SS研
ポストペタアプリ性能WG資料

FUJITSU
shaping tomorrow with you

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

2015年3月17日
富士通株式会社
千葉　修一

Copyright 2015 FUJITSU LIMITED

サマリー（1）

FUJITSU

- 課題

  最適化オプション -O3により結果異常となる

- 対象コード
  - フラグメント分子軌道法プログラム「ABINIT-MP」
  - d関数積分ルーチン
- 事象
  - d関数積分ルーチンの影響で以降の処理に問題が発生
  - FMO計算の1stステップである Monomer-SCCで収束せず
  - 最適化オプション-O2では問題なし

Copyright 2015 FUJITSU LIMITED

サマリー（2）

FUJITSU

■回答

■結果異常の原因

- コンパイラの障害

■対処

- 修正提供済み、保守日などの関係で次期に違いあり
- 「京」16版　　(2014年3月)
- FX10　V1.0L30　(2013年9月)

■コンパイラへのフィードバック

- コンパイラのバージョンの判り難さを改善（中期課題）

Copyright 2015 FUJITSU LIMITED

障害内容

FUJITSU

■障害番号 PH04880

■発生条件

以下の要因の複合条件により発生する場合がある

■ Fortran/C/C++において、最適化オプション -O3を利用

■ ループ内に子ループが存在し、制御変数以外に変数(以降,n)が存在

■ 子ループでnが更新、またはnを添え字とする配列(以降,b)を定義

■ ループ外の分岐においてbが参照

■内容

配列の添え字の更新処理を誤って最適化

■回避方法

最適化オプション -O2を利用

サンプルコード

```
do i=1,m
n = 0
  do j=0,1
    n = n + 1
    b(n) =  1
  enddo
  if (c(1) < 10) then
    a(1) =  b(1)
  endif
enddo
```


Copyright 2015 FUJITSU LIMITED

分析

FUJITSU

■コンパイラの調査

- ■FX10向け最新コンパイラで結果異常がないことを確認
- ■「京」向け標準コンパイラで結果異常を確認
- ■Technical Computing Suite V1.0L30相当で修正された障害

■コンパイラのバージョン情報(frtpx -V)

- ■最新コンパイラ / FX10　－　問題なし

frtpx: Fujitsu Fortran Driver Version 1.2.1
P-id: T01641-04 (Jul 10 2014 14:29:18)

- ■標準コンパイラ / 「京」　－　問題あり

frtpx: Fujitsu Fortran Driver Version 1.2.0
P-id: L30000-07 (Jul 30 2013 08:57:22) K-1.2.0-15

- ■標準コンパイラ / 「京」　－　問題なし

frtpx: Fujitsu Fortran Driver Version 1.2.0
P-id: L30000-08 (Dec 5 2013 15:09:10) K-1.2.0-16-3

バージョン表記が異なり判断がつきにくい

Copyright 2015 FUJITSU LIMITED

対処

FUJITSU

■コンパイラの変更

- ■「京」においては、FX10と同等バージョンのコンパイラを利用することで対処
- ■「京」とFX10 の対応付けについては利用手引書で開示

  「利用手引書(1.35版)」では「17.「 京」と FX10 の言語環境」

- ■環境を変更させることで対応

  「利用手引書(1.35版)」では「4.3.コンパイル環境設定」

```
% source /home/system/Env_base_1.2.0-16-3
```


Copyright 2015 FUJITSU LIMITED

コンパイラへのフィードバック

FUJITSU

- バージョン表記の統一
  - バージョンを「京」、一般展開機でバージョン情報を統一
  - バージョン表記で環境の一致性を判断
  - 開発環境のポータビリティの向上へつなげる
- チェックコンパイラの利用促進
  - 結果異常障害については、チェックコンパイラを提供済み
  - 利用を促進することで早期の自己解決へ

Copyright 2015 FUJITSU LIMITED

FUJITSU

shaping tomorrow with you