

# 5年後のセンター運用に必要な技術

## 数値計算ライブラリについて

岩下 武史

(京都大学学術情報メディアセンター)

# 数値計算ライブラリの役割

- プログラムの負担を軽減
- 計算機の性能を高いレベルで引き出すことを可能にする

\* HPC2500運用時の6か月の統計データではユーザの17%がベンダライブラリを利用している

# 5年後のセンタマシンの構成は？

- 時間がないので詳細には考えないことにして・・・
- (マルチコアプロセッサ+アクセラレータ(GPU等))  
× 多数
  - 数値計算ライブラリ開発の立場からは上記とみればいいでしょう

# センターマシン以外の計算機も含めた 利用向け

- **ヘテロジニアスな環境に対応する数値計算ライブラリの開発**
  - GPU等対応数値計算ライブラリ
  - ローエンドな利用(産業応用も含む)においても多くの人が恩恵を受ける
  - **大規模計算の構成要素**として利用されるため、ハイエンドの計算科学にも重要
  - 従来の数値計算ライブラリの開発と目的、開発手順が同一であるので、開発は進むと想定される
    - Trilinos Project / Sandia National Lab.

# センターマシンの効率的な利用のために

- ① センターマシンでプロダクションRUNをするケース
- ② より大規模な計算環境(例えば京)のためのプログラム開発

## ①のユーザに対して

100TFlopsの計算機を有効に使う技術があれば十分

- ▶ 5Pflopsのマシンを50主要グループで使う
- ▶ 現行: 1Tflops (8ノード) / 100万円

## ②のユーザに対して

ハイエンドの計算機(100PFlops~)における計算科学プログラムのために

# 100Tflopsマシンのための数値計算ライブラリ

- ▶ 現行のハイエンドな計算科学プログラムにおけるライブラリ利用
  - ▶ 小さい計算(例えば密行列積)×多数回
  - ▶ プログラムの一部
  - ▶ **プログラムの骨格を構成するような利用が少ない**
    - ▶ 数値計算ライブラリの性能が期待以下である
      - 超大規模並列計算環境を想定した設計や開発が行われていない。開発環境もないに等しい。
    - ▶ プログラムの骨格形成に数値計算ライブラリが対応しない
      - ライブラリ側が規定するデータ構造に合致しない
      - そもそも計算科学プログラムの開発段階でライブラリの利用を想定して設計されていない(対応するライブラリがなかったともいえるし、鶏と卵の関係のようになってしまっている)

# ライブラリ開発における問題点

- **ライブラリの保守、継続的開発**
  - 単発のプロジェクトベースで後が続かない・・・
  - 汎用性の高い設計が必要であるが、逆に限られたルーチンの利用者にとっては使いにくい・・・
  - 計算科学者に分かりやすい入力データの構造を規定しつつ、将来の計算機アーキテクチャの変更や新しいデータ構造に対応するための慎重な設計が必要
  - 特にアイデアがあるわけではないが、継続的に開発ができる枠組みが必要

# 京大センターでの取り組み

- 複数のアプリケーションで利用されている計算科学上重要ないくつかの方法に重点を置く
- プログラムの骨格を作るライブラリ(技法ライブラリ)の開発
  - 従来の数値計算ライブラリとは異なる利用形態
- 従来の数値計算ライブラリよりも上位の層でのライブラリ
  - ある種の問題のみに対応する
  - 従来の数値計算ライブラリからみれば、入力データが限定されている状況にあり、より高性能なプログラムを提供できる



# 今後のこと

- 数値計算ライブラリ(例えばヘテロ環境向け)、技法ライブラリ などの開発は粛々と進めるとして
- ハイエンドのプログラムについてはプログラム開発パラダイムを検討する必要があるかもしれない(常々言われていることかもしれない)
- プログラムのフルモデルチェンジ、新規開発において
  - 計算機科学者や応用数学者がプログラムの設計段階から関与
  - 複数のアプリケーションで使われる部分はインターフェースを共通化し、高水準のチューニングを施して提供する。継続的な開発や保守についても検討