



OpenMXとDFT①

尾崎 泰助
東京大学 物性研究所

OpenMXとDFT: Agenda①

- 本講義の対象者
- OpenMXの概要
- 開発・公開の経緯
- 開発・公開の意図
- 応用事例
- DFTソフトウェアの開発状況
- ソフトウェア公開のレベル
- de facto standardソフトウェアの条件
- プログラム開発において留意していること
- プログラムの全体構造
- デバッグの方法

OpenMXとDFT: Agenda②

- 安定性向上へのいくつかの工夫
- プログラム実装の品質テスト
- プログラム公開の際の心構え
- 公開は英語で
- マニュアル作成時に留意していること
- リリースの実際
- ユーザービリティ向上への工夫
- ユーザーサポートの実際
- ワークショップ・講習会の開催
- 共同開発におけるポリシー
- 共同開発の実際
- プログラムの保守管理
- 将来の発展へ向けたいくつかの展望
- ソフトウェア開発は長期戦
- ソフトウェアを育てるために

本講義の対象者#1

- これから新しいソフトウェアの開発を始める方
- 開発しているソフトウェアの公開を考えている方
- 公開ソフトウェアへの開発に参加している方/参加を考えている方
- 公開ソフトウェアのコンサルタントを行っている方

本講義の対象者#2

寺田寅彦「科学者とあたま」より

この老科学者の世迷い言を読んで不快に感ずる人はきっとうらやむべきすぐれた頭のいい学者であろう。またこれを読んで会心の笑えみをもらす人は、またきっとうらやむべく頭の悪い立派な科学者であろう。これを読んで何事をも考えない人はおそらく科学の世界に縁のない科学教育者か科学商人の類であろうと思われる。

本講義向けの修正版

この中年の世迷い講義を聞いて不快に感ずる人はきっとうらやむべきすぐれた頭のいい開発者もしくは元開発者であろう。またこれを読んで会心の笑えみをもらす人は、またきっとうらやむべく頭の悪い立派な開発者であろう。これを聞いて何事をも考えない人はおそらくソフトウェア開発の世界に縁のない理論家、ユーザー、科学教育者もしくは科学商人の類であろうと思われる。

密度汎関数理論

基底状態のエネルギーは密度の汎関数で厳密に記述できる。(Hohenberg and Kohn, 1964)

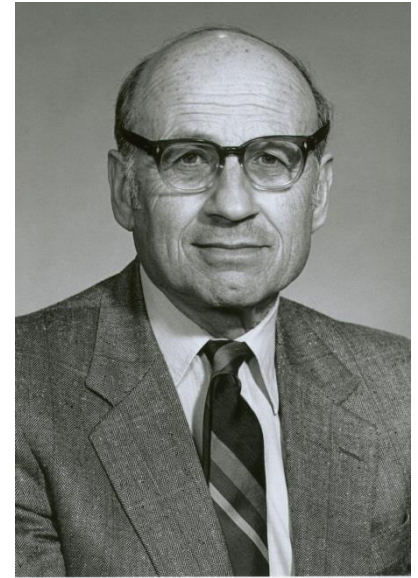
$$E[\rho] = \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d + T[\rho] + J[\rho] + E_{\text{xc}}[\rho]$$

基底状態の多体問題は有効ポテンシャルに対する一体問題に帰着される。(Kohn-Sham, 1965)

$$\hat{H}_{\text{KS}}\phi_i = \varepsilon_i\phi_i$$

$$\hat{H}_{\text{KS}} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\text{eff}}$$

$$v_{\text{eff}} = v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + v_{\text{Hartree}}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{\text{xc}}}{\delta \rho(\mathbf{r})}$$



W.Kohn (1923-)

第一原理計算手法の分類

波動関数理論

e.g., 配置間相互作用法 (CI)

$$\Psi = \sum_{I=1} C_I |\phi_{I1}(x_1) \phi_{I2}(x_2) \cdots \phi_{IN_e}(x_{N_e})|$$

計算の複雑さ

$$O(e^N)$$

特徴

高精度
基底・励起状態
高コスト

密度汎関数理論

$$E(\rho) \quad \rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N_e} f(\varepsilon_i) \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r})$$

$$O(N^3)$$

中精度
基底状態
低コスト

量子モンテカルロ法

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \Psi_\alpha | \hat{H} | \Psi_\alpha \rangle}{\langle \Psi_\alpha | \Psi_\alpha \rangle}$$

$$O(N^{3\sim})$$

高精度
基底状態
高コスト
高並列性

多体グリーン関数法

$$G(t, \mathbf{r}, E)$$

$$O(N^{3\sim})$$

中精度
基底・励起状態
高コスト

DFTが対象とする系と現象

系

金属
絶縁体
半導体
界面
アモルファス
分子
生体高分子
溶液

...

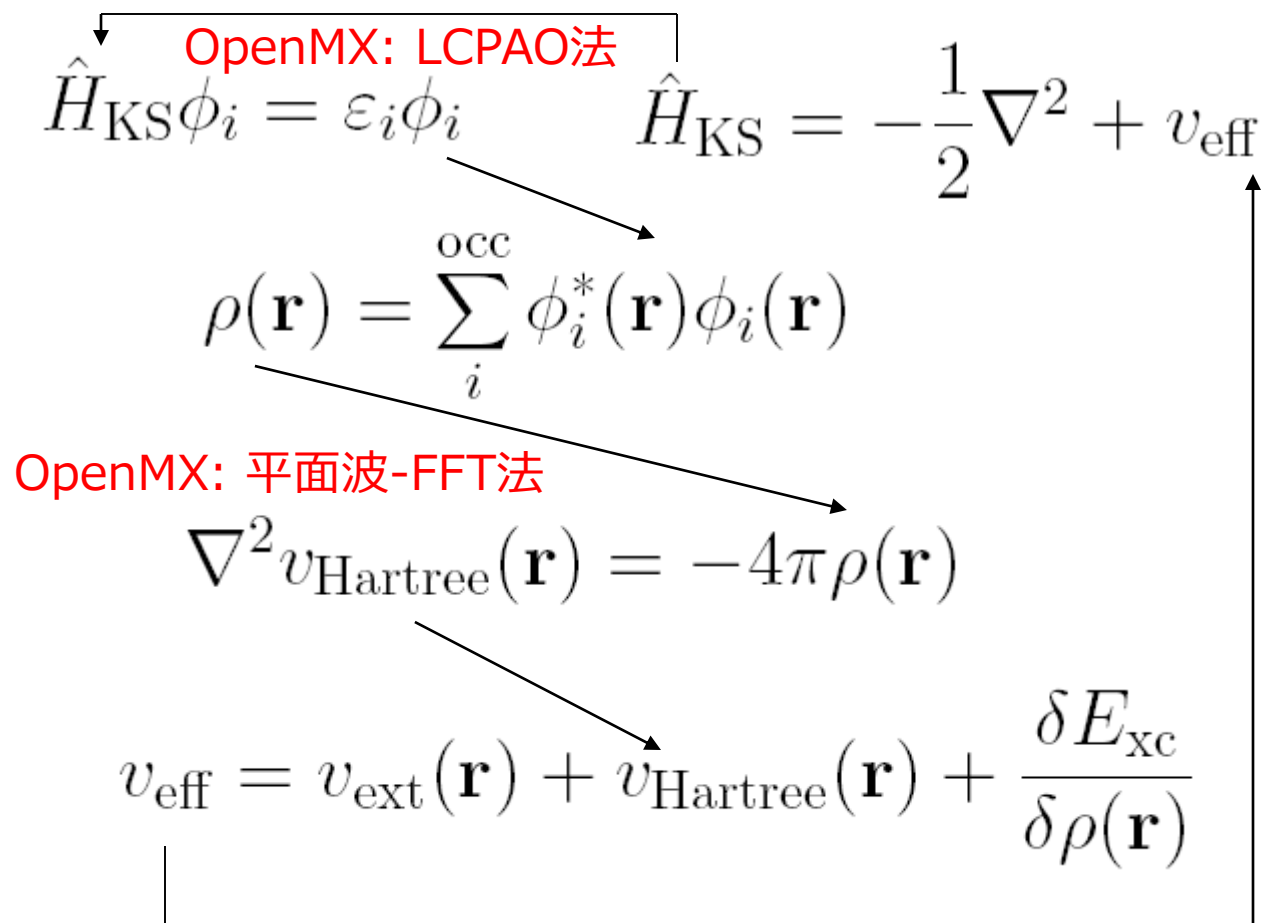
現象

熱力学安定性
力学特性
伝導特性
磁性
光学特性
誘電特性
化学反応
...

