

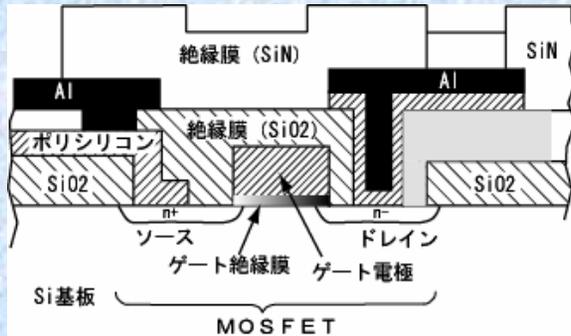
コメント

- ともかくもでかい計算をしたい
- 量子論的な計算をしたい
- 現象を予測できる精度の計算をしたい

なぜ？

そんなこと...しなくてもいいでしょ
世の中にはもっと楽しいことあるでしょ

シリコンテクノロジーと計算科学



1 nm のゲート絶縁膜
5 nm のゲート長



性能・機能の設計は
量子論の領域

粒子性と波動性を併せ持つ
量子論的電子が我々の生活
を支えている

10,000 - 100,000 原子群に対する量子論的シミュレーション



More Moore (微細化)
Gordon Moore:
集積度 (性能) は
More than Moore (ポストスケールリング)
2年で倍増
+
Nano electronics

スケールング則:

トランジスタの平面・縦方向の寸法を $1/n$ にすると、
動作速度は n 倍、消費電力は $1/n^2$

新構造

SOI、多ゲートトランジスタ、
縦型トランジスタ、歪み Si/Ge

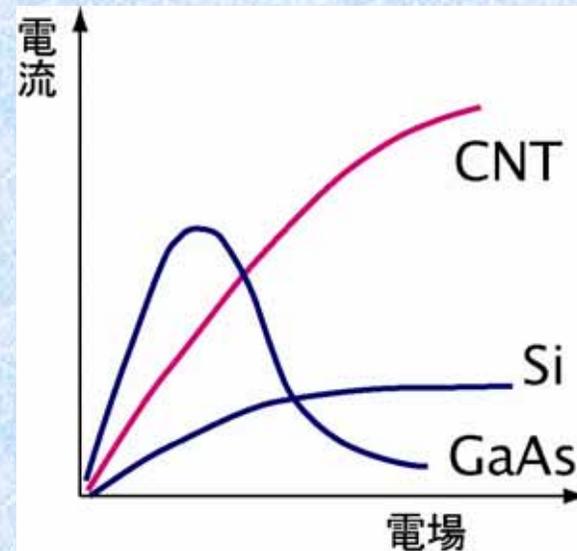
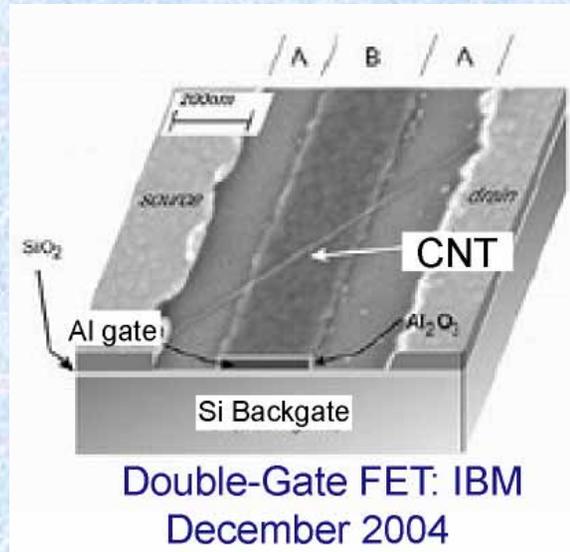
新現象

