



PACS-CS Project

～計算科学の現在と未来～



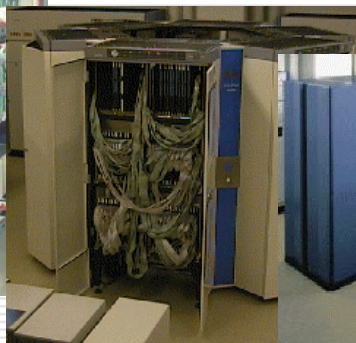
1978
第1号機PACS-9



1980
第2号機PAX-32



1989
第5号機QCDPAX



1996
第6号機CP-PACS



2006
第7号機 PACS-CS



筑波大学学長特別補佐
計算科学研究センター
宇川 彰



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
- 事業目標

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



事業発足

平成15年 6－8月

平成15年12月

平成16年 1月

4月

6月

6－8月

8月

9月

10月

12月

平成17年 4月

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

平成17年度概算要求

「計算科学による新たな知の発見・統合・創造」 事業

筑波大学計算科学研究センター

本事業の重点計画

- 超大規模計算による物質・生命研究の開拓
 - ナノ・バイオ物質の機能発現原理の解明
 - 全生物進化系統樹の解明
- 国内外連携による素粒子・宇宙研究の推進
 - 素粒子標準模型の確立と国際連携による計算素粒子物理学の推進
 - 輻射流体力学による宇宙天体形成の解明
- これらを実現するための高性能クラスタコンピュータCP-PACS-IIの開発・製作
- 国内外連携体制の構築

超大規模計算による物質・生命研究の開拓

■ ナノ・バイオ物質の機能発現原理の解明

(物質・生命研究の基本課題)

- カーボンナノチューブなどのナノ物質や、DNA・蛋白質等のバイオ物質は、なぜ様々の機能を持つのか？そのメカニズムを大規模な量子力学計算で解明

■ 現状と目標

- 約500個の原子を10～20GFLOPS規模(標準的スーパーコンの1/50～1/100の規模)での計算がほとんど。予言力のある計算には不十分。
- 約5,000～10,000個の原子を10～20TFLOPS規模で計算することにより、初めて現実的と言える計算を実現し、当該分野のブレークスルーを目指す。
- 将来的に、約50,000個の原子をPFLOPS規模で計算することにより、ナノ・バイオ量子デザインへの道を切り拓く。

■ 具体的ターゲット

- ナノ分野: 究極のシリコン・アトムテクノロジーの開拓
- バイオ分野: 原子スケールの生命科学の開拓

目標: 大容量大規模データ解析により生物界全体の系統樹を推測し、真核生物の起源と初期進化を解明

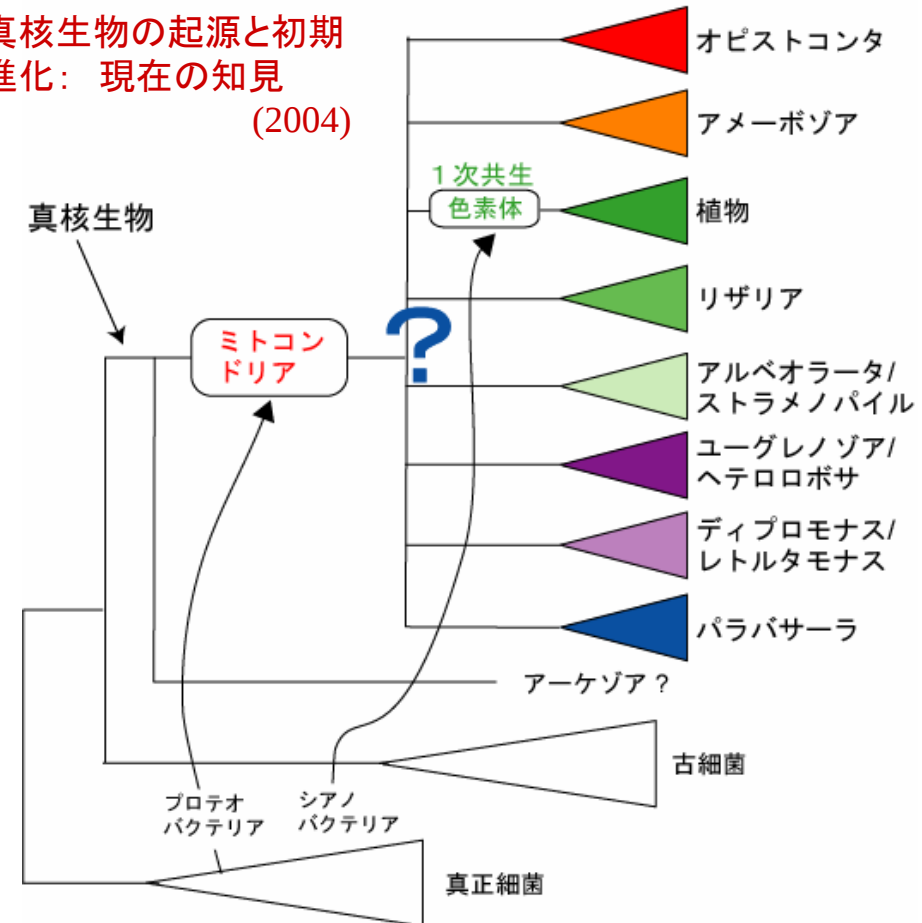
大グループ

真核生物の起源と初期進化：
生物進化史上最も重要で難易度の
高い問題、とくに起源はほとんど不明

(2004)

