鳥取大学 星健夫

(主な所属学会:物理学会,応用数理学会)

1. 概要 2. 基礎:応用からみた大行列数理解法の整理 3. 先端: シフト型線形方程式と超大規模計算アルゴリズム 4. 事例: ナノ多結晶ダイヤモンド(時間がなければスキップ) 5. まとめと展望

謝辞:主な共同研究者

数理系:曾我部知広(愛知県立大), 宮田考史·李東珍·張紹良(名古屋大)·井町宏人(東大) 物理系:山元進(東京工科大), 西野信也(東大)·藤原毅夫(東大)

謝辞:予算補助

JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 構造材料元素戦略拠点, 科研費

鳥取大学 星健夫

(主な所属学会:物理学会,応用数理学会)



謝辞:主な共同研究者

数理系:曾我部知広(愛知県立大), 宮田考史·李東珍·張紹良(名古屋大)·井町宏人(東大)

物理系:山元進(東京工科大),西野信也(東大)・藤原毅夫(東大)

謝辞:予算補助

JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 構造材料元素戦略拠点, 科研費

Overview

Application-Algotirhm-Architecture co-design

→新しいアイディアとその組み合わせでブレークスルーを



Application-Algotirhm-Architecture co-design

→物理分野・数理分野・高速計算技術(HPC)分野の連携研究

→目的物理量ごとに、最適な計算手順(workflow)を構築



ELSES, our electronic-structure calculation code

Hoshi et al., JPSJ 82, 023710 (2013); Hoshi et al., Preprint (http://arxiv.org/abs/1307.3218)

Benchmark with upto 100M atoms(\rightleftharpoons Si : (126nm)³region)

aPF :amourphous-like conjugated polymer, poly-(9,9 dioctil-fluorene), NCCS: sp2-sp3 nano composite carbon solid





ELSES, our electronic-structure calculation code

Hoshi et al., JPSJ 82, 023710 (2013); Preprint (http://arxiv.org/abs/1307.3218)

Benchmark with upto 100M atoms(\rightleftharpoons Si : (126nm)³region)

aPF :amourphous-like conjugated polymer. poly-(9.9 dioctil-fluorene),

Methodology

pse time (sec)

•Oringinal linear-algebraic order-N algorithms with generalized shifted linear equations

$$(zS - H)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

•Applicable both to metals and insulators

- •Modelled (TB-type) systems, based on *ab initio* calc.,
- •A DFT-derived charge-self-consistent formulation (optional)





ELSES:物質研究の例(「京」利用の前)



謝辞(共同研究・データ提供) 西野信也・藤原毅夫(東大), 山元進(東京工科大), 山崎久嗣(トヨタ自動車), 善甫康成(法政大), 石田雅也(住友化学)

鳥取大学 星健夫

(主な所属学会:物理学会,応用数理学会)



JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 構造材料元素戦略拠点, 科研費



 $K_n(A; \boldsymbol{b}) \equiv \operatorname{span} \left\{ \boldsymbol{b}, A\boldsymbol{b}, A^2\boldsymbol{b}, ..., A^{n-1}\boldsymbol{b} \right\}$

n : subspace dimension (iteration number)







2. 行列の性質による解法の分類



cf. 有名な固有値問題解法の教科書 (通称「Template」, Webでも公開) Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems (2000) Edited by Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst http://web.eecs.utk.edu/~dongarra/etemplates/ 2. 行列の性質による解法の分類



cf. 有名な固有値問題解法の教科書 (通称「Template」, Webでも公開) Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems (2000) Edited by Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst http://web.eecs.utk.edu/~dongarra/etemplates/

3. 行列サイズの分類:大規模・中規模・小規模

→中小規模問題では、 並列化による加速が困難

サイズMでの分類(密行列ソルバー) (a)大規模:M=10⁵ or larger (b)中規模:M=10⁴ (c)小規模:M=10³ or smaller

実行列のデータ容量
(a) M=10万だと
8B x 100K x 100K = 80GB
(b) M=1万だと
8B x 10K x 10K = 0.8GB (約1GB)
(c) M=1000だと
8B x 1K x 1K = 8 MB



(*) Intel Xeon (SGI Altix @ISSP), 実対称, ScaLAPACK

4. ワークフロー(実装)の重要性

実際の大規模計算では、ボトルネックの要因は多様。

(a) 演算コスト, (b) 通信コスト, (c) メモリコスト, (d) ファイルI/Oコスト (e) 人的コスト(手間)

→ Application-Algorithm-Architecture co-design
 →最適性の確保のためには、複数のワークフローを用意する必要がある(面倒!!)
 →展望:ミドルウェアとしての「計算エンジン」の共有(?)

