

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 (東京大学大学院新領域創成科学研究科・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

### (1) 概要

平成 24 年度は、前年度に引き続いて開発を継続し、マルチコアクラスタ向けの ppOpen-APPL, ppOpen-MATH/VIS, ppOpen-AT/STATIC を平成 24 年 11 月に公開し、併せて英文ドキュメントの作成、公開もプロジェクトホームページ (<http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/>) より実施した<sup>2)</sup>。各機能は概ね MPI/OpenMP ハイブリッド並列プログラミングに対応しており、FORTRAN 及び C 言語に関するインタフェースを備えている(表 1)。平成 25 年 11 月公開に向けて、京、富士通 FX10, T2K 東大等における最適化を進めるとともに Intel MIC/Xeon Phi 向けの実装、最適化に着手した。

表 1 2012 年 11 月に公開した ppOpen-HPC v.0.1.0 の概要  
(<http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/>)

Component	Archive	Flat MPI	OpenMP/MPI	C	F
ppOpen-APPL/FDM	ppohFDM_0.1.0	○			○
ppOpen-APPL/FVM	ppohFVM_0.1.0	○	○		○
ppOpen-APPL/FEM	ppohFEM_0.1.0	○	○	○	○
ppOpen-APPL/BEM	ppohBEM_0.1.0	○	○		○
ppOpen-APPL/DEM	ppohDEM_0.1.0	○	○		○
ppOpen-MATH/VIS	ppohVIS_FDM3D_0.1.0	○		○	○
ppOpen-AT/STATIC	ppohAT_0.1.0	-	-	○	○

### (2) ppOpen-APPL

本年度は平成 23 年度に実施した、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をもとに実装を継続して実施した。また、ppOpen-MATH の組み込み、ppOpen-AT との連携も継続して実施した。ppOpen-AT との連携においては各機能で独自に実施したチューニングに関する情報を ppOpen-AT 開発に資するとともに、ppOpen-AT による性能評価を実施し、効果の確認とともに ppOpen-AT の更なる高度化に貢献した。

ppOpen-APPL/FDM について、①動的固体力学、②非定常熱伝導、および③非圧縮性流体力学の 3 つを対象としてアプリケーション開発、共通機能抽出、ライブラリ化を実施した。ppOpen-AT との連携の他、ppOpen-MATH/VIS-FDM 開発、公開のテストベッドとしても利用された<sup>2)</sup>。ppOpen-APPL/FEM については Oakleaf-FX (Fujitsu PRIMEHPC FX10, 東大情報基盤センター)において線形弾性問題の Weak Scaling 性能評価を実施し、4 ノードか

ら 1,440 ノードまで高いスケーラビリティを実現するとともに、対ピーク性能比も 5%程度を示した。また、ソリッド要素とシェル要素の混在、接触解析におけるラグランジュ乗数等によって節点毎に異なる自由度を持つ場合の疎行列格納方法に関する検討を実施した。ppOpen-APPL/FVM については、辺ベースの離散化に基づくライブラリを三次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式ソルバーを元に整備した。辺ベースのオペレーションは効率が必ずしも高く無いため、計算手法、データ構造の再検討を実施中である。ppOpen-APPL/BEM については密行列演算による境界要素解析を対象としたフレームワーク、静電場解析向けのテンプレートの開発、公開を実施した。また高速行列ベクトル積実装に基づく境界要素解析フレームワークの中核をなす技術である H 行列法の分散並列化とそのライブラリ化に着手し、地震サイクルシミュレーションにおいて動作検証を実施するとともに、低ランク行列作成法を新たに考案した。ppOpen-APPL/DEM については、平成 23 年度までに開発された散逸のある粒子系に安定で高速な陽解法を改良した DSM 法 (Descent Storage Method)を開発し、GPU、ベクトルプロセッサ、マルチコアプロセッサのアーキテクチャ上でのマルチスレッド処理のためにチューニングすることによって最適化を行った。ppOpen-APPL/DEM によって開発されたコードをマルチフィジックスシミュレーションに適用し、アルゴリズムの有用性を実証した<sup>3)</sup>。

### (3) ppOpen-MATH

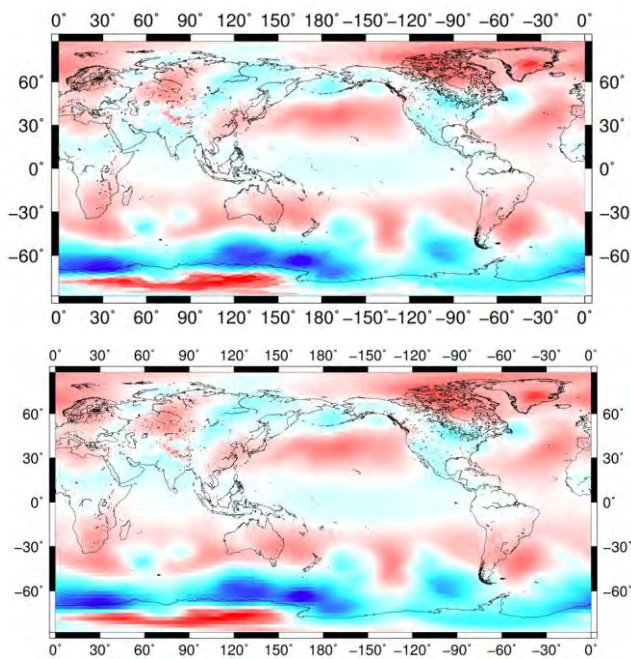


図 1 NICAM と IO モジュールの海面気圧

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である。平成 24 年度は大気・海洋モデルの結合について時間積分試験を実施するとともに、モデルの出力をリアルタイムで受信し格子変換の後ファイルに出力する IO コンポーネントを作成し、大気モデル NICAM と海洋モデル COCO による結合試験を実施した (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継続し、CGA 法 (Coarse Grid

