



「京」の整備状況

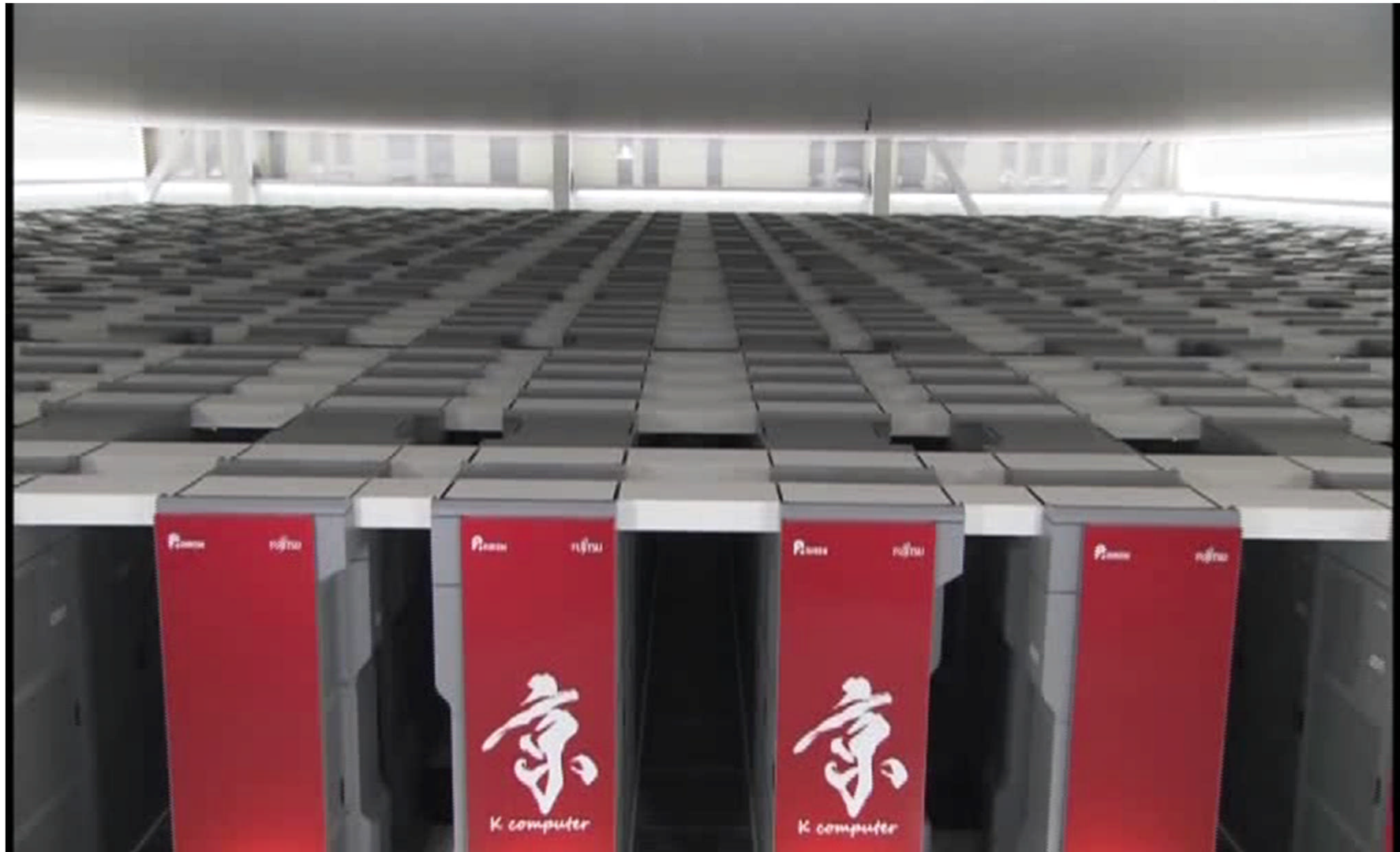


平成24年6月14日

理化学研究所
次世代スーパーコンピュータ開発実施本部

渡辺 貞

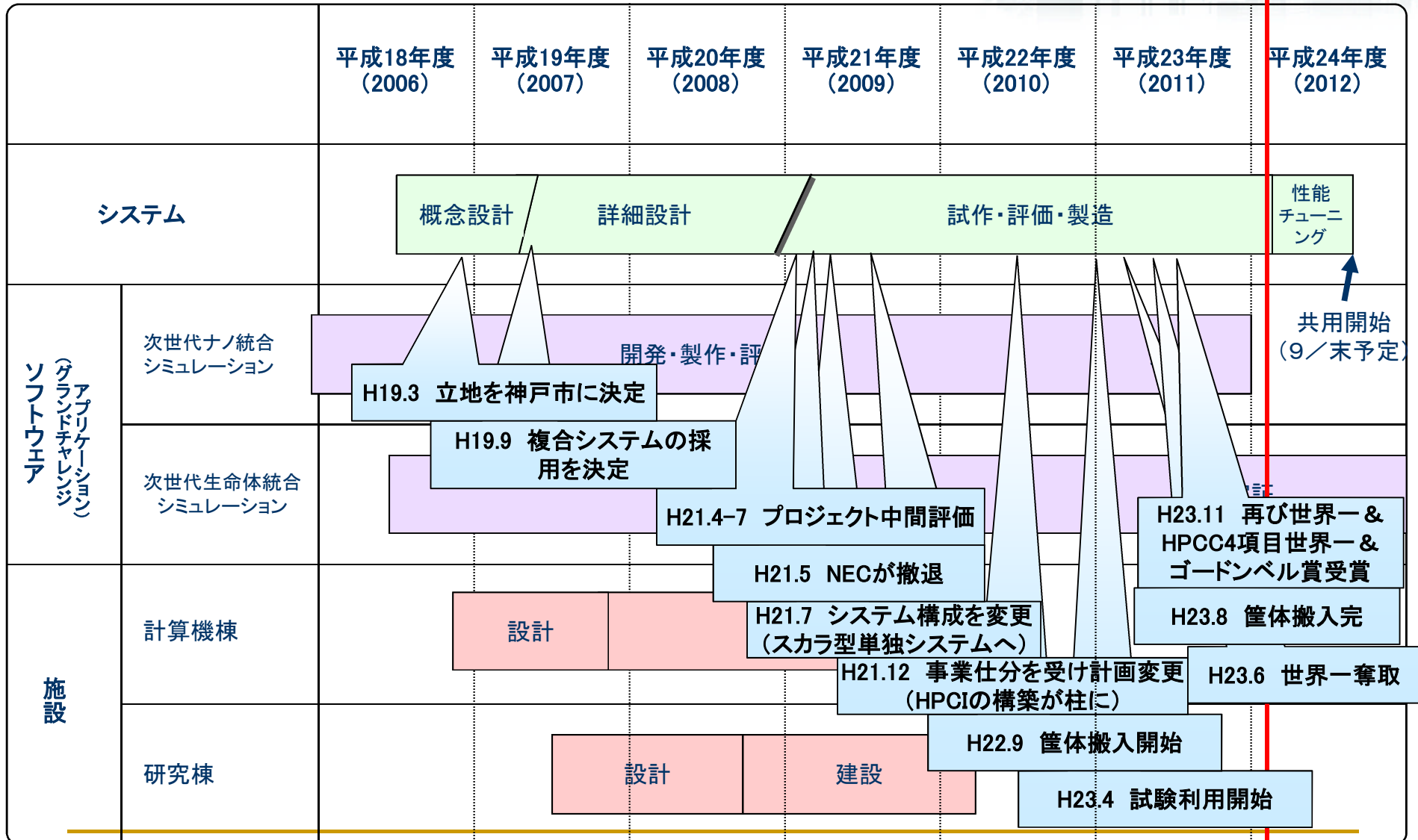
スーパーコンピュータ「京」の開発



開発スケジュール(平成18年度－平成24年度)



