

π 共役ポリマーの電子状態計算に現れる連立一次方程式の並列解法

横川三津夫，熊澤賢一郎（神戸大システム情報学研究科）
山本有作（電通大）

※ 科研費基盤(B) 26286087 「電子状態計算への応用を指向した行列計算ライブラリの機能拡張とメニーコア向け最適化」（代表：山本先生）

2016/11/29

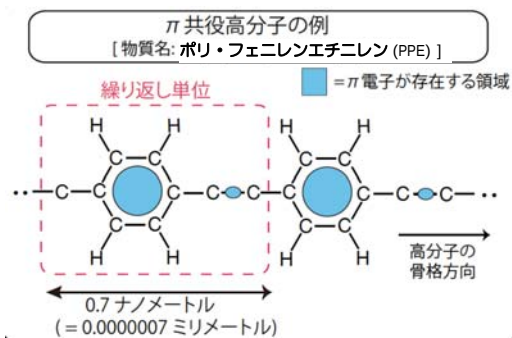
研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

背景

■ 導電性高分子材料（ π 共役ポリマー）

- ◆ 電気が流れる高分子から成る。→ ウェアラブルデバイスへの期待
- ◆ ベンゼン環などに存在する π 電子が移動 → **電子の流れ**

→ 電子状態を知ることが重要



高分子学会Web, 星らの成果 http://main.spsj.or.jp/koho/24p/24p_9.pdfより

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

π 共役ポリマーの電子状態計算

- 時間発展シュレディンガー方程式 $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -iH\psi$

- Crank-Nicolson法により離散化

$$\frac{\psi(t + \Delta t) - \psi(t)}{\Delta t} = -iH \frac{\psi(t + \Delta t) + \psi(t)}{2}$$

$$\Rightarrow \left(I + \frac{1}{2}i\Delta t H \right) \psi(t + \Delta t) = \left(I - \frac{1}{2}i\Delta t H \right) \psi(t)$$

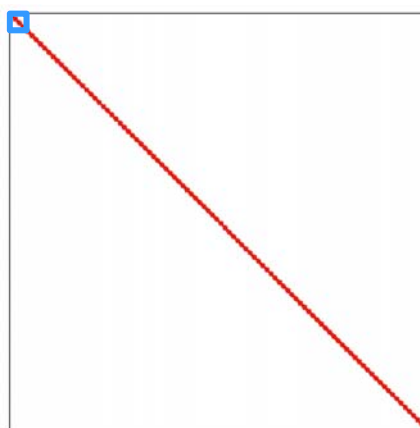
- $\left(I + \frac{1}{2}i\Delta t H \right)^{-1}$ の計算が必要

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

PPEの行列 H の形状

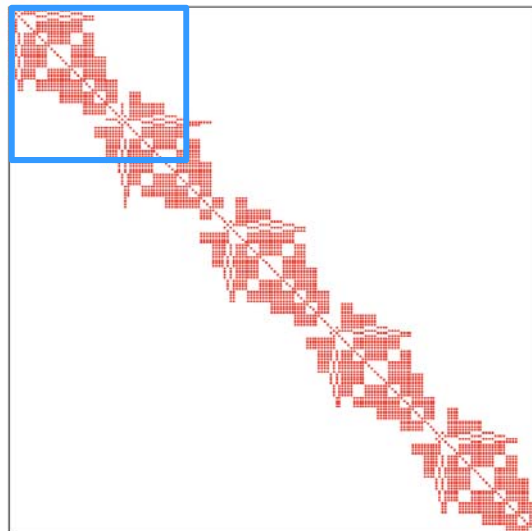
- 行列サイズ: $3,594 \times 3,594$ ($\text{[Chemical Structure: PPE repeat unit with } n=100\text{]}$, $n=100$)
- 非ゼロ要素数: 41,781
- 帯幅: 29

