

2. WG 活動概要

(1)活動方針

ペタスケールあるいはエクサスケールの計算性能の実現には、京コンピュータに代表されるように、ノード内多コア、大規模ノード数の並列計算機が必要となる。そのような計算機上で効率良く動作するアプリケーションを開発することは、アプリケーション開発者への負担が非常に大きい。そのため、プロセス並列(ノード間)とスレッド並列(ノード内)を組み合わせ、ハイブリッド並列の数値計算ライブラリに注目が集まっている。

一方で、ハイブリッド並列の数値計算ライブラリは、非常に限られたものしか開発されていないのが現状であり、その理由の一つは、プロセス間のデータ配置等、計算機のシステム構成やアプリケーションの要件に整合させなければならないためである。

本WGでは、ペタスケール時代に必要なハイブリッド並列数値計算ライブラリの実現を目的として、代表的なアプリケーション毎のライブラリに対する要件を明らかにするとともに、重要性の高い機能あるいはライブラリを選択し、評価を行う。ターゲット計算機は、当面、代表的ペタスケール計算機としての京コンピュータと、デファクトスタンダードとしてのx86クラスタとする。ターゲットプログラミングモデルは、ハイブリッド並列(MPI+OpenMP/自動スレッド並列)とする。

また、本WGは、ペタスケール時代の数学ライブラリを開発することを目的としたグローバルな活動であるOpen Petascale Libraries Network (OPLN)と連携し、OPLNの主催するワークショップ等への参加や、OPLNの開発したライブラリの評価・フィードバックを推進する。

【OPLNについて】

OPLNは、ペタスケール時代の数学ライブラリを開発することを目的とした、関連する大学、研究所等が参加するグローバルな取り組みである(事務局を、富士通と富士通欧州研究所が担当)。

ターゲットシステムは京コンピュータとx86クラスタ、ターゲットプログラミングモデルをハイブリッド並列(MPI+スレッド並列)として活動。当初の参加予定メンバーは、理研(日本)、NAG社(英国)、インペリアル大(英国)、オックスフォード大(英国)、テネシー大(米国)、ダレスバリー研(英国)等。

(2)活動内容

いくつかのアプリケーションとライブラリについて、機能、並列化手法、データ配置等の分析・整理を行う。具体的には、重点を置くアプリケーション分野(例えば、ライフ、ナノ)の中から、いくつかのアプリケーションを選定し、現在の実装について整理するとともに、ターゲット計算機の特徴等を踏まえて、数値計算ライブラリの要件を明確にする。次に、OPLN等が開発したライブラリを、アプリケーションの観点でテスト・評価を行い、ペタスケール計算機上のアプリケーションのより効率的実行に必要な課題を明確にする。

(3)活動期間

2010年11月～2013年7月

(4)WGメンバー

			氏名	機関/所属(2013年7月31日現在)
会員	担当幹事		村上 和彰	九州大学
	推進委員	まとめ役	青柳 睦	九州大学
			松尾 裕一	宇宙航空研究開発機構
			町田 昌彦	日本原子力研究開発機構
			井口 寧	北陸先端科学技術大学院大学
			野田 茂穂	理化学研究所
			姫野 龍太郎	理化学研究所
賛助会員 (富士通)	推進委員	まとめ役	金澤 宏幸	富士通(株)
			堀田 普介	富士通(株)
			林 正和	富士通(株)
			臼井 徹三	富士通(株)

(5)活動実績

- 第1回会合：2011年8月23日(火) 富士通(株)富士通トラステッド・クラウド・スクエア
 - ・WGの主旨説明/自己紹介(各自の取り組みの紹介)、活動計画の説明
 - ・OPLプロジェクトの状況報告[金澤委員] [R. Nobes氏(欧州富士通研究所)]
 - ・ライフサイエンス分野におけるアプリケーションからライブラリに求める要件[姫野委員]
 - ・ナノテクノロジー分野におけるアプリケーションからライブラリに求める要件[青柳委員]

- 第2回会合：2011年10月28日(金) 富士通(株)本社
 - ・マルチプレジジョン(多倍長精度)について[今村氏(電気通信大)] [中田氏(理研)]
 - ・実アプリケーション(Quantum ESPRESSO)によるライブラリ評価の試み[堀田委員]
 - ・OPLプロジェクトの状況報告[金澤委員]

- 第3回会合：2012年3月1日(木) 富士通(株)本社
 - ・固有値ソルバが重要なアプリケーションの紹介[町田委員]
 - ・宇宙プラズマシミュレーションの紹介[深沢氏(九大)]
 - ・富士通の数学ライブラリ取り組みについて紹介[臼井委員]
 - ・WGの今後の進め方の検討(全体の方向性の確認、OPLNとの連携方法、中間報告の検討)

- 第4回会合：2012年7月23日(月) 富士通(株)本社
 - ・FFTEについて[高橋 大介(筑波大)]
 - ・並列擬似乱数発生アルゴリズムとペタスケール時代のモンテカルロ法の展望[三浦 謙一(NII)]
 - ・JAXAにおける数値計算ライブラリの利用状況とOPL適用評価[松尾委員]
 - ・Open Petascale Libraries: Current Status[堀田委員]
 - ・今後の活動の進め方について確認

- 第5回会合：2013年2月22日(金) 富士通(株)本社
 - ・フラグメント分子軌道(FMO)法と並列FMOプログラムOpenFMOについて [稲富 雄一(九州大学)]
 - ・Application of PLASMA to OpenFMO code [堀田委員]
 - ・今後のWG活動について
 - WG活動の方向性、活動の成果報告、活動成果報告書の作成方法、今後のスケジュールなど