

# T2Kオープンスパコン東大版の紹介

---

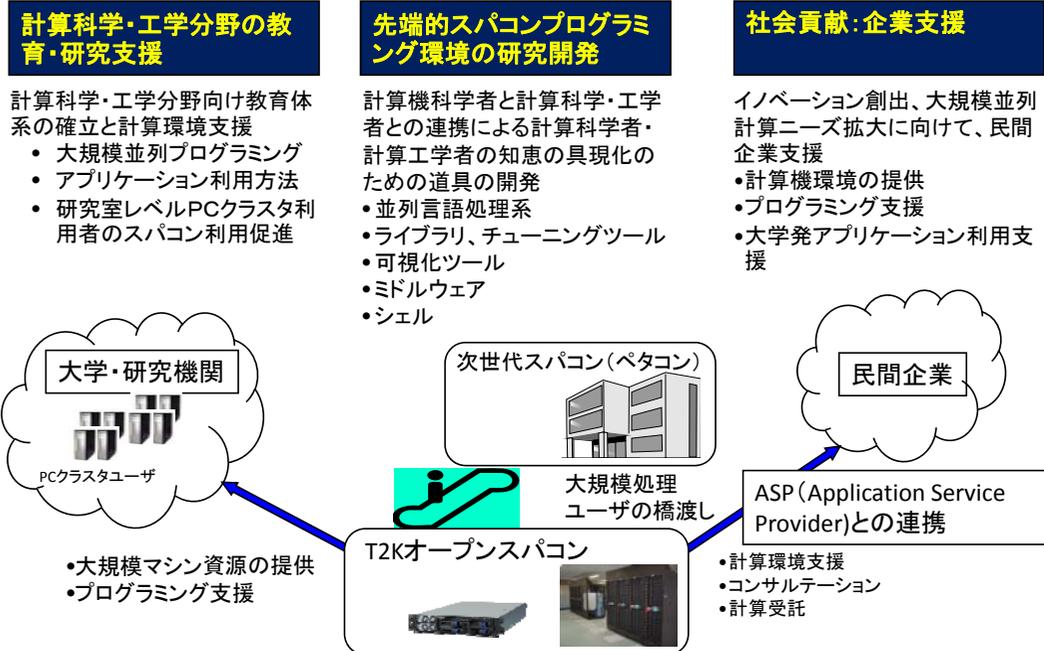
東京大学  
石川 裕

The University of Tokyo

2009/03/12

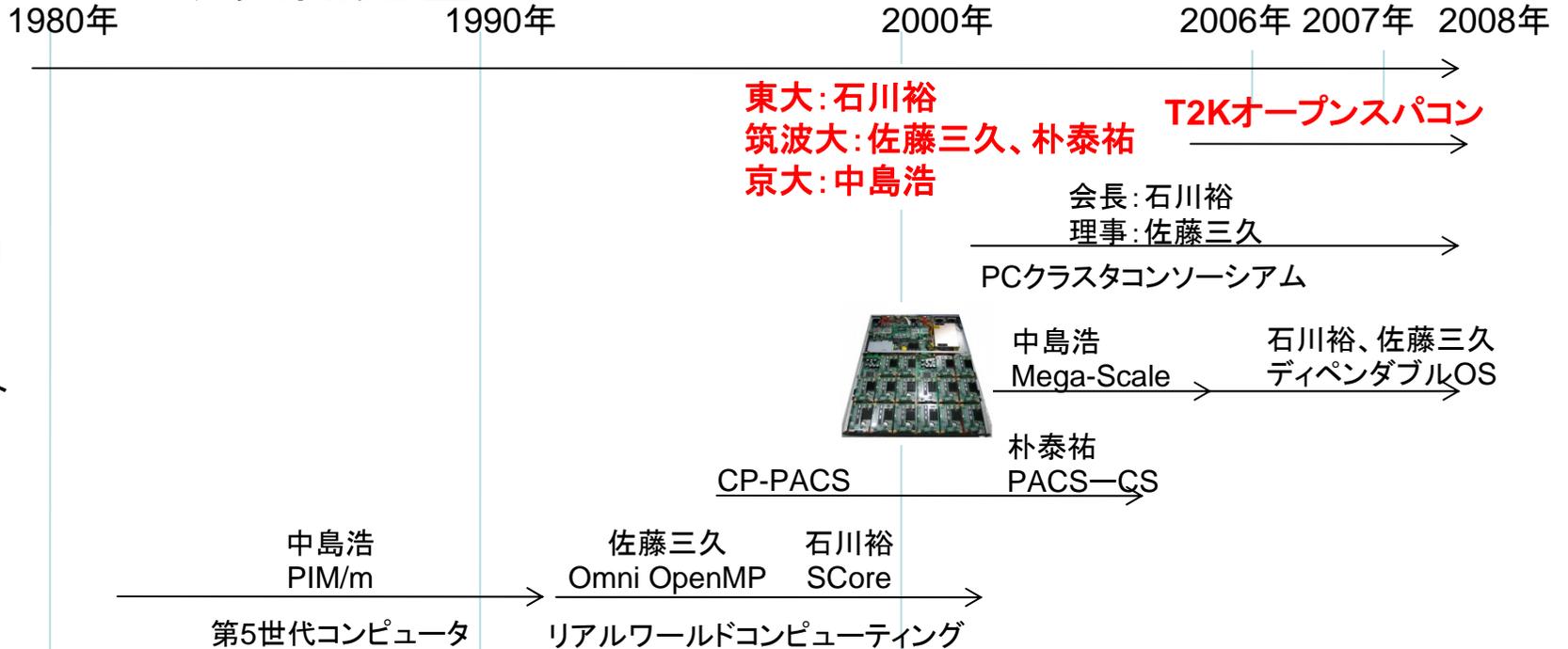
# Outline

1. T2Kオープンスパコン東大版
  - 背景
  - 概要
  - 利用状況
2. 大規模アプリケーション開発支援
3. 学際計算科学・工学人材育成
4. シームレス高生産・高性能計算機環境の研究
5. 企業支援



# 2006年： T2Kオープンスパコンアライアンス

背景：計算機科学者によるボトムアップ的アプローチ  
キーパーソンの研究開発歴



- ❑ PIM/mとは、中島が主導して研究開発を行った並列推論マシン
- ❑ Omni OpenMPとは、佐藤が主導して研究開発を行ったOpenMP処理系
- ❑ SCoreとは、石川が主導して研究開発を行ったクラスタのためのシステムソフトウェア

SCoreユーザ

(プロジェクト終了後)

理研スーパーコンバ  
 インダクラスタ



英国Streamline社による  
 SCoreクラスタ販売

PACS-CS



# T2K背景:PCクラスタユーザの現状

- 満足しているユーザ
  - 小中規模科学技術計算ユーザ
  - Embarrassingly Parallel Applicationユーザ
    - モンテカルロ手法など、並列度はあるが通信をほとんどしない計算
    - 大量のジョブを一度に実行する
- 不満を感じているユーザ
  - 性能が出ない
    - ネットワークの問題
  - 保守・維持が大変
    - よく壊れる
      - 熱設計がされていない
    - システムソフトウェアの保守
    - 電気代がかかる

大規模化への道筋

# T2K背景: 計算ニーズの多様性

- 従来スパコン応用分野
  - 超規模計算科学、超規模計算工学
  - 100テラフロップス超、数十 Tbytes超主記憶
- 新興応用分野
  - 大規模ゲノム情報処理
  - 超規模アーカイブ検索
  - コンピュータグラフィックス
- PCクラスユーザ
  - 小中規模科学技術計算
  - Embarrassingly Parallel Applications

新しい計算センターはこれらニーズを吸収するマシンが必要

# 背景：利用形態の多様性

- バッチ・インタラクティブ
  - 従来の利用形態
- WEBユーザインターフェイス
  - ポータル
- グリッド
  - データ共有、ワークフロー

# オープンスパコンの理念

- 基本アーキテクチャのオープン性
  - コモディティ高性能プロセッサを基本
    - コンピュータ市場を牽引しているコモディティ高性能プロセッサを使用することにより、最新技術を使用することにより、高性能かつ低消費電力を実現したシステムを導入することが可能
- システムソフトウェアのオープン性
  - オープンソースに基づく先端ソフトウェア技術を基本
    - 多くのユーザが使用するこれら資産をシームレスに利用できる環境を提供することにより、より多くのユーザが大規模並列処理環境へ移行することが促進できる
- ユーザのニーズに対するオープン性
  - 従来の計算センターユーザでないニーズに対して応える
    - 大規模ゲノム情報処理、大規模データマイニング

計算センターから研究室までをカバーするアーキテクチャ

# 筑波大・東大・京大の共同研究

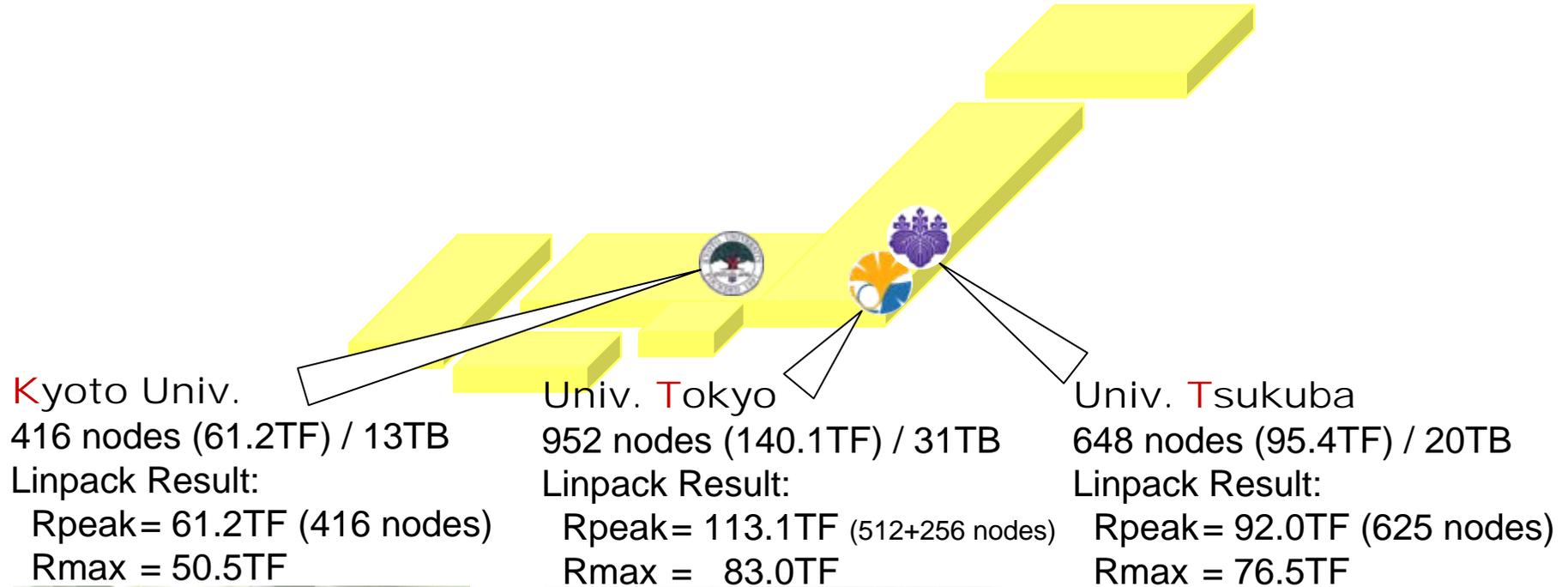
- 目的

- 2007年～2008年に出荷されるCPU技術を想定し、センタ運用できるスパコン仕様を提示
  - ハードウェア仕様
    - ノード構成
    - ネットワーク
  - ソフトウェア仕様
    - オペレーティングシステム
    - コンパイラ&プログラミング環境
    - ライブラリ
    - 商用アプリケーション

