



筑波大学
University of Tsukuba

平成19年10月3日

「次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2007」

計算科学への挑戦

～次世代を担う若者へのメッセージ～

筑波大学長

岩崎 洋一

目次

✦ 計算科学

- 計算科学の発展
- 三本柱の一つとしての計算科学
- スーパーコンピュータの歴史
- 次世代スーパーコンピュータ

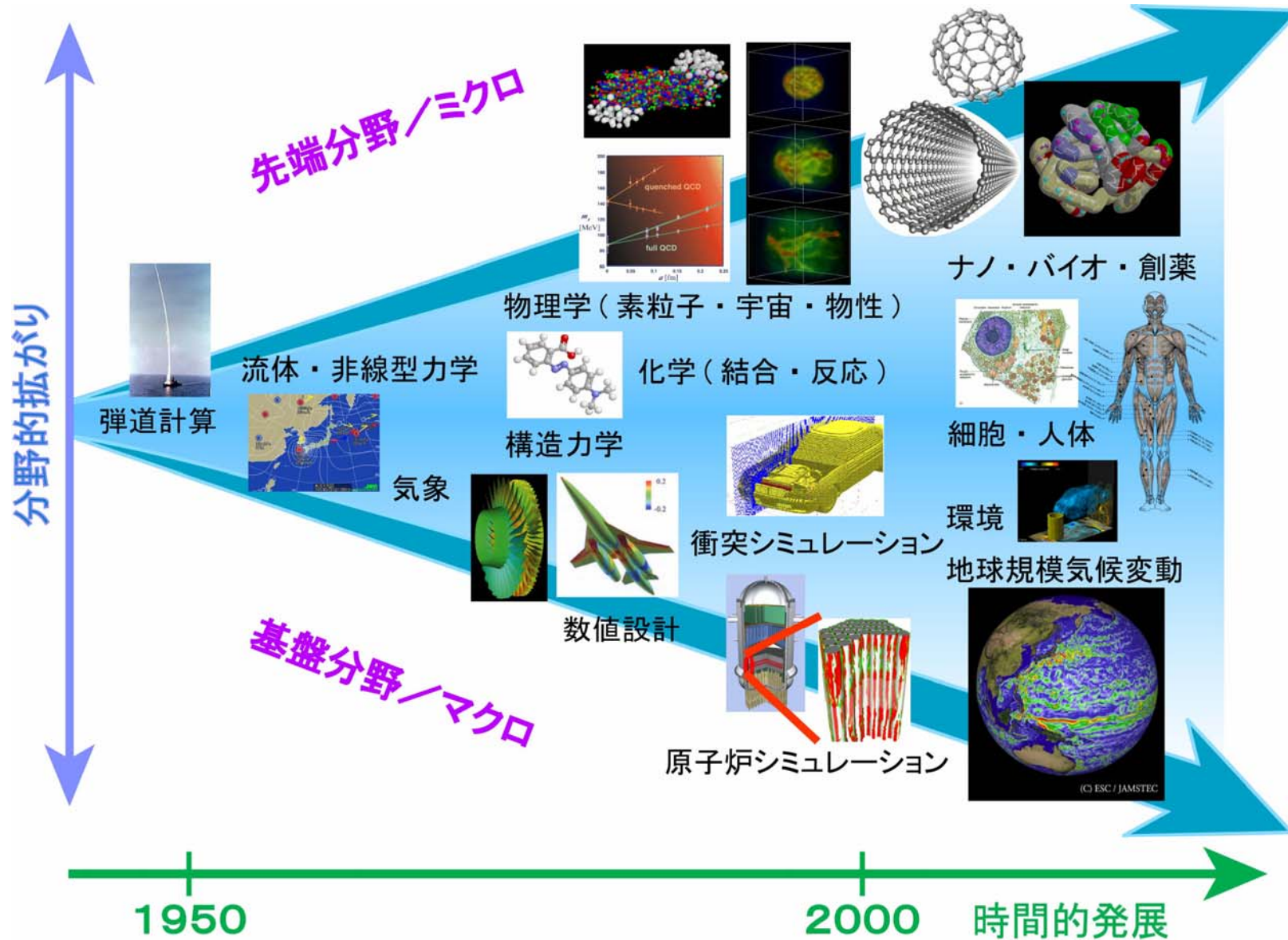
✦ アプリケーションの最前線

- 基礎科学
- 物質科学
- 生命科学
- 環境科学

目次(続)

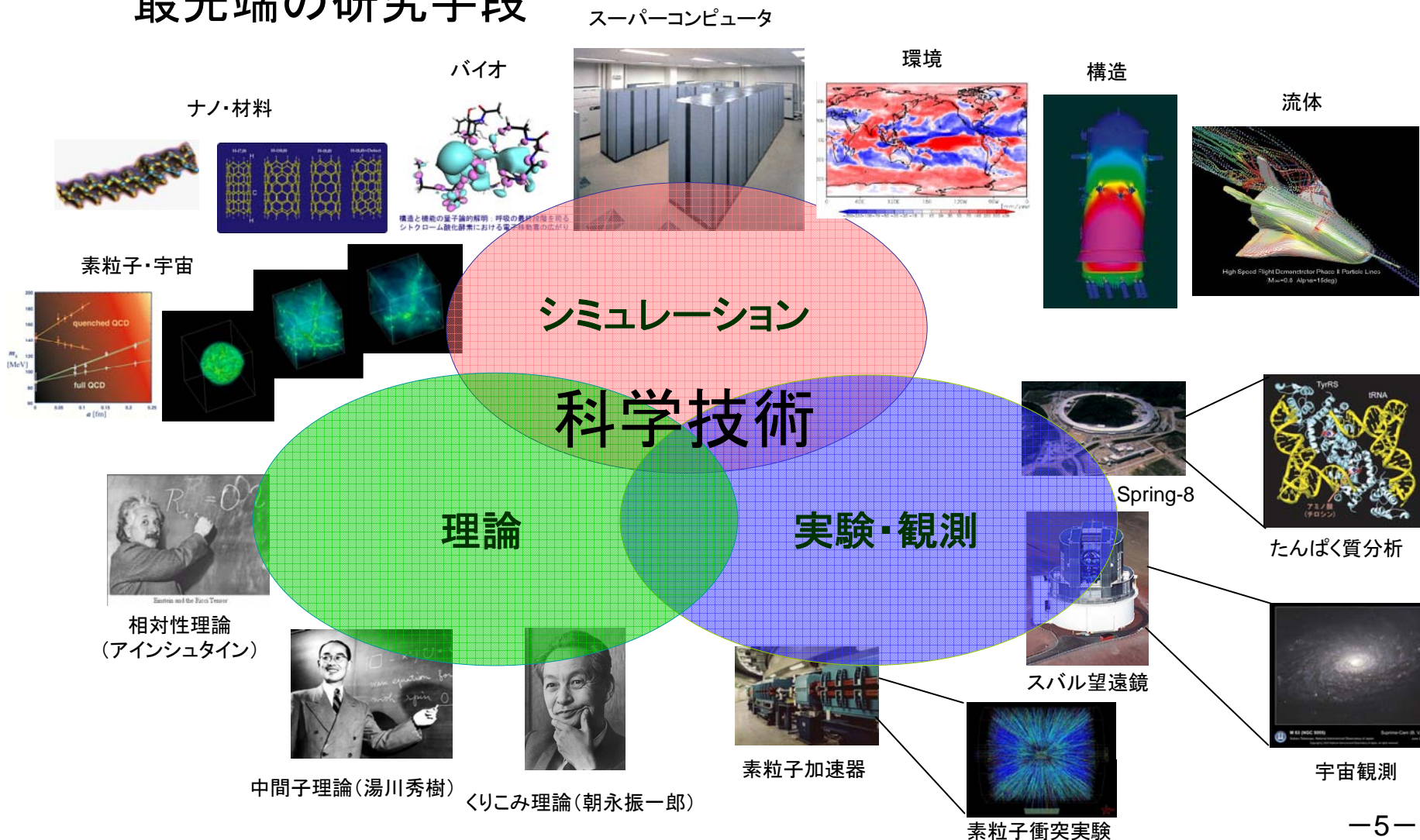
- ✦ 次世代スパコンによるフロンティアの開拓
 - フロントランナー
- ✦ 計算科学によるブレークスルーのために
 - グランドチャレンジの設定
 - ソフトウェアの自己開発
 - 異分野融合
 - 分散拠点
- ✦ 結び

