

今後のHPC技術の研究開発 課題とロードマップの検討状 況ならびに意見交換 —アプリケーション—

理化学研究所・計算科学研究機構

富田 浩文

アプリケーション作業部会

- 目的:

1. 今後のHPCの発展を踏まえながら、計算科学各分野において、どのような計算が必要となるかを整理
2. 各分野で見通しをつけるため、5~15(20)年先まで、現時点で考えられうるサイエンスブレークスルーおよび社会的要請をまとめる。
3. 横断的な分野の連携を図る。
4. 以上をもとに、2018年頃までの各分野で行うべき計算内容・規模を決めて、それに対する可能性を議論。
5. 具現化するのに、どのような計算機が望ましいか(複数を含む)、また、計算機性能としてどこを強化するべきかを話し合う。
6. 計算機科学者と共同して、今後のHPCのあるべき姿を白書の形でまとめる。

これまでの活動報告

- これまで、アプリ作業部会としては、計4回（8月8日、9月1日、10月4日、11月21日）
 - サブWG(要求スペック検討):9月17日、10月4日
- 8月8日:顔合わせ、この先のサイエンスで何をやるべきかを各分野内で議論を始めることを要請。
- 9月1日:各分野進捗、中間報告
- 10月4日:午前中間的まとめ、
 - 午後サブWGにて、各分野主要アプリの情報共有し、いくつかのシステムパターンを選定。
- 10月15日:合同作業部会でアプリ側としての4つのシステムパターンをアーキテクチャ側へ提示
- 10月下旬:これを受けて、アーキテクチャ部会から現時点の外挿で2018年にコモディティレベルで可能なシステムの予想を提示される。
- 11月以降:アーキテクチャ部会の数値とアプリ部会が要望している数値と照らし合わせて、どの部分を強化すべきかを検討中。
- 11月21日: 今後の計算科学発展のための検討すべき項目を議論。
- 11月26日: 合同作業部会。
- 11月28日: HPCI推進委員会で中間報告

基本的な合意事項

● サイエンスドリブンでのHPC施策

- 今後も引き続き、期待されるサイエンスでのブレークスルー、社会的な要請をより重視し、サイエンスドリブンでトップダウン的に行う。

● サイエンスロードマップの継続的作成

- 5年から10(20)年先の現時点での各分野のサイエンスロードマップをおおもととする。
- 一つのマイルストーンとして、2018年頃に到達するであろうエクサフロップス性能を念頭に置きつつ、作成する。
- サイエンスロードマップ自体は、時代の変遷によって修正が必要。
 - 継続的な議論が必要。

● 計算機科学者(アーキテクチャ作業部会)との連携を強化

- サイエンスロードマップを実現するための主要アプリケーションから要求される性能を見積もり、複数のアーキテクチャの可能性を含めて、アーキテクチャ作業部会と技術的な実現可能性の議論する。
 - マシンのどこを強化すべきか？

以下、白書の執筆項目

1. はじめに

アプリ側として盛り込むこと。

- 今後のHPCはどうあるべきか？
 - サイエンスドリブンであることの明確化
- 各分野で必要とされている科学的研究・社会的要請
 - 各分野からのでてきたサイエンスロードマップからサマリー
- サイエンスロードマップは、科学的視点のみならず、社会的要請をも含めている。

2. サイエンスロードマップ

2-X. ○○研究分野

2-X-1 当該分野の長期的戦略

- 今後5～15(20)年の間でどのような発展が必要か？
 - 学会などで議論されていることが望ましい。
 - 海外の情勢、国際協力なども盛り込む
- 学術的な意義、社会的な要請を踏まえて
 - どのような学問的な意義、社会的なインパクトがあるか？国民(globalに)生活へどのように資するか？を記載。
- 分かりやすい線表

2-X-2 短期的戦略

- 長期を踏まえて、5～10年後には具体的には何を行うべきか？
 - その時の必要なスペックは？
 - 必ずしも、1エクサでなくてもよい。場合によっては、数100PF、数EF。
 - 主要なアプリケーションの説明
- **そのほか、社会的要請を踏まえて、横断的なセクションを入れる。**

執筆の進捗状況

- 分子・細胞(粒子)
- 細胞・臓器(連続体)
- ゲノムデータ解析
- 脳神経科学
- 物性物理
- 分子科学
- 材料科学
- 地震・津波科学
- 気象・気候科学
- 素粒子
- 原子核
- 宇宙
- 流体(空力、音響、燃焼、...)
- 構造(FEM系)
- プラズマ、核融合
- 構造(ナノ系)・材料
- デバイスプロセス
- たんぱく質・酵素
- (可視化)