物質科学の関与するほぼ全ての系及び(基底状態の関与する)現象が原理的にはDFTで取り扱うことが可能。ただし計算コストと計算精度の観点から、例え「京」を用いたとしても取り扱い可能な系・現象には限界がある。

KS方程式の数学的構造

3次元の連立非線形偏微分方程式を自己無撞着に解く必要がある。



入力電子密度 = 出力電子密度 → 自己無撞着条件

OpenMXの基本手法

- 汎関数

局所密度近似 (LDA)、一般化勾配近似 (GGA)、plus U法

- コア電子

一般化ノルム保存Vanderbilt擬ポテンシャル

- 基底関数

変分最適化擬原子基底関数

- 数値積分方法

逆空間積分、FFTメッシュ

- 対角化

ELPA, オーダーN法、NEGF法

OpenMXの機能概要

- 密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算ソフトウェア
- ノルム保存型擬ポテンシャルを使用
- 最適化数値局在基底により、Kohn-Sham軌道を展開

基本機能

- LDA, GGA, LDA+UによるSCF計算
- 全エネルギー、力の計算
- バンド分散、状態密度
- 構造最適化(BFGS,RF,EF法等)
- 有効電荷解析(マリケン,ボロノイ,ESP)
- NEV,NVT分子動力学法
- 電荷ドーピング
- フェルミ面解析
- 電子密度等のCubeデータ
- 擬ポテンシャル&基底のデータベース 等

拡張機能

- オーダーN, 低次スケーリング法
- ノンコリニア磁性
- スピン軌道相互作用
- 非平衡グリーン関数法による電気伝導
- Berry位相による電気分極
- 最局在化Wannier関数
- 有効遮蔽体(ESM)法による電場印加
- NEB法による反応経路探索
- バンドunfolding法
- TH法によるSTM解析 等

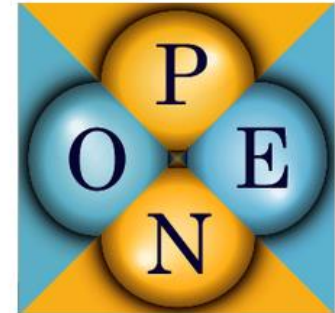
OpenMXの開発経緯

- 2000年 開発開始
- 2003年 公開 (GNU-GPL)
- 2003年 共同研究 :
産総研
物材機構
ソウル大
金沢大
北陸先端大
日産自動車
富士通 等
- 2013年 17回のリリース、
Ver. 3.7に至る

Welcome to OpenMX
open source package for Material eXplorer

Contents

- [What's new](#)
OpenMX Hands-On Workshop on 10th Oct. in Kobe
Patch (Ver.3.7.8) to OpenMX Ver. 3.7 (17/Feb/2014)
Release of OpenFFT Ver. 1.0 (04/Sep/2013)
- [What is OpenMX?](#)
- [Download](#)
- [Manual](#)
- [Technical Notes](#)
- [Publications](#)
- [OpenMX Forum](#)
- [Workshop](#)
- Database of VPS and PAO
[Ver. 2013](#)
- [ADPACK](#)
- [Miscellaneous informations](#)
- [Contributors](#)
- [Acknowledgment](#)
- [Links](#)



<http://www.openmx-square.org>

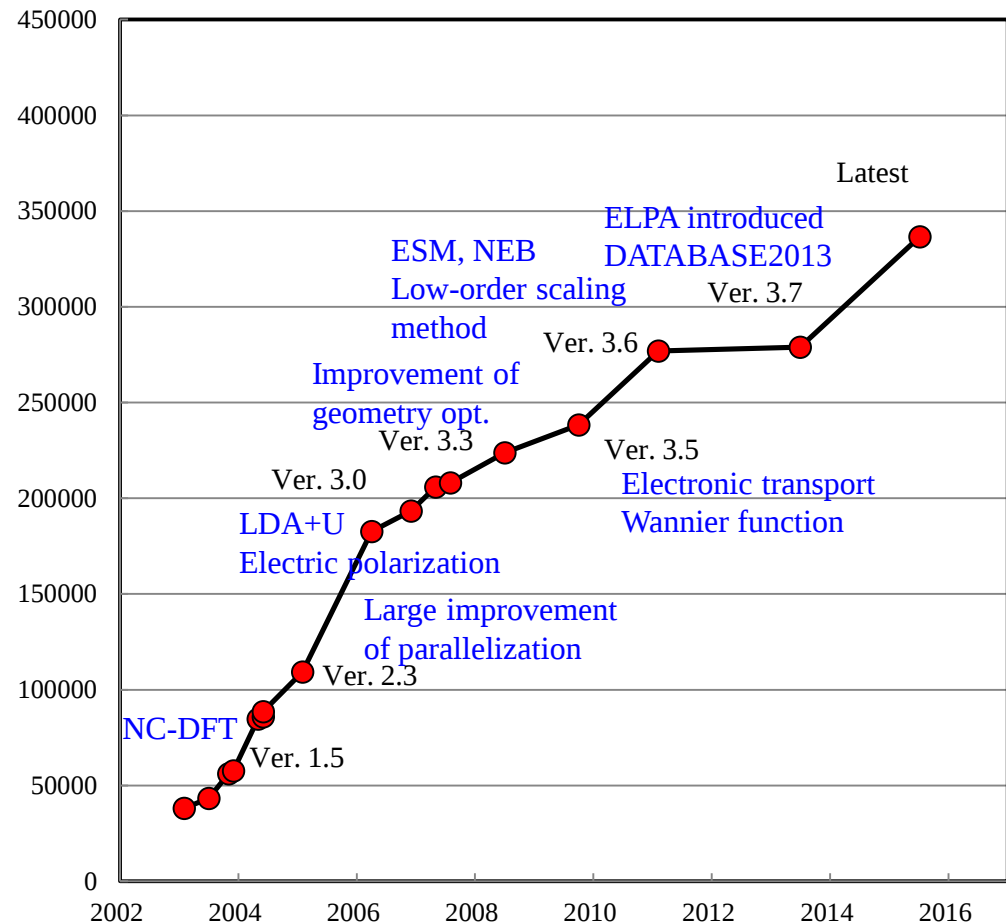
開発の経緯：続き

プログラムは30万行を超える、かなり大規模なものになりつつある。

およそ300報の関連論文が出版されている。

12回の関連ワークショップを開催。

プログラム行数の推移



OpenMXの開発者

- T. Ozaki (U.Tokyo)
- H. Kino (NIMS)
- J. Yu (SNU)
- M. J. Han (KAIST)
- M. Ohfuti (Fujitsu)
- F. Ishii (Kanazawa Univ.)
- T. Ohwaki (Nissan)
- H. Weng (CAS)
- M. Toyoda (Osaka Univ.)
- H. Kim (SNU)
- P. Pou (UAM)
- T. V. Truong Duy (U.Tokyo)
- C.-C. Lee (JAIST)
- Y. Okuno (Fuji FILM)
- Yang Xiao (NUAA)
- Y. Gohda (TIT)

初期の開発・公開の動機

新しい計算手法を開発するプラットフォームを持ちたい。

応用計算は共同研究で進める。そのために情報共有する必要が生じ、それほど熟考せずにGNU-GPLで公開を始める。

低次スケーリング法の重要性

Methods	Computational cost (N: system size)	Computational time for a 10 times larger system	Computable size in 20 years later
CCSD(T)	N^7	10000000	3.7
CCSD, MRMP	N^6	1000000	4.7
MP2	N^4	10000	10
HF, DFT	N^3	1000	22
O(N) DFT	N^1	10	10000

