

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

理研での所属研究室名 :

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、京速コンピュータ「京」の開発は最終段階にある。次世代スーパーコンピュータ開発実施本部では、「京」本体のシステム開発と並行して、戦略分野ごとに選定された複数本の重点化アプリケーションに対してチューニングを実施し、システム評価に供している。各アプリケーションにおいて、「京」コンピュータの性能を最大限引き出す為には、単体実行時と高並列実行時の特性を両面から把握する必要がある。特に、高並列時の挙動として、演算量の偏り、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なっている。本課題では、上記の開発において「京」以外の大規模並列実行が可能な開発環境として RICC を利用した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は昨年度に引き続き、下記アプリケーションの開発を実施した。

1) NICAM

NICAM は、正二十面体非正力学モデルを採用した全球規模の大気大循環モデルである。従来の大気大循環モデルが球面調和関数展開によるスペクトル方が主流に対して、NICAM は有限差分法を用いることで超並列による超高解像度が特徴で、複雑なパラメタリゼーションを用いないで積雲等の雲解像が可能である。「京」開発プロジェクトでは、この NICAM について単体性能から高並列化に至る系統的なチューニングを実施している。チューニングの初期段階では、アプリケーション・コードから主要計算

部分を含む独立したコード (カーネル) を抽出し、複雑な処理内容を単純化した上で、単体性能のチューニングを実施する。この際、大気・海洋・雪氷等の気候システムに基づく計算に沿って、流体計算を行う「力学過程」と外力項を計算する「物理過程」を把握した上でカーネルは抽出される。本年度は、これらカーネルに対するチューニングを行った上で、大規模並列実行時の序盤の動作確認に主に用いた。

2) 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 次元時空格子上に定式化した格子 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。本年度は、昨年度に引き続き、並列実行時の動作確認に用いた。

3. 結果

1) NICAM

本年度は、320 プロセスまでの大規模並列を試行し、並列実行時の動作確認に利用した。

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、4 スレッド及び 8 スレッド時の計算結果の比較、収束性の確認に利用した。

4. まとめ

本課題では、「京」において並列数が数万のオーダーとなるアプリケーション開発の序盤において、RICC を用いることで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

開発プロジェクトは来年度に終了するが、今後、各分野から提出されるアプリケーションの高並列・高性能化手法は、「京」を含めた複数のアーキテクチャの中で検討され、計算科学分野における経験や知見となって蓄積されていくことが期待される。

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

「京」の整備が完了することで、本開発プロジェクトにおける RICC の利用機会は減少すると予想するが、今後の計算科学の発展性を考慮する上で、RICC のような異なるアーキテクチャを用いた比較がより必要となることが予想され、来年度も継続利用を希望したい。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

本年度は、アプリケーションを用いた性能評価をシステム開発にフィードバックすることに専念した。現在は、システムの安定化に伴い、論文等での発表を準備している段階である。