

# 将来(2010年前後を想定)の ペタフロップス超級スパコンセンターとの連携について

平成17年3月8日

東北大学情報シナジーセンター  
根元義章

## 1. 東北大学情報シナジーセンターにおける 現行のスーパーコンピュータシステムについて

- **Vector-Parallel Supercomputer**
  - NEC SX-7 with 240 CPU
  - 2TFLOPS
  - 1.9TB Memory
  - NEC UNIX
- **Scalar-Parallel Supercomputer**
  - 112 Itanium Processors
  - 365GFLOPS
  - 176GB Memory
  - Linux
- **File Server**
  - 3TB Disk
- **Network**
  - Giga-bit Ethernet



## ●●● | 既存スーパーコンピュータの設置役割

研究室、あるいは部局では保持できない、世界最高級の演算能力を有するコンピュータ。

### 国立大学の設置形態

#### 不特定利用目的

経済的、運用維持管理などの面で、共同利用形態が最適  
情報基盤センターに設置され、情報基盤としての役割

#### 特定利用目的

特定研究分野の研究促進のための大型装置として、大学附置  
研究所に設置

## ●●● | 情報基盤センターの利用者の特徴

- 研究分野は多岐にわたる
- 研究の進捗状況により柔軟な利用
  - ・必要な時、速やかに利用
- 効率的に(時間的、経済的)処理結果を獲得
  - ・計算機利用のための研究費に制限
- 安定した運用が前提
  - ・研究資産の維持



## 利用者の現状

東北大学情報シナジーセンターの申請者数

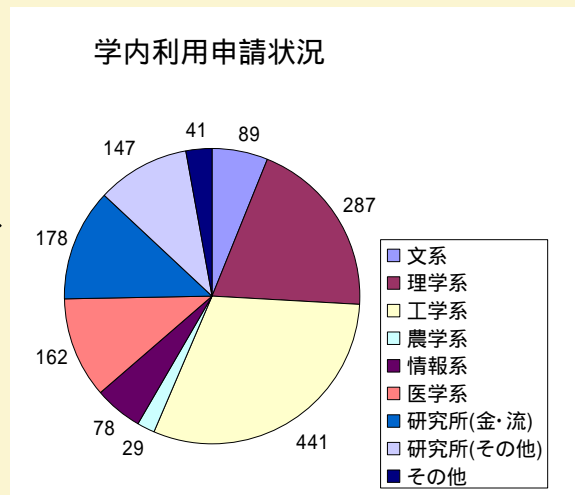
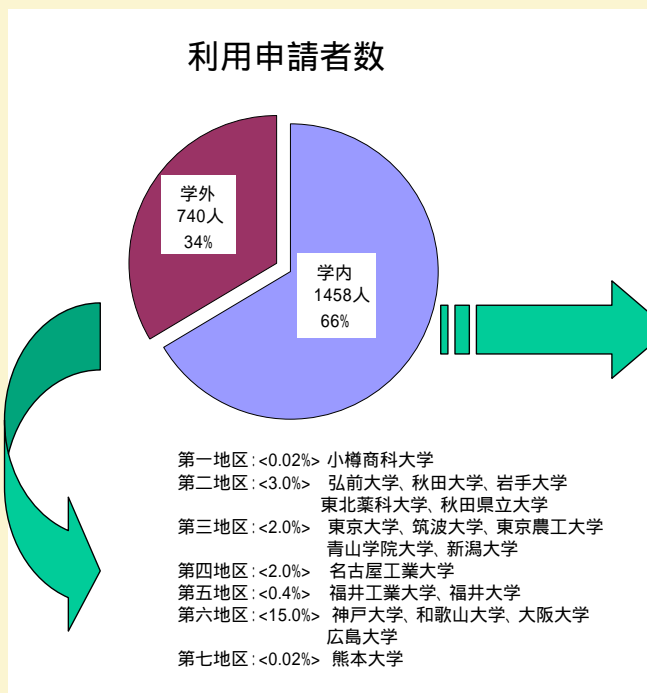
各センターの利用申請者数(平成15年度)  
< 全国共同利用情報基盤センター研究開発論文集より >

大学	利用申請者数
北海道大学	868
東北大学	1,933
東京大学	1,347
名古屋大学	1,047
京都大学	2,140
大阪大学	992
九州大学	973

年度	利用申請者数
平成 6 年度	2,400
平成 7 年度	2,776
平成 8 年度	2,807
平成 9 年度	2,692
平成10 年度	2,776
平成11 年度	2,600
平成12 年度	2,479
平成13 年度	2,209
平成14 年度	2,058
平成15 年度	1,933

