各種計算機基本性能調査

平成24年度第2四半期

目次

平成24年度第1四半期までの資料作成において,性能評価に関しては,その手法と測定手順,検証方法に関する記述の必要性を感じましたので,今回から各種計算機基本性能調査に含める様にしました.また精度に関しても、必ずしも多倍長演算に限らないため,単精度,倍精度演算でも一般の精度問題に関する事柄を多倍長計算手法に含める様にしました.

今回,追加されるアプリ―ケーションの概略説明として
分子動力学計算,ルジャンドル陪関数計算,一次元
複素フーリエ変換,FFTに関する説明を最初に記述しました.

分子動力学計算

分子動力学計算は以下の２つの計算からなり、
クーロン力計算は重力多体問題と同様の計算と
なりますが、異なる計算として、
ワンデルワールス力計算があります。逆に二乗則と
逆六乗則の差により、演算する範囲が異なり、演算量
も単純に粒子数の何乗に比例するとは言えません。
演算精度は倍精度でSIMD命令は一部適用されます。

クーロン力　$\vec{F}_i = \frac{q_i}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{j\neq i}\frac{q_j}{r_{ij}^{\ 3}}\vec{r}_{ij}$　　$r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$

q_i :電荷量, ε_0 :真空の誘電率

ワンデルワールス力

分子間に働く分散力で、等方向性で原子間
距離の６乗に反比例する力

$$F = k \times \frac{\alpha_a \alpha_b}{r^6}$$　　α :分極率

ルジャンドル陪関数計算

ルジャンドル関数

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

$$P_0(x) = 1 \qquad P_1(x) = x$$

$$(r+1)P_{r+1}(x) - (2r+1)xP_r(x) + rP_{r-1}(x) = 0 \qquad (r = 1,2,\ldots,n-1)$$

$$(1-x^2)P_n'(x) = n[P_{n-1}(x) - xP_n(x)]$$

$P_n(x) = 0$の近似解 $\qquad x_k = \sin\left(\left(\frac{n+1-2k}{2n+1}\right)\pi\right)(k = 1,2,\ldots,n)$

ルジャンドル陪関数

m:位数 $\qquad n$:次数 $\qquad m > 0$

$$P_n^{\,m}(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m P_n(x)}{dx^m} = \frac{1}{2^n n!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}}(x^2-1)^n$$

$m > n$ だと$P_n^{\,m}(x) = 0$

$$P_{m-1}^{\,m}(x) = 0 \qquad P_m^{\,m}(x) = (2m-1)!!(1-x^2)^{\frac{m}{2}}$$

$$P_n^{\,m}(x) = \frac{2n-1}{n-m}xP_{n-1}^{\,m}(x) - \frac{n+m-1}{n-m}P_{n-2}^{\,m}(x)$$

$$P_n^{\,-m}(x) = (-1)^m\frac{(n-m)!}{(n+m)!}P_n^{\,m}(x)$$

正規化ルジャンドル陪関数

$$\bar{P}_{m-1}{}^{m}(x)=0 \quad \bar{P}_{m}{}^{m}(x)=\sqrt{\frac{1}{2}\frac{2m+1}{(2m)!}}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}$$

$$\int_{-1}^{1}P_m{}^m(x)^2dx=[(2m-1)!!]^2\int_{-1}^{1}(1-x^2)^m dx=\frac{2(2m-1)!!(2m)!!}{2m+1}=\frac{2(2m)!}{2m+1}$$

$$I_n=\int_{-1}^{1}(1-x^2)^n dx=\int_0^{\pi}\sin^{2n+1}\theta d\theta \qquad x=\cos\theta$$

$$I_n=\frac{2n}{2n+1}I_{n-1}=\ldots=\frac{2^n n!}{(2n+1)!!}I_0=\frac{2^{2n+1}n!}{(2n+1)!!}=\frac{2^{n+1}n!2^n n!}{(2n+1)!}=\frac{2^{2n+1}(n!)^2}{(2n+1)!}$$

$$\bar{P}_n{}^m(x)=\sqrt{\frac{2n+1}{2}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}P_n{}^m(x) \quad \bar{P}_m{}^{-m}(x)=(-1)^m\bar{P}_m{}^m(x)$$

$$\bar{P}_n{}^m(x)=\sqrt{\frac{(2n-1)}{(n+m)}\frac{(2n+1)}{(n-m)}}x\bar{P}_{n-1}{}^m(x)-\sqrt{\frac{(2n+1)}{(2n-3)}\frac{(n+m-1)(n-m-1)}{(n+m)(n-m)}}\bar{P}_{n-2}{}^m(x)$$

計算手順

xとして、ルジャンドル多項式の０点をとる。

$$P_0^{\ 0}(x)=1, P_1^{\ 0}(x)=\sqrt{3}x$$

$$P_{n+1}^{\ \ 0}(x)=\frac{\sqrt{(2n+1)(2n+3)}}{n+1}(xP_n^{\ 0}(x)-\frac{nP_{n-1}^{\ \ 0}(x)}{\sqrt{(2n+1)(2n-1)}})$$

$$(1\le n\le nn-1)$$

$m>0$の場合, $m>n$なら$P_n^{\ m}(x)=0$.このため, $P_{n+m}^{\ \ m}(x)$を$P_n^{\ m}(x)$とする.

$$P_0^{\ m}(x)=\sqrt{2m+1}\sqrt{\frac{(2m-1)!!}{(2m)!!}}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}$$

$$P_1^{\ m}(x)=\sqrt{2m+3}xP_0^{\ m}(x)$$

$$P_{n+1}^{\ \ m}(x)=\sqrt{\frac{(2n+2m+3)(2n+2m+1)}{(n+1)(n+2m+1)}}(xP_n^{\ m}(x)-\sqrt{\frac{n(n+2m)}{(2n+2m+1)(2n+2m-1)}}P_{n-1}^{\ \ m}(x))$$

$$(1\le m\le mm, 1\le n\le nn-1)$$

$DP_n^{\ m}(x)=\dfrac{dP_n^{\ m}(x)}{dx}$で表す.

$$DP_0^{\ m}(x)=-\frac{mxP_0^{\ m}(x)}{1-x^2}$$

$$DP_1^{\ m}(x)=\sqrt{2m+3}(P_0^{\ m}(x)+xDP_0^{\ m}(x))$$

$$DP_{n+1}^{\ \ m}(x)=\sqrt{\frac{(2n+2m+3)(2n+2m+1)}{(n+1)(n+2m+1)}}\times$$

$$(P_n^{\ m}(x)+xDP_n^{\ m}(x)-\sqrt{\frac{n(n+2m)}{(2n+2m+1)(2n+2m-1)}}DP_{n-1}^{\ \ m}(x))$$

$$(1\le m\le mm, 1\le n\le nn-1)$$

チェック方法

$$\int_{-1}^{1}(P_n^{\ m}(x))^2dx=2, \int_{-1}^{1}DP_n^{\ m}(x)P_n^{\ m}(x)dx=0$$

一次元複素フーリエ変換計算とFFT

一次元複素フーリエ変換

$$C_l <-> \quad y_k \quad (l,k=0,1,\ldots,L-1)$$

$$e(x)=e^{2\pi i x}=\cos(2\pi x)+i*\sin(2\pi x)$$

$$C_l=\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{k=0}^{L-1} y_k e(-\frac{lk}{L}) \qquad y_k=\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{l=0}^{L-1} C_l e(\frac{lk}{L})$$

FFT

$$L=MN$$

$$k=p+Mq \qquad p=0,1,\ldots,M-1 \quad q=0,1,\ldots,N-1$$

$$l=Nm+n \qquad m=0,1,\ldots,M-1 \quad n=0,1,\ldots,N-1$$

$$C_l=C_{Nm+n}=\frac{1}{\sqrt{M}}\sum_{p=0}^{M-1} e(-\frac{pm}{M})e(-\frac{pn}{MN})[\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{q=0}^{N-1} e(-\frac{qn}{N})y_{p+Mq}]$$

演算量:フーリエ変換 $L^2=(MN)^2$

FFT $\quad MN(M+N+1)\fallingdotseq MN(M+N)$

MとN互いに素 $\quad MN(M+N)$

$$L=N_1*N_2*\ldots..*N_m$$

FFT演算量 $\fallingdotseq L(N_1+N_2+\ldots.+N_m)$

FFTの効果 $\fallingdotseq \dfrac{L}{(N_1+N_2+\ldots.+N_m)}$

例

$$L=2*3*4*5*6*7*8*9=362880$$

$$362880/(2+3+4+5+6+7+8+9)=8247$$

１．SR16000 モデルM1

SR16000/M1システムの複数ノードでの実行に関しての記述です。

1ノードの概略は以下の様になっています。

プロセッサ:power7
周波数:3.83GHz
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

1.1 姫野ベンチ

姫野ベンチの演算精度を実数型倍精度,実数型4倍精度、複素数型倍精度で演算しました。実数型倍精度,オリジナルソースのみ、SIMD命令は適用されます。

SR16000 1ノード実測結果

姫野ベンチ　1ノードテスト

精度	x軸サイズ	y軸サイズ	z軸サイズ	実行回数
実数型倍精度	129	65	65	20000
実数型4倍精度	129	65	65	2000
複素数型倍精度	129	65	65	2000

性能一覧表

精度	ソース	MFLOPs
実数型倍精度	origin	60677
	tuning	87443
実数型4倍精度	origin	110105
	tuning	292481
複素数型倍精度	origin	108385
	tuning	112532

演算量は性能モニター　より

実数型倍精度　= 実数型単精度

実数型　4倍精度　= 19 × 実数型単精度

複素数型倍精度　= 3.5 × 実数型単精度

1.2 内積計算

```
case1
  do i=1,n
  sum=sum+a(i)*b(i)      a,b 複素変数
 end do

case2
  do i=1,n
  sum=sum+a(i)*b(i)     a,b  実数変数
   end do

 case3
   do i=1,n
   tr=tr+ar(i)*br(i)-ai(i)*bi(i)    ar,br,ai,bi  実数変数
   ti=ti+ar(i)*bi(i)+ai(i)*br(i)
   end do
```

ループ長は$2^{20}=1048576$,演算量はすべて$8796GFLOP$になる様に設定して測定しています.

SR16000/M1 1ノード実行時間(秒)一覧表

並列化は自動並列

ケース	smt数	実行時間	実行効率(%)
1	1	58	15.5
1	2	110	8.2
2	1	65	13.8
2	2	112	8
3	1	116	7.7
3	2	128	7

SMT off の場合のほうが性能が良くなっています.

1.3 QCD計算

主要な計算の一つに以下の部分があります.ここで,配列a,x,yは倍精度複素変数配列です.

```
 do id=1,4
 do ic=1,3
   do iframe=0,nframe-1
     if (mask_eo(iframe)) then
       y(iframe,ic,id) = 0.d0
     end if
   end do
 end do
 end do
do id=1,4
 do ic=1,3
   do id1=1,4
   do ic1=1,3
     do iframe=0,nframe-1
       if (mask_eo(iframe)) then
         y(iframe,ic,id) = y(iframe,ic,id)
&            + a(iframe,ic,ic1,id,id1)*x(iframe,ic1,id1)
       end if
     end do
   end do
   end do
 end do
 end do
```

制御変数iframeは制御変数ix,iy,iz,itを一次元化したもの

ソースチューニング後の実測結果

サイズ　12*8*8*8
所要メモリ　43.8MB

SR16000/M1 1ノード 自動並列 (980.48GFLOPs)

```
32smp,smt=1

 complex*16
niter=     100000  sec=   2.68142652511596680
y(1,nx/2,ny/2,nz/2,nt/2)
   (-102592.000000000000,52992.0000000000000)
 131979.898268774938      MFLOPS
```

(実行効率　13.5%)

```
64smp,smt=2

 complex*16
niter=     100000  sec=   2.56867218017578125
y(1,nx/2,ny/2,nz/2,nt/2)
  (-102592.000000000000,52992.0000000000000)
 137773.283306156285      MFLOPS
```

(実行効率　14.1%)

1.4 分子動力学計算結果

molecular dynamics

演算量と所要メモリ

N	VdW (GFLOP)	Coulomb (GFLOP)	メモリ (MB)
48	286.442	431798	11.8125
64	1644	2436	28
80	6148	9246	54.6875
96	17970	27675	94.5
112	44688	69588	150.625
128	99731	155917	224

演算量	VdW≒23.42*N**6,Coulomb≒35.31*N**6 FLOP
	VdW≒2／3*Coulomb
所要メモリ	14*8*N**3 バイト

SR16000／M1 実行時間(単位:秒)

N=48

MPI数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
128	4	1.8198	4.44435	6.26732
256	4	2.52998	8.61865	11.15244
256	8	1.71889	2.66658	4.38859
512	8	3.35877	3.98576	7.34833

N=64

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

N=80

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

N=96

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

N=112

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

N=128

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

1.5 ルジャンドル陪関数計算

倍精度演算で分点数を16384に増やし,誤差10^{-12}を得ました.そのため$n = m = 1024$,分点数$= 16384$,倍精度演算で性能測定をしました.

演算量 1149GFLOP,並列化は分点に関して実施しました.漸化式で計算しているためsimdは適用されません。

SR16000/M1 1ノードでの結果は以下の様になっています。

Smt	off	32smp	79GFLOPs	実行効率	7.9%
Smt	on	64smp	98GFLOPs	実行効率	10%

1.6 1次元複素フーリエ変換,FFT

SR16000 table方式とno-table 方式

演算量	204*N^2 FLOP		no-table 方式	
	20*N^2 FLOP		table方式	

実行時間一覧表(秒)

N	no-table	方式	table	方式
smt	32core	64smp	32core	64smp
2^15	2.415	1.6	0.173	0.167
2^16	9.665	6.438	0.748	0.676
2^17	38.638	25.57	3.094	2.86
2^18	154.913	102.516	57.145	32.608
2^19	619.635	409.899	1913.5	1819.197
2^20	2477.797	1640.417	6209.564	6191.031

テーブルサイズにより、テーブル化による演算量削減の効果が大きく異なる.

N=2^20 FFTシングル実行ジョブ

フーリエ変換32core	2477.797
フーリエ変換64smp	1640.417
FFT シングルジョブ	4.495

２　BG/Q　システム

使用していますBG/Q　システムの概略は以下の様になっています。

周波数　1.6GHz
1 ノード　16core　 論理性能　204.8GFLOPs
L1 キャシュ　　 16/16KB (Core)
L2　32MB (node)
Main storage　16GB　(Core)
Smt=1,2,4

実行クラス
32 node　6553.6 GFLOPs
128 node　26214.4 GFLOPs
256 node　52428.8 GFLOPs
512　node　1048576.6 GFLOPs
あり、今回は32 node を中心にした測定結果をしめします。

2.1 姫野ベンチ

姫野ベンチの演算精度を実数型倍精度,実数型4倍精度、複素数型倍精度で演算しました。実数型倍精度,複素数型倍精度オリジナルソースのみ、SIMD命令は適用されます。

BG/Q 1ノード実測結果

姫野ベンチ 1ノードテスト

精度	x軸サイズ	y軸サイズ	z軸サイズ	実行回数
実数型倍精度	129	65	65	20000
実数型4倍精度	129	65	65	2000
複素数型倍精度	129	65	65	2000

性能一覧表

精度	ソース	MFLOPs
実数型倍精度	origin	6368
	tuning	5056
実数型4倍精度	origin	19513
	tuning	21850
複素数型倍精度	origin	7662
	tuning	10763

演算量は性能モニター　より

実数型倍精度　= 実数型単精度

実数型 4倍精度 = 19 × 実数型単精度

複素数型倍精度 = 3.5 × 実数型単精度

2.2 内積計算

```
case1
  do i=1,n
  sum=sum+a(i)*b(i)      a,b 複素変数
 end do

case2
  do i=1,n
  sum=sum+a(i)*b(i)     a,b  実数変数
   end do

 case3
   do i=1,n
   tr=tr+ar(i)*br(i)-ai(i)*bi(i)    ar,br,ai,bi  実数変数
   ti=ti+ar(i)*bi(i)+ai(i)*br(i)
   end do
```

ループ長は$2^{20}=1048576$, 演算量はすべて$8796GFLOP$になる様に設定して測定

BG/Q 32ノード実行結果

	BG/Q 32ノード実行時間(秒)		
並列化　ノード間はMPI、ノード内はスレッド並列			
ケース	smt数	実行時間	実行効率(%)
1	1	12.7	10.1
1	2	8.4	16.4
1	4	8.9	15.1
2	1	32.5	4.13
2	2	33.4	4.02
2	4	39.1	3.43
3	1	41	3.3
3	2	26	5.2
3	4	23	5.8

