

秘

評価後回収資料

複写厳禁

資料6 - 2

次世代スーパーコンピュータのシステム 構成案の検討経緯と特長

平成19年5月9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

目次

1. 現在のシステム構成案に至った経緯

- (1) 検討体制
- (2) 経緯と予定(2006年8月)
- (3) 検討経緯(2006年9月～)
- (4) メーカーからのシステム提案に対する評価(概要)
- (5) システム構成案検討の考え方
- (6) 二者択一の検討
- (7) 共同開発の検討
- (8) 結論

1. ユニットA及びユニットBをシステムコネクで結合させるシステム構成案(以下「理研案」という)に関する以下の事項。
 - ・ 理研案に至った経緯、及び最適のシステム構成案と判断した理由。

2. 他のシステム構成案との比較

2. 本プロジェクトの目的・目標や、総合科学技術会議のこれまでの指摘事項(例えば、汎用性の重視、性能目標の達成、大学・研究機関等が必要とする多種多様な計算機としての展開、消費電力や保守費用等の削減の重視、技術の他の製品開発への展開、我が国における技術力の維持・強化)に関して、他のシステム構成案(例:F案のみ、NH案のみなど)と比較して、理研案には具体的にどのような優位性があるのか。

3. 両ユニットのそれぞれの特徴

(理論性能が10PFLOPS超、3PFLOPS超である理由を含む)

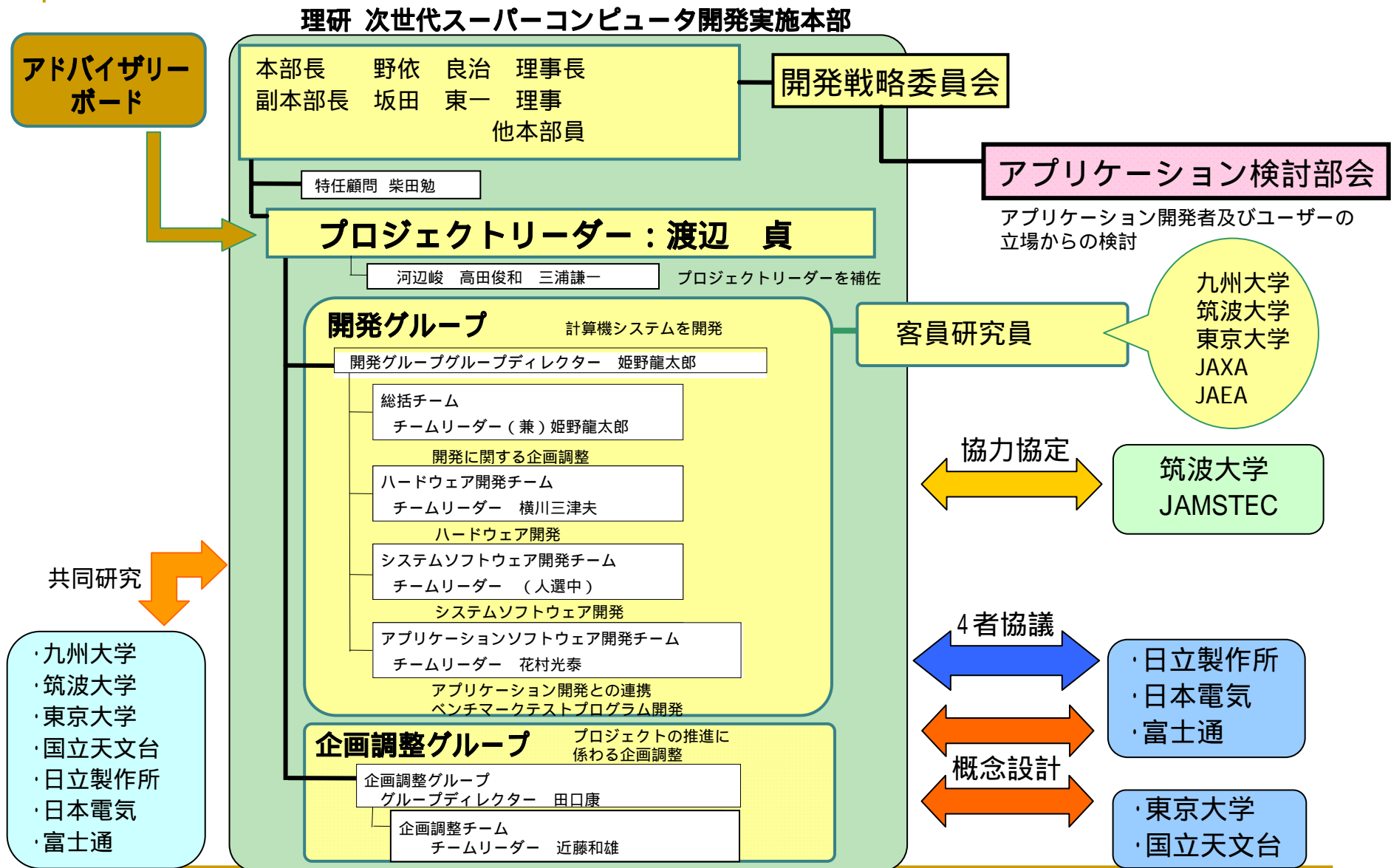
- ・ 両ユニットのそれぞれの特長(理論性能がそれぞれ10ペタ FLOPS 超、3ペタ FLOPS 超である理由を含む)。

4. 統合システムの用途と機能

- ・ 両ユニットを一つのスーパーコンピュータとして利用する用途としてどのようなものを想定しているのか。その場合、両ユニットの有機的な統合を実現するためにどのような機能を予定しており、また、その機能を実現するためにどのような技術を開発するのか。

1.現在のシステム構成案に至った経緯

(1) 検討体制



< 検討の枠組み >

- 客員等を交えた意見交換、検討
- アプリケーション検討部会における審議
1/25,3/1,3/30,7/5,12/7,1/23,3/1,4/20
- 開発戦略委員会における審議
1/24,4/10,7/11,9/1,12/27,2/1,3/7,4/23
- アドバイザリーボードにおける審議
(3/15,5/19,7/28),12/27,1/31,2/28,3/26,4/23
- 4者協議(メーカー3社の担当重役 - 理研副本部長)
6/1,7/5,8/31,12/25,2/27,4/16
- 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部会議
1/19,3/2,4/18,7/14,9/7,12/28,2/6,3/8,3/24,(3/26),4/24

