

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの開発
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名 (研究機関名・職名は研究参加期間終了時点)

研究代表者

西田 晃 (中央大学理工学研究所 客員研究員)

主たる共同研究者

須田 礼二 (東京大学大学院情報理工学系研究科 准教授)

3. 研究内容及び成果

(1)はじめに

本課題では、従来それぞれの分野において別個に進められてきた並列アルゴリズムや実装に関する知見をもとに、大規模化が予想される今後の計算環境に対応したスケーラブルなソフトウェア基盤を整備することを目的として、反復解法、高速関数変換、及びその効果的な計算機上への実装手法を中心に平成14年度より研究を開始した。具体的には、多様なアーキテクチャから構成される計算機群を導入するとともに、研究機関や計算機ベンダとの共同研究を推進し、今後普及すると思われる計算機環境を想定した開発を行ってきた。また、オブジェクト指向に基づくプログラミングインタフェースを採用し、オブジェクトに対する基本的な操作を組み合わせることにより、複雑な機能を持つライブラリを容易に構築できるようにするとともに、実装するアルゴリズムに関してはスケーラビリティの観点から並列化に適したものを厳選し、高並列な環境での使用に耐えうるライブラリを実現した。また、一部のライブラリについては自動最適化機能を採用し、対象とする計算機アーキテクチャ上での動的な最適化を実現した、また、これらのライブラリへのインタフェースとして、並列スクリプト言語 SILCを提案・実装するとともに、主要なアイデアについては国際特許出願を行なった。本研究の成果はネットワークを通じて広く一般に配布し、フィードバックをもとにより汎用性の高いソフトウェアとしていく方針を採っており、平成17年9月以来、これらの各分野についてソースコードを含むソフトウェアを無償公開するとともに、ユーザの要望を反映した更新を適宜行なっている。また、平成18年度からは、地球シミュレータセンター共同プロジェクトの一環として、高並列なベクトル計算機環境への最適化を行なった。

(2)実装手法に関する研究

高並列な計算環境に対応したソフトウェア基盤を実現するためには、今後普及すると思われるハードウェア技術やその利用形態を的確に予測するとともに、それらの前提の下でスケーラブルな性能を発揮し、かつ高い移植性を持つソフトウェア群を設計、開発していく必要がある。このため、本研究では十分な調査研究に基づき、多様なアーキテクチャから構成される並列計算機群を開発環境として導入し、スケーラビリティ、移植性を備えつつ、計算手法に関する研究成果を迅速に実装、評価できる環境を整備した。具体的には、共有メモリ型並列計算機 (SGI Altix 3700)、分散メモリ型並列計算機 (Cray XT3)、PC クラスタ、小型ベクトル計算機 (NEC SX-6i) 等を導入するとともに、平成16年度から IBM T. J. Watson Research Center 及びニイウス株式会社との間で、Blue Gene を利用した数万プロセッサレベルでの高並列な環境下での数値ライブラリ実装技術についての共同研究契約を締結し、反復解法ライブラリ、FFTライブラリの双方について線形な性能向上を実現するとともに、実機上での評価を完了した。また、平成18年度からは地球シミュレータ共同プロジェクトの一環として、高並列なベクトル計算機環境への最適化を行なった。本プロジェクトで開発した成果物は、今後関連分野での利用を通じて、より大規模な並列環境への移植、評価が進むものと考えている。

上記の方針から、ライブラリの設計においては、可搬性を備えるとともに利用者が効率的に処理を記述できる

よう配慮する必要がある。このため、本研究ではオブジェクト指向型のインタフェースを採用し、ライブラリの記述手法、記述言語の双方について研究を進めることとした。この成果は各分野で反映されており、反復解法ライブラリについては完全なオブジェクト指向型のインタフェースを実現するとともに、高速関数変換においては性能の自動最適化機能を備えた高速フーリエ変換ライブラリを実装した。いずれも C 言語で記述するとともに Fortran インタフェースを備えており、必要に応じてより高級な言語によるインタフェースを付加することが可能な仕様となっている。

また、より抽象度の高いインタフェースとして、数値ライブラリの利用を容易にするインタフェース SILC (Simple Interface for Library Collections) を開発し、並列環境で使用可能なソフトウェアとして公開した。SILC の仕様については、そのスクリプト言語への拡張を含め2件の特許出願を行なった。

(3)反復解法に関する研究

a) 連立一次方程式解法

流体シミュレーションや構造解析をはじめとして、偏微分方程式の数値解が必要となる分野では、離散化の過程で大規模な連立一次方程式を解くことから、効率的なアルゴリズムに対する需要が大きい。本研究では、これらの応用分野から派生する連立一次方程式の反復解法及びその前処理手法を中心に、極めて高並列な環境での使用にも耐え得るスケーラブルかつ信頼性の高いアルゴリズムの設計及び実装を行った。近年、大規模連立一次方程式の反復解法として、マルチレベルな解法が多く研究されており、そのような手法のひとつとして、代数的マルチグリッド (AMG) 法を挙げることができる。我々は、AMG 法のうち最も有力な解法のひとつである smoothed aggregation に基づく algebraic multigrid 法を前処理として用いた共役勾配法 (SA-AMGCG 法) の効率的な並列実装手法を提案するとともに、多様な反復解法、前処理、及び疎行列格納形式に対応したオブジェクト指向型の並列反復解法ライブラリ Lis (A Library of Iterative Solvers for Linear Systems) を開発し、ソフトウェアを公開した。Lis では地球シミュレータ用カーネルにおいてベクトル化率99.1パーセント、並列化率99.9パーセントを、またスカラ機用カーネルにおいて並列化率99.99パーセント以上を達成しており、小規模開発環境から大規模並列環境への容易な移行が可能である。今後も必要に応じてアルゴリズムを追加していきたいと考えている。

b) 固有値解法

大規模疎行列の固有値を数値的に求める方法としてはいくつかの解法があり、Lanczos 法やその非対称問題への拡張である Arnoldi 法、あるいは量子化学計算で利用されることの多い Davidson 法や、その一種である Jacobi-Davidson 法などの反復解法を挙げることができる。本研究では、Jacobi-Davidson 法の並列実装を行い、並列環境での性能とそのボトルネックについて評価を行うとともに、一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx$$