計算科学技術の発展

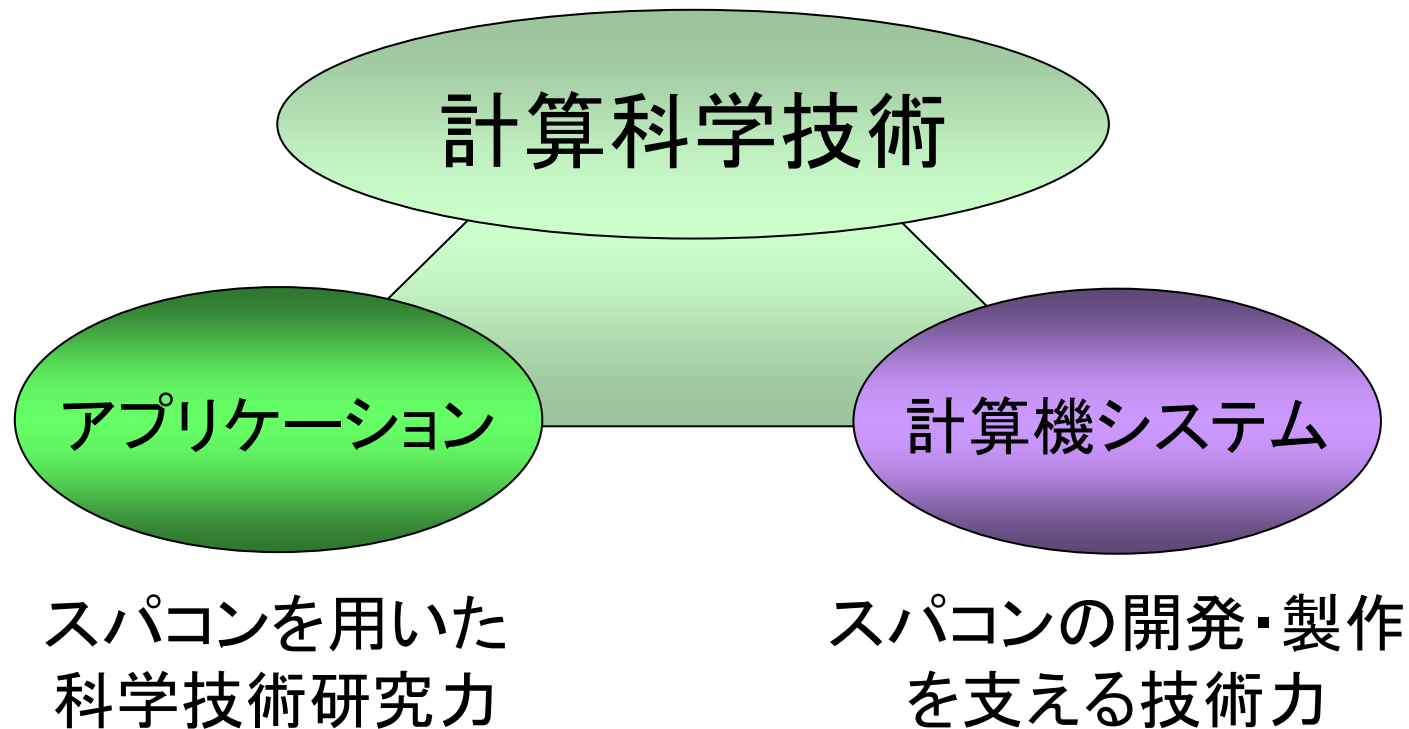


科学技術の三本柱としての計算科学技術

- 科学技術の全分野で、実験・観測、理論と並ぶ、重要且つ最先端の研究手段



計算科学技術を支える二つの要素

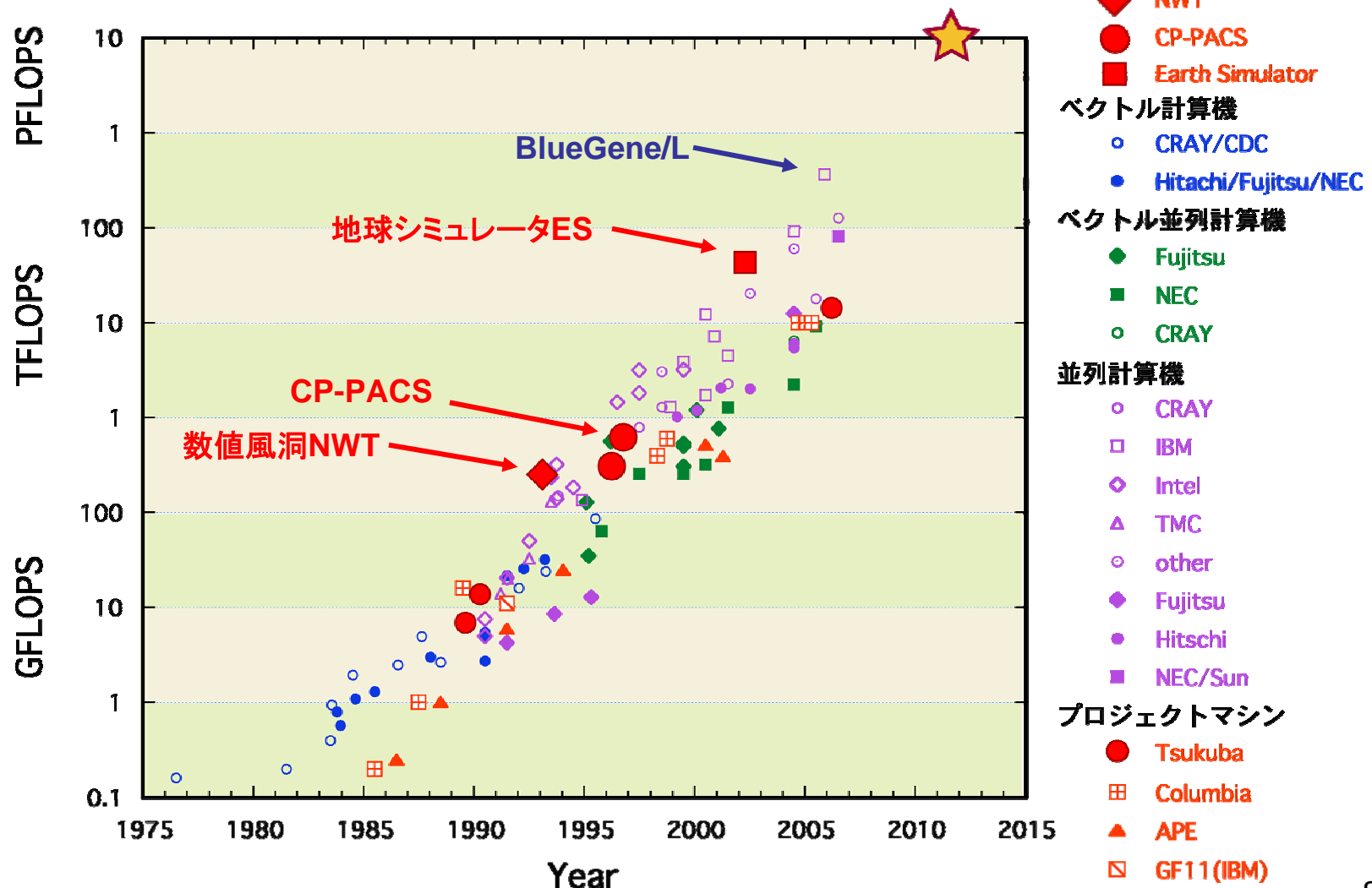


まずは、計算機システムについて

- スパコンの発展史
- 次世代スパコン

スーパーコンピュータの発展 (I)

