

「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」

H23 年度 実績報告

平成 22 年度採択研究代表者

丸山直也

東京工業大学 学術国際情報センター・助教

高性能・高生産性アプリケーションフレームワークによるポストペタスケール
高性能計算の実現

§1. 研究実施体制

(1)「丸山」グループ

① 研究代表者: 丸山 直也 (東京工業大学学術国際情報センター、助教)

② 研究項目

・高い生産性と性能を両立する格子系流体向けアプリケーションフレームワーク

(2)「青木」グループ

① 主たる共同研究者: 青木 尊之 (東京工業大学学術国際情報センター、教授)

② 研究項目

・格子系流体アプリケーションの大規模スーパーコンピュータにおける人手による参照実装

(3)「田浦」グループ

① 主たる共同研究者: 田浦 健次郎 (東京大学大学院情報理工学系研究科電子情報学専攻、
准教授)

② 研究項目

・大域アドレス空間モデルと軽量マルチスレッドによるスケラブルランタイム

(4)「泰岡」グループ

① 主たる共同研究者: 泰岡 顕治 (慶應義塾大学理工学部機械工学科、教授)

② 研究項目

・分子動力学アプリケーションの大規模スーパーコンピュータにおける人手による参照実装

§ 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)

2.1 研究のねらい

本研究チームのねらいはアプリケーションドメイン特化型のソフトウェアスタックを構成し、それによって高い生産性と性能の両立をポストペタスケールスーパーコンピュータで達成することである。具体的には、アプリケーションドメインとして格子系流体シミュレーションおよび分子動力学法を対象とし、それぞれについてアプリケーションフレームワークをランタイムおよびプログラミング技術を応用することで構成する。これを達成するための本研究課題は以下の5つの研究項目から構成される。

【項目1】格子系流体アプリケーションの大規模スーパーコンピュータにおける人手による参照実装

【項目2】分子動力学アプリケーションの大規模スーパーコンピュータにおける人手による参照実装

【項目3】高い生産性と性能を両立する格子系流体向けアプリケーションフレームワーク

【項目4】大域アドレス空間モデルと軽量マルチスレッドによるスケーラブルランタイム

【項目5】高い生産性と性能を両立する分子動力学法向けアプリケーションフレームワーク

平成23年度はこれらの項目の内、項目1から項目4について以下をマイルストーンとして研究を実施した。

【項目1】格子系流体アプリケーションの大規模スーパーコンピュータにおける人手による参照実装(青木グループ)

- AMR の導入を想定した均一構造格子での高次精度移流方程式計算に対する人手による GPU 実装とチューニングによる実行性能の評価とフレームワークへのリクエストの抽出
- AMR の導入を想定した均一構造格子での圧縮性流体計算の人手による GPU 実装

【項目2】分子動力学アプリケーションの大規模スーパーコンピュータにおける人手による参照実装(泰岡グループ)

- GPU を用いた FMM の TSUBAME2 上での手動最適化

【項目3】高い生産性と性能を両立する格子系流体向けアプリケーションフレームワーク(丸山グループ)

- 構造格子差分法向けフレームワークの GPU クラスタ向け実装の初期プロトタイプ

- CPU とアクセラレータのハイブリッドコード生成のプロトタイプ

【項目4】大域アドレス空間モデルと軽量マルチスレッドによるスケーラブルランタイム(田浦グループ)

- 軽量マルチスレッド処理系による木構造問題のノード内での評価
- 軽量マルチスレッド処理系ノード間負荷分散方式の実装と評価

2.2 これまでの研究の概要、進捗状況、および今後の見通し

以下に本年度取り組んだ研究項目について個別にまとめる。

【項目1】格子系流体アプリケーションの大規模スーパーコンピュータにおける人手による参照実装

格子系流体アプリケーションをポストペタスケールのスパコンで十分実行性能を引き出すように参照実装として、構造格子の格子系流体アプリケーションと非常に類似した計算内容のフェーズフィールド法による合金の樹枝状凝固シミュレーションを人手で GPU 計算に実装した。高度なチューニングを施すことで TSUBAME 2.0 の 4,000 GPU を用いて 2.0 PFLOPS(単精度)の実行性能を達成した[11]。また、GPU の津波計算に静的な適合格子(LMR)を手動で実装した。また、AMR への拡張性を十分視野に入れた圧縮性流体計算に対しても同様に参照実装を行い、TSUBAME 2.0 での実行性能を検証した。非構造格子の流体計算については、平成 24 年度に検討を継続することとした。

【項目2】分子動力学アプリケーションの大規模スーパーコンピュータにおける人手による参照実装

2011 年度は GPU を用いた FMM の TSUBAME2 上での手動最適化を行った。まず渦法を用いた乱流計算において TSUBAME2 の 4,096GPU を用いて 1Pflops の速度を達成した。FFT を使った手法に比べノード間通信が少ないことが示された。GPU カーネルについては Fermi 世代への最適化を行った。また、FMM のプログラムを MD のプログラムから呼べるようにライブラリ化し、動作確認を行った結果、FMM のノード間通信のパターンに関して今後改善が必要であることが分かった。本ライブラリを改良し、来年度からは「動的負荷分散」機能を搭載するように改良していく予定である。

【項目3】高い生産性と性能を両立する格子系流体向けアプリケーションフレームワーク

均一構造格子差分法向けアプリケーションフレームワーク **Physis** のプロトタイプ実装およびその性能評価を行った。現在のところ GPU クラスタ環境等において自動並列化を達成しており、さらに通信と計算のオーバーラップなどの最適化を実装している。本年度は比較的単純な差分法アプリ

