

スーパーコンピュータを活用して、 スペインのエストレマドゥーラ地域で 経済活性化を目指す COMPUTAEX



LUSITANIA
SUPERCOMPUTADOR DE EXTREMADURA

スーパーコンピュータは一般に、大規模計算用の機器であって、研究や科学 / 産業の分野で利用するものと考えられています。しかしスペインのエストレマドゥーラ地域では、Itanium プロセッサ搭載スーパーコンピュータが、経済成長の起爆剤として働いています。

スペイン南西部に位置するエストレマドゥーラは、マドリード、セビーリャ、リスボンを頂点とする三角地帯の中心に当たります。2000 年前にはローマ帝国に属するルシタニアと呼ばれていた地域です。スペインで最も経済的に遅れた地域で、失業率は 20% を上回っています。これに対処するため、地域政府は 1998 年以来、エストレマドゥーラ地域研究技術開発計画に取り組んでいます。その結果、社会基盤が整備され、社会事業、科学研究、変革のために資源を使いやすくなりました。

さらに大きな成果を目指して、Ministry of Economic Trade and Innovation of the Junta de Extremadura (エストレマドゥーラ議会の経済貿易および改革庁) が、非営利公共事業団 COMPUTAEX を設立しました。次いで 2009 年には、CénitS (エストレマドゥーラ地域スーパーコンピューティング / 技術革新 / 研究センター) を設立しました。このセンターは、LUSITANIA という、きわめて強力で適応性の高いスーパーコンピュータを中心に建設されています。Intel® Itanium プロセッサ搭載の HP Integrity Superdome SX2000 で、さまざまな研究プロジェクトにおける、大量かつ複雑なデータを処理、管理できる設計です。CénitS には、エストレマドゥーラの研究者や技術者を支援する技法やツールを組み込んでいるほか、技術系中小企業を育成するべく、利用しやすく格安のプラットフォームを提供しています。



さまざまな需要に適合した Itanium プラットフォーム

スーパーコンピュータによるシミュレーション処理は、気象変動や放射線被曝の研究において、実験結果や現実世界への影響を理解する上でおおいに役立ちます。CénitS は、エストレマドゥーラの研究者が迅速にシミュレーション結果を得て、スペインにおける社会的、環境的、科学的課題を解決する、革新的な手段を導くために役立っています。全面的に運用が始まった2009年3月以来、Itanium 搭載 Superdome は既に、次のような分野で成果をあげています。

- 化学、精錬、灌漑その他の産業による、環境への影響の予測。
- 生物学や医学の研究。癌、ゲノム、疾病の予測、生物多様性など。
- 地球科学。地質研究、火災予測など。
- 農業およびその経営。家畜繁殖技術から生産シミュレーションまで、さまざまな研究を支援。
- 工業設計。建物、橋梁、航空機、自動車など。
- 気象予報。地球温暖化、局地的な大気効果（温室効果）など。

共有メモリを組み込んだ Itanium アーキテクチャには、一般の並列プログラミング・プラットフォームに比べてプログラムが容易であるという、非常に重要な長所があります。Superdome には、負荷平衡、データ局所性、メモリ消費量、高速通信などの面で、さまざまな長所が備わっていることが、研究者の目にも明らかになってきました。大容量の共有メモリ・ノードを利用し、どのようにすれば最大の処理性能が得られるかを学んだのです。OpenMP 基盤向けに記述したコードをもとに、ノード内プロセス通信には MPI (Message Passing Interface)、ループやスレッドの並列化には OpenMP の機構を組み合わせ、実装します。ある場合には、ハイパー・スレッディング技術により、MPI のライブラリやアプリケーションを使って、スレッドやプロセス同士が頻繁に通信し合うアプリケーション処理をさらに加速しています。

さまざまなプロジェクトで際立つ Itanium の処理速度と適応性

CénitS の研究者は、Itanium プラットフォームやこれに関する知見を活用して、社会的、経済的に効果が大きい、次のようなプロジェクトを遂行してきました。

WACCM (Whole-Atmosphere Community Climate Model、全大気地域気候モデル)。今後の地球気象の動きを予測するには、さまざまな人間活動を想定し、気象変化をシミュレートするための数値モデルが必要です。WACCM は、地表から熱圏(高度 140 km) までにわたる、包括的な数値気象モデルです。NCAR (National Center for Atmospheric Research、米国立大気研究所) における、High Altitude Observatory (HAO) の高層大気モデル、NESL (NCAR Earth System Laboratory) Atmospheric Chemistry Division (ACD) の中層大気モデル、Climate and Global Dynamics Division (CGD) の対流圏





「効率的に数百もの並列プロセスと大量の RAM を扱える Itanium プロセッサの高い能力が、エストレマドゥーラのあらゆる研究プロジェクトに確実な成果をもたらしています。256 以上のプロセス、2 TB に及ぶ RAM を必要とするいくつかの最先端課題が、Itanium 搭載システムを利用して解決できました」

— José-Luis González-Sánchez 教授、
COMPUTAEX/CénitS 総括管理者

モデルを、共通数値フレームワークとして NCAR Community Earth System Model (CESM) を用いて統合したモデルです。次のような重要な科学計算に使われています。

- 過去 20 年、30 年、50 年間のオゾン消滅と、将来の予測
- 11 年の太陽活動周期により引き起こされる大気の変動
- 圏界面（対流圏と成層圏の境界）付近の物理的、化学的变化、特に CO₂ 濃度の増加に伴うもの

WACCM は異種のモデルを統合しているため、通信タスクの多くが非ローカル・プログラムであり、大量のメモリ資源がノード間で伝送されます。Itanium アーキテクチャは並列処理の適応性や拡張性に優れ、数 TB に及ぶ主記憶を操作可能なので、WACCM のシミュレーションには頻繁に現れる、数百の並行プロセスを容易に処理できます。

Itanium の長所

Itanium アーキテクチャは並列処理の適応性や拡張性に優れ、CénitS における計算で必要となる、数百の並行プロセスを容易に処理できます。また、ほぼ 100% の可用性も実現しています。そのため CénitS の研究者は、長時間にわたる科学シミュレーションでも、高速かつ正確に適切な結果が得られるか、心配する必要はありません。

MLFMA-FFT 並列アルゴリズム。電磁気学の知識は、重工業には非常に重要です。CénitS の研究者は電磁気学上の大規模な問題に取り組むため、2つの手法を組み合わせ、それぞれの長所を活かす、革新的なアルゴリズムを開発しました。ひとつは高い拡張性が分散コンピューティングに向いている FMM-FFT (Fast Multipole Method - Fast Fourier Transform、高速多極展開法による高速フーリエ変換の拡張)、もうひとつは優れたアルゴリズム効率が共有メモリ・コンピュータに向いている MLFMA (Multi-Level Fast Multipole Algorithm、多段階高速多極アルゴリズム) です。この技法により Itanium 搭載 Superdome の処理能力を十分に引き出して、実用的、工業的に重要な、超大規模問題の解決に役立てました。計算機電磁気学では、例えば厳密な積分方程式に基づくソルバ (FMM やその派生技法など) が、大量の RAM を消費します。このプロジェクトでは合計 1.6 TB の RAM が必要であり、これは計算ノード当たり 800 GB 以上に相当します。これほどの容量が必要な計算であったにもかかわらず、計算機電磁気学においては前人未踏である、6億2000万以上もの未知数が含まれる問題の分析に成功しました。プロジェクトではまた、79 GHz での自動車の電磁気的振る舞いもモデル化し、自動車産業において、将来のレーダー・センサ設計に直接役立つ成果を得ました。

中性子線量の計算。癌の治療に、放射線がますます効果的に使われるようになってきました。中性子線量の計算プロジェクトは、医師が患者に適切な放射線治療を施し、治療部位以外に照射する危険を最小限に抑えるために役立っています。このプロジェクトでは、デジタル計測機器を照射室に置いて、治療中に患者の各臓器が浴びる線量と同等の、中性子の寄与を評価します。次に、モンテ・カルロ法によるシミュレーションで、各種検出器による線量計の応答を正確に求め、計測の一貫性を担保します。Itanium プロセッサには、制御とデータに関する投機的実行、ソフトウェア的にパイプライン化されたループの自動レジスタ・ローテーション、明示的なデータ/命令プリフェッチ命令など、この種の計算を加速するための機能がいくつか備わっています。このような機能があるので、ハードウェアは命令レベルの並列性を利用して、メモリ遅延を改善し、モンテ・カルロ・シミュレーションを非常に効率的に実行できます。

システム構成

2 台の HP Integrity Superdome SX2000 スーパーノードでは、64 基のデュアル・コア Intel Itanium2 Montvale プロセッサ (したがって各 128 コア) が稼働。このプロセッサは 1.6GHz で動作し、それぞれ 18 MB のキャッシュ、1 TB のメモリ (2 TB に増強可) と、ディレクトリ・ベースのメモリ・コントローラによりキャッシュ一貫性を保証するメモリ・システム、ccNUMA (cache-coherent Non-Uniform Memory Access) を搭載しています。開発に用いたのは HP Integrity rx2660 で、2 基の Itanium-2 デュアル・コア Montvale プロセッサ、16 GB の DDR-2 メモリ、6 基の 146 GB SAS ディスクを搭載しています。2 台の EVA 8100 ストレージ・ユニットで、合計 265.6 TB の容量があります。ファイバー・チャネル・ネットワークには、active-active マルチパス (8 ポート × 4 コントローラ) により 4 台の NAS サーバーがつながっており、HP StorageWorks PolyServe および HP StorageWorks EML 245e (スロット数 245、LTO-4 Ultrium 1840 テープ・ドライブを統合したテープライブラリ) が稼働しています。

SUSE Linux Enterprise (v.10) 上で、Platform LSF (Load Sharing Facility、負荷分散機構)、HP StorageWorks PolyServe NFS、コンパイラ、ライブラリ、バイナリ (Intel、HP その他製) が動作しています。

信頼性、拡張性に優れたリソース

長時間を要する問題を解くためには、拡張性と並行処理だけでは不十分です。CénitS が広範な研究を成功させることができたのは、Itanium 搭載 Superdome が非常に優れた RAS (reliability (信頼性)、accessibility (可用性)、serviceability (保守性)) を備えているからでもあります。例えば、偶発的に発生するメモリ・エラーを訂正するために、エラー訂正メモリが組み込まれています。ハードウェア/ソフトウェア・エラーを避けるための機能はほかにもあり、100% 近い可用性を実現するために役立っています。Superdome の導入により、CénitS の研究者は、非常に複雑な科学シミュレーションも、自信を持って実行できました。シミュレーションが失敗して時間を無駄にしないのではないかと恐れる必要はなく、高速かつ高精度の結果が得られるのです。

これはさらに、エストレマドゥーラ住民の経済復興、希望の復活という自信にもつながっています。