

次世代スーパーコンピュータの概念設計 について

平成19年3月27日

理化学研究所

次世代スーパーコンピュータ開発実施本部

報告内容

1. 研究開発の全体概要
2. スーパーコンピュータ・センター調査
3. 米国のスーパーコンピュータ開発状況
4. ターゲット・アプリケーションの検討
5. 共同研究によるアーキテクチャ検討, 評価
6. 概念設計について

1. 研究開発の全体概要

プロジェクト全体のスケジュール

年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度	平成23年度	平成24年度
ソフトウェア	基本ソフトウェア・グリッドミドルウェア設計・製作			評価			
	次世代ナノ統合シミュレーション設計・製作			評価			
	次世代生命体統合シミュレーション設計・製作			評価			
ハードウェア	概念設計	詳細設計		製作		システム強化	
ファイルシステム			設計	製作		システム強化	
立地、建屋・付帯設備整備	検討	設計	建設				
運用	意見募集		方針・体制の検討		準備活動	運用	

次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト実施体制

**文部科学省
スーパーコンピュータ
整備推進本部**

- ・予算措置に関する事項(関係施策の企画・立案、予算要求等)
- ・法律に関する事項(利用にかかる基本方針の策定等)
- ・プロジェクトの総合調整(政府部内の調整等)

