

# ユーザー支援報告

寺崎順

筑波大計算科学研究センター

1. 何をやるのか
2. どういう人達がやるのか
3. 依頼者にとって何がいいのか
4. どういう依頼が来たか、どう回答したか
5. ウェブページ
6. まとめ

2013年3月6日  
東京

## 1. 何をやるのか？

- すでにお持ちの研究用数値計算プログラムの最適化、
- これからつくろうとしているプログラムを将来の発展まで考えてどのような構造にすればよいか、またどのような手法を用いればよいか、
- シリアルプログラムの並列化、さらにその大規模化

等の問題あるいは作業過程に関して、ユーザー支援チームメンバーが個々の支援要請に応じて検討の上、助言・提案を行います。

## 2. 什么样的人達がやるのか？

### ユーザー支援チームメンバーリスト 1/2

|             |                    |             |
|-------------|--------------------|-------------|
| 橋本省二        | 高エネルギー加速器研究機構      | 教授、チームリーダー  |
| 入江敦子        | 高エネルギー加速器研究機構      | 研究支援員       |
| 松古栄夫        | 高エネルギー加速器研究機構      | 計算科学センター 助教 |
| 野秋淳一        | 高エネルギー加速器研究機構      | 特任助教        |
| 花田政範        | 高エネルギー加速器研究機構      | 特任助教        |
| 伊藤悦子        | 高エネルギー加速器研究機構      | 特任助教        |
| 上田 悟        | 高エネルギー加速器研究機構      | 研究員         |
| Guido Cossu | 高エネルギー加速器研究機構      | 研究員         |
| 濱口信行        | 高エネルギー加速器研究機構      | 研究支援員       |
| 清水裕也        | 高エネルギー加速器研究機構      | 研究員         |
| 朴 泰祐        | 筑波大学計算科学研究センター     | 副センター長／教授   |
| 櫻井鉄也        | 筑波大学大学院システム情報工学研究科 | 教授          |

## ユーザー支援チームメンバーリスト 2/2

|       |                   |          |       |
|-------|-------------------|----------|-------|
| 吉江友照  | 筑波大学計算科学研究センター    | 准教授      |       |
| 根村英克  | 筑波大学計算科学研究センター    | 准教授      |       |
| 寺崎 順  | 筑波大学計算科学研究センター    | 准教授、連絡係  |       |
| 多田野寛人 | 筑波大学計算科学研究センター    | 助教       |       |
| 佐々木健志 | 筑波大学計算科学研究センター    | 研究員      |       |
| 今倉 暁  | 筑波大学計算科学研究センター    | 研究員      |       |
| 船木靖郎  | 理化学研究所仁科加速器研究センター |          | 協力研究員 |
| 松元亮治  | 千葉大学大学院理学研究科      | 教授       |       |
| 松本洋介  | 千葉大学大学院理学研究科      | 特任助教     |       |
| 武田隆顕  | 国立天文台             | 特任助教     |       |
| 馬場淳一  | 東京工業大学大学院理学研究科    | 理学研究流動機構 | 特任助教  |
| 市川隆敏  | 京都大学基礎物理学研究所      | 特任助教     | 特定研究員 |
| 平松尚志  | 京都大学基礎物理学研究所      | 特定研究員    |       |
| 鎌野寛之  | 大阪大学核物理研究センター     | 特任助教     |       |

総勢26名、うち戦略プログラムによる被雇用人員19名。  
自分の研究を行いながら、ユーザー支援を行っている。

| 専門分野        | 人数  |
|-------------|-----|
| Lattice QCD | 11名 |
| 計算システム      | 5名  |
| 宇宙          | 5名  |
| 原子核         | 4名  |
| 技術支援        | 1名  |

計算システムはアルゴリズムとプログラミングを含む

### 3. 依頼者にとって何がいいのか？

いろいろな専門の豊富な経験をもつ支援員が結集している

- Fortran, C, C++, MPI, OpenMP, Cuda, IDLなどをカバー、
- 物理はもとより応用数学、可視化もカバー



ひとりまたは限られたグループでの議論では解けないプログラミング上の問題が解決できることがある。解けなくても何らかの情報が得られる。

- ・ 用いるプラットフォームはPCから超並列計算機まで何でも可、
- ・ 大規模計算や並列化に限らず、どんなに些細な問題でも扱う、
- ・ 最先端のプログラムを開発中の研究者の方々はもとより院生の皆さんからの依頼も歓迎。

## 4. どんな依頼が来たか、どう回答したか？

抜粋を以下に示す。

|   |             |  |
|---|-------------|--|
| 1 | 問題          | 複素対称行列の一般化固有値問題の並列サブルーチンが必要だがどこにもない。つくるにはどうすればよいか。 |
|   | 解決法・参考情報の要約 | 上記サブルーチンの作成を外注し納入された。それをもとに完成形を作成中。                |
| 2 | 問題          | 5次元行列を用いる格子QCD計算のため、様々な線形ソルバの収束の可否やスピードなどを知りたい。    |
|   | 解決法・参考情報の要約 | 上記データの収集を外注し、レポートが納入された。それをもとに公表できる最終レポートを作成中。     |
| 3 | 問題          | 格子QCDの線形ソルバへの応用のためmultigrid法一般の考え方と具体的なやり方の解説を求む。  |
|   | 解決法・参考情報の要約 | この方法の一般的説明と格子QCDへの応用の二つの解説レポートを作成し依頼者に提出した。        |