< 検討・意思決定の経緯 >

	2006年												2007年					
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	4	5	
アプリケーション検討 部会	▼		▼	▼				▼					▼	▼		▼	▼	
開発戦略委員会	▼			▼			▼		▼				▼	▼	▼	▼	▼	
アドバイザリボード			▼		▼		▼						▼	▼	▼	▼	▼	
4者協議						▼	▼		▼				▼		▼		▼	
次世代スパコン 開発実施本部会議	▼		▼	▼					▼				▼	▼	▼	▼	▼	▼
	調査		共同研究				絞込み		概念設計				中間報告評価		共同開発検討		決定	評価

アプリケーション検討部会名簿

[敬称略・順不同]

部会長	平尾 公彦	東京大学 副学長、工学部 教授
副部会長	中村 春木	大阪大学 蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究センター長
	宇川 彰	筑波大学 計算科学研究センター長
	梅谷 浩之	自動車工業会 CAE WG主査
	加藤 千幸	東京大学 生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター長
	川本 要次	三菱重工業株式会社 技術本部 高砂研究所 次長
	北浦 和夫	京都大学大学院 薬学研究科 教授
	木寺 詔紀	横浜市立大学大学院 国際総合科学研究科 教授
	住 明正	東京大学 サステナビリティ学連携研究機構 地球持続戦略研究イニシアティブ 統括ディレクター・教授
	泰地 真弘人	理化学研究所 ゲノム科学総合研究センター 高速分子シミュレーション研究チーム チームリーダー
	高田 彰二	京都大学理学研究科 准教授
	寺倉 清之	北陸先端科学技術大学院大学 特別招聘教授
	土井 正男	東京大学大学院 工学系研究科 教授
	中村 振一郎	株式会社三菱化学科学技術研究センター 基盤技術研究所 計算科学技術室長

アプリケーション検討部会名簿

[敬称略・順不同]

	西島 和三	持田製薬株式会社 医薬開発本部 開発企画推進部 主事
	姫野 龍太郎	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 開発グループ グループディレクター
	平田 文男	自然科学研究機構 分子科学研究所 教授
	平山 俊雄	日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター長
	樋渡 保秋	金沢大学 名誉教授
	藤井 孝蔵	宇宙航空研究開発機構 情報・計算工学センター長
	古村 孝志	東京大学地震研究所 准教授
	牧野内 昭武	理化学研究所 VCADシステム研究プログラム プログラムディレクター
	松本 洋一郎	東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻 教授
	観山 正見	自然科学研究機構 国立天文台長
	山形 俊男	東京大学大学院理 学系研究科 地球惑星科学専攻 教授
	前川 禎通	東北大学 金属材料研究所 教授

開発戦略委員会名簿

[敬称略・順不同]

委員長	坂田 東一	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 副本部長
副委員長	茅 幸二	理化学研究所 和光研究所長
	平尾 公彦	東京大学 副学長、工学部 教授
	延與 秀人	理化学研究所 延與放射線研究室 主任研究員
	米倉 実	理化学研究所 経営企画部長
	渡辺 貞	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 プロジェクトリーダー
	姫野 龍太郎	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 開発グループ グループディレクター
	田口 康	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 企画調整グループ グループディレクター

アドバイザーボード名簿

[敬称略・順不同]

委員長	岩崎 洋一	筑波大学長
	小林 敏雄	財団法人日本自動車研究所長
	小宮山 宏	東京大学 総長
	立花 隆	ノンフィクション作家、ジャーナリスト、評論家
	中澤 喜三郎	元明星大学教授
	中村 宏樹	自然科学研究機構 分子科学研究所長

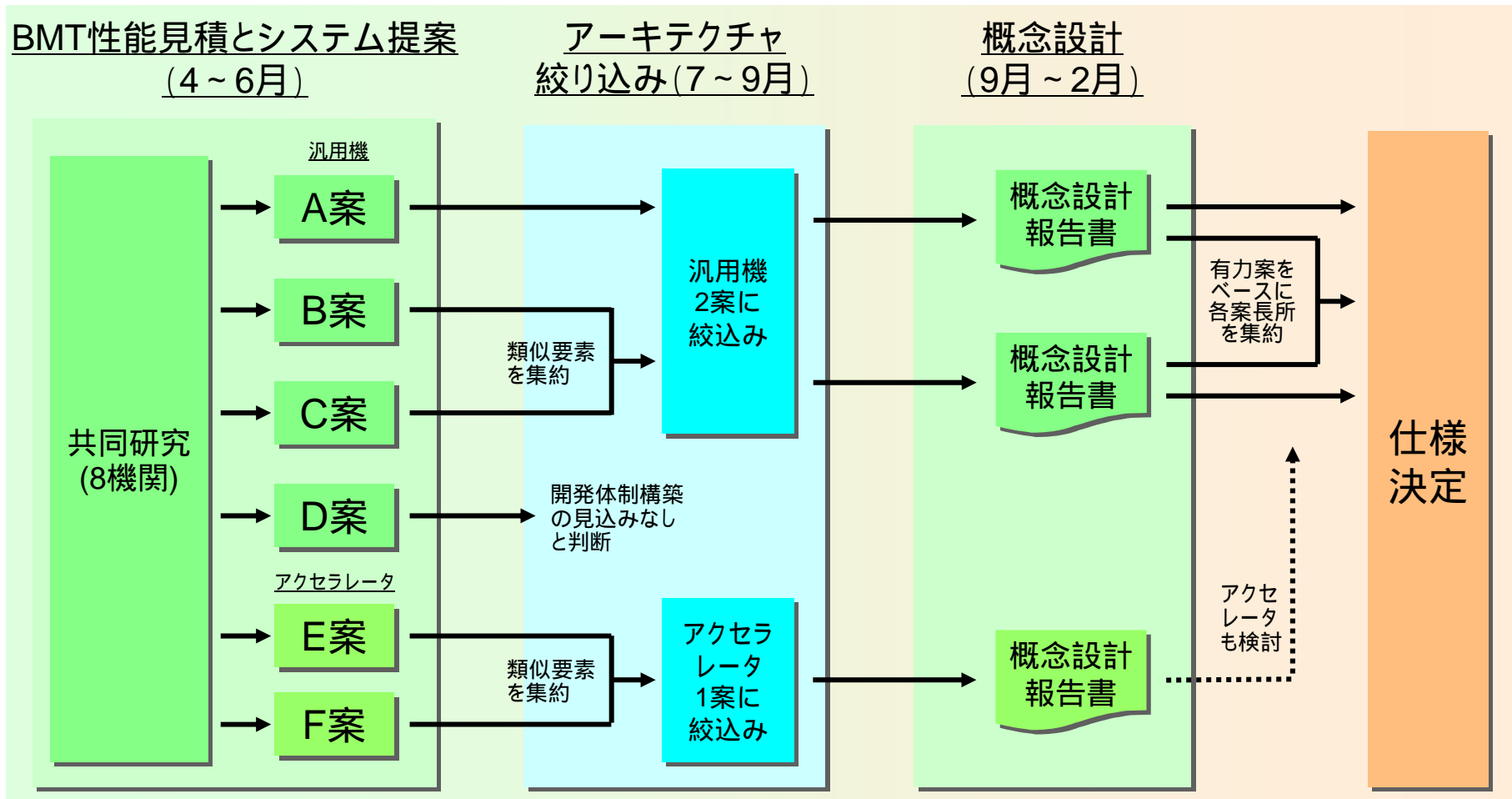
客員研究員名簿

[敬称略・順不同]

