

[2005]九州大学情報基盤センター一年報 : 2005年度

<https://doi.org/10.15017/1467612>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター一年報. 2005, 2006. 九州大学情報基盤センター
バージョン :
権利関係 :

第4章 スーパーコンピューティング研究部門

4.1 スタッフ一覧

職名	氏名	研究キーワード
教授	藤野 清次	反復解法, Krylov 部分空間法, BiCGSafe 法, GPBiCG(M,L) 法, 対角緩和 RIC 分解つき CG 法, 高速数値計算法, 並列算法
助教授	渡部 善隆	精度保証付き数値計算, 偏微分方程式, 有限要素法, 区間解析, 誤差評価

4.2 研究事例紹介

1. 対角緩和 RIC 分解

前処理付き共役勾配法は，偏微分方程式を FEM や FDM で離散化して得られる連立一次方程式が大型の疎な対称正定値行列を係数行列として持つ方程式に対する有力な数値解法としてよく使用される．また，Ajiz らによるロバスト IC 分解は，分解過程で発生するフィルインの影響を考慮し，要素の棄却 (dropping) ごとに対角項の要素に修正を加え対角項の値が負になることを防ぐ分解法であり有望な前処理法とされる．またこの前処理では分解の中断がないので，これはロバスト不完全コレスキー分解と呼ばれる．我々が提案した対角緩和 RIC 分解のアルゴリズムを以下に示す．ただし，行列 A は予め対角項の値が 1 に正規化されている． v_j は作業用列ベクトルの j 番目の要素． tol_1 は要素 u_{ij} の棄却判定の閾値を表す．表-1 に開発したプログラムの一覧を示す．また実例の 1 つとして表-2 に構造解析で現れたある行列 (BEAM) に対する収束性を示す．

```

 $d_i = a_{ii} \quad (i = 1, \dots, n)$ 
for  $i = 1, \dots, n$ 
  for  $j = i + 1, \dots, n$ 
     $v_j = a_{ij}$ 
  end for
  for  $k = 1, \dots, i - 1$ 
    for  $j = i + 1, \dots, n$ 
       $v_j = v_j - u_{ki}u_{kj}$  (非対角項の計算)
    end for
  end for
  for  $j = i + 1, \dots, n$ 
     $\xi = |v_j| / \sqrt{d_i d_j}$ 
    if  $\xi \leq \text{tol}_1$  then  $v_j = 0$ 
       $d_i = (1 + \omega\xi)d_i$  (対角項  $d_i$  の修正)
       $d_j = (1 + \omega\xi)d_j$  (対角項  $d_j$  の修正)
    end if
  end for
   $u_{ii} = \sqrt{d_i}$  (対角項を求める)
  for  $j = i + 1, \dots, n$ 
     $u_{ij} = v_j / u_{ii}$  (非対角項を求める)
     $d_j = d_j - u_{ij}^2$  (対角項の計算)
  end for
end for.

```

表 4.1: 代表的な IC または RIC 分解型反復法のプログラム一覧

プログラム	前処理と反復法
IC0_CG.f90	IC(0) 分解つき CG 法
RIC1_CG.f90	RIC1 分解つき CG 法
RIC2S_CG.f90	RIC2S 分解つき CG 法
MRIC2S_sub.f90	改良版 RIC2S 分解 CG 法
DRRIC_CG.f90	対角緩和つき RICCG 法
Adapt_DRRIC_CG.f90	ω 自動決定 DRRIC-CG 法
Dblock_DRRIC_CG.f90	ブロック DRRIC-CG 法
DSep_DRRIC_CG.f90	対角分離 DRRIC-CG 法
RIC0_sub.f90	RIC(0)-CG 法
MRIC0_sub.f90	改良版 RIC(0)-CG 法
MRTR.f90	スケーリング MRTR 法
DRRIC_MRTR.f90	対角緩和 MRTR 法
COCG.f90	複素対称 COCG 法
IC0_COCG.f90	IC(0) 分解 COCG 法
CSIC_COCG.f90	複素シフト IC-COCG 法
COCR.f90	スケーリング COCR 法
ABRB_IC	(並列) 加速 IC(0)CG 法
ABRB_RIC_ ω	(並列)VRIC(ω) 分解 CG 法
ABRB_PBF_IC	(並列)PBF-加速 IC(0)CG 法
ABRB_PBF_RIC	(並列)PBF-VRIC(ω)CG 法

