



# スーパーコンピューティングの果たす役割と 今後の展開

科学技術基盤としての観点から

理化学研究所 計算科学研究機構  
平尾 公彦



---

■京コンピュータ

■3.11 世界を変えた日

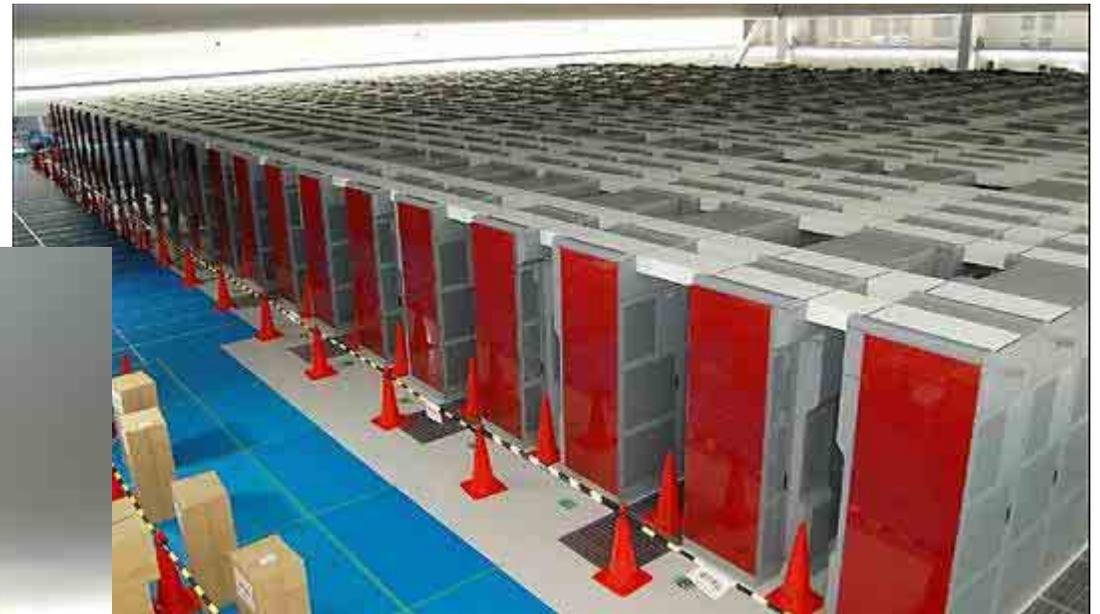
■Exascale Computingの必要性

■まとめ



# TOP500リストで**世界No.1**獲得

京が世界に圧倒的な差をつけての世界一。日本の高い科学技術力、ものづくり力を世界に示した



In an era marked by China's growing technological and economic emergence, the return to the top of the supercomputer heap will be **a source of pride for Japan.**

*(The Wall Street Journal )*

# 「京」コンピュータの整備状況

## 計測に用いた計算機本体

- システム数: 672ラック (全体の80%)
- ピーク性能: 8.774 Petaflops

## LINPACK性能

- 性能値: 8.162 Petaflops (実行効率 93.0%)
- 問題サイズ: 10,725,120 次元
- 実行時間: 100,711秒 (約 28時間)
- 対電力性能比: 825 Megaflops/W

