

第6回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム
－HA-PACSとCOMAによる計算科学の発展と、分野融合への取り組み－

「階層型固有値解法の メニーコアクラスタ向け実装」

櫻井鉄也 （筑波大学大学院システム情報工学研究科）

もくじ

- ▶ 研究課題の背景
- ▶ 固有値解析エンジンの開発状況
- ▶ メニーコア環境への展開
- ▶ 実用化への展開
- ▶ まとめ

研究課題の背景

▶ 階層的アーキテクチャへの対応

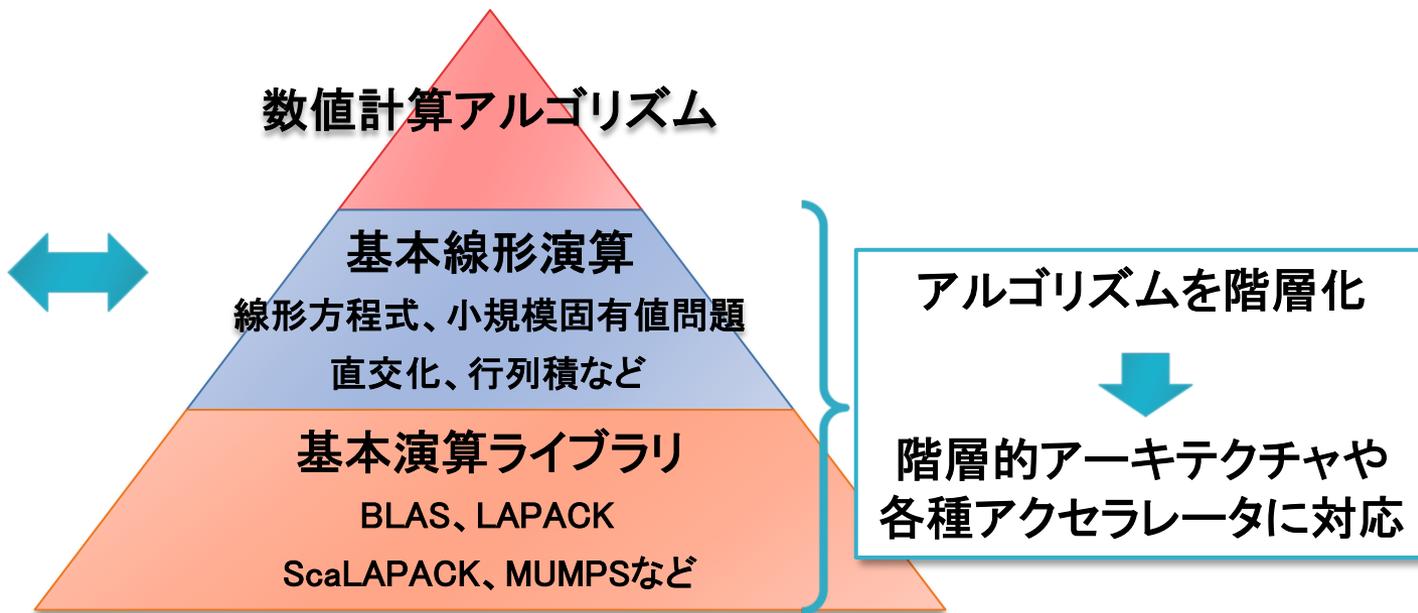
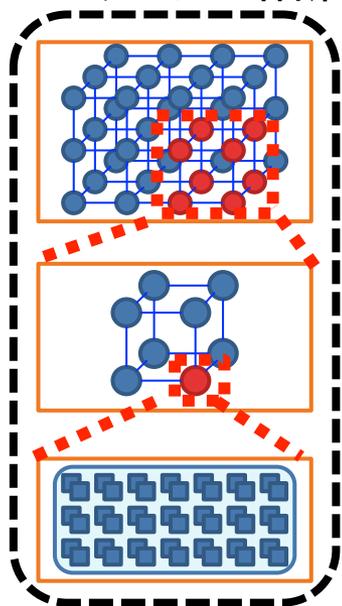
□ 階層構造

- ▶ 計算ノード/コア
- ▶ メモリストレージ
- ▶ ネットワーク

□ 各種アクセラレータ

- ▶ GPU
- ▶ MIC (Many Integrated Core)

