



円管内水流中の気泡の挙動予測結果の可視化

科学技術計算事例

インテル® Itanium® 2 プロセッサー

HPC

シミュレーション/可視化



独立行政法人
日本原子力研究開発機構

原子力研究を変革する 超大規模シミュレーションの実現

基礎・応用科学研究におけるコンピューター・シミュレーションは、研究者の研究活動を支援するだけでなく、理論や実験では得られない新しい成果を生み出す手法として大きく期待されている。独立行政法人 日本原子力研究開発機構は、非常に高い大規模シミュレーション需要に応え、インテル® Itanium® 2 プロセッサーを2,048個搭載したスーパーコンピューターを導入し、原子力研究開発のスピードを加速する最先端のHPC環境を実現した。

背景

- ・ 原子力研究開発における計算科学の役割が拡大
- ・ 各研究課題における大規模シミュレーションの需要が急増
- ・ 大規模でありながら高い可用性、運用性を維持できるスーパーコンピューターの必要性

ソリューション

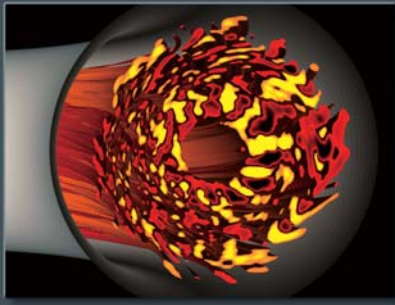
- ・ インテル® Itanium® 2 プロセッサーを2,048個搭載したスカラー並列型スーパーコンピューター「SGI Altix* 3700 Bx2」による大規模シミュレーション
- ・ インテル® Itanium® 2 プロセッサーを搭載した「Silicon Graphics* Prism*」による大規模データの可視化

原子力研究の進展に不可欠となった大規模シミュレーション

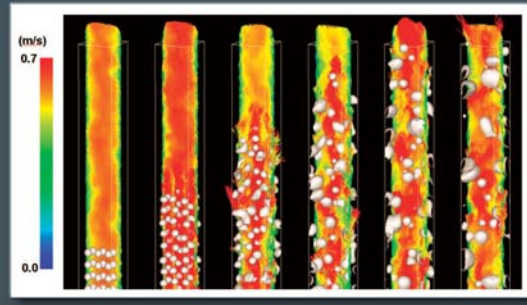
独立行政法人日本原子力研究開発機構(以下、原子力機構)は、2005年10月1日、日本原子力研究所と核燃料サイクル開発機構が統合して誕生した原子力に関する国内唯一の総合研究開発機関である。独立行政法人として新たにスタートを切った同機構は、原子力の基礎・応用研究並びに核燃料サイクルを確立するための研究開発を推進している。

原子力研究では理論・実験研究と同様に、計算科学も重要な分野だ。とくに大規模シミュレーションを支えるスーパーコンピューターの役割は大きい。実験を成功に導くためのシミュレーション、実験の代替として行うシミュレーション、そして実験や理論だけでは創出することが難しい萌芽的研究を行うためにもシミュレーションは用いられる。いまやスーパーコンピューターによる大規模シミュレーションは、原子力研究を推進する上でなくてはならない。

原子力機構においてスーパーコンピューターの導入・運用を担うのがシステム計算科学センターである。同センターでは研究者が円滑に研究を行えるべくほぼ4年置きにコンピューター資源のリプレースを行ってきた。「4年という数字はコンピューター技術の進歩のスピードと導入から運用までのトータルなコストを見合わせて、最もコスト効率のよい期間を導いた」とシステム計算科学センター 情報システム管理室 室長代理 久米 悦雄氏は述べる。



