

誰でも使えるPC普及の一方で ハイパフォーマンス

国家間競争になって ハイパフォーマンス



Blue Gene/L, 地球シミュレータを抜く

今月号の予定では、地球シミュレータ (ES) の成果、課題について書くことになっているが、米国IBM社から9月29日、Blue Gene/L (以後BGLと略) がLinpackベンチマークで地球シミュレータを抜いたとの発表があったので、まず、これに関するコメントをしておきたい。

また同日のJ. ドンガラ教授 (テネシー大学) のLinpackレポートにも、第1位に掲載されているので紹介しておこう。その内容は次の通りである。

IBM BlueGene/L DD 2 Prototype cluster (2 way0. 7Ghz PowerPC440 w/custom interconnect)
Number of Procs.: 16384 Rmax:36010GFlop/s
Rpeek:45875GFlop/s

第2位となった地球シミュレータとのRmax値 (35.86TFlop/s) との差は僅か0.15TFlopsである。

気になるのは、Peek性能比Rmax/Rpeekであるが、ESは0.875に対し、BGLは0.785である。第2位であったIntelのItanium 2 Tiger 4 は0.869だっ

たので、性能の低いチップで構成している関係上、効率が低いのは仕方がないのかもしれない。

地球シミュレータの性能が発表されたときには、ダントツの5倍であったが、今回の発表を見る限りSC2004を控えて、ESの6回目のトップを瞬間風速的に阻止したと見えなくもない。

本誌9月号で説明したように、ベンチマークでは長時間の安定性がないと計測できない。その意味で、16,384台のプロセッサを故障もせずに、どのくらいの時間走らせて計測したのか、是非とも知りたいところである。

また、1プロセッサ当たりのメインメモリサイズは256MBと想定されるが、今後、少しずつ情報も出てくると思うので待ちたい。ちなみに、ESは2GBである。地球シミュレータセンター長のコメントは以下の通りである。

「BGLがESをLinpackベンチマークで抜いたことは、コンピュータ技術の発展からは喜ばしいことである。今後は、実際の計算においてもその成果に期待したい」。

何度も登場した言葉であるが、Linpackベンチマークで、すべてのプログラムまで含めた性能を推し量ることはできない。これについては、まとめて改めて言及したい。

着実に進展している コンピューティングの世界

いる

シミュレーションの最前線 ③



独立行政法人 海洋研究開発機構

地球シミュレータセンター センター長補佐 平野 哲

3. 地球シミュレータの成果, 課題

さて、前号までに地球シミュレータ開発の概要、システムの構成について説明を行ってきた。今回は、このシミュレータを利用して、これまでどのような研究が行われているのか、また具体的な成果としてどのようなものが出ているのかについて説明したい。

地球シミュレータの共同研究プロジェクト公募は、毎年2月に行われる。継続プロジェクトも例外ではないので、公募開始の前に行われる利用報告会での評価が芳しいものでない場合には、次年度採用されないケースも起こる。公募されたテーマの選定は、各分野の専門家からなる課題選定委員会にて選定作業が行われ、4月からの利用に間に合わせるようにリソースの割り当てがなされる。1%と言えども大変なリソースとなる。

Sクラスタを除いた624ノードの1%とは、6.24ノード(400GFlops, メモリ100GB, ワークディスク約2TB)を1年間毎日24時間使うことができるからである。もちろん、定期保守の時間は除かれる。

また、Sクラスタには、制限を設けていないの

で自由に使える。

3.1 リソースの配分

本誌9月号でも説明したように、平成16年度のリソース配分は大気・海洋分野35%、固体地球分野20%、計算機科学分野10%、先進創出分野15%、地球シミュレータセンターの戦略的研究枠として20%と決められている。

「地球」に関わる配分は55%となる。この分野別リソース配分は、地球シミュレータセンター設立当時の利用計画委員会で決定されたが、独法化された現在は、計画推進委員会に引き継がれている。

平成16年度上期は、特に大気・海洋分野において、IPCCへの報告を控えていたので、3プロジェクトには、割り当てられたリソースの中で処理の優先度を高めるために、最大320ノード近くまでの占有運用を行った。表に平成16年度の共同研究プロジェクトを掲げておく。

これらの成果については、地球シミュレータセンターのホームページに利用報告会の内容がアップロードされているので参照願いたい。

事項以降に地球シミュレータセンターが開発に関わったコードを中心に説明する(表参照)。

3.2 大気・海洋分野での成果

(1) AFES

AFESは、地球シミュレータセンターの研究者が大気大循環モデルである東京大学気候システム研究センター (CCSR) / 国立環境研究所 (NIES) のコードをES向けに最適化したものである。ここで測定された26.58TFlopsは、ピーク性能の実に65%であり、実プログラムでこんな数値が出たことに対し、専門家は驚愕したのである。