今後の20年間、Mooreの法則が続いたとしても、低次スケーリング法でないと大規模計算はかなり困難である。

OpenMXの計算手法に関する論文等

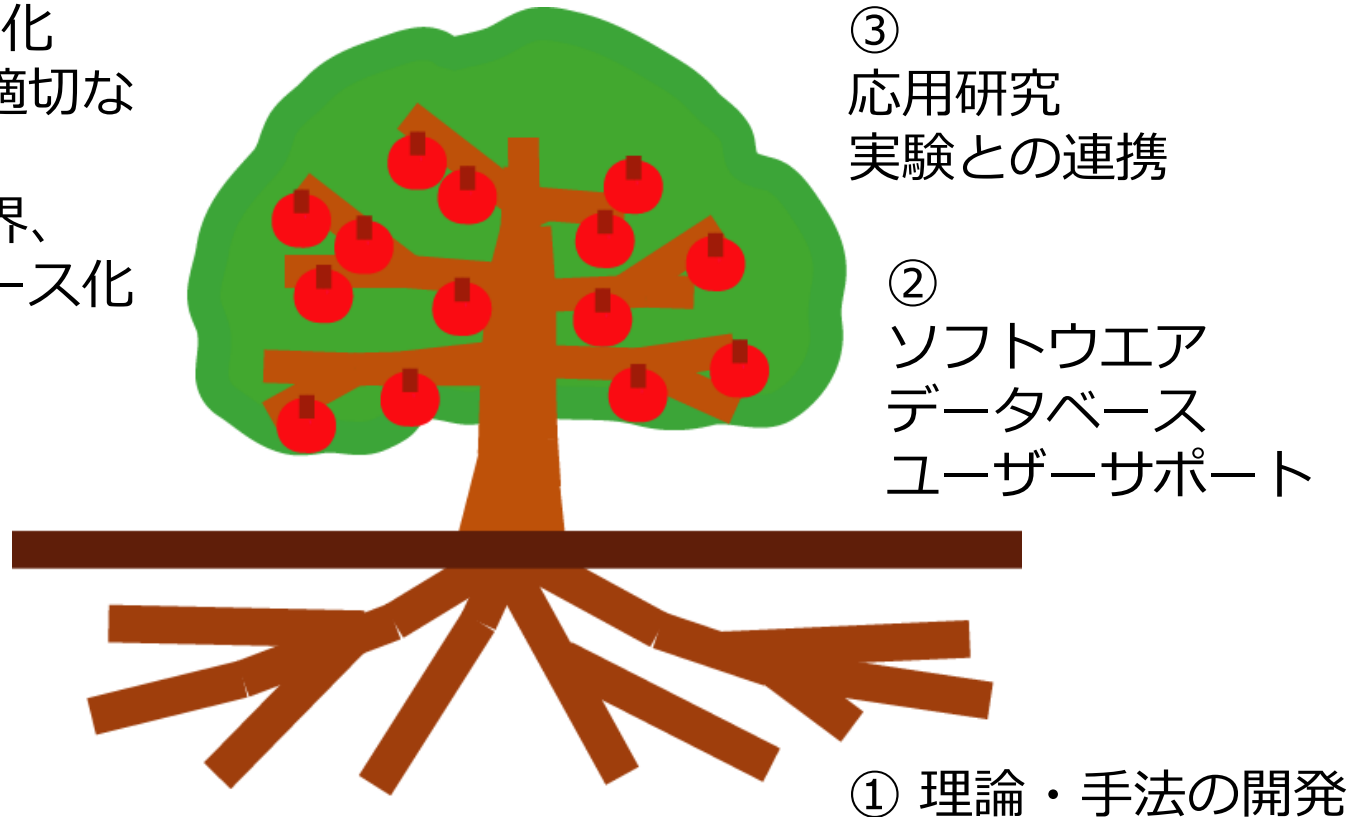
- 2000 block BOP法の開発 PRB 59, 16061, PRB 61, 7972
- 2001 ab initio recursion 法の開発 PRB 64 195126
- 2001 recursion法に基づくO(N)逆行列計算法の開発 PRB 64, 195110
- 2003 変分基底法の開発 PRB 67, 155108, PRB 69, 195113, JCP 121, 10879
- 2005 LCPAO法の高精度実装法の開発 PRB 72, 045121
- 2005 O(N) LDA+U法の開発 PRB 73, 045110
- 2006 O(N) Krylov 部分空間法の開発 PRB 74, 245101
- 2007 高速・高精度Green関数積分法の開発 PRB 75, 035123
- 2008 スピン方位制約条件付きノンコリニア密度汎関数法の開発 web notes
- 2009 高速二電子積分法の開発 JCP 130, 124114
- 2009 高速球ベッセル変換法の開発 CPC 181, 277
- 2010 高精度非平衡グリーン関数法の開発 PRB 81, 035116
- 2011 高並列化O(N²~)法の開発 PRB 82, 075131
- 2011 O(N)厳密交換汎関数法の開発 PRA 83, 032515
- 2012 O(N)法+有効媒質法の開発 JCP 136, 134101
- 2014 O(N)法の超並列化手法の開発 CPC 185, 777 (2014)
- 2014 3D-FFTの超並列化手法の開発 CPC 185, 153 (2014)
- 2014 大規模NBO解析手法の開発 JCP 140, 244105 (2014)

現在の開発・公開の意図

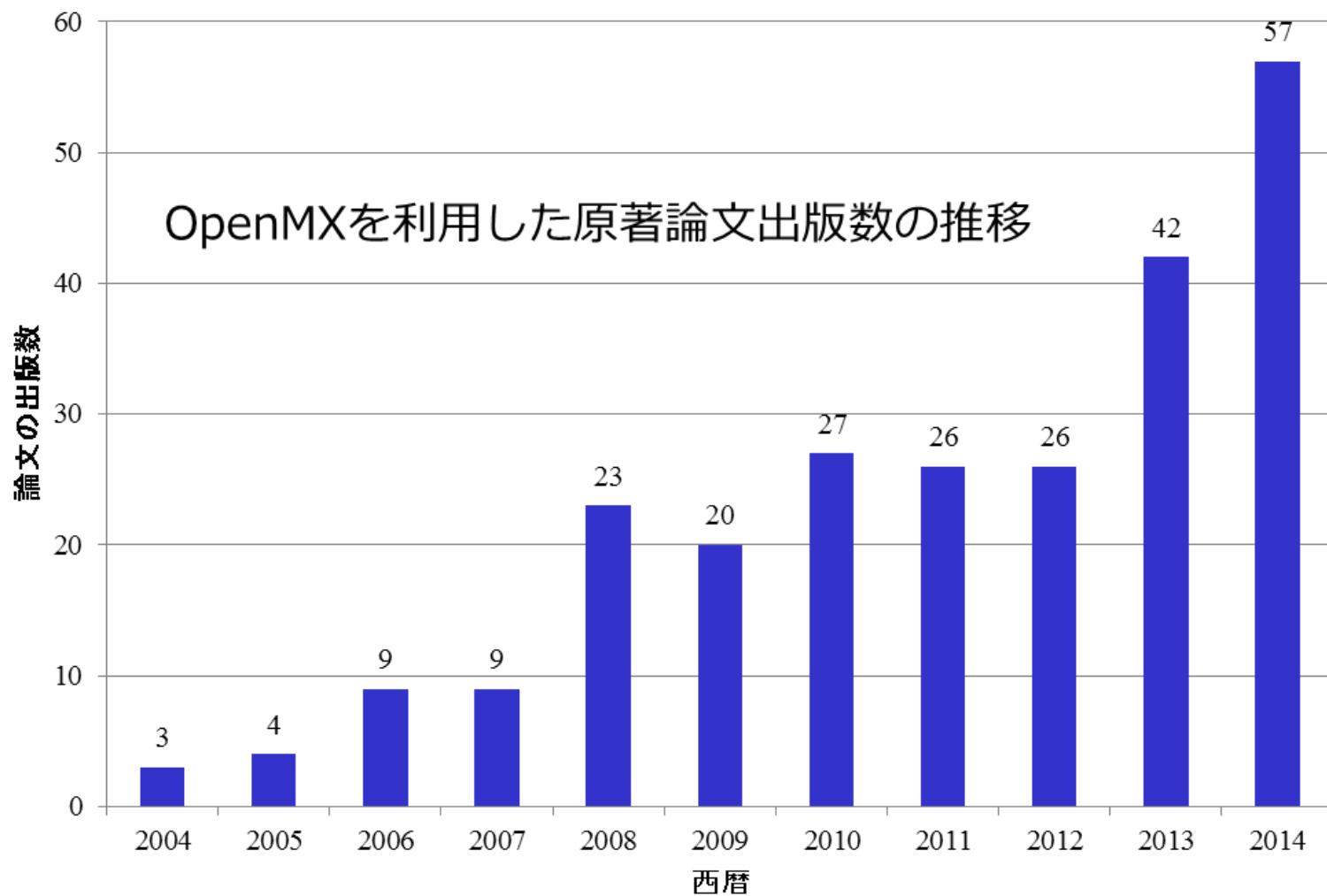
開発・公開の意図

- (1) 手法・コードの高度化
- (2) 共同開発の促進
- (3) 情報の共有化
 - ・ コードの適切な使用例、
 - ・ 手法の限界、
 - ・ データベース化

高度シミュレーションにおける木構造



原著論文の出版数の推移



対象としている物質

実験との共同研究により ZrB_2 上のシリセン構造を初めて実証

A. Fleurence et al., Phys. Rev. Lett. 108, 245501 (2012).

実験との共同研究によりIr酸化物の $J_{\text{eff}}=1/2$ Mott状態を初めて実証

B.J. Kim et al., Phys. Rev. Lett. 101, 076402 (2008).

トポロジカル絶縁体の理論的予測

C.-H. Kim et al., Phys. Rev. Lett. 108, 106401 (2012).