|   |             |  |
|---|-------------|--|
| 4 | 問題          | 宇宙ダストの低速衝突での合体、破壊、変形を調べるため、付着力を入れた弾性球のN体計算コードをOpenMPを用いて並列化しているがシリアルコードに比べ実時間が短縮されない。  |
|   | 解決法・参考情報の要約 | 原因の可能性としてメモリアクセスなどを指摘し、プロファイリングの注意点を述べ、改善方法として、メモリアクセスをできるだけ速くする方法、ロードバランスの向上、リダクション処理の試みを提案した。                              |
| 5 | 問題          | アスキーデータを高速に数値化する方法を知りたい。   |
|   | 解決法・参考情報の要約 | ファイル読み込みをブロックごとに分け、次のブロックを読み込んでいる間に以前に読み込んだデータの数値化を別スレッドで行うことで高速化が行える。その詳細をレポートで示した。。  |
| 6 | 問題          | 3次元Magnetohydrodynamics シミュレーションの結果から、Interactive data language (IDL)を用いて磁力線構造の可視化を行いたい。また、可能であれば、磁力線構造が変化する様子を示すムービーを作成したい。 |
|   | 解決法・参考情報の要約 | IDLを用いてサポート担当者が開発し公開している3次元可視化ツール及び磁力線描画ツールを、サンプルプログラムと共に渡し、使い方を説明した。  |



|   |             |  |
|---|-------------|--|
| 7 | 問題          | 粒子と核子の相互作用が中心力ポテンシャルで与えられている場合の、 $\Lambda N$ 散乱断面積の計算の手順を教えてください。  |
|   | 解決法・参考情報の要約 | 重心系における Schrödinger 方程式の動径部分を差分化した式を示し、その解き方の概略と位相のずれ、ならびに断面積の計算式を示した。   |
| 8 | 問題          | 低次元の超対称ゲージ理論の並列計算用コードで、質量シフトを伴う疎行列の逆行列を解くアルゴリズム"multi-mass solver"を要する。このためのMultimass shift BICGStab法より高速なアルゴリズムがあれば知りたい |
|   | 解決法・参考情報の要約 | Multimass shift BICGStab法の特徴を説明し、この方法の前に2,3の方法を試すことを推奨して、参考文献を紹介した。  |
| 9 | 問題          | 2Gbを超えるデータをCで一度にファイルに出力するにはどうすればよいか。   |
|   | 解決法・参考情報の要約 | fopen, fread, fwrite, fcloseを使えばよい。そうでないと割り込みの排除が保証されない。   |

2012年度 計19案件、(2011年度 計15案件)

| 依頼内容      | 件数(2012年度) | 件数(2011年度) |
|-----------|------------|------------|
| 応用数学      | 7          | 5          |
| プログラミング技術 | 5          | 4          |
| 物理の方法     | 4          | 4          |
| 可視化       | 2          | 0          |
| ソフトウェアの情報 | 1          | 2          |

依頼は、内容、分野、難易度において極めてさまざま。

| 依頼者の専門 | 件数(2012年度) | 件数(2011年度) |
|--------|------------|------------|
| 宇宙     | 5          | 3          |
| 素粒子    | 9          | 3          |
| 原子核    | 5          | 5          |
| その他    | 0          | 1          |

各案件が終了した後、回答をレポートにして、ウェブサイトにアップロード。

JICFuSレポート一覧

Key word for search

- 今までに行われたユーザー支援事例の分類

- I. 分野別

- 1. Lattice-QCD
    - 2. 宇宙
    - 3. 原子核

- II. プログラミング技術

- 1. MPI
    - 2. Open MP
    - 3. Fortran 90
    - 4. C, C++

- III. 数学の手法

- 1. 線型方程式
    - 2. 微分方程式
    - 3. 他

- IV. 理論物理の方法

- V. ライブラリ、ソフトウェア

# ユーザー支援チームメンバーの計算経験レポート

|                                      |   |
|--------------------------------------|---|
| プログラム名                               | テンソルくりこみ群の数値シミュレーションプログラム                   |
| プログラムの目的                             | テンソルくりこみ群を使って分配関数を計算する                      |
| 使っている言語                              | Fortran                                     |
| 基本的なアルゴリズム                           | 行列の掛け算, 行列の特異値分解                            |
| 使っている、または使える<br>プラットフォーム、<br>アーキテクチャ | Linux デスクトップ<br><br><a href="#">詳しくはこちら</a> |

|                                      |  |
|--------------------------------------|--|
| プログラム名                               | Bridge++(NBSWF)  |
| プログラムの目的                             | ハイペロン相互作用を研究するための格子 QCD による 4 点相関関数を計算する   |
| 使っている言語                              | C++, MPI   |
| 基本的なアルゴリズム                           | CG, FFT  |
| 使っている、または使える<br>プラットフォーム、<br>アーキテクチャ | MPI 環境で C++ コンパイラの使える Linux 計算機(x86_64)を利用して作業を行った。<br><br><a href="#">詳しくはこちら</a> |

## 6. まとめ

ユーザー支援活動の定義、実行メンバー、今年度の依頼内容と回答の抜粋、昨年度との統計的比較、ウェブサイトについて述べた。

今回強調したいこと:

発足以来、分野、難易度、内容において極めてさまざまな32案件を受け付け、お手上げだったことは一度もない。

ぜひ、引き続きユーザー支援をご利用下さい。