

ポスト「京」と宇宙シミュレーション

理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダー 牧野 淳一郎
筑波大学計算科学研究センター 主任研究員 永井 智哉

1. ポスト「京」の概要と開発状況

ポスト「京」は、現在開発中であり、2020年に設置、2021年頃に共用開始予定のスーパーコンピュータです。名前の通り、神戸のポートアイランドにある「京」の後継であり、設置場所も同じポートアイランドになります。

「京」は正式な運用開始は2012年9月ですが、2011年初めには大部分が組みあがっており、2011年6月、2011年11月の2回にわたって、世界のスパコンの速度ランキングであるTop500リストで1位となりました。ポスト「京」は、「京」完成からのほぼ10年後の完成となります。



写真1. 現在の「京」スーパーコンピュータ

「京」は、全部で88,128台の計算機を「6次元トラス」と呼ばれるネットワークでつないでいます。コンピュータネットワークというと、最近だと読者の皆さんの家庭にも、パソコンやスマホが多数あり、Wi-Fiや有線LANでつながっていると思います。このような、家庭やオフィスのLANでは、多数のコンピュータが「ハブ」や「スイッチ」といわれる、多数のポートをもつ通信専用の機械につながって、またそのハブやスイッチが相互につながって大きなシステムになっていきます。スパコンでも実はそのような構成のものもありますが、「京」やポスト「京」では、そうではなくてコンピュータ同士がスイッチを経由しないで直接つながる、言い換えるとスイッチにあたるものが各コンピュータ（以下「ノード」といいます）に内蔵される構成になっています。



写真2.
6次元メッシュトラス構造のインターコネクトモデル

ノードは、論理的には6次元の格子状（ $24 \times 18 \times 17 \times 2 \times 3 \times 2$ ）に並んでいて、各次元で「隣」のノードとつながっています。6次元で両側だと全部で12本の線がいますが、6のうち2次元は幅が2しかなく、隣との線は1本なので全部で10本の線となります。「トラス」というのは、格子だと端があるのですが、端同士をつないで輪にしたものです。そうすることで、「端」がなくなって一番遠くまでの距離が半分になります。

この、ネットワークの構成は、「京」とポスト「京」で変わりません。表1に比較を示してみました。ポスト「京」の演算性能は、

表1. 「京」とポスト「京」

	「京」コンピュータ	ポスト「京」
速度	11.3PF	>450PF
消費電力	~15MW	30~40MW
1ノードのコア数	8	48
コア内演算器数	4	16

公表されている情報に基づいて計算すると、400PF（ペタフロップス：1PFは1秒に1000兆回の四則演算）以上となります。つまり、「京」と比べると40倍以上と、文字通り桁違いの能力をもつこととなります。1ノードの演算コア数が8から48と6倍、演算器の数が4倍となったことで24倍となっています。なので、その他にノード数や動作クロックが違ってこの性能になる、ということがわかります。演算コアというのは、普通のパソコンやスマホにもはいつているプロセッサのことで、それぞれのコアは自分のプログラムを実行します。多数のノード上の多数のコアがお互いに必要なデータを交換しながら計算もすることで、1コアでは実現できない高い性能を実現するのが最近のスパコンであり、「京」、ポスト「京」ともに、同時代では最大規模のコア数・ノード数のマシンとなります。

歴史的には、スパコンは10年でほぼ100倍の性能向上を過去70年間にわたって続けてきており、その間にアーキテクチャはスカラー計算機、ベクトル計算機、共有メモリベクトル並列計算機、分散メモリスカラー並列計算機と変遷し、さらにその後は「スカラー並列」の1ノードがベクトル計算機にあたる複数演算器をもつコアやベクトル並列計算機にあたる複数の演算コアをもつ構成になっています。この進化を可能にしたのは半導体技術の進歩により、1チップに積層できるトランジスタの数がこの50年間指数関数的に増えてきたことですが、単純にトランジスタ数が増えたら性能が上がる、というわけではなく、計算機の構成方法（アーキテクチャ）を何度も大きく変えることで性能向上を実現してきています。

