

「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

H28 年度  
実績報告書

朴 泰祐

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

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。また、この概念の発展系として、研究期間後期では AiS (Accelerator in Switch)のコンセプトの下、FPGA を積極的に計算オフローディングにも用いる研究も含めて実施する。平成 28 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、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、これを TCA 上に実装した。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プログラム環境 GMPI のベンチマーク評価を行った。また、TCA の発展系である AiS という新しい枠組みの実現に向け、FPGA 上の高位言語である OpenCL と Verilog HDL による従来記述の混合記述と、低レベルハードウェアへのアクセスを OpenCL から可能とする基礎技術の開発を行った。

●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 について、グラフの幅優先探索、CG 法のプログラムを実行して転送性能の影響を測定した。この結果、ノード内転送については、GPU-CPU 転送ではサイズが 64KB 以内ならばレイテンシ、バンド幅共に CUDA-API より有利、GPU-GPU 間についてはレイテンシ重視のアプリケーションのみ PEACH3 が有利となった。ノード間転送については、データサイズが 1MB までは PEACH3 が有利、それ以上は MPI/Infiniband が有利ということが分かった。交換するデータサイズの小さい問題では PEACH3 は、MPI/Infiniband 利用時よりも 1.5 程度性能が上がり、PEACH2 よりも 20%程度有利であることがわかった。さらに PEACH2 では問題によっては MPI/Infiniband よりも性能が低下することがあるが、PEACH3 ではガイドラインを守って使えば、このようなことは起きないことがわかった。また、PEACH3 上で、スイッチにアクセラレータを付加して使うアクセラレータインスイッチ機構を一般化し、リダクション演算と LET 生成回路

を切り替えて使うシステムを構築した。

●TCA 向け並列言語開発(村井)グループでは、前年度までに基本機能の実装を完了した XcalableACC 処理系を用いて、種々のアプリケーションの開発を行った。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、XcalableACC の言語および処理系の有用性を確認した。また、XcalableACC の適用範囲を広める目的で、PEZY-SC 向け OpenACC コンパイラの予備実装および評価を行った<sup>5)</sup>。

●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、宇宙分野では、昨年引き続き、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、計算機工学分野と連携し、FPGA による ART 法輻射輸送計算のオフローディング実験を行った。素粒子分野では、昨年度に引き続き、マルチスケールの物理として格子 QCD による原子核束縛エネルギーの直接計算、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。これと並行して、これまで開発した GPU 加速コードの改良と新たな物理量計算への応用に取り組んだ。気象学分野では、都市街区気象 LES (City-LES) の境界条件を改良することで、領域気象モデル WRF とのネスティング (WRF の結果を境界条件に用いて LES を動かすこと) を可能にした。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。

平成 28 年度研究における代表的論文発表

・佐藤賢太, 藤田典久, 埜敏博, 松本和也, 朴泰祐, Khaled Ibrahim, "密結合並列演算加速機構 TCA による GPU 対応 GASNet の実装と評価", 2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2016) 論文集, 2016.

・Akihiro Tabuchi, Yasuyuki Kimura, Sunao Torii, Video Matsufuru, Tadashi Ishikawa, Taisuke Boku, Mitsuhisa Sato, "Design and Preliminary Evaluation of Omni OpenACC Compiler for Massive MIMD Processor PEZY-SC", Proc. of IWOMP2016 (International Workshop on OpenMP (LNCS 9903: OpenMP: Memory, Devices, and Tasks), pp.293-305, Nara, Oct. 2016.

・Kazuya Matsumoto, Norihisa Fujita, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, "Implementation and Evaluation of NAS Parallel CG Benchmark on GPU Cluster with Proprietary Interconnect TCA", Proc. of VECPAR2016, 8 pages, Porto, Jul. 2016.