Phylogenetic tree showing the three domains of life and their major groups:

- Red (Bacteria):**
 - 動物 (Animals)
 - 真菌 (Fungi)
 - 微孢子虫* (Microsporidia*)
- Orange (Eukarya):**
 - ロボサ (Rhizaria)
 - 粘菌 (Mycetozoa)
 - エントアメーバ* (Entamoeba*)
 - ペロピオンタ* (Peridinium*)
- Green (Archaea):**
 - 緑色植物 (Green plants)
 - 紅藻 (Rhodophytes)
 - 灰色植物 (Charophytes)
 - ケルコゾア (Chlorococci)
 - 有孔虫 (Forams)
 - 放射虫 (Radiolarians)
 - アルベオラータ (Alveolates)
 - ストラメノバイル (Stramenopiles)
 - ユーグレノゾア (Euglenozoa)
 - ヘテロロボサ (Heterorhizaria)
 - ディプロモナス* (Diplomonads*)
 - レタタモナス* (Retartamonads*)
 - パラバサール* (Parabasalids*)



国内外連携による素粒子・宇宙研究の推進

■ 素粒子標準模型の確立と国際連携による計算素粒子物理学の推進

- CP-PACSにより端緒を開いた近似なし格子QCDシミュレーションによるクォークと強い相互作用の解明  **物理点での初めてのシミュレーション**
- 将来的にPFLOPSクラスの超高速計算機による「素粒子・原子核の統合理論」の構築
青木・石井・初田による核力斥力芯の導出(2007)
- International Lattice Data Gridによる国際的な研究協力体制の構築と研究の推進

■ 輻射流体力学による宇宙天体形成の解明

 **FIRSTプロジェクト(科研費特別推進)**

- CP-PACS及びHMCSにより前進を始めた輻射流体力学を一層発展させ、宇宙の第一世代天体から銀河形成にいたる過程を解明
- 将来的にPFLOPSクラスの超高速計算機による「宇宙における自己組織化と階層構造の起源の解明」を目指す統合シミュレーションを追及
- 国立天文台等との国内的共同研究体制を強化



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プロジェクト実施経緯

平成16年夏～冬	各分野で計算機科学との共同研究WGを設置し共同研究を開始: <i>素粒子pacs-cs、物質生命comas-dft、気象gpv-jma、生物mol-evol</i>
平成17年4月	プロジェクト正式発足
平成17年7月	(株)日立製作所と契約(システム全体製作)
8月	(株)富士通と契約(ネットワークドライバ製作) 以後、2～4週間に一回のペースで両社と <i>システムWG</i> 及び <i>ネットワークWG</i> を開催し、技術検討を実施
平成18年秋～平成19年春	設計・検証及び製作作業
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	ハードウェア全数設置・システム稼動開始
平成18年7月～10月	ネットワーク調整
平成18年晩秋	本格計算



PACS-CSシステム開発

- 目的
 - CP-PACS後継機
 - 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に対応
- 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動実績
- 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



