

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2008～2010

課題番号：2030011

研究課題名（和文）並列化技法ライブラリとその構築技術

研究課題名（英文）Parallelization Methodology Library and Its Framework Technology

研究代表者

中島 浩 (NAKASHIMA HIROSHI)

京都大学・学術情報メディアセンター・教授

研究者番号：10243057

研究成果の概要（和文）：並列計算は大規模シミュレーションに不可欠な手段であるが、30年以上にわたる研究開発にも関わらず、並列プログラミングの生産性は依然として低い水準にとどまっている。本研究は生産性向上の鍵として、並列化の手法・技法をライブラリとして提供すると同時に、ライブラリを応用プログラムに適合する形で構築する技術の確立を目的として実施した。その結果、粒子シミュレーションのための負荷分散技法 OhHelp、疎行列係数線型方程式の ICCG 法・マルチグリッド法によるソルバーなどのライブラリ化を、さまざまな応用に適用可能な形で実現した。

研究成果の概要（英文）：Though parallel computing is the indispensable means for large scale simulations, the effort over 30 years to improve the programming productivity has not yet given us big success. For improving the productivity, this research aimed at providing parallelization techniques and methodologies in the form of library and establishing the technology to build the library applicable to various applications. The deliverables of the research includes libraries of load balancing algorithm OhHelp for particle simulations and of linear solvers using ICCG and Multi-Grid methods.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	5,200,000	1,560,000	6,760,000
2009年度	4,700,000	1,410,000	6,110,000
2010年度	4,800,000	1,440,000	6,240,000
総計	14,700,000	4,410,000	19,110,000

研究分野：計算機工学

科研費の分科・細目：情報学・ソフトウェア

キーワード：並列処理・分散処理、並列化ライブラリ

1. 研究開始当初の背景

大規模計算、特に数値シミュレーションなどの科学技術計算においては、並列計算は必要不可欠な手段となっている。しかし、四半世紀以上にわたって多種多様な研究・開発が続けられてきたにも関わらず、並列プログラミングは依然として容易な作業ではなく、特に計算科学分野の研究者・技術者にとっては大きな障害となっている。

また近年の並列システムは、従来のように

プロセッサの集合体という単純なものではなく、複数コアからなるプロセッサ（ソケット）、複数プロセッサからなる（しばしば階層化された）共有メモリノード、複数ノードを（しばしば階層化された）ネットワークで結合したシステム、といったように多層化された構成が一般的となっている。このような多重階層システムでの効果的な並列計算のためには、階層ごとに最適な計算パラダイムや並列化技法を用いる必要があるが、これが

並列プログラミングの新たな障害となっている。近い将来に出現する高性能並列システムは、このような多重階層に加えて総コア数が10万~100万のスケールを持ち、効果的な並列プログラミングがさらに難しい環境となると予想される。

一方、並列プログラミングを支援する従来の枠組みの中で特に重要なものの一つに、並列化ライブラリがある。しかし従来の並列化ライブラリは、MPIなどのように並列計算機構を提供するのみで並列化自体はプログラマに委ねられているもの、あるいは数値計算ライブラリのように並列プログラム中の一部分のみが対象であるものが一般的であり、プログラミングの生産性向上への寄与は必ずしも十分ではない。またこれらは特定の計算パラダイムを対象とするため、応用プログラムが依拠するパラダイムとの不整合も生じやすい。

2. 研究の目的

本研究の目的は、これまでの並列化ライブラリとは異なり、並列プログラムの全域にわたって問題全体を対象とし、かつ解法と連携して効果的な並列処理を実現する、並列化の技法をライブラリとして構築する技術の確立にある。

たとえば本研究の対象の一つであるプラズマシミュレーションでは、膨大な数の粒子に関する並列計算ができるという「粒子並列性」と、電磁場を格子点ごとに並列計算できるという「空間並列性」を内在しており、我々はこの両者を生かしつつ負荷均衡も保った空間分割型のシミュレーション方式 OhHelp を考案してその高い効果を実証した。この方式はシミュレータの問題全体を対象とし、かつどのように粒子や電磁場の挙動をシミュレートするか解法と深く連携したものである。

この方式の根幹である動的な負荷均衡メカニズムは、そのほとんどの部分が粒子や電磁場の計算と独立した形で実装できるため、これを並列化技法ライブラリとして多様な電磁粒子シミュレーション（高温プラズマ、宇宙プラズマ、雲形成、燃焼など）に用いることが望まれる。しかし負荷均衡のためには、ある部分空間に存在する粒子数の積算処理を「粒子位置・速度計算」に付加する必要があり、また分割された部分空間の境界データを隣接の部分空間との間で交換する処理が「電磁場計算」に付加されなければならない。これらの具体的な操作は、元のプログラムのデータおよび制御構造に強く依存するため、一般的なライブラリ関数・手続の形で実装するのは困難である。

