

次世代の技術への挑戦

- 省電力技術、世界最大規模の超並列システムの制御技術、アプリ開発者と密接に連携したCo-designにより新たな技術開発に挑戦し、ポスト「京」の課題解決力、国際競争力を高めるとともに、商用機を含めた技術の展開を加速する。

1. Co-designによるアプリ実効性能の向上・低電力化

最新の科学的社会的課題は解くべき数式の複雑化や計算量の大幅な増加により、従来スパコンでは解決が困難になってきている。いくつかの代表的なアプリケーションに対して、各アプリケーションのアルゴリズムの改良とアーキテクチャの最適化設計を同時に行うことにより、幅広いアプリケーションに対して高い性能電力比を有するシステムを実現。

2. 省電力化技術

- ・チップ内回路を最適化することにより、省電力高性能システムを実現する。
- ・CPU内部回路、メモリアンターフェイス回路、ネットワーク回路など、細かいレベルで回路の消費電力を制御する機構を開発し、アプリケーションの性質により性能に影響しない回路の消費電力を制御する。これにより、実効性能を維持しながら電力消費を抑えることを実現する。

3. オープンソースソフトウェア（OSS）による高度システムソフトウェアの実現

従来のスパコンはシステムソフトウェアの新規開発部分が多く開発コストが高かつ最新技術取り込みが遅かった。既存OSSと親和性の高いシステムソフトウェアを開発・オープンソース化し同時に国際連携することによって、最先端システムソフトウェア技術をいち早く取り込みユーザーニーズに応えられる画期的システムを開発する。

4. 超大規模並列用高効率システムソフトウェアの構築

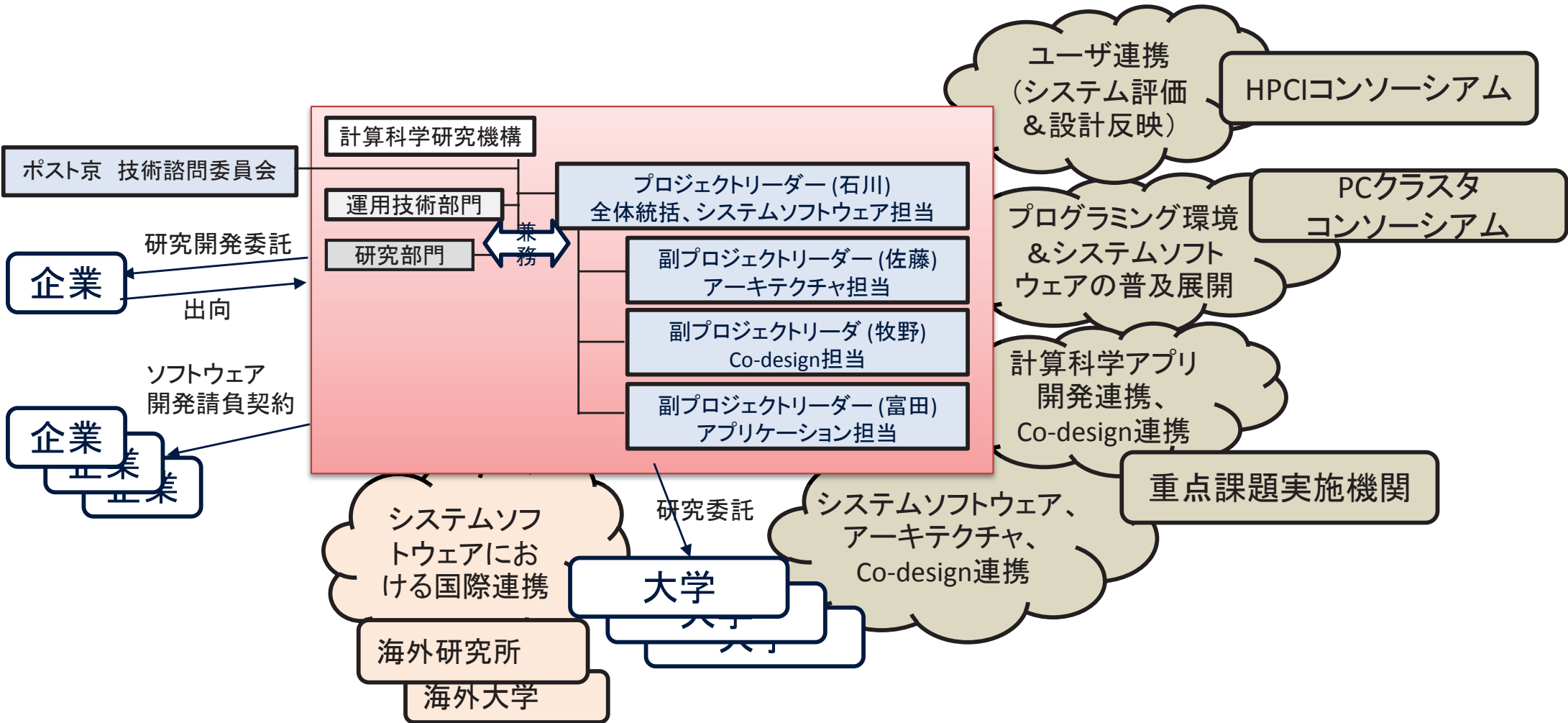
CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なシステムソフトウェアを実現。従来手法ではシステムソフトウェアの処理コストがコア数と共に増大することにより超大規模並列での効率的動作は困難となる。（京は約70万CPUコア並列で動作する。）

