

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

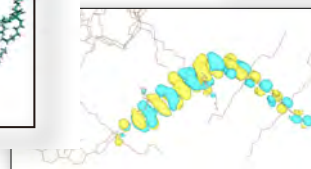
鳥取大学, JST-CREST(PostPeta) 星健夫

主な共同研究者

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

物理系: 秋山洋平・山崎溪太(鳥取大), 山元進(東京工科大), 西野信也(東大)

1. 概要・物理
2. 基盤的数理手法
3. 現状と展望



$$Hy = \lambda Sy$$

$$(zS - H)x = b$$



謝辞: 予算補助

JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 科研費(コンピューティクス領域), 構造材料元素戦略拠点, 他

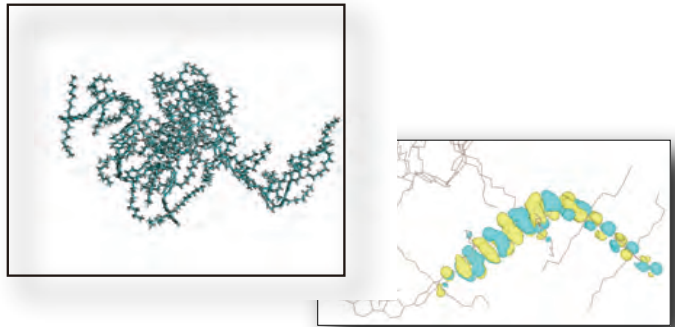
Application-Algorithm-Architecture co-design

→新しいアイデアとその組み合わせでブレークスルーを

Application : electronic state calculation

Algorithm : numerical linear algebra

Architecture : from supercomputers to personal computers



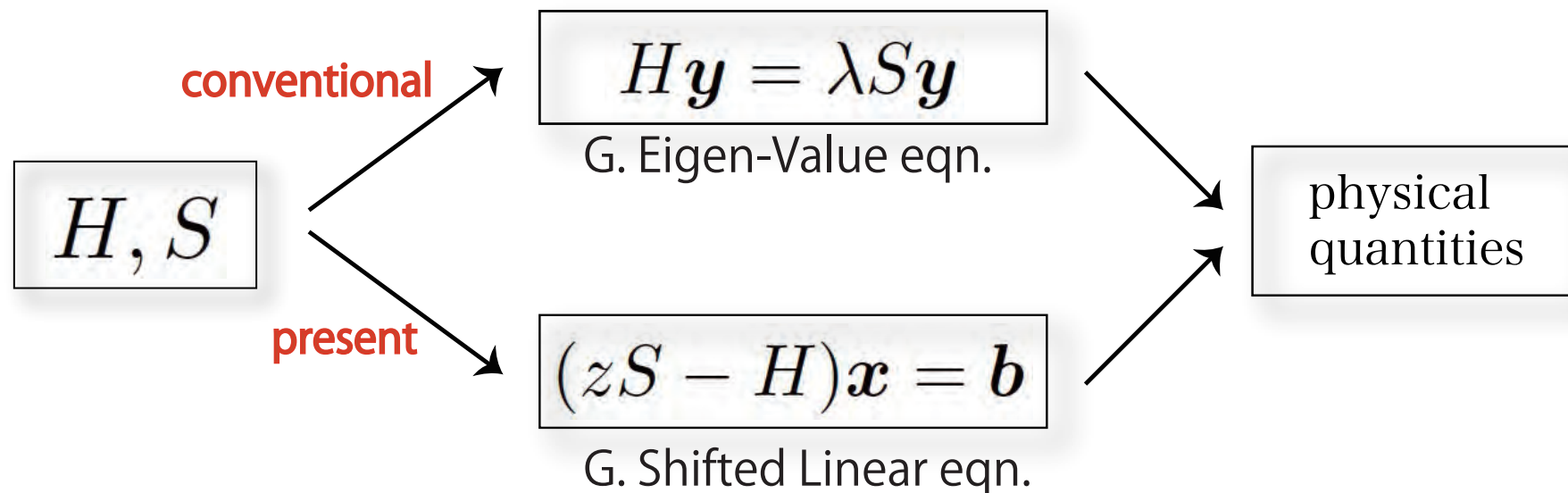
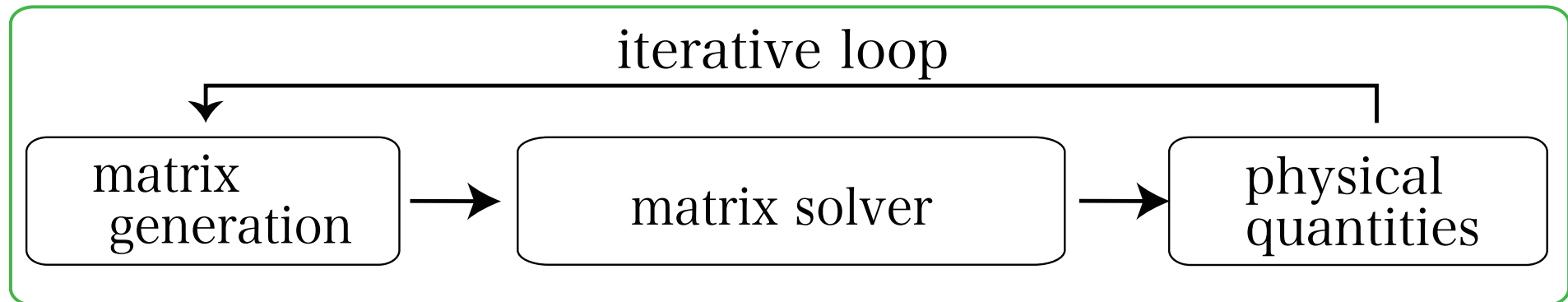
$$Hy = \lambda Sy$$

