

「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」  
平成 24 年度採択研究代表者

H27 年度  
実績報告書

朴 泰祐

国立大学法人 筑波大学 システム情報工学研究科  
教授

ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発

## § 1. 研究実施体制

### (1) 「TCA システムソフトウェア開発」グループ

- ① 研究代表者: 朴 泰祐 (筑波大学システム情報工学研究科、教授)
- ② 研究項目
  - ・TCA アーキテクチャ実装システムソフトウェアの開発
  - ・TCA アーキテクチャ上でのアプリケーションインタフェース及び通信ライブラリ開発
  - ・基本アプリケーションの実装と性能評価

### (2) 「TCA ハードウェア開発」グループ

- ① 主たる共同研究者: 天野英晴 (慶應義塾大学情報工学科、教授)
- ② 研究項目
  - ・PEACH3 の開発
  - ・PEACH2 の余剰 FPGA 資源上へのアクセラレータの実装
  - ・自動オフローディング機構の開発

### (3) 「TCA 向け並列記述言語開発」グループ

- ① 研究代表者: 村井 均 (理化学研究所計算科学研究機構プログラミング環境研究チーム、研究員)
- ② 研究項目
  - ・XcalableACC 言語仕様の拡張
  - ・XcalableACC 処理系の開発および評価
  - ・XcalableACC によるアプリケーション開発
  - ・XcalableMP/ACC プログラムの正当性チェック機能の開発

(4)「TCA 向け計算科学アプリケーション開発」グループ(研究機関別)

① 主たる共同研究者:梅村 雅之 (筑波大学数理物質系、教授)

② 研究項目

- ・ TCA 機構向け重力多体計算及び輻射流体計算コードの開発
- ・ TCA 機構向け素粒子分野の格子 QCD コードの開発
- ・ TCA 機構向け気象学分野の都市型気象計算コード (LES) 開発
- ・ TCA 機構向け物質・生命科学分野の Car-Parrinello 分子動力学法及びフラグメント分子軌道(FMO)計算コード開発

## § 2. 研究実施の概要

本研究課題では、CPU の slave device として位置づけられる、GPU に代表される演算加速装置と並列ノード間通信機構の強連結システムコンセプトである TCA (Tightly Coupled Accelerators)の提案とこれに基づくシステムソフトウェア及びハードウェアの開発、その通信モデルに基づく並列処理システムソフトウェア (通信ライブラリと並列記述言語)、そしてそれらに基づく大規模並列処理アプリケーションの構築を目的とする。平成 27 年度の研究実施概要は以下の通りである。

●TCA システムソフトウェア開発 (朴) グループでは、TCA 通信ライブラリの安定化及びユーザーを防ぐための API 改良とランタイムチェックの強化を行った。また、TCA 機構と一般の InfiniBand の併用による通信特性を生かした GPU 間通信最適化に関し、村井グループで開発中の XcalableACC 言語上で透過に利用可能とした。また、PGAS 言語実装向けに広く利用されている GASNet の GPU 拡張に関し米国 LBNL と共同研究を行い、TCA にこれを実装した。さらに、GPU 上からの MPI ダイレクト実行を可能とするユーザープログラム環境 GMPI の開発と評価を行った。

●TCA ハードウェア開発 (天野) グループでは、PEACH2 で通信ボトルネックになっている PCIe gen2 を PCIe gen3 に変更した PEACH3 を開発し、アプリケーションレベルから転送試験を行った。この結果、2KB のパケットのノード間 GPU-GPU 転送で、PEACH2 の 1.57 倍、Infiniband を用いた MPI の 3.77 倍の転送容量を達成した。また、PEACH2 の FPGA の余剰ロジックを利用し、N 体シミュレーションにおける Local Essential Tree(LET)の生成回路を実装し、転送と同時に Tree を構築することで、7.2 倍の性能向上を実現した。さらに、自動オフローディング環境 Courier を FPGA,GPU 両方でのオフローディングが可能のように改良した。

●TCA 向け並列言語開発(村井)グループでは、XcalableACC 処理系の基本的な機能の実装を完了した。また、TCA アーキテクチャに基づく環境において、通常のインターコネク (e.g. Infiniband)と TCA の両方を活用するハイブリッド通信の機能を実装した。HPCC を始めとするいくつかのベンチマークプログラムを用い、ターゲット計算機である筑波大 HA-PACS 環境においてそれらの機能を評価した。その結果、XcalableACC の言語および処理系の有用性を確認した。

●TCA 向け計算科学アプリケーション開発(梅村)グループでは、宇宙分野において輻射輸送を ray-tracing 法に基づいて計算する ART 法と多数の光源からの輻射輸送を高速に計算できる ARGOT 法を合わせたシミュレーションコードを GPU を用いて高速化した。また、重力多体粒子系計算のための Tree コードを GPU により高速化した。素粒子分野では、マルチスケールの物理として格子 QCD による原子核の直接計算、および有限温度・有限密度の物理として QCD における相構造解析を進めた。GPU 加速コードを開発するとともに、TCA による性能向上を実現した。気象学分野では、都市街区気象 LES (City-LES) の改良を行い、これを用いて都市の熱環境の超高解像度シミュレーション (空間分解能 2~5m) を実施した。物質・生命科学分野では、GPGPU 化 Fock 行列計算ルーチンの OpenFMO への組み込みと、タンパク質の効率的サンプリング法 (Fluctuation Flooding Method (FFM)) の開発を行った。

【代表的な原著論文】

- ・小田嶋哲哉, 朴泰祐, 埜敏博, 児玉祐悦, 村井均, 中尾昌広, 田渕晶大, 佐藤三久, "アクセラレータ向け並列言語 XcalableACC における TCA/InfiniBand?ハイブリッド通信", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS) , Vol. 8, No.4, pp. 61-77, 2015.
- ・Chiharu Tsuruta, Yohei Miki, Takuya Kuhara, Hideharu Amano, Masayuki Umemura, "Off-loading LET generation to PEACH2: A switching hub for high performance GPU clusters", Proc. on International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies, Jun, 1-2, 2015.
- ・田渕晶大, 中尾昌広, 村井均, 朴泰祐, 佐藤三久, "演算加速機構を持つクラスタ向け PGAS 言語 XcalableACC の評価", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol.9, No.1, pp.17-29, 2016 年 3 月.