

[大学 ICT 推進協議会 2018 年度年次大会論文集より]

## 東北大学サイバーサイエンスセンターにおける 高速化推進研究活動の取り組みについて

小野 敏<sup>1)</sup>, 大泉 健治<sup>1)</sup>, 山下 毅<sup>1)</sup>, 齋藤 敦子<sup>1)</sup>, 佐々木 大輔<sup>1)</sup>, 森谷 友映<sup>1)</sup>,江川 隆輔<sup>2,3)</sup>, 滝沢 寛之<sup>2,3)</sup>

1) 東北大学 情報部情報基盤課

2) 東北大学 サイバーサイエンスセンター

3) 東北大学 情報科学研究科

ono@tohoku.ac.jp

### Research Activities to Promote Tuning Program in Cyberscience Center, Tohoku University

Satoshi Ono<sup>1)</sup>, Kenji Oizumi<sup>1)</sup>, Takeshi Yamashita<sup>1)</sup>, Atsuko Saito<sup>1)</sup>, Daisuke Sasaki<sup>1)</sup>, Tomoaki Moriya<sup>1)</sup>, Ryusuke Egawa<sup>2,3)</sup>, Hiroyuki Takizawa<sup>2,3)</sup>

1) Information Infrastructure Division of Information Department, Tohoku Univ.

2) Cyberscience Center, Tohoku Univ.

3) Graduate School of Information Sciences, Tohoku Univ.

#### 概要

東北大学サイバーサイエンスセンター（以下、本センター）は、最新のコンピュータ設備を導入し、大規模シミュレーションの実行環境を整備すると共に、利用者、本センター教員・技術職員、ベンダ技術者が一体となってプログラムの高速化技術および新しいシミュレーション技術に関する研究・開発に取り組み、計算科学・計算機科学の発展に貢献してきた。本稿では、本センターの特徴的な取り組みである高速化推進研究活動について紹介する。

#### 1 はじめに

本センターでは、常に最高・最新鋭の大型計算機を導入し、大規模科学技術計算の要求に答えてきた。現在、本センターの大規模科学計算システムは、主に研究室のワークステーションでは実行できないような大規模シミュレーションに用いられている。2015年2月より運用しているスーパーコンピュータシステムSX-ACE[1]の運用においても、これまでと同様に大規模・長時間シミュレーションの実行を運用の中心として考え、運用環境の構築を行った。

コンピュータのハードウェア技術、ソフトウェア技術の進歩に伴い、コンピュータの機能、および性能は飛躍的に向上してきているが、その潜在的な処理能力を最大限に引き出し、大規模なシミュレーションを実現するためには、コンピュータシステム、およびプログラミング技術に関する高度な専門知識を必要とするのが現

状である。

そこで本センターでは、利用者、本センター教員・技術職員、ベンダ技術者が一体となって利用者アプリケーションの高度化・高速化、並列化に取り組み、高速化支援を行うと共に、その技術的な知見を蓄積し利用者に還元していくことが重要であると考え、高速化推進研究活動を行ってきた。

本稿では、この高速化推進研究活動の取り組みについて紹介する。

#### 2 大規模科学計算システム

高速化推進研究活動の詳細説明に先立ち、本センターの大規模科学計算システムの概要を述べる。本センター大規模科学計算システムの構成を図1に示す。本センターの大規模科学計算システムはベクトル型スーパーコンピュータSX-ACE、スカラー型並列コンピュータLX 406Re-2、

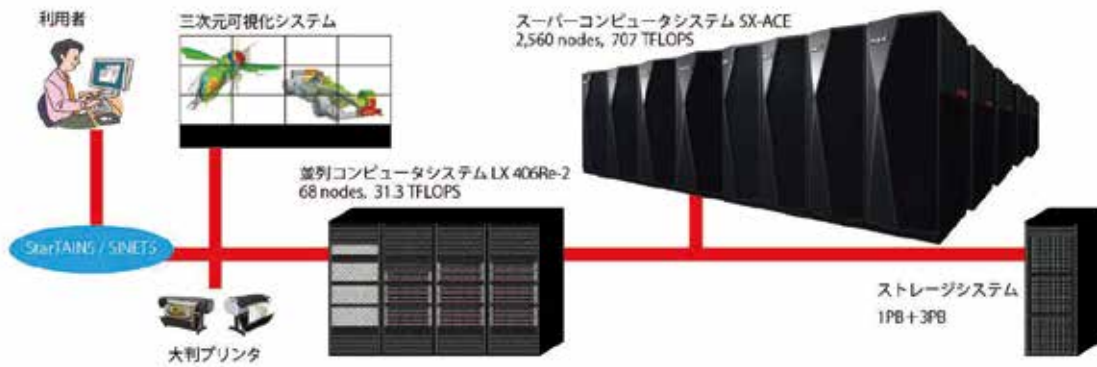


図1 大規模科学計算システム構成図

表1 高速化支援活動実績

	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007
件数	2	9	8	9	10	7	18	20	8	29	10
単体性能向上比	1.9	46.7	4.5	2.5	1.6	2.2	6.7	2.9	1.5	3.1	33.0
並列性能向上比	11.1	18.4	31.7	8.6	4.9	2.8	18.6	4.5	4.1	8.0	1.9