PACS-CS稼働状況

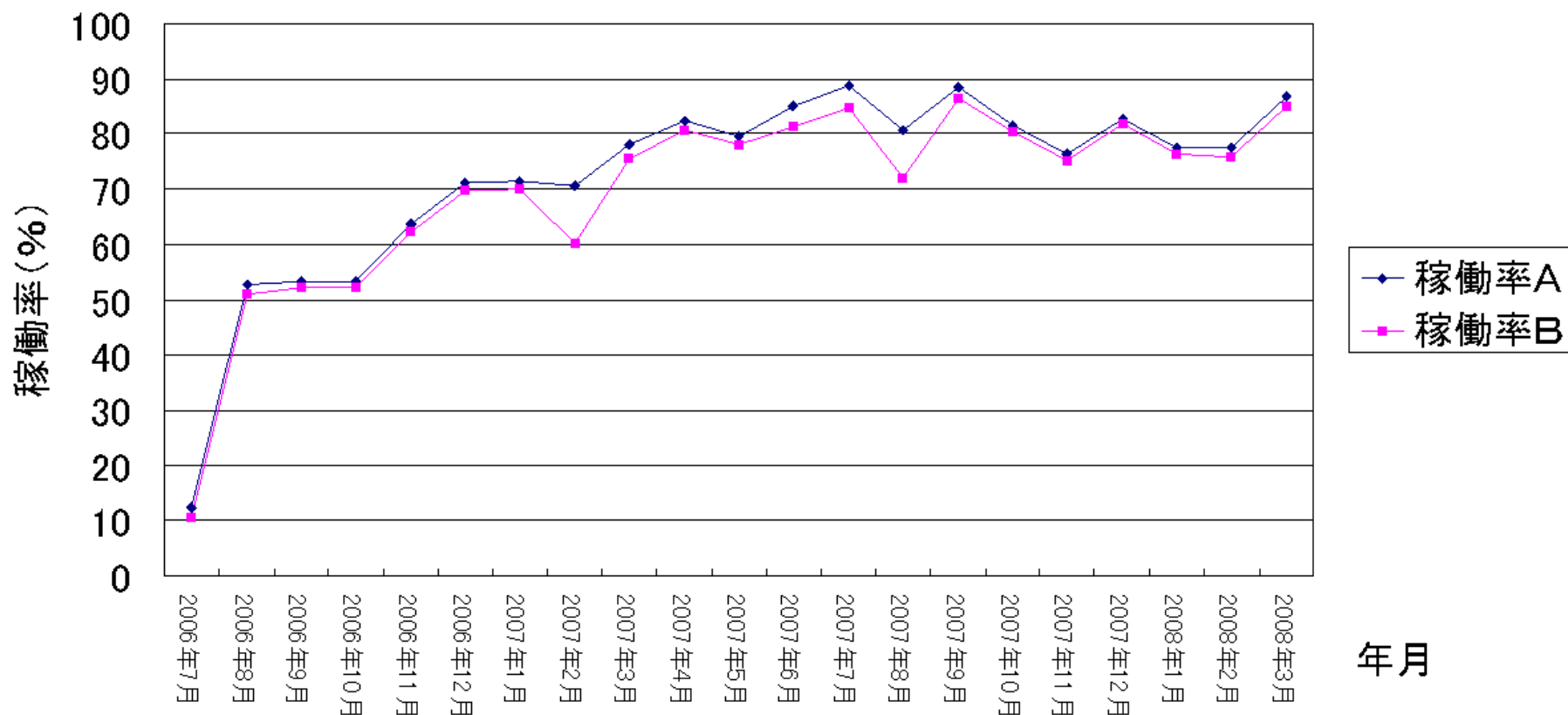
稼働率A

$$\frac{\sum ((\text{実行時間})_i \times (\text{CPU数})_i)}{(2560 \times (\text{月間時間} - \text{保守時間}))} \times 100$$

稼働率B

$$\frac{\sum ((\text{実行時間})_i \times (\text{CPU数})_i)}{(2560 \times \text{月間時間})} \times 100$$

PACS-CS 稼働率推移





多くの人々に感謝(敬称略)

-
- | | |
|---------|---------------|
| □ 日立製作所 | システム開発及び運用支援 |
| ■ システム | 深川、加納 他 |
| ■ ソフト | 清水、藤田 他 |
| ■ SE | 伊藤、瀧田、白勢、山里 他 |
| ■ 営業 | 浅野、田中、橋本 他 |
| □ 富士通 | ネットワークドライバ開発 |
| ■ ソフト | 久門、住元、大江 他 |
| □ 筑波大 | |
| ■ 開発 | 朴(開発主査)、高橋、佐藤 |
| ■ アプリ | 吉江、蔵増、岩田 他 |



平成18年夏以来の計算の成果： 本シンポジウムでの講演

□ 素粒子

- 蔵増嘉伸：現実的クォーク質量における2+1フレーバー格子QCD

□ 物質

- 磐田潤一：実空間密度汎関数法による大規模第一原理計算
- 矢花一浩：時間依存密度汎関数理論による光応答計算

□ 生命

- 舘野賢：QMMM分子動力学法による生体機能解析
- ボエロ・マウロ：第一原理ハイブリッド分子動力学計算によるアミノアシル tRNA 合成酵素の触媒反応機構の解析

□ 生物

- 稲垣祐司：網羅的樹形探索によるブートストラップ解析法の検討

□ 地球環境

- 田中博、日下博之：全球・領域気象予測モデルを用いた地球環境研究と将来予測



今後に向けて



学際計算科学の推進

～テラスケールからペタスケールコンピューティングへ

- PACS-CSの全国共同利用を軸とする「計算科学による先導的知の創出事業」(特別教育研究経費H20年度～22年度)
 - 計算科学の学際開拓・重点課題研究の推進
 - 計算科学の国際的展開の推進
- T2K Open Supercomputer Allianceを軸とする学際計算科学の全国展開
 - 単一拠点ではなく、複数拠点到に跨る計算科学と計算機科学の融合
- 次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 - ナノ・ライフにおけるブレークスルー

「計算科学による先導的知の創出推進」事業（平成20～22年度）

平成21年度概算要求（継続） 特別教育研究経費（研究推進）

【概要】「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」事業（平成17年度～19年度）を受け、超並列クラスタ型計算機PACS-CSを全国共同利用に供して、計算科学の重要課題を推進するとともに、国内外の連携による学際的な計算科学を開拓し、科学諸分野における先導的知の創出の推進を図る。

