

# xTAPPチュートリアル

## 第3回CMSI神戸ハンズオン

吉本芳英 (鳥取大学)  
吉澤香奈子 (東大物性研)

# 第一原理的電子状態計算

写実的に物質中の電子の性質を  
シミュレートする計算

近似はする

- 電子 $\leftrightarrow$ 電子相互作用      クーロン相互作用
- 電子 $\leftrightarrow$ 原子核相互作用
- 電子の運動エネルギー       $p^2/2m$
- 波動関数 連続空間上

# 第一原理計算の意義

写実性による定量的評価 → 実験とは独立な視点

- 原子構造(原子の配列)
  - ⇔ 格子モデル
    - 構造の安定性の評価、安定構造の予測
    - 化学反応における経路、活性化エネルギー
- 電子状態の理解、予測

# Kohn-Sham方程式

- 密度汎関数法による第一原理計算の基本方程式
- 基底状態に関する理論。電子密度が基本変数。
- 多体問題を一体問題へ変換。困難を $E_{xc}[\rho]$ にまとめる。

$V_{eff}$ と $\rho$ についてSCF

$$V_{eff}[\rho](r) = \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr' + \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho} + V_{ext}(r)$$

$$-\frac{1}{2}\Delta\psi_i + V_{eff}\psi_i = e_i\psi_i \quad \rho(r) = \sum_i \psi_i^*(r)\psi_i(r)$$

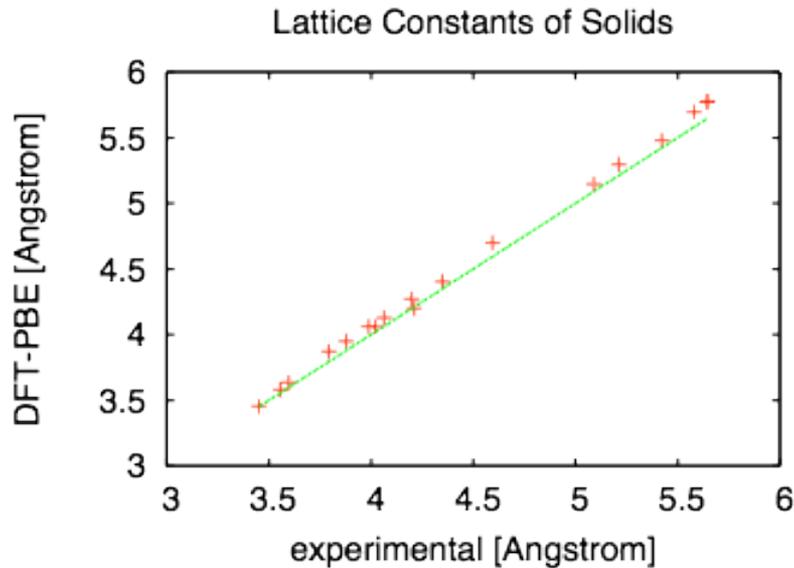
# $E_{xc}$ の近似

## 仮想系の構成

- この手法の**公式誤差**を決める
  - 局所密度近似
    - 計算コスト小、経済的、広く実用
  - 交換相互作用を含む (hybrid汎関数)
    - 計算コスト大、開発途上、一部の系での改善
- 実用的でかつ万能の近似はない
  - ▶ 究極の方法は見つかっていない