そこで本研究は、応用プログラム側に対してライブラリを利用するための宣言的イン

タフェースを提供し、その宣言的情報に基づいてライブラリ自体を構築する技術を開発を目的として実施した。また上記の負荷分散技法に加えて、線型方程式ソルバーなど重要な数値計算解法やプログラミング技法について新たな提案を行い、これらをライブラリの形で実現することも、本研究の重要な目的であった。

3. 研究の方法

本研究は、以下の特徴を有する並列化技法ライブラリとその構築技術の確立を目指して実施した。

- ① プログラム中の関数やカーネルループなどの部分問題の並列化ではなく、プログラム全域にわたって問題全体の並列化技法を対象とする。
- ② 解法と独立した並列化支援ではなく、シミュレーションの手法やアルゴリズムなどの解法と連携した並列化技法を対象とする。
- ③ 特定の並列計算パラダイムではなく、分散メモリと共有メモリなど最近のスーパーコンピュータのアーキテクチャに対応して階層化されたパラダイムを対象とする。
- ④ いたずらに自動的並列化を追及するのではなく、プログラマの問題知識を積極的に活用した並列プログラミングを対象とする。

これらを達成するために、種々の並列化手法を個々の数値シミュレーション問題に適用するための「トップダウンアプローチ」と、特定の計算パラダイムに基づき設計された数値計算ライブラリを他のパラダイムに適合させるために拡張する「ボトムアップアプローチ」の両面から、並列化技法ライブラリと構築技術について研究を行った。

- (1) トップダウンアプローチ (主担当・中島)
粒子シミュレーションを主な対象として、負荷分散アルゴリズムとそれに伴う粒子数積算や部分空間の間のデータ交換処理を、並列化技法ライブラリの一つとして実装した。続いて図1に示すように、応用プログラムが有するデータ構造などをライブラリ構築のために提示するための宣言的インタフェース (ライブラリスタブ) と、提示された情報とライブラリの基本構造 (ライブラリスケルトン) からライブラリコードを生成し、それを応用プログラムとともにコンパイル・リンクして実行コードを得る枠組を実装した。
- (2) ボトムアップアプローチ (主担当・岩下)
特定の計算パラダイム、主として共有メモリマシンにおけるスレッド並列処理を仮定して設計されていた線型方程式のソルバーを、応用プログラムが要求するパラダイム、すなわち分散メモリマシンにおけるプロセス並列処理やスレッド/プロセスハイブリッド

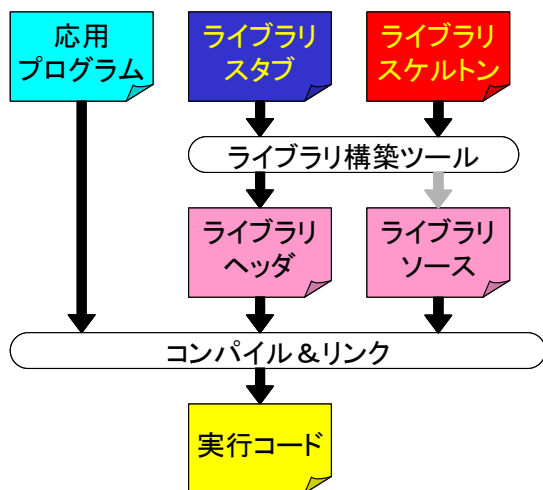


図 1 ライブラリ構築フレームワーク

並列処理に対応させるための拡張について研究した。具体的には、ICCG法やマルチグリッド法などを対象として、スレッド並列、プロセス並列、およびハイブリッド並列の実装方式を検討し、特に計算パラダイムに応じた前処理の並列化や、キャッシュを意識したメモリアクセスの効率化に重点的に取り組んだ。またこれらの実装に関する詳細な性能評価を行い、方式の優劣や実装上の工夫の効果についての知見を得た。

4. 研究成果

(1) トップダウンアプローチ

粒子シミュレーションの負荷分散アルゴリズム OhHelp を、並列化ライブラリの一つとして種々の応用に適用可能な形で実装し、ソースコードライブラリとして公開した。OhHelp ライブラリは、Fortran および C で記述された応用プログラムに対して 24 個の API 関数を提供し、プログラマが求める機能レベルに応じた構成が可能な構造となっている。すなわち、負荷分散アルゴリズムだけを利用するレベル 1 (5 関数)、粒子の移送処理も実施するレベル 2 (5 関数)、および電磁場等の配列の部分領域間通信も実施するレベル 3 (10 関数) が用意され、統計処理のための付加機能 (4 関数) と併せて、必要な機能だけを選択できる実装を行った。