 $H =$


2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

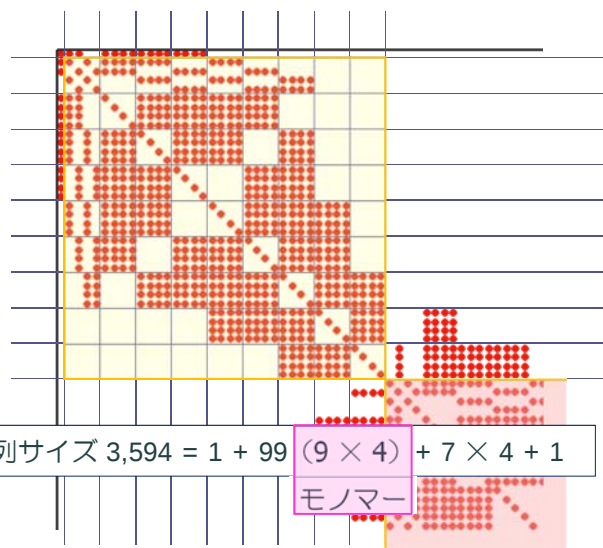
行列 H の先頭 180×180 の形状 (拡大)



2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

行列 H の先頭 53×53 の形状



行列サイズ $3,594 = 1 + 99 (9 \times 4) + 7 \times 4 + 1$

モノマー

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

π共役ポリマーの電子状態計算

- シュレディンガー方程式 $ih \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$

- Crank-Nicolson法により離散化

$$ih \frac{\psi(t + \Delta t) - \psi(t)}{\Delta t} = H \frac{\psi(t + \Delta t) + \psi(t)}{2}$$

$$\Rightarrow \left(I + \frac{i \Delta t}{2h} H \right) \psi(t + \Delta t) = \left(I - \frac{i \Delta t}{2h} H \right) \psi(t)$$

- $\left(I + \frac{i \Delta t}{2h} H \right)^{-1}$ の計算が必要 $\Rightarrow$ 直接法で解けないか？

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

最近のHPCシステム

- 単一コアの性能限界
 - ◆ 微細加工技術が限界に達している（7nm ?）
- マルチコアLSIからメニーコア型LSI
 - ◆ Intel Xeon Phi (KNL)
 - プロセッサー： 14nm
 - 64 - 72コア, オンチップメモリ 16GB
 - 倍精度で 3TFlops以上
 - ◆ 共有メモリ型システムとして利用
 - 直接解法を工夫する.

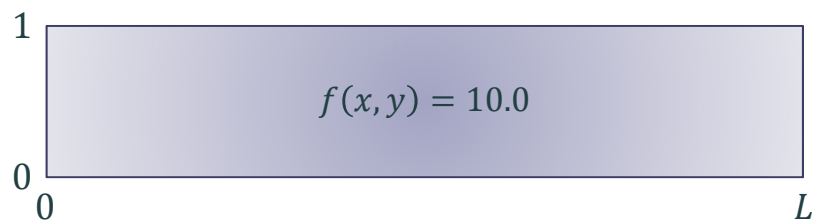
2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

モデル問題

■ ポアソン方程式

$$\begin{aligned} \Delta u &= f(x, y) & \text{in } \Omega &= [0, L] \times [0, 1] \\ u(x, y) &= 0.0 & \text{on } \partial\Omega \end{aligned}$$



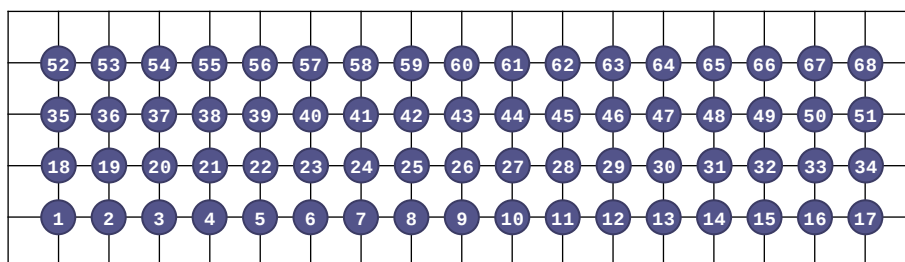
■ 有限差分法で離散化 → $Ax = b$

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

離散化 (natural ordering)

