

## GPUでの交換相互作用計算：平面波第一原理計算プログラムxTAPPへの実装

Computation of the exchange interaction using GPU: implementation for xTAPP

吉本 芳英

Y. Yoshimoto

鳥取大学大学院 工学研究科 機械宇宙工学専攻 応用数理工学科

Department of Applied Mathematics and Physics, Tottori University, 4-101  
Koyama-Minami, Tottori 680-8552

第一原理的な構造サンプリングによって原子構造の多様性を明らかにする際に常に問題になるのが、その電子相関の近似手法の精度である。

密度汎関数法による電子状態の第一原理計算は交換相関ポテンシャルの局所密度近似とセットで大変広く使われているが、それは必要な計算コストに対して得られる計算精度の比が優れているからであり、絶対的な計算精度が常に満足できるものと言うわけではない。

そこで、局所密度近似で得られる計算精度の改善を目的として、交換相関ポテンシャルの近似に厳密な交換相互作用の計算を取り込む試みが多くなされている(HSE[1], LC[2], PBE0 [3]など)が、一方でこの交換相互作用の計算コストは大きい。

この計算コストの問題を解決する一つの手段は、より低コストな計算機の活用である。近年ではGPUがこの目的のために科学技術分野で使用されるようになってきている。なぜなら、GPUはグラフィックス処理というコモディティ目的のおかげで低価格となっている一方で、ある程度の汎用性を伴った高い演算能力を持っているからである。

以上をふまえて、登壇者が維持している平面波基底コードxTAPPに交換相互作用のコードを実装するにあたって、GPUの計算能力をもちいてこれを高速に計算できないか、検討した。

このGPUを使う上で重要な問題はCPUとGPU間のデータ転送速度がGPU自体の演算性能に比べて小さいことである。そこで、交換相互作用が電子軌道 $i$  (バンド)の間のペア関係 $i \leftrightarrow j$ を計算する形になっていることを活用してGPU側のメモリに計算の対象とする電子軌道を複数( $N_{\text{blk}}$ )一度に転送し、それらの間の交換相互作用を一度に計算させることで、演算/データ転送の比を $N_{\text{blk}}$ 倍にして問題の緩和を行うこととした。

このアルゴリズムをxTAPPに実装し、Si 216原子系( $\Gamma$ 点計算)において、その1 SCF時間を比較した結果が以下の表である。カットオフに依存して2から3倍の加速が8CPU並列(Xeon X5690)に比べて8GPU並列(AMD Radeon HD 6950)で得られている。これは、Radeon HD 6950とXeon X5690の単価が2.6万円と14万円であったことを考えると良い結果である。

平面波のカットオフ波数 [a.u.]	3.6	4.0	4.8	5.0	5.4	6.4
Xeon X5690 [s]	378	549	994	1188	1583	2255
Radeon HD 6950 [s]	169	297	342	500	534	749
加速率	2.23	1.84	2.91	2.37	2.96	3.01

[1] J. Heyd, G. E. Scuseria and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. 118, 8207 (2003); 124, 219906(E) (2006).

[2] H. Iikura, T. Tsuneda, T. Yanai, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 115, 3540 (2001).

[3] J. P. Perdew, M. Ernzerhof and K. Burke, J. Chem. Phys. 105, 9982 (1996).