

令和 4 年 5 月 28 日現在

機関番号：12612

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2017～2019

課題番号：17H02828

研究課題名（和文）強スケーリング性能を指向した計算物理向け超並列行列計算ライブラリの開発

研究課題名（英文）Development of a parallel matrix library for computational physics with high strong-scaling performance

研究代表者

山本 有作（Yamamoto, Yusaku）

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授

研究者番号：20362288

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 10,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、電子状態計算、プラズマシミュレーション、亀裂進展シミュレーションなど計算物理の様々な分野に適用可能な行列計算ソルバを開発した。特に、疎行列および帯行列向けの連立1次方程式直接解法と密行列向けの一般固有値解法を中心とし、同期点の少ないアルゴリズムの採用や計算機環境に応じたアルゴリズムの自動選択などにより、高い強スケーリング性能を目指した。また、開発したソルバを有機高分子系の時間発展シミュレーションや亀裂進展シミュレーションに適用し、効果を確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

従来の行列計算ライブラリは、プロセッサ数に比例して問題サイズを大きくする弱スケーリング条件下での性能を追求してきた。しかし、分子動力学やプラズマシミュレーションなど長時間の時間発展が必要な問題では、1ステップの計算時間を極力短縮するため、強スケーリング性能が重要である。本研究で開発した疎行列直接解法、一般固有値解法などの行列解法は、強スケーリング性能に重点を置いて設計されており、今後、計算物理分野での活用が期待される。

研究成果の概要（英文）：In this study, we developed matrix solvers which are applicable to a wide range of computer physics applications, such as electronic structure calculation, plasma simulation and crack growth simulation. Our main targets are direct solvers for sparse and band matrices and generalized eigenvalue solvers for dense matrices. With the use of communication-avoiding algorithms and automatic code selection techniques, our solvers aim at achieving high strong-scaling performance. We applied our solvers to time-dependent simulation of organic polymeric materials and crack growth simulation and verified their performance.

研究分野：高性能計算，数値解析

キーワード：固有値計算 連立1次方程式 並列化 電子状態計算 プラズマシミュレーション

## 1. 研究開始当初の背景

科学技術計算では、連立 1 次方程式の求解や行列の固有値計算などの行列計算が中心的な役割を果たす。近年では、アーキテクチャの高度化・複雑化に伴い、計算機の性能を引き出すには高度な最適化技法が必要となり、そのため、高性能な行列計算ライブラリの重要性が増している。これまでに、**LAPACK**、**ScaLAPACK**、**Eigen-Exa** など、様々な高性能行列計算ライブラリが開発されているが、これらは基本的に弱スケーリングの条件下での性能、すなわち、プロセッサ数に比例して問題サイズを十分大きくしていったときの性能を最大化することを目指している。

一方、近年の科学技術計算では、強スケーリング性能、すなわち、問題サイズを一定としてプロセッサ数を増やした時の並列性能が重要な応用も多い。典型的な例は時間発展問題である。たとえば分子動力学やプラズマシミュレーションでは、物理的に興味のある現象を観察するため、**100** 万ステップの計算を行うことも珍しくない。この場合、現実的な時間で計算を終えるには、プロセッサ数を増やすことで 1 ステップの計算時間を極力短縮する必要がある。

研究代表者はこれまで、固有値計算を中心とした行列計算アルゴリズムの研究に従事しており、特に、超並列向けにプロセッサ間の通信/同期オーバーヘッドを削減した解法や階層型メモリ向けの最適化技術の開発に注力してきた。これらの技術を活用することで、強スケーリング性能に優れた行列計算ソルバを開発できる見込みが高いと考え、本研究を構想するに至った。

## 2. 研究の目的

これまでに研究代表者らが蓄積してきたプロセッサ間の通信/同期オーバーヘッド削減技術や階層型メモリ向けの最適化技術を活用することにより、高い強スケーリング性能を持つ行列計算ソルバを開発する。特に、計算物理で多くの需要が見込まれる次の機能に重点を置いて開発を行う。

- (1) 密行列に対する実対称一般固有値問題の解法
- (2) 疎行列及び帯行列に対する連立 1 次方程式直接解法
- (3) クリロフ部分空間法に基づく連立 1 次方程式反復解法

また、超大規模電子構造計算ソフト **ELSES** やプラズマ解析ソフト **Particle-PLUS** などの実アプリを用いて、開発したソルバの評価を行う。

