

課題名 (タイトル) :

FX100 を用いたチェックスイート性能評価

利用者氏名 :

○南 一生*, 黒田 明義*, 寺井 優晃*, 熊畑 清*, 宮本 健吾*, 北澤 好人*

所属 :

*理化学研究所 計算科学研究機構 運用技術部門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

本課題は、スーパーコンピュータ「京」(以下「京」と記す)開発時に作成したチェックスイートを用いて、FX100での性能解析を行い、システム性能の評価、チューニング効果の評価、チェックスイートの問題点の洗い出しを行うことを目的に利用を行った。

ここで用いたチェックスイートとは、HPCで利用される計算科学アプリケーションから、主要な計算箇所をループ単位の粒度で切り出したものである。切り出しに用いたアプリケーションは、各分野から、アルゴリズム特性に応じて幅広く選択されている。また用途に応じて、単体チェックスイート、並列チェックスイートに分類出来る。

チェックスイートは、「京」開発当初、システム評価並びにアプリケーションのチューニング指針を得ることを目的に構築された。「京」の運用では、システム(OS、ミドルウェア等)のエンハンス/メンテナンスに伴うアプリケーションの性能劣化を「未然に防止する」「検知する」ことを目的とし、以下の機能整備を行った。

- (1) 複数システム(マシン, コンパイラ)動作
- (2) 計算結果のバリデーションチェック機能
- (3) 性能検証の比較結果レポート機能
- (4) 一括実行機能
- (5) ジョブ多重度管理機能
- (6) 評価カーネル選択機能

現在開発が進められているポスト「京」のスーパーコンピュータ開発の場では、最新システムで測定された性能をもとに次世代システムの性能評

価を行う。このため、現段階で最新システムであるFX100での性能評価が重要である。本課題では、現状のチェックスイートを用いて、性能評価を行い、そこから問題点を洗い出し、チェックスイートの再整備を行った。更に実運用で発生した問題の解決に向けたテスト計算を実施した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

(1) NICAM カーネルによる FX100 性能確認

NICAMはJAMSTECで開発された全球を用いた気象解析シミュレーションアプリである。「京」上でこの並列チェックスイートを実行したところ、一時期通信時間の増加が見られた。今回、その原因を調査するために作成した、テストモジュールをFX100にて実行して動作検証を実施した。

(2) FrontFlow/blue カーネルの評価

FrontFlow/blue(以降 FFB)は東京大学革新的シミュレーション研究センターで開発された汎用熱流体シミュレーションコードであり、計算手法は有限要素法であり、用いる要素形状はテトラ、ピラミッド、プリズム、ヘキサなどの各種要素とそれらの混合を扱える。本アプリケーションはものづくりの現場で実用に供されており、我々は幾つかの主要演算部分(カーネルと呼称)に着眼して「京」と比しての性能評価、高度化の検討を行った。

(3) MD カーネルの評価と再整備

本カーネルは、分子動力学計算に特徴的な二体力計算を行っており、原子数を n として、 $O(n)$ で並び替えを行うことで、 $O(n^2)$ のリストアクセス主体の計算を連続アクセスに置き換えるとともに、

命令スケジューリングが効率的に働くようにループ形状を変形したものである。

昨年度は、京の性能・電力評価に使用した分子動力学カーネルループについて、その性能分析を行った。本年度は、実アプリケーションの評価の一環として、理研 AICS で開発されている分子動力学アプリケーション **genesis** から切り出した非結合 2 体力計算のカーネルループについて、切り出しの検証のために HOKUSAI でテスト実行を行った。

3. 結果

(1) NICAM カーネルによる FX100 性能確認

テストモジュールを FX100 にて実行して動作検証を実施したところ、NICAM 内の通信の同期待ちのタイミングを検証することが出来た。

(2) FrontFlow/blue カーネルの評価

今年度はアンロールされた形で書かれたループの再ループ化による SIMD の促進と、主要演算ループのアルゴリズムの大幅変更による性能改善の検討を行った。

FFB ではソースコード中の多くの箇所で、単純な実装ではループで書けるところをアンロールした形で実装している。そのため「FX100」では SIMD 幅及びメモリスループットが「京」よりも向上しているにも関わらず、多くのループが SIMD 化されずに性能向上しないという問題があった。そこで前年度に引き続き、SIMD 化を促進させるためのソース修正を各箇所に対して適用を行った。

「FX100」に限らず、近年のアーキテクチャでは「京」と比して SIMD 幅が増大しているため、本改善は広汎なアーキテクチャ上での性能改善に効果が有ると思われる。

これまで演算時間で最も大きな比重を占めていたカーネルは、右辺がシーケンシャル/ストライドアクセス、左辺へのストアがリストアクセスという構造となっていた。リストでは同じ配列要素へのストアが断続的に複数回含まれているため、キャッシュの有効活用ができなかった。今年度は本

カーネルのループ構造を大きく変更し、ストアが連続アクセスとなるよう書き直した。これによりストア時のミスへのペナルティの削減と、キャッシュの有効活用を大きく改善した。

(3) MD カーネルの評価と再整備

本年度は、実アプリケーションの評価の一環として、理研 AICS で開発されている分子動力学アプリケーション **genesis** から切り出した非結合 2 体力計算のカーネルループについて、その切り出しの検証のために HOKUSAI でテスト実行を行い、切り出し手順に問題がないことを確認した。

4. まとめ

「京」で構築されたチェックスイートを用いて、HOKUSAI での評価を行った。これらの解析を詳細に進めることで、今回新たにチェックスイート側の課題がいくつか顕在化した。FrontFlow/blue のカーネルでの結果はその代表である。また今までの検証結果をもとに新たな MD カーネル切り出しの確認も実施することができた。また実際にシステムで発生した問題の確認にも HOKUSAI を用いて検証することができた。

5. 今後の計画・展望

今回の課題実施によって得られた知見をもとに、更なる詳細の解析を行うとともに、より汎用かつ有用なチェックスイートの整備に力を入れる予定である。

6. 利用がなかった場合の理由

該当なし