

# 計算科学の世界

京がつくる時代

K computer Newsletter  
October 2011

No.1



Interview **世界一の  
計算性能達成の  
核心**



ニュースレター  
創刊!



独立行政法人理化学研究所  
計算科学研究機構

現在開発中の「京」(2012年6月完成予定)





計算科学研究機構  
機構長 平尾公彦

Kimihiko Hirao

Message from the Director

機構長あいさつ

# 世界に誇れる 計算科学の 拠点をめざして

「京」の共用開始を来年秋に控え、私たちは、運用制度や研究環境の整備に全力をあげています。計算科学研究機構は計算科学の拠点の中核となり、共同研究を推進するとともに、研究者と情報の行き来を円滑にする役割を担っています。「京」のシミュレーション能力を広く活かすため、すでに5つの分野で「戦略プログラム」が立ち上がっており、多くの大学・研究機関が参加しています。

まず「分野1：予測する生命科学・医療および創薬基盤」では、タンパク質、細胞、臓器といったさまざまなレベルで生命現象を理解し、医療や創薬につなげていきます。次に「分野2：新物

質・エネルギーの創成」では、物質が示す性質を予測し、新しい量子相の発見や、レアメタルの代替材料、エネルギーを効率的に生み出す新素材などの開発につなげます。「分野3：防災・減災に資する地球変動予測」では、気候変動の影響と、地震時の津波や建物被害などを予測し、防災対策に役立てたいと思っています。一方、「分野4：次世代ものづくり」は、より優れた製品の設計・生産にシミュレーションを活かし、産業界の国際競争力の強化に貢献するのが目標です。最後の「分野5：物質と宇宙の起源と構造」は、宇宙137億年の歴史の解明や物質の究極である素粒子研究に挑みます。

「京」を使ってこのような「計算科学」の研究を進めるには、「京」の威力を最大限に引き出す「計算機科学」の研究が欠かせません。計算科学、計算機科学の研究者の連携を図るのも、私たちの役目です。

また、研究テーマの中には、気候変動をはじめ、本国だけで解決することが難しい課題もたくさんあります。そこで、私たちと同様にスーパーコンピュータの開発と利用を進めている世界各地の大学・研究機関と連携し交流を深めています。将来は、アジアのリーダーとしての役割も求められると考えています。

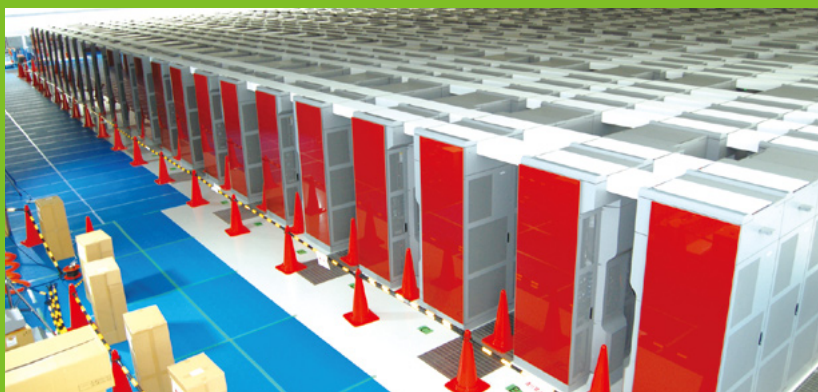
「京」が研究者にとって魅力ある施設となり、科学技術の広範な分野において活用されることが何よりも重要です。分野、組織、国境を越えて多くの研究者が集い、その交流の中から有用な情報を得ることで研究は加速されます。

そして、このような連携は、将来のエクサスケールスーパーコンピュータ（「京」の100倍の性能）の構築にも活かされるはず。計算科学、計算機科学の連携によるCo-Designでエクサスケール時代のスパコンの開発研究も推進したいと考えています。

このニュースレターを通じて、私たちの活動を知り、応援していただければ幸いです。

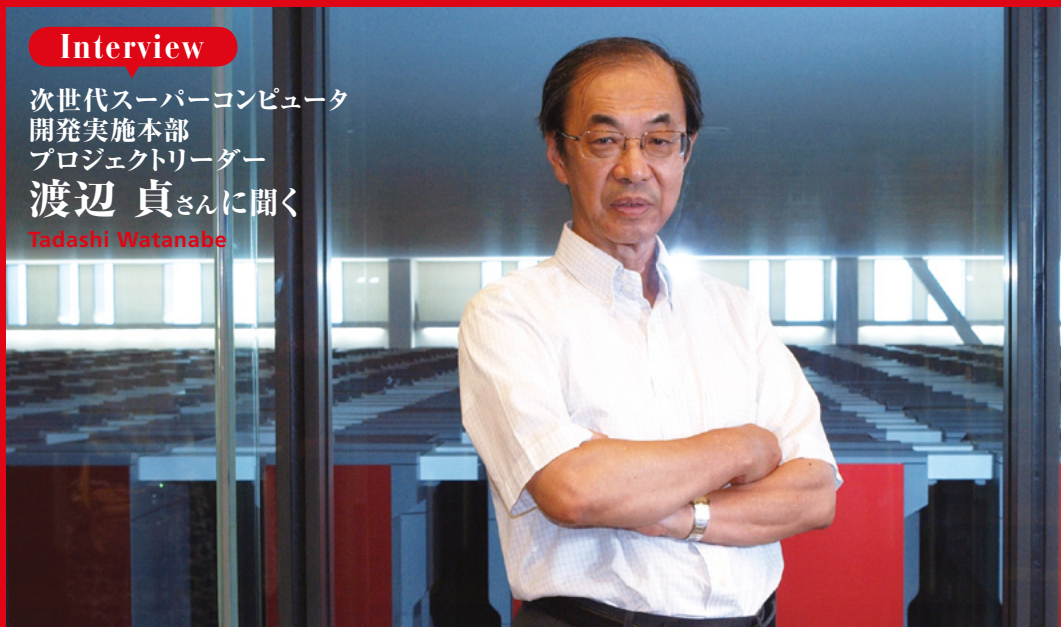
## 「京」 とは

「京」は、理研と富士通が共同で開発中のスーパーコンピュータで、2012年秋に本格的に運用が始まる予定です。本運用開始時には、1秒間に1京回（1京は1兆の1万倍）という世界最高レベルの計算性能が実現し、科学技術の多くの分野で活用されると期待されています。



## Interview

次世代スーパーコンピュータ  
開発実施本部  
プロジェクトリーダー  
渡辺 貞さんに聞く  
Tadashi Watanabe



「京」は、今年6月、完成前にもかかわらず、「TOP500」※1において世界一の計算速度を達成しました。現在、本格稼働に向けて最後の調整が急ピッチで進められています。群を抜く「京」の計算性能は、どのようにして実現されたのでしょうか。2006年のプロジェクト発足以来、開発を牽引してきた渡辺さんに、お話をうかがいました（世界一達成については、裏面の「『京』のあゆみ」で詳しく説明されています）。

## システムの調和が生み出す高い性能

# 世界をリードする「京」の開発

## 計算の速さと汎用性を両立

スーパーコンピュータは、計算を多くのCPU(中央演算処理装置)に分けて行わせることで、計算速度を上げています。「京」は、完成時には8万個以上ものCPUを備える予定ですが、世界一の計算速度は、その約8割を使っ

て達成されました。

「京」の特徴は、CPUの数だけでなく、質にもあります。「『京』は、特定の用途に限定せず、広く使えることをめざして開発が始まりました。そのために、GPU(グラフィックプロセッ

