

大規模電子状態計算コード OpenMX の超並列化  
Massive parallelization of large-scale DFT code: OpenMX

尾崎泰助<sup>1)</sup>, Truong Vinh Truong Duy<sup>1),2)</sup>

T. Ozaki and T.V.T. Duy

<sup>1)</sup>北陸先端科学技術大学院大学、<sup>2)</sup>東京大学物性研究所

<sup>1)</sup>Japan Advanced Institute of Science and Technology, Ishikawa 923-1292, Japan

<sup>2)</sup>ISSP, The University of Tokyo, Chiba 277-8581, Japan

密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算を大規模系へ拡張する手段の一つは計算量が原子数に比例する  $O(N)$  法を用いることである。北陸先端大・尾崎グループでは OpenMX 上でクリロフ部分空間法に基づく  $O(N)$  法の開発をこれまでに進めており、本手法が絶縁体だけでなく、金属にも適用可能であることを示してきた。 $O(N)$  クリロフ部分空間法のこの特性によって、系に絶縁固体、金属、分子などが同時に含まれる場合(例えば、リチウムイオン電池内電極反応や鉄鋼材料中の析出物界面構造)であっても  $O(N)$  計算が可能であり、実問題への応用展開が期待されている。しかしながら本手法に基づき大規模電子状態計算を実現するためにはプログラムコードの超並列化が必須である。現行の OpenMX の並列化は 1 次元領域分割法に基づいており、数十万コアからなる並列計算機上での高並列化は困難である。そこで今回、超並列  $O(N)$  第一原理電子状態計算を実現するために、3 次元領域分割法に基づく並列化手法を開発し、OpenMX への実装を行った[1]。並列化効率を向上させるためには、各プロセスの持つデータの局所性を高め、プロセス間の通信量・回数を最小化することが重要であるが、OpenMX で使用される擬原子局在基底のために、計算負荷をほぼ一定に保ちつつ、いかに任意の系に対して 3 次元領域分割法を実現するのかは自明ではない。今回、修正再帰二分法と慣性モーメントテンソルに基づく新しい領域分割法を開発し、任意の系に対して空間局所性を保持した 3 次元領域分割が可能となった[1]。空間分割の際に経過時間を重みとして使用することで、動的な計算負荷分散が加味された領域分割も実現された。スーパーコンピュータ「京」の 131,072 コアを使用し、131,072 原子から構成されるダイヤモンド格子に対してベンチマーク計算を実施し、その並列効率は 16,384 コアを参照として 68%であった。また本研究において、Row-Wise 型領域分割に基づく、3 次元 FFT の新しい並列化手法を開発した。他の 3 次元 FFT 並列化手法と比較した結果、本手法は任意の並列分割数に対して、最小の通信量を持つ並列化手法であることが分かった[2]。さらに本手法を 4 次元 FFT と 5 次元 FFT に拡張し、最小の通信量を持つ多次元 (3D、4D、5D) FFT の並列化手法を開発した。本研究で開発された並列化手法は一般性が高いため、様々な分野における科学技術計算に適用可能であると考えられる。

[1] T.V. Truong Duy and T. Ozaki, "A three-dimensional domain decomposition method for large-scale DFT electronic structure calculations", *Comp. Phys. Comm.*, submitted (arXiv:1209.4506v1).

[2] T.V. Truong Duy and T. Ozaki, "A decomposition method with minimum communication amount for parallelization of multi-dimensional FFTs", *Comp. Phys. Comm.*, submitted (arXiv:1302.6189v1).