

[JHPCN シンポジウム]

令和 5 年度 JHPCN 採択課題ポスター紹介

令和 5 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠における当センター利用課題のポスター 7 件をご紹介します。

- jh230006 「プラズマ学際科学のためのリアル粒子シミュレーションの研究開発と応用」
研究代表者 大谷寛明(核融合科学研究所)
- jh230010 「QR 分解に関する高性能計算技術の研究」
研究代表者 深谷猛(北海道大学)
- jh230024 「日本全国のため池の治水利用の評価」
研究代表者 風間聡(東北大学)
- jh230032 「Investigation of intramolecular magnetic interaction in rare-earth-based molecular magnets」
研究代表者 Anas Santria (大阪大学)
- jh230050 「回転 detonation エンジンにおける燃焼器サイズ効果に関する数値解析」
研究代表者 松尾亜紀子(慶應義塾大学)
- jh230056 「近代的メニーコアシステムにおける性能モデリング手法」
研究代表者 星野哲也(名古屋大学)
- jh230058 「メニーコア CPU, GPU の最適なリソース割り当てに関する研究」
研究代表者 河合直聡(名古屋大学)



参加者: 宇佐見俊介¹(副代表)、長谷川裕記^{1,2}、森高外征雄^{1,2}、沼波政倫^{1,2}、樋田美栄子^{1,2}、三浦英昭¹、石黒静児^{1,2}、堀内利得^{1,2}、小谷翼³、大野暢亮⁴、川原慎太郎⁵、臼井英之⁶、三宅洋平⁶、田光江⁷、小川智也⁸、深沢圭一郎³、片桐孝洋⁹、滝沢寛之¹⁰
¹核融合研、²総研大、³京大、⁴兵庫県立大、⁵JAMSTEC、⁶神戸大、⁷情報通信研、⁸北里大、⁹名大、¹⁰東北大¹⁰

1. 研究目的

プラズマ: 宇宙の典型的な物質状態(地球惑星科学、宇宙科学、核融合科学、材料プロセス工学など様々な分野で研究対象)→多様な現象
各分野でのプラズマパラメータは異なる→プラズマパラメータを特徴的なスケールで規格化
→共通の現象として議論 学際的な研究(例: プラズマ実験と太陽風-地球磁気圏-電離層でのプラズマ現象のアナロジー)
プラズマ科学: 膨大な数の荷電粒子の集団から構成される巨視的な系であるプラズマにおいて生じられる多様な複雑現象が研究対象
粒子シミュレーション(1960年代初期に最初に考案されたシミュレーションモデルの一つ)。荷電粒子と電磁場のダイナミクスを自己無撞着に解く。
利点: 粒子運動という微視的ダイナミクスの追跡+粒子-波相互作用や粒子運動論的効果の正確な追跡
難点: メモリ量や計算速度の制限→実験装置サイズのような巨視的な系全体の計算が非常に困難(イオン・電子のスケール差: 時間で 10^3 、空間で 10^2 程度)
最適化の困難→粒子に働く力の計算や電荷密度・電流密度の計算でメモリへのランダムアクセス発生。
並列化の困難→均等な領域分割による並列化で偏った粒子密度分布が発生すると、並列負荷分散に偏りが発生
素過程の物理モデル(粒子間衝突や荷電交換、イオン再結合)は粒子間相互作用なので、粒子数 N に対して計算コストが N^2
プラズマ実験や太陽・地球磁気圏プラズマを模擬する境界条件や実験装置のジオメトリや境界条件の設定

実験や観測に即したシミュレーションモデルを構築・導入して、シミュレーションを実行する「リアル粒子シミュレーション」コードのための研究・開発

2. 研究課題

- イオン・電子質量比を実際の値でシミュレーション
- 素過程の物理現象を含むシミュレーション
- 実験や観測など、現実即した境界条件やジオメトリを含むシミュレーション
→コードの最適化や高速化、並列化に対応したアルゴリズムの研究・開発、素過程モデルの最適化・高速化・並列化
- 開発したコードの研究対象: プラズマ物理における微視的ダイナミクスの研究
高速粒子が励起する波動現象、ヘリカル系核融合炉に向けたジャイロ運動論研究、周辺プラズマにおけるプラズマ輸送現象、磁気再結合現象

3. 今年度の研究計画

up3bdコードへの素過程実装:

Coulomb衝突(Nambu法)と原子分子過程(Null Collision法)を用いる1次元PIC-MCCコード(PAMCADE)の名大不老Type-I(FX1000)への移植
→同手法のup3bdコードへの実装を検討

up3bdコードの各システムへの移植:

up3bdコードの東北大AOBA-B、並びに、京大Camphor3への移植

PASMOコードの素過程実装

Coulomb衝突(Takizuka法)の導入

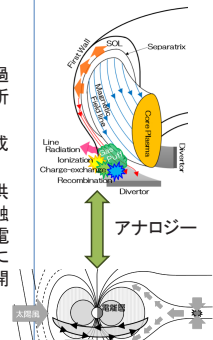
核融合炉周辺領域の弱電離プラズマの模擬

核融合炉周辺領域の弱電離プラズマを模擬する上で重要となる電離・再結合過程のモデル化、およびシミュレーションコードへの実装

プラズマ輸送現象の研究

素過程と輸送現象

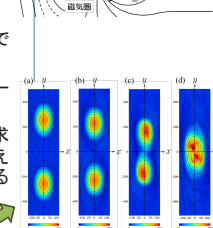
- 粒子衝突、中性粒子との素過程(非接触プラズマ過程)が、径方向プラズマ輸送現象に与える影響を解析する。
- 密度勾配が駆動する不安定性によるフィラメント形成過程、イオン加熱過程などの研究を進める。
- 核融合周辺プラズマは絶えずコアからエネルギーが供給され、その足元には中性粒子が多く含まれる非接触領域が存在するという点で、太陽風-地球磁気圏-電離層結合系と類似しており、そのアナロジーの議論により実験室プラズマとスペースプラズマとの学際的展開をめざす。



