

Frontier
Simulation Software for
Industrial
Science

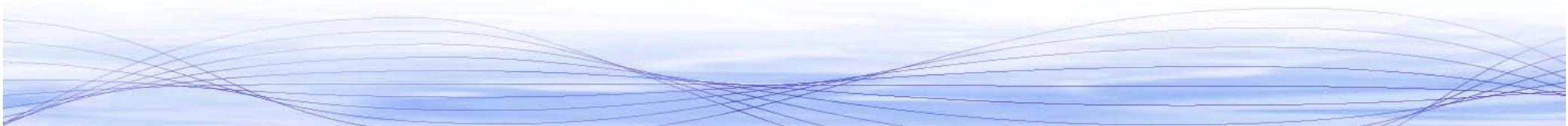
Digital Innovation



HPCミドルウェア (HPC-MW)

PCクラスタから「地球シミュレータ」まで

2007年7月11日



戦略的基盤ソフトウェアの開発

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>

- 文部科学省「ITプロジェクト」の一部
- 東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター
 - プロジェクトリーダー: 加藤千幸 教授
 - 平成14年度～16年度
 - 平成17年度より「革新的シミュレーションソフトウェアの開発」に移行
 - 年10億円弱の予算
 - 7つのサブプロジェクト
 - 100名以上の人員
- 実用ソフトの開発
 - 単なる研究開発ではない
 - ソフトウェアの公開(上記URLからダウンロード可能)
 - 産学連携: 産業応用推進協議会
 - 商用化

戦略的基盤ソフトウェアの開発

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>

- 量子化学, タンパク質, ナノテクノロジー
- 次世代流体解析, 構造解析
- PSE, HPC-MW

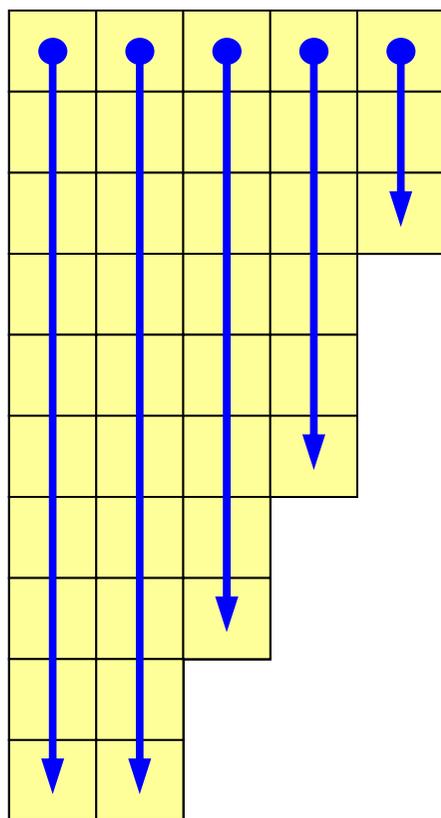
背景

- 様々なHPC環境
 - 並列計算機
 - PCクラスタ
 - 分散メモリ型超並列計算機
 - SMP クラスタ(8-way, 16-way, 256-way)
 - Power, HP-RISC, Alpha/Itanium, Pentium, Vector PE
 - Grid環境 → 様々なリソースにアクセス可能
- 最適化(単体CPU, 並列)は非常に重要
 - Grid環境でのコードの移植性(portability)
 - H/Wに応じた最適化が必要
 - ただ動く・・・ことは可能
 - 基本的アルゴリズム, データ構造変更が必要な場合もある。
 - 重要性は誰でも認めることではあるが, 簡単なことではない。特にアプリケーション開発者にとっては大きな負担。

ICCGソルバー(Factorization部分)

