



PACS-CSプロジェクトについて

筑波大学 宇川 彰

- ❖ 目標・年譜・成果
- ❖ スタートするまで
- ❖ もたらしたものの
- ❖ 今後に向けて

PACS-CS(2006-2011)



目標・年譜・成果



PACS-CSプロジェクト

Parallel Array Computer System for Computational Sciences

- 正式名称:「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」事業
- 国立大学法人運営費交付金特別教育研究経費(拠点形成)
- 平成17年度～19年度の3ヵ年計画 総額 22.9億円
- 事業目標

平成16年度の計算科学研究センターの発足を背景に、

- 「科学と計算機科学の協力により科学の最先端を切り拓く」アプローチを、従来から実績のある素粒子・宇宙分野だけでなく、物質・生命分野、地球生物・環境分野においても展開し、計算科学のフロンティアを切り拓く
- これを支える超並列クラスタ計算機PACS-CSを、CP-PACSの後継機として開発・製作



筑波大学における並列計算機の開発史

1978
星野力(京大→筑波大)ら
により開発開始



星野力



岩崎洋一

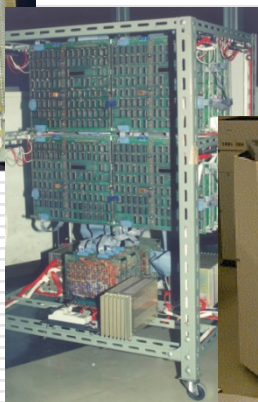


中澤喜三郎

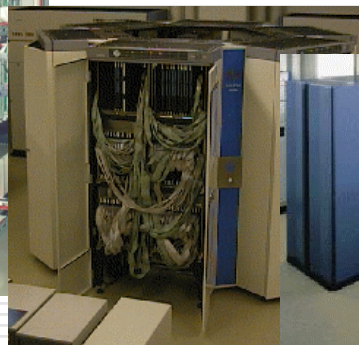
1978
第1号機PACS-9



1980
第2号機PAX-32



1989
第5号機QCDPAX



1996
世界最高速を達成した
第6号機CP-PACS

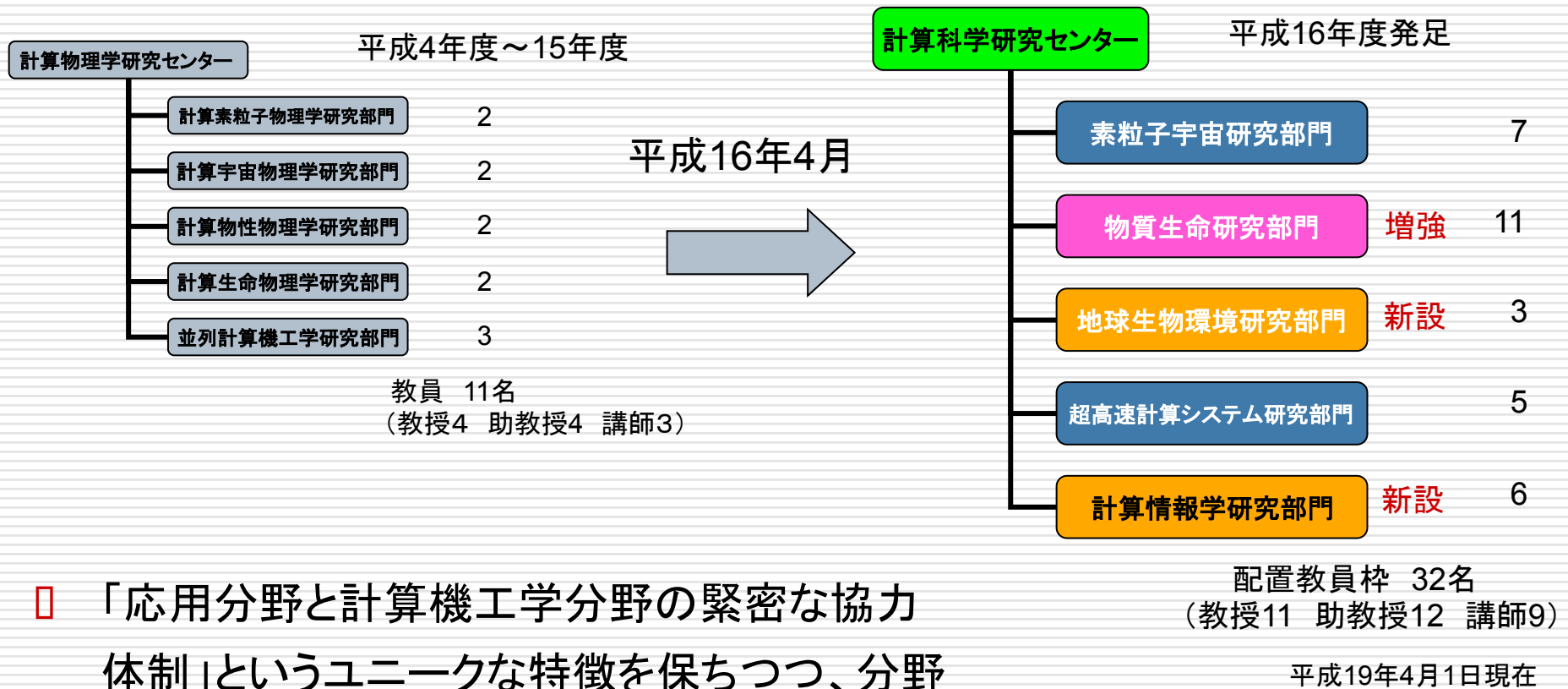


2006

地球シミュレータに次ぐ
国産第二位の性能を実現した
