

SX-Aurora TSUBASA 上でのチューニングと処理速度評価

小川 哲司* 志村 啓** 小田 嘉則*** 西原 慧徑*** 岩田 潤一*** 松尾 春彦***
 大西 陽一* 桐原 亮平** 中森 一郎** 小瀬村 大亮*** 原田 昌紀*** 松原 聖****

Performance Tuning and Evaluation on SX-Aurora TSUBASA computer

Tetsuji Ogawa*, Kei Shimura**, Yoshinori Oda***, Satomichi Nishihara***, Jun'ichi Iwata***,
 Haruhiko Matsuo***, Yoichi Ohnishi*, Ryohei Kirihara**, Ichiro Nakamori**,
 Daisuke Kosemura***, Masanori Harada*** and Kiyoshi Matsubara****

アドバンスソフト株式会社では、日本電気株式会社様（以下、NEC 様）より機会をいただき、いくつかの計算科学ソフトウェア（以下、アプリケーション）に対して、NEC 製の次世代イノベーションプラットフォーム SX-Aurora TSUBASA 向けチューニング、および、処理性能測定とその比較を実施した。SX-Aurora TSUBASA は、ベクトルプロセッサの超高性能と Linux 環境の使いやすさを両立した計算機である。ここでは、アドバンスソフトで販売しているパッケージソフトウェア、および、オープンソースソフトウェア（以下、OSS）を対象とし、ソースコードの改変を含むチューニングを行い、大規模なベンチマークデータに対して処理速度を測定し、従来の計算機での処理速度と比較した。本稿では、複数のアプリケーションに対して SX-Aurora TSUBASA 上でのソフトウェアのチューニングにおける実施項目、および、ベンチマーク結果および従来機との比較を示す。

Keywords: ベクトル計算、並列計算、高速化、第一原理計算、電磁波解析、流体解析

1. はじめに

当社は、2002 年の設立以来、大規模並列計算のソフトウェア開発技術をベースにして、各種アプリケーションの開発、および、そのアプリケーションを利用した解析を行ってきた。並列計算機では、小規模なクラスタから、スーパーコンピュータ京や富岳までの多くの種類の高速計算

機での利用およびチューニング実績がある。また、今後とも爆発的に利用が増大するクラウドの利用技術も蓄積してきた。

現在的高速計算機には、CPU、GPU、各種タイプの並列計算機、ベクトルプロセッサがあり、アプリケーションにはそれぞれ性能を最大限に発揮するための最適な計算機構成がある。また、各種アプリケーションの最大限の性能を引き出すためには、それぞれのプラットフォームでチューニングの必要がある。アドバンスソフトの特徴のひとつは、ソフトウェアを自ら開発し、その高速化を行い、開発したソフトウェアを事業化していることである。

このような背景から、当社独自に開発したソフトウェアのみならず、お客さまの開発したソフトウェアに対しても、利用する高速計算機に合わせたチューニングが可能である。また、ソフトウェアのアルゴリズムを理解した上で、それぞれの計

*アドバンスソフト株式会社 第3事業部

3rd Computational Science and Engineering Group,
 AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 第2事業部

2nd Computational Science and Engineering Group,
 AdvanceSoft Corporation

***アドバンスソフト株式会社 第1事業部

1st Computational Science and Engineering Group,
 AdvanceSoft Corporation

****アドバンスソフト株式会社 代表取締役社長
 President, AdvanceSoft Corporation

算機に適合するアルゴリズムを考案および提案することも多くの実績がある。

今回利用した SX-Aurora TSUBASA[1]は「スーパーコンピュータは研究開発のツールである」との設計思想に基づき、ベクトルプロセッサの超高性能と Linux 環境の使いやすさを両立し、デスクトップタワーから大規模データセンタ対応モデルまで豊富なラインアップが用意された計算機である。また、アプリケーションの実効性能を向上させる高度な自動ベクトル化・自動並列化機能を備えた Fortran/C/C++コンパイラが提供されている。また、システム構成に最適化された MPI ライブラリや科学技術計算ライブラリも提供されている。当社では、SX-Aurora TSUBASA が、ソフトウェアの研究開発に向けた計算機であることを実感した。(本稿において、次世代イノベーションプラットフォーム SX-Aurora TSUBASA に関する情報は、NEC 様の許諾のもと、ホームページ[1]からの情報を記載した。)

