

「京」から「富岳」へ：大規模シミュレーションが拓く惑星科学の未来 開会挨拶

牧野淳一郎

神戸大学理学研究科惑星学専攻
理化学研究所 計算科学研究センター

「京」から「富岳」へ：大規模シミュレーションが拓く惑星科学の未来 2019/9/9-10
東大駒場

皆様今日は大変な天候・
交通状況の中お集まりい
ただきありがとうございます。
ます。

(到着できてない皆様可能
な範囲で)

話の構成

- 「京」と戦略プログラム
- 富岳の現況と今後
- 萌芽的課題「計算惑星」の現況、今後
- まとめ

話の要点

- 富岳（「ポスト京」は2021年完成、「京」の最大100倍程度のアプリケーション性能が目標。
- 今年度から設置・調整が始まる。
- 「京」の戦略分野の貢献、重点課題＋萌芽的課題は今年度で一旦終了。成果の取りまとめ＋来年度からの富岳の利用にむけた課題申請をしていく
- 本シンポジウムでは萌芽的課題「計算惑星」の成果と今後の富岳の利用によるサイエンスを議論する。

話の要点

- 富岳（「ポスト京」は2021年完成、「京」の最大100倍程度のアプリケーション性能が目標。
- 今年度から設置・調整が始まる。
- 「京」の戦略分野の貢献、重点課題＋萌芽的課題は今年度で一旦終了。成果の取りまとめ＋来年度からの富岳の利用にむけた課題申請をしていく
- 本シンポジウムでは萌芽的課題「計算惑星」の成果と今後の富岳の利用によるサイエンスを議論する。

皆様よろしくお願いいたします。

後はおまけ

「京」コンピュータ



ピーク性能 10.62PF

メモリ容量 1.26PB

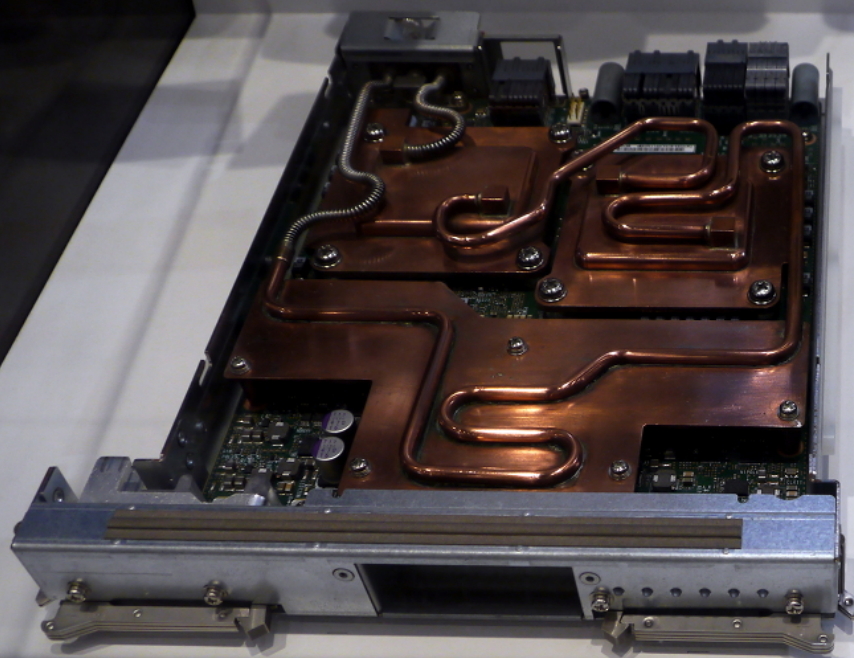
Top 500 #1 2011/6, 11

Gordon Bell Prize 2011,
2012

- 日本として初の「国策プロジェクト」による「世界一」を目指したスパコン
- 総開発費およそ 1100 億円 (年間運用経費 120 億円)
- 2009 年の仕分け「2 位では駄目なんですか」とかあったが予定通り完成
- 2019/8/16 運用終了。8/30 シャットダウンセレモニー
(ダークマターシミュレーション、巨大衝突シミュレーションを「基礎科学分野の成果」として御紹介いただいた)

富岳 (ポスト「京」)

- 2011 年度くらいから色々検討開始
- 2012-13 年度「フイージビリティスタディ」
- 2014 年度プロジェクトスタート。当初は汎用部＋加速部。7月に計画変更。汎用部のみに。
- 「京」100 倍の性能をアプリケーションで実現 (できるものが少なくとも1つはあること) が目標
- 開発コスト 1300 億円、消費電力 30-40MW。
- 製造にはいった。性能見積もりもでた。名前も「富岳」に決まった。



Post-K Computer Prototype
CPU Memory Unit

ポスト「京」コンピュータ試作機
CPU メモリユニット



Post-K Computer Prototype
CPU Package

ポスト「京」コンピュータ試作機
CPU パッケージ

Post-K Information

Top

Specifications

Performance

Applications

Tips

Misc

Perf. Eval.

> [Top](#) > Performance

Performance Targets

- ✓ 100 times faster than K for some applications (tuning included)
- ✓ 30 to 40 MW power consumption

Peak Performance

	PostK	K
Peak DP (double precision)	400+ Pflops (34x +)	11.3 Pflops*
Peak SP (single precision)	800+ Pflops (70x +)	11.3 Pflops
Peak HP (half precision)	1600+ Pflops (141x +)	--
Total memory bandwidth	150+ PB/sec (29x +)	5,184TB/sec

* Reported in TOP500 (including I/O nodes)

Geometric Mean of Performance Speedup of the 9 Target Applications over the K-Computer

37x +

Predicted Performance of 9 Target Applications As of 2019/05/14

Area	Priority Issue	Performance Speedup over K	Application	Brief description
Health and longevity	1. Innovative computing infrastructure for drug discovery	125x +	GENESIS	MD for proteins
	2. Personalized and preventive medicine using big data	8x +	Genomon	Genome processing (Genome alignment)
Disaster prevention and Environment	3. Integrated simulation systems induced by earthquake and tsunami	45x +	GAMERA	Earthquake simulator (FEM in unstructured & structured grid)
	4. Meteorological and global environmental prediction using big data	120x +	NICAM+ LETKF	Weather prediction system using Big data (structured grid stencil & ensemble Kalman filter)
Energy issue	5. New technologies for energy creation, conversion / storage, and use	40x +	NTChem	Molecular electronic simulation (structure calculation)
	6. Accelerated development of innovative clean energy systems	35x +	Adventure	Computational Mechanics System for Large Scale Analysis and Design (unstructured grid)
Industrial competitiveness enhancement	7. Creation of new functional devices and high-performance materials	30x +	RSDFt	Ab-initio simulation (density functional theory)
	8. Development of innovative design and production processes	25x +	FFB	Large Eddy Simulation (unstructured grid)
Basic science	9. Elucidation of the fundamental laws and evolution of the universe	25x +	LQCD	Lattice QCD simulation (structured grid Monte Carlo)

アプリケーションからみたポスト「京」

「京」に比べると

- 1チップのコア数6倍
- SIMD 幅4倍
- 総チップ数は2倍
- メモリバンド幅は比率としては若干低下
- ネットワークはあんまり速くならない

使いこなして成果を出すためのアプリケーション開発＝重点課題、萌芽的課題

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(重点課題)

＜重点課題（9 課題）＞

- ① 社会的・国家的見地から高い意義がある、
- ② 世界を先導する成果の創出が期待できる、
- ③ ポスト「京」の戦略的活用が期待できる課題を「重点課題」として選定。

カテゴリ	重点課題	実施機関（平成28年1月末時点）
健康長 寿社会 の実現	① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。	代表機関： <u>理化学研究所（課題責任者：奥野 恭史・客員主管研究員）</u> 分担機関：京都大学、東京大学、横浜市立大学、名古屋大学、産業技術総合研究所 共同研究参画企業：24社
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。	代表機関： <u>東京大学（課題責任者：宮野 悟・教授）</u> 分担機関：京都大学、大阪大学、株式会社UT-Heart研究所、自治医科大学、岡山大学 共同研究参画企業：5社
防災・ 環境問 題	③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 内閣府・自治体等の防災システムに実装しう、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。	代表機関： <u>東京大学（課題責任者：堀 宗朗・教授）</u> 分担機関：海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学 共同研究参画企業：1社
	④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。	代表機関： <u>海洋研究開発機構（課題責任者：高橋 桂子・センター長）</u> 分担機関：理化学研究所、東京大学、東京工業大学 共同研究参画企業：7社

＜重点課題（9課題）＞（つづき）

カテゴリ	重点課題	実施機関（平成28年1月末時点）
エネルギー問題	⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。	代表機関： <u>自然科学研究機構（課題責任者：岡崎 進・教授）</u> 分担機関：神戸大学、理化学研究所、東京大学、物質・材料研究機構、名古屋大学、岡山大学、北海道大学、早稲田大学 共同研究参画企業：17社
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。	代表機関： <u>東京大学（課題責任者：吉村 忍・教授）</u> 分担機関：豊橋技術科学大学、京都大学、九州大学、名古屋大学、立教大学、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構、物質・材料研究機構、自然科学研究機構核融合科学研究所、みずほ情報総研株式会社、株式会社風力エネルギー研究所 共同研究参画企業：11社
産業競争力の強化	⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。	代表機関： <u>東京大学（課題責任者：常行 真司・教授）</u> 分担機関：筑波大学、大阪大学、自然科学研究機構分子科学研究所、名古屋工業大学、東北大学、産業技術総合研究所、東京理科大学 共同研究参画企業：6社
	⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。	代表機関： <u>東京大学（課題責任者：加藤 千幸・教授）</u> 分担機関：神戸大学、東北大学、山梨大学、九州大学、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所、東京理科大学 共同研究参画企業：30社
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせて、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。	代表機関： <u>筑波大学（課題責任者：青木 慎也・客員教授）</u> 分担機関：高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学、理化学研究所、大阪大学、自然科学研究機構国立天文台、千葉大学、東邦大学、広島大学 共同研究参画企業：1社

宇宙の基本法則と進化の解明(重点課題⑨)

ポスト「京」で目指す成果

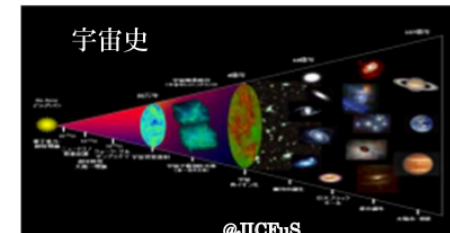
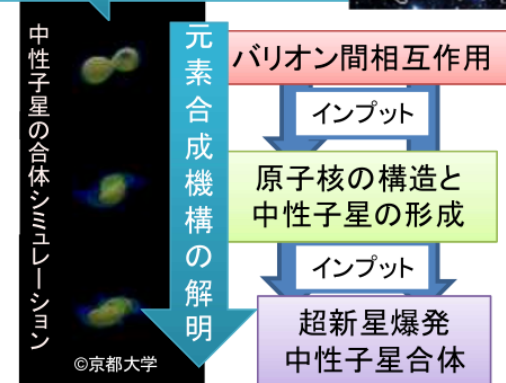
- 素粒子標準理論を検証し、新しい物理法則の発見に貢献する。
- 多様な元素が生まれた宇宙における重元素合成など物質創成・変換過程を統一的に理解する。
- 観測データを融合したビッグデータ宇宙論を展開し、宇宙進化において天体が階層的に形成された仕組みや、銀河中心に巨大ブラックホールが存在する起源を解明する。

実施内容

＜ポスト京で初めて可能となる以下を実現する手法・コード開発＞

- SuperKEKBと連携し**標準理論を超える物理を探索**のため、重いbクォークの直接計算を実現する、格子間隔(時空間解像度)を従来の0.1から0.03 fmの高精細にした格子QCD計算
- 素粒子間に働く力の謎の解明、原子核・宇宙物理学研究の基盤を強固にする、**陽子、中性子、ハイペロン間に働くバリオン間力**を世界最高精度で求める格子QCD計算
- 中性子星連星の合体による**重元素合成の定量的な理解**に一般相対論、磁気流体、輻射流体などあらゆる効果を取り入れた高解像度かつ長時間にわたるシミュレーション
- 広域サーベイ観測データ解析に必要な統計量を得るための**構造形成シミュレーションライブラリ**
- 宇宙論パラメータ測定の一つである**残存ニュートリノ質量決定**のため、 256^6 個の格子数で宇宙論的ボルツマンシミュレーション
- **巨大ブラックホールの形成および進化過程解明**のため、高解像度相対論的輻射磁気流体シミュレーション

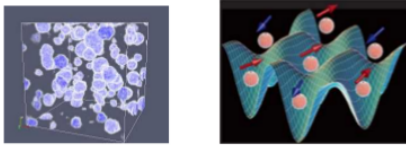
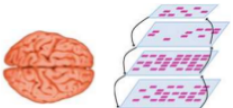
標準模型 or 新物理 $\otimes$ QCD補正 = 実験値



ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(萌芽的課題)

＜萌芽的課題（４課題）＞

ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、今後、公募予定。

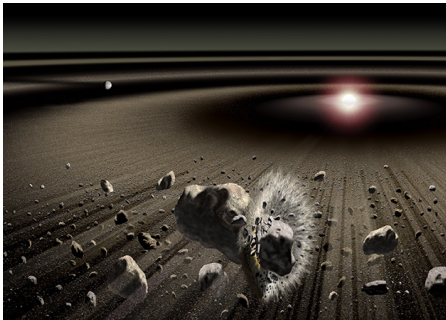
萌芽的課題	
⑩ 基礎科学のフロンティア – 極限への挑戦	極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答の出ない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。 ＜サブ課題(例)＞ A: 破壊とカタストロフィ: 材料、人工物から地球まで B: 相転移と流体が織り成す大変動: ナノバブルから火山噴火まで C: 極限環境での状態変化: 物質の理解から惑星深部へ D: 量子力学の基礎と情報: 計算限界への挑戦 
⑪ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究	複雑且つ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済など社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。 ＜サブ課題(例)＞ A: 各社会要素モデルの統合化とその有効性実証研究 B: 各社会構成要素モデルの高度化(交通システムの高精度高信頼予測の実現、およびそれによる最適化の実現)
⑫ 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明	宇宙、地球・惑星、気象、分子科学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取り組みにより、観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子科学を探究する。 ＜サブ課題(例)＞ A: 地球と地球型惑星(第二の地球)の誕生条件の解明 B: 太陽活動による地球環境変動の解明 C: 太陽系における物質進化の解明
⑬ 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用	革新技術による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」での大規模シミュレーションにより思考を実現する脳の大規模神経回路を再現し、人工知能への応用をはかる。 ＜サブ課題(例)＞ A: 思考を実現する神経回路機構の解明 B: 脳アーキテクチャにもとづく人工汎用知能 

ポスト「京」重点課題と「萌芽的課題」

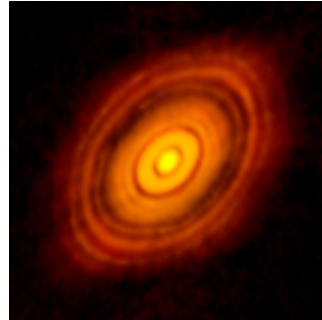
- よくわからないが文科省の方針が変わって「戦略分野」ではなく「重点課題」ということになった。
- 2014年度にあった委員会で重点課題9課題と、「萌芽的課題」4課題が選定。重点課題はこの年に公募・採択。萌芽的は2016年3月末に公募、6月くらいに採択。
- 重点課題の中に「宇宙の基本法則と進化の解明」。但し、これは超新星、宇宙論ははいるが銀河形成・星形成・惑星形成とかは入らない
- 萌芽的課題「太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明」で惑星科学・重点課題にはいってない宇宙科学を推進する

我々の課題の目標

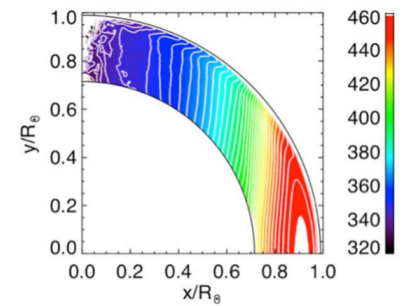
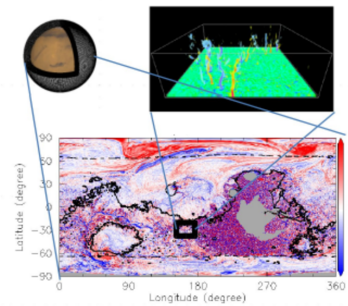
目的: 太陽のような星とそれが持つ惑星系の起源から形成された惑星の構造の進化、大気や表面の水圏の形成・進化、太陽活動の変化やその惑星表層への影響といった、実験では実現不可能な現象を大規模計算によるシミュレーションを使って研究し、国内外で進められている様々な観測・探査プロジェクトと連携して、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明を目指す。



(c) ISAS/JAXA

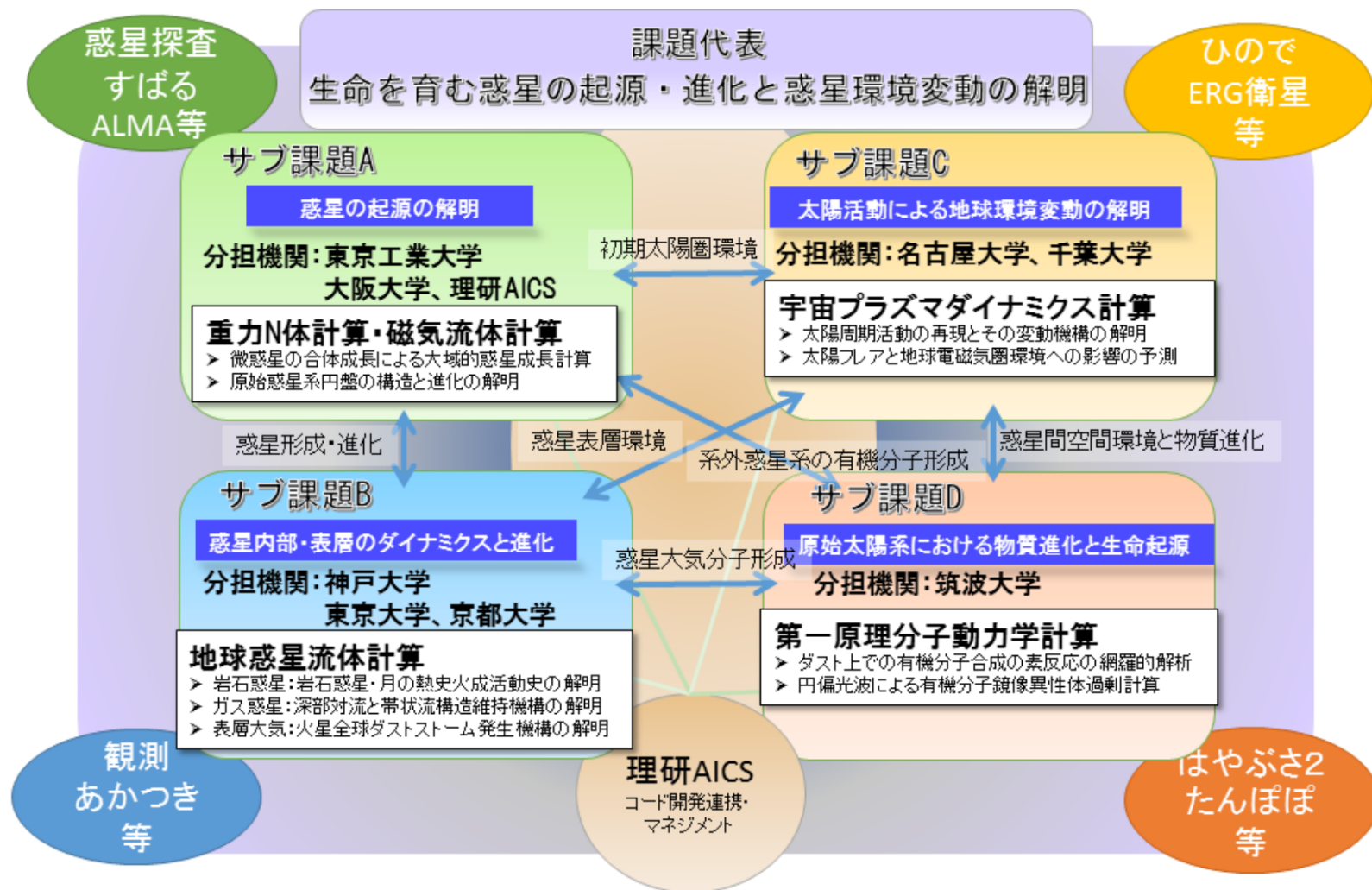


(c) ALMA (ESO/NAOJ/NRAO) Nishizawa et al. 2016



堀田 2013

実施体制



サブ課題 A: 惑星の起源の解明

概要: 原始惑星系円盤の大域的な構造と進化、その環境下における微惑星集積、惑星へのガス集積、円盤との相互作用による軌道移動を融合した大規模計算を行い、一般的な惑星形成過程を明らかにし、「第二の地球」の存在確率や多様性の理論予測を行う。

ポスト京での目標: 非理想 MHD 効果や円盤ガスの電離度の進化まで考慮した、ガス円盤の大域的高解像度シミュレーションにより、惑星形成の初期過程を明らかにする。惑星形成の1億以上の粒子を用いた大域的 N 体シミュレーションで、惑星形成過程の全体を解明する。

サブ課題 B:惑星内部・表層のダイナミクスと進化

概要: 様々なサイズの惑星・衛星の、内部あるいは大気の力学的構造とその進化の探求を最終目標として、岩石惑星・衛星の火成活動・マンテル対流、ガス惑星表層と深部の循環、火星全球ダストストームを中核対象に選び、球面・球殻形状での高解像度数値計算を実現、順次汎用化を進める。

ポスト京での目標: マンテル対流: 月の 45 億年 3 次元。さらに地球、スーパーアースに。惑星大気:火星で水平解像度 800m、鉛直 200 層で表現、60 火星日間 (約 1/12 火星年)。火星のダストストーム、さらに金星の全球計算を目指す。ガス惑星:水平解像度 0.2 度、鉛直 128 層、10 万惑星日。

サブ課題 C: 太陽活動による地球環境変動の解明

概要: 太陽対流層の第一原理的シミュレーションにより黒点、太陽活動の長期変動の起源を明らかにし、太陽活動の地球電磁気圏に与える影響を多階層シミュレーションにより明らかにする。太陽観測衛星、地球観測衛星等のデータと融合した解析により短期・長期予測手法を確立し、太陽活動の社会への影響の軽減を目指す。

ポスト京での目標: これまで不可能だった黒点の自発的形成過程を再現する。フレアにおいて重要な役割を果たす磁気リコネクションの内部構造と粒子加速を再現する。磁気嵐における人工衛星の帯電過程を衛星の形状や表面素材の影響を正確に取り入れて再現する。

サブ課題D:原始太陽系における物質進化と生命起源の探究

概要: 原始惑星系円盤、惑星間ダスト上の有機分子生成の量子化学計算を実施し, ALMA 望遠鏡、はやぶさ 2 やたんぽぽ計画等のデータとの突合せから, 原始太陽系における物質進化を解き明かし, 地球上の生命起源を探究する。

ポスト京での目標: 原始太陽系における有機分子生成の第一原理計算を世界に先駆けて実現する。観測データとの比較により太陽系における生命の起源の解明に迫る。

これまでの成果

- サイエンス: 「京」その他で。各課題十分色々でている。
- ソフトウェア開発: 色々なマシン。各課題十分色々できている。(今日の話、ポスター等)

今後の方向

- 課題：来年度以降につなげること。
- 内部的課題：そろそろ世代交代とか
- 分野の状況をみたサイエンス目標の検討も必要

まとめ

- ポスト「京」は2021年完成、「京」の最大100倍程度のアプリケーション性能を目指す。
- 「萌芽的課題」の中に「太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明」
- 今年度で「重点課題」「萌芽的課題」は終わり、来年度から「ポスト「京」成果創出加速プログラム(仮称)」
- この募集ももうすぐ始まるはず。
- 単に萌芽の延長ではなく、サイエンス・目標の見直し、新しいものの追加も必要。
- これまでの成果に基づき、一層の発展を図るべく、皆様のご支援・ご協力をお願いします。