

「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

本研究では、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している。そこで、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、積極的に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いる。また、大規模ソフトウェア開発の観点からライブラリの要件を検討し、十分な人的資源を確保してソフトウェアの開発を進めており、基礎分野に関しては固有値解法、線形解法、高速関数変換の三分野を想定して各分野の研究者の協力のもとに数値解法に関する研究を進めている。まず、線形解法、固有値解法については、スケーラビリティの観点から共役勾配法・共役残差法系の反復解法を中心に研究を進め、これらの拡張について複数の提案を行ってきた。また、代数的マルチグリッド前処理法に着目するとともにその並列実装手法に関して研究を進め、大規模計算機環境上で有効性を実証した。また、高速関数変換については、高速ルジャンドル変換の提案、ライブラリ化を行うとともに、高速フーリエ変換の効率的な実装手法について研究を行い、複数のアーキテクチャ上での効率的な実装方式を提案した。これらの成果は複数の論文として発表するとともに、ライブラリとして実装を進めている。また、平成16年度より IBM Watson 研究所との間で Blue Gene/L の利用に関する共同研究契約を締結し、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の実装技術について研究を開始するとともに、Co-Array Fortran, Unified Parallel C などの SPMD 型並列言語に関して研究を進めており、これに関連して、データの受け渡しと演算処理を分離し、演算処理を文字列で指定することにより計算環境への依存を取り除いたライブラリインタフェース SILC (Simple Interface for Library Collections) を提案し、特許として出願した。

2. 研究実施内容

以下では、現時点での主要な研究項目と現時点での主な研究成果について述べる。

ハードウェア・システム技術に関する研究及び性能評価

ハードウェア、システム技術に関しては、今後普及すると思われる利用形態を的確に予

測するとともに、これらの上で高い性能を発揮することのできるソフトウェアを設計、開発していく必要がある。現時点で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) , ベクトル計算機 (NEC SX-6i) , 及び中規模 PC クラスタ等を導入し、最新の計算機環境のもとで可搬性を備えたライブラリの開発を行うとともに、ハードウェア技術の研究動向と今後の方向性の把握を目的として計算機技術に関する調査研究を適宜実施している。今後の傾向として、マイクロプロセッサの高性能化に伴う消費電力上の制約から、従来と比較してより高並列な環境が一般的になってくるものと予想される。このような背景から、本グループでは平成16年度より IBM Watson 研究所との間で Blue Gene/L の利用に関する共同研究契約を締結し、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の実装技術について研究を開始した。現在要素アルゴリズムの開発環境上への実装を通じて評価を行っている段階であるが、今後応用分野の研究者との研究協力、設備の相互利用を拡大し、より大規模な環境を用いた評価を進めていく予定である。

ソフトウェア技術に関する研究及び基盤ソフトウェアの仕様設計

ライブラリの設計においては、可搬性を重視するとともに、利用者が効率的に処理を記述できる必要がある。本研究では、基礎的な数値ライブラリについては標準的なプログラミング言語 (C, Fortran90) を用いて記述し、より高級な言語 (C++, Fortran9x) によりオブジェクト指向に基づいたインタフェースを付加する方針で現在実装を進めるとともに、ソフトウェアによる最適化技術、ミドルウェア技術に関する研究動向の把握を目的として、適宜調査研究を実施している。

並列処理に関しては MPI を標準的なインタフェースとして採用する予定であるが、将来的には、できるだけ既存の逐次言語に近く、並列化が容易であるとともに、大規模な並列環境においても高い性能が得られるものであることが望ましい。このような観点から、現在 Co-Array Fortran, Unified Parallel C などの SPMD 型並列言語に関して研究を進めており、Co-Array Fortran に関しては平成17年度よりコンパイラの移植性の向上に関する研究を Cray 社と共同で開始する予定である。また、より抽象度の高いインタフェースとして、データの受け渡しと演算処理を分離し、演算処理を文字列で指定することにより計算環境への依存を取り除いたライブラリインタフェース SILC (Simple Interface for Library Collections) を提案し、特許として出願した。

計算手法に関する基礎的な研究とその効率的な実装技術の開発・実装

本グループではこれまでに13回の公開シンポジウムを開催するとともに、各メンバーとも精力的に研究を進め、関連会議での研究発表を行った。まず、固有値解法、線形解法については、スケーラビリティの観点から共役勾配法・共役残差法系の反復解法を中心に研究を進め、これらの拡張について複数の提案、発表を行うとともに、前処理については代数的マルチグリッド法に着目し、大規模並列環境上でその有効性を実証した。また、高速関数変換については、高速ルジャンドル変換の提案、ライブラリ化を行うとともに、高速フーリエ変換の効率的な実装手法について研究を行い、複数のアーキテクチャ上での効

率的な実装方式を提案した。これらの成果の一部は後述の論文として発表しており，ライブラリの核となる技術として実装を進めている段階である。

3. 研究実施体制

(1) 実装手法研究グループ

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）

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
及び共通研究環境の整備

(2) 固有値解法グループ

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）

研究項目：固有値解法とその実装技術に関する研究

(3) 連立一次方程式解法グループ

研究分担グループ長：長谷川 秀彦（筑波大学図書館情報メディア研究科、助教授）

研究項目：反復解法とその実装技術に関する研究

(4) 高速関数変換グループ

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）

研究項目：高速関数変換とその実装技術に関する研究

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

- R. Suda, "Fast spherical harmonic transform routine FLTSS applied to the shallow water test set", Monthly Weather Review, Vol. 133, No. 3, Mar. 2005, pp. 634-648.
- A. Fujii, A. Nishida, and Y. Oyanagi. The Evaluation of The Aggregate Creation Orders : Smoothed Aggregation Algebraic MultiGrid Method. In Proceedings of International Symposium on High Performance Computational Science and Engineering (HPCSE-04), COROM, August 22-27, 2004, Toulouse.
- R. Suda. Stability analysis of the fast Legendre transform algorithm based on the fast multipole method. Proc. Est. Acad. Sci. Phys. Math., Vol.53, No.2, pp.116-123, Estonian Academy of Science, 2004.
- 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」, 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 6 (ACS 6), pp.86-94, 2004.
- 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.

(2) 特許出願

H16年度特許出願件数：1件（CREST研究期間累積件数：1件）