

PRIMEHPC FX10 における OpenFOAM 性能評価

富士通株式会社
TC)計算科学ソリ統括部
坂口 吉生
大豊 ゆかり

1 はじめに

本稿では、東京大学情報基盤センター Oakleaf-FX/Oakbridge-FX で稼働している FUJITSU PRIMEHPC FX10 (以降 FX10)の OpenFOAM(Open source Field Operation And Manipulation) アプリケーションについて性能評価状況を記載します。OpenFOAM とは、GNU General Public License (GPL) で公開されているオープンソースの数値流体力学 (Computational Fluid Dynamics: CFD) ツールボックスです。その機能はメッシュ作成から、流体・熱・電磁流体・固体応力解析などのソルバー、計算結果の可視化まで豊富に備わっています。

FX10 で実行可能な OpenFOAM 2.2.2 について、富士通コンパイラの最適化オプションの違いによる実行時間比較、実行結果比較を実施したので報告します。

2 性能評価に使用したコンパイラ最適化オプション

性能評価に使用した富士通コンパイラ環境 (Technical Computing Suite/言語処理環境、以降 TCS-LANG) と、OpenFOAM 用に分析・採用したコンパイラ最適化オプション (パターン A~C の計 3 種類) を以下に記載します。

パターン	コンパイラ	最適化オプション
A	TCS-LANG	-O3 -Xg
B	1.2.1-09 版	-O3 -Xg -x- -Klib -Kfp_contract -Ntl_notrt -Nstl=500fast -Krdconv
C		-O3 -Xg -x- -Klib -Ntl_notrt -Nstl=500fast -Krdconv

パターン A は、Oakleaf-FX 運用開始時の OpenFOAM 2.1.0 からこれまで使用している最適化オプションで、パターン B・C はチューニング用に評価した最適化オプションです。

パターン B と C の違いは、-Kfp_contract オプションの有無による違いのみです。FX10 に搭載している SPARC64 IXfx は、HPC-ACE (HPC 向けに大幅に命令を拡張) で SIMD (Single Instruction Multiple Data) 拡張し、浮動小数点積和演算 (Floating-Point Multiply and Add : FMA) を実装しています。-Kfp_contract は、FMA により 1 命令で浮動小数点積和演算を行うため、アプリケーションを高速に実行することが期待できますが、丸め処理による精度問題により結果が想定外になる可能性がある最適化オプションです。

性能評価に使用した最適化オプションの説明を以下に記載します。

パターン	最適化オプション
-O3	最適化レベル3で最適化。-O2 (ソフトウェアパイプライン、プリフェッチ命令、SIMD 化、ループ融合等) で行われる最適化に加え、多重ループのフルアンローリング、ループ交換促進のためのループ分割などを実施。
-Xg	GNU C++ 言語仕様 (C++03 規格に GNU 拡張仕様) に基づいて翻訳。
-x-	関数のインライン展開を実施。定義された関数に対して、マクロ展開後の初期化のある宣言と実行文の数がインライン展開の許容値を超えない関数をインライン展開。
-Klib	標準ライブラリ関数の動作を認識した最適化を促進。
-Kfp_contract	Floating-Point Multiply-Add/Subtract 演算命令を使用した最適化を指示。浮動小数点積和演算命令を1つの連続した命令として処理。
-Ntl_notrt	ツールライブラリを結合せずに翻訳。基本プロファイラは、ツールライブラリを結合する必要があり、本オプションを指定すると、デバッグ機能やプロファイラ機能は使用できない。
-Nstl=500fast	標準テンプレートライブラリ STLport バージョン 5.0.0 の高速版を使用。
-Krdconv	4 バイト符号付整数のループ変数がオーバーフローしないと仮定した最適化を促進。

3 最適化オプションによる性能評価

3.1 チュートリアル性能比較 (代表 9 ケース)

OpenFOAM2.2.2 のチュートリアル全 139 ケースのうち、経験から特徴的な 9 ケースを選択し、代表 9 ケースとして性能評価を実施しました。チュートリアルの代表 9 ケースの総実行時間を、通常オプション (パターン A) とチューニングオプション (パターン B・C) で性能比較した結果を、「図 3-1 代表 9 ケースの総実行時間比較 (パターン A・B・C)」に記載します。パターン A と比較し、パターン B で 37%、パターン C で 33%性能改善しています。

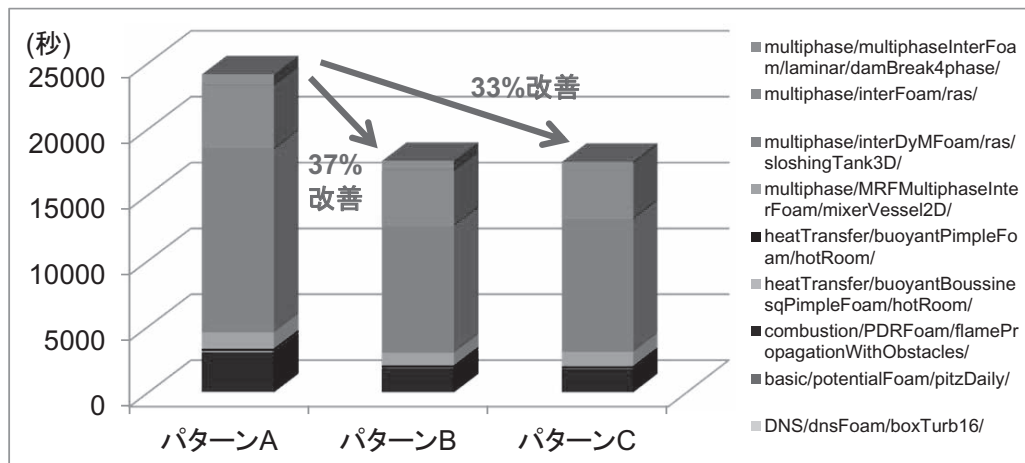


図 3-1 代表 9 ケースの総実行時間比較 (パターン A・B・C)

「表 3-1 代表 9 ケースの実行結果詳細 (パターン A・B・C)」は 9 ケースそれぞれの実行結果の詳細です。パターン B は改善率が高いですが、9 ケース中 8 ケースで結果が異なります。パターン C は改善率が少し低くなっていますが、全ケースで結果が一致しました。結果比較は、チュートリアル実行後に作成される計算結果の diff により、一致するものは「○」、少しでも異なるものは「×」としています。

項	ケース名	A	B		C	
		時間(秒)	時間(秒) 改善率	結果比較	時間(秒) 改善率	結果比較
1	DNS/dnsFoam/boxTurb16/	74	60 23%	○	61 21%	○
2	basic/potentialFoam/pitzDaily/	18	11 63%	×	11 63%	○
3	combustion/PDRFoam/ flamePropagationWithObstacles/	2978	1775 67%	×	1714 73%	○
4	heatTransfer/buoyantBoussinesqPimpleFoam/ hotRoom/	103	85 21%	×	85 21%	○
5	heatTransfer/buoyantPimpleFoam/hotRoom/	168	137 22%	×	138 21%	○
6	multiphase/MRFMultiphaseInterFoam/ mixerVessel2D/	1250	978 27%	×	1102 13%	○
7	multiphase/interDyMFoam/ras/ sloshingTank3D/	13952	9667 44%	×	10131 37%	○
8	multiphase/interFoam/ras/	4821	4167 15%	×	4222 14%	○
9	multiphase/multiphaseInterFoam/laminar/ damBreak4phase/	818	725 21%	×	772 5%	○

表 3-1 代表 9 ケースの実行結果詳細 (パターン A・B・C)

3.2 チュートリアル全ケースの性能比較

「表 3-2 全ケースの実行結果比較」は OpenFOAM2.2.2 のチュートリアル全 139 ケースを、通常オプション (パターン A) とチューニングオプション (パターン B・C) で実行し、実行結果比較を行いました。パターン B は、全 139 ケース中、結果が一致するケースが 36 ケース (26%) にとどまりました。一方、パターン C は、139 ケース中 134 ケース (97%) で結果が一致しました。結果の比較方法は「表 3-1 代表 9 ケースの実行結果詳細 (パターン A・B・C)」と同様です。

結果比較	A	B	C
○	139	36	135
×	0	103	4

表 3-2 全ケースの実行結果比較

パターンAとBで実行結果が一致するケース (36 ケース) の総実行時間比較を「図 3-2 結果が一致するケースの総実行時間比較 (パターンAとB)」に記載します。総実行時間の改善率は2%です。

