

氏名(本籍)	張 士勛 ( 中国 )		
学位の種類	博士 ( 工学 )		
学位記番号	博 甲 第 6681 号		
学位授与年月日	平成 25 年 7 月 25 日		
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当		
審査研究科	システム情報工学研究科		
学位論文題目	Performance Acceleration of Lattice Model Simulations for Interacting Electrons Applying Kernel Polynomial Method on GPUs (相互作用する多電子系のためのカーネル多項式法を適用した格子モデルシミュレーションの GPU 上での性能向上技法)		
主査	筑波大学 教授	學術博士	和田 耕一
副査	筑波大学 教授	博士 (工学)	安永 守利
副査	筑波大学 教授	博士 (工学)	櫻井 鉄也
副査	筑波大学 講師	博士 (工学)	山口 佳樹
副査	筑波大学 准教授	博士 (工学)	山際 伸一
副査	理化学研究所 准主任研究員	博士 (工学)	柚木 清司

## 論文の要旨

物質科学に関する研究は現代の技術革新にとって重要な位置を占めている。量子論を基盤とする物性物理学においては、格子状に配列させた原子や電子といったミクロな視点から物質の振る舞いを観察する。それらの振る舞いを数値計算によるアプローチで明らかにし、物性を解明する研究が盛んに行われている。

カーネル多項式法 (Kernel Polynomial Method: KPM) は複雑さの低さと柔軟さから、最も利便性の高い方法の一つとして注目されている。しかし、KPM は、密な再帰計算を含む多項式法であるため、クラスタやスパコン等の並列計算機におけるメッセージパッシングパラダイムに基づいた実行環境において、高い性能を達成するのは困難である。さらに、KPM における計算ではメモリアクセスが頻発するため、CPU をベースとしたマシンで高性能を得ることは難しい。

本研究では、KPM を GPU に実装することで高速化する。本論文では、Density of States、Local Density of States、Green's Function に KPM を適用する。すべての性能評価結果で、CPU と比較して GPU が圧倒的に高い性能を示している。すなわち、本計算手法を GPU に適用することで、通信を多用しノード間同期が多発する並列化や、メモリバンド幅による限界がネックとなっていたことを克服した。本研究で開発したプログラムは、物性物理学の研究に対するツールとして利用できるようライブラリとしてまとめている。

## 審査の要旨

### 【批評】

本論文は、カーネル多項式法 (Kernel Polynomial Method: KPM) を GPU に実装し、並列度の高いアルゴリズムを提案し、評価している。GPU が持つ高い並列度、および高いメモリバンド幅を有効に引き出すプログラムの構成技法を提案し、GPU を利用することで CPU に比して極めて高い性能が得られることを示している。評価では、実際の物理量 (Density of States、Local Density of States、Green's function) を計算し、物性物理学に関する有用な結果も得ている。GPU を複数搭載したクラスタ型計算機を用いることで、KPM のさらなる高速化も達成している。また、本研究の成果をライブラリとしてまとめ、物性物理学研究者に新たなツールを提供している。以上より、本論文は博士 (工学) の学位論文としてふさわしい内容と判断する。

### 【最終試験の結果】

平成 25 年 5 月 31 日、システム情報工学研究科において、学位論文審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、学位論文審査委員全員によって、合格と判定された。

### 【結論】

上記の学位論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士 (工学) の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。