



計算材料科学のための物質情報構築法の開発

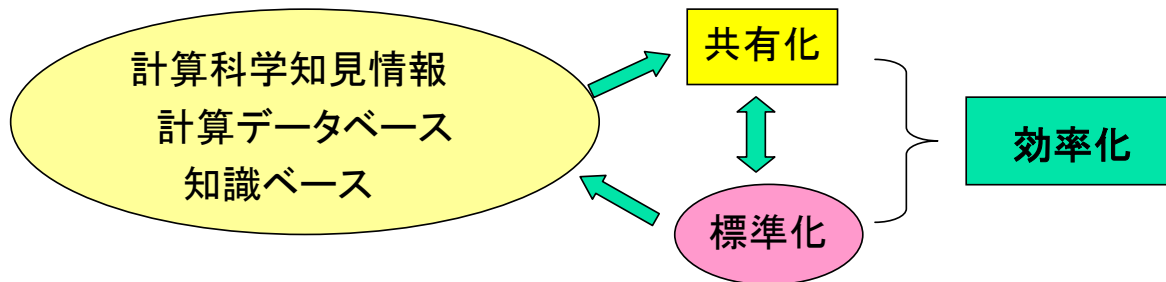
CAMPグループ
大西 楷平(NEC)

2004/01/11

地球シミュレータ利用報告会

研究プロジェクト背景(1)

CAMPプロジェクト概要(www.camp.or.jp)
(Collaborative Activities for Materials Science Programs)
民間異業種研究者の計算科学知見情報標準化活動



活動

◆ Phase I (1990-1994) : 計算物理物質シミュレーションフリーウェア共同開発

1) 第一原理分子動力学計算プログラムCAMP-Atami共同開発

国内初計算物理フリーウェアとして公開→JCPE(日本化学プログラム交換機構)に登録開,94。(2001年時点一次登録者数約600件、2001年度JCPE優秀プログラム賞受賞(CAMP-Atami))

研究プロジェクト背景(2)

Phase II (1994-2000) (通産省、情報処理振興事業団IPA) 10社共同開発契約

◆創造的ソフトウェア育成事業(5億円/2年)

連結ソフトウェアシステム共同開発

物質系シミュレーションソフトウェア

◆次世代デジタルコンテンツ開発(2億円/1.5年)

XML知見情報プラットフォーム

ソフトウェア+物質系データベース

並列計算: 初期段階

計算情報DB: 構築開始

CAMP Members

異業種企業内計算科学研究者集団

- NEC Corp., Fundamental Research Lab.(Project Leader)
- TOYOTA Central R&D Labs. Inc.
- Sumitomo Chemical Co. Ltd., Tsukuba Research Lab.
- Asahi Glass Co. Ltd., Research Center
- Sony Corp., Research Center, ANCL
- TOSHIBA Corp., Research and Development Center
- PIONEER Electronic Corp., Corporate Research and Development Lab.
- FDK Corp., Research and Development Div.
- Mitsubishi Heavy Industries, Ltd., Advanced Technology Research Center
- Fuji Research Institute Corp.

CAMM フォーラム

(企業研究会)

計算物理分科会メンバー

(評価グループ)

NEC Information Systems, Ltd.

Cannon Inc.

SEIKO EPSON Corp.

Nippon Steel Corp.

TDK Corp.

Murata Manufacturing Co., Ltd.

Central Research Institute of Electric Power Industry

Ishikawajima-Harima Heavy Industries Co., Ltd.

National Institute of Materials and Chemical Research



◆Phase III (2000-)

「水科学」総合知見情報プラットフォーム構築: Collaborative Computing System(NPO)

◆Phase IV (2003-)

地球シミュレータ共同プロジェクト: 「計算材料科学のための物質情報構築法の開発」

計算材料科学のための物質情報構築法

物質シミュレータ(並列処理大規模計算)

Input

$$\sum_{\alpha} \rho_{\alpha}^{atom}(r)$$

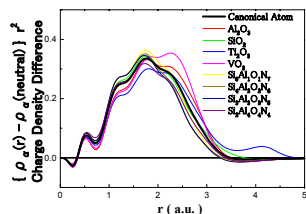
密度汎関数法

output

$$\rho_{SCF}(r)$$

物性

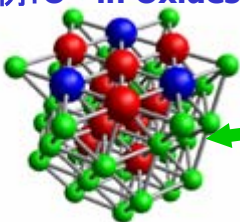
計算物質情報構築



シミュレーションDB
例: O²⁻ in Oxides

$$\sum_{\alpha} \rho_{\alpha}(r)$$

$$\hat{V}_M = \sum_{\kappa, \alpha} \frac{V_{loc,i} |\Phi_{\kappa,i}\rangle \langle \Phi_{\kappa,i}| V_{loc,i}}{\langle \Phi_{\kappa,i} | V_{loc,i} | \Phi_{\kappa,i} \rangle}$$



シミュレーションDB
例: 金属クラスター表面

- 計算結果から物質中擬似原子切り出し
再入力データとして加工
- エネルギー計算 → 原子間ポテンシャルへの変換 → 古典的MDのパラメータ生成
- 境界条件と外部ポテンシャル下での計算



