

## 京コンピュータにおける 1 億原子電子状態計算

### One-hundred-million-atom electronic state calculation on the K computer

星健夫(\*), 秋山洋平 Takeo Hoshi, Yohei Akiyama 鳥取大学 Tottori University

計算科学と計算機科学の融合としてオーダー $N$ 型超大規模(100nm スケール)(\*\*)電子状態計算に取り組んでおり、以下2点を報告する。(i) アプリケーション・アルゴリズム・アーキテクチャ連携研究(Application-Algorithm-Architecture co-design)として、「京」全ノードを用いた1億原子系計算を行った[1](図1)。メモリ容量(1ノードあたり16GB)に最適化されたワークフローなど、HPC的手法を中心に論じる。(ii) 複合数理論理ソルバー構築の基礎として、行列データを公開し('Open data')[2]、数値計算エンジンを中核とする擬似(小型)アプリケーションを試験公開('Quasi appli')した[3]。その役割を研究[4-7]を基礎に論じる。(ii)の複合数理論理研究として、別発表(\*\*\*)もある。汎用可視化コード開発の別発表(\*\*\*\*)もある。

当座の対象コードは独自開発コード ELSESES(TB 型理論利用)[8,9]であるが、論点は数理的・計算科学的に汎用であり、大行列に基礎をおく他計算(他物理分野計算)にも有用である[7]。

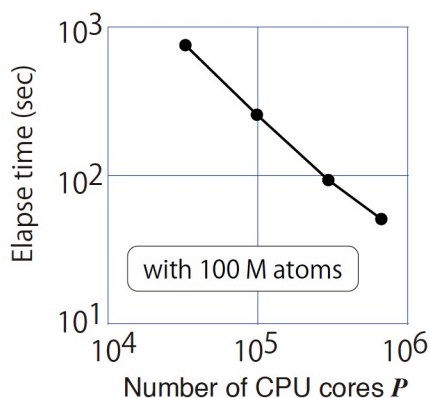


図1: 「京」での103,219,200(約1億)原子系超並列計算(strong scaling) [1]。総コア数  $P = 32,768, 98,304, 294,912, 663,552$ (「京」全コア)による計算。物質は、sp2-sp3 ナノ複合カーボン固体 [4]。MPI/OpenMP(ハイブリッド)並列を利用。

(\* ) WebPage: <http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/> (\*\* )シリコン単結晶での100nm立方領域は約5000万原子に相当するため、5000万原子以上の計算を「100nmスケール系計算」と呼ぶ。(\*\*\* )李・宮田・曾我部・星・張, 本会.(\*\*\*\* ) 山崎・秋山・星, 本会. [1] T. Hoshi, *et al.* (invited talk), The 9th East Asia SIAM Conference The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics, Bandung, Indonesia, 18-20. Jun. (2013). [2] ELSESES Matrix Library: <http://www.elses.jp/matrix/>. [3] Eigen Test: [http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/eigen\\_test/](http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/eigen_test/). [4] T. Hoshi, *et al.*, JPSJ82, 023710 (2013). [5] T. Hoshi, *et al.*, J.PCM24, 165502 (2012). [6] H. Teng, *et al.* PRB 83, 165103 (2011). [7]当領域 H24 成果報告書および当領域 News Letter 用原稿(提出済み。WebPage(\*)にPDFファイルあり) [8] <http://www.elses.jp/> [9] 西野(東大)・山崎(トヨタ自動車)らによる ELSESES を用いた別プロジェクト研究(固体電解質など)として, S. Nishino, *et al.*, Solid State Ionics 225, 22 (2012); S. Nishino *et al.*, J. Mol. Model.19, 2363 (2013); S. Nishino, *et al.*, The 19th International Conference on Solid State Ionics (SSI-19), Kyoto, June 2 -7. (2013); H. Yamasaki *et al.*, SSI-19, Kyoto, June 2 -7. (2013)