「地球シミュレータ」向け係数格納法

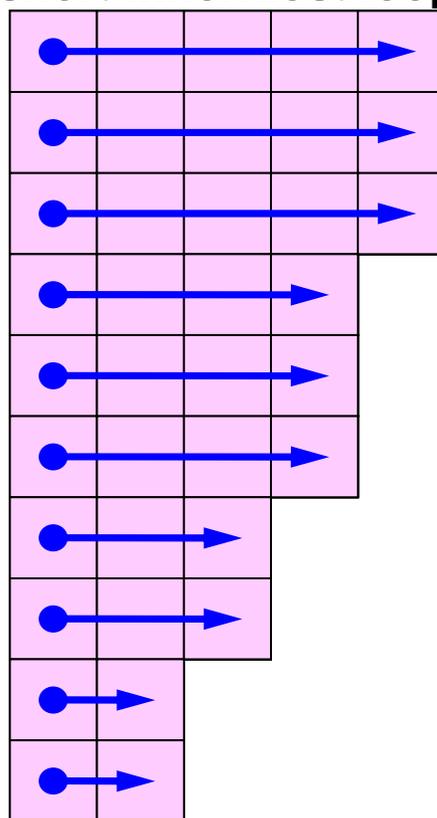
PDJDS/CM-RCM



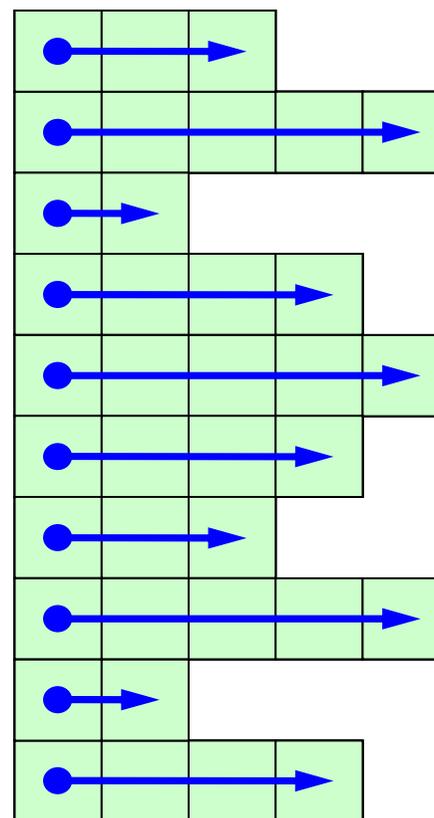
- ベクトル長大
- 連続メモリアクセス

PDCRS/CM-RCM

short innermost loop



CRS no re-ordering

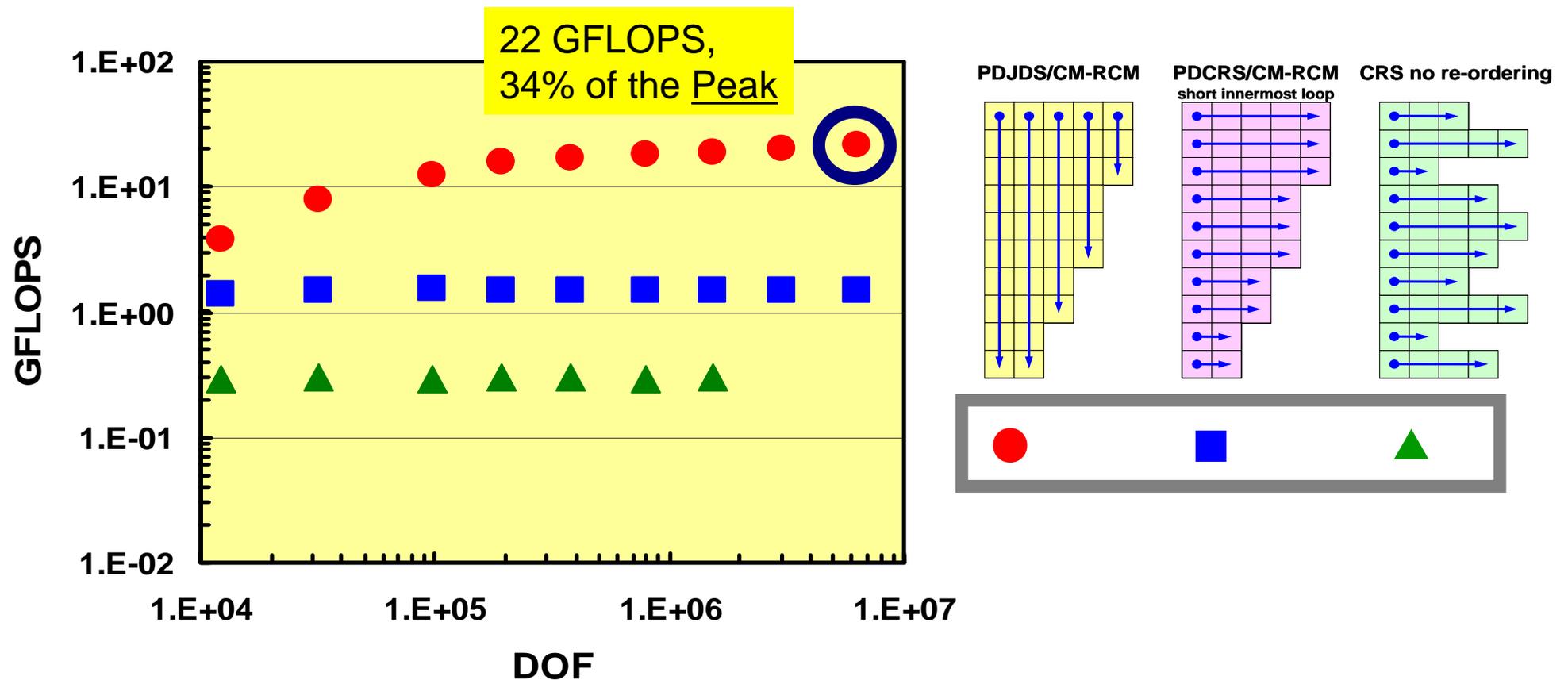


三次元弾性解析:ICCGの性能

Problem Size-GFLOPS

「地球シミュレータ」/SMP node (8 PE's)