ベクトルアーキテクチャのスーパーコンピュータでも30%程度、スカラパラレル機では5%も出れば良しとされていたからである。しかも、プロセッサ数が5,120個という途方もない数であり、アムダールの法則による並列化効率のダウンは避けられないからである。

この性能を出すためには、99.99%近くの並列化が必要となる。コードの最適化に当たっては、NECの優秀なSE 3~4名が3年間協力した。

最適化の方針としては、アーキテクチャを考慮した3階層の並列化を行い、ノード間の通信で衝突が起きないようにする、メモリアクセスを奇数飛びにする、インライン展開によるサブルーチンコールオーバーヘッドの削減、ベクトル長をできるだけ長くするなど考慮した。また遅い割り算などの使用も差し控えた。

ここでは、地球上の10Kmメッシュでの1日分の大気の動きを5時間でシミュレーションしている。高さ方向は96層である。白い部分は降雨を表している。これだけ詳細なシミュレーション結果は、いままで世の中になく、台風も自律的に発生してくることが評価され、米国ComputerWorld誌が主催している21世紀の偉業賞を、農業・エネルギー・環境分野で受賞している。

2002年のゴードンベル賞を受賞したこのコードは、スケラビリティについても特筆すべき点があるので紹介しておく。

プロセッサの並列度が増すと効率は下がっていく。このコードにおいては緩やかに下がる程度であるが、一般的には、スーパーコンピュータのアーキテクチャやオプティマイズに依存するので、16,384台ものプロセッサを使うBGLの評価として

平成16年度 地球シミュレータセンター 採択課題一覧

①大気・海洋分野 (14件) プロジェクト名 責任者氏名 所属

1. 高分解能大気海洋モデルを用いた地球温暖化予測に関する研究 住 明正 東京大学 気候システム研究センター
2. 大気海洋結合モデルの高解像度化 丸山 康樹 電力中央研究所
3. 地球環境変化予測のための地球システム統合モデルの開発 松野 太郎 海洋研究開発機構 地球フロンティア研究システム
4. 高精度・高分解能気候モデルの開発 青木 孝 気象庁気象研究所
5. フル結合四次元データ同化システムの研究開発と初期値化・再解析データの構築 淡路 敏之 海洋研究開発機構 地球フロンティア研究システム
6. 全球・地域スケール化学輸送モデルによる大気組成変動とその気候影響の研究 秋元 肇 海洋研究開発機構 地球フロンティア研究システム
7. 大規模場と中規模現象の相互作用による大気・海洋変動の機構と予測可能性 (AFES CFES OFES) 大淵 清 海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター
8. 地球シミュレータ用・非静力・大気海洋結合モデルの開発 高橋 桂子 海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター
9. 諸物理過程のパラメタリゼーションの高度化 (大気・海洋分野) 日比谷 紀之 東京大学大学院 理学系研究科
10. 広域水循環予測システムの高度化 植田 洋匡 京都大学 防災研究所
11. 気候・海洋変動のメカニズムの解明およびその予測可能性の研究 山形 俊男 海洋研究開発機構 地球フロンティア研究システム
12. 階層構造を持つ水循環システムの雲解像モデルを用いた高解像度モデリング 坪木 和久 名古屋大学 地球水循環研究センター
13. ヒートアイランドの数値モデルの開発 足永 靖信 建築研究所
14. 地球フロンティア研究システムにおける大気・海洋・陸面結合大循環モデルの開発 時岡 達志 海洋研究開発機構 地球フロンティア研究システム

②固体地球分野 (9件)

15. 全地球弾性応答シミュレーション 坪井 誠司 海洋研究開発機構 固体地球統合フロンティア研究システム
16. 実地球環境での地球磁場・変動シミュレーション 浜野 洋三 海洋研究開発機構 固体地球統合フロンティア研究システム
17. マントル対流の数値シミュレーション 深尾 良夫 海洋研究開発機構 固体地球統合フロンティア研究システム
18. 日本列島域の地震活動予測シミュレーション 松浦 充宏 東京大学大学院 理学系研究科
19. 3次元不均質場での波動伝播と強震動シミュレーション 古村 孝志 東京大学 地震研究所
20. 複雑断層系の地震発生過程シミュレーション 平原 和朗 名古屋大学大学院 環境学研究科
21. 固体地球シミュレーションプラットフォームの開発 奥田 洋司 東京大学 人工工学研究センター
22. コア・マントル結合系のダイナミクス 陰山 聡 海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター
23. 計算地球物質科学による地球内部物質の物性評価計算 鳥海 光弘 東京大学大学院 新領域創成科学研究科