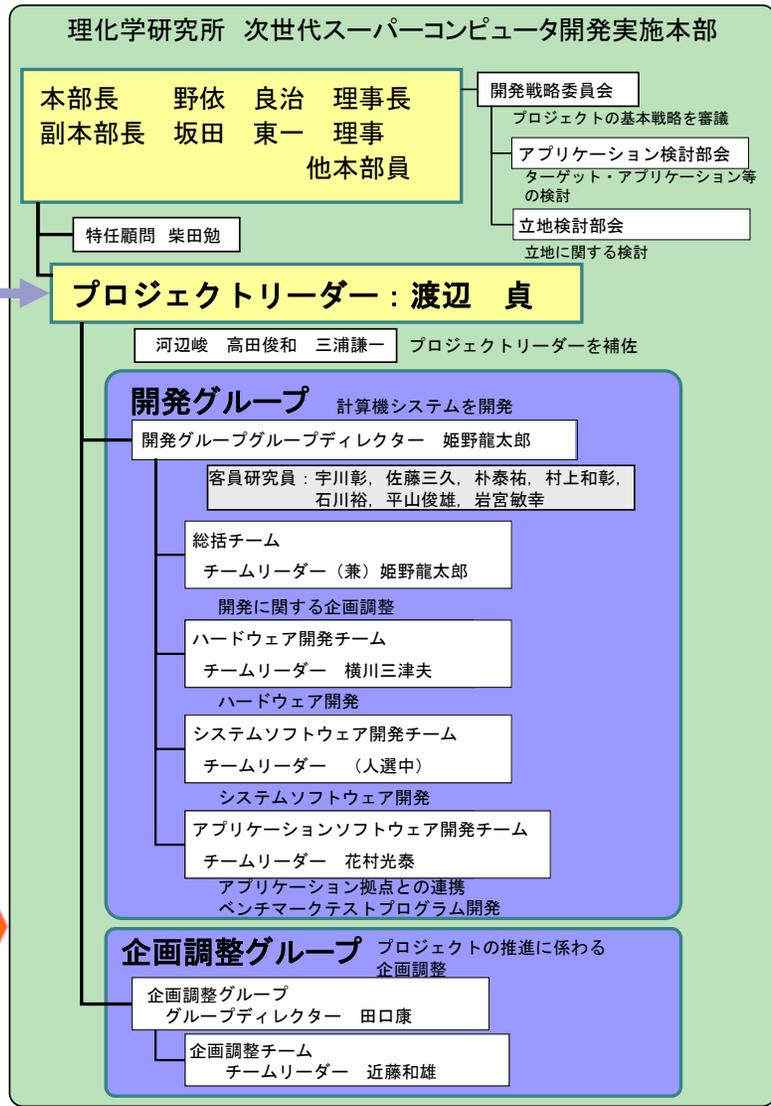
**プロジェクト
推進委員会**

- ・関係機関の連絡調整
- ・施策の企画・立案に資する重要事項の審議検討

**アドバイザリ
ボード**

プロジェクトリーダーに対する助言

**日立製作所
九州大学
東京大学
国立天文台
日本電気
富士通**



**スーパーコンピューティング技術産業
応用協議会**

筑波大学

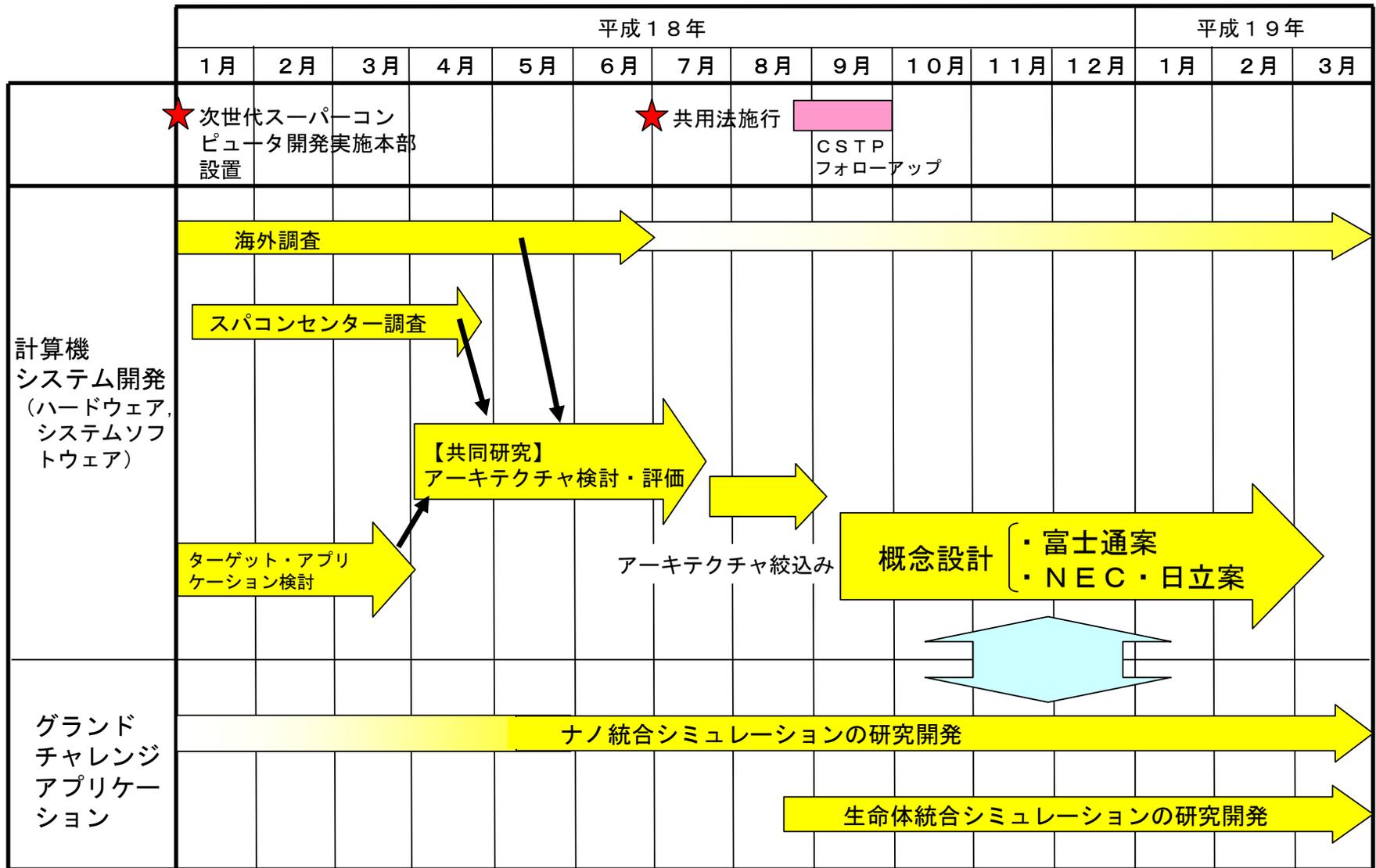
海洋研究開発機構

国立情報学研究所
・グリッドミドルウェアの開発

分子科学研究所
・次世代ナノ統合シミュレーションの開発

**理化学研究所
(和光研究所)**
・次世代生命統合シミュレーションの開発

平成18年度:これまでの経緯



システム開発の方針

■ プロジェクトの基本方針

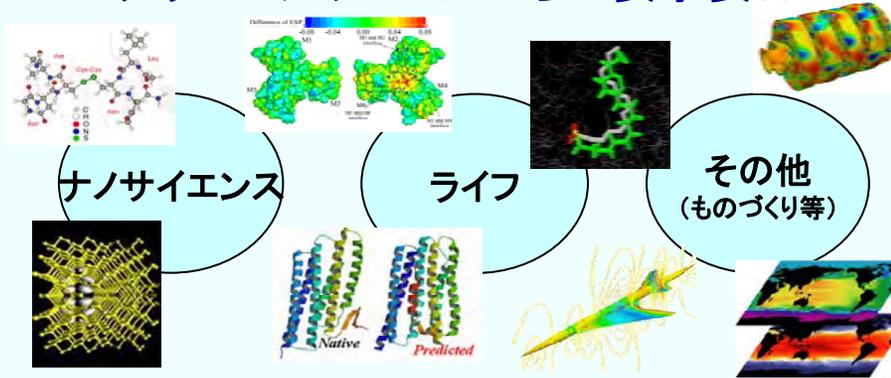
- 計算機シミュレーションにより, 科学技術・産業の競争力を維持, 高めること.
