

Title	スーパーコンピューターを活用した材料設計第一原理計算の実際
Author(s)	川添, 良幸
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2016, 6, p. 17-24
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/70508">https://doi.org/10.18910/70508</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

# スーパーコンピューターを活用した材料設計第一原理計算の実際

川添 良幸

東北大学 未来科学技術共同研究センター

## 1. はじめに

スーパーコンピューター（以下、スパコン）の歴史は、1976年にロスアラモス研究所に納入されたベクトル計算機 Cray-1 に始まる。クロック周波数 80MHz の単一 CPU で、ピーク性能 160MFLOPS を達成した。1981年に筆者はマックスプランク研究所で原子核理論の研究用に使い、当時の国産機に比べ、その絶対的速さに驚いたことを鮮明に覚えている。その6年後に、マルチプロセッサで 800MFLOPS の Cray X-MP が投入された。その後、日米の数社がスパコンを作り始め、クロック周波数と CPU 台数の増大で、ムーアの法則（1年半で2倍の性能向上）が現在に至るまで継続している。日本の計算機メーカーのベクトル計算機による寄与には素晴らしいものがあり、ドンガラ氏の世界トップ 500 レポートに一番から相当数が登場した時期もあった。残念ながら、米国との経済摩擦に端を発して独自の CPU を継続的に作れなくなり衰退した。「京」1台が短期間トップになるレベルでは如何ともしがたい。さらに、この10年程はクロック周波数は上がり、CPU が主メモリーを共有するノードとその中のコアと複雑な構造になることが性能向上の主要因を占め、本稿で示す第一原理計算分野の実効性能が上がらない状態になっていることは利用者である我々にとって大問題である。初期の国産スパコンの様に我々利用者の意見を十分に取り込んで独自開発することなく、カタログ性能のみで判断される現状に問題がある。

HPCI では、従来からの大規模ユーザの分布を基盤にして5戦略分野を設定しているが、第一原理計算は主として「予測する生命科学・医療および創薬基盤」と「新物質・エネルギー創成分野」に関係している。防災・減災に資する地球変動予測と次世代ものづくり分野は、構造計算や流体計算のための有

限要素法、そして、物質と宇宙の起源と構造では大規模データ保存・処理も重要になる。特に、第一原理計算で多用される密度汎関数理論（以下 DFT=Density Functional Theory）は、1964年にコーン教授によって開発された電子多体系の理論で、構築されて200年近いナビエ・ストークス方程式に比べれば、未だ50年の歴史しかない発展途上の理論である。<sup>(1)</sup>さらに量子力学の基礎に関する困難な問題を含むために正しい理解がなされず、特に電子の交換相関相互作用汎関数  $E_{xc}$  が DFT としては与えられていないために、実験値に合うパラメータにより単にスパコンを使って実験的・工業的に興味のある対象物に適用される様になりつつあり、とても本来の第一原理計算とは呼べる状態ではないことに気がついてさえいない現状は嘆かわしい。

## 2. 本当の第一原理計算

新物質・新材料・新薬を実験以前に設計し、開発時間の短縮と経費の削減を達成する手段として第一原理計算が期待されている。第一原理 (first principles、*ab initio*) 計算法というのは、電子及び原子核の質量や電荷等の物理の基本的定数以外はパラメータを用いずに、量子力学の基本方程式であるシュレディンガー方程式（相対論的にはディラック方程式）を解くことである。電子多体問題は3体問題でも難しい位なので、現実系に対しては極めて困難な数値計算となる。これは量子力学のはじめの頃に、ディラックが「必要な方程式は全て分かった。後は解くだけである」と言ったにも関わらず、今でも「解けていない」程の難問題である。具体的には求めたい物理量ごとに定式化とプログラミングが必要である。例えば基底状態の磁気モーメントを求める場合には DFT は  $E_{xc}$  に依らずに相当の高精度計算結果を与える。しかし、

バンドギャップを求めようとする DFT は理論的に対応出来ず、最低でも GW 近似計算が必須である。超微細構造定数や NMR 化学シフトを算定しようとするれば、芯電子状態が効くので擬ポテンシャル法では対応出来ず、全電子法が必要となる。この様に、求めたい物理量に対応した近似レベルを使うことが有限速度のスパコンによって行う第一原理計算法を理想的な手法とする。

