

## 第 14 回先進スーパーコンピューティング環境研究会 (ASE 研究会) 実施報告

東京大学情報基盤センター 准教授 片桐孝洋

2013 年 9 月 25 日 (水) 17:30 ~ 18:30、東京大学情報基盤センター (浅野地区) 4 階遠隔会議室にて、第 14 回先進スーパーコンピューティング環境研究会 (ASE 研究会) が開催されました。

国内の大学・研究機関からの参加者 8 名、企業からの参加者 1 名の合計 9 名の参加がありました。活発な議論がなされました。

今回は、招待講演として国立台湾大学から王偉仲教授をお呼びし、マルチコア CPU と GPU を用いた大規模固有値問題の解法についての講演を行いました。

王教授の講演は、「Solving Large-scale Eigenvalue Problems on Multicore CPU and GPU for 3D Photonic Crystal Simulations」と題し、結晶素材における光通過特性の解析のための 3 次元シミュレーションの話です。このシミュレーションにおいて扱われる、固有値問題の解法がテーマでした。対象となる結晶素材の光通過特性をシミュレーションして解析すると、高性能な光通信が行える素材の開発につながるため重要な研究といえます。

光通過特性を見るためには、素材中の周波数特性を分析するのですが、その分析には大量の固有値問題を求解しなければなりません。ところがこの問題は、固有値問題のなかでも一般化固有値問題 (generalized eigenvalue problems (GEVP)) に帰着されるため、問題自体が数学的に解くのが難しいです。さらに解くためには、計算量も膨大となります。そこで王教授は、対象の物理特性を利用することで、GEVP をより簡単な問題に数学的に帰着させました。かつ、数学的な条件から、要求する固有値の存在箇所のみ計算できるようにしました。そのことで、扱う固有値解法のうち、著名な反復解法の 1 つである inverse Lanczos method を用いて、かつ、容易に収束するような問題設定にすることができました。その結果、高速に GEVP の計算ができる手法の提案ができました。

また、GEVP 以外にも行列と行列の積の演算がこの問題では必要になります。そのため、FFT を用いて、より少ない計算量で計算ができるようにしました。さらに近年、演算性能の高さと導入費用の安さから利用されている Graphics Processing Unit (GPU) を用いて、このシミュレーションを実行できるようにしました。その結果、現実的な時間で計算を行えることを示しました。

以上のように王教授の講演内容は、アプリケーション、数値アルゴリズム、および高性能実装の観点で幅広い範囲についてなされており、たいへん興味深い講演内容でした。会場からも、活発な質疑がなされました。

当日のプログラムを以下に載せます。

### Program

- 17:30 - 17:35 Opening

- Takahiro Katagiri (The University of Tokyo, Japan)
- 17:35 - 18:30 Invited Talk
  - Professor Weichung Wang (Institute of Applied Mathematical Sciences National Taiwan University)
  - Title: Solving Large-scale Eigenvalue Problems on Multicore CPU and GPU for 3D Photonic Crystal Simulations
  - Abstract: Three-dimensional photonic crystals can be modeled by the Maxwell equations as generalized eigenvalue problems (GEVP). Numerical solutions of the resulting discretized large-scale GEVP play an important role to reveal physical properties and to boost innovative applications of photonic crystals. However, to solve these eigenvalue problems remains a computational challenge in both timing and accuracy because there are many unwanted zero eigenvalues, the coefficient matrix is complicated, and the problem size is large. We tackle this challenge by several novel and efficient matrix computation schemes. The main tool is the explicit eigendecomposition of the degenerate coefficient matrix. By using the explicit eigendecomposition, we transfer the GEVP to a standard eigenvalue problem (SEVP) that contains only the positive eigenvalues and the size is two-third of the original GEVP. The SEVP can be solved by inverse Lanczos method containing several efficient features. (i) The embed linear systems are well-conditioned and can be solved by Conjugate Gradient method without preconditioning. (ii) The most computational costly parts can be rewritten as FFT. (iii) The algorithms are suitable for parallel computers. We implement the algorithms on both multicore CPU and GPU. Numerical experiments show that the proposed eigenvalue solver is very efficient for various geometric structure of the photonic crystals.
- 17:30 - 17:35 Closing
  - Takahiro Katagiri (The University of Tokyo, Japan)
- 19:00- Reception near Hongo

ASE 研究会の開催情報はメールリングリストで発信をしております。研究会メールリングリストに参加ご希望の方は、ASE 研究会幹事の片桐 (katagiri@cc.u-tokyo.ac.jp) までお知らせください。

以上