

# 次世代スーパーコンピュータ プロジェクトについて

平成20年4月25日

独立行政法人 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 アプリケーション開発チーム  
チームリーダー 南 一生

[http://www.nsc.riken.jp/index\\_j.html](http://www.nsc.riken.jp/index_j.html)

---

# プロジェクトの概要

# 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト

平成18～24年度（総事業費）： 1, 154 億円

1. 目的 世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータの開発・整備及び利用技術の開発・普及

## 2. 概要

理論、実験と並び、現代の科学技術の方法として確固たる地位を築きつつある計算科学技術をさらに発展させるため、長期的な国家戦略を持って取り組むべき重要技術（国家基幹技術）である「次世代スーパーコンピュータ」を平成22年度の稼働（平成24年の完成）を目指して開発する。

今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるべく、

（1）世界最先端・最高性能の「次世代スーパーコンピュータ（注）」の開発・整備

（注）10ペタFLOPS級

（1ペタFLOPS：1秒間に1千兆回の計算）

（2）次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するためのソフトウェアの開発・普及

（3）上記（1）を中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点（COE）の形成を文部科学省のイニシアティブにより、開発主体（理化学研究所）を中心に産学官の密接な連携の下、一体的に推進する。

## 3. 体制

（1）開発主体である独立行政法人理化学研究所を中心とした産学連携体制を構築。

（2）特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律を整備し（平成18年7月施行）、産学官の研究者等に幅広く開かれた**共用施設**として位置付け。

# 全体スケジュール

		平成18年度 (2006)	平成19年度 (2007)	平成20年度 (2008)	平成21年度 (2009)	平成22年度 (2010)	平成23年度 (2011)	平成24年度 (2012)	
								稼動▲	完成▲
システム	演算部 (スカラ部、ベクトル部)	概念設計		詳細設計		試作・評価	製造・据付調整		
	制御フロントエンド (トータルシステム ソフトウェア)	基本設計		詳細設計	製作・評価		性能チューニング・高度化		
	共有ファイル	基本設計		詳細設計	製造・据付調整				
ソフトウェア (アプリケーション ソフトウェア)	次世代ナノ統合 シミュレーション	開発・製作・評価					実証		
	次世代生命体統合 シミュレーション	開発・製作・評価					実証		
施設	計算機棟	設計		建設					
	研究棟	設計		設計微修正等	建設				

# 立地地点の選定

理化学研究所において、次世代スーパーコンピュータ施設の立地地点を客観的・科学的な観点から検討するため、外部有識者からなる立地検討部会(部会長：黒川 清 内閣特別顧問)を設置し、平成18年7月より、15の候補地について評価を実施。

理化学研究所は立地検討部会の評価報告書に基づき、有力とされた神戸及び仙台について総合的に評価・検討を行い、平成19年3月に、神戸(ポートアイランド第2期)を立地地点とすることを決定。