ングユニット)などの特別なアクセラレータ(計算を加速させる装置)を使うのではなく、汎用のCPUを新たに開発したのです」と、渡辺さんは強調します。

他に類を見ないほど信頼性が高いのも、「京」の特徴です。「『京』はTOP500の性能テストで28時間一度も止まることなく稼働しました。自動車のF1レースに例えると、最初から最後までトップスピードで走り続け、その間一度もメンテナンスのためのピットインをしないようなものです」と渡辺さん。安定した動作を実現できた背景に

### 6次元メッシュ/トーラス構造ネットワーク(Tofu)の概念模型

一つひとつのCPUが黒い球で表されている。直方体状の配置で結合した12個のCPUが1単位となり、直方体内の各CPUは、6方向(上下左右前後)に隣接する直方体内の同等位置にあるCPUと結ばれている。各方向のルートはリング状に閉じており、これをトーラスという。この構造のおかげで、CPU間のデータ転送をより速くすることができる。



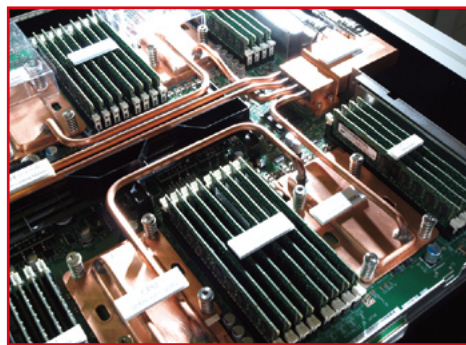


は、CPUの信頼性の高さがあります。

CPUは、動作する温度を下げると故障が起こる率が低くなります。そこで、CPUが配置されているシステムボード上に冷水が通る銅管を設置して、動作時に発生する熱を取り除き(水冷方式[右図])、CPUの動作温度を30°Cに

#### システムボード

銅管に冷水を通し、CPU(銅板の下にある)を冷やす水冷方式がとられている。



保っています。さらに、CPU自体に信号の間違いを自動的に訂正したり、命令の実行をやり直す機能をもたせ、信頼性を高めました。

## 先端技術の結晶、「京」

汎用システムである「京」は、多くのアプリケーションで高い計算性能を出すことが求められます。システム自体の実行効率<sup>※2</sup>が高ければ、アプリケーションの実行効率も高くなり、高い性能を発揮すると期待されます。「京」はTOP500の性能テスト計算で93%という圧倒的な実行効率を達成しました。その鍵となったのは、新たに開発したCPUですが、ほかにも、システム全体のボトルネック(効率の悪い箇所)を解消するためにさまざまな技術が結集されています。

その1つとして、CPUのつなぎ方(ネットワーク)の開発があります。「京」では多数のCPU間でデータをやり取りしながら計算するので、実行効率を上げるには、データ転送距離をできるだけ短くすることが不可欠です。そのため、『京』のCPUは6次元メッシュ/トラスという革新的な構造で結合し、ネットワークをつくっています(左図)と渡辺さん。これにより、通常の3次元トラスに比べて短いルートでのデータ転送が可能になりました。このネットワーク構造は、「京」でいくつかの計算を同時に行う際、空間的に近いCPUをつないで1つの計算を行わせるのに適しています。

また、計算時には、「京」本体と、データを保存するファイルシステムの間でも、大量のデータがやりとりされます。このやりとりを効率的に行うため、ファイルシステムは、計算途中のデー

タを置くローカルファイルと、計算が終了したデータを保管するグローバルファイルとに分けてあります(下図)。

一方、「京」は消費電力が非常に小さいことも魅力です。CPUを低温で動作させるために漏れ電流が少なくなることや、必要でない回路には電流を流さないという工夫などにより、スーパーコンピュータの省電力ランキング「Green500」では世界6位にランクインしました。これは実用の汎用システムとしては世界一の省電力性能です(「京」より上位はすべて試作機、もしくは特別なアクセラレータがついたシステム)。

