

HPCI FS第6回全体ミーティング フルアプリ調査・ミニアプリ化進捗報告

鈴木惣一郎、丸山直也(理研AICS)

2013年5月31日

目次

1. 第2回フルアプリ募集の結果報告
1. 第3回フルアプリ募集
2. ミニアプリ化作業進捗報告

第2回フルアプリ募集結果

4アプリご提供いただきました、ありがとうございます

OpenFMO	稲富@九大	Hartree-Fock法を基にしたフラグメント分子軌道(FMO)法による第一原理計算	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x疎行列, FFT
NGS Analyzer	玉田@東大	次世代シーケンサーの出力データ解析	(内容・動作とも未確認)
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 2~4段ルンゲクッタ

第3回フルアプリ募集スケジュール

最後のフルアプリ募集です

- 近日中:
「フルアプリ申請テンプレート」をMLに流します
- ~6/28: フルアプリ提供受付
上記テンプレートに記入の上、遅くとも6/21ぐらいまでに
返信してください。折り返し、ドキュメント定形フォーム、
アップロード手順をご案内します
- 6/28: フルアプリ提出締め切り
締め切りまでに、指定サーバにアップロードをお願いします

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かまいません
 - 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
 - ミニアプリ作業班メンバー
 - AICS:丸山、鈴木、松田、滝澤
 - 東工大: 松岡、野村、遠藤、佐藤、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)

フルアプリ提供前の準備

- 確認事項
- プログラムの整備
- サンプル入力データの用意
- 実行結果検証手順の用意
- ドキュメントの整備

フルアプリ提供前の準備(続き)

- 確認事項

- 将来的にミニアプリとして公開されることの確認
- 「フルアプリの条件」に合致することの確認
- ミニアプリのライセンス(Apache or GPL)
(プロジェクト終了時まで決定していただければ、かまいません)

- プログラムの整備

- ビルド手順
 - ビルドコマンド
 - 依存外部ライブラリ

フルアプリ提供前の準備(続き)

- サンプル入力データの用意
 - 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の情報
 - 以下のサイズのサンプルデータをお願いします
 - Small系
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)
 - Middle系(準備可能なら)
京で数千ノード規模の実行が可能なデータ
 - Large系(準備可能なら)
京で1万ノード規模の実行が可能なデータ
- 実行結果検証手順の用意
 - ひとまず簡便なものでかまわないので、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)

フルアプリ提供前の準備(続き)

- ドキュメントの整備(定形フォームを用意します)
 - プログラム説明
 - 計算内容
 - 使用アルゴリズム、スキーム
 - ビルド方法
 - 実行方法
 - 計算結果検証方法
 - 現在の実行規模(問題サイズ、実行時間、必要資源)
 - 2018～2020年頃の想定実行規模

MARBLEミニアプリ化

- MARBLEの特徴
 - 開発: 池口先生(横浜市大)
 - 生体高分子系を対象とした古典MDプログラム
 - クーロン相互作用計算は、FFTを用いたPME (Particle Mesh Ewald)
 - 水素原子の運動は剛体モデルとして計算可能
 - MPI + OpenMP
 - 数10万原子系でのアンサンブル・レプリカ計算がターゲット
- ミニアプリ化作業
 - 機能を制限してコードを削減
 - 水分子系のNVEアンサンブル計算に限定
 - 水素原子の運動は、剛体モデルで常に拘束
 - 一部のファイルIO機能を削除

MARBLEミニアプリ化(続き)

- ミニアプリ化作業(続き)
 - その他のコード整備
 - 領域分割されていないデータ → TLBミス
 - 粒子分割並列化の名残(?)
 - 未使用なファイル、関数、配列、コードの削除
 - テストコード、入力データの整備
 - S: 原子数2万, セル分割 8^3 , PMEメッシュ 64^3
 - M: 原子数15万, セル分割 16^3 , PMEメッシュ 128^3
 - L: 原子数126万, セル分割 32^3 , PMEメッシュ 256^3
 - 弱スケーリング計測用データセット
- 進捗
 - コードサイズ: 4万行 → 2万行
 - ほぼ完了

MODYLASミニアプリ化

- MODYLASの特徴
 - 開発: 名大 岡崎研
 - 汎用古典MDプログラム
 - クーロン相互作用計算は、FMM (Fast Multipole Method)
 - MPI + OpenMP
 - 京で理論ピーク性能比41% (8,000万原子、65,536ノード)
- ミニアプリ化作業
 - 機能を制限してコードを削減
 - 水分子系のNVEアンサンブル計算に限定
 - 水素原子の運動は、常にShake,Rattle (ラグランジュ未定常数法)で拘束

MODYLASミニアプリ化(続き)

- ミニアプリ化作業(続き)

- その他のコード整備

- 未使用なファイル、サブルーチン、配列、コードの削除
 - プログラム構築環境の整備

- テストコード、入力データの整備

- S: 原子数2万, セル分割 8^3 , ツリーレベル3
 - M: 原子数15万, セル分割 16^3 , ツリーレベル4
 - L: 原子数125万, セル分割 32^3 , ツリーレベル5

- 進捗

- コードサイズ: 3万行 → 2万行
 - ほぼ完了

FFVCミニアプリ化

- FFVCの特徴
 - 開発: 東大生研 小野グループ
 - 非圧縮熱流体解析ソルバー
 - 直交等間隔格子、差分法
 - MPI + OpenMP
 - 反復解法計算では、係数行列をビットにエンコードしてロードストアを削減
 - 境界形状ファイル(ポリゴンデータ)を入力として、自動格子生成
 - C++, ホットスポットはFortran

FFVCミニアプリ化(続き)

- ミニアプリ化作業

- 機能を制限してプログラムサイズを削減

- 3次元キャビティフロー例題(流体解析のみ)に限定
 - 一部のファイル出力機能(可視化用など)を削除
 - 計算条件指定方法の簡素化(一部はハードコード)

- その他のコード整備

- 未使用コード・ライブラリの削除

- 進捗

- コードサイズ: 10万行 → 2.5万行

- 6月上旬に完了予定

QCDミニアプリ

- “CCS-QCD” by 石川先生(広島大)ら
- ベンチマーク用コンパクトコードを提供
 - 3千行程度
- 理研側作業
 - 動作テスト
 - ボトルネックの特定
 - 共通性能計測ルーチン組み込み
 - 問題サイズの整備
 - CLASS 1 から CLASS 5まで用意
 - 要求性能との比較
 - ドキュメント
- 東大FSチームへ提供済み