

ナノサイズ分子モデリングに向けた スケーラブルな量子化学計算法の開発

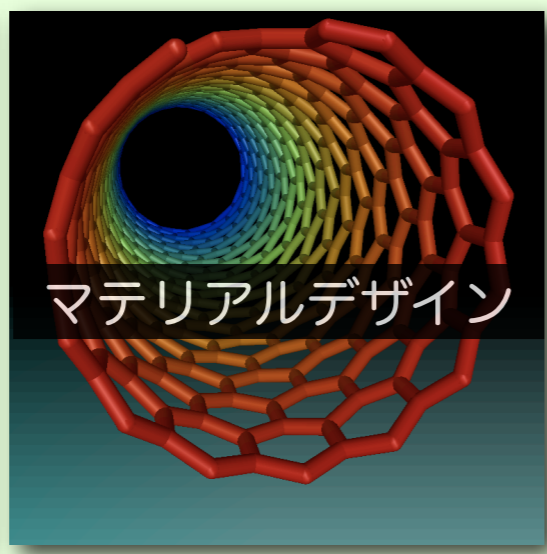
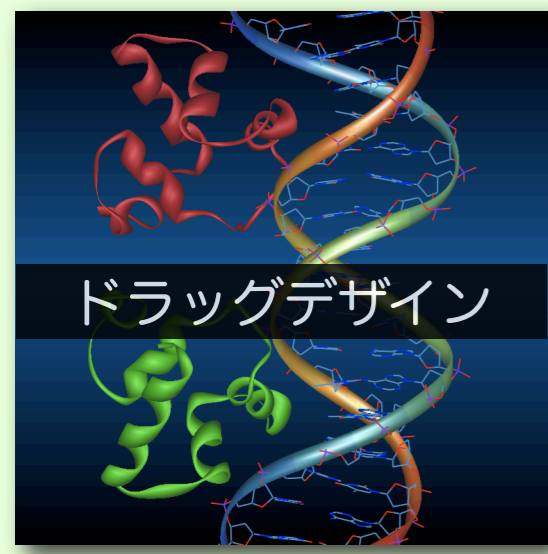
(東京大学大学院 工学系研究科) 倉重佑輝 中嶋隆人 平尾公彦

量子化学計算

- ・ 分子構造, 反応性などを計算
- ・ 精密な予測 (化学的精度)



計算に先導された分子設計



課題：計算量のサイズ依存性

- ・ 密度汎関数法を用いた計算
- ・ ガウス-有限要素クーロン法の開発
 - リニアスケーリングを達成
 - 並列化に適したアルゴリズム

