とハミルトニアンＨ$^{(I)}$との行列積において最大ノルムを与える行列要素の列のインデックス値ｉ$_0\alpha_0$及び行のインデックス値ｊ$_0\beta_0$を特定するステップと、

前記複数の領域Ｉの各々について、前記差の行列Δ$^{(I)}$の非零成分の数と前記ハミルトニアンＨ$^{(I)}$の非零成分の数とのうち大きい方の値Ｎ$^{(I)}_{element}$を特定するステップと、

前記差の行列Δρ$^{(I)}$におけるｉ$_0\alpha_0$列ｊ$_0\beta_0$行成分値Δρ$^{(I)}_{i0\alpha0,\,j0\beta0}$と、前記ハミルトニアンＨ$^{(I)}$におけるｉ$_0\alpha_0$行ｊ$_0\beta_0$列成分値Ｈ$^{(I)}_{j0\beta0,\,i0\alpha0}$と、前記値Ｎ$^{(I)}_{element}$との積が最大となる領域の識別子Ｉ$_0$を特定するステップと、

前記指定された物理量である力ΔＦ$_{input}$の絶対値と前記複数の領域の数Ｎ$_{divide}$と重なり積分行列Ｓ$^{(I)}$におけるｉ$_0\alpha_0$行ｊ$_0\beta_0$列成分値Ｓ$^{(I)}_{j0\beta0,\,i0\alpha0}$と前記領域Ｉ$_0$における（電子数／２）番目の固有値ε$_{max}$'と原子の座標Ｒ$_A$とから、

[数43]

$$\Delta\rho_{i_0\alpha_0,j_0\beta_0}^{(I_0)} \leq \frac{\left|\Delta \boldsymbol{F}_{input}\right|}{2\left[\left|\frac{dH_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}^{(I_0)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right| + \left|\Delta\varepsilon_{\max}\frac{dS_{j_0\beta_0,i_0\alpha_0}^{(I_0)}}{d\boldsymbol{R}_A}\right|\right] N_{element} N_{divide}}$$

を満たしているか判断するステップと、

を含む請求項１記載のプログラム。

[請求項4] 前記第１の数の初期値についての第１の密度行列と前記第１の数の初期値に１を加えた値についての第２の密度行列との差の行列における前記所定の特徴行列要素の値が、前記基準値以下であれば前記探索ステップにおいて前記第１の数を増加させ、前記基準値を超える場合には前記探索ステップにおいて前記第１の数を減少させる

請求項１乃至３のいずれか１つ記載のプログラム。

[請求項5] 物理量を計算すべき範囲を分割することによって得られる複数の領域に各々設定すべきバッファ領域の原子層数を決定するバッファ領域決定方法であって、

前記複数の領域の各々について、前記バッファ領域の原子層数が第１の数である場合における第１の密度行列と、前記バッファ領域の原子層数が前記第１の数とは異なる第２の数である場合における第２の密度行列との差の行列を算出し、データ格納部に格納する差行列算出ステップと、

前記第１の数を変化させつつ前記差行列算出ステップを繰り返し実行させることにより、前記データ格納部に格納されている前記差の行列における所定の特徴行列要素の値が、指定された物理量から算出される基準値以下である最小の原子層数を探索する探索ステップと、

