

戦略的創造研究推進事業 CREST  
研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資  
するシステムソフトウェア技術の創出」  
研究課題「ポストペタスケール時代に向けた  
演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」

## 研究終了報告書

研究期間 平成24年10月～平成30年3月

研究代表者: 朴 泰祐  
(筑波大学システム情報工学研究科、  
教授)

## § 1 研究実施の概要

### (1) 実施概要

本研究では、高性能並列計算における演算系と通信系を TCA (Tightly Coupled Accelerators) という概念の下で融合し、GPU を中心とするアクセラレータによる演算加速と、FPGA を用いたノード間直接通信ハードウェア及びソフトウェアを統合し、従来の枠組みを越えた新しい演算加速並列処理の形を示し、この概念に基づくハードウェア、システムソフトウェア、アプリケーションの開発を垂直統合的に行った。

TCA システムソフトウェア開発グループ(朴グループ)では、TCA テストベッドである PEACH2 通信システム上の BIOS, 通信レイヤ, ベンチマークを開発し、同ハードウェアをアプリケーションレベルで利用可能なシステム整備と最適化を行った。また、中間報告以降の研究では、FPGA に対する演算のオフローディングを積極的に行う AiS (Accelerator in Switch) の概念を天野グループと提唱し、これを高位言語で実現する枠組みと、PEACH2 を上回る高速 FPGA 間通信を実現する基礎実験を行い、一般的な FPGA プラットフォームにこれらの技術を適用可能であることを示した。

TCA ハードウェア開発グループ(天野グループ)では、PCIe gen2 技術に基いて作成された PEACH2 を、同 gen3 技術に引き上げバンド幅の大幅向上を図る PEACH3 の開発を行った。また、AiS コンセプトを具体化する第一歩として梅村グループと共同で、GPU による宇宙物理計算の strong scaling のボトルネックとなっている演算通信処理を Verilog HDL で記述して PEACH2 回路と合成することにより、演算のオフローディングと通信の融合による性能向上がアプリケーション開発に大きく貢献することを示し、これを支援するための動的回路再編成に関する新規技術の開発も行った。

TCA 並列言語開発グループ(村井グループ)では、演算加速機構(アクセラレータ)を備えたクラスタ(アクセラレータクラスタ)のためのプログラミング言語 XscalableACC (XACC) の仕様を設計するとともに、その処理系である Omni XscalableACC の開発を行った。XACC は、既存の PGAS 言語 XscalableMP とアクセラレータ向け言語 OpenACC を統合・拡張したものである。XACC を用いれば、TCA 機能を有するアクセラレータクラスタ向けプログラムを容易に開発できる。XACC によりいくつかのアプリケーションを記述し、ターゲット計算機である HA-PACS/TCA において性能を評価することにより、XACC の有効性を実証した。

アプリケーション開発グループ(梅村グループ)では、宇宙分野で、輻射輸送計算コードと重力計算コードを GPU を用いて高速化した。また、計算機工学分野と連携し、FPGA による ART 法輻射輸送計算のオフローディング実験を行った。素粒子分野では、マルチスケールの物理として格子 QCD の GPU 加速コードを開発・改良した。気象学分野では、都市街区気象 LES (City-LES) の境界条件を改良することで、領域気象モデル WRF とのネスティングを可能にした。物質・生命科学分野では、GPU 化 Fock 行列計算ルーチンの OpenFMO への組み込みと、タンパク質の効率的サンプリング法(Fluctuation Flooding Method (FFM))の開発を行った。

以上の研究において、グループ間共同研究として、朴グループと村井グループによる PEACH2 対応 XscalableACC コンパイラの開発、天野グループと梅村グループによる宇宙アプリの AiS 実証実験、朴グループと天野グループによる PEACH2 から PEACH3 へのシステム移行、村井グループと梅村グループによる XscalableACC アプリケーション開発等、全てのグループが横断的に共同研究を行い、FPGA を中心とする次世代高性能並列演算加速計算に対する一つの方向性を示すことに貢献した。

### (2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1. Tightly Coupled Accelerators の概念とこれを実現する PEACH2 の開発により、並列 GPU コンピューティングにおいて従来問題となっていた通信性能ボトルネックを大幅に改善し、当時のコモディティ技術で  $17 \mu \text{sec}$  程度を要していた並列 GPU ノード間通信レイテンシを  $2 \mu$

sec に縮めることに成功した。これにより、国際会議 HEART2014 において Best Paper Award を、また ISC2014 における HPC in Asia Poster Session において Best Poster Award をそれぞれ受賞した。

2. Tightly Coupled Accelerator 用スイッチハブ PEACH3 を開発し、PCIe gen3 の利用により、実アプリケーションにおいて PEACH2 の性能を 20% 以上向上した。さらに、スイッチハブ部と、密結合したアクセラレータ機構を組み込むことにより、FPGA のスイッチ機能と計算機能を共に生かす機構であるアクセラレータインスイッチを提案した。これにより宇宙物理学における実アプリケーションの高速化に成功し、国際会議 HEART2015 において Best Paper Award を受賞した。
3. アクセラレータ対応 PGAS 並列言語である XcalableACC (XACC) の開発により、今後の HPC 基盤として重要な位置を占めるアクセラレータ型クラスタにおいて、MPI と CUDA 等を用いる既存の手法に比べ、アクセラレータの制御とクラスタ間の分散メモリ並列処理の両方に対し指示文ベースの抽象度の高いプログラム記述が可能になり、プログラム開発の生産性を大きく向上させることができた。これらの成果により、SC14 の HPC Challenge Class2 部門において Best Performance Award を受賞した。
4. GPU による先進的計算科学アプリケーション開発において、空間的に広がった光源からの輻射輸送解く ART 法と、多数の光源からの輻射輸送を高速に計算できる ARGOT 法を合わせたシミュレーションコードを MPI でノード並列化し、GPU で加速した新たな輻射輸送コードの開発を行った。また、重力計算については天野グループと、輻射輸送計算のコア部分については朴グループと、それぞれ共同研究を進め、既存システムよりはるかに高速に計算を実施できることを実証した。これにより、特殊装置ではなく汎用の FPGA ボードでの AiS コンセプトの実現可能性を示し、高性能並列システムへの FPGA の適用に関する新しい枠組みを提供した。

< 科学技術イノベーションに大きく寄与する成果 >

1. AiS の実証実験として開発された最新 FPGA 上の光インターコネクタによる 100Gbps までの超高速直接通信技術と OpenCL による高位合成技術を統合化した、超低レイテンシ・高バンド幅 FPGA 通信に支えられたアプリケーションの部分オフローディングにより、従来型のプラットフォームでは strong scaling のボトルネックとなっていた要因を解消した次世代の演算加速並列処理の実現が期待される。PEACH2 は独自開発ハードウェアであったが、最新の AiS 研究で我々が用いている FPGA ボードはコモディティ製品であり、その IP を含めたシステムのオープン化により、幅広い用途に適用可能である。
2. 本研究の下、理研と筑波大が提供する Omni コンパイラ基盤に基づき開発された Omni XACC (XcalableACC) は、オープンソースとして公開することを予定している。さらに、Omni XACC は、HPC の分野で広く用いられている C および Fortran の両方に対する XACC 機能をサポートすることから、HPC 基盤としてのアクセラレータクラスタの有用性向上を通じ、科学技術イノベーションに大きく貢献できる。

## § 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

- ① 「TCA システムソフトウェア開発」グループ (朴グループ, 筑波大学)  
研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
朴 泰祐	システム情報工学研究科	教授	H24.10～H30.3
塙 敏博	東京大学情報基盤センター	准教授	H24.10～H30.3
高橋 大介	システム情報工学研究科	教授	H24.10～H30.3
多田野 寛人	システム情報工学研究科	助教	H24.10～H30.3
山口 佳樹	システム情報工学研究科	准教授	H24.10～H30.3
藤田 典久	計算科学研究センター	研究員	H28.4～H30.3
田渕 晶大	システム情報工学研究科	D2	H26.9～H30.3
桑野 洋子	計算科学研究センター	研究員	H27.4～H30.3
大島 佑真	システム情報工学研究科	M2	H28.4～H30.3
小林 諒平	システム情報工学研究科	助教	H28.4～H30.3
Fimansyah IMAN	システム情報工学研究科	D2	H28.5～H30.3
児玉 祐悦	システム情報工学研究科	教授	H24.10～H27.3
小田嶋 哲哉	システム情報工学研究科	D3	H24.10～H28.3
藤田 典久	システム情報工学研究科	D3	H24.10～H28.3
藤井 久史	システム情報工学研究科	M2	H25.4～H27.3
松本 和也	計算科学研究センター	研究員	H25.12～H28.3
廣川 祐太	システム情報工学研究科	D1	H27.4～H29.3
飯島 大貴	システム情報工学研究科	M2	H27.4～H28.3
桑原 悠太	システム情報工学研究科	M2	H27.4～H29.3
佐藤 賢太	システム情報工学研究科	M2	H27.4～H29.3
高山 尋考	システム情報工学研究科	M2	H28.7～H29.3

#### 研究項目

- ・ PEACH2 システムソフトウェア(ドライバ, API) 開発
- ・ PEACH2 システムによるベンチマーク及びアプリケーション開発と評価
- ・ AiS を高位合成で実現するシステムの開発とアプリケーション評価

#### ②「TCA ハードウェア開発」グループ(天野グループ, 慶應義塾大学)

##### 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
天野 英晴	理工学部情報工学科	教授	H24.10～H30.3
Ng.Anh Vu Doan	理工学部	特別研究員	H.29.9～H.30.3
志村 英樹	理工学部開放環境科学専攻	M2	H29.4～H30.3
酒井 涼太郎	理工学部開放環境科学専攻	M2	H29.4～H30.3
西川 尚紀	理工学部開放環境科学専攻	研究員	H29.4～H30.3
野田 裕之	理工学部開放環境科学専攻	M1	H29.4～H30.3
安戸 僚太	理工学部開放環境科学専攻	D2	H29.4～H30.3
宮島 敬明	理工学部開放環境科学専攻	D3	H25.4～H26.9
張 浩	理工学部開放環境科学専攻	D3	H25.4～H26.3
野村 鎮平	理工学部開放環境科学専攻	M2	H24.10～H26.3
加賀美 崇紘	理工学部開放環境科学専攻	M2	H24.10～H26.3
久原 拓也	理工学部開放環境科学専攻	M2	H24.10～H27.3
國上 太旗	理工学部開放環境科学専攻	M2	H24.10～H26.3
金田 隆大	理工学部開放環境科学専攻	M2	H27.4～H29.3
鶴田 千晴	理工学部開放環境科学専攻	M2	H27.4～H29.3
杉本 成	理工学部開放環境科学専攻	M2	H27.12～H28.3
Arhed Akram	理工学部	特別研究員	H28.4～H30.3

Ben			
藤木 大地	理工学部開放環境科学専攻	M1	H28.4～H28.9

研究項目

- PEACH3 システム開発と性能評価
- AiS 実証実験(宇宙物理アプリ)
- Partial Offloading 技術と FPGA 動的再構成技術開発

③「並列言語開発」グループ (村井グループ, 理化学研究所)

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
村井 均	国立研究開発法人 理化学研究所	研究員	H24.10～
中尾 昌広	国立研究開発法人 理化学研究所	研究員	H25.12～
岩下 英俊	国立研究開発法人 理化学研究所	リサーチアソシエイト	H27.4～
小田嶋 哲哉	国立研究開発法人 理化学研究所	特別研究員	H28.4～
辻 美和子	国立研究開発法人 理化学研究所	研究員	H29.4～
Lee Jinpil	国立研究開発法人 理化学研究所	特別研究員	H29.4～
下坂 健則	国立研究開発法人 理化学研究所	リサーチアソシエイト	H25.4～H27.3
中村 朋健	国立研究開発法人 理化学研究所	リサーチアソシエイト	H25.4～H26.3
安部 達也	国立研究開発法人 理化学研究所	特別研究員	H24.10～H26.3
安部 達也	国立研究開発法人 理化学研究所	特別研究員	H28.4～H29.3

研究項目

- XACC 言語仕様の設計
- XACC 処理系の開発およびチューニング
- XACC によるアプリケーション評価

④「アプリケーション開発」グループ (梅村グループ, 筑波大学)

氏名	所属	役職	参加時期
梅村 雅之	筑波大学計算科学研究センター	教授	H24.10～H30.3
藏増 嘉伸	筑波大学計算科学研究センター	教授	H24.10～H30.3
吉川 耕司	筑波大学計算科学研究センター	講師	H24.10～H30.3
日下 博幸	筑波大学計算科学研究センター	教授	H24.10～H30.3
重田 育照	筑波大学計算科学研究センター	教授	H24.10～H30.3
庄司 光男	筑波大学計算科学研究センター	助教	H24.10～H30.3
Mauro Boero	Strasbourg 大学, France	教授	H24.10～H30.3
鷹野 優	大阪大学 基礎工学研究科	助教	H24.10～H30.3
原田 隆平	筑波大学計算科学研究センター	研究員	H26.4～H27.3

鬼頭 宏任	筑波大学計算科学研究センター	研究員	H28.4～H30.3
三木 洋平	筑波大学計算科学研究センター	研究員	H26.4～H29.10
安部 牧人	筑波大学計算科学研究センター	研究員	H28.11～H29.10

#### 研究項目

- ・TCA 機構に基づくアプリケーション開発
- ・高度 GPU アプリケーション開発

#### (2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

PEACH2 上で GPU 向け GASNet の実装を行うことを目標に、米国 Lawrence Berkeley National Laboratory のシステムソフトウェア研究グループと共同研究を行い、先方が開発中の InfiniBand 向け GASNet/GPU と同等の API で互換性のある通信ライブラリを PEACH2 上に実装した。この研究を基に情報処理学会 HPCS2016 シンポジウムにおいて発表した論文が同シンポジウムの最優秀論文賞を受賞し、国際共著論文としての受賞となった。

また、AiS のコンセプトに共感を頂き、米国 Oak Ridge National Laboratory の Future Technologies Group の研究グループとの共同研究を開始する予定で、CREST 終了後も FPGA 間直接高速通信のシステムと、彼らが開発中の OpenACC を OpenCL に落とし FPGA で実行する OpenARC コンパイラと、我々の XscalableACC コンパイラを組み合わせ、最終的に XscalableACC が AiS として FPGA 並列実行できることを目標とした共同研究を開始する予定である。

### § 3 研究実施内容及び成果

#### 3.1 TCA システムソフトウェア開発(朴)グループ

##### (1) 研究実施内容及び成果

##### ● PEACH2 基本システムソフトウェア開発

PEACH2 の通信ドライバ及び制御方式について内部利用メモリ領域の見直し、同期処理やバッファリング等の詳細なチューニングを行い、通信性能を改善させた。DMA ディスクリプタモードでは、これまでディスクリプタをホスト側メモリに展開していたものを PEACH2 ボード搭載の DRAM 領域を用いることで通信レイテンシを短縮した。これらの結果、従来方式ではリモートノードの GPU 間通信の最小レイテンシが  $2.1 \mu$  秒であったものを  $2.0 \mu$  秒に短縮した。図 1-1 に H26 年 11 月時点でのレイテンシ及び通信バンド幅の性能を示す。これらの機能をユーザプログラムから自由に呼び出し、GPU を用いた演算加速プログラムにおいて、strong scaling の妨げとなる比較的小さなメッセージ交換を求めるアプリケーションに適用可能とした [原著論文 2,4,28,29]。

PEACH2 の API 及び通信性能改善に基づき、一般的なアプリケーションから利用可能な通信ライブラリとして、主な集団通信 (collective 通信) ライブラリを実装し、性能評価した。システム開発には筑波大学で稼働中の TCA 実験プラットフォームである HA-PACS/TCA (全 64 ノード) のうち、サブクラスタとして PEACH2 ボードで  $8 \times 2$  のトーラスタポロジに結合されている 16 ノードを用いた。

実装における性能向上ポイントとして、以下に傾注した。

- 集団通信において中継地点となるノード上で、GPU→GPU 通信, GPU→CPU 通信, CPU→GPU 通信等, PEACH2 において利用可能な通信ペアを適材適所的に多用し、最小通信時間を実現する。
- メッシュ/トーラスのトポロジであることを考慮し、例えばメッセージ長が増大するような通信 (allgather 通信等) においては、衝突を避けられない経路上でできるだけ短い通信を実行し、長メッセージでの衝突を避ける。
- レジスタモード通信と DMA モード通信を使い分け、通信時間を最小化する。

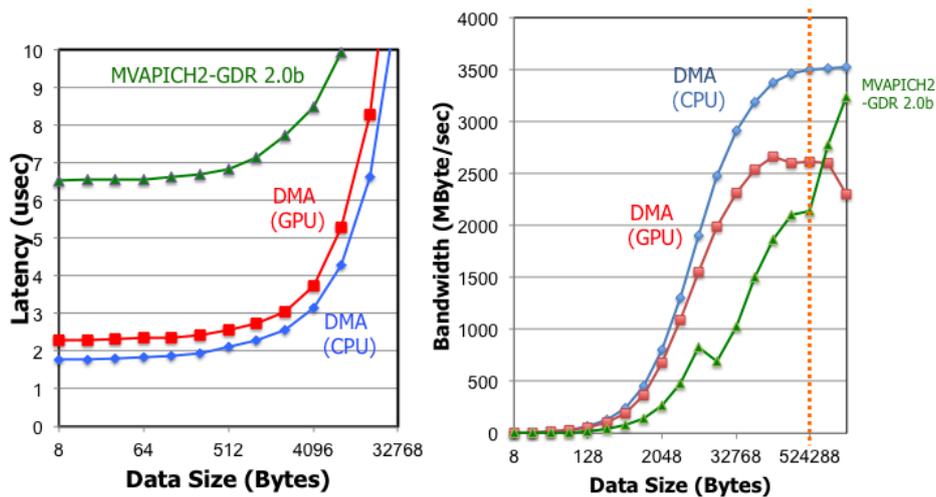


図 1-1 PEACH2 の通信レイテンシとバンド幅:リモートノードの CPU 間及び GPU 間通信と, MVAPICH2-GDR2.0b との比較

これらの結果, スカラーデータにおける allreduce 通信(主に反復計算の収束判定や CG 法における係数計算で利用)を InfiniBand に比べ 50%程度に短縮できた(図 1-2 参照)。一方, InfiniBand が基本的に fat-tree 網による無衝突スイッチ通信を実現できるのに対し, メッシュ/トーラストポロジである TCA 網では経路衝突等の影響のため, allgather 通信ではシステム規模が大きくなるに従い, InfiniBand との性能差が小さくなる, あるいはメッセージ長が大きい場合には逆転する状況が認められた(図 1-3 参照)。これらについては, より同期性が小さくなるようにドライバを改良し, また途中経路における通信方式の組み合わせとパラメータチューニングを進めることで改善していく予定である。

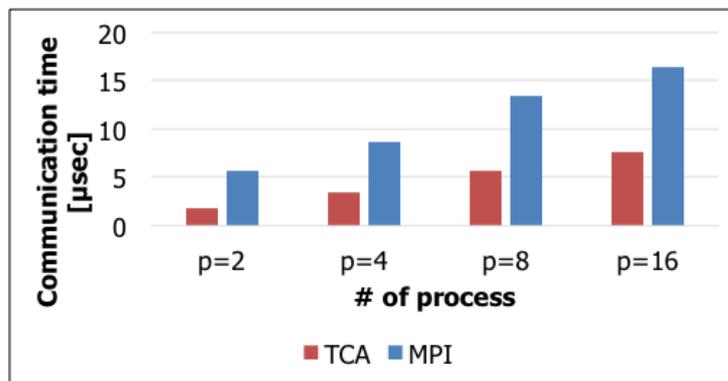


図 1-2 PEACH2 を用いたスカラーデータ(倍精度浮動小数)の allreduce 通信時間と InfiniBand による通信の比較(1 ノード当たり 1GPU, 1 プロセス)

●TCA アーキテクチャに基づく集団通信ライブラリを用いた基本アプリケーション性能評価

開発した TCA/PEACH2 向け通信ライブラリを用い, いくつかの典型的な基本アプリケーションを実装し, 性能評価を行った。

QCD は素粒子物理学における格子 QCD (Quantum Chromo-Dynamics)計算で, ノード内では行列計算, ノード間では隣接通信とリダクション通信を繰り返すアプリケーションである。PEACH2 の開発研究を始めて依頼, 我々は NVIDIA 社との共同研究を進めており, 特に NVIDIA 製 GPU 向けの高性能 QCD 計算ライブラリとして知られている QUDA の TCA 向け開発を行ってきた。QUDA コードのブランチとして, TCA の標準通信モデルであるリモート DMA write protocol を用いた RDMA 版を実装し, さらに MVAPICH2 向け(片方向通信利用)と TCA/PEACH2 向けの両バージョンを実

装した。小規模問題における strong scaling の結果を図 A-4 に示す。

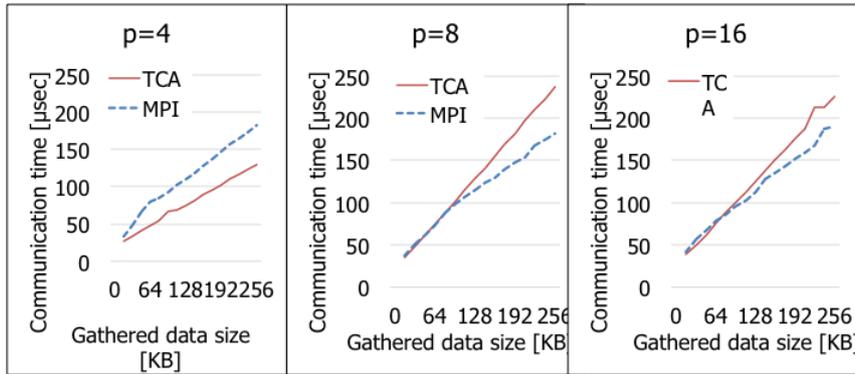


図 1-3 PEACH2 を用いたベクトルデータの allgather 通信時間と InfiniBand による通信の比較 (1 ノード当たり 1GPU, 1 プロセス。p はプロセス数=ノード数)

この結果において、まず我々が NVIDIA と共同開発した RDMA 版は、MPI 通信においても従来の point-to-point 通信版に比べて数%程度の性能向上を示している。これは、一部の通信オーバーラップによる通信隠蔽が作用していると思われる。さらに、RDMA 版の TCA 向け実装では、最高で MPI の場合の 51%の実行時間で済んでいる。しかし、この問題では規模が小さいため、GPU における処理効率が低下し、結果的に全体の処理時間が短縮されていない。一方、中規模問題を対象とした場合は、高速化は図れたが、通信時間の差が MPI と比べそれほど短縮されなかった。これらの結果より、今後の TCA アーキテクチャの適用においては GPU の処理効率が十分高く、通信ボトルネックとなるようなケースについての性能評価定式化が必要で、適用問題をより広範に求めていく必要があることが明らかとなった。[原著論文 11][学会発表 22]