- 手法

- 現状のコモディティCPU技術の検証
- 必要とされる通信性能とその実現性の検証
- 現状のコンパイラ技術、プログラミング環境、オペレーティングシステムの検証
- 新しいタイプのユーザに対する運用方法の検討
- 共通ベンチマーク策定

# T2Kオープンスパコンラインナップ



# 東京大学情報基盤センター スパコン

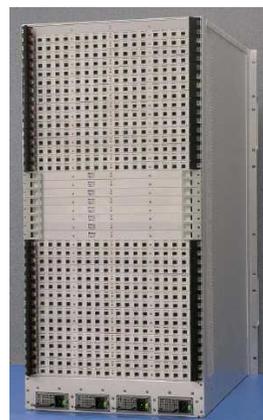
## HITACHI SR11000 model J2

Total Peak performance	: 18.8 TFLOPS
Total number of nodes	: 128
Total memory	: 16384 GB
Peak performance per node	: 147.2 GFLOPS
Main memory per node	: 128 GB
Disk capacity	: 94.2 TB

## T2K東大

## HA8000-tc/RS425 x 952

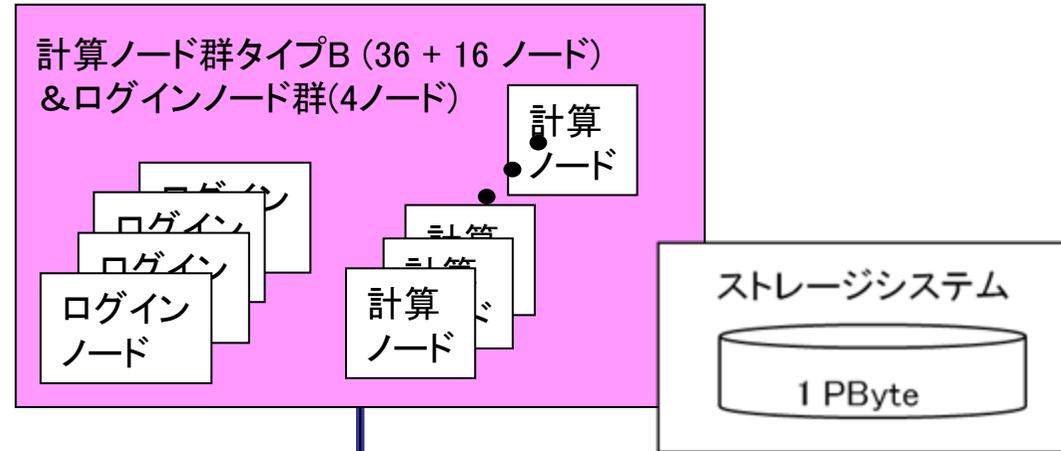
Total Peak performance	: 140 TFLOPS
Total number of nodes	: 952
Total memory	: 32000 GB
Peak performance per node	: 147.2 GFLOPS
Main memory per node	: 32 GB, 128 GB
Disk capacity	: 1 PB



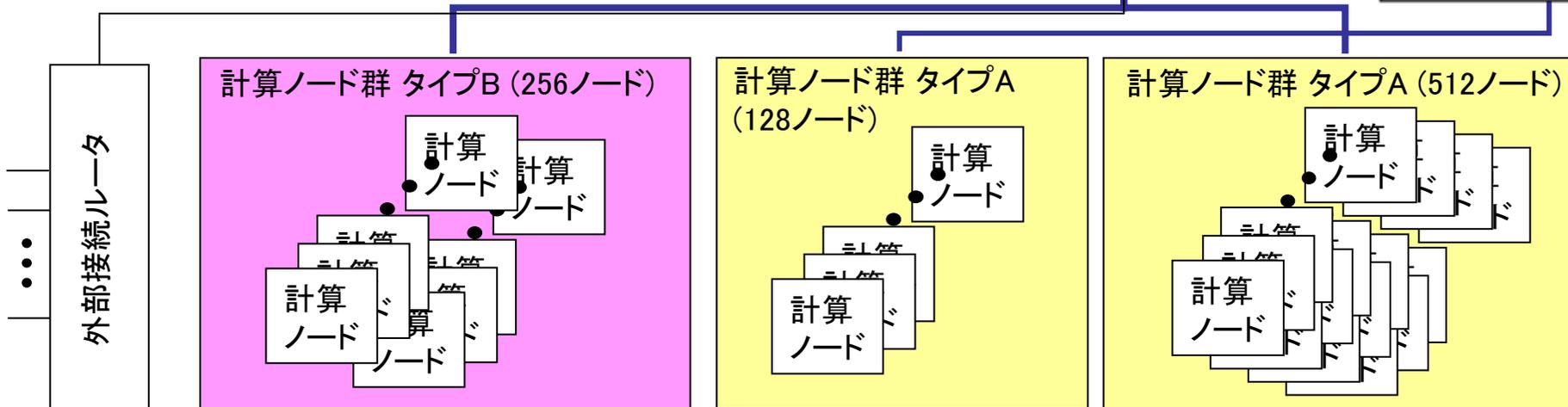
# T2Kオープンスパコン東大版 HA8000-tc/RS425クラスタ群

タイプ	ノード数	CPU数	理論演算性能 (TFlops)	総主記憶 (TB)
A	512	8192	75.366	16
	128	2048	18.841	4
B	256	4096	37.683	8
	36	576	5.299	1.2
	16	256	2.355	2

タイプA:とタイプBの違いはネットワーク性能の違い:  
 タイプA 5GB/sec (片方向通信)  
 タイプB 2.5 GB/sec (片方向通信)



ログインノード: 4台

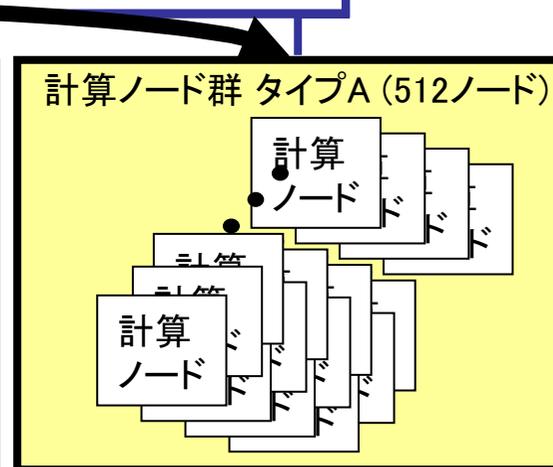
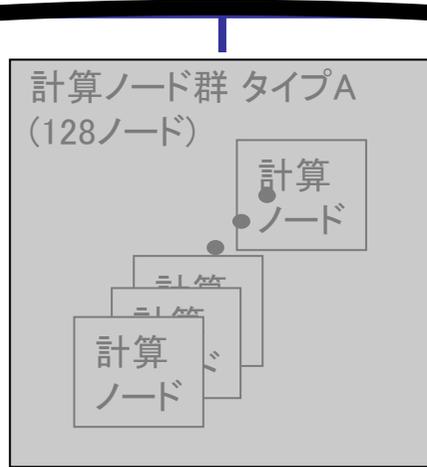
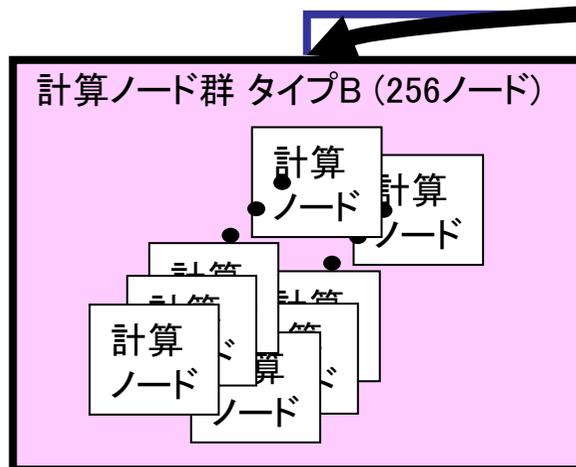
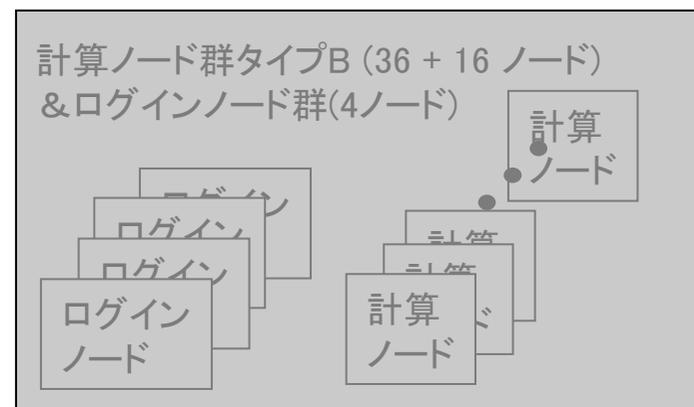


# T2Kオープンスパコン東大版 Linpack性能

- 実測値: 82.9842 TFlops
- 理論性能値:  $113 \text{ TFlops} = (256+512) * 147.2$
- 効率: 73.4 %

注: Linpack性能測定では、計算ノード群タイプA 512ノードと計算ノード群タイプB256ノードのみを使用しました

タイプ	ノード数	CPU数	理論演算性能 (TFlops)	総主記憶 (TB)
A	512	8192	75.366	16
	128	2048	18.841	4
B	256	4096	37.683	8
	36	576	5.299	1.2
	16	256	2.355	2



# T2Kオープンスパコン東大版 Linpack性能

31<sup>st</sup> TOP500 List announced in Jun. 2008

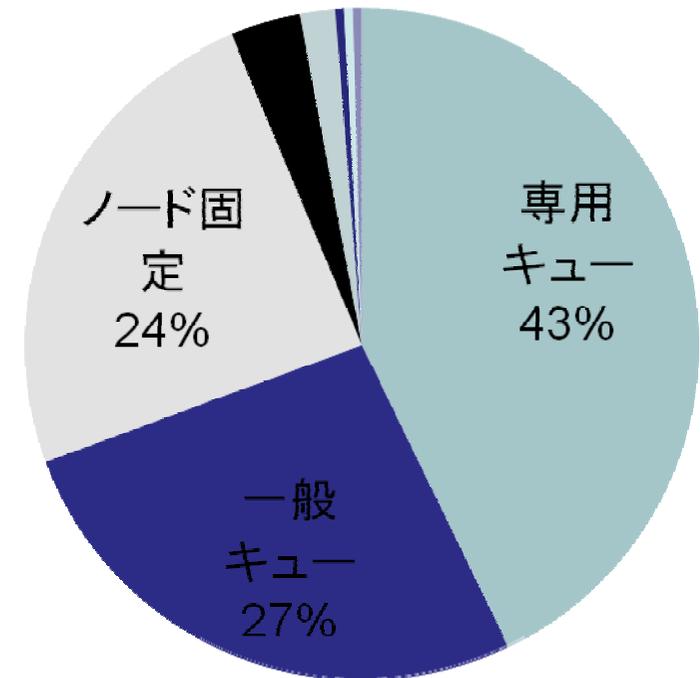
Rank	Site	Cores	Rmax	Rpeak
1	DOE/NNSA/LANL United States	122400	1026	1375.8
2	DOE/NNSA/LLNL United States	212992	478	596.38
3	Argonne National Laboratory United States	163840	450	557.06
4	Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	62976	326	503.81
5	DOE/Oak Ridge National Laboratory United States	30976	205	260.2
6	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	65536	180	222.82
7	New Mexico Computing Applications Center (NMCAC) United States	14336	133	172.03
8	Computational Research Laboratories, TATA SONS India	14384	133	172.61
9	IDRIS France	40960	113	139.26
10	Total Exploration Production France	10240	106	122.88
11	Government Agency Sweden	13728	103	146.43
12	NNSA/Sandia National Laboratories United States	26569	102	127.53
13	EDF R&D France	32768	93	111.41
14	IBM Thomas J. Watson Research Center United States	40960	91.3	114.69
15	NERSC/LBNL United States	19320	85.4	100.46
16	Information Technology Center, The University of Tokyo Japan	12288	83	113.05
17	Stony Brook/BNL, New York Center for Computational Sciences United States	36864	82.2	103.22
18	ECMWF United Kingdom	8320	80.3	156.42
19	RZG/Max-Planck-Gesellschaft MPI/IPP Germany	6720	80.3	126.34
20	Center for Computational Sciences, University of Tsukuba Japan	10000	76.5	92
24	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	12344	67.7	109.73
34	Kyoto University Japan	6656	50.5	61.24
49	The Earth Simulator Center Japan	5120	35.9	40.96

