

[2017]九州大学情報統括本部年報 : 2017年度

<https://hdl.handle.net/2324/2203028>

出版情報 : 九州大学情報統括本部年報. 2017, pp.1-, 2018-10-01. Information Infrastructure Initiative, Kyushu University

バージョン :

権利関係 :



第5章 学際計算科学研究部門

5.1 スタッフ一覧

職名	氏名	研究キーワード
教授	小野 謙二	数値流体力学、可視化、大規模並列計算、機械学習
准教授	天野 浩文	並列処理、並列プログラミング言語、ジョブスケジューリング、並列ファイルシステム、データベース、データベースプログラミング言語、グリッドコンピューティング
准教授	嶋吉 隆夫	ソフトウェア工学、形式手法、計算生理学、フィジオーム、数値解析、細胞モデリング、心臓シミュレーション
助教	大島 聡史	高性能計算、GPU コンピューティング、並列数値計算、自動チューニング

5.2 研究事例紹介

5.2.1 「時間並列計算技術の研究」

研究の背景

今年度は、昨年度までに目途をつけた要素技術を基に時間領域並列化法の基本技術を開発し、フェーズフィールド法（放物型偏微分方程式）や流体シミュレーション（双曲型偏微分方程式）のプロトタイプアプリへ実装・適用しその基本技術の評価を行った。具体的には、(a) 基本性能特性を把握し、放物型では目標の7倍以上の加速性を確認し、双曲型では性能改善の方向を把握した。(b) また、改善点を抽出し、放物型では非線形性の強い問題の加速法を、双曲型ではCIP法と他手法の組み合わせ等の開発方針を得た。

本研究では、昨年度までの広範囲な応用性、コード開発の効率性そして基本問題に対する性能の評価から、Parareal法を要素技術とすることにした。Parareal法は2001年にLionsらにより提案されたもので、本来は逐次計算である時間積分をその計算が実行される時間領域をtime sliceという N_{ts} （並列数）個の時間領域に分割し、それらtime sliceの始端・終端値を並列反復解法ですり合わせて解く手法である。その計算法はNewton-Raphson法を基に考えると次の式(1)と書ける[1]。ここでは $U_n^{k_{par}}$ はtime slice n の k_{par} 回目の反復での終端値、 F 、 G はfine solver、coarse solverと呼ばれ、それぞれNewton-Raphson法の残差計算（並列）、修正計算（逐次）を行い、 T_n 、 T_{n-1} はtime slice n の始端値から終端値までの時間発展計算を行うことを意味する。

$$U_n^{k_{par}} = F(T_n, T_{n-1}, U_{n-1}^{k_{par}-1}) + G(T_n, T_{n-1}, U_{n-1}^{k_{par}}) - G(T_n, T_{n-1}, U_{n-1}^{k_{par}-1}) \quad (1)$$

この時、coarse solverでは積分時間ステップ幅 δT を粗視化するかその時間積分法を粗視化する等により、その計算時間 T_G を削減することが必要である。Fine solverのステップ幅 δt による計算時間 T_F を使って時間粗視化率 $R_{fe}=T_F/T_G$ を定義する。これはParareal法の逐次計算の負荷を表すパラメータとなっている。時間並列計算法での加速率 α は時間方向を逐次計算した処理時間を時間並列計算

の処理時間で割ったものである。時間並列計算法は放物型偏微分方程式と双曲型偏微分方程式に対しては応用性が異なるため、以下ではそれぞれについて具体的に述べる。

放物型偏微分方程式については以下の成果を得ている。Parareal 法に対する加速法としてパイプライン法を対象にさらなる加速性を評価した。パイプライン法はオリジナルの Parareal 法の無駄な待ち時間を削減する手法である (Fig. 1(a))。単純な 3 次元の拡散問題の時空間並列計算を対象に評価を実施した。この時、fine solver と coarse solver の時間積分法は Crank-Nicolson 法を用いているため時間粗視化率は $R_{fc} = \delta T / \delta t$ と時間ステップ幅の比となっている。その結果、オリジナルの Parareal 法で 8.6 倍、パイプライン法により更に 1.98 倍の加速 (全体で 16.6 倍) を確認した (Fig. 1(b))、この時、時間粗視化率 $R_{fc} = \delta T / \delta t = 100$ であった [2]。

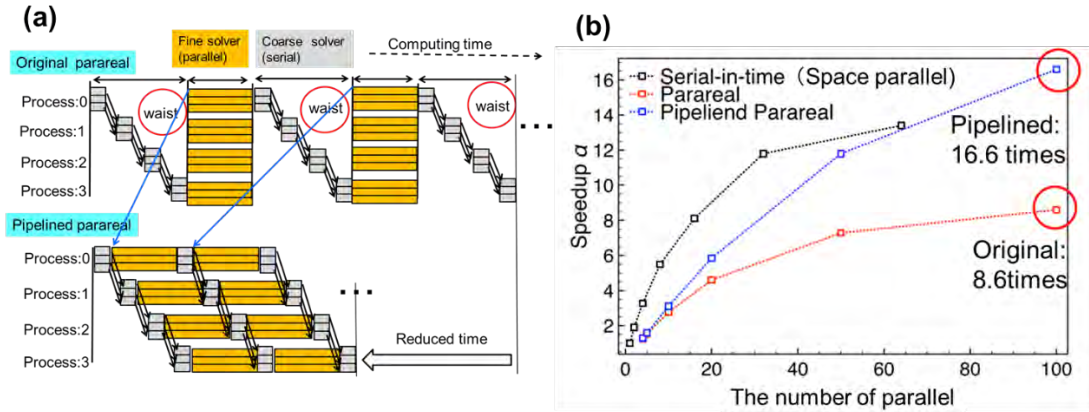


Fig. 1 Pipelined Parareal method. (a) algorithm and (b) acceleration.

つぎに、非線形の強いものへの応用性の評価としてフェーズフィールド法を対象に評価を行った。今回は代表的な 3 つのモデル、非保存形の Allen-Cahn 方程式、保存形の修正 Allen-Cahn 法と Cahn-Hilliard 方程式を対象とした。その方程式と計算条件を以下の Fig. 2 にまとめる。

(a) $\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \nabla^2 \phi - k \phi (\phi - 1.0) (\phi - 0.5 + \beta)$ $(D/k, \beta) = (1/16, 000, -0.128)$ $x = [0 : 1], t = [0, 0.5]$ Number of grids 10^3 $\delta t = 10^{-7}, N_f = 5 \times 10^6$ steps $N_{ts} = 200, R'_{fc} = \delta T / \delta t = 400$	(b) $\frac{\partial \phi}{\partial t} = \partial_x \left[D^o \left\{ 1 - \frac{\phi(1-\phi)}{\varepsilon \partial_x \phi } \right\} \partial_x \phi \right]$ $(D^o, \varepsilon) = (0.01, 4 \times 10^{-4})$ $x = [0 : 1], t = [0, 0.02]$ Number of grids 10^3 $\delta t = 10^{-7}, N_f = 2 \times 10^5$ steps $N_{ts} = 100, R'_{fc} = \delta T / \delta t = 20, 100, 200, 400$ $N_{ts} = 200, R'_{fc} = \delta T / \delta t = 400$	(c) $\frac{\partial \phi}{\partial t} = (p \partial_x^2 + q \partial_x^4) \phi - r \partial_x^2 \phi^3$ $(p, q, r) = (-1, -0.001, 1)$ $x = [0 : 1], t = [0, 0.005]$ Number of grids 10^3 $\delta t = 2.5 \times 10^{-11}, N_f = 2 \times 10^7$ steps $N_{ts} = 100, R'_{fc} = \delta T / \delta t = 100$
---	--	--

Fig. 2 Mathematical model of phase field method and calculation conditions. (a) Allen Cahn equation, (b) Modified Allen Cahn equation, (c) Cahn-Hilliard equation.

これらの方程式と条件に対して、fine solver に陽的 1 次 Euler 法、coarse solver に Crank-Nicolson 法・後退 4 次 Euler 法を用いた時間並列計算を行った。その計算結果 (Fig. 3) においてそれぞれのモデルについて 13 倍、7 倍、2 倍の加速可能性を確認した、この時、加速性の評価は収束判定を残差 10^{-7} 以

下とした時の反復回数を元に行った。これから、Parareal 法は非線形偏微分方程式も加速可能であることとまた加速率は問題に依存することを確認した [3]。さらに、非線形性の強い問題ではParareal 法の反復修正の緩和法の高度化、coarse solver 自体の並列化の可能性の追求等の必要性も確認した。

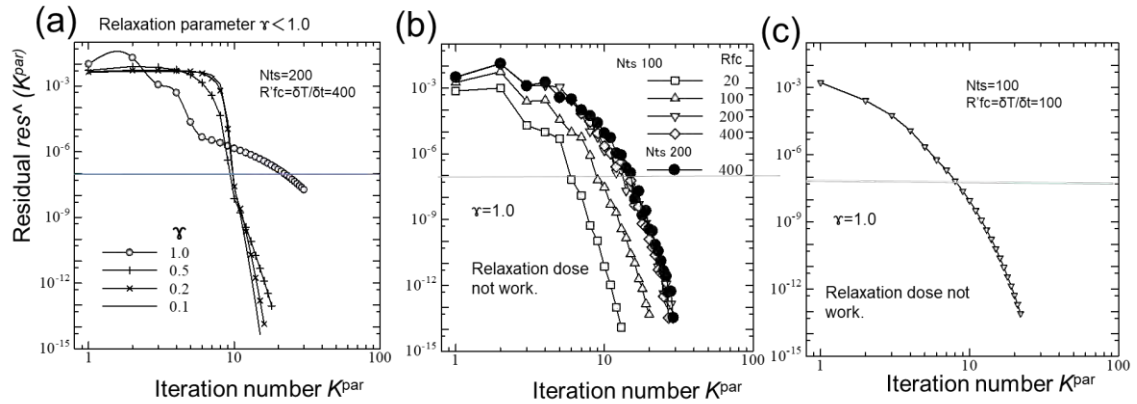


Fig. 3 Convergence history of Parareal method. (a) Allen Cahn equation, (b) Modified Allen Cahn equation, (c) Cahn-Hilliard equation.