$$(zS - H)x = b$$



Application-Algorithm-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



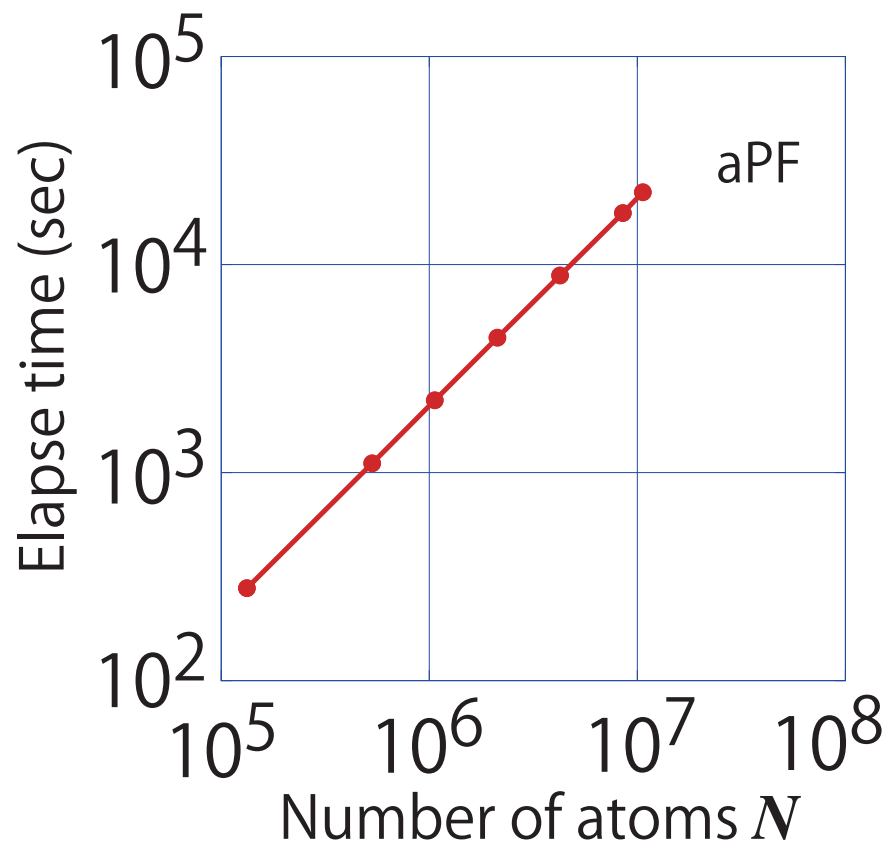
ELSES, our electronic-structure calculation code

