

性能要求値精査状況

丸山直也

アプリFS全体会議

2013年12月25日

性能要求値

性能要求表_v2.xlsx

Microsoft Excel 2010 interface showing the ribbon (File, Home, Insert, etc.) and the spreadsheet grid. The title bar indicates the file name '性能要求表_v2.xlsx' and the user '野田'.

担当者	所属	メールアドレス	要求性能 (FLOPS)	要求メモリ (TB)	要求ネットワーク (TB/s)	要求ファイルIO (TB/s)	メモリ/ケース (TB)	ストレージ/ケース (TB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考	M. 受領日	M. 改訂者	変更内容	
小野	玉田 直紀	東京大学 先端情報理工学 高度実科	tamada@i.u-tokyo.ac.jp	100	50	0.5	0.5	9	100	700	200	50457000	びんぐラム解析200,000人分のマッピングおよび変異判定	4x10^10ノード		10/15	後日先生	
				100	50	5.7	0	4.5	0.04	10	28000	93600000	ペイジアンネットワークおよび1正則化法	4万箱写像 x 28,000データセット x 350万アレイ	メモリ量は140node X 32GBで計算	10/15	後日先生	
ス	山下 謙史 若口 眞俊	東京大学 先端科学技術研究センター 横浜国立大学 生命医科学研究科	yamashita@isbm.org waki@isbm.org	1	0.1	0.1	0	0.001	0.001	1.2	1000000	4320000	全原子分子動力学シミュレーション	ケース数: 10万化合物 x 100個時点あたり	16GB/node, B/F=0.1	10/15	後日先生	数字について修正
				500	50	50	2	4	1.2	98	10	1728000	全原子/精細化分子動力学シミュレーション	~1億粒子	メモリ量について、全粒子の動的な情報すべてをノードで持たせるため、最低限必要なメモリ量(8GB) x ノード数になっているノード数(135万)を想定し、B/F=0.1	10/15	後日先生	数字について修正
計	望月 幸志	立教大学 理学部化学科	tsumon@kky.ac.jp	10	1	0.01	1	1	0.001	1	100	3600	薬品とタンパク質間相互作用の量子化学計算	水和条件下、500個タンパク質 x 1000点		10/15	後日先生	
				100	1	0.01	1	1	0.001	1	100	36000	200-500個タンパク質の分光計算	電子軌道数10万個		10/15	後日先生	
シオン	野田 浩輔	理化学研究所 情報基盤センター	shige@riken.jp	400	84	10	1	1	174	10	2505600	差分法、半導体法(構造・液体・気化学連成シミュレーション)	100nm長 x 100nm幅、0.1um格子、流速 10^-2m/s、解像度1us、10秒		10/15	後日先生		
				200	130	20	132	840	240	10	1728000	差分法、降算法(音波・熱シミュレーション)	400mm x 3、+数解算、+マイクログラセル予後算		10/15	後日先生		
シオン	加尻 知毅	東京大学 先端科学技術研究センター	kazusa@brain.mil.u-tokyo.ac.jp	10	100	0.01		56	0.2	210	30	230000	モンテカルロイベント駆動モデル	1000個ニューロン・ニューロンあたり1万シナプス	100MB/5程度の外部との通信も想定	10/15	後日先生	
シオン(情報学部)	長藤 守 古村 孝志	海洋研究開発機構 東京情報学棟	hyodo@marsec.co.jp fukumura@er.u-tokyo.ac.jp	11以上	80以上			0.1	5	15000-約2000月	5000	116	1. 流線法による地震サイクル計算 2. 差分法による弾性波動伝播計算	要素数 10^6 200x100x200km^3 125x125x25km^3	1) 精度+10000-1を60個域分、 アプリの最大時価=8.0	10/24	藤末先生	
シオン	細浪 誠	東京地震研	hon@er.u-tokyo.ac.jp	40		0.07	2				40	40	有限要素法による地震波動計算	30層要素(200x25x10km^3)	アプリの最大時価=8.0	10/24	藤末先生	
				40		0.07	2				40	40	有限要素法による地震波動計算	30層要素(20x25x10km^3)	アプリの最大時価=8.0	10/24	藤末先生	
シオン	有川 太郎	海洋研究開発機構	arikawa@anp.jp	10		0.03	0.03				10	10	Navier-Stokes方程式数値モデル(静水圧近似、非静水圧、VOF法)計算	3x3x200km x 0.1420 x 1100x100km (3x0.5x4kmの格子)	アプリの最大時価=2.43	10/24	藤末先生	
				360		0.0001	-				360	360	マルチエージェントモデルによる行動シミュレーション			10/24	藤末先生	
以組計算	前崎 剛	物質材料研究機構	MIYAZAKI.Tsuyoshi@nims.go.jp	100	20	30		5	15	240	10	884000	第一原理分子動力学計算	原子数: 1億		10/28	藤末先生	
以組計算	吉本 芳英	鳥取大学	yosimoto@amp.tottori-u.ac.jp	100	10	1		1.2	12	96	10	345000	実空間基底DQD法分子動力学計算	原子数: 10万		10/28	藤末先生	
解算	大久保 誠・森田 浩史	東京大学物性研究所	fu_kubo@iss.u-tokyo.ac.jp morita@iss.u-tokyo.ac.jp	1000	300	1		10		8	100	2880000	変分モンテカルロ法	原子数: 1万		10/28	藤末先生	数字について修正
シオン(自動最適化)	井戸村 泰宏	原子力機構	idomura.yasuhiro@jaea.go.jp	100	200	0.5	10	0.5	0.1	24	50	432000	ボルトマン方程式の3次元計算(スペクトル法+差分法)	10^12格子、10^6ステップ		10/10	藤末先生	
				100	200	0.5	10	0.5	1	170	10	812000	ボルトマン方程式の3次元計算(差分法)	10^12格子、10^7ステップ		10/10	藤末先生	
シオン(自動最適化)	井澤 誠	北大	mtsubo@eng.hokudai.ac.jp	10	20	0.5	16	0.03	4.8	28	1000	1010000	Re=10^6~10^7のLES流体力学計算	10^11格子		10/10	藤末先生	
シオン(自動最適化)	井澤 誠	北大	mtsubo@eng.hokudai.ac.jp	100	200	5	27	0.5	48	28	10	101000	Re=10^6~10^7のLES流体力学計算	格子点数: 10^12	構造精度でB/F=2、1,000ジョブを30分で出力と想定、これを各地域に分散して行うことが必要。	10/10	藤末先生	
シオン(自動最適化)	八代 尚	理化学研究所 計算科学研究科	hyashiro@riken.jp	29	90	0.3	0.3	0.01	0.7	72	100	780000	高解像度LES流体力学計算(差分法)	3200x3200x320格子点(32x32x10=解像度)、125万ステップ(60x21秒、72時間、スピンアップ24時間含む)	1) 広域のアセスメントに約100ケース/200日必要、これを各地域に分散して行うことが必要。 2) 計算の大半を占める大気モデルのみで見ても、1,000ケース全体が1ヶ月で計算完了するため、ネットワークは1,000ノードを仮定しノードあたり大域精度1TB/s)	11/7	河野先生	
別添シナシ	河野 栄太郎	海洋研究開発機構	kawanishi@jamstec.go.jp	0.41	1.6	1	0.04	0.003	0.8	720	100	108000	モデル名MIRCO-ESM、スペクトル法(大気)	格子点数: 2000x1000x200、ステップ数: 5300万 (6h=60秒、100年)		10/30	河野先生	

