

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「シミュレーション技術の革新と
実用化基盤の構築」
研究課題「大規模シミュレーション向け
基盤ソフトウェアの開発」

研究終了報告書

研究期間 平成14年11月～平成20年3月

研究代表者：西田 晃
(中央大学理工学研究所
客員研究員)

1 研究実施の概要

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。

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。

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り、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。

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 2 次元 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。

2 研究構想及び実施体制

(1) 研究構想

背景

近年、科学技術の様々な分野において、数値シミュレーションは理論・実験に代わる有力な手法として、その重要性が高まっている。マイクロからマクロに至る様々な現象を扱う上で、大規模な計算資源の利用を前提としたスケーラブルな並列数値演算ライブラリの果たす役割は大きい。しかしながら、わが国においても現在多数の科学技術アプリケーションが開発されているものの、それらの基礎となる数値演算ライブラリについては、専用のルーチンを独自に開発するか、またはベンダが提供するライブラリを利用することが多く、知的共有資産としての汎用のライブラリが開発される例は少ない。

研究のねらい・着眼点

高速ネットワーク環境の発展に伴い、今後は大規模アプリケーションについても、PC から演算サーバ、スーパーコンピュータに至る多様な資源をネットワーク上で共有し、オープンな環境で研究開発を行う機会が増えてくると予想される。このような環境のもとで、多重化するメモリ階層を考慮したスケーラブルな並列ライブラリの必要性は増大している。そこで本研究では、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研究をもとに、理論的な背景を考慮した標準的なソフトウェア基盤を整備することを目指し、以下の内容について研究を行った。

コンセプト

まず、大規模ソフトウェア開発の方法論に関して、数値アプリケーション開発の観点から国内外の研究動向について詳細な調査研究を実施するとともに、国内における科学技術ソフトウェア開発上の問題点を解決するための方策の提案とその具体化を主要目的のひとつとした。さらにこの結果をもとに、我が国において開発されているアプリケーションの調査及び関連分野の研究者との協力により、国内の科学技術アプリケーション開発において必要と考えられる共通基盤ソフトウェアの内容とその構成の詳細を決定した。実際の研究開発においては、仕様の策定、プロトタイプ実装、評価用ハードウェアの選定、性能評価、公開及び配布など、各段階で詳細な検討が必要であり、十分な人的、物的資源を用意する必要がある。本研究では、線形系の反復解法、高速関数変換の二分野を想定しており、分野によって最適と思われる研究者への協力要請も検討するとともに、常に最新の開発環境を提供できるよう、多様なアーキテクチャから構成される計算機群を導入した。

将来展望

計算機の能力は、今後も飛躍的に発展していくものと期待され、それに伴って、計算機を利用した数値シミュレーションはより広い分野で活用されるようになっていくものと予想される。本研究は、従来国外の研究成果に依存してきた大規模並列アプリケーション向けのソフトウェア基盤を国内で実現する上で、さきがけとなるものであり、関連応用分野の基盤を提供するとともに、今後の研究のモデルケースになるものと期待される。本研究の成果物は、国内外での長期間の利用に耐えるものとして設計され、またその内容についても、十分な理論的検討が行われた完成度の高いものとなっている。このような性格の研究は国内においても例が少なく、我が国における知的財産の形成に資するものと考えられる。

研究のアプローチ

本研究の目的は、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、理論的な背景を考慮した標準的なソフトウェア基盤を整備することにある。現在様々な応用ソフトウェア開発プロジェクトが並行して実施されているが、基盤となる共通の汎用

ルーチンの開発・普及までを行うことは稀であり、それぞれの用途に適したライブラリを独自に作成するか、または国外で開発された汎用ルーチンを用いるのが普通である。本研究では、スーパーコンピュータからPC クラスタまで、多様化する計算環境での利用に十分耐え得る頑健かつ高性能な基本演算ライブラリの構築を目指しており、国内外の需要に応える重要度の高い研究であると考えられる。

主要な研究項目

1. ソフトウェア技術に関する調査研究（実装手法研究グループ）

本研究の実施に当たっては、関連分野の多様な需要に応えつつ、汎用性が高く、かつ使いやすいソフトウェア基盤の提供を目的としている点を踏まえ、ソフトウェア技術の方向性や、関連応用分野における研究開発の現状に関する十分な調査が必要であると考えられる。本研究では、調査研究や関連分野の研究者との研究交流を積極的に行ない、科学技術ソフトウェア開発において取り組むべき課題とその解決策を明らかにした。

2. ハードウェア、システム技術に関する調査研究及び研究環境の整備（実装手法研究グループ）

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とともに、調査研究や国内外の研究者との研究協力、設備の相互利用を積極的に行なった。

3. 計算手法、アルゴリズムに関する研究（反復解法、高速関数変換研究グループ）

並列ソフトウェア基盤の設計に当たっては、常にその計算手法及び実装手法について、最新の研究成果をもとに見直しを行っていく必要がある。本研究では、各分野の分担者が中心となり、研究集会等を積極的に開催することにより、基礎的な研究の振興を図るとともに、研究設備を共同研究者に広く提供し、最新の計算機環境を利用した研究活動を通じて、完成度の高い基盤ソフトウェアの構築を目指した。

具体的手法と進め方

1. 反復解法（反復解法研究グループ）

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。また、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固有値解析が必要となっている。本研究では、これらの応用分野から派生する線形系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なった。

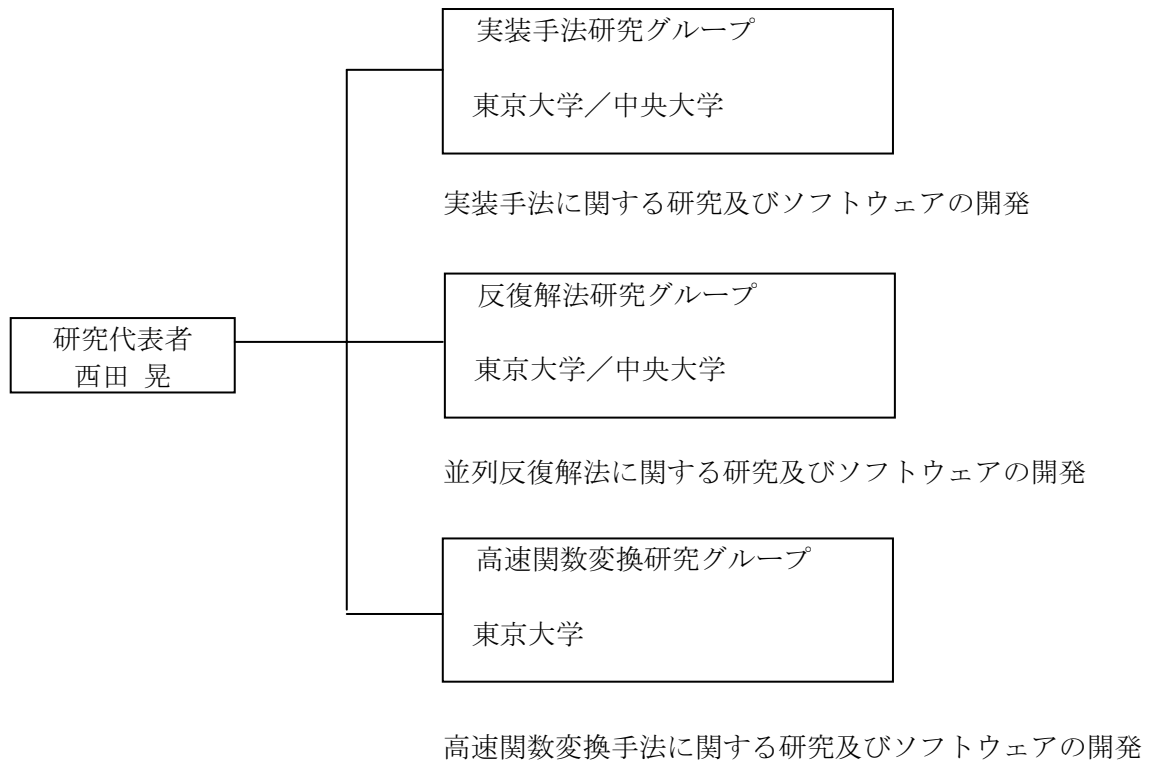
2. 高速関数変換（高速関数変換研究グループ）

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、高速フーリエ変換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、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ソフトウェアの開発を行なった。

研究成果の配布、普及活動

研究成果については、開発段階においてもネットワークを通じて広く一般に配布し、ユーザからの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なるよう努めた。また、応用ソフトウェア開発者との協力により、大規模問題への適用に耐え得る頑健なソフトウェア基盤を提供することを目指した。

(2) 実施体制



3 研究実施内容及び成果

3.1 実装手法(東京大学／中央大学 西田グループ)