H. Weng et al., Phys. Rev. X 4, 011002 (2014).

リチウムイオン電池の電極界面の第一原理分子動力学計算

T. Ohwaki et al., J. Chem. Phys. 136, 134101 (2012).

T. Ohwaki et al., J. Chem. Phys. 140, 244105 (2014).

磁石材料の磁気異方性の第一原理計算

Z. Torbatian et al., Appl. Phys. Lett. 104, 242403 (2014).

I. Kitagawa et al., Phys. Rev. B 81, 214408 (2010).

表面酸化Si基板上のグラフェンナノリボンの大規模電気伝導計算

H. Jippo et al., Appl. Phys. Express 7, 025101 (2014).

M. Ohfuchi et al., Appl. Phys. Express 4, 095101 (2011).

bcc-鉄中の金属炭化物析出物の界面構造予測

H. Sawada et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21, 045012 (2013).

アモルファス金属酸化物を特徴付ける普遍的な中距離秩序構造を提案

K. Nishio et al., Phys. Rev. Lett. 340, 155502 (2013).

これまでの実績

シリセン、グラフェン
カーボンナノチューブ
遷移金属酸化物
金属酸化物
分子磁性体
希土類磁石材料
金属間化合物
リチウムイオン電池材料、
鉄鋼材料
金属(酸化物)アモルファス 等

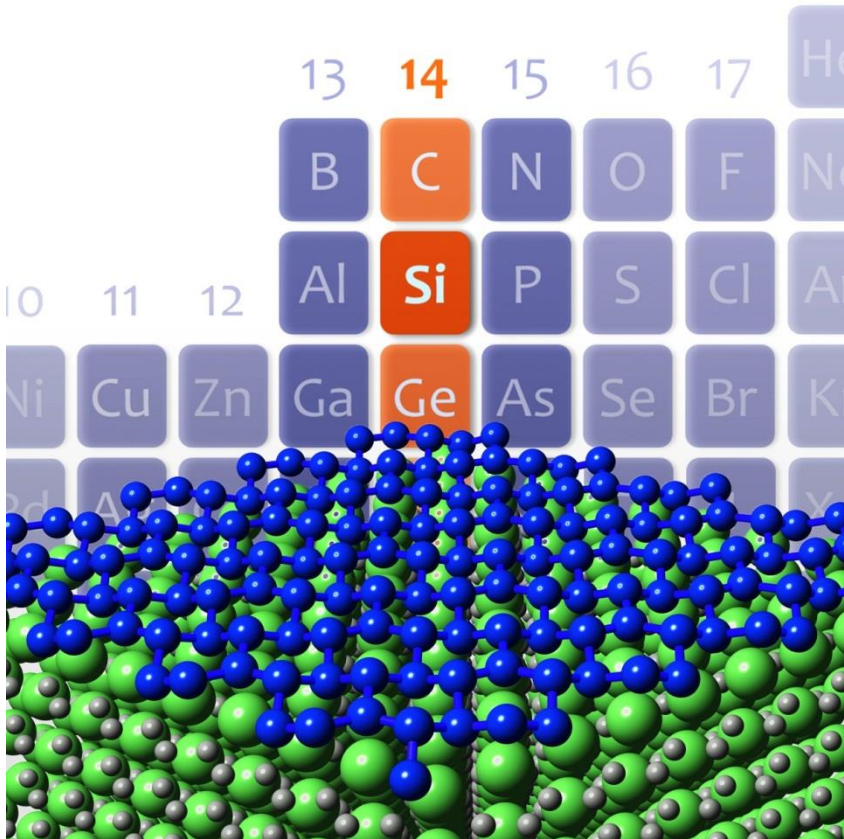
関連論文

およそ300報

実験の共同研究によりZrB₂上のシリセン構造を同定

シリコン原子からなる蜂の巣格子構造(シリセン)は電子デバイス応用に有用な電子構造を持つことが理論的に知られており、実験による実現が期待されていた。

JAISTマテリアルサイエンス・高村(由)グループはZrB₂上にシリコンのネットワーク構造が形成することを発見。密度汎関数理論による大規模第一原理電子状態計算と実験事実を詳細に比較することで、最終的にZrB₂上のシリセン構造の同定に初めて成功。

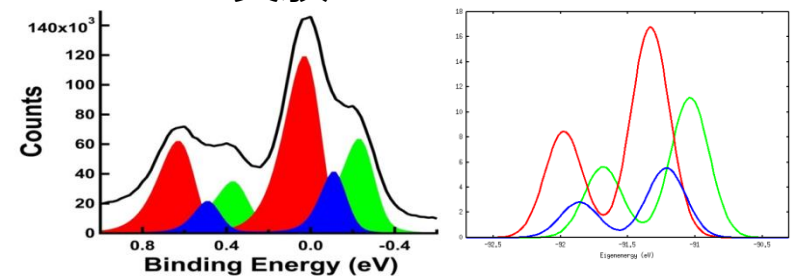


第一原理計算によって得られたZrB₂上のシリセン構造

Si 2pの化学シフト

実験

理論



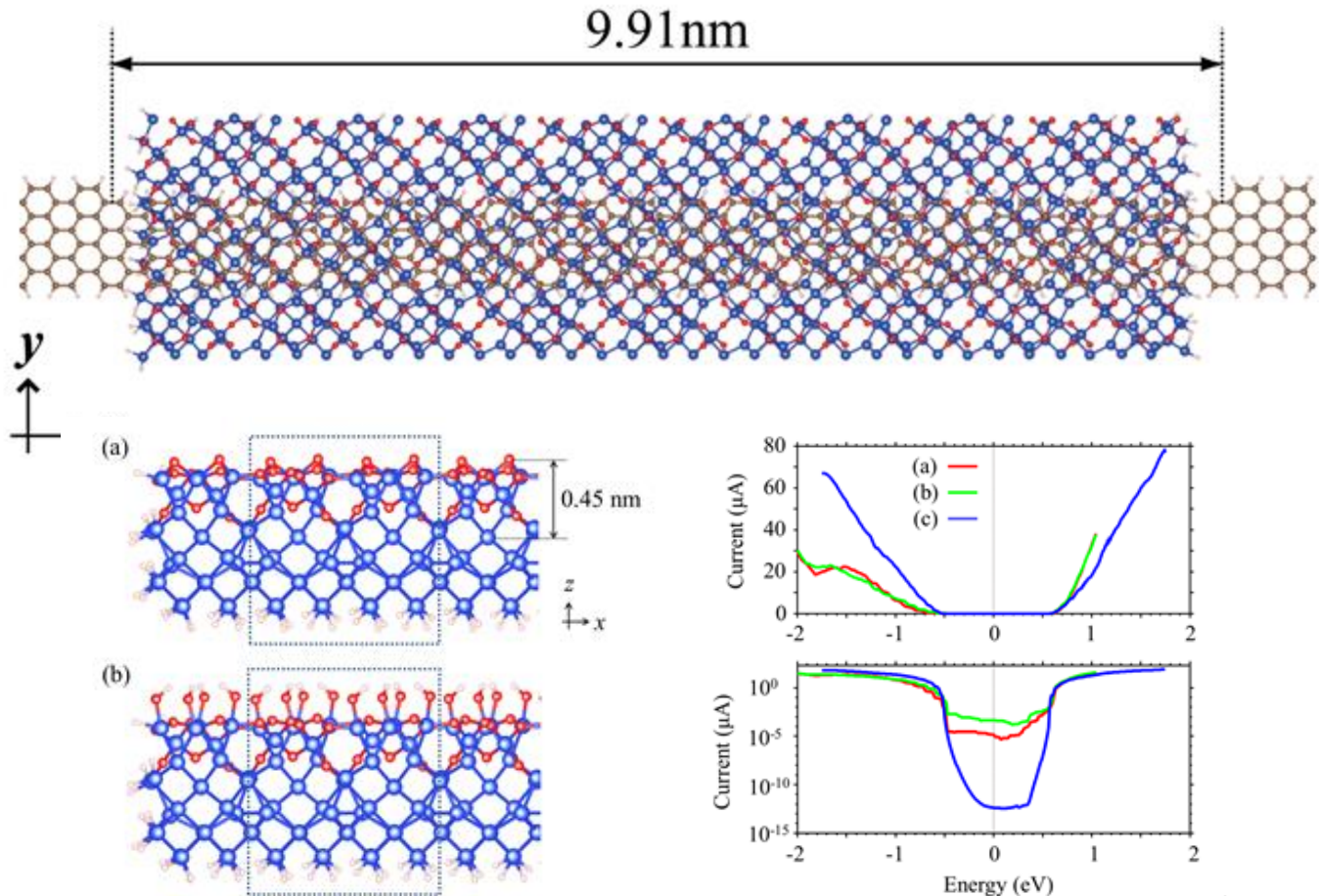
A. Fleurence et al., Phys. Rev. Lett. 108, 245501 (2012).