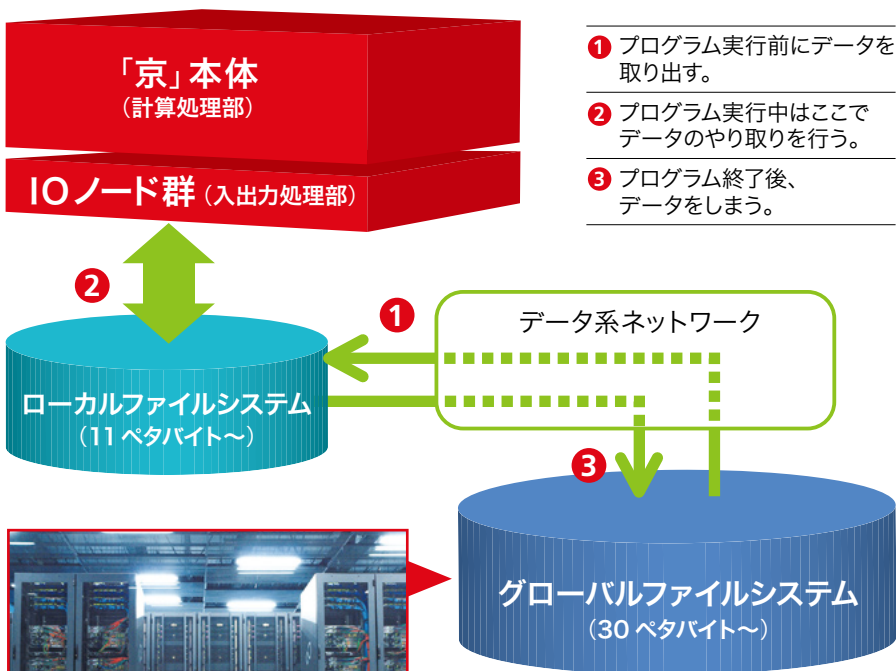
渡辺さんは「重要なのはシステム全体のバランスです。『京』のシステム構成は、各分野の専門家を集め、白紙の状態から1年近くかけて練り上げました」と、プロジェクト開始のころの苦労を語ります。「京」の優れた性能は、最先端の技術の数々と、その調和によって生み出されているのです。

(取材・構成 那須川真澄)

#### <注>

※1 巨大な連立一次方程式を解く速度を測定する「LINPACK」というプログラムの結果をランキングするもの。毎年2回(6月と11月)、公表されている。

※2 理論上のピーク性能に対する実効性能(実際に計測された性能)の割合。



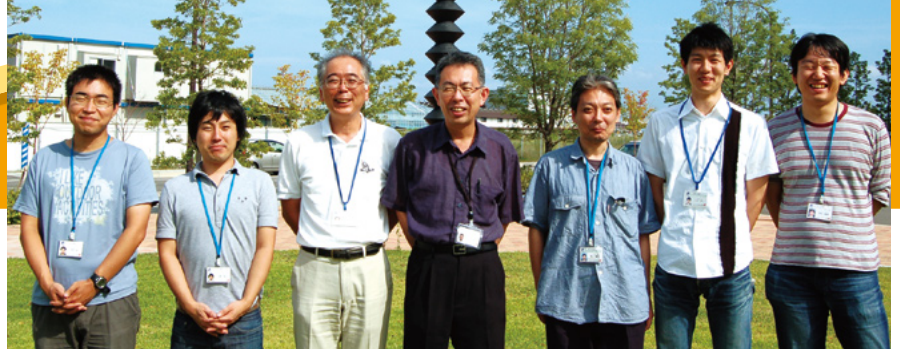
- 1 プログラム実行前にデータを取出す。
- 2 プログラム実行中はここでデータのやり取りを行う。
- 3 プログラム終了後、データをしまう。



グローバルファイルシステム

#### 「京」の全体像

「京」は、3階建ての計算機棟に設置されている。3階には、計算処理を行う本体(8万個以上のCPUからなる)とローカルファイルシステムが、1階には、グローバルファイルシステムが置かれている。



