

jh200061-NAH

## GWspace-time コードの大規模な有機-金属界面への適用に向けた高効率化

柳澤 将 (琉球大学)

### 概要

GWspace-time コードによる大規模な表面・界面系の効率的計算を可能にするため、今年度は、共同研究者との協力のもと、10月より新たに稼働したSX-Aurora TSUBASA上での、コードのコストが大きい箇所について検証を行なった。結果、ベクトル化率が低い高速フーリエ変換について、多重フーリエ変換を導入することで、コストの解消・計算時間の短縮に大きな成果が見られた。表面などの二次元系の電子状態に向けた計算法も、非周期的な方向でクーロンポテンシャルを打ち切る方法の実装を、有機薄膜の予備的な計算にまで適用した。現実的な有機混合膜表面の問題へのコードの適用を、以前よりも大きなサイズの問題に適用して計算結果の信頼性を高めることで成果につなげた。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

東北大学

#### (2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

- 柳澤 将 (琉球大学・代表) プログラム開発・テストおよび、実物質系の大規模計算実行。
- 江川 隆輔 (東北大学・副代表) プログラム効率化のための実装および助言。
- 滝沢 寛之、撫佐 昭裕、曾我 隆、山口 健太 (東北大学・共同研究者) プログラムコードの並列化・最適化の作業進行。

### 2. 研究の目的と意義

本研究では、有機半導体電子材料の基礎電子物性の理解に資するため、量子力学や電磁気学などの基礎の物理学(第一原理)をもとにする電子状態計算のプログラムの整備・開発を進めている。特に、有機分子膜と金属電極との接触する領域(界面)でのキャリア(電子・正孔)注入障壁の正確な予測に向けた第一原理計算(GW近似)を可能にするため、大規模な並列計算を効率的に実行することを目的に、MPI並

列とOpenMPとのハイブリッド並列の実装をはじめ、プログラムの効率向上を進めている。

有機半導体の電子物性の実験研究は日本では歴史と実績があり、現在でも分野を先導する最先端の成果が得られている。本研究では、コード開発の進展とともに、大規模な計算機資源を利用することで、有機半導体の実験事実に対する、理論計算による洞察・解釈の深化をはかっていくことも目指している。2017年度より計算プログラムコードGWspace-time(GWST)をもとに、研究プロジェクトを継続してきた。

本年度は、引き続きノード内でのタスク並列実行や、比較的ノード・コア数の多い計算でのコードの動作効率の検討に加え、副代表をはじめとする東北大学サイバーサイエンスセンター(東北大学CC)の共同研究の協力のもとに、本研究で中心的に使用するSX-ACEまたは今年度からはSX-Aurora TSUBASA上でのプログラムコードの詳細な性能解析と向上をはかっている。

また、GWSTプログラムによる比較的規模の大きい応用としては、以前報告した、表面での有機分子の配向に依存した電荷注入準位の精密な決定に関する成果[K. Yamada and S. Yanagisawa et al., Phys. Rev. B 97, 245206 (2018)]を発展させ、より実際的な、p/n型有機半導体の

混合膜についても、電荷注入準位の物理的な支配要因の検討を進め、今年度の成果につなげた（「7. 研究業績一覧」(1)を参照のこと）。

さらに、現時点のコードの応用目標と考える、より現実的な材料に近い、有機半導体の薄膜自体を GWST によって扱う取り組みについても、計算の収束性を高める工夫や予備計算を開始しており、応用目標に徐々に近づきつつある。

### 3. 当拠点公募型研究として実施した意義

2016 年度まで、東北大学 CC と共同研究を進め、*GW* 近似プログラムの整備・開発や、それをを用いた有機半導体の電子物性計算で少なからず成果を収めてきた。特に、通常の PC クラスタよりも 1 コアあたりのメモリの多い SX を使用することで、比較的大きなサイズの問題にもプログラムを適用できる利点がある。また、平面波基底関数に基づく第一原理計算コードであることから、ベクトル化によって得られる利点も大きい。

2017 年度より、東北大学 CC からプログラム開発の支援を受けながら、効率のよい大規模な並列計算を可能にし、計算対象をバルク結晶だけでなく、表面・界面などの並進対称性のない系にまで拡大するため、計算機資源の使用料金で大きなメリットのある貴拠点公募型共同研究として進めている。前々年度からは、東北大学 CC の共同研究者との、定期的なディスカッションも開始しており、より綿密な共同研究の体制を確立している。