グラフェンナノリボンデバイスの電気伝導

表面酸化Si基板上でのグラフェンナノリボンの電気伝導特性を非平衡グリーン関数による計算。ゲート電圧による電流のon/off比は基板上で 10^5 程度で、実験値と整合。

M. Ohfuchi et al., Appl. Phys. Express 4, 095101 (2011).

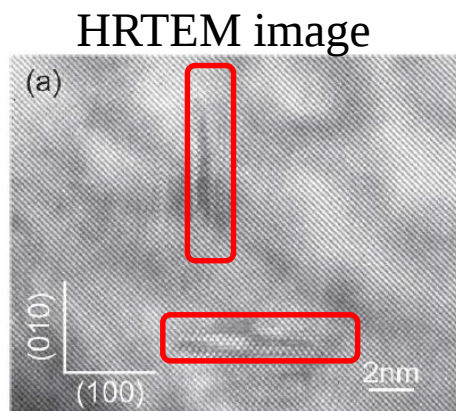
- 電荷移動の解析からナノリボンから基板表面に電荷移動 → ナノリボンにホールドープ
- ショットキーバリアを形成し、チャネル中央の価電子帯のトップが E_F にピン止め
- ホール状態は酸素準位と混成し、ギャップ中に僅かに染み出す
- 染み出したホール準位を介してトンネル電流の増加



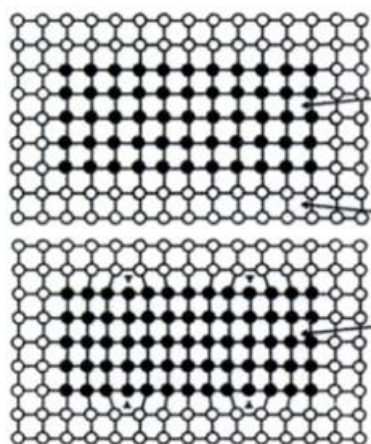
BCC-鉄と金属炭化物の界面構造

鉄鋼材料の硬度・靱性の制御に有効な手段は金属炭化物を析出させることである。第一原理計算とモデルポテンシャル法を用いて析出物の構造予測を行った。

H. Sawada et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21, 045012 (2013).



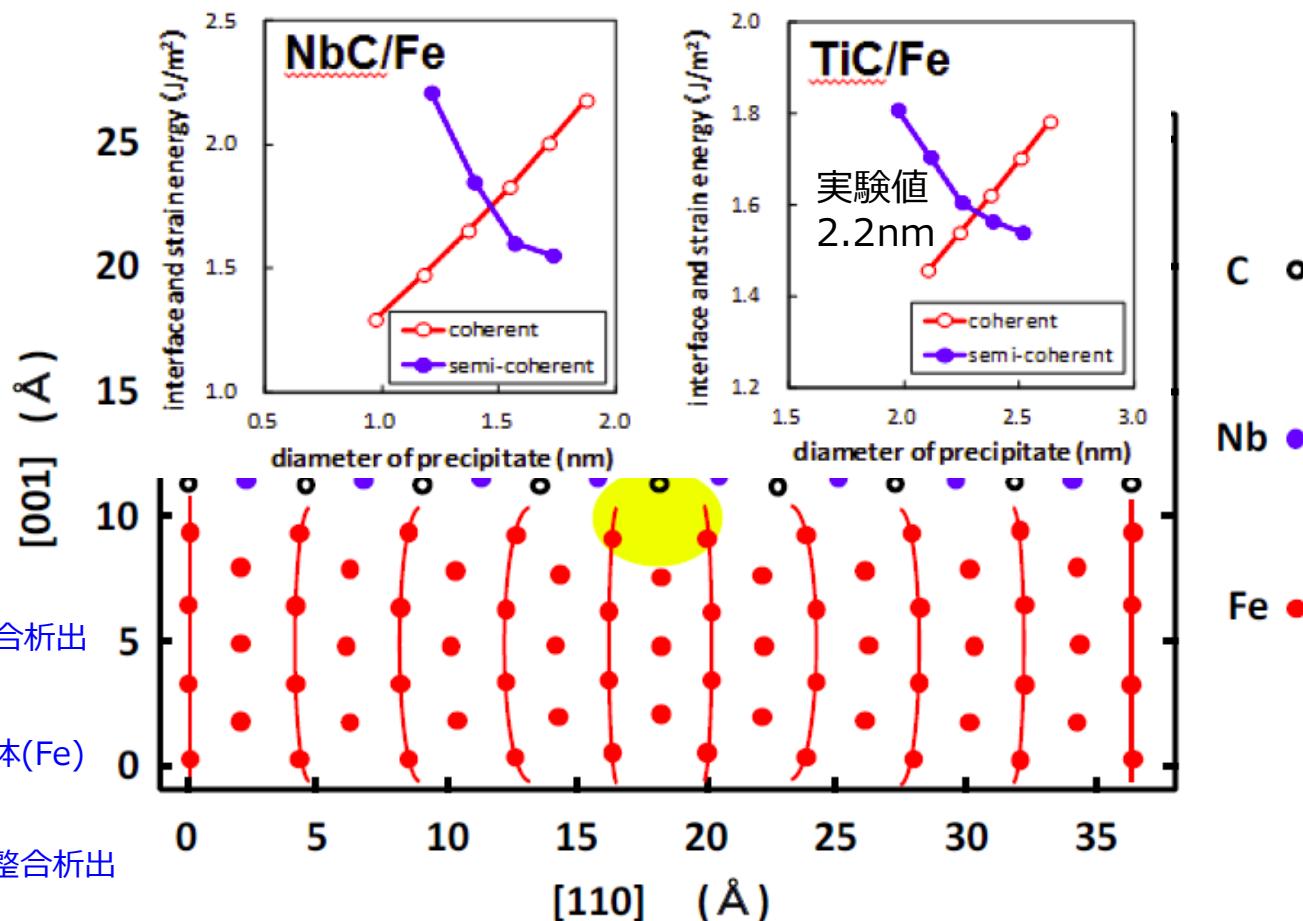
析出物: TiC, VC, NbC



整合析出

母体(Fe)

準整合析出



実際の計算イメージ

1. VESTA等を使用して構造モデルを作成
2. 入力ファイルをeditorで作成
3. 計算機にPBSシステム等を使用してジョブを投げる
4. XCrySDen等を使用して結果を可視化

Editorを用いた入力ファイル作成

```
#
# File Name
#

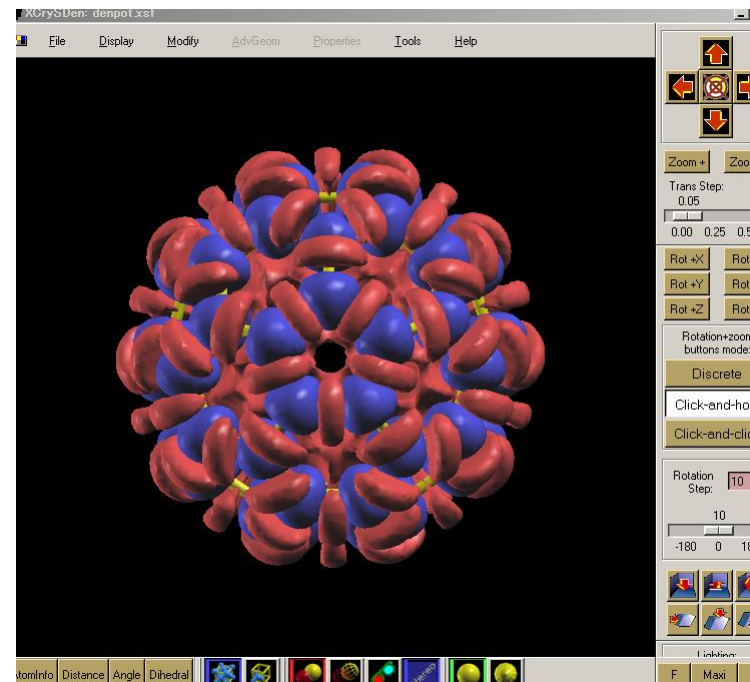
System.CurrentDirectory      ./      # default=./
System.Name                  met      #
level.of.stdout              1        # default=1 (1-3)
level.of.fileout             1        # default=1 (0-2)

#
# Definition of Atomic Species
#
Species.Number               2
<Definition.of.Atomic.Species
H   H5,0-s1                  H_PBE13
C   C5,0-s1p1                 C_PBE13
Definition.of.Atomic.Species>

#
# Atoms
#

Atoms.Number                 5
Atoms.SpeciesAndCoordinates.Unit Ang # Ang|AU
<Atoms.SpeciesAndCoordinates
1  C   0.000000  0.000000  0.000000  2.0  2.0
2  H   -0.889981 -0.629312  0.000000  0.5  0.5
3  H   0.000000  0.629312 -0.889981  0.5  0.5
```

XCrySDenを用いて差電子密度を解析



公開DFTソフトウェア(固体向け)の開発状況

1990年初めより、複数のDFTソフトウェアが公開され、一般に供されるようになった。

商用ソフト

CASTEP (1989-)	PW+Ultrasoft PP/PAW
VASP (1991-)	PW+PAW
Wien2k (1990-)	FLAPW+LO
DMol3 (1989-)	LO+AE

公開フリーソフト

Quantum	
Espresso (2001-)	PW+NCPP/PAW
Abinit (1998-)	PW+PAW
SIESTA (1998-)	LO+NCPP
OpenMX (2003-)	LO+NCPP
xTAPP (2013-)	PW+NCC

DFT, 量子化学、分子動力学計算ソフトウェアの引用数ランキング

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaftが中心となり、DFT、量子化学、分子動力学計算に関する95種類のソフトウェアの引用数の統計データが公開されている。