次に CG (Conjugate Gradient)法であるが、これについては NAS Parallel Benchmarks 等に見られる標準的な疎行列の CG 法による反復計算を TCA API によって記述し、様々な行列とノード数において性能評価を行った。CG 法では疎行列として与えられる係数行列と暫定解ベクトルの行列ベクトル積と、暫定解ベクトルに対する数回のリダクション演算が処理の中心となる。本研究では、並列化を疎行列の一次元分割で行い、暫定解ベクトルは各反復の最初に全ノード間で allgather 通信によって全要素保持を行う方式を取った。各ノードにおける GPU 上の部分的な行列ベクトル積計算は cuSPARSE ライブラリを用いた。性能評価の一例を図 1-4 に示す。

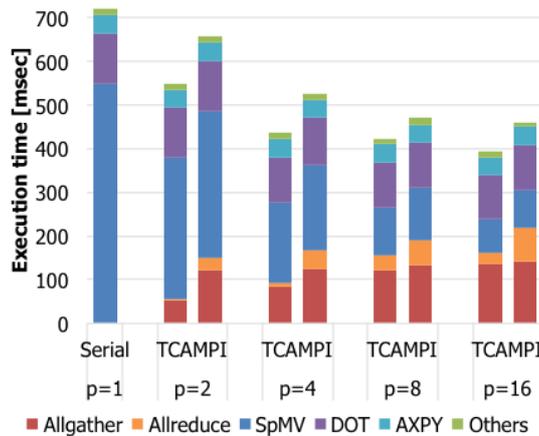


図 1-4 CG 法における 1 反復の処理時間、TCA (左側) と MPI (右側) の比較 (p=ノード数, 1 ノード当たり 1GPU, フロリダ大学 Matrix Market の nd6k 行列, 行列サイズは 18,000 行で非零要素数は約 700 万, スパース率は 2.13%)

図中、青色系が GPU 内計算部分、赤及びオレンジ色が通信部分に相当する。TCA による実装

が MPI に比べて 10~10% 高速であることがわかるが、これは主に allreduce 通信 (オレンジ色) の短縮によっており、allgather 通信 (赤色) はノード数の増加と共に差が小さくなっている。前述のように、TCA 通信がトーラストポロジなのに対し MPI (InfiniBand) は fat-tree であるため無衝突通信が実現できていることから、ノード数が増加すると両者の差が縮まるか逆転するためである。QCD と同様、問題規模やスパース率と通信ベクトルサイズの関係から、最適な通信方法をチューニングする必要がある。これは今後の課題である。[原著論文 89]

● PGAS 言語向け通信ライブラリ GASNet の GPU 向け実装と TCA 実装

GASNet は米国 LBNL (Lawrence Berkeley National Laboratory) で開発された、PGAS (Partitioned Global Address Space) モデル実装用の低レベル通信ライブラリである。分散メモリ上で MPI よりも軽い通信を実現する。これまで GASNet は CPU における並列通信のみを対象にしてきたが、近年、これを GPU を持つクラスタノードに対応させる拡張が LBNL によって進められている。LBNL の GASNet/GPU 開発チームと共同研究を行い、先方が InfiniBand を対象として進めているリファレンス実装と並行し、これを TCA 機構にも使い、両者の性能比較を行う研究を進め、国際会議共著論文及び国内会議共著論文の執筆を行った。TCA 機構の問題点の一つはプログラミング互換性であり、本来は TCA 専用の API を用いたアプリケーションあるいはライブラリの記述が必要であるが、本実装を用いることにより、GASNet/GPU の API で記述された処理系は原理的に TCA 上で実行できることになる。

TCA 上の GASNet/GPU (以下、GASNet/TCA) の設計・実装は、GPU からの通信要求を、CPU 上で実行されている通信デーモンで監視し、そこから発生する必要な通信を TCA の API を用いて発行することで、間接的に GPU からの TCA 要求を処理する。通信結果を返す必要がある場合は、同様の機構を用いて GPU に送る。これらは CUDA で提供されるピンダウンメモリ領域を使ったリングバッファを介して行われるが、通信データは TCA が提供する GPU 間リモート DMA を用いて送受信されるため、リングバッファが性能ボトルネックとなることはない。図 1-5 にリングバッファの基本構造を、図 1-6 に通信性能を最適化するために導入される 4 つの通信モードの様子を示す。現在の GASNet/GPU はリモート通信の対象 (ローカル通信エリアではなく) となる segment を 1 つだけ許している。これらの 4 つのモードは、この制約を意識し、ユーザの要求に応じて最小限のバッファリングで通信が完了するように工夫されている。

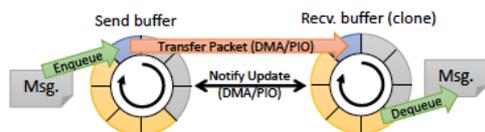


図 1-5 GASNet/TCA における GPU・CPU 間通信のためのパケット通信機構

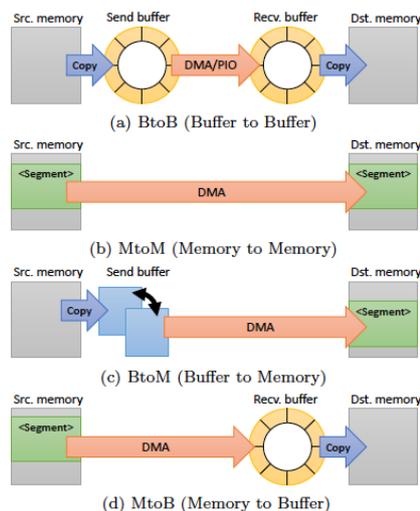


図 1-6 GASNet/TCA における 4 つの通信モード

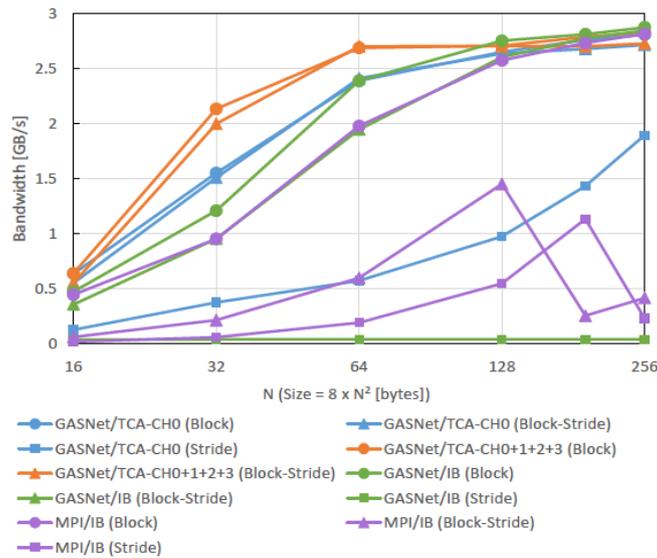


図 1-7 GASNet/GPU における 3 次元矩形領域の halo データ交換性能の比較

CCS における GPU クラスタ HA-PACS/TCA を用い、特に TCA が注目している多次元矩形領域における halo (隣接ノードとの接合面) データ交換について評価を行った結果を図 1-7 に示す。ここでは GASNet/GPU の API に基づき、3 次元矩形領域の halo データ交換を 1 次元方向 (連続領域通信)、2 次元方向 (ブロックストライド通信)、3 次元方向 (ストライド通信) の 3 種類の方向で通信した場合の性能を、MPI/InfiniBand と TCA の両者について比較している。図からわかるように、TCA では連続領域通信とブロックストライド通信でほとんど性能が変わらないのに対し、ブロックストライド通信をパッキングによってのみ処理可能な MPI/InfiniBand では後者の場合に大きく性能が低下していることがわかる。また、このモードでの通信に関しては、GASNet ではなく通常の MPI/InfiniBand を用いた場合よりも TCA がさらに良い性能を示している点も重要である。しかし、単純なストライド転送 (3 次元 halo) については、TCA であってもパッキングを用いないと性能が低下するため、そのオーバーヘッドの度合いは MPI/InfiniBand とほとんど同じである。ハードウェア性能の違いより、単純な連続通信あるいはパッキング通信では MPI/InfiniBand の方が性能が若干高いが、一般的な多次元 halo 通信において、TCA が常に高性能を示すことが確認された。[原著論文 88][学会発表 55]

● AiS コンセプトを実現するための FPGA 間高速通信技術

TCA コンセプトに基づく PEACH2 実装とその周辺整備並びにベンチマークと基礎的なアプリケーション評価は単純な GPU クラスタ実装に比べ大幅な性能向上を実現することが確認されたが、PEACH2 自体のハードウェアは研究開始時点では最先端であったが 5 年間の研究を通じ、他のコモディティテクノロジーの急速な発展によりそのアドバンテージに限界が見えてきた。加えて、PEACH2 が我々が開発した独自 FPGA ボードを用いていることと、外部通信を PCIe gen2 の external link に依存しているため、その点でもアドバンテージが小さくなっている。天野グループによる PEACH3 開発はこれを解決しているが、専用ボードであることで一般への適用が制限されるという点は本質的な問題であった。

この問題に対し、本研究の中間評価を踏まえ、研究期間後半では Altera (現在は Intel) 及び Xilinx の両社の一般的な FPGA 評価ボードを対象とすることにした。近年のこれらの FPGA では、光インターコネクットのインタフェースが備えられ、FPGA から直接光リンクを出すことが可能となっている。さらに近年、OpenCL によるプログラミングがサポートされ、従来の Verilog HDL による記述性の低さをカバーし、アプリケーションユーザが高位合成を用いた記述をすることが可能となってきた。これらは、FPGA 内に高速通信機構と部分演算加速を組み込むという、我々独自のコンセプトである AiS (Accelerator in Switch, 詳細は天野グループ報告参照) の実現に大きく貢献すると考え、

FPGA 間のダイレクト光通信と OpenCL からの制御という二点について実証した。

まず FPGA 単体がサポートできる最大の通信性能であるが, Xilinx Virtex7 UltraScale を用いることで, 最大 4 チャンネルの 100Gbps インターコネク트가ドライブできることを確認した。合計 400Gbps の通信性能は現在の InfiniBand EDR 等を遥かに凌ぎ, FPGA ネットワークによる超高速並列処理の可能性を高めるものである。図 1-8 に, 最大 4 チャンネルの通信実験結果を示す。なお, これは物理層での通信であり, 実アプリケーションではこの上にエラー対応等の層が追加される。[学会発表 57][ポスター発表 67]

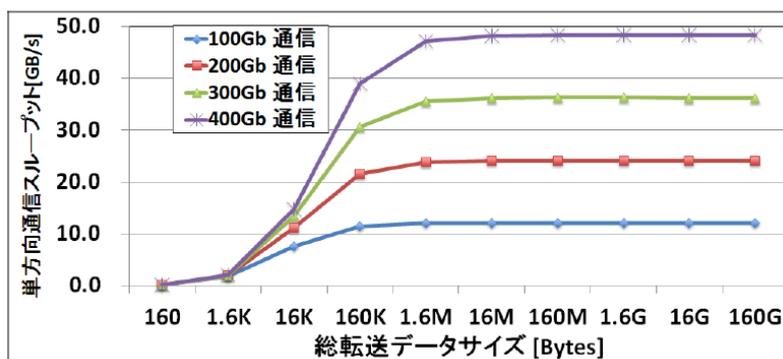


図 1-8 Xilinx FPGA 上の 100Gbps x 4channel での通信性能

次に, こういった高速通信を FPGA 上のアプリケーションから利用可能かという問題がある。上記実験は Verilog HDL で記述された回路上のものであるが, 我々が目指す AiS では, アプリケーションからこういった高速通信がアクセスでき, 最終的に超高速 FPGA ネットワークに支えられた演算加速プログラムを, 一般のユーザが記述できるようにするという目標としている。そこで, Intel 社から提供されている現時点での最高性能 FPGA である Arria10 の評価ボードを用いてこの実装を行った。

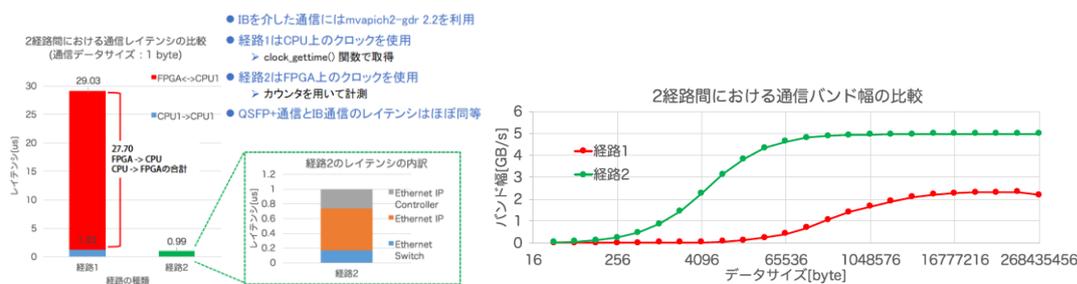


図 1-9 ノードを跨ぐ FPGA 間メモリコピー (pingpong 通信) における従来のホスト InfiniBand を用いた場合 (経路 1) と 40G 光 Ethernet 直接通信 (経路 2) の性能比較。左の図がレイテンシ, 右の図がバンド幅を示す。

FPGA を搭載した評価ボードでは, ボード上の各種ペリフェラル (メモリ, I/O ポート, PCIe 等) がどのように構成され, FPGA チップが実際にそれらとどのように接続されているかという情報が必要である。これは BSP (Board Supporting Package) と呼ばれ, 評価ボードベンダーから提供されている。OpenCL による高位合成コンパイラはこの BSP 情報とユーザのコードから, FPGA にロードされるバイナリを生成する。しかし, 一般的な光インターコネクタ装備の FPGA ボードでは, BSP 内にこのネットワーク情報が提供されていない。そこで, 我々は Intel 社の協力の下, BSP の修正を行い, OpenCL 記述からこれをアクセスすることを可能にした。さらに, 光インターコネクタ (用いた評価ボードでは 40Gbps x2channel) を操作するモジュールである Intel Ethernet IP に対し, これを OpenCL からライブラリとしてアクセス可能とするモジュールを作成した。これらを組み合わせることにより,

OpenCL から 2channel の 40G Ethernet を直接アクセスし、異なるノード上の FPGA 間で OpenCL レベルで pingpong 通信ができることを確認した。従来、ノード間の FPGA 通信を行うためには、送信側 FPGA から PCIe を通じてホスト CPU メモリにデータを送り、MPI/InfiniBand 等によってホスト間でデータを送り、受け取り側ノードのホスト CPU から PCIe を通じてその FPGA メモリにデータを送る、という非常に煩雑な処理が必要であった。特に、FPGA 内メモリを対象とした直接 InfiniBand 通信等は現時点でサポートされておらず、GPU における通信性能よりはるかに遅くなる。こういった従来手法と我々の OpenCL からのダイレクト光通信の性能差を図 1-9 に示す。特にレイテンシでは従来手法が 29  $\mu$  秒もかかっているのに対し、我々の方法では僅か 1  $\mu$  秒で済んでいる。

本研究の成果は、単に FPGA の光インターコネクが高速であることを示すだけでなく、独自モジュールの開発により、OpenCL で記述したアプリケーションレベルからの通信関数呼び出しを可能としたことで、実際にカーネル内に並列演算を記述し、そのカーネルからこれらの通信機能を直接呼び出す形で並列 FPGA アプリケーションの記述を可能としたことである。[学会発表 58]

#### ★研究成果の公開について

開発した BSP 及び OpenCL からの通信をサポートする Verilog HDL によるモジュール等の一式については、今後、筑波大学計算科学研究センターのホームページ、及び Github を通じて一般に公開する予定である。

本グループの研究は専用ハードウェア PEACH2 を用いた TCA コンセプトの実証から始まったが、最終的に CREST 研究としての成果公開を意識し、汎用 FPGA ボード上で実現可能な BSP や Verilog HDL、さらに OpenCL インタフェース等をソフトウェア資産として公開できるように準備中である。今後、エクサスケールコンピューティングにおいて、GPU 等の演算加速機構は限定されたアプリケーションではあるものの非常に大きな演算加速が期待される。その際、非常に些細な、GPU での演算加速が不可能な部分、例えば並列性が不足したり、不規則性が強く大規模 SIMD 実行に不向きであるような部分が、アムダール則によって性能向上の致命的なボトルネックとなってしまふ。本研究で提案する FPGA による AiS はこの問題に対する一つの解を与えると考えている。

### 3.2 TCA ハードウェア開発(天野)グループ

#### (1) 研究実施内容及び成果

##### ●PEACH3 プロトタイプ的设计・実装および評価

TCA の低レイテンシスイッチハブ PEACH2 はホストおよびボード間の接続に、PCI express (PCIe)を用いている。この PCIe は PEACH2 の開発時に標準的に用いられていた PCIe gen2 に基づいていた。しかし、プロジェクト開始時の H24 年にはより高いバンド幅を持つ PCI gen3 が標準になることが決まっており、高性能の PC や GPU を接続するためには、PCI gen2 部を PCI gen3 に変更した PEACH3 を開発する必要があった。当初の予定では、まずテストボードを開発して、転送試験等を経た後に本格的なボードを開発する予定であった。しかし、PCIe gen3 の普及が予想以上に早かったこと、および PEACH3 に利用可能な FPGA が、高価な Altera 社(現 Intel 社) Stratix V 以外には市販されなかったことにより、テストボードの工程を省いて PEACH3 ボードを開発することにした。このため予算を前倒し、H25、26 年度に早期に設計・実装を終了した。PEACH3 は、PCIe を gen3 にグレードアップするために、内部スイッチのビット幅を 128bit から 256bit に拡張し、DMA 転送の起動を内部ロジックから可能にする等の改良を行った。

開発した PEACH3 ボードを図 2-1 に示す。下部にホストに挿すためのカードエッジ、左にケーブルでノード間を用いて接続するためのコネクタを持っている。ケーブルは PEACH2 で用いられているものを流用している。PCIe は基本的に筐体内で使われるため、本ボードは、PCIe gen3 を用いて筐体間を接続した世界で初めての実装例として注目された[原著論文 48]。

H27 年に、基本的な転送性能の評価を行った結果、転送性能の評価を行い、レイテンシは PEACH2 と同等で、バンド幅は、PEACH2 に比べて最大で 1.5 倍、Infiniband を用いた MPI に比べると最大 3.4 倍の向上を実現していることが確かめられた。

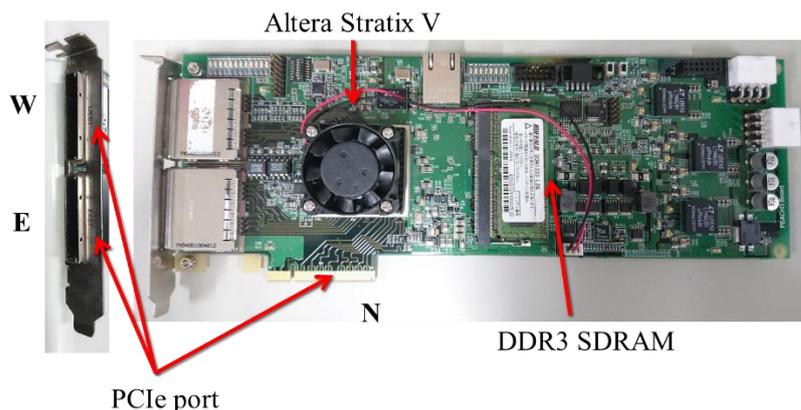


図 2-1 開発した PEACH3 ボード

中間報告では、以下の 2 点を明らかにするように求められた。(1) 実際のアプリケーションの実行時間にどの程度のインパクトがあるのか？(2) プログラムは、PEACH3 以外にもノード内ならば CUDA API, ノード間ならば MPI/Infiniband を利用可能である。これらの転送手段と PEACH3 をどのようにして使い分けるか？

この 2 点を明らかにするため、H28 年度には PEACH3 を用いてグラフの幅優先探索と、CG 法のプログラムを実行し、その結果を解析した。測定は、図 2-2 に示す 1 対 1 のノードで行なった。CPU は Intel Xeon E5-2680(Ivy Bridge) 2.8GHz, GPU は NVIDIA Tesla K40m を用いた。PEACH3 間は、互いのボードの PCIe gen3x8 の W ポートと E ポートを接続している。

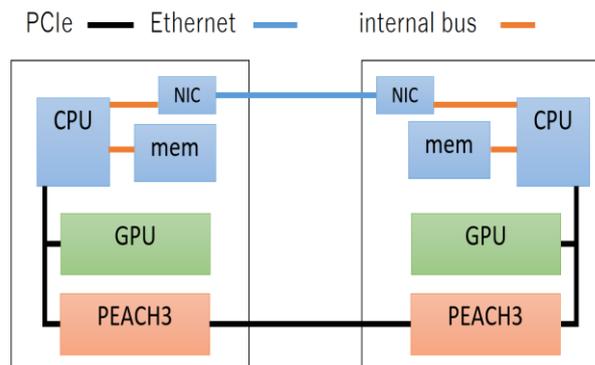


図 2-2 プログラム実行測定環境



図 2-3 PEACH2 との比較

図 2-3 に、1 回の探索に要した通信時間を PEACH2 と比較して示す。スケールは最も大きい 18 で、通信時間は 39% 程度の短くなっている。これが実際の幅優先探索の実行時間にどの程度影響を与えたのを示すのが図 2-4 であり、PEACH2 に比べて 20% 程度の性能向上を実現していることがわかる。図 2-4 には処理上の様々のデータ交換を PEACH3 で実行した様子を示すが、結局すべてを PEACH3 で実行した場合が最も性能が高くなっている。図中には MPI/Infiniband を用いた場合の結果も示している。

PEACH3 は、MPI/Infiniband に比べてどのデータサイズでも有利で、最大 1.5 倍程度の性能向上を達成している。一方、PEACH2 はスケールが小さい場合は PEACH3 と同等の性能を実現し、スケール 14 までは MPI/Infiniband より有利だが、それより大きなスケールでは逆転してしまう。この点が PEACH2 に対してバンド幅の大きい PEACH3 が有利な点である。この評価と CG 法の評価結果および個々の転送性能のグラフより以下の利用上のガイドラインを得た。

