

計算科学ロードマップでの惑星科学

中本泰史(東工大)

- 「計算科学ロードマップ」
～大規模並列計算によるイノベーションの目指す
社会貢献・科学的成果～
- 「惑星科学の大規模計算」はどうすべきか？
意見交換しましょう

「計算科学ロードマップ」

～大規模並列計算によるイノベーションの目指す
社会貢献・科学的成果～

- ・次世代(「京」の次)大型計算機計画に向けての動き
- ・2020年ごろ, EFlops (10^{18} Flops) = 「京」の100倍の速さ
- ・どんなアプリがあるか? 検討

計算科学ロードマップ

～大規模並列計算による
イノベーションの目指す
社会貢献・科学的成果～

中間報告書

平成 25 年 9 月

将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究「アプリケーション分野」

目次

1. 序論	1
1.1. はじめに	1
1.2. 本文書の構成.....	2
2. 今後の HPC が貢献しうる社会的課題	3
2.1. 創薬・医療	3
2.2. 総合防災	10
2.3. エネルギー・環境問題.....	16
2.4. 社会経済予測.....	23
3. 分野連携による新しい科学の創出	28
3.1. 基礎科学の連携と統一理解.....	28
3.1.1. 基礎物理における連携.....	28
3.1.2. 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学.....	39
3.1.3. 生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の分野横断連携.....	46
3.2. ビッグデータの有効利用.....	60
3.2.1. 計算科学基盤技術の創出と高度化.....	60
3.2.2. ビッグデータの有効利用例①：衛星・観測データの有効利用	65

目次

1. 序論	1
1.1. はじめに	1
1.2. 本文書の構成.....	2
2. 今後の HPC が貢献しうる社会的課題	3
2.1. 創薬・医療	3
2.2. 総合防災	10
2.3. エネルギー・環境問題.....	16
2.4. 社会経済予測.....	23
3. 分野連携による新しい科学の創出	28
3.1. 基礎科学の連携と統一理解.....	28
3.1.1. 基礎物理における連携.....	28
3.1.2. 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学.....	39
3.1.3. 生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の分野横断連携.....	46
3.2. ビッグデータの有効利用.....	60
3.2.1. 計算科学基盤技術の創出と高度化.....	60
3.2.2. ビッグデータの有効利用例①：衛星・観測データの有効利用	65

3.3.1.	X線自由電子レーザー施設 SACLA 等の大型研究施設との連携	77
4.	各計算科学分野の社会的・科学的課題	82
4.1.	生命科学	82
4.2.	物質科学	115
4.3.	地球科学	146
4.3.1.	気象・気候科学.....	146
4.3.2.	固体地球科学.....	163
4.4.	ものづくり	178
4.4.1.	熱流体	178
4.4.2.	構造解析.....	188
4.4.3.	機械材料.....	194
4.4.4.	プラズマ・核融合.....	204
4.4.5.	電磁界解析.....	212
4.4.6.	可視化・データ処理.....	216
4.5.	基礎物理	224
4.5.1.	宇宙研究.....	224
4.5.2.	素粒子	246
4.5.3.	原子核物理.....	266
4.6.	社会科学	280

「計算科学ロードマップ」

- ・次世代(「京」の次)大型計算機計画に向けての動き
- ・2020年ごろ, EFlops (10^{18} Flops) = 「京」の100倍の速さ
- ・どんなアプリがあるか? 検討

「京」の戦略5分野に、「宇宙」「地球科学」は入っているが、
惑星科学はない

- ・「惑星科学はどう?」との問い合わせ
←「惑星科学も参加するべし!?!」

有志数人で「計算科学ロードマップ」執筆に参加

- ・問題 = 惑星科学コミュニティの意見を聞いていない

「計算科学ロードマップ」 惑星科学編

3. 分野連携による新しい科学の創出

3.1.2. 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学

(i) 課題概要

「此処は何処で、我々は何者なのか?」、古くからの人類共通の問いであるこの問題に迫ることが、本学問領域が担う知の探求の究極の目標である。惑星科学は、宇宙科学と地球科学の間であって、惑星をはじめとする宇宙空間のさまざまな天体の性質を明らかにし、星間物質から惑星が形成され生命を有する地球に至るまでの道を探り、そのような性質や進化の普遍性や特殊性を考察する。惑星科学の特色は、宇宙科学ならびに地球科学双方の知見や手法を活用、融合、発展させなければならないところにあり、両分野との連携は欠かせない。数値シミュレーション研究はその特色が最も際立って現れる研究領域にあたる。

近年の太陽系探査ならびに太陽系外惑星系観測の進展により、哲学的な色彩の濃い冒頭の問いも科学が対象とする具体的な研究課題として認知されるようになってきた。また、地球への小天体の衝突や太陽活動の変動が私たちの地球環境に大きな影響を与えることが社会に広く

地球惑星科学分野			
執筆者	林 祥介	神戸大学 大学院理学研究科 地球惑星科学専攻 ／惑星科学研究センター (CPS)	教授
	中本 泰史	東京工業大学 大学院理工学研究科 地球惑星科学専攻	准教授
執筆協力者	玄田 英典	東京工業大学 地球生命研究所	研究員
	小久保 英一郎	国立天文台 理論研究部	教授

