

課題名 (タイトル) :

次世代スパコン向け格子 QCD コードの最適化

利用者氏名 : ○庄司 文由

所属 : 計算科学研究機構 運用技術部門

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

スーパーコンピュータ「京」は、2011 年度末の一部稼働を経て、2012 年 6 月末に完成し、同年 9 月末より共用を開始している。

これまで、システム開発・構築作業と並行し、開発されるシステム上で動作するアプリケーションの性能見積もり等、稼働後速やかに成果を上げるための準備を進めてきたが、計算科学研究機構運用技術部門では、アプリケーション開発者から提供を受けたソースコードから、ボトルネックの抽出、演算および通信の特性の分析等を行ない、「京」上での実装方法の検討や、「京」向けのチューニングを進めるとともに、「京」のコンパイラや並列ライブラリなどの高度化にフィードバックしている。

「京」と RICC はマルチコアや SIMD 機構などアーキテクチャ的に近いこともあり、チューニングの効果や結果の妥当性を確認するためのテストベッドとして非常に有用である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

今年度は、昨年度に引き続き、格子 QCD について、最新のアルゴリズムを適用したコードでのキャッシュメモリの動作や SIMD 化の効果を評価し、ネットワークポロジを意識したプロセスマッピングについて検討した。

3. 結果

実装の候補として、ループ間の依存性がないタイプと SSOR を利用した依存性のあるタイプの 2 つを検討した。前者は SIMD 化およびスレッド並列化が容易だが、収束に必要な反復回数が多くなる。一方後者は SIMD 化およびスレッド並列化のためにハイパープレーン法を適用する必要があるため、演算効率は低下するが、収束性は高いという特徴がある。

今年度の成果としては、まず SSOR 法の部分から 3 つ

のカーネルを抽出し、ノード単体性能におけるボトルネック解析を実施した。その結果、SIMD 命令率、整数ロードキャッシュアクセス待ち、浮動小数点ロードキャッシュアクセス待ち、命令スケジューリング、バリア同期待ちに問題があることがわかり、それらの点についてチューニングを実施した。その結果、3 つのカーネルで 3 ~ 4 割程度の性能改善を達成した。ただし、これらは京を使った成果であり、RICC を使った場合との比較は時間の関係上、実施出来なかった。

4. 今後の計画・展望

今年度で、単体ノード向けの格子 QCD コードの最適化は一応一区切りついた。来年度以降に実施する、多数ノードの向けの最適化は京で実施する予定である。