

H P C I 計画推進委員会
今後の H P C I 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ
システム検討サブワーキンググループ 報告書 要旨

本サブWGでは、フラッグシップシステムについて、開発主体候補である独立行政法人理化学研究所（以下「理研」という。）から計4回のヒアリングを実施し、

- ・開発するシステムについては、どのような社会的・科学的課題を解決できるのか、どのような成果が期待されるのか、それらを実現するために必要なスペック、スケジュール、要素技術、コストはどのようなものか 等
- ・プロセッサを中心とする要素技術開発については、海外のベンダ等の技術動向はどうか、我が国として強みを持てる技術かどうか、技術安全保障上保持すべき技術かどうか、当該システムでキーとなる技術かどうか、当該システムが目指す社会的・科学的課題の解決に必要なアプリケーションの効率的・効果的な実行のために必要な技術かどうか、民間への展開も含め、発展性、波及性がある技術かどうか 等

の観点に立って、理研が提案するシステムイメージの技術的妥当性の評価を行った。

1. 解決すべき社会的・科学的課題及び要求されるシステム性能について

○理研からの提案

我が国が直面する問題や分野連携による新しい科学的課題の解決、ものづくり等の産業界への下方展開に貢献する観点から、今後5年から10年程度の短期的スパンで解決すべき社会的・科学的課題（以下「短期課題」という。）として、創薬・医療、総合防災、クリーンエネルギー創出と環境問題解決、社会科学、基礎物理と物性物理の連携等の分野における各課題が示された。この中で、各課題の解決に貢献するアプリケーションが要求する演算性能、メモリバンド幅及びメモリ量が提示され、それによると、要求実効演算性能で見た場合、500ペタフロップスでは61%、800ペタフロップスでは65%、1エクサフロップスでは87%のアプリケーション群がカバーされることが示された。さらに、同ロードマップが提示する社会的・科学的課題に貢献するアプリケーションを

実行した場合、提案の1エクサフロップス級の理論ピーク演算性能をもってしても数年間を要することから、短期課題だけを考えても、フラッグシップシステムの理論ピーク演算性能としてはエクサフロップスレベルが必要条件であることが示された。

○サブWGの見解

フラッグシップシステムについては、「今後のHPCI計画推進の在り方について（中間報告）」において、「社会的・科学的課題の解決という観点から、その必要性やスペックについて適切に判断していくことが必要」であり、「なるべく多くの分野のアプリケーションが効率よく利用できるものとし、全体としてのアプリケーションの実効性能を大きくする」とされている。したがって、我が国の次期フラッグシップシステムとしては、「京」の能力をもってしても解決困難である様々な短期課題の中で、主要なものが要求する性能は満たしつつ、そのほかのものにも幅広く対応していく必要があり、その意味では、9割近くアプリケーション群をカバーする実効演算性能（1エクサフロップス）に見合うレベルの理論ピーク演算性能を実現する必要がある。実効演算性能と理論ピーク演算性能を単純比較することはできないが、想定される2020年頃の技術的限界を考えると、現時点では、フラッグシップシステムとしては理論ピーク演算性能で1エクサフロップスレベルを目指しつつ、同時にアプリケーション側で実効性能を高めていく方策をとることが妥当である。また、諸外国が2020年頃に理論ピーク演算性能でエクサスケールコンピューティングの実現を目指していることを考慮しても、我が国が理論ピーク演算性能で1エクサフロップスレベルを目指すことは、技術的な実現可能性及び競争力の観点から妥当と言える。

【留意事項】

理研からの説明でも触れられているようにアプリ分野の「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」は取りまとめ中なので、それに基づく数値については引き続き精査を続け、フラッグシップシステムに求められる性能を、適切な根拠に基づいて明確化する必要がある。その際、求められる性能を精緻化するのみならず、解決すべき社会的・科学的課題について、引き続きその妥当性や十分性を検証するとともに、優先順位を検討する必要がある。

なお、理研から提示された解決すべき社会的・科学的課題は今後5年から10年程度を想定したものであるが、計算科学技術で解決すべき社会的・科学

的課題は今後も増えるとともに、スーパーコンピュータの要求性能も上がっていくことが予想されるので、10年以上先を見通した中長期課題に対応する取り組みにも留意が必要である。

2. 基本的なシステム構成及びその詳細について

1) 基本的なシステム構成

○理研からの提案

基本的なシステム構成に係る将来動向について、今後のプロセッサとして不規則非構造データ処理など柔軟な処理が可能な汎用コアと高い電力性能比を実現できる演算加速コアが統合されていくことがまず示された。その上で、当該将来動向や国際的な技術動向、冷却などを含めたシステム全体の消費電力の制限（30～40MW）、さらに、①上記 1. で掲げた演算性能やニーズ（Science-driven System）、②「京」の資産の継承、2020年頃の競争力・競合力、将来にわたって我が国のHPCの発展に貢献すること（Sustainable System）、③低電力、ソフトウェア高移植性、高耐故障性（TCO(Total Cost of Ownership)-aware System)等を考慮すると、我が国のフラッグシップシステムとしては、汎用部に加速部を加えたシステム構成を基本とする旨の提案が示された。

また、当該システムの利用イメージとして、Cooperation Model（汎用部と加速部で協調して計算を実行する方法）、Offloading Model（計算の一部を加速部にオフロードする方法）、Separation Model（汎用部のみ又は加速部のみで計算を実行する方法）の3つが示された。

