

これからのライフサイエンス分野のシミュレーション：
次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクトにおける
ライフサイエンス・グランドチャレンジ

理化学研究所
姫野龍太郎

最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用
- 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト -

平成19年度概算要求額：8,700百万円
(平成18年度予算額 3,547百万円)
平成18年度～平成24年度

目的：世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータの開発・整備及び利用技術の開発・普及

趣旨および効果：

理論、実験と並び、現代の科学技術の方法として確固たる地位を築きつつある計算科学技術をさらに発展させるため、長期的な国家戦略を持って取り組むべき重要技術(国家基幹技術)である「次世代スーパーコンピュータ」を平成22年度の稼働(平成24年の完成)を目指して開発する。

今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるべく、

- (1)世界最先端・最高性能の「次世代スーパーコンピュータ(注)」の開発・整備 (注)10ペタFLOPS級
- (2)次世代スーパーコンピュータを最大限利用するためのソフトウェアの開発・普及
- (3)上記(1)を中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点(COE)の形成

を文部科学省のイニシアティブにより、開発主体を中心に産学官の密接な連携の下、一体的に推進する。



次世代スーパーコンピュータのイメージ

平成19年度事業内容

平成19年度は、平成18年度概念設計の結果を受け、次世代スーパーコンピュータのシステムの詳細設計、研究開発等を実施する。

- ・ハードウェア(LSI等)の設計・研究開発
- ・ソフトウェア(OS、ミドルウェア、アプリケーション)の設計・研究開発
- ・建屋の設計・建設等

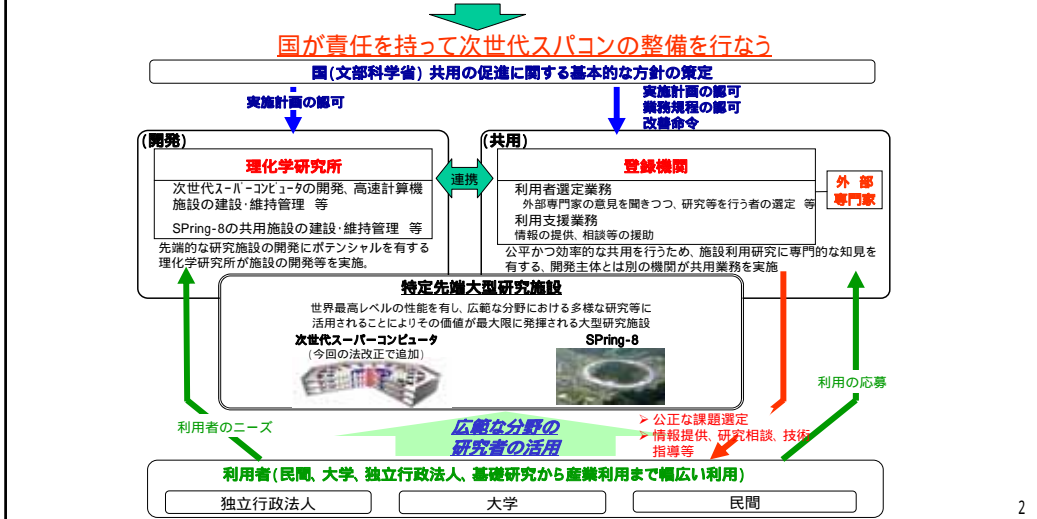
整備・運用体制

- ・計算機システムとソフトウェアの開発を一体的に推進。
- ・開発主体である独立行政法人理化学研究所を中心としたオールジャパンの産学官連携体制を構築。
- ・産学官に広く開放し、基礎研究から産業利用まで幅広く共用するために、新たな法制(特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律)を整備。1

特定先端大型研究施設の共用の枠組み

「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」:

「重複して設置することが多額の経費を要するため適当でないと認められる大規模な研究施設であって、先端的な科学技術の分野において比類のない性能を有し、科学技術の広範な分野における多様な研究等に活用されることにより、その価値が最大限に発揮される」(第2条) 先端大型研究施設の共用を促進する。



