

3. 今後のライブラリへの提言

本WGメンバーや情報提供者としてご参加いただいた方々に、今後のライブラリへの提言を以下のとおり寄稿していただいた。

(敬称略)

■松尾 裕一 (宇宙航空研究開発機構)

今後、ハイブリッド並列等による並列処理の複雑化や GPU 等によるシステム利用の特殊化に対して、利用者が自分でコードを書くという対応は、おそらくどこかで限界に達するであろう。従って、ライブラリ利用の重要性や必要性は増して行くのではないかと思われる。また、数値解析法の成熟とともに、マルチグリッド、解適合 (AMR)、クリロフ反復、領域分割といった複雑な処理が必須となって来ているので、これらのライブラリ化がうまく進めばライブラリ利用を加速させる可能性がある。連立一次、固有値、フーリエ、乱数、補間といった従来のライブラリ捉われない広義のライブラリ開発を期待したい。

■町田 昌彦 (日本原子力研究開発機構)

ライブラリを含めた基盤ソフトの開発を、所属機関 (原子力機構) においても進めてきたが、現状のスパコン等のアーキテクチャーを念頭におくと、普遍的に利用価値の高いものを開発することは、益々と困難な状況となっている。そのような状況の下、ライブラリの役割も変化しているが、速く且つ正確なアウトプットを手軽に得られるというライブラリへのニーズは今後も当然、存在しつづけることは疑う余地はない。特に、正確な計算結果を返すという高い信頼性については、ライブラリの基本的要件であり、高速性能の追及の前に、しばしば、そのプライオリティーが犠牲となることも多いが重要な課題であると思う。しかし、超並列計算機上での大規模計算においてどの程度、既存の数値計算手法を用いて、十分な精度が得られるかについては、あまり十分な研究がなく、今後の更なる計算規模の拡大を前にした場合、系統的且つ十分な研究が必要ではないかと考えており、精度評価とそれへの対応策を今後は更に検討していきたいと考えている。

■井口 寧 (北陸先端科学技術大学院大学)

スーパーコンピュータのアーキテクチャは複雑化しプログラミングに要求されるスキルが高度化している半面、アプリケーションも多様化している。今後の HPC 分野ではライブラリがますます重要になり、大きな要素を占めるようになる。そこで将来のライブラリ設計においては、アーキテクチャの複雑化、アプリケーションの多様化、およびポータビリティの観点から、ライブラリの整理された階層化が重要であると考えられる。現在でもある程度の階層化は行われているが、例えば OSI の 7 層モデルのような、体系的に整理された階層モデルが必要であろう。階層ごとにライブラリを取捨選択できれば、アーキテクチャの進歩やアプリケーションの新たな要求に対して、迅速で低コストにソリューションを提供できるようになると考える。

■野田 茂穂 (理化学研究所)

これからの HPC 適用の裾野を広げて行くには、高性能でかつ利用しやすいライブラリの整備が有効な手段の一つです。アプリケーション開発者との連携だけでなく、計算機アーキテクチャー開発者とも連携し、よりよりライブラリの開発に期待しています。

■今村 俊幸 (理化学研究所計算科学研究機構)

開発する立場から、シミュレーションをする方々は独自に作成するのではなく精度的にも性能的にもよく最適化された数値計算ライブラリを利用していただき、開発者にフィードバックをかけていただきたいと思います。次世代のスパコンでは開発者と利用者の協同作業なしには高度なソフトウェアは成立しないと思います。

■中田 真秀 (理化学研究所)

高精度な計算が一般化する日は近く、今後の発展の応援をお願いします。ご要望などがありましたらお気軽にメール下さい。

■深沢 圭一郎 (九州大学)

ペタスケールの計算ではプロセス並列とスレッド並列を組み合わせたハイブリッド並列が基本であるため、ライブラリにもその対応が必要である。また計算性能が良いことは当たり前だが、低消費電力に対応したのも今後必要と考えられる。

■高橋 大介 (筑波大学)

ポストペタスケール数値計算ライブラリとしては、高い実行性能だけではなく、複雑なシステム構成がアプリケーション開発者から見えないように抽象化されたインタフェースが提供されると共に、パラメータの自動チューニングを行うことによって、アプリケーション開発者の労力を削減することが重要になると考えられる。

■稲富 雄一 (九州大学)

LAPACKが対象としている小規模密行列に対する固有値、固有ベクトル計算や連立方程式求解などの計算、および、数万~数100万次元の大規模疎行列に対する行列計算を、スレッド並列化やプロセス並列化、あるいは、そのハイブリッドにより高速に計算できるようなライブラリが欲しい。また、GPGPUをはじめとしたアクセラレータへの対応も期待している。

■金澤 宏幸 (富士通)

アーキテクチャが変化していくスーパーコンピュータ用の数値計算ライブラリの開発・高度化・高性能化には、これまで以上にアプリケーション等とのコ・デザインが重要であろう。そのためには、OPLのようなオープンな取り組みは有効であり、SS 研としても情報共有等の連携を継続することが期待されていると考える。

■堀田 普介 (富士通)

計算科学アプリケーションを開発する際、最も便利で保守性の高いのはコンピュータが数式（例えば総和や積分）をそのまま理解し、計算してくれることであろう。開発者はアルゴリズムを考えることだけに専念すればよい。しかし、実際には（特にスーパーコンピュータの世界では）まだその域には達しておらず、開発者はアルゴリズム以外のことまで考えなければならない。そうした煩わしい作業を軽減するものとして世の中にライブラリが数多くあるが、まだまだニーズに応えられているとは言い難い。もっと広範、且つ、容易に利用できる（例えば多くのインターフェースを持つ、数式に近い形で呼び出せる）ライブラリの整備が必要であり、そのようなライブラリの出現に期待する。

■林 正和 (富士通)

今後の HPC の数学ライブラリにおいて、分散並列に対応できることは重要な要件の一つとなってきた。しかし、現状のように「アプリケーション担当」「数学ライブラリ担当」と明確な役割分担をしている体制では、「汎用」で高速な数学ライブラリの提供は難しいとも感じた。どの部分をライブラリとして位置付けるのか、また多くのオープンソースをどう利用するのか、という議論はOPLなどの場を通して継続していかなければならないと考える。

■臼井 徹三 (富士通)

分散並列に対応できる汎用的インタフェースの設計をはじめとして、様々な先端的大規模計算機アーキテクチャに適合できる高機能高性能な数値計算ライブラリの実現には技術的困難が大きい。それでも数値計算系ソフトウェアの開発者は、何らかのプログラムインターフェースを介して数学的問題のソルバ処理部分を分担することで、アプリケーションプログラマの負担を軽減できるライブラリあるいはフレームワークを整えたいと考え続けている。未解決課題の存在はむしろ今後の競争力の要になると捉えて、継続的な開発保守組織体制の維持育成が重要である。

■OPL事務局 Ross Nobes (欧州富士通研究所)

SSL II requires re-engineering to include modern algorithms designed for performance on novel, possibly heterogeneous architectures with many threads per node. For example, the reliance on

fork-join parallelism needs to be replaced with graph-based scheduling. This development could be carried out by Fujitsu in collaboration with the Large-Scale Parallel Numerical Computing Technology Research Team at RIKEN AICS and the Innovative Computing Laboratory at the University of Tennessee (led by Prof. Jack Dongarra). Initially, the focus would be on dense and sparse linear algebra (used in High Performance Linpack and the new High Performance Conjugate Gradient benchmarks).