は、実プログラムの成果を見るしかないというのが見解である。

従来までのスカラパラレル機による処理では、5%以下である。このような流体现象のシミュレーションはベクトル機のもっとも得意とするところである。

(2) OFES

海洋の大循環モデルOFESについても、10Kmメッシュで画期的なシミュレーション結果が出ている。深さ方向は50層である。従来までの100Kmメッシュ(左上)では、再現できなかった黒潮やメキシコ湾流などの海流も、くっきりと再現されているのがわかる。

(3) IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change) への報告

今年8月末が締め切りとなっていたIPCCへの報告は、前出のCCSR/NIES/FRSGCのグループ、気象研のグループ、電力中央研究所/NCARの成果がそれぞれ新聞発表されているのでご覧になった方も多いと思うが、さわりだけ再掲する。いずれも2年がかりで計算した結果である。

①CCSR/NIES/FRSGCグループ

2071~2100年で平均した全地球平均の気温は、1971~2000年の平均に比較して、B1で3.0℃、A1Bで4.0℃上昇、同じく降水量は、B1で5.2%、A1Bで6.4%の増加となった。

気温上昇の地理分布は、北半球高緯度で大きく、海上に比べ陸上で大きい。2071~2100年で平均した日本の夏(6・7・8月)の日平均気温は、1971~2000年の平均に比較して、シナリオB1で3.0℃、シナリオA1Bで4.2℃上昇、同様に日本の日最高気温は、シナリオB1で3.1℃、シナリオA1Bで4.4℃上昇となった。

②気象研グループ

温暖化が進むと台風の数は、年平均で2割程度減るが、最大時の勢力は風速40mを超えるものが増え、また、梅雨期の北日本での水不足が心配されるなどの予測がなされている。

採択課題一覧つづき

③計算科学分野(2件)

- 24.並列処理言語HPF(High Performance Fortran)を用いた大規模並列実行の性能検証および新規機能の検討
岡部寿男 京都大学 学術情報メディアセンター
- 25.連結階層シミュレーションアルゴリズムの開発 渡邊 國彦 海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター

④先進・創出分野(12件)

- 26.ロケットエンジン内部流れのシミュレーション
古川 正夫 宇宙航空研究開発機構
- 27.カーボンナノチューブの特性に関する大規模シミュレーション 南 一生 高度情報科学技術研究機構
- 28.パーチャル実証試験のための次世代計算固体力学シミュレータの開発 塩谷 隆二 九州大学大学院 工学研究院
- 29.地球シミュレータによる格子上的素粒子標準模型の研究 宇川 彰 筑波大学 計算物理学研究センター
- 30.テラヘルツ発振超伝導素子に関する大規模シミュレーション 立木 昌 物質・材料研究機構
- 31.宇宙環境シミュレータ 大村 善治 京都大学宇宙電波科学センター
- 32.計算材料科学のための物質情報構築法の開発 大西 楯平 CAMP(Collaborative Activities for Materials Science Programs)グループ
- 33.原子力関係の大規模シミュレーション研究*サブテーマ(下記)を含む 奥田 洋司 (社)日本原子力学会 大規模シミュレーション研究専門委員会
- 34.乱流の世界最大規模直接計算とモデリングによる応用計算 荒川 忠一 東京大学大学院 情報学環
- 35.バイオシミュレーション 高田 俊和 バイオシミュレーション研究者の会
- 36.DEMCによる内部構造を持つ複雑多相系の粒子モデル 阪口 秀 海洋研究開発機構 固体地球統合フロンティア研究システム
- 37.宇宙の構造形成とダイナミクス 松元 亮治 千葉大学 一階層構造を連結する流体・磁気・輻射プロセスへの新たなアプローチ 理学部物理学教室

⑤原子力関係の大規模シミュレーション研究サブテーマ

- 38.直接解析手法による原子炉内複雑熱流動挙動の大規模数値シミュレーション 高瀬 和之 日本原子力研究所 東海研究所
- 39.溶液の第一原理分子動力学シミュレーション 平田 勝 日本原子力研究所 東海研究所
- 40.多階層ダイナミクスが支配するプラズマの構造形成に関する研究 岸本 泰明 日本原子力研究所 那珂研究所
- 41.水銀ターゲットにおける液体水銀の圧力波伝播と容器壁の変形挙動と気泡成長の相互作用のシミュレーション 荒川 忠一 日本 原子力研究所 計算科学技術推進センター
- 42.超伝導ナノファブリケーションによる新奇物性と中性子検出デバイス開発のための超伝導ダイナミクスの研究 町田 昌彦 日本原子力研究所 計算科学技術推進センター
- 43.放射線照射に伴う材料の物性変化と破壊の微視的シミュレーション 無木 英雄 日本原子力研究所 計算科学技術推進センター
- 44.地下空間における放射性核種移行と地下水挙動の大規模シミュレーション技術に関する研究 奥田 洋司 東京大学 人工物工学研究センター
- 45.耐放射線性SiCデバイス用酸化膜の第一原理分子動力学シミュレーション 宮下 敦巳 日本原子力研究所 高崎研究所
- 46.稠密格子燃料集合体サブチャネル内冷却材直接乱流シミュレーション ニノ方 寿 東京工業大学 原子炉工学研究所

③電力中央研究所グループ

米国大気研究センターと共同で温暖化予測計算を、3メンバーでのアンサンブル予測で行い、合計の積分時間は、6000年分に達している。結果の発表が待たれる。

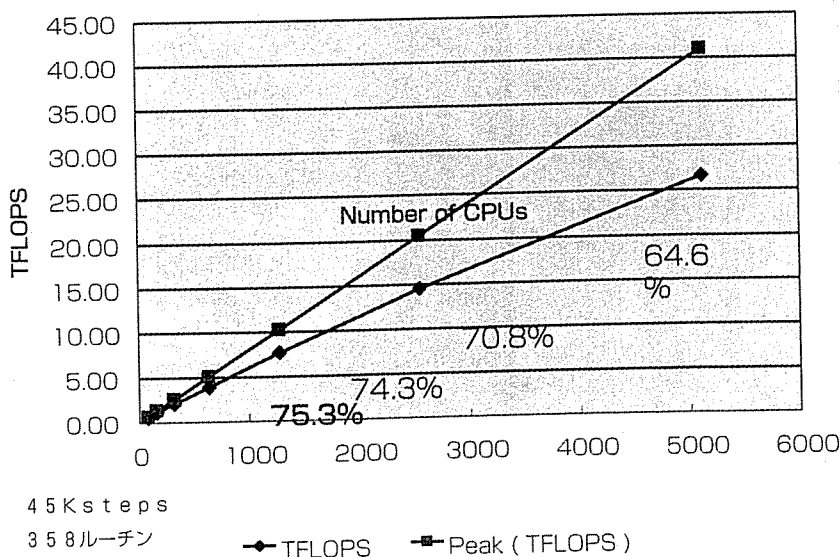
3.3 固体地球分野での成果

固体地球分野は、コンソーシアムを作って、この
大気大循環シミュレーション
 Snapshot of Precipitation of T1279L96 (10-kmmesh)

処理時間：160node・5H/日 データ量：12TB/月



World-beating 26.6TFLOPS sustained performance with the 640 full nodes (5120 CPUs/ 40TFLOPS)



の中で研究分野に重なりがないように調整して研究を行っている。最近の成果として、地震の起こる仕組みの解明が進むとともに、過去に起こった地震の忠実な再現が可能となり、防災上からも有用なデータが提供できるようになった。東大地震研究所の古村先生の成果を紹介する。

ES以前では、メッシュも粗く、地盤は均質な物質で表現されていたが、分解能も200mと細くなり、480億格子を実現している。不均質な地盤構造を入れたのと、高い周波数の振動までが再現できるようになり、震源地から離れた場所のゆれについても、当時の観測データとの一致が見られるようになった。

3.4 計算機科学分野

この分野は、10%ものリソースを割り当てているものの、応募が少ない現状である。

5,120個の超並列ベクトルプロセッサを研究対象とすることは、いろいろなテーマが出てきてもおかしくないと思うのだが、

長い間、できあいのソフトウェアパッケージを使う文化に慣らされてきたせいか、もはや自分でプログラムを書いて実験するなどというのは、今時、流行らないのであろうか、歯がゆい思いである。

ここでは、HPF (High Performance Fortran) を使用して、高い性能を引き出しているケースを紹介しよう。HPFのウリは、ノードにまたがる並列処理をコンパイラ側でやってくれることにある。職人技を要求されるMPIによるノード間通信を、ブ

ログラムは意識する必要がないので、プログラムの開発期間が短縮される利点がある。

メーカーの謳い文句は「20%の努力で80%の性能を」である。最高性能を狙うには、MPIで書いたほうがベターではあるし、研究者は、プログラムを書くことが研究ではなく、結果を得ることが大事という観点からは、もっともっと利用されても良いのだが、MPI利用者は少ない。

