

受付 ID	15a-5
分野	物性

High performance Car-Parrinello 分子動力学法の開発と応用

Implementations and Applications of High Performance Car-Parrinello Molecular Dynamic

重田育照

筑波大学大学院数理物質科学研究科

1. 研究目的

半導体デバイスを支える材料・構造体の物性解明・予測のためには、量子論に立脚した先端的計算を可能にする新たな数理手法とアルゴリズムを開拓し、諸現象の原子レベルでのメカニズムの解明・予測を行うことが必須である。本プロジェクトでは、これまで申請者らが京コンピュータ上で高速化高度化に成功した第一原理実空間計算手法に対して、分子動力学計算を実行できるように筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ上でさらに発展させ、世界をリードするシミュレーション技術を開発するとともに、それを用いた計算物質科学のブレークスルーを目指す。具体的には、実空間密度汎関数法 (RSDFT) とそのダイナミクス計算 (RS-CPMD) への拡張 (東大、筑波大)、ならびに、GPU 演算加速器上で高速に計算可能な平面波基底での第一原理分子動力学計算手法 (GPU-PW-CPMD) の開発 (Strasbourg 大学) ならびにその現実系への応用計算を目的としている。

2. 研究成果の内容

RS-CPMD の開発に関して、表に京における 1MD ステップの実行時間および主要ルーチンの実行時間の内訳を示す。RSDFT ではあまり注視されなかった、ポテンシャルや Hellmann-Feynman 力の計算部分が当初はボトルネックであったが、これらの部分が十分チューニングされた現在では、波動関数の直交性を保つための $O(N^3)$ のラグランジュ未定乗数の計算部分がボトルネックとなっていた。そこで、GPGPU におけるプログラム開発を行い、平均で 3 倍程度の高速化を達成した (発表準備中)。

表: 「京」における 1664 原子系 (4,096,000 格子点, 2560 バンド) の実行時間内訳 (秒)

	1 MD step	Lagrange 未定乗数	力とポテンシャル	Hamiltonian 演算	未定乗数 2
512 MPI × 8 OMP	5.54	2.69	0.52	0.44	1.83

RS-CPMD の応用計算として、グラフェンの生成過程のシミュレーションを行った。大面積グラフェンの製造法として、SiC 熱分解法が注目されている。実験的には SiC ナノファセットから C 原子のクラスター化が開始し、テラスに向かってグラフェンが成長する様子が観

察されている。本研究ではグラフェン成長の初期過程として、4H-SiC(0001)面[11-20]ナノファセットからのSiおよびCの脱離過程に注目し、①Siの選択的な脱離の原因と②ナノファセットからのSi脱離機構に関して、GGA近似のもとでの反応解析を行った。その結果、SBステップエッジからの脱離の反応障壁は、Si原子が下側テラスへ移動する際に最も低いことがわかった。また、CPMDを用いて自由エネルギーバリアを定量的に見積ることに成功した。

3. 学際共同利用として実施した意義

本学際共同研究を通じてRS-CPMDの高速化を達成し、グラフェン成長における初期段階の原子論的メカニズムを解明した。

4. 今後の展望

今後は、GPGPUおよびIntel Xeon Phiにおける開発を継続し、本プログラムの有効性を検証するとともに、さらなる現実系での大規模物性シミュレーションを実行する。

5. 成果発表

(1) 主な学術論文

1. Jun-Ichi Iwata, Chikara Shinei, Atsushi Oshiyama, Phys. Rev. B 93, 125202 (2015).
2. R. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta, Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 6155-6173 (2015).
3. Y. Shigeta, R. Harada, M. Kayanuma, M. Shoji, Int. J. Quantum Chem. 115, 300-308 (2015).

(2) 主な招待講演

1. Y. Shigeta, “Inverse Histogram-based Sampling Algorithm for Protein-folding Problems”, *The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7)*, Jan. 25th-28th 2016, Kaohsiung, Taiwan.
2. Y. Shigeta, “Theoretical studies on triplet-triplet annihilation processes of diphenylanthracene derivatives in solution”, *Symposium #44 ‘Modeling and Analyzing Exciton and Charge Dynamics in Molecules and Clusters’ Pacificchem 2015*, Dec. 15th-20th 2015, Hawaii, USA.
3. Y. Shigeta, “Molecular Design for Optical Properties of Diarylethenes”, *Energy, Materials, Nanotechnology (EMN) Bangkok meeting*, Nov. 10th-13th 2015, Bangkok, Thailand.
4. Y. Shigeta, “Simple Conformational Search Algorithms For Protein Folding”, *6th Czech-Slovakia-Japan Theoretical Chemistry meeting*, Oct. 11th-14th 2015, Bratislava, Slovakia.

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS	○	3200
HA-PACS/TCA	○	480
COMA	○	3300
※配分リソースについては32node換算時間をご記入ください。		