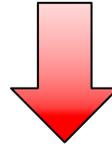


スーパーコンピュータ「京」ってなあに





スーパーコンピュータ「京」ってなあに？



足し算、掛け算がすごく速いコンピュータ

「京」は世界で初めて**10**ペタフロップスの壁を
突破したスーパーコンピュータ



10ペタフロップスとは？



フロップス：一秒間に処理できる浮動小数点計算の回数

10 ペタ (Peta) = 10,000,000,000,000,000 = 10^{16} = 1京

一、 十、 百、 千、 万、 億、 兆、 京、 垓、 杼、 穰、 溝、 澗、 正、
 10^0 10^1 10^2 10^3 10^4 10^8 10^{12} 10^{16} 10^{20} 10^{24} 10^{28} 10^{32} 10^{36} 10^{40}

載、 極、 恒河沙、 阿僧祇、 那由他、 不可思議、 無量大数 (塵劫記 寛永11年
版)

10^{44} 10^{48} 10^{52} 10^{56} 10^{60} 10^{64} 10^{68}

70億人が1秒間に1回計算しても17日かかる

「京」コンピュータはそれをたった1秒で計算する

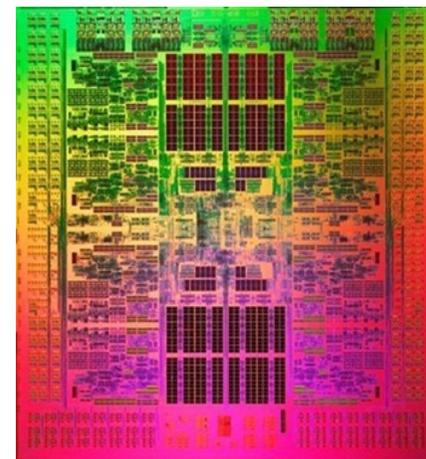


「京」はなぜ速い？



1. 微細化技術

「京」の心臓部である**SPARC64 VIIIfx CPU**は**45ナノメートル(nm)**半導体プロセス技術を採用【富士通製】

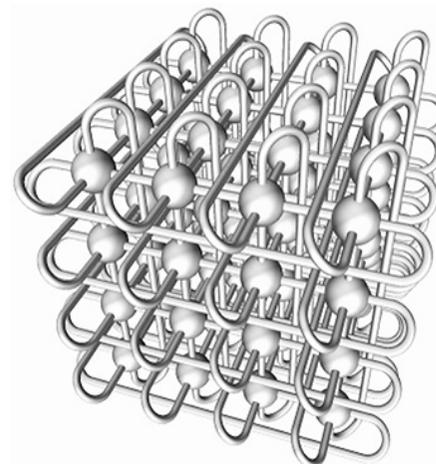


SPARC64 VIIIfx CPU

2. 並列化

みんなで力を合わせて計算しよう

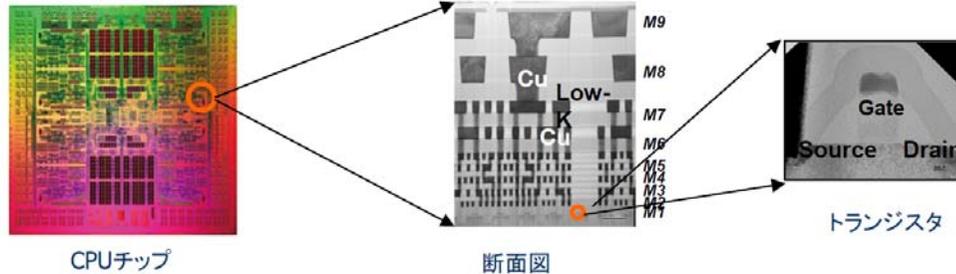
多数の**CPU (CPU88,000以上、Coreの総数は705,000以上)**をネットワークで結び、それぞれのCPUは独立ではなく、お互いに情報を交換しながら1つのシステムとして協調的に動く。インターコネクトは新しく開発した**Tofu**



6-dimensional mesh/torus network

「京」のCPU(プロセッサ)

- SPARC64 VIIIfx (45ナノメートル半導体プロセス)

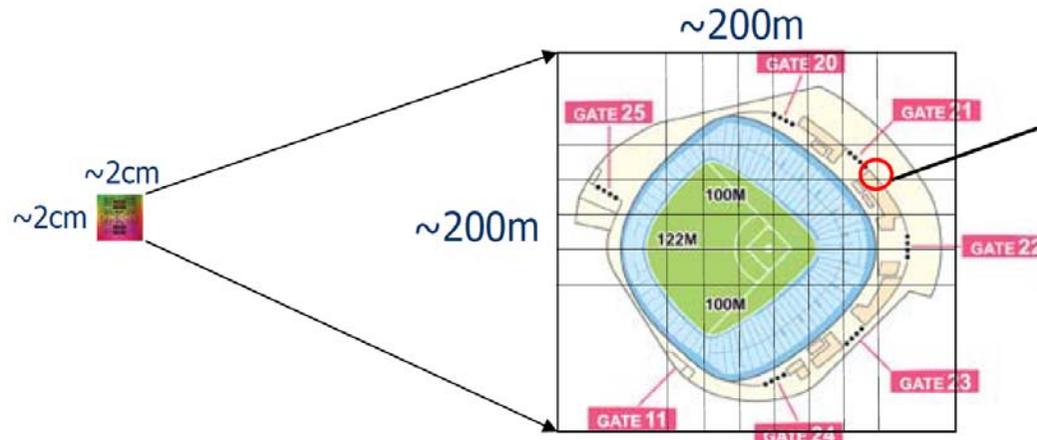


CPUチップ
断面図
トランジスタ

ピーク性能: 128ギガフロップス(1秒間に1280億回の演算性能)
動作周波数: 2GHz
チップサイズ: 22.7mm x 22.6mm
トランジスタ数: 760 Mトランジスタ
消費電力: 58W(水冷30°C)

	仕様
CPU性能	128GFLOPS (16GFLOPSx8コア)
コア数	8個
浮動小数点演算器構成 (コア当り)	積和演算器: 2×2個 (SIMD) (逆数近似命令: SIMD動作) 除算器: 2個
	浮動小数点レジスタ (64ビット): 256本 グローバルレジスタ (64ビット): 188本
キャッシュ構成	1次命令キャッシュ: 32KB (2way) 1次データキャッシュ: 32KB (2way) 2次キャッシュ: 6MB (12way), コア間共有
メモリバンド幅	64GB/s (0.5B/F)

