

プロジェクト名(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(1), 伊奈拓也(1), 椋木 大地(1), Yiyu Tan(2), Franz Frachetti(1), 寺尾剛史(1)

理研における所属研究室名:

(1) 計算科学研究センター 大規模並列数値計算技術研究チーム

(2) 計算科学研究センター 次世代高性能アーキテクチャ研究チーム

---

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本課題ではスーパーコンピュータ「富岳」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。「富岳」以降のスパコンでは大規模化・高並列とともに次世代アーキテクチャでの混合化がますます加速する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。当初、本研究では京コンピュータをベースとする FX10 の後継機 FX100 と GPU クラスタ、さらに Intel のサーバ向け CPU である SkyLake-SP 等を活用して、「富岳」に搭載される A64FX さらには nvidia 社の GPU クラスタに向けた数値計算ソフトウェアライブラリ、それら実現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っていた。一方、HOKUSAI シリーズの内部変更などにより一昨年度以降の活動から HOKUSAI システムへの依存を大きく再考してきている。

2. 利用がなかった場合の理由

本年度 HOKUSAI システムが採用するアーキテクチャ構成に大きな変更はなく、本プロジェクトが必要とするリソースと判断がなされず、利用が見送られた。HOKUSAI における、先端的なアーキテクチャの導入計画に応じてプロジェクト開発のソフトウェアやアーキテクチャ向け新規アルゴリズムの検証をすすめる。次年度以降の導入計画の推移を見つつ継続利用を検討したい。