目的と今年度計画

◆ 目的

- (1) 計算材料科学の知見情報として利用可能な形での蓄積
- (2) 知見情報として利用可能な情報のためのシステム開発
- (3) 材料計算に関する知識ベースによる計算情報の公開

◆ 今年度当初の計画

周期系プログラムCAMP-ATAMIと非周期系プログラムLCAO-PSの地球シミュレータへの移行および代表的材料における動作のチェック

- (1) ベクトル化の再チューニングとMPIおよびHPFを用いた**並列化チューニング**
- (2) 必要に応じて**システムに合わせたコードの書き換え**および新規開発の実施
- (3) Pt、Au、酸化物などの代表的材料における**パフォーマンスチェック**

計算方法の特徴

■ LCAO-PS法による物質系のシミュレーション ← 数値解法のみ (flexibility)

物質系の計算量: $O(N^3)$

(1) 多電子問題 ← 密度汎関数法による第一原理計算 $E=E(\rho(r))$

電子電荷密度分布 $\rho(r)$ の汎関数の有効ポテンシャル場中での1体シュレディンガー方程式の self-consistent 解を求める。 固有値問題の解 ϵ_κ 、クーロンポテンシャル V_C

$$E[\rho(\vec{r})] = \sum_{\kappa} \epsilon_{\kappa} - \frac{1}{2} \iiint \rho(\vec{r}) V_C(\vec{r}) d\vec{r} + E_{XC}[\rho(\vec{r})] - \iiint \rho(\vec{r}) V_{XC}(\vec{r}) d\vec{r} \quad V_C = \iiint \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \quad V_{XC}[\rho] = \frac{\delta E_{XC}[\rho]}{\delta \rho}$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\kappa} \phi_{\kappa}^*(\vec{r}) \phi_{\kappa}(\vec{r}) \quad \left[-\frac{1}{2} \Delta + V_{eff}(\rho) \right] \phi_{\kappa} = \epsilon_{\kappa} \phi_{\kappa} \quad V_{eff} = V_C + V_{XC} + V_{ext} \quad V_{ext} = \sum_m \frac{Z_m(-e)}{|\vec{r} - \vec{R}_m|}$$

(2) 多中心問題 ← 高精度多中心数値積分法

各原子位置の領域分割 ← fuzzy-cell法: cell間のoverlap有り ← 滑らかな関数

1原子当たり3000~10000点で有効数字6~7桁の積分精度

($12 \times 12 \times 12 \sim 20 \times 20 \times 20$ メッシュに相当)

$$F(\vec{r}) = \sum_{\alpha} F_{\alpha}(\vec{r}) \quad F_{\alpha}(\vec{r}) \equiv \omega_{\alpha}(\vec{r}) F(\vec{r}) \quad w_{\alpha}(\vec{r}_{\alpha}): \alpha \text{位置に局在}$$

$$\sum_{\alpha} \omega_{\alpha}(\vec{r}) = 1 \quad \text{for all } \vec{r}$$

$$\iiint F(\vec{r}) d\vec{r} = \sum_{\alpha=1}^N I_{\alpha} \quad I_{\alpha} \equiv \iiint F_{\alpha}(\vec{r}_{\alpha}) d\vec{r}_{\alpha}$$

積分和 ← ベクトル化、

$$F(\vec{r}) = \phi_{\kappa}(\vec{r}) \hat{H} \phi_{\kappa}(\vec{r}) \quad \kappa = (n, l, m, \mu, \alpha = 1, N) \quad \alpha \leftarrow \text{MPI化}$$