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

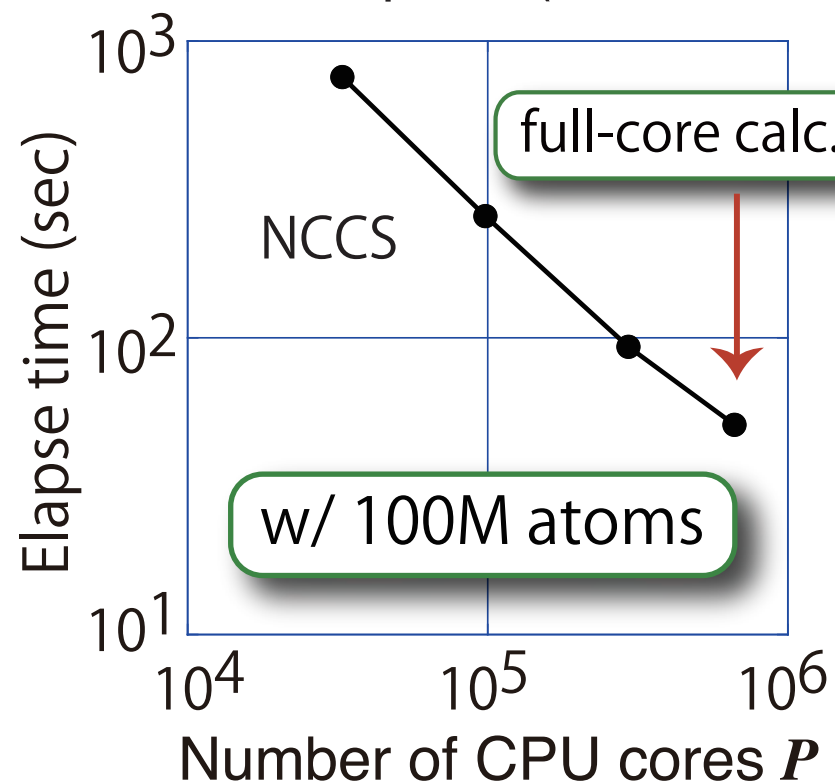
Benchmark with upto 100M atoms (\rightleftharpoons Si : $(126\text{nm})^3$ region)

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

(a) Order- N scaling



(b) Parallel efficiency (strong scaling) on the K computer (\sim all nodes)



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 : $(126\text{nm})^3$ region)

aPF : amorphous-like conjugated polymer, poly-(9,9 dioctyl-fluorene),

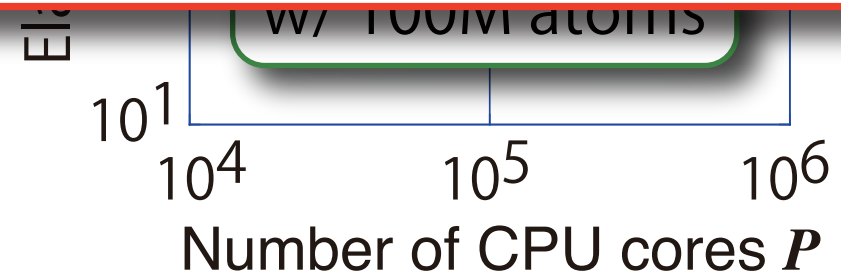
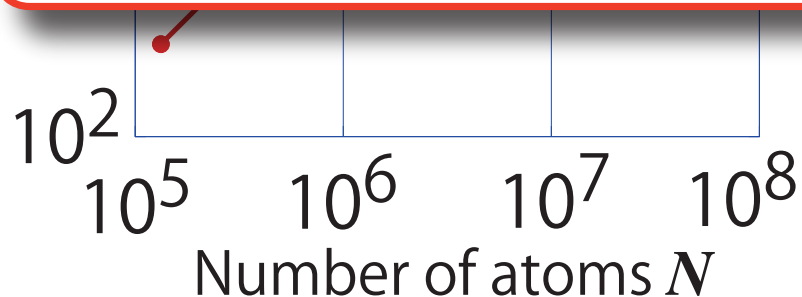
Methodology

- Original linear-algebraic order- N algorithms with generalized shifted linear equations

$$(zS - H)x = b$$

- Applicable both to metals and insulators
- Modelled (TB-type) systems, based on *ab initio* calc.,
- A DFT-derived charge-self-consistent formulation (optional)