Aggregation)を提案し、性能、有用性を Fujitsu PRIMEHPC FX10 4,096 ノードを使用して約 172 億元の連立一次方程式を解くことによって示した<sup>8)</sup>。並列可視化ライブラリ ppOpen-MATH/VIS については、一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を公開するとともに、ハイブリッド並列化を実施した。

#### (4) ppOpen-AT

ppOpen-APPL/FDM, ppOpen-APPL/BEM, および, ppOpen-APPL/FVM ver.0.1への適用評価を行った。新規のAT機能に関し, ppOpen-APPL/FDM と ppOpen-APPL/FVMの主要カーネルを例題とし, 以下のコード変換機能のプロトタイピングと性能評価を実施した: ①陽解法向けループの分割機能, ②陽解法向けループの融合機能, ③①と②の混合機能, ④陽解法向け演算の計算順序入れ替え機能。これらのコード変換機能は, キャッシュ最適化, レジスタスピルコードの抑制という基本能力に加え, 高いスレッド並列化時に効果を奏する。性能評価の結果, 問題サイズが大きい場合, コンパイラ最適化のみの実行時間に対し, ppOpen-ATを適用することで1.5~1.9倍の速度向上が確認された。また, 問題サイズが小さくスレッド数が32スレッドを超える高並列実行時においては, 2.9~7.4倍もの高い速度向上が確認され, ポストペタスケール環境におけるppOpen-ATによる最適化機能の効果が期待できる。また, CFD計算用ツールとして広く利用されているOpenFOAMの疎行列ベクトル積計算部分の最適化に取り組み, 構造格子, 非構造格子の割合 (UNR) によって適応的に疎行列格納法を変更する手法を開発した<sup>7)</sup>。

#### (5) ppOpen-SYS

ppOpen-SYS/COMM については, Fujitsu PRIMEHPC FX10 の拡張 RDMA インタフェースを用いた MPI サブセット実装を整備した。機能を限定して低レイテンシを実現すること, 従来のアプリケーションの書き方を大きく変えずに適用可能であることに特に留意した。ppOpen-APPL/FVM による実アプリケーションに適用することによって通信オーバーヘッドを削減可能であることを示した。

### §3. 成果発表等

#### (3-1) 原著論文発表

##### ●論文詳細情報

- [1] 河合直聡, 岩下武史, 中島浩, ブロック化赤-黒順序付け法に基づく並列マルチグリッドポアンソルバ, 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. 3, pp.1-10, 2012 (DOI:N/A)
- [2] Kengo Nakajima, ppOpen-HPC: Open Source Infrastructure for Development and Execution of Large-Scale Scientific Applications on Post-Peta-Scale Supercomputers with Automatic Tuning (AT), Proceedings of the ATIP/A\*CRC Workshop on Accelerator Technologies for High-Performance Computing: Does Asia Lead the Way?, ACM Digital Library (ISBN: 978-1-4503-1644-6), 2012
- [3] Hiroshi Kawabata, Daisuke Nishiura, Hide Sakaguchi, and Yoshiyuki Tatsumi,

- Self-organized domain microstructures in a plate-like particle suspension subjected to rapid simple shear, *Rheologica Acta*, vol. 52, pp.1-21,2013
- [4] Takashi Furumura, Visualization of Strong Ground Motion from the 2011 Off Tohoku, Japan (MW=9.0) Earthquake Obtained from Dense Nation-Wide Seismic Network and Large-Scale Parallel FDM Simulation, *VECPAR 2012, Lecture Note of Computer Sciences*, vol 7851, pp.9-16, 2013. (in press)
- [5] Masatoshi Kawai, Takeshi Iwashita, Hiroshi Nakashima and Osni Marques, Parallel Smoother Based on Block Red-Black Ordering for Multigrid Poisson Solver, *Selected Papers of 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), Lecture Notes in Computer Science 7851*, 2013 (in press)
- [6] Kengo Nakajima, Automatic Tuning of Parallel Multigrid Solvers using OpenMP/MPI Hybrid Parallel Programming Models, *Selected Papers of 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), Lecture Notes in Computer Science 7851*, 435-450, 2013 (in press)
- [7] Satoshi ITO, Satoshi OHSHIMA, Takahiro KATAGIRI, SSG-AT: An Auto-tuning Method of Sparse Matrix-vector Multiplicataion for Semi-Structured Grids - An Adaptation to OpenFOAM -, *Proceedings of 2012 IEEE 6th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc2012)*, DOI 10.1109/MCSoc.2012.26, pp.191-197, 2012
- [8] Kengo Nakajima, OpenMP/MPI Hybrid Parallel Multigrid Method on Fujitsu FX10 Supercomputer System, *IEEE Proceedings of 2012 International Conference on Cluster Computing Workshops*, 199-206, *IEEE Digital Library*: 10.1109/ClusterW.2012.35, 2012

### (3-2) 知財出願

- ① 平成 24 年度特許出願件数(国内 0 件)
- ② CREST 研究期間累積件数(国内 1 件)