

各種計算機アプリケーション性能比較

平成24年度第2四半期

目次

1. infra box
 - 1.1 倍精度
 - 1.2 4倍精度
2. s221
3. 重力多体問題
4. 内積計算
5. 分子動力学計算

各種計算機

アーキテクチャの相違は性能のみならず,精度,コンパイラの最適化機能,互換性にも影響が出てきます。主に使用した計算機は以下の4つです。

(ア)SR16000/M1

プロセッサ:power7

周波数:3.83GHz

1ノード当たり

CPUコア数 32(物理的),64(論理的)

理論最大性能 980.48 GFLOPs

メモリ容量 256GB

メモリアーキテクチャー NUMA,(16論理コア単位でflat)

SIMD(Single Instruction Multiple Data)を

サポートするVSX機構付き

L3キャッシュ On-Chip 32MB/8コア

演算器/物理コア 乗加算器4つ

(イ)BG/Q

周波数 1.6GHz

1ノード 16core 論理性能 204.8GFLOPs

L1 キャッシュ 16/16KB (Core)

L2 32MB (node)

Main storage 16GB (Core)

Smt=1,2,4

(ウ)HD5870

GPU カード型番:ATI RadeonHD5870

メモリ: GDDR5, 1 GB, 153.6 GB/s

ホストインタフェース: PCI Express 2.1 x16stream

processing unit: 3200個(演算プロセッサ)

動作周波数: 850 MHz ピーク性能(倍精度): 1088 Gflops

(エ)HD6970

GPU カード型番:ATI RadeonHD6970

メモリ: GDDR5, 2 GB, 176 GB/s

processing unit: 6144個(演算プロセッサ)

動作周波数: 880 MHzピーク性能(倍精度):2703 Gflops

これらのほかに

x5570 8コア 2.93GHz キャッシュ 8MB/コア

e5430 16コア 2.66GHz キャッシュ 12MB/コア

などとも比較しています。

1 . Infra box

計算式

$$I = \int_0^1 \int_0^{1-x} \int_0^{1-x-y} \frac{1}{D^2} dz dy dx$$

$$D = -sxy - tz(1-x-y-z) + (x+y)\lambda^2 + (1-x-y-z)(1-x-y)m_e^2 \\ + z(1-x-y)m_f^2$$

テストデータ

$$s = -500^2, t = -150^2, m_f = 150,$$

$$m_e = 0.0005$$

$$\lambda = 10^{-12} \text{ (倍精度)}, \lambda = 10^{-30} \text{ (4倍精度)}$$

1.1 倍精度

N=8192,演算量10447GFLOP

SR16000/M1	1ノード	自動並列		
BG/Q	32ノード	ノード間	MPI	
		ノード内	スレッド並列	
計算機	smp数	smt数	性能(GFLOPs)	実行効率(%)
SR16000/M1	32	1	268	27
SR16000/M1	64	2	263	27
BG/Q	16	1	846	13
BG/Q	32	2	1493	23
BG/Q	64	4	1766	27
HD5870	1	3200	326	30
HD6970	1	6144	588	22
実行効率は25%–30%				

1.2 4倍精度

サイズ	N=2048	演算量	618GFLOP		
テーブルサイズ	32KB				
SR16000/M1	4,8ノード	フラットMPI			
BG/Q	32ノード	フラットMPI			
4倍精度性能測定結果(GFLOPs)					
計算機	ノード数	smt数	性能	実行効率(%)	
SR16000/M1	4	1	248	6.3	
SR16000/M1	4	2	418	10.7	
SR16000/M1	8	1	495	6.3	
SR16000/M1	8	2	836	10.7	
BG/Q	32	1	253	3.9	
BG/Q	32	2	475	7.2	
BG/Q	32	4	705	10.8	
HD5870	2ボード	3200	283	26	
HD6970	4ボード	6144	560	20.7	
SR16000/M1,BG/QではSIMDが適用されない ので,GPGPU系の計算機の実行効率が良い					

2 S221

$$S^{221}(s; m_1^2, m_2^2, m_3^2, m_4^2, m_5^2) = \int_0^1 \int_0^{1-x} \int_0^{1-x-y} \int_0^{1-x-y-z} \frac{1}{DC} dudzdydx$$

$$C = (x + y + z + u)(1 - x - y - z - u) + (x + y)(z + u)$$

$$E = (1 - x - y - z - u)(x + z)(y + u) + (x + y)zu + (z + u)xy$$

$$M^2 = xm_1^2 + ym_2^2 + zm_3^2 + um_4^2 + (1 - x - y - z - u)m_5^2$$

$$D = -sE + M^2C$$

$$s^{221}(-1 : 100, 100, 0, 0, 100)$$

解析近似解 : 0.0380004438127

	サイズ N=2048,演算量=281622GFLOP				
	テーブルサイズ 32KB				
	SR16000/M1	1ノード	BG/Q	32ノード	
計算機	SR16000/M1	SR16000/M1	BG/Q	BG/Q	
並列化	smt=1	smt=2	flat	smp	
実行時間(秒)	1872	1187	244	207	
性能(GFLOPs)	150	237	1054	1360	

$$S^{221} (5; 1001000, 0, 100)$$

$$\varepsilon = 1.2^{-15}$$

$$N = 1024$$

GPU

HD5870 122.551 sec

HD6970 55.667 sec

HOST

HD5870 79903.86 sec

HD6970 96984.31 sec

$S^{221}(-1;100,100,0,0,100)$ の性能測定結果

サイズ N=576,演算量 1762GFLOP (性能モニター)