今年度成果

非周期系プログラムLCAO-PSの並列化

実証

(1) 並列化率**99.95%**到達

(2) 大容量データのオンメモリ化による高速化。

実用的な時間内(1時間程度)で計算可能

(3) ナノサイズの金属クラスター(Au、Pt)における動作確認

最も計算困難な金属触媒系(燃料電池系等)のシミュレーションが可能

内容

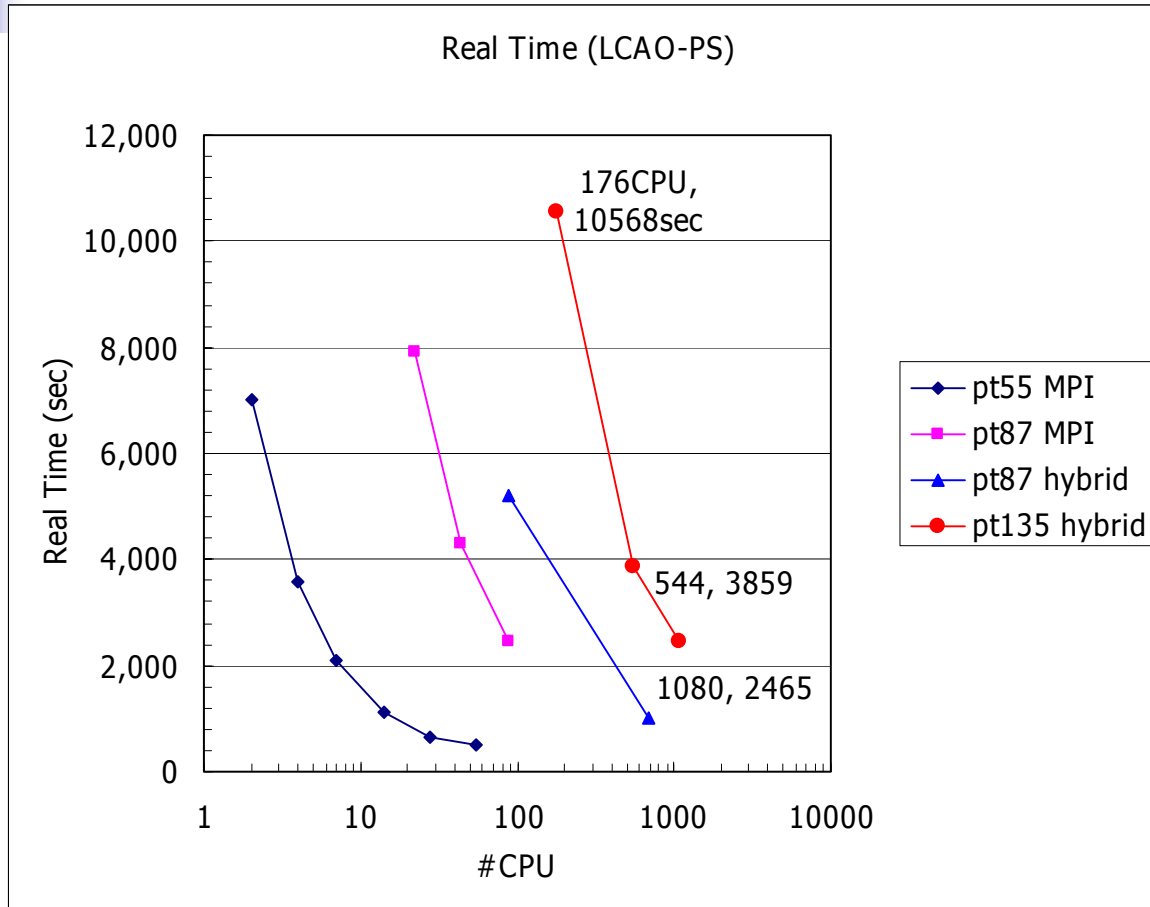
(1) 個々の原子を単位としたMPI化