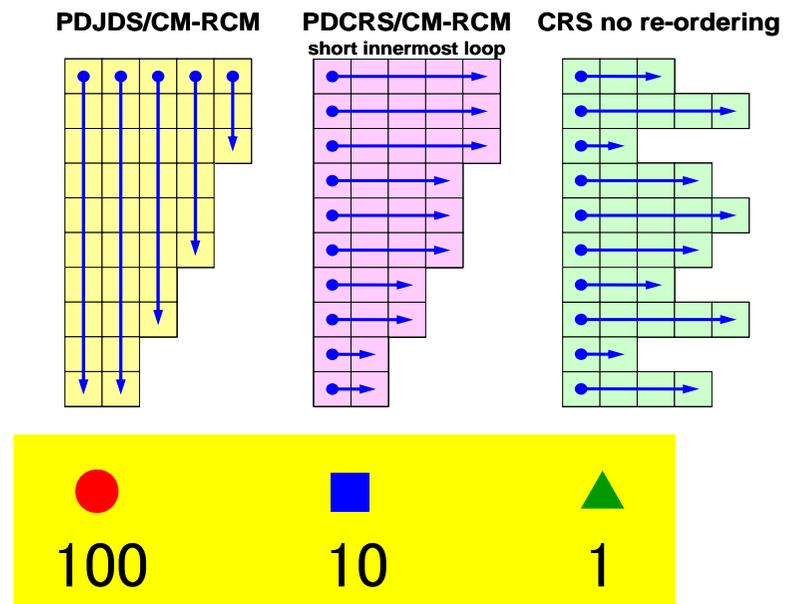
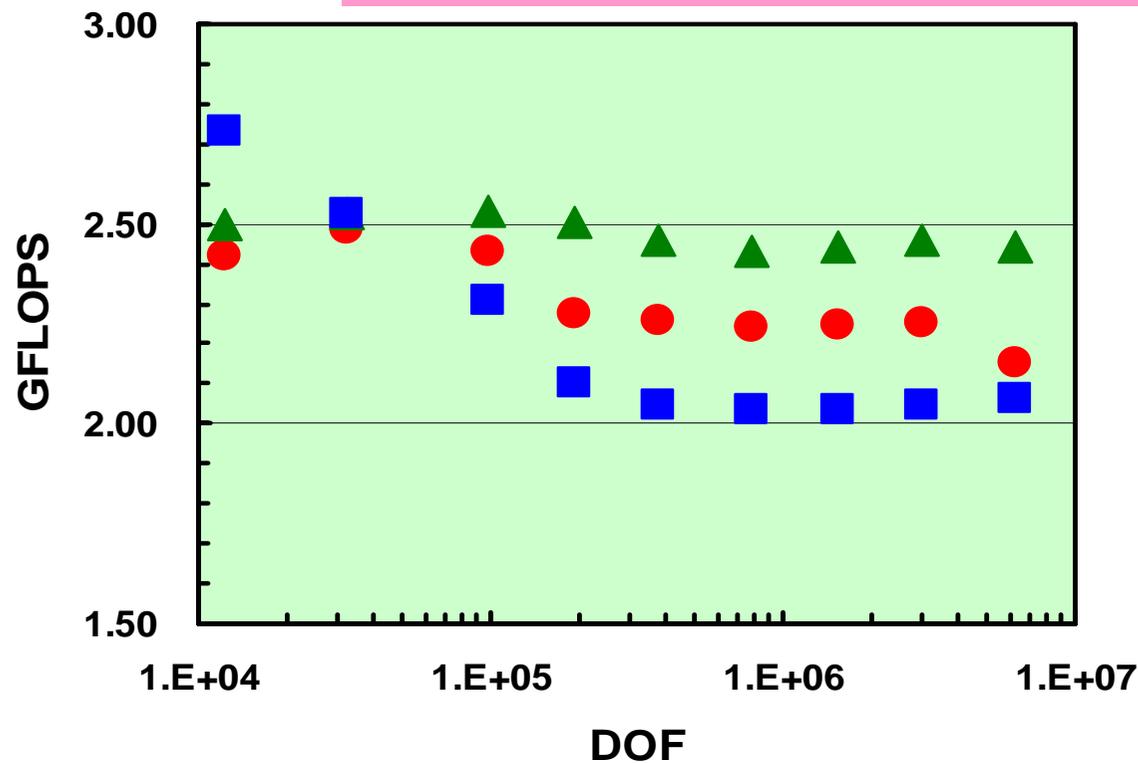
ベクトル長(最内ループ長の影響大)



三次元弾性解析:ICCGの性能

Problem Size-GFLOPS
Intel Xeon 2.8 GHz, 8 PE's

キャッシュサイズの影響大:
何年か後にはこれは考慮不要?



