

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 : 寺井 優晃

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

次世代スーパーコンピュータ開発実施本部では、2012 年を目標に次世代スーパーコンピュータ、「京」コンピュータの開発を推進している。システム本体の開発と並行して、戦略分野ごとに定められた複数本の重点化アプリケーションの開発を関係機関と連携して実施している。

その中には、「京」コンピュータの性能を最大限引き出す為の最適化業務も含まれている。

最適化業務の要点としては、単体実行時と大規模並列実行時の特性を両面から把握する必要がある。特に、高並列時の挙動は経過時間に占める通信時間の割合及び通信の種類、メモリ量の増加等を定量的に評価することでターゲットとなるアプリケーションを大規模並列実行した際の特性を早期に明らかにし、問題があれば修正を行っている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は下記アプリケーションに関して最適化等を検討する過程において、大規模並列実行を試みた。

1) NICAM

NICAM は、正二十面体非静力学モデルを採用した全球規模の気象大循環モデルである。従来の気象大循環モデルが球面調和関数展開によるスペクトル法が主流に対して、NICAM は差分法を用いることで超並列による超高解像度を特徴とし、積雲パラメタリゼーションを用いない雲解像を実現している。熱帯付近の積雲活動は地球規模の気象大循環に大きな役割があり、メソスケールの対

流システム、クラウドクラスター、スーパークラウドクラスター、MJ0 などの階層的な構造を緻密に再現できることに特徴がある。本年度は、大規模並列実行時のロードバランス、通信時間、メモリ量、ファイル入出力に関する特性を調査した。

2) 格子 QCD

格子 QCD は、基本粒子クォークおよびグルオンの基本法則である量子色力学(QCD)を 4 次元時空格子に定式化した格子 QCD により、素粒子の強い相互作用の第一原理計算を行うものである。アルゴリズムとしては SSOR を用いており、昨年度の成果として、マルチカラーブロックオーダリングを用いることで、スレッド並列化及び SIMD 化を併用しつつ、収束回数を抑えることが分かっている。本年度は、上記アルゴリズムを適用したコードの性能評価を行った。

3. 結果

1) NICAM

本年度は、5120 プロセスまでの大規模並列を試行し、高並列時の通信特性とメモリ量に関する特性を明らかにした。メモリ量については大規模並列時にメモリを大量に消費する傾向が得られた為、省メモリ化に関する修正を加えることで改善された。

2) 格子 QCD

本年度は、マルチカラーブロックオーダリングを用いた SSOR の評価に関連して、本体コードの並列実行を実施した。結果、ハイブリッド並列実行時のアプリケーションの収束性に関して調査を行い、コンパイラ、ライブラリ等の利用環境に依存した特性を明らかにした。

平成 22 年度 RICC 利用報告書

4. まとめ

本課題では、RICC を用いることで、今後並列数が数万のオーダーとなるアプリケーション開発において高並列化に必要な指針を得ることができた。RICC は、数千並列規模のアプリケーションを実行できる環境として有用なので、来年度も利用していきたい。

5. 今後の計画・展望

来年度もそれぞれのアプリケーションを対象とした単体実行時及び並列実行時における性能評価および最適化業務を予定している。

6. 利用研究成果が無かった場合の理由

プロジェクトの特性上、対外的に公開できる情報が限られており、本年度は外部に公表できる成果としてはまとめられなかった。