

第一原理計算プログラム TOMBO の電子構造計算の高速化へ向けて

Towards efficient electronic structure calculation in the *ab initio* calculation program TOMBO

小野頌太、大野かおる

Shota Ono and Kaoru Ohno

横浜国立大学大学院工学研究院

Department of Physics, Graduate School of Engineering,
Yokohama National University, Yokohama 240-8501, Japan

密度汎関数理論に基づく電子構造計算において、Kohn-Sham(KS)のエネルギー汎関数の最小値探索を極限まで高速化させることは、多体物理学と計算機科学が関与する分野横断型の重要課題である。本研究室で開発中の第一原理計算プログラム TOMBO は 2013 年度内にオープンソース化される予定であり、その TOMBO を用いた電子構造計算においても計算速度の高速化は目下緊急の課題である。

電子構造計算を高速化させるために、エネルギー汎関数の効率的な最小値探索アルゴリズムの実装は不可欠である。一般に、多変数関数の最小値探索アルゴリズムの一つとして、共役勾配法(CG法)が知られている。Teterらは、エネルギー汎関数の最小値探索にCG法を適用することで、計算時間のかかる固有値方程式の数値対角化を行うことなく、固有状態を求める方法を提案した[1]。よって、プログラム TOMBO の電子構造計算に Teter らの CG 法を実装することは、計算の高速化を図るために極めて重要である。

一方、KS ハミルトニアン行列要素計算の高速化アルゴリズムの実装も不可欠である。現状のプログラムでは各セルフコンシステントループにおいて、行列要素の評価するために基底関数の数に比例した膨大な回数の数値積分の実行が必要である。この数値積分の実行を回避するため、直交多項式などを用いたポテンシャルフィッティング(PF)法を適用し[2]、計算の効率化を図ることが望ましい。

本研究では、以上の2つ高速化アルゴリズムを第一原理計算プログラム TOMBO に実装し、C₆₀分子などのナノ物質の電子構造に対するベンチマーク計算を行った。特に後者の行列要素計算の高速化アルゴリズムの実装において、フィッティングの誤差を最小にする Chebyshev 多項式を用いて PF 法を適用した。PF 法を実装した結果、行列要素計算にかかる時間が PF 法を適用する前に比べて 10 分の 1 に減少した。さらに、PF 法を適用した場合と適用しない場合の KS エネルギー固有値の差は 0.01meV 以下となり、高い計算精度が保たれていることが明らかになった。

[1] M. P. Teter, M. C. Payne, and D. C. Allan, Phys. Rev. B **40**, 12255 (1989).

[2] W. M. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in Fortran 90: The Art of Parallel Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1996).