ゴルフと同じで、初心者向けの打ちやすいクラブは敬遠されて、プロスペックのものが売れるという現象に近いのではないかと考えている。

図は、HPFで処理されたIMPACT-3Dと呼ばれるレーザー核融合爆縮解析コードによる処理結果である。凸凹は、ターゲットのペレットが圧縮され、変形していく過程のスナップショットである。

このコードは、メッシュサイズ2048×2048×4096で、512ノードを使用して14.9TFlops（ピーク性能比45%）を出している。計算に要した時間は、6分である。元のソースプログラム1,131行に対して、20ヶ所50行の指示行を追加するだけでこの性能を実現できた。

なお、このコードはSC2002でゴードンベル賞（言語賞）を受賞した。

3.5 先進創出分野

多様な領域で研究が行われているが、ここでは、さわり

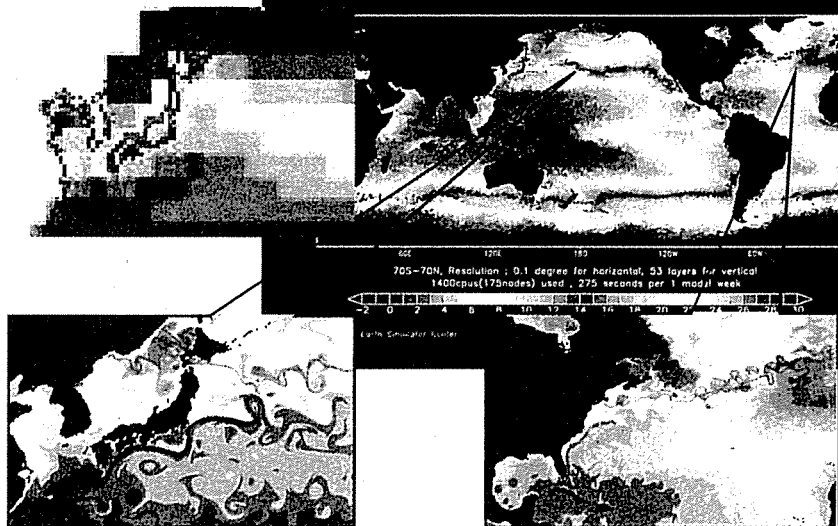
だけの3件の紹介に留めおくこととする。詳細は、地球シミュレーションセンターのホームページから得ることができるので、ご覧いただきたい。

(1) CNT（カーボンナノチューブ）

ナノテクノロジー実験では容易に行えない、熱・機械的特性に関わる計算を行っており、基礎特

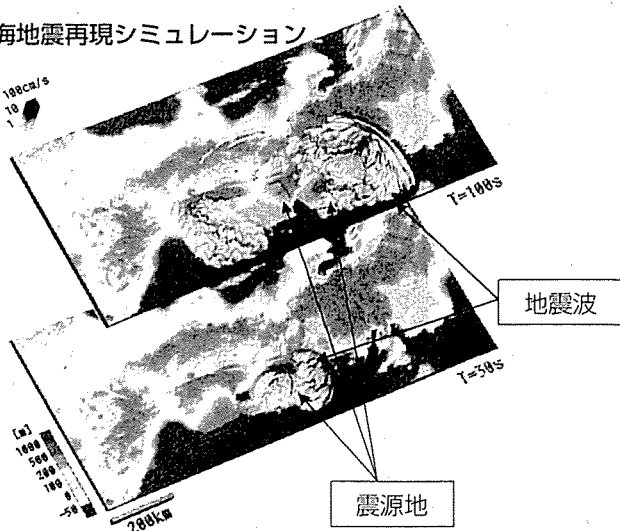
成果：海洋大循環シミュレーション

全球の海面水温（水平解像度10km）



処理時間：94node・10H/年、188node・6H/年、データ量：3.6TB/年

東南海・南海地震再現シミュレーション



東京大学地震研究所 古村先生

性として、ヤング率の評価や数千原子を使用した実験をして、硬さがダイヤモンドの2倍の構造や応用スケールでのチューブの座屈構造が示された。

また応用としてCNTの光スイッチング特性の実時間シミュレーションができた。いずれも世界最初の成果である。

(2) テラヘルツ発振素子

高温超伝導状態におかれた多連結ジョセフソン結合に磁界をかけることにより、励起されたプラズマからテラヘルツ周波数帯の電磁波を発生させるが、最適なデバイス条件の探索は、ESにしかできない。得られた最適発振条件から、現在は素子の試作に取り組んでいる。

