Email: yuta-yahagi@nec.com

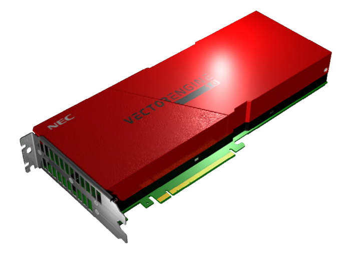
久保公式のベクトル化による電気伝導度計算の高速化

○ 矢作裕太[1,2], 加藤季広[1]

1. NEC, 2. 産業技術総合研究所

概要

◆久保公式にベクトル化を適用することで、電気伝導度および異常ホール伝導度の計算を高速化した。
◆ベクトル計算機 NEC SX-Aurora TSUBASA とスカラ計算機 Xeon でベンチマーク比較を行ったところ、ノード性能でSX-Auroraが最大２倍程度高速であった。



SX-Aurora TSUBASA

背景：ハイスループット第一原理計算による材料データ生成

電気伝導度データ生成のための自動計算ワークフローと所要CPU時間[1]

データベース	前処理	電子状態計算	後処理	伝導度計算
データベースより結晶構造を取得	計算対象のスクリーニング	密度汎関数法による電子状態計算	ワニエ強結合模型の構築	伝導度テンソルを久保公式により評価
< 1 sec	~ 1 sec	~ 1 day	~ 0.5 day	**~ 10 day**

久保公式 [2]： (内因性異常ホール伝導度の場合)

$$\sigma_{\alpha\beta} = v_\alpha \quad v_\beta = \frac{e^2\hbar}{\pi}\int_{\mathrm{BZ}}\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\sum_n\sum_{n\neq m}\mathrm{Im}\left[\frac{\langle n\boldsymbol{k}|\hat{v}_\alpha|m\boldsymbol{k}\rangle\langle m\boldsymbol{k}|\hat{v}_\beta|n\boldsymbol{k}\rangle}{(E_{\boldsymbol{k}m}-E_{\boldsymbol{k}n})^2}\right]\theta(E_{\mathrm{F}}-E_{\boldsymbol{k}n}),$$

久保公式の計算は一般に高コスト、ワークフローの律速要因となっている。

久保公式の高速化ができれば、材料データをより効率的に生成できる。

久保公式のベクトル化による高速化

久保公式に基づく伝導度計算法の課題

- ◆ 数値積分の要求精度が高く、高コスト
  - ➢ 典型的な積分点数 200^3（DFTの約1000倍程度）
- ◆ 律速要因が混在（３次元数値積分×行列対角化）
  - ➢ 実装が容易なMPI(+OpenMP)並列が主流

久保公式の疑似コード（従来手法[3]）

```
! 数値積分（このループにMPI並列適用）
for k⃗ in {k⃗_1, k⃗_2, …, k⃗_{N_k}}
  ! ハミルトニアン、速度演算子の計算
  Ĥ, v̂_α, v̂_β = evaluate_matrix_elements(k⃗)
  ! ハミルトニアンの対角化 (by LAPACK)
  E⃗, Û = diagonalize(Ĥ)
  ! 演算子を固有基底に変換 (v̂ = Û v̂ Û†)
  v̂_α =convert(Û, v̂_α); v̂_β =convert(Û, v̂_β)
  ! 電気伝導度の計算
  σ +=evaluate_conductivity(E⃗, v̂_α, v̂_β)* dk⃗
end for
```

ベクトル化＆SX-Aurora向け最適化コード

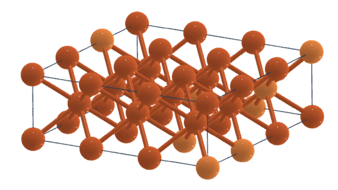
```
! 積分点をベクトル長 lb に分割 (ex. lb = 256)
for k⃗[:] in {k⃗_[1:lb], k⃗_[lb+1:2lb], …, k⃗_[N_k−lb+1:N_k]}
  ! ベクトル(長さlb)を成分にもつ行列 Â[:] を考える
  ! → 行列演算をベクトル実行 (loop-pushing)
  Ĥ[:], v̂_α[:], v̂_β[:] = evaluate_matrix_elements(k⃗[:])
  ! EISPACKをベースに対角化コードを最適化
  E⃗[:], Û[:] = diagonalize_vectorized_eispack(Ĥ[:])
  v̂_α[:] =convert(Û[:], v̂_α[:])
  v̂_β[:] =convert(Û[:], v̂_β[:])
  σ[:] +=evaluate_conductivity(E⃗[:], v̂_α[:], v̂_β[:])* dk⃗
  σ +=sum(σ[:])
end for
```