しかし、この指数関数的な進歩にもそろそろ限界がきています。これには3つの要因があります。一つは、単純に、原子の大きさ、というものがあるので微細加工には限界があることです。特に、トランジスタとして機能するためには、複雑な構造や特殊な材料、また特殊な加工方法が必要になり、製造技術の開発やプラントの建設にかかる費用も指数関数的に上がってきています。このため、2000年頃までは日本の多くの電機メーカーが自社工場で最先端の半導体を製造していましたが、2010年頃にすべて脱落し、現在は国内では最先端の半導体は製造されていません。世界でも、台湾のTSMC、韓国のSamsungを中心とするグループ、Intelの3社だけが先端技術の開発を続けています。もうひ

とつは、動作電圧低下の限界が見えてきていることです。トランジスタの大きさが半分になると、同じ面積に4倍のトランジスタがはいりますが、動作電圧と動作速度が同じならトランジスタの消費電力は半分にしかなりません。従って、全体としては消費電力が2倍になってしまいます。消費電力を下げるためには動作電圧を下げる必要がありますが、動作電圧を下げると動作周波数が大きく下がり、さらに現在のところ0.3V程度以下ではそもそも動作しません。最後の一つは、共有メモリベクトル並列計算機が分散メモリスカラー並列計算機になるのに相当するアーキテクチャの変化が30年近くおこっていないことです。これは、基本的には、「どうすればいいかわからない」からであり、このために2010年以降のスパコンの進歩はそれまでに比べてはっきりと遅くなっています。最大の問題は電力あたり性能であり、そのことは「京」に比べてポスト「京」の消費電力が2倍以上になっていることにも現れています。

ポスト「京」は、従来技術を極限まで改善する、という極めて日本的なアプローチを取りました。その結果が吉とでるか凶とでるか、というと、現時点では良い結果になりそうにみえます。というのは、国際的にはライバルといえる米国、中国ともに、上の3つの要因によりなかなか性能をあげることができていないからです。アメリカでは、2017年にIntelが開発を進めていたKnights Hillプロセッサがキャンセルになりました。これは、ポスト「京」と同じような、多数の演算器をもつ演算コアを多数集積するものですが、その前の世代のKnights Landingプロセッサが、性能があまり高くないのに使いにくいものであったために、非常に良くは売れなかった、というのが大きな要因でしょう。中国は、独自設計のSunway 26010プロセッサ40,960ノードからなるSunway TaihuLightで2016年から2年間にわたりTop500で1位を占めたものの、決して使いやすいマシンではなく、後継の方向が見えていない状況です。

このような世界の状況から、ポスト・ポスト「京」となると、アーキテクチャの変革は必須と思われませんが、ポスト「京」によってこれまでできなかった規模のシミュレーションが可能になり、新しい成果が生まれることは十分期待できる、といえるでしょう。



写真3. ポスト「京」の試作機

2. ポスト「京」で可能になる宇宙シミュレーション

ポスト「京」コンピュータによってどのような計算ができるようになり、どんな新しい成果が期待できるのでしょうか。現在、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発という枠組で、重点課題として9課題と萌芽的課題として4課題のアプリケーション開発が進んでいます。その中で宇宙分野の期待される成果について述べたいと思います。

宇宙は約138億年前に超高温・超高密度状態のビッグバンから始まりました。宇宙の膨張により温度が下がるにつれて、素粒子のクォークから陽子や中性子がつくられ、陽子と中性子から水素やヘリウムといった軽い元素の原子核ができました。一方、宇宙には正体不明のダークマターが存在し、陽子や原子核など普通の物質の数倍あることが分かってきました。まずダークマターが重力によって集まり、そこに普通の物質が引き寄せられて星や銀河が誕生しました。このような素粒子から宇宙までスケールをまたがる現象の精密な計算を、ポスト「京」で実現すること、さらに、その精密計算と大型実験・観測のデータを組み合わせることで宇宙の基本法則の手掛かりを見つけ、ダークマターの正体や金などの重い元素がどこでどのように合成されたのかなど、多くの謎が残されている宇宙誕生と進化の解明を目指すことを目的に「宇宙の基本法則と進化の解明」プロジェクト（重点課題9）が現在進められています。また、地球がどのように生まれ、どのようにして生命を育む惑星に進化したか、さらには現在及び将来の地球・太陽・太陽系の進化が人類社会にどのような影響を及ぼしうるかを解明するため、太陽のような星とそれが持つ惑星系の起源から形成された惑星の構造の進化、大気や表面の水圏の形成・進化、太陽活動の変化やその惑星表