トカマク乱流シミュレーションにおける静電ポテンシャル構造の可視化



矩形流路内上昇流における気泡の成長と軸方向速度分布の予測結果

同センターでは従来まで、リプレースの度に10倍程度の処理性能を持つスーパーコンピューターの導入を行ってきたが、2005年度のリプレースにあたって、従来の比ではない計算性能の向上が望まれた。それは、シミュレーションの利用者数が増大したことのみならず、従来のスーパーコンピューターでは実行すら不可能だった数千億次元の行列計算や数千億格子の流体計算を行うニーズも出てきたからだ。今後の原子力研究開発における大規模科学技術計算の急激な需要増を考慮し、飛躍的な計算性能の向上を図るスーパーコンピューターの導入には、慎重な検討が必要とされた。

インテル® Itanium® 2 プロセッサ搭載のスーパーコンピューターを採用

政府調達となるスーパーコンピューターの要件策定は、公平を期すべく原子力機構の計算需要を代表するユーザープログラムによるベンチマーク・テスト、価格といったファクターのほか、1CPUあたりの性能、全体のメモリー容量、インターコネクトの通信速度など、製品やアーキテクチャーを特定することのない要件が抽出された。

「個々のスペックについては、技術動向を踏まえ、1CPUの性能は6ギガ・フロップス(GFLOPS)以上、メモリーは計算需要から1GFLOPSに対し1GB以上(システム

全体として12テラ・バイト(TB))以上といった具合に決めていきました。しかし、重要なのはスペックだけではありません、24時間365日の常に安定した計算機リソースを研究者に提供するのが我々の役目です。システムの可用性や運用管理にも重点を置きました。スーパーコンピューターのダウンによって多くの研究者の貴重な時間が奪われることは、できる限り避けなければならないのです。」(久米氏)。

研究者が計算機を利用する時間は緻密にスケジューリングされている。「高度なシミュレーション・プログラムは非常に多くの計算機リソースを必要とするため、原子力機構内に設置した委員会での厳格な評価に基づき研究者に利用時間が割り当てられます。研究内容やこれまでの実績に応じて優先順位がつけられるのです」(システム計算科学センター 情報システム管理室 室長 松本 潔氏)。

もう一つの重要な要件は大規模データの可視化だった。シミュレーションの結果を莫大な数値の羅列やグラフだけで見せても十分な理解が期待できない場合が多い。このため、結果を目に見えるかたちで具現化することが求められた。「可視化の目的は、実際に起こっている現象をコンピューター・グラフィックスを用いてビジュアルに再現すること、さらには、仮説をもとにシミュレーションされた結果の正否を検証するためにも行われるのです」(松本氏)

原子力研究における大規模シミュレーションでは、膨大な計算能力とメモリー、そして多量のデータをプロセス間で高速に通信するための仕組みが必要である。また、そのシミュレーション結果を可視化するための効率の良い画像処理システムも不可欠である。

大規模シミュレーションのニーズに応えるため、原子力機構は原子力科学研究所にインテル® Itanium® 2 プロセッサを2,048個搭載した「SGI Altix* 3700 Bx2」を採用した。SGI Altix* 3700 Bx2は、理論演算性能で13テラ・フロップス(TFLOPS)を発揮する。これは従来導入していたベクトル型スーパーコンピューターの約20倍の理論性能を誇る。大規模共有メモリーについては世界最大となる13TBを搭載した。Altix* 3700 Bx2は、16ノード(1ノード、128CPU)で構成される。インターコネクトにはSGIの

独立行政法人 日本原子力研究開発機構

本部：茨城県那珂郡東海村村松4番地49

創立：2005年10月1日

研究内容

- ・ エネルギーの安定供給と地球環境問題の同時解決を目指した原子力システムの研究開発
- ・ 量子ビームの利用のための研究開発
- ・ 原子力の研究、開発及び利用の安全確保と核不拡散に関する政策に貢献するための活動
- ・ 自らの原子力施設の廃止処置及び放射性廃棄物の処理・処分に係る技術開発
- ・ 原子力の研究、開発及び利用に係る共通的科学技術基盤の高度化
- ・ 産学官との連帯強化と社会からの要請に対応するための活動

