

# ポスト「京」と世界の動向

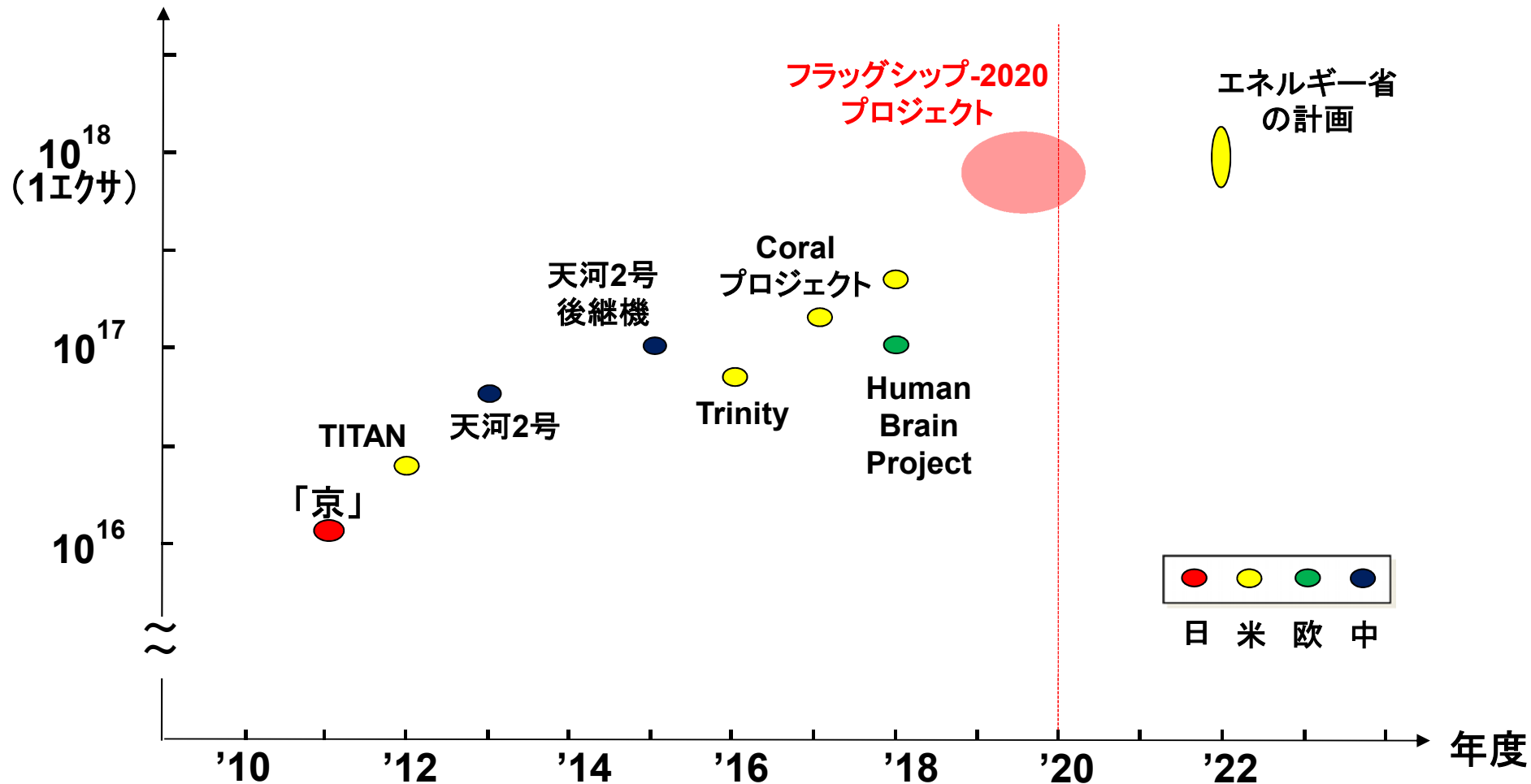
日本原子力研究開発機構  
井戸村泰宏

Plasma Conference 2014, 計算科学研究部会第2回総会  
新潟、2014年11月5日

- ポスト「京」に関して
- 日米エクサスケールアプリケーションワークショップ報告

# エクサスケールシステム開発に向けた国際動向

ピーク演算性能  
(フロップス)



