

課題名 (タイトル) : :

高並列アプリケーションプログラムの研究開発

利用者氏名 : 長谷川 幸弘

理研での所属研究室名 :

本所 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 開発グループ アプリケーション開発チーム

報告内容

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係
 現在開発中の次世代スーパーコンピュータ(京速コンピュータ「京」)に向けて、様々な重要アプリケーションの開発を行っている。次世代スーパーコンピュータ向けのアプリケーション開発においては、数万のオーダーの並列数でのスケラビリティの確保と高性能 CPU の持つ性能を極限まで引き出すチューニングが必須となる。RICC をテスト環境として利用し、各種チューニングを試行・検証する。
2. 具体的な利用内容、計算方法
 実時間 DFT コードの MPI プロセスにおける通信性能向上を目的として、各種の改良を実施した。問題規模の増加に伴い計算コアの 1 つである部分対角化ルーチンの固有値求解部のコストが大きくなるのがこれまでの評価からわかっている。従来は、この部分に ScaLAPACK を使用していたが、スケラビリティが良くないことから、電通大・今村氏によって開発されている高速固有値ソルバ EIGEN を適用し性能を評価してきた。EIGEN は ScaLAPACK に比べて速いが、並列数(プロセス数)が増加すると、通信がボトルネックになり、性能の劣化が見えてくるのがわかっている。今年度は、通信部分をより最適化したバージョンの適用に向けた基礎評価を実施した。
3. 結果
 RSDFT では 3 重対角化バージョン(eigen_s)を使用しており、その処理はハウスホルダー変換部 (TRED1), Divide&Conquer 部 (DC), 逆変換部 (TRBAK) の 3 つで構成されている。問題規模が大きくなった時にボトルネックになっているのは、TRED1 の通信部分である。従来版と通信を改善した版の測定結果を図 1 に示す。元数は 40860, 並

列数は 16 で測定した。TRED1 の通信時間は 167.5 秒から 53.4 秒に約 1/3 に短縮されている。今回の改善は TRED1 の通信部分にのみに効果があり、他の部分では実行時間の変化は現れない。通信の呼び出し回数を少なくする改良であるため、問題規模、プロセス数が大きくなると更に効果が大きくなるのが期待できる。

4. まとめ
 EIGEN ライブラリの通信部分の改善効果を評価し、RSDFT への適用可能性を評価した。これに引き続き、高並列での評価についてを「京」において実施する。
5. 今後の計画・展望
 今年度に引き続き、高並列アプリケーションプログラムの性能評価および性能改善を実施する。
6. 利用した状況、継続して利用する際に行う具体的な内容
 基礎的な評価、低並列での評価については RICC で可能である。今後も継続して、通信性能の評価を実施するために利用する。

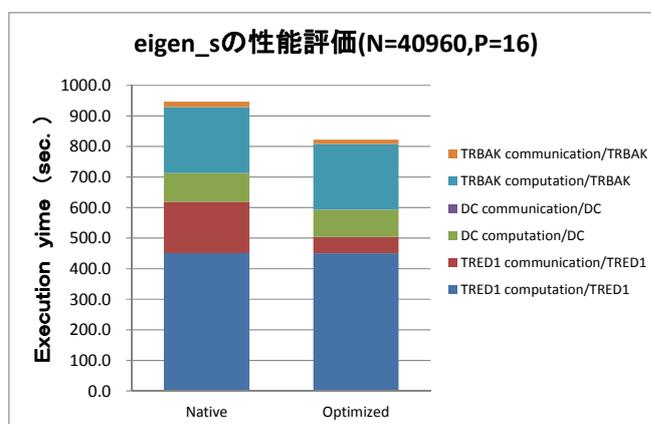


図 1. 通信時間の改善