を含み、コンピュータにより実行されるバッファ領域決定方法。

[請求項6] 物理量を計算すべき範囲を分割することによって得られる複数の領域に各々設定すべきバッファ領域の原子層数を決定する情報処理装置であって、

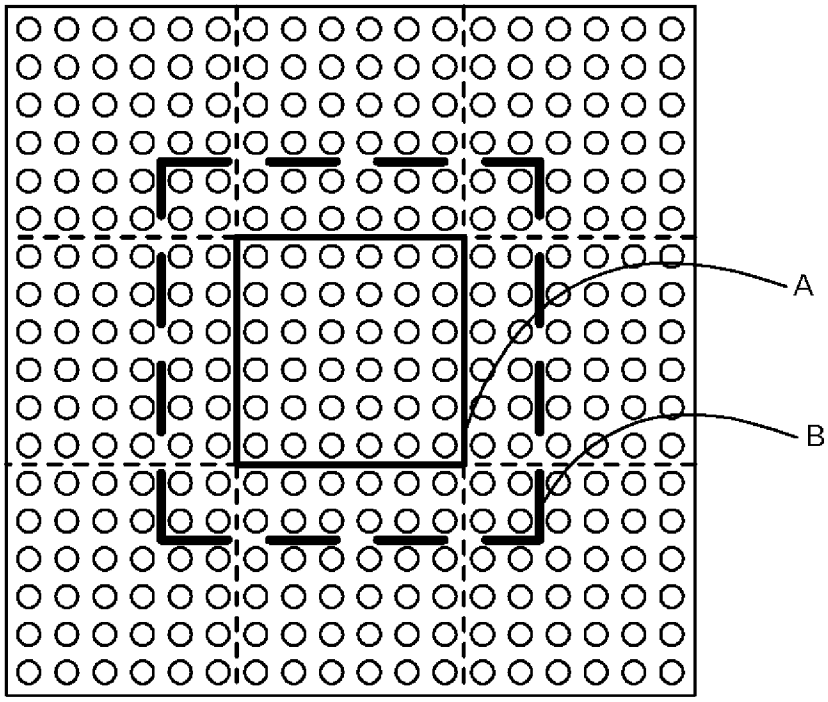
データ格納部と、

前記複数の領域の各々について、前記バッファ領域の原子層数が第１の数である場合における第１の密度行列と、前記バッファ領域の原子層数が前記第１の数とは異なる第２の数である場合における第２の密度行列との差の行列を算出し、前記データ格納部に格納する差行列

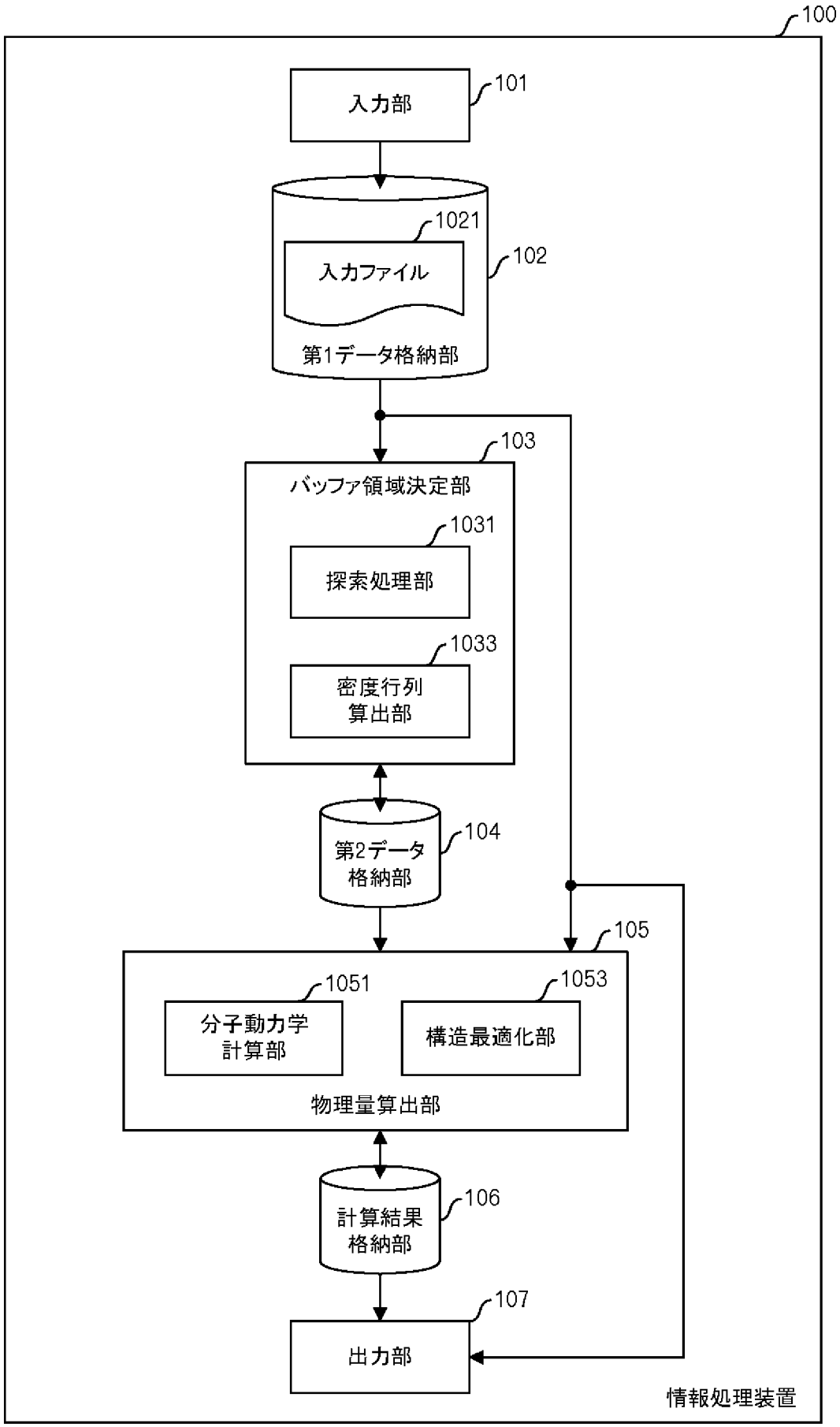
算出処理を実施し、前記第１の数を変化させつつ前記差行列算出処理を繰り返し実行することにより、前記データ格納部に格納されている前記差の行列における所定の特徴行列要素の値が、指定された物理量から算出される基準値以下である最小の原子層数を探索する探索処理部と、