第7号機 PACS-CS



計算科学研究センターへの改組・拡充



□ 「応用分野と計算機工学分野の緊密な協力体制」というユニークな特徴を保ちつつ、分野を幅広く拡大し、同時に陣容を大幅に強化



PACS-CSプロジェクト推進体制

- プロジェクト統括： 計算科学研究センター長
宇川彰(平成17・18年度)
佐藤三久(平成19年度)
 - システム開発主査： 朴泰祐(超高速計算システム部門教授)
 - プロジェクトメンバー
 - 素粒子宇宙 宇川彰他 13名
 - 物質生命 押山淳他 12名
 - 地球生物 田中博他 4名
 - 計算システム 佐藤三久他 4名
 - 計算情報 北川博之他 6名
 - 計 38名
- 科学諸分野
- 計算機工学
- 平成19年9月現在



PACS-CSプロジェクト実施年譜

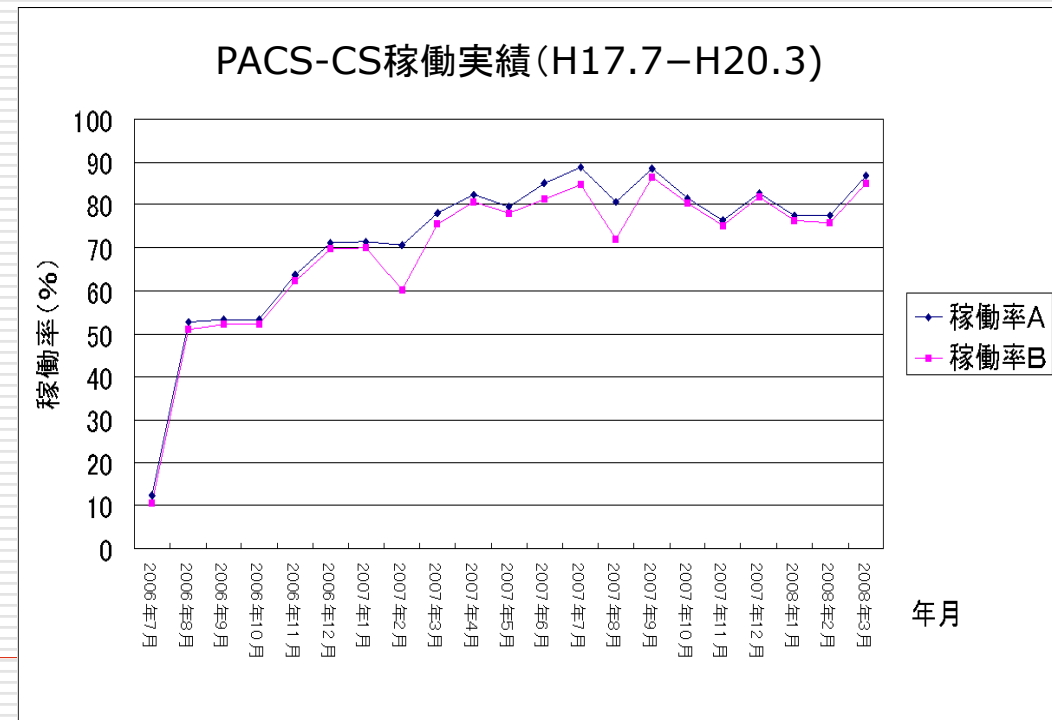
平成16年春～秋	プロジェクト概算要求
平成17年4月	プロジェクト正式発足
平成17年7月	PACS-CS開発・制作開始 (株)日立製作所(システム全体) (株)富士通(ネットワークドライバ製作)
平成18年6月	2006年6月トップ500リストで34位(国産2位)
平成18年7月1日	PACS-CS 稼働開始
平成18年7月～10月	ネットワーク調整
平成18年秋	本格運用開始
平成19年10月	学際共同利用開始(PACS-CSの全国共同利用)
平成23年9月	PACS-CS稼働停止予定



プロジェクトの成果：PACS-CSシステム開発

- 演算性能・メモリ性能・ネットワーク性能にバランスの取れた超並列機をコモディティベースで短期に開発するとの戦略を実現
- クラスタとして極めて優秀な稼働実績（計算科学研究センターの第一期中期目標・中期計画期間中の計算ニーズを極めてタイムリーに充足）

