

1. はじめに

東京大学情報基盤センターでは、2012 年 4 月 2 日 (火) 10:00 より FX10 スーパーコンピュータシステムの試験運転を開始しました。FX10 スーパーコンピュータシステムは、4,800 の計算ノード(76,800 コア)を有するシステムで、試験運転期間中に、この最大ノード数を最大 2 日間・占有利用して行う「大規模 HPC チャレンジ (試験運転期間中)」サービスを実施することとなりました。

大規模 HPC チャレンジ (試験運転期間中) のサービス概要と、採択課題について、以下の通り決定しましたので、お知らせいたします。

2. 「大規模 HPC チャレンジ (試験運転期間)」概要

(1) 対象・目的・利用資格

「大規模 HPC チャレンジ」では、「最大 4,800 ノード (76,800 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の実績があることを前提とし、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。

ただし、ソフトウェアベンダ開発ソフトウェアを利用するなどの利用ではなく、自作プログラム、オープンソースプログラムを利用した課題に限定いたします。

- ・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、大規模計算に関係するソフトウェア実行

また、課題は公募制とし、センター外部からの審査委員を含む課題審査委員会による審査、選定を実施します。試験運転期間の 3 ヶ月間で 6 課題 (各月 2 課題) を募集します。採択課題は、48 時間、4,800 ノードを占有利用することが可能です。

表 1. サービススケジュール (予定)

実施時期	募集締切	審査	採択通知
2012 年 4 月 23 日 (月) 9:00 ~ 4 月 27 日 (金) 9:00	2012 年		
2012 年 5 月 21 日 (月) 9:00 ~ 5 月 25 日 (金) 9:00	3 月 12 日 (月)	3 月中旬	3 月下旬
2012 年 6 月 25 日 (月) 9:00 ~ 6 月 29 日 (金) 9:00	10:00 【締切】		

(2) 要件

- ① 「大規模 HPC チャレンジ (試験運転期間)」により得られた成果については公開して頂きます。
- ② 成果公開には「FX10 スーパーコンピュータシステム」の利用、「大規模 HPC チャレンジ」制度によって実施した旨を明記していただきます。
- ③ 「スーパーコンピューティングニュース」への成果報告記事の執筆、査読付国際会議への投稿 (速報) などを行っていただきます。
- ④ 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。

3. 採択課題について

「大規模 HPC チャレンジ (試験運転期間)」の課題募集は、2012 年 2 月 1 日 (水) ~ 3 月 12 日 (月) に行い、応募された課題は全てで 8 課題でした。課題採択委員会による厳正な課題審査の結果、8 課題中 7 課題について採択することとしました。

採択課題一覧

課題名	急減圧液体における気泡分布関数の数値的解析
代表者名 (所属)	渡辺 宙志 (東京大学 物性研究所)
<p>本研究プロジェクトの目的は、全粒子計算を用いた急減圧液体における気泡間相互作用の解明である。気泡を含む流体の性質の解明は工学応用上極めて重要な問題であるが、気泡間相互作用のモデル化が難しく、また提案されたモデルの妥当性の検討も不十分であった。そこで急減圧させた液相における多重気泡生成現象を全粒子計算により直接再現する。粒子数にして数百億個程度の分子動力学計算により、気泡の数にして数千から 1 万個程度の系を再現することで、連続近似した理論式との直接比較が可能となる。また、分子動力学法であらば気泡中の圧力や相関摩擦といった実験において測定が難しい物理量も直接観測が可能である。これにより、従来行われてきた力学平衡の仮定、局所平衡近似、及び輸送係数の線形応答による記述が妥当であるか調べ、さらには非平衡輸送現象の一般的枠組みの構築を目指す。</p>	

課題名	電磁流体コードによる惑星磁気圏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 情報基盤研究開発センター)
<p>宇宙空間はプラズマに満ちており、我々はそのプラズマダイナミクスを数値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。宇宙プラズマはプラソフ方程式により記述されるが、計算量が莫大なため、惑星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。</p> <p>今までに東京大学 HA8000 512 ノード、九州大学高性能演算サーバ 392 ノード、名古屋大学 FX1 512 ノードを利用し、MHD コードの大規模並列環境下での性能測定を行い、それぞれ高い実効性能を得ている。本課題では、それらの結果・経験を基に今までに行ったことの無い 4,800 ノードを利用した超大規模並列数値シミュレーションを行い、その性能測定を行う。これらの結果は今後の超並列計算機におけるリアルタイム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	2 次元フラストレート系の計算科学的研究
代表者名 (所属)	中野 博生 (兵庫県立大学 大学院物質理学研究科)
<p>$S=1$ のスピンから構成される三角格子ハイゼンベルク反強磁性体の少数スピクラスタのハミルトニアン疎行列に対して、ランチョス法の数値対角化計算を大規模並列化して実行し、スピン励起の大きさを数値的に求める。$S=1$ 三角格子反強磁性体は、近年、候補物質と見られる化合物も報告されていて、その基底状態の解明は急務の課題となっている。可能な限り大きなクラスタの計算結果を得て、熱力学極限における物性としてのスピン励起のギャップの有無は基本的な知見の一つとなる。そのために実行するランチョス法の計算では、ベクトルに行列を繰り返し演算することで得られる三重対角行列を求めるが、スピンの数が大きくなると行列次元が指数関数的に増大するため、ベクトルデータを格納するメモリコストと行列ベクトル積のループの計算コストが行列次元に比例する。この 2 種類のコストを MPI によって並列化する。行列ベクトル積を実行するには、分散格納したデータをノード間転送を適宜行いながら進めるため、並列数の増加によって転送コストが急激に増大しないように、バタフライ型転送を行うプログラムを開発したので、これを用いる。</p>	

