

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成14年度採択研究代表者

西田 晃

(東京大学大学院情報理工学系研究科 助手)

## 「大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの開発」

### 1. 研究実施の概要

#### 研究のねらい

高速ネットワーク環境の発展に伴い、大規模アプリケーションについて各種資源をネットワーク上で共有し、オープン環境で研究開発を行う機会が増えている。本研究は、従来から個別に作成されてきた数値シミュレーションに必要な計算手法やアルゴリズムに関する基本的なライブラリを整備し、並列数値計算を可能とする標準的なソフトウェア基盤を構築することを目的とする。

#### 研究の概要

今年度は基礎研究を中心に研究を進め、IMACS, ICIAM, SIAM Conference 等の国際会議でその成果を発表するとともに、各研究分野の核となる基礎技術についての検討を進め、国内論文として発表した。また、基盤ソフトウェアの仕様を検討するにあたり、ISCA, ICS, SC等のアーキテクチャ技術に関する会議、またOOPSLA, GGF等のソフトウェア技術に関する会議において調査研究を行うとともに、国内研究会(LA研究会)の開催、サンフランシスコ(SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing)における可搬数値ライブラリに関するシンポジウムの開催等を通じて基礎研究の振興に努めた。

#### 成果

実装手法に関しては、西田らの共有メモリ計算機上でのOpenMPを用いた並列化手法、および蓬萊らのクラスタ上におけるbroadcast通信の最適化、また個別の分野においては、藤井らのAMG前処理付共役勾配法の並列化手法、曾我部らのCGS法の改良、長谷川の帯行列に対する直接解法の並列化、額田らの積和演算ユニットに適した高速フーリエ変換に関して、それぞれ論文として発表した。

#### 今後の見通し

平成16年度においては、これまでの基礎的な研究と平行して、個別の並列数値ライブラリの仕様設計、開発と性能評価、及びオブジェクト指向にもとづく上位インタフェースの設計を完了する予定である。

## 2. 研究実施内容

### 計算手法に関する研究とその効率的な実装技術の開発・プロトタイプ実装

#### 固有値解法

大規模疎行列の固有値を数値的に求める場合、いくつかの解法を考えることができ、主なものとしては、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。一方、実対称行列  $A, B$  に関する一般化固有値問題  $Ax = \lambda Bx$  の最小固有値を求める場合、問題を Rayleigh 商の極値問題に帰着することにより、共役勾配法を導くことができる。この手法は1951年に Hestenes らにより提案され、Fletcher らが非線形最適化問題のための手法として発展させたものであるが、1980年代以降の Knyazev らの研究により、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って Lanczos 系の解法と比較してより高速に固有値を計算することが分かってきている。そこで、平成15年度においては、並列計算環境でその基本的な性質を調べるとともに、代数的マルチグリッド前処理や非対称問題への拡張や効率的な並列実装手法について検討を進めた。

#### 連立一次方程式解法

流体シミュレーションや構造解析など、偏微分方程式の数値解が必要となる分野においては、離散化の過程で大規模な連立一次方程式を扱うことから、効率的なアルゴリズムに対する需要は大きい。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ている。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いる。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。平成15年度においては、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、大規模クラスタ上においても、極めて高いスケラビリティが得られることを示した。また、CGS 法の改良や BiCR 法の提案など、基礎的な手法に関しても重要な研究を行った。

#### 高速関数変換

気象予測や地球流体解析など、球面上の流体方程式を扱う必要のある分野では、スペクトル法などの高速積分変換を用いた高精度な解法が利用されている。本グループでは、高性能な並列高速フーリエ変換ライブラリを中心に、主に共有メモリノード内での高効率な高速フーリエ変換ライブラリの開発を中心に行ってきた。一般に大規模な計算では各プロセッサのメモリアクセスに局所性がある場合が多く、各ノードへのデータ配置方式を工夫することによって、より多くのメモリアクセスをノード内に限定することができる。ノード内のメモリアクセスの割合が多ければ、プロセッサ数が増えても高いスケラビリティを持つ可能性が高くなり、高い拡張性が必要となる大規模科学技術計算に適している。キャ

キャッシュを有効利用する従来のアルゴリズムにおいては、キャッシュ内で行われているFFTアルゴリズムにStockham FFT 等bit-reverse 処理を要しないアルゴリズムが用いられることが多いが、平成15年度においては、このbit-reverse 処理を主記憶アクセス時間に隠蔽することで、in-place アルゴリズムを用いることができるような手法を提案し、実際にほぼ隠蔽可能であることを確認した。

#### ハードウェア、システム技術に関する研究

近年の情報技術の発展に伴い、計算機の利用形態は著しい変化を遂げつつある。本研究では、これらの動向を踏まえ、今後国内で普及すると思われる利用形態を想定しつつ、これらの上で高い性能を発揮することのできる並列ソフトウェア基盤を設計、構築していくため、常に最新の開発環境を整備することを目指しており、平成15年度においては、共通開発環境として共有メモリ型並列計算機 (SGI Altix 3700)、小型ベクトル計算機 (NEC SX-6i)、PC クラスタ (dual Intel Xeon プロセッサ搭載サーバ16 台) を導入するとともに、10Gbps ネットワークに対応する高性能ルータ (Cisco C6509) によりこれらを接続し、基礎的な開発環境を整備した。ハードウェア技術に関しては、省電力化、高密度化の進展とともに、従来と比較してより高並列なプログラミング環境が中心的になっていくものと思われる一方、プロセッサの速度と比較してメモリレイテンシが相対的により増大していくことから、チップ内でのマルチスレッド処理もより一般的になっていくものと考えられる。したがって、前節で述べた並列ライブラリの重要性は、より大きくなっていくものと考えられる。このような環境では、分散したノード間の通信スケジューリングやプロセスの配置を最適化することが重要となる。平成15年度においては、通信最適化ライブラリに関する研究の一環として、スケジューリングの影響が大きいと考えられる木構造ネットワークにおける集合通信の最適化について研究を行い、ここで求めた最適解を用いて集合通信を行うことにより、汎用のメッセージ通信ライブラリ (MPICH-Score, LAM/MPI) と比較して大幅に通信時間が削減される場合があることを明らかにした。

