

研究紹介

(情報科学の達人 京大研究室訪問)

岩下 武史
(京都大学 学術情報メディアセンター)

研究室の概要

教員

- 岩下 武史 教授, 安戸 僚汰 准教授, 鈴木 謙吾 助教

所属

- 学術情報メディアセンター (スーパーコンピューティング研究分野)
- 大学院 情報学研究科 通信情報システムコース

現在の体制

- D: 2名 (内1名 社会人博士@NTT), M2: 4名, M1: 3名
- 受託研究員 SONY (1名)

2023年に岩下, 2024年に鈴木, 2025年に安戸が着任した新しい研究室

教員プロフィール

岩下 武史

1986～1989年 私立 洛星高校

1989～1998年 京都大学 工学部 電気工学科 (学部, 修士, 博士)

1998年 京都大学 大学院工学研究科 リサーチアソシエイト (日本学術振興会 博士研究員)

2000年 京都大学 学術情報メディアセンター (大型計算機センター) 助手 / 助教授 / 准教授

2014年 北海道大学 情報基盤センター 教授

2023年 京都大学 学術情報メディアセンター 教授

2003.3～2004.1 豪州, Griffith Univ., Visiting Fellow

2011.3～2011.5 米国, ローレンスバークレー国立研究所, Visiting Researcher

研究テーマ

ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC: High Performance Computing)

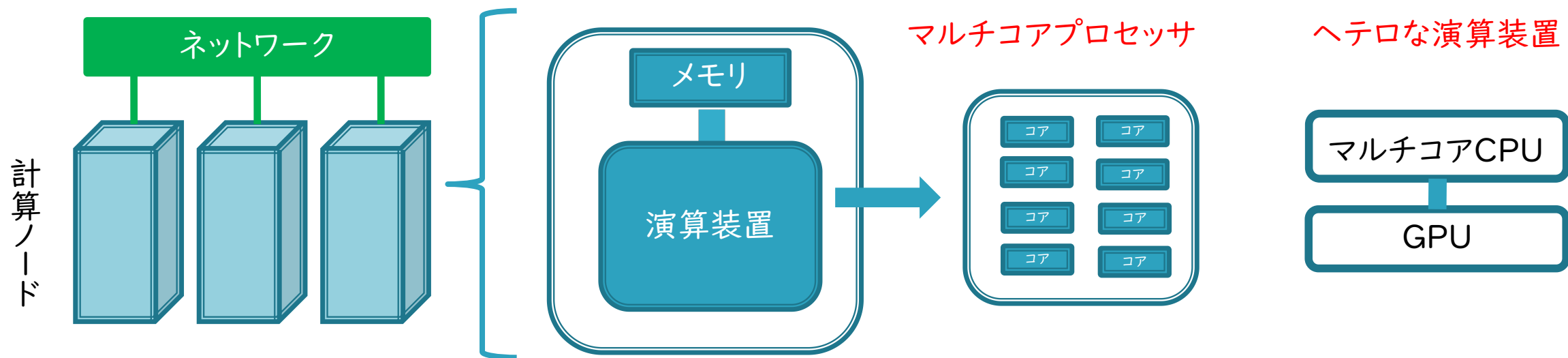
計算機の性能を最大限に引き出す方法の研究

最良のアルゴリズム, 実装方法を研究

実学志向の研究

- ・実社会の問題解決, 最先端の計算科学・計算工学への貢献
- ・最先端の計算機やそのロードマップを意識
- ・【学術的意義】10~20年使われる基盤技術を開発

最新&これからのコンピュータ



多数のコアを備える ⇒ 並列計算の利用がMUST

高性能計算のための演算命令・計算機構を備える

GPU等の演算アクセラレータの活用, 量子計算機との連携

CPUで数100, GPUでは数万程度の並列性を確保したい

AI用途向けに低精度な行列積演算に特化した命令が用意されている

研究のフィールドとアプローチ

解析の計算時間の大部分を占めるプログラムの箇所

研究対象

計算核
ホットスポット

科学・工学の両方で高速化が強く求められている

研究のフィールドとアプローチ

▶ 線形ソルバ

(連立一次方程式: $Ax = b$ の求解法)

- 構造解析, 電磁場解析, 流体解析における主要な計算カーネル
- 多くの解析で計算時間の大部分を占める
 - ・ シミュレーションに要する計算時間の99%以上となることも普通
- 係数行列は疎行列であることが多く、反復解法が用いられる

▶ 行列の低ランク近似

- 地震サイクル解析, 磁性体材料解析

▶ 機械学習・最適化

- 省エネルギーAI応用、データサイエンス

▶ 計算機科学的アプローチ

- 並列計算アルゴリズムの開発
- SIMDベクタ命令, 行列積演算命令の活用
- GPU等のアクセラレータの利用
- 新しい計算機アーキテクチャや専用回路による解決

▶ 数理的アプローチ

- 部分空間への写像に基づく反復法の高速化

▶ 数理・計算機併用型アプローチ

- 混合精度演算の利用
- 新計算デバイスにおける整数演算命令の活用

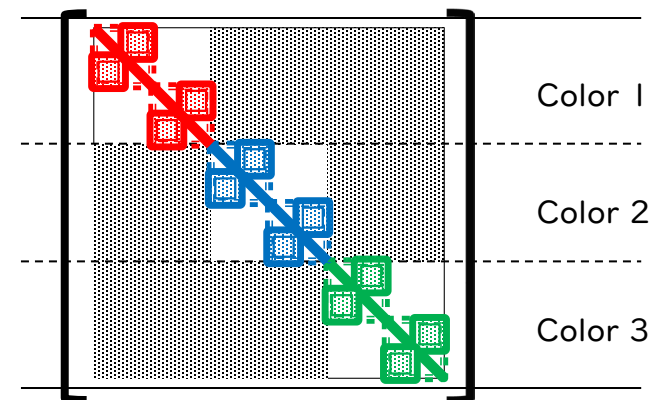
▶ 応用分野との共同研究

- 応用分野からの協力要請が多い
- 民間企業, 国内外の研究機関との共同研究を実施
- 過去の共同研究企業: ソニー, 村田製作所, JSOL (日本総研), ヴァイナス

