

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 : ○南 一生 長谷川 幸弘 井上 孝弘  
黒田 明義 井上 俊介 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 年を目標に京速コンピュータ「京」の開発を推進している。システム本体の開発と並行して、戦略分野ごとに選定さ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。

「京」のアプリケーション開発においては、数万規模の並列数でのスケーラビリティの確保と、高性能 CPU の持つ性能を極限まで引き出す最適化が必須となる。本課題では数千並列で実行可能な RICC をテスト環境として利用し、各種最適化を試行・検証した。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

本課題では、地球科学分野から NICAM 及び Seism3D、ナノ分野から PHASE 及び RSDFT、工学分野から FrontFlow/Blue、物理分野から LatticeQCD を選定し重点的な高並列・高性能化を行っている。昨年度は6本のターゲット・アプリケーションのうち、Seism3D について重点的に高並列実行を行い、FrontFlow/Blue と RSDFT について試験的な高並列実行を行った。今年度はさらに Seism3D 及び NICAM について重点的に評価を行った。なお、RSDFT 等のアプリケーションについては京速コンピュータ「京」での評価に順次移行している。

## 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大気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、MJO 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、昨年度未実施だった大規模並列実行時の挙動解析を行った。

## 2) Seism3D

Seism3D は、不均質な地下構造における地震波動の伝播を、運動方程式 (応力の釣り合いの式) と応力歪みの構成方程式の2つの方程式から差分法計算 (時間2次、空間4次精度) により陽的に求めるものである。本課題では、演算コスト、通信コスト、高並列時のスケーラビリティの検証を実施した。

なお、本コードは以下の特徴がある。

- ・演算部はストリーム変数が多く存在し、比較的高い B/F 値を要求する。
- ・通信部は1タイムステップあたり2回、各プロセスが隣接6プロセスに通信を実施し、数タイムステップに1回、全体通信 (mpi\_reduce) が実施される。

本課題では、上記の特徴を踏まえた上で、他のアーキテクチャを用いてチューニングされたコードが、RICC 上ではどういった振る舞いをするかの評価を中心に検証した。なお、計算モデルは、並列数が上がっても各プロセスの演算コストは変化しないウィークスケーリングにて評価を行った。

## 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) Seism3D

高並列化の性能評価では、各処理ブロックの演算、隣接通信、大域通信を分けて測定することでボトルネックを特定している。

結果、演算部に関しては、他のアーキテクチャ上にて、主に局所性を高めるキャッシュチューニングを施しており、キャッシュサイズやレイテンシの異なる RICC では、逆に性能が悪化する傾向が見られた。

隣接通信部に関しては、派生型による非同期通信が行われており、送信時にデータがバックされるタイミングにて不連続なメモリアクセスが発生する面があり、この箇所が通信のボトルネックになっていた。本問題への対処として、自前にバッファリングをする、不連続なメモリアクセスが発生する面の面積を他の面に比べて小さくする、等を試行し、コストを減らすことに成功した。

大域通信に関しては、当初は全プロセスにて実施していたが、自由表面を担当するランクのみが実施するように変更することにより、最適化を実施した。

## 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。特に Seism3D においては、通信部に関して、上述したチューニングにより 8000 並列までは想定内のコストに納めることができ、どのアーキテクチャにおいても有効な手法であることが確認された。一方、演算部に関しては、「京」のアーキテクチャに合わせたチューニングが必要であることがより明確になった。

NICAM のように異なるアーキテクチャ上で最適化されたアプリケーションにおいては、未踏な高並列時に発生するような想定されていないメモリ問題を早期に明らかにし、開発側にフィードバックすることができた。

## 5. 今後の計画・展望

開発プロジェクトでは、今後、高並列化が急務となる計算科学分野において、各分野から代表的なアプリケーションを選定し、それらに対して高並列・高性能化手法の研究開発を行っている。これらの準備・研究開発の中で蓄積された経験や知見が本課題の直截的な成果となり、エクサ級スーパーコンピュータに應用されることが期待される。また最適化された高並列アプリケーションを京速コンピュータ「京」で実行することにより学術的成果が期待される。

## 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

今年度までの課題によってターゲット・アプリケーションを高並列実行する際の基本的な指針を得ることができた。今後、京速コンピュータ「京」の整備が進むことで、本開発プロジェクトにおける RICC の利用機会は減ると予想するが、問題発生時あるいは「京」の性能を十分に活かすための高性能化手法の研究開発の成果をまとめるにあたり、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に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

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。