

研究会「大規模シミュレーションと数理アルゴリズム」

1、はじめに (星健夫)

- はじめに(会の概要説明)
- Application-Algorithm-Architecture Co-design
~ 大規模電子状態計算を例として~

研究会「大規模シミュレーションと数理アルゴリズム」

世話人：星健夫（鳥取大）・松尾宇泰（東大）

運営：星健夫（鳥取大）・松尾宇泰（東大）・張紹良（名古屋大）

運営協力：相島健助・宮武勇登（東大）

※本研究会の一部は、下記プロジェクトによって運営されています。

科研費新学術領域（コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス）

「計算物質科学の基盤となる超大規模系のための高速解法」

「新しい数理手法による大自由度物理計算アルゴリズム」

JST-CREST（ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出）

「ポストペタスケールに対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発」

鳥取大学学長経費プロジェクト

「スーパーコンピューティング物理科学研究拠点の形成」

研究会「大規模シミュレーションと数理アルゴリズム」

「ニーズ・シーズ」型研究会

ニーズ側講演(天能・矢花・小野)

→物理・化学分野の

実アプリケーション

→電子系。一部、原子核系

シーズ側講演(曾我部・宮田・山本)

→数理アルゴリズム

→大行列ソルバー

(固有値問題・シフト型線形方程式)

50分講演 (talk25分＋discussion25分)

Application-Algorithm-Architecture (A-A-A) Co-design ～ 大規模電子状態計算を例として～

星健夫 鳥取大学 JST-CREST(PostPeta)

- 1、背景：大規模電子状態計算コード「ELSESES」
- 2、「物理計算エンジン」(として実アプリをとらえる)
- 3、Application-Algorithm-Architecture co-designのための課題
- 4、付：数理ソルバー以外のニーズ
→大容量データを人間が扱うための情報技術
- 5、まとめ

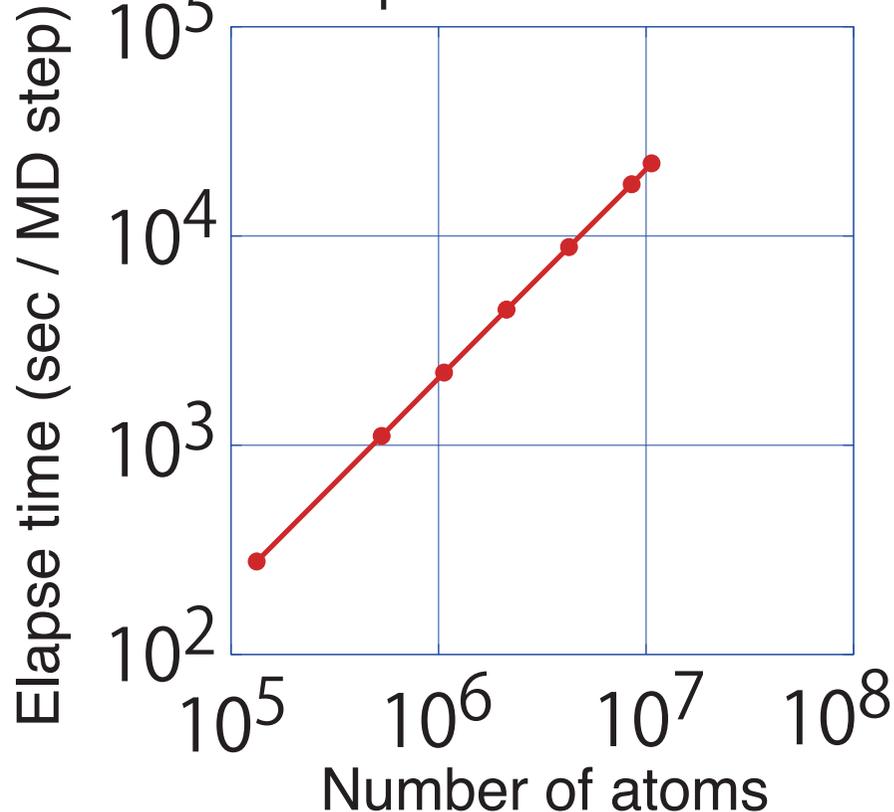
'ELSES' : Our code for 'order- N ' electronic structure calculations

