

# 各種計算機アプリケーション性能比較

---

平成24年度第3四半期

## 目次

1.s221

2.infra box

3. 5次元積分

3.1 laporta (d)

3.2 laporta (f)

4.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. s221

$s^{221}(5;100,100,0,0,100) \quad \varepsilon = 1.2^{-15} \quad N = 1024$			
演算量		17601GFLOP	
実行時間(秒)一覧表			
ボード数	HD5870		HD6970
	gpu0	gpu1	
1	242.313	243.377	221.059
2	122.455		110.715
3			74.519
4			55.638

HD5870 143GFLOPs, HD6970 316GFLOPs  
SR16000/M1 システムに匹敵する性能が  
できています。

		GPU
HD5870	122.551	sec
HD6970	55.667	sec
		HOST
HD5870	79903.86	sec
HD6970	96984.31	sec

GPU がHOSTに比べて非常に良い性能ができています。  
HOSTのc++コンパイラに問題があるのでは？

# HOSTコンピュータでの性能が低い事の原因追究

(1) GPU用に4重DOループを2重DOループにしたのが原因？(4次元積分,2次元積分)

(2) 使用コンパイラの問題では？

実行時間一覧表(秒)

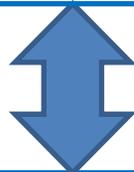
cpu	コンパイラ	4次元積分	2次元積分
x5570	gcc	60808	57308
x5570	ifort	4227	6255

cpu	コンパイラ	4次元積分	2次元積分
e5430	icc	5918	12616
e5430	icc parallel	928	2785



ソースで二次元化したためキャッシュミスが発生。  
コンパイラの最適化処理能力。



GPUでのチューニングは、容量の大きいベクトルレジスタを持ったベクトル機でのチューニングと同じ傾向を示します。

# スーパーコンピュータでの4次元積分と2次元積分の比較

実行時間一覧表 (秒)		64MPI	
CPU	4次元積分	2次元積分	
xm1	15.00185	25.03721	
SR16000/M1	8.80442	17.75754	
T2K	11.88899	31.80749	

4次元積分の方が性能が良いという傾向はサーバー系x5570,e5430と同じ。

## f90とxlf\_r コンパイラの比較

$S^{221}(-1;100,100,0,0,100)$        $N = 1152$

演算量 = 47505      GFLOP

SR16000/M1,xm1 1ノード

	cpu	smp数	f90	xlf_r
	xm1	32	247.354	133.49
	xm1	64	279.959	131.89
	xm1	96	274.067	133.65
	xm1	128	205.521	130.01
	SR16000/M1	64	178.875	
	SR16000/M1	32	147.387	

**f90 xm1 実行効率27.4%,  
SR16000/M1 32.9%**

**と非常に良い値がでています。**

**xlf\_r はf90以上に実行効率43.3%とよく、  
キャッシュの有効利用とSIMDが非常によく効いています。**

## 2.Infra box

演算精度は4倍精度

$$s = -500^2, t = -150^2, m_f^2 = 150^2, m_e^2 = 0.0005^2, \lambda = 10^{-30}$$

$N = 1280,$

演算量488.870GFLOP(倍精度：性能モニターの値)

### 目的：

- (1)論理コア128に拡大の効果検証
- (2)f90,xlf\_rの最適化能力比較
- (3)並列プログラム作成ツール(PPGEN)の効果検証

実行時間(秒)一覧表						
smp数	SR16000/M1	xm1	xm1	xm1	xm1	
	f90	f90	xlf_r	f90 omp	xlf_r omp	
32	7.882	9.16	29.68	9.179	12.91	
64	4.809	5.92	19.69	5.948	12.91	
128		3.376	13.35	3.172	12.61	

論理コア128への拡大,PPGENは効果がある、このプログラムにかんしては,f90の最適化能力がよい。

一般に4倍精度演算プログラムの並列化は,f90の最適化能力がよい。

### 3. 5次元積分

今回新たにlaporta (f) を追加しました。

またlaporta (d) と正反対の結果示していましたが、laporta (d) の更に詳細な測定を行いました。

#### 3.1 laporta (d)

SR16000/M1,xm1 1ノード。

サイズN=128、演算量 2668GFLOP

ソースは5次元積分

smp数	xm1	xm1	sr16000/M1	SR16000/M1
	f90	xlf_r	f90	xlf_r
32	30.005	52.86	11.615	38.46
64	31.151	54.52	7.498	38.51
128	19.369	54.08		

f90,SR16000/M1 の実行効率36.2%と突出して良い値となっています。

## 3.2 laporta (f)

**サイズN=128、演算量 3642GFLOP  
ソースは二次元積分**

### スーパーコンピュータとGPU

	実行時間(秒)					
CPU	ノード数	smp数	mpi数	実行時間 (秒)	性能 (GFLOPs)	実行効率 (%)
BG/Q	32	1	2048	1.289	2825	43.1
SR16000	1	64	1	8.808	413	42.2
HD5870	2	3200	1	8.094	450	41.4
HD6970	4	6144	1	4.252	857	31.7

