

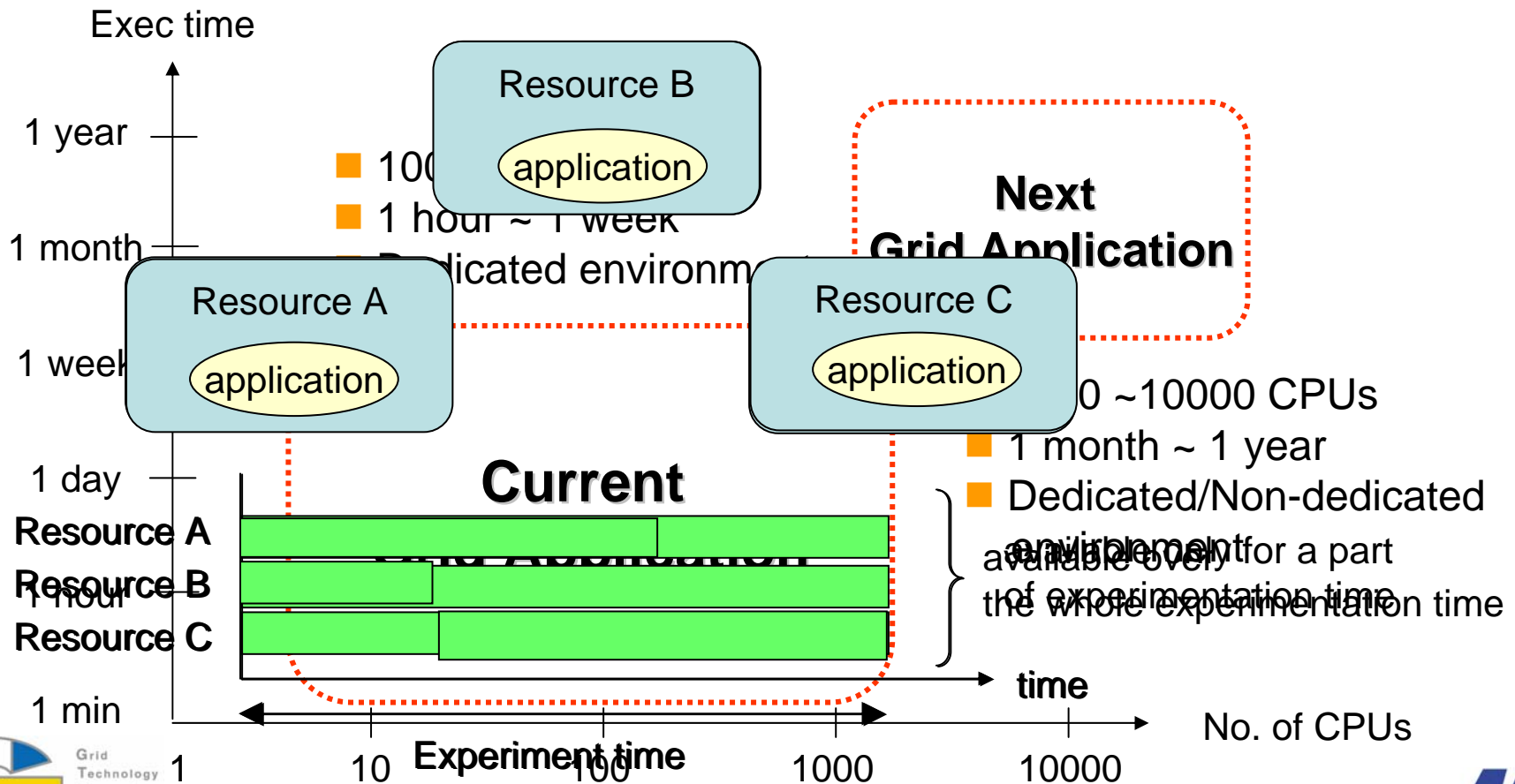
環太平洋グリッド上でのNinf-Gによる 大規模量子/古典連成シミュレーション

産業技術総合研究所
グリッド研究センター

武宮 博

大規模Gridアプリケーションの長時間実行に必要な機能を明確化する

- 動的に計算資源を変更しつつシミュレーションを継続することが必要



● 柔軟性

- ▶ 計算資源の動的な変更可能

● 頑健性

- ▶ ネットワーク/計算資源の障害検出, 障害からの自動復旧

● 高効率性

- ▶ 多数の計算資源の効率的な管理
- ▶ 効率的な通信, 計算の実現

新しいプログラミングアプローチの提案

● GridRPCとMPIを組み合わせて利用

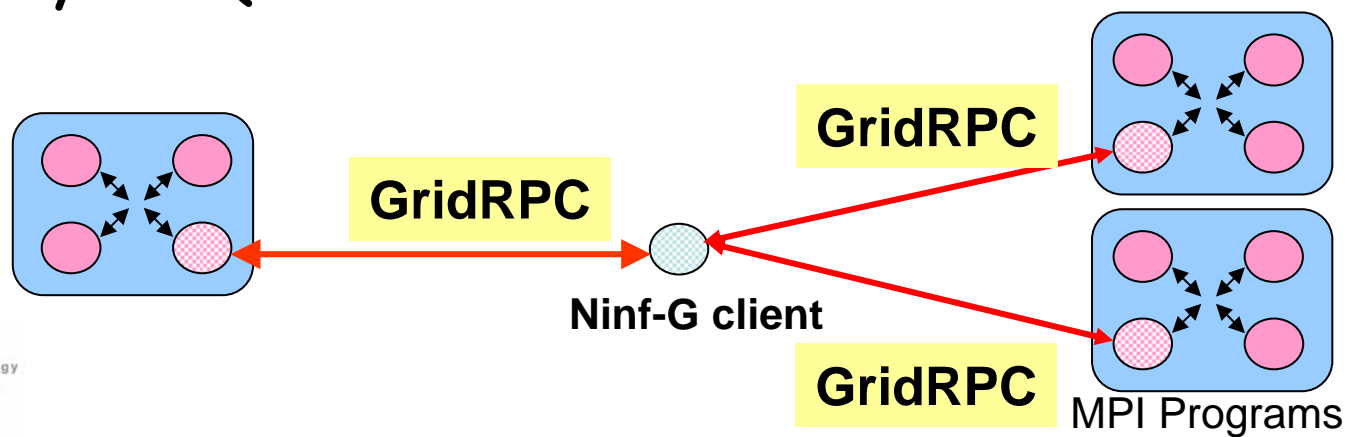
- ▶ 組み合わせることにより両プログラミングモデルの長所を利用

	柔軟性	頑健性	高効率性
MPI	-	-	●
GridRPC	●	●	-
New Approach	●	●	●