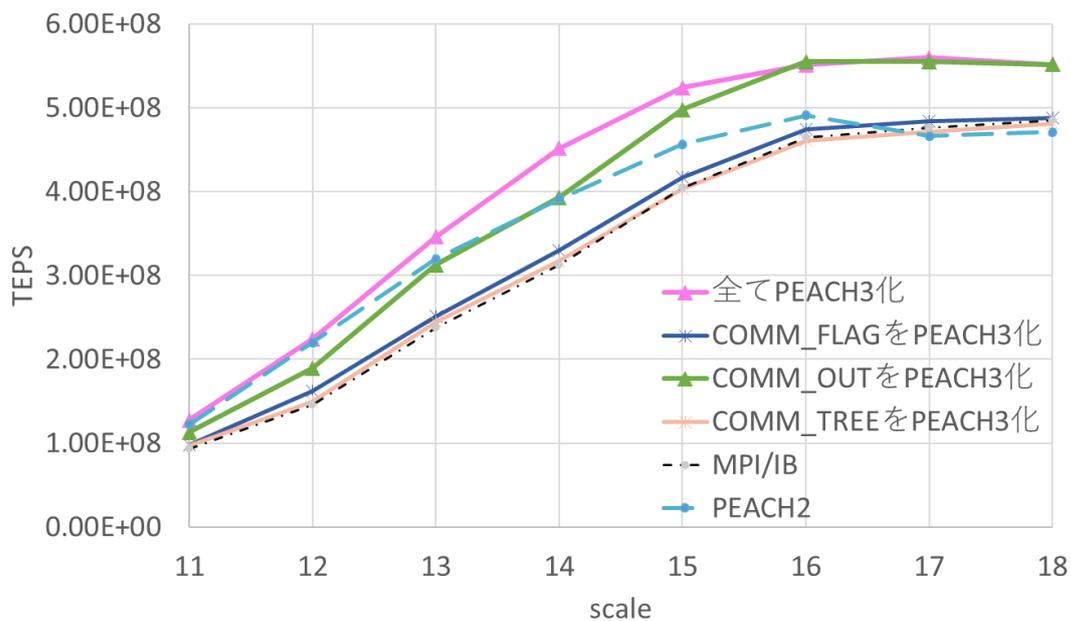


図 2-4 グラフの並列幅優先探索におけるスケールと性能  
(TEPS: Traversed Edge Per Second)

a) ノード内転送の場合:

a-1)GPU 間転送:転送データサイズが16KB 以内ならば, レイテンシは PEACH2/3 を用いた方が有利, バンド幅は転送データサイズによらず CUDA-API が有利。

a-2)CPU-GPU 転送:PEACH3 は, 転送データサイズが64KB 以内ならば CUDA-API よりも有利, PEACH2 は16KB 以内ならば有利。レイテンシは PEACH2/3 を用いた方が有利。

b)ノード間転送の場合: 転送データサイズが1MB まではレイテンシ, バンド幅共に, PEACH2/3 が有利。それ以上は MPI/Infiniband が有利。

すなわち, ノード間通信は1MB 以内, ノード内通信は CPU-GPU 間通信は 64KB 以内で PEACH3 を用いれば, MPI/Infiniband および CUDA-API を用いた場合に比べ, アプリケーションの性質によって程度は異なるものの, 確実に性能が向上する。PEACH2 では適応範囲が狭く, また, ガイドラインを守っても性能が向上しない場合があり, この点でも PEACH3 は優れていると言える[原著論文 73]。

PEACH3 は広く PC, GPU の接続に用いられている PCIe を用いて低遅延のネットワークを実現できる点が他の接続技術と異なる。本プロジェクトの中盤以降, IBM の低遅延リンク CAPI や GPU 同士を直接接続する NVLink など新しい接続方式が登場しており, これらは PEACH3 よりも高い性能を持っている。しかし, これらの接続網は IBM や NVidia の製品専用の傾向が強く, この点で PEACH3 の利点は存在する。PEACH3 の問題点はスイッチハブに相当する Stratix V FPGA と高速転送を行うための基板の価格が高すぎる点にある。将来の FPGA 製品の低価格化により, PEACH のアーキテクチャを製品化できる可能性は残されている。

#### ●アクセラレータインスイッチ (AiS) 機構の提案

PEACH2あるいは PEACH3 の FPGA 上の余剰ロジック資源を用いて, アクセラレータを実装することで, 転送中のデータに対して直接処理を行い, 結果をまたネットワークに転送することが可能である。このようにスイッチに組み込まれたアクセラレータを AiS (Accelerator-in-Switch)と呼ぶ。本プロジェクトでは開始当初から, 梅村グループで開発したアプリケーションの一部をスイッチハブ上で高速化する研究を行ってきた。

(a) H25 年度は、梅村 G の宇宙空間における輻射輸送・輻射流体シミュレーション中に行われるリダクション演算用のオフローディング機構 (REDモジュール) を実装し、実機による評価を行った。この機構は図 2-5 に示すように、DMA 転送により GPU のメモリからデータを取り込み、ツリー型の演算アレイを用いて、リダクション演算を行い、答えを GPU に戻す。PEACH2 の 1 ノードによる実機評価の結果、図 2-6 に示すように、1K バイトの転送サイズでは CPU でリダクション演算を行うのに比べて約 45 倍の性能向上を実現する。転送サイズが大きい場合、CPU-GPU 間の PCIe のバンド幅が PEACH2 より大きいため、その差が縮まる[原著論文 60]。

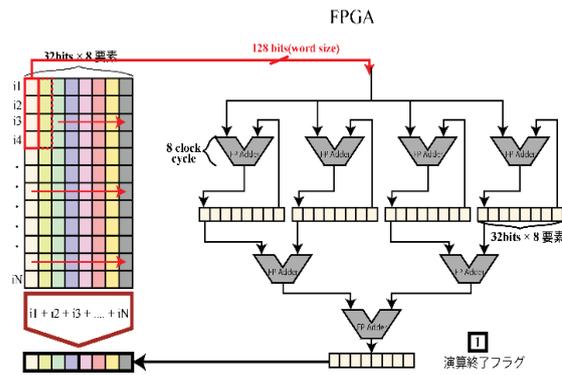


図 2-5 アクセラレータのブロックダイアグラム

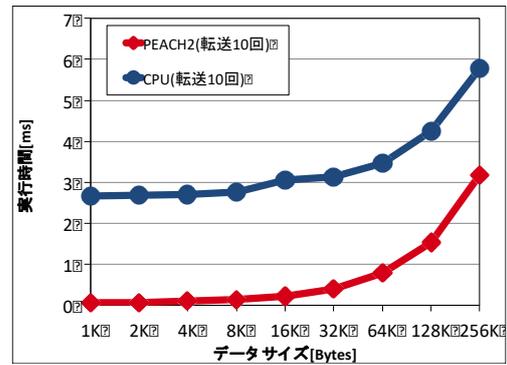


図 2-6 実行時間の比較

(b) H26 年度は、梅村グループの取り組んでいる問題の中から多体問題の解析で用いる LET (Locally Essential Tree) の実装を行った。多体問題の解析では、膨大な数の天体の影響力を、重要度を考慮して近似演算するためにツリー状のデータ構造を用いる。これが LET である。この Tree は GPU で作成することが困難であるため、ホスト上で作成し、ホストを経由して GPU 間で交換される。これを PEACH2 上で作成することで、ホストの負荷を低減し、データ通信のオーバーヘッドを低減することができる。この実装を PEACH2 の余剰ハードウェアを行った。LET の生成回路は図 2-7 に示す構造であり、FPGA 上のメモリを用いて、GPU からのデータをオンザフライで処理してツリーを生成する。距離判定回路は図 2-8 のようにやや複雑な計算を必要とするが、パイプライン構造により、スループットを落とさずに結果を生成できる。小規模なツリーの生成に必要な時間を見積もったところ、交信時間を含めると、この部分について 7.2 倍の性能向上が実現できることがわかった。この成果は国際学会 HEART2015 で Best Paper Award を受賞した[原著論文 57]。

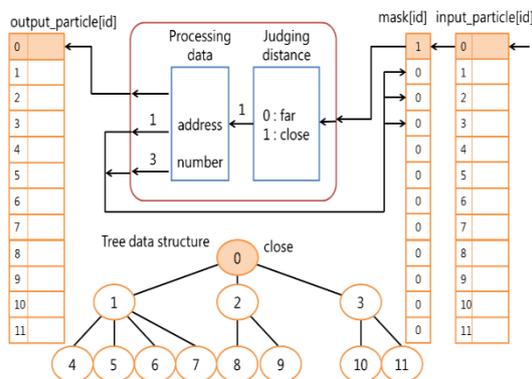


図 2-7 Locally Essential Tree の生成回路

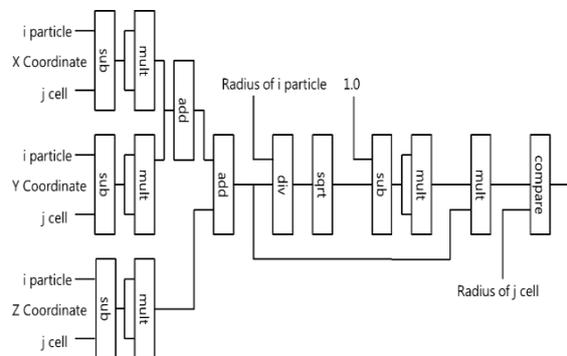


図 2-8 距離判定回路のパイプライン

(c) アクセラレータインスイッチ機構の汎用化

H25, H26 とPEACH2を対象にして、いずれもアドホックな実装を行ってきた。これらは、個別のアプリケーションの高速化へ向けて作りこんでおり、あくまでケーススタディであった。広いアプリケーションで容易に高速化が可能ないようにH27以降は汎用的なアーキテクチャの確立を目指した。開発対象もPEACH2からPEACH3に変更した。

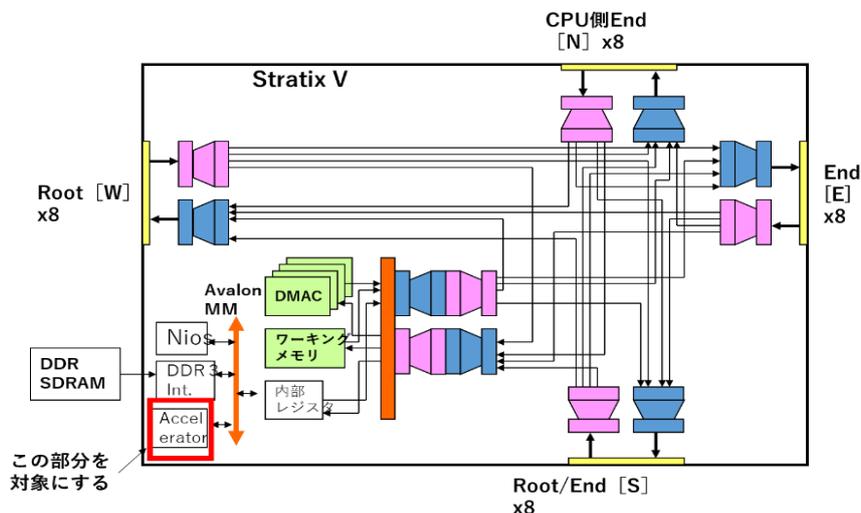


図 2-9 PEACH3 上での AiS 機構の実現

各種アクセラレータを搭載可能にするには以下の機能が必要である。

- (i) 一定の領域を区切ってスイッチ部と分離し、部分再構成によりスイッチとは独立に動作可能とする。アクセラレータをこの領域で動作するIP (Intellectual Property) の形で扱えるようにする。
- (ii) スイッチ、ホスト CPU, GPU とのデータ交換, アクセラレータの起動, 制御を行う一般的な手法の確立。

このうち(ii)については、図 2-9 に示すように、PEACH3上の Avalon MM バスを利用して、共有メモリと DMA 機構によりホスト CPU, GPU とデータ交換を行う手法を確立した。それぞれのアクセラレータは、PEACH3上のワーキングメモリおよびボード上の DRAM を共有し、ホスト、GPU から一定のアドレスに読み書きすることにより、アクセラレータの起動、DMA によるデータ交換、コンフィギュレーションを行うことを可能とした。次に、PEACH3上に独立したアクセラレーション用の領域を確保し、Altera の IP ベース設計 Qsys とバージョン管理機構を利用した部分再構成機構により複数の IP を切り替え可能にした。

図 2-10 は、(a)で開発したリダクション演算ユニット (RED) と (b)で開発した LET 生成回路 (LET) の二種類のアクセラレータを切り替え可能にしたレイアウトを示す。RED と LET は、共に PEACH3 上に搭載することは不可能であるが、100msec 程度の時間で、スイッチの動作を止めることなく切り替え可能である。アクセラレータの設計は PEACH3 のスイッチ部 (図 2-10 の下方の大きなスペースを占める) に影響を与えずに行うことができ、設計時間も、スイッチに直接組み込む場合の半分程度になる [原著論文 76]。この領域に収まる他のアクセラレータも同様な方式で組み込み可能であり、PEACH3 だけではなく、NetFPGA など他のボードにも適用可能である。

従来、スイッチ統合型のアクセラレータの研究は多く、Mellanox 社もリダクション演算モジュールをスイッチに組み込む製品を出荷している。しかし、これらはいずれもアプリケーションに特化したアドホックなもので、汎用アーキテクチャとなる AiS は今後のこの領域の研究のベースとなる位置を占めている。

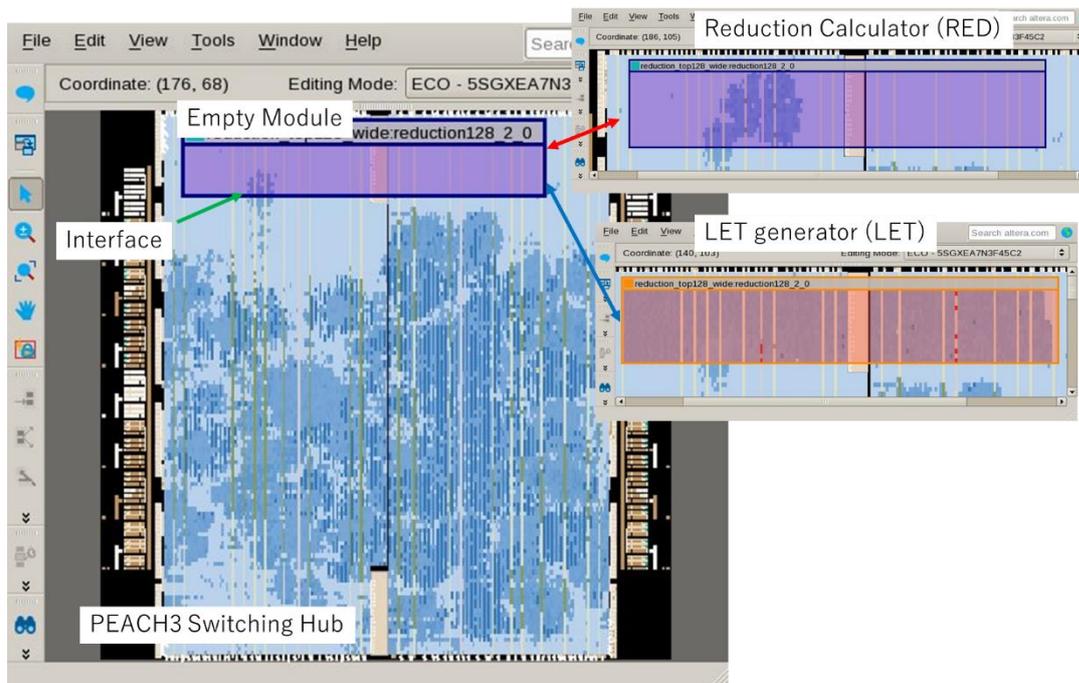


図 2-10 PEACH3 へ実装した場合のレイアウト図

### (3) アクセラレータのオフロードサポート環境

他グループが言語レベルの高位のプログラム環境、開発環境を研究しているのに対して、本グループでは、HDL に近い低位の開発環境を構築し、将来は他の環境との融合を視野に入れた研究を行った。

まず、PEACH2 の FPGA あるいはノードに接続されている GPU に、現在利用されているバイナリコードを自動的にオフローディングする Courier[原著論文 55]と Courier-FPGA[原著論文 56]を開発した。これは H25,26 年度より継続して行っており、H27 年で GPU と FPGA の両方に対してオフロードする機構が完成し、研究としてほぼ終了した。この研究成果は情報処理学会論文賞を受賞した[原著論文 59]。さらに H29 には、高位合成で記述したアクセラレーションモジュールの性能をあらかじめ見積もる機構を Imperial College London の Prof.Weyne Luk のグループと共同で開発した。

### 3.3 並列言語 XcalableACC 開発(村井)グループ (1)研究実施内容及び成果

#### ● XcalableACC 言語仕様の設計

XcalableACC 仕様 [原著論文 7, 48]は, 分散メモリ向け並列プログラミング言語 XcalableMP とアクセラレータ向けプログラミング言語 OpenACC を組み合わせた上で, マルチデバイスおよびデバイス間直接通信のための機能を付加したものである(表 3-1)。

表 3-1. XcalableACC 指示文の分類

XMP 指示文	ノード間の分散メモリ並列処理
OpenACC 指示文	デバイス上の並列処理
XACC 拡張	階層並列性, デバイス間直接通信

データ分散, オフロードおよび通信に関する XcalableACC の実行モデルを図 3-1 に示す。

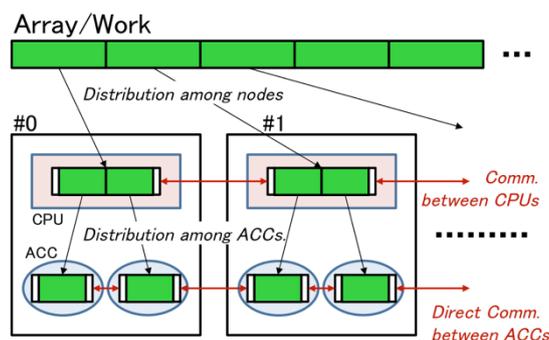


図 3-1. XcalableACC の実行モデル

特に, マルチデバイスおよびデバイス間直接通信に向けた機能は, 以下の XACC 拡張において提供される。

- **acc** 節: デバイス上のデータを通信対象にすることを示す。
- **device** 指示文: データ及び処理の分散の対象である「デバイス配列」を宣言する。
- **on\_device** 節: 各 ACC 指示文の動作の対象となるデバイス配列を指定する。
- **layout** 節: 配列のインデックスおよびループのイタレーションの, デバイス配列への分散方法を指定する。
- **shadow** 節: デバイス配列への分散に関するシャドウ領域(ステンシル)を指定する。
- **barrier\_device** 指示文: デバイス間のバリア同期を行う。

XcalableACC プログラムの例を図 3-2 に示す。

```

void foo(){
    #pragma xmp nodes p(4)
    #pragma acc device d(*)

    #pragma xmp template t(0:99)
    #pragma xmp distribute t(block) onto p

    float a[100][100];
    #pragma xmp align a[i][*] with t(i)
    #pragma xmp shadow a[1:1][0]
    #pragma acc declare copy(a) layout([*][block])
                        shadow([0][1:1]) on device(d)

    #pragma xmp reflect (a) acc

    #pragma xmp loop (i) on t(i)
    for (int i = 0; i < 100; i++){
    #pragma acc parallel loop layout(a[*][j+1]) on device(d)
        for (int j = 0; j < 99; j++){
            a[i][j+1] = 1;
        }
    }
}

```

図 3-2. XscalableACC プログラムの例

● Omni XscalableACC の開発

図 3-3 に示す通り, Omni XscalableACC は, 理研および筑波大で開発中の Omni XscalableMP をベースとするトランスレータとして実装される。Omni XscalableACC は, XscalableACC ソースコードを分散メモリ向けの並列化された中間ソースコード (OpenACC し自分を含む) へ変換する。バックエンドとしての OpenACC 処理系は, この中間ソースコードから演算加速装置向けの実行コードを生成する。ここで, OpenACC 処理系として PGI コンパイラまたは Omni の OpenACC 機能を用いる。

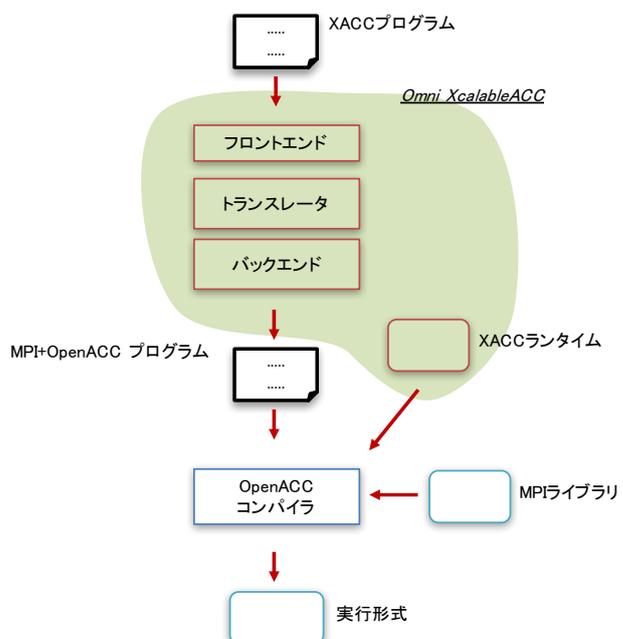


図 3-3. Omni XscalableACC の構成

### 成果(1): TCA 通信によるステンシル通信

姫野ベンチマークを、プロトタイプ XcalableACC コンパイラで記述し、HA-PACS/TCA において性能を評価した[原著論文 15]。その結果を図 3-4 に示す。これらの結果より、XcalableACC を用いることで、半分以下の行数で TCA 通信の活用することができ、OpenACC+MPI の場合に比べて高い性能を達成できることが確認された。

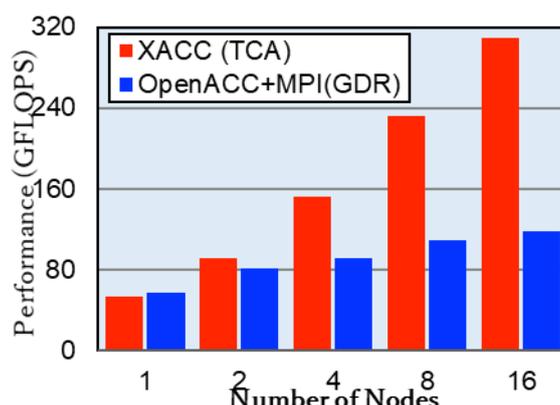


図 3-4. HA-PACS/TCA における評価の結果

### 成果(2): TCA/IB ハイブリッド通信

アプリケーションの通信の性質により、TCA による低レイテンシ通信と InfiniBand+MPI による高バンド幅通信を使い分ければ、より効率の良い通信を行える可能性がある。そのような「ハイブリッド通信」をユーザが直接に記述することは困難だが、指示文で指定された各通信に対し XcalableACC コンパイラが自動的に処理を行うことにより、ユーザはハイブリッド通信の効果を得ることができる。また、現在の TCA では、「サブクラスタ」をまたぐ通信は InfiniBand+MPI に依らなければならないことから、ハイブリッド通信が必要である [原著論文 10,54]。

ステンシル通信に対するハイブリッド通信の機能を実装、評価した。HA-PACS/TCA の 16 ノードを用いて、2 次元配列に対するステンシル通信の実行時間を測定した結果を図 3-5 に示す。ただし、ハイブリッド通信では、仮想的に 8 ノードずつをサブクラスタと見なし、それらをまたぐ通信を InfiniBand+MPI で行った。図において、「MV2GDR」が InfiniBand+MPI を示す。

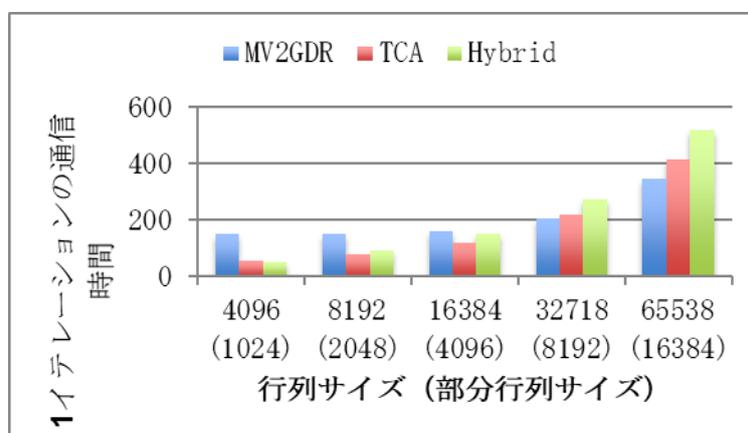


図 3-5. ハイブリッド通信によるステンシル通信の評価の結果

## その他の成果

- XcalableACC における片側通信機能の実装および改善を行った。
- XcalableACC の適用範囲拡大のため、ExaScaler 社のスーパーコンピュータシステムで採用されているアクセラレータ PEZY-SC 向けの OpenACC コンパイラの予備実装および評価を行った [原著論文 85]。
- アプリケーション/ベンチマーク評価

