

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 27 日現在

機関番号：14301
 研究種目：挑戦的萌芽研究
 研究期間：2010～2012
 課題番号：22654056
 研究課題名（和文）デスクトップスーパーコンピュータのための地球流体数値ライブラリの構築
 研究課題名（英文）Development of a numerical library for geophysical fluid dynamics on desktop supercomputers
 研究代表者 石岡 圭一（ISHIOKA KEIICHI）
 京都大学・大学院理学研究科・准教授
 研究者番号：90292804

研究成果の概要（和文）：地球流体力学の研究に必要なとなる数値実験を，比較的安価に入手できる計算機環境上で効率的に実行できるようにすることを目的として，そのような環境で高速に動作する数値ライブラリを構築した．特に，球面スペクトル法で用いられる球面調和関数変換サブルーチン群について，GPGPU および最新の CPU 上の SIMD 機能（AVX 命令）に対応させた高速化を行った．さらに，開発した数値ライブラリをフリーソフトウェアとしてインターネット上で公開した．

研究成果の概要（英文）：In order to enable efficient numerical experiments that are necessary for research in geophysical fluid dynamics on relatively cheap computational platforms, a numerical library that provides a high performance on such platforms is developed. In particular, for subroutines that are used in the spherical spectral method, optimizations are done for GPGPU and SIMD functions (AVX instructions) on the newest CPUs. Furthermore, the developed numerical library is released on the Internet as a free software.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010 年度	1,300,000	0	1,300,000
2011 年度	700,000	210,000	910,000
2012 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	2,700,000	420,000	3,120,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：地球惑星科学・気象・海洋物理・陸水学

キーワード：地球流体力学，数値ライブラリ，スペクトル法，GPGPU，SIMD

1. 研究開始当初の背景

大気・海洋や地球内部のマンテル・核の流れの性質を探究する地球流体力学の分野の研究では，数値実験の役割が大きい．現象のメカニズムを追究するためにはモデル方程式および境界条件に合わせてプログラムを作成する必要がある．そのような目的に対して

は，ある特定の現象に特化した複雑なプログラムを改変するよりは，完成度の高いライブラリを部品として用いてそれを組み合わせる方が自由度も高く，全体像が見渡せるメリットがある．特定の目的に特化したプログラム，例えば全球大循環モデルやメソスケール気象モデルなど，については高度なものが開発されて公開されているものも多

い。しかし、地球流体力学分野においては、部品として使うための数値ライブラリの整備・公開についての取り組みが積極的には行われていなかった。

そのような状況認識から、研究代表者は1996年から、主に地球惑星流体分野の計算にスペクトル法を用いる場合に必要となる部品をまとめた数値ライブラリ ISPACK の開発を始め、フリーソフトとして公開している。この ISPACK は、日本の地球流体研究コミュニティで広く使われており、数値実験にそれを用いた論文も多く発表されている。さらに、2003-2004 年度においては、科学研究費補助金を得て、ISPACK のさらなる整備をただけでなく、ISPACK をベースとして、地球惑星流体の仮想実験室としてのプログラム集である SPMODEL を研究分担者・研究協力者の助力のもとに整備・公開した。

この段階である程度初期の目標は達成されたが、最近の計算機環境の変化が新たな問題となってきた。ISPACK の開発当初はベクトル計算機上で高速実行できることを目指して設計していたが、近年の PC クラスタ環境の発展に対応して、アセンブリ言語レベルのコーディングおよび並列化も行うことによって、これらの環境にも対応してきた。しかし、ごく最近、GPGPU の性能向上が著しく、これを搭載したデスクトップスーパーコンピュータが今後のハイパフォーマンスコンピューティングの主役となっていくような気配であった。そこで、そのような環境で高速実行できるように地球流体数値ライブラリを再整備することが課題となっていた。

2. 研究の目的

地球流体力学の研究の基盤となる汎用的な数値ライブラリを、特殊な目的なものに特化するのではなく、網羅的に整備する。また、デスクトップスーパーコンピュータ上で高速動作するライブラリを開発を目指す。このライブラリを開発することによって、これまでベクトル計算機のような高価な環境での計算が必要だった数値実験が安価な PC 上で十分に行えるようにする。このことにより、地球流体力学の研究コミュニティ全体の研究・教育活動に貢献しうるだけでなく、ライブラリのソースコードも公開することによって、高速実行可能なプログラムを如何に書くべきかというプログラム教育にも貢献することを目指す。