線形ソルバに関する研究

① 疎行列演算の並列化手法を開発

- マルチスレッド並列処理とSIMD命令に適する未知数の順序付け法を提案
 - 階層型ブロック多色順序付け法(右図)
 - IC/ILU分解前処理やGSスムーザの並列化に利用



空白部分には非ゼロ要素がなく
色ごとに並列処理できる

② 低精度演算を活用する線形ソルバの開発

- 計算のほとんどを低精度演算(FP16, FP32)で行いながら, 従来の倍精度浮動小数点演算による方法と同精度の解を導出する実装方式を提案
- 高性能計算に関するトップカンファレンスであるSC25(K. Suzuki & T. Iwashita)に採択
- また、整数演算に基づく線形ソルバに関する研究についても、数値計算に関するトップジャーナルであるACM Transactions on Mathematical Softwareに掲載
 - 低精度・整数演算による疎行列線形ソルバの分野では国際的にトップランナーとなっている

応用分野との共同研究

① 応用分野との連携（卒論研究@北大）

- 日本を代表する気象コードであるSCALEの高速化に取り組む
 - 線形方程式の求解法を改善し, 約7倍の速度向上を達成
 - SCALEのHP上で北大学生と岩下の名前がContributorとして加えられる
https://www.r-ccs.riken.jp/software_center/jp/software/scale/overview/

② 応用分野との連携（卒論研究 in 2024, 2025）

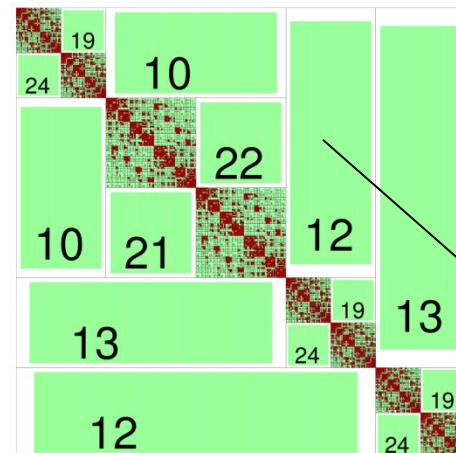
- 京都大学 工学研究科 機械理工学専攻 熱物理工学研究室との共同研究
- 混相流の流体シミュレーションコードの高速化に取り組む
 - ポアソン方程式の求解法を改善し, 約2倍の速度向上を達成

行列近似に関する研究

劇的な演算量とメモリ量の削減



H行列へ変換



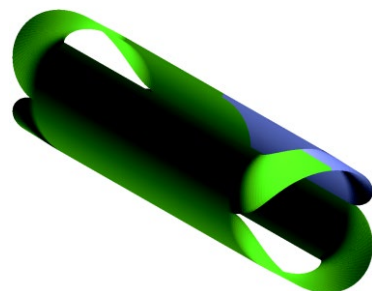
Full-Rank

Low-Rank

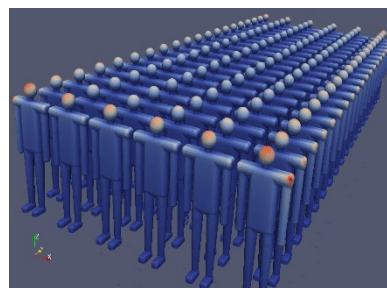
たった12本のベクトルで
近似できる

世界で初めてH行列の分散並列ライブラリを開発

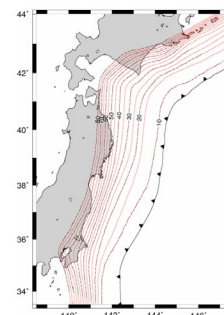
応用



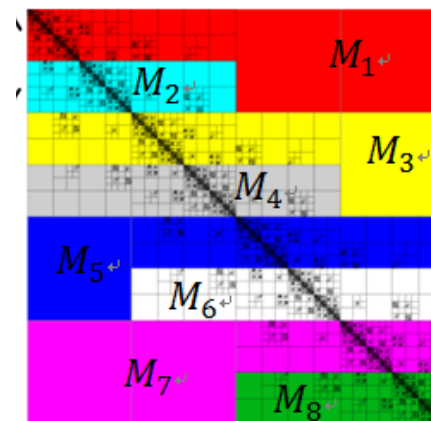
超電導コイルの解析



落雷の解析



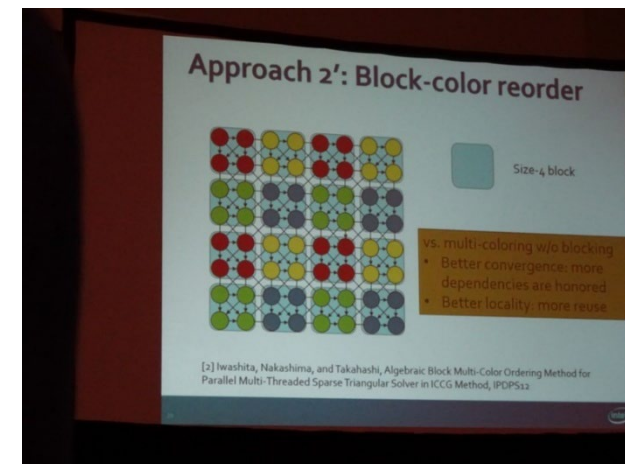
地震サイクルの解析



H行列の分散メモリ分割

HPC研究の何がよい？

- (国際性) 研究成果が世界中で使われる
- (実用性) 現代社会に直結している
- (透明性) 成果の評価が明解
- 開発プログラムを公開した場合, 良いものであれば世界中で使われる
 - ブロックマルチカラー法と呼ぶ並列化手法を提案 @IPDPS2012
 - 日本でNo.1のシェアを誇る商用電磁場解析ソフトウェアに採用
 - 疎行列計算に関する基盤技術として世界中で活用されている



