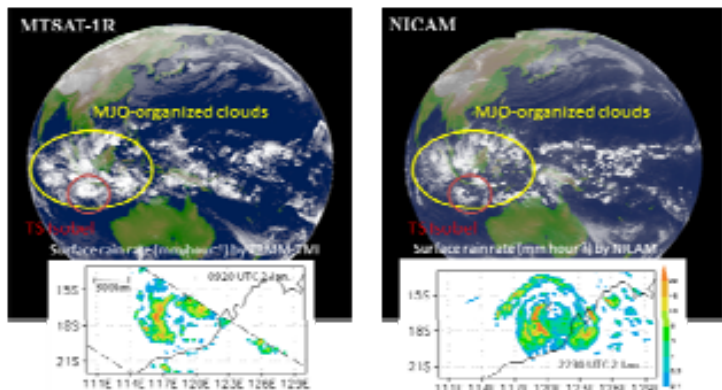


# Exascale Computing Grand Challenge 気象・気候分野での挑戦

富田さん(機構)

## 現状(10PFLOPSマシン) - HPCI戦略分野3での挑戦 -

- 全球数km50層雲解像モデルを使った数10年積分による温暖化時の台風変化の予測
- 次世代型メソスケール・データ同化システムの構築



## エクサスケールの必要性

### 3つの軸の向上が必要

1. アンサンブル数
2. 解像度
3. モデル物理高度化

- 水平格子間隔1km以下の「真の全球雲解像モデル」が可能
- 「京」で構築した次世代型データ同化システムの実用化



## エクサスケールでの挑戦例

### 次世代型全球気象予測システム

- 全球大気1km格子モデル
- 全球海洋数km格子モデル
- 高度化されたデータ同化技術

- ✓ 天気予報から
- ✓ 数か月季節予報、
- ✓ 数年スケールのENSO予報まで

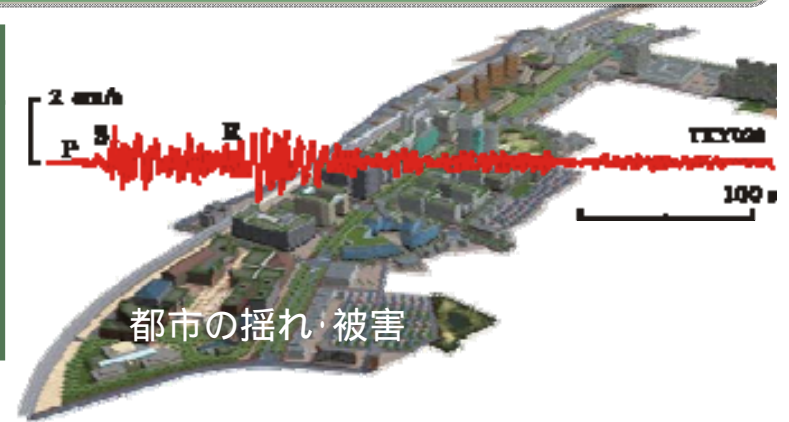
# Exascale Computing Grand Challenge (東大古村先生)

## 強震動シミュレーション

大地震による地震波が、複雑な地下を伝わり、平野に被害を起こす強い揺れを作り出す過程を、運動方程式の計算により評価する。こうして、想定地震の平野の揺れを予測する。

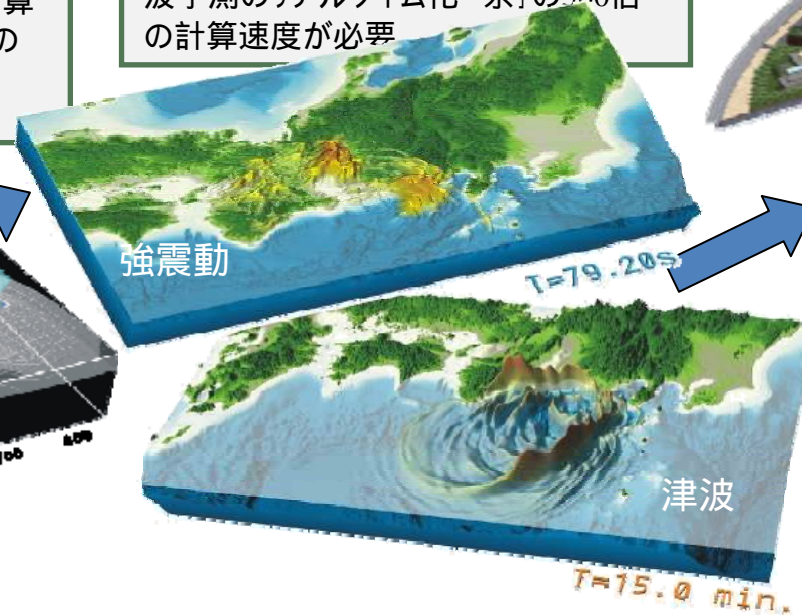
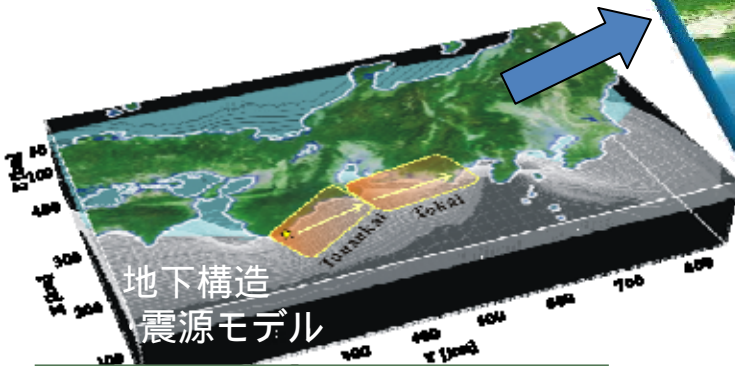
## 津波シミュレーション