電力消費に関しては、加速部を加えたシステムは、汎用部だけのシステムを使った場合に比べて大幅に削減されることが示された。

なお、今後、加速部のメモリ容量を増やすことを検討するとともに、メモリ容量不足で実行できないアプリケーションについては要求メモリ容量の削減の可能性を検討することが示された。

○サブWGの見解

2020年頃に1エクサフロップスレベルの理論ピーク演算性能を実現しようとした場合、現在の技術動向から外挿される2020年頃の汎用部の性能や現実的な消費電力等の境界条件を考えると、汎用部だけのアーキテクチャで1エク

サフロップスレベルを目指すことには限界がある。そのような状況の中で、今後の技術動向、システムの利用イメージやシステム開発後の発展等を考えると、新たなフラッグシップシステムを開発する本国家プロジェクトとしては、我が国の HPC 分野における将来像を示し、今後のハードウェア及びアプリケーション開発の方向性を先導するという観点から、幅広いアプリケーションに対応しつつ電力演算性能を向上させていくアーキテクチャとして「汎用部に加速部を加えたアーキテクチャ」に挑戦する意義は十分にあると言える。

したがって、理研が提案する基本的なシステム構成は、現時点では妥当である。

なお、加速部を加えたアーキテクチャとする場合、これまでの資産を生かしつつ当該アーキテクチャを活用して早期に成果を創出する観点から、「京」のアプリケーションの移植に必要な対応を含めて、新たなモデルやアルゴリズムの開発、加速部を活用するアプリケーションの開発等をハードウェアの開発と並行して進め、Co-design を実現していくことが重要である。

【留意事項】

異なるシステムをつなぐことには様々な困難やトラブルがつきものなので、引き続き、システム設計分野の「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」等において、両システムの開発体制（シングルベンダー又はマルチベンダー、メインコントラクターの存否など）に係る利害得失や両システム開発の相互影響（一方のシステム開発が万が一困難となった場合における全体又はもう一方のシステム開発への影響）のリスクも十分に検討する必要がある。また、半導体プロセスやメモリ技術、デバイス用インタフェース等の技術開発の遅れに対する代替案についても検討する必要がある。さらに、加速部については、有効に機能するアプリケーションの見積りの精査や Cooperation Model 及び Offloading Model での活用可能性の検証を含め、引き続き必要性・有効性を検討する必要がある。

2) システム構成の詳細

○理研からの提案

システムは、汎用プロセッサと一部に演算加速コプロセッサが搭載された計算ノード、汎用プロセッサ間を接続するインターコネクト、演算加速コプロセッサ間を接続する演算加速チップ間ネットワーク及びストレージで構成されることが示されるとともに、システム全体の構成並びに汎用プロセッサ、演算

加速プロセッサ及びネットワーク・インターコネクットの詳細が示された。

○サブ WG の見解

提案のシステム構成の詳細については現時点で個々の要素の妥当性を論じられる段階ではないが、当該詳細により基本的なシステム構成の実現可能性が示されているという点では、全体の方向性として一定の合理性はあると考えられる。

【留意事項】

理研の設計思想及びその論点が明確化されたことから、今後は、汎用プロセッサ及び演算加速コプロセッサ、ネットワーク・インターコネクット、メモリ、消費電力等に係る技術的詳細や汎用プロセッサと演算加速の割合について、引き続き検討する必要がある。

3. プロセッサ開発の必要性について

○理研からの提案

我が国は「京」における汎用プロセッサ及びインターコネクット技術開発の実績並びに Grape-DR などのアクセラレータ技術開発の実績があることから、米国や中国がスーパーコンピュータの開発に力を注いでいる状況において、我が国の国際競争力の維持、技術の継承及び将来に渡る人材育成の観点でプロセッサの自主開発が必要である旨の提案が示された。また、電力性能比向上や信頼性向上のためチップ内にプロセッサとインターコネクットを統合していくことがトレンドであることも示された。

汎用部プロセッサの自主開発に関しては、利点として、マシン開発に並行してアプリ成果の創出及び共用開始のリードタイム短縮が可能であること、世界の先端研究者が参集し、人材育成が加速されること、中長期計画が立案可能といったことが示される一方で、欠点として、開発コストがかかる、製造及び保守コストを下げるのが難しくなる可能性があること、半導体プロセスが 1 世代遅れる可能性があるといったことが示された。

また、加速部コプロセッサに関しては、利点として、電力性能が向上すること、低レイテンシ通信及び強スケールへの対応が可能であることといったことが示され、欠点として、開発コストがかかる、リスクが高いといったこと

が示された。

○サブ WG の見解

我が国は高性能プロセッサを開発できる数少ない国の一つであり、高い信頼性技術を有しているので、「京」の開発で蓄積された技術や人材、さらには研究開発段階の技術やそれに関わる研究者・技術者を最大限活用することで、世界と戦えるプロセッサを自主開発し、我が国の情報科学技術の発展や産業競争力の強化につなげていくことは十分に可能であると考えられる。

実際、世界に伍して「京」を自主開発したことにより、我が国は高性能・低消費電力のプロセッサや、8万個以上のプロセッサ間を相互に接続する超並列システムを高い信頼性のもと効率的に運用できる Tofu インターコネクトといった最先端の技術を獲得するとともに、獲得した技術、人材、ノウハウ等がスーパーコンピュータやサーバの新製品開発や、汎用半導体の設計・開発・製造に活用され、我が国の情報科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献している。また、こうした「京」の開発実績によるブランド力の向上を通して、外国における環境問題の解決への IT 活用など、スーパーコンピュータのみならず IT を活用した幅広いビジネスで、諸外国のプロジェクトに参画するなどの波及効果も生じている。

