

GCEED(Grid-based Coupled Electron and Electromagnetic field Dynamics)

ユーザーマニュアル ver.1.0.0

1. 可能な計算

閉殻系、開殻系の Kohn-Sham エネルギー、Kohn-Sham 軌道。
状態密度(DOS)、部分状態密度(PDOS)、電子局在関数(ELF)
実時間 TD-DFT 計算 (線形応答、レーザー場光励起)

2. インストール方法

Intel マシンを利用する場合は、Makefile 内の「LIBSCALAPACK」という変数に scalapack へのリンク先を記述した後、gceed/ディレクトリ内で

```
$ make all
```

と実行する。京コンピュータ、FX10、FX100 を利用する場合には

```
$ make -f Makefile.fujitsu all
```

と実行する。gceed/scf および gceed/rt ができればインストール終了。

3. 実行方法

基底状態計算と実時間発展計算を順に行う。

基底状態計算

```
$ ./scf <(インプットファイル名)> (アウトプットファイル名)
```

実時間発展計算

```
$ ./rt <(インプットファイル名)> (アウトプットファイル名)
```

4. インプット形式

namelist 形式で指定する。赤字の変数は必ず指定しなければならない。また、青字の変数は必要に応じて必ず指定しなければならない。各変数については「6. 入力変数」参照。

scf 計算用インプット

```
&group_fundamental  
  Harray(1,1)=0.25d0  
  Harray(2,1)=0.25d0  
  Harray(3,1)=0.25d0  
  rLsize(1,1)=16.d0  
  rLsize(2,1)=16.d0  
  rLsize(3,1)=16.d0
```

```
MST(1)=5
ifMST(1)=5
mixrate=0.1d0
/
&group_parallel
inumthreads=24
nproc_ob=1
nproc_Mxin(1)=1
nproc_Mxin(2)=1
nproc_Mxin(3)=1
nproc_Mxin_s(1)=1
nproc_Mxin_s(2)=1
nproc_Mxin_s(3)=1
/
&group_hartree
MEO=3
num_pole_xyz(1)=2
num_pole_xyz(2)=2
num_pole_xyz(3)=2
/
&group_file
file_OUT='C2H2.data'
LDA_Info='C2H2.info'
/
&group_atom
MI=4
MKI=2
iZatom(1)=6
iZatom(2)=1
ipsfileform(1)=1
ipsfileform(2)=1
Mlps(1)=1
Mlps(2)=0
Lref(1)=1
Lref(2)=0
```

```
file_atoms_coo='coo.data'  
/  
&group_scf_analysis  
/  
&group_others  
/
```

rt 計算用インプット

```
&group_fundamental  
/  
&group_parallel  
inumthreads=24  
nproc_ob=1  
nproc_Mxin(1)=1  
nproc_Mxin(2)=1  
nproc_Mxin(3)=1  
nproc_Mxin_s(1)=1  
nproc_Mxin_s(2)=1  
nproc_Mxin_s(3)=1  
/  
&group_propagation  
dt=1.31644d-3  
Ntime=5000  
/  
&group_hartree  
MEO=3  
num_pole_xyz(1)=2  
num_pole_xyz(2)=2  
num_pole_xyz(3)=2  
/  
&group_file  
file_IN='C2H2.data'  
file_RT='C2H2-RT.data'
```

```

file_alpha='C2H2-ALP.data'
/
&group_extfield
  ikind_eext=0
  Fst=0.25d0
  dir='z'
/
&group_others
/

```

5. サンプルインプット

gceed/example/ディレクトリにサンプルインプットがある。

6. 入力変数(赤字の変数は必ず指定しなければならない。また、青字の変数は必要に応じて必ず指定しなければならない。)