## 3. 研究の方法

- (1) 密行列に対する実対称一般固有値問題の解法

本項目では、電子状態計算分野で重要となる実対称一般固有値問題  $Ax = \lambda Bx$  (**A**: 対称行列, **B**: 対称正定値行列) の超並列向け解法を扱う。実対称一般固有値問題に対しては、**ScaLAPACK**、**EigenExa**、**ELPA** などの高性能ライブラリが開発され、広く利用されている。しかし、最速となるライブラリは、計算機環境や行列サイズによって異なる。また、これらのライブラリは基本的に全固有値・固有ベクトルを計算することを目的としており、部分的な固有値・固有ベクトルのみが必要な場合でも、そのことを利用して計算量を削減することは困難である。そこで本研究では、**ScaLAPACK**、**EigenExa**、**ELPA** を構成する下位ソルバ(実対称一般固有値問題の実対称固有値問題への変換、及び実対称固有値問題の解法)を自由に組み合わせ、計算機環境と問題サイズに応じた最適なソルバを構成できるフレームワークを構築する。また、最適なソルバを自動的に選択できる自動チューニング手法を確立する。さらに、部分固有値・固有ベクトルを高速に求めることができる新しいソルバを開発する。開発したこれらのソフトウェアは、超大規模電子構造計算ソフト **ELSES** で生成したテスト行列を用いて評価する。

- (2) 疎行列及び帯行列に対する並列版連立 1 次方程式直接解法

本項目では、対称正定値な疎行列および帯行列に対する並列版の連立 1 次方程式直接解法を開発する。これらのソルバは構造解析や時間発展型の電子状態計算で重要である。疎行列解法については、スーパーノード型マルチフロントアル法によるコレスキー分解を基本とし、複数のフロントアル行列を同時に分解することで並列性を抽出する。また、緩和型スーパーノードを用いることで、階層メモリ向けの最適化を行う。緩和型スーパーノードについては、緩和パラメータの設定が重要であり、これを自動チューニング技術により自動決定することも試みる。本ソルバは、主としてメニーコアプロセッサ向けに開発する。一方、帯行列解法については、帯行列をブロック 3 重対角行列と見て、ブロック版の 1 次元 **Nested Dissection** 法により並列性を抽出する。本ソルバについては、共有メモリ型と分散メモリ型の両方の並列版を開発する。

- (3) クリロフ部分空間法に基づく連立 1 次方程式反復解法

本項目では、対称正定値な疎行列およびシフト線形方程式を対象として、前処理付きクリロフ部分空間法に基づくソルバを開発する。前処理法としては、大粒度並列性を持ち、かつ収束性に優れたブロック赤黒順序付け不完全コレスキー分解法を使用する。本ソルバは、主に共有

メモリ型並列計算機向けに開発する。本ソルバの応用先としては、フェーズフィールド法による亀裂進展シミュレーション、建物の地震動応答シミュレーション、**Particle-in-Cell** 法によるプラズマシミュレーションを考えており、これらのアプリケーションプログラムを用いて性能評価を行う。

#### 4. 研究成果

##### (1) 密行列に対する実対称一般固有値問題の解法

本項目については、次の成果が得られた。

超並列一般化固有値問題向けミドルウェア **EigenKernel** の開発

**ScaLAPACK**, **EigenExa**, **ELPA** などのライブラリを構成する下位ソルバを自由に組み合わせ、計算機環境と問題サイズに応じた最適なソルバを構成できるフレームワークである **EigenKernel** を開発した。**EigenKernel** では、行列データの変換機能によりライブラリごとのデータ分散形式 / 格納形式の違いを吸収するとともに、実行時間の詳細な測定機能を備えている。**EigenKernel** を用いて、京コンピュータ、**Fujitsu FX10**, **SGI Altix**, **Oakforest-PACS** などの様々な超並列計算機上で性能測定を行った結果、各ライブラリを単独で使うのに比べ、複数のライブラリの下位ソルバを組み合わせる使用のほうが実行時間を短縮できることを示した。

**EigenKernel** のための性能予測・自動チューニング機能の開発

**EigenKernel** 向けに、マルコフ連鎖モンテカルロ型ベイズ推定による強スケリング性能の予測手法を開発した。また、自動チューニング数理基盤ライブラリ **ATMathCoreLib** を用いることで、計算機環境と行列サイズに応じた下位ソルバの最適な組合せの自動選択が行えることを示した。後者の結果を図 1 に示す。これは、京コンピュータ上で **430,080** 元の一般化固有値問題を解くことを想定した結果であり、下位ソルバの組合せとして 7 種類を候補としている。データとしては、実際の測定データに、実行時間の 10%, 20%, または 40% に相当する標準偏差の乱数を加え、実行時間