5. 超大規模並列用高効率プログラミング環境の構築

CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なプログラミング環境を実現。従来スパコンでは大規模並列プログラムの効率的動作には、計算機科学専門家の長時間の設計・チューニングが必須であった。（京は約70万CPUコア並列で動作する。）

1. 国として取り組む意義・必要性
2. ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題
3. ポスト「京」のシステム
4. 開発体制とスケジュール
5. プロジェクトの開発目標

システム開発体制



- 海外研究所等(国際連携)**
- システムソフトウェア(OS、通信)
 - 省電力技術、FT技術、等
 - プログラミング環境
 - ミニアプリ

- 大学**
- 標準API策定、ベンチマークコード策定
- 電力制御API、FT API、等
 - アーキテクチャ評価 & Co-design検討評価
 - キャッシュ、SIMD強化、省電力機構等

- 重点課題実施機関**
- ターゲットアプリを使ったCo-design連携 / 主要アプリ高速化
 - アルゴリズムの連携開発

- HPCIコンソーシアム**
- ユーザ意見
- PCクラスタコンソーシアム**
- システムソフトウェア普及 & 広報

アプリケーション開発体制

- 開発主体である理化学研究所と、重点課題実施機関、開発参画企業および連携機関が協力して開発体制を構築。
- 重点課題ターゲットアプリケーションを中心に、アプリケーション開発者と計算機システム開発者の協調によりアプリケーションおよびシステムを協調設計(Co-design)していく。

全体的な観点からプロジェクトを定常的かつ強力にフォローアップし、プロジェクトの進捗状況の把握・評価・改善提言・指導等を行う

アプリ開発、成果創出、社会還元へ責任を持つ取りまとめ機関（公募）

計算科学者を中心に、

- ・理論・応用数学者の協力の下、新アルゴリズム開発やアプリへの実装
- ・大型実験施設等の利用者や研究PJ等と連携した実証実験
- ・成果の社会還元を見据えた社会学者や産業界・自治体等との連携

