

課題番号 14-NA04

## 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

星健夫（鳥取大学, JST-CREST(PostPeta)）

### 概要

独自開発の超大規模超並列電子状態計算コード **ELSESES** (<http://www.elses.jp/>)を対象として、スパコン産業利用を最終目的とした、物理分野（ニーズ）と数理・HPC 分野（シーズ）の融合研究を行っている。計算機は、東京大学 **Oakleaf-FX** を用いた。昨年度成果である「京」での 1 億原子(100 ナノスケール・世界最大)系までの超並列計算を基盤として、本年度は種々の超並列数理ソルバーの高ユーザビリティ手法(=誰でも(理論や HPC に詳しくない者でも)使えるようになるための手法)開発、および応用研究を行っている。主な成果は下記 2 点である：(1)物質応用研究として、有機デバイス材料系の基礎物質である、共役高分子凝縮系計算を行った。(2)数理手法研究として、複数の密行列数値計算ライブラリ (**ScaLAPACK**, **ELPA**, **EigenExa**)を結合した一般化固有値問題ソルバーを構築した。

中間報告からの主な発展として、以下 2 点を記載した：(i)発展的プロジェクトとして **Oakleaf-FX** 全ノード計算(「HPC チャレンジ」)を行った、(ii)展望として 2 つプロジェクト(H27 「京」利用プロジェクト、ポスト「京」プロジェクト)へ発展した。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

東京大学

#### (2) 共同研究分野

□ 超大規模数値計算系応用分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

参加者は、物理系研究者と数理 HPC 系研究者からなる。物理系研究者は星(鳥取大, 代表者)・山元進(東京工科大)・井町宏人(鳥取大 D1)・山崎溪太(同 M2)・横山誠也(同 M1)であり、数理・HPC 系研究者は山本有作(電通大)・曾我部知広(愛知県立大)・宮田考史・張紹良(名古屋大)・工藤周平(神戸大 M2)、である。

役割分担は以下である。

(i) 疎行列型ソルバー・・・星健夫・横山誠也(鳥取大)・曾我部知広(愛知県立大)・張紹良(名古屋大)・山元進(東京工科大)

(ii) 密行列型ソルバー・・・井町宏人・星健夫(鳥取大)・山本有作(電通大)・工藤周平(神戸大)

(iii) 複合型ソルバー・・・星健夫(鳥取大)・宮

田考史・張紹良(名古屋大)

(iv) 関連したデータ処理技術(主に可視化ツール開発)・・・横山誠也・山崎溪太・星健夫(鳥取大)

### 2. 研究の目的と意義

本研究の目的は、並行している **CREST** プロジェクト(注 1)などと連携し、独自開発の超大規模超並列電子状態計算コード **ELSESES** (注 2)を当座の対象として、物理分野（ニーズ）と数理・HPC 分野（シーズ）の融合研究を行うことである。

本研究の意義は、(i)物質科学・(ii)計算科学の 2 点からあげられる。(i)物質科学としての意義は、電子 1 つ 1 つを「波」としてあつかう量子物質計算(電子状態計算)は、量子力学にもとづく盤石な微視的理論基盤をもち、ナノ物質系での応用は、理学・工学の両面から必須である。特に本研究では、1 億原子(100 ナノスケール、世界最大)系までが達成されており(図 1)(注 3)、こうした計算が誰でも(理論や HPC に詳しくない者でも)使えるようになることで、物質科学分野でのスパコン産業利用の飛躍的促進が期待できる。(ii)計算科学と

しての意義は、個々の技術は(数理・HPC 的に)汎用なものであり、電子状態計算以外の分野への「水平的」波及も期待できる点にある。JST-CREST(注 1)などを通じて、計算科学全体を牽引したい。

本年度目的として、申請書には次の 3 点を掲げた。(a) シフト型線形方程式などにおける新しい疎行列型(クリロフ部分空間)ソルバー、(b) ブロックヤコビ法など新しい密行列型ソルバー、(c) 複合型ソルバー(疎行列型ソルバー+密行列型ソルバー)。

(注 1) JST-CREST(ポストペタ領域)平成 23-27 年度「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」(星・山本は分担者)

(注 2) T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang, 'An order- $N$  electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system', J. Phys.: Condens. Matter 24, 165502, 5pp. (2012); <http://www.elsevier.com/locate/physc> (ELSESES = Extra Large Scale Electronic Structure calculation)