(2) ノード内16GBのメモリ制限
← Microtask併用ハイブリッド並列

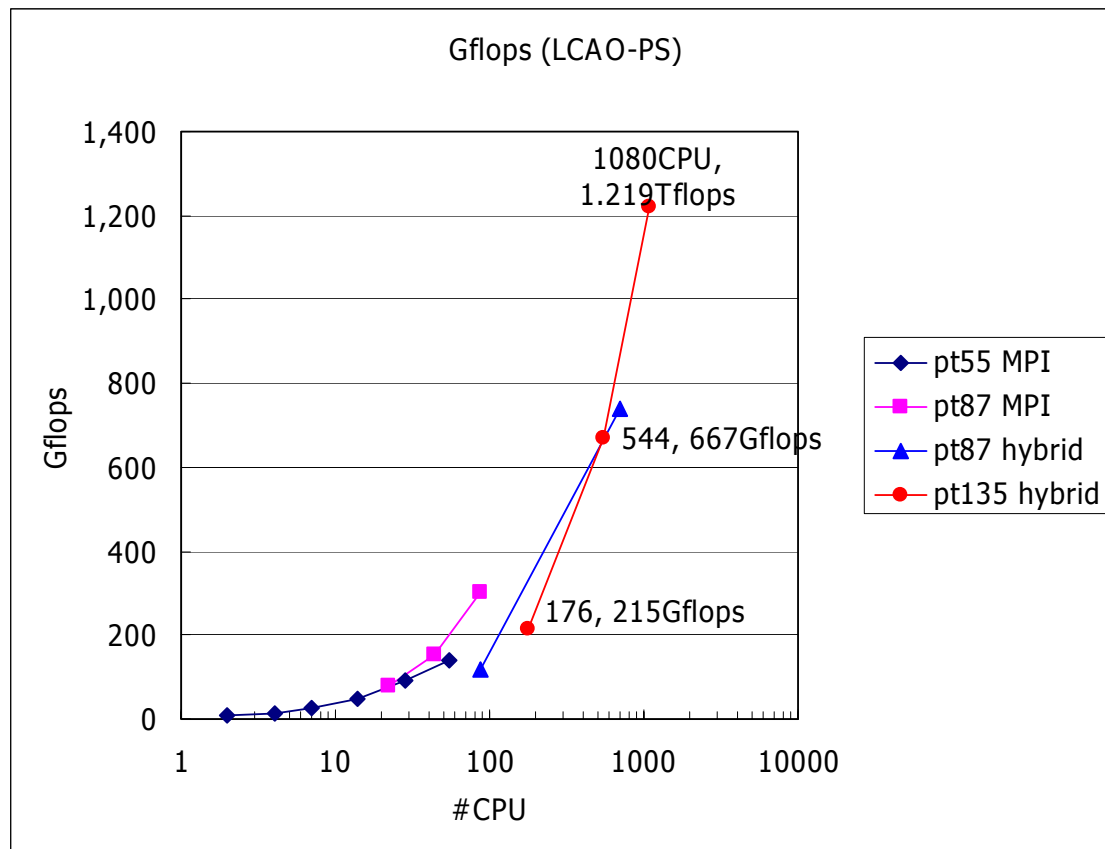
Pt₁₃₅: 1.2TFlops

(3) 分子サイズからナノサイズへ到達
(Pt₁₃, Pt₅₅ → Pt₈₇, Pt₁₃₅)

計算時間と並列性能 (Ptクラスター)

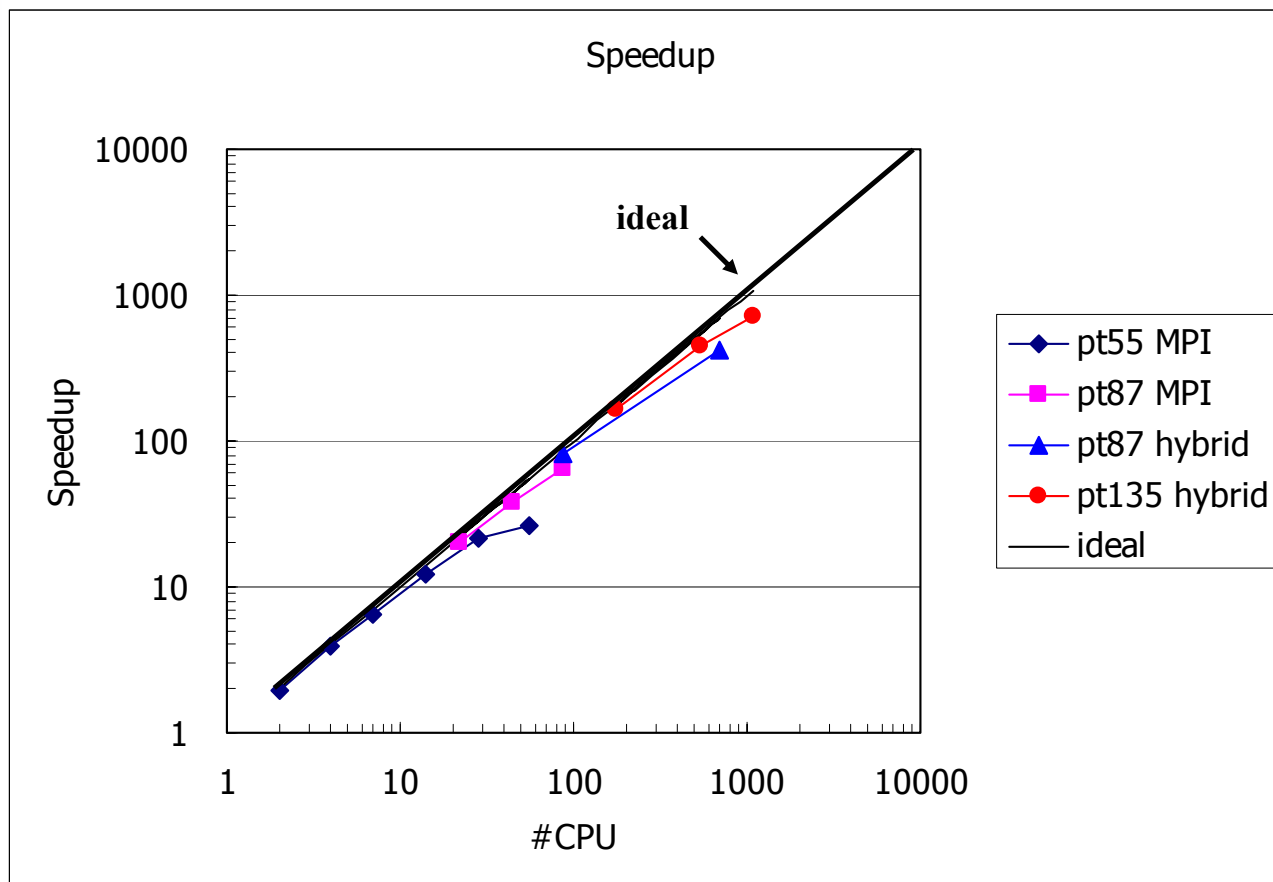


計算効率とスケーラビリティ (Ptクラスター)