◎ 45ナノメートル半導体技術のすごさ!
(ナノメートル=10億分の1m, 1/1,000,000,000m)



東京ドームにおよそ0.5mm
の電気配線を引くのと等価
な技術

梅田学校



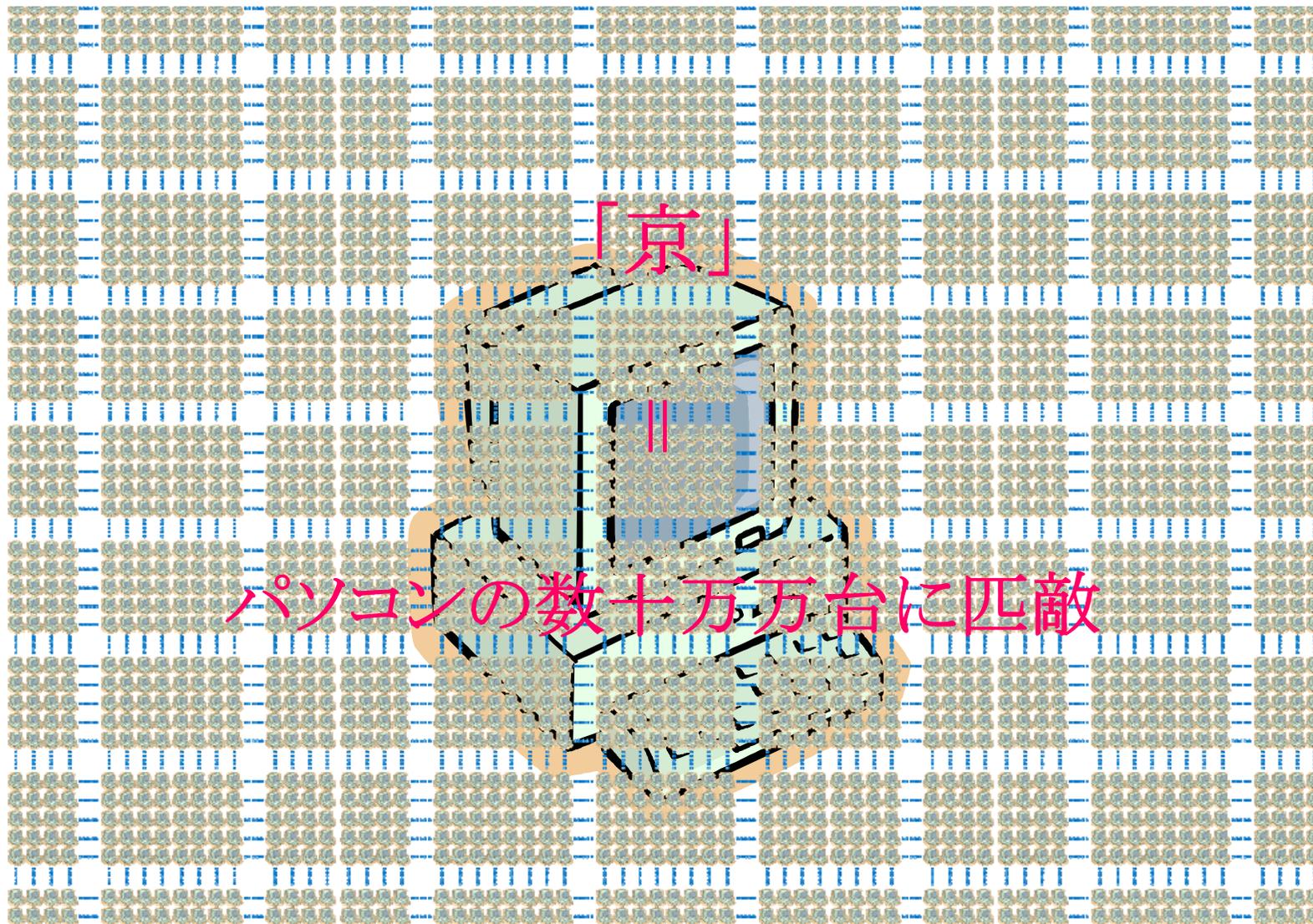
1~4000までの足し算(8,002,000)



1-100	101-200	201-300	301-400	401-500	501-600	601-700	701-800
801-900	901-1000
...
...
3201-3300	3801-3900	3901-4000

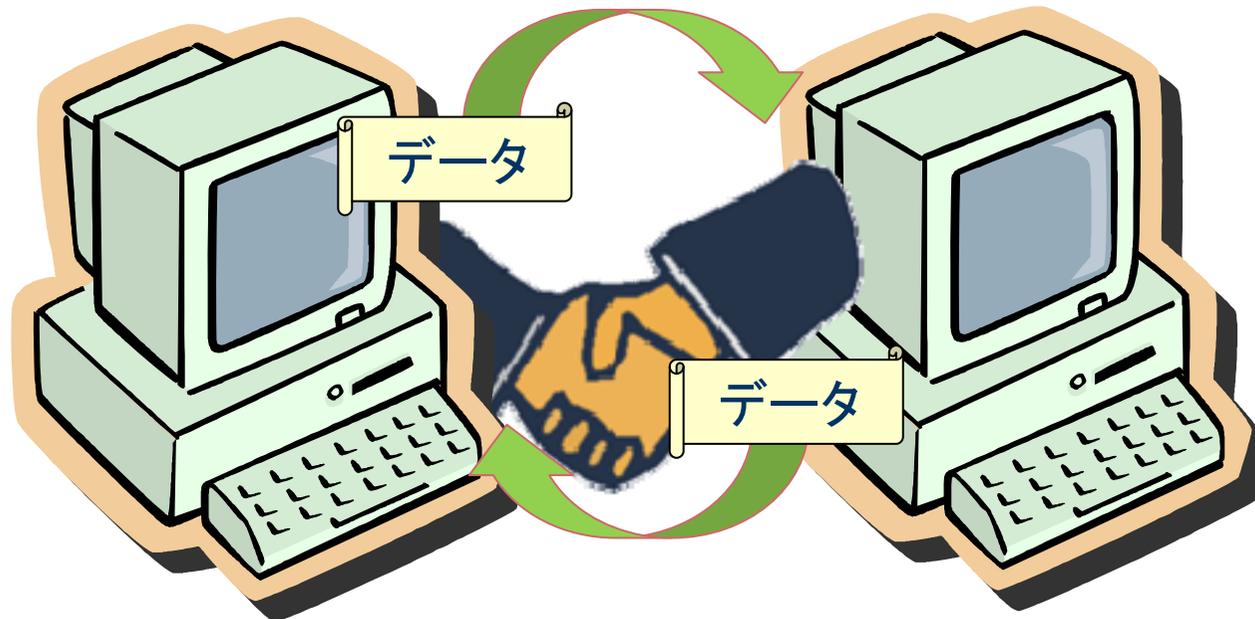
一人で計算するより、計算時間は約1/30に短縮される

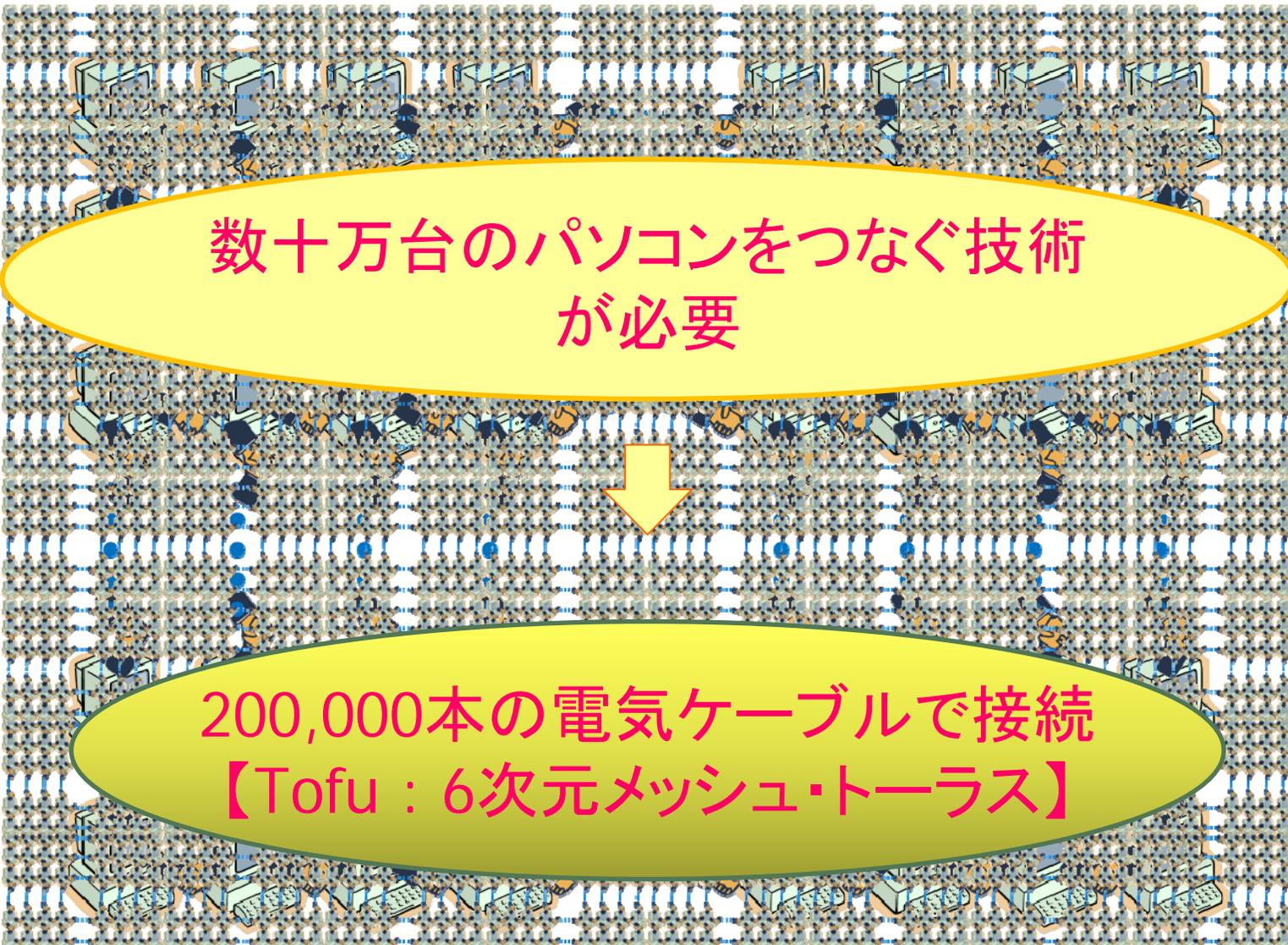
「京」とPCの比較



並べただけではダメ・・・

- それぞれのPCは独立ではなく、ネットワークで結ばれ、お互いに情報を交換しながら1つのシステムとして協調的に動く。
- パソコンをつなぐ技術 → インターコネクト技術【Tofu】