磁気再結合現象

球状トカマクのプラズマ合体実験の粒子シミュレーション

- PASMOコードをもとに合体の断面(下図の黄色い枠で囲んだ図)を模擬するシミュレーションを実施する。
- 球状トカマクが合体する様子を再現する粒子シミュレーションを実施し、実験の結果と比較する。
- イオン速度分布などを詳しく解析して、加熱機構を探求する。リングの一部分のような形状の分布関数が見えており、PASMOによる磁気再結合の成果を適用できる可能性が高い。



高速粒子が励起する波動現象

低域混成波ならびにその高調波の非線形励起機構

磁場強度、プラズマ密度、高速イオンの速さなどが異なるシミュレーションを実行して、低域混成波の高調波が生成される条件を調べる。
低域混成波の非線形発展に重要な影響を及ぼす高速イオンの速度分布の崩壊・再構築に関して、その物理機構とパラメータ依存性を解析する。

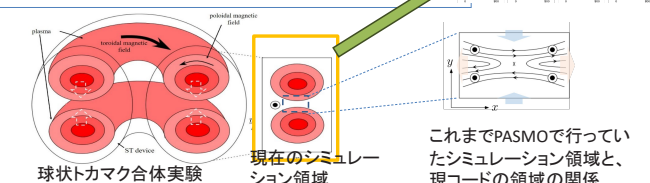
低域混成波の非線形発展における高速イオン質量に対する依存性

高速イオンの種類は、核融合プラズマでは水素同位体とヘリウム、宇宙プラズマでは水素、ヘリウム、酸素など様々なものがある。線形理論によると高速イオンの質量が大きくなると低域混成波は励起されにくくなるが、非線形発展については十分に調べられていない。電磁粒子シミュレーションを用いて研究する。

ジャイロ運動論研究

静電場構造と熱負荷

非構造格子生成手法やポアソン方程式の反復解法を活用し、ヘリカル核融合炉特有の周辺磁場構造における静電場構造と、それが核融合炉への熱負荷に対して与える影響を調べる。



jh230010 (新規課題) QR分解に関する高性能計算技術の研究

深谷 猛(代表・北大), 鈴木 智博(副代表・山梨大), 大島 聡史(九州大),
伊田 明弘(JAMSTEC), 岩下 武史(北大), 門倉 陣之介(北大・学生)

概要

主要な行列分解の一つであるQR分解に対して、その性能向上に資する高性能計算技術の研究開発を行う。現在、QR分解に対して異なる特徴を有する様々な数値計算アルゴリズムが存在する。一方、計算が行われる環境も、マルチコアCPU、GPU、分散並列システムなどと多様化している。更に、計算対象となる行列も、縦長行列から正方行列まで多様な形状があり、加えて、Block Low Rank行列のQR分解のような新しい問題設定も登場している。この状況に対して、本課題では、QR分解に関連した研究実績を持つ研究者を集めて、各々が持つ知見や技術を土台とした上で、それらを柔軟に組み合わせることで、様々な状況におけるQR分解の高性能化の可能性を追求することを目指す。

◆ 実施項目1: Cholesky QRに基づく列ピボット付きQR分解アルゴリズムの開発

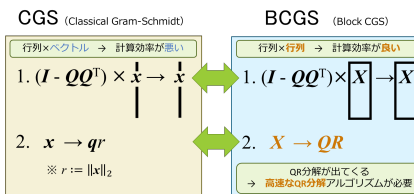
- Cholesky QR型のアルゴリズムはHPCに適した特徴を持ち、縦長行列のQR分解において高性能であることが知られている。
- 列ピボット付きQR分解は行列のランクに関する情報を扱うこと(Rank Revealing QR分解)が可能で、行列のランク近似などの応用を持つ。
- 本課題では、Cholesky QR型の列ピボット付きQR分解アルゴリズムの開発を行う。
- 開発したアルゴリズムの性能を既存アルゴリズム(LAPACKのルーチンなど)と比較し、その有効性を検証する。

CholQR: Cholesky QR
 Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$
 1: $W \leftarrow A^T A$
 2: $R^T R \leftarrow W // \text{Cholesky factorization}$
 3: $Q \leftarrow AR^{-1}$
 Output: $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}, R \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Cholesky QRアルゴリズムの概要

