

「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

(中央大学 21 世紀 COE プログラム 助教授)

「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、平成 14 年度より研究を開始し、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。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。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、主要なアイデアについて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なってきた。また、平成 18 年度には、地球シミュレータセンターの共同プロジェクトに採択され、高並列なベクトル計算機環境への最適化を行なった。

2. 研究実施内容

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てきた。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 年度には IBM T. J. Watson Research Center と、また平成 17 年度にはニ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た。そして、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 年度には地球シミュレータ共同プロジェクトとして採択され、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、今後関連分野の研究者による利用を通じて、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 FFT 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ためインタフェース SILC (Simple Interface for Library Collections) を独立して開発し、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際特許出願を行っており、SILC の並列スクリプト言語への拡張に関しても現在特許出願手続きを進めている段階である。

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 18 年度にはこれを非対称問題に拡張した。連立一次方程式解法を用いているため、並行して開発を進めてきた後述の並列反復解法ライブラリ Lis により、容易に実

装が可能な解法となっている。

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解くことから、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、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、MPI+OpenMP ハイブリッド版を同一のインタフェースにより利用可能なソフトウェアを公開した。小規模な開発環境から大規模並列計算環境への移行が容易であり、今後も必要に応じてアルゴリズムの追加が可能である。

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きた。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度フーリエ変換ライブラリ FFTSS を開発し、平成 17 年 9 月より公開を開始した。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 FFT の計算を実現している。

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。本研究では、平成 18 年度より地球シミュレータ共同プロジェクトの一環として、ベクトル計算機への対応を開始するとともに、地球シミュレータ上でスケーラブルな性能を得ることのできるライブラリを開発を行ない、並列 2 次元 FFT において 16TFLOPS を超える性能が得られることを実機上で確認した。

一方、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も多く、緯度・経度格子上的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、高性能な実装手法に関する研究を行なった。

3. 研究実施体制

(1)「実装手法研究」グループ

①グループリーダー

西田 晃(中央大学 21 世紀 COE プログラム COE 助教授)

②研究項目

・実装手法に関する研究及び成果ソフトウェアの開発

(2)「反復解法研究」グループ

①グループリーダー

西田 晃(中央大学 21 世紀 COE プログラム COE 助教授)

②研究項目

・並列反復解法に関する研究

(3)「高速関数変換研究」グループ

①グループリーダー

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

・高速関数変換手法に関する研究

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

- 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.
- 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.
- 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. 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, pp.13-14, 2007.

(2) 特許出願

平成 18年度特許出願:0件(CREST 研究期間累積件数:1件)