並列可視化: Volume Rendering

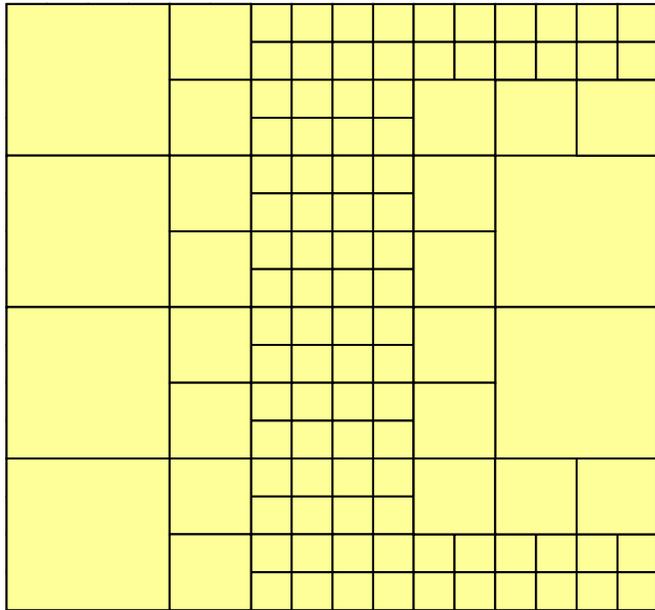
MHD Simulation of Outer Core



並列可視化: Volume Rendering

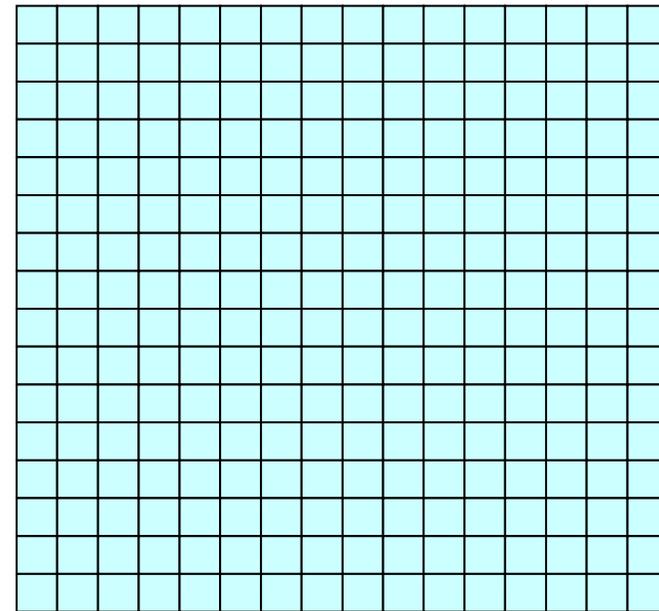
Voxelによる背景格子の利用

On PC Cluster



- Hierarchical Background Voxels
- Linked-List

On Earth Simulator

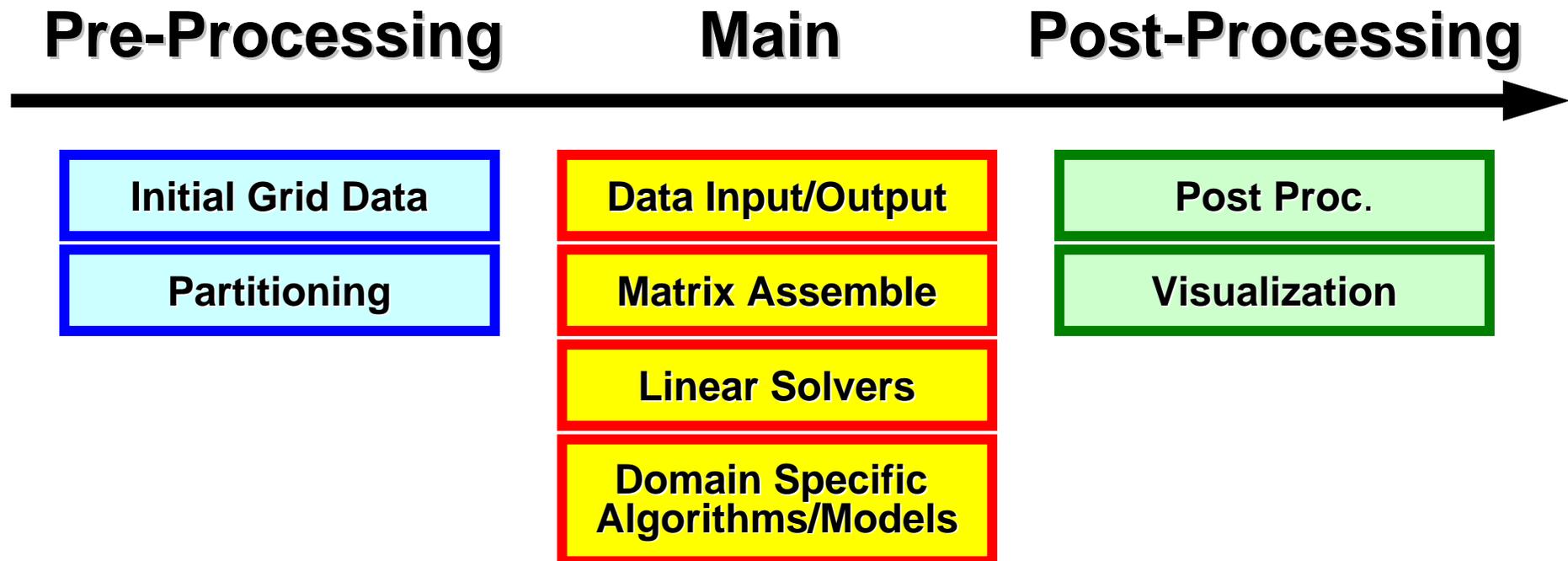


- Globally Fine Voxels
- Static-Array

背 景 (続 き)

- FEM, FDMなどの科学技術計算手法はいくつかの典型的なプロセスから構成されている。

"Parallel" FEM Procedure

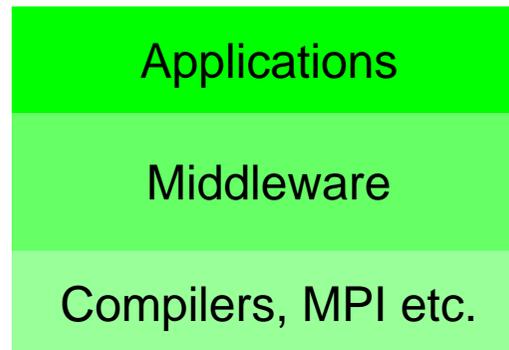


背景(続き)

- FEM, FDMなどの科学技術計算手法はいくつかの典型的なプロセスから構成されている。
- それぞれのプロセスはH/Wごとに最適化可能である。

背景(続き)