● 並列プログラムを疎に連携するGridアプリケーションの開発/実行に適している

- ▶ Multi-disciplinary simulation/multi-scale simulation

Ⓜ Hybrid QM/MD simulation



● 高精度大規模材料シミュレーションを現実的な時間内で可能にする

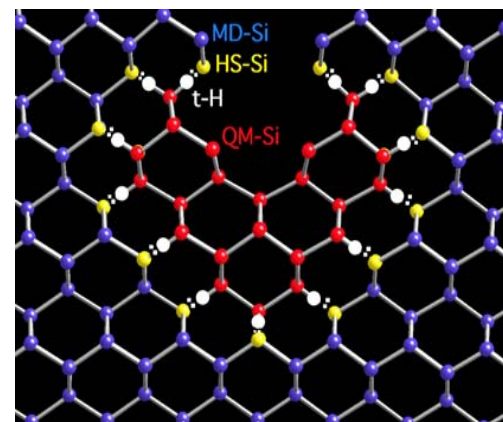
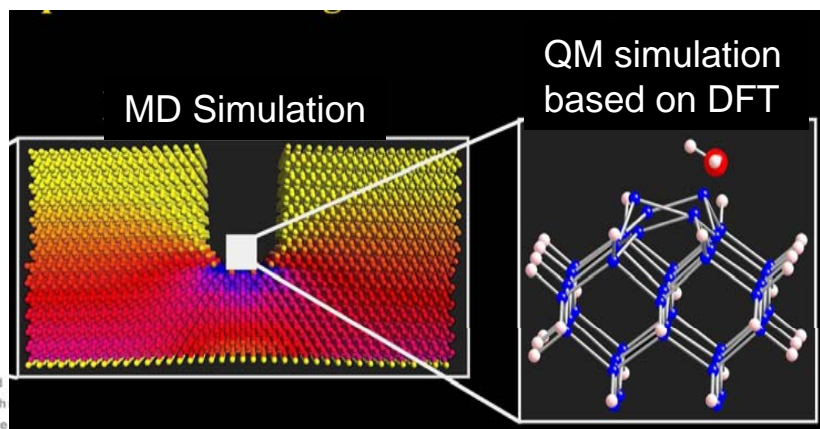
▶ 古典MDシミュレーションとQMシミュレーションを連携

◎ MDシミュレーション

- + 全領域の原子の振る舞いを計算
- + 経験的な原子間ポテンシャルを用いた古典MD

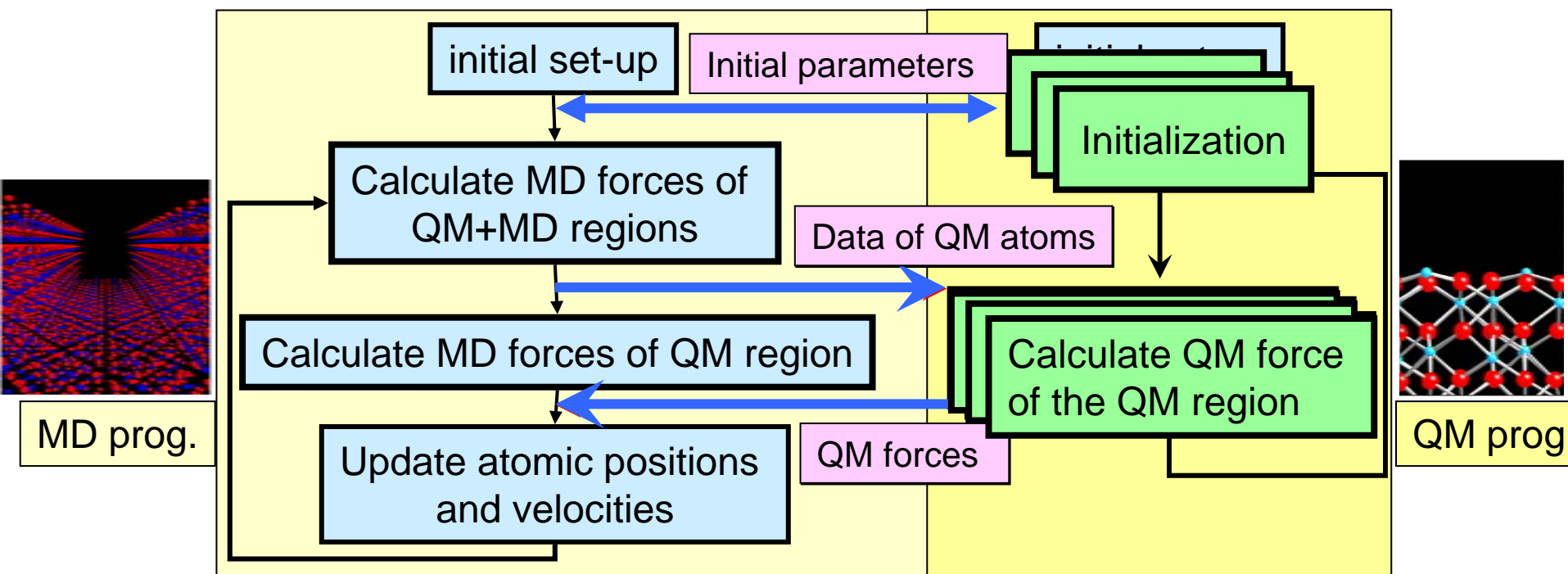
◎ QMシミュレーション

- + 興味のある領域におけるMDシミュレーションの結果を修正
- + density functional theory (DFT)に基づく計算
- + QM領域は複数定義可能



