

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 16 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009～2013

課題番号：21500038

研究課題名(和文)並列分散計算環境における連成シミュレーション用ミドルウェアの開発と応用

研究課題名(英文)Middleware of coupled simulations for distributed parallel environments

研究代表者

青柳 睦(AOYAGI, Mutsumi)

九州大学・情報基盤研究開発センター・教授

研究者番号：00260026

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円、(間接経費) 1,050,000円

研究成果の概要(和文)：異種プログラム間の連成計算を実行する際、データの透過性を保持したまま、データ移動、データ変換を支援するMediator ver2(Med2)を開発した。Med2ではFDM、FEM、粒子等のシミュレーションで用いられる異なった離散表現に対し、それぞれの表現間の相関を有効に活用し、物理量の対応付を行うほか、物理量の意味変換の機能を持つ。オリジナルプログラムから連成プログラムへ容易に移行できるように、Med2ではSPMDおよびMaster-Workerアプリケーションに対応したAPIを提供している。簡単な粒子-格子計算およびOpenFMOの連成計算に適用して、Med2の機能と性能を検証した。

研究成果の概要(英文)：A middleware system called a Mediator ver.2(Med2) has been developed which provides high-level transparency in transferring and transforming data between heterogeneous application components. The Med2 focuses on a data-handling specification that correlates different discrete points in FDM, FEM, and particle simulations. It supports a variety of techniques for semantically transforming the physical values associated with the correlated points.

To facilitate easier usage and minimize customization of original programs, the Med2 provides two types of API, which (1) construct association between Med2 processes and application processes in SPMD and Master-Worker, (2) register different kinds of discrete points, search the correlated discrete points and determine processes with which communication is required. The prototype system has been applied to particle-mesh coupled simulation and OpenFMO program.

研究分野：計算科学

科研費の分科・細目：高性能計算

キーワード：連成計算 ミドルウェア 粒子計算 分子軌道法

1. 研究開始当初の背景

計算科学シミュレーション対象は、系を構成する要素として均一な部分系だけではなく、境界や複数の異なる部分系の集団から構成される複雑系であり、全系を総括的に取り扱う手法として、例えば分子動力学とモンテカルロ法、構造力学と流体力学など、空間・時間スケールの異なる複数のシミュレーション手法を有機的に結合した「連成シミュレーション」の重要性が急速に高まっている。

これらの連成シミュレーションにおいて研究開始当初、共通に顕在化している問題を調査したところ以下の3点が明確になった。

- (a) 従来の連成手法では、アプリケーションコード内においてデータ交換とデータ変換が渾然一体となったプログラムコードが開発されてきたため、アプリケーション自身に関するコード改良・デバッグ・機能追加等の観点で、メンテナンス性が著しく低下する傾向にある。
- (b) 固有のアプリケーション・ペア(例えば、流体計算と構造解析のみ)に特化された連成計算の利用は稀であり、例えば同一の流体計算コードを粒子シミュレーションとカップルさせる場合、流体と電磁気コードの連成を必要とする計算科学問題、等の多対多の疎結合が必要とされるが、従来の手法ではレーシジョンコード自体の独立性を最大限に保った疎結合プログラミングが非常に困難である。
- (c) 空間・時間スケールの異なる複数のシミュレーション手法を結合する手段は一意的ではない場合が多く、研究の進展により新たな数理モデルを導入する際、「シミュレーション・アプリケーション相互の間のデータ変換」をアプリケーション・プログラム内部に(データ転送と渾然一体に)コーディングされるプログラミングスタイルが多いため、新たな数理モデルに基づく「データ変換」の導入を困難にしている。

2. 研究の目的

上述の「研究の背景」で列記した問題点を克服するため、本研究では、MPI等のメッセージ交換型の通信ライブラリの上位に位置するミドルウェア層として「シミュレーション・アプリケーション相互の間のデータ変換機能」を有するレイヤを構築し、従来アプリケーションコード内で顕にコーディングされてきたデータ転送と変換が渾然一体となったプログラミング環境を改め、シミュレーションコード自体の独立性・保守性を最大限に保ったまま、きわめて可塑性に富んだ連成シミュレーションコード開発環境をコード開発者に提供することを目的とする。

更に、開発したミドルウェアの機能実証および性能試験として、研究代表者がこれまで

に開発した大規模な高精度分子シミュレーション計算ソフトウェアおよび流体と音場の連成計算コードをこの連成プラットフォームに展開し、複数のシミュレーションエンジンを高度に連成させたシミュレーションを実行することにより、本研究により開発される連成シミュレーションミドルウェアの有用性を示すことが第二の目的である。