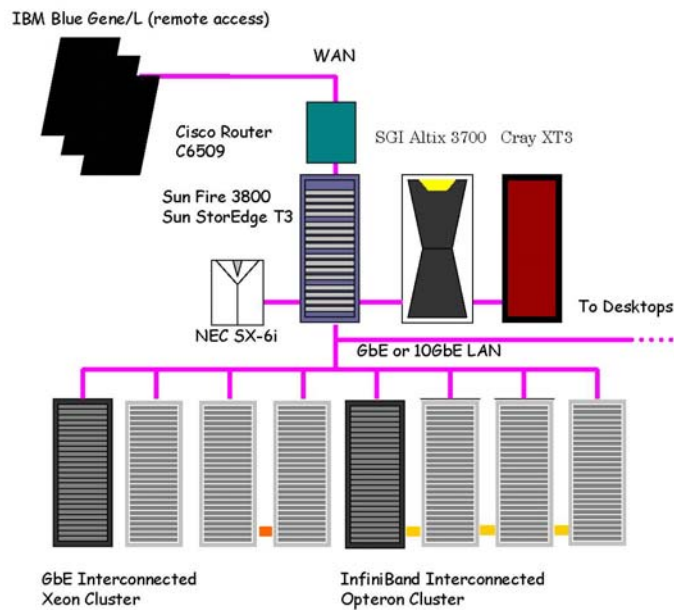
(1) 研究実施内容及び成果

概要

実装手法に関しては、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高い性能を発揮することのできる移植性の高いソフトウェアを設計、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計算機群を開発環境として導入した。

並列処理のためのプログラミングモデルとしては、分散メモリアーキテクチャを前提としたメッセージ通信、及び共有メモリアーキテクチャを前提としたスレッド間通信を挙げることができる。研究開始当時、共有メモリアーキテクチャに関してはさまざまな方式を採用した密結合並列計算機が開発されており、科学技術計算に必要なスケーラビリティを確保するための手法、性能バランスについては十分に分かっていない点が多かった。また、分散メモリアーキテクチャに関しては一般に並列度が大きくなることから、高い並列化効率を示す高並列なアルゴリズムが求められていた。

本研究では、国内外の計算機ハードウェア技術に関する詳細な調査を行うとともに、科学技術用計算機環境として典型的と考えられた、共有メモリ型並列計算機(SGI Altix 3700)、PC クラスタ、分散メモリ型並列計算機(Cray XT3)、開発用ベクトル計算機(NEC SX-6i)等を導入し、各アーキテクチャの性能評価とそれらに適したライブラリの実装手法について、ライブラリの移植性、可搬性に留意した研究を開始した。



一方、調査研究の結果からは、消費電力の増大、ネットワークの高性能化により、今後の計算機環境に関して、高並列化により性能の向上を目指す傾向が顕著になってくることが予想された。このような背景から、本グループでは平成 15 年度より IBM Watson 研究所、及びニウス株式会社との間で Blue Gene/L 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の実装技術について研究を開始し、アルゴリズムの性能評価や開発アプリケーションの移植を実施した。また、科学技術計算のうち、局所性の小さい大域的な通信を伴うものについては、通信帯域幅の大きなベクトル計算機環境を必要とするアプリケーションが存在する。そこで、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ひとつとして参画し、ベクトルプロセッサを用いた大規模並列計算環境に適した計算手法について研究、評価を行ない、その成果をライブラリに反映することとした。

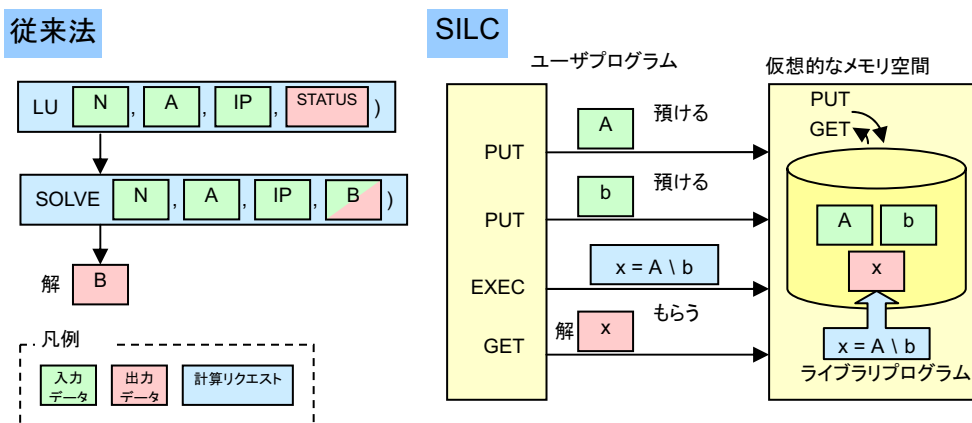
ライブラリ設計にあたっては、可搬性ととも、利用者が効率的に処理を記述できるような枠組みを確保するよう注意する必要がある。そこで、国内外での調査結果も踏まえ、本研究では、実装の多相性をユーザに意識させないオブジェクト指向型のインタフェースを採用することとし、ライブラリの記述手法、記述言語の双方について研究を進めた。この成果は各分野で反映されており、反復解法ライブラリについては完全なオブジェクト指向型のインタフェースを実現するとともに、高速関数変換においては性能の自動最適化機能を備えた FFT ライブラリを実装している。これらのライブラリはいずれも C 言語で記述するとともに Fortran インタフェースを備えており、移植性に富んだ仕様となっている。また、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とともに、自動最適化機能についても充実させていくことが可能である。また、数値計算ライブラリを簡易な記法により利用するためのフレームワークとして提案した SILC (Simple Interface for Library Collections) では、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。

SILC (Simple Interface for Library Collections)

行列計算ライブラリは科学技術計算プログラムの作成に不可欠な構成要素であり、その重要性から多くのライブラリが開発されている。これらのライブラリは一般に、個々のライブラリが提供するインタフェース(API)を通じて利用される。例えば、代表的な行列計算の 1 つである連立一次方程式 $Ax = b$ の求解の場合、ユーザはまず行列 A とベクトル b をライブラリ固有のデータ構造で準備する。次に、特定のライブラリ関数(求解ルーチン)を所定の引数の順序に従って呼び出す。このようなライブラリ固有のデータ構造と関数呼び出しに基づく従来のライブラリ利用法では、作成したユーザプログラムが特定のライブラリに依存す

る。ライブラリ間のインタフェースには互換性がないことが多いため、他のライブラリが提供する求解ルーチンを利用するにはユーザプログラムの修正が必要である。別の前処理や演算精度を利用する場合も同様である。また、特定の計算環境でのみ利用可能なライブラリが存在するため、ユーザプログラムを他の環境に移す際にライブラリの変更とそれに伴うユーザプログラムの修正が必要になる。しかしながら、ライブラリや計算環境を変更する都度ユーザプログラムを修正することは負担であり、より柔軟なライブラリ利用法が求められている。この要求に応えるために、我々は計算環境に依存しない行列計算ライブラリインタフェース SILC (Simple Interface for Library Collections) を提案した。

ライブラリ固有のインタフェースに基づく従来のライブラリ利用法とは異なり、SILC では (1) 入力データの預け入れ、(2) 文字列(数式)による計算指示、(3) 計算結果の受取りの 3 つのステップで行列計算ライブラリの機能を利用する。行列やベクトルなどの入力データは、まずユーザプログラムから独立したメモリ空間に転送される。また、数式の形で与えられた計算指示は、適当なライブラリ関数の呼び出しに翻訳されて、独立したメモリ空間内で実行される。最後に、ユーザプログラムからの要求に応じて計算結果がユーザプログラムのメモリ空間に戻される。



例として、SILC のインタフェースを介して行列計算ライブラリ LAPACK の連立一次方程式の求解ルーチンを呼び出す C プログラムを以下に示す。

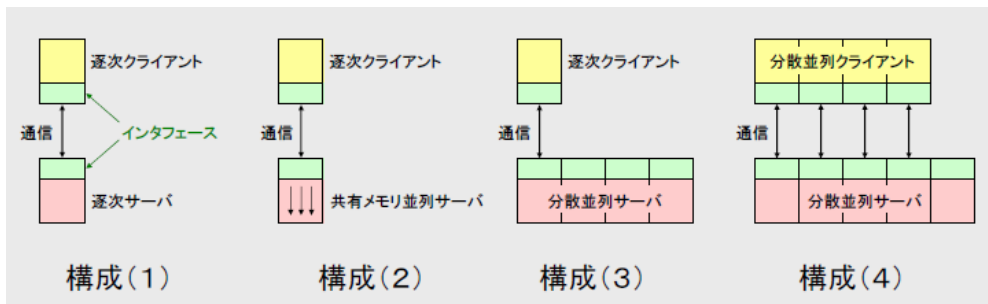
```
silc_envelope_t A, b, x;
/* 行列 A とベクトル b の作成*/
SILC_PUT("A", &A);
SILC_PUT("b", &b);
SILC_EXEC("x = A ¥¥ b"); /* 求解*/
SILC_GET(&x, "x");
```

このプログラムは、LAPACK のデータ構造を用いて行列 A とベクトル b を作成した後、SILC が提供する SILC_PUT, SILC_EXEC, SILC_GET の 3 つのルーチンを介して LAPACK の求解ルーチンを呼び出す。

科学技術計算に用いられる種々の並列環境では、OpenMP や MPI を採用したさまざまな並列行列計算ライブラリが使われている。SILC は、ユーザプログラムと計算環境の間に位置して計算環境の違いを吸収するシステムであり、これらのライブラリをプログラミング言語や計算環境に依らない方法で手軽に利用できるようにする。並列環境については、以下の4種のシステム構成を想定した。