所在地	兵庫県神戸市中央区港島7丁目(ポートアイランド第2期内) ・ポートアイランド南駅より徒歩約1分(JR新神戸駅から25分)
-----	---

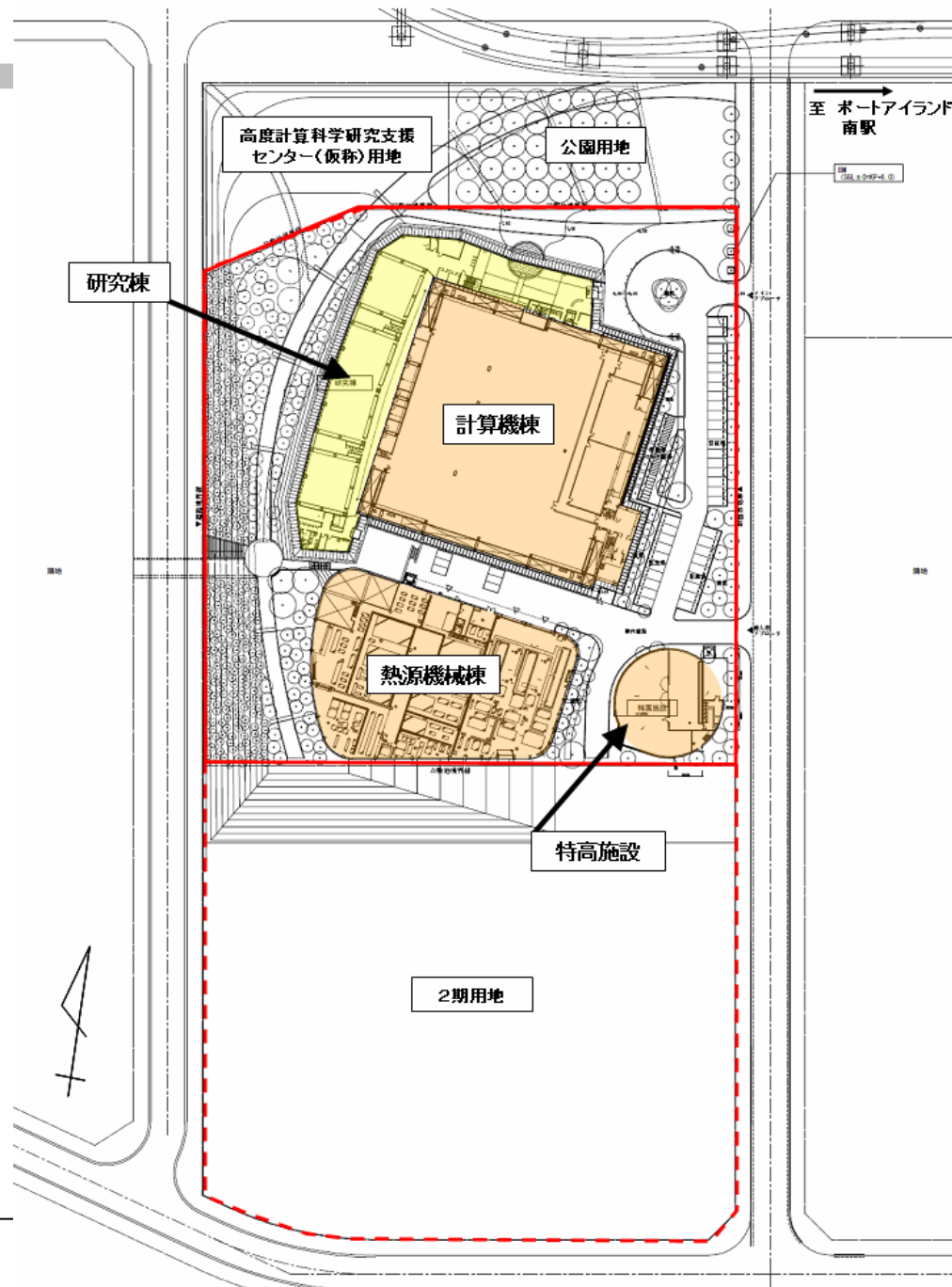


ポートアイランド第2期



土地所有者：神戸市

# 次世代スーパーコンピュータ施設配置計画図





# 次世代スーパーコンピュータ施設(研究棟)イメージスケッチ(検討案)



北西から研究室側を見る

# 次世代スーパーコンピュータ施設の整備

## 施設の建設

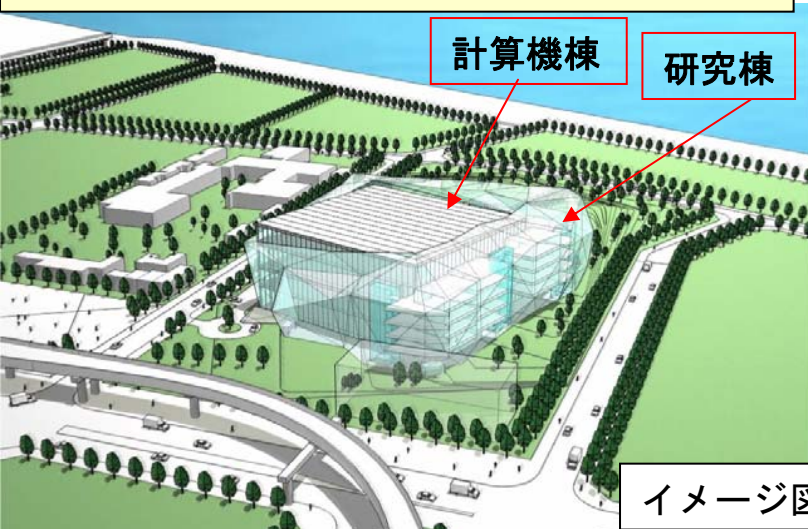
- ・ 現在、理化学研究所において建屋（計算機棟、研究棟等）の設計を実施中。
- ・ **平成19年度内に着工、平成22年度に完工**予定。

## 整備の基本方針

- (1) 次世代スーパーコンピュータの性能を最大限引き出す設備・能力の確保
- (2) **世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点 (COE) として相応しい研究・教育環境の整備**
- (3) ランニングコストと環境負荷の低減化

## 施設の特徴

- (1) 計算機の性能を常時保証できる床耐荷重及び免震構造とするとともに、必要な電源設備及び冷却設備を整備
- (2) 共用施設としての運用上の利便性を高めるとともに、研究交流や多様な知識の融合を促進するため、計算機棟と研究棟を整備
- (3) 廃熱利用の推進や排水処理への配慮などによりランニングコストと環境負荷の低減を実現