本稿で述べる SX-Aurora TSUBASA で処理速度を計測したソフトウェアは、2 つの流体分野のアプリケーション、1 つの電磁波分野のアプリケーション、2 つのナノ分野のアプリケーションとした。いずれのソフトウェアも当社が事業を進めている分野で利用しているアプリケーションであり、ソフトウェアの内部までソースコードレベルでアドバンスソフト技術者が内容を熟知したソフトウェアである。

2. 対象としたアプリケーション

2.1. アプリケーション一覧

今回実施したチューニングと処理速度評価の実施対象としては、各種アルゴリズムと広い範囲から選択する視点で、流体分野、電磁波分野、ナノ分野の 5 つのアプリケーションを選定した。

流体分野では、解析対象と手法の異なる 2 つの種類の流体解析ソフトウェアということで、アドバンスソフトで販売する流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red、および、高速流解析ソフトウェア Advance/FOCUS-i を対象とした。

電磁波分野では、FDTD 法による電磁波解析ソ

フトウェア Advance/ParallelWave を対象とした。ナノ分野では、OSS の第一原理計算ソフトウェアである Quantum ESPRESSO(QE)、および、研究コミュニティのソフトウェアである実空間第一原理計算ソフトウェア RSDFT の 2 つとした。

表 1 対象としたアプリケーション

分野	ソフトウェア	備考
流体	流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red[2]	アドバンスソフト株式会社が販売
	高速流解析ソフトウェア Advanc/FOCUS-i [3]	
電磁波	電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave [4]	
ナノ / 材料	第一原理計算ソフトウェア Quantum ESPRESSO[5]	OSS
	実空間第一原理計算ソフトウェア RSDFT [6]	OSS

2.2. アプリケーション内容

(1) Advance/FrontFlow/red

Advance/FrontFlow/red は非圧縮性から圧縮性流れまで、広範囲で複雑な流れに対応した汎用 3 次元流体解析ソフトウェアである。乱流、混相流の他にさまざまな物理モデルが組み込まれ、ロバスト性、計算の高速化にも注力し、研究分野だけでなく産業界においても実用的に利用されるようになってきた。LES による高精度乱流解析による非定常な流動現象の高精度予測を追求している。燃焼、物質拡散、空力などの非定常大規模解析や、構造、電磁場、音響などとの大規模連成解析にも適用可能である。また、超並列化・ベクトル化による大規模解析が可能である。開発の設計段階から並列計算のパフォーマンスを最大限に引き出すためのアルゴリズムを適用している。

(2) Advance/FOCUS-i

Advance/FOCUS-i は非構造格子に対応した圧縮性流体解析ソルバーである。アドバンスソフトがこれまで蓄積した高度な数値流体技術を結集し、燃焼、爆風圧、衝撃波が取り扱える。特に遷音速

や超音速の流れの解析に適しており、高い並列化効率で計算をすることができる。また、DDT (爆燃爆轟遷移) をモデル化した G 方程式を実装しており、詳細反応モデルよりも比較的低い計算コストで燃焼解析が可能である。Advance/FOCUS-i の適応分野は安全工学分野における火災、爆発を始め、産業機械分野でも製造過程における超音速、燃焼現象にも対応できる。

Advance/FOCUS-i は、①密度ベースソルバーを採用し、圧縮性流体の解析を高精度かつ高速処理、②非構造格子による任意形状に対応、③MPI 並列による高速計算、④G 方程式による低コストの爆燃、爆轟解析、⑤CHEMKIN[®]形式の入力ファイルから NASA 多項式の係数を自動取得可能なことを特徴としている。

