

# 「京」の性能指標について

## Performance index of K computer

一般財団法人高度情報科学技術研究機構  
富山 栄治

独立行政法人理化学研究所が開発したスーパーコンピュータ「京」が、2011年に演算性能の世界1位を獲得した。「京」は約8万個のCPUを持ち、1秒間に1京回の浮動小数点演算を可能とする。「京」の性能を示す様々な指標について紹介する。

「京」が獲得した演算性能世界1位の基準として使用された性能指標はLINPACKベンチマークである。これは、連立一次方程式を計算することによって計算機の演算性能を評価する。

「京」の多角的な性能を示す性能指標として、演算性能だけではなく、メモリ性能、通信性能を含めた複数のプログラムによって構成されるベンチマーク、HPCチャレンジベンチマークがある。「京」はこのベンチマークに基づいて授与されるHPCC賞においても世界一位を獲得した。

さらに、HPC分野において実アプリケーションの実効性能と科学技術計算の成果に対して授与されるゴードン・ベル賞についても、2年連続で「京」を利用した研究が受賞し、研究における計算でもその高い性能が実証された。

その他、電力効率や連続実行時の安定動作信頼性の面でも、「京」は非常に高い性能を達成しておりその完成度の高さを示している。

### 1. はじめに

2011年6月、世界のスーパーコンピュータ演算性能ランキング「TOP500」<sup>[1]</sup>において、日本が誇るスーパーコンピュータ「京」が世界1位を獲得した。さらに、続く11月にも1位を維持した(図1)。日本のスーパーコンピュータとしては地球シミュレータ以来の1位であり、競争の激しいHPC (High Performance Computing) の世界において非常に素晴らしい成果である。しかし、「京」が持つ性能を示す指標はこのTOP500だけではない。

本稿では、スーパーコンピュータの性能はどのように計測する事が出来るのか、どのように解釈することが出来るのか等について出来るだけわかりやすく説明する。本稿を通じて、「京」が達成した様々な性能とその指標に

ついての理解を深めるとともに、日本が世界に誇る「京」から生まれる成果に対する期待を共有して頂ければ幸いである。

### 2. 「京」の紹介

スーパーコンピュータ「京」は日本が世界に誇るHPCシステムである<sup>[2][3]</sup>。愛称を一般公募し、1秒間に1京回(けい。 $10^{16}$ )の浮動小数点演算(例えば $1.2 \times 10^4$ といった数値の表し方で記述される数を用いて行う四則演算で、科学計算でよく用いられる)を実行出来る能力を持つ事、もともと大きな門を表し「計算科学の新たな門」にもつながる、などの理由から「京」と名付けられた。英語での表記は“K computer”である。

2011年6月には開発途中でありながら

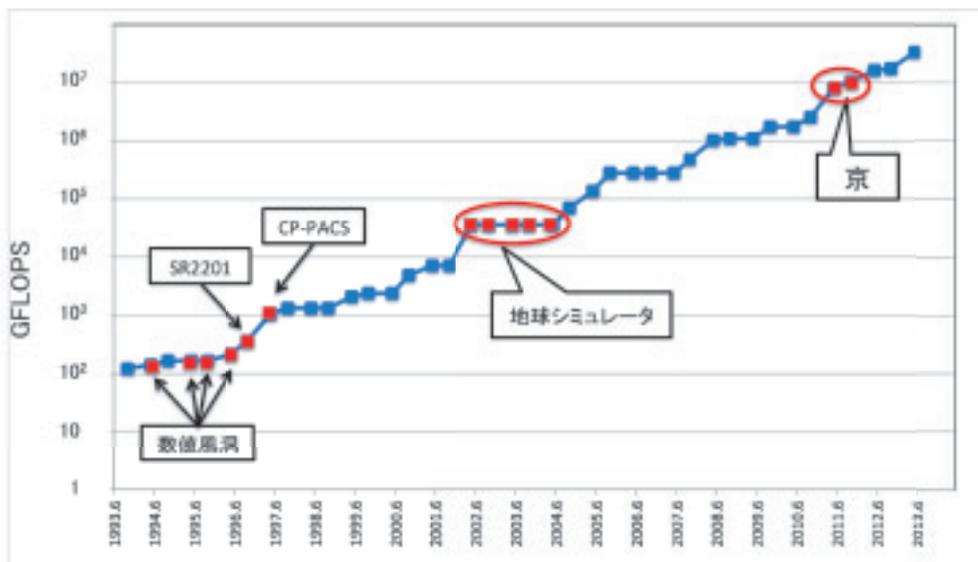


図1 TOP500における1位の推移

表1 近年のTOP500の1位

		システム名	国名	PFLOPS
2013年	6月	天河二号	中国	33.86
2012年	11月	Titan	米国	17.59
	6月	Sequoia	米国	16.32
2011年	11月	京	日本	10.51
	6月	京	日本	8.16
2010年	11月	天河一号A	中国	2.57
	6月	Jaguar	米国	1.76

8.16PFLOPS(ペタフロップス。FLOPSは1秒間に実行する浮動小数点演算数を表す。P=10<sup>15</sup>。他にM=10<sup>6</sup>、G=10<sup>9</sup>、T=10<sup>12</sup>などがある)の演算性能を実現し、見事世界1位を獲得した。当時、世界2位の天河一号Aの2.57PFLOPSに比べ約3倍の性能であった。そして続く11月には最終構成にて計測し、世界で初めて10PFLOPSを達成するとともに、2期連続での1位を獲得した(表1)。

このように華々しい数字が並ぶ「京」であ

るが、そもそも「京」が達成したTOP500の1位とはどのようなものなのか、そして、スーパーコンピュータの性能とは何なのか、について説明していきたい。そのためにまずは、スーパーコンピュータとは何なのか、について簡単に見てみる。

### 3. スーパーコンピュータとは

様々な分野の大規模科学技術計算を行うための超高速処理が可能なコンピュータのこと

を一般にスーパーコンピュータと呼ぶ。超高速処理とはおおまかにその時代の一般的なコンピュータと比較して非常に高い性能、という意味であり、従ってその具体的な対象は国や時代と共に変化する。日本では2005年に「1.5TFLOPS以上の演算性能を持つコンピュータ」をスーパーコンピュータと定義している。

2005年当時の一般的なパーソナルコンピュータ（PC）のCPU演算性能は数GFLOPSであり、そのおよそ1,000倍の性能としてスーパーコンピュータを定義していたと言える。なお、現在のPCに搭載されている最新CPUは百GFLOPSに達しており、その当時のスーパーコンピュータと比べて10分の1に迫る性能である事からも、コンピュータの性能向上の速さが伺える。

#### スーパーコンピュータの構成

次に、PCには不可能な高性能をスーパーコンピュータがどのように実現しているのか

を説明する。

「京」を始め、現在世界中で開発されている多くのスーパーコンピュータは、簡単に表すと図2のような構成になっている。ストレージについては省略した。

処理の基本単位となるものをノードと呼び、演算を行うCPUと、演算に必要なデータとプログラムを記憶するためのメモリが接続されている。このノード一つが、PCに近い構成と言える。そして、このノードが超高速なネットワークによって大規模に接続されたものが近年のスーパーコンピュータの構成である。

近年のスーパーコンピュータ開発はCPU数やコア数を増大させる方向に進んでおり、「京」においては82,944個ものノードで構成されている。そのため、数万にも及ぶCPUをどれだけ効率よく活用出来るか、という点が重要になっており、この事が「京」をはじめとするスーパーコンピュータの性能指標を理解する上で重要である。

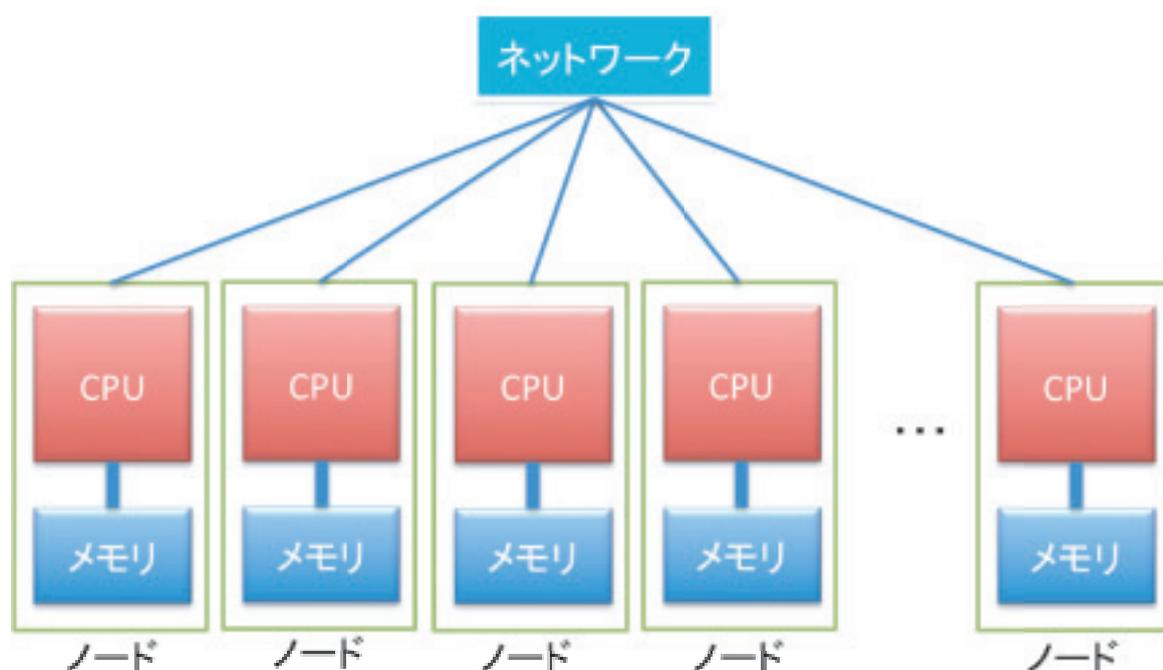


図2 スーパーコンピュータの構成

以上を踏まえて、まずは冒頭でも触れたTOP500の基準として利用されている演算性能指標LINPACKベンチマークについて、その内容と意義について見ていく。

#### 4. LINPACKベンチマーク

LINPACKは、本来は線形代数学の数値演算を行うソフトウェア・ライブラリのひとつであった。その後、計算機システムの浮動小数点演算性能を評価するためにLINPACKベンチマークとして広く利用されるようになった。

ベンチマークは「指標」という意味である。計算機の性能を評価する場合、CPU等のハードウェアスペックだけを見ることは適切ではない。計算機は様々なハードウェア・ソフトウェアの複合で構成されており、また、例えばCPUと言っても様々な種類があるため、異なる種類のCPUの場合単純にクロック周波数などだけで比較出来ないからである。そのような場合に、ベンチマークプログラムを実行し、そのスコアを指標とすることで計算機の性能を評価・比較することが可能となる。

LINPACKベンチマークで計算しているのは、理学・工学で一般的なN元連立一次方程式を解く問題であり、この問題を解くのにかかる時間を基にFLOPSを算出する。今日では、スーパーコンピュータの演算性能を計測する指標として活用されており、この指標に基づいて世界TOP500が決められている<sup>[4]</sup>。「京」の開発もLINPACKベンチマーク10PFLOPS達成を目標の一つに掲げた。

LINPACKベンチマークというものに馴染みがない方もいるかもしれないが、最近ではスマートフォンアプリとしても配布されている。興味のある方は自身のスマートフォンの演算性能を計測してみたいだろうか。ちなみに iPhone 5 では1,296MFLOPSであった。

#### LINPACKベンチマークの問題点

LINPACKベンチマークは現在に至るまで計算機の演算性能指標として利用されているが、「密行列の連立一次方程式を解くその方式は科学技術計算全般を代表するものではなく、スーパーコンピュータの性能を評価する指標としては充分ではない」という批判がある。

スーパーコンピュータの構成要素としてはCPU、メモリ、ネットワーク等があるが、LINPACKベンチマークでは実行時間の殆どを行列一行列積による和と積の演算時間が占めている。この行列一行列積ではCPU性能が重要になり、メモリ性能がベンチマークスコアに殆ど影響を与えない。同時に、問題サイズNに対して演算量はNの3乗に比例するが、一方で通信データ量はNの2乗に比例するため相対的に通信負荷は低く、ネットワーク性能についてもベンチマークスコアへの影響が小さくなる。

しかし、実アプリケーションでは多くの場合メモリ性能やネットワーク性能もまた非常に重要である。

#### メモリとネットワーク

メモリとは演算に使用するデータを記憶し必要に応じてアクセスするための記憶装置であるが、スーパーコンピュータに使用されるメモリには複数の種類があり、それらが図3に示すように階層構造を構成しCPUと接続されている。

それぞれのノード内にはまず非常に高速だが容量の小さいキャッシュメモリがあり、次に、速度が遅いが大容量のメモリ、更にその先に他ノードに属するメモリがある。他ノードに属するメモリは、アクセスするのにネットワークを経由する必要があるため更に速度が遅くなるが、その容量は膨大になる。

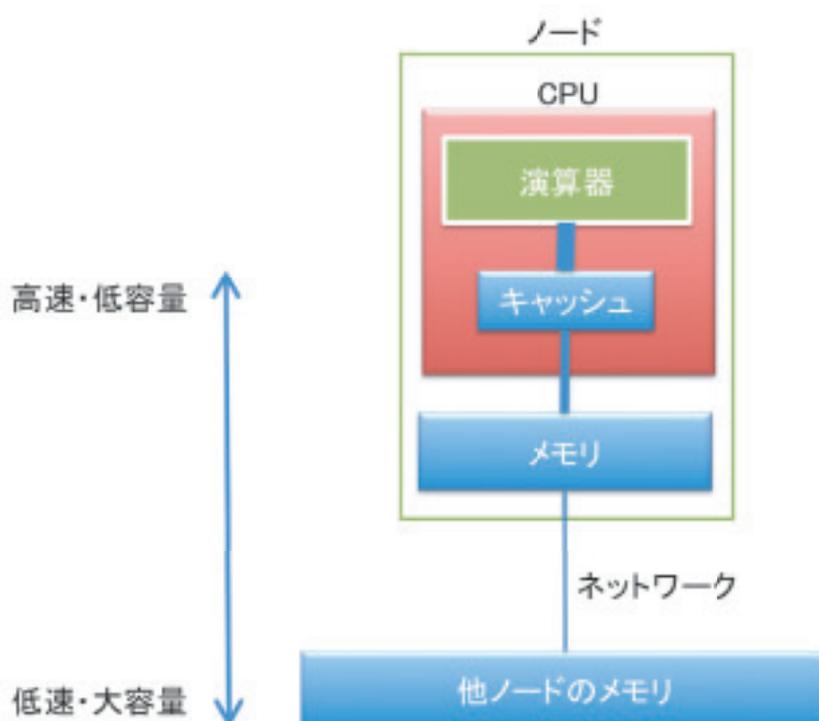


図3 メモリの階層構造

メモリがこのような階層構造になっている理由は、高速かつ大容量という理想のメモリが价格的にも技術的にも実現困難なためである。

また、CPUは演算の際にはキャッシュ上のデータにアクセスする必要がある。もし必要なデータがキャッシュ上に置いていない場合にはメモリ上から、さらにそこにも無い場合にはネットワーク経由でデータを一旦コピーしてから利用する。そのため、キャッシュの内容はその都度必要なデータによって上書きされるという特徴がある。従って、多くのアプリケーションでは、演算を実行するためにノード内のメモリから、あるいはネットワーク経由で他ノードのメモリからデータを転送する必要がある。

このような状況から、演算性能のみが主としてスコアに反映されるLINPACKベンチマ

ークは一つの重要な性能指標ではあるものの、実際にスーパーコンピュータ上で実行される様々なアプリケーションが要求するシステム性能に対する指標として不十分ではないか、という意見も多い。

そのため近年では、HPCの性能を計測する新たな指標としてHPCチャレンジベンチマークに注目が集まっている。

## 5. HPCチャレンジベンチマーク

HPCチャレンジベンチマーク (HPCC)<sup>[5]</sup>とは、HPCシステムの性能をより多角的に評価する事を目的とするベンチマークで、米国HPCS (High Productivity Computing Systems) プロジェクトの一環として2003年に公開された。HPCCは表2に示す7種のプログラム (コンポーネント) で構成される。

表2 HPCCCのコンポーネント

コンポーネント名	内 容	求められる性能	テスト項目
HPL	連立一次方程式	総合演算性能	G
STREAM	4種のメモリバンド幅計測	メモリ性能	EP, S
RandomAccess	整数データのランダム参照	ランダムな1対1通信に対するネットワーク性能	G, EP, S
PTRANS	行列の転置	全対全通信に対するネットワーク性能	G
FFT	1次元高速フーリエ変換	演算性能とネットワーク性能	G, EP, S
b_eff	MPI通信によるメッセージ交換	ネットワーク性能	レイテンシ、バンド幅
DGEMM	実数行列の行列積	演算性能	EP, S

これらのコンポーネントは、科学技術計算で多用される計算パターンから抽出したものであり、それぞれのプログラム毎にHPCシステムに要求する性能が異なっている。これらを総合して評価することで、HPCシステムについて現実の問題を解く能力を評価する。

さらに、この7つのコンポーネントにはそれぞれ、並列性に関して以下の3つの分類に基づいた評価が複数含まれている。単一プロセス実行によるS (Single)、全ノードを用いるが明示的な通信は行わないEP (Embarrassingly Parallel)、全ノードで通信を行うG (Global) である。これらによりテスト項目は合計28項目となり、LINPACKで十分に評価出来ていなかったメモリ性能・ネットワーク性能を総合した様々な観点から評価することができる。

HPCCCとしてこの7つのコンポーネントが選ばれた理由は、世の様々なアプリケーションの性能を捉えるにあたり、データアクセスの局所性という概念が重要である、との考えがあるためである。

#### データアクセスの局所性

データアクセスの局所性には、空間的局所性と時間的局所性がある。空間的局所性とは、データにアクセスした時に、メモリ上の近い場所にあるデータにもアクセスする可能性が高いかどうか、という性質である。空間的局所性が高い場合、メモリ階層の上位に対してアクセスする頻度が高くなりネットワーク通信が少なくて済むため、主としてメモリ性能が重要になる。逆に空間的局所性が低い場合は通信性能が重要になる。

時間的局所性とは、データにアクセスした時に、その後近い時間内に再び同じデータにアクセスする可能性が高いか、という性質である。時間的局所性が高い場合、同じデータに対して何度もアクセスするためキャッシュを有効活用する事が可能となり、CPU性能を發揮しやすい。

様々なアプリケーション毎にHPCシステムに対して求める性能は大きく異なるが、データアクセスの局所性という観点でアプリケーションを分類すると、どのような局所性を持つかによってアプリケーションが必要とする性能が把握出来る。そこで、HPCCSでは時

間的・空間的局所性の特徴が異なるベンチマークを採用することで、多角的な視点からHPCシステムを評価することが可能になる、と考えている<sup>[6]</sup>。

図4を見ると、HPCCで採用された各コンポーネントが空間的局所性・時間的局所性の異なる特徴を持っている事がわかる。b\_effはMPI通信特性に特化したベンチマークであるため図に含まれていない。

そしてHPCCの評価項目のうち、特に4項目がHPCC賞 (HPCC Awards)<sup>[7]</sup>として

Supercomputing Conference (SC) にて表彰される。正確にはHPCC賞にはクラス1と2があり、クラス1ではベンチマークの性能値を競うのに対し、クラス2は生産性の高さを競うものである。

以降ではクラス1のHPCC賞に採用されている4つのベンチマークについて、具体的に見ていく。

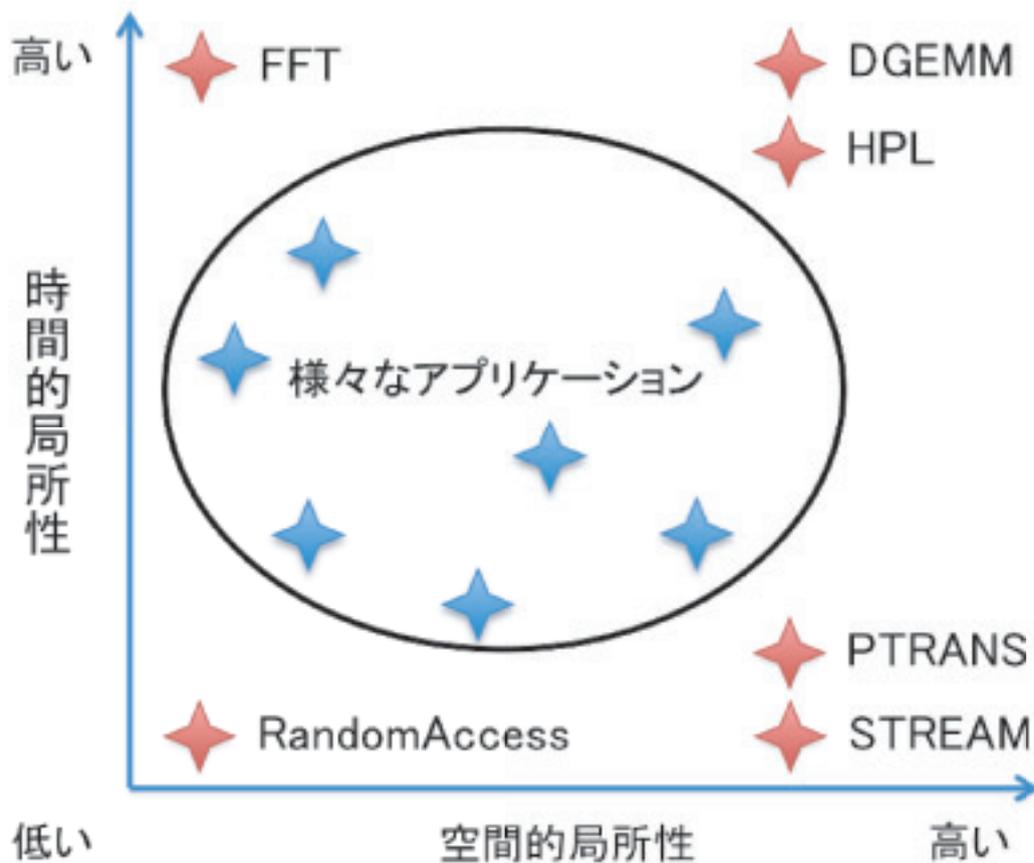


図4 HPCCコンポーネントの位置づけ

表3 近年のHPCC賞1位

	G-HPL	G-RandomAccess	EP-STREAM	G-FFT
2012	京	IBM Power775	京	京
2011	京	京	京	京
2010	Cray XT5	BlueGene/P	Cray XT5	SX-9 (ES2)

### G-HPL

大規模な連立一次方程式を解く演算速度を計測するためのベンチマークである。時間的局所性と空間的局所性が共に高く、通信性能・メモリ性能を必要とせず、演算性能が評価される。いくつかの制限があるものの、TOP500で採用されているLINPACKベンチマークと同様の基準である。

### G-RandomAccess

並列プロセス（ノード）間でのランダムメモリアクセス性能を計測するためのベンチマークである。ランダムなアクセスであるため、使用するデータの空間的・時間的局所性は無く、主として通信性能が評価される。

### EP-STREAM

多重負荷時のメモリアクセス速度を計測するためのベンチマークである。高い空間的局所性があり、メモリからデータを転送する性能が評価される。現在の主要なHPCシステムでは、CPU性能に比べてメモリ性能がボトルネックとなる場合が多く、本ベンチマークの性能が高ければCPUが本来持つ性能をより発揮出来る事を意味する。

### G-FFT

1次元高速フーリエ変換による総合性能を計測するためのベンチマークである。空間的局所性は低く時間的局所性が高いため、シス

テム全体の演算性能、メモリ性能および通信性能を総合的に評価出来る。FFTは実アプリケーションにおいてしばしば利用されるため、FFTをどれだけ高効率で実行出来るかは非常に重要である。

HPCC賞各賞の歴代1位（表3）を見ると、「京」はLINPACK性能世界1位を獲得した2011年のみならず、2012年においてもHPCC賞の3つの項目で1位を保っている。すなわち、HPCシステムの総合的な性能指標において現在でもトップの性能である事がわかる。また、2012年に唯一1位を逃したG-RandomAccessについても、「京」は2位の性能であり依然として高い性能を示している。

なお、HPCCの特徴のひとつとして、TOP500で近年数多くランキングしているGPUアクセラレータを搭載したHPCシステムは高評価になりにくい、という傾向がある。GPUアクセラレータは、限定された計算に対しては非常に高い性能を発揮するが、一方でG-RandomAccessではその性能が活かさない等、総合的な性能評価では苦手とする項目があるためである。

このように、HPCCはLINPACKベンチマークだけでは計測することが出来ない、HPCシステムについての実用的な性能を計測する指標となっている。しかし、HPCシステムにとって最も重要なのは「実際のアプリケー

ションについて」いかに高い性能を実現し成果を生み出すか、ということであろう。その意味で、もうひとつ、HPCシステムの性能を示す指標となるゴードン・ベル賞について説明する。

## 6. ゴードン・ベル賞

ゴードン・ベル賞<sup>[8]</sup>は、科学、工学、大規模データ分析など様々な分野のアプリケーションに適用されているHPC技術の革新・発展を目的としてアメリカ計算機学会が授与する賞である。シミュレーションにおける最高の演算性能達成や大規模な計算の実現、実効性能の高さなど、特別な成果に対して贈られる。ゴードン・ベル賞は毎年SCにて受賞者が決定され、HPC分野において最も注目される賞となっている。

2011年には理化学研究所、筑波大学、東京大学、富士通株式会社による研究グループが京コンピュータを用いた100,000原子シリコン・ナノワイヤの電子状態の第一原理計算でゴードン・ベル賞を受賞した。そして2012年には筑波大学、理化学研究所、東京工業大学による研究グループが、約2兆個におよぶダークマター粒子の重力進化シミュレーションでゴードン・ベル賞を受賞した。

このようにスーパーコンピュータ「京」は、

実際のアプリケーションでも高い性能を発揮し、その成果に大きく貢献し続けている事がわかる。

## 7. その他の指標

ここまで見てきた性能指標以外にも、「京」は様々な観点で非常に優秀な性能を達成している。LINPACKベンチマークにおける93%という非常に高い実行効率をはじめ、性能電力比は830.18MFLOPS/Wとなっており（表4）、これは、「京」のような大規模システムにおいてはトップクラスの性能と言える。これにより、スーパーコンピュータの省エネランキングGREEN500<sup>[9]</sup>では2011年6月に6位を獲得した。これは、HPCシステムが大規模化し、その消費電力が問題になっている現在では、非常に意義のある事である。

また、LINPACKベンチマークにおいて約30時間の高負荷連続運転を達成した（表4）。ランキング上位の他のHPCシステムに比べ飛び抜けて長時間運転が出来ている。膨大な数の部品が搭載されているHPCシステムでは、プログラムの実行中に一部が故障してしまう可能性が無視できない。その意味で、このような長時間実行に耐えられるという事は非常に高い信頼性がある事を示している。

表4 2011年11月TOP500上位の性能指標

順位	国	システム名	演算性能 (PFLOPS)	実行効率 (%)	電力効率 (MFLOPS/W)	実行時間 (h)
1	日本	京	10.51	93	830.18	29.47
2	中国	天河一号A	2.57	55	635.15	3.37
3	米国	Jaguar	1.76	75	253.09	17.27
4	中国	Nebulae	1.27	43	492.64	1.91
5	日本	TSUBAME2.0	1.19	52	852.27	2.40

## 8. おわりに

スーパーコンピュータ「京」に関する様々な性能指標を通して、「京」が実用問題を解くために開発されたシステムであり、現在でもトップクラスの性能と使いやすさを実現していることがご理解頂けたことと思う。

スーパーコンピュータによるシミュレーションは、実験、理論と並ぶ研究開発の第3の手法として近年益々重要になっている。それは、現在の最先端科学の研究の中には対象が複雑あるいは巨大すぎて実験が困難な場合があるからである。スーパーコンピュータ

は、自動車や飛行機的设计・製作のための構造解析や流体解析、気象シミュレーションなど様々な分野で使われており、今後の科学技術の発展に不可欠なものとなっている。

このような背景のもと、既に日本でも「京」に続くスーパーコンピュータ開発の動きが始まっている。「京」が社会に大きく貢献するスーパーコンピュータとして多くの成果に繋がるとともに、競争の激しいスーパーコンピュータの世界において日本のスーパーコンピュータの開発・利用がこれからも発展していく事を期待したい。

## 参考文献

- [ 1 ] <http://www.top500.org>
- [ 2 ] <http://www.aics.riken.jp/jp/k/>
- [ 3 ] 特集スーパーコンピュータ「京」, 情報処理 Vol.53 No.8 Aug.2012
- [ 4 ] <http://www.top500.org/project/linpack/>
- [ 5 ] <http://icl.cs.utk.edu/hpcc/>
- [ 6 ] “The HPC Challenge Benchmark Suite”, SC06 Conference Tutorial
- [ 7 ] <http://www.hpcchallenge.org/index.html>
- [ 8 ] <http://awards.acm.org/bell/>
- [ 9 ] <http://www.green500.org>