## TOP500 List - June 2011 (1-10)

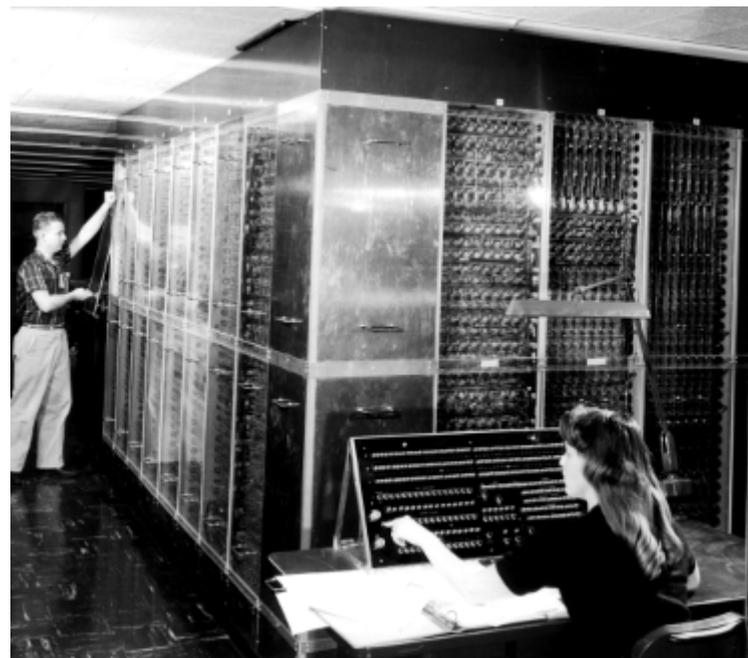
順位・国	機関	PF(実行効率)
1 日本	K, RIKEN Advanced Institute for Computational Science	8.162 (93.0%)
2 中国	Tianhe-1A, National SuperComputer Center in Tianjin	2.566 (54.6%)
3 アメリカ	Jaguar, Oak Ridge National Laboratory	1.759 (75.5%)
4 中国	Nebulae, National Supercomputing Centre in Shenzhen	1.271 (42.6%)
5 日本	TSUBAME2.0, GSIC Center, Tokyo Institute of Technology	1.192 (52.1%)
6 アメリカ	Cielo, DOE/NNSA/LANLSNL	1.110 (81.3%)
7 アメリカ	Pleiades, NASA/Ames Research Center/NAS	1.088 (82.7%)
8 アメリカ	Hopper, DOE/SC/LBNLNERSC	1.054 (81.8%)
9 フランス	Tera-100, Commissariat a l'Energie Atomique (CEA)	1.050 (83.8%)
10 アメリカ	Roadrunner, DOE/NNSA/LANL	1.042 (75.7%)

# スパコン競争の激化 - スパコンの影の部分

スパコンの軍事優先の価値観は現在も健在、「科学を基礎とした核兵器の維持管理」(SBSS)

アメリカは未臨界核爆発実験とスパコンによるシミュレーションを組み合わせ、核爆発実験をもはや必要としていない。超大国が国の威信をかけてスパコン開発を進めている。中国の「天河1A」は国防科学技術大学で開発されたもの

日本が科学や産業応用など平和利用に徹して世界最高速の「京」スパコンを使いこなし、そこから、科学・技術推進の未来像を、新しいパラダイムを世界に発信していくことが重要



MANIAC, LANL (1952)  
水爆のシミュレーションに使われた

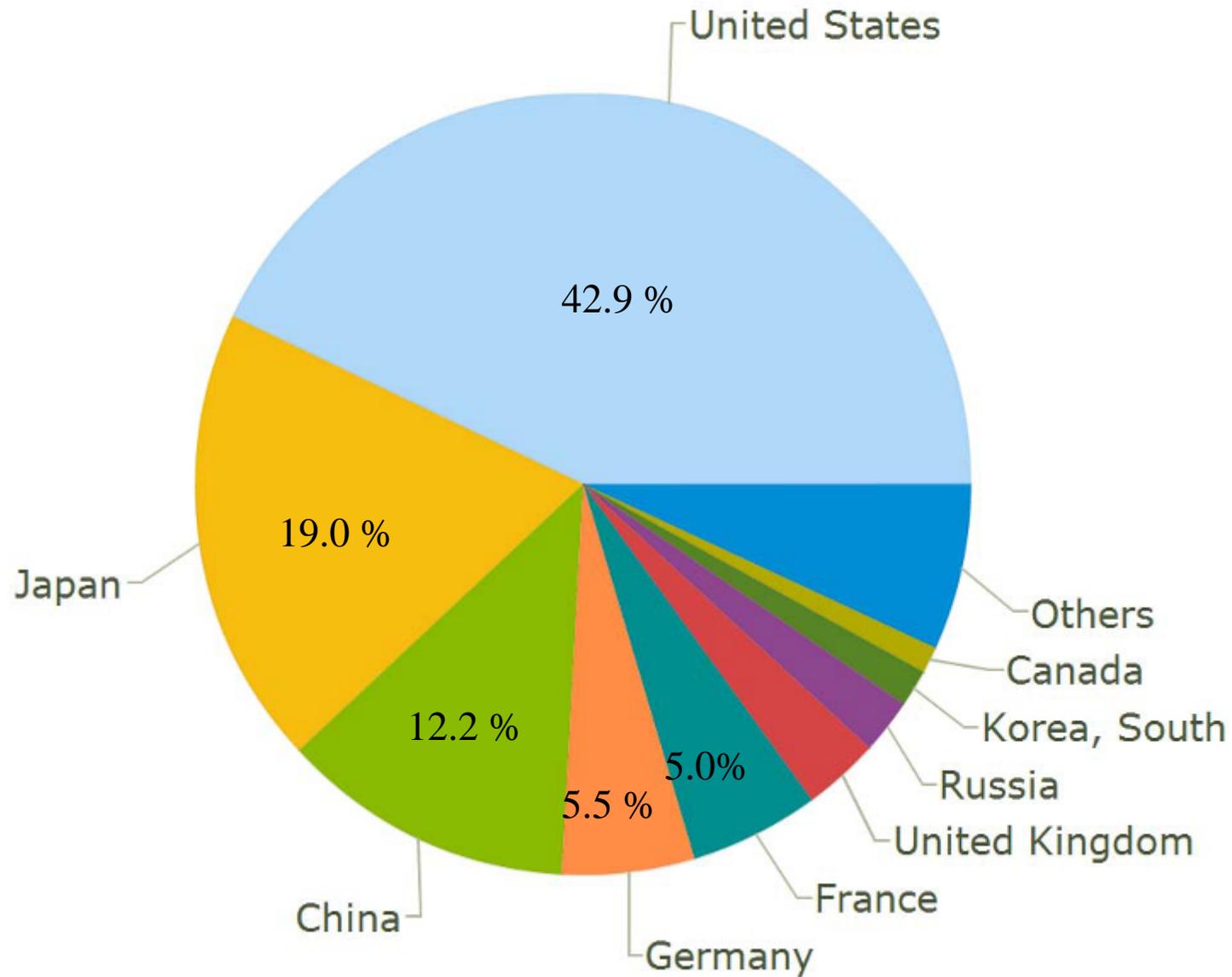
## Green500 List - November 2010 (1-10)

