

HPCI FS第3回全体ミーティング フルアプリ調査報告・ミニアプリ化方針

丸山直也、鈴木惣一郎(理研AICS)

2012年11月20日

目次

1. アプリケーション収集の経過報告
2. 収集したアプリケーションについて
3. 今後の予定について

タイムスケジュール

- 9月27日： 第1回アプリケーション受付締切
- 10月5日： フルアプリ詳細情報およびソースコード一式提供締め切り
- 10月から3月
 - ミニアプリ化作業(年度内に数個のミニアプリを作成予定)
 - フルアプリ情報補完
- 2月末： フルアプリ受付第2回締め切り(想定)
- 5月頃： フルアプリ受付第3回締め切り(想定)
- 5月から2013年夏ごろ
 - ミニアプリ化作業
 - 同時並行してアーキFSと共同で提案アーキ向けミニアプリの拡張
- 2013年秋から2014年3月
 - アーキFSと共同で提案アーキ向けミニアプリの拡張
 - ミニアプリのアップデート

その他のスケジュール想定:

- フルアプリ提供次期によって扱いに差が生じないようにします
- 新規フルアプリの受付は来年度冒頭ぐらいが最後にしたい(あとから出されても作業できないため)。ただしミニアプリとして提供してもらえる場合は来年度夏ぐらいまでは受付可能
- フルアプリ側の開発進捗があった場合のミニアプリへの反映は性能上重要な場合は来年度後半に受け付け

ミニアプリの取り扱い

- ソースコードをプロジェクト終了後速やかに公開します
 - ライセンスはGPLもしくはApacheの2択
 - 著作権者はオリジナルアプリ著作権者＋ミニアプリ作成実施作業者
- プロジェクト実施期間内はアプリFSおよびアーキFS内にて共有
- ミニアプリ開発で行った作業のフルアプリへのフィードバックはライセンス・著作権規定に従う限り自由
 - ミニアプリがGPL → ミニアプリのコードをフルアプリで使い場合はフルアプリもGPLにする必要あり(ミニアプリがApacheであれば特に制限なし)

フルアプリの取り扱い

- フルアプリのミニアプリ作業班への提供は必須ではありません
 - ミニアプリ化をフルアプリ開発者側で行う場合→ミニアプリの提供だけで構いません
 - ミニアプリ化をFSミニアプリ作業班で行う場合→フルアプリの提供が必要です
- フルアプリを提供された場合
 - アプリケーションの情報はアプリFS内で共有します
 - アプリの名前、開発者、計算内容、など
 - ソースコードは**ミニアプリ作業班内**でミニアプリ化のために共有します
 - アプリFSサーバーに関係者内共有可能なリポジトリを作成予定
 - ミニアプリ作業班メンバー
 - AICS: 丸山、鈴木、松田
 - 東工大: 松岡、野村、遠藤、佐藤、滝澤、Pericas, 青木、下川辺、小野寺
 - その他のケースについては適宜開発者側に確認します
- アーキテクチャFSの3チームには共有可能かどうかはアプリ次第とします

フルアプリの条件

- 言語（以下のいずれか）
 - C99, C++ (C++0xはのぞく)、Fortran 2003
 - その他スクリプト系 (Perl、Python、Ruby)
 - できれば京で動くものが望ましいが必須ではない
- Intelマシン＋Linuxで動作確認がとれていること
 - 性能チューニングがされているかどうかは問わない
- 並列動作すること
 - 並列化の手段は問わない (MPI、OpenMP、自動並列化、アレイジョブ、等)

フルアプリを提供する場合の作業事項

- ビルド手順の整備
 - ビルドコマンド
 - 依存外部ライブラリ
- 実行手順の整備
 - 実行に必要な入力・設定ファイル
 - 実行時間、必要メモリサイズ、入出力ファイルサイズ
 - 問題サイズ
 - ひとまず現在のマシンで1ノードで簡単に実行できる程度のサイズ
(目安として、Intel Xeonマシンで1回の実行が数分)としてください
- 実行結果検証の整備
 - ひとまず簡便なもので構わないので検証プログラムを用意してください
 - のちのちより厳密な検証プログラムへ置き換えも可能とします

フルアプリを提供する場合の作業事項

- ドキュメント
 - 計算する問題の概要
 - 計算スキーム
 - 2018-2020年頃の想定実行規模
- 問題サイズ(やその他実行条件)の決定
 - 2020年頃に実行したい問題設定から決定
 - 評価のためには問題サイズ可変が望ましい
- 非実行コードの除去
- ミニアプリのライセンスの決定 (Apache or GPL)
 - プロジェクト終了時まで決定して頂ければ構いません

目次

1. アプリケーション収集の経過報告
2. 収集したアプリケーションについて
3. 今後の予定について

ミニアプリ化予定アプリ

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
para-TCCI	石村@分子研	電子状態密度計算 (Hartree-Fock計算)	MPI+OpenMP, 密行列対角化を逐次計算(並列化予定なし)
FFVC	小野@AICS	差分非圧縮熱流体 (直交等間隔格子)	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のモンテカルロ, 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 (注)	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	有限要素法非圧縮熱流体	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 $O(N^3)$

