

計算物質科学者、みらいを語る ～スーパーコンピュータ「京」が描く未来～

高度情報科学技術研究機構(RIST)
吉澤香奈子

Outline

- 自己紹介
- 簡単に専門(物理)について
- スーパーコンピューター「京」について
 - 「京」を紹介する動画
- 高度情報科学技術研究機構(RIST)の業務
- シミュレーションで出来ること
 - 「京」でやっていることの紹介動画
 - シミュレーションとは？
- 「京」およびスパコン普及活動
- 「京」およびスパコンの未来

自己紹介

略歴

- 1995年 三輪田学園高等学校卒業(46回卒)
- 1995年 上智大学理工学部物理学科入学
- 2004年 上智大学大学院理工学研究科物理学専攻
博士後期課程修了:理学博士(上智大学)
専門:物性物理(物質材料系)
- 2004年 東京大学物性研究所 研究機関研究員
- 2006年 上智大学理工学部 特別研究員
- 2011年 東京大学物性研究所 特任研究員
2012年9月28日スーパー・コンピュータ「京」共用開始
('京'の開発は、2006年度から)
- 2015年 9月より現職
高度情報科学技術研究機構(RIST) 神戸センター

簡単に専門(物理)について

物理とは？

- ある条件下で、ある物質(粒子)の状態(運動)を記述すること。
- 物理の基礎方程式(法則)
 - ニュートン方程式($ma = F$) : 主にマクロな現象
 - シュレーディンガー方程式 : 主にミクロな現象
 - ディラック方程式 : 素粒子など
 - アインシュタイン方程式(一般相対性理論) : 宇宙などなど
- 物理の研究で主にやること
 - ある方程式を解いて、ある物質(粒子)の状態を説明する。
 - 世の中のいろいろな現象から、ある法則(方程式)を導き出す。など

私の研究(物性物理)(1)

- 物質(固体)：
アボガドロ数($\sim 10^{23}$ [個/mol])は、物質 1 mol の中に含まれている構成要素の総数
- 多体問題
“More is different(多は異なり)” P. W. Anderson (アンダーソン)
- 密度汎関数理論(DFT)
W. Kohn (コーン)

物質(固体)の状態や構造を調べるシュミレーションによく用いられる手法

全エネルギー

$$E = \frac{T_s[n_\uparrow, n_\downarrow]}{\text{運動エネルギー}} + \int d^3r n(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) + U[n]$$

外部ポテンシャル

Hartree 静電エネルギー

交換相関汎関数

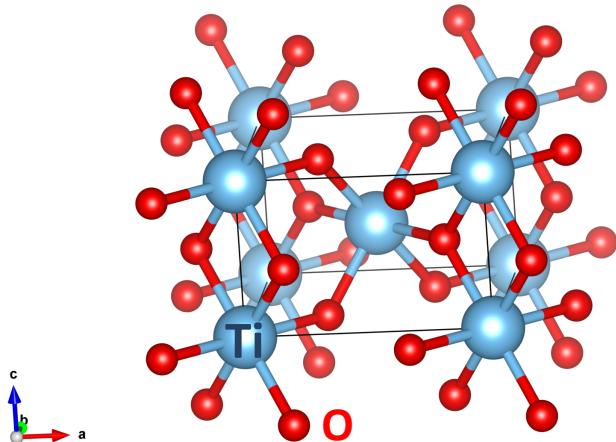
$$E_{\text{xc}}[n_\uparrow, n_\downarrow]$$

Unknown → 近似

計算手法開発：
良い関数を導く

私の研究(物性物理)(2)

- 計算結果

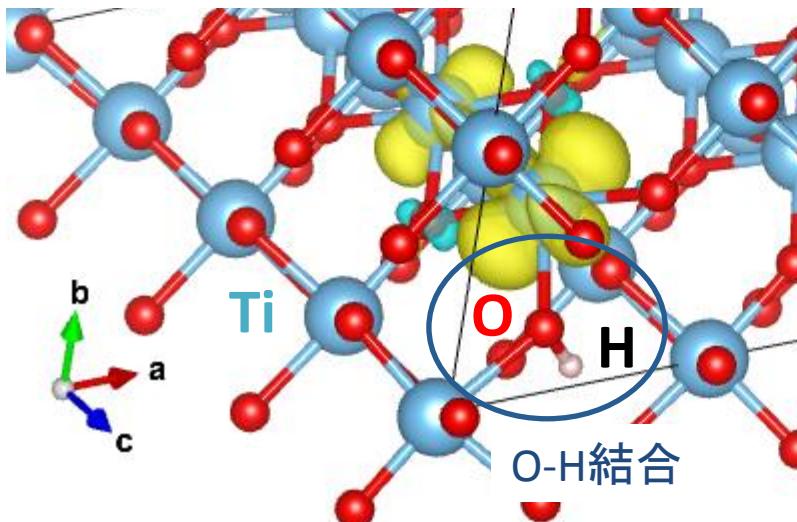


酸化チタン(TiO_2) : 光触媒物質として有名
[原子] チタン Ti , 酸素 O

構造

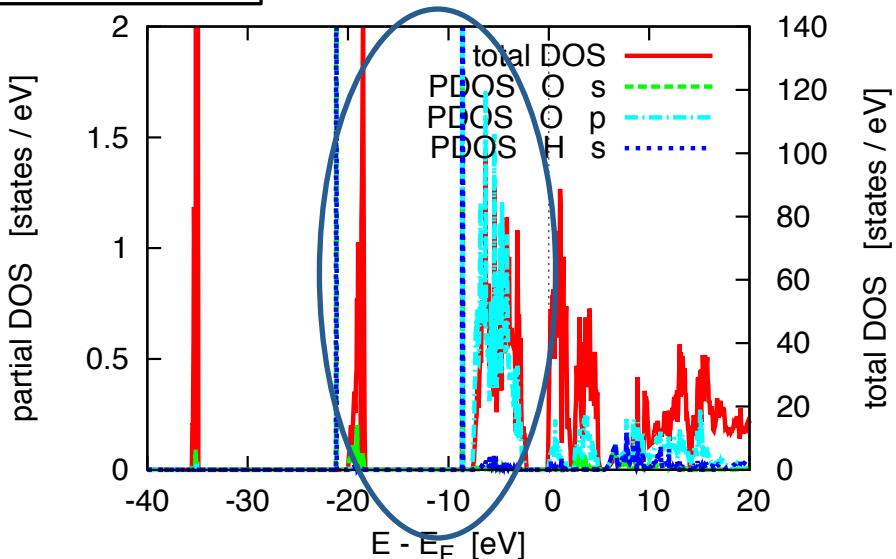


水素(H)を入れた
構造は?



電子状態

O-H結合



スーパーコンピューター「京」 について

スーパーコンピューター「京」



- 文部科学省の次世代スーパーコンピュータ計画の一環として、理化学研究所(理研)と富士通が共同開発した。
理研 計算科学研究機構(AICS)@神戸 によって、運営
- TOP500**(世界で最も高速なコンピュータシステムの上位500位までを定期的にランク付けし、評価するプロジェクト)
LINPACKと呼ばれる数値演算を行うソフトウェアライブラリを用いたベンチマークによって、ランク付けを行っている。
- 2011年6月および2011年11月に世界**1位**
 - 現在(2016年11月)、「京」は、世界**7位**(日本2位)
 - 世界1位は、中国の神威・太湖之光(しんい・たいこのひかり)
日本1位(世界6位)は、東大基盤センターのスパコン(Oakforest-PACS)
- 「京」は、浮動小数点数演算を**1秒あたり1京回**おこなう処理能力(**10ペタフロップス**)に由来する
- 「京」の次は、**ポスト「京」**

数の単位

- 「京」は、浮動小数点数演算を1秒あたり1京回おこなう処理能力(10ペタフロップス)に由来する
- 「京」の次は、**ポスト「京」**(2021年ごろから運用開始予定)

+	じゅう	10	
百	ひゃく	10^2	
千	せん	10^3	K (キロ)
万	まん	10^4	
百万		10^6	M (メガ)
億	おく	10^8	
十億		10^9	G (ギガ)
兆	ちょう	10^{12}	T (テラ)
千兆		10^{15}	P (ペタ)
京	けい	10^{16}	
百京		10^{18}	E (エクサ)

高度情報科学技術研究機構(RIST) の業務と利用支援

「京」の運用・利用体制

国(文部科学省)：特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に基づく
共用の促進に関する基本的な方針の策定

提言

実施計画の認可



理化学研究所(設置者・実施主体)
[計算科学研究機構(神戸)]

(法定業務)

- 「京」の開発
- 施設の建設・維持管理
- 超高速電子計算機の供用



「京」【共用施設】



実施計画・業務規程の認可

登録施設利用促進機関(登録機関)
[高度情報科学技術研究機構]

(法定業務)

- 利用者選定業務
- 利用支援業務
(情報の提供、利用相談 他
支援に必要な業務)

提言

理研、登録機関、コンソーシアム
三位一体の連携により
広範な分野での活用を促進

課題申請

戦略機関について
では、優先的に利
用枠を確保

公正な
課題選定、
情報提供、
研究相談、
技術指導等

HPCIコンソーシアム

計算資源提供機関やユーザーコミュニティ機関等
HPCIの整備・運用や、計算科学技術振興に
関わる意見を幅広く集約し提言

利用者のニーズ

戦略機関(社会が期待する画期的な成果創出のため、「京」を中心とするHPCIの重点的・戦略的な利用)

利用者(大学、独立行政法人、産業界等、基礎研究から産業利用まで幅広く利用)

HPCI資源提供機関と主な計算資源(H28年度)

RIST

HPCIとは、「京」を中心とした、多様なニーズに応える革新的な共用計算環境を実現するハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラのこと。

理化学研究所 計算科学研究機構
「京」82,944ノード(10.62PF)



九州大学
富士通 FX10 384ノード(91TF)
富士通 CX400 256ノード(88TF)

大阪大学
NEC SX-ACE 1024ノード(282TF)
大規模可視化対応PCクラスタ 62ノード
(CPU 25TF + GPU 60TF)

東京大学*1
富士通 FX10
744ノード(176TF)

*1 産業利用へのHPCI計算資源提供はありませんが、独自プログラムで産業利用が可能です。

統計数理研究所
データ同化スーパーコンピュータシステム
SGI UV2000 128ノード(49TF)

北海道大学
HITACHI SR16000/M1
166ノード(163TF)

東北大学
NEC SX-ACE 2560ノード(約707TF)
NEC LX 460Re-2 68ノード(約31TF)

筑波大学
Cray COMA(PACS-IX)
90ノード(約230Tflops)

東京工業大学
TSUBAME2.5 最大420ノード
(CPU64TF+GPU 1.56PF)

海洋研究開発機構(独自ルールで運用)
NEC SX-ACE 5120ノード(1.31PF)

名古屋大学
富士通 FX100 2880ノード程度(約3.2PF)
富士通 CX400 568ノード程度(約727TF)

京都大学
Cray XE6 通期32ノード(10TF), 集中128ノード(41TF)
Cray XC30 通期32ノード(33TF), 集中64ノード(66TF)
Cray XC30withMIC 通期256ノード(299TF)

最新の情報はHPCIポータル (<http://www.hpci-office>)をご参考ください。

HPCIポータル → 課題募集 → 現在受付中または受付開始予定の課題募集
→ 平成28年度の課題募集におけるハードウェア・ソフトウェア資源一覧

RISTの利用支援

問合せ/相談
回答/支援

高度情報科学技術研究機構(RIST)

ヘルプデスク:ワンストップサービス窓口

Tel:078-940-5795 E-mail:helpdesk@hpci-office.jp

(1)申請前相談

- 応募手続き、課題申請書の記載方法
- 計算機環境(ハードウェア、ソフトウェア)
- 産業利用相談
- 产学連携コーディネート



(2)利用相談

- システムの利用方法
- 他システムからの移行
- ライブラリ、ツール等の利用
- コンパイル・実行時の問題解決
- 性能情報の取得方法 etc...



(3)技術支援(高度化支援)

- 性能情報の採取・分析
- ボトルネック調査
- 通信特性分析
- 高速化、高並列化の支援
- 可視化支援



(4)講習会/セミナー等の開催

- 「京」利用者向け講習会(初/中/上級)
- 一般向けセミナー
- チューニング、MPI、OpenMP
- ワークショップ(OpenFOAM等)
- 戦略分野との共催講習会/セミナー



(5)情報提供・公開

- HPCIポータルの運営
- 資源提供機関
- 計算機情報
- 課題募集情報
- 募集説明会
- 課題選定結果
- 成果公開
- アプリケーションの動作確認情報
- 高速化ノウハウ
- 講習会情報
- 広報誌(京算百景)、パンフレット発行



HPCIシステム利用者

問合せ/相談
回答/支援

HPCI資源提供機関

連携協力



連携協力

Copyright 2017 RIST

シミュレーションで出来ること

理研AICSのホームページ



- 理化学研究所 計算科学研究機構 (AICS)

<http://www.aics.riken.jp/jp/>

A black arrow points to the right side of the '検索' (Search) button, indicating it should be clicked.

- ビデオギャラリー | AICS

<http://www.aics.riken.jp/jp/outreach/videogallery.html>

A black arrow points to the right side of the '検索' (Search) button, indicating it should be clicked.

シミュレーションとは？

- Simulation「模擬実験」(なかなか良い日本語がない？カタカナ語シミュレーションで定着？)
- コンピュータを用いたシミュレーション
対象(ターゲット)
 - 起こりづらい現象、実験しづらい(作りづらい)物質
 - コストがかかるもの
 - 実験だけでは現象が解明できないもの(原理の追求)
- シミュレーションの今後の可能性
例えば
 - 流体系: 数値風洞(Numerical Wind Tunnel)
 - 物質材料系: 数値フラスコへ向けて
新しい物質探査(新物質発見)
- 計算機の性能が上がれば、シミュレーションの可能性も広がる
→ 未来はひろがっている

「京」およびスパコン普及活動

「京」およびスパコンを広める

- 「京」およびスパコンを知ってもらう(一般の方向け)
 - シンポジウムの開催
 - 一般公開@神戸AICS 10月末ごろ
- 利用者を増やす(専門家向け)
 - 講習会、ワークショップの開催
 - 利用相談

イベントなどの開催にあたって、
いろいろな取り組みを行うようになった。
(単に研究だけしいた時と大きな違い)



いろいろな人とも出会う
例)吉本芸人のサイエンスコミュニケータ
「趣味(シュミ)レーションじゃなくて、シミュレーション」



伝えることの大切さ

見た目は学生、頭脳は教授その名は、黒ラブ教授!

科学とお笑いを結びつけた世界で唯一無二の芸人さんです。

女子中高生向け、 理科嫌いな人向けの

よしもと芸人

お笑い科学コンテンツ

国立科学博物館認定サイエンスコミュニケータ

「黒ラブ教授 ネタ」

で検索した方が早いかも
難しい科学ネタでお笑いやってたら
意外や意外
科学好きになっちゃたかも～とか
ファンレターくださるように





よしもと劇場でのライブ他

NHKサイエンスzero



「黒ラブ教授 ネタ」
検索した方が早いかも

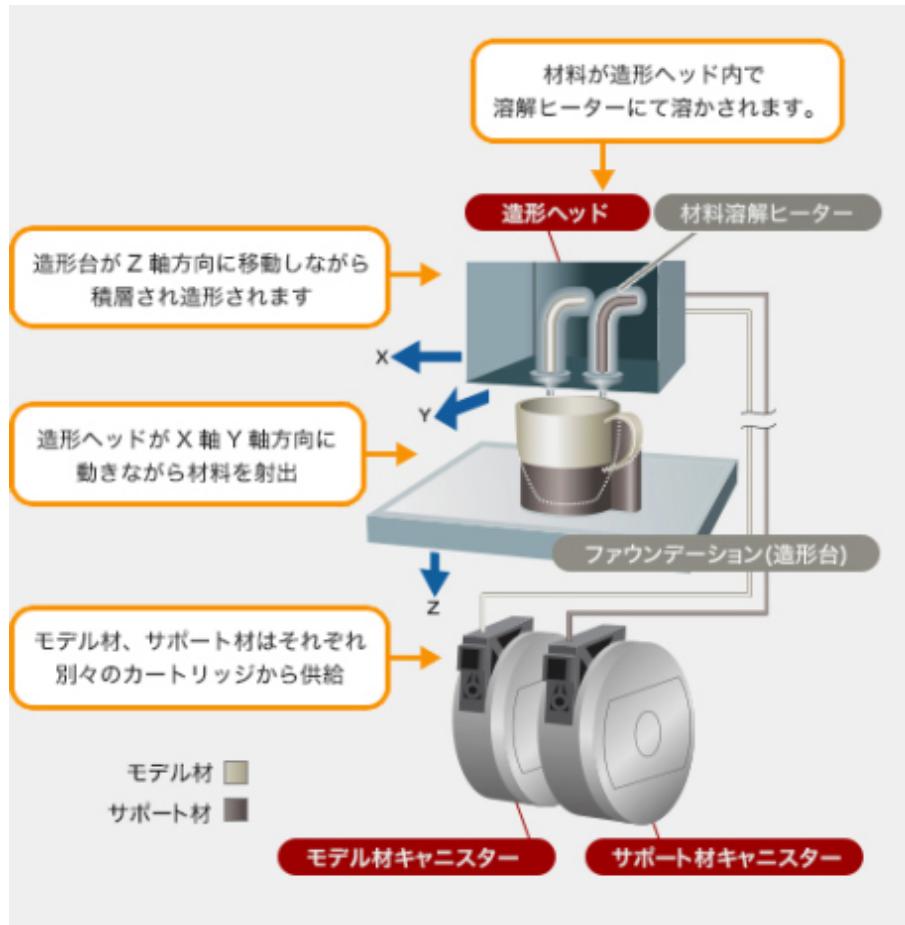
全国の大学(東大阪大など)や中学
高校、研究所(理研など)で、
単独ライブ！お笑いライブ。
まじめな講演、TV、レディオ
書籍などで活動。賞も取れヨ
(*'д`*)ワーア

