「京一般利用者」からの情報提供

信定　克幸（分子研）

共同研究者
野田　真史
(CMSI研究員・分子研)

謝辞
矢花　一浩（筑波大）
朴　　泰祐（筑波大）
石村　和也（分子研）

「京」一般利用情報交換会
2013.5.8@理研神戸

申請書に関して

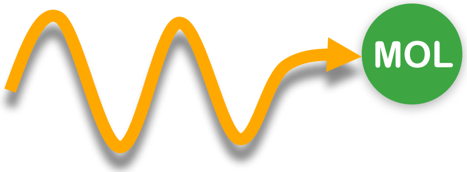
- 京を使う準備が着実に出来ているかどうか
  - 物性研のマシンで〇〇のスペック
  - 東大のマシンで△△のスペック
  - それを踏まえて、京の準備計算で□□のスペックが出ている
  - どこがボトルネックで、何をすればどこまで解決できそうか
  - そうすれば京の４万ノードでどのくらいのスペックが出て、最大の８万ノードであればどこまで達成できるのか
  - 最終的にサイエンスとして何が得られそうなのか
- 以上の項目が具体的に書かれているかどうかが鍵と思われます

研究課題について

- そもそも京を使うべき研究課題なのか
  - 明らかに超並列に不向きな研究課題がある
  - 何でもかんでも取り敢えず京で計算しようとするところに問題
  - 所詮計算機との考えがある限り基本的に無理。少なくとも非生産的。
  - サイエンティストにとって計算機が手段であることは言われなくても分かっている
  - 超並列計算からどんな新しいサイエンスを提案できるのか

★ サイエンスとしての側面

光と物質の相互作用再考



光（電磁波）

双極子近似 ⇒ eEz

光と物質系（電子系）は完全に分離

厳密な式 $-\int dr P(r,t)\times E^{\perp}(r,t)$

P ：分極

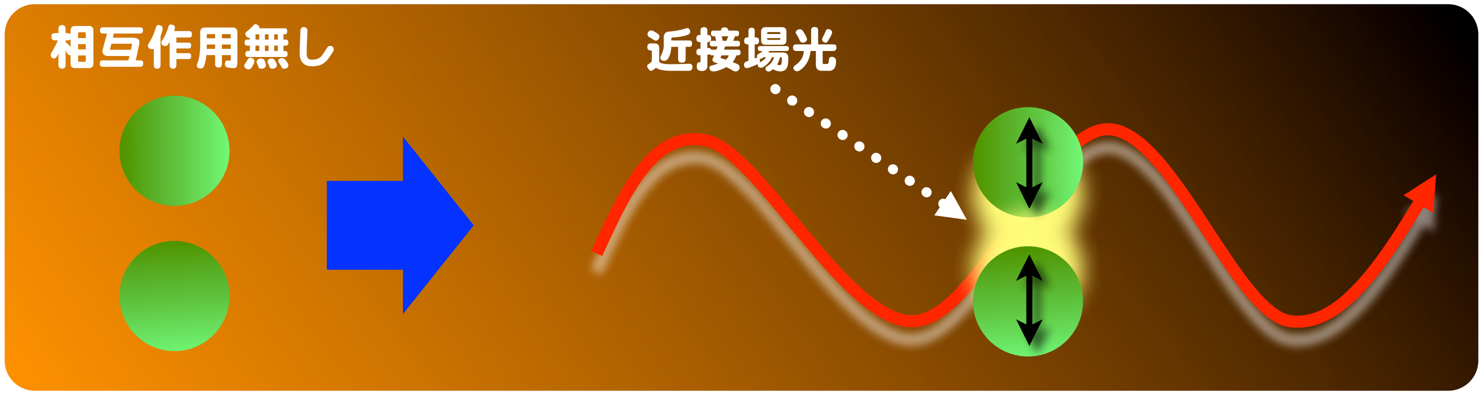
$E^{\perp}$：電場の横成分

第一項

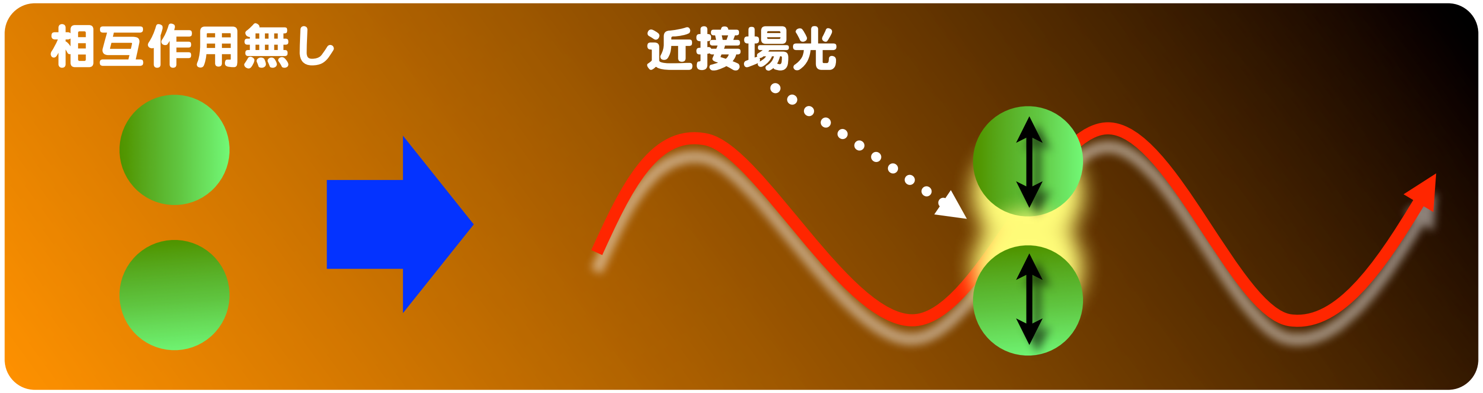
$P(r,t)\approx -e(r'-R)\delta(r-R)$ ⇒ eEz