# T2Kオープンスパコン東大版ユーザ層 (2009年1月時点)

- 大学
  - 個人利用 87人
  - グループ利用 16グループ167人
- 研究機関
  - 個人利用8人
  - グループ利用8グループ64人
    - 国立環境研究所: 温室効果ガス観測技術衛星「いぶき」のデータ処理
    - 理化学研究所、原子力研究開発機構、防災科学技術研究所、他
- 企業
  - 2グループ15人
    - みずほ情報総研(株)
    - 富士通アドバンステクノロジー株式会社

全ノード(952ノード)の利用割り当て状況

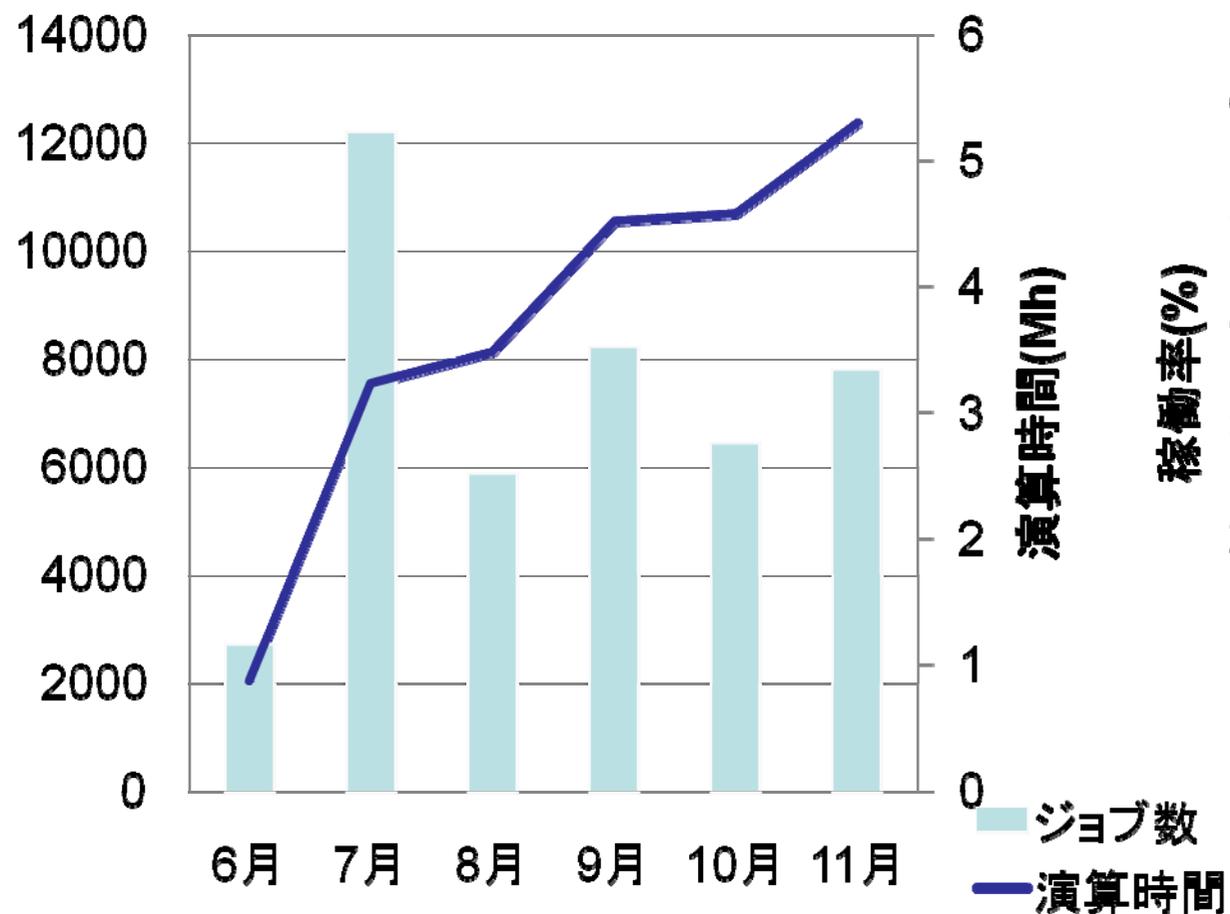
企業	128GB	debug	ログイン	余裕
3%	2%	1%	0%	0%



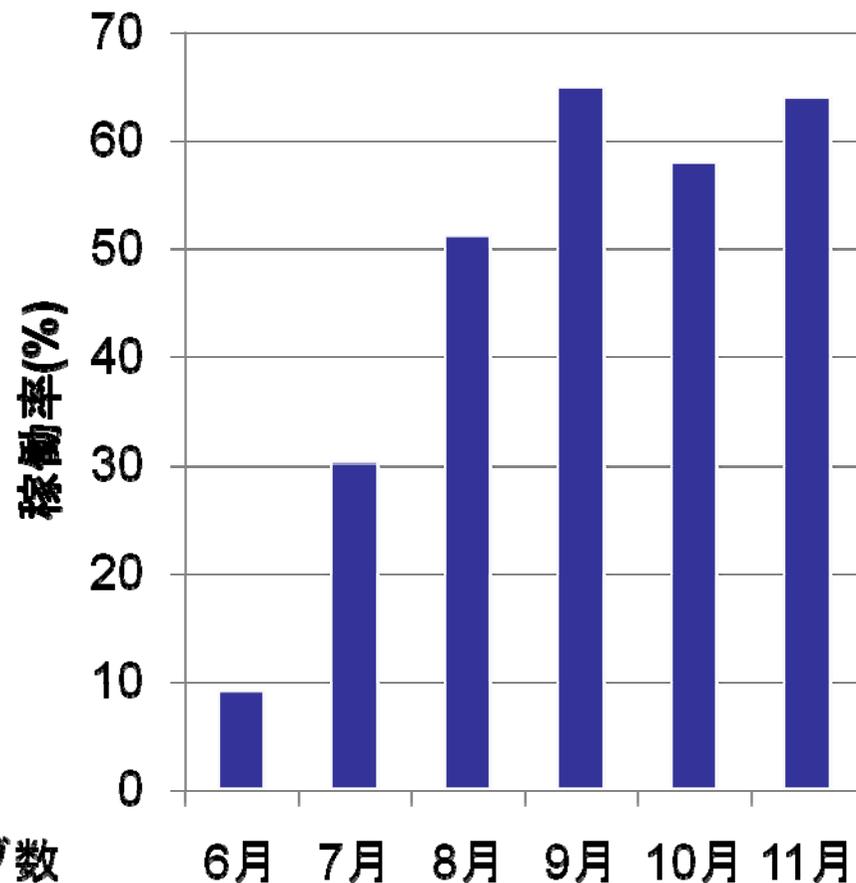
ほぼ完売状況ではあるが、、、

# T2Kオープンスパコン東大版利用状況

## 利用状況



## ノード稼働率



# T2Kオープンスパコン東大版課題(1/3)

## • ライフネットワークとグローバルファイルシステム

### 課題1: 全ノード(952) ⇔ ファイルシステムバンド幅不足

- トータル15 GB/sec
- 隣接16ノードの合計バンド幅が2Gbps

→file stagingの導入予定

→Myri10Gネットワークの増強 & ファイルシステムのトラフィックを流す予定

### 課題2: ホームディレクトリにおけるメタデータアクセス(open, lookup, stat)

#### 遅延問題

- HSFS(Hitachi Striping File System)を使用
- HSFSのメタデータアクセスは、NFSの10から1000倍遅い
- Loginノードにおけるユーザストレス問題

– ファイル展開・コンパイル等の作業に大きな影響

→NFS等、他のファイルシステムの追加を検討中

## • バッチキューイングシステム

### 課題: 実行時間制限(原則48時間)

- 実行時間制限の理由
  - 稼働率
  - 平均ターンアラウンドタイム
  - システム変更のタイミング
- より長時間のジョブを流したい要望もある

→専用キューコースについて、申請に基づいて長時間のジョブ実行を認めることを検討中

# T2Kオープンスパコン東大版課題(3/3)

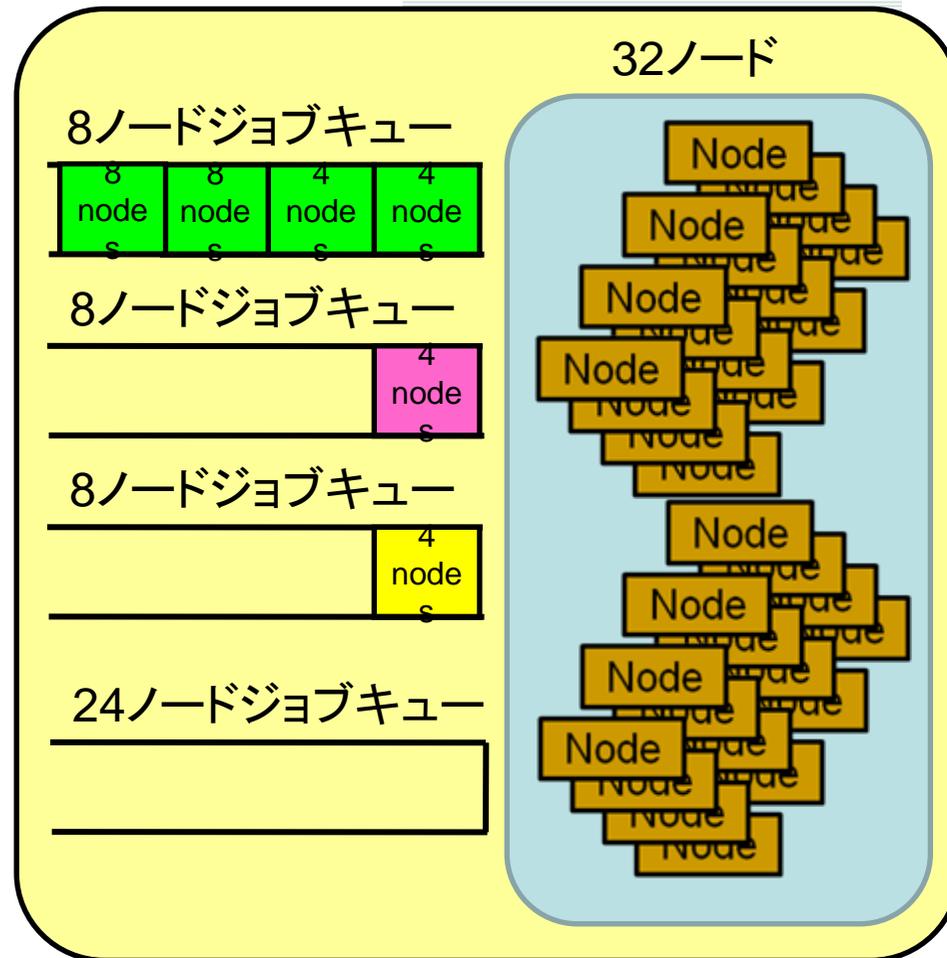
- 専用ジョブキュー

- ユーザに対して一つのジョブキューを割り当て、キューに対して1/1.5のノードを割り当てる

負担金 = 電気代

## 課題: 専用キュー vs. ノード稼働率

- ユーザは必ずしも定常的にジョブを流さない
- 空きノードをどう管理するか?
  - 空いているからジョブを割り当てしまうと、最悪実行時間制限まで占有されてしまう