- コモディティの難しさも実感
 - シングルコアからマルチコアへの端境期
 - ネットワークの安定動作

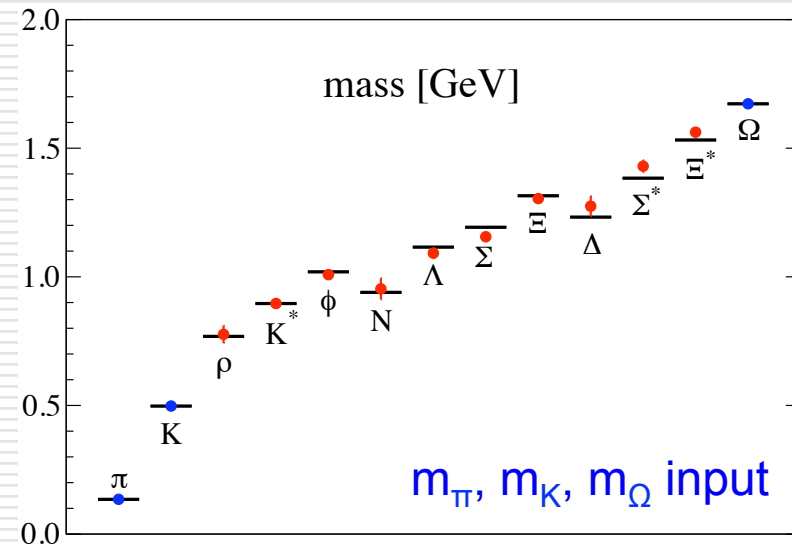
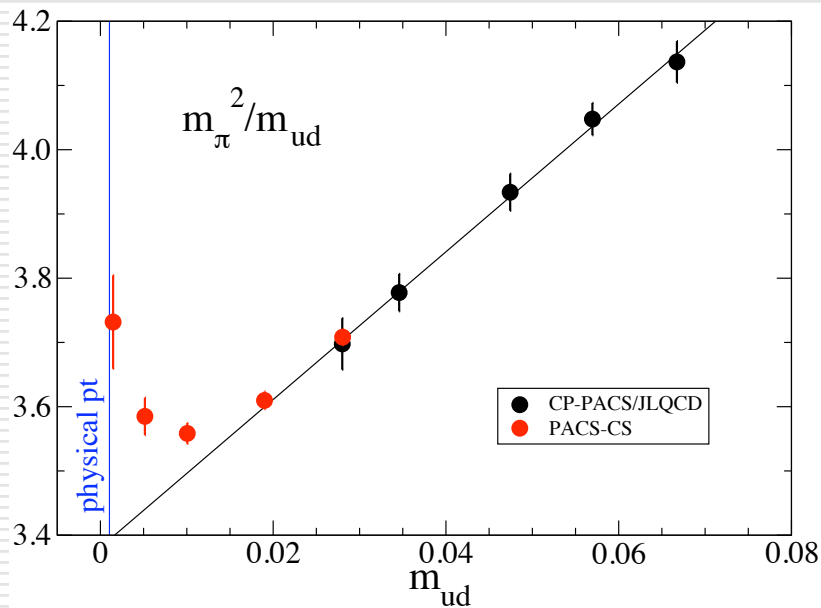


計算素粒子物理における成果

領域分割HMC(DDHMC)アルゴリズムによる計算コストの大幅削減により物理点計算を実現

非自明なクォーク質量依存性
⇒ 物理点直接計算の重要性

ハドロン質量の実験値との比較
2-3%の範囲内で一致





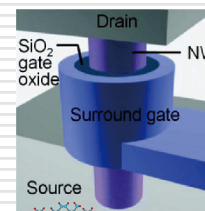
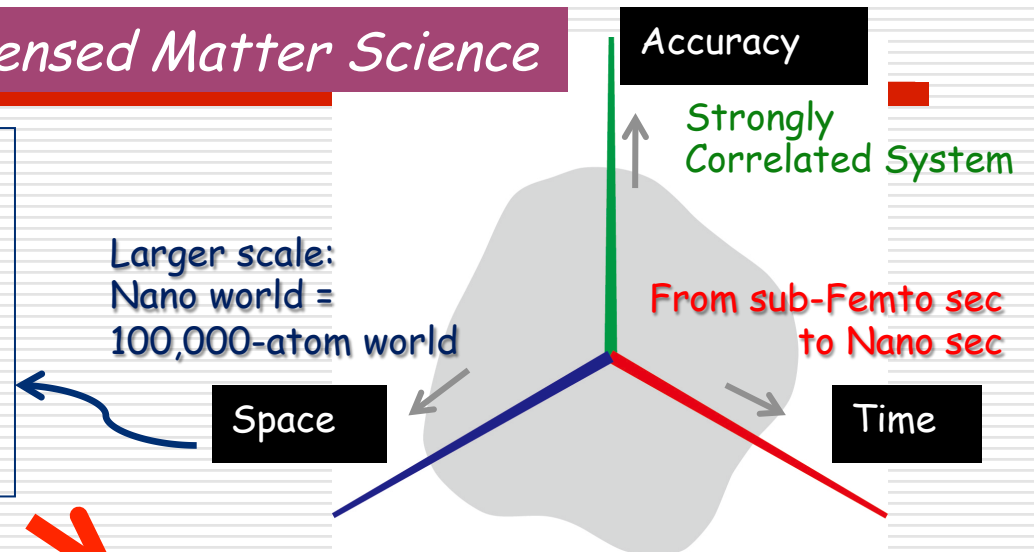
PACS-CSから飛躍した実空間DFTによる物性計算