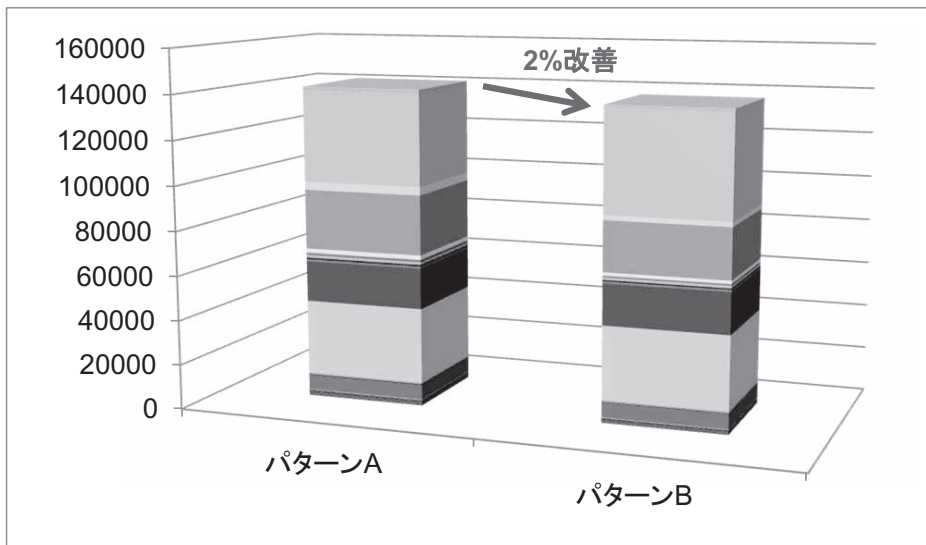


図 3-2 結果が一致するケースの総実行時間比較 (パターンAとB)

パターンAとCで実行結果が一致するケース (135 ケース) の総実行時間比較を「図 3-3 結果が一致するケースの総実行時間比較 (パターンAとC)」に記載します。総実行時間の改善率は、18%です。

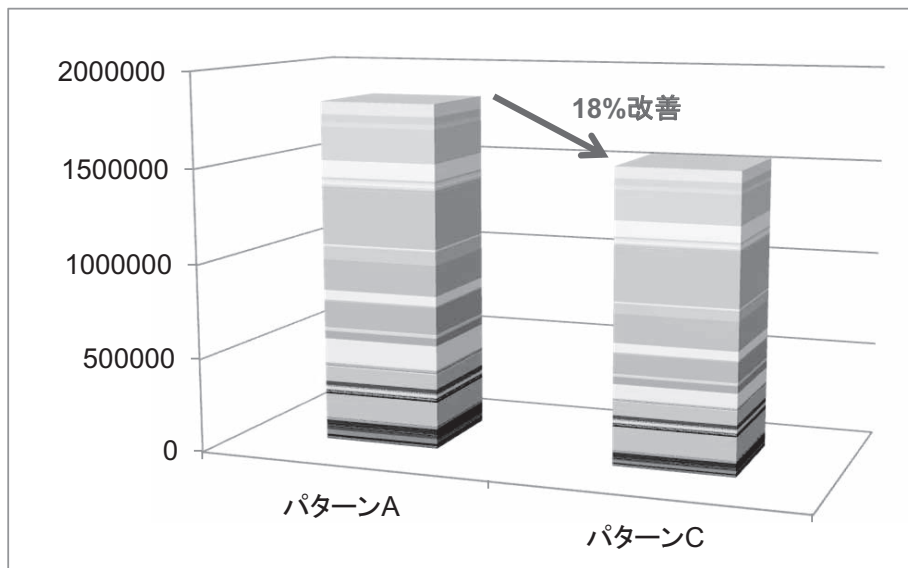


図 3-3 結果が一致するケースの総実行時間比較 (パターンAとC)

4 まとめ

最適化オプション パターン B は、改善率が高いですが、通常オプションとの実行結果の比較で、結果が一致しないケースが 74%であり、高い確率で実行結果異常が発生していることがわかります。一方、最適化オプション パターン C は、改善率が少し下がりますが、ほとんどのケースで通常オプションと結果が一致し、結果が一致するケースは 97%でした。また、結果が一致するケースの総実行時間は、18%改善しました。

上記 2 種類の OpenFOAM2.2.2 チューニング版は、東京大学情報基盤センターFX10 (Oakleaf-FX/Oakbridge-FX) で公開中です。2.2.2tune はパターン C でチューニングしたものであり、2.2.2tune2 はパターン B でチューニングしています。

また、東京大学情報基盤センターFX10 (Oakleaf-FX/Oakbridge-FX) の OpenFOAM リリース状況を以下に記載します。

バージョン	公開日	最終更新日
2.1.0	2012/04/02	2013/04/01
2.2.0	2013/04/01	2013/05/31
2.2.1	2013/09/27	2013/09/27
2.2.2	2013/12/20	2014/12/20
2.2.2tune	2015/07/31	2015/07/31
2.2.2tune2	2015/07/31	2015/07/31
2.3.0	2014/10/31	2014/10/31

OpenFOAM を利用する際は、module コマンドで利用環境を設定してください。

詳細は、利用支援ポータル (<https://oakleaf-www.cc.u-tokyo.ac.jp>) に格納されている「Oakleaf-FX/Oakbridge-FX 利用手引書」の「1.12.4. 実行パス/ライブラリ設定」を参照してください。