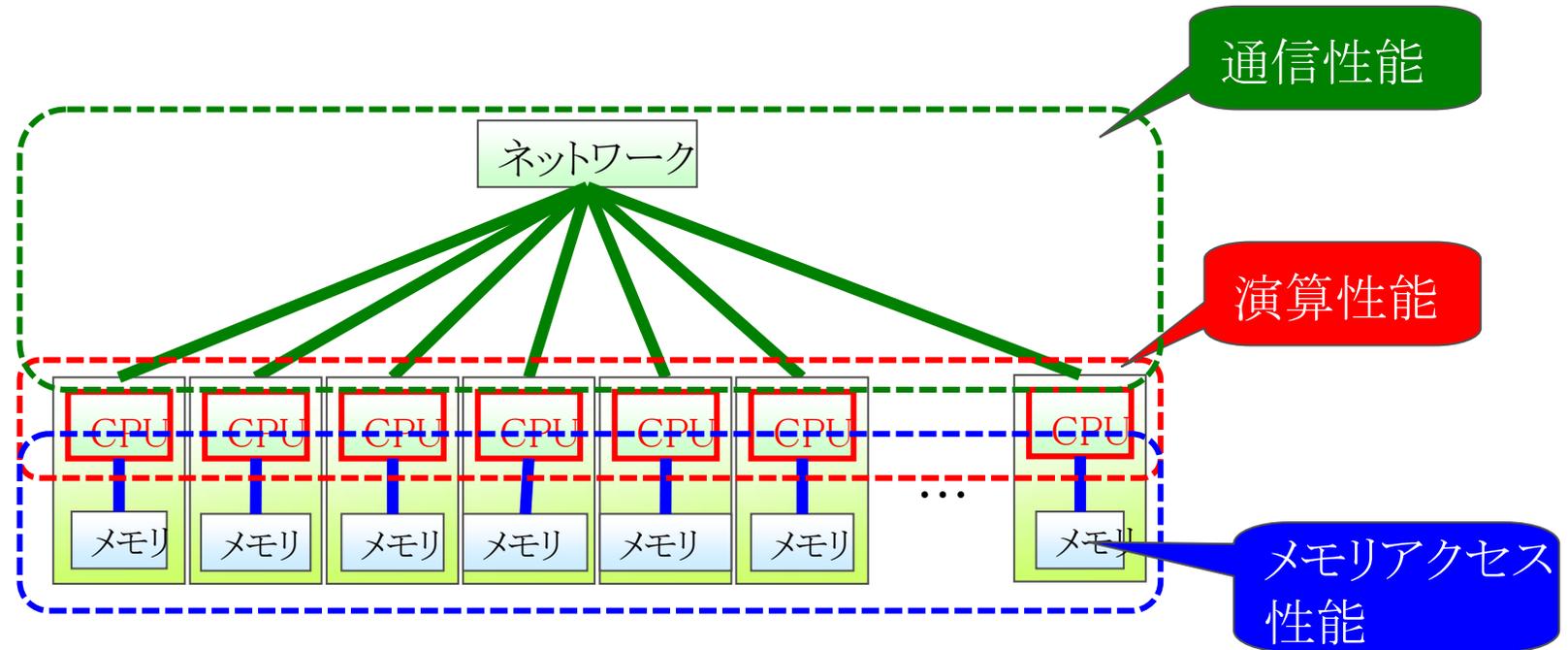


数十万台のパソコンをつなぐ技術
が必要



200,000本の電気ケーブルで接続
【Tofu : 6次元メッシュ・トーラス】

スパコンの性能とは？



3つの性能がバランスしていることが重要



米国製スパコンと「京」の比較

システム名	Titan	Sequoia	「京」
世界一位になった時期	2012年11月	2012年6月	2011年6月、11月
LINPACK性能(PFLOPS)	17.59	16.32	10.51
LINPACKの実行効率(%)	64.8	81.1	93.2
演算性能あたりのメモリ容量 (TB/PFLOPS)	25.7	76.3	122.1
演算性能あたりのメモリアクセス性能 (B/FLOP)	0.2	0.2	0.5
演算性能あたりの通信性能(B/FLOP)	0.019	0.10	0.39
消費電力 (MW)	8.2	7.9	12.7

「京」は使いやすさを重視したスパコン





「京」 理研 計算科学研究機構



タイタン オークリッジ国立研(米)



セコイア ローレンスリバモア国立研(米)



コンピュータは私たちに欠けている
能力を補ってくれます

シミュレーションは時間や空間を容易に超えることが
できます

シミュレーションは実験、理論とならぶ
自然現象や社会現象を認識する新しい方法です

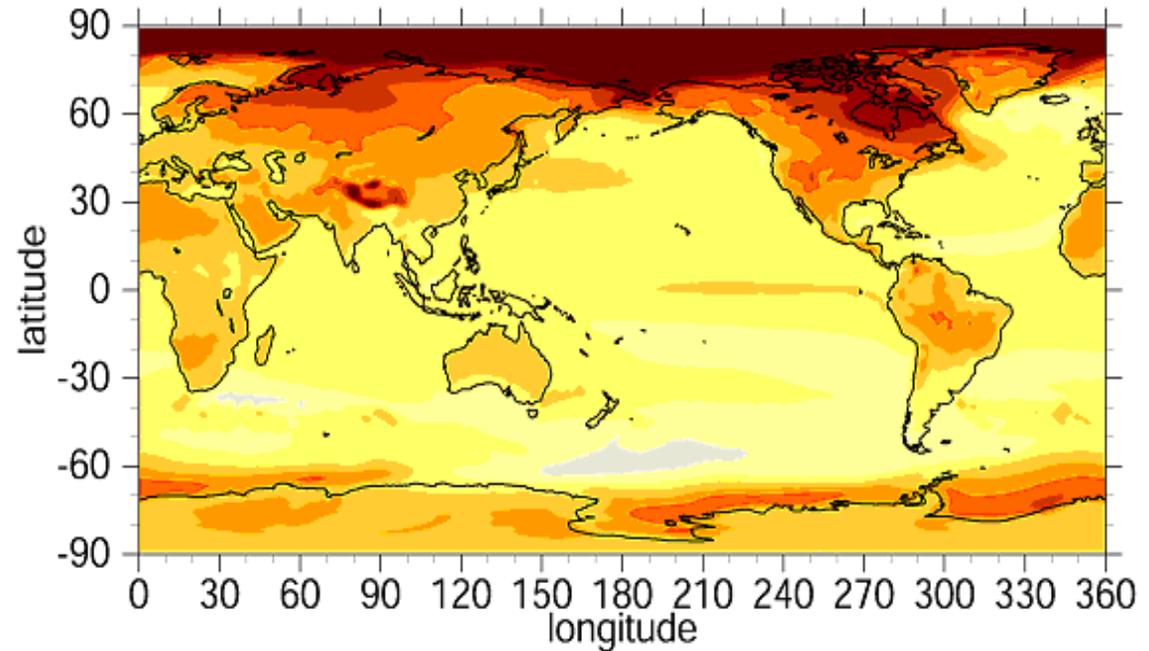
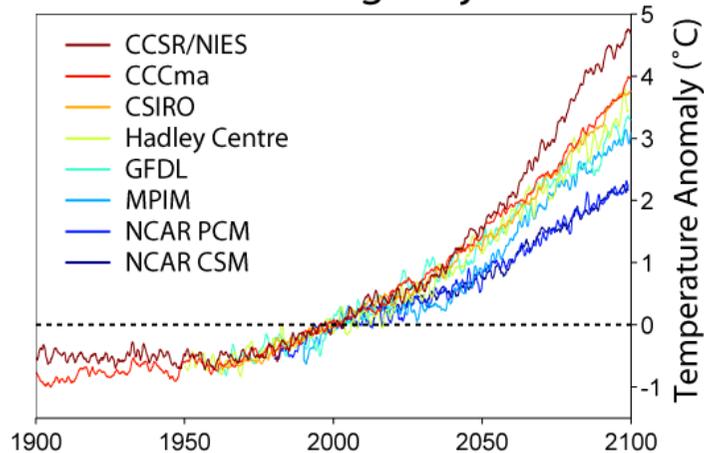
シミュレーションは未来を予測する科学技術

CO₂の増加が地球環境に重大な影響を与えることを人々に認識させたのは、スパコンによるシミュレーションと可視化である。

Al Gore's Keynote Presentation at SC09

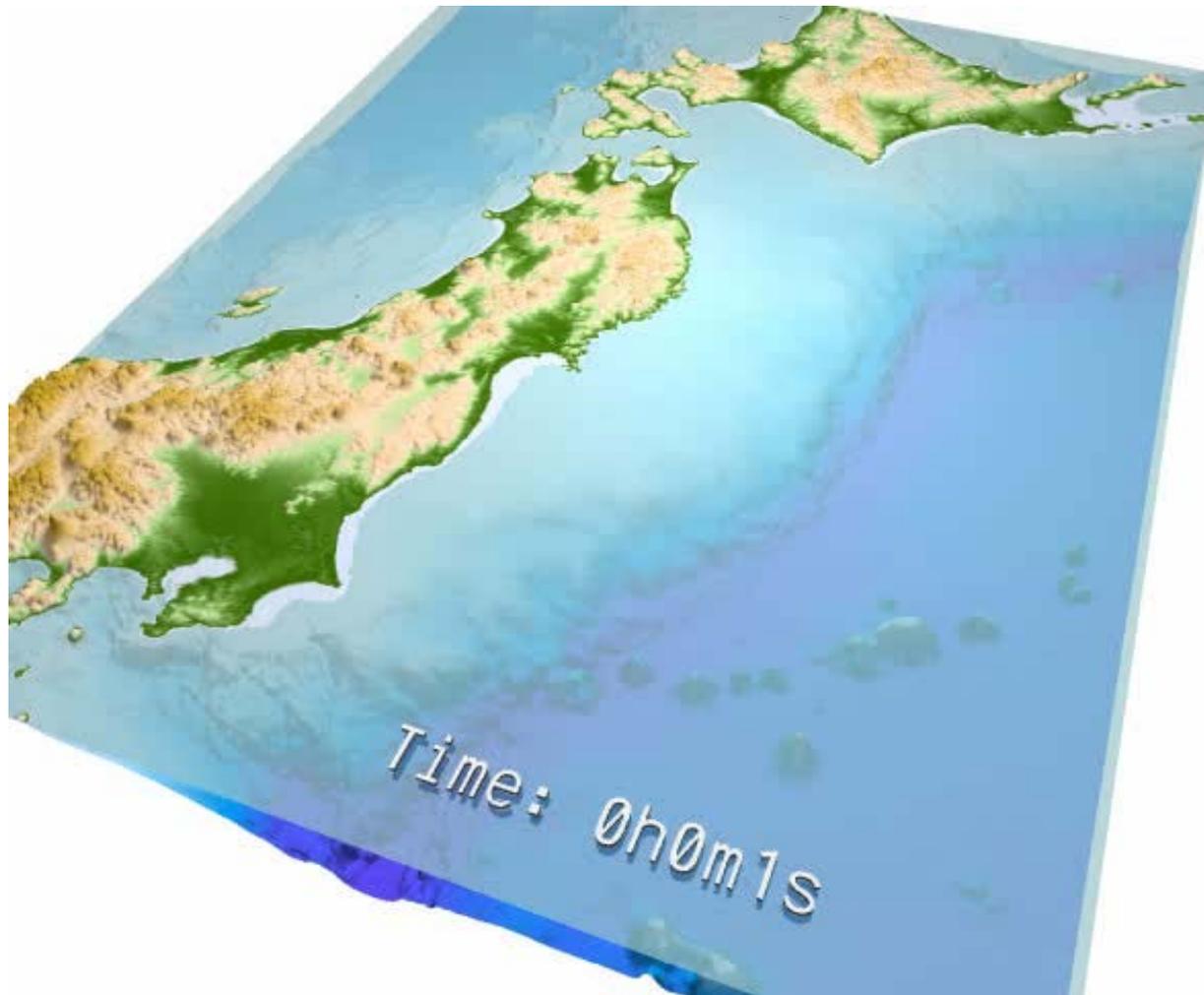


Global Warming Projections



2071~2100年の平均気温から、1971~2000年の平均気温を引いたもの

東日本大震災時の津波シミュレーション



【ES2での結果】

解像度: 1km

計算時間:

2時間(64ノード)

[京での予備計算]

解像度: 0.5 km

計算時間:

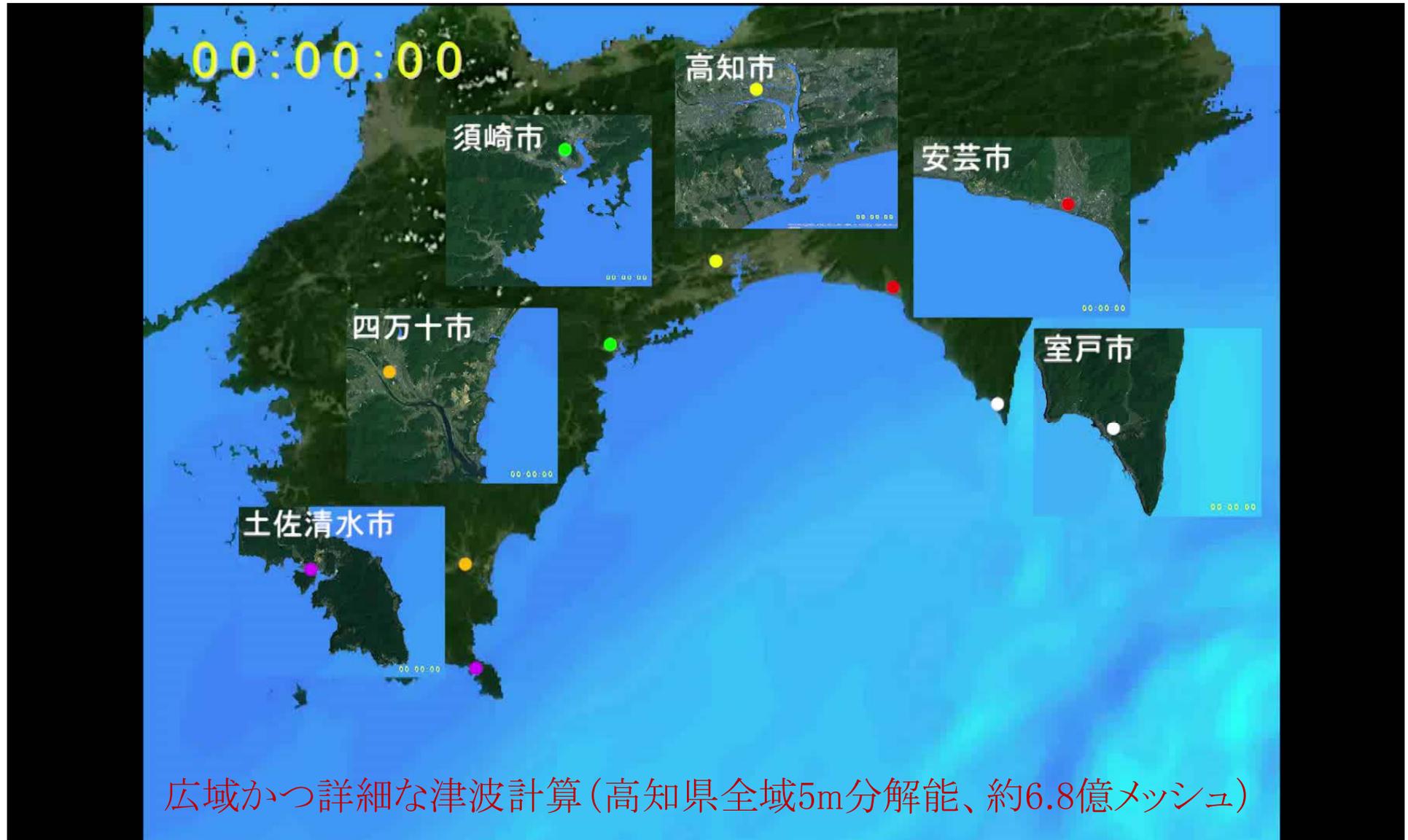
30分以下(12,288 CPU)

[京での目標]

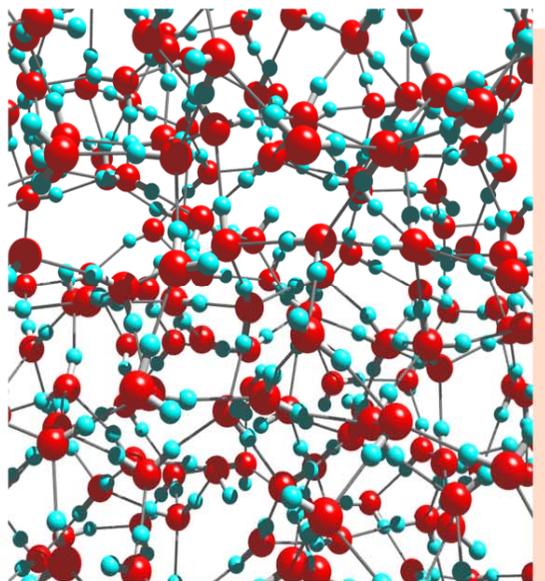
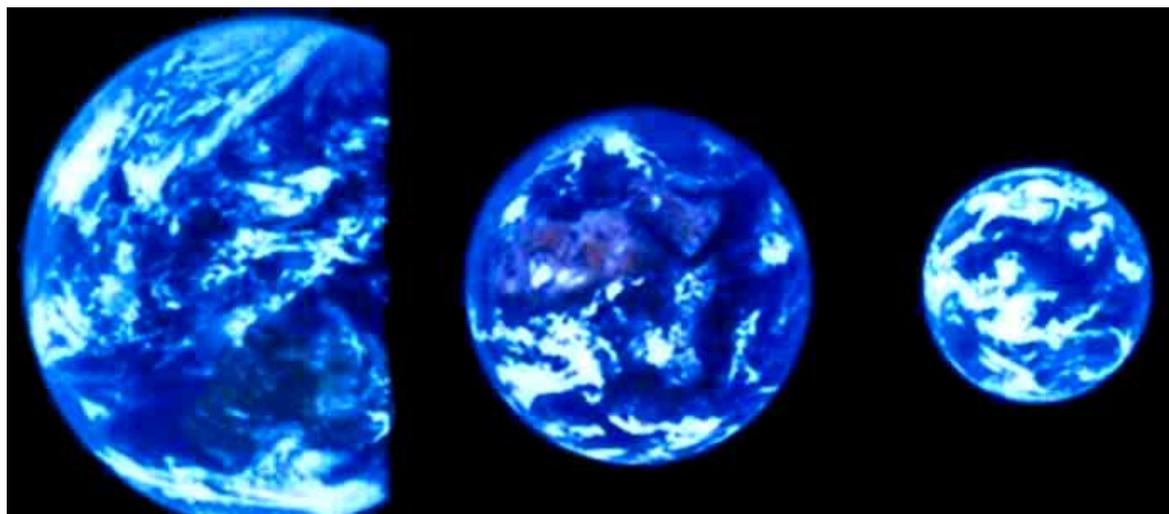
解像度: 0.25 km

計算時間: 10分以下

南海トラフ巨大地震 広域詳細な津波計算

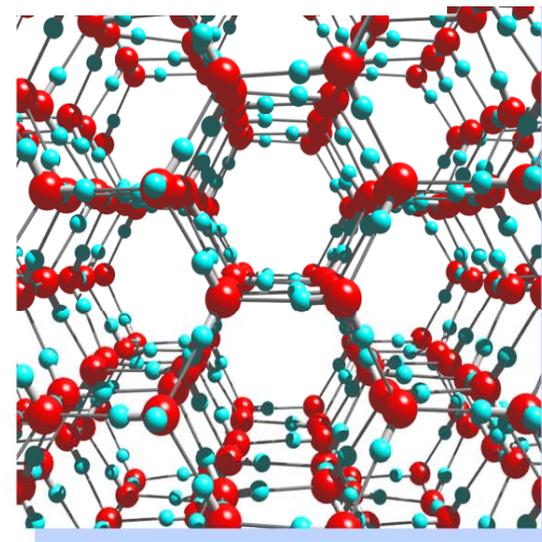
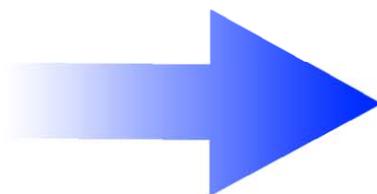


水 (H₂O) 一分子の中の変わりもの

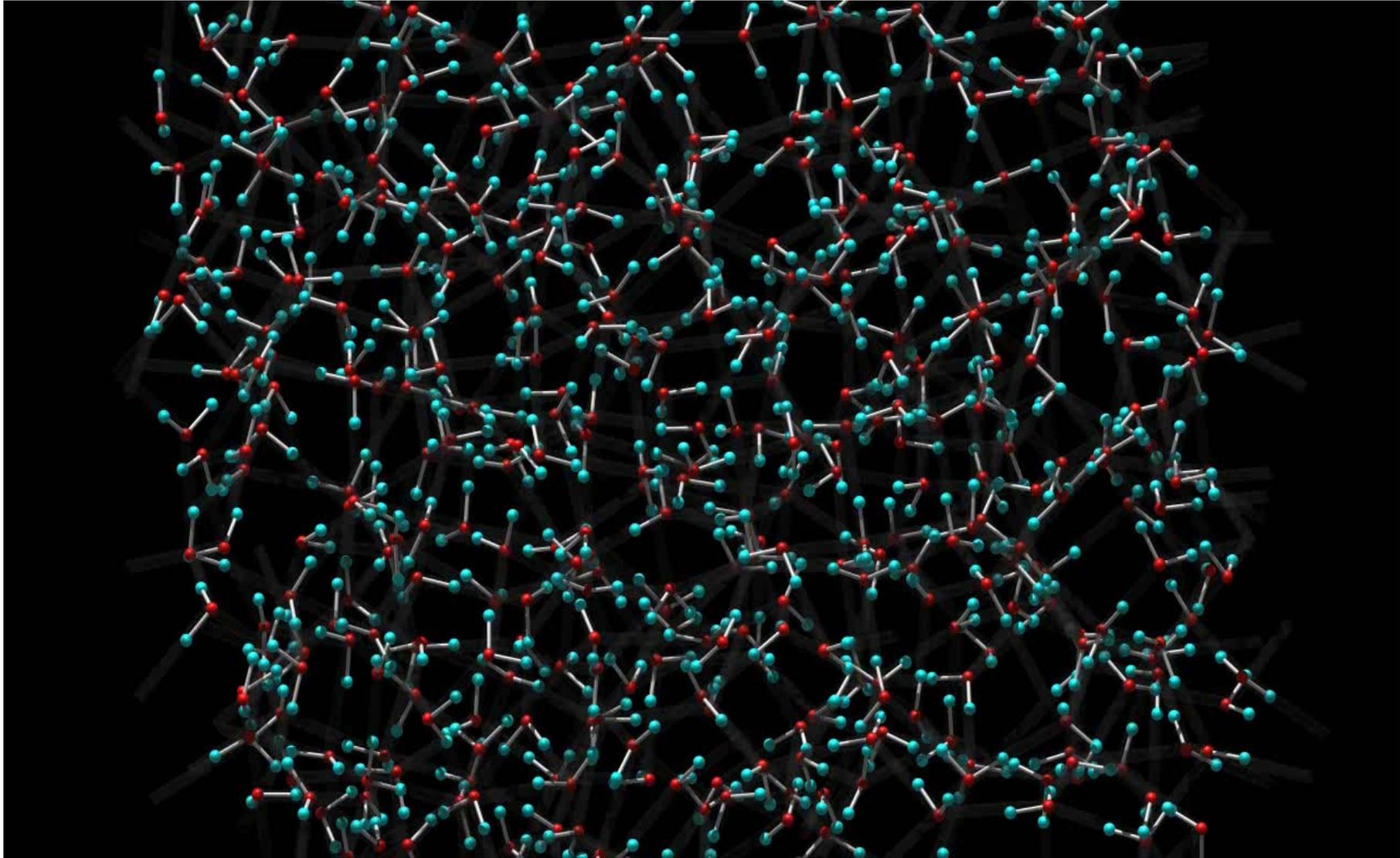


水

氷の結晶



液体の水 → 固体の氷への相転移



Liquid state → 230K, Super Cooled Water, Constant T and V



創薬 (Structure Based Drug Design)

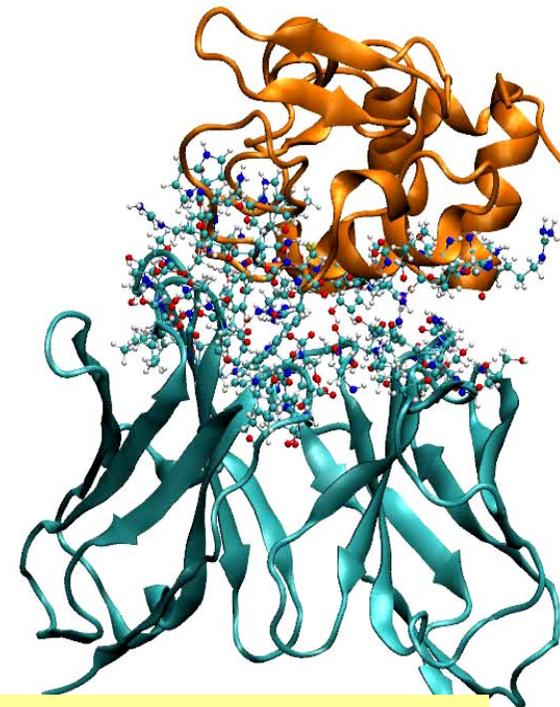
創薬には、分子の動きや溶媒(水分子)も含めたMD (Molecular Dynamics) シミュレーションが必要

計算機能力の爆発的向上をうけ、**がんと生活習慣病の標的タンパク質**に対し、超並列分子動力学計算での**薬物設計が可能**となりつつある。

例えば、
薬物とタンパク質との結合の強さ(結合自由エネルギー)を計算で予測するのに、地球シミュレータでは2か月かかるが、「京」では2,3日で見積もることができる

**すでのがん治療の標的タンパク質
に対し、890の化合物の中から、薬
の候補(リード化合物)を2種類発見**

藤谷先生(東大)



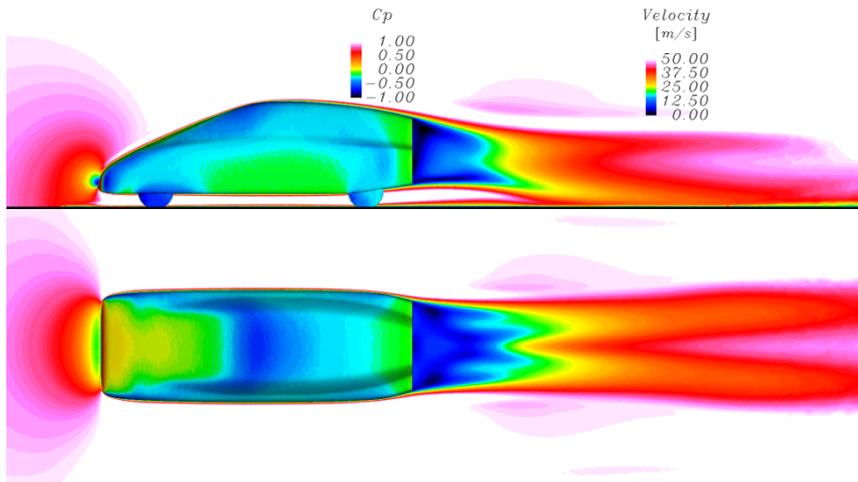
Affinity calculation
Computer aided design

Antibody

「京」で何が変わるのか？

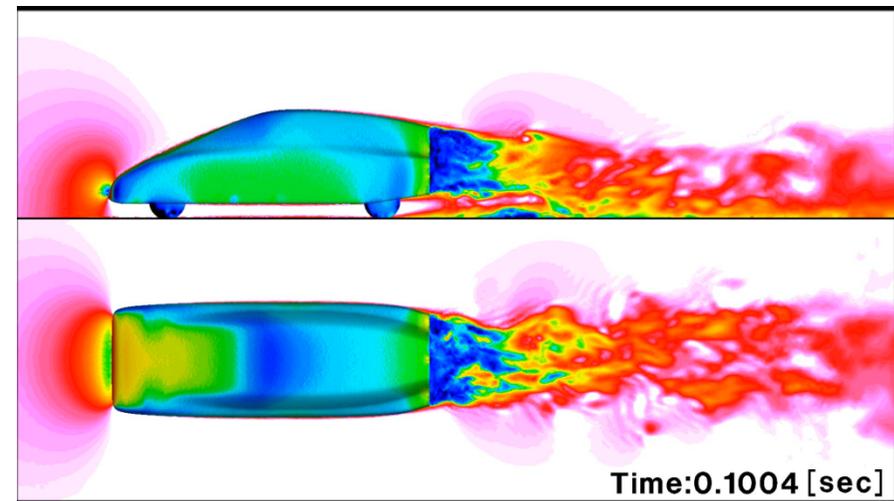
現行の時間平均流体シミュレーション

比較的安価に速く結果(抵抗値、揚力値)を得ることができる
流れ場を平均化してしまってしまうので、物理現象の解明には不向き
流れの非定常現象の評価には使えない



これからの時空間変動シミュレーション

性能の高い計算機が必要
流れ場の時空間渦構造が得られるので物理現象の解明に向く
非定常現象を扱うことができる



ものづくりの「プロセス」そのものを変えることができる(プロセスイノベーション)

- この50年は風洞実験を中心とした設計プロセスで商品を開発。今までのシミュレーションは風洞実験の代替なので、このプロセス自身は変わらなかった。
- 「京」によるシミュレーションを利用すれば、風洞実験の補完的役割から、**風洞実験ではできない解析**、安全性・安定性の評価が可能となる

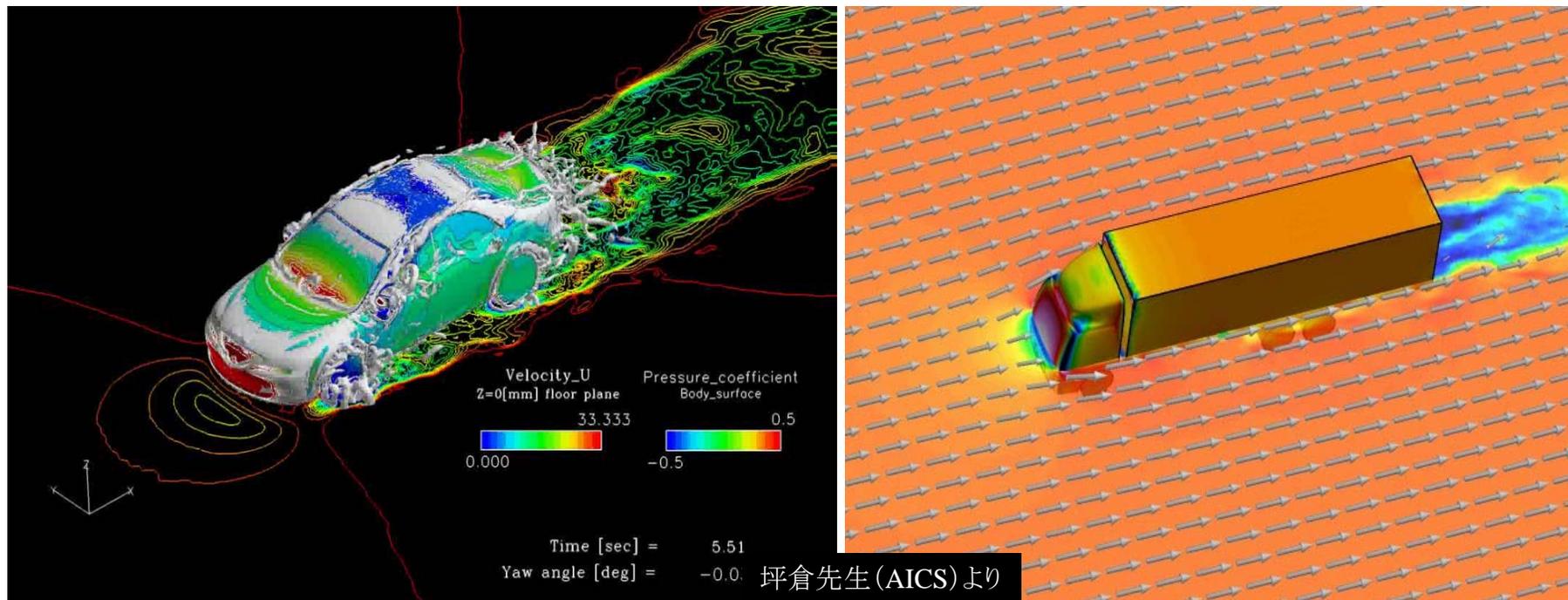
韓国では積極的にシミュレーション技術を導入(ここ数年の品質向上は目覚ましい)

世界をリードする我が国のシミュレーション

超高解像度時空間シミュレーション

ものづくりの「プロセス」そのものを変えることができる(プロセスイノベーション)

- これまでの50年間は風洞実験を中心とした設計プロセスで商品を開発。今までのシミュレーションは風洞実験の代替。
- 「京」によるシミュレーションを利用すれば、風洞実験の補完的役割から、**風洞実験ではできない解析**、安全性・安定性の評価が可能となる。



高速走行時のハンドル操作に対する安定性を空気力学的な観点から評価し、より高品質の自動車開発に役立てる。

横風にあおられた際の自動車の運動挙動を解析することで、より安全な自動車の開発に役立てる。

私たちの生活を支え、明日をひらくスーパーコンピュータ



ご清聴ありがとうございました