第一原稿は提出済み。
網羅的になりすぎるので、現在、もう少し、融合できるところを調整中。

全分野からほぼ、第一稿(サイエンスロードマップ)は出てきているので、早急にここ馬まとめられる。

横断的融合的研究なども含める

例：惑星科学は、宇宙科学と気象・気候科学の両面

3. 2を具現化するための5年～10年後の計算機の必要性能

- 以下盛り込むべきこと
 - 2に基づき、システム類型化
 - 類型化した根拠
 - どのようなアプリがどのタイプにマッチするか？
- 5～10年後のサイエンスプランを遂行するのに足りない性能はどこか？何か？

4. 計算科学のよりよい発展性の考慮

4-1 どのような使い方をすべきか？（議論中）

- 大規模並列ジョブとアレイジョブ
- データ入出力のながれ
 - 例えば、生物物理、MDと次世代シーケンスとでは、データの流
れが異なる。
- ナショナルフラグシップマシンのあり方を含めて

4-2 より効率的発展のためには？（議論中）

- 産業界への下方展開、
- 計算科学・計算機科学研究者の教育面

4-3 アプリケーションサイドとして、使いやすいシステムで
あるためには？（議論中）

各分野主要アプリの解析

- コモディティアーキテクチャの動向によるアーキテクチャ作業部会から提示された主な数値(以下)

	総演算性能 PetaFLOPS	総メモリ帯域 PetaByte/s	総メモリ容量 PetaByte
汎用(従来型)	400	40	40
容量・帯域重視	100	100	100
帯域・演算重視	1000	500	0.2
演算重視	2000	10	10

- まずはどれに当てはまるかを分類した。

ここまでのアプリ解析結果のまとめ

- ネットワークを除いた部分
 - 容量・帯域重視型となるものの多くが陰解法で大規模行列を解くもの
 - PIC、ボルツマン方程式等、自由度が大きく自由度あたりの演算量が少ないものも容量帯域重視型
 - 量子化学計算の多くが演算重視型
 - 小自由度長時間計算では帯域演算重視型も有効
- ネットワークへの要求
 - 低レイテンシ($\ll 1\mu s$) 要求はあまりない。小粒子MD で1ステップをマイクロ秒程度にしたいという要請はある。
 - バイセクションで効率決まるアプリケーションはいくつかある
 - 隣接通信のバンド幅要求はQCD が大きい。10TFに対して128GB/s双方向
 - 通信のメモリアクセスパターン、縮約等には配慮必要
- **概して、アプリ側でまとめているサイエンスを実現するには、全体的な底上げが必要であるが、精査必要。どの部分をどの程度強化すべきかの最終的な詰めはこれから行う。**

計算科学の発展に向けての議論

これからまだ詰めなければならないもの(1)

- 産業界への下方展開について

- 以下、アプリ作業部会での意見

- ハードウェアの下方展開は、するかどうかではなく、できるようなシステムになっているかが問題。
- アプリケーションの下方展開も重要。
 - ポーティングしやすいマシンが望ましい。
 - アプリのポーティングのしやすさでマシンも売れるはず。
- まずはそれ自体がサイエンティフィックで、社会的要請があるもので成果が出る必要
- ほんとの普及は、ベンダのソフトをいかに移植、稼働させるかを考えないとむずかしい。

- この議論は必要と思われるが、白書に盛り込むのかは、
現在調整中

計算科学の発展に向けての議論

これからまだ詰めなければならないもの(2)

※運用面での議論

- アレイジョブの定義:
 - 狭義では、1ノード1ジョブX超大量
 - 広義では、数～数100ノードX大量
 - この意味では、システムの1/10, 1/100を使ったジョブを複数流すことも本質的には一緒。
- 結局使い方(運用)の問題である。
 - 多くのサイエンスは、その時代のスパコンの1/10, 1/100を多く使うことで科学的成果を出す。(パラメータスタディの必要性)
 - **全系計算の必要性、要望は？:**
 - サイエンスとして成果が出るものも当然たくさんある。
 - 特に次の時代の可能性を示すためには重要。ここでの全系が、次の計算機で成果効率の最も高い1/10,1/100クラスのジョブになる。
 - コストパフォーマンス的な一つの提案:
1ラック程度内は強いネットワーク構成し、それらの間は比較的ルーズにつないでもよいのではないか？(全系計算のデマンドには沿うぐらいのノード間結合は必要だが)
 - しかし、ネットワークをケチってもそれほどコストが下がらないという意見が多い。
- 狭義アレイジョブの問題: 運用の問題でもある。そのようなジョブクラスでサイエンスが見込まれるので必要である。