QM/MDプログラムのGrid化

- 初期化関数の追加
- QMシミュレーション処理を関数化
- QM-MD間通信部分をMPIからNinf-G関数へ変更



Mechanisms for long-run



● アプリレイヤとNinfレイヤ間にスケジューリングレイヤを実装

● 実行対象計算機の変更

▶ 意図的変更

- ② QM領域数, QM原子数が変更
- ② 予約時間終了/継続実行時間制限を越えてシミュレーションを実行

▶ 障害発生に基づく変更

- ② Ninf-Gがエラーを検知
- ② タイムアウトが発生

+ Job start/finish timeout, session timeout, heart-beat timeout

● 以下の情報に基づき次の実行対象計算機を決定

- ▶ 予約期間(予約ベース実行のばあい)
- ▶ 必要とされるCPU数と利用可能なCPU数
- ▶ 過去の利用履歴
- ▶ 2種類の選択戦略

- ② 長時間タスクから大規模クラスタへ割付け, 障害発生時は再試行limitを超えるまでretryを繰り返す(予約ベース実行)
- ② 短時間タスクから小規模クラスタへ割付け, 障害が発生したら他のクラスタを優先的に利用(遊休クラスタの動的利用)

● 各タイムステップ実行開始時にクラスタ情報設定ファイルを読み込み

動的にクラスタを追加・削除可能



予約ベースの実行

- ▶ 計算資源を事前に予約
- ▶ 予約スケジュールにあわせて実行対象計算機を変更し、計算を継続

 SIMOX Simulation

動的に遊休クラスタを利用

- ▶ 必要に応じて遊休クラスタを利用
- ▶ マルチユーザ環境を想定し、一定時間継続利用した後に実行対象計算機を変更

 Friction Simulation

SIMOX (Separation by IMplanted OXygen)

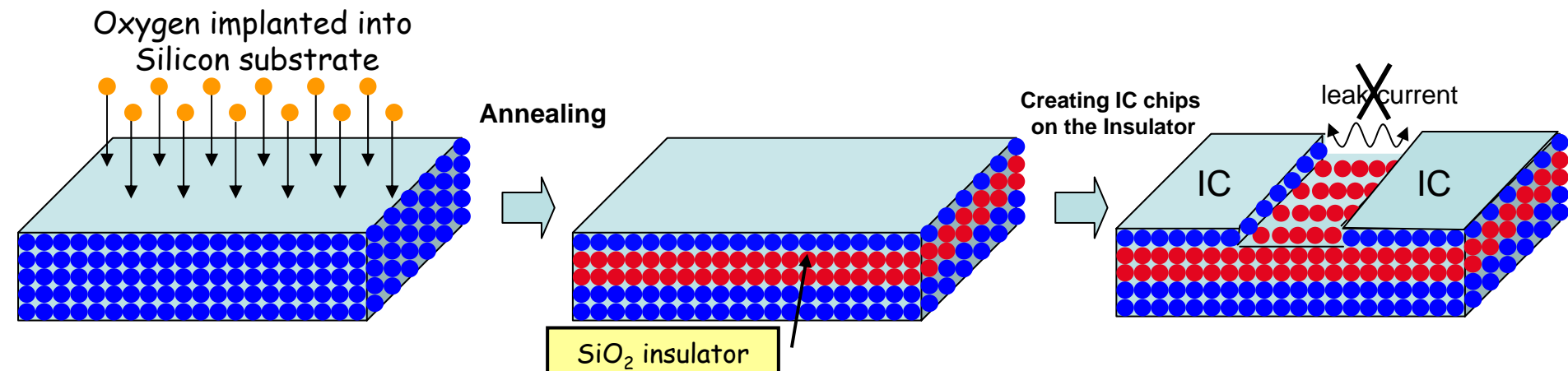


SOI (Silicone On Insulator)構造を持つチップの製造に利用

- ▶ 酸素イオン (~ 200 Kev)をSi基盤に入射
- ▶ Annealingによる SiO_2 絶縁層の生成/Si表面の復旧

高速かつ低消費電力デバイスの製造が可能

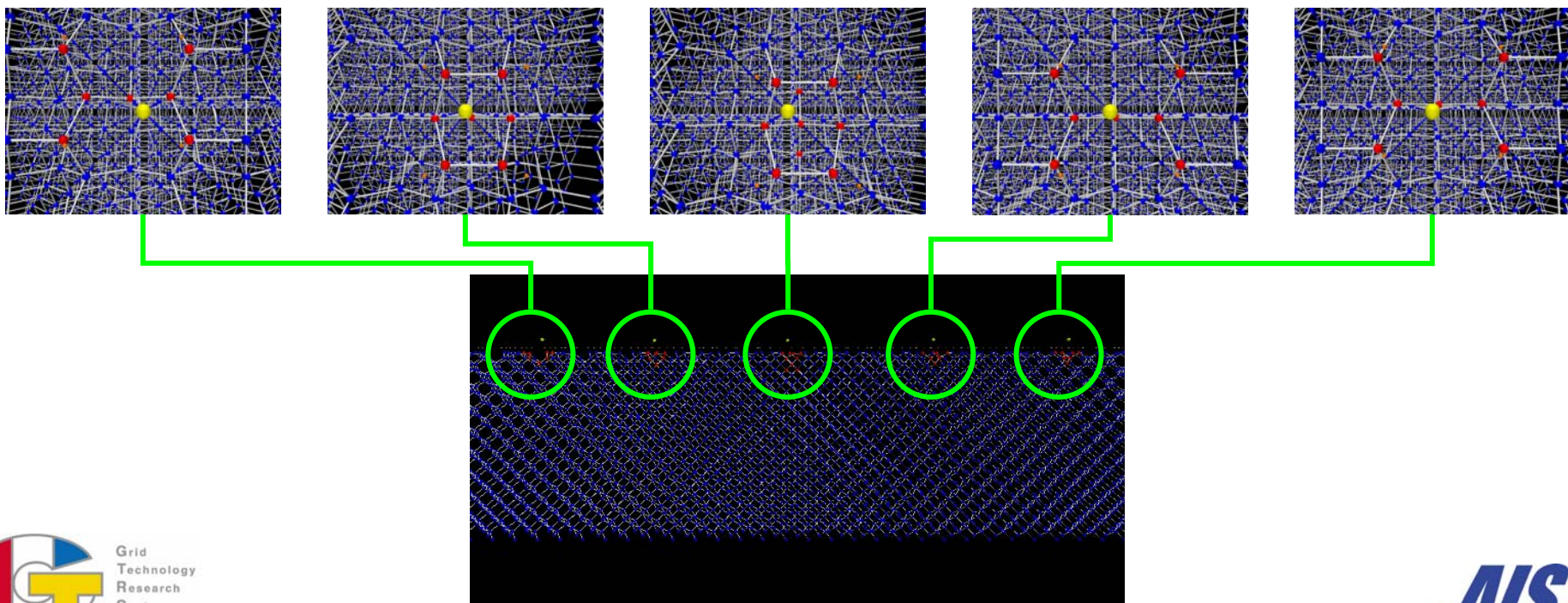
- ▶ SiO_2 絶縁層による漏れ電流のカット



SIMOX simulation on the Grid

- 酸素原子の入射位置と入射後の振る舞いの関連を調査
- Si基盤に5個の酸素原子($\sim 240\text{eV}$)を入射
 - ▶ 各粒子はSi結晶の異なる位置に入射
- 5個のQM領域を定義
 - ▶ 領域数, 領域の大きさはシミュレーション中に変化
- 全原子数: 0.11 million