順位・国	機関	MF/W
1 アメリカ	Blue Gene/Q Prototype, IBM Thomas J Watson Research Center	1684.20
2+ 日本	Grape-DR, National Astronomical Observatory of Japan	1448.03
2 日本	TSUBAME2.0, GSIC Center, Tokyo Institute of Technology	958.35
3 アメリカ	NCSA	933.06
4 日本	K, RIKEN Advanced Institute for Computational Science	828.67
5 ドイツ	Universitaet Wuppertal	773.38
5 ドイツ	Universitaet Regensburg	773.38
5 ドイツ	Forschungszentrum Juelich (FZJ)	773.38
8 ドイツ	Universitaet Frankfurt	740.78
9 アメリカ	Georgia Institute of Technology	677.12

# スーパーコンピュータ TOP500 Location Mapping

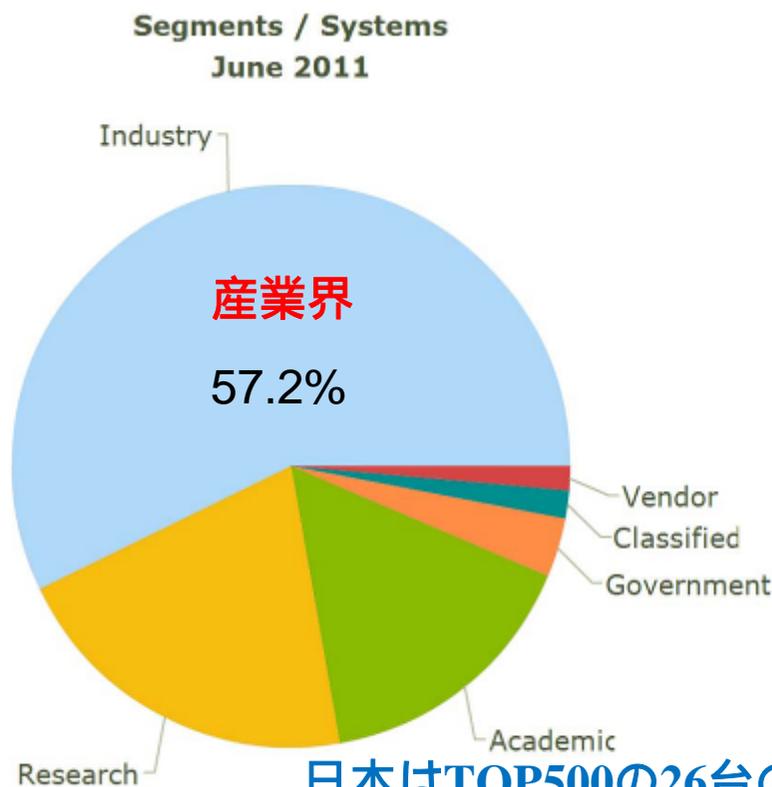


# TOP500 国ごとの計算資源



# TOP500の半数以上のスパコンは産業界が保持

- サイト数では半数以上が産業界
- 導入先は幅広い分野に渡る
  - ◆ エネルギー、自動車、金融、半導体、計算センター、エンジニアリング、バイオ…
  - ◆ 実態は、もっと多くの企業がスパコンを導入(航空宇宙、化学、…)