このように、プロセッサをはじめとする要素技術から自主開発することで、

- ・我が国における重要技術の維持・発展及び人材の育成・確保
- ・国内産業の育成及び競争力の向上
- ・技術の核心部分を国内に維持するという意味での技術安全保障

が実現することとなる。

さらに、

- ・システム全体を統合的に開発して最適化
- ・設計段階からコンパイラ及びシステムソフトウェアを開発
- ・同時並行でアプリケーションを評価及びチューニング

していくためには、自主開発によってプロセッサをブラックボックス化させないことが不可欠であること、また、プロセッサとインターコネクトを統合するトレンドの中で我が国として実績のあるインターコネクト技術を維持・発展させる必要性があることも、重要な観点である。

したがって、我が国のポテンシャル及びプロセッサ自主開発の利点・必要性を考えると、現時点では、プロセッサの自主開発を基本方針とすることは妥当である。

【留意事項】

自主開発の詳細については開発主体候補において引き続き検討していく必要がある。

その際、海外ベンダが技術的に先行している部分もある中では、上記の利点も勘案して性能・コスト比較を行い、自主開発が合理的かどうかを不断に検証するとともに、必ずしも国内ベンダのみの開発に固執することなく、海外の技術の利用も含めた国際協力を視野に入れて検討していく必要がある。

また、2. 1) でも述べた両システムの開発体制に係る利害得失や両システム開発の相互影響のリスクに関し、開発後の商用展開やメンテナンスを含めてシステム全体に責任を持つ者を明確にするとともに、やむを得ない場合にはコモディティの製品で代替できる柔軟性等も検討しておく必要がある。このことは、現在国内ベンダが開発を行っていない演算加速コプロセッサに関して特に重要である。

なお、ハードウェアの商用展開とアプリケーションの商用展開は密接に関係していることから、アプリケーションも巻き込んだ戦略的な対応が求められることに留意が必要である。

4. 開発・製造のスケジュール及びコストについて

1) スケジュール

○理研からの提案

今後の技術動向を見ながら可能な限り前倒しすることを前提としつつ、現時点での計画としては、開発は2014年度から、システム全系の運用は2020年度頃から開始するとともに、その間、システムソフトウェアの整備や数値計算ライブラリの構築なども行うことが示された。

○サブWGの見解

「京」の際の開発・製造スケジュール及び現時点での各国の技術動向を踏まえれば、2014年度から開発を開始することを含めて、現時点では妥当なスケジュールである。

【留意事項】

スーパーコンピューティングの分野は技術的進展が早いため、引き続き諸外国の技術動向を注視し、様々なリスクへの対応の観点も含め、基本設計や詳細設計が終了した段階などのチェックポイントを設けて HPCI 計画推進委員会等の評価を受けながら、順次大きなシステムに拡張していく必要がある。

2) コスト

○理研からの提案

2014 年度から 2019 年度の 6 年間における、汎用部、システムソフト、加速部、数値計算ライブラリ等の開発費の累計及び製造費の累計が示された。

○サブ WG の見解

現在示されているコストについては、「京」のプロジェクトの基本設計が終了した段階で見積もられた開発・製造費を考慮すれば、おおむね妥当な規模と評価できる。

【留意事項】

コスト算出の前提条件（システム設計の詳細やプロセッサ自主開発の有無、チップ製造に使用する半導体プロセス技術）が流動的であることをはじめ、比較検討の際に比較対象となるシステムのコストや性能が定量的に示されていないため、引き続き精査が必要である。

5. まとめ

世界最高水準のスーパーコンピュータは、科学技術の振興、産業競争力の強化、国民生活の安全・安心の確保等に不可欠な「国家の基幹技術」であり、その開発による様々な効果を含めて、競争力の源泉であることが国際的な共通認識となっている。そのため、各国でスーパーコンピュータの自主開発が拡大してきている中で、社会的・科学的課題の解決と豊かで活力のある国づくりにおける今後の計算科学技術の重要性を踏まえると、スーパーコンピュータを自主開発するポテンシャルを有する我が国としては、「京」の開発により獲得した高性能なプロセッサやネットワーク、優れた省電力機構などの技術や、その開発を通じて蓄積された人材や経験を生かしながら、スーパーコンピュータの開発に必要な技術を適切に維持・発展させていくことが重要である。

この認識の下、本サブWGでは、1. から4. で述べたように、我が国のフラッグシップシステムについて、

- ①基本的なシステム構成及びシステム性能については、汎用部に加速部を加えたアーキテクチャで、2020年頃に1エクサフリップスレベルの理論ピーク演算性能の実現を目指すこと
- ②プロセッサについては、汎用部及び加速部ともに自主開発を基本方針とすること
- ③スケジュール及びコストについては、開発主体候補が提示したものとする

を、現時点では妥当と評価したことから、今後、この方針で基本設計に着手していくことは適当であると言える。

一方、社会的・科学的課題が要求する性能、将来展望も含めた課題の妥当性・十分性、コストやシステム設計の詳細については、「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」や基本設計の中で引き続き検討していくものである。したがって、引き続き開発主体候補が各項目で求めた対応を続けることとし、その結果については、「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」の結果、HPCIコンソーシアム等のユーザーの意見等を踏まえ、来年度の前半を目途に、HPCI計画推進委員会等において改めて評価することとする。

なお、1. で論じた短期課題については、1エクサフリップスレベルの理論ピーク演算性能をもってしても、解決困難なものがあり、また、多くのものに対応しようとするとなれば数年単位の時間を要することとなる。さらに、将来的には中長期課題への対応が必要になるとともに、ある課題について今後解決が進むことでさらに高いシステム性能が要求される可能性や現在は想定できていない新たな社会的・科学的課題が生じる可能性も十分にある。したがって、今後のフラッグシップシステムに係る検討においては、長期戦略を持ち、人材育成を含めてエクサスケールの次のシステムも見据えていくことが重要である。

HPCI 計画推進委員会
今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ
システム検討サブワーキンググループの設置について

平成 25 年 6 月 25 日
検 討 W G 決 定

1. 趣旨

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ（以下「検討 WG」という。）の中間報告では、リーディングマシンの研究開発の方向性として、開発主体候補において、期待される成果、必要なスペック、要素技術等に関するイメージを明らかにした上で、フラッグシップシステムの具体的な方向性及び要素技術開発に係る方針を検討することとしている。

この検討を実施するため、検討 WG の下にシステム検討サブワーキンググループを設置する。

2. 設置期間

平成 25 年 6 月 25 日から調査検討の終了までとする。

HPCI 計画推進委員会
今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ
システム検討サブワーキンググループ委員名簿

- | | |
|-------|------------------------------|
| 浅田邦博 | 東京大学大規模集積システム設計教育研究センター長・教授 |
| 宇川 彰 | 筑波大学数理物質系教授 |
| ○小柳義夫 | 神戸大学大学院システム情報学研究科特命教授 |
| 笠原博徳 | 早稲田大学理工学術院教授 |
| 加藤千幸 | 東京大学生産技術研究所教授 |
| 小林広明 | 東北大学サイバーサイエンスセンター長 |
| 関口智嗣 | 産業技術総合研究所情報通信エレクトロニクス分野副研究統括 |
| 中島 浩 | 京都大学学術情報メディアセンター長 |
| 平木 敬 | 東京大学大学院情報理工学系研究科教授 |
| 松岡 聡 | 東京工業大学学術国際情報センター教授 |

○：主査

(50 音順)

システム検討サブワーキンググループ検討経緯

第1回 7月3日（水）15時～17時

- ・システム検討サブワーキンググループの設置と運営について
- ・システム検討サブワーキンググループの今後の進め方について
- ・理化学研究所からのヒアリング

第2回 7月18日（木）17時～19時

- ・理化学研究所からのヒアリング及び意見交換

7月22日（月）17時～19時

今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ（第19回）

- ・システム検討サブワーキンググループの報告

第3回 7月29日（月）10時～13時

- ・理化学研究所からのヒアリング及び意見交換
- ・論点整理

第4回 8月9日（金）10時～12時

- ・理化学研究所からのヒアリング
- ・取りまとめ

8月30日（金）15時～17時

今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ（第20回）

- ・システム検討サブワーキンググループの報告



フラッグシップシステムについて

平成25年8月30日
理化学研究所計算科学研究機構

フラッグシップシステム開発の基本理念

2020年頃までに、電力・設置面積・予算等を勘案しつつ、エクサフロップス級の演算性能をもち、幅広い計算科学プログラムをサポートできるシステムを開発し、科学技術のブレークスルーを達成するとともに産業の国際競争力を高める。

このためアプリFSの要望に幅広く応え、HPCシステムの発展動向も踏まえて、汎用プロセッサと演算加速用コプロセッサを組み合わせたヘテロジニアス・アーキテクチャを提案する。京の後継機として京アプリの移植性も重視する。

1. 汎用プロセッサをメインに十分な性能をもち、幅広いアプリをカバーする
2. 将来のHPCの発展動向を見据え、演算加速プロセッサの開発にもチャレンジする。汎用部に電力演算性能が優れた演算加速部を組み合わせることによりシステムを構成する
3. 演算加速部については、開発のみならず共用マシンとして保守および運用を含めた実現可能性を精査する必要がある
4. 汎用部と演算加速部の比率については、使いやすさや電力性能等を勘案しつつ、さらなる検討を重ね、最適比率を決定する
5. 汎用部と演算加速部を一体的なシステムとして開発せねばならない。インターフェースを含めたシステム一体化、ビジネス展開可能性についてもさらなる検討を進める
6. 汎用プロセッサと演算加速コプロセッサを組み合わせたヘテロジニアス・アーキテクチャについては、HPCIコンソーシアムを中心としたアプリケーションユーザに対し、その利用方法およびアプリケーション移行に関わるコストに関して議論していく必要がある

プロセッサ技術は我が国にとって重要な技術であり、また、汎用プロセッサ、演算加速用プロセッサのいずれも、我が国には開発する力を持ったメーカーがあり、関係する研究者がいる。まずは国内で、国際競争力をもったプロセッサ開発を実施すべきである。同時に、この重要な技術が将来にわたって国際競争力を維持できるように配慮すべきと考えている。