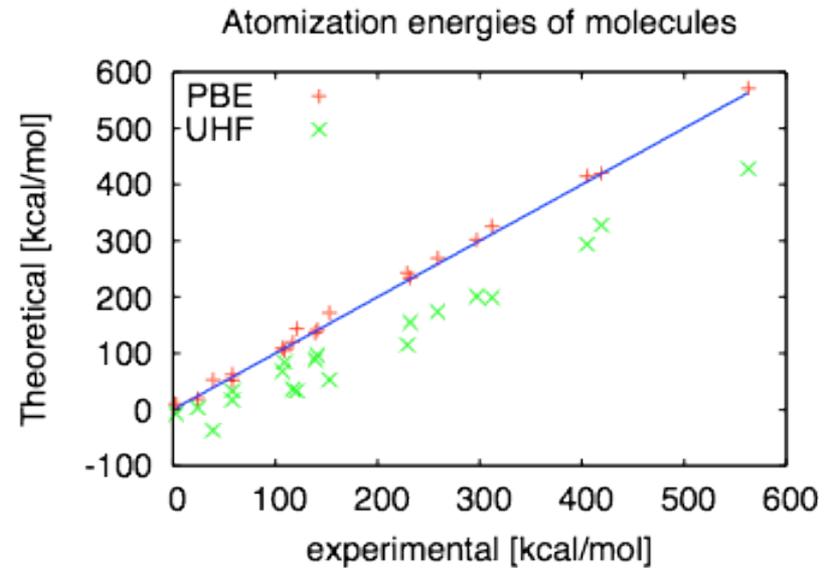
# 局所密度近似：実験との対応

## 精度評価の尺度



Li, Na, K, Al, C, Si, SiC, Ge, GaAs, NaCl,  
NaF, LiCl, LiF, MgO, Cu, Rh, Pd, Ag

J.P. Perdew et al, Phys. Rev. Lett. 100, 136406 (2008)



H<sub>2</sub>, LiH, CH<sub>4</sub>, OH, H<sub>2</sub>O, HF, Li<sub>2</sub>, LiF, Be<sub>2</sub>,  
C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, HCN, CO, N<sub>2</sub>, NO, O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>, P<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>

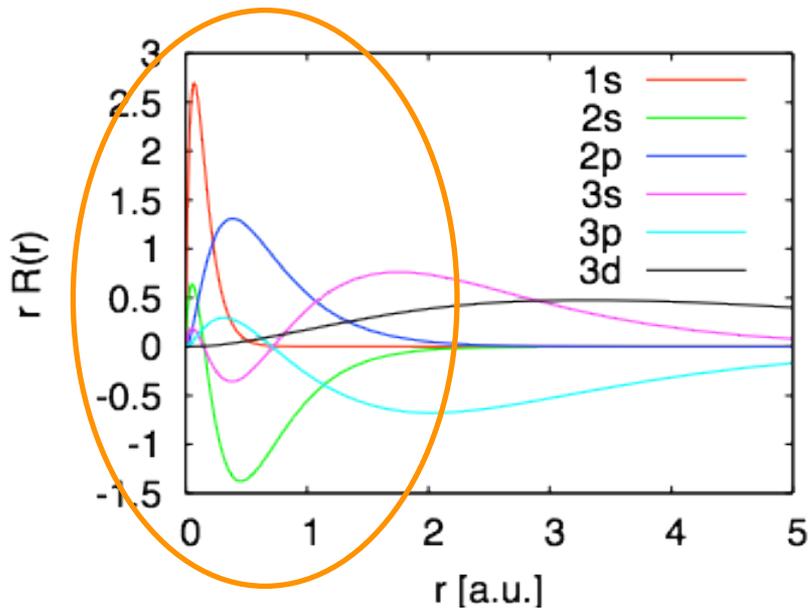
J.P. Perdew et al, Phys. Rev. Lett. 77, 3866 (1996)

# 密度汎関数法の特徴

- 安定構造に対する精度は相当
- 交換エネルギーまでも近似
- 経済的(HFと比較しても)

# Hamiltonianの関数形

- 軌道関数に数値解析的な困難



Silicon

原子核近傍に特異性

$$H = K + V$$

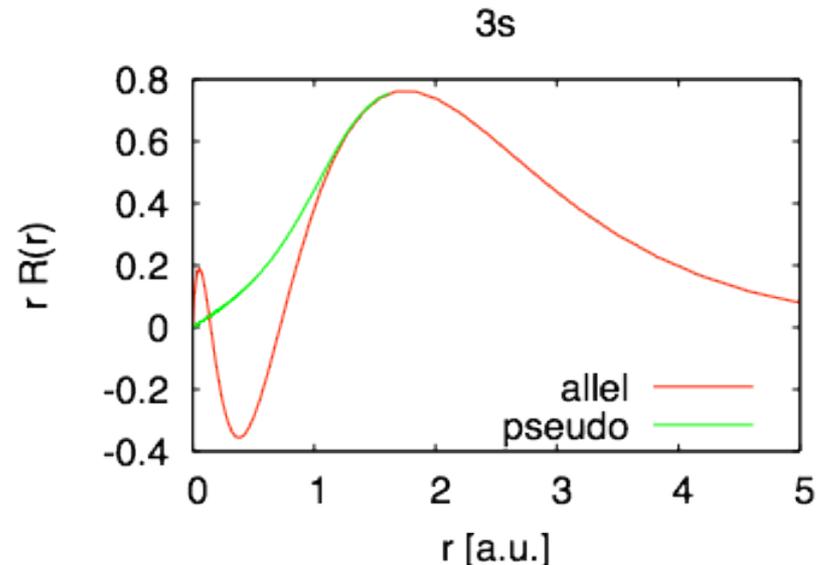
$$V(r) \propto -\frac{1}{r} \text{ に由来}$$

