

新しいスーパーコンピュータシステム

電子計算機室



平成 11 年度末に稼働を開始し、実質的に昨年度当初から公開された計算科学研究センターのスーパーコンピュータシステム（以下、本システム）について、その性能、機能などの概要を解説し、この一年の利用状況を報告する。

1. 構成、スペックと実効性能

本システムは、富士通製 VPP5000（以下 VPP）と SGI 社製 SGI2800 / Origin3800（以下 SGI）から構成されている。¹⁾ VPP はベクトル演算器を持つ分散メモリー型計算機、SGI は cc-NUMA（cache-coherent Nonuniform Memory Access）方式による論理共有メモリーの超並列計算機である。それぞれの構成とカタログ性能は次のとおりである。

1.1 Fujitsu 製 VPP5000

(1) 演算処理装置 (30PE)

主記憶容量 256 GB
総理論演算性能 288GFLOPS (9.6GFLOPS / PE)

(2) 磁気ディスク装置 (アレイディスク)

総容量 3.5TB (18GB_9ドライブ / RAID、24RAID)

1.2 SGI 製 SGI2800 / Origin3800

(1-1) 演算処理装置 (SGI2800 / 192CPU)

プロセッサ MIPS RISC R12000 300MHz
主記憶容量 192 GB
総理論演算性能 115 GFLOPS (0.6GFLOPS / CPU)

(1-2) 演算処理装置 (Origin3800 / 128CPU)

プロセッサ MIPS RISC R12000 400 MHz
主記憶容量 128 GB
総理論演算性能 102 GFLOPS (0.8GFLOPS / CPU)

(2) 磁気ディスク装置 (アレイディスク)

総容量 4.6 TB (36GB_8ドライブ / RAID、16 RAID)

それでは、実際にどのくらいの性能が出ているのだろうか。当センターでは、単体 CPU の浮動小数点演算性能を測るために、linpack²⁾ という密行列のガウス消去法で性能を測るプログラムを使っている。³⁾

さまざまな問題サイズに対して VPP と SGI の性能を比較すると、問題サイズが小さくキャッシュに乗る範囲では SGI が速いが、問題サイズが大きくなるにつれてベクトル性能が伸びてくるために VPP の性能が上回るという結果が得られる。問題によって細かいところは異なるが、1000 × 1000 程度までの行列を扱うような比較的問題サイズの小さい計算は SGI が、ベクトル化が効くような大きな問題に対しては VPP が適しているようだ。

2. バッチキューの構成と利用形態

本システムでは、利用者が公平に各マシンを利用することができるように次ページの表のようにキューを設定し、主にバッチジョブ形式での利用を推奨している。

並列計算は、VPP においては全体の 3 分の 1 程度までの演算装置を利用した並列計算が可能である



写真1 主機室に配置されたVPP5000（左）とSGI2800（右）

が、単体演算装置での高度にベクトル化された計算に対する需要が多いために、これ以上のリソースを並列計算に割り当てることは難しい。一方、SGIにおいては、8並列、16並列、32並列、64並列で利用できる各キューが用意されており、それぞれ

のプログラムに適した並列度合いを選択して実行できるようにになっている。並列化の方法に関しては、VPPではMPI等のメッセージパッシングライブラリを利用しなければならないが、SGIではこのような明示的な並列化以外に、自動並列化コンパイラを

表1 VPP5000のバッチキューの構成

キュー名	CPU時間	主記憶(標準値)	多重度	ノード数	1ユーザ制限	1グループ制限	備 考
V1	6時間	512MB	3	3	1	2	V2,jobexecとノード共用
V2	12時間	12GB(1.5GB)	12	3	1	1	
V3	24時間	15GB(7GB)	4	2	1	1	
V4	24時間	7GB(3GB)	15	14(24)	1	2	VP6が空の時24利用可
V5	48時間	7GB(3GB)	15	14(24)	1	2	VP6が空の時24利用可
VP6	12時間	7GB × 10	1	10	1	1	ベクトル並列ジョブキュー
jobexec	1時間	7GB × 2		2	1	1	会話処理で並列計算
会話処理	30分	256MB		1	-	-	コンパイル・リンク他

表2 SGI2800のバッチキューの構成

キュー名	CPU時間	主記憶	多重度	CPU数	1ユーザ制限	1グループ制限	備 考
G1	12時間	8GB	4	4-8	2	2	並列ジョブ(SGI2800)
G2	24時間	16GB	2	9-16	2	2	並列ジョブ(SGI2800)
G3	48時間	32GB	3	32	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G4	24時間	64GB	1	64	1	1	並列ジョブ(SGI2800)
G2S	24時間	16GB	8	9-16	2	4	並列ジョブ(Origin3800)
G5S	24時間	128GB	無制限	128	-	-	特別申請(Origin3800)
会話処理	2時間	1GB	4	1-4	-	-	8CPU(Origin2000)