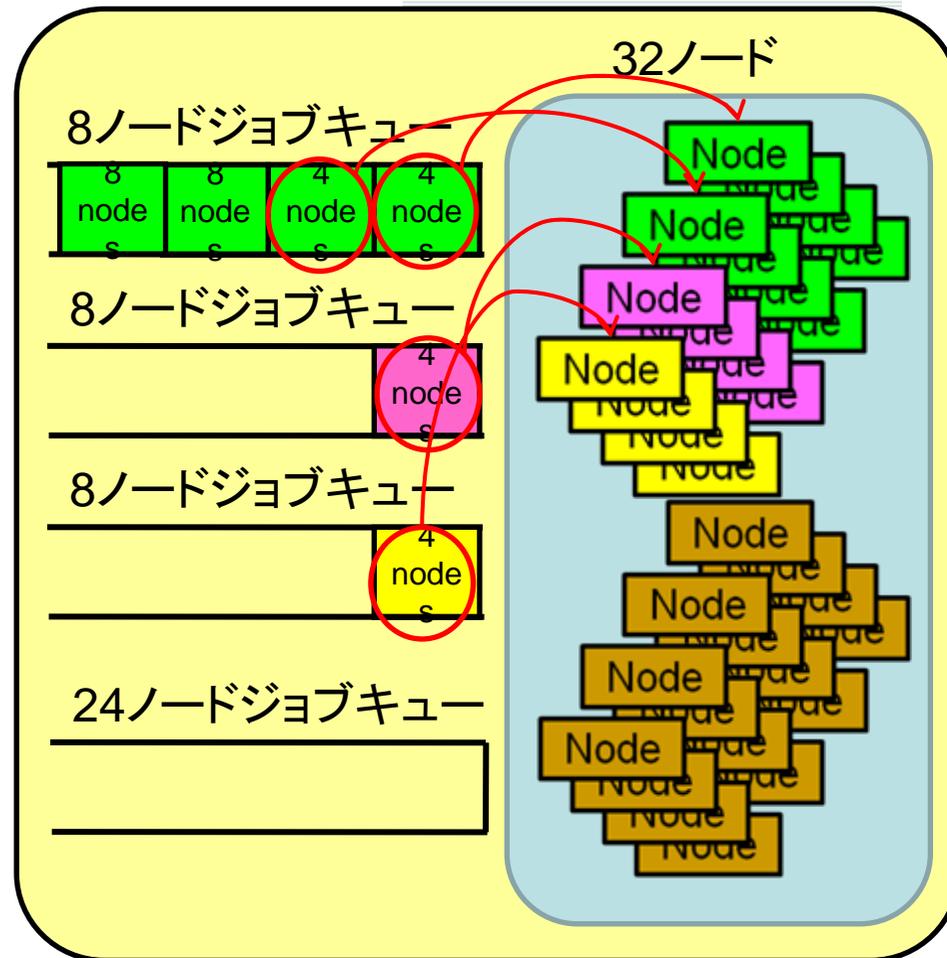
$$(8+8+8+24)/1.5 = 48/1.5 = 32$$

# T2Kオープンスパコン東大版課題(3/3)

- 専用ジョブキュー
  - ユーザに対して一つのジョブキューを割り当て、キューに対して1/1.5のノードを割り当てる
  - 負担金 = 電気代

## 課題: 専用キュー vs. ノード稼働率

- ユーザは必ずしも定常的にジョブを流さない
- 空きノードをどう管理するか?
  - 空いているからジョブを割り当てしまうと、最悪実行時間制限まで占有されてしまう

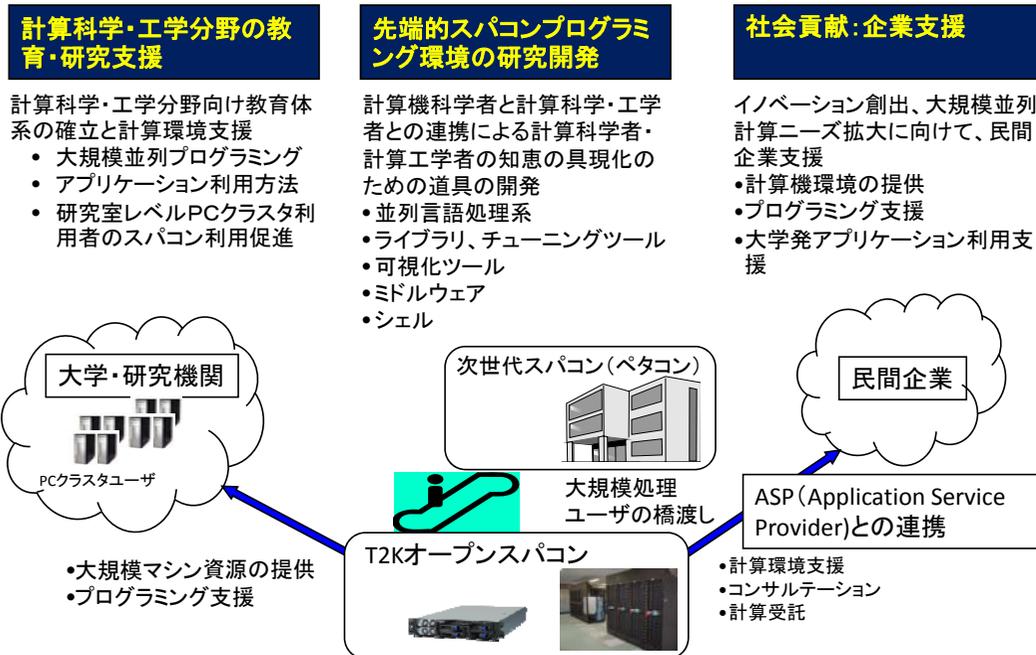


$$(8+8+8+24)/1.5 = 48/1.5 = 32$$



# Outline

1. T2Kオープンスパコン東大版
  - 背景
  - 概要
  - 利用状況
2. 大規模アプリケーション開発支援
3. 学際計算科学・工学人材育成
4. シームレス高生産・高性能計算機環境の研究
5. 企業支援



# 東京大学情報基盤センターのアクティビティ

## 筑波大学、京都大学と連携

### 計算科学・工学分野の教育・研究支援

計算科学・工学分野向け教育体系の確立と計算環境支援

- 大規模並列プログラミング
- アプリケーション利用方法
- 研究室レベルPCクラスタ利用者のスパコン利用促進

### 先端的スパコンプログラミング環境の研究開発

計算機科学者と計算科学・工学者との連携による計算科学者・計算工学者の知恵の具現化のための道具の開発

- 並列言語処理系
- ライブラリ、チューニングツール
- 可視化ツール
- ミドルウェア
- シェル

### 社会貢献: 企業支援

イノベーション創出、大規模並列計算ニーズ拡大に向けて、民間企業支援

- 計算機環境の提供
- プログラミング支援
- 大学発アプリケーション利用支援



# 大規模アプリケーション開発支援の取り組み (1/4)

## • 背景

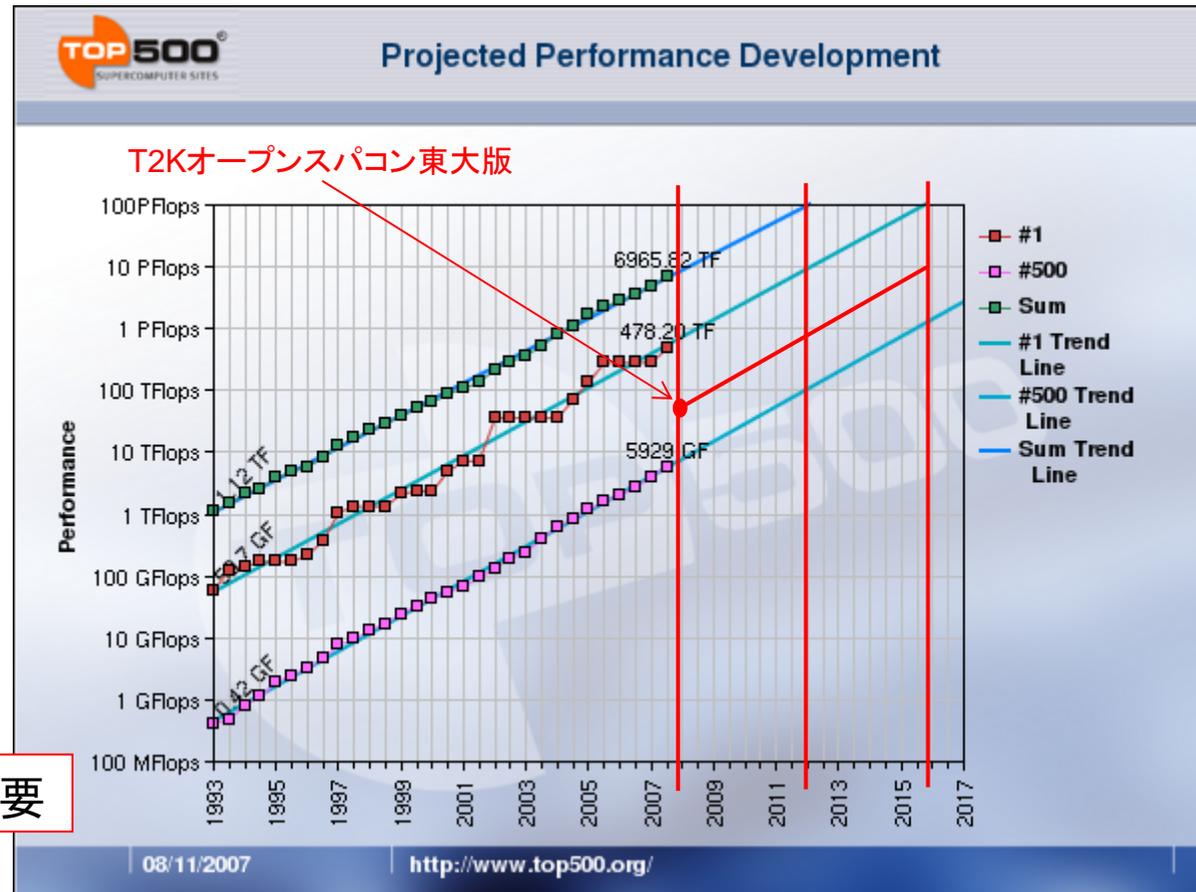
– 計算科学・工学の基盤である高性能並列コンピュータの動向

- 2008年には1 PetaFlops
- 2011年には20 PetaFlops
- 2019年には1 ExaFlops

– 性能向上により大規模アプリケーション実行が可能

– 性能向上の恩恵をこうむるためにはプログラムに工夫が必要であり、黙っていて大規模アプリケーションが動かせるわけではない

大規模アプリケーション開発支援が必要



赤線赤文字は本資料において追加

出典: <http://www.top500.org>

# 大規模アプリケーション開発支援の取り組み (2/4)

- 背景

- 大規模計算シミュレーションのインフラが進む中、大規模アプリケーション開発を支援する計算資源が提供されていない
- 東京大学情報基盤センターでは、ユーザの要求に応じて、75.4 TFlops利用するアプリケーション実行のための計算資源を提供できる