また応用プログラムが対象とする空間の次元数 (1~3)・大きさ・境界条件、粒子データを保持する構造体、領域分割の方法、分割された部分領域間の通信パラメータなど、ライブラリが必要とする応用プログラム側の情報を宣言的に記述するライブラリスタブを設計し、これらに基づいて応用プログラムに適合したライブラリを生成するメカニズムを実装した。

さらにライブラリの構築・適用実験を、フルパーティクル法のシミュレーションと、粒

子・流体ハイブリッド法のシミュレーションの 2 種類を対象として実施した。その結果、従来のプラズマシミュレーションでは実現不可能であった、1000 並列以上のスケールときわめて不均衡な粒子配置に対して、600 倍以上の台数効果という優れた性能が容易に得られることが明らかになった。

(2) ボトムアップアプローチ

ICCG 法およびマルチグリッド法による線形方程式のソルバーを中心に、スレッド並列、プロセス並列およびハイブリッド並列に適合可能なライブラリを構築を行った。

まず ICCG 法では、並列化の阻害要因である不完全コレスキー分解による前処理行列と残差ベクトルとの積を求める前進後退代入処理を、従来から用いられている前処理行列の局所化と、我々が提案した代数的多色順序付け法 (AMC 法) の二つの方法により、実行環境に応じて並列化したライブラリを構築した。またこのライブラリを用いて、種々の求解問題と実行環境を対象とした性能評価を行った結果、AMC 法によるハイブリッド並列が反復回数と演算時間の両面で優位であり、とくに問題・実行環境の規模が大きい場合に優位性が顕著に現れることが明らかになった。またプロセス並列・ハイブリッド並列の際に問題となる疎行列・ベクトル積のための通信最適化法を提案し、ライブラリ実装と性能評価を行った。

またマルチグリッド法では、収束性を悪化させることなくメモリアクセスの局所性を高めることができる方法として、我々が提案したブロック赤黒順序付けによるガウス・ザイデルスムーザを組み込んだ、ポアソン方程式ソルバーライブラリを実装した。また従来法である、ガウス・ザイデル/ヤコビハイブリッド法と、赤黒順序付けガウス・ザイデル法との比較評価を行い、ブロック赤黒順序付け法が後者に匹敵する良好な収束性と、両者を上回るメモリアクセス局所性を示し、両者に対してスレッド並列では 1.7~2.4 倍の、またハイブリッド並列では 1.2~1.6 倍の性能が得られることを明らかにした。

さらにこれらの他、高速多重極展開法の並列化とマイクロマグネティクス計算への適用、密行列の圧縮表現形式 H-Matrix の並列化と巨大地震発生サイクルシミュレーションへの適用、キャッシュメモリを意識した時間発展ループのタイリングと FDTD 法カーネルへの適用、およびメモリ効率を最適化した可変長データ all-to-all 通信ライブラリの実装を行い、それぞれについて優れた効果が得られることを明らかにした。

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 11 件)

