



6 アプリケーションの性能と最適化

—アプリケーションによるペタ FLOPS 性能の実証—

応
専

南 一生 井上俊介 熊畑 清
黒田明義 寺井優晃 長谷川幸弘

理化学研究所

「京」の持つ8万ノード・64万コアのすべてを効率よく利用するためには、ユーザはシステムに導入された新機能や強化された機能を十分に発揮・活用し、加えてアプリケーションに内在する固有の超並列性を最大限に引き出さなければならず、そこには高度な利用技術が必要とされる。我々はプロジェクトの当初から、アプリケーションを用いたシステムの性能の検証と実証を行ってきた。本稿では、その経験から得られたアプリケーションの最適化とその性能について具体的な事例を交えて解説する。

実証アプリケーションの選定

「京」のアプリケーション実行性能の検証と実証を目的に、スーパーコンピュータにおいて高い性能での動作実績を持つ6本のアプリケーションを

さまざまな応用分野から選定した。地球科学分野のNICAM¹⁾、Seism3D^{2), 3)}、ナノ分野のPHASE⁴⁾、RSDFT⁵⁾、工学分野のFrontFlow/blue⁶⁾、物理分野のLatticeQCD⁷⁾である。これらは、表-1に示すような要求B/F値（プログラムが要求するメモリバンド幅と浮動小数点演算速度の比）や並列化の実装手法などの計算機科学的特性の違いが考慮され、偏りがないように選ばれている。たとえば、NICAM、Seism3D、FrontFlow/blue、LatticeQCDの要求B/F値は高いが、PHASE、RSDFTは低い。NICAM、Seism3D、LatticeQCDは隣接通信が中心であるが、FrontFlow/blue、PHASE、RSDFTは大域通信が中心となる。このような6本のアプリケーションの特徴にあわせて、プロダクション・ランも見据えながら、後述するさまざまな改良が加えられた。

アプリケーション名	分野	概要	物理モデル/手法	計算機科学的特徴					
				演算			通信		
				演算量	B/F比	メモリアクセス	タイプ	回数	データ量
NICAM	地球科学	全球解像大気大循環シミュレーション	大気大循環有限差分法	$O(N)$ N : メッシュ数	高	連続	隣接	少ない	小
Seism3D	地球科学	地震伝播・強振動シミュレーション	地震波動有限差分法	$O(N)$ N : メッシュ数	高	連続	隣接	少ない	小
PHASE	ナノ	平面波展開第一原理分子動力学解析	密度汎関数法波数空間法	$O(N^3)$ N : 原子数	低	連続	大域 全対全含む	多い	大
RSDFT	ナノ	実空間第一原理分子動力学解析	密度汎関数法実空間差分法	$O(N^3)$ N : 原子数	低	連続	大域	多い	大
FrontFlow/blue	工学	Large Eddy Simulation (LES) による非定常流解析	非圧縮非定常流体有限要素法	$O(N)$ N : メッシュ数	高	リスト	大域	少ない	小
LatticeQCD	物理	LatticeQCD シミュレーションによる素粒子・原子核解析	LatticeQCD 経路積分法	$O(L^5/a^7)$ L : 格子サイズ a : 格子間隔	高	連続	隣接	多い	小

表-1 アプリケーションの概要と計算機科学的特徴

最適化の手順

プログラムの性能はさまざまな要因によって決まるため、それらが混在した状態では最適化の効果を正しく評価できない。そのため問題の分離を狙い、以下で述べる (A) ~ (F) の手順で最適化作業を実施した。また、我々は「京」のシステム開発と並行してアプリケーションの最適化を実施する必要性があったため、対象をより限定して模擬できる計算機（たとえば、ノード単体性能は京試作機、並列性能ならば可能な限りノード数の大きな並列計算機）を使って開発を進める方法を採用した。