6.1 基底状態計算

6.1.1 group_fundamental

imesh_oddeven	グリッドのとり方(1: グリッドの中心が原点、2: グリッドの頂点が原点)
iflag_stopt	構造最適化についての制御用変数(0: 行わない、1: 行う)
iter_stopt	構造最適化の iteration の回数
Ncg	CG 法や DIIS 法における iteration の回数
iflag_subspace_diag	部分対角化についての制御用変数(0: 行わない、1: 行う)
Harray	グリッド幅(Å)
rLsize	系の大きさ(Å)
Diter	scf 計算の iteration の回数
ilsda	LSDA 計算についての制御用変数(0: LDA, 1: LSDA)
MST	軌道の総数(占有軌道と非占有軌道の数の和)
ifMST	占有軌道の数
iflag_convergence	収束判定についての制御用変数(1: 電子密度の差のノルムの二乗、2: ハートリーポテンシャルの差

	のノルムの二乗)
mixrate	電子密度の混ぜ率
icalcforce	力の計算についての制御用変数(0: 行わない、1: 行う)
iflag_writepsi	波動関数出力についての制御用変数(0: 行わない、1: 行う)

6.1.2 group_parallel

inumthreads	OpenMP 並列のスレッド数
nproc_ob	MPI 用の軌道並列数(「7. プロセス並列についての注意事項」参照)
nproc_Mxin	MPI 用のグリッド並列数(「7. プロセス並列についての注意事項」参照)
nproc_Mxin_s	MPI 用のグリッド並列数(Hartree ポテンシャル、交換・相関ポテンシャルの箇所、「7. プロセス並列についての注意事項」参照)
num_datafiles_IN	入力するデータファイルの数(2 のべき乗、1 でも可)
num_datafiles_OUT	出力するデータファイルの数(2 のべき乗、1 でも可)

6.1.3 group_hartree(青字の変数は MEO=3 のときに必ず指定しなければならない。)

MEO	多極子の取り方についての制御用変数(1: 1つ、2: 原子位置、3: 分割された直方体内の電子の重心)
num_pole_xyz	MEO=3 のときの多極子の数。値の目安は rLsize(1:3)を 8 Å で割った値を整数にしたもの。

6.1.4 group_file

IC	中間データ読み込みについての制御用変数(0: 読み込みなし、1: 読み込みあり)
OC	中間データ書き込みについての制御用変数(0: 書き込みなし、1: 書き込みあり)
file_IN	読み込み用データファイルの名前
file_OUT	書き込み用データファイルの名前
LDA_Info	結果が書かれた出力ファイルの名前

6.1.5 group_atom

MI	原子数
MKI	原子の種類の数
Zatom	原子番号
psfileform	擬ポテンシャルデータのフォーマット (1: Yabana-Bertsch 形式、2: ABINIT(.pspnc)形式、3: fhi98PP(.cpi)形式)
file_atoms_coo	原子の座標が書かれたファイルの名前
Mlps	最大軌道角運動量量子数
Lref	参照用軌道角運動量量子数

6.1.6 group_scf_analysis

iflag_writespsi	波動関数出力についての制御用変数(0: 出力しない、1: 出力する)
iflag_dos	DOS 出力についての制御用変数(0: 出力しない、1: 出力する)
iflag_pdos	PDOS 出力についての制御用変数(0: 出力しない、1: 出力する)
iflag_ELF	ELF 出力についての制御用変数(0: 出力しない、1: 出力する)

6.1.7 group_others

必要であればインプットファイルの&group_others の下の行に値を指定する。

6.2 実時間発展計算

6.2.1 group_fundamental

Nenergy	振動子強度出力の際のエネルギーの点数
dE	振動子強度出力の際のエネルギーの幅 (eV)
N_hamil	テーラー展開の次数
icalcforce	力の計算についての制御用変数(0: 行わない、1: 行う)
iflag_md	MD 計算についての制御用変数(0: 行わない、1: 行う)