タイプ	ノード数	CPU数	理論演算性能 (TFlops)	総主記憶 (TB)
A	512	8192	75.366	16
	128	2048	18.841	4
B	256	4096	37.683	8
	36	576	5.299	1.2
	16	256	2.355	1

- しかし、利用に際して、負担金との兼ね合いで、ユーザが大規模計算を試みようとする動機がでてこないだろう

# 大規模アプリケーション開発支援の取り組み (3/4)

- 「お試し期間限定」T2Kオープンスパコン東大版HPC特別プロジェクト
  - 512ノード(8,192コア)利用を目的とした特別プロジェクト(無料)
  - 応募:29件, 採択:10件(一次:4件, 二次:6件)
    - 64ノード専用キュー(10グループで共有)
    - 月末:256ノード(4,096コア)利用可能
    - 7月~9月の週末:各グループが1日(24時間程度)512ノード占有

①=R: 次世代ターゲットアプリ  
 ①=G: Gordon Bell Finalists  
 ②: Flat MPI  
 ③: Hybrid並列

	課題名・代表者(所属)	①	②	③
A	高性能直接法N体計算ベンチマーク, 似鳥啓吾(東大・天文学専攻)	R	○	
B	海洋循環形成プロセスの高解像度シミュレーション, 羽角博康(東大・気候センター)	R	○	○
C	3次元不均質場での地震波伝播の大規模シミュレーション, 古村孝志(東大・情報学環)	R	○	
D	密度行列繰り込み群法と行列対角化による強相関量子系のシミュレーション, 町田昌彦(原子力機構)	G	○	○
E	プロセッサアフィニティ制御を組み込んだフレームワークによる実用大規模並列シミュレータの性能評価, 小野謙二(理化学研究所)		○	○
F	T2Kオープンスパコンへのインヤン地球ダイナモコードの移植, 陰山聡(海洋研究開発機構)	G	○	
G	革新的シミュレーションソフトウェア, 加藤千幸(東大・生産研)	R	○	○
H	GXPシステムとそれを用いた大規模テキスト処理の実行, 黒橋 禎夫(京大・情報学研究科)		-	-
I	全球雲解像正20面体格子非静力学大気モデル(NICAM)の開発, 佐藤正樹(東京大・気候センター)	R	○	
J	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, 久田俊明(東大・新領域)		○	

# 大規模アプリケーション開発支援の取り組み (4/4)

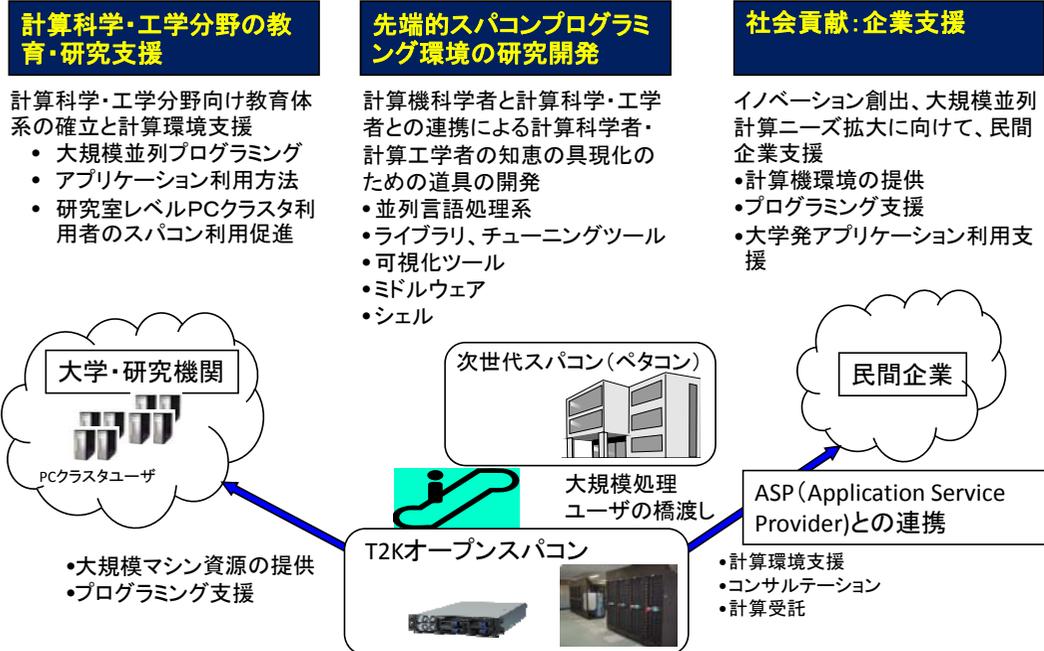
## • 「T2Kオープンスパコン(東大)利用」 共同研究プロジェクト

- 様々なシミュレーションのアルゴリズムの開発, プログラムの高速化に関する研究を本センターの教員と共同で実施
- 共同研究プロジェクト期間中は64ノード専用キュー(1,024コア)を無料で使用(他グループと共用)
- 応募:7件, 採択:5件

	課題名・代表者 (所属)	手 法	ポイント
A	電磁流体コードによる惑星磁気圏シミュレーション, 深沢圭一郎 (NICT)	構造格子差分法 (i-j-k型)	メモリアクセス効率化
B	海洋大循環のマルチスケール連結階層モデリング, 羽角博康 (東大・気候センター)	構造格子差分法 (i-j-k型)	メモリアクセス効率化, Hybrid並列プログラミングモデル
C	津波発生伝播の大規模3次元シミュレーション, 古村孝志 (東大・情報学環)	構造格子差分法 (i-j-k型)	メモリアクセス効率化, 高速ポアソンソルバー
D	地球ダイナモの新しいシミュレーションコード開発とその応用, 陰山聡 (海洋研究開発機構)	構造格子差分法 (i-j-k型)	メモリアクセス効率化
E	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, 久田俊明 (東大・新領域)	有限要素法	高速並列前処理 GMRES法改良, 効率化

# Outline

1. T2Kオープンスパコン東大版
  - 背景
  - 概要
  - 利用状況
2. 大規模アプリケーション開発支援
3. 学際計算科学・工学人材育成
4. シームレス高生産・高性能計算機環境の研究
5. 企業支援

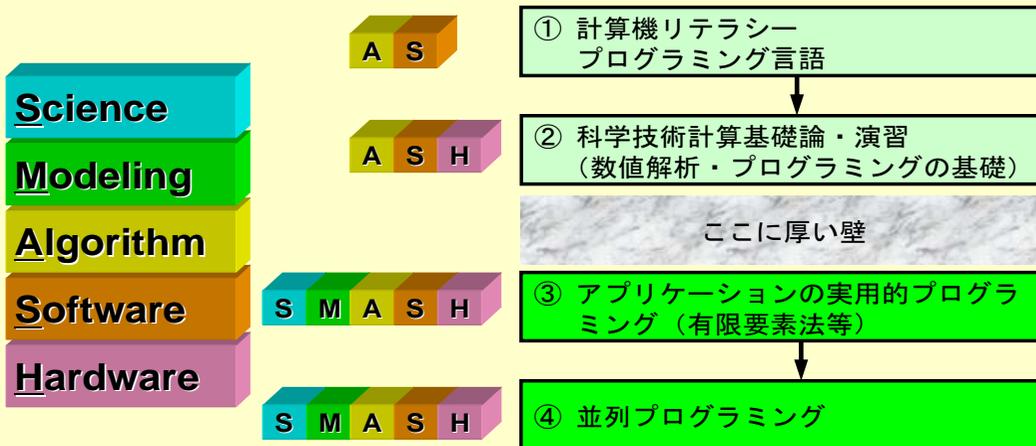


# 学際計算科学・工学 人材育成の取り組み (1/5)

- 東大全学的人材育成プログラム
  - 学際計算科学・工学人材育成委員会
    - 4研究科, 1研究所による連携
- 多様な人材育成
  - 教育 + 持続的研究開発支援
    - スパコンアプリを使える人
    - スパコンアプリを作れる人
    - システムを作れる人
- 4S型人材育成戦略



## System: 体系 & Stage: 育成段階



## Status: 多様な人材

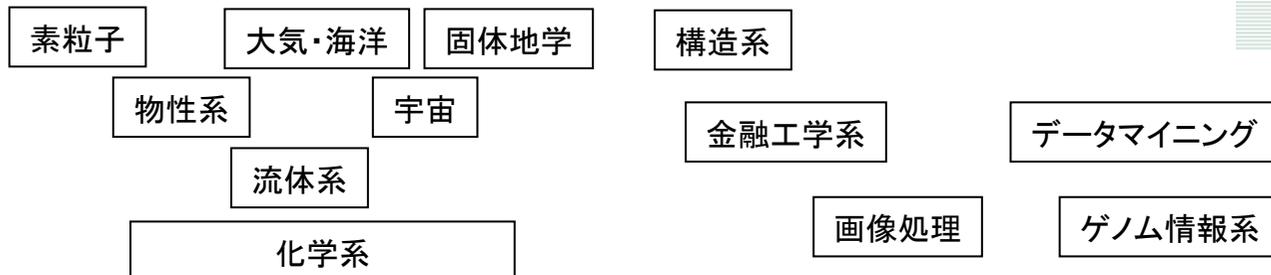
- スパコンアプリを動かせる人
- スパコンアプリを作れる人
- システムを作れる人

## Style: 教育形態

- 講義・演習, (遠隔) 講習会, e-Learning
- 様々なバックグラウンドの受講者対応
  - 社会人、科学系、工学系
- 受講者に対する省負担

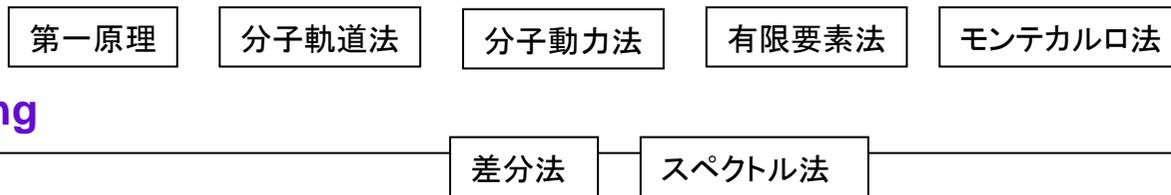
# 学際計算科学・工学 人材育成の取り組み (2/5)

## Sciences (対象領域)



- ポアソン方程式
- ラプラス方程式
- ナビアストーク方程式
- ブラックシュールズ方程式
- シュレディンガー方程式
- マクスウェル方程式
- ニュートン方程式
- ...