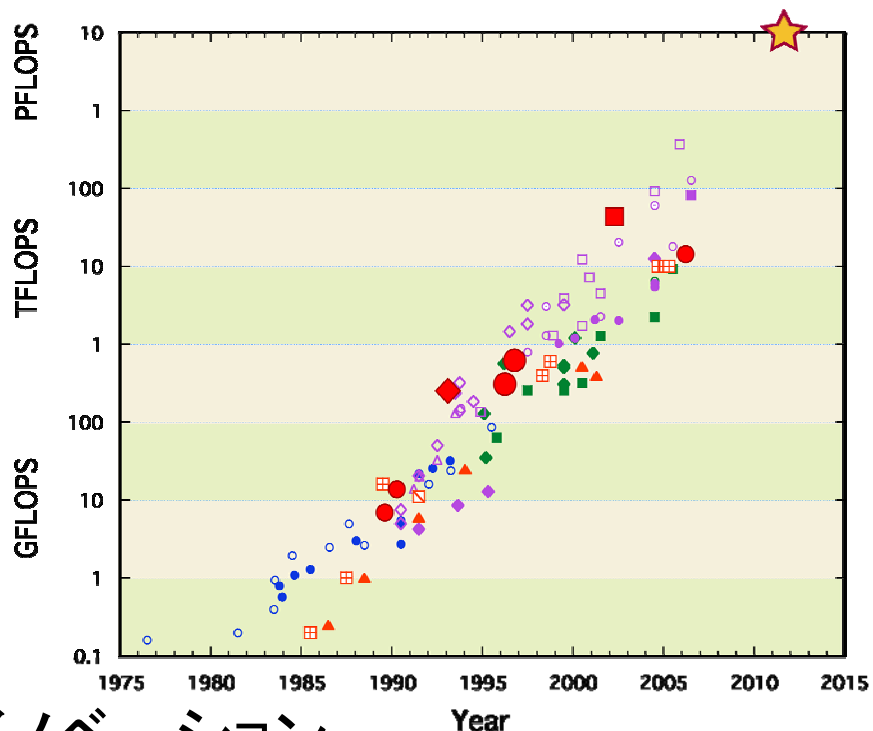
30年間 (1976年～2005年) で100万倍
の高速化



スーパーコンピュータの発展(II)

発展を支えた様々な
技術:

- 半導体技術の進歩
(ムーアの法則)

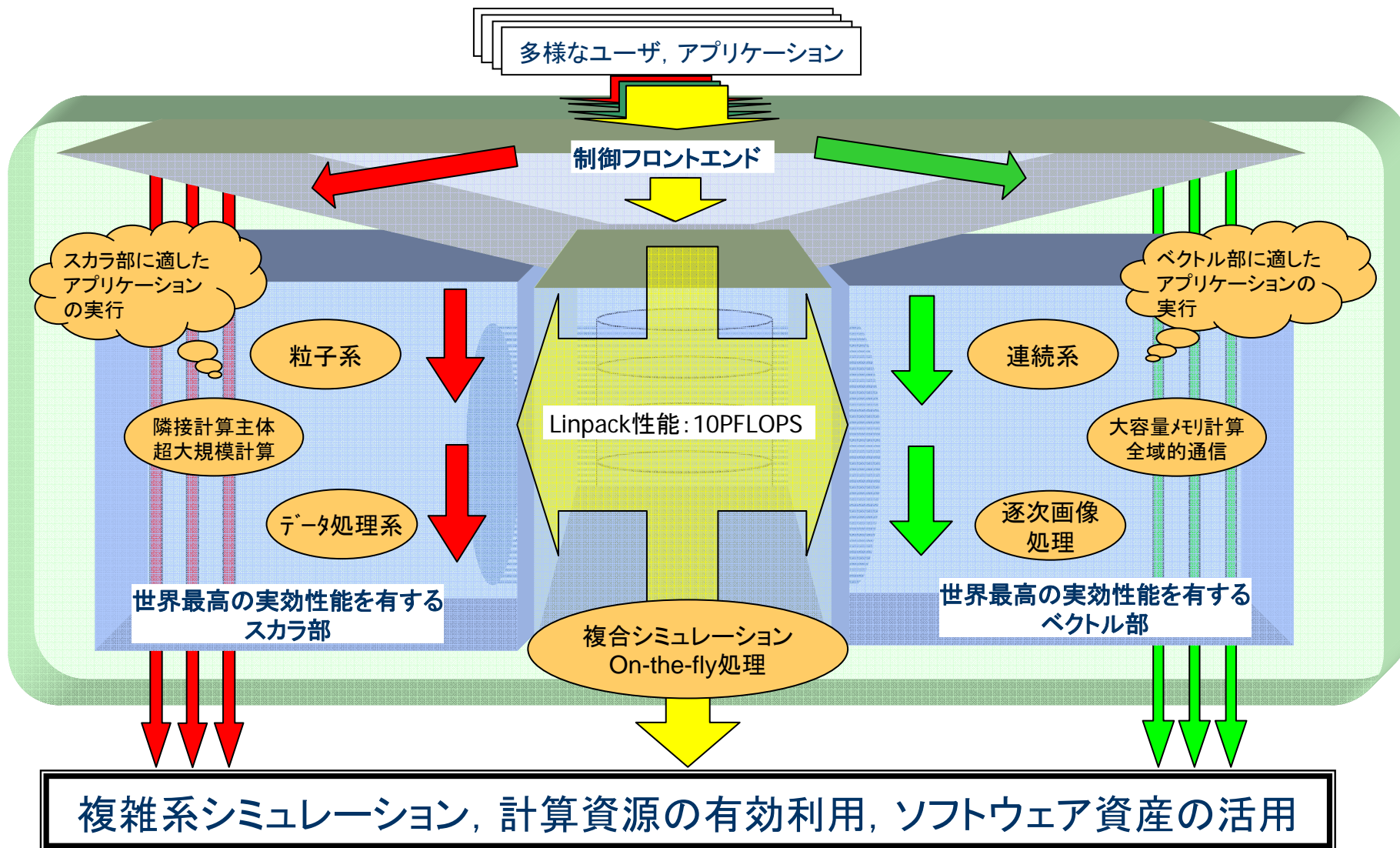


- 数々のアーキテクチャ上のイノベーション

- 1976年 ベクトルプロセッサアーキテクチャの出現
- 1980年代 ベクトル計算機の隆盛
- 1990年頃 マイクロプロセッサの発展と並列計算機アーキテクチャ
- 1990年代以降 並列計算機の隆盛
ベクトル並列(SMP)、超並列(MPP)、スカラ並列(SMP)

<次世代汎用スーパーコンピュータシステム概念図>

= 多様な計算ニーズに対して最適な計算環境を提供する複合型システム

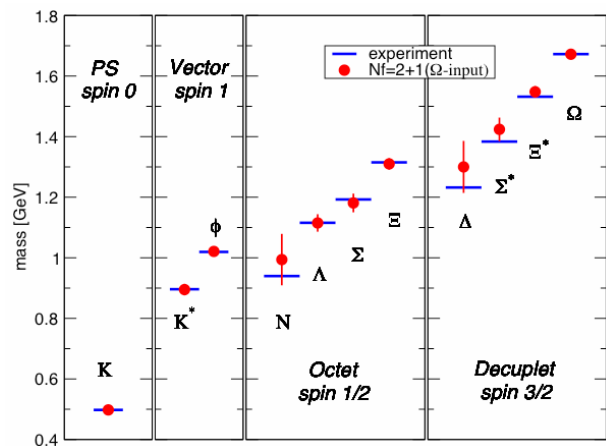


次に、アプリケーションについて

- 現在のアプリ最前線
- これからのグランドチャレンジ

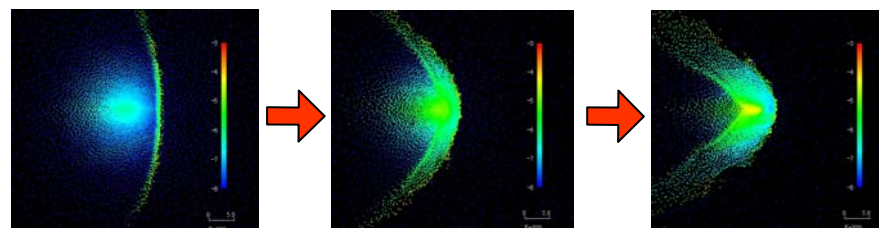
アプリケーション最前線：素粒子・宇宙

QCDによる素粒子の質量



重力・物質・輻射の統合的アプローチ

紫外線輻射場中の第一世代星形成過程の3次元輻射流体力学シミュレーション(2006, 宇宙シミュレータFIRST)

