

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「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」
研究課題「ポストペタスケールに対応した階層
モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発」

研究終了報告書

研究期間 平成23年4月～平成28年3月

研究代表者: 櫻井鉄也
(筑波大学大学院システム情報工学
研究科、教授)

§ 1 研究実施の概要

(1)実施概要

本プロジェクトでは、大規模計算の実行において多くの時間を占め高速化のニーズが高い固有値計算を対象として、ポストペタスケール規模のハードウェア性能を十分に引き出すことのできる「超並列固有値解析エンジン」を開発した。そのために、アーキテクチャの持つ細粒度・大粒度の超並列性を活用する階層型並列アルゴリズムの構築、高性能実装と性能最適化の技術開発、性能評価モデルの設計を行った。

具体的には、疎行列向け超並列固有値解析エンジン z-Pares、密行列向け超並列固有値エンジン EigenExa の開発および実アプリケーションへの適用技術の開発を行った。この目的の実現のため、4 つの課題：1)階層化による超並列化技術の開発、2)共通基盤技術の開発、3)高性能利用技術の開発、4)ソフトウェア技術の開発、を設定した。その遂行のために、櫻井グループ（筑波大）、今村グループ（理研 AICS）、張グループ（名古屋大）、山本グループ（電通大）、藏増グループ（筑波大/理研 AICS）、星グループ（鳥取大）の6つのグループを構成した。櫻井グループ、今村グループが主に疎・密双方の固有値解析エンジンの理論整備およびソフトウェア開発を進めた。また、張グループ、山本グループは両固有値エンジンの共通基盤技術の開発を進め、z-Pares、EigenExa の高性能化を支援した。また、藏増グループ、星グループはそれぞれ実アプリケーションへ適用する際の高性能利用技術の開発を支援した。

本課題を通じて達成された基礎研究の成果として、階層性を利用したポストペタスケール向け固有値計算アルゴリズムおよびその計算基盤技術の開発が挙げられる。また、これらの基礎研究を基に科学技術イノベーションに繋がるプロダクトとして、以下の成果物が得られた：

1. 積分型疎行列固有値解析エンジン z-Pares
2. 新1ステップ型密行列固有値解析エンジン EigenExa
3. 各種物理科学分野および企業内の設計最適化における実応用技術

本課題を通じて、性質の大きく異なる疎行列・密行列それぞれに対応する固有値解析エンジン z-Pares、EigenExa が完成し、素粒子物理、物性物理、原子核物理、振動解析、気象予測など多岐に渡るアプリケーション分野に対する応用において、最大で京コンピュータの全ノードを利用した性能評価によって高い並列性能を発揮することが示された。

さらに、ポストペタスケール環境で想定されるメニーコアプロセッサや演算加速器に対応するため、現行のメニーコア・演算加速器における高性能利用技術の開発も行い、性能予測も併せて組み立てることで、本課題で開発した諸技術によりポストペタスケール環境において超並列高速固有値計算が十分にフィジブルであることを示した。

加えて、固有値計算に関する数理・HPC・実アプリにまたがる分野横断的な国際会議を2回開催し、各分野の著名な研究者を招聘した。その他国際学会や研究拠点訪問も含めた地道な国際交流活動により、本課題のアルゴリズム・ソフトウェアの国際的な知名度が高まり、日本の固有値・線形計算コミュニティのプレゼンスが大きく高まった。

また、企業での解析において固有値問題がボトルネックとなっており、本課題のソフトウェアがそれらの解決に資することから企業との共同研究が進行し、実運用での利用に近づいている。このような取り組みを広めることで、本課題の成果の社会実装が推進できると考えられる。

ポストペタスケール規模のシミュレーションは、高性能なハードウェア開発は言うまでもなく、その性能を十分に引き出すためのコンパイラやミドルウェア、通信制御、計算アルゴリズム、現象モデリングなどの技術を結集して初めて到達できる。本プロジェクトの成果はその一翼を担うものである。

本課題が遂行されたことによって、ポストペタスケールに資するシステム技術の主要な階層の一つとして、固有値計算を中心とする数理アルゴリズム・ソフトウェア・ライブラ

りの開発が達成され、固有値計算がボトルネックとなっている実アプリケーションの今後のポストペタスケールへの飛躍に大きく貢献したといえる。また、現状のアプリケーションの高速化にとどまらず、現状では固有値計算を利用していないアプリケーション分野に対しても、高速固有値計算を基盤とした新しい解析手法の確立も期待される。

(2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1. 階層性を利用しポストペタスケールで高い性能を発揮する積分型疎行列固有値計算アルゴリズム

概要: (200 字程度)

従来の漸化式に基づくアルゴリズムと一線を画す独創的な積分型アルゴリズムの開発を進め、ポストペタスケール計算に向けて高度化した。本アルゴリズムは 3 階層に渡る階層的な構造を持っており、同様な階層構造が想定されるポストペタスケールのアーキテクチャに適する。各種分野のアプリケーションにおける京での大規模計算において高い並列性能を発揮した。本課題での研究を通じてポストペタスケールにおけるアルゴリズム設計の方向性を示した。

2. 階層性を利用しポストペタスケールで高い性能を発揮する新しい1ステップ型密行列固有値計算アルゴリズム

概要: (200 字程度)

大規模密行列固有値計算において顕著になる「メモリまたはネットワーク上のトラフィック」や「通信オーバーヘッド」による性能劣化を回避するため、旧来型 1 ステップスキームや、諸外国の新しいライブラリで導入されている 2 ステップスキームに対してユニークな新 1 ステップスキームを導入することで、ポストペタスケール規模で有効なアルゴリズム基盤を構築した。

3. 固有値解析アルゴリズムを支える各種線形計算基盤技術

概要: (200 字程度)

疎・密行列ともに固有値解析アルゴリズムでは、QR 分解や線形ソルバなど、各種基本線形計算が必要となり、それらのポストペタスケール向けの高度化が課題となっていた。ポストペタ規模で重要となる通信回避や通信隠蔽、大規模問題の数値的不安定性の回避を主眼に、これら基本線形計算の基盤技術を開発した。

<科学技術イノベーションに大きく寄与する成果>

1. 積分型疎行列固有値解析エンジン z-Pares

概要: (200 字程度)

開発したアルゴリズムを実装するソフトウェアパッケージとして z-Pares を開発・公開した。z-Pares を利用することで、実アプリケーション問題において、京コンピュータの数万ノード規模で高いスケーラビリティを達成した。ポストペタスケールスパコンで利用が想定される数万ノード規模の計算で十分なスケーラビリティを発揮し、従来解くことができなかった規模の計算を可能とし、科学技術イノベーションに貢献することが期待される。

2. 新 1 ステップ型密行列固有値解析エンジン EigenExa

概要: (200 字程度)

京コンピュータの全系を用いて 100 万次元行列の全ての固有値・固有ベクトルを計算した。計算時間は 1 時間以内、実行時の計算性能は 1.7PFLOPS (理論ピーク性能の約 16%) に達した。これは世界最大規模であるとともに、本課題で開発している固有値ライブラリがエクサスケールでの計算規模において Feasible であることを示した。密行

列固有値問題が現れる実アプリの性能の限界を拡大し、科学技術イノベーションに寄与することが期待できる。

3. 企業の設計最適化における実応用技術

概要: (200 字程度)

本課題で開発したアルゴリズムやソフトウェアをもとに企業における実際の製品開発での問題に対する実応用技術の開発を行った。この開発を通じて、本課題の手法・ソフトウェアの既存ソフトウェアに対する優位性が明らかになってきており、実運用に向けた共同研究を開始した。このような取り組みは固有値計算がボトルネックとなる自動車・航空機・造船などのさまざまな製造業の分野の解析技術に広く応用することが可能であり、今後国際競争力の強化に貢献することが期待される。

§ 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

① 櫻井グループ

研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|--------|-------------------------|-------------------------------------|----------|
| 櫻井 鉄也 | 筑波大学大学院 システム情報系 | 教授 | H23.4 ~ |
| 多田野 寛人 | 筑波大学大学院 システム情報系 | 助教 | H23.4 ~ |
| 今倉 暁 | 筑波大学大学院 システム情報系 | 助教 | H25.4 ~ |
| 二村 保徳 | 筑波大学大学院 システム情報系 | D1～、研究員 (H26.4～)、助教 (H26.10～) | H23.4 ~ |
| 叶 秀彩 | 筑波大学大学院 システム情報系 | 研究員 | H26.7 ~ |
| 前田 恭行 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | M1～D3 | H23.4 ~ |
| 蘇 黎炯 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | D1～3 | H25.4 ~ |
| 矢野 貴大 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | M1～D1 | H25.4 ~ |
| 諶 鴻佳 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | D1 | H27.4 ~ |
| 小松 壮太 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | M1～2 | H26.4 ~ |
| 長谷川 哲也 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | M1～2 | H26.3 ~ |
| 季 凱陽 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | M1～2 | H26.4 ~ |
| 松下 達也 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | M1 | H27.4 ~ |
| 上田 俊也 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | M1 | H27.4 ~ |
| 井上 雄登 | 筑波大学大学院 システム情報工 学研究科 | M1 | H27.4 ~ |
| 江口 慎子 | 筑波大学システム情報エリア支援 室 | 非常勤職員 | H23..5 ~ |

| | | | |
|--------|---------------------|-------|---------------|
| 佐久間 敬子 | 筑波大学システム情報エリア支援室 | 非常勤職員 | H26.4 ~ |
| 池上 努 | 産業技術総合研究所 情報技術研究部門 | 研究員 | H23.4 ~ |
| 岩田 潤一 | 筑波大学 大学院数理物質科学研究科 | 助教 | H23.4 ~ |
| 長嶋 雲兵 | 産業技術総合研究所ナノシステム研究部門 | 主幹研究員 | H23.4 ~ |
| 木村 欣司 | 京都大学大学院情報学研究科 | 特定准教授 | H23.4 ~ |
| 中務 佑治 | 東京大学大学院除法理工学系研究科 | 助教 | H25.11~ |
| 白砂 溪 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | M2 | H23.4 ~ H24.3 |
| 先崎 健太 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | D2~3 | H23.4 ~ H25.3 |
| 山崎 育朗 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | D~3 | H23.4 ~ H25.3 |
| 内藤 理大 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | M1~2 | H23.4 ~ H25.3 |
| 山本 和磨 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | M1~2 | H23.4 ~ H25.3 |
| 竹腰 開 | 筑波大学情報学群 情報科学類 | 学類2年 | H24.4 ~ H25.3 |
| 川上 大樹 | 筑波大学情報学群 情報科学類 | 学類2年 | H24.4 ~ H25.3 |
| 桑原 悠太 | 筑波大学情報学群 情報科学類 | 学類2年 | H24.4 ~ H25.3 |
| 祖平 明夫 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | M1~2 | H24.4 ~ H26.3 |
| 杜 磊 | 筑波大学大学院 システム情報系 | 研究員 | H24.1 ~ H26.3 |
| 桜井 佐佳恵 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | 非常勤職員 | H24.4 ~ H26.3 |
| 崔 楚英 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | D2 | H25.4 ~ H26.3 |
| 陳 玉蕊 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | M2 | H26.3 ~ H27.3 |
| 西村 恒希 | 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 | M1~2 | H25.4 ~ H27.3 |

研究項目

- ・階層的固有値計算アルゴリズムの理論構築と高性能化技術の開発とその性能モデルの構築
- ・GPU・メニーコア向け実装技術研究
- ・ペタフロップス環境向け実装と実アプリケーションを用いた評価
- ・ポストペタスケールに対応した高性能ソフトウェア群の開発

②張グループ

研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|------|-------|----|---------|
| 張 紹良 | 名古屋大学 | 教授 | H23.4 ~ |

| | | | |
|--------|-------------------------------------|------|---------------|
| 宮武 勇登 | 名古屋大学 | 助教 | H27.4 ~ |
| 曾我部 知広 | 名古屋大学(H27.3 まで愛知県立 大学大学院情報科学研究科) | 准教授 | H23.4 ~ |
| 高務 智法 | 名古屋大学 | M1~2 | H26.4 ~ |
| 都築 啓 | 名古屋大学 | M1~2 | H26.4 ~ |
| 成瀬 由基 | 名古屋大学 | M1~2 | H26.4 ~ |
| 原 吉之介 | 名古屋大学 | M1~2 | H26.4 ~ |
| 原田 あゆ | 名古屋大学 | M1~2 | H26.4 ~ |
| 吉田 延宏 | 名古屋大学 | M1~2 | H26.4 ~ |
| 安富祖 瞬 | 名古屋大学 | M1 | H27.4 ~ |
| 井澤 明浩 | 名古屋大学 | M1 | H27.4 ~ |
| 大澤 匡也 | 名古屋大学 | M1 | H27.4 ~ |
| 片岡 勇貴 | 名古屋大学 | M1 | H27.4 ~ |
| 長谷 陽平 | 名古屋大学 | M1 | H27.4 ~ |
| 渡邊 雅俊 | 名古屋大学 | M2 | H23.4 ~ H24.3 |
| 三森 浩平 | 名古屋大学 | M2 | H23.4 ~ H24.3 |
| 服部 克洋 | 名古屋大学 | M2 | H24.4 ~ H25.3 |
| 白 昊明 | 名古屋大学 | M2 | H24.4 ~ H25.3 |
| 長谷 直哉 | 名古屋大学 | M2 | H24.4 ~ H25.3 |
| 李 東珍 | 名古屋大学 | M1~2 | H24.4 ~ H26.3 |
| 近藤 翔太郎 | 名古屋大学 | M1~2 | H24.4 ~ H26.3 |
| 江 毅 | 名古屋大学 | M1~2 | H24.4 ~ H26.3 |
| 柴田 敬太 | 名古屋大学 | M2 | H25.4 ~ H26.3 |
| 棚橋 優 | 名古屋大学 | M2 | H25.4 ~ H26.3 |
| 内藤 良平 | 名古屋大学 | M2 | H25.4 ~ H26.3 |
| 古澤 賢 | 名古屋大学 | M2 | H25.4 ~ H26.3 |
| 岩澤 宏紀 | 名古屋大学 | M1 | H25.4 ~ H26.3 |
| 川出 静 | 名古屋大学 | M1 | H25.4 ~ H26.3 |
| 宮田 考史 | 名古屋大学 | 助教 | H23.4 ~ H27.3 |
| 奥田 陽子 | 名古屋大学 | M1~2 | H25.4 ~ H27.3 |
| 西澤 慶亮 | 名古屋大学 | M1~2 | H25.4 ~ H27.3 |

研究項目

- ・大規模固有値問題に対する基盤技術の数理的開発

③今村グループ

研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|-------|------------------------------|---------|----------|
| 今村 俊幸 | 理化学研究所(H24.9 まで電気通 信大学所属) | チームリーダー | H23.4 ~ |
| 畢 重科 | 理化学研究所 | 特別研究員 | H24.10 ~ |
| 廣田 悠輔 | 理化学研究所 | 特別研究員 | H25.4 ~ |
| 町田 昌彦 | 日本原子力研究開発機構 | 研究主幹 | H24.10 ~ |
| 山田 進 | 日本原子力研究開発機構 | 研究副主幹 | H24.10 ~ |
| 深谷 猛 | 理化学研究所・北海道大学 | 客員研究員・ | H25.10 ~ |

| | | 助教 | |
|--------|--------|------|--------------|
| 松田 潤一 | 東京大学 | D1～3 | H25.4 ～ |
| 大瀧 嵩 | 電気通信大学 | M1～2 | H23.4 ～H25.3 |
| 近藤 大貴 | 電気通信大学 | M1～2 | H23.4 ～H25.3 |
| 佐々木 龍三 | 電気通信大学 | M1～2 | H23.4～H25.3 |
| 田村 遼也 | 電気通信大学 | M1～2 | H23.4～H26.3 |
| 吉田 剛啓 | 電気通信大学 | M1～2 | H23.4 ～H25.3 |
| 林 熙龍 | 電気通信大学 | M1～2 | H24.4 ～H26.3 |
| 白澤 孝仁 | 電気通信大学 | M1～2 | H24.4～H26.3 |
| 岡田 和人 | 電気通信大学 | M1～2 | H24.4～H26.3 |

研究項目

- ・再帰的アルゴリズムに基づく行列変換法の研究
- ・GPU・メニーコア向け実装技術研究
- ・ペタフロップス環境での試験実装と実アプリを用いた評価
- ・階層型並列環境に対応した高性能ソフトウェア群の開発

④山本グループ

研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|-------|-------------------------|-------|------------------|
| 山本 有作 | 電気通信大学 | 教授 | H23.4 ～ |
| 工藤 周平 | 電気通信大学 (H27.3 まで神戸大学所属) | 研究生 | H25.4 ～ |
| 中村 聡 | 電気通信大学 | B4～M1 | H26.4 ～ |
| 多貝 健志 | 電気通信大学 | B4～M1 | H26.4 ～ |
| 塩谷 明美 | 電気通信大学 | B4 | H27.7 ～ |
| 清藤 博暉 | 電気通信大学 | B4 | H27.7 ～ |
| 深谷 猛 | 神戸大学 | 特命助教 | H24.4 ～ H25.9 |
| 廣田 悠輔 | 神戸大学 | D3 | H23.4 ～ H25.3 |
| 新堂 敬隆 | 神戸大学 | M1～2 | H23.4 ～ H25.3 |
| 高橋 佑輔 | 神戸大学 | M1～2 | H23.4 ～ H25.3 |
| 張 瀾 | 神戸大学 | M1～2 | H24.4 ～ H26.3 |
| 長島 聖児 | 神戸大学 | M1～2 | H25.4 ～ H27.3 |
| 信原 貴也 | 神戸大学 | M1～2 | H25.4 ～ H27.3 |
| 郭 紫進 | 神戸大学 | M1～2 | H25.4 ～ |

| | | | |
|-------|--------|------|------------------|
| | | | H27.3 |
| 松村 友花 | 神戸大学 | M1～2 | H25.4 ～ H27.3 |
| 山本 和輝 | 電気通信大学 | B4 | H26.4 ～ H27.3 |

研究項目

- ・密行列向け固有値計算アルゴリズムの開発
- ・性能モデリング・自動最適化技術の開発
- ・実アプリを用いた評価

⑤蔵増グループ

研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|-------|----------------|-----|---------|
| 蔵増 嘉伸 | 筑波大学数理物質系 | 教授 | H23.4 ～ |
| 石川 健一 | 広島大学大学院理学研究科 | 准教授 | H23.4 ～ |
| 中村 宜文 | 理化学研究所計算科学研究機構 | 研究員 | H23.4 ～ |

研究項目

- ・疎行列向け固有値解析エンジンの性能を実アプリケーションで検証し、開発者へフィードバック
- ・実アプリケーションにおいて固有値解析エンジンを高性能利用するための技術開発

⑥星グループ

研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|-------|------|------|---------------|
| 星 健夫 | 鳥取大学 | 准教授 | H23.4 ～ |
| 井町宏人 | 鳥取大学 | D1 | H26.4 ～ |
| 横山誠也 | 鳥取大学 | M1～2 | H26.4 ～ |
| 梶 貴美 | 鳥取大学 | M1 | H27.4 ～ |
| 川居 佳史 | 鳥取大学 | M2 | H23.4 ～ H24.3 |
| 秋山洋平 | 鳥取大学 | M1～2 | H24.4 ～ H26.3 |

研究項目

- ・物質科学分野実アプリケーションを想定したテストコードの作成と性能実証、および実アプリケーション開発者の立場からのフィードバック

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

並列固有値計算に関する分野横断的な国際会議 EPASA2014 および EPASA2015 を開催し、諸外国の著名な研究者らを招待講演にて招き、交流を深めた。また、学会や現地訪問を通じて海外の数理・HPC・実アプリの各分野の研究者らとの交流を図った。具体的には、電子

状態計算コード NEMO5 を開発するパデュー大のグループ、PETSc/SLEPc を用いたフォトニック結晶のシミュレーションに携わる国立台湾大の Weicheng Wang 氏、線形計算分野で著名なカリフォルニア大学デービス校の Zhaojun Bai 氏、米国サンディヤ国立研究所で耐故障性に関する研究する Keita Teranishi 氏、Randomized algorithm による線形解法を研究するパリ大学の Marc Baboulin 氏、分散疎行列直接線形解法パッケージ MUMPS を開発する Toulouse 大のグループ、スパコン Piz Diant を擁する ETH-CSCS にて電子状態計算コードを開発するグループ。SLEPc を開発するバレンシア工科大の Jose E. Roman 氏、ドイツのエクサコンピューティングプロジェクト SPPEXA の ESSEX のグループなどである。これらの国際交流を通じて、基礎理論の強化が進み、またより幅広いアプリケーションへの展開が可能になった。

§3 研究実施内容及び成果

3.1 階層的固有値計算アルゴリズムの開発および固有値解析エンジンの実装 (筑波大学 櫻井グループ)

(1) 研究実施内容及び成果

ポストペタスケールにおいて高性能を発揮する固有値解析エンジンを開発するために、階層的な並列構造をもつ超並列計算機で高い性能を発揮できる疎行列向けの固有値計算アルゴリズムを開発する。これに基づいて疎行列固有値計算アルゴリズムの実装と実アプリを用いた評価を行い、各種の高性能化技術を開発する。これらの技術を用いて、高性能な固有値解析エンジンを実装する。

本研究のベースとなる櫻井-杉浦法は、従来よく用いられてきた解法とはその原理が大きく異なる。解法的设计段階から演算量よりも通信回数の削減と通信範囲の局所化を重視しており、スーパーコンピュータなどの分散並列環境に適している。その反面、解法の特長なども未知の部分が多く、その理論基盤の構築や頑強性のための各種の手法の開発なども必要であった。近年ではその並列性能の高さが海外でも認識され、本方法を利用する研究者も増えつつある。櫻井-杉浦法は、世界に先駆けて我々が提案した独自性の高い方法であり、積分型の固有値解法という我が国発の新しい研究領域が形成されつつある。

既存の固有値解法の多くは、そのアルゴリズムが漸化関係によって記述され、計算のステップを進めるときに、各ステップでの計算結果の通信が発生する。ポストペタスケール規模での並列計算を想定したとき、この通信が大きなボトルネックとなり、ハードウェア性能を十分に引き出すことができなくなる。櫻井-杉浦法は、漸化関係を用いないアルゴリズムを用いており、分散ノード間での通信を大幅に低減することができる。このアルゴリズムをもとに、領域ごとの並列性、積分点ごとの並列性、内部で現れる線形計算の並列性による階層的な並列構造を持つ固有値解法を設計した。これにより、高い同時並列性を実現し、通信を最下層の線形計算部分に局所化することが可能となった。

以下において、まず得られた成果について示した後、実施方法や開発ソフトウェアの性能評価結果などについて述べる。

実施成果

本グループの主要な成果は「疎行列向け固有値解析エンジン」である。

「公開済みソフトウェア」

1. z-Pares

機能:

疎行列向け固有値解法。実/複素・標準/一般固有値問題の指定領域内の固有値・固有ベクトルを求める。

特徴:

階層的な並列化が可能。行列の格納形式に依存しない。

実行可能環境:

Fortran90・MPI が動作するワークステーション・スーパーコンピュータ

潜在的ユーザ:

並列化を必要とする規模の固有値問題の現れるアプリケーションの開発者および固有値解法の研究者

エクサスケールへの貢献度:

z-Pares は階層的な MPI コミュニケータ定義によって階層的並列性をソフトウェアとして記述している。ユーザは最下層の線形ソルバを自在に取り替えることができるため、最下層の密粒度並列化については、ポストペタ時代に主流となりうる、メニーコア CPU や演算加速器に対応可能となる。

2. 並列ライブラリ SLEPc 向けコード CISS

機能:

疎行列向け固有値解法。実/複素・標準/一般固有値問題の指定領域内の固有値・固有ベクトルを求める。

特徴:

SLEPc に実装されているたの固有値解法とシームレスに比較できる。PETSc に組み込まれている各種の分散並列線形計算機能を容易に利用できる。

実行可能環境:

PETSc と SLEPc が動作するワークステーション・スーパーコンピュータ

潜在的ユーザ:

並列化を必要とする規模の固有値問題の現れるアプリケーションの開発者および固有値解法の研究者

エクサスケールへの貢献度:

SLEPc のベースとなる PETSc では GPU への対応が進んでおり、SLEPc に組み込まれた CISS から GPU を利用できる。そのため、CISS から PETSc 開発者コミュニティの演算加速器活用ノウハウに容易にアクセスすることができるため、今後のポストペタスケールへの発展性が期待できる。

2) 大規模固有値解析ソフトウェアの高度利用技術についても併せて開発を進め、以下のアルゴリズム・実装技術を得た

・負荷分散のための固有値分布推定アルゴリズム

SS法の計算量は領域内部の固有値数に依存するため、複素平面上に複数の領域を設定する場合には、それぞれの領域内部の固有値数をなるべく一定にするような領域配置が、最上位層における並列負荷分散に対して重要である。その負荷分散を達成するため、固有値分布の確率的推定法を開発した。

・省メモリアルゴリズム

実アプリに必要な情報が固有ベクトルではなく、固有値のみの場合において、メモリ要求量を大幅に減らすことのできる一連のアルゴリズムを開発した。エクサスケールでは演算性能に対する主記憶容量の減少が想定されるため、省メモリアルゴリズムが効果を発揮すると想定される。

・演算加速器クラスタで性能を発揮する実装技術

ポストペタスケール環境では、最下層または中位層の並列化において複数のメニーコアや演算加速器を使用するという状況が想定される。本課題では本来主に疎行列を想定したアルゴリズムであるところの SS 法の疎粒度並列性を生かし、密行列問題でも性能を発揮できるアルゴリズム構成を考案、性能評価し、査読付き国際会議論文に発表した。現在の実装では最下層が 1 ノード内の複数 GPU となっているが、今後、行列行列積が計算主要部になる形でアルゴリズム全体を組み立てることで、最下層に演算加速器を複数搭載するノードを複数用いた実装を開発し、ポストペタでのさらなる展開に繋げる。

疎行列計算においても、分散線形直接ソルバ SuperLU_DIST や、分散並列科学技術計算フレームワーク PETSc において GPU 対応が進んでおり、本課題を通してそれらの関係者と連携を深めた。今後もさらなる連携により、ポストペタ実環境での高い実行性能の達成に向けた研究と高可搬ソフトウェア開発を進めていく。

3) 大規模固有値解析の応用分野への適用技術

大規模疎行列固有値解析の実アプリへの応用においては、最下層の線形ソルバとして適したアルゴリズムがアプリの行列データ構造や条件数に強く依存するため、アプリごとに適した線形の開発が必要になる。本課題では実空間密度汎関数計算コード RSDFT の行列の性質に着目し、新たに線形ソルバ Shifted Block CGrQ 法を開発し、これまでにない規模の

バンド構造計算を達成した。さらにそのソルバは殻模型計算による原子核シミュレーションにも有用であることがわかり、これまでにない 150 億次元の固有値密度計算を達成した。また振動解析で現れる固有値問題の行列は実対称行列であり、実数の積分と疎行列直接線形解法を組み合わせた手法を構成することで、既存手法を上回る性能を得ることができた。また、この手法は、まったく別分野ではあるものの同様な固有値問題が現れる Order-N 密度汎関数法コード CONQUEST においても有用であることがわかり、これまでにない規模の固有値計算を達成できた。このように、各アプリに対して適した線形ソルバについての研究成果を分野横断的に応用することができ、横串的な成果を得ることができた。