メッシュ間隔は1 a.u.程度

原子間隔は4 a.u.程度

# 対応の一つ: 擬ポテンシャル法

- 原子核位置にある特異性を除去:  $V, \Psi$
- 芯の電子は取り除く。価電子だけ。
- おつりを打ち消す非局所ポテンシャル:  $V^{NL}$



# 平面波基底による計算

– A die hard method

電子軌道 $\psi$ 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)
- 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高い(BLAS3)

# xTAPPの概要の解説

- **xTAPP (eXtended Tokyo Ab-initio Program Package)**  
密度汎関数理論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**
  - \* **TAPP (Tokyo Ab-initio Program Package) について**  
白石賢二氏(現 筑波大)など東大理・物理の植村、上村研究室の関係者が開発した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PPSFが基礎。  
その後、押山淳氏(現 東大工)のグループに在籍していた杉野修氏(現 東大物性研)が開発した共役勾配法による対角化コードを取り込んで、山内淳氏(現 慶大理工)などがウルトラソフト擬ポテンシャルに対応させたプログラム(1990年)
  - \* **xTAPPへ**  
TAPPを2000年ごろ吉本が分岐させ、OpenMP および MPI やGPU並列などによる高速化、セル変形への対応、分子動力学の実装、コード全体の近代化などを行ったものがxTAPP

# xTAPPについて

- 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)
- 手法  
密度汎関数理論(LDA, LSDA, GGA, hybrid)、ウルトラソフト擬ポテンシャル法と平面波基底、反復的な波動関数の対角化
- 求められる物理量  
全エネルギー、固有エネルギー、電荷密度分布、スピン偏極分布、波動関数、原子に働く力、セルのストレス、projected DOS、バンド分散、STM像、安定構造(原子位置、格子定数)、分子動力学

# xTAPPの実行ファイル(1)

- **inipot**: 初期化プログラム。pefcosを除くその他のプログラムはinipotで生成した初期化データを必要としており、最初に動かす必要がある。ただし、データその物は計算条件を固定すれば使いまわしできる。
- **cgmrrpt**: 構造最適化を行うプログラム。ローカルポテンシャル(lpt)と波動関数(wfn)を出力。
- **vbpef**: lptとwfnを読み込み固有エネルギー、波動関数、軌道電荷分布の空間積分値、軌道電荷分布そのものを求めるプログラム。バンド図のデータを生成する。
- **wfn2chg**: wfnを読み込み電荷分布の空間積分を固有エネルギーで分解したものやprojected DOSを計算するプログラム。

## xTAPPの実行ファイル(2)

- **vbstm**: lptとwfnを読み込みSTM像のシミュレーションを行うプログラム。
- **mdrpt**: 第一原理分子動力学(BOMD)を行うプログラム。
- **pefcos**: cgmrpt で計算されているバンドのcos展開データからバンド図を生成するプログラム。
- **xticonv**: 入力ファイルの構造データを可視化ツール用に変換するツール。
- **strconv**: 構造最適化の結果ファイルを可視化ツール用に変換するツール。

# xTAPP-util

- **fldtool**: xTAPPの各種ファイルを可視化するためのツール群
- **mdtool**: xTAPPの分子動力学の記録データを読み出すためのツール群
- **vbpef2gp-lsda**: xTAPPのバンド計算の結果からバンド図を作成するツール
- **wfchg2pdos**: xTAPPのwfn2chgの結果からprojected DOSのグラフを作成するツール