- (1) 逐次クライアント+逐次サーバ
- (2) 逐次クライアント+共有メモリ並列サーバ
- (3) 逐次クライアント+分散並列サーバ

(4) 分散並列クライアント+分散並列サーバ
 ライブラリを利用するユーザプログラムの構成を図に示す。

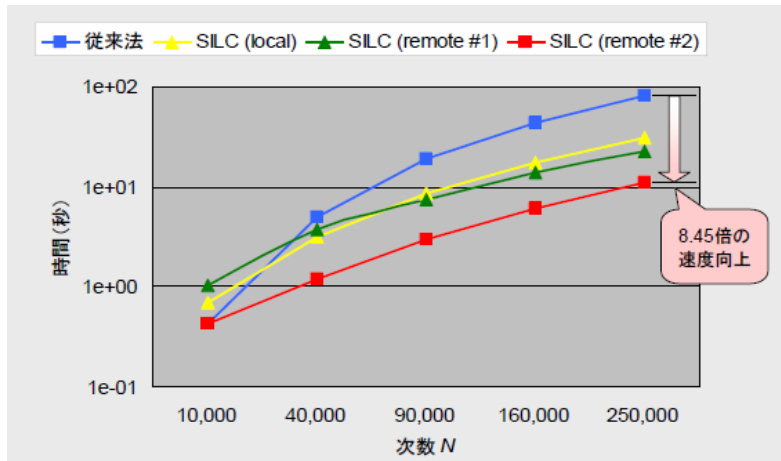


ライブラリはユーザプログラムにリンクされて用いられる。ユーザプログラムは SILC サーバを構成する1つもしくは複数のプロセスに接続してデータ転送と計算指示を行なう。ユーザプログラムからサーバに転送されたデータは、サーバが備えるデータ再分散機構によりライブラリの要求するデータ分散方式に変換され、複数のサーバプロセスに分散して保持される。また、ユーザプログラムに返される計算結果は、データ再分散機構により転送前にユーザプログラムの要求するデータ分散方式に戻される。

実現したシステムを通じて遠隔の高速な分散並列環境を利用することにより、従来法で書かれたユーザプログラムと比較して性能向上が得られることを確かめた。以下に、複数の計算環境の組み合わせについて、2次元拡散方程式の初期値問題を差分法で解いた結果を示す。連立一次方程式の求解には反復解法ライブラリ Lis の前処理なし共役勾配法を用い、サーバ上で連立一次方程式の求解演算子を Lis の MPI 版の呼び出しに翻訳するように設定した。次数を N 、反復回数を α とすると、通信量は $O(N)$ 、計算量は $O(\alpha N)$ であるため、反復回数のかかる問題であれば通信コストを加味しても遠隔の高速な並列計算機を利用した方が速いことが分かる。

	ユーザプログラム	SILC サーバ
従来法	Xeon4 (1 PE)	—
SILC (local)	Xeon4 (1 PE)	Xeon4 (4 PEs)
SILC (remote #1)	Xeon4 (1 PE)	Xeon8 (8 PEs)
SILC (remote #2)	Xeon4 (1 PE)	Altix (16 PEs)

ホスト名	仕様
Xeon4	IBM eServer xSeries 335 (dual Intel Xeon 2.8 GHz, 1.0 GB RAM) × 4, Red Hat Linux 8.0, LAM/MPI 7.0
Xeon8	Xeon4 と同じ PC クラスターの別の8ノード
Altix	Intel Itanium2 1.3 GHz × 32基, メモリ 32 GB, Red Hat Linux Advanced Server 2.1, SGI MPI 4.4 (MPT 1.9.1)



スクリプト化

SILC において、条件分岐や反復などの制御構文を処理する場合は、ユーザプログラムを作成するユーザがあらかじめ上記制御を含む処理が記述された関数を定義し、ライブラリプログラムシステムに渡しておく必要がある。このため、制御構文を含む任意の計算処理をユーザプログラムにおいて記述することができない問題があった。そこで本研究では、SILC の命令記述言語を拡張し、制御構文を加えたスクリプト言語を定義して、これを用いて書かれたユーザプログラムを解析し、演算処理と制御処理を分離して従来の SILC の枠組みで処理することにより、スクリプト化を実現した。これにより、以下の共役勾配法の例に示すような平易な記述を対話的に行なうことが可能となった。

```
# 三重対角行列 A とベクトル b を作る
n = 400
A = diag(2.0 * ones(n, 1)) - diag(ones(n-1, 1), 1) - diag(ones(n-1, 1), -1)
b = A * (-ones(n, 1))

# 連立一次方程式 Ax=b を CG 法で解く
rho_old = 1.0
p = zeros(n, 1)
x = zeros(n, 1)
r = b
bnrm2 = 1.0 / norm2(b)
iter = 1
while (iter <= n) {
    rho = r' * r
    beta = rho / rho_old
    p = r + beta * p
    q = A * p
    alpha = rho / (p' * q)
    r = r - alpha * q
    nrm2 = norm2(r) * bnrm2
    x = x + alpha * p
    if (nrm2 <= 1.0e-12) {
        break
    }
    rho_old = rho
    iter += 1
}

# 解 x をファイルに保存する
```

```
save "sol.mtx", x

# 反復回数を表示する
message "number of iterations:"
pprint iter
```

関連研究

Trilinos プロジェクトでは、行列計算ライブラリを C++ のクラスライブラリとして統合するための枠組みを提案し、多数の行列計算ライブラリを開発している。各ライブラリの API は、(1) 共通の行列とベクトルのデータ構造を用いること、(2) ライブラリが開発言語として C++ を採用し、解法のインタフェースを規定する共通の抽象クラスを継承することの 2 点において統一されている。また、(3) 共通のディレクトリ構造とコンパイル方法を採用し、開発者の異なるライブラリを同じ方法で構築可能な Trilinos パッケージとしてまとめている。ただし、API の詳細はライブラリ毎に大きく異なる。例えば Trilinos に含まれる連立一次方程式の直接解法パッケージと反復解法パッケージの API には互換性がないため、一方から他方に切り替えるにはユーザプログラムの修正が必要である。一方、SILC では計算を数式で指示するので、互換性のないライブラリであっても同じ方法で利用できる。

遠隔の計算環境を利用するという点で分散型 SILC と関連の深いシステムに Ninf-G がある。Ninf-G はグリッド環境において遠隔手続き呼び出し(RPC)を実現するためのミドルウェアであり、MPI ベースの行列計算ライブラリの呼び出しをサポートしている。ただし、RPC を実行するプロセスは 1 つ(逐次プログラム、または分散並列プログラムのプロセスの 1 つ)でなければならない。また、入力データ(ライブラリ関数の引数)はライブラリ側のプロセスの 1 つにのみ転送される。他のプロセスへの入力データの分散と計算結果の収集についてはユーザが IDL ファイル内に記述しなければならない。一方、SILC では複数プロセスからのライブラリ呼び出しをサポートしている。また、SILC がサポートする格納形式を出入力データの授受に使う場合はユーザがデータ分散とデータ収集の処理を記述する必要はない。

スクリプト化に関する先行研究としては、Matlab を挙げることができる。Matlab はライブラリプログラムを簡便に実行するためのスクリプト言語を提供するものであるが、演算が逐次処理に限られる問題点があった。本研究では設計の段階から並列処理を想定しており、スクリプトにおいても容易に並列計算を行なうことができる。なお、Matlab の並列化についても、Interactive Supercomputing 社による Star-P など、複数の実装が提案されており、活発な研究開発が行なわれている。

(2)研究成果の今後期待される効果

本グループでは、実装手法全般に関する研究を、チームの中心となって行ってきた。これまでの成果として、計算機科学分野で得られたハードウェア技術、計算手法に関する知見を迅速に科学技術計算に応用するためのソフトウェア実装手法を確立したこと、今後予想される高並列な計算環境での使用に耐える基盤ソフトウェア群を実際に開発、早期に無償で公開し、ユーザからのフィードバックをもとにソフトウェアを改良、発展させていく手法を確立したこと、などを挙げることができる。ハードウェア技術については、計算環境のマルチコア化、高並列化の傾向を早期に把握することができ、OpenMP、MPI、及びその併用により、プロジェクト終了時点のほとんどの環境でスケーラブルな性能を示すライブラリを開発することができた。なお、開発体制については、今後の長期的な発展を目指して、国内外のユーザの参加を含むよりオープンなものにすることを検討している。本研究では、そのための土台となる優れたソフトウェア群を作成することができたと考えている。

3. 2 反復解法(東京大学/中央大学 西田グループ)

(1)研究実施内容及び成果

概要

反復解法研究グループでは、多数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、共役勾配法、共役残差法系の線形反復解法、固有値解法とその前処理手法について、多くの国際・国内会議で成果を発表した。また、これらの解法及び多数の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)を公開した。以下に、Lis で対応している解法、前処理手法、及び行列格納形式の一覧を示す。

解法

1.0.x	CG	1.1.0 で追加	CR
	BiCG		BiCR
	CGS		CRS
	BiCGSTAB		BiCRSTAB
	BiCGSTAB(l)		GPBiCR
	GPBiCG		BiCRSafe
	Orthomin(m)		FGMRES(m)
	GMRES(m)		
	TFQMR		
	Jacobi		
	Gauss-Seidel		
	SOR		