◆ 実施項目2: 非縦長行列のQR分解に対するCholesky QRアルゴリズムの活用

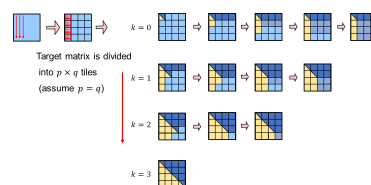
- Cholesky QR型のアルゴリズムは縦長行列に対して高性能である一方で、正方行列に近い(非縦長の)行列に対しては性能に限界があることを確認済み。
- 本課題では、Block Gram-Schmidt(BGS)アルゴリズムとCholesky QR型アルゴリズムを併用し、非縦長行列のQR分解に対する高性能計算を目指す。
- マルチコアCPU環境における提案手法の有効性を検証。
- 分散並列システムに対して、データ分散の方法を含めて、提案手法の拡張を検討予定。



Block Gram-Schmidt (BCGS) アルゴリズムの概要

◆ 実施項目3: 最新のマルチコアCPU環境におけるタイルQRアルゴリズムの性能評価

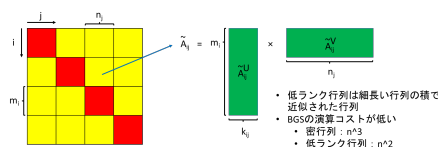
- タイル型の行列分解アルゴリズムは、超並列環境に適した並列アルゴリズムであり、QR分解をはじめとする行列分解における有効性が知られている。
- 本課題では、まず、JHPCNで利用可能である様々な最新のマルチコアCPU環境において、タイル型QR分解アルゴリズムの性能を詳しく調査・分析する。
- タイルサイズ等のパラメータと性能の関係を詳しく分析し、タイル型QR分解アルゴリズムの有効性の検証と性能向上に向けた課題の調査を行う。



タイルQRアルゴリズムの概要

◆ 実施項目4: GPU環境におけるBlock Low Rank行列のQR分解の性能評価

- Block Low Rank (BLR) 行列をはじめとする、行列の低ランク近似を活用した行列近似とそれに対する行列分解の研究が活発に行われている。
- BLR行列: ブロック化された行列の一部ブロックが低ランク表現されたもの。
- 本課題では、まず、別プロジェクトで開発が進んでいる、Block Low Rank行列に対するQR分解のGPU向け実装に関して、性能評価・分析を行う。
- 既存ライブラリをベースとしている実装に対して、その性能のボトルネック箇所を明らかにし、アルゴリズムや実装方法の改良について検討する。(密行列向け手法が適用可能だが、低ランク行列を考慮した改良の余地あり。)



Block Low Rank行列の概要

赤: 密行列(主に対角), 黄: 低ランク行列(主に非対角の大部分)

風間 聡 (東北大学工学研究科), 柳原駿太(同), 池本敦哉(同)
 滝沢 寛之(東北大学サイバーサイエンスセンター)

JHPCN

日本全国のため池の治水利用の評価

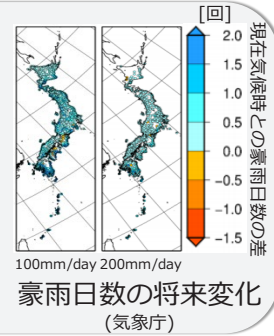
背景・目的

気候変動の豪雨に対する流域全体での洪水対策「流域治水」が取り組まれている

日本古来から資産「ため池」の治水活用
 ⇒ 将来への洪水適応策
 有効性の評価と地域性の考察が必要



山形豪雨 (2020年)



豪雨日数の将来変化 (気象庁)

研究目的：日本全国に20万基あるため池の洪水適応策の有効性の考察のための膨大な計算負荷の軽減化

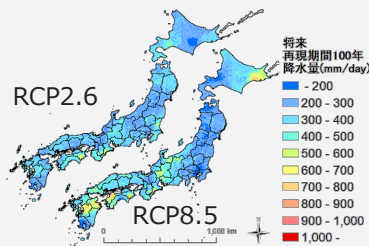
洪水氾濫解析

(Yamamotoら, Climatic Change, 165:60) **jh220018の成果**

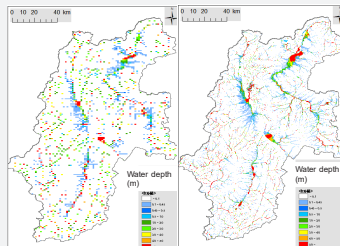
将来の降水量：全球気候モデル

高解像度洪水氾濫解析

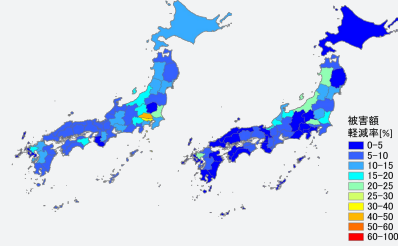
洪水対策の被害軽減比較



日本各域で再現期間100年洪水を生じさせる日降水量の気候シナリオRCPの違い (2050年時)