成果の位置づけや類似研究との比較

<成果の位置づけ>

本課題で 2 つの大きなプロダクトである z-Pares と EigenExa のうち、疎行列を扱う z-Pares の理論基盤構築・設計・開発を行った。

<類似研究>

SS 法と同じく数値周回積分に基づく疎行列固有値計算アルゴリズムとして米国マサチューセッツ大で 2009 年に提案された FEAST がある。FEAST は開発者の精力的な広報によって米国・欧州を中心に広く認知され、その階層的な疎粒度並列性が評価されたことで、多くの分野で使われつつある。SS 法と FEAST は解法として類似点が多いが、SS 法は高次複素モーメントの利用しているため、同じ数の固有値を求めるにあたっては、最下層の線形方程式の求解コストが、SS 法の方が少ないという優れた特徴がある。本課題発足当初は、応用数理学会 (SIAM) 等の国際学会では数値周回積分による固有値解法といえば FEAST という印象を持たれていたが、本課題の支援による国際交流活動が功を奏し、SS 法の存在が広く認知され始め、国際学会等での授賞や招待講演に繋がった。

ユーザ開拓・国際協力

疎行列固有値解析エンジンの実アプリへの可用性を高めるため、諸外国でのユーザ開拓・国際協力関係強化を推進した。具体的には、電子状態計算コード NEMO5 を開発するパデュー大のグループ、PETSc/SLEPc を用いたフォトニック結晶のシミュレーションに携わる国立台湾大の Weicheng Wang 氏、スパコン Piz Diant を擁する ETH-CSCS にて電子状態計算コードを開発するグループ。これらの国際交流を通じて、幅広いアプリケーションへの展開が可能になった。

スケーラビリティの評価

開発手法は、アルゴリズムレベルでの階層性によって高いスケーラビリティが期待される。以下において実問題でのスケーラビリティの評価結果を示す。

自動車部品の振動解析における 1,600 万次元の一般化固有値問題に対する z-Pares の並列性能を測定した。実験環境として京コンピュータを用いた。実験結果を図 S-1 に示す。並列性能は 200 ノードから 38,400 ノードで計測した。200 ノードでは 42,199 秒、38,400 ノードでは 435 秒となった。数万ノード規模での高いスケーラビリティが確認できた。ポストペタスケールスパコンで利用が想定される数万ノード規模の計算で十分なスケーラビリティが期待できることを示すことができた。階層性を導入したことによって、最下層のみに限定した GPU/MIC 対応可能であり、最下層レベルで十分な性能を発揮するライブラリと組み合わせることにより、ポストペタスケール環境での高い性能が期待できる。

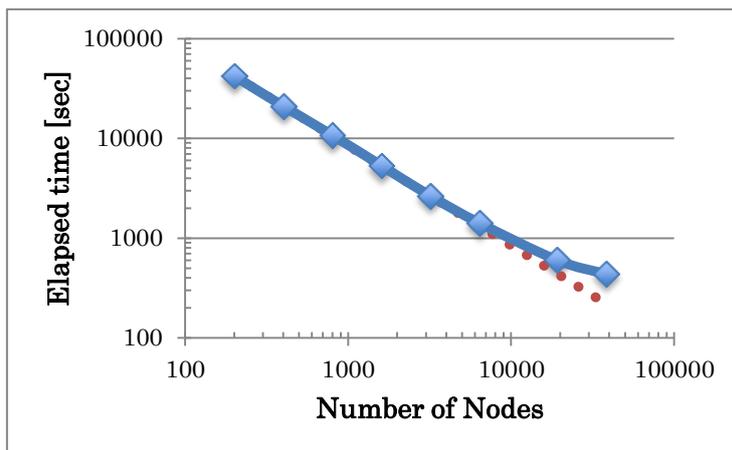


図 S-1：自動車部品の振動解析で現れる固有値問題における z-Pares の並列性能

演算加速器への対応

z-Pares を演算加速器向けに拡張し、10,000 次元の密行列固有値問題に対して、並列性能を測定した。演算加速器として Intel Xeon Phi 7110P（以下 MIC）および NVIDIA M2090（以下 GPU）を用いた。CPU（Intel Xeon E5-2670v2）と MIC の実験は筑波大学の COMA、GPU の実験は筑波大学の HA-PACS を用いた。線形ソルバとして CPU/MIC では Intel MKL、GPU では MAGMA を用いた。実験結果を図 S-2 に示す。本実験では最下層の線形ソルバのみを取り替えることで、MIC や GPU での実行に対応し、計算が加速されることが確認できた。ポストペタスケールにおいては、最下層にメニーコア CPU や演算加速器の導入が想定され、z-Pares がそのような計算環境に対応できることを示した。MIC や GPU に対する線形ソルバは現在発展途上であり、今後高性能化が進むことで、z-Pares 全体が高性能化できると考えられる。

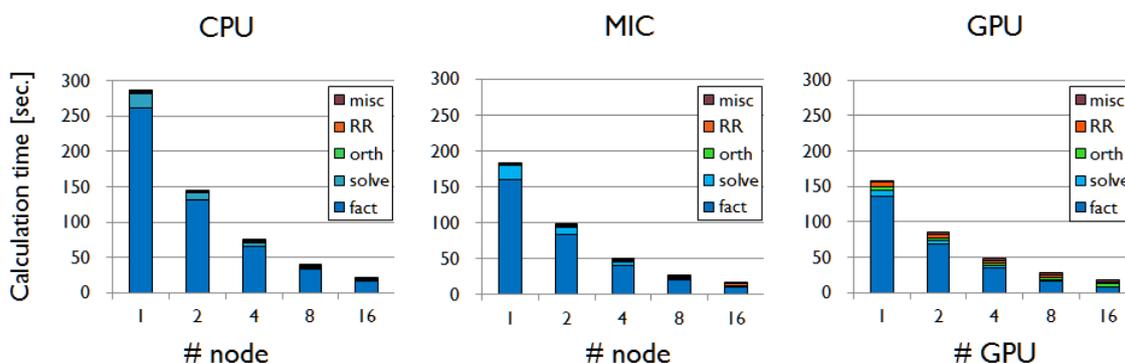


図 S-2：CPU および演算加速器における 10,000 次元密行列の計算における z-Pares の性能評価

本実験では中位層の並列性のみ用いているが、最上位の並列性も利用可能であり、さらなる並列化ができる。また、最下層においては、複数の分散 MIC/GPU に対応した線形ソルバの開発を進めており、これによってポストペタ環境における大並列実行を可能にする。

大規模問題への適用性

以下の大規模実問題において、性能を評価した。

1) 格子量子色力学 (QCD) の計算

格子量子色力学 (QCD) の計算において現れる 4 つの規模の異なる非対称固有値問題に対して、z-Pares の性能評価を行った。実験環境として京コンピュータを用いた。実験結果を表 S-1 に示す。最大で 10 億次元の問題を京 16,384 ノードを用いて 33,154 秒で求解し、本

アプリケーションにおいて、これまでにない規模の固有値計算を達成した。計算精度の面でも解析解との比較により十分な性能を持つことが確認できた。詳細は蔵増グループの欄に記載する。本実験では、最下層の並列性のみを用いている。最下層の並列性はアプリケーション固有の並列性に依存しており、このレベルの並列化のチューニングがこれまでアプリ開発者によって行われてきた。z-Pares の利用により、さらに高位の並列性が与えられることによって、最下層の並列度を下げながら、トータルの並列度を高めることが可能になり、最下層での通信ボトルネックが解消され、全体で高い並列性能を発揮することが期待される。このような並列化戦略はポストペタ環境において重要であり、QCD 以外の幅広いアプリにおいても展開可能である。

表 S-1 : QCD における 4 種類の規模の固有値計算の結果

| 格子サイズ | $8^3 \times 16$ | $24^3 \times 48$ | $48^3 \times 96$ | 96^4 |
|-----------|-----------------|------------------|------------------|-------------|
| 行列サイズ | 98 万 | 796 万 | 1 億 2740 万 | 10 億 1922 万 |
| ノード数 | 16 | 256 | 2048 | 16384 |
| 経過時間[sec] | 423 | 8210 | 18048 | 33154 |

2) 殻模型計算による原子核シミュレーション

殻模型計算コード KShell で現れる標準固有値問題に対して、固有値密度の計算を行った。 ^{58}Ni を対象とし、行列サイズは 150 億次元である。実験環境として京 2, 304 ノードを用いた。線形ソルバとして固有値密度計算向けに省メモリ・省コスト化した Shifted Block CGrQ 法を用いた。本アプリケーションでは固有値密度は Level Density と呼ばれ、それ自身が物理的関心の対象である。図 S-3 に固有値密度計算の結果を示す。実線・点線で示されているものが計算した固有値密度であり、マーカーで示されているものが先行研究で報告されている観測値である。本数値実験により計算値と先行研究の観測値が十分一致することがわかった。当初、固有値密度計算は負荷分散のために用いることを想定していたが、固有値密度そのものがアプリケーションにおいて関心がある場合があり、その計算法が有用となることから、アプリケーション研究者らとの連携を通じてわかった。

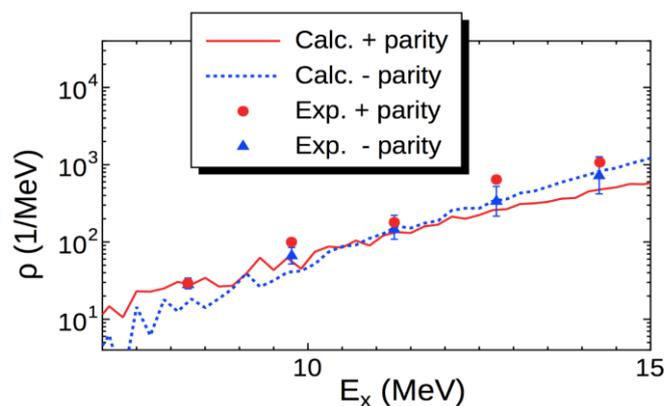


図 S-3 : 殻模型計算コード KShell における 150 億次元問題の固有値密度計算

実際の物理シミュレーションへの展開

1) 実空間密度汎関数法によるバンド構造計算

実空間密度汎関数法 (RSDFT) によるバンド構造計算を行った。対象とした系はシリコンナノワイヤ 9, 924 原子系、行列サイズは 872 万次元である。波数 k に応じて行列の異なる 21 通りの標準固有値問題を求解した。実験環境として京コンピュータ 3, 457 ノードを用いた。線形ソルバとして Shifted Block CGrQ 法を用いた。横軸の波数 k に対して、求めた固

有値の軌跡を図 S-4 に示す。櫻井・杉浦法によってバンドギャップ付近の固有値のみ効率的に求めている。計算時間は約 12 時間となった。本計算はバンド構造計算としては、これまで行うことができなかった規模の計算である。

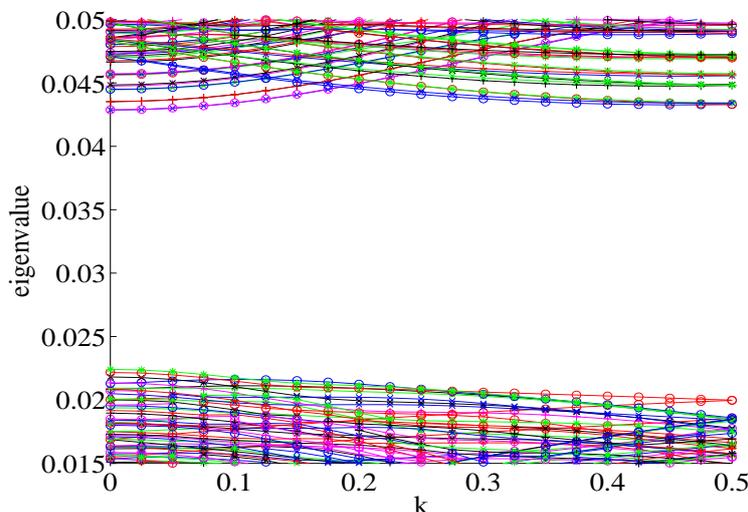


図 S-4 : RSDFT におけるバンド構造計算の結果

2) Order-N 密度汎関数計算における電子密度計算

Order-N DFT コード CONQUEST における 20 万原子系の一般化固有値問題に対し z-Pares を適用し、電子密度を求めた。行列サイズは 778,292 次元である。実験環境として筑波大学の COMA を用いた。線形ソルバとして分散並列疎行列直接解法パッケージ MUMPS を用いた。強スケーリングの並列性能を図 S-5 に示す。4 ノードでは 2,245 秒であったが、256 ノードで 90 秒となり、大幅な高速化が達成できた。本実験により CONQUEST においてこれまでにない規模の固有値計算を達成した。

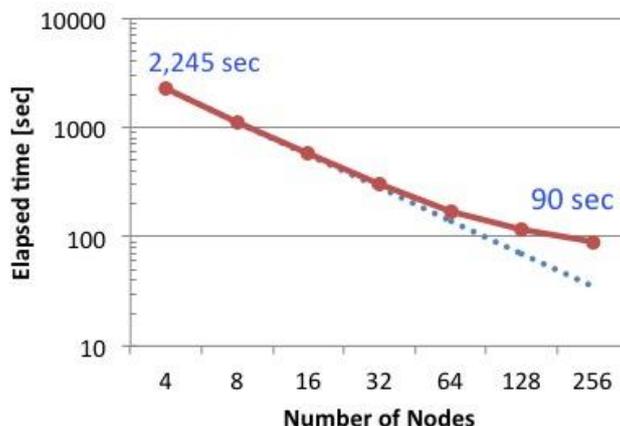


図 S-5 : Order-N DFT コード CONQUEST における固有値問題に対する z-Pares の並列性能

パラメータ最適化

SS 法の計算量は領域内部の固有値数に依存するため、複素平面上に複数の領域を設定する場合には、それぞれの領域内部の固有値数をなるべく一定にするような領域配置が、最上位層における並列負荷分散に対して重要である。その負荷分散を達成するため、固有値分布（固有値密度）の確率的推定法を開発した。

実アプリケーションである RSDFT において固有値密度計算を行った。対象とした系はシ

リコンナノワイヤ 107,292 原子系、行列サイズは、6,470 万次元である。実験環境として京コンピュータ 10,800 ノードを用いた。計算時間は 11,890 秒となった。線形ソルバとして固有値密度計算向けに省メモリ・省コスト化した Shifted Block CGrQ 法を用いた。固有値密度の計算結果を図 S-6 に示す。本原子系は SC11 において Gordon Bell Prize を受賞した論文で扱われた系である。SC11 の論文において京 55,296 ノードで固有値計算の SCF 反復に 1 回あたり 5,456 秒要したことから、この超大規模問題において、本固有値密度計算は固有値計算そのものに対し十分に小さい計算負荷で行うことができるといえる。そのため本課題で開発した固有値密度計算は、固有値計算における負荷分散のためのプロファイリングとして有用であることがわかった。

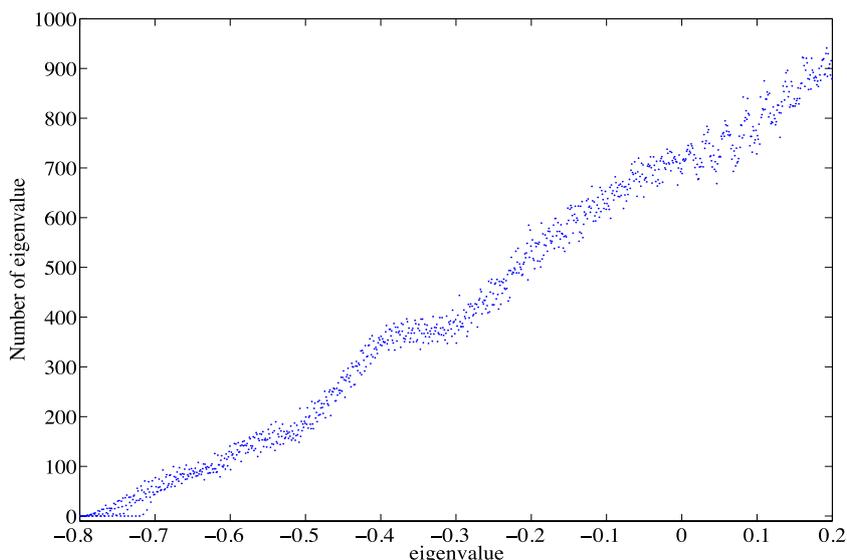


図 S-6 : RSDFT Si10 万原子系における固有値密度計算の結果

高可搬なソフトウェアの開発

広く用いられている大規模並列科学技術計算向けフレームワークとして PETSc があるが、その拡張として大規模疎行列に対する固有値計算フレームワーク SLEPc がある。その SLEPc の開発者と連携し、櫻井・杉浦法を実装したソルバ CISS を開発し、SLEPc に組み込んだ。CISS の組み込みにより既存の SLEPc ユーザであるナノシミュレーションソフトウェア NEMO5 を開発している Purdue 大の研究者や、3 次元フォトニック結晶のシミュレーションの研究を行っている国立台湾大学の研究者との連携が可能となった。図 S-7 に櫻井・杉浦法で計算したフォトニック結晶のバンド構造を示す(行列サイズは 20 万次元)。PETSc/SLEPc は Cray のスーパーコンピュータや、京を始めとするペタスケール環境向けのオープンペタスケールライブラリに登録されており、多くの超並列環境において即座に利用できる。

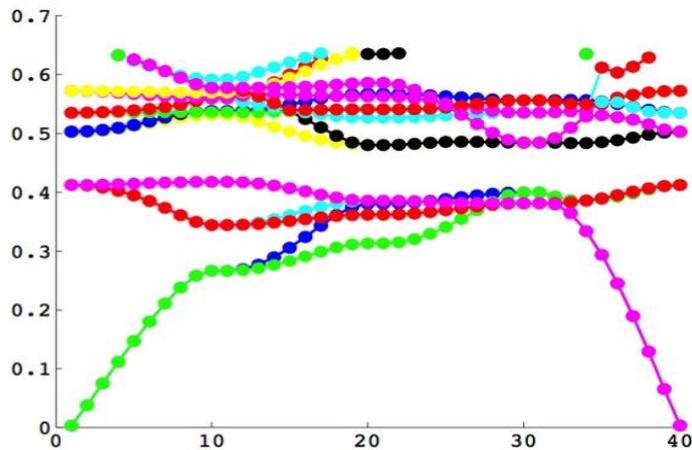


図 S-7：フォトニック単立方格子結晶のバンド構造（20 万次元）

非線形固有値問題への拡張

非線形固有値問題は量子ドットシミュレーションや構造物の制振制御などで現れ、大規模並列ソフトウェアが求められている。リニアコライダーのシミュレーションで現れる非線形固有値問題（固有値の平方根の項が含まれる）に櫻井・杉浦法の強スケーリング並列性能の評価を行った。実験結果を。実験環境として米国ローレンス・バークレイ国立研究所の Cray-XT4 を用いた。線形ソルバとして分散並列疎行列直接解法パッケージ SuperLU_DIST を用いた。表 S-2 に実験結果を示す。本実験により櫻井・杉浦法が非線形固有値問題においても並列性能が高く有用であることを示した。

表 S-2：リニアコライダーで現れる非線形固有値問題に対する櫻井・杉浦法の並列性能

| #cores | 256 | 512 | 1024 | 2048 |
|------------|------|------|------|------|
| Time [sec] | 2513 | 1273 | 661 | 334 |
| Speedup | - | 1.97 | 3.80 | 7.52 |

3.2 ポストペタスケール環境向け再帰的階層化固有値アルゴリズムのための実装技術研究（電気通信大学（平成23年4月～24年9月）・理化学研究所（平成24年10月～）、今村グループ）

(1) 研究実施内容及び成果

本サブテーマの目的は、本研究の中核の1つとなるポストペタスケールに対応した再帰的アルゴリズムに基づく密行列向けアルゴリズムを山本グループと共同開発するとともに、既存システム上（「京」コンピュータやGPU・メニーコアを利用したペタスケールシステム）での実装技術を整理し本研究プロジェクト全体で利用可能な共通開発基盤の構築を実施することにある。また、同開発基盤を用いたソフトウェアの性能評価を行う。最終的に蓄積された高性能ソフトウェア群の公開整備を通して本 CREST で要請される「エクサスケール」への貢献が達成されると認識している。

本サブテーマの主な研究項目は以下の4点になる。

- 1：再帰的アルゴリズムに基づく行列変換法の研究
- 2：GPU・メニーコア向け実装技術研究
- 3：ペタフロップス環境での性能評価
- 4：階層型並列環境に対応した高性能ソフトウェア群の開発

以下それぞれの項目についての実施内容及び特筆すべき成果を示す。

1：再帰的アルゴリズムに基づく行列変換法の研究

密行列の固有値計算を分散並列計算機やアクセラレータ搭載のクラスタなどで実行する際に、「メモリまたはネットワーク上のトラフィック」や「通信オーバーヘッド」による性能劣化が大きな問題であることは従来研究や既存ソフトウェアの利用実績から明らかであった。本研究では、既存システム上での再帰的アルゴリズムに基づくコードの試作とそのネットワーク利用特性を調査し、超並列環境での適応可能性について調査するとともに、メモリや通信のボトルネックを解消するアルゴリズム開発を山本グループと共同（理論面と実装面とを両者で分担）で実施した。

密行列の固有値計算は基本的に、1) 密行列の帯行列などへの基本変換、2) 変化後の行列の固有値計算、3) 固有ベクトルへの逆変換、の3段階をとる。競合する多くの研究グループと同様に、ポストペタスケール環境において密行列の固有値計算の重要な前処理となるハウスホルダーの三重対角化をブロック三重対角化として構成する方法を採用することをまず検討した。ブロック三重対角化は更なる変換により帯行列化操作と同値になるため、第二段階の固有値計算には従来型とは異なる帯行列を対象とするアルゴリズムが必要となる。本研究では、帯行列向けの分割統治法を採用し、複数回の逆変換を避ける方法を採用する。

これらの、アルゴリズム採用に当たっては世界的に主要な数値ライブラリ (ScaLAPACK, ELPA, PLASMA) の状況も加味して実施した。最終的に採用したアルゴリズムは図 I-1 の様になっている、現在世界で進行中の固有値ライブラリ開発は緑(旧来の1ステップスキーム)もしくは青線(2ステップスキーム)の方式をとっているのに対して、我々の方式は赤線でありユニークな新1ステップスキーム方式をとっている。

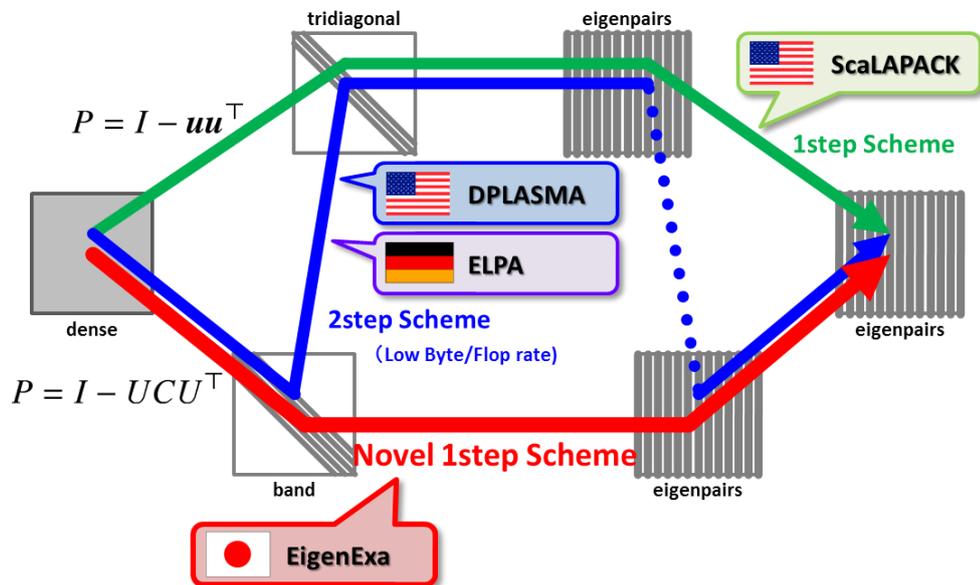


図 I-1: 代表的な固有値ライブラリが採用する密固有値計算のスキーム

更に、CA(Communication Avoiding)と呼ばれる通信回避アルゴリズムやCH(Communication Hiding), SA(Synchronization Avoiding)などのデータ移動や同期数に関する最適化の調査を実施すると共に、1) のハウスホルダー基本変換において演算順序や通信順序の変更を行うことによる通信回避技術の提案を行っている。また、3) の逆変換において非同期集団通信関数を利用することにより通信の隠蔽が可能なアルゴリズムも提案している。

2：GPU・メニーコア向け実装技術研究

ポストペタスケール環境におけるプロセッサ構成要素に近いと考えられる GPU とメニーコアについて、線形計算の基盤となる密行列 BLAS や疎行列ベクトル積 (spMV) の高性能実装手法を開発した。密行列 BLAS の SYMV と GEMV については CUDA GPU 上のスレッド形状などのパラメータを調整し、メモリバンド幅で律速されるカーネルの最高性能を出すことのできるものをライブラリ化しオープンソースソフトウェア ASPEN.K2 としてリリースしている。ASPEN.K2 では特に固有値計算に必要となる SYMV に注力したチューニングを施しており、既存の CUDA-BLAS である CUBLAS や MAGMA, KBLAS と比較しても高い性能を記録する。ASPEN.K2 は研究分担者らが本 CREST 以外のプロジェクトで開発を進めていた 1GPU 上の固有値ソルバ EigenG に使用されている。CPU ではメモリ律速のために性能向上が難しい行列ベクトル積部分 (SYMV カーネル) が加速されるため、GPU 単体の高い性能と相まって CPU 単体の固有値ソルバの計算に比べて 2.5~3 倍の速度向上が成された。特に、SYMV カーネルの比重が高いハウスホルダー基本変換において類似研究である MAGMA よりも 30%程度高速であることが示されている。

本項目では BLAS よりも上位の数値解法にあたる「帯行列一般化固有値問題」をメニーコアの代表格である Intel MIC プロセッサに実装する研究も実施した。MIC プロセッサを使用した計算は BLAS3 の DGEMM へのオフロードが基本となるが、CPU と MIC を併用するスケジューリングにより実行効率を上げる実装を行っている。本実装は MIC プロセッサの効率的な利用を目指した実験的なものであるが、将来的には API や例外処理、計算精度の確認作業を経て公開する予定である。

3：ペタフロップス環境での性能評価

項目 1) で議論してきたアルゴリズムをペタスケール級スパコンに実装し性能評価しポストペタスケール時代の計算環境に展開する道筋を作ることが本項目の目的である。平成 24 年度まで今村グループのプロジェクト参加メンバーでは Eigen-K という名称で並列固有値ライブラリ開発を進めてきた。京コンピュータさらにはポストペタスケール計算機向けに拡張するという意味で EigenExa と名称を変え平成 25 年 8 月 1 日より理化学研究所計算科学研究機構からソースコード公開を開始した。公開以降は京コンピュータをはじめとして国内外のスーパーコンピュータ上でのテストと性能評価を実施している。報告書執筆時点で動作確認されているアーキテクチャは

