

「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 24 年度採択研究代表者

H26 年度 実績報告書

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 システムソフトウェア開発」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 アーキテクチャ実装システムソフトウェアの開発
 - ・TCA アーキテクチャ上でのアプリケーションインタフェース及び通信ライブラリ開発
 - ・基本アプリケーションの実装と性能評価

(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 (慶應義塾大学情報工学科、教授)
- ② 研究項目
 - ・PEACH3 の開発
 - ・PEACH2 の余剰 FPGA 資源上へのアクセラレータの実装
 - ・自動オフローディング機構の開発

(3) 「TCA 向け並列記述言語開発」グループ

- ① 研究代表者: 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
 - ・XMP-dev 言語仕様の拡張
 - ・XMP-dev 処理系の開発および評価
 - ・XMP-dev によるアプリケーション開発

(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 分子動力学法及びフラグメント分子軌道(FMO)計算コード開発

§ 2. 研究実施の概要

本研究課題では、CPU の slave device として位置づけられる、GPU に代表される演算加速装置と並列ノード間通信機構の強連結システムコンセプトである TCA (Tightly Coupled Accelerators)の提案とこれに基づくシステムソフトウェア及びハードウェアの開発、その通信モデルに基づく並列処理システムソフトウェア(通信ライブラリと並列記述言語)、そしてそれらに基づく大規模並列処理アプリケーションの構築を目的とする。

TCA システムソフトウェア開発(朴)グループにおける研究では、ユーザ API の改良と特に高速性の要求される集団通信の実装と性能評価を行い、特に短メッセージ通信を必要とする強スケールングにおける TCA システムの優位性を示した。また、並列言語開発グループ(村井グループ)との協業による TCA 向けコンパイラの開発支援を行った。また、GPU 以外の PCIe 向け演算加速デバイスである Intel Xeon Phi メニーコアプロセッサへの適用を行った。さらに、MPI 等の既存システムとの組み合わせにより、TCA と既存通信の組み合わせによる高速通信システムの実装と性能評価を行い、両システムの併用が一定の通信性能向上をもたらすことを示した。

TCA ハードウェア開発(天野)グループにおける研究では、PEACH2 で通信ボトルネックになっている PCIe gen2 を PCIe gen3 に変更した PEACH3 を開発し、実機により転送実験を行った結果、PCIe gen3 の理論的性能の約 86% の転送バンド幅を実現した。これは PEACH2 の転送バンド幅のほぼ倍である。また、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アクセラレーション機構を実装し、実機評価を行った。データサイズが小さい場合、CPU に転送してリダクション演算を行った場合に比べて約 45 倍の性能向上を実現した。また、FPGA 上へのオフローディングを簡単に行う設計環境 Courier を開発し、ストリームアプリケーションなどで 5 倍程度の性能向上が実現できることを示した。

TCA 向け並列言語開発(村井)グループにおける研究では、TCA アーキテクチャに基づく言語 XcalableACC (XMP-dev より名称を変更)の言語仕様を策定した。本仕様は、分散メモリ向け並列プログラミング言語 XcalableMP とアクセラレータ向けプログラミング言語 OpenACC を組み合わせた上で、マルチデバイスおよび TCA 対応の機能を付加したものである。XcalableMP コンパイラ Omni XcalableMP を拡張することにより、XcalableACC コンパイラのプロトタイプを開発した。本プロトタイプを用いていくつかのベンチマークプログラムを記述し、TCA アーキテクチャに基づく HA-PACS において評価を行い、有効性を確認した。

TCA 向けアプリケーション開発(梅村)グループにおける研究では、計算基礎科学から気象分野までのアプリケーション開発を推進した。宇宙分野では、重力多体粒子系計算のための Tree コードを GPU により高速化し、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。そして、輻射輸送計算と流体力学計算を結合し輻射流体シミュレーションコードを開発し、点光源と拡散光子による光電離問題のシミュレーションを遂行すると共に、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、マルチスケールの物理として格子 QCD による原子核の直接計算、および有限温度・有限密度の物理として QCD における相構造解析を進めた。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、都市街区気象 LES の完成に近づけた。物質・生命科学分野では、GPGPU 化 Fock 行列計算ルーチンの OpenFMO への組み込みと、タンパク質の効率的サンプリング法 (Fluctuation Flooding Method (FFM)) の開発を行った。

【代表的な原著論文】

- [1] Y. kodama, T. Hanawa, T. Boku, M. Sato, "PEACH2: FPGA based PCIe network device for Tightly Coupled Accelerators", Proc. of HEART2014, Sendai, 2014.
- [2] M. Nakao, H. Murai, T. Shimosaka, A. Tabuchi, T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, and M. Sato, "XcalableACC: Extension of XcalableMP PGAS Language using OpenACC for Accelerator Clusters," Workshop on accelerator programming using directives (WACCPD), New Orleans, LA, USA, Nov. 2014.
- [3] N. Fujita, H. Fujii, T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, Y. Kuramashi, M. Clark, "QCD Library for GPU Cluster with Proprietary Interconnect for GPU Direct Communication", Proc. of HeteroPar2014 (with EuroPar2014), Porto, 2014.