

## 実空間密度汎関数法に基づいた Car-Parrinello 法の開発

Title: Development of Car-Parrinello molecular dynamics based on real-space density functional theory

小泉健一<sup>1</sup>、重田育照<sup>2</sup>、岩田潤一<sup>1</sup>、Mauro Boero<sup>3</sup>、押山淳<sup>1</sup>

Kenichi Koizumi, Yasuteru Shigeta, Mauro Boero, and Atsushi Oshiyama

1. 東京大学工学系研究科物理工学専攻

2. 大阪大学基礎工学研究科化学工学領域

3. ストラスブルグ物質化学物理研究所 (IPCMS)

1. Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

2. Department of Materials Engineering Science, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-8531, Japan

3. IPCMS, UMR 7504 CNRS and University of Strasbourg, F-67034 Strasbourg 2, France

Car-Parrinello(CP)分子動力学は 1985 年、物理分野を母体として誕生したが、爾来、その有効性は化学、生物分野もその範疇としながら発展して来た。この方法は量子論に基づいているため、化学結合の組み替えを必要とするシミュレーションを可能にする。しかし、計算時間の問題から現実的なモデルを用いた計算は難しい。固体表面のシミュレーションなどをリアルなモデルで可能にするためには 1000-10000 原子のシミュレーションを行う必要があり、これには超並列コンピュータの利用が必須になる。このような環境によく対応した実空間密度汎関数法コード”RSDFT コード”をベースにした CP 法を開発することにより、飛躍的な効率で計算を行うことを目標とする。まず、第一段階として stable なプログラムを作成することができた。216 原子サイズのシリコンを用いた 50 万ステップに及ぶ計算にも安定に作動することを確認した。また、計算したシリコンの拡散係数は平面波基底のものを良く再現することを確認した。現在、第二段階として京コンピュータ上での高速化を行い、以前からボトルネックであることが突止められていた擬ポテンシャルを空間にマップするルーチンの高速化を行い、バンド並列化を導入し、さらに細かい変更を行う事で徹底的に計算時間を削る事で高速化が完了した。このためシリコン 1000 原子系の MD を 1step あたり最高で 3.5 秒で行える様になった。こちらの京コンピュータ上での平面波基底のコードでの測定では最高でも 18.5 秒かかることがわかっている。この結果をふまえて、どれほどの大きな原子系に適用できるのかなどを調べるために、さらに計算コストのかかる様々なベンチマークテストを行った。この結果シリコンであれば 2000-3000 原子、高カットオフエネルギー(高密度なメッシュ数)の必要なシリコンカーバイドであれば 1000-1500 原子が 1step 10 秒前後で MD が可能である事がわかった。分子系にも適用しベンチマークを行った。この結果、電子数が増え、計算するバンド数が増えて来ると波動関数を直交化するルーチンにかかる時間が急速に増大し、この結果、原子数の大きい系での新たなボトルネックになる事がわかった。通常 MD でボトルネックとなる力の計算はバンド並列により高速化できるが、この部分とのトレードオフとなり、劇的な高速化を阻んでいる事が明らかとなった。当日は、開発過程、ベンチマークの結果とともにこのような問題点についても報告したい。