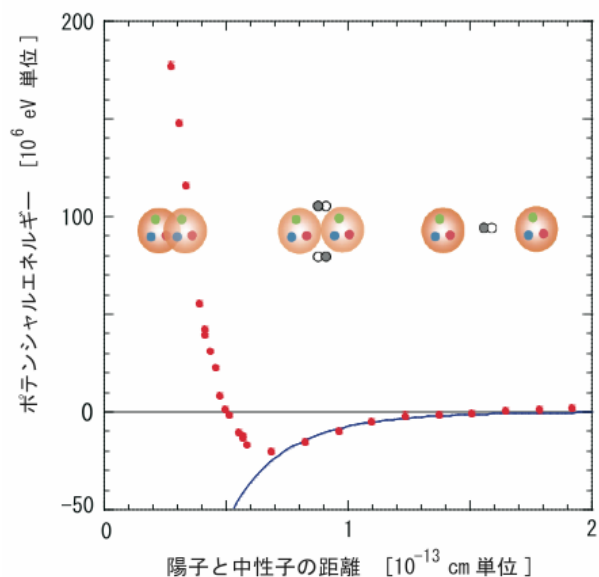


星の進化 50万年

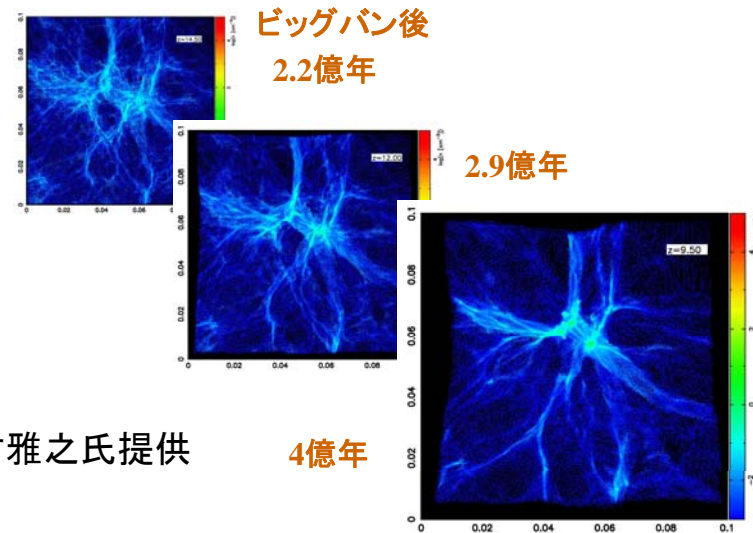
100万年

150万年

QCDによる核力(湯川理論の基礎付け)



宇宙最初の構造発生の大規模重力流体シミュレーション(2007, 宇宙シミュレータFIRST)



