

高精度・並列化による3次元分子動力学法の研究

中部大学大学院工学研究科・田中基彦

この2021年度の研究「電磁波並列化による分子動力学電磁波コードの研究」では、本題の1年目として研究を行った、1) 古典的分子動力学によるカーボンナノチューブの電磁気波動の研究、SIESTAコードのインストールの実行(中部大学 工学)、および2) 最大エントロピー法を用いたスペクトル解析手法の開発(法政大学 善甫康成)。今年は特にスペインのSIESTA-4.1bがデータ解析サーバーで動くようになり、その概要を示す。

第一原理分子動で原子の計算を行うSIESTAコードは、普通のLinuxシステムにおいて、純正のLinux(gfortran)では広く使われている。現在私の研究室ではsiesta-4.1bがインストールされており、小さなシステムでは使っている。しかし、核融合科学研究所シミュレータの日本電気SX-Aurora TSUBASAでは、非gfortran準拠であるSIESTAとは相性がよくない。一方、データ解析サーバーのインテル製intel-lxでは、いくつかのハードルを越える必要はあるが、インストールができた。ただし、2 nodes以上では問題がある模様であり、来年度に改めて行う。

最初に、ネットでソースファイルを探しダウンロードして、Linuxシステムにログインして、tar -xzf siesta-4.1-b4.tar.gzでSIESTA-4.1を展開する。シミュレーターではmodule load intel-lxでインテルコンパイラを呼び出し、siesta-4.1b-LXで領域Objで、MPICH+OMPのもとarch.makeで特に以下の記述が必要である。

```
CC= mpiicc -O2 -qopenmp
FPP= $(FC) -E -P -x c
FC= mpiifort
MPI_INTERFACE= libmpi_f90.a
MPI_INCLUDE= .
FC_SERIAL= ifort
FFLAGS= -O2 -fPIC -qopenmp
LIBS= -L${MKLRROOT}/lib/intel64 -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core \
      -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -mkl -qopenmp -lpthread -lm -ldl
```

この他をsh ./Src/obj_setup.shで環境を整えて、makeを使いコンパイルする。ここからが日本電気製インテルコンパイラの特典であり、ファイルを直す(普通は不要である)。ファイルfinal_H_f_stress.F, old_atmfuns.fはコンパイルできないのでスカラー版に直す。iokp.f, m_mixing.F90, m_ts_contour_neq.f90, m_ts_electype.F90, m_ts_weight.F90, ofc.f90では、e12.6->e13.6他を直す。その次に、normalize_dm.F90がエラーを起こすので、95行目を! call die(msg)としてスキップして、再びコンパイルする。最後に、実行を行うために、

```
#PBS -v NQSV_MPI_VER=2017update8
#PBS -v OMP_NUM_THREADS=4
module load intel-lx/$NQSV_MPI_VER
```

を書いておく(2020update0は問題があり、今は2017update8を使う)。実行結果は次に示すとおりである。

Reference: SIESTA-4.1 https://siesta-project.org/SIESTA_MATERIAL/Docs/Manuals/manuals.html

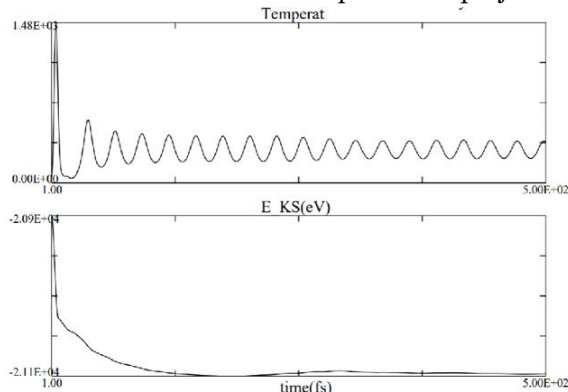


Fig.1 By Nose thermostat, temperature and KS energy up to 500 steps, Dt=1 fs.

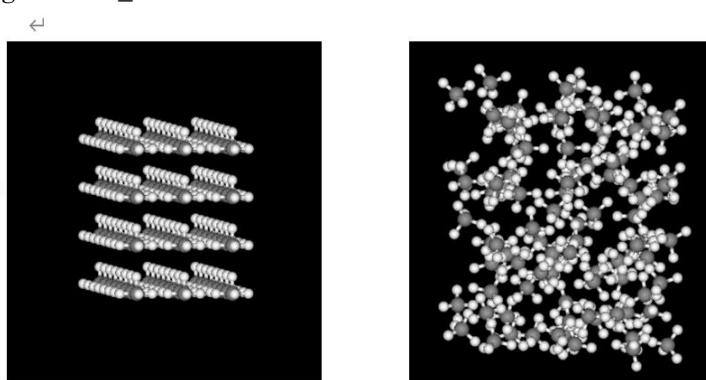


Fig.2 Initial and final states of CH4 molecules, C96H384. about 200 elapsed minutes/48 MPI-1 OMP by Intel LX.