

分類	ナノシミュレーション
キーワード	第一原理分子動力学法
開発者	大野隆央
作成年月	2014年 5月
コード名	PHASE/0
作成言語	Fortran90

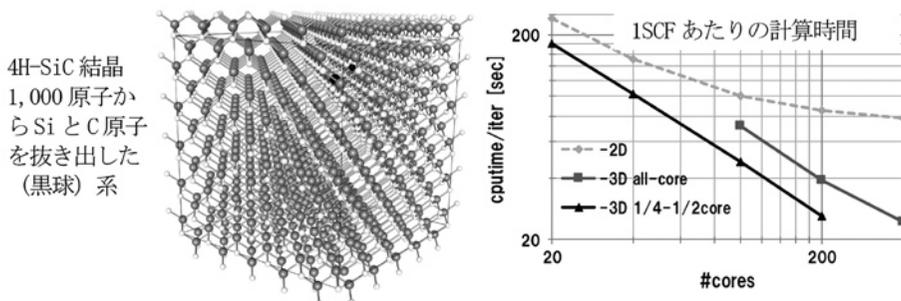
PHASE は、密度汎関数理論に基づく第一原理分子動力学プログラムであり、2012年度まで「イノベーション基盤ソフトウェアの研究開発プロジェクト」において開発がすすめられてきた。さらに PHASE/0 として並列性能の向上など既存機能の改良のほかに新規機能開発を行った。主な開発内容を次に示す。

- 既存機能の改良
 - 付随プログラムを使わず PHASE/0 本体でバンド分散計算が可能に
 - UVSOR 機能を PHASE/0 に合体し高速化
 - 並列効率の向上
 - 厳密交換相互作用計算の高速化
- 新規機能開発
 - 非局所ポテンシャルと波動関数の積の実空間化
 - EELS 及び XAFS 計算機能の実装

以上の開発項目の内、並列効率の向上、非局所ポテンシャルと波動関数の積の実空間化、EELS 及び XAFS 計算機能の実装を紹介する。新しい PHASE/0 は <https://azuma.nims.go.jp/> からダウンロードできる。

◇並列効率の向上

これまで京計算機を対象に大規模並列チューニングを行ってきた版（並列分割軸が3つあるので3D



版とよぶ)に、既存並列版(2D版)に実装されている機能(関数ソルバー・電荷密度ミキサーの自動設定や状態密度等の後処理機能)を実装した。3D版は2D版とほぼ同じ使い勝手になった。1ノードに2CPU(20コア)が実装されているクラスター計算機を使って、1,000原子規模の系の計算時間を計測した。400コアで、2D版は並列効率がほぼ飽和しているのに対して、3D版はまだ並列効率が向上している。3D版はメモリ消費量が相対的に大きく40コア以下では計算コアの密度を大きくできなかった。200コアまでは1/4あるいは1/2のコアを使った計測も行った。

◇波動関数の積の実空間化

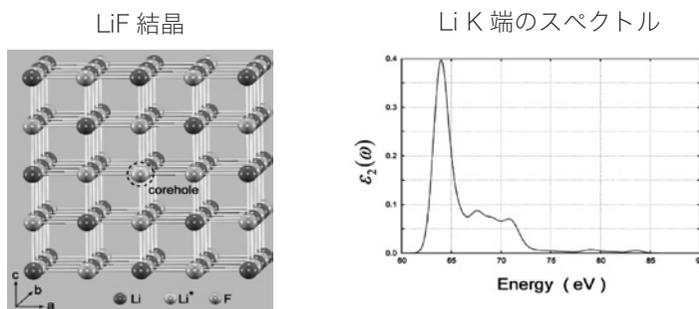
非局所相互作用を計算する際のプロジェクトと波動関数の内積は、PHASEでは逆空間において実行するようになっていた。これを、実空間で行う機能をPHASE/0に実装した。内積演算量は逆空間で $O(N^3)$ に比例するのに対し、実空間では $O(N^2)$ に比例するので、原子数 N が大きいほど演算量削減効果が大きい。本機能の適用例として、シリコン結晶の場合の原子数と非局所相互作用の処理にかかる時間の関係を次の表で報告する。計算は、SDソルバーを1回適用するために必要であった非局所相互作用の計算時間を積算したものである。また、すべての計算は非並列で行った。

原子数	実空間法の計算時間(sec.)	逆空間法の計算時間(sec.)
8	0.088	0.01
64	1.073	0.343
216	14.153	30.280
512	102.512	405.082
1024	384.370	3300.611

原子数が少ない場合は逆空間法が有利だが、216原子以上の系では実空間法の方が高速である。

◇EELS・XAFS 計算機能の実装

PHASE/0に、Electron Energy-Loss Spectroscopy (EELS) および X-ray absorption fine structure (XAFS) スペクトルを計算する機能を追加した。前者は、電子が試料を透過する際に失うエネルギーを測定することによって試料を解析する実験手法であり、後者は、X線を照射すると現れる吸収端付近の物質固有の構造によって試料を解析する実験手法である。実装は、吸収端近傍エネルギー領域におけるスペクトル解析を対象としており、EELS及びXAFSの一部、すなわちELNES及びXANESの実験に対応する。



例として、LiF結晶のLi K端のスペクトル計算結果を示す。左図のように、64原子からなるLiF結晶の中の1つのLi原子の1s軌道より電子が抜けた(corehole)状態を仮定した。この系の電子状態を計算し、得たスペクトルが右図である。吸収端及びピーク位置のエネルギーは、それぞれ62.90eV及び63.99eVに見られる。実験で観測されるピーク位置は62.0eV付近のことが多いが、スペクトル形状は計算結果とよく一致している。(執筆責任者:大野隆央)