Initial No. of QM atoms	
Region 0	12
Region 1	12
Region 2	14
Region 3	12
Region 4	12



SIMOX Simulation用テストベッド

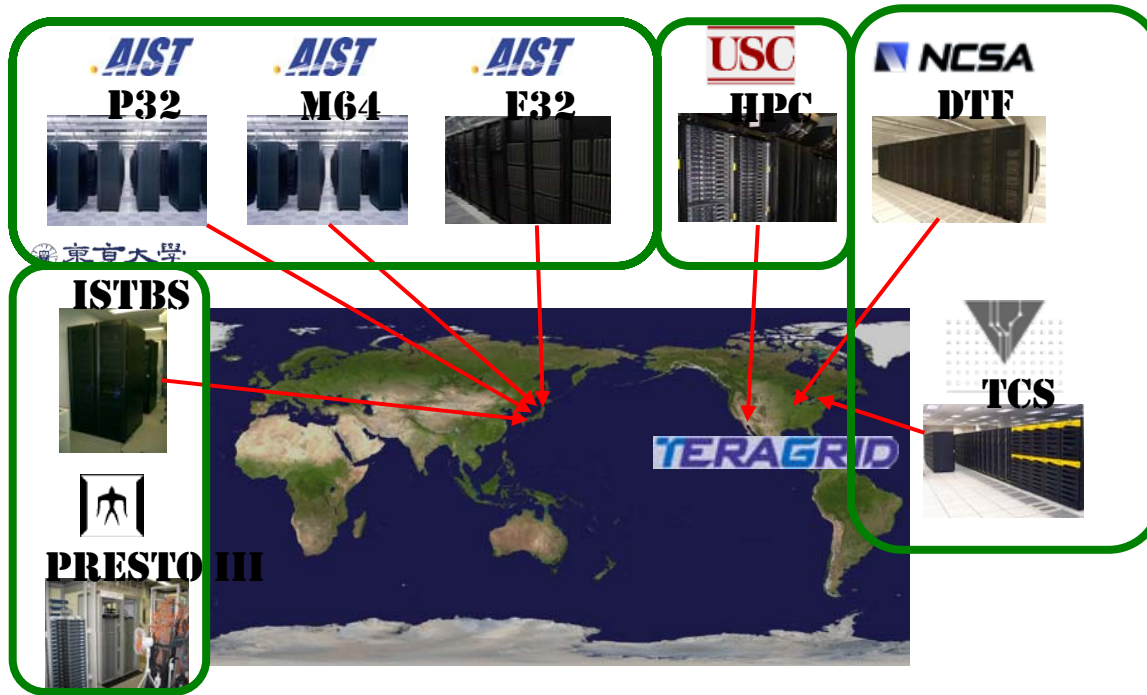


AIST Super Clusters

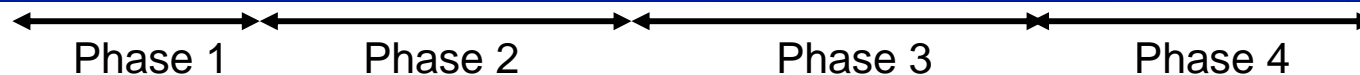
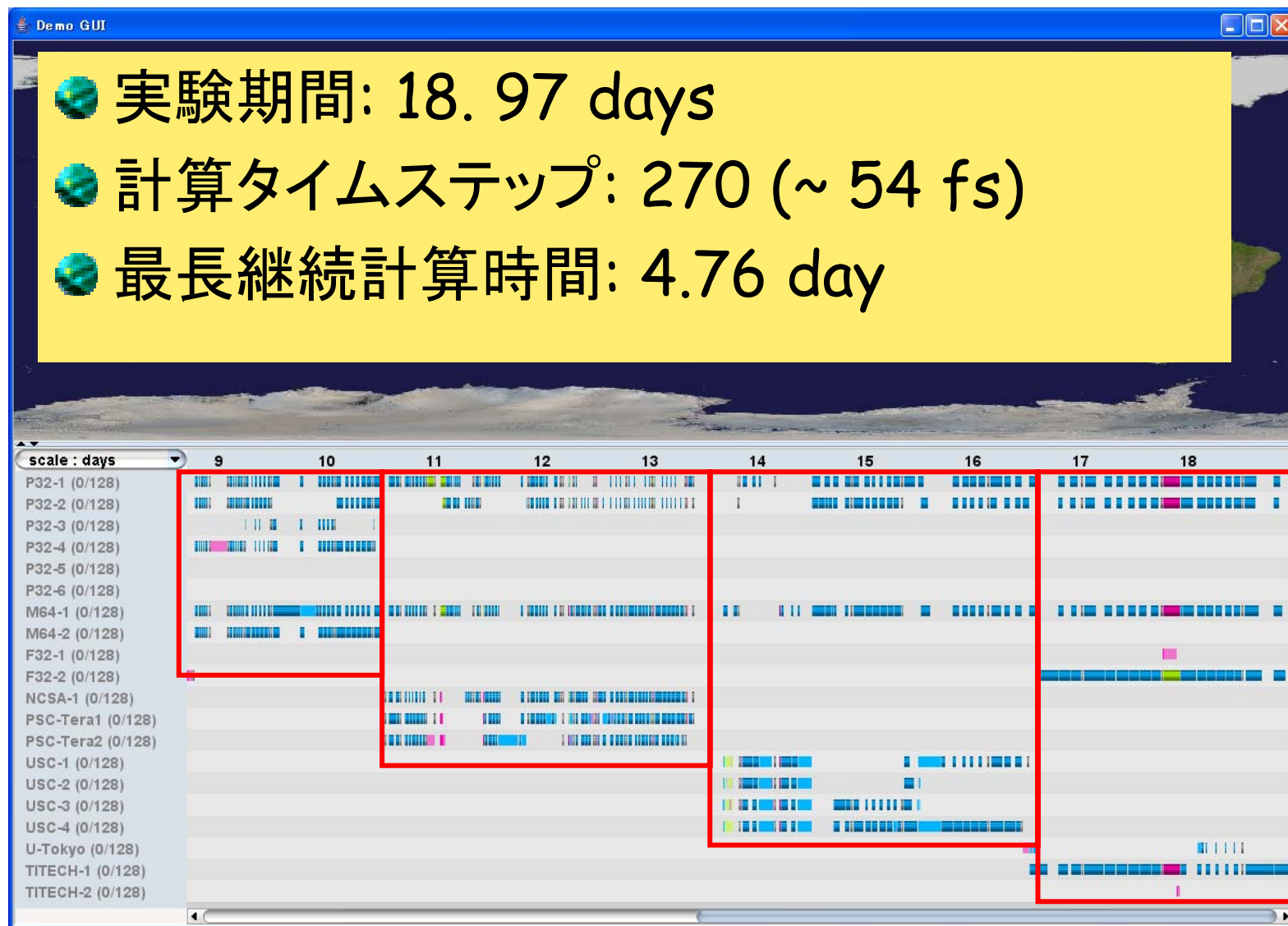
QM1	P32	P32	P32	P32	P32	USC	USC	USC	ISTBS	ISTBS
QM2	P32	P32	NCSA	NCSA	NCSA	USC	USC	USC	Presto	Presto
QM3	M64	M64	M64	M64	M64	M64	M64	M64	M64	M64
QM4	P32	P32	TCS	TCS	TCS	USC	USC	USC	P32	P32
QM5	P32	P32	TCS	TCS	TCS	USC	USC	USC	P32	P32
Reserve	F32	F32	P32	P32	P32	P32	P32	P32	F32	F32