3. 研究の方法

数値ライブラリの開発にあたっては、全てのプログラムについて、GPGPU 上で最大限の性能を発揮できるようにコーディングを行う。さらに、GPGPU が無い環境でもユーザーがプログラム改変をせずに使えるようにするために、GPGPU に依存しないコードも並行して整備する。作成する数値ライブラリは、様々な領域のモデル方程式をスペクトル法で数値的に解くために必要となる変換ルーチン(波数空間 \leftrightarrow 物理空間)およびその補助ルーチン(微分演算その他)からなるルーチン群である。ルーチン群を整備すると同時に、その応用例としていくつか代表的な地球流体モデル方程式、例えば2次元であれば順圧過度方程式、浅水方程式、3次元であればブシネスク流体方程式など、を数値的に解くためのサンプルプログラムも整備する。なお、数値ライブラリは適当な開発の区切毎にインターネットで公開していく。

4. 研究成果

数値ライブラリの GPGPU 向け高速化としては、球面調和関数変換の中核部分であるルジャンドル陪関数変換の部分の CUDA 化を行い、CPU での FFT 計算の部分と合わせて sjpack-cuda というライブラリを作成した。これは、既に関連していた CPU での球面調和関数変換ライブラリ sjpack とほぼ互換的に使えるライブラリで、利用者が CUDA 開発環境に関する知識が無くとも利用できるように設計されている。sjpack-cuda では、GPGPU を利用することにより、最速の CPU 上 1 コアでの sjpack の計算に比べて、5 倍程度の高速化を達成している。

具体的には以下のような実装になっている。GPGPU としては、Nvidia 社製の C2050 というものを導入した。これは理論ピーク性能として、倍精度計算で 515GFlops の能力を持つ GPGPU である。この GPGPU は、32 個の SP(ストリーミングプロセッサ)の集合体が 1 つの SM(ストリーミングマルチプロセッサ)を構成し、その SM が 14 個あるという構成になっている。すなわち、合計 448 個の SP があり、これらを並列動作させることによって高い理論ピーク性能を実現している。ルジャンドル陪関数変換においてこれら SP を並列動作させるために、CUDA プログラミングモデルにおいて、ブロック(これは各 SM 分割される)をルジャンドル陪関数の帯状波数方向に、各ブロック内のスレッド(これは各 SM 内の SP で計算される)を緯度方向の計算に割り当てている。これによって、球面調和関

数変換の切断波数がある程度より大きい場合については、合計 448 個の SP での計算が遅延などを十分に隠蔽した上で効率的に行われる。また、GPGPU 計算において、計算の律速となるのは、GPGPU と CPU とのデータ転送であるため、変換に必要なデータのうち、複数回の変換で再利用できるデータについては、最初に GPGPU にロードして使い回すようにすることによって、可能な限りデータ転送のコストを抑制している。この実装によって、球面調和関数全体(逆変換および正変換)で、切断波数 T682 という高解像度設定において、21.8GFlops の計算効率を得た。これは、同時期に発表された CPU(Intel Xeon X5670) の 1 コアあたりでの効率である 4GFlops に比べて 5 倍程度の高速化になっている。ただし、この 21.8GFlops という数字は理論ピーク性能に比べて 1/20 以下である。これについては、どうしても CPU ⇄ GPGPU 間のデータ転送のコストがかかることと、C2050 という GPGPU 自体の問題との両方の原因がある。この点について、原因究明までは行えたが、それを受けてのさらなる性能向上までは行えなかった。ただし、1 枚の GPGPU によって最新の CPU の 5 倍の高速化を達成した点、およびこの実装がこれまでの ISPACK のインターフェースと互換性を持っていることによって、実際に球面調和関数変換を使うユーザーに利用してもらえただけでなく、研究コミュニティに CUDA の実装例を提供できたことは十分な貢献であると考えている。