3. 研究の方法

本研究では粒子モデルと連続体モデルなど、離散化手法の異なる連成計算において、境界面のデータを交換する際に必須となる数値補間技術や、波数空間と実空間の表現変換、各種の統計平均手法といった「アプリケーション間で同一の“意味”を持つ物理データのセマンティック変換」をアプリケーションエンジン本体に内蔵するのではなく、アプリケーション間を繋ぐ通信ミドルウェアの上位階層に位置付けたミドルウェアとする部分に大きな特徴がある(図-1(a),(b))。更に、セマンティック変換をプラグインとして実装し、そのプロトコルを公開することにより、今後必要となる中間物理量の変換機能をユーザが新たな数理モデルから容易に機能追加できる点で、非常にオープンな仕様に基づいた実装を目指した。

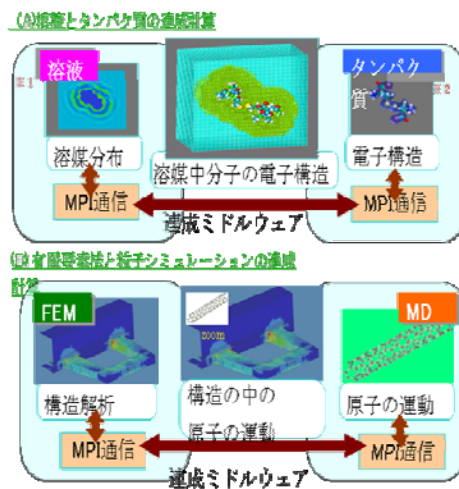


図 1. 離散化手法の異なるアプリ間の連成計算の例, (a) 溶液計算-分子構造計算, (b) 有限要素-分子動力学計算

離散化手法が異なるアプリケーション間における境界面のデータ変換機能としては、球内相関、最近接格子およびそれらの重み付平均を採用し、物理量のデータ変換の機能としては、FFTによる波数-実変換、時間領域の平均操作を基本機能とし、他の変換機能をアドオンという形で追加可能なプログラム実装とした(コード名: Mediator2)。

研究前半にはこれらの機能を有するミドルウェアをMPIの上位階層に構築し、研究後半においてはファイル交換による連成計算の

アプリ・ペアにおいても同様の機能を提供する必要が生じたため、同期型ファイル転送ライブラリ (Strage Based Communication, コード名: SBC2) として通信層を MPI 以外にも拡張した。

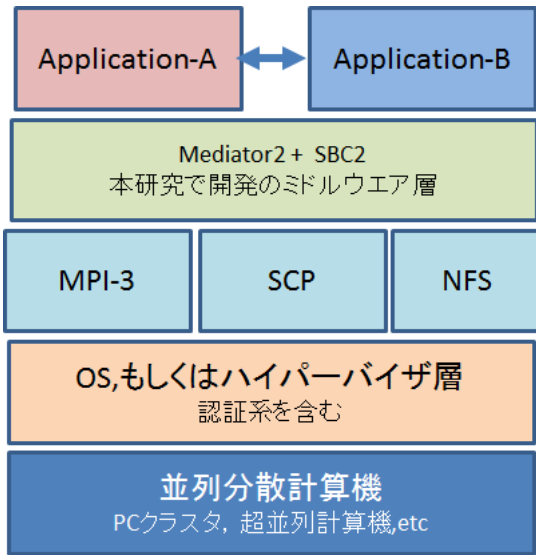


図 2. 連成ミドルウェアとソフトウェア階層

4. 研究成果

(1) 概要

研究期間の前半では、離散化手法が異なるアプリケーション間における境界面のデータ変換機能を有し、データ転送を MPI または上記の SBC により行うミドルウェアを作成し、簡単な粒子シミュレーションと格子シミュレーションを例に挙げ、ミドルウェアの機能検証を行うと同時に、連成前の状態からそれぞれのプログラムの変更箇所が明確になるようにサンプルプログラムとして公開した。

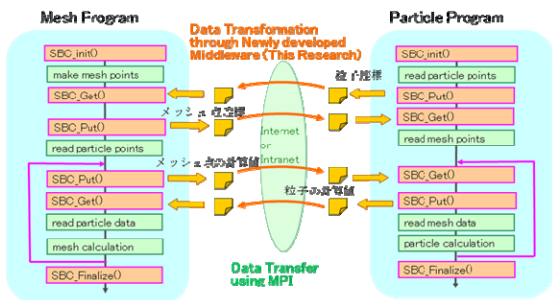


図 3. 連成ミドルウェアによる Mesh-Particle プログラムの結合例

まず FDM を例に格子法のプログラム構造と今回作成した SBC 関数の挿入箇所をデータの送受信を明記して示す。(図 4)