(注 3) T. Hoshi, K. Yamazaki, Y. Akiyama, 'Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom electronic structure calculation on the K computer', JPS Conf. Proc. 1, 016004, 4pp. (2014)

### 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

- (i) 物理(電子状態計算)分野研究者と数理・HPC 分野研究者の融合チームであり、基盤的数理研究から超並列化、実用研究まで、全てを垂直統合したプロジェクトが実施できた。
- (ii) 実施マシン(Oakleaf-FX10)は「京」との親和性が高く、「京」向けのソフト開発を行う目的として、理想的であった。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

代表者らは近年大規模(100 ナノ)電子状態計算のコード開発と応用を行っている。コードは独自

の超並列型数理アルゴリズム(注 2)を基盤として開発され、「京」全ノードをもちいた計算では 1 億原子(シリコン単結晶で 126nm 立方領域相当)までの強スケーリング性が確認された(図 1)(注 3)。

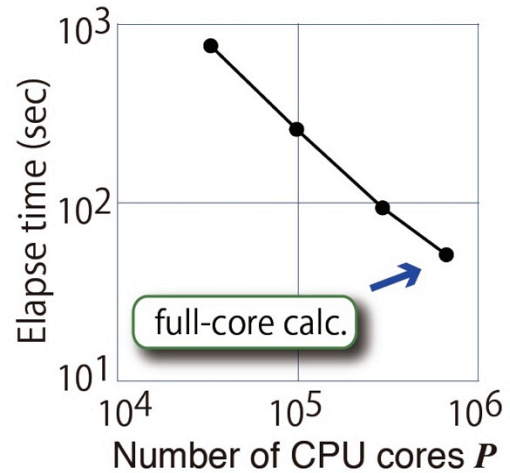


図 1: 「京」での 103, 219, 200(約 1 億, 世界最大)電子状態計算における並列効率(strong scaling)(注 3)。全コア(663, 552 コア)までの計算。物質は、ナノ多結晶ダイヤモンド研究における、sp<sup>2</sup>-sp<sup>3</sup> ナノ複合カーボン固体。

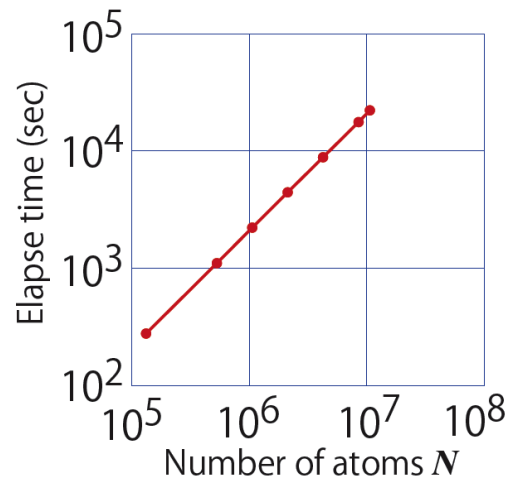


図 2: オーダー $N(O(N))$ スケーリング(注 2)。物質はアモルファス状共役高分子(poly-(9,9 dioctyl fluorene))。

計算手法は、オーダー $N(O(N))$ 型計算である(図 2)。中核となるのは数種類の大規模疎行列向け数理ソルバー((注 2)など)であり、金属・半導体など幅広い物質に適用できる。これらは、第一原理にもとづくモデル化(tight-binding 型, TB 型)理論を用

いている。応用研究としては、有機デバイス材料・sp<sup>2</sup>-sp<sup>3</sup> ナノ複合カーボン固体・電池関連物質、に注力している。手法の詳細や応用研究は、論文(注 2,3)やその文献を参照。

## 5. 今年度の研究成果の詳細

### (1) 申請書・中間報告書との対応

申請書に、以下のテーマを掲げた；(a)シフト型線形方程式などにおける新しい疎行列型（クリロフ部分空間）ソルバー、(b)ブロックヤコビ法など新しい密行列型、(c)複合型ソルバー（疎行列型ソルバー＋密行列型ソルバー）、(d)派生したデータ処理技術（並列化ファイル IO 技術および可視化技術）。また、超並列計算での高ユーザビリティ手法（＝誰でも使えるようになるための手法）の開発もテーマにあげたが、この主な対象は(a)であり、「(3)高ユーザビリティ手法」で述べる。

