

フラッグシップシステムに関する 検討状況

理化学研究所計算科学研究機構

社会的・科学的課題とシステム設計の基本的考え方

- Science-driven System
 - 計算科学ロードマップ(第2版)に基づく概念設計
 - アプリFSにおいて社会的・科学的課題および必要とする計算資源量について精査を行っている
 - ロードマップで見えてくる使い方は
 - 大規模、精密、長時間発展といったcapability computingのニーズ
 - 複雑な現象を対象とした課題におけるensemble computingのニーズ
 - Big data computing、社会科学シミュレーションのニーズ
 - これらの要求に応えるシステムの設計が前提
- Sustainable System
 - 京の後継機として京の資産が受け継げる、そして、将来の計算機システム発展動向を見据えたシステム
 - 2020年ごろの世界の最先端システム、競争力、競合力あるシステム
 - 将来の我が国のHPCの発展につながるシステム
- TCO(Total Cost of Ownership)-aware System
 - 白書で必要とされる計算資源量に対して、低電力、ソフトウェア高移植性、高耐故障性を有するシステム設計

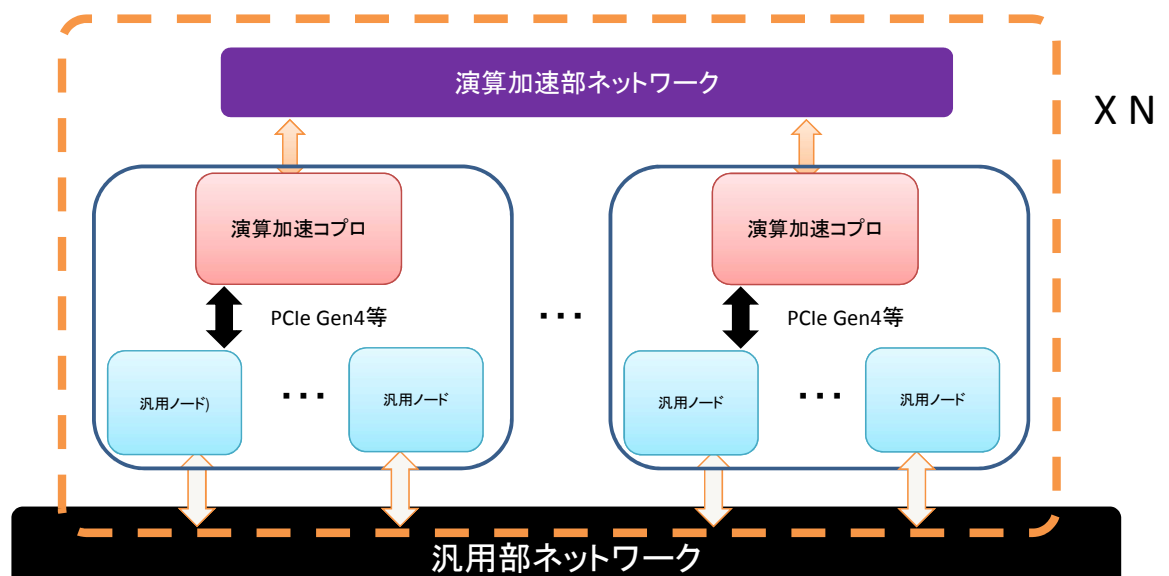
システム設計基本的考え方

- 将来動向
 - 高い性能電力比と不規則非構造データ処理もできるCPUとして、汎用コアと演算加速コアが統合されていく。しかし、どのように統合されていくかは今後の研究成果に依存
 - ノード単体の演算性能向上に比べ搭載可能メモリ容量はさほど増えない
- 開発に関する考え方
 - システム設計
 - 汎用部(汎用コア)と演算加速部(演算加速コア)を有するマシン
 - 汎用コアでないと性能がだせないアプリケーション、演算加速コアで性能だせるアプリケーション、両コアを使って性能がだせるアプリケーションを棲み分け、全電力時間積削減
 - 将来にわたって有効な統一プログラミングモデル、ライブラリ、フレームワークを提供
 - 早期成果創出のためにキラーアプリケーションの同時開発を通してシステム設計に反映

3

汎用部・演算加速部構成

- 汎用部
 - 京で開発されたアプリケーションの継承を重視したCPU
- 演算補助部
 - SIMDアーキテクチャによる電力性能に優れたCPU



4

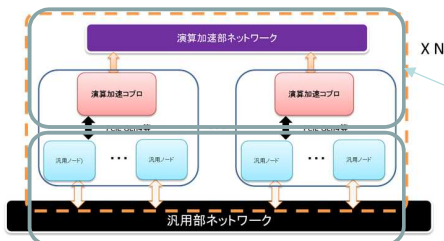
システム利用イメージ

Offloading Model

- OpenACCコンパイラディレクティブ等を用いてコードの一部を演算加速コ・プロセッサにオフロード
- 演算加速コ・プロセッサで動作するライブラリを呼び出す

適応可能アプリケーション

- 量子化学など対角化や直交化が必要なアプリ
- 原子核のシェルモンテカルロ等
- UT-Heartなど大規模な行列を多数反転するアプリ
- 大規模粒子系

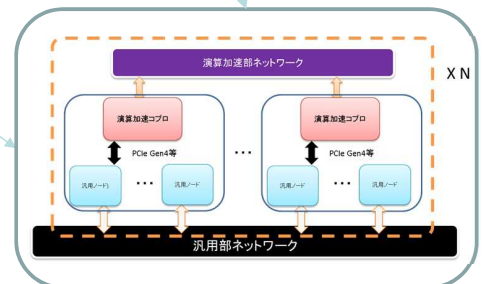


Cooperation Model

- 汎用部と演算加速部それぞれで協調するアプリ実行
- 複数の汎用部プログラムと複数の演算加速部コプロプログラムによる協調動作

適応可能アプリケーション

- 前処理を汎用で、カーネルを加速機構で実行
- 連成計算等のMPMD実行(例: 気候、気象のカプラー)



