「ポストペタスケール高性能計算に資する

システムソフトウェア技術の創出し

H23 年度 実績報告

平成22年度採択研究代表者

中島研吾

東京大学情報基盤センター・教授

自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境

§1. 研究実施体制

- (1)中島グループ
 - ① 研究代表者:中島研吾 (東京大学情報基盤センター・教授)
 - ②研究項目:自動チューニング機構を有するポストペタスケールアプリケーション開発・実行環境のための基盤ソフトウェア
 - ・ppOpen-HPC の基本設計
 - ・ppOpen-MATH の研究開発
 - ・ppOpen-AT の研究開発
 - ・ppOpen-SYS の研究開発
- (2) 佐藤グループ
 - ① 主たる共同研究者: 佐藤正樹 (東京大学大気海洋研究所・教授)
 - ②研究項目:ポストペタスケールアプリケーション連成機構
 - ・ppOpen-HPC の基本設計
 - ・ppOpen-APPL/FVM の研究開発
 - ・ppOpen-MATH/MP の研究開発
- (3) 古村グループ
 - ① 主たる共同研究者: 古村孝志 (東京大学大学院情報学環・教授)
 - ②研究項目: 差分法に基づくポストペタスケールアプリケーション開発環境
 - ・ppOpen-APPL/FDM の研究開発
- (4) 奥田グループ
 - ① 主たる共同研究者: 奥田洋司 (東京大学人工物工学研究センター・教授)

- ②研究項目:有限要素法に基づくポストペタスケールアプリケーション開発環境
 - ・ppOpen-APPL/FEM の研究開発
 - ・混合精度演算手法に関する研究

(5) 岩下グループ

- ① 主たる共同研究者: 岩下武史 (京都大学学術情報メディアセンター・准教授)
- ②研究項目:境界要素法に基づくポストペタスケールアプリケーション開発環境
 ・ppOpen-APPL/BEM の研究開発

(6) 阪口グループ

- ①主たる共同研究者:阪口 秀 (海洋研究開発機構・プログラムディレクター)
- ②研究項目:個別要素法に基づくポストペタスケールアプリケーション開発環境
 - ・ppOpen-APPL/DEM の研究開発
 - ・通信削減アルゴリズムの研究開発

§ 2. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(3-1)に対応する)

(1)概要

平成23年度は、平成24年9月初旬に予定されている第一回公開を目指した研究開発を実施した。第一回公開では、ppOpen-APPL、ppOpen-ATが様々なマルチコア、GPU環境で稼働することを検証するためのppOpen-APPL、ppOpen-MATH/VIS、ppOpen-AT/STATICについて最低限の機能を満足する機能の公開を実施する予定である50。

(2) ppOpen-APPL

平成 23 年度は、まず各離散化手法における必要データ、内容、格納形式等について整理、検討を実施し、共通入出力インタフェースの設計を実施し、netCDF フォーマットをベースとしたファイルフォーマットとすることに決定した。netCDF をベースとすることでベクトルデータの記述しやすさと任意データへのアクセス性、ユーザへの親和性も兼ね備えることが期待できる 5)。

本年度はppOpen-APPLの①データ入出力,②領域間通信,③簡易領域分割ユーティリティ, ④係数マトリクス生成部・陽解法ソルバー,⑤離散化手法の特性を考慮した前処理付き反復法等 の各機能の設計,実装を行うとともに,ppOpen-ATの評価用プログラムの開発,実装を行った。

ppOpen-APPL/FEM, ppOpen-APPL/FVM, ppOpen-APPL/DEMについては, 本チームの各メンバーが開発した既存のフレームワーク(HEC·MW, HPC·MW, DEMIGLACE)に基づき,各機能の設計,アルゴリズム開発,実装,動作確認,大規模問題への適用を実施した⁶⁾。差分法,境界要素法については各機能のモジュール化を検討し,各機能の基本設計,プロトタイプ開発を行うとともに,ppOpen-ATグループとも共同して実アプリケーションを使用した高速化,最適化に関する検討を実施した^{1,2,7,8,10,11)}。