目次

1. 解決すべき社会的・科学的課題について
2. 基本的なシステム構成について



解決すべき社会的・科学的課題

- 解決すべき課題・期待される成果
 - 創薬・医療／エネルギー環境問題／総合防災／社会経済予測など我が国が喫緊に解決すべき問題を計算科学から貢献を目指す
e.g. 総合防災においては1000を超えるシナリオを想定し科学的根拠に基づく被害想定
 - 分野連携による新しい科学課題の解決
e.g. ものづくり、生命科学、物質科学の知の結集および大型実験設備との連携による生体分子の構造解析
 - モノづくり等産業界への下方展開への指向
e.g. 最適化設計によるモノづくりのコストダウン
- 要求されるシステム性能
 - 社会的・科学的課題を解くアプリケーション群のカバー率

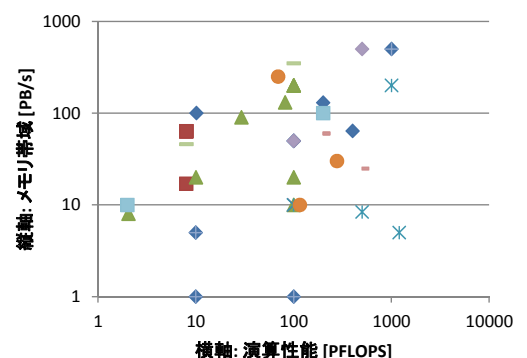
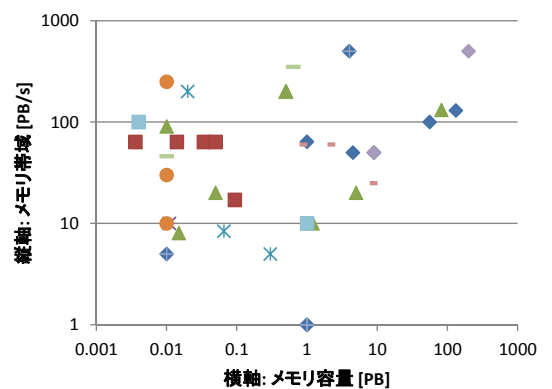
科学的基盤から社会的基盤への転換

～1 PB	～2 PB	～3 PB	～4 PB	～5 PB	～10 PB
55%	65%	66%	68%	71%	81%

～100 PF	～200 PF	～400 PF	～500PF	～800 PF	～1000 PF
45%	54%	58%	61%	65%	87%

注：メモリ容量と性能に相関があるわけではない

要求メモリ容量および要求演算性能については、今後、アプリ側とともに精査していく必要がある



解決すべき社会的・科学的課題と計算量 (1/2)

計算科学ロードマップ白書(第2版)の「2章解決すべき社会的課題」から推定

例えば、下表黒枠で囲んだ総合防災アプリでは、1ケース3時間かかる。これを5000ケース実行することを想定。5000ケース実行することにより課題が解ける。それに必要な総演算量は430000 Exa Flop必要である。

$$\begin{aligned} \text{総演算量(EFLOP)} &= 1 \text{ ケースジョブで必要とされる演算量} \times \text{ケース数} \\ \text{要求性能(PFLOPS)} &= (\text{総演算量(EFLOP)} / \text{ケース数} / 1 \text{ ケース要求計算時間(hour)} / 3600) * 1000 \end{aligned}$$

分野	課題	要求性能 / ケース (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 / ケース (PB/s)	メモリ量 / ケース (PB)	計算時間 / ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)
創薬医療	個人ゲノム解析	100	50	9	700	200	50457600
	遺伝子ネットワーク解析	100	50	4.5	10	26000	93600000
	創薬などMD・自由エネルギー計算	10	5	0.01	1.2	100000	4320000
	細胞環境・ウィルス	1000	500	4	48	10	1728000
	高精度創薬	10	1	1	1	100	3600
	バイオデバイス設計	100	1	1	1	100	36000
	血流シミュレーション	400	64	1	174	10	2505600
	超音波シミュレーション	200	130	132	240	10	1728000
総合防災	脳神経系シミュレーション	10	100	56	210	30	230000
	地震発生	8	64	0.014	3	5000	20000
	波動伝搬		17	0.094			60000
	地震動増幅		64	0.034			200000
	建物震動		64	0.05			100000
	津波遡上		64	0.0036			50000
	避難誘導シミュレーション	0.1		0.0001	1	5000	1800
	クリエーションエネルギー	電子材料の電子状態計算・手法1	100	20	5	240	10
電子材料の電子状態計算・手法2		100	10	1.2	96	10	345600
強相関電子系の理解		82	131	82	42	10	124000
プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流		100	200	0.5	24	50	432000
プラズマ乱流計算・大域的非常乱流		100	200	0.5	170	10	612000
熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題)		200	400	1	28	50	1010000
熱流体シミュレーション(自動車、ハイエンドベンチマーク)		100	200	0.5	28	10	101000
風力発電立地条件アセスメント		29	90	0.01	72	100	760000
近未来地球環境予測システム		2	8	0.015	720	50	106000
科社会		自動車交通流のリアルタイムシミュレーション	100	10	0.011	2.78E-05	10
	株式取引所ルールの最適化	208	1E-05	1E-05	24	10	180000

解決すべき社会的・科学的課題と計算量 (2/2)