安定したテラヘルツ波が利用できれば、超高速・大容量ネットワークによる次世代超高速計算機の開発にもつなげていくことが期待できる。世界最先端の成果が得られている。

(3) 素粒子標準模型

量子色力学 (QCD) の検証を行っている。自然界の基本定数であるクォーク質量およびQCD結合定数の決定を、近似なく第一原理にもとづく完全なシミュレーションで行っている。

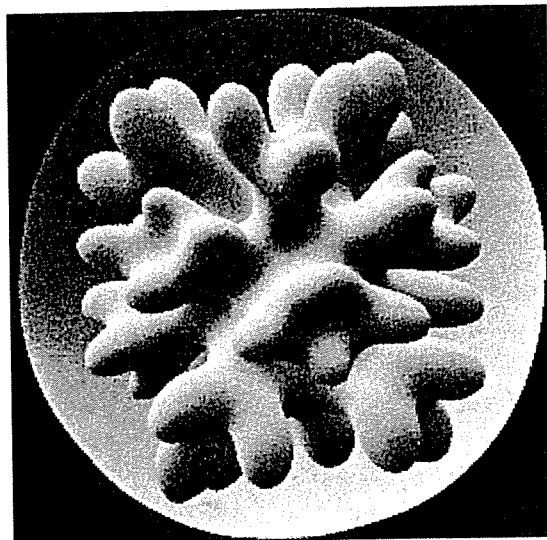
こうした共同研究プロジェクトが、どのくらいの実効性能を出しているのか次に示そう。

ピーク性能に対してバラツキはあるものの概ね30%程度の実効性能を出していることがわかる。実効性能が低いプログラムに対しては、より少ないノードで計算するよう指導している。スカラパラレル機では、1TFlopsの実効性能を出すのは容易ではない。

前述のもの他に、戦略的研究枠の中で、外国との協定 (MOU) にもとづいて、現在5ヶ国9研究機関と共同研究が始まっているが、成果も出始めている。一部、成果がアニュアルレポートに報告されているが割愛する。

また、同枠のなかで、最近、国内で民間との共同研究がスタートしているので紹介しよう。

第1は、財団法人自動車工業会との「自動車丸ごと高精度リアルタイムシミュレーション」である。従来からこの分野は、衝突解析、空力特性、



IMPACT-3Dによるシミュレーションの例

燃焼、騒音、振動など、早くからシミュレーションが行われていたが、この研究のゴールは、これら各パーツを共通基盤の上で同時に実行させる、いわば、地球シミュレータ上で仮想的に車を走らせることである。

これが可能になると、車のモデルチェンジなどが短縮されると同時に、コストダウンにもつながるのは容易に理解できよう。今年度はまず、既存パッケージをES上で高精度化を図ることから始めているが、やはり並列化が一番の難所である。

第2は航空機関連、第3は経済シミュレーションの分野で、現在、契約手続き中である。

3.6 システムの安定性確保と保守

地球シミュレータは、640台のスーパーコンピュータから構成されているので、本体系だけでも非常にたくさんの部品が使われている。部品数の多い順からいくと、まずメモリチップは約100万個、INのシリパラ変換チップ17万個、チップではないがノード間のケーブルも8万3千本、電源モジュール2万7千個、メモリのコントローラ2万個・・・という具合でベクトルプロセッサチップは5,120個である。

周辺機器では、ハードディスクのHDDモジュールは約8,800個、テープライブラリのカートリッジは2万7,000個などなどである。他にファイバ

チャネル、LAN関係なども膨大な量である。

これだけのものがあると、毎日がトラブルとの闘いである。できるだけ事前に怪しげなところは、交換・修理（予防保守）しておくが、それでもトラブルは起きる。メーカーとの保守契約により、ハードウェア、ソフトウェアともに昼間の駐在保守を行っている。

オペレータ体制は、2名が12時間勤務で4交代である。定期保守として1週間に1日だけ1クラスタ（16ノード）を切り離して保守作業を行っている。結合ネットワークは停めることができないので、3ヶ月に一度、3日間停めて保守作業とともに、ソフトウェアの変更作業も行っている。

この停止以外は、電気設備の法定点検を除いて24時間連続運転である。図は、ES導入以降の障害記録である。利用者に多大な影響を与えたシステムダウンは、導入当初を除きほとんどなく、全体としては、極めて安定して稼働しているといっ