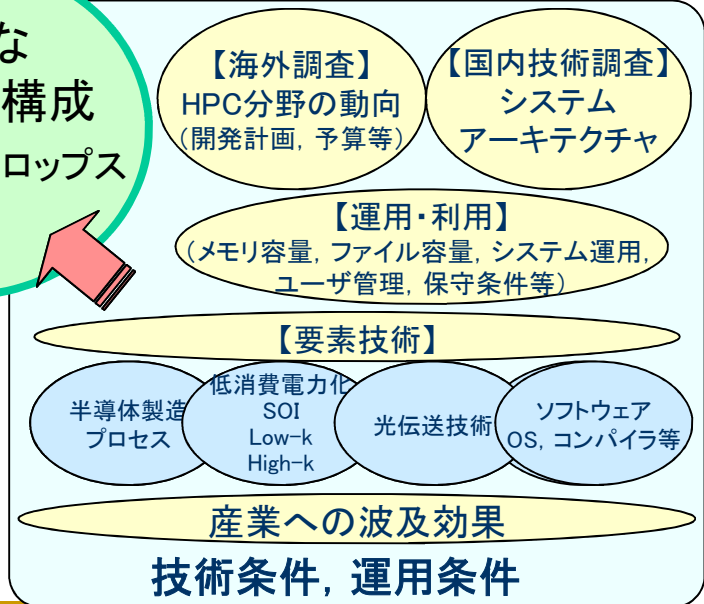
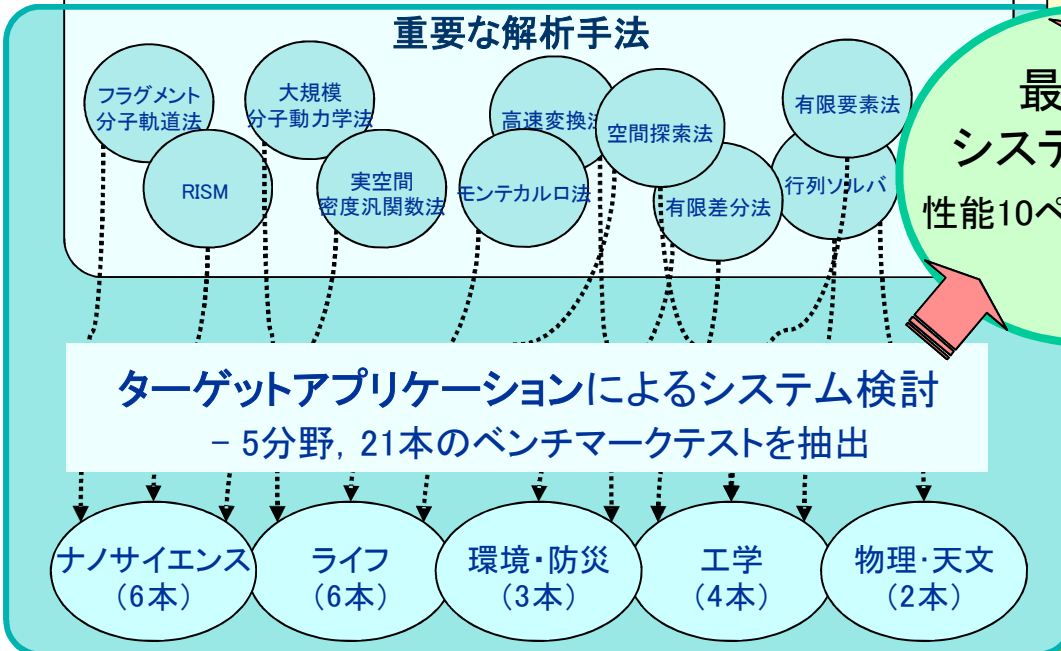
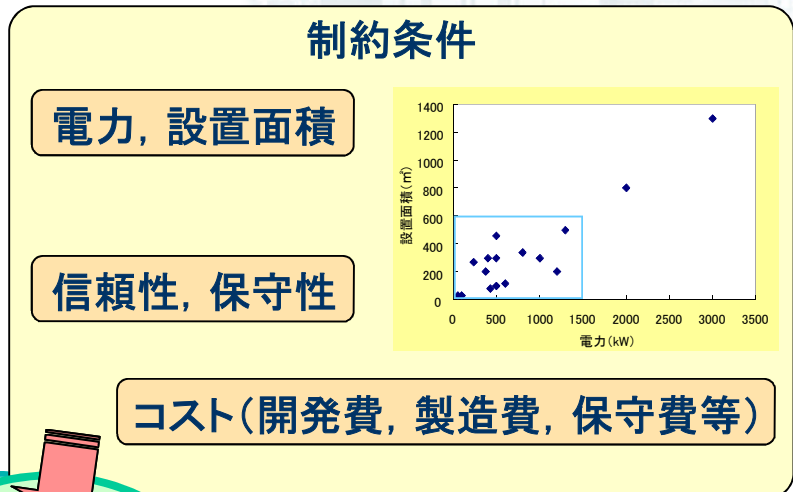
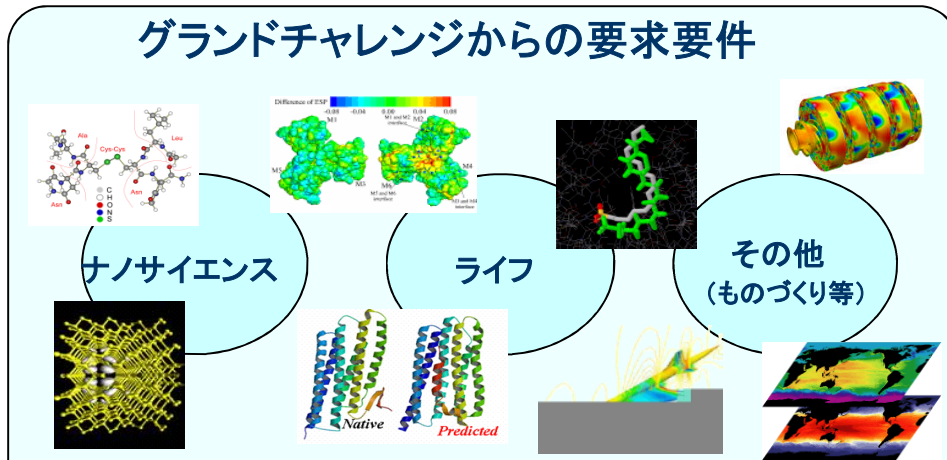
現在