Dr. Park@IntelのSC14における発表スライド

HPC分野の
最高峰会議

SC24の論文でも活用
Iwashitaの論文4件を引用
10年以上使われる技術に！

[2] Iwashita, Nakashima, and Takahashi, Algebraic Block Multi-Color Ordering Method for Parallel Multi-Threaded Sparse Triangular Solver in ICCG Method, IPDPS12

当研究室の特徴

- 国際的に価値のある研究に携わることができる
- 高性能計算について学ぶことができる
 - 様々な分野に応用できる ⇒ 将来に役立つ
- きめ細かい指導を受けられる
 - 研究者や博士進学を目指している人にはメリット有
- 企業との共同研究, 海外を含めた他大学や研究所との共同研究に参加できる
 - 例) パリ第11大学, ローレンスバークレー米国国立研究所, カーネギーメロン大学, 東京大学, 北海道大学, 東京科学大学, 同志社大学, ソニー, JSOLなど

今後の研究課題

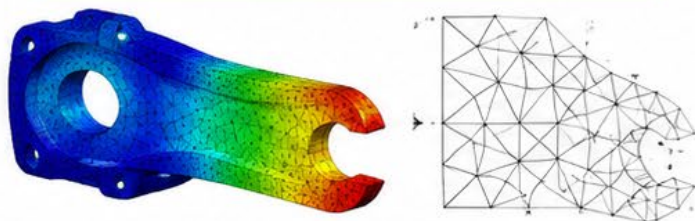
- GPU向けアルゴリズム、実装方式開発
 - 線形計算、反復型ステンシル計算
- 混合精度演算・整数演算を用いた高速計算アルゴリズム
- H行列ライブラリの性能改善
- 大規模数値シミュレーションプログラム開発（電磁場など）
- 応用分野との共同研究
 - 開発したソルバやアルゴリズムの実応用での検証・性能評価
- 生成AIを支える高性能計算システム

線形ソルバに関する研究の紹介 (もうちょっとだけ深掘り)

さまざまな科学・工学分野で現れる疎行列連立一次方程式

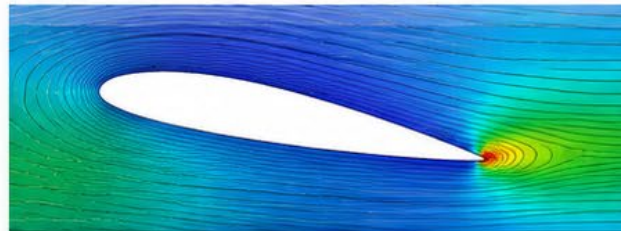
➤ 多くのシミュレーションやデータ解析では、離散化やモデル化により $Ax = b$ が現れる (A は大規模かつ疎行列)

有限要素法 (構造・熱・振動など)



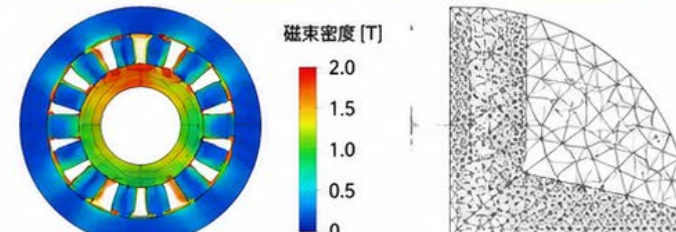
構造物の変形・応力解析、熱伝導解析、振動解析などで **FEM** により離散化すると連立一次方程式が現れる。

計算流体力学 (CFD)



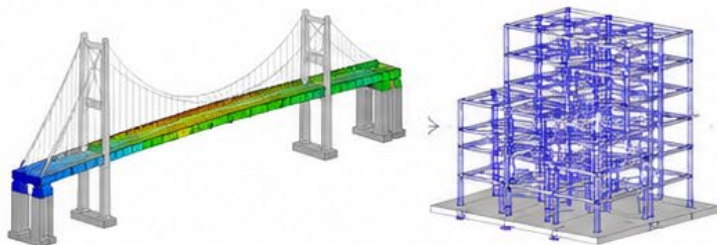
ナビエ-ストークス方程式などを離散化すると、大規模な疎行列連立一次方程式を解く必要がある。

電磁場解析



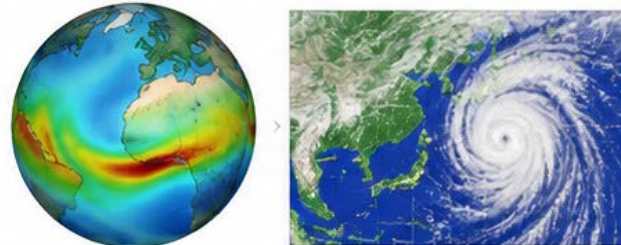
マクスウェル方程式を離散化すると、大規模な疎行列連立一次方程式が現れる。

構造解析 (建築・土木・機械など)



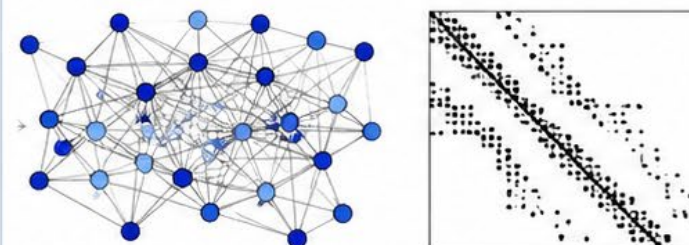
建築物や橋梁、自動車部品などの構造解析では、**有限要素法**により連立一次方程式を解く必要がある。