石川 裕	東京大学大学院 情報理工学系研究科 准教授
宇川 彰	筑波大学 教授 学長補佐
佐藤 三久	筑波大学 教授 計算科学センター長
朴 康祐	筑波大学 システム情報工学研究科 教授
村上 和彰	九州大学大学院 システム情報科学研究院 情報理学部門 教授
岩宮 敏幸	宇宙航空研究開発機構 情報システム部 参事
平山 俊雄	日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター長

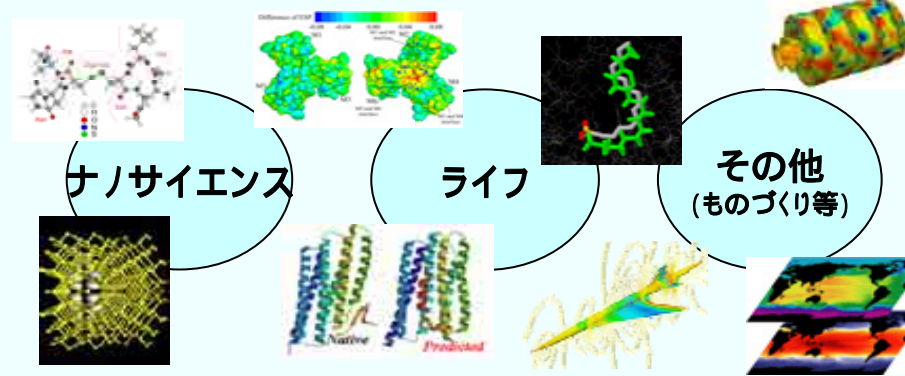
(2) 経緯と予定(2006年8月)

- 9月より実施される概念設計の報告書(中間報告:12月、最終報告:2月)を評価・検討したうえ、3月までに仕様を決定する予定。



<システム構成 最適化の考え方>

グランドチャレンジからの要求要件

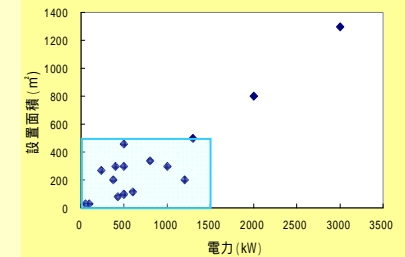


制約条件

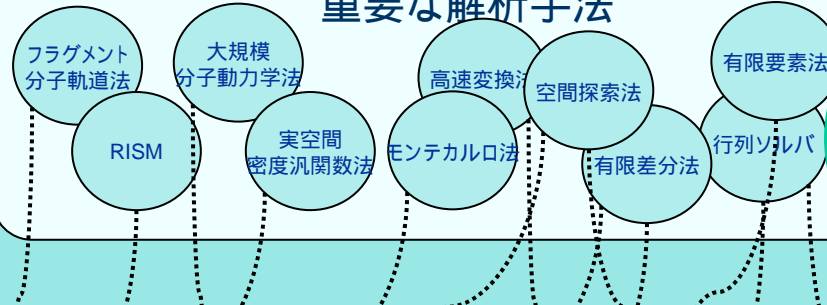
電力, 設置面積

信頼性, 保守性

コスト(開発費, 製造費, 保守費等)

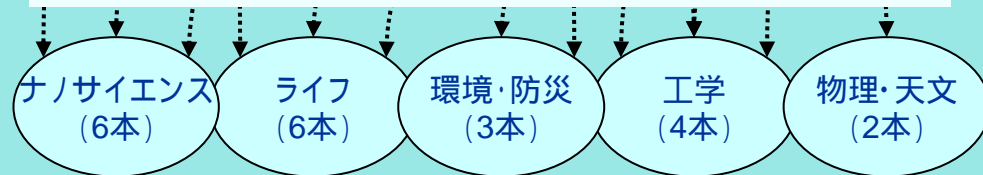


重要な解析手法



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】

半導体製造
プロセス

低消費電力化
SOI
Low-k
High-k

光伝送技術

ソフトウェア
OS, コンパイラ等

産業への波及効果

技術条件, 運用条件

< 概念設計開始にあたっての確認事項(2006年8月)[1] >

➤ 基本方針

1. 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
2. スパコン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
3. 完成時に世界最速と内外から広く認められること(継続的な支援を得るため)

➤ 目標性能

- 理論性能: 5 ~ 10PF (内外の開発状況に応じて具体化)
- 実効性能: 1.5 ~ 3PF (同上)
- 消費電力: 1 ~ 3MW/PF (10 ~ 30MW: 空調等を含むシステム全体)
- ターゲット時期: 2010年度末 運用開始、2011年度末 完成

(目標性能 算出の根拠)

- スーパーコンピュータセンター調査
- 米国主要プロジェクトの状況

< 概念設計開始にあたっての確認事項(2006年8月)[2] >

➤ 目標性能を達成するための開発の方針

- 理論性能やLINPACK性能を考慮しつつ、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。

(3) 検討経緯(2006年9月～)

- NEC + 日立チーム(NH)、富士通(F)の2者が汎用機の概念設計を実施
(別途、東大 + 天文台が専用機の概念設計実施)
 - 期間: 平成18年9月19日 - 平成19年2月28日
 - 概念設計の主な要求仕様
 - ピーク性能10PFLOPS以上, メモリ容量2.5PB以上, 消費電力30MW以下(周辺機器, 空調機器を含む), 設置面積3,200m²以下(周辺機器を含む)
- 平成18年12月1日, 2者から中間報告を受領.
最終報告書(平成19年2月28日)
- 中間報告結果の評価(～平成19年1月)
- システム構成案の検討(1～4月)
二者択一及び複数の共同開発案 の検討
メーカー間の情報開示 & 守秘義務の枠組み整備も実施
- 本部会議で理研としてのシステム構成案を決定(4月24日)

(4)メーカーからのシステム提案に対する評価(概要)

➤ 両提案の比較概要

- 概念設計の要求仕様(ピーク性能10PFLOPS以上,メモリ容量2.5PB以上,消費電力30MW以下,設置面積3,200m²以下など)を満足.
- ベンチマーク・テスト(BMT)による性能推定結果,電力性能比等はほぼ同等.