計算科学ロードマップ白書(第2版)の「3章分野連携による新しい科学的ブレークスルー」から推定

分野	課題	要求性能 / ケース (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 / ケース (PB/s)	メモリ量 / ケース (PB)	計算時間 / ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)
基礎物理と物性物理との連携	自己重力N体流体シミュレーション	1200	5	0.3	30	100	12960000
	宇宙天気予報	1000		2	100	50	18000000
	カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用	500	8	0.066	0.28	31536	15768000
	閉殻を仮定しない殻模型計算	100	10	1	27.8	100	1000000
	超新星爆発のシミュレーション	1000	200	0.02	1200	1	4320000
宇宙科学・地球科学の連携による惑星科学	惑星系形成	278	3	0.00003	1000	1	1000000
	地球・惑星の形成シミュレーション	116	10	0.01	24	10	100000
	惑星表層環境の形成と進化シミュレーション	69	250	0.01	100	100	2500000
タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析	創薬などMD・自由エネルギー計算	10	5	0.01	1.2	10000	432000
	高精度創薬	10	1	1	1	100	3600
	バイオデバイス設計	100	1	1	1	100	36000
	細胞環境・ウィルス	1000	500	0.000008	48	10	1728000
計算科学基盤技術の創出と高度化	並列レンダリング	200	60	0.8	0.5	1	360
	並列レンダリング	200	60	2	0.5	1	360
	データ圧縮	500	25	8	0.5	1	900
衛星・観測データの有効利用	ゲリラ豪雨・熱帯気象の高度予測	100	350	0.64	216	2	155520
	統合地球環境再解析	8	46	0.01	18	80	41600
ゲノム解析	個人ゲノム解析	100	50	9	700	200	50457600
	疾患遺伝子発見のための統計的解析	500	500	200	140	5	1260000
大型研究施設との連携が切り開く生命科学	大量実験データ解析による4次元イメージング	2	10	1	28	1	201.6
	実験解析結果に基づく動的構造モデリング	200	100	0.004	240	10	1728000

社会的・科学的課題とシステム設計の基本的考え方

- Science-driven System
 - 計算科学ロードマップ(第2版)に基づく概念設計
 - アプリFSにおいて社会的・科学的課題および必要とする計算資源量について精査を行っている
 - ロードマップで見えてくる使い方は
 - 大規模、精密、長時間発展といったcapability computingのニーズ
 - 複雑な現象を対象とした課題におけるensemble computingのニーズ
 - Big data computing、社会科学シミュレーションのニーズ
 - これらの要求に応えるシステムの設計が前提
- Sustainable System

京の後継機として京の資産が受け継げる、そして、将来の計算機システム発展動向を見据えたシステム

 - 2020年ころの世界の最先端システム、競争力、競合力あるシステム
 - 将来の我が国のHPCの発展につながるシステム
- TCO(Total Cost of Ownership)-aware System
 - 白書で必要とされる計算資源量に対して、低電力、ソフトウェア高移植性、高耐故障性を有するシステム設計



システム設計基本的考え方

- 将来動向
 - 高い性能電力比と不規則非構造データ処理もできるCPUとして、汎用コアと演算加速コアが統合されていく。しかし、どのように統合されていくかは今後の研究成果に依存
 - ノード単体の演算性能向上に比べ搭載可能メモリ容量はさほど増えない
- 開発に関する考え方
 - システム設計

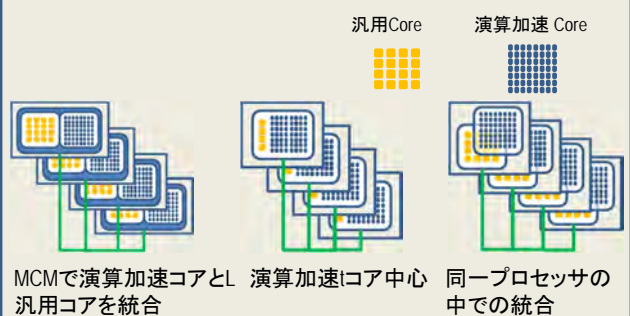
汎用部(汎用コア)と演算加速部(演算加速コア)を有するマシン

 - 汎用コアでないと性能がだせないアプリケーション、演算加速コアで性能だせるアプリケーション、両コアを使って性能がだせるアプリケーションを棲み分け、全電力時間積削減
 - 将来にわたって有効な統一プログラミングモデル、ライブラリ、フレームワークを提供
 - 早期成果創出のためにキラーアプリケーションの同時開発を通してシステム設計に反映

	汎用コア (Server)	演算加速コア (GPU, SIMD)
データ構造	不規則・非構造	規則構造
性能電力比	低 Ex. 4.27GF/W, 22nm	高 Ex. 7GF/W, 28nm
メモリ階層の現状	キャッシュと主メモリ	GPU側とホスト側メモリ

