

第11回アプリFS全体ミーティング ミニアプリ&性能リポジトリ 進捗報告

鈴木惣一郎、丸山直也(理研AICS)

2013年12月25日

性能評価リポジトリで知りたいこと・ 知れること

- アプリ間・計算環境間で性能の傾向の違いを可視化する
 - 自分のアプリと似た/違う挙動のアプリはどれ?
 - 自分のアプリはどんな計算機でうまく動く?
 - この計算機で一番効率よく動くアプリってどのようなもの?
 - 最終的にはアプリと計算機のスペックを与えたらどのぐらいの性能で動くかを知りたい
- 性能評価リポジトリで格納・表示するもの(成果物)
 - 実行時間、命令の傾向(instruction mix)、演算数、メモリアクセス量、メモリ使用量、通信、I/O、電力
 - 今年度中にはこれらの単純な統計処理(複数runの平均・分散)と、そのplotを表示できるようにする

性能評価リポジトリ開発状況

- スキーマの細部を作成中 → 1月にfix
 - ORNLとDBテーブル構造と記載内容について共通化
 - Platform, Application, Tool, Experiment
 - ベンチマーク状況(メタデータ)を格納
 - Summary_Metrics
 - ベンチマーク結果を共通の形式でまとめる
 - Tool_Results
 - ベンチマークツールの出力を保存
 - ORNLのツールと相互に変換できるようにする予定
- ベンチマーク結果格納用サーバ構築: 完了
 - 上記の構造のXMLを格納し、結果となるXMLを検索できる
- ベンチマーク結果(Scalascaのアーカイブ)から、上記XMLへの変換ツールを作成 → 2月末

完成

- Marble
- Modylas
- CCS-QCD
- FFV
- NGS Analyzer (新規)

作業中

- CONQUEST
 - このあと鈴木より報告
- ALPS/looper (藤堂@東大)
- mVMC (大久保@東大)

今後の予定

- ものづくり
 - FFB
- その他
 - 気候シミュレーション関係
- 基礎カーネルベンチマーク

CONQUESTのミニアプリ化

CONQUEST

- 計算内容:
 - オーダーN法による第一原理計算、
 - それにもとづく構造最適化、分子動力学計算
- 開発:
 - 宮崎剛(物質・材料研究機構)、他
 - URL: <http://www.order-n.org/>
- 言語:
 - Fortran90
- プログラムサイズ:
 - 11.5万行
- 将来の想定問題規模:
 - 数十万～百万原子でのアンサンブル計算
 - 1億原子での一点計算

オーダ一N法第一原理計算

- 密度行列

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n f_n \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi_n(\mathbf{r}'), \quad \Psi_n(\mathbf{r}): \text{Kohn-Sham方程式の固有関数}$$

- 局在軌道

$$\{\phi_{i\alpha}(\mathbf{r})\}, \quad i \text{ は原子、} \alpha \text{ は軌道}$$

- 密度行列最適化法

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{i\alpha, j\beta} \phi_{i\alpha}^*(\mathbf{r}) K_{i\alpha, j\beta} \phi_{j\beta}(\mathbf{r}')$$

$K_{i\alpha, j\beta}$ と $\phi_{i\alpha}(\mathbf{r})$ について全エネルギーを最小化する

- 密度行列の局在性から

原子 i, j の位置座標を $\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j$ とすると

$$|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| > R_{\text{cutoff}} \text{ なら } K_{i\alpha, j\beta} = 0$$