赤文字で記した行が連成前のプログラムに新しく挿入した部分であり、SBC を DEX に変更

するだけで MPI 通信によるデータ転送を行うことも可能である。新に挿入したそれぞれの関数について、その役割を以下にまとめた。

SBC_Init: SBC の API 内部の初期処理を行う。

SBC_Get: ファイルの受信, この例では粒子プログラムから粒子の座標を受信している。

SBC_Put: ファイルの送信, この例では粒子プログラムへ格子情報を送信している。

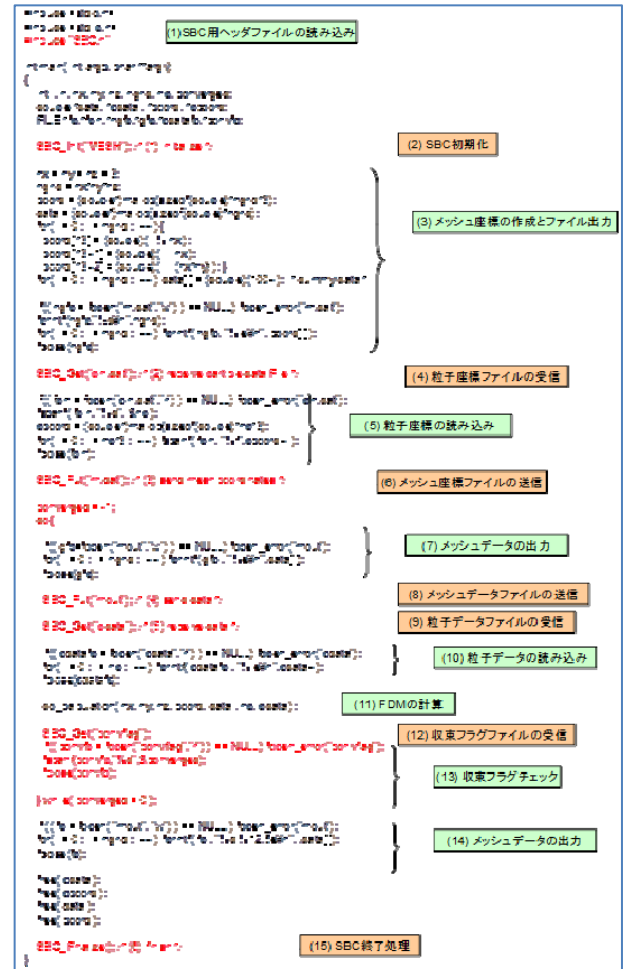


図 4. 連成計算用に変更した FDM 計算コードの例

SBC_Finalize: SBC 関数の終了処理を行っている。

以上のようにプログラム開発者が、アプリケーションプログラムを連成コードとして変更する際、データ交換とデータ変換を明示的に分離した形で記述できる。

(2) 異種データの変換機能の実装

まずデータ交換が行われる異種離散点の位置関係を表す相関関係として、dex_register_correlation という API 関数を作成した。これを用いて、矩形内相関, 球内

相関、第一近接、最近接という代表的な4種類の相関関係を指定できる。以下では、離散点上のデータが変換される側を変換元、変換後のデータを離散点上のデータに設定する側を変換先と呼ぶことにする。次に `dex_register_quantum` というAPI関数を作成し、これを用いて、複数シミュレーションで設定した異種離散点の情報(例えば、粒子法、有限差分法や有限要素法などの離散点の形式、離散点の空間次元、離散点の数、有限要素法の場合は要素数と要素の属性数、離散点のインデックス、離散点の座標、有限要素法の場合は要素のインデックス、面要素を構成する離散点のインデックス、離散点の属性)を登録する仕様とした。

相関関係の指定、異種離散点の登録と相関探索により得られた相関表をもとに、変換元の離散点上のデータから変換先の離散点上のデータに変換を行う機能が必要であり、これを `dex_vsend`, `dex_vreceive` というAPI関数を用いて実装した。このとき、同一の物理量でありながら、変換元の物理データの表現から、変換先の物理データの表現に変換するプロセスが必要であり、データのセマンティック変換と呼ぶことにした。相関関係を有する離散点上のデータ変換として、ビルドイン関数、または、ユーザ定義による変換関数を用いることが可能である。以下では、相関関係に対応したビルドイン関数とユーザ定義による変換関数についてまとめた。