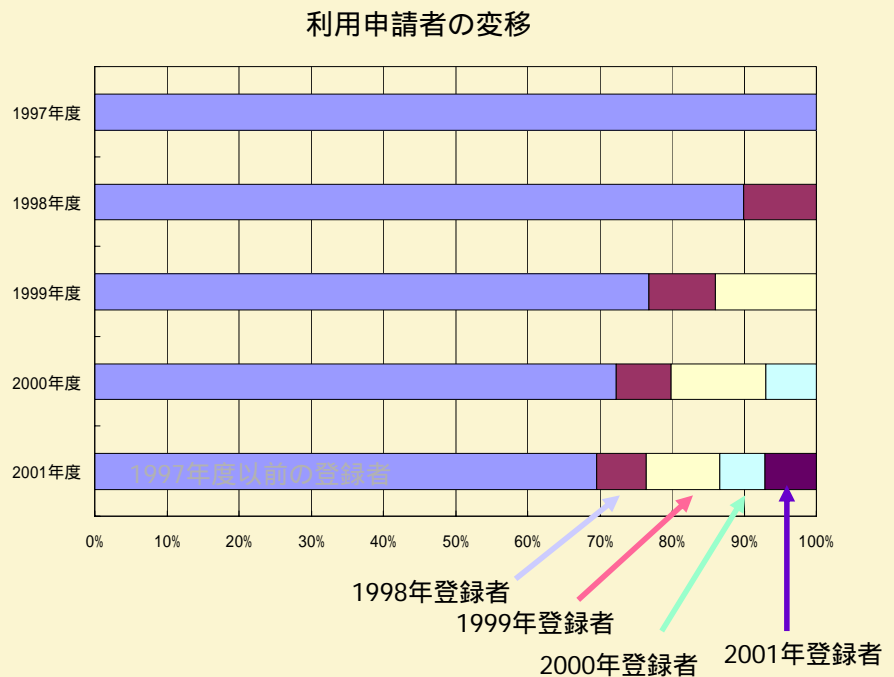


## 東北大学情報シナジーセンターの利用状況



## ●●● | 利用者の推移

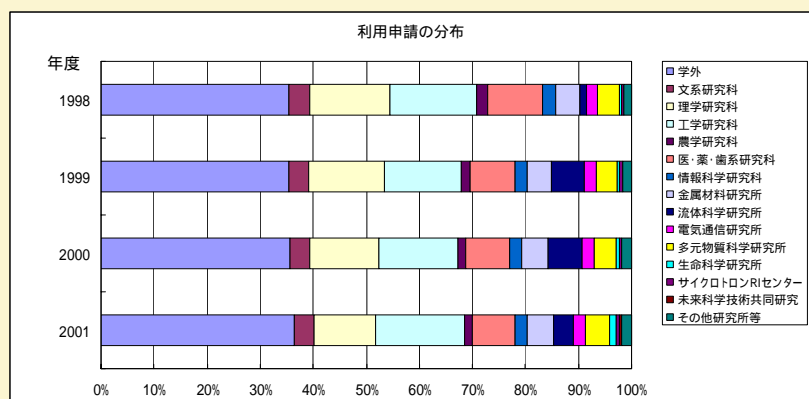
- センターの利用者は年々入れ替わっており、5年間の継続利用者は全体の7割弱



7

## ●●● | 東北大学情報シナジーセンターの利用状況

- 全国共同利用施設
  - 学外利用者3割強
  - 学内利用者7割弱
- 幅広い学内利用者
  - 工学研究科、理学研究科が主ではあるが、全研究科、全研究所にわたっている



「その他の研究所等」とは:

附属図書館, 東北アジア研究センター, 国際文化研究科, 極低音科学センター, 総合学術博物館, 大学教育研究センター, 学際科学研究センター, アドミッションセンター, 留学生センター, 言語文化部

8



## 東北大学情報シナジーセンターの スーパーコンピュータシステムの変遷

### ベクトル型スーパーコンピュータシステム

導入年	機種	CPU	性能(GFLOPS)	メモリ	シミュレーションモデル
1986	SX-1	1	0.57	256MB	小規模1次元モデル
1989	SX-2N	1	1.14	256MB	中規模1次元モデル
1994	SX-3	4	25.6	4GB	小・中規模2次元モデル
1998	SX-4	128	256.0	32GB	小・中規模3次元モデル
2003	SX-7	232	2048.56	1792GB	中・大規模3次元モデル

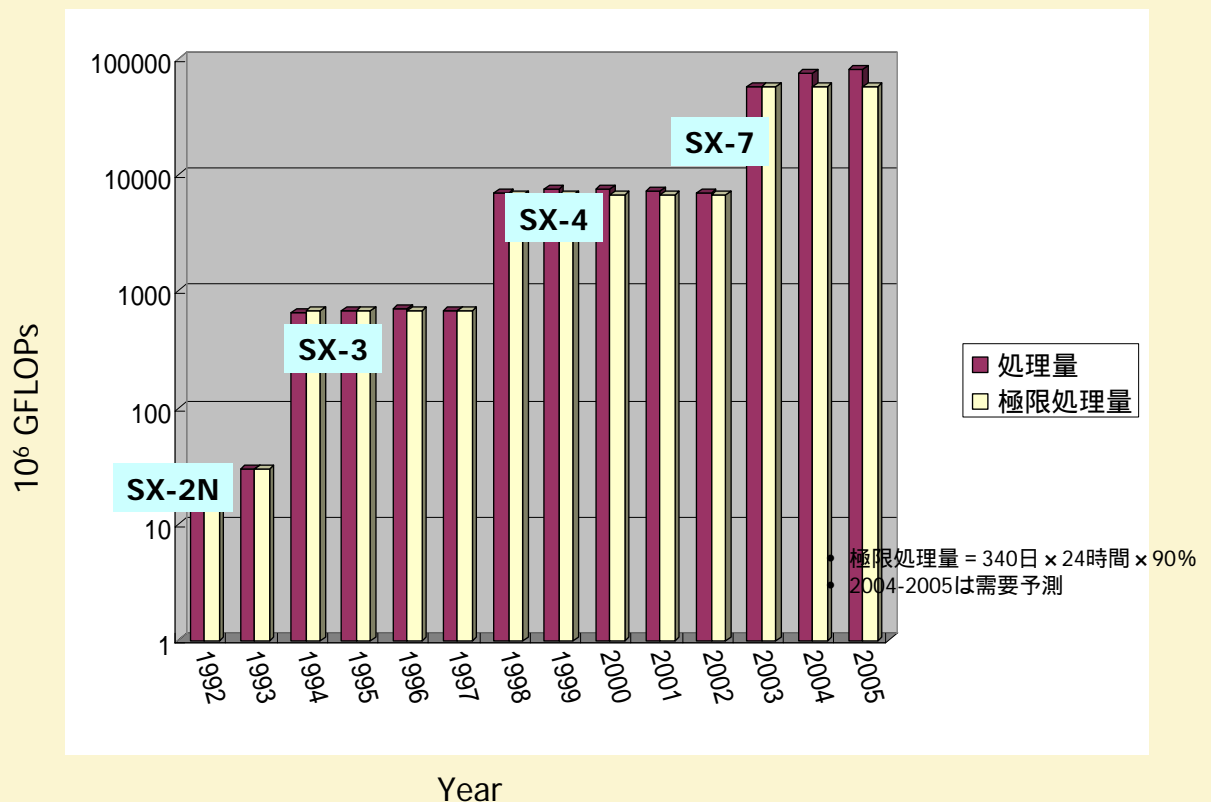
### スカラ並列型コンピュータシステム

導入年	機種	CPU	性能(GFLOPS)	メモリ	シミュレーションモデル
1997	Exemplar/X	48	34.56	12GB	小規模2次元モデル
2002	Tx7/AzusA	112	358.4	176GB	小規模3次元モデル

9



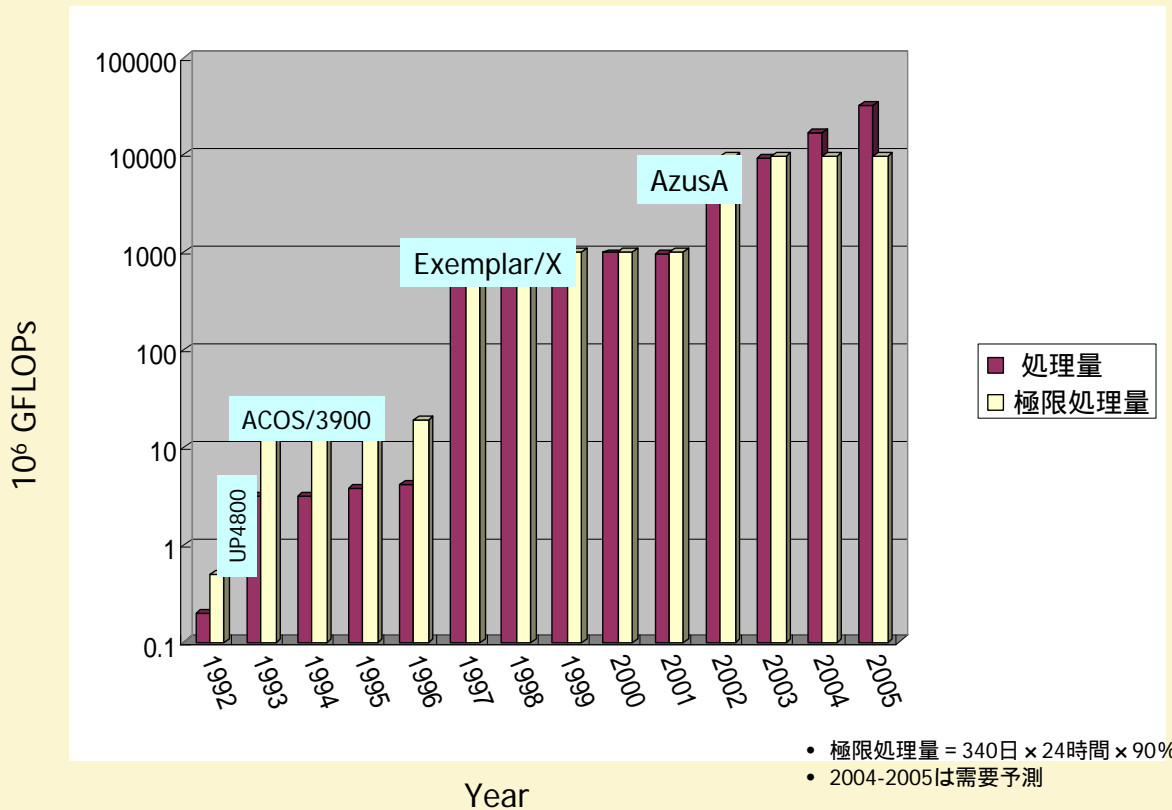
## ベクトル型スーパーコンピュータの処理状況



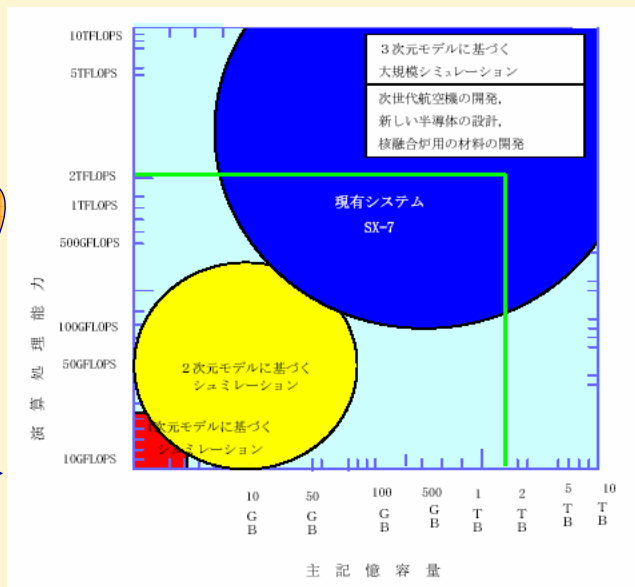
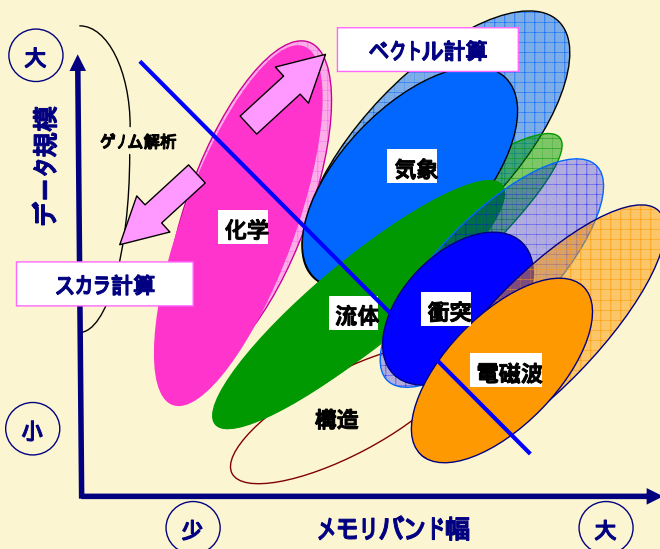
10



