

課題名 (タイトル) :

マルチプラットフォームの大規模数値シミュレーションを支援するフレームワークの構築

利用者氏名 : 今村俊幸

所属 : 本所 情報基盤センター

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

本研究課題は大規模シミュレーションにおけるマルチコア・GPGPUを利用した科学技術計算ソフトウェアの性能を測定し、性能向上の問題点をキャッシュ、メモリ、マルチコアの観点から明らかにし、その結果を次世代計算機向け数値計算ライブラリ開発に反映させるというものである。

2. 具体的な利用内容、計算方法

今年度の主な利用内容は、昨年度、理研 RICC システムに移植し、RICC システムの性能評価を実施した固有値計算ライブラリの性能評価を継続して実施するとともに、大規模並列環境における性能特性を調査することにある。具体的には、4000 コア以上を利用して安定かつ高速に動作することを確認することにある。また、RICC クラスタを構成する GPGPU クラスタ向けの固有値ソルバ開発も研究開発項目としてあげる。

3. 結果

0. 平成 21 年度からの継続研究の結果

昨年度の研究成果として、マルチコアクラスタである RICC システムで flat-MPI, hybrid/MPI+OpenMP のいずれのスタイルでの動作も確認しており、今年度は更に使用コア数を増やした状況において性能測定を行った。マルチコアプロセッサで構成されるクラスタ型並列計算機である東京大学情報基盤センターT2K (HA8000) との性能比較を実施した。図 1 は昨年度の予備実験でえられた性能 FLOPS 値 (計算量を計算時間で割った値であり、1 秒間に行われた計算回数を指す。値が高ければ計算機を効率的に利用できたことになる。)

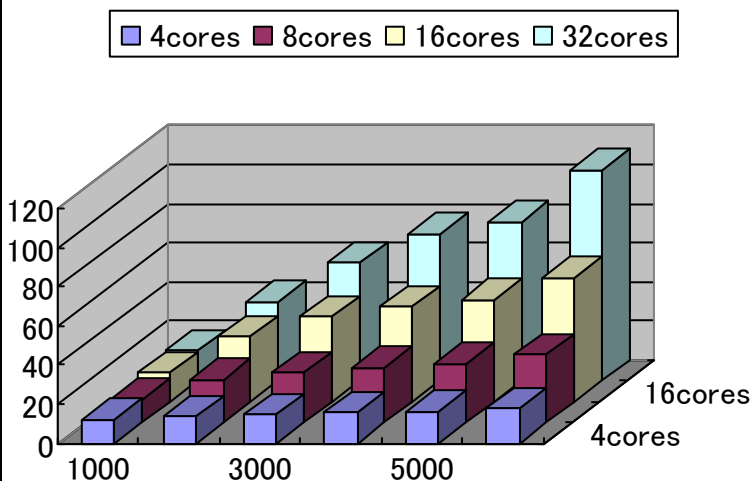


図1: R I C C での性能 (GFLOPS 値, 横軸は行列のサイズ,

奥行き軸は使用コア総数 (プロセス数は 1/4))

RICC システムの理論性能の 28% に達する 105GFLOPS を得ており、これは同様のマルチコアクラスタである東京大学の HA8000 システムの約 2 倍の性能達成率となっている。

1. 4000 コアでのテスト (理研: 奥村雅彦研究員との共同研究による)

6 月度大規模並列ジョブ実行の制度により、4000 コアを利用した固有値ソルバの動作検証と性能評価を実施する機会を得た。それに先立ち、最大利用可能な 32 ノード (128 コア) までの、動作確認と性能評価を実施した。開発中の固有値ソルバは、主として 3 パートに分かれ、第一パート: ハウスホルダーの三重対格化と第三パート: 逆変換が全体の主要部である。図 2、3 にそれぞれの計算性能を示したグラフを掲載した。

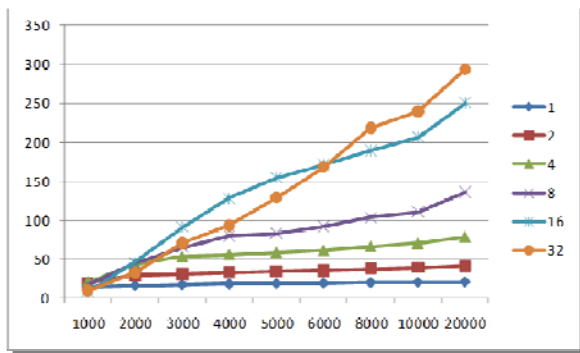


図 2 : ハウスホルダー三重対角化の性能 (GFLOPS 値, 横軸は行列のサイズ, 凡例中の数値はノード数)