(a) 疎行列型ソルバーは、前年度までに基礎コードは完成しており、物質科学における実問題として、有機デバイス材料への適用を行った[5, 6, 10, 11, 14, 15]。関連して研究会企画も行った[24, 25]。詳細を「(2) 有機デバイス材料系計算」にあげる。ポイントの多くは、本テーマで使用している。ただし、許可ポイントが申請ポイントの2/3程度であり、当初計画の大規模計算（1万コア以上・100nm スケール）よりはやや小規模計算までとなった。

(b) 密行列型については、昨年度開発したブロックヤコビ法による超並列固有値ソルバの収束性を理論的・実験的に解析した[1]。また、同ソルバを特異値分解に適用するための基礎技術を開発し、予備的な性能評価を行った[2][3]。また、状態密度（固有値ヒストグラム計算）への適用など、手法の特徴を活かした物理分野応用について議論した。

(c) 複合型ソルバー（疎行列型ソルバー＋密行列型ソルバー）については内容を変更した。というのも、利用予定であった密行列ソルバーの一部（ScaLPACK を用いた一般化固有値問題解法のうち、一般化固有値問題から標準固有値問題への変換部分）において、並列効率（強スケーリング性）

が非常に悪くなることが分かったからである。そのため、異なる密行列ソルバーからなる複合型ソルバー（密行列型ソルバー＋密行列型ソルバー）を構築し、強スケーリング性のある最適な複合型ソルバーを構築した[4]。詳細を「(4) 最適結合型密行列ソルバー」にあげる。当初予定とはやや違うものの、一般化固有値問題の密行列ソルバーは電子状態計算の基盤であり、強スケーリング性のある最適複合型ソルバーが構築できたことは、応用上大きな成果と言える。当初目的である複合ソルバー（疎行列型ソルバー＋密行列型ソルバー）は、上記成果により困難が取り除かれたため、次年度以降で実現したい。

(d) データ処理技術については、並列化ファイル IO 用の分割 XML ファイル作成を高速に作成できるようになり、また、大規模電子状態計算むけの汎用可視化ツールの開発と公開[23]（注5）を行った。

なお、当初予定および中間報告書にはない関連（発展的）プロジェクトとして、前段落にある複合型一般化固有値問題ソルバーを Oakleaf-fx 全ノード計算[22]として実行し、一般化固有値問題として世界最大である M=100 万次元系までの有用性を確認した[4]。

以下では、本プロジェクトでの主要な成果である、(2) 有機デバイス材料系計算、(3) 高ユーザビリティ手法、(4)最適結合型密行列ソルバー、を詳しく述べる。

(注4) D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, 'An interior eigenvalue problem from electronic structure calculations', Japan J. Indust. Appl. Math. 30, pp 625-633 (2013)

(注5) 可視化コード[23]は Python を基盤とし、論文(注3)や本報告書図3(b)に用いられている。

### (2) 有機デバイス材料系計算

疎行列ソルバーの応用計算として、有機デバイス材料系（共役高分子）計算を行った。有機材料は、フレキシブル（ウェアラブル）デバイス・医療応用などの広い産業応用が期待できる。これまでの

産学連携研究(注 6)の発展として、共役高分子凝集体に取り組んでいる。巨大な $\pi$ 電子ネットワークであり、本研究の大規模計算にもとづく構造デザインにより、デバイス材料が可能となる(注7)。

まずは結果例を図 3 に示す。発光材料の基礎物質である、共役高分子系 poly-(9,9 dioctyl fluorine) (PF0) (図 3(a) 左) および poly-(para-phenylene vinylene) (PPV) (図 2(a) 右) である。図 3(b) は PF0 10 量体の有限温度計算 (500K) に現れる $\pi$ 電子波動関数である。熱揺らぎによって、モノマー間の 2 面体角が揺らぎ、局在した $\pi$ 電子系が得られた。また、図 3(c) では非理想構造バンドル PPV 系 (長さ  $L \approx$  約 40nm) の有限温度計算 (500K) である。配向自由度が揃い、ドメイン化現象が得られた。これら結果はまだテスト計算レベルであるが、体系的計算を行うことでデバイス設計の指針を与えるものと期待できる。