今年度からは SX-Aurora TSUBASA に機種が変更された。これまでのように、ベクトル演算を得意とする一方、OS 処理を行うベクトルホスト (VH) 1 基に 8 ベクトルエンジン (VE; 1VE は 8 コア) を合わせて構成単位としている。演算では VE だけでなく VH と協調したメモリの効率使用や通信のマッピングといった、コードの最適化や応用可能性と本質的に関係する性能のチューニングの余地が多いと考えられる。その点からも、機種変

更に合わせて、引き続き共同研究体勢を継続していくことが必要である。

また、物性の計算科学コミュニティにも成果を広めることによって、同センターでの開発プログラムの使用を広めることができる点でも意義があると言える。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

固体・結晶系の準粒子エネルギーを正確に予測できる *GW* 近似の計算プログラム GWST を、有機半導体系の表面・界面の問題にも適用できるよう、MPI 並列とノード内タスク並列 (OpenMP) とのハイブリッド並列の導入によって、並列化効率の向上を試みた。プログラム中の複素誘電行列の逆行列化計算において、ScaLapack のライブラリの使用をやめ、並列度が増すにつれて通信時間の増大で発生するボトルネックの解消を進めた。計算データは、ノード・プロセス間では独立な変数についてノード間に分散させ、さらにノード内でタスク並列化を行うようにした。結果、計算時間の短縮と並列化効率の改善が見られた。ノード内タスク並列化については、逆行列化計算における LU 分解とその後のプロセスにおいて、タスク並列化の効率に差異が見られ、使用する数値計算ライブラリの選択などの工夫が必要であることが示唆された。これらの成果は、昨年度に査読付き国際会議プロシーディングスにて報告した (S. Yanagisawa, T. Yamashita, and R. Egawa, the proceeding book “Sustained Simulation Performance 2018 and 2019”, pp. 225-234 (Springer 2020))。

応用計算の面では、二次元並進対象を有する物質系の *GW* 近似による取り扱いに向け、表面での有機分子の配向に依存する静電ポテンシャルの効果と、有機半導体の結晶・バルク内部での注入電荷への誘起分極の効果とを切り分けて扱う工夫を行なった。この工夫により、*GW* 近似によって高コストな表面をあらわに扱わなくても、有機半導体の表面の構造に依存した

電荷注入準位の正確な決定が可能になることが分かった [S. Yanagisawa, AIP Conf. Procs. 1906,030014-1-4 (2017); K. Yamada, S. Yanagisawa et al., Phys. Rev. B 97, 245206-1-8 (2018)]. さらに昨年度は、より構造が複雑な、複数の有機半導体分子の混合膜への適用も進め、成果を得ることができ、今年度の成果に結びついた（「7. 研究業績一覧」(1)を参照）。

より現実材料に近い、数分子層からなる有機半導体薄膜をあらわに  $GW$  近似で取り扱うため、周期的スラブモデルの導入によって人為的に起こる、薄膜表面に垂直な方向に隣接するスラブ間のクーロン相互作用を取り除く方法(クーロン相互作用カットオフ法)を GWST コードに実装する取り組みも進めた。結果、代表的な半導体薄膜シートのバンドエネルギーの再現への見通しがたった(今後、論文として報告予定)。

## 5. 今年度の研究成果の詳細

### A. p/n 型有機半導体の混合膜における電荷注入準位の決定要因

有機薄膜太陽電池の材料として注目される金属フタロシアニン (MPc) について、p 型半導体特性をもつ ZnPc と、分子周囲のすべての水素原子をフッ素原子に置換し n 型半導体特性を持たせた  $F_{16}ZnPc$  とを混合させ、太陽電池でのバルクヘテロ接合の構造と電子状態の関係について知見を得ることを試みた。特に、太陽電池でも正孔-電子対(励起子)の生成効率と関係があると考えられる電子・正孔注入準位が、薄膜中の分子配置によってどう変わるかを、電子・正孔注入準位の再現にすぐれる GWST プログラムを用いて検討した。

本研究成果は、昨年度の最終成果に加え、さらに大規模な計算を実行し、比較の実験データもさらに精査されたことで研究論文成果につながったので、昨年度の報告内容から新たに変更された点について報告する。