### 【計算機棟】

- 延床面積 約17,500㎡
- 建築面積 約6,300㎡
- 構造 鉄骨造り地上3階地下1階

### 【研究棟】

- 延床面積 約8,500㎡
- 建築面積 約1,900㎡
- 構造 地下1階、地上6階

その他、電源を供給する特高受変電設備、計算機棟の空調機を冷却する冷却設備、及び環境負荷低減のためのCGS(自家発電)設備等を設置



# プロジェクト推進体制

文部科学省

スーパーコンピュータ整備推進本部

本部長 藤木 完治 大臣官房審議官（研究振興局担当）

- ・プロジェクトの総合調整
- ・予算措置及び法律に関する事項

スーパーコンピューティング  
技術産業応用協議会

連携

開発体制

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

本部長 野依 良治 理事長  
副本部長 倉持 隆雄 理事 他本部員

開発戦略委員会

アプリケーション  
検討部会

ナノ統合シミュレーション  
拠点：分子科学研究所

生命体統合シミュレーション  
拠点：理化学研究所  
和光研究所

プロジェクトリーダー：渡辺 貞

（次世代スーパーコンピュータ開発に係る業務全般を統括）

開発グループ

システム開発チーム

アプリケーション開発チーム

企画調整グループ

富士通

NEC  
日立製作所

・筑波大学  
・JAMSTEC

協力協定

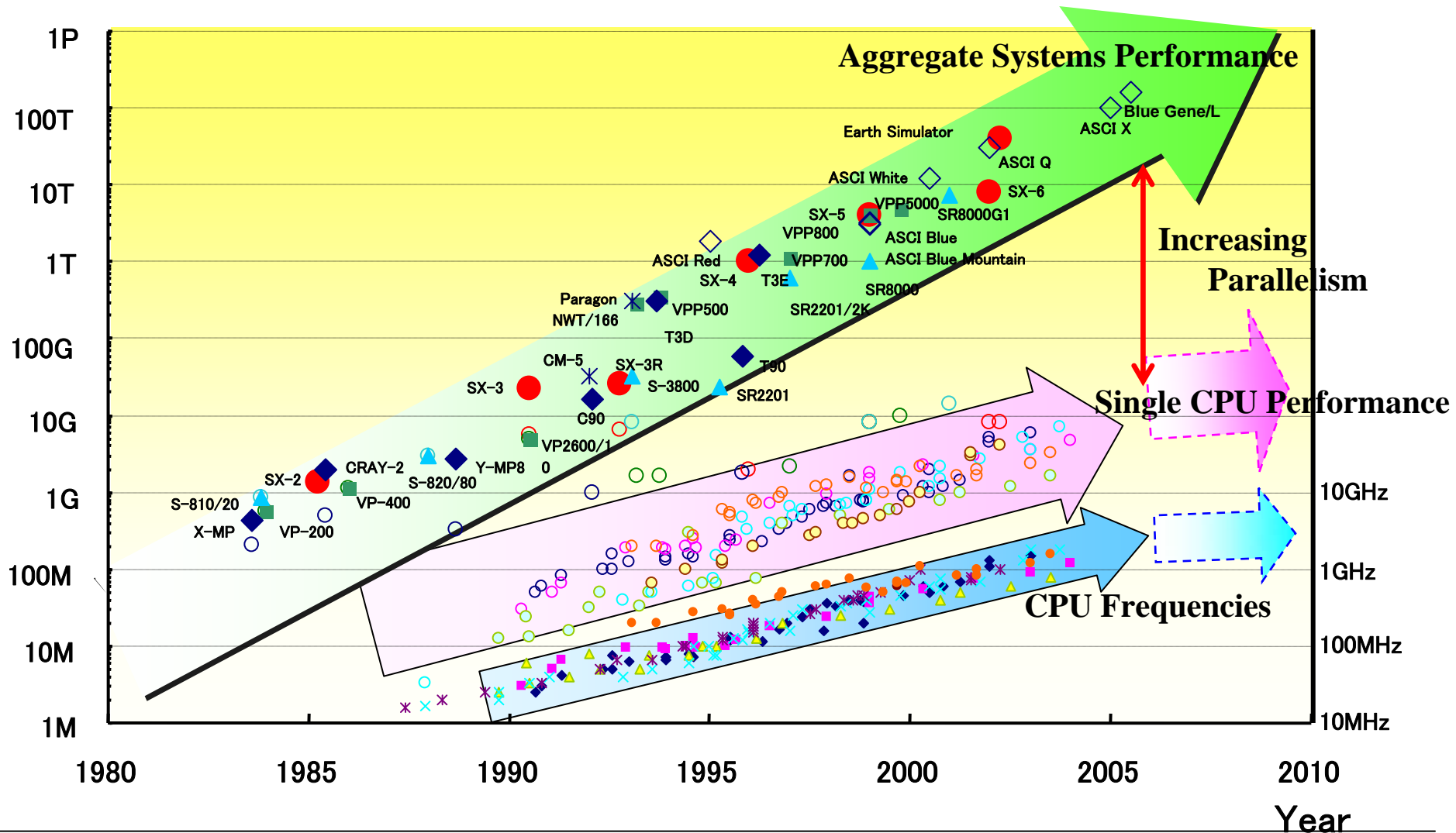
アドバイザリーボード

助言

---

# 次世代スーパーコンピュータの 技術課題

# スーパーコンピュータの性能推移

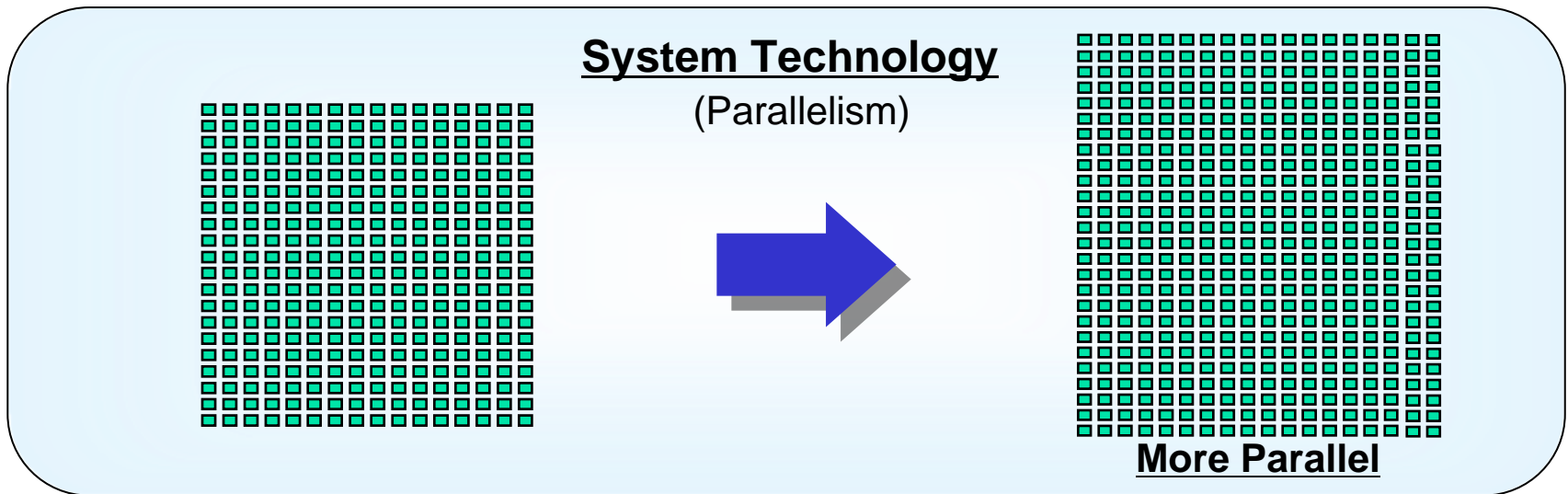


# HPCアーキテクチャの変遷

	単一CPU型		共有メモリ型	(共有)分散メモリ型		
システム構成イメージ						
CPU数	1CPU	1CPU	~数十CPU	~数百CPU	~数千CPU	>数万CPU
CPU種類	スカラー	ベクトル	スカラー/ ベクトル	スカラー/ ベクトル	←	←
言語	Fortran	ベクトル化Fortran	並列(ベクトル) Fortran	並列(ベクトル) Fortran/C, MPI	←	←
チューニング	コンパイラ レベル	ベクトル チューニング	並列/ベクトル チューニング	並列 チューニング	←	←