1. 京コンピュータ (富士通 PRIMEHPC FX10 ならびに FX100 も含む)
2. インテル x86 系クラスタシステム
3. IBM Blue Gene/Q システム
4. NEC SX-ACE システム

である。これまでの移植経験から大方のクラスタシステムで動作する、もしくは修正は軽微なものと考えている。性能評価は京コンピュータの全系 (663, 552 プロセッサ) を用いて 100 万次元行列の全ての固有値・固有ベクトルを計算したものが最大規模のものになる。計算時間は 1 時間以内、実行時の計算性能は 1.7PFLOPS (理論ピーク性能の約 16%) に達する。この規模の計算は当然、世界最大規模であるとともに、本プロジェクトで開発している固有値ライブラリがエクサスケールでの計算規模において (100 万次元の固有値計算をターゲットサイズとして) Feasible であるとの示唆をするものであり、今後のエクサスケール計算機環境にそのまま、または、何らかの修正を加えた形で EigenExa を提供し続けられる見通しが立ったといえる。また、アルゴリズムの有効性、ハードウェアの長時間耐久性なども同時に測定

することができたと考えられる。

更に、東京大学情報基盤センターの「大規模 HPC チャレンジ」サービスに採択され、Fujitsu PRIMEHPC FX10 システム 4800 ノードを 24 時間使用して EigenExa の詳細な性能測定を実施した。EigenExa に収録されている新規アルゴリズム採用ソルバ（五重対角化版）eigen_sx と従来アルゴリズム採用ソルバ eigen_s の演算時間と通信時間を詳細にプロファイリングし、主要な計算部分に対して特徴（compute intensive か memory access intensive, communication intensive など）を調べ上げて、既存システムから、将来登場する実システムでの性能予測に役立てる試みも実施した。富士通が PRIMEHPC FX10 の後継機として販売している PRIMEHPC FX100 は、プロセッサコア数、メモリバンド幅、ネットワークスループットにおいて増強されているが、大方の計算機としての構成は京コンピュータや FX10 と大きな違いはない。現時点と同規模システムでの導入前事前性能予測を可能にするために、京コンピュータや FX10 で得られた性能測定データとアルゴリズム上の線形計算のパターンから精密な性能モデルを立て、諸性能パラメータを FX100 相当システムでの数値（但し、測定値ではなくカタログや論文で示された数値）に置き換えて、ポストペタスケール級のシステムにおける EigenExa の振る舞いを予測した。速報的な予測結果からは数万から数十万次元規模の問題を扱う場合にはノード内の性能向上がネットワークの性能向上を上回るため、高並列実行では通信オーバーヘッドが顕著になるという妥当な結果が導かれた。今後は研究項目 1) で推進している通信削減や隠蔽技術を取り込んだ実装を進めていくべきとの重要な示唆を得るに至っている。

現在公開中の EigenExa は国内外から 800 件近いダウンロードの記録がある。今村グループが技術協力する関係で認識できる範囲では、以下の国内 8 アプリケーション

1. 東京大学工学研究科押山研究室の密度汎関数法電子状態計算ソフト RSDFT
2. 東京大学生産技術研究所の第一原理擬ポテンシャルバンド計算ソフトウェア PHASE
3. 大阪大学タンパク質研究所中村研究室の生体高分子解析ソフトウェア Platypus-QM/MM
4. 鳥取大学星研究室の電子構造計算コード ELSESES
5. 理化学研究所計算科学研究機構中島チームの計算化学ソフトウェア NTChem
6. 理化学研究所計算科学研究機構三好チームのアンサンブルデータ同化ソフトウェア LETKF
7. 理化学研究所計算科学研究機構小野チームの POD 画像データ圧縮アルゴリズム
8. 東京大学物性研究所坂下達哉研究員の固有値計算インターフェイス Rokko
で使用されている。

4：階層型並列環境に対応した高性能ソフトウェア群の開発

本項目は本研究全体のゴールであるポストペタスケール計算機環境を想定したソフトウェア作成のための各種共通基盤の構築を行うものである。共通基盤的な側面として、固有値計算に特化しないが固有値計算に必要な不可欠な基礎基盤的な役割をなすアルゴリズムについて理論的側面も含めて高性能計算の側面からの研究を進める。研究計画班全体での高性能ソフトウェア群の開発土台となる基盤部分の構築を実施する。

電気通信大学山本グループと連携して、超並列環境下での固有値ソルバの柔軟な利用形態の要望などをまとめ、縦長行列（複数ベクトル群）の直交化に関する通信回避が可能なアルゴリズムに対して、理論面と実装面からの研究を実施した。

縦長行列の直交化について近年 TSQR と呼ばれる手法を元に、分散並列アルゴリズムにおいて通信回避する CAQR アルゴリズムが注目されてきた。アメリカの UC バークレー校の Demmel 氏らを中心にして、通信に関して理論的な解析が進み、CAQR が

分散並列環境で最有力なアルゴリズムであると信じられていた。一方、従来型の HouseholderQR やグラムシュミットの直交化法に基づく方法(古典グラムシュミット CGS, 修正グラムシュミット MGS など)やグラム行列のコレスキー分解を元にする CholesyQR 法が存在している。その中でも CholeskyQR は通信量や計算時間の面で有利な側面を持つものの計算精度に不安定性の問題があった。本研究で, CholeskyQR を複数回実施する CholeskyQR2 を考案し、通信コストは2倍になるものの精度面の不安を解消した(計算精度の解析と保証は山本グループの成果である)。

東京大学情報基盤センターの「大規模 HPC チャレンジ」サービスで、従来型の HouseholderQR と TSQR, CAQR の詳細な性能測定を通じて、行列サイズによって CAQR の性能面での優位性が従来型の HouseholderQR と逆転する可能性が見いだされた。更に TSQR や HouseholderQR, CholeskyQR2 の性能モデリングならびに性能測定を実施することで、「ある条件下では、先駆的なアルゴリズムの最有力と信じられていた TSQR よりも、HouseholderQR や CholeskyQR(CholeskyQR2)が優位な場合がある」との解析結果が得られた。また、TSQR 分解はハウスホルダー変換のブロック化(ブロックリフレクター構成法)に強く関連する内容として注目されている。今後、TSQR 型の手法と CholeskyQR 型の手法を選択的に利用した通信回避型ブロックリフレクター構成アルゴリズムへと展開され EigenExa に組み込まれることが期待されている。

3.3 疎行列向け固有値解析エンジンのための共通基盤技術の開発(名古屋大学 張グループ)

(1)研究実施内容及び成果

[当グループの位置付け]

計算科学に現れる様々な超大規模固有値問題をポストペタスケールの超並列環境で高効率に解くには、階層的な構造を持つアルゴリズムが必要不可欠である。当グループは、非対称や非標準、非線形の困難な問題における領域分割・周回積分・線形方程式求解の各階層に対して、数理的手法重視の高速アルゴリズムの開発を目的としている。

なお、当グループは共通基盤技術(基礎研究)の開発を主としているため、エクサスケールへの貢献度は、原理的に見えにくいものとなっている。つまり、レーシングカーに例えるならば、本研究は超高速な車のエンジンを構成する様々な部品の高性能化に資する研究として位置付けられるためである。(それぞれの部品の性能向上がエンジン性能の向上に非線形的に寄与すると期待される。)

[研究実施方法]

固有値解析エンジンにおける2つのエンジン(疎行列用固有値解法, 密行列用固有値解法)のロバスト化・高速化に資する研究を実施した。

具体的には、疎行列用固有値問題の基本的な解法としてSS法に焦点を当て、SS法の部分問題である線形方程式に着目し、その線形方程式に対するロバスト・高速解法の開発を行った。当グループでは多種多様な実問題に柔軟に対応できる性能を固有値解析エンジンに付加するべく、線形方程式の解法を総合的に開発したことが特長的である。

[研究実施内容・成果]

ロバストな高性能線形計算手法の開発として、以下の成果が挙げられる。

① 非対称線形方程式のロバストな数値解法の開発

Sonneveld空間という巧妙な線形部分空間を利用した解法である IDR(s)法が国際的に著名である。これは、20世紀のトップテンアルゴリズムとして知られるクリロフ部分

空間法(線形部分空間の一種)の空間構造を包含した新型の解法であり、実用上も理論上も興味深い。当グループでは IDR(s)法の数値安定性をさらに向上するべく、残差ノルムに準ずる概念である疑似残差ノルムに着目し、疑似残差ノルムの最小化技法の開発することで、滑らかな収束性を有する解法の開発(QMRIDR(s)法)を行った。これは、SS法の部分問題に現れる複数の線形方程式系の中で、比較的解きにくい方程式であれば、QMRIDR(s)法を用いるという選択肢を与える成果である。

② 複数の右辺ベクトルを有する非対称線形方程式のロバストな数値解法の開発

①で着目した IDR(s)法は1本の非対称線形方程式に対する数値解法である。非対称固有値問題に対するSS法では、その部分問題として複数の右辺ベクトルに対する線形方程式系も高速・高精度に解く必要がある。そこで、IDR(s)法で使用される Sonneveld 部分空間を拡張した Block Sonneveld 部分空間を構築し、構築された部分空間上で近似解行列を得る Block IDR(s)法を提案した。Block IDR(s)法は、ロバストかつ並列環境に適した高速アルゴリズムであるため、非対称固有値問題に対するSS法のロバスト性・高速性に寄与する成果である。

③ 非対称シフト線形方程式系の高速解法の開発

非対称固有値問題におけるSS法では、部分問題として非対称シフト線形方程式とよばれる複数の特殊な n 本の線形方程式系を高速に解く必要がある。本研究では、①や②で着目した IDR(s)法に関して Sonneveld 部分空間のシフト不変性が成立することを明らかにした。IDR(s)法による求解のためには通常 n 種類の Sonneveld 部分空間を生成する必要があるが、この不変性を利用することで原理的に 1 種類の生成で済むという理論を構築し、その理論を基に解法(Shifted IDR(s)法)を開発した。この原理により、計算の主要部である部分空間生成の個所が n 倍高速になるという意味で、高速な解法である。

一方、シフト線形方程式の負のシフト量が固有値に近いときには、収束の遅さが他のシフト量の場合と比べて目立つ。したがって、比較的解きにくい際は、問題を適切に変換(シフト線形方程式の係数行列の固有値分布を変更)した上で①、②の成果を併用することにより、ロバストに求解できると期待される。

④ 複素対称一般化シフト線形方程式

実対称一般化固有値問題に対するSS法では、部分問題として複素対称一般化シフト線形方程式といわれる特殊な線形方程式系を高速に解く必要がある。シフト線形方程式の解法では、③のように Sonneveld 部分空間(クリロフ部分空間)のシフト不変性が有用であるが、一般化シフト線形方程式を基に Sonneveld 部分空間(クリロフ部分空間)を生成すると、シフト不変性が一般に成り立たないことが問題である。そこで、研究実施内容として、一般化シフト線形方程式を、それと等価なシフト線形方程式に帰着した上で、複素対称性という特長を活かした解法を開発した。実問題に対して適用した結果、本解法は複素対称線形方程式用の著名な解法である Block COCG 法と比較して40倍程度高速であることが分かった。

⑤ 単位円周上の固有値問題に対するSS法の拡張

SS法は指定された閉曲線内の固有値・固有ベクトルを効率よく求めることができる解法である。すなわち、単連結領域内の固有値・固有ベクトルを求める解法である。本研究では、より多様な領域である多重連結領域に対しても適用できるようSS法を拡張した。応用例として、単位円周上の固有値問題に対して細いドーナツ型の領域を考えることにより、効率よく固有値・固有ベクトルが抽出できることを検証した。

3.4 密行列向け固有値解析エンジンのための共通基盤技術の開発(電気通信大学 山本グループ)

(1)研究実施内容及び成果

3.4.1 密行列向け固有値計算アルゴリズムの開発

ポストペタスケールマシン上での固有値計算に向けて、量子化学計算などで現れる中規模密行列向けに最適化した超並列固有値計算アルゴリズムと、密行列・疎行列の両方で部品として重要な役割を果たす QR 分解(直交化)アルゴリズムを開発した。以下、それぞれについて述べる。

(1.1) 中規模密行列向けの超並列固有値計算アルゴリズム

実対称密行列の固有値問題は様々な科学技術計算で重要な役割を果たす線形計算であり、ScaLAPACK をはじめとして様々な超並列向けライブラリが開発されている。しかし、そのほとんどは、弱スケーリングでの性能、つまり、ノード数に比例して問題サイズを大きくしていった場合の並列性能に重点が置かれている。一方、量子化学や第一分子動力学などでは、行列は 1 万元程度と中規模だが、時間発展などの繰り返し計算を数万回にわたって行うタイプの問題も存在する。このような問題を高速化するには、行列サイズを固定してノード数を増やしていった場合の並列性能、すなわち強スケーリングの性能が重要となる。ScaLAPACK はこの規模の問題に対する並列性能が低く、たとえば「京」上ではノード数を数百以上にしても、ほとんど実行時間が減少しない。

そこで本グループでは、強スケーリング性能の向上を目標として、ブロックヤコビ法に基づく超並列固有値ソルバの開発を行った。ブロックヤコビ法は、行列をブロックに分割し、複数の非対角ブロックを同時に消去しつつ、行列を対角行列に近づけていく手法である。ScaLAPACK などで行われている 3 重対角化に基づく方法に比べ、計算量は数倍多いものの、通信が大粒度であり、演算パターンが単純であるという特徴を持つ。そのため、通信オーバーヘッドが実行時間の多くを占める強スケーリングの環境では、3 重対角化法に比べて有利となる可能性がある。

そこで、ブロックヤコビ法を MPI を用いて実装し、通信の最適化とノード内での性能最適化を行った。さらに、非対角ブロックの消去順序について、ブロック化ソート順序と名付けた収束性の高い新開発の順序を採用した。「京」上で 1 万ノードまでを使って性能評価を行ったところ、我々が開発したブロックヤコビ法では、1 万元の問題に対して 1 万ノードまで順調な加速が見られた。一方、ScaLAPACK では、100 ノードを越えるとほとんど加速が見られず、600 ノード以上ではかえって遅くなる傾向が見られた。その結果、最短の実行時間は、ScaLAPACK の 7.85 秒に対し、ブロックヤコビ法は 2.68 秒となり、強スケーリングの環境下では後者が有望であることが示された。ブロックヤコビ法は、通信の大粒度性に加えて演算の大部分を Level-3 BLAS で実行可能という特徴も持っており、ポストペタスケールマシンに適した解法だと考えられる。

なお、本プログラムについては、「京」向けの更なる最適化を行った上で、公開の予定である。

(1.2) 大粒度並列性を持つ QR 分解アルゴリズム

縦長行列の QR 分解は、密行列・疎行列両方の固有値計算アルゴリズムで重要な役割を果たす処理である。密行列固有値計算では、前処理である行列の帯行列化においてピボットブロックの QR 分解が必要となる。また、疎行列固有値計算では、CIRR 法における固有ベクトル抽出計算中の特異値分解、およびレゾルベント計算のためのブロッククリロフ部分空間法において QR 分解が必要となる。そこで、縦長行列の QR 分解について、理論と実装の両面から研究を行った。

まず、理論面では、CholeskyQR2 と呼ばれる新しい大粒度並列 QR 分解アルゴリズムの理論誤差解析を行った。CholeskyQR2 は、計算のすべてが level-3 BLAS で構成されてお

り、かつ、アルゴリズム全体での通信が reduce, broadcast 各 1 回のみという優れたアルゴリズムであり、ポストペタスケールマシンに最適である。しかし、このアルゴリズムについて、精度や安定性の面での詳細な解析は行われておらず、実際の使用には不安があった。

そこで本グループでは、CholeskyQR2 に対する詳しい誤差解析を行った。その結果、条件数が 10^8 以下の行列に対しては CholeskyQR2 は安定に適用でき、誤差も従来法に比べて概ね低いことが示された。同アルゴリズムは今村グループにより「京」上の並列実装が行われ、1 万ノード規模での高い並列性能が確認されている。

一方、主に条件数が 10^8 以上の行列への適用に向けて、Langou, Demmel らにより提案された TSQR アルゴリズムの並列実装を行った。本アルゴリズムは、並列性能の面では CholeskyQR2 より劣るが、任意の行列に対して安定に計算を行える利点を持つ。本実装について「京」および東大情報基盤センターの FX10 上で性能評価を行い、良好な加速を確認した。また、本プログラムを、実アプリである RSDFT に組み込み、評価を行った(東京大学 片桐孝洋准教授との共同研究)。

3. 4. 2 性能モデリング・自動チューニング技術の開発

ポストペタスケール向け固有値解法の開発は、ペタスケールの計算機を利用して行う。そのため、精度の高い性能モデルを構築し、性能予測や性能ボトルネックの検出に役立てることが不可欠である。また、固有値計算においては、同じ問題に対して複数のアルゴリズムやアルゴリズム中のパラメータが存在し、それらを問題サイズや計算機環境において自動最適化することが、高性能実行のために不可欠となる。そこで、性能モデリングと自動チューニングに関する研究を行った。以下、それぞれについて述べる。

(1.1) 性能モデリング技術の開発

密行列固有値ソルバのうち、演算時間の主要部分を占める 3 重対角化の部分について、性能モデルを構築した。本モデルは、1 ノードでの演算性能の実測値と、複数ノードでの通信性能の実測値に基づき、複数ノードでの 3 重対角化の実行時間を予測する。「京」上で本モデルの精度を評価したところ、行列サイズが十分大きい場合、3 重対角化処理中の大部分の演算については、10%程度の誤差で実行時間を予測できるという結果が得られた。また、EigenExa で使われている 5 重対角化処理についても、同様の手法に基づき、性能モデルを構築した。両方の性能モデルを用いて「京」上での性能予測を行ったところ、5 重対角化に基づく EigenExa の方が高速であるという結果が得られた。これは実測結果と合致する。

また、QR 分解についても、特に高い数値的安定性を持つハウスホルダー法と TSQR 法の 2 つについて、性能モデリングを行った。その結果、TSQR 法は(行列の横幅の 3 乗) $\times \log_2$ (ノード数)で実行時間が増える部分を持ち、横幅が大きな行列に対しては、従来のハウスホルダー法よりも遅くなる場合があることを見出した。これは実測によっても確認されている。一方が他方より高速になる条件も導出しており、これは、今後のポストペタスケールマシンにおいて、自動チューニングに役立つ知見であると考えられる。

線形計算の性能モデリングに関する研究は多いが、その多くはアルゴリズムの理論的振る舞いを調べるためのモデルであり、本研究のように、計算パターンの違いによる実効性能の違いを含めた精密なモデリングを行っている例は少ない。本研究は、精密なモデリングによる高精度な性能予測という点で、優位に立つと考えられる。

(1.2) 自動チューニング技術の開発

固有値問題における各種性能パラメータの自動最適化に向け、自動チューニング数理基盤ライブラリ ATMathCoreLib の適用を行った。ATMathCoreLib では、プログラムの性能を性能パラメータの関数としてモデル化するが、モデルにおける基底関数の決め方が最適化の効率を大きく左右する。そこで、密行列固有値解法とほぼ同じプログラムの構造を持つ特異値分解について、プログラムの構造に基づく基底関数の適切な選び方を提案し、

これによりパラメータの最適化が効率的に行えることを示した。本結果は、ポストペタスケールマシン上での固有値計算において、問題サイズや計算機環境に応じて最適な手法を自動選択するために直接役立つ。

3.5 基礎科学分野実問題における高性能利用技術の開発(筑波大学 蔵増グループ) (1)研究実施内容及び成果

本グループでは、櫻井グループが中心となって開発する疎行列向け固有値解析エンジンの性能を実アプリケーションを用いて検証し、問題点や改良点を開発者へフィードバックすると同時に、実アプリケーションにおける固有値解析エンジンの高性能利用のための技術開発を行うことを目的とする。実アプリケーションとしては、基礎科学分野における格子QCDを主眼とする。

計算科学において広汎に現れる問題の一つとして、大規模疎行列の固有値の効率的求解があり、格子QCDも例外ではない。格子QCD計算ではWilson-Dirac方程式と呼ばれる大規模疎行列線形方程式を解く必要があり、行列の次元は $N=L_x \times L_y \times L_z \times L_t \times 3 \times 4$ (格子点数と内部自由度の積)で表され、現在の最先端のシミュレーションにおいては $O(10^9)$ 次元程度である。各行は51個の非ゼロ要素しか持たない非エルミートの疎行列である。櫻井グループで開発中の大規模疎行列向け超並列固有値解析エンジンz-Paresは、複素周回積分法を応用したものであり、ターゲットとなる固有値の周りに離散化された積分点を配置し、領域内の固有値とそれに対応する固有ベクトルを求める。格子QCD計算で必要とされる固有値は、原点近傍の数個から数十個に限定される場合が殆どであり、z-Paresの応用に適した例となっている。

本グループの目標は、z-Paresの格子QCD計算への応用であり、具体的には、現在の最先端の格子QCD計算で用いられている2+1フレーバーQCDの物理点での 96^4 格子サイズの配位(モンテカルロサンプル)に対して、「京」を用いて固有値・固有ベクトル対の計算を行うことである。図K-1は、問題サイズ 96^4 の自由な(相互作用なし)Wilsonフェルミオンを用いたテスト計算の結果である。この場合、固有値は解析的に求めることが可能であり、z-Paresを用いて数値的に求めた固有値との比較を行うことが可能である。 κ はフェルミオン質量を表すパラメータであり、Wilson-Dirac行列の性質をコントロールする。緑*シンボルと青*シンボルは原点を中心とした円上の離散化された32個の積分点であり、超並列固有値解析エンジンでは、この円内の固有値と対応する固有ベクトルを求めることができる。解析的に求めた固有値は黒×シンボルで、他方z-Paresを用いて数値的に求めた固有値は赤丸で表されており、両者を比較すると周回積分の領域内で一致していることがわかる。z-Paresによって求められた、固有値・固有ベクトル対の相対精度は 5×10^{-4} 程度である。図K-2は、実際の格子QCD計算で用いられている2+1フレーバーQCDの物理点での 96^4 格子サイズの固有値計算の結果である。原点まわりの周回積分の領域内に4個の固有値が存在していることがわかる。この場合も、得られた固有値・固有ベクトル対の相対精度は 5×10^{-4} 程度である。

以上より、本グループでは、「京」上において現在の最先端の格子QCD計算で用いられている2+1フレーバーQCDの配位を用いてz-Paresの有効性を検証し、実問題における $O(10^9)$ 次元の行列の固有値・固有ベクトル対の求解に成功した。今後の課題としては、積分点でのshifted Wilson-Dirac方程式の解法の更なる高度化およびアルゴリズムパラメータの最適化が挙げられる。また、GPUクラスタやMICクラスタなど異なるアーキテクチャへの計算機への利用拡張も重要である。

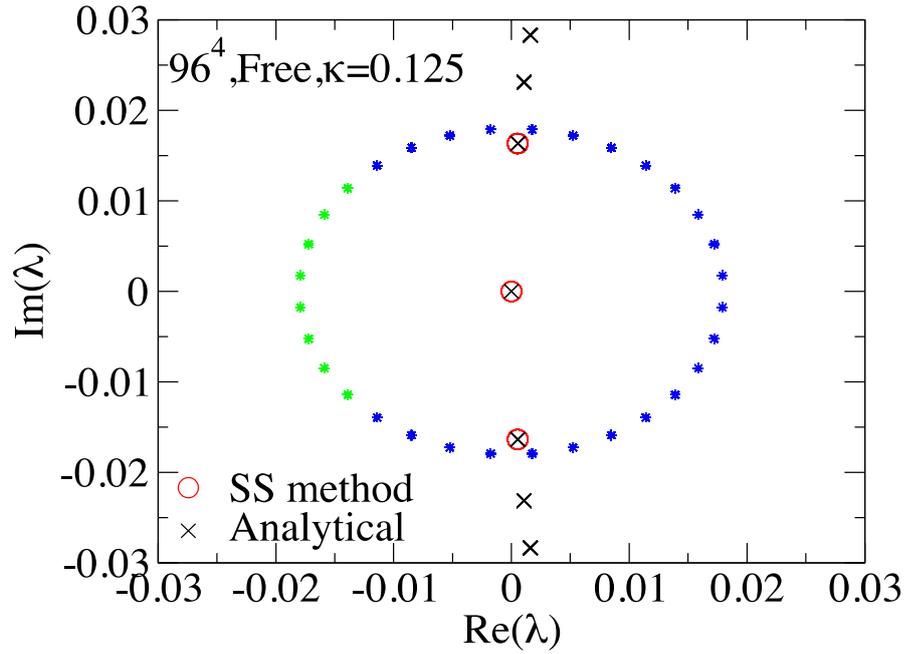


図 K-1:複素平面における原点近傍の自由な(相互作用なし)Wilson-Dirac 行列の固有値。問題サイズは 96^4 、 κ は Wilson-Dirac 行列の性質をコントロールするパラメータ。緑*シンボルと青*シンボルは原点を中心とした円上の離散化された積分点。黒×シンボルは解析的に求められた固有値、赤丸は z-Pares によって数値的に求められた固有値を表す。

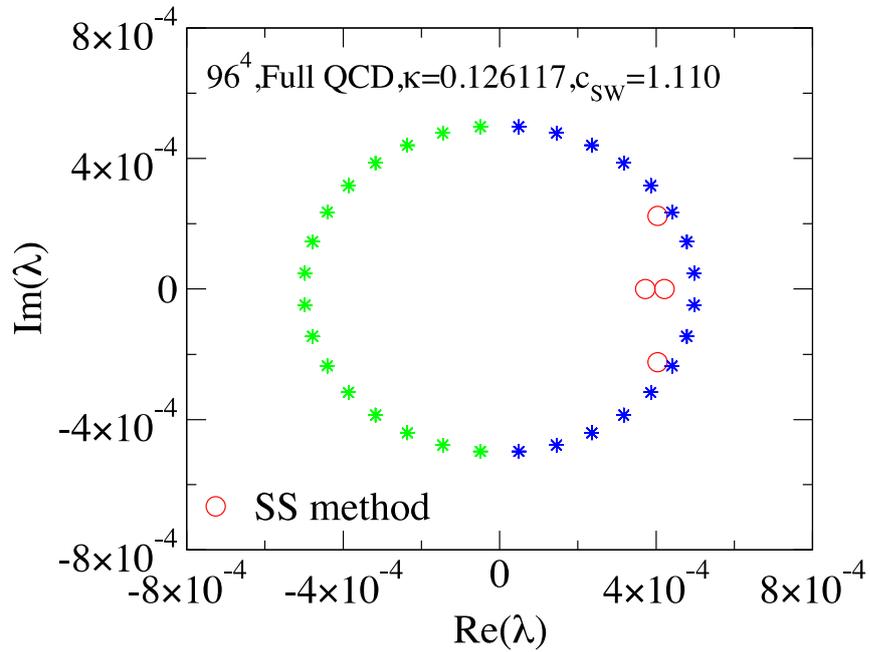


図 K-2:複素平面における原点近傍の 2+1 フレーバー QCD Wilson-Dirac 行列の固有値。問題サイズは 96^4 、 κ および c_{SW} は Wilson-Dirac 行列の性質をコントロールするパラメータ。緑*シンボルと青*シンボルは原点を中心とした円上の離散化された積分点。赤丸は z-Pares によって数値的に求められた固有値。

