

丸山 直也

独立行政法人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科電子情報学専攻、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 顕治 (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 26 年度はこれまで開発してきた各種ソフトウェアに加えて、これまでのところ特に 1) 分子動力学法において用いられる計算手法の一つである高速多重極展開を対象としたフレームワークの設計および初期プロトタイプの開発、2) 適応細分化格子法参照実装の開発について注力して研究を実施してきた。1) のフレームワークはこれまで開発してきた ExaFMM アプリケーションを基に、高性能な並列プログラムを簡易なプログラミングによって可能にすることを狙ったものである。ExaFMM は同様に本研究課題にて開発された MassiveThreads ライブラリ等を用いて並列化されているが、すべて人手による煩雑なプログラミングによるものであり、今後さらなる高い並列効率が要求されるポストペタスケールシステムにおいて特に大規模システム向け並列プログラミングが課題である。本研究課題にて開発中のフレームワークではポストペタスケールシステムにて想定される種々の並列アーキテクチャを対象とした自動並列化を実現し、プログラミングの生産性向上と高い実効性能の両立を目的としている。平成 26 年度は逐次版および簡易並列版プロトタイプを実装することでプログラミング API の検討および評価を行った。

2) の適応細分化格子法は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であり、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 26 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、これまでのところ複数 GPU をもちいた実装を完了した。今後 TSUBAME2.5 の多数 GPU をもちいた性能評価やフレームワーク化を進める予定である。

【代表的な原著論文】

[1] Mohamed Attia Wahib, Naoya Maruyama, "Scalable Kernel Fusion for

- Memory-Bound GPU Applications", Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC'14), New Orleans, LA, 2014-11-18, (DOI: 10.1109/SC.2014.21)
- [2] Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Naoyuki Onodera, "High-productivity Framework on GPU-rich Supercomputers for Operational Weather Prediction Code ASUCA", Proceedings of the 2014 ACM/IEEE conference on Supercomputing (SC'14), New Orleans, LA, USA, 2014-11-18.
- [3] Shigeki Akiyama and Kenjiro Taura, "Uni-Address Threads: Scalable Thread Management for RDMA-Based Work Stealing", The 24th International ACM Symposium on High-Performance Parallel and Distributed Computing, Portland, Oregon, 2015-06 (to appear).