地震動シミュレーションの結果を用いて、津波の発生と伝播を、流体の式の計算により、リアルタイムかつ高精度に評価し、津波警報の高度化に役立てる。津波予測のリアルタイム化「京」の500倍の計算速度が必要



## 被害予測シミュレーション

多様な構造物(原発等)の被害予測  
・5Hz以下の短周期長地震の評価が必要  
・「京」の5倍(計算量625倍)モデルの分解能必要



## 構造・震源モデル高度化

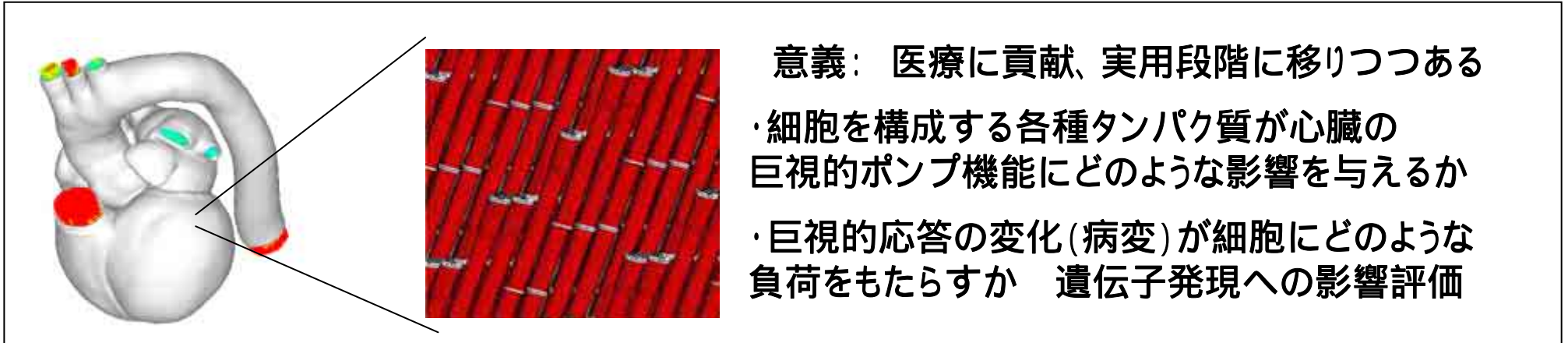
日本の高密度地震観測網データを用いて、地殻・マントル構造と、断層モデルを構築する。観測とシミュレーションにより、将来の地震の揺れを予測する高精度モデルを整備する。

## Exascale スパコンの必要性

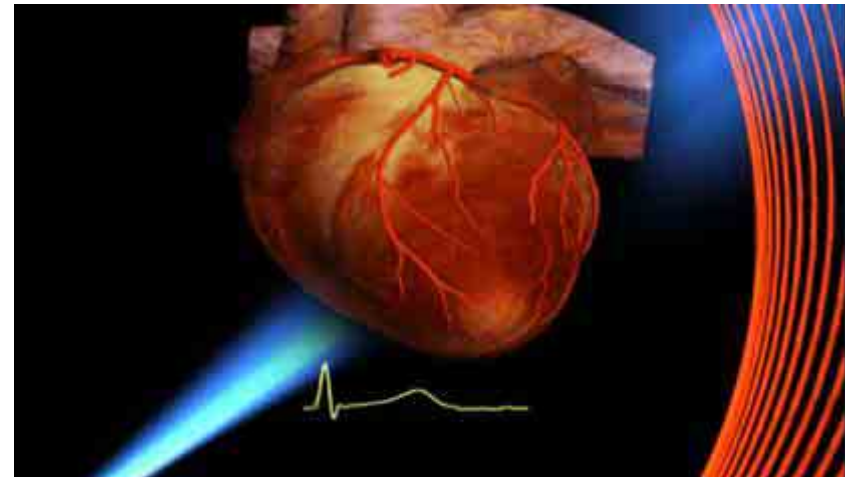
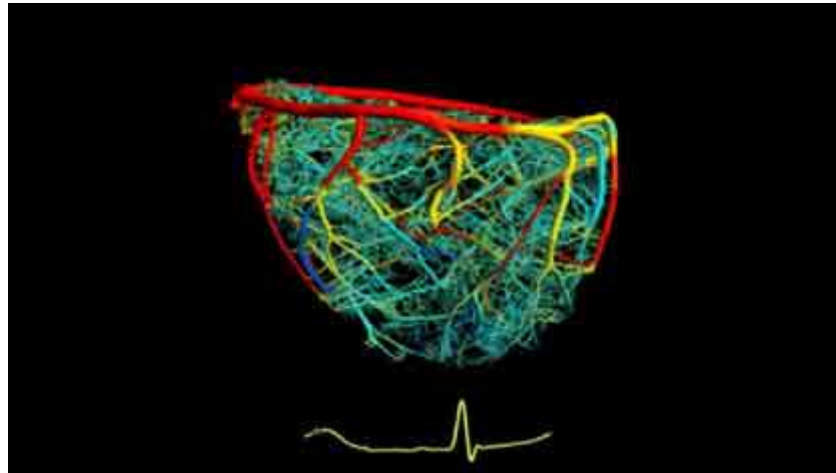
地球シミュレータで現実的な精度での計算が可能になり、「異常震域」の再現された。「京」では、より短周期の地震動を含む評価が可能になる。次々世代スパコンで津波や建物振動シミュレーション等との連携により現代構造物の被害を予測し、災害軽減に生かすことが初めて可能になる。

# 細胞モデルからの心臓シミュレーション (東大 久田先生)

## 細胞有限要素モデル



総自由度 1000億自由度のマルチスケール、「京」では1心拍 2日で実行



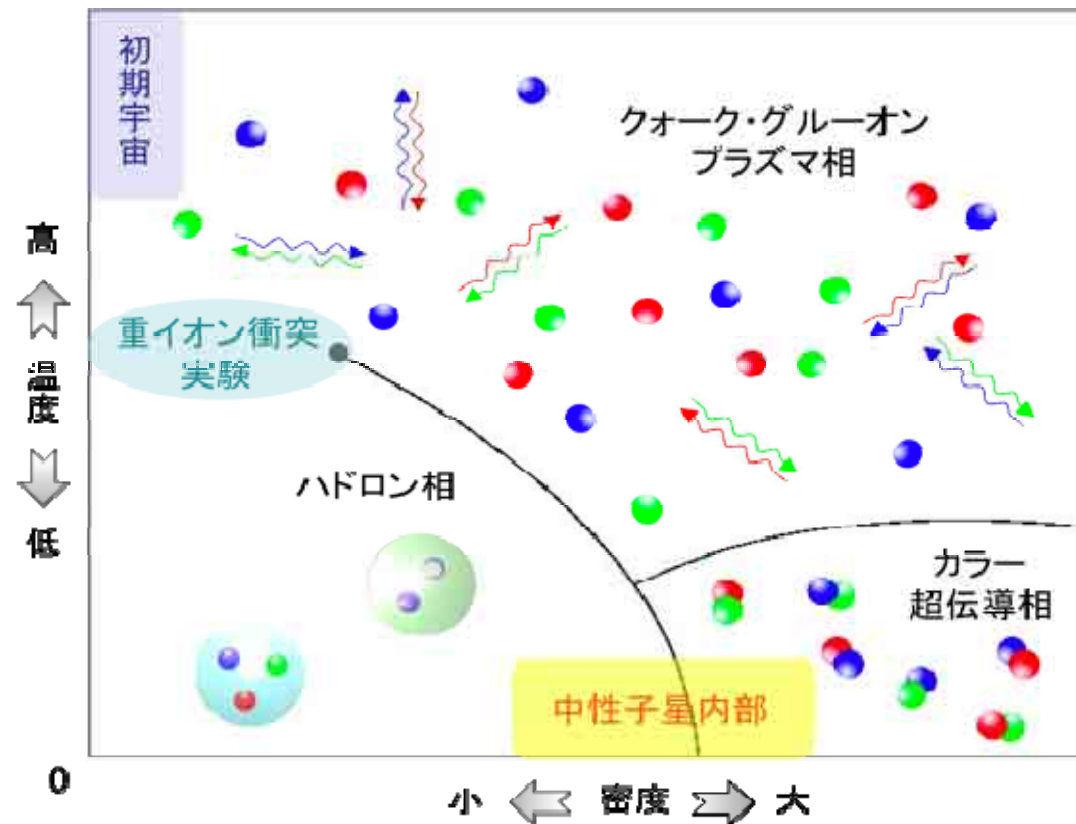
現行モデルはExaで1心拍30分。分解能を上げたいが、現在のアルゴリズムでは計算時間は総自由度 $N$ の4乗、メモリーは $N$ の5乗で増加。

# Exascale computing grand challenge

蔵増さん(機構)

格子QCDを用いた有限温度・有限密度のシミュレーションによって実験不可能な宇宙初期や中性子星内部の相構造を調べ、状態方程式を決定する。

期待されている相図





# 物質科学：波動方程式を解く

中辻先生

物質の物理学、化学、生物学など電子と原子核が主役を演じる科学の「要」は Schrödinger 方程式と Dirac 方程式である。ミクロな世界はこの二つの方程式によって「支配」されている。「もし正確に解ければ」現象を正確に予言することができる。最新の理論とペタコンで80年間、解けなかった波動方程式の正確な解を求める。



「京」

分子	電子数	Total E	計算時間 (Min)
CH	7	99.920	1.8 sec
H2O	10	99.971	4.8
N2	14	99.999	26.4
C2H2	14	99.972	22.8

この方法でいくらかでも正確な解を計算できる

$$\psi_0 = [1 + \ln(s + u)] \exp(-\alpha s)$$

$N^5$  ( $N$ は電子数)のアルゴリズム、並列化は比較的容易

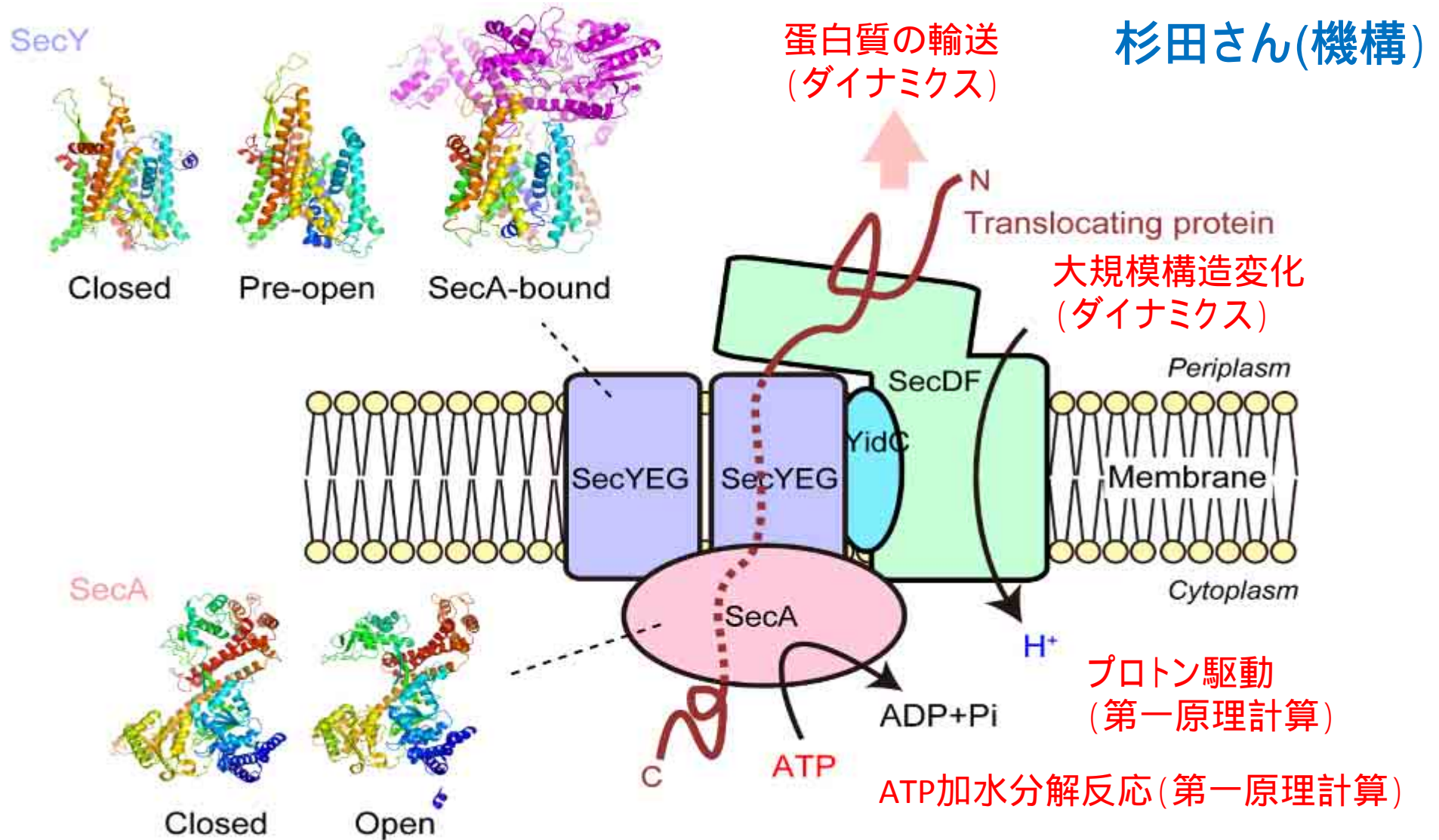
## 次々世代スパコン(1Exa)での挑戦

基礎科学の最先端の方法とペタスケールコンピューティングのinterplayによって超正確な予言が次々行われる可能性

100電子系の厳密解を10時間で求めることができる

波動方程式の正確な予言力を科学と産業の強力な武器に！

# Exascale Computingでの精密化と長時間化

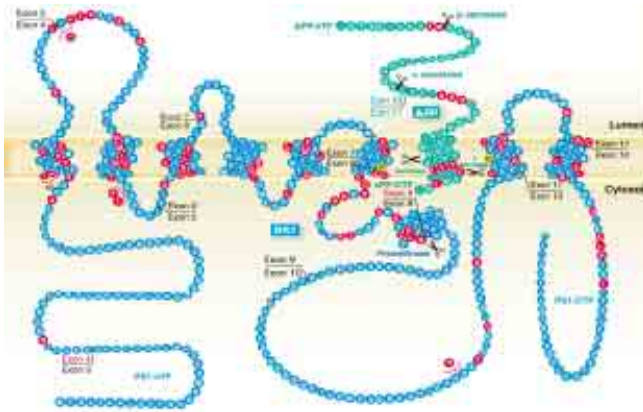


