

京都大学教育研究振興財団助成事業  
成果報告書

平成23年6月3日

財団法人京都大学教育研究振興財団  
会長 辻 井 昭 雄 様

所属部局・研究科 学術情報メディアセンター

職名・学年 准教授

氏名 岩下 武史

事業区分	平成22年度・中期派遣助成		
研究課題名	大規模並列計算環境のための高度な数値計算ライブラリと運用技術		
受入機関	ローレンスバークレー国立研究所		
渡航期間	平成23年3月25日 ～ 平成23年5月31日		
成果の概要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> 有( )		
会計報告	交付を受けた助成金額	500,000円	
	使用した助成金額	500,000円	
	返納すべき助成金額	0円	
	助成金の使途内訳 (使用旅費の内容)	旅費(往復航空運賃等)	180,180円
		滞在費(宿泊費および日当の一部)	319,820円

## 成果の概要／岩下武史

### 1. 研究の目的と滞在中の主な研究活動

貴財団の援助を受けた今回のローレンスバークレー国立研究所（アメリカ合衆国、期間 2011 年 3 月 25 日～5 月 31 日）における在外研究の主な目的は、近年注目される計算科学と呼ばれる計算機（スーパーコンピュータ）を活用した、物理、化学、医学、工学といった分野での研究活動を支援するために必要な数値計算ライブラリ技術の開発やその展開、及びスーパーコンピュータの効率的な運用技術の確立に関する情報交換と共同研究の推進にある。本目的のために滞在期間において、ローレンスバークレー国立研究所（以下、LBNL）およびカリフォルニア大学バークレー校（以下、UCB）において研究討議を行った。LBNL では公開セミナー1 回と少人数の研究者によるプライベートセミナーを 3 回にわたって開催し、また、UCB では Department of Mathematics の講義の 1 コマとして公開セミナーを 1 度行った。詳細は個別の研究活動とあわせて以下に述べる。

### 2. 滞在中の研究活動の詳細

#### 2. 1 IC/ILU 前処理の並列化に関する研究

有限要素解析に代表される多くの計算科学、工学のシミュレーションにおいて、連立一次方程式の求解（以下、線形ソルバ）は最も計算時間を要する部分となっている。そこで、岩下は代表的な線形ソルバの一つである IC/ILU 分解前処理付き反復法の並列化に関して研究を行ってきた。その結果、2002 年度において、規則的な構造格子に基づいた解析における新しい並列化手法として、ブロック化赤-黒順序付け法を考案し、その優位性に関する解析的な分析と共に、*Intl. J. Parallel Programming*, *SIAM J. Sci. Comput.* の両誌に発表を行っている。こうした背景の下で、近年、同手法を不規則メッシュによる解析を含めた、一般の疎係数行列を持つ連立一次方程式に展開することを目的とした研究を行い、代数的ブロック化多色順序付け法と呼ぶ方法について検討を行ってきた。そこで、本研究内容について、4 月 22 日に LBNL において公開セミナー（講演会）を開催するとともに、4 月 19 日にホストである Marques 博士とのプライベートセミナーを 4 時間にわたって行った。これらのセミナーにおいて、本研究の今後の進展、特にマルチコアプロセッサやプロセス並列環境における将来的な展望に関する有意な知見が得られた他、LBNL で取り組んでいる計算科学シミュレーションにおける活用に関して有意義な議論を行う事ができた。

#### 2. 2 大規模電磁場解析に関する研究

岩下は 2007 年以降において、京都大学大学院工学研究科の美船健助教、ソニー株式会社と共に幾何マルチグリッド法に基づいた大規模な並列電磁場解析に関する研究を行ってきた。本解析では、AFW スムーザと呼ばれる一般に並列化が困難な計算手順に対して、Hybrid parallel ordering 法と呼ぶ手法を提案し、国際的にも例が少ない約 8 億自由度の問題を 250 秒以内で解くことを可能とした。本研究内容について、UCB の講義 (Scientific Computing and Matrix Computations Seminar) の一環として 5 月 4 日に公開セミナーを開催した。講義の開催案内は <http://math.berkeley.edu/~mgu/LAPACKSeminar.htm> に記載されている。本セミナーにおいて、一般の乗法シュワルツスムーザの並列化に関する情報交換やプロセス並列とスレッド並列を併用するハイブリッド並列方式の優位性について議論を行い、今後の研究展開において有用な知見を得た。

## 2. 3 高速なポアソンソルバに関する研究

近年、計算科学において複数の物理現象を同時に扱うマルチフィジックスシミュレーションが注目されている。マルチフィジックスシミュレーションでは、しばしばFFTや連立一次方程式の求解が用いられるポアソン求解部が解析の高並列実行を妨げ、問題となっている。そこで、岩下は情報学研究科修士（現：博士）学生の河合氏と協力し、マルチグリッド法に基づいた高速な並列ポアソンソルバを開発し、これをライブラリとして整備した。本ポアソンソルバライブラリについて、LBNLで実施されている粒子シミュレーションでの活用を目的とし、5月13日にLi博士、Qiang博士らとプライベートセミナーを行った。本ライブラリが使用している並列化ガウス＝ザイデルスムーザの性能について、既存手法を上回ることを説明し、LBNLにおけるシミュレーションへの移植の問題点について討議を行った。今後のライブラリの高性能化の方向性に関する有意な知見を得た他、今後の協力体制についても有意義な議論ができた。

## 2. 4 次世代のスーパーコンピュータを活用する為の諸技術

LBNLに滞在中に、同研究所のMarques博士、Li博士、Canning博士らと頻繁に今後の計算科学に必要とされるソフトウェア技術について討論を行った。現在、日本では神戸において京コンピュータの運用開始が目前と迫っている。このような大規模なスーパーコンピュータを効率的に活用するためには、同計算機上で実行されるプログラムが高い実効演算性能を有している必要がある。しかし、現在、ハイエンドのスーパーコンピュータの構成は複雑なものとなり、10万を超える並列度の活用が要求されることが少なくない。こうした背景の下、日米間のみならず、あらたなプログラミングパラダイム確立の必要性が国際的に認知されている。このような現状の下で、数値計算ライブラリとして求められる要求要件がどのようなものになるか、またスーパーコンピュータの運用においてどのような点に留意する必要があるかについて討論を行い、有意義な情報交換ができた。

## 3. 今後のローレンスバークレー国立研究所との協力体制について

今回の滞在期間において、LBNLの複数の研究員と研究討議を重ね、引き続き京都大学との連携が有益であるとの結論に至った。また、滞在期間中に国際会合のため、京都大学学術情報メディアセンターの中島浩センター長がサンフランシスコに来る機会があったため、バークレーにおいてMarques博士を含めて3者で研究討議を行った。その結果、今年度の下半期以降においてJSPS等の招へいプログラムの支援を申請し、Marques博士を京都大学に招へいする計画が成立した。このように今後もLBNLと学術情報メディアセンターの連携を図っていく予定である。