

NA-18

大規模並列計算における陰的時間積分法を使用した MHD 非線形コードの高速化

佐藤雅彦 (核融合科学研究所)

3次元 MHD コードである MIPS コードの半陰解法化、及び、基礎的検証を目的として完全陰解法を使用した2次元 MHD コードの開発を行った。これらの陰解法コードでは大規模な連立一次方程式を高速に処理できる反復法が要求される。本研究で提案されているブロック化 BBS 法は、反復法において多くの処理がかかる疎行列-ベクトル積を高速に処理可能であり、その有効性を確認した。

1. 研究の目的と意義

核融合炉を実現するためには、高温高密度のプラズマを安定に閉じ込める必要があり、プラズマ中で発生する磁気流体力学(MHD)不安定性の非線形現象の解明が重要である。このため、核融合科学研究所では、一流体 MHD モデルに基づいた MHD 非線形シミュレーションコード(MIPS コード)を開発し、MHD 不安定性の非線形現象の解明に向けた研究を進めている。

MIPS コードは円柱座標系のもとで4次の有限差分、4次のルンゲクッタ法による陽的な時間積分法を使用している。陽的な時間積分法では、時間積分における時間の刻み幅がクーラン条件により制限されるという問題点がある。MHD 不安定性の中において興味のある現象は、プラズマ抵抗値に依存する抵抗性 MHD 不安定性であり、その非線形現象の時間スケールはミリ秒のオーダーである。これに対し、一流体 MHD モデルに含まれる最も短い時間スケールの現象は、マイクロ秒のオーダーを持つ速い磁気音波である。このため、現在使用している陽的な時間積分法では、時間刻み幅が速い磁気音波によって制限されている。高精度のシミュレーションのために高解像度の格子を使用すると、この制限はより厳しいものとなる。また、一流体 MHD モデルから二流体 MHD モデルへとコードを拡張していく際においても、同様の問題に直面する。そこで、本研究では、高速かつ安定に計算を進めるために、クーラン条件に制限されない陰的な時間積分法を MIPS コードへ導入することを行う。陰的解法においては、連立非線形方程式をニュートン法により解く必要がある。

ニュートン法では反復計算により解を求めることになるが、その反復過程において大規模な連立一次方程式を解かなければならない。このため、陰的解法の高速化には大規模疎行列に対する高速な線形ソルバーの開発が必須となる。

国際熱核融合炉(ITER)に関連する国際核融合エネルギー研究センター(IFERC)プロジェクトとして、2012年に日欧共同運用による核融合計算センター(CSC)にて1ペタフロップスのスーパーコンピュータの導入が予定されているなど、核融合プラズマシミュレーションにおいても超大規模並列計算を有効利用できる能力が求められている。このような超大規模並列計算機を有効利用し、国際的に先導的な MHD シミュレーション研究を進めていくためには、(1)より精密な計算モデル(一流体 MHD モデルから二流体モデルへの拡張)、(2)より現実的な物理パラメータ(大きな磁気レイノルズ数、大きな磁力線方向の輸送係数)、(3)より高精度な数値計算(高解像度格子)、(4)高い並列性能による高速な数値計算手法等が MHD 非線形シミュレーションコードに対して求められる。本研究で開発を行う陰的時間積分法を使用することにより、これらの課題に対処することが可能となる。例として、オーム則におけるプラズマ抵抗(磁場の拡散係数)を考える。抵抗性 MHD 不安定性の成長率はプラズマ抵抗値に依存し、プラズマ抵抗値が小さくなるとともに成長率も小さくなる。このため、プラズマ抵抗値が小さい計算に対しては計算時間を長く取る必要がある。また、プラズマ抵抗が小さくなるとより小さな空間スケールの構造が

現れるため、より高解像度の格子が必要とされ、陽的な時間積分法では小さい時間刻み幅が要求される。このため、シミュレーションで使用されているプラズマ抵抗値は、実際の実験パラメータよりも3桁も大きい値を使用しているのが現状である。陰的時間積分法を使用すれば、クーラン条件に制限されることがないため、高解像度の格子を使用し、かつ、時間の刻み幅を大きくしたシミュレーションが可能となる。これにより、実験結果の解釈や予測を可能とする、実験に即したより現実的なパラメータでの核融合 MHD シミュレーションが可能となり、核融合研究の進展に大きく貢献できると考えられる。