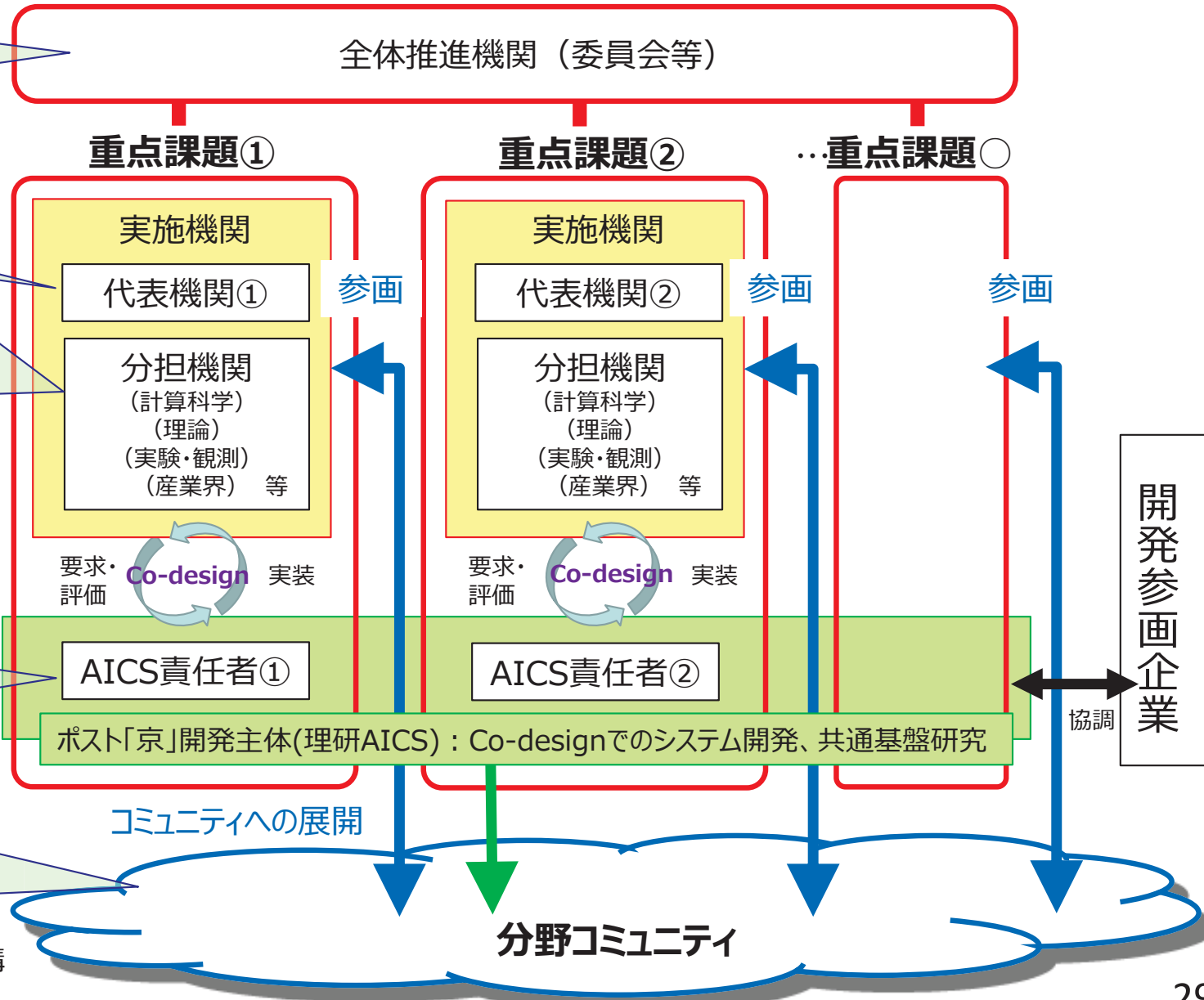
等が実施できる分野を越えた関係者が結集した体制

ポスト「京」開発主体が、Co-designに責任を持つべく、実施体制に参画するとともに、重点課題間の連携や共通基盤技術の整備を担う

計算科学技術を活用する裾野を拡大していくため、分野コミュニティによる以下の取組を推進。

- ・萌芽的・基礎的研究の効果的な実施
- ・研究人材・利活用人材の育成
- ・先端アプリの維持・発展、利活用促進 等

※理研AICS：理化学研究所計算科学研究機構
 ※実施機関には理研AICSも含み得る。



開発スケジュール

2014年度

2015年度

2016年度

2017年度

2018年度

2019年度

2020年度～

システム
開発

基本設計

試作・詳細設計

製造（量産）

設置・調整

アプリ
開発

立上げ
準備

調査研究・準備研究

本格実施

成果創出

▲代表機関公募

Co-design（ターゲットアプリケーション）

グループ I

○第一フェーズ

アーキテクチャパラメータ等、早期に決定する必要があるプロセッサデザインに関わる部分の協調設計。ターゲットアプリケーションのうち、特にプロセッサデザインに関してキーとなるいくつかを対象。