利用することによって、比較的簡単に並列計算を行うことができる。並列化による性能の向上は、プログラムの内容に大きく依存するため一般的にその効率を見積もることは難しいが、分子動力学計算など通信の比率の少ない計算においては、100%に近い効率を達成しているプログラムもあるようである。

3. パッケージプログラムの利用状況

本センターでは、Gaussian、GAMESS、Molproといった、いわゆる量子化学計算のための汎用パッケ

ージプログラムの利用が多く、本システム上でもそれぞれの計算に適したキューを選択して実行されている。VPPでは、大規模な行列の対角化が含まれる計算など、比較的ベクトル化率の高い計算が効率よく実行できる。SGI上では、これらのパッケージプログラムを利用しても16並列程度まで効率よく実行できる計算もあるようで、例えばGaussianでのベンチマークによると、DFT計算は比較的効率よく並列化ができていようである。下のグラフは並列化によって計算速度がどの程度上がるかを示した一例

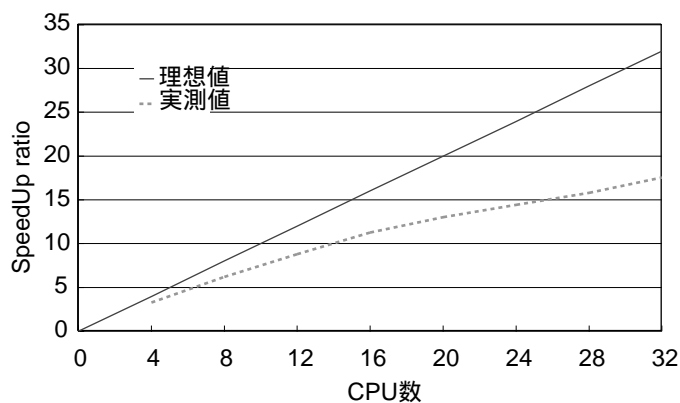


図1 SGI2800での並列計算の速度向上比

表3 昨年度のCPU利用状況

年月 マシン名	CPU使用時間				VPU時間	
	VPP5000	利用率 (%)	SGI2800	利用率 (%)	VPP5000	利用率 (%)
平成12年4月	8,963	47	60,558	39	6,248	33
5月	8,846	43	88,362	49	6,044	29
6月	8,544	40	52,923	29	6,202	29
7月	9,709	45	51,228	28	7,437	35
8月	11,172	51	53,594	28	8,825	40
9月	9,505	47	50,572	29	7,383	36
10月	12,010	63	25,385	14	9,473	50
11月	13,460	70	43,283	26	10,468	54
12月	16,236	74	48,706	26	12,151	55
平成13年1月	15,905	78	34,793	20	11,730	58
合計	114,350	56	509,404	29	85,961	42

〔注〕VPP5000のCPU、VPU時間は30PEの合計。SGI2800のCPU時間は192CPUの合計である。

であるが、利用CPU数が少ない間は効率よく並列化されていることがわかる。並列化効率がどこで頭打ちになるかは問題によって大きく異なるので、詳細はセンターのWEBページ等の情報を参考にしてほしい。⁴⁾

4．平成12年度の利用状況

今年1月までのCPU利用状況を表3に示す。並列キューの構成などを効率がよくなるように修正をしてきた結果、特にVPPではCPU利用率も徐々に上昇して70%前後と、かなり高い状況が続くようになってきた。VPU時間とはベクトルプロセッサの動作時間をあらわし、ベクトル化率の高い計算が実行されるほど利用率が上がることになる。

5．今後の運用方針

この10年程度の間には各研究室に高性能ワークステーションが普及し、また現在、急速にパーソナル

コンピュータの性能が向上しており、問題によっては、これらのマシンの性能が本システムの単体CPU性能を上回る場合もあるようになってきた。小規模の数値計算に関しては、より安価に、手軽に実行できる環境が整いつつあるということで歓迎すべきことであるが、これは逆に、本システムのような高性能スーパーコンピュータに対しては、よりいっそう大規模計算の需要が高まるということをしている。

この一年間は、主に新しいマシンに慣れるために幅広い計算を受け入れるようにキューを構成し運用してきた。今年度は、これに加えて特別申請という利用形態が始まっている。これは、一定期間、特定のグループに本システムの一部を貸し出す形で利用してもらう方式で、大規模計算を実行しやすくするためのものである。特別申請での利用は、平成13年度前期はSGIシステムのうちOrigin3800(128CPU)部分のみ、後期からはVPPの一部も使うこ