注: 未入手(秘密保持契約待ち)

アプリ開発側によるミニアプリ化

- `fft_check`
- `RSGDX`
- `CCS QCD Solver Benchmark test program`
- `ALPS/looper`
- `ZZ-EFSI`
- `rmcsm bench_nocor`

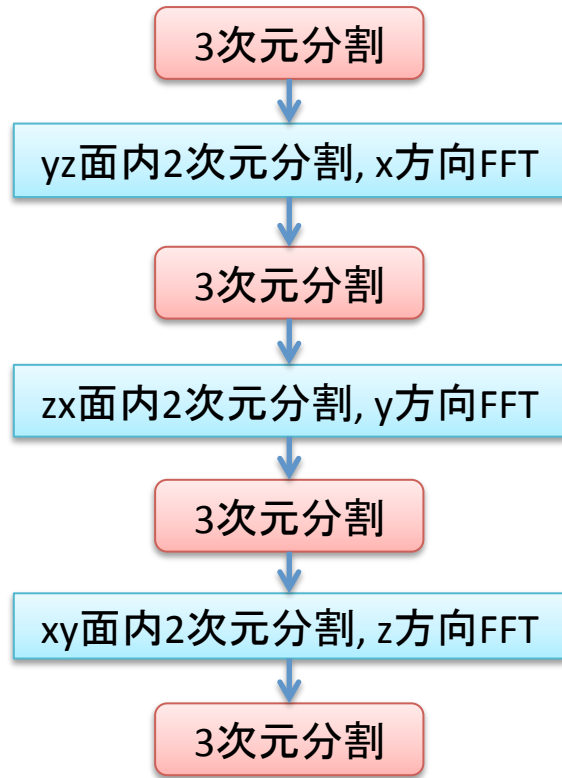
FFTを使用しているフルアプリ

アプリ	種類	OpenMP	MPI	サイズ	ホットスポット	使用ライブラリ
feram	3次元FFT	✓		数百 ³ (~8万 ³)	✓	FFTW, Intel, 富士通, 日立
MARBLE	3次元FFT	✓	✓ ^{*1}	64 ³ ~256 ³	✓	FFTW
GT5D	1次元FFT(多重)	✓		~数百		Intel, 富士通, 日立, SGI
STATE	3次元FFT	✓	✓ ^{*2}	数百 ³ (~?)	✓ (他にもホットスポットあり)	FFTW, FFTE, NEC, 日立
	3次元FFT	✓				
	1次元FFT(多重)	✓				

*1 独自に並列3次元FFTを実装

*2 FFTW利用時には、独自実装の並列3次元FFTを使用

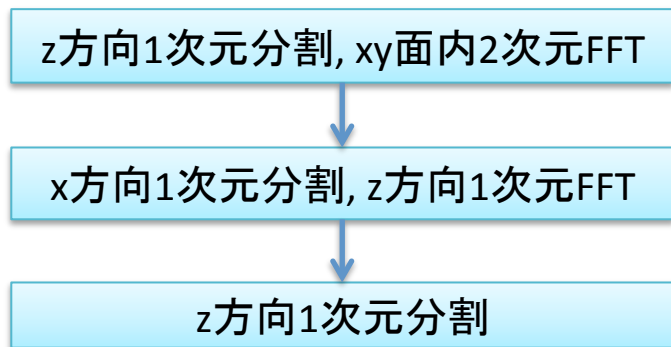
3次元並列FFTの実装(MARBLE)



↓ = 通信を含む転置計算

- 3次元領域分割からスタート
- 転置時の通信は、各軸方向に限定したコミュニケータ内でのAlltoAll
- 転置時に3次元分割を経由しているが、これをスキップすれば、通信量は2/3に、通信時間は？

3次元並列FFTの実装(STATE)



↓=通信を含む転置計算

- z方向1次元領域分割からスタート
- 転置時の通信は、MPI_COMM_WORLD内でのAlltoAll

目次

1. アプリケーション収集の経過報告
2. 収集したアプリケーションについて
3. 今後の予定について

今後のタイムスケジュール

- ~~9月27日： 第1回アプリケーション受付締切~~
- ~~10月5日： フルアプリ詳細情報およびソースコード一式提供締め切り~~
- 10月から3月
 - ミニアプリ化作業(年度内に数個のミニアプリを作成予定)
 - フルアプリ情報補完
- 2月末： フルアプリ受付第2回締め切り(想定)
- 5月頃： フルアプリ受付第3回締め切り(想定)
- 5月から2013年夏ごろ
 - ミニアプリ化作業
 - 同時並行してアーキFSと共同で提案アーキ向けミニアプリの拡張
- 2013年秋から2014年3月
 - アーキFSと共同で提案アーキ向けミニアプリの拡張
 - ミニアプリのアップデート

その他のスケジュール想定：

- フルアプリ提供次期によって扱いに差が生じないようにします
- 新規フルアプリの受付は来年度冒頭ぐらいが最後にしたい(あとから出されても作業できないため)。ただしミニアプリとして提供してもらえる場合は来年度夏ぐらいまでは受付可能
- フルアプリ側の開発進捗があった場合のミニアプリへの反映は性能上重要な場合は来年度後半に受け付け