○第二フェーズ

- 第一フェーズにおけるCo-designの成果を取り入れて、コンパイラやシステムソフトウェアプログラミング環境、ライブラリの協調設計及び詳細設計を行っていく。
- 基本設計で決定したアーキテクチャを念頭に、アプリケーション実効性能の向上を図る。

グループ II

○第一フェーズ

システムソフトウェア（通信ライブラリ、入出力システム等）に関わる部分の協調設計。特に、入出力に関してキーとなるいくつかを対象に進める。

性能向上に向けたターゲットアプリケーションのチューニング等を引き続き行っていく。

社会的・科学的成果の創出

(※) グループ I ……ハードウェアの根幹に関わるため詳細に取り組むべきアプリケーション、グループ II ……グループ I 以外のアプリケーション

1. 国として取り組む意義・必要性
2. ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題
3. ポスト「京」のシステム
4. 開発体制とスケジュール
5. プロジェクトの開発目標

開発目標

- 重点課題のターゲットアプリケーションとシステムのCo-designにより、以下の性能目標を実現
 - ↳ 多重ケース処理型計算で最大「京」の100倍、大規模単一問題型計算で最大「京」の50倍
- 消費電力は30～40MW（※「京」の消費電力は約13MW）

カテゴリ	重点課題	目標性能 (対「京」比)	目標性能によって可能となる計算内容(例)	計算の種類	想定 プログラム
健康長寿 社会の実現	① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築	100倍	全原子分子動力学シミュレーションにおいて、10万原子の10万ケース計算によるスクリーニングにより、より効果的で安全な創薬候補物質のスクリーニングが可能に。（「京」では1000ケース程度の計算スクリーニングまで。）	多重ケース処理型計算	GENESIS
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	今後精査	個人ゲノム解析（パターンマッチング）については、20万人規模を目指す。（「京」では数千検体の解析まで。）	多重ケース処理型計算	Genomon
防災・環境 問題	③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	今後精査	有限要素法（複雑な要素を表現できる計算法）を用いた複雑な地盤構造および建物の振動の1領域につき1000ケース程度を目指したシミュレーションにより、想定外を出来るだけ無くした地震災害想定が可能に。（「京」では、数十ケースの予測まで。）	多重ケース処理型計算	GAMERA
	④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化	75倍	構造格子の有限体積法による3.5km解像度での1000のアンサンブル計算と次世代観測データ用いたデータ同化により、局地的豪雨や竜巻などの高精度な予測を実現。（「京」では、数十アンサンブル程度で雲や台風の構造の再現まで。）	多重ケース処理型計算 +大規模単一問題型計算	NICAM +LETKF

注：現在、開発企業選定中のため、表中の記載内容は概念設計レベルにおける性能予測である。企業選定後、基本設計を進め、更なる検討を行う予定。

※多重ケース処理型計算（Capacity Computing）：

小・中規模のプログラムを大量に実行する計算。分子動力学シミュレーションや気象、気候シミュレーションなどの分野では、初期パラメータを変えてシミュレーションし、それらの結果から予測値を得る手法が取られる。（例：「京」で80ノード使って動作するプログラムを1000個同時に動かす。）

