

超並列クラスタシミュレータ“PACS-CS”の開発に関する記者説明会

日 時：平成 18 年 3 月 7 日（火）13:30～15:00

場 所：筑波大学計算科学研究センター 1 階会議室

説明者

宇川 彰（うかわ あきら）（研究室内線 6485）

プロジェクト代表・計算素粒子物理学担当

計算科学研究センター長（数理物質科学研究科物理学専攻）

朴 泰祐（ぼく たいすけ）（研究室内線 5518）

計算機システム開発担当

計算科学研究センター（システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻）

押山 淳（おしやま あつし）（研究室内線 5908）

計算物質生命科学担当

計算科学研究センター（数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻）

プログラム

1. プロジェクト概要説明 及び  
PACS-CS の拓く素粒子研究のフロンティア 13:30-13:45  
宇川 彰
2. 超並列クラスタ PACS-CS の概要 13:45-14:00  
朴 泰祐
3. PACS-CS の拓く物質生命研究のフロンティア 14:00-14:10  
押山 淳
4. 質疑応答 14:10-14:30
5. 現場見学

配布資料

1. 記者説明会プログラム
2. 説明資料
3. センター紹介パンフレット
4. センター主催シンポジウムポスター

展示物

1. PACS-CS ボード
2. QCDPAX 及び CP-PACS

[計算科学研究センター事務室]

TEL029-853-6486 (fax 6406)



平成18年3月7日  
記者説明会資料

# PACS-CSプロジェクト の概要

筑波大学 計算科学研究センター

**PACS-CS:**

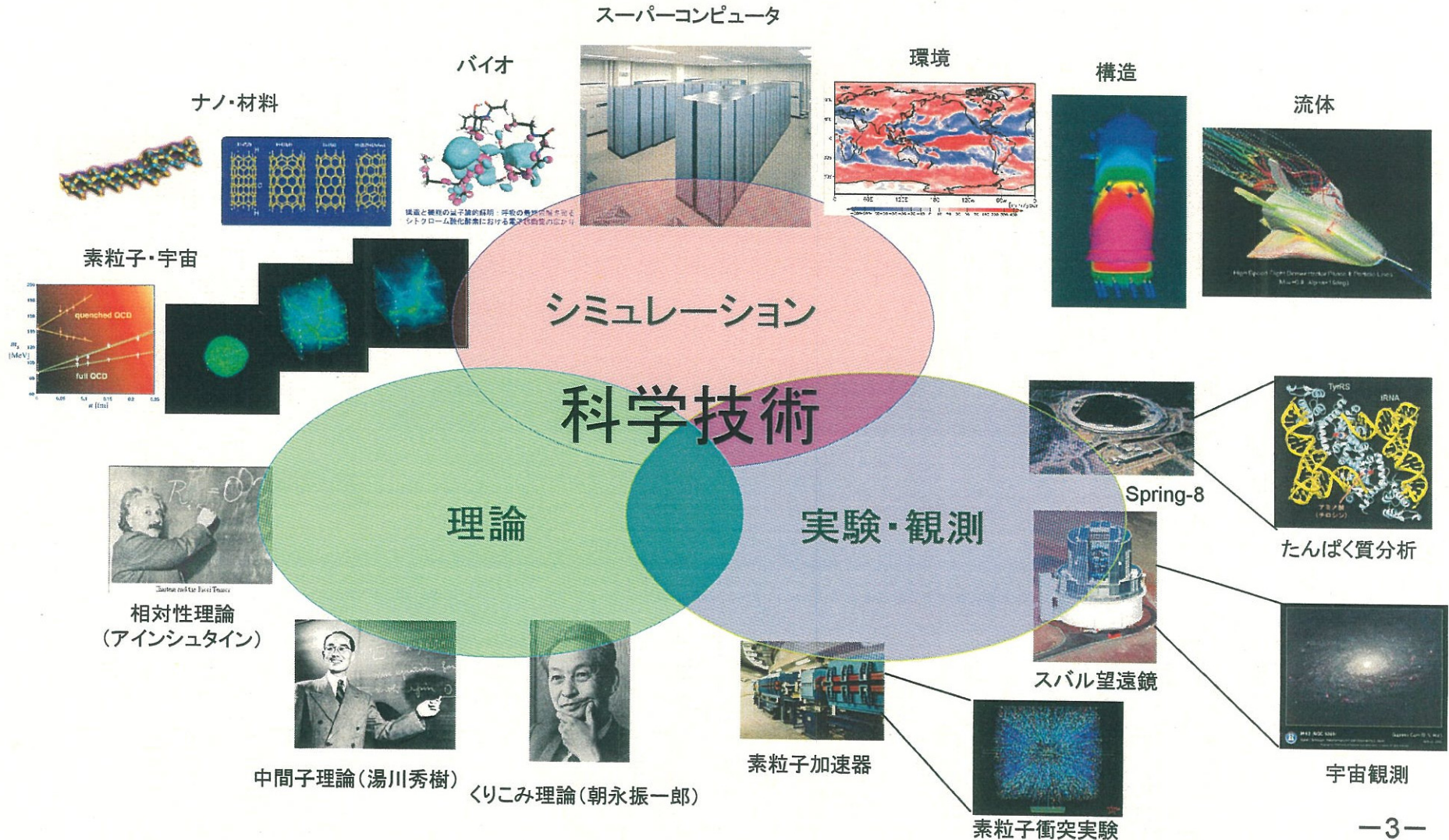
**Parallel Array Computer System for  
Computational Sciences**

“計算科学のための並列計算機システム”



# 科学の三本柱としての計算科学

- スーパーコンピュータを用いた、大規模シミュレーションを中心とした研究手段
- 科学技術の全分野で、実験・観測、理論と並ぶ、重要且つ最先端の研究手段

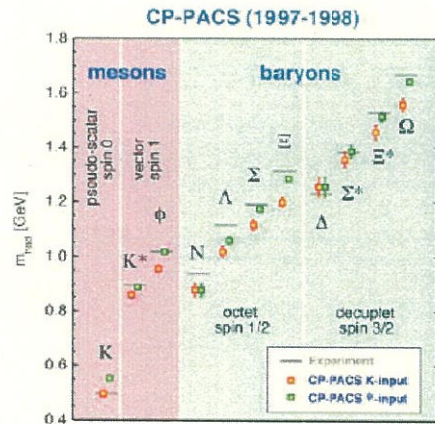




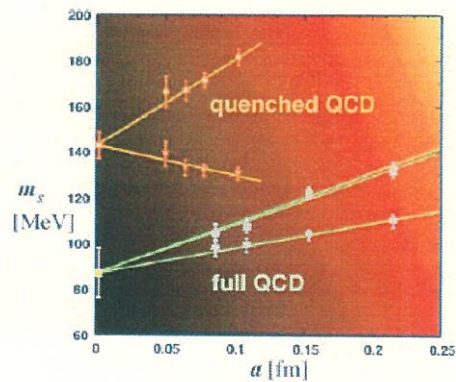
# 筑波大学計算科学研究センターにおける最近の成果

基礎物理学を中心として多くのブレークスルー

## 素粒子物理学

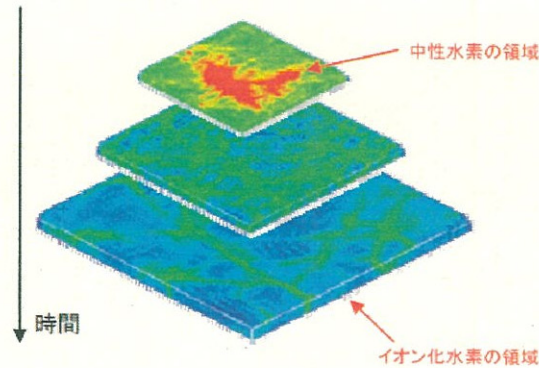


クエンチ近似のハドロン質量スペクトルの  
予言(1980年からの懸案)(1999)

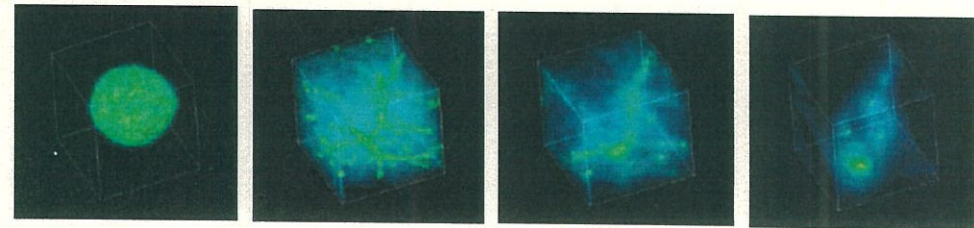


基本粒子クォーク質量の計算  
(自然界の基本定数の一つ)(2000)

## 宇宙物理学



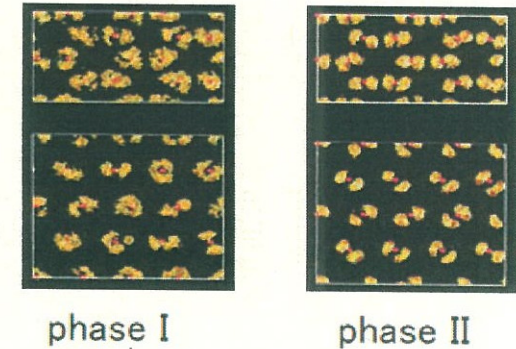
宇宙をみたく水素の再電離過程の3  
次元輻射輸送計算(世界初の試み)  
(2000)



ビッグバン後  
3億年                      5億年                      7億年                      10億年

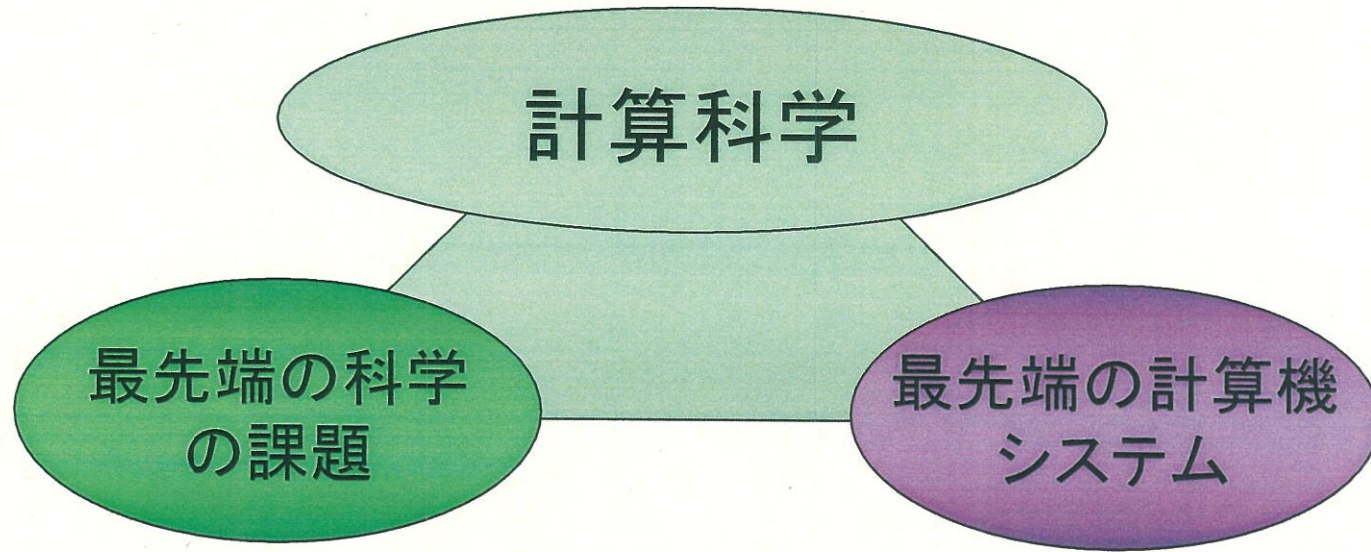
HMCS (CP-PACS+GRAPE)による銀河形成  
の3次元輻射流体シミュレーション(2002)

