

## プロフィール



## 高橋 大介(たかはし だいすけ)

### 【現職】

筑波大学大学院システム情報工学研究科 准教授

### 【略歴】

1997年 東京大学大学院理学系研究科博士課程中退

1997年 東京大学大型計算機センター 助手

1999年 博士(理学)

1999年 東京大学情報基盤センター 助手

2000年 埼玉大学大学院理工学研究科 助手

2001年 筑波大学電子・情報工学系 講師

2006年 筑波大学大学院システム情報工学研究科  
助教授

2007年 筑波大学大学院システム情報工学研究科  
准教授

# 計算機科学と計算科学の連携

高橋大介

筑波大学大学院システム情報工学研究科

# 計算機科学と計算科学の連携の重要性

- 近年、計算機システムの大規模化、高性能化に伴い、ハードウェアやソフトウェアが複雑になってきている。
  - 超並列型スパコン, マルチコアプロセッサ, Cell B.E., GPGPU, etc.
  - MPI, OpenMP, ベクトル化 (SIMD化)
- このような計算機システムを使いこなすには、高性能計算技術が不可欠.
- 計算機科学と計算科学の研究者が連携することで、グランドチャレンジ・アプリケーションの研究開発をさらに推進できる.

# 計算機科学と計算科学の連携の事例

- RSDFTプログラムの高速化
  - RSDFTでは直交化が多くの計算時間を占めている.
  - オリジナルのコードでは, 古典Gram-Schmidt直交化をLevel-1 BLAS(内積計算およびベクトル変換)により計算.
  - これをLevel-3 BLAS(行列-行列積)に帰着させるアルゴリズムを開発したことで, 性能が大幅に向上.
- 3D-RISMプログラムの高並列化
  - 3D-RISMでは並列3次元FFTが多くの計算時間を占めている.
  - オリジナルのコードでは3次元のデータのうち, 1次元方向のみを分割して並列3次元FFTを計算.
  - 2次元分割による並列3次元FFTを新たに開発することにより, プロセッサ数が増えた場合でも実行可能になった.
  - さらに全対全通信のオーバーヘッドも小さくなることでスケーラビリティが向上.

# 計算機科学と計算科学の連携は どのようにするとうまくいくか

- 計算機科学と計算科学の連携を通じて両方の分野に貢献できる場合に、うまくいくことが多い。
  - 計算機科学者：
    - アプリケーションソフトウェアの高度化・高速化を通して新しい研究テーマが発掘できる.
    - 開発したアルゴリズムの有用性を実アプリケーションによって示すことができる.
  - 計算科学者：
    - これまで計算時間やメモリの制約により解けなかった規模の問題が解けるようになる→サイエンスの成果.

# 計算機科学と計算科学の より密接な連携に向けて

- 今後、科学技術のブレークスルーを目指すためには計算機科学と計算科学の研究者のより密接な連携が不可欠となる。
  - 方法論, モデリング, アルゴリズム等の確立.
  - 個人・グループベースの連携だけではなく, 連携や人材育成を組織的に行うことが必要.
  - 神戸にできる中核拠点に期待.