

スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」採択課題のお知らせ

1. はじめに

Oakforest-PACS、Reedbush-H スーパーコンピュータシステムでは、「大規模 HPC チャレンジ」を実施しています。「大規模 HPC チャレンジ」は、スーパーコンピュータシステムがもつ最大計算ノードを、最大 24 時間・1 研究グループで計算資源の占有利用ができる公募型プロジェクトです¹。

課題審査委員会による厳正な審査の結果、以下の課題を採択しましたのでお知らせいたします。

2. 採択課題

システム：Oakforest-PACS

募集期間：2017 年度 第 2 回再募集 2017 年 12 月 20 日～2018 年 1 月 22 日

2 件の応募があり、以下の課題を採択しました。

採択課題一覧

課題名	櫻井・杉浦法とシフト CG 法を用いた実空間差分法に基づく第一原理伝導計算の高速化
代表者名 (所属)	小野倫也 (筑波大学 計算科学研究センター)
実空間差分法を用いた第一原理電子状態・伝導特性計算コード RSPACE を開発している。第一原理伝導計算は、電極自己エネルギー及び散乱領域のグリーン関数の計算が計算規模拡大の障害となっている。申請者らは、櫻井杉浦法による高速固有値問題解法とシフト共役勾配法による大規模連立方程式解法を組み合わせ、これらのボトルネックの計算コストを大幅に削減した。そして、これまで高々数百原子程度であった第一原理伝導計算の計算モデルを、OFP512 ノードを使用して 2000 原子以上に拡大することに成功した。改良した計算コードの実行時間の 90%以上は大規模疎係数行列に対する連立方程式解法の実行に費やされ、当該部分が優れた並列化効率と 6～9%の実行効率を達成することを確認している。得られた成果を学会に投稿するため、OFP でのフルノード実行により、計算コードの性能評価と 1 万原子程度に計算モデルを拡大した伝導計算を行う。	

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/service/challenge/>