超並列クラスタPACS-CS



PACS-CSの共同利用による計算科学の強化・充実

計算機・計算科学の連携
大規模・超並列アプリケーションの
計算手法・プログラム・ノウハウの蓄積

ペタスケールの計算科学の開拓

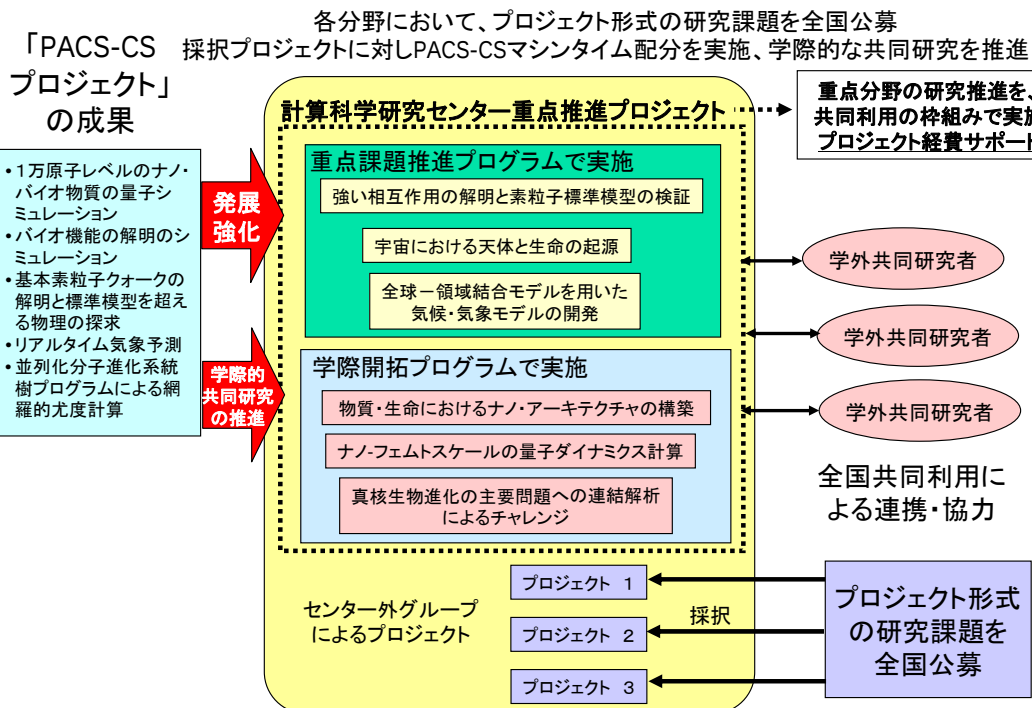
学際共同利用プログラム

①計算科学の学際開拓・重点課題研究の推進

- 平成17年度～19年度の拠点形成事業により立ち上がった重点研究分野（素粒子・宇宙、物質・生命、地球生物環境、超高速計算システム、計算情報）を中心に、プロジェクト形式の課題を全国公募する「学際共同利用プログラム」を実施
 - 重点課題推進プログラム
 - 学際開拓プログラム
- 本事業では、この枠組みの中で、内外の共同研究として、6つのプロジェクトを重点課題プロジェクトと位置づけ、推進する。

②計算科学の国際的展開の推進

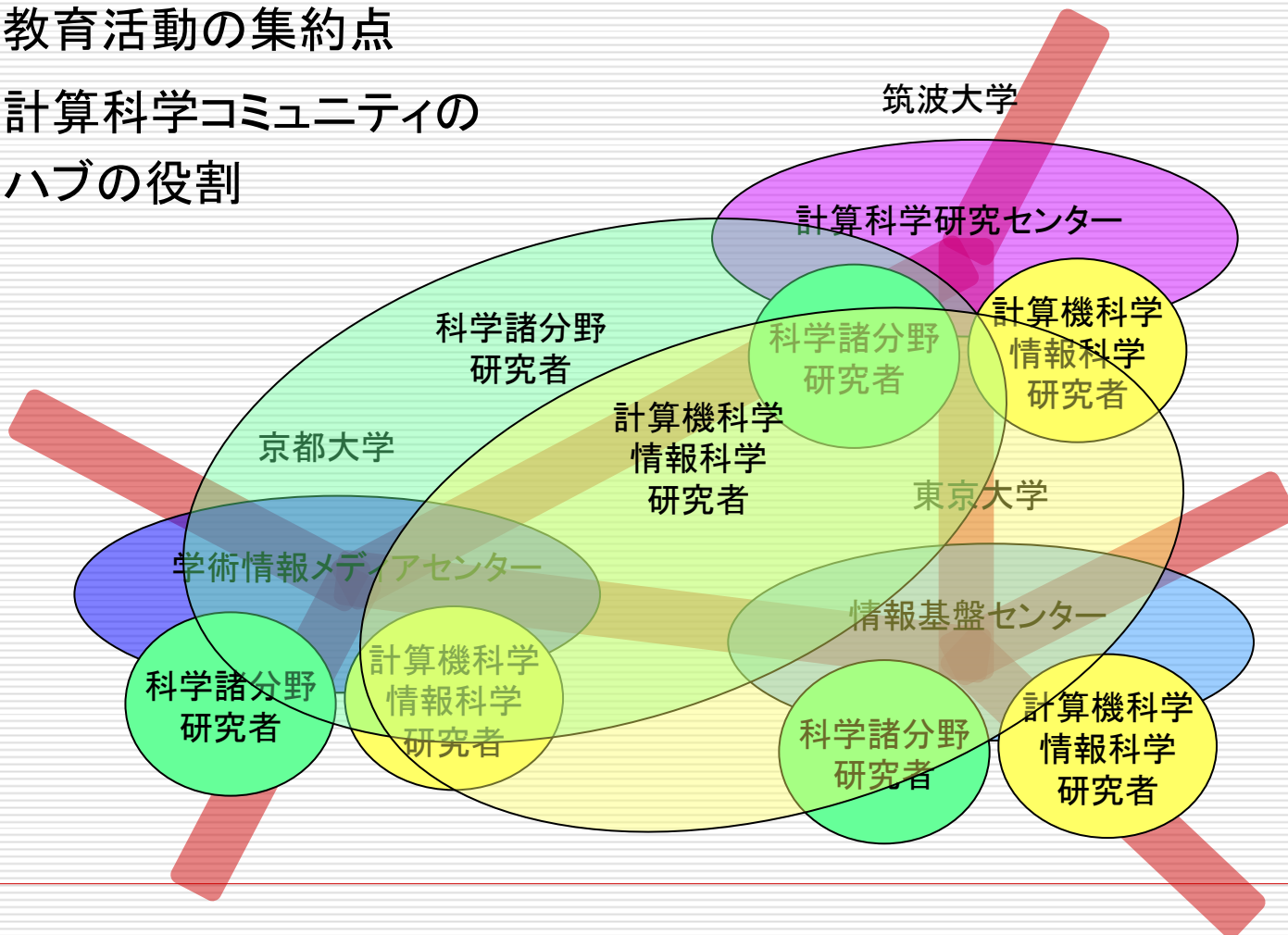
- 国際交流の強化のために計算科学をテーマとする国際ワークショップの毎年開催を制度化
- 世界的規模で計算データや計算設備を共有するグリッドによる共同研究の推進