3. 6 物質科学分野実問題における高性能利用技術の開発(鳥取大学 星グループ)
 (1)研究実施内容及び成果

(1-a) 疎行列型ソルバ・密行列型ソルバの高性能利用技術開発

物質科学分野、特に大規模量子物質シミュレーション(電子状態計算)への応用を目的として、CREST チーム内共同研究を基礎とした疎行列型ソルバ・密行列型ソルバについての高性能利用技術開発を行った。得られたソルバは、独自開発シミュレーター ELSES(<http://www.elses.jp/>)に実装した。密行列ソルバについては、ミニアプリ・ミドルウェアとして公開した((6)成果展開事例①実用化に向けての展開[7])。

疎行列ソルバ・密行列ソルバは、物質科学分野では、相補的に用いられるものであり、応用研究・産業利用波及が可能となった((1-b)項目参照)。

疎行列型ソルバとしては、シフト型線形方程式における反復(クリロフ部分空間)解法を基盤とするオーダー $N(O(N))$ 型ソルバを開発した。物質科学実問題をもちいたベンチマークを行った。京上にて、1 億原子(世界最大、100 ナノメートルスケール、行列次元 $M=$ 約 4 億次元)系計算までが達成され、京全ノードにいたるまでの、高い強スケーリング性が得られた(図 1(a))。疎行列型ソルバは、数理的に設定項目が多いため、これらを自動設定する利用者技術にもとりくみ、産業利用が可能となった((1-b)項目を参照)。また、基盤的数理アルゴリズム研究についての受賞(受賞欄[9])もある。

密行列ソルバとしては、量子物質シミュレーションでもっとも標準的な実対称一般化固有値問題を対象とした、複合化ソルバを開発した。具体的には、今村グループで開発された EigenExa、ヨーロッパで開発された ELPA、ScaLAPACK、の 3 種の複合型ソルバを複合化した。物質科学実問題をもちいたベンチマークを行った。京 1 万ノードまで用いて、行列次元 $M=43$ 万次元でのベンチマークを行った(図 H-1(b))。最も上部の(最も遅い)データが従来ソルバ(ScaLAPACK)であり、他が複合型ソルバである。最速となった複合型ソルバは、EigenExa と ELPA を複合化したソルバであり、従来ソルバより約 4.3 倍高速となった。さらに、世界最大となる $M=100$ 万次元の一般化固有値問題ベンチマークを行い、京全ノードを用いて 2 時間弱(6,051 秒)で完了した。

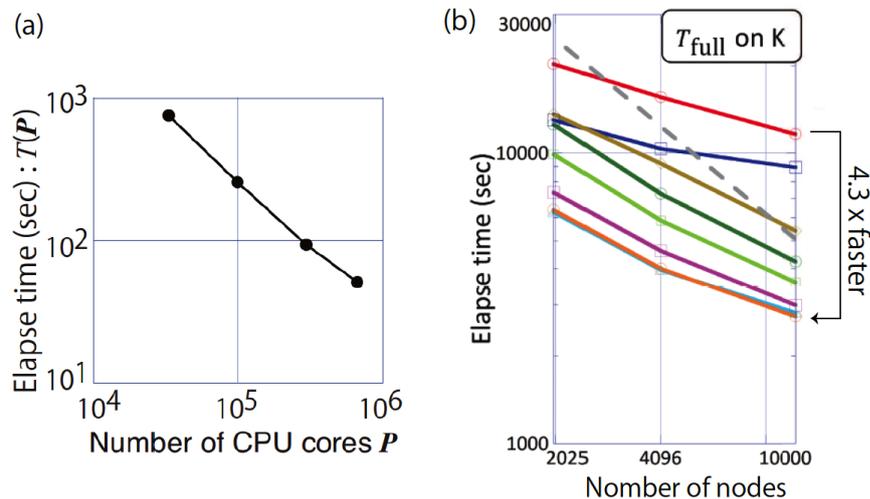


図 H-1 京における強スケーリングベンチマーク。(a) 疎行列型(オーダー N)ソルバのベンチマーク(原著論文[65])。京全体にいたるまでの、約 1 億原子系(世界最大、100 ナノメートルスケール、行列次元 $M=$ 約 4 億)計算。(b) 複合化密行列型ソルバのベンチマーク(原著論文[85])。行列次元 $M=$ 約 43 万。最も上部の(最も遅い)データが従来ソルバ(ScaLAPACK)であり、他が複合型ソルバ。最速複合型ソルバ(EigenExa と ELPA を複合化)は、従来ソルバより約 4.3 倍高速。

(1-b) 物質科学分野での応用研究、ポスト京および産業利用への展望

(1-a)で得られたソルバは、独自開発シミュレーターELSES(<http://www.elses.jp/>)に実装されることで、物質科学分野での応用研究にもちいられ、産業利用へと波及している。産業プロセスにあらわれる物質は、乱れ(disorder)が大きい非理想構造系である。こうした非理想大規模系が扱えるようになることで、スパコン産業利用の促進が期待できる。

現状における主な応用研究を説明する。下記にとりあげた電子波は、大行列固有値ソルバの結果(固有ベクトルの1つ)から計算されるものである;(1) 新しい超強度材料であるナノ多結晶ダイヤモンド(愛媛大入舩教授ら:2012年住友電工が商品化)の形成過程を目的として、 sp^2 - sp^3 ナノ複合カーボン固体研究をおこなった。大規模系計算によりナノドメイン形状可視化解析が可能となった。図 H-2(a)に、ドメイン境界部分に現れる特徴的電子波を示す。(2) 有機デバイス材料における量子電気伝導計算。有機デバイス材料は、ウェアラブルデバイスなど産業への期待が大きく、対応する大規模計算を行った。一部は、住友化学との共同研究である。H27年度より、京一般利用プロジェクトがスタートしている((6)成果展開事例①実用化に向けての展開[8])。図 2(b)に、量子電気伝導計算にあらわれる、準局在 π 電子波を示した。有機高分子デバイス材料における実験と整合する結果を得ており、プレス発表(プレス発表[3])が行われた。(3) (1)(2)以外にも、電池関連物質研究(トヨタとの共同研究)(原著論文[35])がある。

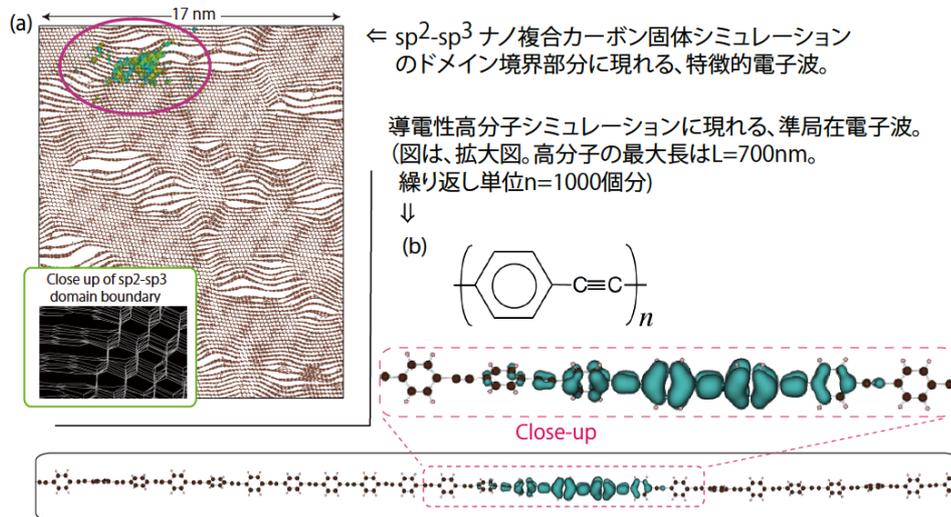


図 H-2 成果物ソルバを利用した、物質科学研究。(a) sp^2 - sp^3 ナノ複合カーボン固体シミュレーション(原著論文[52])。ドメイン境界部分に現れる、特徴的電子波の可視化。(b) 有機高分子デバイス材料(poly-(phenylene-ethynylene))シミュレーション(国内ポスター発表[H4];プレス発表[3];国際会議招待講演[57])量子(波束)ダイナミクスに現れる特徴的準局在 π 電子波の可視化。

展望としては、(1)ポスト京プロジェクト、(2)京産業利用、の2点をあげられる。

- (1) ポスト京プロジェクトとしては、重点課題 6,7 分野への参加(星(鳥取大))がある((6)成果展開事例①実用化に向けての展開[9,10])。これらは、本プロジェクト成果物ソルバを実装した独自量子物質シミュレーターELSESを基礎とした発展である。
- (2) 京産業利用としては、特に化学系メーカーとの共同研究が進行中(詳細は非公開)。

§ 4 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 12件、国際(欧文)誌 80件)

1. Y. Maeda, Y. Futamura and T. Sakurai, "Stochastic estimation method of eigenvalue density for nonlinear eigenvalue problem on the complex plane", *JSIAM Letters*, 3, 61-64, 2011
2. 今村俊幸, "CUDA 環境下での DGEMV 関数の性能安定化・自動チューニングに関する考察", *情報処理学会論文誌コンピューティングシステム*, 4, 4, 158-168, 2011
3. T. Imamura, S. Yamada and M. Machida, "Development of a High Performance Eigensolver on the Peta-Scale Next Generation Supercomputer System", *Progress in Nuclear Science and Technology, the Atomic Energy Society of Japan*, 2, 643-650, 2011
4. L. Du, T. Sogabe, and S.-L. Zhang, "A variant of the IDR(s) method with quasi-minimal residual strategy", *J. Comput. Appl. Math.*, 236, 5, 621-630, 2011, (DOI:10.1016/j.cam.2011.07.027)
5. L. Du, T. Sogabe, B. Yu, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang, "A block IDR(s) method for nonsymmetric linear systems with multiple right-hand sides", *J. Comput. Appl. Math.*, 235, 14, 4095-4106, 2011, (DOI:10.1016/j.cam.2011.02.035)
6. L. Du, T. Sogabe, S.-L. Zhang, "Quasi-minimal residual smoothing technique for the IDR(s) method", *JSIAM Letters*, 3, 13-16, 2011
7. T. Miyata, Y. Yamamoto, T. Uneyama, Y. Nakamura and S.-L. Zhang, "Optimization of the Multishift QR Algorithm with Coprocessors for Non-Hermitian Eigenvalue Problems", *East Asian Journal on Applied Mathematics*, 1, 2, 187-196, 2011, (DOI: 10.4208/eajam.300510.250311a)
8. 山下達也, 宮田考史, 曾我部知広, 星健夫, 藤原毅夫, 張紹良, "一般化固有値問題に対する Arnoldi(M, W, G) 法", *日本応用数学会論文*, 21, 3, 241-254, 2011
9. T. Sogabe and S.-L. Zhang, "An extension of the COCR method to solving shifted linear systems with complex symmetric matrices", *East Asia J. on Appl. Math.*, 1, 97-107, 2011
10. Y. Yamamoto and Y. Hirota, "A parallel algorithm for incremental orthogonalization based on the compact WY representation", *JSIAM Letters*, 3, 89-92, 2011
11. Y. Hirota, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang, "Cache Optimization of a Non-Orthogonal Joint Diagonalization Method", *JSIAM Letters*, 3, 9-12, 2011
12. D. Mori, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang, "Backward error analysis of the AllReduce algorithm for householder QR decomposition", *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 29, 1, 111-130, 2011, (DOI: 10.1007/s13160-011-0053-x)
13. 深谷猛, 山本有作, 張紹良, "動的計画法を用いたブロックハウスホルダ QR 分解アルゴリズムの性能最適化", *情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS)*, 4, 4, 146-157, 2011
14. J. Muramatsu, T. Fukaya, S.-L. Zhang, K. Kimura and Y. Yamamoto, "Acceleration of Hessenberg Reduction for Nonsymmetric Eigenvalue Problems in a Hybrid CPU-GPU Computing Environment", *International Journal of Networking and Computing*, 1, 2, 132-143, 2011
15. H. Toyokawa, K. Kimura, Y. Yamamoto, M. Takata, A. Ajisaka and Y. Nakamura, "On Auto-tuned Pre/postprocessing for the Singular Value Decomposition of Dense Square Matrices", *情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS)*, 4, 3, 9-21, 2011
16. A. Fukuda, Y. Yamamoto, M. Iwasaki, E. Ishiwata and Y. Nakamura, "A Backlund Transformation Between Two Integrable Discrete Hungry Systems", *Physics Letters A*, 375, 3, 303-308, 2011
17. H. Teng, T. Fujiwara, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang and S. Yamamoto, "Efficient and accurate linear algebraic methods for large-scale electronic structure calculations with nonorthogonal atomic orbitals", *Phys. Rev. B*, 83, 165103, 12, 2011,

(DOI:10.1103/PhysRevB.83.165103)

18. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Kohsuke Sumiyoshi and Hideo Matsufuru, "A Parameter Optimization Technique for a Weighted Jacobi-Type Preconditioner", JSIAM Letters, 4, 41-44, 2012
19. Michihiro Naito, Hiroto Tadano and Tetsuya Sakurai, "A modified Block IDR(s) method for computing high accuracy solutions", JSIAM Letters, 4, 25-28, 2012
20. 山本和磨, 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, "非線形固有値問題の固有値密度推定法における適応的並列アルゴリズム", 情報処理学会 ACS 論文誌, 5, 3, 22-29, 2012
21. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, Shinnosuke Furuya and Jun-Ichi Iwata, "Efficient Algorithm for Linear Systems Arising in Solutions of Eigenproblems and its Application to Electronic-Structure Calculations", Proceedings of 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), LNCS 7851, 226-235, 2012
22. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Kohsuke Sumiyoshi and Hideo Matsufuru, "An Auto-Tuning Technique of the Weighed Jacobi-Type Iteration used for Preconditioners of Krylov Subspace Methods", in: IEEE 6th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-12), 183-190, 2012
23. 山本和磨, 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, "非線形固有値問題の固有値密度推定法における適応的並列アルゴリズム", 2012 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム予稿集, 127-134, 2012
24. Toshiyuki Imamura, Susumu Yamada and Masahiko Machida, "A High Performance SYMV Kernel on a Fermi-core GPU", Proceedings of 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), LNCS 7851, 59-71, 2012
25. 今倉暁, 楊濟榮, 曾我部知広, 張紹良, "デフレーション型と Look-Back 型のリスタートを併用した GMRES(m)法の収束特性", 日本応用数学会論文誌, 22, 3, 117-141, 2012
26. Tomohiro Sogabe, Takeo Hoshi, Shao-Liang Zhang and Takeo Fujiwara, "Solution of generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices", J. Comp. Phys, 231, 5669-5684, 2012, (DOI :10.1016/j.jcp.2012.04.046) ?
27. 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良, "非対称線形方程式のための Look-Back GMRES(m)法", 日本応用数学会論文誌, 22, 1, 2012
28. A. Imakura, T. Sogabe and S.-L. Zhang, "An efficient variant of the GMRES(m) method based on the error equations", East Asian Journal on Applied Mathematics, 2, 1, 19-32, 2012, (DOI: 10.4208/eajam.280611.030911a)
29. Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura, "Error analysis for matrix eigenvalue algorithm based on the discrete hungry Toda equation", Numerical Algorithms, 61, 2, 243-260, 2012, (DOI: 10.1007/s11075-012-9606-6)
30. Yusuke Hama, Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura, "On Some Properties of Discrete Integrable System Derived from Hungry Lotka-Volterra System of Multiplicative Type", Journal of Math-for-Industry, 4(A), 5-15, 2012
31. 廣田悠輔, 橋本拓也, 山本有作, "倍精度正方行列特異値分解アルゴリズムの GPGPU 上での性能・精度評価", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), 5, 5, 163-176, 2012
32. 廣田悠輔, 山本有作, 張紹良, "非直交同時対角化アルゴリズムのハイブリッド解法", 日本応用数学会論文誌, 22, 2, 63-79, 2012
33. Yusuke Takahashi, Yusuke Hirota and Yusaku Yamamoto, "Performance of the Block Jacobi Method for the Symmetric Eigenvalue Problem on a Modern Massively Parallel Computer",

- Proceedings of ALGORITMY 2012, 151–160, 2012
34. Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, T. Sakurai and H. Tadano, "Modified block BiCGSTAB for lattice QCD", *Computer Physics Communications*, 183, 1, 34–37, 2012
 35. S. Nishino, T. Fujiwara, H. Yamasaki, S. Yamamoto and T. Hoshi, "Electronic structure calculations and quantum molecular dynamics simulations of the ionic liquid PP13-TFSI", *Solid State Ionics* 225, 22–25, 2012, (DOI :10.1016/j.ssi.2012.01.045)
 36. T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe and S.-L. Zhang, "An order-N electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system", *J. Phys.: Condensed Matter.*, 24, 165502, 5, 2012
 37. Shinnosuke Yokota, Tetsuya Sakurai, "A projection method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals", *JSIAM Letters*, 5, 41–44, 2013
 38. Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura and Hiroto Tadano, "Efficient parameter estimation and implementation of a contour integral-based eigensolver", *J. Alg. Comput. Tech.*, 7, 3, 249–269, 2013
 39. Yuki Nagai, Yasushi Shinohara, Yasunori Futamura, Yukihiro Ota and Tetsuya Sakurai, "Numerical construction of a low-energy effective Hamiltonian in a self-consistent Bogoliubov-de Gennes approach of superconductivity", *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 094701, 2013
 40. 山崎 育朗, 今倉 暁, 多田野 寛人, 櫻井 鉄也, "残差最小性に基づく Krylov 部分空間反復法に対する疎行列用直接解法を用いた前処理のパラメータ推定", *日本応用数理学会論文誌*, 23, 3, 281–404, 2013
 41. Akira IMAKURA, Lei DU, Hiroto TADANO, "A Weighted Block GMRES method for solving linear systems with multiple right-hand sides", *JSIAM Letters*, 5, 65–68, 2013
 42. Akira IMAKURA, Lei DU, Tetsuya SAKURAI, "A block Arnoldi-type contour integral spectral projection method for solving generalized eigenvalue problems", *Applied Mathematics Letters*, 32, 22–27, 2014
 43. Y. Nakatsukasa and N. J. Higham, "Stable and efficient spectral divide and conquer algorithms for the symmetric eigenvalue decomposition and the SVD", *SIAM J. Sci. Comp.* 35, 3, A1325–1349, 2013
 44. Y. Nakatsukasa, N. Saito and E. Woei, "Mysteries around the graph Laplacian eigenvalue 4", *Linear Algebra Appl.* 438, 8, 3231–3246, 2013
 45. T. Yano, Y. Futamura, T. Sakurai, "Multi-GPU scalable implementation of a contour-integral-based eigensolver for real symmetric dense generalized eigenvalue problems", *Proceedings of 8th International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC-2013)*, 121–127, 2013
 46. A. Imakura, T. Sogabe and S.-L. Zhang, "An Efficient Variant of the Restarted Shifted GMRES Method for Solving Shifted Linear Systems", *Journal of Mathematical Research with Applications*, 33, 2, 127–141, 2013
 47. T. Miyata, S. Honda, R. Naito, S.-L. Zhang, "A numerical approach to surface Green's functions via generalized eigenvalue problems", *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 30, 3, 653–660, 2013
 48. D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, "An interior eigenvalue problem from electronic structure calculations", *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 30, 3, 625–633, 2013
 49. Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, "Integrable discrete hungry systems and their related matrix eigenvalues", *Ann. Mat. Pura Appl.*, 192, 423–445, 2013, (DOI: 10.1007/s10231-011-0231-0)
 50. A. Fukuda, Y. Yamamoto, M. Iwasaki, E. Ishiwata and Y. Nakamura, "On a shifted LR transformation derived from the discrete hungry Toda equation", *Monatshefte für Mathematik*, 170, 11–26, 2013

51. 福田亜希子, 岩崎雅史, 山本有作, 石渡恵美子, 中村佳正, "ハングリー型の離散可積分系と非対称行列の固有値計算: 可積分アルゴリズムにおける最近の発展", 日本応用数理学会論文誌, 23, 1, 109-181, 2013
52. T. Hoshi, Y. Akiyama, T. Tanaka and T. Ohno, "Ten-million-atom electronic structure calculations on the K computer with a massively parallel order-N theory", J. Phys. Soc. Jpn, 82, 023710, 4, 2013, (DOI:10.1016/j.cpc.2011.08.010)
53. J. Lankeit, P. Neff and Y. Nakatsukasa, "The minimization of matrix logarithms - on a fundamental property of the unitary polar factor", Linear Algebra Appl. (accepted)
54. F. De Teran, R. Lippert, Y. Nakatsukasa and V. Noferini, "Flanders' theorem for many matrices under commutativity assumptions", Linear Algebra Appl. 443, 120-138, 2014
55. H. Tadano, Y. Ishikawa, A. Imakura, "Improvement of the accuracy of the approximate solution of the Block BiCR method", JSIAM Letters, 6, 61-64, 2014
56. S. Saito, H. Tadano, A. Imakura, "Development of the Block BiCGSTAB(l) method for solving linear systems with multiple right hand sides", JSIAM Letters, 6, 65-68, 2014
57. A. Imakura, "An Efficient Algorithm to Construct an Orthonormal Basis for the Extended Krylov Subspace", East Asian Journal on Applied Mathematics, 4, 3, 267-282, 2014
58. T. Imamura, S. Yamada, M. Machida, "Eigen-G: GPU-based eigenvalue solver for real-symmetric dense matrices", Proceedings of PPAM 2013, LNCS8384/8385, 2014, (to appear)
59. S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, "Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models", Advances in Parallel Computing, 25, (to appear)
60. Takeshi Fukaya, Toshiyuki Imamura and Yusaku Yamamoto, "Performance Analysis of the Householder-type Parallel Tall-Skinny QR Factorizations toward Automatic Algorithm Selection", Proceedings of the Ninth International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT2014), 1-8, 2014, (山本グループとの共同の成果)
61. Takeshi Fukaya, Yuji Nakatsukasa, Yuka Yanagisawa and Yusaku Yamamoto, "CholeskyQR2: A Simple and Communication-Avoiding Algorithm for Computing a Tall-Skinny QR Factorization on a Large-Scale Parallel System", Proceedings of Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA), 31-38, 2014, DOI: 10.1109/ScalA.2014.11, (山本グループとの共同の成果)
62. L. Du, T. Sogabe, and S.-L. Zhang, "An algorithm for solving nonsymmetric penta-diagonal Toeplitz linear systems", Applied Mathematics and Computation, 244, 10-15, 2014
63. Takumi Yamashita, Kinji Kimura and Yusaku Yamamoto, "A new subtraction-free formula for lower bounds of the minimal singular value of an upper bidiagonal matrix", Numerical Algorithms, 2014, (DOI: 10.1007/s11075-014-9931-z)
64. Yusaku Yamamoto, Zhang Lan, Shuhei Kudo, "Convergence analysis of the parallel classical block Jacobi method for the symmetric eigenvalue problem", JSIAM Letters, 6, 57-60, 2014
65. Takeo Hoshi, Keita Yamazaki, Yohei Akiyama, "Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom electronic structure calculation on the K computer", JPS Conf., 1, 016004, 4, 2014, (DOI: 10.7566/JPSCP.1.016004)
66. T. Hoshi, T. Sogabe, T. Miyata, D. Lee, S.-L. Zhang, H. Imachi, Y. Kawai, Y. Akiyama, K. Yamazaki, S. Yokoyama, "Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom quantum material simulations on the K computer", PoS(IWCSE2013), 065, 13 pp., 2014
67. Lijiong Su, Akira Imakura, Hiroto Tadano and Tetsuya Sakurai, "Improving the convergence behaviour of the BiCGSTAB method by applying D-norm minimization", JSIAM Letters, 7, 37-40, 2015
68. Yasuyuki Maeda, Yasunori Futamura, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "Filter analysis for the stochastic estimation of eigenvalue counts", JSIAM Letters, 7, 53-56, 2015

69. Xiucui Ye and Tetsuya Sakurai, "Spectral clustering using robust similarity measure based on closeness of shared Nearest Neighbors", 2015 International Joint Conference on Neural Networks, 1-8, 2015
70. Xiucui Ye and Tetsuya Sakurai, "Spectral Clustering Using Robust Similarity Measure Based on Closeness of Shared Nearest Neighbors", Proceeding of the International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), 1-8, 2015
71. 廣田 悠輔, 今村 俊幸, "帯行列の一般化固有値問題向け分割統治法", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, 8, 4, 78-87 2015
72. Takeshi Fukaya, Toshiyuki Imamura and Yusaku Yamamoto, "Performance Analysis of the Householder-type Parallel Tall-Skinny QR Factorizations toward Automatic Algorithm Selection", High Performance Computing for Computational Science -- VECPAR 2014, LNCS 8969, 269-283, 2015, (山本グループとの共同の成果)
73. T. Fukaya and T. Imamura, "Performance Evaluation of the Eigen Exa Eigensolver on Oakleaf-FX: Tridiagonalization Versus Pentadiagonalization", Proceedings of the Parallel and Distributed Processing Symposium Workshop (IPDPSW, PDSEC 2015), 960-969, 2015
74. T. Imamura, T. Fukaya, Y. Hirota, S. Yamada, M. Machida, "CAHTR: Communication-Avoiding Householder Tridiagonalization", post-Proceedings of ParCo2015, (to appear)
75. S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, "High Performance Eigenvalue Solver in Exact-diagonalization Method for Hubbard Model on CUDA GPU", post-Proceedings of ParCo2016, (to appear)
76. L. Du, T. Sogabe, and S.-L. Zhang, "IDR(s) for solving shifted nonsymmetric linear systems", J. Comput. Appl. Math., 274, 1, 35-43, 2015
77. J. Jia, T. Sogabe, and S. Li, "A generalized symbolic Thomas algorithm for the solution of opposite-bordered tridiagonal linear systems", J. Comput. Appl. Math., 290, 423-432, 2015
78. C. Luo, Z. Hu, S.-L. Zhang, and Z. Jiang, "Adaptive space transformation: An invariant based method for predicting aerodynamic coefficients of hypersonic vehicles", Engineering Applications of Artificial Intelligence, 46, 93-103, 2015
79. Sho Araki, Kinji Kimura, Yusaku Yamamoto and Yoshimasa Nakamura, "Implementation details of an extended oqds algorithm for singular values", JSIAM Letters, 7, 9-12, 2014
80. Y. Yamamoto, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa and T. Fukaya, "Roundoff error analysis of the CholeskyQR2 algorithm", Electronic Transactions on Numerical Analysis, 44, 306-326, 2015
81. Sonomi Kakizaki, Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura, "Conserved quantities of the integrable discrete hungry systems", Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S, 8, 5, 889-899, 2015
82. Masato Shinjo, Masashi Iwasaki, Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Yusaku Yamamoto, Yoshimasa Nakamura and Kok Lay Teo, "An asymptotic analysis for an integrable variant of the Lotka-Volterra prey-predator model via a determinant expansion technique", Cogent Mathematics, 2, 1, 1046538, 2015
83. Ryo Sumikura, Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, "Eigenvalue computation of totally nonnegative upper Hessenberg matrices based on a variant of the discrete hungry Toda equation", Proceedings of the International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics 2014 (ICNAAM-2014), 1648, 690006
84. H. Suno, Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, Y. Futamura, A. Imakura and T. Sakurai, "Eigenspectrum Calculation of the Non-Hermitian $O(a)$ -Improved Wilson-Dirac Operator using the Sakurai-Sugiura Method", Proceedings of Science(LATTICE2015), 026,