## 物性物理学



高圧下の固体水素の結晶構造  
(1930年代からの懸案)(2000)

# 計算科学を支える二つの柱



基礎科学(素粒子・宇宙)  
物質・生命科学  
地球環境科学

などにおける**最先端の科学の課題**

課題の追求を可能とする  
**“最先端の研究装置”**

科学者と計算機工学者が協力し、計算科学に適した  
計算機システムを開発するアプローチが重要且つ有効



# 筑波大学における超並列計算機の開発の歴史

1978  
第1号機PACS-9



1980  
第2号機PAXS-32



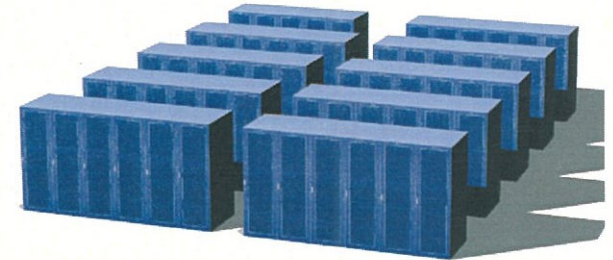
1989  
第5号機QCDPAX



1996  
世界最高速を達成した第6号機CP-PACS



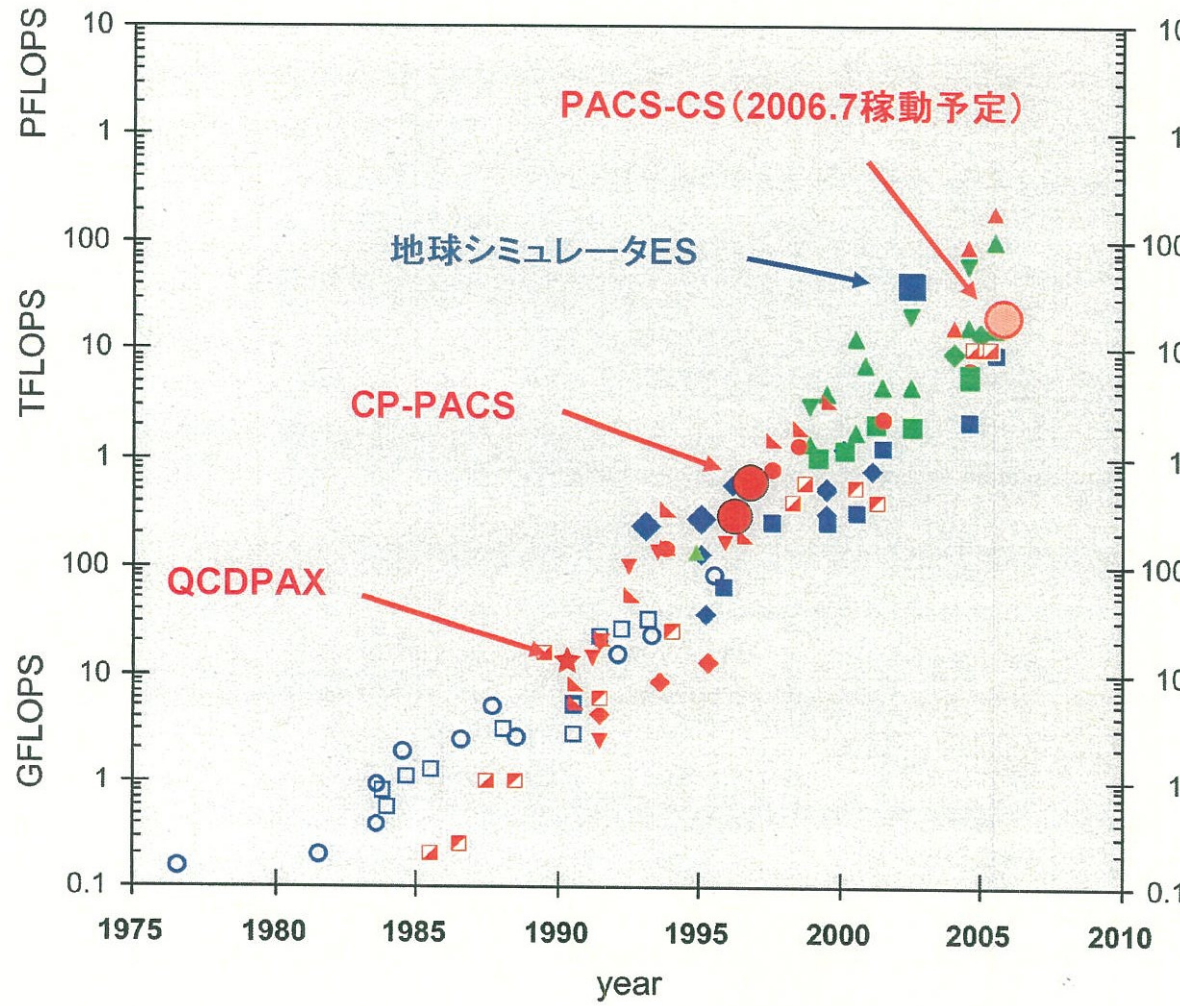
(2006)  
次期システムPACS-CS  
完成予想図



- 1977年に研究開始(星野・川合)
  - 1978年に第一号機が完成
    - 1996年のCP-PACS(岩崎・中澤)はTOP500第一位
      - 2006年完成予定のPACS-CSは第7号機

完成年	名称	計算速度
1978年	PACS-9	7千回/秒
1980年	PAXS-32	50万回/秒
1983年	PAX-128	4百万回/秒
1984年	PAX-32J	3百万回/秒
1989年	QCDPAX	14億回/秒
1996年	CP-PACS	614億回/秒
2006年	PACS-CS	14兆3千億回/秒

# スーパーコンピュータの発展



## 我が国の主要なプロジェクトマシン

- ◆ 数値風洞 NWT/ベクトル並列
- CP-PACS/超並列
- 地球シミュレータ ES/ベクトル並列

## ベクトル計算機

- CRAY/CDC
- Hitachi/Fujitsu/NEC

## ベクトル並列計算機 (SMP)

- ◆ Fujitsu
- NEC
- CRAY

## スカラー並列計算機 (SMP)

- ◆ Fujitsu
- Hitachi
- ▲ IBM
- ▼ SGI/HP/Dell

## 超並列計算機 (MPP)

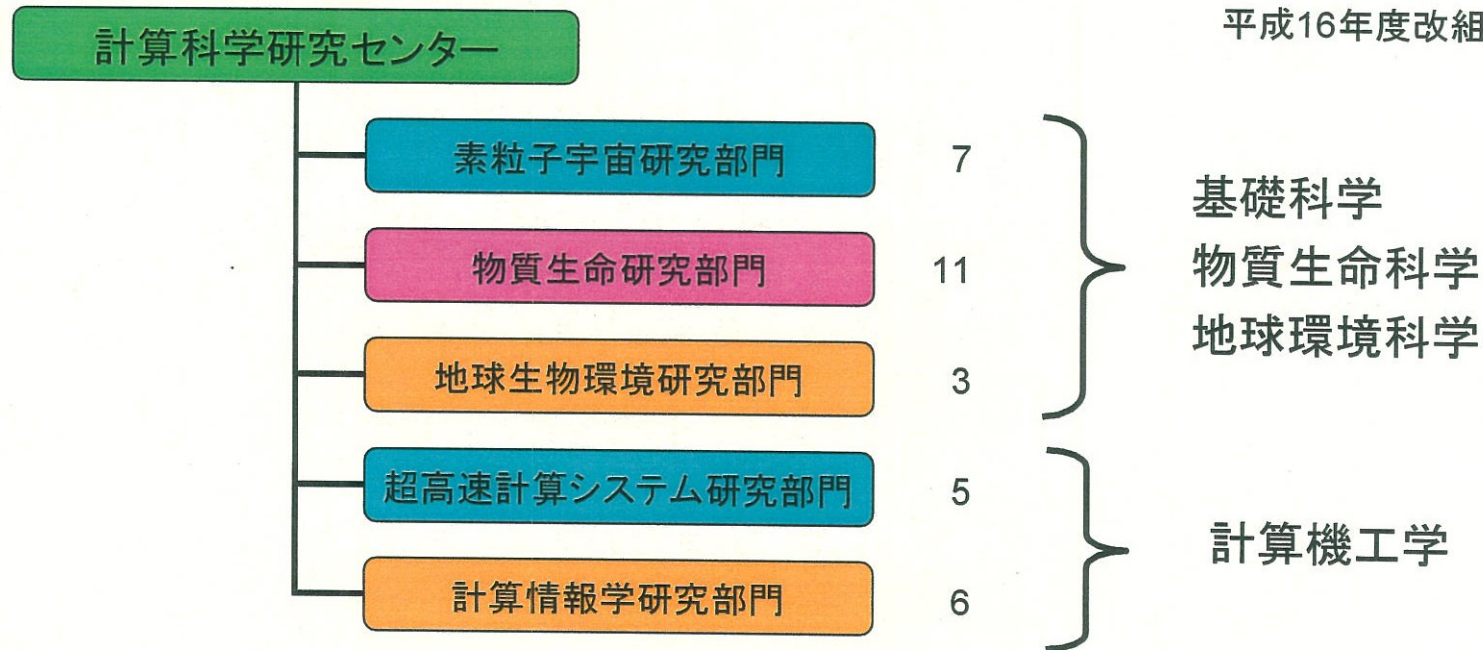
- CRAY
- ◆ Fujitsu
- ▲ IBM
- ▼ TMC/nCUBE
- ▲ Intel/MPP
- ★ QCDPAX
- Columbia
- APE



# 筑波大学計算科学研究センターの研究体制

平成4年度設置

平成16年度改組・拡充



教員 32名  
(教授11 助教授12 講師9) 平成17年4月1日現在

科学の重要分野の研究者と計算機工学の研究者が一体となった、世界的にも非常に特色のある研究組織

## 筑波大学における計算科学研究の特色

- 科学者と計算機工学者の協力による,  
目標を明確にした超高速計算機の開発・製作
- 高い計算パワーの集中による, 計算科学の  
最重点課題・最先端課題の研究
- 産学連携に広がる研究・開発

“つくばスタイル”の計算科学



# PACS-CSプロジェクト

- 計算素粒子物理学研究の一層の飛躍  
「湯川・朝永の夢の実現」
- 計算物質生命科学のフロンティアの開拓  
“つくばスタイル”の計算科学研究手法による物質・生命研究の  
ブレークスルーを目指す
- 国内最大規模の超並列クラスタ計算機PACS-CSを  
開発・製作

## プロジェクト正式名称

「計算科学による新たな知の発見・創出・統合」事業

- 文部科学省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
- 事業予算 3カ年総額 約23億円を予定

# PACS-CSプロジェクトとセンター一年次計画

H17年4月 7月 10月 H18年1月 4月 7月 10月 H19年1月 4月 7月

## 超高速計算機システム

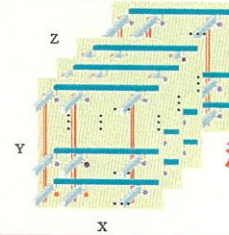
CP-PACS



稼動停止

撤去(一部国立科学博物館へ収納)

## PACS-CS概念図



X次元スイッチ  
Y次元スイッチ  
Z次元スイッチ  
計算ノード(CPU単位)

汎用計算能力14.3Tflops

## PACS-CSプロジェクト

準備研究

開発・製作

設置稼働

## FIRSTプロジェクト (宇宙物理学)

開発・製作

1号機



予備計算及び全システム製作

1/2設置稼働

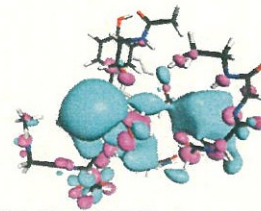
全システム設置・稼働

2005年3月設置稼働

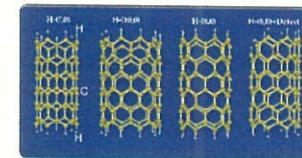
重力専用計算能力35Tflops  
汎用計算能力3.5Tflops

## 研究計画

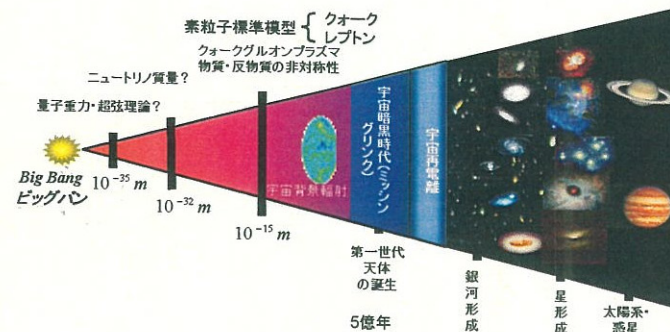
- 物質・生命分野
  - 量子機能を持つナノ物質の量子デザイン
  - 生命機能の原子スケール量子論
- 素粒子・宇宙分野
  - 素粒子標準模型とそれを超えるマイクロ階層の探求
  - 重力・輻射・流体過程による宇宙天体階層の解明
- 計算機工学分野
  - 次世代高性能計算機システムの基礎研究
  - グリッド技術及び関連研究



