

## 高性能並列固有値計算アルゴリズムの開発

### Development of High Performance Parallel Algorithms for Computing Eigenvalues

櫻井鉄也<sup>1),2)</sup>、二村保徳<sup>1)</sup>、前田恭行<sup>1)</sup>、矢野貴大<sup>1)</sup>、

Du Lei<sup>1),2)</sup>、今倉暁<sup>1)</sup>、多田野寛人<sup>1)</sup>

T. Sakurai, Y. Futamura, Y. Maeda, T. Yano, L. Du, A. Imakura and H. Tadano

<sup>1)</sup>筑波大学大学院システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻

Department of Computer Science, University of Tsukuba, Tsukuba 305-8573

<sup>2)</sup>科学技術振興機構 CREST

CREST, Japan Science and Technology Agency (JST), Kawaguchi 332-0012

我々は JST CREST 領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」において、高い並列性能を備えた固有値解析のためのソフトウェアを開発している。本発表では、とくに、周回積分を用いたスペクトル射影に基づく方法[5]を基礎としたソフトウェアについて紹介する。

この方法は、求めようとする固有値の分布する領域を囲む複素平面上での周回積分によって、特定のスペクトル成分のみを抽出する。そのため、バンドギャップ近傍など、求めようとする固有値の領域が限られる内部固有値問題に対して有効である。また、アルゴリズムが階層的な並列構造を備えていることから、ハードウェアの階層的なアーキテクチャとの親和性が高く、GPUやIntel MICなどの演算加速機構を備えた計算機においても高い性能が期待できる。方法の特徴を活かして、これまでに、実空間密度汎関数法によるバンド図計算[1]、殻モデル[2]、超伝導計算[3]、格子 QCD[4]、分子軌道計算[6]などに適用してきた。発表において、アルゴリズムの特徴や開発しているソフトウェアについて説明し、いくつかの数値計算結果を示す。

[1] Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya and J.-I. Iwata, Proc. 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science, LNCS 7851, 226–235 (2013).

[2] T. Mizusaki, K. Kaneko, M. Honma, and T. Sakurai, Phys. Rev. C **82**, 024310 (2010).

[3] Y. Nagai, Y. Shinohara, Y. Futamura, Y. Ota and T. Sakurai, arXiv:1303.3683 (2013).

[4] H. Ohno, Y. Kuramashi, H. Tadano and T. Sakurai, JSIAM Letters **2**, 115-118 (2010).

[5] T. Sakurai and H. Sugiura, J. Comput. Appl. Math. **159**, 119-128 (2003).

[6] T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami and U. Nagashima, Taiwanese J. Math. **14**, 855-867 (2010).