光と物質の非一様相互作用と自己無撞着相互作用は完全に無視

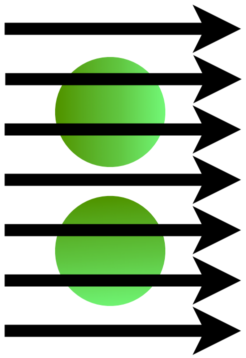
光と物質の非一様相互作用と自己無撞着相互作用の典型例



電子ダイナミクスとFDTD



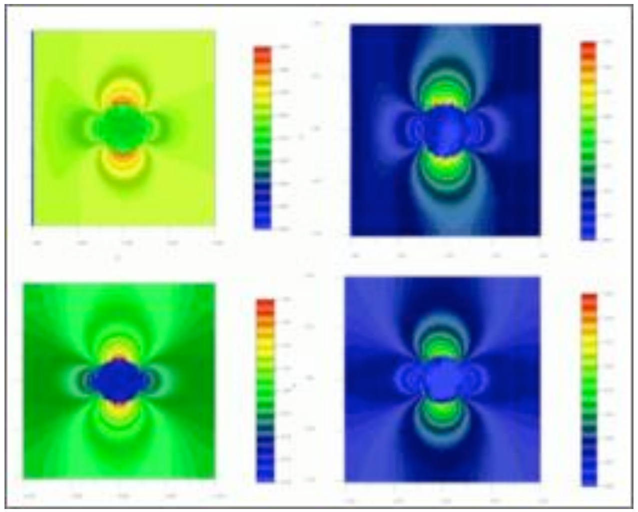
物質に注目すれば：
電子ダイナミクス



光吸収
Far Fieldの情報のみ

物質科学の光応答は、
ほぼ全て

場に注目：FDTD

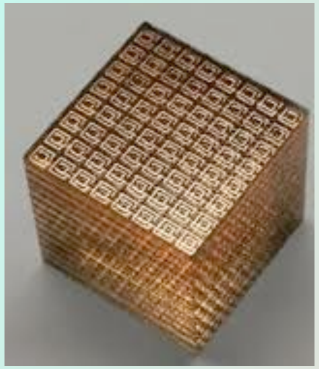


近接場の情報有り

物質の情報は誘電率のみ

光エネルギー変換デバイス

メタマテリアル



屈折率 $N = \sqrt{\varepsilon}\sqrt{\mu}$

通常の物質

$\varepsilon > 0, \mu > 0 \rightarrow N > 0$

メタマテリアル

$\varepsilon < 0, \mu < 0 \rightarrow N < 0$

X. Zhang et al., Nature Material, 5, 452 (2006)

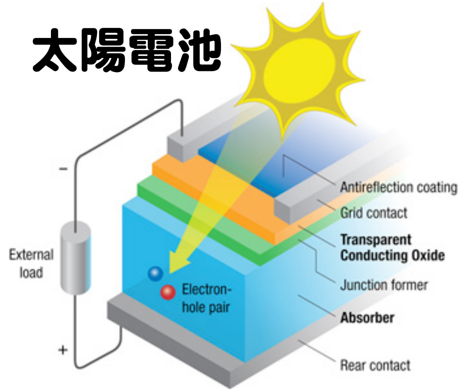
近接場光励起ダイナミクスを利用した
光・電子機能性ナノ構造体の理論設計

背後にある物理は何か？

光と物質の露な相互作用
(双極子近似を超えた光学応答)