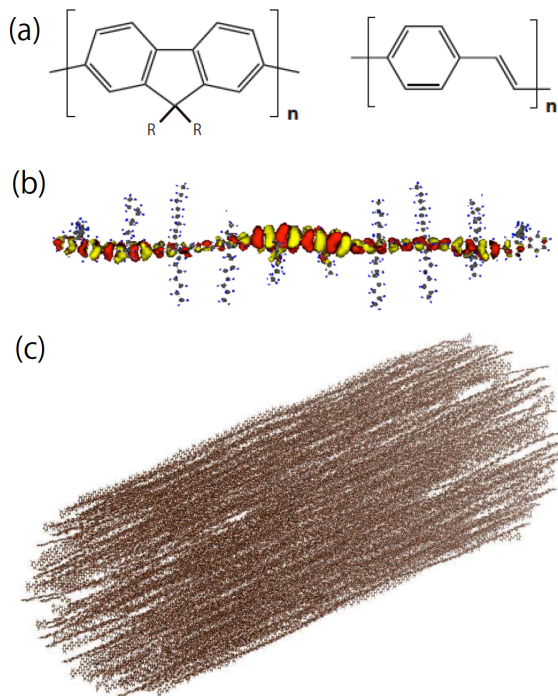


図 3: 有機材料系(共役高分子)計算 ; (a) poly-(9,9 dioctyl fluorine) (PF0) (左)・poly-(para-phenylene vinylene) (PPV) (右) の分子構造。(b) 非理想構造 PF0 系に現れる局在した $\pi$ 電子波動関数 ; (c) 非理想構造バンドル PPV 系 (長さ  $L \approx$  約 40nm)。

本年度の課題は、上記計算を遂行するための手法開発に重きを置いた。課題の 1 つは、高分子鎖間相互作用の取り扱いであり、これは第一原理計算を基礎としてモデル化したファンデアワールス力(注 8)で実現させた。もう 1 つは、簡単に使える効率的並列化であるが、これは次の(3)で記す。

### (3) 高ユーザビリティ手法

「高ユーザビリティ手法」に取り組んでいる。ここでの「高ユーザビリティ手法」とは、主にオーダー  $N$  型(疎行列型)超並列計算を、誰でも(理論や HPC に詳しくない者でも)使えるようになるための手法をさす。一般論として、上記解法は局所性を解法で利用しており、系の局所的性質が均一である系なら、特別な手法を構築しなくても、高い並列効率が実現できる。一方不均一の場合には、高ユーザビリティ手法の開発が重要となる。

高ユーザビリティ手法の 1 つとして、本研究では「準最速法」(注 9)を構築した。シリコンなどの典型的固体系では単純な空間分割が並列計算には有効(図 4(a))だが、高分子系ではそうでない(図 4(b))。そこで、 $O(N)$  計算(図 2)の他に、局所原子リスト作成などの一部の処理を  $O(N^2)$  で行い、純粋な  $O(N)$  計算より、計算コスト・メモリコストが劣るが、設定項目が少なく、非専門家でも容易に扱えるようにした。図 4(c) は、Oakleaf-FX10 における  $P=128$  から 15,360 コアを用いた、PPV バンドル系(図 3(c))の経過時間である。 $P=128$  コア計算を基準とした  $P=15,360$  コア計算の並列効率(強スケールリング)  $\alpha$  は、 $\alpha=0.86$  であった。 $P=15,360$  コア計算では、1 時間ステップが 10 秒弱である。数千時間ステップが数時間で完了する計算であり、十分な実用性を持っている。