準バリスティック伝導

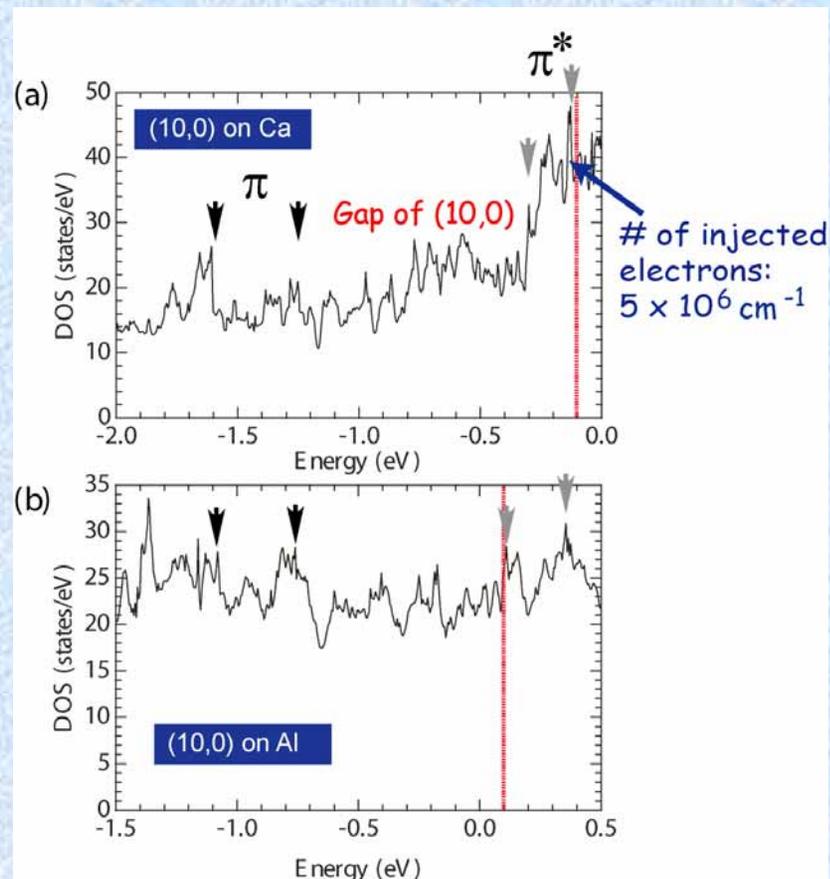
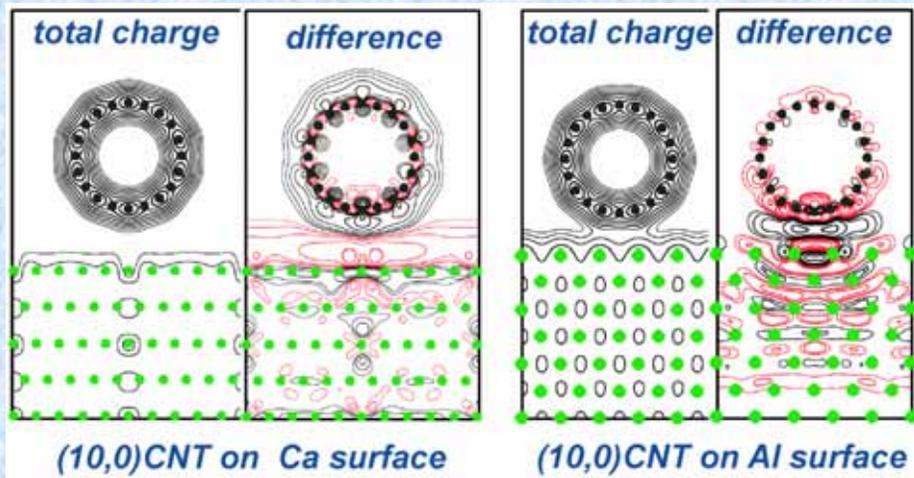
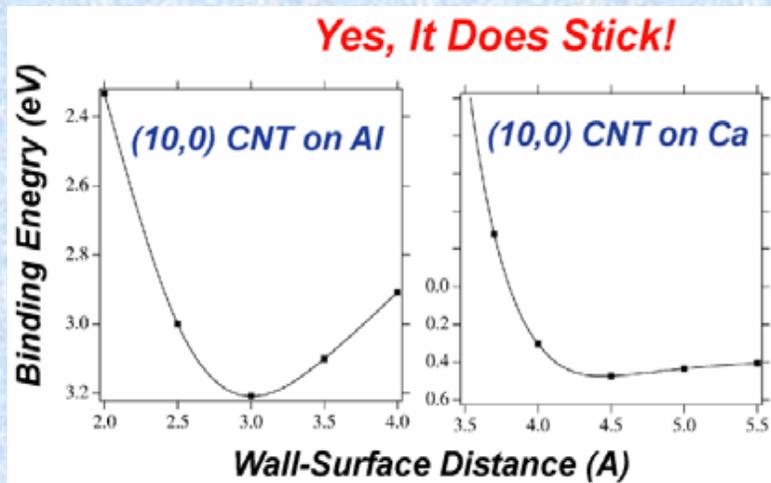
新材料

