

課題名 (タイトル) :

高並列アプリケーションプログラムの研究開発

利用者氏名 :

黒田 明義

所属 :

本所 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 開発グループ
アプリケーション開発チーム

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

現在, 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部では, ナノ分野のシミュレーション科学を担うターゲットアプリケーションである PHASE, また CREST との連携開発を行っている固有値ソルバについて, 次世代スーパーコンピュータに向けた高並列化・高性能化の作業を行っている. 本年度は試作と評価を中心に実施しており, 本課題では RICC システムを用いて, 特に並列性能に着目して次世代スーパーコンピュータ上での可用性について評価を行った.

2. 具体的な利用内容, 計算方法

本プロジェクト開発実施本部では, 重点的に高速化に取り込むとしたアプリケーション 6 本をチーム内で選定した. その中でナノ分野での計算科学において重要とされるアプリケーション PHASE を, 次世代スーパーコンピュータ上での高速化に向けた試作並びに評価を行った. PHASE とは, 擬ポテンシャルと密度汎関数法によるナノ材料第一原理分子動力学プログラムであり, 局在基底ではなく平面波基底を用いることにより, 分子から固体まで多くの物質に対して高精度な電子状態計算が可能となるアプリケーションである.

作業内容は 2 つ. PHASE 実アプリケーションの高並列化並びに, 単体性能向上の開発であり, 本課題では, 高並列化の試作とその評価を実施した. 高並列化に向けた作業とは, その障害要因となり得る並列度制限, 残存非並列部, 通信内訳とその影響, ロードインバランスなどの影響を調査し評価を行う. PHASE は主要な演算が $O(N^3)$ であり, 演算時間が爆発しないように系の大きさ(原子数)を選択すると超並列時に, 分割可能数(～

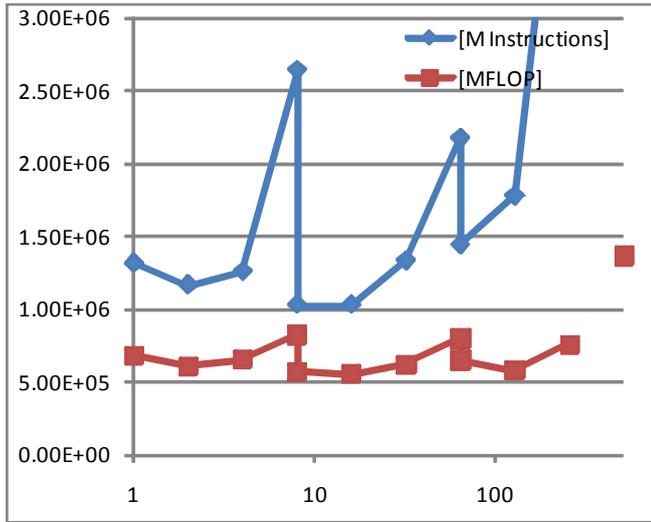
$O(N)$) が並列数を下回ってしまうという問題があり, 超並列での実行が困難であることが分かっている. これを回避するには, 並列軸を増やす多軸並列化が必要であり試作を行った. これはもともとバンド方向若しくは G 空間方向にのみに並列化されているプログラムにて, バンド+G 空間の 2 方向に並列軸を増やすというものである. PHASE には大きく分けて, 3 種類の特徴的なカーネルが存在する. Gram-Schmidt などの行列行列積で記述される部分, 全体通信や並び替えを伴う FFT の部分, 固有値を求める部分である. 本年度の試作では, まず行列ベクトル積から行列行列積への書き換えが既に終わっており, BLAS Level 3 を適用することで単体性能向上策が施された Gram-Schmidt などのカーネルについて, 多軸並列試作を行い, 性能評価を行った.

3. 結果

まず, アプリケーションのスケラビリティの測定を実施した. 先述の通り PHASE は, 演算量が $O(N^3)$ で増えるため, 並列数増やせない. たとえ増やせたとしても, プロセス当たりの粒度が細かくなりすぎて, 目標規模とはかけはなれた系を計算したことになってしまう. よって次世代計算機を想定した並列数で切り出しを行い測定する Weak Scaling の手法を用いて測定することにした. この手法を用いても $O(N^3)$ という性質が測定に制約を与える. 結晶のバンド計算を想定すると, 原子の入っている BOX の 1 辺を 2 倍にすると, 粒子数は $2^3=8$ 倍, 演算量は $8^3=512$ 倍になるわけで, 系を倍にすると, 分割数を 512 倍にしないと Weak Scaling の測定は出来ないことになる.

これを回避するために, 非晶入力データを用意し, BOX の 1 辺のみ 2 倍にしても物理的に問題ないような系を用意した. それでも Weak Scaling を測定するために

は、8th 並列単位での測定しか出来ず、せいぜい数点しか測定点を確保出来ないことになる。粒子数固定で、バンド数を増やすことで、2nd 並列での測定が出来るか調査を行った。結果は以下の通りである。



並列度を増やしても浮動小数点演算量はあまり増減しないことが確かめられた。しかし、実行時間は大幅に増加している。問題があるのは、メモリ節約のために Work 配列を毎回計算しなおす手続きを行う箇所であり、Instruction が爆発していた。この部分はテンポラリな手続きのため、削除するかうまく並列処理するかは今後の作業にかかっているが、比較的容易に Weak Scaling を測定できることが見込みがたった。

また、実際に大並列ではないが、多軸並列の効果についても評価を行った。

- ・ 残存非並列部の並列化
- ・ 通信が局所的に抑えられる効果
- ・ 粒度が増えることによる並列効率の増大

の効果が、並列軸の追加に伴う新たな通信のコストを上回り、性能向上が見られることが分かった。

4. まとめ

RICC のシステムを利用して PHASE の並列性能調査並びに評価を行った。PHASE はその特性から Weak Scaling を測定が困難であるが、アモルファスを用い、かつ粒子数固定でバンド数を変化させることで、比較的容易にプロセス当たりの演算量を固定出来ることがわかった。またこれとは別に多軸並列の効果も確かめられ、次世代スーパーコンピュータでの性能向上の見込みが立った。

5. 今後の計画・展望

本年度、一部のルーチンの多軸並列の試作並びに評価を行った。次年度は FFT や固有値ルーチンを用いた二軸並列の試作評価を行い、次世代スーパーコンピュータでの実行への道筋をつける。

固有値ソルバについては、まずは多軸並列下で ScaLAPACK を用いて並列動作することを確認した後、現在、試作評価中の固有値ソルバを組み込んだ高性能計算を試作・評価を行う。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容

本年度、Weak Scaling 測定の道筋をつけ、実際に多軸並列の試作を行った行列行列積で記述されるいくつかの箇所についてその性能評価を行い、超並列化への道筋を示すことができた。

来年度は、残りの FFT や固有値計算に関する所について、多軸並列の試作を実施し、実際に高並列における詳細のスケーリング評価を行う。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

本年度は次世代スーパーコンピュータにて性能を高めるためのアプリケーションの試作並びに、性能調査並びに評価を目的に利用を行った。

次年度以降、本年度の試作評価結果をもとにしたアプリケーション開発・高速化の実装へのフェーズへとシフトしていくため、そこでの成果を発表していく機会が出てくる予定である。

また、今後は、新規アルゴリズムを用いた新規アプリケーションの開発にも手がけるフェーズへ展開していく可能性もあり、今後成果を発表していく機会が増えていくと思われる。