※大規模単一問題型計算（Capability Computing）：

従来技術でなし得なかった規模の計算。（例：「京」で8万ノード使わないと動かせないプログラム）

開発目標

カテゴリ	重点課題	目標性能 (対「京」比)	目標性能によって可能となる計算内容(例)	計算の種類	想定 プログラム
エネルギー 問題	⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	40倍	量子力学に基づく700原子規模の20ケースのシミュレーションにより、光化学反応のメカニズムを解明し、光エネルギー変換のための材料候補物質のスクリーニングが可能に。(「京」では、数百原子程度の数ケースまで。)	多重ケース処理型計算	NTChem
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	20倍	有限要素法に基づき、複雑な形状の構造物を1兆要素規模で計算することにより、熱発生率、冷却・排気損失、ノッキング、サイクル変動等の予測の正確な評価が可能。(「京」では、数百億要素規模で予測技術の確立まで。)	大規模単一問題型計算	FFB
産業競争力の 強化	⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成	35倍	量子力学的第一原理計算に基づき、10万原子のシミュレーションを10ケース程度行うことにより、複数の異種物質から構成されるナノ界面を解明。(「京」では、ナノ界面の一部を切り出した部分系での理解。)	多重ケース処理型計算	RSDFT
	⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発	今後精査	有限要素法に基づき複雑な形状の構造全体を時空間的に予測する計算により、最適な全体設計を実現。(「京」では、個別のシミュレータまで。)	大規模単一問題型計算	Adventure
基礎科学の 発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明	50倍	クォークを 192^4 個の格子上の場として計算することにより、素粒子から宇宙全体にわたる物質創成史を解明。(「京」では、 96^4 格子上で、星、銀河、巨大ブラックホールなど、宇宙における諸階層の構造形成過程まで。) 計算量は「京」時代の計算内容の60倍程度。	大規模単一問題型計算	CCS-QCD

注：現在、開発企業選定中のため、表中の記載内容は概念設計レベルにおける性能予測である。企業選定後、基本設計を進め、更なる検討を行う予定。

スパコン性能の国際的な指標

開発したスパコンの国際競争力を測るため、様々な性能指標で多角的に評価する必要がある。

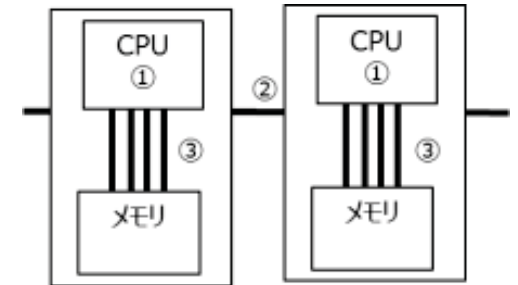
Top500

単純な計算を解く速度を評価するランキング。理論ピーク演算性能に近い性能を示すものであり、現時点で国際的に最も通用している指標である。2014年6月時点で「京」は第4位であり、第1位は中国のマシン（Tianhe-2）。

HPC Challenge

HPCチャレンジベンチマークというプログラムによりスパコンの総合的な性能を多角的に評価するもの。計算速度を競うTop500と異なり実用に近い総合性能が評価できる。

年	①Global HPL	②Global RandomAccess	③EPSTREAM(Triad) per system	④Global FFT
2011	京	京	京	京
2012	京	Power775 (IBM)	京	京
2013	京	Power775 (IBM)	京	京



- ① CPUがデータを計算する速度
- ② CPU間のデータ転送速度
- ③ CPUとメモリ間のデータ転送速度
- ④ ①～③を全て考慮した総合性能

HPCG

Top500と比べ、実アプリケーションの実効性能を反映しやすいとされる。Top500を創始したジャック・ドンガラ氏（米・テネシー大学）が提唱。2014年6月時点で「京」は第2位だが、実行効率で見ると第1位。

ランキング	1	2	3	4	5
システム名称	Tianhe-2	京	Titan	Mira	Piz Diant
実行効率	1.1%	3.8%	1.2%	1.0%	1.3%

Graph500

大規模グラフ解析性能（大規模かつ複雑なデータ処理が求められるビッグデータ解析において重要となるもの）を評価する国際的なランキング。計算速度だけでなく、アルゴリズムやプログラムを含めた総合的な能力を評価。

順位	システム名称	設置場所	ベンダー	国名
1	京	理研 計算科学研究機構	富士通	日
2	Sequoia	ローレンス・リバモア研	IBM	米

※最新のランキング(2014年6月)
 ※Top500で第1位である
 Tianhe-2は本ランキング
 では第6位