計算科学の発展に向けての議論 これからまだ詰めなければならないもの(3)

※リアルタイム性の議論

- 11月26日合同作業部会で取り上げられた。
- 例えば、減災の観点から、地震津波など緊急時にスパコンを開放し、計算するようなことは考えられるか？
 - 国の危機管理システムの問題であるので、もし行うとすれば、観測機器の整備、法律の改訂などHPCの中で閉じる問題ではない。
 - **ただし、技術的に可能かどうかは、今後、専門家と議論が必要**

計算科学の発展に向けての議論(4)「スモールサイエンスを大規模に」

- 「スモールサイエンスを大規模に」
 - 消費電力のコストから考えることも大事だが、**プログラム開発コストの問題は同様に重要**
 - アプリ開発が分業化すると、新しいアルゴリズムの開発が止まる。新しい手法への対応に時間がかかる。アプリ開発に特化した人のキャリアパスは？
- 今後も、一人でアルゴリズム開発、プログラミング、シミュレーション、成果発表までやりたい、やれる人材を育てる必要がある。

今後の執筆予定

- 各分野から第一稿をもとに、計算機科学側と強調しながら、序論を作成。
- 積み残しの議論を収束させる(12月)
- 10ページ程度のサマリーの報告書と、それを裏付ける白書の完成(1月末)

- 課題

サイエンスロードマップは、網羅的にならず融合的に再構築。また、横断的な研究も十分に配慮する。

主要アプリの要求スペックは、更に精査し、現行の延長で足りないかを明確にする。

オープンディスカッション (会場の方から意見お願いします)

- 大きなコンピュータは必要か？：
 - 多くのサイエンスは、その時代のスパコンの $1/10, 1/100$ 程度のリソースでの計算を多く行って、成果を出す。
 - なら、 $100\text{PFLOPS} \times 10$ でいいのではないか？
 - **全系計算の必要性、要望はあるか？**：
 - サイエンスとして成果が出るものも当然たくさんある。
 - 特に次の時代の可能性を示すためには重要。ここでの全系が、次の計算機で成果効率の最も高い $1/10, 1/100$ クラスのジョブになる。
 - (ある程度)タイトにつながれた大きなコンピュータは必要である。
 - 同時に、そうでないと計算機の技術発展もしない。
- 大きなコンピュータにリアルタイム性は求めるのか？
 - 例：緊急時の対応
 - 技術的可能性の研究までにとどめるべきなのでは？
- スモールサイエンスと人材育成
- 下方展開

補足:10月21日時点でのアプリ作業部会取りまとめ役
赤:全体統括役

富田 浩文	計算科学研究機構 チームリーダー
杉田 有治	計算科学研究機構 チームリーダー
泰地 真弘人	計算科学研究機構 チームリーダー
池口 満徳	横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科
玉田 嘉紀	東大情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻
野田 茂穂	理化学研究所情報基盤センター
藤堂 眞治	東大・工 講師
信定 克幸	分子研 准教授
西松 毅	東北大・金研 助教
河宮未知生	海洋研究開発機構 地球環境変動領域 チームリーダー
堀 高峯	海洋研究開発機構 地球内部ダイナミクス領域 地震津波・防災プロジェクトサブリーダー
高木 亮治	宇宙研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授
志賀 基之	日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター 研究副主幹
牧野 淳一郎	東京工業大学大学院理工学研究科理学研究流動機構 教授
石川 健一	広島大 理学研究科 物理科学専攻 准教授
山崎 隆浩	富士通研究所厚木研究所 主任研究員
中田 一人	NEC HPC事業部 主任
高山 恒一	日立製作所 中央研究所 情報システム研究センタ プラットフォームシステム研究部 主任研究員
米村 崇	日立製作所 エンタープライズサーバ事業部