最近では、市販の第一原理シミュレーション計算ソフトウェアが高度化し、ユーザーフレンドリーなため、自分ではプログラムを作成せず、利用するだけという数値計算屋が多くなった。その場合でも、次の節の問題点は正しく理解して活用するようにして欲しい。そうでないと、いつになっても実験先行の材料設計・開発体制のまま、理論設計を基盤にする様になるパラダイムシフトを起こすことは出来ない。

### 3. 適切な近似レベル

材料・物質の理論的取り扱いには、モデル計算と呼ばれる極めて単純化した手法もあり、代表的な例がハバード模型である。物理量そのものを対象としているために分かり易い。最近では、数値計算により具体的な対象物を扱うことにも多用されている。しかし、電子の多体系はそう簡単にモデル化出来る程単純ではない。我々は、原子や小さい分子に対して知られているフント則（縮退した基底状態ではスピン最大状態が基底状態）が従来の 2 準位模型では本質的な間違いの上での説明であったことを明らかにした。<sup>(2)</sup>これはハバード模型の場合にも適用出来る。2 準位に対して同じ空間波動関数を適用することは本質的に間違っている。系の全ハミルトニアンを解けば、ハバード模型の扱う 2 準位のエネルギー差の多くは空間波動関数の違いから発現していることが分かる。t と U の様な分かり易いパラメータで説明出来る程、電子多体系は単純ではない。もちろん、物理量を分かり易く導出出来る理論体系は望ましく、新たな取り組みが大事であるが、現在までのところ、この様な「都合の良い」理論はない。

量子化学や物性物理の教科書では、水素分子を最初の例題として採り上げる。<sup>(3)</sup>そこに登場するのがハイトラ・ロンドン模型(以下 HL)で、各水素原子の 1s 電子状態をパウリの排他律が成立するように重ね合わせで水素分子の状態を構成する。「電子雲が重なって分子状態が出来る」と言い、電子という実体が雲だと喩えて教えてしまう。実は観測の問題であり、電子は質量が極めて小さいため光を当てると影響を受ける。しかしその範囲は限られていて、その近くにいるとは言えるので、その辺りを雲と呼ぶ。表 1 に示す様に、HL では、原子から分子が構成される時、運動エネルギー T が下がりポテンシャルエネルギー V が上昇するが、全エネルギー  $E=T+V$  は低下して安定化する。しかし、実は、これは「自然の摂理に反する」安定化である。2 つの電子は負の電荷を持つ粒子であり、近寄ることで安定化は出来ない。系の安定化要因は原子核と電子の間の引力相互作用であり、図 1 に示すように電子が原子核に近づいて (V が下がって) 安定化する。電子はより高速に運動するようになり T は上昇する。クーロン相互作用する多体系の必要条件であるビリアル定理（平衡状態では  $2T+V=0$ ）により、T の上昇は V の低下のちょうど半分になる。

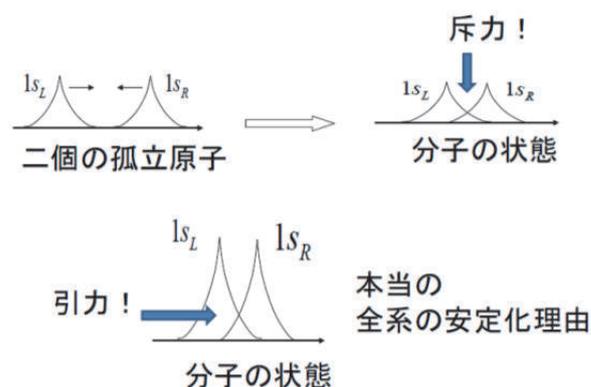


図 1. 水素分子は、孤立した 2 つの水素原子が各々電子を原子核に引き寄せてポテンシャルを下げることで安定化する。電子雲の重なりは斥力で安定化には逆に働く要因である。

