

「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23年度採択研究代表者

H23 年度 実績報告

滝沢寛之

東北大学大学院情報科学研究科・准教授

進化的アプローチによる超並列複合システム向け開発環境の創出

§1. 研究実施体制

(1) 滝沢グループ

① 研究代表者: 滝沢 寛之 (東北大学大学院情報科学研究科、准教授)

② 研究項目

- ・システムの複合性を扱うためのプログラミングインタフェースの設計
- ・HPC アプリケーションのためのリファクタリングツールの開発

(2) 高橋グループ

① 主たる共同研究者: 高橋 大介 (筑波大学システム情報系、准教授)

② 研究項目

- ・超並列複合システムに向けた高速フーリエ変換 (FFT) ライブラリおよび代数的多重格子法ライブラリの開発
- ・混合精度計算に対応した基本線形計算ライブラリの基本設計

(3) 須田グループ

① 主たる共同研究者: 須田礼仁 (東京大学情報理工学系研究科、教授)

② 研究項目

- ・ドメイン特化型ツールによる超並列複合システムの階層的抽象化に関する研究

(4) 江川グループ

① 主たる共同研究者: 江川 隆輔 (東北大学サイバーサイエンスセンター、助教)

② 研究項目

- ・HPC のためのリファクタリングカタログの設計
- ・超並列複合システム向けのアプリケーション開発手法の確立

§ 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)

従来、大規模高性能計算(HPC)システムを必要とする計算科学アプリケーションの開発においては、ハードウェアの持つ性能を最大限に引き出すことが最優先されてきた。特定のシステムやハードウェア構成を強く意識する抽象度の低いアプリケーション開発手法では、精緻な最適化によって高性能の達成を期待できる一方で、システムの変遷に伴って大幅なアプリケーションコードの書き換えが必要となる。本研究の目標は、世代を追って超並列複合化するシステムを適切に抽象化し、システムの性能を十分に活用できる計算科学アプリケーションの開発基盤を創出することである。研究開発にあたっては、既存のソフトウェア資産との親和性やソフトウェア開発の連続性を十分に考慮し、既存のコードが超並列複合システム向けの抽象度の高いコードへと段階的に進化していくことを支援する。このために、既存コードの想定するシステムと新世代の超並列複合システムとの差異を可能な限り隠蔽するという観点から、抽象化技術を設計する。

本研究では、アプリケーション開発者に対してハードウェア構成を抽象化するために、(1)プログラミングインタフェース、(2)数値計算ライブラリ、(3)ドメイン特化型支援ツールの 3 つの階層で抽象化のアプローチを考える。また、本研究では上記の階層的抽象化技術と組み合わせることでアプリケーションの段階的な進化を支援する、性能リファクタリング技術を研究開発する。さらに、アプリケーション開発者の視点からも超並列複合システム向けの開発環境の在るべき姿を考察し、それらの研究成果も統合することで革新性と実用性を兼ね備えた開発環境を構築する。多くのプロジェクトでは、プログラマに抽象度の高い記述方法を提供して、抽象度の高いコードを抽象度の低いコードへと変換(低抽象度化)することを考えている。一方、本研究課題で想定するソフトウェア進化のシナリオでは、低抽象度のコードがすでに存在することが前提になっている。したがって、そのようなコードをいったん抽象度の高いコードへと移植(高抽象度化)するための支援方法を研究開発することも、本研究プロジェクトの特徴であり、重要な研究テーマである。平成 23 年度は上記の研究方針に従い、3 つの階層の抽象化技術について研究開発を進め、性能リファクタリング技術の第 0 版を作成した。またソフトウェアアーキテクチャについて検討を進めてきた。また、チーム内でのキックオフミーティングや情報共有のための wiki ページを整備し、今後チーム内で連携して研究開発を進めるための基盤を準備した。

滝沢グループは、CPUとGPUから構成されるシステムを例とし、ポストペタ時代のアプリケーション開発における課題点を整理し、主にアプリケーションプログラミングインタフェース(API)の階層で複数のCPUとGPUの効果的かつ効率的な連携を実現するための技術を研究開発する。アプリケーション開発者が指定しなければならないシステム構成のパラメータを極力減らすことにより、GPUアプリケーションの可搬性と性能可搬性を改善するプログラミングモデルを設計する。平成 23 年度後半には、研究代表者として本研究課題の理念を国際ワークショップ・シンポジウムの招待講演などで発表し、本研究課題の今後の進め方について議論を深めた。また、ソフトウェア進化のためのコード編集作業を支援するために有効なリファクタリングツールについても、その要素技術

を研究した[1]。さらに、複数の GPU を意識することなく使うための OpenCL API 拡張について検討し、GPU クラスタの高信頼化、CPU と GPU 間のデータ共有の高効率化や、性能解析ツール等についても試験的実装や評価を行った。

