

1P01

Car-Parrinello 法加速のための近似ベクトル正規直交化法

○長嶋雲兵^{1,2}, 青山智夫³

¹産業技術総合研究所計算科学研究部門, 〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1 中央第二,

²科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 (JST-CREST), 〒332-0012 川口市本町 4-1-8,

³宮崎大学工学部, 〒889-2192 宮崎市学園木花台西 1-1.

1. はじめに 固体や表面の第一原理計算手法として、最も良く利用される手法に、結晶の周期性を考慮した平面波展開をもちいる Car-Parrinello 法 (CP 法) [1]がある。CP 法が登場する前の従来法、すなわち、ハミルトニアン行列を直接対角化する手法は、平面波基底の数を N として、 $O(N^3)$ の計算負荷を要していた。CP 法は固有値問題を繰り返し法による最小値問題に置き換えると同時に FFT を用いることで、固有状態の数を M として、計算負荷を $O(MN \ln N)$ まで削減することに成功した。これにより、第一原理分子動力学 (MD) への道が開かれた。

しかし、単体の PC や WS では、メモリや計算時間の制約により、第一原理 MD によって扱える原子数は 100 原子程度に限られる。したがって、最近のナノテクノロジー研究や材料開発現場においてしばしば必要とされる 1,000 原子を超える大規模計算への要望に応えられない状況にはない。一方、科学技術計算分野において、汎用 CPU に代わり、FPGA などのリ

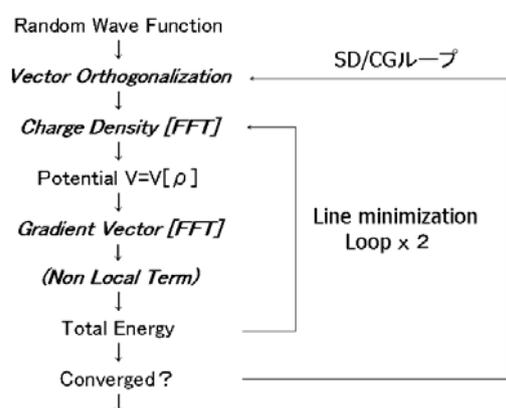


図1 CP 法のフロー

いる CP 法の処理フローの概略を示す[2]。非局所擬ポテンシャルの演算を除くと、CP 法の計算処理時間の大部分は、固有状態の三次元 FFT と固有状態間の Gram-Schmidt (GS) 直交化によって占められている。われわれはオブジェクト指向設計と C++言語を利用し、CP 法プログラムを新規に開発した。簡単のため、CP の原論文と同様に擬ポテンシャルを局所的とした[1][2]。われわれの CP コードを、バルクシリコンを例題として、最急降下法の 1 ステップについて計測した。200 原子以下の計算規模では、処理時間の 90%弱は波動関数の 3 次元 FFT に費やされる。したがって、CP 法を専用ロジック化により高速化するには、3 次

X 線結晶構造解析などにも使用され始めている。そこで、われわれは、CP 法において計算負荷の高い箇所を FPGA へオフロードすることにより、大規模な第一原理計算を、個人で占有可能なハードウェアにおいて実現するための研究に着手した。ここに、個人で占有可能とは、低消費電力、高コストパフォーマンス、デスクサイドに収まるサイズを想定している。

2. CP 法 図1に本稿が高速化の対象として

元 FFT の高速化が第一の課題となるが、すでに我々は、3 DFFT の高速化を FPGA を用いて実現した[3]。そのため、3 DFFT のコストは減少し、固有状態間の Gram-Schmidt (GS) 直交化の比重が急速に増大した。本研究では、CP 法のさらなる高速化を念頭に置いて、GS 直交化の高速アルゴリズム開発を行った。

3. アルゴリズムと性能 GS 直交化を改良し、固有値の近いベクトル間のみを直交化する。直交化するベクトル数はパラメータ m とする。ベクトルの次元を n とした場合 GS 直交化の演算回数は $O(n^3)$ であり、本方法では $O(n2m)$ となる。 $n=10m$ としたときの性能の比を図 2 に示した。用いた計算機は ThinkPad X60s Intel Centrino 1.66GHZ, 1GB メモリである。プロ