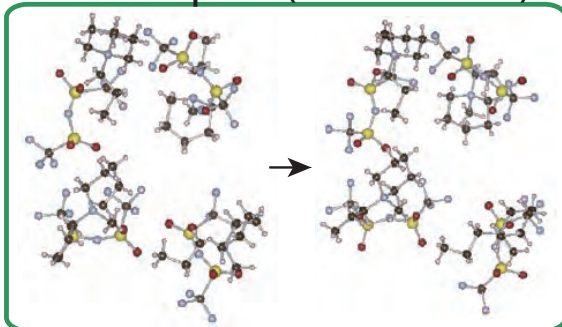
Elapse time (sec)



ELSES:物質研究の例(「京」利用の前)

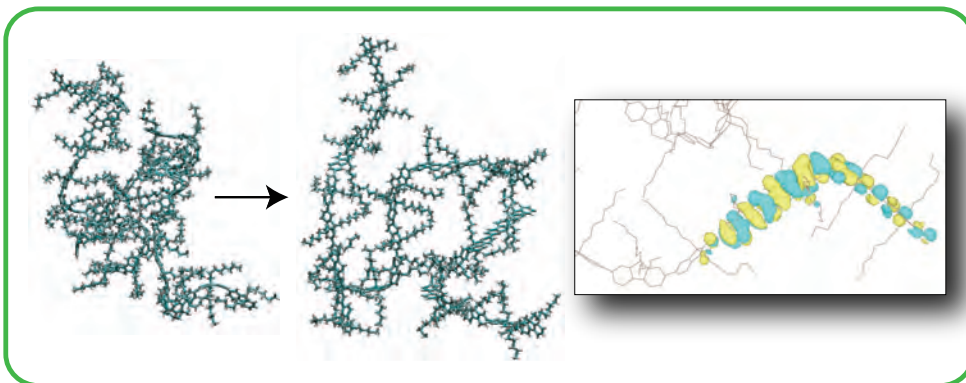
- 方針 (i) 産業利用
- (ii) 新物質(日本発)
- (iii) 基準物質

Ionic liquid (PP13-TFSI)

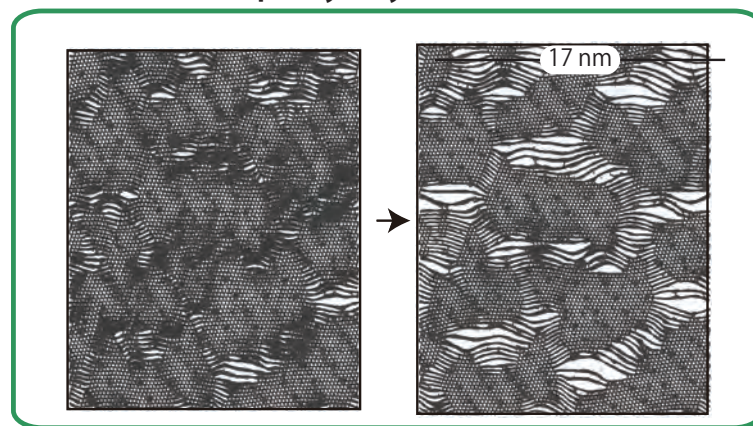


Li⁺ diffusion
in solids
(Nishino et al.)

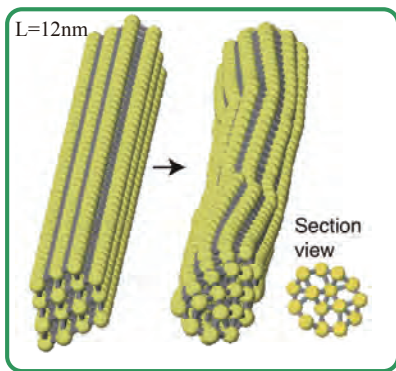
Amourphous-like conjugated polymer
(poly-(9,9 dioctyl fluorene) [有機EL]



