

第12回アプリFS全体ミーティング ミニアプリ化進捗報告

鈴木惣一郎 (理研AICS)

2014年2月24日

提供アプリ (フルアプリ) #1/2

feram	西松@東北大	強誘電体MD(長距離相互作用する擬スピン系)	OpenMP(MPI使用はパラメータ並列版のみ), 3次元FFT
MARBLE	池口@横浜市大	生体高分子MD (クーロン力はPME)	MPI+OpenMP, 3次元FFT
SMASH (para-TCCI)	石村@分子研	電子状態密度計算 (Hartree-Fock計算)	MPI+OpenMP, 密行列対角化は逐次計算
FFVC	小野@AICS / 東大	熱流体 (直交等間隔格子、差分法)	MPI+OpenMP, SOR or GMRES
pSpatioocyte	岩本@QBIC	細胞内シグナル伝搬計算 (反応拡散系)	MPI+OpenMP, 六方細密充填格子上的モンテカルロ, 反応過程は未実装
NEURON_K+	加沢@東大	神経回路シミュレーション (NEURONのカスタマイズ)	MPI+OpenMP, ALL_GATHER多用, 専用のモデル記述言語からCへのトランスレータ
GT5D	井戸村@JAEA	5次元プラズマ乱流 (5次元差分+2次元FEM)	MPI+OpenMP, 共役残差法, 1次元FFT
MODYLAS	安藤@名大	汎用古典MD (クーロン力はFMM)	MPI+OpenMP
STATE	稲垣@阪大	第一原理MD (密度汎関数法)	MPI+OpenMP(レプリカ並列、k点並列、バンドor平面波 並列), FFT, 固有値計算(RMM)
FrontFlow/blue	山出@みずほ	熱流体 (非構造格子、有限要素法)	MPI+自動並列(京対応版), BiCGSTAB
SiGN-L1	玉田@東大	遺伝子ネットワーク推定 (L1正則化法)	MPI+OpenMP, ファイル出力が律速
NTChem/RI-MP2	河東田@AICS	電子相関計算 (分子軌道法)	MPI+OpenMP, DGEMM, 逐次計算部分が残っている, メモリ量 $O(N^3)$

提供アプリ (フルアプリ) #2/2

OpenFMO	稲富@九大	Hartree-Fock法を基にしたFMO第一原理計算	MPI+OpenMP, 動的負荷分散
CONQUEST	宮崎@物材研	密度汎関数法による第一原理計算、 $O(N)$ 法	MPI+OpenMP 疎行列積, FFT
NGS Analyzer	玉田@東大	次世代シーケンサーの出力データ解析	MPI I/O律速
DCPAM	西澤@AICS	全球気象・気候シミュレーション スペクトル法(球面調和関数展開)	MPI+OpenMP

提供アプリ (ミニアプリ、ベンチマークプログラム)

fft_check, fft_check_mpi	西松@東北大	3次元FFTベンチマーク
ALPS/looper	藤堂@東大	量子モンテカルロ法, リンクリスト操作, 整数演算, MPI+OpenMP
CCS QCD Solver Benchmark test program	石川@広大	格子QCDのClover型フェルミオンの伝搬関数を求めるソルバーのベンチマーク, 疎行列連立一次方程式, BiCGStab, MPI+OpenMP
ZZ-EFSI	杉山@東大	固体流体練成コードのホットスポット, 直交格子, VOF, 擬似圧縮性法 MPI+OpenMP
rmcsm bench nocore	清水@東大	モンテカルロ殻模型計算のベンチマークコード, MPI+OpenMP
GCEED	信定@分子研	時間依存密度汎関数法, 時間依存コーンシャム方程式の差分解法における複数のホットスポットを統合
NICAM-DC	八代@AICS	全球雲解像モデルNICAMの力学コア部, 有限体積法 MPI
mVMC	今田@東大	強相関多体電子系, 多変数変分モンテカルロ法
RSGDX	兵藤@JAMSTEC	地震発生サイクルシミュレーション

ミニアプリ化および他FSへの提供

CCS QCD	格子QCD	→東大FS, 筑波大FS
MARBLE	MD(PME)	
MODYLAS	MD(FMM)	→東大FS, 筑波大FS
FFVC	熱流体(直交格子、差分)	→東北大FS
NGS Analyzer	次世代シーケンサー出力解析	→東大FS, 筑波大FS
ALPS/looper	量子モンテカルロ法	(ほぼ完成)
CONQUEST	第一原理計算($O(N)$)	(ほぼ完成)
NICAM-DC	気象	(ほぼ完成)
FrontFlow/blue	熱流体(非構造、有限要素法)	(予定)
mVMC	多変数変分モンテカルロ法	(予定)

オリジナルコードをそのまま提供したもの

- NTChem/RI-MP2 → 東大FS
- NEURON_K+ → 東大FS
- rmcsmbench_nocore → 東北大FS

詳細性能調査

- ミニアプリ化のために京、TSUBAME、FX10上にて性能詳細調査を以下のアプリについては実施
 - CONQUEST
 - DCPAM
 - GT5D
 - MARBLE
 - mVMC
 - NICAM
 - NTChem/RI-MP2
 - pSpatocyte
 - SMASH
 - ZZ-EFSI
- 開発元にて報告書資料をご希望の場合はご連絡ください