研究結果を図 1 に、実験での実測値と比較して示す。まず、注意する点として、有機固体・

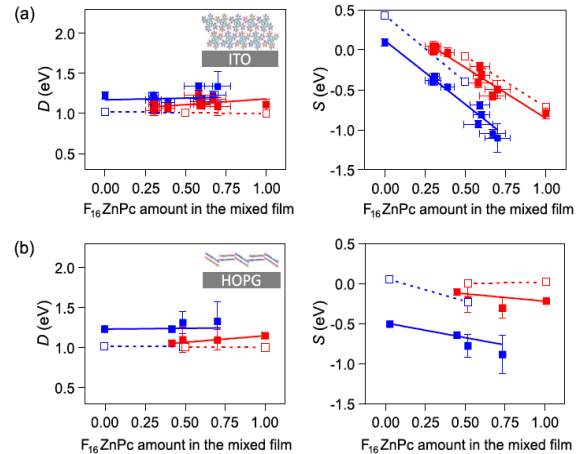


図 1. ZnPc と  $F_{16}ZnPc$  の混合薄膜における、電荷注入準位の支配要因(電子分極( $D$ )および静電エネルギー( $S$ ))の理論計算値(点線)と実測値(実線)の比較。横軸には  $F_{16}ZnPc$  の混合比を取った。(a)は薄膜の表面に対して分子が立ち上がっている構造、(b)は表面に対し分子が寝ている構造を表す。

薄膜中での電荷のエネルギー準位は、電子分極(図 1 の  $D$ )および静電エネルギー(図 1 の  $S$ )によって支配されていることが実験・理論によって明らかになっている。本研究でも、理論計算によって混合膜での電子分極  $D$  と静電エネルギー  $S$  をどの程度再現可能であるかに注目した。

電子分極  $D$  とは、物理的には、注入された正または負の電荷が、周囲の電子雲の分極によって誘起された反対符号の電荷で取り囲まれることによる安定化のエネルギーの大きさである。主に結晶・薄膜を構成する各分子の内部・バルクの電子物性に由来すると考えられている。 $GW$  近似は、このような電子分極を正しく再現できる理論計算法である。

図 1(a-b)の左側のパネルから分かるように、 $F_{16}ZnPc$  の混合比に関わらず、 $D$  の光電子分光による精密な測定値とよく一致している。また、 $F_{16}ZnPc$  の混合比に関係なく  $D$  の値はほぼ一定で、実験のトレンドをよく再現している。また、今年度は数値的信頼性の向上のために、バルクを表現する単位格子の大きさを倍にして

構成原子数を倍にした  $GW$  近似での計算を行った。結果として、ほとんど数値結果に差異はなく、これまでの計算結果の信頼性を裏付けるものとなった。

一方、静電エネルギー  $S$  は、結晶・薄膜を構成する各分子に局在する電荷が、分子間で静電相互作用することに由来するエネルギーであり、分子内の電荷分布に加え、分子同士の相互配置によっても変化する。図 1(a-b)の右側のパネルから分かるように、分子が立っているか・寝ているかにより、または混合膜中の  $ZnPc$  と  $F_{16}ZnPc$  の混合比によっても  $S$  の値は大きく変化する事が分かる。

分子が立っているか・寝ているかで大きな違いが見られるのは、分子の配向に依存する電荷—四重極相互作用が支配的であるため、と理論的には説明できる[B. J. Topham and Z. G. Soos, Phys. Rev. B 84, 165405 (2011); K. Yamada and S. Yanagisawa et al., ibid. 97, 245206 (2018)]。

$ZnPc$  と  $F_{16}ZnPc$  とは p 型/n 型の違いがあるように、分子周囲の電荷分布は正反対であるため、静電エネルギー  $S$  には正反対に寄与する。したがって、これらの混合比の変化によって、図 1(a-b)のように実験・理論ともに単調に連続的に  $S$  が変化するの妥当と言える。

昨年度の理論計算の結果では、 $S$  の値は実験値からややずれが目立っていたが、今年度は  $S$  の計算のための系のサイズを大きくした。やはり、 $D$  の計算と同様に結果はほとんど変わらなかったが、実験の再試によって理論計算と実験との間の一致が向上した。

以上の成果から、有機薄膜太陽電池において重要な、電荷注入の準位や効率を支配する電子分極および静電エネルギーの効果、薄膜の成膜条件や p/n 型有機半導体の混合比によって連続的に調整することができる可能性が示唆された。

