

平面波擬ポテンシャル第一原理計算コードの高速化と磁性スラブ系への応用

Development of high performance computation in the planewave pseudopotential first-principles code and application to slab system

後藤純平¹、原口辰也¹、辻川雅人¹、小田竜樹²

Junpei Gotou¹, Shinya Haraguchi¹, Tsujikawa Masahito¹, Tatsuki Oda²

¹金沢大学自然科学研究科、²金沢大学理工研究域

Graduate School of Natural Sciences and Technology, Kanazawa University, Kanazawa 920-1192
Institute of Science and Engineering, Kanazawa University, Kanazawa 920-1192

計算機性能の向上により、密度汎関数法(カー・パリネロ法等)を用いたシミュレーションの対象が様々な分野まで広がっている。そのような計算では高い計算精度が要求され、膨大な計算時間が必要となる。そこで高い計算効率を得るために並列計算を用いた高速化が重要となる。本研究では磁性薄膜で電子状態計算を加速するため、MPI(Message Passing Interface)やOpenMPなどの並列プログラミング手法、あるいはGPU(Graphics Processing Unit)を用いたソースコードの開発を推進した。具体的には、平面波基底擬ポテンシャル第一原理計算コードの高性能化を目指した。このようなコードではFFT(Fast Fourier Transform)やMM(Matrix Multiplication)の計算時間が全体の計算時間の大部分を占めていた。計算コードでは、FFTを使って逆格子空間と実空間の2つの空間を用いることにより効率よく物理量を計算している。またウルトラソフト擬ポテンシャル法に現れる平面波基底と局所軌道との変換計算や、波動関数の規格直交化計算などにおいて行列積計算が使われる。そこでOpenMPなどの並列プログラミング手法、あるいはGPUを用いるソースコードの開発を行い、その性能の評価を行った[1]。

磁気トンネル接合(Fe/MgO/Fe)の系(16層22原子系のノンコリニア磁性系)の計算では、FFTとMMの部分が計算時間の約80%以上を占めており、高負荷の部分となっていたが、開発の結果、最大で従来のコード(MPI並列のみ)の約35%の計算時間に短縮させることが可能となった。計算時間の内訳(図1)では、行列積が59%から31%、FFTが19%から16%、その他が21%から53%となり、今後は行列積やFFT以外の高速化が求められる。

本研究で開発したHybrid+GPUの計算コードでは、従来の計算コードにかかる計算時間の約35%に短縮させることができた。しかしながらGPUを十分に活用することができておらず、今後の研究開発が求められる。

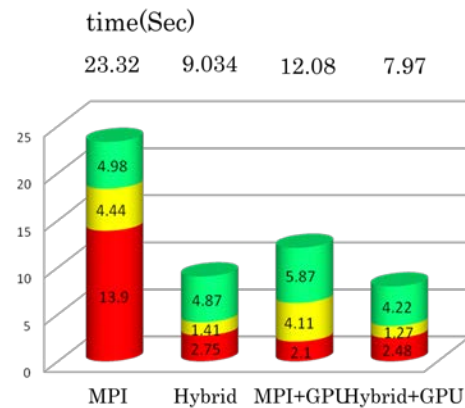


図1: ナノサイズのノンコリニア磁性薄膜系の計算時間の内訳と計算手法による比較。円柱の下から、行列積、FFT、その他の時間を秒で示す。

[1] J. Gotou et al., Recent Development in Computational Science 2, 17 (2011)