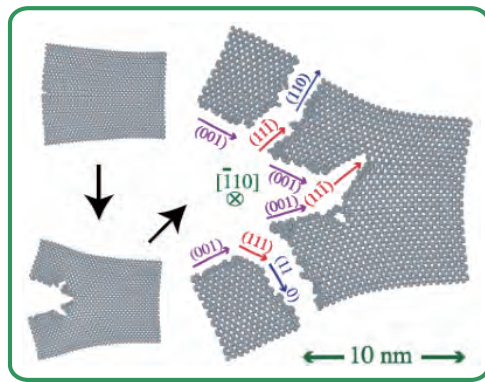
sp²-sp³ nano-composite carbon solid
(for nano-polycrystalline diamond)



helical gold nanowire



silicon brittle fracture



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)

Classification of matrix solvers

Krylov (iterative) solvers

- for sparse matrices
- basics of $O(N)$ calc.
- ‘projection’ strategy

ex. Conjugate Gradient
(CG) algorithm

Direct solvers

- for dense matrices,
- $O(N^3)$ calc
- ‘transformation’ strategy

‘projection’ on the Krylov subspace of

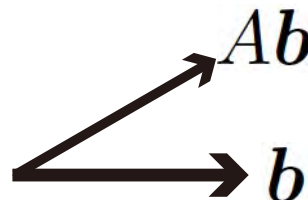
$$K_n(A; \mathbf{b}) \equiv \text{span} \{ \mathbf{b}, A\mathbf{b}, A^2\mathbf{b}, \dots, A^{n-1}\mathbf{b} \}$$

n : subspace dimension (iteration number)

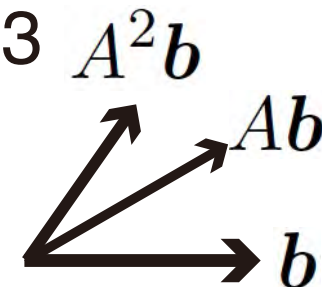
$n=1$



$n=2$

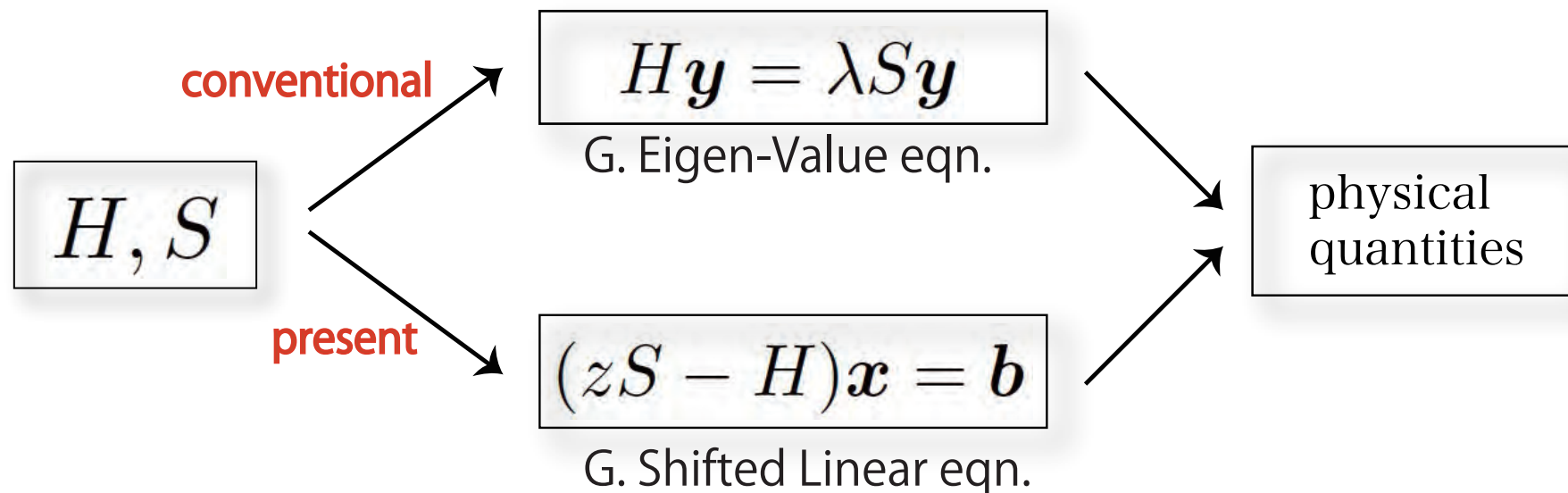
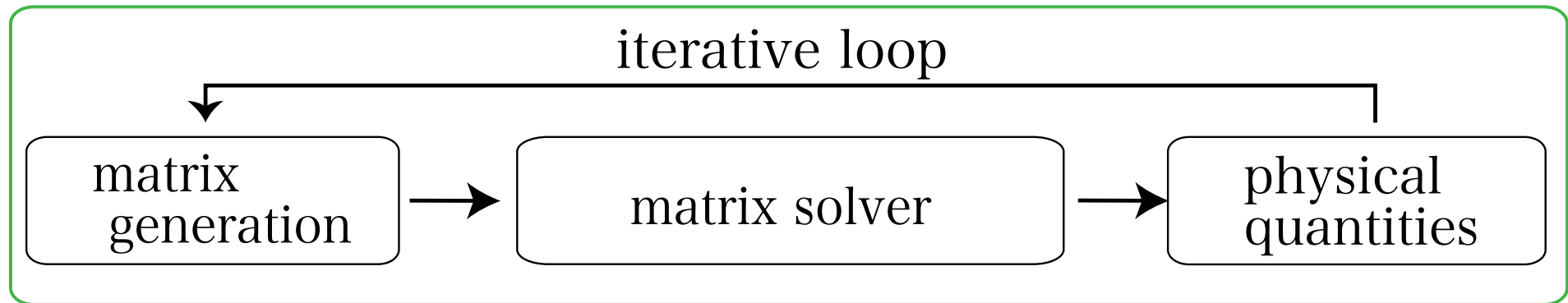