# フラッグシップ2020プロジェクトの開発方針

- 以下の4つの基本的設計方針の下、
  - ・システムとアプリケーションのCo-designにより、社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを実現する。
  - ・具体的には、2020年までに、世界トップレベルで幅広い分野の重点課題に対応できる汎用のシステムを実現し、エクサスケールを目指す。

## • 課題解決型

- ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題(重点課題)及びターゲットアプリケーションに基づく基本設計
- アプリケーション開発者と計算機システム開発者の協調により、アプリケーション及びシステムを協調設計(co-design)

## • 国際競争力

- 幅広いアプリケーションに対して高い性能電力比を有するハードウェアを構築し、性能電力比で国際競争力のある汎用マシンを実現する

## • 「京」の資産継承

- 「京」の後継機として、「京」で確立された技術・人材・アプリケーション等を最大限活用

## • 性能拡張性

- 2020年以降も半導体技術の進展等に応じて効果的・効率的に性能拡張できる システム

# システムと開発の概要

## <システム構成>

### ○CPU

- 汎用CPUを用いたメニーコア型アーキテクチャ  
→高い汎用性、幅広いアプリ実行に利点。
- ネットワークインターフェイスをチップ内に内蔵  
→高い通信性能、大規模並列処理に利点。

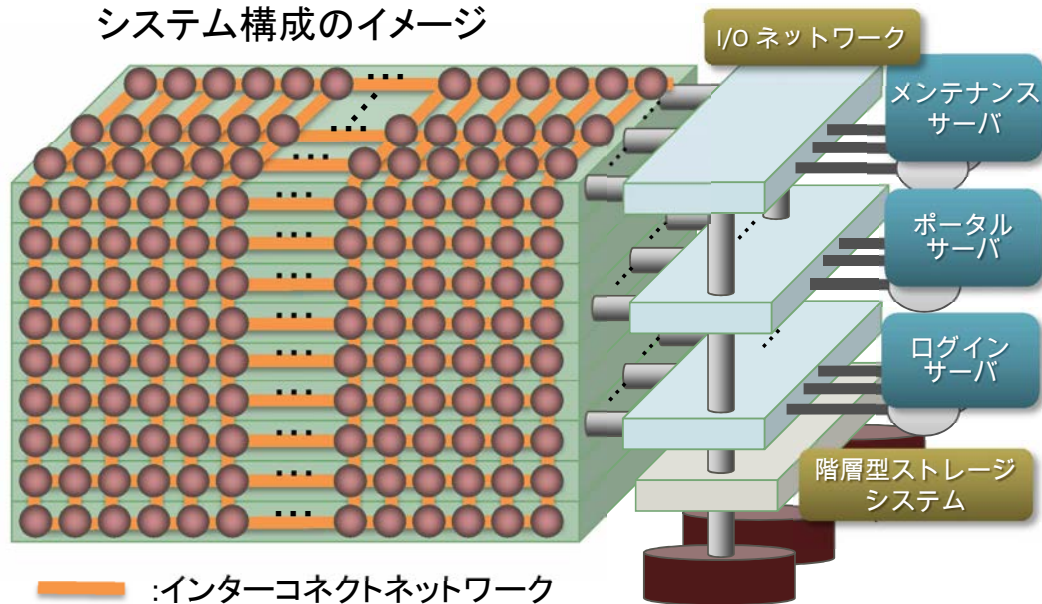
### ○ネットワーク構造

- 「京」の多次元トラスネットワークポロジを踏襲  
→高い移植性、京の資産を生かす利点。

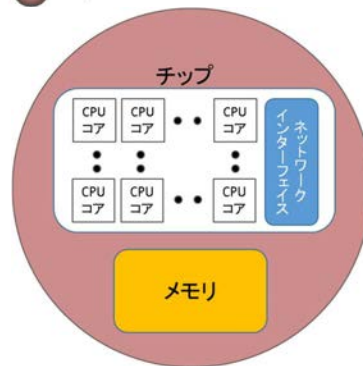
## <要素技術開発の要点>

- 我が国が強みを持つコア技術は確保した上で、汎用品の活用や国際協力の推進により、効果的・効率的に開発。
- 規格化を図ることによりユーザの利便性が高まるシステムソフトウェアは、米国と協力しながら開発。