Challenges in Condensed Matter Science

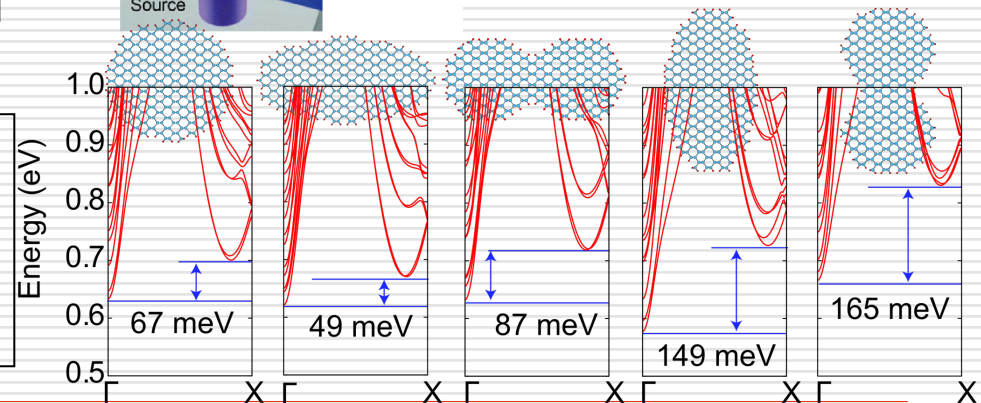
Progressive Tuning of **RSDFT** (Real-Space Density-Functional-Theory) Code in collaboration with computer science people and materials science people on **PACS-CS**

High Performance achieved by new **algorithms** and active use of BLAS3 on **1000-CPU**s of PACS-CS

100,000-atom DFT calculations using hundreds of thousands cores on **K** with unprecedentedly high performance



Si Nanowire Transistor: Booster in Technology
Nano-shapes that are decisive



高精度な計算技術の開発と生命科学への応用

高精度(かつ一般的な)有効ポテンシャル場の構築法を開発

- 分子動力学(MD)計算へ
- ◇ 「 π -電子と Na^+ イオンとの相互作用」へ応用
- Na^+ - π 相互作用を正確に記述したMD計算を初めて実現
- 自由エネルギー計算による評価
- **触媒部位の立体構造**を初めて決定

J. Am. Chem. Soc., 131 (2009), 16697-705.

ハイブリッドQM/MM MD 計算システムを開発

- 立体構造と電子構造のダイナミクス
- 酵素触媒反応のメカニズムを解析
- 自由エネルギー計算による評価
- ダイナミカルな電子構造の変化
- ◇ 新しい生体触媒分子種である「**ハイブリッド酵素**」を初めて発見
- RNAとタンパク質が直接共同して反応する初めての生体システム!

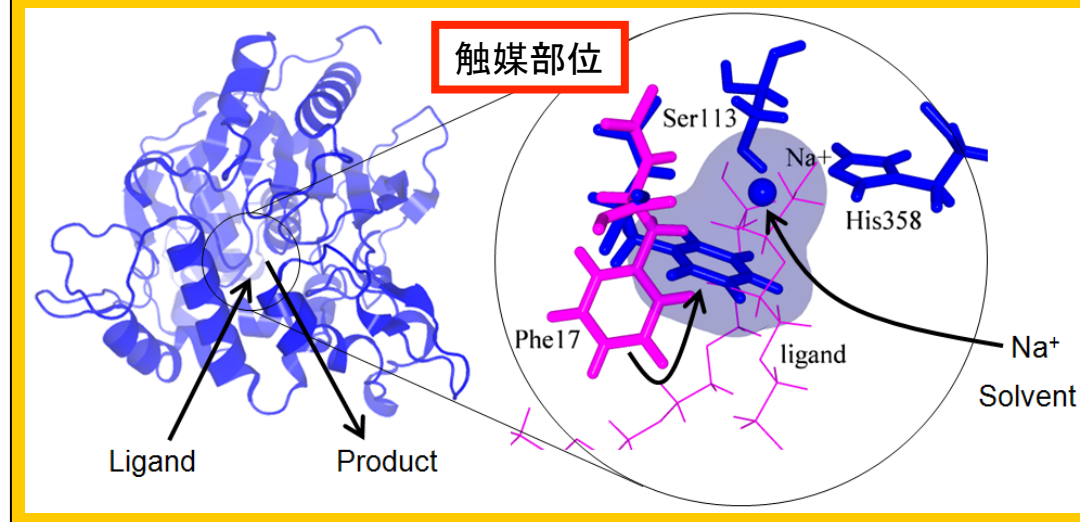
J. Comp. Theor. Nanosci., 6 (2009), 2648-55.