## Modeling



モデルごとに使用するアルゴリズムを教える

数値解析: 誤差解析、積分、ニュートン法、常微分方程式、連立一次方程式、固有値、最小二乗法、乱数、FFT、偏微分方程式

線形計画法

データ構造とアルゴリズム  
木、グラフ、ネットワーク

アルゴリズムの肝を網羅的に教えることにより、将来研究で必要になったときに備える

## Algorithms

可視化

並列プログラミング: OpenMP, MPI, 集団通信アルゴリズム

プログラミング入門: Fortran, C, C++, JAVA, シェル、エディタ、UNIX上でのプログラミング

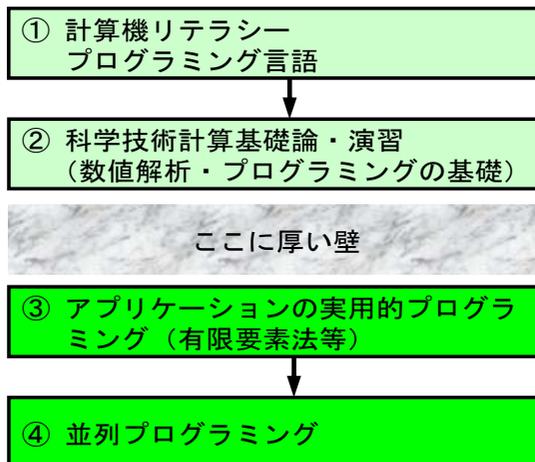
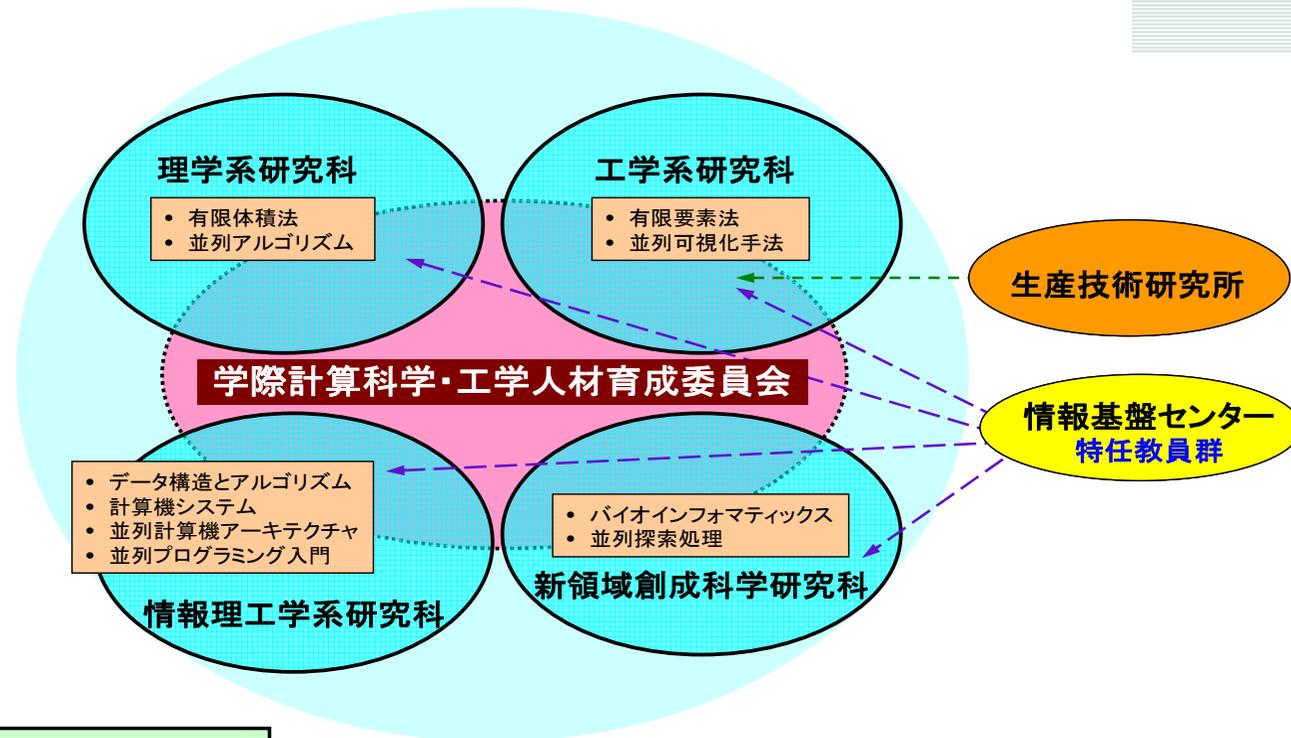
並列計算機アーキテクチャ: ベクトル並列計算機、共有メモリ並列計算機、分散メモリ並列計算機、インターコネクション

計算機システム: データ表現、機械語、パイプライン、記憶階層、仮想記憶、性能評価、ファイルシステム、ネットワーク、オペレーティングシステム

## Programming (Software) & Computer Architecture (Hardware)

正しい(スケーラブルな)プログラミングを身につけるために必要な一般教養

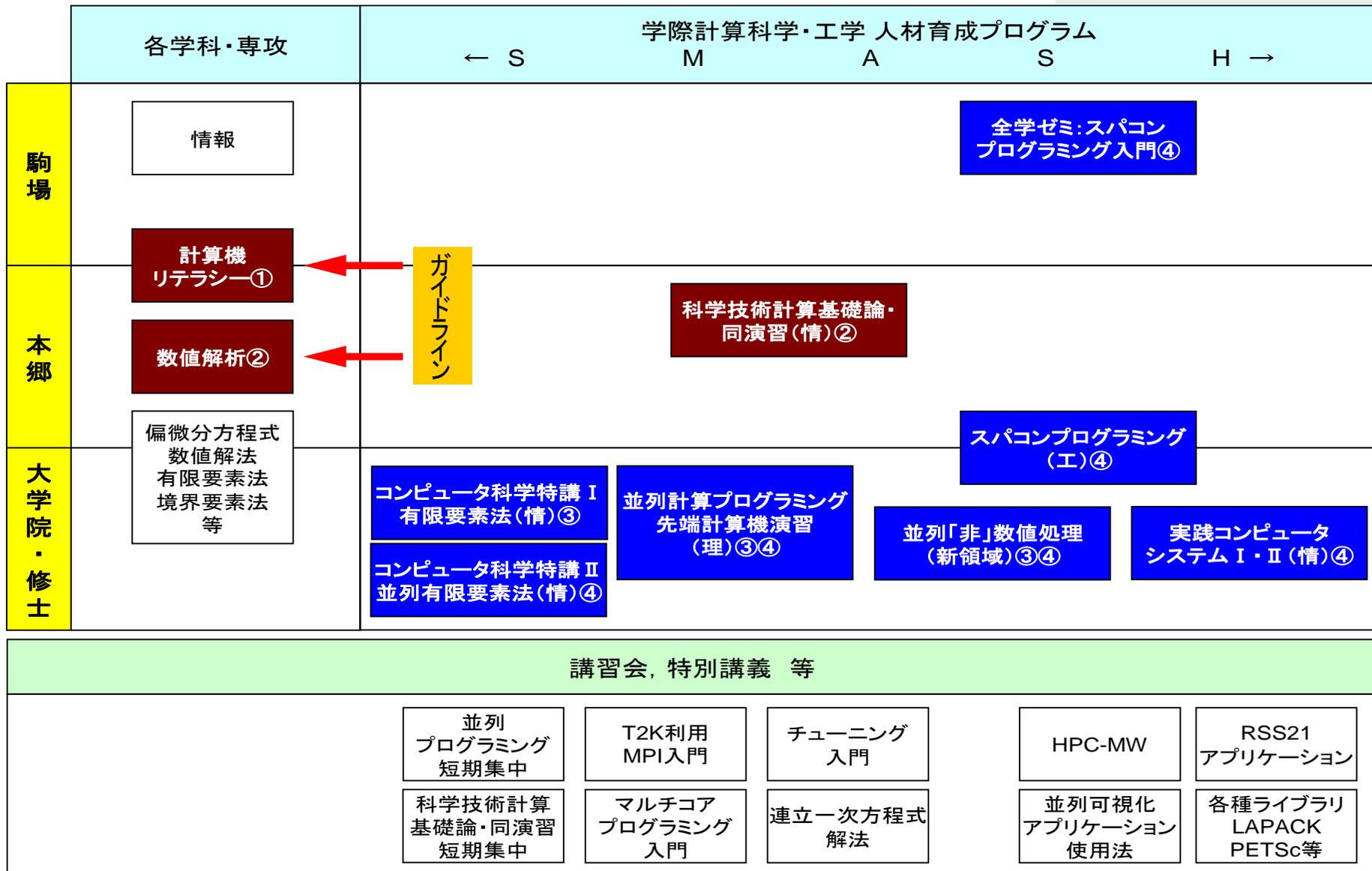
# 学際計算科学・工学 人材育成の取り組み (3/5)



- ①, ②レベルは各学科に任せる  
- 人材育成委員会はガイドライン策定⇒認定

- ③, ④レベルは手法ごとに全学的共通講義を研究  
科単位で開講: 各研究科・専攻で単位認定

# 学際計算科学・工学 人材育成の取り組み (4/5)



## 科学技術計算プログラミング

### 有限要素法 I, II (夏学期、冬学期)

- I 有限要素法の基礎理論からプログラムの作成法
  - 有限要素法の基礎理論、ガラーキン法による実装、疎行列解放、前処理手法、プログラミング解説&実習
- II 並列有限要素法のデータ構造と並列プログラム作成法
  - 並列計算プログラミング入門、データ構造、並列プログラム開発、プログラミング実習

## 科学技術計算プログラミング

### スパコンプログラミング 1, I

(夏学期、冬学期、同一科目)

- 高性能計算技法: ループアンローリング、キャッシュブロッキング、連続アクセス化、解説&実習
- 数値計算法基礎: 行列積、べき乗法、LU分解法
- 並列プログラム実習: 並列プログラミング入門、MPIとOpenMP利用法
- 同様な講義を教養学部生に行う全学ゼミも開講

## 実践コンピュータシステムI, II (3日間x2の集中講義)

### I コンピュータの仕組みと性能

- コンピュータアーキテクチャ、キャッシュ・ページングによる計算性能のインパクト、機械語によるプログラミング

### II 並列コンピュータおよび並列計算モデルの基礎と性能

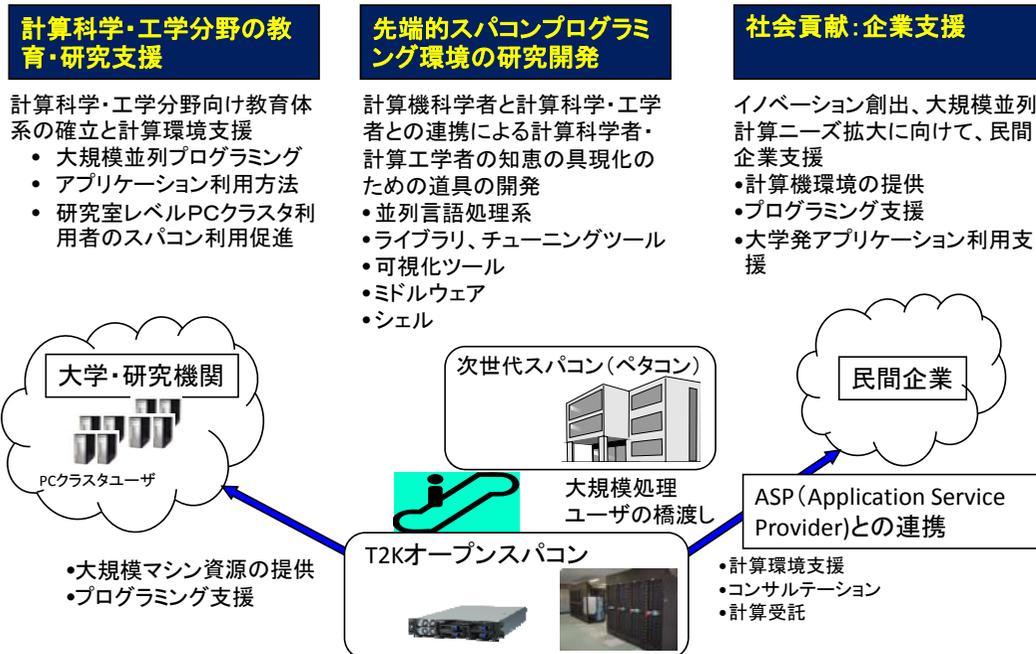
- 並列コンピュータアーキテクチャと並列計算モデル、演算性能・メモリ性能・通信性能とアプリケーション性能、並列計算性能評価方法、並列プログラミング

