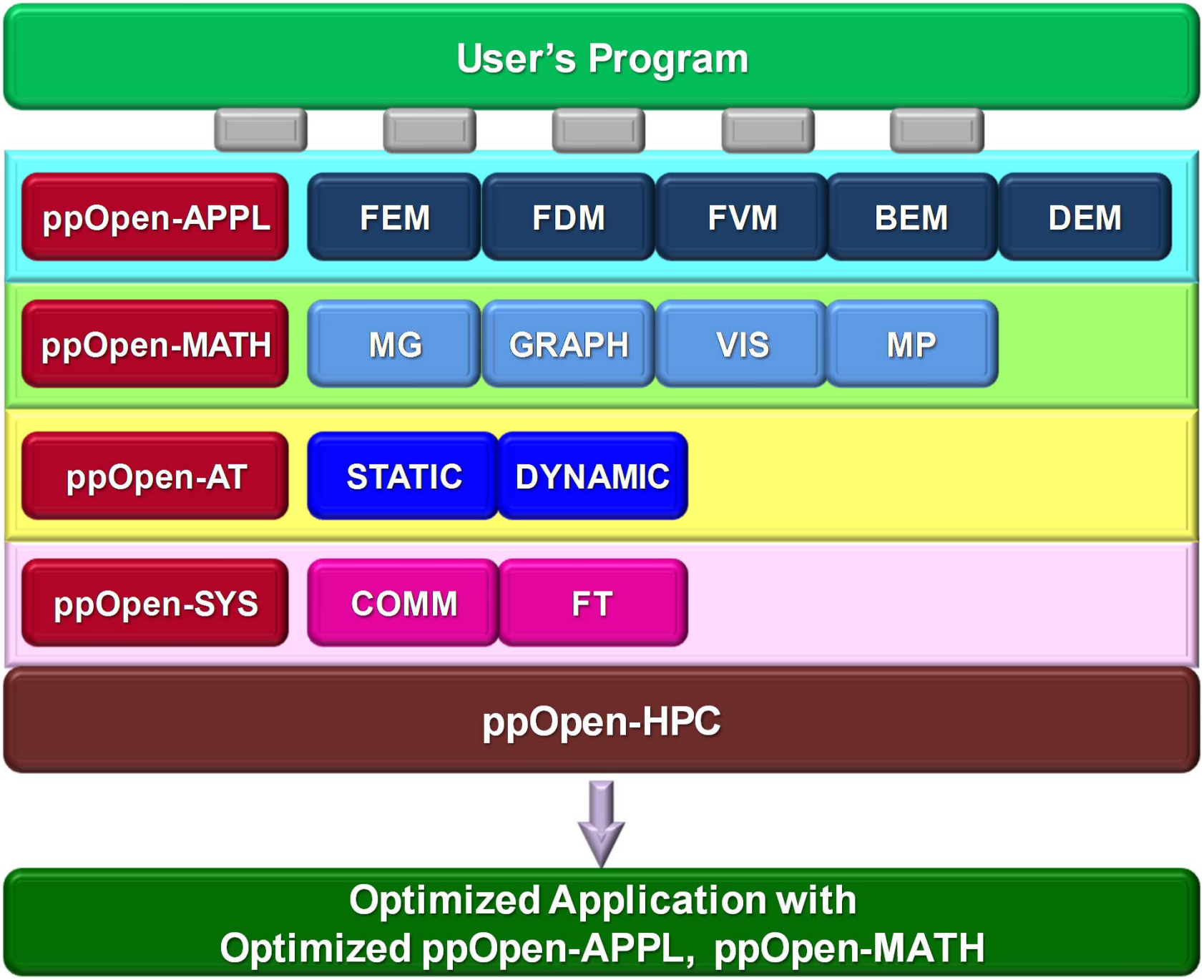
自動チューニング機構を有する アプリケーション開発・実行環境 ppOpen-HPC

中島研吾
東京大学情報基盤センター
佐藤正樹（東大・大気海洋研究所），奥田洋司（東大・新領域創成科学研究科），
古村孝志（東大・情報学環/地震研），岩下武史（京大・学術情報メディアセンター），
阪口秀（海洋研究開発機構）

2013年10月28日

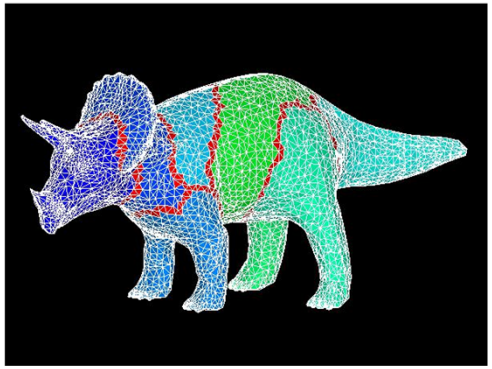
概 要(1/3)

- メニーコアクラスタによるポストペタスケールシステム上での科学技術アプリケーションの効率的開発，安定な実行に資するppOpen-HPCの研究開発を計算科学，計算機科学，数理科学各分野の緊密な協力のもとに実施している。
  - 6 Issues in Post-Peta/Exascale Computingを考慮
  - “pp”: Post Peta
- 東大情報基盤センターに平成27年度導入予定のO(10)PFLOPS級システム(ポストT2K，Intel MIC/Xeon-Phiベース)をターゲット:
  - スパコンユーザーの円滑な移行支援
- 大規模シミュレーションに適した5種の離散化手法に限定し，各手法の特性に基づいたアプリケーション開発用ライブラリ群，耐故障機能を含む実行環境を実現する。
  - ppOpen-APPL:各手法に対応した並列プログラム開発のためのライブラリ群
  - ppOpen-MATH:各離散化手法に共通の数値演算ライブラリ群
  - ppOpen-AT:科学技術計算のための自動チューニング(AT)機構
  - ppOpen-SYS:ノード間通信，耐故障機能に関連するライブラリ群

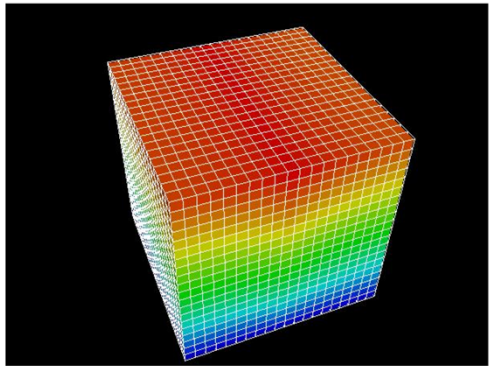

User's Program
ppOpen-APPL
FEM
FDM
FVM
BEM
DEM
ppOpen-MATH
MG
GRAPH
VIS
MP
ppOpen-AT
STATIC
DYNAMIC
ppOpen-SYS
COMM
FT
ppOpen-HPC
Optimized Application with
Optimized ppOpen-APPL, ppOpen-MATH

対象とする離散化手法

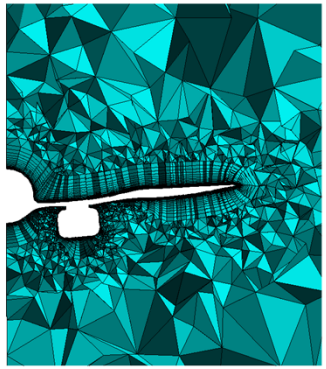
局所的，隣接通信中心，疎行列



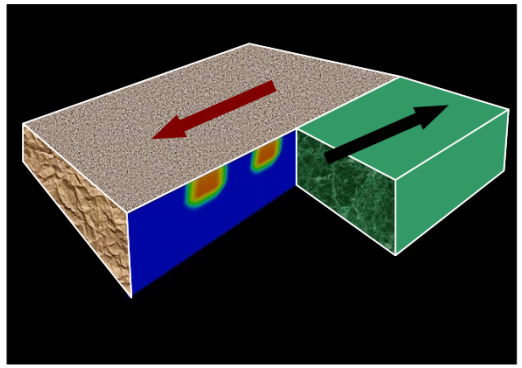
有限要素法
Finite Element Method
FEM



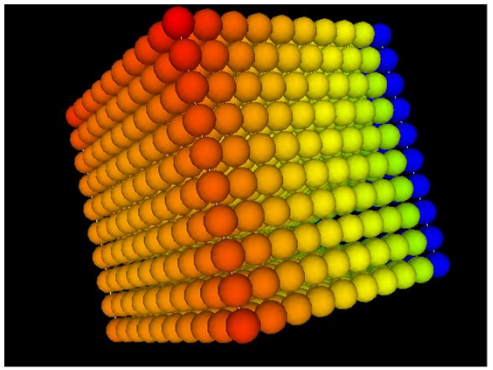
差分法
Finite Difference Method
FDM



有限体積法
Finite Volume Method
FVM



境界要素法
Boundary Element Method
BEM



個別要素法
Discrete Element Method
DEM

概 要(2/3)

- 先行研究において各メンバーが開発した大規模アプリケーションに基づきppOpen-APPLの各機能を開発，実装
  - 各離散化手法の特性に基づき開発・最適化
    - 共通データ入出力インタフェース，領域間通信，係数マトリクス生成
    - 離散化手法の特性を考慮した前処理付き反復法
    - 適応格子，動的負荷分散
  - 実際に動いているアプリケーションから機能を切り出す
  - 各メンバー開発による既存ソフトウェア資産の効率的利用
    - GeoFEM，HEC-MW，HPC-MW，DEMIGLACE，ABCLibScript
- ppOpen-ATはppOpen-APPLの原型コードを対象として研究開発を実施し，その知見を各ppOpen-APPLの開発，最適化に適用
  - 自動チューニング技術により，様々な環境下における最適化ライブラリ・アプリケーション自動生成を目指す

FEM Code on ppOpen-HPC

```
Program My_pFEM
use ppOpenFEM_util
use ppOpenFEM_solver

call ppOpenFEM_init
call ppOpenFEM_cntl
call ppOpenFEM_mesh
call ppOpenFEM_mat_init

do
  call Users_FEM_mat_ass
  call Users_FEM_mat_bc
  call ppOpenFEM_solve
  call ppOPenFEM_vis
  Time= Time + DT
enddo

call ppOpenFEM_finalize
stop
end
```

概 要（3/3）

- 平成24年11月にマルチコアクラスタ向けに各グループの開発したppOpen-APPL，ppOpen-AT，ppOpen-MATHの各機能を公開（Ver.0.1.0）
  - http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/
  - 平成25年11月にVer.0.2.0公開予定
- 現在は各機能の最適化，機能追加，ppOpen-APPLによるアプリケーション開発とともに，Intel Xeon/Phi等メニーコア向けバージョンを開発中

第1回公開　2012 Fall（Ver.0.1.0）（1/2）

- マルチコアクラスタ向け
- Flat MPI，OpenMP/MPI Hybridに対応
- SC12@SLCに合わせて公開，配布（英文DOC（のみ））

Component	Archive	Flat MPI	OpenMP/MPI	C	F
ppOpen-APPL/FDM	ppohFDM_0.1.0	○			○
ppOpen-APPL/FVM	ppohFVM_0.1.0	○	○		○
ppOpen-APPL/FEM	ppohFEM_0.1.0	○	○	○	○
ppOpen-APPL/BEM	ppohBEM_0.1.0	○	○		○
ppOpen-APPL/DEM	ppohDEM_0.1.0	○	○		○
ppOpen-MATH/VIS	ppohVIS_FDM3D_0.1.0	○		○	○
ppOpen-AT/STATIC	ppohAT_0.1.0	-	-	○	○

第2回公開　2013 Fall（Ver.0.2.0）（予定）Ver.0.1.0との差分

Component	内容
ppOpen-APPL/FDM	• （OpenMP+MPI）Hybrid並列プログラミングモデル適用 • Intel Xeon/Phi対応版 • ppOpen-MATH/VIS-FDM3D対応
ppOpen-APPL/FVM	• 通信部分性能向上版
ppOpen-APPL/FEM	• 弾性動力学
ppOpen-MATH/MP-PP	• ppOpen-MATH/MPのためのリマッピング（remapping）テーブル作成ツール
ppOpen-MATH/VIS	• 三次元差分格子向けリアルタイム可視化ライブラリ高速化版
ppOpen-AT/STATIC	• 式並び変更機能、ループ分割機能の高度化 • ppOpen-APPL/FVM版 • ppOpen-APPL/FDM・BEM対応版改良

研究開発項目

① ppOpen-HPC基本設計
② ppOpen-APPL, ppOpen-MATHの研究開発

③ ppOpen-MATH/MPの研究開発
④ ppOpen-ATの研究開発
⑤ ppOpen-SYSの研究開発
⑥ 混合精度演算手法
⑦ 通信・同期削減アルゴリズム