とができるようになるが、通常のバッチキューの運用とのバランスを考えて調整していくことが必要であると考えている。

参考サイト

- 1) さらに詳しい情報は、計算科学研究センターの Web Page (<http://www.rccs.orion.ac.jp/>) を参照。
- 2) linpackc も含めて各種のベンチマークプログラムは、Netlib (<http://www.netlib.org/>) より入手可能。
- 3) さまざまな CPU に対して、linpackc の実効性能をセンターで測定した結果は、計算機室便利帳 (<http://ccinfo.ims.ac.jp/network/>) 以下の該当ページを参照。
- 4) センターで運用している各種パッケージプログラムのベクトル化、並列化に関する情報は、<http://ccinfo.ims.ac.jp/bench/> を参照。

不等刻線間隔平面回折格子分光器 BL4B

極端紫外光実験施設 繁 政 英 治

極端紫外光実験施設 (UVSOR) では創設期からいろいろなエネルギー領域で分光器や測定装置を整備してきた。しかし、放射光分光技術に格段の進歩を遂げている他の新しい施設と比較すると創設来 17 年以上も経た UVSOR の分光性能に劣るものが数カ所見られるようになった。そこで特に遅れをきたしていると思われた 100 eV から 800 eV 付近までのエネルギー領域 (イオウやリンの 2p 内殻や炭素、窒素、酸素の 1s 内殻を励起) をカバーする高性能な分光器の開発を目指して、繁政が着任した平成 11 年前期に研究系 (小杉、高田) と施設 (繁政、下條) の連携チームを編成し直ちに設計を開始した。初期のレイトレースによる設計作業は、高エネルギー加速器研究機構や東京大学理学部の研究者とも意見交換しながら主に高田 (現理研) が担当し、最終的に不等刻線間隔平面回折格子分光器を採用するに至った。その後、平成 12 年後期より小杉グループの新メンバー (初井、陰地、永園) を加え、BL4B への設置作業を開始し、同 12 月より放射光を導入して調整と性能チェックを行った。なお、立ち上げの際、出射部との繋ぎ込みでは UVSOR の中村技官、分光器の制御では UVSOR の近藤技官、ビームラインインターロックでは装置開発室の豊田技官の協力が不可欠であった。また、建設計画の遂行にあたっては、かなり無理な予算申請をしたにも関わらず、茅所長にはいろいろとご配慮頂いた。この場を借りて感謝したい。この分光器の特長は、1) 回折格子の偏角 (入射角 + 回折角) が一定な定偏角型の分光器であり、出射光の方向や集光位置が一定である、2) 集光素子と分散素子が分離しており、調整が容易であ

る、3) 回折格子の回転のみで波長操作が可能であり、波長再現性などの信頼性が高い、4) 回折格子の刻線密度をパラメータとして収差補正を行っており、高分解能が達成できる、等があげられる。2 種類 (800 l/mm 及び 267 l/mm) の回折格子を真空中で切り替えることによって、目的のエネルギー範囲全域で高分解能の光が得られる仕組みとなっている。

テストの結果、入射スリット幅を 25 μm –10 μm に設定した時 (800 l/mm の回折格子の場合、400 eV において分解能 5000 程度に相当) 90~1000 eV の光エネルギー領域において、 10^8 – 10^{10} photons/sec の光強度である事が確認された。分解能に関しても、綿密に光学素子の調整を行った結果、スリット開度に依存して望みの高分解能が得られることが確認された。図示したように振動構造が明瞭に分離された窒素分子の K 殻吸収スペクトルが観測され、文献等との比較から、400 eV 付近での最高到達分解能 ($E/\Delta E$) は設計段階での目安の 5000 (余裕を見て見積もった値) を遙かに上回ることが判明した。更に、現在計画中の UVSOR 電子蓄積リングの高度化が実現すれば、同じ分解能の時の光強度が数倍になることが予想され、世界的な競争力も増すと思われる。高度化計画が、近い将来に実現することを切に希望する。内殻励起領域で振動構造を分離できる高性能分光器が完成したことにより、内殻励起分子の構造、電子構造、光化学反応などの詳細を解明する研究が展開することが期待される。平成 13 年度前期は、高分解能を活かした対称性分離イオン分光法や光電子分光法による性能評価を兼ねた実験を分光器建設グループが中心になって行う。特に大きな問題がなけれ



ば、後期から協力研究ビームラインとして一般に公開する。

