

高性能並列アルゴリズム研究における科学

アプリケーション

高性能並列アルゴリズム・応用ソフトウェア

計算機科学

計算機をモデル化
する科学

数理科学

数理をモデル化
する科学

可視化・データ
解析

認知やデータ解析
の科学

アーキテクチャ・基盤ソフトウェア・プログラミング環境

規模の拡大で顕在化する問題点

規模の拡大によって、それまで見えなかった問題が顕在化してくると予想され、アルゴリズムの革新が必要.

- 誤差の拡大と収束性の悪化
誤差や反復回数の問題規模への依存性.
解が得られなくなると、高速化が意味を持たない.
- 「オーダーの壁」と「レイテンシの壁」
並列規模を上げるだけでは問題規模の拡大に対応できなくなる.
- ハードウェア障害
長期間、すべてのハードが無障害で動作することが期待できない.
- 現在の数値アルゴリズムの多くは、その基礎がシリアル計算機時代のもの（漸化関係を利用）.

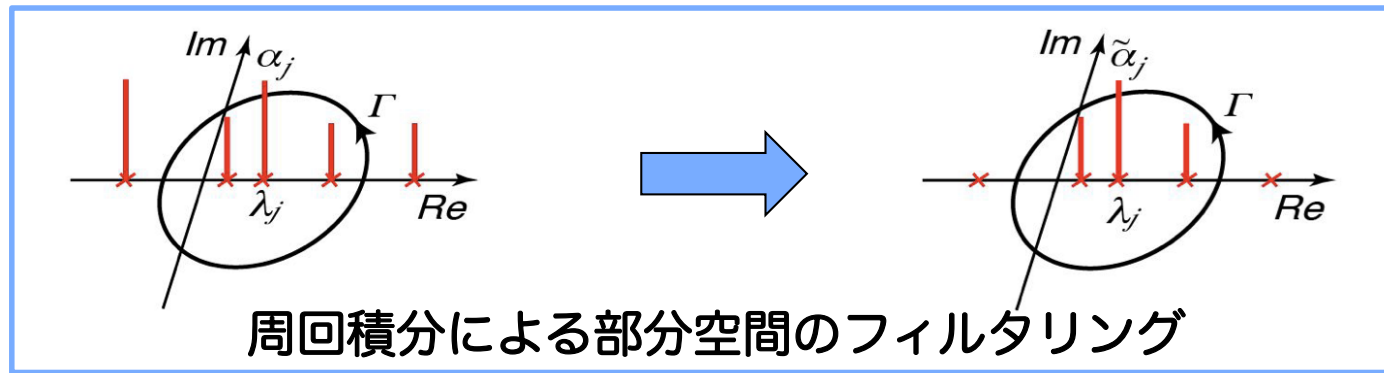
次世代アルゴリズムに求められること

- 並列化のパラダイム転換
処理（ループ）の分割から問題の分割へ
- 演算におけるデータ局所性・再利用性
コア／ソケット／ノード／クラスタ単位の高効率な演算性能
- 耐障害性
アルゴリズムレベルでの耐障害性・計算継続性の保持
- 階層的並列構造
アーキテクチャの階層的な構造に即した並列構造