構造と機能の量子論的解明：呼吸の最終段階を司るシトクローム酸化酵素における電子移動量の広がり



強磁性 反強磁性  
カーボンナノチューブの磁性発現

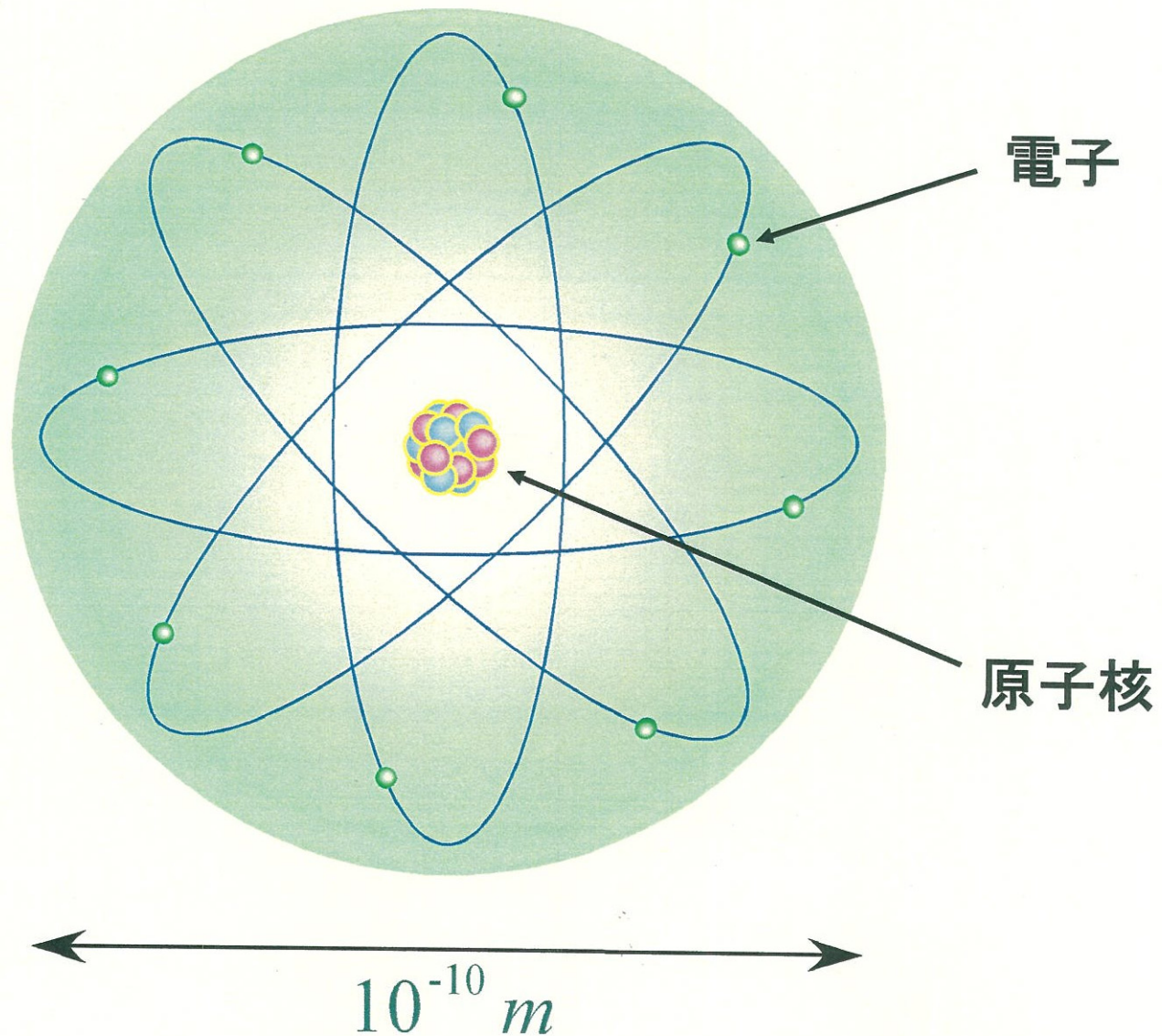




# PACS-CSの拓く素粒子物理学 のフロンティア

自然界の最小の構成単位「素粒子」

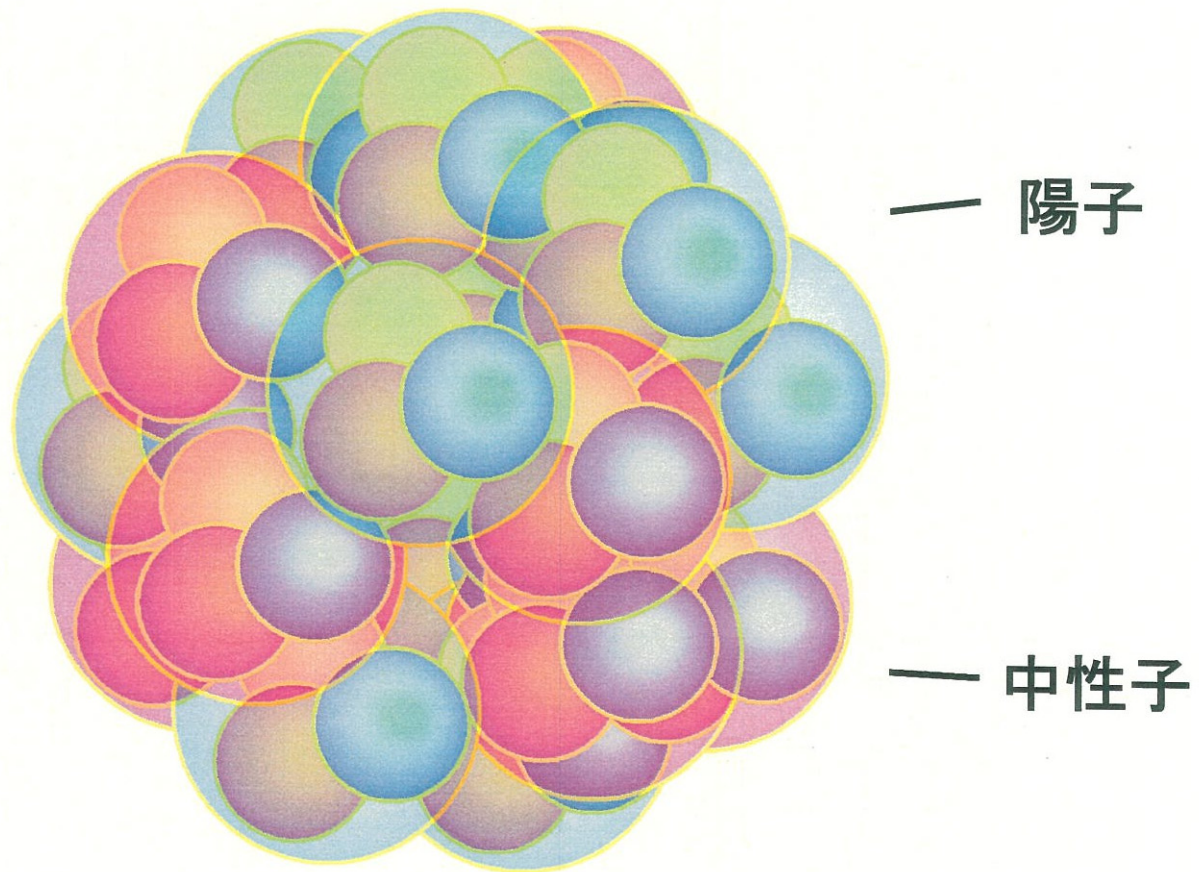
原子





自然界の最小の構成単位「素粒子」

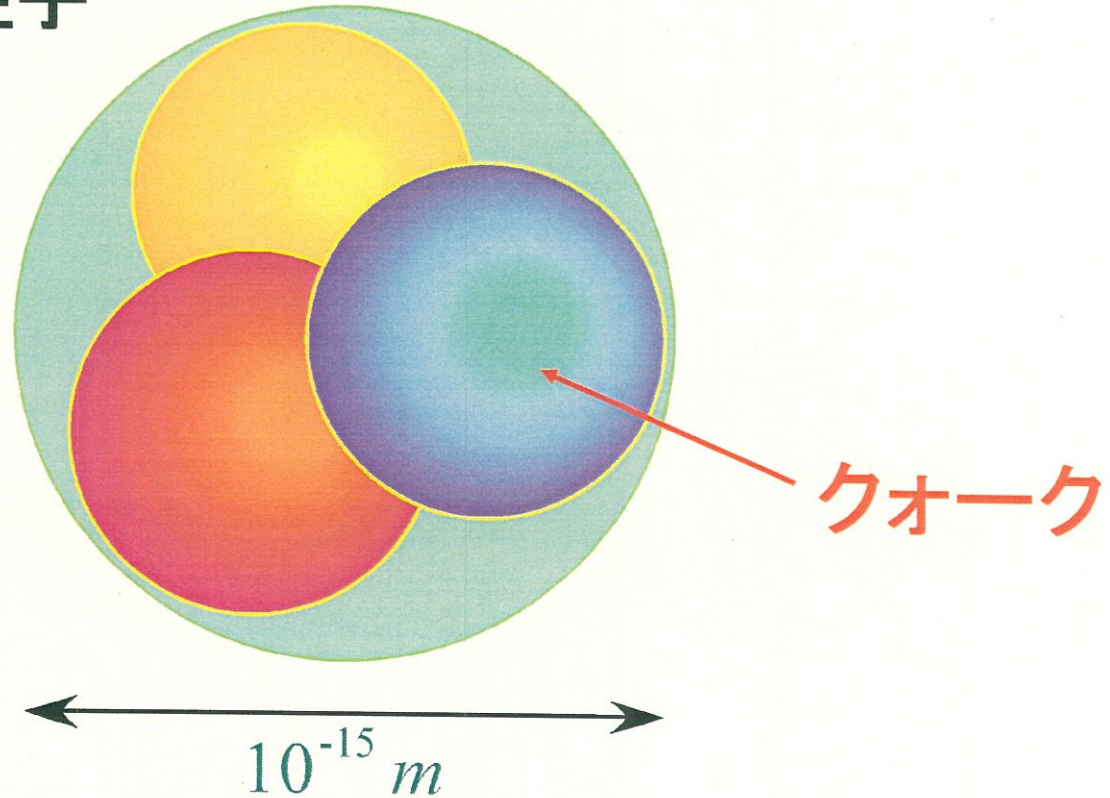
## 原子核



$10^{-14} m$

自然界の最小の構成単位「素粒子」

陽子、中性子



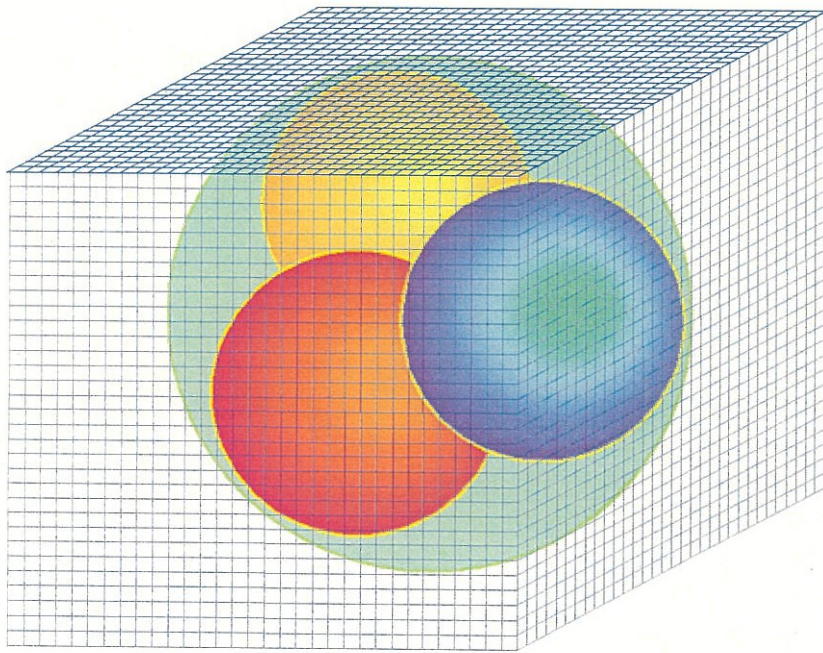
クォークより細かい構成単位は、まだ見つかっていない。



# 量子色力学

(Quantum Chromodynamics = QCD)

$$L = -\frac{1}{4} \text{Tr} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \sum_f \bar{\Psi}^f \left[ \gamma_\mu (i\partial^\mu + gA^\mu) - m_f \right] \Psi^f$$



くりこみ理論に基礎付けられた強い相互作用の基礎理論

近似なし格子QCDによる  
数値シミュレーション



クォークが従う基本法則の解明

クォークが持つ未知の性質の探求

物質・反物質の非対称性の解明

クォーク・グルオン・プラズマの予言

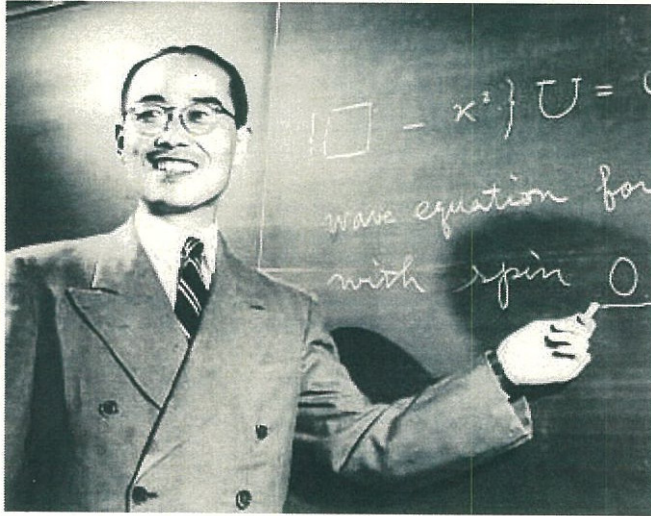
ビッグバン直後の宇宙の進化



# 計算素粒子研究と湯川秀樹・朝永振一郎生誕100年

湯川秀樹

1907.1.23～1981.9.8



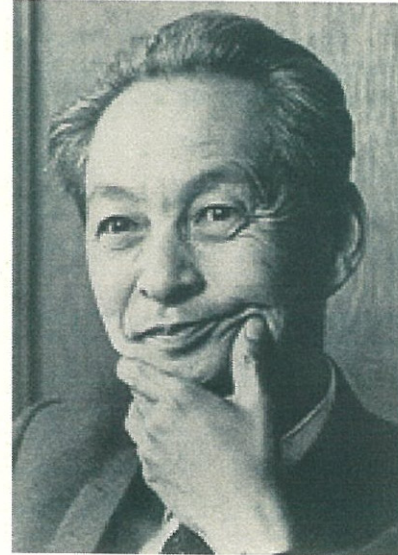
中間子の予言により**素粒子の強い相互作用の理論**を創始(1934)

ノーベル物理学賞 1949

大阪大学・京都大学

朝永振一郎

1906.3.31～1979.7.8



量子電気力学の**くりこみ理論**を建設(1948)

ノーベル物理学賞 1965

東京文理科大学・東京教育大学  
(筑波大学の前身)



## まとめ

計算科学は、21世紀の科学を牽引する最先端・  
最重要分野の一つ

- 科学者と計算機工学者の学際協力による、計算科学のターゲットを見据えた、超並列クラスタ計算機システムPACS-CSの開発・製作が進行中(本年7月稼動開始予定)
- PACS-CSのポテンシャルを最大限・集中的に活用し、最先端の素粒子及び物質・生命研究を推進予定

■ 超並列クラスタ計算機PACS-CSの概要

朴 泰祐 教授

システム開発担当

(計算機工学)

■ PACS-CSの拓く物質生命科学のフロンティア

押山 淳 教授

物質生命研究担当

(計算物質生命科学)





# 超並列クラスタPACS-CSの概要

2006年3月7日

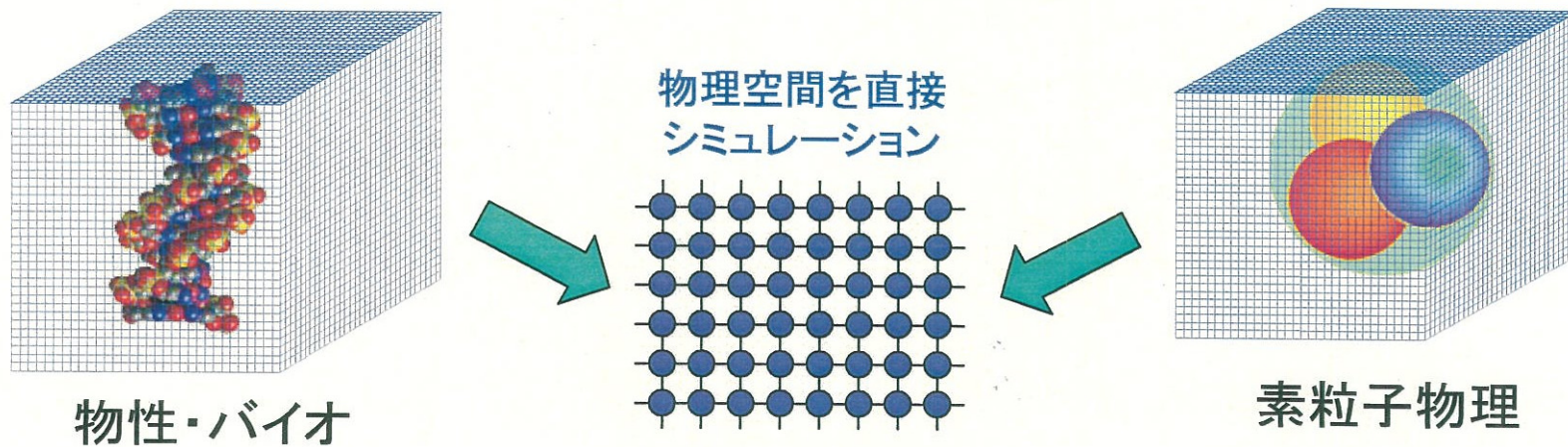
筑波大学 計算科学研究センター

# 計算科学研究センターにおける 高性能計算プラットフォームの戦略



## 超並列処理方式＋実空間アプローチ

- バランスの取れた適度な性能を持つ演算ノードを、近接通信に強いネットワークで結合  
⇒TFLOPSからPFLOPS、さらにその先まで性能を延ばすロードマップが実現可能
- 大規模シミュレーションの対象となる物理空間をそのままモデリング
- 遠距離通信を伴う波数空間への転換等を行わず直接計算

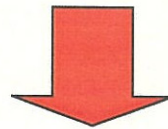




# なぜ実空間アプローチ＋超並列方式か？



- 演算ノードでピーク演算性能だけを追求してもメモリ性能・ネットワーク性能とのバランスが取れなければ実効性能が得られない
- 実空間アプローチは膨大な空間並列性を持つ問題空間を提供し、超並列処理方式に適合する
- 実空間アプローチに必要な本質的通信は多次元近接通信のみ



この手法を現実的な問題に適用し、超並列処理方式の有効性を実証し、超並列処理方式向けのアプリケーション開発を推進する必要がある



# PACS-CSのコンセプト

- **CPU性能:メモリ性能:ネットワーク性能**の性能バランスを極力保つことを強く意識したPCクラスタ
- 実空間アプローチによる超並列アプリケーションの開発
- 現在のコモディティ技術を最大限に利用



## コモディティ技術による超並列計算機(MPP)を作る

- チップ等の開発はしない
- コモディティCPU、コモディティネットワーク、コモディティソフトウェア
- ボード・レベルでの開発は行う
- 必要なドライバソフト等の開発は行う