前処理

1.0.x	Jacobi	1.1.0 で追加	Crout 版 ILU
	ILU(k)		ILUT
	SSOR		Additive schwarz
	Hybrid		ユーザ定義前処理
	I+S		
	SA-AMG		
	SAINV		

行列格納形式

Point	Compressed Row Storage
	Compressed Column Storage
	Modified Compressed Sparse Row
	Diagonal
	Ellpack-Itpack generalized diagonal
	Jagged Diagonal Storage
	Dense
Block	Coordinate
	Block Sparse Row
	Block Sparse Column
	Variable Block Row

以下に Lis を用いたプログラミング例を示す。

```

1: LIS_MATRIX   A;
2: LIS_VECTOR   b, x;
3: LIS_SOLVER   solver;
4: int          iter;
5: double       times, itimes, ptimes;
6:
7: lis_initialize(argc, argv);
8: lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD, &A);
9: lis_vector_create(LIS_COMM_WORLD, &b);
10: lis_vector_create(LIS_COMM_WORLD, &x);

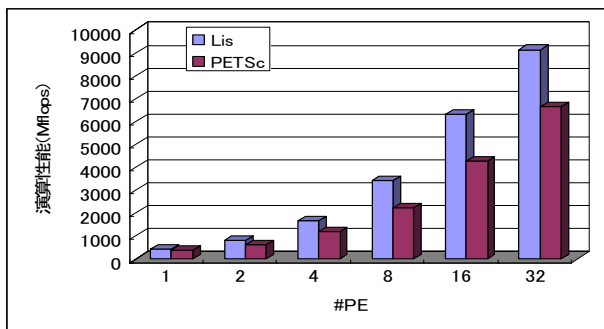
```

```

11: lis_solver_create(&solver);
12: lis_input(A, b, x, argv[1]);
13: lis_vector_set_all(1.0, b);
14: lis_solver_set_optionC(solver);
15: lis_solve(A, b, x, solver);
16: lis_solver_get_iters(solver, &iter);
17: lis_solver_get_times(solver, &times, &itimes, &ptimes);
18: printf("iter = %d time = %e (p=%e i=%e)%n", iter, times, ptimes, itimes);
19: lis_finalize();

```

Lis は公開後もユーザからの要望が特に多く、それらを取り入れつつ、版を重ねている。一般的な SMP PC クラスタ環境の他、地球シミュレータ、IBM Blue Gene、Cray XT などの特殊な計算環境にも対応しており、今後もアルゴリズムの充実を図るとともに、より多様な計算機環境での利用実績を増やしていきたいと考えている。以下に SGI Altix (32 ノード搭載) 上での 3 次元 Poisson 方程式 (次数 100 万画素, 非零要素数 26,207,180) を用いた MPI 版 Lis と他のライブラリとの共役勾配法の性能比較例を示す。



一方、理論的な研究においても、本研究では顕著な成果を挙げた。以下に主な成果について述べる。

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ールアップ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きた。

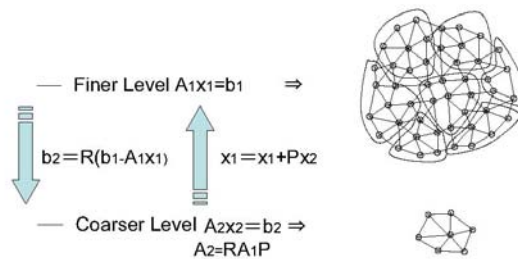
近年、大規模連立一次方程式の反復解法として、マルチレベルな解法が多く研究されており、そのような手法のひとつとして、代数的マルチグリッド (AMG) 法を挙げることができる。一般にマルチグリッド法は

- ・ 並列性に富む
- ・ 逐次計算の場合、問題行列の大きさを $n \times n$ とすると、うまく機能した場合収束までの計算量は $O(n)$ である

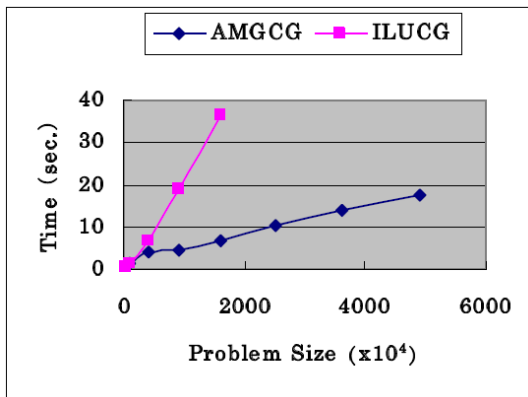
といった性質を持つ。AMG 法は幾何的マルチグリッド法と同様の原理にもとづいているが、解くべき物理問題の空間的な情報を利用する幾何的マルチグリッド法と異なり、問題行列を点枝接続行列と見なすことにより、各要素とその位置関係に関する情報のみを利用して誤差の高周波数成分の取り除かれた粗いレベルの行列を生成し、幾何的マルチグリッド法と同等の計算量で高速に問題を解くことができ、

- ・ 不規則な疎行列に対しても適用可能である
- ・ 異方性問題に対しても有効である

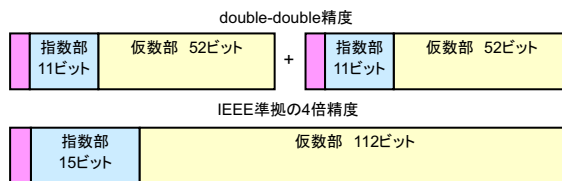
といった利点を持つ。



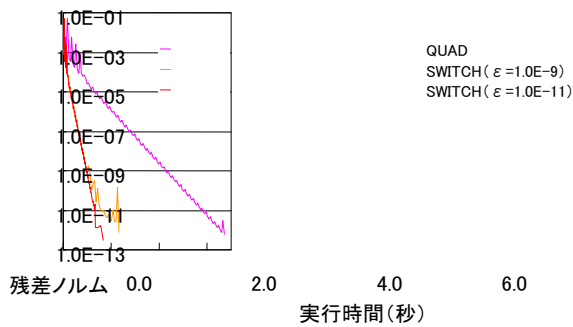
我々は、AMG 法のうち最も有力な解法のひとつである smoothed aggregation に基づく algebraic multigrid 法を前処理として用いた共役勾配法 (SA-AMGCG 法) の効率的な並列実装手法を平成 14 年より提案するとともに、ICCG 法 (Localized ILU 前処理付共役勾配法) との比較から、大規模な問題になるほどより高速に解けることを示した。AMG 法は汎用の前処理手法としては現時点で最も有効なアルゴリズムであり、スケーラビリティに関しても優れた特性を持つ。本グループではこれを反復解法ライブラリ Lis 上に実装し、高並列環境上でその性能を検証した。以下に平成 18 年 12 月に開催された Juelich 総合研究機構でのワークショップに際して実施した IBM Blue Gene 上の 1024 ノードでの実行結果を示す (2 次元 Poisson 方程式, 次数 4,900 万)。



共役勾配法などのクリロフ部分空間法の収束性は丸め誤差に大きく影響されるが、高精度演算を用いた場合、通常は計算時間が多くかかってしまう。我々は、倍精度浮動小数を 2 個用いた double-double 型 4 倍精度演算の SIMD 命令を用いた高速化手法を提案し、Intel プロセッサを用いた評価において、商用 Fortran コンパイラを用いた完全 4 倍精度演算に比べて約 5.8 倍の性能向上を得た。



また、これを用いた倍精度と 4 倍精度の混合型反復法を提案し、4 倍精度のみの計算と比較して最良で 2.8 倍の性能向上を得た。以下に Toeplitz 係数行列を用いた倍精度 (DOUBLE), 4 倍精度 (QUAD), 混合精度での計算例を示す。

