

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

Oakforest-PACS、Reedbush-H、FX10 スーパーコンピュータシステムでは、「大規模 HPC チャレンジ」を実施しています。「大規模 HPC チャレンジ」は、スーパーコンピュータシステムがもつ最大計算ノードを、最大 24 時間・1 研究グループで計算資源の占有利用ができる公募型プロジェクトです<sup>1</sup>。Oakforest-PACS (2017 年度第 1 回)、FX10 (2017 年度第 2 回再募集) の大規模 HPC チャレンジ採択課題について、以下の通り決定しましたのでお知らせいたします。

2. Oakforest-PACS 大規模 HPC チャレンジ 採択課題

今回は、2017 年 8 月 1 日 (火) ~ 2017 年 9 月 11 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、以下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	IHK/McKernel 軽量カーネル OS の大規模評価
代表者名 (所属)	Balazs Gerofi (理化学研究所計算科学研究機構)
<p>Interface for Heterogeneous Kernels (IHK) is a software framework that facilitates the deployment and execution of specialized operating systems kernels on a subset of node resources (e.g., CPUs and memory) in many-core systems. McKernel is a lightweight co-kernel, implemented on top of IHK, that runs side-by-side with Linux, optionally offloading OS services to the Linux kernel. The two main advantages of IHK/McKernel from an HPC perspective are lightweight kernel scalability; and the retention of the full Linux APIs. This proposal aims at performing a comparative evaluation of Linux and McKernel at the full potential of the OFP machine. The following applications will be evaluated using up to 8K nodes: GeoFEM (Tokyo Univ.), CCS-QCD (Hiroshima Univ.), AMG2013 (Coral), miniFE (CORAL), HACC (CORAL), HPCG (CORAL), Lammmps (CORAL), MILC (CORAL), Nekbone (CORAL), QBOX (CORAL), UMT2013 (CORAL), Lulesh (CORAL), MCB (CORAL).</p> <p>In addition, if time allows we also intend to evaluate a partial OmniPath (HF11) device driver incorporated version of McKernel that further improves communication performance.</p>	

課題名	SELL-C- $\sigma$ 疎行列格納法による自動チューニング付き並列多重格子法ソルバーの最適化および性能評価
代表者名 (所属)	中島 研吾 (東京大学情報基盤センター)
<p>連立一次方程式の反復解法、前処理手法としての多重格子法は、問題規模が増加しても収束までの反復回数が増加しないスケラブルな手法であり、大規模問題向けの解法として注目されており、並列計算においてもその効果が確認されている。申込者は、Sliced ELL 法を ILU 型前処理に世界に先駆けて導入することによるノード単体性能の向上、更にコア数が増加した場合、特に粗いレベルにおける通信の改善のために hCGA 法 (Hierarchical CGA) を提案し、Oakleaf-FX 4,096 ノードを使用して高いスケラビリティを得られることを示し、内外で高い評価を受けてきた。本提案では、これらの機能を有する並列マルチグリッド法による三次元地下水シミュレーションプログラム pGW3D-FVM について、更に SIMD ベクトル化に適した SELL-C-<math>\sigma</math> を導入し、応募者の提案した多重格子法向け自動チューニング手法を適用することによって、Oakforest-PACS 向けに最適化を実施し、8,192 ノードを使用した評価を実施するものである。また、メモリアクセス OS 軽量カーネルである McKernel の評価も併せて実施する。</p>	

課題名	磁性体を記述する疎行列の数値対角化における大規模並列計算の挑戦
代表者名 (所属)	中野 博生 (兵庫県立大学大学院物質理学研究科)
<p>与えられた行列の固有値を求める固有値問題として、どのくらいの大きさの次元を持つ行列まで計算が実際に行えるのか、という素朴な疑問を答えるべく、そのような大規模並列計算に挑戦する。挑戦の舞台となる物理系は、絶縁体磁性を記述する量子スピン系である。挑戦する最大の行列次元は約 1.8 兆であり、この規模の次元が実現されれば世界記録となる事例である。この規模での計算結果を得て、2016 年度ノーベル物理学賞に輝いた Haldane が提唱した整数スピン系が示す励起ギャップなどの精密評価を行う。実施予定のプログラムは、京コンピュータや Oakforest-PACS で既に実行確認済みで、本研究の最大規模の実現可能性を強く示唆するウィークスケリングも両方の最先端スーパーコンピュータで良好な結果を得ている。Haldane によって提唱された新奇な量子相は、対称性に守られたトポロジカル相として一般化されており、本研究の成果は、最近注目されるトポロジカル物質の研究に、重要なブレークスルーをもたらすと期待される。</p>	

<sup>1</sup> 「大規模 HPC チャレンジ」  
<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/service/challenge/>

### 3. FX10 大規模 HPC チャレンジ 採択課題

今回は、2017年6月29日(木)～2017年9月11日(月)までの期間で課題募集を行い、2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、以下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	ICCG 法向け多色順序付けアルゴリズムの階層的並列化手法の提案
代表者名(所属)	河合 直聡(東京大学情報基盤センター)
<p>多色順序付け法は CG 法と併用される IC 前処理の並列化を行うために広く利用されている。多色順序付けを行うアルゴリズムは Greedy や代数多色順序付けなど複数存在しており、ICCG 法の収束性との関連性も広く議論されている。ただし、これらの色付け手法は並列化されておらず、より大規模な問題に対応することができない。本申請では申請者が現在評価を行っている多色順序付けアルゴリズムの階層的な並列化手法の評価を目的とする。</p> <p>申請者らが提案している階層的な並列化手法は、既存の多色順序付け法に適用可能な汎用的手法である。また、大規模並列環境でも少ないメモリリソースで並列化可能である。本申請ではこの提案手法が ICCG 法に与える収束性および1反復回りの計算性能の評価を目的とする。具体的には電磁場解析、量子力学の固有問題を対象として、提案手法を適用した Greedy アルゴリズム、代数多色順序付けで並列化した ICCG 法の性能を評価する。</p>	