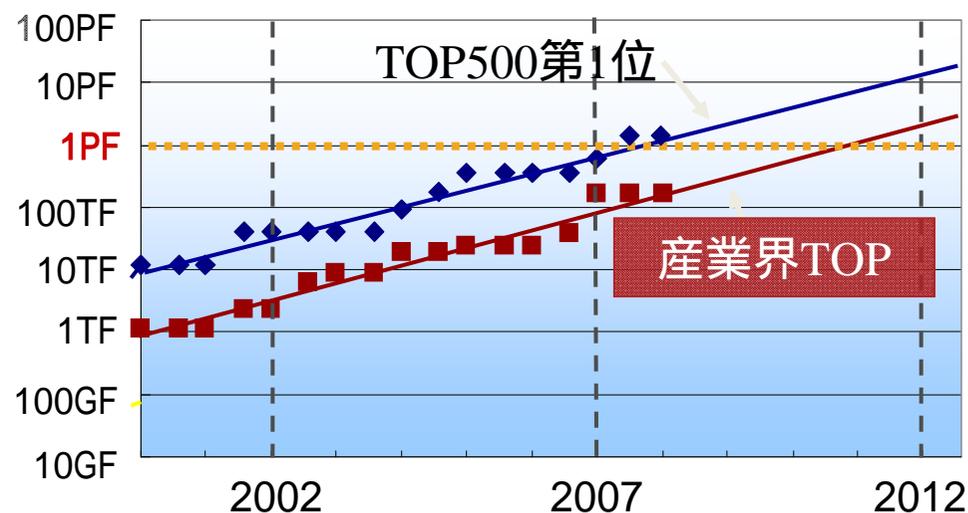


日本はTOP500の26台のうち産業界が保持しているのは8台(6カ月前は3台)

## ● 産業界のスパコン性能動向

現在の産業界第1位は(仏)

- 29位 Manufacturing Company (仏) 243.90 TF
- 43位 EDF(仏) 168.7 TF,
- 53位 Vestas Wind System (Denmark) 151.67TF
- 産業界でも超大企業は2012年にはペタフロップ機を導入か?



出典: TOP500 Reportの2010年11月データ(PDF版統計)を基にワシントン・コア作成  
(<http://www.top500.org> より最新版をダウンロード可)



# 引き続き高い目標を掲げてプロジェクトを推進

---

早期に成果を挙げよう

人類に知的貢献をなし、国民、国際社会の期待に応える

日本人の独創性を世界に発信

神戸を世界に誇れる計算科学、計算機科学の拠点に

次世代を担う人材育成

シミュレーション技術の産業利用への積極的活用

サイエンスの感動を子供たちに伝えたい

**ワクワクするような成果を挙げたい！**

## 3.11 世界を変えた日



死亡	15,500人
行方不明	7,306人

生と死に直面し、これまでの生き方を見直している。どんな文明、社会を作っていくのか、模索を始めている。よりよい暮らしを追求してきたが、それが必ずしもより人間的な暮らしではなかった。物質的豊かさの代償に失ってきたものの大切さに気がつき始めた。価値観が変わりつつある。

# Ground motion and tsunami simulations using the tsunami-coupled equation of motion in 3D

Maeda and Furumura (2011) *Pure and Applied Geophysics* - *under review*



古村教授 (東大)

[Present] Resolution: 1km  
CPU Time: 2 hour  
(ES 64 node)



[Expected] Resolution: 0.25  
km  
CPU Time: < 10 min  
(K-Computer)

# 情報公開

---



**SPEEDI**

**MELTDOWN**

# 社会のための科学・技術



真理の探求のための科学研究は今後も続くが、これからの科学は、人類社会の持続性に寄与し、人を支える科学技術であらねばならない。人類社会の目標は、肥大化した人間圏を地球と共生しうる持続的なシステムとして再構築すること、一方で多様な価値観を有する人々に、健康で快適な生活と安全・安心な社会を保証すること



## 還元論と「知の統合」を目指す全体論との相克

---

科学技術の発展にともなうディシプリンの細分化・深化の方向性と、科学技術が対象とするシステムや課題の複雑化・巨大化の方向性に乖離

研究者は細分化された専門学術を追及することに傾き、また研究成果は専門家集団の中でピアレビューによって評価されるため、部分のみに関心を持ち、全体を俯瞰的に見通すことができにくくなっている