➤ CPUに対する評価

- F案は,既存スカラプロセッサと親和性が高く,より幅広い技術展開が可能.
- NH案は,ベクトルプロセッサの課題を解決し,高い演算性能を容易に達成.

➤ ネットワークに対する評価

- F案の新規性・将来性は評価できるが,汎用性,運用性,実績などに優れたNH案が好ましい.

(5) システム構成案検討の考え方(2006年12月末)

■ 選択肢

➤ 2者のいずれかを選択(2者択一)。

2者の提案は明らかな優劣をつけ難いものであるが、対外的に分かりやすい答えを出すためにも総合判断としていずれか一方を選択する

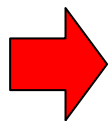
➤ 2者の案をベースに共同開発。ただし、以下を満たすことが条件。

- a. 共同開発のシステム構成の方が単独開発のシステムより、性能が上がること。
- b. 共同開発により、将来の我が国のスパコン開発の技術力、国際競争力、ビジネス展開力等の向上に一層貢献すること。
- c. 開発予算の範囲内で、共同開発システムが構築できること。

■ 汎用機による目標性能達成の見込みが確認できたため、アクセラレータの採用は考慮しない。

(6) 二者択一の検討

- システム全体の性能(電力、設置面積含む)としては明らかな優劣をつけ難い。
- 両者とも自社の負担分を伴った上で開発費総額内。実際の製作コストを正確に見積もり両者が納得のいく差をつけることは困難。
- 二者択一をした場合、次々世代の開発に向け、重要な技術オプション(CPU技術)を失う懸念あり。



両者の長所を活かした共同開発を検討し、最適システムを構成できない場合は二者択一を行う

並行して両案の詳細な評価を行うとともに、二者択一の方法、手続き等を検討

(7) 共同開発の検討

< 議論のポイント >

- メーカー間でどこまで協力可能か。
 - ・CPUの共同開発はできないか
 - ・協力と情報開示の範囲
- 両CPUを密に繋ぐ必要性
連成計算のニーズは開発リスクに見合うか、システムとしての一体性が高くなることは重要か、等
- ネットワーク
FatTreeが良いが、ToFuも使えるか。
- 責任体制
プライム制等を検討

< 検討したシステム構成案 >

- F案プロセッサで10PFLOPS超, NH案プロセッサで3PFLOPS超の統合汎用システムを複数案(大きく3案に分類)を検討.
- 案1, 案2は開発期間の延長(約1年半)など技術的なリスクが大きい.
- **案3がベストな選択.**

	案1	案2	案3
構成	<p>10 3</p>	<p>10 3</p>	<p>10 3</p>
特徴	<ul style="list-style-type: none"> ■ 両技術の確保 ■ Fat Treeの汎用性, 運用性 ■ 10+3: Fプロセッサの互換性, 汎用性重視 	<ul style="list-style-type: none"> ■ 両技術の確保 ■ ToFuの将来性, 新規性 ■ Fat Treeの汎用性, 運用性 ■ 10+3: Fプロセッサの互換性, 汎用性重視 	<ul style="list-style-type: none"> ■ 両技術の確保 ■ ToFuの将来性, 新規性 ■ Fat Treeの汎用性, 運用性 ■ 10+3: Fプロセッサの互換性, 汎用性重視 ■ ユニットAとユニットB <ul style="list-style-type: none"> - 多様なアプリケーションへの対応と計算資源の有効利用.

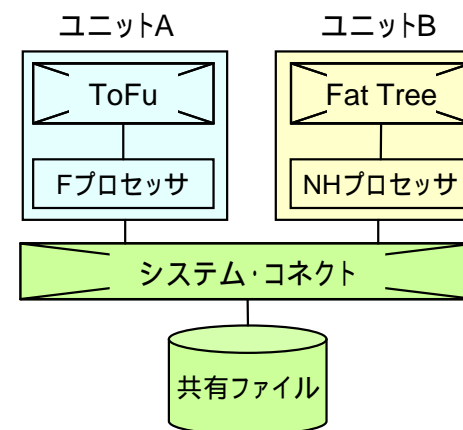
(8) 結論

F及びNH両者の提案は、それぞれに優れた特長を持ち、一方のみを選択することは、スパコン技術の将来の可能性とリスクを考慮すると適切とは言えず、共同開発の条件を満たし、かつ技術的、経費的な実現見通しがついたことから、両者の技術を開発して、一つのシステムを構成することが最善と判断。



- 演算加速機構を付加すること等により高性能化したスカラプロセッサ及び拡張性の高い新規のネットワーク構成によるスカラユニット(理論性能約10PFLOPS超)と、画期的な構成により高い演算性能を達成するベクトルプロセッサ及び汎用性・運用性の高い省電力ネットワーク構成によるベクトルユニット(理論性能約3PFLOPS超)の両者をシステムコネクで結合した統合汎用システムを開発する。
- これにより、少なくとも目標性能であるLinpackの実行性能10PFLOPSを達成する。

統合汎用スーパーコンピュータシステム



本システム構成案を採用する理由 . (共同開発の条件b.)

- 将来の我が国のスパコン開発の技術力, 国際競争力等の向上に一層貢献する .

世界的主流となっているスカラプロセッサに演算加速機構を付加したプロセッサと, 我が国が強みを持つベクトルプロセッサの改良型となる新しい汎用プロセッサを同時に開発することにより, 次世代以降のプロセッサの技術オプションを発展させ, 将来に向け国際競争力の一層の向上を図る

(= 次々世代の開発に繋げるために必要) .

世界的に大多数のスパコンシステムが採用しているスカラプロセッサにSIMD型演算加速機構を付加すること等によりさらに高性能化を図り, 将来に向け国際競争力を高めることは極めて重要 .

制御構造が単純なベクトルプロセッサは, スカラプロセッサに比べ演算性能を向上させることがより容易であり, 将来に向け更に高度化を図り技術を発展させることにより, 我が国の重要な基幹技術の一つとなり得る .

FとNH両者の競争関係が維持され, 国際的により強い技術を開発できる可能性が高まるとともに, 次々世代以降のCPU開発においては, 両者の技術を融合させることも視野に入れることが可能 .