年度	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017
件数	15	8	8	13	6	11	9	6	9	7
単体性能向上比	9.3	47.0	47.2	16.2	19.7	16.7	10.3	32	19.2	5.9
並列性能向上比	5.1	3.6	48.5	17.2	15.3	12.9	8.0	5	3	1.2

ストレージシステム、三次元可視化システム、および大判プリンタから構成される。主力システムはその規模が示すとおり SX-ACE であり、主にユーザが開発した大規模シミュレーションの実行を担っている。一方、SX-ACE には適さないアプリケーションや、汎用・商用のアプリケーションの実行には LX 406Re-2 が活用され、両システムが相補的な役割を担っている。ベクトル型スーパーコンピュータ SX-ACE は 2,560 のノードから構成される。1 つのノードは、理論演算性能 276GFLOPS のベクトルプロセッサ 1 基と 64GB の主記憶容量を有している。各ノードは、ノード間接続装置 (IXS) で高速に相互接続されており、1 ジョブで最大 1,024 ノードを占有する並列処理が可能である。なお、OS は UNIX System V に準拠した SUPER-UX である。スカラ型並列コンピュータ LX 406Re-2 は 68 のノード

から構成される。1 つのノードは理論演算性能 230GFLOPS の Intel Xeon プロセッサ 2 基と 128GB の主記憶容量を有している。なお OS は Linux である。

### 3 高速化推進研究活動

本センターでは 1999 年よりユーザアプリケーションの高度化・高速化、大規模化の支援を目的とした共同研究制度を施行している。利用者、センター教員・技術職員、ベンダ技術者が連携してアプリケーションの高度化・高速化に取り組んでいる。また、本センターでは社会貢献の一環として、サイバーサイエンスセンター共同研究制度の他に、産学連携共同研究に基づく民間企業利用も実施しており、学術分野のみならず産業のイノベーション創出にも貢献している。

さらには全国の情報基盤センター等と連携して JHPCN(学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点)を形成しての学際的な共同利用・共同研究の実施、HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)への資源提供機関としての活動など近年はその役割を広げ、これらの研究課題を通じて計算科学分野の利用者と共同研究を行い、様々な分野におけるアプリケーションの高度化・高速化、並列化に取組み高速化推進研究活動を行ってきた。

サイバーサイエンスセンター共同研究は恒常的に年 10 件程度実施されていることに加え、近年 JHPCN、HPCI を介した共同研究課題が増加している。これは、サイバーサイエンスセンター共同研究を通してユーザアプリケーションが高度化、大規模化し JHPCN、HPCI 採択課題へとステップアップしているためだと考えられ、継続的な高速化推進研究活動が一定の成果をあげていることがわかる。また、表 1 にこれまで本センターが行ってきた高速化支援の成果を示す。1997 年から 2017 年にかけて 222 件の共同研究に基づくユーザアプリケーションの高度化・高速化に取り組んでおり、単体性能、並列性能ともに大幅な向上を実現している。

このような高速化支援体制のもと、大規模計算利用者との共同研究を実施し、大学の多様な研究分野で活用される様々なシミュレーション計算モデルの大規模化、高精度化、高効率化、並列化に関する研究開発に取り組む、その知見を高速化推進研究活動報告として、2001 年[1]、2003 年[2]、2005 年[3]、2008 年[4]、2011 年[5]、2015 年[6]に出版すると共に本センターweb ページでも広く公開し、日本の大規模科学計算コミュニティにその成果を還元している。

#### 4 SX-ACE におけるユーザアプリケーションの性能改善例

現在運用している SX-ACE 導入後の代表的なユーザアプリケーションの性能改善例を表 2～表 4 に示す。なお、性能向上比は相談を受けた

時点のオリジナルコードに対してのものである。

ユーザアプリケーションの高度化・高速化に取り組む高速化の成果を出すと共に、担当者の技術力強化のため、システムの特徴を有効に活用する高速化の技法に関するノウハウを表 2～表 4 のように年度毎にまとめ蓄積している。