双曲型偏微分方程式については以下の成果を得ている。Parareal 法では、fine solverと coarse solver のタイムステップ幅の違いによるそれぞれの計算結果の位相精度の差による収束性の悪化が課題である [4]。そこでその解決法の調査・開発を実施した。今回は双曲型偏微分方程式の代表の1つである移流方程式を対象に、位相精度がタイムステップ幅への依存性が低い移流計算法を検討した。比較基準として TVD 法と Crank-Nicolson 法を利用したものを、位相高精度計算の手法として CIP-3次（位相計算精度が高い、勾配情報[位相情報]も移流させる方法）及び CIP-5次（さらに曲率情報を移流させる方法として開発）を利用したものをを用いた。ステップ形状の移流問題 ($v=1.0$)、空間 $L=3.0$ 、 $\Delta x=0.01$ 、時間 $T=2.0$ 、 $\delta t=0.001$ 、 $CFL=0.1$ 、2,000steps の条件で計算を実施した。その結果、CIP 法による位相計算精度向上は効果的で、修正緩和法も有効であることが分かった。しかしさらに改良が必要であることも分かった (Fig.4) [5, 6]。

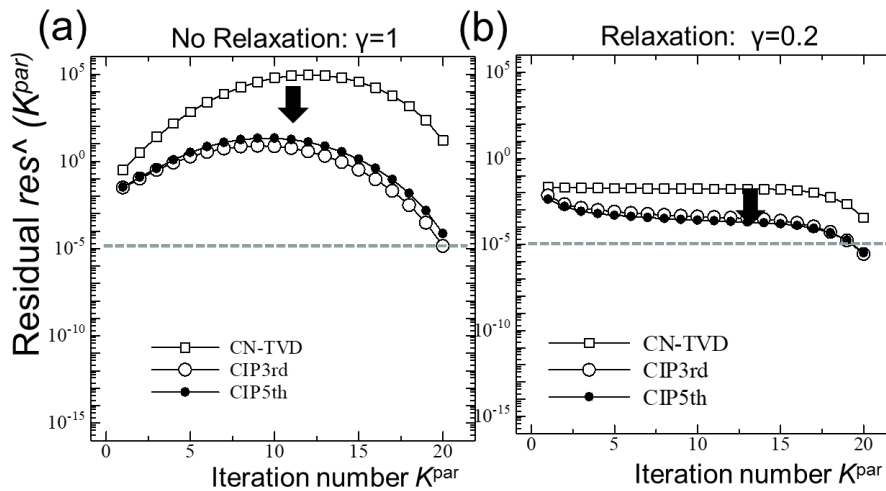


Fig. 4 Convergence history of Parareal method. (a) case with no relaxation, (b) case with relaxation.

また「PinT2017時間並列計算国際会議」を調査し、fine solverとcoarse solverで同じタイムステップ幅を利用し（ただし、fine solverの計算負荷がcoarse solverの計算に比べ桁違いに高い必要がある）、かつ計算する時間領域を N_c 個に分割して各分割領域にParareal法を N_c 回適用し収束性を向上させる方法も有望であるということも分かった。

以上のように今年度は、時間領域並列化法の基本技術を開発しプロトタイプアプリへ実装・適用し評価を行い、その後の開発方針を得た。具体的には、Parareal法は放物型偏微分方程式に対しては有効であること、また、応用範囲は広い（地下の資源・環境問題、多相流、形状最適化等）こと、つまり成果を広めることが重要であることが分かった。しかし成果を広めるためのフレームワークは汎用化が難しくチュートリアル形式（書籍と例題プログラム）で成果を広める方針とした。

[発表論文等]

- [1] J.-L. LIONS, Y. MADAY, AND G. TURINICI, A parareal in time discretization of PDEs, C.R. Acad. Sci. Paris, Serie I, 332, 2001, pp.661–668.
- [2] 飯塚 幹夫, 今村 成吾, 小野 謙二, 横川 三津夫, 大規模時空間並列計算での Parareal 法の性能評価, 第22回計算工学講演会, 2017年5月.
- [3] 飯塚幹夫, 小野謙二, フェーズフィールド法に対する Parareal 法による時間並列計算の収束挙動, 飯塚幹夫, 小野謙二, 第31回数値流体力学シンポジウム, 2017年12月.
- [4] Mikio Iizuka, Kenji Ono, Influence of the phase accuracy of the coarse solver calculation on the convergence of the Parareal method iteration for hyperbolic PDEs, Mikio Iizuka, Kenji Ono, Computing and Visualization in Science – Springer, will be published.
- [5] Mikio Iizuka, Kenji Ono, Investigation of Convergence Characteristics of Parareal Method for Advection Equation using Accurate Phase Calculation Method, 6th Workshop on Parallel-in-Time methods, October, 2018.
- [6] Mikio Iizuka, Kenji Ono, Convergence Acceleration of the PinT Integration of Advection Equation using Accurate Phase Calculation Method, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, March, 2018.

5.2.2 「心筋細胞における低酸素アシドーシスの数理モデリングに関する予備的研究」

研究の背景

心臓は血液を全身に循環させるためポンプとして働く、生命維持に欠かせない重要な臓器である。心臓は大まかには心筋という筋肉でできた組織で構成される袋状の臓器であり、その心筋が常に収縮と弛緩を繰り返すことで心臓が拍動して血液を拍出している。心臓は全身の組織に血液を送る臓器であるが、心臓自身も酸素需要の大きな臓器であり、冠循環と呼ばれる血管網により血液が供給される。冠動脈疾患 (CAD) は世界的にも最も一般的な循環器疾患である。冠動脈疾患によって冠動脈を流れる血流 (冠血流) は減少することで心筋虚血となり、心筋細胞は低酸素状態に陥る。さらに心筋の低酸素はアシドーシスと呼ばれる pH が低下する現象を引き起こす。アシドーシスは心筋細胞の死を招く大きな要因である。低酸素によるアシドーシスは主に嫌気性代謝と二酸化炭素蓄積によるものと考えられているが、その定量的詳細については十分に分かっていない。

細胞の生理機構を定量的に解析する手法として細胞数理モデル化がある。近年、松岡らは、酸化リン酸化による ATP 産生や pH 調節機構を含む、モルモット心筋細胞の包括的な数理モデルを開発した (論文未発表、以下松岡モデルと呼ぶ)。このモデルは低酸素状態およびアシドーシス状態における細胞の挙動をシミュレーション可能だが、低酸素により引き起こされるアシドーシスを再現することはできない。一方それとは別に、冠血流による心筋組織への酸素供給の計算モデルはこれまでに開発されてきており、我々も心筋組織における冠血流による酸素と二酸化炭素の輸送と交換を表現する心筋微小循環モデルを開発している [1]。ただし、このモデルでは血流量の低下による虚血状態での細胞の低酸素は再現できるが、細胞内 pH 調節機構は考慮されていない。

そこで本研究では、心筋虚血により引き起こされる細胞アシドーシスを再現する計算機モデルを開発することを目的とする。そのために、我々がこれまでに開発した心筋組織微小循環モデルによる細胞外環境の計算と、松岡モデルによる心筋細胞の生理応答の計算を統合する。本稿では、予備的な統合モデルによる正常状態と虚血状態のシミュレーション結果を報告する。

手法

心筋細胞モデル

本研究で用いる松岡モデルは、連立常微分方程式として定式化された集中定数型単一細胞モデルであり、既発表の心筋細胞モデル [2, 3] に基づいて、心筋細胞の活動電位発生、イオン恒常性、興奮収縮連関、ATP 消費、ミトコンドリア呼吸鎖による ATP 産生などの生理機能を表現している。松岡モデルは ATP 産生のモデル化に、ミトコンドリアの電子伝達系と ATP 合成酵素を含む既存の数理モデル [4] を用いている。このモデルでは、電子伝達系の複合体 IV による酸素消費と、基質脱水素過程による二酸化炭素生成を定式化している。また、pH 調整機構を別の心筋細胞モデル [5] から取り込んで用いている。松岡モデルによる pH 調節機構モデル化の概略を図 1 に示す。このモデルでは、細胞膜イオン輸送体による水素イオン (H^+) の輸送と細胞内水素イオン緩衝作用を考慮した細胞内水素イオン濃度変化、重炭酸イオン (HCO_3^-) の膜輸送と炭酸水和反応による細胞内重炭酸イオン濃度変化、さらに、二酸化炭素 (CO_2) の膜透過と炭酸水和反応による細胞内二酸化炭素濃度変化を定式化している。さらに、松岡モデルでは細胞内機能要素の pH 依存性を導入している。