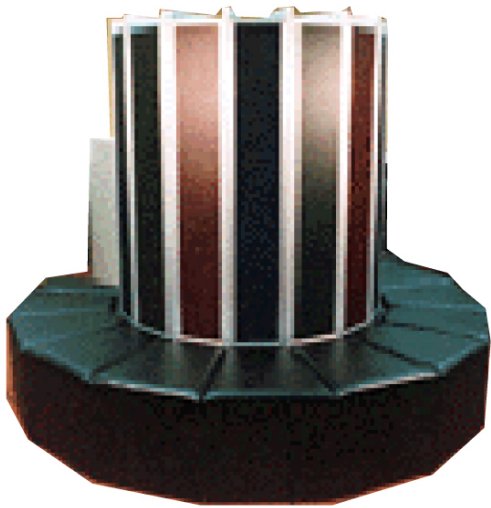
P: Processor、P (S):スカラー、P (V):ベクトル  
M: Memory

# Increasing Parallelism



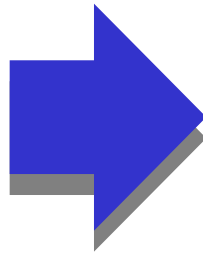


# Increasing Power and Foot-Print



Cray-1

Sourced from [http://www.thocp.net/hardware/cray\\_1.htm](http://www.thocp.net/hardware/cray_1.htm)



Earth Simulator

---

# システム開発

# システム構成について(概念設計の実施)

【世界最速のシステム】 ⇒ 1秒間に1京(ケイ=10の16乗)回の計算性能

(現最速計算機の約36倍)

【汎用システム】 ⇒ 科学技術・産業で用いられる多様なアプリケーションやこれまで不可能だった複雑かつ大規模なシミュレーションが実行可能

【革新的なシステム】 ⇒ 先端技術の積極的導入により、画期的な省電力、省スペースを実現

理化学研究所とメーカー3社(NEC、日立、富士通)による共同開発・共同負担により、日本の技術力の総力を結集して開発

## [検討経緯および今後の予定]

平成18年4月

理化学研究所において、システム構成案の検討を開始

平成19年4月

NEC・日立及び富士通の提案を基礎に、理化学研究所においてシステム構成案を作成。

平成19年3～6月

文部科学省において、概念設計評価作業部会を設置し、理化学研究所のシステム構成案について評価を実施

平成19年6～9月

総合科学技術会議において評価を実施

平成19年9月

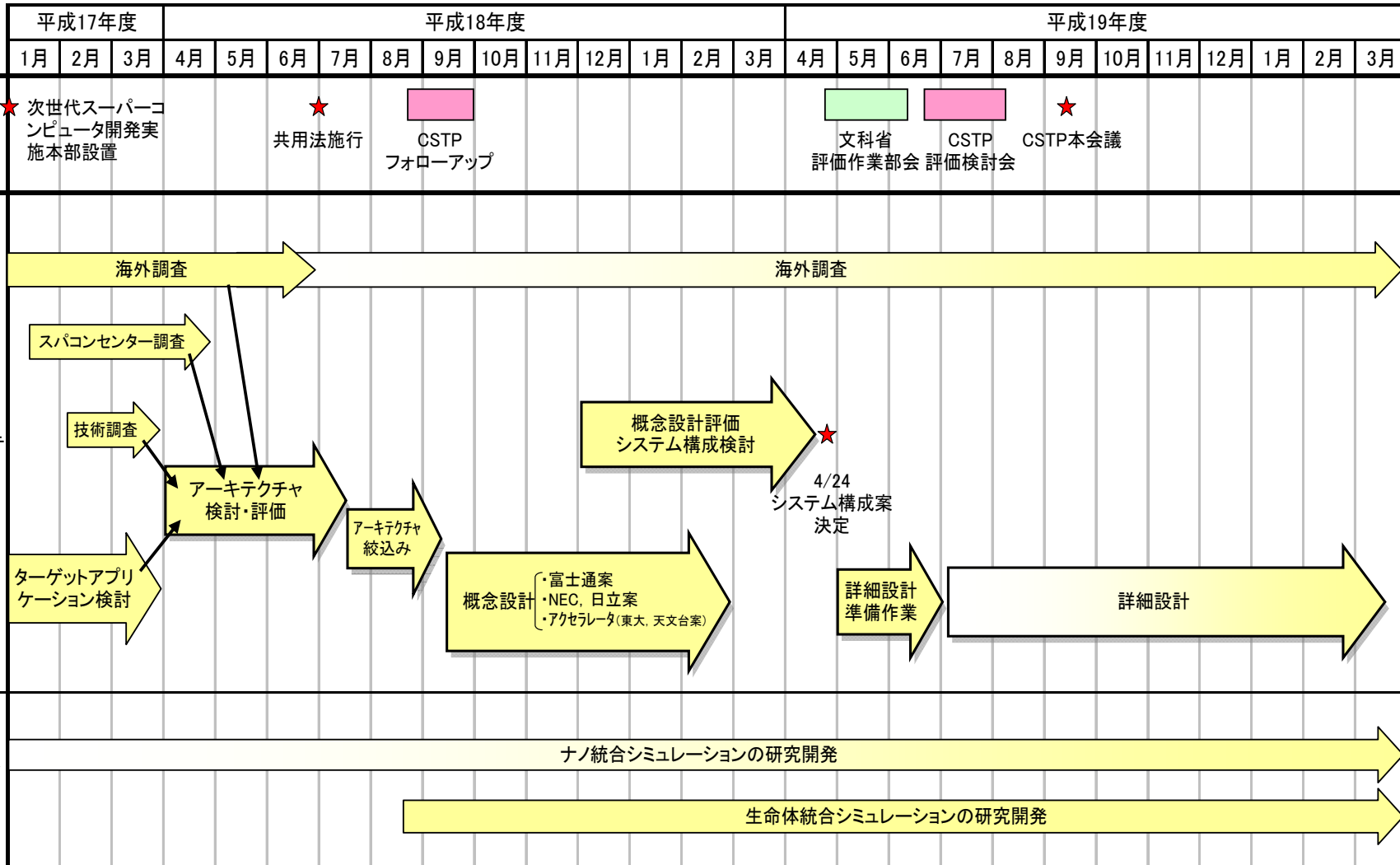
文部科学省及び総合科学技術会議の評価を踏まえ、理化学研究所においてシステム構成を正式決定