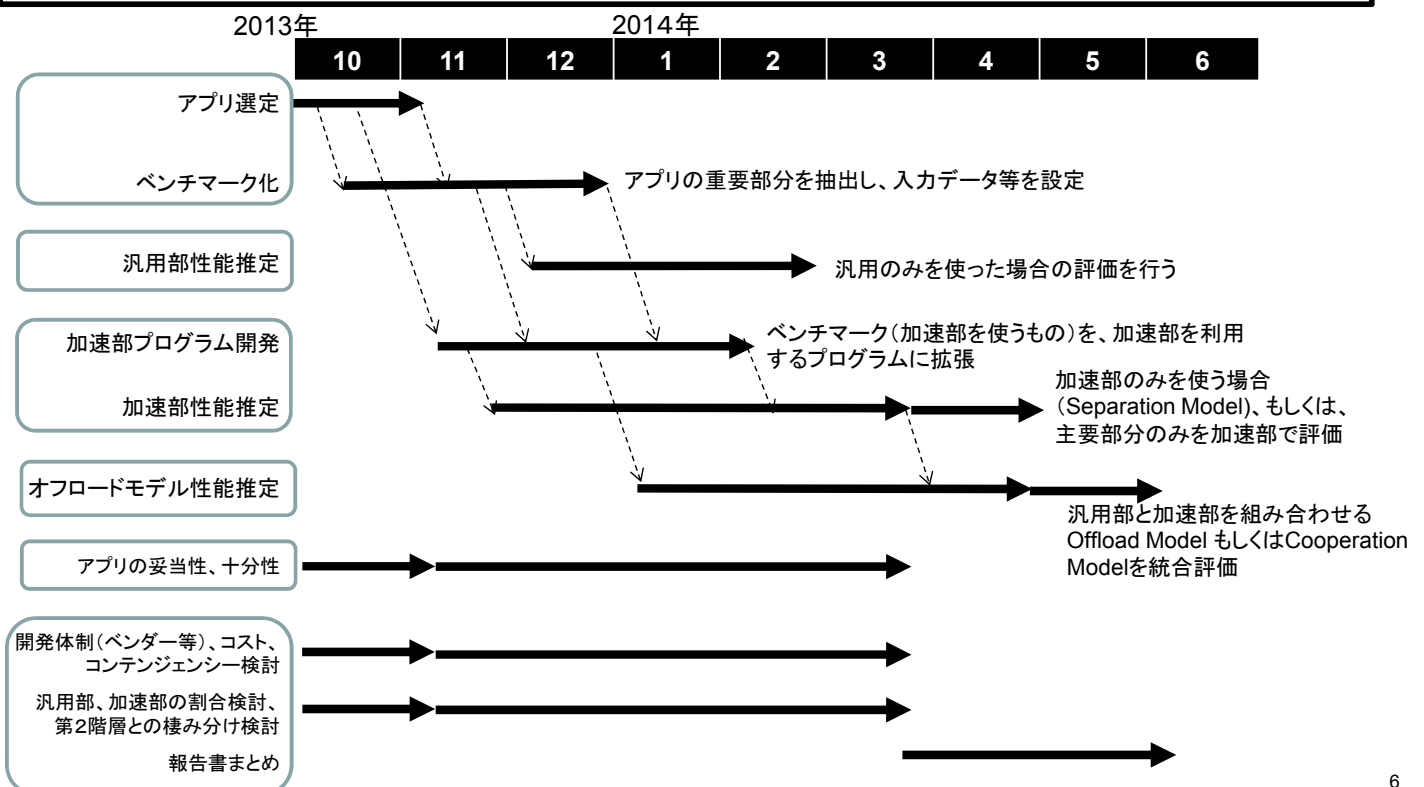
Separation Model

1. 汎用部だけで計算するアプリ
 2. 演算加速部のグループで実行されるアプリ
- 適応可能アプリケーション
- 主に、ステンシル計算(メモリに入る場合)、QCD等
 - 分子動力学計算(MD)

