

超並列クラスタシミュレータ“PACS-CS”について

筑波大学計算科学研究センター

○ ポイント

国立大学法人筑波大学【学長岩崎洋一】計算科学研究センター【センター長宇川彰教授】では、文部科学省より国立大学法人運営費交付金特別教育研究経費の交付を受けて、平成 17 年度から開発・製作を進めて来た超並列型クラスタ計算機“PACS-CS”が、7 月 1 日より稼動を開始します。

“PACS-CS”は、従来型の科学技術計算用クラスタの欠点であった、計算性能、メモリ性能、ネットワーク性能のバランスの欠如を、コモディティ技術をベースにしたハードウェアとソフトウェアの開発により解決し、大規模科学技術計算に耐えるシステムを実現しています。

“PACS-CS”は、日本において開発された高性能計算機としては、“地球シミュレータ”に続く第二位の 14.34 テラフロップス(每秒 14 兆 3400 億回)のピーク計算性能を実現します。国産のクラスタ用基本ソフト SCore を搭載稼動する中で、世界最大・最高速のクラスタ型計算機です。

“PACS-CS”の開発・製作は、計算科学研究センターと、株式会社日立製作所及び富士通株式会社との三者連携により行われ、我が国における科学技術向けの最先端高性能計算機技術の維持・強化の観点からも大きな意義を有するものです。

計算科学研究センターでは、今後“PACS-CS”を使って、これまで謎とされてきた素粒子の性質や、生命現象を司るたんぱく質の性質などについて、野心的なシミュレーションを実行する予定であり、これらの分野において大きな進歩が期待されます。



○ 概要

国立大学法人筑波大学【学長岩崎洋一】計算科学研究センター【センター長宇川彰教授】では、平成 17 年度より、国立大学法人運営費交付金特別教育研究経費の交付を受けて、素粒子・宇宙や物質・生命の研究を牽引する、最先端型の超並列クラスタ計算機“PACS-CS”の開発・製作を進めて来ましたが、同機が7月1日より稼動を開始しますので、その概要と特徴のご紹介及び見学会を開催します。

○ 研究の背景

スーパーコンピュータは、自然科学から工学に至る科学技術のあらゆる分野で、高度の研究を進めるためには不可欠のエンジンとなっています。

筑波大学は、計算科学研究センターを中心として、超並列型のスーパーコンピュータの開発・製作と、それをを用いた物理学を始めとする科学の研究に高い実績を有しています。

近年、Intel に代表されるプロセッサや、イーサネット等の汎用のIT技術の急速な進展と低価格化に伴い、汎用の部品を用いたクラスタ型計算機が、従来型スーパーコンピュータに替わり、急速に普及を始めています。

しかしながら、従来のクラスタ型計算機は、プロセッサの計算性能に比して、プロセッサにデータを供給するメモリ性能と、プロセッサ間でデータを交換するネットワーク性能が貧弱であり、大規模な科学技術計算処理に対しては実効性能が上がらず、スーパーコンピュータに比してその有効性に限界がありました。

○ 研究の経緯

計算科学研究センターでは、平成 17 年度より文部科学省から国立大学法人運営費交付金特別教育研究経費を受け、3 カ年計画で、「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」事業(責任者 センター長 宇川彰)を推進しています。

この事業は、従来型クラスタ計算機の欠点を克服し、大規模な科学技術計算に適した性能・機能を有する超並列型クラスタ計算機“PACS-CS”を開発・製作し、これを用いて、素粒子・宇宙や物質・生命の先端的な研究を推進しようとするものです。

“PACS-CS”の開発・製作に当たっては、科学諸分野の研究者と計算機工学者(総勢38名)が協力して、実際の計算を高い効率で行うために必要とされる計算性能、メモリ性能、ネットワーク性能と、それを満足するためのハードウェアとソフトウェアの検討と開発を行い、株式会社日立製作所(システム全般)及び富士通株式会社(ネットワーク・ソフトウェア)と契約を結び、実際の開発・製作を進めたものです。

○ 成果の内容

システムの特徴

“PACS-CS”は、2560 台の計算ノードを総計 20480 本のギガビットイーサネットケーブルで結合した超並列型のクラスタ計算機です。全体で 14.34 テラフロップス(毎秒 14 兆 3400 億回)のピーク計算性能、5 テラバイトのメモリ、819 テラバイトの分散ディスクを持っています。計算科学の大規模計算を実現可能とする特徴は次のとおりです：