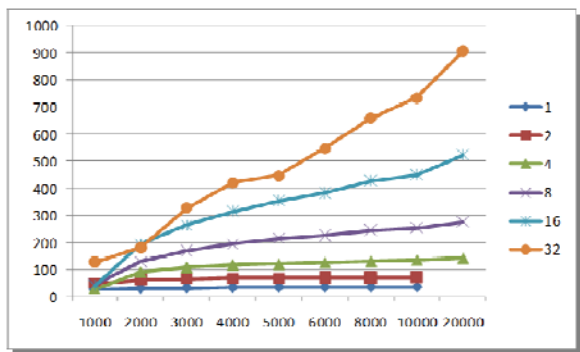


図 3 : ハウスホルダー逆変換の性能 (GFLOPS 値, 横軸は行列のサイズ, 凡例中の数値はノード数)

```

N= 10240C NM= 2064
NV= 2096
NUMOFPROCESS= 4000( 50 80 )
NUMOFTHREADS= 1
calc (u,beta) 129.598367120743
mat-vec (Au) 367.857017993927 1945.94050572871
COMM1/2 50.487753462982 229.528367446899
2update (A-uv-vu) 20.3103623390198 352.444663821401
calc v 48.984156317444
v=-(Uv+VU)u 88.6461744308472
UV post reduction 3.325343132019043E-002
OCMM,STAT
BCAST : 43.9906423423767
REDUCE : 435.9537298890E2
REDIST : 52.6327230930328
GATHER : 0.00000000000000E+000
TRD-BLK 102400 6E4.524480810702 2187.32105248126 3GFLOPS
TRD_BLK_INT 102400 48
PDSTEDC 96.7467158775330
OCMM,STAT
BCAST : 2.354311943354198E-002
REDUCE : 0.00000000000000E+000
REDIST : 0.00000000000000E+000
GATHER : 0.00000000000000E+000
D&C 98.4987939853688 ERROR DE= 0
TRBAK= 127.804280042648
OCMM= 69.46283981878
16832.9086919733 3GFLOPS
34439.6898745609 3GFLOPS
39738.6974309300 3GFLOPS
OCMM,STAT
BCAST : 41.2770607471463
REDUCE : 27.83582615882E6
REDIST : 0.00000000000000E+000
GATHER : 0.00000000000000E+000
TRBAKWY 127.805510044098
TRBAK 102400 127.828458070755 1E799.7300419313 GFLOPS
Total 8808407769832E1 4063.28012460771 GFLOPS
max(w(i) w(i)-true)/w = 9.631749080368398E-008
    
```

図 4 : 4000 コアを利用した固有値ソルバの実行ログ)

横ジョブ実行で設定した 4000 コアを上限として RICC システムでの最大規模並列実行を検証した。図 4 は計算ログである。4000 コア利用であるため、問題サイズも十分に大きな 102400 次元を設定した。全体で 4 テラフロップスを記録している。ただし、今回の実行では OpenMP+MPI のハイブリッド実行ができなかったため(理由は不明)、4000 プロセスの flat-MPI 実行となっている。そのため、通信コストが多くなっていると考えられる。RICC システムに最適な 1000 プロセス(4 スレッド/プロセス)の実行では更なる高性能が達成できると期待される。

2. GPGPU に関して

RICC システム特徴である複合的システムの 1 要素である GPU クラスタが近年注目を浴びている。中国の天河や東工大の Tsubame2 など、スパコンのトレンドであり、今回開発中の固有値ソルバも一部を GPU で処理する修正を実施している。今年度はデスクトップ用の GPU で移植作業を行い、RICC システムでの検証は来年度以降になる予定である。

4. まとめ

本年度は、昨年度に引き続き RICC で開発した固有値ライブラリがスケラブルに動作したことを確認した。特に、4000 コアを利用した安定・高速動作は、通常 2 べきコアが想定される並列計算機利用であっても、それ以外の構成で十分高性能であることが確認できた。これは、RICC のハードウェア的な優位さの確認とともに、開発した固有値ソルバの柔軟性の証明材料といえる。GPU クラスタ部分への対応も開始した。次世代スパコン「京」コンピュータのみならずポストペタスケール環境に向けた固有値ソルバのもととなるライブラリであり、本研究での性能予測は必要な結果を示唆しており、ベンチマーク結果ならびに今後のチューニング状況が「京」コンピュータにおける固有値計算ライブラリにうまくフィードバックされるものと考えられる。

5. 今後の計画・展望

平成 23 年度は GPU クラスタ向けの固有値ソルバ部分の開発を中心にして、GPU クラスタ + マルチコア クラスタ 混合環境 などポストペタスケール環境で想定される未来の計算機環境に対応するための数値計算ライブラリの構成方法についての提案をしていくことが今後の展望である。

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

マルチコア クラスタで MPI+OpenMP のハイブリッド並列実行が適切に動作できない部分を調査して、大規模並列ジョブ実行において 8000 コア以上での動作性能確認と性能測定を実施する。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

本項には該当しない

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

本項には該当しない

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

1. 今村俊幸：ペタスケール環境での高並列固有値ソルバの開発, 日本計算工学会 計算工学講演会論文集 Vol. 15, pp. 103-106, 2010.

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. Imamura, T., Pham, H. P., Yamada, S. and Machida, M. : Performance Evaluation for a Dense Eigenvalue Solver for the Next-generation Petascale System, Oral presentation at SIAM CSE2011, Reno, March 1st 2011.
2. 今村俊幸, 山田進, 町田昌彦 : eigen_sg: マルチコア+GPGPU 環境における固有値ソルバ開発, 2011 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, HPCS2011 論文集 (ポスター発表), 産業技術総合研究所, 2011 年 1 月 18 日.