

課題名 (タイトル) :

大規模・高並列・高性能な数値計算ソフトウェアライブラリの研究開発

利用者氏名 :

○今村 俊幸

廣田 悠輔

棕木 大地

Doru Thom Popovich

Franz Frachetti

理研での所属研究室名 :

計算科学研究機構 研究部門 大規模並列数値計算技術研究チーム

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

本課題ではポスト京コンピュータおよびエクサスケールコンピュータに向けた、大規模・高並列・高性能な数値計算ソフトウェアライブラリの実現に向けた研究開発を行うことを目的とする。計算科学で用いられるアプリケーションの多くは、連立一次方程式や固有値計算、高速フーリエ変換、非線形方程式などの様々な数値計算ソフトウェアライブラリの上に構築されている。申請チームで業務として推進している京コンピュータでの高度利用化プロジェクトと比べてさらなる大規模化・高並列化が次世代のスーパーコンピュータにおいて進むことが明確になっている。これらのソフトウェアライブラリが十分な性能を発揮できるようにするためには、アルゴリズムや実装方法の見直しが不可欠である。本研究では京コンピュータをベースとする FX10 の後継機種である FX100 と GPU クラスタを活用して、次世代のスーパーコンピュータに向けた数値計算ソフトウェアライブラリに必要なアルゴリズムの選定・評価、プログラムの実装技術に関する基礎研究を行う

2. 具体的な利用内容、計算方法

研究チームが開発する高性能固有値ソルバ EigenExa や関連ソフトウェア Kevd を FX100 が具備する 4WDP-SIMD に対応させ、Intel プラットフォーム以外の広幅 SIMD に送付とウェアに対応させる技術評価を行う。また、Tesla K20Xm 世代の GPU での移植を進めるが、現時点では K20Xm は最新プラットフォームとは言えないため互換性を確認するための作業とする。

3. 結果

本年度は、単ノードでの高速固有値計算ライブラリ Kevd を FX100 が提供する浮動小数点演算環境 HPC-ACE2 に対応させ、4wordSIMD による動作を確認した。当該業務は主に、ポスト「京」開発業務の一環であり作業内容ならびに結果詳細についてはプロジェクトの進行に従って適切な時期に公開することが判断される。

更に、当方で開発を行っている SYMV カーネル ASPNE. K2 の最新版(1.6)を K20Xm 下で動作確認した。HOKUSAI に搭載される GPU は既に 3 世代も前のものになっているため、学会発表にデータを含めることはなくソフトウェアメンテナンスの色合いが濃いものとなっている。

4. まとめ

本課題では昨年来からの、固有値ソルバ EigenExa の FX100 での性能評価に引き続き関連ソフトウェア Kevd の HPC-ACE2 化作業を進めた。成果は主業務である大規模数値計算技術研究に反映するとともに、ポスト「京」開発プロジェクトに応用される予定である。

5. 今後の計画・展望

FX100 や Tesla K20Xm はメインストリームのアーキテクチャではなくなるため、今後はさらにソフトウェア保守としての利用になることが予測される。新規ソフトウェアとしてテンソル分解系のソフトウェアの移植作業もあり得るが、ハードウェアの刷新の次期を見計らって計画をリバイスする。