アルゴリズムの高分散性，耐障害性を実現する一つの方向として階層的並列構造がある

階層的並列構造をもつアルゴリズム

- 階層的並列構造をもつ固有値解法の一例

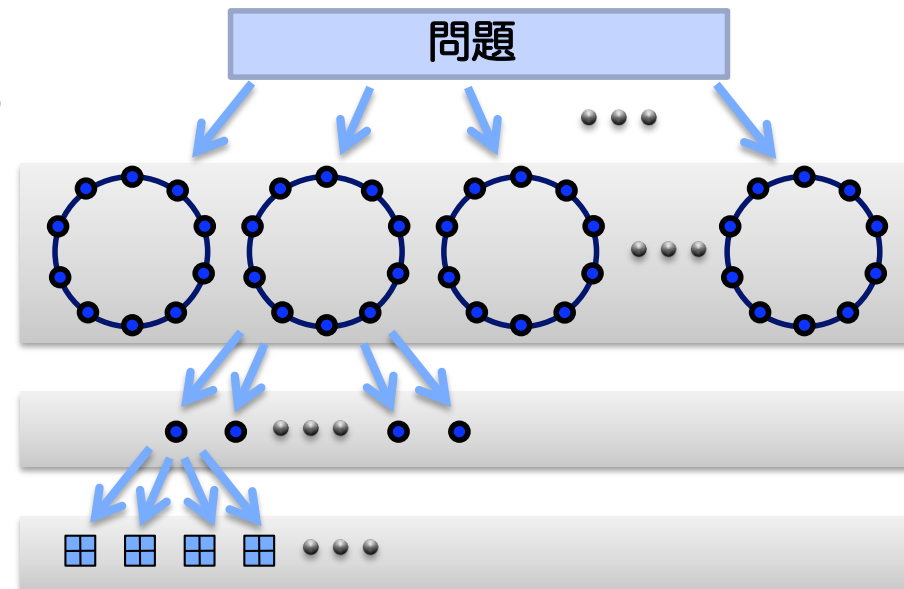


各階層ごとに並列性をもつ

領域ごとの並列性

領域内の並列性

各分点での並列性



アプリケーションとの協働事例 1/2

- 規模の拡大による質的变化

分子軌道計算(FMO-MO)

約17,000原子のタンパク質 (10万基底) の計算で現れる行列は、(最大要素 $\times 10^{-10}$) 以下の要素が95%を占め、密行列と疎行列の中間程度の性質。従来の密行列や疎行列の解法だけでは不十分。疎行列解法と密行列処理を組み合わせた新しい解法が必要。

- 計算オーダーの低減

実空間密度汎関数法(RSDFT)

大規模になると原子数の3乗に比例する計算が優位となる。階層型の解法を適用することで分散型の計算をおこなうことで、高いスケーラビリティを確保。高性能化のためには新たな手法開発が必要になった。

アプリケーションとの協働事例 2/2

- 問題の持つ性質の利用

格子QCD (Lattice QCD)

ブロック部分空間, Krylov部分空間のシフト不変性を利用し, 解法的高速化を図る.

- 不安定性の回避

格子QCD (Lattice QCD)

クリティカルなパラメータ付近で行列の特異性が強くなるため, 精度混合演算で収束性を改善し, 誤差の蓄積も回避. メモリバンド幅が律速となるため, 多倍長演算のコストを隠蔽し, 計算時間の増大を抑える.

- 新たな手法を前提としてモデリングを開発

非線形固有値問題(NEPs)

リニアコライダーの設計, 自動車の連成振動解析, 時間遅れのある微分方程式など. 従来は非線形性問題に帰着するモデリングを避けていたが, モデリングの段階から非線形性を積極的に取り込む.

計算科学研究体制の構築に向けて

- アルゴリズム分野ができる貢献
次世代に向けた新たなアルゴリズムの開発と高性能なライブラリやツールの提供はもちろんのこと.
- 学際的な活動がもたらす技術革新
アプリケーションとアーキテクチャ・基盤ソフトウェアの間をつなぐことで新発見を得る.

学際融合



3つの **A** をつなぐことで新たな段階へ

人材の育成・交流が競争力のカギ

- 学際的な活動のできる人材の決定的な不足
幅広い応用分野の研究者とのコミュニケーション.
- 深い専門性の必要性
ジェネラリストを育てるのではない.
一つの分野の深い専門性（得意技）の上に立脚した上で、学際的な活動ができる人材.
- 高度利用技術の結集と産業への応用
ニーズとシーズの交流から生まれる新たな技術.
- アプリケーション・アーキテクチャからの要請によって発見できる新アルゴリズム
汎用アルゴリズムは簡単には開発できない. 協力関係から新しい知見が得られる.