2015, (櫻井グループとの共同の成果)

85. H. Imachi and T. Hoshi, "Hybrid numerical solvers for massively parallel eigenvalue computation and their benchmark with electronic structure calculations", J. Inf. Process. 24, 164-172, 2016
86. Akira Imakura, Lei Du, Tetsuya Sakurai, "Error bounds of Rayleigh--Ritz type contour integral-based eigensolver for solving generalized eigenvalue problems", Numerical Algorithms, 71, 1, 103-120, 2016
87. Xiucui Ye, Kaiyang Ji and Tetsuya Sakurai, "Unsupervised Feature Selection with Correlation and Individuality Analysis", International Journal of Machine Learning and Computing (IJMLC), 6, 1, 36-41, 2016
88. Xiucui Ye and Tetsuya Sakurai, "Robust Similarity Measure for Spectral Clustering Based on Shared Neighbors", ETRI Journal, (accepted)
89. Tetsuya Hasegawa, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "Recovering from accuracy deterioration in the contour integral-based eigensolver", JSIAM Letters, 8, 1-4, 2016
90. Xiucui Ye, Kaiyang Ji and Tetsuya Sakurai, "Spectral clustering and discriminant analysis for unsupervised feature selection", Proceeding of the European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning (ESANN 2016), (accepted)
91. Xiucui Ye, Kaiyang Ji and Tetsuya Sakurai, "Global Discriminant Analysis for Unsupervised Feature Selection with Local Structure Preservation", Proceeding of the Florida Artificial Intelligence Research Society Conference (FLAIRS-29), (accepted)
92. Y. Yamamoto, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa and T. Fukaya, "Roundoff error analysis of the CholeskyQR2 algorithm in an oblique inner product", JSIAM Letters, 8, 5-8, 2016

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 23 件、国際会議 34 件)

1. T. Sakurai, "Scilab for mathematical education and high performance computing", European pole of competence in high performance simulation TERATEC 2011, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France, June 29, 2011
2. Takafumi Miyata, "Jacobi-Davidson Type Methods for Eigenvalue Problem", International Workshop on Numerical Linear Algebra and Its Applications -20th NLA seminar-, Shanghai, China, Jul. 2011
3. 張紹良, 宮田考史, "多重連結領域内の固有値計算に対する一つの試み", 大規模計算コロキウム, 岐阜, 2011 年 9 月 8-9 日
4. 星健夫, "電子状態計算から見た自動チューニングへの期待", 日本応用数理学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 14-16 日
5. S.-L.Zhang and T. Miyata, "A Projection Approach Based on the Residue Theorem for Generalized Eigenproblems within a Multiply Connected Domain", Center of Mathematical Modeling and Scientific Computing, Chiao Tung University, Taiwan, Sep. 15, 2011
6. S.-L.Zhang and T. Sogabe, "Iterative Solutions of Large Nonsymmetric Linear Systems "---, Two Attempts to Improve Bi-CG ---"", Taida Institute for Mathematical Sciences National, National Taiwan University, Taipei, Sep. 16, 2011
7. S.-L.Zhang, A. Imakura and T. Sogabe, "Look-Back GMRES(m) for Solving Nonsymmetric Linear Systems", Department of Mathematics, National Taiwan University, Taipei, Sep. 19, 2011

8. S.-L.Zhang, T. Miyata, T. Sogabe and T. Yamashita, "An Arnoldi(M, W, G) Approach for Generalized Eigenvalue Problems", National Center of Theoretical Science & Department of Mathematics, National Cheng Kung University, Tainan, Sep 20, 2011
9. S.-L.Zhang, A. Imakura and T. Sogabe, "Look-Back GMRES(m) for Solving Nonsymmetric Linear Systems", Department of Mathematics, National Sun Yat-sen University, Gaoxiong, Sep. 21, 2011
10. S.-L.Zhang, T. Miyata, T. Sogabe and T. Yamashita, "An Arnoldi-like Approach for Generalized Eigenvalue Problem", The 8th International Conference on Numerical Optimization and Numerical Linear Algebra, Xiamen, China, Nov. 7-11, 2011
11. 櫻井鉄也, "大規模並列環境向けの固有値解析ソフトウェア開発", 第3回自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム, 東京大学小柴ホール, 2011年12月5日
12. S.-L.Zhang, A. Imakura and T. Sogabe, "GMRES(m) method with Look-Back restart for solving nonsymmetric linear systems", the 2011 Workshop on Scientific Computing, Macau, December 10-12, 2011
13. 多田野寛人, "超大規模並列環境における大規模疎行列に対する固有値解法と線形計算技術の開発", 2012年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 名古屋大学豊田講堂シンポジオンホール, 2012年1月25日
14. 今村俊幸, "京コンピュータに向けた密行列固有値ソルバーの開発について", 2012年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 名古屋大学豊田講堂シンポジオンホール, 2012年1月25日
15. T. Hoshi, T. Sogabe, S. Yamamoto, S. Nishino, T. Fujiwara, S.-L. Zhang and Y. Yamamoto, "Novel linear-algebraic theories in large-scale electronic structure calculation and its application to nano-materials", Dresden-Kobe Joint Workshop on Electronic Simulations for Nanosystems, Kobe University, Japan, March 7, 2012
16. 星健夫, "超大規模電子状態計算の基礎と応用", 自然科学研究機構「非平衡を制御する科学」研究会, 鳥取大学, 2012年3月19-20日
17. T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, "Krylov subspace methods for solving generalized shifted linear systems", International Workshop on Computational Science and Numerical Analysis, The University of Electro-Communications, Tokyo, Japan, March 24-26, 2012
18. S.-L. Zhang, A. Imakura and T. Sogabe, "Look-Back GMRES(m) for solving large nonsymmetric linear system", Numerical Linear Algebra --- Algorithms, Applications, and Training, an NOW-JSPS joint seminar, Delft, Apr. 10-13, 2012
19. 山本和磨, 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, "非線形固有値問題の固有値密度推定法における適応的並列アルゴリズム", 第12回先進スーパーコンピューティング環境研究会, 東京大学情報基盤センター, 2012年4月25日
20. Y. Kuramashi, "1+1+1 Flavor QCD+QED Simulation at the Physical Point", Workshop on 「New Horizons for Lattice Computations with Chiral Fermions」, Brookhaven National Laboratory, New York, USA, May 14-18, 2012
21. Y. Kuramashi, "Lattice QCD ? From Quarks to Nuclei ?", 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR2012), Kobe, Japan, July 17-20, 2012
22. T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, "Numerical methods for generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices", 4th China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, Otsu, Japan, Aug. 26, 2012
23. T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang, Y. Akiyama and T. Ohno, "Ten-million-atom electronic structure calculations with novel linear-algebraic algorithm and the K computer", International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka University Hall, Osaka, Japan, Oct. 11-13, 2012

24. 星健夫, "超大規模電子状態計算における Application-Algorithm-Architecture Co-design", 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 14 回研究会, 筑波大学, 2012 年 11 月 20 日
25. S.-L. Zhang, D. Lee, T. Miyata and T. Sogabe, "An intermediate eigenvalue problem in electronic structure calculation", The 4th Workshop on Numerical Algebra and High Performance Computation, Macau, Dec. 8-10, 2012
26. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Kohsuke Sumiyoshi and Hideo Matsufuru, "A Parameter Tuning Technique of a Weighted Jacobi-Type Preconditioner and its Application to Supernova Simulations", Symposium: `Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2012)', Nara Prefectural New Public Hall, Japan, Dec. 13-16, 2012
27. 星健夫, "超大規模電子状態計算における Application-Algorithm-Architecture Co-design", 第 3 回産業科学研究所共同研究研究会, メープル有馬, 2013 年 2 月 10-11 日
28. 今倉暁, 櫻井鉄也, 住吉光介, 松古栄夫, "大規模連立一次方程式に対する高並列前処理技術について", 宇宙磁気流体・プラズマシミュレーションワークショップ --WS2013--, 千葉大学, 2013 年 2 月 18-19 日
29. 星健夫, 曾我部知広, 宮田考史, 張紹良, "数学・計算材料科学・HPC 分野の融合としての大行列数理アルゴリズム", 計算材料科学と数学の協働によるスマート材料デザイン手法の探索, 東北大学, 2013 年 3 月 13-15 日
30. Y. Nakatsukasa and S. Guettel, "Efficient Scaling and Squaring Method for Computing the Matrix Exponential", Advances in Matrix Functions and Matrix Equations, Manchester, UK, April 10-12, 2013
31. T. Hoshi, "Novel Krylov-subspace algorithms for generalized shifted linear equations and ultra-large-scale quantum mechanical nano material simulation on the K computer", The 9th East Asia SIAM Conference The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics (EASIAM-CIAM 2013), Bandung, Indonesia, Jun. 2013
32. Takeo Hoshi, "Krylov subspace theories and ultra-large-scale electronic state calculations on the K computer", The 9th East Asia SIAM Conference The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics (EASIAM-CIAM 2013), Institut Teknologi Bandung, Bandung, West Java, Indonesia, Jun. 18-20, 2013
33. 今村俊幸, "Roadmap to Eigensolver on a GPU-cluster", GTC Japan 2013, 東京工業大学, 2013 年 7 月 30 日
34. Takeo Hoshi, Tomohiro Sogabe, Takafumi Miyata, and Shao-Liang Zhang, "Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom quantum material simulations on the K computer", The First International Workshop on Computational Science and Engineering, National Taiwan University Taipei, Taiwan, Oct. 14-17, 2013
35. 今村俊幸, "大規模並列固有値ソルバー～京での現状からエキサまで～", 今後の HPC(基盤技術と応用) に関するワークショップ, 長崎市図書館, 2013 年 12 月 8-9 日
36. T. Sakurai, "A Scalable Parallel Eigensolver using Contour Integral-based Spectral Projection", 2013 NCTS Workshop on Numerical Linear Algebra and High Performance Computing (2013 NLA-HPC), National Tsinghua University, Hsinchu, Taiwan, Dec. 9-12, 2013
37. T. Miyata, "Riccati Method for PageRank", 2013 NCTS Workshop on Numerical Linear Algebra and High Performance Computing (2013 NLA-HPC), National Tsinghua University, Hsinchu, Taiwan, Dec. 9-12, 2013
38. Y. Yamamoto, "A Nonlinear Eigenvalue Problem Arising in Theoretical Fluid Dynamics and Its Solution Using Signed Singular Values", 2013 NCTS Workshop on Numerical Linear Algebra and High Performance Computing (2013 NLA-HPC) National Tsinghua University, Hsinchu, Taiwan, Dec. 9-12, 2013
39. 星健夫, "数学・計算物質科学・HPC 分野の融合としての超大規模電子状態計算", 物性研

- スパコン共同利用・CMSI 合同研究会, 東京大学, 2013 年 12 月 10-13 日
40. 藏増嘉伸, "PACS-CS Project and beyond", 新学術領域「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」のまとめと今後を語る研究会, 鳴子温泉, 2013 年 12 月 20 日-21 日
 41. 今村俊幸, "数値線形計算に現れる通信削減アルゴリズムについて", 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第 16 回研究会, 東京大学, 2013 年 12 月 26 日
 42. 山本有作, "エクサフロップス時代に向けた線形計算アルゴリズムの課題と研究動向", 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 東京大学, 2013 年 12 月 26 日
 43. 星健夫, "京での超大規模量子物質シミュレーションとクリロフ部分空間", 日本応用数学会三部会連携「応用数理解セミナー」東京大学, 2013 年 12 月 27 日
 44. Y. Nakatsukasa and R. W. Freund, "Using Zolotarev's high-order rational approximations for computing the polar, symmetric eigenvalue and singular value decompositions", Householder symposium 2014, Spa, Belgium, Jun 8-13, 2014
 45. Y. Nakatsukasa, "Perturbed eigenvalue problems: beyond first-order approximation", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA 2014), Tsukuba, Japan, March 8, 2014
 46. Y. Nakatsukasa and F. Tisseur, "Eigenvector error bounds and perturbation for nonlinear eigenvalue problems", Workshop on Nonlinear Eigenvalue Problems, Manchester, UK, April 25, 2014
 47. Toshiyuki Imamura, "The EigenExa Library ? High Performance & Scalable Direct Eigensolver for Large-Scale Computational Science", International Supercomputing Conference (ISC' 14), Leipzig, Germany, June 22-26, 2014
 48. Yusaku Yamamoto, "A Nonlinear Eigenvalue Problem Arising in Theoretical Fluid Dynamics and Its Solution Using Signed Singular Values", The Fifth China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, Yinchuan City, Ningxia Province, China, August 25-28, 2014
 49. 星健夫, 井町宏人, "京での 100 ナノ電子状態計算とその展望", 東京大学物性研究所計算物質科学研究センター 第 4 回シンポジウム, 東京大学, 2014 年 11 月 12-14 日
 50. Takeo Hoshi, Hiroto Imachi, "Krylov subspace theories and one-hundred-million-atom electronic structure calculations on the K computer", International Symposium on Computics Quantum Simulation and Design (ISC-QSD-2014), University of Tokyo, Tokyo, Japan, 1-3. Dec. 2014
 51. 深谷猛, "高性能計算におけるコレスキーQR分解", 第 12 回計算数学研究会, かんぼの宿, 焼津, 2014 年 12 月 26-28 日
 52. 星健夫, 井町宏人, "「京」での 1 億原子電子状態計算 ~物質科学と数理科学の接点として~", 第3回 CMSI 人材育成シンポジウム「応用数理解と計算科学の連携II」, 大阪大学(配信), 2015 年 1 月 15 日
 53. 廣田悠輔, 深谷猛, 今村俊幸, "固有値ソルバの現状とポストペタスケール環境に向けた展望", Cyber HPC Symposium, 大阪大学銀杏会館, 2015 年 3 月 20 日
 54. 今村俊幸, "数値計算ライブラリ開発における コデザインについて", 第7回筑波大学計算科学研究センターシンポジウム, 筑波大学, 2015/10/20
 55. T. Sakurai, "A Scalable Parallel Eigensolver for Large-scale Simulations on Post Peta-scale Computing Environments", International Workshop on Software for Peta-Scale Numerical Simulation SPNS2015, Tokyo, Japan, December 4, 2015
 56. T. Sakurai, A Scalable Parallel Eigensolver for Large-scale Simulations on Next-generation Computing Environments, The first annual meeting of applied mathematics: Frontier aspects of applied mathematics, Taipei, Taiwan, December 7, 2015
 57. T. Hoshi, "Massively parallel electronic structure calculations and transport property of organic materials", Computational Chemistry Symposium of 12th International Conference of

Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2016), Athens, Greece, 17–20.
Mar. 2016

② 口頭発表 (国内会議 172 件、国際会議 94 件)

1. Y. Nakamura, "Modified Block BiCGSTAB for Lattice QCD", The XXIX International Symposium on Lattice Field Theory, Squaw Valley, California, USA, July 10–16, 2011
2. 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, "非線形固有値問題における複素平面上での大域的固有値分布推定", 第 40 回数値解析シンポジウム, 鳥羽シーサイドホテル, 2011 年 6 月 22 日
3. L. Du, T. Sogabe, S.-L. Zhang, "A variant of the IDR(s) method with quasi-minimal residual strategy", The 7th East Asia SIAM Conference & RIMS Workshop on Methods in Industrial and Applied Mathematics, Waseda University, Kitakyushu Campus, Kitakyushu, Fukuoka, Japan, June 27–29, 2011
4. T. Miyata, L. Du, T. Sogabe, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang, "A Projection Approach to Complex Eigenvalues of a Specified Absolute Value", The 7th East Asia SIAM Conference & RIMS Workshop on Methods in Industrial and Applied Mathematics, Waseda University, Kitakyushu Campus, Kitakyushu, Fukuoka, Japan, June 27–29, 2011
5. T. Fukaya, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang, "Automatic Performance Tuning for the Blocked Householder QR Algorithm", Automatic Performance Tuning for the Blocked Householder QR Algorithm, Waseda University, Kitakyushu Campus, Kitakyushu, Fukuoka, Japan, June 27–29, 2011
6. Y. Hirota, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang, "Cache optimization of a non-orthogonal joint diagonalization method", International Workshop on Numerical Linear Algebra and Its Applications, Tongji University, Shanghai, China, June 30–July 4, 2011
7. 宮田考史, "大規模固有値問題の数値解法", 東京大学数値解析セミナー, 東京, 2011 年 7 月
8. 櫻井鉄也, "大規模固有値問題の並列解法とその応用", HPCI 戦略プログラム 分野2×分野5 異分野交流研究会, 筑波大学筑波キャンパス, 2011 年 7 月 26 日
9. 内藤理大, 櫻井鉄也, 多田野寛人, "IDR(s)法における残差停滞の回避方法について", 2011 年並列/分散/協調処理に関する『鹿児島』サマー・ワークショップ (SWoPP 鹿児島 2011), かごしま県民交流センター, 2011 年 7 月 27 日
10. 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良, "Restarted Shifted GMRES 法の収束の安定化に向けての試み", 2011 年並列/分散/協調処理に関する『鹿児島』サマー・ワークショップ (SWoPP 鹿児島 2011), かごしま県民交流センター, 2011 年 7 月 27–29 日
11. T. Hoshi, S. Nishino, Y. Zempo, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang and M. Ishida, "Large-scale electronic structure calculation with ELSEs and its application to conjugated polymer", Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII), Waseda, Tokyo, Japan, Sep. 2–8, 2011
12. 今村俊幸, "GPGPU で数値計算ソフトウェアはどこまで加速するか", 大規模計算コロキウム, 岐阜市文化産業交流センターじゅうろくプラザ, 2011 年 9 月 8 日
13. 山本和磨, 櫻井鉄也, "量子ドットシミュレーションにおける多項式固有値問題の並列解法", 日本応用数理学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 14 日
14. 古庄菜紀, 櫻井鉄也, "非線形固有値問題に対する TDS Arnoldi-SS ハイブリッド解法", 日本応用数理学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 14 日
15. 白砂溪, 櫻井鉄也, "周回積分を用いた固有値解法の耐障害性について", 日本応用数理学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 14 日
16. 内藤理大, 櫻井鉄也, 多田野寛人, "IDR(s) 法における残差停滞の回避方法について", 日本応用数理学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 14 日

17. 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良, "Restarted Shifted GMRES 法の収束の振る舞いに関する考察 -- 収束の安定化に向けて --", 日本応用数学会 2011 年度年会, 同志社大学, 2011 年 9 月 14-16 日
18. 山本有作, "TSQR アルゴリズムで生成されるコンパクト WY 表現の合成について", 日本応用数学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 14 日
19. 今村俊幸, 山田進, 町田昌彦, "ポストペタ時代の超並列固有値ソルバー開発", 日本応用数学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 15 日
20. 今村俊幸, "大規模計算における Eigen シリーズの応用と可能性", 第 4 回大規模計算ワークショップ ~ マルチプラットフォームの大規模数値シミュレーションを支援するフレームワークの構築 ~, 理化学研究所和光キャンパス, 2011 年 9 月 21 日
21. 西野信也, 藤原毅夫, 山崎久嗣, 山本智, 山元進, 星健夫, "イオン液体/リチウム塩電解質の量子分子動力学シミュレーション", 日本物理学会, 富山大学, 2011 年 9 月 21-24 日
22. I. Yamazaki, H. Tadano, T. Sakurai, "A parameter selection for a preconditioner using a cutoff for Krylov subspace methods", ASE 研究会, 東京大学情報基盤センター, 2011 年 10 月 13 日
23. 西野信也, 藤原毅夫, 山崎久嗣, 山本智, 山元進, 星健夫, "Li₄GeS₄ の量子分子動力学シミュレーション", 第 52 回電池討論会, 東京, 2011 年 10 月 17-20 日
24. 櫻井鉄也, "次世代スーパーコンピュータの性能を引き出す計算アルゴリズムデザイン", コンピュータサイエンス特別シンポジウム「数値解析ソフトウェアの発祥と発展? 研究と教育への応用」, 筑波大学筑波キャンパス, 2011 年 10 月 20 日
25. 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良, "シフト線形方程式に対するリスタート付き Krylov 部分空間法", RIMS 研究集会「科学技術計算における理論と応用の新展開」, 京都大学 数理解析研究所, 2011 年 10 月 25-27 日
26. 山本有作, "ハウスホルダー変換に基づく直交化法の最近の進展 ~ 並列計算・高性能計算の観点から ~", 京都大学数理解析研究所研究集会, 京都大学, 2011 年 10 月 25 日
27. 櫻井鉄也, "耐障害性を考慮した大規模並列環境向けの固有値解法", RIMS 研究集会「科学技術計算における理論と応用の新展開」, 京都大学数理解析研究所, 2011 年 10 月 26 日
28. 山崎育朗, 多田野寛人, 櫻井鉄也, "Cutoff を用いた前処理のパラメータ選択", 並列固有値解析研究会, 伊香保温泉旅館 よろこびの宿しん喜, 2011 年 11 月 4 日
29. 山田進, 今村俊幸, 町田昌彦, "密度行列繰り込み群法の大規模並列化: 超並列計算機向きの通信手法の提案", 並列固有値解析研究会, 渋川市, 2011 年 11 月 4 日
30. 今村俊幸, 山田進, 町田昌彦, "ポストペタスケール環境向け再帰的階層化固有値計算アルゴリズムのための実装技術", 並列固有値解析研究会, 渋川市, 2011 年 11 月 4 日
31. 多田野寛人, "高精度近似解を生成する Block Krylov 部分空間反復法とその安定化", 第 1 回計算力学シンポジウム, 日本学術会議, 2011 年 11 月 11 日
32. S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, "Parallelization Design for Multi-core Platforms in Density Matrix Renormalization Group toward 2-D Quantum Strongly-correlated Systems", ACM/IEEE the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Seattle WA, USA, Nov. 17, 2011
33. 今倉暁, 櫻井鉄也, "減速定常反復型前処理付き Krylov 部分空間法のための減速パラメータ推定法", 行列・固有値研究部会第 12 回研究会, 国立情報学研究所, 2011 年 11 月 21 日
34. 廣田悠輔, 山本有作, 張紹良, "非直交同時対角化アルゴリズムのハイブリッド戦略についての検討", 日本応用数学会「行列・固有値の解法とその応用」研究部会 第12回研究会, 国立情報学研究所, 2011 年 11 月 21 日
35. 今倉暁, 櫻井鉄也, 住吉光介, 松古栄夫, "超新星爆発計算のための減速 Jacobi 型前処理", 研究会「素核宇融合による計算基礎物理学の進展」, 三重県志摩市合歓の郷, 2011 年 12 月 3-5 日
36. 西野信也, 藤原毅夫, 山崎久嗣, 山本智, 山元進, 星健夫, "Li₄GeS₄, Li₃PS₄ 中 Li イオンのダイナミクス: 第一原理電子構造計算および長時間(ns)タイトバインディング分子動力学

- 計算を用いた解析”, 第 37 回固体イオニクス討論会, 鳥取, 2011 年 12 月 7-9 日
37. 山本和磨, 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, “非線形固有値問題の固有値密度推定法における適応的並列アルゴリズム”, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2012), 名古屋大学豊田講堂シンポジオンホール, 2012 年 1 月 26 日
 38. T. Imamura, “ASPEN-K2: Automatic-tuning and Stabilization for the Performance of CUDA BLAS Level 2 Kernels”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Hyatt Regency Savannah, Savannah, USA, Feb. 15, 2012
 39. S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, “Dynamical Variation of Eigenvalue Problems in Density-Matrix Renormalization-Group Code abstract”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Hyatt Regency Savannah, Savannah, USA, Feb. 15, 2012
 40. Y. Hirota, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang, “Cache optimization of a non-orthogonal joint diagonalization method”, SIAM Conference on Parallel Processing 2012, Hyatt Regency Savannah, Savannah, USA, Feb. 15-17, 2012
 41. T. Sakurai, H. Tadano, Y. Futamura, “z-Pares: A complex moment based parallel sparse eigenvalue solver package”, International Workshop on Computational Science and Numerical Analysis, The University of Electro-Communications, Japan, March 25, 2012
 42. 横田真之介, 櫻井鉄也, “非線形固有値問題への周回積分を用いた射影法の適用”, 日本応用数理学会 2012 年, 研究部会連合発表会「行列・固有値問題の解法とその応用」, 九州大学伊都キャンパス, 2012 年 3 月 8 日
 43. 山本有作, “丸め誤差があっても破綻しない dqds 法向け修正型一般化 Newton シフト”, 日本応用数理学会研究部会連合発表会, 九州大学伊都キャンパス, 2012 年 3 月 8 日
 44. 廣田悠輔, 橋本拓也, 山本有作, “倍精度正方行列特異値分解アルゴリズムの GPGPU 上での性能・精度評価”, 日本応用数理学会研究部会連合発表会, 九州大学伊都キャンパス, 2012 年 3 月 8 日
 45. 多田野寛人, 櫻井鉄也, “高精度近似解を生成する Block Krylov 部分空間反復法とその応用”, 2011 年度【プラズマ-壁相互作用シミュレーション解析に関する研究会】非線形解析部門研究会, 自然科学研究機構核融合科学研究所, 2012 年 3 月 13 日
 46. T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, “Krylov subspace methods for solving generalized shifted linear systems”, International Workshop on Computational Science and Numerical Analysis, The University of Electro-Communications, Japan, Mar. 24, 2012
 47. 星健夫, 川居 佳史, 秋山洋平, “超大規模電子状態計算における π 状態ナドメインの可視化解析”, 日本物理学会, 関西学院大学, 2012 年 3 月 24-27 日
 48. 西野信也, 藤原毅夫, 山崎久嗣, 山本智, 山元進, 星健夫, “Li₄GeS₄, Li₃PS₄ における Li イオンのダイナミクス: 第一原理電子構造計算および長時間(ns)タイトバインディング分子動力学計算を用いた解析”, 日本物理学会, 関西学院大学, 2012 年 3 月 24-27 日
 49. T. Imamura, “High-performance eigensolver on K-computer system”, International Workshop on Computational Science and Numerical Analysis, The University of Electro-Communications, Tokyo, Japan, March 26, 2012
 50. 近藤大貴, 吉田剛啓, 田村遼也, 今村俊幸, “自動チューニングによる通信最適化を施した固有値ソルバの開発について”, 第 133 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 有馬ビューホテルうらら, 2012 年 3 月 27 日
 51. 廣田悠輔, 橋本拓也, 山本有作, “GPGPU 向け倍精度正方行列特異値分解アルゴリズムの高速化”, 日本計算工学学会 第 17 回計算工学講演会, 東京大学, 2012 年 5 月 29-31 日
 52. 今村俊幸, 山田進, 町田昌彦, “Eigen-Exa: ポストベタ スケール環境での 密行列固有値ソルバ開発”, 第 17 回計算工学学会講演会, 京都教育文化センター, 2012 年 5 月 30 日
 53. Toshiyuki Imamura, Susumu Yamada and Masahiko Machida, “Eigen-K: high performance eigenvalue solver for symmetric matrices developed for K computer”, 7th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA2012), London, UK, Jun. 2012