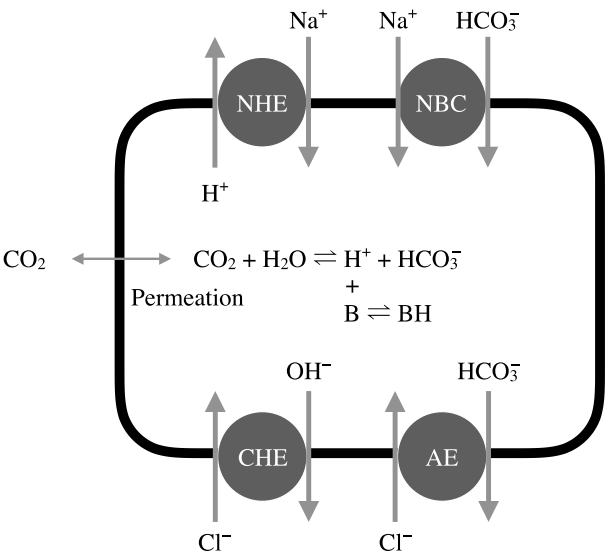


図 1 松岡モデルにおける pH 調節機構の模式図

心筋組織微小循環モデル

本研究では、我々が開発した心筋組織微小循環モデル [1] を用いて、細胞外の酸素、二酸化炭素、重炭酸イオン、水素イオンの各濃度を計算する。このモデルは図 2 に示すように、赤血球、血漿、間質液、細胞の各領域における前記 4 物質の移流、拡散、透過の一次元軸性分布モデルである。なお、膜輸送タンパクによるイオン輸送を本モデルでは透過現象として模擬している。

本研究では、間質液領域の物質濃度を松岡モデルの細胞外物質濃度として利用する。細胞膜を介する物質のフラックスは松岡モデルにより計算される値を、細胞と間質液の容積により換算して用いる。

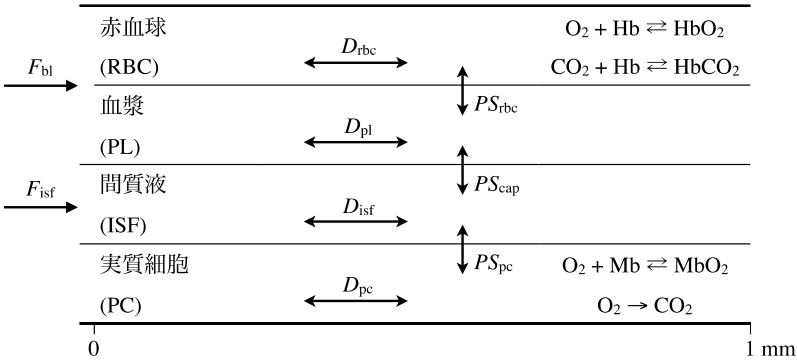


図 2 心筋組織微小循環モデルの模式図

実験条件

心筋組織微小循環モデルにおける動脈血の組成は、標準生理条件に基づき、以下に定める。動脈酸素分圧および二酸化炭素分圧はそれぞれ 100 mmHg, 40 mmHg とする。血漿の pH を 7.4 とする。ヘマトクリット値を 0.45 とする。動脈血における血漿および赤血球の重炭酸イオン濃度は水和反応の平衡状態に達しているものと仮定する。冠血流は、標準条件で 1.0 ml/g/min、虚血条件で 0.2 ml/g/min とする。心筋細胞には 2.5 Hz 周期で電気刺激が印可されるものとする。

計算方法

シミュレーションは NVIDIA Tesla GPGPU カード上で行った。心筋組織微小循環モデルの偏微分方程式は有限差分法の BTSC スキームを用いて、松岡モデルの常微分方程式は各格子点で並列に古典的ルンゲクッタ法を用いて計算した。時間ステップ幅を 0.02ms とし、空間方向は毛細血管長を 1mm とし、2048 分割した。境界条件は、赤血球および血漿領域の動脈端 ($x=0$) に Dirichlet 条件を、それ以外の端点に Neumann 条件を用いた。

シミュレーションはまず標準血流状態でシミュレーション時間 2 分間の計算を行い、続いて虚血条件で 1 分間分のシミュレーションを行った。モデル変数の初期値は定常状態における値を用いた。

結果

提案モデルによる標準条件 (control) および虚血条件 (ischemia) におけるシミュレーション結果を図 3 に示す。上から、細胞内酸素濃度 ($[O_2]_i$)、細胞酸素消費速度 (v_{C4})、細胞外総二酸化炭素濃度 (total $[CO_2]_e$)、細胞内 pH の軸性分布を示しており、位置 0mm が動脈端、1mm が静脈端である。ここで、総二酸化炭素濃度とは二酸化炭素濃度と重炭酸イオン濃度の和を指す。標準血流条件では、細胞内酸素濃度は静脈端に至るまで 20uM 以上であり、酸素消費速度はほぼ一定の傾きで静脈端に向かって下降している。一方虚血条件では、細胞内酸素濃度は位置 0.8mm より静脈側で 1uM を下回っており、酸素消費速度は静脈端付近でほぼ 0 まで低下している。細胞外総二酸化炭素濃度は全般的に虚血条件の方が標準条件よりも高い。細胞内 pH は全ての位置で標準条件に比べて虚血条件で低下している。

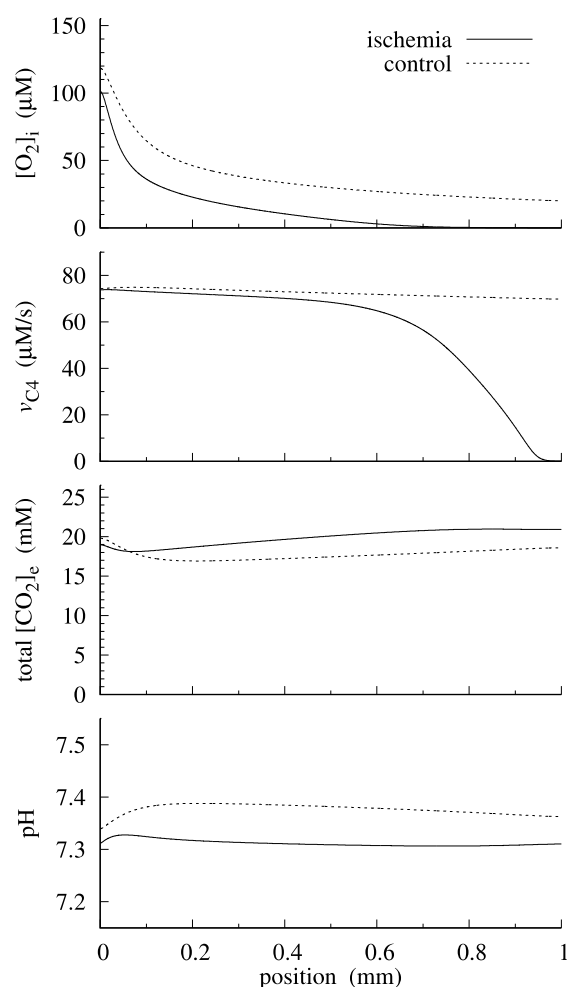


図3 シミュレーション結果

考察とまとめ

提案モデルでは、虚血条件のシミュレーションにおいて、標準条件に比べて細胞内pHの低下が再現できた。虚血条件では酸素供給の低下により静脈側で細胞が低酸素に陥っている。低酸素細胞では酸素消費速度は低下しており、それゆえ二酸化炭素生成速度も低下しているにもかかわらず、細胞外総二酸化炭素濃度は上昇している。これは、血流速度の低下により静脈端からの二酸化炭素の流出が低下したことが原因である。細胞外の二酸化炭素濃度が上昇したことにより最終的に細胞内pHの低下が引き起こされる。提案モデルでは、嫌気性代謝による細胞内pHへの影響については全く考慮されていない。しかし、低酸素に応じてpHの低下が確認された。このことは、二酸化炭素の蓄積だけでもアシドーシスが発生することを示している。

提案モデルでは、虚血条件での相対的なpHの低下は再現できたが、標準条件の細胞内pHは標準的な生理値である7.2前後よりも高い。この要因として、代謝による水素イオン生成が考慮されていないことが考えられる。また、シミュレーション結果の細胞外pHは標準的生理値よりも非常に高い値となった。この原因は心筋微小循環モデルのパラメータ値の設定によるものと考えられ、今後、松岡モデルと統合した状態でパラメータ値の調整を行う必要であると考えられる。

参考文献

- [1] T. Shimayoshi, Y. Yamamoto, and T. Matsuda, “A computational model of myocardial microcirculation including interstitial flow,” in Proceedings of 39th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, 2017, pp. 3668-3671.
- [2] A. Takeuchi, S. Tatsumi, N. Sarai, K. Terashima, S. Matsuoka, and A. Noma, “Ionic mechanisms of cardiac cell swelling induced by blocking Na^+/K^+ pump as revealed by experiments and simulation,” *Journal of General Physiology*, vol. 128, no. 5, pp. 495-507, Nov. 2006.
- [3] M. Kuzumoto, A. Takeuchi, H. Nakai, C. Oka, A. Noma, and S. Matsuoka, “Simulation analysis of intracellular Na^+ and Cl^- homeostasis during β 1-adrenergic stimulation of cardiac myocyte,” *Progress in Biophysics and Molecular Biology*, vol. 96, no. 1-3, pp. 171-186, June 2008.
- [4] B. Korzeniewski and J. A. Zoladz, “A model of oxidative phosphory- lation in mammalian skeletal muscle,” *Biophysical chemistry*, vol. 92, no. 1-2, pp. 17-34, 2001.
- [5] E. J. Crampin and N. P. Smith, “A dynamic model of excitation- contraction coupling during acidosis in cardiac ventricular myocytes,” *Biophysical journal*, vol. 90, no. 9, pp. 3074-3090, 2006.

