

「大規模・高精度電子状態計算から何がわかるか - EDAによるアプローチ」

講演者氏名	中井 浩巳
所属	早稲田大学理工学部化学科
講演タイトル	「大規模・高精度電子状態計算から何がわかるか - EDAによるアプローチ」
講演概略	<p>近年の電子状態計算は、大規模かつ高精度を目指して進歩している。しかし、大規模・高精度計算を行ったからといって、すぐに現象を理解できるわけではない。計算結果を何らかの手法で解析し、それに基づいて研究者が考え、初めてメカニズムや概念が導かれる。計算が大規模・高精度になればなるほど、解析が複雑になるのも事実である。この状況を打開するためには、大規模・高精度計算に対しても適用可能な解析手法が必要となる。そのような目的で、我々はエネルギー密度解析(EDA)という方法を提案した。</p> <p>本講演では、EDAの基本的な考えから、その応用例をいくつか紹介する予定である。</p>