

京速コンピュータ「京」におけるペタフロップス・アプリケーション RSDFT

長谷川 幸弘[†] 岩田 潤一[‡] 辻 美和子[§] 高橋 大介[§] 南 一生[†]

理研では、京速コンピュータ「京」の性能確認のために、6つの重点アプリケーションコードの高度化を行っている。その1つが密度汎関数法に基づいて第一原理電子状態計算を行うRSDFT(Real Space Density Functional Theory)コードである。高度化においては、「京」の特徴であるSIMD、スレッド並列、セクタキャッシュなどの機能により計算ノードの高い演算性能を引き出すことが重要であり、また「京」のような超並列アーキテクチャでは通信性能の向上が重要になる。「京」にチューニングしたコードにより、55,296計算ノードを用いて107,292原子のシリコンナノワイヤの計算を行った。SCF計算の反復1回で3.08PFLOPSの実効性能、7.07PFLOPSのピーク性能に対して43.63%の実行効率を達成し、実アプリケーションでペタフロップス以上の性能を得ることができた。本報では「京」の持つ種々の機能を効果的に使うために、RSDFTに対して実施した並列化や最適化について述べる。

Peta-Flops application RSDFT on the K computer

YUKIHIRO HASEGAWA[†], JUN-ICHI IWATA[‡], MIWAKO TSUJI[§],
DAISUKE TAKAHASHI[§] and KAZUO MINAMI[†]

We are optimizing six application codes to show high execution performance of the K computer by obtaining over peta-flops sustained performance in real applications. One of them is RSDFT (Real Space Density Functional Theory) code which is a first-principles electronic-structure calculation code based on density functional theory. In the optimization of codes, it is important to make use of the various capabilities such as SIMD execution, thread parallelization, and sector cache function, as well as to get higher performance in communication among compute nodes. A 3.08 peta-flops sustained performance was measured for an iteration of the SCF calculation in a 107,292-atom Si nanowire calculation using 55,296 compute nodes, which is 43.63% to the peak performance of 7.07 peta-flops. In this report, we present how to parallelize and optimize the code so as to make effective use of the various capabilities of the K computer.

[†] 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
RIKEN, Next-Generation Supercomputer R&D Center

[‡] 東京大学
The University of Tokyo

[§] 筑波大学 計算科学研究センター
Center for Computational Sciences, University of Tsukuba