## システム構成のイメージ



— : インターコネクトネットワーク  
● : 計算ノード



バッチジョブシステム  
階層化ストレージシステム  
並列ファイルシステム

|                              |                |                 |            |
|------------------------------|----------------|-----------------|------------|
| ファイルI/O                      | MPI<br>通信ライブラリ | 並列プログラミング<br>言語 | 電力制御<br>機構 |
| 低レベル通信機構                     |                |                 |            |
| OS (Linux + 軽量マイクロカーネル)      |                |                 |            |
| Post京、Manycore architectures |                |                 |            |

## ポスト「京」で想定されるシステムソフトウェア群

システムソフトウェアとは、ハードウェアを管理・制御し、アプリケーションプログラムを安全かつ効率よく実行するための環境を提供するソフトウェア群をさす。 3

# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題 についての検討委員会

## ○趣旨

スーパーコンピュータ「京」の次を担うポスト「京」については、大規模な研究開発プロジェクトであり、そこから高いインパクトのある成果を創出することが期待される。スーパーコンピュータで解決できる問題は、基礎科学から産業利用まで幅広いものであるが、ポスト「京」においては、国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に優先的に取り組むべきである。

こうした状況を踏まえ、ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題や課題解決による早期の成果創出に向けた研究開発体制等を検討するため、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会を設置。

## ○検討経緯

- 第1回（平成26年4月4日）  
検討委員会の設置について  
ポスト「京」プロジェクトについて  
将来のHPCIシステムのあり方の調査研究（アプリ分野）からの報告  
関係府省庁における計算科学技術に対するニーズについて
- 第2回（平成26年5月30日）  
ポスト「京」の社会的・科学的課題の考え方  
アプリケーションの研究開発体制について
- 第3回（平成26年6月19日）  
ポスト「京」の計算資源配分の考え方  
ポスト「京」の社会的・科学的課題
- 第4回（平成26年7月24日）  
ポスト「京」の社会的・科学的課題の取りまとめ案
- 第5回（平成26年8月20日）  
報告書取りまとめ

## ○検討委員会メンバー

- |  |                             |
|--|-----------------------------|
| 安西 祐一郎（日本学術振興会理事長）                                   | 関口 和一（日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員）  |
| 内山田 竹志（スーパーコンピューティング技術産業応用協議会運営委員長<br>トヨタ自動車代表取締役会長） | 瀧澤 美奈子（科学ジャーナリスト）           |
| 大隅 典子（東北大学大学院医学系研究科教授）                               | 土屋 裕弘（田辺三菱製薬代表取締役会長）        |
| ◎小宮山 宏（三菱総合研究所理事長）                                   | ○土居 範久（慶應義塾大学名誉教授）          |
| 城山 英明（東京大学公共政策大学院院長）                                 | 土井 美和子（独立行政法人情報通信研究機構監事）    |
| 住 明正（国立環境研究所理事長）                                     | 林 春男（京都大学防災研究所巨大災害研究センター教授） |
|  | 平尾 公彦（理化学研究所計算科学研究機構長）      |

（◎：主査、○：主査代理）（合計13名）（50音順）

# プロジェクト概要

## 【プロジェクトの目的・狙い】

国家的に解決を目指す、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題を予め選定し、

- これら課題の解決に資するアプリケーションの開発や課題に関する研究開発の推進に必要な体制を構築するとともに、
- これらのアプリケーションとポスト「京」のシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を協調的に設計開発（コデザイン）し、更には、これらのアプリケーションを利活用して行う重点課題に関する研究開発に対し、ポスト「京」の計算資源を重点的に配分する、  
ことを通じて、戦略的にポスト「京」を活用し、世界を先導する成果の早期創出を図るとともに、  
ポスト「京」システム全体として成果を最大化し、国際競争力のあるシステムを実現することを狙いと  
する。

