

CMSI計算科学技術特論C (第5回) 2015年10月29日

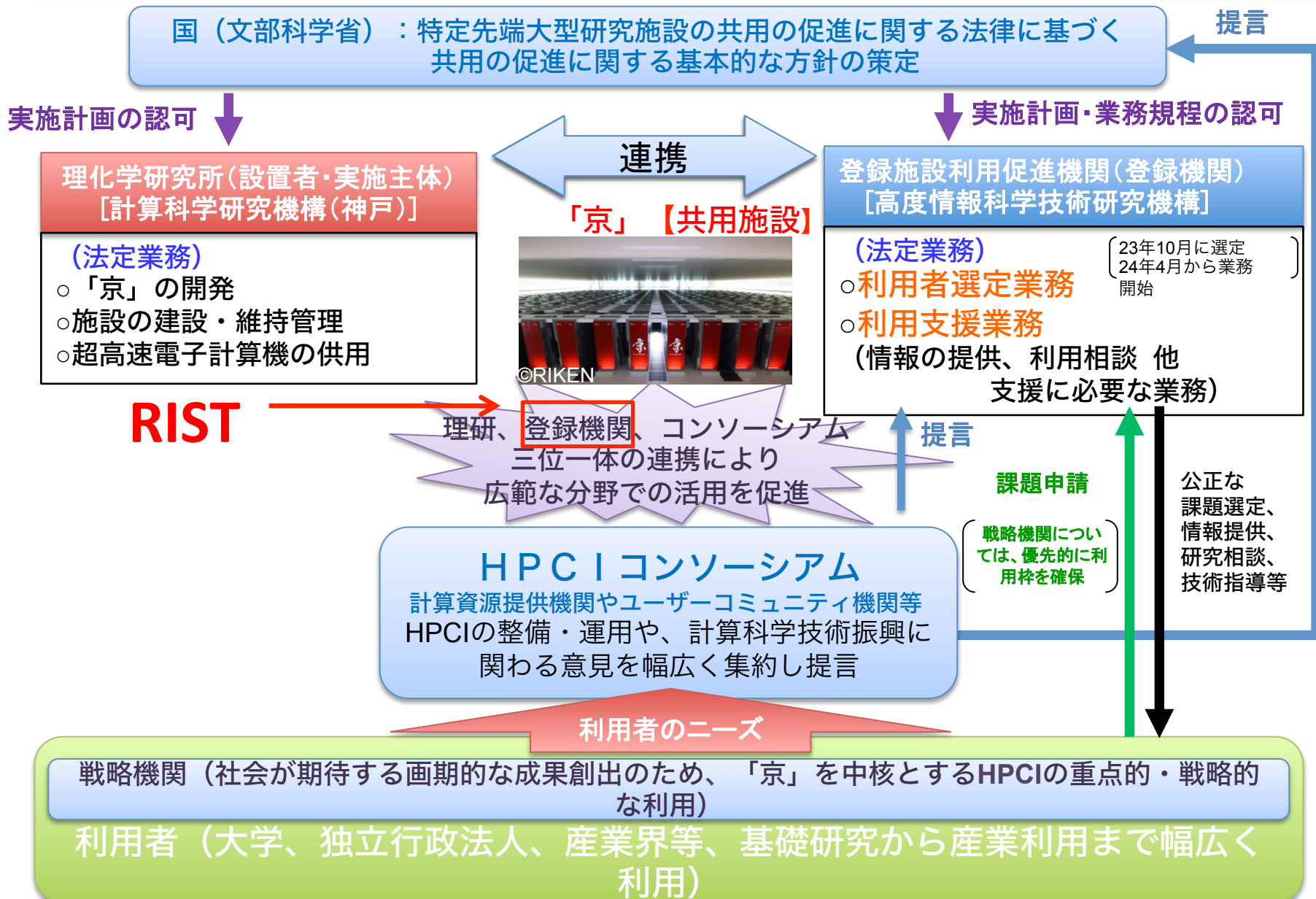
xTAPP をはじめとしたDFTコードと ユーザーインターフェース

高度情報科学技術研究機構 (RIST)
吉澤香奈子

Outline

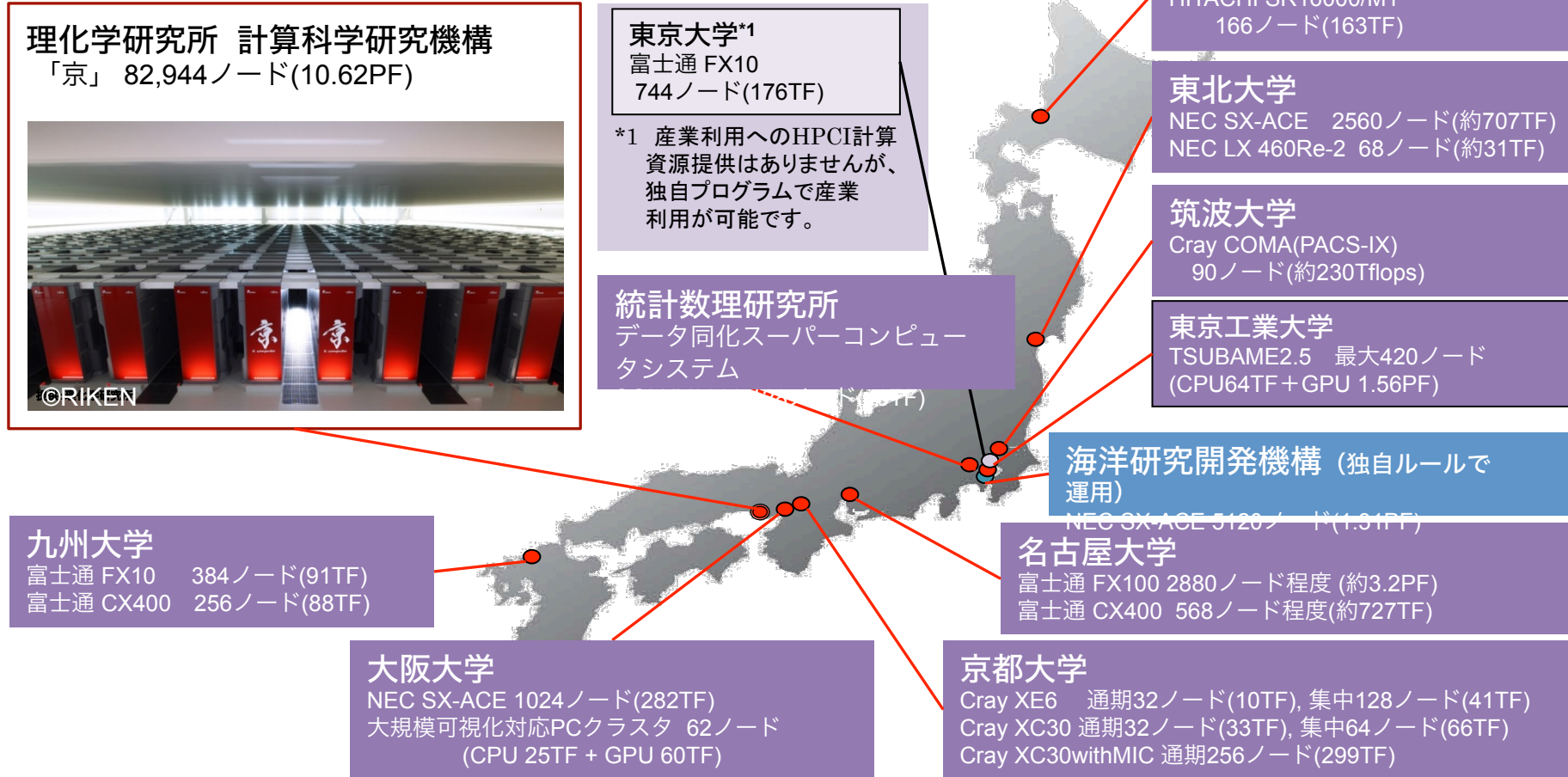
- はじめに(RISTの利用支援)
- 平面波基底DFTコードについて
xTAPPの紹介
- 平面波基底DFTコードの比較
- 平面波基底DFTコードの開発について
出入力の統一へ
入力変換:統合パラメータの作成
- ソースコードの公開へ向けての取り組み
MateriAppsでの公開
- xTAPPの普及に向けて
可視化GUIソフトウェア TAPIOCA & C-Tools の開発など

「京」の運用・利用体制



HPCI資源提供機関と主な計算資源 (H28年度)

HPCIとは、「京」を中核とし、多様なニーズに応える革新的な共用計算環境を実現するハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラのこと。



最新の情報はHPCIポータル (<http://www.hpci-office>)をご参照ください。

HPCIポータル → 課題募集 → 現在受付中または受付開始予定の課題募集

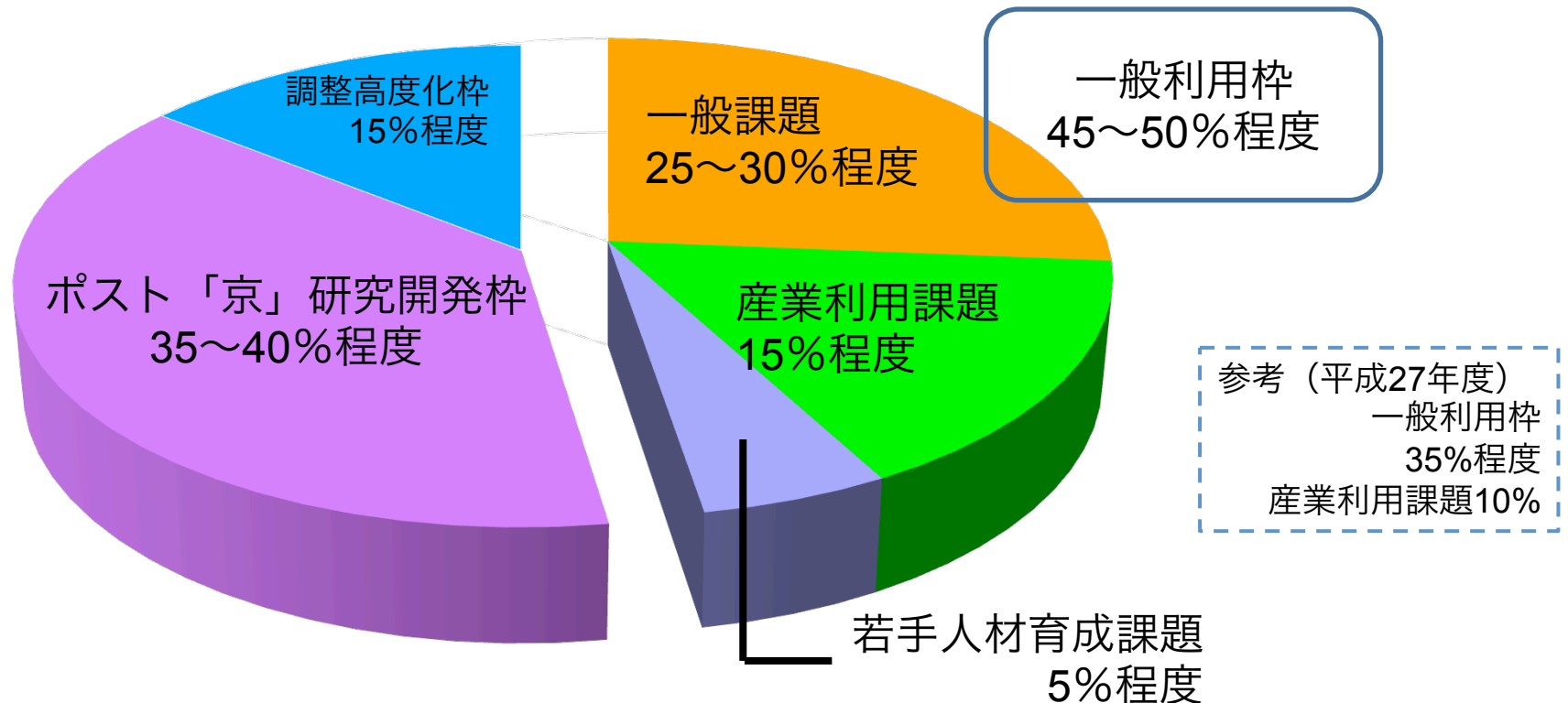
→ 平成28年度の課題募集におけるハードウェア・ソフトウェア資源一覧

「京」一般課題（競争的資金等獲得課題）

- 募集対象（下記の課題の解決に貢献することを目的）
 - 競争的資金を獲得した課題
（内閣府の競争的資金制度一覧に掲載されているものを基本）
 - 科研費、CREST、元素戦略プロジェクト等
 - 国の資金により実施されている研究プロジェクトとして採択された課題
 - 革新的研究開発推進プログラム（ImPACT）
 - 戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）、等
- 平成27年4月23日より**随時募集中**
- 成果公開、**有償**、最長1年間
- 申請できる資源クラス 600万NHと1000万NH
- 優先的にジョブを実行できる有償利用向けの優先制度を利用可
- 学術界、産業界両方からの応募が可能