気象・気候シミュレーション



大気や海洋の運動方程式を離散化すると、非常に大規模な連立一次方程式が現れる。

AI・データ解析・グラフ解析



グラフラプリアンやレコメンデーションなど、データ解析の多くの場面で現れる。



これらの分野の大規模シミュレーションやデータ解析を支える基盤技術が、疎行列連立一次方程式の高性能な求解法である。

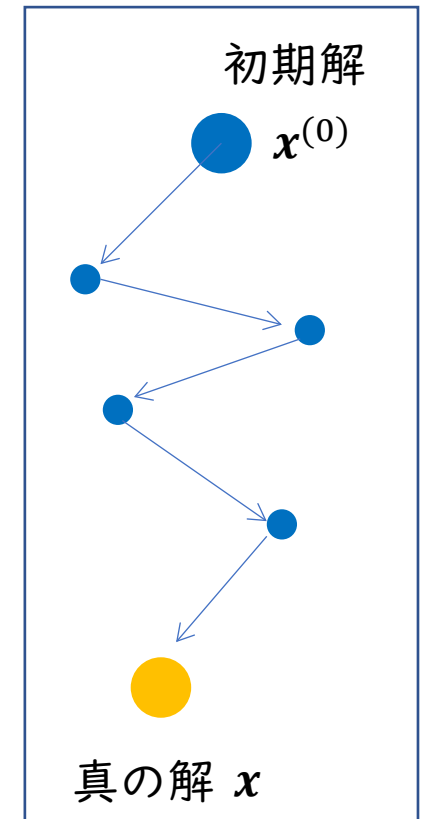


疎行列を係数とする場合に特に有効

反復法

- 実応用上の問題では最もよく用いられる線形ソルバ
- $Ax = b$: 初期解 $x^{(0)}$
- k 回目の反復後に得られた近似解ベクトルを $x^{(k)}$ として $x^{(k+1)}$ をある手続きを用いて得る
- 収束判定基準（残差ノルム $\|b - Ax^{(k)}\|_2$ を使用することが多い）に達したら反復を終了する
 - （注意）直接法による解＝正解，反復法による解＝近似解というのは誤解です．両方とも近似解となります．直接法を用いても数値計算上の誤差が入るためです．
- 代表的な方法
 - ヤコビ法，ガウス＝ザイデル法，SOR法
 - クリロフ部分空間反復法
 - 共役勾配（CG）法（対称行列向け）
 - BiCG法とその改良法，GMRES法

反復法



反復法的高速化

- 反復法の計算時間 = 1反復あたりの計算時間 × 反復回数
- 戦略 1 : 反復回数の短縮 (=収束性の向上)
 - 前処理
 - 解法の改良
- 戦略 2 : 1反復あたりの計算時間の短縮
 - コンピュータを上手に使う (HPC: High Performance Computing)
 - 並列処理を有効に活用する
 - SIMD命令の活用やプロセッサの特性に合わせた実装・アルゴリズムの開発

反復法の収束性を向上させる方法

- 反復法では近似解を正解に近づけていく
 - $x^{(0)} \rightarrow x^{(1)} \rightarrow x^{(2)} \rightarrow \dots$
- 見方を変えると・・・
 - 誤差を減らす（0に収束させる），誤差： $e^{(k)} = x - x^{(k)}$
- 反復法では「収束しやすい誤差」と「収束しにくい誤差」がある
 - 例えば，係数行列 A の小さい固有値に対応する固有空間に属する誤差は収束しにくい
 - Subspace correction法
 - 収束しにくい誤差は係数行列とは別の行列を使って除去する（適切な小さいサイズの空間を用意してその中での誤差を除去する）
 - 最も応用上うまくいっている方法：マルチグリッド法

一反復あたりの計算時間の短縮

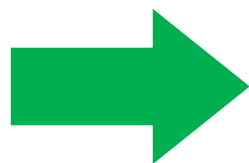
- **ムーアの法則が牽引してきた時代**
 - 集積回路の微細化技術が指数関数的に向上
- **90年～90年代後半**
 - CPUのクロックがどんどんあがる
 - 何も努力しなくてもシミュレーションが速くなる
- **2000年以降**
 - (古典的) デナード則の終焉
 - 消費電力に関する制約からこれ以上クロックをあげることができなくなる
 - マルチコア時代の到来
 - プロセッサ (CPU) の中に複数のコアがある
 - 計算ノード, ノード内の複数プロセッサ, マルチコアプロセッサ
 - 階層構造の並列処理

並列処理の活用が重要



並列処理の活用 (2006年の講義スライドから)

武田信玄型から織田信長型計算法への転換



並列処理を前提とした手法・プログラム
コア数増加の恩恵をうけることができる
構造、手順が単純なプログラム

スケーラブルである

・ 武田信玄型

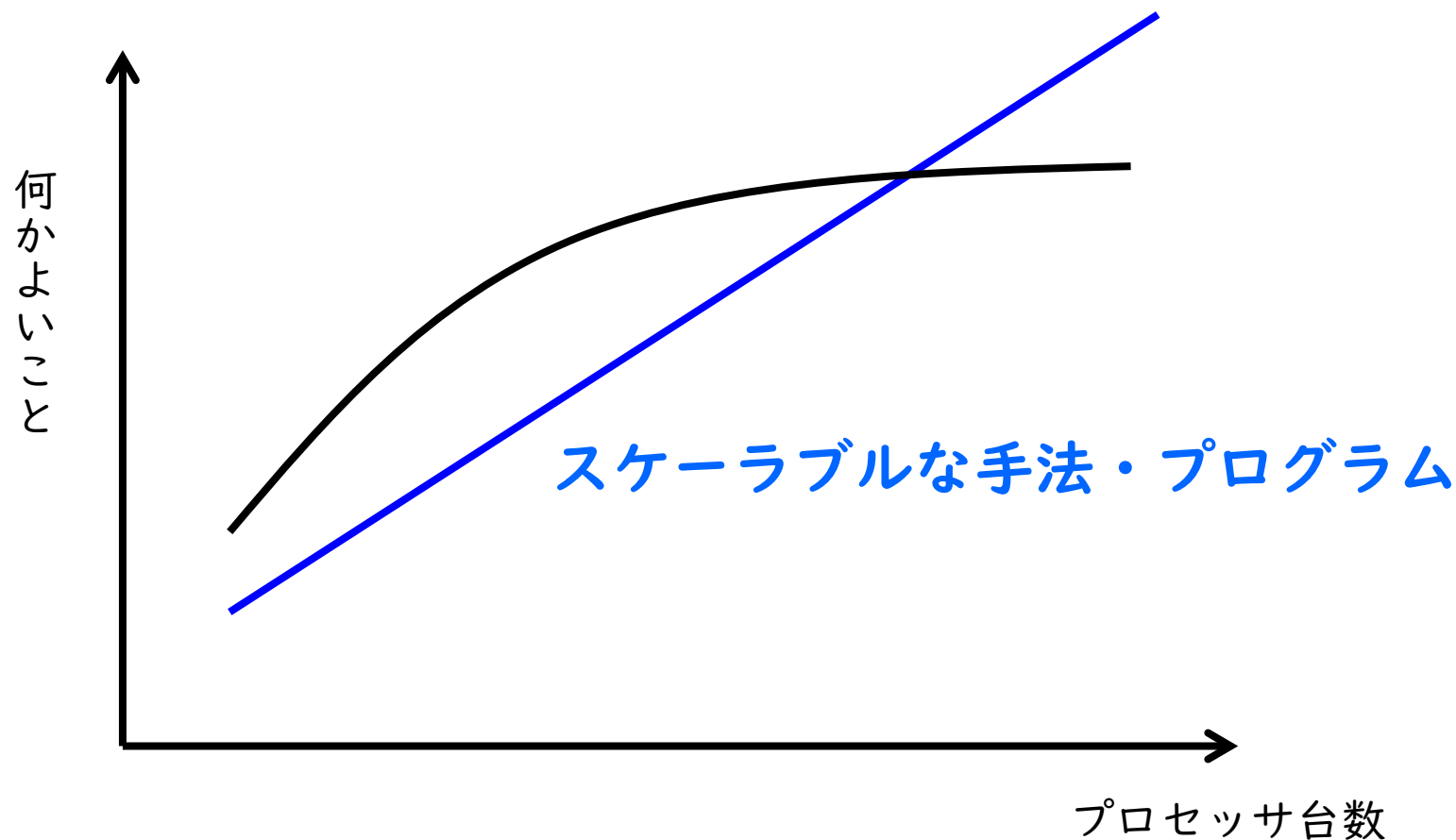
- ・ 個人の能力を高める
- ・ 無敵の騎馬軍団（1対1なら無敵！）
- ・ 逐次計算において最も洗練された計算