表 4.2: シェル要素解析 (行列 BEAM) に対する前処理つき CG 法の収束性

前処理+CG	反復回数	Pre-時間	CG時間	合計時間	メモリ量
なし	18014	-	82.3	82.3	3.35
IC	max	-	-	-	-
重み IC	7269	0.05	72.9	73.0	3.36
RIC	1065	0.30	13.8	14.1	6.67
対角緩和 RIC	204	1.43	4.85	6.28	10.5

4.3 研究内容紹介

4.3.1 藤野 清次

研究内容

- 大規模科学計算・並列算法の研究

計算機のすさまじい発達, 特に高速化により, 科学と工学の研究開発で発生する問題は今後ますます大規模になり, 同時にそれらを解決する科学技術計算の重要性がますます高くなっている. そこで, 計算工学, 数値解析学の基礎理論に基づいて高速算法の研究開発を行なっている. 開発した高速算法を利用し, 計算物理学やエンジニアリングなどの科学技術計算分野に現れる諸問題を高速並列計算機を用いて数値的に解明する. 特に, 2005年4月から情報基盤センターにおいて稼働し始めた IBM eServer p5 モデル 595 はスレッド数 416, 1 ノードの共有メモリ量は 512GB の共有メモリ型並列計算機で, この計算機に向けた高速並列算法の開発を目指す.

- 環境・エネルギー問題解決に向けての科学技術計算

地球規模での環境問題は人類共通の課題としてその解決に向けた様々な取り組みが行なわれている. たとえば, 環境に優しいエコカー, ハイブリッドカーの開発, 燃料電池の開発と実用化, 太陽電池発電そして人に優しいロボットの開発と民生化, あるいは地中資源探索などこれらが新聞やマスコミで取り上げられない日はないといっても過言ではない. これらに共通しているのは効率的な電気エネルギーの変換と最適設計そして開発期間の短縮である. そこで, 企業との共同研究も含めて, その研究開発に役に立つソフトウェア支援を行なっている. すでに, その一部, すなわち並列版高速前処理つき共役勾配法は, 大学の共同研究者あるいは共同研究中の企業等の研究所で実際に使われており, 多くの研究者の研究開発に役に立っている.

研究のキーワード

反復解法, Krylov 部分空間法, BiCGSafe 法, GPBiCG(M,L) 法, 対角緩和 RIC 分解つき CG 法, 高速数値計算法, 並列算法

所属学会名

日本応用数理学会, 情報処理学会

研究業績

- 主な研究テーマ

1. 数値計算, 大規模並列計算.

- 学会発表等

1. 藤野清次: 大規模な行列に対して前処理付き CG 法を適用したときのメモリ量の比較, 富士通 SMP スレッド WG 第 2 回会合資料, 汐留シテイセンター, 2005.4.25.
2. S. FUJINO, A. INOUE, M. KAKIHARA: Enhancement of Parallelism for a Variant RIC(ω) CG Methods Using the PBW (Percentage of Band Width) Index for matrices, Abstract of Preconditioning 2005, Atlanta, May 19-21, 2005.