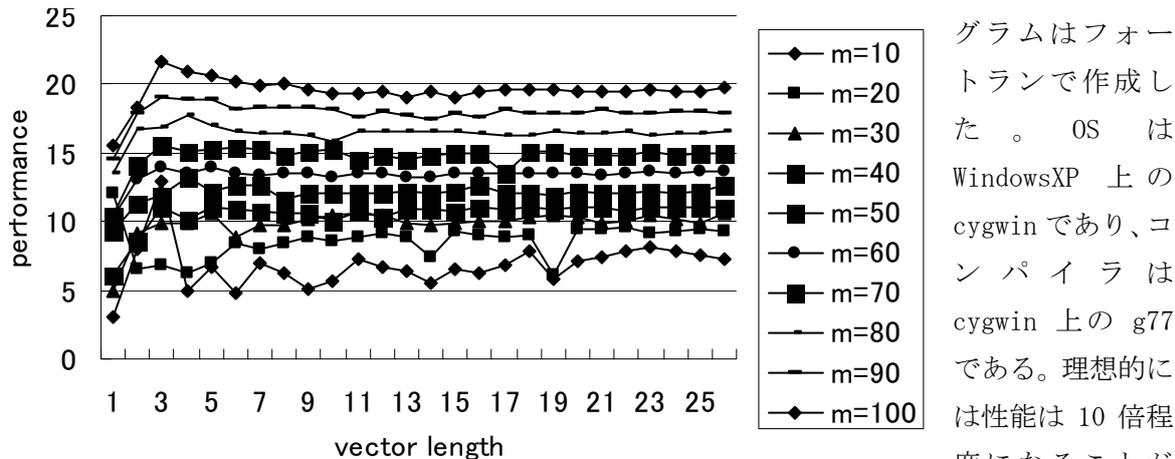


図 2 GS 法と本方法の性能比 ($n=10m$)

が 10-30 程度小さいと 10 倍の性能はせず、それより大きい場合は、期待される性能向上より高い性能を得る。これは、m が大きくなるにつれて、GS 法のキャッシュミスのペナルティが大きくなるためである。

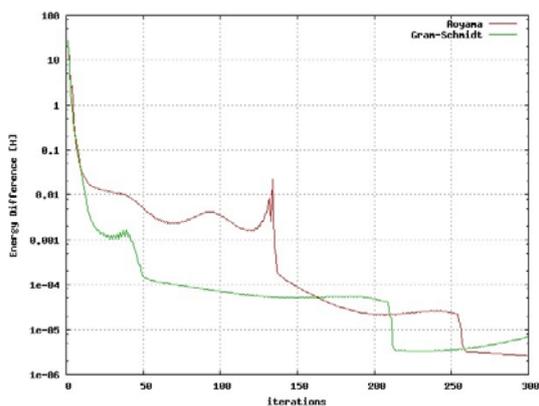


図 3 CP 法の収束傾向

Boysana, R. and Parrinello, M., Phys. Rev. Lett., Vol. 55, pp. 2471-2474, 1985. [2] 陽電子の第一原理計算では局所擬ポテンシャルで十分である。例えば、Kawasuso, A., Chiba, T., and Higuchi, T., Phys. Rev. B, 71 (2005)193204; Kawasuso, A., Yoshikawa, M., Itoh, H., Chiba, T., Higuchi, T., Betsuyaku, K., Redmann, F., and Krause-Rehberg, R., to appear in Phys. Rev. B, (2005). [3] 佐々木徹, 溝口大介, 長嶋雲兵, ”Car-Parrinello 計算向け三次元 FFT ロジックの開発”, 情報処理学会論文誌, Vol. 45, No. SIG11(ACS7), pp. 313-320, Oct. 2004.

図 3 に CP 法の収束傾向を示した。本法の収束傾向は GS 法に比べ遅いが、 10^{-5} 程度ではほぼ同じ回数で収束している。1 回の速度が 20 倍速いとすると、その性能が実現されていることになる。

参考文献

[1] Car, R. and Parrinello, M., Phys. Rev. Lett., Vol. 55, pp. 2471-2474, 1985. [2] 陽電子の第一原理計算では局所擬ポテンシャルで十分である。例えば、Kawasuso, A., Chiba, T., and Higuchi, T., Phys. Rev. B, 71 (2005)193204; Kawasuso, A., Yoshikawa, M., Itoh, H., Chiba, T., Higuchi, T., Betsuyaku, K., Redmann, F., and Krause-Rehberg, R., to appear in Phys. Rev. B, (2005). [3] 佐々木徹, 溝口大介, 長嶋雲兵, ”Car-Parrinello 計算向け三次元 FFT ロジックの開発”, 情報処理学会論文誌, Vol. 45, No. SIG11(ACS7), pp. 313-320, Oct. 2004.