・ 織田信長型

- ・ とにかく戦は数が多い方が勝つ！
- ・ 一人一人がすることを単純化（皆に鉄砲を持たせる等）して、多くの兵士を動員できるように
 - ・ 騎馬を上手に操ったり、重い槍を自在に扱う兵士の養成は大変だが、引き金は誰にでもひける？
- ・ 並列処理に適した計算手順



スケーラブルな手法・プログラムとは



スケーラブルな計算プログラムのために

- 並列アルゴリズムの検討

- 従来的なアプローチ

- 一般的な逐次アルゴリズムの並列化

- しかし、洗練された逐次アルゴリズムは並列処理の阻害要因を含む場合が多い

- これからのアプローチ

- シミュレーションの目的を満たす手法とは何か、根底から考えなおす
 - ときには時代遅れの方法を使う方が有利な場合も

- 並列プログラミングによる実装

- マルチコアプロセッサによるスレッド並列処理

- ネットワークで接続された複数の計算機を利用するプロセス並列処理



(単純でない) 並列計算の例

Sparse triangular solverの並列化

疎行列ソルバにおける
重要な部品

- 疎行列下三角（上三角）行列による代入計算
 - マルチグリッド法におけるガウス＝ザイデルスムーザ
 - 不完全LU/コレスキー分解前処理

下三角行列に対する前進代入計算

$$\begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \end{pmatrix}$$

$$y_1 = r_1 / l_{11}$$

$$y_2 = (r_2 - l_{21}y_1) / l_{22}$$

$$y_3 = (r_3 - l_{32}y_2 - l_{31}y_1) / l_{33}$$

$$y_4 = (r_4 - \sum_{k=1}^3 l_{4k}y_k) / l_{44}$$

上から順番に
逐次的に処理

並列化に不向き！

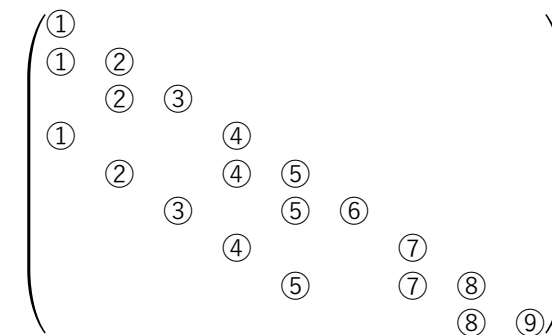
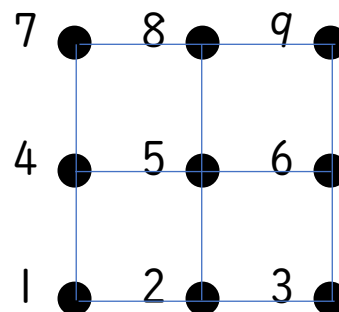
リオーダーリング手法

- 係数行列は疎行列であるため，互いに関係のない未知変数の組が多数存在している
- 未知変数の順番を適切に変更すれば，係数行列の非ゼロ要素位置が変更され，代入計算の並列実行が可能となる．