科学的発見や技術的発明を社会的、経済的価値に具現化するイノベーションにつなげることを難しくしている

未踏分野の開拓、ディシプリンを超えた協働による新しい  
知の創造、学術ディシプリンを深化発展させるとともに、  
「知の統合」を可能にする新しい科学の確立が必要

計算科学は「知の統合」を  
可能にする新しい科学の核になり得る

# 学際計算科学

## 計算機科学の共通基盤技術

アーキテクチャー、超並列計算技術、言語、システムソフトウェア、数値計算アルゴリズム、データ解析、可視化技術、...

## 計算科学の共通のアルゴリズム、方法論

第一原理、分子動力学、ランジュバン、連続系量子力学(QCD)、モンテカルロ法、遺伝子アルゴリズム、離散化、...

## 計算科学の共通の視点

多次元(自由度)空間での最適化問題 (エネルギー極小、構造予測、パラメータフィッティング、乱流制御、...)

計算  
物理

計算  
化学

計算  
生物学

計算  
工学

医療  
インフォ  
マティク

社会  
インフォ  
マティク

## 現象の本質的な共通性

多階層性、相転移、強相関ゆらぎ、大偏差統計、非線形、...

物理学

化学

生物学

工学

医学

人文社会科学

## 自然現象、社会現象

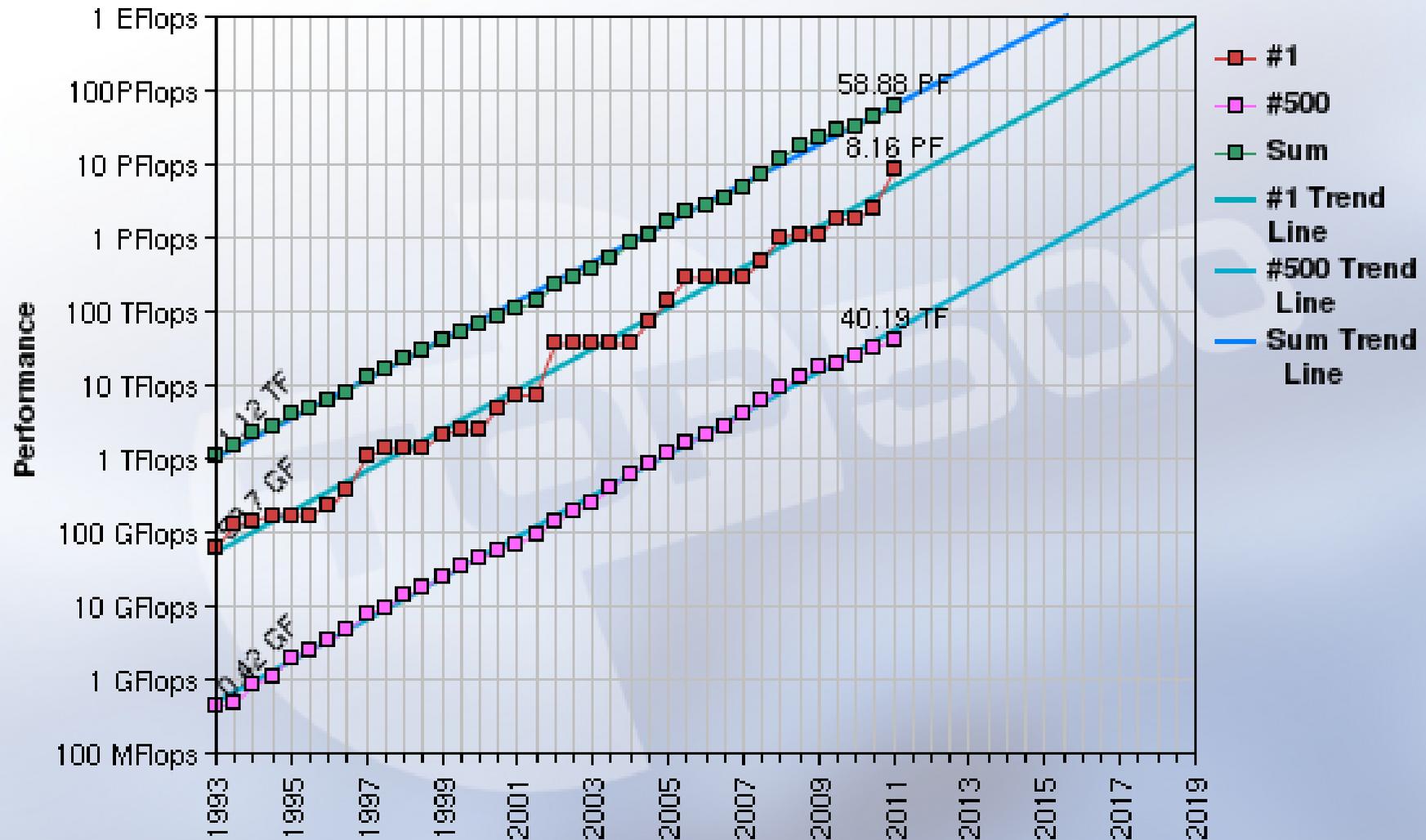
ミクロ系、マクロ系、複合系、複雑系、生体系、ゲノム系、...