表 1. 1s 軌道のみを仮定する HL 模型や分子軌道法 (MO) はパウリ原理を満たし全エネルギーが低下するので一見正しそうであるが、 $T$  と  $V$  を別々に算出すると、運動エネルギーを下げる (電子雲を広げる) という方策であることが分かり、自然の摂理に反している。ハートリー・フォック法 (HF) はビリアル定理を満たし、正しく分子構築理由を表現する。拡散モンテカルロ法 (DMC) によれば、実験値も絶対値で精密に再現できる。

(eV)	条件	HL	MO	HF	DMC	実験値
$\Delta E$	負	-2.48	-2.88	-3.63	-4.75	-4.75
$\Delta T$	正	-5.01	-4.22	3.63	4.8(1)	
$\Delta V$	負	2.53	1.33	-7.27	-9.6(1)	
$-\Delta V/\Delta T$	2	0.5	0.3	2.0	2.0(1)	

精度の問題ではなく、正負が逆
絶対値で一致

原子 1 個と言え、水素原子以外は多体電子系であり厳密な意味では容易に解ける系ではないが、ハーマン・スキルマン法等で相当の精度の数値計算が可能である。その原子の電子状態を使い、分子や結晶の量子力学計算をするのがハートリー・フォック法を基本とする分子軌道法である。原子に対する近似以外はパラメータを使わないので、第一原理計算本来の計算法であり、高精度計算が可能である。とは言っても、精度を上げるためには原子数の 10 乗というレベルの計算量になってしまい、小さい原子系に限られる。

DFT は縮退のない基底状態に対する電子多体系の厳密な理論であり、多体問題の難しさは全て交換相関汎関数  $E_{xc}$  に込められている。対象電子以外の電子は環境 (衣) として扱い、 $n$  電子系の波動関数を 3 次元で記述出来るため、多数の原子を含む系への適用が容易である。実際の数値計算には何らかの  $E_{xc}$  を具体的に「与える」必要がある。コーン教授は一様分布電子系を想定した局所密度近似 (LDA=Local Density Approximation) を提案し成功している。直ぐに一般化勾配法 GGA が考案され、現在に至るまでこれらが DFT での標準となっている。

DFT は基底状態の理論なのだが、実験は基本的に励起状態を経由する。そのため、例えば、半導体の発光波数を決めるバンドギャップは荷電子帯の最上位準位から伝導電子帯の最下位準位間のエネルギー差として求められる。基底状態の理論の DFT ではこれが出来ない。しかし、入力に設定した準位数だけ対角化した後でエネルギー準位が得られるので、本当は意味のない伝導電子帯の最下位準位を使う。すると実験値より遙かに小さな値になってしまう。これはしょうがないことなのだが、ここで理論の適用範囲を逸脱し、どうせ分からないパラメータなのだからと  $E_{xc}$  をいじり、現象論的に実験値を再現する。LDA+U やハイブリッド汎関数である。計算量は  $O(n^6)$  と増大するが、GW 近似によって伝導電子帯の最下位準位のエネルギーを求める方が理論的には好ましい。最近ではファンデルワールス力の計算を  $E_{xc}$  によってパラメータ化するケースが見られるが、ファンデルワールス力は双極子励起状態間の相互作用であり、 $E_{xc}$  とは無関係である。我々は独自の全電子第一原理計算プログラム TOMBO (TOhoku Mixed Basis Orbitals *Ab Initio* Simulation Package)<sup>(3)</sup> に時間依存 DFT (TDDFT) を適用してこの問題解決に当たっている。

この様に第一原理計算は手法自体が未完であり、今後とも開発を継続しなければならない。計算機の進歩に合わせ、原子数を増やして実験的に興味ある物質に適用する。そのために並列化に膨大な時間をかける。もちろん、これも取り組まなければならない重要な課題であるが、DFT 自体の問題を解決してこそ初めて大規模系への適用の意義がある。

## 4. 具体的例題

### 4.1 イオン液体による瓦礫からの希少元素抽出

東日本大震災の被害として大量の瓦礫が発生した。この中には電子基板の様な有用元素が多量に含まれている場合があり、その抽出方策が東北発素材技術先導プロジェクト・希少元素高効率抽出領域 (リーダー中村崇教授) として検討されている。特