疎行列のグラフによる表現

節点：未知変数

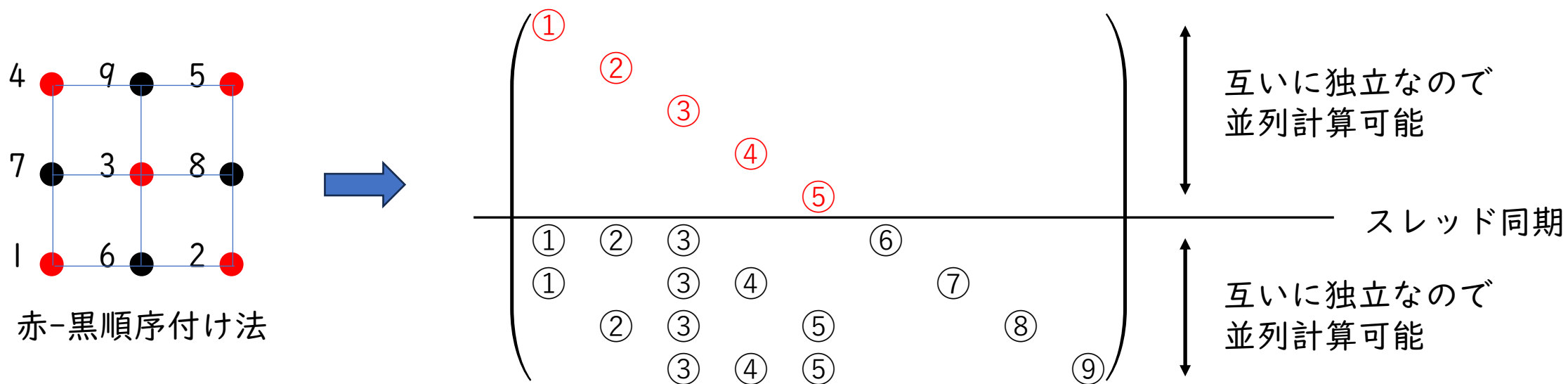
辺：係数行列の非ゼロ要素



2次元差分解析におけるグラフ

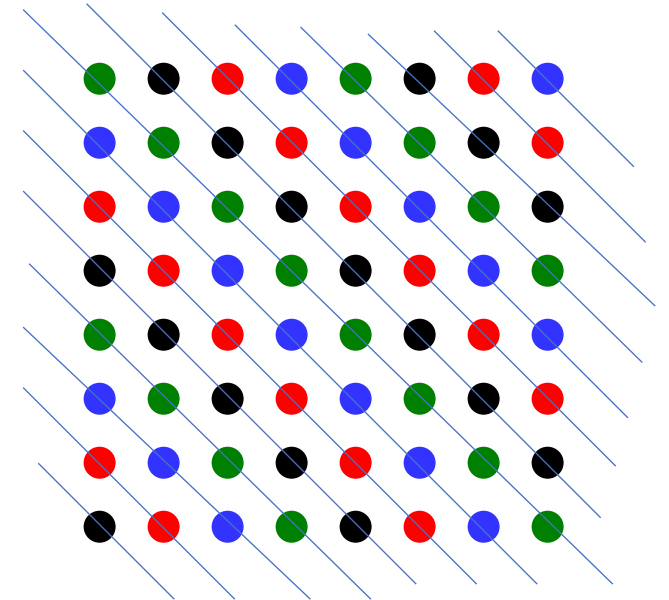
リオーダーリング手法

- 多色順序付け法 (Multi-Color ordering)
 - 同一の色の節点同士に関係性がないように塗り分ける



多色順序付け法

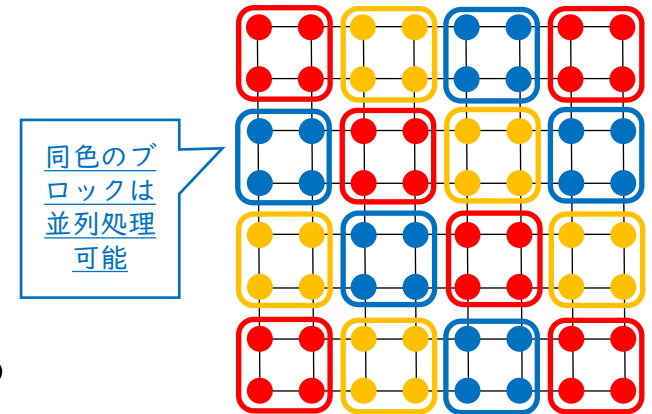
- 同色の未知変数は依存関係がなく、並列に処理できる
- 色数-1：同期点の数（同期や通信が必要）
- 疎行列一般に対する色分けの方法
 - 貪欲法、サイクリックな割り当て（1行当たりの非ゼロ要素数が定数の疎行列の場合、 $O(n)$ で行える）
 - 色数を最小にしようとすると、、、NP完全
 - 現実的な時間で再順序付けが行えることが重要
- ところが、、、
 - 多色順序付けを行うと、反復法の収束性が悪化することが明らかに



4色順序付けの例

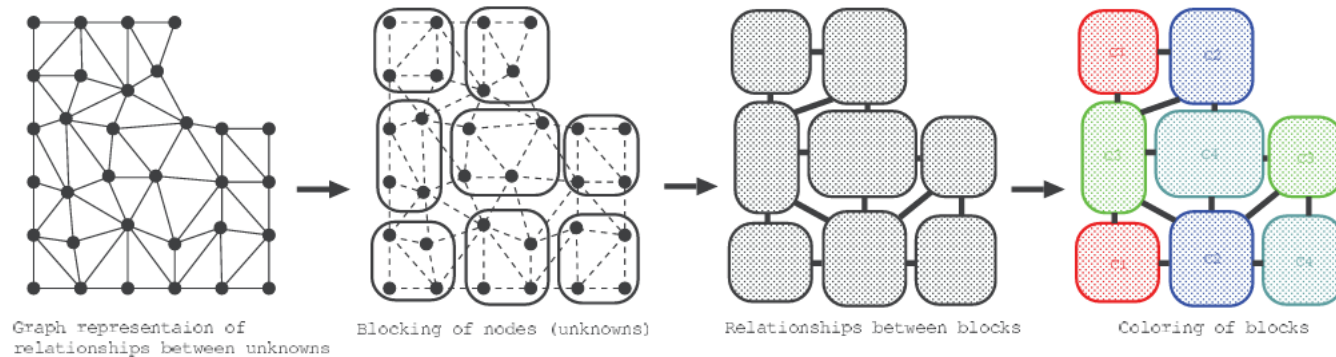
ABMC法

- リオーダリング手法における並列性と収束性のトレードオフ
- オーダリングの評価指標（反復法の収束性への影響）の提案：Iwashita et al., SIAM Sci. Comput., 2005
- **ABMC (Algebraic Block Multi-Color) 法の提案**
 - Iwashita et al., IPDPS2012
 - (手順1) 未知変数をブロック化する
 - ブロックサイズは同一として、4~16程度
 - 3種のブロック化手法を提案
 - (手順2) ブロックに対して多色順序付けを適用する