ハードウェアの階層性



研究課題の背景

▶ 本研究課題の目的

- 大規模並列環境のハードウェア性能を十分に引き出す
階層的超並列固有値解析エンジン「z-Pares」の開発

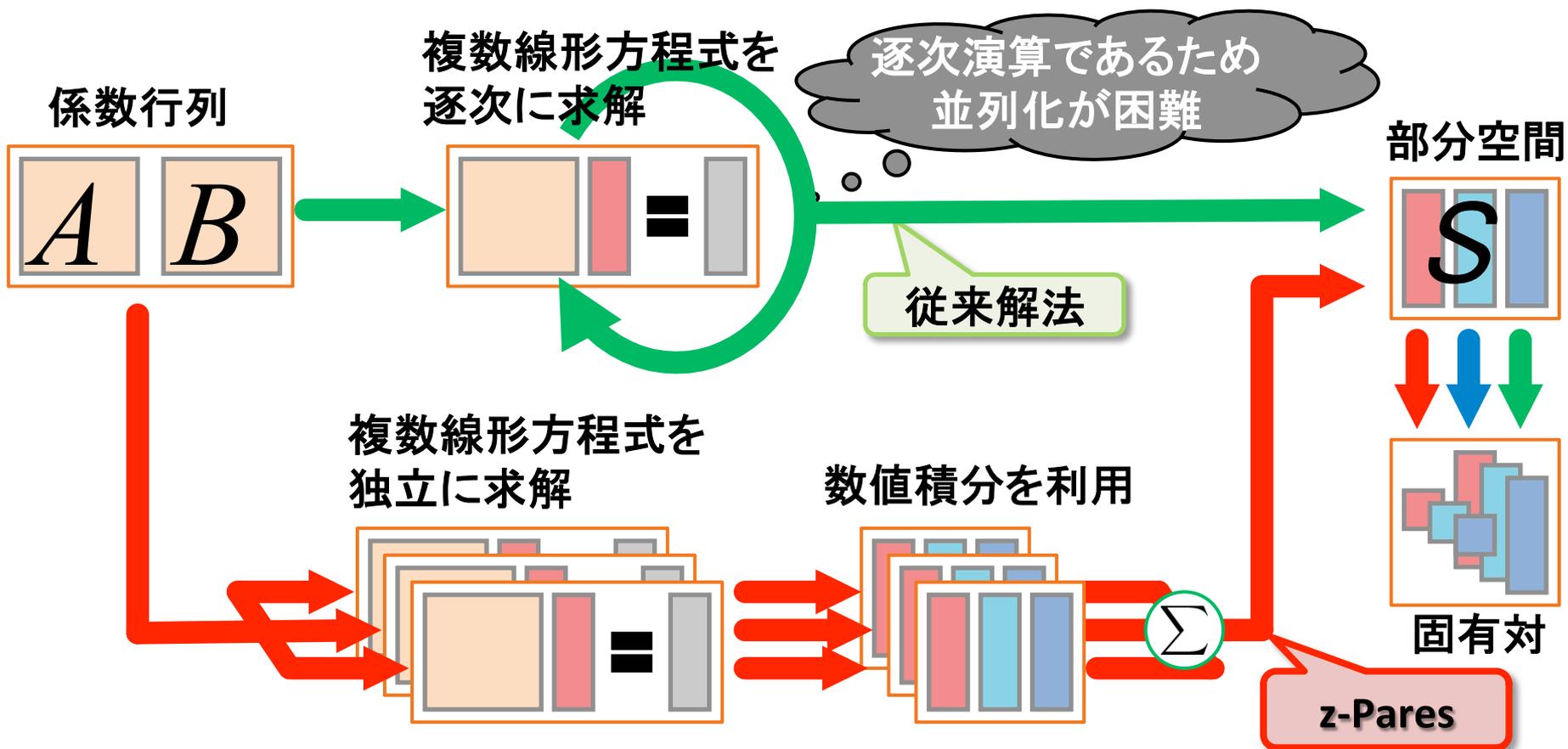
- 固有値解析エンジンのメニーコア環境への展開
 - 階層型超並列環境/演算加速器への対応
 - 耐故障技術の開発

- 固有値解析エンジンの実用化への展開
 - 各種アプリケーションへの適用・性能評価
 - パラメータ自動設定・自動最適化
 - 国際協力

固有値解析エンジンの開発状況

固有値解析エンジンのアルゴリズム

- ▶ 疎行列向け超並列固有値エンジン: **z-Pares**
 - 性能を左右するノード間通信コストを削減するために階層的アルゴリズムによって通信を局所化する



固有値解析エンジンの開発状況

▶ z-Pares開発・リリース状況

- 2013.12 : ver. 0.9.3 リリース
- 2014. 7 : ver. 0.9.5 リリース
- 2014. 9 : ver. 0.9.6 リリース