プログラミング言語、並列コンピュータを使いこなせるための基本原理の理解

プログラミング言語、通信ライブラリ  
そのものは教えない

# Outline

1. T2Kオープンスパコン東大版
  - 背景
  - 概要
  - 利用状況
2. 大規模アプリケーション開発支援
3. 学際計算科学・工学人材育成
4. シームレス高生産・高性能計算機環境の研究
5. 企業支援

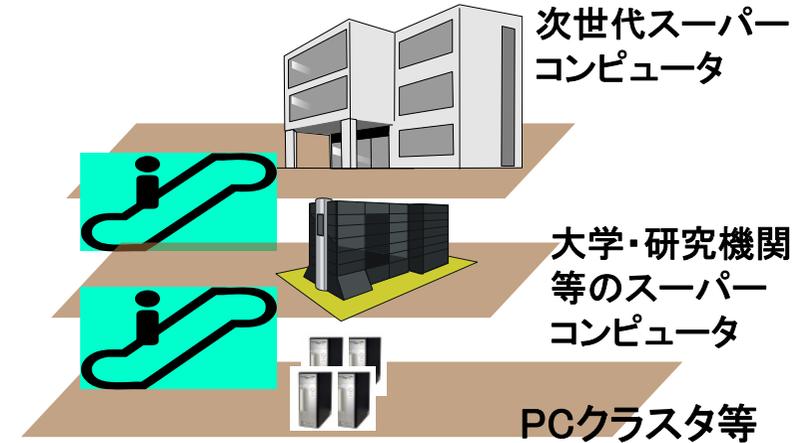


# シームレス高生産・高性能プログラミング環境 (1/2)

- 科学技術・学術研究における萌芽的研究は、研究室レベルで進められているが、利用できるコンピュータの能力程度の問題規模を解くに留まることが多い

理由:

- 研究室レベルで使用されているコンピュータ上で開発されたアプリケーションを計算センターに設置されているスパコン上に持っていても動かないことがある
- また動いたとしても大規模問題を解くことができないことが多い
- 大規模問題を解くプログラムは、並列処理に関する深い知識に加えて、スパコンの性能を引き出す豊富なノウハウを持つ、限られたプログラマにしか作れない



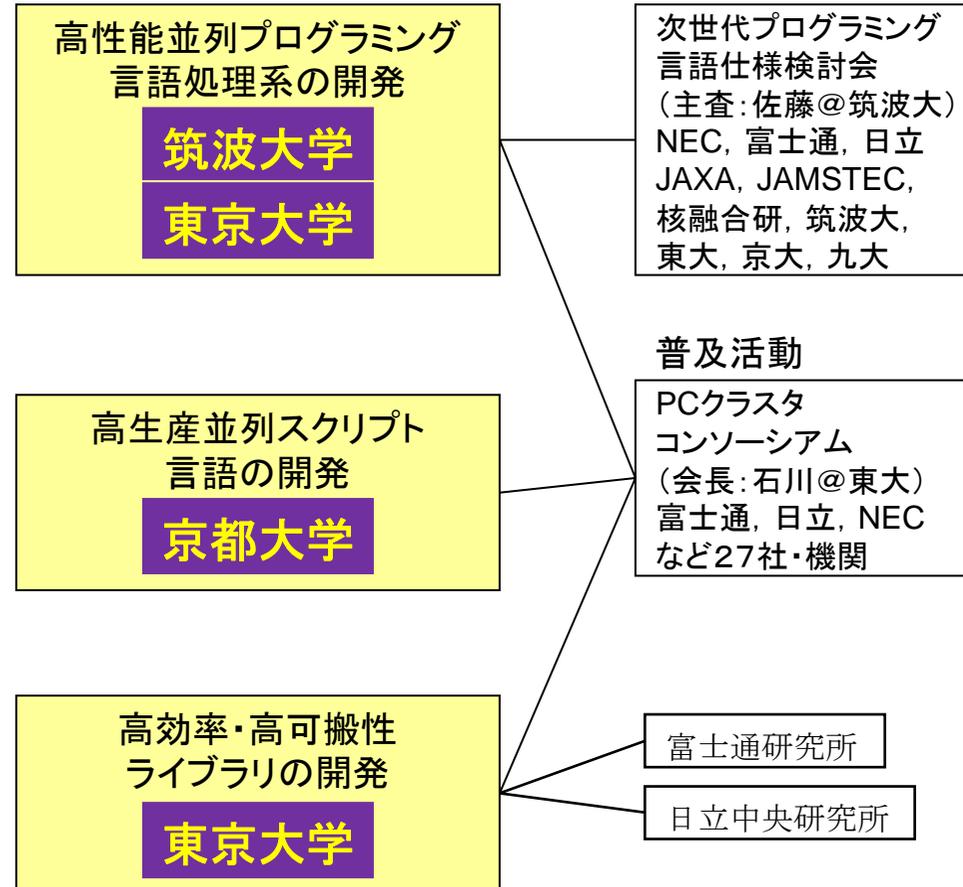
並列アプリケーション生産性拡大のための道具

- 並列言語処理系
- 並列スクリプト言語
- ライブラリ&チューニングツール

# シームレス高生産・高性能プログラミング環境 (2/2)

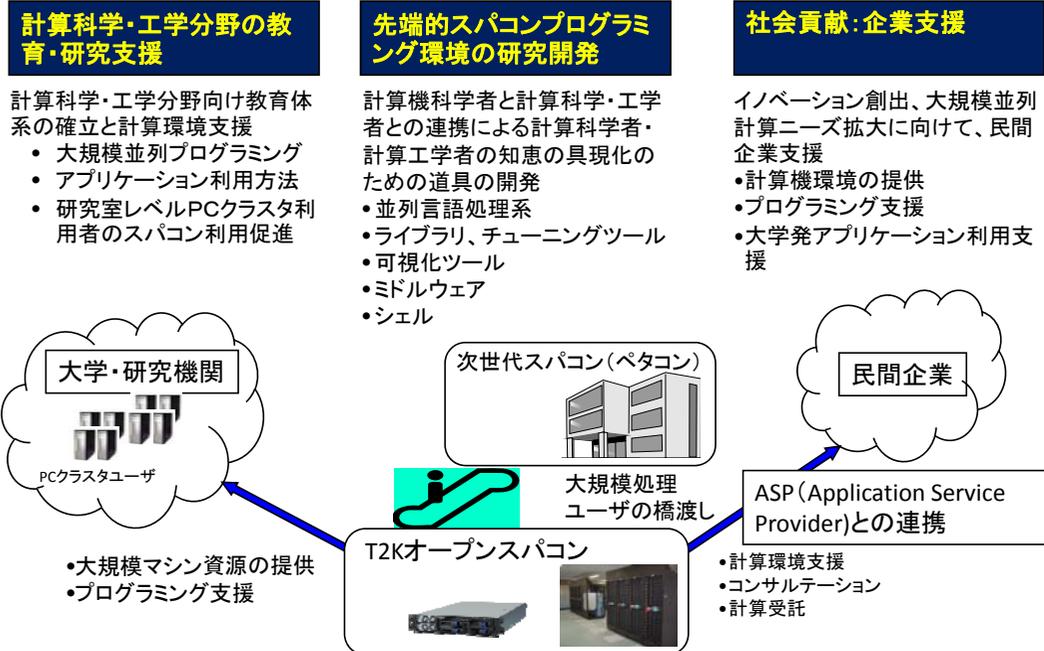
PCクラスタから大学情報基盤センター等に設置されているスパコンまで、ユーザに対するシームレスなプログラミング環境を提供

- 高性能並列プログラミング言語処理系
  - 逐次プログラムからシームレスに並列化および高性能化を支援する並列実行モデルの確立とそれに基づく並列言語コンパイラの開発
- 高生産並列スクリプト言語
  - 最適パラメータ探索など粗粒度の大規模な階層的並列処理を、簡便かつ柔軟に記述可能で処理効率に優れたスクリプト言語とその処理系の開発
- 高効率・高可搬性ライブラリの開発
  - 自動チューニング(AT)機構を含む数値計算ライブラリの開発
  - PCクラスタでも基盤センタースパコン(1万規模CPU)でも単一実行時環境を提供するSingle Runtime Environment Image環境の提供



# Outline

1. T2Kオープンスパコン東大版
  - 背景
  - 概要
  - 利用状況
2. 大規模アプリケーション開発支援
3. 学際計算科学・工学人材育成
4. シームレス高生産・高性能計算機環境の研究
5. 企業支援



# 先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス

- 文部科学省「先端研究施設共用イノベーション創出事業」プログラムから支援を受けた事業
- 全国共同利用施設スーパーコンピュータを有する大学
  - 北海道大学、東北大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学、の7大学による共同事業
  - 代表：東京大学
- 特徴
  - 大学発アプリケーション利用(RSS21等)
  - 企業の持つプログラム利用、あるいは新規開発支援
  - 専門研究員を雇用(アプリケーション支援、プログラム支援)
  - ASP (Application Service Provider) との連携によるサービス
  - 東京工業大学「みんなのスパコンTSUBAMEによるペタスケールへの飛翔」との連携

# 研究施設の概要(提供マシンのみ掲載)

## 大阪大学：

SX-8R (5.3Tflops, 3.3TB)  
PCクラスタ(24.4Tflops, 3TB)  
SX-9 (16Tflops, 10TB)



## 京都大学：

T2Kオープンスパコン  
(61.2 Tflops, 13 TB)



## 北海道大学：

SR11000/K1(5.4Tflops, 5TB)  
PCクラスタ(0.5Tflops, 0.64TB)



## 東北大学：

SX-7C(0.64Tflops, 0.64TB)  
SX-9(26.2Tflops, 16TB)



## 東京大学：

T2Kオープンスパコン  
(140 Tflops, 30TB)



## 九州大学：

PCクラスタ(18.4Tflops, 4TB)



名古屋大学：H21.5月以降  
SPARC Enterprise(3.84Tflops, 3TB)  
HX600(15.36Tflops, 6TB)  
FX1(30.72Tflops, 24TB)

