

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

Oakbridge-CX、Oakforest-PACS、Reedbush-U、Reedbush-H 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規模の計算ノードを、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¹。

課題審査委員会による厳正な審査の結果、以下の課題を採択しましたのでお知らせいたします。

2. 採択課題

システム：Oakbridge-CX

募集期間：2020 年度 第 1 回課題再募集 2020 年 1 月 10 日～2020 年 2 月 17 日

1 件の応募があり、以下の課題を採択しました。

採択課題一覧

課題名	Oakbridge-CX 上での IHK/McKernel を使用した並列疎行列ソルバーの性能評価
代表者名(所属)	中島 研吾(東京大学情報基盤センター)
有限要素法、差分法等の偏微分方程式数値解法は、大規模な疎行列を係数行列とする連立一次方程式を解くことに帰着される。昨今は前処理付きクリロフ部分空間法が幅広いアプリケーションに使用されている。本研究では、代表者の開発した、①ICCG 法ソルバー、②多重格子法 (Multigrid) ソルバーの性能評価を Oakbridge-CX (OBCX) 上で実施するものである。①については、有限要素法による三次元固体力学コード GeoFEM の ICCG ソルバーを対象とする。②については、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 を対象として、応募者等が提案する Adaptive Multilevel hCGA (AM-hCGA) 法による並列性能向上を図るものである。また、①、②についてメニーコア向け OS 軽量カーネルである IHK/McKernel の評価も併せて実施し、性能向上への効果について検討し、OBCX 上での IHK/McKernel の普及に資するものである。	

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>

システム : Oakforest-PACS

募集期間 : 2019 年度 第 3 回課題再募集 2019 年 11 月 14 日～2020 年 1 月 6 日

2 件の応募があり、以下の課題を採択しました。

採択課題一覧

課題名	ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験
代表者名 (所属)	三好 建正 (理化学研究所 計算科学研究センター)
本申請課題では、理化学研究所において独自に開発している領域気象モデル・データ同化システム SCALE-LETKF を用いて、水平解像度 250m、100 メンバーで 120km 四方の領域をシミュレーションし、従来のレーダの 100 倍のデータを出力するフェーズドアレイ気象レーダの観測を 30 秒毎に同化するという、今までに例のない大規模な計算によって、これまでの技術では予測の出来なかったゲリラ豪雨の 30 分先までの予測をリアルタイムに行う実験を実施する。本実験で得られる知見を用いて、ビッグデータの転送・入出力、フェイルセーフなワークフロー、リアルタイムの全球予報から 250m 格子までのマルチスケールの接続、Oakforest-PACS における計算速度向上などの課題をクリアし、2020 年夏季の東京オリンピック・パラリンピックでの実証実験を実現することを目標とする。	

課題名	電子動力学アプリケーションの超並列システムにおけるボトルネック解析
代表者名 (所属)	廣川 祐太 (筑波大学・計算科学研究センター)
我々は、電子動力学アプリケーション SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) の研究開発を進めている。本申請課題の目的は、SALMON による大規模電子動力学シミュレーションの遂行のために、Oakforest-PACS を代表とした大規模メニーコアクラスタにおける性能解析を実施し、さらなる大規模化のための知見を得ることである。SALMON は、古典的電磁気学と量子論的第一原理計算を組み合わせたマルチスケールの電子動力学シミュレーションを実現する世界初のアプリケーションである。これまで我々は比較的小さな系を対象としたマルチスケールシミュレーションを、Oakforest-PACS 全系を用いて実施してきた。SALMON では大規模系を対象とした電子動力学シミュレーションも実施可能だが、マルチスケールシミュレーションよりもさらに複雑な MPI プロセス分割、並列化を考える必要があり、超大規模システムで実行した場合のボトルネックを特定する必要がある。本申請課題では、(1) 初期状態 (SCF) 計算の性能評価、(2) 大規模 IO 処理性能、(3) 実時間発展 (RT) 計算の Weak scaling 性能、について評価を行い、大規模計算で顕在化するボトルネックの有無について評価を行う。	