$n=3$



Application-Algorithm-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



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

$$\underbrace{(H - zS)}_{\text{non-hermitian}} x = b$$

non-hermitian

Mathematical principles	Solver
Galerkin Principle	gLanczos, gArnoldi, <u>mArnodi</u> , Arnoldi (M;W;G)
Collinear Residual	gsCOCG, gsQMR

cf. older theories (cases with $S=I$)

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)
→ **Shell-model calculation**
- (5) F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie, PRB 81, 115105 (2010)
→ **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)**

現状と展望

物理

- ・「京」での100ナノスケール(1億原子)電子状態計算
- 展望 応用(当座):有機ELなどのアモルファス状高分子デバイス
(基礎的物質:PPV, Poly-fluorene)
- 理論:電子物性への理論拡張

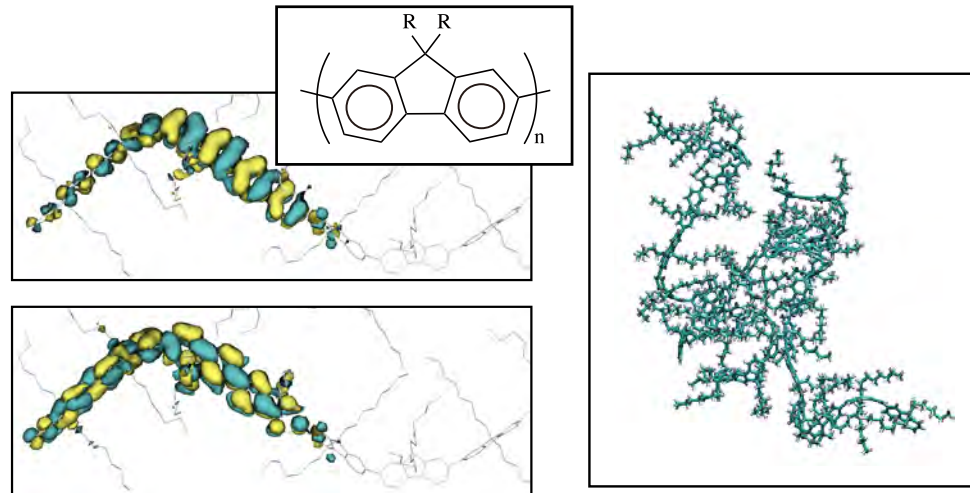


物理と数理・HPCの接点

- (i) 数理的問題
- (ii) コード共有
→ミドルウェア的汎用
→ひな形:<http://www>
- (iii) 問題(データ)共有
→疎行列データベース
- (iv) コミュニティ形成
→国際会議EPASA20