→ 計算量は $O(N)$

ホットスポット

- 密度行列の idempotency 条件

$$\rho^2 = \rho$$

- 最適化は密度行列 K ではなく、補助行列 L に対して行う

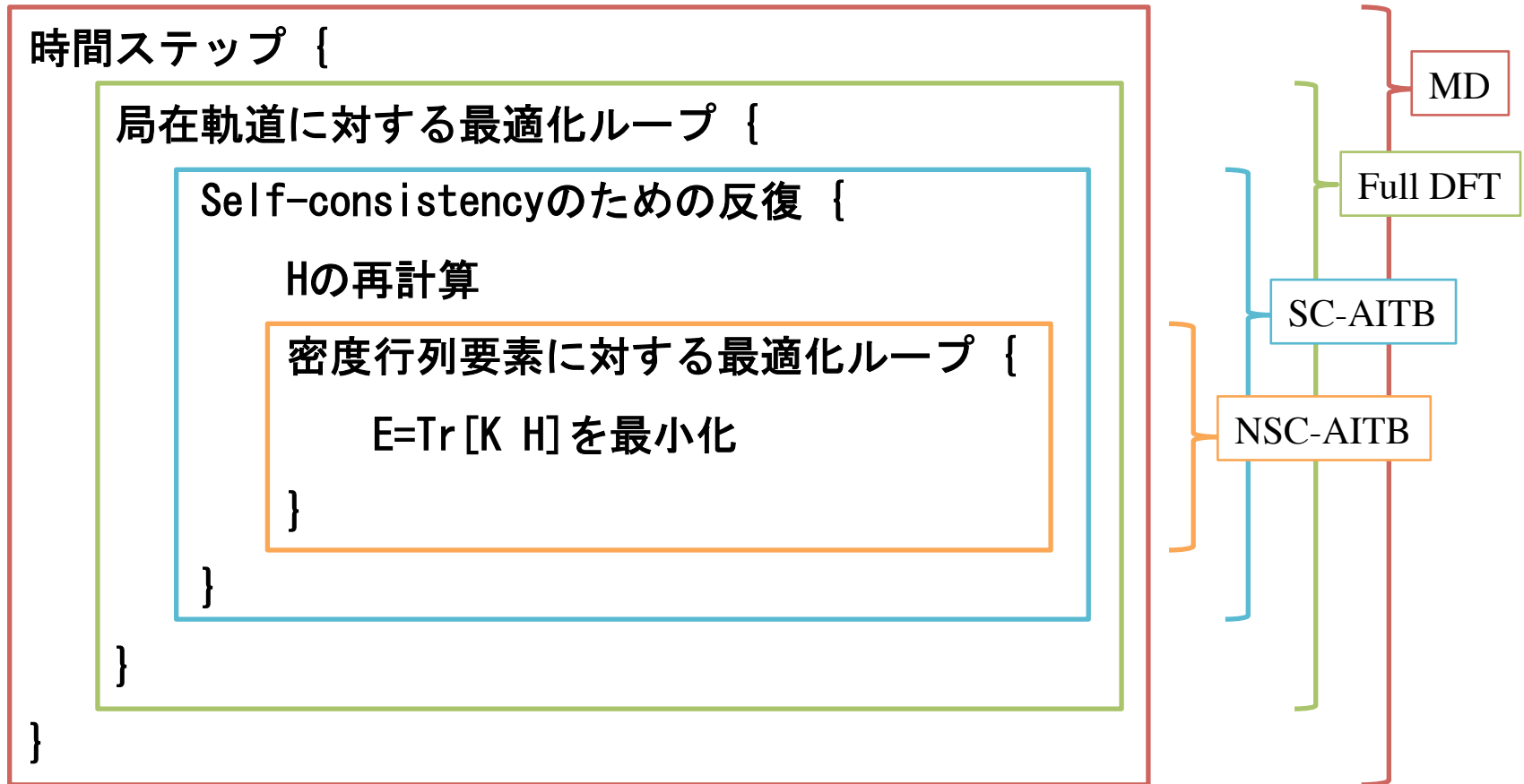
$$E = \text{Tr}[K H] \text{ を最小化する}$$

$$K = 3LSL - 2LSLSL, \quad S \text{ は局在軌道間の重なり積分}$$

- 疎行列積がホットスポット

$$LSL = (LS)L, \quad LSLSL = (LSL)(SL), \quad \dots$$

ループ構造とミニアプリ化部分



NSC-AITB(non-self-consistent *ab initio* tight binding)計算部分を
中心にミニアプリ化する

ミニアプリ化方針

- NSC-AITB計算専用プログラムとする
 - 密度行列要素についてのみ最適化計算を行う
 - Full DFTの計算時間は、NSC-AITBでの計算時間にSC反復数と局在軌道最適化の平均反復数の予想値を掛ければ評価できる
- 密度行列要素に対する最適化反復回数数を一定数に固定するベンチマークモード
 - 弱スケーリング計測でのノードあたりの計算量を一定に保つため
- その他の機能削減によるコードサイズ縮小
- 来年1月中に作業完了予定