(A) 並列特性分析

ソースコードの反復・分岐等の論理構造を静的に解析し^{☆1}実行時間の測定結果をもとに、プログラムから処理ブロック（計算ブロックと通信ブロック）を抽出する。計算ブロックごとに、非並列/完全並列/部分並列等の計算特性、計算量の問題規模 (N) に対する依存特性（たとえば、 N に比例、 N^2 に比例等）を把握する。通信ブロックごとには、隣接通信（隣のプロセスとの1対1通信）、大域通信（全プロセスもしくは一部のプロセス間の集団通信）等の通信特性、通信データ量の問題規模に対する依存性（たとえば、分割された領域の隣接面に比例、領域体積に比例等）を把握する。また、処理ブロックごとにスケラビリティを調査し、高並列時の挙動を分析する。

(B) 計算・通信カーネル評価

(A) で得た情報をもとに、計算・通信ブロック群を同種の計算と通信に分類する。それらの中からターゲット問題実行時に主要部となるブロックを計算カーネル、通信カーネルとして洗い出す。

(C) ノード単体性能向上

計算カーネルをテストプログラムとして切り出し、要求 B/F 値とキャッシュの利用効率から推定性能の見通しをたてる。その上で配列次元の入れ替え、配列融合、ループの組替え等さまざまな性能向上策を

試行し、それらの効果を評価する。

(D) 高並列化

(A) の高並列時の挙動の評価結果に基づき、通信カーネルの高並列最適化を試行し、その効果を評価する。大規模なターゲット問題を想定した次の4点の評価が重要である。(1) 非並列部の有無とそのコスト、(2) プロセス間のロードバランス、(3) 隣接通信のコスト、(4) 大域通信のコスト、である。演算ブロックごとの計算特性、通信ブロックごとの通信特性から評価モデルを作成し、演算および通信の挙動を予測・評価する。

(E) 高性能化策の実装

(C) と (D) の試行結果を合わせて実装し、並列計算機で評価する。

(F) 「京」での最適化

(E) まで実施されたプログラムの「京」の上での性能を確認し、さらに最適化を施す。実機での測定結果と (C) (D) で実施した評価結果と比較し、著しい差異がある場合はその原因を究明し、対策を実施する。

NICAM

●アプリケーション概要

NICAM (Nohydrostatic ICosahedral Atmospheric Model) は、正二十面体非静力学大気モデルを採用した、全球を対象とする大気大循環モデルの1つである。地球シミュレータ (ES) 上で開発されてきた経緯により、ベクトルプロセッサを意識しており、ESにおいて最高性能が得られるようにコーディングされている。その一方で、T2K-Tsukuba, T2K 東大, Cray XT4, RICC 等の異なるアーキテクチャでの大規模実行の動作実績があり、ポータビリティの高いソースコードとなっている。

●ノード単体性能向上

ノード単体性能の最適化では、流体計算を行う「力学過程」と外力項を計算する「物理過程」を把握した上でカーネルの抽出を行った。力学過程から

^{☆1} プログラムの論理構造を静的に解析し最適化を支援するツール K-scope を開発した。2012 年度中の公開を予定している。

は、水平発散項 (divergence), 水平拡散項 (diffusion), 鉛直方向の音波・重力波の陰解法 (divdamp3d), 単調性を保存したリミッタ付き風上差分の発散項 (divergence2_rev), 水平勾配項 (gradient), 鉛直方向のフラックス収束計算 (src_flux_convergence), 物理過程からは雲微物理 (NSW6) についてカーネルを抽出した。

NICAM の力学過程カーネルの特徴を整理すると、(1) 最内ループのループ長が長く、ベクトルパイプラインを意識したコーディングであり、メモリバンド幅を要求すること、(2) ループ内に出現する配列数が多い一方、キャッシュが効く配列もあること、が挙げられる。物理過程カーネルの特徴を整理すると、(3) 1つのループボディの中に大量のスカラ変数が中間変数として使われておりレジスタスピル等による演算待ちが発生しやすいこと、が挙げられる。NICAM 全体の特徴は、(4) 実行時に問題サイズが与えられるため、コンパイル時にループ長が不明なこと、(5) ソースコードが巨大でボトルネックが比較的満遍なく分布しているため最適化個所が多いこと、(6) IF 文による実行処理の分岐が多いコーディングであることが挙げられる。

