

1

計算科学ロードマップ (平成 28 年度版)

2

3

今後の HPCI を使った計算科学発展のための検討会

4

平成 29 年 3 月発行予定

目次

1

2	第 3 章	アプリケーションの分類	1
3	3.1	計算機アーキテクチャから見たアプリケーションの分類	2
4	3.2	ミニアプリとの対応	3

¹ 第 3 章

² アプリケーションの分類

₁ 3.1 計算機アーキテクチャから見たアプリケーションの分類

3.2 ミニアプリとの対応

3.2.1 はじめに

計算機ハードウェア・ソフトウェアの性能や機能を評価するためにベンチマークソフトウェアが用いられているが、それらは典型的にはアプリケーションから限られた一部を切り出したプログラムであったり、人工的に作成されたプログラムである。カーネルベンチマークと呼ばれるこれらの評価用プログラムは、通常のアプリケーションと比較してそのサイズは大幅に小さいものであり、システムの評価に用いやすい利点がある。一方で、カーネルベンチマークは実際のアプリケーションのごく一部のみを反映したものであり、実際のアプリケーション全体を評価できているとは限らない。しかしながら、特に開発途中のシステムの評価に巨大な実アプリケーションを用いることは技術的に困難であり、カーネルベンチマークのような簡易なプログラムが必要である。

より実際のアプリケーションに即しつつ、プログラムサイズを比較的小さなものと評価に利用し易くすることを目的としたベンチマークとして、ミニアプリベンチマークが提唱されている。ミニアプリは実アプリケーションから評価に必要な箇所を残し、それ以外の非本質的なコードを可能な限り削除することでプログラム全体の見通しを改善する。また、コンパイル方法や実行方法などの文書化、入力データの整備などがあわせて必要である。実アプリケーションには限定的なライセンスにより配布が制限されているものも多いが、そのような制約は限定された範囲内における利用で問題とならないかもしれないが、第三者によるベンチマークとしての利用の場合は利用に関する制約は大きな障害となりうる。そのためミニアプリが非公開アプリケーションから作成された場合であってもミニアプリについてはオープンソースとすることが一般的である。

上記のような背景のもとに作成されたミニアプリは特にアプリケーションと計算機システムのコードザインに有効なツールとして用いられている。特に代表的なものとしては米国のコードザインセンターを中心に開発された Mantevo や Lulesh などがあげられる。国内では理化学研究所が中心となっており整備した Fiber があげられる。以下ではそれらについて概要を紹介し、本ロードマップのアプリケーションとの比較を示す。

3.2.2 Fiber ミニアプリ

Fiber ミニアプリ集 (Fiber Miniapp Suite) [1] は、理化学研究所および東京工業大学にて実施した「将来の HPCI システムのあり方の調査研究「アプリケーション分野」」 [2] (以下、アプリ FS と呼ぶ) において整備開発したミニアプリ群をまとめたものである。アプリ FS 参加協力者から提供されたアプリケーションプログラムをベースに、完成後の一般公開を前提に、オリジナルアプリケーション開発者の協力のもとでミニアプリの整備開発が行われた。2017 年 3 月現在、著作権や性能面などでの問題が解決できなかったものを除いた、8 つのミニアプリを Web 上で公開している。

Fiber では、前節で示した一般的なミニアプリの共通点の他に、以下のような特徴を持ったミニアプリ集を目標とした。

- 簡単にインストール、簡単に実行
- 正しくインストールされ、正しく実行されていることが検証可能なテスト
- システムの性能評価に使える入力データセット
- 将来 (2018~2020 年頃) の想定計算対象規模とそこでの目標性能に関する記述を含めたドキュメントの整備

また、その開発経緯により、ミニアプリ化されたアプリケーションは全て国内で開発されたものであり、事実上国内固有のアーキテクチャである京コンピュータ上でのインストール・実行が保証されている。

以下では、Fiber として公開中の各ミニアプリに対して、計算対象と計算手法、使用言語と並列化ライブラリ、どのようにミニアプリ化したか、ソースコードサイズ、付随する入力データ、などを中心に簡単に紹介する。