さらに、最新の CPU の SIMD 機能に対応した高速化としては、Intel が Sandy Bridge という新しいアーキテクチャの CPU を発表したことに伴って、その環境で高速動作する球面調和関数変換数値ライブラリの開発を行った。この Sandy Bridge というアーキテクチャにおいては、AVX(Advanced Vector eXtensions)という新しい命令セットが使える(これまでのアーキテクチャでは 2 個)。球面調和関数変換の中核部分であるルジャンドル陪関数変換にこの AVX 命令を用いることにより、それまで開発していたライブラリに比べて 1.3 倍速程度の高速化に成功した。

具体的には、球面調和関数変換の中のルジャンドル陪関数変換において、緯度方向のループを回す部分があるが、そこをアセンブリ言語で記述することによって、4 つの緯度をまとめて AVX 命令で処理するようにして高速化を行った。

以上の GPGPU および最新の CPU に対応させた数値ライブラリおよび、それらを用いて実

際の地球流体数値実験を行うためのサンプルプログラム等とともにコードを整理し、英語によるインストールガイドなども新たに加えて ispack-1.0.0 としてインターネット上で公開した。

以上の開発の経緯などについて、学会発表(1)~(4)として発表している。

さらに、数値ライブラリの開発と並行して、スペクトル変換の数値ライブラリの応用として、密度成層流体中で流れが地形を越える際に発生する波(山岳波)をスペクトル法で比較的容易に計算するための新しい手法の開発を行った。これは、代用電荷法と呼ばれる偏微分方程式の計算手法のアイデアを応用したもので、既存の手法に比べて実装が容易であり、山岳波の数値実験を比較的 low コストで行うことを可能にするものである。この手法については、学会発表(5)として発表している。

また、本研究で開発されたライブラリを応用した研究として、ジェット的不安定からの慣性重力波放射に関する研究、回転軸が傾いた系におけるシア流と対流との相互作用の研究、エクマン境界層の安定性に関する研究、についてもそれぞれ推進し、雑誌論文(1)~(3)として発表した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

(1) K. Hibino, H. Ishikawa, and K. Ishioka,
Effect of a Capping Inversion on the Stability of an Ekman Boundary Layer,
Journal of the Meteorological Society of Japan, 査読有, vol.90, 2012, 311--319,
DOI:10.2151/jmsj.2012-210

(2) N. Saito and K. Ishioka,
Interaction between thermal convection and mean flow in a rotating system with a tilted axis,
Fluid Dyn. Res., 査読有, vol.43, 2011, 065503,
DOI:10.1088/0169-5983/43/6/065503

(3) M. Harada and K. Ishioka,
Inertia-Gravity Wave Radiation from an Unstable Bickley Jet in Rotating Two-Layer Shallow Water,

SOLA, 査読有, vol.7, 2011, 113--116,
DOI:10.2151/sola.2011-029

[学会発表] (計 5 件)

(1) 石岡圭一,
無限領域のスペクトル法を用いた山岳波の
安直計算について,
GFD セミナー2012,
2012 年 8 月 20 日,
北海道千歳市

(2) K. Ishioka,
Development of a spherical harmonics
transform library for several
architectures,
Connections between Rotating, Stratified
Turbulence and Climate: Theory,
Observations, Experiments, and Models,
2012 年 5 月 17 日,
コロラド州ボルダー, 米国

(3) K. Ishioka,
Development of a spherical harmonics
transform library for several
architectures,
2nd AICS International Symposium,
2012 年 3 月 1 日,
兵庫県神戸市

(4) 石岡圭一,
SJPACK の AVX 利用について
GFD セミナー2011,
2011 年 8 月 21 日,
北海道千歳市

(5) 石岡圭一,
ISPACK の GPGPU 利用の話,
地球流体データ解析・数値計算ワークショップ
2011 年 3 月 8 日,
東京都文京区

[その他]

ISPACK のホームページ:
<http://www.gfd-dennou.org/arch/ispack/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者
石岡 圭一 (ISHIOKA KEIICHI)
京都大学・大学院理学研究科・准教授
研究者番号: 90292804