



Computer simulations create the future

未来をひらくスーパーコンピュータ 2014年8月23日(土)

未来をひらくスーパーコンピュータ

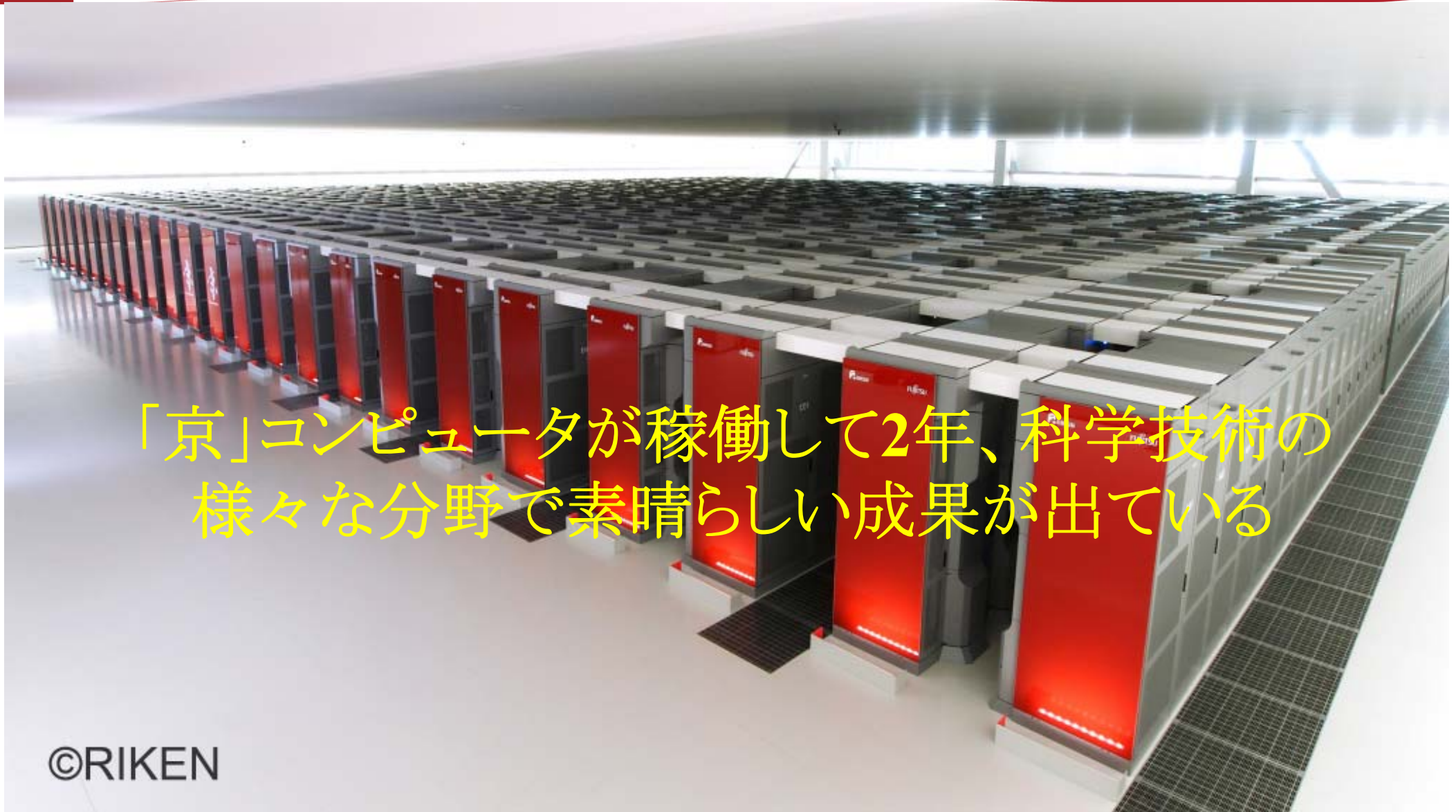
理化学研究所 計算科学研究機構

平尾 公彦



「京」の現況について

2012年9月に本格稼働



「京」コンピュータが稼働して2年、科学技術の
様々な分野で素晴らしい成果が出ている

©RIKEN

富士通と理研が共同開発した「京」コンピュータ

「京」は今でも世界最先端スパコン

「京」は演算性能では現在、世界4位。しかし「京」は幅広い分野での活用が可能で、科学的成果を出すこともできるスパコンとして世界から高い評価を受けている。アプリケーションプログラムの実効性能や演算性能あたりのメモリ容量、CPU・メモリ間のデータ転送性能やCPU間のデータ転送性能に優れ、バランスのとれたスパコンといえる。

