

実用アプリケーション部会報告
フリーソフトウェアの普及を
目指して

部会長
片桐 孝洋

会員募集中！

第十四回PCクラスタシンポジウム
秋葉原コンベンションホール
2014年12月11日(木) 14:20～14:40

PCクラスタを取り巻く環境

- PCクラスタは普及はしたが・・・
 - 従来スパコンを所有していた機関にPCクラスタは普及
 - 研究機関、大学、製造業（自動車、重工、化学など）
 - これまでスパコンを持てなかった部門にも普及
 - 研究室単位、中規模民間企業

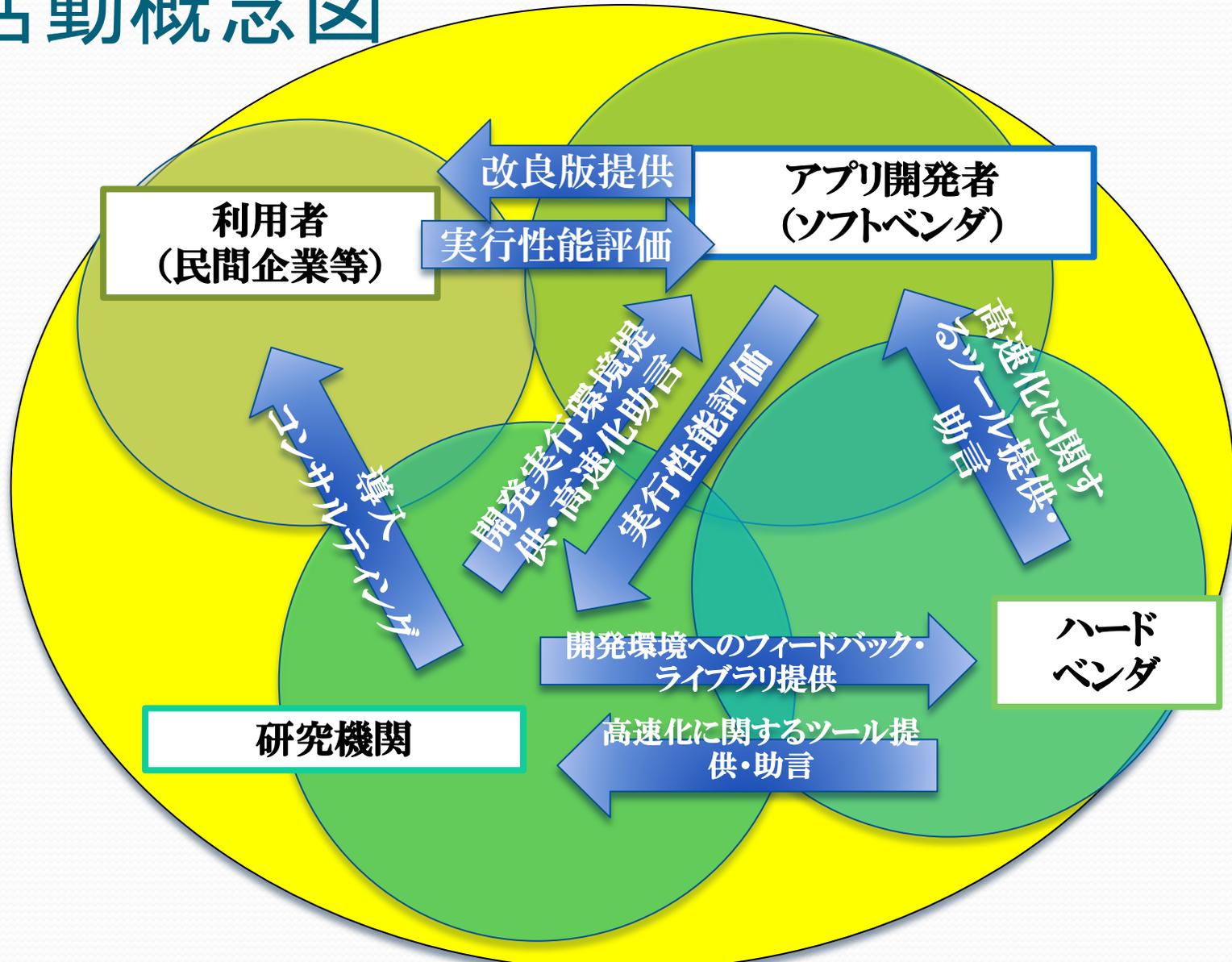
PCクラスタを取り巻く環境

- 超並列計算は普及していない
 - 民間では平行計算が主流
 - 商用アプリケーションは並列化が進んでいない
 - 大規模クラスタがあっても大規模計算をするソフトがない
 - 並列化ができる人材がいない
 - 並列のライセンス料が高い
 - 「京」のような大規模スパコンでの産業利用拡大に期待するが・・・
- 数値シミュレーション分野は拡大していない
 - PCクラスタの普及により安価に計算機を手に入れることができるが、数値シミュレーション自体の裾野(ユーザ)は増えていない。
 - PCクラスタ→安い→儲からない→サービスができない
 - これでは今後の市場および利用分野、ユーザの拡大は望めない