(3) ppOpen-MATH

ppOpen-MATH/MP は、複数のアプリケーションを結合し、大規模データ転送、変換を実施する弱連成のためのカップリングツールの開発である。本年度はツールの開発に向けて、カップラーの検討とマッピングツールの開発、大気海洋モデル(NICAM, COCO)を用いた結合試験を行った(図 1)。多重格子法ライブラリppOpen-MATH/MGについては、粗い格子レベルにおけるソルバーの収束性改善、通信量削減に関する検討を実施した9。並列可視化ライブラリppOpen-MATH/VISについては、一

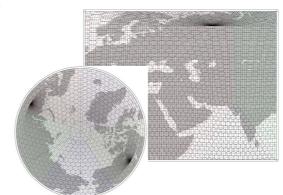


図 1 COCO と NICAM の格子配置 赤: NICAM, 黒: COCO

様差分格子を対象としたリアルタイム可視化処理ライブラリのプロトタイプを実施した。

(4) ppOpen-AT

ppOpen-ATは、ppOpen-HPCのプログラムソースコードの最適化に関し自動チューニング (AT)機能を提供する。計算実行前に静的な最適化を実現するppOpen-AT/STATICについては、本年度はppOpen-APPL、ppOpen-MATH等の自動チューニングのための機能を開発するのではなく、ppOpen-APPLのサポートする各離散化手法に基づく1CPU用サンプルプログラムを対象として、疎行列解法、係数マトリクス生成部、陽解法ソルバー等のメモリアクセス性能の最適化に特に着目して、研究開発を実施した。本年度は、本チームのメンバーにより開発された既存のAT機能付言語ABCLibScriptに基づくppOpen-ATの基本機能を設計、プロトタイプの開発を実施し、差分法陽解法コード、境界要素法コードを対象とした検証を実施した12)。①ループアンローリング機能、②CPU-GPU切り替え機能の他、③ループ分割・融合に基づく陽解法用コード最適化機能を新規に開発した。図2は差分法陽解法コードをHitachi SR16000(IBM Power7)1ノード上でATにより最適化した例である。オリジナルコード(#1)を含め全部で7種類の最適化が試されている。コア数によって最適な方法の自動選択が可能である(#4、#7)(図2(a)参照)。

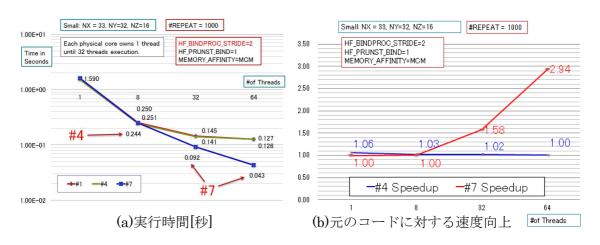


図 2 差分法陽解法コードへの AT 適用の効果

この他オープンソース CFD ツール群 OpenFOAM において、主演算となる疎行列・ベクトル積演算部に対して構造格子に特化したデータ構造に基づき、ppOpen-AT で提供される AT 機能の予備評価を実施したところ、従来の 10 倍を超える速度向上が実現可能であることがわかった。この他、有限要素法プログラムによって CPU-GPU ヘテロジニアス環境向けの最適化に関する検討を実施した 4,130。

(5) ppOpen-SYS

ppOpen-SYS/COMM は、マルチコアクラスタ、GPU クラスタを対象としたノード間通信ライブラリである。本年度は各離散化手法における通信パターンを検討し、通信負荷軽減のための手法

について検討した。ppOpen-SYS/FT は耐故障機能について容易な記述環境を提供するライブラリである。本年度はプログラムのコアループを仮想クロックとして用い、自主的なコーディネーションを行うことで、外部から与えられる最適周期に対応し、同期を極力行わない手法を検討した。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