システム概要

世界最高レベルの スーパーコンピューティング研究開発基盤を目指して



システム開発目標



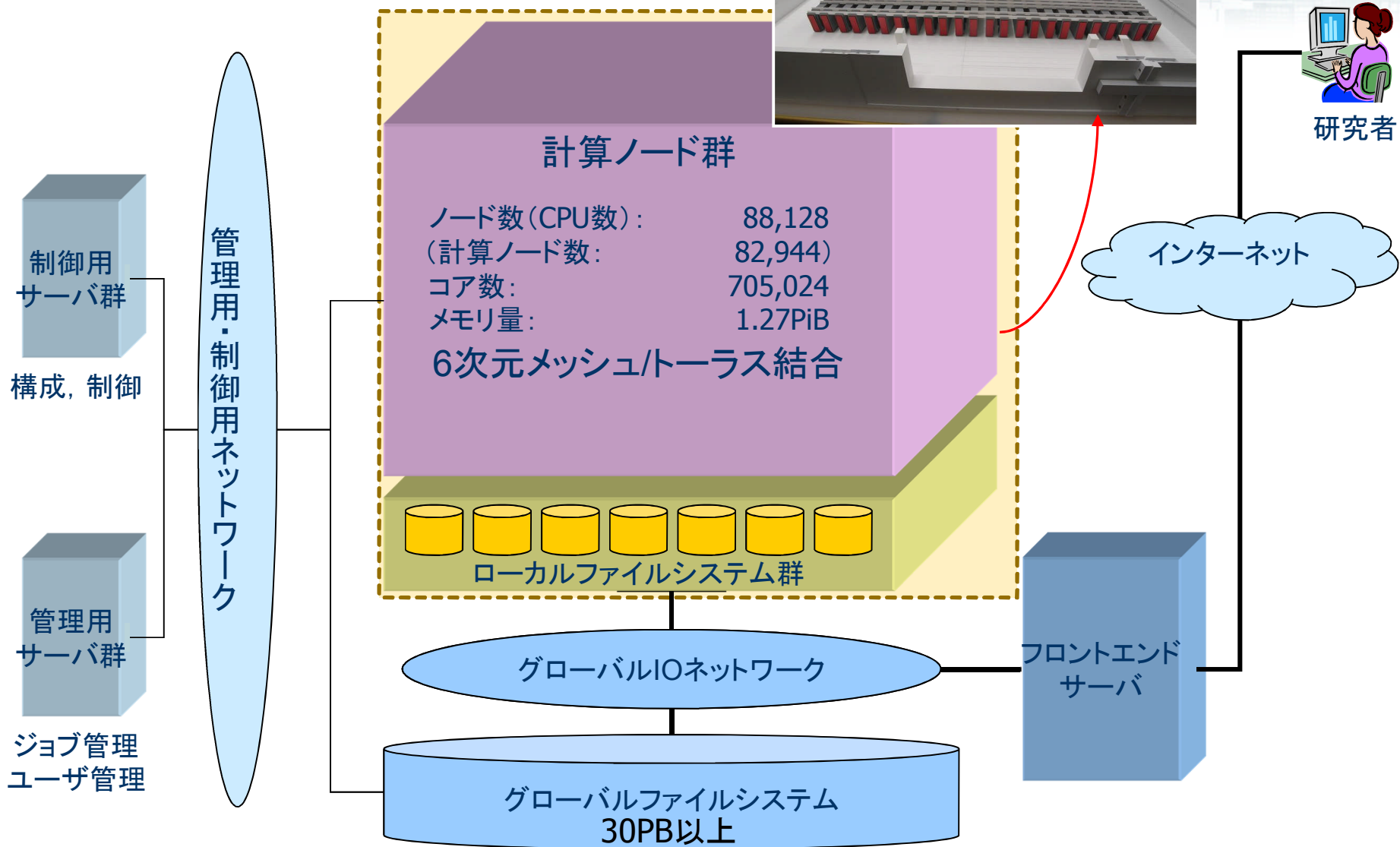
- LINPACK10ペタフロップスの達成
- 実アプリケーションでペタフロップスの性能達成
- 低消費電力システム
- 高信頼性・高可用性システム
- 運用性に優れ、使い易いシステム

システムの特長



- アプリケーションの超高速実行が可能なシステム
 - ペタフロップス級のアプリケーション実行性能
 - LINPACK 10ペタフロップス（世界最高クラス）
 - ハイパフォーマンスコンピューティング向けCPUを採用
 - ・ マルチコアCPU（8コア）,演算アクセラレータ付き（SIMD機構）,レジスタ数増強
 - 高速・高信頼性ネットワーク（Tofu）
- 高性能・低消費電力CPU（SPARC64 VIIIfx）を採用
 - 45nm CMOS プロセス
 - 低消費電力/高信頼性:58W@30°C
 - 2.2GFlops/W:ワット当たり世界最高クラス
- 高信頼性システム
 - 「故障しにくい」,「1か所故障しても全てが止まらない」,「故障箇所はすぐ直せる」
 - ネットワークの高信頼性化：自動代替経路, 自動再構成機能
 - サーバ二重化, ファイル経路二重化など
- 運用性に優れた使いやすいシステム
 - 世界標準のソフトウェア環境