(1), (2) については、配列添字の入れ替えと配列融合を軸としたデータのプリフェッチとキャッシュのラインアクセスの有効利用、(3) については、コンパイラの改善を前提とした効率の良いスケジューリング、(4), (5) については、コンパイラが提供する自動並列化とディレクティブの有効利用、(6) については、マスク付き SIMD (Single Instruction Multiple Data) またはリストベクトルの採用、等を検討した。

結果、divergence では実行効率が 2.0% から 16.7% まで向上した。その他のカーネルについてもおおむね 10 ~ 15% に達した。

約 8 万ノードを用いる最終ターゲット問題では、初期条件、境界条件等の入力ファイルが 28TB に達

する。現在はウィーク・スケーリング^{☆2}の測定と評価を進めている。

Seism3D

●アプリケーション概要

Seism3D は、有限差分法を用いて数値的に粘弾性方程式を時間発展させることにより、地震伝播と津波を連動して解く、大規模な並列化に対応したプログラムである。Seism3D は以下の 6 つの計算カーネルから構成される。

- (a) 応力空間微分計算
- (b) 速度空間微分計算
- (c) 応力時間積分計算
- (d) 応力時間積分吸収計算
- (e) 速度時間積分計算
- (f) 速度時間積分吸収計算

●ノード単体性能向上

Seism3D の主要な 6 つの計算カーネルは、メモリバンド幅を要求し、要求 B/F 値が高いことが特徴として挙げられる。「京」の実効メモリバンド幅の実測値が 46GB/s であり、ハードウェアの B/F 値が 0.36 であることを踏まえると、プログラムの要求 B/F 値から各カーネルの性能値を推定できる。ノード単体性能は、(1) 各カーネルが推定性能値まで達しているか、(2) 推定性能値に達していない原因は何か、(3) さらに性能向上は可能か、の 3 つのステップを踏むことにより検証と最適化を進めた。

応力、速度積分部は、応力成分、速度成分がストリーム配列 (再利用性のない配列) であり、最内に 10 配列程度のアクセスが発生する。その場合、L1 データキャッシュでのキャッシュ競合が発生しやすい状況であるため、推定値に達していないケースが散見された。このようなループの場合はループ分割や配列融合など、ストリーム配列の局所的なアクセス数を減らすことにより推定性能値まで性能を改善できた。

微分計算部は各軸方向の差分計算が発生するため、

☆1 ノードで実行する問題規模を一定にして並列数を増やす方法。一方、全体の問題規模を一定にして並列を増やす方法をストロング・スケーリングと言う。

```

!$OMP DO SCHEDULE(static,1)
do J = 1, NY
  do I = 1, NX
    do K = 3, NZ-1
      DYV(k,I,J) = (V(k,I,J) - V(k,I,J-1))*R40 &
        - (V(k,I,J+1) - V(k,I,J-2))*R41
    end do
  end do
end do
    
```

図-1
Seism3D y方向速度差分項 (cyclic分割スレッド並列化)

キャッシュの利用効率が各差分軸によって変化する。この場合、ループ融合により元の複数ループよりも相対的に要求 B/F 値を下げる事が可能となり、性能を改善できた。また、要求 B/F 値を下げる他の手法には、図-1のような OpenMP ディレクティブによる cyclic 分割を指定する方法がある⁸⁾。これにより最外軸において1つのスレッドが L2 キャッシュにロードしたデータを他のスレッドが再利用可能となる。要求 B/F 値が 4.8 から 2.4 まで下がった結果、実行効率は 7.5% から 13.6% まで向上した。本手法はコア間で L2 キャッシュを共有する「京」の特性を活用している。

●高並列化

Seism3D は「京」への移植に伴い、地震動に加えて津波のシミュレーションに対応する改良が行われている。その改良に伴い、Seism3D は 3次元分割から水平方向のみの 2次元分割に変更されたため、通信部は隣接 4ノードにおける境界データの交換のみとなった。2次元分割モデルを Tofu インターコネクト上にマッピングした場合、1ホップによる隣接通信が保証され、ウィーク・スケーリングによる測定でも通信コストの増加は見られなかった。現在、5PFLOPS の規模においてもプログラム全体の実行効率は 17% を超えており、要求 B/F 値が高いプログラムでも「京」で高い実行効率を確保できた事例である。

PHASE

●アプリケーション概要

PHASE は、擬ポテンシャルと密度汎関数法による

ナノ材料第一原理分子動力学プログラムである。平面波基底を用いることで、多様な物質に対して高精度な電子状態計算が可能である。なかでも、結晶・アモルファスなどの解析を得意とし、ミクロな観点から量子論効果を厳密に解析し、新規材料開発につながる計算を目指している。「京」でターゲットとする計算対象は、半導体のデバイス特性や燃料電池の輸送特性など、新材料やエネルギー問題が挙げられる。

●ノード単体性能向上

電子状態計算とは、離散化されたハミルトニアン演算子に対する固有値問題である。その大部分は演算密度が高く、行列-行列積 (DGEMM) の形に書き出すことで高効率が見込める。直交化についても依存関係を分離することで、DGEMM への書換えが可能となり、高性能が期待できる。

●高並列化

PHASE のオリジナル並列手法は、エネルギーバンド並列を採用しており、一部の処理では波数空間並列を用いていた。この両並列手法間には、データ持ち替えに伴う全体通信が発生し、並列特性分析により、「京」の持つ 8 万ノードという高並列性への対応が不可能であることが分かった。したがって、最適化における最大の作業は、両並列手法間の全体通信を削減するために、全面的にエネルギーバンドと波数空間の二軸並列を実装することであった。

PHASE では、電子の状態を波数空間でフーリエ級数展開することで離散化するため FFT (Fast Fourier Transform) を用いる。一般に FFT は、転置転送に伴う全体通信のため高並列化が困難とされる。上記の二軸並列を採用すると、波数方向に新たな通信は発生するが、転置転送に伴う全体通信は、小規模な部分空間内にパックされ、多重実行も可能となる。大規模計算では、FFT の演算量は DGEMM に比べて増大しないため、通信性能が向上すれば、相対的に FFT の比率が下がり、並列性能の向上が見込める。PHASE の最適化では、これらの利点と欠点を総合して高性能が得られるかがポイントであった。性能見

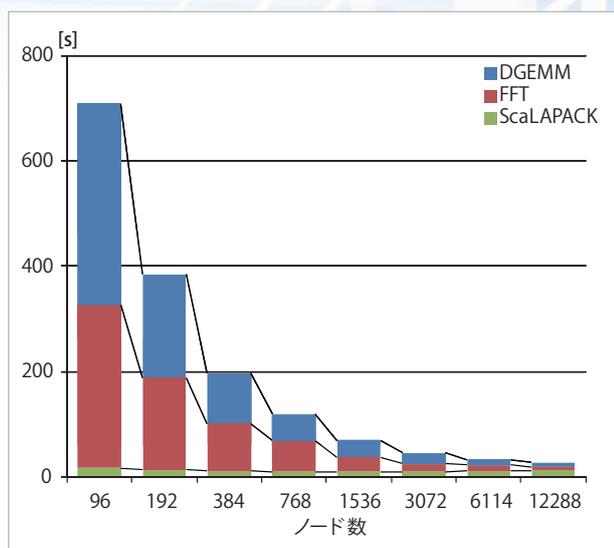


図-2 PHASEの並列性能 (SiC 3800 原子 SCF1 回)

積りの結果、二軸並列の方が高い性能が見込めると判断し作業を実施した。

結果として、パワーデバイスとして用いられるシリコンカーバイド (SiC) 16,384 原子の螺旋転移の電子状態の計算を行い、12,288 並列では 28.8% の実行効率、36,864 並列では 21.3% もの実行効率を達成した。二軸並列による FFT の影響も、性能悪化要因となっていないことが確認できた (図-2)。

また当初の見積り通り、二軸並列の効果として並列数の上限が拡大した。1 万原子ほどの電子状態計算を電子数より遙かに多い「京」の全ノードを用いての計算が可能となり、計算科学的に画期的な成果が得られた。

RSDFT

●アプリケーション概要

RSDFT (Real Space Density Functional Theory code) は密度汎関数法による電子状態計算を行うプログラムである。ナノスケールでの量子論的諸現象を第一原理に立脚して解明し、新機能を有するナノ物質・構造の予測を行うことを目的としている。実空間に格子を導入し各格子上に離散化された物性値を差分法で計算する。並列処理は、空間格子をいくつかの小領域に分け、それぞれの小領域をそれぞれ

のノードに対応させることで実装されている。演算の主要部は、前述の PHASE と同様に行列 - 行列積 (DGEMM) で処理される。一方、通信は大域的なものが多く高並列で通信ボトルネックとなることが予想される。本章では最適化のポイントになる高並列化について解説する。

●高並列化

並列特性分析から、オリジナルのプログラムに実装されている空間並列のみでは、「京」の持つ 8 万ノードの高並列性に対応できないことが分かった。そのため、前述の PHASE と同様に二軸並列を採用し、空間並列に加えてエネルギーバンド並列を実装した⁹⁾。これによりエネルギーバンドに関する通信が新たに発生するが、空間並列の全プロセスを対象とする大域通信が、グルーピングされたプロセス群単位となり、通信コストを削減できる。RSDFT における最適化のポイントは、このように増加と減少の両面を持つ通信コストをいかに最小化できるかである。

通信コストの大きいプログラムの場合、性能を向上させる一番効果的な方法は MPI (Message passing Interface) 関数の呼び出し回数を削減することである。関数呼び出し回数の削減は複数回の呼び出しをまとめることで実装できるが、それによって 1 回あたりの通信データ量は大きくなる。このタイプの通信は「京」の MPI に実装されている Tofu 向け集団通信アルゴリズム Trinaryx3^{☆3} を利用できる。RSDFT では、二軸並列、Trinaryx3 の適用、さらに Tofu インターコネクトへのプロセスマッピングの組合せによって、通信コストの大きな削減が見込める。二軸並列化されたプロセス群 (サブコミュニケータ) の形状と並び (データの連続性) を意識して、プロセス全体のマッピングを決める必要があり、プログラムの実行時にマッピング情報をテキストファイルで与えることで実現している。図-3 の例では二軸並列化された 3 つのプロセス群 (サブコミュニケータ) の形状と並び (データの連続性) を意識して、プロセス全体のマッピングを決める必要があり、プログラムの実行時にマッピング情報をテキストファイルで与えることで実現している。図-3 の例では二軸並列化された 3 つのプロセス群 (サブコミュニケータ) の形状と並び (データの連続性) を意識して、プロセス全体のマッピングを決める必要があり、プログラムの実行時にマッピング情報をテキストファイルで与えることで実現している。