この成果は、当該物質系を研究する実験家グループとの共同研究成果として査読つき国際誌 Physical Review B 誌に掲載された (「7. 研究

業績一覧」(1)を参照)。

## B. 非周期系でのクーロン相互作用カットオフの実装: 有機薄膜への予備計算の実行

一般に固体・結晶系の電子状態・バンドエネルギーの第一原理計算では、周期的ポテンシャル下の電子波(ブロッホ波)を効率よく計算するために、周期的境界条件の下で平面波基底関数を用いる。

表面などの二次元周期系では、表面垂直方向に周期性がないため、周期的な単位格子(ユニットセル)を、その方向に沿って大きめに取り、隣接セル同士が相互作用しないよう工夫する(スーパーセルの方法; 図 2 を参照)。スーパーセルの方法は、自由電子の振る舞いに近い典型金属などの表面では電子間相互作用が短距離的で小さく、極めて有効である。しかし、一般に固体中の多体電子間のクーロン相互作用は、誘起分極で遮蔽されても長距離的である。セル間の人為的な相互作用を避けるには、100 Å以上のセル長が必要と見積られるが、そのようなサイズのスーパーセルの計算は、今日の計算機環境でも実行は容易ではない。

その状況の改善のため、2006年に、相互作用すべきでない非周期的な方向のクーロン相互作用を、適当な距離(カットオフ)で打ち切る方法が提案された [C. A. Rozzi et al., Phys. Rev. B 73, 205119 (2006); S. Ismail-Beigi, ibid. 73, 233103 (2006)]。この方法では、たとえば二次元物質の場合、面に垂直な方向のクーロン相互作用が、表面からの距離 $|z|$ について、カットオフ $z_c$ を超えるとゼロになる(図 2)。

昨年度の成果報告では、そのクーロン相互作用カットオフ法の実装が大体成功し、ブリルアンゾーンサンプリングの  $k$  点数に対する計算値の収束性の改善が確認され、効率的に表面や薄膜系の探索が可能になった。

これまでは比較的単位格子中の原子数の少ない、無機物質の二次元シートへの適用テストのみであったが、実験対象に近い有機半導体の

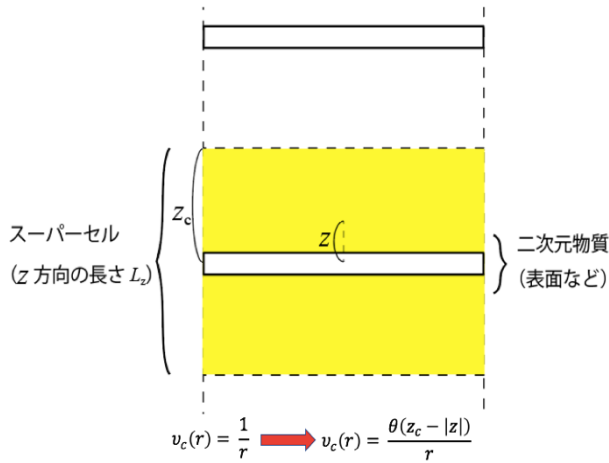


図 2. 二次元系でのクーロン相互作用打ち切りの概念図。表面からの距離 $|z|$ が $z_c$ を超えると、クーロン相互作用はゼロとなる。

単分子層の二次元シートにも適用を拡張した。

典型的な例として、これまで検討したペンタセン  $C_{22}H_{14}$  の単分子層の薄膜の検討を行なった（シミュレーション系の模式図は、図 3）。薄膜の構造は、ペンタセンの代表的な結晶を成膜した際に得られる典型的な構造で、成膜面に対し、分子が立ち上がった構造となっている。

何も原子・分子が存在しない真空層が、単位格子の半分程度を占め、単なるバルク結晶よりも計算コストが膨大になる傾向にある。まずは、これまでの有機半導体結晶での  $GW$  近似の計算に比べ、平面波基底数では 1/3 程度にて、薄膜のエネルギーギャップのテストを行なった。

その結果、バンドギャップは 2.9 eV と見積もられた。すでに自著の文献で報告した、3 次元並進対称性のバルク結晶でのバンドギャップの計算値 2.5 eV よりも大きくなった。これは、薄膜の垂直方向には並進対称性がなく単位格子が存在しないため、その分だけ周囲分子中の電子から受けるクーロンポテンシャルの遮蔽効果がバルク結晶よりも小さくなっていることに物理的に対応し、妥当な結果と言える。

