

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24年 5月31日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2009～2011

課題番号：21300017

研究課題名（和文） マルチプラットフォームの大規模数値シミュレーションを支援するフレームワークの構築

研究課題名（英文） Development of the Framework to Support Large-scale Numerical Simulation on Multi-platform

研究代表者

姫野 龍太郎 (HIMENO RYUTARO)

独立行政法人理化学研究所・情報基盤センター・センター長

研究者番号：60342838

研究成果の概要（和文）：

電磁界問題，量子化学計算，数値流体計算の大規模数値シミュレーションに向けて，大規模行列計算に向けた高速化，高精度化，安定化を実現し，従来手法では解きにくい問題に対する新たな求解アルゴリズムを提案した．さらに，そのようなシミュレーションを支援するために，応用問題の特性に応じたデータ構造を決定する自動チューニング技術，ジョブスケジューラによる最適な計算機資源割当て方式，任意高精度線形代数演算パッケージも開発した．

研究成果の概要（英文）：

New linear solvers, eigenvalue solvers and modified algorithms that realize to compute fast with high accuracy and stability were proposed. These were developed to solve large-scale numerical simulations, such as electromagnetic problems, computational quantum chemistry problems and computational fluid dynamics problems. Further, in order to support large-scale numerical simulations, new technologies and libraries such as auto-tuning technologies to decide data structure depending on application problems' characteristics, job scheduling strategies to assign optimal computational resources and free library for arbitrary/higher precision linear algebra were developed.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	5,000,000	1,500,000	6,500,000
2010年度	4,800,000	1,440,000	6,240,000
2011年度	3,900,000	1,170,000	5,070,000
年度			
年度			
総計	13,700,000	4,110,000	17,810,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・計算機システム・ネットワーク

キーワード：大規模数値シミュレーション，ハイパフォーマンスコンピューティング，計算科学，応用数学，ミドルウェア，フレームワーク

1. 研究開始当初の背景

文部科学省による国家プロジェクト「次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト」に対しては、計算科学のアプリケーション（応用問題）分野の研究者や技術者からも大きな期待が集まっており、2011年の完成後には国内外で未踏の規模の数値シミュレーションが展開される。ところが一方で、このプロジェクトで開発されるのは、スーパーコンピュータ（スパコン）本体と一部分の基本的ソフトウェアのみ（従来から用意されている線形ライブラリの改良までしか含まれていない）であり、両者のバランスが悪い状況となる。このスパコンは、従来のものよりも二桁大きなプロセッサ数を有する超並列計算機となるが、その性能を余すことなく十分に発揮させるためには、応用問題の特性に応じて、超並列計算における最適な求解アルゴリズムを用いることと、そもそも、そのようなスパコン利用への円滑な移行を支援するための様々な計算機（マルチプラットフォーム）でジョブ実行可能な基盤ソフトウェアの開発が非常に重要である。

以上が当研究課題申請時の背景である。

2. 研究の目的

本研究では、前節で述べた現状を問題視し、アプリケーション領域、求解アルゴリズム分野、基盤システム開発のコンピュータ科学分野の研究者が集う学際フレームワークを形成し、実際の大規模数値シミュレーションに対する有用な求解アルゴリズムの開発と、最適な計算性能を得るための基盤ミドルウェア開発を目的として研究を実施した。

3. 研究の方法

本研究は、次の3グループから構成される学際研究であり、定期開催の会合等（公開と非公開の両方）にて互いの要求要件などの意見交換を行いながら研究を進めた。

(1) アプリケーショングループ：

様々な数値シミュレーションを実施するグループ。大規模電磁界問題、量子化学計算、数値流体計算を取り上げ、各々のテーマにおいては、求解アルゴリズム選択、計算実行環境、離散化手法、数理モデリング、高精度計算について研究を進めてきた。

(2) 求解アルゴリズムグループ：

従来のアルゴリズムでは解きにくい問題に対する新アルゴリズムを開発するグループ。数学的側面とアーキテクチャ的側面から、大規模問題求解に向けた高速化、高精度化、安定化を実現するよう、また、従来のアルゴリズムでは解きにくい問題の求解に対する新たなアルゴリズムを提案した。