## スカラ並列型コンピュータの処理状況

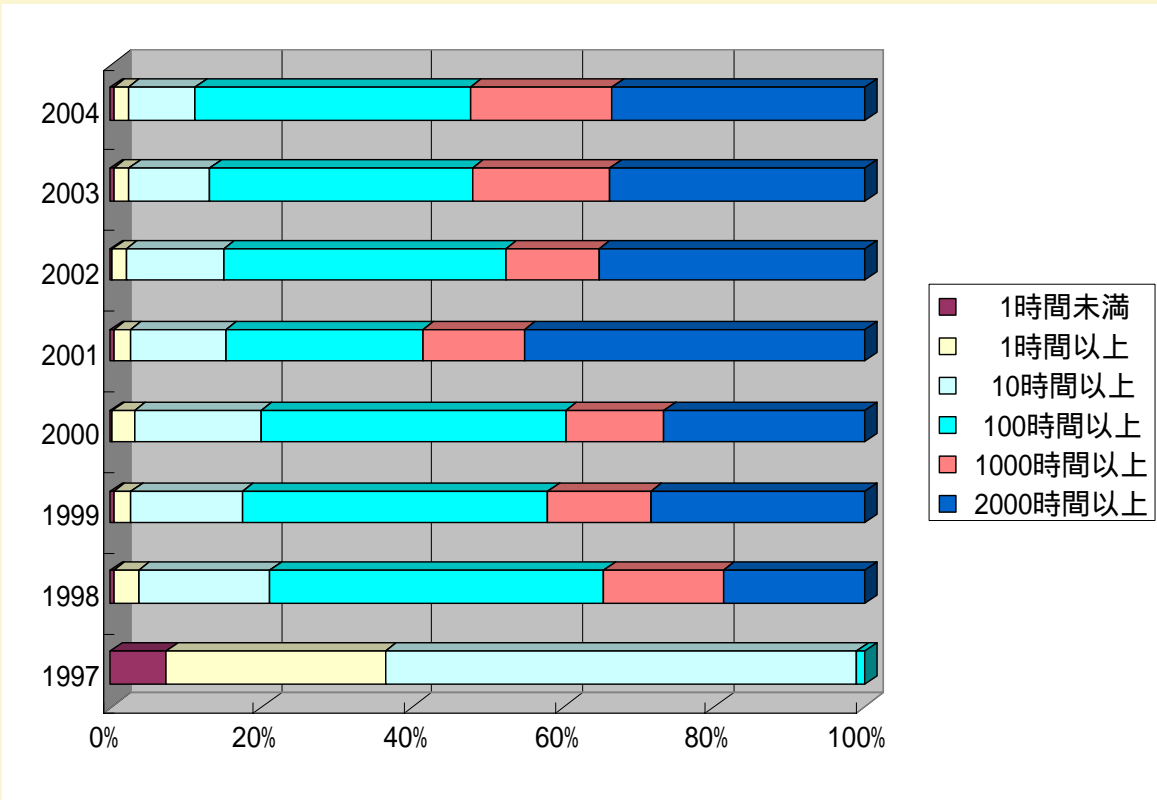


## シミュレーションを支える大規模科学計算システム —ジョブの大規模化—

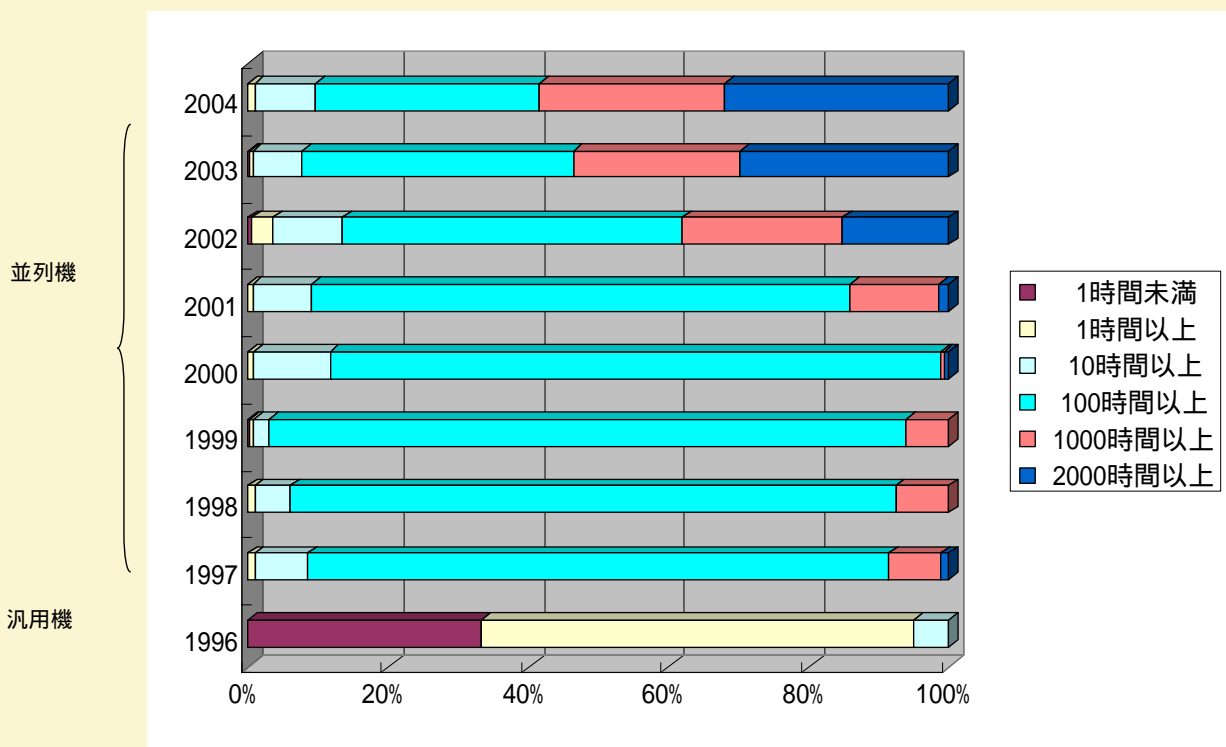




## ベクトル処理用ジョブのCPU時間の分布 (%)



## 並列コンピュータのジョブのCPU時間の分布 (%)



## ●●● | 2. 現在のセンターにおける課題

1. システムの性能(処理能力)  
処理能力を使いきっている。(処理能力の不足)  
慢性的な残ジョブ  
将来の利用予測に答えられない
2. 安定した運用  
利用が飽和状況 (負担金収入の増収?)  
運用経費の定常的な確保  
(光熱水料、スペース)  
レンタル料の維持 (運営交付金)  
支援スタッフの確保