・矩形領域の重み付けデータ変換

粒子点とその粒子点の矩形領域内のメッシュ点において、メッシュ点上の空間分布に対する体積和が粒子上の数になる保存モデルを記述したデータ変換であり、粒子点の矩形領域とメッシュ点の占有領域の重なった領域の体積を用いて、メッシュ点上のデータに重み付けを行う。矩形領域内に存在する全メッシュ点上の重み付けたデータの総和を求め、変換先の粒子上のデータとする。このタイプの変換は粒子-等間隔 FDM 連成計算等で特に重要である。

・球内相関の重み付けデータ変換

粒子点とその粒子点を中心とする半径 r の球内のメッシュ点において、メッシュ点上の空間分布に対する体積和が、粒子上の物理量になる保存モデルを記述するための変換であり、粒子-FEM 連成計算等で特に重要である。

・ユーザ定義によるデータ変換

上記に加え、ユーザの定義した変換関数をシェアドライブラリとして登録し、Mediator2 実行時に動的にリンクしてデータ変換を行うため、`dex_upload` 関数を実装した。

(3) 動作検証に必要なログ情報

`DEX_LOGOPTION` という環境変数に A-Z 等のア

ルファベットを列記することで、以下の内容のログ情報を取得することが可能になる。

- A: API 呼び出しの開始と終了
- B: API 呼び出しに対する Mediator2 の処理の開始と終了ログ
- C: Mediator2 の特定 API のログ情報
- D: 離散点の概略情報
- E: 離散点の詳細情報
- F: 相関関数のログ情報
- J: プロセス管理情報
- S: SBC の処理シーケンス情報

(4) OpenFM0 計算による実証実験

我々の研究室ではオープンな仕様に基づく FM0 プログラムを開発しており(開発代表: 稲富博士)、本プログラムコードは計算負荷の重い2電子積分の並列性および各フラグメントを分散並列する際の2階層の並列性を持つ。これまでに、上位階層の並列化をRPCにより実現した研究[6]、京コンピュータ上に移植し性能評価を行った成果がある[4]。

今回、各フラグメントを分散並列するプロセスを、各プロセス間での連成計算として扱い、Mediator2 により中間物理量を相互に交換するプログラムモデルを構築し、連成ミドルウェアの適用範囲の検証を行った。



図5. OpenFM0 コードの実行プロセス

開発した連成ミドルウェアは SPMD コードは勿論、OpenFM0 のように Master-Worker 型のプログラムにおいても、Worker 間における物理量の交換を実行することが可能であることを示した。また分子科学的な成果としては、Sp2 混成軌道による結合を含む大型の化合物に OpenFM0 を適用し、全エネルギーを RHF 法と比較し、さらに計算時間を評価した。計算対象は $C_{14}H_{12}$ で表される不飽和炭化水素であり側鎖構造を持たない直鎖状分子、およびベンゼン環が直鎖状に結合したものとした(分子に含まれる炭素原子数 n_C 、分割数 N_F 、フラグメント内炭素原子数 n_{FC} 、およびフラグメントへの分割パターン、フラグメント電子密度、これらすべての値はミドルウェアを通じてデータ交換を行っている。

適応例として4ノードのPCクラスタ(Xeon E5-2630, 主記憶 128GB, 10Gb Ether) 上で実行した $C_{512}H_{514}$ におけるフラグメントサイズの変化に対する RHF 法計算と FM0 法計算との全

エネルギー差とそれぞれの実行時間の関係を図6に示す. 1フラグメント中の炭素数32程度ではRHF法とのエネルギー差が0.5kcal/mol以下となり, OpenFMOによる2階層の並列計算が, 単純な1階層のRHF並列計算の実行時間よりも短く, 性能と計算精度を考える際, 1フラグメントの分子サイズの選択が重要であることが解った.

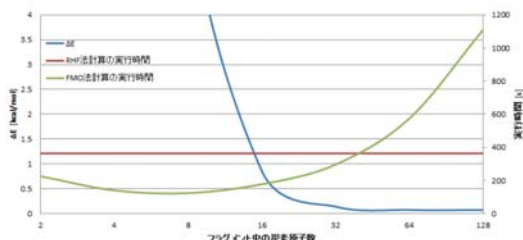


図6. フラグメントサイズの変化に対するRHF法計算とFMO法計算との全エネルギー差とそれぞれの実行時間

以上より本研究成果をまとめると以下のようになる. (a)データ交換とデータ変換を分離した形でMPI(またはストレージ経由)によるデータ交換をコード中に記述することが可能であることが解った. (b)この際, 個々のオリジナルコードの変更部分を極力少なくするためのAPIを提示した.