▶ 主たる成果

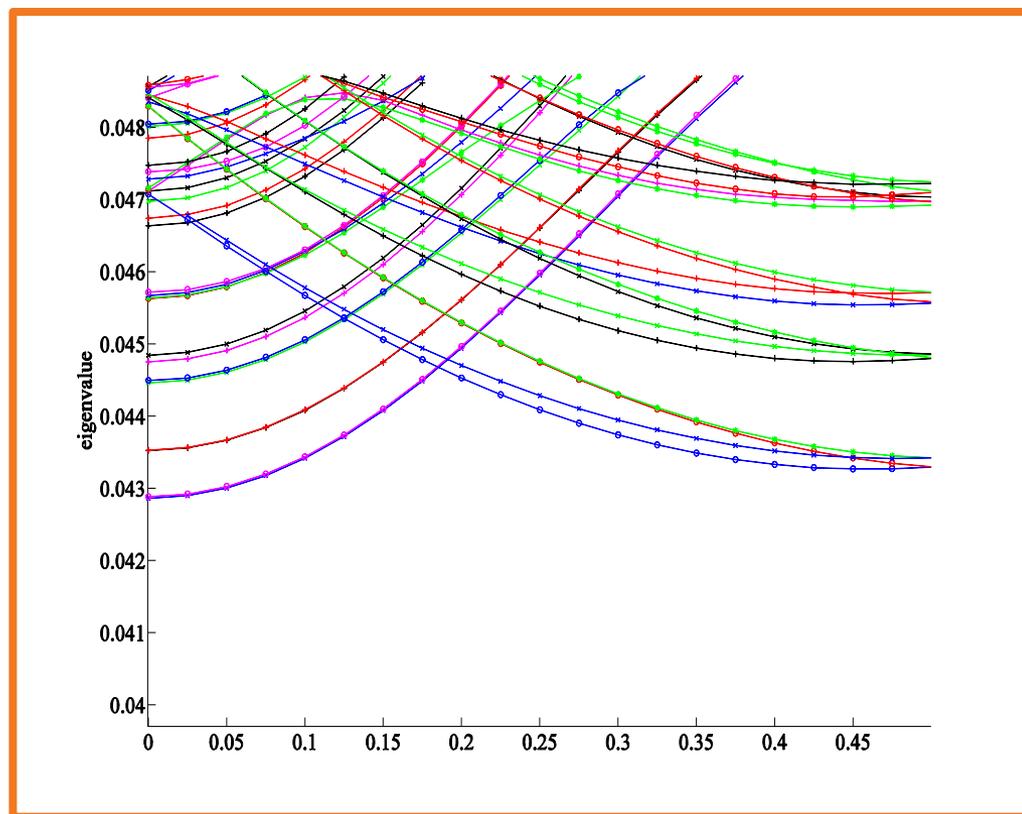
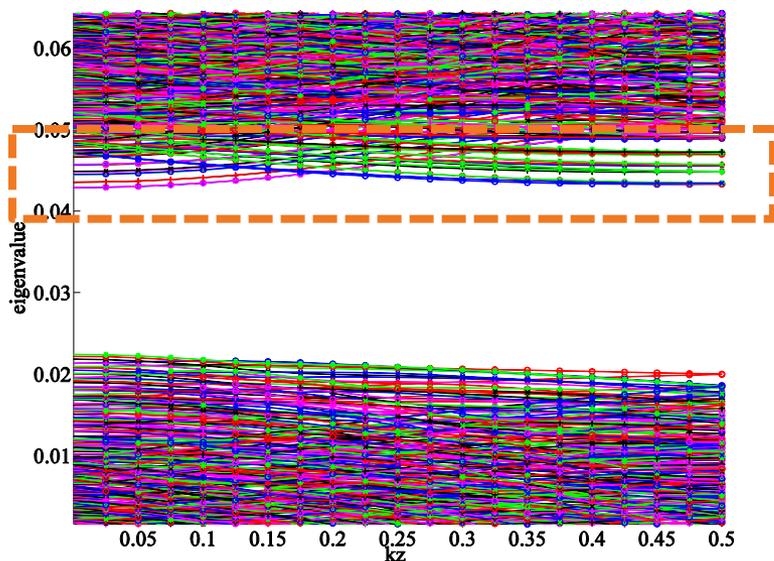
- 企業の振動解析における大規模問題を高速化

▶ 今後の展開

- 電子構造計算の各種アプリで性能を発揮する計算カーネルの開発と性能評価
 - RSDFT
 - CONQUEST
 - ETH-CSCSの電子構造計算コード

固有値解析エンジンの開発状況

- ▶ 疎行列向け超並列固有値エンジン: **z-Pares**
 - 実アプリケーション(RSDFT)への適用事例
 - ▶ シリコンナノワイヤ 9,563原子のバンド構造計算
 - ▶ 問題規模: 約900万次元1000固有対 × 21種類
 - ▶ 「京」: 27,648コア
 - ▶ 12時間



メニーコア環境への展開

メニーコア環境への展開

▶ 方針

- 開発した固有値解析エンジンをポストペタスケールで想定される環境や状況へ対応させる

▶ 項目

- 階層型超並列環境および演算加速器への対応
- 耐故障技術の開発

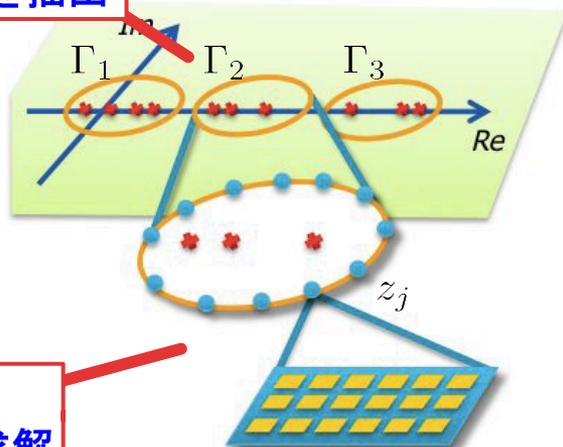
メニーコア環境への展開

- ▶ 階層型超並列環境および演算加速器への対応
 - 固有値解析エンジンは高い階層性を持つ
 - 計算カーネル部の超並列/演算加速器への対応により、固有値解析エンジンの超並列/演算加速器対応化

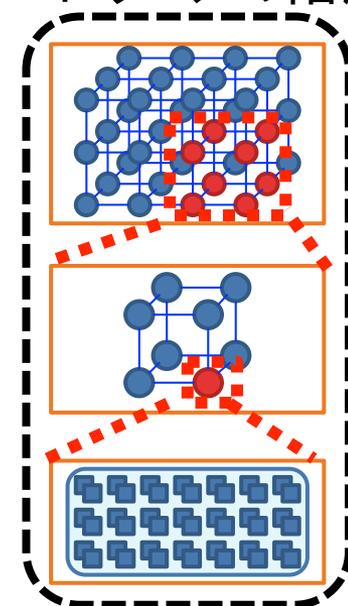
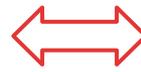
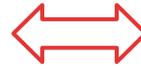
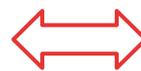
アルゴリズムの階層性

ハードウェアの階層性

周回積分に基づき
指定領域内部の固有対を抽出



各積分点での計算は
独立した線形方程式の求解



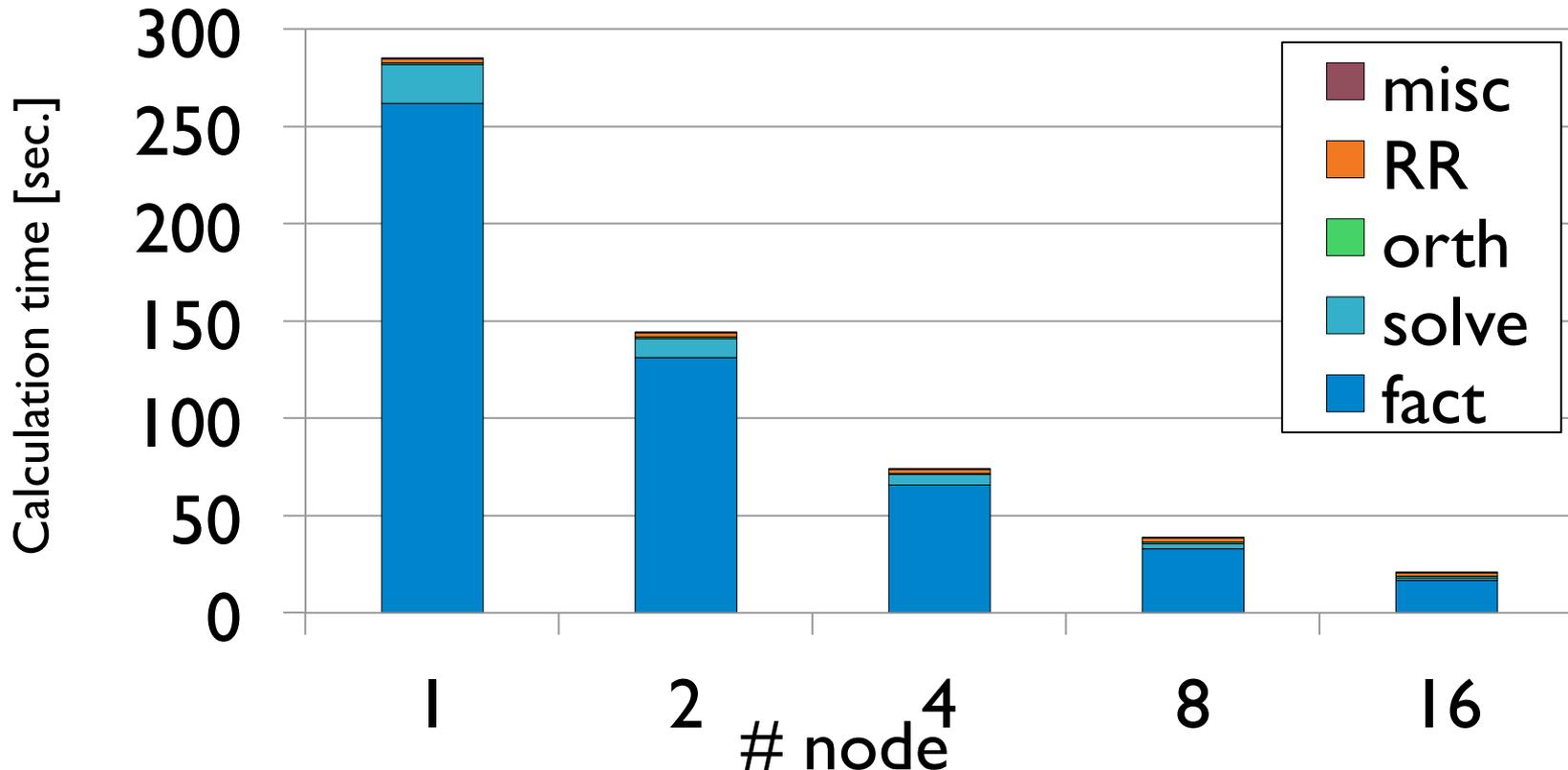