- 1) 計算性能とメモリ性能のバランスを保つため、計算ノードのプロセッサ数は 1 個に絞り、高速メモリを設置したこと。
- 2) 計算ノードを結合するネットワークとして、ノードあたり 6 本のギガビットイーサネットケーブルを用いる 3 次元ハイパクロスバ構造の採用により、高いネットワーク性能と柔軟さを低コストで実現したこと。
- 3) 国産のクラスタ基本ソフトウェアとして国際的に評価の高い SCore を採用し、3 次元ハイパクロスバに対応するネットワーク・ソフトウェアの開発を行って高いネットワーク性能を実現したこと。

リンパック(Linpack)ベンチマークとランキング

高性能計算機システムの性能評価として代表的な標準とされているリンパックベンチマークに対しては 10.35 テラフロップス(毎秒 10 兆 3500 億回)を実現します。

日本における高性能計算機システムの設置状況は表 1 のとおりであり、“PACS-CS”は我が国で開発された高性能計算機としては、地球シミュレータについて第二位の位置を占めるものとなります。

また、SCore を搭載するクラスタとして、世界最大のノード数と世界最高速の計算性能を持つものとなります。

産学連携

“PACS-CS”は株式会社日立製作所及び富士通株式会社との協力により開発・製作されています。科学技術向けの高性能計算機の開発・製作は最先端IT技術として、日本が高い水準を誇ってきた分野であり、今後も一層の強化が望まれています。メーカーと大学の協力はこのような技術の維持・強化と当該分野における若手人材育成に重要な役割を果たすものです。

○ 今後の予定

計算科学研究センターでは、今後“PACS-CS”を用いて、これまで謎とされてきた素粒子の性質や生命現象を司るたんぱく質の性質などについて、野心的なシミュレーションを実行し、計算科学の進展を図る予定です。

表1 国内に設置された高性能計算機 (平成 18 年 6 月 27 日現在)

システム名称	メーカー名	設置機関	稼動年月	Linpack 性能
“Tsubame”	Sun (米国)	東京工業大学学術国際情報センター	2006 年 4 月	38.18Tflops
地球シミュレータ	NEC (日本)	地球シミュレータセンター	2002 年 3 月	35.86Tflops
BlueGene/L	IBM (米国)	産業技術総合研究所生命情報科学研究センター	2005 年 3 月	18.20Tflops
BlueGene/L	IBM (米国)	高エネルギー加速器研究機構	2006 年 3 月	18.20Tflops (2 台)
Altix 3900	SGI (米国)	日本原子力研究開発機構	2005 年 4 月	11.81Tflops
PACS-CS	日立・富士通 (日本)	筑波大学計算科学研究センター	2006 年 6 月	10.35Tflops
SR11000/K1	日立 (日本)	気象庁	2005 年 10 月・11 月	8.89Tflops (2 台)
Super Combined Cluster	富士通 (日本)	理化学研究所	2004 年 3 月	8.73Tflops
PrimePower HPC2500	富士通 (日本)	名古屋大学情報基盤センター	2005 年 3 月	6.86Tflops
Super Cluster	IBM (米国)	産業技術総合研究所グリッド研究センター	2004 年 3 月	6.16Tflops

○ 用語解説

並列計算機と超並列計算機

多数のプロセッサをネットワークで結合したタイプの計算機。プロセッサ数が数千個から数万個以上の場合には超並列型と呼ぶ。

クラスタ計算機

Intel 製等の汎用のプロセッサをギガビットイーサネットやミリネット等の汎用のネットワークで結合するタイプの計算機。

メモリ性能

計算のためのデータを、データを格納してあるメモリから、計算を行うプロセッサに送る速さ.

ネットワーク性能

プロセッサの間で計算のためのデータをやり取りするときのデータを送る速さ.

ギガビットイーサネット

現在最も良く使われている汎用ネットワークの規格. 最高で毎秒 10 億ビットのデータを送り、同時に受け取ることができる.

リンパック Linpack

米国テネシー大学の Jack J. Dongarra 氏により開発されたベンチマークプログラムで高性能計算機の評価に標準的に用いられる.

SCore クラスタソフトウェア

経済産業省リアルワールドコンピューティングプロジェクトを推進した技術研究組合新情報処理開発機構で開発され、PC クラスタコンソーシアムにより開発・配布されている、クラスタシステムソフトウェア.

○ 関連情報

計算科学研究センターホームページ <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp>

“PACS-CS”プロジェクトホームページ <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/PACS-CS/>

○ 問い合わせ先

宇川 彰 研究代表者 教授 計算科学研究センター長

数理物質科学研究科物理学専攻

電話 029-853-6485

e-mail ukawa@ccs.tsukuba.ac.jp

朴 泰祐 “PACS-CS”開発担当主査 教授 計算科学研究センター

システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻

電話 029-853-5518

e-mail taisuke@is.tsukuba.ac.jp