5.2.3 「GPU を用いた階層型行列計算法に関する研究」

研究の背景

大規模な計算や複雑な計算を高速に行いたい、そのために大規模な密行列を扱う計算を行いたいという需要は大きい。しかし大規模な密行列計算は大きな記憶容量を必要とするのに対し、近年の計算ハードウェアは演算性能の向上に比べて記憶容量の向上が遅れている。そこで、密行列をより小さな記憶容量で保持できるデータ構造に近似して扱う近似行列計算法が注目されている。今年度は、近似行列計算法の一つである階層型行列計算法（Hierarchical matrix method, H-matrices, H 行列法 [1]）を GPU（NVIDIA Tesla P100、Pascal アーキテクチャ）にて高速に行うことを目指して研究を実施した。特に、階層型行列を係数行列として扱う BiCGSTAB 法と、その主要な計算部分である階層型行列ベクトル積計算の高速化を目指した。

本研究で扱う階層型行列とは、対象行列を多数の部分行列に分割した上で、それらの部分行列の大部分を低ランク行列により近似したものである（Figure 1）。低ランク行列とは、密行列 $A[m \times n]$ （ m は縦辺の長さ、 n は横辺の長さ）を 2 つの密行列の積 $V[m \times k] \times W[k \times n]$ 、ただし $k \ll \min(m, n)$ 、により近似したものである。この近似により、対象行列を小さな記憶容量にて保持することが可能となる。近似された行列に対する演算についても、密行列に対する計算と比べて、 k が十分に小さい場合には総演算量や必要なメモリを減らすことができる。

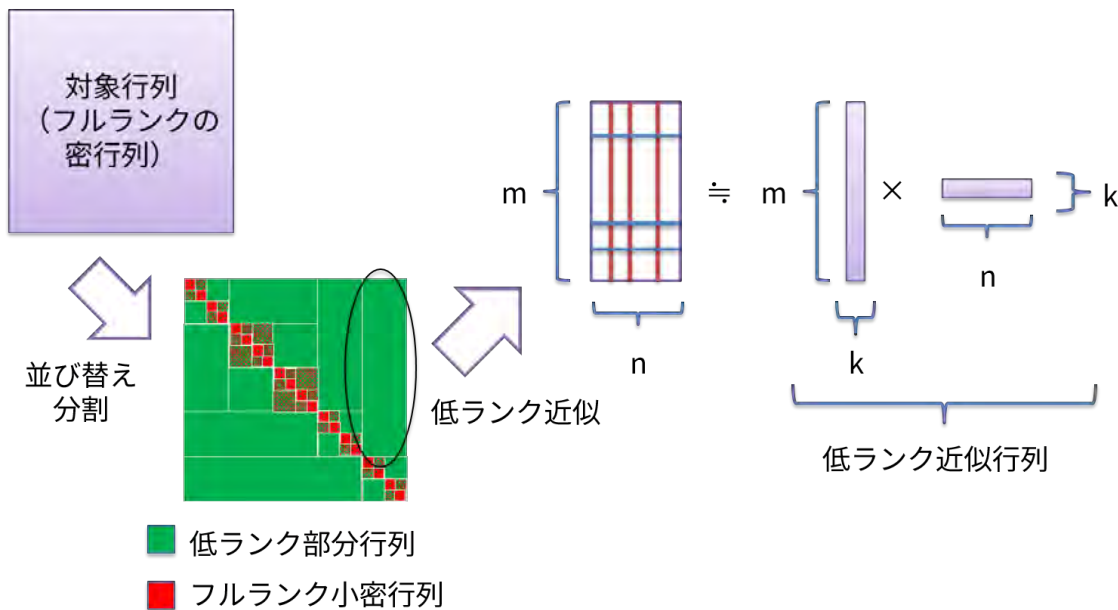


Figure 1. 階層型行列の構造

本研究では階層型行列計算法の実装として HACApK [2] を用いる。HACApK は JST CREST「自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境：ppOpen-HPC」[3] に含まれる ppOpen-APPL/BEM の構成要素であり、主な対象問題は静電場解析問題、その求解には BiCGSTAB 法を用いた連立一次方程式ソルバーが用いられている。BiCGSTAB 法の実行時間の多くは行列ベクトル積に費やされることが知られている。階層型行列を用いた場合でも BiCGSTAB 法の計算手順自体は密行列を用いた場合と同様であり、1 イタレーション中に 2 回実行される階層型行列ベクトル

積計算が多く時間を必要とする。そこで、GPU を用いた階層型行列ベクトル積計算の高速化を目指して実装と評価を実施した。なお、HACApK における BiCGSTAB 法は Fortran で記述されており、MPI と OpenMP を用いたハイブリッド並列化が適用されている。本研究では外部ライブラリ連携等の都合により、C 言語により同様のアルゴリズムを実装した上で、それをさらに CUDA C により GPU 化した。また低ランク近似アルゴリズムについてはライブラリに含まれている ACA 法ではなく新たに実装した ACA+ 法 [4] を用いている。

実装

GPU を用いた階層型行列ベクトル積計算については、段階を踏んで幾つかの最適化を適用し、それぞれの性能を評価した。ここでは 1GPU 向けの実装のみを扱うが、共同研究プロジェクト内においては複数 GPU 向けの実装も進めている。

0. リファレンス実装（CPU 向け、OpenMP を用いた並列化実装）

階層型行列ベクトル積計算は、階層型行列を構成する各部分行列（近似行列または小密行列）と対応する部分ベクトルとの積により構成される。さらに近似行列とベクトルの積は 2 つの小密行列ベクトル積により構成されている。また、結果ベクトルの各要素に複数の部分行列に関わる可能性がある（高い）ことから、計算結果の足しあわせも必要である。HACApK における OpenMP を用いた並列化実装は、各スレッドが部分行列ごとの計算を行うことで実現している（Figure 2）。これを「OMP カーネル」と呼ぶことにする。さらに、密行列ベクトル積は BLAS ライブラリの GEMV に置き換えが可能なため、これを Intel MKL ライブラリの dgemv 関数に置き換えたものも作成した（Figure 3）。これを「MKL カーネル」と呼ぶことにする。

```
#pragma omp for
for(i=0; i<部分行列数; i++){
    if(部分行列[i]==低ランク近似行列){
        tmpvec2 <= 近似行列_2 * ベクトル;
        tmpvec <= 近似行列_1 * tmpvec2;
    }
    if(部分行列[i]==密行列){
        tmpvec <= 部分行列 * ベクトル;
    }
    for(){
#pragma omp atomic
        result <= result + tmpvec;
    }
}
```

Figure 2. OMP カーネル

```
#pragma omp for
for(i=0; i<部分行列数; i++){
    if(部分行列[i]==低ランク近似行列){
        dgemv(tmpvec2 <= 近似行列_2 * ベクトル);
        dgemv(tmpvec <= 近似行列_1 * tmpvec2);
    }
    if(部分行列[i]==密行列){
        dgemv(tmpvec <= 部分行列 * ベクトル);
    }
    for(){
#pragma omp atomic
        result <= result + tmpvec;
    }
}
```

Figure 3. MKL カーネル

1. CUBLAS GEMV による実装

密行列ベクトル積（密行列積和演算、GEMV）は多くの数値計算ライブラリにて提供されており、NVIDIA 社の GPU においては CUBLAS や MAGMABLAS がよく知られている。そこで、密行列ベクトル積を CUBLAS の GEMV 関数に置き換えた階層型行列ベクトル積を実装した。これを「CUBLAS カーネル」と呼ぶことにする。

2. 非同期 GEMV 計算カーネルによる実装

CUBLAS などのライブラリにより提供される GEMV は良好な性能が期待できるものであるが、これらの関数の多くは大規模な行列に対する計算に向けて最適化が行われている。具体的には、CUBLAS のソースコードは公開されていないが、高い性能を得るためには GPU 上の多数の演算器を全て使い切る程度の問題規模が必要である。一方で階層型行列ベクトル積計算に含まれる多数の密行列ベクトル積は小さな行列を対象としているため、期待通りの性能が得られない可能性がある。そこで、GPU の一部分を用いて GEMV 計算を行う GPU カーネルを作成し、これを非同期で連続実行する階層型行列ベクトル積を実装した。これを「ASYNC カーネル」と呼ぶことにする。

3. 1GPU カーネル化による実装

非同期な GPU カーネル呼び出しにも GPU カーネル起動のオーバーヘッドがある。これを削減するため、全ての計算を 1 つの GPU カーネルにまとめた階層型行列ベクトル積を実装した (Figure 4)。これを (All-in-one の意味から)「A1 カーネル」と呼ぶことにする。

4. Batched BLAS を用いた実装

BLAS ライブラリに含まれる行列積和計算などの多くは大きな行列やベクトルに対して高速に計算することを主眼に開発されている。しかし、対象アプリケーションによっては小さな行列を多数高速に計算したいという需要もあり、それらに向けた新しい BLAS、COMPACT BLAS や BATCHED BLAS も開発されている。ここでは MAGMA BLAS の提供する BATCHED BLAS (ただし、結果の足しあわせの為に atomic 演算を用いたものに改造している) を用いた階層型行列ベクトル積を実装した (Figure 5)。これを「Batched カーネル」と呼ぶことにする。

```
・ ホスト (CPU) 側コード
myHMVM<<<g,b>>>(...);

・ デバイス (GPU) 側コード (CUDA C)
__global__ void myHMVM (...){
    i = blockIdx.x;
    for(i=0; i<部分行列数; i++){
        if(部分行列[i]==低ランク近似行列){
            tmpvec2 <= 近似行列_2 * ベクトル
            tmpvec <= 近似行列_1 * tmpvec2
        }
        if(部分行列[i]==密行列){
            tmpvec <= 部分行列 * ベクトル
        }
    }
}
```