(3) 基盤システム開発グループ：

求解アルゴリズムの特性の分析評価と計算効率向上のための解決方法について研究開発するグループ。ソルバー利用や計算機システム利用を支援する観点からの研究とミドルウェア開発、さらには、アプリケーション領域で生じたニーズに応えるような研究開発も実施した。

4. 研究成果

前節で述べた学際研究により、研究分野を超えて相互の研究開発成果の活用や意見交換を実施した。また、一般公開のワークショップやホームページにて研究成果を公開した。以下に、研究成果の概要を述べる。

(1) アプリケーショングループにおける研究成果：

大規模電磁界数値シミュレーション分野では、シミュレーションを援用する電気機器設計の支援ソフトウェア作成を目的として、並列化進化型アルゴリズム（EA）に基づく位相最適化計算の基礎研究を実施した。位相最適化は、設計領域内の各セル（例えば、有限要素）の材料配置を推定し、機器の概形を導出する算法である。本問題は、各セルにおける材料のON-OFFを二進表示するため、整数計画問題となる。そこで、離散問題を容易に取り扱えるEAを導入する。その際、良質な解を高速に得ることを目的として、設計領域の解像度を段階的に向上させる多段式EAを開発した。次に、多段式EAをPCクラスタへ並列実装し、磁気シールドや埋込磁石構造回転機等の実機へ適用可能な電気機器の位相最適化ソフトウェアを構築した。

また、アプリケーション領域の研究では、単に物理現象の解析に留まらず、その現象解析の中で必要が生じた計算手法についても研究を行った。量子化学計算では、そこで扱う問題を半正定値計画法への置き換えを行い、高精度を要求する大規模な内点法を適用した。数値流体計算では、非計算部分を有する計算空間に対する効率的な計算方法を検討した。反復解法を適用する場合には、計算時間が異なることなどを考慮し、サブドメインごとに最適な解法を選択するなどである。また、離散化後の格子モデル、計算機アーキテクチャ、（数値計算ライブラリ利用を中心とした）ソルバーに跨る計算効率についても分析した。これらの取り組みは、基盤システム開発にも大きく貢献した。

(2) 求解アルゴリズムグループにおける研究成果：

近年に提案され、国内外で注目されているInduced Dimension Reduction (s) method（帰納的次元縮小(s)法、IDR(s)法）の長所と応用問題分野で従来から利用されてきた積型反復解法（特に一般化積型解法、GPBiCG法）

の長所を結びつけ、高速、かつロバストなアルゴリズムの開発を進めてきた。ここで開発されたアルゴリズムにより、丸め誤差の影響を数学的に制御し、高速、かつ精度の良い近似解を得ることができる。そして、計算効率の向上に関しては、逐次計算および並列計算の両面で研究を進めた。その結果、新しい前処理として Eisenstat Symmetric SOR(m) 前処理を考案し、その有効性を実証した。また、並列化に関しては、行列ベクトル積のプロセッサへの均等配分に注目し、行列の非零要素のブロック単位の均等法を考案した。新しい反復法である GPBiCGSafe 法も考案し、その有効性を数値実験で明らかにした。

さらに、本科研費研究以外で作成された科学技術計算ソフトウェア（大規模計算向け固有値ソルバー）の性能を測定し、性能向上の問題点をキャッシュ、メモリ、マルチコアの観点から明らかにし、その結果を次世代計算機向け数値計算ライブラリ開発やシミュレーション開発領域の研究者と情報共有するよう研究を進めてきた。また、大規模疎行列向き反復解法ライブラリを用いて、体系的に求解アルゴリズムの性能を評価する中で、顕在化した従来手法の問題点やライブラリ作成における盲点などを見出し、それらの分析、および、改善手法を提案した。

(3) 基盤システム開発グループにおける研究成果：

スパコンの性能を余すことなく十分に発揮させるために、応用問題の特性に応じ超並列計算における最適な求解アルゴリズムを用いることと、スパコン利用を円滑にすることを支援する基盤ソフトウェアの開発が重要である。本科研費研究の中では、特に基盤ソフトウェアの観点から、応用問題の特性に応じて最適なデータ構造を決定する自動チューニング (AT) の研究を以下の観点から行った：