平成19～20年度

詳細設計

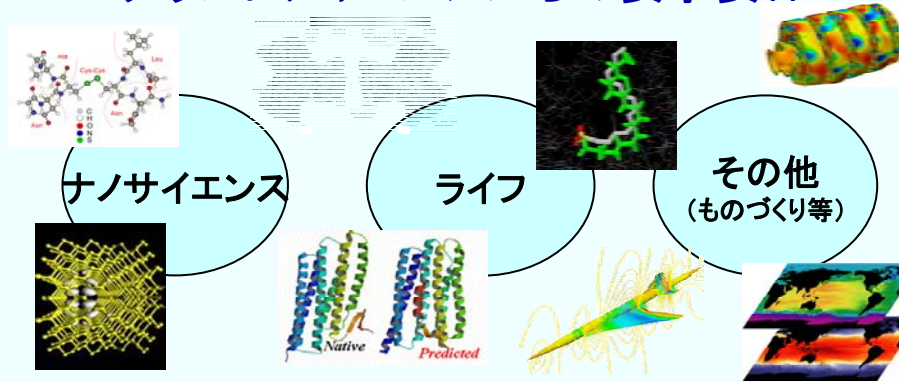
# システム開発の経緯と進捗状況

CSTP:総合科学技術会議



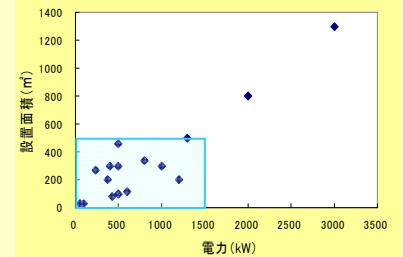
# システム最適化の考え方

## グランドチャレンジからの要求要件



## 制約条件

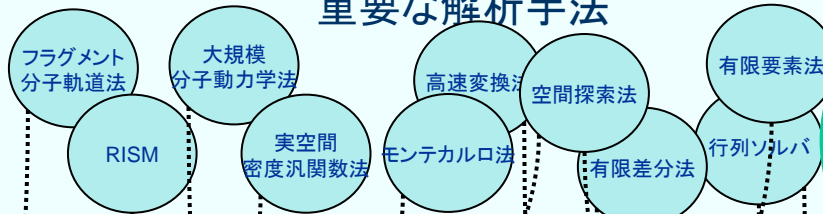
電力, 設置面積



信頼性, 保守性

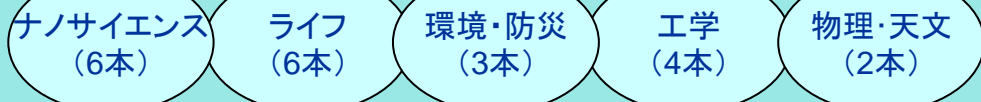
コスト(開発費, 製造費, 保守費等)

## 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】

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

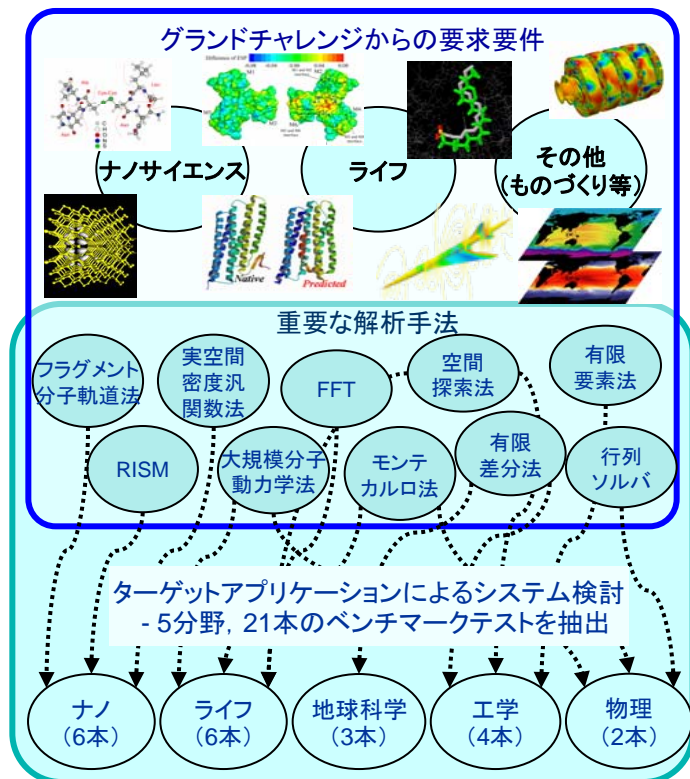
ソフトウェア  
OS, コンパイラ等

産業への波及効果

技術条件, 運用条件



# 重点的に評価したターゲット・アプリケーション



ベンチマーク	分野	アプリケーション
SimFold	ライフ/ナノ	ライフタンパク質立体構造の予測
GAMESS/FMO		分子軌道法計算
Modyas		高並列汎用分子動力学計算
RSDFT		実空間第一原理分子動力学計算
NICAM	地球科学	全球雲解像大気大循環モデル
LatticeQCD	物理	格子QCDシミュレーション
LANS	工学	圧縮性流体計算

# システムの特徴

## スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システム

- ・異なる2つの演算部の特性を活かし、あらゆるシミュレーションに対応可能な高い汎用性
- ・計算能力に関する高い拡張性
- ・大学や研究機関向けの高性能な計算機への展開性
- ・スカラ及びベクトルの両技術の確保による、我が国の技術力の強化と、国際競争力の向上

### スカラ型

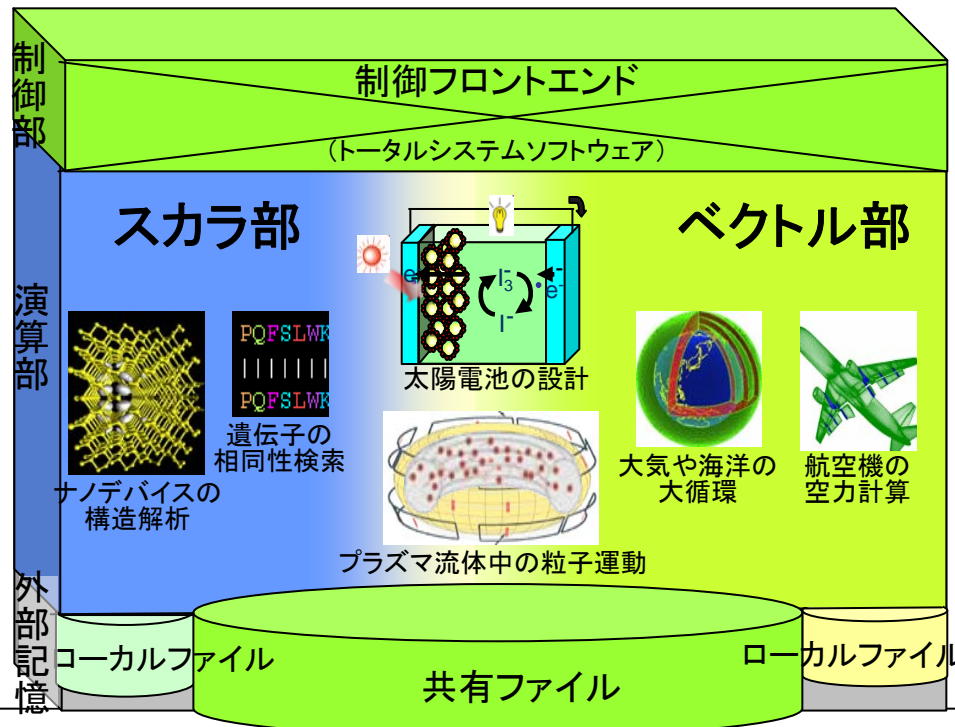
- ・大きなデータを細分化して処理する  
(ナノデバイスの構造解析や、遺伝子の相同性検索等の計算が得意)
- ・世界的主流となっている技術

### 従来のスカラ型計算機

- ・比較的低速なCPUを多数接続

### 本システムのスカラ部

- ・CPUの高速化及び新規ネットワーク技術による超大規模接続の実現



### ベクトル型

- ・大きなデータをまとめて処理する  
(大気や海洋の大循環や、航空機の空力等の計算が得意)
- ・我が国が強みを持つ技術

### 従来のベクトル型計算機

- ・比較的高速なCPUを接続

### 本システムのベクトル部

- ・CPUの省電力化及び光を用いた革新的ネットワーク技術による大規模接続の実現

# 次世代スーパーコンピュータシステムの概要

## 【世界最速を達成する最先端システム】

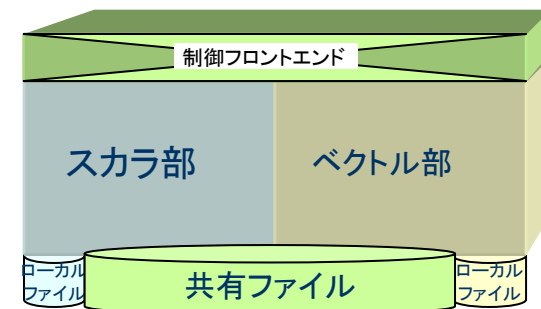
- Linpack性能10ペタFLOPSの達成のみならず、アプリケーションの実行においても世界最高性能
- 先端技術(45nm半導体プロセス,光インターコネクなど)により画期的な省電力、省スペースを実現
- 理研とメーカー3社が共同で開発

## 【科学技術・産業の競争力を発展させる将来型システム】

- 高機能スカラ部と革新的ベクトル部から構成される複合汎用システム
- 複雑系問題、多階層問題などシミュレーションの革新を先導する計算環境を提供
- 次々世代以降の開発と利用を見据え、我が国の国際競争力を牽引