を有する情報処理装置。

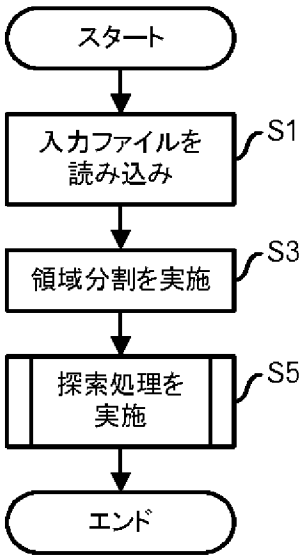
[図1]



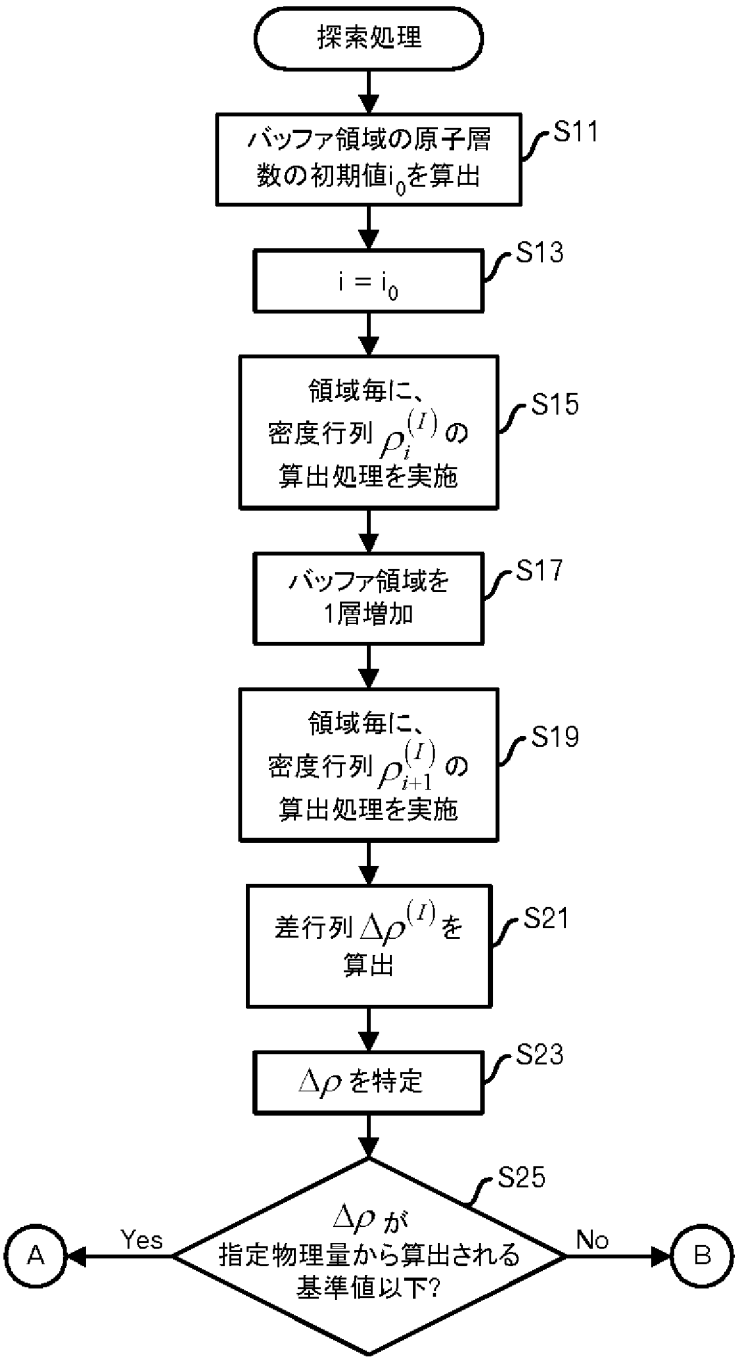
[図2]