(注 6) これまでの共役高分子系計算(注 2)では、石田雅也(住友化学)らからデータ提供を受けた(論文(注 2)の謝辞欄参照)。

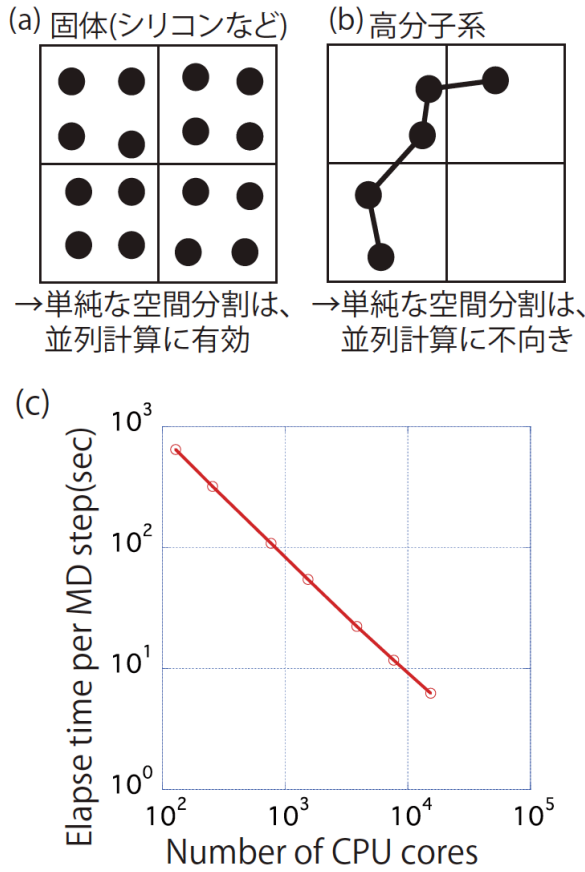


図 4: (a) 典型的固体系(シリコンなど)・(b) 高分子系の模式図。単純な空間分割は、前者の並列計算には有効であるが、後者は有効でない。(c) 共役高分子凝集系 (PPV バンドル系) (図 3(c))における「準最速」並列計算。

(注 7) 先行研究の例; J. Terao, *et al.*, 'Design principle for increasing charge mobility of  $\pi$ -conjugated polymers using regularly localized molecular orbitals', *Nature Comm.* 4, 1691 (2013).

(注 8) F. Ortman, F. Bechstedt, W. G. Schmidt, 'Semi-empirical van der Waals correction to the density functional description of solids and molecular structures', *Phys. Rev.* B73, 205101 (2006).

(注 9) 「準最速法」とは、本研究における造語である。「最速ではないが、誰でも(非専門家でも)容易に扱うことができる」方法をさす。

#### (4) 最適結合型密行列ソルバー

(2)を補完する数理手法として、大規模一般化固有値問題( $Hy_k = \lambda_k Sy_k$ )に対する最適結合化された分散並列ソルバを開発した。ここで左辺行列( $H$ )は対称行列で、右辺行列( $S$ )が正定値対称行列である。最適結合化ソルバーの基礎となる分散並列数値計算ライブラリとして、現状でのデファクトスタンダードである ScaLAPACK のほか、近年のアーキテクチャに適合した EigenExa(注 10)、ELPA(注 11)を取り上げた。テスト系は、我々の電子状態計算で見られる実問題行列(注 12)を用いた。

上記一般化固有値問題に対する代表的な密行列解法は順に次のような手続きを行うものである: (i) コレスキー分解を通じた対称標準固有値問題( $(\tilde{H}\tilde{y}_k = \lambda_k \tilde{y}_k)$ )への帰着、(ii) 三重または五重対角化、(iii) 分割統治法、(iv) (ii)に関わる固有ベクトルの逆変換、(v) (i)に関わる固有ベクトルの逆変換。このうち(ii)~(iv)が標準固有値問題に対する手続きである。このように解法がいくつかの部分的な手続きからなっているため、それぞれの手続きについて最適なルーチンを 3 ライブラリ (ScaLAPACK・EigenExa・ELPA) から選んで組み合わせることが考えられる(図 5(a))。手続き(i)~(v)についてそれぞれ、3 ライブラリから高性能ルーチンを選択する(注 13)ことで結合化ソルバを実現し、最速なソルバーを「最適結合化ソルバー」とすることにした。

性能測定は様々な次元の入力行列に対して行ったが、ここでは測定した内で最大の 225,000 次元の行列を入力としたときの強スケーリングベンチマーク結果を図 5(b)に示す。まず標準固有値問題への帰着に用いるライブラリで大きく 2 グループに分かれ、ScaLAPACK を用いるよりも ELPA を用いた方がよくスケールすることが分かる。その中でも標準固有値問題に対し eigen\_sx (EigenExa) を用いたソルバー (eigen\_sx (EigenExa) + ELPA) が最速ソルバーと言える。