- ① Takeshi Iwashita, Takeshi Mifune, Masaaki Shimasaki. Similarities Between Implicit Correction Multigrid Method and A-phi Formulation in Electromagnetic Field Analysis, IEEE Trans. Magnetics, 査読有, Vol. 44, 2008, 946-949
- ② Yasuhito Takahashi, Shinji Wakao, Takeshi Iwashita, Masanori Kanazawa. Micromagnetic Simulation by Using the Fast Multipole Method Specialized for Uniform Brick Elements, J. Applied Physics, 査読有, Vol. 105, 2009, 07D514
- ③ Takeshi Mifune, Soichi Moriguchi, Takeshi Iwashita, Masaaki Shimasaki. Convergence Acceleration of Iterative Solvers for the Finite Element Analysis Using the Implicit and Explicit Error Correction Methods, IEEE Trans. Magnetics, 査読有, Vol. 45, 2009, 1104-1107
- ④ Takeshi Iwashita, Takeshi Mifune, Soichi Moriguchi, Masaaki Shimasaki. Physical Meaning of the Advantage of A-phi Method in Convergence, IEEE Trans. Magnetics, 査読有, Vol. 45, 2009, 1424-1427
- ⑤ 高橋康人, 岩下武史, 中島浩, 若尾真治. 直方体要素用高速多重極法を用いた大規模マイクロマグネティックス計算の並列化, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, 査読有, Vol. 3-1, 2010, 101-111
- ⑥ 岩下武史, 美船健, 高橋康人. 有限要素電磁場解析における反復法とその周辺技術, 査読有, 応用数理, Vol. 20, 2010, 12-24
- ⑦ T. Mifune, Y. Takahashi, T. Iwashita. New Preconditioning Technique to Avoid Convergence Deterioration due to the Zero-Tree Gauge Condition in Magnetostatic Analysis, IEEE Trans. Magn., 査読有, Vol. 46, 2010, 2579-2584
- ⑧ Y. Takahashi, T. Tokumasu, A. Kameari, H. Kaimori, M. Fujita, T. Iwashita, S. Wakao. Convergence Acceleration of Time-Periodic Electromagnetic Field Analysis by Singularity Decomposition-Explicit Error Correction Method, IEEE Trans. Magn., 査読有, Vol. 46, 2010, 2947-2950
- ⑨ 美船健, 廣谷迪, 岩下武史, 村山敏夫, 大谷秀樹. マルチコアプロセッサシステムによる高速有限要素電磁界解析, 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, 査読有, 3(3), 2010, 189-198.
- ⑩ 廣谷迪, 美船健, 岩下武史, 村山敏夫, 大谷秀樹. 並列幾何マルチグリッド法による大規模高周波電磁場有限要素解析, 電子情報通信学会論文誌 B、査読有, J93-B, 2010, 1331-1341
- ⑪ 南武志, 岩下武史, 高橋康人, 中島浩. キャッシュメモリを考慮した 3 次元 FDTD カーネルの性能改善, 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, 査読有, 4(2), 2010, 70-83

[学会発表] (計 27 件)

- ① Takeshi Iwashita, Takeshi Mifune, Masaaki Shimasaki. Physical Meaning of the Advantage of A-phi Method in Convergence, IEEE Conf. Electromagnetic Field Computation, 2008 年 5 月 11 日, Athens, Greece
- ② Takeshi Mifune, Soichi Moriguchi, Takeshi Iwashita, Masaaki Shimasaki. Convergence Acceleration of Iterative Solvers for Finite Element Analysis Using Implicit and Explicit Error Correction Methods, IEEE Conf. Electromagnetic Field Computation, 2008 年 5 月 11 日, Athens, Greece
- ③ 美船健, 岩下武史, 村山敏夫, 金子祥宏, 大谷秀樹. マルチグリッド法を用いた大規模高周波電磁界解析の並列化に関する基礎検討, 計算工学講演会, 2008 年 5 月 19 日, 仙台市
- ④ 高橋康人, 徳増正, 若尾真治, 岩下武史, 金澤正憲. 時間周期有限要素法と EEC 法に基づく非線形過渡電磁場解析の収束特性改善に関する基礎的検討, 電気学会静止器・回転機合同研究会, 2008 年 9 月 18 日, 大分市
- ⑤ 高橋康人, 美船健, 岩下武史, 金澤正憲. 不完全コレスキー分解と EEC 法に基づく新たな前処理による A 法の高速化, 電気学会静止器・回転機合同研究会, 2008 年 9 月 18 日, 大分市
- ⑥ 加藤雄人, 大村善治, 臼井英之, 中島浩. ペタスケールコンピューティングによる放射線帯電子加速シミュレーションの展望, 地球電磁気・地球惑星圏学会総会, 2008 年 10 月 10 日, 仙台市
- ⑦ Yasuhito Takahashi, Shinji Wakao, Takeshi Iwashita, Masanori Kanazawa. Micromagnetic Simulation by Using Fast Multipole Method Specialized for Uniform Brick Elements, Magnetism and Magnetic Materials Conf., 2008 年 11 月 10 日, Austin, TX, USA
- ⑧ 高橋康人, 岩下武史, 金澤正憲, 若尾真治. 電磁界数値解析における IDR(s)法の有効性評価, 情報処理学会システム評価研究会,

