

## 複合数理原理による超大規模超並列電子状態計算

### Hybrid mathematical principles

#### for ultra-large-scale massively parallel electronic state calculations

星健夫 鳥取大学

Takeo Hoshi, Tottori University

物理・数理・高速計算技術(HPC)の融合研究として、複合数理原理による超大規模(オーダー $N$ )超並列電子状態計算に取り組んでいる。本年度の主な成果は、以下の2点である。(i)前年度計算(注1)の10倍となる1億原子(100nmスケール)電子状態が、京コンピュータを使って達成された(論文[1],図1)(注2)。(ii)内部固有対計算の新しい複合数理原理ソルバーを2種類、開発した。1つは、多重アーノルディ法を基盤とする手法(論文[1])であり、もう1つはシルベスタ慣性定理を基盤とする手法(論文[2], 一般講演[5,18])である。論文[2] および一般講演[5,18]は、当領域A01-3班メンバーである、曾我部知広(愛知県立大)、張紹良(名古屋大)、宮田考史(名古屋大)ら数理系研究者との共同研究となっている。

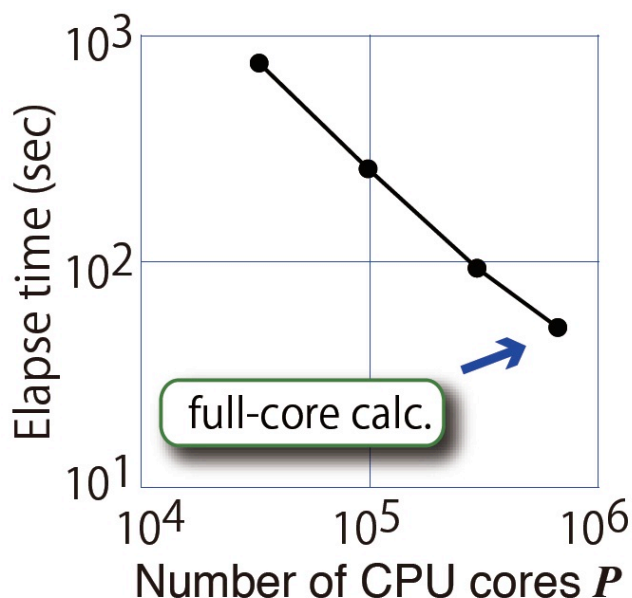


図1: 「京」での  $N=103,219,200$  原子系(100 nm スケール)電子状態計算。全コア(663,552 コア)までの計算。における並列効率(strong scaling) [1]。物質は、ナノ多結晶ダイヤモンド研究における、sp<sup>2</sup>-sp<sup>3</sup> ナノ複合カーボン固体(注1)。

(注1): Takeo Hoshi, Yohei Akiyama, Tatsunori Tanaka and Takahisa Ohno, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 023710 (2013)

(注2): 1億原子はシリコン単結晶 126 ナノメートル立方領域に相当するため、「100nm スケール計算」と呼ばれる。

1. 背景

我々は物理・数理・高速計算技術(HPC)の融合研究として、超大規模(オーダー  $N$ )超並列電子状態計算に取り組んでいる。基本的戦略を図2にまとめた。電子状態に基づく物質デザインは、その基盤たる大行列数理ソルバーが加速することで、劇的に発展する。一方、現代（あるいは次世代）の計算機アーキテクチャは質的に複雑であるため、実アプリケーション-数理アルゴリズム-アーキテクチャ全てを見据えた協調研究が必須となっている。こうした取り組みは、「Application Algorithm Architecture co-design」と呼ばれることがある。

コード開発の出口イメージとしては、複数のアプリケーション（電子状態計算以外の分野も含めて）の基盤となるような、汎用ミドルウェアとしての数理ソルバーコードを提供していきたい(図2)。