「京」: 膜蛋白質 Exascale: 膜蛋白質超複合体

「京」: 構造変化 Exascale: エナジेटイクス

# Exascale Computingでの粗視化と大規模化

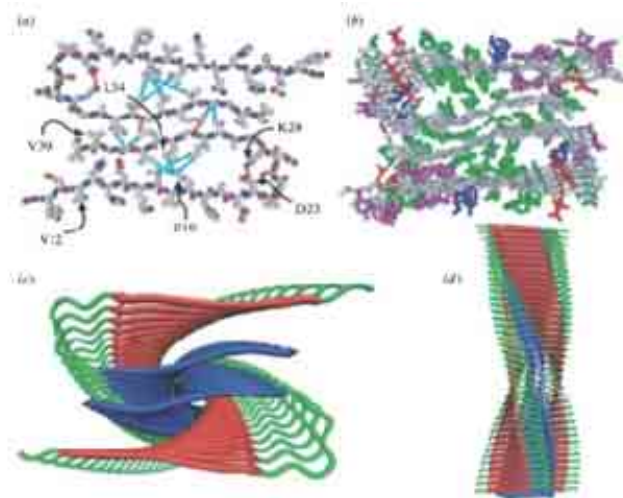
アミロイド前駆体蛋白質



制限酵素による切断



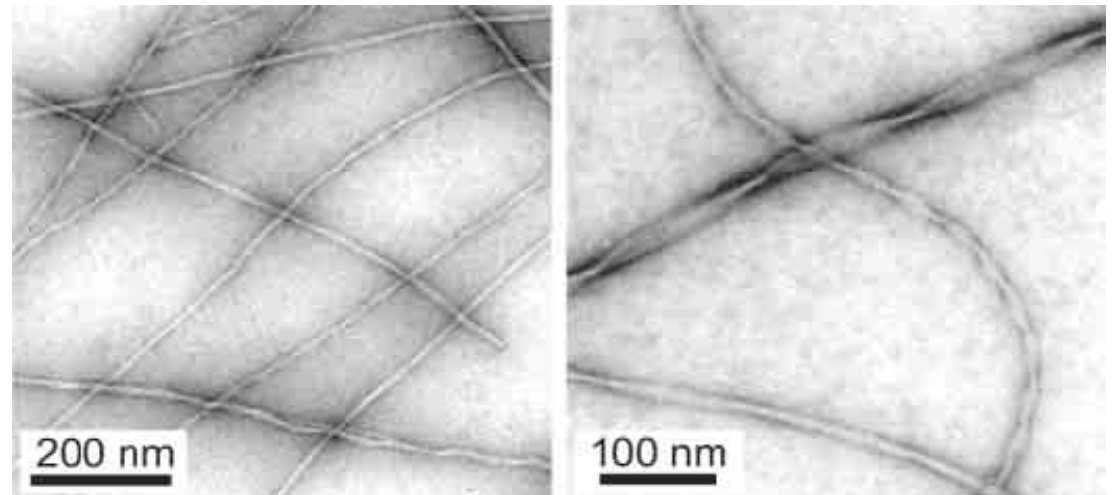
アミロイドベータ蛋白質の凝集



アミロイド仮説: アルツハイマー病の原因として考えられる最も有力な仮説

アミロイド前駆体の分子動力学から細胞環境でのアミロイドベータ蛋白質の凝集機構の解明

アミロイドベータ蛋白質の凝集



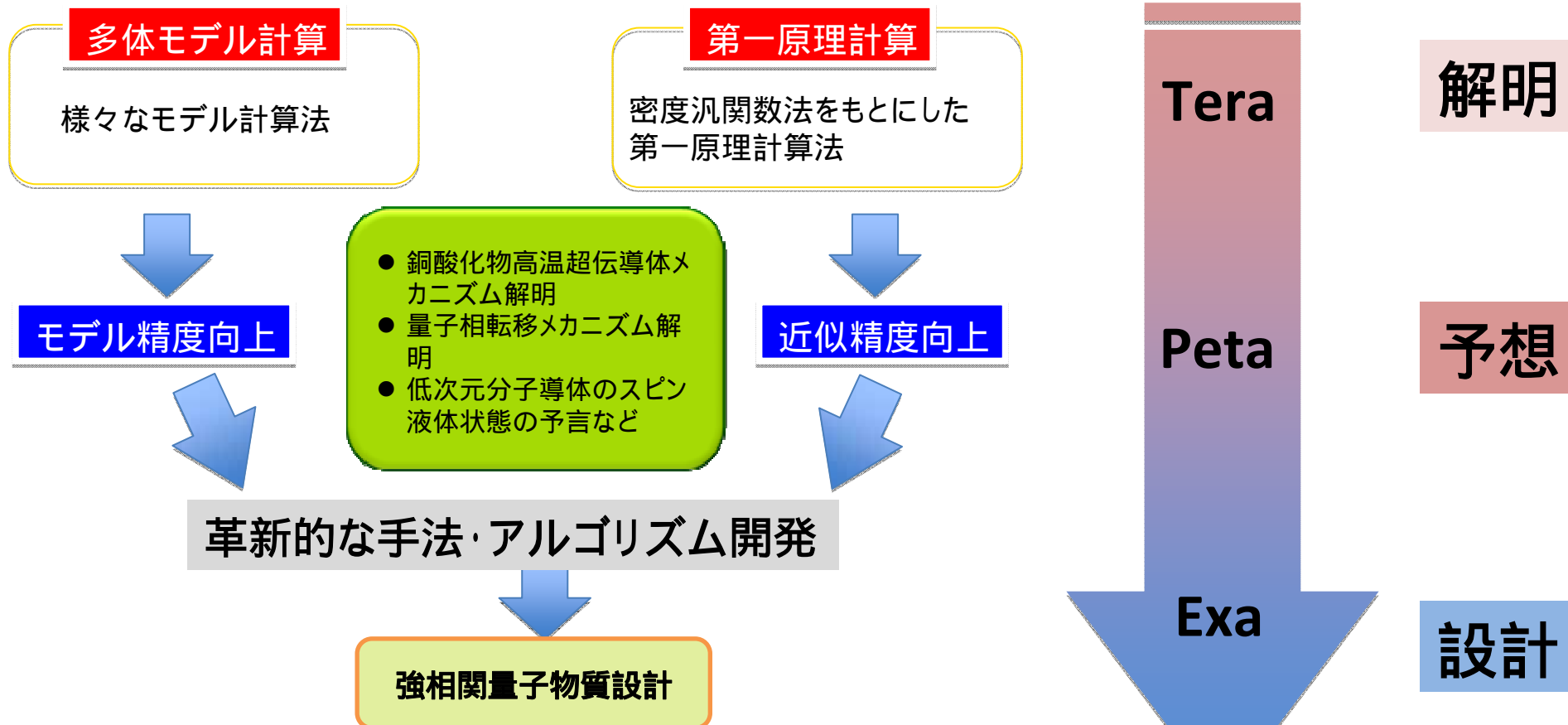
# Exascale computingでのグランドチャレンジ(物質科学・物性物理)

