

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

H25 年度
実績報告

平成 24 年度採択研究代表者

朴 泰祐

筑波大学システム情報工学研究科
教授

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 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 アーキテクチャに基づく PEACH2 システムソフトウェアの開発
 - ・ アプリケーション開発のための PEACH2 API の開発と性能評価

(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 (慶應義塾大学理工学部、教授)
- ② 研究項目
 - ・ PEACH-FPGA 上へのオフローディング機構の実装
 - ・ PEACH2 へのストリームアプリケーションの実装
 - ・ PEACH3 テストボードの実装

(3) 「並列言語 XMP-dev/TCA 開発」グループ

- ① 主たる共同研究者: 村井 均 ((独)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
 - ・ TCA アーキテクチャ向け XMP-dev 拡張仕様(XMP-dev/TCA)の検討
 - ・ XMP-dev/TCA 処理系の設計およびプロトタイプ開発

(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 分子動力学法及びメタダイナミクス法に関するコード開発

§ 2. 研究実施の概要

●TCA ソフトウェア開発グループ

TCA (Tightly Coupled Accelerators)アーキテクチャ概念に基づき FPGA によって実装された PEACH2 通信ハードウェア上に、ファームウェアとして通信基本機能を実装し、さらにこれを汎用 CPU 及び GPU からアクセス可能とするドライバを含むシステムソフトウェアの構築を行った。前年度までの基本機能実装に加え、各種通信機能を安定化させ、高性能化した。また、アプリケーション用の API を設計・実装し、片側通信機構のみによる一般的なアプリケーション記述を可能とさせ、NVIDIA 社が提供している QCD 計算向けライブラリである QUDA の移植を行った。通信機能の最適化により、メッセージ通信時の最低遅延時間を、既存標準技術である InfiniBand QDR における MPI 通信の約 1/3 となる 2.2 μ 秒まで短縮させ、また 512KB までのメッセージ長について同ネットワーク以上のバンド幅が達成された。

●TCA ハードウェア開発グループ

PEACH2 - FPGA の余剰ロジックを利用し、一般的な HPC アプリケーションで重要となるリダクション演算のオフローディング機構を実装し、その性能を予備評価した。また、画像処理プログラムである Sobel フィルタを複数の GPU でパイプライン処理を行う構成を PEACH2 上で実装した。タスクレベルパイプラインの実装には Intel TBB (Thread Building Block)ライブラリを利用した。実装システムは PEACH を利用しない場合に比べて 52%の高速化を実現した。さらに、現在の PEACH2 で通信ボトルネックとなっている PCIe gen2 を gen3 に変更した PEACH3 テストボードを実装した。現在までに 3 枚のハードウェアを完成させ、今後内部ロジックを搭載して転送試験を行う予定である。

●並列言語 XMP-dev/TCA 開発

並列プログラミング言語 XcalableMP を拡張し、TCA アーキテクチャ上で動作する効率の良いプログラムを容易に記述できるプログラミング言語(XMP-dev/TCA)の仕様を検討した。同時に、XMP-dev/TCA 言語の処理系の基本設計を行い、一部機能についてはプロトタイプを実装した。XMP-dev/TCA で記述したテストプログラム(二次元ラプラス方程式の求解)を、前述の基本設計に基づいて人手で変換し、ターゲット計算機である筑波大 HA-PACS 環境において評価した。その結果、XMP-dev/TCA の有効性を確認できた。

●TCA 向け計算科学アプリケーション開発

宇宙分野では、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、TCA アーキテクチャにおける更なる高速化について検討を進めた。素粒子分野では、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 QCD 計算における 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、建物解像 LES 計算のホットスポットである圧力解法に用いる疎行列計算の GPU 化を進めた。物質・生命科学分野では、GPU 上の量子系シミュレーションコード(Open FMO)の開発が進められ、TCA での実装に向け更なる演算アルゴリズムの検討を行った。また、第一原理分子動力学計算コード(CPMD)、分子動力学法コード(Platypus)の GPU 化を進め、QM/MM 法と GPU 分子動力学計算(NAMD)を用いた大規模計算アプリケーションを実施した。

§ 3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

論文詳細情報(国内)

- A-1 塙 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに基づく GPU クラスタの構築と性能予備評価", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol. 6, No. 4, pp. 14-25, 2013.
- A-2 扇谷 豪, 三木 洋平, 朴 泰祐, 森 正夫, 中里 直人, "計算宇宙物理のための GPU クラスタ向け並列 Tree Code の開発と性能評価", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol. 6, No. 3, pp. 58-70, 2013.
- A-3 小田嶋 哲哉, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 塙 敏博, 児玉 祐悦, Raymond Namyst, Samuel Thibault, Olivier Aumage, "GPU クラスタ向け並列言語 XMP-dev における GPU/CPU 動的負荷分散機能", 2014 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 HPCS2013 論文集, 2014.
- A-4 塙 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, "Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに基づく GPU クラスタの構築", 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2013 論文集, 2013.
- D-1 梅田 宏明, 塙 敏博, 庄司 光男, 朴 泰祐, 稲富 雄一, "フラグメント分子軌道法における Fock 行列計算の GPGPU 化", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), 6, Vol. 4, 26-37 (2013).