「京」のシステム構成概要



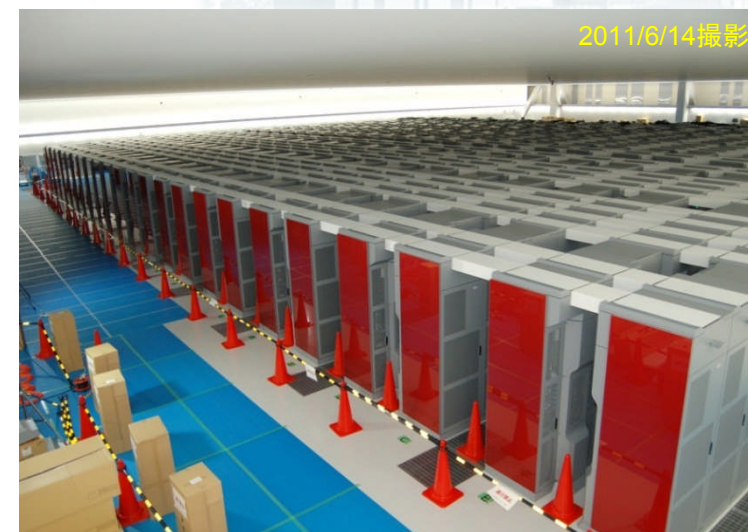


整備状況

「京」の整備状況と予定



- 平成22年9月29日に計算機本体(筐体)の搬入開始.
- 平成23年4月より, 整備中の計算機本体の一部(16筐体)を, アプリケーション・ユーザ(グランドチャレンジ及び戦略分野の一部のユーザ)に提供し, 試験利用を開始.
- 平成23年6月20日 ISC'11(国際スーパーコンピューティング会議2011, 独・ハンブルク)にて, 第37回TOP500リストで第一位を獲得.
- 平成23年8月本体機器の搬入完, システムソフト評価を継続中
- 平成23年11月2期連続で世界一位
- 平成23年11月ゴードン・ベル賞受賞
- (予定)平成24年6月システム完成
- (予定)平成24年9月末共用開始



システム設置状況

平成23年11月
LINPACK 10ペタフロップス達成

性能値	10.51ペタフロップス
理論性能	11.28ペタフロップス
実行効率	93.2%
問題サイズ	11,870,208
実行時間	29時間28分



TOP500リストで2期連続世界第一位！ (LINPACK性能テストで、10.51PFlops)



- 世界第一位の評価
 - ダントツの一位
第2位の4倍以上の性能
2位～8位を足した性能を上回る
 - 高い信頼性
高負荷下、29時間以上連続走行
 - 高効率システム
効率93%(多くのアプリで高性能)