①ppOpen-HPC基本設計 ②ppOpen-APPL，ppOpen-MATH開発（1/2）

- H23
  - 基本設計（一部既存研究に基づく），プロトタイプ開発
- H24，H25
  - 開発，検証，公開（Ver.0.1.0，Ver.0.2.0）
  - ppOpen-ATとの協調
- 対象アプリケーション
  - ppOpen-APPL/FEM
    - 非圧縮性流体力学，定常／非定常熱伝導，静的／動的固体力学
  - ppOpen-APPL/FDM
    - 動的固体力学，非定常熱伝導，非圧縮性流体力学
  - ppOpen-APPL/FVM
    - 圧縮性流体力学，定常／非定常熱伝導
  - ppOpen-APPL/BEM
    - 電磁気学，準静的固体力学（地震発生サイクル）
  - ppOpen-APPL/DEM
    - 動的固体力学，非圧縮性流体力学

①ppOpen-HPC基本設計 ②ppOpen-APPL，ppOpen-MATH開発（2/2）

- 当初予定からの変更
  - マルチコアクラスタ⇒GPU⇒メニーコアクラスタの予定
    - 予定よりも早期にメニーコア環境にアクセスすることが可能
  - GPU：既にGPU向けの機能が開発されている一部の機能（ppOpen-APPL/FEM，ppOpen-APPL/DEM）についてのみ重点的に実施
- H25以降の重点項目
  - ppOpen-APPL
    - 各機能の更なる最適化の実施，ppOpen-ATによる評価
    - メニーコア（Intel Xeon Phi）向け開発・最適化，一部GPU
    - ppOpen-MATH/MPによる連成計算のためのインタフェース
    - 局所細分化（AMR），通信削減，動的負荷分散（FDM，FEM，FVM，DEM）
  - ppOpen-MATH/MG
    - 通信オーバーヘッド削減手法
  - ppOpen-MATH/VIS
    - 最適化継続，各ppOpen-APPLの共通データ構造向けインタフェースを整備，ハイブリッド化
  - 利用者定義データ構造～ppOpen-APPL共通データ構造インタフェース

ppOpen-APPL/BEM

- H23・H24
  - 密行列演算による境界要素解析を対象としたフレームワーク，静電場解析向けのテンプレートの開発，公開
  - ppOpen-ATとの連携
  - H行列法の分散並列化とそのライブラリ化に着手
    - 地震サイクルシミュレーションにおいて動作検証
    - 低ランク行列作成法を新たに考案した。
- H25：H行列法ライブラリ
  - 境界要素解析やN体問題等で用いられる高速行列演算技術
  - H行列生成過程における新手法の考案等により，既存の逐次演算ライブラリであるマックス・プランク研究所のH-libに対して行列ベクトル積演算で約7倍の高速化（逐次演算）を達成
  - 国際的に初めてとなるハイブリッド並列化されたH行列法のライブラリ開発に成功し，静電場解析においてその並列性能を確認

③ ppOpen-MATH/MP

- FVMやFEMなど異なる離散化手法を持つ複数のモデル結合，大規模データ転送，データ変換のための弱連成カップリングツールppOpen-MATH/MPを開発
  - 補間高速化アルゴリズム開発（H25公開）
  - モデルの出力をリアルタイムで受信し格子変換の後ファイルに出力するIOコンポーネント
- ケーススタディとして正二十面体格子大気モデルNICAMと海洋モデルCOCOを結合（H24）
  - H25は一般手法へ拡張