平成28年度の「京」における資源配分

「京」資源全体の45～50%程度が一般利用枠の募集対象となっており、そのうち産業利用課題に15%程度、若手人材育成課題に5%程度ずつ割り当てられます。なお、これらの割当は応募状況等により変動することがあります。



※各利用枠に対する割合は、現在検討中です。

RISTの利用支援



「京」高度化支援実績

利用者のページ ~アカウントをお持ちの方へ~

- 利用支援 (利用相談・技術支援・講習会・セミナーなど)
- 各種手続きについて
- 「京」を含むHPCIシステムの関連情報
- マニュアル
- 接続情報
- 利用者向け情報発信・ドキュメント管理

ホーム > 利用者のページ ~アカウントをお持ちの方へ~
 > 利用支援 (利用相談・技術支援・講習会・セミナーなど) > 「京」高度化支援
 > 「京」高度化支援について

「京」高度化支援について

「京」コンピュータの登録施設利用促進機関 (登録機関) である高度情報科学技術研究機構 (RIST) では、HPCIシステム利用者の皆様への高度化支援を無償で実施しております。

※RISTでは、一般利用、若手人材育成利用、産業利用、戦略プログラムの利用者に対する高度化支援を実施しています。

- ▼ 支援内容
- 利用者のプログラムの並列化、高速化支援
 - 実行性能分析支援
 - 性能情報採取の支援、性能ホットスポットの調査
 - CPU単体性能、並列性能、インバランス、ボトルネック分析等
 - 単体性能・並列性能向上策のアドバイス等
 - 打合せを随時実施し、密接なサポートを行います
- ※1件当たりの支援期間は、4カ月程度を目安とします。

▼ 支援実績

これまでの高度化支援の実績一覧は、[こちら](#)に掲載しています。

これまでの高度化支援の実施課題一覧は、[こちら](#)に掲載しています。

▼ 申込方法

平成27年度第2回高度化支援課題の募集は締め切りしました。次回は、11月頃を予定しております。

※高度化支援は無償で実施しておりますが、支援作業に伴う計算資源は、各課題に配分された計算資源をわせて頂きます。

※選定された課題については、[高度化支援実施課題一覧](#)として公開いたします。

京 K computer

京の利用案内

お問い合わせ・FAQ

ヘルプデスク

「京」高度化支援

ご不明な点や、ご相談など、お気軽にお尋ねください。

お問い合わせフォーム

講習会・セミナー

高度化支援の申込み

ホーム > 利用者のページ ~アカウントをお持ちの方へ~
 > 利用支援 (利用相談・技術支援・講習会・セミナーなど) > 「京」高度化支援 > 「京」高度化支援の実績

「京」高度化支援の実績

これまでの「京」を含むHPCIシステムでの高度化支援の実績一覧を掲載しています。

性能改善

No.	支援前の課題・問題点、依頼事項	改善策の分類
1	GFK(Genomon-Fusion)は、スクリプト、bowtie、BLATなどの複数プログラム構成で、実行時間の大半をBLATが占める。想定するデータで実行時間を見積もると、与えられた計算リソース内では終了しない。一番計算コストが高いプログラムBLATの高速化について	性能分析、および単体性能の改善
2	1次元領域分割された三重対角行列解法の高効率化 2048ノードを超えると、Alltoally通信時間が大きくなる。また、節点数とともにメモリ使用量も増加するため、少しでもメモリ使用量を減らしたい。性能分析と実行時間を短縮する高度化、特に負荷の大きいAlltoally通信の回避について	並列性能・単体性能の改善、および使用メモリ量の削減
3	分子動力学シミュレーションプログラムをインテル機と「京」でそれぞれ実行すると、1ノード8スレッド同士の比較で、「京」がインテル機 (79秒) の10倍以上の時間がかかった。その原因特定と、改善策について	性能分析、および単体性能の改善
4	MDコード(LAMMPS)について (1)性能分析の方法 (2)最小限の修正で高速化する方法 (3)基本・詳細プロファイルの使用法	単体性能・並列性能の分析、および分析方法
5	利用者の流体コードにおいて、単体性能/並列性能が十分かどうか、また、その性能改善方法について	並列性能分析、および単体性能の改善

高度化支援の事例

「京」に関する利用支援 ～支援環境整備～

利用支援用スパコンを運用

一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)

神戸センター

- 「京」利用前のソフト動作確認、性能測定
- 要望の多いソフトの動作確認
- 高速化、高並列化支援
- 商用ソフトの移植・高速化(ベンダーと共同)
- 小規模および会話型ジョブの実行
- 申請前相談



共用促進
利用支援
強化



利用支援用スパコン

FUJITSU FX10(「京」互換機)
1ノード: 16コア, 211.2GLOPS, 32Gバイト
ノード数: 48ノード(748コア)
理論演算性能: 10.1TFLOPS
総メモリ量1.5Tバイト

アクセスポイント東京(AP東京)

- 実習形式での講習会
- 「京」利用前のソフト動作確認、性能測定

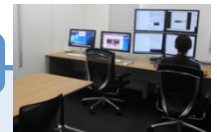
運営 RIST 東京事務所(東京都品川区)



アクセスポイント神戸(AP神戸)

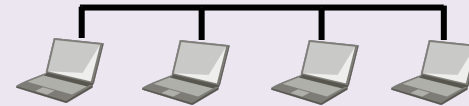
- 実習形式での講習会

運営 公益財団法人計算科学振興財団(FOCUS)
計算科学研究機構(AICS)に隣接



講習会・ワークショップ会場

RIST、戦略分野等が開催



- 実習形式での講習会
- 小規模ジョブの一斉実行



「京」の産業利用で利用企業数の多いアプリケーション

前回順位	今回順位	利用プログラム	利用企業数	課題数	分野	種別
1	1	LAMMPS	10	17	計算化学（古典MD）	OSS
2	2	FrontFlow/blue	8	10	流体解析	国家PJ
2	↓3(2)	OpenFOAM	6(8)	12(14)	流体解析	OSS
4	↑3	FrontFlow/red	6	9	流体解析	国家PJ
4	↓5	LS-DYNA	4	8	衝突解析	商用
6	6	FrontISTR	3	5	構造解析	国家PJ
7	↑6	GROMACS	3	5	計算化学（古典MD）	OSS
7	↑6	VSOP	3	5	計算化学（粗視化MD）	商用
7	↓9	MODYLAS	2	5	計算化学（古典MD）	国家PJ
7	9	ELSES	2	3	計算化学（電子構造計算）	国家PJ
—	↑9	OpenMX	2	2	計算化学（DFT）	OSS

(2015.8.1現在)

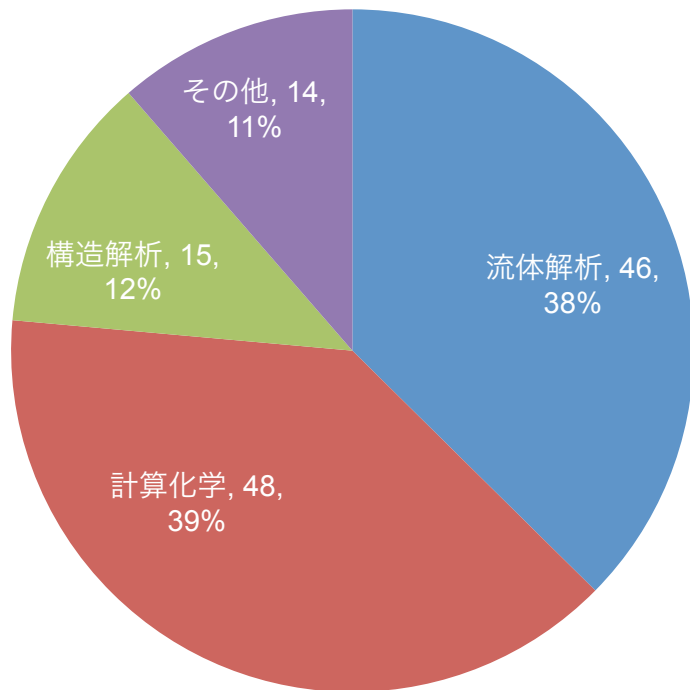
H24年度～H27年度までの「京」産業利用課題（トライアル・ユースと実証利用）の採択課題の申請書から、利用企業数の多い上位のソフトウェア（インハウスを除く）を集計。

（）内の件数はOpenFOAM関連のソフト(Helyx-Core, iconCFD)を含めた数。

オープンソースと国家プロジェクトのアプリケーションが人気、商用ではLS-DYNAとVSOPが健闘

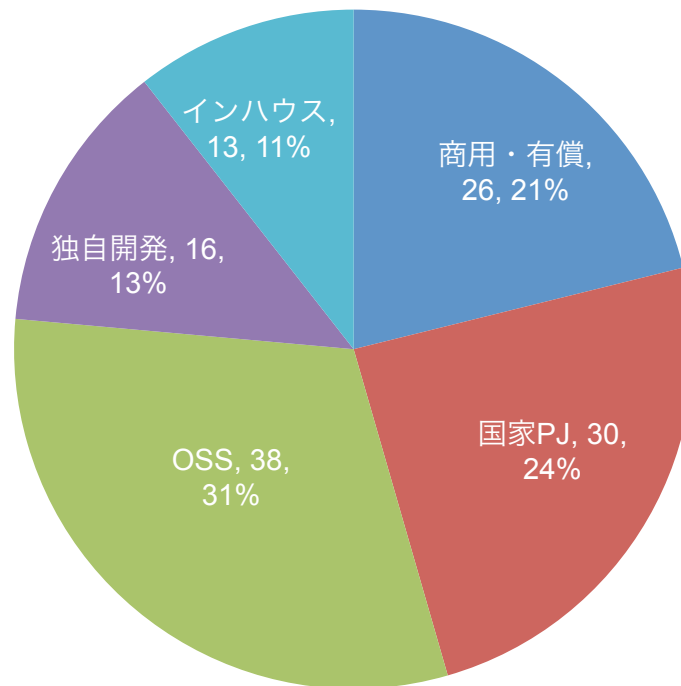
「京」産業利用課題でのアプリの傾向

計算分野別「京」産業利用企業数
H24～H27



流体解析と計算化学系のアプリを利用する企業が多く両者で8割近くを占める。

開発種別「京」産業利用企業数
H24～H27



国プロとOSSのオープンソース系が55%、商用・有償が21%、独自開発とインハウスが26%。

課題数集計でも同様の傾向

HPCI産業利用の利用企業

(2015.8.1現在)