- スーパーコンピュータの開発力を国内に保持し, 継続的な開発を可能とすること.
- 完成時に世界最速と内外から広く認められること.

■ システム開発方針

- 理論性能やLINPACK性能(10PFLOPS以上)を考慮しつつ, 実効性能(アプリ性能)を重視したシステム構築を目指す.
- 幅広い活用を促すため, 低コストを実現しつつ, 利便性の高い汎用機により目標性能を達成することを目指すとともに, アクセラレータの検討も行う.
- 低消費電力CPUなど, 新規性の高い技術をベースとした波及効果の高いハードウェア技術の開発を目指す.

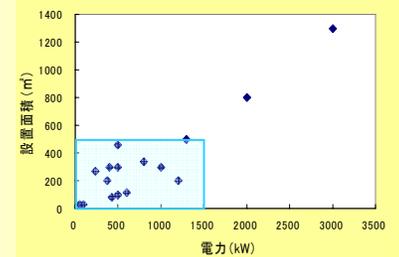
システム最適化の考え方

グランドチャレンジからの要求要件



制約条件

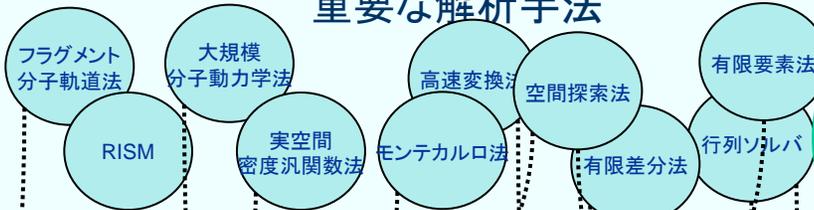
電力, 設置面積



信頼性, 保守性

コスト(開発費, 製造費, 保守費等)