今後は、より大きな計算リソースを使用し、計算値の収束性を高めるとともに、真空準位から測った電荷注入準位のエネルギー（イオン化エネルギー・電子親和力）を直接求めるところ

まで展開を目指す。

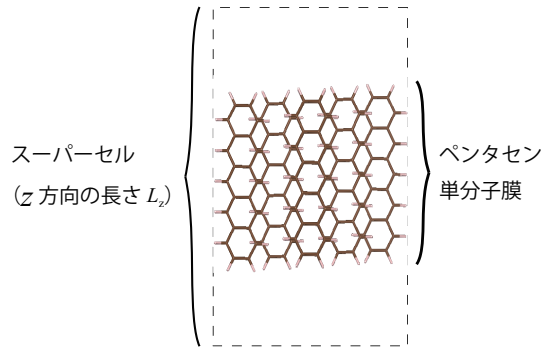


図 3. ペンタセン単分子膜の模式図。直立した分子が、膜内で二次元的に並進対称性を持つ構造となっている。

### C. プログラムコードの性能評価・考察: コストとなる箇所への多重フーリエ変換の導入

本年度の 10 月より、東北大学 CC では、SX-Aurora TSUBASA への機種変更が行われ、あらためて性能評価・必要なコード改定を行った。

これまでの上記の応用計算でも明らかになっていたが、ボトルネックであった高速フーリエ変換 (FFT) の箇所についての性能評価・改善を行った。GWST コードでは、2 種類の FFT があり、そのうち波数ベクトル  $k$  と実空間格子ベクトル  $R$  との間の FFT は、ベクトル長も小さくなるのが、一般的な応用計算での傾向であった。

日頃、一般的なテスト系として用いている分子結晶系のテスト計算を、以下のような測定・評価条件で実施した。

- SX-Aurora TSUBASA Type 20B (計算サーバ)
- Vector Engine 向け NEC Fortran コンパイラ Version 3.2.0
- NEC MPI Version 2.15.0
- 64MPI (1MPI プロセス/1VE)

今回のテストでは 1VE あたり 40 GB 程度のメモリを使用し、VE 内でのスレッド並列は行っていない。SX-Aurora TSUBASA 上でのスレッド並列の効率については、今後の検証課題とする。

表 1. コード最適化前における、FTRACE でのコストが大きい箇所の解析情報の採取結果。

FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec]( % )	MFLOPS	V. OP. RATIO	AVER. V. LEN	VECTOR TIME	L1CACHE MISS	CPU PORT	VLD LLC	PROC. NAME
473011067	3637.840( 48.2)	143.8	18.43	7.0	458.522	1347.783	0.777	100.00	FFT3DMOD::FFT3D
14	1707.626( 22.6)	123.9	20.32	7.8	756.274	230.624	0.378	98.67	WEPSMOD::FT_W_W2T_MEM_V
23400	647.550( 8.6)	58204.9	97.18	251.4	264.410	72.686	8.770	43.36	GREENSFUNC::GREENSRT
273720960	564.037( 7.5)	10.1	16.99	16.6	115.838	171.468	6.544	99.63	ICT
1	292.866( 3.9)	0.0	3.77	242.4	0.893	31.293	0.034	66.18	READ_WFN_SPECK
6	177.419( 2.4)	0.0	4.91	8.0	30.865	4.968	0.000	99.88	MY_ALLREDUCE
1	145.701( 1.9)	382.3	46.03	106.6	22.129	2.703	0.000	46.79	WEPSMOD::WEPS

コード最適化前には、表 1 の簡易性能解析機能情報 (FTRACE) の採取に示すように、上述の FFT に対応する "FFT3D" というサブルーチンのコストが最大であることがうかがえる。また、"ICT" というルーチンで "FFT3D" のコールが行われることが多く、やはり "FFT3D" のコードのコストがボトルネックになっていることが分かる。

"FFT3D" では、ベクトル長が 7 と極めて短く、そのためにベクトル化が有効に行われていない。このようなベクトル長が短くなる場合は、一般的なアプリケーション・物質系で少なからず発生する。この状況を改善するため、図 4 に

示すようにコードの修正を行った。すなわち、ループ長 nrgrid (このテストでは nrgrid=23040) のループ内で "ICT" がコールされ、さらに "FFT3D" がコールされるのを、ループを削除し、新たにサブルーチン W\_ ICT および W\_ FFT3D を作成した (図 5)。同時に、多重フーリエ変換のプラン作成・破棄のためのサブルーチンも新たに準備した。

