

## 新しい数値アルゴリズムを中核とした電子状態計算と計算機科学の融合

### Novel algorithms for electronic structure calculation and computer science

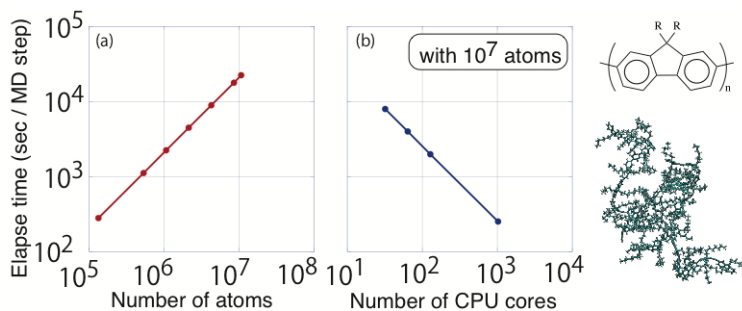
星健夫 Takeo Hoshi 鳥取大学 Tottori University

本公募研究の現状と展望を述べる。一部は、当領域下記メンバーを研究協力者としている；曾我部知広（愛知県立大）、張紹良、宮田考史（名古屋大）、山本有作（神戸大）。筆者は大規模電子状態計算コード「ELSESES」[1](最近の論文 [2][3])を中心として、基盤的オーダー $N$ 数値アルゴリズム構築・コード開発・応用研究を行っている。最近の応用研究（産業利用を目的としたナノ物質研究）として、ナノ多結晶ダイヤモンド[4]、アモルファス型 $\pi$ 共役高分子[2]、リチウム塩電解質[5]などがある。解析・可視化ツールの開発も行っている[6]。

電子状態計算と計算機科学の融合として、目的（計算したい物理量）ごとに、最適な数値アルゴリズムをデザインすることをあげる。目的としては、(1) 汎用な（金属・絶縁体に適用できる）分子動力学計算（エネルギー・フォースの計算）、(2) 電子状態スペクトラム（DOS, LDOS, COHP など）、(3) 特定固有値・固有状態計算、を想定している。

上記を達成するための新しい数値アルゴリズムとして、一般化固有値問題に対する種々のクリロフ部分空間解法を構築した；gsCOCG 法[7][3], gLanczos 法[3], gArnoldi 法[3], mArnoldi 法[2], Arnoldi(M,W,G) 法[8], gsQMR 法[9]。図は、mArnoldi 法を使った並列計算例(MPI/OpenMP, SGI Altix ICE 8400EX at ISSP)。

今後の展望については(本公募研究の直接の課題ではないが)、以下の2点があげられる。(i) 超並列計算機向けの新しい直接( $O(N^3)$ )法[10]に基づく数値計算ライブラリを開発し、問題に応じて上記クリロフ空間法と選択・複合する。(ii) 計算対象（物質・現象）の多様性と計算機の多様性（パソコンからポストペタスケール級スパコンまで）に対して、自動最適化（自動選択・自動チューニング）スキームを実現する。特に、電子状態計算は様々な意味で同種計算の繰り返しであるので、それら総体での高速化が重要となる。



図：並列化オーダー $N$ 電子状態計算例[2]。アモルファス型 $\pi$ 共役高分子 poly-(9,9 dioctil fluorene)。 (a) 10,629,120 原子系までのオーダー $N$  スケーリング性。 (b) 10,629,120 原子系における、1,024CPU コアまでの並列性。

[1] <http://www.elses.jp>. [2] Hoshi, *et al.* ISTCP-VII, Waseda (2011); JPCM in press; arXiv:1202.0098. [3] Teng, *et al.*, PRB83, 165103 (2011) [4] Hoshi *et al.*, JPCS 215, 012118 (2010); 星他, 日本物理学会 2012 年 3 月 [5] Nishino, *et al.* SSI18, Warsaw (2011); 西野他, 電池討論会 (2011). [6] 秋山他, 当研究会ポスター発表. [7] Sogabe *et al.* talk (2009). [8] 山下他, 日本応用数学会論文誌 21, (2011) [9] Sogabe *et al.* submitted. [10] 山本有作, 情報処理学会論文誌 ACS 46, SIG3, 81 (2005).