本システム構成案を採用する理由 . (共同開発の条件a.)

■ 効率的なシミュレーションの実行及びシステムの運用が可能 .

両者のCPUを用いた統合汎用システムにより,ソフトウェア資産のより有効な利用や共用施設として効率的なユーザー対応ができるだけでなく,多くのアプリケーションで有効な複合シミュレーションのための最適なシステム環境を構築できる .

スカラプロセッサ向けに開発された多くのアプリケーションと地球シミュレータに代表されるベクトルプロセッサ向けに最適化されたアプリケーションの両方を容易かつ発展的に利活用でき,ソフトウェア資産のより多様な有効活用が可能となる .

多様なアプリケーションをそのアプリケーションに適したプロセッサで実行することにより,単独プロセッサによるシステムよりも計算資源を有効活用できる .

計算科学の多くのアプリケーションで見られる複合シミュレーションにおいて,最適な統合システム環境(スカラ+ベクトル)の構築が可能となる .

本システム構成案を採用する理由 . (共同開発の条件b.)

■ 本プロジェクトの波及効果を最大化できる .

大学等の計算センターの多様なニーズを踏まえ、必要とされるスパコンの規模やアプリケーションに対応したより柔軟な下方展開が期待される . また、メーカーの競争関係も維持される .

CPU技術及びネットワーク技術の様々な要素技術が、家電や電子機器、ビジネスサーバー等へ幅広く展開されることが期待される .

人材を含めた両者のリソースをより多く投入できる共同開発により、費用対効果の高いシステム開発が可能。

2. 他のシステム構成案との比較

		単独で Peak 1 3 P F 超		Peak 1 0 P F 超 + Peak 3 P F 超		
		F	NH	案 1	案 2	案 3
Linpack 性能	10PFLOPS					
	Top 1	+	+	×スケジュール遅延の見込み	×スケジュール遅延の可能性	
×単独では10P超まで		×単独では10P超まで	×単独では10P超まで			
アプリ実効性能 (<3P)						
アプリ実効性能 (3~10P)						
アプリ実効性能 (>10P)		+	+			
×単独では10P超まで		×単独では10P超まで	×単独では10P超まで			
汎用性		+ { CPU ネットワーク	{ CPU ネットワーク			
アプリ資産の活用						
消費電力 及び設置 面積	消費電力			×ルーターの消費電力	×NIC等の消費電力	
	設置面積			×ルーターの物量	×NIC等の物量	
技術力の 強化への 寄与等	革新性			異機種間の密結合	異機種間の密結合(標準規格)	+
	発展性			×異機種間密結合の必要性?	×異機種間密結合の必要性?	
	拡張性					
	ビジネス展 開性			×Fは単独展開困難		
費用対効果		×民間資金は半分	×民間資金は半分	×密結合は利用が見込まれず	×密結合は利用が見込まれず	
スケジュール				×遅延の見込み	×遅延の可能性	
下方展開				×F単独の整備が困難		
要素技術の波及効果						
多様なユーザーの効率的な利用						
(システムの一体性)						

3. 両ユニットのそれぞれの特徴

(理論性能が10PFLOPS超、3PFLOPS超である理由を含む)

< 統合汎用システム構築の考え方 >

1. メーカーから提案のあった両者の優れた技術の特長を最大限活かし、目標性能であるLINPACKの実効性能10PFLOPSを達成しつつ、様々なアプリケーションを効率よく実行し、多くのユーザのニーズに応える最適なシステムを構築する。
2. スカラプロセッサベースのユニットは、理論性能10PFLOPS超とする。
 - ナノ・デバイスの高精細度シミュレーション等を実行するためには、10PFLOPS超の理論性能が必要。(実効性能 約3-5PFLOPS)
 - 多くのユーザが利用可能なPCクラスタや並列サーバによる開発・実行環境からの連続性、プログラムの移植性を重視。
3. ベクトルプロセッサベースのユニットは、理論性能3PFLOPS超とする。
 - 雲解像大気大循環モデルによる気候変動予測等には、理論性能3PFLOPS超が必要。(実効性能 約1PFLOPS)
 - 地球シミュレータなどベクトルプロセッサ向けのプログラム資産の有効利用を図る。

< 統合汎用スーパーコンピュータシステムの構成 >

別資料

両ユニットの特長

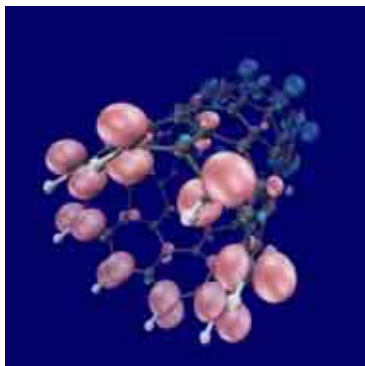
	ユニットA	ユニットB
プロセッサ	別資料	
ネットワーク		
ピーク性能決定 の考え方		

ナノ・デバイスの高精細度シミュレーション

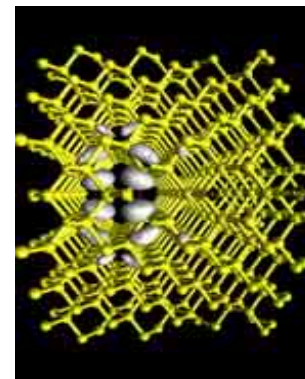
- ナノ・デバイスの基本構造を再現できる 10nm^3 以上(10万原子以上)の第一原理に基づく高精細度シミュレーションでは、数万原子系のシミュレーションを数時間で実行する性能が必要。
- 理論性能10PFLOPSのシステム(実効性能 約5PFLOPS)により、約10時間でシミュレーション可能と予測。

概念設計の結果から、10PFLOPS(理論性能)のシステムで、シリコン5万原子系のシミュレーションを10時間で実行可能と推定。

- シミュレーションによる半導体デバイスの設計支援が可能。
 - 実験では2,3週間の時間と十数人の人手が必要



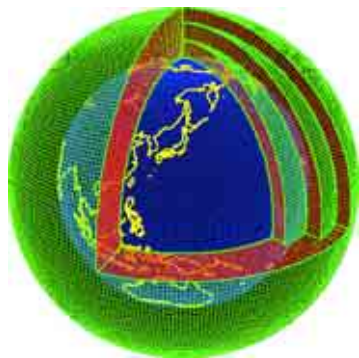
炭素ナノチューブ
でのスピン磁性



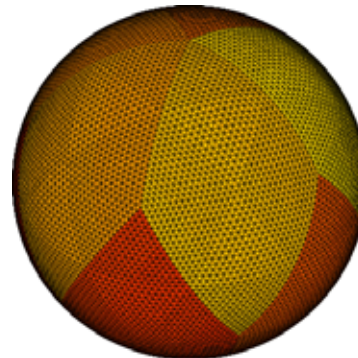
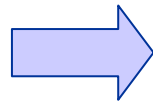
Si中原子空孔による
準位の電子雲

