

「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、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指し、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研究を進めている。このため、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いる。具体的には、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ている。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。さらに、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、国際特許出願を行った。本研究の成果はネットワークを通じて広く一般の研究者に配布し、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 月には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の初期バージョン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っている。平成 18 年度には、地球シミュレータ等の高並列環境への対応と最適化を進めるとともに、特定用途向けプロセッサベンダとの共同研究を開始し、大規模実問題への適用に耐え得る移植性に優れたソフトウェア基盤を提供していく予定である。

2. 研究実施内容

実装手法に関する研究

まず、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ている。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)、小規模 PC クラスタ、及びベクトル計算機 (NEC SX-6i) 等を使用し、可搬性を備えたライブラリの開発を行っている。また、平成 16 年度より IBM T. J. Watson Research Center との間での 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も順調に進展し、平成 17 年度からはニイウス株式会社の協力を得て、実機を利用した研究を行っており、反復解法ライブラリについては 16384 プロセッサまでの線形な性能向上を実現した。平成 18 年度には地球シミュレータ共同プロジェクトにも採択が決定しており、今後も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、より大規模な並列環境での評価を進めていく予定である。

ライブラリの設計に関しては、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ライブラリとするため、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、研究を進めている。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 C 言語を用いたオブジェクト指向型の並列ライブラリを実現している。また、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 C 言語で実装しており、今後はより高級な言語によるインタフェースを付加していくとともに、自動最適化機能についても充実させていく方針である。

言語に関しては、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 年度よりオープンソースコンパイラを用いた PC アーキテクチャ上への移植に関する研究を Cray 社と共同で開始した。既に Cray 社により XT3 への SHMEM ライブラリの移植も完了しており、今後はこれを用いた並列言語の実装を行っていく予定である。また、より抽象度の高いインタフェースとして、数値ライブラリの利用を容易にするための並列スクリプト言語 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。なお SILC の仕様については国内特許、国際特許の出願を行っている。

反復解法に関する研究

A) 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。本グループでは、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

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

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すとともに、平成 17 年度にはこれを非対称問題に拡張した。

B) 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、ICCG 法 (Localized ILU 前処理付共役勾配法) 等の既存の解法を含む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) の実装を進め、MPI 版、OpenMP 版を含む初期バージョンを公開した。今後はアルゴリズムの充実を図るとともに、大規模な計算機環境での使用実績を増やしていく予定である。

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っている。本グループでは、MIT で開発されている FFTW とインタフェース互換性を備えたスーパースカラプロセッサ向けの高速フーリエ変換ライブラリ FFTSS を開発し、昨年 9 月に公開した。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し、実行プランを構築することのできる自動最適化機能を搭載しており、移植性に留意するとともに、多くの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 FFT の計算を実現している。

一方、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。このような分野では、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。今年度は、本研究で提案している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、高性能な実装手法に関する研究を行った。

3. 研究実施体制

「実装手法」グループ

- ①研究分担グループ長：西田 晃（東京大学、助手）
- ②研究項目：スケーラブルなソフトウェア基盤を実現するためのハードウェア及びソフトウェア技術に関する研究

「反復解法」グループ

- ①研究分担グループ長：西田 晃（東京大学、助手）
- ②研究項目：高並列環境に適したスケーラブルな反復解法とその前処理手法に関する研究

「高速関数変換」グループ

- ①研究分担グループ長：須田 礼仁（東京大学、助教授）
- ②研究項目：高効率な高速関数変換ソフトウェアの実現に関する研究

4. 主な研究成果の発表（論文発表および特許出願）

(1) 論文（原著論文）発表

- 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, 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, 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, 2005.
- T. Kajiyama, A. Nukada, H. Hasegawa, R. Suda, and A. Nishida, SILC: a Flexible and Environment Independent Interface to Matrix Computation Libraries, In *Proceedings of the Sixth International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM2005)*, Lecture Notes in Computer Science, Springer, in press.
- 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 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, 2005.

(2) 特許出願

H17 年度出願件数： 0 件 (CREST 研究期間累積件数： 1 件)