☆3 Tofu インターコネクトの性能を引き出すため、3 つのネットワークインターフェースを用いて通信経路の重なりがないように実装されたアルゴリズム。

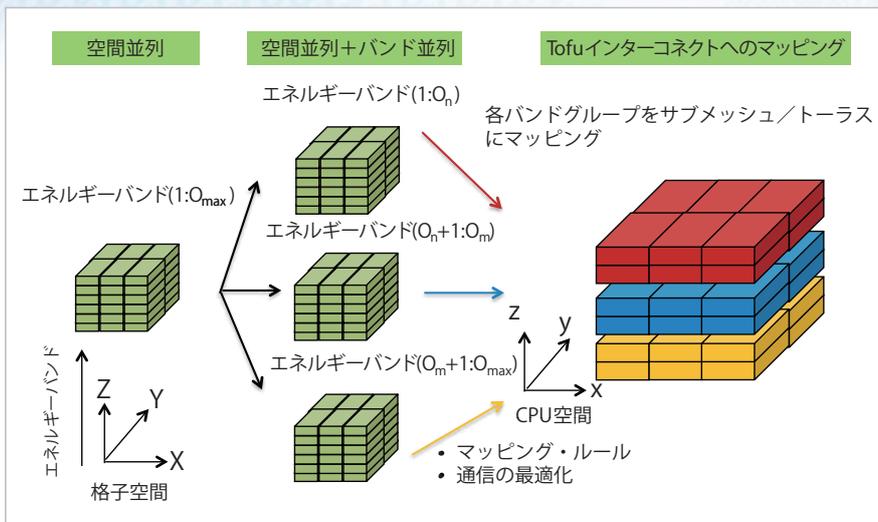


図-3 二軸並列化されたプロセスのTofuインターコネクトへのマッピング

ニケータ)を3つのサブメッシュ/トーラスにマッピングしている。これらによって、(1) 1プロセスあたりのMPI関数呼び出し回数が削減される、(2) バンド分割でグルーピングされたプロセス内で通信が閉じられるため通信の輻輳が起こらない、(3) Trinaryx3が適用され通信時間が短縮される、等の効果が得られるので、Allreduce, Bcast, Reduceの通信時間が1/5～1/10に短縮された。

7PFLOPS規模の55,296ノードを用いて、シリコンナノワイヤ107,292原子(格子数:576×576×192, エネルギーバンド数:229,824)の1反復計算を測定し、56.3%の実行効率を得た。全実行時間に対する通信時間の割合は29.7%であり、通信コストの削減が大きな効果を発揮した。

FrontFlow/blue

●アプリケーション概要

FrontFlow/blueは非圧縮性流体の非定常流動を高精度に予測可能なLES(Large Eddy Simulation)に基づいた汎用流体解析プログラムである。形状適合性に優れた有限要素法による離散化を採用し、ファンやポンプ等の流体機械や複雑形状周りの非定常乱流解析および流れから発生する騒音の予測が可能である。

●ノード単体性能向上

FrontFlow/blueで採用している行列ソルバはBiCGSTAB法(Bi-Conjugate Gradient Stabilized method)であり、疎行列とベクトル積計算が大きなコストを占める。FrontFlow/blueの計算カーネルの課題として、(1)ベクトル部はリストアクセスのため、リストの非局所性により性能が左右されること、(2)行列部はCRS(Compressed Row Storage)形式により記述さ

れており、最内のループ回転数が可変かつ高々30回転程度と比較的小さいため、コンパイラによるループ最適化が難しいことが挙げられる。(1)の解決方法として、図-4のように解析空間を小領域に分割し、さらに節点番号を小領域の内側(A)、外側(B)の順にリナンバリングすることにより、ベクトルの局所性を高めた⁸⁾。

(2)の解決方法として、すべての節点の隣接節点数を0埋めによって最大隣接節点数に合わせることで回転数を一定化し、フルアンローリングにより回転数不足を解消した。(1)、(2)の手法を適用することにより、本カーネルの要求B/F値から求められる推定性能値9%に迫る8.5%の実行効率が確認された。

●高並列化

FrontFlow/blueの高並列化の際に留意しなければならない点は、大域通信であるAllreduceの実行時間が並列数の増加に伴い、どのように推移するかである。1要素データのAllreduceの場合、Tofuインターコネクトの持つハードウェアバリア機能が用いられるため、並列数が増えても高速な通信が可能である。FrontFlow/blueでは、10PFLOPS規模において44マイクロ秒の通信性能が確認できていることから、数万ノード規模の高並列実行でも、通信はボトルネックにならないと考えられる。ただし、基礎性

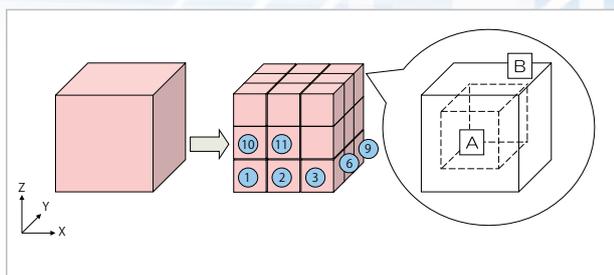


図4 節点番号のリナンバリング

能は10PFLOPS構成の場合に21マイクロ秒であり、FrontFlow/blueで用いた場合との性能差が確認できている。今後はこの性能差の検証を予定している。

LatticeQCD

●アプリケーション概要

LatticeQCDは、素粒子クォークおよびグルオンの基本法則である量子色力学（QCD）を4次元時空間格子上に定式化した第一原理計算である。今回用いたLatticeQCDは、領域分割されたハイブリッドモンテカルロ（DD-HMC）に基づく手法⁷⁾でLDDHMCと呼ばれる。