更に、ニュートン法で用いられる高速な線形ソルバーは、他の核融合プラズマシミュレーションコードにおいても有用である。固有値問題による MHD 線形安定性コード、他のスキーム（有限要素法、コンパクトスキーム等）による MHD 非線形シミュレーションコード等へも適用することが可能であろう。特に、MHD 線形安定性コードがプラズマの実時間制御に使用される場合、その計算時間の高速化が重要な課題となっている。したがって、本研究の成果はより幅広いプラズマシミュレーション研究の発展に貢献できると期待される。

陰的な時間積分法は、上述したとおり現実的な物理パラメータでのシミュレーションを実行可能にするだけでなく、将来のコード拡張においても必要とされる数値計算手法である。現在の MHD シミュレーションコードでは、一流体モデルをベースとしているため、陽的な時間積分法でもある程度の規模のシミュレーションが可能である。しかし、一流体モデルをベースとしたコードから、二流体モデルをベースとしたコードへと拡張していくと、速い磁気音波よりもさらに速い時間スケールの物理現象が現れる。このため、将来開発される二流体モデルをベースとした MHD 非線形シミュレーションコードにおいては、陽的な時間積分法で対処することは非現実的と言える。したがって、陰的な時間積分法の導入が必須と考えられ、本研究は将来のシミュレーションコード拡張をも見据えた研究である。

陰的解法において、計算の負荷がもっとも大きい部分は、ニュートン法の反復過程で現れる大規模疎行列問題の部分である。自動チューニング機能付き数値計算ライブラリ Xabelib を導入することにより、大規模連立一次方程式の高速な処理を目指す。この大規模疎行列問題は前処理付きクリロフ法により解くことが有効であると考えられる。一般的な問題と同様に、クリロフ法では有効な前処理法の導入が必要であるが、プラズマが持つ強い非線形性のために大規模疎行列の条件数が非常に大きいことが問題である。そのため、MHD 非線形シミュレーションに適した前処理方法の研究を行い、大規模並列計算機の性能を有効に活用した高速な線形ソルバーの適用を行っていくことも本研究の課題である。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

- (1) 共同研究を実施した大学名
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) 当公募型共同研究ならではの事項など
陰解法を用いた非線形 MHD シミュレーションコードの開発においては、大規模な連立一次方程式の高速化がもっとも重要な課題である。この課題に対して、核融合科学研究所設置のプラズマシミュレータ上での線形ソルバーの最適化等のサポートを受けることができたなどの意義があった。

3. 研究成果の詳細

3.1 MHD コードの陰解法化

(1) MIPS コードの半陰解法化

MIPS コードでは、次の一流体方程式を数値的に解くコードである。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \\ \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= -\rho \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} - \rho \nabla \left(\frac{v^2}{2} \right) - \nabla p + \mathbf{j} \times \mathbf{B} \\ &\quad + \frac{4}{3} \nabla [\nu \rho (\nabla \cdot \mathbf{v})] - \nabla \times (\nu \rho \boldsymbol{\omega})\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial p}{\partial t} &= -\nabla \cdot (p \mathbf{v}) - (\gamma - 1) p \nabla \cdot \mathbf{v} \\ &\quad + (\gamma - 1) [\nu \rho \boldsymbol{\omega}^2 + \frac{4}{3} \nu \rho (\nabla \cdot \mathbf{v})^2] \\ &\quad + \eta \mathbf{j} \cdot (\mathbf{j} - \mathbf{j}_{eq})\end{aligned}$$

$$\mathbf{E} = -\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \eta (\mathbf{j} - \mathbf{j}_{eq})$$

$$\mathbf{j} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B}$$

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v}$$

ここで、 ρ はプラズマ密度、 \mathbf{v} はプラズマの速度、 p はプラズマの圧力、 \mathbf{B} は磁場、 \mathbf{E} は電場、 \mathbf{j} はプラズマ電流密度を表している。 \mathbf{j}_{eq} は平衡での電流密度である。また、 η はプラズマの抵抗値、 ν は