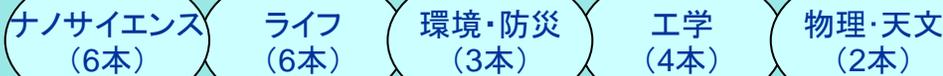
重要な解析手法



最適なシステム構成

世界最速 (完成時)

ターゲットアプリケーションによるシステム検討
- 5分野, 21本のベンチマークテストを抽出



【海外調査】
HPC分野の動向
(開発計画, 予算等)

【国内技術調査】
システム
アーキテクチャ

【運用・利用】
(メモリ容量, ファイル容量, システム運用,
ユーザー管理, 保守条件等)

【要素技術】



産業への波及効果
技術条件, 運用条件

2. スーパーコンピュータ・センター調査

※ 参考2-1 スーパーコンピュータセンター調査報告書

スーパーコンピュータ・センター調査について

■ 調査目的

- 大学・研究機関等の計算機システムに、次世代スーパーコンピュータの技術が垂直展開される状況、条件等を予測するための基礎データの収集
- 次世代スーパーコンピュータ完成後、運用・共用を行う機関の運営検討のための基礎データの収集
- 次世代スーパーコンピュータのアーキテクチャの評価とそれに資する主要なアプリケーションの利用状況に関する情報収集

■ 調査内容

- 調査対象
 - 国内の主要大学・研究所の計算センター合計26ヶ所
- 調査方法
 - アンケート調査
 - ◎ 調査票による記入形式にて実施
 - ヒアリング調査
 - ◎ プロジェクトメンバーが直接出向きインタビュー形式で実施

スーパーコンピュータセンター調査対象機関一覧

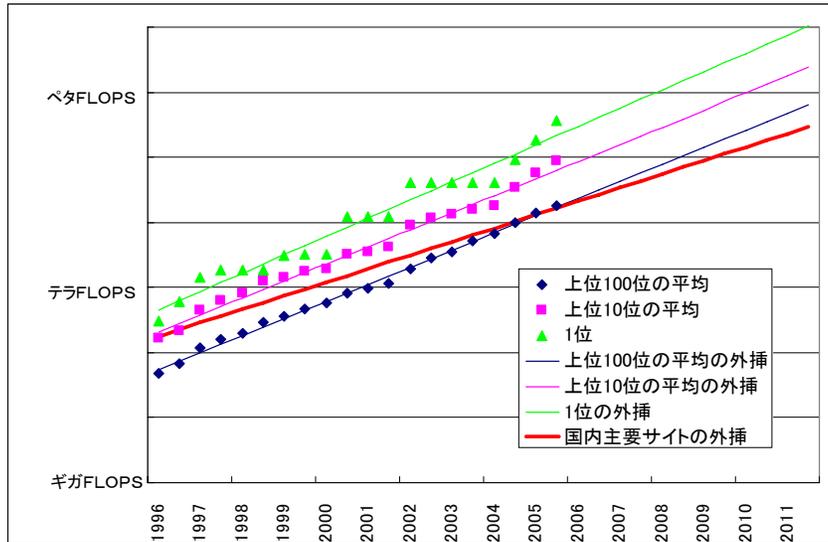
機関名	スーパーコンピュータセンター名
宇宙航空研究開発機構	情報・計算工学センター
大阪大学	サイバーメディアセンター
海洋研究開発機構	地球シミュレータセンター
気象庁	気象研究所
九州大学	情報基盤センター
京都大学	学術情報メディアセンター
高エネルギー加速器研究機構	計算科学センター
産業技術総合研究所	グリッド研究センター
自然科学研究機構 核融合科学研究所	理論・シミュレーション研究センター
自然科学研究機構 国立天文台	天文学データ解析研究センター
自然科学研究機構 分子科学研究所	計算科学研究センター
情報・システム研究機構 統計数理研究所	統計科学技術センター
筑波大学	計算科学研究センター