世界のスパコン トップ5 - 2014年6月

順位・国	機関	PF (実行効率)
1 中国	「天河2号」 広州国立スーパーコンピュータセンター	33.86 (61.7%)
2 アメリカ	「タイタン」 オークリッジ国立研究所	17.59 (64.9%)
3 アメリカ	「セコイア」 ローレンス・リバモア国立研究所	17.17 (85.3%)
4 日本	「京」 理研 計算科学研究機構	10.51 (93.2%)
5 アメリカ	「ミラ」 アルゴンヌ国立研究所	8.59 (85.3%)

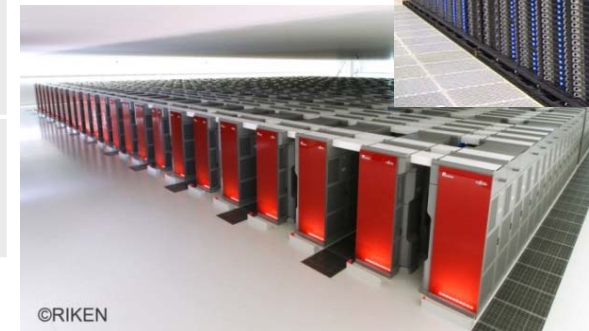
天河2号



タイタン



セコイア



京

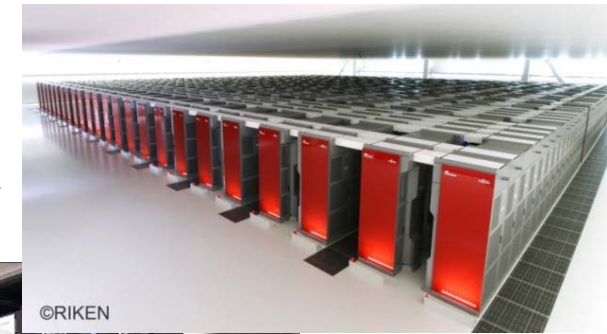
「京」がGraph500で世界第1位を獲得

Graph500はグラフ処理における速度を計測するベンチマーク。ビッグデータを用いたデータマイニング、Webページのリンク解析、ソーシャルグラフ解析、ITS(高度交通システム)データの分析などで重視される大規模データ処理の性能を計測する指標。プロセッサの演算性能がものをいうTOP500のLINPACKと異なり、ネットワークやメモリーの性能が重要になる。演算性能の単位はTEPS(1秒間に探索したグラフの枝数)。

Graph500 トップ5 - 2014年6月

順位・国	機関	GTEPS	Top500の順位
1 日本	「京」 理研 計算科学研究機構	17977	4
2 アメリカ	「セコイア」 ローレンス・リバモア国立研究所	16599	3
3 アメリカ	「ミラ」 アルゴンヌ国立研究所	14328	5
4 ドイツ	「ユークイーン」 ユーリッヒ研究所	5848	8
5 イタリア	「フェルミ」 シニカ	2567	17
6 中国	「天河2号」 広州国立スーパーコンピュータセンター	2061	1

京



©RIKEN

セコイア



ミラ



ユークイーン

「京」が我が国の計算科学を一気に開花

「京」以前には見渡すことができなかった
眺望を「京」は与えてくれた

「京」は新しい世界をひらき
新たな可能性とチャレンジを与えつつある

「京」は広い分野で科学的成果を出すことのできる
Strong Science Machine

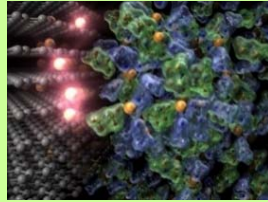
「京」による最近の成果事例

材料・エネルギー

リチウムイオン電池 充電時間1/3に高濃度電解液の動作原理を解明

2014年3月30日 産経新聞2014年3月27日 日経産業新聞等、多数誌に掲載

リチウムイオン電池の新規電解液について、「京」による分子レベルの解析を行った。従来の1/3以下の急速充電や、5V以上の高電圧下での動作が可能になることが分かった。高性能電池の開発に大きく貢献する。

