
東京大学物性研究所スパコン共同利用の紹介

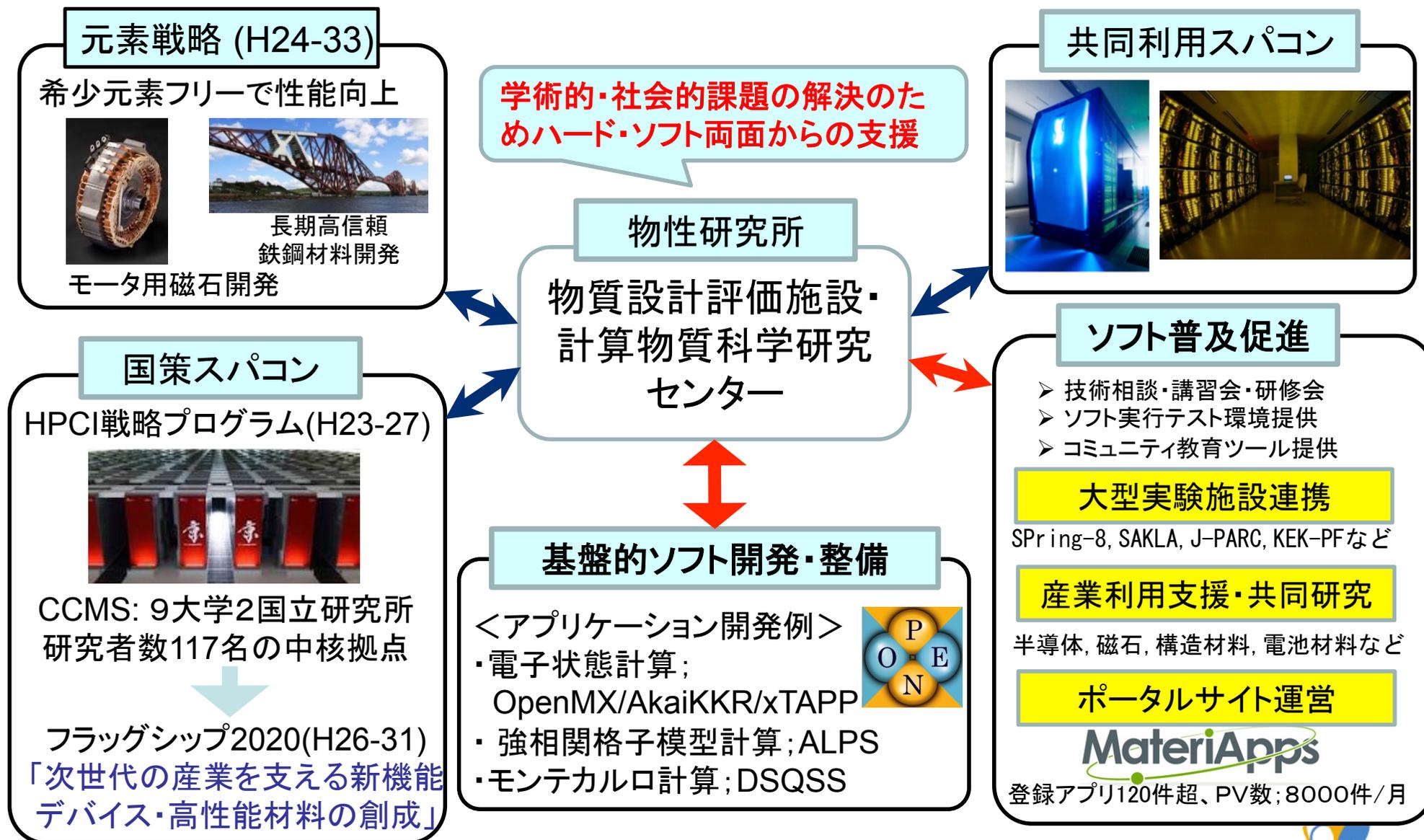
渡辺宙志

東京大学物性研究所
物質設計評価施設 助教

Jun. 24, 2015@PCクラスタワークショップ in 柏2015

日本の物質科学研究と物性研究所の役割

計算資源提供を核とした全国の計算物質科学研究者の活動の中心
分野の基盤的アプリケーション開発を通じたソフトウェアインフラ整備を展開



物性研スパコンの歴史 (1/4)