X5570,SR11000 自動並列,E5430 MPI

スレッド数	X5570		E5430		SR11000	
	実行時間	性能	実行時間	性能	実行時間	性能
	秒	GFLOPs	秒	GFLOPs	秒	GFLOPs
1	367.441	4.795	460.579	3.826	1477.16	1.193
2	204.562	8.614	232.52	7.578	738.884	2.385
4	98.036	17.973	116.234	15.159	369.904	4.763
8	48.402	36.403	90.206	19.533	185.167	9.516
16	57.326	30.736	58.128	30.312	92.873	18.972
32			28.79	61.202		
				MPI16	175.644	10.032
				MPI32	87.315	20.18
				MPI64	43.782	40.245

BG/L MPI

スレッド数	N	演算量	実行時間	性能
		GFLOP	秒	GFLOPs
256	1024	17601	273.879	64.266
512	1024	17601	136.939	128.532
1024	1024	17601	68.469	257.065
2048	2048	281622	557.638	505.027

$S^{221}(1;100,100,0,100)$ の性能測定結果

ϵ -算法 反復回数 15回

CPU	N	演算量	スレッド数	実行時間	性能
		GFLOP		秒	GFLOPs
BG/L	1024	264015	1024	1061	249
X5570	548	21660	8	609	36
E5430	576	26430	32	516	51