- 1) 固有値問題の求解における性能を決定するベクトル (枢軸ベクトル) の分散配置方式
- 2) 連立一次方程式の求解時の主演算となる疎行列 - ベクトル積での疎行列データ構造の実行時変換方式

また、性能情報 DB で AT 結果を共通化することで、スパコンシステムに依存しない高性能を達成するシステム構築法の事例となる。さらには、数多くの求解アルゴリズムを用いて、数多くの連立一次方程式を解かせ、そこで産出 (算出) される求解品質 (計算速度、計算精度や安定性) を示すデータを体系的に分析するシステムも整備した。

スーパーコンピュータに代表される大規模化・多様化する計算機システムであるが、これら計算機資源を効率的に使用することは重要な課題である。計算機のアーキテク

チャを巨視的に捉えた場合、計算資源割当てのツールの一つとしてジョブスケジューラがある。ジョブスケジューラは、スケジューリングアルゴリズムやポリシーに従って同時かつ非同期に要求されるリソースを分配するが、実際には空き資源があってもジョブが割り当てられなかったり、ジョブが効率よく実行されていなかったりする。このため、本研究では、システム利用効率を向上させることを目的として、ジョブスケジューラに関する研究を行った。一方、計算機のアーキテクチャを微視的に捉えた場合、様々なプロセッサアーキテクチャに対する利用環境の整備も必要である。その一つとして、任意高精度線形代数演算パッケージ MPACK を開発し、本研究の中で多くの機能を付け加えた。サポートされるルーチンや高精度演算ライブラリが増えただけでなく、NVIDIA C2050 GPU を用いて行列-行列演算を理論性能値のほぼ限界まで最適化した。高精度計算をコモディティ化する方向で研究開発を進めた。これらのプログラムはオープンソースとして公開し、これを元にした研究成果も他研究者からいくつか発表された。ここでの高精度演算は量子化学計算や大規模固有値問題求解にも貢献している。さらには、ジョブ実行の支援環境からソルバー選択などのエンドユーザ利用支援環境を備えたシステムの一つとして V-Sphere/SPHERE があり、本科研費研究の中でも取り組まれた。このシステム開発においては、上述の数値流体計算がターゲットアプリケーションであり、自動チューニングライブラリの実装に向けての検討も進めた。

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 15 件)

- 1) K. Abe, G. Sleijpen, Solving linear equations with a stabilized GPBiCG method, Applied Numerical Mathematics, 査読有, 採録決定.
- 2) 伊藤祥司, 片桐孝洋, 他 5 名, BiCGStab 法の前処理付きアルゴリズムに対する改善, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), 査読有, 採録決定.
- 3) Y. Okamoto, Y. Tominaga, and S. Sato, Topological Design for 3-D Optimization Using the Combination of Multi-step Genetic Algorithm with Design Space Reduction and Nonconforming Mesh Connection, IEEE Transaction on Magnetics, 査読有, 48(2), 515-518, 2012.
- 4) 岡本吉史, 富永悠介, 里周二, 遺伝的アルゴリズムの多段階使用と設計空間の縮減を併用した磁気回路の形態最適化手法