100
入力部
101
1021
入力ファイル
102
第1データ格納部
103
バッファ領域決定部
1031
探索処理部
1033
密度行列
算出部
第2データ
格納部
104
105
1051
分子動力学
計算部
1053
構造最適化部
物理量算出部
計算結果
格納部
106
107
出力部
情報処理装置

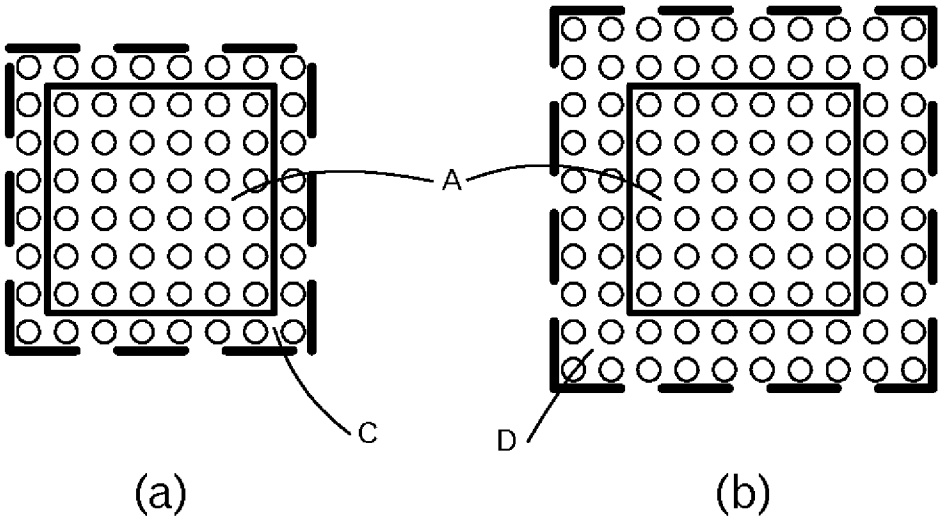
[図3]



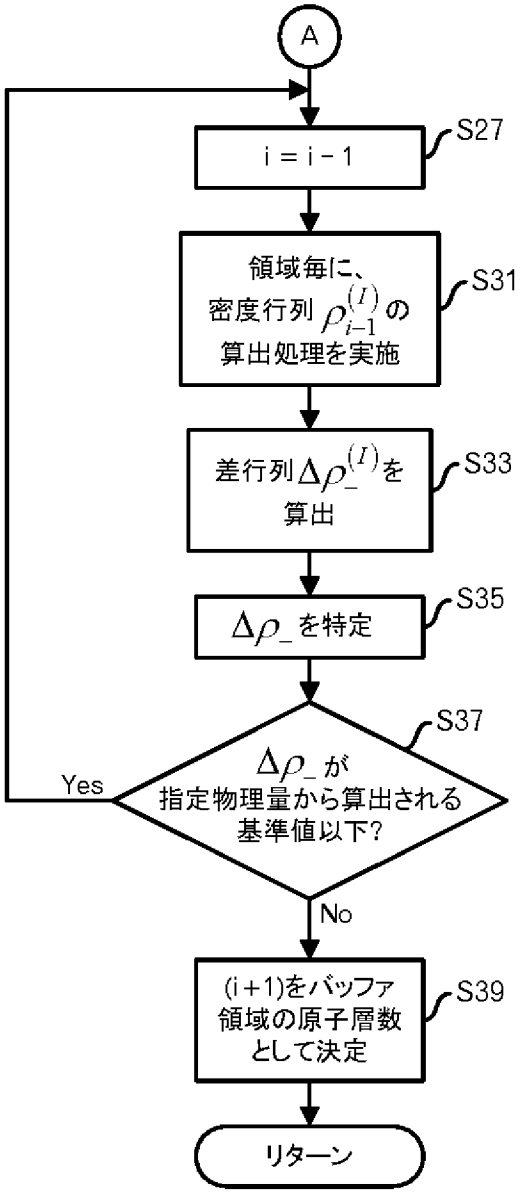
[図4]