掲載号のCover Imageに

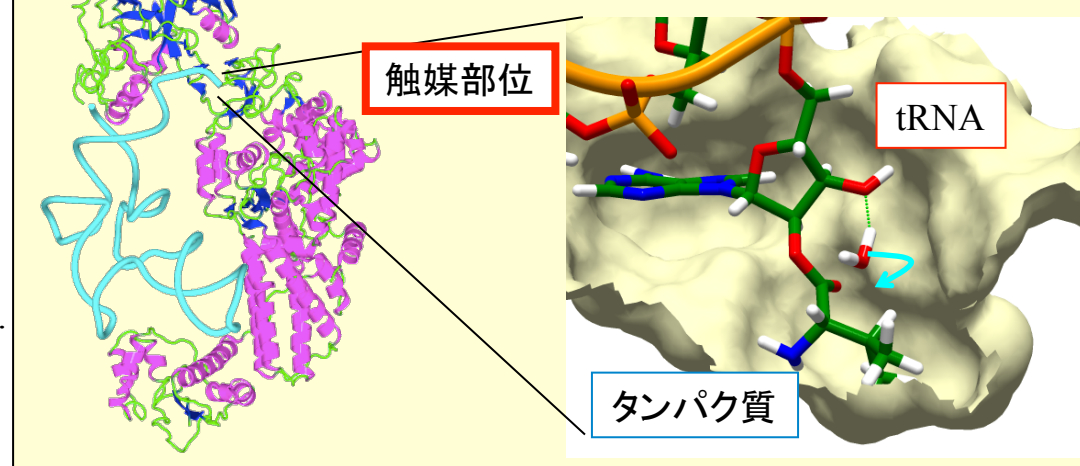
J. Am. Chem. Soc., 132 (2010), 2751-58.