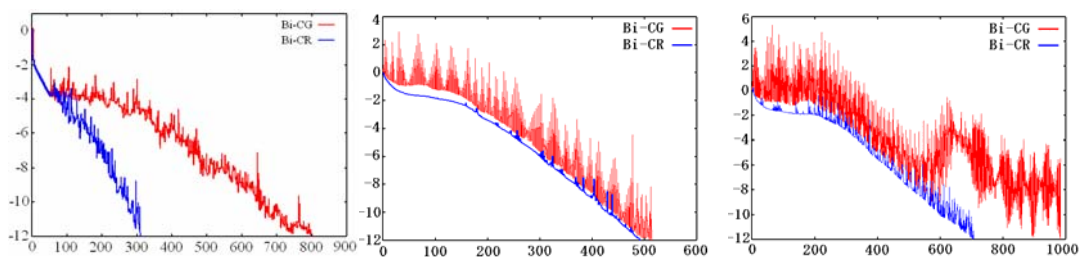


また、理論的成果として、対称行列用の共役残差 (CR) 法を非対称行列用へ拡張した解法である双共役残差 (BiCR) 法の提案を挙げることができる。これについては、双共役勾配 (BiCG) 法よりも多くの場合に滑らかな収束性を示すことを示すとともに、積型反復解法にこれを応用した GPBiCR 法を提案した。以下に BiCR 法のアルゴリズムと、Matrix Market から抽出したいくつかの問題 (WATT1, WATT2, petroleum engineering) での収束特性を示す。

```

set  $\mathbf{x}_0$  is an initial guess,  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ ,  $\beta_{-1} = 0$ ,
 $\mathbf{r}_0^*$  is an arbitrary vector, such that  $(\mathbf{r}_0^*, \mathbf{r}_0) \neq 0$ , e.g.,  $\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$ ,
for  $n = 0, \dots$  until  $\|\mathbf{r}_n\| \leq \varepsilon \|\mathbf{r}_0\|$  do :
begin
 $\mathbf{p}_n = \mathbf{r}_n + \beta_{n-1}\mathbf{p}_{n-1}$ ,       $\mathbf{p}_n^* = \mathbf{r}_n^* + \beta_{n-1}\mathbf{p}_{n-1}^*$ ,
 $(\mathbf{A}\mathbf{p}_n = \mathbf{A}\mathbf{r}_n + \beta_{n-1}\mathbf{A}\mathbf{p}_{n-1})$ ,
 $\alpha_n = \frac{(\mathbf{r}_n^*, \mathbf{A}\mathbf{r}_n)}{(\mathbf{A}^T\mathbf{p}_n^*, \mathbf{A}\mathbf{p}_n)}$ ,
 $\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n - \alpha_n\mathbf{A}\mathbf{p}_n$ ,       $\mathbf{r}_{n+1}^* = \mathbf{r}_n^* - \alpha_n\mathbf{A}^T\mathbf{p}_n^*$ ,
 $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \alpha_n\mathbf{p}_n$ ,
 $\beta_n = \frac{(\mathbf{r}_{n+1}^*, \mathbf{A}\mathbf{r}_{n+1})}{(\mathbf{r}_n^*, \mathbf{A}\mathbf{r}_n)}$ ,
end

```

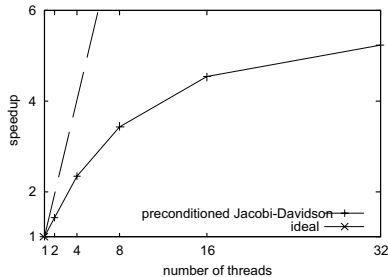


これらの解法はいずれも Lis 上に実装されており、ユーザが利用できるようになっている。

固有値解法

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。これらの計算では、高速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。このような計算では、大規模問題において少数の固有値・固有ベクトルを効率的に求める必要があり、実際の応用に耐え得る高速かつスケーラブルな固有値計算アルゴリズムの設計が求められている。大規模疎行列の固有値を数値的に求める方法としては、いくつかの解法を考えることができ、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 法の並列環境での性能とそのボトルネックについて評価を行なった.以下に Sun Starfire 上での 66,000 元 2 次元 Poisson 問題を用いた並列化効率の評価例を示す.



この結果を踏まえて,本研究では一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx$$

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

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

の非線形最適化問題に帰着して共役勾配法により解けることに着目し,国外の研究者との研究交流を通じて,本解法を発展させた.共役勾配法系の固有値解法では,我々のグループで研究,実装を進めてきた代数的マルチグリッド法などの高性能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することができる.また並列化も容易であるため,高いスケーラビリティを得ることができる.連立一次方程式解法ライブラリを用いた実装が可能であり,米国でも Lawrence Berkeley 国立研究所において,反復解法ライブラリ HyPre への組み込みに関する研究が行なわれている.当グループでは現在, Lis をベースとした検証を進めている段階である.

(2)研究成果の今後期待される効果

大規模科学技術シミュレーションにおいて大きな比重を占める差分法や有限要素法をはじめ,反復解法の適用分野は大変広い.反復解法ライブラリ Lis は,計算機科学,計算科学両分野の知見を反映したソフトウェア基盤として,十分な波及効果が期待できる.現時点においても国内外の様々な分野の研究者から多数のフィードバックを得ており,新たな機能を追加していくことにより,さらなる展開が期待できるものと考えている.

3.3 高速関数変換(東京大学 須田グループ)

(1)研究実施内容及び成果

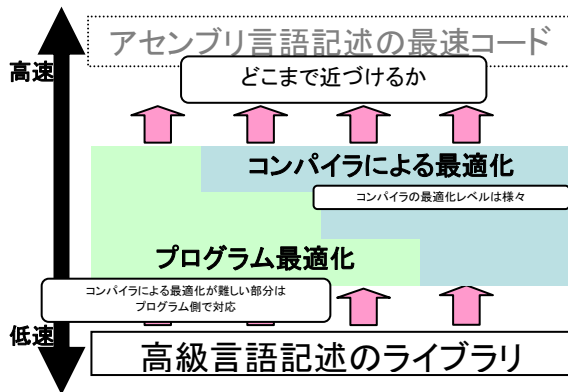
概要

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,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.

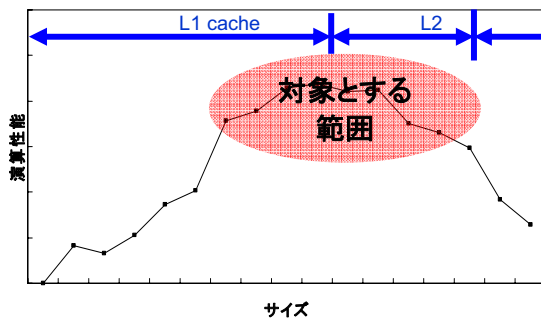
高速フーリエ変換

離散フーリエ変換とその高速アルゴリズムである高速フーリエ変換 (FFT) は,大規模な科学技術計算から画像処理まで,非常に多くの分野で用いられている. FFT のアルゴリズム

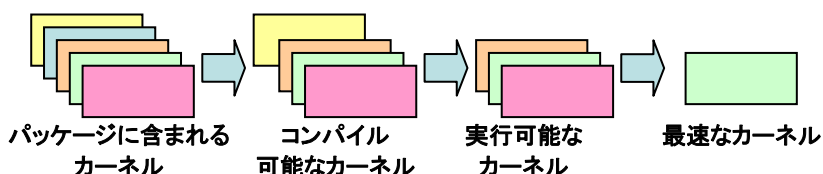
が発見されてから多くの改良が行なわれているが、プロセッサアーキテクチャの急激な進歩に伴い、それに適した新しい FFT カーネルの開発が必要となっている。



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、本研究では、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。



また、Intel IA-64, IBM POWER などのように、科学技術計算において使用されることの多いアーキテクチャでは、積和演算ユニットを 2 つ持ち、1 サイクルあたり 4 つの浮動小数演算が実行できるプロセッサが増加する傾向にある。積和演算命令は乗算結果に加減算を行う複合命令であり、積和演算命令をサポートするプロセッサの場合は乗算だけ、または加減算だけを行いたい場合にも積和演算ユニットを使用する。このため、積和演算ユニットを効率よく使用するためには、なるべく乗算と加減算を組み合わせる積和演算命令として実行することが不可欠である。本研究では積和演算命令数が最小となる 8 基底 FFT カーネルにおいて、必要なひねり係数のテーブルが小さく、ロードする必要があるひねり係数の数も少ないという利点を持つ新しい 8 基底 FFT カーネルを提案した。これらの成果は開発ライブラリに反映され、スーパースカラ型のプロセッサを対象に、カーネルの自動最適化機能を備えた FFT ライブラリである FFTSS を平成 17 年 9 月より公開した。



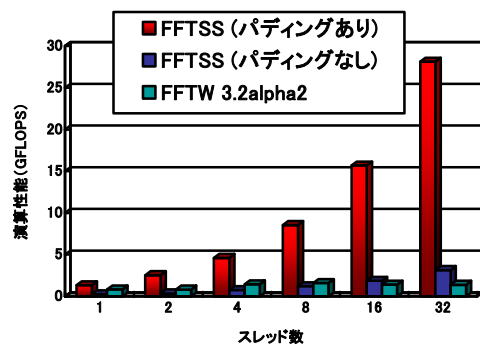
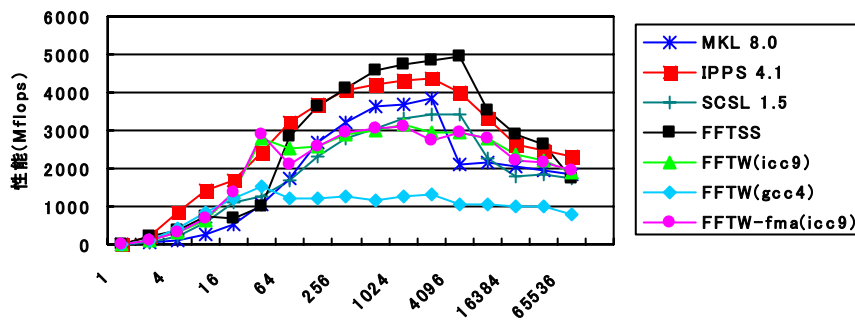
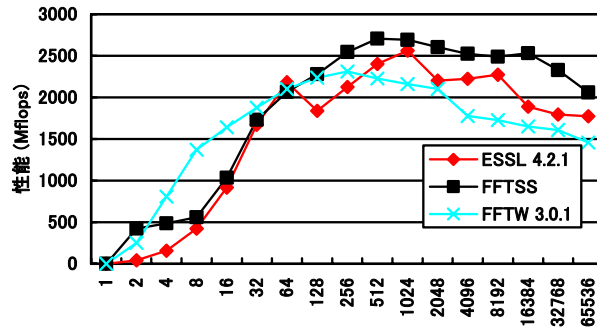
以下にプログラミング例、及び商用ライブラリ等と比較した Itanium2 1.3GHz, IBM