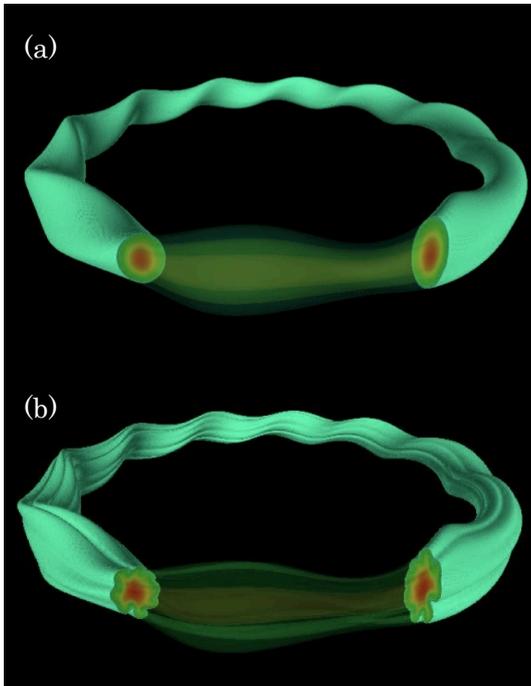


図1. MIPSコードによるLHDプラズマの非線形シミュレーション例。(a)は初期平衡、(b)は非線形状態の様子である。

粘性、 γ は比熱比である。円柱座標系 (R, ϕ, z) のもとで4次の中心有限差分により空間方向の離散化を行い、1階微分、2階微分はそれぞれ、次式のように離散化されている。

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{1}{12\Delta z} (-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2})$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = \frac{1}{12\Delta z^2} (-f_{i+2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2})$$

陽解法版MIPSコードでは、4次精度の陽的ルンゲクッタ法を用いて時間積分を行っている。陽解法版MIPSコードによる大型ヘリカル装置(LHD)二対する非線形シミュレーション結果の例を図1に示す。

MIPSコードの陰解法化の第一段階として、まず拡散項のみを陰的に取り扱う半陰解法コードの開発を行った。ファラデー則とオーム則より、磁場の時間発展方程式は、

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla \eta \times \mathbf{j} + \nabla \times (\eta \mathbf{j}_{eq}) + \eta \nabla^2 \mathbf{B}$$

とかけ、 η を拡散係数とした磁場の拡散項が現れる。この式を分離し、第一ステップにおいて

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla \eta \times \mathbf{j} + \nabla \times (\eta \mathbf{j}_{eq})$$

を陽的に時間積分を行った後、

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \eta \nabla^2 \mathbf{B}$$

を陰解法により時間積分を行う。陰解法における連立一次方程式の解法として、Lisライブラリに実装されているGMRES法を導入し性能評価を行った。この性能評価では、メッシュを R 方向に256分割、 ϕ 方向に640分割、 z 方向に256方向に分割している。プラズマ抵抗値を一様としたとき、並列数を8, 16, 32と変えていったときの時間積分1ステップにおけるGMRESの計算時間、及び、前処理の計算時間を図2に示す。ここでは前処理として不完全LU分解法を用いた。32並列まではスケラビリティを確認することができる。前処理方法として代数的マルチグリッド法を用いた場合も同様に検証を行ったが、不完全LU分解の場合と

比較して大きな違いは得られなかった。次に、抵抗が非一様である場合について評価した。抵抗は温度（圧力）の関数であるため実際には非一様であり、周辺に従って増大する。自由境界問題を取り扱う場合には、コアプラズマの周りに抵抗が非常に大きいプラズマ（擬真空プラズマ）を置く手法が用いられる。このとき、擬真空プラズマの抵抗は $1(\Omega\text{m})$ 以上の値が求められ、陽的な時間積分法においてはクーラン条件を非常に厳しくなる。本件証では、次式のように圧力分布から抵抗分布を与えた。

$$\eta = (\eta_s - \eta_0) \frac{p_{\frac{-3}{2}} - p_{\frac{-3}{2}max}}{p_{\frac{-3}{2}min} - p_{\frac{-3}{2}max}} + \eta_0$$