## 【我が国の科学技術基盤となる複合汎用システム】

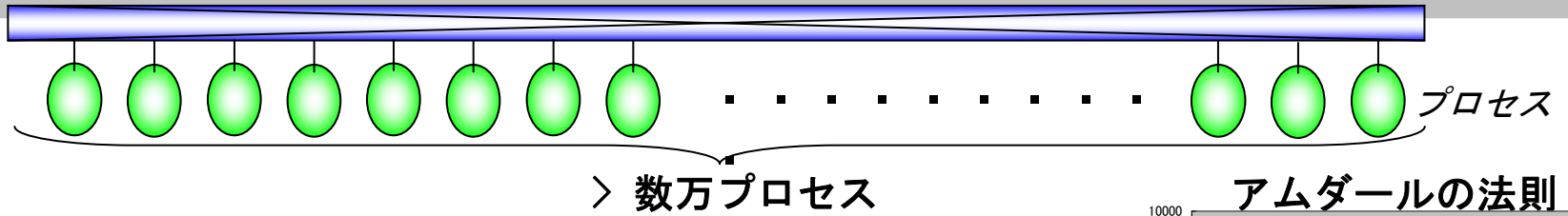
- 様々なアプリケーションを効率よく実行する複合汎用システム  
(⇒より多くのユーザーが利用可能)
- 全国の産学の研究者等の共用施設
- アプリケーション資産を最大限活用
- 大学等のスパコンセンターへの展開性大  
(⇒我が国の計算機環境を質的にも量的にも革新)



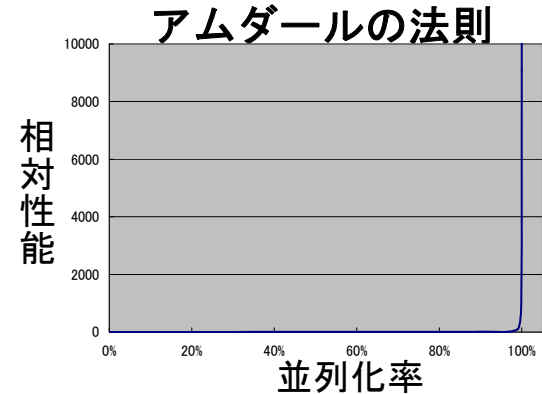
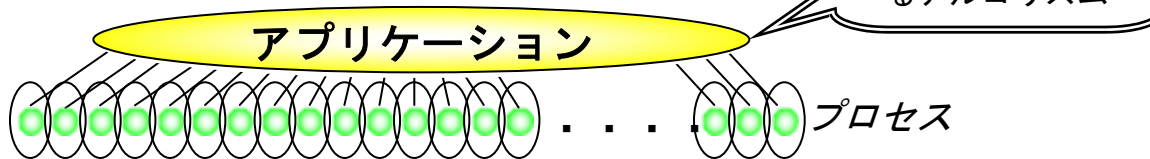
---

# 次世代スパコンにおけるプログラミング

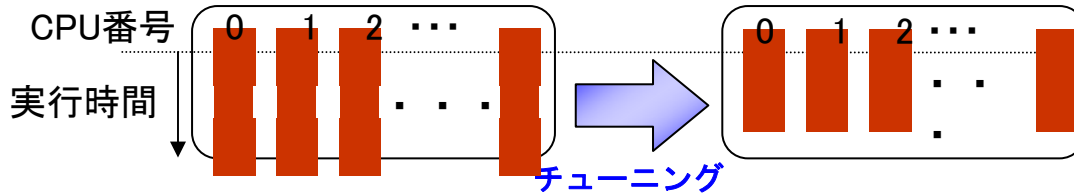
# 並列化チューニング



① 並列度の増大 → 並列化率 : 99.999%以上

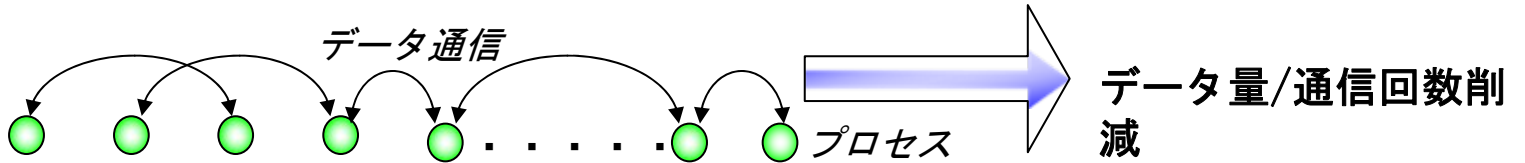


② CPU (プロセス) チューニング

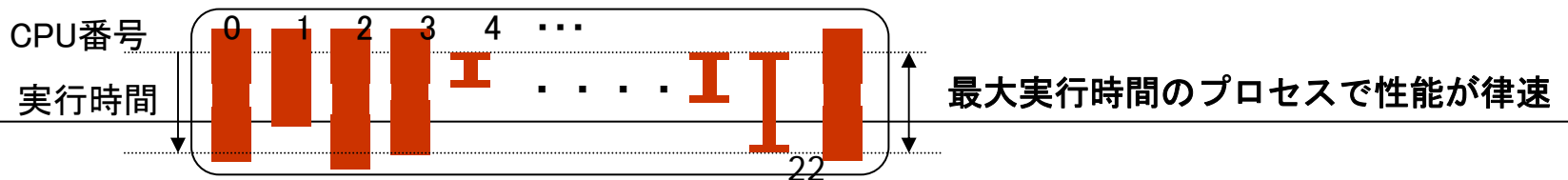


- チューニング手法
- キャッシュ/ソフトウェアパイプライン
  - ベクトルチューニング
  - ...