次世代スーパーコンピュータ研究開発スケジュール

年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度	平成23年度	平成24年度
開発項目	マネジメント体制 開発ターゲット 計算機システムの 構成等		設計本格化 仕様・実装内容の判断 (概念設計内容、開発体制、 採用する半導体プロセスの決定等)	外部評価により 設計内容の適否を判断 立地・運用方針、 採用する半導体プロセスの決定等)	研究開発状況 評価(システム性能 機能等)	COE形成、運用評価 (利用状況、研究成果、 人材育成状況等) :総合科学技術会議による評価等	
システムソフトウェア	基本ソフトウェア・グリッドミドルウェア設計・製作				評価		
ソフトウェア	次世代ナノ統合シミュレーション設計・製作				評価		
グランドチャレンジアプリケーション	次世代生命体統合シミュレーション設計・製作				評価		
ハードウェア	概念設計	詳細設計	製作		システム強化		
ファイルシステム			設計	製作	システム強化		
立地、建屋・付帯設備整備	検討	設計	建設				
運用	意見募集		方針・体制の検討	準備活動	運用		

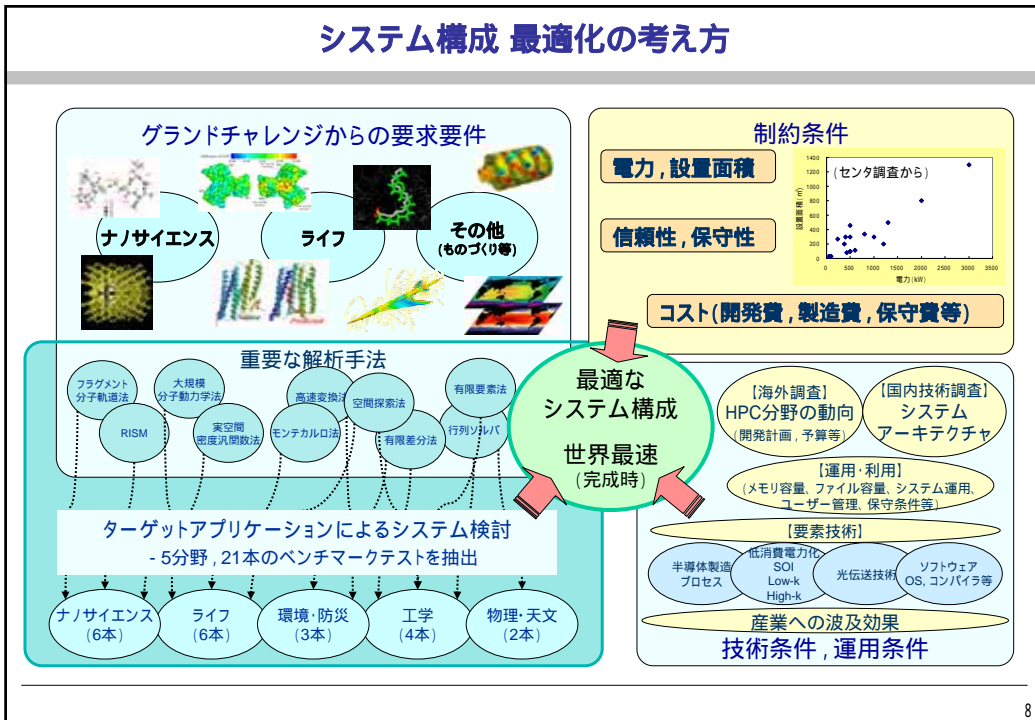
システム開発の方針

目標性能を達成するためのシステム開発の方針

- 理論性能やLINPACK性能を考慮しつつ、実効性能(アプリ性能)を重視したシステム構築を目指す。
- 幅広い活用を促すため、低コストを実現しつつ、利便性の高い汎用機により目標性能を達成することを目指すとともに、アクセラレータの検討も行う。
- 低消費電力CPUなど、新規性の高い技術をベースとした、波及効果の高いハードウェア技術の開発を目指す。