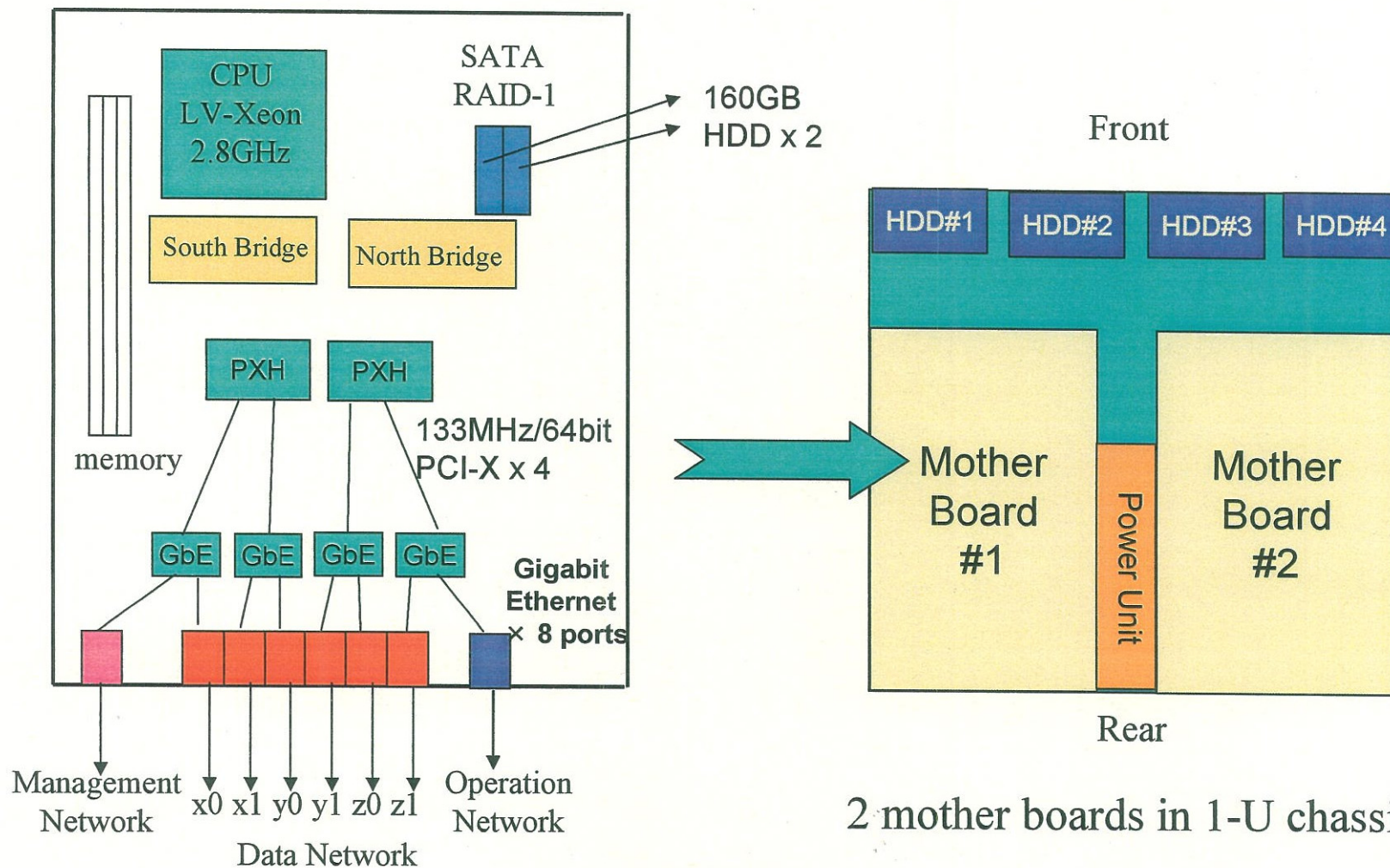


# ノード構成の特徴

- ノード当り1台のCPUのみ搭載
- CPUがノード上の全メモリバンド幅を占有可能
- 素粒子物理学・物性物理学の重要アプリケーションに対応
- 従来の2CPU／ノード構成のハイエンドPCクラスタと同じ実装密度を保つ  
⇒新規ボードの開発



# ボードの構成: 1ノード当たり1 CPU



2 mother boards in 1-U chassis

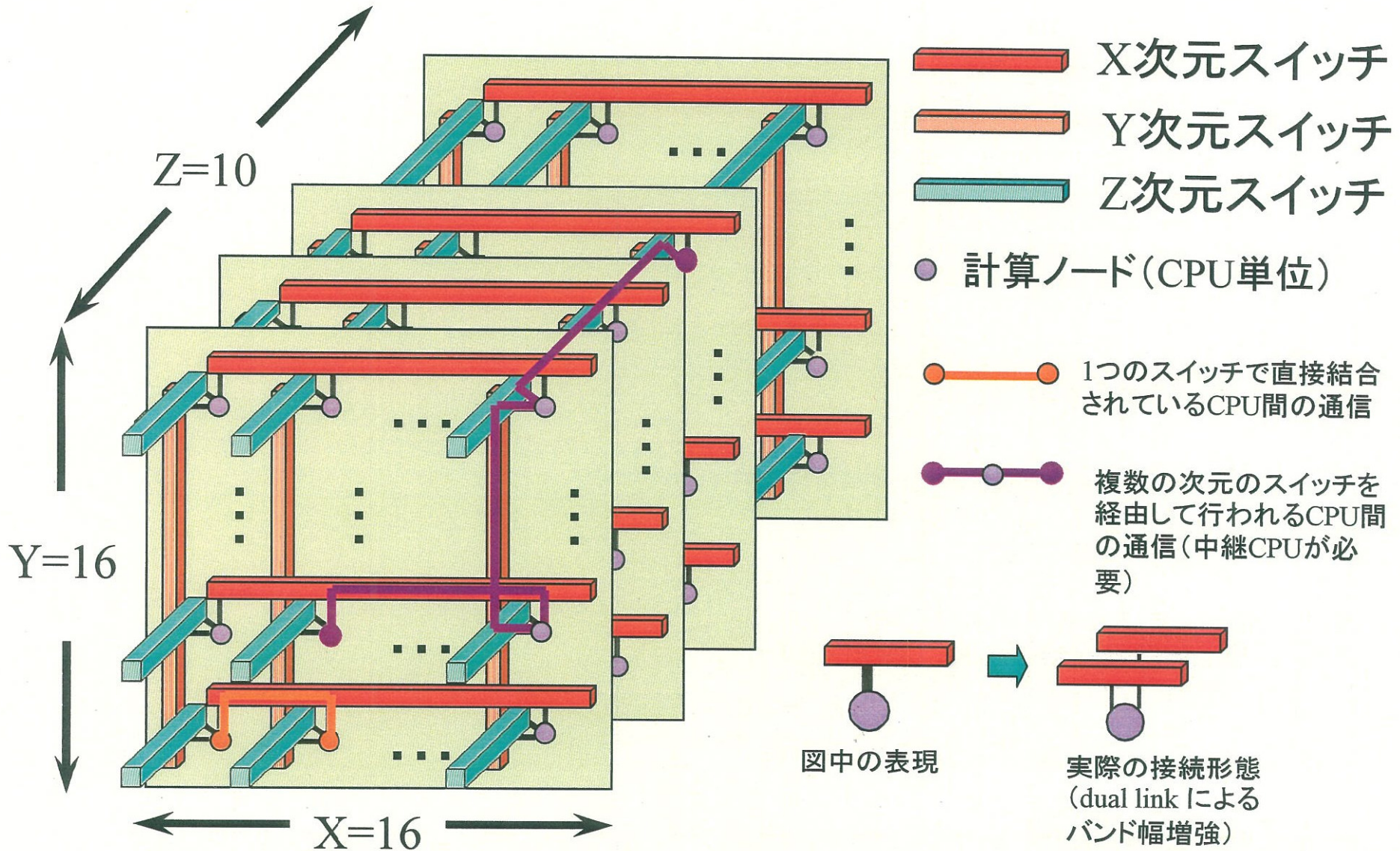




## ネットワーク構成の特徴

- ターゲットアプリケーションの絞込みによりネットワーク構成の無駄を省く
  - 実空間アプローチによる通信パターンの局所化
  - 近接通信と集合通信を高性能で実現
  - ランダムな大域通信が発生しないことを前提にするとネットワークのコストを大幅に削減可能
  - 対価格性能比に極めて優れている Gigabit Ethernet を積極的に利用
- ➡ Gigabit Ethernet トランクに基づくハイパクロスバ網

# ノード(CPU)間の論理的結合 (3次元ハイパクロスバ網) 2560 node 構成

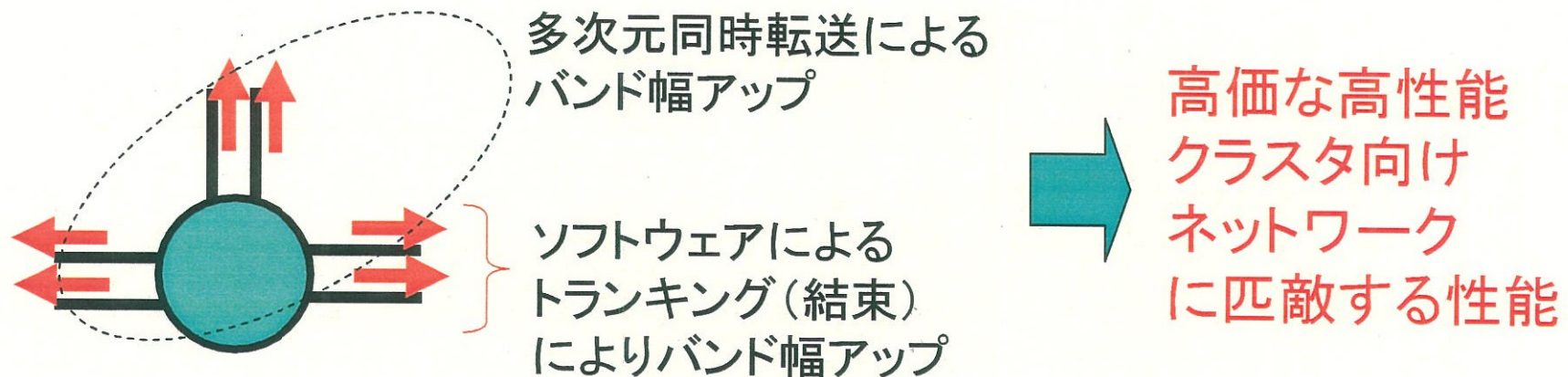




# GbEトランキングに基づくハイパクロスバ網



- 対価格性能比の高いコモディティハードウェアの有効利用
- ネットワークバンド幅(通信性能)
  - 高性能ネットワークをソフトウェア制御で束ねることにより大幅な性能アップ
  - 多次元方向への同時データ転送によりさらに性能を向上



# PACS-CSシステム諸元



ノード台数	2560 (16 x 16 x 10)
理論ピーク性能	14.3 Tflops
ノード構成	単一CPU / ノード
CPU	Intel LV Xeon EM64T, 2.8GHz, 1MB L2 cache
メモリ容量	2GB/ノード (5.12 TB/システム)
並列処理ネットワーク	3次元ハイパクロスバ網
リンクバンド幅	単方向 250MB/s/次元 単方向 750MB/s (3次元同時転送時)
ローカルHDD	160 GB/ノード (RAID-1)
総システムサイズ	59ラック
総消費電力(推定)	545 kW





