

ペタフロップス時代の到来



RIKEN

Next-Generation Supercomputer R&D Center

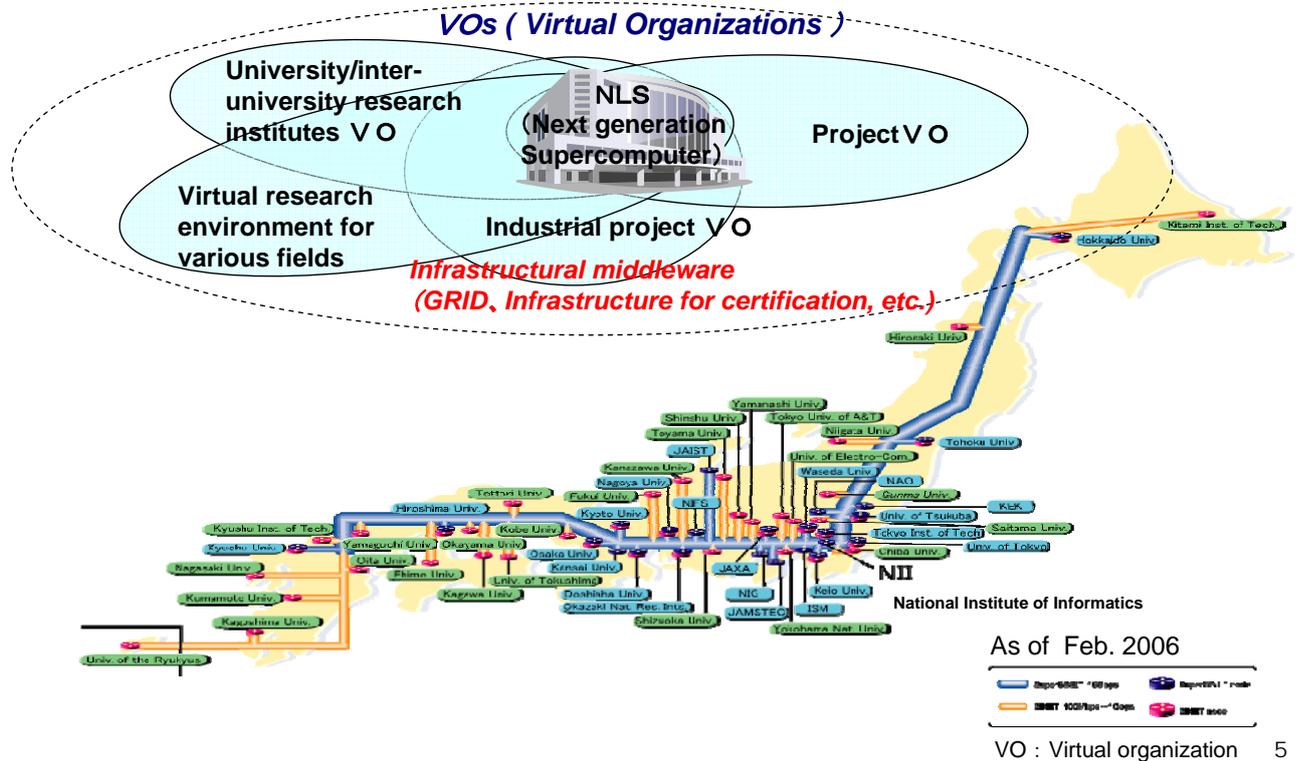
理化学研究所
開発グループ
姫野龍太郎

RIKEN Next-Generation Supercomputer R&D Center

Outline

- 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトの紹介
 - 目指しているもの
 - 計画
 - ハードウェア・ソフトウェア
 - アプリケーション
 - 現状
- これまでに分かった克服すべき課題
 - 電力・スペース
 - アプリ並列性能
 - ソフトのブラックボックス化

Cyber Science Infrastructure plan



従来の開発計画との違い

- 従来は単発の開発・目的が絞られた開発
 - NWT、CPPACKS、地球シミュレータ
 - 研究機関の附属施設
- 今回は継続的な開発の一回目の位置付け
 - 理研は開発を担当
 - 運営は第三者機関が行う
 - SPring-8と同様、開発されたスパコンは全国の共同利用施設(法律の整備: 共用法)
 - 特定の分野の研究に限定しない、汎用スーパーコンピュータの開発
- 計算科学技術に関するCOEの形成も合わせて計画
 - 大学や研究機関と連携
- インターネット・GRID世代
 - 通信により全国から利用可能
 - ここでしか走らないジョブしか受け入れない(デバッグ・チューニングは例外)

ペタフロップス超級SuperComputingが待たれている世界



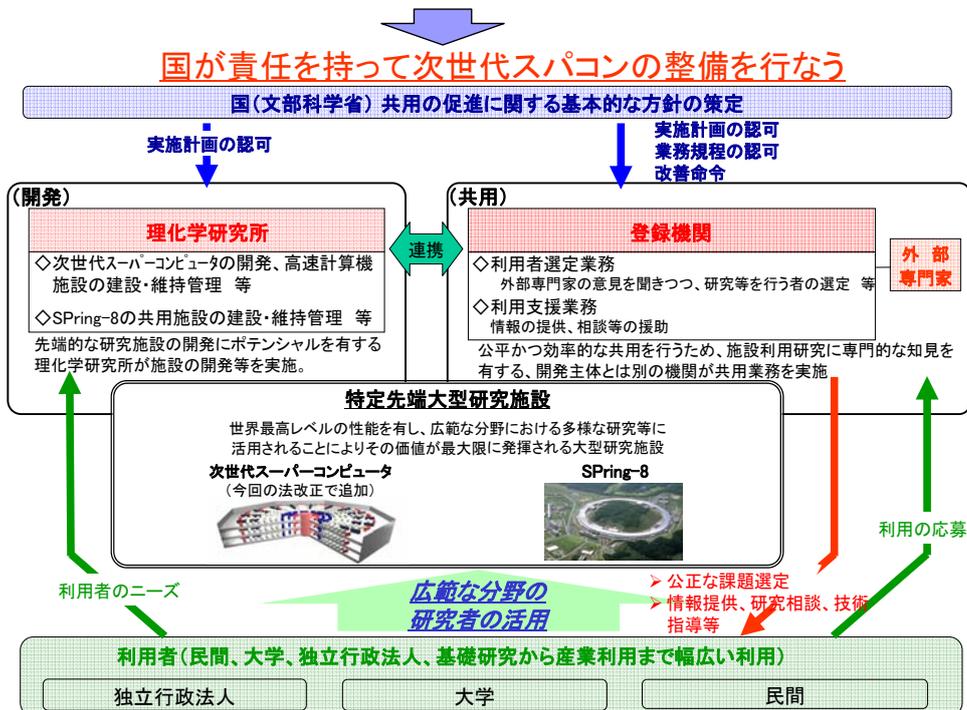
マルチスケール・マルチフィジクスな系全体の統合シミュレーション

特定先端大型研究施設の共用の枠組み

文部科学省資料

「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」:

- ①重複して設置することが多額の経費を要するため適当でないと認められる大規模な研究施設であって、
- ②先端的な科学技術の分野において比類のない性能を有し、科学技術の広範な分野における多様な研究等に活用されることにより、その価値が最大限に発揮される」(第2条) 先端大型研究施設の共用を促進する。



1.1次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト

■ 基本方針

- 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
- 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
- 完成時に世界最速レベルの性能を達成する

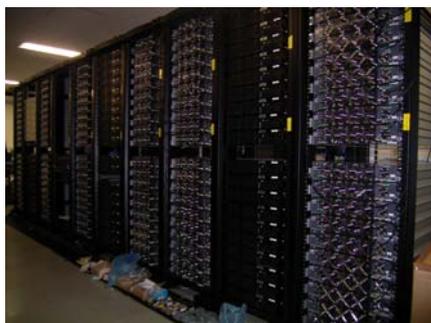
■ 目標

- 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。

理研での計算機開発

■ 専用機開発

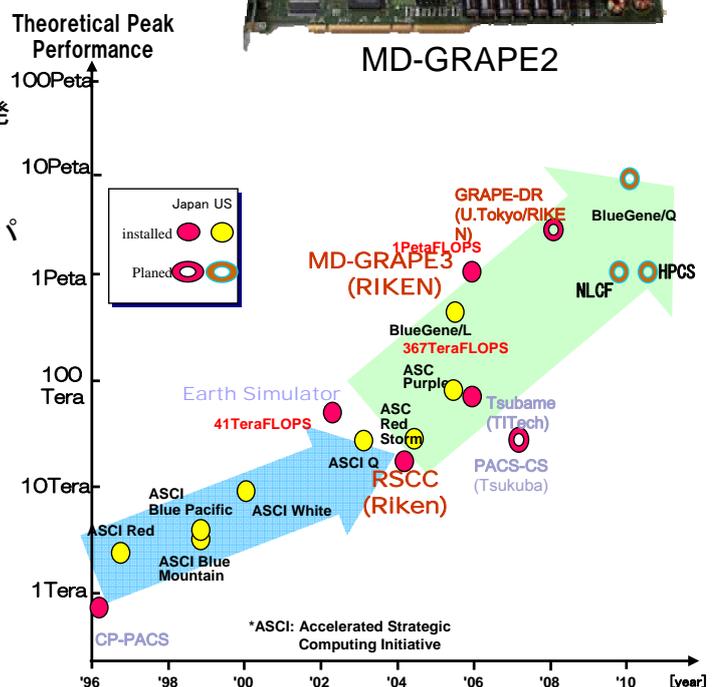
- 東大でGRAPE開発、1989
- 理研でMDM:MD-GRAPE2開発
- 2004年MDMを統合したRSCC開発
- 2006年、MD-GRAPE3、理論ピーク性能1 Peta FLOPS
- 2006年11月Gordon Bell賞ピークパフォーマンス部門Honorable Mention賞180TFLOPS