探索処理
バッファ領域の原子層数の初期値i_0を算出
S11
$i = i_0$
S13
領域毎に、密度行列$\rho_i^{(I)}$の算出処理を実施
S15
バッファ領域を1層増加
S17
領域毎に、密度行列$\rho_{i+1}^{(I)}$の算出処理を実施
S19
差行列$\Delta\rho^{(I)}$を算出
S21
$\Delta\rho$を特定
S23
$\Delta\rho$が指定物理量から算出される基準値以下?
S25
Yes
No
A
B

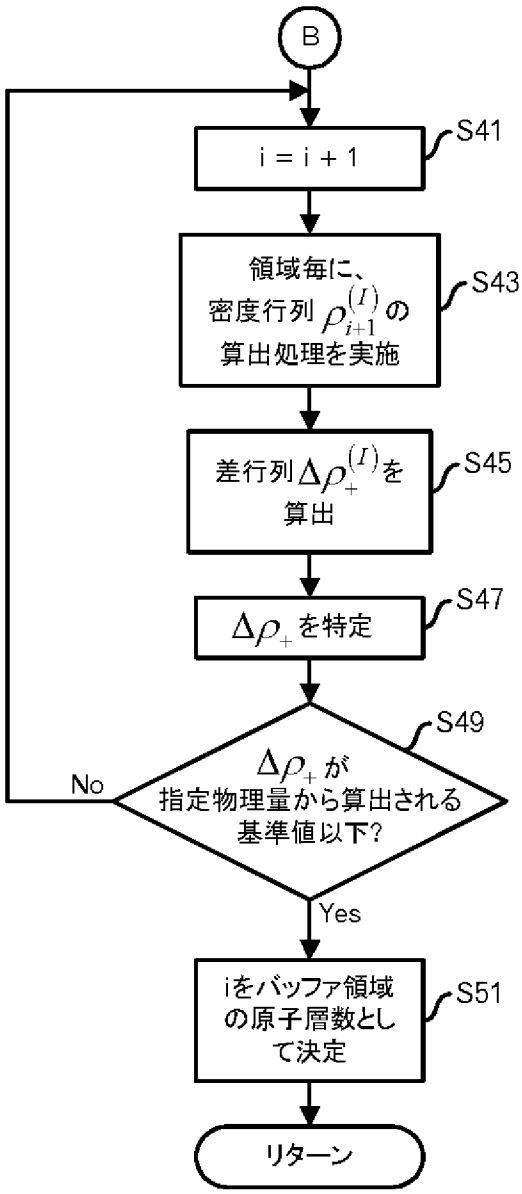
[図5]


A
C
D
(a)
(b)