業種	HPCI産業利用課題(H24～H27)課題代表者の所属	企業数
輸送用機器・ 機械	川崎重工業(株)、三菱航空機(株) [自動車] スズキ(株)、トヨタ自動車(株)、トヨタテクニカルディベロップメント(株)、日産自動車(株)、富士重工業(株)、(株)本田技術研究所、マツダ(株)、一般社団法人日本自動車工業会 [船舶] ジャパンマリンユナイテッド(株)、一般財団法人日本造船技術センター [機械] (株)IHI、三菱重工業(株)	14
化学・繊維	(株)コベルコ科研、JSR(株)、昭和電工(株)、住友ベークライト(株)、住友化学(株)、東洋紡(株)、(株)日産アーク、日東電工(株)、日本ゼオン(株)、(株)半導体理工学センター、富士フイルム(株)、富士フイルムホールディングス(株)	12
情報・通信	(株)アスミス、アドバンスソフト(株)、茨城日立情報サービス(株)、(株)ヴァイナス、(株)CAEソリューションズ、(株)数値フローデザイン、(株)ヒューリンクス、(株)フォーラムエイト、富士通アドバンステクノロジー(株)、みずほ情報総研(株)	10
医薬品	第一三共(株)、第一三共RDノバーレ(株)、大正製薬(株)、大日本住友製薬(株)、武田薬品工業(株)、京都大学大学院薬学研究科、日本大学松戸歯学部	7
電気機器	京セラ(株)、パナソニック(株)、日立アプライアンス(株)、(株)日立製作所、富士ゼロックス(株)、富士電機(株)、三菱電機(株)	7
建設	(株)大林組、鹿島建設(株)、清水建設(株)、(株)竹中工務店、千代田化工建設(株)、阪神高速道路(株)	6
ゴム製品	住友ゴム工業(株)、東洋ゴム工業(株)、(株)ブリヂストン、三ツ星ベルト(株)、横浜ゴム(株)	5
防災・環境	応用地質(株)、(株)風工学研究所、(株)地震工学研究開発センター、メトロウェザー(株)	4
鉄鋼	JFEスチール(株)、新日鐵住金(株)	2
鉄道	東海旅客鉄道(株)、公益財団法人鉄道総合技術研究所	2
電気・ガス	関西電力(株)	1
非鉄金属	住友電気工業(株)	1
126企業が「京」を利用し、32企業が「京」以外のHPCIシステムを利用しました。(2015.4月現在)		合計企業数
		71

利用成果報告書の公開

HPCIポータル(<http://www.hpci-office.jp>)で公開中

ホーム > 利用成果 > 利用成果の発表 > 利用報告書 > 利用分野から検索 > 利用分野一覧

HPCI High Performance Computing Infrastructure

English

サイト内検索 詳細検索 文字サ

ホーム HPCIについて 利用案内 課題募集 利用成果 イベント・広報 利用:

利用分野一覧

ホーム > 利用成果 > 利用成果の発表 > 利用報告書 > 平成26年度 利用報告書

平成26年度 利用報告書

ホーム > 利用成果 > 利用成果の発表 > 利用報告書 > 平

一般利用枠

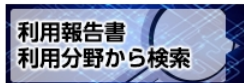
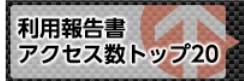
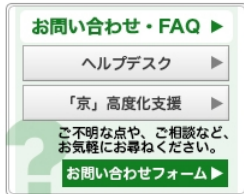
「京」産業利用(実証利用)

- 「京」
- [一般利用](#)
- [若手人材育成利用](#)
- [産業利用 \(実証利用 トライアル・ユース\)](#)
- [共用法第12条調査研究](#)
- 「京」を除くHPCIシステム利用
- [一般利用](#)
- [産業利用 \(実証利用\)](#)



課題番号	研究課題 代表者名	所属機関名	課題名
hp140009	山崎 一人	大日本住友製薬株式会社・ゲノム科学研究所	標的蛋白質に対する薬物の作動性予測 [成果概要] [要約]
hp140018	日野 理	東洋ゴム工業株式会社 タイヤ技術本部タイヤ先行技術開発部	低燃費タイヤ用ゴム材料設計を目指した大規模分子シミュレーションの実証的研究 [成果概要] [要約]
hp140033	黒木 博史	株式会社 I H I	炭素繊維強化プラスチックを利用した超軽量ジェットエンジンの開発 [成果概要] [要約]

利用報告書 アクセス数 トップ20



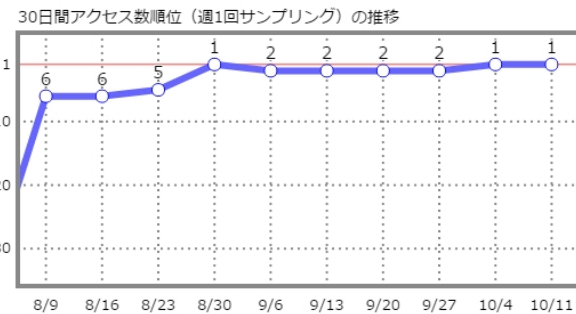
- 1 - 84 download **京産業(トライアル)** 物質・材料・化学
高分子材料の自己組織化の大規模シミュレーション
hp130033 課題代表者: 本田 隆
- 2 - 72 download **京産業(トライアル)** 工学・ものづくり
電子写真システム設計のための並列シミュレーション技術の開発
hp140242 課題代表者: 世古 文裕
- 3 - 67 download **HPCI一般** 情報・計算機科学
経済社会データおよび環境データを用いた空間評価指標の大規模計算
hp140076 課題代表者: 佐藤 彰洋
- 4 - 56 download **京一般** 原子力・核融合
核融合プラズマの乱流輸送シミュレーション
hp120011 課題代表者: 井戸村 泰宏
- 5 - 54 download **京産業(トライアル)** 工学・ものづくり
金属3次元造形ミクروسケールシミュレーション
hp140241 課題代表者: 眞 紀子
- 6 - 53 download **京産業(実証)** 工学・ものづくり
エアバッグを含む詳細衝突モデルによる乗員傷害値の高精度予測
hp130080 課題代表者: 羽良 正道
- 7 - 51 download **京産業(実証)** 工学・ものづくり
自動車操縦安定性および空力性能の連成に関する非定常空力解析手法の構築
hp140126 課題代表者: 藤山 祐司

システムを利用した研究成果が検索できます。

（ジャーナル）

「京」産業（トライアル）
高分子材料の自己組織化の大規模シミュレーション
hp 130033 課題代表者: 本田 隆 (日本ゼオン (株) 総合開発センター基盤技術研究所)

[成果概要全文](#) [成果発表D.B.](#)

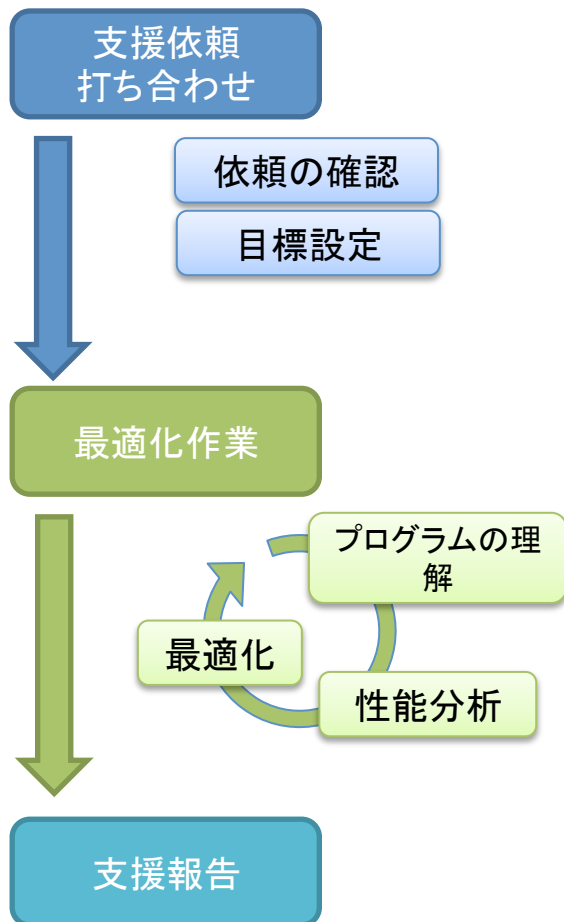


RISTの利用支援(まとめ)

大規模で複雑な解析を、より速く

- 対象: 京を含むHPCIシステム利用者
- 支援内容
 - 応募前相談: 申請に向けた相談
 - 高度化支援: 移植支援、プログラム最適化方法提案
 - 可視化支援: 可視化ソフトの紹介
- 作業期間: 4ヶ月程度
- 料金: 無償
- 実績: 78件 (2015年3月現在)
 - 大学・研究所42件
 - 民間企業36件

支援の流れ



- 依頼内容の確認
 - 高速化
 - 大規模化
- 支援のための目標設定

- 期間1～4ヶ月
- 定期的に情報を共有し、適宜打ち合わせ実施
- プログラムの最適化を実施

- 性能分析結果の報告
- 最適化方法の提案

- 支援の申し込み
HPCIポータル
「京」高度化支援について
 - http://www.hpci-office.jp/pages/k_koudoka?parent_folder=294
- RISTでは、プログラムの最適化に関する様々な依頼に応えます
 - ご相談はヘルプデスクまで
 - helpdesk@hpci-office.jp
- 多数の支援実績があります
 - ノウハウ集も公開しています、是非参考にして下さい
 - http://www.hpci-office.jp/pages/k_koudoka_knowhow

平面波基底による計算

– A die hard method

電子軌道 ψ を展開する基底関数の種類

- 実空間メッシュ(RSDFT)
- 実空間有限要素
- ガウス関数(Gaussian)
- 局在基底 (OpenMX)
- 平面波 (フーリエ変換)

平面波基底の良い点

空間的局在性を持たないのに使われるのは？

- 周期境界条件の下で自然(結晶格子)
- 物体を並進しても精度が変化しない
 - 関数の微分について閉じている
- ほとんどすべての行列要素が厳密に得られる。定式化が単純にすむ。
- シミュレーションセルの形状変化への追従が簡単
- ハードウェアの利用効率が低い(BLAS3)

xTAPP (平面波基底DFTコード)

- **xTAPP (eXtended Tokyo Ab-initio Program Package)**
密度汎関数理論 (DFT) に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理計算コード
- **xTAPPの歴史**
東大理・物理の植村、上村研究室の関係者が開発
 - * 1983年 PPSF (白石 賢二 現筑波大など)
平面波基底擬ポテンシャル全エネルギー計算プログラム
 - * 1990年 TAPP (山内 淳 現慶應大とTAPPコンソーシアム)
共役勾配法による対角化コード
ウルトラソフト擬ポテンシャルに対応
 - * 2000年 xTAPP (吉本芳英 現東大情報理工)
TAPPからの派生
OpenMP および MPI やGPU並列などによる高速化
 - * 2013年4月 GPLv3での一般公開 (MateriApps)