(i) CCS QCD

ミニアプリ CCS QCD [3, 4] は、高エネルギー物理学で用いられる格子量子色力学 (格子 QCD) 計算における、最も計算コストがかかるクォーク伝搬関数の計算部部分を抜き出したものである。CCS QCD では、Wilson 型の作用を用いたクォーク伝搬関数の 4 次元格子上での大規模疎行列連立 1 次方程式を、red/black ordering により前処理をした係数行列に対して、BiCGStab 法により解いている。プログラムは Fortran90 で記述され、並列化は、空間 3 次元に対する MPI 領域分割と OpenMP スレッド並列を行っている。コメント行を除いたソースコードサイズは約 1 千行である。パッケージには、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能な 6 つの入力データセットが含まれている。

(ii) FFVC Mini

ミニアプリ FFVC Mini は、直交等間隔格子上の有限体積法による熱流体解析プログラム FFV-C [5] をベースとしている。プログラム全体の制御は C++ で記述されているが、ホットスポット部分は Fortran90 により書かれている。空間 3 次元に対する MPI 領域分割と OpenMP により並列されている。ミニアプリ化にともない、計算対象を非圧縮流体に対する 3 次元キャビティ流れに限定した。コメント行を除いたソースコードサイズは約 9000 行である。ミニアプリ内で、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能なグリッドデータを自動生成する。

(iii) NICAM-DC Mini

ミニアプリ NICAM-DC Mini は、全地球規模での気象現象をシミュレーションする大気大循環モデルのアプリケーション NICAM [6] のサブセット NICAM-DC [7] をベースにしている。NICAM-DC は、NICAM から力学過程 (Dinamical Core) のみを抜き出したミニアプリとなっている。NICAM-DC では、地球大気の運動を静水圧近似を行わない Navier-Stokes 方程式で記述し、それを球殻上の三次元格子を用いて有限体積法により離散化して解いている。水平方向の格子は、正二十面体を構成する正三角形要素を再帰的に分割していくことにより得られる全球で一様な三角格子を採用している。NICAM-DC は、Fortran90 で記述され、MPI による領域分割並列化がなされている。コメント行を除いたソースコードサイズは約 3 万 5 千行である。ミニアプリ NICAM-DC Mini には、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能な 5 つの入力データセットが付随している。

(iv) mVMC Mini

ミニアプリ mVMC Mini は、強相関電子系シミュレーションプログラム mVMC [8, 9] をベースとしている。mVMC は、近藤格子などの多体量子系有効モデルの基底状態の波動関数を多変数変分モンテカルロ法により求める。mVMC は、C 言語で記述され、MPI および OpenMP により並列化されている。コメント行を除いたソースコードサイズは約 9 千行である。ミニアプリ mVMC Mini には、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能な 2 つの入力データセットが付随している。

(v) NGS Analyzer Mini

ミニアプリ NGS Analyzer Mini のベースとなった NGS Analyzer は、次世代シーケンサーの出力データを高速に解析し、ヒト個人間の遺伝的差異やがんゲノムの突然変異を高い精度で同定するプログラムである [10]。NGS Analyzer Mini は、NGS Analyzer を大規模 I/O 性能および整数演算性能を評価するためのミニアプリとして整備したものである。2 つのオープンソースソフトウェアを含む 4 つの C/C++ プログラムと、ワークフローを制御する MPI 並列化された C プログラムとシェルスクリプト群で構成され、オープンソースソフトウェアを除いた総コードサイズは約 3 千行である。入力データはサイズが大きいため、付属ドキュメントの記述に従い、別途ダウンロードする必要がある。

(vi) MODYLAS Mini

ミニアプリ MODYLAS Mini は、古典分子動力学シミュレーションプログラム MODYLAS [11, 12] をベースにしている。MODYLAS では、クーロン相互作用を、八分木構造を持つ空間セル上での多重極展開計算により計算する Fast Multipole Method (FMM) 法を採用している。MODYLAS は Fortran90 で記述され、MPI および OpenMP による並列化がなされている。ミニアプリ化にともない、計算対象を水分子系のミクロカノニカル計算に限定している。コメント行を除いたソースコードサイズは 8.7 千行である。パッケージには、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能な 3 つの入力データセットが付随している。

(vii) NTChem Mini

ミニアプリ NTChem Mini は、第一原理計算にもとづく電子状態計算プログラム NTChem [13] のサブパッケージ NTChem/RI-MP2 [14] をベースにしている。NTChem/RI-MP2 では、電子相関を 2 次の Møller-Plesset 摂動 (MP2) 法に対する resolution-of-identity (RI) 近似を用いて計算しており、演算は密行列に対する行列行列積計算が中心となる。NTChem/RI-MP2 は、Fortran90 で記述され、MPI および OpenMP により並列化されている。コメント行を除いたソースコードサイズは約 6.5 千行である。ミニアプリ NTChem Mini には小規模分子系のサンプル入力データのみが付属するが、別途、強スケーリング性能計測に対応可能な入力データがダウンロード可能である。