ここで、 p_{min} 、 p_{max} はプラズマ圧力の最小値、最大値であり、 η_0 、 η_s はプラズマ中心での抵抗値、周辺領域の抵抗値である。簡単のために抵抗分布は非一様であるが、時間発展しないと仮定している。このとき、 $\eta_0 = 10^{-6}(\Omega\text{m})$ は固定して、 η_s の値を 0.01, 0.1, $1(\Omega\text{m})$ と上昇させ、線形ソルバーの反復回数、計算時間を調べた。その結果、反復回数、計算時間ともに周辺の抵抗の値にほとんどよらない結果が得られた。ここでの検証は線形領域のみで調べており、非線形領域での計算効率の検証については今後の課題である。

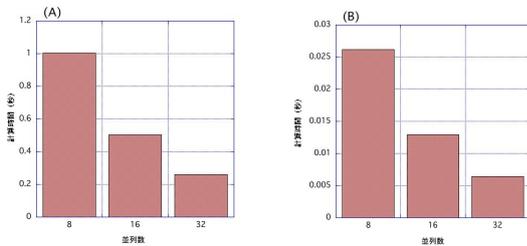


図 2. 磁場拡散項における陰解法のパフォーマンス評価。(A)は GMRES における計算時間、(B)は前処理における計算時間を示す。

(2) 完全陰解法を用いた 2 次元 MHD コードの開発

完全陰解法コードの基礎的検証のため、2 次元スラブ配位を対象とした 2 次元 MHD コードの新規開発を行った。(x, y, z)座標系のもとで、物理変数は z 方向に一様と仮定する。(x, y)座標系において、y 方向に周期境界条件、x 方向には固定境界条件を与える。また、速度、磁場の z 方向の成分は 0 とする。初期平衡として、磁場は y 成分のみを持つとし、その分布を

$$B_y = B_0 \tanh(x/d)$$

と与えた。ここで、 d は磁場のシアの幅を表すパラメータである。圧力分布は、平衡方程式 $\nabla p = \mathbf{j} \times \mathbf{B}$ から決定され、ここで考えている問題では、

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{dB_y}{dx} B_y$$

より決定される。また、初期速度は 0 と仮定する。このとき、磁場に微小な摂動成分を与えその時間発展を求めていく。

陰的時間積分法では、連立非線形方程式を解く必要があり、ニュートン法により解を反復的に求める必要がある。連立非線形方程式を

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) = 0$$

とおくと、推定解の近傍で線形化した方程式

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{du} = -\mathbf{F}(\mathbf{u})$$

から解の更新量 \mathbf{du} をもとめ、

$$\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{u} + \mathbf{du}$$

により推定解を更新する。この過程を $\mathbf{F}(\mathbf{u})$ が要求精度を満たすまで反復する。記憶容量の削減等を目的として、ヤコビアン行列を明示的に与えない方法が主に行われているが、本研究で開発した 2 次元 MHD コードでは、ヤコビアン行列は解析的に与えている。線形方程式は反復法である GMRES 法により解かれる。このとき、必ずしも線形化方程式を精密に解く必要はない。そこで、GMRES 法に与える要求精度と、ニュートン法で収束するまでの GMRES の全反復回数の関係を調べた。図 3 では、

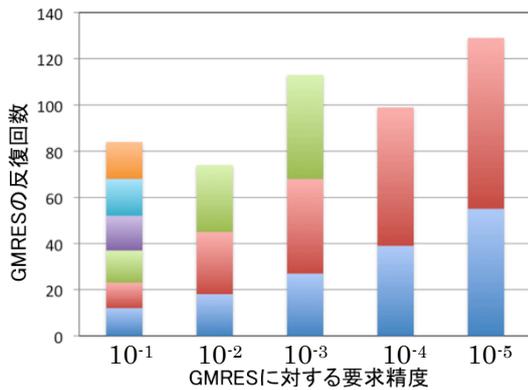


図3. GMRESの要求精度とGMRESの反復回数の関係。

線形発展のある時間ステップに対する検証結果を示したものである。図3では、ニュートン法の1, 2, 3, 4, 5, 6ステップ目におけるGMRESの反復回数をそれぞれ青色、赤色、緑色、紫色、水色、オレンジ色で示している。GMRESの要求精度が小さいほど、ニュートン法の反復回数は減少する。しかし、ニュートン法の1ステップあたりのGMRESの反復回数が増大するため、全GMRESの反復回数は大きくなり全計算時間は増大する。一番効率がよいのは、要求精度が10⁻²としたときである。これよりも要求精度を大きくすると、ニュートン法の反復回数が増大するため効率は悪くなる。一般的にニュートン法のステップが進むにつれて、GMRESの反復回数が増大している。ニュートン・クリロフ法の高速化は、クリロフ法（ここではGMRES法）の要求精度の調整と、ニュートン法における解の近傍におけるGMRES法の収束改善が必要と思われる。