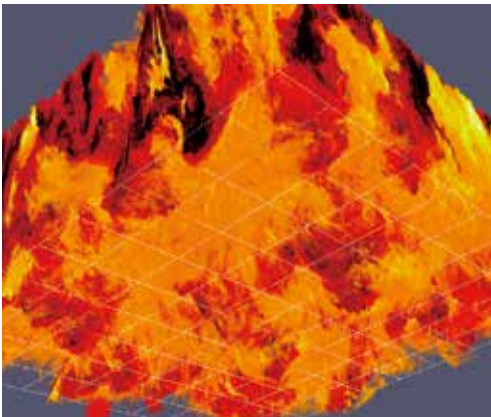


図1. 太陽放射層対流層境界の超精密シミュレーション

層への影響といった、実験では実現不可能な現象を大規模計算によるシミュレーションを使って研究し、国内外で進められている様々な観測・探査プロジェクトと連携して、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明を目指している「生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明」プロジェクト（萌芽的課題3）も進んでいます。

この2つのプロジェクトを中心にポスト「京」でシミュレーションするアプリケーション開発がさ

れており、ポスト「京」が稼働すると「京」ではできなかったような大規模な、または多くの条件を変えたシミュレーションと最新の観測結果の比較によって数多くの宇宙の解明が進みますが、全てを紹介はできないのでいくつかについて書きたいと思います。

1つめの例としては、太陽対流層の第一原理的シミュレーションがポスト「京」で可能となり、これまで不可能だった黒点が自発的に形成される過程や太陽フレアにおいて重要な役割を果たす磁気リコネクションという現象の内部構造と粒子加速を再現し、黒点、太陽活動の11年周期など長期変動の起源が明らかになると考えられます。

2つめには、ダークマターとニュートリノの両方を含む宇宙構造形成シミュレーション（6次元ボルツマンシミュレーション）が可能となり、このデータを含む宇宙論的シミュレーションデータベースとすばる望遠鏡のHSC大規模銀河サーベイ観測結果から得られる1250平方度にわたる宇宙のダークマター分布から高精度の統計解析を行うことで、ニュートリノ質量の絶対値の決定に寄与し、基本的宇宙論パラメータを推定することが可能になることが期待できます。

3つめには、鉄より重たい重元素がどこでできたかを明らかにする超新星爆発や中性子星連星合体過程の高精度シミュレーションを初期条件を変えて多数実行することが可能になり、日本で間もなく稼働予定のKAGRAを含めた重力波望遠鏡やすばる望遠鏡といっ