3. 藤原牧, 藤野清次, 吉田正浩: 前処理つき BiCGSafe 法の電磁場解析への応用と評価, 計算工学講演会論文集 第 10 号, pp.1111-114, 2005.5.
4. 藤野清次, 井上明彦, 畑崎隆雄: PBW 指標の導入による VRIC(ω)-CG 法の並列効果度の向上とその収束特性, 計算工学講演会論文集 第 10 号, pp.231-234, 2005.5.
5. 吉田正浩, 藤野清次, 岡田裕: 重合メッシュ法による複合材料解析に対する RIF 前処理つき CG 法の収束性, 計算工学講演会論文集 第 10 号, pp.511-514. 2005.5.
6. 井上明彦, 松原仁, 神田康行, 藤野清次, 伊良波繁雄, 富山潤: 回転自由度を有する要素を用いた剛性方程式に対する前処理つき CG 法の収束特性, 計算工学講演会論文集 第 10 号, pp.691-694, 2005.5.
7. 藤野清次, 反復解法 vs. 直接解法, 第 3 回「波と数値計算」合同セミナー 予稿集資料, 九州大学西新プラザ, 2005.7.2.
8. S. FUJINO, M. FUJIWARA, M. YOSHIDA: A proposal of preconditioned BiCGSafe method with safe convergence, Proc. of The 17th IMACS World Congress on Scientific Computation, Applied Mathematics and Simulation, CD-ROM, Paris, France, 2005.7.11-15.
9. M. FUJIWARA, S. FUJINO, M. YOSHIDA: Safe convergence of preconditioned BiCGSafe method in the analysis of large eddy currents problem, Proc. of The 2nd Int. Conf. on Cybernetics and Information Technologies, Systems and Applications, pp.267-272, Orland, Florida, 2005.7.14-17.
10. M. YOSHIDA, S. FUJINO, H. OKADA: Masking RIF preconditioner of CG method for composite materials analysis using s-version FEM, Proc. of The 2nd Int. Conf. on Cybernetics and Information Technologies, Systems and Applications, pp.166-169, Orland, Florida, 2005.7.14-17.
11. 藤野清次: フィルインの選択に基づく改良版 ABRB 順序付け法による並列化 ICCG 法の性能, 情報処理学会研究会 2005-HPC-103, pp.13-18, 2005.8.3-5.
12. 藤野清次: フィルインを考慮した並列版 ICCG 法と性能評価, 富士通 SMP スレッド WG 第 3 回会合資料, 名古屋大学情報連携基盤センター, 2005.8.24.
13. 藤野清次, 藤原牧, 吉田正浩: 非対称行列用の前処理 ILUC(Crout) つき BiCGSafe 法の収束性について, 電気学会 静止器回転機合同研究会資料 SA-05-66 RM-05-73, pp.9-14, 2005.9.8-9.
14. 藤野清次, 藤原牧, 吉田正浩: Crout 版 ILU-BiCGSafe 法の安全収束性について, 日本応用数理学会 2005 年度年会講演予稿集, pp.16-17, 2005.9.23-25.
15. 岡田真幸, 櫻井鉄也, 柿原正伸, 藤野清次, 長嶋雲兵: 分子軌道計算で現れる行列に対する反復法の前処理について, 日本応用数理学会 2005 年度年会講演予稿集, pp.14-15, 2005.9.23-25.
16. 藤野清次: 複合材料分野で現れる疎行列に対する新しい前処理つき反復解法ライブラリーの構築, 日本機械学会 M & M2005 材料力学カンファレンス講演論文集, 九州大学伊都キャンパス, pp.113-114, 2005.11.4-6.
17. 藤原牧, 吉田正浩, 藤野清次: 棄却した要素に基づいて対角項を修正する Crout 版 ILU-BiCGSafe 法の収束性評価, 第 9 回環瀬戸内応用数理研究部会 シンポジウム予稿集, pp.58-63, 金沢大学, 2005.11.12-14.
18. 塩出亮, 藤野清次, 阿部邦美: 対称正定値行列用の MRTR 法の前処理とソフトランディング収束, 第 9 回環瀬戸内応用数理研究部会 シンポジウム予稿集, pp.88-93, 金沢大学, 2005.11.12-14.