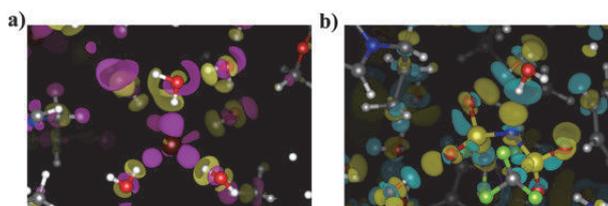


図 2. a) [Br]<sup>-</sup>負イオンを取り囲む水分子（紫は正で黄色は負電荷を表す）。

b) [NTF<sub>2</sub>]<sup>-</sup>負イオンを取り囲む水分子（黄色は正でシアンは負電荷を表す）。白、灰色、青、赤、茶色、緑、黄色の球は、それぞれ水素、炭素、窒素、酸素、臭素、フッ素、硫黄原子を表す。

にイオン液体を活用する抽出法に集中した研究を推進中である。その中で我々は理論計算を担当し、実験家との共同で有用イオン液体の探索業務に当たっている。<sup>(5)</sup>

イオン液体は実験室系では有用な物性を有するが、瓦礫処理の様な環境では直ぐに水蒸気を吸って劣化してしまう。我々は実験家との共同で、疎水性のイオン液体の探索とその理由を明らかにした。正負のイオンの組み合わせは膨大であり、実験のみでは迅速な開発が困難である。

イオン液体は極めて粘度が高く、その温度依存性も大きい。網羅的にイオン液体の粘度を測定することは実験のみでは困難な作業となる。特に親水性の場合には純粋なイオン液体ではなく水の混入した物質に対する測定になりかねない。そこで、我々は第一原理計算、古典分子動力学、及び流体計算を組み合わせて理論的に粘度を算定する定式化を行い、種々のイオン液体に適用している。図 3 に親水性 (IBr) 及び疎水性イオン液体 (ITF<sub>2</sub>) (イオン液体分子 10 対の系) に対する水分依存性のシミュレーション計算結果を示す。

最終目的である希少元素の抽出に関しては、主として負イオンに各種リガンドを付加したイオン液体を対象とした実験・理論的取り組みを行っている。特に、実験的に困難とされて来たロジウム (Rh) の高効率抽出剤探索を集中的に行っている。

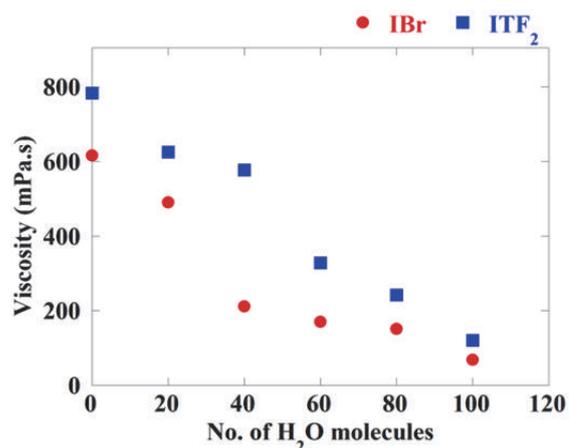


図 3. IBr 及び ITF<sub>2</sub> の粘性の水分依存性の計算結果

## 4.2 ペンタグラフェン

実験的には見つからない新物質を第一原理シミュレーション計算によって設計した例題としてペンタグラフェンを取り上げる。<sup>(6)</sup> 炭素の作る安定構造にはダイヤモンドとグラファイトがあると長年教科書に書かれて来た。しかし、1985 年、炭素のナノ構造体である C<sub>60</sub> フラーレンが見つかったこの概念が崩れ、その後、ナノチューブ、グラフェン (グラファイトの 1 層分の 2 次元構造体) と進展してきた。グラフェンに関する研究が盛んになされ、理論の論文数もうなぎ登りである。フルーレンがサッカーボールの縫い目の重なり位置に原子がある構造であり、五員環は隣り合うことがないことから IPR (=Isolated Pentagon Rule) が成り立つと信じられるようになった。炭素ナノ構造体を扱う教科書にも IPR が登場する。しかし、人間が作る規則には限界がある。我々は五員環のみで構成されるペンタグラフェンが安定構造であることを理論的に証明し、IPR の破綻を示した。図 4 に 3 次元プリンターで作成したペンタグラフェンの模型を示す。