この修正により、フーリエ変換のルーチンがループ内で繰り返しコールされるのをやめ、かわりに多重フーリエ変換 (多重度 nrgrid) が行われるようにした。長いループ内でのルーチンをコールするオーバーヘッドが解消されると

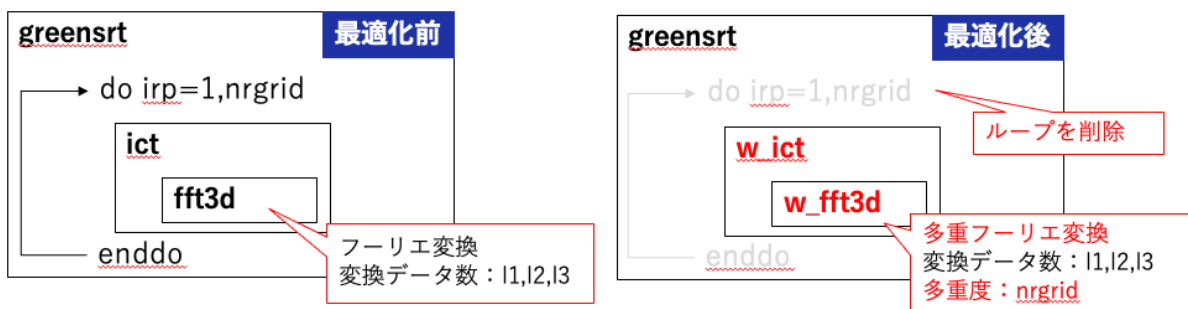


図 4. コード最適化の概要。greensrt のルーチン内での、ループ長 nrgrid のループ削除、および、多重フーリエ変換を行う W\_ FFT3D を新たに作成した。

```

708:      subroutine w_fft3d(action,nrgrid,a,no)
709:        implicit none
710:        character(1), intent(in) :: action
711:        integer, intent(in) :: no
712:        integer, intent(in) :: nrgrid
713:        complex(r8), intent(inout) :: a(nrgrid,l1(no),l2(no),l3(no))
715:        select case(action)
716:        case('F','f')
717:          call dfftw_execute_dft(fplan_many(no),a,a)
718:        case('B','b')
719:          call dfftw_execute_dft(bplan_many(no),a,a)
720:        V=====>
721:          a(:, :, :, :) = a(:, :, :, :) / n(no)
721:        case default
722:          if(mype.eq.0)print*, 'fft3d: invalid action parameter'
723:          stop
724:        end select

```

図 5. W\_ FFT3D のコードの内容。これまでの fft3d に新たに nrgrid を引数として追加し、多重フーリエ変換を行っている。

表 2. コード最適化後の、FTRACE での FFT3D/W\_FFT3D の解析情報の採取結果。

FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec]( % )	AVER. TIME [msec]	MOPS	MFLOPS	V.OP RATIO	AVER. V. LEN	VECTOR TIME	L1CACHE MISS	CPU PORT	VLD LLC	CONF HIT E. %	PROC. NAME	最適化前
473011067	3637.840( 48.2)	0.008	1171.4	143.8	18.43	7.0	458.522	1347.783	0.777	100.00		FFT3DMOD::FFT3D	

FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec]( % )	AVER. TIME [msec]	MOPS	MFLOPS	V.OP RATIO	AVER. V. LEN	VECTOR TIME	L1CACHE MISS	CPU PORT	VLD LLC	CONF HIT E. %	PROC. NAME	最適化後
230267	25.173( 0.9)	0.109	18432.2	11534.4	92.28	30.9	17.277	2.316	0.777	99.99		FFT3DMOD::FFT3D	
20520	10.405( 0.4)	0.507	36081.5	17506.2	95.18	256.0	9.975	0.318	0.000	53.34		FFT3DMOD::W_FFT3D	