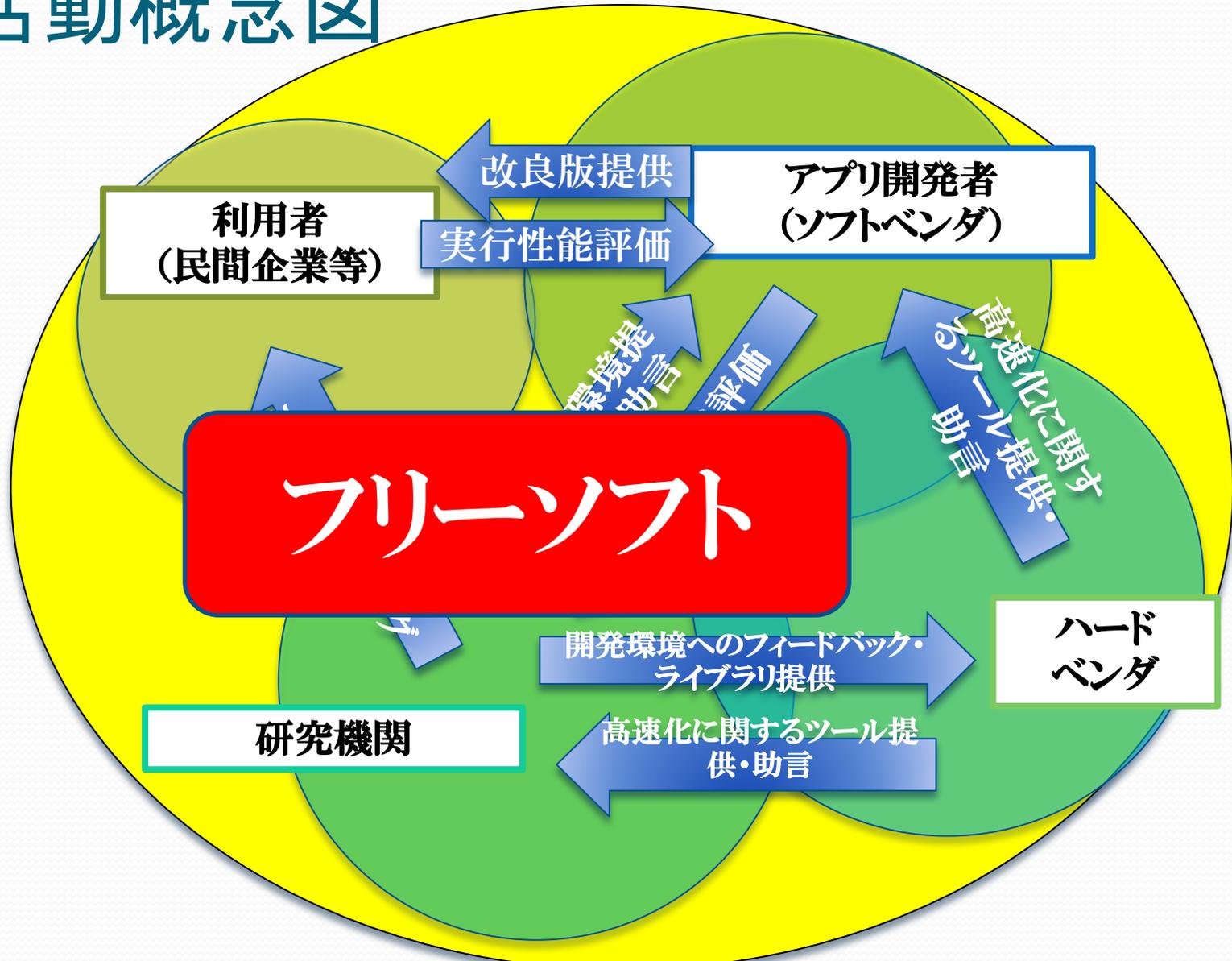
部会設立目的

- アプリケーション高速化支援
 - まだまだアプリケーションの高速化、チューニングが必要
 - アクセラレータ対応もさらに進める必要がある
 - アプリケーションの高速化を部会で促進
- 数値シミュレーション導入支援
 - PCクラスタはおろか数値シミュレーション自体が普及していない
 - 中小企業では何から始めて良いのかわからない
 - 無償で導入コンサルを実施

活動概念図



活動概念図



活動内容

- アプリケーション高速化支援活動
 - 利用者、ベンダ、研究者とつなぐ協調体制を築き、実アプリケーションの高速化を行う。
- 数値シミュレーション技術普及活動
 - **講習会、ワークショップの開催**
 - 数値シミュレーションに関する講習会、ワークショップを開催する。
 - **計算機環境の提供(ポータルサイトの提供)**
 - いつでも利用できる小規模の計算機環境を提供する。
 - オープンソースソフトウェアをプリインストール

フリーソフトウェア提供予定

- **OpenFOAM**
 - 流体解析ソフト
 - MPI化されている
 - 1ノード(共有メモリ)から、超並列環境(MPI)まで
 - 企業における導入例が多い
- 東京大学情報基盤センター開発ソフトウェア
 - **Xabclib**
 - 疎行列の連立一次方程式および固有値問題のソルバライブラリ
 - **ppOpen-HPC**
 - FEM、FDM、FVM、BEM、DEMに基づく
数値シミュレーション基盤(数値ミドルウェア)

フリーソフト募集！

講習会実施予定

- 東京大学情報基盤センター
「お試しアカウント付き並列プログラミング講習会」と共催
 - 東京大学FX10の1週間無料アカウント付き
 - 企業の方も参加可能