19. 吉田正浩, 藤野清次: IC 分解をベースとした近似逆行列前処理の性能評価, 第 9 回環瀬戸内応用数理研究部会 シンポジウム予稿集, pp.94-99, 金沢大学, 2005.11.12-14.
20. 長嶋利夫, 塩出亮, 藤野清次: X-FEM 解析における前処理つき CG 法の収束性評価, 第 18 回計算力学講演会 講演論文集, 筑波大学, pp.385-386, 2005.11.19-21.
21. 藤野清次: 電磁界解析で現れる線形方程式に対する前処理つき反復法の現状と課題, 第 18 回計算力学講演会 講演論文集, 筑波大学, pp.645-646, 2005.11.19-21.
22. 神田康行, 佐々木優, 伊良波繁雄, 富山潤, 藤野清次, 山城建樹: 回転自由度を有する立体要素の薄板解析への適用に関する一考察, 第 18 回計算力学講演会 講演論文集, 筑波大学, pp.753-754, 2005.11.19-21.
23. 藤野清次: IC 分解をベースとした近似逆行列型前処理の性能評価, 富士通 SMP スレッド WG 第 4 回会合資料, 汐留シテイセンター, 2005.11.25.
24. 吉田正浩, 藤野清次: 不完全コレスキー分解に基づく近似逆行列型前処理の性能評価, 京都大学数理解析研究所「計算科学の基盤技術とその発展」研究集会 予稿集, pp.8-10, 2005.11.30-12.2.
25. S. Fujino, M. Fujiwara, M. Yoshida: Realization of Safe Convergence based of Triple Strategies, Abstract of Joint Workshop on Computational Chemistry and Numerical Analysis -CCNA2005-, Akihabara Dai Bld., pp.6-7, 2005.12.5-6.
26. 藤野清次: 大規模スパース行列解法の基礎と応用, 電気学会 静止器技術研究会主催 第 15 回電磁界数値解析に関するセミナー講演論文集, 早稲田大学, pp.61-90, 2005.12.15.
27. 藤原牧, 吉田正浩, 藤野清次: 収束の三重の安全鍵を与える Crout 版 ILU 分解つき BiCGSafe 法, 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 HPCS2006, pp.113-120, 2006.1.19-20.
28. 藤野清次, 塩出亮, 阿部邦美: MRTR 法の Soft_Landing 収束について, 電気学会 静止器回転機合同研究会資料 SA-06-11 RM-06-11, pp.55-60, 2006.1.26-27.
29. 藤野清次: 近似逆行列 (SAINV) vs. ロバスト IC 近似逆行列 (RIC_AINV) 前処理, 富士通 SMP スレッド WG 第 5 回会合資料, 汐留シテイセンター, 2006.3.3.
30. 藤野清次, 藤原牧: 非対称行列用の対角要素補償型前処理の性能評価, 日本応用数理学会 平成 18 年度研究部会 連合発表会, 早稲田大学, 2006.3.4.
31. 塩出亮, 阿部邦美, 藤野清次: 複素対称線形方程式用の MRTR 法について, 日本応用数理学会 平成 18 年度研究部会 連合発表会, 早稲田大学, 2006.3.4-5.

● 原著論文

1. 吉田正浩, 藤野清次, 岡田 裕: 重合メッシュ法による複合材料解析で現れる線形方程式に対するマスキング前処理つき CG 法の有効性 (Effectiveness of masking preconditioner of CG method for linear systems in the composite materials analysis by s-version FEM analysis), 日本計算工学会 論文集, 2005. インターネット論文集
<http://save.k.u-tokyo.ac.jp/jsces/trans/trans2005/No20050041.pdf>
2. 塩出亮, 藤野清次, 阿部邦美: MRTR 法の対称正定値行列用前処理について (Preconditioning for symmetric positive definite matrices of MRTR method), 日本計算工学会 論文集, 2005. インターネット論文集
<http://save.k.u-tokyo.ac.jp/jsces/trans/trans2005/No20050038.pdf>