### 成果(1): KEK-QCD

KEK-QCD は格子ゲージ理論の実アプリケーションである Bridge++を元に作成したミニアプリケーションである。KEK-QCD は規則的な格子構造を持ったステンシルアプリケーションであるため、XcalableACC が持つグローバルビュー機能を用いることで、オリジナルの逐次コードを可能な限り変更しないように並列化した [原著論文 87]。また、比較のために MPI+CUDA および MPI+OpenACC を用いた KEK-QCD の実装も行った。

評価環境として、筑波大学の HA-PACS/TCA システムを用いた。強スケーリングで計測した性能結果を図 3-6 に示す。

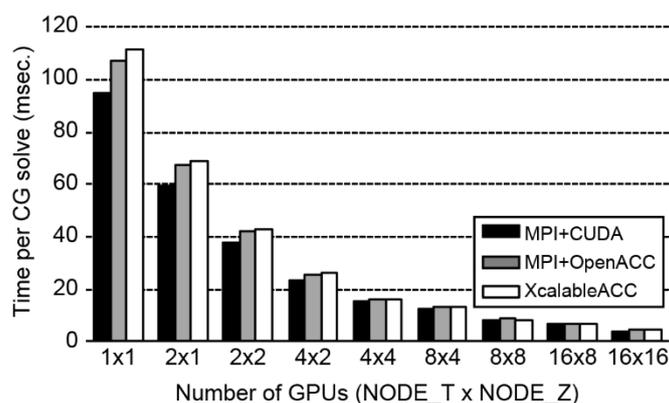


図 3-6: KEK-QCD の性能結果

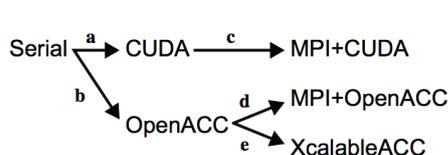
図 3-6 の横軸は GPU 数 (各 GPU で KEK-QCD の T 次元と Z 次元を領域分割している) であり、縦軸は KEK-QCD の中で行われる CG 法を 1 回実行するのに必要な時間である。この図から、XcalableACC と比較した MPI+CUDA の性能は 104~118%であり、MPI+OpenACC の性能は 99~104%であった。また、用いる GPU を増やすほど、性能差が小さくなることもわかった。

XcalableACC が MPI+OpenACC よりも性能が高い場合があることについて、その原因を調査した。その結果、ステンシル計算時に行ういくつかの処理において、XcalableACC の性能が優位にあることがわかった。MPI+OpenACC で記述したステンシル計算の GPU が処理するコードは OpenACC で記述している。その箇所は、XcalableACC では指示文で記述しており、その指示文の内部では XcalableACC のランタイムが呼び出されている。その XcalableACC のランタイムは最適化された CUDA で実装しているため、同じ箇所を OpenACC で記述したコードよりも XcalableACC の指示文は高い性能を発揮していることがわかった。

次に生産性の評価を行うため、逐次コードから各並列コードを生成するのに必要な DSLOC (Delta Source Lines of Code) を調べた。DSLOC は生産性を表す指標の 1 つであり、あるコードから別のコードに作成する際に必要な、追加した行、削除した行、変更した行の 3 つの行数を足し合わせたものである。DSLOC が少ないほど、生産性が高いといえる。本評価では、図 3-7 にある手順の通りに並列コードを作成した。図 3-7 では、まず逐次コードからアクセラレー

タに対する並列化を行い、次にクラスタシステムに対する並列化を行ったことを示している。

表 3-2: KEK-QCD の DSLOC



	a	b	c	d	e	a+c	b+d	b+e
DSLOC	552	22	280	201	138	832	223	<b>160</b>
Add	137	20	185	140	134	322	160	<b>154</b>
Delete	73	0	0	0	0	73	0	<b>0</b>
Modify	342	2	95	61	4	437	63	<b>6</b>

図 3-7: 並列コードの作成順序

表 3-2 に DSLOC の結果を示す。表 3-2 で用いているアルファベットは、図 2-4 で示した手順を示している。表 3-2 より、XcalableACC (b+e) の DSLOC は MPI+CUDA (a+c) と MPI+OpenACC (b+d) の DSLOC と比較して非常に少ないことがわかった。また、XcalableACC の DSLOC の 160 行中 154 行は既存コードに対する追加であるため、逐次コードのイメージを十分に保ったまま、並列化できていることもわかった。

成果(2): ARTED

ARTED は、実時間実空間密度汎関数理論に基づく電子動力学のマルチスケールシミュレータである。ARTED も KEK-QCD と同様にステンシルアプリケーションであるが、KEK-QCD とは異なり各ノードで閉じたステンシル計算になるため、隣接ノード間における袖通信を行う必要はない。しかし、袖通信以外の集合通信は発生するため、KEK-QCD と同様に XcalableACC の持つグローバルビュー機能を用いることで、元々の逐次コードを可能な限り変更しないように並列化した。

評価環境として、筑波大学の HA-PACS/TCA システムを用いた。強スケーリングで計測した性能結果を図 3-8 に示す。図 3-8 では、既存コードである MPI+OpenACC で作成された ARTED の性能も示している。

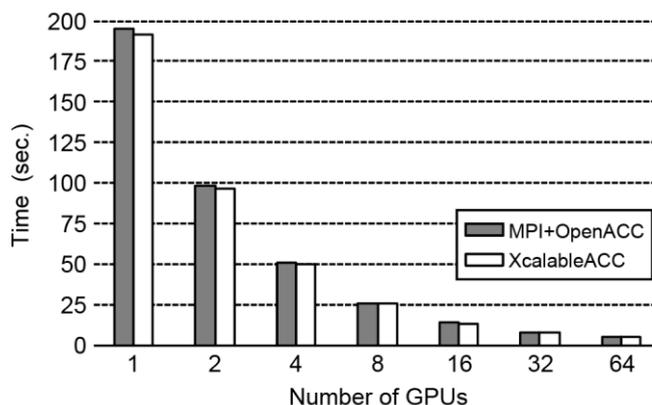


図 3-8: ARTED の性能結果

図 3-8 の横軸は GPU 数であり、縦軸は ARTED の時間発展部分の時間を示している。XcalableACC と比較した MPI+OpenACC の性能は 99~102% であり、XcalableACC と MPI+OpenACC の性能は、ほぼ同等であることがわかる。

その他の成果

以下に挙げるアプリケーションまたはベンチマークを XcalableACC により記述し、HA-PACS/TCA

において評価を行った。

- HPC Challenge Benchmark の STREAM と HPL [原著論文 86]
- 3次元流体コード Impact3d
- 幾何的マルチグリッド法コード HPGMG-FV
- 2次元流体コード CloverLeaf

★研究成果の公開について

- 公開済みソフトウェア

Omni XcalableACC ベータ版

- XcalableACC 言語のオープンソース処理系であり、TCA アーキテクチャに基づく環境では、それを利用する演算加速機構間の直接通信をサポートする。MPI と CUDA が動作する任意の GPU クラスタで利用可能であり、GPU クラスタ向けのプログラムを開発するあらゆるユーザが潜在的なターゲットである。
- 演算加速機構は、エクサスケールの計算機環境において主要な位置を占める。したがって、演算加速機構を備えたクラスタにおけるプログラム生産性を向上させる XcalableACC は、エクサスケールの実現および有効利用に関して大きく貢献できる。

### 3.4 TCA 向け計算科学アプリケーション開発 (梅村) グループ

#### ◆ 宇宙分野実施内容

##### (1) 輻射流体力学計算

宇宙初期における天体形成を正確に数値シミュレーションするため、輻射輸送計算コードを GPU を用いて高速化した。空間的に広がった光源からの輻射輸送を ray-tracing 法に基づいて計算する ART 法と非常に多数の光源からの輻射輸送を高速に計算できる ARGOT 法を合わせたシミュレーションコードを MPI でノード並列化し、さらに CUDA を用いて GPU による高速化を行った。ART は Multiple-Wave-Front 法による並列化を行なった。また、輻射輸送計算と流体力学計算を結合し輻射流体シミュレーションコードを開発し、点光源と拡散光子による光電離問題のシミュレーションを遂行し (図 4-1)、宇宙初期における宇宙再電離や原始銀河形成研究の準備を行った。更に、FPGA を用いた ART 法計算コードの高速化のため、計算機工学分野と連携し、コアとなる指数関数計算部分のオフローディングの実験を行った。

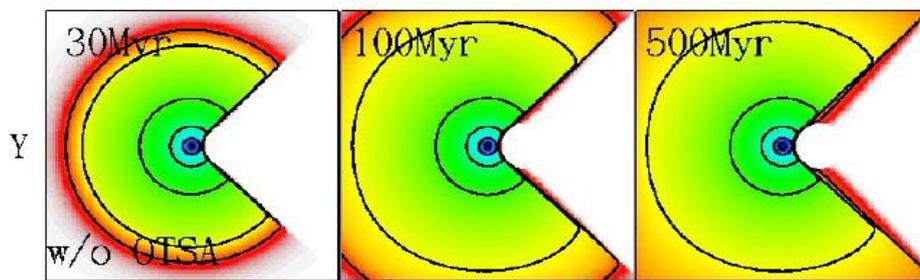


図 4-1 : 高密度ガス雲の近傍に置かれた光源による電離領域の伝播

##### (2) 重力多体粒子系計算

宇宙物理学の研究で広く用いられている重力多体計算に用いるための Tree コード Tree コードを GPU により高速化した。ここでは、interaction list 方式と on-the-fly 方式を warp 内で共有する方法をとり、interaction list を順次構築し、近ければセル or 粒子を計算リストに追加、遠ければセル群を判定リストに追加する。そして、計算リストのサイズがある程度大きくなれば、重力計算を行う。これにより、ベクトル化、グループ化の

恩恵を受けられるが、判定リストの正確なサイズは予測不可能なので、グローバルメモリへの退避も必要となる。また、**block time step** を採用することで全体の計算量を削減し、また複数の関数の実行時間を監視しながら動的な最適化を施すという自動最適化も行った。これらを実装し、**GOTHIC** (Gravitational Oct-Tree code accelerated by **H**ierarchical time step **C**ontrolling) コードを開発した。本研究による成果については、国際会議“Perspectives of GPU computing in Science”において口頭発表し、また学術論文誌 *New Astronomy* 誌に Miki & Umemura (2017) として発表した。**GOTHIC** は、自動最適化の採用により、粒子分布の時間発展に応じて実行構成が自動的に更新されていくため、実際の宇宙物理学の研究に適用しやすい実装となっている。**Fermi**, **Kepler**, **Maxwell** 世代を代表する GPU を用いて性能評価を行った結果を、図 4-2 に示した。直接法によって得られた重力からの誤差の関数として 1 ステップあたりの実行時間をプロットしたところ、先行研究でも採用されている一般的な実装 (図中の白丸) に比べて 5-10 倍程度の高速化が確認できた (図中の赤丸)。また、先行研究である Bédorf et al. (2012, 2014) による公開コード **Bonsai** と性能を比較した (図中の青三角) 結果、**block time step** を採用した **GOTHIC** の方が **Bonsai** よりも高速であることが確認できた。GPU を用いた並列ツリーコード **Bonsai** は、SC14 におけるゴードン・ベル賞のファイナリストにも選ばれており、高速に動作することが知られている。

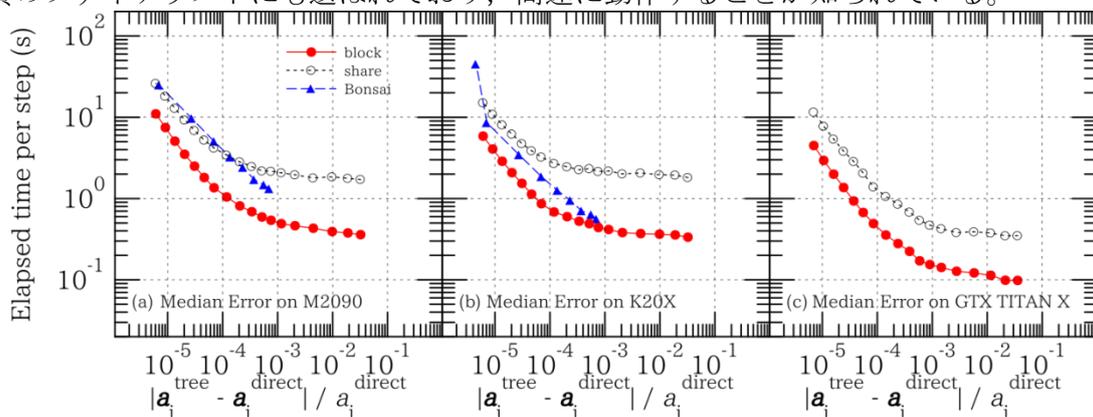


図 4-2 : Tree code の性能評価の結果。

高速化の効果が特に大きかったのは **block time step** の採用であり、一般的に採用されている **shared time step** と比較して 2-6 倍程度の高速化が達成できた (図 4-3)。図の横軸はツリー法による重力計算の精度を制御するパラメータであり、銀河スケールの計算であれば  $10^{-2}$  程度に取っておけば十分である。従って、現実的な計算を行った際には **block time step** の導入によって 3-5 倍程度の高速化が期待できる。

ストロング・スケーリングの改善に取り組むためには、通信性能の向上だけではなく、GPU 内の問題規模が小さくなった際に単体性能の劣化を抑制する性能最適化も重要である。先行研究で開発されてきた GPU を用いたツリーコードでは、実装の簡単な一次元並列化がなされてきたが、本研究では粒度が小さくなった際にもより演算

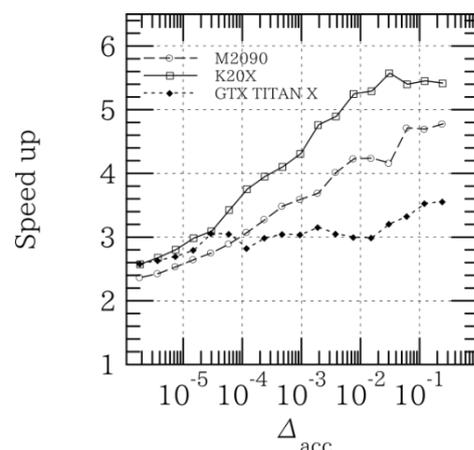


図 4-3 : Block time step による速度向上率

性能を維持しやすい二次元並列化を施した。その結果、 $N=10^5$  程度以上の領域においては全世代の GPU で良好なスケーリングが達成できた (図 4-4)。つまり、TCA 機構を利用した通信最適化に取り組むための前準備が完了したと言える。

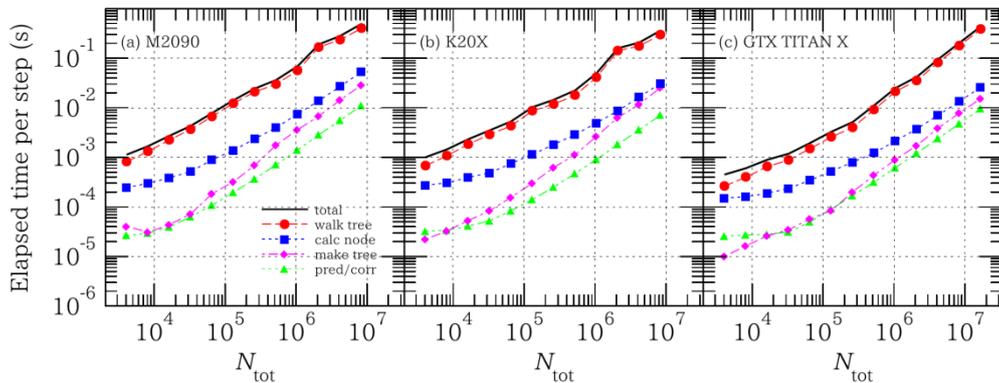


図 4-4：実行時間の粒子数依存性。

また、ツリーコードの性能や block time step による加速率は粒子分布に依存するため、宇宙物理の研究で用いられる粒子分布を生成した上で性能評価を行う必要がある。そのためには長時間安定な粒子分布を生成する必要があり、本研究では特に銀河を念頭に置いた多成分力学平衡分布生成コード MAGI (MAny-component Galaxy\_INITIALIZER) を開発した。MAGI についてはソフトウェアの公開準備も進めた。

#### ◆ 素粒子分野実施内容

##### (1) マルチスケールの物理の計算

研究目的は、「格子 QCD による原子核の直接構成とその諸性質解明」である。GPU 加速部分は大規模疎行列線形方程式の求解である。典型的計算は、格子サイズ  $96^4$ 、12 ノード 48GPU ジョブであり、TCA により 1.5 倍の性能向上を達成している。また、2+1 フレーバー QCD における物理点での軽原子核の束縛エネルギー計算を実行した。

##### (2) 有限温度・有限密度の物理の計算

研究目的は、「有限温度・有限密度 QCD における相構造解析」である。GPU 加速部分は密行列の行列積演算である。典型的には、格子サイズ  $10^3 \times 6 \sim 24^3 \times 6$  の計算を数ノードジョブで実行する。本年度は、3 フレーバー QCD から 2+1 フレーバー QCD へと拡張を行った。われわれは、まず 3 フレーバー QCD の計算結果を用いた reweighting 法によって、3 フレーバー QCD の臨界点近傍の臨界終線の振る舞いを調べた。図 4-5 は、 $(m_n)^2 - (m_\pi)^2$  平面における SU(3) 対称点近傍の臨界終線の振る舞いをプロットしたものである。紫色の直線は SU(3) 対称な点を表しており、それを横切る臨界終線の傾きは理論的に -2 になるはずであるが、われわれの結果はそれを再現することに成功した。

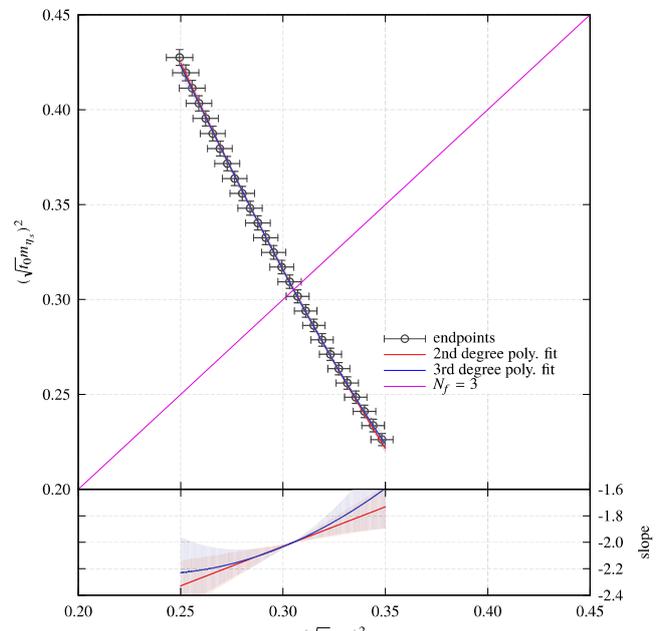


図 4-5： $(m_n)^2 - (m_\pi)^2$  平面における臨界終線。直線は SU(3) 対称点 ( $m_n = m_\pi$ ) を表す。

◆ 気象学分野実施内容

T2K 筑波で開発してきた建物解像 LES 気象モデルを PGI CUDA Fortran を利用して GPU 化を進め、HA-PACS 上で性能評価を行った。LES 計算のホットスポットである圧力解法に用いる疎行列計算の GPU 化を進めた。また、GPU 化した LES 全体での実行時間を評価した。課題であった I/O を Parallel NetCDF (WRF と同じ) にすることでデータ書き込み時間を縮減することに成功した。データフォーマット変換も不要になった。課題であった BiCGSTAB の GPU 化もほぼ完了した。

また、GPU コード版とは別にある MPI コード版の LES を OpenMP/MPI コードに変更し、OpenACC コード化が必要になったときに備えるようにした。City-LES の境界条件を改良することで、WRF とのネスティング (WRF の結果を境界条件に用いて LES を動かす) を可能にした。WRF を初めとする気象モデルは、乱流をパラメタライズしているため、WRF の結果をそのまま LES の境界条件に使うことはできない。そこで、本研究では、乱流成分生成用の LES モジュールを作成することで、乱流成分と WRF の結果の両方を考慮した境界条件を与える手法を導入した。この改良により、これまで理想計算しかできなかった City-LES が、現実計算ができるようになり、実際の大気場のシミュレーションや、実在都市での応用研究ができるようになった。また、都市気象モデルの実行時間のうち約 30% を占めるポアソン方程式求解部分の高速化に着手した。単精度マルチグリッド前処理 + Orthomin(1)法が最も高速であることが分かった。

◆ 物質・生命科学分野実施内容

(1) 分子動力学計算に基づく効率的構造サンプリング手法の解発と GPU 化

タンパク質の折りたたみは、通常の分子動力学(MD)シミュレーションで追跡可能な時間より長時間の確率過程において観測される「レアイベント」である。我々は、(1)「構造変化を誘起する可能性が高い初期構造 (シード) の選択」、(2)「選ばれたシードに対して速度を再分配した短時間 MD を実行」の 2 つの過程を 1 サイクルとする、構造サンプリング手法を開発してきた。鍵となるのは、如何にして適切なシードを選択するか? にある。タンパク質は多自由度複雑系であるが、高次元の反応座標空間上に複数の高い密度分布の準安定状態 (クラスタ) が存在し、大きな構造変化の際には異なるクラスタ間を遷移する。低い密度分布の疎な領域はクラスタの淵 (時には 2 つのクラスタの間) に存在することから、低い密度分布の状態を集中的に選択することで構造変化を誘起することが期待できる。情報科学的にクラスタに属さない疎な領域は、「はずれ値」あるいは“Outlier”と呼ばれる。我々は、「はずれ値」に対応する構造を検出し、初期速度再配分による短時間 MD を用いて構造サンプリングする手法(Outlier FLOODing (OFLOOD) 法)を提案した [原著論文 69]。

図 4-6 に、OFLOOD 法の適用例として、小タンパク質 Villin (35 アミノ酸残基) のフォールディング経路抽出過程を示す。ここで、2 つのセグメント (A) Helix1-Helix2 と (B) Helix2-Helix3 の天然構造に対する平均自乗変位 (RMSD) を反応座標とした。完全に伸びきったアミノ酸鎖から出発して、OFLOOD 法による構造サンプリングを 20 サイクル繰り返した。実際の MD 計算では、溶媒効果を誘電体でモデル化した GB/SA 法を用いた。図 4-6 には、「はずれ値」(黒点) と MD の軌跡の射影 (赤点) を示されている。サイクルを繰り返すごとに、「はずれ値」が分布の端の領域を広げていき、10 サイクル程で Villin の天然構造をサンプルできていることが分かる。最終的な X 線構造からの最小