●ノード単体性能向上

LatticeQCDでは、モンテカルロ積分において逆行列を求める部分が計算時間の大部分を占めるため、最適化は大規模疎行列ソルバの高速化に帰着する。

最適化の流れとしては、ソルバの選択、並列性と収束性を考慮した前処理の選択を行い、次にSPARC64TMVIIIfxのコア数を意識したOpenMPによるスレッド並列化、最後にSIMD演算の最適化を実施した。なお、オリジナルのLDDHMCの前処理部分は、インテル・アーキテクチャのSSE（Streaming SIMD Extensions）を用いることで単精度浮動小数点演算による4命令同時実行が実装されている。これをSPARC64TMVIIIfxのSIMD命令に置き換える作業を行った。

ソルバは、LatticeQCDで一般的なBiCGSTAB法を採用している。オリジナルは、SSOR法（Symmetric Successive Over Relaxation method）が前処理として

採用されており、ノード間はRed-Black（Even-Odd）Orderingによって並列化されている。

最適化は、ノード内の並列性と収束性を考慮しRed-Black OrderingとBlock-Natural Orderingについて検討を行った。Red-Black Orderingは、スレッド内およびスレッド間にデータ依存がないため並列性は高いが収束性は悪い。一方、Natural Orderingは、スレッド内およびスレッド間にデータ依存を残しているため収束性は良い。Block-Natural Orderingは、Natural OrderingとRed-Black Orderingの中間的な方法であり、スレッド内はデータ依存を残しつつも、スレッド間のデータ依存をなくし並列化を可能とする方法である。ここではスレッド並列が可能となる利点と、Natural Orderingに比べた場合、収束性能の低下がそれほど大きくなかったため、Natural Block Orderingを採用した。

作業の効率とプログラムの見通しを良くするために、計算主要部分から3つのカーネルを抽出した。カーネル1はSSORの前進代入に関する部分、カーネル2は後退代入に関する部分、カーネル3は両方向の代入部分である。なお、ノードあたりの問題サイズはL2データキャッシュに載るように設定した。

その結果、オリジナルではカーネル全体で15%程度の実行効率が得られたが、L1データキャッシュミス率が高く、整数ロードキャッシュアクセス待ち、バリア同期待ちが大きい。バリア同期待ちについては、アルゴリズム由来のもので、境界部分の計算量がスレッドごとに偏りがあることが原因であるが、L1データキャッシュミス率については、インライン展開された場合に適切なプリフェッチが生成されていなかったことが要因であった。これについては、コンパイラの改善により解決を図った。整数ロードキャッシュアクセス待ちについては、不要なインデックス計算を削除することで改善された。有効総命令数に対するSIMD命令数の割合については、C言語のSIMD組込み関数を用いることで45%程度だったものが75%程度まで向上した。最適化の結果、カーネル全体で実行効率33%まで向上した。

●高並列化

大規模並列としては、5PFLOPSと10PFLOPS規模の測定を行った。それぞれ、通信を含めた主要計算部分の実行効率は15%程度で、ウィーク・スケールリングしていることが確認された。

まとめ

「京」のアプリケーション性能の実証を目的に、6本のアプリケーションのノード単体性能の向上と高並列化を実施してきた。ノード単体性能に関しては、スカラ型計算機が不得意とする要求B/F値が大きいプログラムについても、要求B/F値とキャッシュの利用効率から見積もられる推定性能と同程度の性能が得られた。さらに、性能向上のためのキャッシュの有効利用法等の最適化手法を適用し、Seism3Dはトータル性能で17%以上の高い実行効率が得られた。PHASEとRSDFTでは、「京」の8万ノードを活かすために適用した二軸並列化手法等が十分に機能し、高並列に対応できることが確認された。高並列時の実行で重要な通信性能については、隣接通信、大域通信のどちらでも高速な通信が実現できていることが確認された。ここで述べたことは「京」が汎用システムとして実際のアプリケーションにおいて十分に高い性能を出すことができることを示している。演算部、通信部ともに性能を引き出しやすく、「京」の供用開始後に動き出す多くのアプリケーションにおいても高い実効性能が得られることが期待できる。