15

## ●●● | 3. 計算機センターの将来像について

センターの役割  
—質的と量的面での優位性の保持—

### 最高の支援環境の構築

最高速のシステムの導入

省エネルギーシステム

省スペースシステム

利用環境の整備

利用者の高度な支援

教育、プログラミング支援

安心、安全なシステムの構築

### 地域的に分散したセンター

研究拠点としての責務の遂行

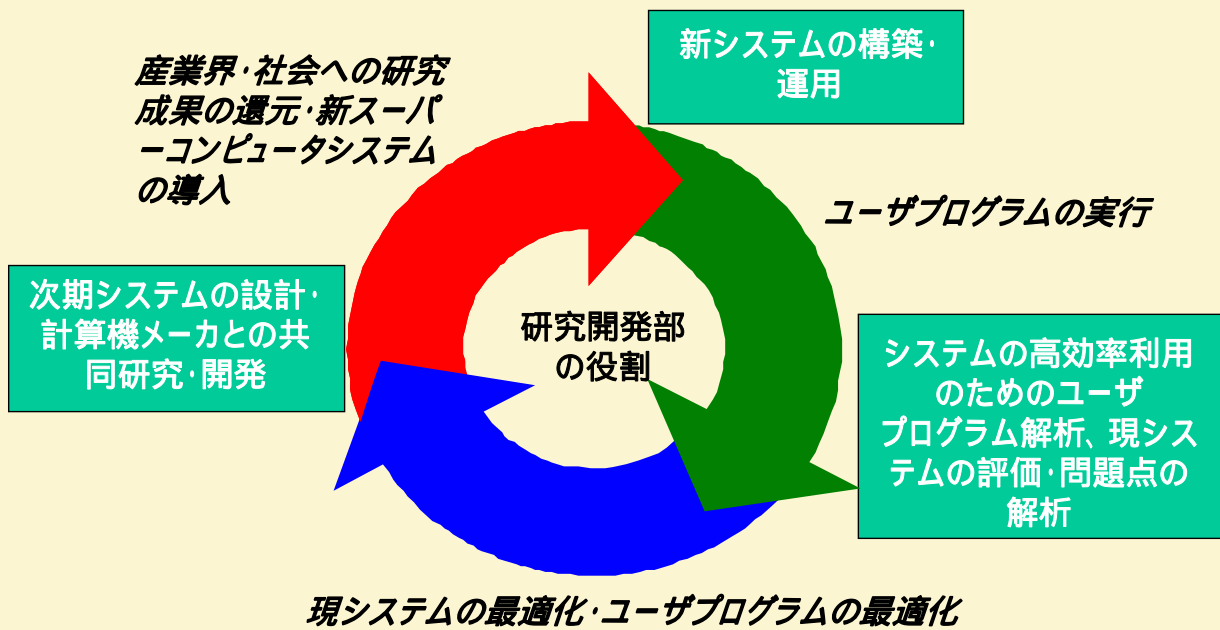
研究活動(特徴のある、得意とする分野)

人材育成

16

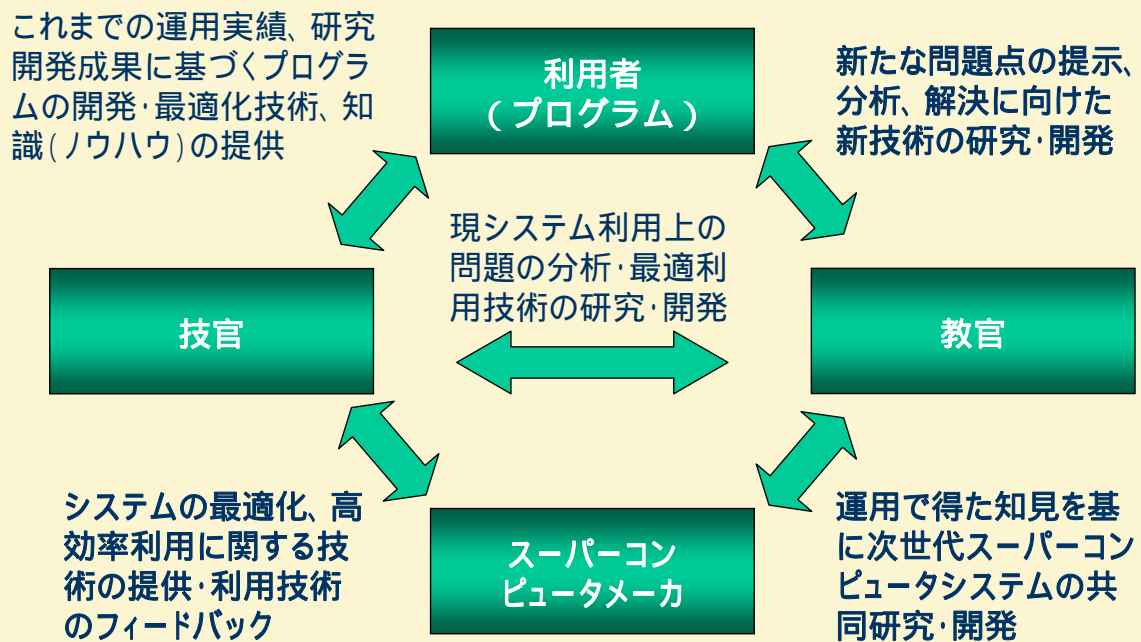


## 情報シナジーセンターにおける スーパーコンピューティング研究・開発サイクル



17

## 研究開発体制



18



## 特徴ある活動例

### 高速化支援 成果例(SX-4)

年	1997	1998	1999	2000	2001	2002
件数	2	8	8	9	10	7
単体性能向上比	1.9	46.7	4.5	2.5	1.6	2.2
並列性能向上比	11.1	18.4	31.7	8.6	4.9	2.8

性能向上比はオリジナルを1としたときの性能倍率

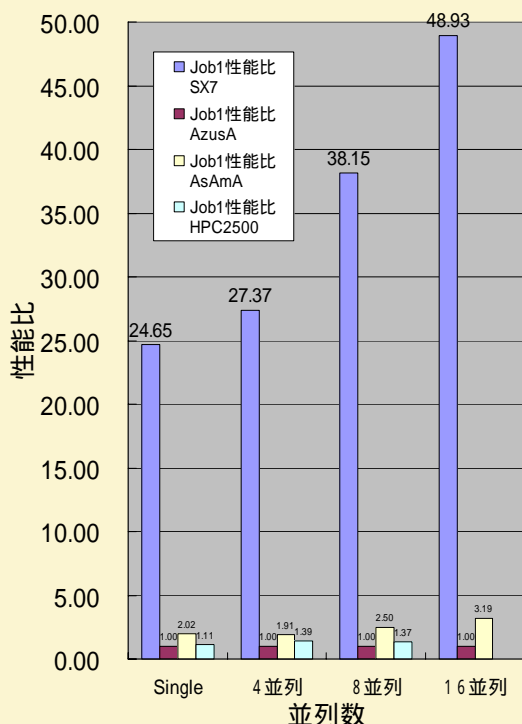
2003年はSX-7において18件の高速化支援を行い、単体性能で1.26倍から41.3倍(平均6.7倍)、並列性能で1.4倍から118.23倍(平均18.6倍)を達成

- 高速化推進研究活動報告書  
第1号(2001)、第2号(2003)