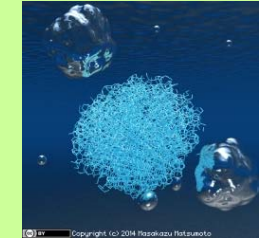


出典: <http://www.t.u-tokyo.ac.jp/epage/release/2014/2014032401.html> (HPCI戦略プログラム分野2 館山グループで実施)

メタンハイドレートからメタン発生の仕組みを解明

世界で初めて、メタンハイドレートが分解してメタンが発生する仕組みを分子レベルで解明

2014年4月16日 朝日新聞



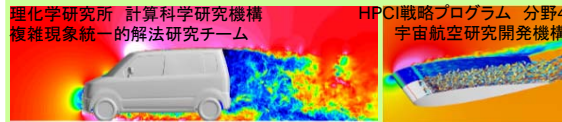
次世代半導体として注目されているシリコン・ナノワイヤ材料の電子状態計算でゴードンベル賞受賞

ものづくり

大規模空力シミュレーションで自動車開発を加速

2014年2月3日 産経新聞等、多数誌に掲載

「京」による大規模数値計算で、今までの風洞実験では難しかった実際の運転状況下でのシミュレーションを実現した。強力な産学連携体制で進行中。



流体制御シミュレーションにより輸送・流体機器開発に革新の芽を育成

小さなデバイスが輸送・流体機器の性能を圧倒的に向上させるポテンシャルを有することを「京」利用で実証。具体的な機器での利用に向けて産業界との連携を推進中。

防災・減災

超高解像度の気象シミュレーション実現、積乱雲をより正確に

2013年10月18日 日経産業新聞に掲載

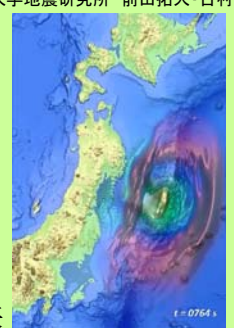
「京」では水平格子間隔1km未満の超高解像度の気象シミュレーションが可能となった。積乱雲の詳細な表現が可能になった。



海洋研究開発機構・東京大学大気海洋研究所 (HPCI戦略プログラム分野3) および 理化学研究所計算科学研究機構の共同研究

地震動、地殻変動、津波を同時にシミュレーション

「京」の利用で、地震動、地殻変動、津波をまとめてシミュレーションすることが可能になった。将来的には、大地震に伴う、強震動、地殻変動、津波襲来の総合的な災害予測が期待される。



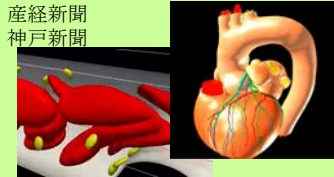
ライフサイエンス

血流シミュレーション、心臓シミュレーションで医療支援

2014年2月3日 産経新聞
2013年9月23日 神戸新聞

「京」の活用により、2年近く掛かっていた細胞内の構造を精密に再現した心臓モデルの1回収縮分の計算が1日できるようになった。「京」を用いて、直径約100μmの大きさの血管で、赤血球の変形や血小板の粘着などを考慮に入れたシミュレーションを実施した。医療分野へ貢献

HPCI戦略プログラム 分野1
東京大学 久田・杉浦・鷲尾・岡田研究室
協力 富士通株式会社



HPCI戦略プログラム 分野1 ISLIM, SCLS

血流や心臓の階層
統合シミュレーション

2013年7月4日 WIRED.jp



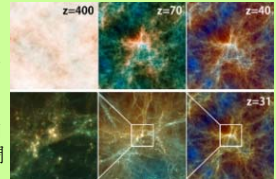
HPCI戦略プログラム 分野1
東京大学 先端科学技術研究センター 藤谷 秀章
タンパク質と化合物の
相互作用シミュレーション

宇宙

ダークマターの動きを再現した成果でゴードンベル受賞

約2兆個のダークマター粒子の重力計算に成功。「京」全体の約98%を使用し、実効性能5.67ペタフロップスを達成。ゴードン・ベル賞を受賞した

2012年11月17日 読売新聞



世界最高の解像度で太陽の対流層を計算



©国立天文台
2014年4月25日 マイナビニュース

HPCI戦略プログラム 分野5
シミュレーション 石山智明
(筑波大学計算科学研究センター)
可視化 武田隆顕(国立天文台)