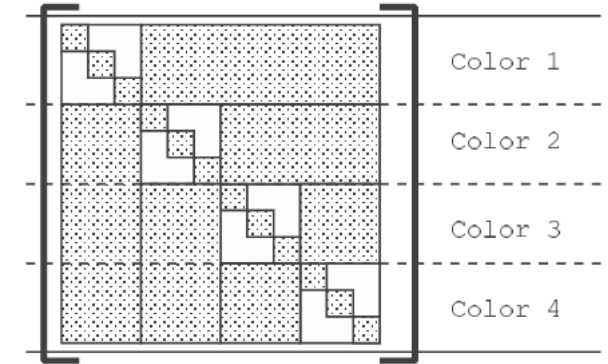
Block Multi-Color Ordering
(ブロックサイズ：4, 色数：3)

ABMC法



ABMC法の手順

■のみに非ゼロ要素が存在



ABMC法より得られる係数行列

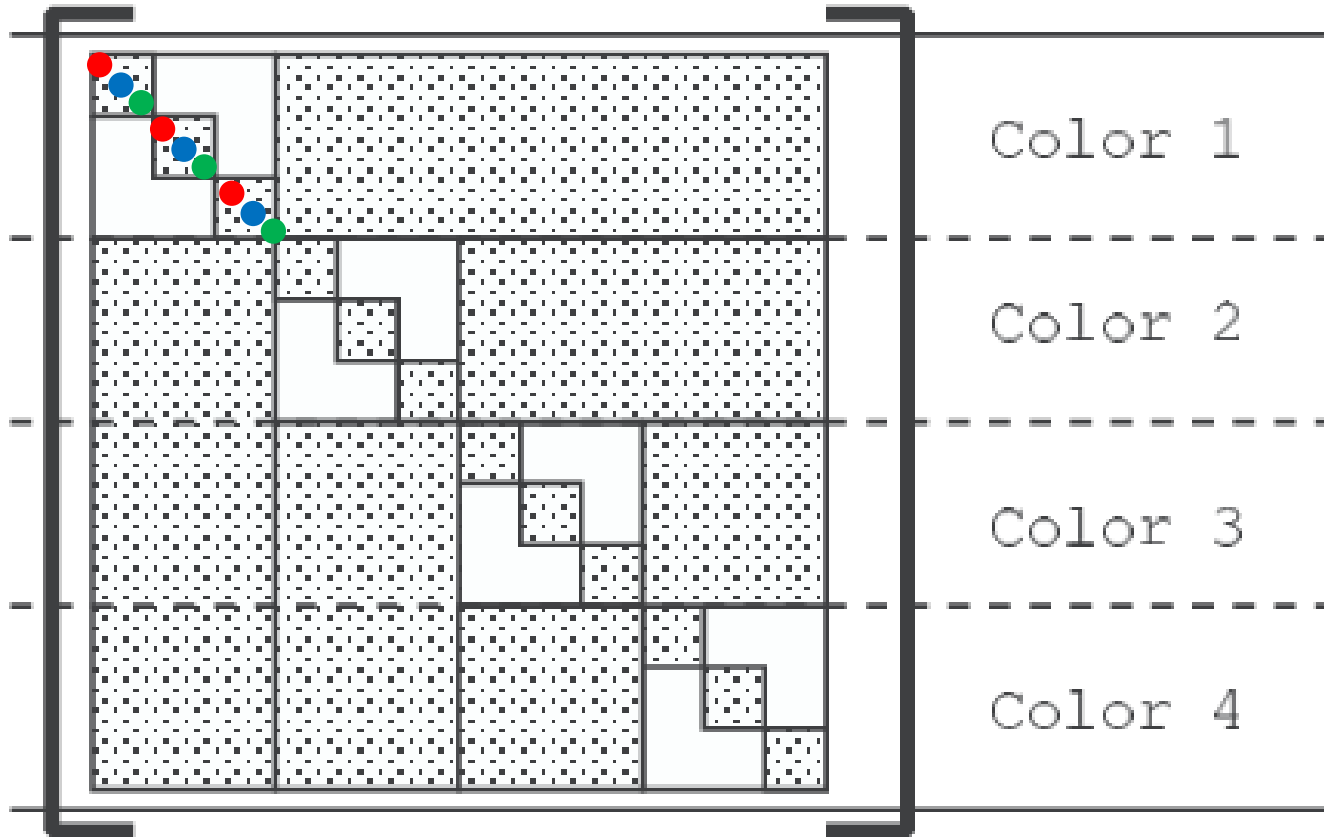
• ABMC法の特徴（利点）

- ブロック化により，IC/ILU分解前処理やGSスムーザの性能劣化を抑えることができる
- ブロック化により，代入計算におけるキャッシュヒット率の向上が期待できる
- マルチカラーオーダリングと比べて並列度は下がるが，実用的な問題では十分な並列性が得られる
- HPCGベンチマークの基礎技術，商用電磁場解析ソフトウェアJMAGへの採用

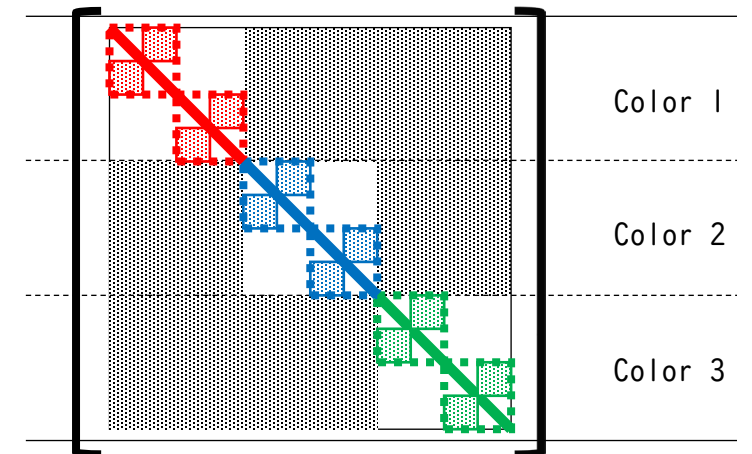
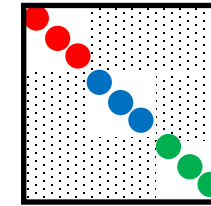
ABMC法からの発展

