

「大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの開発」

東京大学大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻 西田 晃

1. 研究概要

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、研究を進めてきた。

本研究では、まず国内における科学技術ソフトウェアの開発の現状と問題点を調べるため、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の調査研究を初年度、第二年度に集中的に実施するとともに、これらの調査結果とグループ内での検討をもとに、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てきた。また、実際の研究開発においては、評価用ハードウェアの選定においても詳細な検討が必要である。本研究では、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、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きた。今後も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する予定である。

一方、ソフトウェアの開発においては、十分な人的資源を得ることが必要不可欠である。本研究では、線形計算、高速関数変換、実装手法の三分野について専任の研究員を得て研究開発を進めており、分野によって最適と思われる外部の協力を得つつ、順調に進展している。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した段階である。

本研究で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、ベクトル、行列などの基本的な要素から構成されるオブジェクトに対する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構築するとともに、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ている。さらには、これらのライブラリへのインタフェースとして、新たなスクリプト言語を開発、実装しており、現時点までの研究成果は十分満足できるものであると考えている。今後はこれらの機能をより充実させるとともに、より完成度の高いライブラリを目指していく必要がある。また、本研究の成果については、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いる。今後は特に応用ソフトウェア開発プロジェクトとの共同研究を推進し、大規模実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していく必要があると考えている。

2. 研究実施内容（研究目的、方法、進捗状況、今後の予定などを記述）

①研究目的

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ものと予想される。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の三分野を中心に、研究を進めてきた。

②方法

本研究では、まず国内における科学技術ソフトウェアの開発の現状と問題点を調べるため、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の調査研究を初年度、第二年度に集中的に実施するとともに、これらの調査結果とグループ内での検討をもとに、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てきた。また、実際の研究開発においては、評価用ハードウェアの選定においても詳細な検討が必要である。本研究では、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、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きた。今後も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する予定である。

一方、ソフトウェアの開発においては、十分な人的資源を得ることが必要不可欠である。本研究では、線形計算、高速関数変換、実装手法の三分野について専任の研究者を得て研究開発を進めており、分野によって最適と思われる外部の協力を得つつ、順調に進展している。

③進捗状況

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。計算機技術に関する調査研究は、SC, ISCA, Hot Chips, ISSCC などを対象に適宜実施しており、今後の傾向としては、消費電力を最適化しつつ、ネットワークの高性能化と高並列化、計算の局所化により、計算能力の向上を目指す方向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 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、多様なアプリケーションで性能評価を実施している。また、再構成可能な計算機アーキテクチャによる局所的な計算の高速化技術の進展を考慮し、これらの技術の利用可能性についても検討を進めている。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、IPDPS, OOPSLA, Global Grid Forum などでの調査結果を踏まえ、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、研究を進めてきた。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 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。なお、平成 16 年 2 月には Eleventh SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing において小シンポジウム Portable Parallel Numerical Libraries for Various Types of Architectures を開催し、ライブラリの可搬性に関して議論を行った。

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なうとともに、複数の国際会議でその成果を発表している。

反復解法に関する研究

反復解法研究グループでは、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、多くの国際・国内会議で成果を発表した。なお、本グループは当初は固有値解法研究グループ、連立一次方程式解法グループとしてスタートし、スケーラビリティの観点から前者は共役勾配法系の固有値解法、後者は共役勾配法、共役残差法系の線形反復解法を中心に研究を進め、これらの拡張について多数の提案、発表を行った。特に、代数的マルチグリッド前処理法とその並列実装手法に関しては合同で研究を進め、大規模計算機環境上での有効性を実証した。専任研究員の参加に伴い、両グループは平成 17 年度から統合し、実装に重点を置くとともに、反復解法全般全般に関する研究を行なっている。

現在までの理論的な研究成果については以下を挙げることができる。

A) 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。これらの計算において、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。このような計算においては、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

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

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、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、問題行列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。本研究においてもより詳細な研究を行っていく予定である。

これらのアルゴリズムに関しては、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) において C 言語による実装を進めており、既に MPI 版、OpenMP 版を含む初期バージョンを公開している。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。なお、平成 17 年 10 月には、IBM T. J. Watson 研究所の協力を得て、Blue Gene システム 16384 ノードを用いた MPI 版 Lis の動作検証に成功している。

高速関数変換に関する研究

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っている。

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マルチメディア関連の圧縮/伸長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と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。

一方、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。

これらの成果は論文として発表しており、また FFT ライブラリについては、スーパースカラ型のプロセッサを対象に自動最適化機能を備えたソフトウェアを公開している。

④今後の見通し

本研究で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、ベクトル、行列などの基本的な要素から構成されるオブジェクトに対する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構築するとともに、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ている。さらには、これらのライブラリへのインタフェースとして、新たなスクリプト言語を開発、実装しており、現時点までの研究成果は十分満足できるものであると考えている。今後はこれらの機能をより充実させるとともに、より完成度の高いライブラリを目指していく必要がある。また、本研究の成果については、既に初期リリースを行っており、開発段階においても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いる。今後は特に応用ソフトウェア開発プロジェクトとの共同研究を推進し、大規模実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していく必要があると考えている。

3. 研究実施体制

実装手法研究グループ

1 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）

2 研究項目：

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。本グループでは、広く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を行なうとともに、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する。

反復解法研究グループ

1 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）

2 研究項目：

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計算が必要となることが多くなっている。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う。

高速関数変換研究グループ

1 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）

2 研究項目：

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FFT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を得つつ、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、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う。

4. 主な研究成果

(1) 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, 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), to appear.

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), to appear.

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), to appear.

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, to appear.

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, to appear.

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), to appear.

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.

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

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), November 3-6, 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, Guiling.
- 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, Guiling.
- 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.