(viii) FFB Mini

ミニアプリ FFB Mini は、有限要素法による熱流体解析プログラム FrontFlow/blue (FFB) [15, 16] をベースにしている。ミニアプリ化にあたり、計算対象を六面体要素に対する基本的な非定常流体解析計

- 算に限定した。FFB Mini は Fortran90 で記述され、MPI により 3 次元領域分割並列化に対応している。
また、京コンピュータおよび富士通 FX10 上での、自動並列によるスレッド並列計算に対応している。コメント行を除いたソースコードサイズは約 8 千行である。ミニアプリ内で、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能なグリッドデータを自動生成する。

3.2.3 その他のミニアプリ関連プロジェクト

- 海外においても FIBER と同様にミニアプリを整備して性能評価用の共通情報資源として活用しようとする動向がある。

3.2.3.1 米国のミニアプリ関連 - CORAL プロジェクト

- 米国においては米国エネルギー省の管轄下にある Argonne 国立研究所、Lawrence Livermore 国立研究所、Oak Ridge 国立研究所の 3 研究所の HPC 調達共通化にともない、性能評価用に用いられる CORAL ベンチマークが公開されている [17, 18]。CORAL ベンチマークの内 LSMS, CAM-SE, QMCPACK, NAMD を除き、アプリは基本的にミニアプリである。

表 3.1 CORAL benchmarks (tier1 および tier2 アプリのみ掲載)

アプリ名	CORAL によるジャンル分け
LSMS, QBOX, HACC, Nekbone	Scalable Science Benchmarks
CAM-SE, UMT2013, AMG2013, MCB, QMCPACK, NAMD, LULESH, SNAP, miniFE	Throughput Benchmarks
Graph500, Integer Sort, Hash, SPECint2006	Data-Centric Benchmarks
CLOMP, IOR, CORAL MPI, STREAM, STRIDE, LCALS	Skeleton Benchmarks

- これらのミニアプリ全体で以下の計算負荷を網羅するように選択されている。

表 3.2 CORAL benchmarks Platform Stress Areas

システムの部位	注目する主な計算負荷
計算コア	浮動小数点演算、SIMD/ベクトル化、整数・分岐処理
メモリアクセス	メモリバンド幅、連続・等間隔アクセス、不連続アクセス、大規模メモリ領域
ノード間通信	非局所的 P2P 通信、短いメッセージ、長いメッセージ、集合通信、バイセクションバンド幅
スレッド処理	細粒度スレッド処理

3.2.3.2 米国のミニアプリ関連 - MANTEVO プロジェクト

また、米国においてはコデザインを推進するためのミニアプリの開発整備それ自体に主眼をおいたプロジェクトの試みもあり、ミニアプリを用いた性能モデリングと実際のプラットフォームにおける挙動とのマッピングが 2009 年あたりから提唱されている。MANTEVO プロジェクトはそのようなプロジェクトの一つである [19]。MANTEVO プロジェクトの特徴として、ミニアプリの開発整備は全てフルアプリの開発者が行っていることがあげられる。以下に Workshop on Representative Applications 2015 [20] において紹介された MANTEVO3.0 ミニアプリのリストを示す。

表 3.3 MANTEVO 3.0 miniApp

アプリ名	計算内容
Cleverleaf	Eulerian on structured grid with AMR
CloverLeaf	Compressible Euler eqns,explicit 2nd order accurate
CoMD	Molecular dynamics(SPaSM)
EpetraBenchmarkTest	Exercises Epetra sparse and dense kernels
HPCCG	Unstructured implicit finiteelement
miniFE	Implicit finite element solver
miniGhost	FDM/FVM explicit (haloexchange focus)
miniMD	Molecular dynamics(Lennard-Jones)
miniXyce	SPICE-style circuit simulator
miniAMR	Adaptive mesh refinement of an Eulerian mesh
miniSMAC2D	FD 2D incompressible N/S on a structured grid.
PathFinder	Signature search
miniAero	3D unstr FV R-K4th order time, inviscid Roe Flux
TeaLeaf	Solid mechanics