機関名	スーパーコンピュータセンター名
筑波大学	計算科学研究センター
東京大学	情報基盤センター
東京大学	物性研究所
東京工業大学	学術国際情報センター
東北大学	情報シナジーセンター
東北大学	金属材料研究所
東北大学	流体科学研究所
名古屋大学	情報連携基盤センター
日本原子力研究開発機構	システム計算科学センター
物質・材料研究機構	計算材料科学研究センター
防災科学技術研究所	防災基盤科学技術研究部門
北陸先端科学技術大学院大学	情報科学センター
北海道大学	情報基盤センター

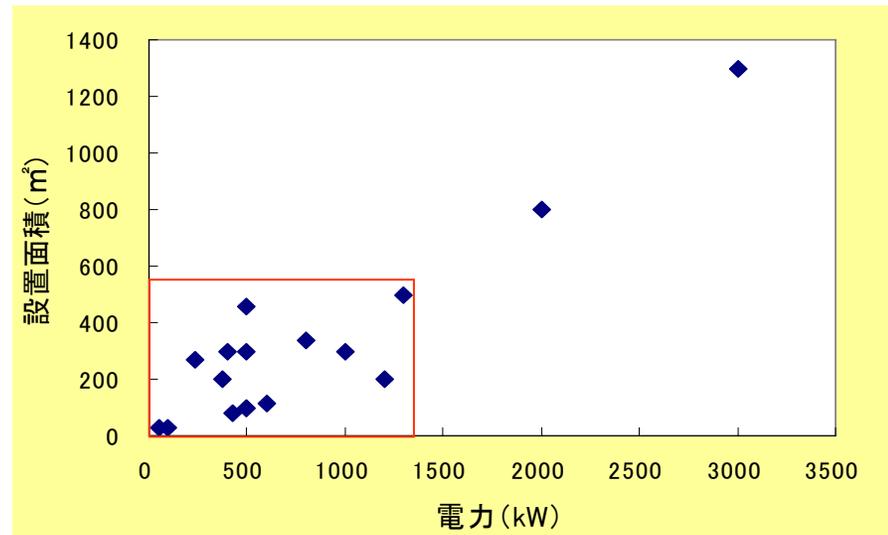
合計 26機関

スーパーコンピュータセンター調査結果(1)

TOP500における国内外の計算機性能
上昇トレンドの比較



各センターの電力的および設置面積的制約



- 国内計算機センターのスーパーコンピュータ性能は長期低落傾向にある
- 国内の計算機センターは年率約1.6倍の性能向上
- 世界的には年率約1.8倍で性能が上昇
(TOP500リストによる)

- 設置面積, 受電設備許容量には強い制約がある.
- ほとんどのスパコンセンターの
 - 設置面積は約600m²以下
 - 受電設備容量は1.5MW以下

スーパーコンピュータセンター調査結果(2)

- 国内の計算資源の性能上昇速度は、世界的な傾向と比較して大きく劣っている
 - 最高性能を目指すと同時に、重層的な強化への配慮が必要
- 次世代スーパーコンピュータに対する要求
 - 制約について
 - ほとんどのセンターでは、1.5MWが消費電力の上限
 - ほとんどのセンターでは、600m²が設置面積の上限
 - 機能について
 - ソフトウェア資産・環境の継続性
 - 高い実行性能が手軽に得られる容易性
 - プログラム開発を促進するための生産性
 - 安定稼動のための耐故障性
 - 低消費電力などの経済性
 - 運用について
 - 既存センターとの共存および連携
 - トップダウン型アプリとボトムアップ型アプリの共存

3. 米国のスーパーコンピュータ開発状況

※ 詳細は参考2-2を参照のこと.