 - 平成26年度は、以下の2講習会
 1. 2015年2月18日
 - ppOpen-HPC講習会
 2. 2015年3月26日～27日
 - ライブラリ利用講習会
 - BLAS、LAPACK、ScaLAPACK、Xabclib、ppOpen-HPC
- 平成27年度は、数回の地方開催を計画したい

研究開発事例

東京大学情報基盤センターと日立製作所との共同研究

OpenFOAMにXabclibを適用

- OpenFOAMおよびXabclibともに、オープンソースソフトウェア
- OpenFOAMはスレッド並列化がされていないため、1ノード実行でもMPI実行する
- OpenFOAMの疎行列演算の演算効率が悪い
(上三角、下三角、対角要素の分離型COO形式)
- Xabclibはスレッド化され、演算効率の高い疎行列データ構造(CRS等)と演算、自動チューニング機能を実装
- OpenFORMへのXabclibの適用ソースコード(コードパッチ)をフリーソフトウェアとして提供予定



OpenFOAMへの疎行列計算ライブラリXabclibの適用と評価

櫻井隆雄 (日立製作所)
片桐孝洋 (東京大学)
大島聡史 (東京大学)
猪貝光祥 (日立超LSIシステムズ)
黒田久泰 (愛媛大学)

- Xabclib

- 数値計算ライブラリ

- 連立一次方程式の疎行列反復解法

- 対称行列向け

- 解法:PCG法

- 前処理法:対角スケーリング、jacobi反復型前処理、DIC

- 非対称行列向け

- 解法:BiCGStab法、GMRES(m)法

- 前処理法:対角スケーリング、SSOR、DILU、ILU、ILUT(p, τ)

- 悪条件の問題に効果的

- 標準固有値問題の疎行列反復解法

- OpenMPによりSMP並列化

- 対応行列格納形式はCRS(Compressed Row Storage)