【例】 x 方向 $\times$ y 方向 : 18×5 等分割



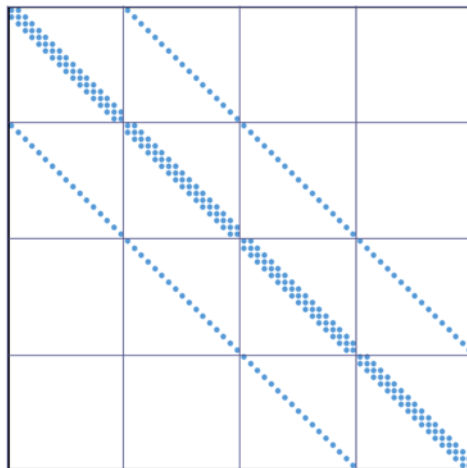
■ A が 68×68 行列の連立一次方程式 $Ax = b$

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

行列（natural ordering）の非ゼロ要素形状

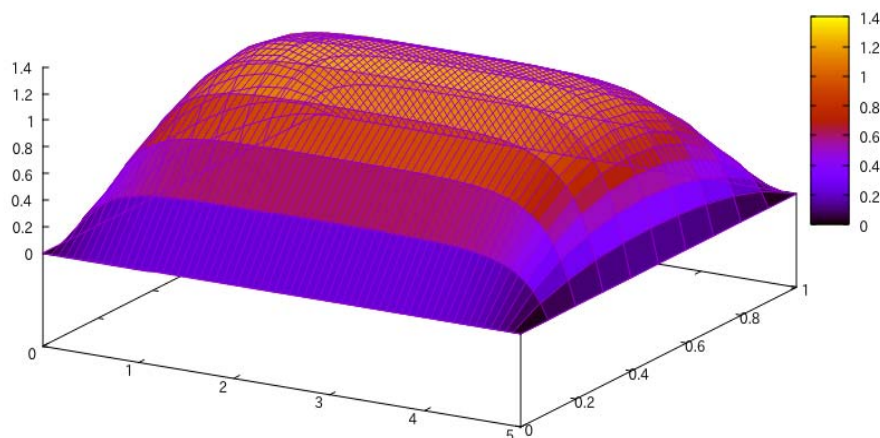
$A =$



2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

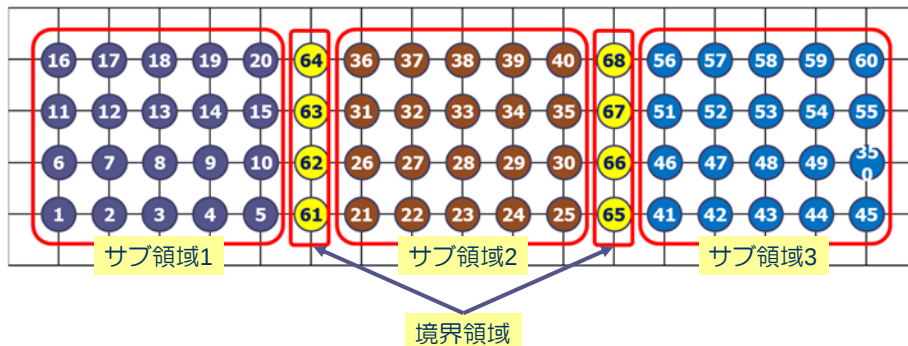
計算結果： $[0,5] \times [0,1]$ ， 64×10 分割



2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

One Way Dissection Ordering



- 全体の格子数 ($N_x \times N_y$) : 17×4
- サブ領域数 (n_B) : 3
- サブ領域格子数 ($n_x \times n_y$) : 5×4
- 境界領域格子数 : $(n_B - 1) \times n_y = 8$

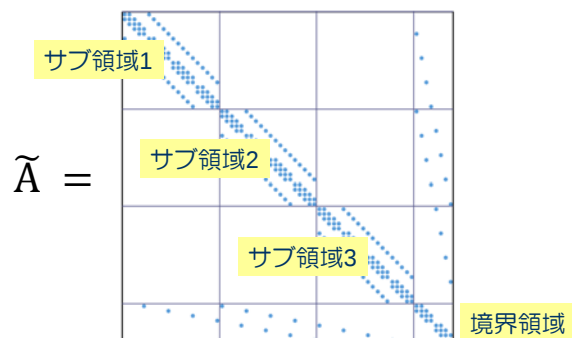
2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