- FEM, FDMなどの科学技術計算手法はいくつかの典型的なプロセスから構成されている。
- それぞれのプロセスはH/Wごとに最適化可能である。
- これらのプロセスをアプリケーションとコンパイラの中の「ミドルウェア」によって「隠蔽」できれば有効である。: 一種のライブラリ
 - アプリケーション開発: 効率的, 信頼性, 移植性, 保守性
 - シミュレーション本来の目的に労力を注ぐことができる
 - Application Layer寄りの「ミドルウェア」= **HPC Middleware**



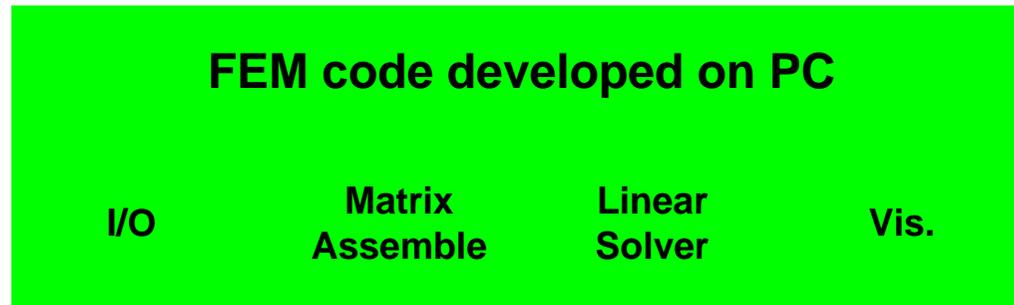
HPC-MWのサポートする機能

「メッシュ生成」はスコープ外

- データ入出力
- 適応格子, 動的負荷分散
- 並列可視化
- 線形ソルバー (AMG, SAI)
- 有限要素処理 (コネクティビティ処理, 係数行列生成)
- カップリング
- メッシュ関連Utility (領域分割等)

HPC Middlewareの利用イメージ

PC(単独CPU)上で開発されたFEMコード



HPC Middlewareの利用イメージ

HPC-MWを使用する場合、共通部分は不要

FEM code developed on PC

HPC Middlewareの利用イメージ

各H/W用に最適化されたライブラリ(HPC-MW)

FEM code developed on PC

I/O

Matrix
Assemble

Linear
Solver

Vis.

HPC-MW for Earth Simulator

I/O

Matrix
Assemble

Linear
Solver

Vis.

HPC-MW for Xeon Cluster

I/O

Matrix
Assemble

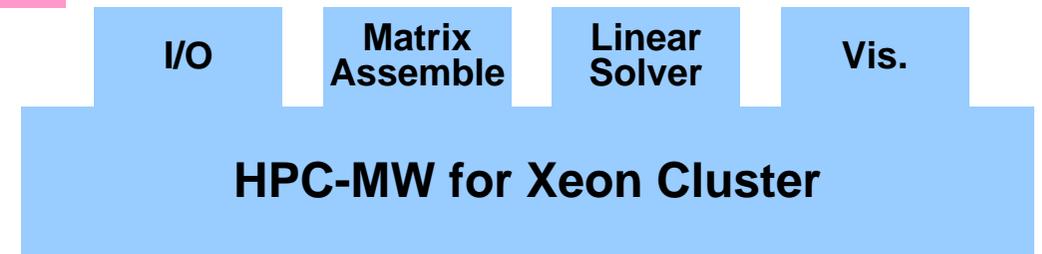
Linear
Solver

Vis.

