

性能要求値精査状況

丸山直也

アプリFS全体会議

2014年2月24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 current sheet is 'sheet1'.

担当者	担当者 (関係者と管理者など、複数可)	所属	メールアドレス	要求性能 (FLOPS)	要求メモリ 容量 (TB)	要求ネットワーク 性能 (Tb/s)	要求ファイ ルIO性能 (TB/s)	メモリ量 (TB)	ストレージ 量 (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	ML 受領日	ML 改訂者	変更内容	
情報系	玉田 憲紀	東京大学 大学院情報理工学系研究科	tamada@iis.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			10/15	後日先生		
	山田 謙史 若口 真優	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@abm.org waki@yokohama-cu.ac.jp	100	50	5.7	0	4.5	0.04	10	28000	93600000	ペイジネットワークおよび1正則化法	4万箱写像×28,000データセット×350万アレイ	メモリ量は140node X 32GBで計算	10/15	後日先生		
系	若田 有治 若田 秀行	理化学研究所 計算科学研究機構 理化学研究所 量子系生物物理研究チーム 名古屋大学 工学研究科附属計算科学連携教育研究センター	wakada@kenji.jp wakada@ccs.eng.nagoya-u.ac.jp	500	50	50	2	4	1.2	98	10	1728000	全原子分子動力学シミュレーション	全原子分子動力学シミュレーション	~1億原子	メモリ量について、全原子の動力学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)×ノード数になっているノード数(350万)を想定し、B/F=0.1	10/15	後日先生	数字について修正
	望月 幸志	立教大学 理学部化学科	tsunemitsu@kaiy.ac.jp	10	1	0.01	1	1	0.001	1	100	3600	東京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+リガンド		10/15	後日先生		
計	野田 謙輔	理化学研究所 情報基盤センター	nishida@iken.jp	400	84	10	1	1	174	10	2505600	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			
	加沢 知毅	東京大学 先端科学技術研究センター	kazawai@brain.mil.u-tokyo.ac.jp	200	130	20		132	840	240	10	1728000	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x100nm径、0.1um格子、流速10 ⁻² ~2m/s、解像度1us、10秒		10/15	後日先生		
シミュ	加沢 知毅	東京大学 先端科学技術研究センター	kazawai@brain.mil.u-tokyo.ac.jp	10	100	0.01		56	0.2	210	30	230000	単一コンピュータシミュレーション	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		
	加藤 謙	理化学研究所	kato@iken.jp	11以上	80以上			0.1	5	115000	約200ヶ月	5000	116	4 流線形法による地震サイクル計算 12 差分法による弾性波動計算 40 有限要素法による地震波動計算 10 有限要素法による地震波動計算 10 Navier-Stokes方程式連続モデル(静水圧近似、非静水圧、VOF法)計算 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	要素数10 ⁶ 200x1000x200Km ³ 125m×125m×25m格子 30億点(300×250×100m ³) 30億点(30x25x100m ³) 構造物100万個 3x3x200Km×0.1400x1100x100Km (3x0.5x0.4Kmの格子)	アプリの最大時価=8.0 アプリの最大時価=2.14 アプリの最大時価=8.0 アプリの最大時価=8.0 アプリの最大時価=2.43	10/24 10/24 10/24 10/24 10/24	藤末先生 藤末先生 藤末先生 藤末先生 藤末先生	
シミュ	加藤 謙	理化学研究所	kato@iken.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		
	若木 芳美	鳥取大学	yasimoto@camp.tottori-u.ac.jp	100	10	1		1.2	12	96	10	345600	実空間基底DQD分子動力学計算	原子数:10万		10/28	藤末先生		
解析	大久保 毅・森田 浩史	東京大学物性研究所	fujioka@iss.u-tokyo.ac.jp morita@iss.u-tokyo.ac.jp	1000	300	1		10		8	100	2880000	量子モンテカルロ法	原子数:1万		10/28	藤末先生	数字について修正	
	若田 有治	理化学研究所	wakada@kenji.jp	100	200	0.5	10	0.5	0.1	24	50	432000	ボルツマン方程式の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		
シミュ	若田 有治	理化学研究所	wakada@kenji.jp	100	200	0.5	10	0.5	1	170	10	812000	ボルツマン方程式の3次元計算(差分法)	10 ¹² 格子、10 ⁷ ステップ		10/10	藤末先生		
	若田 有治	理化学研究所	wakada@kenji.jp	10	20	0.5	16	0.05	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		
シミュ	若田 有治	理化学研究所	wakada@kenji.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	構造物でB/F=2、1,000シットを30分で出力と想定	10/10	藤末先生		
	若田 有治	理化学研究所	wakada@kenji.jp	29	90	0.5	0.5	0.01	0.7	72	100	780000	高解像度LES流体力学(差分法)	3300x3300x330格子点(30x30x10=解像度)、125万ステップ(6x0.21秒、72時間、ステップアップ4時間)	1500x1500x1500の約100ケース/200日必要、これを各地域に分散して行う必要がある	11/7	河野先生		
シミュ	河野 美佳	理化学研究所	kawanami@jamstec.go.jp	0.41	1.6	1	0.04	0.003	0.8	720	100	108000	モデル系MHD-CISM、スペクトル法(大気)	格子点数:2000x1000x200、ステップ数:5300万 (6~80秒、100年)	計算の大まかさを求める大気モデルのみで思っても、100ケース全体が1ヶ月で計算完了するため必要、ネットワークは1,000ノードを想定(ノードあたり大規模演算1TB/s)	10/30	河野先生		

調査状況全体

- 課題数108
- 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(桁で一致)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(調査中): 担当者が作業中
 - D(未調査)
- 最終的に全体をAもしくはBに・・・

前回ミーティング以降・・・

- プロファイルの提供ありがとうございました
- AICSメンバー中心にプロファイル内容の確認
- ロードマップ2章・3章に該当する課題についてはほぼ確認終了

記載方法の変更

- 性能 = 演算量 ÷ 要求時間
 - これまでは総演算量を記載
 - ケースあたりの演算量と要求時間のみを数値を記載
 - 性能、総演算量は計算式により自動計算
 - メモリ関連も同様

調査状況現状サマリ

- 34本確認完了(約30%)
 - 昨年末時点5本(4.2%)から29本増加
- 数課題調査中
- まだ66本(6割)未調査

		2013/12/25		2014/2/21	
		本数	割合	本数	割合
A	良	4	3.4%	15	13.9%
B	許容範囲	1	0.8%	19	17.6%
C	調査中	14	11.8%	8	7.4%
D	未調査	100	84.0%	66	61.1%

今後の予定

- 短期的
 - 2章・3章課題確認(残り10課題程度)
- 年度末まで
 - 未着手課題(2章・3章以外)の調査
- 来年度以降
 - エクサプロジェクトの中で引き続き継続調査
 - 未確認課題
 - 通信やファイルI/Oなど十分に確認ができてない項目