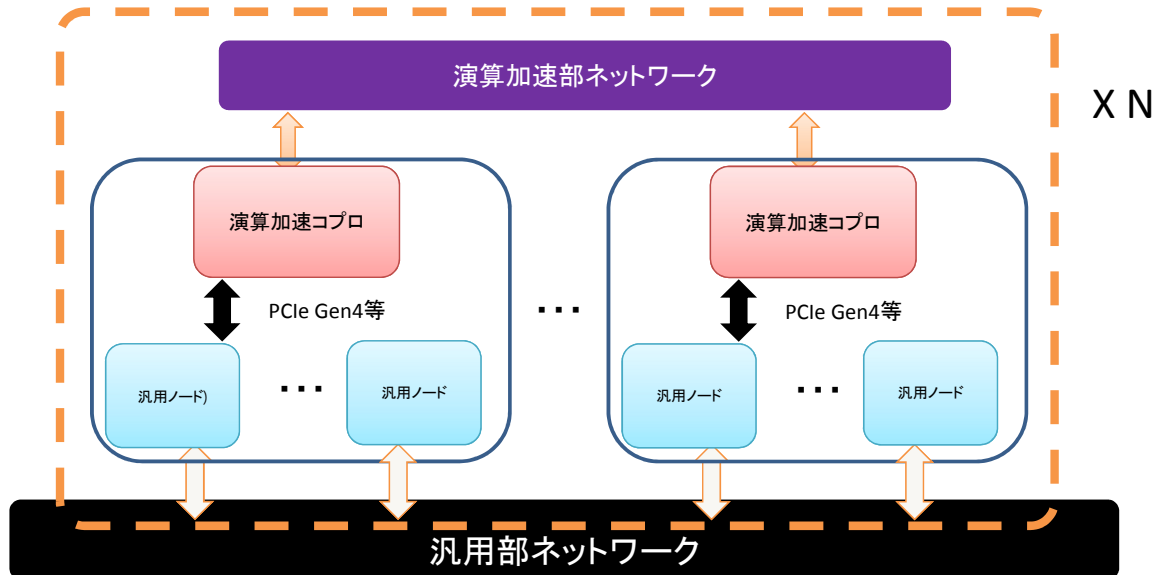
将来マシンイメージ群

- 汎用コア、演算加速コア、ネットワークが統合されていく
- 統合方法および搭載メモリ容量とメモリバンド幅は、実装技術によって変わっていく
- 3D実装可能メモリ容量以上が必要な場合、低速メモリが導入される



汎用部・演算加速部構成

- 汎用部
 - 京で開発されたアプリケーションの継承を重視したCPU
- 演算補助部
 - SIMDアーキテクチャによる電力性能に優れたCPU



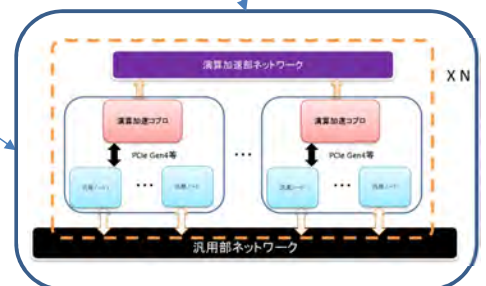
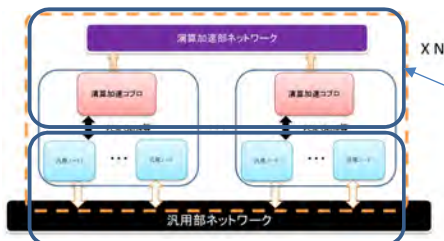
システム利用イメージ

Offloading Model

- OpenACCコンパイラディレクティブ等を用いてコードの一部を演算加速コ・プロセッサにオフロード
 - 演算加速コ・プロセッサで動作するライブラリを呼び出す
- 適応可能アプリケーション**
- 量子化学など対角化や直交化が必要なアプリ
 - 原子核のシェルモンテカルロ等
 - UT-Heartなど大規模な行列を多数反転するアプリ
 - 大規模粒子系

Cooperation Model

- 汎用部と演算加速部それぞれで協調するアプリ実行
 - 複数の汎用部プログラムと複数の演算加速部コプロプログラムによる協調動作
- 適応可能アプリケーション**
- 前処理を汎用で、カーネルを加速機構で実行
 - 連成計算等のMPMD実行(例: 気候、気象のカプラー)



Separation Model

- 汎用部だけで計算するアプリ
 - 演算加速部のグループで実行されるアプリ
- 適応可能アプリケーション**
- 主に、ステンシル計算(メモリに入る場合)、QCD等
 - 分子動力学計算(MD)

解決すべき社会的・科学的課題と計算量 (1/2)

今後、メモリ容量を増やすことを検討するとともに、メモリ容量不足で実行できないアプリについては、アプリ側とともに要求メモリ容量削減の可能性を検討する

- 演算加速コア: 演算加速のコアメモリだけで実行できるアプリ
- 演算加速モジュール: 演算加速のモジュールメモリを使って実行できるアプリ
- 汎用: 汎用部で実行すべきアプリ

