

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

井町 宏人, 星 健夫 (鳥取大, JST-CREST)

概要: 一般化固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ (A, B : symmetric, B : positive definite)

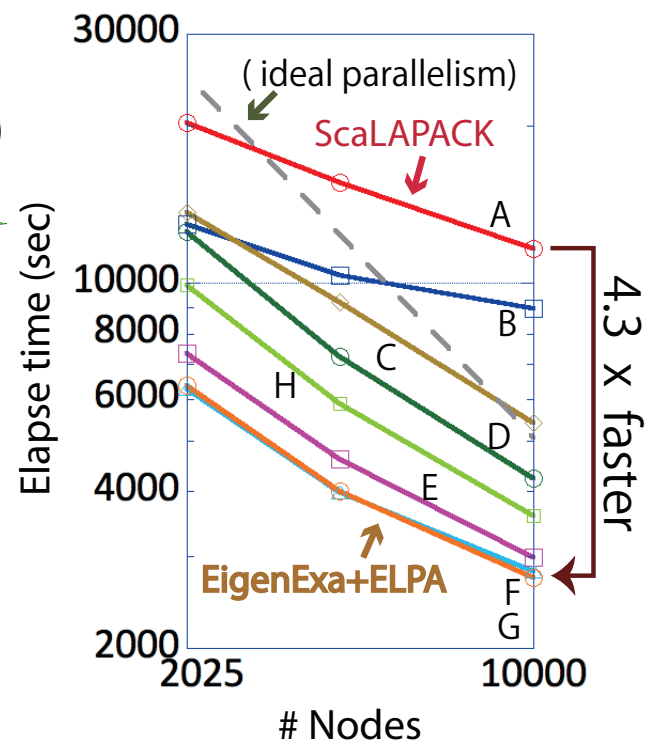
複数の部分的手続き → (直接法)固有値計算ライブラリの複合化による高性能化

: ScaLAPACK, ELPA[1], EigenExa[2]

→ コード公開予定・他ソルバー(クリロフ法など)も追加予定

計算例: 「京」での一般化固有値問題ベンチマーク

- 行列は電子状態計算に由来, 最大100万次元(フルノード計算)
 - 43万次元行列での強スケーリング性(<10000ノード)
- 種々の複合ソルバーの比較・ボトルネックの調査



	SEP solver	Reducer
A	ScaLAPACK	ScaLAPACK
B	EigenExa(sx)	ScaLAPACK
C	ScaLAPACK	ELPA
D	ELPA(2)	ELPA
E	ELPA(1)	ELPA
F	EigenExa(s)	ELPA
G	EigenExa(sx)	ELPA
H	EigenExa(sx)	EigenExa(sx)

- [1] A Marek, et al.,
J. Phys. Condensed
Matter 26,
213201 (2014).
[2] <http://www.aics.riken.jp/labs/lpnctr/EigenExa.html>