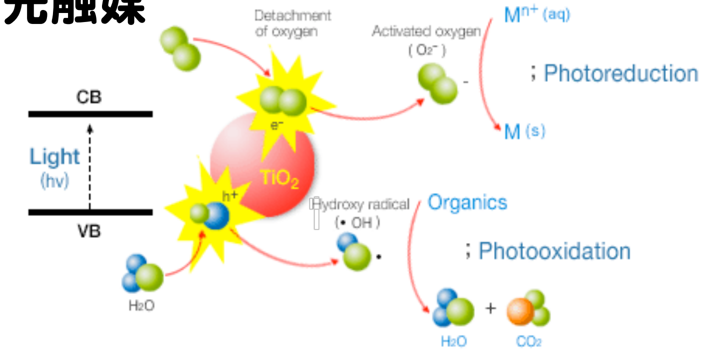
太陽光エネルギー変換

太陽電池

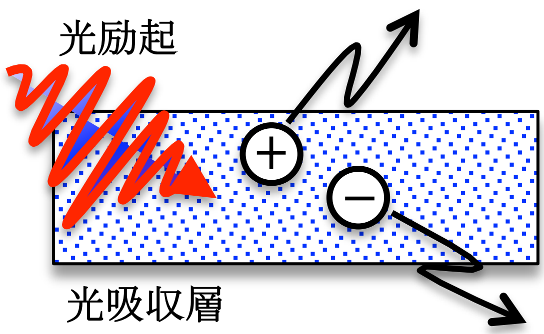


- シリコン型
- 化合物半導体型
- 色素増感型
- 有機薄膜型
- 量子ドット型

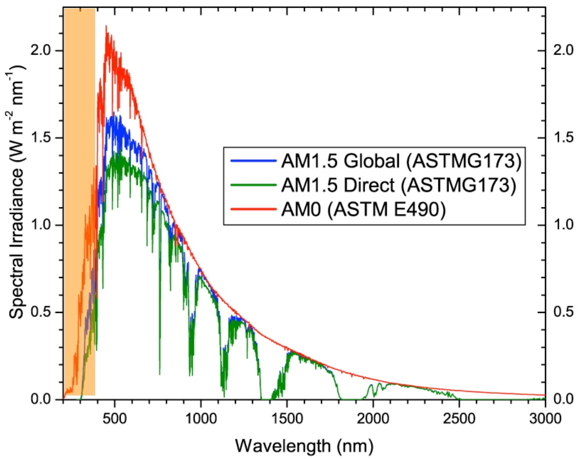
光触媒



基本の物理は同一

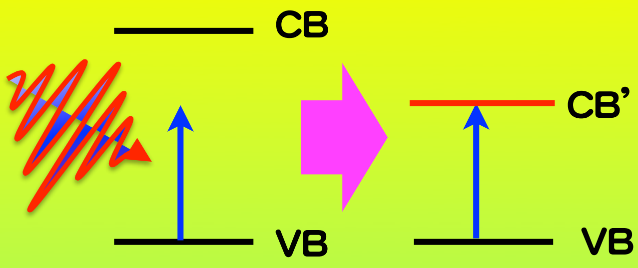


1. 光吸収（電子励起）
2. 電子・正孔対生成
3. 電荷分離



太陽光スペクトル

バンドギャップデザイン



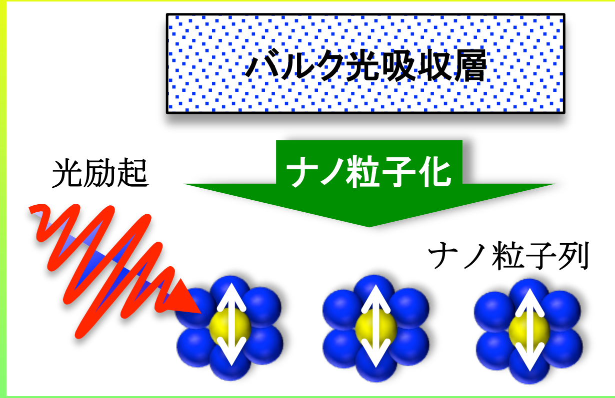
可視光励起

- 異種物質ドーピング
- 新規材料探索
- 多層化
- Zスキーム

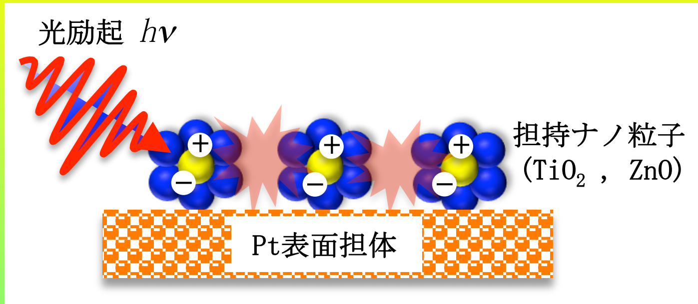
物質が決まれば物性が決まる

光励起ダイナミクスを利用

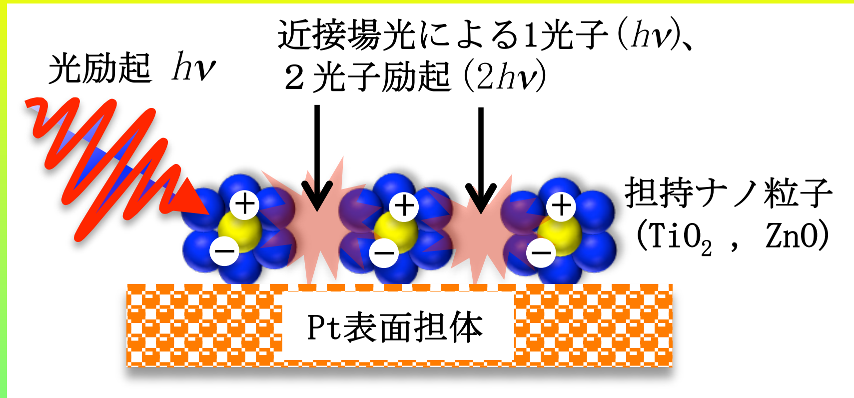
1. ナノ構造化（幾何学的構造）



2. 光の自由度を取り込む



3. 更に非線形効果を利用



ナノ光応答理論

時間依存シュレディンガー方程式（物質系）

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - i\hbar\frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\nabla + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2 - e\phi + V\right]\psi(\mathbf{r},t)$$

非一様相互作用

自己無撞着相互作用

$$\nabla^2\phi = -\frac{e}{\varepsilon_0}n_e, \quad -\nabla^2\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\nabla\phi = \frac{1}{c^2\varepsilon_0}\mathbf{j}$$

ミクロなレベルのマクスウェル方程式

非一様相互作用に関して

T. Iwasa and K. Nobusada, Phys. Rev. A <u>82</u>, 043411 (2010)

T. Iwasa and K. Nobusada, Phys. Rev. A <u>80</u>, 043409 (2009)

時間依存コーンシャム方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_l(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{n_e(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}' + V_{\mathrm{xc}} + V_{\mathrm{ion}} + V_{\mathrm{laser}}\right]\psi_l(\mathbf{r},t)$$

Hartree potential

exchange-correlation potential (LDA)

pseudopotential

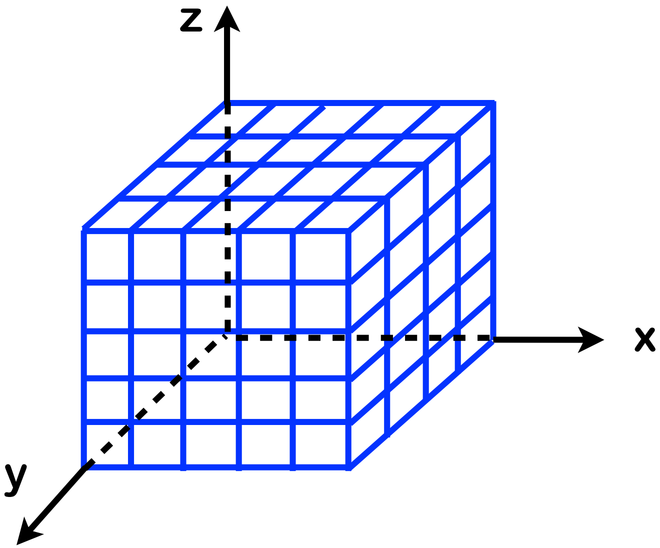
laser pulse

electron density

$$n_e(\mathbf{r},t) = 2\sum_{l}^{N/2}|\psi_l(\mathbf{r},t)|^2$$

M. Noda, T. Yasuike, K. Nobusada, and M. Hayashi, Chem. Phys. Lett. 550, 52 (2012)
T. Iwasa and K. Nobusada, Phys. Rev. A 82, 043411 (2010)