最長ループである数値積分にベクトル化を適用
→ 高いベクトル化率を達成 (~99%)

ベクトル計算機とスカラ計算機のベンチマーク比較

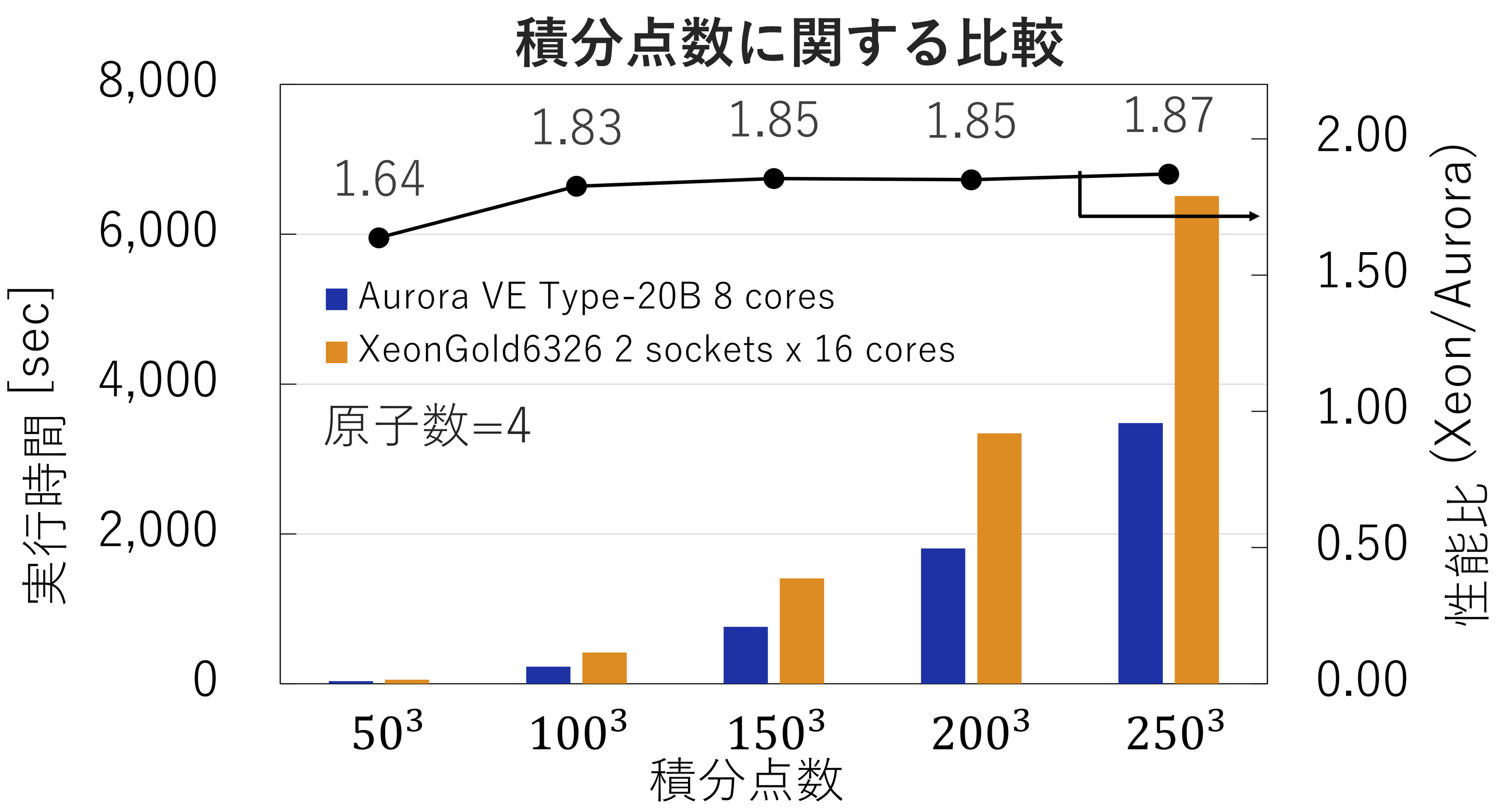
計算対象

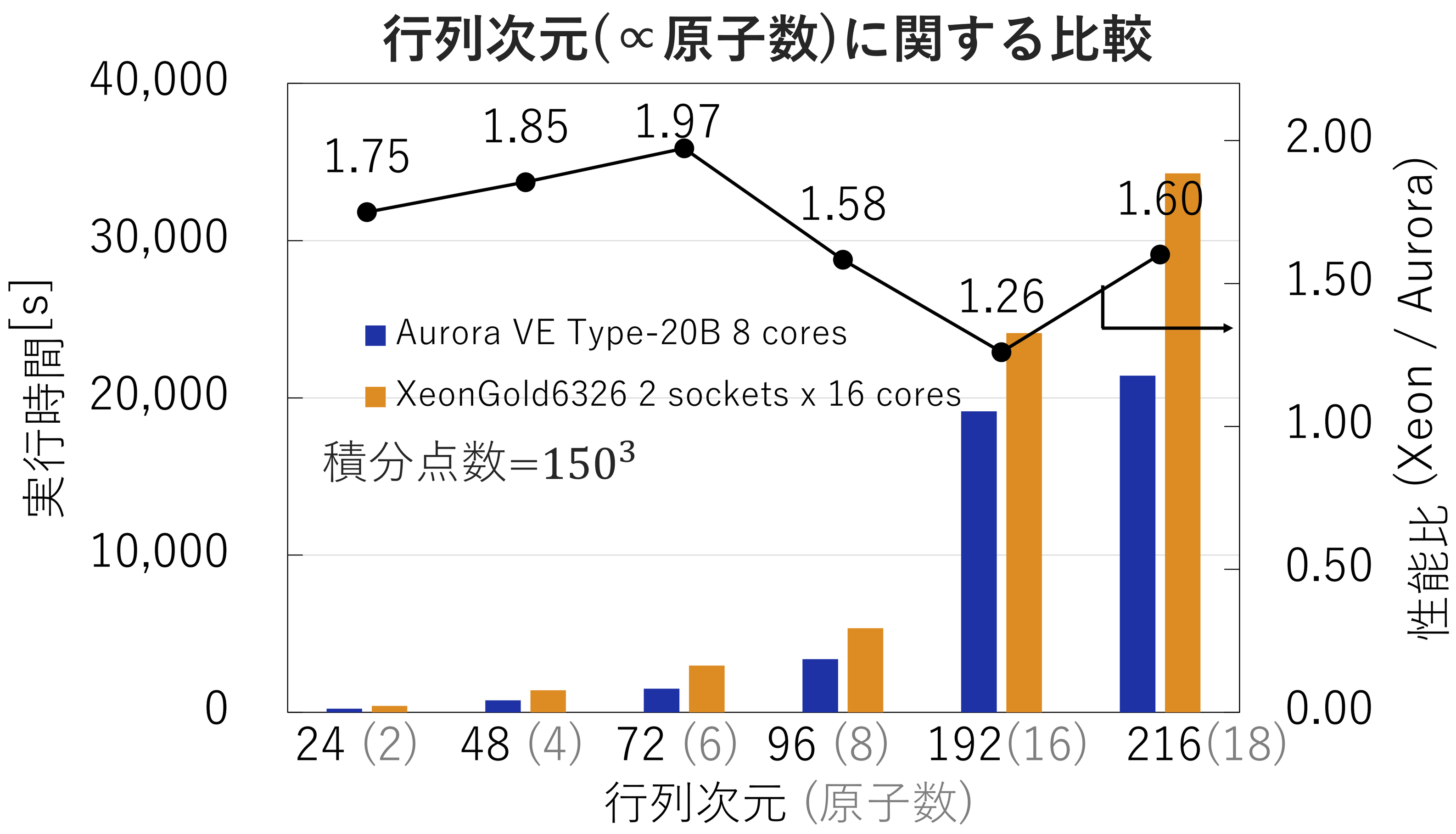
電気伝導度テンソル@bcc-Fe supercell
(原子数=2, 4, 6, 8, 16, 18)



計算環境

	ベクトル計算機	スカラ計算機
ハードウェア (1ノード)	VE Type-20B 8 cores	Xeon Gold 6362 2sockets × 16 cores
コンパイラ	NEC SDK 4.0.0	ifort 19.1.2.254
MPI	NEC MPI 3.0.0	Intel MPI ver. 2019
ライブラリ	NLC 2.3	MKL





◆久保公式のベクトル化による伝導度テンソル計算の高速化に成功。
◆ノード性能でSX-Auroraが最大２倍程度高速であった。
◆積分点数を増やす (=計算精度を上げる) と優位性がより顕著になる傾向。
◆行列次元=96,192でSX-Auroraの性能が低下。メモリバンク競合が原因？

参考文献

[1] J. Zelezny, Y. Yahagi, C.-G. Ollivella, Y. Zhang, and Y. Sun, arXiv:2205.14907 (2022),
[2] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570-586 (1957),
[3] J. Zelezny, *Wannier-linear-response*, <https://bitbucket.org/zeleznyj/wannier-linear-response>