

レイテンシコアの高度化・高効率化による将来のHPCIシステムに関する調査研究におけるアプリケーションの最適化と複数の計算機環境での性能評価

大島 聡史¹ 片桐 孝洋¹ 中島 研吾¹ 米村 崇² 熊洞 宏樹² 樋口 清隆² 橋本 昌人² 高山 恒一²
藤堂 眞治³ 岩田 潤一⁴ 内田 和之⁴ 佐藤 正樹⁵ 羽角 博康⁵ 黒木 聖夫⁶

1. 概要

文部科学省の実施する「将来 HPCI システムのあり方の調査研究」における「レイテンシコアの高度化・高効率化による将来の HPCI システムに関する調査研究」においては、東京大学が中心となり、アーキテクチャ概念設計、システム設計評価、そしてアプリケーション性能最適化の連携により研究を進めている。本ポスターでは、本研究において実施しているアプリケーション最適化について報告・紹介する。

2. 対象アプリケーションと性能モデル化手法

本研究では ExaFlops を目指す計算機システムのモデルをいくつか提案し、そのシステム上で実行する対象となるアプリケーションを選定して性能のモデル化を行い、既存のスーパーコンピュータシステム上での性能評価結果を用いて性能予測およびシステム設計へのフィードバックを行っている。特に対象計算機システムとして異なる性能特徴を持つ複数のシステムを用いていることから、対象アプリケーション群に対して様々な計算機上で性能最適化を行う必要がある。

本研究が対象としているアプリケーションを以下に示す。

- ALPS/looper (新機能を持った強相関・磁性材料の物性予測・解明。虚時間経路積分にもとづく量子モンテカルロ法と厳密対角化。)
- RSDFT (Si ナノワイヤ等、次世代デバイスの根幹材料の量子力学の一原理シミュレーション。実空間差分法。)
- NICAM (長期天気予報の実現、温暖化時の台風・豪雨等の予測。)
- COCO (海況変動予測、水産環境予測。)

我々はこれらのアプリケーションに対して以下のような性能モデル化手法を用いて性能の解析と最適化を行っている。

¹ 東京大学 情報基盤センター
² 日立製作所 情報・通信システム社
³ 東京大学 物性研究所
⁴ 東京大学 大学院工学系研究科
⁵ 東京大学 大気海洋研究所
⁶ 海洋研究開発機構

- ホットスポット同定
- カーネル分離
- 通信パターン確認
- 詳細プロファイルと分析
- ベンチマーク化
- 詳細モデル化

3. 性能評価・性能最適化の例

これまでに実施した性能評価および性能最適化の事例として、RSDFT の最適化を行った例を以下に示す。

RSDFT は dgemm の実行時間の割合が大きなアプリケーションではあるが、今回提示している例は dgemm を利用する固有値ソルバの呼び出し部分のチューニングによって性能向上を得ている。また、FX10 では dgemm を含むカーネルが全体の実行時間の約 50% を占めていることがわかっていて、SR16000 では問題サイズが小さいことや直交化と固有値ソルバ以外の時間も大きいことから約 30% にとどまっている。ExaFlops を目指すシステムにおいてもこれらのバランスが性能に影響し、重要な検討事項となることが推察されている。

FX10 での最適化 48 ノード 48mpi×16omp 実行の最適化結果 (パラメータサーベイとノード配置の最適化)

カーネル	最適化前 (s)	最適化後 (s)	向上倍率 (倍)
diag_2d	365.0	358.0	1.02
gram_shmidt_sub_blkcy	229.8	229.5	1.00
Total	1327.2	1107.2	1.20

SR16000 での最適化 1 ノード 32mpi 実行の最適化結果 (パラメータサーベイによる最適化)

カーネル	最適化前 (s)	最適化後 (s)	向上倍率 (倍)
diag_2d	13.6	12.9	1.05
gram_shmidt_sub_blkcy	7.5	7.4	1.01
Total	69.4	62.4	1.11

ポスター発表の場ではさらに多くの事例を提示して成果の公開と議論を行う予定である。