T. Iwasa and K. Nobusada, Phys. Rev. A 80, 043409 (2009)
Y. Kawashita, K. Yabana, M. Noda, K. Nobusada, T. Nakatsukasa, J. Mol. Struct.: Theochem 914, 130 (2009)
K. Nobusada and K. Yabana, Phys. Rev. A 75, 032518 (2007)
K. Shiratori, K. Nobusada and K. Yabana, Chem. Phys. Lett. 404, 365 (2005)
K. Nobusada and K. Yabana, Phys. Rev. A 70, 043411 (2004)

実時間・実空間差分電子ダイナミクス法



rather brute force approach but …

straightforward manner
no basis set dependence
easy to discuss time-dependent phenomena
nonlinear effects are tractable
suitable for massive parallelization

Simple Algorithm for TD-KS equation

Laplacian Operator: 9-pt FD

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_l(\mathbf{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{n_e(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}'+V_{\rm xc}+V_{\rm ion}+V_{\rm laser}\right]\psi_l(\mathbf{r},t)$$

Time-Propagation:
Taylor expansion

Hartree Potential (Poisson Eq.):
Conjugate gradient method

Finite Difference in Real Space

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_l(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{n_e(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}' + V_{\mathrm{xc}} + V_{\mathrm{ion}} + V_{\mathrm{laser}}\right]\psi_l(\mathbf{r},t)$$

finite difference approximation

J. R. Chelikowsky et al., Phys. Rev. B 50, 11355 (1994)

9-pt FD

diagonal & off-diagonal

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_l(x_i,y_j,z_k,t)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{n=-4}^{4}\left[C_n\psi_l(x_i+n\Delta x,y_j,z_k,t) + C_n\psi_l(x_i,y_j+n\Delta y,z_k,t) + C_n\psi_l(x_i,y_j,z_k+n\Delta z,t)\right]$$

$$+ \left[V_{\mathrm{H}}(x_i,y_j,z_k,t) + V_{\mathrm{xc}}(x_i,y_j,z_k,t) + V_{\mathrm{ion}}(x_i,y_j,z_k,t) + V_{\mathrm{laser}}(x_i,y_j,z_k,t)\right]\psi_l(x_i,y_j,z_k,t)$$