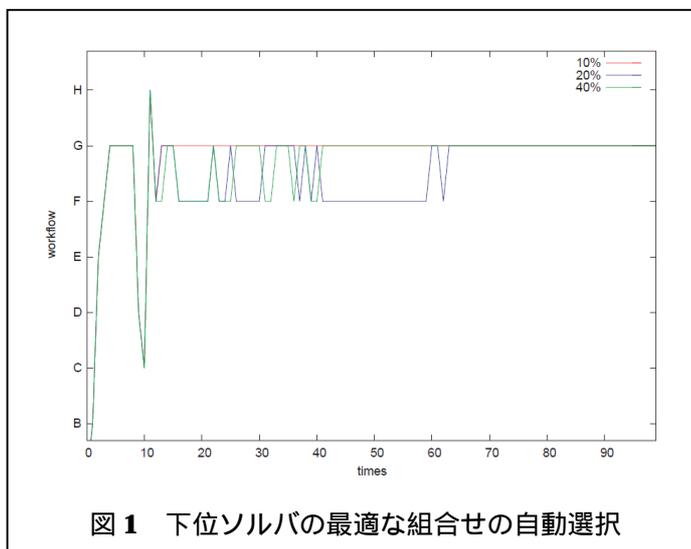


図 1 下位ソルバの最適な組合せの自動選択

にばらつきのある場合を模擬している。一般化固有値問題ソルバをコールする回数を 90 回と設定した場合、最初のうちは色々な組合せがランダムに選択されるが、回数が進むにつれ、決まった組合せが選択されるようになる。最終的に選択されたのは、実際に実行時間が最短の組合せとなった。実行時間のばらつきが 40% と大きくても最適な組合せが選択されることから、**ATMathCoreLib** を用いた本自動チューニング方式は高いロバスト性を持つと言える。

超並列性に優れた選択的固有対計算ソルバ **k-ep** の開発

実対称一般化固有値問題において、選択した固有値・固有ベクトル対のみを計算する選択的部分固有対計算ソルバ **k-ep** (<https://github.com/lee-djl/k-ep>) を開発した。また、これを全固有対計算のためのミドルウェアである **EigenKernel** と統合した。従来の **EigenKernel** では、京コンピュータ全体をもってしても 100 万円の行列が限界だったが、**k-ep** を統合することで、東大物性研スーパーコンピュータ(**Sekirei**)1 ノードにおいてさえも 1000 万円の行列の計算が可能となった。また、ソルバの高信頼化に向け、**EigenKernel** で計算した固有対に対する、高速な後処理型精度保証手法を実現した。

超並列一般化固有値ソルバを用いた応用研究

超並列型量子物質計算の応用研究として京コンピュータを用いた有機高分子の多数計算 (1200 原子, 4 万サンプル) を行い、データ科学的解析 (主成分解析) により有機材料のデバイス性能が、2 種の競合的要因で得られることを示した。これにより、受賞 2 件を受けた。また、**EigenKernel** と **k-ep** を統合したソルバを有機デバイス材料 (ペンタセン薄膜系 100 ナノメートルスケール系) の電子状態計算に応用し、伝導メカニズムを担う準局在型電子状態を得た。さらに、米国 **Priya Vashista** など共著で、これまでの研究成果を含めた **Handbook** を分担執筆した。

##### (2) 疎行列及び帯行列に対する並列版連立 1 次方程式直接解法

本項目については、次の成果が得られた。

**Intel Xeon Phi** 向け疎行列直接解法の開発

正定値対称疎行列を係数行列に持つ連立 1 次方程式に対する解法の一つであるマルチフロントル法を、ランタイムシステム **StarPU** を用いて、メニーコアプロセッサである **Intel Xeon Phi** システム上で実装し、64 スレッド並列において最大 26.8 倍の性能を達成した。また、立方体

領域に周期境界条件を課した圧縮性流体のシミュレーションにおいて、移流項を8次コンパクト差分法による離散化で得られる連立一次方程式に対し、拡張 **Mator** 法による並列化を行い、従来の並列化コードと比較して最大 **2.3** 倍の高速化を達成した。