- 2008年11月24日、長崎市
- ⑨ 増子拓也、岩下武史、金澤正憲. AMC法の非対称係数行列用拡張による並列化ILU-BiCGSTAB2法、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、2009年1月22日、東京大学
- ⑩ 高橋康人、岩下武史、金澤正憲、若尾真治. 直方体要素用高速多重極法によるマイクロマグネティックス計算の高速化、電気学会静止器・回転機合同研究会、2009年1月29日、早稲田大学
- ⑪ 美船健、高橋康人、岩下武史. A- ϕ 法における冗長未知数 ϕ の消去をもたらす反復収束性悪化の解消—冗長未知数の利用と同等な新しい前処理：Folded Preconditioning—、電気学会静止器・回転機合同研究会、2009年1月29日、早稲田大学
- ⑫ Hiroshi Nakashima, Yohei Miyake, Hideyuki Usui, Yoshiharu Omura. Performance Evaluation of OhHelp'ed 3D Particle-in-Cell Simulation, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、2009年2月26日、北海道大学
- ⑬ Hiroshi Nakashima. Performance Evaluation of OhHelp'ed PIC Simulation, France-Japan WS. Petascale Applications, Algorithms and Programming (招待講演), 2009年4月21日, Kyoto, Japan
- ⑭ Hiroshi Nakashima, Yohei Miyake, Hideyuki Usui, Yoshiharu Omura. OhHelp: A Scalable Domain-Decomposing Dynamic Load Balancing for Particle-in-Cell Simulations, Intl. Conf. Supercomputing, 2009年6月9日, Ossling, NY
- ⑮ Hiroshi Nakashima. OhHelp Load Balancer: A Help to PIC Codes for Flying Peta-Scale Sky, 9th International School for Space Simulations (招待講演), 2009年7月7日, Versailles, France
- ⑯ Bingbing Zhuang, Hiroshi Nakashima, Hiroshi Nagamochi. A Memory-Efficient Algorithm and Its Implementation of Variable-Size All-to-All Communication, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、2009年8月4日、仙台市
- ⑰ 岩下武史、高橋康人、中島浩. 代数ブロック化多色順序付け法による並列化ICCGソルバの性能評価、情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、2009年8月4日、仙台市
- ⑱ 福原敏行、高橋康人、岩下武史、中島浩. Localized IC分解と多色順序付けを併用したハイブリッド型並列ICCG法に関する検討、情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、2009年10月9日、東京都
- ⑲ Hiroshi Nakashima, Toshiyuki Fukuhara, Takeshi Iwashita. An Efficient Vector Transfer for Sparse Matrix-Vector Multiplication on Distributed Memory Systems, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、2010年2月22日、熱海市
- ⑳ 南武志、岩下武史、高橋康人、中島浩. キャッシュメモリを考慮したFDTDカーネルの性能改善、情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、2010年2月22日、熱海市
- 21 秋山隼太、小路真史、三宅洋平、大村善治、中島浩. 負荷分散技法 OhHelp による粒子・流体ハイブリッドプラズマシミュレーションの並列化、情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、2010年2月22日、熱海市
- 22 藤田直樹、高橋康人、岩下武史、中島浩. Cell Broadband Engineを用いた表面電荷法の実装と評価、電気学会全国大会、2010年3月17日、明治大学
- 23 Takeshi Iwashita, Yasuhito Takahashi, Hiroshi Nakashima. Algebraic Block Multi-Color Ordering Method for Parallel ICCG Solver in Unstructured Mesh Analyses, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, 2010年3月30日, Yokohama, Japan
- 24 H. Nakashima. OhHelp Load Balancer for PIC Simulation and Its Library, Japan Geoscience Union Meeting (招待講演)、2010年5月26日、幕張市
- 25 平原和朗、大谷真紀子、高橋康人、堀高峰、兵藤守、中島浩、岩下武史. 地震発生サイクルシミュレーションコードの高速化：(2) Hierarchical Matrices法の適用、日本地震学会2010年度秋季大会、2010年10月27日、広島市
- 26 大谷真紀子、平原和朗、高橋康人、堀高峰、兵藤守、中島浩、岩下武史. H-matricesを用いた大規模準動的地震発生サイクルシミュレーション、日本地震学会2010年度秋季大会、2010年10月27日、広島市
- 27 南武志、高橋康人、岩下武史、中島浩. キャッシュメモリを考慮した3次元FDTD法の実装とその性能評価、第14回環瀬戸内応用数理研究部会シンポジウム、2011年1月23日、岡山理科大学

〔その他〕

ホームページ等

① OhHelp ライブラリ公開ページ、

<http://www.para.media.kyoto-u.ac.jp/ohhelp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中島 浩 (NAKASHIMA HIROSHI)
京都大学・学術情報メディアセンター・教授
研究者番号：10243057

(2) 研究分担者

岩下 武史 (IWASHITA TAKESHI)
京都大学・学術情報メディアセンター・准教授
研究者番号：30324685

(3) 連携研究者

平石 拓 (HIRAISHI TASUKU)
京都大学・学術情報メディアセンター・助教
研究者番号：60528222