注:アーキテクチャのトレンド

→演算性能を重視する(メモリ性能が相対的に軽視される)
→実アプリでは、省メモリ型ワークフロー、が重要に(?)

参考:有用な教科書やレビュー記事(大行列固有値問題など)

- •Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems (2000) Edited by Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst http://web.eecs.utk.edu/~dongarra/etemplates/
- Matrix Computations (4th Ed). (2012)
 - G. H. Golub, C. F. Van Loan
- ・大規模シフト線形方程式の数値解法:クリロフ部分空間の性質に着目して 曽我部・張,応用数理19,163 (2009)
 http://ci.nii.ac.jp/naid/110007361021
- ・密行列固有値解法の最近の発展(I)
 - 山本 有作, 日本応用数理学会論文誌 15, 181 (2005) http://ci.nii.ac.jp/naid/10016594490
- •同(II)
 - 山本有作,日本応用数理学会論文誌 16,507 (2006) http://ci.nii.ac.jp/naid/110006197075
- ・超並列環境向きの固有値計算アルゴリズムと自動チューニング
 今村 俊幸,応用数理 20,212 (2010)
 - http://ci.nii.ac.jp/naid/110007730720

鳥取大学 星健夫

(主な所属学会:物理学会,応用数理学会)



謝辞:主な共同研究者

数理系:曾我部知広(愛知県立大), 宮田考史·李東珍·張紹良(名古屋大)·井町宏人(東大)

物理系:山元進(東京工科大),西野信也(東大)・藤原毅夫(東大)

謝辞:予算補助

JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 構造材料元素戦略拠点, 科研費

Mathematical structure of quantum physical quantities

Generalized eigen-value problem

$$H \boldsymbol{y}_k = \lambda_k S \boldsymbol{y}_k$$
 (1)

Physical quantity with a given matrix X(Ex. the case of X = H--> Electronic structure energy)

$$\langle X \rangle \equiv \sum_{k} f(\lambda_k) \, \boldsymbol{y}_k^{\mathrm{t}} X \boldsymbol{y}_k \quad (2)$$

with a given weight funciton ('Fermi distribution function')

$$f(\lambda) \equiv \frac{1}{\exp(\beta(\lambda - \mu)) + 1} \quad (3)$$

$$(\beta, \mu : \text{given parameters})$$

Physical quantity in trace form

$$\langle X \rangle = \operatorname{Tr}[X \rho]$$
 (4)

with the density matrix

$$\rho \equiv \sum_{k} f(\lambda_k) \boldsymbol{y}_k \boldsymbol{y}_k^{\mathrm{t}}$$
(5)



Basic equations

Generalized eigen-value (GEV) equation

 $H\boldsymbol{y}_k = \varepsilon_k S \boldsymbol{y}_k$

 $\boldsymbol{x} = G\boldsymbol{b}$

H, *S* : Hermitian, *S*: positive definite ($S \rightleftharpoons I$)

 $G = \sum_k rac{oldsymbol{y}_k oldsymbol{y}_k^{\mathrm{T}}}{z - arepsilon_k}$

Generalized shifted linear (GSL) equations

 $(zS - H)\mathbf{x} = \mathbf{b}$ (z:complex energy) non-Hermitian the propagation (Green's) function formulation

wavefunction

formulation

with
$$G \equiv (zS - H)^{-1}$$
 : the Green's function

Novel linear algebraic algorithms

[1] Teng et al., PRB 83, 165103 (2011); [2] Hoshi et al, JPCM 24, 165502 (2012).
[3] Sogabe JCP 231, 5669 (2012); [4] Yamashita et al., Trans. JSIAM 21, 241 (2011).