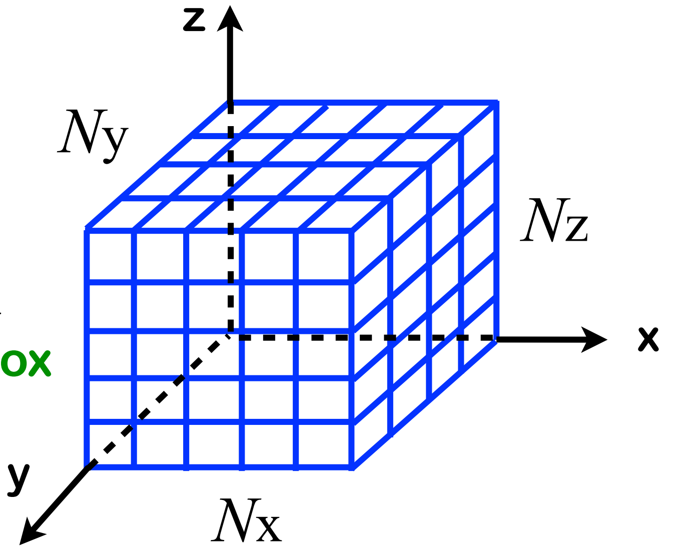
diagonal

sparse matrix

$$(N_x \times N_y \times N_z) \times (N_x \times N_y \times N_z) \approx 8M \times 8M$$

$$\sim 50\text{Å} \times 50\text{Å} \times 50\text{Å}$$

3D computational box



Hartree Potential

$$V_{\rm H} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{n_e(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}'$$

almost impossible to carry out direct integration

$$\to \nabla^2 V_{\rm H} = -e^2\frac{n_e}{\varepsilon_0}$$

Poisson Eq.

formally equivalent

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

very sparse matrix

$$(N_x\times N_y\times N_z)\times(N_x\times N_y\times N_z)\approx 8M\times 8M$$

- Conjugate gradient method might be better, i.e., iterative method
- alternative method, FFT (?)

