

「ポストペタスケール高性能計算に資する

システムソフトウェア技術の創出」

平成23年度採択研究代表者

H23 年度 実績報告

塩谷 隆二

東洋大学総合情報学部・教授

ポストペタスケールシミュレーションのための
階層分割型数値解法ライブラリ開発

§ 1. 研究実施体制

(1) 「東洋大」グループ

- ① 研究代表者： 塩谷 隆二（東洋大学総合情報学部、教授）
- ② 研究項目
 - ・ 階層分割型数値計算ライブラリの基礎研究並びに設計とその応用

(2) 「九大」グループ

- ① 主たる共同研究者： 荻野 正雄（九州大学大学院工学研究院、助教（H23.10.31 まで））
- ② 研究項目
 - ・ 階層分割型反復法アルゴリズムの基礎開発

(3) 「名大」グループ

- ① 主たる共同研究者： 荻野 正雄（名古屋大学情報基盤センター、准教授（H23.11.1 から））
- ② 研究項目
 - ・ 階層分割型ソルバーライブラリの基礎研究とその応用

(4) 「東大」グループ

- ① 主たる共同研究者： 越塚 誠一（東京大学大学院工学系研究科、教授）
- ② 研究項目
 - ・ 階層分割型入出力ライブラリ並びに連続体力学向け問題領域専用言語の基礎研究とその応用

§ 2. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(3-1)に対応する)

(A) DDM 入出力ライブラリ

演算処理装置や記憶装置の階層構造に適した負荷分散機能として、非構造格子向けの多階層領域分割アルゴリズムを開発した。特に本年は、MPI-OpenMP ハイブリッド並列処理に適した多階層領域分割機能の開発を行った。更に、大規模解析支援機能として、四面体ソリッド要素と六面体ソリッド要素の一樣メッシュ細分割の機能の開発を行った。本ライブラリを用いることで、東大T2Kの1,024計算ノードを用いて13億要素数の非構造四面体メッシュを280秒で生成することができ、京コンピュータの3,072計算ノードを用いて28億要素数の非構造四面体メッシュを約12分で生成することに成功した。

また、粒子法向けライブラリの重要性が高まっていることから、当初計画を1年前倒して、メッシュフリー向け階層型領域分割アルゴリズムとメッシュフリー向け標準I/Oライブラリを開発を行った。特に本年は粒子法向けの機能開発を行った。メッシュフリー向け階層型領域分割アルゴリズムでは、粒子が計算ノードに均等に割り当てられ、隣接間通信の少ない領域分割が行われるものである(図1)。メッシュフリー向け標準I/Oライブラリでは、大規模有限要素法解析の実績があり、ソースプログラムが公開されているADVENTURE I/Oライブラリをベースに開発を行い、粒子法への対応を行った。粒子法で用いられる物理量のラベルを定義し、本ライブラリを用いることで解析プログラムから接続するプレポストまでの統一的な開発が可能となった。

本年度の成果を元に、来年度は「DDM 入出力ライブラリ」の50%以上の機能開発を目指す。

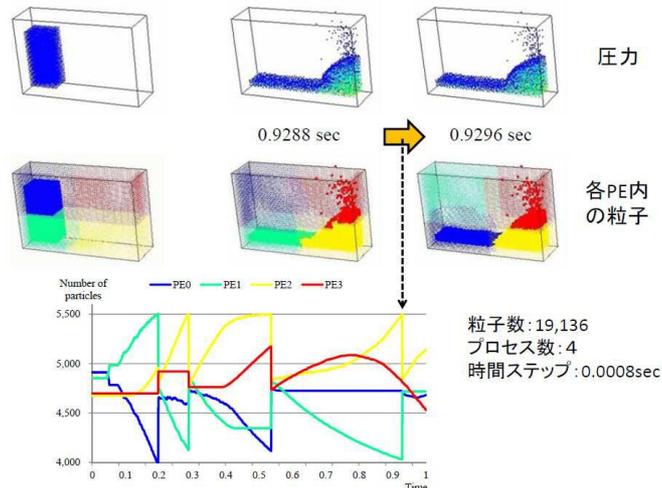


図1 メッシュフリー向け領域分割ライブラリによる動的負荷分散例

(B) DDM ソルバーライブラリ

非構造格子向けDDM反復法ライブラリとして、多階層領域分割情報を利用したDDM反復アルゴリズムの開発を行った。特に本年は、MPI-OpenMP ハイブリッド処理に適した2階層領域分割