高橋グループは、超並列複合システムに向けた高速フーリエ変換 (FFT) ライブラリ、代数的多重格子法ライブラリ、そして混合精度計算に対応した基本線形計算ライブラリの基本設計を行う。計算科学分野の大規模数値計算アプリケーションの多くは、何らかの数値計算ライブラリを呼び出しているが、これら既存の数値計算ライブラリは、今後主流になると考えられる超並列複合システムの高い性能を引き出すように設計されていない可能性がある。したがって、ポストペタスケールのシステムへのアプリケーションプログラムの移行に際して、GPU 等のアクセラレータ上で動作する数値計算ライブラリを開発することは必須である。平成 23 年度は超並列複合システムに向けた高速フーリエ変換 (FFT) の実現方法について検討すると共に試験的な実装を行い、マルチコア超並列クラスタ上で性能評価を行った。また、GPU における代数的多重格子法ライブラリの基本設計について検討を行った[3]。さらに、GPU における 3 倍精度演算について検討を行い、試験的に実装を行い、その性能評価を行った[2]。

須田グループでは、並列計算科学に特化したソフトウェア開発手法を研究する。《ポストペタ時代の計算機に向けた並列数値計算手法の研究》ポストペタ時代の超並列計算機では、大域的集団通信のコストが相対的に増大する懸念があるなかで、我々は CG 法の大域的集団通信を削減する手法を開発した。通常 CG 法では 1 反復に 2 回の大域的集団通信が必要であるが、提案手法である k -skip CG 法では $k+1$ 反復に 1 回に減らすことができる。その代償として計算量の増加と安定性の低下があるが、本手法は関連研究に比べると、比較的安定性が高く、計算量の増加は最小限である。現在安定性についてさらに調査を進めている。また、ポストペタ時代の超並列計算機では電力効率の良い SIMD 型並列性が一層利用されると見込まれるなかで、SIMD 計算機における **divergence** による性能低下を軽減する 3 つの手法を開発した。これらの手法を高橋グループが持っているアプリケーションへの適用を検討している。《ポストペタ時代に向けた新たな数値計算手法の開発》モンテカルロシミュレーションによる評価から設計変数を最適化する問題において、モンテカルロ法による値のばらつきを考慮しつつ、最小限のシミュレーション回数で最適化を実現する手法を開発した。また、工学でよく表れる数値計算手法が確立していない分数回微積分について、既存の公式の誤差を証明し、新たな高次差分公式を提案した。また、高速ではあるが誤差が集積する線形最小二乗法の **update** アルゴリズムについて誤差解析を行い、誤差の集積を検出してリスタートする手法を提案した。《ポストペタ時代の計算科学アプリへ向けた研究》第一原理電子状態計算において、計算コストの大きな交換相互作用の厳密計算を GPU により高速化した。ブロック化等の高速化の工夫により、CPU の約 3 倍の性能を得た。また、遺伝子ネットワーク推定において、超高並列化の研究を進め、京コンピュータへの実装を行った。《ポストペタ時代に向けたドメイン特化ツールの開発》ナノサイエンス・バイオサイエンスの研究者の協力を得て、重要アプリケーションプログラムの解析をスタートした。また、滝沢グループ・江川グループと連携し、HPC リファクタリングカタログの作成を進めている。我々のグループでは、特に並列処理・数値計

算に関するHPCリファクタリングを準備している。これらの知見を生かしたツールによる自動化に向けて、ソフトウェア工学・プログラミングモデル・言語処理系・IDEなどの既存技術の調査を行った。

江川グループでは、HPCリファクタリングのガイドラインとなるリファクタリングカタログの整備を行う。そのために共同研究者や彼らの所属機関が有する既存のアプリケーションを、並列複合システムの構成要素となり得る既存の複数のプラットフォームに対する移植・最適化とその性能評価を行う。平成23年度は、東北大学サイバーサイエンスセンターにおいて実行されているコードの分析・解析や、高性能計算分野におけるコードの保守・管理に関する関連研究の調査に取り組み、リファクタリングカタログの仕様について検討した。これらの検討とアプリケーションを開発している共同研究者との議論をとおして、第0次版のリファクタリングカタログに掲載される項目内容の収集、検討、整備に取り組んだ。さらに、コード作成者、最適化にたずさわるエンジニアを交えたヒアリングを行い、実用的なカタログ作成に向けて議論を始めた。また、既存コードの最適化、並列化にも取り組み、並列複合システムを効率的に利用するための最適化技術に関する研究開発も行った。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

1. 佐藤功人, 小松一彦, 滝沢寛之, 小林広明, “OpenCLにおけるタスク並列化支援のための実行時依存関係解析手法,” 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), Vol.5 No.1 53-67, 2012.
2. Daichi Mukunoki and Daisuke Takahashi, “Implementation and Evaluation of Triple Precision BLAS Subroutines on GPUs”, Proc. 13th IEEE International Workshop on Parallel and Distributed Scientific and Engineering Computing (PDSEC-12), (in press).
3. Kosuke Takahashi, Akihiro Fujii, Teruo Tanaka, “GPGPU-based Algebraic Multigrid Method”, Proc. 23rd IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Systems (PDCS 2011), pp. 93--99, 2011. (DOI: 10.2316/P.2011.757-061)

(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)