Phase 1 Phase 2 Phase 3 Phase 4

▶ U-Tokyo (386 CPUs), TITECH (512 CPUs)



実験結果

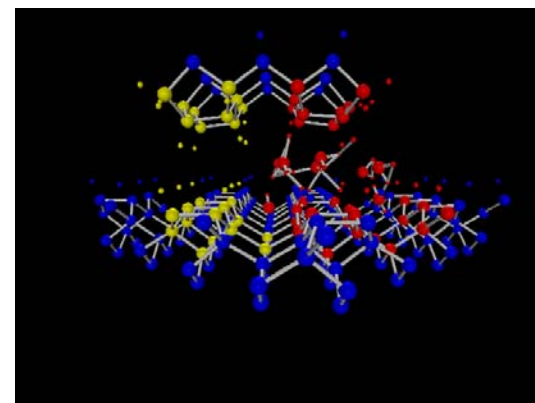
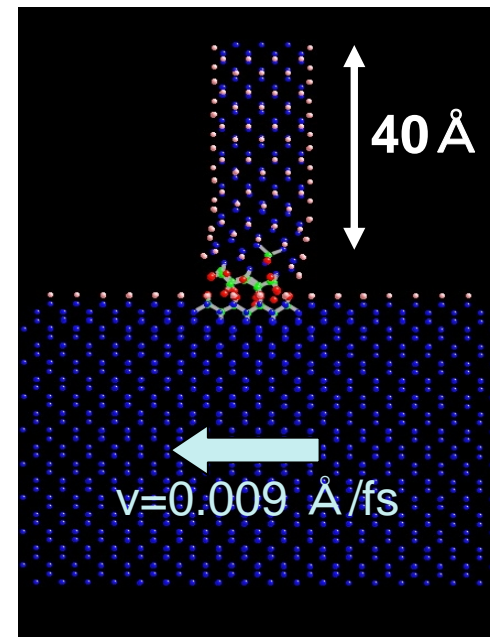


Nano-scale probing deviceにおける摩擦過程を力学的・化学的に解析

- ▶ Stick-slip過程
- ▶ 接触領域の酸化

初期パラメータ

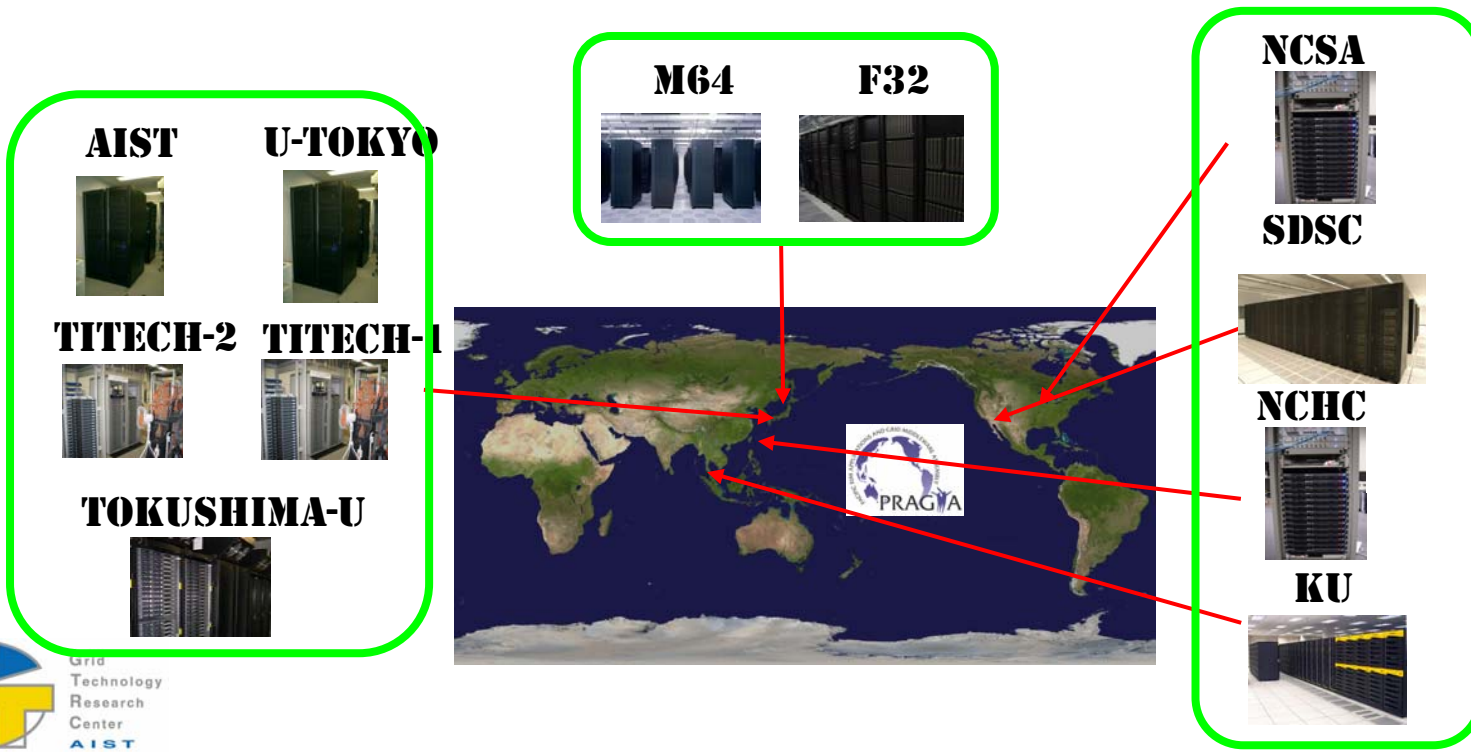
- ▶ 基盤移動速度: 0.009 \AA/fs
- ▶ 2つのQM領域を定義
 - @ 72 + 41 QM atoms
- ▶ 総原子数: 28598



