

(様式7)

学位論文審査結果の要旨

氏名	井町宏人
審査委員	委員長 _____ 星 健夫 _____ 印 委員 _____ 小谷 岳生 _____ 印 委員 _____ 山本 有作 _____ 印 委員 _____ 印 委員 _____ 印
論文題目	Numerical methods for large-scale quantum material simulations (大規模量子物質シミュレーションのための数値計算法)
審査結果の要旨	<p>本論文は、大規模量子物質シミュレーションの中核となる数値計算法について、基盤的数値アルゴリズムおよびスーパーコンピュータを用いた応用研究を論じたものである。量子物質シミュレーション(電子状態計算)は、電子を波としてあつかう量子力学的シミュレーションであり、今日の物質科学の盤石な理論基盤となっている。しかし一般には計算量が膨大になり、時間的・空間的に極小なスケールしか扱えない。本研究では、スーパーコンピュータむけの超並列数値アルゴリズムを起点として、次世代フレキシブル電子デバイスなど巨視的系を直接扱い、ものづくり産業に至ることを最終目標としている。これら数値計算手法は、プログラム言語 Fortran を用いた汎用数値ルーチン(行列計算ソルバー)として開発され、量子物質シミュレーションコード ELSES(http://www.elses.jp/)に接続されることで物質科学研究に用いられた。成果物ルーチンは公開予定であり、一部はすでに公開されている。</p> <p>本論文は、以下の構成となっている。</p> <p>第1章は序論であり、上記の大局的視点が述べられている。</p> <p>第2章は、2つの背景が述べられている。1つ目の背景は、2000年代中旬以降における、超並列計算機の台頭である。「京」(けい) コンピュータなど、今日のスーパーコンピュータは超並列型計算機であり、膨大な(数十万台以上の)演算機(CPU コア)が並列的に稼動する。この傾向は次世代スーパーコンピュータでは、さらに顕著になると予想されている。こうしたスーパーコンピュータの潜在的性能をフルに引き出すために、超並列性をもった(ほぼ独立した多数プロセスに分割可能な)数値アルゴリズムが必須であり、計算科学にパラダイムチェンジが求められている。2つ目の背景は、計算手法の概論であり、本研究に直結する、数値線形計算ルーチン・大規模電子状態計算の数理的側面などが概観されている。電子状態計算は通常、一般化固有値問題に帰着されるが、計算コストの増大や並列化が困難なことがボトルネックとなる。超並列型計算機に適した革新的数値アルゴリズムが求められており、本研究はそれに応えるものと言える。</p> <p>第3章・第4章は、本論文の中核となる2つのテーマが論じられている。</p> <p>第3章では、複合型一般化固有値問題ルーチンの構築と、計算速度の評価が行われている。スーパーコンピュータを用いた大規模計算においては、計算速度は問題(行列サイズなど)・アルゴリズム・</p>

計算機(ハードウェア)の全てに依存する。そこで、問題・計算機ごとに最適なアルゴリズムを選択することが重要となる。複合化ルーチンでこれを実現することが、本章での目標となっている。一般化固有値問題ルーチンは、(i)標準固有値問題への変換ルーチン、(ii)標準固有値問題の求解ルーチン、の2つのサブルーチンに分解できる。複合ルーチンとは、3種の既存並列固有値問題計算ライブラリ(ScaLAPACK, ELPA, EigenExa)から、(i)(ii)についてそれぞれ最適なサブルーチンを選択可能とした、ミドルウェア型のソフトウェアをさす。数理的な適用可能性は明らかであるが、分散データフォーマットの変換を高速に実行できることなど、実用化への要請があり、これを達成した。(i)(ii)の組み合わせとして全部で8通りの複合化ルーチンが実現され、京コンピュータを用いたテストを行った。複雑ナノカーボン材料研究に現れた43万次元行列を対象とした京全体を用いたテスト計算で、従来ルーチン(ScaLAPACKを(i)(ii)に用いた計算)に対して、最適複合化ルーチン(ELPAを(i)に用い、EigenExaを(ii)に用いた計算)は、4.1倍高速となった。また、熱運動するカーボンナノチューブ研究に現れた100万次元行列の計算も行い、京全体をもちいて1.5時間で全固有値・固有ベクトルの計算が達成された。100万次元行列は、世界最大の計算系である。計算コードは、オープンソースソフトウェアとして公開された(EigenKernel; <https://github.com/eigenkernel/>)。

第4章では、ELSEESのオーダー N (大規模)計算アルゴリズムについて、プログラムチューニング(高速化)および有機高分子集合体への応用研究が行われている。従来型計算では、原子数 N に対して計算コストが N^3 に比例し、大規模計算を困難にする原因となっている。オーダー N 計算とは、計算コストが N に比例する方法の総称である。ここでのオーダー N 法は、一般化固有値問題の代わりに、シフト型線形方程式を数理的基盤としている。アルゴリズムは、計算の数理的性質(行列対角和(trace)計算を部分和に分解できること)を利用するため、高い並列性を発揮できる。本研究では、京コンピュータ上で詳細な計算速度調査を行い、基盤的なルーチン(疎行列・ベクトル積)の高速化などを行った。世界最大となる1億原子の有機高分子集合体に対して、京全体までの高並列効率が達成された。具体的には、強スケーリング型の並列効率 α が、 $\alpha=0.75$ であった。応用研究として、典型的な有機高分子系(poly-(phenylene-ethynylene))の集合体における、キャリア(ホール)伝導メカニズム研究が行われた。10万本の高分子非理想(乱雑)集合体に対して、局所量子結合解析(integrated Crystalline Orbital Hamiltonian Population 解析)を行い、高分子1本を1要素とする、粗視化量子システムが導出された。数理的には、ハミルトニアン行列が約2億次元から10万次元に次元縮約されたことを意味する。粗視化行列に対して、第3章で開発したソフトウェア(EigenKernel)で固有値問題をとき、全固有値・固有ベクトルを得た。得られた固有ベクトルは、高分子同士が量子的に結合していることを意味し、高分子数本からなる小規模ネットワークが伝導を担うという物理描像が示唆される。小規模ネットワークの1例(3高分子)をとりあげて量子(波束)ダイナミクス計算を行ったところ、高分子間を伝導する電子波が得られ、上記物理描像が確認された。

第5章は、まとめと展望が述べられている。展望としてはデータ駆動科学との融合が、予備的研究と共に論じられている。

研究成果を総括すると、計算科学の基盤として、非常に大きなインパクトが認められる。2つのテーマ(第3章・第4章)はいずれも、京コンピュータ全体を使った、世界最大系の計算であり、計算科学の到達点をあらわしている。量子力学に基づく数理的手法であるため、広範囲な物質に適用でき、大きな波及効果も期待できる。研究成果は「京」コンピュータ上での産業利用課題にも用いられており、産業へも展開しつつある。主要な成果は、3本の主論文として出版済みである。学会発表としては、数理科学分野最大の国際会議The International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2015, 2015年8月,北京)で口頭発表に選出されるなど、十分な実績がある。さらに、第4章の研究内容は、スーパーコンピュータを用いた優れた研究成果に与えられる、ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)平成27年度優秀成果賞を受賞している(2016年6月17日)。

上記のように本論文は、数理手法に基づく量子力学的物質シミュレーションの革新として、計算科学分野に大きなインパクトをもたらしており、学位に資するものである。