- OpenATLibを利用した自動チューニング(AT)機能を実装

- OpenATLib

- 疎行列反復解法で必要となる機能を集約

- 疎行列 - ベクトル積(SpMV)の実装方式を問題に合わせて選択

- 直交化アルゴリズム

- 解法に必要なパラメタの自動調整機能、など

- ATポリシー機能の提供

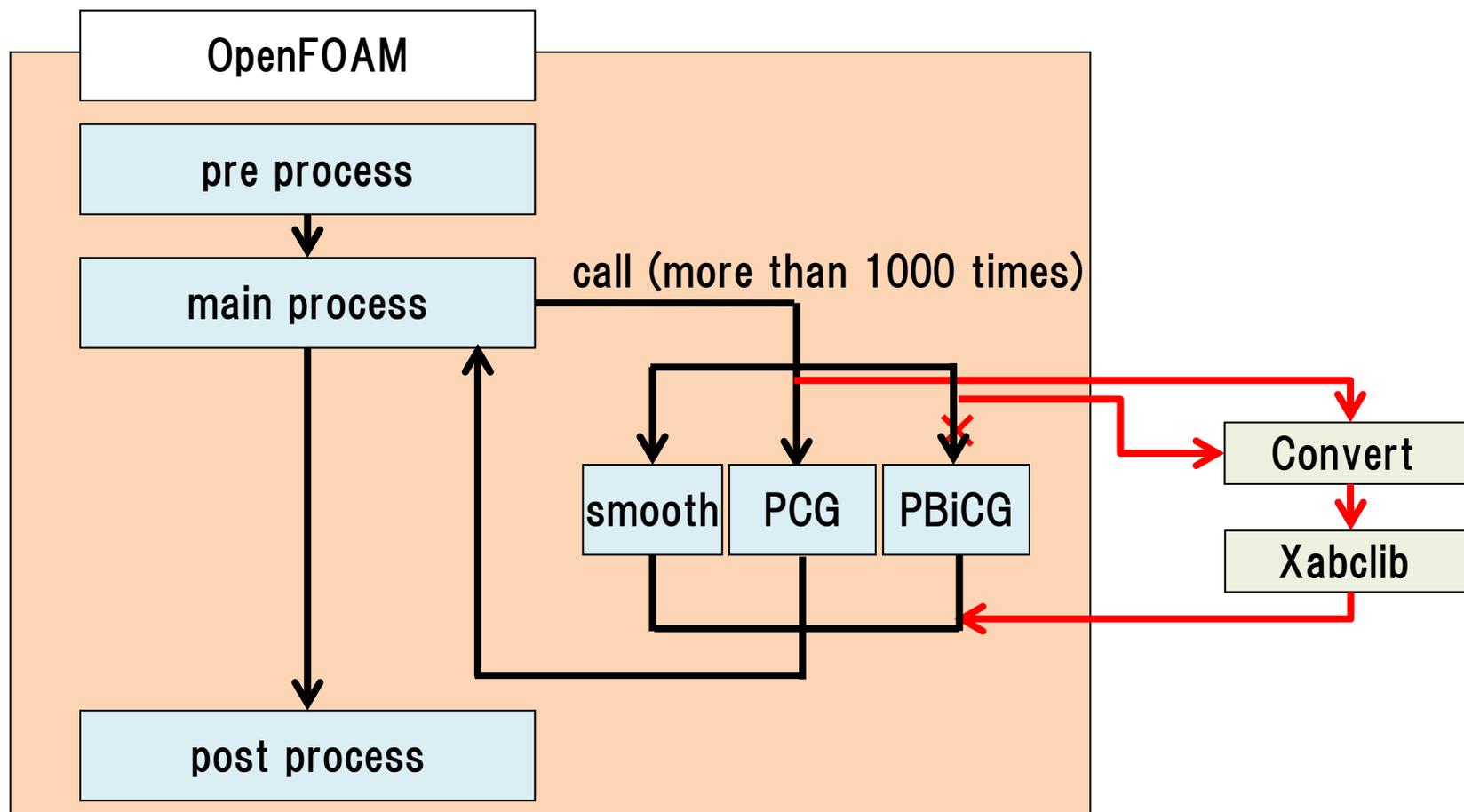
- 実行速度、演算精度、メモリ量

- 反復解法や前処理法の自動選択

3-1. OpenFOAMへのXabclibの適用

■ 初期実装としてオリジナルのソルバをXabclibに入れ替え

- ◆ OpenFOAM本体からPCG、PBiCGが呼ばれる際に、Xabclibを呼び出し
- ◆ 呼び出される際に行列格納形式を変形COOからCRSに変換



- XabclibとOpenFOAMのオリジナルのソルバの性能を比較
 - ◆ OpenFOAMの2つのチュートリアルで評価
 - ◆ 非対称問題のみを差し替え
 - ◆ MPIは不使用