行列 (one-way dissection ordering) の非ゼロ要素形状

- 適当な置換行列 P を使って

$$(PAP^t)(Px) = Pb \quad \rightarrow \quad \tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$$

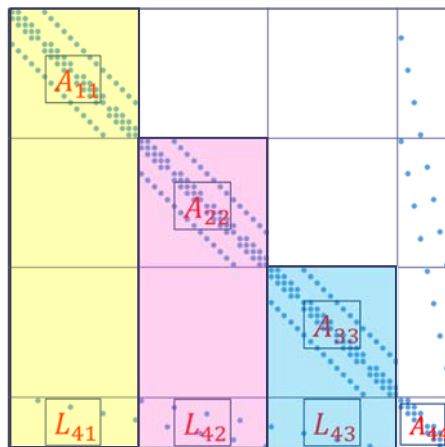


- 対称行列なので、コレスキー分解を用いる。

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

コレスキー分解の並列化



- ① A_{11}, L_{41} を LDL^t 分解
- ② A_{22}, L_{42} を LDL^t 分解
- ③ A_{33}, L_{43} を LDL^t 分解
- ④ $\widetilde{A}_{44} = A_{44} - \sum_{i=1}^3 L_{4i} L_{4i}^t$ を計算
- ⑤ $\widetilde{A}_{44}$ を LDL^t 分解

①, ②, ③は並列に実行可能

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

行列 (one-way dissection ordering) の並列 LDL^t 分解

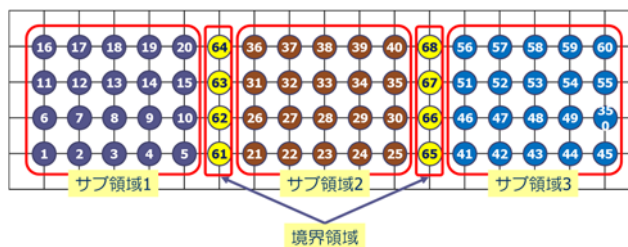
- 一般に, サブ領域数 n_B に対して

- ① $A_{ii}, L_{n_B i}$ ($i = 1 \dots n_B$) を LDL^t 分解
- ② $\widetilde{A}_{n_B n_B} = A_{n_B n_B} - \sum_{i=1}^{n_B} L_{n_B i} L_{n_B i}^t$ を LDL^t 分解

並列計算可

Reduction演算

- 並列数は n_B



2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

スケーラビリティ評価（行列サイズを固定）

■ 評価条件

- ◆ 全体の格子数 ($N_x \times N_y$) : 639×9
- ◆ サブ領域数 (n_B) : 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128
 - サブ領域の n_x : (319, 159, 79, 39, 19, 9, 4)
 - 境界領域の格子数 : $9 \times (n_B - 1)$
- ◆ スレッド数 : 2, 4, 8, 16