ペンタグラフェンは特徴的な興味ある物性を示す。その一つが負のポアソン比である。通常物質のポアソン比は正で、ある方向に引っ張れば、体積保存のため、それに直交する 2 方向は縮む。ペンタグラフェンでは、五角形という幾何学が優先し、2 次元面内の一方向に伸び縮みさせると、その垂直方向も同様に伸び縮みする。もちろん、3 次元的には

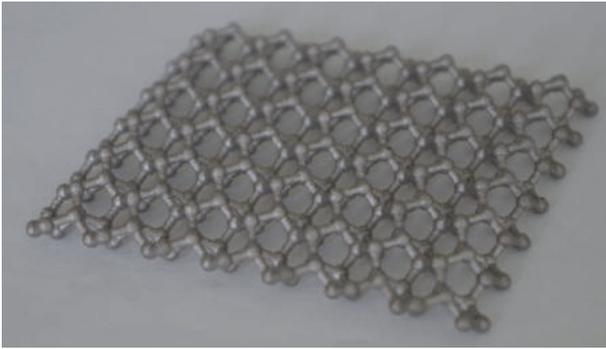


図4. 3D プリンターで作成したペンタグラフェンの模型。金属の質感があり、「実物」を手にとってみると五角形構造がよく分かる。

厚さが減ったり増えたりして補填している。

我々が第一原理計算によって提案する実験的には見つからない物質が存在するはずである、と言いきれる理由は、エネルギー的、動的、熱的な安定性をシミュレーション計算で確認できるからである。特に、物質の動的安定性を格子振動計算で確認する方法は、我々の定式化と最初の論文で示され、その後、一般化した。<sup>(7)</sup> 実験結果がある場合には、その説明、解析という立場であるが、第一原理計算には予言能力があり、今回の様な新規構造体を実験家に提案することが出来る。(さらに厳密には、クーロン力で相互作用する粒子からなる多体系の必要条件であるビリアル定理及びカस्प条件も確認する。) 現在、数グループで実験的な合成が試みられている。筆者は原子核・素粒子理論で博士課程を修了したが、そこでは明らかに理論先行で、実験は理論家の予言の確認に当たる。それに比べ、物性物理、量子化学、バイオ系では、理論は実験の説明という立場が通常であり、何とか抜本的なパラダイムシフトを実現したい。

ペンタグラフェンは完全に 2 次元ではなく、1.3 Å の「厚み」を持つ「薄膜」である。タイルの敷き詰め問題では三角、四角、六角形のみが可能で、正五角形では隙間が出来てしまう。それがちょっと厚みを持たせれば敷き詰め可能になる、というのは幾何学的にも興味を持たれ、さらには建築やデザイン

でもペンタグラフェン(構造)が注目される様になった。

## 5. 処理効率

我々が研究対象としている問題に対して、SX-ACE の処理効率をノード数の関数として、第一原理シミュレーション計算で標準的に用いられている VASP(Viena *Ab Initio* Simulation Package)コード<sup>(8)</sup> を用いて確認した。

1-Butyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethylsulfonyl) amide ([BMIM]<sup>+</sup> [NTF<sub>2</sub>]<sup>-</sup>)イオン液体を具体的対象とした。[BMIM]<sup>+</sup> [NTF<sub>2</sub>]<sup>-</sup> の 10 単位を含む単位胞内で原子構造を最適化した。それには 25 回の原子位置移動のサイクルが必要となった。計算対象の全原子数は 400 個(水素=150, 炭素=100, 窒素=30, 酸素=40, フッ素=60, 硫黄=20)であり、DFT 計算としては大規模系に分類される。原子数が多いので  $\Gamma$  点のみで計算し、標準的なパラメータ設定として電子の交換相関相互作用に PBE の GGA 近似を用いた。電子系の収束には共役勾配(CG=Conjugate Gradient)法を用いた。ノード内の全 4 コアを用いて、同一問題に対して、1 ノードから 128 ノードまで計算を実行した。25 回で原子の最適構造を得るまでの時間をノード数(コア数=ノード数×4)の関数として図 5 に示す。