補足2: アプリ作業部会のアドバイザー

小柳 義夫	神戸大学
鷹野 景子	お茶の水女子大学大学院
矢川 元基	東洋大学計算力学センター
木寺 詔紀	理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 副プログラムディレクター
常行 真司	東京大学理学系研究科 / 物性研究所 教授
渡邊 國彦	海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター長
加藤 千幸	東京大学 生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター センター長・教授
青木 慎也	筑波大学数理物質科学研究科 教授
平尾 公彦	理化学研究所計算科学研究機構長
宇川 彰	筑波大学副学長・理事
高橋 桂子	海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター
古村 孝志	東京大学大学院情報学環総合防災情報研究センター教授
奥田 基	富士通 TCソリューション事業本部エグゼクティブアーキテクト
高原 浩志	NEC HPC事業部 統括部長
撫佐 昭裕	NEC 文教・科学ソリューション事業部 統括マネージャ

ライフサイエンス分野

- **分子・細胞**：創薬支援、Drug Design
 - 膜タンパク質、DNA蛋白質複合体、リボゾーム、ウィルス、生体超分子複合体、細胞内小器官、細胞環境分子混み合い、反応ネットワーク(真核細胞)
 - 数十万～数億原子、数マイクロ秒～数ミリ秒以上(実際)
京での現状：数十万～数百万原子
- **細胞・臓器**：疾患の原因解明(血栓成長など)／医療支援(超音波シミュレーションなど)
 - 粒子、格子計算の連携シミュレーション
 - 直径数百マイクロメートルから数ミリメートル、数秒から数分の時間スケールの血流解析(血栓生成など)
- **データ解析**：がん遺伝子解析(次世代シーケンサー)
 - がんゲノム解析
 - 20万人(一人当たり10TB～100TB) # 現状1000人
- **脳神経**：脳型情報処理機構の解明
 - カイコ蛾全脳モデル # 「京」カイコ蛾嗅覚
 - 人の脳の部分系のシミュレーション

物性物理分野

- **強相関電子系(超伝導体、磁性体、熱電素子)の機能解明、新物質デザイン**: 新機能を持った物質材料の可能性を提示、材料開発や新機能デバイス開発を加速
 - 第一原理ダウンフォールディング法により、数千バンド、単位胞あたり数百原子以上を含む系の有効模型を第一原理的に導出
 - 量子モンテカルロ法 (数万~10億格子点)、変分モンテカルロ法 (数千格子点)、厳密対角化 (50格子点)などのアルゴリズムを用いたシミュレーション
 - **ナノテクノロジー基幹デバイス**: 過渡的現象を含む非平衡状態におけるデバイス性能の予測へ
 - 実空間密度汎関数法と分子動力学法、非平衡グリーン関数理論の組み合わせにより十萬原子規模の系のダイナミクスの追跡を実現
 - **光・電子機能性**: 高い機能性を備えたデバイス開発を計算科学的な観点から支援
 - 実時間・実空間グリッド上において時間依存コーンシャム方程式及びマクスウェル方程式を差分法に基づいて解くことにより、実在系(数十ナノメートルサイズ)に即したナノ構造体の物性予測

分子科学分野

- **分子微細量子構造予測**: 未知の分子の機能や状態を人間生活レベルでの享受／新しい合成化学が創成
- 非経験的分子軌道理論を用いた超高精度電子状態計算により、数ナノメートルサイズの巨大分子の電子状態を高い精度で予測
- **蛋白質の立体構造予測と創薬設計、ウィルスの全原子計算**: インフルエンザやHIVなどの細胞膜や表面タンパク質を有する大きなウィルスの営みの分子科学を確立
- 現在の高速多重極展開を越えた長距離力計算の新アルゴリズムを用いた分子動力学法により10億原子系の全原子計算へ
- **エネルギー変換デバイス (太陽電池、人工光合成)**: 革新的エネルギー変換、将来のエネルギー問題の解決へ
- 第一原理分子動力学法と自由エネルギー計算コードの融合により、 $10\text{nm}^3 \times 100$ ピコ秒 $\times 10^5$ 状態のシミュレーションを実現し、デバイス開発の礎となる理論を構築

ナノ材料科学分野

- **構造材料の構造・特性の高精度予測・設計**：強度や耐久性、耐熱性を併せ持つ材料や軽量高強度の材料の開発
 - 高精度自由エネルギー計算、第一原理計算、フェーズフィールド法などを連成したマルチスケール計算により、結晶相・化合物相、粒界・界面・欠陥の安定性・強度特性を第一原理から予測
- **気液混相流の全粒子計算**：マルチスケール・マルチフィジックスな問題をミクロな相互作用から統一的に解明・理解
 - 100兆粒子系の分子動力学シミュレーションにより、気液混相流などの直接シミュレーションを実現し、マルチスケール・マルチフィジックス現象の解明へ