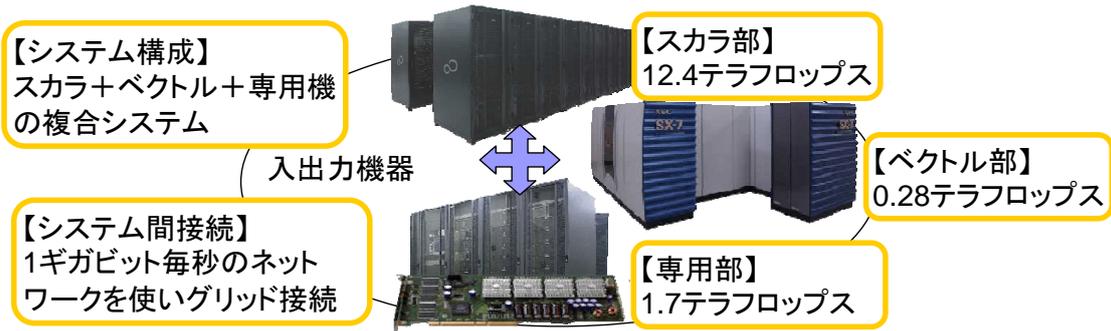
MD-GRAPE3



MD-GRAPE2



2004年導入したRSCC



2007年3月MD-GRAPE3
64TFLOPS接続

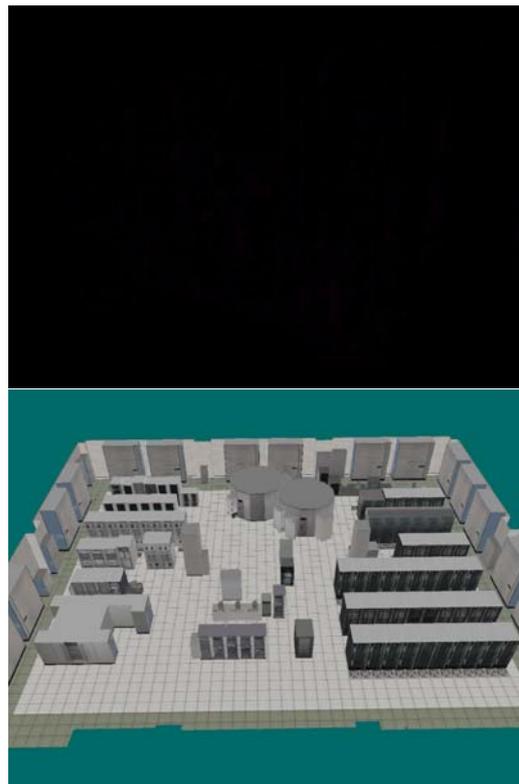
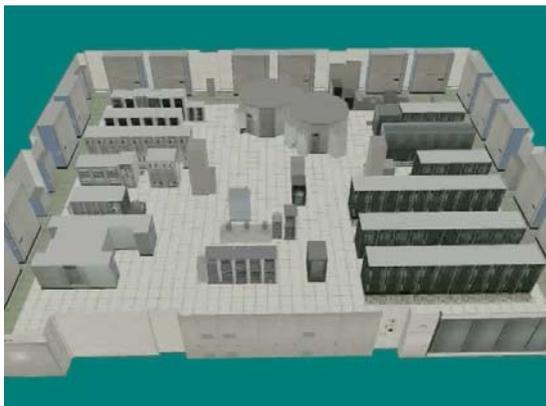
【チャレンジ】

- ・世界初のスカラ+ベクトル+専用機複合システム
 - 一つの計算機に異なる機種のコパイラ
 - 機種で異なるバイナリーファイルを統一
- ・日本で初めてグリッド技術を全面的に採用した計算機センター
 - 利用者に利用計算機を意識させない
- ・世界最大規模、日本で最速のPCクラスター
 - Top500リスト(2004年6月)第7位
 - 高性能で低コスト
 - SCore