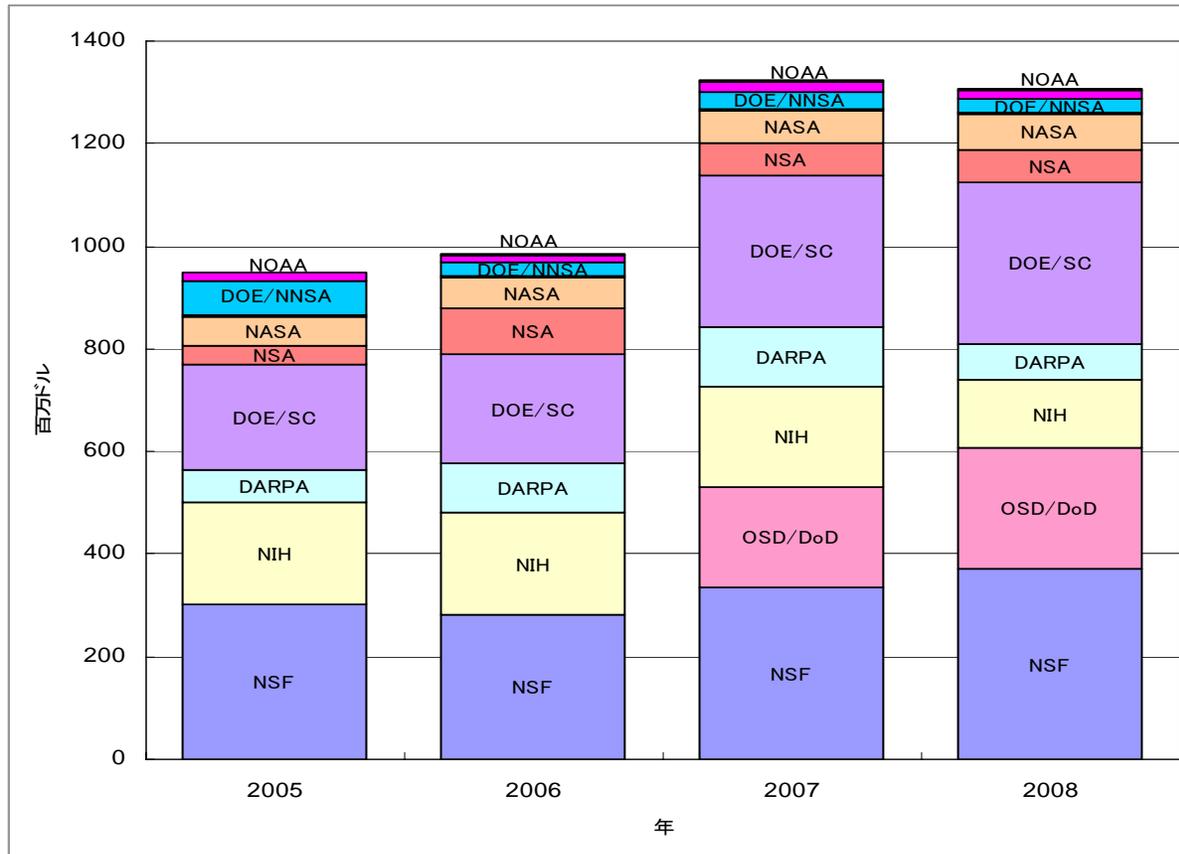
米国政府のスーパーコンピュータ開発について

- 1991年, HPC法を制定し, 「スーパーコンピュータの重要性」を法的に確立.
 - 1991年HPC法の趣旨: (1) HPCに対する連邦政府支援の継続, (2) 各省のスーパーコンピュータ施策のコーディネーション
 - 2006年1月, ブッシュ大統領一般教書演説においてスーパーコンピュータ開発支援に言及
 - 「米国の競争力を維持していくためには, 人々の才能や創造力といった点で世界をリードしなければならない. このためにスーパーコンピューティングのような有望分野への取り組みを支援する. 」
- 数多くの府省において, 自らのミッションを達成するための共通の基盤 (enabling technology) として位置づけられている.
 - スーパーコンピュータ戦略の主目的は「国防・安全保障」
 - 兵器開発: DoD中心
 - 核実験の置き換え: DoE中心
 - 国防シミュレーション(テロ対策などに利用(2001.09.11以降追加))
 - 科学技術の振興
 - ナノ・バイオ・気象・災害シミュレーション・宇宙等: DoE, NSF, NASA, NIH等
 - 産業の国際競争力の強化
- 上記達成のためのスーパーコンピュータ技術(先端コンピュータ技術)開発
 - 関連予算を, 約1,000億円(2005年度)から約1,500億円(2007年度)に拡大