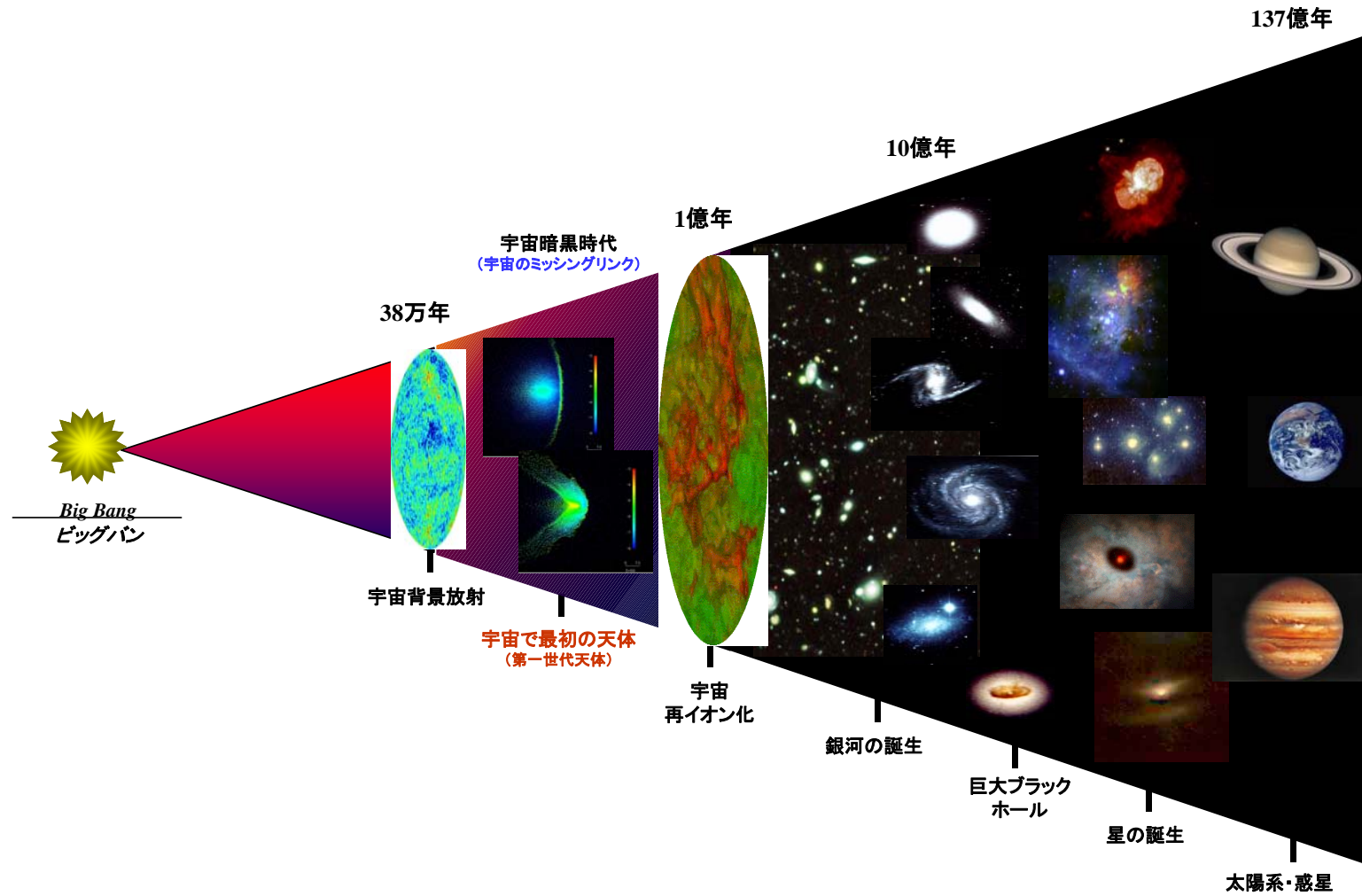
ビッグバン後
2.2億年

2.9億年

梅村雅之氏提供

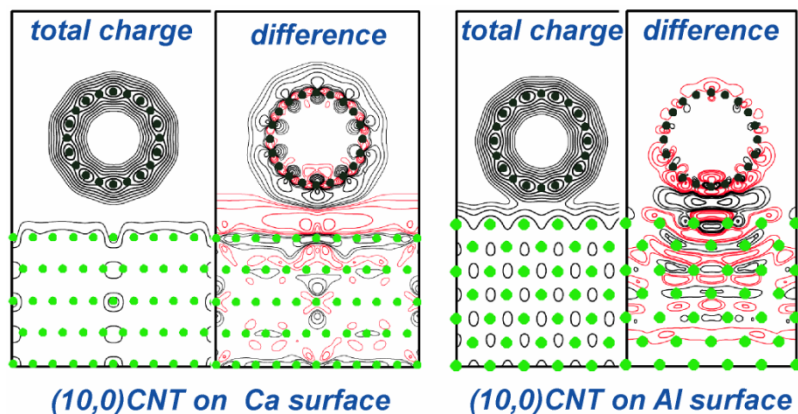
4億年

宇宙史

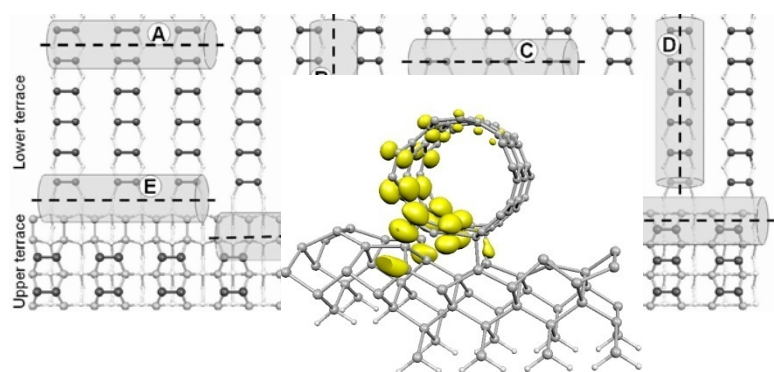


アプリケーション最前線: ナノ・バイオ

炭素ナノチューブと金属の界面

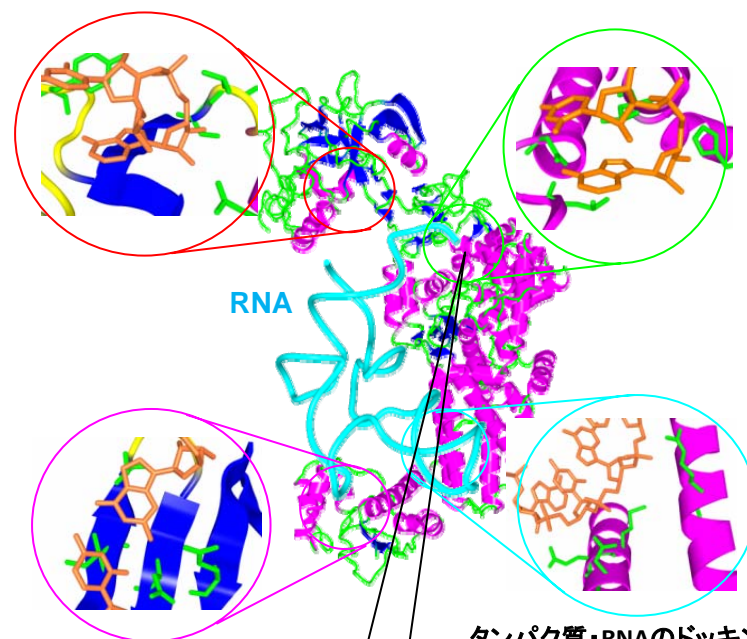


炭素ナノチューブとシリコンの界面

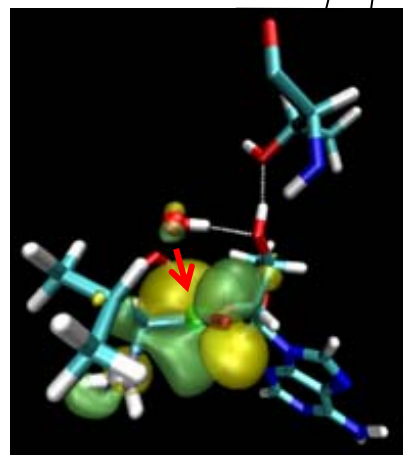


押山敦氏提供

タンパク質・RNAの分子認識と酵素反応



タンパク質・RNAのドッキング・シミュレーション



溶媒(水分子)がRNAを攻撃して、酵素反応が生じる

舘野賢氏提供

アプリケーション最前線：環境科学

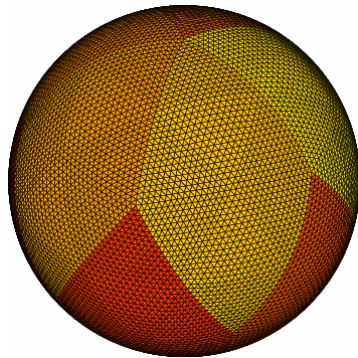
全球雲解像モデルNICAMによる 気象シミュレーション

東京大学 佐藤正樹氏提供

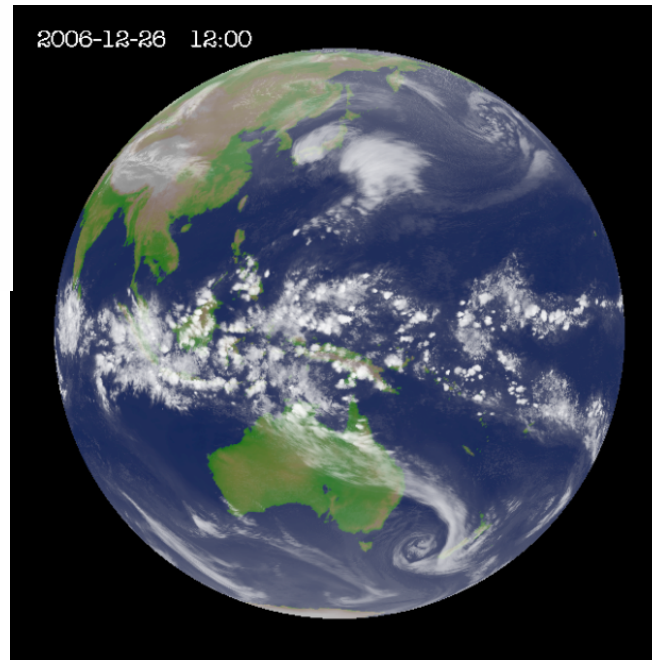
Thunderstorms seen from the Space Shuttle



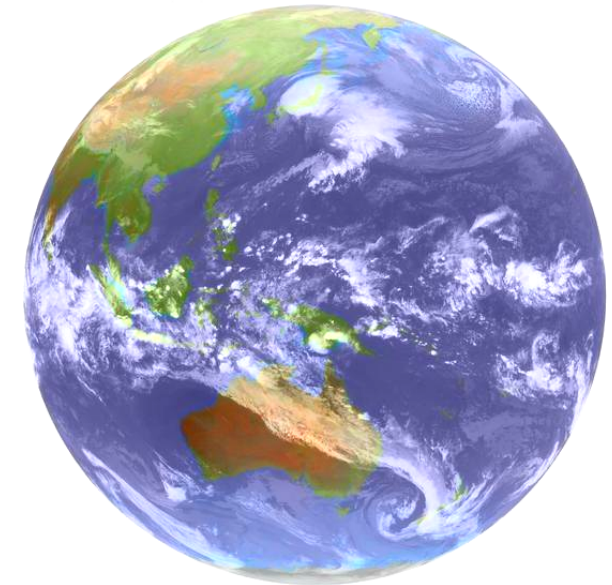
積乱雲：大気循環の駆動源



正20面体分割格子
NICAMの格子配置の例



MTSAT-1R IR1 06122621 JST Kochi Univ.



左：全球を約3.5kmメッシュで分割した数値シミュレーション。
右：静止衛星画像（2006年12月26日。初期値は25日）

計算科学技術の重要性: 今後ますます増大

- 基礎科学のフロンティアを開拓するシミュレーション
- 原子・分子のミクロの法則(量子力学)に基づく物質と生命のシミュレーション
- マクロな自然と人間社会の関わりでのシミュレーション
- ものづくりの道具となるシミュレーション