# xTAPPのコンパイル

- ソースコード  
CMSIの「MateriApps」のサイトにリンク(予定)  
本講習会では、`/opt/nano/xtapp/source/xTAPP-rc-130416.tgz`
- 動作環境  
Fortran90 (intel Fortranなど)とMPI (OpenMPIなど)が必要  
UNIX系の環境で動作。OpenMPが使えることが望ましい  
LAPACK
- コンパイルする時に`config90.h`と`config.h`ファイルが必要
- phiでのコンパイル例  
`/opt/nano/xtapp/xtapp-130416/Makefile` を参照

# xTAPPの実行テスト

- 自分のディレクトリに作業ディレクトリを作る。  
例) `$ mkdir $HOME/test/Al`
- テスト用のinputファイルAl.cgと擬ポテンシャルps-Al-pbeをファイルをコピーする。  
`$ cd $HOME/test/Al(作業ディレクトリ)`  
`$ cp /opt/nano/xtapp/test/Al/Al.cg ./`  
`$ cp /opt/nano/xtapp/test/Al/ps-Al-pbe ./`
- inipot の実行  
`$ export FORT10=./Al.cg FORT34=./ps-Al-pbe`  
`$ mpirun -np 1 -env OMP_NUM_THREADS 12 /opt/nano/xtapp/xtapp-130416/inipot > inipot.log`
- cgmrrpt の実行  
`$ export FORT10=./Al.cg FORT11=./Al.lpt FORT25=./Al.rho`  
`$ export FORT96=./Al.wfn FORT99=./Al.str`  
`$ mpirun -np 1 -env OMP_NUM_THREADS 12 /opt/nano/xtapp/xtapp-130416/cgmrrpt > cgmrrpt.log`

# xTAPPのinputファイル(1)

/opt/nano/xtapp/test/Al/Al.cg を見る

```
# main data
&TAPPINPUT
LATTICE_FACTOR = 7.656,
LATTICE_LIST = 0.5, 0.5, 0.0, 0.5, 0.0, 0.5, 0.0, 0.5, 0.5,
CUTOFF_WAVE_FUNCTION = 5.0,
NUMBER_ELEMENT = 1,
NUMBER_ATOM = 1,
NUMBER_BAND = 6,
STORE_WFN = 1,
SCF_NUMBER_ITER_1ST = 40,
SCF_NUMBER_ITER = 40,
XC_TYPE = PBE,
CONTROL_UPTIME = 3600.0
/
```

# xTAPPのinputファイル(2)

```
# symmetry data
&SYMMETRY
SYMMETRY_FORMAT = reciprocal,
NUMBER_SYM_OP = 24
/
  1 0 0  0 1 0  0 0 1  0 0 0 ! rg(3,3), pg(3)
  0 1 0  0 0 1  1 0 0  0 0 0
  0 0 1  1 0 0  0 1 0  0 0 0
  1 0 0  0 0 1  0 1 0  0 0 0
  0 0 1  0 1 0  1 0 0  0 0 0
  0 1 0  1 0 0  0 0 1  0 0 0
-1 -1 -1  0 1 0  0 0 1  0 0 0
-1 -1 -1  0 0 1  0 1 0  0 0 0
-1 -1 -1  1 0 0  0 0 1  0 0 0
-1 -1 -1  0 0 1  1 0 0  0 0 0
-1 -1 -1  1 0 0  0 1 0  0 0 0
-1 -1 -1  0 1 0  1 0 0  0 0 0
```

...

# xTAPPのinputファイル(3)

```
# atom data
 3.0 13.0 ! zo, zn
  1 0.0 0.0 0.0 ! atom_kind, pos_a, pos_b, pos_c (in lattice coordiate)

# k-points data
&SMPL_KPT
DOS_MODE      = COS,
DOS_MESH = 32, 32, 32,
BZ_MESH = 24,
BZ_NUMBER_TILE = 1
/
 13  13  13
  2   2   2

# struct_opt data
&STRUCT_OPT
NUMBER_CYCLE = 0
/
```