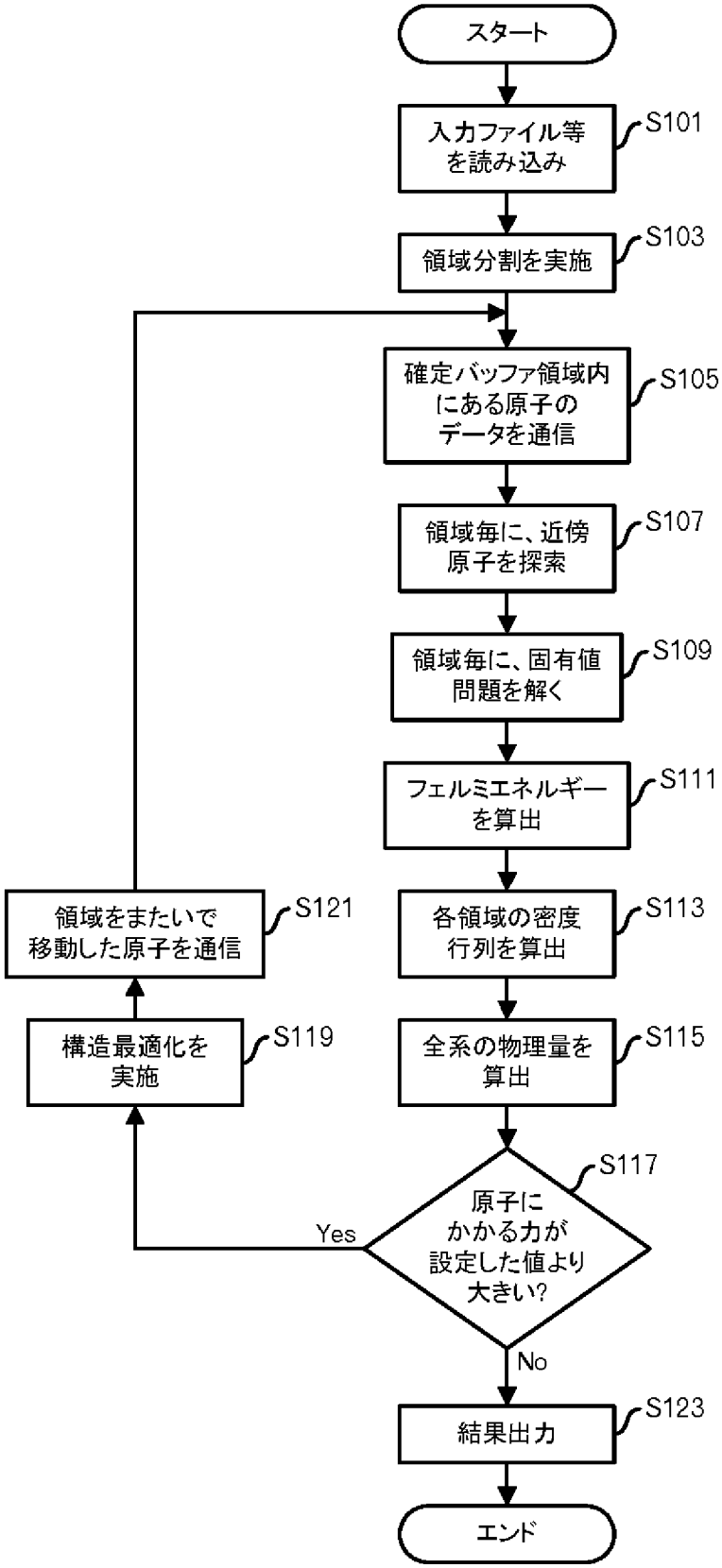
[図6]


A
i = i - 1
S27
領域毎に、
密度行列 $\rho_{i-1}^{(I)}$ の
算出処理を実施
S31
差行列$\Delta\rho_{-}^{(I)}$を
算出
S33
$\Delta\rho_{-}$を特定
S35
S37
$\Delta\rho_{-}$が
指定物理量から算出される
基準値以下?
Yes
No
(i+1)をバッファ
領域の原子層数
として決定
S39
リターン