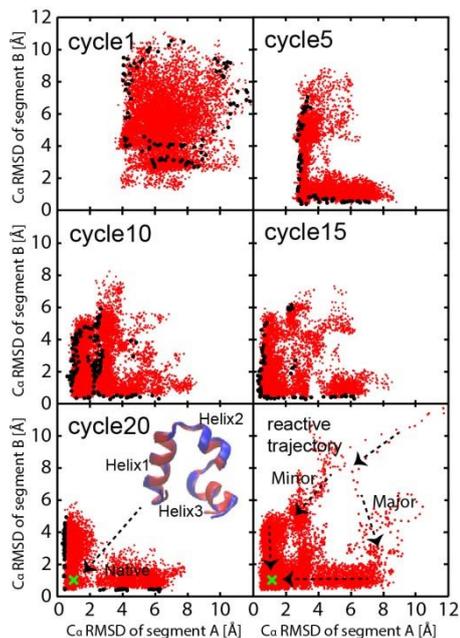


図 4-6: OFLOOD による Villin の folding 経路探索

$C_{\alpha}$  RMSD は  $0.60 \text{ \AA}$  であり、極めて精度よく天然構造をサンプルできた。更に、先行研究では抽出できていなかった副フォールディング経路(図右下)もサンプルできた。計算効率として、天然構造をサンプルするまで( $C_{\alpha}$  RMSD  $< 1.0 \text{ \AA}$ )の合計の計算時間が  $135.6 \text{ ns}$  であり、先行研究のレプリカ交換 MD( $8 \mu\text{s}$ )と比較して、非常に効率的にフォールディング経路を抽出できた。我々の方法は数百 ns 程度の計算時間で、D.E. Shaw らの MD 専用計算機 ANTON を用いた  $\mu\text{s}$  オーダーのシミュレーションと同程度の精度で天然構造をサンプルできており、構造・経路探索において有力な方法になることが期待される。これらの成果に関して、特許 3 件を申請している。今後は開発した、GPGPU 化した分子動力学計算プログラムである **psygene-G** [原著論文 40] に実装することで、高速なタンパク質構造サンプリングを達成する。

## (2) フラグメント分子軌道法の GPU クラスタへの実装

蛋白質などの巨大分子の電子状態計算を解く代表的な手法として、フラグメント分子軌道(FMO)法がある。FMO 法は、大きな分子系をフラグメントに分割し、各フラグメントに対して解かれた電子状態から全系のエネルギーを決定することで、計算コストの問題を回避する。OpenFMO は、稲富らによって開発された Hartree-Fock(HF)レベルの FMO (FMO-HF) 計算を行うプログラムで、MPI+OpenMP ハイブリッド並列で動作する。我々は、これまで、OpenFMO の FMO-HF 計算ホットスポットを CUDA で実装し、GPU クラスタを用いて高速な FMO 計算を実行することに成功してきた。一方、現在の固体や分子の電子状態計算では、HF 法よりも精度の高い密度汎関数理論(DFT)を用いることが一般的になっている。そこで、この研究では、DFT レベルの FMO(FMO-DFT)計算が行えるように、DFT コードを OpenFMO に MPI + openMP ハイブリッド並列で実装し、その性能評価を行った。

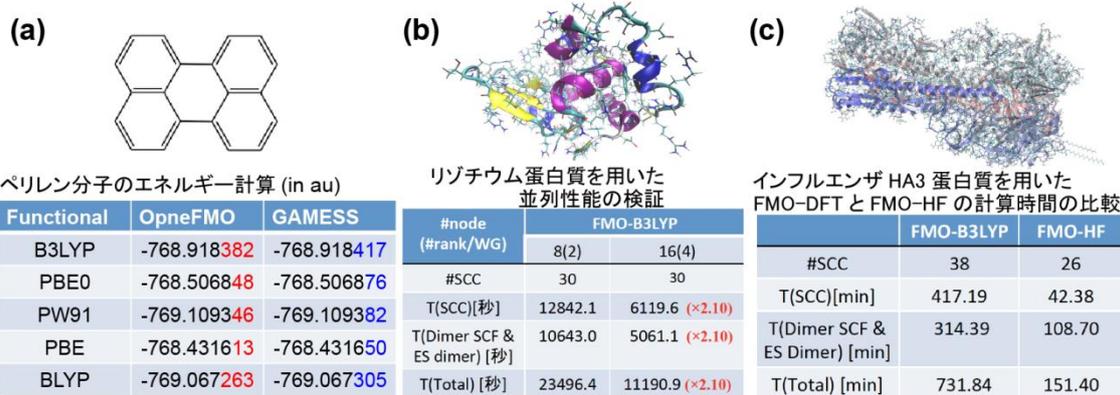


図 4-7 (a) ペリレン分子(b)リゾチウム蛋白質(c)インフルエンザ HA3 蛋白質, に対する DFT 版 OpenFMO プログラムのベンチマーク計算(基底関数は 6-31G(d)を使用)

DFT コードの交換相関汎関数ポテンシャルは、実際の分子計算で一般的に用いられる、一般勾配法汎関数 BLYP, PW91, PBE と、混合汎関数 B3LYP, PBE0 を実装した。まず、各フラグメントの電子状態を解くルーチン(スケルトンプログラム)を用いて、正しく DFT 計算が実行されるかを確認した。図 4-7 (a) にはペリレン分子を用いた計算例で、DFT 版 OpenFMO スケルトンプログラムが、汎用量子化学計算プログラム GAMESS の電子状態エネルギーを十分に再現していることが分かる。

次に、リゾチウム蛋白質(1,961 原子, 57 フラグメント)を用いて、DFT 版 OpenFMO プログラムが正しく MPI + OpenMP 並列動作することを確認した。図 5(b)は、HA-PACS ベースクラスタ上で、1 ノード当たり 4MPI ランクを 4OpenMP スレッド環境で FMO-B3LYP / 6-31G(d)計算を実行した例である。16 ノード計算が、8 ノード計算に較べて正しくスケール(2 倍の高速化)していることが分かる。

最後に、インフルエンザ HA3 蛋白質(23,460 原子, 721 フラグメント, 澤田敏彦(産総研)らによって作成)を用いて、DFT 版 OpenFMO プログラムの超並列計算が正しく動作する

ことを確認した。図 4-7(c)では、HA-PACS ベースクラスタ上で、1 ノード当たり 4MPI ランクを 4OpenMP スレッド環境で起動し、64 ノード(計 256MPI ランク・GPU256 台)から FMO-HF/6-31G(d)と FMO-B3LYP/6-31G(d)計算を実行した場合の、計算時間を比較している。FMO-DFT 計算は正しく完了するが、FMO-HF 計算と比較すると 5 倍程度遅い。これはまだ、FMO-DFT 計算のホットスポットが CUDA で実装されていないため、FMO-HF 計算のように GPU によって加速されないからである。

#### ★研究成果の公開について

本テーマで開発した、GPU 版 HF 行列計算ルーチンは、九州大学を中心として開発されている OpenFMO の一部に組み込まれ公開される予定である。このルーチンは、FMO 計算の中でも特に処理の思い HF 行列処理を GPU 化によって高速処理するため、FMO を利用するユーザーに幅広く貢献すると考えられる。

## § 4 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 19 件, 国際(欧文)誌 71 件)

1. 扇谷豪, 三木洋平, 朴泰祐, 森正夫, 中里直人, “計算宇宙物理のための GPU クラスタ向け並列 Tree Code の開発と性能評価”, 情報処理学会 ACS 論文誌, Vol.6, No.3, pp.58-70, 2013.
2. 塙 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, “Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに基づく GPU クラスタの構築”, 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2013 論文集, 2013.
3. 扇谷豪, 三木洋平, 朴泰祐, 森正夫, 中里直人, “重力多体系用 Tree Code の並列 GPU 化による計算加速”, 2013 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2013 論文集, 2013.
4. 塙 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, “Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに基づく GPU クラスタの構築と性能予備評価”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.6, No.4, pp.14-25, 2013.
5. 塙 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, “Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに基づく GPU クラスタの構築”, 先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2013 論文集, 2013.
6. 梅田 宏明, 塙 敏博, 庄司 光男, 朴 泰祐, 稲富 雄一, “フラグメント分子軌道法における Fock 行列計算の GPGPU 化”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), 6, 4, 26-37 (2013).
7. 小田嶋 哲哉, 朴 泰祐, 佐藤 三久, 塙 敏博, 児玉 祐悦, Raymond Namyst, Samuel Thibault, Olivier Aumage, “GPU クラスタ向け並列言語 XMP-dev における GPU/CPU 動的負荷分散機能”, 2014 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2014 論文集, 2014.
8. 梅田宏明, 塙敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 重田育照, “GPGPU クラスタ上での FMO 計算の性能評価”, Journal of Computer Chemistry Japan (invited letter) 13, 323-324 (2014).
9. 藤田典久, 藤井久史, 塙敏弘, 児玉祐悦, 朴泰祐, 藏増嘉伸, Mike Clark, “GPU 向け QCD ライブラリ QUDA への TCA アーキテクチャの適用”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.8, No.2, pp.25-35, 2015.
10. 小田嶋哲哉, 朴泰祐, 塙敏博, 児玉祐悦, 村井均, 中尾昌広, 田淵晶大, 佐藤三久, “アクセラレータ向け並列言語 XcalableACC における TCA/InniBand ハイブリッド通信”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol. 8, No.4, pp. 61-77, 2015.
11. 松本和也, 塙敏博, 児玉祐悦, 藤井久史, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構 TCA による GPU 間直接通信における Collective 通信の実装と性能評価”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), Vol. 8, No.4, pp. 36-49, 2015 年 11 月.

12. 松本和也, 埜敏博, 児玉祐悦, 藤井久史, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構 TCA を用いた GPU 間直接通信による Collective 通信の実装と性能評価”, 2015 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2015) 論文集, 2015.
13. 津金佳祐, 朴泰祐, 村井均, 佐藤三久, William Tang, Bei Wang, “PGAS 言語 XcalableMP のハイブリッドビューによる核融合シミュレーションコードの実装と評価”, 2015 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2015) 論文集, 2015.
14. 神谷克政, 重田育照, “酵素による人工物質の分解反応シミュレーション”, 『シミュレーション』小特集 34, 6 (2015).
15. 田淵晶大, 中尾昌広, 村井均, 朴泰祐, 佐藤三久. “演算加速機構を持つクラスタ向け PGAS 言語 XcalableACC の評価”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol.9, No.1, pp.17-29, 2016 年 3 月.
16. 梅田宏明, 埜敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 重田育照, “OpenFMO における 4 中心クーロン相互作用項計算の GPGPU 化の試み”, Journal of Computer Chemistry Japan (invited letter) 14(3), 69-70(2015).
17. 佐藤賢太, 藤田典久, 埜敏博, 松本和也, 朴泰祐, Khaled Ibrahim, “密結合並列演算加速機構 TCA による GPU 対応 GASNet の実装と評価”, 2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2016) 論文集, 2016.
18. 廣川 祐太, 朴 泰祐, 佐藤 駿丞, 矢花 一浩, “電子動力学シミュレーションのステンシル計算最適化とメニーコアプロセッサへの実装”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol. 9, No.4, pp. 1-14, 2016.
19. 廣川祐太, 朴泰祐, 佐藤駿丞, 矢花一浩, “電子動力学シミュレーションのステンシル計算に対するメニーコアプロセッサ向け最適化”, 2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2016) 論文集, 2016.
20. Y. Takano, O. Okuyama, Y. Shigeta, H. Nakamura, “Density functional studies of the structural variety of the Cu<sub>2</sub>S<sub>2</sub> core of the Cu-A site”, International Journal of Quantum Chemistry, vol. 112, No. 24, pp. 3756-3762, 2012(DOI: 10.1002/qua.24214).
21. A. Akagic, H. Amano, “High-Speed Non-Adaptable and Fully-Adaptable CRC Accelerators,” IEICE Trans. Inf. & Syst. Vol.E96-D No.6, pp.1299-1308, 2013 (DOI:10.1587/transinf.E96.D.1299)
22. Y. Shigeta, T. Inui, T. Baba, K. Okuno, H. Kuwabara, R. Kishi, M. Nakano, “Quantal cumulant mechanics and dynamics for multidimensional quantum many-body clusters”, International Journal of Quantum Chemistry, vol. 113, No. 3, pp.348-355, 2013 (DOI: 10.1002/qua.24052)
23. T. Matsui, Y. Kitagawa, M. Okumura, Y. Shigeta, S. Sakaki, “Consistent scheme for computing standard hydrogen electrode and redox potentials”, Journal of Computational Chemistry, vol. 34, No. 1, pp.21-26. 2013 (DOI:10.1002/jcc.23100)
24. Y. Takano, O. Okuyama, Y. Shigeta, H. Nakamura, “Density functional studies of the structural variety of the Cu<sub>2</sub>S<sub>2</sub> core of the Cu-A site”, International Journal of Quantum Chemistry, vol. 112, No. 24, pp. 3756-3762, 2012(DOI: 10.1002/qua.24214)
25. S. Le Roux, A. Bouzid, M. Boero and C. Massobrio, “Structural properties of glassy Ge<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> from first-principles molecular dynamics”, Physical Review B, Vol. 86, No. 22, 224201 (12 pages), 2012 (10.1103/PhysRevB.86.224201)
26. C. Massobrio, D. Mbongo Djimbi, M. Matsubara, R. Scipioni and M. Boero, “Stability of Ge<sub>12</sub>C<sub>48</sub> and Ge<sub>20</sub>C<sub>40</sub> heterofullerenes: a first principles molecular dynamics study”, Chemical Physics Letters, Vol. 556, No. 2, 163, 2013 (10.1016/j.cplett.2012.11.033)
27. M. Shoji, K. Hanaoka, A. Sato, D. Kondo, M. Yang, K. Kamiya, K. Shiraishi, “Calculation of the Electron Transfer Coupling Matrix Element in Diabatic Reactions”, International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 133, No. 3, 342-347, 2013 (DOI: 10.1002/qua.24074)
28. T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, “Tightly Coupled Accelerators Architecture for

- Minimizing Communication Latency among Accelerators”, Proc. of 3rd Int. Workshop on Accelerators and Hybrid Exascale Systems (conj. with IPDPS2013), 2013.
29. Toshihiro Hanawa, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku, and Mitsuhsa Sato, “Interconnect for Tightly Coupled Accelerators Architecture,” IEEE 21st Annual Symposium on High-Performance Interconnects (HOT Interconnects 21), short paper, pp. 79–82, Aug. 2013. doi: <http://doi.ieeecomputersociety.org/10.1109/HOTI.2013.15>
  30. T. Odajima, T. Boku, M. Sato, T. Hanawa, Y. Kodama, R. Namyst, S. Thibault, O. Aumage, “Adaptive Task Size Control on High Level Programming for GPU/CPU Work Sharing”, Proc. of Int. Workshop on Advances of Distributed and Parallel Processing 2013 (ADPC-2013, with ICA3PP-2013), Vietri sul Mare, LNCS-8286 Part II, pp.59–68, 2013. (DOI: 10.1007/978-3-319-03889-6\_7)
  31. Takaaki Miyajima, Takuya Kuhara, Toshihiro Hanawa, Hideharu Amano, Taisuke Boku, “Task level pipelining with PEACH2: an FPGA switching fabric for high performance computing,” International Conference on Field Programmable Technologies (FPT 2013), (DOI:10.1109/FPT.2013.671841,) Kyoto, Japan, (2013年12月)
  32. Yoshikawa, Kohji, Yoshida, Naoki, Umemura, Masayuki, “Direct Integration of the Collisionless Boltzmann Equation in Six-dimensional Phase Space: Self-gravitating Systems”, The Astrophysical Journal, Volume 762, Issue 2, article id. 116, 18 pp. 2013 (DOI: 10.1088/0004-637X/762/2/116)
  33. Wagner, A. Y., Umemura, M., Bicknell, G. V., “Ultrafast Outflows: Galaxy-scale Active Galactic Nucleus Feedback”, The Astrophysical Journal Letters, Volume 763, Issue 1, article id. L18, 5 pp. 2013 (DOI: 10.1088/2041-8205/763/1/L18)
  34. Takaaki Miyajima, Takuya Kuhara, Toshihiro Hanawa, Hideharu Amano, Taisuke Boku, “Task Level Pipelining on Multiple Accelerators via FPGA Switch,” The 12th IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN 2013), (DOI:10.2316/P.2014.811-026) Innsbruck, Austria, (2014年2月)
  35. Y. Shigeta, T. Inui, T. Baba, K. Okuno, H. Kuwabara, R. Kishi, M. Nakano, “Qantal Cumulant Mechanics and Dynamics for Multi-Dimensional Quantum Many-Body Clusters”, International Journal of Quantum Chemistry, 113, 348–355 (2013).
  36. Xiao-Yong Jin, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Akira Ukawa, “Finite size scaling study of Nf=4 finite density QCD on the lattice”, Physical Review D, vol. 88, No. 9, ref. 094508, 2013 (DOI:10.1103/PhysRevD.88.094508)
  37. T. Baba, T. Matsui, K. Kamiya, M. Nakano, Y. Shigeta, “A density functional study on pKa of small polyprotic molecules”, *Int. J. Quantum. Chem.*, in press (2014). Feb. 2014. DOI: 10.1002/qua.24631.
  38. M.Shoji, K.Hanaoka, Y.Ujii, W.Tanaka, D.Kondo, H.Umeda, Y.Kamoshida, M.Kayanuma, K.Kamiya, K.Shiraishi, Y.Machida, T.Murakawa, H.Hayashi, “A QM/MM Study of the l-Threonine Formation Reaction of Threonine Synthase: Implications into the Mechanism of the Reaction Specificity”, J. Am. Chem. Soc. in press (2014). (DOI: 10.1021/ja408780c)
  39. T. Inui, Y. Shigeta, K. Okuno, T. Baba, R. Kishi, M. Nakano, “Finite-field method with unbiased polarizable continuum model for evaluation of the second hyperpolarizability of an open-shell singlet molecule in solvents”, J. Comput. Chem. 34, Vol. 27, 2345–2352 (2013). DOI: 10.1002/jcc.23395
  40. T. Mashimo, Y. Fukunishi, N. Kamiya, Y. Takano, I. Fukuda, H. Nakamura, “Molecular dynamics simulations accelerated by GPU for biological macromolecules with a non-Ewald scheme for electrostatic interactions”, J. Chem. Theory Comp. 9, Vol 12, 5599–5609 (2013). DOI: 10.1021/ct400342e.
  41. K. Hanaoka, M. Shoji, D. Kondo, A. Sato, M. Y. Yang, K. Kamiya, and K. Shiraishi,

- “Substrate mediated proton relay mechanism for the religation reaction in topoisomerase II” *J. Biomol. Struct. Dyn.* (2013), DOI:10.1080/07391102.2013.834848.
42. Xiao-Yong Jin, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Akira Ukawa, “Critical endpoint of the finite temperature phase transition for three flavor QCD”, *Physical Review D*, vol. 91, No. 1, ref. 014508, 2013 (DOI:10.1103/PhysRevD.91.014508)
  43. N. Fujita, H. Nuga, T. Boku, Y. Idomura, “Nuclear Fusion Simulation Code Optimization and Performance Evaluation on GPU Clusters”, *Proc. of PDSEC2014 (with IPDPS2014)*, Phoenix, 2014.
  44. Yuetsu Kodama, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku and Mitsuhisa Sato, “PEACH2: FPGA based PCIe network device for Tightly Coupled Accelerators”, *Proc. of HEART2014*, Sendai, Jun. 9–11, 2014.
  45. N. Fujita, H. Fujii, T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, Y. Kuramashi, M. Clark, “QCD Library for GPU Cluster with Proprietary Interconnect for GPU Direct Communication”, *Proc. of HeteroPar 2014 (with EuroPar 2014)*, Porto, 2014.
  46. K. Tsugane, H. Nuga, T. Boku, H. Murai, M. Sato, W. Tang, “Hybrid-view Programming of Nuclear Fusion Simulation Code in PGAS Parallel Programming Language XcalableMP”, *Proc. of ICPADS2014*, Hsinchu, Dec. 16–19, 2014.
  47. Takuya Kuhara, Takahiro Kaneda, Toshihiro Hanawa, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku, Hideharu Amano, “A preliminary evaluation of PEACH3: a switching hub for tightly coupled accelerators,” *Proc. on 2nd International Workshop on Computer Systems and Architectures*, Dec. 7–9, 2014.
  48. Masahiro Nakao, Hitoshi Murai, Takenori Shimosaka, Akihiro Tabuchi, Toshihiro Hanawa, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku, and Mitsuhisa Sato, “XcalableACC: Extension of XcalableMP PGAS Language using OpenACC for Accelerator Clusters,” *Workshop on accelerator programming using directives (WACCPD)*, New Orleans, LA, USA, Nov. 2014. (DOI: 10.1109/WACCPD.2014.6)
  49. T. Baba, R. Harada, M. Nakano, Y. Shigeta, “On the induced-fit mechanism of substrate-enzyme binding structures of Nylon-oligomer hydrolase”, *Journal of Computational Chemistry* 35, 1240–1247 (2014).
  50. K. Kamiya, T. Baba, M. Boero, T. Matsui, S. Negoro, Y. Shigeta, “A Nylon-oligomer Hydrolase Promoting Cleavage Reactions in Unnatural Amide Compounds”, *Journal of Physical Chemistry Letters* 5, 1210–1216 (2014).
  51. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Fluctuation Flooding Method (FFM) for accelerating conformational transitions of proteins”, *Journal of Chemical Physics* 140, 125103 (2014).
  52. K. Matsumoao, T. Hanawa, Y. Kodama, H. Fujii, T. Boku, “Implementation of CG Method on GPU Cluster with Proprietary Interconnect TCA for GPU Direct Communication”, *5th Int. Workshop on Accelerators and Hybrid Exascale Systems (AsHES)*, in conjunction with IPDPS2015, Hyderabad, May 2015.
  53. Toshihiro Hanawa, Norihisa Fujita, Tetsuya Odajima, Kazuya Matsumoto, Taisuke Boku, “Evaluation of FFT for GPU Cluster Using Tightly Coupled Accelerators Architecture”, *Int. Workshop HUCAA 2015 (with Cluster2015)*, Chicago, Sept. 2015.
  54. Tetsuya Odajima, Taisuke Boku, Toshihiro Hanawa, Hitoshi Murai, Masahiro Nakao, Akihiro Tabuchi and Mitsuhisa Sato, “Hybrid Communication with TCA and InfiniBand on A Parallel Programming Language for Accelerators XcalableACC”, *Int. Workshop HUCAA 2015 (with Cluster2015)*, Chicago, Sept. 2015.
  55. Toshihiro Hanawa, Hisafumi Fujii, Norihisa Fujita, Tetsuya Odajima, Kazuya Matsumoto, Yuetsu Kodama and Taisuke Boku, “Improving Strong-Scaling on GPU Cluster Based on Tightly Coupled Accelerators Architecture”, *Cluster2015*, 2015.
  56. Takaaki Miyajima, David Thomas, Hideharu Amano “A toolchain for Dynamic Function