表1: 国内の第一原理計算ソフトウェア

名前	主な開発者(グループ)	関連	基底
PHASE	山崎(富士通)	1	i
QMAS	石橋(産総研)	1	i
STATE-Senri	森川(阪大)	1	i
CPVO	小田(金沢大)	1	i
(x)TAPP	TAPPコンソーシアム	1	i
FPSEID	杉野(物性研)、 宮本(産総研)	2	i
無名	押山(東大)、 岡田(筑波大)	1	i
ES-Opt	草部(阪大)、 荻津(リバモア)、 常行(東大)	1	i
OSAKA2K	白井(阪大)	1	i
TC++	佐久間(千葉大)、 常行(東大)	4	i
HiLAPW	小口(阪大)	1	iii
ABCAP	浜田(東理大)	1	iii
Ecalj	木野(物材機構)、 小谷(鳥取大)	1,3	iii
MACHIKANNEYAMA	赤井、小倉(阪大)	1,4	iii
TOMBO	大野(横浜国大)、 川添(金研)	1,3	iii
RS-DFT	岩田、押山(東大)	1	iv
FEMTECK	土田(産総研)	1	iv
RSPACE	小野、広瀬(阪大)	1	iv
ARTED	矢花(筑波大)	2	iv
OpenMX	尾崎(JAIST)	1	ii
ELSEES	星(鳥取大)	1	ii
DV-X α	足立(京大)	1	ii
Electron Transport Simulator	小林(筑波大)、 広瀬(NEC)	1	vi
無名	渡邊(東大)	1	vi
無名	胡、渡辺(東理大)	2	iv
ASCOT	近藤(物材機構)	1	ii
CONQUEST	宮崎(物材機構)、 D.Bowler(UCL)	1	ii, v

平面波基底
DFT

表2: 海外の第一原理計算ソフトウェア

名前	主な開発者(グループ)	相関	基底
VASP	J. Hafner (Austria)	1、2、3	i
abinit	X. Gonze (Belgium)	1、2、3	i
qbox	F.Gygi (US)	1	i
bigDFT	T. Deutsch, S.Goedecker (Germany)	1	vii
CASTEP	M.Payne (UK)	1	i
quantum espresso	DEMOCRITOS, SISSA (Italy)	1、2、3	i
Siesta	E. Artacho (Spain)	1	ii
octopus	A.Rubio (Spain)	1、2	iv
WIEN 2k	K. Schwarz (Austria)	1	iii
CP2K	J. Hutter	1、2	i, ii
CPMD	J.Hutter (US,Germany)	1、2	i
Ontep	P. Haynes (UK)	1	ii
LMTO	O. K.Andersen	1	iii

**平面波基底
DFT**

平面波基底DFTは国内外ともに
コードの数が多い

平面波基底DFTコードの開発

- 平面波基底のDFTコードについて
 - ・ 原子に働く力の高精度計算が容易
 - ・ 逐次的な固有系の解法と組み合わせる
 - 比較的大きな系にも適用可能
 - バンド計算、構造最適化、動力学計算など様々な物性シミュレーションに使われてきた
- スパコンの性能を十分に生かす(高並列への対応など)コードの整備を目指す
 - ・ 国内の既存のコードをベースにする
 - ・ コード開発の歴史が長く、多数のコードが存在
 - このままで良いのか？
 - 今後の国内のコード開発の方向性は？

今後の開発方針は？

- このままバラバラに高並列化、チューニングをしていては
労力の無駄の可能性、開発が追いつかない
→ コードの乱立を避ける
- VASP (フリーではない) が世界的によく使われている (やっぱり速い)
みんなVASPを使えば良い？
- 国産のコードを開発、整備する理由
 - * 京などの国産スパコンやマシンへのチューニング
 - * 第一原理とはいえ、それぞれのコードには特徴があるので、
研究の目的によって使い分けたい
(良い擬ポテンシャルの有無など)
 - * 新しい理論、手法を試したい (新しい交換相関汎関数Excなど)
→ 手元にフリーのコードがあると便利

- 共有化できる所はそうする。(他のコードの良い機能は使う)
- 自分の研究に合ったカスタマイズの便利な環境を残す。

平面波基底DFTコードの比較 (2011年ごろのデータ)



コードの比較 xTAPP、QMAS、VASP

- 各コードの性能を理解 → 新しいコード開発に生かす
- 日本のコードが今海外のコード(VASP)と比べてどの水準にあるのか

コード名	計算手法	基底関数	擬ポテンシャル	交換相関汎関数	対象とする系
TAPP (Tokyo Ab-initio Program Package) ver. 3.2.0 [1,2]	DFT	平面波基底	ウルトラソフト	GGA	周期系
xTAPP (TAPPの改良版) ver.110426 [3]				GGA	
QMAS (Quantum Materials Simulator) ver.110520 [4]			PAW	GGA	
VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) ver.5.2 [5,6]			PAW	GGA、HSE	

[1] J. Yamauchi, M. Tsukada, S. Watanabe, and O. Sugino, Phys. Rev. B **54**, 5586 (1996).

[2] O. Sugino and A. Oshiyama, Phys. Rev. Lett. **68**, 1858 (1992).

[3] 吉本芳英、TAPPコンソーシアム tapp@cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp.

[4] 石橋章司ほか, [<http://www.qmas.jp/>].

[5] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

[6] G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci. **6**, 15 (1996).

コードの計算時間の比較

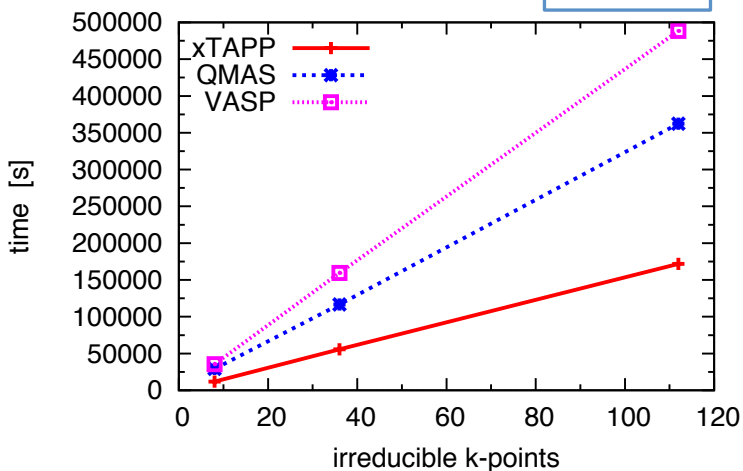
シリコン(Si)のアルミニウム(AI)の全エネルギーと全電子密度を求める時の計算時間の測定

Si : [supercell、カットオフエネルギー: 300 eV、格子定数: 5.43Å]

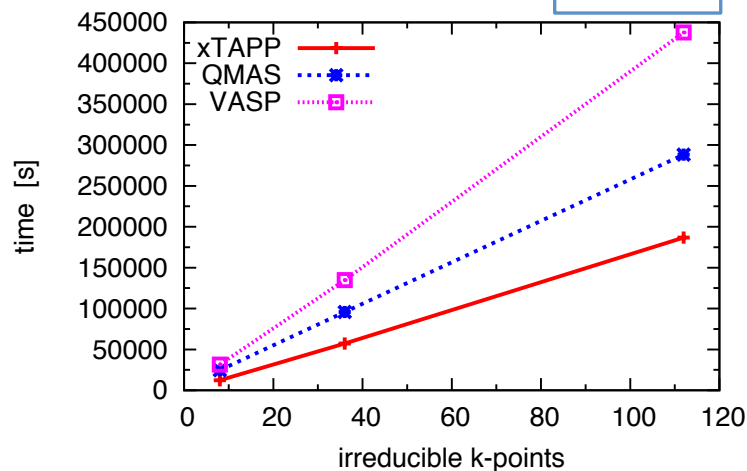
Al : [supercell、カットオフエネルギー: 256 eV、格子定数: 5.05Å]

• Serial

Si (number of atoms : 128 iteration : 25)

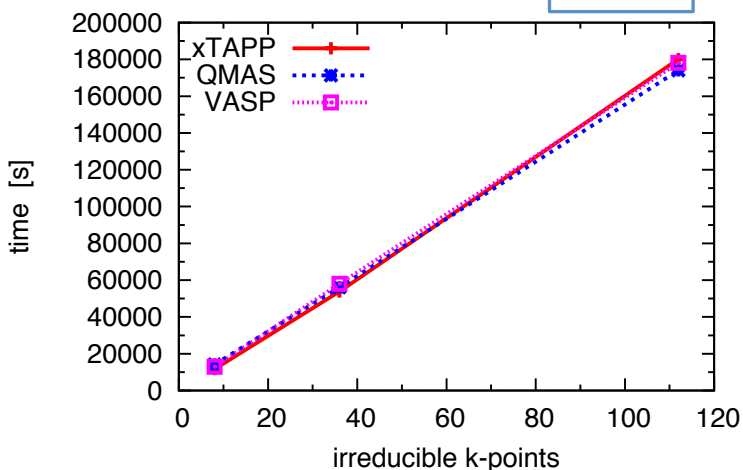


Al (number of atoms : 125 iteration : 25)

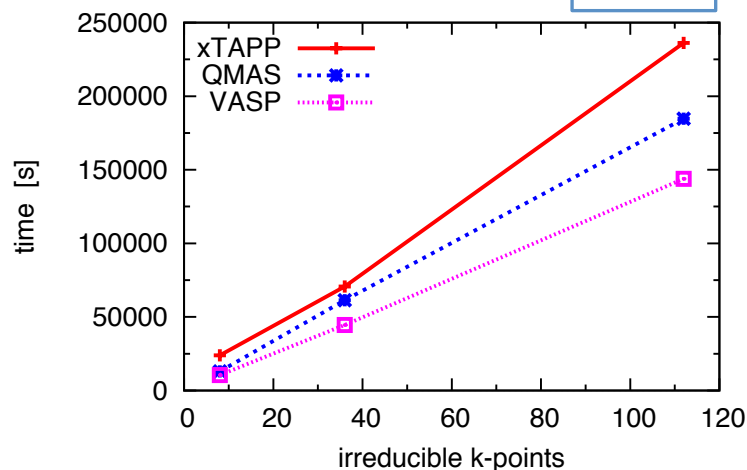


xTAPPは1回のループの計算が速い

Si (number of atoms : 128 dE = 10⁻⁴)



Al (number of atoms : 125 dE = 10⁻⁴)



VASPは収束が速い

コードの計算時間の比較

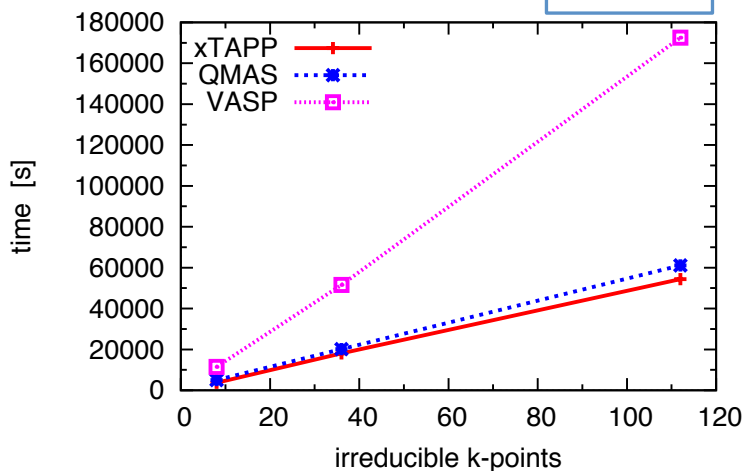
シリコン(Si)のアルミニウム(AI)の全エネルギーと全電子密度を求める時の計算時間の測定