(ELSES = Extra Large-Scale Electronic Structure calculation)

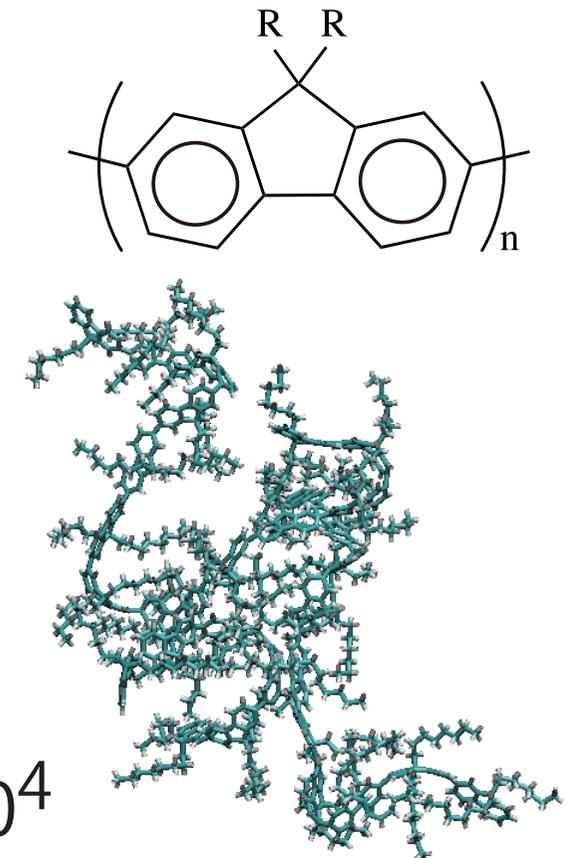
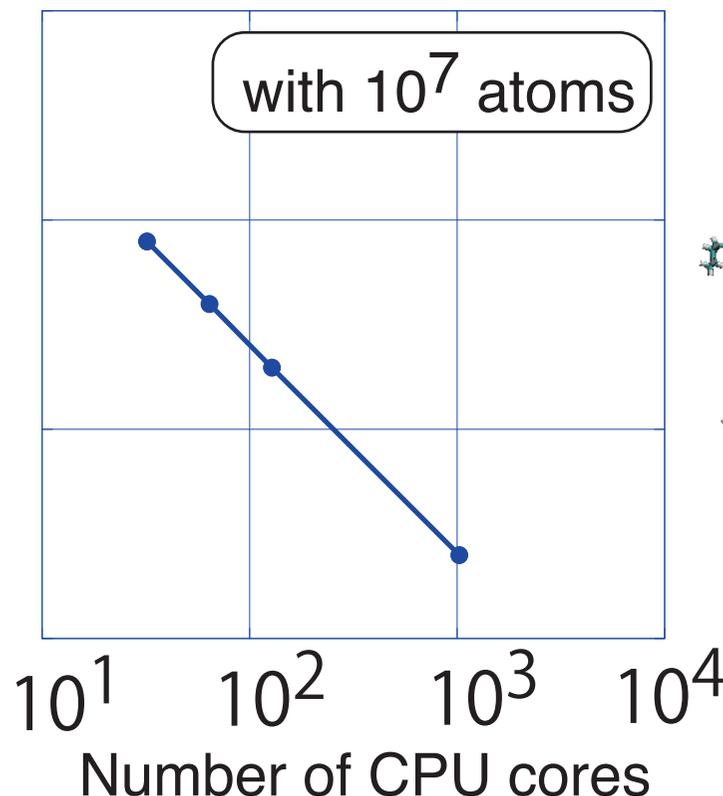
Hoshi *et al.*, J.Phys. Condens. Matt. 24, 165502, (2012)

Benchmark for amorphous-like conjugated polymer; poly-(9,9 dioctyl-fluorene)