→ Iterative (Krylov subspace) solvers for generalized shifted linear equation

$$(\underline{H-zS})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

non-hermitian

Mathematical principles	$S \neq I$	S=I*
Gerlerkin Principle	gLanczos, gArnoldi, mArnodi, Arnoldi (M;W;G)	subs. diag.
Collinear Residual	gsCOCG, gsQMR	sCOCG, sQMR

*Takayama *et al.*, JPSJ73, 1519 (2004); Takayama et al. PRB 73, 165108(2006); Sogabe et al. ETNA31, 126 (2008)

Physics papers with shifted Krylov subspace and the collinear residual theorem

- (1) (a) A. Frommer, Computing 70, 87 (2003) [Original paper]
 (b) J. C.R. Bloch, T. Breu, A. Frommer, et al., Comp. Phys. Comm. 181, 1378 (2010)
 → QCD
- (2) R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, PRB 73, 165108 (2006).
 → large-scale electronic structure calculation [present work]
- (3) S. Yamamoto, T. Fujiwara, and Y. Hatsugai, PRB 76, 165114 (2007);
 - S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, JPSJ 77,114713 (2008).
- → many-body electron [full-CI type, multi-orbital extended Hubbard model, LaSrNiO]
- (4) T. Mizusaki, K Kaneko, M. Honma, T. Sakurai, PRC 82, 024310 (2010)
 - \rightarrow Shell-model calculation
- (5) F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie, PRB 81, 115105 (2010)
 - \rightarrow GW method with the self-consistent Sternheimer equation
- (6) 篠原康、二村保徳、矢花一浩、櫻井鉄也、日本物理学会, 2012年3月.
- → TDDFT(linear response)

鳥取大学 星健夫

(主な所属学会:物理学会,応用数理学会)



謝辞:主な共同研究者

数理系:曾我部知広(愛知県立大), 宮田考史·李東珍·張紹良(名古屋大)·井町宏人(東大)

物理系:山元進(東京工科大),西野信也(東大)・藤原毅夫(東大)

謝辞:予算補助

JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 構造材料元素戦略拠点, 科研費

Nano-polycrystalline diamond (NPD)

novel ultra-hard material

T. Irifune, et al., Nature 421, 599 (2003) (@ Ehime Univ.)

 \rightarrow harder than conventional diamond crystals



Visualization analysis on sp² / sp³ nano composite carbon solid

Preliminary research for nano-polycrystalline diamond
 (1) Massively parallel quantum molecular dynamics
 (2) Massively parallel Green's function analysis (π-COHP*)
 → the distinction between sp² and sp³-domains

(A) Visualize sp² and sp³ domains

(B) Visualize only sp² domains



鳥取大学 星健夫

(主な所属学会:物理学会,応用数理学会)



謝辞:主な共同研究者

数理系:曾我部知広(愛知県立大), 宮田考史·李東珍·張紹良(名古屋大)·井町宏人(東大)

物理系:山元進(東京工科大),西野信也(東大)・藤原毅夫(東大)

謝辞:予算補助

JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 構造材料元素戦略拠点, 科研費

まとめと展望

まとめ ・(物理)「京」での100ナノスケール(1億原子)電子状態計算 •(手法) Application-Algorithm-Architecture co-design 展望 ・実アプリ(物理)と数理の接点 (a) データ共有 → 疎行列データベース(http://www.elses.jp/matrix/) (b) コード共有 →ミドルウェア的「シミュレーション・エンジン」の開発 (c)問題 (c-1) 内部固有対計算(フェルミレベル近傍) 例:Lee et.al., Jpn. J. Ind. and App. Mat. 30, 625 (2013) (c-2) 非線形シフト型方程式(量子電気伝導) (c-3) 中小規模問題の高速計算 (d) コミュニティ形成 →国際会議企画(ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月) EPASA2014; http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/

Physical quantities in trace form

Generalized eigen-value problem

$$H \boldsymbol{y}_k = \varepsilon_k S \boldsymbol{y}_k$$
 (1)

Physical quantity in a trace form: (Ex. the case of X=H --> Electronic structure energy)

$$\langle X \rangle \equiv \sum_{k} f_{k} \boldsymbol{y}_{k}^{\mathrm{t}} X \boldsymbol{y}_{k}$$
$$= \operatorname{Tr}[\rho X]$$
(2)

with the one-dody density matrix

$$\rho \equiv \sum_{k} f_k \boldsymbol{y}_k \boldsymbol{y}_k^{\mathrm{t}}$$
(3)

Decomposition of the trace form

$$\operatorname{Tr}[\rho X] = \sum_{j} e_{j}^{\mathrm{t}} \rho X e_{j} \tag{4}$$

with $oldsymbol{e}_j$ (j-th unit vector)

$$\boldsymbol{e}_j \equiv (0, \cdots 0, 1_j, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{t}}$$
 (5)

"projected physical quantity" (to be calculated)