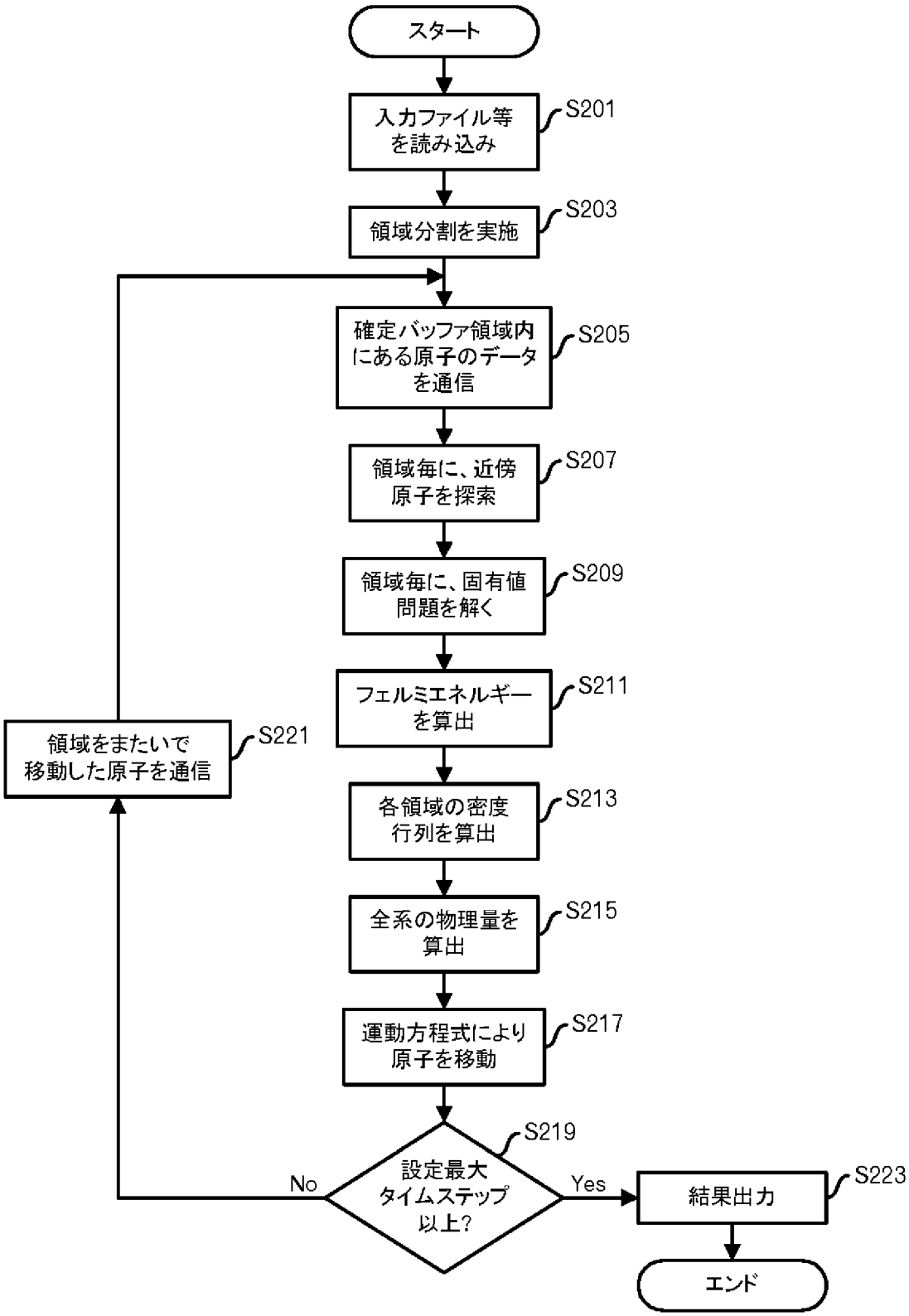
[図7]


B
i = i + 1
S41
領域毎に、
密度行列 $\rho_{i+1}^{(I)}$ の
算出処理を実施
S43
差行列 $\Delta\rho_{+}^{(I)}$ を
算出
S45
$\Delta\rho_{+}$ を特定
S47
$\Delta\rho_{+}$ が
指定物理量から算出される
基準値以下?
S49
No
Yes
iをバッファ領域
の原子層数とし
て決定
S51
リターン

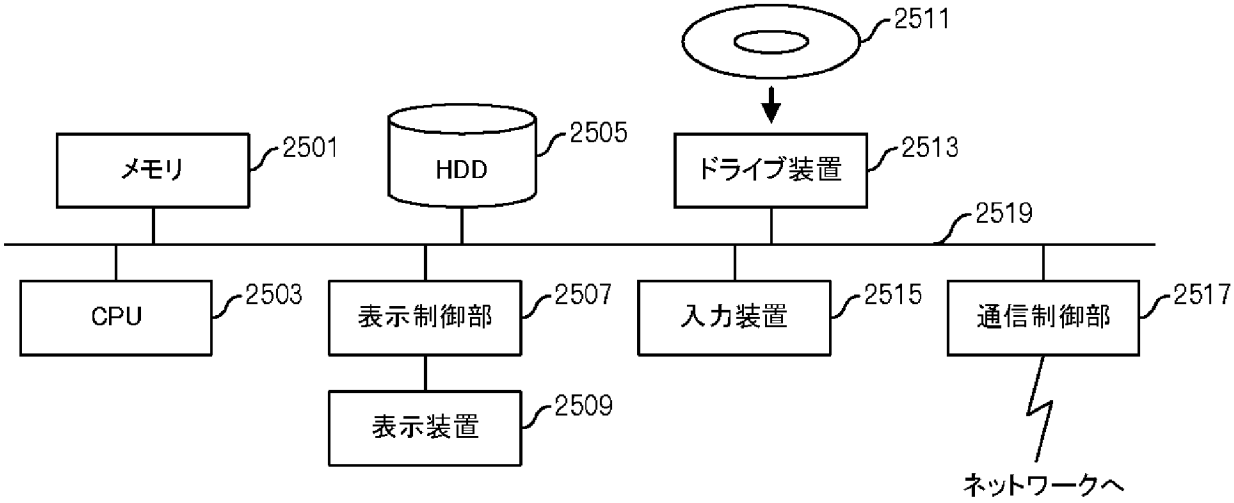
[図8]