地震・津波分野

- 都市スケールでの複合災害の再現と予測：中防や各地域での被害予測の高度化
- 強震動→液状化→津波襲来→建物破壊→漂流
- 様々な規模の地震を発生させる地殻のモデル化
- 変形・破壊のレオロジー、地震活動の物理
- 大破壊前の地殻状態(不均質・異方・非弾性媒質の分岐直前過程)の解明
- 列島スケールでのプレート境界固着・すべり：
 - 固着・すべり状態のモニタリング・逐次同化による推移予測
 - 固着・すべりにもとづく応力蓄積・様々な巨大地震発生シナリオ
- 全球地殻・マントルダイナミクス：M₁₀地震の発生可能性、大規模カルデラ形成メカニズム
- プレートテクトニクスの自発的形成
- マグマ分化と大陸形成

気象・気候分野

- **地球環境監視予測システム構築へのパス：地球環境再解析、予測システムの構築**
- 地球統合モデル(ESM)の要素モデル開発と結合が加速される
 - 古気候や惑星大気モデリングによる検証
- 生物化学過程のデータ同化への挑戦が可能に
- **スケール間相互作用解明：大気海洋の乱流と大規模場との相互作用の理解／化学－エアロゾル過程相互作用解明／個体動態と群集動態の関係解明**
- エアロゾル－大気化学結合モデルの開発
- 個体ベース生態系モデル(陸域・海域)の開発
- **超高解像度気象予報：局地的大雨の直前予報、確率予報の実証／再生可能エネルギーの供給予測・大気拡散問題の信頼性向上**
- 500m～2km高解像度雲解像モデルとデータ同化の高度化
- 氷相を入れたデータ同化技術の確立
- 高精度な風系・物質輸送再現が可能に

ものづくり分野

- 一貫した姿勢と期待：我が国のものづくりの革新を通して産業競争力強化

- 製品試作の数値シミュレーションによる代替

- 熱流体解析：

- 例：自動車：数ミクロンから数mの大きさの渦を解像することで、風洞試験以上の精度で空力抵抗予測が可能
- 最適化による製品の高機能化（省エネ、低騒音）
 - 多数の設計パラメータを最適化するために必要な膨大なケース数の解析を実施可能

- 構造解析（地震学と融合的に）

- 核融合・プラズマ：

- ITER規模の核燃焼プラズマの長時間高精度解析が可能

- ナノ科学（物性物理と融合しながら横断的に）

- 材料科学（材料物理と融合しながら横断的に）

- タンパク質の電子状態（分子化学と融合しながら横断的に）

- 可視化：

- HPCを支える基盤技術としてエクサスケールデータへの対応

調整中のため今後変更の可能性あり

素粒子・原子核分野

- 人類の自然に対する新しい知見を広げる知的フロンティア。
 - 宇宙と物質の起源と進化の解明
 - 宇宙の中の我々の存在に関する哲学的疑問
 - 基礎的な物理法則の確立から階層を繋ぐ複雑な現象の解明へ
- 格子QCD理論
 - 場の量子論の手法の確立
 - 実験困難な現象の演繹的解析のための基礎物理
 - 素粒子から原子核へ: 2階層を繋ぐ
 - 必要なブレークスルー:
 - **クォーク・グルーオンから原子核(少数核子多体系)の構成ができる! ⇔核力の第一原理的説明に必要**
 - **極限環境下でのクォーク・グルーオンの状態方程式⇔元素合成の第一原理的説明に必要**
 - **重いクォーク物質を通じた新しい素粒子階層の探求⇔素粒子標準模型をこえる理論の探求**
- 原子核物理
 - 宇宙の元素構成と元素合成の過程
 - 実験困難な現象の演繹的解析のための基礎物理
 - 原子核から原子分子へ
 - 必要なブレークスルー:
 - **核子少数多体系から核子多数多体系の性質の解明⇔第一原理的計算から重核子の性質の説明**
 - **極限環境下での核物質の状態方程式⇔元素合成の第一原理的説明に必要**

宇宙・惑星科学分野

- 宇宙史の探求

- 個々の星を分解した「第一原理的」銀河形成・進化シミュレーションで**銀河の起源を理解**する

- 惑星形成と地球外生命の探求

- 分子雲から惑星形成までのシームレスなシミュレーションで**多様な系外惑星の起源を理解**
- 巨大衝突期から現在にいたる**地球史の理解**をシミュレーションから構築

- 宇宙環境科学

- 太陽活動、太陽風の物理過程を解明し、**気候、宇宙環境への影響を予測**