● 計算条件

#	OpenFOAM	Xabclib
version	2.2.2	1.02
Iterative solver	PBiCG	BiCGStab, GMRES(m)
Preconditioner	DILU	Jacobi, SSOR, DILU, ILU0
Sparse matrix format	COO	CRS
Num of threads	1	1, 2, 4, 8, 16
Convergence criterion	1.0E-08	

4-2. 計算機環境

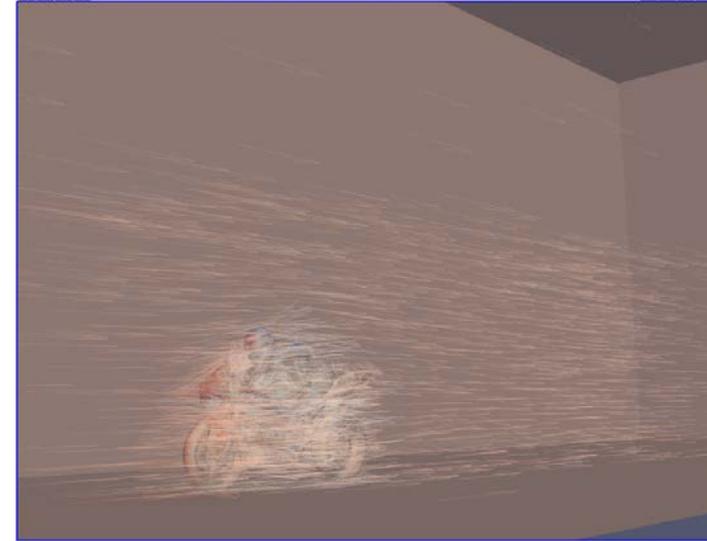
■ 東大FX10を1ノード使用

FX10

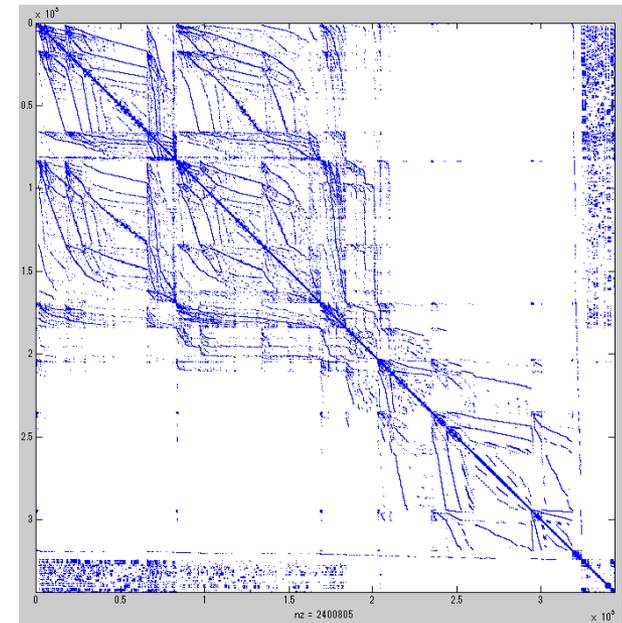
CPU	SPARC64™ IXfx 1.848GHz , 1socket, 16 core/node
Main Memory	32GByte
OS	XTCOS
Compiler	Fujitsu Technical Computing Suite V1.0
Compile Option	-Kfast,openmp, -Fixed

4-4. Target tutorials ② motorBike

- SIMPLE法を用いた乱流解析ソルバ
- 右図のような形状での乱流解析
- 1反復で以下の求解を実施
 - ・ p : 対称行列
 - ・ $U(x,y,z$ 方向): 非対称行列
 - ・ k : 非対称行列
 - ・ ω : 非対称行列

