

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 22 年度採択研究代表者

| |
|----------------|
| H25 年度 実績報告 |
|----------------|

丸山 直也

(独)理化学研究所計算科学研究機構
チームリーダー

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 ((独)理化学研究所計算科学研究機構、チームリーダー)
- 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研究所電子情報学専攻、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ーラブルランタイム

(4)「泰岡」グループ

- ① 主たる共同研究者: 泰岡 颯治 (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

(5)「丸山」グループ

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

② 研究項目

・高性能・高生産性を達成する垂直統合型アプリケーションフレームワーク

§ 2. 研究実施の概要

ポストペタスケール高性能計算に向けて特性の異なる複数のプロセッサを搭載した異種混合型スーパーコンピュータが主流になりつつある。特に、汎用処理に最適化された CPU とよりスループット処理に適した GPU アクセラレータを共用するアーキテクチャである GPU スーパーコンピュータがその優れた性能および低消費電力により注目されている。例えば国内では東京工業大学の TSUBAME スーパーコンピュータや世界的にはアメリカ ORNL の Titan などがあげられる。一方で GPU アクセラレータを用いたスーパーコンピュータは既存プログラムの変更が必要であるため利用の障壁が高い問題がある。さらに、単に利用するだけでなく高い実効性能を達成するためにはプログラムの大がかりな変更が必要となる場合が多く、その低い生産性が問題となっている。

本研究課題では高い性能と生産性を両立することを目的とし、特定のアプリケーションパターンに特化した専用フレームワークを開発している。アプリケーションパターンに特化した高い抽象度のプログラミングモデルを実現することにより、特定のアーキテクチャに依存することなく高性能なプログラム開発が可能になる。具体的には流体計算と分子動力学法に着目してこれまでフレームワークの実現に向けた要素技術の開発を進めてきた。同時にフレームワークの設計に必要な高度に最適化された「お手本」となるアプリケーションの実装を進めてきた。

平成 25 年度は流体計算向けフレームワークについて性能最適化を進め、またそれを用いた実アプリケーションの実装、評価を行った。その結果、これまでのフレームワークではアプリケーションの記述に一部不十分な点があることがわかったため、フレームワークを拡張することによりその問題を解決した。また、さらに性能を向上させるためにデータアクセス効率を大幅に改善するより高度な最適化手法を開発、評価し、それをフレームワークによって自動適用するための予備的な研究開発を進めた。

今後はより高度な流体計算手法をサポートするためのフレームワークの拡張を行っていく予定である。具体的には、流体シミュレーションでは典型的にはある一定領域を決められた数の点を用いて表現するが、適合細分化格子法とよばれるシミュレーションの各領域において必要に応じて点の数を定める手法が存在し、これにより計算量および必要メモリ量を大幅に節約することが可能であるが、計算が大幅に複雑になり特にアクセラレータを用いる場合はプログラミングが大変困難である。本研究課題では適合細分化格子法の複雑な処理をフレームワークによって大幅に簡略化することを目標としているが、平成 25 年度はそのフレームワークの設計のために適合細分化格子法のお手本となるアプリケーション実装を進めた。特に、並列計算のための処理の分割方法およびメモリ管理手法の検討評価を行い、次年度に GPU アクセラレータを用いた適合細分化格子法アプリケーションの完成を目指す。

また分子動力学法としては高速多重極展開法を対象としたフレームワークを開発する予定である。本研究課題ではそのためのお手本となるアプリケーション実装を進めてきたが平成 25 年度も引き続きその高速化等の拡張を行った。また高速多重極展開法や適合細分化格子法などのフレームワークを実現するための要素技術として高効率な並列計算を可能にするシステムソフトウェアの開発を進めてきたが、平成 25 年度も引き続き同ソフトウェアの拡張を進め、単一ノードに限らず多数ノードを用いた場合にも有効であることを示した。今後はこれらを用いたフレームワークの開発およびそれによるアプリケーション実装を行いその有効性を示していく予定である。

§ 3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

論文詳細情報(国内)

[A-1] 都築怜理, 青木尊之, 下川辺隆史, "GPU スパコンにおける 1 億個のスカラー粒子計算の強スケールリングと動的負荷分散", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム IPSJ Transactions on Advanced Computing System (ACS, Vol. 9, No. 3, P. 82-93, 2013-09-01

[proceedings]

[A-2] 大筒裕之, 中島潤, 田浦健次朗, "タスク並列処理系における CPU の利用効率に着目したスケジューリング手法", 先進的計算基盤システムシンポジウム (SACSIS) 2013, 仙台, 2013-05-23