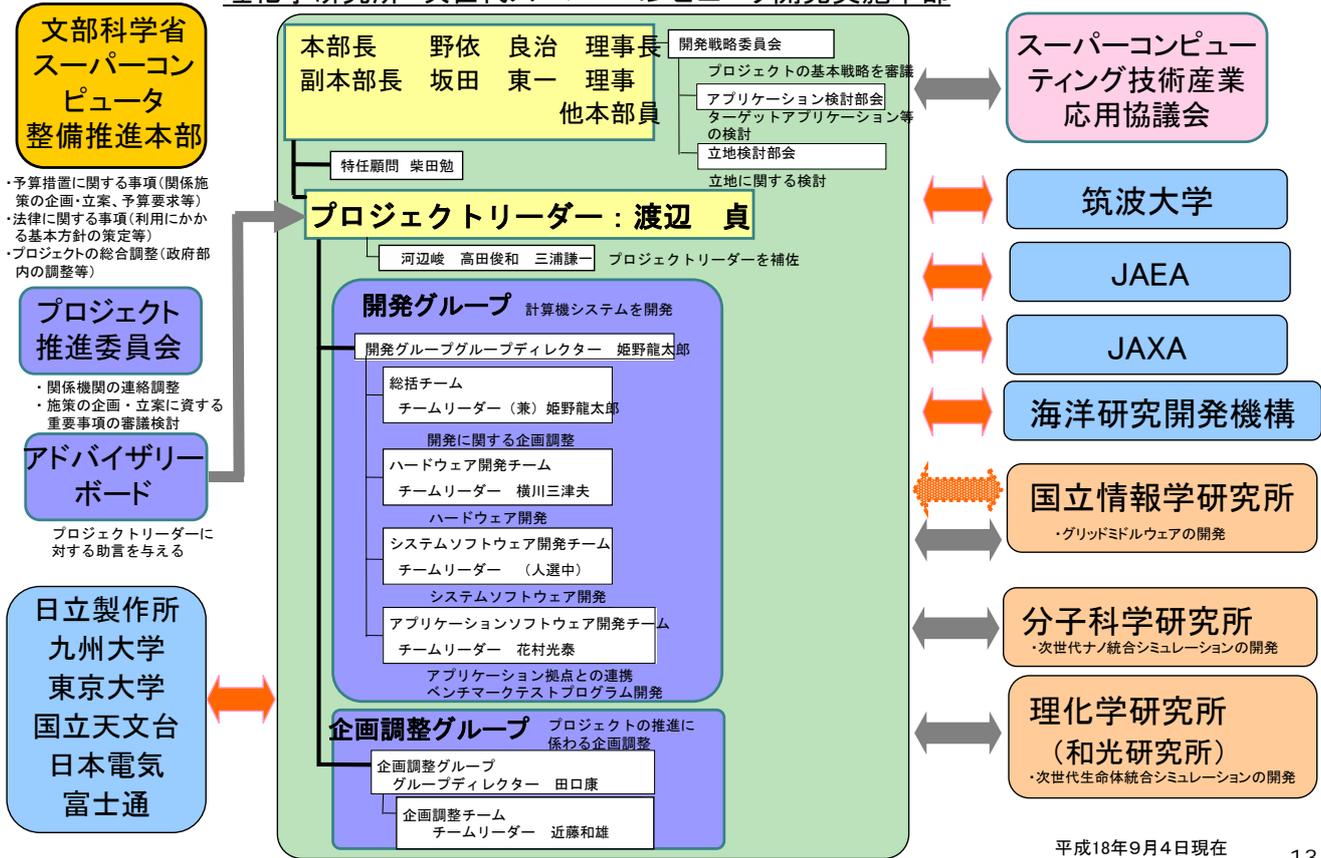
RSCC: Riken Super Combines Cluster

- VPP700Eからリプレース、2004年1月
- 2004年3月稼働.
- 2004年6月のTop500 Listで世界7位



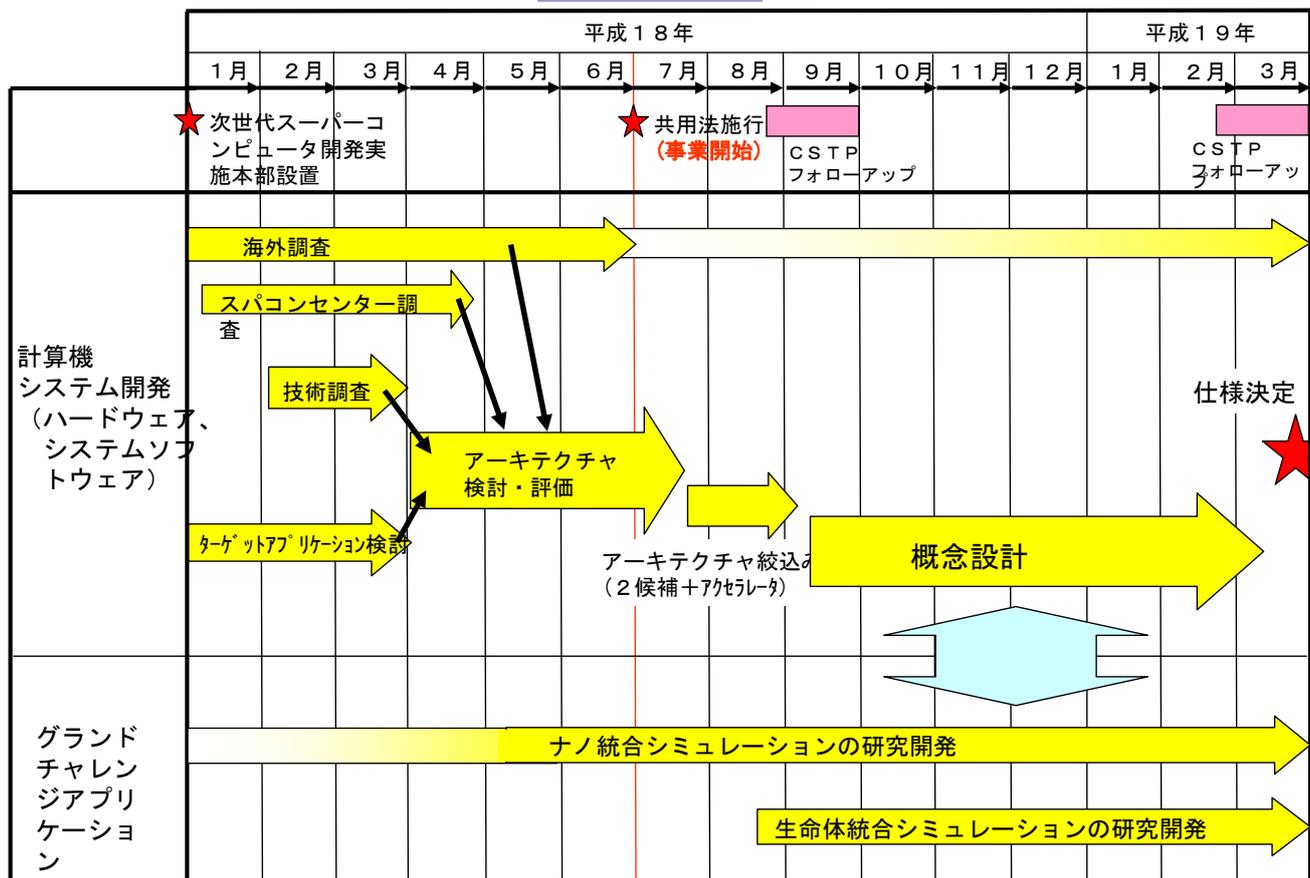
次世代スーパーコンピュータプロジェクト実施体制

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

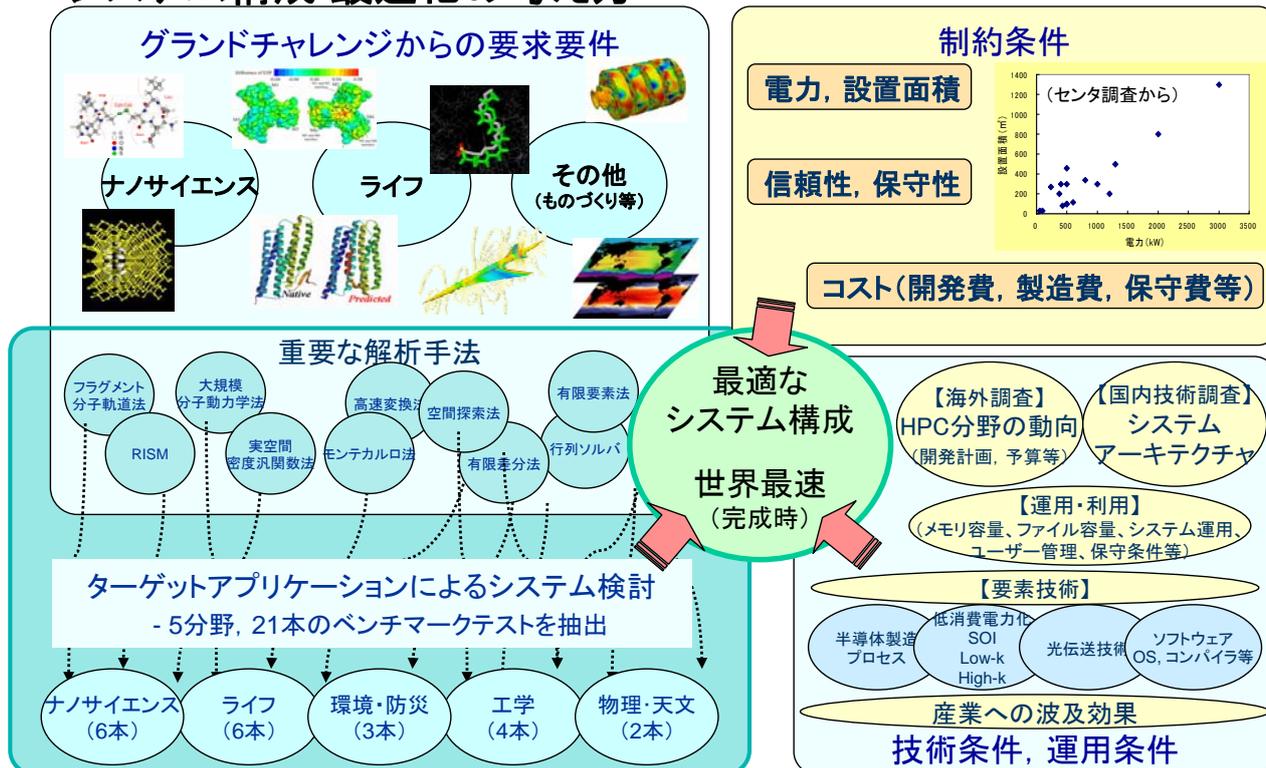


1.2計画

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	
開発項目	★マネージメント体制 開発ターゲット、 計算機システムの 構成等		★設計本格化 ★仕様・実装内容の判断 (概念設計内容、開発体制、立地・運用方針、 採用する半導体プロセスの決定等)		★外部評価により 設計内容の適否を判断		研究開発状況★ 評価(システム性能・ 機能等)	COE形成、運用評価★ (利用状況、研究成果、 人材育成状況等)
	★詳細なハードウェア要件、LSIの論理構成概略仕様等						★: 総合科学技術会議による評価等	
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				
ハードウェア	次世代生命体統合シミュレーション設計・製作			評価				
	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			



システム構成最適化の考え方



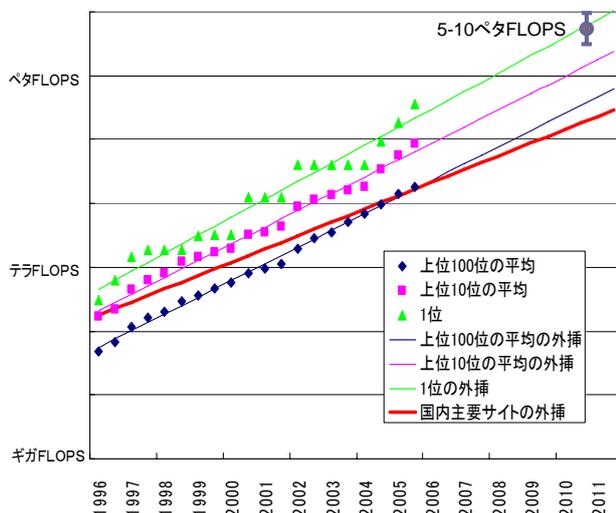
運用基本方針(案)

- 世界でここでしかできない計算を可能にする
 - グランドチャレンジジョブ:システムの80%を1ヶ月占有
 - 他の計算センターでできる程度の小さいジョブは計算対象外(当初は0.5PetaFLOPSが目安)
 - ただし、チューニング・デバッグ用途は利用を認める(0.1-0.5 Peta FLOPS程度)
- 想定する利用方法
 - バッチジョブの実行
 - 通常ジョブ:0.5-5.0Peta、10時間から1週間
 - グランドチャレンジジョブ:8Peta
 - デバッグ・チューニング用ジョブ:0.5Peta以下、10時間未満
 - 会話型ジョブの実行
 - 特定利用者の占有使用
 - リモートからの利用を許可
 - VPN経由での利用