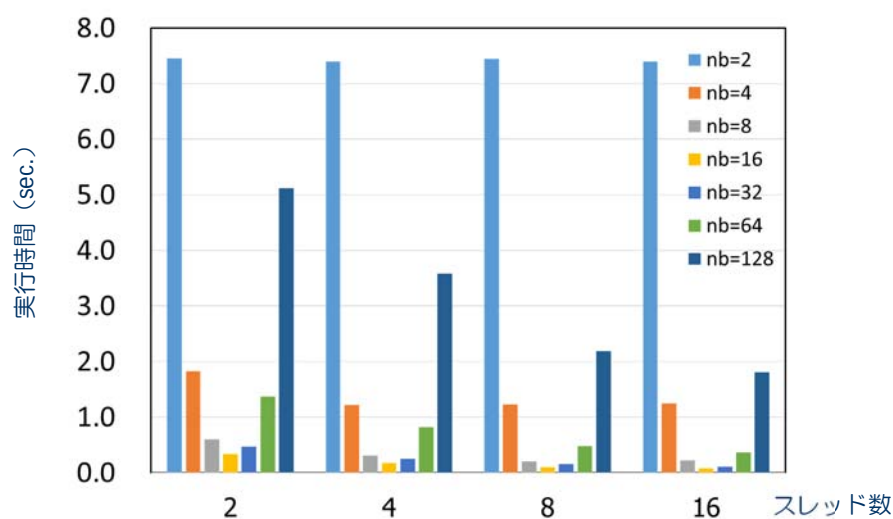
■ 評価に用いた計算機システム

- ◆ SGI UV300 (Xeon 3.0GHz, 32CPU, 12cores/CPU)
- ◆ Intel compiler (-O3 -xAVX -qopenmp)

2016/11/29

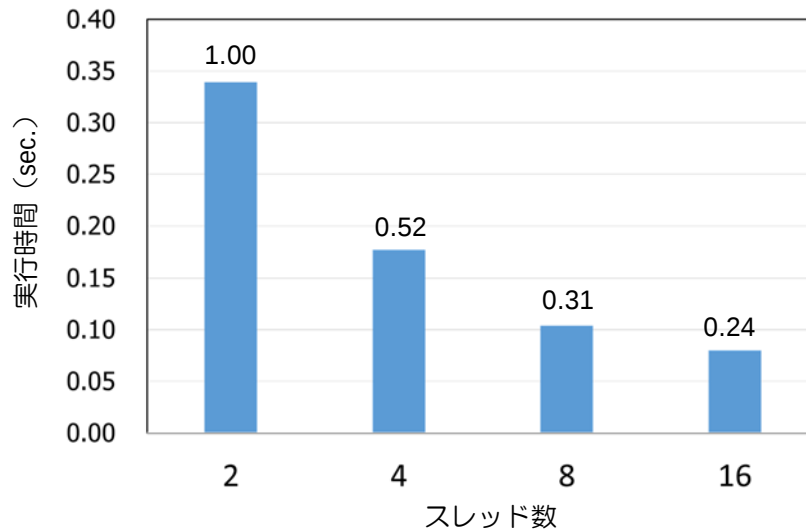
研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

実行時間（スレッド数 vs. サブ領域数 n_B ）



2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

サブ領域数 $n_B = 16$ のときの実行時間

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

コレスキー分解部分の演算量モデル: $C = C_p + C_s$

■ 並列実行部分

① $A_{ii}, L_{n_{Bi}} (i = 1 \dots n_B)$ を LDL^t 分解② $\sum_{i=1}^{n_B} L_{n_{Bi}} L_{n_{Bi}}^t$

$$C_p = \frac{n(n+1)(2n+3m+10)}{6} + 2m^2n + 2mn + n$$

■ 逐次実行部分

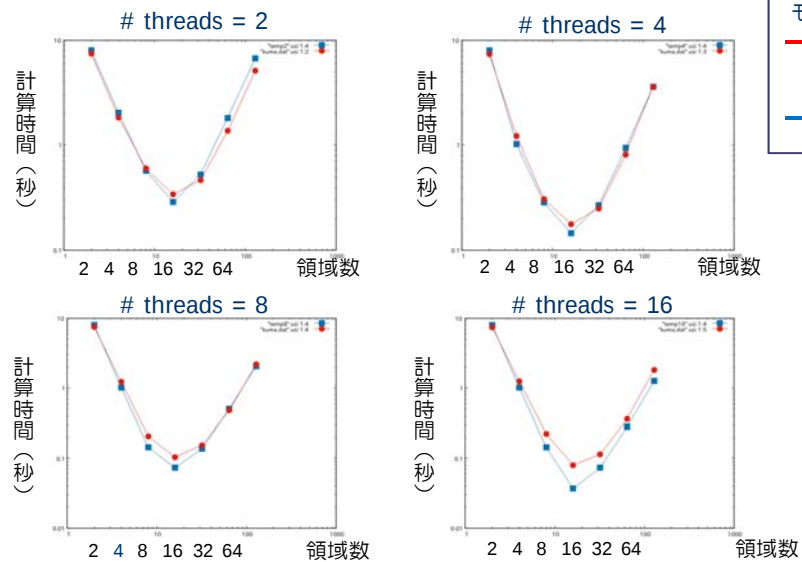
① $\widetilde{A_{n_B n_B}} = A_{n_B n_B} - \sum_{i=1}^{n_B} L_{n_{Bi}} L_{n_{Bi}}^t$ ② $\widetilde{A_{n_B n_B}}$ を LDL^t 分解

