

# HA8000 クラスタシステム 512 ノードサービス採択課題（第一期）について

## 1. はじめに

東京大学情報基盤センターでは、HA8000 クラスタシステムを用いた大規模計算の利用支援、次世代スーパーコンピュータ利用への橋渡し、利用者の育成などを目的とし、2010 年度より、512 ノードサービスを開始いたしました。

2010 年度に行う 512 ノードサービスの概要と、採択課題（第一期：2010 年 6 月～9 月）が決定しましたので、簡単にご紹介いたします。

## 2. 512 ノードサービスの概要

### (1) 対象・目的

512 ノードサービスでは以下のような「High-Performance Computing」に関連した幅広い分野の研究を対象としています。

- \* 大規模シミュレーション
- \* 大規模データ処理
- \* 大規模ベンチマーク、演算・通信システム性能評価
- \* その他、大規模計算に関するソフトウェア実行

但し、512 ノードサービスの対象は「最大 512 ノード (8,192 コア)」を使用する大規模計算を実施する研究に限定します。申込者及び研究グループのメンバーは、国内外の並列計算機を利用した大規模計算に実績があることを前提としています。

また、課題は公募制とし、センター外部からの審査委員も含む審査委員会による審査、選定を実施します。年 3～4 回課題を募集し、各月に 1 グループ採用を原則とします。2010 年度は以下の 3 回の募集を予定しています（申込状況によっては変更の可能性があります。詳細は、本センター Web Page<sup>1</sup> を参照して下さい）。

表 1. 2010 年度課題募集（予定）

実施時期	募集締切	審査	採択通知
2010 年 6～9 月	2010 年 5 月 7 日 (金)	2010 年 5 月中旬	2010 年 5 月下旬
2010 年 10～12 月 (3 回分の募集)	2010 年 9 月 10 日 (金) 午後 5 時【必着】 (予定)	2010 年 9 月中旬	2010 年 9 月下旬
2011 年 1～3 月 (3 回分の募集)	2010 年 12 月 10 日 (金) 午後 5 時【必着】 (予定)	2010 年 12 月中旬	2010 年 12 月下旬

### (2) 応募資格

申込者、研究グループのメンバーは、本センター利用有資格者（国内の大学、公共機関、企業に所属する学生、研究者）でなければなりません。また、申込者は「国内の大学、公共機関に所属する研究者」に限定します。また、当センターのユーザーである必要はありません。

### (3) 要件

- ① 実施期間（2010 年度）は 2010 年 6 月～2011 年 3 月の間とします。
- ② 「512 ノードサービス」で得られた成果を発表する場合は、「T2K オープンスパコン（東大）」を利用した

<sup>1</sup> 「HA8000 クラスタシステム 512 ノードサービス」  
[http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/use\\_info/512node/](http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/use_info/512node/)

ことを明記し、当「512 ノードサービス」によって実施したことをプロジェクト番号とともに明記してください。

- ③ 「512 ノードサービス」で得られた成果は当センター（スーパーコンピューティング部門）広報誌「スーパーコンピューティングニュース」に投稿していただきます。
- ④ 当センターの主催、共催するセミナー、ワークショップ等でご発表いただく場合があります。
- ⑤ 「512 ノードサービス」実施後に、所定の様式に従って実績報告書（研究成果の概要、外部発表リスト等）を提出していただきます。
- ⑥ 「512 ノードサービス」で得られた成果を学会、論文等で発表された場合は、速やかに（⑤とは別に）、別刷り、コピー等を、本センター宛提出をお願いいたします。
- ⑦ 利用料金は無料です。

### 3. 採択課題について

512 ノードサービスの課題募集については、年複数回行うこととしております。第 1 回の課題募集として、2010 年 3 月 30 日に募集を開始し、5 月 7 日に締め切りました。応募された課題は 5 件でした。課題採択委員会による厳正な課題審査の結果、応募してきた全課題について採択することとなりました。

#### 採択課題一覧

課題名	流体解析ソフトウェア FrontFlow/blue ver.6.0 の大規模ベンチマークテスト
代表者名（所属）	加藤千幸（東京大学生産技術研究所革新的シミュレーションセンター）
<p>東京大学生産技術研究所・革新的シミュレーション研究センターでは、流体解析ソフト FrontFlow/blue (FFB) を開発している。ここでは、100 万コア規模の計算機リソースを用いた 1,000 億点規模の大規模解析を視野にいれ開発を進めている。既に、大規模解析を実現するための要素技術の開発は終了しており、これらの要素技術が含まれた FFB の最新バージョン(FFB ver.6.0)を平成 22 年 6 月に公開する予定である。本研究開発では、8,192 コアを用いて 10 億規模のベンチマークテストを実施し、ソルバーの並列性能を評価するとともに、大規模データハンドリングにおける課題を抽出する。</p>	

