

# CMSI若手技術交流会の報告と技術共有

石村和也(分子研)

# 2012年度若手技術交流会

- 第6回 (2012年7月17日-19日 掛川)
  - 研究員・学生28人、サポート富士通4人
  - テーマ:京利用に向けた技術・情報の共有
  - 内容:FX10で各自のプログラムのコンパイルとチューニングもしくはフリーソフトのコンパイル
  - Wiki: <http://trac.cms-initiative.jp/wakate6>
- 第7回 (2013年2月14日-16日 金沢)
  - 研究員・学生30人、サポートRIST4人、富士通4人
  - テーマ:京の効率利用のための技術習得と共有
  - 内容:FX10で各自のプログラムの解析とチューニング
  - Wiki: <http://trac.cms-initiative.jp/wakate7>

# 第6回のスケジュール

[7月17日(1日目)]

13:00-15:30 「京及びFX10でのコンパイル、チューニングについて」(富士通)

16:00-18:00 「実習 コンパイル」

19:30-21:30 「新メンバー研究紹介」

「固有値計算ルーチンについての意見交換会」進行:坂下達哉(物性研)

[7月18日(2日目)]

9:00-12:30 「実習 チューニングもしくはコンパイル」

13:30-18:00 「実習 チューニングもしくはコンパイル」

19:30-21:00 「座談会 超並列時代のプログラム整備・継続開発」

話題提供 :北浦和夫先生(神戸大)

[7月19日(3日目)]

9:00-12:00 「実習 チューニングもしくはコンパイル」

13:00-14:00 「新メンバー研究紹介」

14:00-15:00 「成果発表」

## 第6回の成果

- コンパイル・チューニングに関するwikiへの書き込み30件
- FX10もしくは京での各自のプログラムのコンパイルは、ほぼ成功
- コンパイルに成功したフリーソフトウェア・ライブラリー一覧：  
CMake, HDF5, tcl (for NAMD), fftw3, fftw2, FFTe, GSL,  
Elemental, libint, GAMESS, SIESTA, OpenMX, GROMACS,  
MDACP, TINKER, NAMD
- 詳しくは <http://trac.cms-initiative.jp/wakate6>

# 第7回のスケジュール

[1月中]

各自のプログラムのプロファイラデータ取得 (チューニングに取り組む参加者)

[2月5日]

プロファイラデータを基にしたグループ分け(RIST、富士通、藤堂先生、若手幹事)

[2月14日(1日目)]

13:00-15:00

講演 (南一生 理化学研究所)

15:00-15:30

講義 (富士通)

16:00-18:00

「実習 チューニングもしくはコンパイル」

20:00-22:00

座談会 将来HPCI調査研究と今後の計算科学について

[2月15日(2日目)]

9:00-12:00

「実習 チューニングもしくはコンパイル」

13:30-18:00

「実習 チューニングもしくはコンパイル」

20:00-22:00

アプリ開発・公開に関する意見交換会

ソフトウェアの公開とは？ ～アプリcafeの活用法～

[2月16日(3日目)]

9:00-12:00

「実習 チューニングもしくはコンパイル」

13:30-14:30

「実習 チューニングもしくはコンパイル」

14:30-15:00

成果発表及び次回の内容に関する議論

# 第7回の準備内容

- FX10で各自のプログラムのプロファイラデータ取得(関数・サブルーチンごとのコスト、全体の実行性能)
- プロファイラデータと参加者の希望から、チューニング班を3つにグループ分け(CPU6人、スレッド並列8人、MPI・プロセス並列8人)
- プロファイルデータを基に、それぞれの参加者が行うチューニング内容を決定し、wikiに参加者ごとのページを作成

# 第7回の成果

- プロファイラデータの内容を理解し、プログラムの問題箇所  
の特定と、どのようにチューニングすればよいか分かるよ  
うになった(はず)
- チューニング成果のwikiへの書き込み18件
- 計算時間を3割以上削減できた参加者 5名以上
- 詳しくは <http://trac.cms-initiative.jp/wakate7>

# まとめ

- 昨年度行った若手技術交流会で、コンパイル・チューニングに関するノウハウが数多く集まった
- プロファイラデータから判断すると、同じ問題を抱えているアプリが複数あり、情報共有は非常に重要
- wikiへの書き込みで共有すべきものは、今後MateriApps(旧アプリcafe)に移す予定(移す際、許可をお願いするのでご協力ください)