## 【プロジェクト推進スケジュール】

**立上げ準備**  
(H26年度)

**調査研究・準備研究フェーズ**  
(H26～H27年度)

**本格実施フェーズ**  
(H28年度～)

- 課題決定
- 開発体制  
骨子決定

- 実施計画策定
- 開発着手

- 開発推進

▲代表機関公募

(年度)

H26

H27

H28



# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の選定方針

ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題は、以下の3つの基準に基づいて選定。  
なお、本基準は、プロジェクトの基本的な考え方に係るものであり、重点課題選定時のみならず、プロジェクト実施の段階においても尊重すべきもの。

## (1) 社会的・国家的見地から高い意義があるか。【必要性の観点】

- ① 我が国を取り巻く社会的・科学的課題の解決に貢献できること。

## (2) 世界を先導する成果の創出が期待できるか。【有効性の観点】

- ① 科学的なブレークスルーや我が国の産業・経済への波及効果が期待されること。
- ② 成果創出に向けて、計算科学者や理論科学者に加え、計算機科学者、応用数学者、社会科学者、実験・観測科学者、産業界や自治体等の関係者などが連携・協調した開発体制を構築できる見通しがあること。

## (3) ポスト「京」の戦略的な活用が期待できる課題か。【戦略的活用の観点】

- ① ポスト「京」によりはじめて可能となる超大規模計算・データ解析であること。
- ② 俯瞰的にみてポスト「京」の十分な活用が期待できること。
- ③ ポスト「京」の利用による投資効果が明確であること。

# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題①

## 1. 重点課題（9課題）

「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、選定方針に沿う課題。重点課題の中からターゲットアプリケーションを選定の上、コデザイン及び性能目標の明確化に活用する。公募による代表機関決定後、代表機関により実施計画を策定し、平成27年度からアプリケーション開発に着手する。

| カテゴリ      | 重点課題   |
|-----------|--|
| 健康長寿社会の実現 | <b>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</b><br>超高速分子シミュレーションを実現し、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、機能制御までを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。            |
|           | <b>② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学</b><br>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   | <b>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</b><br>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。  |
|           | <b>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</b><br>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②

## 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  | <b>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</b><br>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。      |
|          | <b>⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化</b><br>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 | <b>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</b><br>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。    |
|          | <b>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</b><br>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  | <b>⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明</b><br>素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。                      |

# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題③

## 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課題として、今後、調査研究を通じて実現化を検討する。調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定する。

### 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、分子化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、星間分子化学を探究する。

#### 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

革新技術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。

# ⑥革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

## 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点: ポスト「京」を用いた第一原理解析により、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。
- (2) 有効性の観点: 産業界の大型プロジェクト(SIP等)と連携し、ポスト「京」の超高精度解析を駆使することで、鍵となる物理現象を解明し、**世界最先端のエネルギーシステムを実現する**。
- (3) 戦略的活用の観点: エネルギー変換の中核をなす、燃焼等の複雑な物理現象を高精度に予測するためには、**第一原理解析**が必須となる。実問題に対する第一原理解析にはポスト「京」の能力が必要となる。

## 内容の詳細

具体的なサブ課題として以下のようなものが想定されるが、**波及効果の大きなもの**、解析基盤技術が共有できるものを**優先して実施**。

- ・ **サブ課題A: 超臨界タービン燃焼器:**  
超臨界燃焼挙動を詳細に解明し、  
高熱効率・低環境負荷(CCS、ゼロNOx)  
に寄与する超臨界タービン燃焼器の実用化を加速。
- ・ **サブ課題B: ICエンジン:** エンジン内の乱流噴霧燃焼挙動を解明し、  
熱効率の飛躍的向上(40%→50%以上)に貢献。
- ・ **サブ課題C: 超大型風車:** 最重要課題である立地アセスメントに必要な100  
ケース/アセスメントの高精度風況予測を実現し、実用化を加速。
- ・ **サブ課題D: 核融合炉:** 核融合炉の実用化に必須となる核燃焼プラズマ挙動  
の解析技術を確認し、国際熱核融合実験炉ITERの炉心設計に貢献。