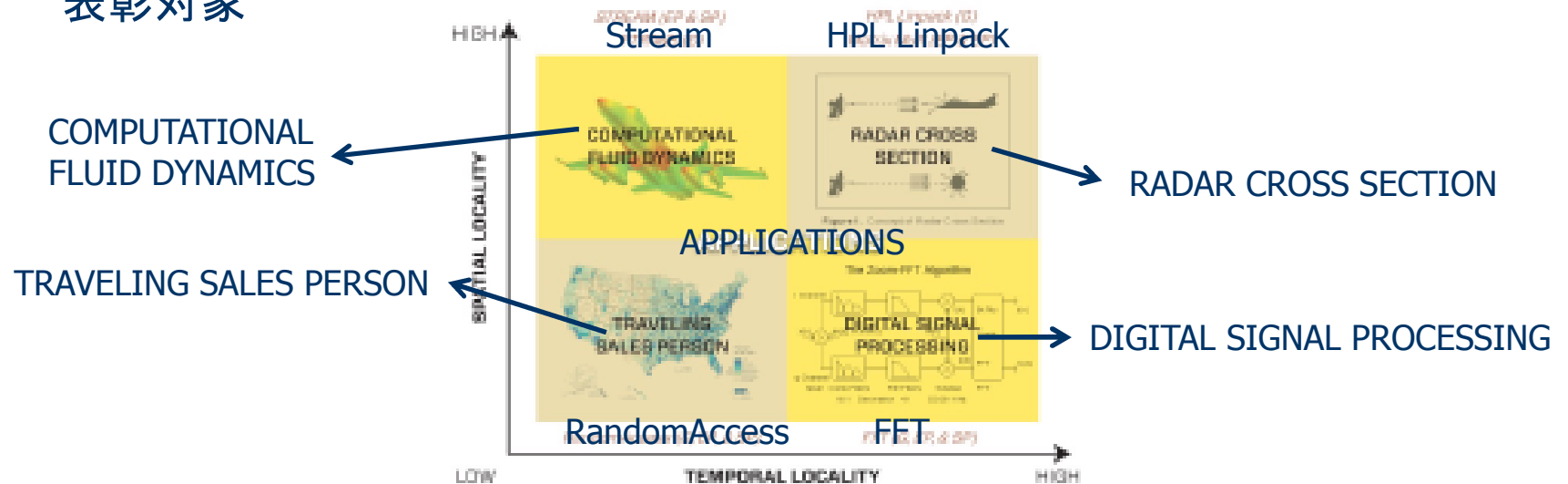


順位	システム名称	サイト	ベンダー	国名	Linpack演算回数 (テラ FLOPS)
1	K computer	理研 計算科学研究機構	Fujitsu	日	10,510
2	天河1A号	天津スパコンセンタ	NUDT	中	2,566
3	Jaguar	オークリッジ研	Cray	米	1,759
4	Nebulae (星雲)	深圳スパコンセンタ	Dawning	中	1,271
5	TSUBAME2.0	東京工業大学	NEC/HP	日	1,192
6	Cielo	ロスアラモス研 (サンディア研)	Cray	米	1,110
7	Pleiades	NASA・エイムズ研究センタ	SGI	米	1,088
8	Hopper	ローレンス・バークレイ研	Cray	米	1,054
9	Tera-100	原子力庁 (エネルギー研)	Bull	仏	1,050
10	Roadrunner	ロスアラモス研	IBM	米	1,042

HPC Challenge Award (四冠)@SC11



- HPCチャレンジベンチマークは、科学技術計算で多用される計算パターンから抽出した28項目の処理性能によって、スパコンの総合的な性能を評価するベンチマークプログラム
 - このうち特に重要なベンチマークが以下の4つ：
 - Global HPL (大規模な連立1次方程式の求解における演算性能)
 - Global RandomAccess (並列プロセス間でのランダムメモリアクセスの性能)
 - EP STREAM (Triad) per system (多重負荷時のメモリアクセス性能)
 - Global FFT (高速フーリエ変換の性能).
 - The HPC Challenge Class 1 Awardsは上の4つのベンチマークの1位が表彰対象

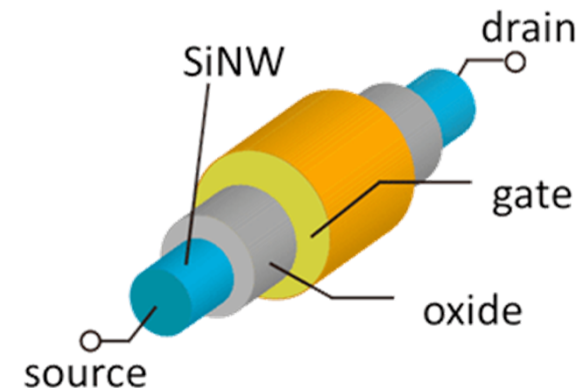


HPC Challenge Award 四冠 → バランスのとれたシステム、様々なアプリで高性能

ゴードン・ベル賞(最高性能賞)@SC11



- "First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer"
 - 107,292個のシリコン原子からなるナノワイヤ(直径20ナノメートル、長さ6ナノメートル)に対する、量子論に基づく電子状態計算(世界初)を行い、実効性能3.08ペタフロップス(実行効率 約43.6%)を達成
 - 電界効果トランジスタの電子チャネルの状態計算
 - 約10,000個から40,000個のシリコン原子からなる、円、楕円、ダンベルなどさまざまな断面形状を持つ長さ約10ナノメートルのナノワイヤの電子状態を解明し、電子輸送の特性がナノスケールの形状に大きく依存することを初めて明らかにしました。