宇宙物理研究分野			
執筆者	梅村 雅之	筑波大学計算科学研究センター	センター長
執筆協力者	石山 智明	筑波大学 計算科学研究センター	研究員
	岡本 崇	筑波大学 数理物質系	准教授
	草野 完也	名古屋大学 太陽地球環境研究所	教授
	柴田 大	京都大学 基礎物理学研究所	教授
	庄司 光男	筑波大学 数理物質系	助教
	関口 雄一郎	京都大学 基礎物理学研究所	特定研究員
	滝脇 知也	国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト	特任助教
	富阪 幸治	国立天文台 理論研究部	教授
	中本 泰史	東京工業大学 理工学研究科	准教授
	星野 真弘	東京大学 理学系研究科	教授
	長谷川 賢二	筑波大学 計算科学研究センター	研究員
	牧野 淳一郎	東京工業大学 理工学研究科	教授
	松元 亮治	千葉大学 理学研究科	教授
	松本 洋介	千葉大学 理学研究科	特任助教
	三上 隼人	千葉大学	

学術的課題:

「此処は何処で、我々は何者か？」

「他の惑星系も含め『惑星』というものを

包括的に理解すること(→地球を理解すること)」

- (1) 惑星系の形成と起源
- (2) 個々の惑星等の個性
- (3) 惑星の表層環境
- (4) 生命の起源

可能になる計算資源をどこに割り振るか？

1. 素過程の高精度計算
2. システム統合計算
3. アンサンブル計算

分野連携による新しい科学の創出

基礎科学の連携と
統一的な理解

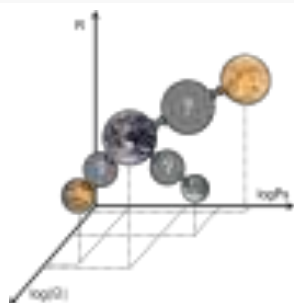
宇宙科学、地球科学の
連携による惑星科学

目標・目的、克服すべき学術的課題

- 「此処は何処で、我々は何者なのか?」、古くからの人類共通の問いに迫ること(生命の起源を知る)
- 他の惑星系を宇宙論的観点・地球科学的な観点を含めて包括的に理解すること(我々の住む地球を理解する)

従来の研究

- 個別の現象の理解(限定された時間や空間スケールでのシミュレーション)
- 観測等の制約による検証の困難性



惑星表層環境の多様性

分野連携の方策

- 惑星等の状態、起源および進化を理解するための数値シミュレーション
- 観測、探査、実験から得られたデータの理解のための数値シミュレーション



太陽系惑星

大規模計算で実現されること

- 広領域・長時間・複数現象を含んだシミュレーションによる複合的理解
- 数値シミュレーションによる理解・理論・モデルの妥当性検証



© 国立天文台
4次元デジタル宇宙プロジェクト

巨大衝突による地球・月形成シミュレーション

図 3.1-4 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学

具体的課題:

1. 惑星系の形成

小久保講演

2. 地球・惑星の形成

玄田講演

3. 惑星表層環境の形成と進化

高橋講演

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
惑星系形成	2.8	0.3	0.000003	0.0001	1	1,000	100	1,000,000	N-体シミュレーション	粒子数: 1億体 積分時間: 1億年 (ステップ数: 10G) 1ステップ1粒子あたりの演算量: 10K	(0.3GB/s)
地球・惑星の形成シミュレーション	12	1	0.00001	0.001	1	24	100	100,000	SPH 計算	粒子数: 10億体 積分時間: 数ヶ月 (ステップ数: 100M) 1ステップ1粒子あたりの演算量: 10K	(10GB/s)
惑星表層環境の形成と進化シミュレーション	6.9	25	0.00001	0.001	4	100	1,000	2,500,000	流体計算 + 輻射計算 (スペクトル法+差分法)	格子数: 3840x1920x192, 100 ケース x 10 惑星, 積分時間: 10年 (ステップ数: 30M), 1ステップ1格子あたりの演算量: 60K	

コメントの例:

分野ごとに固有の問題に関するコメント多数

- ・次世代人材育成が重要
- ・より使いやすいソフト・システムを

パブリックコメントの1例:

2013年7月に公開された「概要版」に対するパブリックコメント

29

ロードマップでは将来のハイパフォーマンスコンピューティングがもたらすと期待される成果、例えば、宇宙科学と地球科学の連携を可能とし新たな科学的ブレイクスルーをもたらす、などと述べられている。ロードマップ概略の記述を読む限りにおいて、このような成果が大規模計算機を開発するだけで実現するかのごとく人々に誤解されないようにする留意が足りないと感じる。大規模計算機の存在は必要だがそれだけで十分ではない。このことは以下に説明するように当該分野の専門家には当然の見解であるが、ロードマップの文章からはまったくわからない。当該分野が国民を騙すようなことになってはいけない。

広領域・長時間・複数現象を含んだシミュレーションを遂行するには、空間時間スケールの異なる素過程を含んだ結合モデルを構築しなければならない。そのようなモデルを安定に計算し、意味ある結果を得るためにはさまざまな計算技術の開発やチューニング

パブリックコメントから(意見No.29):

- ・大型計算機を開発するだけでサイエンスのブレークスルーが起るといわんばかりの書き方は, 誤解を招く。
- ・広領域・長時間・複数現象を含んだシミュレーション
 - ← 空間時間スケールの異なる素過程を含む結合モデルが必要
 - ← その開発は大変
- ・高精度シミュレーションで理論モデルの妥当性検証
 - ← 素過程モデルの検証(アンサンブル計算)
 - & 結合モデルの検証(アンサンブル計算)
 - = 膨大なアンサンブル計算が必要
- ・これらの遂行には, フラッグシップ機1台が速いだけではダメ。
- ・当然, これらを実施できる人材は不可欠だが, 現状のサポート体制は貧弱。
 - 人的資源確保, ソフトウェアへの投資も重要

計算科学ロードマップでの惑星科学

中本泰史(東工大)

- 「計算科学ロードマップ」
～大規模並列計算によるイノベーションの目指す
社会貢献・科学的成果～
- 「惑星科学の大規模計算」はどうすべきか？
意見交換しましょう