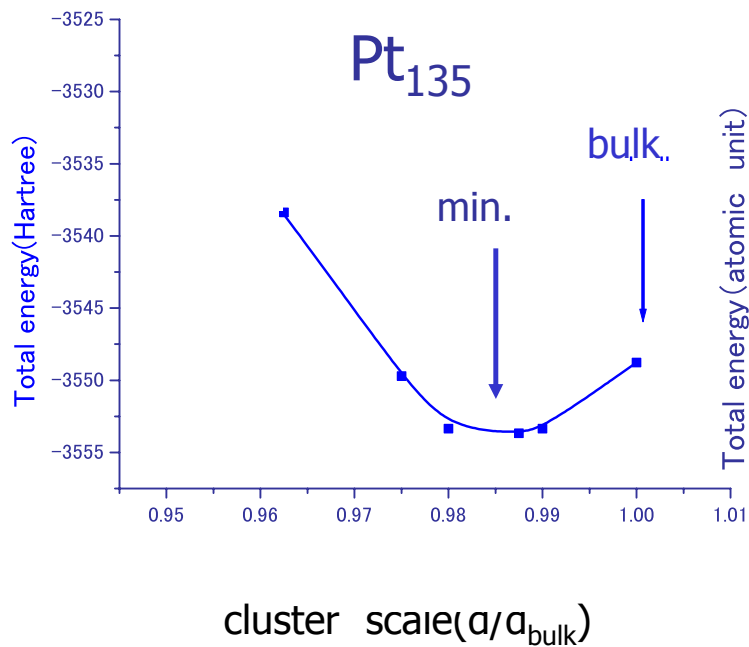
計算効率: 加速率 (Ptクラスター)

(補足資料)

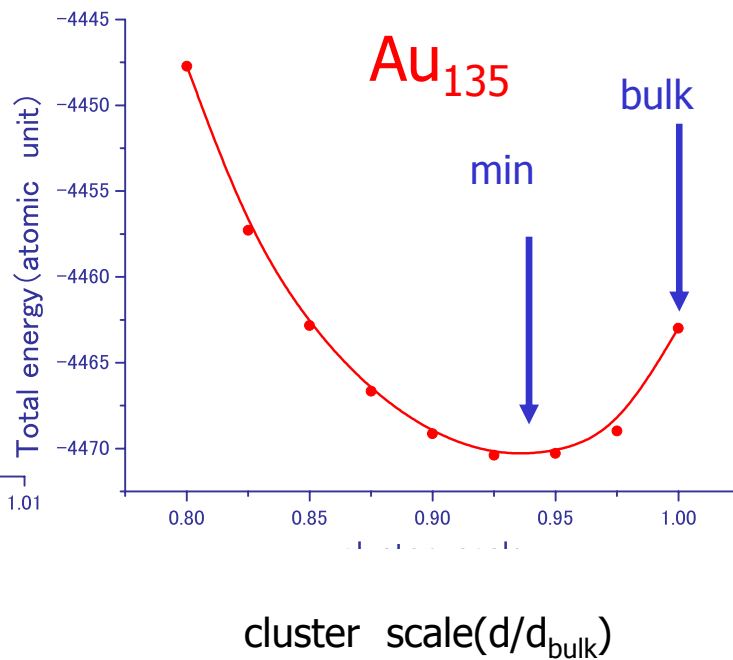


貴金属クラスター (Pt₁₃₅、Au₁₃₅ ; 1nm サイズ)