石川裕チームリーダー(中央)とチームのメンバー

### システムソフトウェア 研究チーム

私たちは、「京」に最大限の性能を発揮させるためのシステムソフトウェアの開発に取り組んでいます。「システムソフトウェア」とは、ハードウェアをうまく管理してシステムとしてのスーパーコンピュータを動かすためのものです。みなさんが使うパソコンでいえば「Windows 7」「Mac OS X」などにあたります。

多くのCPUをつないで情報のやり取りをしながら同時に計算を進めていくのが、「京」のようなスーパーコンピュータの特徴です。CPUが増えると、

CPU間の通信やメモリへのアクセス、ハードディスクへの大量かつ同時に起きる読み書きなどにかかる「計算とは無関係な時間」が無視できなくなります。システムソフトウェアを改善することで、この計算とは無関係な時間を減らすことができます。しかし、システムソフトウェアは、自分自身の動作の一部が計算とは無関係な時間に計上されてしまうという、非常にデリケートなものでもあります。このため、必要かつ最低限のシステムであることが求められます。さらに、コンピ

ュータは「故障するもの」です。もし、どこかで障害が発生してもスーパーコンピュータ全体の機能をきちんと維持できるように、故障に耐えられるしくみをシステムソフトウェアの中につくすることも非常に重要です。

「京」のようなスーパーコンピュータに向けた新しいハードウェアの管理は、今まで通りの方法では通用しないことも多々あります。そうした困難を、システムソフトウェアでどうやって乗り越えようかと新しく考えていくのは、とても大きな喜びです。(今田俊寛)

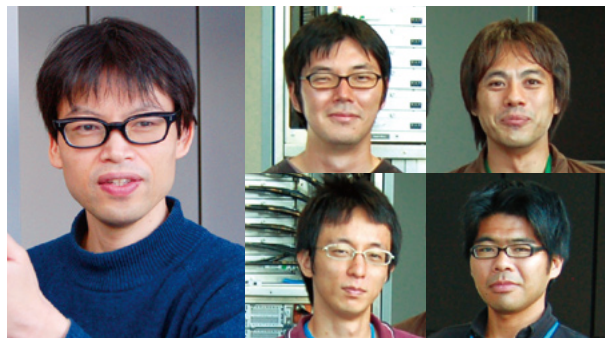
### 量子系分子科学 研究チーム

当研究チームでは、大規模で複雑な分子の「電子状態」を高速に計算するための分子理論とそのプログラム開発を行っています。

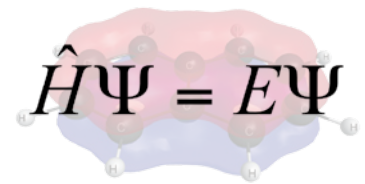
私たちの周りにはさまざまな物質があり、それぞれ多彩な機能や性質をもっています。これを決めるのは、物質を構成する分子の性質です。分子は、水素や炭素、鉄といった原子が結合し

たもので、原子はさらに原子核と、その周りの電子からできています。電子のふるまい、すなわち「電子状態」を調べると、物質の機能や性質を説明したり、予測したりすることができません。分子の電子状態を調べることで分子のいろいろな問題を解明しようとする研究分野は「理論分子科学」と呼ばれ、分子の研究では今や不可欠になっています。

電子状態は、ミクロの世界の基本方程式であるシュレーディンガーやディラックの波動方程式を解けばわかります。しかし、一見簡単なこの式を完全に解くのは非常に難しく、適切な近似が必要です。これまで扱えなかった複雑で大きな分子の電子状態を、「京」を使って明ら



中嶋隆人チームリーダーとチームのメンバー



波動方程式を解いて分子の電子状態を明らかに

かにするために、波動方程式をコンピュータで解くための種々の手法やソフトウェアをつくり出して多くの研究者に使ってもらうのが私たちの目標です。生命や物質の諸問題を、理論分子科学の手法と「京」を使って切り拓いていきたいと思っています。