(3) Advance/ParallelWave

Advance/ParallelWave は、電磁波の支配方程式である Maxwell 方程式をコンピューターシミュレーションによって解き、電磁波の挙動とそれを起源とする物理諸量を算出する。FDTD (Finite-Difference Time-Domain、有限差分時間領域) 法を採用している。

電磁波分野では、建造物による電波の遮蔽・反射・回折、輸送機器およびその周辺の電磁界分布、人体およびその周辺の電磁界分布、電子デバイスの高周波特性、電子機器への静電気放電、電子機器の漏洩電磁界解析へ適用可能である。

光分野においては、Advance/ParallelWave は光が波であるという本質を解析する。さまざまな材料・形状に対し、光の透過・反射・吸収・干渉・回折の現象を再現する。これにより、さまざまな光学デバイスの研究開発を強力にサポートすることができる。

(4) Quantum ESPRESSO (QE)

アドバンスソフトでは、第一原理計算ソフトウェアとして Advance/PHASE[7]を販売、および、研究開発[8]を行っている。本件では、NEC 様のご要望に沿い OSS の第一原理計算 Quantum ESPRESSO(QE)での性能測定を実施することとし

た。QE は、密度汎関数(DFT)法による電子状態計算をベースとした材料モデリングのための OSS である。第一原理計算の結果からの後処理プログラムが充実しており、多種多様な物理量が計算できる。実用例として、解析対象の電子状態、電気伝導特性や光励起スペクトルなどを求めることができる。また、材料開発のための MI の計算用ソフトウェアとしても利用されている。また、QE は大規模計算における並列性能も高いアプリケーションである。

(5) RSDFT

RSDFT は、QE と同じく、DFT による電子状態の第一原理計算を、実空間差分法で実行する代表的なソフトウェアである。「実空間法」とは、Advance/ PHASE や QE のような平面波法がフーリエ変換により逆空間 (波数空間) で定式化された計算手法であることに对比して使われる用語である。全ての計算を実空間で行うことにより、高速フーリエ変換を必要とせず、超並列計算に非常に適した手法となっている。また周期境界条件に縛られることがなく、バルクではない分子やクラスタといった有限孤立系の計算や、周期境界条件と孤立境界条件が混在している表面・界面スラブ系、半無限系など、さまざまな境界条件に非常に柔軟に対応できるという長所も兼ね備えている。

3. 使用した計算機環境

3.1. SX-Aurora TSUBASA

本計算においては、SX-Aurora TSUBASA は下記の構成で利用した。

- ・ モデル : A300-4
- ・ 搭載ベクトルエンジン(VE)数 : 4

ただし、測定は特記しない限り 1 ベクトルエンジンで行った。

- ・ 搭載ベクトルエンジン(VE) : Type 10B
- ・ VE 演算性能(TFLOPS)倍精度 : 2.15
- ・ VE メモリー帯域(TB/s) : 1.22

3.2. 比較計算の環境 (Intel Xeon)

また、比較用に利用した計算機は、Intel Xeon である。構成は下記の通りである。

- ・ CPU : Intel Xeon Gold 5218 @2.3GHz
- ・ 計算リソース : 32 コア (2 CPU, 1 node)
- ・ ピーク性能 : 768 GFLOPS /CPU (1.536 TFLOPS/node)

4. ベンチマーク結果

4.1. Advance/FrontFlow/red

(1) 計算モデル

建築物の風荷重評価のベンチマークとして用いられる、単体単純形状建築物モデルを計算対象とした。風洞実験に対応させることができるように、建築物の形状は $7.5\text{cm} \times 7.5\text{cm} \times 22.5\text{cm}$ のアスペクト比 3 の直方体で、計算領域のサイズは $2\text{m} \times 3\text{m} \times 1.5\text{m}$ である。計算メッシュの節点数は 1,014,773 で、要素数は 5,278,479 である。

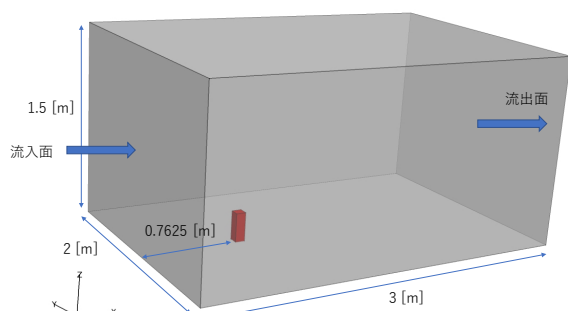


図 1 解析対象

(2) チューニング手順

まず、SX-Aurora 計算機に合わせたベクトル化として、マルチカラー法を用いた連立一次方程式の求解のベクトル化を行った。ベクトル化を阻害する依存性がある要素は互いに異なる「色」になるような色付けを行う（マルチカラー）。同じ「色」に属する要素の間には依存性がなく、ベクトル化が可能になる。また、メモリの連続性のため、変数を色順に並び替えた（オーダリング）。ここでは、Cyclic-Multicoloring + Reverse Cuthill-McKee による色付け[9]を行った。

次に、連立一次方程式の係数行列を求めるときに、各行の非零成分数のカウンタが逐次的であり

ベクトル化が阻害されていた。そこで、同じ行の複数の成分の計算を同時に行わないようにグループ分けをすることで、グループごとにベクトル計算できるように修正した。また、疎行列とベクトルの積の計算は、NLC (NEC Numeric Library Collection)のSBLASルーチンを利用するように変更した。

(3) 処理時間比較

SX-Aurora TSUBASA のベクトルエンジン (VE) 上で 8 コアを用いた MPI 並列計算を時間ステップ数 500 で行った。また、当社内のスカラー計算機 (Intel Xeon Gold) で 32 コアを用いた MPI 並列計算を時間ステップ数 500 で行った。その計算時間を表 2 に示す。計算時間は wall clock である。MPI 並列計算の結果、ベクトルエンジンを用いた計算は、Intel Xeon Gold での処理時間と比較して、約 1/2.2 の処理時間で計算できた。

表 2 SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU の実行時間比較 (Advance/FrontFlow/red)

利用した計算機	計算時間(秒)
SX-Aurora TSUBASA(1VE)	3415 sec
Intel Xeon(32 コア)	7683 sec

4.2. Advance/FOCUS-i

Advance/FOCUS-i については、アドバンスシミュレーション本号の「高速流解析ソフトウェア Advance/FOCUS-i の紹介」に SX-Aurora TSUBASA におけるチューニング作業およびその評価の詳細を記述しているため、本稿では概要を述べるにとどめる。

(1) 計算モデル

セル数は $100 \times 100 \times 100$ とし、乱流燃焼解析を計算するよう疑似的な火炎を置いた系において速度比較を行った。

(2) チューニング手順

対流項計算、粘性項計算、勾配計算ルーチン、セル内再構築計算、乱流モデル計算、燃焼モデル

計算、熱力学的関数について、ベクトル化のチューニングを行った。

(3) 処理時間比較

Intel® Xeon® Gold 5218 と SX-Aurora TSUBASA Type 10B の計算時間の比較を行った。両者の計算時間を比べるとベクトルマシンでは約 0.52 となっており、速度向上比としてはおよそ 1.92 倍となる結果となった。

表 3 SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU の実行時間比較 (Advance/FOCUS-i)

利用した計算機	計算時間(-)
SX-Aurora TSUBASA(1VE)	1.00
Intel Xeon(32 コア)	0.52

4.3. Advance/ParallelWave

(1) 計算モデル

FDTD 法においてコアとなる、電場・磁場の更新ルーチンはもともとベクトル化に適したアルゴリズムであり、SX-Aurora TSUBASA において高い性能が得られることが期待できる。