algorithm of CG

initial vectors

$$Z^{(0)} = -\frac{e^2}{\varepsilon_0}n_e - \nabla^2 V_{\rm H}^{(0)}$$

$$P^{(0)} = Z^{(0)}$$

residual vector

$$Z^{(k)} = -\frac{e^2}{\varepsilon_0}n_e - \nabla^2 V_{\rm H}^{(k)} << 1$$

$$T^{(k+1)} = \nabla^2 P^{(k)}$$

$$A^{(k+1)} = (Z^{(k)}\cdot Z^{(k)})/(Z^{(k)}\cdot T^{(k+1)})$$

$$V_{\rm H}^{(k+1)} = V_{\rm H}^{(k)} + A^{(k+1)}P^{(k)}$$

$$Z^{(k+1)} = Z^{(k)} - A^{(k+1)}T^{(k+1)}$$

$$C^{(k+1)} = (Z^{(k+1)}\cdot Z^{(k+1)})/(Z^{(k)}\cdot Z^{(k)})$$

$$P^{(k+1)} = Z^{(k+1)} + C^{(k+1)}P^{(k)}$$

do loop

H. Flocard et al., Phys. Rev. C 17, 1682 (1978)

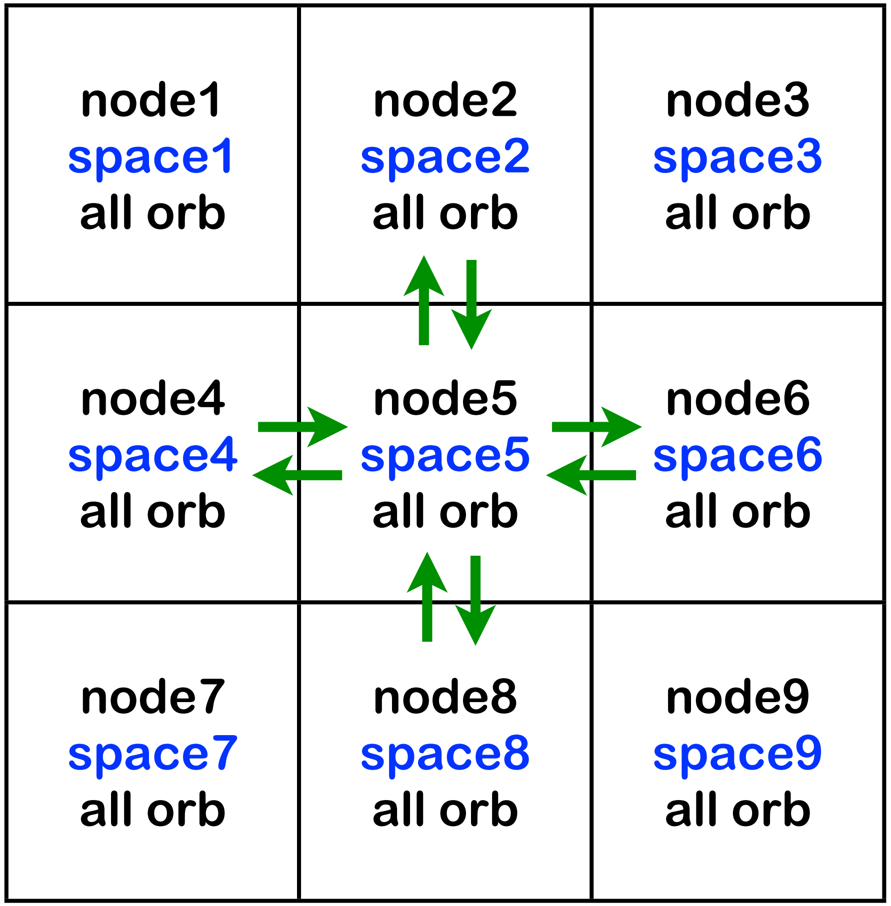
Time Propagation in Real-Time:Taylor Expansion

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_l(\mathbf{r},t) &= H\psi_l(\mathbf{r},t) \\
\Rightarrow \psi_l(\mathbf{r},t+\Delta t) &= \exp\left(-i\frac{H(t+\Delta t/2)}{\hbar}\Delta t\right)\psi_l(t) \\
&\approx \sum_{n=0}^{4}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{H(t+\Delta t/2)}{\hbar}\Delta t\right)^n\psi_l(t)
\end{aligned}
$$

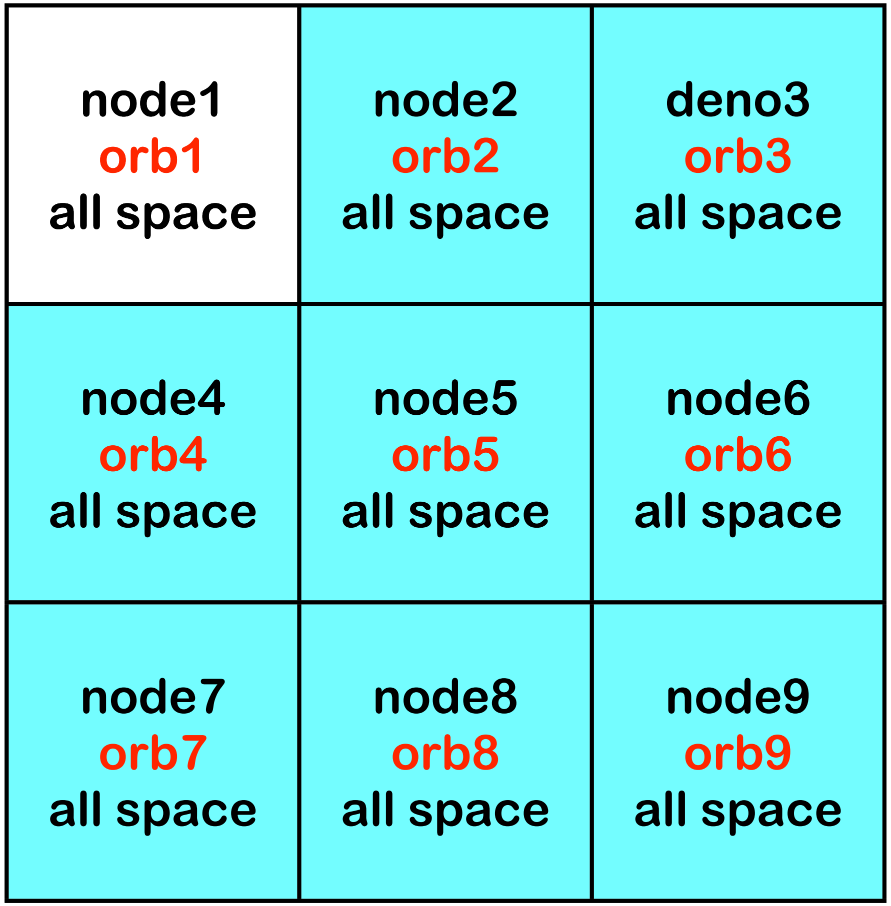
alternative propagation methods:
ex.
1) Crank-Nicholson operator method
2) Split operator method with FFT

unconditionally stable even for large step size,
but higher cost per one step and not suitable for massively parallel computation

Grid vs. Orbital Parallelization



隣接サイコロ面の通信増大
(空間差分に起因)