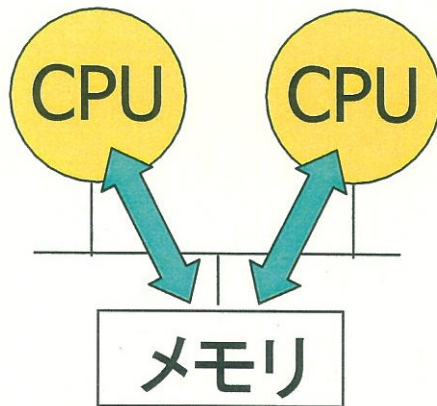
# 一般的なHPC向けクラスタとPACS-CSの比較

	一般的なHPCクラスタ	PACS-CS
ノード構成	SMP(共有メモリ)構成 ピーク性能重視	単一CPU構成 実効性能重視
ネットワーク	高価なクラスタ向けネットワーク(SAN)を利用	安価なGigabit Ethernetを束ねて多次元化して利用
実装密度	SMP構成の汎用PCサーバを利用して高密度化	専用ボードを開発し、一般のHPCクラスタと同等の実装密度を実現
ターゲット応用・モデリング	あらゆる演算・通信特性を持つアプリケーションを対象とする(特定の手法に特化しない)	大規模シミュレーションに実空間アプローチを適用し、汎用性を保ちつつ大規模化を実現
総合性能	Linpackベンチマークでは高性能だが一般応用では高性能は困難	Linpackベンチマークを含め、高いメモリ、ネットワークバンド幅を要求する問題に対応

# SMP構成 vs 単一CPU構成

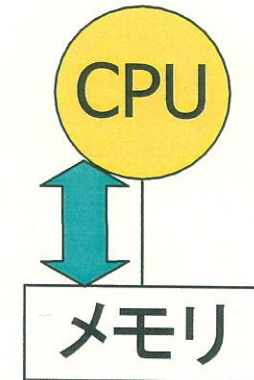


SMP構成(一般のクラスタ)



- ノード上のメモリを複数CPUで共有
- 頻繁なメモリアクセスを行うプログラムで性能低下
- 複数CPUでネットワークアクセスを共有するので性能低下

単一CPU構成(PACS-CS)

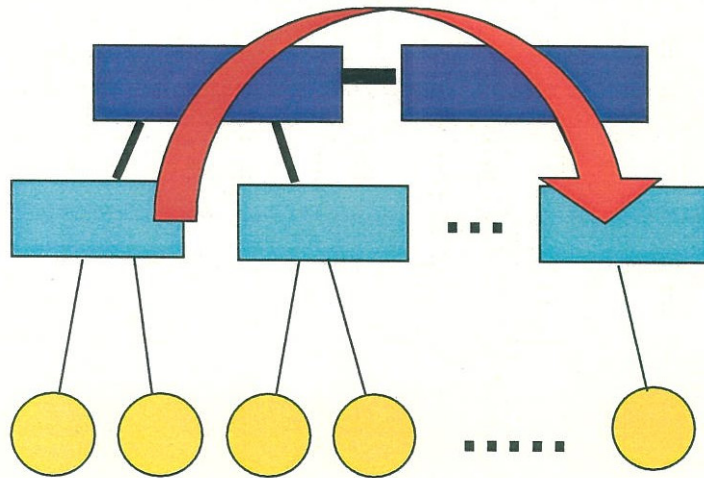


- ノード上のメモリを単一CPUで独占
- 頻繁なメモリアクセスを行うプログラムで性能向上
- 単一CPUでネットワークアクセスを占有



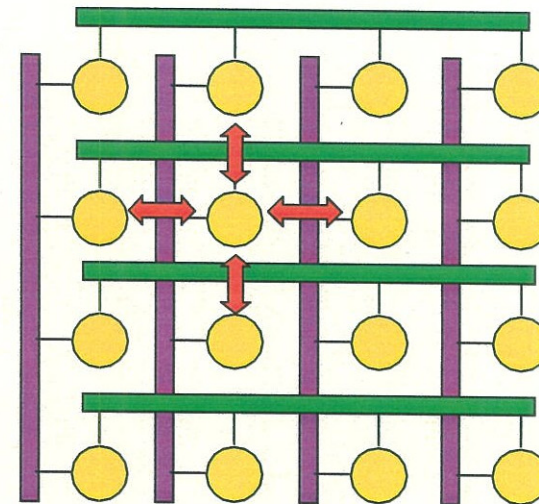
# ツリー型ネットワーク vs 3次元HXB

ツリー型ネットワーク  
(一般の高性能クラスタ)



- 木構造のルート付近で混雑発生
- 多次元格子状の近接通信であっても大域的通信が発生
- 数千ノード規模での実装でコストが大幅に増加

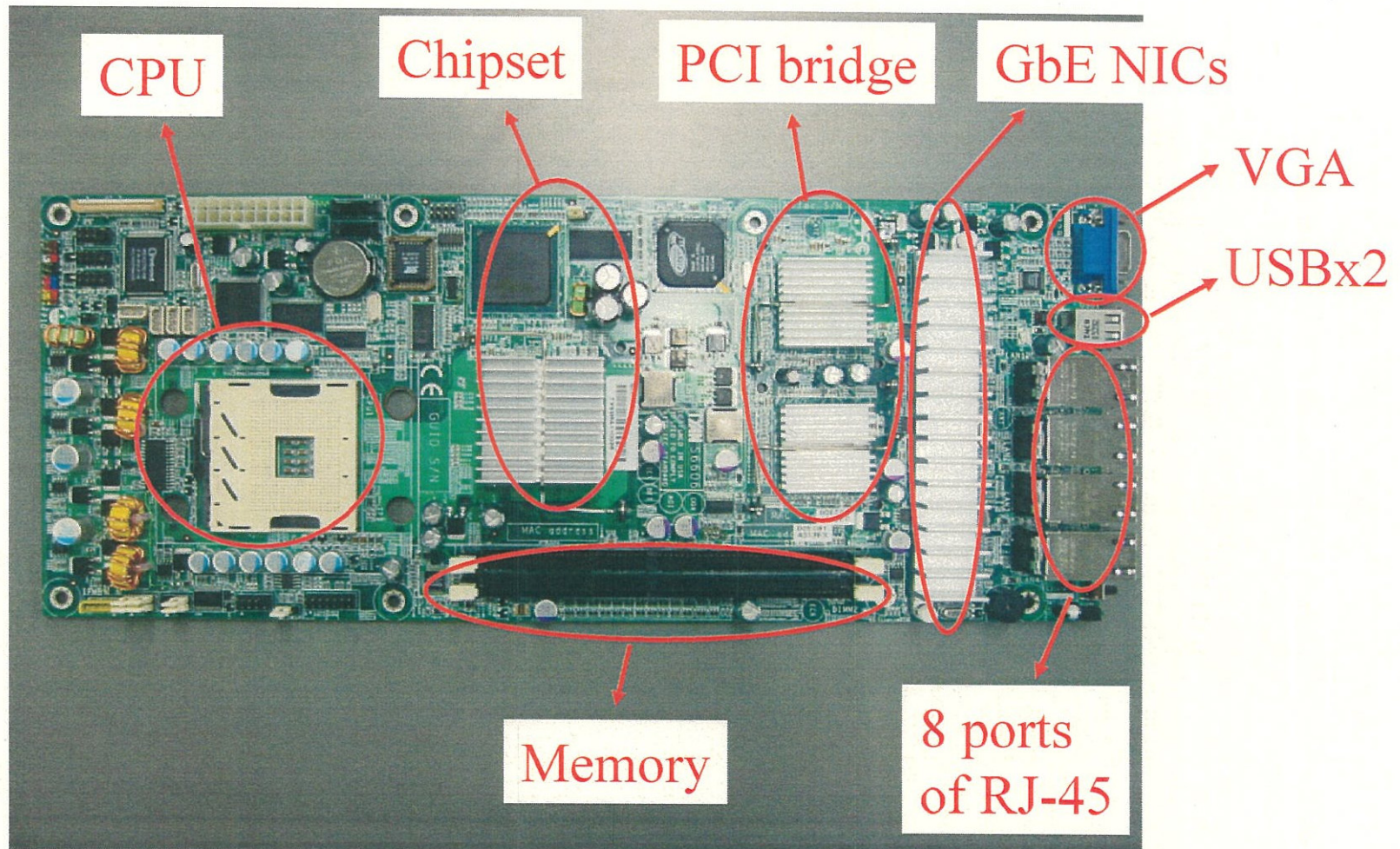
ハイパクロスバネットワーク  
(PACS-CS)



- 近接通信・集団通信ではボトルネックが発生しない
- 数千ノード規模に容易に拡張可能
- 耐価格性能比の高いネットワークを利用可能
- ノード上での通信メモリ効率が高い