理論分子科学は、波動方程式を出発点としてコンピュータを道具とする秩序だったアプローチです。多種多様で、無秩序のかたまりともみえる分子の問題が、このような論理的で系統的な研究手法で解明できてしまうところが、理論分子科学の面白さではないかと感じています。(秋永宣伸)





# 「京」の あゆみ

## 番外編

このコラムでは、「京」の開発の歴史をご紹介します。その前に今号では、今年6月のInternational Supercomputing Conference (ISC)で、「京」がスーパーコンピュータ性能ランキングTOP500<sup>※1</sup>の第1位を獲得したようすをお伝えします。

### TOP500の上位10位

順位	名称	国名	実効性能 (PF)	ピーク性能 (PF)	実行効率	電力 (kW)	実効性能/電力 (MF/W)
1	「京」	日本	8.16	8.77	0.93	9898.56	824.56
2	天河1A	中国	2.56	4.70	0.55	4040.00	635.15
3	Jaguar	アメリカ	1.75	2.33	0.75	6950.60	253.07
4	星雲	中国	1.27	2.98	0.43	2580.00	492.64
5	TSUBAME2.0	日本	1.19	2.28	0.52	1398.61	852.27
6	Cielo	アメリカ	1.11	1.36	0.81	3980.00	278.89
7	Pleiades	アメリカ	1.08	1.31	0.83	4102.00	265.24
8	Hopper	アメリカ	1.05	1.28	0.82	2910.00	362.20
9	Tera-100	フランス	1.05	1.25	0.84	4590.00	228.76
10	Roadrunner	アメリカ	1.04	1.37	0.76	2345.50	444.25

PF: ペタフロップス、MF: メガフロップス

ISCはスーパーコンピューティングに関する国際会議で、毎年ドイツで開催されています。TOP500の発表だけでなく、研究発表、企業や研究機関による展示などが行われる一大イベントです。今年は、昨年に引き続きハンブルクのCongress Center Hamburgにおいて6月19～23日の日程で開催され、2000人を超える人が参加しました。

20日のオープニングセッションで第37回目のTOP500リストの発表があり、8.162ペタフロップス<sup>※2</sup>の性能を達成した「京」が第1位を獲得しました。ちなみに上位10位は表の通りです。

今回の「京」の世界一獲得にあたっては、



展示を見る来場者

- ・2位の3倍以上という圧倒的な実効性能
- ・93%という他の追随を許さない高い実行効率<sup>※3</sup>
- ・28時間の高負荷連続稼働が可能な高耐久性(上位の他のコンピュータでは2～20時間程度)
- ・世界最高水準の低消費電力性

などが高く評価されました。「京」は2012年秋の運用開始に向けて開発途上にあり、これらの成果は、68,544個のCPUを用いた部分システムによって達成されたものです。

また、計算科学研究機構の展示ブースには、「京」のCPUの製造に使われる円盤状の半導体ウェハと、「京」の重要な部品であるシステムボードが展示され、「京」や計算科学研究機構の活動に興味をもつ多くの方でにぎわいました。

「京」の部品の中には、今年3月11日に起きた東北地方太平洋沖地震で被災した東北地方の工場で製造されているものもあります。被災後の大変厳しい状況の中、「京」の部品製作を遂行し



TOP500の表彰式

てくださった各企業のご尽力なくしては、今回の成果を達成することはできませんでした。関係者の皆様に心より感謝いたします。

さて、次回からは、「京」開発の歴史を、プロジェクトの始まりから順にお話ししていきます。

(次世代スーパーコンピュータ開発実施本部  
開発グループ 村井均)

※1、※3 渡辺氏インタビューの注参照。

※2 フロップスは1秒間に行う計算の回数を表す単位。ペタは10の15乗。