Si : [supercell、カットオフエネルギー: 300 eV、格子定数: 5.43Å]

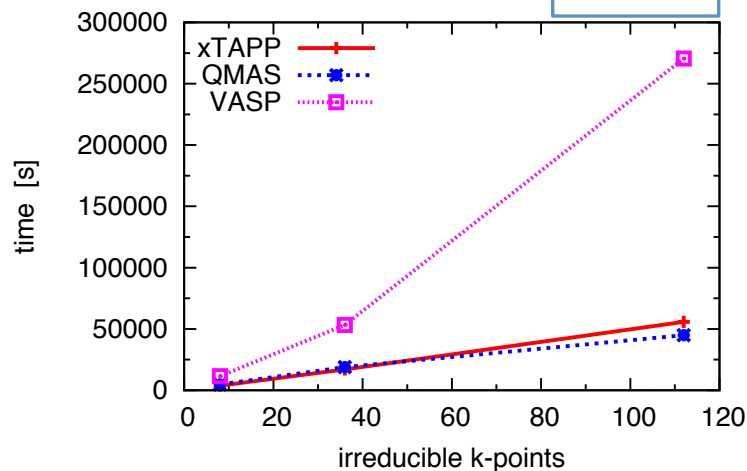
Al : [supercell、カットオフエネルギー: 256 eV、格子定数: 5.05Å]

• Parallel (1node 8core)

Si (number of atoms : 128 iteration : 25)



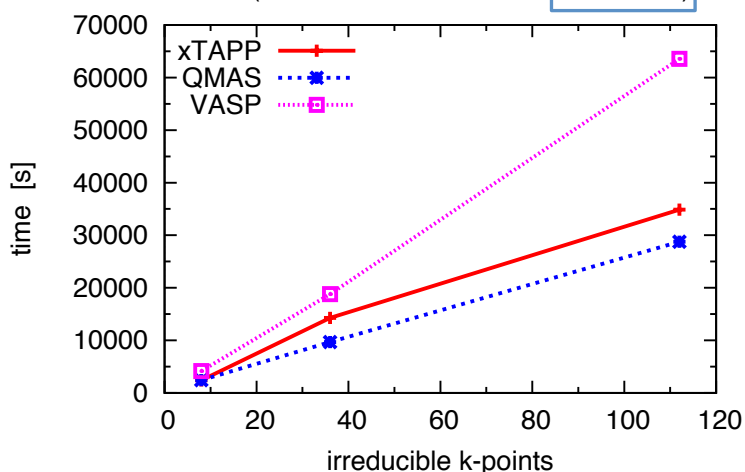
Al (number of atoms : 125 iteration : 25)



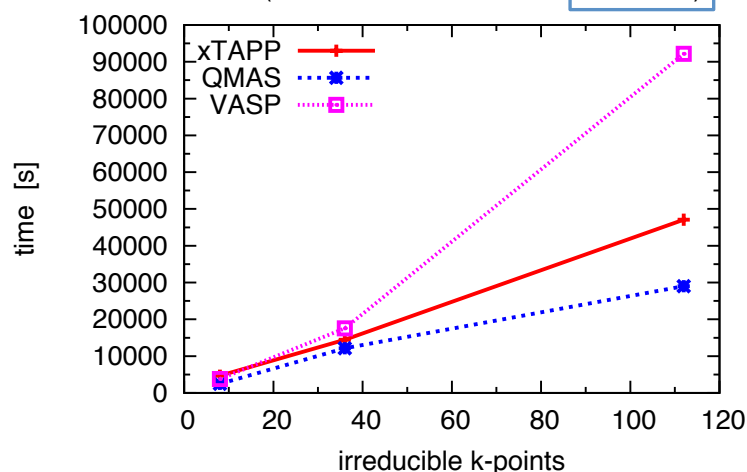
xTAPP、QMAS
は並列計算が
速い

VASPは少ない
k点で収束が
良いので、
k点を増やす計
算には向いて
いない

Si (number of atoms : 128 dE = 10⁻⁴)



Al (number of atoms : 125 dE = 10⁻⁴)



コードの計算時間の比較

シリコン(Si)のアルミニウム(Al)の全エネルギーと全電子密度を求める時の計算時間の測定

iterationの回数 $dE = 10^{-4}$

xTAPP	Si	Al	QMAS	Si	Al	VASP	Si	Al
k点: 8点	25	50	k点: 8点	12	13	k点: 8点	11	10
k点: 36点	31	33	k点: 36点	12	16	k点: 36点	11	10
k点: 112点	24	31	k点: 112点	12	16	k点: 112点	11	10

QMAS、VASPは
少ないiteration
の数で収束する

xTAPP : 1回のSCF (self-consistent field) 計算が速い

QMAS : 収束性、並列化効率が良い

VASP : 収束性が良く、k点の数、SCF計算の回数が少なくても収束する
(k点やSCF計算の回数を増やすと時間がかかる)

- それぞれ特徴がある (長所、短所がある)
- 目的に応じて、使用するコードが選択できたら便利
- 違うコードの利用者に新しいコードを使ってもらう

入力形式の統一化

コードの比較は
なかなか難しい。
速さだけ?
精度は?
何を基準に比較?

- それぞれの特性を生かし、計算の目的によってコードを変えて計算したい
- 使うコードを変える時に、書式(入力ファイルなど)を変える必要がない

→ 使うコードが選択出来るようになる(乗り換え補助)

各コードによって入力時に必要な
パラメータが異なる



各コードのプログラムを書き換えるよりも
前処理の変換ツールを作る方が良い

DFTによる第一原理計算コード
(Kohn-Sham方程式を解く部分)

いろいろな物理量

入力ファイル

入力



変換

xTAPP、VASP
QMAS、OpenMX
RSDFT
その他のコード

出力



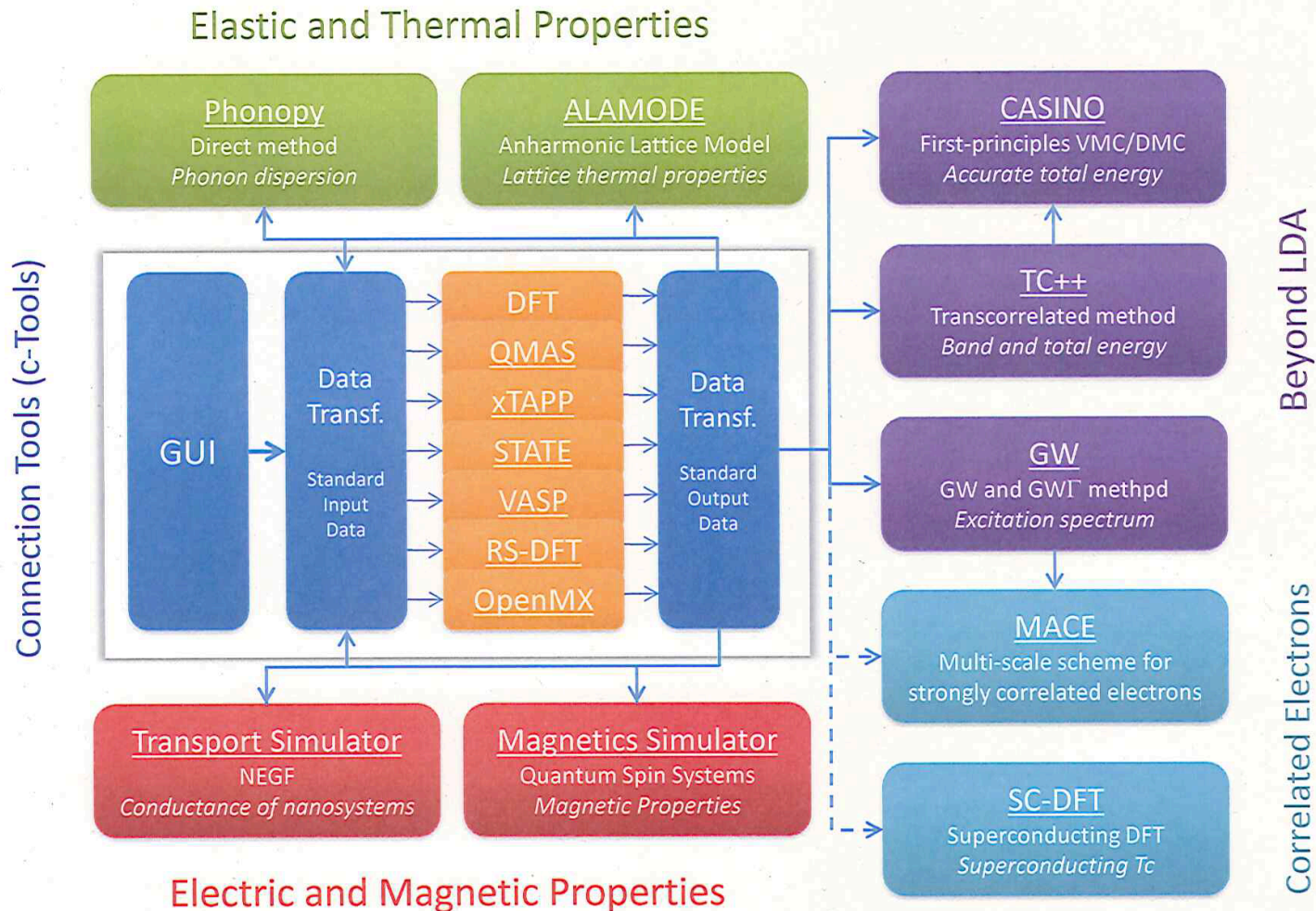
変換

分極関数
ワニエ関数
フォノン
など

使えるコードが選択できると、よく使われるコードが絞られて来る

出入力の統合構想 (C-Tools)

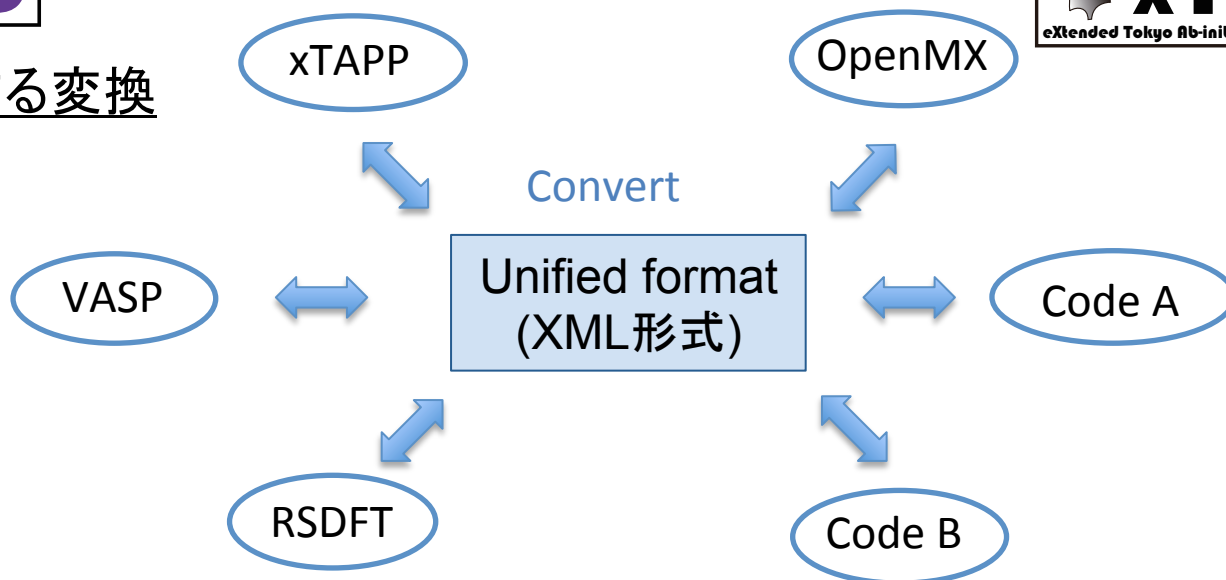
Platform for First-Principles Simulation of Condensed Matter