#### 帯行列直接解法の開発

時間依存シュレーディンガー方程式に基づく波動シミュレーション向けに、**1-way dissection (OWDO)** 法に基づく帯行列用の並列版連立1次方程式直接解法を開発した。本手法は、帯幅が狭く、行列サイズが大きい問題の場合に特に有効である。性能評価の結果、半帯幅 **10** で **40** 万の問題を解く場合に **10** コアで7倍程度の加速が得られ、**LAPACK** に比べて4倍程度の高速化が得られることを明らかにした(図2)。また、モデル問題として2次元ポアソン方程式を取り上げ、種々の疎行列格納方式を用いた場合の性能を評価した。本ソルバは、有機高分子系の時間発展シミュレーションなどへの適用が期待される。

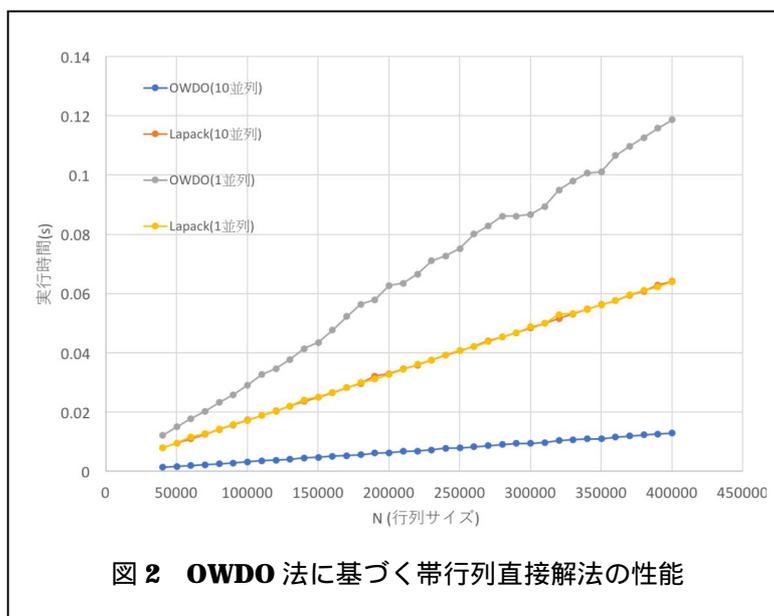


図2 OWDO 法に基づく帯行列直接解法の性能

### (3) クリロフ部分空間法に基づく連立1次方程式反復解法

本項目については、次の成果が得られた。

#### ブロック赤黒順序付け不完全LU分解前処理を用いたソルバの開発

プラズマシミュレーションの電位計算部分で現れる連立1次方程式向けに、ブロック赤黒順序付け法に基づく高並列な不完全LU分解型前処理プログラムを開発し、GPU上で実装した。性能評価の結果、マルチコアプロセッサ上での実行に比べて10倍以上の加速が得られた。また、GPU向けのソルバであるMAGMAと比較しても、大規模問題の場合に3倍程度の速度向上が見られた。さらに、開発したプログラムをプラズマシミュレーションコードParticle-PLUSに組み込み、実問題に適用して性能評価を行った。また、本ソルバの対称行列版を作成し、フェーズフィールド法に基づく亀裂シミュレーションに適用した。