雲解像大気大循環モデルによる気候変動予測

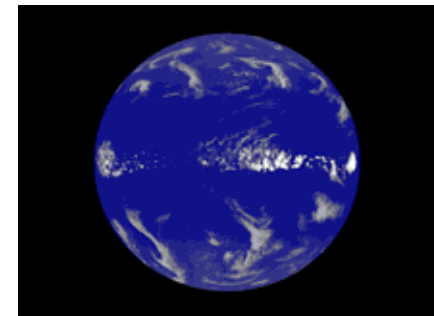
- 雲の振舞いを詳細に表現する大気大循環モデル(NICAM)を全球に適用して気候変動予測を行うためには、理論性能3PFLOPS超のユニットBが必要(実効性能約1PFLOPS)。
- 気候変動予測では、10年間の気候予測を数日でシミュレーションする性能が必要であるが、地球シミュレータで約1年3ヶ月(実効性能 約15TFLOPS)必要。
- 高精度の気候変動予測が可能となり、地球温暖化予測に貢献。



従来の大気大循環モデルの
計算格子



雲解像大気大循環モデル(NICAM)
の正20面体格子

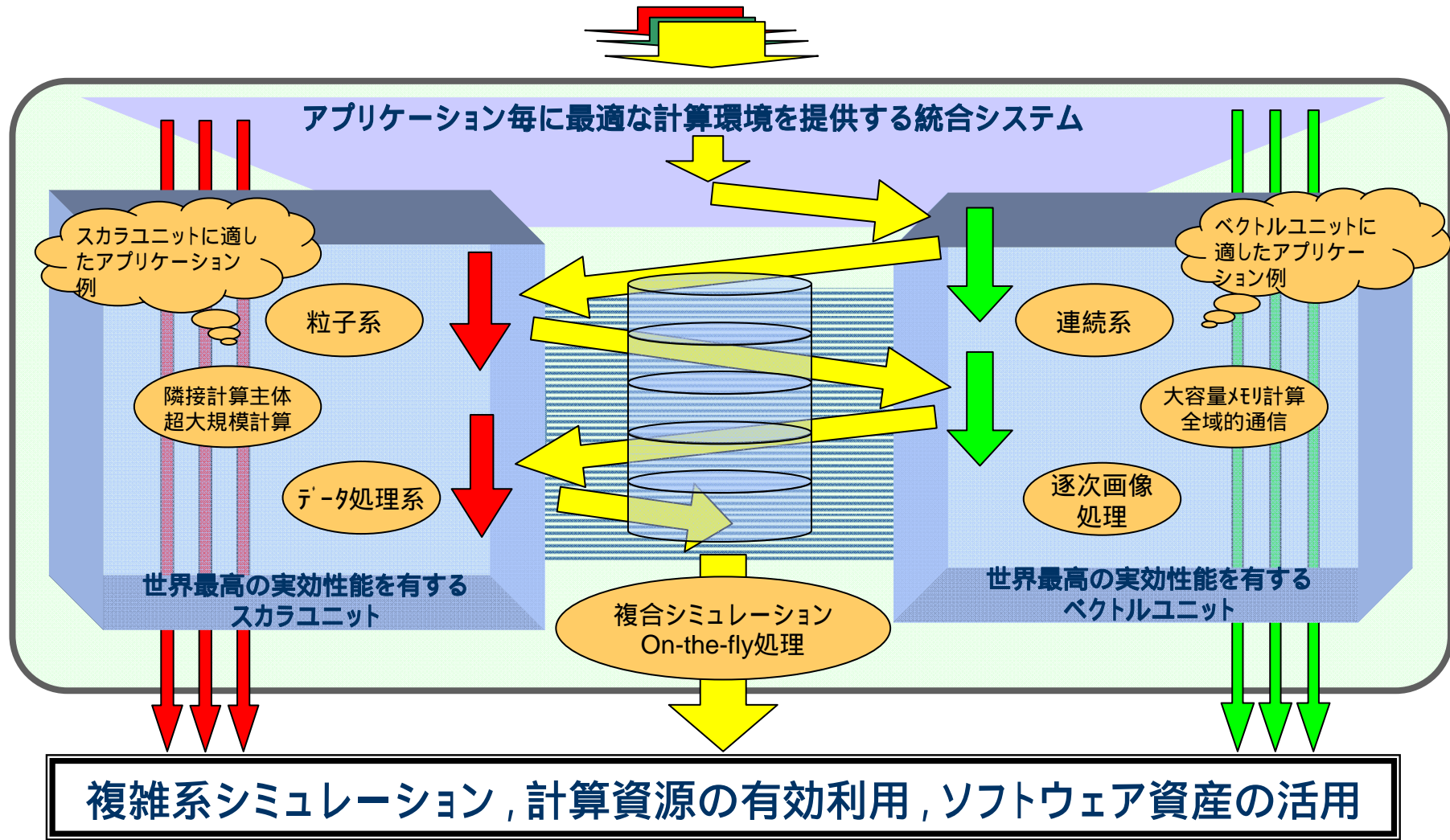


3.5kmメッシュ全球雲解像モデル
による水惑星実験結果

4．統合システムの用途と機能

< 次世代統合汎用スーパーコンピュータシステム概念図 >

多様なユーザ, 多様なアプリケーション



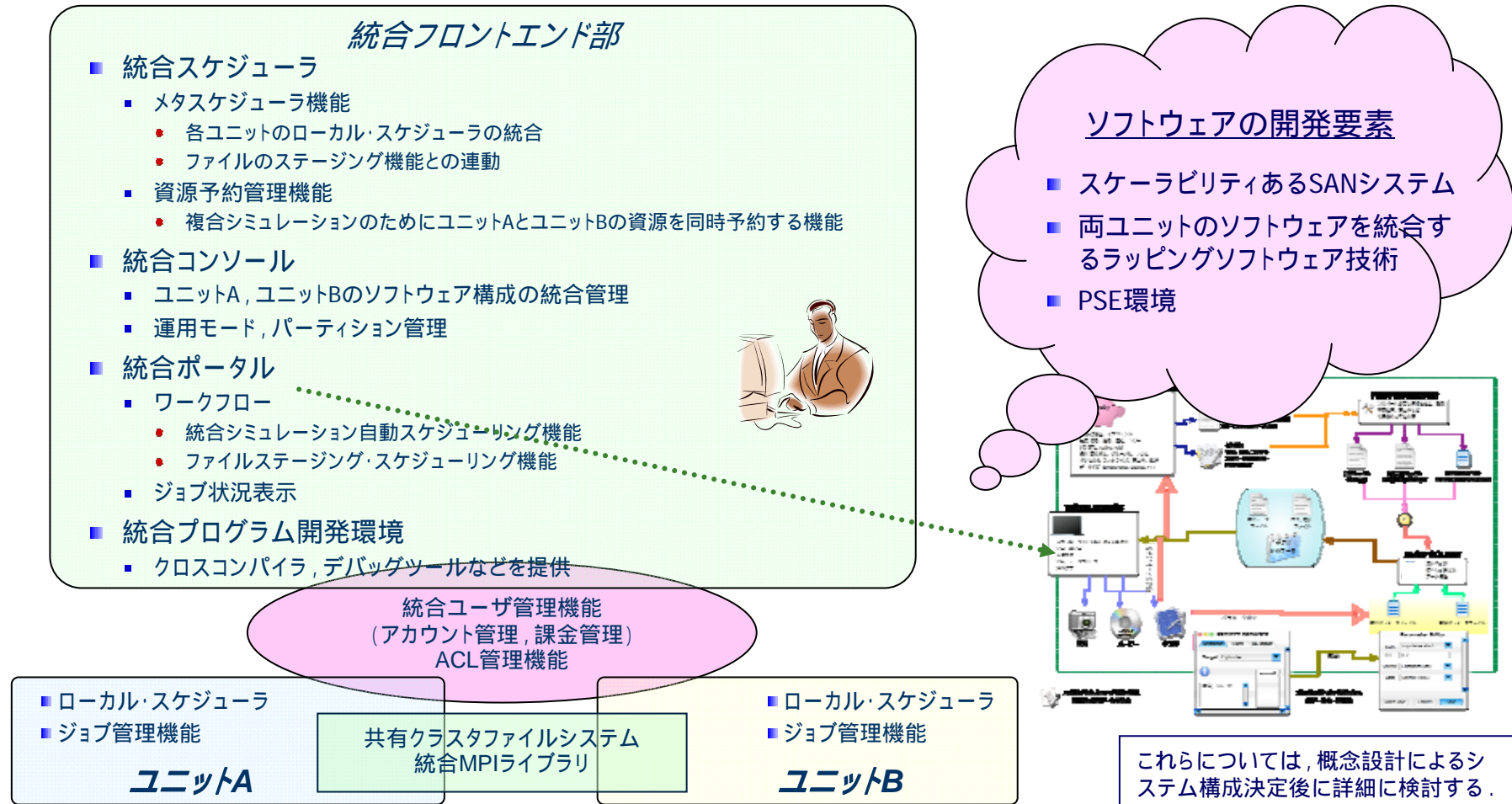
< アプリケーションから見た統合システムのメリット >

