

物性研究所スーパーコンピュータの歴史

計算機性能と計算物性分野の変遷

第一期(1995-2000): 物理学における計算機利用が急速に増加したのは、大型計算機の演算性能が飛躍的に向上した1980年代であろう。ベクトル演算器が導入されると「スーパー」なコンピュータ性能に皆、驚愕を覚えた。その頃から計算機は不可欠な研究手段として重視されるに至った。それだけに留まらず、計算物理という分野が実験物理と理論物理から独立した新しいカテゴリーを形成して自律的な発展を遂げていく。それに伴って、様々な研究拠点におけるスーパーコンピュータセンターの整備が進み、研究者に計算機資源が手厚く提供されていくこととなった。海外や他分野の動きに比べて我が国の計算物性科学におけるセンターの整備は遅れを取り、計算物理の分野形成の立ち遅れが顕著化してきた。この事態に危機感を感じた当時の研究者は、「物性研究のための大型計算機センター設置ワークショップ」(1987年)を開き、日本学術会議の物理学研究連絡委員会として

スーパーコンピュータ導入に向けた活動を行う(1991年)などの様々な努力を重ね、遂に1995年4月から物性研究所にセンターが発足することとなった。

1995年に導入されたのはFUJITSU VPP500/40である。これは航空技術研究所(当時)と富士通が共同開発したベクトルパラレル型と呼ばれる新方式のスーパーコンピュータであり、ガリウムヒ素LSIなどを採用した世界最高速を誇った計算機である。この計算機資源をできるだけ多くの物性研究者に配分し、しかも緊急性や重要度の高い研究課題は重点化するという基本方針を定めて全国共同利用が始まり、それが今日も継承されている。

第一期から超大規模計算が積極的に行われ、例えば常行真司氏らは第一原理経路積分法とよばれる方法で結晶珪素中の水素不純物状態を調べる等、専用のスーパーコンピュータでなければなかなか着手できない規模の大型計算を実施した。また独自の計算手法

の開発が積極的に進められることとなり、福島孝治氏らの交換モンテカルロ法などが成果として生まれた。

第二期(2000-2005): 第一期システムの導入以降、5年毎にシステムが最新のものに更新され、現在は第四期のシステム(2010年～)が導入されている。さて、初期スーパーコンピュータ導入後に起こったことは計算機のダウンサイジングである。比較的安価なPC等をネットワークで接続したクラスタ計算機が飛躍的に高速化する時期が訪れた。デスクトップスーパーコンピュータという言葉が生まれ、先進的な研究者がその利用を始めた。そのため第二期のシステム(2000年～)を導入する際、ベクトルパラレル型の計算機(system A)だけでは利用者の要求を満たすことができないと判断され、スカラーパラレル型の計算機(system B)も加えた複合システムを導入することとなった。

System Aとして導入されたのは日立製のSR8000/60 model F1で、これはベクトル機として位置づけられるものの、ソフトウェア等で疑似的にベクトル演算を達成させたものであり、CPU技術的にはスカラー計算機と考えることもできる。すなわち計算機のスカラー化がこの時に行われた。System Aは第一期に比べて計算ノード数が40から60に増加した結果、より多数の計算を同時に実行することが可能になりユーザー層の拡大に寄与した。System BとしてはSGI製のOrigin 2800が導入された。このスカラーパラレル機は384CPUから成るもの



History of
ISSP Supercomputers



であり、これを用いた大規模計算が導入当初から積極的に行われた。例えば2000年度には、藤堂眞治氏のモンテカルロ計算や大槻東巳氏らのスケーリング計算などの大規模計算が行われた。

第三期(2005-2010): 2000年頃はCPU動作周波数の著しい向上が見られた時期であり、その結果特に苦勞して並列プログラミングをしなくても容易に高速化が達成される状況であった。しかもCPUの単価が急激に下がったため、手持ちのPCクラスだけでもある程度大型計算を行うことが可能になった。その結果、センターの計算機の演算性能が相対的に低下し(すなわち陳腐化し)、利用者離れの兆候が見られるに至った。そこで第三期(2005年～)のsystem Bとしては、研究室のPCクラスで開発した計算プログラムをそのまま物性研の計算機センターで利用できるような計算機環境を提供することが望ましいとの意見が多数寄せられた。しかも計算機の陳腐化を防ぐためにできるだけ多数のCPUから構成される計算機を調達することが必要となった。そうすると問題になるのは設置場所と冷却能力であり、その確保および設備工事が困難になる。そこで共同利用計算機としては初めての試みとして、データセンターに設置してリモートアクセスする方法を取るようになった。

一方、この手のスカラーループ機は一般に、CPUの演算性能に対してデータ転送性能が低く、第一原理計算のような通信が多く発生する問題には不向き

であった。したがってまだベクトルパラレル機への需要は高かった。そのため第三期においてもsystem A,Bの2種類のハードウェアを導入することとなった。

2005年には疑似ベクトル機であるHitachi SR11000がsystem Aとして、Intel Itanium 2で構成されるSGI Altix 3700がsystem Bとして導入された。後者の計算機はスカラーループ機としてはメモリ転送能力がかなり優れた高性能機が導入された。System Bの性能が引き上げられたことは大きな意味があった。これまでsystem Aのみ利用してきた研究者(特に第一原理計算)がsystem Bもうまく使いこなせるようになり、両システムを併用して計算する人が増加したのである。計算機がsystem B一本に集約していく布石となった。

第三期は地球シミュレータ活用や京コンピュータ利用準備などが盛んに行われた時期である。並列プログラミング技法の普及が進み、大規模計算を志向する研究者が急増した。それを象徴するのは例えば、押山淳氏らの次世代スーパーコンピュータ用の大規模第一原理計算手法の開発や、大谷実氏らの物性研スーパーコンピュータや地球シミュレータを用いた反応動力学の大規模応用計算などであろう。

第四期(2010-): 第三期頃から、徐々に電気使用料の問題が表面化し、手持ちのPCクラスで計算するよりもセンター利用を志向する研究者が増加した。徐々にセンター利用者が増加し計算機利用率も高水準を記録し、利用

者離れの傾向はもはや過去のこととなった。そこで第四期(2010年～)の計算機調達としては、system Bを支柱とする一方、必要最小限の規模のsystem Aを導入して高速メモリ転送を必要とする特殊用途に供することとした。NEC SX-9(system A)およびSGI Altix ICE 8400EX(system B)が導入された。導入当初は180TFlopsというスペックはかなりのものであり、system Bは使ってもなかなかポイントが減らないと評された。

この第四期のシステムは導入当初から大規模計算が盛んに行われた。例えば、中野博生氏はsystem Bの過半数のCPUを用いた厳密対角化の計算を行った。また、京コンピュータの練習機としてsystem Bが利用され、1000CPUを超えるような大規模計算が頻繁に行われた。

2011年3月11日の東日本大震災に伴う原発事故をきっかけとして電力事情がひっ迫すると、節電のため最大半数のノードを停止させた縮退運転が行われるようになった。今まで当たり前だと思ってきた電力の安定供給に対する神話が崩れた。さらに電気料の大幅な値上げが行われるとの予想もある。その際、計算のグリーン化がますます求められることとなるであろう。すなわち電力使用量の小さな計算機をいかに巧みに利用して成果をあげるかがこれからの鍵となり、第一期からの鍵であった並列化に代わる課題として今後対峙することになると考えられる。その時代にはどのような種類の計算が発展を遂げるのであろうか。

スパコン運用実績データ

東京大学物性研究所では、1995年に初めてスーパーコンピュータが導入されてから現在にいたるまで、物性研究コミュニティのための計算資源を安定的かつ継続的に提供している。システムは高い稼働率と利用率を維持しており、関連論文も継続的に出版され続けている。

東京大学物性研究所(以下物性研)では、物性研究のための大規模計算資源への要望の高まりに応える形で、1995年に物性研初代スーパーコンピュータ、Fujitsu VPP500/40を導入、運用を開始した。当初から無料で物性研究コミュニティに、公正かつ効率的に計算資源を配分するため、計算時間の上限を設定した課題クラスA,B,C(それぞれ計算時間小、中、大)を設けた。これらの課題は年に二回(前期、後期)に申請を受け付けているが、緊急に大きな計算資源を必要とする課題はDクラスとして随時申請を受け付けている。これらのクラス別課題採択数の推移を見ると、スパコン運用開始当初はクラスA, Bの比較的小規模な課題申請が多かったが、その後Cクラスの割合が増え続けている。ここから物性コミュニティのユーザが、より大規模な計算を志向していることが窺える。