5

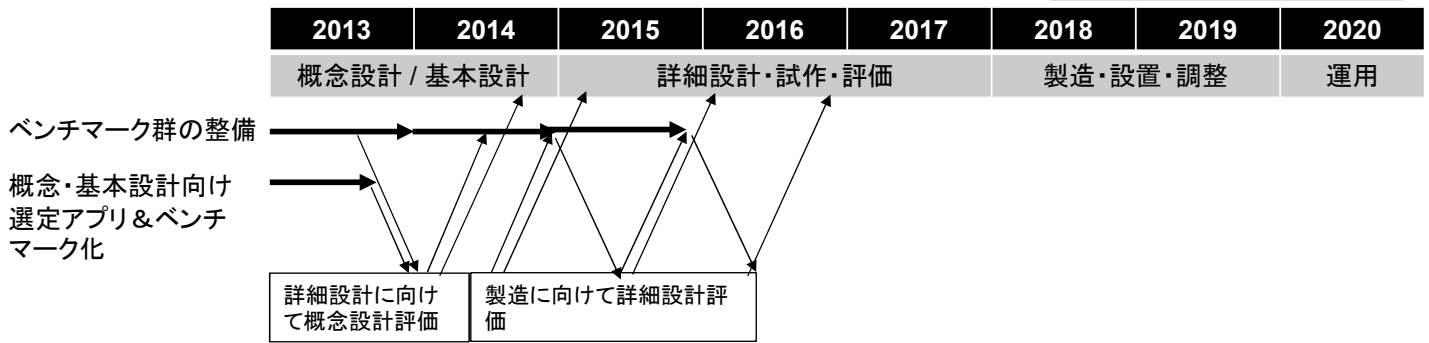
フラグシップシステム概念設計性能推定等工程表

方針: 社会的課題を含む課題を、計算科学ロードマップ白書(第2版)から選定。ベンチマーク化し、汎用部および加速部を用いた評価を進める。ファイルI/Oに関しては2014年度実施。



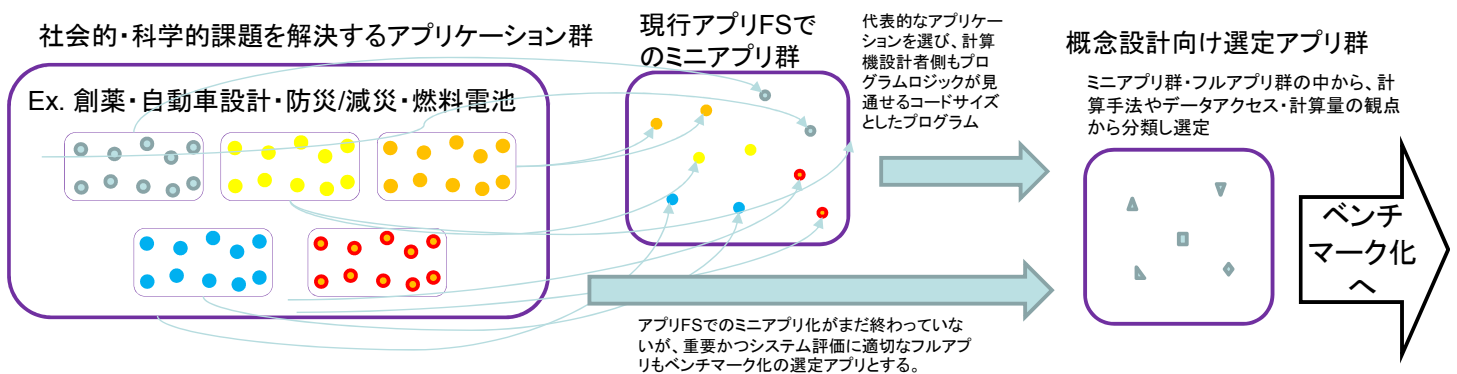
6

課題解決アプリ・ミニアプリ・概念設計向け選定アプリの関係



ベンチマーク群の選定方法

現行のミニアプリ群とフルアプリ群(ミニアプリ化できていないもの)からベンチマーク群を作る。



7

概念設計向けアプリ選定の流れと基本指針

- FSアプリへ提供されているフルアプリ群を整理する。
 - 評価基軸の観点からミニアプリ化の有無を整理
- 上記で整理されたアプリ群の中で候補と考えられる10本程度を選ぶ。
 - 評価基軸を網羅できる形で選ぶ。
- 上記で選定されたアプリと同様の計算手法のもので、開発実施主体候補がより効率的と判断したものは、それを選定アプリとする。
 - この時点で、京からの継承性も考慮する。

- 注1: 計算科学ロードマップ全章(2~4章)での課題において想定されるアプリの特性について
上記の過程1, 2において評価基軸を網羅的に満たしていることで十分に考慮されていると考える。ただし、開発実施主体候補としては、説明上、計算ロードマップ2, 3章の社会的課題、科学的課題の主要課題の解決に配慮した。
 - 創薬医療からは、計算創薬と臓器シミュレーション
 - 総合防災からは、地震津波防災システムと集中豪雨課題
 - クリーンエネルギー創出・環境問題からは、燃料電池と風力発電立地アセスメント
 - 社会科学は、萌芽的であり、今回の対象から外し、今後FSを行いながら選定していく必要あり。
 - 格子QCD、N体問題など代表的に特に演算性能が必要なものを選定する。
- 注2: 時間的制約からくる評価用選定アプリの入れ替え
開発主体候補開発のアプリは、アーキテクチャ・システムソフトウェア・アプリグループの連携が取りやすいため、過程3の時点で、システム評価に取り入れる場合もありうる。
- 注3: 選定アプリとフラグシップシステムで行う課題との関係について
今回選んだアプリが「必ずフラグシップシステムで採用される」というわけではなく、開発主体候補が提案機の評価として最も速いパスを考えたものである。汎用機としての評価基軸を満たしていることが主眼である。2, 3章に配慮するものの、フラグシップシステムでの優先的に行う課題とは切り離して考えるべきであり、今後、フラグシップ機で行うのに適当であると判断される課題は、別途、議論となると考えている。

8

1. アプリFS提供のフルアプリとミニアプリ現状整理

開発主体候補としての判断

提供フルアプリ	提供者	内容	並列化	ミニアプリ化	構造格子計算	非構造格子計算	粒子法計算	密行列計算(局所的)	密行列計算(大域的)	通信・低レイテンシ	通信・隣接高バンド幅	大域的通信	大容量IO	その他	概念設計向け評価アプリとしての妥当性
feram	西松@東北大	強誘電体MD(長距離相互作用する擬スピン系)	OpenMP(MPI使用はパラメータ並列版のみ)、3次元FFT												△ : FFTは基本なので、他のアプリでも行っている。
MARBLE	池口@横市大	生体高分子MD(クーロン力はPME)	MPI+OpenMP、3次元FFT	完成			○					○			○ : すでにミニアプリ化
para-TCCI	石村@分子研	電子状態密度計算(Hartree-Fock計算)	MPI+OpenMP、密行列対角化を逐次計算(並列化予定なし)						○		△				△ : CONQUESTで代表させる
FFVC	小野@AICS /東大	差分非圧縮熱流体(直交等間隔格子)	MPI+OpenMP、SOR or GMRES	完成	○										△ : 構造格子系の典型として可能。NICAMで代用
pSpatocyte	岩本@QBIC	細胞内シグナル伝達計算(反応拡散系)	MPI+OpenMP、六方密充填格子上のモンテカルロ、反応過程は未実装											○	○ : 新しい計算パターン?
NEURON_K+	加沢@東大	神経回路シミュレーション(NEURONのカスタマイズ)	MPI+OpenMP、ALL_GATHER多用、専用のモデル記述言語からCへのトランスレータ							○		○		○	○ : 新しい計算・通信パターン?
GT5D	井戸村@JAEA	5次元プラズマ乱流(5次元差分+2次元FEM)	MPI+OpenMP、共役残差法、1次元FFT		○	△									△ : 構造・非構造は、NICAM、FF/Bで代表
MODYLAS	安藤@名大	汎用古典MD(クーロン力はFMM)	MPI+OpenMP	完成			○			○	○				○ : 既にミニアプリ化
STATE	福垣@阪大	第一原理MD(密度汎関数法)	MPI+OpenMP(レプリカ並列、k点並列、バンドor平面波並列)、FFT、固有値計算(RMM)						○						△ : 密行列系で、CONQUESTで代表
FrontFlow/blue	山出@みずほ	有限要素法非圧縮熱流体	MPI+自動並列(京対応版)、BiCGSTAB		○										○ : 非構造格子計算の典型
SIGN-L1	玉田@東大	遺伝子ネットワーク推定(L1正則化法)	MPI+OpenMP、ファイル出力が得意										○	○	○ : 新しい計算パターン?
NTChem/RI-MP2	河東田@AICS	電子相関計算(分子軌道法)	MPI+OpenMP、DGEEM、逐次計算部分が残っている、メモリ量O(N3)					○							○ : MO代表、局所的密行列代表
OpenFMO	福富@九大	Hartree-Fock法を基にしたFMO第一原理計算	MPI+OpenMP、動的負荷分散					○							△ : NTChemで代表可能
CONQUEST	宮崎@物材研	密度汎関数法による第一原理計算、O(N)法	MPI+OpenMP疎行列x疎行列、FFT									○		○	○ : 局所的密行列、大域的疎行列
NGS Analyzer	玉田@東大	次世代シーケンサーの出力データ解析	MPI、I/O得意	完成									○		○ : IO得意型の典型として
NICAM-DC	八代@AICS	全球雲気象モデルNICAMの力学コア部(有限体積法)	MPI、2~4段レンゲクッタ		○						○		○		○ : 構造格子系の典型として、機構に開発者いるため連携容易
DCPAM	西澤@AICS	全球気象・気候シミュレーション、スペクトル法(球面調和関数展開)	MPI+OpenMP、リープフロッグ		○							○			△ : 球面調和関数スペクトルは、大気通信評価で推論できる。
FFVC-LPT	小野@AICS	流体解析+粒子追跡線成、流体解析部分はFFVC	MPI+OpenMP		○										△ : 構造格子系の典型として可能。
ALPS/looper	藤堂@東大	量子モンテカルロ法、リンクリスト操作、整数演算	MPI+OpenMP	藤堂先生に整備依頼済み						○				○	○ : 整数演算
CCS QCD	石川@広大	格子QCDのClover型フェルミオンの伝搬関数を求めるソルバーのベンチマーク、疎行列連立一次方程式、BiCGStab	完成	○						○	○				○ : 構造格子系であるが、コアあたりの自由度が小さいケースとして、すでに
ZZ-EFSI	杉山@東大	固体流体線成コードのホットスポット	MPI+OpenMP		○						○				△ : 構造格子系なのでNICAMで代表可能
rmcm bench nocore	清水@東大	モンテカルロ殻模型計算のベンチマークコード、時間依存密度汎関数法、時間依存コーンシャム方程式の差分解法における複数のホットスポットを統合	OpenMP					○							△ : 局所的密行列なのでNTChemで代表可能
GCEED	信定@分子研	多変数変分モンテカルロ法	未提供						○						△ : CONQUESTで代表可能
MVMC	今田@東大	地震発生サイクルシミュレーション	未提供(東北大FSより提供予定)												× : 現時点、未提供
RSIDX	兵藤@JAMSTEC	スピン系ハミルトニアン行列の厳密対角化計算	未提供										○		× : 現時点未提供
Barista	坂下@東大														× : 現時点未提供

9

2. アプリの選定と評価基軸の網羅性

提供フルアプリ	提供者	他のシステムFSでの検討状況	アプリFSミニアプリ化	構造格子計算	非構造格子計算	粒子法計算	密行列計算(局所的)	密行列計算(大域的)	通信・低レイテンシ	通信・隣接高バンド幅	大域的通信	大容量IO	その他
MARBLE	池口@横市大	×	完成			○					○		
pSpatocyte	岩本@QBIC	×											○
NEURON_K+	加沢@東大	×							○		○		○
MODYLAS	安藤@名大	東大FS	完成			○			○	○			
FrontFlow/blue	山出@みずほ	理研運用部資産あり、東大FS			○								
SIGN-L1	玉田@東大	×										○	○
NTChem/RI-MP2	河東田@AICS	×					○						
CONQUEST	宮崎@物材研	×	年内完成予定								○		○
NGS Analyzer	玉田@東大	東大FSで予定	完成									○	
NICAM-DC	八代@AICS	東大FS、筑波大FS	年度内完成予定	○						○		○	
ALPS/looper	藤堂@東大	東大FS	近、完成予定						○				○
CCS QCD	石川@広大	筑波大FS	完成	○					○	○			

・ 各分野の論点整理と概念設計段階でのシステム評価の判断

- 分野1:
 - ・ 上記で当該分野のアプリが網羅できると判断できるかどうか？
(開発主体候補の判断) 臓器シミュレーションの典型血流シミュレーションなどは、NICAMの構造格子流体計算で類推可能と判断
- 分野2:
 - ・ 波数空間N3法の代表として、PHASEも候補であり、含めてはどうか？
(開発主体候補の判断) いずれにしても密行列演算になるため、CONQUESTやNTChemで類推可能と判断
 - ・ MO法の代表として、SMASHも考えられる？
(開発主体候補の判断) NTChemで代表できると判断
 - ・ 大域的密行列系の評価に相当であるものが必要か？
(開発主体候補の判断) 実空間N3法のRSDFが京の継承から妥当であると判断
- 分野3:
 - ・ 波動伝搬コードSeism3Dが必要か？これは構造格子系として、NICAMで代表できるか、どうか？
(開発主体候補の判断) 高次精度差分の典型として、取り入れることは妥当と判断
- 分野4:
 - ・ ステンシル計算／構造・非構造のハイブリッドとして、GT5Dは含ませるべきかどうか？
(開発主体候補の判断) NICAMやFFBでそれぞれ、構造格子と非構造格子の評価で代表できると判断。
 - ・ 構造物計算のADVENTUREは、非構造格子のもう一つの代表として必要か？
(開発主体候補の判断) 現時点では、FFBで代表可能と判断
- 分野5:
 - ・ 宇宙科学分野の粒子計算の典型であるGreeMなどは、必要か？
(開発主体候補の判断) MARBLE、MODYLAS等のMD計算で類推可能と判断

10

3. 効率性を考慮した最初の評価アプリの決定

考え方の前提: プログラム担当者がベンチマーク化はもとより短期間での作業においてシステム側と密な連携が取れること

- Marble (GENESIS)とMODYLAS:
 - どちらもMDだが、大域通信 (FFT)が入っているかどうかが大きく違い、どちらも評価
 - FSの進み方からは、MODYLASは問題ない。Marble (GENESIS)のベンチマーク化は提供者の協力が不可欠
 - MarbleとGENESISはどちらかシステム側と密に連携がとれる方とする。現在の候補はGENESIS
- pSpatocyte, NEURON K+, SiGN-L1: 従来からの計算手法評価が必要だが、どれか一つを選びぶ。NEURON K+が最有力候補
 - pSpatocyte, SiGN-L1は担当者とのすり合わせの上、早期ベンチマーク化を行い、来年の6月以降の基本設計段階で評価したい。
- NTChem, CONQUEST以外に分野2において手法の異なるPHASE (波数空間N3法), RSDFT (実空間N3法)の評価も必要である。
 - 本質的にどれも密行列計算 (局所・大域)であるので、最初の段階では、NTChem, CONQUESTでベンチマーク化をはじめ。6月までの間にPHASE, RSDFTのベンチマーク化を行い、以降の基本設計段階で評価したい。
- Adventure, GT5Dも、分野4からの要望は高いが、現段階での評価アプリの観点からは、FFBで行う。ベンチマーク化は並行して進め来年6月以降の基本設計へ評価できるような形へもっていけるように調整が必要

以下のアプリケーションを最初の評価アプリとして選定する (12本)

提供フルアプリ	提供者	4FSでの検討状況	構造格子計算	非構造格子計算	粒子法計算	密行列計算 (局所的)	密行列計算 (大域的)	通信・低レイテンシ	通信・隣接高バンド幅	大域的通信	大容量IO	その他
GENESIS	池口@横市大/杉田@AICS	MarbleはアプリFSでミニアプリ化、機構での連携はGENESIS			○					○		
NEURON_K+	加沢@東大	×						○		○		○
MODYLAS	安藤@名大	東大FSですでにベンチマーク化、アプリFSでミニアプリ化			○			○	○			
FrontFlow/blue	山出@みずほ	追加だが、理研の運用部に資産あり、東大FSすでも対応		○								
NTChem/RI-MP2	河東田@AICS	×				○						
CONQUEST	宮崎@物材研	×				○						○
RSDFT		東大FSでベンチマーク化					○			○		
NGS Analyzer	玉田@東大 / 鈴木@AICS	アプリFSでミニアプリ化 / 東大FSで予定									○	
NICAM-DC	八代@AICS	東大FS、筑波大FSでベンチマーク化	○						○		○	
ALPS/looper	藤堂@東大	東大FSですでにベンチマーク化						○				○
CCS QCD	石川@広大	筑波大FSでベンチマーク化	○					○	○			
Seism3D	古村@東大	東北大FSで検討。理研内でも資産あり	○									