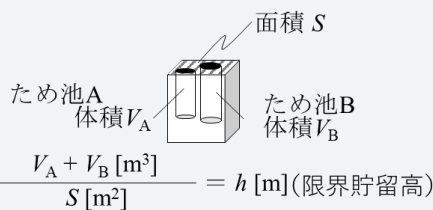


1km解像度 250m解像度
 100年確率降雨時の浸水深分布



県別被害軽減割合
 左：治水施設レベルの向上
 右：たんぼダム

ため池の要素モデル付加



ため池に一律の初期貯水率 (0・25・50・75%)を設定

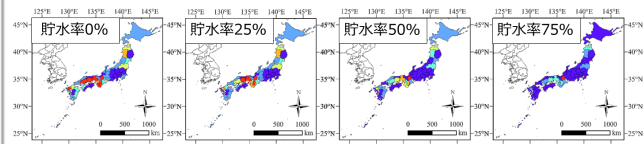
ため池存在セルにため池モデルを付加
 限界貯留高を超えると浸水が発生
 (Ikemoto, et al., Water Resources Management, 2023)

多数の組み合わせ計算

全国600万セルの計算

10万を超えるため池要素モデルの実行

初期貯水率: 0, 25, 50, 75% 4通り+ため池なし
 並列化の負荷をバイズ最適化を利用し, 高速化



県別+初期貯水率別 期待被害額軽減率

初期貯水率0%の場合,
 香川県(17%), 滋賀県(10%), 奈良県(9%),
 兵庫県(9%), 岡山県(8%)の軽減率が高い。

jh230032

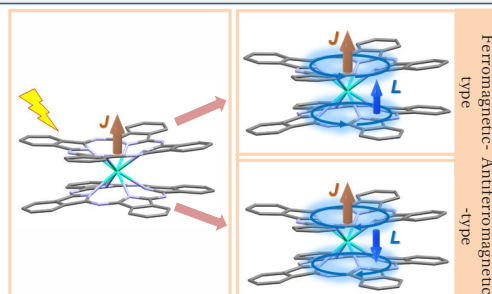


Ab Initio Study of An Intramolecular Magnetic Interaction in Rare-Earth-Based Molecular Magnets

Anas Santria^{1,2} and Naoto Ishikawa¹¹Graduate School of Science, Osaka University²Research Center for Chemistry, National Research and Innovation AgencyOSAKA UNIVERSITY
School of Science
Graduate School of Science

1. Introduction

The exploration of electronic interactions in molecular compounds has led to intriguing discoveries in the field of lanthanide complexes. Among these compounds, bisphthalocyaninato lanthanide(III) complexes, Pc_2Ln^- , have exhibited a novel type of interaction. Previous studies have revealed that an interaction arises between the total angular momentum (J) of the lanthanide ion and the orbital angular momentum (L) of the cyclic π system of the ligand.^{1,2} This interaction, called the “ $J-L$ interaction”, can occur in either a ferromagnetic-type or an antiferromagnetic-type manner, as illustrated in Figure 1. Notably, this interaction has the ability to alter the energy ordering of the sublevel structure in the ground state through the photogeneration of L . Consequently, this presents a remarkable opportunity to manipulate the quantum state of molecular magnets via the excitation-deexcitation process.

Figure 1. Schematic $J-L$ interaction in Pc_2Ln^- .

2. Research Purpose

This research aims to study the intramolecular magnetic interaction in the excited state of rare-earth-based molecular magnets and propose a new strategy to control the quantum states of molecular magnets.

3. Methods

This research utilizes three primary software packages: GAUSSIAN, OpenMOLCAS, and ORCA. GAUSSIAN is employed for density functional theory with scalar relativistic effects. OpenMOLCAS and ORCA are used for relativistic *ab initio* wave function calculations with the second-order Douglas-Kroll-Hess scalar relativistic Hamiltonian and ANO-RCC basis sets. State-averaged Complete/Restricted Active Space Self Consistent Field (CASSCF/RASSCF) wave functions are constructed for the f , π , π^* orbitals, as shown in Figure 2. The Restricted Active Space State Interaction (RASSI) and SINGLE_ANISO modules are employed to compute the oscillator strength and spin-orbit coupling states. The magnitude of the $J-L$ interaction is determined from the latter module by referring to our previous report.³ By employing this strategy, the relationship between J and L is expected to be revealed.

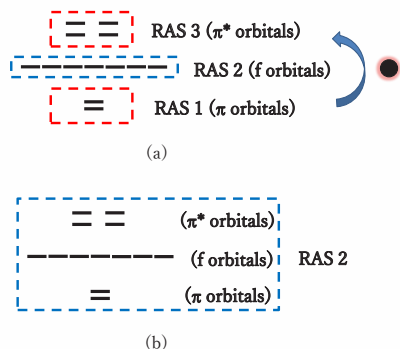
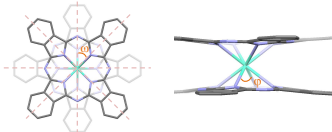


Figure 2. Schematic RASSCF

4. Research Progress

(a) Geometry Structure Optimization

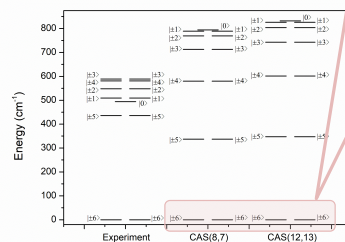
Program : Gaussian 16; Level : B3LYP
Basis set : Stuttgart RSC 1997 (Tb)
6-31G** (C, H, N)