SX-ACE 用にチューニングしたコードであるが、DFT 計算の特性から最適な並列度は 16 ノードに留まる。特に問題にすべきはターンアラウンド時間が 16 ノード以上では短縮せず、128 ノードを使った場合には数倍に跳ね上がる。これはノード間通信が増大するからであり、明らかに資源の無駄使いとなる。この例では、16 ノードを使うのが最適ということになる。

図 6 に、図 5 に示した計算のターンアラウンド時間を示す。ウォールクロックから算定したので利用状況によるが、およそ図 1 の 4 分の 1 になっており、ノード内でコアごとの均一処理がなされたことが分かる。

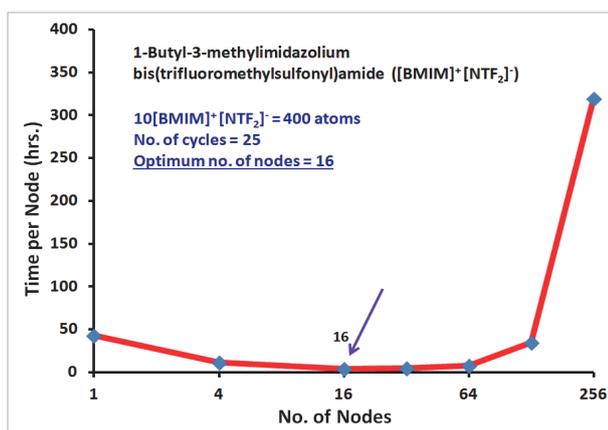


図5. ノード数の関数として同一計算を実行した場合のノードごとの計算時間を示す。1 ノードに比べ、16 ノードでは各ノードが約 10 分の 1 の計算時間になり、並列化が有効に効いている。400 原子を含むこの系では 16 ノードが最適ということになる。

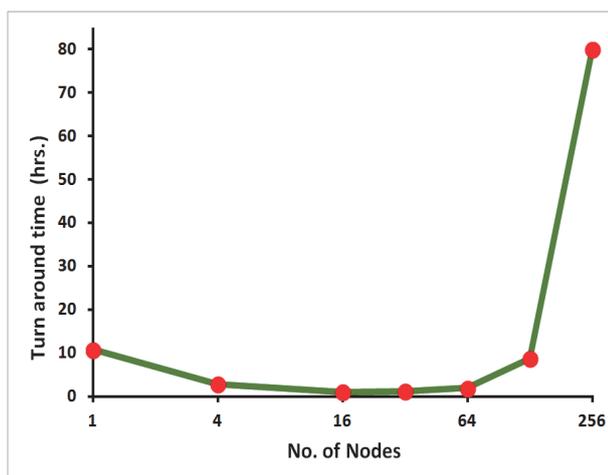


図6. ノード数の関数として、ターンアラウンド時間を示す。4 コア構成の 1 ノードなので理想的には図5の4分の1の時間になるはずである。待ち時間の意味でも 16 ノードが最適であり、それ以上は資源の無駄使いと言える。他の利用者にも多大の迷惑をかけるので、自分のジョブの最適な実行を確認しながら計算すべきである。

図7に、1 から 128 ノードを使った計算におけるノードごとに使った最大メモリーサイズを示す。1 ノードの場合の約 6.5GB が、4 ノードでは各ノードで半減する。ただし、全体としては倍増している。それ以上のノードを使う計算を実行するとノード

