

メインプログラムからの MPI サブルーチンの呼び出し、行列積に関する MPI 化について

依頼内容

助言、提案の欲しい問題

bosonic BFSS 行列モデルのコードで、MPI を用いないシリアルなコードから MPI を用いて並列化することを目指している。この際、行列の積 $A*B=C$ 演算部分が計算時間の大半を占めるため、この部分を並列化することを目指す。しかしながらその MPI 化した行列積演算部分をサブルーチンとしてメインプログラムから呼び出そうと試行錯誤したがうまくいかない。MPI 版を正しく動作するようにしたい。

使用する計算機（予定も含む）：

九州大学スーパーコンピュータシステム FUJITSU PRIMEHPC FX10

用いる言語：FORTRAN

支援内容、回答

依頼者が、自作 MPI 版が正しく動作していないと考える理由として、

- 1) シリアル版と比較して、MPI 版は同じ初期値から出発しているにもかかわらず異なる出力結果を与える。
- 2) MPI 版はシリアル版に比べて数倍程度計算時間がかかってしまう。

の二点があり、この点を中心に原因を調べた。

1)に関しては、MPI 版では非エルミート行列を含む行列積に対して、エルミート性を仮定して行っていたために生じたものであり、その部分を修正するとシリアル版と同様の正しい出力を与えることを指摘した。つまり MPI の動作に関しては全く影響のないものであることを指摘した上で、2)の、MPI 版が遅くなる理由として、

- i) MPI 化した行列積演算を数 10 万回程度繰り返す構造になっているため、overhead がかかり高速化が得られにくい。
- ii) 行列の次元が高々 16 程度であり、 16×16 の行列積演算では並列化の効果は得られない。

という点を指摘した。

例えば 2CPU(12core/CPU)、CPU:Xeon E5-2697v2(2.7GHz)、intel コンパイラ+MKL で計算時間をチェックしたところ、

1core: 112 sec

2core: 170 sec

4core: 235 sec

8core: 250 sec

16core: 305 sec

となり並列化の効果が全く得られないことを示した。依頼内容の回答として、MPI 版自体は正しく動作しているが、上記 i), ii) の理由により並列化の効果が得られないということを説明した。その上で、該当箇所では MPI 並列を行うべきでないこと、依頼者が使用予定の九大 FX10 に用意されている SSL-2 の blas ルーチンのスレッド並列版を用いるのが良いのではないかと回答を行った。