の最小固有値、あるいはこれと同値な問題

$$Bx = \mu Ax, \mu = 1 / \lambda$$

の最大固有値を求める問題が Rayleigh 商

$$\mu(x) = x^T Bx / x^T Ax$$

の極値問題に帰着して共役勾配法により解けることに着目し、代数的マルチグリッド法などの適切な前処理と組み合わせることにより、Lanczos 法系の解法と比較してより高速に固有値を計算できることを示した。連立一次方程式解法を用いているため、並列反復解法ライブラリにより容易に実装が可能であり、国内外で実装に関する研究が進んでいる。本研究では反復解法ライブラリ Lis 上に実装し、解法の性能、スケーラビリティを実証した。

(4)高速関数変換に関する研究

本研究では、高性能な並列高速フーリエ変換ライブラリを中心に、実際の計算環境において高い実効性能を得ることのできる高速関数変換ソフトウェアの開発を行なった。

平成17年9月より公開を開始した高速フーリエ変換ライブラリ FFTSS は、多様な FFT カーネルルーチンを搭載するとともに、各計算実行環境に於いて最適なカーネルセットを選択する自動最適化機能を搭載しており、多くの逐次アーキテクチャ上において商用版を含む既存のライブラリと比較してより高速な計算を実現した。また、平成18年度よりMPI 並列環境でスケーラブルな性能を実現するライブラリを開発を行ない、地球シミュレータ共同プロジェクトの一環としてベクトル計算機環境に対応するとともに、倍精度 FFT において地球シミュレータ上での最高記録となる 16.2TFLOPS を達成した。

一方、気象予測などの分野では、球面上の球座標において直交関数系となる球面調和関数を用いることも多く、緯度・経度格子上の関数値と球面調和関数展開の係数との間の変換である球面調和関数変換の高速化は重要な意味を持っている。本研究では、後者を高速に解くための一般化高速多重極子展開法について、高性能な実装を実現した。

4. 事後評価結果

4-1. 外部発表(論文、口頭発表等)、特許、研究を通じての新たな知見の取得等の研究成果の状況

基盤ソフトウェアの開発という所期の目的を達成する過程で、基礎的な研究成果を論文として適宜発表している。知的所有権に関しては主に海外での研究開発との競争の観点から、必要と思われる成果である SILC (Simple Interface for Library Collections) については2件の特許出願により権利を保護している。

本研究では自前のコンピュータだけでなく、地球シミュレータやIBM Watson研究所のBlueGene/L などにも実装し性能を実証するなど当初の研究計画を推進した。3種類の基本ソフトウェアを公開しているが、短期間に1000件以上のダウンロードがあり、研究成果が多くの研究者やユーザに評価されているものと思われる。

研究推進については、プロジェクトの中心課題が前半の基礎研究から後半の実用化に向けた開発に移る時点でグループ構成の変更が必要となったが、いろいろ困難な状況を克服して研究を遂行した。ただし、各研究グループの相互の協力関係が分かりにくかった点、また外部発表の仕方について今後改善・工夫が必要であると考ええる。

4-2. 成果の戦略目標・科学技術への貢献

ネットワーク上でのソースコード公開を前提とした開発モデルを採用することにより、商用もしくは非公開であることの多かった大規模科学技術計算用ソフトウェア開発手法の現代化に貢献したことは高く評価できる。

海外においても、同様な開発モデルに基づくソフトウェアが複数の研究機関により公開されているが、本研究では各分野でスケーラビリティを重視した解法の研究とライブラリを開発を進めることにより、短期間で Blue Gene や地球シミュレータなどの高性能計算機への対応を実現しており、これらの類似研究と比較しても高いレベルにあるといえる。

本研究で開発した成果ソフトウェアは、マルチコアプロセッサやベクトルプロセッサ、多様なアーキテクチャに対応しており移植性に富んでいる。実装された解法も高並列計算環境において高い性能を示しており、適用範囲は非常に広いと考えられる。各ソフトウェアとも、多様な計算機環境で動作するよう移植性に富んだ設計が行なわれており今後の普及が期待される。

4-3. その他の特記事項(受賞歴など)

移植性の高い本研究成果のソフトウェアの中で特にFFTについてカーネルの自動最適化機能の適用等により他のライブラリよりも高速であり高く評価できる。大規模な科学技術計算からマルチメディア画像処理の圧縮/伸長まで多くの分野で有効に利用されるであろう。

本研究の成果であるソフトウェアが数値解析の基盤ソフトウェアとして広く用いられるようにするためには今後さらに普及に向けた活動を行なう必要がある。特に公開したライブラリを今後どのようにしてメンテナンスしていくかが問題となるため、その施策について検討が必要である。