(a) 'Order- N ' scaling
upto 10^7 atoms



(b) Parrallel efficiency
upto 1,024 cores



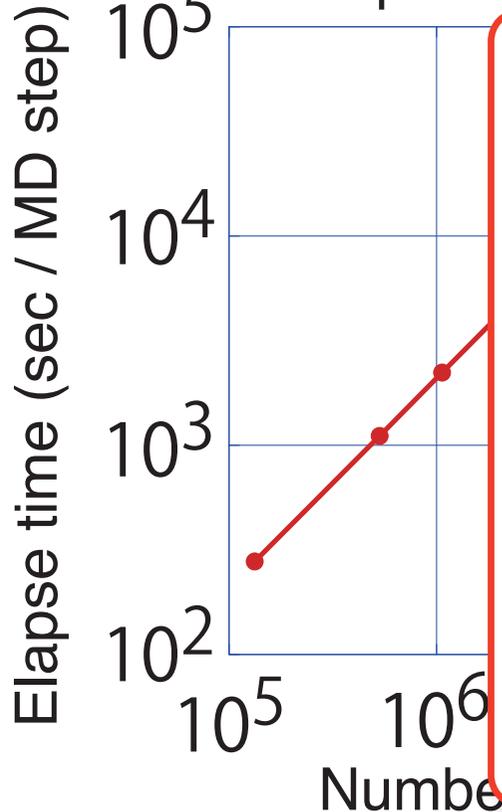
'ELSES' : Our code for 'order- N ' electronic structure calculations

(ELSES = Extra Large-Scale Electronic Structure calculation)

Hoshi *et al.*, J.Phys. Condens. Matt. 24, 165502, (2012)

Benchmark for amorphous-like conjugated polymer; poly-(9,9 dioctyl-fluorene)

(a) 'Order- N ' scaling
upto 10^7 atoms



(b) Parrallel efficiency
upto 1,024 cores

- Original linear-algebraic order- N algorithms (multiple Arnoldi method) for generalized eigen-value equation

$$H\phi = \epsilon S\phi$$

- Applicable to both metals and insulators
- Modelled (TB-type) Hamiltonians based on *ab initio* calculaiton



‘ELSEES’の応用研究:主に10nm系の構造(変化)

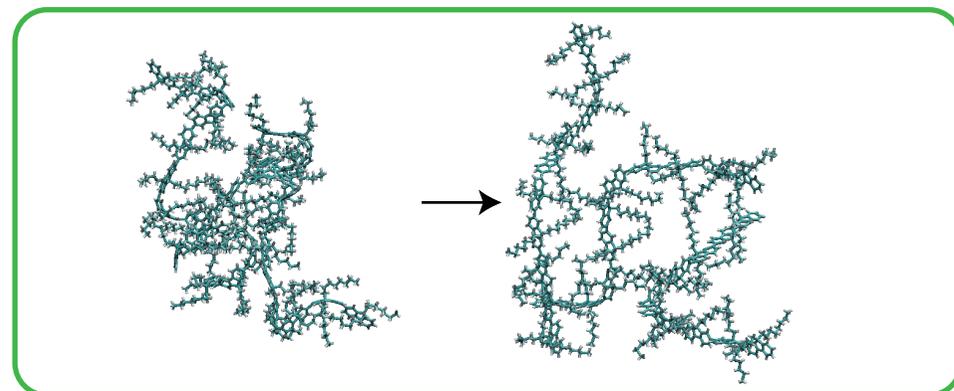
→産学連携・新物質(日本発)・基準物質

最近の例(産学連携)