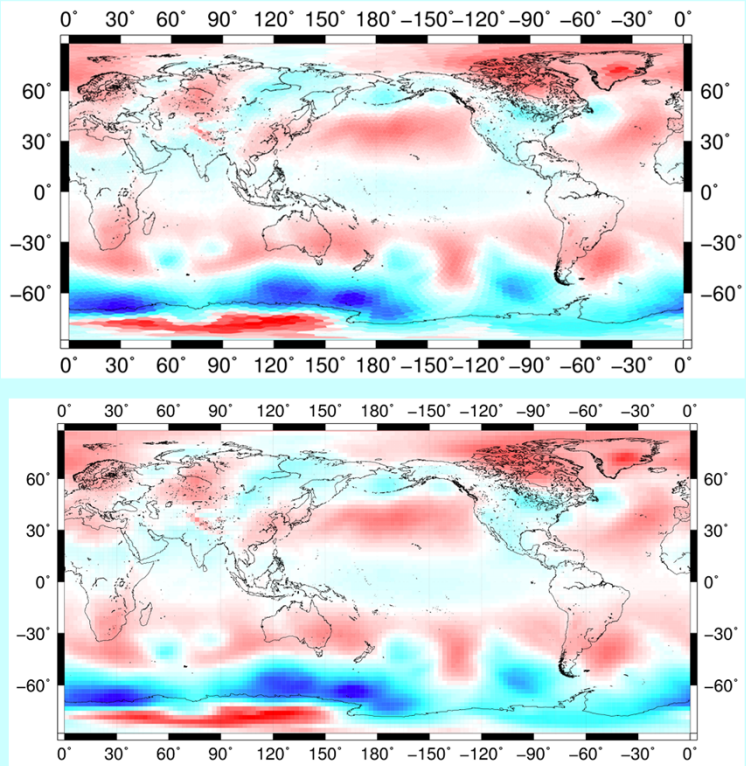


図 1　NICAM と IO モジュールの海面気圧

- 構造＋準構造格子を結合した先駆的事例，従来のスペクトル法では不可であった高解像度気候シミュレーションの可能性を開く。
- H25年度以降は構造物モデルと地震モデルの結合など，他分野への応用も予定されている。

実施体制

- 数値ライブラリ，システムソフトウェア，アプリケーションの専門家による協力，Co-Design
  - 開発ー検証ー最適化・機能拡張のサイクル
  - グループ間連携
    - 連成シミュレーション（地震動＋建造物振動）
      - ppOpen-APPL/FDM, ppOpen-APPL/FEM, ppOpen-MATH/MP
    - ツール共有，利用，実証
      - 可視化（ppOpen-MATH/VIS），線形ソルバー，適応格子，領域分割
      - カプラー（ppOpen-MATH/MP），チェックポイント機構（ppOpen-SYS/FT）
- 各分野で既に先端的な研究実績，開発経験
  - GeoFEM，HPC-MW/HEC-MW，DEMIGLACE，ABCLibScript

ネットワーク形成・アウトリーチ

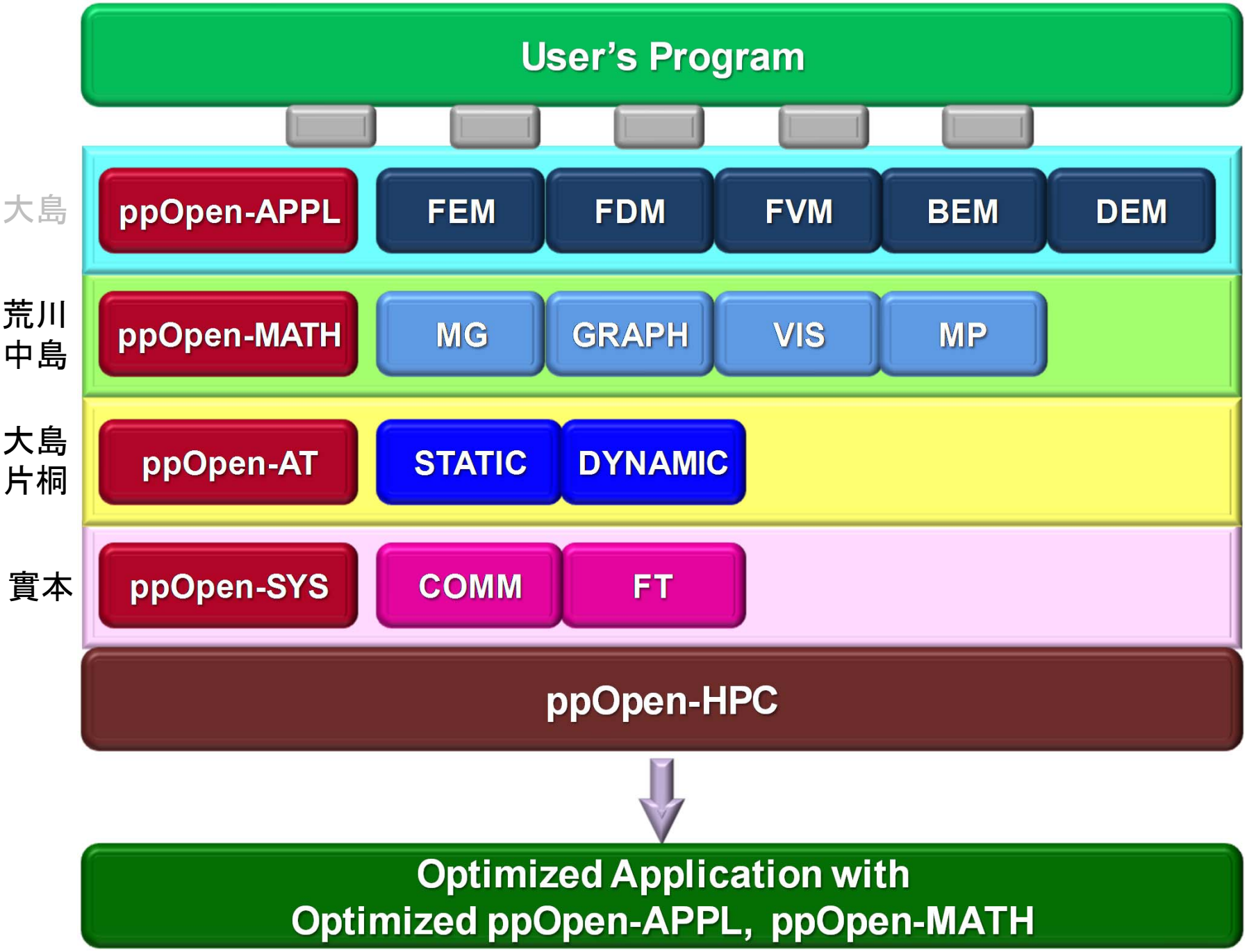
- ネットワーク形成
  - CREST内他チームとの協調
    - 堀チーム，櫻井チーム
  - 国内外諸機関との連携
    - OPLプロジェクト，LBNL，國立臺灣大學（手続中）
- 成果普及・アウトリーチ
  - 共同研究
    - JHPCN（学際大規模情報基盤共同利用共同研究拠点）
    - ppOpen-AT，ppOpen-MATH/VIS，ppOpen-MATH/MP，線形ソルバー
  - 国際ワークショップ
    - 2012年12月，2013年12月
  - 講義での利用，講習会
  - アプリFS向けミニアプリ（Seism3D-ppOpen-APPL/FDM）

