ポストペタアプリ性能WG成果報告書

「アプリ高速化事例集」

(WG活動期間:2014年3月-2016年2月)

2016年3月31日

サイエンティフィック・システム研究会

ポストペタアプリ性能WG

■商標について

記載されている製品名などの固有名詞は、各社/各機関の商標または登録商標です。

■著作権について

著作権は各原稿の著者または所属機関に帰属します。無断転載を禁じます。

■測定マシンについて

WG では以下の環境を利用させていただきました。

・スーパーコンピュータ「京」
・宇宙航空研究開発機構　JSS(JAXA スーパーコンピュータシステム)(FX1)、JSS2(FX100)
・核融合科学研究所　プラズマシミュレータ (FX100)
・九州大学　FX10
・高度情報科学技術研究機構　FX10
・諏訪東京理科大学　PC(Haswell)
・東京大学　Oakleaf-FX(FX10)
・名古屋大学　CX400/250、CX400/2550 、FX10、FX100
・理化学研究所　RIKEN Integrated Cluster of Clusters (RICC)(PRIMERGY RX200 S5　PC サーバ)、
　SCLS 計算機システム(FX10) 、HOKUSAI GreatWave(FX100)
・富士通社内機

［謝辞］　当 WG の測定結果は、記載の測定マシンを利用して得られたものです。

ポストペタアプリ性能WG成果報告書　目次

1. はじめに
   - 1.1　当報告書について
   - 1.2　WG活動概要
     - (1) 活動期間
     - (2) WGメンバー
     - (3) 活動実績

2. アプリケーションの測定評価
   - 2.1　圧縮性流体解析プログラムによるFX100の性能評価と高速化チューニング ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 高木亮治（JAXA）
   - 2.2　ハイブリッド非構造格子CFDソルバのメモリ階層構造への対応および有限体積法における再帰参照とSIMD化 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・坂下雅秀（JAXA）
   - 2.3　惑星磁気圏MHDコードの性能評価 ・・・・・・・・・・・・・・・深沢圭一郎（京大）
   - 2.4　LexADV-AutoMTおよびAutoLinASライブラリの性能評価 ・・・・河合浩志（諏訪東京理科大）
   - 2.5　LAMMPS/ReaxFFのFX100における性能評価とチューニング ・・・・平井宏俊（豊田中研）
   - 2.6　2次元プラズマ粒子(PIC)コードの測定評価および宇宙プラズマ５次元ブラソフコードVlasov5の測定評価・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・梅田隆行（名大）
   - 2.7　電磁場解析コードADVENTURE_Magnetic性能評価 ・・・・・・・・・荻野正雄（名大）
   - 2.8　核融合プラズマ流体解析コードGT5DおよびGKVの性能測定 ・・・井戸村泰宏（JAEA）
   - 2.9　生体分子粗視化シミュレータCafeMolのFX100での性能評価・・・検崎博生（理研）
   - 2.10 N体計算ベンチマーク ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・似鳥啓吾（理研）
   - 2.11 NGSデータ処理プログラムBWAの評価について ・・・・・・・・・野田茂穂（理研）
   - 2.12 FMOプログラムABINIT-MPの富士通系マシンでの性能評価 ・・・・望月祐志（立教大）

3. システムへのフィードバック
   - 3.1　フラグメント分子軌道法「ABINIT-MP」d関数積分ルーチンの結果異常について ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 千葉修一（富士通）
   - 3.2　核融合プラズマ流体解析「GKV」SSL2の性能改善について・・・・千葉修一（富士通）
   - 3.3　圧縮流体解析「UPACS-L」tune1コード:プレ処理の性能劣化について・・千葉修一（富士通）
   - 3.4　電解磁場解析「ADVENTURE_Magnetic」DAXPYのSIMD化について・・千葉修一（富士通）
   - 3.5　圧縮流体解析「UPACS-L」レジスタの不足、大きなループボディに対する最適化の適用・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・千葉修一（富士通）