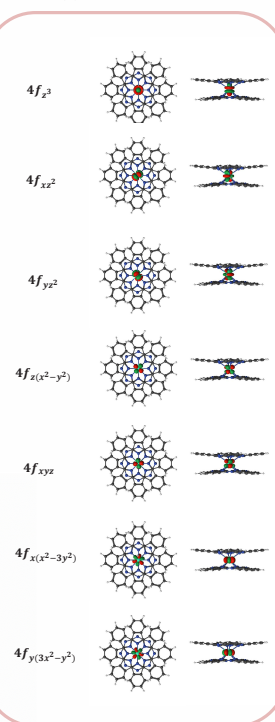
	Calc.	Exp. ⁴
Tb-N (average)	2.45 Å	2.44 Å
Interplanar distance (d_N)	2.86 Å	2.83 Å
Skew angle (ω)	44.97°	45.00°
Opening angle (ϕ)	108.73°	108.86°

(b) Ground Multiplet State of Pc_2Tb^-

Program : OpenMOLCAS V.20.06
Basis set : ANO-RCC-VTZP (Tb)
ANO-RCC-VDZ (C_{close}, N_{close})
ANO-RCC-MB (C_{distant}, N_{distant}, H)



(c) The 4f orbitals



5. Conclusions

At this stage, the ground multiple states of the terbium complex have been determined using the CASSCF calculations, followed by RASSI and Single Aniso modules. Expanding active space in calculations can influence the energy gap between two states in the ground state. Nevertheless, the two lowest substates for the complex remains the same, with the lowest J_z state is ± 6 .

6. Acknowledgement

This work is supported by the “Joint Usage/Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures (JHPCN)”. All calculations have been done using the supercomputer system SQUID at the Cybermedia Center, Osaka University, and AOBA-B at the Cyberscience Center, Tohoku University.

7. References

1. K. Kizaki, H. Ozawa, T. Kobayashi, R. Matsuoka, Y. Sakaguchi, A. Fuyuhuro, T. Fukuda, N. Ishikawa, *Chem. Comm.*, 2017, **53**, 6168-6171.
2. T. Fukuda, H. Ozawa, Y. Sakaguchi, K. Kizaki, T. Kobayashi, A. Fuyuhuro, N. Ishikawa, *Chem. Eur. J.*, 2017, **23**, 16357-16363.
3. A. Santria, N. Ishikawa, *Inorg. Chem.*, 2020, **59**, 14326-14336.
4. F. Branzoli, P. Carretta, M. Filibian, G. Zoppellaro, M. J. Graf, J. R. GalanMascaros, O. Fuhr, S. Brink, M. Ruben, *J. Am. Chem. Soc.* 2009, **131**, 4387-4396

jh230050

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募型共同研究 2023年度採択課題



回転デトネーションエンジンにおける燃焼器サイズ効果に関する数値解析

慶應義塾大学理工学部機械工学科
松尾亜紀子

15th JHPCN Symposium, 2023/7/6

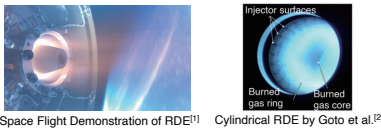
研究背景および目的

デトネーション

- 燃焼波が超音速で伝播する予混合燃焼
- 先行衝撃波、誘導領域、反応領域によって構成

回転デトネーションエンジン (RDE)

- 燃焼器内をデトネーションが回転伝播
- 一般的な燃焼器形状は二重円筒型
- 理論熱効率の向上, 圧縮機の簡略化が可能



実用化への課題

- 現在のRDEの実験スケールは未だ小さく, さらなる大型化が想定される
→ 現在の実験スケール: 半径200 mm程度
- 実用化に伴う燃焼器の大型化に関する知見は少ない

[1] Goto et al. Journal of Spacecraft and Rockets, 2023
[2] Goto et al. Journal of propulsion and power, 2022.

本研究の目的

燃焼器のサイズ効果がデトネーションの伝播や推進性能に与える影響を定量的に評価する

本報告の内容

サイズの異なる3種類の二重円筒燃焼器の流れ場および推進性能の比較

数値解析手法および解析条件

(in-house code)

支配方程式

- 3次元圧縮性Euler方程式
- 状態方程式 (熱的完全を仮定)
- 9化学種の保存則 (H₂, O₂, H, O, OH, H₂O, HO₂, H₂O₂, N₂)

化学反応モデル

Hong et al. (2011)^[3] による詳細反応モデル (9化学種20素反応を考慮)

離散化手法

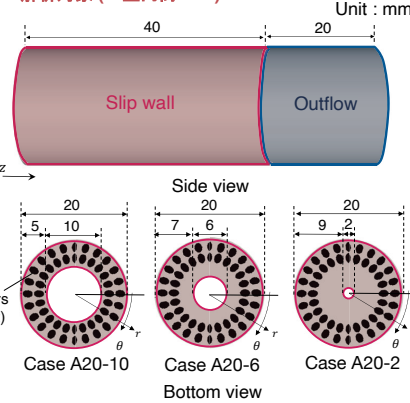
AUSM-DV (MUSCL法により3次精度化)

時間積分手法

- Point Implicit法 (化学反応)
- 3 stages 3rd order TVD Runge-Kutta (流体)

[3] Hong et al. Combustion and flame, 2011.

