

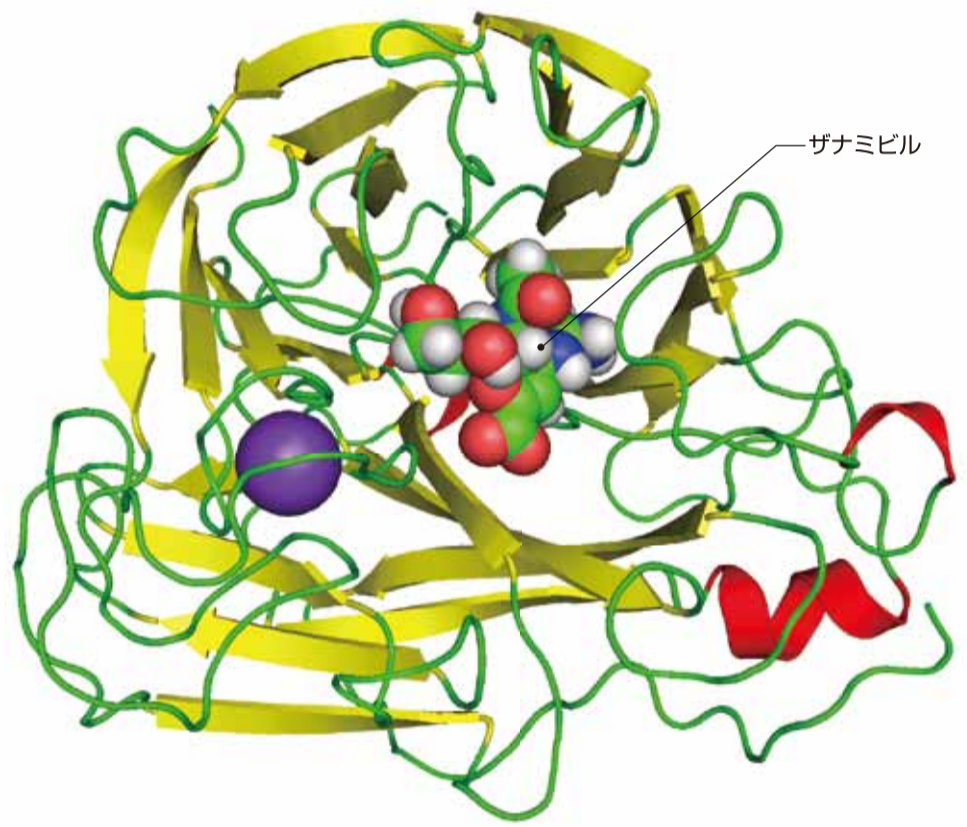
並列型スパコンでは、計算ノード数を増やすことでより大規模な計算を実行できるようになります。そのとき計算を大きくするやり方には、大きく分けて2つのタイプがあります。1つは、問題の「大きさ」を大きくして同じ速さでの計算をめざすやり方で、これを「弱いスケーリング性能」と呼びます。もう1つは、同じ大きさの問題をより速く解くことをめざす場合です。これを「強いスケーリング性能」と呼びますが、こちらはより実現が難しくなります。私たちは強いスケーリング性能の実現のため、プロセッサという観点でソフトウェア・ハードウェアの両面から問題に取り組み、京の高度利用および今後のスパコンの基礎を築くことをめざしています。



チームリーダー
泰地真弘人 (たいじ・まこと)

「強いスケーリング」が必要な計算とは

計算ノード数を増やすことで同じ大きさの問題をより速く解くことができる性能を「強いスケーリング性能」と呼びます。強いスケーリング性能が求められる計算の代表例は、タンパク質の分子動力学計算です。この計算では、分子の中の原子を、ニュートンの運動方程式に従って少しずつ動かしていきます。前の計算結果が出ないと次の計算ができないので、計算ノード数を増やしても高速化が困難です。また、「京」の計算ノードは8万個もありますが、タンパク質分子をあまり細かく分けて計算しても、高速化は達成しにくくなります。

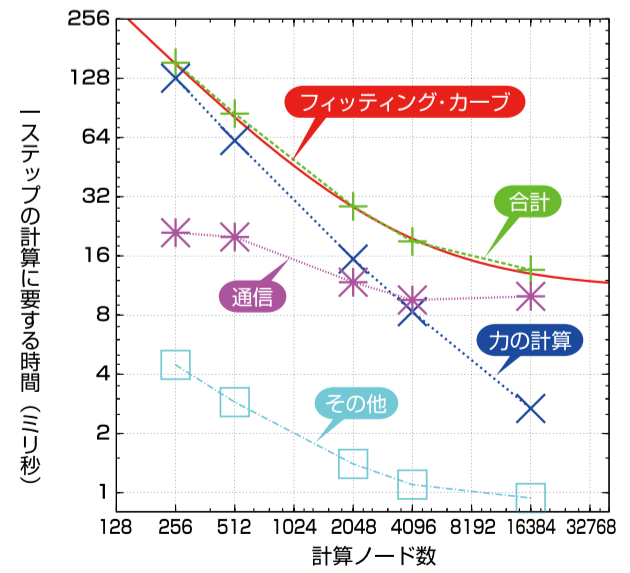


インフルエンザウイルスが感染する際に働くタンパク質(ノイラミニダーゼ)と、その動きを抑える薬(ザナミビル)が結合した複合体の構造。分子動力学計算で時間変化を計算したうちの一場面。

プロセッサという観点から、並列型スパコンの問題解決を図る

プログラムの最適化

強いスケーリング性能を追求していくと、ある計算ノードが、ほかの計算ノードからのデータを待っているために働けない「未並列」の状態にある比率が大きくなってきます。未並列の計算ノードの割合をできるだけ低く抑えるため、プログラムを最適化する必要があります。



160万個以上の原子からなる系の分子動力学計算を既存プログラムで行ったところ、未並列の計算ノードは0.03%だった。この割合では、計算ノードが4000個程度で計算速度が頭打ちになってしまう。

新たなプロセッサの開発

システム・オン・チップ技術により、汎用コア、加速コア、メモリ、ネットワークなどをすべて1つの半導体チップに搭載したプロセッサを開発しています。これにより、不必要な遅れを減らして計算を加速します。加速コアの部分には、計算の種類に応じて調整することができます。