54. Dongjin Lee, Takafumi Miyata, Tomohiro Sogabe, Takeo Hoshi, Shao-Liang Zhang, "Eigenvalue Computation for a Specific Need Arising from Electronic Structure Calculation", The 8th East Asia SIAM Conference (EASIAM 2012), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Jun. 2012
55. Akira IMAKURA, Tomohiro SOGABE and Shao-Liang ZHANG, "On Convergence Behavior of the GMRES(m) Method with a Hybrid Restart Technique", The 8th East Asia SIAM Conference (EASIAM 2012), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Jun. 2012
56. T. Miyata, T. Sogabe, S.-L. Zhang, "Jacobi-Davidson Type Methods Using a Shift Invariance Property of Krylov Subspaces for Eigenvalue Problems", SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Valencia, Spain, Jun. 2012
57. Y. Yamamoto, "Aggregation of the Compact WY Representations Generated by the TSQR Algorithm", 2012 SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Universitat Politècnica de València, Valencia, Spain, June 18-22, 2012
58. Kazuma Yamamoto, Yasuyuki Maeda, Yasunori Futamura and Tetsuya Sakurai, "A scalable parallel method for large scale nonlinear eigenvalue problems", SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, Spain, Jun. 20, 2012
59. Lei Du, Tetsuya Sakurai, Hiroto Tadano and Michihiro Naito, "IDR(s) for linear systems with multiple shifts and multiple right-hand sides", The 8th East Asia SIAM Conference, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Jun. 25-27, 2012
60. Yusuke Hirota and Yamamoto Yamamoto, "An Acceleration of Backward Transformation of Singular Vectors on a CPU and GPU Heterogeneous Environment", Parallel Matrix Algorithms and Applications 2012, Birkbeck University of London, London, UK, June 28-30, 2012
61. Yasuyuki Maeda, Yasunori Futamura and Tetsuya Sakurai, "Effective resource utilization for a contour integral based parallel eigensolver", 7th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Birkbeck University of London, UK, Jun. 29, 2012
62. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, Shinnosuke Furuya and Jun-Ichi Iwata, "Efficient algorithm for solving linear systems arising from a sparse eigensolver", 7th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Birkbeck University of London, UK, Jun. 30, 2012
63. Toshiyuki Imamura, Susumu Yamada and Masahiko Machida, "A High Performance SYMV Kernel on a Fermi-core GPU", 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), Kobe, Japan, July 2012
64. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, Shinnosuke Furuya and Jun-Ichi Iwata, "Efficient Algorithm for Linear Systems Arising in Solutions of Eigenproblems and its Application to Electronic-Structure Calculations", 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science, Kobe, Japan, July 20, 2012
65. 今村俊幸, 吉田剛啓, 田村遼也, 近藤大貴, 山田進, 町田昌彦, "マルチコアを考慮した通信隠蔽手法の自動チューニング機能付き高性能固有値ソルバの開発", 2012年並列/分散/協調処理に関する『鳥取』サマー・ワークショップ(SWoPP 鳥取 2012), とりぎん文化会館, 2012年7月25日
66. Dongjin Lee, Takafumi Miyata, Tomohiro Sogabe, Takeo Hoshi, Shao-Liang Zhang, "On intermediate eigenvalue problems in computational materials science", 4th China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, Otsu City, Shiga Prefecture, Japan, Aug. 2012
67. 星健夫, 山元進, 曾我部知広, 藤原毅夫, 張紹良, 大野隆央, "一般化クリロフ部分空間法と大規模電子状態計算への応用", 並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ(SWoPP), とりぎん文化会館, 2012年8月1-3日
68. 祖平明夫, "ノイズ画像に対する複素モーメントを用いたエッジ検出", 第2回協定講座シンポジウム「計算科学 次代を担う若手の集い」, 神戸大学, 2012年8月23日

69. Lei Du, Yasunori Futamura and Tetsuya Sakurai, "Conjugate gradient type methods for computing the block bilinear form CHA-1B", 日本応用数学会 2012 年度 年会, 北海道 稚内全日空ホテル, 2012 年 8 月 28 日-9 月 2 日
70. 深谷猛, 山本有作, 張紹良, "SMP 上での並列 QR 分解に対する自動チューニングの検討", 日本応用数学会 2012 年度年会, 稚内全日空ホテル, 2012 年 8 月 28 日-9 月 2 日
71. 廣田悠輔, 山本有作, "CPU-GPU ヘテロジニアス環境向け特異値分解アルゴリズムの高速化", 日本応用数学会 2012 年度年会, 稚内全日空ホテル, 2012 年 8 月 28 日-9 月 2 日
72. 内藤理大, 多田野寛人, 櫻井鉄也, "Block IDR(s)法における残差停滞の回避方法について", 日本応用数学会 2012 年度年会, 稚内全日空ホテル, 2012 年 8 月 29 日
73. 前田恭行, 櫻井鉄也, "周回積分を用いた固有値解法における計算資源の効率的利用", 日本応用数学会 2012 年度年会, 稚内全日空ホテル, 2012 年 8 月 29 日
74. 今村俊幸, 山田進, 町田昌彦, "ポスト・ペタスケール時代の密固有値計算ソルバについて", 日本応用数学会 2012 年度年会, 稚内全日空ホテル, 2012 年 8 月 31 日
75. 矢野貴大, "複素対称行列を対象とした Real valued 解法について", 2012 年度数値解析研究集会, 少年自然の家 八ヶ岳荘, 2012 年 9 月 8 日
76. 前田恭行, "周回積分を用いた固有値解法における計算資源の効率的利用", 2012 年度数値解析研究集会, 少年自然の家 八ヶ岳荘, 2012 年 9 月 8 日
77. 星健夫, 秋山洋平, 大野隆央, "並列化大規模電子状態計算によるナノ構造シミュレーション", 日本物理学会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月 18-21 日
78. T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, "Numerical methods for generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices", International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka University Hall, Osaka, Japan, Oct. 11, 2012
79. Lei Du, Yasunori Futamura and Tetsuya Sakurai, "Conjugate gradient type methods for the approximation of block bilinear form CHA-1B", The 4th International Conference on Numerical Algebra and Scientific Computing, Dalian University of Technology, Dalian, China, Oct. 20-24, 2012
80. 今倉 暁, 櫻井 鉄也, 住吉 光介, 松古 栄夫, "重み付き定常反復型前処理のためのパラメータ最適化手法および超新星爆発計算における有効性", RIMS 研究集会「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, 京都大学 数理解析研究所, 2012 年 10 月 23-25 日
81. 宮田考史, 張紹良, "指定された絶対値を有する複素固有値の計算について", RIMS 研究集会「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, 京都, 2012 年 10 月 23-25 日
82. 今村俊幸, 山田進, 町田昌彦, "京コンピュータに向けた大規模固有値ソルバーの開発", 京都大学数理解析研究所 RIMS 研究集会「科学技術計算における理論と応用の新展開」, 京都大学数理解析研究所, 2012 年 10 月 26 日
83. 二村保徳, 櫻井鉄也, "櫻井・杉浦法における shifted Krylov 部分空間反復法の応用", 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第 14 回研究会, 筑波大学, 2012 年 11 月 20 日
84. 前田恭行, 櫻井鉄也, "大規模固有値問題に対する固有値分布推定について", 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第 14 回研究会, 筑波大学, 2012 年 11 月 20 日
85. 星健夫, "超大規模電子状態計算コード ELSESES の紹介 -- NIMS ソフトウェアとの連携研究可能性 --", NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2012, 学術総合センター, 2012 年 11 月 20 日
86. 深谷猛, "ハウスホルダーQR 分解の数値計算アルゴリズムと高性能計算のための工夫", 一橋大学 第 14 回「数理解析セミナー」, 一橋大学国立キャンパス, 2012 年 11 月 21 日
87. 山田進, 佐々成正, 今村俊幸, 町田昌彦, "4 倍精度基本線形代数ルーチン群 QPBLAS の紹介とアプリケーションへの応用", 第 194 回計算機アーキテクチャ・第 137 回ハイパフォーマンスコンピューティング合同研究発表会 (HOKKE-20), 北海道大学情報基盤センター, 2012 年

12月14日

88. 深谷猛, "TSQR アルゴリズムに基づく QR 分解の並列計算に対する自動チューニング", 2012 年 若手の会 単独研究集会, 東京大学情報基盤センター, 2012 年 12 月 26 日
89. Tomohiro Sogabe, Shao-Liang Zhang, "An iterative method for solving complex symmetric generalized shifted linear systems with multiple right-hand sides", 4th International Conference of Matrix Analysis and Applications (ICMAA2013), Dedeman Konya Hotel & Convention Center, Konya, Turkey, 2013
90. Lei Du, Tetsuya Sakurai, Hiroto Tadano and Yasunori Futamura, "A parallel eigensolver package based on contour integral methods", Mini-Symposium on High Performance Eigenvalue solver, RIKEN AICS, 2013 年 1 月 25 日
91. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, Shinnosuke Furuya and Jun-Ichi Iwata, "Density Functional Electronic Band Structure Calculations with a Complex Moment Based Eigensolver", SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Boston, MA, USA, Feb. 25, 2013
92. Takeshi Fukaya, Toshiyuki Imamura and Yusaku Yamamoto, "Performance Modeling of the Eigen-K Dense Eigensolver on Massively Parallel Machines", SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE13), The Westin Boston Waterfront, Boston, USA, Feb. 25-Mar. 1, 2013
93. Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura, Lei Du and Hiroto Tadano, "A Hierarchical Parallel Implementation of a Contour Integral-based Eigensolver on Trilinos", SIAM conference on Computational Science and Engineering, Boston, MA, USA, Feb. 27, 2013
94. Yasuyuki Maeda, Yasunori Futamura and Tetsuya Sakurai, "Parameter Auto-tuning for a Contour Integral based Eigensolver using Stochastic Estimation of Eigenvalue Count", SIAM conference on Computational Science and Engineering, Boston, MA, USA, Feb. 27, 2013
95. Lei Du, Akira Imakura and Tetsuya Sakurai, "Simultaneous Band Reduction of Two Symmetric Matrices", 日本応用数理学会 2013 年研究部会連合発表会, 東洋大学白山キャンパス, 2013 年 3 月 14-15 日
96. 前田恭行, 櫻井鉄也, "ゲルシュゴリン集合の非線形固有値問題への拡張", 日本応用数理学会 2013 年研究部会連合発表会, 東洋大学, 白山キャンパス, 2013 年 3 月 14 日
97. Takeshi Fukaya and Yusaku Yamamoto, "Performance Evaluation and Tuning of Tall Skinny Type QR Factorization on the K Computer", 2013 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High Performance Scientific Computing, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Mar. 27-29, 2013
98. S. Iwata, Y. Nakatsukasa and A. Takeda, "Global optimization methods for extended Fischer discriminant analysis", AISTATS 2014, Reykjavik, Iceland, Apr. 22-24, 2013
99. 李東珍, 宮田考史, 星健夫, 張紹良, "中間固有値問題とその数値解法", 数値解析シンポジウム, 「四国道後館」愛媛県松山市, 2013 年 6 月
100. Dongjin Lee, Takafumi Miyata, Takeo Hoshi, Shao-Liang Zhang, "An interior eigenvalue problem and its numerical solution", The 9th East Asia SIAM Conference & The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics, The Newton Hotel, Bandung, West Java, Indonesia, Jun. 2013
101. Y. Yamamoto, "An Algorithm for the Nonlinear Eigenvalue Problem based on the Contour Integral", International Linear Algebra Society 2013 Meeting, The Crown Plaza Providence-Warwick, Warwick, USA, June 3-7, 2013
102. Lei DU, Akira IMAKURA, Tetsuya SAKURAI, "Band Reduction for a Pair of Symmetric Matrices with Applications", 第 42 回数値解析シンポジウム -NAS2013-, 四国道後館, 2013 年 6 月 12-14 日
103. 今倉 暁, 杜 磊, 櫻井 鉄也, "一般化固有値問題に対する周回積分射影法の新しい解釈について", 第 42 回数値解析シンポジウム -NAS2013-, 四国道後館, 2013 年 6 月 12-14 日

104. 李東珍, 宮田考史, 星健夫, 張紹良, “中間固有値問題とその数値解法”, 数値解析シンポジウム, 「四国道後館」愛媛県松山市, 2013 年 6 月 12-14 日
105. 深谷猛, 山本有作, “超並列環境における縦長行列の QR 分解に対する種々の計算方法の性能比較”, 第 42 回数値解析シンポジウム(NAS2013), 松山市道後温泉「道後館」, 2013 年 6 月 12-14 日
106. Yasunori Futamura and Tetsuya Sakurai, “Conjugate gradient type methods for shifted linear systems with multiple right hand sides”, The 9th East Asia SIAM Conference, The Newton Hotel Bandung, Bandung, West Java, Indonesia, Jun. 18--20, 2013
107. Lei DU, Akira IMAKURA, Tetsuya SAKURAI, “Band Reduction for Two Dense Symmetric Matrices via Congruence Transformation”, The 9th East Asia SIAM Conference – The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics, The Newton Hotel, Bandung, West Java, Indonesia, June 18-29, 2013
108. Akira IMAKURA, Lei DU, Tetsuya SAKURAI, “A Novel Interpretation for the Contour Integral-Based Spectral Projection Methods for Solving Generalized Eigenvalues Problems”, The 9th East Asia SIAM Conference – The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics, The Newton Hotel, Bandung, West Java, Indonesia, June 18-29, 2013
109. D. Lee, T. Miyata, T. Hoshi, S.-L. Zhang, “An interior eigenvalue problem and its numerical solution”, The 9th East Asia SIAM Conference & The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics, The Newton Hotel, Bandung, West Java, Indonesia, Jun. 18-20, 2013
110. 今村俊幸, 山田進, 町田昌彦, “O(メガ)コア級超並列固有値ソルバの自動チューニングによる戦略”, 第 18 回計算工学会講演会, 東京大学生産技術研究所, 2013 年 6 月 19-21 日
111. 深谷猛, 山本有作, “超並列環境における縦長行列の QR 分解に対する自動チューニングの研究”, 第 18 回計算工学講演会, 東京大学生産技術研究所, 2013 年 6 月 19-21 日
112. T. Sogabe, S.-L. Zhang, “An iterative method for solving complex symmetric generalized shifted linear systems with multiple right-hand sides”, 4th International Conference of Matrix Analysis and Applications (ICMAA2013), Dedeman Konya Hotel & Convention Center, Konya, Turkey, Jul. 2-5, 2013
113. 李東珍, 宮田考史, 曾我部知広, 星健夫, 張紹良, “電子構造計算に現れる固有値問題の数値解法について”, コンピューティクスによる物質デザイン: 複合相関と非均衡ダイナミクス, 東京大学, 2013 年 7 月 8-9 日
114. 星健夫, 秋山洋平, “超大規模超並列電子状態計算を中核とした物理・数理・HPC の融合研究”, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 5 回シンポジウム, THE GRAND HALL, 2013 年 7 月 11-12 日
115. Takeo Hoshi, Keita Yamazaki, Yohei Akiyama, “Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom electronic structure calculation on the K computer”, The 12th Asia Pacific Physics Conference (APPC12), Makuhari Messe, Chiba, Japan, Jul. 14-19, 2013
116. Yoshinobu Kuramashi, “2+1 Flavor Lattice QCD Simulation K Computer”, The 31st International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013), Mainz, Germany, Jul.29 – Aug.3, 2013
117. 今倉 暁, 杜 磊, 櫻井 鉄也, “周回積分型固有値解法に対する Block Krylov 部分空間に基づく新解釈”, 2013 年並列/分散/協調処理に関する『北九州』サマー・ワークショップ (SWoPP 北九州 2013), 北九州国際会議場, 2013 年 7 月 31 日-8 月 2 日
118. 廣田悠輔, 今村俊幸, “帯行列の一般化固有値問題向け分割統治法”, 2013 年並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ (SWoPP 2013), 北九州国際会議場, 2013 年 7 月 31 日-8 月 2 日
119. 二村保徳, 櫻井鉄也, “周回積分を用いた並列固有値解法に基づく固有値解析エンジンの実装”, 並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ, 北九州国際会議場, 2013 年 7 月 31 日-8 月 2 日
120. 前田恭行, Claus Aranha, 櫻井鉄也, “固有値分布推定による周回積分を用いた並列固有値

- 解法パラメータ自動設定”, 並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ, 北九州国際会議場, 2013年8月1日
121. 深谷猛, 今村俊幸, 山本有作, “超並列環境における密行列計算プログラムの性能モデリングに向けた検討”, 2013年並列/分散/協調処理に関する『北九州』サマー・ワークショップ (SWoPP 北九州 2013), 北九州国際会議場, 2013年7月31日-8月2日
 122. 今倉 暁, “線形方程式の数値解法と科学技術計算への応用”, 2013年度 数値線形代数研究集会, 東京理科大学, 大子研修センター, 2013年8月28日-30日
 123. 矢野貴大, “周回積分を用いた実対称密一般化固有値問題解法の GPU ライブラリによる並列実装”, 数値線形代数研究集会(NLAW2013), 東京理科大学大子研修センター, 2013年8月28日-30日
 124. 近藤翔太郎, 張紹良, “劣決定系線形方程式に対する数値解法”, 数値解析・最適化 研究集会, 愛知県青年の家(愛知県岡崎市), 2013年9月3-4日
 125. 西澤慶亮, 宮田考史, 張紹良, “マルチシフト QR 法の GPU 向けの改良”, 数値解析・最適化 研究集会, 愛知県青年の家(愛知県岡崎市), 2013年9月3-4日
 126. T. Imamura, S. Yamada, M. Machida, “Eigen-G: GPU-based eigenvalue solver for real-symmetric dense matrices”, 10th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM2014), Warsaw, Poland, Sep. 8-11, 2013
 127. 二村保徳, 櫻井鉄也, “周回積分を用いた固有値解法に基づく並列固有値解析エンジン”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月9-11日
 128. 多田野 寛人, 石川 陽一, 今倉 暁, “双共役残差型反復解法の複数右辺ベクトル対応版への拡張と性能評価”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月9-11日
 129. Lei DU, Akira IMAKURA, Tetsuya SAKURAI, “Reducing Two Symmetric Matrices to Band Form by Congruence Transformations”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月9-11日
 130. 中務佑治, “スペクトル分割統治法による固有値分解”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月9-11日
 131. 深谷猛, 今村俊幸, 山本有作, “京コンピュータにおける対称密行列向け固有値計算プログラムの性能評価と性能予測”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月9-11日
 132. 工藤 周平, 高橋 佑輔, 深谷 猛, 山本 有作, “ブロックヤコビ法に基づく固有値解法の超並列計算機上での実装”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月9-11日
 133. 星健夫, “京コンピュータにおける超大規模量子物質シミュレーション”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月9-11日
 134. S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, “Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models”, International Conference on Parallel Computing (ParCo2013), Munich, Germany, Sep. 10-13, 2013
 135. 長島 聖児, 深谷 猛, 山本 有作, “オンライン自動チューニング数理基盤ライブラリ ATMathCoreLib の特異値分解問題への適用”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月9-11日
 136. 前田恭行, Claus Aranha, 櫻井鉄也, “周回積分を用いた並列固有値解法に対するパラメータ設定について”, 日本応用数理学会 2013年度年会, アクロス福岡, 2013年9月11日
 137. 今倉 暁, “拡張 Krylov 部分空間に対する2ステップ基底生成法”, 第2回岐阜数理科学研究会, 飛騨高山まちの博物館, 2013年9月16-18日
 138. 星健夫, 秋山洋平, “京コンピュータにおける超大規模電子状態計算”, 日本物理学会, 徳島大学, 2013年9月25-28日
 139. 矢野貴大, “周回積分を用いた密一般化固有値問題解法の GPU ライブラリによる並列実装”, 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻 協定講座 第五回協定講座シンポジウム, 神戸大学統合研究拠点 コンベンションホール, 2013年9月30日

140. Lei DU, Akira IMAKURA, Tetsuya SAKURAI, "Simultaneous Band Reduction of Two Symmetric Matrices and its Applications", RIMS 研究集会「応用数理論と計算科学における理論と応用の融合」, 京都大学 数理解析研究所, 2013 年 10 月 15-17 日
141. 中務佑治, "スペクトル分割統治法による固有値分解", RIMS 研究集会:応用数理論と計算科学における理論と応用の融合, 京都大学益川ホール, 2013 年 10 月 15 日
142. Y. Maeda, "Parallel stochastic estimation method of eigenvalue density for nonlinear eigenvalue problems", International Workshop on Computer Science and Technology 2013, Zhejiang University, China, Oct. 26, 2013
143. T. Yano, Y. Futamura, T. Sakurai, "Multi-GPU scalable implementation of a contour-integral-based eigensolver for real symmetric dense generalized eigenvalue problems", 8th International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC-2013), Compiègne, France, Oct. 28-30, 2013
144. 廣田悠輔, "一般化固有値問題向け分割統治法とその帯行列向け拡張について", 第 11 回計算数学研究会, ブランナールみささ, 2013 年 11 月 2-4 日
145. 深谷猛, 山本有作, 今村俊幸, "大規模並列環境における縦長行列の QR 分解の性能評価", 第 11 回計算数学研究会, ブランナールみささ, 2013 年 11 月 2 日-4 日
146. 今倉 暁, 二村 保徳, 櫻井 鉄也, "周回積分型固有値解法に基づく並列固有値解析ソフトウェア", 今後の HPC(基盤技術と応用) に関するワークショップ, 長崎市図書館, 2013 年 12 月 8-9 日
147. 今倉 暁, 杜 磊, 櫻井 鉄也, "周回積分型固有値解法に対する精度解析", 日本応用数理論学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第 16 回研究会, 東京大学, 2013 年 12 月 26 日
148. 深谷猛, 山本有作, 今村俊幸, "グラム・シュミットの直交化に基づく TSQR アルゴリズムとその性能評価", 日本応用数理論学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第 16 回研究会, 東京大学, 2013 年 12 月 26 日
149. 今倉 暁, "疎行列向け直接解法に基づく定常反復法および前処理としての有効性", 環瀬戸内応用数理論研究部会 第 17 回シンポジウム, 愛媛大学, 2014 年 1 月 11-12 日
150. 今倉 暁, 杜 磊, 櫻井 鉄也, "Rayleigh-Ritz 法に基づく周回積分型固有値解法の精度解析", Kunitachi One-Day Symposium on Applied Mathematics and Related Topics, 一橋大学国立キャンパス, 2014 年 2 月 5 日
151. Yasunori Futamura and Tetsuya Sakurai, "A Hierarchical Parallel Software Package of a Complex Moment Based Eigensolver", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Marriott Portland Downtown Waterfront, Portland, Oregon, USA, Feb. 18-21, 2014
152. T. Imamura, Y. Hirota, "Communication Avoiding-hiding and Auto-tuning for Extreme-scale Eigensolver", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP14), Portland, Oregon, USA, Feb. 17-21, 2014
153. T. Fukaya, T. Imamura, Y. Yamamoto, "A Performance Model based Approach to Auto-tuning Tall and Skinny QR Factorizations", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (SIAM PP14), Portland, Oregon, USA, Feb. 18-21, 2014
154. 田村遼也, 今村俊幸, 仲谷栄伸, "GPU への完全オフロード化による TSQR の高速化に関する研究", 第 143 回情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会 (HPC143), 和倉温泉「あえの風」, 2014 年 3 月 3-4 日
155. J. Charles, M. Povolotskyi, Y. He, Y. Maeda, D. Lemus, T. Kubis, G. Klimeck, T. Sakurai, "Applications of Eigenvalue Solvers in Nanoelectronic Device Modeling", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba, Japan, Mar. 7
156. T. Fukaya, Y. Yamamoto, T. Imamura, "A Communication-Avoiding Algorithm for the Gram-Schmidt Orthogonalization", 2014 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in

- High Performance Scientific Computing (2014 ATAT in HPSC), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Mar. 14-15, 2014
157. Toshiyuki IMAMURA, Takeshi Fukaya, Yusuke Hirota, Susumu Yamada, Masahiko Machida,, "Numerical Eigenvalue Engine towards Extreme-scale Computing Era", SIAM 2015 Conference on Computational Science and Engineering (CSE15), Salt Lake City, Utah, USA, Mar.14-18, 2015
 158. 西村 恒希, 今倉 暁, 櫻井 鉄也, "Adaptive Smoothed Aggregation マルチグリッド前処理の流体計算への適用", 第 10 回 日本応用数学会 研究部会連合発表会, 京都大学, 2014 年 3 月 19-20 日
 159. 蘇 黎炯, 今倉 暁, 櫻井 鉄也, "BiCGSTAB 法に対する残差の D ノルム最小化手法の適用", 第 10 回 日本応用数学会 研究部会連合発表会, 京都大学, 2014 年 3 月 19-20 日
 160. 齋藤 周作, 多田野 寛人, 今倉 暁, "Block BiCGSTAB(l)法の構築と安定化", 第 10 回 日本応用数学会 研究部会連合発表会, 京都大学, 2014 年 3 月 19-20 日
 161. 廣田悠輔, 今村俊幸, "一般化固有値問題向け分割統治法の secular 方程式の数値解法について", 第 10 回日本応用数学会研究部会連合発表会, 京都大学, 2014 年 3 月 19-20 日
 162. 星健夫, 秋山洋平, 山崎溪太, 横山誠也, "アモルファス状共役高分子系の超大規模電子状態計算", 日本物理学会, 東海大学, 2014 年 3 月 27-30 日
 163. 深谷猛, "通信削減型 QR 分解アルゴリズムと自動チューニング", 第 9 回 AT 研究会オープンアカデミックセッション(ATOS9), 東京都, 2014 年 5 月 12 日
 164. 片桐孝洋, 高山恒一, 米村崇, 熊洞宏樹, 猪貝光祥, 北上純一, 江口義之, 深谷猛, 山本有作, 岩田潤一, 内田和之, 大島聡史, 中島研吾, "通信削減アルゴリズム CAQR の RSDFT の直交化処理への適用と評価", 第 144 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 横浜市, 2014 年 5 月 26 日-27 日 (今村グループとの共同の成果)
 165. Tetsuya SAKURAI, Yasunori Futamura, Akira IMAKURA, "On error resilience of a complex moment-based eigensolver", 10th International Workshop on Accurate Solution of Eigenvalue Problems (IWASEP10) Dubrovnik, June 2-5, 2014
 166. 今倉 暁, 杜 磊, 長谷川 哲也, 櫻井 鉄也, "Hankel 行列版周回積分型固有値解法の精度解析", 第 43 回 数値解析シンポジウム -NAS2014-, ホテル日航八重山, 2014 年 6 月 11-13 日
 167. 深谷猛, 今村俊幸, "TSQR で生じる特殊な構造を持った QR 分解に対する自動チューニングの検討", 第 19 回計算工学講演会, 広島市, 2014 年 6 月 11 日-13 日
 168. 今村俊幸, 廣田悠輔, 深谷猛, 町田進, 山田昌彦, "密行列固有値計算における通信回避 (CA)と通信隠蔽(CH)について", 第 19 回計算工学講演会, 広島市, 2014 年 6 月 11 日-13 日
 169. 西澤慶亮, 宮田考史, 張紹良, "GPUを用いたマルチシフトQR法の高速化について", 第 43 回数値解析シンポジウム, ホテル日航八重山(沖縄), 2014 年 6 月 10-13 日
 170. Akira IMAKURA, Tetsuya SAKURAI, "A Novel Contour Integral Based Eigensolver for Solving Linear and Nonlinear Eigenvalue Problems", East Asia Section of SIAM (EASIAM) 2014, Ambassador City Jomtien, Pattaya, Chonburi, Thailand, June 23-25, 2014
 171. Yusuke Hirota and Toshiyuki Imamura, "Acceleration of Divide and Conquer Method for Generalized Eigenvalue Problems of Banded Matrices on Manycore Architecture", Parallel Matrix Algorithms and Applications 2014 (PMAA14), Lugano, Switzerland, July 2-4, 2014
 172. Toshiyuki Imamura, Yusuke Hirota, Takeshi Fukaya, Susumu Yamada and Masahiko Machida, "EigenExa: high performance dense eigensolver, present and future", Parallel Matrix Algorithms and Applications 2014 (PMAA14), Lugano, Switzerland, July 2-4, 2014
 173. Yusaku Yamamoto, Lang Zhang, Shuhei Kudo, "Block Jacobi methods for the symmetric eigenvalue problem and their convergence analysis ", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA 14), Universita della Svizzera italiana, Lugano,