課題名	超並列重力多体問題シミュレーションコードの性能測定
代表者名 (所属)	石山 智明 (筑波大学計算科学研究センター神戸分室)
<p>本プロジェクトでは、「京」で最適化された重力多体問題シミュレーションコード、「Greem」を後継機である FX10 上で性能評価し、「京」上で実施してきた最適化が FX10 上でも有効かどうかを検証する。また多スレッド多並列環境においての問題点を抽出し、きたるエクサスケールに備えた最適化とアルゴリズム改良のための準備を行う。</p> <p>シミュレーションコードはすでに「京」上で最大限チューニングされており、12000 ノードを用いて 45% 程度の対ピーク性能と良好なスケーラビリティが得られている。FX10 は「京」と比べて 1 ノードあたりのコア数が 2 倍となっているため、シングルスレッド部による性能ボトルネックや、通信性能への影響などの評価を行う。また逆に、FX10 での性能が「京」と比べ遜色ないものであれば、「京」から容易に移植可能な優れたシステムであると言える。</p>	

課題名	大規模グラフ処理ベンチマーク Graph500 のスケーラブルな探索手法による性能評価
代表者名 (所属)	鈴木 豊太郎 (東京工業大学)
<p>従来、スーパーコンピュータは物理シミュレーションなどの数値計算に、主に使われてきたが、大規模グラフ処理も重要なアプリケーションとなりつつある。そのような中で、スーパーコンピュータのグラフ処理性能を計測する、Graph500 という新しいベンチマークが登場し、注目を集めている。Graph500 は、大規模グラフに対する幅優先探索の速度を計測するベンチマークである。本来は、スパコンハードウェアのベンチマークであるが、アルゴリズムの選択やプログラムの最適化によって、スコアは大きく変わるので、高いスコアを出すには、計算プログラムの最適化が非常に重要となる。</p> <p>我々のチームは、Graph500 の最適な計算方法に関する研究を行っている。2011 年 10 月の行われた東工大 TSUBAME グランドチャレンジでは、1366 ノードを使った大規模実行に成功し、TSUBAME2.0 は Graph500 リストで 3 位を獲得した。現在、アルゴリズムの変更や、さらなる最適化により、性能を大幅に向上させている。我々は Graph500 リストの上位にランクインすることを目指す。</p>	

課題名	100 億超格子を用いた自動車の大規模流体解析への挑戦
代表者名 (所属)	小野 謙二 (東京大学 生産技術研究所)
<p>実設計を目指した流体解析で 100 億を超えるような超大規模計算は未だかつて実施された報告例はない。このような大規模な解析のためには、計算格子の準備や解析コード自身の計算性能、また可視化処理に至る、CFD の全プロセスにわたる大規模データ対応の課題を明らかにし、解決する必要がある。本研究課題では、超大規模解析の準備段階として、100 億のオーダーの格子を用いた解析を実施する。格子生成や演算効率、データハンドリングの点から直交格子を用いた解法を採用し、自動車まわりの流れを解析する。合理的に実施可能なパラメータを探索し、ベンチマークを実施する。結果は実験結果と比較し、精度検証を行い、提案手法の妥当性を検討する。</p>	

課題名	ポストペタスケール環境における大規模疎行列解法のための数値計算・通信ライブラリに関する研究
代表者名 (所属)	林 雅江 (東京大学 情報基盤センター)
<p>有限要素法、差分法等の科学技術計算は最終的には大規模な疎行列を係数とする線形方程式を解くことに帰着される。大規模問題向けの解法として、クリロフ部分空間法に基づく前処理付反復法が広く使用されている。並列計算においては、隣接領域境界における一対一通信と Allreduce (内積) による通信が発生し、コア数 (MPI プロセス数) の増加とともに、通信によるオーバーヘッドは無視できないものになる。本研究では、計算科学と計算機科学の両分野の緊密な協力のもとに、数値計算アルゴリズムおよび通信の両方の観点から、ポストペタスケール環境における疎行列解法の確立を目標として実施するものである。具体的には 1 対 1 通信オーバーヘッドを削減した並列前処理付共役勾配法アルゴリズムを開発するとともに、申込者の一人が開発中の Fujitsu FX10 のインターコネク트가有する RDMA (Remote Direct Memory Access) 機能に基づく Persistent Communication をサポートする MPI ライブラリを適用し、更なる最適化を図る。最終的には、これらの研究成果を数値計算ライブラリ、通信ライブラリとして FX10 利用者に公開する予定である。</p>	