<http://nomad-lab.eu/index.php?page=codes>

Code	Type	Description	License	Citations 2009-13	Reference website
Gaussian ^(*)	QC,TB	DFT,HF,MP2,CCSD(T),pHF,AE,GAO,sol,mol,p,MD	C	48120	http://www.gaussian.com/
VASP ^(*,**)	DFT	DFT, HF, MP2, RPA, psP, PW, sol, p, MD	C (O)	21490	http://www.vasp.at/
Gromacs ^(*)	FF	MD, p/GPU	G	10600	http://www.gromacs.org/
TINKER ^(*)	FF	MM, MD, mol, liq	G	9330	http://dasher.wustl.edu/tinker/
CASTEP ^(*,**)	DFT	DFT, HF, psP, PW, sol, p, MD	C [2]	8160	http://www.castep.org
GAMESS ^(*)	QC	DFT, GAO, HF, p, mol	G	7660	http://www.msg.ameslab.gov/gamesh/
NAMD ^(*)	FF	MD, p/GPU	F(O)	7220	http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/
MOPAC	FF,QC	HF,AE,GAO,sol,mol,p/GPU, Min	F(O)	6199	http://openmopac.net/
LAMMPS ^(*)	FF	MD, p/GPU, mol, li	G	5501	http://lammps.sandia.gov/
WIEN2k ^(*,**)	DFT/VP	HF, psP, LPAW, PAW, MD, Mol, sol, p	C	5279	http://www.wien2k.at/

日本からは唯一、OpenMXが記載されており、この統計によれば固体DFTソフトウェアでは13番目の引用数である。

固体計算向けDFTソフトウェアの精度比較#1

ベルギーのThe Center for Molecular Modeling が中心となり、DFTコードの精度比較の結果が公開されている。

<http://molmod.ugent.be/deltacodesdft>

Code	Version	Basis	Potentials	Δ -factor	Authors
WIEN2k	13.1	LAPW/APW+lo	full	0 meV/atom	S. Cottenier
VASP	5.2.12	plane waves	PAW 2012	0.7 meV/atom	K. Lejaeghere
VASP	5.2.12	plane waves	PAW 2012 GW-ready	0.8 meV/atom	K. Lejaeghere
Abinit	7.5.3	plane waves	PAW JTH	1.2 meV/atom	F. Jollet <i>et al.</i> [3]
Abinit	7.1.2	plane waves	GPAW PAW 0.9 (40 Ha cut-off)	1.3 meV/atom	F. Jollet <i>et al.</i> [3]
GPAW	0.9.1	plane waves	PAW 0.9	1.5 meV/atom	ASE [2]
Quantum ESPRESSO	5.0.2	plane waves	PAW 0.3.1	1.8 meV/atom	Quantum ESPRESSO [5]
OpenMX	3.7	pseudo-atomic orbitals	Morrison-Bylander-Kleinman norm-conserving (2013)	2.0 meV/atom	OpenMX [4]
VASP	5.2.2	plane waves	PAW 2011	2.1 meV/atom	K. Lejaeghere <i>et al.</i> [1]
GPAW	0.8.0	grid-based	PAW 0.6	3.8 meV/atom	K. Lejaeghere <i>et al.</i> [1]
Dacapo	2.7.16	plane waves	Vanderbilt ultrasoft version 2	6.2 meV/atom	ASE [2]
Abinit	5.4.4p	plane waves	Troullier-Martins norm-conserving (FHI)	14.5 meV/atom	ASE [2]

固体計算向けDFTソフトウェアの精度比較#2

The Kohn-Sham equation of state for elemental solids: a solved problem

Kurt Lejaeghere,¹ Chandler Becker,² Gustav Bihlmayer,³ Torbjörn Björkman,^{4,5} Peter Blaha,⁶ Stefan Blügel,³ Volker Blum,⁷ Damien Caliste,⁸ Ivano E. Castelli,⁹ Stewart J. Clark,¹⁰ Andrea Dal Corso,¹¹ Stefano de Gironcoli,¹¹ Thierry Deutsch,^{8,12} John Kay Dewhurst,¹³ Igor Di Marco,¹⁴ Claudia Draxl,^{15,16} Marcin Dułak,¹⁷ Olle Eriksson,¹⁴ José A. Flores Livas,¹³ Kevin F. Garrity,² Luigi Genovese,^{8,12} Paolo Giannozzi,¹⁸ Matteo Giantomassi,¹⁹ Stefan Goedecker,²⁰ Xavier Gonze,¹⁹ Oscar Grånäs,^{14,21} E. K. U. Gross,¹³ Andris Gulans,^{15,16} François Gygi,²² D. R. Hamann,^{23,24} Phil J. Hasnip,²⁵ N. A. W. Holzwarth,²⁶ Diana Iusan,¹⁴ Dominik B. Jochym,²⁷ François Jollet,²⁸ Daniel Jones,²⁹ Georg Kresse,³⁰ Klaus Koepnick,³¹ Emine Küçükbenli,¹¹ Yaroslav O. Kvashnin,¹⁴ Inka L. M. Locht,¹⁴ Sven Lubeck,¹⁵ Martijn Marsman,³⁰ Nicola Marzari,⁹ Jens Jørgen Mortensen,¹⁷ Ulrike Nitzsche,³¹ Lars Nordström,¹⁴ Taisuke Ozaki,³² Lorenzo Paulatto,³³ Chris J. Pickard,³⁴ Ward Poelmans,¹ Matt I. J. Probert,²⁵ Keith Refson,^{35,36} Manuel Richter,³¹ Gian-Marco Rignanese,¹⁹ Santanu Saha,²⁰ Matthias Scheffler,¹⁶ Martin Schlipf,²² Karlheinz Schwarz,⁶ Sangeeta Sharma,¹³ Francesca Tavazza,² Patrik Thunström,³⁷ Alexandre Tkatchenko,¹⁶ Marc Torrent,²⁸ David Vanderbilt,²³ Michiel J. van Setten,¹⁹ Veronique Van Speybroeck,¹ John M. Wills,³⁸ Jonathan R. Yates,²⁹ Guo-Xu Zhang,³⁹ and Stefaan Cottenier^{1,40}

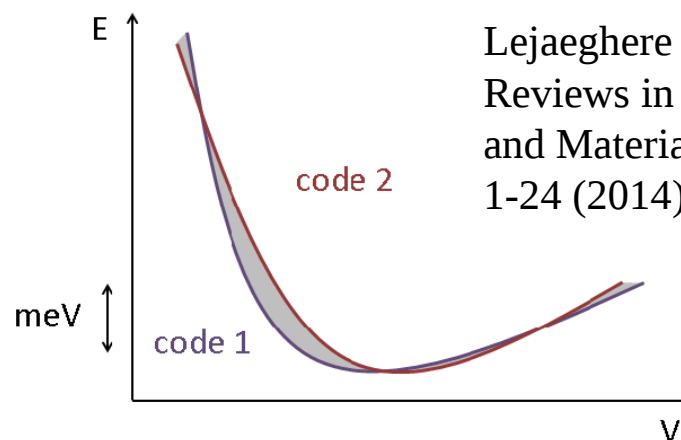
¹Center for Molecular Modeling, Ghent University,
Technologiepark 903, BE-9052 Zwijnaarde, Belgium

²Material Measurement Laboratory, National Institute of Standards and Technology,
100 Bureau Drive, Stop 8553, Gaithersburg, MD 20899, USA

³Physikalisches Institut, Universität zu Köln, 50939 Köln, Germany

Δファクター法

FLAPW+LO法であるWien2kの体積-エネルギー曲線の収束解を参照として、そこからのエネルギーのずれ Δ によって各コードの数値精度を見積もる。(V₀から±6%の範囲でのエネルギー計算からV₀, B₀, B₁を求め、Birch-Murnaghan状態方程式を利用し、 Δ -factorを計算)



Lejaeghere et al., Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences 39, 1-24 (2014).

ソフトウェア公開のレベル

(1) 研究室レベル

気心が知れたレベルでプログラムを共有。

(2) 共同研究者間での共有レベル

研究室の枠を越えて、共同研究者間でプログラム共有。

(3) 講習会等を通した伝授レベル

開発者の把握している範疇で、一定の教育を受けた方に使ってもらう。

(4) Web等を通した(無償)一般公開

GPLや開発者の取り決めたcopyrightの下、webを通じて一般公開。外国人を含めた不特定多数の方が使用する可能性。

(5) 有償製品として販売

有償製品として国内外に販売する。

プログラム公開のメリット・デメリット

メリット

- 自分の開発した手法やプログラムが他の研究者の応用研究に役立つ
- ユーザーからフィードバックが得られ、プログラムの改良に役立つ
- 共同研究の輪が広がる
- 手法・ソフトウェアに関連する論文が引用される
- 学会で評価され、職が得られる
- 有償ソフトウェアであれば、販売することで収入がある