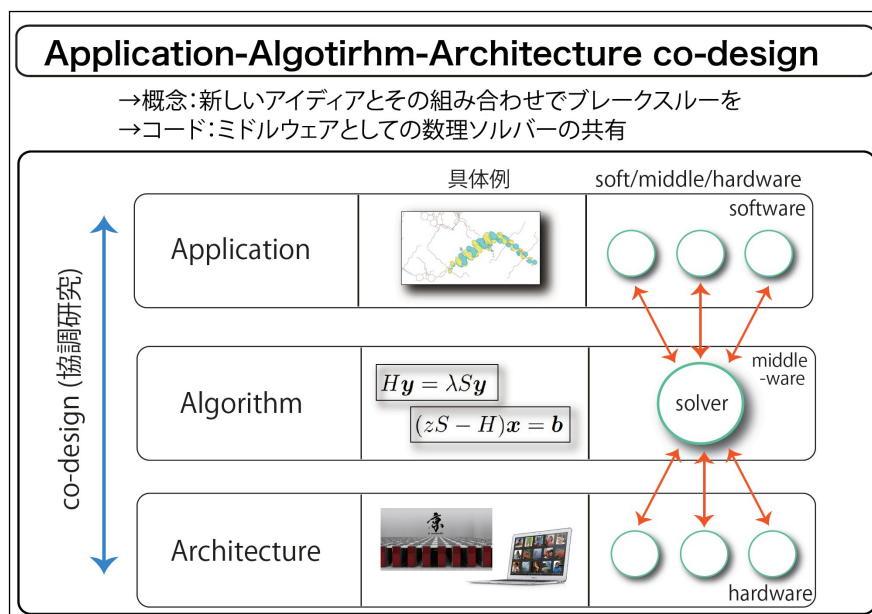


図2: Application-Algorithm-Architecture co-design:計算物質科学における本研究の基本的戦略

計算とコードの概要を述べる。我々のコードは「ELSES」(注3)と名付けられ、2007年から産学連携型コンソーシアムとして開発されている。超並列オーダー  $N$  型計算の数理的基礎は、論文(注4)にあるクリロフ部分空間解法(多重アーノルディ法)である。実空間における原子基底表示を用い、並列計算を実現している。オーダー  $N$  性は、図3(a)に示されている。ワークフローの概要を図3(b)に示した。従来の電子状態計算は、一般化固有値方程式( $Hy = \lambda Sy$ )を数理的基盤とする波動関数表現の計算である(図3(b)で「conventional」と記されたワークフロー)。ここで  $H, S$  は行列であり、それぞれハミルトニアン行列・重なり行列、と呼ばれる。一方、本手法では一般化シフト型線形方程式( $(zS - H)x = b$ )を数理的基盤とする伝搬(グリーン)関数表現の計算である(図3(b)で「present」と記されたワークフロー)。上記の数理的ブレークスルーのために、超並列計算が可能となっている。詳細としては、上記の一般化シフト型線形方程式に、新しい反復(クリロフ部分空間)解法である多重アーノルディ法(注4)を適用している。具体的計算には、モデル化(tight-binding型)理論を用いている。本研究と平行してコンソーシアム内で、第一原理計算(Gaussianなどの分子系計算、および、平面波基底の固体系計算)を基礎として、最適モデル導出の自動化研究が行われている(注5)。

(注 3) : <http://www.elses.jp/>; ELSSES=Extra-Large-Scale Electronic Structure calculation

(注 4) : Takeo Hoshi, Susumu Yamamoto, Takeo Fujiwara, Tomohiro Sogabe, Shao-Liang Zhang, J. Phys.: Condens. Matter 24, 165502, 5pp. (2012)

(注 5) : Shinya Nishino, Takeo Fujiwara J. Mol. Model. 19, pp. 2363-2373 (2013); Yasuaki Ohtani, Takeo Fujiwara, Shinya Nishino, Takashi Suzuki, Susumu Yamamoto and Yasunari Zempo, MRS Proceedings, 1523 (2013).