- Switzerland, July 2-4, 2014
174. Y. Maeda, T. Sakurai, "Contour Integral Spectral Slicing Solver CISS in SLEPc", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Universita della Svizzera italiana Lugano, Switzerland,, July. 3. 2014
 175. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, Akira Imakura, "Parallel implementation and performance improvement of the SS projection method", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Universita della Svizzera italiana, Lugano, Switzerland, July 2-4, 2016
 176. Yasuyuki Maeda, Tetsuya Sakurai, "Contour integral spectral slicing solver CISS in SLEPc", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Universita della Svizzera italiana, Lugano, Switzerland, July 2-4, 2017
 177. T. Yano, Y. Futamura, T. Sakurai, "Parallel implementation of a complex moment based eigensolver for dense generalized eigenvalue problems on distributed GPU systems", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Universita della Svizzera italiana Lugano, Switzerland,, July. 4. 2014
 178. Y. Futamura and T. Sakurai, "z-Pares: A complex moment based hierarchical parallel eigenvalue solver package", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Universita della Svizzera italiana Lugano, Switzerland,, July. 4. 2014
 179. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "z-Pares: A complex moment based hierarchical parallel eigenvalue solver package", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Universita della Svizzera italiana, Lugano, Switzerland, July 2-4, 2014
 180. Takahiro Yano, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "Parallel implementation of a complex moment based eigensolver for dense generalized eigenvalue problems on distributed GPU systems", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Universita della Svizzera italiana, Lugano, Switzerland, July 2-4, 2015
 181. Y. Futamura and T. Sakurai, "z-Pares: A Complex Moment Based Hierarchical Parallel Eigensolver Package", 2014 SIAM Annual Meeting, The Palmer House Chicago, Illinois, USA, July. 10. 2014
 182. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "z-Pares: A Complex Moment Based Hierarchical Parallel Eigensolver Package", 2014 SIAM Annual Meeting, The Palmer House Chicago, Illinois, USA, July 7-11, 2014
 183. 横山誠也, 山崎溪太, 星健夫, "超大規模電子状態計算におけるナノ複合カーボンの可視化解析", 日本応用物理学会中国四国支部合同学術講演会, 香川大学, 2014年7月26日
 184. 二村保徳, 櫻井鉄也, "並列疎行列固有値解析エンジン z-Pares の性能評価", 2014年並列/分散/協調処理に関する『新潟』サマー・ワークショップ, 朱鷺メッセ 新潟コンベンションセンター, 2014年7月28日
 185. 今倉 暁, 櫻井 鉄也, "周回積分型固有値解法の数理的耐故障性について", 2014年並列/分散/協調処理に関する『新潟』サマー・ワークショップ (SWoPP 新潟 2014), 朱鷺メッセ 新潟コンベンションセンター, 2014年7月28-30日
 186. 深谷猛, 山本有作, 今村俊幸, "ハウスホルダー変換のブロック化と通信回数削減に関する一考察", 2014年並列/分散/協調処理に関する『新潟』サマー・ワークショップ (SWoPP 新潟 2014), 新潟市, 2014年7月28日-30日
 187. 西澤慶亮, 宮田考史, 張紹良, "非エルミート行列向け固有値解法の GPU による高速化", 2014年並列/分散/協調処理に関する『新潟』サマー・ワークショップ, 朱鷺メッセ 新潟コンベンションセンター(新潟), 2014年7月28-30日
 188. Ye Xiucui, "Distributed Coding Schemes for Continuous Data Collection in Wireless Sensor Networks", 情報処理学会 モバイルコンピューティングとユビキタス通信研究会 第72回研究発表会, 横浜市技能文化会館 802大研修室, 2014年8月28日
 189. 今倉 暁, 杜 磊, 櫻井 鉄也, "Communication-Avoiding Arnoldi 版周回積分型固有値解法

- ”, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 政策研究大学院大学, 2014 年 9 月 3-5 日
190. 深谷猛, 中務佑治, 柳澤優香, 山本有作, “大規模並列計算機上での再直交化付きコレスキーQR 分解の性能評価”, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 東京都, 2014 年 9 月 3 日-5 日 (山本グループとの共同の成果)
 191. 柳澤優香, 深谷猛, 中務佑治, Kannan Ramaseshan, 山本有作, 大石進一, “シフト付きコレスキーQR 分解アルゴリズムの提案”, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 東京都, 2014 年 9 月 3 日-5 日 (山本グループとの共同の成果)
 192. 井町宏人, 星 健夫, “実応用・アルゴリズム連携研究のための固有値ソルバ性能評価環境の開発”, 日本応用数理学会, 政策研究大学院大学, 2014 年 9 月 3-5 日
 193. 齋藤 周作, 多田野 寛人, 今倉 暁, “Block BiCGSTAB(l)法の計算量削減”, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 政策研究大学院大学, 2014 年 9 月 3-5 日
 194. 山本有作, “WY 表現の厳密な誤差解析”, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 政策研究大学院大学, 2014 年 9 月 3 日-5 日
 195. 宮田考史, 西澤慶亮, “マルチシフト QR 法の GPU による高速化”, 飛騨高山まちの博物館 (岐阜), 2014 年 9 月 7-9 日
 196. 長谷川 哲也, “実数計算のみを利用した周回積分型固有値解法における精度悪化とその対処”, 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻 協定講座 第 8 回協定講座シンポジウム, 神戸大学 瀧川記念学術交流会館 2 階 大会議室, 2014 年 9 月 11 日
 197. 星 健夫, 横山誠也, “超大規模電子状態理論による有機材料シミュレーション”, 日本応用物理学会, 北海道大学, 2014 年 9 月 17-20 日
 198. 今村俊幸, 椋木大地, 山田進, 町田昌彦, “CUDA-xSYMV の実装と評価”, 第 146 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 那覇市, 2014 年 10 月 2 日-3 日
 199. 今倉 暁, 杜 磊, 櫻井 鉄也, “各種周回積分型固有値解法の関係性について”, 2014 年度 RIMS 研究集会「新時代の科学技術を牽引する数値解析学」, 京都大学 数理解析研究所, 2014 年 10 月 8-10 日
 200. H. Tadano, “Stabilization of the Block BiCGGR method by the Parital Near Breakdown procedure”, International Conference on Simulation Technology (JSST2014), Kitakyushu, Japan, Oct. 29-30, 2014
 201. 井町宏人, 星健夫, “固有値問題むけ最適複合化ソルバの構成と「京」コンピュータ上でのベンチマーク”, 物性研究所計算物質科学研究センター 第 4 回シンポジウム, 東京大学, 2014 年 11 月 12-14 日
 202. 山本有作, “ハウスホルダー変換に基づく QR 分解法の最近の進展 ~ 高性能化の技法とその誤差解析 ~”, UTNAS セミナー, 東京大学, 2014 年 11 月 17 日
 203. Shuhei Kudo, Yusaku Yamamoto, “Performance of the Block Jacobi Method for the Symmetric Eigenvalue Problem on the K computer”, The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD2014), The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Dec. 1-3, 2014
 204. 井町宏人, 星健夫, “実応用・アルゴリズム連携のための複合固有値ソルバと京での性能評価”, 環瀬戸内応用数理研究部会シンポジウム, 倉敷市, 2014 年 12 月 5-7 日
 205. 山本有作, “固有値解析を対象とした 手法, 特徴, ライブラリー”, 日本応用数理学会, 応用数理ものづくり研究会, 第 3 回技術セミナー, 政策研究大学院大学, 2014 年 12 月 12 日
 206. 山本有作, “最小固有値に対する Laguerre 下界の 最適性とシャープさについて”, 日本応用数理学会「行列・固有値の解法とその応用」研究部会 第18回研究会, 東京大学, 2014 年 12 月 25 日
 207. 井町宏人, 星健夫, “一般化固有値問題むけ最適複合化ソルバの構成と性能評価”, 行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 東京大学, 2014 年 12 月 25 日
 208. Akira Imakura, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, “Error resilience strategy of a complex moment-based eigensolver”, Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2015, 筑波国際会議場, 2015 年 1 月 26-28 日

209. Takeshi Fukaya and Toshiyuki Imamura, "Performance evaluation of the EigenExa eigensolver on the Oakleaf-FX supercomputing system", Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2015, つくば国際会議場, 2015年1月26-28日
210. Toshiyuki Imamura, "Automatic-tuning for CUDA-BLAS kernels by multi-stage d-Spline", 2015 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing (2015 ATAT in HPSC), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 2015/2/27-28
211. Takeshi Fukaya, Yuji Nakatsukasa, Yuka Yanagisawa and Yusaku Yamamoto, "CholeskyQR2: an Algorithm of the Cholesky QR Factorization with Reorthogonalization", 2015 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High Performance Scientific Computing (2015 ATAT in HPSC), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Feb. 27-28, 2015
212. 今村俊幸 椋木大地 山田進 町田昌彦, "CUDA-BLAS 等の選択による最速 GPU 固有値ソルバーの性能評価", 第151回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 別府市大分県, 2015/3/2-3
213. 長島聖児, 深谷猛, 山本有作, 横川三津夫, "オンライン自動チューニングのための性能モデルの構築法, ~ 正方行列の特異値分解を例にして ~", 日本応用数理学会研究部会連合発表会, 明治大学中野キャンパス, 2015年3月6日-7日
214. 星健夫, "厳密な物理的保存則をもつクリロフ部分空間解法の構築", 日本応用数理学会2015年研究部会連合発表会, 明治大, 2015年3月6-7日
215. 井町宏人, 星健夫, "超並列固有値計算のための最適複合化数理ソルバと電子状態計算におけるベンチマーク", 日本応用数理学会2015年研究部会連合発表会, 明治大, 2015年3月6-7日
216. 信原貴也, 山本有作, 横川三津夫, "高速 Hh 変換の提案とジャンプ拡散モデルの下でのオプション価格評価への応用", 日本応用数理学会研究部会連合発表会, 明治大学中野キャンパス, 2015年3月6日-7日
217. Takeshi Fukaya, "Cholesky QR factorization with reorthogonalization", Matrix Computations and Scientific Seminar, University of California, Berkeley, Berkeley, USA, Mar. 11, 2015
218. Akira IMAKURA, Yasunori FUTAMURA, Tetsuya SAKURAI, "Inherent Error Resilience of a Complex Moment-Based Eigensolver", SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE15), Salt Lake City, Utah, USA, March 14-18, 2015
219. Takeshi Fukaya and Toshiyuki Imamura, "Performance Evaluation of the EigenExa Dense Eigensolver on the Oakleaf-FX Supercomputer System", SIAM Conference on Computational Science & Engineering (CSE15), Salt Palace Convention Center, Salt Lake City, USA, Mar. 14-18, 2015
220. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "z-Pares: Software package for solving large sparse eigenvalue problems based on contour integral and complex moment", Sparse Solvers for Exascale: From Building Blocks to Applications, Greifswald, Germany, March 23-25, 2015
221. T. Sakurai, Y. Futamura, T. Ide and K. Toda, "A scalable parallel eigensolver for large-scale NVH problems on petascale computing environment", PANACM 2015, Buenos Aires, April 27-29, 2015
222. 工藤周平, 山本有作, 横川三津夫, "三重対角化に対する Dongarra-Wilkinson 法の性能解析と実装手法について", 2015年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2015), 東京大学 武田先端知ビル5階 武田ホール, 2015年5月19日-20日
223. 井町宏人, 星健夫, "超並列固有値計算のための複合化数理ソルバと電子状態計算におけるベンチマーク", HPCS2015: 2015年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 東京大学, 2015年5月19-20日
224. Akira Imakura, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "Inherent error resilience of a complex moment-based eigensolver for solving interior eigenvalue problem", 2015 LBNL - Tsukuba Joint Meeting, LBNL, USA, May 28-29, 2015

225. 齋藤 周作, 多田野 寛人, 今倉 暁, "Shifted Block BiCGSTAB(l)法の構築とその近似解の精度について", 第44回 数値解析シンポジウム (NAS2015), ぶどうの丘, 2015年6月8-10日
226. 深谷猛, 山本有作, 今村俊幸, "1次元分散型のCAQRアルゴリズムの性能評価とパネルサイズの自動チューニングに向けた検討", 第20回計算工学講演会, つくば国際会議場, 2015年6月8-10日
227. J.C. Butcher, 宮武勇登, "無段式 Runge-Kutta 法の次数条件", 第44回数値解析シンポジウム(NAS2015), ぶどうの丘(山梨県甲州市), 2015年6月8-10日
228. 井町宏人, 星健夫, "Hybrid Numerical Solvers for Eigenvalue Problems and Their Performance Evaluation on Massively Parallel Machines", 第44回数値解析シンポジウム(NAS2015), 甲州市, 2015年6月8-10日
229. 深谷猛, 中務佑治, 山本有作, "コレスキーQR分解を用いたブロック鏡像変換の生成", 第44回数値解析シンポジウム, 勝沼ぶどうの丘, 2015年6月8-10日
230. 星健夫, 井町宏人, "超大規模超並列電子状態計算を中核とした物理・数理・HPCの融合研究", 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第7回シンポジウム, 東京, 2015年7月9-10日
231. Xiucan Ye and Tetsuya Sakurai, "Spectral Clustering Using Robust Similarity Measure Based on Closeness of Shared Nearest Neighbors", International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), Killarney, Ireland, July 12-17, 2015.
232. 今倉 暁, 二村 保徳, 櫻井 鉄也, "内部固有値問題のためのFEAST法に対するArnoldi/Lanczos型改良法の提案", 2015年並列/分散/協調処理に関する『別府』サマー・ワークショップ (SWoPP2015), ビーコンプラザ 別府国際コンベンションセンター, 2015年8月4-6日
233. 前田恭行, 櫻井鉄也, "周回積分型固有値解法における円弧領域への拡張", 2015年並列/分散/協調処理に関する『別府』サマー・ワークショップ (SWoPP2015), ビーコンプラザ 別府国際コンベンションセンター, 2015年8月4-6日
234. 矢野貴大, 二村保徳, 櫻井鉄也, "GPUクラスタにおける周回積分型固有値解法の密行列向け並列実装と性能評価", 2015年並列/分散/協調処理に関する『別府』サマー・ワークショップ (SWoPP2015), ビーコンプラザ 別府国際コンベンションセンター
235. 深谷猛, 山本有作, 今村俊幸, "ペタ・ポストペタスケールシステムにおける密行列向けアルゴリズムの実行時間 -EigenExaの開発を通して得られた実測データに基づく考察-", 2015年並列/分散/協調処理に関する『別府』サマー・ワークショップ (SWoPP2015), ビーコンプラザ別府国際コンベンションセンター, 2015年8月4-6日
236. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "Arnoldi-type contour integral-based eigensolver for solving nonlinear eigenvalue problems", ICIAM 2015, Beijing, China, August 10-14, 2015
237. H. Imachi and T. Hoshi, "Parallel generalized eigenvalue computation with hybrid solvers and their benchmark on supercomputers", The International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2015), Beijing, China, Aug 10-14, 2015
238. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, Takanori Ide, Kentaro Toda, "Highly Parallel Eigenvalue Computation in Vibration Analysis Using A Complex Moment Based Eigensolver", ICIAM 2015, Beijing, China, August 10-14, 2015
239. Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura, "Applications of A Contour Integral Based Eigenvalue Solver to Large-scale Nanostructure Simulations with Density Functional Theory", ICIAM 2015, Beijing, China, August 10-14, 2015
240. 今村俊幸, "Review on CA-based eigenvalue calculation 通信回避型密行列固有値計算についての最新動向", Workshop on Information Technology, Applied Mathematics and Education, (IME2015 in Tsuwano)「情報技術、応用数学そして教育に関するワークショップ (IME2015 津和野)」, 島根県津和野市, 2015/9/3
241. Yosuke Kumagai, Akihiro Fuji, Tesuo Tanaka, Yusuke Hirota, Takeshi Fukaya, Toshiyuki

- Imamura and Reiji Suda, "Performance Analysis of the Chebyshev Basis Conjugate Gradient Method on the K Computer", 11th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Krakow, Poland, Sep. 6-9, 2015
242. S. Kudo, Y. Yamamoto, M. Bekka M. Vajter?ic, "Performance of the Parallel One-Sided Block Jacobi SVD Algorithm on a Modern Distributed-Memory Parallel Computer", 14th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2015), Krakow, Poland, Sept. 6-9, 2015
243. 山本有作, "ブロック化ハウスホルダー・コレスキーQR法の安定性について", 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学角間キャンパス, 2015 年 9 月 9 日-11 日
244. 井手 貴範, 東田 憲太郎, 二村保徳, 櫻井鉄也, "自動車用オートマチックトランスミッションの振動問題の固有値計算の並列化", 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学, 2015 年 9 月 9-11 日
245. Y. Miyatake, J.C. Butcher, "The construction of parallel energy-preserving methods for Hamiltonian systems", International Conference on Scientific Computation And Differential Equations 2015, Potsdam, Germany, Sep. 14-18, 2015
246. 今村俊幸, 椋木大地, 山田進, 町田昌彦, "SYMV・GEMV ルーチン群のマルチ GPU 化とその評価", 第 151 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発, 那覇市, 2015/9/23
247. 多田野 寛人, 齋藤 周作, 今倉 暁, "複数右辺ベクトル・複数シフトをもつ線形方程式に対する Shifted Block Krylov 部分空間法の近似解の精度改善", 【プラズマ壁相互作用における非線形現象の理論モデル構築と画像・動画解析手法開発に関する研究会】第1回非線形・可視化部門研究会, 核融合科学研究所, 2015 年 9 月 28-29 日
248. Takeshi Fukaya, "The CholeskyQR2 algorithm and its applications", 20th Advanced Supercomputing Environment (ASE) Seminar, The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Oct. 16, 2015
249. 今村俊幸, "CUDA-BLAS の自動チューニングについて", 自動チューニング研究会第 12 回オープンアカデミックセッション(ATOS12), 山梨大学(山梨県甲府市), 2015/10/19
250. Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura, Akira Imakura, "A Contour Integral-based Parallel Eigensolver with Higher Complex Moments", SIAM Conference on Applied Linear Algebra (SIAM LA15), Hyatt Regency Atranta, Atranta, Georgia, USA, October 26-30, 2015
251. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, "A novel complex moment-based eigensolver using a communication-avoiding Arnoldi process", SIAM Conference on Applied Linear Algebra (SIAM LA16), Hyatt Regency Atranta, Atranta, Georgia, USA, October 26-30, 2015
252. T.Imamura, "Performance Analysis of the Householder Back-transformation with Asynchronous Collective Communication", SIAM Conference on Applied Linear Algebra (LA15), Hyatt Regency Atlanta, Atlanta, USA, Oct.26-30, 2015
253. Y.Hirota, and T. Imamura, "Divide-and-Conquer Method for Symmetric-Definite Generalized Eigenvalue Problems of Banded Matrices on Manycore Systems", SIAM Conference on Applied Linear Algebra (LA15), Hyatt Regency Atlanta, Atlanta, USA, Oct.26-30, 2016
254. Takeshi Fukaya, Yuji Nakatsukasa, Yuka Yanagisawa and Yusaku Yamamoto, "Performance evaluation of the CholeskyQR2 algorithm", SIAM Conference on Applied Linear Algebra (SIAM LA15), Hyatt Regency Atlanta, Atlanta, USA, Oct 25-30, 2015
255. Yusaku Yamamoto, Yuji Nakatsukasa, Yuuka Yanagisawa, Takeshi Fukaya, "Roundoff Error Analysis of the CholeskyQR2 and Related Algorithms", SIAM Conference on Applied Linear Algebra (LA15), Hyatt Regency Atlanta, Atlanta, USA, Oct. 26-30, 2015
256. 山本有作, "コレスキーQR法と古典的グラム・シュミット法の数値的安定性について", 京都大学数理解析研究所 研究集会「現象解明に向けた数値解析学の新展開」, 京都大学数理解析研究所, 2015 年 11 月 18 日-20 日
257. 井町 宏人, 星健夫, "大規模量子物質計算に現れる数値解析上の課題", RIMS 研究集会「現象解明に向けた数値解析学の新展開」, 京都大学数理解析研究所, 2015 年 11 月 18-20

日

258. 星健夫, 井町宏人, 横山誠也, 梶貴美, “俯瞰的数理モデリング -数理・超並列計算からものづくりまで-”, 数理構造保存を接点とした数学・HPC・実科学のクロスオーバー, 電通大, 2015年11月24-25日
259. 井町宏人, 星健夫, “超並列固有値計算のための複合化数理ソルバと電子状態計算におけるベンチマーク”, 数理構造保存を接点とした数学・HPC・実科学のクロスオーバー, 電通大, 2015年11月24-25日
260. 深谷猛, “線形計算アルゴリズムと通信回避”, 数理構造保存を接点とした数学・HPC・実科学のクロスオーバー, 電気通信大学, 2015年11月24-25日
261. 成瀬由基, 曾我部知広, 宮武勇登, 張紹良, “制御理論に現れる最小特異値を用いた関数の極値問題について”, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第20回研究会, 東京大学, 2015年12月11日
262. 山本有作, “対称行列のトレースに対する確率的推定法の分散について”, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 第20回研究会, 東京大学, 2015年12月11日
263. 工藤周平, 山本有作, “Xeon PhiにおけるDSYRKのスレッド並列化手法”, 第152回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 北海道立道民活動センター, かでる2・7, 2015年12月16日-17日
264. Xiucui Ye, Kaiyang Ji and Tetsuya Sakurai, “Unsupervised Feature Selection with Correlation and Individuality Analysis”, the 8th International Conference on Machine Learning and Computing (ICMLC 2016), Hongkong, February 22-23, 2016
265. 今村俊幸, “Block communication avoiding Householder tridiagonalization 実装上の問題点について”, 2016年度日本応用数学会連合発表会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 兵庫県神戸市中央区 神戸学院大学, 2016/03/04-05
266. Toshiyuki Imamura, “EigenExa: Dense symmetric eigenvalue solver for distributed parallel systems”, AICS HPC Seminar, 兵庫県神戸市中央区 理化学研究所計算科学研究機構, 2016/03/29

③ ポスター発表 (国内会議 52件、国際会議 43件)

1. S. Nishino, T. Fujiwara, H. Yamasaki, S. Yamamoto, T. Hoshi, “Electronic structure calculations and quantum molecular dynamics simulations of the ionic liquid PP13-TFSA”, the 18th International Conference on Solid State Ionics, Warszawa, Poland, July 3-8, 2011
2. 山本和磨, 櫻井鉄也, “量子ドットシミュレーションにおける多項式固有値問題の並列解法”, 第40回数値解析シンポジウム, 鳥羽シーサイドホテル, 2011年6月21日
3. 内藤理大, 多田野寛人, 櫻井鉄也, “IDR(s)法における残差停滞の回避方法について”, 第40回数値解析シンポジウム, 鳥羽シーサイドホテル, 2011年6月21日
4. 深谷猛, 山本有作, 張紹良, “ブロックQR分解アルゴリズムの性能最適化, -ブロック化による性能向上についての考察-”, 第40回数値解析シンポジウム(NAS2011), 鳥羽シーサイドホテル, 2011年6月21日
5. 杜磊, 曾我部知広, 張紹良, “IDR(s) for solving shifted linear systems”, 第40回数値解析シンポジウム, 鳥羽シーサイドホテル, 2011年6月21日
6. Y. Futamura, T. Sakurai, “A Memory Saving Technique for a Resolvent Based Sparse Eigensolver, Scalable Eigensolver for Electronic Structure Calculations on Hierarchical Parallel Computers”, The 7th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Vancouver, Canada, July 19, 2011
7. 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良, “シフト線形方程式に対するリスタート付き Krylov 部分空間法のための新しい最小残差条件”, 2011年度数値解析研究集会, 少年自然の家八ヶ岳荘,