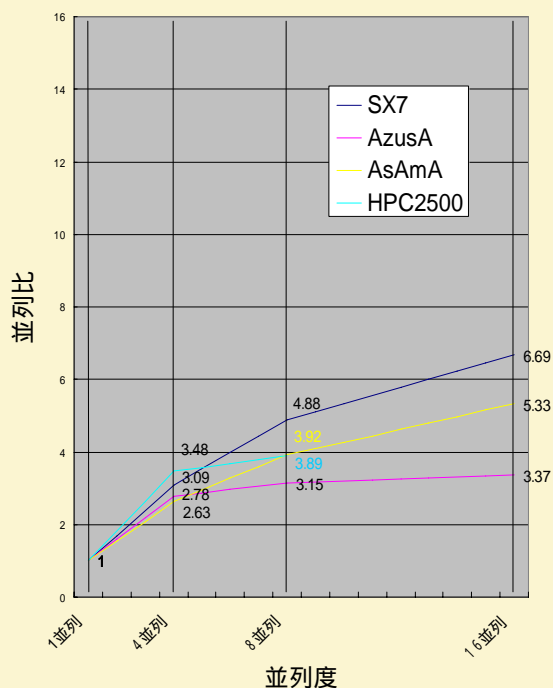


## ユーザプログラムによる性能比較(1)

[job1] AzusAを1とした性能比



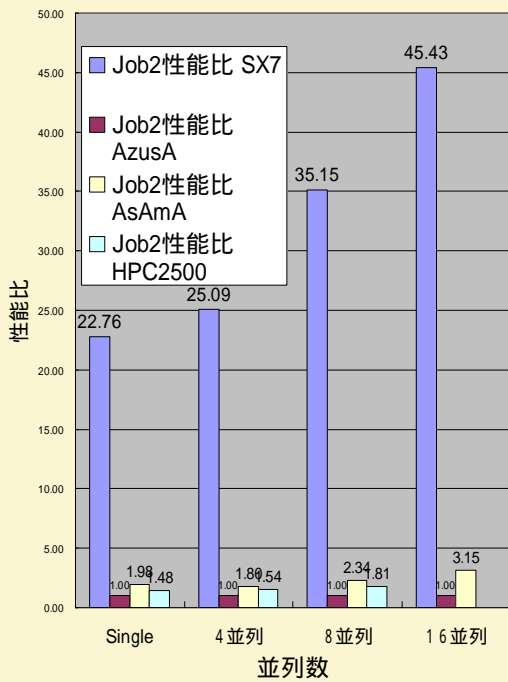
[job1] singleを1とした並列比



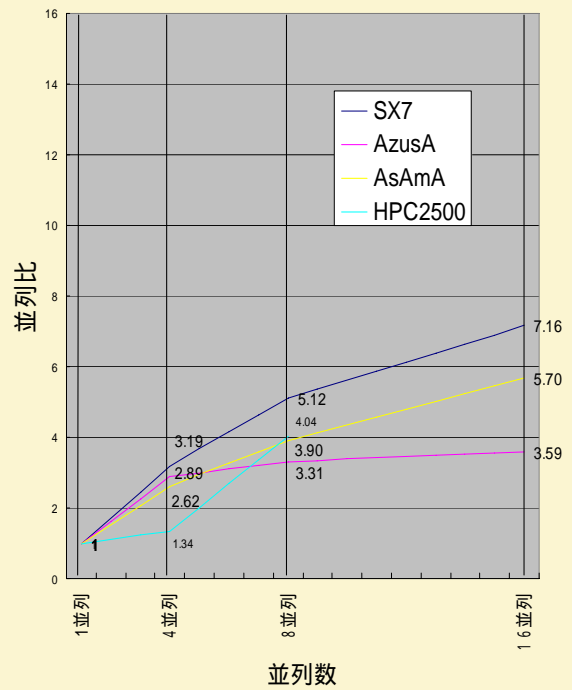


## ユーザプログラムによる性能比較(2)

[job2] AzusAを1とした性能比

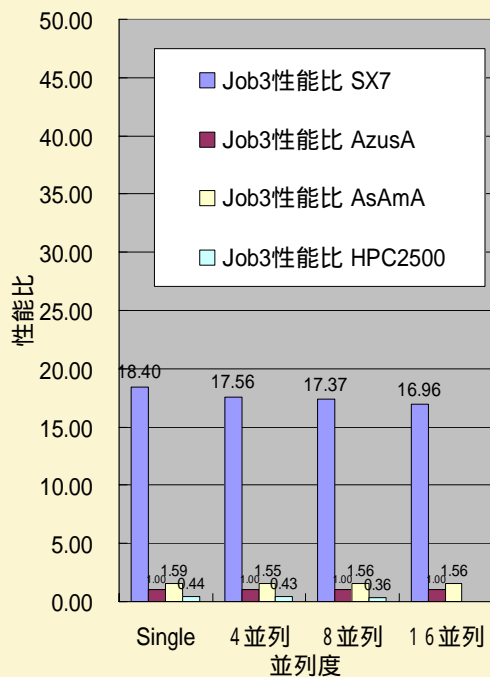


[job2] Singleを1とした並列比

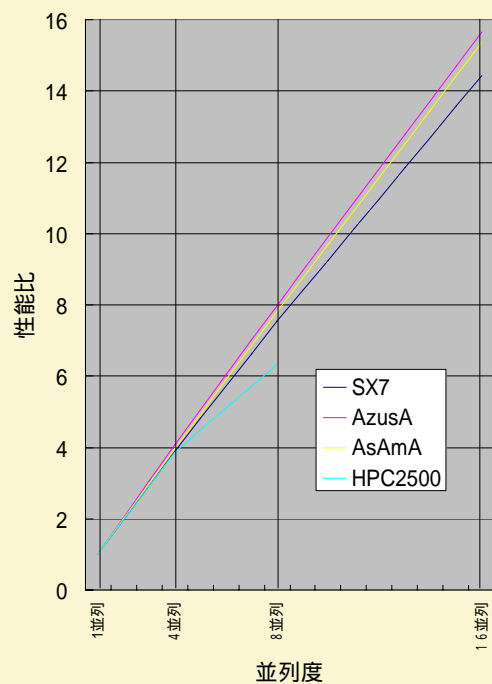


## ユーザプログラムによる性能比較(3)

[job3] AzusAを1とした性能比



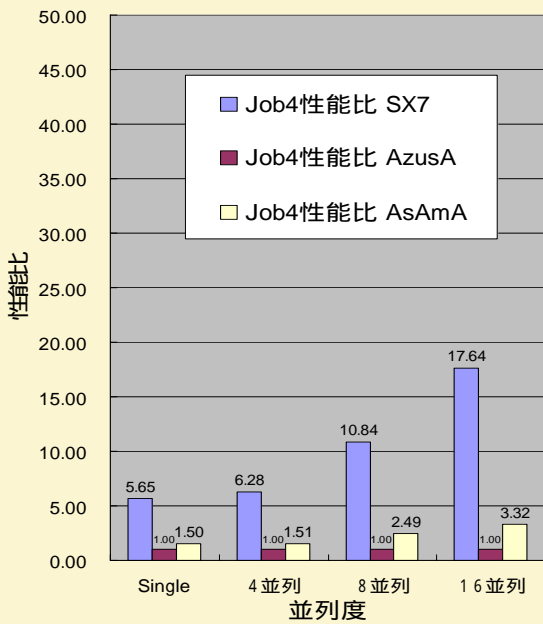
[job3] Singleを1とした並列比



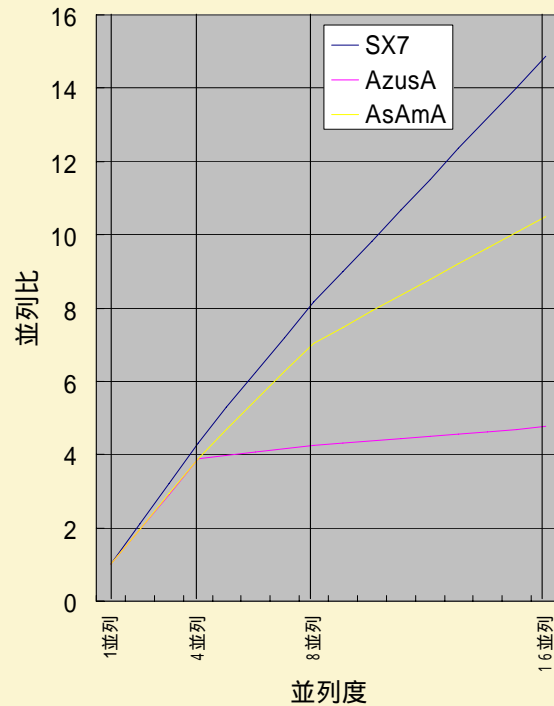


## ユーザプログラムによる性能比較(4)

[job4] AzusAを1とした性能比



[job4] Singleを1とした並列比



## 特徴ある活動例

### SX-7のHPCCによる評価

2004年11月のTop 10 List [www.top500.org](http://www.top500.org)

Top 500のうち、294が商用部品を応用したクラスタ型

	Manufacturer	Computer	Rmax [TF/s]	Installation Site	Country	Year	#Proc
1	IBM	BlueGene/L β-System	70.72	DOE/IBM	USA	2004	32768
2	SGI	Columbia Altix, Infiniband	51.87	NASA Ames	USA	2004	10160
3	NEC	Earth-Simulator	35.86	Earth Simulator Center	Japan	2002	5120
4	IBM	MareNostrum BladeCenter JS20, Myrinet	20.53	Barcelona Supercomputer Center	Spain	2004	3564
5	CCD	Thunder Itanium2, Quadrics	19.94	Lawrence Livermore National Laboratory	USA	2004	4096
6	HP	ASCI Q AlphaServer SC, Quadrics	13.88	Los Alamos National Laboratory	USA	2002	8192
7	Self Made	X Apple XServe, Infiniband	12.25	Virginia Tech	USA	2004	2200
8	IBM/LLNL	BlueGene/L DD1 500 MHz	11.68	Lawrence Livermore National Laboratory	USA	2004	8192
9	IBM	pSeries 655	10.31	Naval Oceanographic Office	USA	2004	2944
10	Dell	Tungsten PowerEdge, Myrinet	9.82	NCSA	USA	2003	2500



## ●●● | スーパーコンピュータの性能を決める要素

- 演算性能:
  - 単位時間あたり、何回計算できるか
- メモリ性能:
  - 単位時間あたり、どれだけのデータを演算器とメモリの間でやり取りできるか
- ネットワーク性能