研究拠点：全国12箇所

「NUMALink*4」を採用。業界最速6.4 GB/秒の高速なノード間通信を実現する。

また、大規模シミュレーションによって得られた大規模データの可視化用サーバーシステムとして、那珂核融合研究所にAltix同様にインテル® Itanium® 2 プロセッサを128個搭載し、専用のグラフィックス装置を有する「Silicon Graphics Prism*」を導入した。

トータルコストと性能とのバランスに優れた、スカラー型スーパーコンピューターが導入されることとなった。さらにSGIのNUMAFlex*グローバル共有メモリー・アーキテクチャーは大容量のメモリー使用を容易に実現し、従来まで巨大メモリーを確保できないことによって実行さえ不可能だったシミュレーション・プログラムを利用可能にした。

原子力機構の大規模シミュレーションを支える

今回設置されたスーパーコンピューターと可視化サーバーシステムは、原子力機構全体から利用できるようになっている。原子力科学研究所設置のスーパーコンピューターの計算データを原子力機構内からアクセスできるよう、磁気ディスク装置「SGI InfiniteStorage TP9300」と共有ファイルシステム「SGI CXFS」を導入。原子力科学研究所と那珂核融合研究所間(約10km)を、WDM装置(波長分割多重装置)を介して接続するストレージグリッド環境の構築により、36 Gbpsという高速データ転送を実現。那珂核融合研究所からは原子力科学研究所の磁気ディスク装置をあたかもローカルディスクのように利用できる。

現在このスーパーコンピューターのユーザーは522名

(平成17年度)いる。1日の利用者は、平均約50名(20~90名)だが、計算機能力の2倍以上の利用申請があり、SGI Altix*3700 Bx2のCPU占有率は80%以上(並列プログラムがCPUを占有していた時間の割合)で、高並列で運用する並列計算機としてはフル稼働の状態だ。このようなフル稼働の状況でもトラブルなく、安定した運用を実現している。

大規模シミュレーションの使い方は、ミクロに向かうものと、マクロに向かうものとに分けられる。「例えば、原子炉事故の原因となる材料腐食のプロセスの解明。これはミクロに向かうシミュレーションです。一方、原子力発電所全体の耐震設計のために行うシミュレーションでは、発電プラント全体の構成要素での地震応答試験を実規模・実形状でシミュレーションを行います。これがマクロな視点でのシミュレーションです。いずれも大規模な並列処理、大規模メモリーを必要とする計算であり、従来のスーパーコンピューターでは計算不可能でした」(松本氏)。これ以外にも、那珂核融合研究所に設置されている臨界プラズマ試験装置JT-60Uにおけるトカマク実験の解析においても大規模シミュレーションが活用されている。トカマクとはトランスの原理を使いドーナツ状容器の中にできるプラズマに電流を流し、太陽の中心温度を超えるプラズマを実現する装置で、現在のところ最も有望な核融合方式。容器内に発生させたプラズマを熱し数億度まで高めた状態でのプラズマの流れ(プラズマ乱流)を計測することは困難であるが、これをシミュレーションで再現することにより、核融合炉の実現に必要な不可欠な炉心プラズマの性能向上に役立つ知見を得ることが目的だ。

導入技術

■ スーパーコンピューター

「SGI Altix* 3700 Bx2」

CPU : インテル® Itanium® 2 プロセッサ
(1.6 GHz) × 2,048個

主記憶 : 13,312 GB

ディスク : 120 TB

OS : SGI Linux* (64 bit)

PE間結合方式 : NUMALink*4

■ 大規模可視化サーバー

「SGI Prism*」

CPU : インテル® Itanium® 2 プロセッサ
(1.5 GHz) × 128個

主記憶 : 1,024 GB

グラフィックス装置 : ATI FireGLグラフィックス × 8

OS : SGI Linux* (64 bit)