**どの機種も高い実行効率をしめしています。**

### GPUとHOST

	実行時間(秒)		
cpu	gpu	host	host/gpu
HD5870	8.094	2459	304
HD6970	4.252	3009	708

## 各種計算機詳細

GPU				
		実行時間(秒)一覧表		
	ボード数	HD5870		HD6970
		gpu0	gpu1	
	1	15.678	15.702	15.428
	2	8.08		7.894
	3			5.448
	4			4.251
BG/Q				
	case1 -O5 -qhot=level=2			
	case2 -O3 -qstrict -qhot=level=1			
	32ノード実行時間(秒)			
	case	flat	hybrid	
	1	1.289	1.324	
	2	4.855	4.106	

**GPU:ボード数の効果がよくでています。**  
**BG/Q: コンパイルオプションの効果が大きい。**  
**オプションによりflat MPIとハイブリッドMPI**  
**の効果が変わっています。**

SR16000/M1					
1ノード実行時間(秒)					
	smt	smp	実行時間 (秒)	性能 (GFLOPs)	実行効率 (%)
	on	64	7.909	460	47
	off	32	11.674	312	31.8
T2K					
実行時間(秒)一覧表					
	MPI数	実行時間 (秒)	性能 (GFLOPs)	実行効率 (%)	
	64	17.275	211	35.6	
	128	8.646	421	35.8	
	256	4.33	841	35.8	
	512	2.199	1656	35.2	
XM1					
実行時間(秒)一覧表 論理コア数64					
f90	smt	32	64		
	on	88.458	55.063		
	off	57.756			
xlf_r	execution	29.01	18.95		
実行時間(秒)一覧表 論理コア数 128					
	smp	32	64	128	
	f90	40.911	38.31	24.677	
	xlf_r	26.62	22.22	20.82	

**SR16000/M1,T2K とともに実行効率は  
高くなっています。**

**Xm1: 論理コア数増加の効果は  
f90に大きくでています。**

## 4.分子動力学計算

xm1の論理コア128への拡大により  
smtの効果をBG/Qとの比較でみています。

ソースは従来のものをmdcore,  
MPIオーバーヘッド削減したものをmdcore2  
としています。

実行環境はxm1では1ノードでf90を使用しています  
BG/Qは32ノードでbgxlf\_r を使用して  
ハイブリッド並列を行っています。

比較したプログラムのサイズはN=96、で  
所要メモリ94.5MBです。

BG/Q						
mdcore						
smp数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	対smt=1	
16	32	219.958	326.512	546.518	1	
32	32	133.103	198.099	331.25	1.65	
48	32	113.692	166.067	279.81	1.95	
64	32	110.894	158.311	269.255	2.03	
mdcore2						
smp数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	対smt=1	
16	32	232.7985	361.71276	594.61322	1	
32	32	119.5483	186.49663	306.14688	1.94	
48	32	80.8	140.882	221.784	2.68	
64	32	61.61527	109.81348	171.53069	3.47	
xm1						
mdcore						
smp数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	対smt=1	
32	1	370.355	1031.531	1402.025	1	
64	1	246.078	611.013	857.267	1.64	
96	1	223.676	446.46	670.328	2.09	
128	1	173.189	340.836	514.222	2.73	
mdcore2						
smp数	ノード数	VdW	Coulomb	全体	対smt=1	
32	1	353.256	930.879	1254.276	1	
64	1	306.571	605.227	911.972	1.38	
96	1	229.255	442.445	671.89	1.87	
128	1	177.715	339.45	517.357	2.42	

**MPIオーバーヘッド削減の効果はBG/Qで  
でています。  
Xm1では1ノード並列のためほとんど  
変化はありません。**

smt=1に対する効果一覧表

プログラム	cpu	smt=2	smt=3	smt=4
mdcore	BG/Q	1.65	1.95	2.03
mdcore2	BG/Q	1.94	2.68	3.47
mdcore	xm1	1.64	2.09	2.73
mocore2	xm1	1.38	1.87	2.42

xm1

論理コア128(new),64(old)の比較

mdcore

smp数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
32 new	1	370.355	1031.531	1402.025
32 old	1	370.239	1051.356	1421.733
64 new	1	246.078	611.013	857.267
64 old	1	250.312	554.729	805.976
128 new	1	173.189	340.836	514.222

mdcore2

smp数	ノード数	VdW	Coulomb	全体
32 new	1	353.256	930.879	1254.276
32 old	1	352.106	931.449	1283.693
64 new	1	306.571	605.227	911.972
64 old	1	297.089	556.781	854.376
128 new	1	177.715	339.45	517.357

**BG/Q MPIオーバーヘッド削減の効果が大きい  
(smt=4)**

**Xm1 論理コア128 (smt=4) の拡大の効果が  
大きい。**