3.2 Blocked BBS

(1) Blocked BSSの提案の背景

多くの数値シミュレーションにおいて、疎行列に対する反復解法が使われている。とりわけ、反復解法において多くの時間がかかる処理は、疎行列・ベクトル積（以降、SpMV）の処理である。そのため、高速なSpMVの実装法が高速な数値シミュレーションで鍵となる。

一方、核融合科学研究所に設置されたプラズマシミュレータ HITACHI SR16000/VL1 は、1ノード

あたり物理コアで64スレッド実行、疑似スレッド実行（SMT実行）で128スレッド実行が可能な高スレッド環境である。次々世代スーパーコンピュータ（エクサフロップス環境）の1ノードで想定される、メニーコアな試験環境といえる。

以上から本研究では、高速なSpMV実装の提案と、128スレッド実行を想定した高スレッド環境でのSpMVの性能評価を行うことを目的とした。

(2) ブロック化BSS法のカーネル

自動チューニング機能付き数値計算ライブラリ用のインターフェース集 OpenATLib (β版) を本研究では利用した。特にβ版で新規開発したSpMVの方式であるBSS(Branchless Segmented Scan)法は、特定の行列で高性能を発揮するため注目されている。

BSS法のカーネルにおける主演算は

$$S = VAL(I) * X(ICOL(I)) + S, \quad \dots (1)$$

である。式(1)は、スカラーSのループ伝搬フロー依存(回帰演算)であるので、並列実行を阻害する。そこで、式(1)の計算において、積の計算部分と、Sへの足しこみ部分が分離できる性質を利用し、並列性を高める方式を実装する。すなわち、

$$VALS(I) = VAL(I) * X(ICOL(I)) \quad \dots (2)$$

$$S = VALS(I) + S \quad \dots (3)$$

のように数式とループとを分割する。このことで、間接参照の式(2)の並列性を増加させ、コンパイラによるソフトウェア・パイプライン適用の機会の拡大をねらう。この実装を図1に示す。

図4では、<7>行でSの拡張配列VALSを導入している。キャッシュの親和性を高めるため、図1<6>-<9>の積の部分で昇順にインデックスを動かしVALSへ値を代入した後、図4<11>-<17>では逆に降順にインデックスを動かし、配列VALSに関するキャッシュヒット率の向上をねらう。

以上のように、(1)間接参照演算の並列性を高める目的でSを配列拡張する、(2)キャッシュ親和性を高めるため積部分で昇順、和部分で降順にイン

```

<1>!$OMP PARALLEL DO
PRIVATE(S,K,I,K1,K2,IV,VALS,ISTART,IEND)
<2>DO J=1,JL
! ---- 積の計算部
<3> K1=JFSTART(J-1)+1; ISTART=MFLAG(K1);
<4> K2=JFSTART(J); IEND=MFLAG(K2+1)-1;
<5> IV=1
<6> DO I=ISTART, IEND
<7> VALS(IV) = VAL(I)*X(ICOL(I))
<8> IV = IV + 1
<9> END DO
! ---- 和の計算部
<10> IV = IV - 1
<11> DO K=K2, K1,-1
<12> S=0.0D0
<13> DO I=MFLAG(K+1)-1, MFLAG(K), -1
<14> S=S+VALS(IV); IV=IV - 1;
<15> END DO
<16> VALSS(K)=S
<17> END DO
<19>END DO
<20>!$OMP END DO PARALLEL
    
```