スタート
入力ファイル等を読み込み
S101
領域分割を実施
S103
確定バッファ領域内にある原子のデータを通信
S105
領域毎に、近傍原子を探索
S107
領域毎に、固有値問題を解く
S109
フェルミエネルギーを算出
S111
各領域の密度行列を算出
S113
全系の物理量を算出
S115
原子にかかる力が設定した値より大きい?
S117
Yes
No
構造最適化を実施
S119
領域をまたいで移動した原子を通信
S121
結果出力
S123
エンド

[図9]


スタート
入力ファイル等を読み込み
S201
領域分割を実施
S203
確定バッファ領域内にある原子のデータを通信
S205
領域毎に、近傍原子を探索
S207
領域毎に、固有値問題を解く
S209
フェルミエネルギーを算出
S211
各領域の密度行列を算出
S213
全系の物理量を算出
S215
運動方程式により原子を移動
S217
設定最大タイムステップ以上?
S219
No
Yes
領域をまたいで移動した原子を通信
S221
結果出力
S223
エンド

[図10]


2511
メモリ
2501
HDD
2505
ドライブ装置
2513
2519
CPU
2503
表示制御部
2507
入力装置
2515
通信制御部
2517
表示装置
2509
ネットワークへ

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2010/073100

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
G06F19/00(2011.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
G06F19/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2011
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2011	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2011

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
CiNii, JSTPlus(JDreamII)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	Tetsuya KAWASAKI et al., "A Divide and Conquer Method for Solving Boundary Value Problems based on Shwartz's Alternating Method", IEICE Technical Report, 17 November 1995 (17.11.1995), vol.95, no.371, pages 1 to 6	1-6
A	Taisuke OZAKI, "Generalized divide-conquer method for large-scale O(N) DFT calculations", Abstracts of the Meeting of the Physical Society of Japan, 04 March 2005 (04.03.2005), vol.60, no.1, separate vol.2, page 320	1-6

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
15 February, 2011 (15.02.11)	01 March, 2011 (01.03.11)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office Facsimile No.	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2010/073100

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	Masato KOBAYASHI et al., "Implementation of Divide-and-Conquer (DC) Electronic Structure Code to GAMESS Program Package", Journal of Computer Chemistry, Japan, vol.8, no.1, Society of Computer Chemistry, Japan, 2009, pages 1 to 12	1-6

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１０／０７３１００

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　G06F19/00(2011.01)i

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　G06F19/00

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０１１年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０１１年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０１１年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

CiNii, JSTPlus(JDreamII)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
A	川崎哲矢、外３名，シュワルツの交代法を利用した境界値問題の分割統治法，電子情報通信学会技術研究報告，1995.11.17，Vol.95，No.371，P.1-6	１－６
A	尾崎泰助，一般化分割統治法によるオーダーＮ密度汎関数法の開発，日本物理学会講演概要集，2005.03.04，第60巻，第１号，第２分冊，P.320	１－６

☑　Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☐　パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊　引用文献のカテゴリー

「Ａ」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「Ｅ」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「Ｌ」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）

「Ｏ」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「Ｐ」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献

「Ｔ」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「Ｘ」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Ｙ」特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「＆」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日 １５．０２．２０１１	国際調査報告の発送日 ０１．０３．２０１１
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ） 郵便番号１００－８９１５ 東京都千代田区霞が関三丁目４番３号	特許庁審査官（権限のある職員）　５Ｌ　３９７５ 田中　伸次 電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３５６２

Ｃ（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
Ａ	小林正人、外２名，分割統治(DC)電子状態計算プログラムのGAMESSへの実装，Journal of Computer Chemistry, Japan，第８巻，第１号，日本コンピュータ化学会，2009，P.1-12	１－６