課題名	電磁流体コードによる宇宙天気シミュレーション性能測定
代表者名（所属）	深沢圭一郎（九州大学宇宙環境研究センター）
<p>宇宙空間はプラズマに満ちており、そのプラズマダイナミクスをシミュレーションにより研究することを目的としている。宇宙プラズマはブラソフ方程式により記述されるが、地球磁気圏のようなグローバルな構造に注目する場合、電磁流体 (MHD) 近似が成り立ち、MHD 方程式によってその構造はよく表される。MHD シミュレーションは現在宇宙天気と呼ばれる宇宙環境を理解、予測する研究の中核を成している。今までに限定的ではあるが、512 ノードを利用し、MHD コードの基本的な性能測定を行い 13.5%の実効性能 (10TFlops) を得ている。本課題では、その結果を用いて、strong scaling、また 1 万に近いコアを Flat MPI で並列化させ分散 I/O を行った場合の動作確認、性能評価を行う。また次世代コードであるブラソフコードにおいても同様の性能評価をおこなう。これらの結果は次世代超並列計算機にける宇宙天気シミュレーションの基礎となることが期待される。</p>	

課題名	密行列固有値解析の大規模並列化のための通信性能評価
代表者名（所属）	大島聡史（東京大学情報基盤センター）
<p>次世代スーパーコンピュータのコア数が数万～数十万に達することを考慮すると、数千コア規模の MPI 性能を測定することは急務である。一方、タンパク質の高精度構造解析シミュレーションにおいては、比較的小規模の密行列の対称実数固有値問題の全固有値、全固有ベクトルが必要となる場合がある。そこで本提案では、固有値解析のピュア MPI プログラムが大規模並列化した際に、タンパク質構造解析アプリケーションなどへ及ぼす影響を分析することを目的とする。そのため、Intel MPI Benchmark を用いて、基本的な MPI 関数について 512 ノード (8192 並列実行) 時の性能評価を行う。また、小規模行列用超並列環境向け固有値 ソルバ ABCLib_DRSSSED においても、小規模行列の超並列実行時を想定し、512 ノード (8192 並列実行) 時の性能評価を行う。これらの性能を分析し、将来きたるべき大規模並列実行に備えた性能評価とアルゴリズム改良へのフィードバックを行うことを目的とする。</p>	

課題名	超並列計算によるマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション
代表者名 (所属)	久田俊明 (東京大学新領域創成科学研究科)
<p>当研究チームでは、細胞イオンチャンネルや収縮タンパクの数理モデルから出発し有限要素法でモデル化された心室の収縮、血液の拍出に至る現象を一貫して再現できる国際的にも突出した心臓シミュレータ、<b>UT-Heart</b> の開発を行ってきた。一方、有限要素法に基づく心筋細胞も並行して開発し、両者を組み合わせることでシームレスなマルチスケール・マルチフィジックスシミュレータを開発中であり、最終的には次世代スパコン上での数十万個の細胞を用いたマルチスケールシミュレーションを実施することを目指している。これまでに、規模を縮小した心臓モデルと細胞モデルにより、最大 8000 コアを用いたマルチスケールシミュレーションを実施し、非常に良好なスケーラビリティを得ており、ペタコンキラーアプリの第 1 走者に選ばれている。最終的に、より高精度なシミュレーションを行なうことにより、基礎医学や創薬への貢献が可能であると考えている。</p>	

課題名	酸化チタンと金属材料の界面構造の電子状態
代表者名 (所属)	大野隆央 (東京大学生産技術研究所)
<p>酸化チタン (<math>\text{TiO}_2</math>) は、抵抗変化メモリ、色素増感太陽電池、光触媒など応用範囲が広く、また自然界に豊富に存在する物質であり、省エネルギー・省稀少資源の観点からも利用がすすむと期待される材料である。<math>\text{TiO}_2</math> と金属との界面特性、欠陥や金属などの不純物の挙動、表面構造と吸着分子の構造安定性の関係、触媒機能発現機構など様々な課題の原子論的解明がのぞまれる。そのためには、1 万～10 万原子規模の系をつくって量子論に基づいた高精度な第一原理計算を行う必要がある。次世代並列計算機では 10 万ノード規模の並列計算が可能であるが、こういった計算を効率的に行うためには、計算プログラムもそれに対応した新しい並列化法の実装が必要となる。われわれは既存の第一原理分子動力学法プログラム PHASE に多次元並列化法の実装を行っている。その効率検証と精度の検証、さらなるチューニングを目標とし、<math>\text{TiO}_2</math> と金属材料の 1 万原子規模の界面構造をつくり電子構造計算を行う。</p>	