- の提案, 電気論文誌 B, 査読有, 131(8), 677-686, 2011.
- 5) K. Aihara, K. Abe, E. Ishiwata, An alternative implementation of the IDRstab method saving vector updates, JSIAM Letters, 査読有, 3, 69-72, 2011.
 - 6) 尾上勇介, 藤野清次, Multi-Restarts 型 Look-Back GMRES(k) 法の提案, 日本応用数理学会論文誌, 査読有, 21, 175-195, 2011.
 - 7) 尾上勇介, 藤野清次, 分離形 Multi Restarts Look-Back GMRES(k, m) 法の提案, 日本シミュレーション学会論文誌, 査読有, 3, 79-881, 2011.
 - 8) H. Waki, M. Nakata, M. Muramatsu, Strange behaviors of interior-point methods for solving semidefinite programming problems in polynomial optimization, Computational Optimization and Applications, 査読有, Published online: 28 September 2011, (2011).
 - 9) 中田真秀, MPACK 0.6.7:高精度線形代数演算ライブラリの開発, 応用数理, 査読有, 21(2) pp.2-14, (2011).
 - 10) Kuniyoshi Abe, Gerard Sleijpen, BiCR Variants of Hybrid BiCG Methods for Solving Linear Systems with Nonsymmetric Matrices, Journal of Computational and Applied Mathematics, 査読有, 234(4), 985-994, 2010.
 - 11) Y. Okamoto, K. Fujiwara, and Y. Ishihara, Effectiveness of Higher Order Time Integration in Time-Domain Finite-Element Analysis, IEEE Trans. on Magnetics, 査読有, 46(8), 3321-3324, 2010.
 - 12) 藤野清次, P. Sonneveld, 尾上勇介, M. van Gijzen: IDR(s)-SOR の提案, 日本応用数理学会論文誌, 査読有, 20(4), 289-308, 2010.
 - 13) 伊藤祥司, 杉原正顕, 姫野龍太郎, クリロフ部分空間法に対する前処理方式と収束判定について, 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム (ACS), 査読有, 3(2), 9-19, 2010.
 - 14) Y. Nakatsuka, T. Nakajima, M. Nakata, and K. Hirao, Relativistic quantum Monte Carlo method using zeroth-order regular approximation Hamiltonian, Journal of Chemical Physics, 査読有, 132, 054102 (2010).
 - 15) 中田真秀, 半正定値計画法に対する高精度・安定計算の技術, オペレーションズ・リサーチ, 査読有, vol. 55. no. 7, pp. 406-411, (2010).
- [学会発表] (計 114 件)
- 1) Himeno, R., Grand Challenge in Life Science on K Computer, The 1st HD Physiology International Symposium: Integrative Multi-level Systems Biology for In silico Cardiology and Pharmacokinetics, Tokyo, Japan, Jan. 20-21, 2012. (welcome lecture)
 - 2) 姫野龍太郎, 京で実現するライフサイエンスのグランドチャレンジとバイオエンジニアリング, 第 24 回バイオエンジニアリング講演会, 日本機械学会, 大阪 2012 年 1 月 7 日-8 日
 - 3) 伊藤祥司, 片桐孝洋, 他 5 名, BiCGStab 法の前処理付きアルゴリズムに対する改善, 2012 年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論文集, pp. 117-126, 名古屋大学, 2012. 1. 26.
 - 4) 岡本吉史, 他 3 名: 「並列計算を援用した多段式進化型アルゴリズムによる永久磁石型同期電動機の位相最適化計算」, 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-12-30, RM-12-30, pp. 41-46, 関西大学, 2012. 1. 27
 - 5) 富永悠介, 岡本吉史, 他 2 名: 「局所探索を併用した多段式進化型アルゴリズムによる磁気シールドの三次元位相最適化計算」, 平成 24 年電気学会全国大会, 5-146, pp. 222-223, 広島工業大学, 2012. 3. 21
 - 6) Himeno, R., 1st Experiences with K, Cologne Meeting, International Exascale Software Project, Cologne, Germany, Oct. 7-8, 2011.
 - 7) Himeno, R., Development of Petascale Life Science Software Package for K Computer, Plenary meeting in Bordeaux, Japanese French Laboratory for Informatics, Bordeaux, France, Sept. 2-3, 2011. (invited talk)
 - 8) Himeno, R., Japan's Grand Challenge Activities in Life Science, International Supercomputing Conference, Hamburg, Germany, June 19-23, 2011.
 - 9) 伊藤祥司, 杉原正顕, 導出過程に着目した前処理付き CGS 法の適切なアルゴリズム, 2011 年並列/分散/協調処理に関する「鹿児島」サマー・ワークショップ (SWoPP 鹿児島 2011), 鹿児島, 2011. 7. 28.
 - 10) 伊藤祥司, 片桐孝洋, 他 6 名, 前処理付き BiCGStab 法の問題点に対する改良, 第 16 回計算工学講演会, 東大柏, 2011. 5. 25.
 - 11) S. Itoh, T. Katagiri, 他 6 名, An improvement in preconditioned BiCGStab method, 2011 年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論文集, pp. 62-62 (Poster), 産総研 (つくば), 1 月 18 日, 2011.
 - 12) Abe, K., Can hybrid BiCG methods learn