## 強相関物質設計

(遷移金属酸化物、低次元有機導体等)

柚木さん(機構)

新機能性物質  
新奇量子状態



- **強相関エレクトロニクス**(半導体エレクトロニクスに代わる超低消費電力デバイス設計)
- **グリーンエネルギーイノベーション**(超高効率エネルギー捕獲、貯蔵、変換機能を持った強相関物質設計)



# 次世代スパコンで目指す「自動車用次世代空力・熱設計システムの開発」

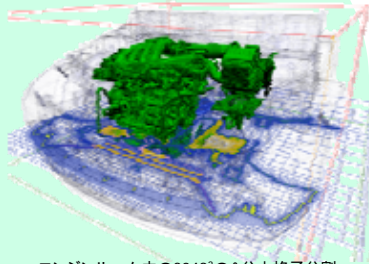
3大空力問題(車両運動・熱害・空力騒音)の高精度予測

加藤・坪倉先生

## 5年後の成果 <ブレークスルー技術>

### 設計プロセスの自動化と高速化

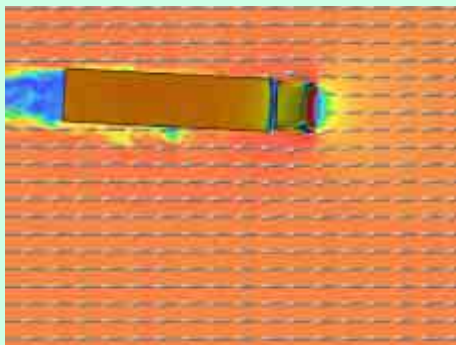
- ・10億点/2時間、CADデータ修正を必要としない格子作成
- ・プリからポストまでをほぼ1日で完了(既存の実験を上回る解析速度の実現)
- ・高速化による最適化シミュレーションの実用化



エンジンルーム内の2048<sup>3</sup>の8分木格子分割 (VCAD, データ提供:日産自動車)

### リアルワールドシミュレーションの実現

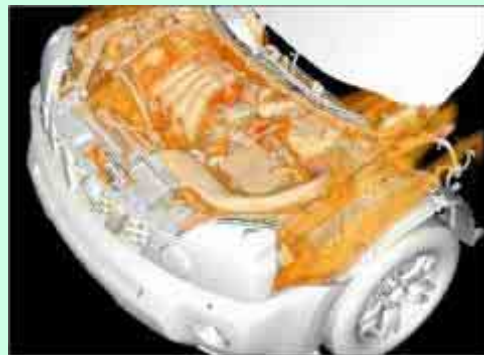
- ・長時間モニタリングによる運動挙動や音質の評価
- ・突風・追い越し等の危険度評価



車両運動モデルと運転者反応モデルのカップリングによる気流連成解析 (NEDO助成事業)

### 流動メカニズム解明と制御

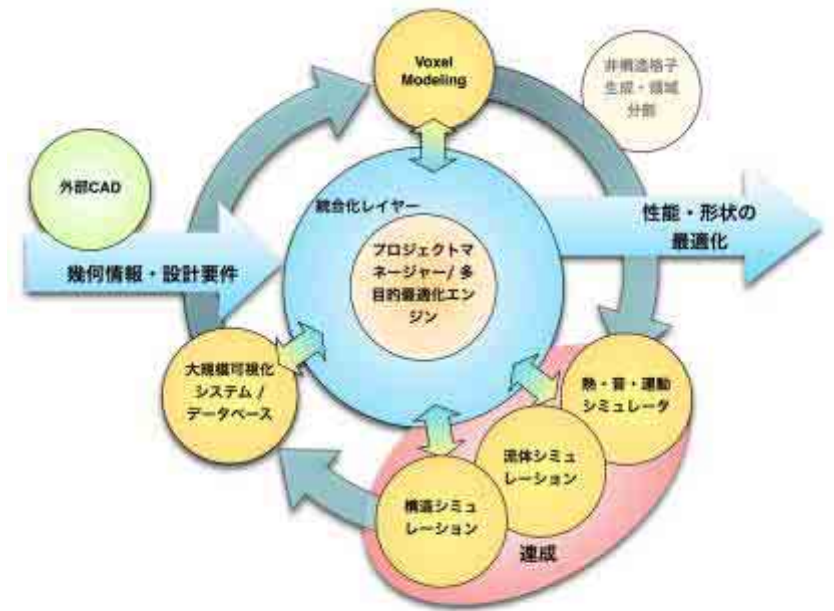
- ・パッシブ制御による車両抵抗低減



現状の測定温度と熱伝達係数を与えた自然対流計算  
6600万ボクセル(5mmピッチ)  
Nehalem@2.93GHz 32コア 6Hours  
VCAD-PJ

