

富岳成果創出加速プログラム「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」の現況

牧野淳一郎

神戸大学 理学研究科 惑星学専攻/CPS

概要

- 富岳の現況と今後
- 富岳成果創出加速プログラムの概要
- 富岳とその次

富岳(ポスト「京」)

- ハードウェアは完成、今月から「共用開始」
- 2020/6 Top500 1位 415.53PF、HPCG、Graph500、HPL-AI 1位
- ちなみに 2020/6 Green500 1位は PFN の MN-3。プロセッサの MN-Core は牧野のとことの共同開発。(11月はNVIDIAに1位奪回された、、、)



Post-K Information

Top	Specifications	Performance	Applications	Tips	Misc	Perf. Eval.	F
-----	----------------	-------------	--------------	------	------	-------------	---

➤ [Top](#) ➤ Performance

▣ Performance Targets

- ✓ 100 times faster than K for some applications (tuning included)
- ✓ 30 to 40 MW power consumption

▣ Peak Performance

	PostK	K
Peak DP (double precision)	400+ Pflops (34x +)	11.3 Pflops*
Peak SP (single precision)	800+ Pflops (70x +)	11.3 Pflops
Peak HP (half precision)	1600+ Pflops (141x +)	--
Total memory bandwidth	150+ PB/sec (29x +)	5,184TB/sec

* Reported in TOP500 (including I/O nodes)

▣ Geometric Mean of Performance Speedup of the 9 Target Applications over the K-Computer

37x +

▣ Predicted Performance of 9 Target Applications As of 2019/05/14

Area	Priority Issue	Performance Speedup over K	Application	Brief description
Health and longevity	1. Innovative computing infrastructure for drug discovery	125x +	GENESIS	MD for proteins
	2. Personalized and preventive medicine using big data	8x +	Genomon	Genome processing (Genome alignment)
Disaster prevention and Environment	3. Integrated simulation systems induced by earthquake and tsunami	45x +	GAMERA	Earthquake simulator (FEM in unstructured & structured grid)
	4. Meteorological and global environmental prediction using big data	120x +	NICAM+ LETKF	Weather prediction system using Big data (structured grid stencil & ensemble Kalman filter)
Energy issue	5. New technologies for energy creation, conversion / storage, and use	40x +	NTChem	Molecular electronic simulation (structure calculation)
	6. Accelerated development of innovative clean energy systems	35x +	Adventure	Computational Mechanics System for Large Scale Analysis and Design (unstructured grid)
Industrial competitiveness enhancement	7. Creation of new functional devices and high-performance materials	30x +	RSDFT	Ab-initio simulation (density functional theory)
	8. Development of innovative design and production processes	25x +	FFB	Large Eddy Simulation (unstructured grid)
Basic science	9. Elucidation of the fundamental laws and evolution of the universe	25x +	LQCD	Lattice QCD simulation (structured grid Monte Carlo)

日本のスパコン開発の過去から現在

システム	完成年	ピーク性能	消費電力	性能向上	電力性能向上
数値風洞	1993	280 GF	1MW	—	—
地球シミュレータ	2002	40TF	6MW	143	24
「京」	2011	11PF	15MW	275	110
「富岳」	2020	500PF	~35MW	45	19

計算機(の技術)の使い方を常に見直して、自分の問題に適した構造の機械を使う(作る)ようにし、かつその上で解き易いように問題を立て直すことがないと、「10年で100倍」を生かした人に比べ10倍分は立ち遅れることになります。

近田義広「計算機を使う、計算機の技術を使う」(1988)

アプリケーションからみた富岳

「京」(が使いやすかったかどうかはともかく)に比べると

- 1チップのコア数6倍
- SIMD 幅4倍。チップ単体性能は24倍。メモリ量は2倍
- 総チップ数は2倍
- メモリバンド幅は比率としては若干低下
- ネットワークバンド幅はほぼ同じ(ちょっと速い+3方向同時が4方向同時に)

使いこなして成果を出すためのプログラム=富岳成果創出加速プログラム(2020年度から3年間)

「富岳」成果創出加速プログラム

- 2020年度から2022年度までの3年間
- 4領域19課題(+追加募集)

4領域

1. 人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓
2. 国民の生命・財産を守る取組の強化
3. 産業競争力の強化
4. 研究基盤

1 人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓

- 量子物質の創発と機能のための基礎科学 — 「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学
- 全原子・粗視化分子動力学による細胞内分子動態の解明
- シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで
- 宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築 (計算宇宙惑星)
- 大規模データ解析と人工知能技術によるがんの起源と多様性の解明
- 脳結合データ解析と機能構造推定に基づくヒトスケール全脳シミュレーション※
- 核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓

2 国民の生命・財産を守る取組の強化

- プレシジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ統合システムの推進
- 防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測
- マルチスケール心臓シミュレータと大規模臨床データの革新的統合による心不全パンデミックの克服
- 大規模数値シミュレーションによる地震発生から地震動・地盤増幅評価までの統合的予測システムの構築とその社会実装

3 産業競争力の強化

- 省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション
- 「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発
- 航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究
- 次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究
- 環境適合型機能性化学品
- 大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発
- スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用

4 研究基盤

- 全脳血液循環シミュレーションデータ 科学に基づく個別化医療支援技術の開発

歴史的経緯

- 「京」の時: (準備期間除いて) 2011-2015 の5年間の「戦略プログラム」
 - － 分野5 物質と宇宙の起源と構造
- 2015-2019 重点課題9分野、 2016-2019 萌芽的課題4分野
 - － 宇宙の基本法則と進化の解明
 - － 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

(個人的には、あんまり分野・期間を細かくわけないほうが成果につながると思うわけですが)

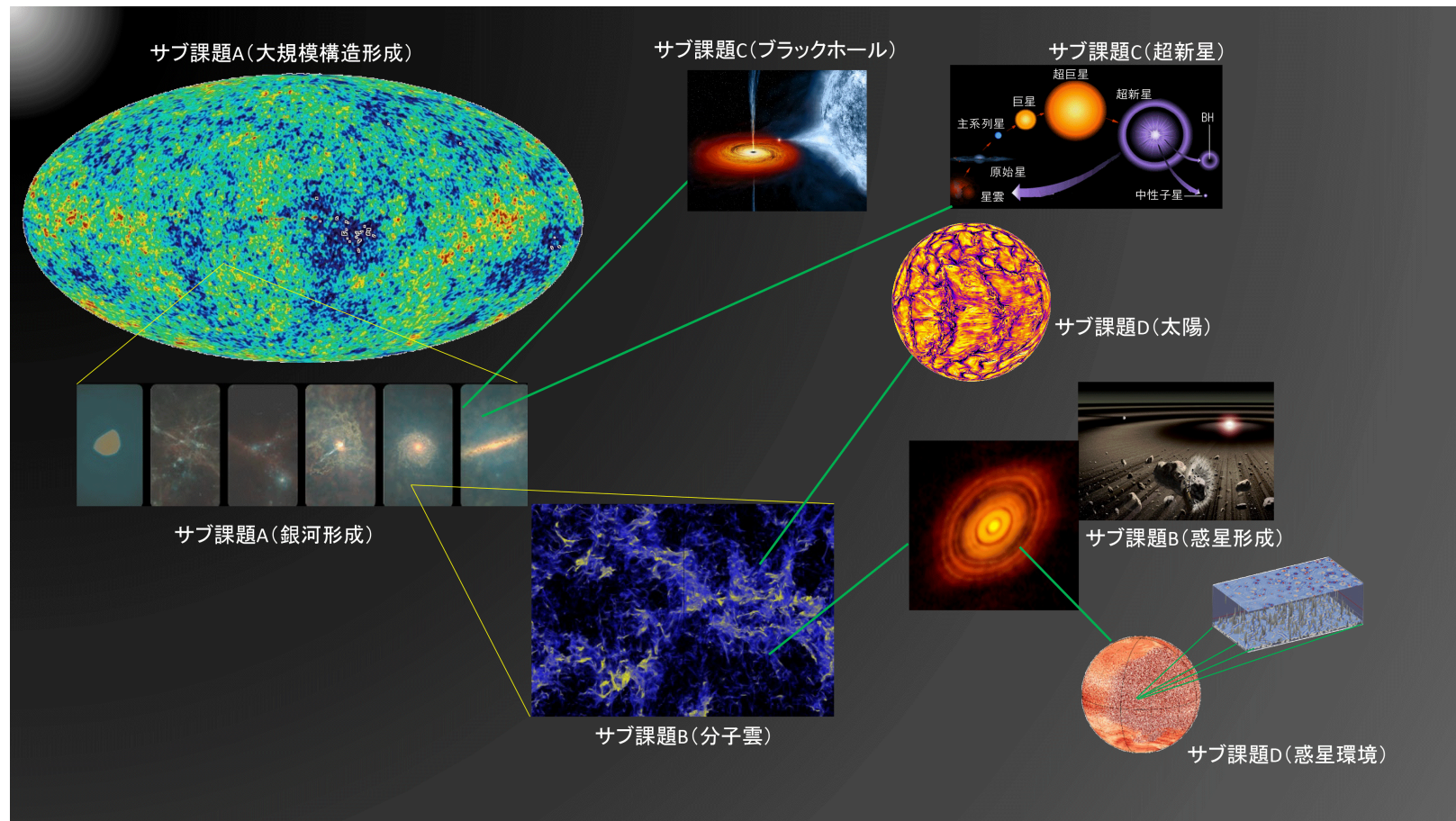
重点 → 富岳加速で年間総予算およそ 1/3 に (1/3 減じゃない)

計算宇宙惑星課題の目標

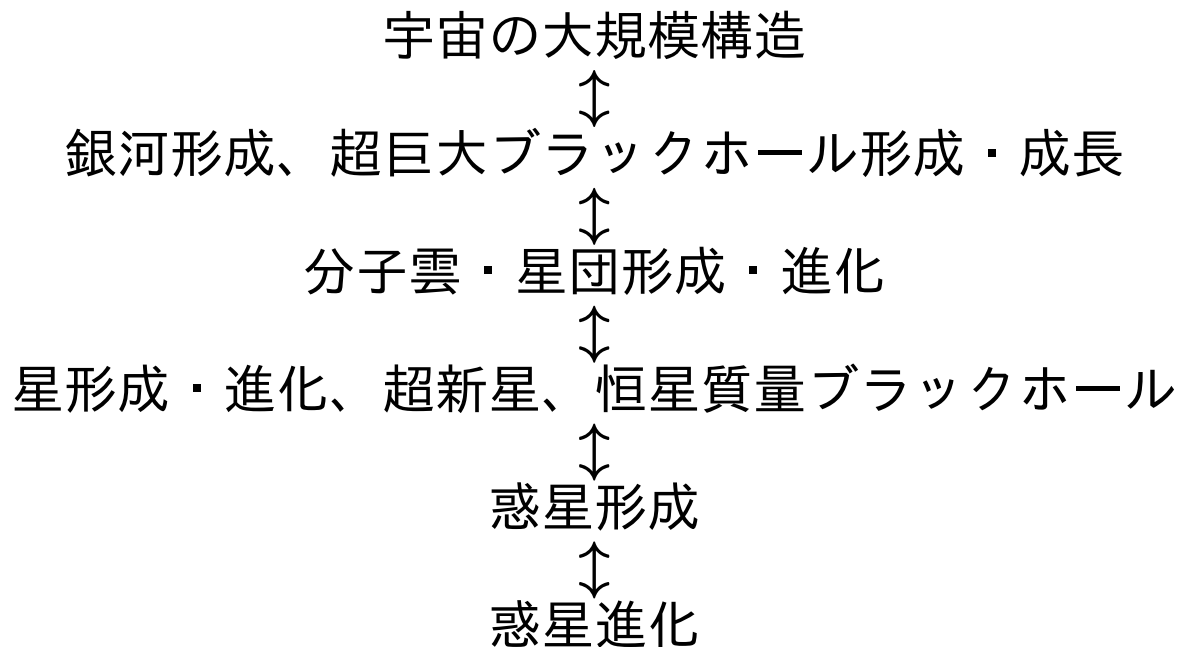
宇宙の始まりであるビッグバンから、膨張宇宙における重力不安定による構造形成、それに伴って起こる銀河形成、銀河の中での星形成、星形成に伴う惑星形成、形成後の惑星の進化、惑星表層環境の形成、さらには太陽活動とその太陽圏、地球への影響といった、宇宙における階層的な構造の形成と進化についての全体的・統一的な理解を、複数の階層にまたがって「富岳」を駆使した世界最高規模のシミュレーションと最新の観測成果を組み合わせることで構築する。

割と文字通り、「宇宙の統一的理解」

課題の構造



目標としては、、、



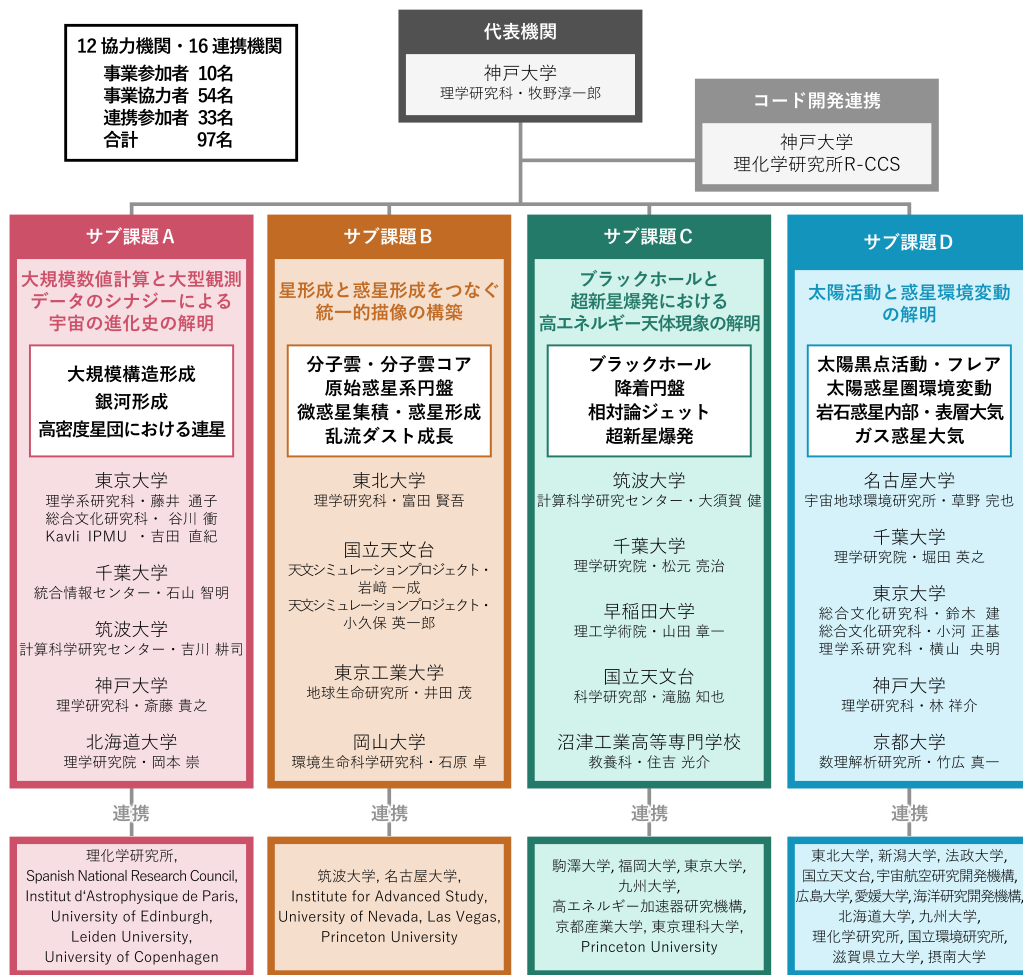
あんまり変な仮定や近似いれなくて、関係する階層との相互作用もちゃんといれて、観測と連携して天体形成進化を理解する

ように「なりたい」

課題内の構成

- サブ課題 A「大規模数値計算と大型観測データのシナジーによる宇宙の進化史の解明」— 大規模構造、銀河、星団
- サブ課題 B「星形成と惑星形成をつなぐ統一的描像の構築」— 星形成から惑星形成、
- サブ課題 C「ブラックホールと超新星爆発における高エネルギー天体現象の解明」— ブラックホールとその周りの降着円盤や超新星爆発等の高エネルギー現象
- サブ課題 D「太陽活動と惑星環境変動の解明」— 惑星の内部および表層環境の動態・太陽恒星活動とその惑星環境への影響

宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築



今年度は最終年度

- 具体的な中身はそれぞれの発表で、ということで。
- 昨年度は吉川さんのブラソフシミュレーションがゴードンベル賞ファイナリストになった。他にも数多くの成果がでている。
- この講演ではあとは富岳自体の現況とポスト富岳について少し

富岳の現状

HPCI計画推進委員会（第51回）会議資料 https://www.mext.go.jp/kaigisiryo/mext_00367.html

【資料2-3】富岳の運用改善に向けた取り組み <https://www.mext.go.jp/kaigisiryo/content/000173674.pdf>

を見ると問題点は書いてないが対応は書いてある。

- コンティニュアスベンチマーキングによる富岳性能の見える化=どんな性能なのかよくわからない
- コンパイラを含む言語環境の持続可能な開発体制の構築=あんまりちゃんと性能がでてない
- カスタマーエクスペリエンス（CX）の改善・高度化=とにかく色々使いにくい

性能がでない問題

- コンパイラの問題と言われることが多く、そういう面もないわけではないが、根本的な問題はプロセッサアーキテクチャ
- 命令レイテンシが長い (Xeon の 2 倍程度)、キャッシュレイテンシはもっと長い、キャッシュバンド幅が小さい、アーキテクチャレジスタが少ない、物理レジスタや命令ウィンドウも小さい、等のためパイプラインを埋めるのが非常に困難。
- MIMD、コヒーレントな階層共有キャッシュ、コア内ワイドSIMD、共有L2 キャッシュといったアーキテクチャと高い電力性能を共存させた結果。
- 次世代はこの延長では難しい。

ポスト富岳の方向？

- HPCI 計画推進委員会・次世代計算基盤に係るシステム検討ワーキンググループで議論されているはず。
- ワーキンググループは資料非公開なのでよくわからない。
- 今年度・来年度でフィージビリティスタディが行われる模様(まだ公募でてない)
- 富岳の経験をちゃんと反映させていくように色々努力するべき。

まとめ

- 富岳成果創出加速プログラムの計算宇宙惑星では、割と本当に「宇宙の統一的理解」を目標にする。
- 富岳の有効利用はかなり進んでいる (詳しくは他の発表で)
- 富岳自体は、わりと問題ある、というのが明らかになってきた。
- ポスト富岳ではその経験を反映させる必要がある。