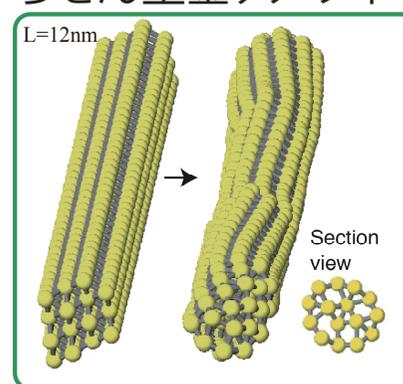
- ・アモルファス状有機EL高分子* →
- ・リチウム系**

*星健夫(鳥取大),
西野信也(東京大),
善甫康成(法政大),
石田雅也(住友化学)
山元進(東京工科大),
藤原毅夫(東京大),
曾我部知広
(愛知県立大),
張紹良(名古屋大),
ISTCP-VII, Waseda
(2011)など。

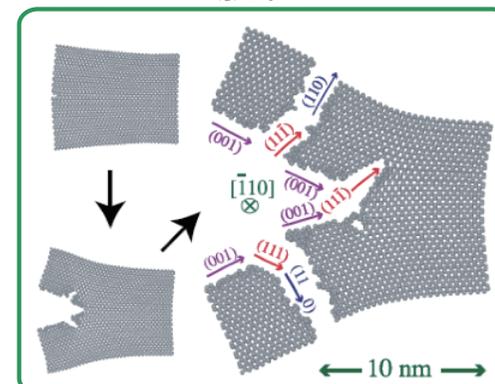
**西野信也(東大),
藤原毅夫(東大),
山崎久嗣
(トヨタ自動車),
山元智(豊田中研),
山元進(東京工科大),
星健夫(鳥取大),
SSI18, Warsaw
(2011);
日本物理学会(2011),
電池討論会(2011),
など。



