

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。

他にも、MPI と OpenCL を組合わせた並列シミュレーションコードを開発し、複数の GPU を用いたシミュレーション高速化技術を研究する。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。

平成 24 年度、MPI と OpenCL を用いたハイブリッドプログラミング化によって同シミュレーションコードの高速化を実現した。その大規模システム上での性能評価のために、多目的クラスタを利用した。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 (clMPI)。その結果として、従来よりも計算と通信のオーバラップを簡潔に記述することが可能であり、高度に最適化された実装と同等の性能がであることを性能評価によって実証した。RICC で姫野ベンチマークを実行した場合の評価結果を図 1 に示す。また、比較的新しいプログラミングモデルである OpenACC を用いた実装も行い、その有用性と実用性を評価した。

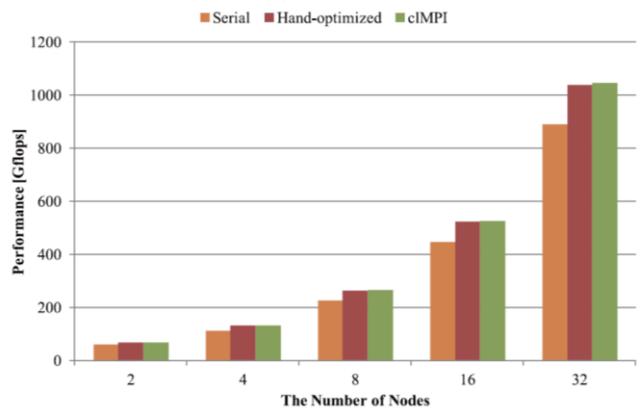


図 1: MPI 向け OpenCL 拡張の性能評価

4. まとめと今後の展望・計画

本研究では、ナノ粒子群生成プロセスシミュレーションを MPI と OpenCL/OpenACC によって飛躍的に高速化することができた。その性能評価

平成 24 年度 RICC 利用報告書

には RICC を使わせていただいた。これらの成果は国内研究会で口頭発表され、国際ワークショップにおいても 1 編の採録が決定している。さらに 1 編の論文を投稿に向けて準備中である。

平成 24 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, “clMPI: An OpenCL Extension for Interoperation with the Message Passing Interface,” accepted for presentation at the Multicore and GPU Programming Models, Languages and Compilers Workshop (PLC2013) co-located with 27th IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS 2013), 2013.

【国際会議、学会などでの口頭発表】

菅原 誠, 小松一彦, 平澤将一, 滝沢寛之, 小林広明, “ナノ粒子群形成アプリケーションの OpenACC による実装と性能評価,” 第 136 回情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, 沖縄, 10 月 3~4 日, 2012.

菅原 誠, 小松一彦, 平澤将一, 滝沢寛之, 小林広明, “ナノ粒子群形成アプリケーションの OpenACC による実装と性能評価”, 数値流体力学シンポジウム(CFD2012), 代々木, 12 月 18~20 日, 2012.

菅原 誠, 平澤将一, 小松一彦, 滝沢寛之, 小林広明, “複合型計算システム向けの OpenACC の拡張,” 第 11 回 情報シナジー研究会, 仙台, 2 月 25 日, 2013.