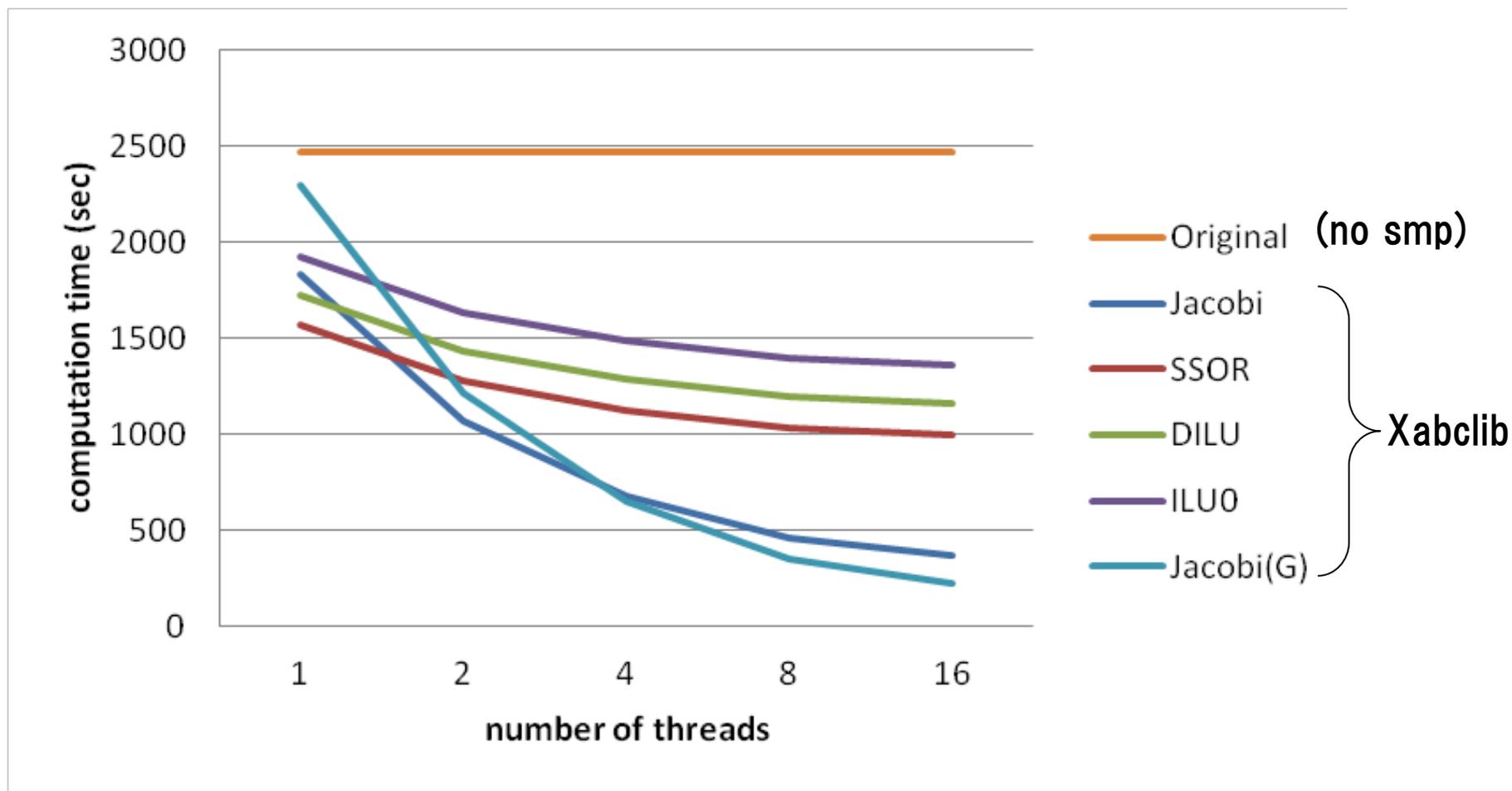


- 行列の次元数は343,673、非零要素数は2,400,805
 - チュートリアルでのDefault設定では500反復
 - ・ 2,500回の非対称行列の反復解法を実行
 - ・ ソルバは初期設定ではGauss-Seidel法
- ➡ Xabclibに差し替えて評価を実施



4-7. motorBikeの計算時間

- 2,500回の呼び出しの合計値
- Xabclibにより、1スレッド時は1.6倍に高速化 (SSOR+BiCGStab)
16スレッド時は11.1倍に高速化(Jacobi+GMRES)



おわりに

- 実用ソフトウェア部会では、以下の活動を強化していきます
 - 講習会の実施
 - フリーソフトウェアの普及
 - 無償コンサルティング
- 本部会の活動に賛同する企業の入会を募集します
 - 平成26年度入会
 - 日本マイクロソフト株式会社
- 本部会で提供するフリーソフトウェアを募集します