

プロジェクト名(タイトル): 第一原理計算ソフトウェア NTCChem の開発

利用者氏名: 〇川嶋 英佑

理研における所属研究室名: 計算科学研究センター 量子系分子化学研究チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

当研究チームでは量子化学計算ソフトウェア NTCChem を開発している。密度汎関数 (density functional theory, DFT) 法における汎関数のカテゴリーの一つに一般化勾配近似 (generalized gradient approximation, GGA) があり、これは汎関数を電子密度とその勾配で記述したものである。GGA にさらに密度のラプラシアンや運動エネルギー密度を加えたものはメタ GGA と呼ばれ、一般に精度は向上するが計算コストが増大する。

NTChem はメタ GGA を実装しているが、数値的不安定性のために密度ラプラシアンや運動エネルギー密度にはカットオフを導入していなかった。特に大規模系の計算においては上記の箇所がボトルネックになっていることが判明したため、カットオフを導入し、計算結果を検証した。

その他種々のリファクタリングやテストなどを行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

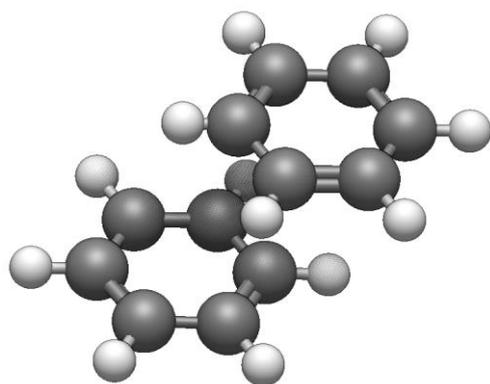


図 1: ベンゼン 2 量体.

カットオフを導入した際、特に複合系の電子密度が低い領域において、力の計算で誤差が発生しやすいと考えられた。これは構造最適化を行う際に問題になり得る。そこで、ベンゼン 2 量体 (図 1; 平面間の距離 3.5 Å) を対象に計算を行った。メタ GGA 汎関数には M06-L, MN15, SCAN, TPSS を、基底関数には def2-TZVP を用いた。

開発版の NTCChem (flat MPI) を Intel コンパイラでビルドした。計算には 1 ノードを使用した。

3. 結果

M06-L/def2-TZVP でのエネルギーはカットオフなしでは -453.686401529215 hartree で、他の汎関数でも同程度である。カットオフの有無によるエネルギーの差は 10^{-12} hartree 程度で、力の差 (x, y, z 成分の絶対値の差) は 10^{-7} hartree/bohr 以下であり、精度の悪化は見られなかった。計算時間はおよそ 30%程度短縮された。

4. まとめ

メタ GGA にカットオフを導入することで、NTChem の性能向上が達成された。

5. 今後の計画・展望

今後も継続して NTCChem のテストやベンチマークを行い、性能の向上を目指す。

2023年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

- Eisuke Kawashima, “Development of Massively Parallelized Quantum Chemical Software NTChem on Fugaku,” ADAC Applications & Benchmarks Monthly Seminar, 2023-04, virtual

【ポスター発表】

- Eisuke Kawashima, William Dawson, Takahito Nakajima, “Development of Massively Parallelized Quantum Chemical Software NTChem on the Fugaku Supercomputer,” CJK-WTCC-VI, 2023-06, Suwon, Korea