PE間結合方式 : NUMALink*4

ソリューション

■ スカラー型スーパーコンピューターによるHPC環境を構築。大規模な並列処理かつ大規模メモリーを必要とする大規模シミュレーションの実行が可能。

■ 大容量の磁気ディスク装置を原子力科学研究所、那珂核融合研究所の双方で共有し、拠点間を高速ファイル伝送装置で接続。拠点を意識することのない大規模シミュレーションと莫大なシミュレーションデータの可視化を実現。

公共性を高める原子力機構で スーパーコンピューターの役割は大きい

原子力機構は、さらに国際貢献にも取り組んでいる。

その1つの取り組みとして、ITER(イーター)プロジェクトへの参画が挙げられる。ITERとは、国際熱核融合実験炉のこと。平和利用のための核融合エネルギー実現可能性の実証を目指す大型国際共同プロジェクトで、現在の参加国は日本、欧州連合(EU)、ロシア、アメリカ、中国、韓国及びインドの7極である。このプロジェクトにプラズマ乱流シミュレーションの研究で参加しているのが、核融合研究開発部門プラズマ理論シミュレーショングループ 研究員 井戸村 泰宏氏だ。この研究成果はITERを高性能化するための基礎データとして活用される。

核融合エネルギーを効率的につくりだすには、プラズマの乱れ(プラズマ乱流)が抑制される断熱層をつくり1億℃以上のプラズマを長い時間、閉じ込めることが重要とされる。この断熱層は、現在、経験的にしか作ることができないため、これを自在にコントロールできることが重要だ。井戸村氏は、現在、プラズマ乱流および断熱層の解明に向けたシミュレーション・コードを開発している。この研究も原子力機構のスーパーコンピューターなくしては不可能である。「今回のスーパーコンピューターが導入されるまでは、メモリーが少なくとも計算可能な粒子シミュレーションを行っていましたが、この手法は実際のトカマク実験をモデル化する上で限界がありました。その100倍スケールのメモリーが必要とされる格子シミュレーションが計算可能になったことで、モデル化の限界を乗り越えてより実験に近い状況を再現し、断熱層形成の物理プロセスにまで切り込んでいけるようになりました。」(井戸村氏)。

現在、井戸村氏が開発したシミュレーション・コードは1536CPU、9TBメモリーを用いる超並列計算において、対理論性能比17.2%という高い処理性能を達成している。並列度の高いプログラム実行を実現するインテル® Itanium® 2 プロセッサのEPICアーキテクチャーと命令の緻密なスケジューリングを行うインテル・コンパイラー バージョン9.1の高性能、高速なプロセス間通信を実現するSGIのNUMAアーキテクチャーとが相まって、大規模シミュレーション・コードに対する高い処理性能を発揮しているといえる。

ビジネス・ソリューションについてさらに詳しい情報は、

下記サイトにてご覧いただけます。

<http://www.intel.co.jp/jp/solutions/>

ソリューション・インテグレーター

sgi®

©2006 Intel Corporation. 無断での引用、転載を禁じます。

*Intel、インテル、Intelロゴ、Intel. さあ、その先へ、ロゴ、Itanium、Itanium Insideロゴは、アメリカ合衆国およびその他の国におけるIntel Corporationまたはその子会社の商標または登録商標です。

*その他の社名、製品名などは、一般に各社の商標または登録商標です。

*性能に関するテストや評価は、一定のコンピューター・システム、コンポーネント、またはそれらを組み合わせて行ったものであり、使用するハードウェア、ソフトウェアの設計、構成等の違いにより、結果が異なる場合があります。

JP/0605/???/AT/SBDG/KI 312812-001JA

投資効果

■ コストパフォーマンス

前代のベクトル型スーパーコンピューター(理論性能620 GFLOPS)に比べてトータルコストを抑えながら、約20倍(13 TFLOPS)の理論性能を実現。

インテル・プラットフォームによるスカラー型スーパーコンピューターの優位性を立証。

■ 高可用性と連続稼働を実現

サービス開始から今日まで平均80%を超えるCPU占有率で運用。ダウンタイムの少ない連続稼働を実現し、ノード稼働率は常時95%を超える。