超新星爆発の大規模計算を実現

「京」を用いて初めて現実に近い形で超新星爆発を計算。ニュートリノ加熱説を支持する強い証拠を示した。超新星爆発の詳細な研究の進展につなげる。

10兆個の結合の世界最大の脳神経シミュレーション

2013年のノーベル賞とコンピュータ

昨年のノーベル化学賞、ノーベル物理学賞は、科学技術の発展によってコンピュータが不可欠な基盤技術であることを改めて示した

ノーベル化学賞は、タンパク質のような巨大な分子の化学反応をコンピュータを使って効率よく計算する手法を開発した、Martin Karplus氏、Michael Levitt氏、Arieh Warshel氏の三氏に贈られた。三氏の貢献は“**Taking the experiment to cyberspace**”生体内で起こる様々な現象をコンピュータ上で再現することに道を開いた。

シミュレーションに初のノーベル賞！



© Harvard University
Martin Karplus 氏



Photo:©S.Fisch
Michael Levitt 氏



Photo:Wikimedia Commons
Arieh Warshel 氏

ノーベル物理学賞は、物質に質量を与える「ヒッグス粒子」の存在を50年前に予言したピーター・ヒッグス氏とフランソワ・アングレール氏に贈られた。一昨年7月によりやく日米欧などの国際チームがスイスにあるCERNの大型加速器を使ってヒッグス粒子の存在を実験的に確かめた。この実験はComputer-Intensiveな実験であり、コンピュータの助けがなければ、ヒッグス粒子の発見に至らなかつたのではないかとされている。



Peter Higgs (right) and François Englert (left)

現代におけるスパコンの意義

- 科学技術のブレークスルー達成
Excellent science
- 産業の国際競争力強化
Industrial leadership
- 安全安心な社会の構築
Safe and Secure Society
- 社会的課題の解決
Societal challenges

「京」を使い倒して

自然の懐は深く、多様な自然に比べると、われわれのシミュレーションはまだまだかもしれない。

しかしシミュレーションは実験や理論では見えないものが見える。測定不能、実現不能な時間や空間の場でのシミュレーションを行うことにより、科学事象や社会現象の解明と予測に大きな役割を果たすことができる。

「京」コンピュータを使い倒して、世界がギクリとする成果を挙げたい。

シミュレーションの限界

自然現象を説明するシミュレーションや理論は、所詮ひとつのモデルや近似以上にでることはあり得ない。ある近似の平面を選んでそこで自然を切り、その平面への投影を見ているにすぎない。