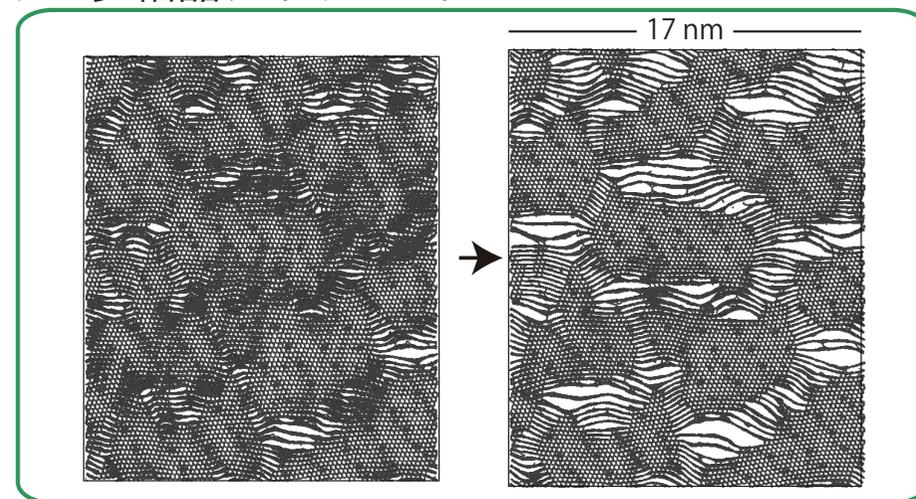
らせん型金ナノワイヤ



シリコン脆性



ナノ多結晶ダイヤモンド



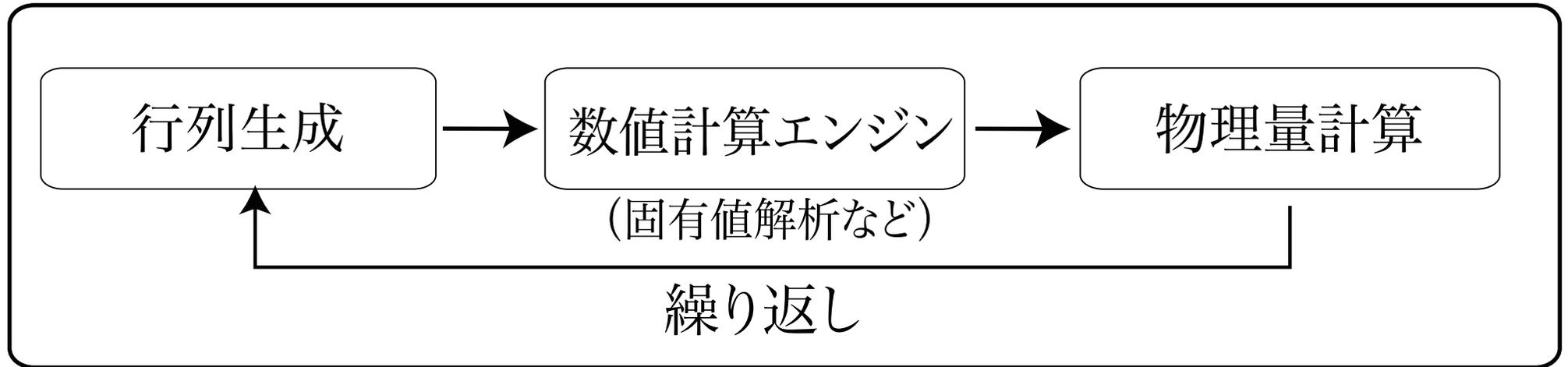
Application-Algorithm-Architecture (A-A-A) Co-design ～ 大規模電子状態計算を例として～

星健夫 鳥取大学 JST-CREST(PostPeta)

- 1、背景：大規模電子状態計算コード「ELSESES」
- 2、「物理計算エンジン」(として実アプリをとらえる)
- 3、Application-Algorithm-Architecture co-designのための課題
- 4、付：数理ソルバー以外のニーズ
→大容量データを人間が扱うための情報技術
- 5、まとめ

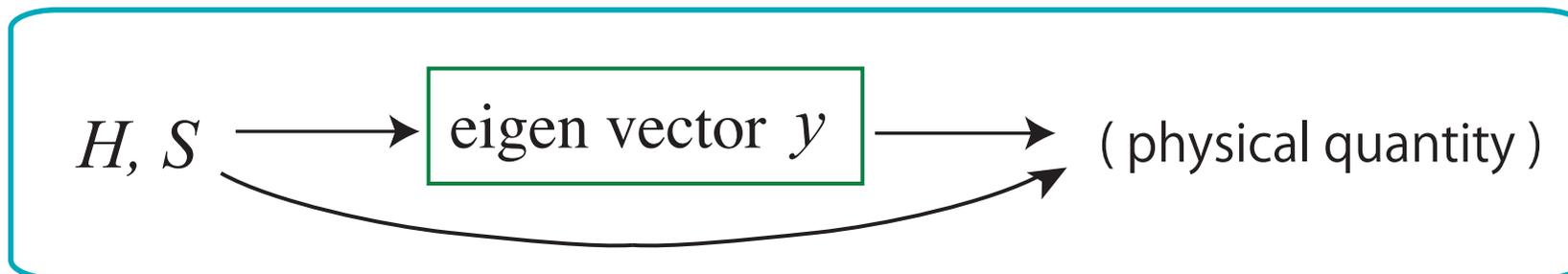
「物理計算エンジン」としてのアルゴリズムデザイン

→「物理計算エンジン」・・・行列生成+数値解析エンジン+物理量計算、を一体化して考える。



→物理量(目的)ごとに、最適なアルゴリズムを構築できる可能性

(注:固有値・固有ベクトルは、中間データに過ぎない)



物理量(目的)ごとに、最適なアルゴリズムを構築(したい)

→物理量(目的)ごとに、最適なアルゴリズムを構築

→物理(目的)の典型例:

(1) エネルギーとフォース(物質の構造と構造変化)

