

課題名 (タイトル) :

大規模・高並列・高性能な数値計算ソフトウェアライブラリの研究開発

利用者氏名 :

○今村 俊幸

廣田 悠輔

棕木 大地

Doru Thom Popovich

Franz Frachetti

所属 :

計算科学研究機構 研究部門 大規模並列数値計算技術研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本課題ではポスト京コンピュータおよびエクサスケールコンピュータに向けた、大規模・高並列・高性能な数値計算ソフトウェアライブラリの実現に向けた研究開発を行うことを目的とする。計算科学で用いられるアプリケーションの多くは、連立一次方程式や固有値計算、高速フーリエ変換、非線形方程式などの様々な数値計算ソフトウェアライブラリの上に構築されている。現在の京コンピュータと比べてさらなる大規模化・高並列化が進む次世代のスーパーコンピュータにおいて、これらのソフトウェアライブラリが十分な性能を発揮できるようにするためには、アルゴリズムや実装方法の見直しが不可欠である。本研究では京コンピュータをベースとする FX10 の後継機種である FX100 を活用して、次世代のスーパーコンピュータに向けた数値計算ソフトウェアライブラリに必要なアルゴリズムの選定・評価、プログラムの実装技術に関する基礎研究を行う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

次世代のスーパーコンピュータをターゲットとした行列積プログラムの開発作業への活用、また早稲田大学・森倉氏らが開発を進める超並列環境向け精度保証付き行列計算プログラムの性能評価を行い、議論の土台となるデータの収集に活用する。加えて、本研究チームが開発する高性能固有値ソルバ EigenExa や関連ソフトウェアコン

パイルや性能評価、高性能な NVIDIA GPU 向け BLAS ルーチンの SYMV・GEMV についてマルチ GPU 対応化を行い、最大 4GPU を使用した場合の性能評価を行う。

3. 結果

本年度は主として昨年度開発したソフトウェアのアップデートならびに動作確認作業、更に関連する ELPA ライブラリのコンパイルの確認作業にとどまり、特に新規の性能評価結果はない。さらに、マルチ GPU に対応した行列ベクトル積・行列積カーネルの実装および自動チューニング技術について、HOKUSAI システムを使用して検討する予定であったが、ローカルの機材を用いたシングル GPU における技術検討に時間を要したため、HOKUSAI システムを利用したマルチ GPU 実装の検討段階まで到達していない。

4. まとめ

本課題では FX100 を用いた既存プログラムの性能評価、GPU 演算サーバを用いたマルチ GPU プログラムの開発を行い、その成果を主業務である大規模数値計算技術研究に反映する。

5. 今後の計画・展望

FX100 を用いた既存プログラムの性能評価は京コンピュータでの新規ソフトウェアに依存するが、新ソフトウェアを順次移植し性能評価を実施する。また、マルチ GPU における実装・自動チューニング手法について検討を行う計画である。