参考文献

- 1) Satoh, M., Matsuno, T., Tomita, H., Miura, H., Nasuno, T. and Iga, S. : Nonhydrostatic Icosahedral Atmospheric Model (NICAM) for Global Cloudresolving Simulations., *Journal of Computational Physics, the Special Issue on Predicting Weather, Climate and Extreme events*, 227, pp.3486-3514 (2008).
- 2) Furumura, T. and Chen, L. : Parallel Simulation of Strong Ground Motions during Recent and Historical Damaging Earthquakes in Tokyo, Japan, *Parallel Computing*, 31, pp.149-165 (2005).
- 3) 古村孝志 : 差分法による3次元不均質場での地震波伝播の大規模計算, 地震2, 61巻, S83-S92 (2009).

- 4) 黒田明義, 長谷川幸弘, 寺井優晃, 井上俊介, 市川真一, 小松秀実, 大井憲行, 安藤琢也, 山崎隆浩, 大野隆央, 南一生 : ナノ材料第一原理分子動力学プログラム PHASE の京速コンピュータ「京」上の計算性能最適化, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, pp.144-152 (2012).
- 5) Iwata, J., Takahashi, D., Oshiyama, A., Boku, T., Shiraiishi, K. and Okada, S. : A Massively-parallel Electronic-structure Calculations based on Real-space Density Functional Theory, *Journal of Computational Physics*, 229, pp.2339-2363 (2010).
- 6) http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/theme/multi/fluid/fluid_softwareinfo.html
- 7) Aoki, S., Ishikawa, K.-I., Ishizuka, N., Izubuchi, T., Kadoh, D., Kanaya, K., Kuramashi, Y., Namekawa, Y., Okawa, M., Taniguchi, Y., Ukawa, A., Ukita, N. and Yoshie, T. : 2+1 Flavor Lattice QCD toward the Physical Point, *Physical Review D*, 79, 034503 (2009).
- 8) 南一生, 井上俊介, 堤重信, 前田拓人, 長谷川幸弘, 黒田明義, 寺井優晃, 横川三津夫 : 「京」コンピュータにおける疎行列とベクトル積の性能チューニングと性能評価, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, pp.23-31 (2012).
- 9) Hasegawa, Y., Iwata, J. I., Tsuji, M., Takahashi, D., Oshiyama, A., Minami, K., Boku, T., Shoji, E., Uno, A., Kurokawa, M., Inoue, H., Miyoshi, I. and Yokokawa, M.: First-principles Calculations of Electron States of a Silicon Nanowire with 100,000 Atoms on the K Computer. In: *Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. pp.1:1-1:11. SC '11, ACM, New York, NY, USA (2011).
(2012年4月27日受付)

■南 一生 minami_kaz@riken.jp

(独) 理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部開発グループアプリケーション開発チームチームリーダー。

■井上俊介 inoue.shunsuke@riken.jp

(独) 理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部開発グループアプリケーション開発チーム所属。開発研究員。Seism3DおよびFrontFlow/blueの最適化に従事。

■熊畑 清 kuma@riken.jp

(独) 理化学研究所計算科学研究機構運用技術部運転技術課所属。研究員。博士(情報科学)。FrontFlow/blueの最適化に従事。

■黒田明義 kro@riken.jp

(独) 理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部開発グループアプリケーション開発チーム所属。開発研究員。博士(人間・環境学)。PHASEの最適化に従事。

■寺井優晃(正会員) teraim@riken.jp

(独) 理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部開発グループアプリケーション開発チーム所属。開発研究員。博士(情報科学)。NICAMおよびLatticeQCDの最適化に従事。

■長谷川幸弘 y.hasegawa@riken.jp

(独) 理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部開発グループアプリケーション開発チーム所属。開発研究員。RSDFTの最適化に従事。