性能要求値

- ロードマップ記載の性能要求値の確認を進めています
- 性能調査ワークショップ第1回 10月25日@東工大
 - 16アプリについてプロフィール結果収集
 - ご協力ありがとうございました
 - 内、性能要求値の確認に使える結果は6アプリ
 - その他は時間内に十分な計測ができなかったため、確認に使える信頼性のあるデータ取得できず
- 性能調査ワークショップ第2回 12月19日@東工大
 - 現在結果収集中→1月7日まで
- 要求値をプロフィール結果から推定される値と突き合わせ
 - プロフィール結果もあくまであるケースでの値であり、ばらつきも有り
 - 数倍程度の違いは許容。最低限オーダーで合致していればOK

調査状況全体

- 課題数120程度(内、重複20弱?)
- 調査状況を4段階に分類
 - A(良): プロファイルやアルゴリズムから全項目ほぼ合致することを確認
 - B(許容範囲内): 一部不一致があるが許容範囲と判断
 - C(要再検討): 全体的に乖離があり要再検討
 - D(調査中): 担当者が作業中
 - E(未調査)
- 最終的に全体をAもしくはBに...

調査状況現状

- まだ8割方未着手
- 第2回WSの結果により5本程度は増加の見込み
- 20本程度は重複
- 10本程度は簡単に確認可能(と期待)
- それでもまだ60本(6割)程度は残る

		12/25/13	
		本数	割合
A	良	4	3.4%
B	許容範囲	1	0.8%
C	要再検討	0	0.0%
D	調査中	14	11.8%
E	未調査	100	84.0%

記載方法確認：「ケース」

- ケースの粒度の統一がとれてない
- 例： 10並列のアンサンブルを10回
 - 「10並列のアンサンブル」は同時に実行する必要があるか？
 - 計算機設計側からすればシステムの規模に関わるため重要な情報
 - 同時実行の必要がなければ単純に「100ケース実行」と書かれていれば明確
- ケースの定義
 - 「並列実行する必要のない最小単位」？

記載方法確認： 実行効率の換算

- 演算量、許容時間から導出される性能にシステムの典型的な実行効率を換算した性能要求値を記載
- 例： 本質的には1PFLOPS必要だが、典型的には効率10%なので、10倍の10PFLOPSを要求
 - 換算せずに1PFLOPSと記載してください
 - 要求表からは格子QCDなどが「効率20%」
- 要求値にはアプリが本質的に必要とする要求値を記載
 - 可能な限り特定のシステム依存な話は省く
 - ただし、要求値のプロファイル結果からの推定など依存を完全に除くことは現実的には困難

調査完了課題

- 地震発生 (A)
 - アプリ: RSGDX (堀、兵藤@JAMSTEC)
 - 堀さん、東北大FSと協力し、アルゴリズムおよびプロファイルから推定
- プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流 (A)
 - アプリ: GT5D (井戸村@原研)
 - 京でのプロファイル結果から確認済みであることを確認
- プラズマ乱流計算・大域的非常乱流 (A)
 - アプリ: GKV (井戸村@原研)
 - 京でのプロファイル結果から確認済みであることを確認
- 細胞の分化、癌化、増殖機構解明 (A)
 - アプリ: pSpatiocyte (岩本@理研)
 - 性能調査WS結果より要求表修正
- 近未来地球環境予測システム (B)
 - アプリ: MIROC (河宮@JAMSTEC)
 - 性能調査WSで西澤さんが代替アプリより問題ないこと確認

調査中課題(D)

- 個人ゲノム解析(滝澤@AICS) (括弧内調査担当者)
- 血流シミュレーション(辻@AICS)
- 総合防災波動伝搬(丸山、松田@AICS)
 - 東北大FSと調整中(プログラムバージョンが異なる)
- 総合防災地震動増幅(丸山、三上@AICS)
 - 東北大FSと調整→開発担当者と要調整(問題サイズ、プログラムバージョンが異なる)
- 総合防災建物振動(松田@AICS)
- 総合防災津波遡上(鈴木@AICS)
- 強相関電子系の理解(丸山、大久保@東大)
 - 性能調査WSの結果からの修正が必要
- 惑星表層環境の形成と進化シミュレーション(西澤@AICS)
 - 性能調査WSの結果からの修正が必要
- 光・電子デバイス(河東田@AICS)
- 強相関電子系の機能解明(藤堂@東大)
- 格子QCD4課題(中村@AICS)

今後の見通し

- 短期的
 - 重複の削除
 - 追加調査不要課題の洗い出し
 - これらで30本ぐらい
- 年度末まで
 - 残り60本程度
 - 手分けして作業予定