ポストペタからエクサスケールへ

- ポストT2Kを念頭に置き，Intel Xeon/Phiなどメニィコアアーキテクチャ向け最適化を中心に研究開発を進める
- 「ポストペタスケール」から「エクサスケール」へ
  - エクサスケールシステムの詳細が具体的になりつつある
    - スーパーコンピュータシステムはより複雑化，巨大化
    - アプリケーション実行性能を引き出すためのプログラミングはより困難に
  - ppOpen-HPCのような環境の必要性はより高まる
  - エクサスケールシステム開発の動向も念頭に置いた開発を継続して実施して行くことで，エクサスケールシステムの利用に当たってもスムーズな移行を支援できると考えられる。
- エクサスケールシステムを念頭においた研究開発
  - 電力最適化
  - Communication/Synchronization Reducing Algorithms（通信・同期削減アルゴリズム）

成果普及・実用化

- 普及のためには実用化事例の紹介が必要
  - 実用化に合わせてppOpen-HPCを修正，改良が必要となる場合もある
    - 更なる機能向上にもつながる
- ポストT2K上で使ってもらうためには現在のマルチコアクラスタ上での利用者を多数獲得することが必要
  - 本プロジェクトメンバーによる利用・開発事例の積極的紹介
  - ppOpen-MATH/MPを使用した「地震動＋構造物応答連成シミュレーション」（H25-H26）
    - 防災・減災への貢献という観点からも大きな社会的インパクトがある
  - 国内外の計算科学・工学分野研究者との協力（JHPCN研究課題等）
- 講義での利用，講習会
- ユーザー定義データ構造へのインタフェース
  - ppOpen-HPCのようなフレームワークは，プログラムをスクラッチから開発する際には有効であるが，既存プログラムへの適用は必ずしも容易でない。
  - ユーザー定義データ構造とppOpen-APPL共通データ構造を柔軟に取り扱うことのできるインタフェースの整備が必要。


User's Program
大島
ppOpen-APPL
FEM
FDM
FVM
BEM
DEM
荒川
中島
ppOpen-MATH
MG
GRAPH
VIS
MP
大島
片桐
ppOpen-AT
STATIC
DYNAMIC
實本
ppOpen-SYS
COMM
FT
ppOpen-HPC
Optimized Application with
Optimized ppOpen-APPL, ppOpen-MATH