計算モデル

光源
波面：平面波
強度：一様分布
波長：550 nm
偏光：円偏光
照射： θ 15度 ϕ 90度

領域終端の境界条件
垂直方向：吸収境界
水平方向：周期境界

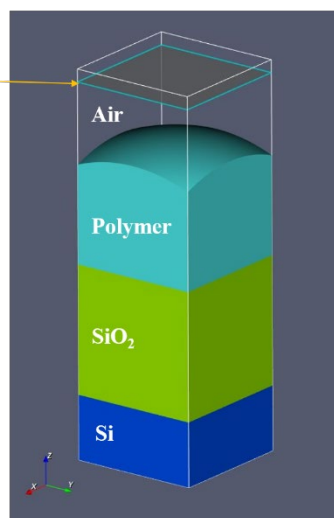


図 2 受光素子の計算モデル

今回のテストデータとしては、マイクロレンズ付き受光素子の解析に用いられるモデルを用いた。素子形状は、x,y 方向が $2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$ 、高さ方向は $6\mu\text{m}$ の直方体である。材質としては、底部よ

り、 $1\mu\text{m}$ のシリコン層、 $2\mu\text{m}$ の SiO_2 層、 $2\mu\text{m}$ 程度のポリマーからなるマイクロレンズ層、 $1\mu\text{m}$ の空気層から構成されている。計算領域の分割数は $300 \times 300 \times 300$ でセル数は 27,000,000 である。シミュレーションとしては、解析領域上部に設定した光源から波長 550nm の一様な平面波を 15 度の斜めの角度から入射する場合の解析を行うものである。境界条件は、平面方向は周期的境界条件、垂直方向は吸収境界条件を設定した。実際のシミュレーションは計算がスタートしてから定常状態になるまで計算を行うが、今回は予め設定したタイムステップでの計算時間を測定した。

(2) チューニング手順

まず、コア部の do ループで用いられている配列は 3 次元配列のままにし、配列の添字に 1 次元配列のリストベクトルを用いて、3 重ループになっている部分を 1 重ループにするというベクトル化を行うことにした。FDTD 法のプログラム内容から、この部分はベクトル化を行っても実行結果が変わらないことが分かっているため、強制ベクトル化を行うコンパイラ指示行 (!NEC\$ IVDEP) を do ループの直前に挿入することによって全面的なベクトル化を行うことができた。

また、ループの初期値と最終値に関して、領域分割を用いた MPI 並列化を行っている関係で、各領域での境界部における配列添字の取り扱いを簡単に行う目的で関数呼び出しになっており、この部分で非常に多くの回数呼び出されていることが NEC 製解析ツール FTRACE によるプロファイリングによって判明した。この部分に関して関数呼び出しを止めるようにしたいのであるが、実はこの関数呼び出しは各ループにおいて毎回呼び出す必要はなく、MPI の rank が決まってしまうとその後変わることはないことが分かっているため、プログラムの最初の部分で一度計算して変数に保存しておき、各ループではその変数を使ってやればよい。こうしておけば MPI で領域分割した場合の並列計算でも問題は発生しない。

(3) 処理時間比較

SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU でベンチマーク計算を実施した。表から分かるように、SX-Aurora TSUBASA は Intel CPU と比較して、今回の比較においては約 2.9 倍以上の性能がある。また、Advance/ParallelWave は、MPI 並列化されており SX-Aurora TSUBASA の複数ノード計算にも対応が可能である。

表 4 SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU の実行時間比較 (Advance/ParallelWave)

利用した計算機	計算時間
SX-Aurora TSUBASA(1VE)	42 s
Intel Xeon(32 コア)	2 m 04 s

4.4. Quantum ESPRESSO

(1) 計算モデル

ベンチマークの対象として次の 2 種類の系について性能測定を実施した。最初に、Pt(234)表面モデルの構造のモデルにて計算を実施した。系に含まれる原子数は、216 個である。