## 10年後の展開

熱流動の物理メカニズム理解に基づいた高度な設計制御技術の確立と、環境(CO<sub>2</sub>、Nox等)と製品性能のバランスを目指した自動車ものづくりの実現



### 統合CAEシミュレーションの実現と多目的最適化

Weak Scaling(大規模・複雑化)と  
Strong Scaling(同じ規模で高速化)

# Exascale Computingへの挑戦



## エネルギー

- 現在のPetaflops systemsの消費電力 2-3 MegaW/petaflops
- Exaflop system – 高々20MW
- 計算性能で1000倍を達成するものの、消費電力は10倍に抑える必要あり

## メモリー、ストレージ

- Main memories (DRAM) & disk drives (HDD) も電力消費が著しい  
新しいtechnologyが必要

## 並列化

- もはやclock rateを最適化してsingle processorのperformanceを上げることは困難  
concurrencyの増大に頼らざるを得ない

## 自律回復力

- 10年前のTF systemは10,000プロセッサ、現在のPF systemは100,000 プロセッサ、Exascaleでは1億個のプロセッサ、コア
- トランジスタの数 京で60兆個、Exascaleでは~1京個
- 基本的にAutonomicでなければならない

# 京からExascaleは「予測の科学」へのtipping point



- スパコン開発は国の発展にとって不可欠  
技術的困難、開発期間の長さや費用の膨大さ、波及効果の大きさを考えるなら国家プロジェクトとしてAll Japanで推進すべき
- スパコンはますます高度化(アクセラレータ、メニーコア・システム)  
またその能力を引き出すことも難しくなっている  
ハードウェア単独の技術開発ではなく、システムソフトウェア、アプリケーションソフトウェアの開発と一体となって開発すべき(Co-design)
- ソフトウェアは複雑化高度化し、単独のグループでは開発することがますます困難になりつつある、  
基盤的ソフトウェア、キラーソフトウェア開発を国として推進すべき  
ライブラリー、ミドルウェア、可視化
- 科学技術だけでなく、国家安全保障面(安全安心な社会、減災、環境問題、医療、高齢化社会、エネルギー政策、社会経済問題)でのスパコン利用を拡大すべき  
Securityの重要性(東南海地震、感染症パンデミック…)  
ユーザーの拡大、特に産業利用の拡大




# 国の主導でスパコン開発を

- スパコン拠点は複数必要、神戸と開発の位相をずらす  
拠点は共通基盤研究、高度化研究を推進し、人材を育成するセンターであるべき
- エクサを目標にしつつも、途中の数10PF-100PFをまず開発し、ハード面、ソフト面のさまざまな課題を検証すべき  
技術面の課題、Science, 国家安全保障の観点からどの分野がもっとも必要としているかを判断
- 我が国のHPCの在り方、ロードマップ作成を検討する体制、組織(組合)を早急に構築すべき、計算機科学、計算科学の次代を担う若手リーダーの参加が必須  
コミュニティーの意見集約はHPCIコンソーシアムが担うべき
- 早急に取り組むべきはエクサに向けた科学技術の課題、社会的課題の検証  
米国DOEのextreme computing workshop:  
<http://extremecomputing.labworks.org/index.stm>



# Exascale Computer開発を必要とするもう一つの理由



Capacity oriented machinesを開発するためにも、Exascale Computerを開発することが必要

開発によって技術的なさまざまな困難を克服することができ、廉価なCapacity oriented machines (Petascale class machines)を開発できる

# 私の提言

---



- ピークパフォーマンスだけでなく、高い持続性能をもったマシーンを国家プロジェクトとして開発
- 計算機科学と計算科学の将来を担う若手のリーダーを中心に検討チームを編成し、Co-designでプロジェクトを推進
- 2018-2019年のエクサスケールまでのロードマップを描き、マイルストーンを確定
- まずは2015年ころまでに100PFのシステムを神戸地区以外で開発
- 10年後を見通し、スパコン利用の課題を十分に検証し、明確な科学技術上の目標を掲げること
- 目標は高く、決して妥協しないこと

## おわりに



スパコンによるシミュレーションは科学・技術を牽引するとともに、われわれ人類が直面している困難な課題解決にも重要な役割を演じる。シミュレーションは現象の再現にとどまらず、進んで現象を予測しなくてはならない。これからは社会問題にも大胆に切り込まねばならない。

シミュレーションの果たす役割はますます大きくなり、その結果は社会に大きな影響を与える。科学者の責任は重い。シミュレーションは自然に比べると、まだまだである。信頼性、公開性を高めるとともに、これまで以上に謙虚にならねばならない。