

課題名 (タイトル) :

ナノ粒子生成シミュレーションの高速化

利用者氏名 : ○滝沢 寛之

所属 : 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

近年急速にそのニーズが高まっているナノテクノロジーの一端を担う流動プラズマ支援型ナノ粒子量産プロセスを計算対象として取り上げ、そのマクロスケールからナノスケールに及ぶマルチスケール物理の包括的なシミュレーションを実現する。これによりプロセスを構成する数多の素過程とそれらの干渉現象が初めて解明され、物理学・化学・材料科学分野への学際的な貢献を果たすのみならず、産業界に対しても実機の最適制御のための指針提供が叶うことになる。しかし、そのためには現在膨大な時間を要するナノ粒子群生成プロセスシミュレーションの高速化が必要不可欠であり、その並列度の高さを考えると特に GPU による高速化が有望である。このためには GPU を搭載する大規模クラスタが必要不可欠であるため、国内有数の大規模 GPU クラスタシステムである多目的クラスタを利用する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

多目的クラスタを利用して GPU による高性能計算を行い、様々なパラメータ設定でのナノ粒子生成プロセスをシミュレートするとともに、MPI アプリケーション中で GPU を効果的に利用する技術の性能評価を行う。

3. 結果

ナノ粒子群生成プロセスのシミュレーションには大容量メモリが必要であり、高解像度なシミュレーションを行うためには、大規模分散メモリ型並列システムによる並列処理が必要不可欠である。また、シミュレーションの実行時間も長いため、その飛躍的な高速化の要求も強い。しかしながら、その疎粒度並列性は限られているため、MPI プロセス数の上限は制約されている。このため、各 MPI プロセスを GPU によって高速化するアプローチが有望である。

しかし、MPI と OpenCL のハイブリッドプログラミングにおいては、システム依存の複雑な実装が要求される。このため、その実装の詳細をアプリケーション開発者が意識しなくて済むように OpenCL を MPI 向けに拡張した c1MPI を開発しており、平成 25 年度にはその仕様を他の I/O にも拡張し、学术论文への投稿を準備している。

また、OpenACC を用いてナノ粒子生成シミュレーションを再実装し、OpenACC における最適化手法と従来の CUDA/OpenCL における最適化手法の類似性を議論した。その結果を図 1 に示す。基本的に OpenACC では、OpenCL と同様の最適化が効果的である。しかし、一部の最適化手法を OpenACC では実現することができず、特に共有メモリを明示的に利用できないことが大きな性能差につながっている。このため本研究では CAPS 社の OpenACC コンパイラで共有メモリを明示的に利用するための独自のディレクティブを作成した。その結果、OpenCL と比較して遜色のない性能を達成できることが示された(図 1 の opt4)。

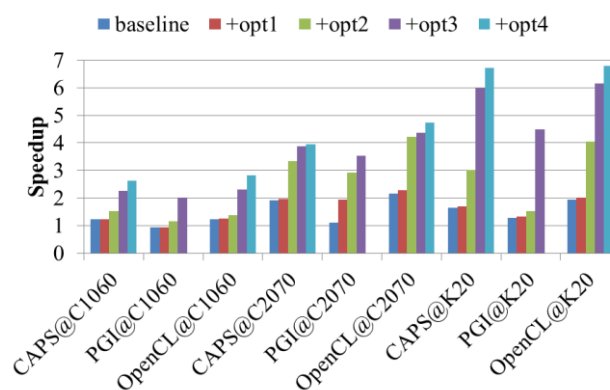


図 1: OpenACC と OpenCL との比較

4. まとめと今後の展望・計画

ナノ粒子群生成プロセスシミュレーションを OpenACC で再実装し、その実用性を評価した。国際ワークショップで発表されている。さらに昨年国際ワークショップで発表された c1MPI を拡張した学术论文を投稿に向けて準備中である。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Hiroyuki Takizawa, Makoto Sugawara, Shoichi Hirasawa, Isaac Gelado, Hiroaki Kobayashi, and Wen-mei W. Hwu, “cIMPI: An OpenCL Extension for Interoperation with the Message Passing Interface,” The Multicore and GPU Programming Models, Languages and Compilers Workshop (PLC2013), pp.1138—1148, 2013. (平成 24 年度報告書でも報告済み)

Makoto Sugawara, Shoichi Hirasawa, Kazuhiko Komatsu, Hiroyuki Takizawa, and Hiroaki Kobayashi, “A Comparison of Performance Tunabilities between OpenCL and OpenACC,” 2013 IEEE Internal Symposium on Embedded Multicores and SoCs (MCSoc), pp.147—152, 2013.

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Hiroyuki Takizawa, “Towards an Extensible Programming Environment for Software Evolution,” Legacy HPC Application Migration 2013, September 27, 2013.

【その他】

滝沢寛之, “GPU 向けプログラミング環境の現状と将来展望” 北陸先端科学技術大学院大学 情報社会基盤研究センター講演会, January 30, 2013. (招待講演)

滝沢寛之, “XML を用いたツール間連携に向けて,” The 1st XscalableMP Workshop, November 1, 2013. (招待講演)

滝沢寛之, “HPC システム多様化・複雑化時代のアプリケーション開発環境,” 次世代 RHW 創造研究会 (JACORN), December 26, 2013. (招待講演)