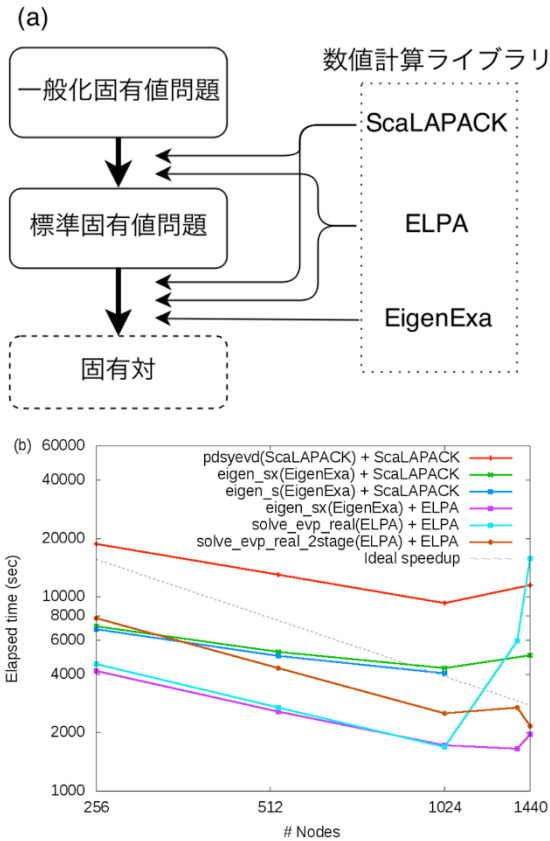


図 5: (a) 最適結合型密行列ソルバ構成の概略図。一般化固有値問題から標準固有値問題への変換および逆変換(本文中の手続き(i)、(v))、標準固有値問題の求解(本文中の手続き(ii)、(iii)、(iv))の両者に対して3種の数値計算ライブラリから最適なものを選択する。(b)  $M=22.5$  万次元行列に対する並列効率(強スケーリング)ベンチマーク。ソルバの名称は「標準固有値問題に対して用いたライブラリ」 + 「一般化固有値問題から標準固有値問題への変換に用いたライブラリ」という形式。破線はノード数の増加に対し線形に速度が向上する理想的な場合の傾きを示す。

ソルバの性能は計算機の特性に大きな影響を受けるので、今後様々な計算機上で性能評価を行うことは重要である。現在「京」コンピュータでの評価を別プロジェクトで実施中である。

(注 10) <http://www.aics.riken.jp/labs/lpnctr/EigenExa.html>

(注 11) A Marek, et al., J. Phys. Condensed Matter 26, 213201 (2014).

(注 12) <http://www.elses.jp/matrix/>

(注 13) 各ライブラリで使用するルーチンについて詳細を述べる。一般化固有値問題から標準固有値問題への帰着に ScaLAPACK を用いる際には、手続き(i)で pdpotrf および pdsygst を、手続き(v)で pdtrtrs を呼び出す。ELPA はこれらと同じ役割のルーチンを再実装しており、コレスキー分解の逆行列を陽に求めるという点で ScaLAPACK のものとはアルゴリズム的にも異なる。一方、標準固有値問題を解く際には、ScaLAPACK より pdsyevd、EigenExa より eigen\_s および eigen\_sx、ELPA より solve\_evp\_real および solve\_evp\_real\_2stage の計 5 つのルーチンが存在する。これらのうち pdsyevd、eigen\_s、solve\_evp\_real は広く知られた三重対角化を経由する手法であり、差異は実装上のものである。残る eigen\_sx と solve\_evp\_real\_2stage は、三重対角化がボトルネックになることに着目し、五重対角化を経由することでこれを解決しようとしたライブラリであり、この点で類似しているが、詳細なアルゴリズムは異なっている。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

申請内容以上の成果があがっている点は、2 点ある。(I)Sec. 5-(3)にあげた「準最速」型並列計算が予想以上の強スケーリング性能を示し(図 4(c))、「超並列計算を誰でも(理論や HPC に詳しくない者でも)使えるようになる」という見地にたつての大きな発展である。(II)Sec. 5-(4)において、当初想定していなかった高速な結合型ソルバー (EigenExa + ELPA) が構築できた。それを基盤として、Oakleaf-fx 全ノード計算[22]が実行され、一般化固有値問題として世界最大である  $M=100$  万次元系までの有用性を確認した。

全体としては、「物理・数理・HPC の統合研究により超並列超大規模電子状態計算を実用化しスパコン産業利用へつなげていく」という大局的に照らして、「当初想定以上の成果があがってい

る」と考えている。

展望として、本プロジェクトは下記の 2 プロジェクトに発展している。

- 平成 27 年度「京」利用プロジェクト(一般利用)「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(当プロジェクト代表)が代表。他、当プロジェクトから山本(電通大)・山元(東京工科大)・井町宏人(鳥取大 D 学生)が参加。
- ポスト「京」重点課題 7(H27 年 2 月～)「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」; 当プロジェクトメンバーから、星(代表)・山本(電通大)が参加。

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文([4]は投稿中)

[1] Y. Yamamoto, L. Zhang and S. Kudo, "Convergence analysis of the parallel classical block Jacobi method for the symmetric eigenvalue problem", JSIAM Letters, Vol. 6, pp. 57-60 (2014).