# xTAPPのinputファイル(4)

```
# str_opt_constr data  
1  
0
```

TAPIOCAでGUIでinputファイルを作る

# xTAPPのinputファイル(1)

# main data	
lattice_factor	格子定数の値
lattice_list	基本単位格子ベクトル
cutoff_wave_function	波動関数を展開する平面波のカットオフ波数
xtrap_beta	Anderson extrapolation の混合パラメータ
number_element	原子種の数
number_atom	原子数
number_band	求めるバンドの数
scf_converge	SCF の収束条件。local potential の収束度
scf_number_iter	SCF の繰り返し回数の上限
control_uptime	計算時間(CPU time)の上限
xc_type	交換相関汎関数の指定

# symmetry data	
symmetry_format	対称性の入力フォーマットを指示する
number_sym_op	対称性行列の数
rg(3,3)	対称操作の 3 x 3 行列部分
pg(3)	対称操作の並進部分

# xTAPPのinputファイル(2)

# atom data	
zo	元素の価電子数
zn	元素の全電荷数(原子番号)
atom_kind	元素の種類番号
pos_a, pos_b, pos_c	原子位置を格子座標で与えたもの

# k-points data	
dos_mode	k 点サンプルに用いる手法
dos_band_lower	dos band lower 未満のバンドはすべて占有されていると解釈される
dos_band_upper	dos band lower から dos band upper までのバンドが部分占有される可能性があると解釈され、k 点サンプル手法が適用される
dos_mesh	k 点サンプル手法が用いる BZ の分割数
bz_mesh	計算上の k 点のサンプル数を決定する k 点のタイルを表すため、BZ は Gamma 点を含む bz mesh x bz mesh x bz mesh の grid に分割される
bz_number_tile	計算上のサンプル k 点を定めるタイルの種類数
mmm(3,3,3)	計算上のサンプル k 点を定めるタイルの起点 計算上のサンプル k 点を定めるタイルの間隔

# xTAPPのinputファイル(3)

# struct_opt data	
converge_energy	構造最適化の終了条件の一つ。エネルギー変化の収束
number_cycle	1次元構造最適化の繰り返し数

# str_opt_constr data	
nmkd	原子の逆質量テンソルの数
tim(3,3,3)	原子の逆質量テンソル
nset	逆質量テンソルを適用するセットの数

# xTAPPのk点の取り方

(例)  $nk=8$ 、 $(m1, m2)=(5, 5)$ 、 $(mm1, mm2)=(2, 2)$  の場合 (二次元)

S

```

+-+--+--+--+--+--+
+-$--+-$--+-$--+
+-+--+--+--+--+--+
+-$--+-$--+-$--+
+-+--+--+G--+--+--+
+-$--+-$--+-$--+
+-+--+--+--+--+--+
+-$--+-$--+-$--+
+-+--+--+--+--+--+

```

G= Gamma 点

S= (5, 5)

\$= サンプル k 点

```

# k-points data
&smpl_kpt
BZ_MESH = 8,
BZ_NUMBER_TILE = 1
/
  5  5  5
  2  2  2

```



4 x 4 x 4

# 計算結果のサマリ(99番)

- セル形状
- 全エネルギー
- ストレス
- フェルミエネルギー
- スピン偏極、絶対スピン偏極
- 原子位置
- 原子に働く力

# チュートリアル

- テキスト  
`/home/hands-on/xtapp_20130423/tutorial.pdf`  
に従って進めて行く
- 擬ポテンシャルなどチュートリアルに必要なファイル  
は、  
`/opt/nano/xtapp/tutorial`  
に置いてある

# 課題

- クォーツでやったチュートリアルをアルミニウム (Al) またはシリコン (Si) で行い、バンド図やDOSを書いてみる。
- DOSを描くには、濃いk点サンプリングが必要なので調整すること。