→Traceでかける物理量

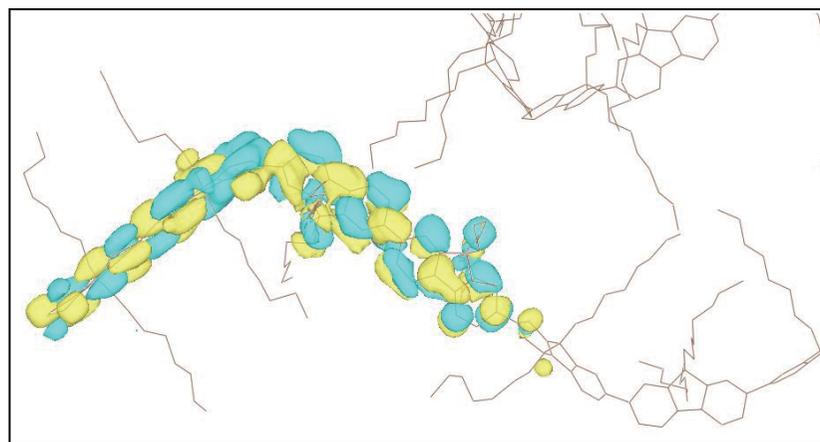
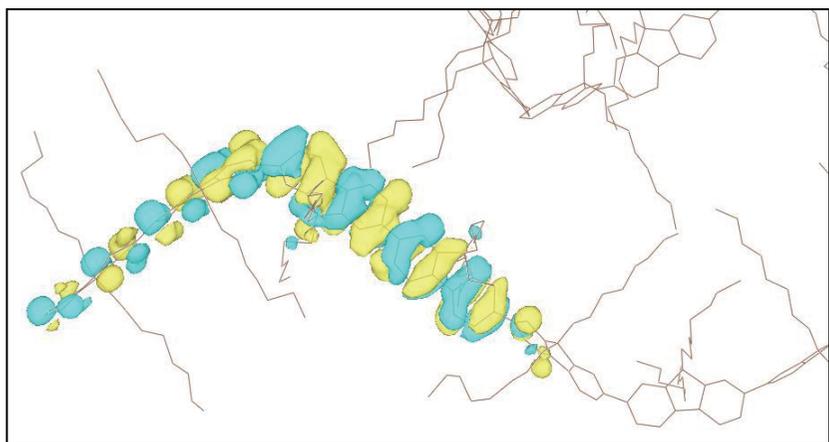
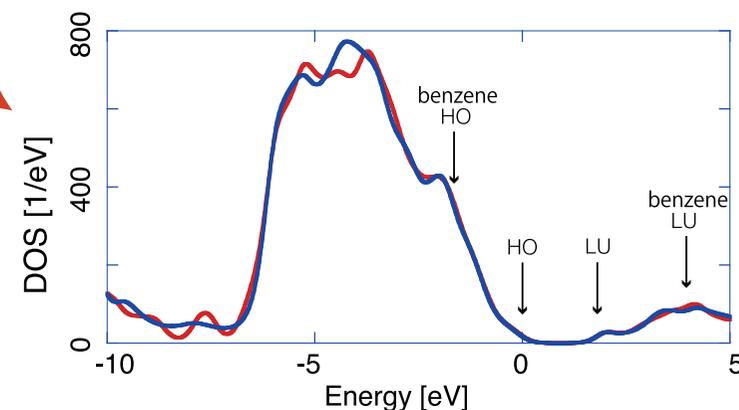
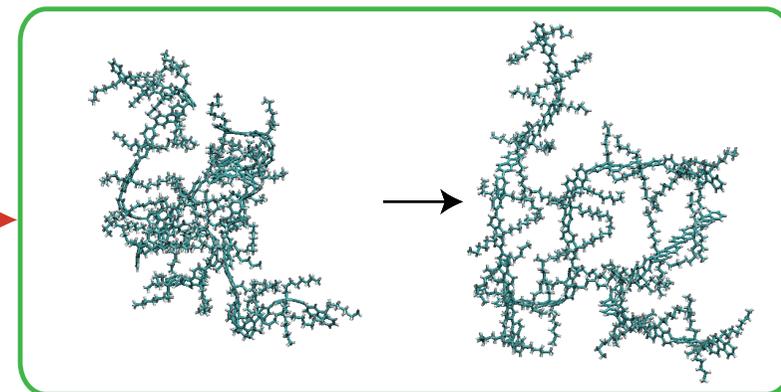
(2) 電子状態スペクトラム(DOS, LDOS, COHP)

→(射影した)固有値分布ヒストグラム

(3) 特定の(少数)固有値・固有ベクトル

(HOMO, LUMOなど)

