

第一原理電子状態計算ソフトウェア xTAPP の開発と一般公開

鳥取大工応数¹、東大物性研²、東大院理³ 吉本芳英¹、吉澤香奈子²、山本良幸³、常行真司^{2,3}

xTAPP[1]は平面波基底、ultrasoft 擬ポテンシャル、密度汎関数法の組み合わせでの第一原理電子状態計算を行うソフトウェアである。コードの歴史は PPSF(1983年、現筑波大学白石賢二氏)までさかのぼることができ、これを ultrasoft 擬ポテンシャルに対応させた TAPP(1990年、現慶応大学、山内淳氏)をへて、2000年ごろから吉本がハイブリッド並列化などについて発展させたものが xTAPP である。xTAPP は 2013年4月より GPL ver. 3 の元で一般公開されている。

この講演では、xTAPP の一般公開作業、xTAPP の最近の開発状況、入出力の可視化ソフト TAPIOCA の開発 (吉澤)、xTAPP と連携するソフトウェア (山本) について発表を行う。

xTAPP の一般公開においては、コードのこれまでの開発者に一般公開のメリット、狙いを説明し了承を得ている。また公開が不適切であったり、コードの今後の発展のためここで新規に書き直した方が良い部分については、新規に開発したコードで差し替えており、入力形式は刷新されている。また、第三者が独自の系をすぐに計算できるようにするために必要な擬ポテンシャルデータベース(H から Bi までの大部分)の整備を行ったが、この際、基礎的な物質について計算した格子定数、体積弾性率、凝集エネルギー、バンド図も提供している。

最近の開発状況については GPGPU による hybrid 密度汎関数汎関数の実装について報告する。Hybrid 汎関数の計算ではバンド×バンドの FFT による畳み込み計算がその kernel となっているが、これをブロック化することで GPGPU と CPU 間の低速なデータ転送の問題を緩和している。GPGPU としては AMD Radeon 6950 と NVIDIA Tesla C2070 の両方をそれぞれ OpenCL と CUDA によるプログラムで使用したが、双方のメモリバンド幅に大きな差がないため、ほぼ同じ性能が得られている。

可視化ソフト TAPIOCA (吉澤) は、xTAPP の入力データを GUI で作成し、また電荷密度やバンド図など計算結果を同時に可視化するソフトウェアである。吉本が提供したコードを元に基本セルをクラスタ化して拡張セルを作成する機能を含んでいる。また TAPIOCA は xTAPP の入力データだけではなく VASP[2,3]の物も扱うことができ、プログラムの相互乗り入れを支援できる。

xTAPP と連携するソフトウェア開発については、xTAPP で作成した波動関数を量子モンテカルロ計算ソフトウェア CASINO の試行波動関数のフォーマットへの変換ユーティリティ (山本) について報告する。

文献

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

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

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