#### 部分的不完全コレスキー分解前処理付き共役勾配法ソルバの開発

建物の地震動応答シミュレーションに現れる大規模連立一次方程式に対し、部分的不完全コレスキー分解前処理付き共役勾配法 (Conjugate gradient method preconditioned with partially incomplete cholesky decomposition) のプロセス並列実装を行い並列性能の評価を行った。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Gabriel Oksa・Yusaku Yamamoto・Martin Becka・Marian Vajtersic	4. 巻 58
2. 論文標題 Asymptotic Quadratic Convergence of the Parallel Block-Jacobi EVD Algorithm with Dynamic Ordering for Hermitian Matrices	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 BIT Numerical Mathematics	6. 最初と最後の頁 1099-1123
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10543-018-0711-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Gabriel Oksa・Yusaku Yamamoto・Martin Becka・Marian Vajtersic	4. 巻 to appear
2. 論文標題 Asymptotic Quadratic Convergence of the Two-Sided Serial and Parallel Block-Jacobi SVD Algorithm	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Akira Imakura・Yusaku Yamamoto	4. 巻 to appear
2. 論文標題 Efficient Implementations of the Modified Gram-Schmidt Orthogonalization with a Non-standard Inner Product	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kazuyuki Tanaka・Hiroto Imachi・Tomoya Fukumoto・Akiyoshi Kuwata・Yuki Harada・Takeshi Fukaya・Yusaku Yamamoto・Takeo Hoshi	4. 巻 to appear
2. 論文標題 A Middleware for Parallel Generalized Eigenvalue Solvers to Attain High Scalability and Usability	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroaki Seito・Takeo Hoshi・Yusaku Yamamoto	4. 巻 11
2. 論文標題 On Using the Shifted Minimal Residual Method for Quantum-mechanical Wave Packet Simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 13-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.11.13	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shuheki Kudo, Kousuke Yasuda and Yusaku Yamamoto	4. 巻 10
2. 論文標題 Performance of the Parallel Block Jacobi Method with Dynamic Ordering for the Symmetric Eigenvalue Problem	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 41-44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.10.41	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 白間久瑠美・工藤周平・山本有作	4. 巻 29
2. 論文標題 荻田・相島の固有ベクトル反復改良法に基づく実対称行列の固有値分解追跡手法	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 日本応用数理学会論文誌	6. 最初と最後の頁 78-120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Lee Dongjin, Hoshi Takeo, Sogabe Tomohiro, Miyatake Yuto, Zhang Shao-Liang	4. 巻 371
2. 論文標題 Solution of the k -th eigenvalue problem in large-scale electronic structure calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Physics	6. 最初と最後の頁 618 ~ 632
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcp.2018.06.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takeo Hoshi, Hiroto Imachi, Akiyoshi Kuwata, Kohsuke Kakuda, Takatoshi Fujita, Hiroyuki Matsui	4. 巻 to appear
2. 論文標題 Numerical aspect of large-scale electronic state calculation for flexible device material	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 後藤啓, 横川三津夫, 坂敏秀	4. 巻 2018-HPC-167
2. 論文標題 建物の地震動応答シミュレーションに現れる前処理付き共役勾配法の並列化	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 情報処理学会研究報告	6. 最初と最後の頁 1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 中野智輝, 横川三津夫, 深谷猛, 山本有作	4. 巻 2018-HPC-167
2. 論文標題 緩和型スーパーノードマルチ フロントアル法の最適な緩和パラメータについて	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 情報処理学会研究報告	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yusaku Yamamoto	4. 巻 62
2. 論文標題 On the optimality and sharpness of Laguerre's lower bound on the smallest eigenvalue of a symmetric positive definite matrix	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Applications of Mathematics	6. 最初と最後の頁 319-331
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.21136/AM.2017.0022-17	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shioya Akemi, Yamamoto Yusaku	4. 巻 35
2. 論文標題 The danger of combining block red-black ordering with modified incomplete factorizations and its remedy by perturbation or relaxation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 195 ~ 216
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s13160-017-0277-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ooi Kouhei, Mizuno Yoshinori, Sogabe Tomohiro, Yamamoto Yusaku, Zhang Shao-Liang	4. 巻 7
2. 論文標題 Solution of a Nonlinear Eigenvalue Problem Using Signed Singular Values	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 East Asian Journal on Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 799 ~ 809
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4208/eajam.181016.300517c	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shuheii Kudo and Yusaku Yamamoto	4. 巻 10777
2. 論文標題 On Using the Cholesky QR Method in the Full-Blocked One-Sided Jacobi Algorithm	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 612-622
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-78024-5_53	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 中野智輝, 横川三津夫, 深谷猛, 山本有作	4. 巻 2017-HPC-162
2. 論文標題 One-way dissectionオーダリングによる連立一次方程式の直接解法の並列化	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)	6. 最初と最後の頁 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計16件（うち招待講演 3件 / うち国際学会 9件）