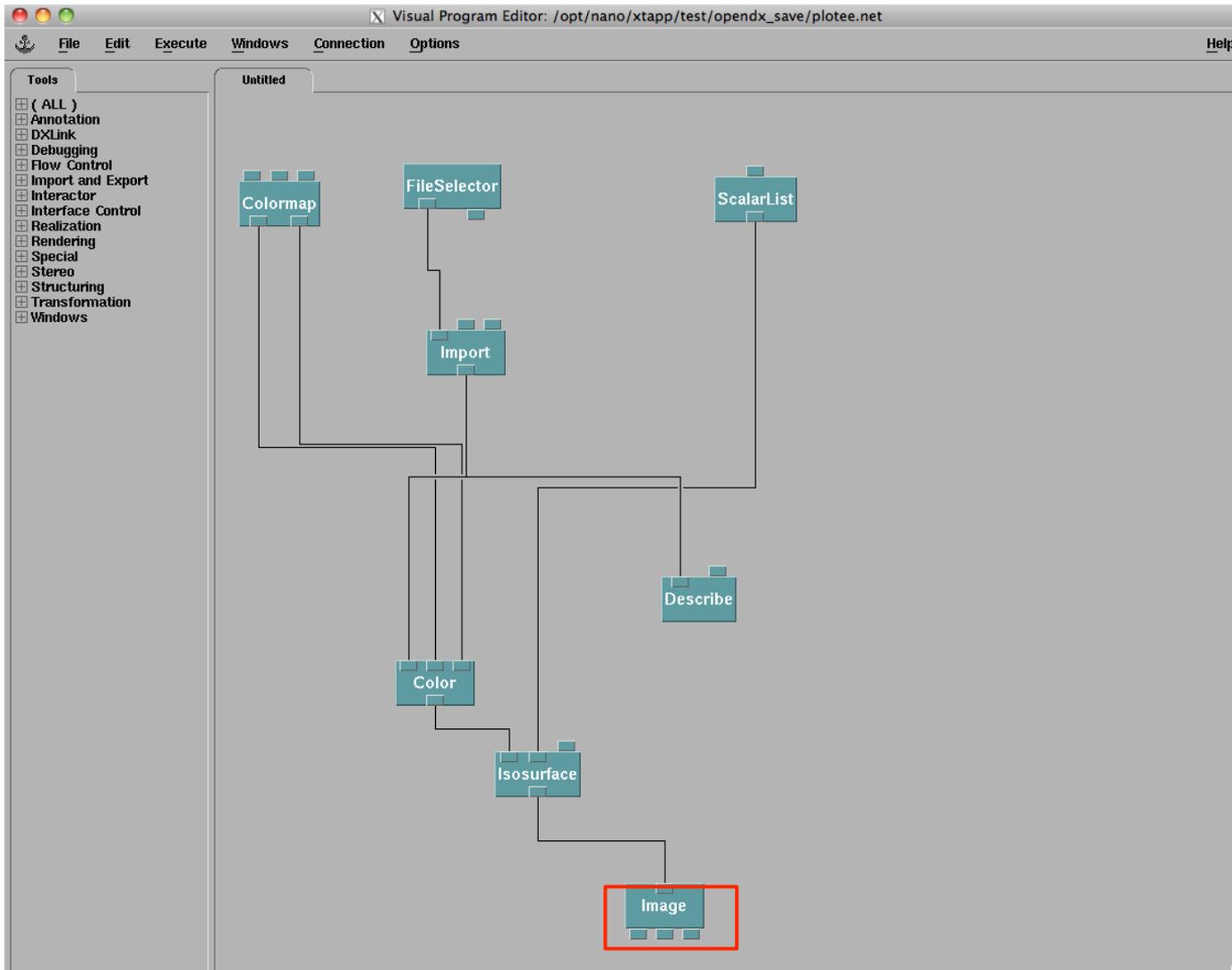
# OpenDXによる可視化(1)

OpenDX (<http://www.opendx.org>)での電荷密度、波動関数などの可視化  
例)