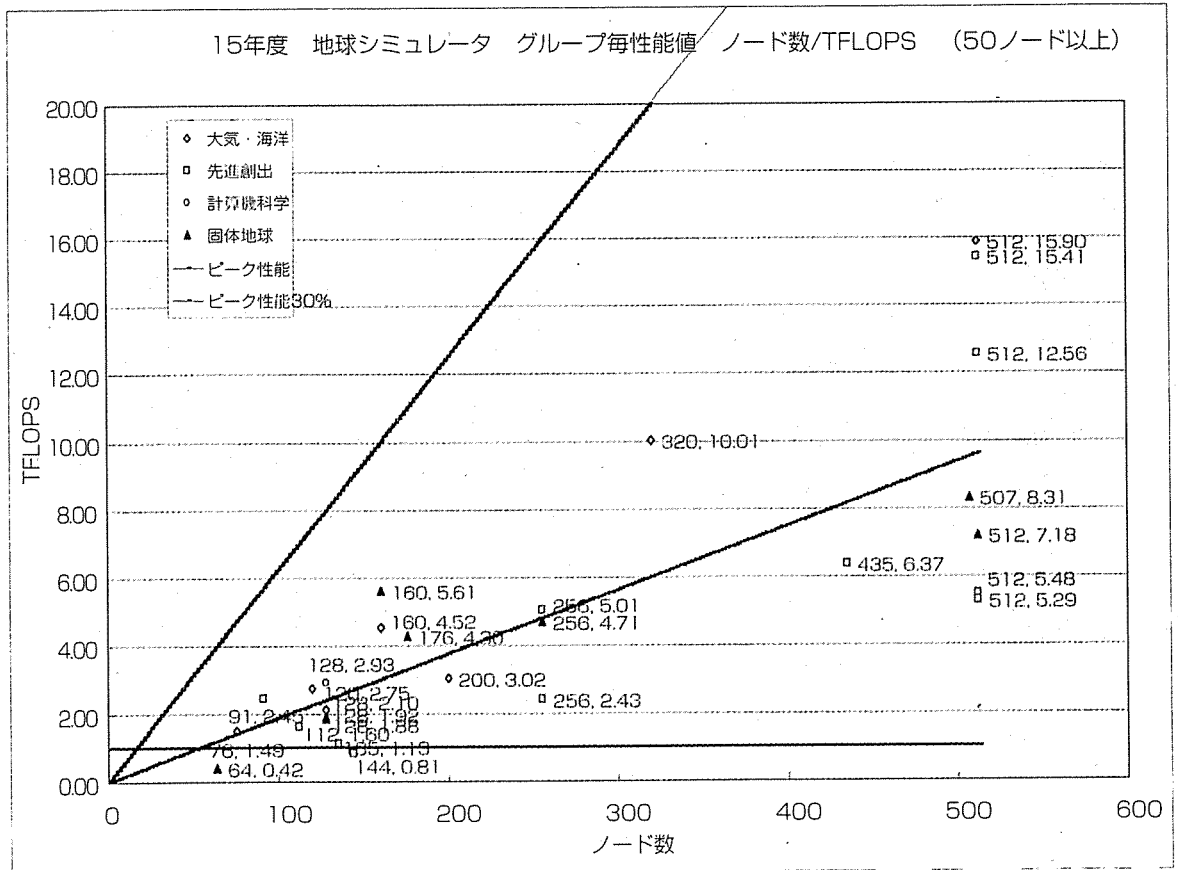
て良いだろう。

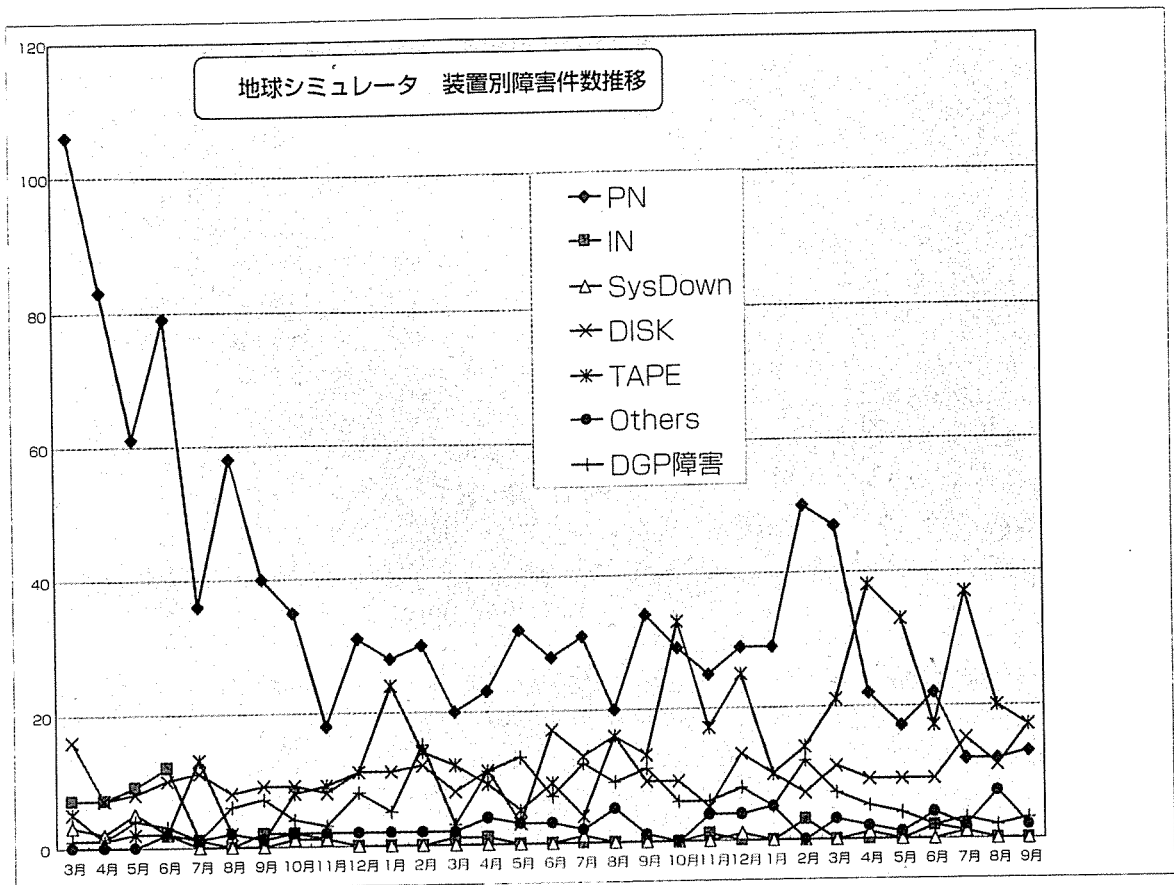
たノード障害は漸減し、最近では10件台となっている。ノード障害の原因はいろいろあるが、8個のベクトルプロセッサの1個でも障害を起こすと、運用はできるが、ノードの性能がダウンするので、常に最高性能の計算をやってもらうために、切り離して保守を行うこととしている。この間は、他のノードに影響を与えることはない。

2004年2月、3月あたりの障害の増加は、障害対策の手当が裏目に出てしまったことによる。元に戻した後、対応処置を再検討して現在は、運用開始以来、初めて10件以下となった。

目立つのは、テープライブラリの障害で、一向に減る様子が見えない。昨年10月のMDPSへの移行以来、増加しているようにも見える。27,000巻のカートリッジテープと80台のアクチュエータとの相性問題は、導入当初から問題含みであったが、収斂せず困っているところである。

また、ディスク装置の障害も増加傾向が見えてきており、RAIDなので実害はないが、これも心配である。ノードでいくら素晴らしい処理をしても、





結果が記録されなければESを使用した成果が無いことと同じである。開発当初は、本体系の処理に費用的にみても相当つぎ込んだので、ファイル系は後に廻されたようなものであるが、MDPSで強化したとはいえ、課題としては残るところである。