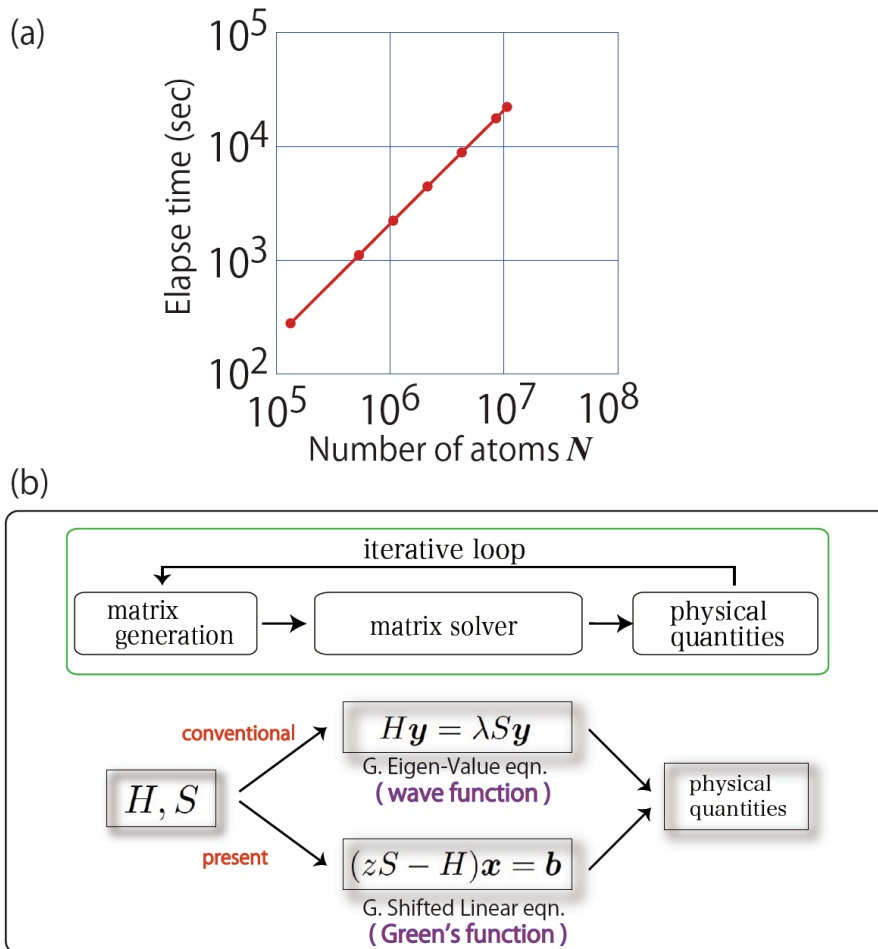


図 3 : (a) オーダー $N$ 性(計算時間が原子数  $N$  に比例すること)のベンチマーク。物質は、アモルファス状共役高分子系 (poly-(9,9 dioctyl fluorine)) (注 4)。(b) 計算ワークフローの概要。

## 2. 「京」コンピュータによる 1 億原子(100nm スケール)計算

前年度計算(注 1)の 10 倍の系となる 1 億原子(100nm スケール)電子状態が、京コンピュータを使って達成された(論文[1], 図 1)(注 2)。数値アルゴリズムに変更はないが、実際の 1 億原子計算を行おうとすると、メモリ容量(1 ノードあたり 16GB)の限界など、いくつかの問題があったため、これらをクリアするのが主な論点となった。

結果を図 1 に示す。原子数  $N=103,219,200$  (約 1 億)の計算に対する、強スケーリング性のテストを行っている。Fortran90 を基盤としたコードにおいて MPI/OpenMP のハイブリッド並列を行い、OpenMP における並列度数は 8 に固定した。 $P=32,768$ 、 $P=98,304$ 、 $P=294,912$ 、 $P=663,552$ (全コア)、の 4 通りの計算を示す。約 3.2 万コア計算( $P=32,768$ )を基準とした並列効率  $\alpha$  は、約 10 万コア計算( $P=98,304$ )で  $\alpha=0.98$ 、約 30 万コア計算

( $P=294,912$ )で $\alpha=0.90$ 、全コア計算( $P=663,552$ )で $\alpha=0.73$ 、であった。

以下、議論を付す。(i)最大の問題はメモリコストを物理メモリ容量(1ノードあたり16GB)以下に抑えることにあった。コード全体の見直しを行い、配列利用の最適化などを行った結果、(計算結果を全く変えずに)メモリコストの削減ができた。(ii)得られた結果では、約30万コア計算ではほぼ理想的な並列効率が $\alpha=0.90$ であるものの、全コア計算では $\alpha=0.73$ と減少した。全コア計算の並列効率については、限られた資源・機会での実施であり、解析を行うことができなかった。しかし、物理研究推進の立場からは $\alpha=0.73$ は十分な並列効率であり、さらなる並列効率向上( $\alpha=0.73 \rightarrow \alpha=1$ )を考えることは最優先課題とは考えていない。