T2K連携の意義

- 各センターは各大学の計算科学の研究教育活動の集約点
- 全国の計算科学コミュニティの活動のハブの役割





次世代スパコンプロジェクトとの連携

理化学研究所

筑波大学

基本協定 H18.9.8

次世代スパコンプロジェクト推進に連携・協力

- システム開発への協力
 - 客員研究員3名(宇川、佐藤、朴)
 - 概念設計(H18.9～19.3)・詳細設計(H19.4～)に協力(ユニットA、ユニットB月例打ち合わせ)
 - ペタスケール重要ターゲットアプリ7本中2本(QCD、RSDFT)についてベンチマークコードを共同開発(H19.11～)
- 重要アプリケーション分野における協力・連携
 - アプリケーション検討部会における検討(H17.2～H18.8)
 - ナノソフトの開発に協力(分子研ー筑波大 H20.1～)
- 主要委員会等
 - プロジェクトアドバイザリ委員会委員長(岩崎学長)
 - 次世代計算科学アドバイザリ委員会委員(宇川)
 - アプリケーション検討部会委員(宇川)
 - 共用検討WG(朴)

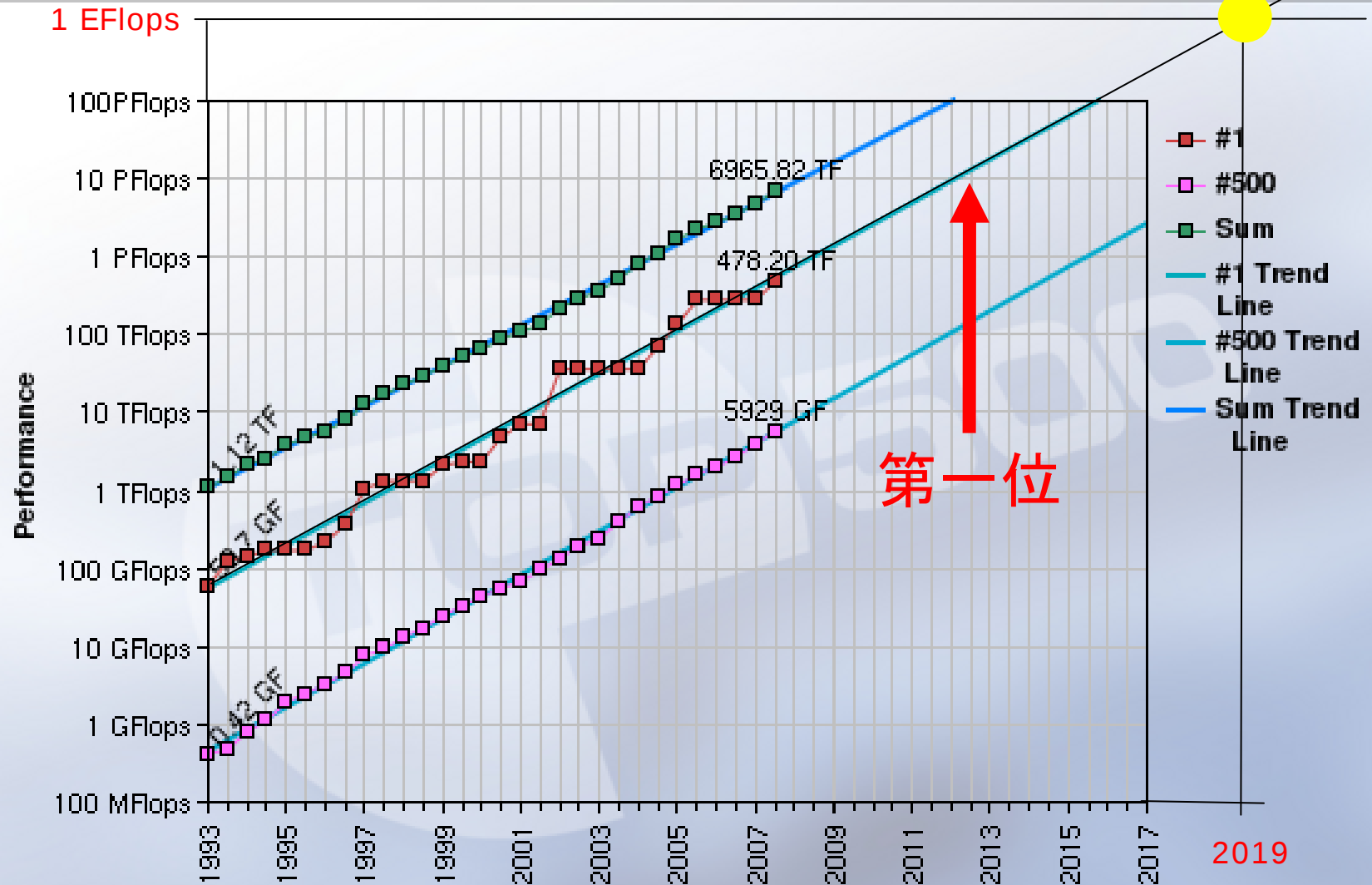
次世代スパコン
開発実施本部

計算科学
研究センター



ペタスケールコンピューティングを越えて

Projected Performance Development

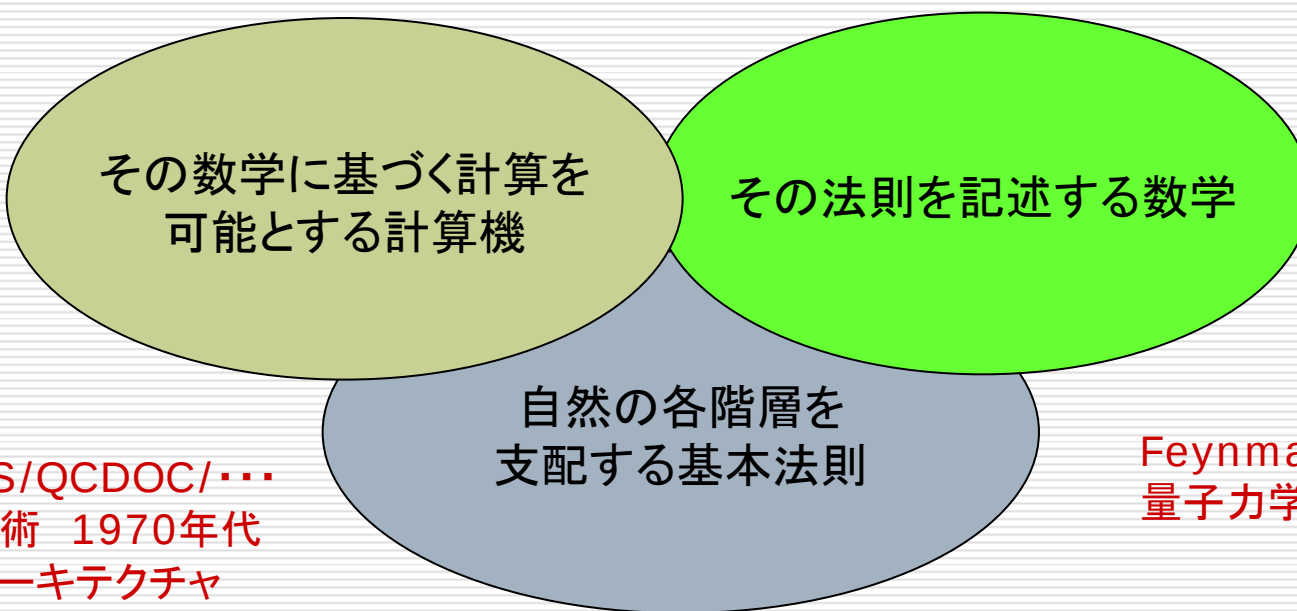




物理的自然観における “計算”の輝かしい成功体験

□ 成功を支えた三つの要素

素粒子物理学(格子QCD)の例



CP-PACS/QCDOC/...
半導体技術 1970年代
超並列アーキテクチャ

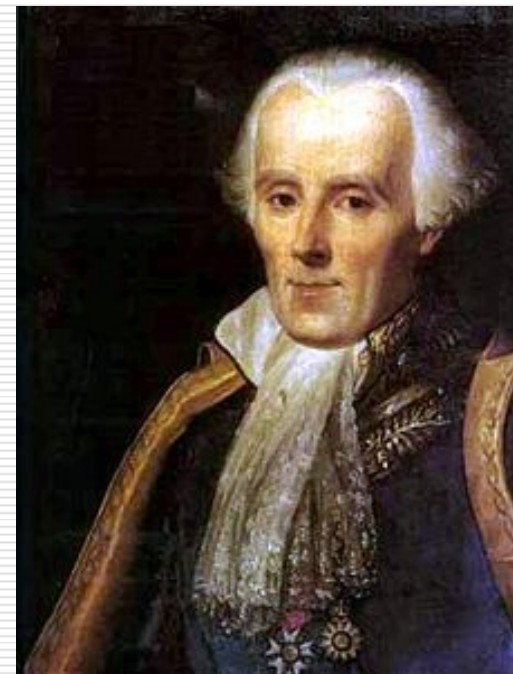
Feynman path integral
量子力学の定式化 1943

格子QCD 1974
繰り込み可能な場の量子論 1948