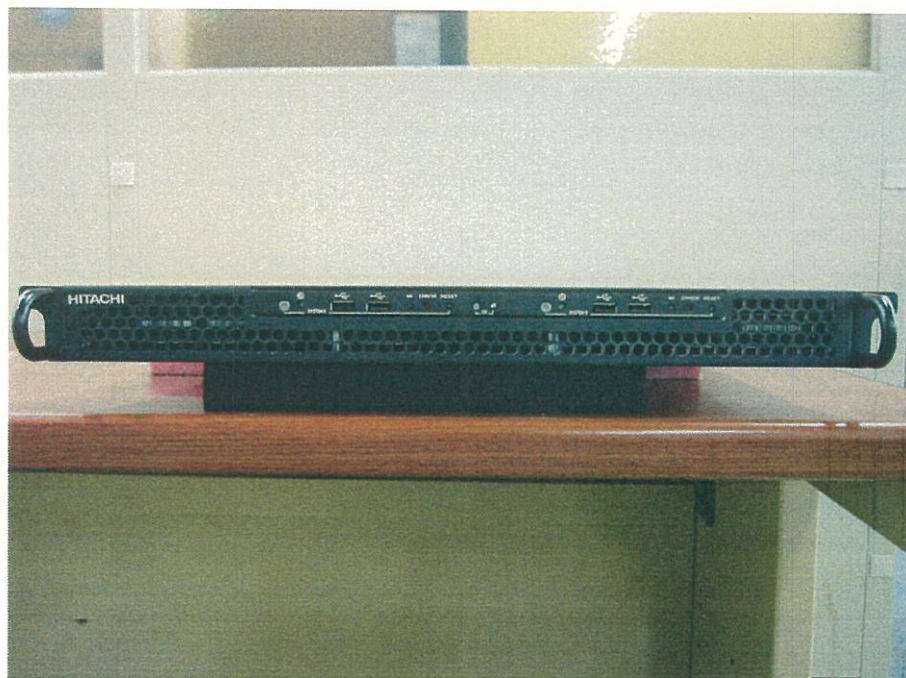
# 開発したマザーボード



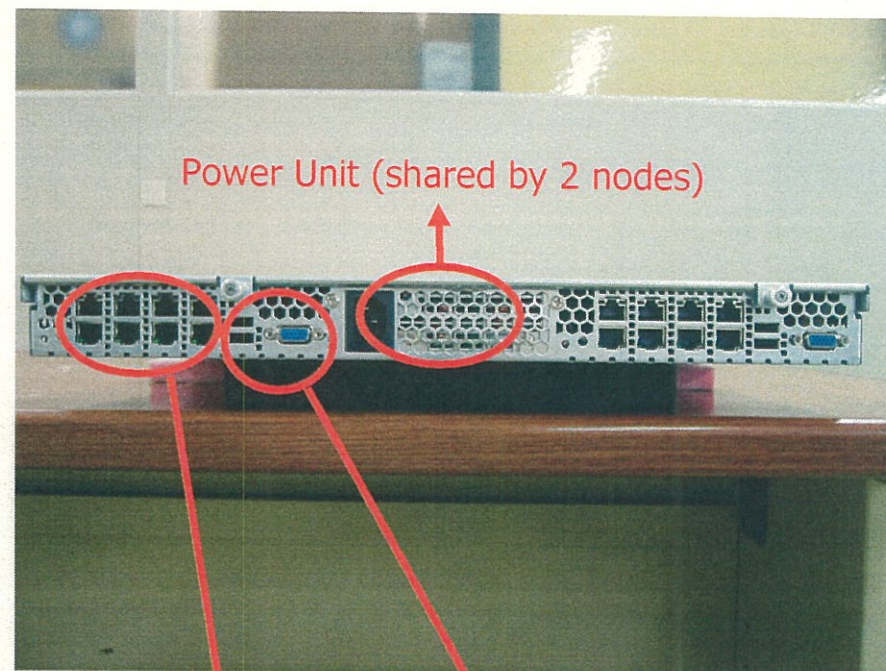


# 1ユニット(2ノード内蔵)の前面及び背面

## Front View

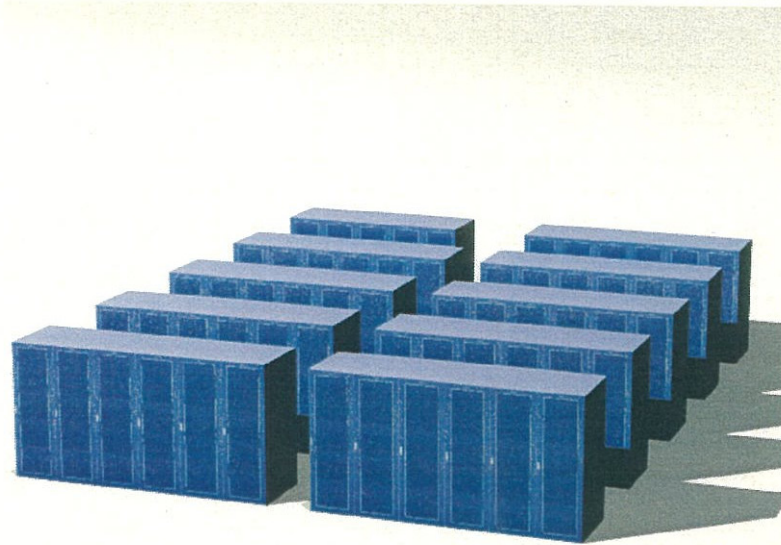


## Rear View

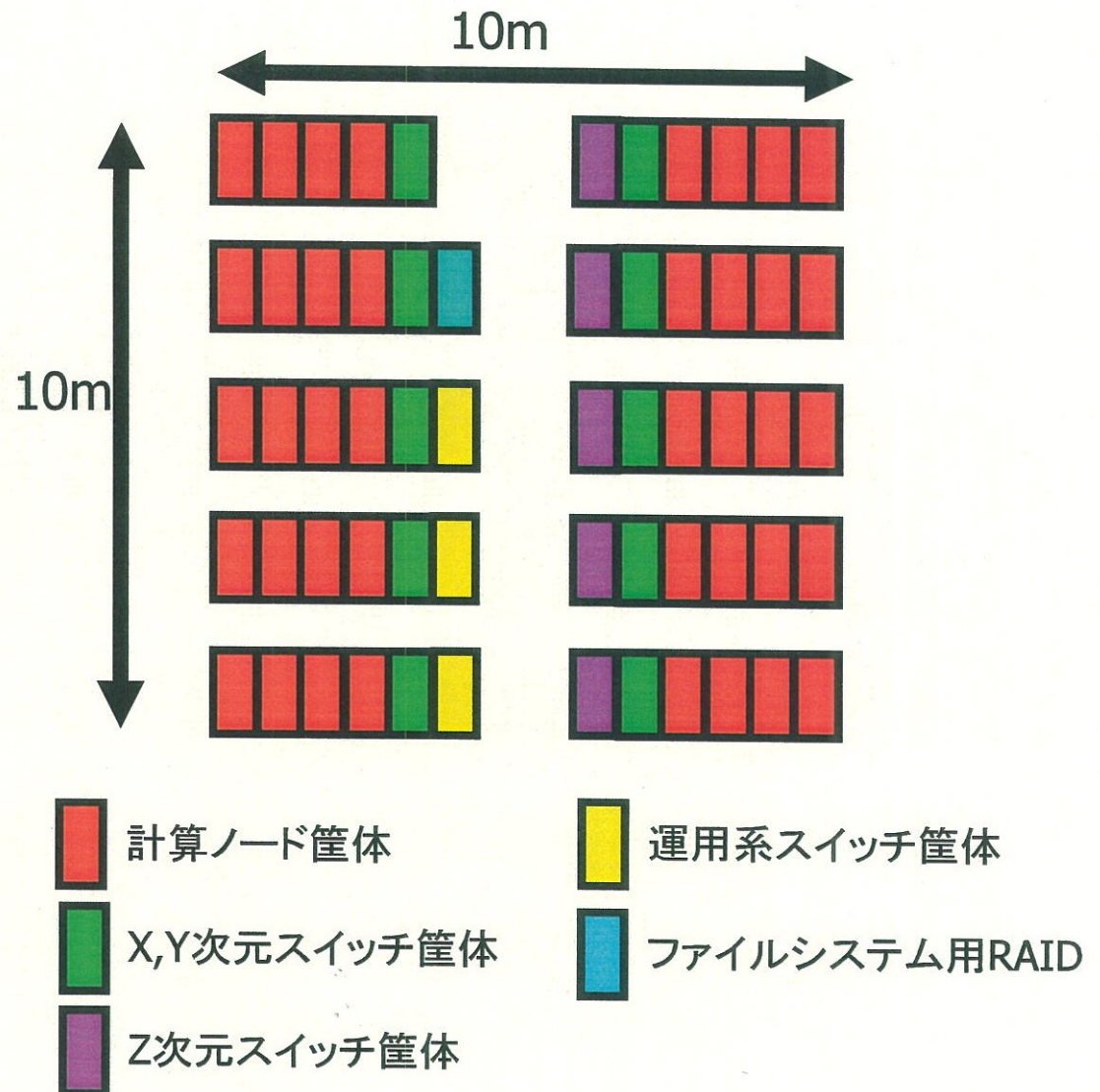




# 筐体配置と内訳



完成予想図



ノード筐体とスイッチ筐体  
は分離されている





# ソフトウェア

- Linux + SCore
  - PM/Ethernet-HXBドライバ  
(GbEトランク3次元ハイパクロスバ用の専用ドライバ)
  - パーティショニング、モニタリング
  
- MPIによる並列プログラミング
  - MPICH(標準)とYAMPII(東京大学開発)を切り替えて使用
  
- 言語: Fortran90, C, C++
  
- 数値計算ライブラリ: MKL



## 体制・スケジュール

- 産学連携によるシステム開発
  - ハードウェア: 日立製作所
  - ソフトウェア (PM/Ethernet-HXB): 富士通 (富士通研究所)
  
- 筑波大学とベンダー2社による三者体制
  - コモディティ技術を軸としたマルチベンダー開発の実現
  
- 予定
  - 2006年7月: 稼動開始





## まとめ

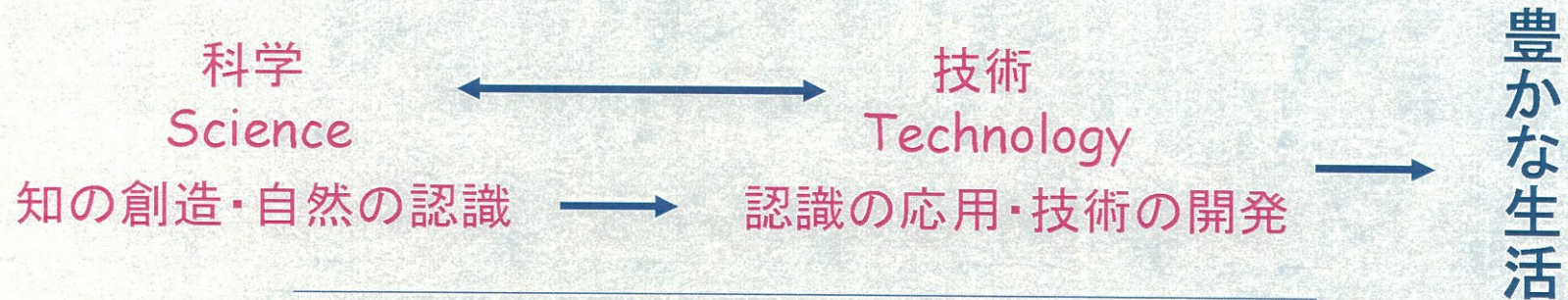
- PACS-CSは**コモディティ技術に基づくMPP**
- **実空間アプローチ**をコンセプトとするモデル&システム構築
- 「**CPU性能:メモリ性能:ネットワーク性能**」のバランスを重視
- アプリケーションの特性を生かしたコストパフォーマンスの高いネットワーク(**GbE trunked 3D-HXB**)
- 従来の dual CPU SMP ノードと同等の演算ノード**実装密度**
- 2560 CPU, 14.3 Tflops システムが**2006年7月に稼動開始予定**
- **SCoreクラスタ**として世界最大・最高性能
- Linpack性能だけに満足せず、**実アプリケーションにおける性能にコストをかける**



# PACS-CSの拓く 計算物質生命科学のフロンティア



# 計算物質生命科学



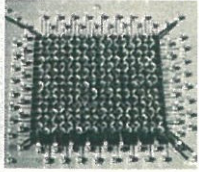
ナノサイエンス・ナノテクノロジー  
バイオサイエンス・バイオテクノロジー  
では

科学 技術  
Science Technology

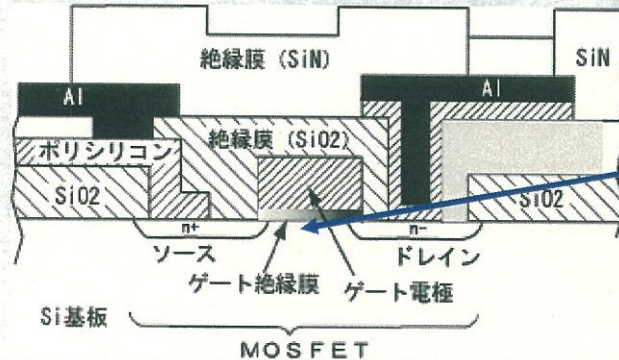
知の創造・自然の認識・認識の応用・技術の開発

実験あるいは理論に代わり、広範囲をカバーする  
計算科学・シミュレーションが果たす大きな役割





# たとえば... シリコンテクノロジーと計算科学

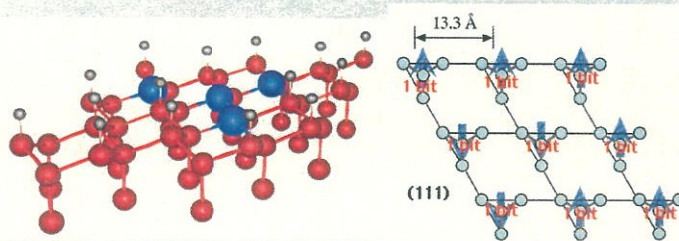


1 nm の厚さのゲート絶縁膜  
10原子のゲート長

粒子性と波動性を併せもつ、すなわち量子論的電子が運ぶ電流が、われわれの生活を支えている

デバイス性能・機能の設計は量子論の領域

## デバイス設計に計算量子科学が必要

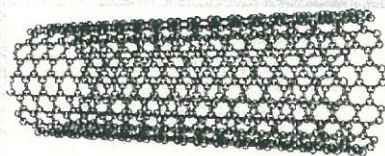


Si 表面上究極のメモリーユニット

Okada, Shiraishi & Oshiyama: *Physical Review Letters* (2003)

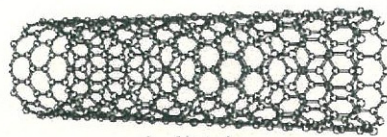


# たとえば... 炭素ナノチューブと計算科学



(n,n) tube

金属チューブ

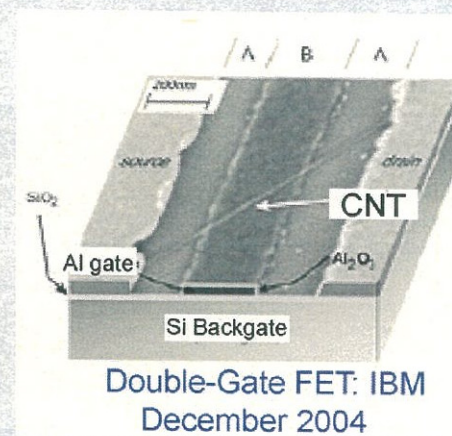


(n,0) tube

半導体チューブ

形状の僅かの違いで電子波動関数を制御

Hamada, Sawada & Oshiyama: Physical Review Letters (1992)



Double-Gate FET: IBM  
December 2004

ナノエレクトロニクスの誕生  
しかし、...