デメリット

- 一般性のあるプログラム作成が必要となり、時間が掛かる
- マニュアル作成に労力が掛かる
- プログラムの品質テストに労力が掛かる
- 不特定多数にコンタクトされ、その対応に時間が掛かる
- プログラムの有用性が高まり、多数のユーザーを獲得すると、開発者の意図しないプロジェクトが立ち上がり、想定外に責任が重くなる

de facto standardソフトウェアの条件

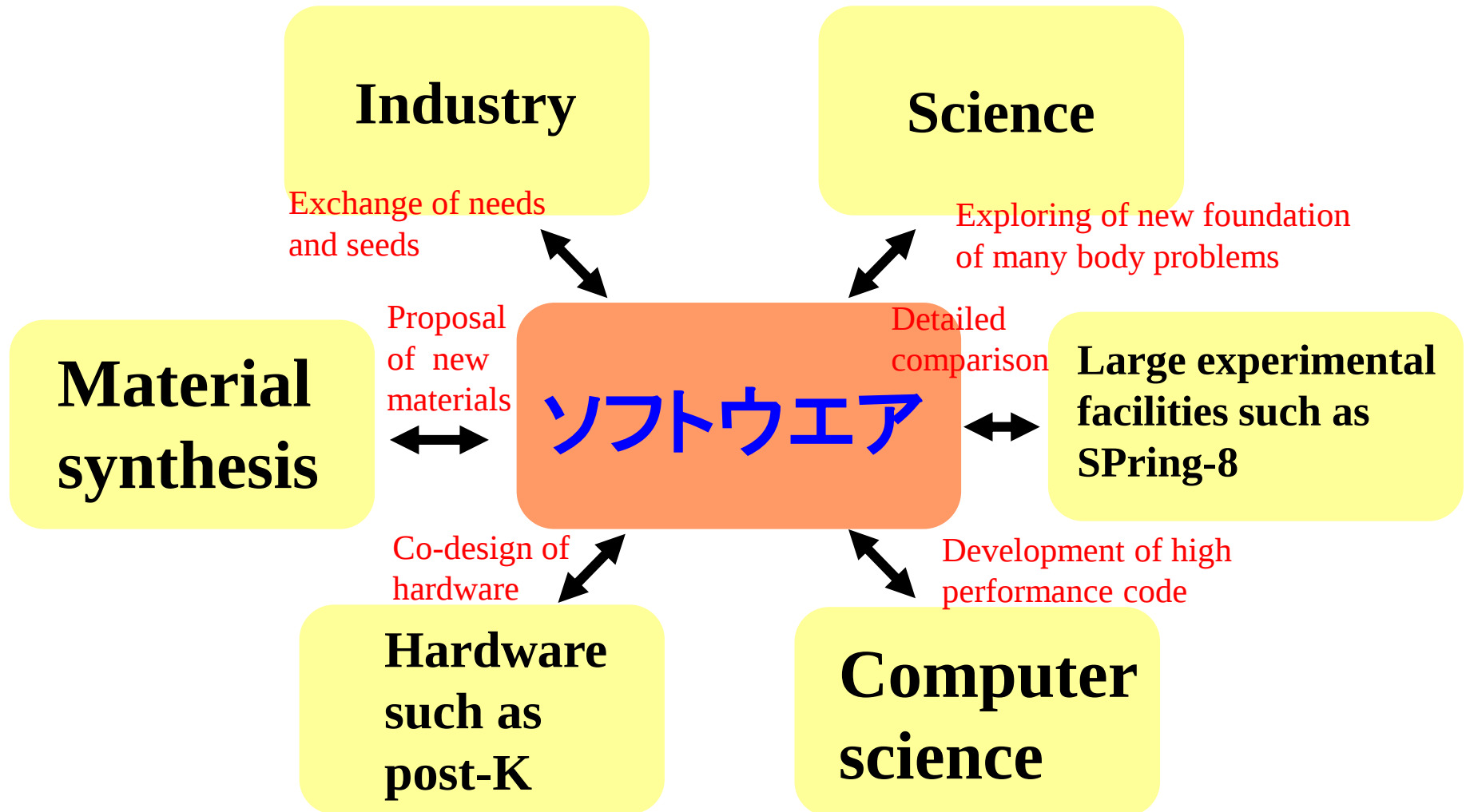
- 高精度で信頼できる
- 高速である+高並列化可能である
- 計算がロバストである
- ユーザーフレンドリーインターフェース
- 計算手法の独自性が高く、優位性がある
- 英語マニュアルが整備されている
- Web & databaseが充実している
- 計算実例が豊富にある
- ユーザーのコミュニティが形成されている

ソフトウェア公開の際に留意すべきこと

- アイデアがある場合には形とし、気軽に公開
- しかしde facto standardを狙うなら、覚悟が必要
- インターネットの時代、ほとんど全ての情報は容易に白日の下にさらされる
- ユーザーは容赦なく類似ソフトウェア間の値踏みを行い、その情報は容易にユーザー間で共有される（ただしネガティブバイアスが掛かっていることが多い）
- 多くのユーザーはデフォルトの設定で期待する結果が出ないと諦め、他のコードの使用を検討する
- リリースした機能が認知されるまでには2年は掛かる
- 一旦、覚悟をもって始めたら、初志貫徹

ハブとしてのソフトウェア

近い将来、基盤ソフトウェアは物質科学のハブとして機能するだろう。多くの情報がそこに集約され、de facto standard ソフトウェアを開発したグループが物質科学研究の主導権を握るかも知れない。



プログラム開発において留意していること

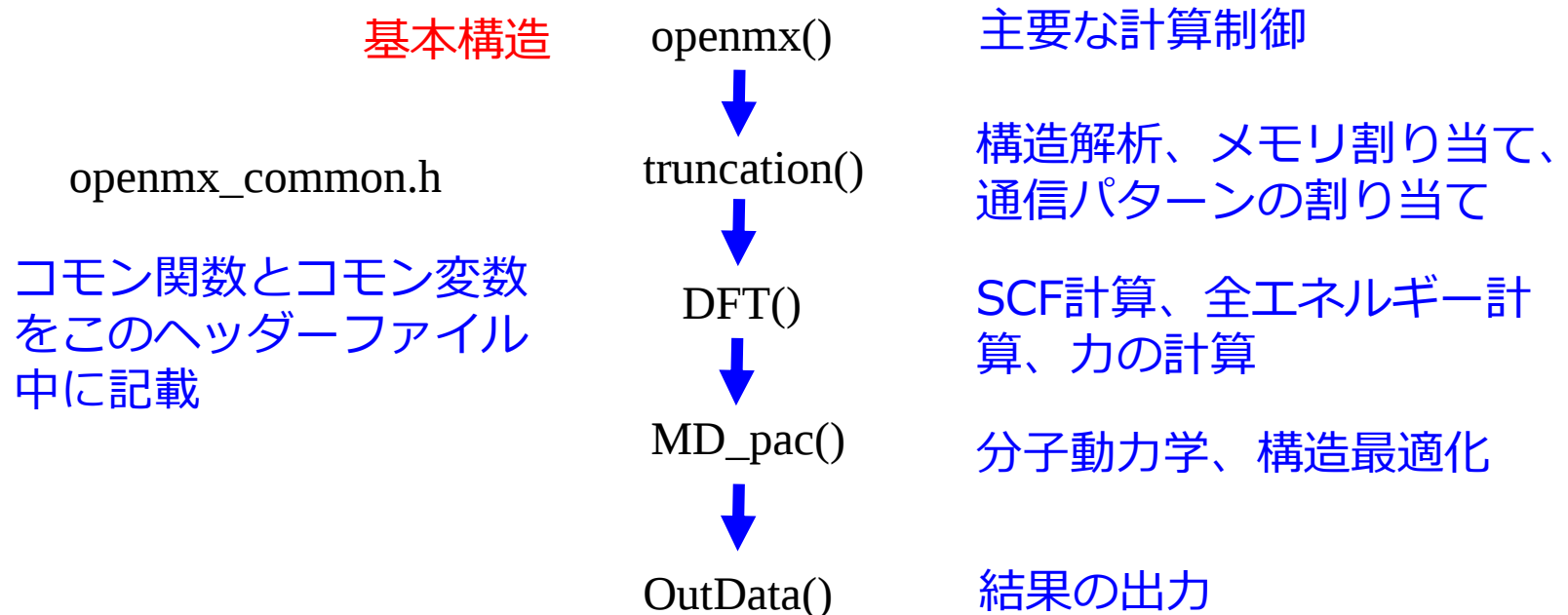
- 方法論の開発を行いながら、プログラム開発を行っている場合、多くのアイデアはうまくいかず、対応する実装は無駄になる。この際に重要なこととして、
 - ① アイデアを考案
 - ② 実装して数値的に実験
 - ③ ②の数値実験の結果を踏まえ、①に戻る

このサイクルをいかに効率よく回すか、留意している。①は煮詰まることが多く、時間を要する。したがって②を最短にすることを心がけている。

- プログラムの可読性や再利用性に留意している。
- しかしそれ以上にユーザービリティの向上を重視する。ユーザービリティの向上のためには可読性や再利用性の低下も辞さない。ユーザーが知る必要のない複雑な部分は可能な限り、ユーザーには見せずに隠蔽する。
- 可能な限り、低メモリ化、高速化を目指している。しかしそれ以上にプログラムのロバスト性が重要である。

OpenMXのプログラム全体構造

- プログラム言語: C, fortran90
- 265個のサブファイル、サブルーチンはおそらく900個程度
- 21個のヘッダーファイル
- およそ30万行
- makefileによるコンパイル
- ELPAは必要部分のみを組み込んで、再配布
- LAPACK, BLAS, FFTW3をリンク
- MPI, OpenMPによるハイブリッド並列