3. 井上明彦, 藤野清次: フィルインの選択に基づく改良版 ABRB 順序付け法による ICCG 法の並列化 (Improved ABRB ordering algorithm based on selection of fill-in for parallelized ICCG method), 情報処理学会論文誌 コンピュータシステム, Vol.46 No.SIG16 (ACS12), pp.119-128, 2005.12.
 4. Y. Fujii, M. Kakihara, M. Aoyagi, S. Fujino: An application of projection method for generalized eigenvalue problems using preconditioned COCG method, Trans. of INFORMATION, Vol.8, No.6, pp.811-818, 2005.12.
 5. 藤野清次, 藤原 牧, 吉田正浩: 準残差の最小化に基づく BiCGSafe 法の収束性について (BiCGSafe method based on minimization of associate residual), 日本計算工学会 論文集, 2005. インターネット論文集
<http://save.k.u-tokyo.ac.jp/jscs/trans/trans2005/No20050028.pdf>
 6. 岡本則子, 大鶴徹, 富来礼次, 藤野清次: 有限要素法による室内音場解析における COCG 法の収束性 (Convergence of COCG method applied to finite element sound field analysis of rooms), 日本計算工学会 論文集, 2005. インターネット論文集
<http://save.k.u-tokyo.ac.jp/jscs/trans/trans2005/No20050027.pdf>
 7. 柿原正伸, 小山大介, 藤野清次: 外部 Helmholtz 問題で生じる線形方程式に対する前処理つき COCG 法の応用 (Application of preconditioned COCG method for linear systems stem from exterior Helmholtz problem), 日本計算工学会 論文集, 2005. インターネット論文集
<http://save.k.u-tokyo.ac.jp/jscs/trans/trans2005/No20050022.pdf>
 8. 井上明彦, 藤野清次, 柿原正伸: 行列の非零要素だけを使う修正 RIC(0)-CG 法の収束性について (Convergence property of modified RIC(0)-CG method with only nonzero entries of the original matrix), 日本計算工学会 論文集, 2005. インターネット論文集
<http://save.k.u-tokyo.ac.jp/jscs/trans/trans2005/No20050018.pdf>
 9. M. Kakihara, S. Fujino: Convergence of Quasi-Robust Incomplete Cholesky CG Method by means of Uniformed Modification for Diagonal Entries, Trans. of INFORMATION, Vol.8, No.1, pp.53-60, 2005.
- 紀要, 年報, 広報誌などの出版物
 1. 藤原牧, 吉田正浩, 藤野清次: 対角要素を修正する Crout 版 ILU 前処理の収束性評価, 九州大学大学院システム情報科学紀要, Vol.11, No.1, March, 2006.3.

研究資金

- 科学研究費
 1. 「領域分割法による大規模 3 次元有限要素解析」, 研究分担者として参加, 研究代表者 (九州大学 金山寛教授), 2003 年 4 月–2006 年 3 月 .
 2. 「数値的検証法から計算機援用解析学の構築へ向けての総合的研究」, 研究協力者として参加, 研究代表者 (九州大学 中尾充宏教授), 2004 年 4 月–2006 年 3 月
- 九州大学教育研究プログラム・研究拠点形成プロジェクト (H,16, H17 年度), 研究分担者として参加, 研究代表者 (九州大学 牛島恵輔教授), 2004 年 4 月–2006 年 3 月 .
- 共同研究

1. 研究テーマ「ポアソン方程式に対する高速反復解法の研究」, 理化学研究所情報環境室との共同研究, 1998年6月より継続.

- 受託研究

1. 2005.09~2006.03 「前処理つき共役勾配法の高速度の研究」(株)鹿島建設 技術研究所
2. 2005.01~2005.06 「前処理つき共役勾配法の高速度の研究」(株)フォトン

- 奨学寄付金

1. 2005年, 「前処理つき反復法の高速度の研究」(株)サイエンスソリューションズ
2. 2005年, 「前処理つき反復法の高速度の研究」(株)清水建設 技術研究所
3. 2005年, 「前処理つき反復法の高速度の研究」(有)T-SOFT
4. 2005年, 「前処理つき反復法の高速度の研究」(株)フォトン
5. 2005年, 「前処理つき反復法の高速度の研究」(株)くいんと

教育活動

1. 大学院講義、計算法工学特論 (H16, H17年度)
2. 創生教育演習 (電気情報工学科1年生向け, H16, H17年度)
3. 高度プログラミング演習 (1年生後期演習, H16年度)
4. コンピュータシステム通論 (電気情報工学科3年生向け, H16, H17年度)

4.3.2 渡部 善隆

研究内容

「精度保証付き数値計算」とは、数理科学上に現れる関数方程式の解を、その存在証明および誤差評価込みで数値的に厳密に捉えようという方法です。

自然界のモデルから導かれる関数方程式の解を数値計算によって近似的に求める場合、離散化による誤差に加えて、計算機による丸め誤差が発生します。「精度保証付き数値計算」はこれら二つの誤差を厳密に評価することによって数値計算の信頼性を保証します。また、この方法は理論的に解の存在証明が困難な解析学の問題に対するアプローチとしても重要であると考えます。