1. 発表者名 酒井翼・藤周平・井町宏人・宮武勇登・星健夫・山本有作
2. 発表標題 エネルギー保存型並列解法MB4に基づく2次元量子ダイナミクス計算
3. 学会等名 第47回数値解析シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yusaku Yamamoto・Tsubasa Sakai・Shuhei Kudo・Hiroto Imachi・Yuto Miyatake・Takeo Hoshi
2. 発表標題 Application of an Energy-preserving Integrator to Quantum-mechanical Wavepacket Dynamics
3. 学会等名 13th SIAM East Asian Section Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 白間久瑠美・工藤周平・山本有作
2. 発表標題 荻田・相島の固有ベクトル反復改良法における重複固有値の扱いについて
3. 学会等名 応用数理学会2018年度年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yusaku Yamamoto
2. 発表標題 Orthogonalization Algorithms and Dense Symmetric Eigenvalue Solvers Optimized for Strong Scaling
3. 学会等名 International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山本有作
2. 発表標題 荻田・相島の固有ベクトル反復改良法に基づく実対称行列の固有値分解追跡手法
3. 学会等名 RIMS共同研究（公開型）「次世代の科学技術を支える数値解析学の基盤整備と応用展開」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 星健夫, 李東珍, 桑田亨成, 角田皓亮, 曾我部知広, 張 紹良
2. 発表標題 選択的中间固有対計算と有機デバイス材料への応用
3. 学会等名 応用数理学会 2019年研究部会連合発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeo Hoshi
2. 発表標題 HPC challenge in material science
3. 学会等名 International HPC Summer School 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takeo Hoshi
2. 発表標題 Organic device material research by the combination of large-scale massively-parallel electronic state calculation and data-driven science
3. 学会等名 Symposium on Materials Genome Towards Exascale (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yusaku Yamamoto
2. 発表標題 Roundoff error analysis of the CholeskyQR2 and related algorithms
3. 学会等名 PARNUM2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 塩谷明美, 山本有作
2. 発表標題 ブロック赤-黒順序付けされた摂動/緩和MILU(0) 前処理法のGPUとマルチコアCPUにおける性能評価
3. 学会等名 SWoPP 2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shuhei Kudo and Yusaku Yamamoto
2. 発表標題 On using the Cholesky QR method in the full-blocked one-sided Jacobi algorithm
3. 学会等名 PPAM2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 清藤 博暉, 山本 有作
2. 発表標題 虚数シフトを行った実対称行列のための COCG法と一般化MINRES法の性能比較
3. 学会等名 日本応用数理学会「行列・固有値問題 の解法とその応用」研究部会 第24回研究会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Akemi Shioya and Yusaku Yamamoto
2. 発表標題 Block Red-Black Milu(0) Preconditioner with Relaxation on GPU
3. 学会等名 18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 星健夫, 福本智哉, 深谷猛, 山本 有作
2. 発表標題 Oakforest-PACSにおける一般化固有値計算の性能解析と性能予測
3. 学会等名 日本応用数理学会 2018年 研究部会連合発表会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takeo Hoshi, Tomoya Fukumoto, Takeshi Fukaya and Yusaku Yamamoto
2. 発表標題 Analysis and prediction of the performance in generalized eigenvalue solvers on Oakforest-PACS
3. 学会等名 International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Yokokawa, T. Nakano, T. Fukaya and Y. Yamamoto
2. 発表標題 A parallel solver for a linear system with symmetric sparse matrix by one-dissection ordering
3. 学会等名 Workbench on Sustained Simulation Performance (WSSP) (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計7件

1. 著者名 Takeo Hoshi, Yusaku Yamamoto, Tomohiro Sogabe, Kohei Shimamura, Fuyuki Shimojo, Aiichiro Nakano, Rajiv Kalia, Priya Vashishta	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Taylor&Francis (CRC Press)	5. 総ページ数 -
3. 書名 Numerical methods for large scale electronic state calculation on supercomputer, in '21st Century Nanoscience - A Handbook' (K. Sattler, Ed.)	

1. 著者名 Yusaku Yamamoto	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 251-266
3. 書名 Eigenvalue Problems: Algorithms, Software and Applications in Petascale Computing	

1. 著者名 金田 行雄、笹井 理生、張 紹良	4. 発行年 2022年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 360
3. 書名 20世紀のトップ10アルゴリズム	

1. 著者名 金田 行雄、笹井 理生、張 紹良	4. 発行年 2019年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 256
3. 書名 計算科学のための基本数理アルゴリズム	

1. 著者名 日本応用数学会、櫻井 鉄也、松尾 宇泰、片桐 孝洋	4. 発行年 2018年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 336
3. 書名 数値線形代数の数理とHPC	

1. 著者名 下司雅章、片桐孝洋、中田真秀、渡辺宙志、山本有作、吉井範行、Jaewoon Jung、杉田有治、石村和也、大石進一、関根晃太、森倉悠介、黒田久泰	4. 発行年 2017年
2. 出版社 大阪大学出版会	5. 総ページ数 298
3. 書名 計算科学のためのHPC技術 1	

1. 著者名 山本 有作、石原 卓	4. 発行年 2020年
2. 出版社 裳華房	5. 総ページ数 182
3. 書名 理工系の数理 ベクトル解析	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	横川 三津夫  (Yokokawa Mitsuo)  (70358307)	神戸大学・先端融合研究環・教授   (14501)	
研究分担者	星 健夫  (Hoshi Takeo)  (80272384)	鳥取大学・工学研究科・准教授   (15101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------