物性研究の中でも、計算手法によりベクトル型の計算機に向く手法とスカラー型の計算機に向く手法がある。物性研はそのどちらのニーズにも対応するため、2000年度からシステムA(ベクトル型)とシステムB(スカラー型)に分けて二種類の計算資源を提供している。その後、計算機の稼働率は常に90%を超えており、これは物性研のシステムが高い安定性を持った、信頼性の高い計算資源であることを示している。

利用率(稼働時間中に計算資源が使われた割合)は、2005年のシステムが導入されてからはおおむね80%を超え、計算資源がユーザによって有効に使われていることがわかる。なお、2010年度に稼働率がやや低下しているのは、2010年の7月から運用を開始した新システムが、2011年3月に発生した東日本大震災の影響を受けた

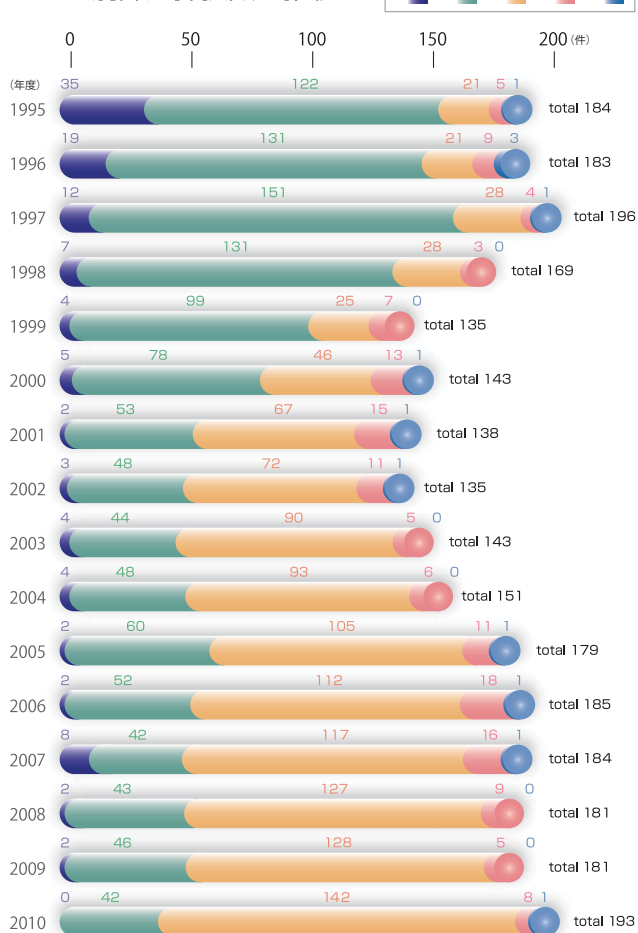
ものである。震災当日、システムは加速度計による緊急システムが作動して緊急停止し、火災も発生せず、水冷システムの水が漏れだすこともなかった。はからずも通常時の安定運用性だけでなく非常システムも信頼できることが判明したわけだが、二度と緊急システムが動作することのないよう祈るばかりである。

物性研スパコンは利用者に無料で提供されているため、毎年利用報告書の提出、及びスパコンを利用して得られた成果が論文として出版される際には謝辞に

物性研のスパコンを利用したことの明記を義務づけている。利用報告書は、数編の招待論文と共にActivity Reportとしてまとめられ、毎年発行されている。関連論文は500編前後出版されており、物性研スパコンが物性研究の発展に大きな貢献をしていることがわかる。

今後も物性研は計算資源を安定的に、かつ使いやすい形で物性コミュニティに提供するために努力を続けていく。ユーザの皆様は是非有効に活用し、素晴らしい成果を挙げてほしい。

クラス別課題採択数の推移



スパコン運用実績