高誘電体膜 (high k)、低誘電体膜、
... 炭素ナノチューブ?

Carbon Nanotube as a Technology Booster

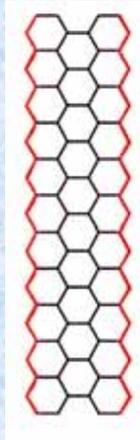
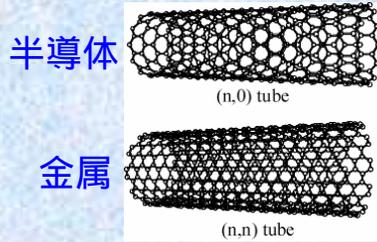


CNT on Metal



[Okada & Oshiyama: Phys Rev Lett 95, 206804 (05)]

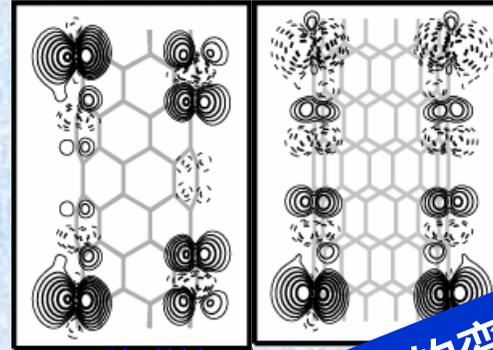
ナノにおける形状と機能



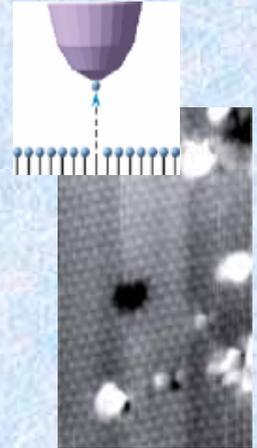
ジグザグ端グラフェンの
エッジ状態



ジグザグCNTは磁石



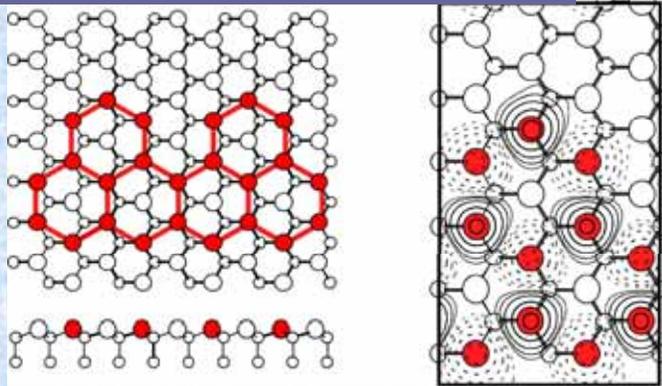
シリコン表面でも



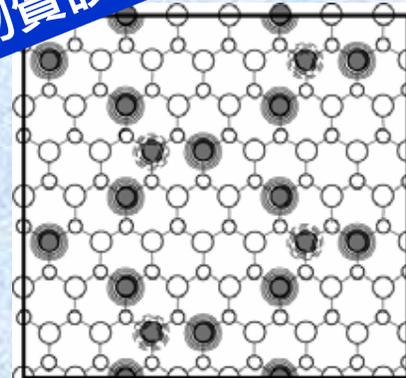
ナノ形状制御による量子論的変調
物質設計の新要素

[Okada & Oshiyama: PRL 87, 1510 (03)]

