

課題名 (タイトル) :

種々なアプリケーションプログラムの性能解析

利用者氏名 : ○鈴木 惣一郎、丸山 直也、松田 元彦

所属 : 計算科学研究機構 プログラム構成モデル研究チーム

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

本研究は文部科学省委託業務「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」(平成 24 年 7 月 ~平成 26 年 3 月)に付随するものである。この調査研究の目的は、まず今後 5~10 年間に於いて計算科学から貢献できる社会的・科学的課題を抽出するとともに、その実現に向けて必要なアプリケーションを整理することである。さらに、それらのアプリケーションが将来の HPCI システムにおいて達成すべき要求性能を精査し、実際に将来の HPCI システムがその要求性能を満足可能か定量的に評価可能にすることが目的である。我々のグループでは、これらアプリケーションを簡略化した評価用ベンチマークの作成と、その性能評価モデルの構築を担当している。

2. 具体的な利用内容、計算方法

RICC では、各アプリケーションおよび作成したベンチマークに対して、Intel アーキテクチャにおける動作検証と性能解析を行う。

3. 結果

2012 年 9 月末に、ベンチマーク化の候補となる 12 のアプリケーションの選定が行われ、これらに対して、京コンピュータ、九州大学の FX10、RICC の超並列 PC クラスタを用いて動作検証を行ってきた。選定されたアプリケーションの内訳は、物質科学分野からは、古典分子動力学計算、密度汎関数法による第一原理計算、Hartree-Fock 法・分子軌道法による量子化学計算など 5 件。生命科学分野からは、分子動力学計算、細胞内シグナル伝搬シミュレーション、神経回路網シミュレーション、遺伝子ネットワーク推定の 4 件。ものづくり分野より、流体解析計算 3 件となっている。幾つかのアプリケーションについては、ベンチマー

ク化作業と、それを前提とした性能測定作業を実施中である。

4. まとめ

本年度は、RICC を用いて、選定した 12 のアプリケーションに対する動作検証と、ベンチマーク化の予備調査としての性能測定を行った。

5. 今後の計画・展望

来年度にかけて、ベンチマーク化の候補となるアプリケーションが数本増える予定である。これらの新規アプリケーションに対しての動作検証の一部を RICC 上で行う。また、ベンチマーク化作業を引き続き行い、完成したベンチマークに対する性能評価モデルの構築とその検証にも RICC を利用する予定である。