解析対象 (二重円筒RDE)



流入条件

全圧: 1.0 MPa
全温: 298 K
組成: 2H₂-O₂-3.76N₂ 予混合気

境界条件

- 断熱滑り壁
- 超音速流出時: 外挿
- 亜音速流出時: 定圧 (10 kPa)

格子条件

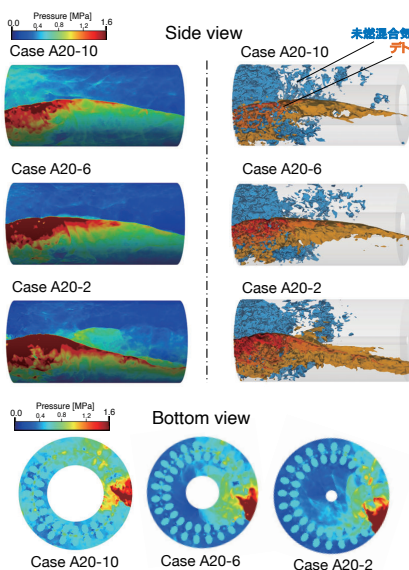
- A20-10** 点数: 105 × 1005 × 698 pts.
格子幅: 31-63 μm
- A20-6** 点数: 145 × 1005 × 698 pts.
格子幅: 19-63 μm
- A20-2** 点数: 187 × 1005 × 698 pts.
格子幅: 6-63 μm

使用した計算機

東北大学サイバーサイエンスセンター
サブシステム AOBASX-Aurora TSUBASA)

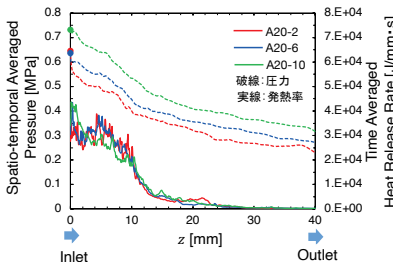
結果および今後の展望

燃焼器内部の可視化

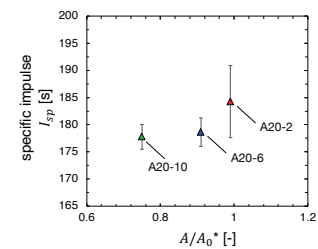


燃焼器特性および推進性能

- はっきりとした斜め衝撃波を伴う波面が1つ伝播
- 内筒の直径が小さくなると推進性能は向上



* 内筒のない直径20 mmの燃焼器の底面積



Case	内筒直径 D _i [mm]	底面積 A [mm ²]	平均流量 ṁ [g/s]	推力 F [N]	比推力 I _{sp} [s]
A20-10	10.00	235.62	95.64 ± 1.11	166.77 ± 1.50	177.79 ± 3.09
A20-6	6.00	285.88	99.07 ± 0.68	173.61 ± 1.85	178.63 ± 2.28
A20-2	2.00	311.02	98.20 ± 0.42	177.49 ± 2.08	184.25 ± 2.59

今後の展望

- 内筒直径の変化と推進性能の関係について, 底面の圧力分布に着目しさらに検証を行う
- より高解像度かつ粘性を考慮した解析を行い燃焼器壁面が内部流れに与える影響を明らかにする

jh230056 近代的メニーコアシステムにおける性能モデリング手法

代表: 星野 哲也, 河合 直聡, 片桐 孝洋 (名大), 塙 敏博 (東大), 伊田 明弘 (JAMSTEC)

研究背景・目的

- メモリ階層の深化, CPUのメニーコア化, GPUの導入など, 計算機が多様化・複雑化
- アプリケーションの性能に影響を及ぼすパラメータも複雑化
 - ピーク性能やメモリ性能はもちろん, ベクトル長と命令レイテンシの大きさ, キャッシュの速度やサイズ, コア間の通信レイテンシ, ノード間の通信レイテンシなど
 - アプリケーションの最適化は専門家でも難しくなって来ている
- 計算機の性能モデリングはアプリケーションの手動・自動最適化, 計算機の開発・導入において重要
 - マイクロベンチマークレベルでの評価はよく行われているが, 幅広くより実用的・先端的なアプリケーションを用いた, 様々なアーキテクチャにおける性能モデリングは十分でない
- 目的: アプリケーションの性能理解や自動最適化に有用な性能モデルの開発
 - ハードウェアをメモリ性能と演算性能で単純化したルーフラインモデルは, ルーフラインに至らない最適化途上のアプリケーションの性能律速原因の理解に適さない
 - ハードウェアの複雑性やアプリケーションの特性を考慮した, 人間にわかりやすい性能モデルが必要
 - ハードウェアの複雑化に伴い, 自動最適化におけるパラメータ探索空間が増加
 - 探索空間を狭めるための, 自動最適化向けの性能モデルが必要