# 平成19年度採択状況

## 平成19年度 第1期 採択課題 一覧

会社名 部署名	課題名
三菱重工業株式会社 原動機事業本部蒸気タービン統括技術部	「三次元蒸気タービン静動翼列多段流動の大規模数値シミュレーション」
国際電気通信基礎技術研究所 音声言語コミュニケーション研究所	「音声翻訳のための音声言語データの収集とモデル化の並列処理」
特定非営利活動法人 バイオグリッドセンター関西	「タンパク質機能シミュレータによる創薬開発」
鹿島建設株式会社 ITソリューション部	「建設分野構造解析における大規模外部リソース利用とRSS21ソフトウェア活用に関する研究」
(株)豊田中央研究所 先端研究センター倉本研究グループ	「第一原理計算による貴金属/担体の相互作用と触媒活性についての解析」
SRI研究開発株式会社 商品研究部	「大規模/フルアトムモデルを用いた分子シミュレーションによる分子構造からの高分子化合物の物性予測」
三菱自動車工業株式会社 技術開発本部 機能実験部 流体技術グループ	「自動車部品から発生する空力騒音予測手法の開発」
松下電器産業株式会社 システムエンジニアリングセンター	「大規模EMCシミュレーション」
日本電気株式会社 ナノエレクトロニクス研究所	「固体高分子型燃料電池材料のin silico設計」
株式会社神戸製鋼所 電子技術研究所	「有機分子/金属界面構造のシミュレーション」
積水化学工業株式会社 R&Dセンター NBO開発推進センター	「熱硬化性樹脂原料の構造・物性シミュレーション」
株式会社情報数理解研究所	「環境対応型全体最適指向生産スケジューラ ASP のための分散・並列計算基盤の構築」
SRI研究開発株式会社 材料プロセス研究部	「高性能タイヤの開発を目的とした大規模MDのための初期構造作成方法の検討」
SRI研究開発株式会社 情報研究部	「ゴルフボール空力大規模計算による乱流遷移の研究」
川崎重工業株式会社 航空宇宙カンパニー研究部空力技術課	「航空宇宙分野における大規模空力解析の応用」
みずほ情報総研株式会社 サイエンスソリューション部	「大規模流体解析を対象としたASP事業のフィージビリティスタディ」
日本アイ・ビー・エム株式会社 東京基礎研究所	「大規模エージェントベースシミュレーションの性能評価」
ソニー株式会社 モノ造り技術センター 技術開発室	「大規模電磁界解析の高速化/高精度化の検討」
ビヨンド・コンピューティング株式会社	「グリッドASP利用モデルの研究」

## 平成19年度 第2期 採択課題 一覧

会社名 部署名	課題名
ダイハツ工業株式会社 先端技術開発部	脱貴金属を目指すナノ粒子自己形成触媒の新規発掘
株式会社ケイ・ジー・ティー ビジュアルソリューション事業部	大規模計算結果の遠隔可視化システムの実現

# 平成20年度第1期採択状況

先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス  
平成20年度第1期 採択課題一覧

	会社名 部署名	課題名
	住友電気工業 株式会社 伝送デバイス研究所	電磁界解析によるEMCシミュレーション
	株式会社 村田製作所 故障解析センタ	遷移金属酸化物における酸素欠陥に関する研究
	株式会社 豊田中央研究所 計算物理研究室	多階層複合材料の大規模シミュレーション
*	株式会社神戸製鋼所 電子技術研究所	有機分子/金属界面構造のシミュレーション
*	国際電気通信基礎技術研究所(ATR) 音声言語コミュニケーション研究所	音声翻訳のための音声言語データの収集とモデル化の並列処理
	株式会社 エコ・ウェーブ 名取研究所	Large Eddy Simulationによるエマルジョン燃焼シミュレーションの開発
	NECソフト株式会社 ニューソリューション事業部 エンジニアリングSIグループ	大規模HPC向けASP・SaaSサービスを適用したモデルと実現可能性の研究
*	川崎重工業株式会社 航空宇宙カンパニー技術本部研究部空力技術課	航空宇宙分野における大規模空力解析の応用
*	SRI研究開発株式会社 商品研究部	大規模/フルアトムモデルを用いた分子シミュレーションによる分子構造からの高分子化合物の物性予測
*	ビヨンド・コンピューティング株式会社	グリッドASP利用モデルの研究
*	株式会社 情報数理研究所	環境対応型全体最適指向生産スケジューラASPのための分散・並列計算基盤の構築
	株式会社 ワールドフュージョン 技術営業部	化学反応動力学を応用した蛋白質と薬物の結合自由エネルギーの予測と生理活性物質探索
	富士通株式会社 光モジュール事業本部 第三商品部	大規模・高精度高周波電磁界解析
*	みずほ情報総研株式会社 サイエンスソリューション部	大規模流体解析を対象としたASP事業のフィージビリティスタディ
	NECソフト株式会社 VALWAYテクノロジーセンター	核酸のフォールディングシミュレーションによる特異的結合分子の探索
	アドバンスソフト株式会社	大規模マルチフィジクスシミュレーションの工学的諸問題への適用
*	鹿島建設株式会社 ITソリューション部	建設分野構造解析における大規模外部リソース利用とRSS21ソフトウェア活用に関する研究

注\* 19年度第1期採択の継続課題(再採択)

# 平成20年度第2期採択状況

## 先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス 平成20年度第2期 採択課題一覧

	会社名 部署名	課題名
	三菱航空機株式会社 本社 技術部	国産小型民間航空機空力設計への大規模空力解析技術の適用
*	特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西	タンパク質機能シミュレータによる創薬開発
#	富士通株式会社 光モジュール事業本部技術部	大規模・高精度高周波電磁界解析
#	株式会社ワールドフュージョン 技術営業部	化学反応動力学を応用した蛋白質と薬物の結合自由エネルギーの予測と生理活性物質探索
#	住友電気工業株式会社 伝送デバイス研究所	電磁界解析によるEMCシミュレーション
#	株式会社エコ・ウェーブ 名取研究所	Large Eddy Simulationによるエマルジョン燃焼シミュレーションの開発
#	アドバンスソフト株式会社 技術部	大規模マルチフィジクスシミュレーションの工学的諸問題への適用
*	三菱重工業株式会社 原動機事業本部蒸気タービン統括技術部	三次元蒸気タービン静動翼列多段流動の大規模数値シミュレーション
*	パナソニック株式会社(旧 松下電器産業株式会社) 本社R&D部門	大規模EMCシミュレーション
*	日本電気株式会社 ナノエレクトロニクス研究所	固体高分子型燃料電池材料のin silico設計
	TDK株式会社 テクノロジーグループSQ研究所	熱アシスト磁気記録の記録磁化過程シミュレーション
	HPCシステムズ株式会社 新規事業企画室	量子化学計算ASPにおけるアプリケーションレベルの有効な資源配分の研究
*	住友ゴム工業株式会社 研究開発本部 情報研究部	ゴルフボール空力大規模計算による乱流遷移の研究
*	三菱自動車工業株式会社 開発本部 実験総括部 流体技術グループ	自動車部品から発生する空力騒音予測手法の開発
	エス・ジー・ゲートウェイ株式会社 技術開発本部	GridASPによるサービス提供フレームワークの研究
#	NECソフト株式会社 ニューソリューション事業部 エンジニアリングSIグループ	大規模HPC向けASP・SaaSサービスを適用したモデルと実現可能性の研究
*	ソニー株式会社 モノ造り技術センター技術開発室	大規模電磁界解析の高速化/高精度化の検討

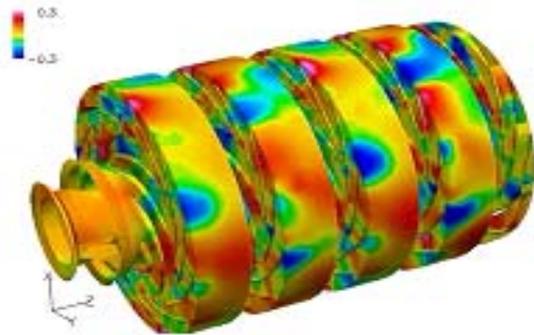
注) \* : 平成19年度第1期採択の継続課題 (再採択)

# : 平成20年度第1期採択の継続課題 (再採択)

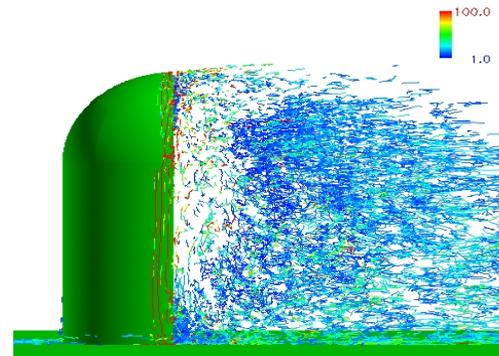
# ASP例:みずほ情報総研

## 大規模流体解析コード FrontFlow/blue

- LESによる非定常流体解析(非圧縮)
- 「革新的ソフト」PJで東大・加藤教授を中心に開発
- ターボ機械内部流れ、乱流音騒音等を解析
- 数値計算スキーム
  - 有限要素法(六面体要素、四面体要素)
  - クランクニコルソン法、Fractional-Step法
- 並列計算機能( $\sim 4 \times 10^3$  CPUs)、乱流音解析、マルチフレーム機能、オーバーセット機能、キャビテーション解析、熱輸送解析、DES解析



多段遠心ポンプ内部流れ



ドアミラー付近の流体騒音

出典:大谷泰昭、「大規模流体解析を対象としたASP事業のフィジビリティスタディ」、  
先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用シンポジウム、主催東大他、2008年3月28

# ASP例：FrontFlow/blueの計算コスト

■ 計算時間

$$\frac{\text{演算回数}[FLOP]}{\text{マシン性能}[FLOPS]} = \frac{(20 \times 10^3) \times \text{グリッド数} \times \text{時間ステップ}}{\text{ピーク性能} \times \text{実行効率}}$$

(e.g. 20 sec/step for  $10^6$  grids using 1.0GFLOPS)

■ メモリ容量

$10^3$  words/grid → 4KB/grid  
(e.g. 4GB for  $10^6$  grids)

■ ディスク容量

入力ファイル: 44 Bytes/grid  
(e.g. 44MB for  $10^6$  grids)  
出力ファイル: 16 Bytes/grid  
(e.g. 16MB for  $10^6$  grids)

	CPU数	ピーク性能 (TFlops)	実行効率 (%)	計算時間
1.E+06 ケース	128	1	10	5.4時間
1.E+07 ケース	128	1	10	2.3日
1.E+08 ケース	1024	8	5	5.8日

出典: 大谷泰昭、「大規模流体解析を対象としたASP事業のフィジビリティスタディ」、  
先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用シンポジウム、主催東大他、2008年3月28

## みずほ情報総研の 超大規模計算ASP事業展開

### 超大規模計算の潜在ニーズ

解析対象	利用分野	潜在ニーズ
固体	ものづくり全般、エネルギー	大規模構造系、振動、音場、破壊
流体	ものづくり全般、エネルギー、環境	乱流、騒音、混層流、界面変化、燃焼
電磁場	機械、エネルギー、電気・電子	タービン、磁気ヘッド、光学材料（核融合）
原子・分子	素材、化学、半導体、バイオ	ナノ計測、材料物性、創薬、量子素子
データ	気象、バイオ、経済	Bioinformatics、Data Mining、データ同化

出典：大谷泰昭、「大規模流体解析を対象としたASP事業のフィジビリティスタディ」、  
先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用シンポジウム、主催東大他、2008年3月28

# おわりに

1. T2Kオープンスパコン東大版
  - 背景
  - 概要
  - 利用状況
2. 大規模アプリケーション開発支援
3. 計算科学・計算機科学のための教育
4. シームレス高生産・高性能計算機環境の研究
5. 企業支援

## 計算科学・工学分野の教育・研究支援

計算科学・工学分野向け教育体系の確立と計算環境支援

- 大規模並列プログラミング
- アプリケーション利用方法
- 研究室レベルPCクラスタ利用者のスパコン利用促進

## 先端的スパコンプログラミング環境の研究開発

計算機科学者と計算科学・工学者との連携による計算科学者・計算工学者の知恵の具現化のための道具の開発

- 並列言語処理系
- ライブラリ、チューニングツール
- 可視化ツール
- ミドルウェア
- シェル

## 社会貢献:企業支援

イノベーション創出、大規模並列計算ニーズ拡大に向けて、民間企業支援

- 計算機環境の提供
- プログラミング支援
- 大学発アプリケーション利用支援