6.2.2 group_parallel

inumthreads	OpenMP 並列のスレッド数
nproc_ob	MPI 用の軌道並列数(「7. プロセス並列についての注意事項」参照)
nproc_Mxin	MPI 用のグリッド並列数(「7. プロセス並列についての注意事項」参照)
nproc_Mxin_s	MPI 用のグリッド並列数(Hartree ポテンシャル、交換・相関ポテンシャルの箇所、「7. プロセス並列についての注意事項」参照)
num_datafiles_IN	入力するデータファイルの数(2 のべき乗、1 でも可)
num_datafiles_OUT	出力するデータファイルの数(2 のべき乗、1 でも可)

6.2.3 group_hartree(青字の変数は MEO=3 のときに必ず指定しなければならない。)

MEO	多極子の取り方についてのフラグ(1: 1 つ、2: 原子位置、3: 分割された直方体内の電子の重心)
num_pole_xyz	MEO=3 のときの多極子の数。値の目安は rLsize(1:3)を 8 Å で割った値を整数にしたもの。

6.2.4 group_file

IC_rt	時間発展計算時の中間データ読み込み制御用変数 (0: 読み込みなし、1: 読み込みあり)
OC_rt	時間発展計算時の中間データ書き込み制御用変数(0: 書き込みなし、1: 書き込みあり)
file_IN	基底状態計算の読み込み用データファイルの名前
file_RT	誘起双極子モーメント等書き込み用データファイルの名前
file_alpha	振動子強度書き込み用ファイルの名前

6.2.5 group_extfield(青字の変数は ikind_eext の値に応じて必ず指定しなければならない。)

ikind_eext	外場の種類についての制御用変数(0: 光学応答、1: 直線偏光レーザー場、4: 円偏光レーザー場)
Fst	光学応答計算(ikind_eext=0)における外場の強さ (V/Å)

dir	光学応答計算および直線偏光レーザー場計算 (ikind_eext=0,1)における外場の向き。'x','y','z'のいずれかで指定する。
dir2	円偏光レーザー場計算(ikind_eext=4)における偏光の向き。'x+','x-','y+','y-','z+','z-'のいずれかで指定する。
romega	直線偏光レーザー場計算(ikind_eext=1)におけるレーザーの振動数 (eV)
pulse_T	直線偏光レーザー場計算(ikind_eext=1)におけるパルスの長さ (fs)
rlaser_I	直線偏光レーザー場計算(ikind_eext=1)におけるレーザーの強度 (W/cm ²)
tau	直線偏光レーザー場計算(ikind_eext=1)におけるレーザーが切れるまでの時間 (fs)
romega2	円偏光レーザー場計算(ikind_eext=4)におけるレーザーの振動数 (eV)
pulse_T2	円偏光レーザー場計算(ikind_eext=4)におけるパルスの長さ (fs)
rlaser_I2	円偏光レーザー場計算(ikind_eext=4)におけるレーザーの強度 (W/cm ²)
tau2	円偏光レーザー場計算(ikind_eext=4)におけるレーザーが切れるまでの時間 (fs)

6.2.6 group_propagation

dt	時間刻み幅 (fs)
Ntime	時間ステップ数

6.2.7 group_others

必要であればインプットファイルの&group_others の下の行に値を指定する。

7. プロセス並列についての注意事項

以下の全ての条件を満たす必要がある。

- $nproc_ob \times nproc_Mxin(1) \times nproc_Mxin(2) \times nproc_Mxin(3) = (\text{総プロセス数})$
- $nproc_Mxin_s(1) \times nproc_Mxin_s(2) \times nproc_Mxin_s(3) = (\text{総プロセス数})$
- $nproc_Mxin_s(1)$ が $nproc_Mxin(1)$ で割り切れる。
- $nproc_Mxin_s(2)$ が $nproc_Mxin(2)$ で割り切れる。

- $\text{nproc_Mxin_s}(3)$ が $\text{nproc_Mxin}(3)$ で割り切れる。