### 3. 新しい複合数値原理ソルバーによる内部固有対計算

新しい数値的問題設定により、2種の新しい複合数値原理ソルバーを構築した。光学的性質などの電子物性は、一部の(HOMO・LUMO・フェルミレベル付近などの)固有対(固有値・固有ベクトル)計算が数値的基礎となる。前節であげたような大規模系においては、全ての固有対を計算することは計算時間から不可能となり、必要な固有対だけを選択的に計算する手法が重要となる。以下では、実固有値問題だけを扱う。最低・最高固有値(あるいはそれらの付近の固有値)の計算は、従来より多数の数値的研究がある。しかし、固有値分布の中間に位置する固有値(「内部固有値」)に対応する解法への十分な研究がない。

本研究では準位指定問題を対象としている。すなわち、与えられた整数 $j$ に対して、 $j$ 番目の固有対を計算する問題である。例えば、para-spin系のHOMO軌道計算では、電子数 $N_e$ に対して $j = N_e/2$ 、である。

2つの新しい複合数値原理ソルバーを提案した。1つは多重アーノルディ法(注4)にもとづく解法[1]であり、もう1つはシルベスタ慣性定理にもとづく解法である。2つは独立のアイデアである。以下、2つのソルバーの概要を述べる。

1番目のソルバー [1]は、多重アーノルディ法(注4)の後処理計算となる。計算結果の波動関数例を図4に示す。多重アーノルディ法は図1などで使われているオーダー $N$ 法であるため、本ソルバーはこれまでの計算と相性が良い。一方、最初の多重アーノルディ法で用いたクリロフ部分空間をそのまま利用するため、計算した結果が必ずしも十分な精度をもつとは限らない。この場合、別なクリロフ部分空間法で、得られた解をさらに高精度化する必要がある。

2番目のソルバーは、シルベスタ慣性定理を用いた、2段階アルゴリズムである(論文[2], 一般講演[5,18])。図5(a)に概要を示した。第1段階は、シルベスタ慣性定理にもとづき $LDL^T$ 変換を反復する(iterative  $LDL^T$ 変換)。これにより、目的( $j$ 番目)固有値 $\lambda_j$ を唯一の固有値として含む区間 $[a, b]$ が求まる( $a < \lambda_j < b$ )。第2段階は、目的( $j$ 番目)固有値および固有対を、クリロフ部分空間解法の1つであるArnoldi( $M, W, G$ )法(注6)で計算する。図5(b)には、プロセス(i)(iterative  $LDL^T$ 変換)における収束の振る舞いを示した。3通りの手法を試して比較している。

2つのソルバーは、まだ予備的段階であるため、どのソルバーが良いのかはまだ十分検討されておらず、今後の課題である。また、両者を複合することも考えられる。具体的には、2番目のソルバーのプロセス(ii)のクリロフ部分空間解法では反復計算の初期波動関数(ベクトル)が必要であるが、これを1番目のソルバーで得られたベクトルにすることが可能である。

(注6): 山下達也, 宮田考史, 曾我部知広, 星健夫, 藤原毅夫, 張紹良, 日本応用数理学会論文誌 21, pp 241-254 (2011)

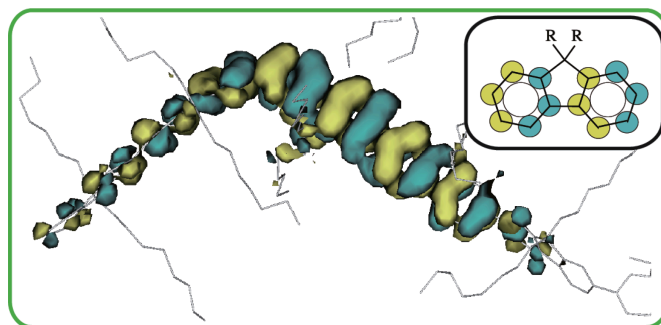


図4：内部固有対問題に対する、多重アーノルディ法の利用[1]。対象系は、アモルファス状 poly-(9,9 dioctyl fluorine) の HOMO 軌道。波動関数の模式図を挿入図に示した。