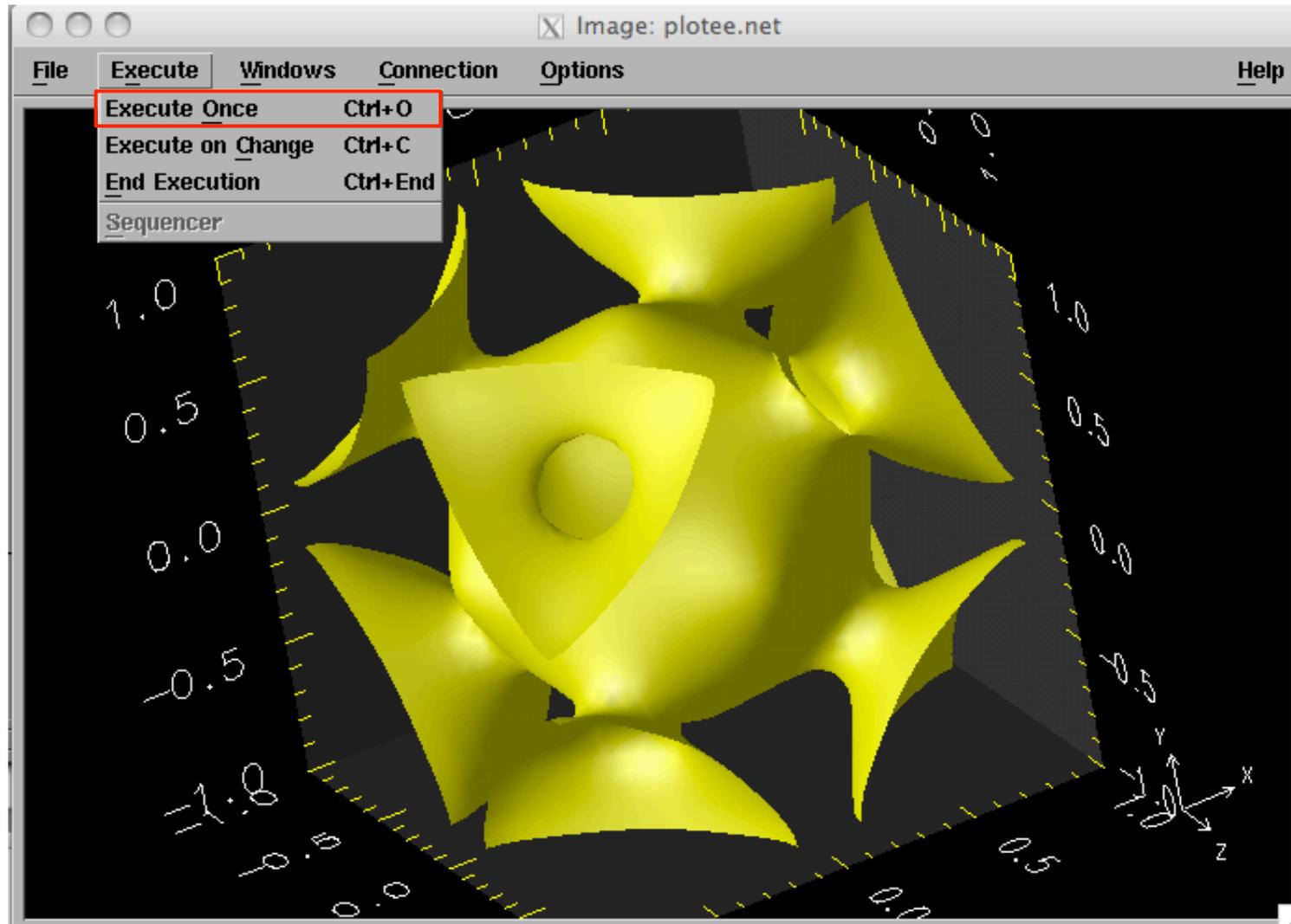
- まず /opt/nano/xtapp/test/opendx にあるファイルを自分の作業ディレクトリ(例えば、\$HOME/work)にコピーする。  
\$ cp /opt/nano/xtapp/test/opendx/plotee.net \$HOME/work  
\$ cp /opt/nano/xtapp/test/opendx/cu.6.ee.dx \$HOME/work  
\$ cp /opt/nano/xtapp/test/opendx/init\_CMSP.sh \$HOME/work
- plotee.net に書かれている /opt/nano/xtapp/test/opendx/ を自分の作業ディレクトリ(\$HOME/work)に変える。
- init\_CMSP.sh を実行して、環境変数を設定する。  
\$ ./init\_CMSP.sh

# OpenDXによる可視化(2)

- \$ dx -program plotee.net



# OpenDXによる可視化(3)



# OpenDXによる可視化(4)

- Cuの実行例

テキスト

`/home/hands-on/xtapp_20130423/example-cu.pdf`

に従って進めて行く。

wfk2dx を使って出来たファイルをOpenDXで可視化する。

必要なファイルは、

`/opt/nano/xtapp/example-cu`

に置いてある。