Figure 4. A1 カーネル

```
・ ホスト (CPU) 側コード
for(i=0; i<部分行列数; i++){
    if(部分行列[i]==低ランク近似行列){
        dA1_array[m] = 近似行列_2[i];
        dx1_array[m] = vector;
        dy1_array[m] = tmpvector2;
        dA1_array[m] = 近似行列_1[i];
        dx1_array[m] = tmpvector2;
        dy1_array[m] = tmpvector;
        m++;
    }
    if(部分行列[i]==密行列){
        dA2_array[n] = 部分行列[i];
        dx2_array[n] = vector;
        dy2_array[n] = tmpvector;
        n++;
    }
}
magmablas_dgemv_vbatched_atomic
(..., dA1_array, ..., dx1_array, ..., dy1_array, ...);
magmablas_dgemv_vbatched_atomic
(..., dA2_array, ..., dx2_array, ..., dy2_array, ...);
```

Figure 5. Batched カーネル

性能評価

以上の 6 つの階層型行列ベクトル積計算カーネルに対して、Table 1 に示す 4 つの行列について階層型行列ベクトル積計算の実行時間を測定した。実行時間は階層型行列ベクトル積を 100 回程度実行した際の平均時間である。実験環境の概要を Table 2 に示す。Pascal および BDW は東京大学情報基盤研究開発センターに設置されている Reedbush-H システム、SKX は九州大学情報基盤研究開発センターに設置されている ITO システム、KNL は JCAHPC に設置されている Oakforest-PACS システムを使用した。

Table 1. 問題設定 (対象行列)

	10ts	216h	human_1x1	100ts
行数	10,400	21,600	19,664	101,259
部分行列数	23,290	50,098	46,618	222,274
近似行列数	8,430	17,002	16,202	89,534
小密行列数	14,860	33,096	30,416	132,740
H 行列容量	136 MByte	295 MByte	298 MByte	2050 Mbyte
問題設定 (形状)	1 つの球体	2 つの球体	人型の形状 1 体	1 つの球体

Table 2. 実験環境

	Pascal	BDW (Broadwell-EP)	SKX (Skylake-SP)	KNL (Knights Landing)
プロセッサ名	Tesla P100	Xeon E5-2695 v4	Xeon Gold 6140	Xeon Phi 7150
コア数	3584 (64 コア*56)	18 (HT 無効)	18 (HT 無効)	68 ※
動作周波数	1328 ~ 1480 MHz	2100 ~ 3300 MHz	2300 ~ 3700 MHz	1400 ~ 1600 MHz
理論演算性能 / HPL 性能	5300 GFLOPS / 4000 GFLOPS	604.8 GFLOPS / 570 GFLOPS	1324.8 GFLOPS / 900 GFLOPS	3046.4 GFLOPS / 1800 GFLOPS
メモリ種類, STREAM Triad 性能	HBM2, 550 GB/s	DDR4, 65 GB/s	DDR4, 95 GB/s	MCDRAM, 495 GB/s
利用システム名	Reedbush-H		ITO	Oakforest-PACS

※ 68 コア中 64 コアを使用、HT は有効だが使用しても性能が上がらなかったため未使用

BDW と Pascal の実行時間を Figure 6 および Figure 7 に示す。Figure 6 は全 6 実装の性能を全て表示したものであるが、CUBLAS カーネルと ASYNC カーネルの実行時間が他の実行時間より非常に長い
ため、縦軸の範囲を限定したものが Figure 7 である。これらの結果から、OMP カーネルと MKL
カーネルは実行時間に大きな差がないこと、GPU カーネル起動回数が多いため CUBLAS
カーネルと ASYNC カーネルは OMP カーネルや MKL カーネルと比べて非常に時間がかか
っていること、A1 カーネルと BATCHED カーネルは OMP カーネルや MKL カーネルと
比べて高速であることが確認できる。A1 カーネルが BATCHED カーネルより高速である
理由は、BATCHED BLAS は汎用的なライブラリとして機能を提供している分だけ A1
カーネルよりも今回の計算にとっては余計な処理が含まれているためであると考えられ
る。

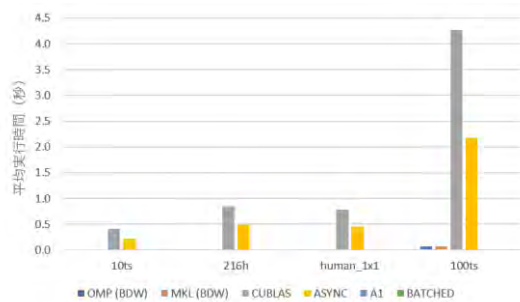


Figure 6. BDW と Pascal の性能

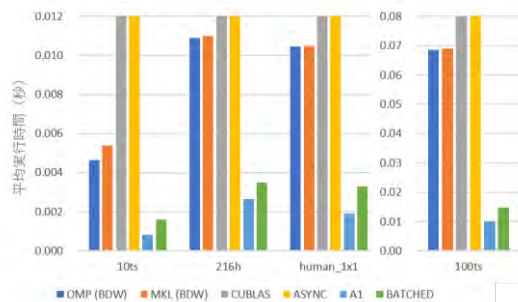


Figure 7. BDW と Pascal の性能（縦軸の範囲を制限したもの）

A1 カーネルおよび BATCHED カーネルの実行時間を全対象ハードウェアにおける OMP カーネル及び MKL カーネルの実行時間と比べた結果を Figure8 に示す。全体としては実行時間が短い順に Pascal, SKX, KNL, BDW の順となった。理論演算性能や理論メモリ転送性能と照らし合わせると Pascal, SKX, BDW については妥当な性能だと言えるが、KNL は行列によって性能差が大きい結果となった。KNL は他のハードウェアと比べてスレッド間の負荷バランスの良い場合と悪い場合の差が実行時間に大きく反映されたと考えられる。

最後に、階層型行列ベクトル積計算を含む BiCGSTAB 法全体の実行時間の比較結果を示す。BDW, SKX, KNL の実行時間については OMP カーネルと MKL カーネルの高速な方を選んでいる。BiCGSTAB 法を構成する階層型行列ベクトル積計算以外の各行列・ベクトル計算もそれぞれ OpenMP や CUDA を用いて並列化して実行した。結果としては、BiCGSTAB 法の実行時間の多くが階層型行列ベクトル積によって占められるため、特に Pascal, BDW, SKX については階層型行列ベクトル積の時間が大きく反映される結果となった。ただし KNL の実行時間については上記の傾向から逸脱気味であり、さらに性能の分析・評価が必要な結果となった。

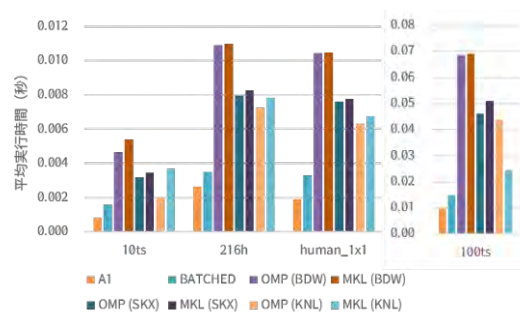


Figure 9. 全対象ハードウェアの実行時間

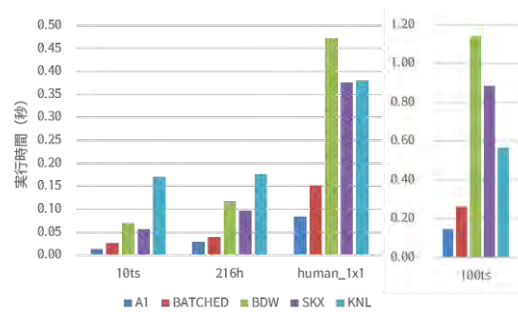


Figure 10. BiCGSTAB 法全体の実行時間

研究成果

以上のように、今年度は 1GPU を用いた階層型行列計算、特に BiCGSTAB 法とその主要な計算である階層型行列ベクトル積計算について実装と性能評価に取り組んだ。得られた成果は幾つかの研究会や論文誌にて発表している [発表論文等 1-4]。さらに、複数 GPU 環境における性能評価についても共同研究にて実施している [発表論文等 5]。今後はさらに高い性能を得るためのパラメータチューニングや、階層型行列ベクトル積計算の性能向上に適した階層型行列の生成の最適化などに取り組む予

定である。

参考文献

- [1] Hackbusch, W.: A Sparse Matrix Arithmetic Based on H-Matrices, Part I: Introduction to H-Matrices. Computing 62 (1999) pp.89-108
- [2] Ida, A., Iwashita, T., Mifune, T., Takahashi, Y.: Parallel Hierarchical Matrices with Adaptive Cross Approximation on Symmetric Multiprocessing Clusters. Journal of Information Processing 22(4) (10 2014)
- [3] ppOpen-HPC: Open Source Infrastructure for Development and Execution of Large-Scale Scientific Applications on Post-Peta-Scale Supercomputers with Automatic Tuning (AT). <http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/ppopenhpc/> (2017)
- [4] Börm S., Grasedyck L. and Hackbusch W., “Hierarchical Matrices” , Lecture Note, Max-Planck-Institut für Mathematik (2006)