朝日, 読売, 毎日(全国版)などに紹介記事

T1リパーゼの触媒部位の立体構造の決定



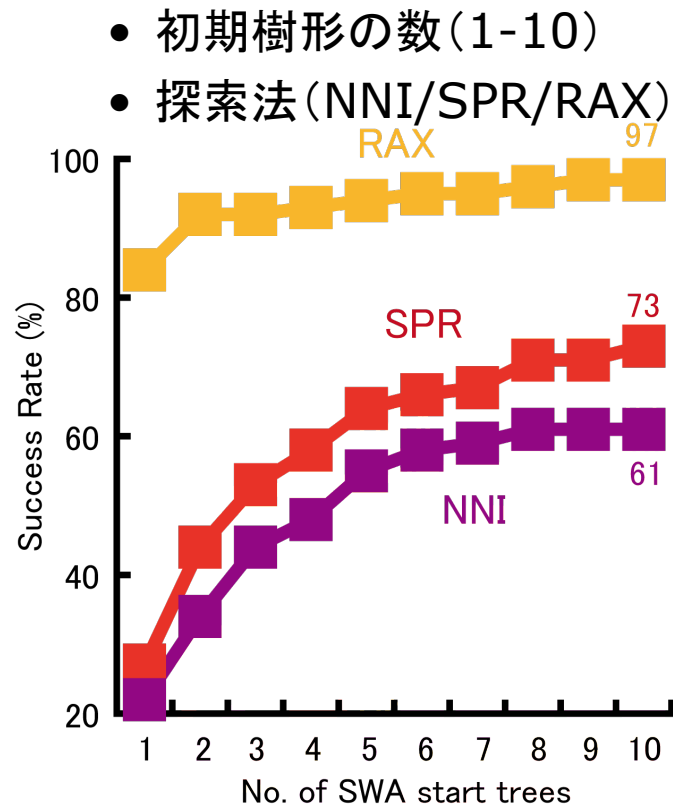
ハイブリッドQM/MM分子動力学計算による生体反応機構の解析



計算機科学との共同による分子進化系統樹探索の進展

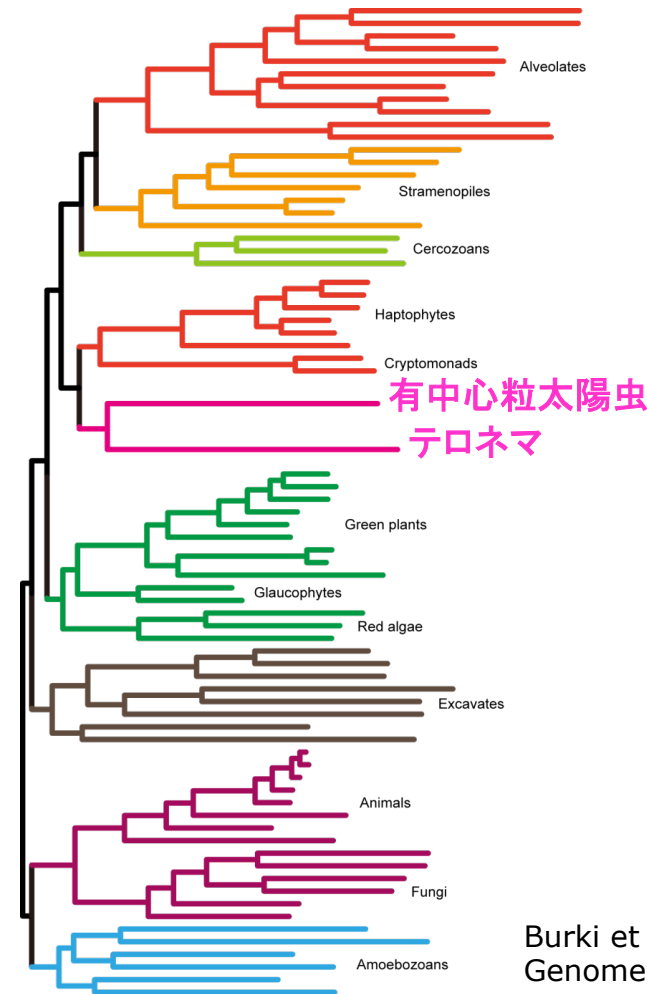
- 202万樹形中から網羅的に「真」の系統樹を選んだ

- 発見的探索から得られた系統樹との比較



- NNI/SPRの探索効率が予想以上に悪い

- 127遺伝子データの解析により、テロネマ類と有中心粒太陽虫類の系統的位置を解明した

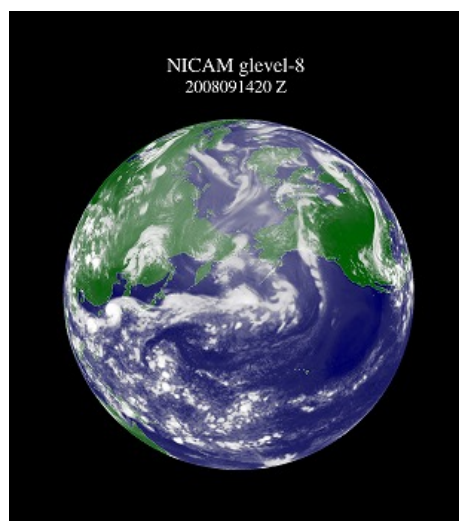
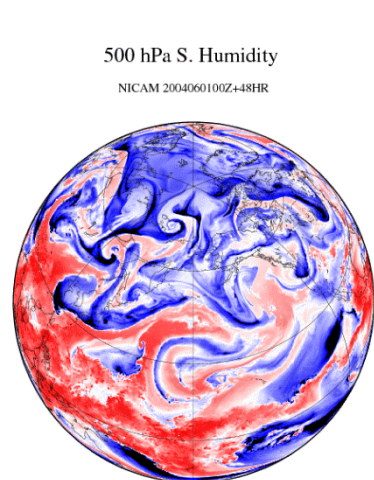


Burki et al. (2009)
Genome Biol Evol
1:231-8

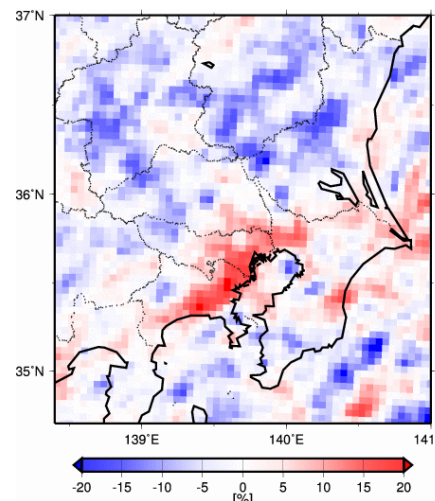
地球環境研究部門の主な研究成果

- 全球雲解像モデルNICAM(最大で水平分解能7km)をPACS-CS・T2Kに移植し実行可能にした。ES以外ではCCSのみ。
- 温帯低気圧・梅雨前線・ブロッキング・北極低気圧・熱帯低気圧の研究に応用。北極温暖化研究の推進に利用。(田中)

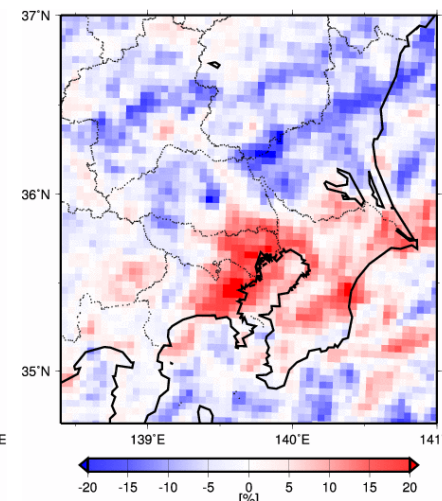
- 領域気候モデルWRF(水平分解能4km)を利用。2001年～2008年の8月を対象としたシミュレーション。
- 降水量の増減率 = (都市がある場合のシミュレーション結果とない場合の結果の差) / 都市がある場合の結果。(日下)