6

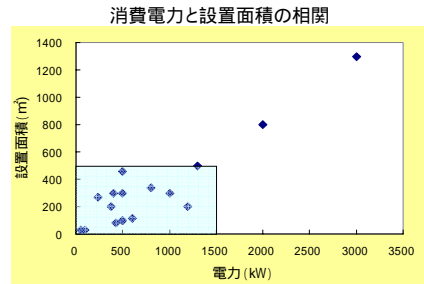
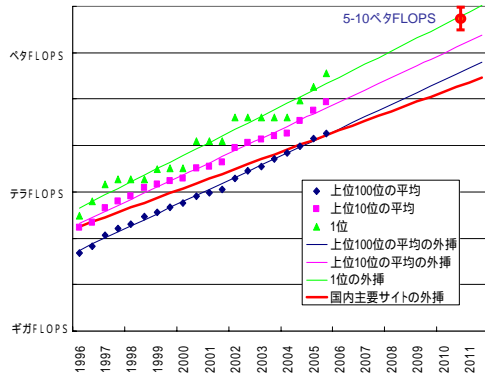
システム構成 最適化の考え方



8

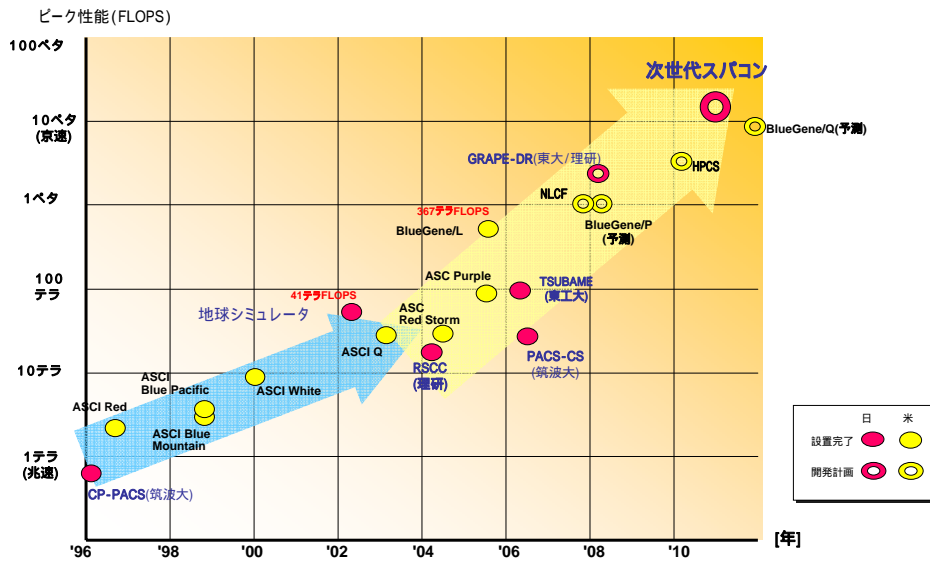
スーパーコンピュータ センター調査より

- 国内計算機センターのスーパーコンピュータ性能は長期低落傾向にある
- 国内の計算機センターは年率1.6倍の性能向上
- 世界的には年率1.8倍で性能が上昇
(TOP500リストによる)
- 2011年の世界最速のシステムは、5-10ペタFLOPS
- 現状の施設設備を変えずに、次世代スーパーコンピュータの縮小版が入られる必要がある。
- 設置面積、受電設備許容量には制限がある。ほとんどの計算機センターは、
 - 設置面積: 約500㎡以下
 - 受電設備容量は1.5MW以下
- 2011年頃の国内最大級のスーパーコンピュータの性能は約500TFLOPSが要求されている。



(第1回検討会資料2 - 11 参照)

日米の主要なスパコン開発



運用基本方針(案)

- 世界でここできしかできない計算を可能にする
 - グランドチャレンジジョブ: システムの80%を1ヶ月占有
 - 他の計算センターでできる程度の小さいジョブは計算対象外(当初は0.5PetaFLOPSが目安)
 - ただし、チューニング・デバッグ用途は利用を認める(0.1-0.5 Peta FLOPS程度)
- 想定する利用方法
 - バッチジョブの実行
 - 通常ジョブ: 0.5-5.0Peta、10時間から1週間
 - グランドチャレンジジョブ: 8Peta
 - デバッグ・チューニング用ジョブ: 0.5Peta以下、10時間未満
 - 会話型ジョブの実行
 - 特定利用者の占有使用
 - リモートからの利用を許可
 - VPN経由での利用

「次世代計算科学研究開発プログラム」の体制