素粒子・宇宙物理

素粒子・初期宇宙の解明

提供: 国立天文台

銀河・惑星形成シミュレーション

ナノテクノロジー

物質設計

触媒

提供: (独)物質・材料研究機構

ライフサイエンス

計算創薬・テーラーメイド医療

遺伝子・タンパク質から細胞・人体まで解析

地球・環境

エルニーニョ予測

提供: (独)海洋研究開発機構

気候変動

原子力

原子炉設計

ものづくり

デジタルエンジニアリング

防災・気象

津波予測

台風

提供: 東北大学

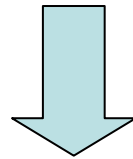
ロケットエンジン設計

航空機開発

提供: (独)宇宙航空研究開発機構

●次世代スパコンによるフロンティアの開拓

- 過去のノーベル物理学賞のうち約3分の1は、新しい実験装置・観測装置の開発によるもの
- **次世代スパコンは新しい実験装置・観測装置に対応**



- 次世代スパコンでフロンティアを開拓
- その分野でのフロントランナー
- 新学域を創出

高い目標(グランドチャレンジ)を目指すことの 重要性

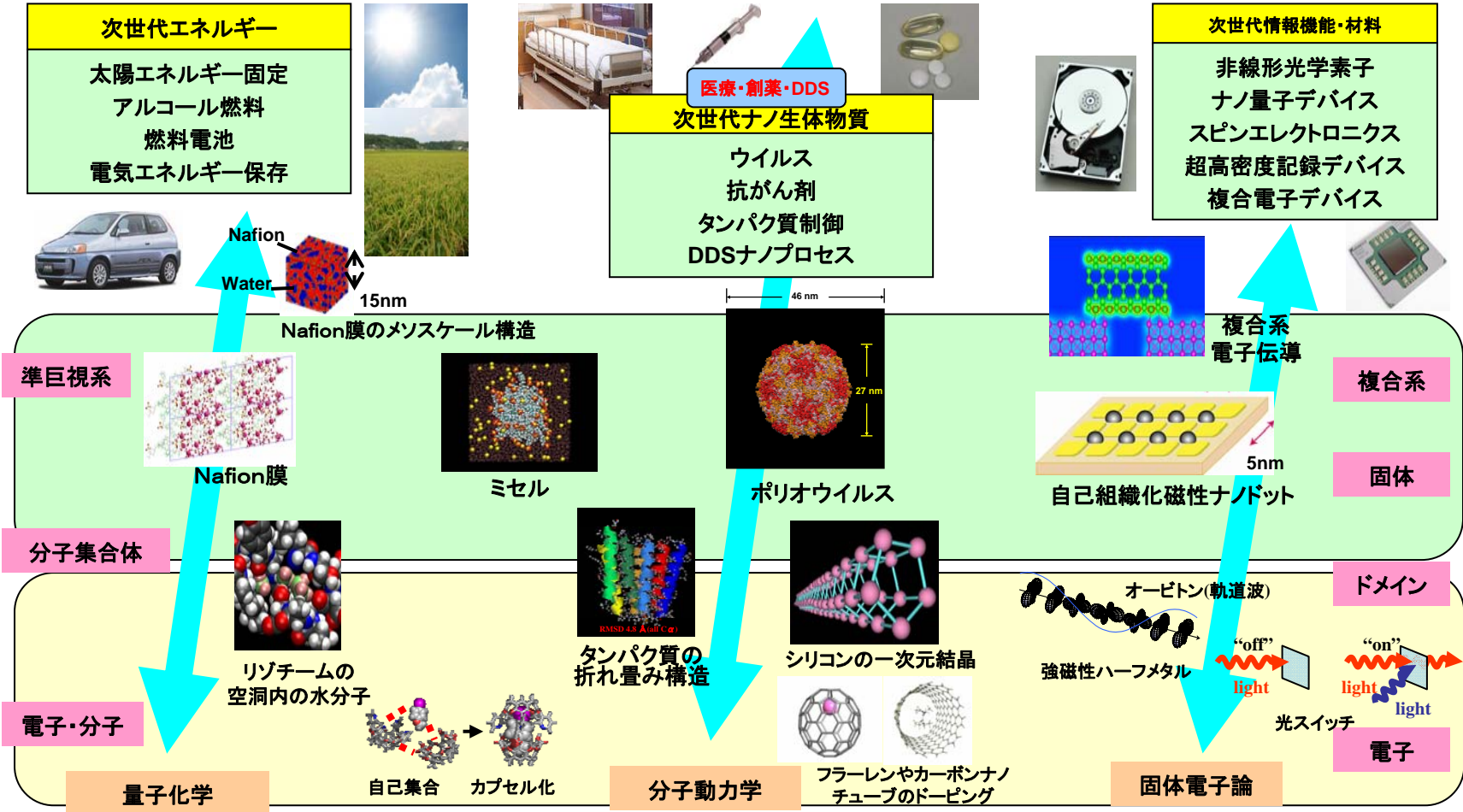
(平成17年9月26日講演より)

- 国によるスパコン開発の目的は、科学技術のブレークスルーの実現
- これを実現するには、高い目標を掲げ、妥協のないプロジェクト実施が必要
 - 明確な科学技術上の目標の設定
 - 原点に立ち戻った、問題のモデル化と計算アルゴリズムの(再)定式化
 - **これに適した計算機開発**
 - 必要ならばゼロベースからの応用プログラム開発
- 計算科学技術の革新は、このような妥協のない努力の過程で育まれると考える

グランドチャレンジの例

- ナノ
- ライフ

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア (平成18～22年)



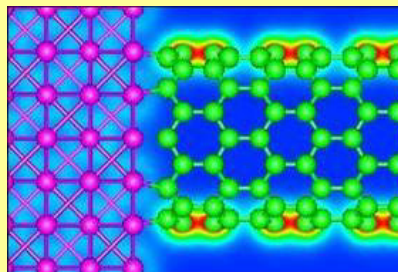
拠点：分子科学研究所

次世代情報機能・材料、ナノ生体物質、エネルギーの分野において、量子化学、統計力学、固体電子論などの理論や基礎となるシミュレーション手法を統合したシミュレーションにより、次世代ナノ材料(新半導体材料等)の創出を目指す。

次世代ナノ情報機能・材料(例: ナノ電子デバイス)

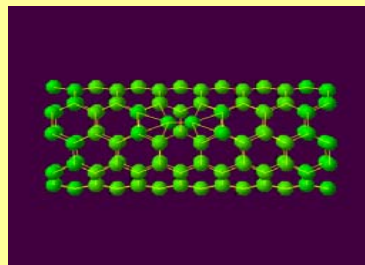
ポストシリコンデバイス実現のための複合的ナノ電子デバイスシミュレーション
(個々の素子の機能探索からデバイスとしての機能デザインへ)

電極と量子細線の接合



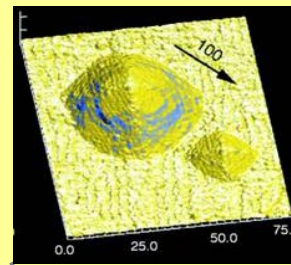
接合の安定性
接合抵抗

量子細線



弾性・非弾性散乱
電流誘起構造変化

量子ドット

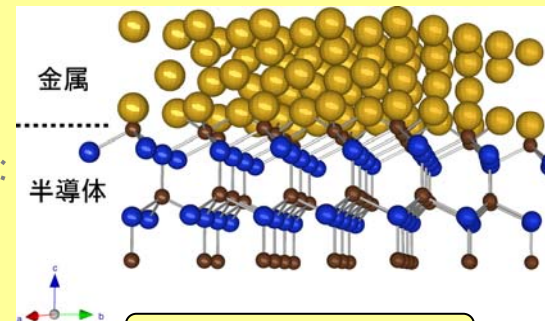
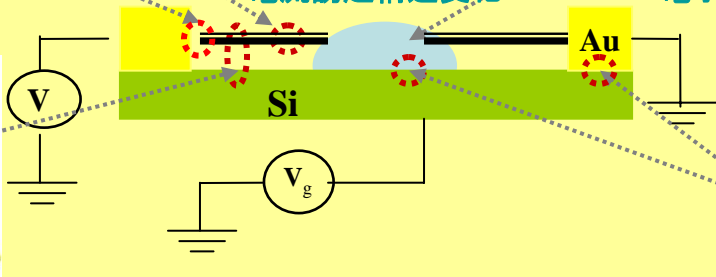
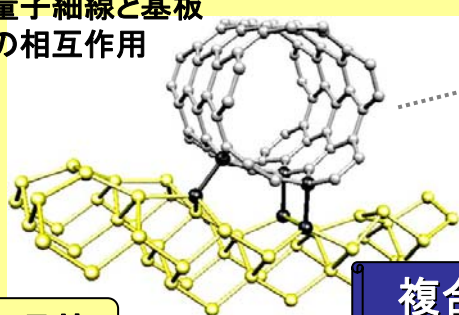


量子ドットの構造安定性
電子間相互作用

複合系としての
デバイス機能の
シミュレーション
には、部品間の
接合の解析が
重要な課題。

電極・量子ドット
と基板の界面

量子細線と基板
の相互作用



複合的ナノ電子デバイスシミュレーション

現状

2千原子程度の複合系(量子細線
と電極)の計算が可能
10万原子の系を扱うには800年:
実現不可能
(実効性能で1テラフロップス)

実空間差分等による第一原理計算
超並列計算
オーダーN法

次世代スパコン

量子細線や分子、電極、ゲート、
基板などの全体(10万原子系)
の計算が2ヶ月程度で可能
(実効性能で1ペタフロップス)

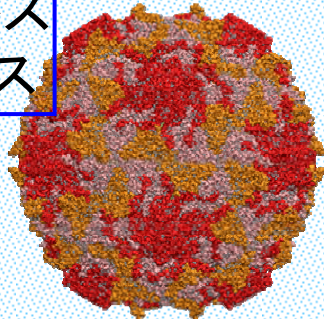
期待される具体的 アウトカム

デバイスの超微細化の実現とそれによる**高速応答**と**高機能**、接合抵抗の低下と弾道的伝導の利用による**省エネルギー**、軽元素利用による**環境負荷の低減**により、イノベーションを起こす。