1.5% contraction*

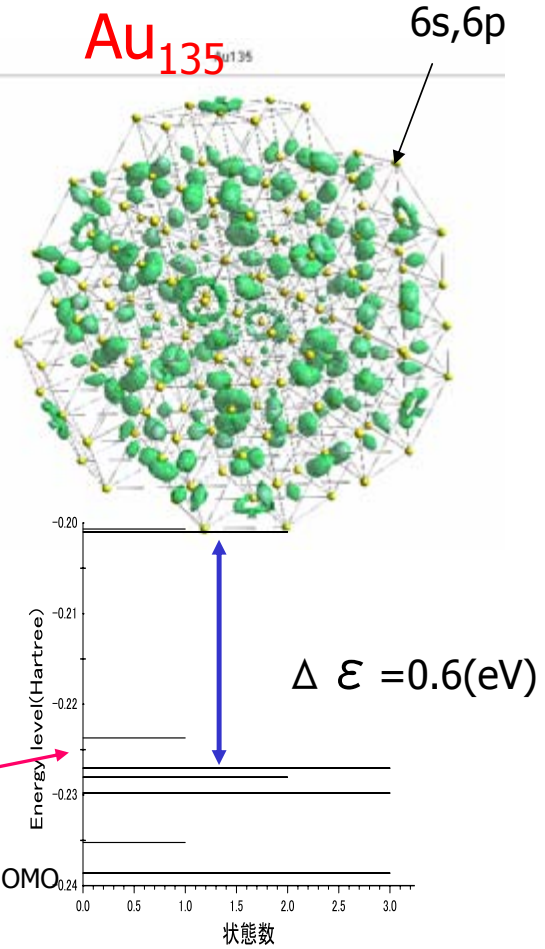
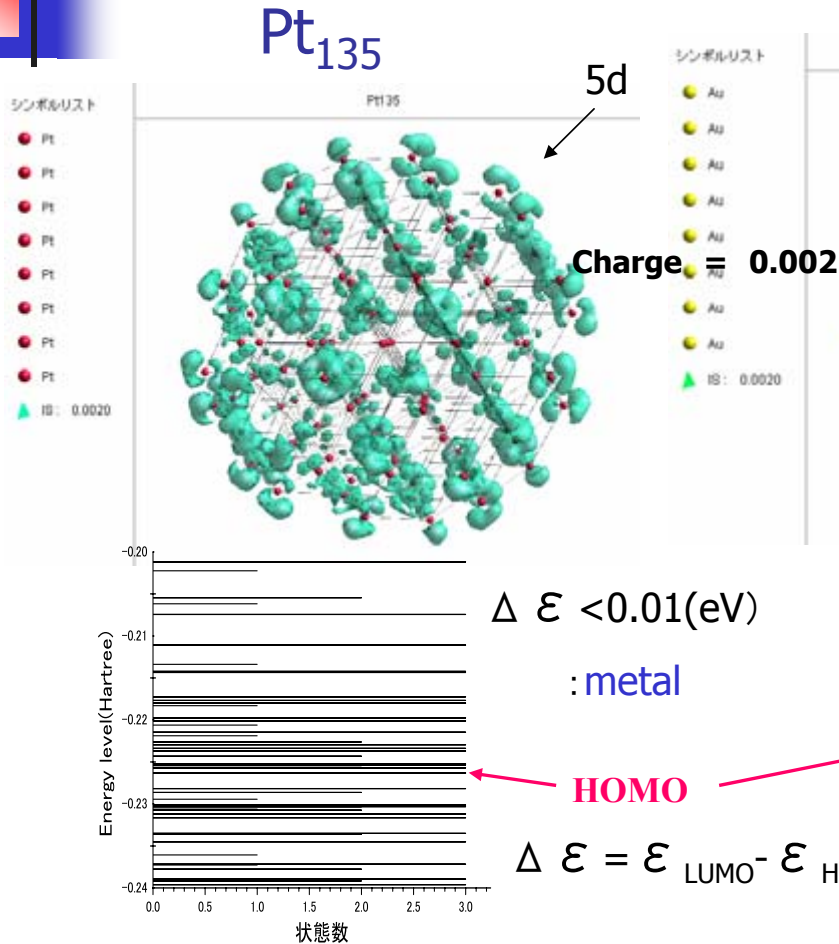


7% contraction



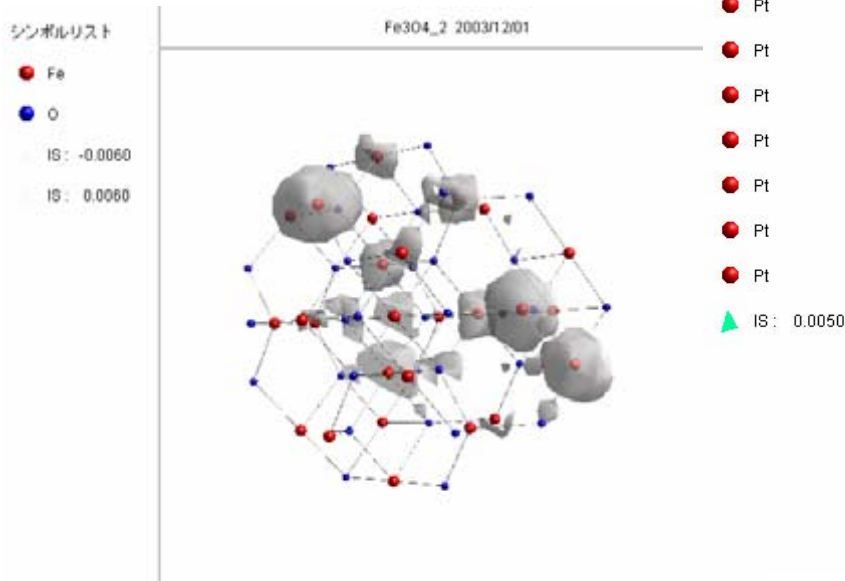
*計算中

Charge-density HOMO(Highest Occupied Molecular Orbitals)



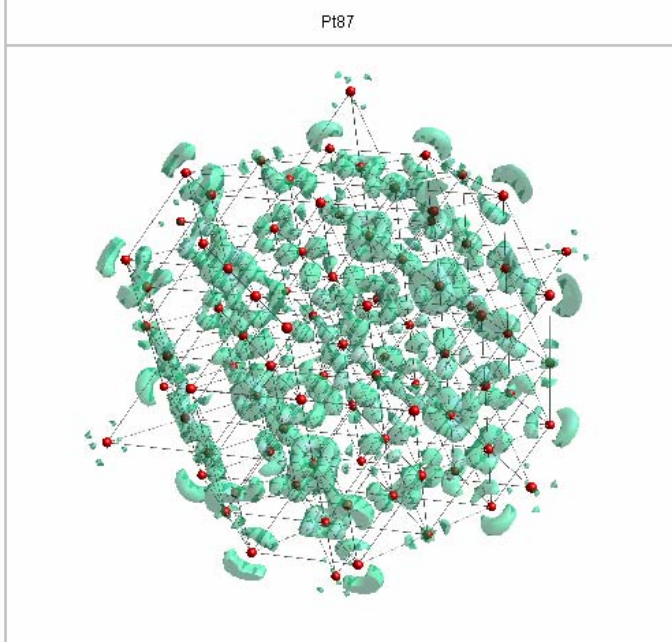
Charge-density (2)