発表論文等

- [1] 大島聡史, 山崎市太郎, 伊田明弘, 横田理央: GPU クラスタ上における階層型行列計算の最適化, 情報処理学会研究報告 (HPC-160), pp.1-8, 2017年7月19日発行
- [2] Satoshi Ohshima, Ichitaro Yamazaki, Akihiro Ida, Rio Yokota: Performance Evaluation of Hierarchical Matrix Computation on Various Modern Architectures, SIAM PP18, May 7-10, 2018 (ポスター発表)
- [3] Satoshi Ohshima, Ichitaro Yamazaki, Akihiro Ida, Rio Yokota: Optimization of Hierarchical matrix computation on GPU, SC-Asia 2018, Resorts World Convention Centre Sentosa, Singapore, May 26-29, 2018
- [4] Satoshi Ohshima, Ichitaro Yamazaki, Akihiro Ida, Rio Yokota: Optimization of Hierarchical matrix computation on GPU, In proceedings of Supercomputing Frontiers. SCFA 2018. Lecture Notes in Computer Science, vol 10776. Springer, Cham, pp.274-292, Print ISBN=978-3-319-69952-3, Online ISBN=978-3-319-69953-0, DOI=https://doi.org/10.1007/978-3-319-69953-0_16, 2018 ([3]の Proceedings)
- [5] Ichitaro Yamazaki, Ahmad Abdelfattah, Akihiro Ida, Satoshi Ohshima, Stanimire Tomov, Rio Yokota, Jack Dongarra: Analyzing Performance of BiCGStab with Hierarchical Matrix on GPU cluster. In: 2018 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS), March 21-25, 2018 (採録決定済)

5.3 研究内容紹介

5.3.1 小野 謙二

研究内容

- ・ 研究 — 数値流体力学、可視化、並列計算
- ・ 教育 — 数値解析および演習、並列アルゴリズム、高性能並列計算法特論
- ・ 業務 — スーパーコンピュータの運用、サポート
- ・ ほか — 文部科学省科学技術試験研究委託事業、CREST、科研費、JHPCN

所属学会名

情報処理学会，日本計算工学会，可視化情報学会，日本機械学会，自動車技術会，日本流体力学会，IEEE

主な研究テーマ

- ・ 深層学習を用いたデータからの自然法則の発見
キーワード：深層学習、遺伝的プログラミング、Lasso, 2017.04～2020.10.
- ・ AR, VR 技術を用いた実世界と仮想世界とのインタラクション
キーワード：HMD, UI, 2016.04～2018.03.
- ・ 時間並列計算法の研究
キーワード：時間方向マルチグリッド、Parareal 法, 2015.10～2022.10.
- ・ 上流設計システム技術の研究開発
キーワード：アイデア創出、気づき, 2016.10～2018.03.
- ・ 大規模並列格子生成法の研究
キーワード：CAD データ、幾何、CFD, 2010.10～2018.03.
- ・ シミュレーション実行支援環境の構築
キーワード：ワークフロー、データ管理、マルチプラットフォーム、エコシステム, 2012.10～2020.10.
- ・ 大規模並列可視化システムの技術開発
キーワード：ソートラスト型画像重畳、レイトレーシング、マルチプラットフォーム、データモデル, 2003.04～2020.03.
- ・ 複雑形状周りの熱流体流れシミュレータの開発
キーワード：直交格子、格子生成, 1996.04～2026.12.

研究プロジェクト

- ・ HPCと高速通信技術の融合による大規模データの拠点間転送技術開発と実データを用いたシステム実証試験
 2017.04～2018.03, 代表者：村田 健史, 国立研究開発法人情報通信研究機構, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（日本）
- ・ 高レイノルズ数乱流現象解明のための計算・実験科学研究ネットワーク形成
 2017.04～2018.03, 代表者：山本 義暢, 山梨大学, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（日本）
- ・ エアリード楽器および音響機器における大規模音響流体解析
 2017.04～2018.03, 代表者：高橋 公也, 九州工業大学, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（日本）
- ・ 粒子法の高精度化と大規模流体シミュレータへの応用
 2017.04～2018.03, 代表者：井元 佑介, 東北大学, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（日本）
- ・ 逐次問題の並列計算の数理とフレームワーク研究開発・実証
 2017.04～2020.03, 代表者：小野謙二, JST
- ・ 文部科学省 科学技術試験研究委託事業「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」
 2014.12～2020.03, 代表者：加藤千幸, 東京大学生産技術研究所, 文部科学省
- ・ 内閣府SIP/革新的設計生産技術「全体俯瞰設計と製品設計の着想を支援するワークスペースの研究開発」
 2014.09～2017.03, 代表者：小野謙二, 内閣府, NEDO（日本）

研究業績

・ 原著論文

1. Fan Hong, Chongke Bi, Hanqi Guo, Kenji Ono, Xiaoru Yuan, Compression-based integral curve data reuse framework for flow visualization, Journal of Visualization, <https://doi.org/10.1007/s12650-017-0428-4>, 20, 4, 859-874, 2017.11.
2. Ryo Takenoshita, Toshinobu Harada, Kenji Ono, データマイニングを用いた2種類の酒類におけるWeb上の感性情報の比較と視覚化, 日本感性工学会論文誌, <https://doi.org/10.5057/jjske.TJSKE-D-17-00052>, 2017.08.
3. 今村 成吾, 飯塚 幹夫, Kenji Ono, 横川 三津夫, 大規模時空間並列計算でのParareal法の性能評価, 計算工学講演会論文集 Proceedings of the Conference on Computational Engineering and Science, 22, 4p, 2017.05.

• 学会発表

1. Mikio Iizuka, Kenji Ono, Convergence Acceleration of the PinT Integration of Advection Equation using Accurate Phase Calculation Method, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, 2018.03.
2. Jorji Nonaka, Motohiko Matsuda, Takashi Shimizu, Naohisa Sakamoto, Masahiro Fujita, Keiji Onishi, Eduardo C. Inacio, Shun Ito, Fumiyoshi Shoji, Kenji Ono, A study on open source software for large-scale data visualization on SPARC64fx based HPC systems, 2018 International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, HPC Asia 2018, 2018.01.
3. Issei Koga, Kenji Ono, Estimation of Functions Representing Data Using Convolution Neural Network, 2018 International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, HPC Asia 2018, 2018.01.
4. Mikio Iizuka, Kenji Ono, フェーズフィールド法に対する Parareal 法による時間並列計算の収束挙動, 第31回数値流体力学シンポジウム, 2017.12.
5. Kenji Ono, Tomohiro Kawanabe, 全体俯瞰分析を用いた着想支援とビッグデータ分析への応用 WC2-3, 大学ICT 推進協議会2017年度年次大会 AXIES2017, 2017.12.
6. Kenji Ono, 領域分割に起因する性能劣化とその改善, 第31回数値流体力学シンポジウム, 2017.12.
7. Satoshi Ohshima, Takeshi Nanri, Yoshitaka Watanabe, Hirofumi Amano, Kenji Ono, スーパーコンピュータシステム ITO の性能評価, 2017.12.
8. Takeshi Nanri, Satoshi Ohshima, Kenji Ono, 非ブロッキング集団通信の通信隠蔽効果に関する調査, 2017.12.
9. Jorji Nonaka, Naohisa Sakamoto, Yasumitsu Maejima, Kenji Ono, Koji Koyamada, A visual causal exploration framework case study A torrential rain and a flash flood in Kobe city, SIGGRAPH Asia 2017 Symposium on Visualization, SA 2017, 2017.11.
10. Mikio Iizuka, Kenji Ono, Investigation of Convergence Characteristics of the Parareal method for Hyperbolic PDEs using the Reduced Basis Methods, Fifth Parallel-in-time Integration Workshop, 2017.11.
11. Eduardo C. Inacio, Jorji Nonaka, Kenji Ono, Mario Dantas, Analyzing the I/O Performance of Post-Hoc Visualization of Huge Simulation Datasets on the K Computer, 2017 Brazilian Symposium on High Performance Computing Systems, 2017.10.
12. Mikio Iizuka, Kenji Ono, Investigation of Convergence Characteristics of Parareal Method for Advection Equation using Accurate Phase Calculation Method, 6th workshop on Parallel-in-Time methods, 2017.10.
13. Jorji Nonaka, Naohisa Sakamoto, Takashi Shimizu, Masahiro Fujita, Kenji Ono, Koji Koyamada, Distributed particle-based rendering framework for large data visualization on hpc environments, 15th International Conference on High Performance Computing and Simulation, HPCS 2017, 2017.09.
14. Seigo Imamura, Kenji Ono, Mikio Iizuka, Mitsuo Yokokawa, Building the Performance Model of Parareal Method, 28th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics Parallel CFD2016, 2017.05.
15. Mizue Munekata, Akimasa Narita, Go Kitamura, Hiroyuki Yoshikawa, Kenji Ono, Takashi Watanabe, Flow Characteristics and Separation Performance in a Hemispheric Head Cyclone Separator, the 13th International Symposium on Experimental Computational Aerothermodynamics of Internal Flows, 2017.05.

- **受賞**

ベストリサーチアワード，公益社団法人日本生体医工学会，2017.09.

研究資金

- **科学研究費補助金**

1. 2017年度～2019年度，基盤研究(B)，代表，逐次問題の並列計算の数理とフレームワーク研究開発・実証
2. 2014年度～2019年度，文部科学省 科学技術試験研究委託事業，分担，近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

- **競争的資金**

1. 2015年度～2019年度，科学技術試験研究委託事業，分担，近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

- **共同研究、受託研究**

1. 2017.12～2018.03, 代表，新物質構造探索のための第一原理計算結果DB 構築と、それに必要な多数のジョブを効率的に処理するための環境整備に関する研究
2. 2017.12～2018.03, 代表，アイデア創出を支援する文書データ閲覧検索システムの研究
3. 2018.01～2018.03, 代表，非線形問題への時間並列計算アルゴリズムの適用について指導

教育活動

- **担当授業科目**

1. 2017年度・前期，高性能並列計算法特論
2. 2017年度・後期，並列アルゴリズム
3. 2017年度・前期，数値解析演習
4. 2017年度・前期，数値解析
5. 2017年度・前期，情報学論議 I
6. 2017年度・前期，情報学論述 I
7. 2017年度・前期，情報学読解
8. 2017年度・後期，情報学論議 II
9. 2017年度・後期，情報学論述 II

社会貢献・国際連携

- 国内、国際政策形成、及び学術振興等への寄与活動

2015.07～2018.10, 理事に就任し、HPCI システムの整備と運用、計算科学技術の振興、将来のスーパーコンピューティングについて計算科学技術コミュニティの幅広い意見を集約し、その推進を図るとともに、その実現を図ることを目的として国及び関係諸機関へ提言を行う、一般社団法人 HPCI コンソーシアム。

大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2017.04～2018.03, 情報基盤研究開発センター スパコン技術審査委員会委員長
2. 2017.04～2018.03, 情報基盤研究開発センター 計算委員会 委員長
3. 2016.04～2018.03, 情報基盤研究開発センター 教員業績評価委員会
4. 2016.04～2018.03, 情報基盤研究開発センター 自己点検・評価委員会委員
5. 2017.04～2018.03, 情報基盤研究開発センター HPC 事業室 事業室長
6. 2017.04～2018.03, 情報基盤研究開発センター 副センター長
7. 2016.10～2017.10, 情報統括本部 外部評価WG
8. 2016.06～2018.06, 留学生センター委員会

5.3.2 天野 浩文

研究内容

- ・ **次世代NVRAMに対応したシングルレベルストレージサブシステムの研究**

これまでの主記憶装置に用いられてきたDRAMとはまったく異なる原理に基づく不揮発性メモリ(NVRAM)が実用化されつつある。このような次世代NVRAMは、電源を切っても内容が失われることなく、DRAMなみの応答速度を持つと期待されている。しかし、次世代NVRAMがただちにSSDやHDDの座を完全に奪うことは考えにくい。このため、将来の計算機内には、HDD、SSD、主記憶と同等の応答速度を持つ装置、の三種類の記憶装置が混在する可能性がある。これらの記憶媒体をアクセス頻度等に応じて適切に使い分けることは、現在のSSDとHDDを使い分けるよりもさらに複雑になるであろう。そこで、ストレージ仮想化技術を用いて三種類の記憶媒体を統合し、その内部で自動的にデータの配置・移動を制御することの可能なシングルレベルストレージシステムの研究を行っている。

- ・ **ストレージ仮想化技術を応用した安全な遠隔バックアップ方式の研究**

社会における電子情報の重要性が増すにつれ、災害やシステム障害等でそれが失われた場合の影響も深刻になる。組織の持つほとんどすべての機能が同時に大きな損害を受けるような大規模災害の際には、災害やシステム障害に備えて組織内で採取・保持されているバックアップ情報自体も同時に危険にさらされるおそれがある。しかし、大きな費用や労力がかかること、あるいは、電子情報の外部預託に心理的抵抗があることにより、自力では地理的に離れた地点に複数のバックアップを保持することが困難な組織も多い。そこで、これらの組織が共同で費用を負担することによって個々の組織あたりの金銭的負担を軽減するとともに、一定のネットワークセキュリティレベルを有する組織どうしが複製情報を相互に保持し合うことによって心理的な抵抗も軽減できるようなバックアップ手法の研究を行っている。

- ・ **電子認証基盤と計算機センター業務フローの融合に関する研究**

わが国の全国共同利用情報基盤センター群は、対面による確認が困難な全国の大学・短大等の研究者にもサービスを提供するため、大学等の経理担当者による間接的な保証や郵便物の到達性にもとづき、個々に利用者アカウントを発行してきた。ここに電子認証技術を利用したシングルサインオン環境を導入しようとする、そこで交付される電子証明書は本人性確認のレベルの問題から海外のグリッド環境では信用されず利用できないという問題があった。そこで、従来型の利用を希望する利用者への対応は変更なく継続しつつ、国際的に通用する電子証明書の交付も可能となるような新たな業務フローを確立するため、海外のグリッド環境でも承認されるような電子認証局プロファイルで求められる要件と、従来からのセンター業務を融合させるための検討を行い、わが国で最初のスパコングリッドの試行運用に貢献した。これらの成果は、2012年度からサービスを開始する予定のHPCIの認証基盤構築の基礎となった。

所属学会名

情報処理学会，電子情報通信学会，IEEE (The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc.)

主な研究テーマ

- ・ 汎用的な計算環境のための拡張公平性スレッドスケジューリングの研究
キーワード：スレッド，スケジューリング，マルチコア CPU，仮想計算機，2016.04～2017.03.
- ・ オーバーレイクラウド上で複数の並列プログラムを結合するための並列ストリーム型データ分配機構の研究
キーワード：オーバーレイクラウド，インタークラウド，2015.10～.
- ・ 次世代NVRAMに対応したシングルレベルストレージサブシステムの研究
キーワード：シングルレベルストレージ，2015.09～.
- ・ 電子認証基盤と計算機センター業務フローの融合に関する研究
キーワード：電子認証技術，計算機センター利用者支援業務，2011.04～.
- ・ ストレージ仮想化技術を応用した安全な遠隔バックアップ方式の研究
キーワード：ストレージ仮想化，遠隔バックアップ，2010.04～.

研究業績

- ・ 学会発表
 1. 大島 聡史，南里 豪志，渡部 善隆，天野 浩文，小野 謙二，スーパーコンピュータシステム ITO の性能評価，情報処理学会ハイパフォーマンズコンピューティング研究会 (2017-HPC-162)，2017.12.

研究資金

- ・ 科学研究費補助金
 1. 2014年度～2017年度，基盤研究 (C)，代表，安全かつ迅速なデータ復旧を可能にする遠隔バックアップ相互保持システムの開発.

教育活動

• 担当授業科目

1. 2017年度・後期, コンピュータシステムⅡ
2. 2017年度・前期, プログラム設計論特論
3. 2017年度・前期, 電気情報工学入門Ⅰ
4. 2017年度・後期, 情報知能工学演習第一
5. 2017年度・前期, 情報知能工学演習第二
6. 2017年度・後期, 情報知能工学演習第三
7. 2017年度・後期, 情報知能工学講究第一
8. 2017年度・前期, 情報知能工学講究第二
9. 2017年度・後期, 情報知能工学講究第三

社会貢献・国際連携

• 社会貢献・国際連携活動概要

「革新的ハイパフォーマンズ・コンピューティング・インフラ（HPCI）」の円滑な運営のため、連携体制の構築に必要な技術的な事項の検討をする「HPCI 連携サービス運営・作業部会」のメンバーとして活動している。また、文部科学省研究振興局科学官が議長を務める『大学の情報環境のあり方検討会』の下に設けられた「クラウド調達に関する財務ガイドライン検討WG」の主査を務めている。

大学運営

• 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2015.04～, 九州大学情報統括本部全学情報環境利用委員会委員
2. 2011.04～, 九州大学情報基盤研究開発センター民間利用審査委員会委員
3. 2011.01～, 事務用業務システム運用部会メンバー
4. 2008.04～, 九州大学情報基盤研究開発センター公募型プロジェクト審査委員会委員
5. 2007.03～, 箱崎地区共通施設利用検討チーム委員
6. 2007.04～, 九州大学情報基盤研究開発センター全国共同利用運営委員会委員
7. 2007.04～, 九州大学情報基盤研究開発センター計算委員会委員

5.3.3 嶋吉 隆夫

研究内容

- ・ 計算機シミュレーション用ソフトウェアシステム

近年では、自然科学・工学・経済学だけでなく、生命科学や医学分野などでも計算機シミュレーションを用いた研究が盛んに行われている。この中で、新たな計算モデルを構築するような研究においては一般的に、何らかのシミュレーション用プログラムを研究者自らが実装しなければならないことが多い。しかし、そのためには、研究分野の知識だけでなく、数値計算とその実装方法、さらには、実行環境となる計算機に対する知識が要求される。これは、数値計算を用いた研究の普及に対する大きな障壁である。また従来は、シミュレーションプログラムは計算性能が最重要視され、ソフトウェアの保守性や拡張性、再利用性などはあまり重視されていなかった。そこで、オントロジーや形式手法といったソフトウェア工学の方法論を計算モデリングや計算機シミュレーションの分野に適用する研究を行っている。

- ・ 生理機能の理論解析

近年の生命科学研究は、新たな方法論の開発や計測技術の向上により著しく進展しており、それに伴って生命現象を対象とした計算機シミュレーション研究も普及しつつある。生命の仕組みを解き明かすことを目的とする生理学の分野では以前から数理モデルによる現象の説明が行われてきたが、近年の観測データの急速な蓄積や高性能計算環境の一般化などによって、生理学現象をより詳細かつ精密に再現する複雑大規模な計算モデルの構築が進んでいるが、未だ生理機能には未解明の点が多い。そこで、大規模計算や数値解析を用いて生理機能を理論的に解析する研究を進めている。

所属学会名

Institute of Electrical and Electronics Engineers, 情報処理学会, 電子情報通信学会, 日本生体医工学
会

主な研究テーマ

- ・ 数値計算アルゴリズムを対象とした形式手法
キーワード：ソフトウェア工学, 記述言語, 数値計算, 2010.04～.
- ・ 細胞生理機能モデルの数理解析手法
キーワード：計算生理学, フィジオーム, 2009.04～.
- ・ 心循環器系の多階層シミュレーション
キーワード：心臓, 心室, 血管系, 細胞生理学, 電気生理学, 構造力学, 2003.04～.