デバッグの方法#1

デバッグが難しいバグの一つはメモリの領域侵害である。配列の allocation が間違っていたり、deallocation を忘れていたりすると、“[Segmentation fault](#)”で落ちる。しばしば落ちる箇所はバグが存在する箇所と離れており、デバッグが困難であるが、次の方法でほぼ100%、デバッグできる。

- ① 落ちる箇所Pを特定する。
- ② 落ちる箇所を単純化した最小プログラム単位Uを作成する。
- ③ その最小プログラムUを落ちる箇所Pから遡って、挿入し、実行する。
- ④ 二分法を使って、③を繰り返し、落ちる位置の最上流箇所Mを特定する。
- ⑤ ④で見つかった最上流箇所Mの直前の処理中にバグが見つかる。

デバッグの方法#2

① 落ちる箇所Pを特定

```
for (i=0; i<N; i++){  
  for (j=0; j<N; j++){
```

V1 = 何行にも渡る長い計算;

V2 = 何行にも渡る長い計算;

/ 例えばこの行で落ちる */*

A[i][j] += V1*A[i][j] + V2*B[9][7]*C[j];

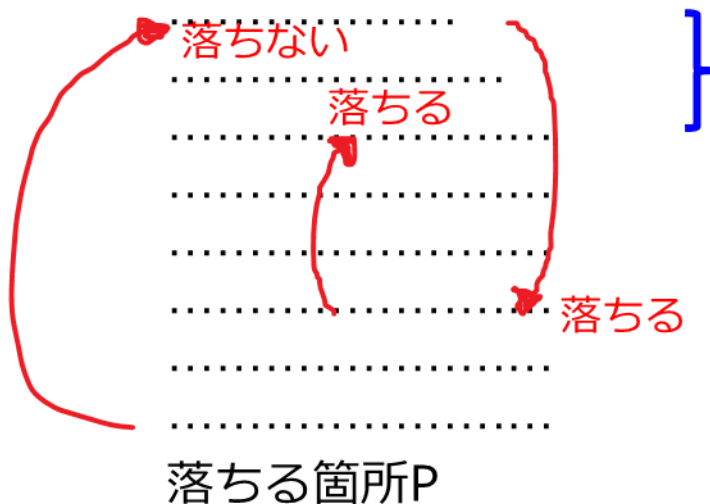
}

② 落ちる最小プログラム単位Uを作成

例えば以下で落ちることが判明

```
for (i=0; i<N; i++){  
  A[7][9] += A[7][9] + B[9][7]*C[i]  
}
```

③、④ 落ちる最上流を特定

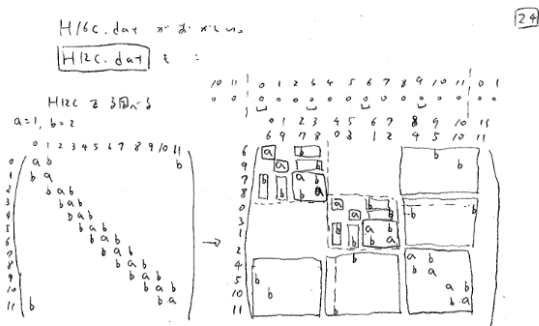


⑤

落ちる箇所と落ちない箇所に
囲まれた領域を詳細に検討す
れば、バグが見つかる。

デバグの方法#3

複雑な計算のデバグは難しい。手計算やmathematicaを用いて、紙の上で計算を丁寧にトレースしておき、プログラム中の各ステップで数値が同じであるか確認する。並列計算の場合も同じ。通信パターンや通信量を紙の上で丁寧にトレースしておいて、実際のプログラム中の動作と比較する。紙の上でトレースできるレベルの適切なモデルを構築できるかが、腕の見せ所。



n=2, m=4

①

$$L_{00}^T = V_{00}^T = \frac{1}{a} (1 \ 0) = (2 \ 0)$$

$$L_{01}^T = V_{01}^T = \frac{1}{a} (0 \ b) = (0 \ 2)$$

$$L_{10}^T = V_{10}^T = \frac{1}{a} (b \ 0) = (2 \ 0)$$

$$L_{11}^T = V_{11}^T = \frac{1}{a} (0 \ b) = (0 \ 2)$$

②

$$S_{00} = C_{00} - B_{00} V_{00}^T - B_{01} V_{01}^T$$

$$= \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (2 \ 0) - \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} (0 \ 2)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & -4 \\ 2 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -3 \end{pmatrix}$$

$$S_{00}^{-1} = \frac{1}{9-4} \begin{pmatrix} -3 & -1 \\ -2 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix}$$

$$S_{01}^{-1} = S_{00}^{-1}$$

③

$$L_{00}^T S_{00}^{-1} = (2 \ 0) \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{6}{5} & -\frac{2}{5} \end{pmatrix}$$

$$L_{01}^T S_{00}^{-1} = (0 \ 2) \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{5} & -\frac{6}{5} \end{pmatrix}$$

$$L_{10}^T S_{00}^{-1} = (2 \ 0) \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{6}{5} & -\frac{2}{5} \end{pmatrix}$$

$$L_{11}^T S_{00}^{-1} = (0 \ 2) \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{5} & -\frac{6}{5} \end{pmatrix}$$

④

$$A_{00}^{-1} + L_{00}^T S_{00}^{-1} L_{00} = \frac{1}{a} + \begin{pmatrix} -\frac{6}{5} & -\frac{2}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 - \frac{12}{5} = -\frac{7}{5}$$

$$A_{11}^{-1} + L_{11}^T S_{00}^{-1} L_{11} = \frac{1}{a} + \begin{pmatrix} -\frac{2}{5} & -\frac{6}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} = 1 - \frac{12}{5} = -\frac{7}{5}$$

$$I A_{00} = -\frac{7}{5}$$

$$I B_{00} = \begin{pmatrix} 4 & 5 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$I B_{01} = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 4 & 3 \end{pmatrix}$$

$$I C_{00} = \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix}$$

n=1 m=1 m2=2

⑤

$$V_{10}^T = A_{00}^{-1} (B_{10} [B_{00}])^T = \frac{1}{a} (0 \ b \ 0 \ 0) = (0 \ 2 \ 0 \ 0)$$

$$V_{01}^T = A_{01}^{-1} (B_{10} [B_{01}])^T = \frac{1}{a} (0 \ 0 \ b \ 0) = (0 \ 0 \ 2 \ 0)$$

$$V_{01}^T = A_{02}^{-1} (B_{11} [B_{01}])^T = \frac{1}{a} (0 \ 0 \ 0 \ b) = (0 \ 0 \ 0 \ 2)$$

$$V_{10}^T = A_{11}^{-1} (B_{11} [B_{10}])^T = \frac{1}{a} (b \ 0 \ 0 \ 0) = (2 \ 0 \ 0 \ 0)$$

⑥

$$R_{110}^T = S_{00}^{-1} (B_{00} V_{10}^T + B_{01} V_{01}^T - (B_{10} [C_{00}])^T)$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 2 \ 0 \ 0) + \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} (0 \ 0 \ 2 \ 0) - \begin{pmatrix} 0 \ 0 \ 0 \ 0 \end{pmatrix} \right)$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 0 \ 4 \ 0 \ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \ 0 \ 0 \ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \end{pmatrix} \right)$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \ 4 \ 0 \ 0 \\ 0 \ 0 \ 4 \ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{12}{5} & -\frac{8}{5} & 0 \\ 0 & -\frac{8}{5} & -\frac{12}{5} & 0 \end{pmatrix}$$

$$R_{110}^T = S_{00}^{-1} (B_{00} V_{10}^T + B_{01} V_{01}^T - (B_{11} [C_{00}])^T)$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 0 \ 0 \ 2) + \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} (2 \ 0 \ 0 \ 0) - \begin{pmatrix} 0 \end{pmatrix} \right)$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 0 \ 0 \ 0 \ 4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 4 \ 0 \ 0 \ 0 \end{pmatrix} \right)$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{2}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \ 0 \ 0 \ 4 \\ 4 \ 0 \ 0 \ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{8}{5} & 0 & 0 & -\frac{12}{5} \\ -\frac{12}{5} & 0 & 0 & -\frac{8}{5} \end{pmatrix}$$

通信の解析

Num-Snd E ID = (2X nuid + 1 + i) % numproc 2番目の場合をみる

== 2番目の numproc = 16 を見る, MV = 4

Snd-Table

Rcv-Table

⑦

⑧

⑨

⑩

⑪

⑫

⑬

⑭

⑮

⑯

⑰

⑱

⑲

⑳

㉑

㉒

㉓

㉔

㉕

㉖

㉗

㉘

㉙

㉚

㉛

㉜

㉝

㉞

㉟

㊱

㊲

㊳

㊴

㊵

㊶

㊷

㊸

㊹

㊺

㊻

㊼

㊽

㊾

㊿

OpenMXとDFT: Agenda①

- 本講義の対象者
- OpenMXの概要
- 開発・公開の経緯
- 開発・公開の意図
- 応用事例
- DFTソフトウェアの開発状況
- ソフトウェア公開のレベル
- de facto standardソフトウェアの条件
- プログラム開発において留意していること
- プログラムの全体構造
- デバッグの方法