Fe₂₆O₃₂ spin-charge-density



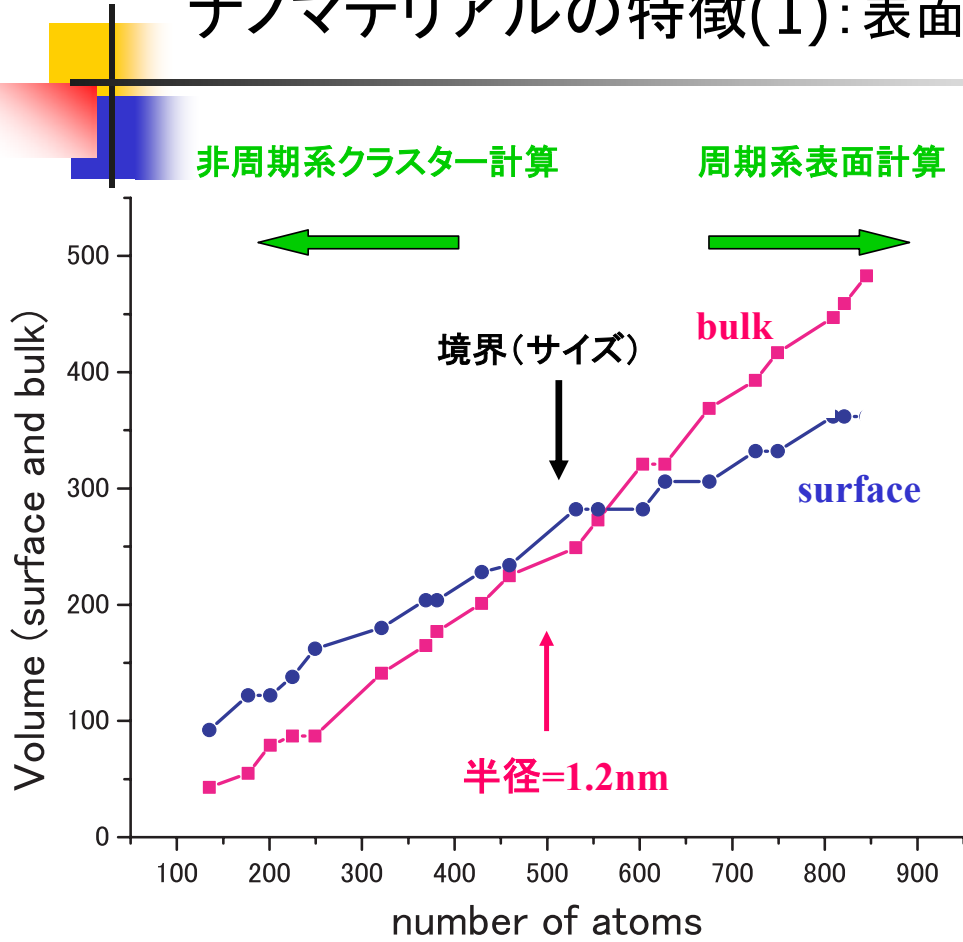
酸化物クラスターのスピン分布
(計算中)

Pt₈₇ HOMO

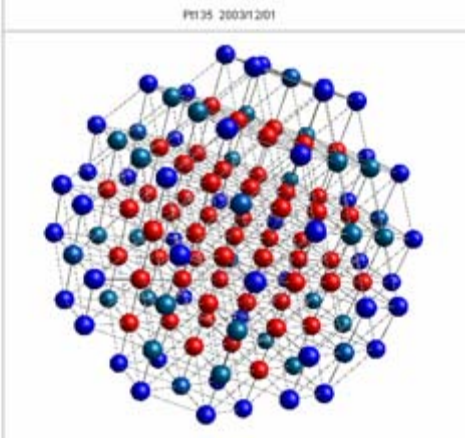


(補足資料)