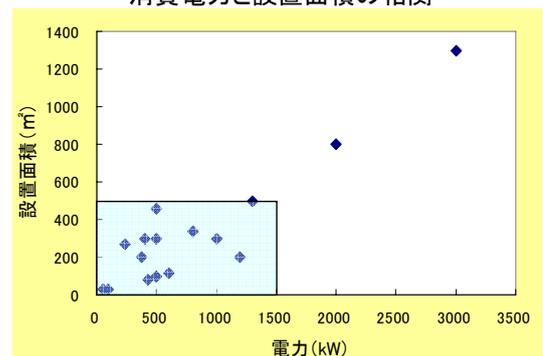
17

スーパーコンピュータセンター調査より

- 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1.6倍の性能向上
- 世界的には年率1.8倍で性能が上昇
(TOP500リストによる)
- 2011年の世界最速のシステムは、5-10ペタFLOPS
- 現状の施設設備を変えずに、次世代スーパーコンピュータの縮小版が入れられる必要がある。
- 設置面積、受電設備許容量には制限がある。ほとんどの計算機センターは、
 - 設置面積: 約500㎡以下
 - 受電設備容量は1.5MW以下
- 2011年頃の国内最大級のスーパーコンピュータの性能は約500TFLOPSが要求されている。

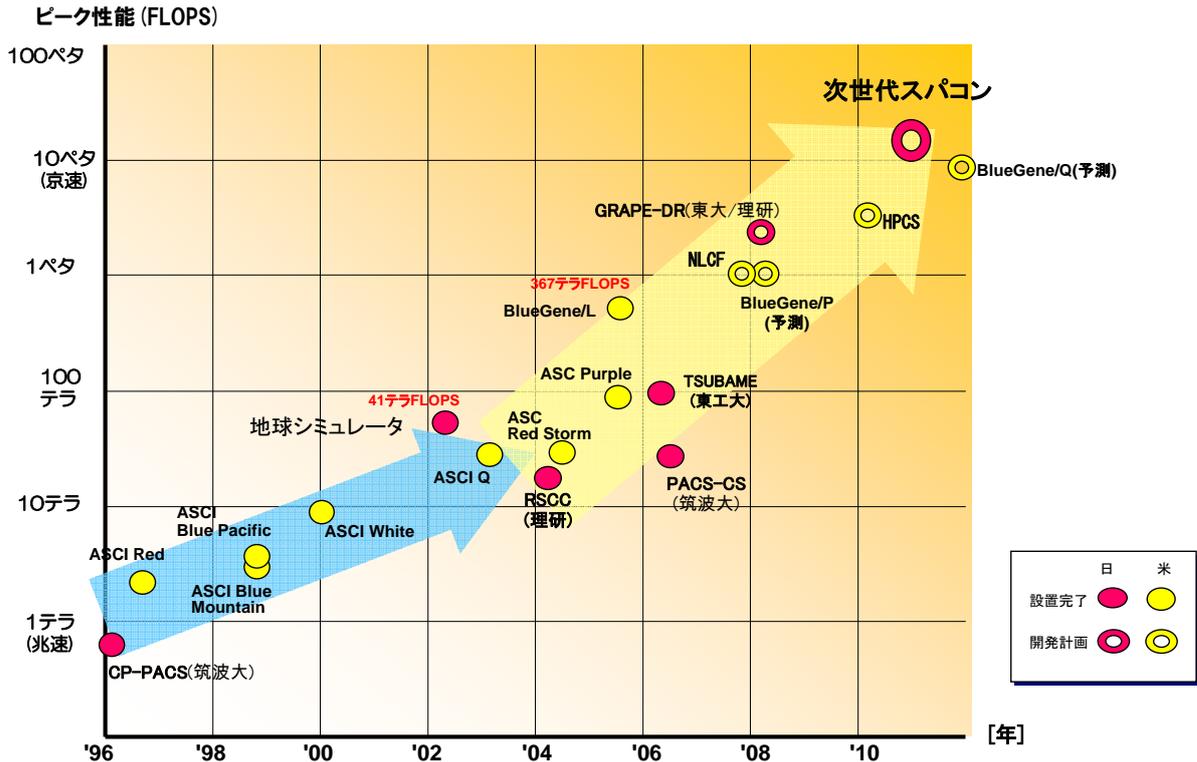


消費電力と設置面積の相関

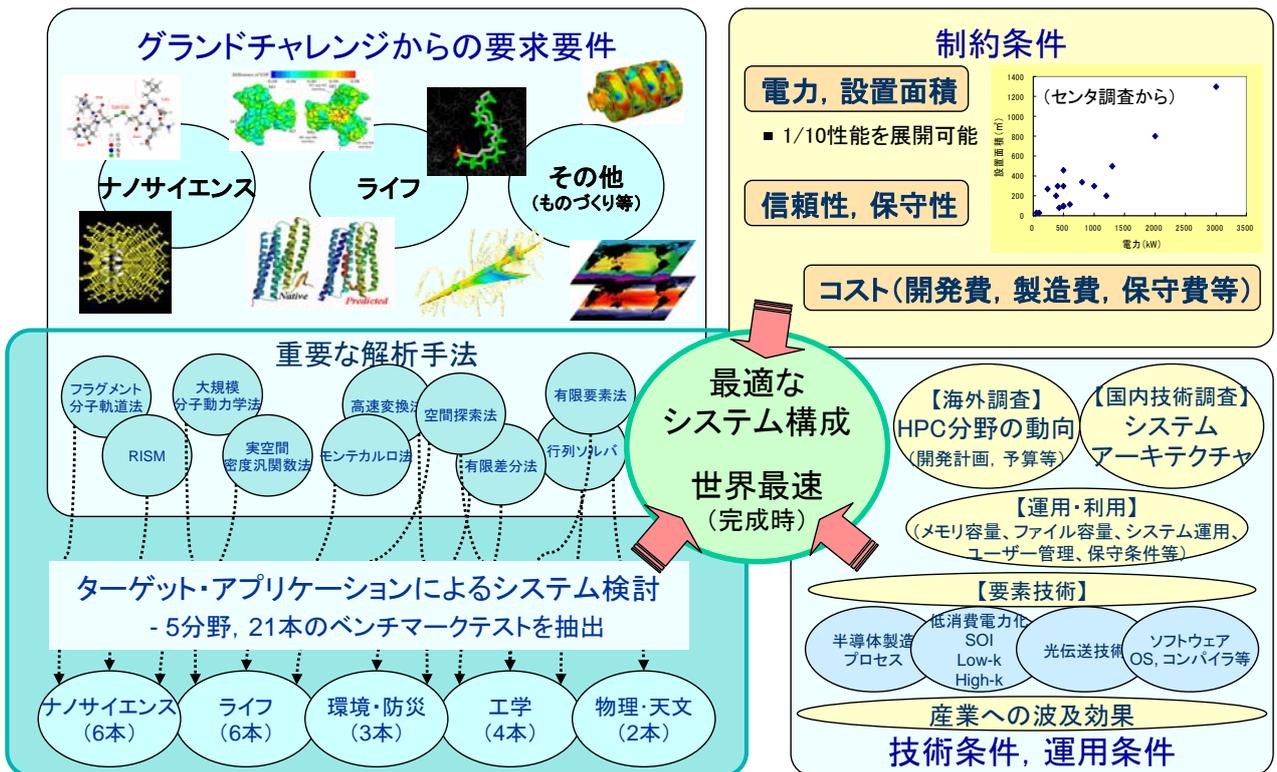


(第1回検討会資料2-11参照)

日米の主要なスパコン開発



次世代スパコンシステム構成の最適化の実施方法



Next BMT:選定されたアプリケーションソフトウェア

プログラムの略称	PetaFLOPS BMT	アプリケーション説明資料にあるタイトル	分野
Cavitation		有限差分法によるキャビテーション流れの非定常計算	工学
GOCO		超高解像度海洋大循環モデル	地球科学
FrontFlow/Blue		Large Eddy Simulation (LES)に基づく非定常流体解析	工学
FrontSTR		有限要素法による構造計算	工学
GAMESS	○	FMO分子軌道法計算	ナノ
GNISC		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	ライフ
LANS	○	航空・宇宙機解析における圧縮性流体計算	工学
LatticeQCD	○	格子QCDシミュレーションによる素粒子・原子核研究	物理
MC-Bflow		血流解析シミュレーション	ライフ
MLTest		オーダーメイド医療実現のための統計的有意差の検証	ライフ
Modylas	○	高並列汎用分子動力学計算ソフトウェア	ナノ
NICAM	○	全球雲解像大気大循環モデル	地球科学
NINJA/ASURA		天体の起源を探る超大規模重力多体シミュレーション	天文
Octa		粗視化分子動力学計算	ナノ
PHASE		平面波展開第一原理分子動力学解析	ナノ
ProteinDF		巨大タンパク質系の第一原理分子動力学計算	ライフ
RISM/3D-RISM		溶液内タンパク質の電子状態の3D-RISM/FMO法による解析	ライフ
RSDFT	○	実空間第一原理分子動力学計算	ナノ
Seism3D		地震波伝播・強震動シミュレーション	地球科学
sievgene/myPresto		タンパク質・薬物ドッキングシミュレーション	ライフ
SimFold	○	タンパク質立体構造の予測	ライフ

21

ペタフロップス超までのスケーラビリティを有するベンチマーク作成

- これまでのベンチマークの結果得られたこと
 - 8ベンチマークで1ペタフロップス超の達成が予測された
 - 数万プロセッサまでスケーラブルなものが案外少ない
 - 通信処理の最適化は困難
 - 通信処理の変更はアルゴリズムレベルの変更まで考慮する必要がある
 - 問題サイズが非常に小さい場合がある

22

2.これまでに分かった克服すべき課題

- 10PFLOPSを達成しようとするシステムではプロセッサ数は数～数十万
 - アプリ性能を出すには数万並列で性能を発揮することが必須
- 電力・スペース:周辺機器・冷却込みで10PFLOPS、30MWは結構苦しい
 - 冷却が鍵か:空冷は効率が悪い
- アプリ並列性能
 - 多くのプログラムで並列性能が100程度で頭打ち
 - 数百以上の並列実行環境がほとんど無い
 - 高速化に関して無関心な開発者が多い:高速化より機能向上
 - HPCの観点からの研究が少ない?