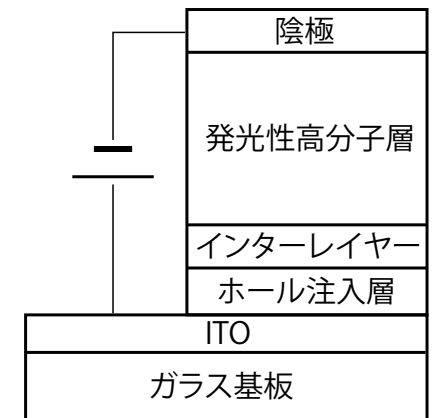
<http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/>

アモルファス状共役高分子
(超巨大 π 電子ネットワーク)
→予備的結果(*)



(*)T. Hoshi, K. Yamazaki, Y. Akiyama, in press
<http://arxiv.org/abs/1307.3218>

デバイス構造例



現状と展望

物理

- 「京」での100ナノスケール(1億原子)電子状態計算
- 展望 応用(当座): 有機ELなどのアモルファス状高分子デバイス
(基礎的物質: PPV, Poly-fluorene)
- 理論: 電子物性への理論拡張

物理と数理・HPCの接点

- (i) 数理的問題
- (ii) コード共有
 - ミドルウェア的汎用「計算エンジン」・擬似(ミニ)アプリの開発
 - ひな形: http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/eigen_test/
- (iii) 問題(データ)共有
 - 疎行列データベース(<http://www.elses.jp/matrix/>)
- (iv) コミュニティ形成
 - 国際会議EPASA2014 (ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月7-9日)
 - <http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/> (海外招待講演者: 16名)

現状と展望

物理

- ・「京」での100ナノスケール
- 展望 応用(当座):
()
- 理論:電子物

1. 内部固有対問題

→フェルミレベル付近の詳細な電子状態

→最近の提案:「level-given型」問題への複合数理原理ソルバー
(シルベスタ慣性定理 + Arnoldi(M, W, G)法)

Lee, Miyata, Sogabe, Hoshi, S.-L. Ziang, JJIAM 30, 625 (2013);
EASIAM, Indonesia, June. 2013.

2. 非線形シフト型方程式: $(zS - H - \Sigma(z))x = b$

→量子電気伝導(非平衡グリーン関数)

→予備的研究:

Shinaoka, Hoshi, Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. 77,114712 (2008)

3. 中小規模問題の高速計算アルゴリズム

→例:山本有作(電通大)らによるブロックヤコビ法

Takahashi, Hirota, Yamamoto, ALGORITHMY 2012, 151(2012).

工藤, 高橋, 深谷, 山本, 日本応用数理学会, 2013年9月

(i) 数理的問題

(ii) コード共有

→ミドルウェア的汎用

→ひな形:<http://v>

(iii) 問題(データ)共有

→疎行列データベース

(iv) コミュニティ形成

→国際会議EPASA2014 (ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月7-9日)

<http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/> (海外招待講演者:16名)

現状と展望

物理

- 「京」での100ナノスケール(1億原子)電子状態計算
- 展望 応用(当座):有機ELなどのアモルファス状高分子デバイス
(基礎的物質:PPV, Poly-fluorene)
- 理論:電子物性への理論拡張

物理と数理・HPCの接点

- (i) 数理的問題
- (ii) コード共有
 - ミドルウェア的汎用「計算エンジン」・擬似(ミニ)アプリの開発
 - ひな形:http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/eigen_test/
- (iii) 問題(データ)共有
 - 疎行列データベース(<http://www.elses.jp/matrix/>)
- (iv) コミュニティ形成
 - 国際会議EPASA2014 (ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月7-9日)
 - <http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/> (海外招待講演者:16名)



Thank you

Basic equations

Generalized eigen-value (GEV) equation

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

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

wavefunction
formulation

$$G = \sum_k \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T}{z - \varepsilon_k}$$

Generalized shifted linear (GSL) equations

$$(zS - H)\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (z : \text{complex energy})$$

non-Hermitian

$$\rightarrow \mathbf{x} = G\mathbf{b}$$

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

the propagation
(Green's) function
formulation