研究実施項目

- マイクロベンチマークによる性能評価
 - メモリ性能, キャッシュ性能, コア間通信レイテンシ等の計測
 - 実アプリケーションでの性能モデリングに活用
- ステンシル計算の時空間ブロッキング
 - ステンシルカーネルのパラメータ (次元数, 近傍セルの参照点数, 各セルの物理量など)
 - 時空間ブロッキングのパラメータ (空間ブロック形状・サイズ, 時間ブロッキングサイズなど)
 - プロセッサのパラメータ (キャッシュサイズ・速度, メモリ性能, 演算性能, コア間レイテンシなど)
 - 上記を踏まえた性能モデルの構築
- 低精度演算を含む非線形ソルバ
 - 精度影響が小さい計算カーネルの一部の低精度化は, 速度の向上に変換によるオーバーヘッド (変換そのもののコスト, 変換による最適化の障害) が伴う
 - 低精度計算適用による性能の予測モデル
- 階層型行列演算の性能モデル
 - 階層型行列のパラメータ (低ランク部分行列のサイズ・ランク数, 小密行列の数など) は解析対象の形状によって大きく異なり, 構築するまでわからない
 - 階層型行列パラメータや実行するプロセッサによって適用すべき最適化手法が異なる
- 自動最適化への応用
 - 性能モデルの自動最適化への応用手法の検討
 - 自動最適化ツールであるppOpen-ATへの取り込み

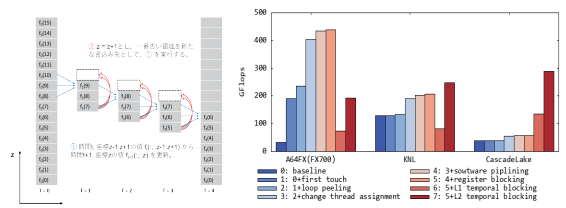


図1: 時空間ブロッキングの実装例。一度に進める時間ステップ数 (図の場合は4) や X, Y, Z 方向の空間ブロックサイズがパラメータとなる

図2: 倍精度3次元ステンシル計算の性能評価 [1]。右2つが時空間ブロッキングの適用によるもので, 空間ブロックサイズの違いで大きく性能が異なる。

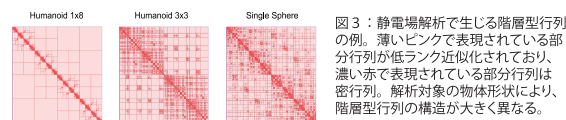


図3: 静電場解析で生じる階層型行列の例。薄いピンクで表現されている部分行列が低ランク近似化されており, 濃い赤で表現されている部分行列は密行列。解析対象の物体形状により, 階層型行列の構造が大きく異なる。

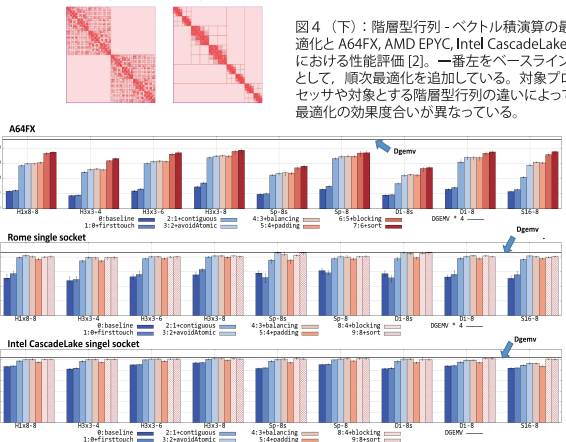


図4 (下): 階層型行列-ベクトル積演算の最適化と A64FX, AMD EPYC, Intel CascadeLake における性能評価 [2]。一番左をベースラインとして, 順次最適化を追加している。対象プロセッサや対象とする階層型行列の違いによって最適化の効果度合いが異なっている。

[1] 星野 哲也, 塙 敏博, 「A64FX におけるテンポラルブロッキングの実装と性能評価」情報処理学会研究報告, 2021-HPC-178(17), pp. 1-8, 2021年3月。
 [2] T. Hoshino, A. Ida and T. Hanawa, "Optimizations of H-matrix-vector Multiplication for Modern Multi-core Processors," 2022 IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER), 2022, pp. 462-472, doi:10.1109/CLUSTER51413.2022.00056.

jh230058



メニーコアCPU, GPUの最適なリソース割り当てに関する研究

代表: 河合 直聡^{†1}, 副代表: 埜 敏博^{†2}

参加者: 伊田 明弘^{†3}, 大島 聡^{†4}, 三木 洋平^{†2}, 星野 哲也^{†1}, 吳 天涯^{†5}

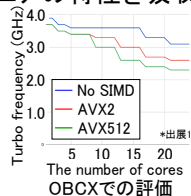
- †1: 名古屋大学 情報基盤センター
- †2: 東京大学 情報基盤センター
- †3: 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門
- †4: 九州大学 情報基盤研究開発センター
- †5: 東京大学 工学系研究科

背景および研究目的

ハードウェア、ソフトウェアの両方の要因によって、効率的なシステムの利用が困難となっている。
 →ソフトウェア、ハードウェアの特性を吸収し、計算時間、消費電力の両方の観点からCPU、GPUリソースの最適な割り当てを実現する。

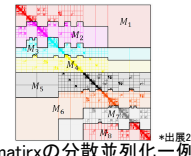
ハードウェア

- ・メニーコア化
- ・単一コアの高性能化 (SIMD幅の増加など)
- ともなう消費電力の増加
- 使用コア数、コアの演算負荷に依存した動作クロックの変化



ソフトウェア

- ・並列化時の均一な負荷分散が困難
- ・演算量を均一化しても演算時間が不均一 (キャッシュヒット率など)