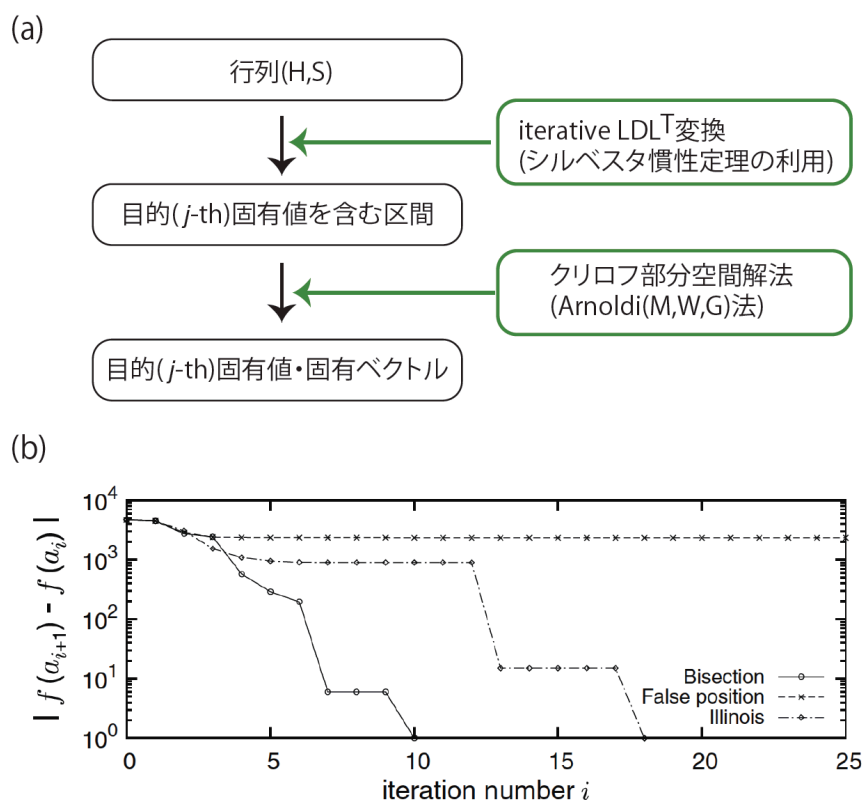


図5：準位指定型の内部固有対問題に対する、シルベスタ慣性定理をもちいた複合数値原理ソルバー（論文[2]，一般講演[5, 18]）。(a)ソルバーの概要；目的(j番目の)固有値・固有ベクトルを、(i)iterative  $LDL^T$ 変換・(ii)クリロフ部分空間解法の2段階型複合ソルバーで計算する。(b)プロセス(i)における収束の振る舞い。

#### 4. 連携研究者・研究協力者

連携研究者：

なし。

## 科研費新領域（物質デザイン）平成25年度報告書（v.1, 2014年4月）

研究協力者：

曾我部知広（愛知県立大）、張紹良（名古屋大）、宮田考史（名古屋大）。

### 5. 発表論文

- 1) Takeo Hoshi, Keita Yamazaki, Yohei Akiyama, “Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom electronic structure calculation on the K computer”, JPS Conf. Proc. 1, 016004, 4pp. (2014)
- 2) Dongjin Lee, Takafumi Miyata, Tomohiro Sogabe, Takeo Hoshi, Shao-Liang Zhang, “An interior eigenvalue problem from electronic structure calculations”, Japan J. Indust. Appl. Math. 30, pp 625-633 (2013)

### 6. 招待講演・一般講演・その他（受賞、データベース公開、ソフトウェア公開）

#### 招待講演

- 1) Takeo Hoshi, Tomohiro Sogabe, Takafumi Miyata, and Shao-Liang Zhang, “Krylov subspace theories and ultra-large-scale electronic state calculations on the K computer”, The 9th East Asia SIAM Conference The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics (EASIAM-CIAM 2013), Institut Teknologi Bandung, Bandung, West Java, Indonesia, 18-20., June (2013)
- 2) Takeo Hoshi, Tomohiro Sogabe, Takafumi Miyata, and Shao-Liang Zhang, “Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom quantum material simulations on the K computer”, The First International Workshop on Computational Science and Engineering, National Taiwan University Taipei, Taiwan, 14-17., Oct., (2013)
- 3) 星健夫, 「数学・計算物質科学・HPC分野の融合としての超大規模電子状態計算」, 物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会, 東京大学, 2013年12月10-13日.
- 4) 星健夫, 「京での超大規模量子物質シミュレーションとクリロフ部分空間」, 日本応用数理学会三部会連携「応用数理セミナー」, 東京大学, 2013年12月27日.