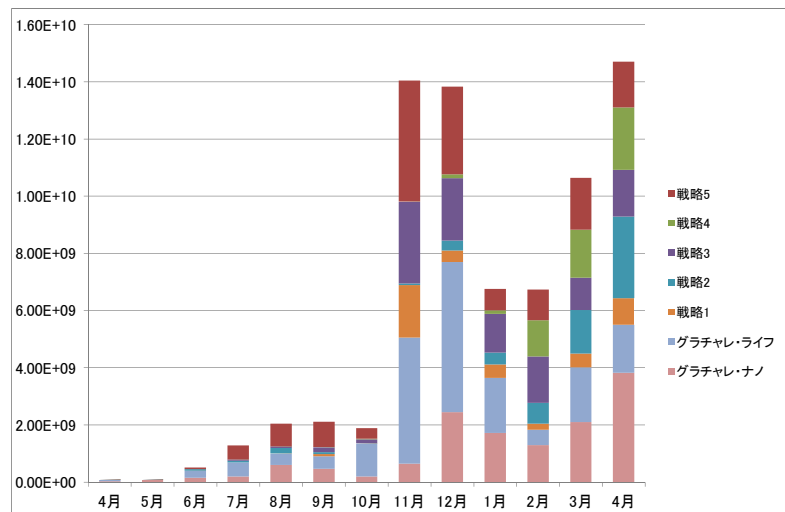


試験利用状況

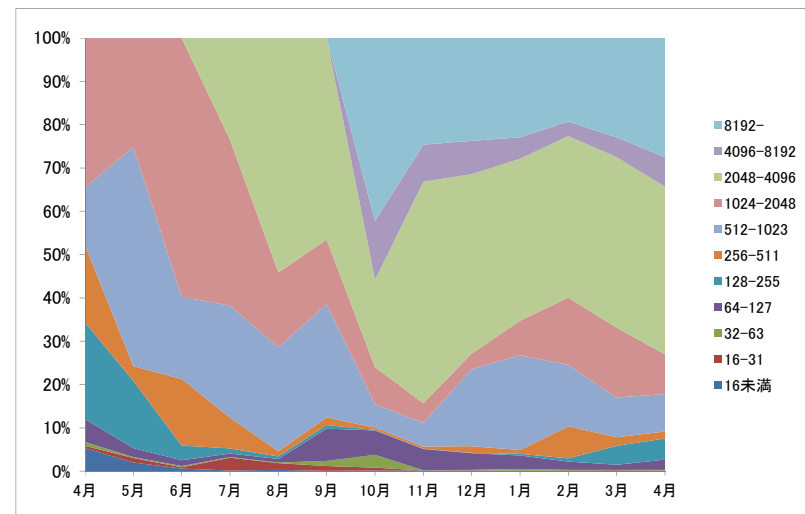


- 平成23年4月よりアプリケーション開発者に対し、「京」の資源の一部を提供
 - システム資源を順次拡大し、平成24年5月より最大5.9ペタフロップス構成を利用
- 現在、30本以上のアプリケーションが、1万ノード(約1.6PFLOPS)で十分な並列化を達成
 - うち19本は、2.5万ノード(約3.2PFLOPS)に到達

ジョブの内訳(ノード時間積ベース)



ノード拡大割合の時系列変化



最適化作業実施中のアプリケーション例



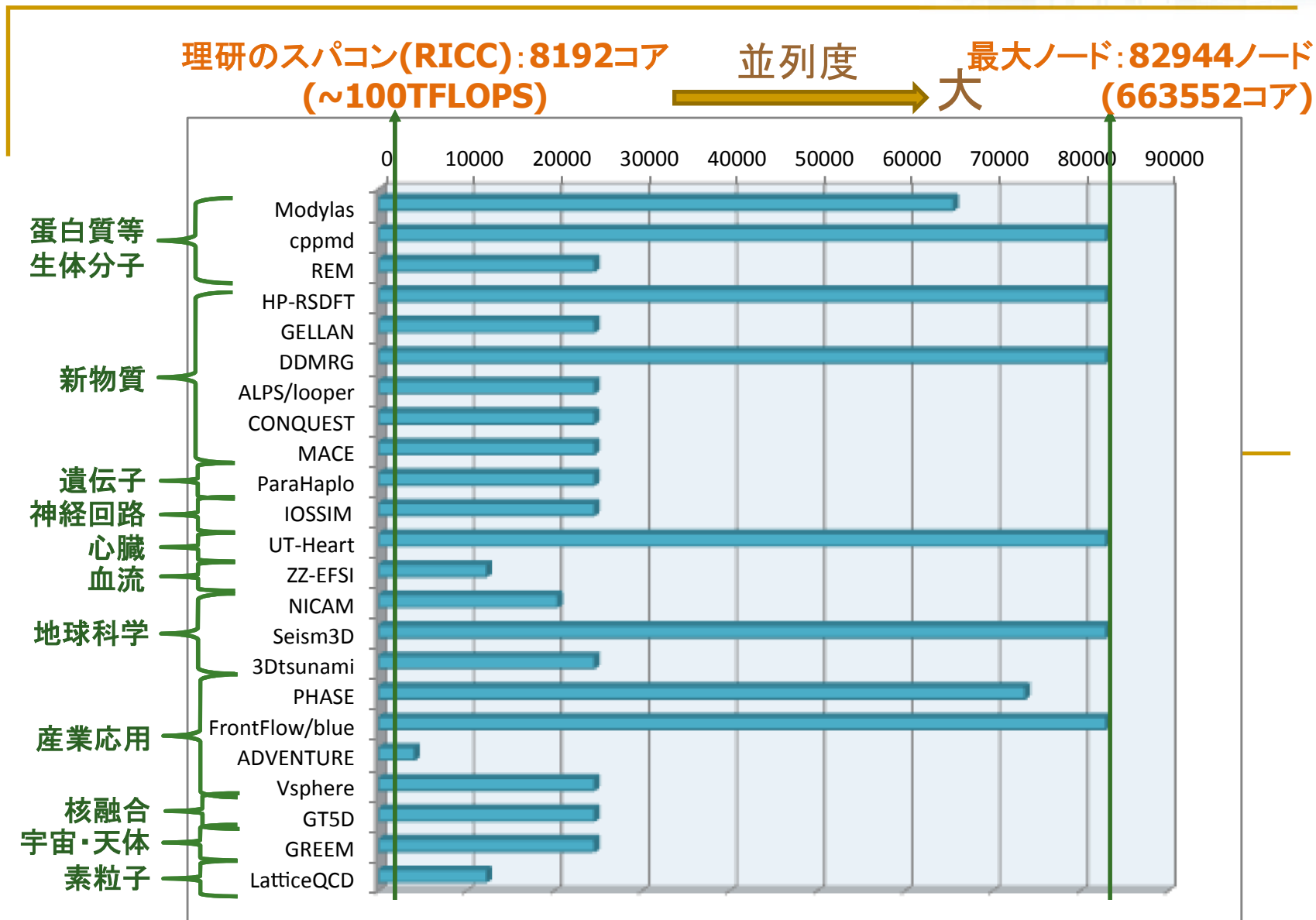
グランドチャレンジアプリケーション開発事業 (ナノ)	実空間第一原理ナノ物質シミュレータ(ゴードンベル賞)
	大規模並列量子モンテカルロ法
	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
	動的密度行列繰り込み群法
	液体の統計力学理論計算
	高速量子化学計算ソフト
グランドチャレンジアプリケーション開発事業 (ライフ)	全原子分子動力学計算によるタンパク質・細胞動態シミュレーション
	マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション
	全ゲノムをカバーするSNP遺伝子型を用いた高速計算のための関連解析手法の開発
	無脊椎動物嗅覚系シミュレーション
	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法による生体分子構造サンプリング
戦略分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤	HIFUシミュレータ
戦略分野2 新物質・エネルギー創成	創薬応用シミュレーション
	次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムの開発
戦略分野3 防災・減災に資する地球変動予測	第一原理計算に基づく物質の低エネルギー有効モデル導出と有効モデルの多変数変分モンテカルロ法を用いた解析
	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測
戦略分野4 次世代ものづくり	防災・減災に資する気象・気候・環境予測研究
	3次元不均質場での地震波と津波の伝播シミュレーション
戦略分野5 物質と宇宙の起源と構造	階層型直交格子を用いた実用複雑系流体解析システムの開発
	原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションの研究開発
戦略分野5 物質と宇宙の起源と構造	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定
	ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成