## ポスト「京」利用の必要性

- ・ 超臨界タービン燃焼器では垂臨界状態に比べて雰囲気圧が10倍(300気圧)になり**解析規模が約100倍**になるため。
- ・ ICエンジンでは予測精度を飛躍的に向上させることが可能な気筒内噴霧燃焼の第一原理解析(**DNS解析**)が必要なため。
- ・ 超大型風車の立地アセスメントでは、**100ケース以上**の詳細な風況予測シミュレーションを実施することが必要なため。
- ・ 核融合炉心の核燃焼プラズマ挙動の解析では、「京」の成果を重水素など多種イオン系、かつ、**長時間スケール**(10ms→1s)に拡張することが必要となるため。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

占有日数は7日～53日程度と見積もられるが、詳細は具体的な研究課題に依存する。

## 期待される成果・波及効果

- ・ 超高効率・低環境負荷な産業機器・コンシューマ製品の実現による我が国の**産業競争力の強化**、低炭素社会・省エネルギー社会の実現に向けた**世界的リーダーシップの発揮**。
- ・ 「**エネルギー基本計画**」で重要性が指摘される省エネルギー・低環境負荷技術、中長期クリーンエネルギー源等の技術開発に貢献。
- ・ 具体的な成果としては、高熱効率・低環境負荷の超臨界タービン燃焼器の実用化、ICエンジンの熱効率の飛躍的向上(10%以上向上)、超大型風車の実用化、核融合炉の炉心設計への貢献などが期待される。

# 日米エクサスケールアプリケーションWSについて

2014 Smoky Mountains Computational Sciences and Engineering Conference and U.S./Japan Exascale Applications Workshop

2014/9/2-6, Gatlinberg, TN, USA

エクサアプリ開発のための理研-ORNLの間での日米協力の覚書の作成を目的として医療、材料、気候、産業応用、核物理、核融合の6分野の専門家が議論

## ■ 核融合セッション参加者

Yasuhiro Idomura (JAEA,GT5D) & Phil Ferguson(ORNL, Summary), co-chairs

Shinya Maeyama (JAEA, GKV)

Masanori Nunami (NIFS, Numerical Simulation Reactor Research Project)

John Mandrekas (US-DOE, Overview@SMC)

C S Chang (PPPL, SciDAC-EPSI)

David Bernholdt (ORNL, SciDAC-PSI)

Sophie Blondel (ORNL)

John Canik (ORNL)

David Green (ORNL, SciDAC-RF, SciDAC-AToM)

Andreas Wingen (ORNL, Workflow on VMEC)

# ワークショップにおける主な議論

1. 既存アプリケーションのエクサスケール拡張に向けたコデザイン
  - ネットワークトポロジ、メモリ階層構造、耐故障性
  - プログラミングモデル、ライブラリ、並列アルゴリズム(時間並列)
  - エクサスケールシミュレーション間のデータ結合モデル
2. エクサスケールシミュレーションの目標
  - マルチフィジックス核燃焼プラズマシミュレーション(Whole Device Modeling)によるITERの運転支援
  - プラズマ・材料相互作用の定性的・定量的理解
3. エクサスケール時代の研究課題
  - 第一原理プラズマシミュレーションに基づく制御・運転シナリオ設計
4. エクサスケールアプリケーション開発における日米協力
  - エクサスケール計算機向けアルゴリズム、物理モデルの共同開発
  - エクサスケールアプリコデザインに関するJIFTワークショップ提案

→JIFT workshop on innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing (Aug. 2015, Nagoya)