見えすぎるものについては、いささか疑いのまなざしを向け、見え難いものは、よく見極めて、そこに隠れているかも知れない価値と美を認識する心掛けを忘れてはなるまい。



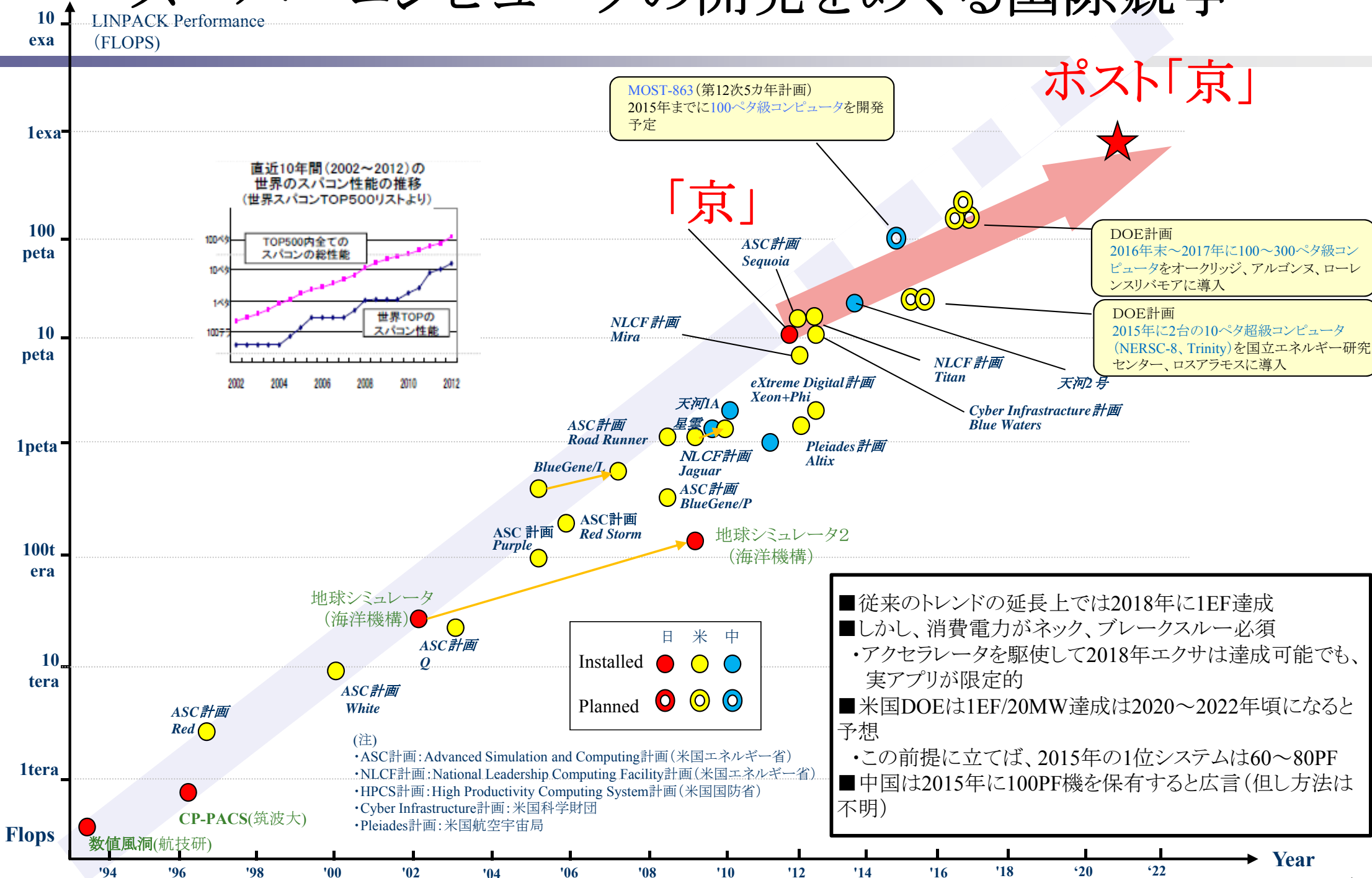
ポスト「京」の開発について

各国のスパコン保有台数 2014年6月



29ヶ国

スーパーコンピュータの開発をめぐる国際競争



ポスト「京」に向けてのハードウェアの挑戦

Energy and Power Challenge

現在のPetaflops systemsの消費電力1-2 MegaW/Petaflops、 Exascale では30MWが上限

Concurrency (並列度) Challenge

もはやclock rateを最適化してsingle processorの性能を上げることは困難
Concurrencyの増大に頼らざるを得ない

Resiliency (回復度) Challenge

10年前のTeraflops systemは10,000CPUコア、「京」は700,000 CPUコア、
Exascaleでは10,000,000のCPUコア、基本的にシステムは自律的でなければならない

Programming Challenge

CPUコア1000万以上並列での効率的動作が可能なシステムソフトウェアを実現

Flops are cheap and moving data is expensive

メニーコアで効率的に働く新しいアルゴリズム、アプリケーションソフトウェアの開発

“co-design” of architecture and application

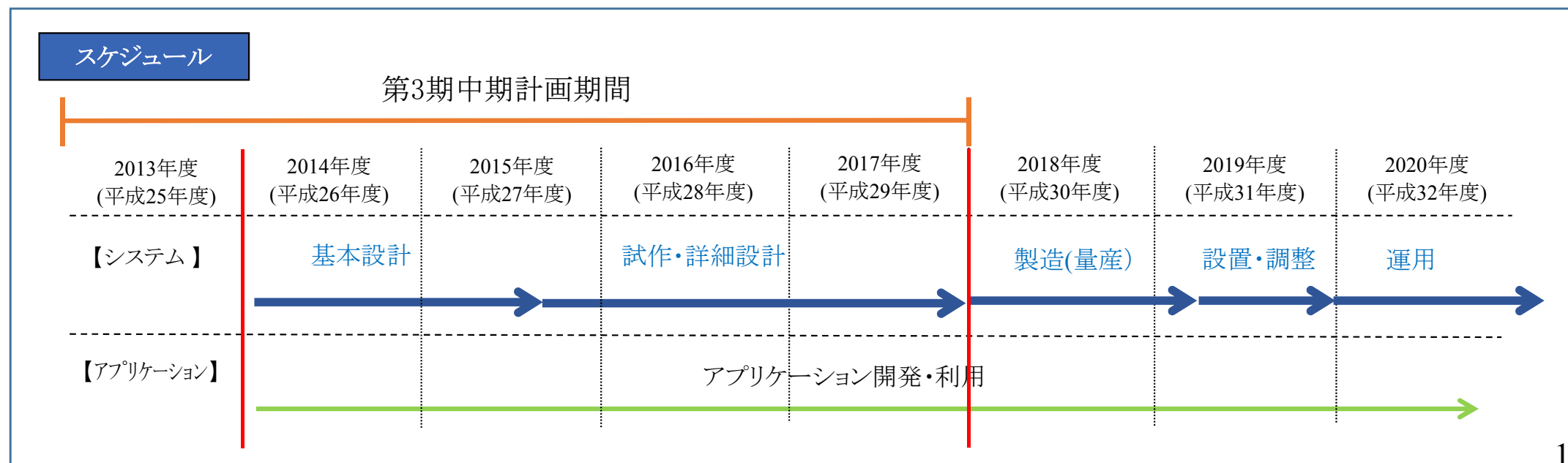
Capability Computer or Capacity Computer?