POWER5 1.65GHz 上での 1 次元 FFT, パディングを実装した OpenMP 版 2 次元 FFT の評価結果を示す.

```

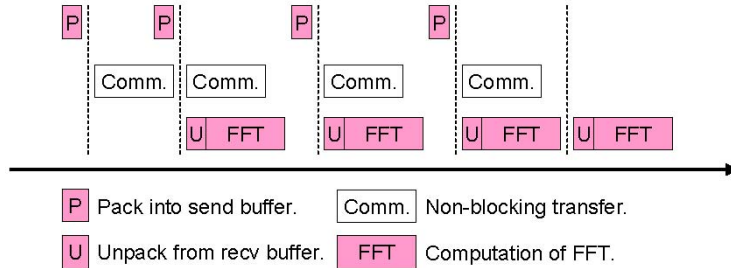
max_threads = omp_get_num_procs();
fftss_plan_with_nthreads(max_threads);
plan = fftss_plan_dft_2d(nx, ny, py, vin, vout,
FFTSS_FORWARD, FFTSS_MEASURE);
{ /* 配列の初期化. */ }
for (nthreads = 1; nthreads <= max_threads; nthreads++) {
fftss_plan_with_nthreads(nthreads);
t = fftss_get_wtime();
fftss_execute(plan);
t = fftss_get_wtime() - t;
printf("%d スレッドで実行した場合%f 秒.¥n", nthreads, t);
}

```



また, 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, 大量のデータを用いた大規模な FFT 計算が必要となることが多い. そこで, 本研究では

平成 18 年度より MPI 並列環境への対応を行なうとともに、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への最適化を行い、並列 FFT において発生する大量の全対全通信を計算とオーバーラップさせるソフトウェアパイプラインを実装したライブラリの開発を行った。



この結果、倍精度 2 次元並列 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。

高速多重極子展開法

気象予報・気候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が多く、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。球面調和関数は東西方向の三角関数と南北方向のルジャンドル陪関数との積に分解できることから、前者は FFT で処理することができる。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を提案し、 $O(N^2 \log N)$ での安定な計算が可能になることを示した。

(2)研究成果の今後期待される効果

本グループが開発したライブラリは、ベンダにより提供されているものと比較しても多くの場合に優れた性能を示しており、科学技術分野や産業界に対する波及効果は大きい。現在アーキテクチャに応じて個別に作成されている複数の FFT カーネルの統合を進め、ライブラリとしての完成度を高めていくことで、実アプリケーションでの利用がさらに進むものと期待される。

4 研究参加者

① 実装手法研究グループ

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期			
				開始		終了	
				年	月	年	月
西田 晃	中央大学理工学研究所	客員研究員	ライブラリ実装技術に関する研究開発	14	11		
長谷川 秀彦	筑波大学図書館情報メディア研究科	准教授		16	4		
須田 礼仁	東京大学大学院情報理工学系研究科	准教授		14	11		
中島 研吾	東京大学地球惑星科学専攻 21世紀 COE プログラム	特任准教授		15	1		

高橋 大介	筑波大学大学院システム情報工学研究科	准教授		15	1		
小武守 恒	(株)TCAD インターナショナル	シニアエンジニア		16	10	19	10
梶山 民人	東京大学大学院情報理工学系研究科	CREST 研究員		16	10		
額田 彰	東京工業大学学術国際情報センター	産学官連携研究員		15	1		
藤井 昭宏	工学院大学 CPD センター	講師		15	1		
蓬来 祐一郎	産業技術総合研究所生命情報科学研究センター	特別研究員		15	8	19	3

② 反復解法研究グループ

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期			
				開始		終了	
				年	月	年	月
西田 晃	中央大学理工学研究所	客員研究員	大規模行列問題の反復解法とその実装手法に関する研究	14	11		
長谷川 秀彦	筑波大学図書館情報メディア研究科	准教授		16	4		
張 紹良	名古屋大学工学研究科	教授		14	11		
中島 研吾	東京大学地球惑星科学専攻 21世紀 COE プログラム	特任准教授		15	1		
阿部 邦美	岐阜聖徳学園大学経済情報学部	准教授		15	1		
伊藤 祥司	理化学研究所情報基盤センター	協力研究員		15	1		
橋本 康	東京大学生産技術研究所合原研究室	ERATO 研究員		14	11	18	4
藤井 昭宏	工学院大学	講師		15	1		
小武守 恒	(株)TCAD インターナショナル	シニアエンジニア		16	10	19	3
曾我部 知広	名古屋大学工学研究科	助教		15	4		

③ 高速関数変換研究グループ

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期			
				開始		終了	
				年	月	年	月
須田 礼仁	東京大学大学院情報理工学系研究科	准教授	大規模高速関数変換の実装手法に関する研究	14	11		
高橋 大介	筑波大学大学院システム情報工学研究科	准教授		15	1		
額田 彰	東京工業大学学術国際情報センター	産学官連携研究員		15	1		

5 成果発表等

(1)論文発表 (国内14件、海外20件)

小武守恒, 藤井昭宏, 長谷川秀彦, 西田晃, 「反復法ライブラリ向け 4 倍精度演算の実装と SSE2 を用いた高速化」, 情報処理学会論文誌「コンピューティングシステム」, to appear.

阿部邦美, 曾我部知広, 藤野清次, 張紹良, 「非対称行列用共役残差法に基づく積型反復解法」, 情報処理学会論文誌「コンピューティングシステム」, Vol. 48, No. SIG 8 (ACS 18), pp.11-21, 2007.

額田彰, 西田晃, 「地球シミュレータを用いた高性能 2 次元 FFT」, 2007 年先進的計算基盤システムシンポジウム論文集, pp.137-144, 2007.

小武守恒, 藤井昭宏, 長谷川秀彦, 西田晃, 「倍精度と 4 倍精度の混合型反復法の提案」, 2007 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.9-16, 2007.

阿部邦美, 曾我部知広, 藤野清次, 張紹良, 「非対称行列用共役残差法に基づく積型反復解法」, 2007 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, 2007.

小武守恒, 西田晃, 「キャッシュを考慮した疎行列格納形式 CJDS の提案と評価」, 2006 年先進的計算基盤システムシンポジウム論文集, pp.167-174, 2006.

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.

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」, 2003 年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 28-30 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, 2003.

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, 2003.

A. Fujii, R. Suda, A. Nishida, and Y. Oyanagi. Evaluation of Asynchronous Iterative Method for Sparse Matrix Solver. In *Proceedings of the Second international Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2007)*, pp. 43–51, 2007.

T. Kajiyama, A. Nukada, R. Suda, H. Hasegawa, and A. Nishida. Toward Automatic Performance Tuning for Numerical Simulations in the SILC Matrix Computation Framework. In *Proceedings of the Second international Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2007)*, pp. 81–90, 2007.

T. Kajiyama, A. Nukada, R. Suda, H. Hasegawa, and A. Nishida. Cloth simulation in the SILC matrix computation framework: A case study, In *Proceedings of the Seventh International Conference on Parallel Processing (PPAM 2007)*, Springer, to appear.

A. Nukada, D. Takahashi, R. Suda, and A. Nishida. High Performance FFT on SGI Altix 3700, In *Proceedings of the High Performance Computation Conference 2007 (HPCC 2007)*, Lecture Notes in Computer Science 4782, pp.396–407, Springer, 2007.

A. Nukada, Y. Hourai, A. Nishida and Y. Akiyama. High Performance 3D Convolution for Protein Docking on IBM Blue Gene, In *Proceedings of the Fifth International Symposium on Parallel and Distributed Processing and Applications (ISPA07)*, Lecture Notes in Computer Science 4742, pp.958–969, Springer, 2007.

T. Kajiyama, A. Nukada, R. Suda, H. Hasegawa, and A. Nishida. Distributed SILC: An easy-to-use interface for MPI-based parallel matrix computation libraries, In *Proceedings of 2006 Workshop on State-of-the-art in Scientific and Parallel Computing (PARA'06)*, Lecture Notes in Computer Science 4699, pp.860–870, Springer, 2007.

T. Kajiyama, A. Nukada, R. Suda, H. Hasegawa, and A. Nishida. A Performance Evaluation Model for the SILC Matrix Computation Framework, In *Proceedings of the IFIP International Conference on Network and Parallel Computing (NPC 2006)*, pp.93–103, October 2–4, 2006.

A. Nishida. Building Cost Effective High Performance Computing Environment via PCI Express. In *Proceedings of the 2006 International Conference on Parallel Processing Workshops (ICPPW2006)*, pp.519–526, IEEE, 2006.

A. Nukada. FFTSS: a High Performance Fast Fourier Transform Library, In *Proceedings of the 2006 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 2006)*, Vol. III, pp.980–983, IEEE, May 14–19, 2006, Toulouse.

A. Fujii, A. Nishida, and Y. Oyanagi, Evaluation of Parallel Aggregate Creation Orders : Smoothed Aggregation Algebraic Multigrid Method, In *IFIP International Federation for Information Processing*, Vol. 172, pp.99–122, Springer, 2005.

H. Kotakemori, H. Hasegawa, and A. Nishida, Performance Evaluation of a Parallel Iterative Method Library using OpenMP, In *Proceedings of the 8th International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2005)*, pp.432–436, IEEE, 2005.