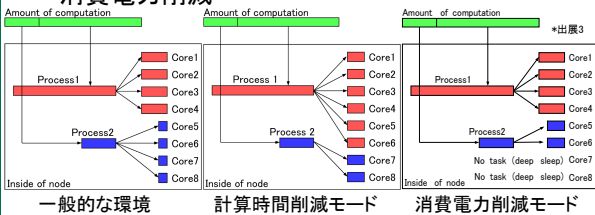


研究方法

Dynamic Core Binding (DCB)およびUT-Helperの併用により、研究目的を達成する。

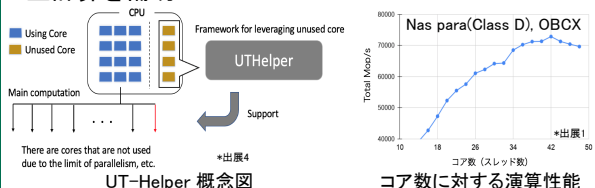
Dynamic Core Binding (DCB)

- ・MPI+OpenMPで並列化されたアプリケーションを対象に、プロセス毎に割り付けコア数を変更して、プロセス間の負荷の不均衡をコアレベルで吸収
- ・全コアを使用して、プロセス間の負荷を均一化 → 計算時間短縮
- ・最も演算量が多いプロセスに合わせて、それ以外のプロセスに割り当てるコア数を削減 → 消費電力削減



UT-Helper

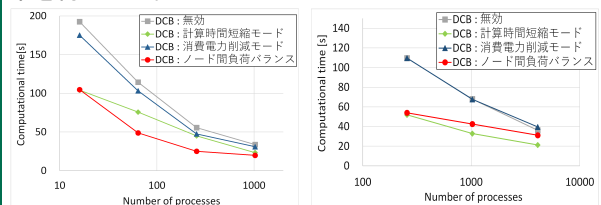
- ・全コアを使用せずに、一部のコアを余らせることで、性能向上が期待できる場合多数
- ・アプリケーションの性能が最大化するように使用するコア数を選択した上で、余った(余剰)コアに別のタスク(File I/OやMPI通信など)を割り当て、主計算を補助



UT-Helper 概念図
 コア数に対する演算性能
 DCB、UT-Helperともに、最適化対象はノード内に限定されるため、ノード間の最適化に関しては、プロセスの再配置を検討
 →大規模な組み合わせ最適化問題に落とし込まれるため、Simulated Annealingの使用も検討

現状および研究計画

DCBは基本的な実装およびLattice H-matrixに適用してのOakbridge-CX(OBCX)およびWisteria/BDEC-01 Odyssey(WO)上で評価を実施しており、期待通りの効果を得ている。

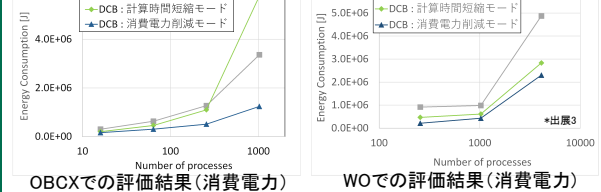


OBCXでの評価結果(計算時間)

WOでの評価結果(計算時間)

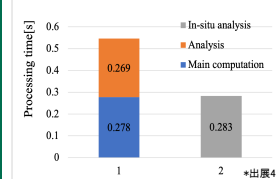
OBCXでの評価結果(消費電力)

WOでの評価結果(消費電力)



OBCXでの評価結果(消費電力)

WOでの評価結果(消費電力)



UT-Helperの研究に関して基本的な実装、評価は完了しており、UT-Helperを重カブリーコードに適用し、In-situ可視化に伴うFile IOをHelperスレッドに割り当てて評価した結果、期待通りの効果(Wisteria/BDEC-01 Aquarius(WA))を確認している。

WAで評価した結果

それぞれのライブラリの高度化に含めて以下の計画で研究を実施、研究目的を達成する。

- ・DCBおよびUT-Helperの連携および、それらを併用できるフレームワークの作成
- ・Multi Instance GPUを有効にし、見かけ上のGPU数を増やした環境へのDCBの適用
- ・ノード間負荷分散を目的としたプロセス配置の自動化

本年度の計画

- ・DCBの様々な環境、アプリケーションでの評価
- ・UT-HelperのHelperスレッドの使用範囲拡大
- ・DCB、UT-Helperの連携準備 (DCBでのコア割り付けパラメータの自動化、余剰コアの抽出)
- ・GPU(MIG有効環境)へのDCBの適用検討
- ・Simulated Annealingを使用したノード間負荷分散の均一化



DCBライブラリはbitbucket上にて公開しております。

出展1: 工藤 純 埜 敏博 "余剰コアの活用に向けた実行中プロファイリング手法の検討", 第177回HPC研究会 2020
 出展2: A. Ida, T.Iwashita, T. Mifune and Y. Takahashi "Parallel hierarchical matrices with adaptive cross approximation on symmetric multiprocessing clusters", Journal of information processing 22.4 (2014): 642-650.
 出展3: M. Kawai, A. Ida, T. Hanawa and K. Nakajima "Dynamic Core Binding for Load Balancing of Applications Parallelized with MPI/OpenMP", International Conference on Computational Science(ICCS2023), 2023
 出展4: 赤沢 龍哉 埜 敏博 三木 洋平 "余剰コアを活用したOpenMP TaskによるIn-situ解析の実現", 第183回HPC研究会, 2022