

ポスト「京」で実現を目指している コンピューティングについて

2014年6月19日

理化学研究所計算科学研究機構
平尾公彦

スーパーコンピュータの利用

計算科学のアプリケーションプログラムは実世界をモデル化。例えば、気象、飛行機の周辺の気流、自動車衝突時の車体の状況、銀河系の星々の動き、分子の運動や結合など。



スーパーコンピュータ

気象予測、分子動力学、シミュレーション天文学、最適化問題、金融工学のような大規模数値解析に基づくシミュレーションに利用される。

一般コンピュータの利用

それほど大規模でないもの。時間をかけて低コストで解決できるテーマに有利。



ポスト「京」の利用

計算規模が大規模にわたるもので、かつ、迅速に解決がされるべき課題。

それ以外のスパコンの利用

それほど大規模ではないうえに、かつ、ある程度時間をかければ解決する課題。

Science-Driven Supercomputerとしてのポスト「京」で実現を目指しているコンピューティングについて

① Capability Computing (大規模単一問題型計算)

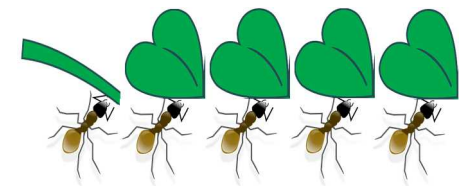
- ・現状では解けない大規模な単一問題を扱う
 1. 大量のメモリーを必要とし、現状のスパコンでは物理的に走らせることができない問題
 2. 大量の計算量を時系列で必要とし、現状のスパコンでは合理的な時間で終わらない問題



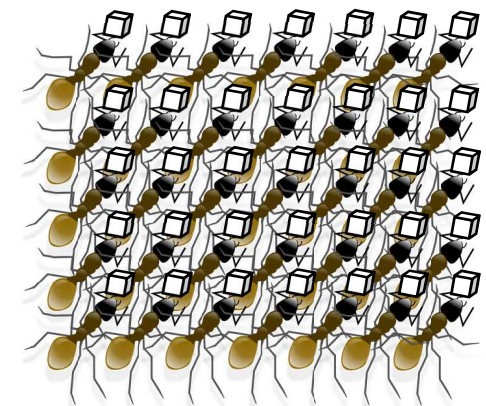
② Capacity Computing (多重ケース処理型計算)

- ・現状のスパコンでも、一つ一つは解くことができるが、大量のケース数が必要な問題を扱う
 1. そのあとの統計処理を行って始めて科学的な意味が出てくる問題
 2. 大量の探索を必要とするような問題

分割できる餌を分割してみんなで運ぶ



大量の小粒な餌をみんなで運ぶ



③ Data Intensive Computing (データ集中型計算)

- ・入出力ともに莫大なデータを扱うことができるようにする
 1. 同質な実験・観測データを大量に処理する問題
 2. 異質なビッグデータを有効利用するような問題

① Capability Computing(大規模単一問題型計算)の例

エネルギー・環境

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

【「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
- ミ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。人工光合成への道を切り開く

二次電池や燃料電池など電力を効率的に貯蔵し取り出す技術開発

- 二次電池や燃料電池などの性能を高めるべく、電池材料のシミュレーション
- より効率的な電池材料の設計を行うことにより、エネルギーの有効利用に貢献

【「京」からポスト「京」への飛躍】

- 電極表面や電解液などのパーツの計算を行い、機構解明や材料予測に貢献。しかし、複雑な新規材料系の探索など、パーツの計算だけでは済まない問題への適用は困難
- ポストリチウムイオン電池(新型電池)や脱白金電極などの複雑な新規材料系の開発に貢献できるシミュレーションの実現

② Capacity Computing(多重ケース処理型計算)の例

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

- 高精度な創薬シミュレーションや、大量の計算スクリーニングによって、薬剤候補の同定や新規薬剤のデザイン
- これにより、新薬開発のコストを大幅に低減、期間を大幅に短縮し、医薬品産業の国際競争力を高める

【「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しての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

③ Data Intensive Computing(データ集中型計算)の例

ビッグデータ同化

ビッグデータ気象学の礎を築く

○従来では考えられない革新的なゲリラ豪雨のリアルタイム予測を実現

【「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数km解像度のシミュレーションにより都市スケールでの10数時間後の天気を予測する可能性が開けた
- 数100m解像度で30秒毎に更新するリードタイム30分の次世代天気予報を確立
 - 高解像度高速シミュレーションと複数の新型センサ・観測衛星によるビッグデータの融合