$$C_s = \frac{n(n+1)(m+1)}{6} + m^2 n_B + 8m$$
ここで, $m = (n_B - 1), n = \frac{N_x + 1}{n_B} - 1$

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

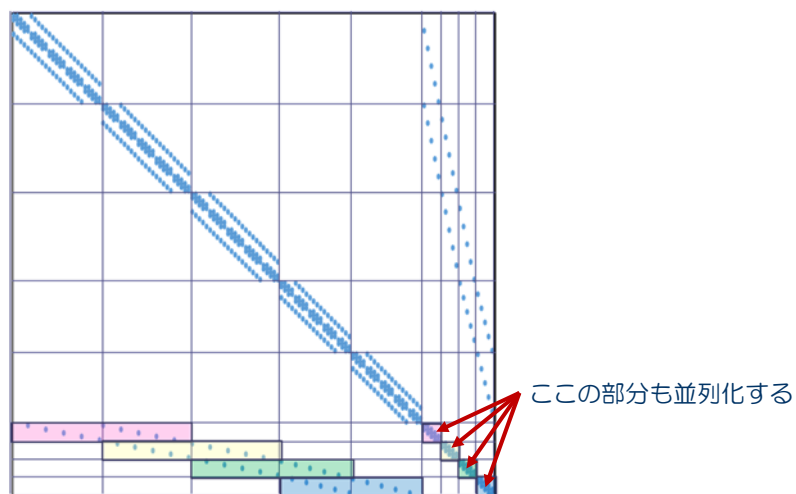
演算量モデル (αC) と計算時間



2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

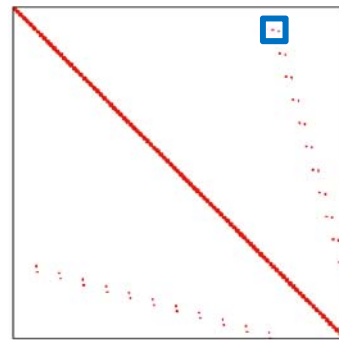
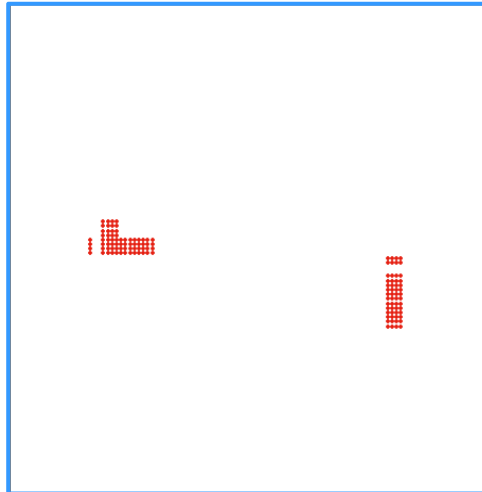
逐次計算部分の改良



2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

最初の問題に適用できるか？



サブ領域数 11
 サブ領域格子数 252
 境界格子数 72×10

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

今後の課題（評価の方向性）

■ ポアソン方程式

- ◆ x方向の格子数を固定した場合に、任意の領域分割数（境界領域のx方向の格子数を1より大きくした場合を含む）に対するStrong scalingの評価（サブ領域の格子数が変化）
- ◆ Weak scalingの評価（x方向の格子数を増加）
- ◆ 行列の疎性を活かした実装（CRS形式等）
- ◆ ハイブリッド並列（スレッド並列＋プロセス並列）実装

■ π 共役ポリマーの電子状態計算に向けて

- ◆ Hの疎性を活かした実装
- ◆ 時間発展をしたときの評価（行列分解は一度で良い）

2016/11/29

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」