23

これまでに分かった克服すべき課題(続き)

- ソフトのブラックボックス化
 - 自分で計算コードを書くことが少ない
 - フリーソフトをダウンロードして実行させている
 - FORTRANは教育していない
 - 高速化・並列化の体系的講義はほとんどない

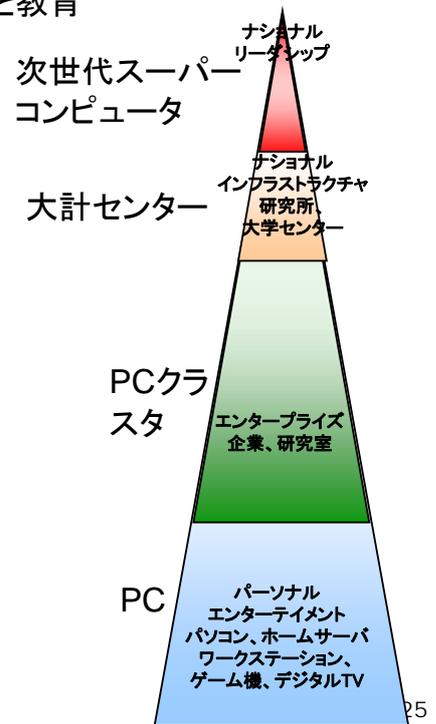
- 市販ソフトのほとんどは外国製

24

3.ペタフリップス時代の役割分担

■ 大学での教育

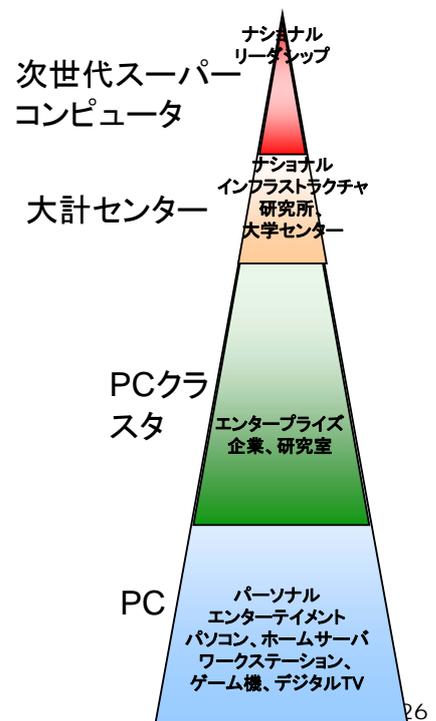
- HPCで必要な知識の体系的なカリキュラムの整備と教育
 - ソフトウェアの効率的な開発
 - 高速化・並列化
 - FORTRAN
- 実践的な応用ソフト開発
- ライブラリ開発
- GRID等、ミドルウェア



25

大学の計算機センター(NIS)の役割

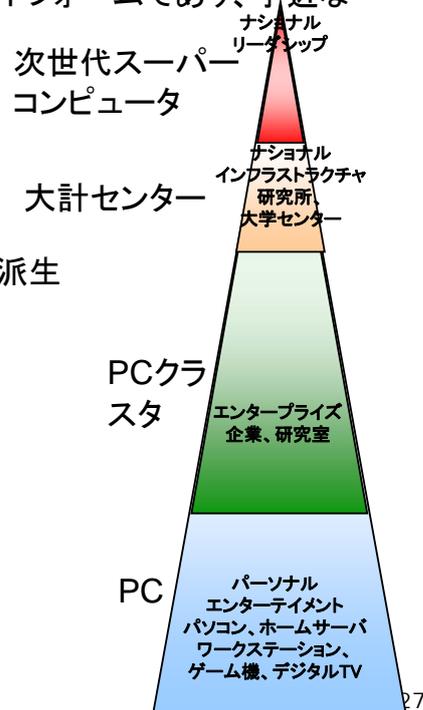
- 大規模計算の実行環境
- 研究としての応用
- さらに大規模な計算はNLSへ
 - NLSへの登竜門
 - 移行を促進
- NISはNLSと同じアーキテクチャーが好ましい



26

PCクラスタの役割

- ソフト開発のプラットフォームはPCとPCクラスタ
- 特にPCクラスタは並列ソフト開発の最重要な開発プラットフォームであり、手近な実行環境
- ツールとしての応用ソフト開発
- ソフトウェアのNIS、NLSへの自然な移行
次世代スーパーコンピュータへの重要な要求事項
自然な移行のため、一部のNISはPCクラスタか、その派生

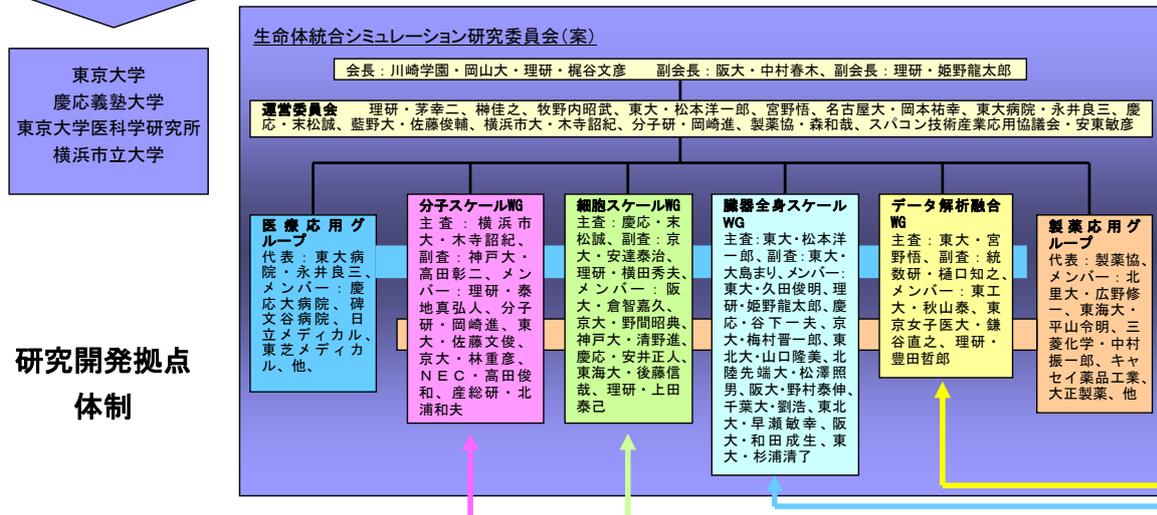
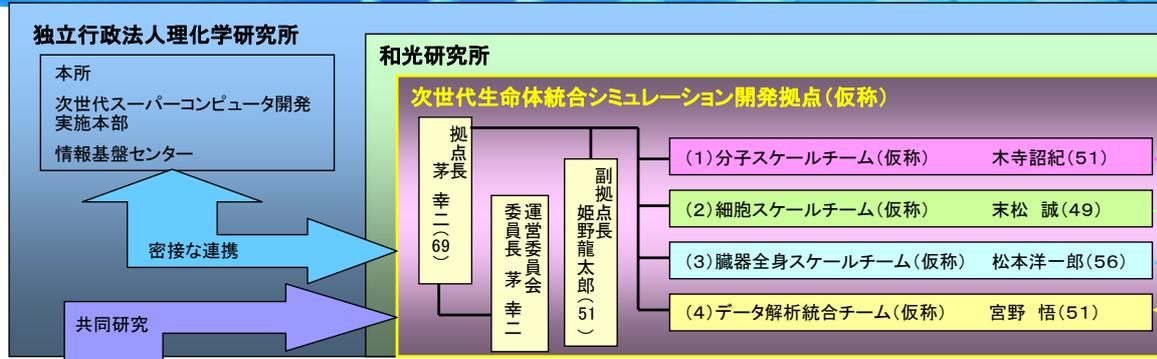