に基づく DDM 共役勾配法の開発を行った。線形代数演算のアプリ特化型最適化として、有限要素法における節点自由度数に応じた手動ループ展開や SIMD 向け最適化を行った。本ライブラリを用いることで、非構造格子による大規模有限要素解析が京コンピュータにおいて 10%以上のピーク性能比を得ることに成功した。また、目標アプリの 1 つである磁場解析向けに、非正則行列及び複素対称行列向け DDM 反復法アルゴリズムの開発を行った。本ライブラリを用いることで、解析規模に対してロバストな収束性を得ることが可能となった。来年度は、開発ライブラリを用いた外部ユーザによる実装評価を行っていく。

また、多階層前処理技術として、有限要素法向け BDD 並びに BDDC 前処理アルゴリズムの開発を行った。既に実績がある構造解析向け BDD 前処理については超並列計算環境向け実装技術の開発を行い、京コンピュータの 256 計算ノードでウィークスケーリング 89%、ストロングスケーリング 92%の並列効率が得られた。来年度は、京コンピュータの大規模ノードに加えて東大 FX10 と東工大 Tsubame2 における性能評価を行う。構造解析向け BDDC 前処理アルゴリズムを開発し、試解析を行い、理論に基づく性能が得られた。来年度はポアソン・磁場解析向けアルゴリズム開発を行う。また、3 次元静磁場解析向け BDD アルゴリズムの検討を行った¹⁾。来年度は試解析を行う。

本年度の成果を元に、来年度は「DDM ソルバーライブラリ」の 50%以上の機能開発を目指す。

(C) 連続体力学向け DSL

連続体力学向け DSL として、基本機能であるトランスレータ開発を行った。本年は特に、DSL の仕様・文法について詳細な検討を行った。LaTeX および独自のテキストベース DSL の二種類に対して、特に有限要素解析向け応用を意図し、言語仕様や LaTeX マクロを定めた。次に、アクセラレータ対応コード自動生成として、SIMD・GPU 向けに性能最適化ライブラリ開発を行った。本年は特に、スカラー型プロセッサでの SIMD 命令利用に重点を置き、テンソル・行列演算向けライブラリのプロトタイプ実装を行った。アイソパラメトリック要素の要素剛性行列作成コードのベンチマークにおいて、インテル社 Sandy Bridge において理論ピーク性能比の 40~70%、京コンピュータ(富士通 SPARC64 VIIIfx)において同 20~25%程度を、それぞれ達成した。また、外部ユーザによる開発中ライブラリの性能評価を並行して行うことで、開発効率化並びにユーザビリティ改善を行っている。

本年の成果を元に、来年度は「連続体力学向け DSL」の 30%以上の機能開発を目指す。

(D) 連続体力学系シミュレータ

粒子法向けライブラリは実問題解析に適用可能かが重要な評価指針であるため、当初計画を前倒して、開発中の粒子法向けライブラリを用いたシミュレータ実装並び評価を並行して実施することとした。粒子法向けライブラリでは、関数ポインタを用いて利用者が粒子の物理量計算の関数を定義することができるので、解きたい物理モデルを自由に組み込むことができる仕様となっている。

東大 T2K を用いて、粒子法向けライブラリを用いたシミュレータの並列性能を測定したところ、64 計算ノード 1,800 万粒子から 1,024 計算ノード 2.6 億粒子へのウィークスケーリング性能評価で 94%の並列効率が得られ、6,900 万粒子の 64 計算ノードから 1,024 計算ノードのストロングスケーリング性能評価において 93%の並列効率が得られた。来年度は、東大 FX10 と東工大 TSUBAME2 への実装と性能評価を予定している。

また、プロメテック社に商用コード ParticleWorks を用いた GPU クラスタ上での試解析を外注した。来年度はその試験結果を元に、開発ライブラリの性能評価と検証に用いる予定である。

本年度はモデル作成や条件設定などにおいて仮想的なシミュレーションを行ったが、来年度は実問題解析を対象にシミュレータ実装と性能評価を行う予定である。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

1. Hiroshi Kanayama, Masao Ogino, Shin-ichiro Sugimoto, Qinghe Yao, and Endah Komalasari, “A Preconditioner Construction for Domain Decomposition Method for Large Scale 3D Magnetostatic Problems”, Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol.60, pp.381-390, 2012 (DOI: 10.1109/ICMSAO.2011.5775641)
2. 崎原康平, 松原仁, 江戸孝昭, 原久夫, 矢川元基, 弾性固体問題における付帯条件付き多次元型移動最小自乗法, 日本機械学会論文集 (A), Vol.78, pp.142-151, 2012 (DOI: 10.1299/kikaia.78.142)

(3-2) 知財出願

- ① 平成 23 年度特許出願件数(国内 0 件)
- ② CREST 研究期間累積件数(国内 0 件)