



ペタスケール数値計算ライブラリ WG 成果報告書

(WG 活動期間:2010 年 11 月-2013 年 7 月)

2013 年 10 月 24 日

サイエンティフィック・システム研究会
ペタスケール数値計算ライブラリWG

目次

(敬称略)

1. まえがき	1
2. WG 活動概要	2
3. 今後のライブラリへの提言	4
4. 各会合での情報提供資料	7
4.1 Japan's Grand Challenge Activities in Life Science	8
姫野 龍太郎 (理化学研究所)	
4.2 多倍長計算の紹介と K-computer 向け固有値ソルバ「Eigen-K」について	19
今村 俊幸 (理化学研究所計算科学研究機構)	
4.3 高精度線形代数演算ライブラリ MPACK の紹介	32
中田 真秀 (理化学研究所)	
4.4 宇宙プラズマでのペタスケール数値計算(惑星磁気圏シミュレーション)	55
深沢 圭一郎 (九州大学)	
4.5 ペタスケールのアプリケーションへ向けて	68
町田 昌彦 (日本原子力研究開発機構)	
4.6 JAXA における数値計算ライブラリの利用状況と OPL 適用評価	87
松尾 裕一 (宇宙航空研究開発機構)	
4.7 並列擬似乱数発生アルゴリズムとペタスケール時代のモンテカルロ法の展望	103
三浦 謙一 (国立情報学研究所)	
4.8 FFTE について	119
高橋 大介 (筑波大学)	
4.9 フラグメント分子軌道(FMO)法と並列 FMO プログラム OpenFMO について	132
稲富 雄一 (九州大学)	
5. 各会合での富士通からの情報提供資料	151
5.1 Open Petascale Libraries : Application Requirements	152
R. Nobes (欧州富士通研究所)、J. Southern (同)、R. Saksena (同)	
5.2 OPL 状況報告(2011 年 10 月)	163
金澤 宏幸 (富士通)	
5.3 FFTE ライブラリ適用事例(Quantum ESPRESSO)	165
堀田 普介 (富士通)	
5.4 大規模数値計算における数学ライブラリの取り組みについて	173
臼井 徹三 (富士通)	
5.5 Open Petascale Libraries : Current Status	181
堀田 普介 (富士通)	
5.6 Application of PLASMA to OpenFMO code	192
堀田 普介 (富士通)	
6. 各会合の議事録	199
7. あとがき	217

□本書に記載されている機関名、所属名、役職名および原稿の内容は、発表/執筆当時のものです。

□登録商標について

会社名、機関名、製品名は各社、各機関の商標または登録商標です。

1. まえがき

ペタスケール時代に必要なハイブリッド並列計算ライブラリの実現を目的に、本WGでは代表的なアプリケーション毎のライブラリに対する要件を明らかにするとともに、重要性の高い機能あるいはライブラリを選択し、評価する活動を行ってきた。また、ペタスケール時代の数学ライブラリの開発を目的にした、グローバルな活動であるOPLN (Open Petascale Libraries Network) との意見交換も実施した。

本WG成果報告書では、会員でのライブラリの実装状況やその課題について、ライブラリ利用者、及びライブラリ開発者からの情報提供、意見交換内容を記載している。また、WGメンバーや各回の情報提供者の方々からの、今後のライブラリへの期待や提言について纏めている。これらの成果が、今後の数値計算ライブラリの普及に向けての一助になれば幸いである。