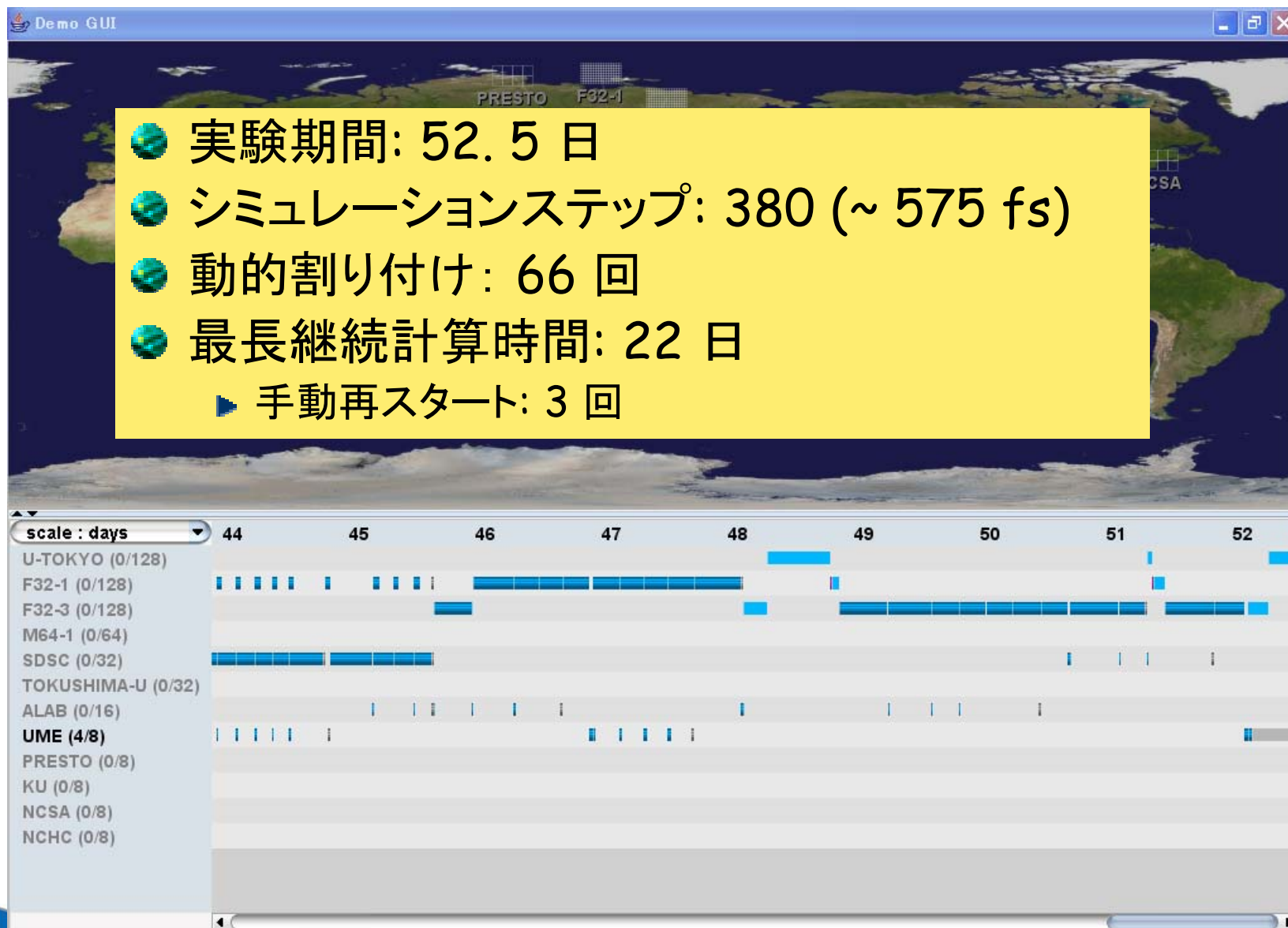
Friction simulation用テストベッド



- AIST Super Cluster
 - ▶ M64 (128 CPUs), F32-1(128 CPUs), F32-2(128 CPUs)
- Japan Clusters
 - ▶ U-Tokyo (128 CPUs), Tokushima-U (32 CPUs), Titech-1 (16 CPUs)
 - ▶ Titech-2(8 CPUs), AIST(8 CPUs)
- PRAGMA Clusters
 - ▶ SDSC (32 CPUs), KU (8 CPUs), NCSA (8 CPUs), NCHC (8 CPUs)