計算カーネル部を超並列/演算加速器対応する

階層型超並列環境および加速器への対応

▶ z-Paresの演算加速器への対応例

□ CPUのみでの実行結果

- ▶ CPU: COMA@筑波大学 16[node] x 8[core]
- ▶ 計算例: 実対称GEP、乱数密行列 ($n=10,000$)

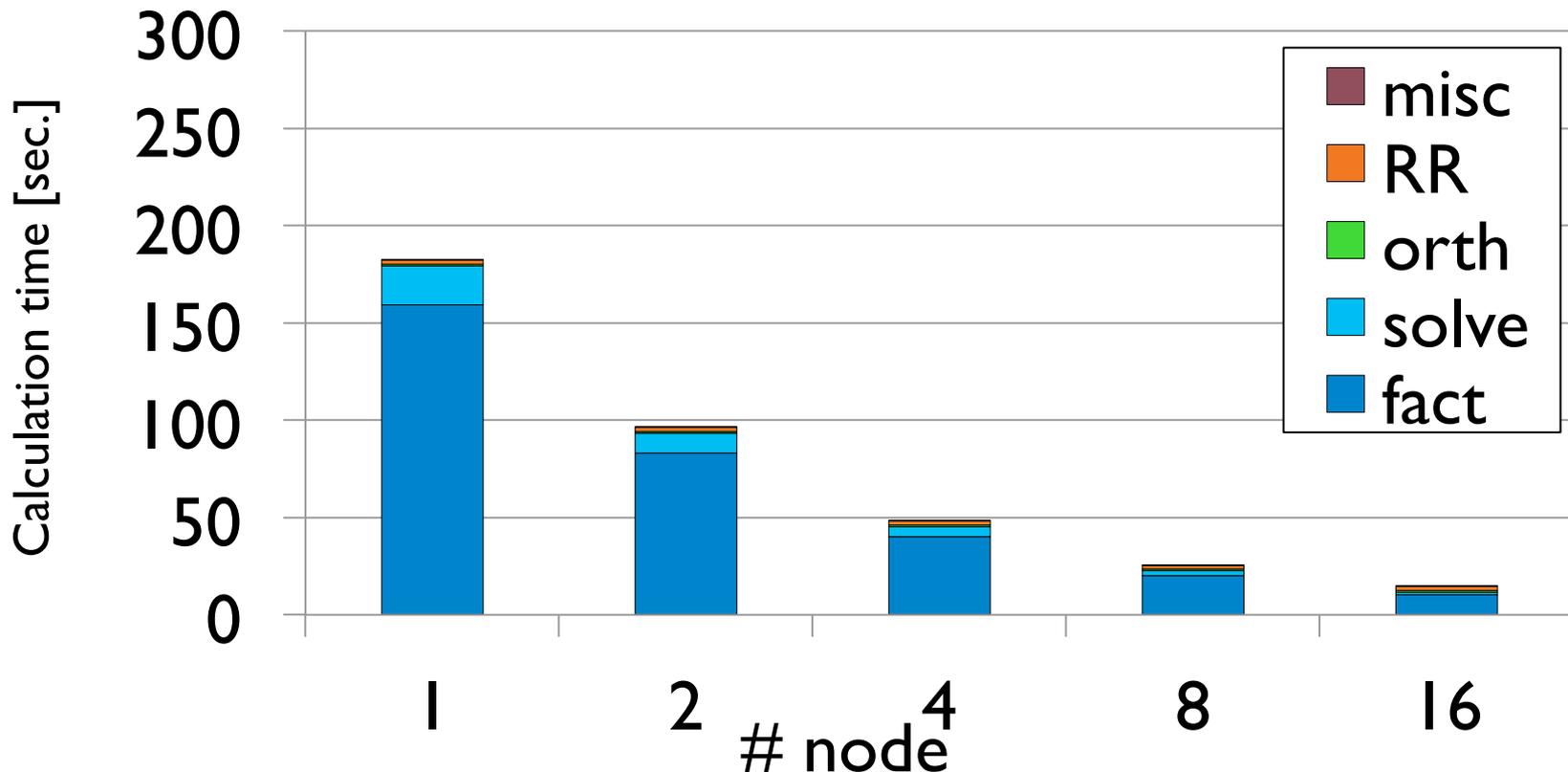


階層型超並列環境および加速器への対応

▶ z-Paresの演算加速器への対応例

□ 計算カーネル部をMICで計算(自動オフロード)