→中間固有値問題



派生する大行列数値問題の例

- (特殊な)一般化固有値問題: $H\mathbf{y} = \varepsilon S\mathbf{y}$
 H, S : real symmetric ($\in \mathbb{R}^{N \times N}$), S : positive definite,
→ (a) 疎行列解法 or 密行列解法, (b) $S = I$ or $S \doteq I$,
- 一般化シフト型線形問題*: $(H - zS)\mathbf{x}(z) = \mathbf{b}$ (z : complex)
- 時間依存 (繰り返し) 型の一般化固有値問題
Type I: $H=H(t), S=S(t)$, Type II: $H=H(t), S:\text{const.}$
- 中間固有値問題
- 超並列型計算機の活用 → 多段型 (階層的) 並列性

アルゴリズムは汎用→多分野計算における共通パーツとしての可能性

ex. Shifted Conjugate-Orthogonal Conjugate-Gradient(sCOCG)法

Takayama, Hoshi, Sogabe, Zhang and Fujiwara, PRB73,165108(2006)

電子状態計算

一体問題→ELSESへ実装。(ナノ構造)

多体問題→ Full-CI型計算(6400万次元計算)*

(多軌道拡張ハバードモデル; $\text{La}_{3/2}\text{Sr}_{1/2}\text{NiO}_4$)

*S. Yamamoto, et al. PRB76, 165114 (2007); JPSJ. 77, 114713 (2008).

Application-Algorithm-Architecture (A-A-A) Co-design ～ 大規模電子状態計算を例として～

星健夫 鳥取大学 JST-CREST(PostPeta)

- 1、背景：大規模電子状態計算コード「ELSESES」
- 2、「物理計算エンジン」(として実アプリをとらえる)
- 3、Application-Algorithm-Architecture co-designのための課題
- 4、付：数理ソルバー以外のニーズ
→大容量データを人間が扱うための情報技術
- 5、まとめ

Applicaton-Algorithm-Architecture (A-A-A) co-designのための課題

- (1) 数学的には特殊だが、応用的には汎用な、数理的問題
- (2) 複合型ソルバー
- (3) 自動最適性の研究
- (4) コードの共有→「擬似アプリ」
- (5) くりかえし計算全体での高速化

Applicaton-Algorithm-Archctecture (A-A-A) co-designのための課題

(1) 数学的には特殊だが、応

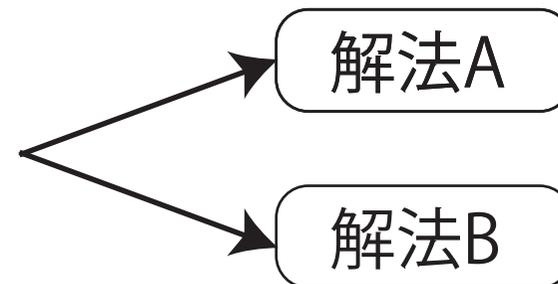
(2) 複合型ソルバー

(3) 自動最適性の研究

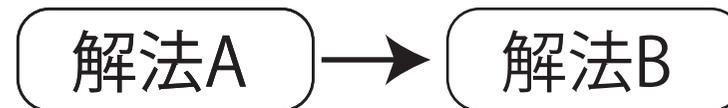
(4) コードの共有→「擬似ア

(5) くりかえし計算全体での高

(a) 選択型



(b) multi-stage型



Applicaton-Algorithm-Archctecture (A-A-A) co-designのための課題

- (1) 数学的には特殊だが、応
- (2) 複合型ソルバー
- (3) 自動最適性の研究
- (4) コードの共有→「擬似ア
- (5) くりかえし計算全体での

- 自動最適化技術(Auto-Tuning)
→種々のマシン環境に対応
(PC ~ スパコン)
→競合要因
- (a) 演算コスト
 - (b) 通信コスト
 - (c) メモリコスト
 - (d) 人的コスト(手間)

電子状態計算における自動最適性保証への需要

(自動チューニング技術)

