

FX10 スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」採択課題のお知らせ

1. はじめに

東京大学情報基盤センターでは、2012年7月より、FX10 スーパーコンピュータシステムで「大規模 HPC チャレンジ」サービスを開始しました。

「大規模 HPC チャレンジ」は、HA8000 クラスタシステムで行ってきた「512 ノードサービス」、「512 ノード利用大規模 HPC 研究」と同様のサービスで、FX10 スーパーコンピュータシステムがもつ最大計算ノード数 4,800 ノード(76,800 コア)を、最大 24 時間・1 研究グループで計算資源を占有利用することを可能とするサービスです。

大規模 HPC チャレンジの採択課題について、以下の通り決定しましたので、お知らせいたします。

2. 採択課題について

今回は、2012年9月21日(金)～11月19日(月)までの期間で課題募集を行い、4件の応募がありました。課題採択委員会による厳正な課題審査の結果、全ての課題について採択することとしました。

採択課題一覧

課題名	小規模行列に対する超並列固有値ソルバーおよび通信回避方式を実現した超並列直交化方式の性能評価
代表者名 (所属)	片桐 孝洋 (東京大学 情報基盤センター)
<p>固有値・固有ベクトルの求解が可能な固有値ソルバーは科学技術計算で根幹となるツールである。近年並列性の増加に伴い、解くべき問題サイズが大規模化しているが、スパコン運用時の計算時間制約により、逆に問題サイズが小規模化することが指摘されている。</p> <p>そこで本提案では、以下の3点を研究目標に置く：(1)小規模行列に対する超並列固有値アルゴリズム；(2)超並列直交化アルゴリズム；(3)(1)(2)が適用可能なアプリケーションでの性能評価。提案者による小規模行列向け超並列アルゴリズム (Communication Splitting Multicasting Algorithm, CSMA) の評価、通信回避を施した QR 分解 (Communication Avoidance QR, CAQR) の予備評価を行い(1)(2)の目標の実現を狙う。実空間密度汎関数法 RSDFT への適用を考慮する。</p> <p>FX10 の全系 4800 ノードを利用し、L2 キャッシュに搭載できるサイズの超小規模行列を超並列実行する場合の性能評価を行う。RSDFT 利用時のプロダクトランにおける問題サイズを考慮し、エクサスケールのスパコンでの実行性能の予備評価を達成する。</p>	

課題名	新カーネルを取り入れた大規模グラフ処理ベンチマーク Graph500 のスケーラブルな探索手法による性能評価
代表者名 (所属)	鈴木 豊太郎 (東京工業大学 情報理工学研究所)
<p>Graph500 は、大規模グラフに対する幅優先探索の速度を計測するベンチマークである。本来は、スパコンハードウェアのベンチマークであるが、アルゴリズムの改良や新しい計算手法の適用による性能向上が常に行われており、1位のスコアは半年ごとに4～6倍に性能が向上している。</p> <p>2012年4月の大規模 HPC チャレンジを利用して実行したベンチマークでは、幅優先探索において 358.1 GTEPS の性能を達成し、Oakleaf-FX は Graph500 リストで4位となった。また、2012年9月には 609 GTEPS を達成した。今回も、さらなるアルゴリズムの改良や最適化を行った実装で、計測する。また、Graph500 ベンチマークへの新しく導入が予定されている最短経路問題についても、独自のスケーラブルな探索手法で性能を計測する。</p>	

課題名	分散メモリ型並列 MPS 陽解法による数十億粒子規模の津波シミュレーション
代表者名 (所属)	塩谷 隆二 (東洋大学 総合情報学部総合情報学科)
<p>MPS とは、Moving Particle Simulation の略であり、粒子法の代表的手法の一つである。粒子法は粒子が移動するという解法のため、格子法に比べて分散メモリ計算機環境での並列化を困難なものとしてきた。本研究グループでは、従来の方法とは異なり、計算領域に領域分割用のボクセル状の格子を定義して、この領域分割用のボクセルを用いて領域分割を行う手法を開発した。数値解法は従来の半陰解法から、大規模並列計算でも問題サイズに解析時間がスケールする陽解法に切り替えた。解析対象となる津波解析の物理モデルも開発が進み、浮遊物と構造物の接触を扱うことができるようになった。また、プレポストの並列化も完了しており、データハンドリングのボトルネックが無くなっている。これらの要素技術は、それぞれ一定の成果を挙げてきており、その成果を集約するために、「大規模 HPC チャレンジ」の利用が必要となった。</p>	

課題名	自動チューニング機能を備えた固有値計算ライブリと疎行列反復解法ライブリの性能評価
代表者名 (所属)	黒田 久泰 (愛媛大学 大学院理工学研究科)
<p>固有値を求めるための計算や大規模疎行列を係数行列とする線形方程式を解くための計算は様々な分野の数値シミュレーションにおいて頻繁に出てくる計算である。我々は広く汎用的に利用できる固有値計算ライブリと疎行列反復解法ライブリの開発を行っている。我々の開発しているライブラリは、解こうとしている問題や実行しているコンピュータシステムに応じて、演算カーネルやMPIの通信方式などを静的（ライブラリインストール時）あるいは動的（ライブラリ実行時）に最適なプログラムの実装コードを選択するといった自動チューニング機能を有している。今回、FX10 スーパーコンピュータシステムにおいて、4800 ノード (76,800 コア) という大規模なノード数 (コア数) で性能評価を行い、問題点の洗い出しを行う。その後、ライブラリを公開する予定である。</p>	