T. Kajiyama, A. Nukada, H. Hasegawa, R. Suda, and A. Nishida, LAPACK in SILC: Use of a

Flexible Application Framework for Matrix Computation Libraries, In Proceedings of the 8th International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2005), pp.205–212, IEEE, 2005.

A. Fujii, R. Suda, and A. Nishida, Parallel Matrix Distribution Library for Sparse Matrix Solvers, In Proceedings of the 8th International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2005), pp.213–219, IEEE, 2005.

T. Kajiyama, A. Nukada, H. Hasegawa, R. Suda, and A. Nishida, SILC: A Flexible and Environment Independent Interface for Matrix Computation Libraries, In Proceedings of the Sixth International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM2005), Lecture Notes in Computer Science 3911, pp.928–935, Springer, 2006.

H. Kotakemori, H. Hasegawa, T. Kajiyama, A. Nukada, R. Suda, and A. Nishida, Performance Evaluation of Parallel Sparse Matrix–Vector Products on SGI Altix3700, In Proceedings of the First International Workshop on OpenMP (IWOMP2005), Lecture Notes in Computer Science, Springer, in press.

Y. Hourai, A. Nishida, and Y. Oyanagi, Network–aware Data Mapping on Parallel Molecular Dynamics, In Proceedings of 11th International Conference on Parallel and Distributed Systems (ICPADS2005), pp.126–132, IEEE, 2005.

R. Suda, Fast spherical harmonic transform routine FLTSS applied to the shallow water test set, Monthly Weather Review, Vol. 133, No. 3, pp. 634–648, 2005.

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), CDROM, 2004.

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.

A. Nishida and Y. Oyanagi. Performance Evaluation of Low Level Multithreaded BLAS Kernels on Intel Processor based cc–NUMA Systems. In Proceedings of 2003 International Workshop on OpenMP:Experiences and Implementations (WOMPEI2003), Lecture Notes in Computer Science 2858, pp.500–510, Springer, 2003.

(2)口頭発表(国際学会発表及び主要な国内学会発表)

①招待講演(国内1件、海外2件)、口頭講演(国内39件、海外15件)

西田晃, 「線形計算ライブラリを用いた共役勾配法系固有値解法の実装と評価」, IPSJ SIG Notes, 2008(19), pp.199–204, 情報処理学会, 2008.

西田晃, 「固有値解法の応用と広がり」, 日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第4回研究会, 日本応用数理学会, 2007.

小武守恒, 「反復解法ライブラリー Lis の紹介」, 線形計算フォーラム, 九州大学情報基盤研究開発センター, 平成19年10月22日.

西田晃, 「線形計算ライブラリを用いた共役勾配法系固有値解法の設計と実装」, IPSJ SIG Notes, 2007(80), pp.157-160, 2007.

小武守恒, 藤井昭宏, 長谷川秀彦, 西田晃, 「高速な 4 倍精度演算を用いたクリロフ部分空間法の安定化」, 第 12 回日本計算工学会講演会論文集, pp.631-634, 2007.

小武守恒, 「4 倍精度クリロフ部分空間法の収束比較」, 日本応用数学会平成 19 年研究部会連合発表会, 2007.

西田晃, 「大規模素因数分解のための高性能計算環境の実現」, 第 13 回「ハイパフォーマンスコンピューティングとアーキテクチャの評価」北海道ワークショップ (HOKKE2007), IPSJ SIG Notes, 2007(17), pp.205-208, 2007.

西田晃, 「大規模素因数分解のための GF(2) 上疎行列線型方程式解法の性能解析」, 2007 年暗号と情報セキュリティシンポジウム (SCIS2007) 論文集, CDROM, 2007.

小武守恒, 藤井昭宏, 長谷川秀彦, 西田晃, 「SSE2 を用いた反復解法ライブラリ Lis 4 倍精度版の高速化」, IPSJ SIG Notes, 2006(106), pp.7-12, 2006.

西田晃, GF(2) 上巨大疎行列に対する共役勾配法の適用と評価, IPSJ SIG Notes, 2006(87), pp.287-292, 2006.

梶山民人, 額田彰, 須田礼仁, 長谷川秀彦, 西田晃, 行列計算ライブラリインタフェース SILC の分散並列環境への実装, IPSJ SIG Notes, 2006(87), pp.251-256, 2006.

西田晃, GF(2) 上疎行列線形解法の現状と評価, 日本応用数学会「数論アルゴリズムとその応用」研究部会第 15 回研究集会, 2006.

西田晃, 広帯域ネットワークを用いたソフトウェア分散共有メモリの実現と性能評価, IPSJ SIG Notes, 2006(20), pp.187-192, 2006.

第 1 回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム, 平成 17 年 12 月 6-7 日, 東京大学.

西田晃, InfiniBand クラスタを用いた疎行列線形代数演算ライブラリの効率的な実装技術, IPSJ SIG Notes, 2005(81), pp.97-102, 2005.

小武守恒, 長谷川秀彦, 西田晃, 「OpenMP を用いた並列反復法ライブラリの性能評価」, 第 34 回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp.45-48, 2005.

梶山民人, 額田彰, 須田礼仁, 長谷川秀彦, 西田晃, 「共有メモリ並列環境における SILC の実現と利用」, 第 34 回数値解析シンポジウム講演予稿集, pp.49-52, 2005.

梶山民人, 額田彰, 須田礼仁, 長谷川秀彦, 西田晃, 「SILC: 行列計算ライブラリを利用を簡単化するフレームワーク」, 第 10 回日本計算工学会講演会論文集, pp.239-242, 2005.

長谷川秀彦, 「古典的アルゴリズムによる大規模対称帯行列の固有値計算」, 第 10 回日

本計算工学会講演会論文集, pp.247-248, 2005.

藤井昭宏.「不規則疎行列ソルバに対する動的負荷分散への評価」, 第 10 回日本計算工学会講演会論文集, pp.251-254, 2005.

長谷川秀彦, 須田礼仁, 額田彰, 梶山民人, 中島研吾, 高橋大介, 小武守恒, 藤井昭宏, 西田晃.「計算環境に依存しない行列計算ライブラリインタフェース SILC」, 情報処理学会研究報告 2004-HPC-100, pp.37-42, 2004.

曾我部知広, 張紹良, 「シフト複素対称線形方程式のための COCR 法」, 日本応用数理学学会年会予稿集, pp.408-409, 2004.

須田礼仁, 「高速球面調和関数変換法: アルゴリズム, 応用, 展開」, 日本応用数理学学会年会予稿集, pp.26-27, 2004.

西田晃, 「非線形最適化問題としての固有値解法: 最適化手法の適用と評価」, 日本応用数理学学会年会予稿集, pp.220-221, 2004.

曾我部知広, 藤野清次, 張紹良, 「COCG 法の積型解法について」, 京都大学数理解析研究所講究録, pp.201-211, 2004.

西田晃, 「非対称固有値問題への並列 AMG 前処理付共役残差法の適用と評価」, IPSJ SIG Notes, 2004(81), pp.85-90, 2004.

西田晃, 「SSI: 大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの概要」, IPSJ SIG Notes, 2004(38), pp.25-30, 2004.

曾我部知広, 張紹良, 「複素対称線形方程式のための COCR 法」, 第 33 回数値解析シンポジウム, 2004.

西田晃, 「大規模固有値問題への並列 AMG 前処理付共役勾配法の適用と評価」, IPSJ SIG Notes, 2004(20), pp.205-210, 2004.

曾我部知広, 張紹良, 「Bi-CR 法の積型解法について」, 京都大学数理解析研究所共同利用研究集会「数値解析と新しい情報技術」, 2003 年 12 月 8-10 日.

長谷川秀彦, 伊藤祥司, 「帯行列に対する直接解法の並列化」, IPSJ SIG Notes, 2003(14), pp.18-25, 2003.

須田礼仁, 「ERXPP - 数値ライブラリにより並列計算性能を簡易かつ適応的に引き出す方式の提案」, IPSJ SIG Notes, 2003(96), pp.19-24, 2003.

西田晃, 「大規模対称固有値問題への前処理付共役勾配法の適用と評価」, 日本応用数理学学会年会予稿集, pp.326-327, 2003.

阿部邦美, 張紹良, 杉原正顕, 「特異な系に対する GCR, GMRES 法の収束性」, 日本応用数理学学会年会予稿集, pp.322-323, 2003.

長谷川秀彦, 「クリロフ部分空間法の計算精度依存性」, 日本応用数理学学会年会予稿

集, pp.316-317, 2003.

長谷川秀彦, 「OpenMP を用いた帯ガウスの SMP 並列化」, 第 2 回情報科学技術フォーラム, 2003.

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 Broadcast スケジューリング」, IPSJ SIG Notes, 2003(95), pp.59-63, 2003.

曾我部知広, 鄭波, 橋本康, 張紹良, 「非対称 Toeplitz 行列に対する CG 法の適用」, 第 32 回数値解析シンポジウム予稿集, pp.59-62, 2003.

西田晃, 額田彰, 小柳義夫, 「コモディティ分散共有メモリ IBM x440 の性能評価」, IPSJ SIG Notes, 2003(93), pp.31-36, 2003.

