第一回STATE開発会議(2012/04/06)

出席者　稲垣、大谷、木崎、杉野、濱田、原口、森川

日時　2012年4月6日　10:00-11:30

場所　物性研第四会議室、阪大森川研究室

* STATEの開発進行状況について現状報告を行った。

1. Grad-Schmid 直交化
   1. コレスキー分解法＋BLAS3で、並列性やキャッシュ効率などを大幅に向上
   2. Block GS法の導入による並列性向上が次の課題
2. Allgatherv等の導入による通信の効率化
3. FFTの並列化
   1. MPIによる並列化向上
   2. どうしてもdata通信が律速する。Duplicateによる通信の削減が必要か。
   3. FFTE, SSLIIは現状では数十%の速度の劣化につながってしまう。
   4. FFTW3は日立のライブラリよりも速い
4. Scalapackの並列化効率
   1. あまり良くない。これが律速過程のひとつ。

* 期間Vの大規模利用に関して現状報告等を行った。

大規模計算のための試験にパスできる見通しが出てきている。

* 新しいアルゴリズムの導入に関して議論した

1. constantμ法
2. smooth ESM法
3. 拡張アンサンブル法

* 原口さんへの開発委託業務内容に関して議論した。

詳細は次ページ

委託内容

(1)並列FFTおよび並列対角化の性能調査（具体的には総てのプロセスで行うことに問題点があるかどうかの調査）

(2)esm部分の並列化効率の調査、改良

(3)2種類のブロックコレスキーのプログラム作成（仕様策定後）およびそのチューニング

(4) FFTWの組み込み

約0.7人月、金額にして約100万円未満。納期は、7月以降。

ただし、ブロックコレスキーのプログラムは森川研で作成。