2011 年 9 月 5-7 日

8. S. Nishino, T. Fujiwara, H. Yamasaki, S. Yamamoto, T. Hoshi, "Quantum Molecular Dynamics Simulation of the Ionic Liquid PP13-TFSA Doped with LiTFSA", 62nd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry - Electrochemical Frontiers in Global Environment and Energy, Niigata, Japan, Sep. 11-16, 2011
9. 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, "非線形固有値問題における複素平面上での大域的固有値分布推定", 日本応用数学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 15 日
10. 平野光, 多田野寛人, 櫻井鉄也, 池田亮作, 日下博幸, "局所気象シミュレーションで現れる線形方程式に対する前処理の評価", 日本応用数学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 15 日
11. 二村保徳, 多田野寛人, 櫻井鉄也, "複数右辺ベクトルをもつシフト線形方程式に対する共役勾配法とその応用", 日本応用数学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 15 日
12. 山崎育朗, 多田野寛人, 櫻井鉄也, "Cutoff を組み合わせた前処理について", 日本応用数学会 2011 年度年会, 同志社大学今出川キャンパス, 2011 年 9 月 15 日
13. S. Nishino, T. Fujiwara, H. Yamasaki, S. Yamamoto, T. Hoshi, "Li ion dynamics in Li₄GeS₄ and Li₄GeP₄: First Principle Electronic Structure Calculation and Long Time Tight Binding Molecular Dynamics Simulation", The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Tokyo, Japan, Oct. 31-Nov. 2, 2011
14. 大瀧 嵩, 藤山 慧太, 今村 俊幸, 山田 進, 町田 昌彦, "Eigen_sg+ASPEN.K2 の性能評価", 2012 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 名古屋大学豊田講堂シンポジオンホール, 2012 年1月 25 日
15. Y. Maeda, Y. Futamura, T. Sakurai, "Stochastic Estimation Method of Eigenvalue Density for Nonlinear Eigenvalue Problems on the Complex Plane", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Hyatt Regency Savannah, Savannah, USA, Feb. 15, 2012
16. K. Yamamoto, T. Sakurai, "Scalable Parallel Software for Large-Scale Nonlinear Eigenvalue Problems on Petsc/Trilinos", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Hyatt Regency Savannah, Savannah, USA, Feb. 15, 2012
17. M. Naito, H. Tadano, T. Sakurai, "A Modified Block IDR(s) Method for Computing High Accuracy Solutions", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Hyatt Regency Savannah, Savannah, USA, Feb. 15, 2012
18. Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya, J. Iwata, "Efficient Algorithm for Linear Systems Arising in Solutions of Eigenproblems and Its Application to Electronic-Structure Calculations", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Hyatt Regency Savannah, Savannah, USA, Feb. 15, 2012
19. 今倉暁, 櫻井鉄也, "大規模並列化を考慮した減速 Jacobi 型前処理の有効性", 第 1 回協定講座シンポジウム「計算アルゴリズムと化学・生物学の融合」, 神戸大学, 2012 年 2 月 17 日
20. Y. Nakamura, "Modified Block BiCGSTAB for Lattice QCD", 2nd AICS International Symposium, RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Kobe, Japan, March 1-2, 2012
21. 今倉暁, 櫻井鉄也, 住吉光介, 松古栄夫, "超新星爆発計算のための減速 Jacobi 型前処理に対するパラメータ最適化手法について", HPCI 戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム, 秋葉原コンベンションホール, 2012 年 3 月 7-8 日
22. 前田恭行, 山本和磨, 二村保徳, 櫻井鉄也, "固有値密度推定法における適応型並列アルゴリズムの適用", 第 41 回数値解析シンポジウム, 伊香保温泉旅館よろこびの宿しん喜, 2012 年 6 月 7 日
23. 祖平明夫, 櫻井鉄也, "複素モーメントによる画像特徴抽出の性能評価", 第 41 回数値解析シンポジウム, 伊香保温泉旅館よろこびの宿しん喜, 2012 年 6 月 7 日

24. 内藤良平, 宮田考史, 張紹良, “電子状態計算に現れる固有値問題への QZ 法の応用”, 第 2 回協定講座シンポジウム, 2012 年 8 月
25. 長谷直哉, 宮田考史, 張紹良, “多項式固有値問題に対する数値解法”, 第 2 回協定講座シンポジウム, 2012 年 8 月
26. 二村保徳, 櫻井鉄也, 古家真之介, 岩田潤一, “周回積分を用いた固有値解法における線形方程式求解アルゴリズムとその電子状態計算への応用”, 日本応用数理学会 2012 年度年会, 稚内全日空ホテル, 2012 年 8 月 30 日
27. 篠原康, 矢花一浩, 二村保徳, 櫻井鉄也, “シフト線型方程式のクリロフ部分空間法のスカラー化とその時間依存密度汎関数理論への応用”, 日本応用数理学会 2012 年度年会, 稚内全日空ホテル, 2012 年 8 月 30 日
28. 服部克洋, 白昊明, 張紹良, “数値解析に関するユーザー構築型 Web システムについて”, 2012 年度数値解析研究集会, 長野, 2012 年 9 月
29. 長谷直哉, 宮田考史, 張紹良, “多項式固有値問題に対する数値解法”, 2012 年度数値解析研究集会, 長野, 2012 年 9 月
30. 秋山洋平, 川居佳史, 星健夫, “Python-OpenGL による大規模電子状態計算むけ可視化ツール VisBAR の開発”, 日本物理学会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月 18-21 日
31. T. Miyata and S.-L. Zhang, “A Numerical Method for Eigenvalue Problems in the Application of Photonic Crystals”, International Symposium on Compuotics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka University Hall, Japan, Oct. 11, 2012
32. Toshiyuki Imamura, Susumu Yamada, Masahiko Machida, “Preliminary Report for a High Precision Distributed Memory Parallel Eigenvalue Solver”, The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC12), Salt Lake City, US, Nov. 10-16, 2012
33. Lei Du, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, “Block conjugate gradient type methods for the approximation of bilinear form CHA-1B”, 2013 SIAM Conference on Computational Science and Engineering, The Westin Boston Waterfront, Boston, Massachusetts, USA, Feb. 25- Mar. 1, 2013
34. 深谷猛, 今村俊幸, 山本有作, “京における密行列固有値ソルバ Eigen-K の性能評価と性能モデリング”, SACSIS2013 - 先進的計算基盤システムシンポジウム -, 仙台国際センター, 2013 年 5 月 22 日-24 日
35. 西澤慶亮, 宮田考史, 張紹良, “GPU を用いたマルチシフト QR 法の高速度化”, 数値解析シンポジウム, 「四国道後館」愛媛県松山市, 2013 年 6 月
36. 西澤慶亮, 宮田考史, 張紹良, “GPU を用いたマルチシフト QR 法の高速度化”, 数値解析シンポジウム, 「四国道後館」愛媛県松山市, 2013 年 6 月 12-14 日
37. 今倉 暁, 杜 磊, 櫻井 鉄也, “周回積分型固有値解法に対する Block Arnoldi 法に基づく新解釈および改良法の提案”, 日本応用数理学会 2013 年度年会, アクロス福岡, 2013 年 9 月 9-11 日
38. 山崎溪太, 秋山洋平, 星健夫, “Python を用いた電子状態計算むけ波動関数可視化ツールの開発”, 日本物理学会, 徳島大学, 2013 年 9 月 25-28 日
39. 蘇黎炯, “BiCGSTAB 法における残差の 2 ノルム最小化の改良”, 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻 協定講座 第五回協定講座シンポジウム, 神戸大学統合研究拠点 コンベンションホール, 2013 年 9 月 30 日
40. 西村恒希, “Adaptive Smoothed Aggregation Multigrid 法におけるスムージングパラメータの収束性への影響について”, 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻 協定講座 第五回協定講座シンポジウム, 神戸大学統合研究拠点 コンベンションホール, 2013 年 9 月 30 日
41. 陳玉蕊, “大規模固有値計算における SLEPc, CISS 法の性能検討”, 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻 協定講座 第五回協定講座シンポジウム, 神戸大学統合研究拠点 コンベンションホール, 2013 年 9 月 30 日

42. 近藤翔太郎, 張紹良, "劣決定系線形方程式に対する数値解法", 第5回協定講座シンポジウム, 「計算科学, 次世代を担う若手の集い, 2013」, 神戸大学統合研究拠点, コンベンションホール, 2013年9月30日
43. 古澤賢, 張紹良, "Discontinuous, Galerkin, Method, に現れる数値流束の選択", 第5回協定講座シンポジウム, 「計算科学, 次世代を担う若手の集い, 2013」, 神戸大学統合研究拠点, コンベンションホール, 2013年9月30日
44. 西澤慶亮, 宮田考史, "固有値計算のためのマルチシフトQR法, - GPU 向けの改良 -", 第5回協定講座シンポジウム, 「計算科学, 次世代を担う若手の集い, 2013」, 神戸大学統合研究拠点, コンベンションホール, 2013年9月30日
45. 岡田和人, 岡本吉央, 今村俊幸, "マルチGPU環境におけるCRS形式疎行列・ベクトル積の入力行列の最適化による高速化", ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2014), 一橋大学一橋講堂, 2014年1月7-8日
46. 白澤孝仁, 今村俊幸, 岡本吉央, "村田法のスレッド並列化によるマルチコア CPU 上での実対称帯行列帯幅縮小操作の高速化", ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2014), 一橋大学一橋講堂, 2014年1月7-8日
47. 林熙龍, 今村俊幸, 岡本吉央, "d-Spline 関数を用いた GEMV カーネルの性能チューニング", ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2014), 一橋大学一橋講堂, 2014年1月7-8日
48. T. Yano, Y. Futamura, T. Sakurai, "Parallel Implementation of a Contour-Integral-Based Eigensolver for Dense Generalized Eigenvalue Problems on GPU Clusters", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP14), Portland, Oregon, USA, Feb. 18-21
49. Yasunori Futamura and Tetsuya Sakurai, "z-Pares: A complex moment based hierarchical parallel eigen-solver package", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing, Tsukuba International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, Mar. 7-9, 2014
50. Hiroto TADANO, Akira IMAKURA, "A high accuracy Block Krylov subspace method based on the bi-conjugate residual approach", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, March 7-9, 2014
51. Lei DU, Akira IMAKURA, Tetsuya SAKURAI, "Two-Stage Simultaneous Band Reduction for Two Dense Symmetric Matrices", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, March 7-9, 2014
52. Akira IMAKURA, Lei DU, Tetsuya SAKURAI, "Accuracy analysis on the Rayleigh-Ritz type of the contour integral based eigensolver", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, March 7-9, 2014
53. Y. Hirota, T. Imamura, "Divide and Conquer Method for Computing Generalized Eigenvalues of Banded Matrices", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba, Japan, Mar. 7-9, 2014
54. T. Miyata, R. Naito, S. Honda, "Computing surface Green's functions", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing, Tsukuba International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA(Tsukuba-city, Japan), Mar. 7-9, 2014
55. D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, "A numerical approach to interior eigenvalue problems in electronic structure calculations", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing, Tsukuba International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA(Tsukuba-city, Japan), Mar. 7-9, 2014

56. Takeo Hoshi, Tomohiro Sogabe, Shao-Liang Zhang, Hiroto Imachi, "Krylov subspace theories and one-hundred-million-atom quantum material simulations on the K computer", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, Mar. 7-9, 2014
57. Takeo Hoshi, Hiroto Imachi, Yoshifumi Kawai, Yohei Akiyama, Keita Yamazaki, Seiya Yokoyama, "ELSES matrix library: a sparse matrix collection arising from electronic structure calculations", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, Mar. 7-9, 2014
58. T. Yano, Y. Futamura, T. Sakurai, "Parallel Implementation of a Contour-Integral-Based Eigensolver for Dense Generalized Eigenvalue Problems on GPU Clusters", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba, Japan, Mar. 7-9
59. Y. Maeda, T. Sakurai, "Contour Integral Spectral Slicing Solver CISS in SLEPc", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba, Japan, Mar. 9
60. T. Fukaya, Y. Yamamoto, T. Imamura, "An overview of parallel algorithms for tall-skinny QR factorizations", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba, Japan, Mar. 7-9, 2014
61. Y. Yanagisawa, Y. Nakatsukasa, T. Fukaya, "Cholesky-QR and Householder-QR factorizations in nonstandard inner product spaces", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba, Japan, Mar. 7-9, 2014
62. 多田野 寛人, 今倉 暁, "複数右辺ベクトルを持つ連立一次方程式に対する双共役残差型アプローチに基づく高精度 Block Krylov アルゴリズムについて", 新学術領域研究「コンピュータティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス」平成 25 年度 第 2 回研究会, 東京大学, 2014 年 3 月 10-11 日
63. 今倉 暁, 櫻井 鉄也, "疎行列向け直接法に基づく重み付き定常反復法", 新学術領域研究「コンピュータティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス」平成 25 年度 第 2 回研究会, 東京大学, 2014 年 3 月 10-11 日
64. 宮田考史, 張紹良, "フォトニクス結晶の応用に現れる固有値問題の数値解法について", コンピューティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス, 東京大学, 2014 年 3 月 10-11 日
65. 李東珍, 宮田考史, 曾我部知広, 星健夫, 張紹良, "電子構造計算における内部固有値問題の数値解法", コンピューティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス, 東京大学, 2014 年 3 月 10-12 日
66. Yusaku Yamamoto, "On Quadratic Convergence of the Block Jacobi Method in the Presence of Multiple Eigenvalues", 10th International Workshop on Accurate Solution of Eigenvalue Problems, University of Zagreb, Dubrovnik, Croatia, June 2-5, 2014
67. 成瀬由基, 宮田考史, 張紹良, "単位円周上の固有値計算 - Sakurai-Sugiura 法と射影法の利用 -,", 第 43 回数値解析シンポジウム, ホテル日航八重山(沖縄), 2014 年 6 月 10-13 日
68. 前田 恭行, 櫻井 鉄也, "確率的固有値分布推定法を用いたバンドギャップの高速計算", 日本応用数理学会 2014 年度年会, 政策大学院大学, 2014 年 9 月 3 日
69. 長谷川哲也, 今倉暁, 櫻井鉄也, "実数計算のみを利用した周回積分型固有値解法における精度悪化とその対処", 日本応用数理学会 2014 年度年会, 政策研究大学院大学, 2014 年 9 月 3-5 日
70. 前田恭行, 櫻井鉄也 "確率的固有値分推定法を用いたバンドギャップの高速計算", 日本

応用数理学会 2014 年度年会, 政策研究大学院大学, 2014 年 9 月 3-5 日

71. 深谷猛, "コレスキー分解に基づく QR 分解の計算方法について", 第 8 回協定講座シンポジウム, 「計算科学, 次世代を担う若手の集い, 2014」, 神戸市, 2014 年 9 月 11 日
72. 井町宏人, 星健夫, "固有値問題むけ最適複合化ソルバの構成と「京」コンピュータ上でのベンチマーク", 東京大学物性研究所計算物質科学研究センター第 4 回シンポジウム 東京大学, 2014 年 11 月 12-14 日
73. Y. Futamura and T. Sakurai, "A hierarchical parallel eigen-computing engine for large sparse eigenvalue problems ", JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software, RIKEN AICS, Kobe, Japan, Dec. 2. 2014
74. Takeshi Fukaya, Yusaku Yamamoto and Toshiyuki Imamura, "Modeling the performance of parallel dense eigensolvers on peta/post-petascale systems", JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software, Kobe, Japan, Dec. 2-4, 2014
75. Hiroto Imachi, Takeo Hoshi, "Optimally combined eigenvalue problem solvers and their benchmark on the K computer", JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software (ISP2S2), Riken, Kobe, Dec. 2-4, 2014
76. Takeshi Fukaya and Toshiyuki Imamura, "Performance evaluation of the EigenExa dense eigensolver on the K computer", 5th AICS International Symposium, Kobe Japan, Dec. 8-9, 2015
77. Akira Imakura, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "Fault tolerance inherent in a complex moment-based eigensolver", Sparse Solvers for Exascale: From Building Blocks to Applications, Greifswald, Germany, March 23-25, 2015
78. Toshiyuki Imamura Takeshi Fukaya Yusuke Hirota, "Performance evaluation of the EigenExa dense eigensolver on the K computer", Sparse Solvers for Exascale: From Building Blocks to Applications., Greifswald, Germany, Mar. 23-25
79. 深谷猛, 山本有作, 今村俊幸, "ポストペタスケール計算機上での密行列向け固有値ソルバの性能の展望", 2015 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2015), 東京大学武田ホール, 2015 年 5 月 19-20 日
80. T. Hoshi and Hiroto Imachi, "Parallel generalized eigenvalue computation with hybrid solvers and their benchmark on supercomputers", The International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2015), Beijing, China, Aug 10-14, 2015
81. 深谷猛, 中務佑治, 柳澤優香, 山本有作, "重み付き内積空間における行列の QR 分解アルゴリズムの考察 - 高性能計算の視点から -", 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学, 2015 年 9 月 9-11 日
82. 工藤周平, 山本和輝, 多貝健志, 山本有作, "Xeon Phi 上でのコレスキーQR2 法の性能評価", 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学角間キャンパス, 2015 年 9 月 9 日-11 日
83. 中村聡, 高石武史, 松村友花, 谷口隆晴, 山本有作, "亀裂進展シミュレーションにおける連立 1 次方程式解法の並列化について", 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学角間キャンパス, 2015 年 9 月 9 日-11 日
84. 井手 貴範, 東田 憲太郎, 二村保徳, 櫻井鉄也, "自動車用オートマチックトランスミッションの振動問題の固有値計算の並列化", 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学, 2015 年 9 月 9-11 日
85. Chen Hongjia, Yasuyuki Maeda, Tetsuya Sakurai, "Scaling technique for Sakurai-Sugiura method in quadratic eigenvalue problems", 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学, 2015 年 9 月 9-11 日
86. Hiroto Tadano, Shusaku Saito, Akira Imakura, "Accuracy improvement of the Shifted Block BiCGGR method for linear systems with multiple shifts and multiple right-hand sides", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, September 14-16, 2015

87. Akira Imakura, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "Error resilience strategy of a complex moment-based eigensolver", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, September 14-16, 2015
88. H. Suno, Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, Y. Futamura, A.Imakura, T. Sakurai, "Eigenspectrum calculation of the $O(a)$ -improved Wilson-Dirac operator in lattice QCD using the Sakurai-Sugiura method", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, September 14-16, 2015
89. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, "A memory saving technique for a complex moment based sparse eigensolver using the shifted block biconjugate gradient method", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, September 14-16, 2015
90. Yasuyuki Maeda, Tetsuya Sakurai, James Charies, Michael Povolotskyi, Gerhard Klimeck, Jose E. Roman, "A parallel eigensolver using numerical quadrature for annular regions", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, September 14-16, 2015
91. Y. Hirota and T. Imamura,, "Performance of Divide-and-Conquer Method for Symmetric-Definite Generalized Eigenvalue Problems of Banded Matrices on Multicore and Manycore Systems", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA) 2015, International Congress Center Epochal Tsukuba, Sep.14-16,2015
92. Takeshi Fukaya and Toshiyuki Imamura, "Performance evaluation of the divide-and conquer method in the EigenExa eigensolver", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), Tsukuba, Japan, Sep. 14-16, 2015
93. So Nakamura, Yuuka Matsumura, Takeshi Takaishi, Takaharu Yaguchi, Yusaku Yamamoto "Parallelization of a Linear Simultaneous Equation Solver for Crack Growth Simulation", EPASA2015, Tsukuba International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA(Tsukuba-city, Japan), Sept. 14-16, 2015
94. Yusaku Yamamoto, "On the Stability of the Blocked Householder Cholesky QR Method", EPASA2015, Tsukuba International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA(Tsukuba-city, Japan), Sept. 14-16, 2015
95. 星健夫, 横山 誠也, 井町 宏人, 梶 貴美, 多田 朋史, "京コンピュータによる π 共役高分子系の大規模量子電気伝導計算", 第 24 回ポリマー材料フォーラム, 東京, 2015 年 11 月 26-27 日

(4)知財出願

- ①国内出願 (0 件)
- ②海外出願 (0 件)
- ③その他の知的財産権(0 件)

(5)受賞・報道等

①受賞

1. 応用数学会 2011 年度年会若手優秀ポスター賞, 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, 2011 年 9 月 15 日.
2. 日本応用数学会論文賞, 則竹渚宇, 今倉暁, 山本有作, 張紹良, 2011 年 9 月 15 日.
3. 日本応用数学会ベストオーサー賞(論文部門), 山田 進, 五十嵐 亮, 奥村 雅彦, 今村俊幸, 町田 昌彦, 2011 年 9 月 15 日.
4. *日本応用数学会第 1 回業績賞 (2011 年度) 分類B, 今村 俊幸, 山田 進, 町田 昌彦, 2012 年 4 月 27 日
5. 鳥取大学平成24年度科学研究業績表彰、星健夫、2013 年 3 月 1 日
6. 日本応用数学会 第 9 回 若手優秀講演賞, 今倉 暁, 2013 年 5 月 24 日
7. *Best paper award of 8th International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC-2013), T. Yano, Y. Futamura, T. Sakurai, Oct. 28, 2013
8. 今後の HPC(基盤技術と応用) に関するワークショップ 優秀講演賞, 今倉 暁, 2013 年 12 月 9 日
9. 星健夫, 日本応用数学会 2015 年研究部会連合発表会優秀講演賞 (2015 年 6 月 19 日) 「厳密な物理的保存則を持つクリロフ部分空間解法の構築」

②マスコミ(新聞・TV等)報道(プレス発表をした場合にはその概要もお書き下さい。)

1. 「京」を使い世界最高速の固有値計算に成功ー超巨大行列の固有値を 1 時間で計算ー, 今村俊幸, 2013 年 12 月 5 日
2. 「京」を使い世界最大規模の全球大気アンサンブルデータ同化に成功ー天気予報シミュレーションの高精度化に貢献ー http://www.riken.jp/pr/press/2014/20140723_2/
(本プロジェクトで開発した密行列向け固有値解析エンジン EigenExa を利用している)
3. プレス発表「高分子上を走る電子の波 ~京スーパーコンピュータで目指す、21 世紀のものづくり~」, 2015 年 11 月 16 日, 高分子学会主催。

③その他

(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

1. 開発した疎行列固有値解析エンジン「z-Pares」を <http://zparecs.tsukuba.ac.jp> でオープンソースとして公開
2. バレンシア工科大で開発されている並列固有値計算フレームワーク SLEPc に SS 法を実装する CISS ソルバを組み込んだ。現在 <http://slepc.upv.es/> で公開されている。
3. 開発した密行列固有値解析エンジン「EigenEXA」を <http://www.aics.riken.jp/labs/lpnctr/EigenExa.html> でオープンソースとして公開
4. 本課題における成果を応用してアイシン AW 社と自動車部品設計の高速化に関する共同研究を進めた。
5. 本課題で得られた成果の社会実装の推進のため、本課題代表者を代表とするベンチャー企業「MathDesign」を立ち上げた。
6. 星グループが開発した複合化密行列型固有値ソルバを、ミドルウェア・ミニアプリとして、「EigenKernel」(開発)の名で HP (<https://github.com/LennMars/EigenKernel/>) にて配布

- 中。
7. 本プロジェクト成果物ソルバ(密行列型・疎行列型;上記の「EigenKernel」を含む)を実装した量子物質シミュレーター「ELSESES」を基盤として、H27 年度京一般利用プロジェクト「有機デバイス材料系の 100 ナノスケール電子状態計算」(hp150144;星(鳥取大)が代表)へ、発展した。
 8. 本プロジェクト成果物ソルバ(密行列型・疎行列型;上記の「EigenKernel」を含む)を実装した量子物質シミュレーター「ELSESES」を基盤として、ポスト「京」プロジェクト重点課題 6「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」(H27-,サブ課題「膜・界面のナノレベルからの設計」,星(鳥取大)が参加者)へ、発展した。
 9. 本プロジェクト成果物ソルバ(密行列型・疎行列型;上記の「EigenKernel」を含む)を実装した量子物質シミュレーター「ELSESES」を基盤として、ポスト「京」プロジェクト重点課題 7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」(H27-,サブ課題「共通基盤シミュレーション手法」内「基盤的超並列計算アルゴリズム」班,星(鳥取大)が班長。他に櫻井(筑波大)・山本(電通大)がメンバー)へ、発展した。
 10. JST-ASTEP「ナノスケール材料向け超大規模電子構造計算プログラムの実用化研究開発」[平成 23-25 年度]星健夫らによって本プロジェクトで開発した大行列数値ソルバ(論文[1-4])を基礎とした、超大規模超並列ナノ物質量子シミュレーターELSESES(<http://www.elses.jp>)の、産業利用にむけたプロジェクト。

②社会還元的な展開活動

1. 大行列数値アルゴリズム研究に利用されることを目的として、物質科学分野実問題に起因する疎行列データライブラリ「ELSESES matrix library」を公開した(<http://www.elses.jp/matrix/>)。

§ 5 研究期間中の活動

5. 1 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

| 年月日 | 名称 | 場所 | 参加人数 | 概要 |
|-----------------------|-----------------------------------|-----------------|------|---|
| 2012 年 5 月 27-28 日 | 大規模シミュレーションと数値アルゴリズム, | 東京大学工学部(東京) | 35 人 | 星健夫を代表世話人として、表題のニーズ・シーズ型研究会を開催した。ニーズ側講演(3講演;当プロジェクトメンバー以外)では実アプリケーション(物理・化学分野)に含まれる数値的問題を提示し、シーズ側講演(3講演;当プロジェクトメンバー)では大行列数値アルゴリズムのレビューと最新解法を紹介した。 |
| 2012 年 12 月 4 日 | 「産業における応用数値」研究会 | 筑波大学 東京キャンパス | 50 人 | 企業における大規模計算のニーズについて企業研究者に講演して頂いた。 |
| 2013 年 9 月 9 日 | 日本応用数値学会 正会員主催 OS「ペタスケール環境における固有値 | アクロス福岡 | 30 人 | 日本応用数値学会 年会の正会員主催オーガナイズドセッション |

| | 「解法」 | | | |
|-------------------|---|--------------|-----|--|
| 2013年5月 30日 | CREST セミナー | 筑波大学 | 15人 | 応用分野の研究者である筑波大学の Bogdan Enescu 先生に講演して頂いた。 |
| 2013年4月 15日 | CREST セミナー | 筑波大学 | 15人 | 応用分野の研究者である日本原子力研究開発機構システム計算科学センターの永井佑紀先生に講演して頂いた。 |
| 2014年3月 7-9日 | EPASA2014 | つくば国際 会議場 | 84人 | 国際ワークショップ |
| 2014年3月 10日 | Current Topics in Nano Simulations (CT-NanoSim2014) | 筑波大学 | 30人 | EPASA2014 のサテライトワークショップ |
| 2015年9月 14-16日 | EPASA2015 | つくば国際 会議場 | 56人 | 国際ワークショップ |
| 2015年9月 17日 | Current Topics in Nano Simulations (CT-NanoSim2015) | 筑波大学 | 15人 | EPASA2015 のサテライトワークショップ |

§ 6 最後に

本課題を通じて大規模並列固有値解析アルゴリズムの理論基盤構築が達成され、さらにそれに基づいた分散並列ソフトウェア開発・公開を行うことができた。性質の大きく異なる疎行列・密行列それぞれに対応する固有値解析エンジン z-Pares、EigenExa が完成し、素粒子物理、物性物理、原子核物理、振動解析、気象予測など多岐に渡るアプリケーション分野に対する応用において、最大で京コンピュータの全ノードを利用した性能評価によって高い並列性能を発揮することが示された。

さらに、ポストペタスケール環境で想定されるメニーコアプロセッサや演算加速器に対応するため、現行のメニーコア・演算加速器における高性能利用技術の開発も行い、性能予測も併せて組み立てることで、本課題で開発した諸技術によりポストペタスケール環境において超並列高速固有値計算が十分にフィージブルであることを示した。

加えて、固有値計算に関する数理・HPC・実アプリにまたがる分野横断的な国際会議を2回開催し、各分野の著名な研究者を招聘した。その他国際学会や研究拠点訪問も含めた地道な国際交流活動により、本課題のアルゴリズム・ソフトウェアの国際的な知名度が高まり、日本の固有値・線形計算コミュニティのプレゼンスが大きく高まった。

また、企業での解析において固有値問題がボトルネックとなっており、本課題のソフトウェアがそれらの解決に資することから企業との共同研究が進行し、実運用での利用に近づいている。このような取り組みを広めることで、本課題の成果の社会実装が推進できると考えられる。



国際会議 EPASA2014 2014/3/7~9 @EPOCAL つくば



国際会議 EPASA2015 2015/9/14~16 @EPOCAL つくば