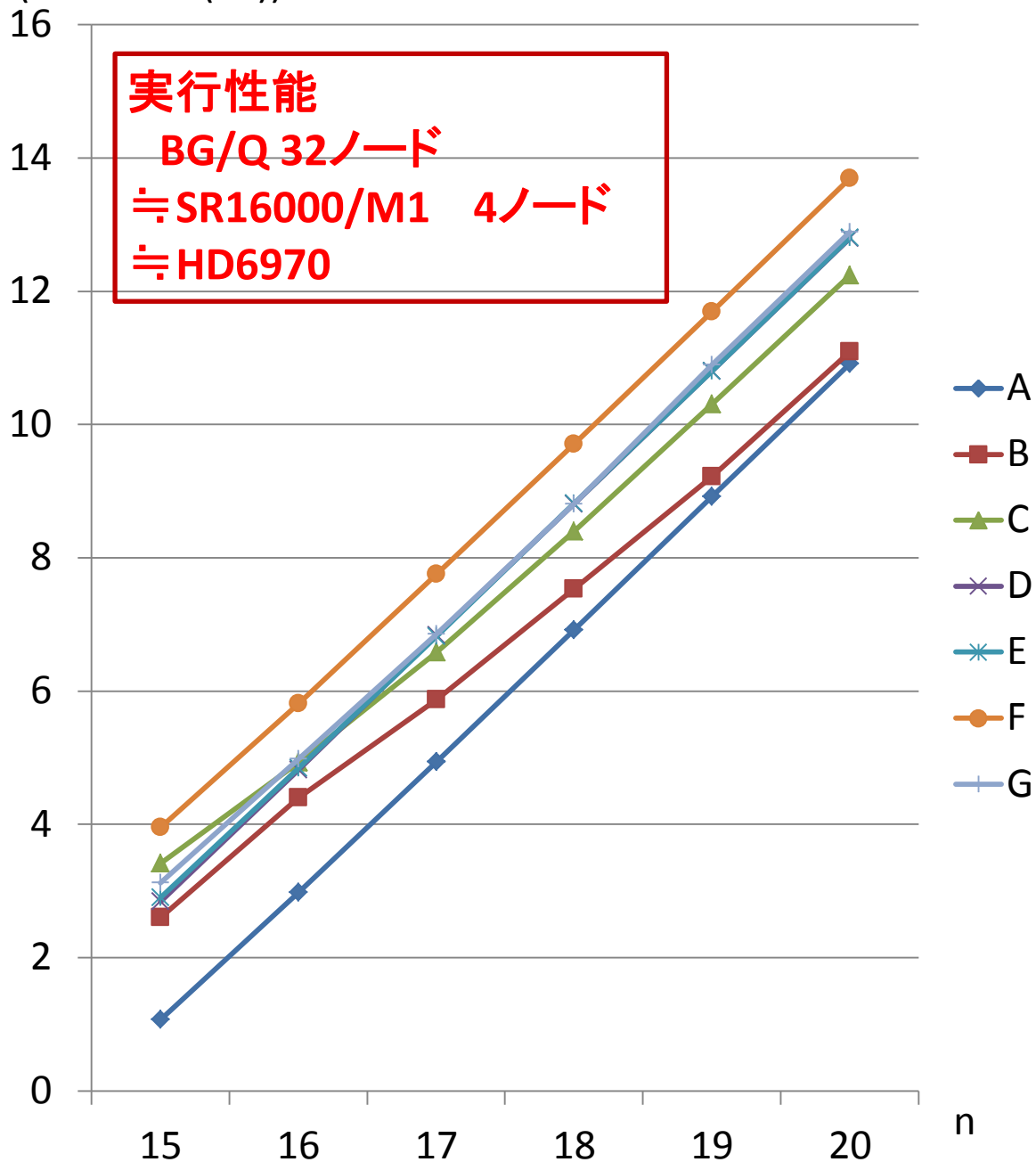
3 重力多体問題

	計算機					
	A	BG/Q 128node smp				
	B	BG/Q 128node 8192MPI				
	C	BG/Q 32node 2048MPI				
	D	SR16000/M1 4node 128MPI				
	E	SR16000/M1 4node 256MPI				
	F	HD5870	3200core			
	G	HD6970	6144core			

HD6970	880MHz	1536core	683GFLOPs	176GB/sec
HD5870	850MHz	1600core	544GFLOPs	153.6GB/sec

重力多体問題実行時間

log₂(実行時間(秒))



粒子数 $N=2^{**}n$

4. 内積計算

倍精度複素数内積演算				
N=2 ²⁰	1,000,000 回実行		演算量=8388.608GFLOP	
実行時間一覧表(秒)				
CPU	ノード数	MPI数	実行時間	GFLOPs
BG/Q	32	512	40.861952	205.3
BG/Q	32	1024	21.38558	392.3
BG/Q	32	2048	13.504455	621.2
BG/Q	32	16smp	21.156067	396.5
BG/Q	32	32smp	18.799888	446.1
BG/Q	32	64smp	19.542653	429.2
SR16000	1	32core	42.367335	198
SR16000	1	64smp	27.429707	305.8
SR16000	4	128	7.207432	1163.9
SR16000	4	256	6.652243	1261
SR16000	8	256	12.843104	653.2
SR16000	8	512	6.569715	1276.9
HD5870	2	3200smp	21.418635	391.6
HD6970	4	6144smp	10.255931	817.9

実行効率

BG/Q **約10%**

SR16000/M1 **約20%**

GPGPU **約30%**

5. 分子動力学計算

N	所要メモリ (MB)				
48	11.8125				
64	28				
80	54.6875				
96	94.5				
112	150.625				
128	224				
実行時間(秒)一覧表					
N=48					
SR16000/M1					
MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	
256	4	2.52998	8.61865	11.15244	
256	8	1.71889	2.66658	4.38859	
512	8	3.35877	3.98576	7.34833	
BG/Q					
MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	
512	32	8.16086	8.81916	16.98838	
1024	32	11.82922	9.99511	21.83329	
2048	32	24.60092	17.70815	42.32042	
N=64					
SR16000/M1					
MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	
128	4	12.54277	63.21624	75.76465	
256	4	16.55753	97.01006	113.57417	
256	8	8.77493	35.47022	44.25077	
512	8	20.90441	63.69971	84.61077	
BG/Q					
MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	
512	32	29.56434	37.76663	67.34834	
1024	32	32.48871	32.1485	64.65611	
2048	32	57.664	45.01047	102.69909	
N=80					
SR16000/M1					
MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	
128	4	44.93113	412.63567	457.57689	
256	4	63.25216	362.52039	425.78437	
256	8	33.06468	259.85763	292.93251	
512	8	91.30541	281.84471	373.16153	
BG/Q					
MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	
512	32	92.13976	128.87558	221.04942	
1024	32	80.97082	91.95302	172.96071	
2048	32	121.47084	106.98893	228.50708	

メモリの制限により,N=112,N=128ではBG/Q 2048MPIは実行不可

N=96

SR16000/M1

MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
128	4	135.30229	1018.25815	1153.57737
256	4	170.37763	1035.44061	1205.83632
256	8	96.82403	592.82008	689.65997
512	8	217.66733	688.59726	906.2826

BG/Q

MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
512	32	247.50348	392.02168	639.58082
1024	32	185.35274	274.96719	460.38124
2048	32	231.82941	340.60404	572.51359

N=112

SR16000/M1

MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
128	4	333.35061	2736.97492	3070.34942
256	4	411.22115	2556.15124	2967.40039
256	8	244.40453	1447.09706	1691.52595
512	8	369.37199	1905.33538	2274.73516

BG/Q

MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
512	32	591.7365	1262.05753	1853.88598
1024	32	394.3729	1181.64034	1576.11295

N=128

SR16000/M1

MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
128	4	755.4252	5581.71674	6337.17718
256	4	924.26017	6382.94117	7307.24141
256	8	539.1269	3196.45186	3735.61507
512	8	750.14716	4215.49161	4965.67888

BG/Q

MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
512	32	1317.87477	3370.73599	4688.74093
1024	32	805.80939	3364.92311	4170.8758