- from IDR ?, International Workshop on application of Iterative Methods to Engineering and its Mathematical Elements, Doshisha Univ., Oct.23-24, 2011
- 13) Abe, K., Solving linear equations with a stabilized GPBiCG method, 湖南商学院情報学科(China), Apr.14,2011, 招待講演
 - 14) Abe, K., Alternative implementations of the hybrid Bi-CG methods for linear equations, 10th IMACS Int'l Conference on Iterative Methods in Scientific Computing, Morocco, May 18-21,2011
 - 15) S. Fujino, 他 3 名: Preconditioned linear solvers for nonsymmetric matrix which stems from earthquake response analysis of dam, Proc. of ICCCM2011 (Computational Contact Mechanics), 15-17 June, Hannover, Germany, 2011.
 - 16) S. Fujino: A proposal of Multi-Restarts type of Look-Back GMRES(k) methods, Abstract of ILAS 2011 17th Conf. of the Int. Linear Algebra Society, p.91, August 22-26, Braunschweig, Germany, 2011.
 - 17) Seiji Fujino: A proposal of GPBiCGSafe method without reverse recurrence and its estimation, GAMM workshop applied and Numerical Linear Algebra with special emphasis on model reduction, p.12, September 22-23, Bremen, 2011.
 - 18) Yoshifumi Okamoto, Yusuke Tominaga, Shuji Sato, "Optimal Design Method Based on Magnetic Material Distributions Using Multi Step Genetic Algorithm with Reduced Design Space," Procs of IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (COMPUMAG 2011), Sydney Australia, 2011.7.13
 - 19) Y. Okamoto, 他 6 名, "Analysis of Uniform Magnetic Field Problem by Edge Elements - Effects of Reduced Integration and High Order Elements -" Procs. of IEEE Conf. on Electromagnetic Field Comput. (COMPUMAG 2011), Sydney Australia, 2011.7.14
 - 20) 今村俊幸, GPGPU で数値計算ソフトウェアはどこまで加速するか, 大規模計算コロキウム, 岐阜市, 2011年9月8日
 - 21) 片桐孝洋,「実行時にデータ構造変換を行う疎行列ベクトル積の自動チューニング方式」, 大規模計算コロキウム, 岐阜市, 2011年9月8日
 - 22) R. Ito, Kenichi KIKUCHI, Efficient Algorithm for hardware resource management using 2-D strip packing problem, The forth International Symposium on Intelligent Informatics ISII2011., 5(10), pp.3809-3814, May 3, 2011.
 - 23) Maho Nakata, "On the size-consistency and size-extensivity of the reduced density-matrix method", ACS meeting, Colorado Convention Center Room, Denver Colorado USA, 2011/8/30.
 - 24) S. Itoh, M. Sugihara, Quality Control Approach for Systematic Performance Evaluations of Numerical Solving Process of Linear Equations, 14th SIAM Conf. on Para. Proc. for Sci. Comput., Seattle, WA, USA, Feb. 24-16, 2010.
 - 25) Shoji Itoh, Quality control approach for systematic performance evaluation of linear solvers, 第6回先進スーパーコンピューティング環境(ASE)研究会, 東京大学, 2月12日, 2010.
 - 26) Abe, K., A stabilized GPBiCG method with a strategy to remedy accuracy of Bi-CG coefficients for solving linear systems, Conference In Numerical Analysis 2010, Greece, Sep. 15-18,2010
 - 27) Abe, K., Hybrid BiCG methods vs. BiCR variants of hybrid BiCG methods, 2nd Int'l Kyoto-Forum on Krylov Subspace Methods, Kyoto Univ., Mar. 25-26, 2010
 - 28) S. Fujino, Performance evaluation of IDR(s)-based Jacobi method, PARA2010, Reykjavk, Iceland, June 6-9, 2010.
 - 29) S. Fujino, Y. Kusakabe and Y. Onoue, A proposal of GS-based preconditioning applicable to restarted GMRES(k) method, Proc. of NumAn2010 Conference in Numerical Analysis, Chania Crete, Greece, September 15-18, 2010.
 - 30) Y. Okamoto, K. Fujiwara, and Y. Ishihara, "Fast Magnetic Field Analysis by Applying Nonconforming Mesh Connection Technique to an outer Region," Proceedings of IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC 2010), Chicago USA, 2010.5.10
 - 31) 岡本吉史, 他 4 名:「サブパラメトリック辺要素による一様磁界計算」, 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-10-81, RM-10-90, pp. 27-32, かがしま県民交流センター, 2010.9.28
 - 32) 今村俊幸, ペタスケール環境での高並列固有値ソルバの開発, 計算工学会講演論文集, Vol.15, pp.103-106, 5月26-28日, 2010.
 - 33) 小野謙二, 高ユーザビリティを目指す大規模並列シミュレータの開発インフラ SPHERE, 第2回自動チューニング技術の