  - CPU間で単位時間当たり、どれだけのデータをやり取りできるか

高性能・高効率スーパーコンピュータは、演算、メモリ、ネットワークに関してバランスの取れた性能を持つ必要がある。

25

## ●●● | ベンチマークによるスーパーコンピュータ評価の取り組み (目的)

- **スーパーコンピュータ・スーパーコンピューティングに関する研究・開発能力の確認**
  - 長年のスーパーコンピューティングに関する研究開発成果の蓄積
  - 産学連携の研究開発の重要性
- **スーパーコンピュータはどう評価されるべきか**
  - スーパーコンピュータの研究開発において、Top500を盲目的に信じることの危うさ
    - 先端科学が必要とする高精度大規模シミュレーションで性能が発揮できないスーパーコンピュータシステムを量産？
  - 2002年以降、東北大のTOP500への不参加
- **市場性重視だけのスーパーコンピュータ研究開発に対する警鐘** としたい
  - 国による高性能・高効率スーパーコンピュータシステム研究開発の継続的な支援の必要性

26

# 米国のHPC戦略と、新ベンチマーク開発の背景

## 米国 HPCS (High Productivity Computing System)



- DoD/DARPA主導
- 2010年を目標に、経済性、運用性に優れた高実効性能のHPCの開発 → 新しいアーキテクチャの開発

### [スケジュール]

- ・ Phase Industry Concept Study (2002年～2003年)
  - Cray、IBM、SUN、HP、SGIによる提案 [完了]
- ・ Phase R&D (2003年～2006年)
  - Cray "Cascade" \$43.1M/3年 <http://www.cray.com/products/programs/cascade/index.html>
  - IBM "PERCS" \$53.3M/3年 [http://www.research.ibm.com/resources/news/20030710\\_darpa.shtml](http://www.research.ibm.com/resources/news/20030710_darpa.shtml)
  - SUN "Hero" \$49.7M/3年 <http://www.ncsc.org/casc/meetings/CASC2.pdf>
- ・ Phase Full Scale Development (2006年～2010年)
  - 実効1Peta Flops (ベンダは最大2社:未定)

新アーキテクチャに関して、従来からのTOP500番付け(Linpackベンチマークにもとづく演算性能指標)に対して、より総合的なProductivity評価の方式が必要に ひとつの試みとして、HPC Challengeベンチマークを発案

27

## Linpack一辺倒を排して、新ベンチマークへ

米国において、LINPACKの問題点をカバーし、実用アプリケーション性能での比較に近いベンチマークプログラム模索に着手

### HPC Challenge (HPCC) ベンチマーク

- HPCSプログラム(2010年)の目指す「高生産性コンピュータシステム」の性能評価を狙った新ベンチマーク
- LINPACK開発者のJack Dongarra博士(テネシ-大学)を中心に開発中
- 米国政府から資金援助
  - DARPA(国防総省 高等研究計画局)
    - HPCSプログラムからの助成
  - DOE(エネルギー省)
  - NSF(全米科学財団)
- 右の7つのベンチマークで構成される(各ベンチマークの重み付けは規定されず、LINPACKのような総合ランキングはなし)