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 6 件)

[1] Shirun HO and Mutsumi Aoyagi, "Molecular Cluster Assembly Method for Analysis of High-Dimensional Structures of p-Cresol Chains in Phenolic Polymers," *Macromolecular Theory and Simulations*, vol.22, pp.443-461, 2013.

[2] Masataka Miyamoto, Yasunori Ito, Takuya Iwasaki, Takahiro Akamura, Kin'ya Takahashi, Toshiya Takami, Taizo Kobayashi, Akira Nishida, and Mutsumi Aoyagi, "Numerical Study on Acoustic Oscillations of 2D and 3D Flue Organ Pipe Like Instruments with Compressible LES," *Acta Acustica united with Acustica*, vol. 99, pp.154-171, 2013.

[3] Takuya. Iwasaki,, Taizo Kobayashi, Kin'ya Takahashi, Toshiya Takami, Akira Nishida, and Mutsumi Aoyagi, "Numerical study on the function of tone holes of a recorder like instrument from the viewpoint of the aerodynamic sound theory," in *Proceedings of Meetings on Acoustics*, vol. 19,035024-1-7, 2013.

[4] 稲富 雄一, 眞木 淳, 本田 宏明, 高見

利也, 小林 泰三, 青柳 睦, 南 一生, "京コンピュータでの効率的な動作を目指した並列FMOプログラム OpenFMOの高性能化," *Journal of Computer Chemistry, Japan*, Vol.12, No.2, pp.145-155, 2013.

[5] Hideki Miwa, Ryutaro Susukita, Hidetomo Shibamura, Tomoya Hirao, Jun Maki, Makoto Yoshida, Takayuki Kando, Yuichiro Ajima, Ikuo Miyoshi, Toshiyuki Shimizu, Yuji Oinaga, Hisashige Ando, Yuichi Inadomi, Koji Inoue, Mutsumi Aoyagi, and Kazuaki Murakami, "NSIM: An Interconnection Network Simulator for Extreme-Scale Parallel Computers," *IEICE Transactions*. vol. 94, pp.2298-2308, 2011.

[6] Yuichi. Inadomi, Toshiya Takami, Jun Maki, Taizo Kobayashi, and Mutsumi Aoyagi, "RPC/MPI Hybrid Implementation of Open FMO-All Electron Calculations of a Ribosome," *Advances in Parallel Computing*, vol.19, pp.220-227, 2010.

[学会発表] (計 5 件)

[1] Kin'ya Takahashi¹, Takuya Iwasaki¹, Takahiro Akamura¹, Yuki Nagao, Ken'ichiro Nakano, Taizo Kobayashi, Toshiya Takami, Akira Nishida, and Mutsumi Aoyagi, Effective techniques and crucial problems of numerical study on flue instruments, *Proceedings of Meetings on Acoustics*, Volume 19, pp. 35021-35029 (June 2013).

[2] Kin'ya Takahashi, Masataka Miyamoto, Yasunori Ito, Toshiya Takami, Taizo Kobayashi, Akira Nishida, Mutsumi Aoyagi. Numerical study on air-reed instruments with LES, *ASME-JSME-KSME Fluids Engineering Conference 2011 (AJK2011)*; 01/2011.

[3] Yasunori Ito, Taizo Kobayashi, Kin'ya Takahashi, Toshiya Takami, Akira Nishida, Mutsumi Aoyagi. Reproduction of Transitions among Notes on an Air-reed Musical Instrument with Compressible LES Combined with Moving Boundary Technique, *Proceedings of Open Source CFD International Conference 2011*.

[4] M. Miyamoto, Y. Ito, K. Takahashi, T. Takami, T. Kobayashi, A. Nishida, M. Aoyagi, Applicability of compressible LES to reproduction of sound vibration of an air-reed instrument, *Proceedings of 20th International Symposium on Music Acoustics (ISMA2010)*.

[5] Y. Inadomi , T. Takami, J. Maki, T. Kobayashi, M. Aoyagi, "RPC/MPI Hybrid Implementation of OpenFMO", International Conference on Parallel Computing (ParCo09).

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

〔その他〕

ホームページ等

Server-500. cc. kyushu-u. ac. jp

6. 研究組織

(1) 研究代表者

青柳 睦 (AOYAGI, Mutsumi)

九州大学情報基盤研究開発センター・教授

研究者番号：00260026

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし