

|         |   |        |       |
|---------|---|--------|-------|
| 氏名      | 廣川 祐太                                     |        |       |
| 学位の種類   | 博士（工学）                                    |        |       |
| 学位記番号   | 博 甲 第 8813 号                              |        |       |
| 学位授与年月日 | 平成 30年 9月 25日                             |        |       |
| 学位授与の要件 | 学位規則第4条第1項該当                              |        |       |
| 審査研究科   | システム情報工学研究科                               |        |       |
| 学位論文題目  | 最先端高性能計算システムにおける第一原理電子動力学シミュレーションのコードデザイン |        |       |
| 主査      | 筑波大学 教授                                   | 工学博士   | 朴 泰祐  |
| 副査      | 筑波大学 教授                                   | 博士（工学） | 櫻井 鉄也 |
| 副査      | 筑波大学 教授                                   | 博士（理学） | 高橋 大介 |
| 副査      | 筑波大学 教授                                   | 理学博士   | 矢花 一浩 |
|         | （数理物質科学研究科）                               |        |       |
| 副査      | 東京大学 准教授                                  | 博士（工学） | 埴 敏博  |

## 論 文 の 要 旨

本論文では、高性能計算機システムのプロセッサ及びネットワークアーキテクチャの最新動向を調査し、最先端科学技術計算の実アプリケーションをそれらのアーキテクチャに適合するための各種最適化について考察、最終的に世界トップクラスの超並列型スーパーコンピュータ上にこれを実装し、性能評価を行っている。これらを通じ、アーキテクチャに適合したアプリケーションの最適化を行うためには、システムとアプリケーションの双方の特性を理解した上で最適化を行うというコードデザイン概念に基づく最適化手法が、今後の超並列高性能計算とその上で行う計算科学の発展に大きく貢献することを示している。

本論文ではメニーコアアーキテクチャを持つ最先端プロセッサを数千台用いた超並列型スーパーコンピュータを対象に、物性第一原理計算に基づく電子動力学シミュレーションコードを取り上げ、SIMD 命令の効率的利用・メモリ上のデータ配置の最適化・キャッシュの有効活用と複合型メモリアーキテクチャへの適合等の各種最適化を施した結果、同アプリケーションの中核部分においてプロセッサの理論ピーク性能の約 25%、さらに 8192 ノードの超並列システムにおいてシステム全体の理論ピーク性能の約 16%の実効性能をそれぞれ達成している。さらに GPU に向けての最適化も行い、共に極めて高い電力当たり性能を持つ両タイプのプロセッサでアプリケーション最適化を実現している。最終的に、アプリケーションとシステム両面からのコードデザインによってこういう先進的システムのコード最適化が可能であり、今後の先進的計算科学と超高性能システムの開発の推進にはこういったアプローチが極めて重要であることが結論として示された。

## 審査の要旨

### 【批評】

本論文のテーマである「コデザイン」の概念は抽象的には広く理解されつつあるが、実例としての先進的スーパーコンピュータとこれを求める実アプリケーション例において最適化を徹底的に追求し、その意義を示すケースはまだ多くはない。本論文では計算機工学研究者が物理学研究グループと協業することで、潜在的性能を引き出すことが困難な最先端プロセッサアーキテクチャを効率的に利用し、実際の計算科学研究に大きく貢献し得ることを示した重要な例であると言える。

研究の題材となった物性物理学における電子動力学シミュレーションコードは筆者が開発したのではなく、既存コードをどのようにアーキテクチャに適するように最適化するかについて論じたものである。メニーコアやGPUといった先進的高性能計算機アーキテクチャは年々進化し、同時にその性能を引き出すための制約も厳しくなっている。本論文の意義は、そういったアーキテクチャ特性にアプリケーション特性をいかに適合させ、最適化するかという手法を示しており、コード改変においてそういったコデザインの概念が極めて重要であることを示している。

本論文はコデザイン手法の実例であるものの一例に過ぎず、ここで用いられた手法が一般的なコードに適用できるわけではない。また、アーキテクチャにうまく適合する問題サイズや現実的な時間で実行可能な問題をうまく選択できている等の特別な条件の下で高性能化が達成されている。その意味では一般論に展開できるレベルでの研究であるとは言えず、今後のアーキテクチャの動向やそこから発生する制約等についての知見は必ずしも十分ではない。

しかし、実例・実証が一般的にまだ不十分な現状において、計算科学の実際の研究者と、アーキテクチャを熟知した計算機工学者との協業でコード性能を大幅に引き上げることがコデザインの実例であることを示した本論文の意義は大きい。また、対象としたメニーコアアーキテクチャの超並列計算機では、数値計算上最高の性能になると想定される Linpack ベンチマークですら 56%程度の実効性能しか得られないことを考慮すると、アプリケーションにおいて十分な性能を達成していると認められる。

以上により、本論文で得られた結果は、今後の先進的スーパーコンピュータにおけるコデザインの研究に対する重要な実証例となっており、博士学位論文として十分な意義があると認められる。

### 【最終試験の結果】

平成 30 年 7 月 25 日、システム情報工学研究科において、学位論文審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、学位論文審査委員全員によって、合格と判定された。

### 【結論】

上記の学位論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。