T. Kajiyama, A. Nukada, H. Hasegawa, R. Suda, and A. Nishida, Numerical Simulations in the SILC Matrix Computation Framework, In Proceedings of the International Conference on Computational Methods 2007 (ICCM2005), p. 235, April, 2007.

A. Nishida, H. Kotakemori, A. Fujii, and A. Nukada, Development of Scalable Software Infrastructure on Blue Gene Systems, In Report on the Juelich Blue Gene/L Scaling Workshop 2006 (FZJ-ZAM-IB-2007-02), John von Neumann Institute for Computing, Research Centre Juelich, February, 2007.

H. Hasegawa, T. Sogabe, T. Ogita, and T. Kajiyama, Comparison of conjugate gradient method for nonsymmetric matrices, In Joint GAMM-SIAM Conference on Applied Linear Algebra (ALA 2006), July 24-27, 2006, Düsseldorf, Germany.

A. Nishida. High Performance Computing over Finite Fields, IEICE ISEC Conference, May 19, 2006.

R. Suda. Fast Spherical Harmonic Transform with the Generalized Fast Multipole Method. 2005 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations, May 23-27, 2005, Nagoya.

A. Nishida. AMG Preconditioned Conjugate Gradient Type Methods for Nonsymmetric Eigenproblems. Twelfth Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, April 3-8, 2005, Aspen.

A. Nishida. SSI: Overview of Simulation Software Infrastructure for Large Scale Scientific Applications, In Proceedings of the International Workshops on Advances in Computational Mechanics (IWACOM2004), p.163, 2004, Tokyo.

A. Fujii, A. Nishida, and Y. Oyanagi. Vectorized Algebraic Multigrid Algorithm for Unstructured Finite Element Problems. 6th International Meeting on High Performance Computing for Computational Science (VECPAR2004), June 28-30, 2004, Valencia.

A. Nishida. Performance Evaluation of Intel Processor based cc-NUMA Systems for Scalable Iterative Solvers. Eighth Copper Mountain Conference on Iterative Methods, March 28-April 2, 2004, Aspen.

A. Nishida. SSI: Development of Simulation Software Infrastructure. Eleventh SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, February 25-27, 2004, San Francisco.

S. Zhang, and T. Sogabe. The Bi-CR Method for Nonsymmetric Linear Systems. International Conference on Numerical Linear Algebra and Optimization, October 7-11, 2003, Guilin.

K. Abe, S. Zhang, and M. Sugihara. Necessary and Sufficient Conditions for Convergence of GCR and GMRES Methods on Singular Systems. International Conference on Numerical Linear Algebra and Optimization, October 7-11, 2003, Guilin.

R. Suda. FLTSS – the Fast Legendre Transform with Stable Sampling and interpolation. In Proceedings of the Second International Conference on Approximation Methods and Orthogonal Expansions, September 12-14, 2003, Estonia.

K. Nakajima. Implementing SuperLU on Contact Problems. Fourth Workshop on the DOE Advanced Computational Software Collection, August 5-8, 2003, Berkeley.

T. Sogabe, C. Jin, K. Abe, and S. Zhang. On the Improvement of the CGS Method. 5th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, July 7-11, 2003, Sydney.

A. Nishida. Efficient Parallel Implementation of Jacobi-Davidson Method for Shared Memory Architectures. 5th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, July 7-11, 2003, Sydney.

K. Nakajima. Parallel Iterative Solves for Solid Earth Simulation on the Earth Simulator, Sixth IMACS International Symposium on Iterative Methods in Scientific Computing, March 27-30, 2003, Denver.

②ポスター発表 (国内6件、海外1件)

小武守恒, 藤井昭宏, 中島研吾, 長谷川秀彦, 西田晃. 「複数の前処理と格納形式を持つ反復解法ライブラリ」, 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 (HPCS2005), ポスター, 2005.

梶山民人, 額田彰, 須田礼仁, 長谷川秀彦, 西田晃. 「行列計算ライブラリに対する計算環境に依存しないインタフェースの開発」, 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 (HPCS2005), ポスター, 2005.

小武守恒, 藤井昭宏, 長谷川秀彦, 西田晃. 「Lis: a Library of Iterative Solvers for linear systems」, 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 (HPCS2006), ポスター, 2006.

梶山民人, 額田彰, 須田礼仁, 長谷川秀彦, 西田晃. 「分散型SILCの設計: MPIベースの行列計算ライブラリを使いやすくするインタフェース」, 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 (HPCS2006), ポスター, 2006.

額田彰, 高橋大介, 須田礼仁, 西田晃. 「多様な計算環境で高性能を実現するFFTライブラリ FFTSS」, 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 (HPCS2006), ポスター, 2006.

A. Nishida, H. Kotakemori, T. Kajiyama, and A. Nukada, Scalable Software Infrastructure Project, SC06, Poster, November 11-17, 2006, Tampa, USA.

蓬来祐一郎, 額田彰, 「Performance Evaluation of CONV3D with nVidia CUDA」, 2007年先進的計算基盤システムシンポジウム論文集, pp.156-157, ポスター, 2007.

(3)特許出願

①国内出願 (1 件)

1. 特願 2007-161627, 「演算処理システム, 演算処理方法, ユーザプログラムシステム, ライブラリプログラムシステム, プログラム, 及びプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体」, 西田 晃

②海外出願 (1件)

1. CALCULATION PROCESSING SYSTEM, CALCULATION PROCESSING METHOD, USER PROGRAM SYSTEM, LIBRARY PROGRAM SYSTEM, PROGRAM, AND RECORDING MEDIUM CONTAINING THE PROGRAM
Hasegawa, Hidehiko
Hasegawa, Hidehiko
Nov 11, 2005
PCT/JP2005/020716

(4)受賞等

①受賞

小武守恒, 藤井昭宏, 長谷川秀彦, 西田晃, 「高速な 4 倍精度演算を用いたクリロフ部分空間法の安定化」, 第 12 回日本計算工学会講演会論文集, pp. 631-634, 日本計算工学会, 2007. (ベストペーパーアワード)
曾我部知広, 張紹良, 「シフト複素対称線形方程式のための COCR 法」, 日本応用数学会年會予稿集, pp.408-409, 2004. (若手優秀講演賞)
須田礼仁, 「高速球面調和関数変換法: アルゴリズム, 応用, 展開」, 日本応用数学会年會予稿集, pp.26-27, 2004. (若手優秀講演賞)

②新聞報道

なし。

(5)その他特記事項

開発ソフトウェアは無償にて公開しており, 平成 17 年 9 月の公開開始より平成 20 年 2 月までの間に, Lis, FFTSS, SILC の国内外からのダウンロード件数はそれぞれ 590 件, 543 件, 192 件となっている. 応用分野の研究者からの質問が多く, 今後よりオープンな開発体制を取ることで, さらに活用が進んでいくものと期待される.

6 招聘した研究者等

なし。

7 研究期間中の主な活動

(1)ワークショップ・シンポジウム等

年月日	名称	場所	参加人数	概要
02/12/19	小セミナー	東京大学	5人	寺西慶太博士(ペンシルバニア州立大学) “Time-Memory trade-offs for solving standard symmetric sparse eigenvalue problems with a hybrid approach”
04/10/18	セミナー	東京大学	10人	Leonid Oliker 博士(ローレンスバークレー米国立研究所, “Scientific Computations on Modern Parallel Vector Systems”
06/12/27	第1回 SSI プロジェクトワークショップ	東京大学	26人	プロジェクト研究成果及びソフトウェアの利用方法, 利用例など

8 結び

本研究の進捗状況は大変順調であり、満足できるものであるといえる。実装手法に関しては、計算機科学分野で得られたハードウェア技術、ソフトウェア技術に関する知見を迅速に科学技術計算に応用するためのソフトウェア実装手法を確立したこと、今後予想される高並列な計算環境での使用に耐える基盤ソフトウェア群を実際に開発、早期に無償で公開し、ユーザからのフィードバックをもとにソフトウェアを改良、発展させていくサイクルを確立したこと、などを挙げることができる。また、大規模科学技術シミュレーションにおいて大きな比重を占める差分法や有限要素法をはじめ、反復解法の適用分野は大変広い。反復解法ライブラリ Lis は、計算機科学、計算科学両分野の知見を反映したソフトウェア基盤として、十分な波及効果が期待できる。現時点においても国内外の様々な分野の研究者から多数のフィードバックを得ており、新たな機能を追加していくことにより、さらなる展開が期待できるものと考えている。一方、FFTSS ライブラリは計算機ベンダにより提供されているものと比較しても優れた性能を示しており、科学技術分野や産業界に対する波及効果は大きい。現在アーキテクチャに応じて個別に作成されている複数の FFT カーネルの統合を進め、ライブラリとしての完成度を高めていくことで、実アプリケーションでの利用がさらに進むものと期待される。



研究室風景（平成 15 年 8 月撮影）

プロジェクト運営に関しては、メンバーの意見を取り入れつつ、全体としての方向性を保つことに腐心した。研究費に関しても、プロジェクトの方針に沿って一貫した使い方ができたと自負している。若手研究者については、3名の研究員を指導する機会を得、各人とも高性能計算分野において優秀な業績を挙げるに至った。研究構想を実現する上で、戦略的創造研究推進事業を担当する機会を与えていただいたことは、大変な幸運であったと考えている。



第1回 SSI プロジェクトワークショップ風景（平成 18 年 12 月 27 日撮影）