#### HPL:

- LINPACK TPPベンチマーク(連立一次方程式の求解性能測定)

#### DGEMM:

- 倍精度実数の行列積の演算性能測定

#### STREAM:

- メモリバンド幅の測定

#### RandomAccess:

- メモリのリストアクセス性能の測定

#### PTRANS:

- プロセッサ間通信性能の測定

#### FFTE:

- 倍精度一次元複素数離散フーリエ変換の演算性能測定

#### beff:

- 通信のレイテンシとバンド幅の測定

28

# HPC Challenge (HPCC) ベンチマーク

## 1) Linpack以外の本格的なベンチマーキング

→ Linpackによる演算能力(FLOPS)計測に加えて、メモリバンド幅およびネットワーク性能、基本カーネル性能(行列積)を含み、実際のアプリケーションを意識した、多面的な計測指標を提供(7カテゴリ、28の詳細項目から構成)

<http://icl.cs.utk.edu/hpcc/>

## 2) 2003年11月(IEEE/SC2003スパコン会議)における提唱後、わずか1年で、主要HPCサイト、ベンダからの性能登録が進行

~ Cray X1, IBM Power3,4,4+,5, SGI Altix(Itanium, Itanium2), SUN, Opteron/Xeon Clusterなど(49件)

\* 2004年11月に地球シミュレータを凌駕してLinpack1位となったIBM BlueGeneは、未登録

## 3) 単一の総合指標を持たず、対象機の最大性能(演算、メモリ、ネットワーク)に依存して評価が変動する項目がある等、やや難解な面もあるが、急速に普及中

29



## 4. ペタフロップス超スーパーコンセンターとの 計算機センターのあるべき姿

基本的にジョブはジョブ数は膨大  
サイズは長大規模から小規模まで存在



わが国としてバランスの取れた  
利用体系の確保

### 役割分担

#### 超スーパーコンピュータセンターシステム:

超大規模システムならではの利用(超大規模ジョブについて効率的に処理担当)

限られた利用者の利用(でない、システムの特徴が発揮するには必須)し、研究成果を上げることを目的

想定されるシステム: 利用目的に即し開発されるシステム

#### 情報基盤センター等スーパーコン:

超大規模ジョブ以外の担当、不特定多数の利用者に利用環境を提供

想定されるシステム: 超スーパーコンピュータが商用化された実用機レベル

30





## ベクトル型スーパーコンピュータの新たな利用計画

研 究 課 題	2004年度	2005年度
電磁波との共鳴による電子加速シミュレーション	30,000時間	33,000時間
気候モデルの高速化	45,000	50,000
プレート境界面におけるすべりの数値シミュレーション	35,000	40,000
超大規模流体計算法	45,000	50,000
超広帯域アンテナの設計	60,000	65,000
地雷探査地中レーダの開発	45,000	50,000
大規模系の電気伝導特性の解析	65,000	70,000
電磁・音響と熱伝搬のシミュレーション	25,000	25,000
円管流・渦度輸送方程式の解の一意性	30,000	33,000
気液二相流れと熱伝達のシミュレーション	25,000	27,000
矩形ダクト内の3次元熱流動シミュレーション	20,000	20,000
小 計	425,000時間	463,000時間
年伸び率6.86%での年間処理時間	1,932,464	2,065,058
合 計	2,357,464時間	2,528,058時間

2005年度(平成17年度)には現行能力の1.4倍以上の処理能力が必要

31



## スカラ並列型コンピュータの新たな利用計画

研 究 課 題	2004年度	2005年度
有機分子の立体配座の分子軌道計算	75,000時間	90,000時間
DNAの振動スペクトルならびに水素結合効果	60,000	80,000
色素分子の構造および電子状態の解析	80,000	90,000
宇宙航空機の設計	75,000	85,000
有機半導体およびその界面の電子構造、振動スペクトル	70,000	80,000
テラヘルツ波発生のための新有機結晶の設計	55,000	75,000
プリント基板から放射される電磁界の解析	65,000	70,000
小 計	480,000時間	580,000時間
年伸び率87%での年間処理時間	1,461,559	2,738,023
合 計	1,941,559時間	3,318,024時間

2005年度(平成17年度)には現行システムの能力の5倍以上の処理能力が必要

32



## ● ● ● | ペタフロップス超スーパーコンセンタ-との 計算機センターのあるべき姿

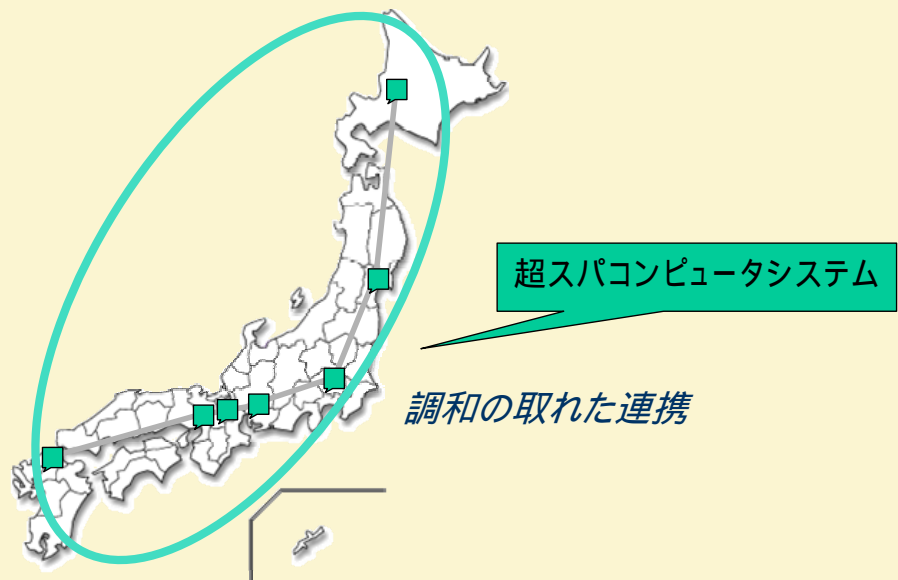
状況に応じた相互の連携、全体として効率的な運用

- 利用者支援
  - 高速化支援などは基盤センターが担当
- 計算科学技術人材育成
  - 特徴のある研究拠点の形成
- 共同利用方針(課金、セキュリティ、情報公開)

33

## ● ● ● | Capability Computing vs. Capacity Computing

生産性を高める (Short Time to Solutions) ためには  
優れたスーパーコンピュータとそれを使いこなす技術力が重要



34