ターゲットアプリケーション(重点化アプリケーション)の評価・実証

プログラム名	分野	アプリケーション概要	期待される成果	手法
NICAM 20,480ノード実行	地球科学	全球雲解像大気大循環モデル	大気大循環のエンジンとなる熱帯積雲対流活動を精緻に表現することでシミュレーションを飛躍的に進化させ、現時点では再現が難しい大気現象の解明が可能となる。	FDM (大気)
Seism3D 82,944ノード実行	地球科学	地震波伝播・強震動・津波シミュレーション	既存の計算機では不可能な短い周期の地震波動の解析・予測が可能となり、木造建築およびコンクリート構造物の耐震評価などに応用できる。	FDM (波動)
PHASE 73,728ノード実行	ナノ	平面波展開第一原理電子状態解析	第一原理計算により、ポスト35nm世代ナノデバイス、非シリコン系デバイスの探索を行う。	平面波 DFT
FrontFlow/Blue 82,944ノード実行	工学	Large Eddy Simulation (LES)に基づく非定常流体解析	LES解析により、エンジニアリング上重要な乱流境界層の挙動予測を含めた高精度な流れの予測が実現できる。	FEM (流体)
RSDFT 82,944ノード実行	ナノ	実空間第一原理電子状態解析	大規模第一原理計算により、10nm以下の基本ナノ素子(量子細線、分子、電極、ゲート、基盤など)の特性解析およびデバイス開発を行う。	実空間 DFT
LatticeQCD 82,944ノード実行	物理	格子QCDシミュレーションによる素粒子・原子核研究	モンテカルロ法およびCG法により、物質と宇宙の起源を解明する。	QCD

アプリケーションの到達並列数

- 「京」の能力を生かすには、アプリケーションが高並列に対応できている必要あり
- 1つのノードは8個のコアを持つためコアレベルではこのグラフの8倍の並列度に到達している



今後の予定



- 6月25日～6月末 : システム検収
- 7月初～7月末 : システム再構築
- 7月末～9月中 : 試験利用VI(～9PFLOPS)
(インターネットからのアクセス可)
: 運用試験(手順確認など)
: 利用者登録など
- 9月中～9月末 : システム初期化
(課金、ログ、稼働情報等)
- 9月末～ : 共用開始



END