論文詳細情報(国際)

- A-5 Toshihiro Hanawa, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku, and Mitsuhsisa Sato, "Interconnect for Tightly Coupled Accelerators Architecture," IEEE 21st Annual

Symposium on High-Performance Interconnects (HOT Interconnects 21), short paper, pp. 79-82, Aug. 2013. doi: <http://doi.ieeecomputersociety.org/10.1109/HOTI.2013.15>

- A-6 Toshihiro Hanawa, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku, and Mitsuhisa Sato, "Tightly Coupled Accelerators Architecture for Minimizing Communication Latency among Accelerators," The Third International Workshop on Accelerators and Hybrid Exascale Systems (AsHES2013) in conjunction with IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS2013), pp. 1030-1039, May. 2013.
- A-7 T. Odajima, T. Boku, M. Sato, T. Hanawa, Y. Kodama, R. Namyst, S. Thibault, O. Aumage, "Adaptive Task Size Control on High Level Programming for GPU/CPU Work Sharing", Proc. of Int. Workshop on Advances of Distributed and Parallel Processing 2013 (ADPC-2013, with ICA3PP-2013), Vietri sul Mare, LNCS-8286 Part II, pp. 59-68, 2013. (DOI: 10.1007/978-3-319-03889-6_7)
- B-1 Takaaki Miyajima, Takuya Kuhara, Toshihiro Hanawa, Hideharu Amano, Taisuke Boku, "Task level pipelining with PEACH2: an FPGA switching fabric for high performance computing," International Conference on Field Programmable Technologies (FPT 2013), (DOI:10.1109/FPT.2013.671841), Kyoto, Japan, (2013年12月)
- B-2 Takaaki Miyajima, Takuya Kuhara, Toshihiro Hanawa, Hideharu Amano, Taisuke Boku, "Task Level Pipelining on Multiple Accelerators via FPGA Switch," The 12th IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN 2013), (DOI:10.2316/P.2014.811-026) Innsbruck, Austria, (2014年2月)
- D-2 Wagner, A. Y., Umemura, M., Bicknell, G. V., "Ultrafast Outflows: Galaxy-scale Active Galactic Nucleus Feedback", The Astrophysical Journal Letters, Volume 763, Issue 1, article id. L18, 5 pp. 2013 (DOI: 10.1088/2041-8205/763/1/L18).
- D-3 Yoshikawa, Kohji, Yoshida, Naoki, Umemura, Masayuki, "Direct Integration of the Collisionless Boltzmann Equation in Six-dimensional Phase Space: Self-gravitating Systems", The Astrophysical Journal, Volume 762, Issue 2, article id. 116, 18 pp. 2013 (DOI: 10.1088/0004-637X/762/2/116)
- D-4 Xiao-Yong Jin, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Akira Ukawa, "Finite size scaling study of $N_f=4$ finite density QCD on the lattice", Physical Review D, vol. 88, No. 9, ref. 094508, 2013 (DOI:10.1103/PhysRevD.88.094508)
- D-5 T. Baba, T. Matsui, K. Kamiya, M. Nakano, Y. Shigeta, "A density functional study on pKa of small polyprotic molecules", *Int. J. Quantum. Chem.*, in press (2014). Feb. 2014. DOI: 10.1002/qua.24631.
- D-6 M. Shoji, K. Hanaoka, Y. Ujiie, W. Tanaka, D. Kondo, H. Umeda, Y. Kamoshida, M.

- Kayanuma, K. Kamiya, K. Shiraishi, Y. Machida, T. Murakawa, H. Hayashi, “A QM/MM Study of the L-Threonine Formation Reaction of Threonine Synthase: Implications into the Mechanism of the Reaction Specificity”, *J. Am. Chem. Soc.* in press (2014). (DOI: 10.1021/ja408780c)
- D-7 T. Inui, Y. Shigeta, K. Okuno, T. Baba, R. Kishi, M. Nakano, “Finite-field method with unbiased polarizable continuum model for evaluation of the second hyperpolarizability of an open-shell singlet molecule in solvents”, *J. Comput. Chem.* **34**, Vol. 27, 2345–2352 (2013). DOI: 10.1002/jcc.23395
- D-8 T. Mashimo, Y. Fukunishi, N. Kamiya, Y. Takano, I. Fukuda, H. Nakamura, “Molecular dynamics simulations accelerated by GPU for biological macromolecules with a non-Ewald scheme for electrostatic interactions”, *J. Chem. Theory Comp.* **9**, Vol. 12, 5599-5609 (2013). DOI: 10.1021/ct400342e.
- D-9 K. Hanaoka, M. Shoji, D. Kondo, A. Sato, M. Y. Yang, K. Kamiya, and K. Shiraishi, “Substrate mediated proton relay mechanism for the religation reaction in topoisomerase II”, *J. Biomol. Struct. Dyn.* (2013), DOI:10.1080/07391102.2013.834848.
- D-10 M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, A. Sato, H. Umeda, K. Kamiya, K. Shiraishi, “A QM/MM study of nitric oxide reductase-catalyzed N₂O formation”, *Mol. Phys.* **112**, Vol. 3-4, 393-397 (2013), DOI:10.1080/00268976.2013.830200.