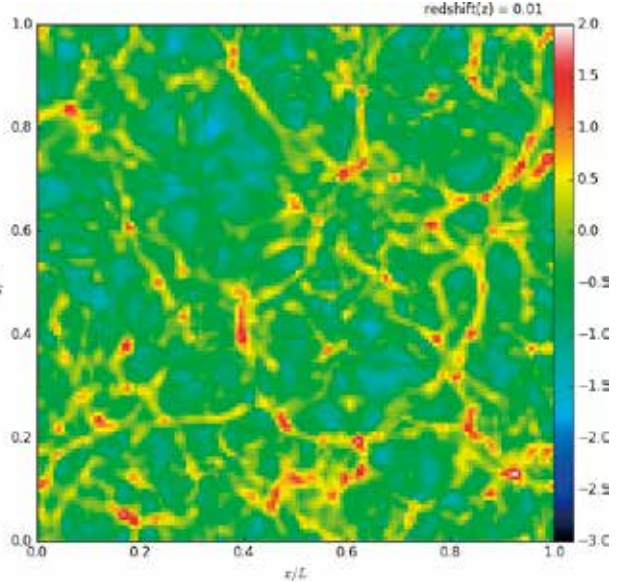


図2. ダークマターとニュートリノの両方を含む宇宙構造形成シミュレーション

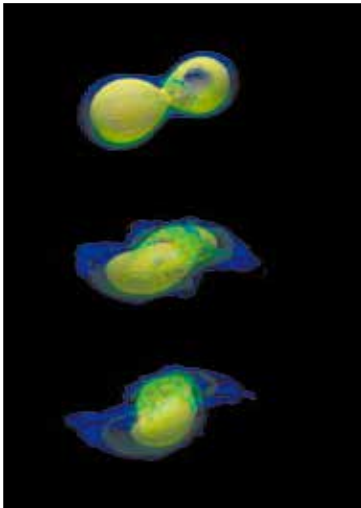


図3-1. 中性子星合体のシミュレーション

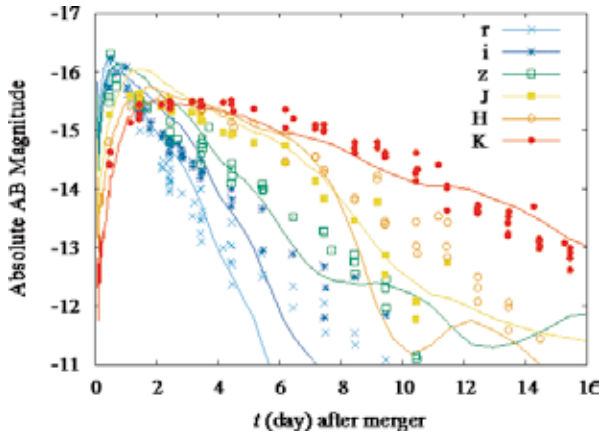


図3-2. 重力波源GW170817で放射された光学・赤外線(データ点)と数値相対論に基づいたモデルから計算された理論曲線が概ね合致していることを示した図

ダークマターが何か、宇宙はどのように構造形成し銀河や星が生まれてきたか、我々の身の回りにある元素が宇宙のどこでどのようにしてできたのか、我々の太陽系のような惑星系がどのようにして形成されたか、人類にとって重要な太陽の活動はどのようにして変動しているかなど、ポスト「京」によるシミュレーションと最先端の実験・観測が宇宙の成り立ちを明らかにしてくれ、新しい天体現象も発見するでしょう。今年いよいよポスト「京」の製造が始まり、その後決まるであろう名称、実際の最高演算性能とそこで生まれる科学成果の発表と2021年に向けご注目下さい。

た大型光赤外望遠鏡などの重力波・電磁波の同時観測との比較が積み重ねることで、金やプラチナ、レアアースやウランなどの重い元素がこれまで教科書などにも載っていた超新星爆発より中性子星の合体で作られた可能性が高いことが検証されると思われます。

以上の例を含め、宇宙で存在は知られているがまだ何かわかっていない

著者紹介 牧野 淳一郎(まきの じゅんいちろう)



1963年生まれ。神戸大学大学院理学研究科惑星学専攻教授。1990年東京大学大学院総合文化研究科(広域科学専攻)博士課程修了。2016年より現職。

主な研究分野は理論天文学、恒星系力学、並列計算機アーキテクチャ。

著者紹介 永井 智哉(ながい ともや)



1971年生まれ。筑波大学計算科学研究センター主任研究員。ポスト「京」重点課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」プロジェクトマネージャー。1999年東京大学大学院理学系研究科(天文学専攻)博士課程修了、博士(理学)。2011年より現職。元々の専門は理論天文学、現在は研究開発アドミニストレーション、サイエンスコミュニケーション。