#### 一般講演

- 5) Dongjin Lee, Takafumi Miyata, Takeo Hoshi, and Shao-Liang Zhang, “An Interior Eigenvalue Problem and Its Numerical Solution”, The 9th East Asia SIAM Conference The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics (EASIAM-CIAM 2013), Institut Teknologi Bandung, Bandung, West Java, Indonesia, 18-20., June (2013)
- 6) 星健夫, 「京コンピュータにおける1億原子電子状態計算」, 科研費新学術領域「コンピュートイクスによる物質デザイン」研究会, 東京大学, 2013年7月8-9日.
- 7) 山崎溪太, 秋山洋平, 星健夫, 「Python を用いた波動関数可視化ツールの開発」, 科研費新学術領域「コンピュートイクスによる物質デザイン」研究会, 東京大学, 2013年7月8-9日.
- 8) 星健夫, 秋山洋平, 「超大規模超並列電子状態計算を中核とした物理・数理・HPCの融合研究」, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第5回シンポジウム, THE GRAND HALL (品川), 東京
- 9) Takeo Hoshi, Keita Yamazaki, Yohei Akiyama, “Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom electronic structure calculation on the K computer”, The 12th Asia Pacific Physics Conference (APPC12), Makuhari Messe, Chiba, 14-19., Jul, 2013
- 10) 秋山洋平, 星健夫, 「超大規模電子状態計算におけるナノ複合カーボンの可視化解析」, 応用物理学会 中国四国支部学術講演会, 香川大学, 香川, 2013年7月14-19日.
- 11) 山崎溪太, 秋山洋平, 星健夫, 「Pythonを用いた電子状態計算むけ波動関数可視化ツールの開発」, 応用物理学会 中国四国支部学術講演会, 香川大学, 香川, 2013年7月14-19日.
- 12) 星健夫, 「京コンピュータにおける超大規模量子物質シミュレーション」, 日本応用数理学会2013年度年会, 「ペタスケール環境における固有値解法」セッション, アク

## 科研費新領域（物質デザイン）平成25年度報告書（v.1, 2014年4月）

ロス福岡, 福岡, 2013年9月9-11日.

- 13) 星健夫, 秋山洋平, 「京コンピュータにおける超大規模電子状態計算」, 日本物理学会, 徳島大学, 徳島, 2013年9月25-28日.
- 14) 山崎溪太, 星健夫, 秋山洋平, 「Pythonを用いた電子状態計算むけ波動関数可視化ツールの開発」, 日本物理学会, 徳島大学, 徳島, 2013年9月25-28日.
- 15) 星健夫, 「京における100ナノスケール電子状態計算と大行列数理解法」, セミナーレクチャー, 神戸大学
- 16) Takeo Hoshi, Tomohiro Sogabe, Shao-Liang Zhang, Hiroto Imachi, “Krylov subspace theories and one-hundred-million-atom quantum material simulations on the K computer”, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba-city, Japan, 7-9, Mar. 2014.
- 17) Takeo Hoshi, Hiroto Imachi, Yoshifumi Kawai, Yohei Akiyama, Keita Yamazaki, Seiya Yokoyama, “ELSES matrix library: a sparse matrix collection arising from electronic structure calculations”, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba-city, Japan, 7-9, Mar. 2014.
- 18) Dongjin Lee, Takafumi Miyata, Tomohiro Sogabe, Takeo Hoshi, and Shao-Liang Zhang, “A numerical approach to interior eigenvalue problems in electronic structure calculations”, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba-city, Japan, 7-9, Mar. 2014.

その他（受賞）

- 19) 第18回（2013年度）応用物理学会中国四国支部学術講演会発表奨励賞受賞；一般講演[10]に対して。

以上。