障害で困るのは、同一の沢山使われている部品のトラブルである。たとえば、ファイバチャネルのバックアップ系のボードの障害は、全ノードに装備されていたため、定期保守で取り替えるのに40週間かかった。

全部で705台ある診断プロセッサ(DGP)のレベルコンバータのチップ不良では、確率的に240ノードで障害が起き得ると報告されたが、あらかじめ特定することは不可能のため、結局DGP全部を取り替えるのに1年近くかかった。

幸いなことにベクトルプロセッサチップは、致命的な問題は出ず、今日に至っている。運転開始以来、ベンダーであるNECとの毎週1回のハードウェア、ソフトウェア打ち合わせは欠かすことが

なかった。本誌9月号で示した高い稼働率は、日常の保守活動によって支えられているといっても過言ではない。

共同研究プロジェクトが開始された以降、毎月8千件から1万件のバッチジョブが処理されている。

3.7 まとめ

(1) ベンチマークについて

冒頭述べたように、ESのような大規模なシミュレータの性能を他と比較するのは大変難しい。

LinpackベンチマークやIDCのバランスド・レーティングにしても、今の測定でいいと考えているわけではなく、HPCSなど新しい方式が提案されている。

我々が経験してきたことを踏まえて、定量的にはまだこなれていないが、どのような指標が有効なのか考えてみたい。