表 2 2015 年度の高速化支援性能向上比

番号	主な改善点	性能向上比	
		単体性能	並列性能
1	作業配列の導入によるベクトル化の促進 ADB ヒット率の改善 未並列ループの MPI による並列化	-	1.8 倍 (64 コア並列)
2	MPI 分割方法の改良によるロードインバランスの改善	-	1.1 倍 (256 コア並列)
3	MPI 転送処理の最適化によるデータ転送量の削減	-	1.4 倍 (32 コア並列)
4	MPI による並列化	-	15.5 倍 (16 コア並列)
5	自動インライン展開によるベクトル化の促進 ループ分割によるベクトル化の促進 ファイルアクセス方法の変更	32 倍	-
6	作業配列の導入によるベクトル化の促進 コンパイラ指示行によるメモリアクセス性能の改善 ファイルアクセス方法の変更	32 倍	-

表 3 2016 年度の高速化支援性能向上比

番号	主な改善点	性能向上比	
		単体性能	並列性能
1	自動インライン展開によるベクトル化の促進 ループ展開によるベクトル化の促進 ループ分割、ループ交換によるベクトル化の促進	45 倍	-
2	自動インライン展開によるベクトル化の促進 ループ分割、ループ交換によるベクトル化の促進	43 倍	-

	コンパイラ指示行によるベクトル化の促進 ファイル出力方法の変更		
3	ストリップマイニングによるメモリアクセス性能の改善	3.3 倍	-
4	ASL ライブラリへの置換 ループ 1 重化とループ融合によるメモリアクセス性能の改善 配列サイズの変更によるメモリバンクコンフリクトの改善	18 倍	-
5	MPI_ISSEND の MPI_ISEND への変更による通信性能の効率化 不必要な MPI_BARRIER の削除	-	1.5 倍 (32 コア並列)
6	作業配列の導入によるベクトル化の促進	3 倍	-
7	リダクション処理 (ALLREDUCE) の最適化 ファイル出力方法の変更	-	3.8 倍 (636 コア並列)
8	多重ループの融合/分割/入れ換えによるベクトル化の促進 IF 文のループ外への移動によるベクトル化の促進 MAX・MIN 関数への置き換え、除算の乗算化、冗長演算の削除による演算の効率化 作業配列の変数化によるメモリアクセス性能の改善 RedBlack 法の間接参照からマスク処理への変更によるメモリアクセス性能の改善 MPI による並列化	3 倍	5.1 倍 (4→16 コア並列)
9	GTHREORDER 指示行の挿入によるリストベクトルアクセスの効率化 MPI_ISSEND の MPI_ISEND への変更による通信性能の効率化	-	1.4 倍 (32 コア並列)
2	配列定義の変更による平均ベクトル長の改善 指示行による再内ループの展開 指示行によるメモリアクセス性能の改善		1.8 倍 -
3	指示行の挿入によるベクトル化の促進 ループブロック化、マスク処理、ループ交換によるベクトル化の促進	10 倍	-
4	計算カーネル部分について、ループブロック化、マスク処理によるベクトル化の促進	1.7 倍	-
5	不要な演算の削減 依存関係解消のための作業配列追加によるベクトル化の促進 MPI 通信性能の改善 ハイブリッド並列の効率化 メモリ使用量の削減	-	約 5000 倍 (512 コア並列・推定値)
6	指示行の挿入による演算効率の改善 指示行の挿入によるメモリアクセス性能の改善	-	1.3 倍 (32 コア並列)
7	複雑な条件分岐の簡略化のためのループ分割によるベクトル化の促進 通信命令の並び替えによる通信性能の改善	10 倍	1.05 倍 (636 コア並列)

表 4 2017 年度の高速度化支援性能向上比

番号	主な改善点	性能向上比	
		単体性能	並列性能
1	グローバルメモリ機能の使用による通信性能の改善 非同期通信への変更による通信性能の改善 演算オーバーラップ機能の使用		1.2 倍 (32 コア並列)

### 5 スーパーコンピュータ SX-ACE のベクトル化・並列化の状況

スーパーコンピュータ SX-ACE システムを導入した 2014 年度から 2017 年度までの各年度における、ベクトル化率および並列化率とノード時間割合との関係を図 2 に示す。SX-ACE を導入した 2014 年度において特徴的なのは、並列化率は 80%以上であるがベクトル化率がほぼ 0%であるジョブのノード時間割合が、15%程度あった点である。これは他のシステムにおいて高度に並列化されているがベクトル化を考慮していないジョブが、SX-ACE で実行されたためであると考えられる。高速化支援によってこのようなジョブのベクトル化が促進されたことにより、翌年の 2015 年度ではベクトル化率および並列化率ともに 80%を超えるジョブのノード時間割合