アプリケーション検討部会における審議での主な意見

- 計算科学のトレンドとして、複雑系のシミュレーションや、現象全体の“まるごと”シミュレーションは重要。各ユニットに適合したアプリケーションを連携させることによるシミュレーションの質的な向上が期待できる。
- ユニットAのシミュレーション結果を、ユニットB上でいろいろな角度から解析できることは有意義。ある種の実験装置と観測装置と考えることができる。
- インタラクティブに両ユニットを利用できる環境があれば、動的に計算条件を変化させるシミュレーションに有効。本システムの特徴を生かした利用環境に期待する。
- 幅広いアプリケーションに対応できるシステム構成である。
 - ユニットBの理論性能は3PFLOPSだが、ユニットBに適したアプリケーションの実効性能は世界一になるはず。

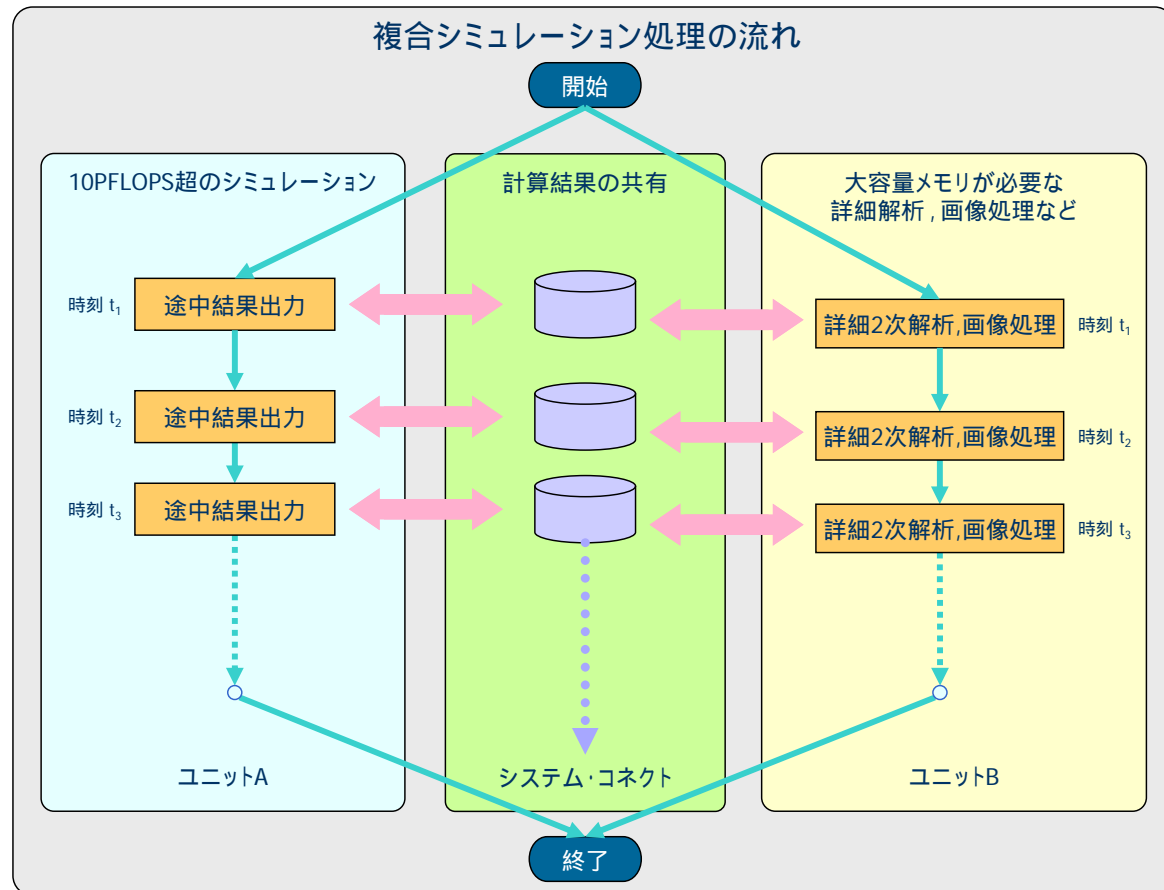
統合システムとしての機能

- システム・コネクは、コモディティ技術 (InfiniBand, または10GbE) で構成する。
 - システム全体の性能及びコストを最適化する観点で、両ユニットを結合する案として最適と判断。