→競合要因:

(1)演算コスト (2)通信コスト (3)メモリコスト (4)人的コスト(手間)

背景

1, (利用者人口) \gg (開発者人口)

→ブラックボックス的に利用できることが期待される

2, パソコンからスパコンまで、広く使われる

(cf. クラウド型計算サービス)

3, 計算手法(基礎方程式など)が多様

電子状態計算における自動最適性保証への需要

(自動チューニング技術)

→競合要因:

(1)演算コスト (2)通信コスト (3)メモリコスト (4)人的コスト(手間)

実例

(a) 省通信型

→ノードごとに必要な行列成分を冗長に生成

(b) 省メモリ型

→大きな配列を保存せず、使うたびに再計算

(例:10万原子系でのメモリ量:12GB→1GB)

Memory-saving scheme

for 100K atom of nano-polycrystalline diamond
reduction of the required memory : 12GB→1GB

→ The Green's function G (a large array)
is not stored in the memory but will be recalculated

The work flow

$(H,S) \rightarrow G \rightarrow \mu \rightarrow (\text{recalc of } G) \rightarrow \rho$

μ : chemical potential

(determined by the bisection method)

ρ : density matrix (calculated from G & μ)

$$\rho_{ij} = \frac{-1}{\pi} \int f(\varepsilon) G_{ij}(\varepsilon + i0) d\varepsilon$$

Applicaton-Algorithm-Architecture (A-A-A) co-designのための課題

- (1) 数学的には特殊だが、応用的には汎用な、数理的問題
- (2) 複合型ソルバー
- (3) 自動最適性の研究
- (4) コードの共有→「擬似アプリ」
- (5) くりかえし計算全体での高速化

Applicaton-Algorithm-Architecture (A-A-A) co-designのための課題：(4)「擬似アプリ」

擬似アプリ……数理ソルバーを含み、実アプリを模した、最低限のコード

- 実アプリ研究者とアルゴリズム研究者が、コードを共有できる。

- 単体で機能し、計算結果を

 - Application (問題、入力行列) 由来の性質、

 - Algorithm(solver)由来の性質

 - Architecture由来の性質

 - に切り分けて、議論できる

- 単体で動く、ベンチマークソフトになる。

- ソルバールーチンを実アプリへ実装をするさいの、お手本になる。

Applicaton-Algorithm-Architecture (A-A-A) co-designのための課題

- (1) 数学的には特殊だが、応用的には汎用な、数理的問題
- (2) 複合型ソルバー
- (3) 自動最適性の研究
- (4) コードの共有→「擬似アプリ」
- (5) くりかえし計算全体での高速化

くりかえし計算における高速化可能性

電子状態計算は、繰り返し計算(数回~数100万回以上)

→繰り返し計算での高速化(だんだん速くなること)への期待

→「予測・学習併用型」自動チューニング

(i) 性能モデルからの予測

(ii) 過去の実計算データからの「学習」

注：繰り返し計算の根源

(1) 実問題の非線形性からくるiterative loop

(2) 時間発展(例:物質の構造変化)

(3) 同一物質について、条件(例:温度)を変えた多数回run

(4) 類似物質のシミュレーション(多数ユーザ)

計算ごとの性能データをシステム側でデータベース化?

(→新規(ライト)ユーザーにも最適計算をもたらす)

Application-Algorithm-Architecture (A-A-A) Co-design ～ 大規模電子状態計算を例として～

まとめ

- 1、背景：大規模電子状態計算コード「ELSESES」
- 2、「物理計算エンジン」
(行列生成＋数値計算＋物理量計算を、一体化して考える)
- 3、Application-Algorithm-Architecture co-designのための課題
 - (1) 数学的には特殊だが、応用的には汎用な、数理的問題
 - (2) 複合型ソルバー
 - (3) 自動最適性の研究
 - (4) コードの共有→「擬似アプリ」
 - (5) くりかえし計算全体での高速化
- 4、付：数理ソルバー以外のニーズ
→大容量データを人間が扱うための情報技術



Thank you