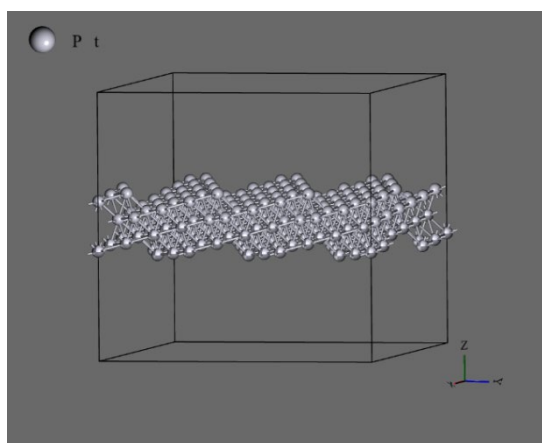


図 3 Pt(234)表面モデル

また、次に、SiC 結晶のスーパーセルの構造のモデルにて計算を実施した。系に含まれる原子数は、784 個である。

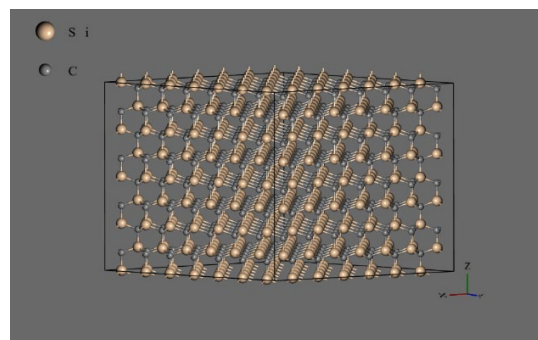


図 4 SiC 結晶のスーパーセル

(2) チューニング手順

Quantum ESPRESSO を SX-Aurora TSUBASA 用にチューニングするため、以下の 2 つの内容についてソースコードを改修した。

- ・ FFT のデータ形式を変更
- ・ 非局所演算子の計算の一部をベクトルホスト(VH)にて実行

FFT の計算はベクトルエンジンの得意とするところであり、全ての FFT はベクトルエンジンにて実行する。ただし、ベクトルエンジンのパフォーマンスを向上させるためには、FFT における配列の並びを変更する必要がある。Quantum ESPRESSO では N 個の FFT を同時に実行する際に、フーリエ変換対象のデータをメモリー上にひとまとめに格納して、これらのデータを N 個分だけ連結させる。ベクトルエンジンにて高速化実現するためには、逆に、 N 個の多重度についてデータをひとまとめにして格納して、これらのデータをフーリエ変換の次元数分だけ連結させた。

Quantum ESPRESSO では、3 次元 FFT ボックスにおけるデータを MPI の各プロセスに分散して配置しているため、1 次元 FFT を 3 回実行することで 3 次元 FFT を実現する。ソースコードの該当箇所は以下の通りである。非局所演算子またはオーバーラップ演算子を波動関数に作用させる処理には、Level3-BLAS が使用される。一方で、局所演算子を波動関数に作用させる処理には、FFT が使用される。Level3-BLAS および FFT の処理内容は互いに独立しているため、両処理を非同期にて実行することができる。そこで、Level3-BLAS の処理の一部を VH にて実行させつつ、Level3-BLAS の残りの部分および FFT を VE にて

実行させる。これにより、VE と VH で負荷分散することができる。

(3) 処理時間比較

まず、SiC 結晶のスーパーセルにおいては SX-Aurora TSUBASA の VE は 1 機利用し、MPI プロセスは 8 とした。VH の呼び出しはやっていない。Intel Xeon は 32 コアを利用した。

また、Pt(234)表面モデルにおいても、SX-Aurora TSUBASA の VE は 1 機利用し、MPI プロセスは 8 とした。VH の呼び出しはやっていない。Intel Xeon は 32 コアを利用した。

表 5 SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU の実行時間比較 (Quantum ESPRESSO Pt(234)表面モデル)

利用した計算機	計算時間
SX-Aurora TSUBASA(1VE)	4 m 50 s
Intel Xeon(32 コア)	7 m 36 s

表 6 SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU の実行時間比較 (Quantum ESPRESSO SiC スーパーセル)