図4 ブロック化BSS法のカーネル

デックスを動かす，ことを特徴とするBSS法の実装法をBlocked BSS法と呼び，本研究で提案する実装方式である。

(3) 性能評価

核融合科学研究所に設置されたプラズマシミュレータ HITACHI SR16000/VL1 を利用した。CPU は IBM POWER6 (5.0GHz)，64 コア/ノード (物理構成)，128 スレッド/ノード (SMT 実行時) である。L1 データキャッシュは 64 Kbyte/コア，L2 データキャッシュは 4Mbyte/コア，および L3 データキャッシュは 32 MByte/2 コアである。メモリは，ノード当たり 1024GByte である。OS は AIX 5L v. 5.3 である。コンパイラは日立最適化 f90 V02-00-/B，コンパイラオプションは“-64 -opt=ss -omp” である。

Blocked BSS を実装した OpenATLib はβ版である。なお，OpenATLib の疎行列圧縮形式は CRS (Compressed Row Storage) 形式である。図1<11>-<17>のループを，日立コンパイラが提供する最適化ディレクティブにより，4段および8段のアンローリングを指定した場合の性能を評価する。以下に今回評価する SpMV の実装をまとめる。

- U1: 行分割方式 (従来のシンプルな実装)
- U2: 非零要素均等化方式 (OpenATLib β 版の最適化方式)
- U3: BSS 法
- U4: ブロック化 BSS 法 (アンローリング無)
- U5: ブロック化 BSS + アンローリング 4 段
- U6: ブロック化 BSS + アンローリング 8 段
- U7: オリジナル SS 法

図5に，特定の1行が密な行列について，性能評価を行った。この行列は，BSS が有効となる行列であり，従来法である単純な行分割方式では並列性が抽出できない特徴がある。

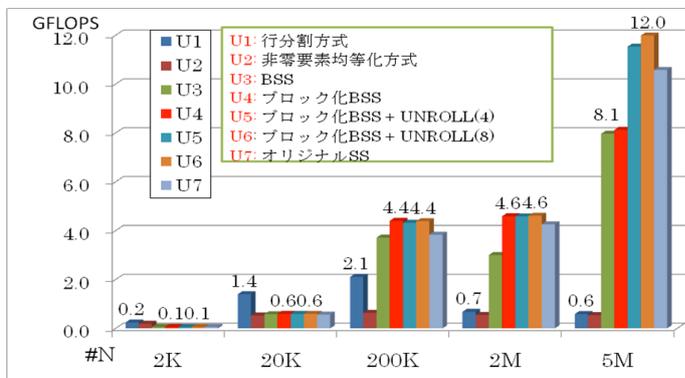


図5 特定の1行が密な行列の性能

図5から，従来法では行列サイズに関係なく，高々0.6GFLOPS程度しか性能が出ない。ところがBSSでは，サイズが5Mのとき8.1GFLOPSを達成している。一方で提案するブロック化BSSとアンローリングにより，12.0GFLOPSの性能を達成した。これにより，本提案手法の有効性が確認された。

また，フロリダ大学疎行列コレクションから選んだ以下の行列において高性能を達成した。

- 行列名: torsol
67.6GFLOPS (U2, 非零要素均等化方式)
N : 116, 158 , NNZ: 8, 516, 500
- 行列名: xenon2
62.8GFLOPS (U1, 行分割方式)
N : 157, 464 , NNZ: 3, 866, 688

4. これまでの進捗状況と今後の展望

陰解法コードの高速化、効率化の方法として、ヤコビアン行列を陽に評価しない方法、及び、物理現象に基づいた前処理方法がこれまでに提案されてきている。ヤコビアン行列を陽に評価しない方法では、GMRES 法においてヤコビアン行列とベクトル積の部分にしか現れないことに着目して、ヤコビアン行列とベクトル積自体を差分により近似的する方法である。これにより、大規模となるヤコビアン行列の評価を回避できる。

また、物理現象に基づいた前処理方法では、Schur 分解により方程式系を楕円型に変換するものである。MHD 方程式の線形化方程式は、形式的に次のように書くことができる。

$$\begin{pmatrix} M_{\rho\rho} & 0 & 0 & U_{\rho\nu} \\ 0 & M_{BB} & 0 & U_{B\nu} \\ M_{p\rho} & M_{pB} & M_{pp} & U_{p\nu} \\ L_{\nu\rho} & L_{\nu B} & L_{\nu p} & D_{\nu\nu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\rho \\ d\mathbf{B} \\ dp \\ d\mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{\rho} \\ G_{B} \\ G_{p} \\ G_{\nu} \end{pmatrix}$$