4. まとめ

別冊　PRIMEHPC FX100 チューニングチュートリアル(仮)　（富士通）(5月ご提供予定)

1 はじめに

1.1 当報告書について

スーパーコンピュータ「京」やFX10、FX100などマルチコアクラスタマシンの利用が広がりつつある。これらのマシンではコア数が8、16、32と急激に増加しており、多くのコア数（FX100ではもはやメニーコアと呼んで良いであろう）を活用する技術がユーザーに求められている。そのため、多くのコアを持つクラスタマシンに適したプログラミング技術を広く一般ユーザーに広めることを目的に当WGは発足した。

本WGでは会員が開発した各分野のアプリケーションプログラムを対象に、前半では「京」およびFX10を用いて、後半では最新鋭のFX100を用いて性能分析・評価およびチューニングを実施することで、マルチコアクラスタマシンに向けた並列プログラミングスタイルの検討/ノウハウ共有を行った。本WGでは、これまで比較的対象とする機会が多かった連続体系のアプリケーションに加えて、分子動力学系、遺伝子解析など新しいアプリケーションプログラムの評価も実施できた。

本WGの活動を通じて得られた成果である各アプリケーションプログラムの性能測定結果及びその評価、並列化プログラミングおよび高速化チューニングの各種ノウハウなどは実践的事例として本報告書にまとめられた。また別冊としてPRIMEHPC　FX100チューニングチュートリアルも作成した。これらの成果が、今後のマルチコアクラスタ方式のスーパーコンピュータを利用する上で広く一般ユーザーの一助となれば幸いである。

1.2 活動概要

(1)活動期間

2014年3月～2016年2月

(2)WGメンバー

			氏名	機関(2016年2月22日現在)
会員	担当幹事		石井　克哉	名古屋大学
	推進委員	（まとめ役）	高木　亮治	宇宙航空研究開発機構
			坂下　雅秀	宇宙航空研究開発機構
			深沢　圭一郎	京都大学
			河合　浩志	諏訪東京理科大学
			堀之内成明	(株)豊田中央研究所(～2014年12月)
			平井　宏俊	(株)豊田中央研究所(2015年1月～)
			梅田　隆行	名古屋大学
			荻野　正雄	名古屋大学
			井戸村泰宏	日本原子力研究開発機構
			検崎　博生	理化学研究所
			似鳥　啓吾	理化学研究所
			野田　茂穂	理化学研究所
			南　　一生	理化学研究所
			望月　祐志	立教大学
賛助会員(富士通)	推進委員	（まとめ役）	井上　晃	富士通(株)
			青木　正樹	富士通(株)
			山中　栄次	富士通(株)
			三吉　郁夫	富士通(株)
			千葉　修一	富士通(株)
			内藤　俊也	富士通(株)
			本藤　幹雄	富士通(株)
			錦　　龍生	富士通(株)
			向井　優太	富士通(株)
	オブザーバ		森重　博司	富士通(株)
			市川　眞一	富士通(株)

(3)活動実績

■第1回会合 : 2014年3月25日(火)　富士通(株)本社　出席者:会員=12名/富士通=8名
・メンバー紹介
・各アプリケーションプログラムの紹介
・富士通からの情報提供 (Post-FX10関連)
・活動の進め方の検討
・成果物の検討

■第2回会合 : 2014年7月1日(火)　富士通(株)本社　出席者:会員=12名/富士通=8名
・会員からの情報提供
-「京」でのアプリケーションカーネル性能評価 [南委員]
・富士通からの情報提供
-FX10後継機の基礎性能 [青木委員]
-FX10後継機PAツールの説明 [青木委員]

■第3回会合 : 2014年10月1日(火)　富士通(株)本社　出席者:会員=12名/富士通=9名
・アプリ性能評価報告
-UPACS [高木委員]、-MHDコード [深沢委員]、-ADVENTURE_Magnetic [荻野委員]
-BWA [野田委員]
・富士通からの情報提供
-理研チェックスイートでのFX10後継機の性能評価 [青木委員]
-FX10後継機における通信オーバーラップ [三吉委員]

■第4回会合 : 2014年12月10日(水)　富士通(株)本社　出席者:会員=10名/富士通=8名
・アプリ性能評価報告
-非構造格子CFDソルバ [坂下委員]、-構造コード [河合委員]
-GT5D、GKV [井戸村委員]、-ABINIT-MP [望月委員]
・前回のアプリ性能評価の追加調査報告
-ADVENTURE_Solid [内藤委員]、-BWA [錦委員]
・富士通からの情報提供
-FX100紹介 [青木委員]

■第5回会合 : 2015年3月17日 (火)　富士通(株)本社　出席者:会員=13名/富士通=11名
・WGメンバーの交代について
・アプリ紹介
-加速分子動力学法 [平井委員]
・アプリ性能評価報告
-プラズマ粒子コードの性能測定 [梅田委員]
-生体分子粗視化シミュレータ「CafeMol」の性能測定 [検崎委員]
-N体計算ベンチマーク [似鳥委員]
・前回までのアプリ性能評価の追加調査報告
-UPACS-L [千葉委員]、-MHDコード [内藤委員]、-GKV [千葉委員]、-ABINIT-MP [千葉委員]
・今後の測定評価スケジュールの検討
・「SS研会員見学･意見交換会」「合同分科会の若手検討会」について

■第6回会合 : 2015年7月1日(水)　富士通(株)本社　出席者:会員=10名/富士通=9名
・会員からの情報提供
-UPACS [高木委員]、-LAMMPS [平井委員]、-CafeMol [検崎委員]、
-N体計算ベンチマーク [似鳥委員]
・富士通からの情報提供
-ADVENTURE_Magestic(荻野委員)で出たA/Iの報告 [千葉委員]
-GT5D(井戸村委員)で出たA/Iの報告 [三吉委員]

■第7回会合 : 2015年10月8日(木)　富士通(株)本社　出席者:会員=11名/富士通=9名
・会員からの情報提供
-有限体積法における再帰参照とSIMD化 [坂下委員]
-電磁場解析ADVENTURE_MagneticのFX100性能評価 [荻野委員]
-有限差分カーネルの最適化 [井戸村委員]
・富士通からの情報提供
- GKVカーネルの通信/演算オーバラップ [三吉委員]

■第 8 回会合 ： 2015 年 12 月 3 日(木)　富士通(株)本社　出席者:会員=12 名/富士通=11 名

・会員からの情報提供

-LexADV-AutoMT および AutoLinAS (FX100 でのベンチマーク) ［河合委員］

-プラズマ粒子(PIC:Particle-In-Cell)コードとブラソフコードの性能測定［梅田委員］

-BWA の FX100 性能報告［野田委員］

・富士通からの情報提供

-圧縮流体解析「UPACS-L」

レジスタの不足、大きなループボディに対する最適化の適用［千葉委員］

-核融合プラズマ流体解析「GT5D」

FMA 命令の適用について［千葉委員］

・報告書の目次作成

■第 9 回会合 ： 2016 年 1 月 13 日(水)　富士通(株)本社　出席者:会員=12 名/富士通=10 名

・会員からの情報提供

-MHD コードの FX100 における最適化［深沢委員］

-LAMMPS/ReaxFF の FX100 における性能評価とチューニング　［平井委員］

-FMO 計算プログラム ABINIT-MP の現状の評価と今後の展開　［望月委員］

・富士通からの情報提供

-核融合プラズマ流体解析「GT5D」［千葉委員］

-Vlasov5D 性能評価（ご報告）［内藤委員］

-GT5D カーネルのプリフェッチ強化余地について［三吉委員］

・FX100 チューニングチュートリアルの目次案の検討

■第 10 回会合 ： 2016 年 2 月 22 日（月）　富士通(株)本社　出席者:会員=9 名/富士通=9 名

・報告書レビュー、FX100 チューニングチュートリアルレビュー、報告書完成

・次期 WG のテーマ検討