米国主要プロジェクトの状況

	予算総額	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012
DoE ASC計画	約 \$1800M (2005- 2010)	ASCI Purple 100TF BlueGen e/L 370TF			BlueGen e/P 1PF			BlueGen e/Q 10PF?	
DoE NLCF計 画	約\$150- 200M (2004- 2008)	Cray Red Storm (XT3) 20TF	Cray X2 100TF	Cray X2 250TF	Cray Baker 1PF				
		IBM BlueGen e/L 5TF	BG/L 50TF	BlueGen e/P 100TF					
DoD/DA RPA HPCS計 画	約 \$160M (2002- 2005)	第二 フェーズ 研究開発 (Cray, I BM, Su n)	第三 フェーズ 研究開 発開始 (2ベン ダーに絞 る)				実効2PF (4PF超 までの拡 張性確 保)		
DoD/NSA	\$52M (2006の み)			Cray Black Widow 数100TF ~	(最終 目標は 1PF超 の実現 。時期 未定)				
NSF Cyber Infrast ructure 計画	\$200M (2007- 2010)	説明会 (6月) 一次提案 (9月)	最終提 案 (2月) →選定	開発(2007年 10月開始)			2010年 に1PFを 目指す		

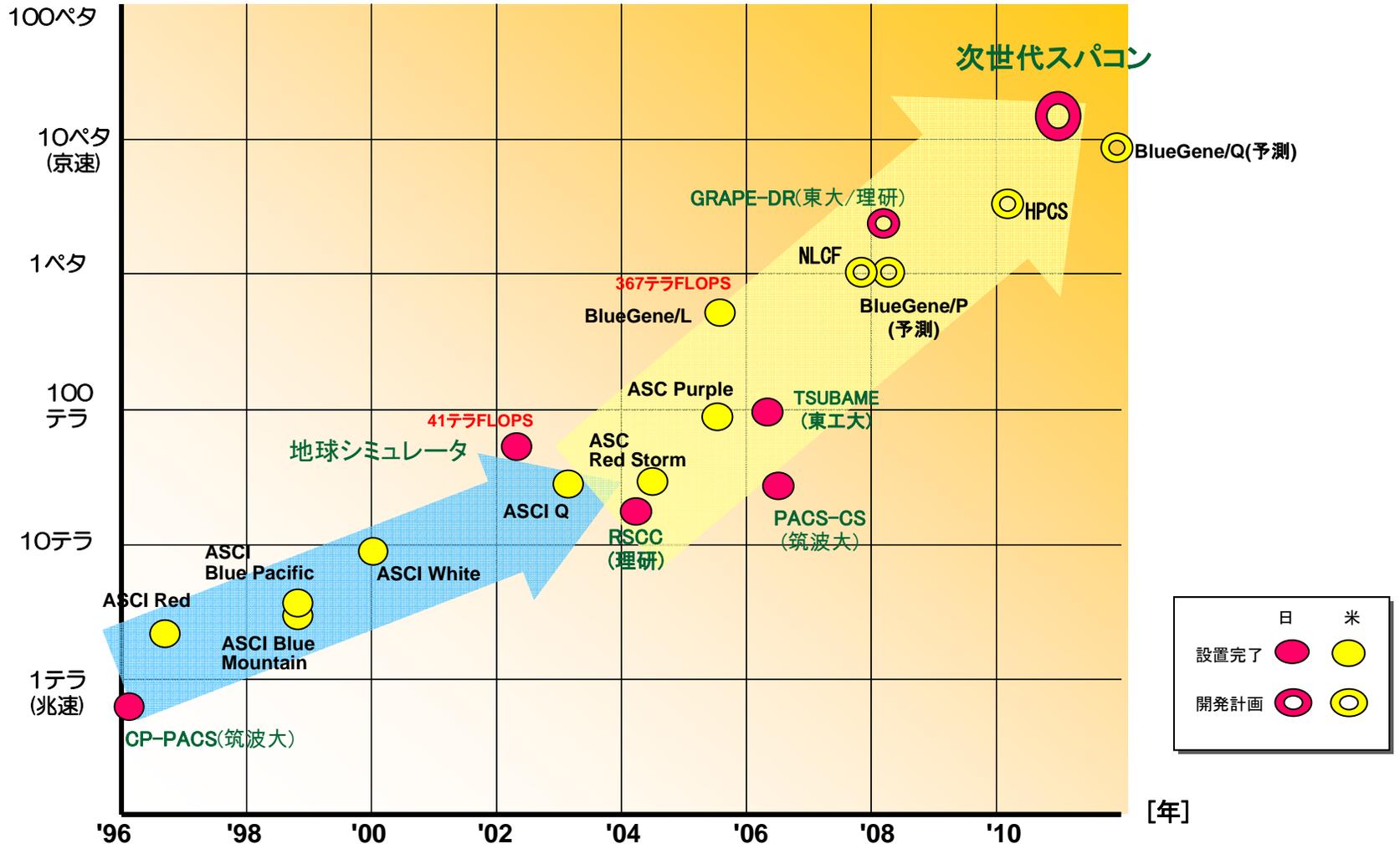
米国政府主要プロジェクトの予算の推移



	2005	2006	2007	2008
HEC 予算合計(M\$)	967.1	984.6	1,341.6	1,308.6
前年からの成長率	-	1.8%	36.3%	-2.5%

日米の主要なスパコン開発

ピーク性能 (FLOPS)



4. ターゲット・アプリケーションの検討

ターゲット・アプリケーションの選定

- 次世代スーパーコンピュータのアーキテクチャ検討に資するため、2010年頃に重要となるアプリケーション・ソフトウェアを検討.
- 次世代スーパーコンピュータ開発戦略委員会の下にアプリケーション検討部会を設置し、ターゲット・アプリケーションを選定.
 - 平成18年1月から平成19年3月までに計7回の会議を開催.
 - 5分野からターゲット・アプリケーション21本を選定(参考2-3).
 - その他の討議事項(参考2-5)
 - 概念設計における運用・管理システム検討のための運用指針(案)の検討
 - システム構成案について
 - COE形成について

ターゲット・アプリケーション(参考2-3)

【ライフ分野】

名称	プログラム名
巨大タンパク質系の第一原理分子動力学計算	ProteinDF
タンパク質立体構造の予測	SimFold
血流解析シミュレーション	MC-Bflow
オーダーメイド医療実現のための統計的有意差の検証	MLTest
遺伝子発現実験データからの遺伝子ネットワークの推定	GNISC
タンパク質-薬物ドッキング計算	Sievgene/myPresto

【ナノ分野】

名称	プログラム名
分子動力学計算	Modylas
FMO分子軌道法計算	GAMESS
疎視化分子動力学計算	Octa
実空間第一原理分子動力学計算	RSDFT
平面波展開第一原理分子動力学計算	PHASE
溶液中の電子状態の統計力学的解析	RISM/3D-RISM

【物理・天文分野】

名称	プログラム名
天体の起源を探る超大規模重力多体シミュレーション	NINJA/ASURA
格子QCDシミュレーションによる素粒子・原子核研究	LatticeQCD

【地球科学分野】

名称	BMT*略称
地震波伝播・強振動シミュレーションモデル	Seism3D
全球雲解像大気大循環モデル	NICAM
超高解像度海洋大循環モデル	COCO

【工学分野】

名称	BMT*略称
有限要素法による構造計算	FrontSTR
有限差分法によるキャビテーション流れの非定常計算	Cavitation
航空機解析における圧縮性流体計算	LANS
Large Eddy Simulation (LES)に基づく非定常流体解析	FrontFlow/Blue