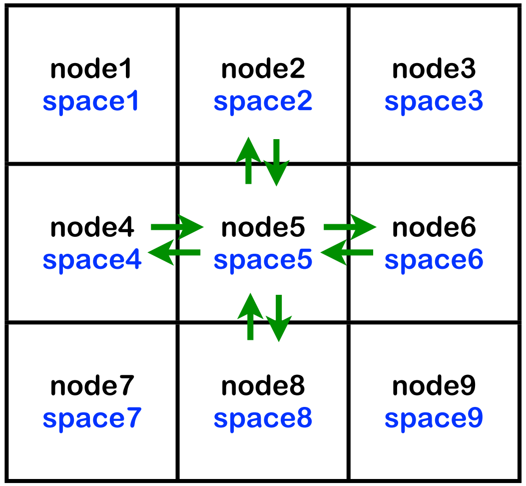
全体通信増大
(電子密度計算に起因)

$$n_e(\mathbf{r},t) = 2\sum_{l}^{N/2} |\psi_l(x_i, y_j, z_k, t)|^2$$

Bottleneck in solving poisson equation

grid parallelization only

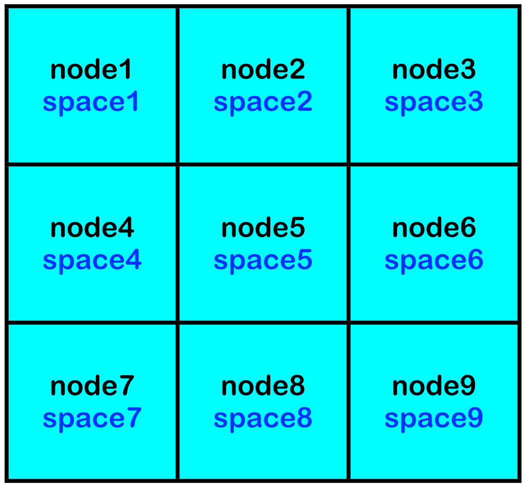
$$\nabla^2 V_{\mathrm{H}} = -e^2 \frac{n_e}{\varepsilon_0}$$



差分：隣接通信増大

$$T^{(k+1)} = \nabla^2 P^{(k)}$$
$$A^{(k+1)} = (Z^{(k)} \cdot Z^{(k)})/(Z^{(k)} \cdot T^{(k+1)})$$
$$V_{\mathrm{H}}^{(k+1)} = V_{\mathrm{H}}^{(k)} + A^{(k+1)} P^{(k)}$$
$$Z^{(k+1)} = Z^{(k)} - A^{(k+1)} T^{(k+1)}$$
$$C^{(k+1)} = (Z^{(k+1)} \cdot Z^{(k+1)})/(Z^{(k)} \cdot Z^{(k)})$$
$$P^{(k+1)} = Z^{(k+1)} + C^{(k+1)} P^{(k)}$$

内積：全体通信増大



Bottleneck in Laplacian operation

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_l(\mathbf{r},t) = H\psi_l(\mathbf{r},t)$$

$$\Rightarrow \psi_l(\mathbf{r},t+\Delta t) = \exp\left(-i\frac{H(t+\Delta t/2)}{\hbar}\Delta t\right)\psi_l(t)$$

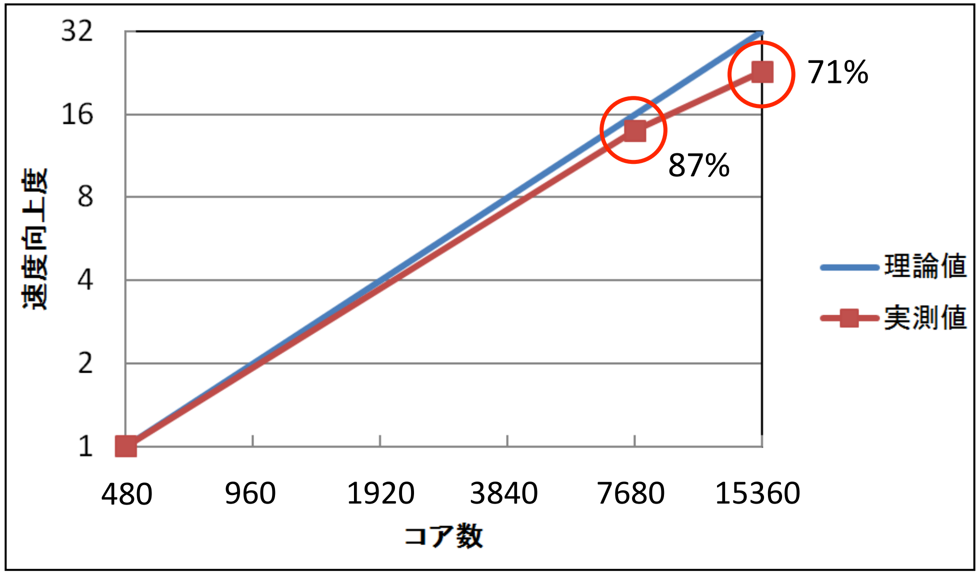
$$\approx \sum_{n=0}^{4}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{H(t+\Delta t/2)}{\hbar}\Delta t\right)^n\psi_l(t)$$

$$H\cdot\begin{pmatrix} \\ \psi_l \\ \\ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \\ a \\ \\ \end{pmatrix} \Rightarrow H\cdot\begin{pmatrix} \\ a \\ \\ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \\ b \\ \\ \end{pmatrix} \Rightarrow \cdots$$

