

序 文

本書は、VASP, CASTEP など多くの汎用コードが開発され、規範的手法となっている「平面波基底の第一原理計算法」に焦点を絞り、その原理と計算技術を詳しく説明するものである。

著者は90年代より「平面波基底の第一原理計算」の独自コード開発に取り組み、詳細なノートを作成してきた。また、大学院集中講義や研究者向けのセミナーで手法や計算技術の概要や詳細を講義してきた。本書は、そうした際の資料や経験、受講者からの質問や要望に基づく。

理論や手法に関する資料や書籍はあるが、手法と計算技術を中心に、具体的に何をどう計算しているか、どういう工夫や技術で高精度化・高効率化が実現されているか等、コード開発の立場からの詳細資料はそれほど多くない。実際に計算を開始しようとする人や新規手法やコード開発を志す人にとって、この種のまとまった情報、説明は有益である。

著者は、約40年にわたり計算材料科学の研究に従事してきた。研究を始めた当時、汎用コードはほとんどなく、自作が当たり前であった。Tight-binding法の独自コード開発に続き、第一原理計算のコード開発に着手した。1985年のCar-Parrinello法以降、この方向が新しい時代を拓くとの予感、期待があった。理論や手法を厳密に理解し、詳細なアルゴリズムを考えねばならず、今から思えば思い切った決断であったが、やりがいのあるものであった。やがて仲間も広がり、粒界・界面・欠陥への適用、局所応力・エネルギー法の開発など、道が拓けた。

第1章でも触れるが、90年代から新世紀にかけては、Car-Parrinello法に代表される大規模第一原理計算の実現、オーダー N 法などの新規手法開発や機械学習などinformaticsとの連携が開始されるなど、計算科学や計算材料科学の「革命期」であり、その中で研究生活をおくれたことは実に幸運であった。また著者の世代は、いわゆる汎用機からベクトル型スパコン、並列ワークステーション、超並列スパコンと、計算機の変遷にフルで遭遇した世代であり、計算機システムに適合したアルゴリズムの採用、既存コードの修正を体験してきた。この点からも理論や手法と共に、具体的な計算技術やアルゴリズムの重要性を痛感してきた。

ii 序 文

現在の研究者には、そのような作業よりも、汎用コードを使いこなすことで、材料科学や物質科学を一層豊かにし、さらには、それを基盤に新規手法やコードの開発、各種 informatics との連携・融合など、計算材料科学の進化・発展を図ることが期待される。そのためにも、著者が研究開発で得た様々な知見、情報を若い世代に何らかの形で伝えたいと考えている。本書が、若い世代による新たな開発や計算科学や計算材料科学の発展に役立つことを期待したい。

最後に、計算材料科学に導いていただいた故堂山昌男先生(東京大学名誉教授)、山本良一先生(東京大学名誉教授)、計算材料科学の「革命期」を共に奮戦した、石橋章司、田中真悟、田村友幸、椎原良典、澤村明賢、Guang-Hong Lu の各氏をはじめとする共同研究者の皆様、様々な場でご指導や励ましをいただいた先生方、研究者の皆様、常に温かいサポートをいただいた職場の皆様に、深く感謝致します。

2024年9月

香山 正憲