1960年～1995年 (スパコン導入以前)

富士通 FACOM 202 (PC2)

富士通 FACOM 270-30

富士通 FACOM 320-48

富士通 FACOM M-160F

富士通 FACOM M-360

富士通 FACOM M-380R

富士通 FACOM M-380

FACOM-202 (パラメトロン式)



※ MシリーズはIBM互換機

主な計算物理:

金属・イオン結晶のバンド計算

量子モンテカルロ法

遷移金属中不純物の電子状態計算

ハバードモデルの数値対角化計算

ハバードモデルの量子モンテカルロ計算



物性研スパコンの歴史 (2/4)

1995年～2000年 (スパコン第一期)

導入マシン:

富士通 VPP500(40 CPU) [64 GF]
 SGI Origin 2000(24CPU)
 Intel Paragon(66 CPU) ※ VLIW

レプリカ交換法
 スピングラス問題の数値計算による検証
 カーボンナノチューブのエキシトン
 ヘテロダイヤモンド構造 BC2N の第一原理計算
 非平衡緩和法

2000年～2005年 (スパコン第二期)

ベクトル機とスカラ機の二本立て

システムA (ベクトル):

日立 SR8000/60 [720 GF]

システムB (スカラ):

SGI 2800/384 [230 GF]

量子モンテカルロ法の並列化
 経路積分繰り込み法
 ハイゼンベルグスピングラス
 アンダーソン局在

数値行列対角化法によるアンダーソン局在のスケール理論の検証
 カーボンナノチューブの電子状態計算
 表面への水素原子吸着の第一原理計算

HITACH SR8000



SGI 2800



物性研スパコンの歴史 (3/4)

2005年～2010年 (スパコン第三期)

システムA (ベクトル)

日立 SR11000 [5.8 TF]

システムB (スカラ)

SGI Altix 3700 [7.7 TF] ※ VLIW

※システムBの計算能力>システムA

2バンドハバードモデルの動的平均場近似計算

帯電した表面付近の第一原理分子動力学計算

遷移金属化合物での巨大スピンホール効果

蛋白質結晶における水和効果の分子動力学計算

ナノ構造体の密度汎関数計算

価数転移の量子臨界点近傍に出現する超伝導

ジョセフソン接合配列での非線形電気伝導・レオロジー

2010年～2015年 (スパコン第四期)

システムA (ベクトル)

NEC SX-9 [6.6 TF]

システムB (スカラ)

SGI Altix ICE 8400EX [180 TF]

※システムBの計算能力>>システムA

SGI Altix ICE



NEC SX-9



カゴメ格子ハイゼンベルグ反強磁性体

高強度パルスレーザー伝播の第一原理計算

遷移金属酸化物の第一原理計算



物性研スパコンの歴史 (4/4)

2013年～2016年 (システムC)

物性研究所がHPCI戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」の代表機関に物性分野のユーザを「京」に導く

導入マシン:

富士通 FX10 [90.8 TF]
「京」の練習機

2015年～2020年 (スパコン第五期)

SGI ICE XA/UVハイブリッドシステム

- ・FATノード 大容量共有メモリ
- ・CPUノード 分散並列
- ・ACCノード アクセラレータ (NVIDIA Tesla K40)

「高バンド幅」から「大容量共有メモリ」へ
物性研としては初めてアクセラレータを導入



物性研スパコン共同利用システム (1/3)

利用資格者

研究代表者

国・公立大学、私立大学及び国公立研究機関の教員、研究者
ならびにこれに準ずる者で、物性科学に関する研究に携わる者

共同研究者

大学院生等を含む、上記以外の研究者

利用条件

- ・ **利用料金は原則として無料**
- ・ 利用申請には課題申請書を提出
 - ・ 利用する形態、計算資源の規模に応じて様々な「申請クラス」を用意
- ・ **申請された課題はピアレビューにより審査**
- ・ 審査により、課題の採否、および提供する計算資源を決定

利用ポイント制

計算資源は「ポイント」という形で配布

1ポイント ~ 1ノード日

ディスククォータの上限を上げる場合も消費



物性研スパコン共同利用システム (2/3)

申請クラス種別

大きくわけて「定期申請クラス」と「随時申請クラス」の二種類

定期申請クラス

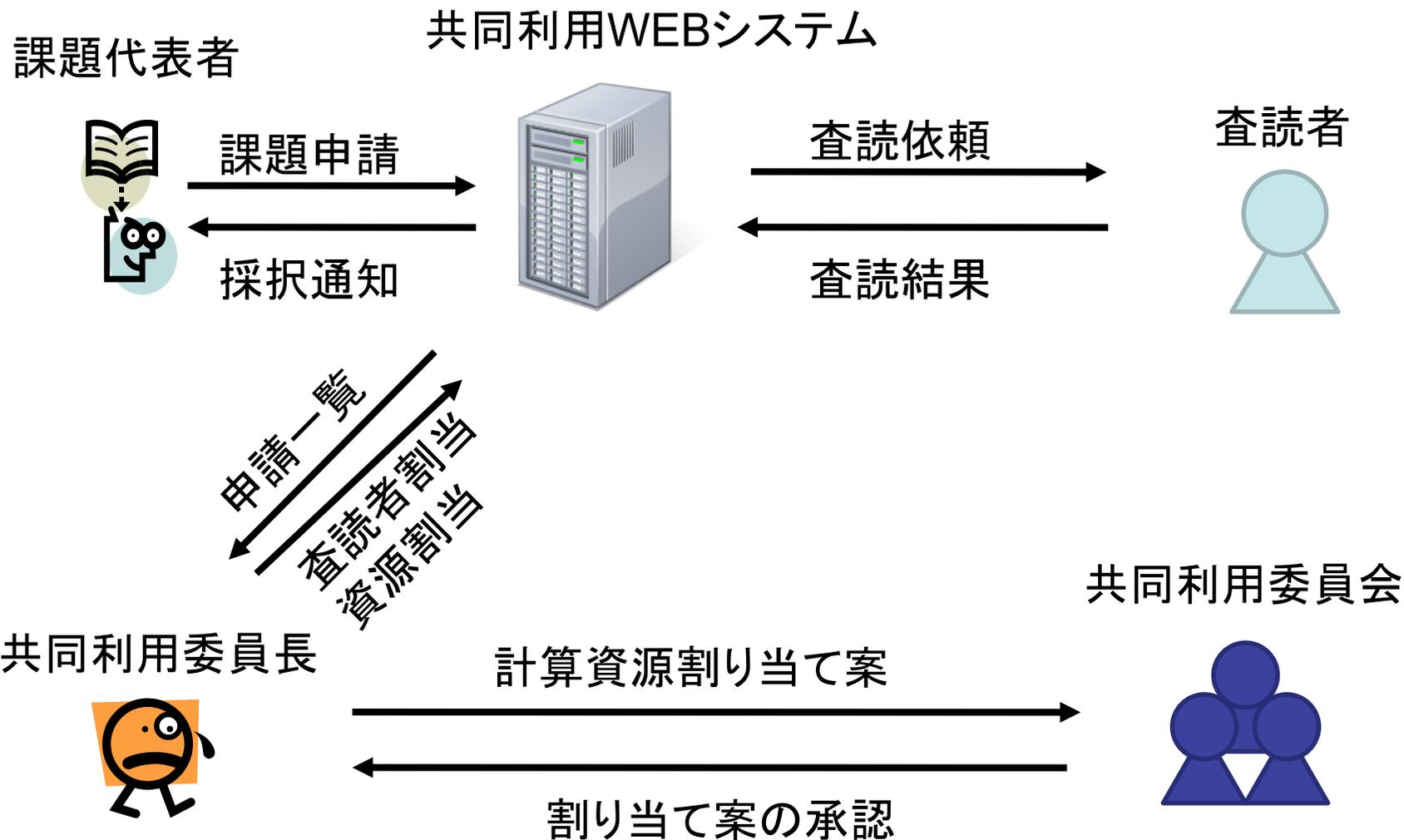
- ・Bクラス(小型)、Cクラス(中型)、Eクラス(大型)、Sクラス(特別)
- ・年2回、6月と12月に受付。利用期間は採択されてから年度末まで。
- ・12月受け付け→来年度4月より年度末まで利用 (前期)
- ・6月受け付け→同年10月より年度末まで利用 (後期)
- ・Sクラスのみ、利用期間は前後期にかかわらず採択されてから1年間

随時申請クラス

- ・Aクラス(軽量)
 - ・随時申請可能、年度末まで利用可
 - ・お試し利用クラスという位置づけ
- ・Dクラス(緊急)
 - ・随時申請可能、採択後半年間利用可
 - ・研究の進捗が著しく、緊急に計算資源が必要になった課題向け



物性研スパコン共同利用システム (3/3)



新たな取り組み ―ソフトウェア高度化―

学術的・社会的ニーズが高い、物質科学計算用ソフトウェアの開発・高度化
 簡便なシミュレーション環境を物性研スパコン上に構築
 全国共同利用スパコンユーザー層の底上げと科学的・社会的な課題解決

プロジェクト体制（2015年4月開始）

◇ 実行メンバー（計4名）※追加人員によって課題解決機能を強化

☆ コーディネータ（1名/ソフトウェア、物性研スタッフ）

☆ プロジェクトマネージャ(デベロッパー兼)（1名）+デベロッパー（1名）

◇ 対象ソフトウェア

公募で募集。物性研スパコン委員会による審査に基づき、年2件採用。

最終的にはオープンソースソフトウェア(OSS)として公開→科学・社会への貢献。

・ 2015年度実績 (1) 電子状態計算ソフトウェア:伝導計算機能の拡張

(実施中) (2) 格子模型計算ソフトウェア:対象モデル・手法の整備・拡張

課題代表・協力者

<応募時>

- ・ニーズ・目標・作業内容の説明
- ・OSSでの公開に対する同意

<プロジェクト時>

- ・既存コード・実装内容の説明
- ・テスト協力、マニュアルチェック

ミーティング
(隔週程度)



ソフトウェア開発・高度化

<審査時(物性研スパコン委員会)>

- ・ニーズ、将来性、実現性の検討

<プロジェクト時>

- ・スケジュール立案・管理
- ・機能設計、コーディング、チューニング
- ・バージョン管理ソフト導入、マニュアル作成

新たな取り組み —GPGPU移植支援—

計算物性物理のヘテロジニアスコンピューティング化へ向けて
全国共同利用スパコンユーザーへの技術支援

プロジェクト体制（2015年8開始）

◇ 実施体制 ※物性研スタッフと導入ベンダーによる**総合的な技術支援**

☆ 物性研スタッフ

☆ 導入ベンダーのシステムエンジニア数名

◇ 対象ソフトウェア

公募で募集。物性研スパコン委員会による審査に基づき、年3～5件程度採用
GPGPU化で得られた知見を公開、共有

課題代表・協力者

<応募時>

- ・ニーズ・目標・作業内容の説明
- ・物性科学上の重要性

<プロジェクト時>

- ・既存コード・実装内容の説明
- ・テスト協力

ミーティング

GPGPU移植支援

<審査時(物性研スパコン委員会)>

- ・ニーズ、将来性、実現性の検討

<プロジェクト時>

- ・コーディング、性能評価
- ・報告書
- ・技術ノウハウの公開・共有



気泡生成シミュレーション (1/3)

工学応用上「泡」は厄介者

冷却システムで気泡発生→熱交換効率低下
スクリー周りで気泡発生→騒音や腐食

➡ 泡を理解/制御したい

お湯を沸かす
(加熱による発泡)



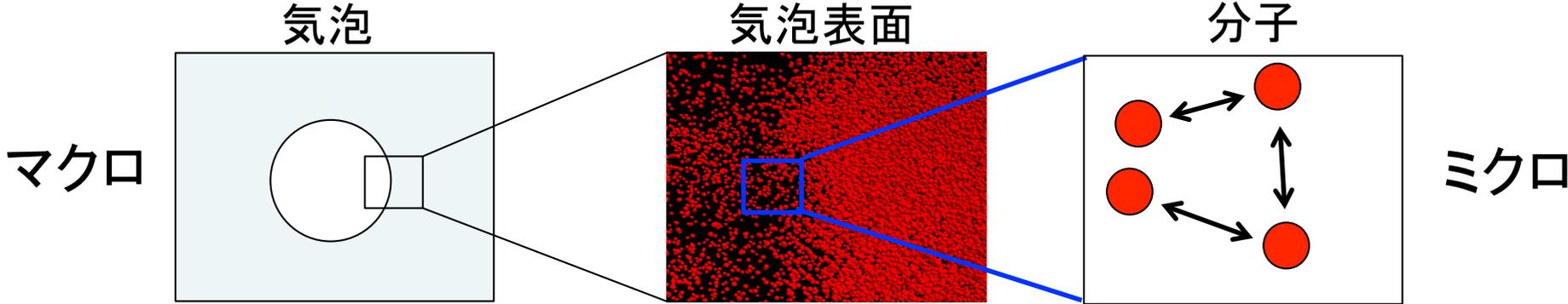
from Wikipedia

スクリーまわりの気泡
(減圧による発泡)



from Wikipedia

泡の発生の研究は難しい
(ナノメートル程度の相互作用がミリ～センチメートル程度の現象を支配)



泡の発生・成長メカニズムを分子レベルから明らかにしたい

コードの開発

擬似Flat-MPI法による並列化

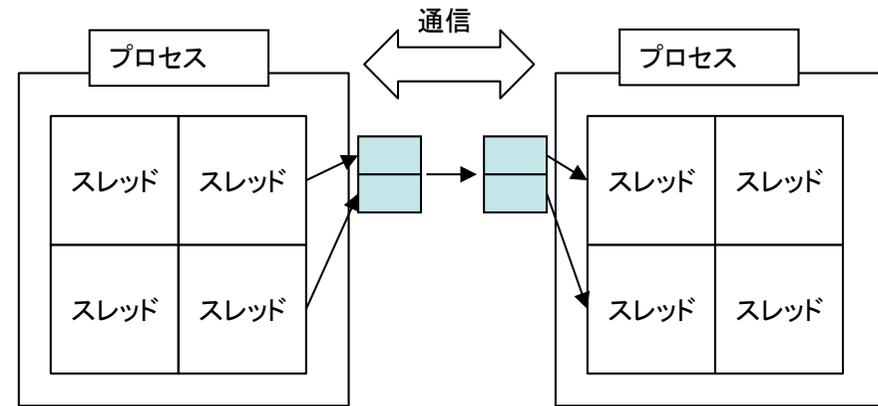
- ・スレッド単位で領域分割
- ・スレッド番号をランクとして扱う

メリット:

- ・Flat-MPIコードからの改修が容易
- ・ホットスポットでスレッド並列とSIMD化を同時に扱わなくて良い

デメリット:

- ・通信が全て二段階に



並列部分のテストはシステムB(SGI Altix)で
カーネル部分のチューニングはシステムC(FUJITSU FX10)で

➡ 物性研スパコンから「京」へ

物理としての準備

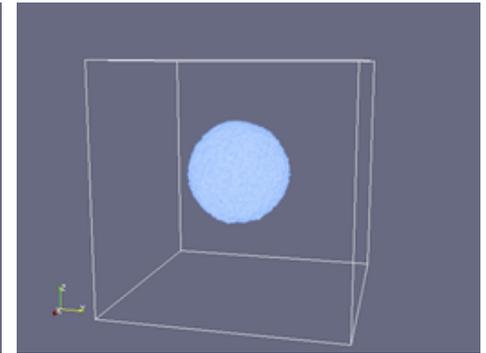
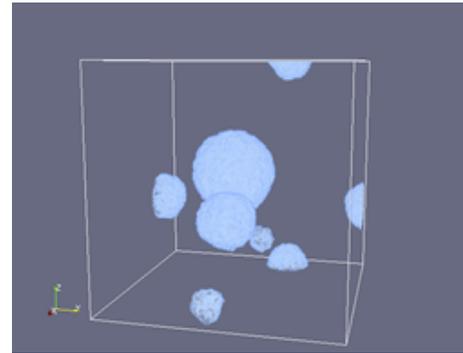
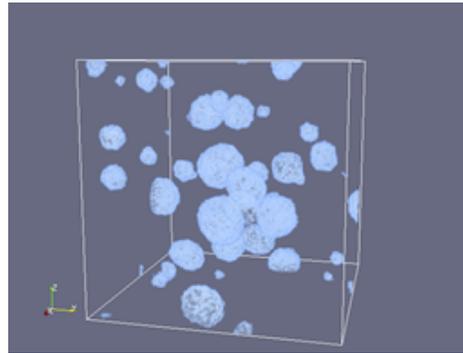
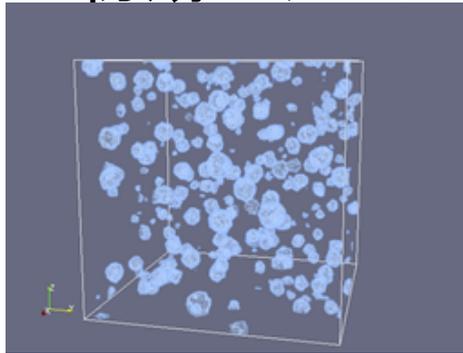
物性研スパコンで、相図の計算、単一/多重気泡生成条件の洗い出し
東大情報基盤センター FX10で大規模計算のテスト(特にデータIOまわり)



初期ステージ

中間ステージ

最終ステージ



多重核生成

気泡間相互作用による「つぶしあい」

単一気泡へ収束

計算規模: 10億粒子の計算。4096ノード×24時間×10回 = 100万ノード時間

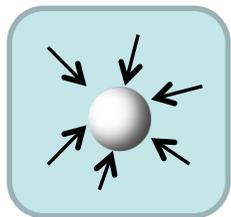
物理現象とスケール

イマココ

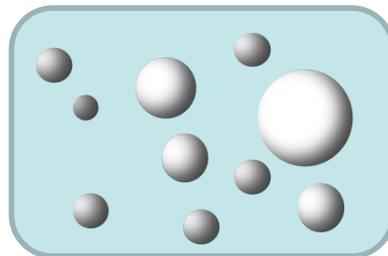
Movie

ミクロ

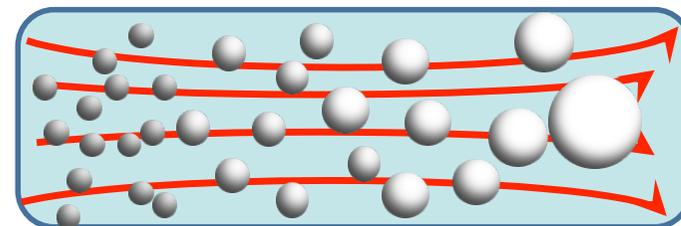
マクロ



気泡生成
10 nm
百万粒子



多重気泡生成
100 nm
十億粒子



気泡流
1 um
一兆粒子



まとめ

物性研共同利用スパコンの役割

- 計算物性物理の中核として
申請→審査→計算資源提供を行う仕組みを構築した
- 計算資源の提供にとどまらない積極的な支援

物性研共同利用スパコンの今後

- 時代に即した計算資源の提供
- 計算物性物理のあり方についての検討
- 計算物性分野の「サロン」としての役割

ハードのまわりには人が集まる
→その「人のネットワーク」を大事にしなければならない