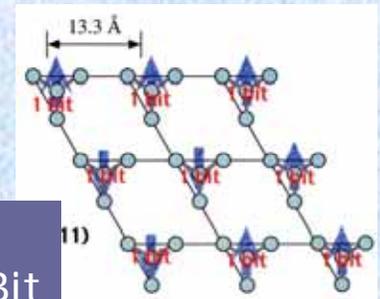
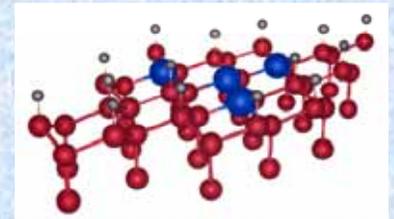
量子デザインで表面フェリ磁性
スピントロニクス



[Okada, Shiraishi & Oshiyama: PRL 90, 026803 (03)]

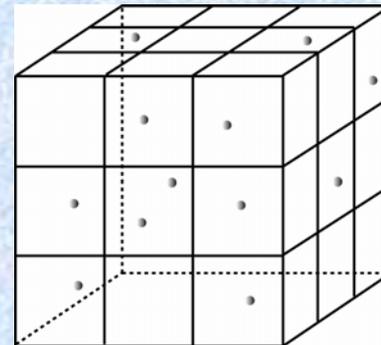


ダングリングボンドを
デザインして究極の100 PBit



RSDFT の利点

- Locality is naturally and easily utilized.
- FFT is unnecessary in Hamiltonian operation.
- Easy to implement with parallel processing.
 - A real-space cell corresponds to each processor
- Flexible boundary conditions
- Toward $O(N)$ using density matrix scheme



- *Our real-space code with several techniques is faster than our plane-wave code by 4 times*

RSDFTのパフォーマンス

Si-1000 by RSDFT	SX-7/IMS (8.83GF, 256GB)	SX-8/1B_64GB/s (16GF, 64GB)	SX-8/1B_32GB/s (16GF, 32GB)
User Time	11424.6136	5208.2036	6624.3151
Sys Time	16.9656	26.0517	39.3449
MFLOPS	5781.1822	12681.4872	9970.5051
Memory (MB)	14272.0312	14144.0313	14144.0313
Bank(sec)	388.2055	33.5614	2565.1330



実行性能: 79.25%

RSDFTの並列マシンにおけるスケーリング

筑波大学PACS-CS

- ピーク性能: 14.3 Tflops (2.8GHz CPUを想定)
- プロセッサ数: 2560 CPU

	計算時間	隣接通信時間	全体通信時間	メモリ量/CPU
RSDFT-CG	N^{**3}/P	$N(N/P)^{**}(2/3)$	$N^{**2} \ln P$	N^{**2}/P
RSDFT-RM	to N^{**2}/P	$N(N/P)^{**}(2/3)$	$N^{**2} \ln P$	N^{**2}/P

RSDFT-CG

- PACS-CS 2000 CPU: a single SCF for 15,000 Si atoms
70 hours

RSDFT-RM

- PACS-CS 2000 CPU: a single SCF for 15,000 Si atoms
1000 secs
- PFLOPS マシン: a single SCF for 150,000 Si atoms
500 hours

N: 系のサイズ
P: プロセッサ数

密度汎関数法計算の次世代コンピュータへの期待

10PFLOPS できること:

- 100,000原子DFT計算(1点)は22x 100 hours = 92日
- 10,000原子DFT計算(1点)は2,3時間: ということは,
 - 構造最適化(物質デザインに欠かせない)、コンビナトリアル物質探索(常行談)
 - 1000 MD ステップ、サンプリング、統計的处理
- 1,000 原子超精密計算: Post LDA, Post GGA
 - 強相関系(相互作用のゆらぎの問題)、励起状態、電子励起と原子移動

計算機アーキテクチャについて:

- ベクトル並列 vs 超並列...
 - いずれにしても、低消費電力・高性能のデバイスができないことには(ハードのブレークスルー)
- 専用エンジン?
 - 多変数関数最小化エンジン、GS直交化エンジン、実空間Poisson解法エンジン