- Off-load on CPU-FPGA Platforms ”, *Journal of Information Processing*, Vol.23, No.2 105–115, Aug. 2015. (DOI:10.2197/ipsjip.23.153)
57. Chiharu Tsuruta, Yohei Miki, Takuya Kuhara, Hideharu Amano, Masayuki Umemura, “Off-loading LET generation to PEACH2: A switching hub for high performance GPU clusters, *Proc. on International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies*, Jun, 1–2, 2015.
  58. Takahiro Kaneda, Takuji Mitsuishi, Yuki Tatsuta, Takuya Kuhara, Toshihiro Hanawa, Hideharu Amano, “Parallel processing of Breadth First Search by Tightly Coupled Accelerators,” *Proc. on the 21st International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications*, July 27–30, 2015.
  59. Takaaki Miyajima, David Thomas, Hideharu Amano “Courier: A toolchain for Acceleration on Heterogeneous Platforms ”, *IPSI Transactions on System LSI Design Methodology*, Vol.8, No.2 153–162, Aug. 2015. (DOI:10.2197/ipsjtsldm.8.105)
  60. Takuya Kuhara, Chiharu Tsuruta, Toshihiro Hanawa, Hideharu Amano, “REDUCTION CALCULATOR IN AN FPGA BASED SWITCHING HUB FOR HIGH PERFORMANCE CLUSTERS,” *Proc. of the 25th International Conference on Field Programmable Logic and Applications*, Sept 2–4, 2015.
  61. S. Tanaka, Yoshikawa, K., T. Okamoto, K. Hasegawa, “A new ray-tracing scheme for 3D diffuse radiation transfer on highly parallel architectures”, accepted for the publication in *Publications of the Astronomical Society of Japan*
  62. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Efficient conformational sampling of proteins based on a multi-dimensional inverse histogram: An application to folding of chignolin in explicit solvent”, *Chemical Physics Letters* 630, 68–75(2015).
  63. H. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta, “Simple, Yet Powerful Methodologies for Conformational Sampling of Proteins”, *Physical Chemistry Chemical Physics* (invited feature article) 17, 6155–6173 (2015).
  64. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Enhanced Conformational Sampling Method for Proteins Based on the TaBoo SeArch (TBSA) Algorithm: Application to the Folding of a Mini-protein, Chignolin”, *Journal of Computational Chemistry* 36, 763–772 (2015).
  65. Y. Shigeta, H. Harada, M. Kayanuma, M. Shoji, “Quantal cumulant dynamics for real-time simulations of quantum many-body systems”, *International Journal of Quantum Chemistry* (invited review), 115, 300–308 (2015). DOI: 10.1002/qua.24820
  66. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, A. Ukawa, “Study of quark mass dependence of binding energy for light nuclei in 2+1 flavor lattice QCD”, *Physical Review D* 92, No.1, ref.014501, 2015
  67. X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa, “Curvature of the critical line on the plane of quark chemical potential and pseudoscalar meson mass”, *Physical Review D* 92, No.11, ref.114511, 2015
  68. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, “Automatic detection of hidden dimension in Outlier FLOODing (OFLOOD) method”, *Chemical Physics Letters* 639, 269–274 (2015)
  69. R. Harada, T. Nakamura, Y. Takano, Y. Shigeta, “Protein folding pathways extracted by Outlier FLOODing method (OFLOOD)”, *Journal of Computational Chemistry*, 36, 97–102 (2015).
  70. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, “Sparsity-weighted Outlier FLOODing (OFLOOD) method: Efficient rare event sampling method using sparsity of distribution”, *Journal of Computational Chemistry* 37, 724–38 (2016)
  71. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, “A Fast Convergent Simulated Annealing Algorithm: Simulated Annealing Outlier FLOODing (SA-OFLOOD) Method”, *Bulletin of the Chemical Society of Japan* 89, 1361–1367 (2016).

72. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “TaBoo SeArch (TBSA) algorithm with a modified inverse histogram for reproducing biologically relevant rare-events of proteins”, *Journal of Chemical Theory and Computation* **12**(5), 2436–2445(2016).
73. Takahiro Kaneda, Ryotaro Sakai, Naoki Nishikawa, Chiharu Tsuruta, Toshihiro Hanawa and Hideharu Amano, “Application Performance using Tightly Coupled Accelerators”, International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART2017), June7, 2017.
74. Naoki Nishikawa, Hideharu Amano and Keisuke Iwai , “Implementation of Bitsliced AES Encryption on CUDA-Enabled GPU”, 11th International Conference on Network and System Security (NSS-2017), Finland, 21–23 August
75. Chiharu Tsuruta, Takahiro Kaneda, Naoki Nishikawa and Hideharu Amano, “Accelerator-in-Switch: a framework for tightly coupled switching hub and an accelerator with FPGA”, International Conference on Field-Programmable Logic and Applications (FPL2017), 4–8 September
76. Ryota Yasudo, Michihiro Koibuchi, Koji Nakano, Hiroki Matsutani, Hideharu Amaon, “Order/Radix Problem: Towards Low End-to-End Latency Interconnection Networks,” 46th International Conference on Parallel Processing (ICPP-2017), August, 2017.
77. Y. Miki, M. Umemura, “GOTHIC: Gravitational oct-tree code accelerated by hierarchical time step controlling”, *New Astronomy* **52**, 65–81 (2017)
78. T. Kirihara, Y. Miki, M. Mori, T. Kawaguchi, and R. M. Rich, “Formation of the Andromeda giant stream: asymmetric structure and disc progenitor”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **464**, 3509 (2017)
79. T. Kirihara, Y. Miki, M. Mori, “The nature of the progenitor of the M31 north-western stream: globular clusters as milestones of its orbit”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **469**, 3390 (2017)
80. R. Harada, Y. Shigeta, “Structural Dissimilarity Sampling with Dynamically Self-Guiding Selection”, *Journal of Computational Chemistry* **38**, 1921–1929(2017).
81. J. Fujita, R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, H. Matsumura, “ Identification of the key interactions in structural transition pathway of FtsZ from *Staphylococcus aureus*”, *Journal of Structural Biology* **198**, 65–73 (2017).
82. R. Harada, Y. Shigeta, “Efficient conformational search based on Structural Dissimilarity Sampling: Applications to reproductions of structural transitions on Maltodextrin Binding Protein”, *Journal of Chemical Theory and Computation* **13**, 1411–1423(2017). DOI: 10.1021/acs.jctc.6b01112
83. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Common folding processes of mini proteins: Partial formations of secondary structures initiate the immediate protein folding”, *Journal of Computational Chemistry* **38** (Front Cover), 790–797(2017).
84. H. Kitoh-Nishioka, K. Welke, Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, S. Irlé “Multi-Scale Simulations on Charge Transport in Covalent Organic Frameworks: Including Dynamics of Transfer Integrals from FMO-DFTB/LCMO”, *The Journal of Physical Chemistry C*, in press. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b057
85. Akihiro Tabuchi, Yasuyuki Kimura, Sunao Torii, Video Matsufuru, Tadashi Ishikawa, Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato, “Design and Preliminary Evaluation of Omni OpenACC Compiler for Massive MIMD Processor PEZY-SC”, Proc. of IWOMP2016 (International Workshop on OpenMP (LNCS 9903: OpenMP: Memory, Devices, and Tasks), pp.293–305, Nara, Oct. 2016.
86. Masahiro Nakao, Hitoshi Murai, Hidetoshi Iwashita, Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato. “Implementation and evaluation of the HPC Challenge benchmark in the XscalableMP PGAS language”, *International Journal of High Performance Computing Applications*, 2017.

87. Masahiro Nakao, Hitoshi Murai, Hidetoshi Iwashita, Akihiro Tabuchi, Taisuke Boku and Mitsuhisa Sato, "Implementing Lattice QCD Application with XcalableACC Language on Accelerated Cluster," IEEE Cluster 2017, 2017 (採録決定済).
88. Kenta Sato, Norihisa Fujita, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, Khaled Z. Ibrahim, "GPU-ready GASNet Implementation on the TCA Proprietary Interconnect Architecture", Proc. of CSCI2016 (Int. Conf. on Computational Science and Computational Intelligence 2016), 6 pages, Las Vegas, Dec. 2016.
89. Kazuya Matsumoto, Norihisa Fujita, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, "Implementation and Evaluation of NAS Parallel CG Benchmark on GPU Cluster with Proprietary Interconnect TCA", Proc. of VECPAR2016, 8 pages, Porto, Jul. 2016.
90. Yuta Hirokawa, Taisuke Boku, Shunsuke Sato, Kazuhiro Yabana, "Electron Dynamics Simulation with Time-Dependent Density Functional Theory on Large Scale Symmetric Mode Xeon Phi Cluster", Proc. of PDSEC2016 (in IPDPS2016), 8 pages, Chicago, 2016.
91. Iman Firmansyah, Yoshiaki Yamaguchi, and Taisuke Boku, Performance evaluation of Stratix V DE5-Net FPGA board for high performance computing, The 2016 International Conference on Computer, Control, Informatics and its Applications, pp.23-27, October, 2016.

(2)その他の著作物

1. 重田育照, "Cumulant mechanics : An explicit treatment for fluctuation on dynamics" (Review), Mol. Sci. **7**, Vol. 1, A0057 (2013)
2. Yasuteru Shigeta, "Quantal Cumulant Mechanics as Extended Ehrenfest Theorem", Chapter 17 of Quantum Mechanics 2013, InTech open (ISBN 980-953-307-945-0).
3. 梅田宏明, 埜敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 重田育照, "GPGPU クラスタ上での FMO 計算の性能評価", (日本コンピュータ化学会 2014 秋季年会精選論文特集号) Journal of Computer Chemistry Japan (invited letter) **13**, 323-324 (2014) . DOI: 10.2477/jccj.2014-0053
4. 馬場剛史, 安東寛之, 重田 育照, "第一原理 Meta-Dynamics 法, Blue Moon Ensemble 法を用いた反応経路解析 (特集 反応経路探索)", アンサンブル : 分子シミュレーション研究会会誌 **16**, Vol. 1, 36-41 (2014).

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 44 件, 国際会議 44 件)

1. 重田育照, "生体内化学反応解析の基礎", 第2回量子化学ウィンタースクール, 岡崎コンファレンスセンター・分子科学研究所, 2012年12月17日~18日
2. 重田育照, "第一原理計算による生体内反応解析", 神戸大学第4回協定講座シンポジウム「計算生物学と材料科学の融合」, 神戸大学統合研究拠点コンベンションホール, 2012年12月19日
3. 田中賢, "GPUを用いた再結合光子輸送を考慮した輻射輸送計算の高速化", 第25回理論懇シンポジウム「計算宇宙物理学の新展開」, つくば国際会議場, 2012年12月22日~12月24日
4. 重田育照, "構造ゆらぎと化学反応に関する理論的研究", 分子科学会奨励賞受賞講演, Sep. 24th-27th 2013, 京都.
5. 朴泰祐, "G8 NuFuSE プロジェクトにおけるプラズマコードの大規模並列化/GPU化", プラズマシミュレータシンポジウム 2013, 核融合科学研究所(土岐), 2013年9月12日
6. 藏増嘉伸, "PACS-CS Project and beyond", 新学術領域「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」のまとめと今後を語る研究会, 鳴子温泉, 宮城県, 12月20日 - 21日, 2013年
7. 重田育照, "構造ゆらぎと化学反応に関する理論的研究", 分子科学会奨励賞受賞講演,

- 京都, Sep. 24<sup>th</sup>-27<sup>th</sup> 2013
8. 重田育照, “ナノマテリアルの非線形光学特性の分子設計に向けて”, 領域研究「コンピューティクス」成果報告会, 東京大学, July. 8<sup>th</sup> -9<sup>th</sup> 2013.
  9. 重田育照, “第一原理計算に基づく反応解析”, 「宇宙生命計算科学連携拠点」ワークショップ, 筑波大学, June 28<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> 2013.
  10. 重田育照, “量子化学計算によるタンパク質の物性および機能評価”, 第 13 回蛋白質科学会, ワークショップ “蛋白質機能を化学的に理解するために”, とりぎん文化会館(鳥取), Jun 12<sup>th</sup>-14<sup>th</sup> 2013.
  11. 庄司光男, トレオニン合成酵素における反応特異性決定過程の理論解明, 第 13 回蛋白質科学会, とりぎん文化会館(鳥取), 2013/6/13.
  12. 庄司光男, QM/MM 法による光合成酸素発生中心 S 1 状態の電子状態解析, 第 2 回公開シンポジウム人工光合成特別セッション, 立命館大学, 2013/10/28.
  13. 庄司光男, QM/MM 法による光合成酸素発生中心の電子状態と構造, 異分野融合による新材料開発のための計算科学, RIKEN AICS, 2014/3/8.
  14. 朴泰祐, “アクセラレータによる計算科学と今後の展開”, Cray Workshop, 東京, 2014 年 7 月 31 日.
  15. 梅村雅之, “次世代計算科学の新展開”, FIT 2014 第 13 回情報科学技術フォーラム, 「エクサスケールコンピューティング時代の大学スパコンセンターの役割」, 筑波大学, つくば市, 2014年9月3日
  16. 朴泰祐, “アクセラレータ間直接通信機構 TCA と XcalableMP”, XcalableMP ワークショップ 2014, 東京, 2014 年 10 月 24 日.
  17. 朴泰祐, “演算加速クラスタ HA-PACS と COMA 及びアプリケーションについて”, 首都大学東京ミニワークショップ, 秋葉原, 2014 年 12 月 12 日.
  18. 朴泰祐, “高性能計算技術と計算宇宙物理～これまでとこれから～”, 第 27 回理論懇シンポジウム, 三鷹, 2014 年 12 月 25 日.
  19. 梅田宏明, “FMO 計算のための Fock 行列生成ルーチンの GPGPU 化”, CUTE シンポジウム, Oct. 31st 2014, 津.
  20. 重田育照, “CMD の思想に基づく生命物理学の研究”, 第25回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD)ワークショップ, September 1st-5th 2014 国際高等研究所, 京都.
  21. 梅田宏明, “フラグメント分子軌道法における Fock 行列計算の GPGPU 化”, GTC Japan 2014, July 16th 2014, 東京, 梅田宏明, “Development of FMO program\_for recent HPC systems: K-computer and GPGPU cluster”, ポスト京向けアクセラレータについての勉強会, April 17th 2014, 岡崎.
  22. 梅田宏明, 「GPGPU 化 OpenFMO プログラムの開発」, CBI 学会 2015 年 大会フォーカストセッション, 10/27-30, 2015(船堀)
  23. 梅田宏明, International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics (ポスター招待講演発表), 11/26-27 2015(東京)
  24. 梅田宏明, HPCC2015 ワークショップ, 12/1 2015(神戸).
  25. 重田育照, “実空間 Car-Parrinello Molecular Dynamics 法のマルチコア超並列アーキテクチャでのチューニング”, 領域研究「コンピューティクス」勉強会, March 12th 2014, 東京大学.
  26. 重田育照, “実空間 Car-Parrinello Molecular Dynamics 法のマルチコア超並列アーキテクチャでのチューニング”, 領域研究「コンピューティクス」勉強会, March 12th 2014, 東京大学.
  27. 重田育照, 「第一原理計算に基づくタンパク質機能デザイン」, 第 8 回 FMO 研究会 (CBI 学会 2014 年大会), October 28<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> 2014, タワーホール船堀, 東京.
  28. 重田育照, “分子動力学法によるタンパク質の効率的構造探索に関して”, 領域研究「コンピューティクス」成果報告会, March 10th -11th 2014, 東京大学.
  29. 重田育照, 「宇宙生命連携研究による物質進化過程の探索」 27 回理論懇シンポジウム, December 24<sup>th</sup>-26<sup>th</sup> 2014, 国立天文台, 東京.
  30. 重田育照, “理論研究によるチトクロム c 酸化酵素の酸化還元と共役したプロトン輸送機構:

- 入り口と出口”, 生物物理学会シンポジウム「膜を介したプロトン透過機構」, September 13th-15th 2015, 金沢, 石川.
31. 重田育照, “第一原理計算に基づく酵素機能解析: チトクロム c 酸化酵素のプロトンポンプを例として”, 東京大学物性研究所 「機能物性融合科学シリーズ(3)「反応と輸送」」, June 24th-26th 2015, 柏, 千葉.
  32. 重田育照, “チトクロム c 酸化酵素におけるプロトン輸送の構造的仕掛け”, 分子研研究会 「膜タンパク質内部のプロトン透過を考える」, April 20th-21st 2015, 分子研, 愛知.
  33. 重田育照, 「高分散分子動力学法によるタンパク質でのレアイベントの検出」, レアイベントの理論科学ワークショップ, February 16th 2015, 日本原子力研究開発機構システム計算科学センター, 千葉.
  34. 重田育照, “酵素活性制御に向けた多階層量子計算手法の応用”, 理研シンポジウム「生体分子系量子化学計算の最前線」, January 22nd-23rd 2015, 理化学研究所, 和光.
  35. 重田育照, 「理論と実験の協奏的アプローチによる複合スピン励起子変換制御」, 新学術領域研究「高次複合光応答」第2回公開シンポジウム, January 23<sup>rd</sup>-24<sup>th</sup> 2015, 千里ライフサイエンスセンター, 大阪.
  36. 重田育照, “第一原理計算によるタンパク質の  $pK_a$  と構造機能相関”, 日本物理学会シンポジウム「プロトネーション イントゥ ダークネス: 生体分子機能理解の為の水素位置情報」, March 21<sup>st</sup>-24<sup>th</sup> 2015, 早稲田大学, 東京.
  37. 重田育照, 「CMD の発想に基づく生命物理の研究」第25回 CMD ワークショップ, September 1<sup>st</sup>-5<sup>th</sup> 2014, 国際高等研究所,
  38. 重田育照, “計算化学による  $pK_a$  の高精度算出法”, 第1回水和ナノ構造研究会, August 28<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> 2014, 奥平温泉, 岩手
  39. 重田育照, 「高分散分子動力学法によるタンパク質でのレアイベントの検出」, レアイベントの理論科学ワークショップ, February 16<sup>th</sup> 2015, 日本原子力研究開発機構システム計算科学センター, 千葉.
  40. 重田育照, 「レアイベントとしてのタンパク質の構造変化と機能」, タンパク研セミナー「構造を基盤とする蛋白質科学における未解決問題」, 東京大学 先端科学技術研究センターENEOS ホール, March 1<sup>st</sup>-2<sup>nd</sup> 2016, 東京.
  41. 重田育照, 「分子動力学法と情報科学の融合によるタンパク質の構造探索」, 「分子技術と理論計算・データ科学」大阪大学未来研究分子技術イニシアティブセミナー, March 14<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> 2016, 大阪大学豊中キャンパス, 大阪
  42. 庄司光男, “宇宙空間でのアミノ酸生成についての理論的研究”, 実験・観測・計算シナジーによる自然界における生体分子の非対称性起源の解明, 自然科学研究機構, 2014/11/29.
  43. 庄司光男, “QM/MM 法による酵素反応機構の理論的解明”, CUTE Mini-Worksho, 三重大学, May 21<sup>st</sup> 2014.
  44. 三木洋平, 『GPU を用いた N 体シミュレーション向けの実践的テクニック』, GPU Computing Workshop for Advanced Manufacturing, 2015 年 9 月 17 日, 虎ノ門ヒルズフォーラム, 東京
  45. T. Boku, “Towards Exascale Systems: Activity in Japan”, ORAP Forum, CNRS, Paris, Oct. 14th, 2012.
  46. T. Boku, “XMP-dev: PGAS language with accelerating device support and communication enhancement”, PGAS-X Workshop 2012, Santa Barbara, Oct. 10th, 2012.
  47. T. Boku, “Accelerated Computing in Next Generation: Unification of Acceleration and Communication”, CO-DESIGN China 2012, Beijing, Oct. 23rd, 2012.
  48. M. Boero, “Metal-Organic Molecule-Metal Nano-Junctions: A close contact between first-principle simulations and experiments. (Plenary lecture)”, The 2<sup>nd</sup> International Workshop on Large-scale Computational Science and Engineering, Science Council of Japan,

- Tokyo, Japan, Dec. 8th, 2012.
49. Y. Shigeta, "Theoretical Studies on Current-voltage (I-V) Characteristics of Metal Containing Artificial DNA and Ni Complex Based Molecular Devices", 2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), Hapuna Beach Hotel, Hawaii, Dec. 2nd~7th, 2012.
  50. M. Boero, "Introduction to Density Functional Theory and DFT-Molecular Dynamics", Simulating Activated Processes in Physics and Chemistry: Theoretical Foundations - CUSO International Winter School, Eurotel Victoria, Villars-sur-Ollon, Switzerland, Mar. 3rd~8th, 2013.
  51. M. Boero, "DFT-MD & QM/MM Approaches", Simulating Activated Processes in Physics and Chemistry: Theoretical Foundations - CUSO International Winter School, Eurotel Victoria, Villars-sur-Ollon, Switzerland, Mar. 3rd~8th, 2013.
  52. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, N. Kamiya, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, "A QM/MM study on the S<sub>2</sub> spin state of the oxygen-evolving complex", 5<sup>th</sup> OCARINA Symposium, Osaka City University, Mar. 5th, 2013.
  53. T. Boku, "Nu-FuSE Exascale Simulations and the XMP programming language", Exascale Applications and Software Conference (EASC2013), Edinburgh, April 10th, 2013.
  54. T. Boku, "Toward Exascale Accelerated Computing", International HPC Forum China, Changsha, May 28th, 2013.
  55. T. Boku, "Accelerated Computing Unified with Communication Towards Exascale", CO-DESIGN China 2013, Guilin, October 30th, 2013.
  56. Y. Shigeta, "Quantum chemical studies for estimation of pK<sub>a</sub> and redox potential", World Congress on Petrochemistry and Chemical Engineering, Hilton San Antonio Airport, USA, November 18-20, 2013,
  57. Y. Shigeta, "Free Energy Analyses on Cluster Deformations by Cumulant Mechanics", 8th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Budapest, Hungary, Aug. 25th-31st 2013.
  58. Y. Shigeta, "Car-Parrinello molecular dynamics studies on reaction mechanisms of surface oxidation and nylon-degrading enzyme", 1/2 journée Séminaires Chimie Théorique, Seminar at ISM, University Bordeaux I, France, May 30, 2013
  59. M. Shoji, A QM/MM study on the reverse reaction of Threonine Synthase, BIT's 4th Symposium on Enzymes and Biocatalysis 2013 (SEB-2013), Nanjing, China, 2013/4/26.
  60. M. Shoji, Theoretical investigation on the electronic structures of photosystem II oxygen evolving complex at the S<sub>2</sub> state, 1st Awaji International Workshop on "Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications" (1st AWEST2013), 2013/6/16.
  61. M. Shoji, QM/MM study on the photosystem II oxygen evolving complex at the S<sub>1</sub> state, The 51<sup>st</sup> Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, kyoto, 2013/10/28-30.
  62. T. Boku, "Tightly Coupled Parallel Accelerated Computing for Post-Petascale Computing", French-Japan HPC Conference, Tokyo, Apr. 14, 2014.
  63. \* T. Boku, "Towards Reconfigurable High Performance Computing based on Co-Design Concept", HEART2014 Keynote Talk, Sendai, Jun. 9, 2014.
  64. T. Boku, "Next Generation Parallel Accelerated Computing with High Productivity", Keynote Talk, Int. Workshop on Enhancing Parallel Scientific Applications with Accelerated HPC (ESAA) 2014, with EuroMPI/Asia 2014, Kyoto, Sep. 9, 2014.
  65. T. Boku, "Status Report from Japan", HPC in Asia Session, ISC2014, Leipzig, Jun. 26, 2014.
  66. T. Boku, "Accelerator and Communication CoDesign Challenges at Extreme Scale",