- **Capability Computer** は大規模問題を短時間で解く (Heroic Computations) 計算機明らかに京よりも100倍速い計算機を必要とする大規模で複雑な課題が様々な分野で存在する (大規模単一型計算)
- シミュレーションが対象とする現象の複雑さ、不確実さ、予測困難ゆえ、**Ensemble Computing**が必要
- **Capacity Computer**は多くのユーザーの様々な課題を同時に処理する計算機確率論的予測、パラメータの最適化・・・(多重ケース処理型計算)
- **Predictive Capability**の重要性、新しい予測モデリングの必要性
データ同化、シミュレーション (演繹的推論) とデータ解析 (帰納的推論) の融合。
自然科学のみならず、社会科学、経済、ビジネスなどの課題にはさらに有用
- **Ensemble Computing**にとっては**Capability Computer**も**Capacity Computer**も必要

フラッグシップ2020 — ポスト「京」の開発

開発の概要

- 2020年までに「京」の後継機である世界最先端の新たな超高速電子計算機を開発
- 幅広い分野で活用できる汎用性あるシステムをアプリケーションと一体的に開発 (Co-design)し、社会的・科学的課題の解決に貢献
- 自主開発によりIT技術の波及効果が得られ、海外展開に貢献するとともに、我が国に蓄積された高度なICT技術・人材を維持・強化
- 開発チーム プロジェクトリーダー (石川 裕)
副プロジェクトリーダー (佐藤 三久、牧野 淳一郎、富田 浩文)



ポスト「京」 Capability Computing (大規模単一型計算)

人工光合成など次世代エネルギー源の開発への加速

天然光合成のメカニズムの理解

人工光合成を制御するためのエネルギー原理の確立

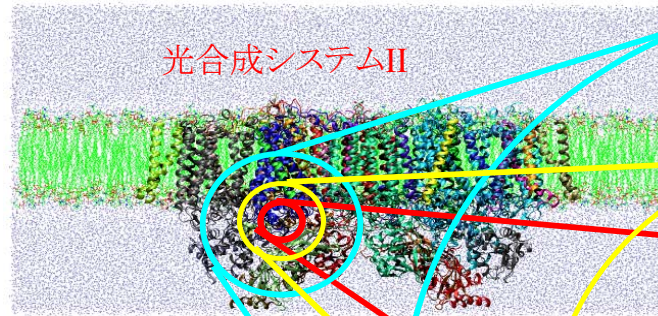
私たち人類のすべての活動はCO₂を排出する。化石燃料を燃やしても、息をしてもCO₂を出す。地球上で、これと逆の動き、つまりCO₂から炭水化物を合成のは、光合成を行う植物だけ。現在の生物界と大気中の酸素は「全部」光合成でつくられた。

【京からポスト京への飛躍】

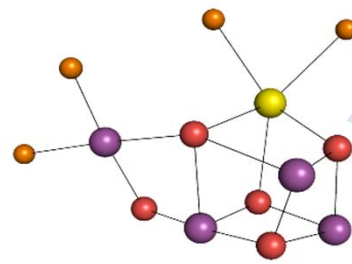
●天然光合成系の部分的シミュレーションとして、酸素発生中心の高精度電子状態計算等がようやく可能になった。

●マイクロからマクロの多階層に渡る連成計算により、天然光合成の全系のメカニズム解明し、人工光合成への道を切り開く。

実在系は100万原子系の大きさ



SPring-8で構造決定された活性中心:
酸素発生Mn₄CaO₅(H₂O)₄クラスター



紫: マンガン(Mn)
黄: カルシウム(Ca)
赤: 酸素(O)
オレンジ: 水(H₂O)

3d 強相関電子系、開殻系

1電子過程

QM/MM/MDモデル
(分散力+クーロン)
~一万原子系

構造最適化(QM/MM)領域
~千原子系

QM領域
~2百原子

MM領域

多階層連結コンピューティング

Quantum Mechanics
Molecular Dynamics
Mesoscale Dynamics
Continuum Methods

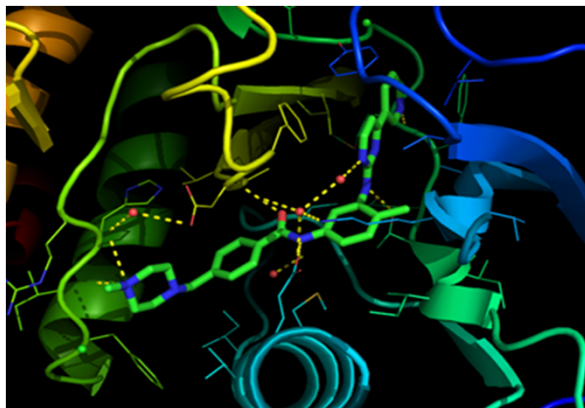
創薬スクリーニング

計算創薬による創薬過程での大幅なコスト低減

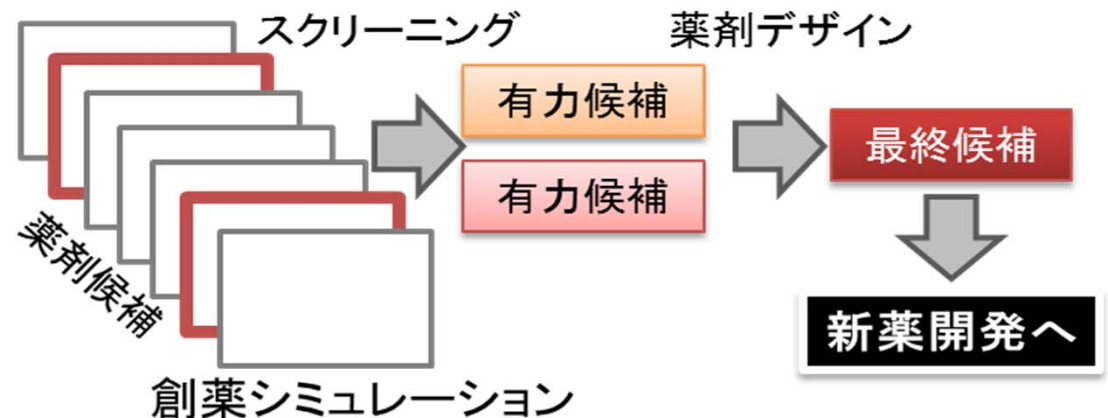
探索空間を核酸、ペプチド、抗体に広げ、副作用の少ない画期的な新薬^{TM2}早期発見
量子論的な取扱いでエピジェネティクスの制御による創薬

【京からポスト京への飛躍】

- 薬剤とタンパク質の間の相互作用を高速、高精度に解析する手法は確立されたが、大量な薬剤候補に対するスクリーニングや新規薬剤デザインを行うのは困難
- 大量の薬剤候補から短時間に計算スクリーニングにより候補を絞り込み(ある程度の絞り込みが可能な10万ケース程度を想定)、更に高精度創薬計算によりタンパク質と薬剤の間の詳細な相互作用計算に基づいた薬剤デザインを行い、高い薬効や低い副作用を持つ薬剤候補を得る



タンパク質と薬の結合



TM2

ここは違うことが書いてあります。
Takemasa Miyoshi, 2014/06/30

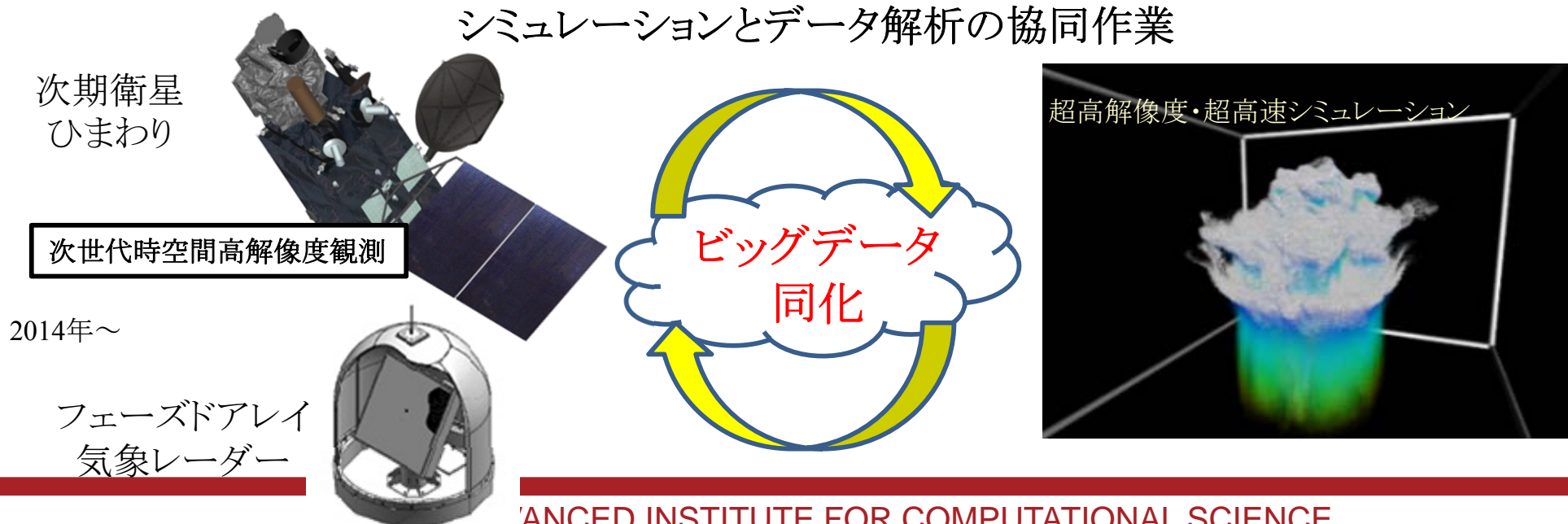
ビッグデータ同化

ビッグデータ気象学の礎を築く
ゲリラ豪雨をピンポイントに予測、天気予報に革命を

【京からポスト京への飛躍】

- 数時間毎の観測データを使った1km以下の解像度のシミュレーションにより都市スケールでの数時間後の天気を予測する可能性が開けた。
- 100m以下の解像度で30秒毎に更新するリードタイム1時間の革命的天気予報を実現
 - 雲・雨・ひょうなどを忠実に再現する高解像度シミュレーションと、複数の新型センサ・衛星観測によるビッグデータの融合

シミュレーションとデータ解析の協同作業



ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

1. 重点課題(9課題)

科学的卓越性、社会的重要性、ポスト「京」利用の必要性のある課題、さらに「京」からの発展として世界を先導する成果の創出が期待できる9課題が選ばれた。

カテゴリ	重点課題
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 ポスト「京」で初めて実現される分子シミュレーションの高速化によって、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。
	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。
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る、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。
	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。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

1. 重点課題(9課題)(つづき)

カテゴリ	重点課題
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。
	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。
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。
	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。
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 自然界の基本法則と宇宙の進化過程には多くの謎が残されている。ポスト「京」で可能となる精密計算や異なるスケール間の現象の計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせて宇宙と物質の創成史を解明する。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

2. 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萌芽的課題として、次に4課題が選ばれた。今後、調査研究を通じて実現化を検討する。

萌芽的課題	
将来性を考慮し、今後、実現化を検討する課題	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ていない難問に、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。
	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。
	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。
	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 革新技术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人間の精神活動を脳の物理的実体にねざして再現し、人工知能への応用をはかる。

エクサスケール・コンピューティング

多くの分野で「予測の科学 (Predictive Science)」への tipping point に到達する。

新しい現象を発見できる。

われわれ人類は新しい認識を獲得する強力なツールを手にすることになる。

終わりに

- スパコンは日本社会を力強く支え、明日の時代を切り開く国家存立の基盤技術
- 「京」を活用し、人類に知的貢献をなし、国民、国際社会の期待に応える
- 科学技術で世界をリードするには、世界トップクラスのスパコンの継続的な開発が必要。ポスト「京」の開発にも全力で取り組む

今後ともよろしくご支援ください！