- Y. Takahashi, H. Kaimori, A. Kameari, T. Tokumasu, M, Fujita, S. Wakao, T. Iwashita, K. Fujiwara, and Y. Ishihara, Convergence Acceleration in Steady State Analysis of Synchronous Machines Using Time-Periodic Explicit Error Correction Method, IEEE Transaction of Magnetics, vol. 47, no. 5, pp. 1422-1425, May 2011 (DOI: 10.1109/TMAG.2010.2091947)
- 2. Ohtani, K. Hirahara, Y. Takahashi, T. Hori, M. Hyodo, H. Nakashima, and T. Iwashita, Fast Computation of Quasi-Dynamic Earthquake Cycle Simulation with Hierarchical Matrices, Procedia Computer Science, vol. 4, pp. 1456-1465, June 2011. (DOI: 10.1016/j.procs.2011.04.158)
- 3. Kazuki Yoshizoe, Akihiro Kishimoto, Tomoyuki Kaneko, Haruhiro Yoshimoto and Yutaka Ishikawa, Scalable Distributed Monte-Carlo Tree Search, Proceedings of the Fourth Annual Symposium on Combinatorial Search (SoCS 2011), pp. 180-187, Barcelona, Spain, July 2011
- 4. 大島聡史, 林雅江, 片桐孝洋, 中島研吾, 三次元有限要素法アプリケーションにおける行列生成処理の CUDA 向け実装, ,情報処理学会研究報告(HPC-130-11), July 2011
- 5. 中島研吾, 佐藤正樹, 古村孝志, 奥田洋司, 岩下武史, 阪口 秀, 自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境 ppOpen-HPC, 情報処理学会研究報告 (HPC-130-44), July 2011
- 6. Hori, T. and H. Sakaguchi, Mechanism of dcollement formation in subduction zones, Geophysical Journal International, 187, 1089-1100, doi:10.1111/j. 1365-246X.2011.05204.x, October 2011.
- 7. Y. Takahashi, T. Iwashita, H. Nakashima, S. Wakao, K. Fujiwara, and Y. Ishihara, Micromagnetic Simulations of Perpendicular Recording Head Using the Parallel Fast Multipole Method Specialized for Uniform Brick Elements, IEEE Transaction of Magnetics, vol. 47, no. 10, pp. 3805-3808, October 2011. (DOI: 10.1109/TMAG.2011.2154305)
- 8. 森田樹一郎, 西村 直志, 周期性の乱れを含む領域における Helmholtz 方程式の境界値

- 問題の解法について, 計算数理工学論文集, vol. 11, pp. 65-70, November 2011
- 9. Nakajima, K., New strategy for coarse grid solvers in parallel multigrid methods using OpenMP/MPI hybrid programming models, ACM Proceedings of Proceedings of the 2012 International Workshop on Programming Models and Applications for Multicores and Manycores, ACM Digital Library, February 2012 (DOI: 10.1145/2141702.2141713)
- 10. Noguchi, S., T. Maeda, and T. Furumura, FDM simulation of an anomalous later phase from the Japan Trench subduction zone earthquakes, Pure and Applied Geophysics, 2011 (accepted)
- 11. Maeda, T., and T. Furumura, FDM Simulation of Seismic Waves, Ocean Acoustic Waves, and Tsunamis Based on Tsunami-Coupled Equations of Motion, Pure and Applied Geophysics, 2011 (accepted)
- 12. 片桐孝洋, ppOpen-AT:ポストペタスケール時代の数値シミュレーション基盤ソフトウェア ppOpen-HPC のための自動チューニング基盤, 京都大学数理解析研究所研究集会「科学技術計算における理論と応用の新展開」, 京都大学数理解析研究所講究, 2012 (in press)
- 13. Satoshi Ohshima, Masae Hayashi, Takahiro Katagiri and Kengo Nakajima, Implementation and Evaluation of 3D Finite Element Method Application for CUDA, 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), 2012 (accepted)

(3-2) 知財出願

- ① 平成23年度特許出願件数(国内1件)
- 1. 阪口 秀, 西浦 泰介,「解析装置,解析方法,解析プログラム及び記録媒体」,特願 2011-228247
- ② CREST 研究期間累積件数(国内 1件)