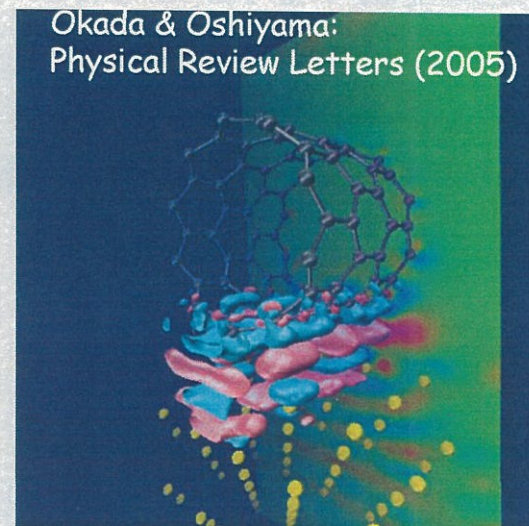


そしてこんな予測も:  
ナノチューブ磁石

4 Okada & Oshiyama: Physical Review Letters (2001)

基礎的物性解明の  
必要性  
科学と技術は表裏一体

チューブ金属界面での  
電子状態の改変



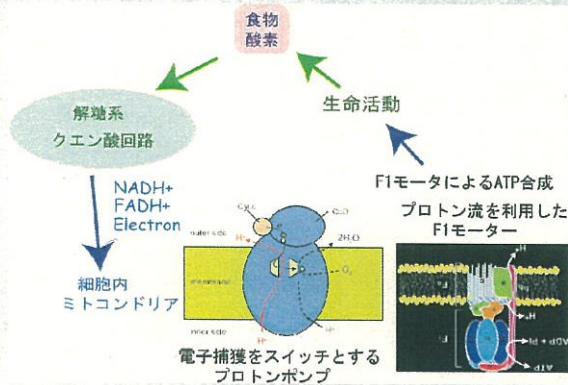
Okada & Oshiyama:  
Physical Review Letters (2005)

PACS-CSプロジェクト: 3/7/06 筑波大学

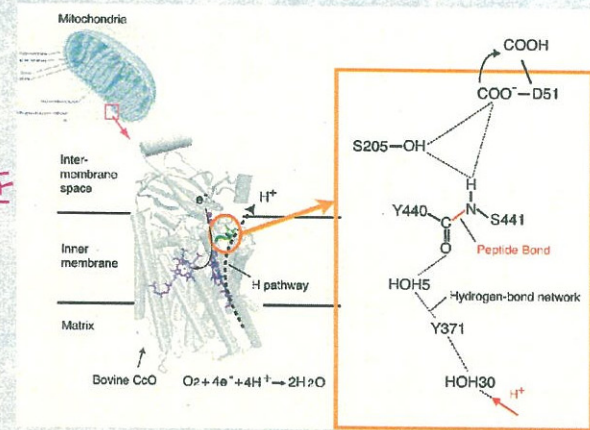


# 精巧なナノマシンとしてのバイオ 計算科学の役割

物を食べて呼吸をすることは、

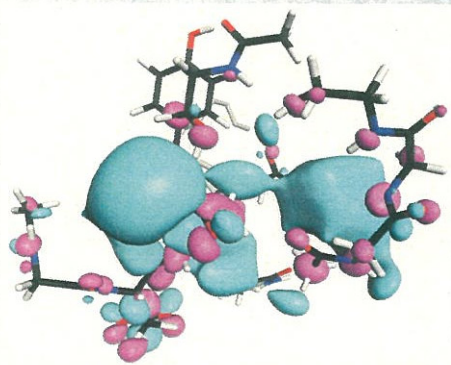


ミトコンドリア膜  
にあるシトクローム  
酸化酵素がプロトンを  
ポンプ  
そのプロトン流の  
エネルギーで  
体内電池ATPを合成



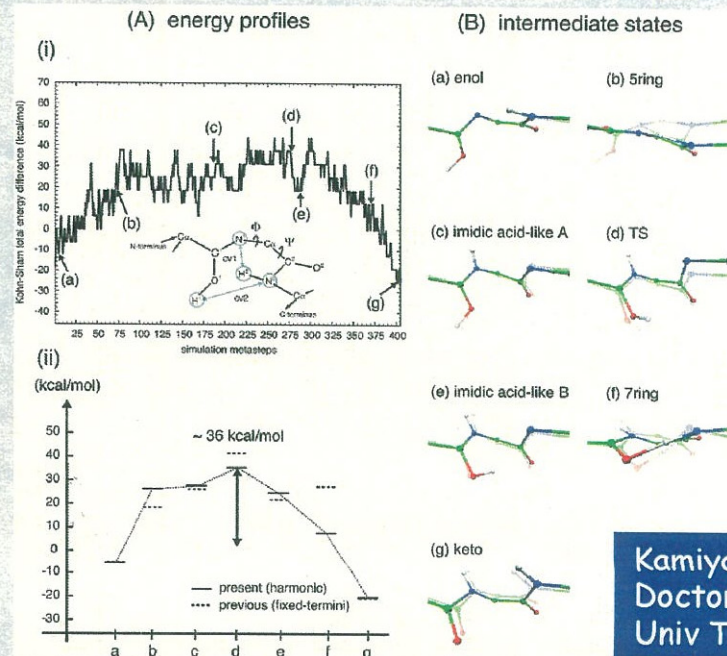
でも、どうやって？  
計算科学の出番！

電子の状態を調べ、



プロトンの道と  
その勾配を明らかに

高効率エネルギー  
変換の謎にせまる



Kamiya:  
Doctor Thesis  
Univ Tsukuba



# 豊かなナノ・バイオ世界

ナノバイオ世界は量子の世界  
量子性が物の機能を決めている

ナノバイオを  
つくる みる あつめる しる

実験、理論に代わる第3のアプローチ  
計算科学でチャレンジ



# 国内外の計算物質科学と計算生命科学

## ➤ 国内

- 東北大学: 川添グループ
- 東京大学: 常行グループ、杉野グループ、藤原グループ
- 大阪大学: 赤井グループ、吉田グループ
- 広島大学: 小口グループ
- 産総研: 寺倉一池庄司グループ
- 物・材機構: 大野グループ
- 名古屋大学: 岡本グループ

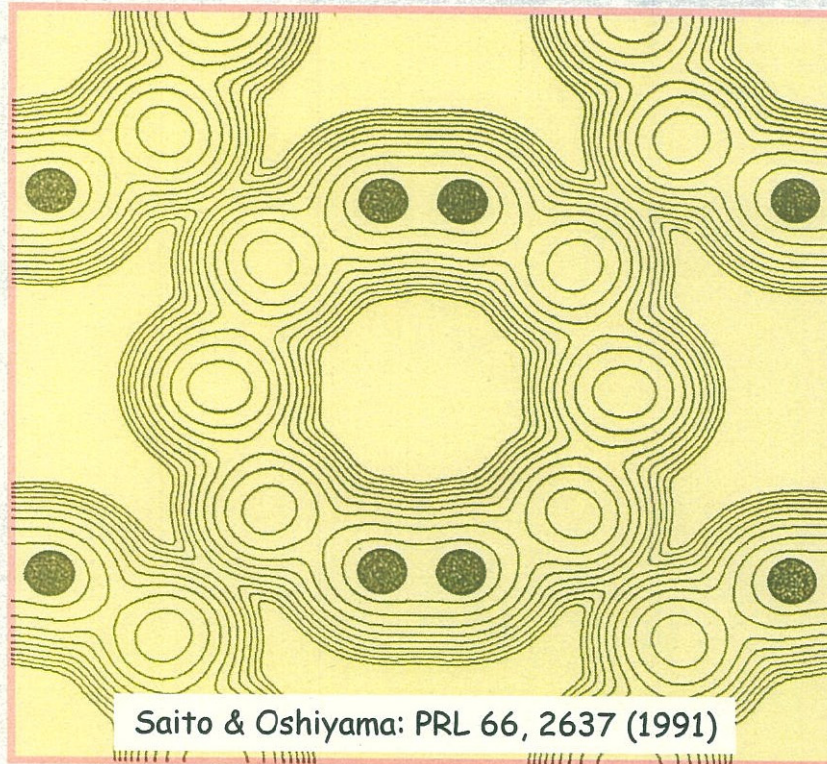
## ➤ 国外

- Swiss Fed Inst Tech (ETH): Parrinello グループ
- Ecole Polytech Fed de Lausanne (EPFL): Roethlisberger グループ
- Princeton Univ: Car グループ
- UC Berkeley: Louie グループ
- . . . .

計算機工学との連携により、最適な計算機を開発し、  
物質と生命の双方を量子論的にアタックし、  
1万原子群の量子シミュレーションを行うのはつくばが初めて



## 少し具体的に...



0.7 nm

$C_{60}$  固体中の電子密度の等高線図  
ナノサッカーボールを輪切りしたところ

コンピュータ内にボックスを用意し、  
原子核をばらまく

さっきの変分方程式を解き、電子  
密度を計算する。

電子密度がわかれば全エネル  
ギーも計算できる。

全エネルギーを原子核の座標で微  
分すれば、その配置での原子核に  
働く力が計算できる。

力に沿って原子核を動かせば安定  
配置が求まる。

あるいは原子核に初速度を与え、  
運動を追えば、動力学が計算でき  
る(Car-Parrinello法)



## 少し専門的に...

- RSDFT (Real Space Density Functional Theory)
  - 量子論の基礎方程式をできるだけ正確に、そしてコンピュータ上でできるだけ速く解く

$$\frac{\delta E}{\delta \psi_i^*(\mathbf{r})} = H\psi_i(\mathbf{r})$$

### - PACS-CS上でのチャレンジと適合性

- 超並列アーキテクチャ計算機での物質生命計算
- 融合的研究: 物理、生物、化学と計算機工学との共同
- RSDFTとPACS-CSの相性
  - *FFT-Free* ⇒ 通信負荷の最小化
  - 任意の境界条件
  - 系の局所性の利用 (オーダー  $N$ )



# つまり...

超並列計算機PACS-CS上での  
物理、化学、生物、計算機工学... の研究者による  
学際的研究プロジェクト

それにより、

ナノ・バイオ世界のことわりを明らかにし、  
それに基づいて  
新しいナノバイオ物質の量子デザインをめざす