	ケース1のSIMD適用の効果		
simd	smt=1	smt=2	smt=4
使用	12.7	8.4	8.9
未使用	53.2	28	17.6
比率	4.2	3.3	2
	(注)simdはComplex Simd		

Complex　Simd 適用の効果が大きくでています。

2.3 QCD計算

主要な計算の一つに以下の部分があります.ここで,配列a,x,yは倍精度複素変数配列です.

```
  do id=1,4
 do ic=1,3
   do iframe=0,nframe-1
     if (mask_eo(iframe)) then
       y(iframe,ic,id) = 0.d0
     end if
   end do
 end do
 end do
do id=1,4
 do ic=1,3
   do id1=1,4
   do ic1=1,3
     do iframe=0,nframe-1
       if (mask_eo(iframe)) then
         y(iframe,ic,id) = y(iframe,ic,id)
    &            + a(iframe,ic,ic1,id,id1)*x(iframe,ic1,id1)
       end if
     end do
   end do
   end do
 end do
 end do
```

制御変数iframeは制御変数ix,iy,iz,itを一次元化したもの

ソースチューニング後の実測結果

サイズ　12*8*8*8

所要メモリ　43.8MB

BG/Q 1ノード　(204.8GFLOPs)

16smp (smt=1)
complex*16
niter= 100000 sec= 19.6887544525088742
y(1,nx/2,ny/2,nz/2,nt/2)
(-102592.000000000000,52992.0000000000000)
17974.4432718497519 MFLOPS
(実行効率 8.8%)

32smp(smt=2)
complex*16
niter= 100000 sec= 11.5486670456593856
y(1,nx/2,ny/2,nz/2,nt/2)
(-102592.000000000000,52992.0000000000000)
30643.7443040677717 MFLOPS
(実行効率 15.0%)

64smp(smt=4)
complex*16
niter= 100000 sec= 8.29826071311254054
y(1,nx/2,ny/2,nz/2,nt/2)
(-102592.000000000000,52992.0000000000000)
42646.8162708833552 MFLOPS
(実行効率 20.8%)

2.4 分子動力学計算

molecular dynamics

演算量と所要メモリ

N	VdW (GFLOP)	Coulomb (GFLOP)	メモリ (MB)
48	286.442	431798	11.8125
64	1644	2436	28
80	6148	9246	54.6875
96	17970	27675	94.5
112	44688	69588	150.625
128	99731	155917	224

演算量	VdW≒23.42*N**6,Coulomb≒35.31*N**6 FLOP
	VdW≒2/3*Coulomb
所要メモリ	14*8*N**3 バイト

BG/Q 実行時間(単位:秒)

N=48

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

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

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

N=96

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

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

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

2.5 ルジャンドル陪関数計算

倍精度演算で分点数を16384に増やし，誤差10^{-12}を得ました.そのため$n=m=1024$，分点数$=16384$，倍精度演算で性能測定をしました.

演算量 1149GFLOP,並列化は分点に関して実施しました.漸化式で計算しているためsimdは適用されません。またノード内スレッド並列が出来ませんのでフラットMPIとなります。

BG/Q 32 1ノードでの結果は以下の様になっています。

Smt=1	512mpi	162GFLOPs	実行効率	2.5%
Smt=2	1024mpi	304GFLOPs	実行効率	4.6%
Smt =4	2048mpi	504GFLOPs	実行効率	7.7%

2.6　1次元複素フーリエ変換,FFT

BG/Q 32ノード 2048MPI実行

BG/Q table 方式とno-table 方式

演算量	204*N^2 FLOP	no-table 方式
	20*N^2 FLOP	table方式

実行時間一覧表（秒）

N	no-table	table
2^15	0.558	0.234
2^16	2.11	1.316
2^17	8.197	5.92
2^18	32.32	24.995
2^19	128.432	102.578
2^20	512.207	415.428

テーブル化による演算量削減の効果はさほど大きくない。

N=2^20 FFTシングル実行ジョブ

フーリエ変換2048MPI	1472.585
FFTシングルジョブ(-O3 -qstrict)	193.142
FFTシングルジョブ（ーO5)	30.873