表 3. FFT3D コード最適化後の、高コスト箇所の解析情報の採取結果。

FREQUENCY	EXCLUSIVE TIME[sec]( % )	MFLOPS	V.OP RATIO	AVER. V. LEN	VECTOR TIME	L1CACHE MISS	CPU PORT	VLD LLC	CONF HIT E. %	PROC. NAME
14	1619.846( 58.8)	130.6	20.32	7.8	715.533	214.296	0.373	98.67		WEPSMOD::FT_W_W2T_MEM_V
23400	406.723( 14.8)	92668.9	97.99	255.5	207.892	16.674	0.085	43.84		GREENSFUNC::GREENSRT
1	231.259( 8.4)	0.0	3.77	242.2	0.896	15.566	0.034	66.19		READ_WFN_SPECK
224	100.458( 3.6)	0.0	4.93	8.1	17.579	0.227	0.000	99.32		MY_ALLTOALLV_G2RS
4	84.359( 3.1)	174124.0	99.77	215.4	84.133	0.066	0.033	7.64		WEPSMOD::COMPUTE_W_FROM_P
1	63.079( 2.3)	883.1	56.81	157.6	8.053	0.516	0.000	43.32		WEPSMOD::WEPS
540	48.456( 1.8)	4494.0	89.05	5.0	48.388	0.048	1.510	31.43		SIGG_MOD::ADDTOSIGMATEL
13500	37.992( 1.4)	16836.6	99.19	255.9	37.935	0.052	0.001	68.06		SFQ

ともに、平均ベクトル長が7から256まで伸ばされることによって、サブルーチンの実行時間は3637.9秒から35.6秒まで、99%の削減が見られた(表2)。

最適化後のFTRACEの採取結果を示す(表3)。コスト上位のルーチンに(W\_)FFT3Dは現れておらず、今回の修正がコード全体のコスト削減に大きく寄与したことがわかる。

しかし、その一方で、まだベクトル演算率の低いサブルーチンがいくつか存在し、それらのコストが大きいことも改めて分かる。その中でもっともコストが高い”FT\_W\_W2T\_MEM\_V”という名前のサブルーチンでは、MY\_ALLTOALLV\_G2RSの通信を待っているために、ベクトル演算率が低く経過時間が長くなってしまっていることが判明している。MY\_ALLTOALLV\_G2RS自身もベクトル演算率が低くなっているが、これも通信のコストが現れている結果と言える。

しかし、SX-Aurora TSUBASAのVH・VEの通信のアーキテクチャは、これまで使用してきたSX-ACEとは異なっており、通信のマッピングに関し、少なからず改善の余地があるため、今後、大いに改善が期待される。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度は、当初は、コードのボトルネックとして、ベクトル化率の向上のための修正を掲げており、それについてまだ修正すべき点もあるとは思うが、大きな進歩を達することができたのではないかと考える。

しかし、その一方で、複素誘電行列 $\epsilon_{GG}$ の計算コードで、逆格子ベクトル引数{G}または{G'}のいずれかをブロック並列分割するために起動されるMPI AlltoAllv通信のコスト解消を掲げてもいたが、この点は達成を果たすことができなかった。2020年7月頃から9月終わりまで、それまで使用したSX-ACEが稼働終了となり、10月からSX-Aurora TSUBASAに機種変更されたことで、一貫して通信のコスト解消に取り組みなかったことが原因として挙げられる。それでも、前述のように、SX-Aurora TSUBASAは通信コストについてはVH・VEの通信アーキテクチャをより有効に利用して改善する余地が十分にあるため、その点を来年度の課題として継続していきたい。

応用計算の課題も、SX-ACEの稼働中に、大きな計算資源を生かして成果につながれたものがあつたが、その後の機種変更後に

速やかに大規模な計算実行を行うのが進まず、分量としては半分近く、当初の目標を積み残してしまった。

以上から、今年度の達成度は 60%程度と評価したい。

また、SX-Aurora TSUBASA では、1VE8 コアあたり 48 GB の共有メモリ搭載となっており、以前の SX-ACE の 1 ノード 4 コアあたり 64 GB に比べて減少している。これだけを見ると、これまで SX-ACE で行ってきた大規模な計算を同様に SX-Aurora TSUBASA 上では行うのが容易でなくなることになる。しかし、Linux ベースの VH にもメモリを担わせることが可能なようであり、また、SX-Aurora TSUBASA のメンテナンス時には特別に 576 VE までのシステム全系を使った計算が可能であるため、今後、東北大 CC の共同研究者の方々とも打ち合わせて、そのような大規模実行の進行を計画していく。

## 7. 研究業績一覧

### (1) 学術論文 (査読あり)

Y. Uemura, S. A. Abd-Rahman, S. Yanagisawa, and H. Yoshida, 'Quantitative analysis of the electrostatic and electronic polarization energies in molecularly mixed films of organic semiconductors', *Physical Review B* **102**, 125302-1-8 (2020).