ナノマテリアルの特徴(1): 表面領域 \approx bulk領域



- シンボルリスト
- Pt
 - Pt
 - Pt
 - Pt
 - Pt
 - Pt
 - Pt
 - Pt
 - Pt



Pt₁₃₅

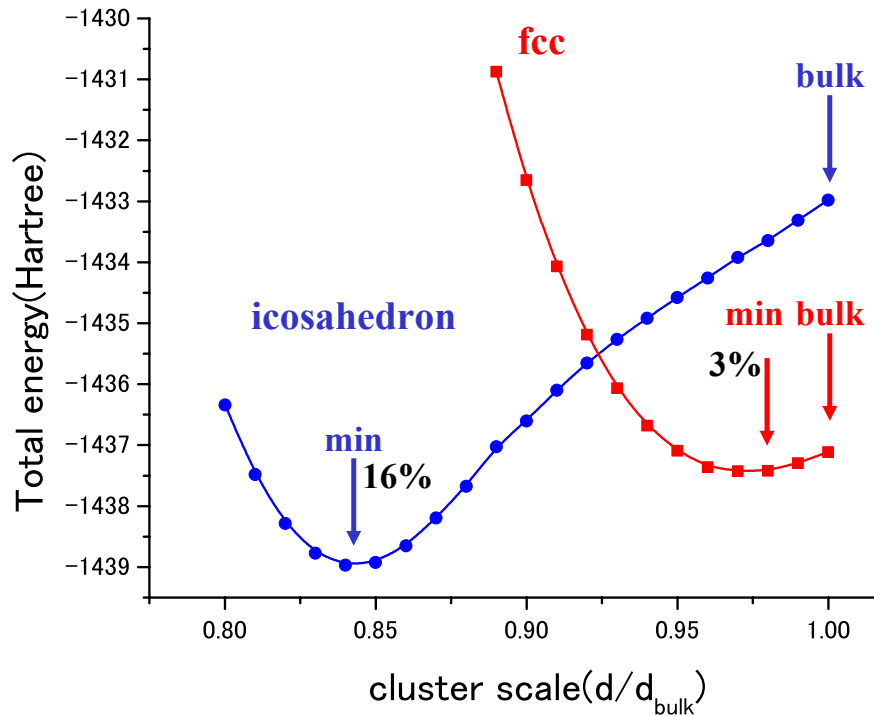
半径=0.75nm

ナノマテリアルの特徴(2): 5回対称性

(補足資料)

Pt_{55} : 5回対称性が安定 $\rightarrow Pt_{100\sim 500}$ 安定?

5回対称は空間充填不可能

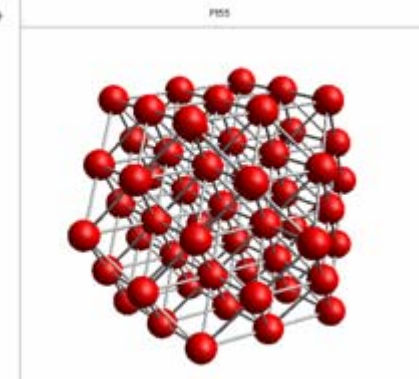


$\Delta \varepsilon \approx 0.04(eV)$

fcc (正8面体対称性)

シンボリックリスト

- Pt
- Pt
- Pt
- Pt
- Pt

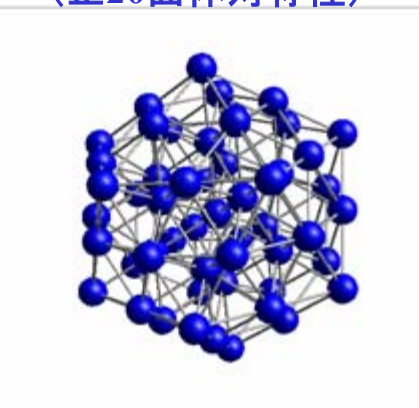


icosahedron

(正20面体対称性)

シンボリックリスト

- Pt
- Pt
- Pt



ナノマテリアルシミュレーション(計算中)

ナノクラスターの電子・原子構造決定

貴金属・重金属クラスター:d電子+相対論効果+多くの原子基底関数

(1) 高機能触媒: 燃料電池等
Cluster-morphology
クラスター環境(担持効果)

(2) 高密度材料
磁気メモリ
水素吸蔵
分子FET
...

(3) イオン+水クラスター: 環境問題
金属+水素系: エネルギー

■ 金属クラスター

Pt触媒 ← 燃料電池

$Pt_{13}, Pt_{55}, Pt_{87}, Pt_{135} \dots Au, Pd, Ru \dots$

準正多面体: fcc構造、20面体構造

■ 酸化物クラスター

Fe_3O_4 : スピン分極(フェリ磁性?)

$Cr_x Mo_y O_z$

■ 合金クラスター

触媒設計($Pd_x Cu_y$)、磁性合金($Pt_x Fe_y$)

$Nb_x H_y$

■ 金属+水、水素クラスター

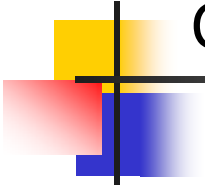
スケール付着問題: Feイオンの水中での
振舞い($FeOOH$)

イオン化傾向



次年度計画

- ◆ 周期系プログラムCAMP-ATAMIの移植
第一原理分子動力学並列計算標準化
- ◆ 非周期系LCAO-PSプログラム
物理量計算プログラムの並列化
データベース作成プログラムの並列化
- ◆ 物質情報標準化プラットフォーム構築
出力データ加工 → 入力データ生成



CAMP-ESプロジェクト参加メンバー

- NEC基礎環境研
- 豊田中研
- 住友化学
- 東芝
- 三菱重工
- 旭硝子
- ソニー
- FDK
- ANCL
- NEC情報システムズ
- NECシステムテクノロジー
- 富士総研