次世代ナノ生体物質(例:ウイルス)

感染機構や免疫機構解明のための全原子シミュレーション (巨大生体分子の動作機構解明、ライフサイエンスとの融合領域)

小児麻痺ウイルス
リンゴ病ウイルス



小児麻痺ウイルスのカプシド
タンパク質でできたウイルスの殻

1000万原子系の分子動力学計算

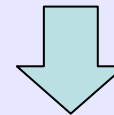
セル多極子展開法による長距離相互作用の評価

安定構造、カプシドタンパク質間の接合構造と熱運動、
熱安定性、構造のpH依存性、化学物質との相互作用、
環境依存性、脂質膜、タンパク質との相互作用などをシミュレーション

1,000万原子系の分子動力学計算

現状

1マイクロ秒に500年:
解析不可能
(実効性能で0.5テラフロップス)



・完全領域分割化
多階層分割
多極子展開法

次世代スパコン

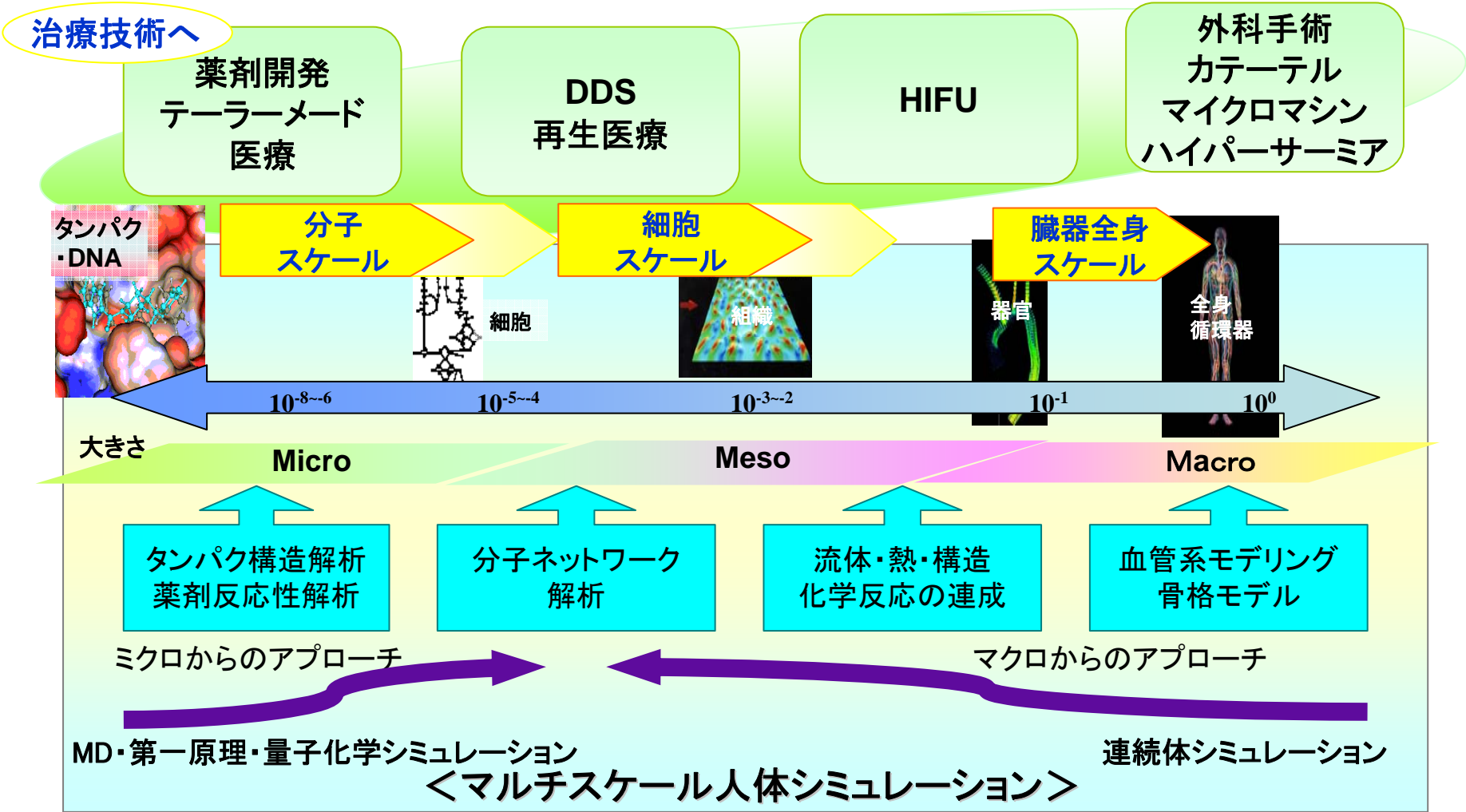
自由エネルギーレベルでの長時間
ダイナミクス解析を実現
1マイクロ秒に3ヶ月
(実効性能で1ペタフロップス)

・自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化、また動的な振るまいをシミュレートできる方法論の開発と、10ペタフロップス級の高性能計算機を用いた大規模シミュレーションにより、水中のウイルス構造やその動作を解析、ウイルスの感染機構や免疫機構を解明

期待される具体的アウトカム

未克服のウイルスに対する予防法と治療法の開発に寄与が可能となり、
国民の健康維持分野でイノベーションを起こす。

次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア (平成18~24年)



拠点：理化学研究所 和光研究所

ペタスケールのシミュレーション技術によって、ライフサイエンスの諸課題解決にブレークスルーをもたらす新たな手段を提供し、生命現象の統合的な理解と医薬品・医療機器、診断・治療方法の開発に繋げる。

グランドチャレンジをいかに作り上げるか

- ナノ・バイオとも 素粒子・宇宙・気候変動などと比較し、グランドチャレンジの設定が難しい
- 若い研究者の新鮮な発想法が必要
- 分野融合が必要
- 例：バイオ
 - バイオ研究者
 - 物理研究者
 - 化学研究者
 - 計算機工学者

ライフサイエンスと計算科学

- 「数学は生物学の次の顕微鏡であり、生物学は数学の次の物理学である」 ジョエル・コーエン(2004)
稲葉寿 「数学イノベーション」
- 計算科学はライフサイエンスの次の実験・観測装置であり、
ライフサイエンスは計算科学の次の物理学である
- 理論、実験ではなく数値実験による新概念形成
例:ソリトン 再起現象 フェルミ・パスタ・ウラム
- ライフサイエンスには、まだまだ隠された新概念がある(はず) 宝庫？
遺伝子発現と環境応答、脳、心、生物とは？ ……
- 新概念形成こそイノベーション
- そのためには……

ライフサイエンスと計算科学(続き)

- 明確な科学上の目標設定
- 明確な(計算可能な)モデルの構築

例: QCDはQEDとはまったく異なる構築 K. ウィルソン

- 分野融合が必要
 - バイオ研究者
 - 物理研究者
 - 化学研究者
 - 計算機工学者
 - 数学者

グランドチャレンジをいかに解くか

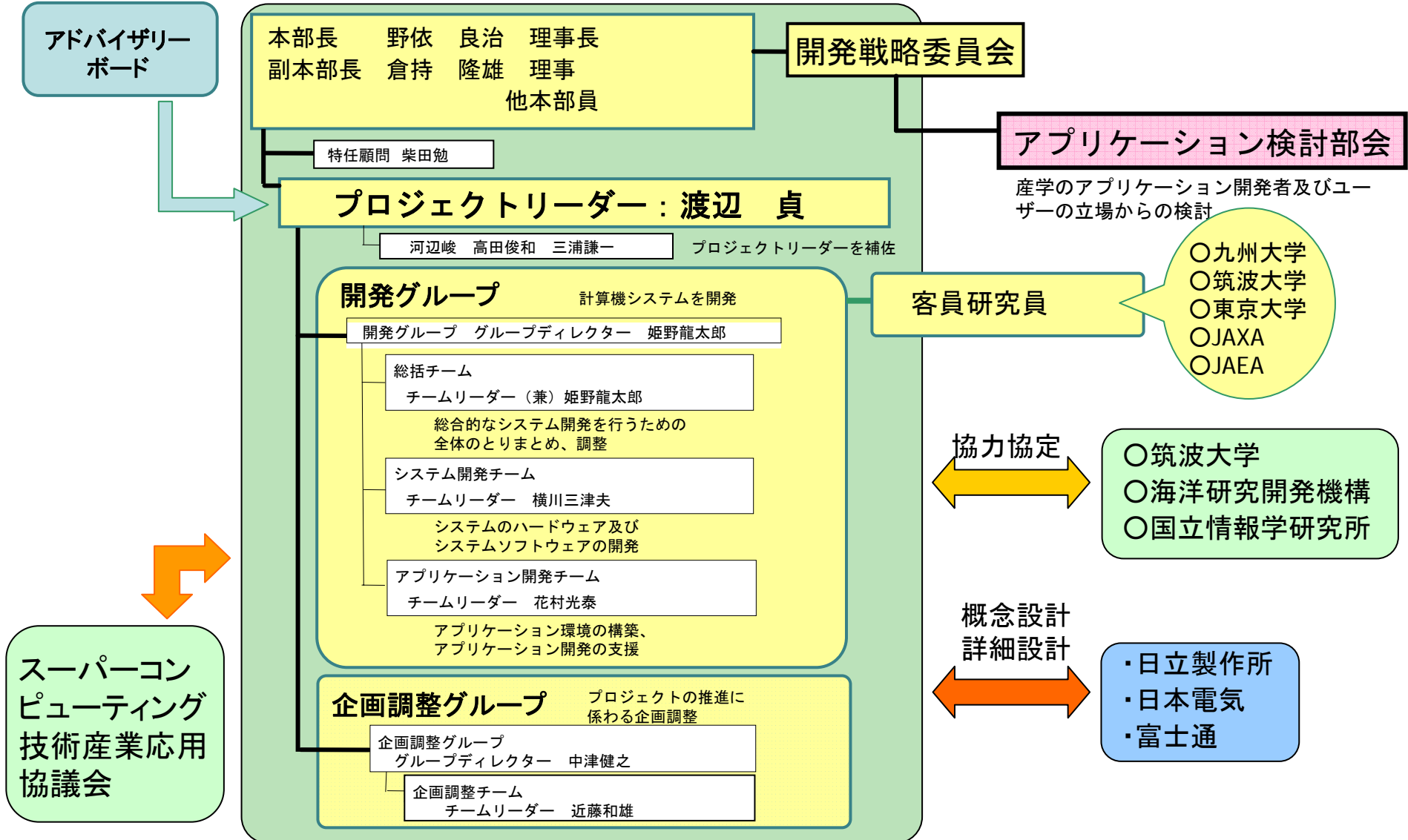
- 明確な科学上の目標の設定
- 原点に立ち戻った、問題のモデル化と計算アルゴリズムの(再)定式化
- 必要ならばゼロベースからの応用プログラム開発
 - シミュレーションは自然を模写すべき 川合敏雄
 - 自然は隣接相互作用である
 - 超並列計算機には隣接結合が適している
 - 計算機アーキテクチャによって、アルゴリズム、プログラミングは異なるべき
- 我々の例
 - ハードウェアの開発・製作 QCDPAX, CP-PACS, PACS-CS
 - システムソフトウェアの開発
 - アルゴリズム、アプリソフトウェアの開発
 - そのために、分野融合必要: 物理学研究者と計算機工学研究者

アプリ側が研究しやすい体制が重要

- ハードウェアの詳細設計(周辺計算環境を含む)
アプリ側からの要求が重要
- 組織体制
透明性のある効率的な運用体制
- 人材育成機能
大学との有機的なネットワーク組織
- スパコンの重層的な配備と情報ネットワーク

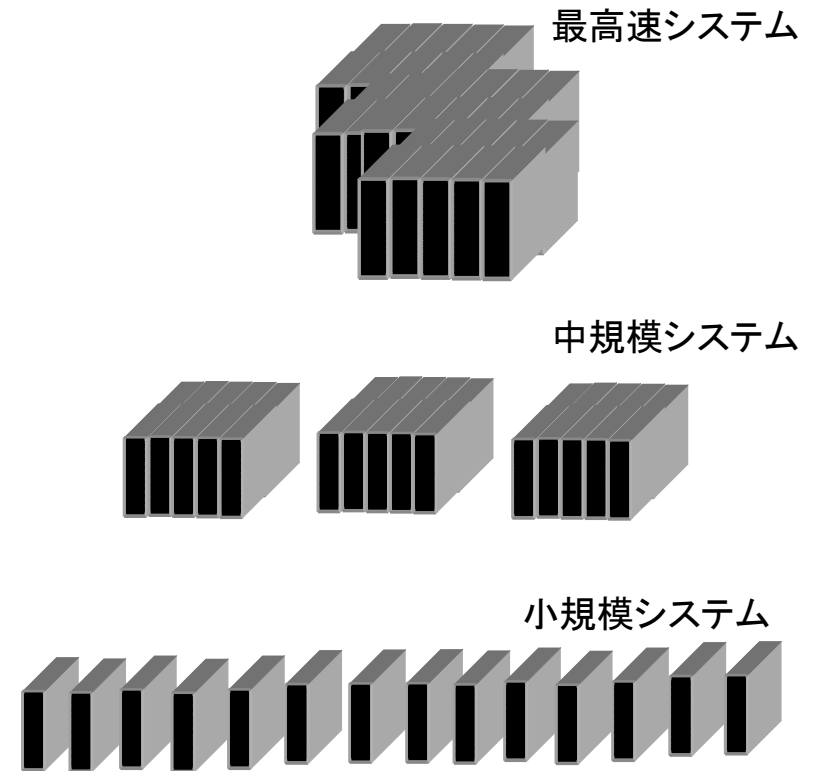
開発体制

理研 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部



計算科学の発展のためのスパコンの配備(Ⅰ)

- “一点豪華”状況の回避
- 重層的な配備の重要性
 - 最高速システムと同時に、複数の中規模システムを配備
 - 世界最高速のシステムは、集中利用して初めて実質世界最高速
 - 最高速システムによるcapability computingと同時に、中規模システムによるcapacity computingを底支え
 - 単一分野集中でなく、計算科学技術の多様な分野を底支え



計算科学技術全体の持続的且つ厚みのある
発展に必須

計算科学の発展のためのスパコンの配備(II)

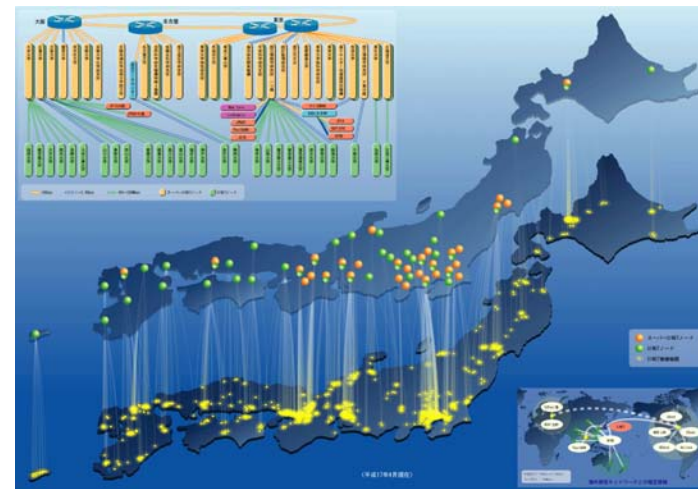
■ 重点分野とその時代的変遷

- 重点分野は科学技術の進展と共に変遷する
- 現在の発展途上分野から明日の重点分野が成長できるようなシステム配備が重要

➡ 重層的配備を必要とするもう一つの理由

■ 高速ネットワークを含めた計算環境整備が重要

- 国内ネットワーク
- 国際連携とグリッド



SuperSINET/SINETノード配置

持続的なスパコン開発

- スパコン開発のロードマップが必要
- ESと次世代スパコンの間隔は開き過ぎ
- 次世代スパコンの開発と平行して次々世代スパコンの開発準備作業が必要

むすび

■ 若い人たちへのメッセージ

- グランドチャレンジを自ら作り上げてください
- 異分野融合が大事です
- モデル、アルゴリズム、ソフトウェアを自ら開拓してください
- そして、グランドチャレンジを解決してください

■ シニアの方々へのメッセージ

- アプリ側が研究しやすい体制を構築してください