入力変換: 統合パラメータの作成

- xTAPPの入力ファイルから他のDFTコードの入力ファイルへの変換
(入出力を統合したいが、まずは入力ファイルから)
→ 複数コードへの対応も可能にするため
Unified format (統合パラメータ) を作成
- 入力形式を変換するシステムの構築
 - * 共通で設定するものは基本パラメータのみ。
 - * 各プログラムにおける固有な機能や詳細な設定は、
[xTAPP Additional], [VASP Additional]、[OpenMX Additional]
などにてユーザーが設定。
 - * 各種パラメータには推奨値を予め記載。

複数のコードに対する変換



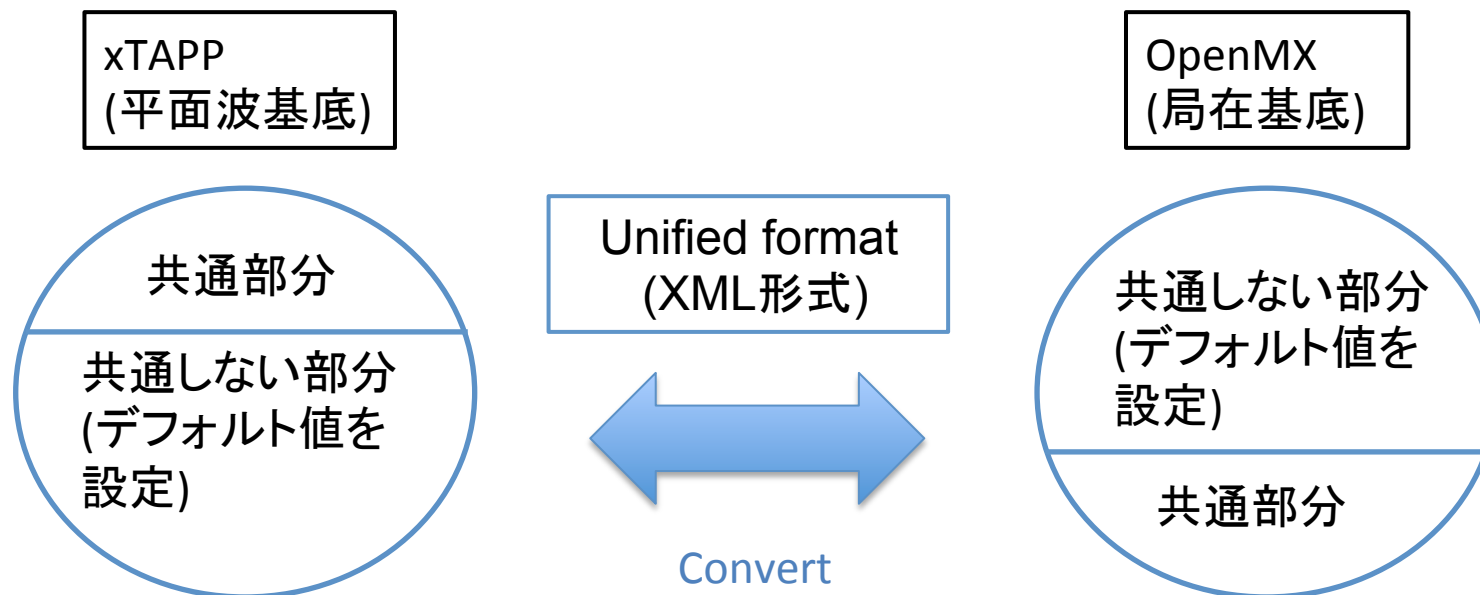
xTAPP

Unified format (XML形式)

VASP

<pre># main data &tappinput scf_converge = 1.0E-10, scf_number_iter = 40, number_band = 28, lattice_factor = 9.2850, lattice_list = 1.0, 0.0, 0.0, -0.5, 0.866, 0.0, 0.0, 0.0, 1.1001, number_atom = 9, number_element = 2, /</pre>	<pre><?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?> <Unified_DFT_Format> <Common_Parameters> <Calculation_Settings> <Calculation_Type> Energy </Calculation_Type> <Continue> No </Continue> <Accuracy> Normal </Accuracy> <Energy_Converge> 1.0E-10 </Energy_Converge> <Electron_Max_Iteration> 40 ron_Max_Iteration> <Number_Band> 28 </Number_Band> <Smearing> ON </Smearing> <Symmetry> ON </Symmetry> <Force_Converge> 1.0E-3 </Force_Converge> </Calculation_Settings></pre>	<pre># SCF input for VASP SYSTEM = Quartz EDIFF = 0.1E-03 NELM = 60 NBANDS = 28 IMIX = 4 ISMEAR = 1 ISYM = 1 NSW = 0 EDIFFG = 0.1E-02</pre>
---	--	---

Unified format (統合パラメータ)を用いた変換の仕組み



入力形式を変換するシステム

- * 共通で設定するものは基本パラメータのみ。
- * 各種パラメータには**デフォルト値 (推奨値)**を予め記載。
- * 各プログラムにおける固有な機能や詳細な設定は、
[xTAPP Additional], [OpenMX Additional]にてユーザーが設定。

ソースコードの公開へ向けての取り組み

ソースコード公開の必要性

- コードを広める → コードの信頼性が高まる
- 個人レベルの開発では、発展していくスパコン(高並列、キャッシュチューニング、インターフェースの整備など)に対応していくのは難しい
→ 組織的に開発を進める(個人ではついていけなくなる)
- 大勢の人と協力していくためには、コードを公開するのが便利
利用者がコードに修正や追加の機能を加えることによって、そのコードのさらなる発展が期待できる
- スパコンの共同利用と合わせた社会貢献
- 公的な援助を受ける

ソースコードの公開準備について

- 開発の初期段階で公開する方が楽？
- 開発の歴史が長い(関係者が多い)と大変？

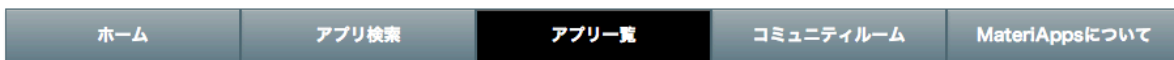
主にやること (xTAPPは2013年に公開)

- 開発者(関係者)全員の承諾を得る。
- ライセンスを決める。(途中で変更も出来るが。)幅広く使ってほしいのか、目標は？
- (必要最低限の)マニュアルとチュートリアルを作成

ソースコードの書き方を気にする人が多いが、それはあまり気にしなくても良い。(著作権などには注意)

MateriAppsでの公開

- 物質科学シミュレーションポータルサイト MateriApps (<http://ma.cms-initiative.jp/ja>) 「xTAPP Forum/ xTAPPフォーラム」で利用者と開発者が情報交換できる。



xTAPP
xTAPP開発者の声
xTAPPチュートリアル
xTAPP: α クォーツのチュートリアル
xTAPP: α クォーツのサンプル
xTAPPドキュメント
Cuの例
C6H12の例
第6回CMSI神戸ハンズオン: xTAPPチュートリアル

現在位置: ホーム > アプリ一覧 > xTAPP

xTAPP

公開度: 3 ★★★ ドキュメント充実度: 2 ★★☆☆
 擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理計算ライブラリ。金属、半導体、酸化物、表面・界面など広範な対象に対して、バンド計算・電子状態計算を高精度で行うことができる。出入力の補助ツール・可視化プログラムが整備されているほか、OpenMP・MPI・GPGPUに対応しており京コンピュータを含む超高並列型計算機で利用可能。

開発者

吉本 芳英 (鳥取大学 大学院工学研究科)、山内 淳 (慶應義塾大学 理工学部)、吉澤 香奈子 (東京大学 物性研究所) が保守

アプリケーションの最大の魅力

OpenMPおよびMPIやGPUによる並列化効率が良い。hybrid 汎関数がGPGPU対応。GUIによる出入力の補助ツール (TAPIOCA) がある。OpenDXによる可視化。日本語マニュアルがある。

対象物質・モデル

原子・分子系、固体系 (金属、半導体、酸化物、表面・界面など)



MateriAppsで
**xTAPP、TAPIOCA、
 C-Tools**が公開されている。

コードの利便性の向上と普及活動 (どこまでやるか?)

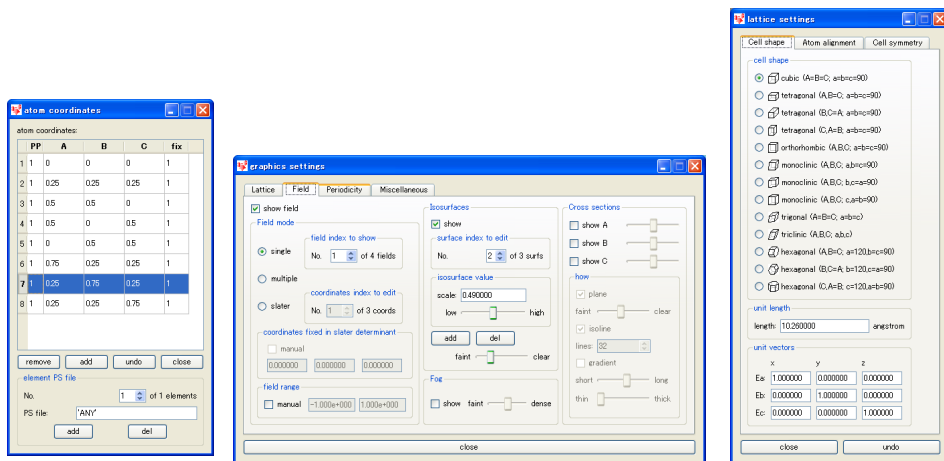
- 目標は？
- (費用対)効果は？

これまで行ったこと (コードの普及のために、何が有効か試す)

- TAPIOCA & C-Tools の開発
- web上での擬ポテンシャル作成ツール
- チュートリアル動画の作成
- 講習会 (講習会を録画して、動画配信)

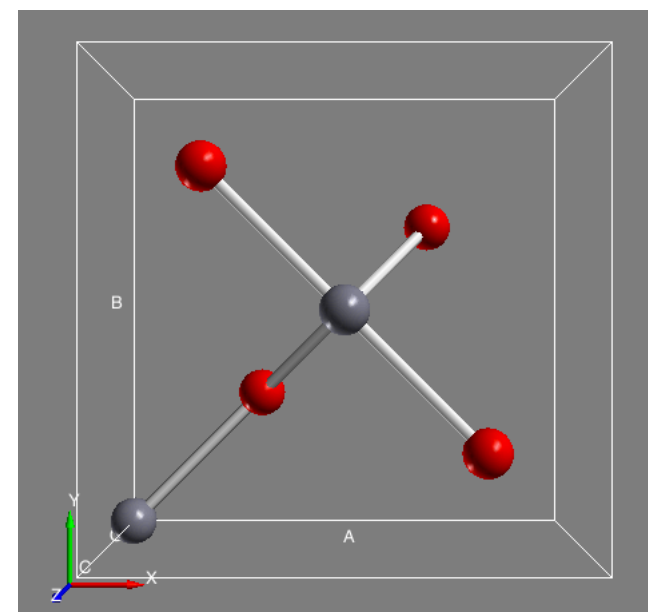
グラフィカルユーザーインターフェース(GUI)と3次元コンピュータグラフィックス(3DCG)によって、xTAPPのinputの設定や計算結果の確認が簡単に行える

TiO₂ 結晶構造



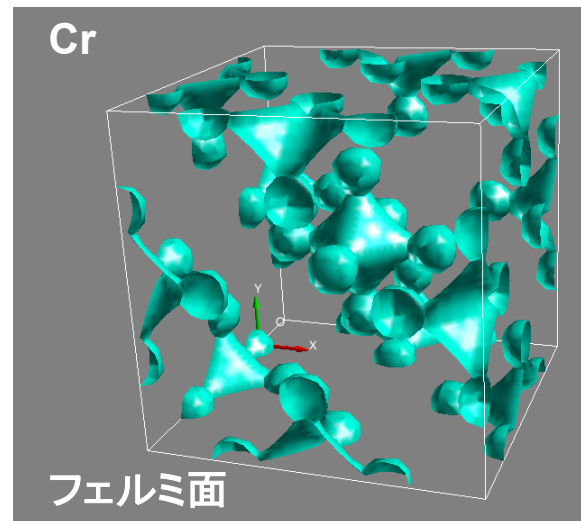
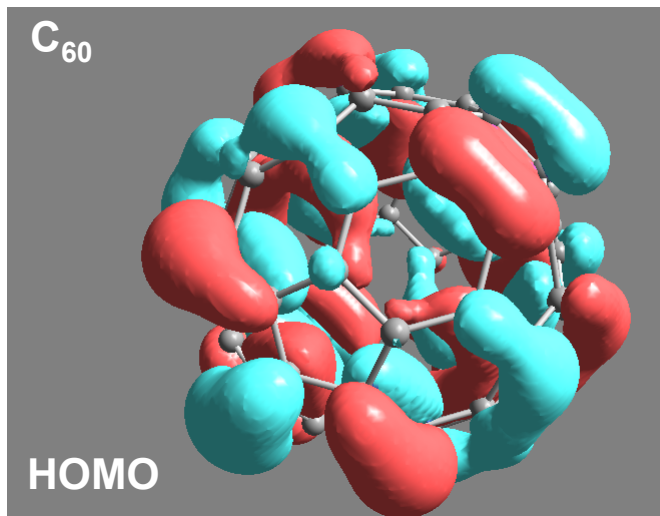
GUIでxTAPPの入カパラメータを設定できる

最初からinput(config)ファイルを作る

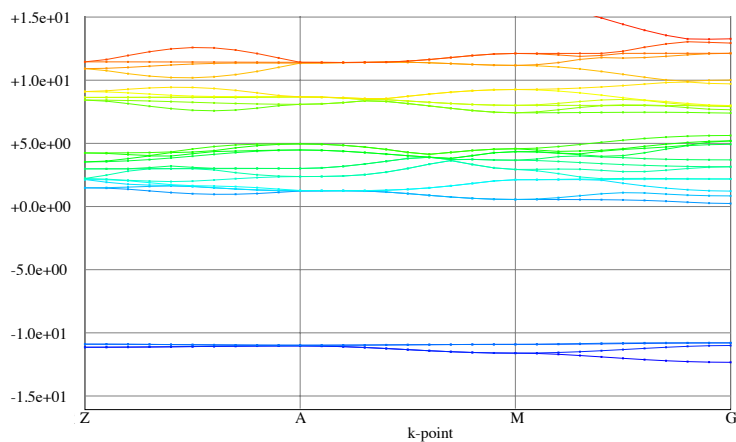


input(config)ファイルを開いて修正

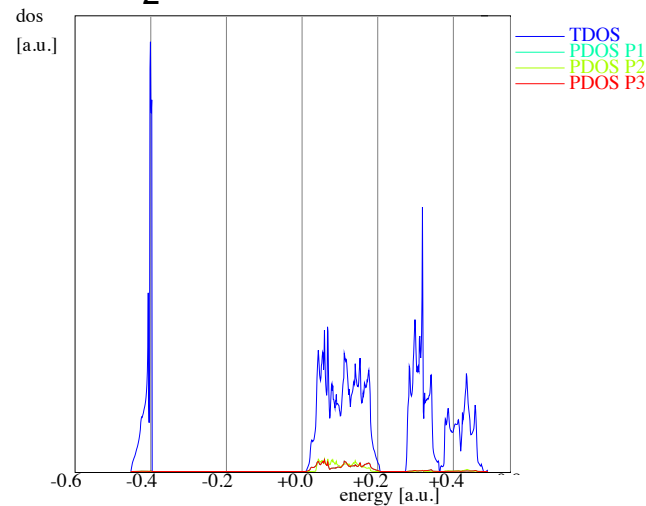
TAPIOCAによるxTAPPの計算結果の可視化



TiO₂ バンド図



TiO₂ DOS



TAPIOCAをどこまで整備するか？

TAPIOCAの主な機能

(TAPIOCA: xTAPPのファイル形式に対応)

- * **インプットファイルの生成**
- * **結晶構造の表示**
- * **基本セルから拡張セルの作成**
- * **DOSやバンドデータのグラフ表示**
- * **三次元フィールドデータ**
(密度、波動関数、フェルミ面など)
の可視化
- * **バンド図K点経路の作成**
- * **物質構造(cifファイル)からの対称性の自動判別**(VASPなどのコードには備わっているが、xTAPPにはない)

他の可視化ソフトの主な機能

(VASPや他のDFTコードのファイル形式に対応)

VESTA

- * **cifファイルを読める**(空間群の判別)
- * **密度、波動関数**

XCrySDen

- * **密度、波動関数、フェルミ面**
- * **バンド図K点経路の作成**
- * **アニメーションの作成**
(MD, 構造最適化)

可視化ソフトとしてはVESTAやXCrySDenの方が優れている(所がある)

TAPIOCAは、xTAPPの補助ツールとして出入力の簡便化(統合ツール)

統合ツール(出入力管理)の例: Materials Studio(CASTEP、Gaussianなど多くのコードに対応)

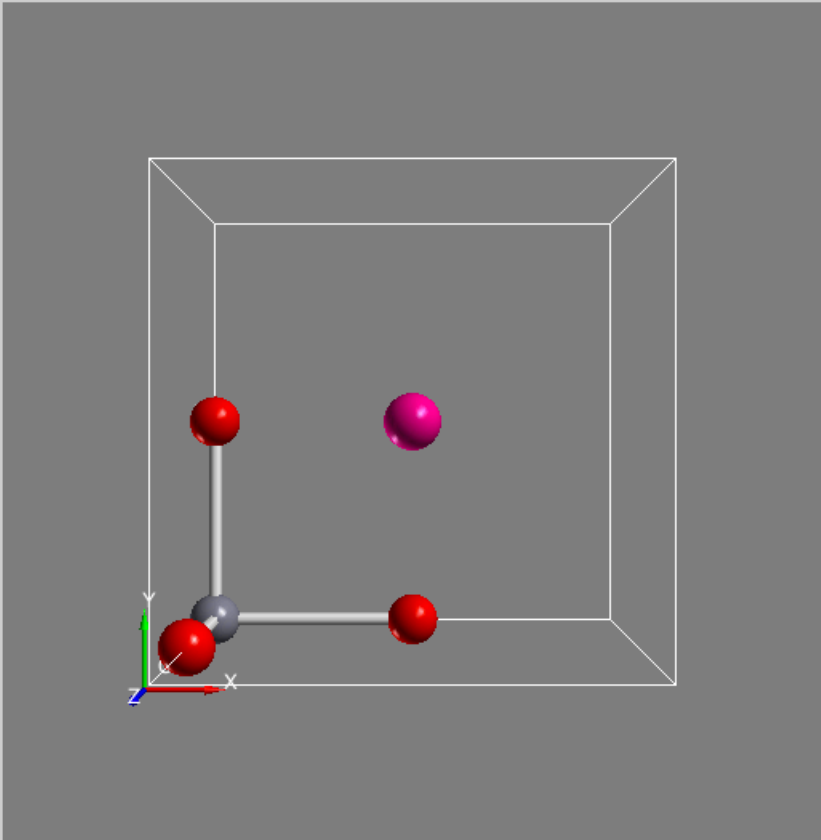
基本的な計算パラメータをGUIで調整し、多種のDFTコードの入力ファイルを作成できる。DFTコード間の入力ファイルの変換も可能。

C-Tools 0.5.0

Unit Lattice Reciprocal Lattice UDF setup

clear
load
save
quit

real space view



real space parameters

unit length

length: angstrom

unit vectors

	x	y	z
Ea:	<input type="text" value="3.950"/>	<input type="text" value="0.000"/>	<input type="text" value="0.000"/>
Eb:	<input type="text" value="0.000"/>	<input type="text" value="3.950"/>	<input type="text" value="0.000"/>
Ec:	<input type="text" value="0.000"/>	<input type="text" value="0.000"/>	<input type="text" value="3.950"/>

atom list

elem	A	B	C
1 O	0.500	0.000	0.000
2 O	0.000	0.500	0.000
3 O	0.000	0.000	0.500
4 Pb	0.500	0.500	0.500
5 Ti	0.000	0.000	0.000

delete the selected atom

append the selected atom

C-Tools: Supported DFT codes

xTAPP (平面波基底)、OpenMX (局在基底)、
RSDFT (実空間)、VASP (平面波基底)
(今後実装予定: Quantum ESPRESSO)

[load]

構造ファイル

CIF (Crystallographic Information File)
XYZ (Chemical file format)

構造を開いて、保存するだけで、簡単に
DFTコードの入力ファイルができる

出力



入力ファイル
を自動生成

[save]

入力ファイル
xTAPP
OpenMX
RSDFT
VASP

C-Tools 0.5.1

Unit Lattice Reciprocal Lattice UDF setup

clear

load

save

quit

real space view

real space parameters

unit length

length: 10.000 angstrom

unit vectors

x	y	z
1.000	0.000	0.000

web上での擬ポテンシャル作成ツール(作成中)