③ 通信量削減



④ ロードバランス





# 次世代スパコンで高速に計算するには？

## 一般論として

- 分散並列でスケールするアルゴリズムが必須
- 全体での集団通信が少ないものがベター
- プログラムの高速化 = データの局所性の利用
  - ✓ キャッシュメモリによるメモリアクセスの高速化
  - ✓ 並列分散化による局所性の向上
  - ✓ プリフェッチの活用

## 次世代スパコンも同じストラテジー

- プログラム構造に関する開発(超並列化対応)は既存の環境でも可能.
  - 細かいチューニングは実機が必要.
-

# プログラミングモデル

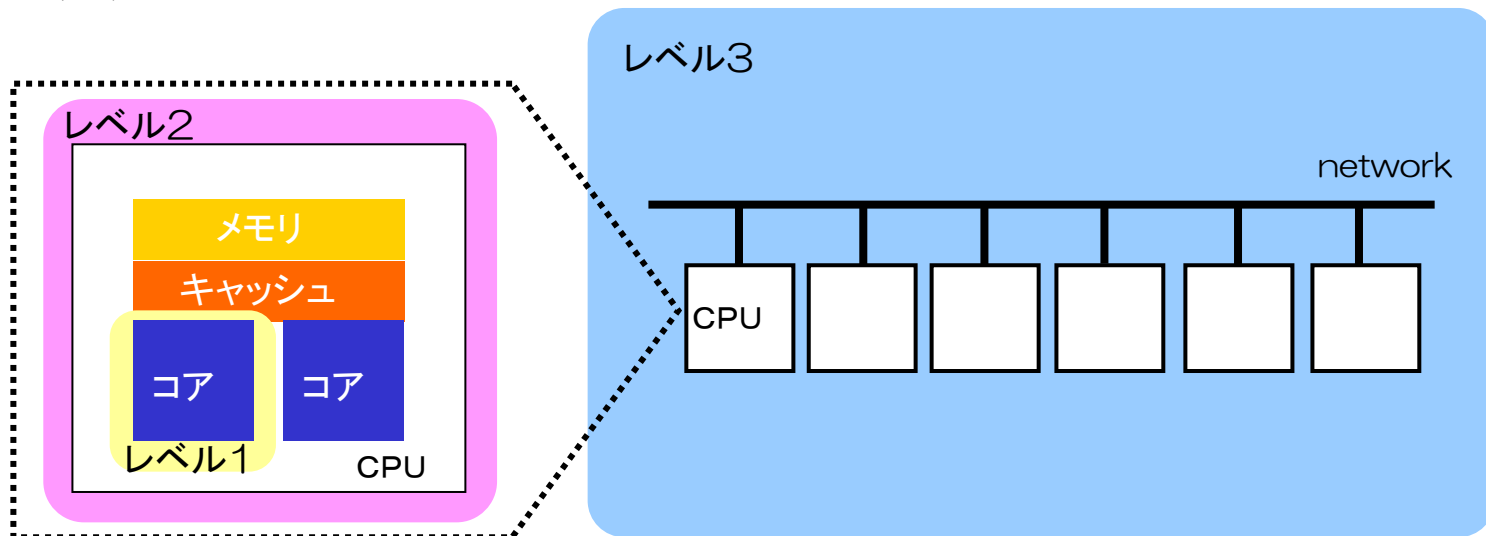
## 多階層のハイブリッド並列

並列の各階層でデータの局所性を意識したプログラミングが必要

レベル1: 命令レベル並列

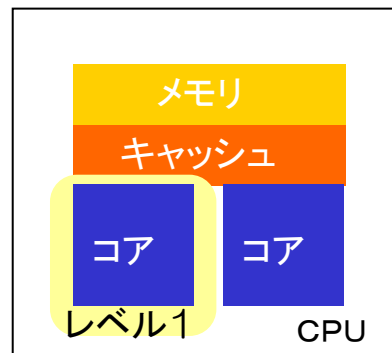
レベル2: 共有メモリ並列

レベル3: 分散メモリ並列



# 命令レベル並列

- ・SIMD, ベクトル機能による命令レベルの並列化
- ・アクセスするデータの局所性の向上が必要
- ・演算器の実行効率の向上が必要
  - ✓命令の並列動作特性を最大限に使い切る演算密度
- ・コンパイラがサポートする予定だが, 高速化のためには手作業によるプログラム構造の改良が必要.



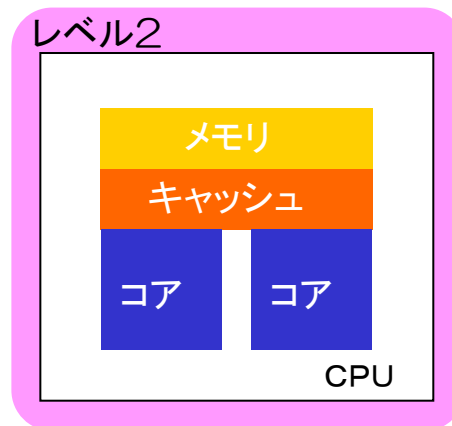
# 共有メモリ並列

- ・OpenMPや自動並列機能によるSMP並列

- ✓実際にはループが対象
- ✓スレッド生成等のオーバーヘッドを上回る演算密度が必要
- ✓並列化を阻害する原因(変数の依存関係など)を除外

- ・メモリアクセス競合の回避が必要

- ✓メモリバス, キャッシュ



# 分散メモリ並列

- ・MPIによる分散メモリ並列

- ✓領域分割, 粒子分割など

- ✓CPU内のメモリにおさまるサイズでの分割が必要

- ・分散メモリ間の通信が少ないものがベター

- ・通信コストは従来に比べて大

- ✓全体での集団通信 (all\_reduce, all\_gather, alltoallなど)

---



# まとめ

- 次世代スパコンプロジェクトの概要
  - 次世代スパコンの技術課題
    - 超高並列-低電力-設置面積の制約
  - 技術課題を克服するためのシステム設計
    - 高機能スカラ部と革新的ベクトル部から構成される複合汎用システム
    - 10Peta以上のピーク性能
    - 実アプリで高性能を達成
  - 次世代スパコン上のアプリ開発
    - 次世代スパコンも従来と同じストラテジー
    - 分散並列でスケールするアルゴリズムが必須
    - 全体での集団通信が少ないものがベター
    - プログラムの高速化 = データの局所性の利用
-

---

END