ライフ・サイエンスでのグランド・
チャレンジ



RIKEN

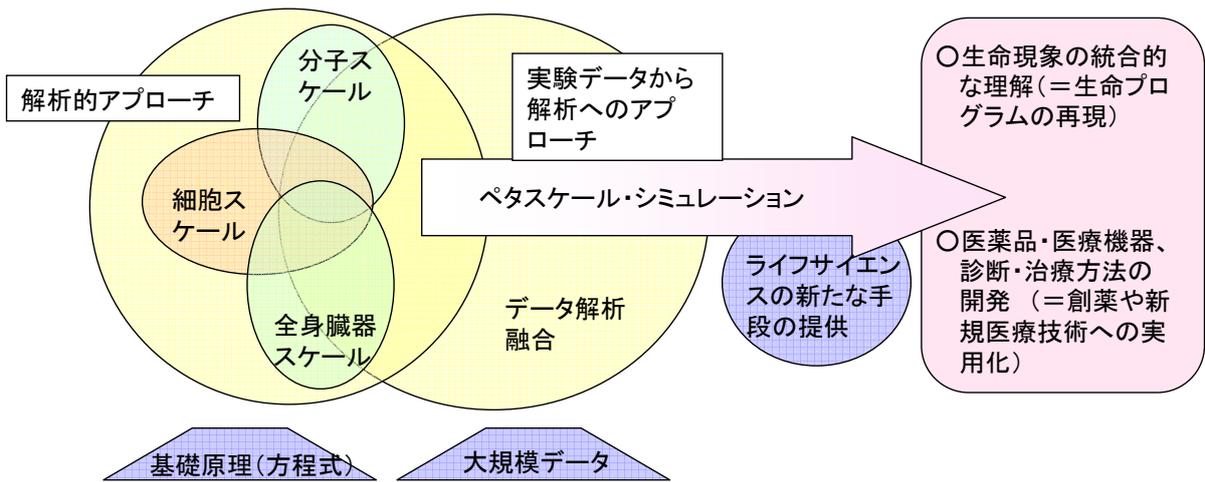
Next-Generation Supercomputer R&D Center



研究開発拠点体制

2. 研究開発の概要と達成目標

基礎方程式に基づく解析的アプローチと大量の実験データから未知の経路と法則に迫る実験的アプローチにより、異なるスケールの研究とデータ解析を統合的かつ有機的に進め、ペタスケールという桁違いの性能を持つスーパーコンピュータの性能をフルに発揮し、生体で起こる種々の現象を理解し医療に結びつけるためのソフトウェアを開発する。



(1)分子スケール解析チーム

- チームリーダー:横浜市大・木寺詔紀
- 協力研究者所属機関:
分子研、神戸大、東大、京大、産総研、NEC

31

分子スケールに関する研究

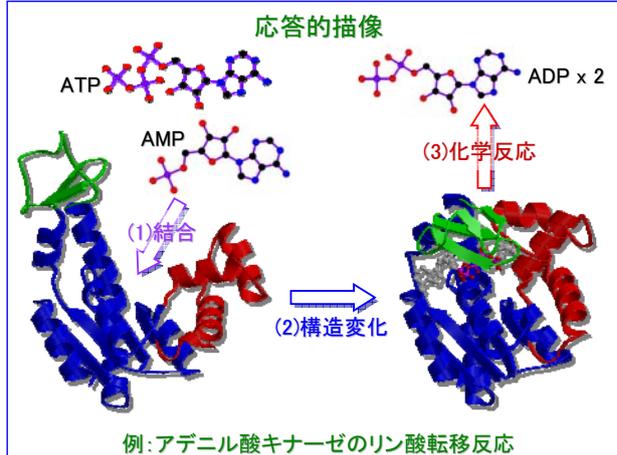
目的

生命活動の分子基盤であるタンパク質などの生体高分子が生体内で担っている機能をシミュレーションによって捉えることにより分子生物学・細胞生物学の課題を解明し、さらには新たな薬剤開発につなげることを目的とする

観点

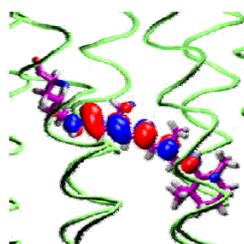
生物機能をどうシミュレーションで捉えるか?
タンパク質における生物機能の応答的描像

「**基質結合**、環境因子の変化などの外部からの**摂動**に対する**応答**として開始される一連の**構造変化**とそれに伴う**化学反応**」



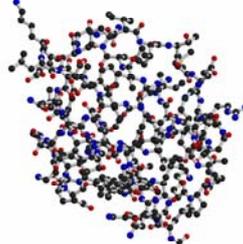
手段 分子スケール研究は以下の3つのスケールの計算を総合して行う

量子化学計算



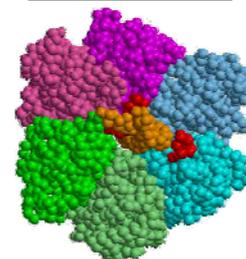
第一原理計算

分子動力学計算



分子力場計算

粗視化モデル計算

1粒子 = 1アミノ酸などの粗視化
データベースから得た経験的ポテンシャル

より小さく
より短時間
より厳密

より大きく
より長時間
より近似的

32

(2)細胞スケール解析チーム

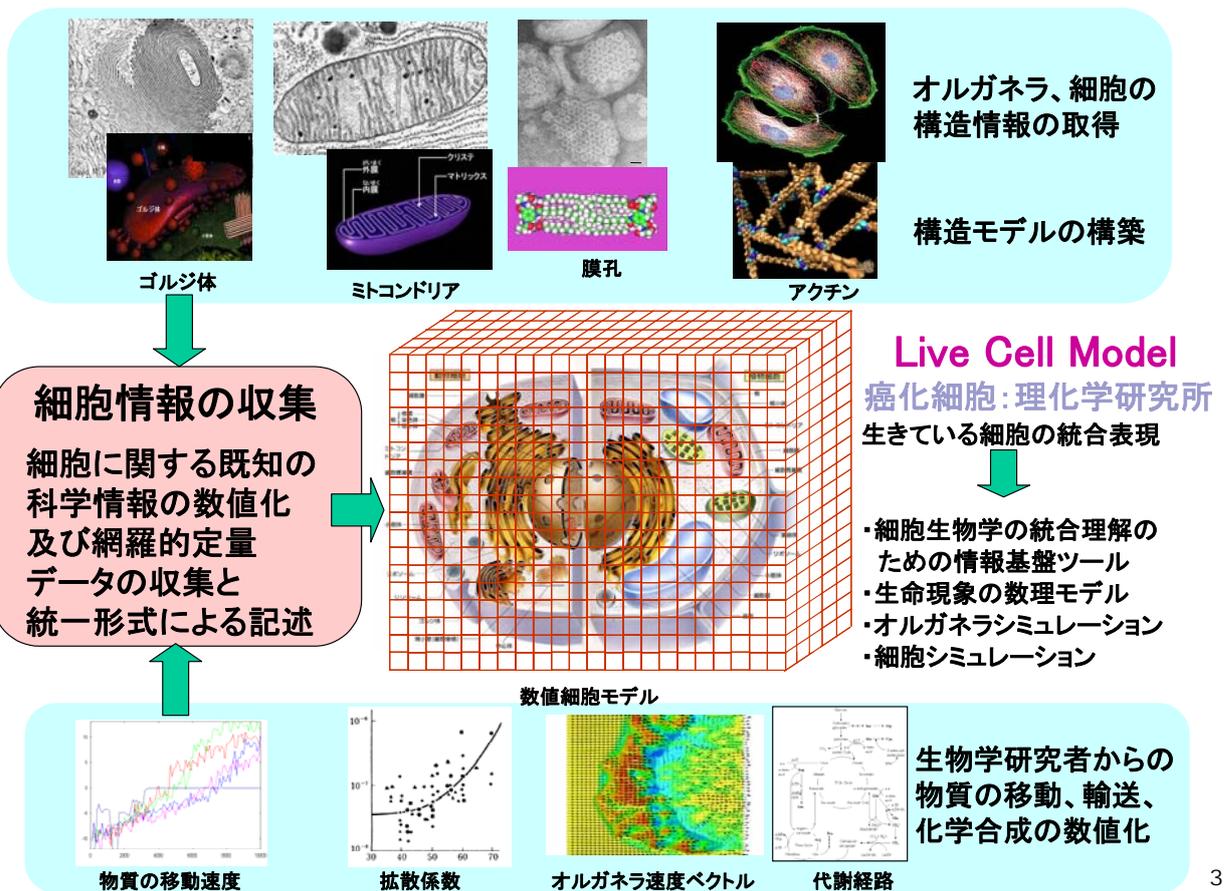
- チームリーダー:慶應義塾大学医学部 医化学教室 教授 末松 誠
- 協力研究者所属機関:
京大、阪大、神戸大、東海大

目的

- ・生命の最小単位である細胞を対象に、生きている細胞内の現象を再現する統合シミュレーションを実現
- ・各種事象に特化した各種細胞シミュレーションを、細胞内の場(形状、コンパートメント)を基準に統合
- ・細胞内のオルガネラ、膜の不均一性、濃度勾配などを考慮したシミュレーションにより、より精緻な細胞内シミュレーションを実現