- ABMC法では、単一のブロック内の処理は逐次的になるので、SIMD処理に適さない
- HBMC法の提案
 - T Iwashita et al., CCF Trans. High Perform. Comput., (2020).
 - ABMC法のある色に属する複数のブロックについて、先頭のを集める→二番目のものを集める→3番目のものを集める・・・として、集めた順に並び替える
 - 関係のある未知変数間の順序を変えないので、ABMC法と同じ収束性が得られる

HBMC法

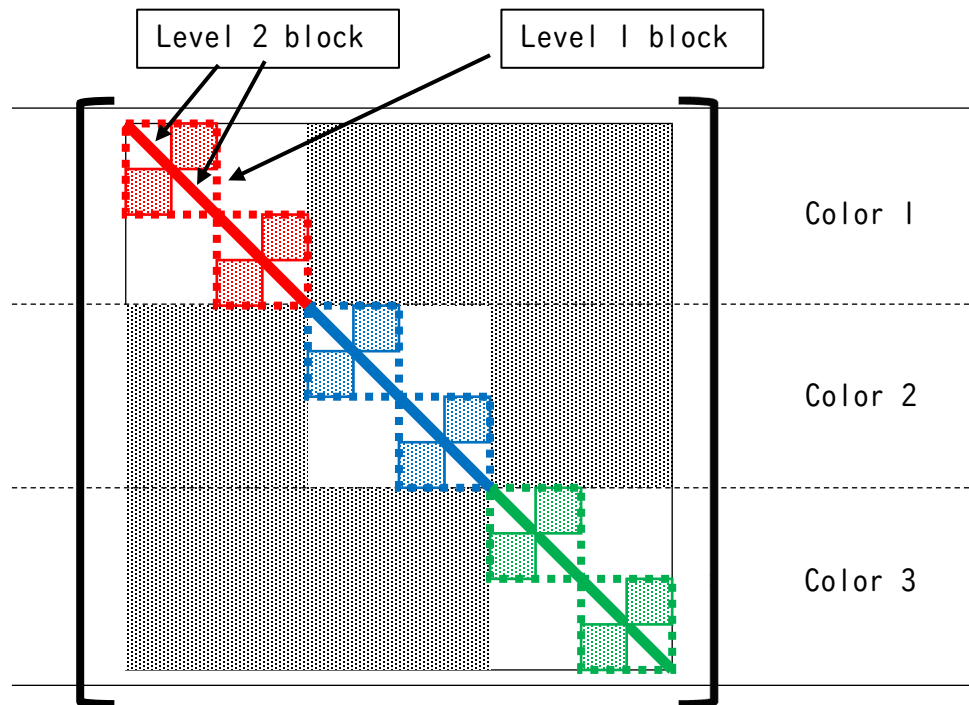


BMC法による係数行列



HBMC法による係数行列

HBMC法



HBMC法による係数行列

前進代入計算のマルチスレッド&ベクトル並列化

✓ マルチスレッド並列処理：レベル1ブロック

✓ SIMD命令による並列処理：レベル2ブロック

```
for (c = 0; c < nc; c++){
    #pragma omp for private(p, j, num, t, index, \
                          mtmp, mval, pos, mb, mdiag)
    for (k = lev1b[c]; k < lev1b[c+1]; k++){
        num = k * 8 * bs;
        index = mat.offset[k];
        j = lev2b[k];
        for (p = j; p < j + bs; p++){
            mtmp = _mm512_load_pd( &r[num] );
            for (t = 0; t < mat.slen.lev2b[p]; t++){
                mval = _mm512_load_pd( &val[index] );
                pos = _mm512_load_epi32( &col[index] );
                mb = _mm512_i32logather_pd( pos, z, 8 );
                mtmp = _mm512_sub_pd( mtmp, \
                                     _mm512_mul_pd(mval,mb) );
                index += 8;
            }
            mdiag = _mm512_load_pd( &diaginv[num] );
            mtmp = _mm512_mul_pd( mtmp, mdiag );
            _mm512_store_pd( &z[num], mtmp );
            num = num + 8;
        }
    }
}
```

さらなる改良

- HBMC法はレベル2ブロックのサイズを大きくすることで、GPUへの効果的な実装が可能である
 - GPU向けには、レベル2ブロックのサイズの設定は、BMC法における一色あたりのブロック数にするのがよい
- レベル2ブロックのサイズをより大きくしたい
 - BMC法における色の割り当ての条件を緩和する
 - BMC法では同色のブロック間に依存関係がないようにした
 - ブロックの一部は依存関係をもってもよい
- Two-Step Multi-Color orderingの提案（鈴木助教のアイデア）
 - SIAM Journal on Scientific Computing誌に採録決定



現在～将来の展望

- 現在のプロセッサアーキテクチャ $\Rightarrow$ AIに関する爆発的計算需要の急増に対応
- GPUやAIチップ等がAIで必要となる行列・行列積演算や低精度演算に注力
 - 低精度演算はメモリバンド幅の有効利用の点でも有効
- これらの計算技術の活用がキー
 - SC25 (HPCに関するトップ会議) では半精度演算を使った新しい疎行列線形ソルバを提案
 - K. Suzuki, T. Iwashita, A Nested Krylov Method Using Half-Precision Arithmetic, SC 25.
- 線形方程式 (連立一次方程式) の求解に量子計算はあまり向いていない
 - 解ベクトル全体を扱うには $O(n)$ のコストがかかる
 - 代表的なアルゴリズムを解ベクトル全体を計算するものではない
 - 解ベクトル全体を計算するような方式には注意が必要：経済性で古典計算機を上回るのは至難
 - 量子計算の活用はより上位の層 (解法) から考え直す必要がある

問い合わせ先

- 研究のことなど, もっと聞きたい事があれば・・・
 - iwashita@i.kyoto-u.ac.jpまでメールしてください
- 研究室のWEBページはこちら
 - <http://hpc.media.kyoto-u.ac.jp/index.html>