Result of the Friction Simulation



● 大規模プログラムの長期実行に関する困難

▶ 運用管理上の問題

- ◎ 各サイトのセキュリティポリシーに起因する問題
 - ✦ Outgoing connectionの制限
 - 内向きだけでなく外向きのconnectionも制限される
 - ✦ Trusted CAの問題
 - どのCAから発行されたcertを信頼するかはサイト毎に異なる
- ◎ 組織間の情報伝達に起因する問題
 - ✦ 必要な情報が組織間でうまく伝わらない
 - ✦ タイムゾーンが異なる地域間でのネゴは人的負荷が高い

▶ 技術的な問題

- ◎ 幾つかの障害は再実行では復旧不可能
 - ✦ Queueが動作しない, quota制限による失敗...
- ◎ Fragileなmiddleware/infra
 - ✦ 大規模になればなるほどプログラムの起動に失敗することが多い.
 - ✦ mpichはIPCを保持したまま異常終了する
- ◎ タイムアウトメカニズムの有効性
 - ✦ 非均質な計算機群に対し, 動的に変動する計算時間を対象にタイムアウトパラメータを設定することは困難
 - ✦ 一回の計算に時間がかかるとタイムアウト機構の有効性が薄れる

- 大規模長時間シミュレーションを想定した2種類の実行シナリオに基づき、環太平洋Gridテストベッド上でQM/MDシミュレーションを実行し、GridRPC+MPIを用いたGrid化手法の有効性を検証

- ▶ 予約ベースアプローチ

- ◎ 10日間の実行(最長5日間の継続実行)に成功

- ▶ アイドルクラスタ上での動的実行アプローチ

- ◎ 50日間の実行(最長21日間の継続実行)に成功

- ◎ 計算資源が充分にあれば安定して動作

- ⊕ “君子危うきに近寄らず”戦略が有効

- 全自動長期実行の実現には多数の問題点が存在

- ▶ 予約ベースの実行のための運用体制の確立が必要

- ▶ Grid技術以前にcluster技術がfragile

- ▶ 実行継続をどこまで頑張るか、どこであきらめるか、判断基準は何か、必要情報提供手段はあるか？

- ▶ 利用CPU数が大規模になればなるほど利用可能クラスタ数が減少

- ◎ 一つのクラスタの安定性がシミュレーションの継続可能性を左右





● これらの要求を全て満足することは困難

▶ GridRPC

◎ 柔軟性 ☺

- ✦ Co-allocationの必要なし
- ✦ 実行対象計算資源の動的変更, 計算規模の変更が容易

◎ 頑健性 ☺

- ✦ ネットワーク/計算資源の障害発生を検知し, appにエラーを返却
- ✦ システムの一部でエラー発生 → 再実行が可能

◎ 高効率性 ☹

- ✦ 単一クライアントが多数のサーバプログラムを管理することは困難

▶ Grid-enabled MPI

◎ 柔軟性 ☹

- ✦ Co-allocationが必要
- ✦ 静的な実行対象計算資源の利用
- ✦ 計算規模の変更困難

◎ 頑健性 ☹

- ✦ システムの一部で障害発生 → システム全体の障害につながる

◎ 高効率性 ☺

- ✦ 効率的な並列実行のための通信機構を提供

● QM領域の拡張/分割

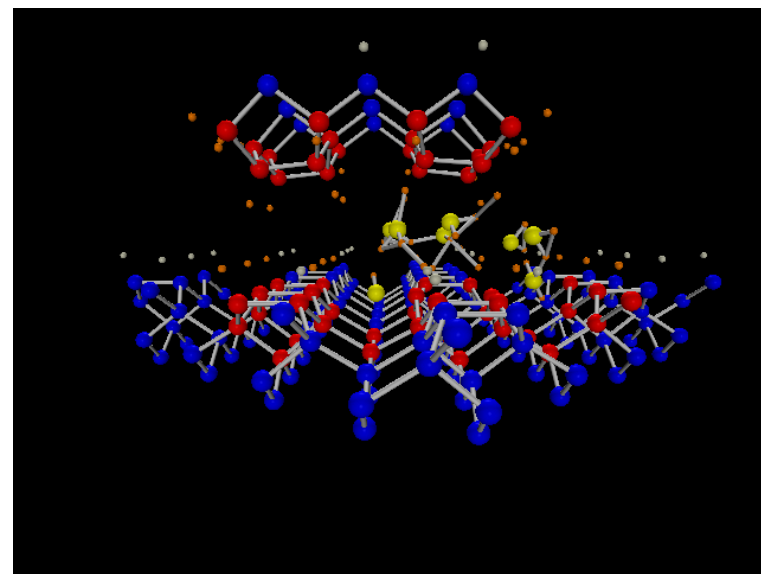
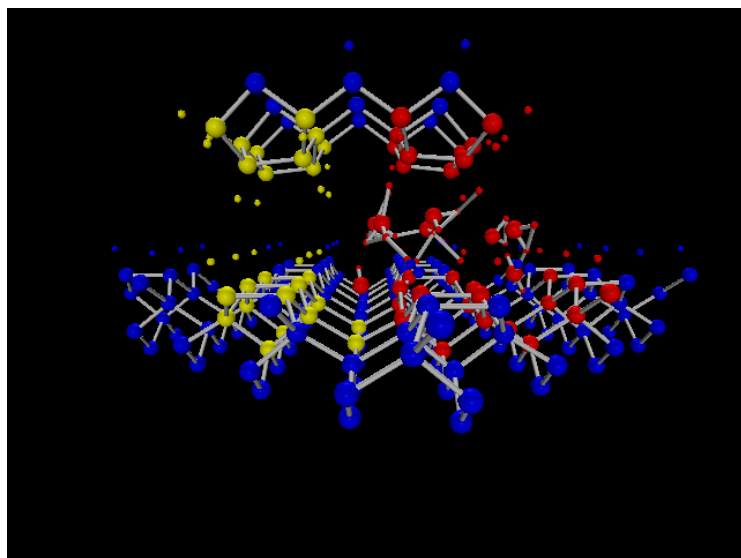
- ▶ 拡張: 21回