3.2.3.3 ヨーロッパのミニアプリ関連 - European Exascale プロジェクト

ヨーロッパにおいては 2013 年から 2016 年にかけて European Exascale Projects (FP7) の活動の中で整備されたアプリケーションがプロトアプリと称されているが、これらはミニアプリと同じ位置づけである。Mini-FEM, BPMF, ExaMD, OASIS3-MCT の各プロトアプリが公開されている [21]。

表 3.4 EXA2CT proto apps

アプリ名	計算内容
Mini-FEM	reproducing the assembly step of 3D FEM unstructured meshes
BPMF	A big data and machine learning proto application
ExaMD	A scalable proto-app library for Molecular Dynamics using the Adaptive Midpoint method
OASIS3-MCT	Coupling code by CERFACS, developed for climate applications

3.2.4 2章アプリケーションとミニアプリの対応

- 公開されている Fiber ミニアプリ と サンプルデータを用いて計算を行った場合の B/F 値、および必要メモリ量を、2章アプリケーション要求性能値この表 ref はどこ？ に重ねた図を図 3.1 に示す。

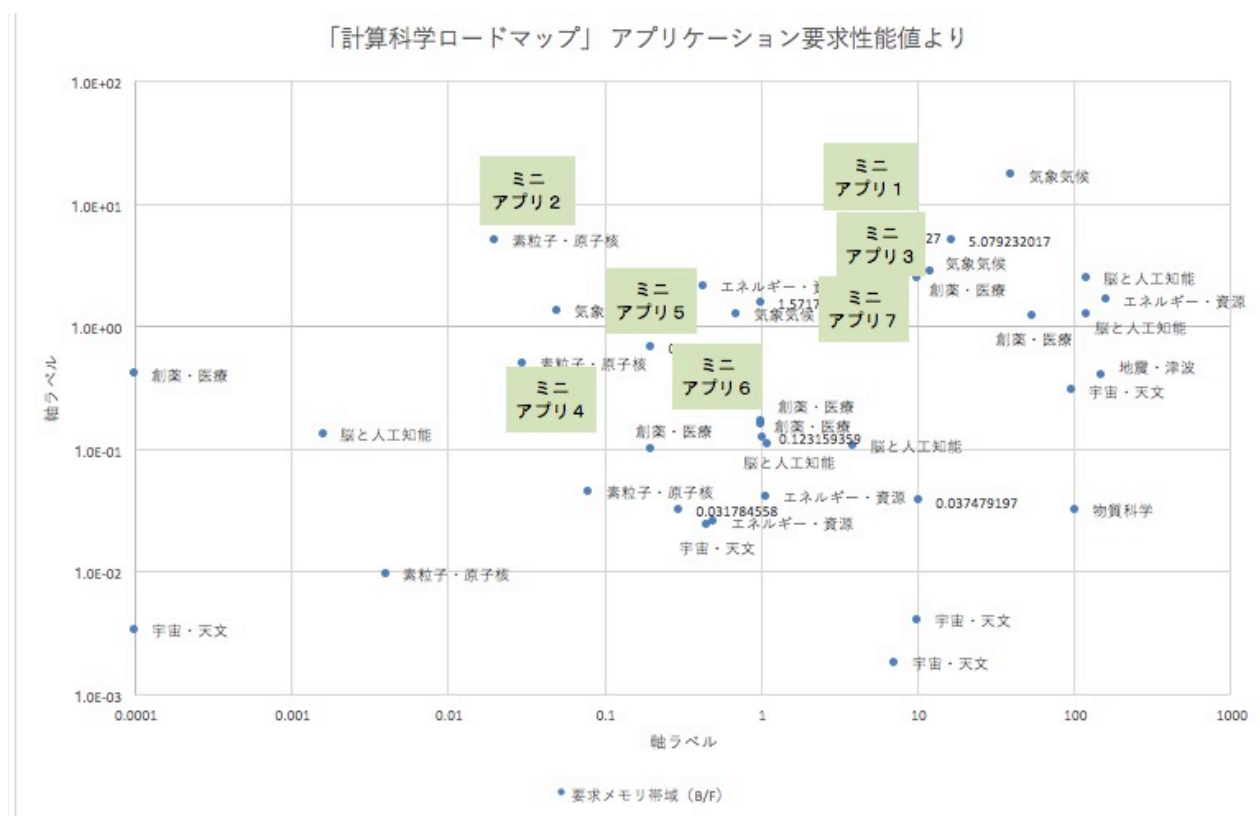


図 3.1 2章アプリケーションとミニアプリの対応

参考文献

- [1] Fiber MiniApp Suite. <http://fiber-miniapp.github.io/>.

