

## 混合精度演算による電子状態計算の高速化

### Accelerating electronic-structure calculations with mixed precision algorithms

土田 英二、崔 隆基

Eiji Tsuchida, Yoong-Kee Choe

産業技術総合研究所ナノシステム研究部門

Nanosystem Research Institute, AIST,  
Tsukuba Central 2, Umezono 1-1-1, Tsukuba 305-8568

数値計算的に見た場合、電子状態計算は行列対角化の一種と言える。通常このような演算は 64 ビットの倍精度実数を用いて行われるが、我々は 32 ビットの単精度実数を部分的に利用することで、計算の精度を損ねることなく 30% 以上の高速化が可能であることを示した [1]。また、計算コストの高い  $O(N^3)$  の部分は全てレベル 3 の BLAS/LAPACK を利用して計算できるため、理論ピーク性能に近いパフォーマンスが期待できる。効率的な前処理法との兼ね合いについても考察する。

本手法は一般性が高く、同種の反復法（例えば density-functional perturbation theory や TD-DFT）へ適用することも可能であると考えている。また、GPU 等のアクセラレータと組み合わせることも有望である。

[1] E.Tsuchida and Y-K.Cho, “Iterative diagonalization of symmetric matrices in mixed precision and its application to electronic structure calculations”, *Comput.Phys.Commun.* **183**, 980-985 (2012).