ケーションについて Physis DSL を用いた実装を行い、TSUBAME2.0 の最大 512GPU までを用いた性能評価を行い良好な性能スケーリングを確認した [10]。今後はフレームワークの性能改善や耐故障性の実現などを行う。また研究項目1で開発されている人手による参照実装アプリケーションについて本 DSL を用いた実装を行い、性能や生産性の比較評価を行う。

【項目4】大域アドレス空間モデルと軽量マルチスレッドによるスケーラブルランタイム

研究計画マイルストーンの一つ目である軽量マルチスレッド処理系による木構造問題のノード内での評価に対応し、軽量マルチスレッド処理系 MassiveThreads の実装ならびにオープンソース化、行列積、LU 分解、AMR を用いた評価、Cray の提唱する並列言語 Chapel への組み込みを行った。本処理系は Chapel の次期バージョンで用いられる予定である。二つ目のマイルストーンである軽量マルチスレッド処理系のノード間負荷分散方式の実装と評価に対応し、分散メモリ MPP 上での MassiveThreads の実装を行った。今後の見通しとして、FMM、AMR での MassiveThreads の評価、それらの知見を元にした、差し替え可能な負荷分散インタフェースの設計と評価、MPP 上での MassiveThreads 処理系、そのための大域アドレス空間ライブラリの高性能化、堅牢化を行いオープンソースソフトウェアの公開へ向けて研究を進める。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

● 論文詳細情報

1. Mark Silberstein, Naoya Maruyama, “An exact algorithm for energy-efficient acceleration of task trees on CPU/GPU architectures” Proceedings of the 4th Annual International Conference on Systems and Storage (SYSTOR '11), pp. 7:1-7:7, DOI: 10.1145/1987816.1987826 (Best Paper), May 2011
2. T. Shimokawabe, T. Aoki, J. Ishida, K. Kawano, C. Muroi, “145 TFlops Performance on 3990 GPUs of TSUBAME 2.0 Supercomputer for an Operational Weather Prediction” First International Workshop on Advances in High-Performance Computational Earth Sciences, June 2011
3. Naoyuki Onodera, Takayuki Aoki, Hiromichi Kobayashi, “Large-eddy simulation of turbulent channel flows with conservative IDO scheme” Journal of Computational Physics, Volume 230, Issue 14, pp.5787-5805, June 2011
4. 岡元太郎, 竹中博士, 中村武史, 小林直樹, 青木尊之, “フル GPU 計算による地震波伝播シミュレーション” GTC Workshop Japan 2011, July 2011
5. T. Miki, X. Wang, T. Aoki, Y. Imai, T. Ishikawa, K. Takase and T. Yamaguchi,

- “Patient-specific modelling of pulmonary airflow using GPU cluster for the application in medical practice” *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, DOI: 10.1080/10255842.2011.560842, August 2011
6. Xian Wang and Takayuki Aoki, “Multi-GPU performance of incompressible flow computation by lattice Boltzmann method on GPU cluster” *Parallel Computing*, pp.521-535, DOI: 10.1016/j.parco.02.007, September 2011
 7. 丹愛彦, 青木尊之, 井上景介, 吉谷清文, “回転体に駆動される気液二相流の数値計算” *日本機械学会論文集 B 編*, Vol.77, No.781, pp. 1699-1714, September 2011
 8. Takayuki Aoki, Sato Ogawa and Akinori Yamanaka, “Multiple-GPU Scalability of Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification” *Progress in Nuclear Science and Technology*, Vol.2, pp.639-642, October 2011
 9. Leonardo Arturo Bautista Gomez, Dimitri Komatitsch, Naoya Maruyama, Seiji Tsuboi, Franck Cappello, Satoshi Matsuoka, and Takeshi Nakamura, “FTI: High Performance Fault Tolerance Interface for Hybrid Systems” *Proceedings of the 2011 ACM/IEEE conference on Supercomputing (SC'11)*, November 2011
 10. Naoya Maruyama, Tatsuo Nomura, Kento Sato, Satoshi Matsuoka, “Physis: An Implicitly Parallel Programming Model for Stencil Computations on Large-Scale GPU-Accelerated Supercomputers” *Proceedings of the 2010 ACM/IEEE conference on Supercomputing (SC'11)*, November 2011
 11. Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Tomohiro Takaki, Akinori Yamanaka, Akira Nukada, Toshio Endo, Naoya Maruyama, Satoshi Matsuoka, “Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer” *Proceedings of the 2010 ACM/IEEE conference on Supercomputing (SC'11)*, November 2011
 12. Taro Okamoto, Hiroshi Takenaka, Tatsuhiko Hara, Takeshi Nakamura, and Takayuki Aoki, “Rupture Process And Waveform Modeling of The 2011 Tohoku-Oki, Magnitude-9 Earthquake” Abstract U51B-0038 presented at 2011 Fall Meeting, AGU, December 2011
 13. Masaki Hiratsuka, Ryo Ohmura, Amadue K. Sum, Kenji Yasuoka, “Molecular Vibrations of Methane Molecules in the Structure I Clathrate Hydrate from Ab Initio Molecular Dynamics Simulation” *The Journal of Chemical Physics*, pp. 136, 044508(2012), DOI : 10.1063/1.3677231, January 2012
 14. Nan Dun, Kenjiro Taura, “An Empirical Performance Study of Chapel Programming Language” (to be published) 17th International Workshop on High-Level Parallel Programming Models and Supportive Environments (HIPS) 2012, May 2012

15. Akihiro Nomura, Yutaka Ishikawa, Naoya Maruyama, Satoshi Matsuoka, “Design and Implementation of Portable and Efficient Non-blocking collective Communication” (to be published) The 12th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid2012), May 2012

(3-2) 知財出願

① 平成 23 年度特許出願件数(国内 0 件)

② CREST 研究期間累積件数(国内 0 件)