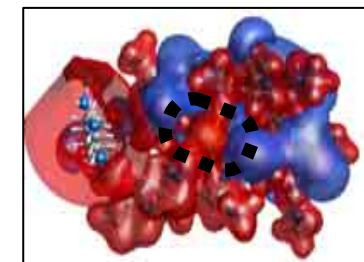
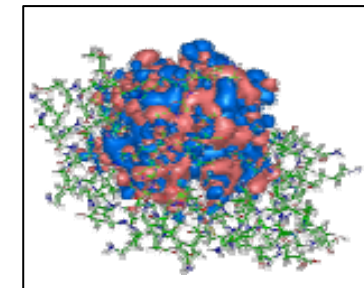
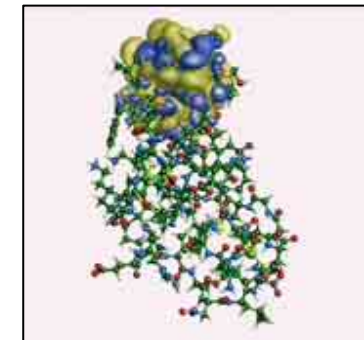
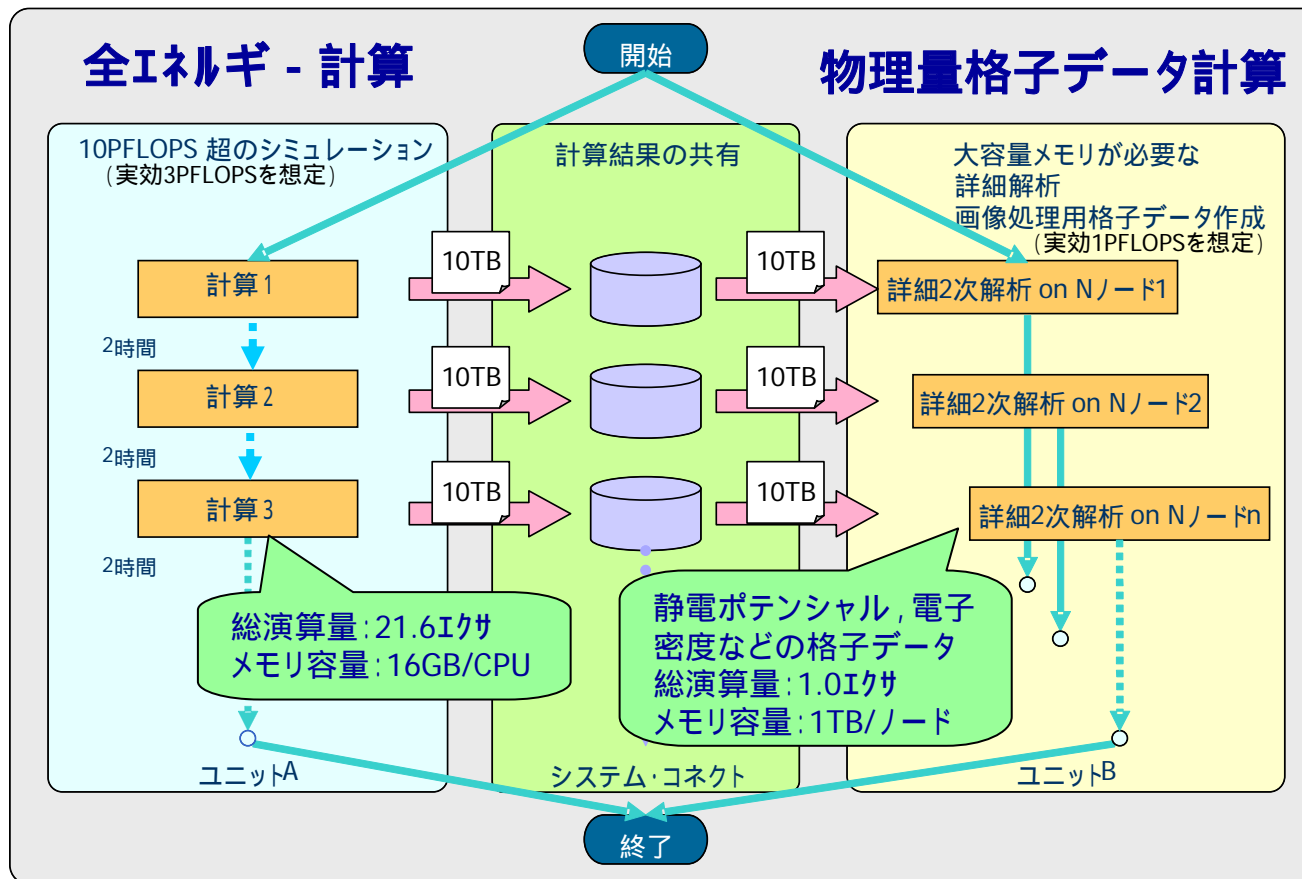
On-the-fly複合シミュレーション

- 統合システムによる複合シミュレーションにおいて、ある時刻ごとに出力される途中結果の流れ作業的なデータ解析、及び画像処理に最適なシステム。
- 各ユニットとシステム・コネクットの連携により、一連のデータ処理の短縮化が可能。
- 大規模かつ長時間シミュレーションの途中結果のモニタリングによる計算資源の有効活用が可能。



On-the-fly複合シミュレーションの例(分子軌道計算)

- タンパク質を含む10万原子系の分子軌道計算をユニットAで実施.
- ユニットAを使い2時間程で, 10TBの計算結果を出力.
- ユニットBで, 各データのCG解析用格子データを作成.



複合シミュレーション(太陽電池設計の例)

- 色素増感型太陽電池の構成要素のシミュレーション
- 構成要素毎に異なるシミュレーション技術が必要
- ユニットAとユニットBの複合計算でデバイス設計が可能