梅雨前線・北極低気圧の数値実験。右は水蒸気量のアニメ。左は雲画像の再現実験。これらの成果はPACS-CSを用いて行われた。



都市の設定を低層住宅地とした場合



都市の設定を高層ビルとした場合

PACS-CSとT2Kを利用。長期間・アンサンブルの数値実験で示したのは世界初。

スタートするまで



CP-PACSプロジェクト(1992-1996)

- 我が国初めての大規模汎用超並列型スーパーコンピュータ
 - スカラプロセッサだが擬似ベクトル機能
 - 柔軟・高性能なネットワーク



- 物理学と計算機工学の共同作業
- 大学とメーカ(日立)の産学連携(日立の商用機SR2201、SR8000へと発展)



CP-PACS開発チーム

- 基礎物理(素粒子、宇宙)でブレークスルー
 - モデルではない、第一原理(基本方程式)からの近似なしの計算
 - 場(流体、電磁場、波動関数など)による自然記述一般に通ずる汎用性



CP-PACS(1996)からPACS-CS(2006)へ

平成4年度 計算物理学研究センター設置(10年時限)

平成8年度 CP-PACS 運用開始

100Tflopsマシン構想

平成14年度 計算物理学研究センター時限更新(計算生命部門設置)

練り直し

平成16年度 国立大学法人化
計算科学研究センターへの改組・再編

平成17年度 PACS-CSプロジェクト開始

平成18年度 PACS-CS 運用開始



100Tflopsマシン構想(平成11年~13年)(I)

□ センター将来計画の検討(平成11年度)

- センター外部評価の実施(11年11月) 8名の評価委員により英語で実施
- 計算物理の重要課題と計算量の検討 素粒子・宇宙・物質・生命

□ Post CP-PACSマシンに向けての計算機科学の研究

- メモリ混載プロセッサ
 - メモリをチップ上に搭載し、メモリバンド幅問題を軽減
 - 未来開拓プロジェクト「次世代超並列計算機の開発」での研究(平成9年度~13年度・総額5億円) SCIMA アーキテクチャ
- 異機種結合型計算機 HMCS
 - 汎用プロセッサと専用アクセラレータを結合
 - 未来開拓プロジェクト「次世代超並列計算機の開発」による実証研究(CP-PACS/GRAPE-6結合システム)

100Tflopsマシン構想(平成11年~13年)(I)

□ センター将来計画の検討(平成11年度)

- センター外部評価の実施(11年11月) 8名の評価委員により英語で実施
- 計算物理の重要テーマの抽出と計算量

1999.12.01

今後の計算物理学の重要テーマと計算量

Report of the Review

1. Introduction

Representing the review team were Columbia University, Prof. Jack Dongarra, Masaaki Shimasaki, Kyoto University, Sugimoto, University of The Air, Prof. National Institute for Advanced Interdisci-

Presenting from the Center for Computational Physics, Yoshiie, Kazuyuki Kanayama, Masayuki U-

The day began with an overview of the described work in the Center and interdisci- some issues to be explored more fully. Some of the investigators in written material and j-

	分野	テーマ	計算アルゴリズム	実効スピード (Tflops)	問題規模	CPU 時間	主記憶容量
1	素粒子	格子QCD	HMC法	131	48 ³ x96	409 days	176GB
2	原子核	原子核の性質	量子モンテカルロ法	100	Carbon with A=12	14 days	150GB
3	宇宙	輻射宇宙流体力学	SWT法	131	128 ⁵ x6	9.2 hoursxフレーム数	114GB
4	材料科学	半導体材料の表面物性などの決定	密度汎関数法	100	原子数 2000	127 days	115GB
5	生科学	生体化学反応の電子論的理解	第一原理分子動力学経路積分法	80	原子数 5000	100 days	288GB
6	生科学	蛋白質の3次元構造 高次機能	分子動力学法	100	アミノ酸 200	1300 days	50GB

100Tflopsマシン構想(平成11年~13年)(II)

□ 実現のための準備

- メーカーとの検討
(平成11年秋~12年秋)
- 理研との共同提案の検討
(平成11年秋~13年秋)

□ 概算要求

- 平成12年夏(13年度要求)
 - 筑波大(文部省)・理研(科技庁) 特別枠で省内検討
- 平成13年冬・春・初夏(14年度要求)
 - 筑波大・理研間で調整どまり

平成14年になると、国立大学法人化と計算科学研究センターへの改組再編の準備に忙殺される...