### 3. 研究実施体制

#### 実装手法研究グループ

① 研究分担グループ長：西田 晃 (東京大学大学院情報理工学系研究科, 助手)

② 研究項目：ソフトウェア技術及びハードウェア、システム技術に関する研究

概要：関連分野の研究者との研究交流を促進するとともに、科学技術ソフトウェア開発において、ソフトウェア・ハードウェア技術の観点から取り組むべき課題とその解決策を明らかにする。また、今後国内で普及すると思われる計算機の利用形態を想定しつつ、常に最新の開発環境を整備するとともに、国内外の研究者との研究協力、設備の相互利用、及びハードウェア開発に関する最新動向の調査に努める。

#### 固有値解法研究グループ

① 研究分担グループ長：西田 晃 (東京大学大学院情報理工学系研究科, 助手)

## ② 研究項目：固有値解法

概要：物性物理や量子化学などの物質科学分野では、密度汎関数法や第一原理計算を用いた大規模なシミュレーションが必要となることが多い。これらの計算において、効率的な固有値解法に対する需要は大きく、両分野の研究者が密接に協力することにより、実用性の高い汎用ソフトウェアを開発することができるものと期待される。本研究では、実際の応用に耐え得る、高速でかつスケーラビリティに富む固有値計算アルゴリズムの設計及び実装を目指す。

### 連立一次方程式解法研究グループ

① 研究分担グループ長：長谷川 秀彦（筑波大学図書館情報学系， 助教授）

## ② 研究項目：連立一次方程式の反復・直接解法

概要：流体シミュレーションや構造解析など、偏微分方程式の数値解が必要となる分野においては、離散化の過程で大規模な連立一次方程式を扱うことから、効率的なアルゴリズムに対する需要は大きい。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について、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う。

### 高速関数変換研究グループ

① 研究分担グループ長：須田 礼仁（東京大学大学院情報理工学系研究科， 助教授）

## ② 研究項目：高速関数変換

概要：気象予測や地球流体解析など、球面上の流体方程式を扱う必要のある分野では、スペクトル法などのFFT を用いた高精度な解法が利用されている。本研究では、これらの分野の研究者との協力により、アルゴリズムレベルにおいて並列度の高い解法の研究及び設計を行うとともに、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を中心に開発を行う。

## 4. 主な研究成果の発表（論文発表および特許出願）

### (1) 論文発表

#### 海外査読論文

- A. Nishida and Y. Oyanagi. Performance Evaluation of Low Level Multithreaded BLAS Kernels on Intel Processor based cc-NUMA Systems. In *Proceedings of The fifth International Symposium on High Performance Computing (ISHPC-V WOMPEI2003)*, Lecture Notes in Computer Science 2858, pp. 500-510, Springer, 2003.

#### 国内査読論文

- 曾我部知広，金成海，阿部邦美，張紹良，「CGS法の改良について」，日本応用数理学会論文誌，Vol. 14, No. 1, pp. 1-12, 2004.
- 蓬来祐一郎，西田晃，小柳義夫，「木構造型ネットワークにおける最適ブロードキ

キャストスケジューリング」, 情報処理学会論文誌「コンピューティングシステム」, Vol. 45, No. SIG 3 (ACS 5), pp.100-108, 2004.

- 額田彰, 西田晃, 小柳義夫, 「積和演算命令に適した新しい8基底 FFT カーネル」, 2004年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, pp. 17-24, 2004年1月15-16日.
- 長谷川秀彦, 「OpenMP を用いた帯行列に対する直接解法の並列化」, 2004年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, pp. 157-164, 2004年1月15-16日.
- 蓬来祐一郎, 西田晃, 小柳義夫, 「木構造型ネットワークにおける最適ブロードキャストスケジューリング」, 第15回コンピュータシステムシンポジウム論文集, pp. 111-118, 2003年12月11-12日.
- 藤井昭宏, 西田晃, 小柳義夫, 「Smoothed Aggregation MG 法の異方性問題への対応と評価」, 先進的計算基盤システムシンポジウム論文集, pp. 137-144. 2003年5月28日-30日.
- 額田彰, 西田晃, 小柳義夫, 「分散共有メモリを用いた並列 FFT とその最適化」, 情報処理学会論文誌「コンピューティングシステム」, Vol. 44, No. SIG 6 (ACS 1), pp. 1-8.
- 藤井昭宏, 西田晃, 小柳義夫, 「領域分割による並列 AMG アルゴリズム」, 情報処理学会論文誌「コンピューティングシステム」, Vol. 44, No. SIG 6 (ACS 1), pp. 9-17.

(2) 特許出願

H15年度特許出願件数: 0件 (CREST研究期間累積件数: 0件)