ニュース解説



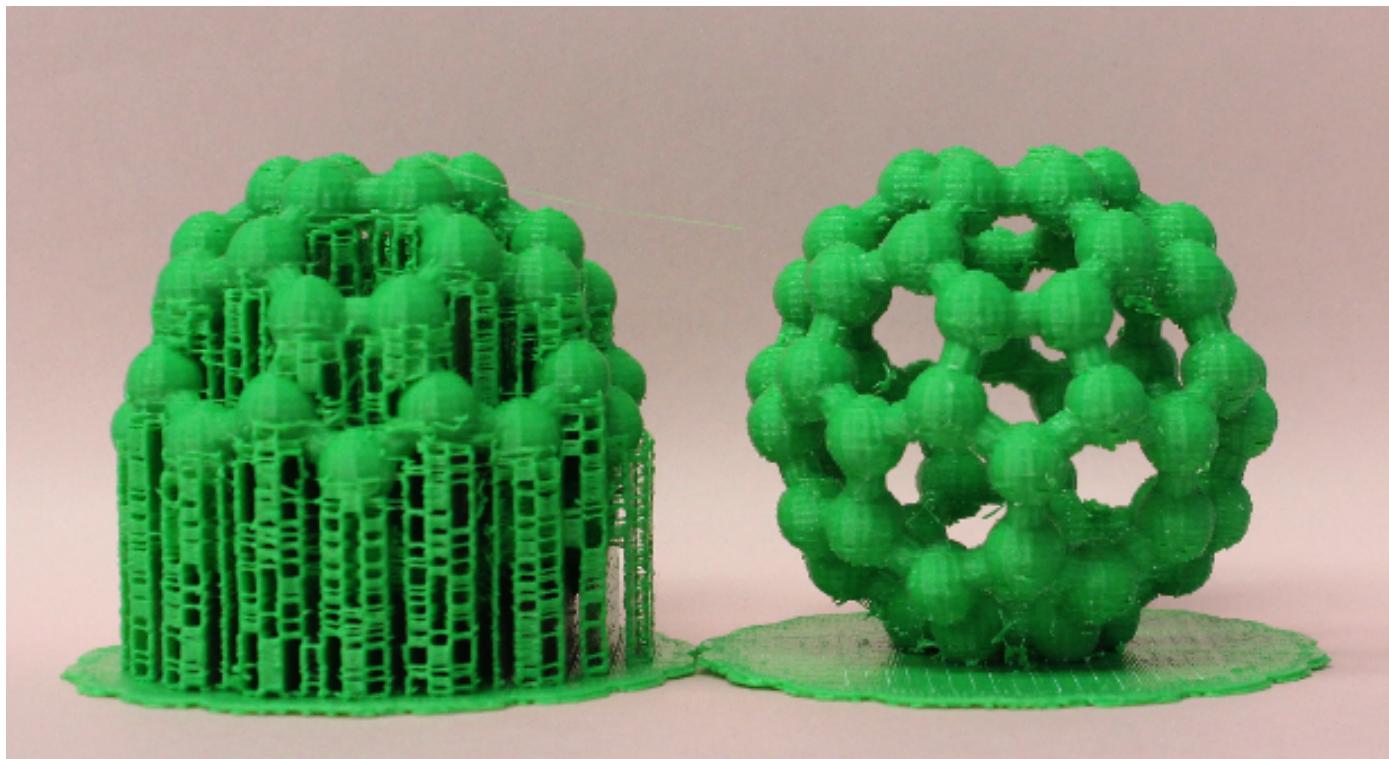
3Dプリンター

熱溶解積層(Fused Deposition Modeling; FDM)法



結晶構造の見える化

ボール&ステイックモデルでフラーレン(C_{60})の試作

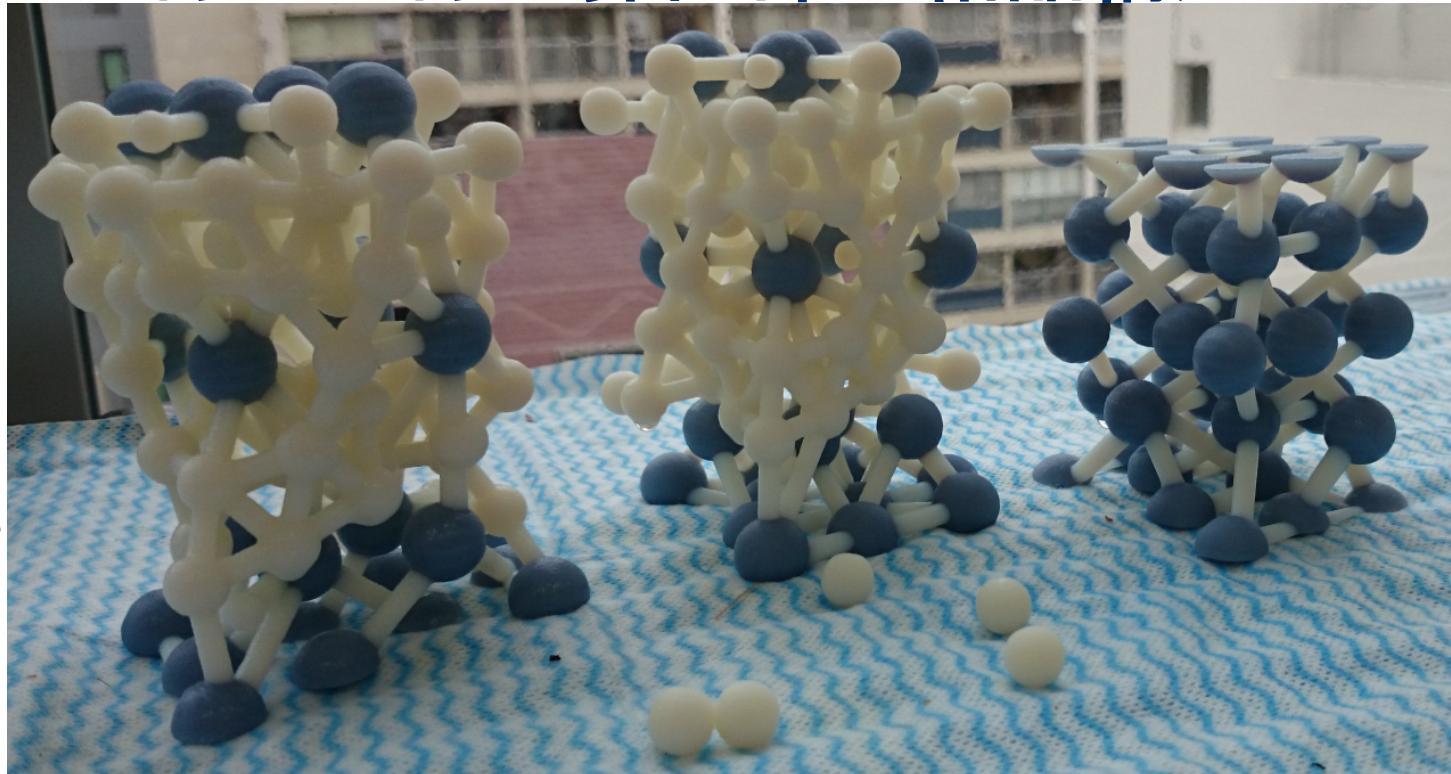
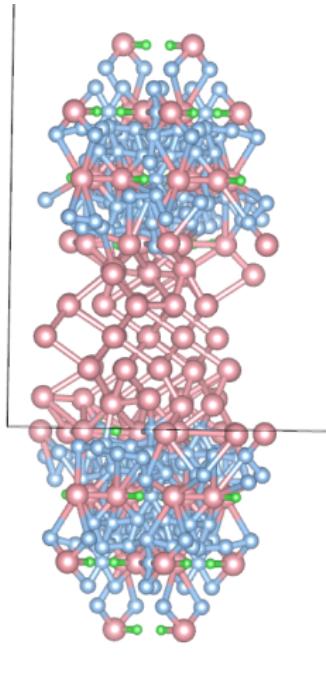


複雑構造の結晶モデル試作

RIST

- ◆サポート材が水に溶けるので除去が簡単
- ◆サポート材除去後の表面が平ら

Nd-Fe-B磁石の磁区界面部の結晶構造



青:Nd 白大:Fe 白小:B

シミュレーションを始めよう！



- ・ シミュレーションのアプリケーションの整備が整ってきた
アプリケーションを使いこなせれば、シミュレーションが出来る！
(式を導いたり、自分でコードを書く必要はない。)
→ 現象を理解できる
- ・ **なぜだろう？**と思ったこと、何かの現象に興味を持つこと、
を大切にしてほしい。
(難しいことは時間をかけければ理解できる、かも知れない。)
- ・ シミュレーションは、**間違う可能性**があるので、
必ず実験などの確認が必要

「京」およびスパコンの未来



- 製品開発、自然現象の解明などに利用シミレーションだけではなく、今後は人工知能(AI)や機械学習も→いろいろな事が出来る可能性
- まだまだ道半ば→もっとスパコンの性能を引き出すアプリケーション(ソフト)の開発など課題はある
- 新しいスパコン(ポスト「京」)が出来れば、可能性はさらに広がる→社会に役立つ成果の創造へ

期待してください