HPC-MW for Hitachi SR8000

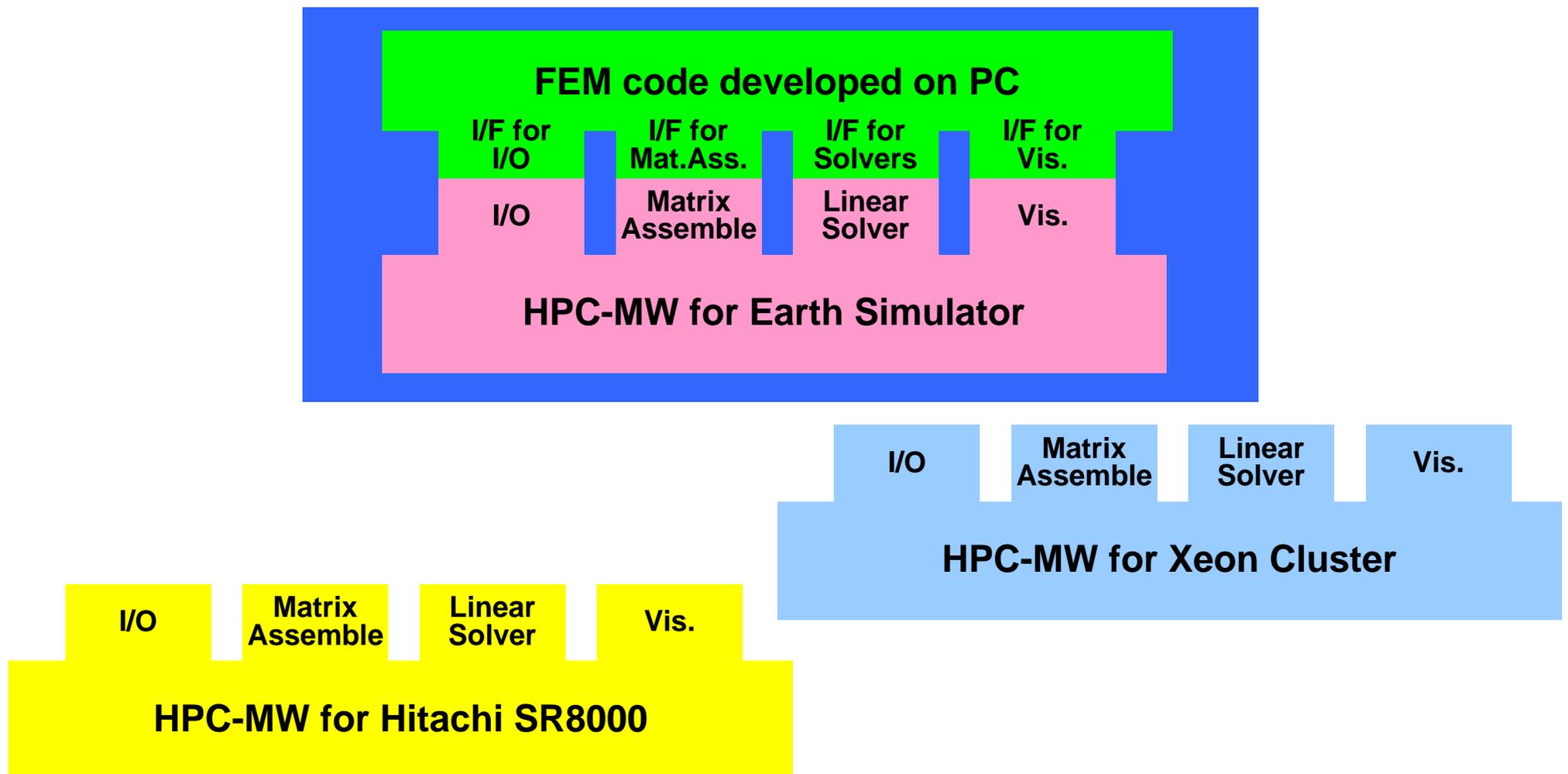
HPC Middlewareの利用イメージ

ライブラリ(HPC-MW)へのインタフェース, 各ライブラリに対して同じインタフェースを使える!