分野	課題	要求性能 /ケース (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 /ケース (PB/s)	メモリ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	主な計算部分の 想定ハードウェア	プログラミングモデル
創薬・医療	個人ゲノム解析	100	50	9	700	200	50457600	---	
	遺伝子ネットワーク解析	100	50	4.5	10	26000	93600000	汎用	Separation model
	創薬などMD・自由エネルギー計算	10	5	0.01	1.2	100000	4320000	演算加速コア	Separation model
	細胞環境・ウイルス	1000	500	4	48	10	1728000	演算加速コア	Separation model
	高精度創薬	10	1	1	1	100	3600	演算加速モジュール	Offloading model (FMOなので密行列処理)
	バイオデバイス設計	100	1	1	1	100	36000	演算加速モジュール	Offloading model (FMOなので密行列処理)
	血流シミュレーション	400	64	1	174	10	2505600	演算加速モジュール	Separation model
	超音波シミュレーション	200	130	132	240	10	1728000	---	
	脳神経系シミュレーション	10	100	56	210	30	230000	---	
	総合防災								
決クリンエネルギー創出と環境問題	地震発生		64	0.014			20000	演算加速コア	Separation model
	波動伝搬		17	0.094			60000	演算加速モジュール	Separation model
	地震動増幅	8	64	0.034	3	5000	200000	演算加速モジュール	Offloading model (陰解法の場合)
	建物震動		64	0.05			100000	演算加速モジュール	Offloading model (陰解法の場合)
	津波遡上		64	0.0036			50000	演算加速コア	
	避難誘導シミュレーション	0.1		0.0001	1	5000	1800	汎用	Separation model
	電子材料の電子状態計算・手法1	100	20	5	240	10	864000	演算加速モジュール	Offloading model (ブロック疎行列の部分)
	電子材料の電子状態計算・手法2	100	10	1.2	96	10	345600	演算加速モジュール	Offloading model (GS直交化部分)
	強相関電子系の理解	82	131	82	42	10	124000	---	
	プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流	100	200	0.5	24	50	432000	汎用	Separation model
プラズマ乱流計算・大域的非常乱流	100	200	0.5	170	10	612000	演算加速モジュール	Separation model	
科学	熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題)	200	400	1	28	50	1010000	汎用 (場合によっては演算加速コアが使える可能性あり)	Separation model
	熱流体シミュレーション(自動車、ハイエンドベンチマーク)	100	200	0.5	28	10	101000	汎用	Separation model
	風力発電立地条件アセスメント	29	90	0.01	72	100	760000	演算加速コア	Separation model
	近未来地球環境予測システム	2	8	0.015	720	50	106000	演算加速コア	Separation model (場合によってはCooperation model)
	自動車交通流のリアルタイムシミュレーション	1.00	10	0.011	2.78E-05	10	0.1	汎用	Separation model
	株式取引所ルールの最適化	208	1E-05	1E-05	24	10	180000	汎用	Separation model

1

解決すべき社会的・科学的課題と計算量 (2/2)

今後、メモリ容量を増やすことを検討するとともに、メモリ容量不足で実行できないアプリについては、アプリ側とともに要求メモリ容量削減の可能性を検討する

- 演算加速コア: 演算加速のコアメモリだけで実行できるアプリ
- 演算加速モジュール: 演算加速のモジュールメモリを使って実行できるアプリ
- 汎用: 汎用部で実行すべきアプリ

分野	課題	要求性能 /ケース (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 /ケース (PB/s)	メモリ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	主な計算部分の 想定ハードウェア	プログラミングモデル	
基礎物理と物性物理との連携	自己重力N体流体シミュレーション	1200	5	0.3	30	100	12960000	演算加速モジュール	Offloading model	
	宇宙天気予報	1000		2		100	50	18000000	汎用	Separation model
	カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用	500	8	0.066	0.28	31536	15768000	演算加速コア	Separation model	
	閉殻を仮定しない殻模型計算	100	10	1	27.8	100	1000000	演算加速モジュール	Offloading model	
	超新星爆発のシミュレーション	1000	200	0.02	1200	1	4320000	汎用	Separation model	
宇宙科学・地球科学の連携による惑星科学	惑星系形成	278	3	0.00003	1000	1	1000000	演算加速コア	Separation/offloading	
	地球・惑星の形成シミュレーション	116	10	0.01	24	10	100000	演算加速コア	Separation/offloading	
	惑星表層環境の形成と進化シミュレーション	69	250	0.01	100	100	2500000	演算加速コア	Separation model	
タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析	創薬などMD・自由エネルギー計算	10	5	0.01	1.2	10000	432000	演算加速コア	Separation model	
	高精度創薬	10	1	1	1	100	3600	演算加速モジュール	Offloading model	
	バイオデバイス設計	100	1	1	1	100	36000	演算加速モジュール	Offloading model	
	細胞環境・ウイルス	1000	500	0.000008	48	10	1728000	演算加速コア	Separation model	
計算科学基盤技術の創出と高度化	並列レンダリング	200	60	0.8	0.5	1	360	汎用	Separation model	
	並列レンダリング	200	60	2	0.5	1	360	汎用	Separation model	
	データ圧縮	500	25	8	0.5	1	900	---		
衛星・観測データの有効利用	ゲリラ豪雨・熱帯気象の高度予測	100	350	0.64	216	2	155520	演算加速モジュール	Cooperation model	
	統合地球環境再解析	8	46	0.01	18	80	41600	汎用	Cooperation model	
ゲノム解析	個人ゲノム解析	100	50	9	700	200	50457600	---		
	疾患遺伝子発見のための統計的解析	500	500	200	140	5	1260000	---		
大型研究施設との連携が切り開く生命科学	大量実験データ解析による4次元イメージング	2	10	1	28	1	201.6	汎用	精査中	
	実験解析結果に基づく動的構造モデリング	200	100	0.004	240	10	1728000	演算加速コア	精査中	

今後の課題

- 今回の構成を決めるに当たっては、
 - システムFSにおける現時点での概念設計の検討結果に基づいている
 - 性能見積もり、電力見積もりの精度は荒い
 - アプリケーションが要求する性能については、アプリFSにおける現時点での計算機要求に基づいている
 - 要求の精度にばらつきがある
 - アプリケーションが演算加速部で実行できるかの判断はラフ
- 従って、今回提示している構成および総演算性能等の数値は今後も見直していく
 - 特に、演算加速部だけを使った、あるいは演算加速部と汎用部を使ったアプリケーションに移行できるかどうか重要であり、コミュニティの意見を聞きながら検討を継続していく必要がある