※ NICAM-DCは、更にフルアプリのNICAMを用い、LETKF (データ同化)とともに、cooperation modelの典型として評価する。NICAM++と記載

11

ロードマップ社会的課題・科学的課題との関係 (補足)

前提: 本概念設計段階では、フラグシップシステムでの研究課題と直接リンクするものではない。フラグシップ機で行う課題の決定は、今後何らかのプロセスを経て決定されるが、現段階では、汎用マシンとして、幅広くカバーできるように評価アプリを選定した。

しかしながら、同時に主要な社会的課題・基礎的課題が遂行できるような構成になっているかの観点も必要。以下、この妥当性を記載。

- 創薬医療
 - ① MD計算: **Modylas, GENESIS**
分野1からのMarble / GENESISの手法は、実際に創薬スクリーニングで用いられる可能性がある。
 - ② ゲノム解析: ホモロジー解析コード: **NGS Analyzer**
ゲノム解析における類似度検索で重要と判断する。
 - ③ 脳のシミュレーション: **NEURON K+**
ライフサイエンスで今後発展が予想される。
- 総合防災
 - ③ 波動伝搬シミュレーション: **Seism3D**
総合防災 (地震津波) は複数のモデルコンポーネントのCooperation modelであるが、特に計算の重い本コードを対象とするのが妥当と判断できる。
 - ④ 集中豪雨課題 (3章の集中豪雨予測): **NICAM++**
ビッグデータを取り扱う課題として、妥当。NICAM評価は、構造格子系の領域モデルの評価につながる。LETKFは定番のデータ同化手法であり、NICAMと組み合わせで評価するのが妥当。
- クリーンエネルギー創出と環境
 - ⑤ 電池設計のための電子材料の電子状態解明: **CONQUEST, NTChem, RSDFT**
CONQUESTが大規模計算向き。NTChemは、MO法の代表として妥当。
 - ⑥ 強相関・磁性材料の物性予測・解明: **ALPS/looper**
ALPS/looperはより量子モンテカルロの代表。
 - ⑦ 自動車設計での熱流体問題 (非構造格子): **FrontFlow / Blue**
非構造格子流体の代表として、また実績としてFrontFlow/blueが妥当。
 - ⑧ 風力発電アセスメント: **NICAMの評価で代替**
構造格子系の領域気象モデルは多くあるが、NICAMは領域モデルとしても機能する (stretch NICAM) のでこれを評価するのが妥当
- 基礎科学課題
 - ⑨ 格子QCD: **CCS-QCD**
格子QCDは基礎科学でも最も用いられるアプリケーションの一つ。
 - ⑩ 宇宙N体問題: **MD計算アプリで代替**
N体問題の代表的アプリケーションで京でも実績があるが、本質的にMD計算を評価することで、類推が十分に可能

12

概念設計向け選定アプリ候補と実行モデル対応表&FS取組

	汎用部only	加速部only	offload	cooperation
MODYLAS, GENESIS		○	一部	
NGS Analyzer	○			
NEURO K+	○			
Seism3D		○		
NICAM++	LETKF	NICAM		○
CONQUEST, NTChem, RSDFT			○	
Front Flow/Blue	○			
CCS-QCD		○		
ALPS/looper	○			

注1: 上記すべてのアプリは汎用部onlyにおける性能予測を行い比較する。

	FSで取り組んでいるミニアプリ群 & ベンチマーク群
アプリFS	Marble, Modylas, NGS Analyzer, ALPS/ILooper, NICAM, CONQUEST, Front Flow/Blue, Front Flow/VC, CCS-QCD
筑波大FS	CCS-QCD, GreeM, HMD, CPP-MD, FDM, NICAM
東大FS	ALPS/looper, NICAM, COCO, RSDFT, CCS-QCD, Front Flow/Blue, Modylas, NGS Analyzer