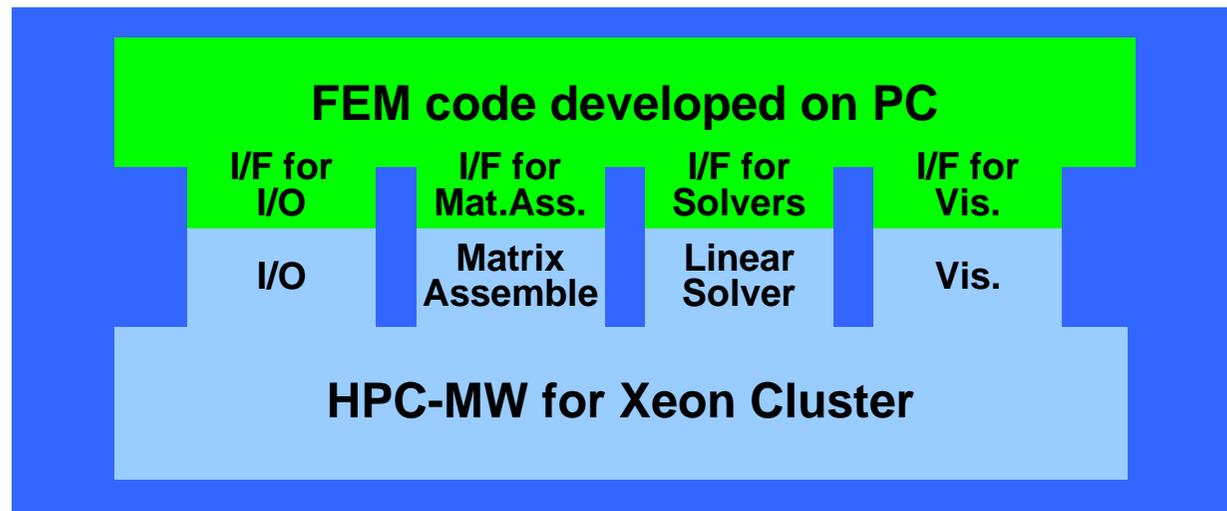
HPC Middlewareの利用イメージ

「地球シミュレータ」向け最適化並列FEMコード



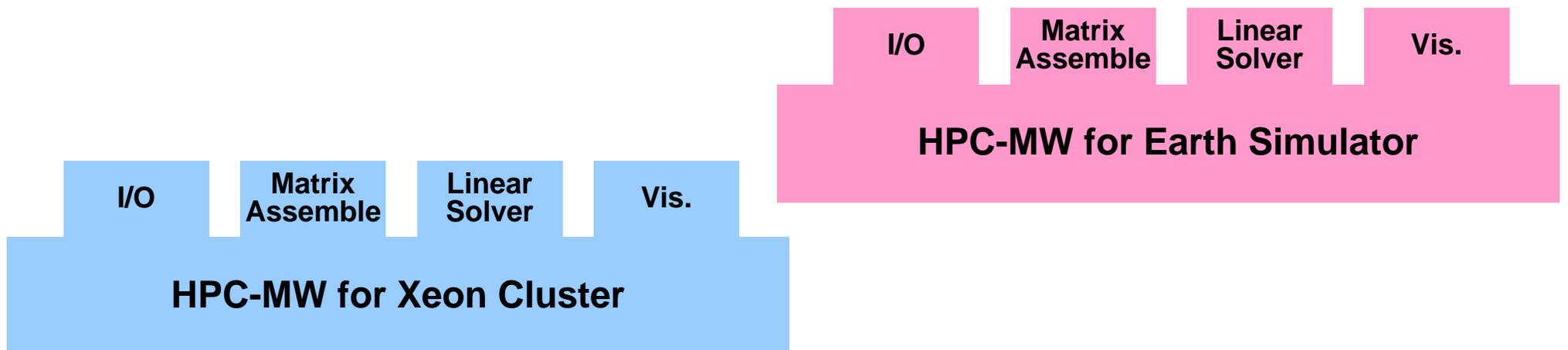
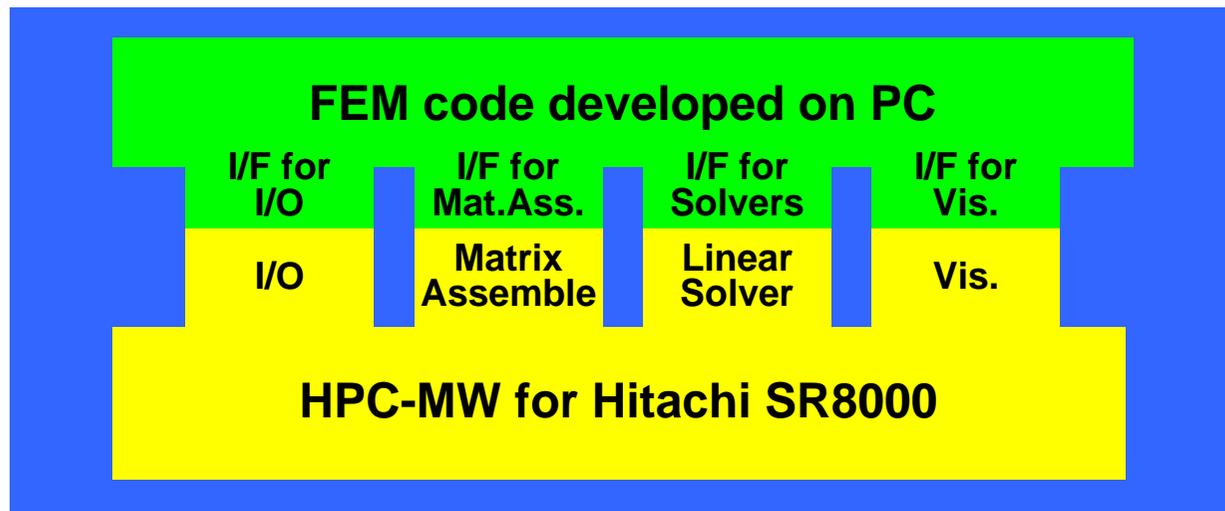
HPC Middlewareの利用イメージ

「Xeon Cluster」向け最適化並列FEMコード



HPC Middlewareの利用イメージ

「Hitachi SR8000」向け最適化並列FEMコード



HPC-MWによって何ができるか？

- PC(1-CPU)用のコードを容易に並列化できる
- ライブラリ型
 - 最も基本的なアプローチ
 - 個々のハードウェアに対して最適化されている
- コンパイラ型
 - 次世代アーキテクチャに対応
 - ライブラリ型HPC-MWをベースにマシンパラメータ等によって、最適化コードを自動生成
 - 不規則データに対する自動プログラミング
- ネットワーク型
 - Gridにおける異種ハードウェア環境
 - 超大規模計算, 連成, Steering Visualization
 - 基本的にライブラリ型を使用: 各ハードウェアに最適化されたHPC-MW

何が新しいか？ 何が嬉しいか？

- アプリケーション中心である（FEM限定）
 - 並列FEMに関するあらゆる機能がサポートされている
 - 単なるライブラリ, 並列化ツールではない
 - 多少, 「汗」をかいて頂きます
- 個別のハードウェアに対する最適化が考慮されている
 - 単体CPU性能
 - 並列性能
- 用途がある程度限定されている分, きめ細かい対応が可能
- 類似研究と比較してもこれらの点は際立った特徴である
 - AZTEC, PETSc, ACTS
 - GridLab
 - ParaWise
 - Common Component Architecture (CCA)