ゲージ理論と漸近自由性 1951/1973



～計算はどこまで自然にせまれるか～

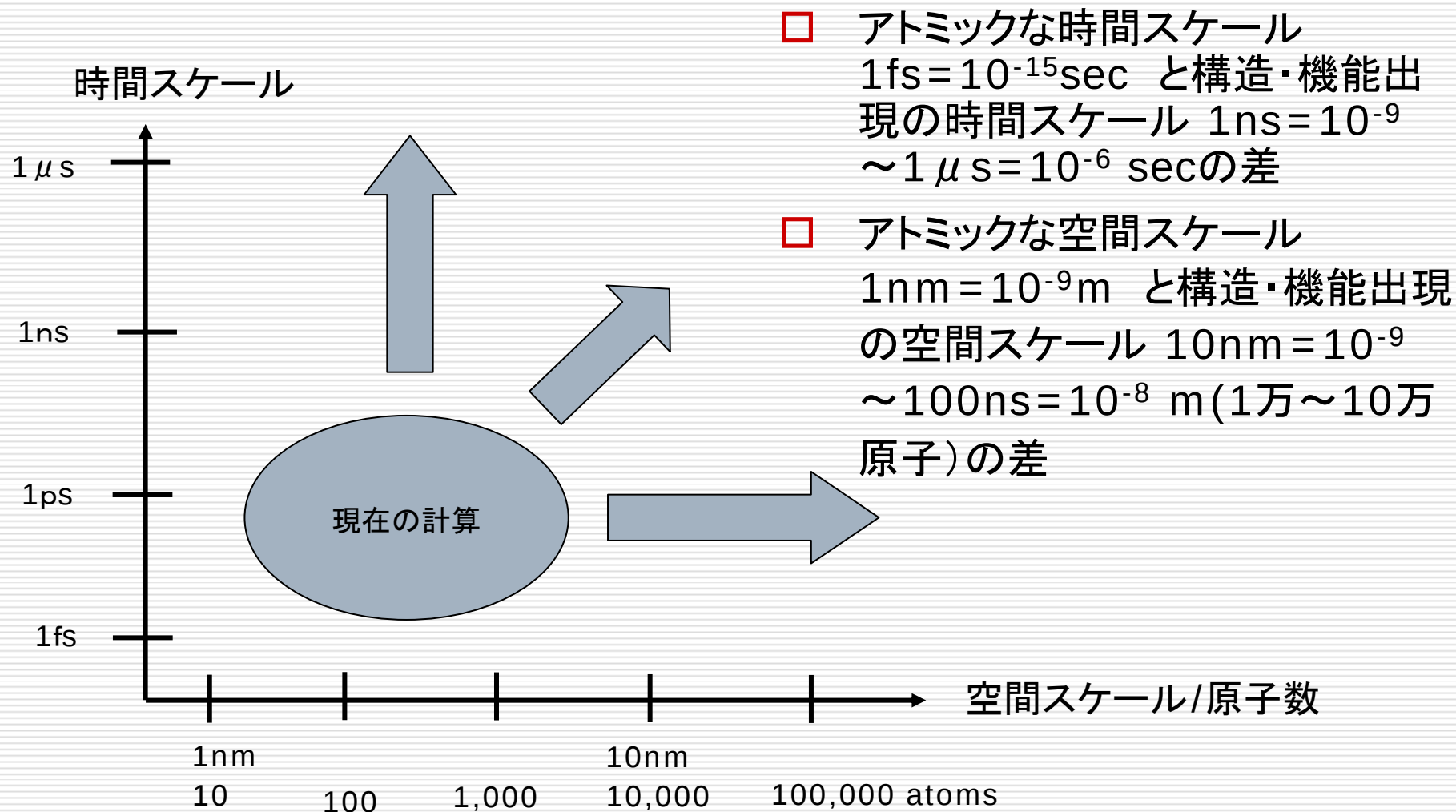
“... An intellect which at a certain moment would know all forces that set nature in motion, and all positions of all items of which nature is composed, if this intellect were also vast enough to submit these data to analysis, it would embrace in a single formula the movements of the greatest bodies of the universe and those of the tiniest atom; ...”