33

細胞の統一表現空間: Live Cell Model



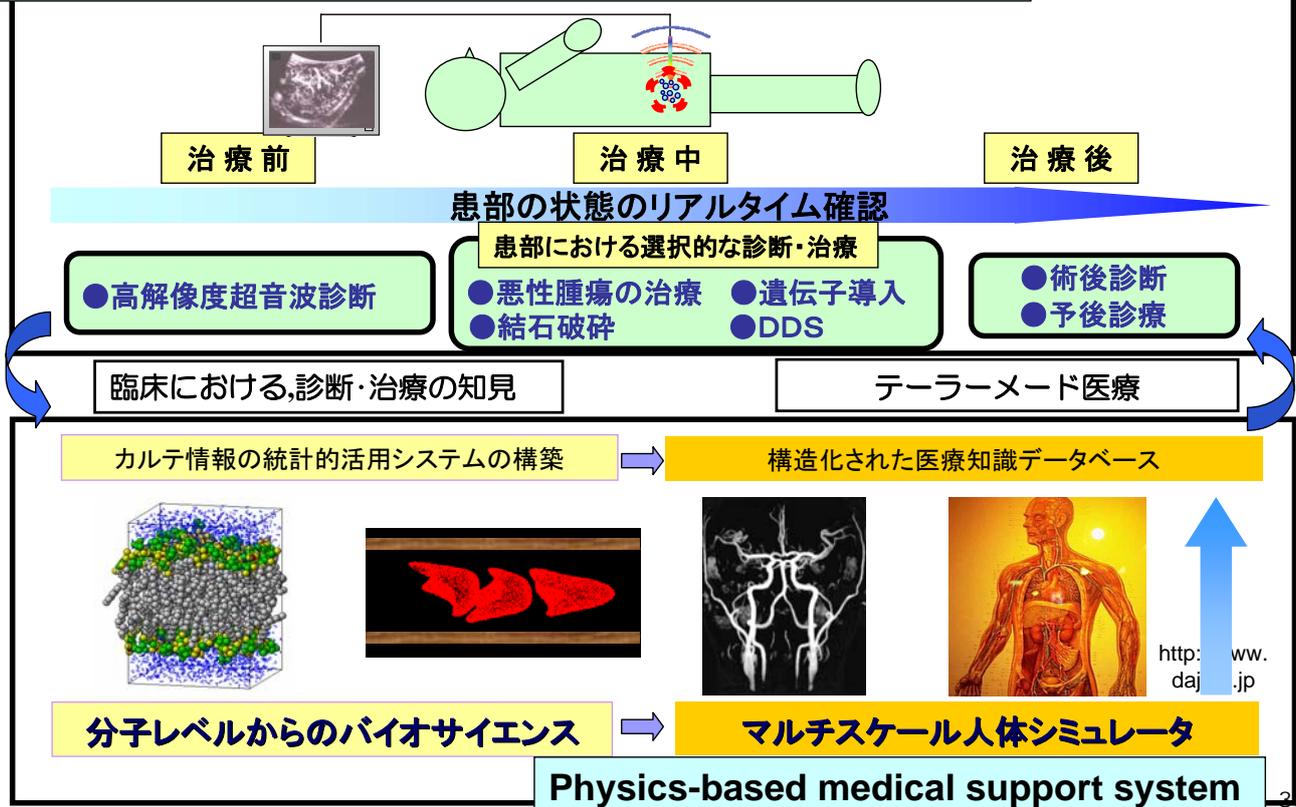
34

(3)臓器全身スケール解析チーム

- チームリーダー: 東大・松本洋一郎
- 協力研究者所属機関:
東大、慶応、京大、東北大、北陸先端大、阪大、千葉大、
- ・医療機関
東京大学医学部附属病院, 自治医科大学付属病院血管内治療部, 藤田保健衛生大学脳神経外科, 京都大学付属病院脳神経外科, 帝京大学医学部脳神経外科, 他

高度診断治療統合システム

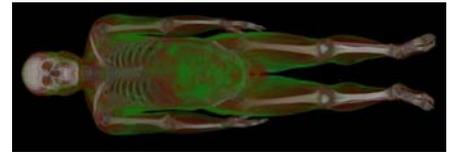
超音波診断・治療を中心とした、低侵襲統合診断・治療システム



全身スケールデータの医療応用

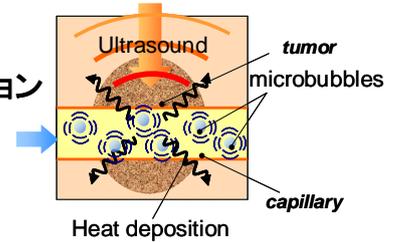
(1) 治療時の姿勢における体内の臓器位置に関する情報の獲得

- ・これまでの成果: MRI, CTのデータを基にしたボクセル法による全身データの構築
- ・今後の予定: 患者の姿勢の変化による臓器位置の変化を力学的に解析し、その位置を予測するツールの開発



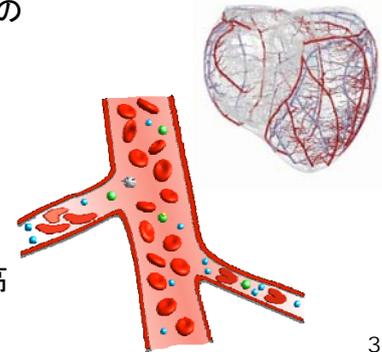
(2) 低侵襲治療のための体内における超音波伝播のシミュレーション

- ・これまでの成果: 異なる媒質中を伝播する超音波のシミュレーション, HIFU焦点領域におけるマイクロバブルの挙動解析(シミュレーション&検証実験)
- ・今後の予定: リアルタイム検診・治療を目指した超音波シミュレータの開発

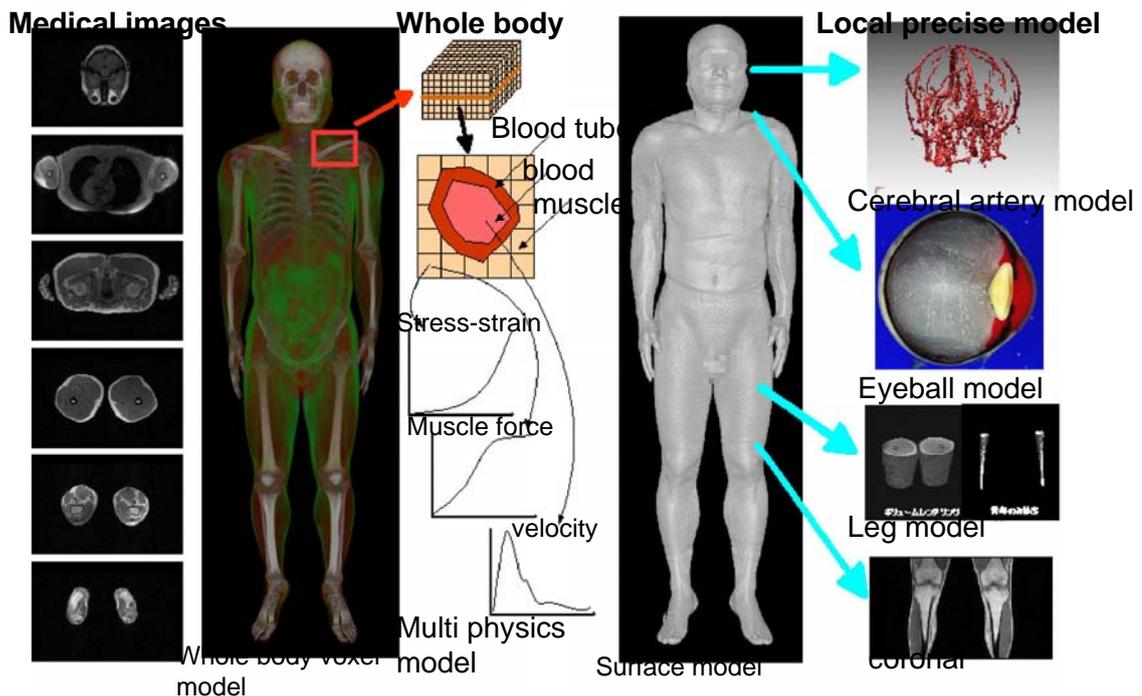


(3) 心臓から毛細血管まで血液循環器系の総合シミュレーション

- ・これまでの成果: 心臓・脳血管・毛細血管等各部位におけるシミュレータの開発と種々の疾患の原因説明
- ・今後の予定: 原因説明および治療支援のための各シミュレータの高精度化および統合による高度化