- CoDesign China 2014, Guangzhou, Nov. 7, 2014.
67. T. Boku, "Research and Development on Unified Environment of Accelerated Computing and Interconnection for Post-Petascale Era – TCA and XcalableACC –", Workshop on Japanese Research Toward Next-Generation Extreme Computing, with SC14, New Orleans, Nov. 17th, 2014.
  68. Hitoshi Murai, XcalableACC: a PGAS Language for Accelerated Parallel Computers, JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software (2014).
  69. Y. Kuramashi, "Lattice QCD", US/Japan Exascale Applications Workshop, Gatlinburg, Tennessee, USA, Sep. 5–6, 2014
  70. H. Umeda, "Fock matrix preparation with GPGPU for fragment molecular orbital (FMO) calculation", HPC connection workshop SC14, Nov. 19th New Orleans USA.
  71. Y. Shigeta, "Protein Folding Processes Detected by Enhanced Sampling Techniques", 19th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Nov. 11th–17th 2014, Tamsui, Taiwan.
  72. Y. Shigeta, "Towards Theoretical Design of Catalytic Activities of Enzymes", The Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2014, Nov. 11th–12th, in Sichuan University (SCU), Chengdu, China.
  73. Y. Shigeta, "First-principles analysis on enzymatic degradation of nylon", 2nd World Congress on Petrochemistry and Chemical Engineering, Oct. 27th–29th 2014, Las Vegas, USA.
  74. Y. Shigeta, "Theoretical Studies on Reaction Mechanism of An Enzyme Cleaving Unnatural Amide Compound", Symposium on Molecular Science and Synthesis of Functional Molecules for Next Generation, Mar.10th–11th 2014, Hiroshima, Japan.
  75. T. Boku, "Extreme-SIMD Accelerator toward Exascale Computing", International HPC Forum, Tianjin, China, May 20th, 2015.
  76. M. Umemura, "The Cutting-edge of Radiation Hydrodynamics", The Sixth East-Asian Numerical Astrophysics Meeting, Suwon, Korea, Sept. 15–19, 2014
  77. Y. Shigeta, "A Molecular Design of Nonlinear Optical Properties and Conductivity Switches on the Basis of Open-shell Nature", 2014 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), (**Invited**), Nov. 30<sup>th</sup>–Dec. 5<sup>th</sup> 2014, Hawaii, USA.
  78. Y. Shigeta, "Towards Theoretical Design of Catalytic Activities of Enzymes", *The Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2014*, Nov. 11<sup>th</sup>–12<sup>th</sup> 2014, Sichuan University (SCU), Chengdu, China.
  79. Y. Shigeta, "Computational Studies on Redox Potential of Metal Complexes and Model Cofactors", *International Conference on Synthetic Metals*, June 30<sup>th</sup>–July 5<sup>th</sup> 2014, Turku, Finland.
  80. M. Shoji, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, R. Harada, H. Umeda, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, "QM/MM study of the L-threonine formation reaction of threonine synthase: mechanism of the product-assisted catalysis", *Computational science workshop 2014*, August 20<sup>th</sup>–22<sup>nd</sup> 2014, Tsukuba.
  81. M. Shoji, "A development of the computational biosciences with supercomputers", *AWEST2014*, June 17<sup>th</sup> 2014, Awaji Island.
  82. Y. Shigeta, "Simple Conformational Search Algorithms For Protein Folding", *6<sup>th</sup> Czech-Slovakia-Japan Theoretical Chemistry meeting*, Oct. 11<sup>th</sup>–14<sup>th</sup> 2015, Bratislava, Slovakia.
  83. Y. Shigeta, "Inverse Histogram-based Sampling Algorithm for Protein-folding Problems", *The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7)*, Jan. 25<sup>th</sup>–28<sup>th</sup> 2016, Kaohsiung, Taiwan.
  84. Y. Shigeta, "Efficient Conformational Search Methods for Protein Folding Problems", The

nineth *Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics* (ISTCP 2016), Jul. 17<sup>th</sup>–22<sup>nd</sup> 2016, Grand Forks, North Dakota, USA.

85. Y. Shigeta, “Simple conformational search methods for understanding biological functions”, *Shanghai Workshop on Frontiers in Molecular Biophysics*, Jul. 23<sup>th</sup>–26<sup>th</sup> 2016, Shanghai, China.
86. Y. Shigeta, “Simple conformational search methods for understanding biological functions”, *10<sup>th</sup> China-Japan Joint Symposium on Functional Supramolecular Architecture*, May 14<sup>th</sup>–17<sup>th</sup> 2017, Wuhan, China.
87. Hitoshi Murai, XcalableACC: A Directive-Based Language Extension for Accelerator Clusters, LENS2015 International Workshop, AKIHABARA CONVENTION HALL, 2015/10/29
88. Masahiro Nakao, Evaluation of Productivity and Performance of the XcalableACC programming language, LENS2015 International Workshop, AKIHABARA CONVENTION HALL, 2015/10/29

② 口頭発表 (国内会議 57 件, 国際会議 13 件)

1. 宮島敬明, デビッド・トーマス, 天野英晴, “OpenCVとGPUを対象としたラインタイムバイナリアクセラレーションの試作と評価”電子情報通信学会 CPSY 研究会, 広島, 2012 年 10 月 12 日
2. 田口真彦, 小松勇, 佐藤皓允, 蘇根成, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 梅村雅之, 矢花一浩, 白石賢二, “系外惑星における生命指標としての光合成色素についての理論的研究”, 第 5 回アストロバイオロジーワークショップ, 国立天文台. 2012 年 11 月 23 日～24 日
3. 小松勇, 梅村雅之, 庄司光男, 矢花一浩, 白石賢二, 神谷克政, 栢沼愛, 田口真彦, 佐藤皓允, 蘇根成, “系外惑星のバイオマーカー検出に向けた光合成アンテナ機構の励起状態計算”, 第 5 回アストロバイオロジーワークショップ, 国立天文台, 2012 年 11 月 23 日～24 日
4. 小松勇, 梅村雅之, 庄司光男, 矢花一浩, 白石賢二, 神谷克政, 栢沼愛, 田口真彦, 佐藤皓允, 蘇根成, “系外惑星バイオマーカー検出を目指した光合成機構のエネルギー移動計算”, 2013 年日本天文学会春季年会, 埼玉大学, 2013 年 3 月 20 日～23 日
5. 田口真彦, 小松勇, 佐藤皓允, 蘇根成, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 梅村雅之, 矢花一浩, 白石賢二, “光化学系 II アンテナ部の光捕集機構についての量子化学的研究”, 第 93 回日本化学会年会, 立命館大学, 2013 年 3 月 22 日～25 日
6. 小松勇, 梅村雅之, 庄司光男, 矢花一浩, 白石賢二, 神谷克政, 栢沼愛, 田口真彦, 佐藤皓允, 太陽系外惑星バイオマーカー検出に向けた光捕集機構のエネルギー転移計算, Japan Geoscience Union Meeting 2013, 5/19-24.
7. 田口真彦, 小松勇, 佐藤皓允, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 白石賢二, 矢花一浩, 梅村雅之, 系外惑星のバイオマーカーのための光合成光吸収についての理論的研究, Japan Geoscience Union Meeting 2013, 5/19-24
8. 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, “Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャ向け通信機構の予備評価”, 情報処理学会計算機アーキテクチャ研究会, 札幌, 2012 年 12 月 13 日～14 日
9. 梅田宏明, 塙敏博, 庄司光男, 朴泰祐, “分子軌道計算の GPGPU 化に向けた行列加算手法の提案”, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, 芦原温泉, 2013 年 22 月 21 日～22 日
10. 藤井久史, 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, “TCA アーキテクチャによる並列 GPU アプリケーションの性能評価”, 2013-HPC-140, 2013.
11. 小田嶋哲哉, 朴泰祐, 佐藤三久, 塙敏博, 児玉祐悦, Raymond Namyst, Samuel Thibault, Olivier Aumage, “並列言語 XMP-dev における GPU/CPU 動的負荷分散機能”,

- 2013-HPC-140, 2013.
12. 宮島敬明, 久原拓也, 塙敏博, David Thomas, 天野英晴, “TCA ノードにおけるランタイムバイナリアクセラレーションの検討と実装”, 情報処理学会 RECONF 研究, RECONF2013-18, pp.97-102, 高知, 日本, (2013 年 5 月)
  13. 宮島敬明, 久原拓也, 塙敏博, David Thomas, 天野英晴, “PEACH2 におけるパイプライン実行の検討”, 情報処理学会 RECONF 研究会, RECONF2013-33, pp. 79-84 石川, 日本, (2013 年 9 月)
  14. 久原拓也, 宮島敬明, 塙敏博, 天野英晴, 朴泰祐, “PEACH2 を用いたノード間通信中の FPGA/GPU 協調動作”, 情報処理学会 RECONF 研究会, RECONF2013-62 pp.37-42, 神奈川, 日本, (2014 年 1 月)
  15. 藤田 典久, 奴賀 秀男, 朴 泰祐, 井戸村 泰宏, “GPU クラスタ HA-PACS における核融合シミュレーションコードの性能評価”, 2013-HPC-140, 2013.
  16. 田中賢, 吉川耕司, 岡本崇, 長谷川賢二, “GPU を用いた輻射輸送シミュレーションの高速化”, 日本天文学会 2013 年秋季年会, 東北大学, 2013 年 9 月 11 日
  17. 花岡恭平, 庄司 光男, 栢沼愛, 神谷克政, 白石賢二, ビタミン D 受容体のコンフォメーションアンサンブルと細胞応答, 第 86 回日本生化学会大会, 横浜, 2013/9/11-12.
  18. 庄司 光男, 氏家謙, 田中弥, 花岡恭平, 梅田宏明, 栢沼愛, 神谷克政, 白石賢二, 町田康博, 村川武志, 林秀行, トレオニン合成酵素における反応特異性についての理論的解明, 第 86 回日本生化学会大会, 横浜, 2013/9/11-12.
  19. 庄司 光男, 磯辺寛, 山中秀介, 沈建仁, 山口兆, 大規模 QM/MM 法による光合成酸素発生中心の電子状態, 日本化学会春年会 2014@名古屋大学 2014/3/27-30.
  20. 庄司 光男, 氏家謙, 田中弥, 栢沼愛, 梅田宏明, 町田康博, 村川武志, 林秀行, トレオニン合成酵素の反応機構についての理論的研究: 反応特異性決定過程の解明, 日本化学会春年会 2014@名古屋大学 2014/3/27-30.
  21. 中尾 昌広, 村井 均, 下坂 健則, 田渕 晶大, 塙 敏博, 児玉 祐悦, 朴 泰祐, 佐藤 三久, “Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに向けた XcalableMP-dev 拡張”, 情報処理学会研究報告 2014-HPC-143(34), 1-8, 2014
  22. 松本和也, 塙敏博, 児玉祐悦, 藤井久史, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構 TCA を用いた GPU 間直接通信による Collective 通信の実装と予備評価”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2014-HPC-147, 2014.
  23. 小田嶋哲哉, 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 村井均, 中尾昌広, 佐藤三久, “HA-PACS/TCA における TCA および InfiniBand ハイブリッド通信”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2014-HPC-147, 2014.
  24. 藤井久史, 藤田典久, 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, 藏増嘉伸, Mike Clark, “GPU 向け QCD ライブラリ QUDA の TCA アーキテクチャ実装の性能評価”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2014-HPC-145, 2014.
  25. 津金佳祐, 奴賀秀男, 朴泰祐, 村井均, 佐藤三久, William Tang, “並列言語 XcalableMP による核融合シミュレーションコードの実装と評価”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2014-HPC-145, 2014.
  26. 田渕晶大, 村井均, 朴泰祐, 佐藤三久, “XcalableMP と OpenACC の統合による GPU クラスタ向け並列プログラミングモデル”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2014-HPC-145, 2014.
  27. 中尾 昌広ほか, “Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに向けた XcalableMP の拡張”, 第 143 回 HPC 研究会, 2014 年 3 月
  28. 中尾 昌広ほか, “XcalableACC: OpenACC を用いたアクセラレータクラスタのための PGAS 言語 XcalableMP の拡張”, 第 146 回 HPC 研究会, 2014 年 10 月
  29. 飯島大貴, 廣川祐太, 塙敏博, 朴泰祐, “密結合演算加速機構 TCA アーキテクチャの Intel MIC プロセッサへの適用”, 2015-HPC-149, 2015.
  30. 藤井久史, 塙敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, “GPU 向け FFT コードの TCA アーキテクチャによる実装と性能評価”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2015-HPC-148, 2015.

31. 桑原悠太, 埜敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, “GPU クラスタにおける GPU 間セルフ通信機構に関する提案”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2015-HPC-148, 2015.
32. 佐藤賢太, 藤田典久, 埜敏博, 朴泰祐, “密結合演算加速機構 TCA における Verbs 実装による MPI 環境の実現”, 2015-HPC-150, 2015.
33. 松本和也, 埜敏博, 藤田典久, 朴泰祐, “密結合並列演算加速機構 TCA による並列 GPU コードの性能予測モデル”, 2015-HPC-150, 2015.
34. 小田嶋哲哉, 朴泰祐, 埜敏博, 村井均, 中尾昌広, 田淵晶大, 佐藤三久, “アクセラレータ向け並列プログラミング言語 XcalableACC における TCA/InfiniBand ハイブリッド通信”, 2015-HPC-150, 2015.
35. 中尾 昌広ほか, “並列言語 XcalableMP を用いた HPC Challenge Benchmark の実装と評価”, 第 148 回 HPC 研究会, 2015 年 3 月
36. 中尾 昌広. “XcalableMP による HPC Challenge Class 2 への挑戦”, HPCS2015 オーガナイズド・セッション, 2015 年 5 月
37. 田淵 晶大ほか, “演算加速機構を持つ並列クラスタ向け PGAS 言語 XcalableACC の性能評価”, 第 150 回 HPC 研究会, 2015 年 8 月
38. 鶴田千晴, 金田隆大, 三木洋平, 天野英晴, “アクセラレータインスイッチを用いた LET generator の実装”, 第 217 回 システム・アーキテクチャ研究発表会, 2017 年 3 月
39. 野田裕之, 酒井諒太郎, 宮島敬明, 藤田直行, 天野英晴, “Altera SDK for OpenCL を用いた Full-PIC 法における割り付け処理の高速化”, 第 217 回 システム・アーキテクチャ研究発表会, 2017 年 3 月
40. 工藤知宏, 高野了成, 天野英晴, 鯉淵道紘, 松谷宏紀, 埜 敏弘, 田浦健次朗, 木 周, 池上 努, 須崎有康, 赤沼領大, 田中 哲, “データの流れに着目した異種エンジン統合クラウドシステム Flow In Cloud”, 第 219 回システム・アーキテクチャ研究発表会, 2017 年 7 月
41. 天野英晴, PEACH3 の基本転送性能の予備評価, 電子情報通信学会コンピュータシステム研究会, 新潟, 2014 年 7 月 29 日
42. 久原拓也, PEACH2 への演算機構の実装とその性能評価, 電子情報通信学会リコンフィギュラブルシステム研究会, 広島, 2014 年 9 月 18 日
43. 天野英晴, PEACH2 によるビッグデータ処理の可能性, JACORN2014 次世代 RHW 創造研究会, 北海道, 2014 年 10 月 31 日
44. 金田隆大, **Tightly Coupled Accelerators** によるグラフ探索の並列処理の評価, 電子情報通信学会コンピュータシステム研究会, 広島, 2014 年 11 月 14 日
45. 中尾昌広, 村井均, 下坂健則, 田淵晶大, 埜敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, “Tightly Coupled Accelerators アーキテクチャに向けた XcalableMP の拡張機能の実装および性能評価”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2014-HPC-146, 2014.
46. 中尾昌広, 村井均, 岩下英俊, 下坂健則, 朴泰祐, 佐藤三久, “PGAS 言語 XcalableMP を用いた HPC Challenge ベンチマークの実装と評価”, 情報処理学会 HPC 研究会, 2015-HPC-148, 2015.
47. 田中賢, 吉川耕司, 岡本崇, 長谷川賢二, “再結合光子を考慮した再電離輻射流体シミュレーション”, 日本天文学会 2015 年春季年会, 大阪大学, 口頭, 2015/3/20
48. 三木洋平, 梅村雅之, 『銀河の多成分力学平衡分布生成コードの開発』, 日本天文学会 2015 年 秋季年会, 2015 年 9 月 9--11 日, 甲南大学, 神戸
49. 中尾昌広, 村井均, 岩下英俊, 田淵晶大, 埜敏博, 朴泰祐, 佐藤三久, PGAS 言語 XcalableACC を用いた HPC Challenge ベンチマークの実装と評価, 第 151 回 HPC 研究発表会, 沖縄産業支援センター, 2015/10/1
50. 中尾昌広, アクセラレータクラスタ用プログラミング言語 XcalableACC による格子 QCD の並列化の検討, 分散/協調処理に関する『松本』サマー・ワークショップ (SWoPP2016), キッセイ文化ホール(長野), 2016/8/9
51. 田淵晶大, アクセラレータクラスタ向け PGAS 言語 XcalableACC の片側通信機能の実装と評価, 第 158 回 HPC 研究発表会, 大月ホテル和風館, 2017/3/9

52. 田淵晶大, アクセラレータクラスタ向け PGAS 言語 XcalableACC の実装状況報告, 第 4 回 XcalableMP ワークショップ, 秋葉原 UDX, 2016/11/1
53. 田淵晶大, EZY-SC 向け Omni OpenACC コンパイラ的设计・試作, 第 154 回 HPC 研究発表会, 海洋研究開発機構 横浜研究所 三好記念講堂, 2016/4/25
54. 廣川 祐太, 朴 泰祐, 佐藤 駿丞, 矢花 一浩, “電子動力学コード ARTED による Knights Landing プロセッサの性能評価”, 情報処理学会第 157 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-157, 2016 年 12 月.
55. 佐藤 賢太, 藤田 典久, 埜 敏博, 朴 泰祐, Ibrahim Khaled, “密結合並列演算加速機構 TCA における複数 DMAC の活用による GPU 対応 GASNet の性能改善”, 情報処理学会第 156 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-156, 2016 年 9 月.
56. 桑原 悠太, 埜 敏博, 朴 泰祐, “GPU クラスタにおける GPU セルフ MPI システム GMPI の予備性能評価”, 情報処理学会第 155 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-155 (SWoPP2016), 2016 年 8 月.
57. 高山 尋考, 山口佳樹, 朴泰祐, “FPGA による PCIe Gen3 および 100G 超光インターコネクタに関する実験評価:汎用高速演算クラスタシステムの実現に向けて”, FIT2016 第 15 回情報科学技術フォーラム, 第 1 分冊, pp.267-268, (C-018), 富山, 2016 年 9 月.
58. M. Hatto, T. Miyajima, T. Toda, H. Amano, “An Automatic Code Modification and Optimization System for High-Level Synthesis”, Int. Workshop on Networking, Computing, Systems, and Software, Okinawa, Japan, Dec. 6th, 2012.
59. A. Akagic, H. Amano, “A Study of Adaptive co-processors for Cyclic Redundancy Checks on an FPGA,” Proc. of International Conference of Field Programmable Technology, pp.119-124. Dec. 2012. 978-1-4673-2845-6/12 IEEE
60. T. Miyajima, D. Thomas, H. Amano, “A Domain Specific Language and Toolchain for OpenCV Runtime Binary Acceleration using GPU”, Proc. of Third International Conference on Networking and Computing, pp.175-181, Dec.2012, 10.1109/ICNC.2012.34
61. T. Kugami, T. Miyajima, H. Amano, “A circuit division method for High-Level synthesis on Multi-FPGA systems”, Int. Workshop on Renewable Computing Systems, Porto, Portuguese, Mar. 16th, 2013.
62. Yoshinobu Kuramashi, “2+1 Flavor Lattice QCD Simulation K Computer”, The 31st International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2013) Mainz, Germany, Jul. 29 - Aug. 3, 2013.
63. Taisuke Boku, “Tightly Coupled Accelerators for Accelerator-oriented Parallel Processing”, ISP2S2, JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software, Kobe, Japan, 2014-12-04.
64. Takaaki Miyajima (Keio Univ.) “An Automatic Mixed Software Hardware Pipeline Builder for CPU-FPGA Platforms,” Int. workshop on FPGAs for Software Programmers, Munich, Germany, Sept.1, 2014.
65. Takahiro Kaneda (Keio Univ.) Parallel Processing of Graph Search by Tightly Coupled Accelerator, CoolChips XVIII, Yokohama, April 14,2015.
66. Chiharu Tsuruta (Keio Univ.) Off-loading LET generator in PEACH2: A Switching Hub for High Performance GPU Clusters, CoolChips XVIII, Yokohama, April 14,2015.
67. Y. Miki, M. Mori, T. Kawaguchi, Y. Saito, “Hunting a Wandering Supermassive Black Hole in M31 Halo Hermitage using GPU Cluster”, The 6th East-Asian Numerical Astrophysics Meeting, Suwon (Korea), 2014/9/15-19.
68. Y. Miki, “Computation / Communication Unification on FPGA Solution”, LENS2015 (International Workshop on Language, Network and System Software 2015), Oct. 29--30, 2015, Akihabara, Japan
69. Y. Miki and M. Umemura, “GOTHIC: Gravitational Oct-Tree code accelerated by Hierarchical time step Controlling”, Perspectives of GPU computing in Science, Sep.

26--28, 2016, Rome, Italy

70. Yuta Kuwahara, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, "A proposal of GMPI: GPU self MPI for GPU clusters", ACSI2016, 2016.