これを、

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{\rho\rho} & 0 & 0 \\ 0 & M_{BB} & 0 \\ M_{p\rho} & M_{pB} & M_{pp} \end{pmatrix}, \mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_{\rho\nu} \\ U_{B\nu} \\ U_{p\nu} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{\nu\rho} & L_{\nu B} & L_{\nu p} \end{pmatrix}, \mathbf{D} = D_{\nu\nu},$$

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} d\rho \\ d\mathbf{B} \\ dp \end{pmatrix}, \mathbf{G}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} G_{\rho} \\ G_{B} \\ G_{p} \end{pmatrix}$$

とおけば、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M} & \mathbf{U} \\ \mathbf{L} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\mathbf{q} \\ d\mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{\mathbf{q}} \\ \mathbf{G}_{\mathbf{v}} \end{pmatrix}$$

と書くことができる。これを Schur 分解すれば、

$$\begin{pmatrix} d\mathbf{q} \\ d\mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ -\mathbf{L}\mathbf{M}^{-1} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{M}^{-1} & 0 \\ 0 & \mathbf{S}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{U} \\ 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{\mathbf{q}} \\ \mathbf{G}_{\mathbf{v}} \end{pmatrix}$$

と表すことができる。ここで、 $\mathbf{S} = \mathbf{D} - \mathbf{L}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{U}$ である。

ここで、 $\mathbf{M}^{-1} \sim 1/\Delta t$ と近似すれば、 $\mathbf{L}\mathbf{U}$ は拡散型の演算子となり、代数的マルチグリッド等の並列性能の良い前処理を使用することが可能となる。これらの高速化に関する計算技術を段階的に導入し、陰解法コードの高速化を段階的に進めていく予定である。

もっとも重要な部分は GMRES 法の高速化である。GMRES 法の高速化に関しては、予備評価として、疎行列 - ベクトル積演算を、核融合科学研究所に設置されたプラズマシミュレータ HITACHI SR16000/VL1 の高スレッド実行時に高い性能を発揮するブロック化 BSS を提案した。本評価はプラズマシミュレーションの MHD コードに自動チューニング機能付き数値計算ライブラリ Xabclib を組み込む予備評価という位置づけである。来年度に向けて、実際の MHD コードに Xabclib 組み込み、性能を評価する予定である。

5. 研究成果リスト

- (1) 学術論文 (投稿中のものは「投稿中」と明記)
 - 片桐 孝洋, 佐藤 雅彦, 情報処理学会論文誌 : A C S, 第 3 4 号, (2011) 「疎行列-ベクトル積におけるブロック化 BSS 法と高スレッド並列環境での性能評価」 (採録決定)
- (2) 国際会議プロシーディングス
- (3) 国際会議発表

(4) 国内会議発表

- 佐藤雅彦、第4回シミュレーション科学シンポジウム、自然科学研究機構 核融合科学研究所 主催、2010年9月14日(火)～15日(水)「完全陰解法を用いた非線形MHDコードの開発」
- 片桐孝洋(東大)、佐藤雅彦(核融合研)、2010年並列/分散/協調処理に関する『金沢』サマー・ワークショップ (SWoPP2010)、金沢市文化ホール、日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 (MEPA) 研究会、2010年8月3日(水)～8月5日(木) (2010)「高並列スレッド環境での改良 Segmented Scan 法による疎行列-ベクトル積の性能評価」
- 片桐孝洋、第4回シミュレーション科学シンポジウム、自然科学研究機構 核融合科学研究所 主催、2010年9月14日(火)～15日(水)「自動チューニング機能付き数値計算ライブラリ Xabclib の HITACHI SR16000/VL1 での性能評価 ～疎行列-ベクトル積を中心に～」
- 片桐 孝洋, 佐藤 雅彦、2011年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学論文集 HPCS 2011、2011年1月18日(火)～1月19日(水)、HPCS 2011 論文集、(2011)「疎行列-ベクトル積におけるブロック化 BSS 法と高スレッド並列環境での性能評価」(採録済み)

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)