

## 櫻井杉浦法を用いた大規模第一原理計算の高速化

### Acceleration of large scale first principles calculation using Sakurai-Sugiura method

中田 彩子

物質・材料研究機構

#### 1. 研究目的

本プロジェクトでは学際開拓プログラムを通じて、数値計算の専門家と連携しながら大規模第一原理計算の高速化を目指す。我々は第一原理計算プログラム CONQUEST の開発を行ってきた。CONQUEST では局所軌道関数の利用やオーダーN 計算手法の導入により、数万原子を含む大規模な物質・材料の計算が可能である。CONQUEST では電子密度を最適化するのに、通常対角化による固有状態計算に基づく手法と、固有状態計算を必要としないオーダーN 計算手法の両方をサポートしている。オーダーN 計算は高速だが金属系への適用性が不明確である。一方、最近導入したマルチサイト関数を用いた固有状態計算では、大規模金属系の計算が可能である。本研究では、非常に並列化効率の高い固有状態計算手法である櫻井杉浦法を用いることにより、固有状態計算に基づく大規模第一原理計算の高速化を目指す。CONQUEST では従来の局所軌道関数を用いた計算は疎行列演算となるが、マルチサイト関数を用いた場合には行列がより密になる。本プロジェクトでは、筑波大学システム情報工学研究科の櫻井教授のグループと連携して研究を進めることにより、それぞれの関数を用いた場合の行列の性質を詳細に解析し、その性質に応じた固有状態計算手法の導入を試みた。

#### 2. 研究成果の内容

本研究では、CONQUEST によって計算される電子ハミルトニアンと重なり行列を用いて櫻井杉浦法による固有値計算を行う。以前に CONQUEST の疎行列における固有値計算に櫻井杉浦法を用いていた際には、まず CONQUEST で行列作成後に行列を書き出してから、改めて櫻井杉浦法計算プログラム(z-Pares)を用いて計算を行い、その結果を再度 CONQUEST に読み込むという手順を踏んでいた。今回密行列にチャレンジするにあたり、櫻井杉浦法による計算を CONQUEST に内装させる予定であったが、CONQUEST の他の機能更新とも重なり予定通りに進められず、そのためスパコンの効率的な利用が行えなかった。

予備計算として、これまで通り行列を書き出す形でマルチサイト関数を用いて金属ナノ粒子の密行列(約2万次元、5万次元の二種類)を作成し、櫻井グループと共同で

固有値計算の効率を検討した。特に、どのような前処理を施すことが固有値計算の効率化に有効かを検討した。

3. 学際共同利用として実施した意義

これまで CONQUEST では疎行列計算を中心に行ってきたおり密行列計算に関する知識は豊富ではなかったが、数値計算の専門家である筑波大櫻井グループと共同で研究を行うことにより、CONQUEST の密行列を用いる際の課題が明確となった。また、その課題を解決するための方法を詳しく検討することが出来た。これにより、CONQUEST でのマルチサイト法を用いた大規模第一原理計算の効率化の可能性が大きく広がった。

4. 今後の展望

本課題における共同研究を発展させ、櫻井杉浦法に基づく密行列演算の CONQUEST への導入を進めることにより、オーダーN 計算だけでなく固有値計算に基づく大規模 DFT 計算を可能にし、金属材料の大規模第一原理計算への応用に取り組みたい。

5. 成果発表

(1) 学会発表

Ayako Nakata, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, David R. Bowler,  
Tsuyoshi Miyazaki  
“Eigenstate-Analysis using Sakurai-Sugiura Method with O(N)-DFT Code  
CONQUEST”,  
MolSSI Workshop / ELSI Conference: Solving or Circumventing Eigenvalue  
Problems in Electronic Structure Theory,  
Richmond (USA), 2018 年 8 月 (招待).

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
COMA	○	3000	
Oakforest-PACS	○	3000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			