利用した計算機	計算時間
SX-Aurora TSUBASA(1VE)	13 m 10 s
Intel Xeon(32 コア)	25 m 40 s

4.5. RSDFT

(1) 計算モデル

ここでは、Si 結晶系で原子数 1000 原子の場合についての測定を行った結果を示す。測定は、第一原理計算の最も基本となる、基底状態の自己無撞着計算の、反復 5 回分に対して行う（収束解まで到達するには数十回の反復が必要となる）。解くべき方程式は Kohn-Sham 方程式と呼ばれる空間 3 次元の偏微分方程式型の固有値問題である。今回の Si1000 の計算では、ユニットセル内の空間を格子点数 512,000 ($=80^3$) 点で離散化し、求める固有ベクトル本数は 3000 本としている。

結果に進む前に QE との処理の違いを挙げておくと、(1) 局所演算子を波動関数に作用させる際に FFT が不要で、単に対角行列の掛け算として処理できること、(2) 非局所演算子の作用範囲が逆

空間では全空間となるものが実空間では各原子周りの小領域に限定されるため、演算量が $O(N^3)$ から $O(N^2)$ に減じる（その代わり Level3-BLAS は使用できなくなる）事、(3) 波動関数へのラプラシアン作用に差分法を用いること（QE 等の逆空間法では対角行列の掛け算になる）、といったあたりが主な違いとなる。

(2) チューニング手順

FTRACE による各ルーチンのベクトル化率の確認、およびコード解析のベクトル化情報を元にして、該当箇所を 1 つ 1 つベクトル化されるようコードの修正を行っていった。最も効果の大きかったベクトル化チューニングは、初期化部分における、誤差関数や乱数生成の組み込み関数に対し、ベクトル化関数が呼び出されるようにすること、および非局所演算子を波動関数に作用させる部分に対し明示的にベクトル化指示行を入れることであった。

次に、RSDFT には、例えば Gram-Schmidt 直交化にもいくつかのアルゴリズムが実装されており、より性能の出るアルゴリズムの組み合わせを模索することを行った。

SX-Aurora TSUBASA ではステンシル計算を高速化するためのライブラリ SCA(Stencil Code Accelerator)が用意されている。ただし、差分の次数が 4 までの場合にしか適用できない仕様となっている (RSDFT のデフォルト差分次数は 6)。よって次項の処理時間比較においては、差分次数 4 で SCA を適用した場合についての時間も示す。

(3) 処理時間比較

チューニングを行った RSDFT を用いて Si 1000 原子系でのベンチマークテストを行った。ここではトータルの計算時間のみを示す。また比較対象として Xeon 機での計算結果も示す。実行は、SX-Aurora では 8 コア (1 VE)、Xeon では 32 コア (2 CPU) のフラット MPI 並列で行っている。表 7 に差分次数 6 (RSDFT のデフォルト値) および差分次数 4 の場合の計算時間を示す。差分次数 4 のケースでは、SX-Aurora TSUBASA ではステンシル

計算を高速化するためのライブラリ SCA を使用している。

差分次数の減少によりそもそもの演算量が減少していることにより、計算時間が大きく減少することが分かる。また SX-Aurora TSUBASA 向けのチューニングの一部は Xeon 機に対しても効果がある。その結果、現状 RSDFT は、1 ノード 1VE (8 コア) 構成の SX-Aurora TSUBASA を用いることにより、1 ノード 2CPU (32 コア) 構成の最新 Xeon 機に比べて約 1.3 倍～1.5 倍の速度を達成できることが分かる。まったく同じ入力で FTRACE を使用した結果、差分次数 4 のケースで 778 GFLOPS (1 VE, 8 コア) の性能が出ており、理論ピーク比の 36%となっていることが確認できた。

表 7 SX-Aurora と Intel CPU の実行時間比較 (RSDFT)

利用した計算機	計算時間 (秒)
SX-Aurora TSUBASA (1VE)	281 (差分次数 6)
	218 (差分次数 4)
Intel Xeon(32 コア)	431 (差分次数 6)
	292 (差分次数 4)