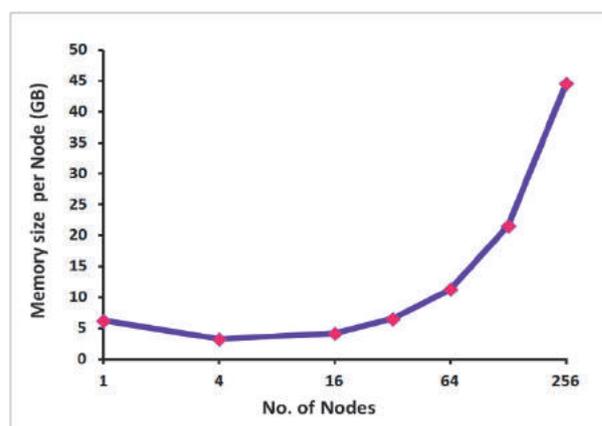


図7. ノードごとに使った最大メモリーサイズを示す。1 ノードで実行した場合の約 6.5GB が、4 ノードでは各ノードで半減(全体としては倍増)するが、それ以上のノードを使うとノードごとのメモリーサイズが増え始め、128 ノードでは 20GB を超える(全体では 3TB に近い)。SX-ACE では最大使っても 1 ノードで 64GB なので、これ以上は物理的にもメモリー不足になって実行できなくなる。

ごとのメモリーサイズが増え始め、128 ノードでは 20GB を超える。これは全体では 3TB に近い単一ノードの 500 倍のメモリー量を使ったことになる。並列処理の問題として、このように膨大な(分散処理するための)メモリー量の発生がある。メモリーが低価格したと言ってもこのレベルの量になるとやはり高価であり、ネットワーク系も含め、計算実行に当たっては資源の無駄遣いにならないことを意識すべきである。他の問題として、SX-ACE の 1 ノードのメモリーは 64GB なので、これ以上のメモリー量が必要になると、物理的にもメモリー不足になって計算が実行できなくなる(システムが数 GB 使うので実際はもっと少ない)。これは深刻な問題で、高精度の DFT 計算が扱える原子数は限定されてしまう。

DFT の計算時間は  $O(n^3)$  ( $n$ =電子数)で増えるので、1 ノードのメモリー64GBを最大限に使う計算は(手法で異なるが、必要メモリー量を  $O(n^2)$  とすると、この例題から算定して、3 倍の原子数(1200 個)が可能であるが、ターンアラウンド時間は 10 日程になる。もちろん並列化効率が上がるので、より多く

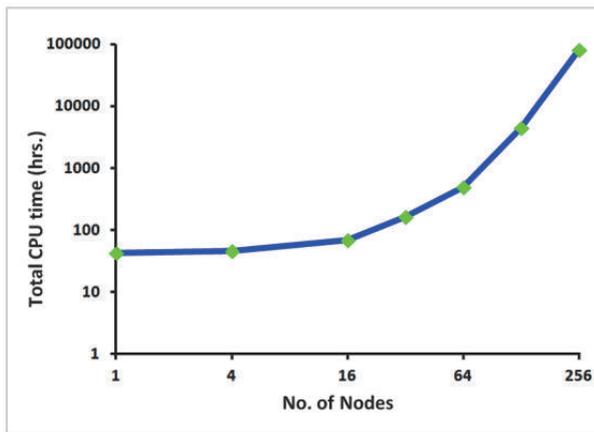


図8. 全 CPU 時間をノード数の関数として示す。1 ノードで約 43 時間で終了したジョブが、256 ノードでは総計では 2,000 倍近くの CPU 時間を消費する。高価なスパコンを活用する限り、このような無駄使いは慎むべきである。(すみませんが、このテスト計算は許して下さい。)

のノードを効率良く使えるようになる。とは言ってもそんなには変わらない。

図8は総資源利用量である。1 利用者としてはターンアラウンド時間が短ければ嬉しい。その意味で、この問題では 16 ノードが最適である。しかし、高価なスパコンは他人数でシェアして活用するのが基本である。この図の示すことは、多数の利用者が待ち状態にある場合には 1 ノードによる実行が全体としては最も好ましいことになる。極論すれば、ノードをバラバラに使う、となると高価なノード間接続が不要になり、スパコンのコストは大幅に削減出来る。

