

超並列計算機向け第一原理電子状態計算コード「RSDFT」の開発と応用

東大院物工¹、岩田潤一¹

量子論の第一原理に立脚した物性解明、物性予測を実行することにおいて、密度汎関数法 (DFT = Density Functional Theory) は、物理・化学はもちろん、工学や産業応用にいたるまで幅広い応用を持つツールとなっている。より現実的なモデルに即して第一原理電子状態計算を実行するためには、より多くの原子数を扱える必要があり、そのためには近年ますます発展を見せる最先端の計算機を有効活用することが必須の技術となる。京コンピュータは総演算性能が 10 ペタフロップを越える、現時点で世界最先端の性能を有する超並列計算機である。京コンピュータは 8 万ノード、64 万コアを越える並列計算が可能であるが、従来の平面波基底に基づく DFT 計算コードは、高速フーリエ変換 (FFT = Fast Fourier Transform) に大きく依存するアルゴリズムとなっているため、超並列計算機においては全対全通信が大きなボトルネックとなる。そこで我々は、FFT に依存しない、実空間差分法に基づく DFT 計算コード「RSDFT」の開発を行い、これを用いて一万原子を越える規模の系の第一原理計算を実行可能にした[1]。開発を進めてきた RSDFT を、さらに京コンピュータに向けてチューニングを行い、京コンピュータ全体の 1%程度のリソースを使用すれば、Si10,000 原子系の計算が一日足らずで実行可能になることがわかった。さらに京コンピュータ全体の 70%程度のリソースを利用すれば、Si100,000 原子系に対する自己無撞着計算の 1 ステップが約 5500 秒で実行できること、すなわち一週間程度で収束した電子状態を得られることがわかった。また計算の実行効率はピーク性能比で 44%と非常に高いものであった。これらの成果により RSDFT は 2011 年度 Gordon Bell 賞最高性能賞を受賞した[2]。本発表では、RSDFT の詳細といくつかの応用例を紹介する。

文献

[1] J.-I. Iwata *et al.*, *J. Comp. Phys.* 229, 2339 (2010).

[2] Y. Hasegawa *et al.*, SC'11 Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis.