

オーダーN法による超大規模第一原理計算手法の開発

宮崎 剛†

通常用いられている第一原理計算手法では、計算量が計算する系に含まれる原子数 N の3乗に比例して増加するため、数千原子を越える大規模系に第一原理計算を実現することは極めて困難である。この問題を克服する為に計算量、メモリ量が N に比例するオーダーN法の開発が行われてきた。オーダーN法の最近の発展は著しく、実際に応用計算も行われるようになってきている。本講演では、我々が開発してきたオーダーN法第一原理計算手法プログラム CONQUEST の計算手法と応用計算例を説明すると共に、プログラムに用いられている計算の種類と並列効率を紹介し、オーダーN法の将来性を議論する。

1. 背景

密度汎関数理論に基づいた第一原理計算は、実際の物質の安定原子構造、電子的性質などを実験データによらず定量的に求めることを可能とする強力な研究手法である。当初は数原子程度の小さな分子や単純な固体が対象であった第一原理計算も、その後の計算機の進歩とカーパリネロ法などの効率的な計算手法の開発により、今では数百から一千原子を含んだ系に対する計算も珍しくない。扱える系が大きくなることにより研究対象となる物質や現象は増え、今では第一原理計算手法は様々な科学、工学分野において必須の研究手段となっている。第一原理計算に対するニーズは現在でも増大しており、さらなる大規模系への計算が望まれている。

しかし、通常用いられている平面波基底関数を用いた第一原理計算では系の含む原子数 N が数百を越えると計算量が N の3乗で比例して急激に増加する。(小さな系では N の2乗で増加する。) 10倍大きな系を計算するには1000倍の計算時間が必要となるため、扱える系の大きさを増加させることは極めて困難になってきている。大規模第一原理計算における、この計算時間、資源の問題はかなり前から認識されており、欧米、日本の複数の研究グループが計算時間とメモリ量が N に比例するオーダーN法と呼ばれる計算手法の開発を行ってきた。

オーダーN法のここ数年の発展は著しく、複数の

研究グループから重要な進展が報告されている[1, 2]。今までは手法開発が中心に行われてきたが、オーダーN法を用いた実際の応用研究の例もいくつか現れ始めている。近い将来に、標準的な計算手法となることも十分に考えられるという状況になっている。

2. オーダーN法第一原理計算プログラム CONQUEST の開発

本講演では、我々が開発してきたオーダーN法第一原理計算プログラム CONQUEST(Concurrent O(N) QUantum Electronic Structure Technique)を中心に紹介する。オーダーN法の実現には、1) 電子状態を表す為の局在基底の開発、2) 電子状態をオーダーN法で解く為の解法の開発、という二つの要素が必要になる。1) に対しては、CONQUESTは高効率計算のための基底関数(擬原子軌道 Pseudo Atomic Orbitals)と高精度計算のための基底関数(B-spline関数を用いた有限要素法)という2種類の局在基底関数を選べる。また、2) に関しては密度行列最適化手法を用いている。講演では、これらの計算手法の説明を簡単に行った後に、ナノ構造物質や生体系に対する実際の応用例をいくつか紹介する。また、他のグループで行われている同様の手法についても少し紹介したい。

次に、プログラム CONQUEST で用いられている計算の種類を紹介する。一般に、第一原理計算プ

† 物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット

Computational Materials Science Unit, National Institute for Materials Science

プログラムでは様々な種類の計算を必要とする。現在広く使われている平面波基底を用いた通常の第一原理計算手法と CONQUEST で使われている手法との比較を行い、CONQUEST で用いられている局在基底による計算、そして電子状態の局所性を用いたオーダーN 法が並列計算に有利であることを示す。CONQUEST の並列効率は非常に高く、超大規模系に対する第一原理計算が可能となっている。最新の大型計算機を用いると、百万原子系に対する第一原理計算も可能となってきた事[3]を報告する。

さらに、このような超大規模第一原理計算によって、近い将来にどのような問題が扱えるようになってくるかを議論したい。

3. 謝辞

プログラムCONQUESTの開発は、英国University College London(UCL)のD. R. Bowler博士の研究グループとの共同研究で行われている。UCLとNIMSの研究グループの共同開発者に感謝したい。また、本講演で紹介する研究の一部は、科研費新学術領域研究「コンピューティクス」(課題番号22104005)、そして文部科学省のHPCI戦略プログラム、および、計算物質科学イニシアティブの助成により行われている。

参 考 文 献

- [1] D. R. Bowler and T. Miyazaki, "O(N) methods in electronic structure calculations", Rep. Prog. Phys. 印刷中 (Feb., 2012 予定. arXiv:1108.5976.v5)。
- [2] 宮崎剛, "II.2.2 オーダーN を目指して", 密度汎関数法の発展-マテリアルデザインへの応用-, 赤井久純、白井光雲編著, pp141-162, シュプリンガー・ジャパン、日本、2011年
- [3] D. R. Bowler and T. Miyazaki, "Calculations for millions of atoms with density functional theory: linear scaling shows its potential", J. Phys. Condens. Matter, 22, 074207-1-6, (2010).