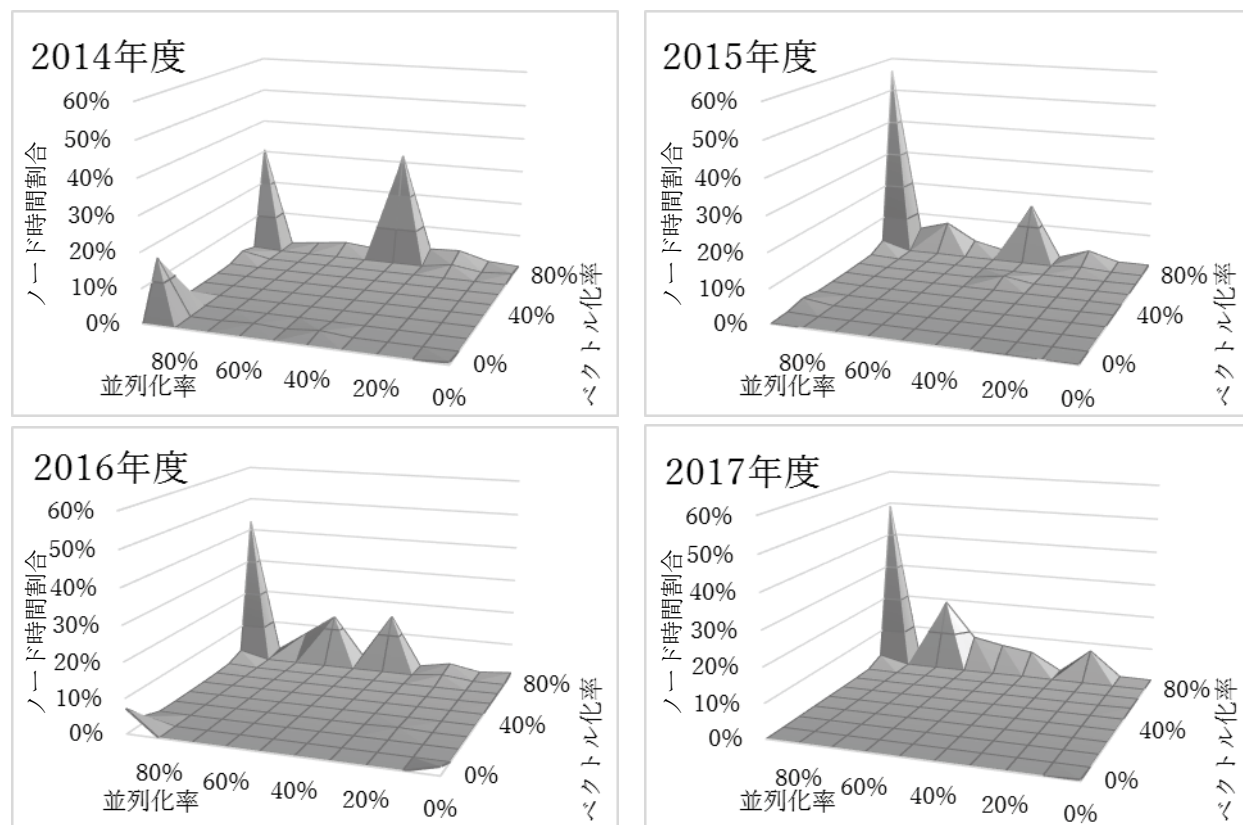


図2 ベクトル化率および並列化率とノード時間割合

は50%を上回った。また、2016年度においては新規利用者が実行したと思われる、ベクトル化率および並列化率ともに10%未満のジョブが見られるが、2017年度ではベクトル化率についてはほぼ80%以上となっている。

## 6 まとめ

本稿では、東北大学サイバーサイエンスセンターにおける高速化推進研究活動への取り組みを紹介し、SX-ACEでの代表的な性能改善例、ベクトル化・並列化の状況を報告した。大規模シミュレーションの実行には高度化・高速化、並列化が不可欠であり、今後も利用者アプリケーションの高速化支援を継続し、その知見を利用者に還元することを推進して行きたいと考える。それとともに、高速化に対する認識を利用者に高めてもらうよう努力していきたい。

## 参考文献

[1] 日本電気株式会社、萩原 孝、浜口 博幸、山信田 恒、スーパーコンピュータ SX-ACE

のハードウェア、東北大学サイバーサイエンスセンター大規模科学計算システム広報 Vol. 48, No. 1, pp. 5-14, 2015.

- [2] 東北大学サイバーサイエンスセンター、高速化推進研究活動報告 第1号、2001.
- [3] 東北大学サイバーサイエンスセンター、高速化推進研究活動報告 第2号、2003.
- [4] 東北大学サイバーサイエンスセンター、高速化推進研究活動報告 第3号、2005.
- [5] 東北大学サイバーサイエンスセンター、高速化推進研究活動報告 第4号、2008.
- [6] 東北大学サイバーサイエンスセンター、高速化推進研究活動報告 第5号、2011.
- [7] 東北大学サイバーサイエンスセンター、高速化推進研究活動報告 第6号、2015.