## 6. まとめと今後の課題

大規模数値計算の 2 つの代表と言われるのは第一原理計算と流体計算である。スパコンの進展により流体計算はメッシュ数が膨大に取れるようになり、計算精度は上がったがメッシュ作成が大問題になっているという程の長い歴史を有する「枯れた」手法である。一方、第一原理計算は名前に反して現象論に走っている。実験値の説明は可能でも、未知の材料・物質の設計には問題がある。さらに、ク

ロン相互作用の特徴として要素ごとの切り分けが出来ず、多数のノード・コアを使っても効率向上が難しい。細線化とコア数増大によるカタログ性能向上のみでは、実験家が興味を持つ対象を扱う「有用な」計算を行おうとすると、今後とも第一原理計算は現象論に走らざるを得なくなる。Power6 で達成した 5GHz の上に行く高速クロックの計算機の開発により、第一原理計算の抜本的進展可能性を期待する、しかし、科学技術専用機の開発は経費上無理で結局、金融関係に適した計算機を使わざるを得ない。原理的に高精度計算が可能で、しかも並列計算効率の良い第一原理計算手法の開発を継続しなければならない。

謝辞

HPCI での大阪大学サイバーメディアセンターの利用により、参考文献(4)及び(5)等に発表した成果を得た。計算実施に当たり、種々のご支援をいただいたことに感謝する。

参考文献

- (1) Computational Materials Science, K. Ohno, K. Esfarjani, and Y. Kawazoe, Springer Series in Solid-State Sciences 129 (1999).
- (2) Unified Interpretation of Hund's First and Second Rules for  $2p$  and  $3p$  Atoms, Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara, J. Chem. Phys., Vol. 133 (2010) pp.16411301-16411319
- (3) Diffusion Monte Carlo Study of Correlation in the Hydrogen Molecule, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara, Int. J. Quantum Chem., Vol. 107 (2007) pp.1459-1467 ; 磁性の根源-85 年も続いた誤解-, 川添良幸、金属 Vol. 84 (2014) 690-702.
- (4) TOMBO: All-electron Mixed-basis Approach to Condensed Matter Physics, Shota Ono, Riichi Kuwahara, Yoshihumi Noguchi, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno, Computer Physics Communications, Vol. 189 (2015) pp. 20-30.
- (5) Solvation Mechanism of Task-Specific Ionic Liquids in Water: A Combined Investigation Using Classical Molecular Dynamics and Density Functional Theory,

Yuvaraj, Surya V. J.; Zhdanov, Ravil K.; Belosludov, Rodion V.; Belosludov, Vladimir R.; Subbotin, Oleg S.; Kanie, Kiyoshi; Funaki, Kenji; Muramatsu, Atsushi; Nakamura, Takashi; Kawazoe, Yoshiyuki *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*, Vol. 119 (2015) pp. 12894-12904.

(6) Penta-graphene: A new carbon allotrope, S. H. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. H. Chen, Y. Kawazoe, and P. Jena, *Proc. Natl. Acad. Sci.* (IP=9.674) Vol. 112 (2015) pp. 2372-2377.

(7) First-Principles Determination of the Soft Mode in Cubic ZrO<sub>2</sub>, K. Parlinski, Z. Q. Li and Y. Kawazoe, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 78(1997) pp.4063-4066.

(8) G. Kresse and J. Hafner, “*Ab initio* molecular dynamics for liquidmetals,” *Phys. Rev. B* 47(1993) pp. 558–561; G. Kresse and J. Furthmuller, “Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set,” *Phys. Rev. B* Vol. 54 (1996) pp. 11169–11186.

資料 1

図 1 から 4 までのグラフの元データ

No. of Nodes	No. of Cores	Total CPU time (sec)	CPU time per node (sec)
1	4	155655	155655
4	16	167308	41827
16	64	252329	15770
32	128	587922	18372
64	256	1800429	28131
128	512	16108900	125850
256	1024	294096428	1148814

No. of Nodes	No. of Cores	Total available Memory (GB)	Total Used Memory (GB)	Memory size per node (GB)
1	4	60	6.25	6.25
4	16	240	13.25	3.31
16	64	960	67.50	4.21
32	128	1920	210.00	6.56
64	256	3840	724.00	11.31
128	512	7680	2760.07	21.56
256	1024	15360	11408.03	44.56