現在は、有限要素法とその誤差評価をもとに、非線形偏微分方程式、特に Navier-Stokes 方程式に対する解の存在の数値的検証法の研究を進めています。

九州大学情報基盤センターでは、ベクトル並列型スーパーコンピュータ VPP5000/64、汎用 UNIX サーバ GP7000F をはじめとする大規模数値計算環境を全国の研究者に提供しています。研究活動として、これらの計算機上で動作する数値計算ライブラリの研究開発、性能評価などを行なっています。また、教育・広報活動としては、プログラム言語、アプリケーションライブラリの利用方法に関する解説記事の執筆、利用の手引の作成、講習会の講師、プログラム相談、プログラムライブラリ開発の支援等を担当しています。

研究のキーワード

精度保証付き数値計算、偏微分方程式、有限要素法、区間解析、誤差評価

所属学会名

日本応用数理学会、日本数学会

研究業績

- 主な研究テーマ

1. 精度保証付き数値計算，計算機援用証明
2. 数値解析
3. ハイパフォーマンスコンピューティング

- 原著論文

1. 渡部 善隆, 山本 野人, 中尾 充宏, 楢円型方程式の解に対する局所一意性付き数値的検証法の効率化, 日本応用数理学会論文誌, Vol.15, No.4, pp.509-520, 2005.
2. Kouji Hashimoto, Ryohei Abe, Mitsuhiro T. Nakao and Yoshitaka Watanabe, A Numerical Verification Method for Solutions of Singularly Perturbed Problems with Nonlinearity, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol.22, No.1, pp.111-131, 2005.
3. Mitsuhiro T. Nakao, Kouji Hashimoto and Yoshitaka Watanabe, A Numerical Method to Verify the Invertibility of Linear Elliptic Operators with Applications to Nonlinear Problems, Computing, Vol.75, Number 1, pp.1-14, 2005.

- 学会発表等

1. Yoshitaka Watanabe, A computer assisted proof of a symmetry-breaking bifurcation point for the Rayleigh-Benard problem, Workshop on Numerical Analysis of Flow Problems and Validated Computations, 2006.11.
2. 渡部 善隆, Rayleigh-Benard 問題の大域分岐構造に対する精度保証付き数値計算, 研究集会・計算科学の基盤技術とその発展, 2005.11.
3. Mitsuhiro T. Nakao, Yoshitaka Watanabe, Nobito Yamamoto, Takaaki Nishida, Myoungnyoun Kim, Some Computer Assisted Proofs on the Bifurcation Structure of Solutions for Heat Convection Problems, International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, 2005.10.
4. 渡部 善隆, 中尾 充宏, 山本 野人, 西田 孝明, 熱対流問題の分岐点に対する計算機援用証明, 日本数学会 2005 年度秋季総合分科会, 2005.09.
5. Yoshitaka Watanabe, A computer assisted proof of a bifurcation point for the heat convection problems, Algebraic and Numerical Algorithms and Computer-assisted Proofs, 2005.09.
6. 坂口 秀雄, 渡部 善隆, 今井 仁司, 多倍長計算を適用した精度保証数値計算, 研究集会・21 世紀における数値解析の新展開, 2005.07.
7. 渡部 善隆, 直接解法による大規模疎行列に対する連立 1 次方程式ソルバー, 九州大学数値解析学セミナー, 2005.06.

研究資金

- 科学研究費（平成 17 年度）

1. 若手研究 (B) 「流体力学的非線形安定性問題に対する計算機援用証明」研究代表者
2. 基盤研究 (S) 「流れ問題のための高品質数値解法の開発と解析とシミュレーション」研究分担者
3. 基盤研究 (A) 「数値的検証法から計算機援用解析学の構築へ向けての総合的研究」

教育活動

1. 情報処理概論（機械航空工学科航空宇宙コース）
2. 京都大学理学研究科非常勤講師（非線型数学）
3. 情報基盤センター・プログラミング言語講習会講師
4. 平成 17 年度 情報基盤センター・数値計算ライブラリ利用法講習会講師
5. 平成 17 年度 情報基盤センター・センター利用法講習会講師
6. 高性能演算サーバ eServer p5 利用の手引き執筆
7. その他, 数値計算における速度向上 (チューニング) のポイント, 丸め誤差の累積についての注意点, ベクトル並列計算機の性能評価などを広報記事として発表しました。

社会貢献・国際連携等

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2005.04 ~ ., スペースコラボレーションシステム委員会.