Pierre-Simon, marquis de Laplace
1749-1827



生命計算のチャレンジ





□ 従来の手法

- 物理モデル(古典原子群、古典原子核+量子力学的電子、...)
- 運動方程式(古典MD,density functional theory、...)
- スーパーコンピュータによる数値解

□ 従来の手法はまだ限界まで試されていない

- 時間/空間スケール
- 計算規模

□ 魅力ある疑問

- 現在の法則・数学・計算の枠組みで十分なのか？



生命と計算科学

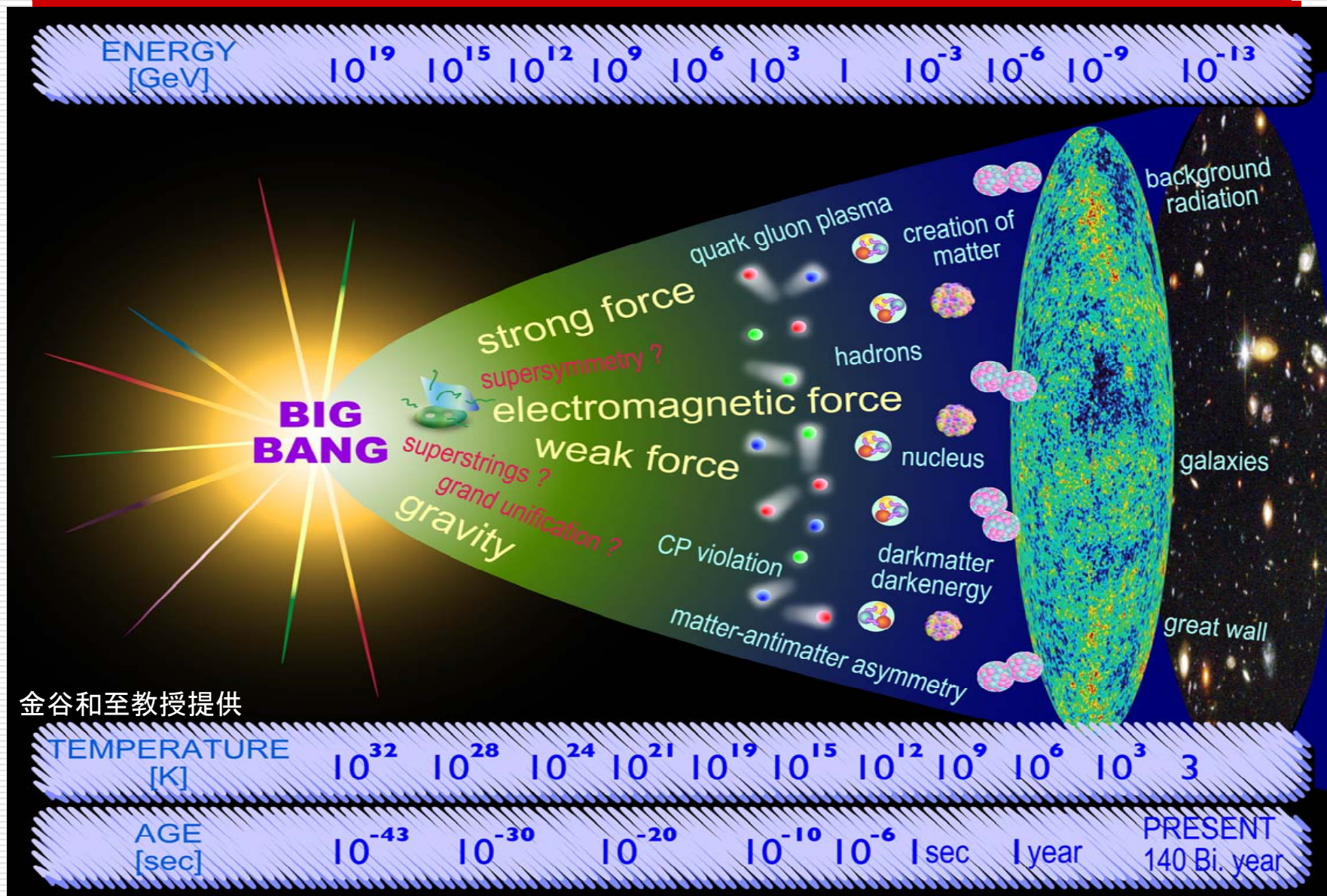
- 「数学は生物学の次の顕微鏡であり、生物学は数学の次の物理学である」 ジョエル・コーエン(2004)
稲葉寿 「数学イノベーション」
- 計算の限界を追及する中で、新たな法則とそれを記述する数学、さらにはその数学に対応する計算が見えて来はしないか？
- 生命はそのような可能性の宝庫かもしれない

たんぱく質の構造と機能、遺伝子発現と環境応答、脳、・・・



ひるがえって

素粒子・宇宙分野においても...



金谷和至教授提供



“計算”を実現する“計算機”は人類の持つ最大の知恵のひとつ

“計算”が、今後も科学技術の発展の鍵であり続けることに疑問の余地はない

PACS-CSプロジェクトがその発展に貢献することを期待する