- ▶ CPU: COMA@筑波大学 16[node] x (8[core] + 2[MIC])
- ▶ 計算例:実対称GEP、乱数密行列 ($n=10,000$)

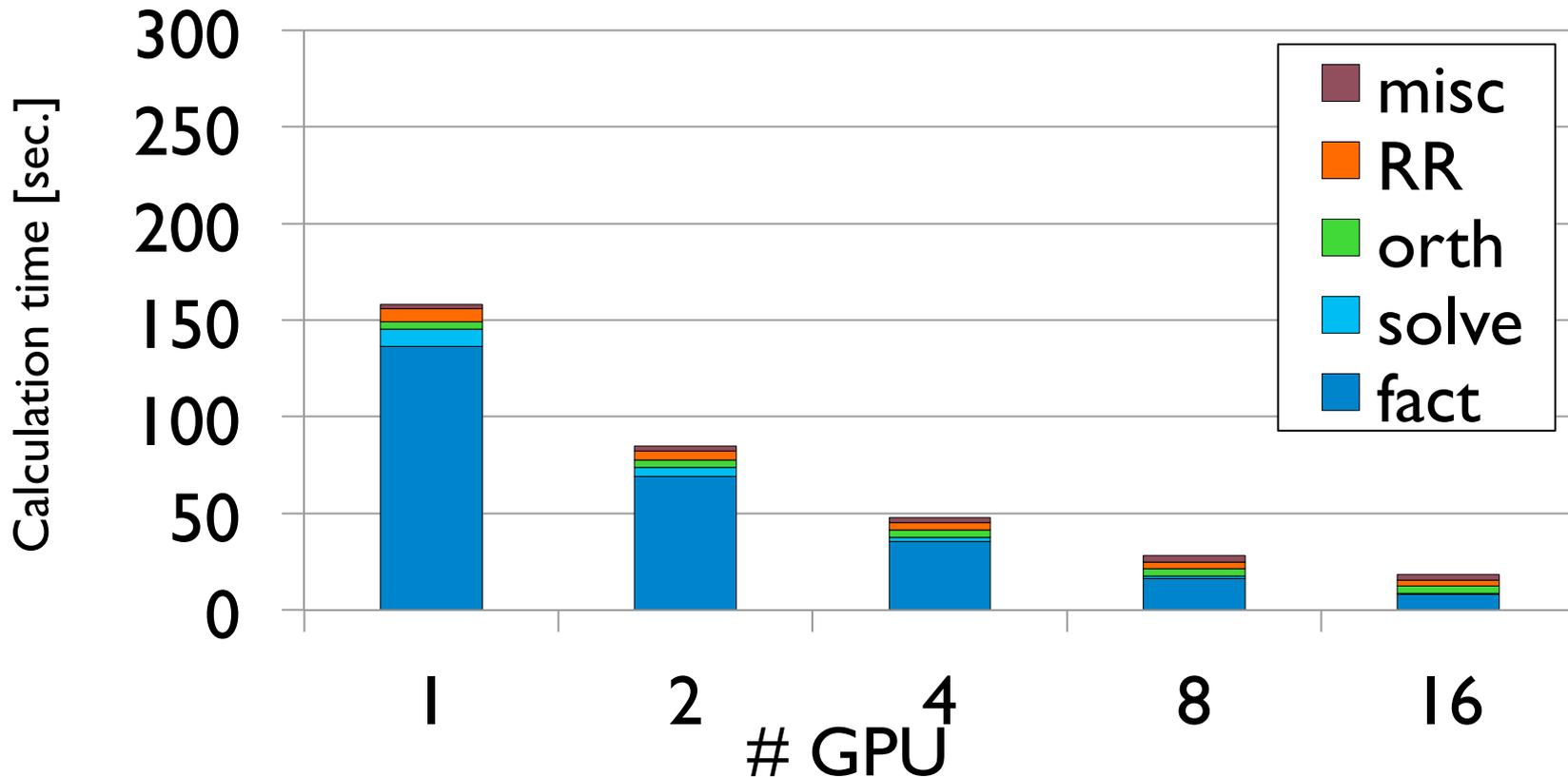


階層型超並列環境および加速器への対応

▶ z-Paresの演算加速器への対応例

□ 計算カーネル部をシングルGPUで計算

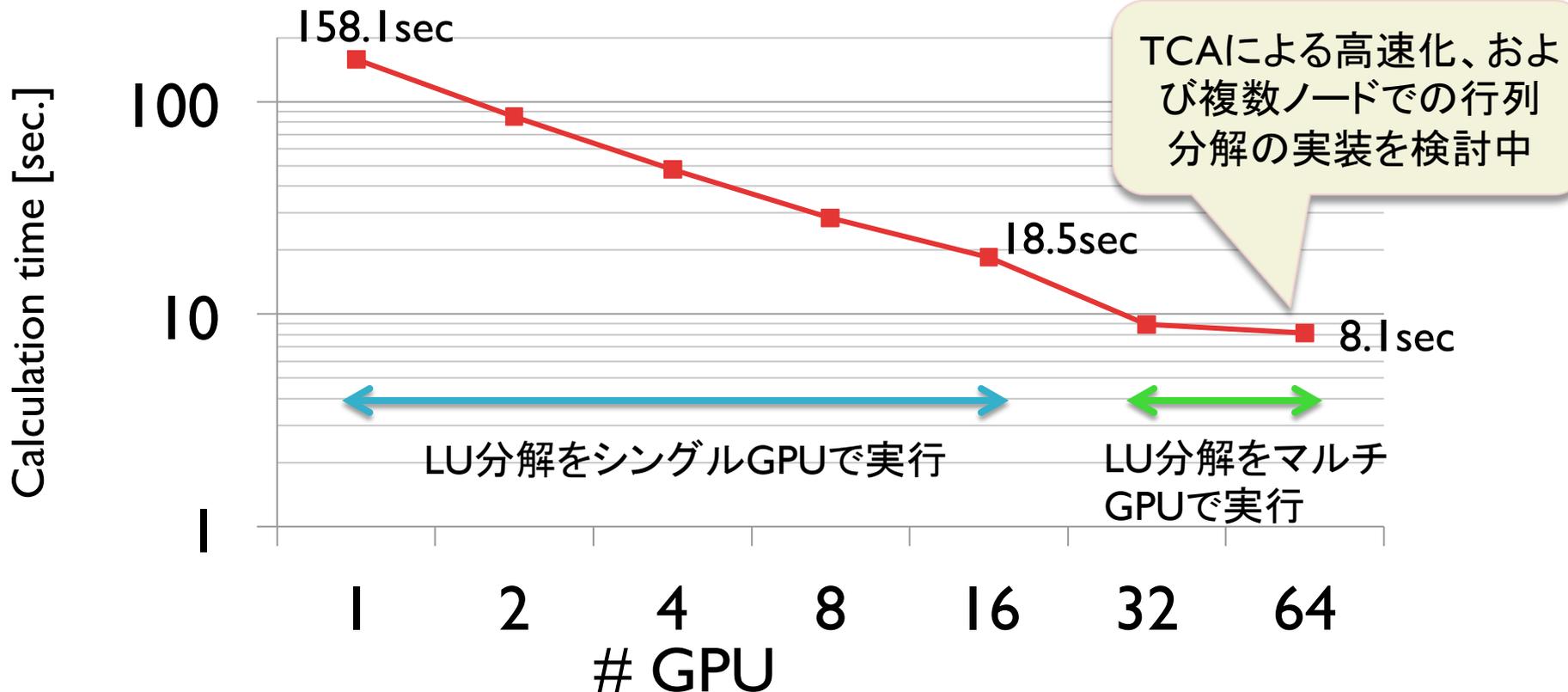
- ▶ GPU: HA-PACS@筑波大学 4[node] x 4[GPU]
- ▶ 計算例:実対称GEP、乱数密行列 ($n=10,000$)



階層型超並列環境および加速器への対応

▶ z-Paresの演算加速器への対応例

- 計算カーネル部をマルチGPUで計算
- GPU: HA-PACS@筑波大学 16[node] x 4 [GPU]
- 計算例:実対称GEP、乱数密行列 ($n=10,000$)



