

# 計算科学の世界


京がつくる時代

K computer Newsletter  
January 2012 No. 2



Interview **スパコンと  
人と研究をつなぐ拠点**

 計算科学研究機構

 独立行政法人理化学研究所  
計算科学研究機構





## Interview

計算科学研究機構

米澤明憲 副機構長  
に聞く

Akinori Yonezawa

「京」が完成した暁には、これまで数時間かかっていた計算を数分で完了することが可能になり、計算の精度も飛躍的に向上します。しかし、「京」のように大規模なスーパーコンピュータ（スパコン）を使いこなすのは容易なことではありません。「京」を効率よく、そして効果的に運用していく“鍵”となるのは何か。米澤副機構長にお話をうかがいました。

# 計算科学と計算機科学のインタープレイ

## 分野を越えた 研究開発が活かす「京」の性能

### 開発が進む「京」

2012年6月の完成に向け、「京」の開発は着々と進行しています。すでに本体のハードウェアは完成し、現在は、ハードウェアを動作させるために必要なシステムソフトウェアの開発と検証作業が進められています。ハードウェアを骨格に例えるなら、システムソフトウェアは神経や筋肉に相当します。このハードウェアとソフトウェアが完

成することで、「京」の能力は100%発揮されるのです。

「京」の完成後、その運用を担うのが計算科学研究機構（AICS）です。米澤副機構長は、「京」を構築するプロジェクトに早い時期から参画し、運用方針について他のメンバーと議論を重ねてきました。米澤副機構長は「『京』のように大規模な超並列型スパコンを使い

こなすのは、非常に難しいこと」と語ります。抜群の計算能力をもつ「京」からは、シミュレーションによる画期的な研究成果が生まれると期待されています。しかし、そのためには、「どのような研究に使うのか」を考えることと、使いこなすための準備が不可欠です。

### オールジャパンの研究体制

「『京』がもつ世界一の計算性能を有効に活用するためには、優れた成果が生み出されると期待される研究課題を選択し、重点的に取り組むことが重要です」と米澤副機構長は指摘します。このように、計算資源を集中するという

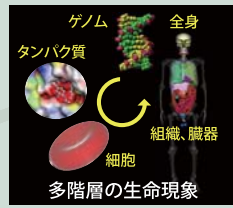
戦略的な考えから、5分野にわたる戦略プログラム（研究計画）、「戦略5分野」が立ち上がりました（図1）。各分野の研究者たちは、日本全国から「京」に集い、研究を行います。

また、これまで、計算科学の研究や

コミュニティは大学や研究所が所有するスパコンを中心に培われてきました。そこで、これらの計算資源と「京」をうまく連携させるネットワークとして、「ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）」を構築しよう

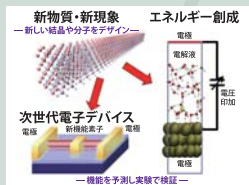
# 1 予測する生命科学・医療および創薬基盤

理化学研究所\*  
(協力組織：東京大学工学系 / 医学研究所ほか)



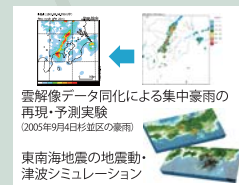
# 2 新物質・エネルギーの創成

東京大学物性研究所\*、分子科学研究所、  
東北大学金属材料研究所



# 3 防災・減災に資する地球変動予測

海洋研究開発機構\* (協力組織：東京大学大気海洋研究所 /  
情報学環/地震研究所、気象庁気象研究所、東北大学ほか)



## 計算科学研究機構



# AICS

# 4 次世代ものづくり

東京大学生産技術研究所\*、日本原子力研究開発機構、  
宇宙航空研究開発機構



# 5 物質と宇宙の起源と構造

筑波大学計算科学研究センター\*、  
高エネルギー加速器研究機構、国立天文台



図1 戦略5分野とAICSの関係

HPCIの戦略5分野の研究者は、「京」に集い、研究を遂行する。

※印は代表機関

という計画も進行しています。2012年春には「HPCIコンソーシアム」が正式に発足する予定です。「スパコンを

利用した研究の裾野を広げ、日本全体が一丸となり、HPCIの将来を考えていくという取り組みです」と米澤副機

構長。このようなオールジャパン体制の中心に位置づけられる機関として、AICSの活動方針が検討されています。

## 世界でも類を見ないインタープレイ(学際融合)

戦略5分野では、各分野の研究者が「京」の性能を最大限に生かしたシミュレーションに挑みますが、大規模な並列計算を成功させるためには、「京」のしくみや特性をよく理解した上で、プログラムをつくる必要があります。しかし、これは容易なことではありません。「計算科学の専門家は、研究手法としてシミュレーションを用いますが、「計算機」の専門家ではありません。そこでAICSが計算科学と計算機科学

の橋渡しをする役割を担い、『京』を用いた研究の遂行をサポートします」と米澤副機構長は語ります。

そのために、AICSは独自に研究チームを擁しています。現在、研究チームは8つあり、その研究テーマは、計算科学で共通に用いられる計算手法の高度化と、スパコンに密接に関わる計算機科学の2つに大別されます。来年度には、さらに8つのチームが加わる予定です(図2)。計算科学では、研究

対象(分野)が異なっても、似通った方程式やアルゴリズムが用いられることがあります。そこでAICSでは、分野間で共通する計算手法を洗い出し、基盤的なツールとして高度化する研究を進めています。また、「京」で実行するプログラムの生産性を上げるため、例えばプログラムの再利用について検討するといった、計算機科学の研究も行われています。

「これまで、計算科学の分野を越え

図2 AICSの研究チーム構成

「京」を効率的・効果的に使いこなすため、現在AICSは、計算科学に関する5つの研究チームと、計算機科学に関する3つの研究チームをもって、今後、共通分野として、可視化や大規模データ処理に関する研究チームが加わる予定。

て、また計算科学と計算機科学の枠組みを越えて、共同研究するような試みはまれでした」と米澤副機構長。さらに「計算機施設に、このように分野を越えた研究者のインタープレイの場を設ける体制は、世界でも他に類を見ないものです」とAICSの独自性を強調します。さまざまな分野から研究者が集う「京」、そしてその運用を担うAICSだから実現できる環境といえるでしょう。

すでに、このインタープレイは始まっています(図3)。例えば、「戦略分野3：防災・減災に資する地球変動予測」では、気象シミュレーションを専門とする研究者と、AICSの3つの研究チーム(複合系気候科学研究チーム・システムソフトウェア研究チーム・プログラミング環境研究チーム)が一体となって、「京」で行うシミュレーションのプログラム作成に取り組んでいます。このように、「京」の本格稼働に向け、戦略5分野とAICSの研究チームの共同により着々と準備が進められています。

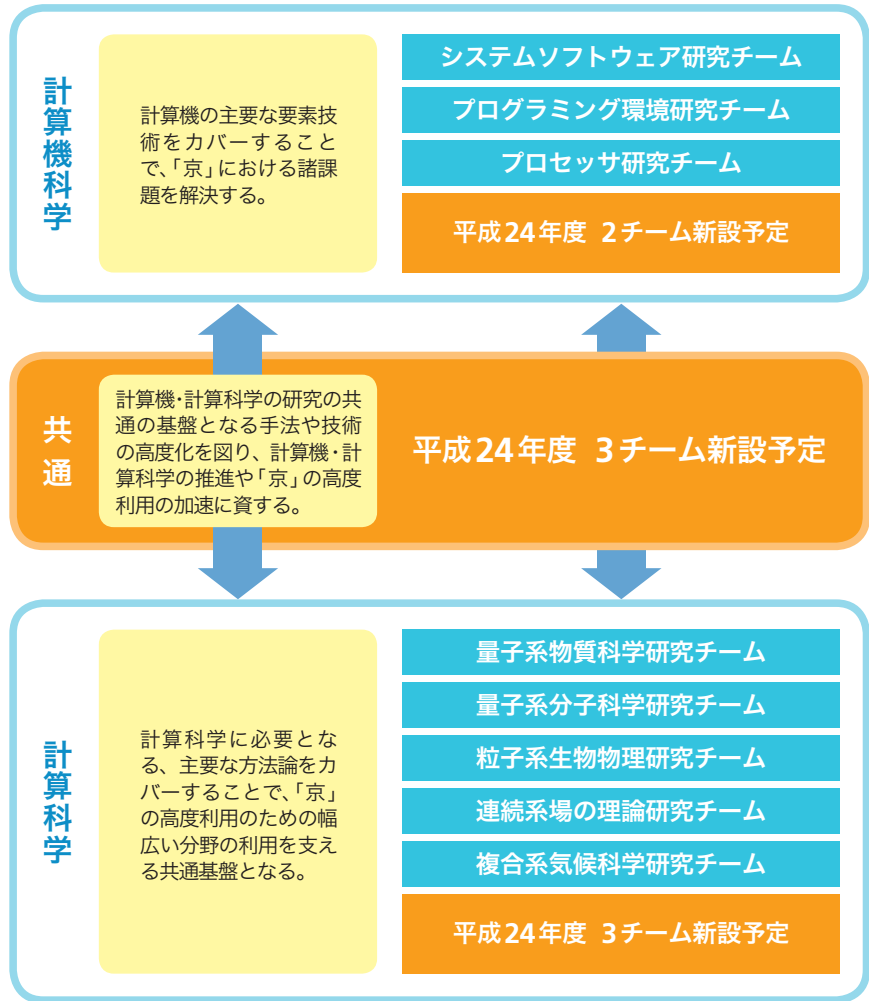


図3 AICS研究棟に設けられた研究者居室

居室には、分野を隔てる壁がない。大部屋の中で、さまざまな分野の研究者が交流し、日々、新しいアイデアが生まれている。

## 未来を見据えた課題に向かう

AICSでは、「京」を運用し、発展させ、世界的な研究拠点を形成するというミッションを遂行すると同時に、新しいプロセッサの開発に着手するなど、次の世代のスーパーコンピュータ「エクサ\*1」に向けた検討も始まっています。また、「京」のような大規模スパ

コンを扱う技術に関する教育や交流にも、積極的に取り組む予定です。ここで育った人材は、将来の計算機科学・計算科学を支えると期待されます。

米澤副機構長は「AICSの活動によって計算機科学、計算科学を活性化させ、国力のアップにつなげていきたい」と

語ります。今後、AICSを舞台とした連携と交流はさらにさかんになり、計算科学の未来を切り拓いていくことでしょう。(取材・構成 那須川真澄)

\*1 エクサスケール・スーパーコンピュータ。1秒間に100京回以上の演算速度をもつもので、アメリカや中国、日本で実現に向けた検討が始まっている。



佐藤三久チームリーダー(右から3人目)とチームのメンバー

### プログラミング環境 研究チーム

我々の研究チームでは、「京」のプログラミング環境の研究をしています。プログラミング環境とは、プログラム開発をするために必要な一連の道具(ソフトウェア)のことで、人間が書いたプログラムをコンピュータで実行できるようにコンピュータの言葉に書き替えるものや、プログラムの不良を見つけるものなどがあります。人間とコンピュータをつなぐ要ともいえます。

「京」は数万ものプロセッサ(1つのコンピュータを構成する単位)をもち、

各プロセッサに膨大な計算を分担して実行させる「大規模並列システム」です。多数のプロセッサを扱うプログラムは複雑になりがちで、プログラムの開発者は大変な苦勞をします。開発者が簡単に扱えて、かつ、システムに最適なプログラムをつくりやすいプログラミングの方法やプログラミング言語を研究・開発することが、我々の第一の目的です。

また、「京」の性能を最大限に引き出すためには、数万個もある各プロセッ

サにバランスよく計算が割り振られているか確認し、そうでない場合は原因を調べて対策をとる必要があります。こうした高度な性能解析のためのソフトウェアを研究・開発するのも重要な仕事です。

プログラミング環境の研究では、その時代の先端的なコンピュータに対して、どこまで高効率な環境をつくれるかを追及できます。そこに大きな魅力を感じています。

(下坂健則)

### 複合系気候科学 研究チーム

当研究チームでは、「京」をはじめ最先端の性能をもつスパコンに向けて気候シミュレーションモデルを開発しています。気候シミュレーションモデルとは、大気の流れをスパコン上にあらわした、バーチャルな地球です。方程式を使って、刻々と変化する大気の流れを表現します。計算機の性能が高ければ高いほど、より高い解像度(図)でのシミュレーションが可能となり、台風や前線、さらには一つひとつの雲ま

で詳細に表現できるようになります。我々の目的は、シミュレーションによって精度の高い気象予測や地球温暖化などの気候予測を実現するための基盤を整備することです。

そのためには大きく分けて2つの作業が必要です。1つは、解像度に合わせた計算手法の変更です。雲や乱流など気象を構成する要素の表現方法は解像度によって変わります。これらをどのように修正し、表現していくかがより良いモデルをつくる鍵となります。もう1つはモデル計算の高速化です。新しい計算機である「京」の能力を最大

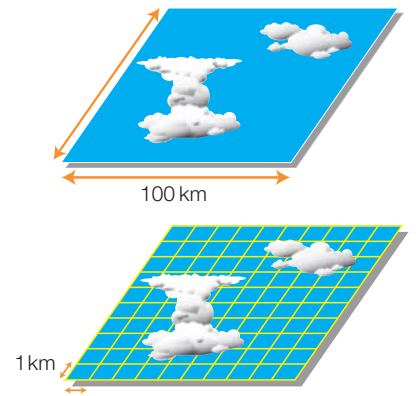
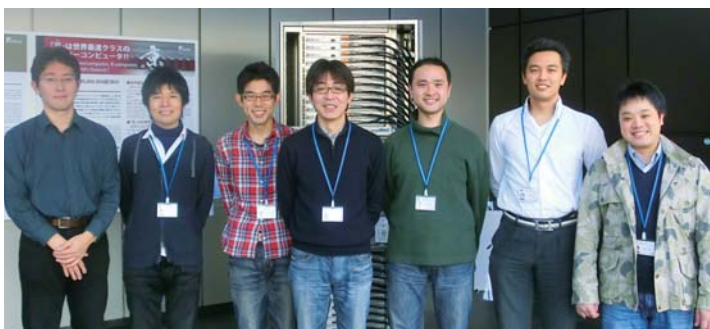


図 解像度とは、地球大気全体をどれだけのマス目で区切って計算を行うかという細かさの指標。例えば、解像度が低いと、1マスの中の雲の量はパーセンテージでしか表現できないが、解像度が高いと、マスごとに雲の有無を表現できるので計算精度が高くなる。

限に活用して計算できるよう、計算機科学の専門家とも協力しながら研究開発をしています。新しい計算機である「京」の能力を最大限に活用して計算できるよう、計算機科学の専門家とも協力しながら研究開発をしています。このように多様な研究者の中で、化学反応を起こすがごとく、まったく違った視点で新しいアイデアを生み出すことをめざしていきます。

(伊賀晋一)



富田浩文チームリーダー(中央)とチームのメンバー

計算科学研

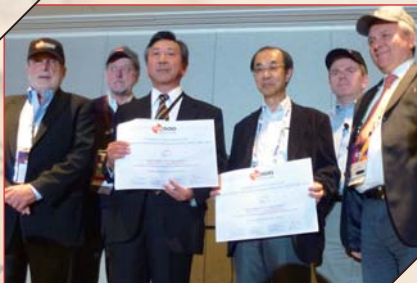


## 「京」が受賞した賞

受賞日	受賞内容
2011/11/14	第38回TOP500リスト第1位
11/14	HPC wire 年間賞「Top supercomputing achievement Editor's choice」
11/15	2011年「HPCチャレンジ賞」4部門
11/17	ゴードン・ベル賞 最高性能賞

### 番外編 2

2011年11月にアメリカ・シアトルで開催された国際会議で、「京」は、演算性能において再び世界に輝くとともに、多くの賞を受賞することができました。そこで、今号も番外編としてそのようすをお伝えします！



TOP500の表彰式



展示ブースでの集合写真

International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis(SC)は、スーパーコンピューティングに関する最も大きな国際会議です。毎年1万人以上の研究者や技術者が集い、多くの発表や展示が行われます。また、この分野における重要な賞の発表も数多く行われます。今回、「京」はたくさんの賞を受賞しました(右上の表)。中でも「京」の活用に大きく関係する「ゴードン・ベル賞」と「HPCチャレンジ賞」をご紹介します。

### ゴードン・ベル賞 最高性能賞

スパコンの実際的な応用における計



ゴードン・ベル賞の受賞

算性能を競う賞で、TOP500のようにあらかじめ性能測定用のプログラムが決められているのではないことが特徴です。特に最高性能賞は大変名誉ある賞で、日本の研究チームが受賞したのは2004年の「地球シミュレータ」を用いた地磁気ダイナモの研究以来、7年ぶりのことです。

受賞した研究のタイトルは「シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算」です。シリコン・ナノワイヤは、シリコン原子でできた直径が10ナノメートル\*ほどの細長い線状の物質で、次世代の電子部品材料として有望視されています。「京」を使うことで、10万個ものシリコン原子でできたナノワイヤ中の電子の状態を厳密に計算できるようになりました。電子のふるまいを、これだけの数の原子からなる物質について厳密に計算したのは、世界で初めてのことです。この研究は、「京」を使うことでナノメートルサイズの材料を開発するための高精度なシミュレーションが可能となり、その結果が今後の電子部品材料の開発に大きく貢献

できることを世界に示しました。

### HPCチャレンジ賞

HPCチャレンジ賞とは、スパコンの性能を4つの異なる視点から評価するもので、「京」は全体の2割のシステムを使い、4部門とも世界最高性能をマークしました。ここでは計算性能のほか、ネットワークやメモリアクセスの速さなどが一度に測定されます。「京」は汎用スパコンとしての総合的な能力においても世界一となり、いろいろな分野のシミュレーションに役立つことが証明されたのです。

今回のSCで、基礎性能から実用まで「京」の能力が広く認知されるようになりました。これからは「京」を使って世界をリードする研究成果を生み出すときです。「京」の完成を間近に控え、私たち開発スタッフもラストパートでがんばります。

(次世代スーパーコンピュータ開発実施本部  
開発グループ 黒田明義)

\* ナノメートル: 1ミリメートルの百万分の1の長さ