本件でチューニングを行った RSDFT のソースコード (2020/4/20 版) を web サイト[10]および GitHub リポジトリ[11]において公開する。

5. まとめ

今回のベクトル化作業を通じて、いずれのアプリケーションに対しても、SX-Aurora TSUBASA を利用することで、当社で所有する計算機よりも処理速度を上げることができることを確認できた。チューニング作業においては、NEC 製解析ツール FTRACE によるプロファイリングを利用した。これらの作業の過程では、ベクトル機に対する高速化のためのチューニングは比較的短期間で実施でき、見通しのいい作業であることが確認できた。ここまでに述べた処理速度の比較結果を表にまとめた。

また、ベクトル化の作業を通じて、今回は取り組むことができなかったが、もう少しチューニン

グを進めることにより高速化できる見込みのあるアプリケーション、また、別のアルゴリズムの高速化が見えてきたアプリケーションもある。後者については、例えば、SX-Aurora TSUBASA の線形ライブラリは高速であるため、全体での演算量は増えるが、そのライブラリを利用して高速化できる可能性、および、もう少し手間をかけてプログラム構造を変更しての高速化の可能性等が見えてきた。

表 8 チューニング後の実行速度比

分野	ソフトウェア	処理時間比率 (Intel Xeon / SX-Aurora TSUBASA)
流体	AFFr	2.20
	FOCUS-i	1.92
電磁波	ParallelWave	2.91
ナノ / 材料	Quantum	1.57 (Pt234)
	ESPRESSO	1.95 (SiC)
	RSDFT	1.34

これらのチューニング作業は、いずれの部分も当社が得意とする部分であり、今後とも、各種プラットフォームでの高速化チューニング等のサービスを提供できると考えている。ベクトル機・並列機・専用計算機等にかかわらず、チューニングや高速化のご要望があれば、まずは、アドバンスにお声いただきたい。

謝辞

本稿は、日本電気株式会社様の許諾をいただいて本内容を記事とすることができた。また、作業の実施におきましては、日本電気株式会社 AI プラットフォーム事業部の磯部洋子マネージャーおよび加藤季広主任には、多大なるご指導いただき、本成果をここで公開することができた。ここに記して感謝の意を表す。

参考文献

- [1] 次世代イノベーションプラットフォーム

- SX-Aurora TSUBASA
<https://jpn.nec.com/hpc/sxauroratsubasa/index.html>
- [2] 富塚孝之, 大西陽一, 小川哲司, 高橋邦生, "流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red の新機能", アドバンスシミュレーション 2016.12 Vol.23
- [3] 中森一郎, "高速流解析ソフトウェア Advance/FOCUS-i の紹介", アドバンスシミュレーション 2020.9 Vol.28
- [4] 並木武文, 松原聖, "大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave の開発", アドバンスシミュレーション 2016.12 Vol.23
- [5] <https://www.quantum-espresso.org/>
- [6] 岩田潤一, "実空間差分法による第一原理計算ソフトウェア: RSDFT と超並列計算", アドバンスシミュレーション 2018.7 Vol.26
- [7] 胡春平, 田中大地, 岡崎一行, "第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE における EELS 計算機能", アドバンスシミュレーション 2018.7 Vol.26
- [8] 西口和孝, 草部浩一, "強相関電子系への Advance/PHASE の適用", アドバンスシミュレーション 2018.1 Vol.25
- [9] 中島研吾, 奥田洋司 「Hitachi SR8000/MPP フルノードによる並列有限要素法コード 「GeoFEM」 における MPI/OpenMP ハイブリッド並列ソルバーの性能評価」 東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティングニュース, Vol 4 (2002). <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL4/No4/repo200207-2.pdf>
- [10] <https://rsdft.jp>
- [11] https://github.com/j-iwata/RSDFT_DEVELOP/tree/SX-AuroraTSUBASA
- アドバンスソフト株式会社ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、