- 現状と応用に関するシンポジウム, 東京大学, 2010年11月4日
- 34) 伊東 聡, 小野謙二, アプリケーションミドルウェア SPHERE の開発, 第3回 大規模計算ワークショップ, 理研, 2010.10.27
- 35) R. Ito, Job Scheduling Parameter Configuration Focusing on Elapsed Time, Euromicro Int'l Conf. on Parallel, Distributed and network-based Processing, PDP2010, Pisa, Feb.19, 2010.
- 36) Maho Nakata, "Recent progresses in the variational reduced-density-matrix method", 50th Sanibel Symposium, Florida Georgia USA, 2010/2/24.

[図書] (計3件)

- 1) Takahiro Katagiri and Shoji Itoh, A Massively Parallel Dense Symmetric Eigensolver with Communication Splitting Multicasting Algorithm, Lecture Notes in Computer Science, 2011, 査読有, Vol.6449/2011, pp. 139-150, 2011.
- 2) Shoji Itoh, Masaaki Sugihara, Systematic performance evaluation of linear solvers using quality control techniques, Software Automatic Tuning From Concepts to State-of-the-Art Results (eds. Ken Naono, et al.), 査読有, 135-152, Springer, 2010.
- 3) M. Nakata (6名中6番目), "Latest Developments in SDPA Family for Solving Large-Scale SDPs", Handbook on Semidefinite, Conic and Polynomial Optimization Series: Int'l Series in Operations Research & Management Science, Vol. 166, Anjos, Miguel F.; Lasserre, Jean B. (Eds.) 1st Edition, 査読有, pp. 687-714, (2012).

[その他]

ホームページ等

<http://accc.riken.jp/Prj/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

姫野 龍太郎 (HIMENO RYUTARO)

独立行政法人理化学研究所・情報基盤センター・センター長

研究者番号: 60342838

(2) 研究分担者

藤野 清次 (FUJINO SEIJI)

九州大学・情報基盤研究開発センター・教授

研究者番号: 40264965

阿部 邦美 (ABE KUNIYOSHI)

岐阜聖徳学園大学・経済情報学部・准教授

研究者番号: 10311086

小野 謙二 (ONO KENJI)

東京大学・生産技術研究所・特任研究員

研究者番号: 90334333

(H23:連携研究者)

伊藤 祥司 (ITOH SHOJI)

東京大学・情報基盤センター・特任准教授

研究者番号: 70333482

岡本 吉史 (OKAMOTO YOSHIFUMI)

宇都宮大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号: 40415112

(H21:連携研究者)

(3) 連携研究者

今村 俊幸 (IMAMURA TOSHIYUKI)

電気通信大学・電気通信学部・准教授

研究者番号: 60361838

片桐 孝洋 (KATAGIRI TAKAHIRO)

東京大学・情報基盤センター・准教授

研究者番号: 40345434

伊藤 利佳 (ITO RIKA)

宇宙航空研究開発機構・研究開発本部・主任開発員

研究者番号: 70442928

中田 真秀 (NAKATA MAHO)

独立行政法人理化学研究所・技術開発ユニット・開発研究員

研究者番号: 50469912