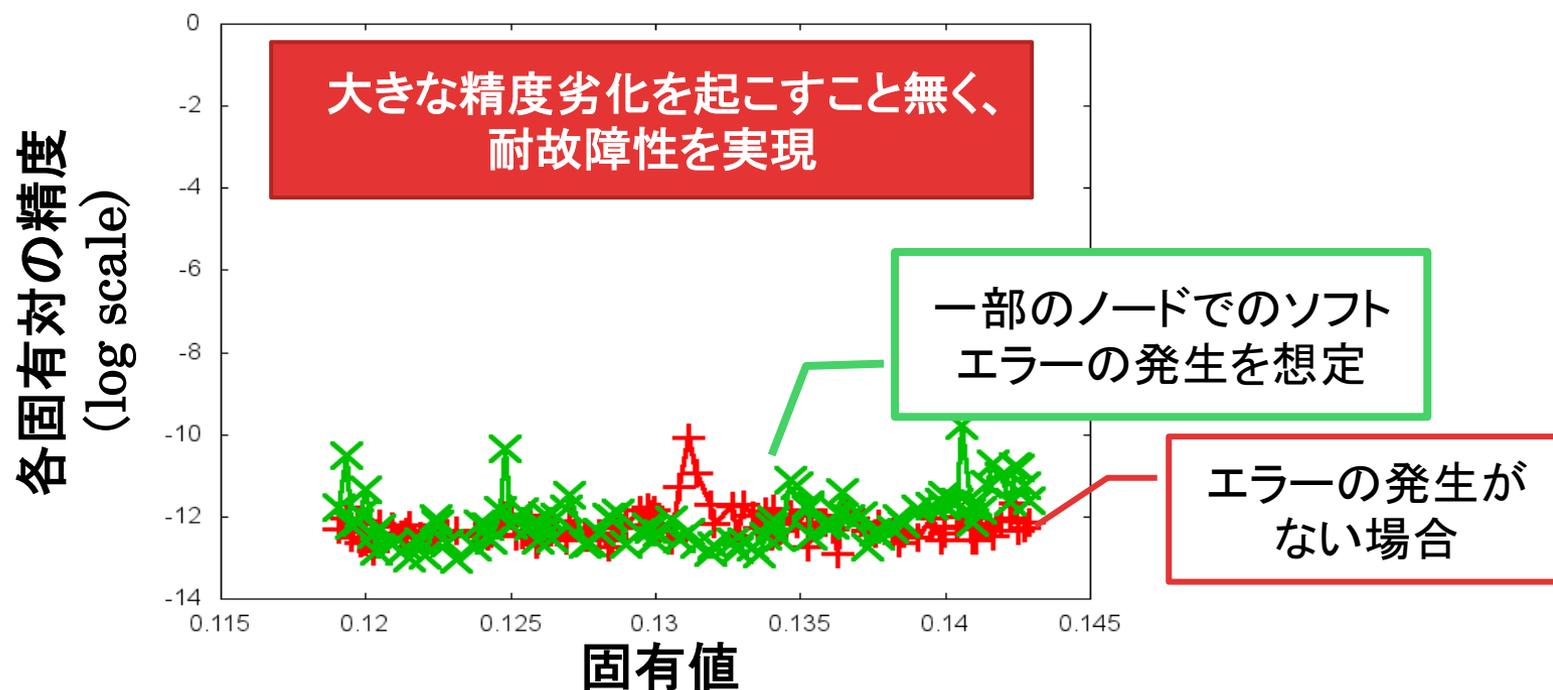
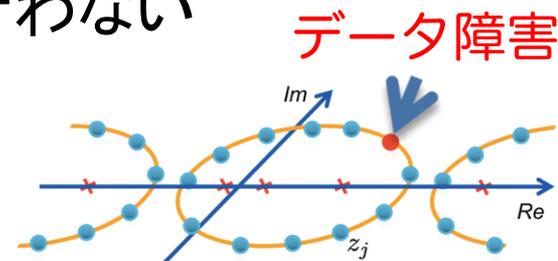
耐故障技術の開発

▶ z-Paresの耐故障性

□ チェックポイントニングや冗長計算などを行わない
アルゴリズムレベルでの耐故障性を実現

□ 計算例

▶ AUNW9180 (ELSES matrix library)



実用化への展開

アプリとの連携

- RSDFT(ゴードン・ベル賞2011)
 - 10万原子超の大規模SCF計算の実現を目指す
- CONQUEST(オーダーN法)
 - これまで行われなかった実用規模でのFermi準位付近の電子構造計算に取り組む
- 振動解析(アイシンAW(株)との共同研究)
 - 産業実用規模での構造最適化の超並列高速化
 - GPU向けLDL分解を利用した超大規模解析を計画
- ETH Swiss National Supercomputing Centreの電子構造解析プログラム(ゴードン・ベル賞2010)
 - HA-PACSで固有値計算部分を組み込み中
 - TOP500 6位のGPUスパコンPiz Daintにおけるフルノード規模グランドチャレンジを目指す

▶ z-Paresの応用例

<<非公開データ>>

国際連携

ロンドン大学(ナノ)



パリ大学(高性能化)



トゥールーズ大(線形ソルバ)



台湾国立大(ナノ)

パデュー大学(ナノ)



U.C. Davis(数理)

Sandia National Lab.
(耐故障性)

バレンシア工科大
(ライブラリ)

チューリッヒ工科大
(ナノ・GPU)

シドニー大(ナノ)



国際連携

- ▶ 固有値計算に関する国際会議 (EPASA2014) を開催
 - 海外招待講演者: 17名、参加者: 84名
 - 次回は2015年9月に開催予定



まとめ

まとめ

▶ これまでの主な成果

- ポストペタスケールにおいて性能を発揮する超並列固有値解析エンジンを開発・公開
 - ▶ 疎行列向けの**z-Pares** (H25.12公開)
- メニーコアへの展開
- 実用化への展開

▶ 主な今後の展開

- ポストペタへの展開および実用化への展開の継続・進展
 - ▶ 階層型超並列環境および演算加速器への対応
 - 複数GPU/MICの線形計算カーネルの高速化
 - TCAの利用、通信の隠蔽
 - ▶ 耐故障性技術の開発
 - ▶ 各種アプリとの連携による実用性向上
 - ▶ 国際協力の推進