

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^{1),2)}、二村保徳¹⁾、前田恭行¹⁾、矢野貴大¹⁾、

Du Lei^{1),2)}、今倉暁¹⁾、多田野寛人¹⁾

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

¹⁾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

²⁾科学技術振興機構 CREST

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

本発表では、周回積分を用いたスペクトル射影に基づく固有値解法[3]の概要とその応用について示す。

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、特定のエネルギー領域や振動数の範囲など、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[5]。

本方法は並列ソフトウェアとして実装しており、Fortran 版の京コンピュータバイナリを2013 年末に公開した[6]。このソフトウェアは Reverse Communication Interface (RCI) を備え、アプリケーション固有の分散データ形式に依存しないため、固有値計算を必要とするアプリケーションとの柔軟な接続が可能となる。このプロトタイプ版を RSDFT に適用し、大規模なシリコンナノワイヤーに対して京コンピュータ上でバンド曲線を計算した[2]。また、Bilinear Form[1]を利用することで計算量とメモリー量を削減し、すべての占有軌道の固有値分布を高速に求めることができた。C 版については、SLEPc ver. 3.4 において CISS として登録されている[4]。SLEPc はスケラブル並列固有値計算ライブラリで、複数の固有値計算法を含んでいる。これらのソフトウェアを用いたいくつかの適用事例を示す。

- [1] L. Du, Y. Futamura and T. Sakurai, *Comput. Math. Appl.*, 66:2446-2455 (2014).
- [2] 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).
- [3] T. Sakurai and H. Sugiura, *J. Comput. Appl. Math.*, 159:119-128 (2003).
- [4] SLEPc: <http://www.grycap.upv.es/slepc/>
- [5] T. Yano, Y. Futamura and T. Sakurai, *Proc. 8th International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing*, in print.
- [6] z-Pares: <http://zpare.cs.tsukuba.ac.jp>