

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 : 寺井 優晃

所属 : 計算科学研究機構 ソフトウェア技術チーム

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

次世代スーパーコンピュータ開発実施本部では、「京」本体のシステム開発と並行して、戦略分野ごとに選定された複数本の重点化アプリケーションに対してチューニングを実施し、システム評価に用いた。各アプリケーションにおいて、「京」の性能を最大限引き出す為には、単体実行時と高並列実行時の特性を両面から把握する必要がある。特に、高並列時の挙動として、演算量の偏り、経過時間に占める通信時間の割合及び通信の種類、メモリ量の増加等を定量的に評価することで大規模並列実行した際の特性を早期に明らかにし、問題があれば修正を行なった。本課題では、上記の開発において「京」以外の大規模並列実行が可能な開発環境として RICC を利用した。また、「京」が採用している SPARC64VIIIIfx プロセッサの従来版である SPARC64VII プロセッサを搭載した FX1 を用いた性能評価を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

昨年度に引き続き「京」開発プロジェクトでは、NICAM および格子 QCD アプリケーションの開発を実施した。特に本年度は「京」が完成し、全系システムが使用できるようになったため、昨年度に比べて大規模実行の性能検証という点で RICC の使用頻度は減少した。一方、本年度は、NAS Parallel Benchmark (NPB), IOR 等のベンチマークを用いた基礎性能の比較のために RICC および FX1 を利用した。また RICC では、インテル製コンパイラと富士通製コンパイラの両方が使用できるため、同じアーキテクチャに対する異なるコンパイラを用いた性能比較も行った。さらに、別途開発しているソフトウェアのオペレーティング・システム、コンパイラ依存の問題検証用に利用した。

1) NICAM

NICAM は、正二十面体非正力学モデルを採用した全球規模の大気大循環モデルである。従来の大気大循環モデルが球面調和関数展開によるスペクトル方が主流に対して、NICAM は有限差分法を用いることで超並列による超高解像度が特徴で、複雑なパラメタリゼーションを用いないで積雲等の雲解像が可能である。「京」開発プロジェクトでは、この NICAM について単体性能から高並列化に至る系統的なチューニングを実施している。チューニングの初期段階では、アプリケーション・コードから主要計算部分を含む独立したコード (カーネル) を抽出し、複雑な処理内容を単純化した上で、単体性能のチューニングを実施する。この際、大気・海洋・雪氷等の気候システムに基づく計算に沿って、流体計算を行う「力学過程」と外力項を計算する「物理過程」を把握した上でカーネルは抽出される。本年度は、これらカーネルに対するチューニングを行った上で、大規模並列実行時の序盤の動作確認に主に用いた。

2) QCD

格子 QCD は基本粒子クォークおよびグルオンの基本法則である量子色力学 (QCD) を 4 次元時空格子上に定式化した格子 QCD により、素粒子の強い相互作用の第一原理計算を行うものである。本年度は、昨年度に引き続き、並列実行時の動作確認に用いた。

3) その他ベンチマーク

複数 CPU アーキテクチャ間の性能評価として NPB を利用した。この中で、Nehalem 及び SPARC64VII の測定環境として RICC 及び FX1 を利用した。

3. 結果

おける経験や知見となって蓄積されていくことが期待される。

1) NICAM

320 プロセスまでの大規模並列を試行し、並列実行時の動作確認に利用した。

2) 格子 QCD

マルチカラーブロックオーダーリングを用いた SSOR の評価に関連して、4 スレッド及び 8 スレッド時の計算結果の比較、収束性の確認に利用した。

3) その他

複数 CPU アーキテクチャ間の性能評価として NPB を利用した。検証では、「京」における SPARC64VIIIfx (8 コア, 1 スレッド), FX1 における SPARC64VII (4 コア, 2 スレッド) を比較した。また, RICC では富士通製コンパイラとインテル製コンパイラによりロードモジュールを作成し, コンパイラの違いによる比較を行った。SPARC64VII と SPARC64VIIIfx は単純にコア数が異なるため比較はできないが, コア数増加によるチップの演算性能[Mop/s]の向上が確認できた。また, 同じアーキテクチャ上でのコンパイラの違いによる性能比較では, 大きな差がないことが確認できた。

4. まとめ

RICC は IA ベースの一般的なアーキテクチャを採用しており, SPARC64VIIIfx を採用している「京」と比較する上で都合が良かった。また, 過去数年の課題利用において並列数が数万のオーダーとなるアプリケーション開発の序盤において, RICC を用いることで高並列化に必要な指針を得ることができた。RICC は, 上記観点で有用なので, 来年度も利用していきたい。

5. 今後の計画・展望

開発プロジェクトは本年度 6 月に終了したが, 重点化アプリケーション等を用いた性能評価は「京」のシステム開発にフィードバックされた。今後, 各分野から提出されるアプリケーションの高並列・高性能化手法は, 「京」を含めた複数のアーキテクチャの中で検討され, 計算科学分野に

平成 24 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

なし

【国際会議などの予稿集、proceeding】

なし

【国際会議、学会などでの口頭発表】

なし

【その他】

なし