③ ポスター発表 (国内会議 36 件, 国際会議 28 件)

1. 庄司光男, 花岡恭平, 近藤大生, 梅田宏明, 神谷克政, 白石賢二, "一酸化窒素還元酵素におけるN<sub>2</sub>O生成機構についての理論的研究", 第3回協定講座シンポジウム, 神戸大学統合研究拠点, 2012年11月29日
2. 重田育照, 岩田潤一, 古家真之介, 内田和之, 小泉健一, Mauro Boero, 押山淳, "実空間密度汎関数法に基づいた Car-Parrinello 分子動力学法の高速度化", グランドチャレンジ・アプリケーションの研究開発, 東京大学山上会館, 2013年3月1日
3. 花岡恭平, 庄司光男, 近藤大生, ヤンムンヨン, 神谷克政, 白石賢二, "QM/MM 法による II 型 DNA トポイソメラーゼの DNA 再結合反応の解明", 第3回協定講座シンポジウム, 神戸大学統合研究拠点, 2012年11月29日
4. 近藤大生, 花岡恭平, 田口真彦, 神谷克政, 庄司光男, 河合野間繁子, 田口英樹, 白石賢二, "Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の計算科学的解析", 第3回協定講座シンポジウム, 神戸大学統合研究拠点, 2012年11月29日
5. 花岡恭平, 庄司光男, 近藤大生, 田口真彦, 栢沼愛, 神谷克政, 白石賢二, "アゴニスト結合型ビタミン D 受容体のマイナーコンフォメーション", 第35回日本分子生物学会年会, 福岡国際会議場, 2012年12月11日~14日花岡恭平, 庄司光男, 栢沼愛, 白石賢二, ビタミン D 受容体におけるコンフォメーションアンサンブル: 分子動力学法による解明, 第36回日本分子生物学会年会, 神戸, 2013/12/3-6.
6. 氏家謙, 田中弥, 花岡恭平, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 白石賢二, 町田康博, 村川武志, 林秀行, 分子動力学法によるトレオニン合成酵素の基質結合自由エネルギー計算.
7. 田口真彦, 小松勇, 佐藤皓允, 蘇根成, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 梅村雅之, 矢花一浩, 白石賢二, "光合成光化学系 II におけるアンテナ部の光捕集機構についての理論的研究", 第35回日本分子生物学会年会, 福岡国際会議場, 2012年12月11日~14日
8. 田口真彦, 小松勇, 佐藤皓允, 蘇根成, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 梅村雅之, 矢花一浩, 白石賢二, "時間依存密度汎関数法に基づく光合成アンテナ部の吸収スペクトルの研究とそれを用いた系外惑星における生命指標検出に向けての検討", Supercomputer workshop 2013, 分子科学研究所, 2013年1月22日~23日
9. 近藤大生, 花岡恭平, 田口真彦, 神谷克政, 庄司光男, 河合(野間)繁子, 田口英樹, 白石賢二, "Gln や Asn を多く含むミスフォールドしたタンパク質の構造安定化機構に関する理論的研究", Supercomputer workshop 2013, 分子科学研究所, 2013年1月22日~23日
10. 真下忠彰, 福西快文, 福田育夫, 神谷成敏, 鷹野優, 中村春木, "GPU を利用した Zero-dipole summation 法による静電相互作用計算の高速度化", 2013年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2013), 東京工業大学, 2013年1月15日
11. 福田育夫, 神谷成敏, 荒川貴将, 真下忠彰, 鷹野優, 中村春木, "A simple non-Ewald scheme for calculating electrostatic interactions of charged particle systems: the zero-dipole summation method and the application to molecular systems", 2013年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2013), 東京工業大学, 2013年1月15日
12. 田口真彦, 小松勇, 佐藤皓允, 蘇根成, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 梅村雅之, 矢花一浩, 白石賢二, "生命指標となりうる光合成の光吸収スペクトル帰属についての理論的研究", 2013年日本天文学会春季年会, 埼玉大学, 2013年3月20日~23日
13. 花岡恭平, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 白石賢二, QM/MM 法による HIT スーパーファミリー酵素の触媒機構の解明, 蛋白質科学会年会@鳥取, 2013/6/13.

14. 田中弥, 氏家謙, 花岡恭平, 友池 史明, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 倉光成紀, 白石賢二, ウリジンシチジンキナーゼの特異的基質認識機構の理論的解明, 蛋白質科学会年会@鳥取, 2013/6/13.
15. 田中弥, 氏家謙, 花岡恭平, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 友池史明, 倉光成紀, 白石賢二, ウリジンシチジンキナーゼ(ttCK)の基質認識機構についての分子動力学解析, 第 86 回日本生化学会大会, 横浜, 2013/9/11-12.
16. 藤井久史, 藤田典久, 埜敏博, 児玉祐悦, 朴泰祐, 佐藤三久, 藏増嘉伸, Mike Clark, "GPU 向け QCD ライブラリ QUDA の TCA アーキテクチャ実装の性能評価", GTC Japan 2014 ポスター, 東京, 2014 年 7 月 16 日.
17. 梅田宏明, 埜敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 重田育照, OpenFMO における 4 中心クーロン相互作用項計算の GPGPU 化の試み, 日本コンピュータ化学会(春), 東工大, 2015/5/28, 29.
18. 梅田宏明, 埜敏博, 庄司光男, 朴泰祐, "GPGPU クラスタ上での FMO 計算の性能評価", 日本コンピュータ化学会 2014 秋季年会, 郡山, 2014/10/19.
19. 梅田宏明, 埜敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 重田育照, GPGPU 化 Fock 行列計算ルーチンの OpenFMO への組み込み, ポスター(4P119), 分子科学討論会@広島大, 2014/9/21-24
20. 梅田宏明, 庄司光男, 埜敏博, 朴泰祐, GPGPU 化した Fock 行列計算ルーチンの OpenFMO への組み込み, 日本コンピュータ化学会(春), 東工大, 2014/5/29, 30.
21. 庄司光男, 氏家謙, 田中弥, 栢沼愛, 梅田宏明, 重田育照, 村川武志, 林秀行, トレオニン合成酵素における生成物支援触媒機構解明のための精密自由エネルギー計算, 日本生化学会大会, ポスター, 2014/10/15.
22. 田中弥, 氏家謙, 友池史明, 庄司光男, 栢沼愛, 増井良治, 倉光成紀, 重田育照, ウリジンシチジンキナーゼ中のウリジンのプロトン化状態についての理論的研究, 日本生化学会大会, ポスター, 2014/10/15.
23. 氏家謙, 田中弥, 庄司光男, 栢沼愛, 重田育照, 町田康博, 村川武志, 林秀行, トレオニン合成酵素における反応中間体の自由エネルギー変化についての理論解析, 日本生化学会大会, ポスター, 2014/10/15.
24. 栢沼愛, 庄司光男, 重田育照, ニトリルヒドラーターゼの触媒機構に関する理論的研究, 分子科学討論会, ポスター, 2014/9/21.
25. 庄司光男, 田中弥, 氏家謙, 栢沼愛, 梅田宏明, 重田育照, 中野祥吾, 片柳克夫, 同化型亜硝酸還元酵素における全化学反応の理論的解明, 分子科学討論会, 口頭発表, 2014/9/21.
26. 氏家謙, 田中弥, 花岡恭平, 庄司光男, 栢沼愛, 神谷克政, 白石賢二, 町田康博, 村川武志, 林秀行, 分子動力学法によるトレオニン合成酵素の反応特異性についての理論的解明, 第 86 回日本生化学会大会, 横浜, 2013/9/11-12.
27. 田中 弥, 氏家 謙, 友池 史明, 栢沼 愛, 増井 良治, 倉光 成紀, 庄司 光男, "ウリジンシチジンキナーゼ基質のプロトン化状態についての理論的検討", 第 14 回蛋白質科学会, 横浜, ポスター, 2014/6/25-27.
28. 氏家 謙, 田中 弥, 栢沼 愛, 町田康博, 村川 武志, 庄司 光男, "熱力学積分法によるトレオニン合成酵素の基質結合自由エネルギー評価", 第 14 回蛋白質科学会, 横浜, ポスター, 2014/6/25-27.
29. 庄司 光男, 田中 弥, 氏家 謙, 栢沼 愛, 梅田 宏明, 中野 祥吾, 片柳 克夫, "同化型亜硝酸還元酵素の反応機構の理論的解明", 第 14 回蛋白質科学会, 横浜, ポスター, 2014/6/25-27.
30. 原田隆平, 鷹野優, 重田育照, "蛋白質構造揺らぎを用いた構造変化加速法:FFM", 第 14 回蛋白質科学会, 横浜, ポスター, 2014/6/25-27.
31. 吉川耕司, 田中賢, 岡本崇, 長谷川賢二, "輻射流体シミュレーションにおける再結合放射の影響", SKA-Japan ワークショップ 2015, 国立天文台三鷹キャンパス, 2015/3/3-5

32. 鬼頭(西岡)宏任, “Studies on Charge Transfers in Bio-system and Organic Semiconductor by Using Fragment Molecular Orbital Methods”, TIA “かけはし”ポスター交流会, つくば, ポスター, 2016/8/30.
33. 鬼頭(西岡)宏任, 重田育照, “有機ナノ結晶における励起状態ダイナミクスの理論研究”, 第10回分子科学討論会, 神戸, ポスター, 2016/9/13-15.
34. 中尾昌広, 村井均, 辻美和子, 岩下英俊, 小田嶋哲哉, 田渕晶大, 津金佳祐, 杉山大輔, 朴泰祐, 佐藤三久, アクセラレータクラスタにおける高生産言語 XcalableACC の開発と評価, 第7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, 筑波大学, 2015/10/20
35. 中尾昌広, 第8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, 第8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, 筑波大学大学会館 国際会議室, 2016/10/18
36. 大島 佑真, 藤田 憲久, 小林 涼平, 山口 佳樹, 朴 泰祐, “高位合成による FPGA の高性能計算への適用”, 2017年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2017) 論文集(ポスター発表), 2017.
37. 高山尋考, 山口佳樹, 朴泰祐, “FPGA による PCIe Gen3 および 100G 超光インターコネクトに関する実験評価:汎用高速演算クラスタシステムの実現に向けて”, FIT2016 第15回情報科学技術フォーラム, 第1分冊, pp.267-268, (C-018), 富山, 2016年9月.
38. T. Inui, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, “Theoretical study on the optical properties of polycyclic aromatic hydrocarbon chains and sheets based on real-space density functional theory”, 15<sup>th</sup> Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-15), Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, Taipei, Nov. 5<sup>th</sup>~7<sup>th</sup>, 2012.
39. M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, H. Umeda, K. Kamiya, K. Shiraishi, “A QM/MM study of nitric oxide reductase-catalyzed N<sub>2</sub>O formation”, 53<sup>rd</sup> Sanibel symposium, Georgia, USA, Feb. 17<sup>th</sup>~22<sup>th</sup>, 2013
40. T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, “HA-PACS/TCA: Tightly Coupled Accelerators for Low-Latency Communication among GPUs”, GPU Technology Conference 2013, San Jose, Mar. 18<sup>th</sup>-21<sup>st</sup>, 2013.
41. M. Kayanuma, K. Hanaoka, M. Shoji, “Theoretical Study on Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase”, The 51<sup>st</sup> Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kyoto, 2013/10/28-30.
42. M. Taguchi, Y. Komatsu, A. Sato, M. Shoji, M. Kayanuma, K. Kamiya, K. Shiraishi, K. Yabana, M. Umemura, “Theoretical investigation on the absorption spectrum of photosystem as a biomarker of extrasolar plants, ISTCP-8@Budapest, Hungary, 2013/8/25.
43. W. Tanaka, Y. Ujiie, K. Hanaoka, M. Shoji, M. Kayanuma, K. Kamiya, T. Ishida, F. Tomoike, S. Kuramitsu, K. Shiraishi, “Theoretical Investigation on the Substrate Specificity of Uridine-cytidine Kinase”, ISTCP-8@Budapest, Hungary, 2013/8/25.
44. Y. Ujiie, W. Tanaka, K. Hanaoka, M. Shoji, M. Kayanuma, K. Kamiya, T. Ishida, K. Shiraishi, Y. Machida, T. Murakawa, H. Hayashi, “Molecular dynamics study on the substrate binding free energy of Threonine Synthase”, ISTCP-8@Budapest, Hungary, 2013/8/25.
45. T. Odajima, T. Boku, T. Hanawa, J. Lee, M. Sato, R. Namyst, S. Thibault, O. Aumage, “Task Size Control on High Level Programming for GPU/CPU Work Sharing”, HPC in Asia Poster Session, ISC2013, Leipzig, June 17<sup>th</sup>, 2013.
46. Y. Komatsu, M. Umemura, M. Shoji, K. Yabana, K. Shiraishi, K. Kamiya, M. Kayanuma, A. Sato, “The energy transfer simulation for detecting

- photosynthetic biosignatures on extrasolar planets” , 1st Awaji International Workshop on “Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications” (1st AWEST2013), 2013/6/16.
47. M. Shoji, K. Hanaoka, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, H. Umeda, Y. Machida, T. Murakawa, H. Hayashi, “Theoretical elucidation on the reaction control mechanism in Threonine Synthase” , The 51<sup>st</sup> Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kyoto, 2013/10/28-30.
  48. T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, “Proprietary Interconnection with Low Latency for HA-PACS/TCA” , HPC in Asia Posters, ISC2014, Leipzig, Jun. 26, 2014.
  49. T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, “Tightly Coupled Accelerators Architecture for Low-latency Inter-node Communication between Accelerators”, SC14 Posters, New Orleans, Nov. 18, 2014.
  50. Hitoshi Murai, Masahiro Nakao, Takehiro Shimosaka, Akihiro Tabuchi, Taisuke Boku, and Mitsuhisa Sato, “XcalableACC - a Directive-based Language Extension for Accelerated Parallel Computing,” SC14, New Orleans, LA, USA, Nov. 2014.
  51. M. Umemura, Y. Miki, “Development of Applications with GPU/TCA - Research and Development on Unified Environment of Accelerated Computing and Interconnection for Post-Petascale Era” , JST/CREST International Symposium on Post Petascale System Software, Kobe, 2014/12/2-4.
  52. H. Umeda, T. Hanawa, M. Shoji, T. Boku, and Y. Shigeta, “Development of GPU-accelerated FMO Program with OpenFMO and its Performance Benchmark” , Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations, June 16-20 2015, Kobe, Japan.
  53. Toshihiro Hanawa, Hisafumi Fujii, Yuetsu Kodama, Taisuke Boku and Mitsuhisa Sato, “Evaluation of FFT Code for GPU Cluster Using Tightly Coupled Accelerators Architecture”, HPC in Asia Poster Session, ISC2015, 2015.
  54. Hiroyuki Noda, Ryotaro Sakai, Takaaki Miyajima, Naoyuki Fujita and Hideharu Amano, “Acceleration of the aggregation process in a Hall-thruster simulation using Altera SDK for OpenCL”, International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART2017), June7, 2017.
  55. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, A QM/MM study of amide formation reaction of Nitrile Hydratase, The 53<sup>rd</sup> Annual meeting of the biophysical Society of Japan, 2015/10/15, poster.
  56. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, Theoretical investigation on the conformation-charge relationship of the photosystem II oxygen evolving complex (PSII-OEC), The 53<sup>rd</sup> Annual meeting of the biophysical Society of Japan, 2015/10/15, poster.
  57. M. Shoji, Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Kayanuma, R. Harada, H. Umeda, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashib, QM/MM study on the L-threonine formation reaction of threonine synthase, QSCP XIX@taipei, poster, 2014/11/11-17.
  58. M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, “Theoretical study of the reaction mechanism of nitrile hydratase”, computational science workshop 2014, Tsukuba, 2014/8/21.
  59. Y. Ujiie, W. Tanaka, M. Shoji, R. Harada, M. Kayanuma, Y. Shigeta, T. Murakawa, H. Hayashi, “Free energy calculations of intermediate states of threonine synthase”, computational science workshop 2014, Tsukuba, 2014/8/21.
  60. W. Tanaka, Y. Ujiie, F. Tomoike, M. Shoji, M. Kayanuma, R. Masui, S. Kuramitsu, Y. Shigeta, “A theoretical study on interactions between uridine-cytidine Kinase and its Substrate”, computational science workshop 2014, Tsukuba, 2014/8/21.

61. H.Umeda, T.Hanawa, M.Shoji,T.Boku, Y.Shigeta, "Large-Scale MO Calculation with GPU-accelerated FMO Program", SC15, Austin USA, 11/15-20, 2015
62. H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta, "Singlet Fission Couplings Calculated with Complete-Active-Space Self-Consistent Field (CASSCF) Theory", The 57th Sanibel Symposium, Georgia, USA, Feb. 19th~24th, 2017, poster.
63. 3. Mashiro Nakao, XcalableACC: A Parallel Programming Language for Accelerated Clusters, The 6th AICS International Symposium, 理研 AICS, 2016/2/22
64. 4. Masahiro Nakao, Productivity and Performance of XcalableACC Language for Acceralated Clusters, The 7th AICS International Symposium, Integrated Research Center of Kobe University, 2017/2/23
65. Yuta Hirokawa, "Electron Dynamics Simulation with Time-Dependent Density Functioncal Theory on Large Scale Many-Core Systems", SC16 Student Poster, 2016.
66. Iman Firmansyah, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Capability assessment of a multiple-FPGA system for high-performance computing, ISC 2016 HPC in ASIA Posters, June, 2016.
67. Hirotaka Takayama, Yoshiki Yamaguchi and Taisuke Boku, Performance Assessment of PCIe Gen3 and 100+G High Speed Serial Link Communication on FPGAs, the International Symposium on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies, pp.1-2, July, 2016.

#### (4)知財出願

##### ① 国内出願 (3 件)

1. 名称：情報処理，シミュレーションプログラムおよびシミュレーション方法  
 発明者：中村朋健，重田育照，原田隆平  
 出願人：富士通，筑波大学  
 出願番号：2015-032321  
 出願年月日：2015/02/20
2. 名称：情報処理装置，シミュレーション方法，およびシミュレーションプログラム  
 発明者：中村朋健，重田育照，原田隆平  
 出願人：富士通，筑波大学  
 出願番号：2015-156702  
 出願年月日：2015/08/07
3. 名称：情報処理装置，指標次元抽出方法，および指標次元抽出プログラム  
 発明者：中村朋健，重田育照，原田隆平  
 出願人：富士通，筑波大学  
 出願番号：2015-156703  
 出願年月日：2015/08/07

##### ②海外出願 (0 件)

##### ③その他の知的財産権

#### (5)受賞・報道等

##### ①受賞

1. 埜敏博，情報処理学会 2013 年度山下記念研究賞，“Tightly Coupled Accelerators アー

キテクチャ向け通信機構の予備評価”

2. Best Paper Award, HEART2014 (Int. Symp. on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies), Yuetsu Kodama, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku and Mitsuhsa Sato, "PEACH2: FPGA based PCIe network device for Tightly Coupled Accelerators", Sendai, Jun. 9-11, 2014.
3. Best Poster Awards, HPC in Asia Posters, ISC2014, T. Hanawa, Y. Kodama, T. Boku, M. Sato, "Proprietary Interconnection with Low Latency for HA-PACS/TCA", Leipzig, Jun. 26, 2014
4. 電子情報通信学会リコンフィギャラブルシステム研究会若手優秀発表賞: 宮島敬明(慶應義塾大学), CPU-FPGA 環境におけるソフトウェアハードウェア混在パイプラインの構築, 電子情報通信学会リコンフィギャラブルシステム研究会, 広島, 2014年9月18日
5. 電子情報通信学会コンピュータシステム研究会若手優秀研究賞: 鶴田千晴(慶應義塾大学) 重力計算アプリケーションのPEACH2へのオフローディング, 電子情報通信学会コンピュータシステム研究会, 東京, 2015年4月17日
6. Best Paper Award: Chiharu Tsuruta, Yohei Miki, Takuya Kuhara, Hideharu Amano, Masayuki Umemura, "Off-loading LET generation to PEACH2: A switching hub for high performance GPU clusters, Proc. on International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies, Jun, 1-2, 2015.
7. Best Paper Award: Takaaki Miyajima, David Thomas, Hideharu Amano "Courier: A toolchain for Acceleration on Heterogeneous Platforms", IPSJ Transactions on System LSI Design Methodology, Vol.8, No.2 153-162, Aug. 2015.
8. HPC Challenge Class 2 Best Performance Award, Masahiro Nakao, Hitoshi Murai, Hidetoshi Iwashita, Takenori Shimosaka, Akihiro Tabuchi, Taisuke Boku, Mitsuhsa Sato, 2014-11-18.
9. 原田隆平, 重田育照, 「生物学的レアイベントを再現する効率的構造サンプリング手法の開発」若手招待講演賞, 第54回生物物理学会(2016)
10. 佐藤皓允, 庄司光男, 栢沼愛, 白石賢二, 矢花一浩, 梅村雅之, 重田育照, 「円偏光によるL型アミノ酸過剰生成機構の理論的探求」学生発表賞, 第54回生物物理学会(2016)
11. 中尾 昌広, 山下記念研究賞, 情報処理学会, 横浜, 2015/3/10

②マスコミ(新聞・TV等)報道

③その他

(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

現時点では該当なし。

②社会還元的な展開活動

現時点では該当なし。

## § 5 研究期間中の活動

### 5. 1 主なワークショップ, シンポジウム, アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
-----	----	----	------	----

2014年6月9日-11日	HEART2014	東北大学	100人	PEACH2 デモンストレーション
2014年10月24日	XcalableMP ワークショップ 2014	秋葉原 UDX 6F RoomF	60人	本 CREST が PC クラスタコンソーシアムと共催し、XcalableMP 言語の普及と成果発表、XcalableACC に関する成果発表を行った
2014年12月4日	Keio Technomole	東京国際フォーラム	300人	PEACH2 デモンストレーション
2015年10月29日～30日	国際ワークショップ LENS2015	秋葉原コンベンションホール	70人	ポストペタ CREST の朴 T, 堀 T, 南里 T の合同開催によるシステムソフトウェアと言語に関する国際ワークショップを主催した。研究代表者の朴は本ワークショップの実行委員長となり、開催をリードした。
2016年11月7日	XcalableMP ワークショップ 2016	秋葉原 UDX 6F RoomF	60人	本 CREST が PC クラスタコンソーシアムと共催し、XcalableMP 言語の普及と成果発表、XcalableACC に関する成果発表を行った
2017年4月6日	国際ワークショップ SPPEXA Workshop in Japan 2017	秋葉原コンベンションホール	70人	本 CREST が主催し、CREST の一部として実施している SPPEXA 共同研究を、他の複数の SPPEXA 研究チームと共に研究成果発表と XcalableACC 言語の普及活動を行った。

## § 6 最後に

本研究課題は本 CREST 領域の中では若干異質であり、特定のハードウェア技術に依存した形でハードウェアからアプリケーションまでの垂直統合を目指した研究であった。このことから、領域が本来求めているポストペタからエクサまでつながるシステムソフトウェアのオープン化という目的に如何に合致させるかという点は、研究代表者として常に留意していた。その上で、まず確実に公開可能かつエクサまでつながる研究成果として、XcalableACC コンパイラの開発が成果を挙げるよう担当グループとの連絡を密にし、運営してきた。また、アプリケーション開発については、TCA 機構に依存する部分と、それを睨みつつ従来型の GPU クラスタにも適用可能なライブラリ、例えば OpenFMO に組み込み可能な GPU 版 HF 行列ルーチンの開発にも当初から傾注して来た。一方、FPGA 周辺技術については、当初の PEACH2 ボードから、中間評価を経て汎用 FPGA ボードに移行し、さらに最新の光インターコネクトを利用した、TCA から一歩進んだ技術として AiS を目指し、これに必要な技術やツールを着々と築きつつある。H29 年度末のプロジェクト完了までにこの部分で成果を上げると共に、汎用 FPGA ボードを対象とした BSP, Verilog HDL, OpenCL の各レベルのモジュールのソースを公開する予定である。

こうした背景の下、我々のプロジェクトはハードからアプリケーションまでの連携が重要であったことから、全体ミーティングを年に3回程度行っており、さらに連携の強いグループ間では別途詳細な

打ち合わせを進め、例えば朴グループと村井グループでの TCA-API や XcalableACC コンパイラの改良に向けての協力や、天野グループと梅村グループの協業による宇宙物理 LET 計算の AiS 化といった、研究レイヤ縦断的な交流を活発に行い、それぞれの成果につなげた。この点については概ね運営を成功させられたのではないかと考えている。