[2] T. Yamashita, K. Kimura and Y. Yamamoto, "A new subtraction-free formula for lower bounds of the minimal singular value of an upper bidiagonal matrix", Numerical Algorithms, to appear. (DOI: 10.1007/s11075-014-9931-z)

[3] S. Araki, K. Kimura, Y. Yamamoto and Y. Nakamura, "Implementation details of an extended oqds algorithm for singular values", JSIAM Letters, Vol. 7, pp. 9-12 (2015).

[4] (投稿中) H. Imachi and T. Hoshi, 'Hybrid numerical solvers for massively parallel eigenvalue computation and their benchmark with electronic structure calculations', submitted (preprint: <http://arxiv.org/abs/1504.06443>)

### (2) 国際会議プロシーディングス

[5] 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', Proceedings of Science, in press.

### (3) 国際会議発表学術論文

[6] (招待講演) T. Hoshi, H. 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), Koshiba Hall, University of Tokyo, 1-3, Dec., 2014,

[7] (招待講演) Y. 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, China, Aug. 25-28, 2014.

[8] T. Fukaya, T. Imamura and Y. Yamamoto, 'Performance analysis of the Householder-type parallel tall-skinny QR factorizations toward automatic algorithm selection', iWAPT2014, Eugene, Oregon, July 1, 2014.

[9] H. Imachi, T. Hoshi, 'Optimally combined eigenvalue problem solvers and their benchmark on the K computer', JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software (ISP2S2), 2-4. Dec., 2014

### (4) 国内会議発表

[10] (招待講演) 星健夫, 「京での 100 ナノ電子状態計算とその展望」, 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, 2014 年 11 月 12-14 日, 東京大学

[11] (招待講演) 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 「応用数理と計算科学の連携 II」, 2015 年 1 月 15 日, 大阪大学(配信)

[12] 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」, 2014 年 7 月 26 日, 応用物理学会中国四国

支部合同学術講演会，香川大学

[13] 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」，2014 年 9 月 3-5 日，日本数理学会，政策研究大学院大学。

[14] 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」，2014 年 9 月 17-20 日，日本応用物理学会，北海道大学。

[15] 星健夫，「京での 100 ナノ電子状態計算と有機物質系」，インフォーマル計算科学セミナー ～100 ナノ有機物質量子シミュレーションにむけて～，2014 年 10 月 9 日，東京工業大学

[16] 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，2014 年 11 月 12-14 日，東京大学

[17] 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，2014 年 12 月 25 日，東京大学

[18] 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，2015 年 3 月 6-7 日，明治大学

[19] 星健夫，「超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，2015 年 3 月 6-7 日，明治大学

[20] (予定) 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」，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)，2015 年 5 月 19-20 日，東京大学

[21] (予定) 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)，2015 年 6 月 8-10 日，山梨県甲

州市

(5) その他 (特許，プレス発表，著書等)

[22] (発展的プロジェクト) 星健夫，井町宏人，東京大学 Oakleaf-FX スーパーコンピュータシステム大規模 HPC チャレンジ，2014 年 12 月 18-19 日。注：Oakleaf-fx 全ノードでの計算 (24 時間限定)。

[23] (コード公開) 大規模電子状態計算むけ汎用可視化ツール「VisBAR Wave Batch」；<http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/visbar/>

[24] (研究会企画) 「インフォーマル計算科学セミナー ～100 ナノ有機物質量子シミュレーションにむけて～」東工大，2014 年 10 月 9 日；世話人：多田朋史 (東工大)・星健夫 (鳥取大)。注：科研費新学術領域「 $\pi$  造形科学：電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出」によるコロキウムを兼ねる。

[http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/info/semi\\_20141009\\_100nano.pdf](http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/info/semi_20141009_100nano.pdf)

[25] (研究会企画) 「次世代デバイスと先端シミュレーション」鳥取大，2015 年 1 月 21 日；世話人：星健夫 (鳥取大)。

<http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/info/2015-01-Workshop.pdf>