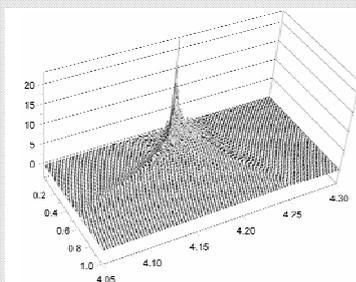
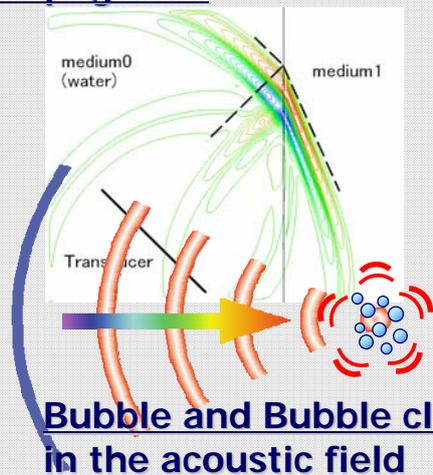


臓器全身スケール数値データの構築

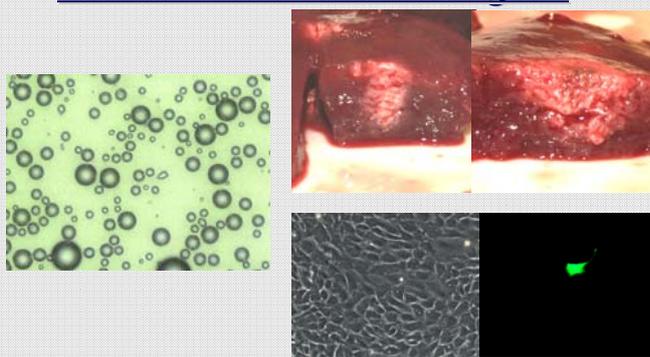


超音波による低侵襲診断/治療法の開発

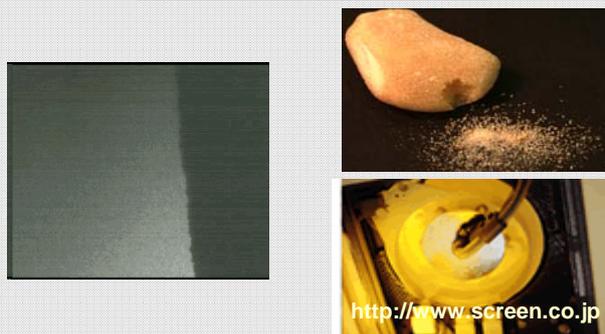
Nonlinear ultrasound propagation



Microbubble contrast agent



Acoustic cavitation



(4) データ解析融合の概観

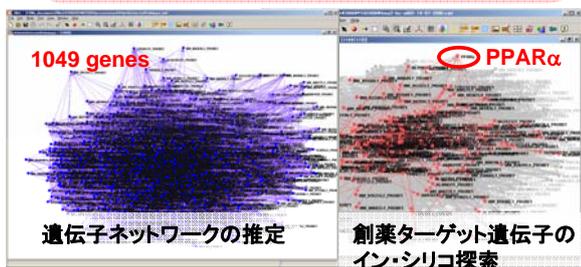
超高次元大規模ヘテロデータ解析技術と生体生命シミュレーションの融合

実験データの飛躍的増大

- ・超高次元化: 遺伝子からエクソンレベルへ
- ・極めてヘテロ: 配列, 構造, ダイナミクス, ...
- ・不観測性: 情報の欠損・欠如

期待される成果

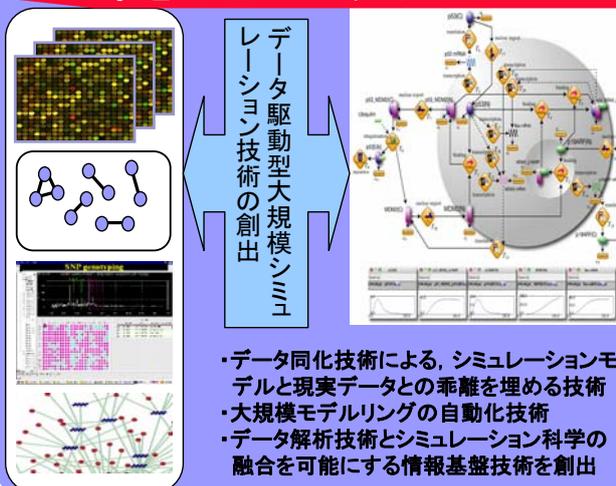
- ・ペタスケールデータ解析による個人差を考慮した投薬量・最適投与プロセスなどの開発
- ・ 10^4 スケール遺伝子ネットワーク推定による創薬ターゲット・毒性関与パスウェイ探索法の開発



ペタスケール
データ解析技術

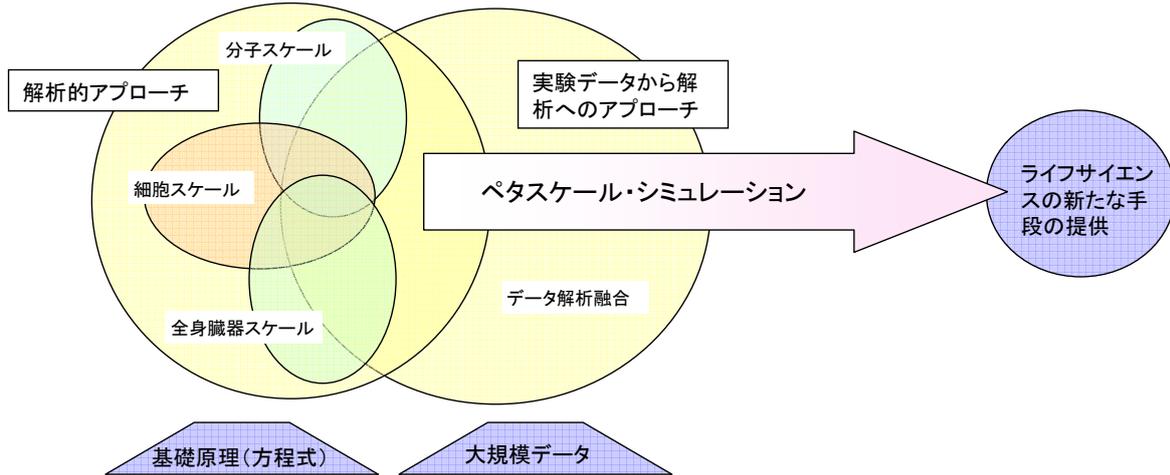
機能のモデル化
技術

京速コンピューティング



階層問題の解決に向けて

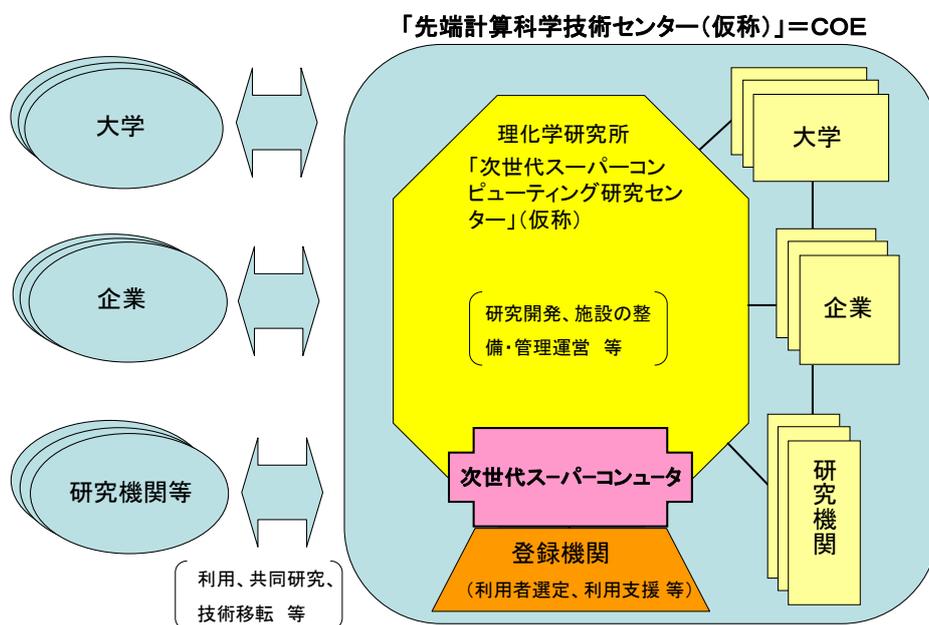
- それぞれのスケールの中で、隣のスケールと連成
- 粗視化モデル、統計的手法、データ同化(逆問題的アプローチ)を駆使
- 解析的アプローチと実験データからのアプローチの連携
- スケール問題の克服自体が研究



41

COE構想

- COE: Cluster of Excellence



42

まとめ

- 10PetaFLOPSの性能を持つスーパーコンピュータを2011年度末に完成すべく、現在概念設計の最終段階
- 性能を見積もるためのBMスイートを完成
- 2006年9月から3方式に絞って、概念設計を委託
- 現在、3方式の概念設計を受け、理研としての最終案を作成中
- 今年度中に概念設計を終える
- グランドチャレンジ問題としてナノとライフサイエンスが設定
 - ナノは従来のNAREGI・分子研拠点が模様替えして再スタート
 - ライフは理研・和光研究所で担当、2006年10月からスタート
- COE構想の議論を開始