

## 審査の結果の要旨

氏 名 野村 直也

数値シミュレーションに基づく計算科学が理論、実験に続く「第三の科学 (The Third Pillar of Science)」と呼ばれるようになって久しい。計算科学において最も重要かつ、計算時間を要するプロセスが大規模連立一次方程式の求解である。大規模連立一次方程式、特に有限要素法、差分法等の離散化手法から得られる疎行列を係数行列とする連立一次方程式の求解法としては直接法、反復法が知られているが、並列処理に基づくスーパーコンピュータにおいては、Krylov部分空間法を中心とした反復法が広く使用されている。反復法の一つである多重格子法 (Multigrid) 法は、収束までの反復回数が問題サイズによらないスケラブル (Scalable) な性質を持ち、特にKrylov部分空間法の前処理 (Preconditioning) として適用することによって、大規模問題を高速に解くことが可能である。一方で、多重格子法は実用的アプリケーションから得られる悪条件問題の求解には適さない場合があり、近年、様々な研究開発が進められてきた。本論文は、大規模連立一次方程式 $Ax=b$ の求解において、 $Ae \sim 0$ ,  $e \neq 0$ となるニアカーネルベクトル (Near-Kernel Vector) の性質に着目し、ニアカーネルベクトルの効率的な抽出手法とそれによる安定な並列多重格子法スキームを提案するとともに、その高速化手法について検討するものである。

本論文は「ロバストな並列多重格子法のための効率的なニアカーネルベクトル抽出手法の研究 (The Study of Efficient Method for Extraction of Near-Kernel Vectors for Robust Parallel Multigrid Method)」と題して7章から構成されている。第1章「序論」では、研究の背景として、「第三の科学」である計算科学、並列処理に基づくスーパーコンピュータ、連立一次方程式のアルゴリズムに関連した研究開発、技術の現状と動向を俯瞰するとともに、本論文の目的を述べるとともに、並列多重格子法の安定化 (ニアカーネルベクトル)、高速化 (ハイブリッド並列, CGA (Coarse Grid Aggregation) 法) の概要を紹介している。

第2章「反復法」では、疎行列を係数行列とする大規模連立一次方程式の求解に広く使用されている反復法として、定常反復法、Krylov部分空間法に代表される非定常反復法について紹介している。特に、Krylov部分空間法の一つである共役勾配法 (Conjugate Gradient, CG) 及びそれに前処理を適用した前処理付CG法について解説している。

第3章「多重格子法」として、多重格子法の原理から説明し、代数的多重格子法 (Algebraic Multigrid, AMG) について述べた後、第4章「SA-AMG法」では本論文で使

用するSmoothed Aggregationに基づくAMG法 (SA-AMG) について、原理、並列実装法も含めて詳細に説明している。更に、大規模並列時の並列効率を向上する手法であるCoarse Grid Aggregation (CGA) について紹介し、その有用性について検証、議論している。本論文では、SA-AMG前処理による共役勾配法を対象として、ニアカーネルベクトルに関する検討を実施している。

第5章「ニアカーネルベクトル抽出のための新手法の提案」は本論文の中核をなす章である。本章は、5.1節における、ニアカーネルベクトルの説明に始まり、著者による先行研究において示されているニアカーネルベクトルを利用したSA-AMG法における補間演算子生成手法について説明している。続いて5.2節ではニアカーネルベクトルを三次元弾性問題、二次元不均質熱伝導問題に適用することによって収束性が改善する事例を示している。

ニアカーネルベクトルを利用した先行研究では、多重格子法の最も細かいレベル (最上層) のみでニアカーネルベクトルを定義し、それを全レベルに拡張して利用していた。5.3節では、これまでのAMG法、SA-AMG法の歴史とともに、本論文で提案する3つの手法の多重格子法研究に与える意義について議論している。5.4節で提案する「提案手法1」は、全レベルの各係数行列に対してニアカーネルベクトルの抽出を行うことにより、粗いレベルの減衰しにくい波長成分も効率よく減衰でき、高い収束性が得られるという仮説に基づいている。Oakforest-PACSシステム (OFP, 最先端共同HPC基盤施設) を使用した数値実験により、全レベルにおいて適切な本数のニアカーネルベクトルを抽出することによって、収束性が改善することがわかったが、最適なベクトル本数を決定するには、全ての場合についての検証が必要であり、ニアカーネルベクトル抽出に膨大な時間を要する。5.5節で提案する「提案手法2」は、適切な抽出本数を新しい判定式の利用により決定し、ニアカーネルベクトル抽出を効率化するものである。5.6節で提案する「提案手法3」は、ニアカーネルベクトル抽出のさらなる効率化のため、Lanczos法に基づく固有値計算法を用いて粗レベルのニアカーネルベクトルを補間近似するものである。行列サイズが小さい粗いレベルの係数行列に対して固有値解析を実施することで、0 固有値に近い固有ベクトル、つまりニアカーネルベクトルを低コストで抽出できる。

OFP上での数値実験により、提案手法2は提案手法1及び先行研究と比較して10分の1以下、提案手法3は更に提案手法2の3分の1以下の抽出時間で、同等の高い収束性を実現できることがわかった。これらの提案手法は三次元弾性問題によって検証されたが、更にSuiteSparse Matrix Collection (Texas A&M University) の提供する様々なアプリケーションから導出された係数行列に対しても本論文の提案手法を適用し、その有効性が示されている。第5章では、更に導出されたニアカーネルベクトルと係数行列の固有ベクトルが構成する空間のベクトルとの比較により、提案手法の有用性について、数学的な考察を行った。

現在使用されている並列計算機は、各計算ノード上に多数のコアを有するマルチコア、

メニィコアをネットワークで接続したクラスタが主流となっている。このようなアーキテクチャでは、ノード内にOpenMPなどのスレッド並列、ノード間にMPI (Message Passing Interface) などのメッセージパッシングを適用したHybrid並列プログラミングモデルが有効とされている。第6章では、「Hybrid並列」として、第5章までで使用してきた各コアを独立に扱うFlat MPIとHybrid並列プログラミングモデルの計算効率を比較した。OFPシステムとITOシステム（九州大学）ではそれぞれMPIプロセス内のスレッド数を8または16にしたHybrid並列の方がFlat MPIよりもやや効率が良いことが確認された。第7章では、本論文の成果についてまとめ、将来への展望が示されている。

以上を要するに、本論文は、並列多重格子法に対して、ニアカーネルベクトルを適切に導入することにより、大規模な悪条件問題をより効率的に安定に解くことが可能となることを示すとともに、ニアカーネルベクトルと固有ベクトルの分析により数学的解釈を与えたものである。また、従来と比較して30分の1以下の計算時間でニアカーネルベクトルを抽出する手法を提案し、様々なアプリケーションでその有効性を検証した。本論文の成果は、多重格子法を中心とする数値解析学のみならず、それに立脚する数理情報学、更には高性能計算 (High Performance Computing) , 計算科学の発展に大きく寄与するものである。

よって本論文は博士 (情報理工学) の学位請求論文として合格と認められる。