 - ◎ QM原子数: 113→151に増加

- ▶ 分割: 15回

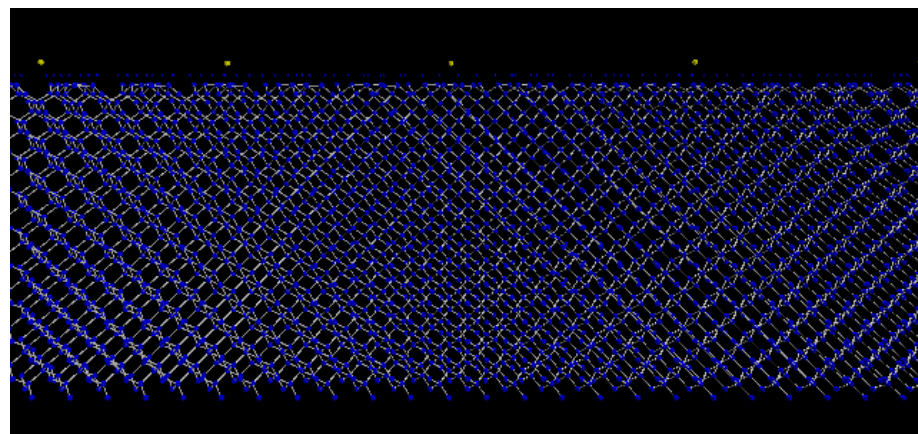
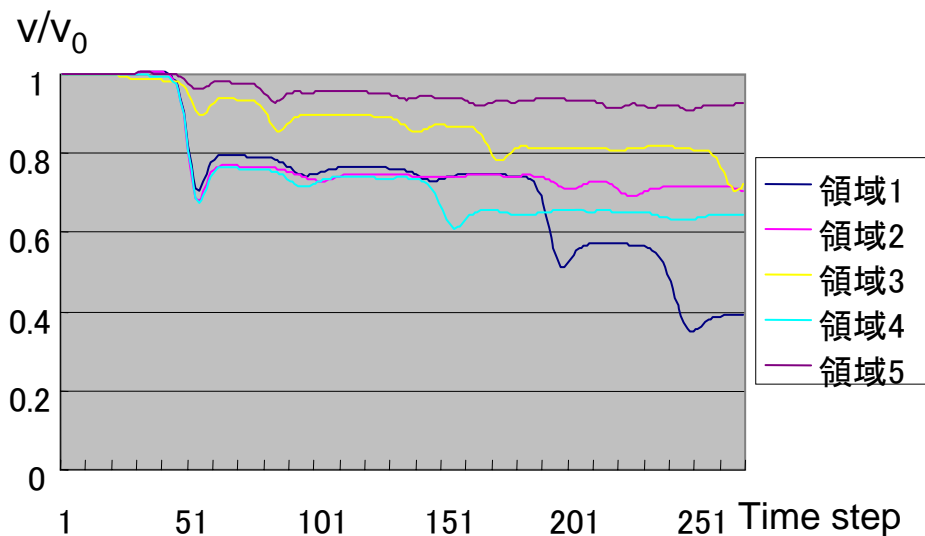
 - ◎ QM領域: 1~3に変化

● 期待された酸化反応は発生せず



● 酸素原子の振る舞いは初期位置に強く依存

- ▶ 初期速度の40~90%の速度成分を保持
 - ② 残存速度の大きさも初期位置に依存
 - ② 最終的な結論を得るためにはシミュレーションを継続する必要あり



● QM-MD間の通信コストはnegligible

- ▶ QM計算時間: ~ 数時間
- ▶ QM-MD間通信コスト: ~ 1分
 - ◎ 転送データサイズ: 1 ~ 5MB/領域

● 実行効率は50~60%程度

- ▶ 平均クラスタ利用率: 2.52 cluster/day
- ▶ CPU利用率: 186.95 cpu/days
- ▶ 主原因:
 - ◎ クラスタ間の負荷のインバランス
 - ◎ 単一クラスタへのQM領域の多重割り付け (shrink mode)
 - ◎ 障害復旧コスト

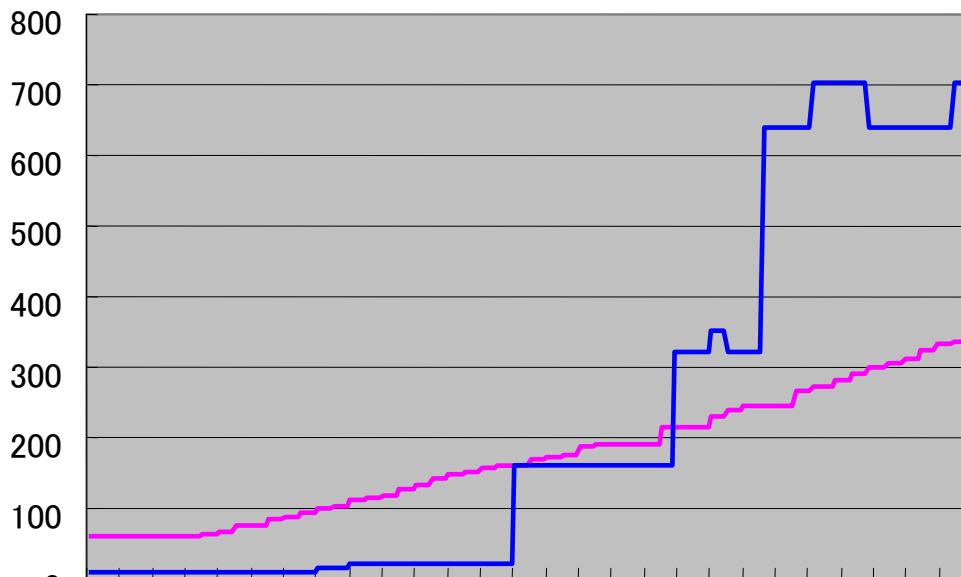
5 タイムステップ毎にQM領域の拡張/分割を実行

▶ 拡張: 47 回

▶ 分割: 8 回

➡ QM領域の拡張に対応し, MPIプロセス数を増加
QM領域の分割に対応し, 利用クラス多数を増加

No. of CPUs/Atoms



No. of CPUs

No. of QM Atoms

● 多数の障害が発生

- ▶ 実行キューが動作しない
- ▶ MPIプログラムの起動失敗
- ▶ quota limit
- ▶ :

➡ 22回のマニュアル再起動
いつまで障害復旧を試みるべきか
いつから再利用を図ればよいか

● 障害検知成功例