研究業績

• 原著論文

1. Takao Shimayoshi, Yuta Yamamoto, Tetsuya Matsuda, A computational model of myocardial microcirculation including interstitial flow, Proceedings of 39th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, <https://doi.org/10.1109/EMBC.2017.8037653>, 3668–3671, 2017.09.
2. Yoshiaki Kasahara, Takao Shimayoshi, Masahiro Obana, Naomi Fujimura, Our experience with introducing microsoft office 365 in Kyushu University, Proceedings of the 2017 ACM Annual Conference on SIGUCCS, <https://doi.org/10.1145/3123458.3123491>, Part F131713, 109–112, 2017.10.

• 学会発表

1. 松本 亮介, 小田 知央, 笠原 義晃, 嶋吉 隆夫, 金子晃介, 栗林 健太郎, 岡村 耕二, 精緻に解析可能な恒常性のあるメール基盤の設計, 情報処理学会インターネットと運用技術研究会, 2018. 02.
2. 笠原 義晃, 松本 亮介, 近藤 宇智朗, 小田 知央, 嶋吉 隆夫, 金子晃介, 岡村 耕二, 軽量コンテナに基づく柔軟なホスティング・クラウド基盤の研究開発と大規模・高負荷テスト環境の構築, 情報処理学会インターネットと運用技術研究会, 2018. 02.
3. Takao Shimayoshi, Yuta Nishimura, Ayako Takeuchi, Tetsuya Matsuda, Satoshi Matsuoka, Effects of Respiratory Acidosis on Myocardial Mitochondrial Functions: A Simulation Study, Cardiac Physiome Workshop 2017, 2017.11.
4. Takao Shimayoshi, Yoshiaki Kasahara, Masahiro Obana, Naomi Fujimura, Our Experience with Introducing Microsoft Office 365 in Kyushu University, ACM Annual Conference on SIGUCCS, 2017.10.
5. Takao Shimayoshi, Yuta Yamamoto, Tetsuya Matsuda, A Computational Model of Myocardial Microcirculation including Interstitial Flow, IEEE Engineering in Medicine and Biology, 2017.07.
6. 嶋吉 隆夫, 天野 晃, 非線形方程式求根アルゴリズムの宣言的形式言語の設計と実装, 情報処理学会プログラミング研究会, 2017. 06.

教育活動

• 担当授業科目

1. 2017年度・後期, 計算機シミュレーション特論
2. 2017年度・後期, 仮想実験特論
3. 2017年度・前期, 情報処理概論

大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2017.06～2018.03, 要機密情報の保護方法検討WGリーダー
2. 2017.04～2018.03, 障害者支援推進専門委員会
3. 2017.04～2018.03, 情報統括本部 Office365運用事業室長
4. 2016.10～, 九大 CSIRT
5. 2015.11～, 情報統括本部ネットワーク事業室

5.3.4 大島 聡史

研究内容

計算機の性能向上が進んでいる一方で、アーキテクチャの複雑化や多様化も進んでおり、ハードウェアの持つ性能を発揮する難しさも増加している。本研究では、多用される計算手法や最新の計算手法を最新の計算機環境で高速に実行する方法の検討・実装を行ったり、既存のアプリケーションの性能を最新の計算機環境で測定・分析することにより、最新の計算機環境を十分に活用できるようにすることを目指している。主な対象計算ハードウェアとしては、マルチコア CPU、メニーコアプロセッサ、GPU を用いている。主な対象計算は疎行列ソルバー（CG 法およびその主要な計算である疎行列ベクトル積、通信削減 CG 法）であるが、分子動力学アプリケーションの性能評価に携わったり、プログラムに可搬性を持たせる自動チューニング技術と自動チューニング用プログラミング環境（指示文を用いたプログラム記述）に関する研究も行っている。

所属学会名

オープン CAE 学会, Association for Computing Machinery (ACM), Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 日本応用数理学会, 自動チューニング研究会, 情報処理学会

主な研究テーマ

- GPU を用いた高性能計算に関する研究
キーワード：GPU, GPGPU, GPU コンピューティング, 2004.05～2020.12.
- 並列数値計算の自動チューニングに関する研究
キーワード：自動チューニング, 2009.10～2020.12.
- GPU を用いた低ランク近似行列計算法に関する研究
キーワード：低ランク近似計算, GPU, 2016.04～2020.12.
- メニーコアプロセッサにおける分子動力学計算に関する研究
キーワード：分子動力学計算, メニーコアプロセッサ, 2015.04～2020.12.
- 最新並列計算機環境における通信削減 CG 法に関する研究
キーワード：通信削減 CG 法, 2017.04～2020.12.

研究プロジェクト

- ・ 逐次問題の並列計算の数理とフレームワーク研究開発・実証
2017.04～2019.03, 代表者：小野謙二, 九州大学 情報基盤研究開発センター 科研基盤研究(B)
- ・ H 行列法ライブラリの機能拡張と次世代スパコン向け最適化
2017.04～2020.03, 代表者：伊田明弘, 東京大学 情報基盤センター 科研基盤研究(B)
- ・ 通信回避・削減アルゴリズムのための自動チューニング技術の新展開
2016.04～2019.03, 代表者：片桐孝洋, 名古屋大学 情報基盤センター 科研基盤研究(B)

研究業績

・ 原著論文

1. Satoshi Ohshima, Ichitaro Yamazaki, Akihiro Ida, Rio Yokota, Optimization of Hierarchical matrix computation on GPU, In proceedings of Supercomputing Frontiers. SCFA 2018, Lecture Notes in Computer Science, 10.1007/978-3-319-69953-0_16, 10776, 274-292, Lecture Notes in Computer Science, vol 10776. Springer, Cham, pp.274-292, Print ISBN=978-3-319-69952-3, Online ISBN=978-3-319-69953-0, DOI=https://doi.org/10.1007/978-3-319-69953-0_16, 2018.03.
2. Yoshimichi Andoh, Soichiro Suzuki, Satoshi Ohshima, Tatsuya Sakashita, Masao Ogino, Takahiro Katagiri, Noriyuki Yoshii, Susumu Okazaki, A thread-level parallelization of pairwise additive potential and force calculations suitable for current many-core architectures, The Journal of Supercomputing, 10.1007/s11227-018-2272-2, 1573-0484, 2018.02.

・ 学会発表

1. 石黒史也, 片桐孝洋, 大島聡史, 永井亨, 荻野正雄, 高精度行列-行列積アルゴリズムにおける batched BLAS の適用, 第80回情報処理学会全国大会, 2018.03.
2. Satoshi Ohshima, Ichitaro Yamazaki, Akihiro Ida, Rio Yokota, Optimization of Hierarchical matrix computation on GPU, SC-Asia 2018, 2018.03.
3. Takahiro Katagiri, Satoshi Ohshima Masaharu Matsumoto, Auto-tuning on NUMA and Many-core Environments with an FDM code, The Twelfth International Workshop on Automatic Performance Tuning (IWAPT2017) (In Conjunction with the IEEE IPDPS2017), 2017.06.
4. 南里豪志, 大島聡史, 小野謙二, 非ブロッキング集団通信の通信隠蔽効果に関する調査, 情報処理学会 第162回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 2017.12.
5. 大島聡史, 南里豪志, 渡部善隆, 天野浩文, 小野謙二, スーパーコンピュータシステム ITO の性能評価, 情報処理学会 第162回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 2017.12.
6. 大島聡史, 通信削減CG 法の性能評価@OFP, AT マイクロワークショップ@鳥羽, 2017.10.
7. Satoshi Ohshima, Auto-tuning of directives: tuning directives of OpenMP and OpenACC, Second International Workshop on Deepening Performance Models for Automatic Tuning (DPMAT), 2017.08.
8. 大島聡史, 山崎市太郎, 伊田明弘, 横田理央, GPU クラスタ上における階層型行列計算の最適化, 情報処理学会 第160回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 2017.07.

9. 片桐孝洋, 大島聡史, 松本正晴, KNL を用いた FDM コードの自動チューニングと GPU 適用の最新動向, 2017 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 (HPCS2017), 2017.06.

研究資金

- **科学研究費補助金**

1. 2017 年度～2019 年度, 基盤研究(B), 分担, 逐次問題の並列計算の数理とフレームワーク研究開発・実証
2. 2016 年度～2018 年度, 基盤研究(B), 連携, 通信回避・削減アルゴリズムのための自動チューニング技術の新展開
3. 2017 年度～2019 年度, 基盤研究(B), 分担, H 行列法ライブラリの機能拡張と次世代スパコン向け最適化

社会貢献・国際連携等

- **国内, 国際政策形成, 及び学術振興等への寄与活動**

1. 2018.01～2020.01, 文部科学省研究振興局 HPCI 計画推進委員会将来の HPCI の在り方に関する検討ワーキンググループ委員, 文部科学省