- [2] 将来の HPCI システムのあり方の調査研究「アプリケーション分野」. <http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>.
- [3] T Boku, K-I Ishikawa, Y Kuramashi, K Minami, Y Nakamura, F Shoji, D Takahashi, M Terai, A Ukawa, and T Yoshie. Multi-block/multi-core SSOR preconditioner for the QCD quark solver for K computer. *arXiv preprint arXiv:1210.7398*, 2012.
- [4] 寺井優晃, 石川健一, 杉崎由典, 南一生, 庄司文由, 中村宜文, 藏増嘉伸, 横川三津夫. スーパーコンピュータ「京」における格子 QCD の単体性能チューニング. 情報処理学会論文誌. コンピューティングシステム, Vol. 6, No. 3, pp. 43–57, 2013.
- [5] K. Ono, Y. Kawashima, and T. Kawanabe. Data Centric Framework for Large-scale High-performance Parallel Computation. *Procedia Comput. Sci.*, Vol. 29, No. 0, pp. 2336 – 2350, 2014.
- [6] M. Satoh, T. Matsuno, H. Tomita, H. Miura, T. Nasuno, and S. Iga. Nonhydrostatic icosahedral atmospheric model (NICAM) for global cloud resolving simulations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 227, No. 7, pp. 3486–3514, 2008.
- [7] NICAM-DC. <http://scale.aics.riken.jp/nicamdc/>.
- [8] mVMC. <https://github.com/issp-center-dev/mVMC>.
- [9] D. Tahara and M. Imada. Variational Monte Carlo Method Combined with Quantum-Number Projection and Multi-Variable Optimization. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 77, No. 11, p. 114701, 2008.
- [10] NGS Analyzer. http://www.csrp.riken.jp/application_d_e.html#D2.
- [11] MODYLAS. <http://www.modylas.org>.
- [12] Y. Andoh, N. Yoshii, K. Fujimoto, K. Mizutani, H. Kojima, A. Yamada, S. Okazaki, K. Kawaguchi, H. Nagao, K. Iwahashi, et al. MODYLAS: A Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation Program for Large-Scale Systems with Long-Range Forces Calculated by Fast Multipole Method (FMM) and Highly Scalable Fine-Grained New Parallel Processing Algorithms. *J. Chem. Theory Comput.*, Vol. 9, No. 7, pp. 3201–3209, 2013.
- [13] NTChem. http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/ntchem_e.html.
- [14] M. Katouda and T. Nakajima. MPI/OpenMP Hybrid Parallel Algorithm of Resolution of Identity Second-Order Møller-Plesset Perturbation Calculation for Massively Parallel Multicore Supercomputers. *J. Chem. Theory Comput.*, Vol. 9, No. 12, pp. 5373–5380, 2013.
- [15] 南一生, 井上俊介, 堤重信, 前田拓人, 長谷川幸弘, 黒田明義, 寺井優晃, 横川三津夫. 「京」コンピュータにおける疎行列とベクトル積の性能チューニングと性能評価. ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, 第 2012 巻, pp. 23–31, 2012.
- [16] 熊畑清, 井上俊介, 南一生. FrontFlow/blue の勾配計算カーネルのスーパーコンピュータ「京」上でのチューニング. 情報処理学会論文誌. コンピューティングシステム, Vol. 6, No. 3, pp. 31–42, sep 2013.
- [17] CORAL benchmark codes. <https://asc.llnl.gov/CORAL-benchmarks/>.
- [18] Argonne-Livermore-OakRidge National Laboratories. CORAL Procurement Benchmarks. In

-
- ¹ *May 31 CORAL vendor meeting*, pp. 1–15, Sep 2013.
- ² [19] MANTEVO Project. <https://mantevo.org/>.
- ³ [20] Workshop on Representative Applications 2015. [http://hepcce.org/files/2015/10/](http://hepcce.org/files/2015/10/HerouxWRapKeynote.pdf)
- ⁴ [HerouxWRapKeynote.pdf](http://hepcce.org/files/2015/10/HerouxWRapKeynote.pdf).
- ⁵ [21] The EXA2CT European Project. <http://www.exa2ct.eu/content/proto-apps.html>.