[A-3] 下川辺隆史, 青木尊之, 小野寺直幸, "複数 GPU による格子に基づいたシミュレーションのためのマルチ GPU コンピューティング・フレームワーク", HPCS2014, 一橋大学, 2014-01-08, (<http://hpcs.hpcc.jp>)

論文詳細情報(国際)

[A-4] T. Takaki, T. Shimokawabe, M. Ohno, A. Yamanaka, T. Aoki, "Unexpected selection of growing dendrites by very-large-scale phase-field simulation", Journal of Crystal Growth, 21-25, Volume 382, 2013-07-28, (DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2013.07.028)

[A-5] Rio Yokota, "An FMM based on dual tree traversal for many-core architectures", Journal of Algorithms and Computational Technology, Vol. 7, No. 3, pp. 301-324, 2013-08-21, (DOI: 10.1260/1748-3018.7.3.301)

[A-6] Un-Hong Wong, Hon-Cheng Wong, Yonghui Ma, "Global magnetohydrodynamic simulations on multiple GPUs", Computer Physics Communications 185 (2014), 144-152, 2014-01-01, (DOI: 10.1016/j.cpc.2013.08.027),

(<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465513003007#>)

[proceedings]

- [A-7] Tetsuya Hoshino, Naoya Maruyama, Satoshi Matsuoka, Ryoji Takaki, "CUDA vs OpenACC: Performance Case Studies with Kernel Benchmarks and a Memory Bound CFD Application", Proceedings of the 13th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing, Delft, Netherland, 2013-05-14. (10.1109/CCGrid.2013.12)
- [A-8] Mohamed Slim Bouguerra, Ana Gainaru, Leonardo Bautista Gomez, Franck Cappello, Satoshi Matsuoka, Naoya Maruyama, "Improving the Computing Efficiency of HPC Systems Using a Combination of Proactive and Preventive Checkpointing", 2013 IEEE 27th International Symposium on Parallel & Distributed Processing (IPDPS), 501-512, Boston, MA, USA, 2013-05-20, (DOI: 10.1109/IPDPS.2013.74)
- [A-9] Jun Nakashima, Sho Nakatani, Kenjiro Taura, "Design and Implementation of a Customizable Work Stealing Scheduler", 3rd International Workshop on Runtime and Operating Systems for Supercomputers (ROSS2013, ICS13 併設), Eugene, OR, USA, 2013-06-10. (10.1145/2491661.2481433)
- [A-10] Abdelhalim Amer, Naoya Maruyama, Miquel Pericàs, Kenjiro Taura, Rio Yokota, Satoshi Matsuoka, "Fork-Join and Data-Driven Execution Models on Multi-core Architectures: Case Study of the FMM", 28th International Supercomputing Conference, ISC 2013, Germany, 2013-06-16. (10.1007/978-3-642-38750-0_19)
- [A-11] Mohamed Attia Wahib, Naoya Maruyama, "Highly Optimized Full GPU-Acceleration of Non-hydrostatic Weather Model SCALE-LES", IEEE Cluster 2013, Indianapolis, IN, USA, 2013-09-25. (10.1109/CLUSTER.2013.6702667)
- [A-12] Toshiya Komoda, Shinobu Miwa, Hiroshi Nakamura, Naoya Maruyama, "Integrating Multi-GPU Execution into an OpenACC Compiler", 42nd International Conference on Parallel Processing (ICPP), 260--269, Lyon, France, 2013-10-02, (DOI: 10.1109/ICPP.2013.35)
- [A-13] Shinya Hayashi, Kenjiro Taura, "Parallel and Memory-efficient Burrows-Wheeler Transform", IEEE Big Data Workshop for Bioinformatics and Health Informatics (IEEE BHI), Santa Clara, CA, USA, 2013-10-06. (10.1109/BigData.2013.6691757)
- [A-14] Miquel Pericàs, Abdelhalim Amer, Kenjiro Taura, Satoshi Matsuoka, "Analysis of Data Reuse in Task-Parallel Runtimes", 4th International Workshop on Performance Modeling, Benchmarking and Simulation of High Performance Computer Systems (PMBS13), Denver, CO, USA, 2013-11-01

[A-15] Naoya Maruyama, Takayuki Aoki, "Optimizing Stencil Computations for NVIDIA Kepler GPUs", International Workshop on High-Performance Stencil Computations, Vienna, Austria, 2014-01-21