# 現代におけるスパコンの位置づけ

- スパコンは現代の科学技術の発展にとって不可欠な基盤技術、同時にスパコンは一般市民の毎日の生活を陰で支えている
- コンピュータ・シミュレーションは実験、理論と並ぶ第3の科学であり、21世紀の「予測の科学(Predictive Science)」の基盤をつくる
- 自然科学の知識獲得、発見にスパコンは必須、計算科学には世界最先端のスパコンが必要(科学や技術はギリギリのところまで勝負している。数年経てばスパコンの性能は10倍になるが、この数年が重要)
- スパコンは科学技術のブレークスルーや産業の国際競争力の源泉、資源の乏しい日本の「成長戦略」にとって必須の基盤技術、国家安全保障にとってもきわめて重要
- シミュレーションは将来の科学技術を牽引するとともに、地球的規模の困難な課題の解決にも重要な貢献をなす、成果は人類の利益という観点から活用されるべき

# Projected Performance Development



# 次々世代スパコン、計算科学者からの要望



- 科学コミュニティーは科学的成果を出せるスパコンを求めている
- ピークパフォーマンスだけでなく、高い持続性能が必要
- 「京」で開発したアプリケーション・ソフト(1PF for real applications) の大幅な書き換えがないことが望ましい。もちろん目的達成のためならスクラッチから作ることも厭わない。
- Exaは京の100倍、十分か？
- 計算科学の役割  
多くの場合 $N$ (問題の大きさ)依存性は $N^3$ 以上、能力が1000倍になっても $N=10$   
理論・アルゴリズム開発で10-100倍速くする必要あり  
システム開発やプログラミングの改良で1000倍速くすることは難しいが、理論開発で1000倍速くすることは十分に可能

現状の100TF 1EF 10,000倍、理論・アルゴリズムで100倍速くすれば  
現在より  $10^6$ 倍、 $N=100$ が達成可能、このインパクトは大きい

# 次々世代スパコンへの期待



## 最先端のサイエンス

素粒子、原子核構造、新たな量子相、新機能物質、生命科学、地球科学、天文・宇宙論  
理論的限界、高効率熱電変換材料  $ZT > 4$ 、高温超伝導体  $T_c > 400K$ 、アクアマテリアル、...

## 国の安全保障、安全安心な社会、減災

気候変動、巨大地震・津波、危機管理、災害予測・避難誘導、社会現象・経済予測、次世代交通システム、感染症伝搬予測、ネットワーク解析

## 生命科学、医療

ゲノム、タンパク・細胞シミュレーション、ドラッグデザイン、器官、血流、医療シミュレーション、XFELやSuperMRIとの連携  
大規模化、長時間の時間発展、ダイナミクスが機能を生む、器官等では現象論的アプローチも有効

## エネルギー問題

Triple50 (2030年までにエネルギー自給率50%、化石燃料依存率50%、利用効率50%)  
再生可能エネルギー、電池(太陽、燃料、リチウム)、窒素の固定化、原子力発電、核融合

## エンジニアリング

「京」で開発・実証した技術が、より設計技術として定着し、多目的最適化  
次世代自動車、航空・宇宙、ジェットエンジン、材料開発、電子物性、次世代デバイス



# Capability Computer or Capacity Computer?

---

## Heroic computations

大規模化、精密化、長時間の時間発展、...

## Ensemble Computing

現象や課題の複雑さ、不確実さ、多変数、予測困難ゆえに確率論的予測  
Ensemble ComputingにとってはCapability ComputerもCapacity Computerも必要

## Predictive Capability

新しい予測モデリングの必要性  
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有用