ベクトルの使い回しが効かない
しかもベクトルのサイズが大きい

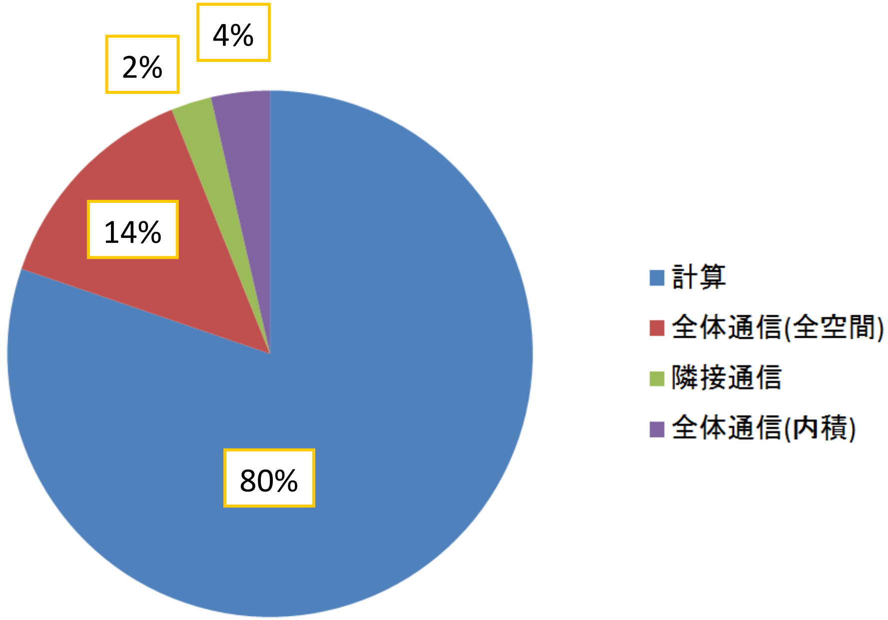
キャッシュミス発生
ノード内並列(OpenMP)にも影響

C_{60}×16のベンチマーク



コア数	480	7680	15360
理論性能比	10.50%	9.36%	7.81%

15360コアでの計算の内訳



Bench mark (TDDFT)　2012年当時

	実績値	K-Computer
最大並列度	8192core（Altix） 576core（京・トライアル枠） 15,360core（京・大規模枠1月）	京 98304core（2012年6月）
最大メモリ/コア	0.002 GB	0.15 GB
並列化方法	MPI+OpenMP： MPI1024/OpenMP8	98304core：MPI 12288＋ OpenMP 8
速度向上率	C_{60}array（数百原子系） 75-85%	数千原子系 75%（2012年6月）
実行性能	10.56%（京576コア） 7.81%（京15,360コア）	15%（2011年10月）
通信オーバーヘッド	C_{60}フラーレンのベンチマーク 17% (1024コア)	10%以下

申請時点での準備状況

（1） 最大実行ノード数
12288ノード

（2） 実行並列化率
99.984 %
※速度向上率は、75.3% (12288ノード・6144ノード比)

（3） 演算性能値(実行効率)
3.25% (12288ノード)
4.19% (6144ノード)

蛇足：
- 特別支援課題なので、事実上、京を一切使用できない
- 完全に崖っぷちの状態
- しかし、広く万遍無く採択するのも困る
- 大学のスパコンと棲み分け必要

K(京)-Computer and its High Performance Architecture

世界最高速レベル　８コア / ノード
８万ノード以上 (~66万コア)

参考までに
※現在の世界最速：
Cray Titan（1位)
IBM Sequoia（２位)

我々の超並列プログラミングの現状
全ノードを使い切る計算　66万コア並列（３月中旬)

- 闇雲に計算してもあまり成果は出ない
- 真に超並列スパコンを必要とする研究かどうか

十数～数十nmレベルの実在系近接場光励起ダイナミクスが射程距離圏内

量を質に変える事が出来るのか？

ママチャリ

ロードバイク

新幹線

量が質に変わる
ためのギャップ

我々の例で言えば、電子と電磁場のカップリング

- 十数〜数十nmサイズのナノ構造体（量が質に変わるためのギャップ）
- 超並列スパコン必須（手段の必然性・正当化）
- 光・電子デバイス（成果）

まとめ

- ナノ光応答理論に基づく電子・電磁場カップリングダイナミクスの定式化
- 実在系（十数〜数十nm）をターゲットとする超並列光・電子協奏ダイナミクスプログラム開発
- 京コンピュータを使った実機稼働（６６万コア並列）
- ピラジン-ナトリウム複合クラスター系におけるSERSのデモ

今後の展開

★　実在系光・電子機能性デバイスの理論設計