ライブラリ型HPC-MW開発

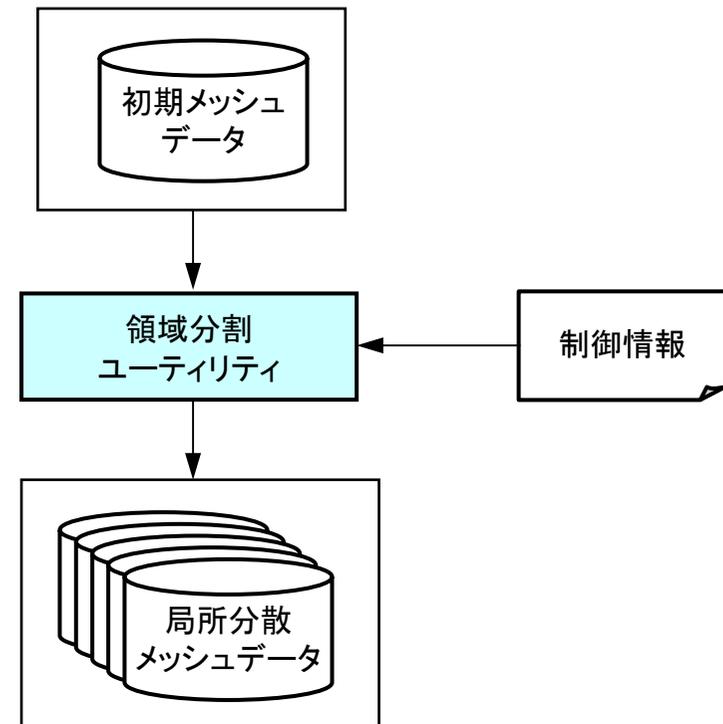
「メッシュ生成」はスコープ外

- データ入出力(商用コードとのインタフェース)
- 適応格子
- 動的負荷分散(+pMETIS)
- 並列可視化
- 線形ソルバー(AMG, SAI)
- 有限要素処理(コネクティビティ処理, 係数行列生成)
- カップリング
- メッシュ関連Utility
- On-lineチュートリアル

データ構造, ハンドリング

- 初期全体メッシュデータ
 - NASTRAN, ABAQUS, GeoFEM, Neutral Fileなど既存アプリケーションのメッシュファイルを直接読み込むことが可能
 - 自由書式による独自のデータフォーマットも準備

- 局所分散データ構造
 - 利用者からは直接見えない
 - 基本的にGeoFEMのデータ構造を踏襲しているが, よりフレキシブルで多機能である
 - 要素ベース分割, 節点ベース分割に対応



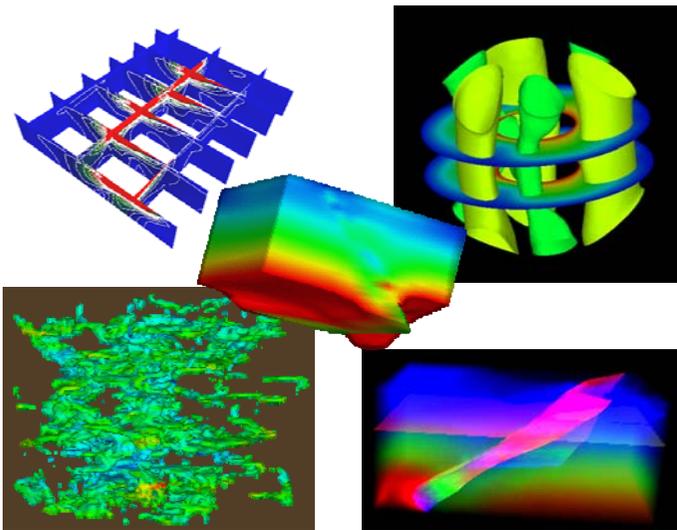
並列可視化手法

Scalar Field

Surface rendering

Interval volume-fitting

Volume rendering



Vector Field

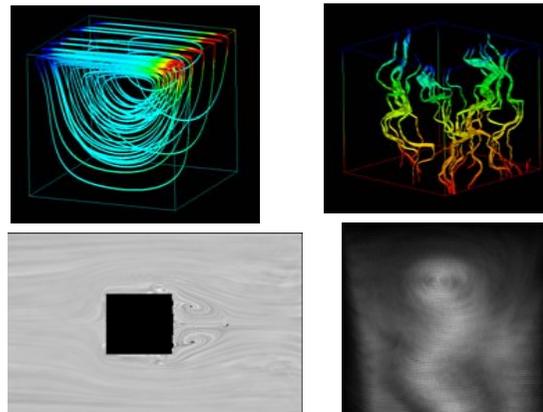
Streamlines

Particle tracking

Topological map

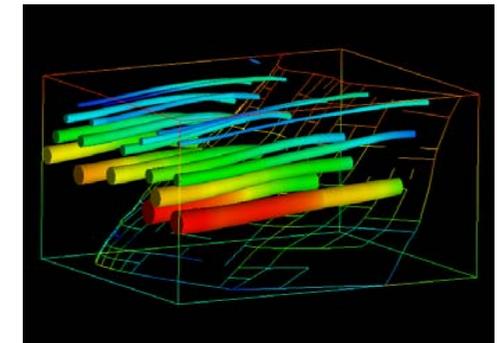
LIC

Volume rendering



Tensor Field

Hyperstreamlines



Extension of functions
Extension of dimensions
Extension of Data Types

並列線形ソルバー

- 前処理付並列反復法の採用
 - 大規模並列計算を実施するための唯一の選択
 - 安定, スケーラブルな前処理手法の開発が必要
- 標準的な手法, 前処理
 - CG, BiCGSTAB, GPBiCG, GMRES
 - IC/ILU(0), (1), (2): ブロックJacobi型アプローチ(並列計算の場合)
 - SAI (Sparse Approximate Inverse)
 - AMG (Algebraic Multigrid)
- 問題依存型の前処理手法の開発も必要である
 - 接触問題, シェル要素
- 外部ライブラリとのインタフェース
 - SuperLU (LBNLで開発された並列直接法ライブラリ)
- PCクラスタから「地球シミュレータ」まで
 - IC/ILU系については既に「地球シミュレータ」に対応