- H原子からBi原子まで(一部除く)のPBEとLDAの擬ポテンシャルが揃っている
- web上で自分で作成することも可能

Web システム



パラメータ設定



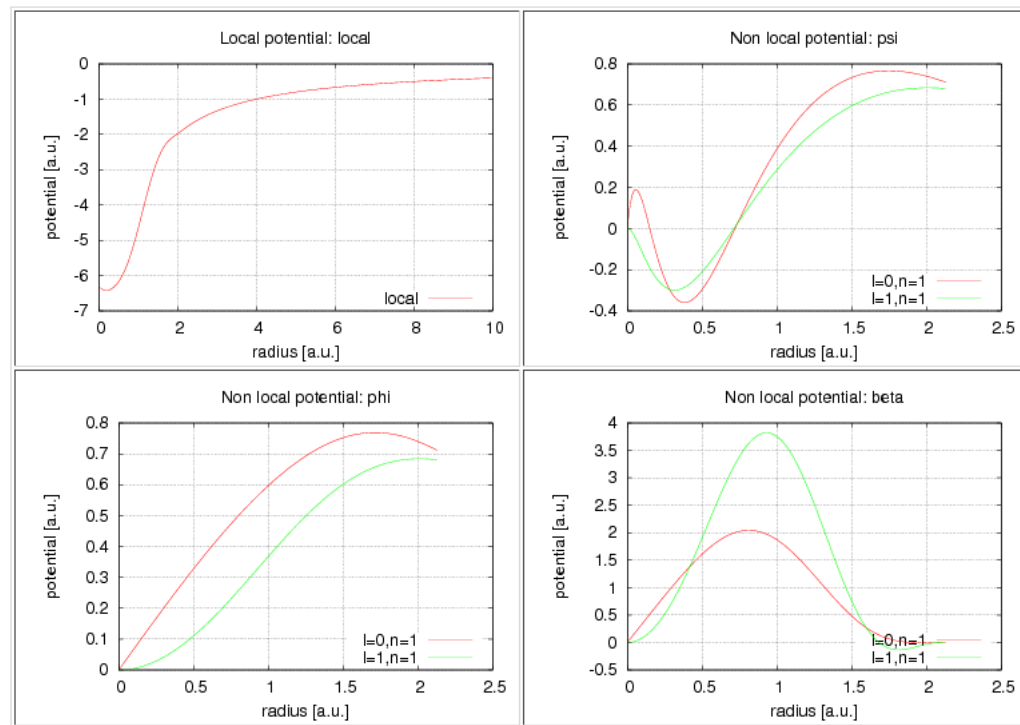
psv(ver.2.3.0)の実行



擬ポテンシャルの出力(可視化)

(擬ポテンシャルを作るプログラム psv
を変更予定なのでまだ非公開)

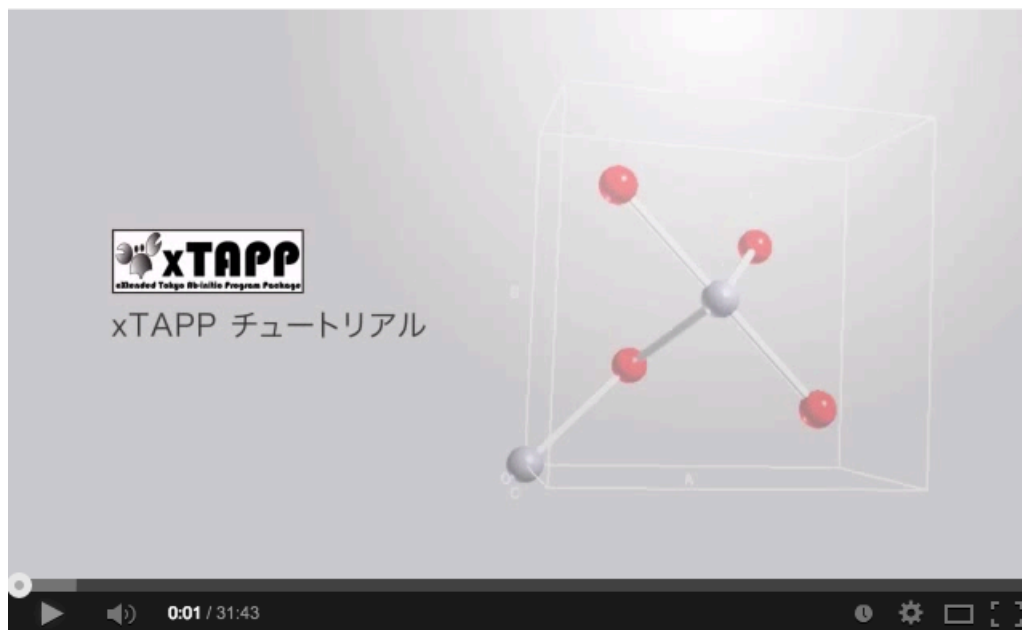
Siの擬ポテンシャル



チュートリアル動画の作成

チュートリアル動画 (Youtube上で公開、MateriAppsからリンク)

<https://www.youtube.com/watch?v=FlhmarjhHms>



TAPIOCAを用いて

- Siの入力ファイルの作成方法
- TiO_2 の結晶構造の可視化方法

作業内容

- シナリオを作る
- 動画の撮影
(編集して30分の動画を1日かかりで撮影)
- 編集する(今回業者に頼んだ)

思った以上に手間がかかった

- アプリが version up したら作り直し?

- CMSI神戸ハンズオン
- CCMS柏ハンズオン

毎月、MateriAppsの中のどれか1つのアプリに対して講習会を開催
講習会で用いたスライドなどは、後日AateriAppsにアップロードされる

xTAPP講習会動画 (Youtube上で公開、MateriAppsからリンク)

<https://www.youtube.com/watch?v=BykCjlm-tS8>



このxTAPPの講習会動画は、全部で2時間以上あるので、長くて全部見る人はいない？

講習会を受けた人が復習するにはよいかも知れない。

東大理学系物理常行研 D3遠藤辰哉

「嵩上げポテンシャルエネルギー面を用いた物質構造探索手法の開発」

<http://white.phys.s.u-tokyo.ac.jp/research/Endo.html>

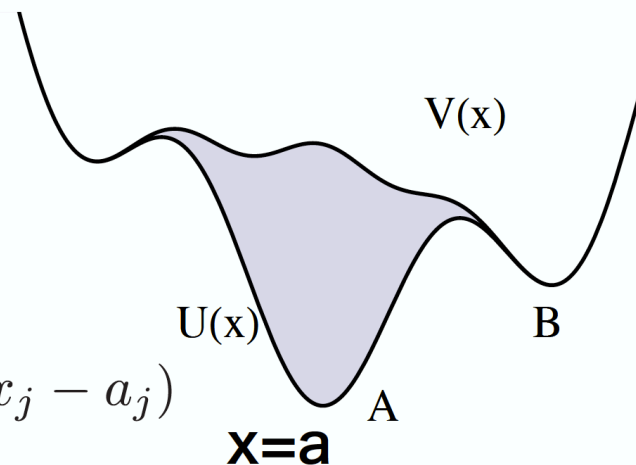
物質の高圧など極限環境における相や表面・界面などの原子構造を取り扱う場合の数値計算による原子構造探索が重要な役割を果たす。

原子系の(準)安定構造は、系のポテンシャルエネルギー曲面(PES)内の極小点に対応する。このPESを用いた構造探索手法を開発している。

Raised PES

$$V(x) = U(x) + \alpha \exp\left[-\frac{H(x)}{\alpha}\right] \frac{U(x) - U(a)}{H(x)}$$

harmonic PES
$$H(x) = \frac{1}{2} \sum_{ij} H_{ij} (x_i - a_i)(x_j - a_j)$$



東大理学系物理常行研 D2山田俊介

「分割統治法に基づく一電子エネルギースペクトルの第一原理計算手法」

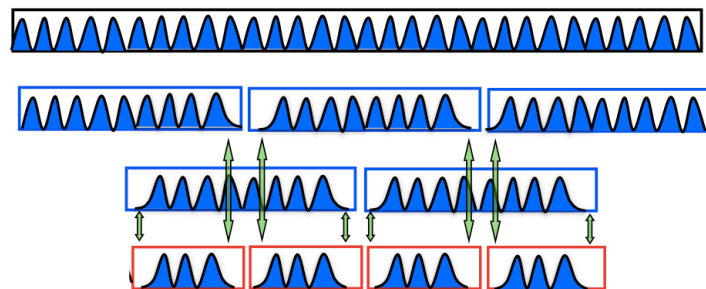
http://white.phys.s.u-tokyo.ac.jp/research/divide_and_conquer.html

分割統治法では、自己無撞着計算に各部分系の波動関数のみを使用するため、全系の波動関数を考慮しておらず、従ってそのままでは全系のスペクトルを計算できないという問題がある。

分割統治法計算の出力を最大限に利用してハミルトニアンを再構成し、全系スペクトルの高速計算を可能にする手法の開発を行っている。

LS3DF

L.W.Wang, Z.Zhao, and J.Meza, Phys. Rev. B **77**, 165113 (2008).
http://crd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/dhbtalks/SC08_GB_Final-v3.pdf



$$\text{Total} = \sum_F \{ \boxed{\phantom{\text{Energy}}}_F - \boxed{\phantom{\text{Energy}}}_F \}$$

分割統治法として、高精度で汎用性の高いLS3DF法における副産物である、部分系の軌道波動関数と軌道エネルギーを組み合わせる事で、全系のハミルトニアンを再構築する。

xTAPPのポストプロセス

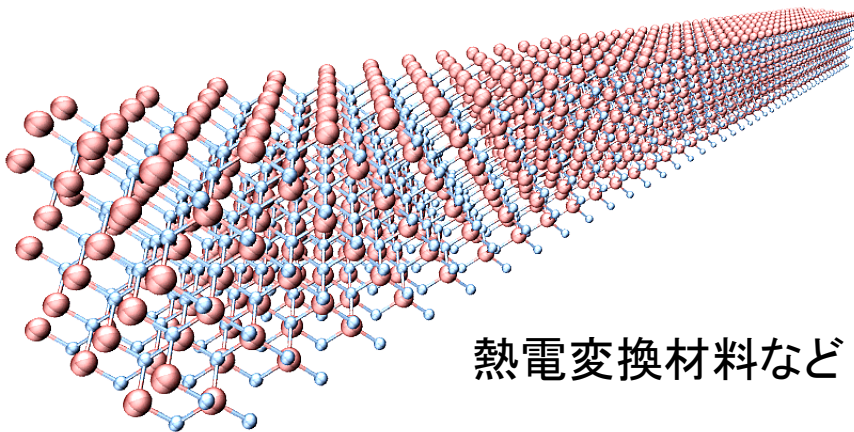
東大工学系物理工学今田研 CMSI PD只野央将

「格子熱伝導率の第一原理計算」(**ALAMODE**)

<http://white.phys.s.u-tokyo.ac.jp/research/tadano2015.html>

ALAMODE

スーパーセル中の原子に変位を与えた時に、xTAPPで計算した各原子に働くフォース(原子変位)を読み込んで、フォノン計算をするコード

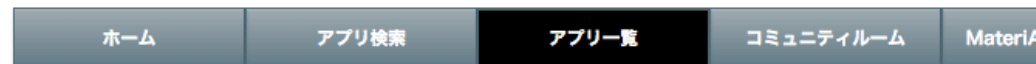


熱電変換材料など

MateriAppsで公開

<http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/alamode/alamode>

MateriApps



現在位置: ホーム > アプリ一覧 > ALAMODE

ALAMODE

公開度: 3 ★★★ ドキュメント充実度: 2 ★★★

格子振動の非調和性を露わに考慮した原子間ポテンシャルを構築するプログラムパッケージ。VASPやxTAPP等の第一原理計算プログラムの結果から調和・非調和force constantを推定し、それらをもとにフォノン分散、フォノン状態密度、グリューナイゼン定数、フォノン-フォノン散乱強度、格子熱伝導率などを計算することが可能。

まとめ

- RISTの利用支援
- xTAPPを含む平面波基底DFTコードの開発について
出入力の統一へ (C-Tools)
- ソースコードの公開の取り組み
MateriAppsでの公開
- xTAPPの普及の取り組み (試行錯誤中)
 - 可視化GUIソフトウェア TAPIOCA & C-Tools の開発
 - web上での擬ポテンシャル作成ツール
 - チュートリアル動画の作成
 - 講習会 (講習会を録画して、動画配信)