練り直し(平成15年度)

平成15年	7月	計算科学研究センター設置概算要求作業一段落
平成15年	6-8月	CP-PACS後継機の基本仕様再検討(朴・佐藤・宇川)
平成15年	12月	平成16年度の計算科学研究センター発足内定
平成16年	1月	平成17年度概算要求に向け学術機関課と初折衝
	4月	計算科学研究センター発足
	6-8月	学術機関課と概算要求折衝(特別教育研究経費)
	9月	総合科学技術会議によるヒヤリング
	10月	総合科学技術会議の評価公表(A相当)
	12月	平成17年度政府予算案に盛り込まれる
平成17年	4月	事業発足



平成15

平成15

平成15

平成16

平成17

る。従って、クラスタ計算機には、計算物理学への具体的応用を念頭に置きつつ計算機工学の観点から研究開発を行うことにより、現状のシステムより遥かに高い性能を発揮するシステムを開発することが可能である。

1-3. 本計画の目標

以上の状況に鑑み、本計画の目的とするところは、コモディティのプロセッサ及びネットワークを用いて、計算物理学の計算に高い実効性能と柔軟性を発揮し、性能価格比に優れたクラスタ型の超並列計算機を開発製作し、それを用いて計算物理学、特に計算素粒子物理学と計算宇宙物理学の重要課題の解決を図ることである。

本計画においては、ピーク演算性能 12TFLOPS のクラスタ型計算機を、コモディティ技術を活用して、2年間の短期間で開発・製作する。この性能は、現在、計算素粒子物理学分野や計算宇宙物理学分野で専ら用いられている計算性能の約 10 倍であり、研究の飛躍的な進歩が期待される。即ち、素粒子物理学分野においては、up, down, strange の 3 つの軽いクォークを全て近似なく扱った格子 QCD のシミュレーションにより、素粒子の標準理論が最終的な解決に大きく近づく。又、宇宙物理学においては、宇宙輻射流体力学のシミュレーションにより、宇宙天体諸階層の形成、特に宇宙の再電離と銀河の形成過程の解明が期待さ

による

..... 2

..... 2

..... 3

..... 4

..... 5

..... 5

..... 6

..... 7

..... 7

..... 9

..... 9

..... 10

..... 11

もたらしたものの

直接的インパクト

- 計算科学と計算機科学の一体的追求の発展
 - 素粒子・宇宙分野－高性能計算システム分野
 - 既存の大きな実績と成果を基礎に、一層の発展を実現
 - 物質・生命分野－高性能計算システム分野
地球・生物環境分野－計算情報学分野
 - 計算機科学分野との初めての共同研究を行い、高性能計算技術やデータ工学の持つポテンシャルをフルに生かした成果を実現
 - 科学と計算機科学にまたがる共同研究体験を共有する研究者グループを育成し、一層の発展の基盤を形成
- ● データ工学をフルに活用した国際的なデータグリッドの構築と運用(ILDG)等
- 「京」コンピュータプロジェクトにおける実空間密度汎関数法による物質材料研究への発展等

より幅広い視点から

- 計算科学と計算機科学の融合の必要性の幅広い認識と浸透
 - 理研計算科学研究機構(2010年7月神戸に設立)
 - 「京」コンピュータの運用
 - 計算科学と計算機科学の共同が中心概念
 - HPCIコンソーシアム(平成22年7月～) 国内38機関
 - ユーザコミュニティ代表機関(計算科学)13機関と計算資源提供機関(計算機科学)25機関が共同して計算科学技術を推進
 - 国によるエクサスケールコンピュータの検討(平成23年5月～)
 - アプリケーション作業部会(計算科学)とアーキテクチャ作業部会(計算機科学)が合同で検討しロードマップを作成予定

- “学際計算科学”の概念(concept by 佐藤三久)

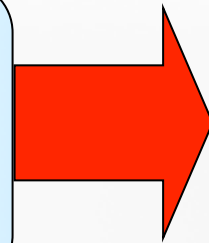
CCS's Vision : 「学際計算科学」の国際的拠点

計算科学は、21世紀の科学技術を牽引する最先端・最重要分野の一つ

- 自然・人間・環境のグランドチャレンジを解決する鍵としての計算科学
- これを実現する、科学と計算機科学・情報科学の融合
- 計算科学を連携軸とする、科学全般に対する俯瞰的視野を持つ人材の育成

これまでの「計算科学」

- 個々の分野の一部としての「計算科学」
- 個々の短期的なプロジェクトとして推進
- 「大計センター」等の計算機施設を利用



学際計算科学へ

- 計算科学諸分野と計算機科学の融合・連携
 - 計算科学のための計算機システムは、大規模化、多様化。使いこなすためには高性能計算技術が不可欠
 - 次世代、次々世代の計算科学を可能にする持続的な計算技術・計算機システム・計算科学応用の研究開発が必須
- 計算科学の分野を包括的に捉える
横糸としての計算科学が必要
 - 大規模数値解析を共通軸とする計算科学の方法は、科学諸分野を分野横断的に捉えることが可能

今後に向けて

“予測の科学”としての計算科学と、それを可能とする“計算機”は、人類の持つ最大の知恵のひとつ

科学技術にとどまらず人類の幸福のために、その重要性が今後一層増大することに疑問の余地はない

しかし、その発展には、その時々、大きな努力・協力と、新たな創意・工夫を必要とする

計算科学研究センターが、今後も、そのような発展を先導し、貢献することを期待する