

ターゲットアプリケーションによる 性能評価について

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。
 - ナノ、バイオ、物理・天文、地球科学、工学の5分野100本以上のアプリケーションからターゲット・アプリケーション21本を選定。
 - 21本のうち、典型的なアルゴリズムを含むスケーラビリティの高い7本について、詳細評価を実施。

ターゲット・アプリケーション一覧

【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	Sievene/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	RSDFE
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

ベンチマーク・テストによる性能評価について

- ベンチマーク・テスト・プログラム(21本)の実行時間を推定

- 特に,ベンチマーク・テスト・プログラム(9本)について,詳細に評価

- ターゲット・アプリケーションから7本のベンチマーク・テスト
- HPL (High Performance Linpack) , NPB-FT

- 推定方法は,両者独自の手法を採用

- 実機での計測値から推定
- 新たなアーキテクチャ部分は,机上で分析,評価

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
Lattice QCD	物理	格子QCDシミュレーション
LANS	工学	圧縮性流体計算

- 代表的なアルゴリズムを含む主要なアプリケーションを評価
 - その他の広範なアプリケーションにおいても,高い実効性能が得られると推測