

研究会開催報告： 計算惑星科学シンポジウム

林 祥介¹, 梅田 隆行², 梅村 雅之³, 小河 正基⁴, 亀山 真典⁵,
玄田 英典⁶, 小久保 英一郎⁷, 高橋 芳幸¹, 寺田 直樹⁸,
中本 泰史⁹, 西澤 誠也¹⁰, 牧野 淳一郎⁶

2012年に完成した「京」コンピュータの後継となる、エクサフロップス級計算機の開発計画が具体的になりつつある。文部科学省の「将来のHPCI^{*1}システムのあり方の調査研究」（2012年度、2013年度）^{*2}ならびに「今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」^{*3}等で調査・議論が重ねられ、「エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト（仮称）」が第116回総合科学技術会議（2013年12月17日）で評価を受けるに至った^{*4}。そこでは「様々な社会的・科学的課題の解決に資する演算性能1エクサフロップス（「京」の約100倍）レベルのスーパーコンピュータの開発・整備及びそれを活用するためのアプリケーションの開発を行い、平成32年（2020年）頃までに運用を開始する」とされている（図1左^{*5}）。対象とされる社会的・科学的課題や、それらを扱っていく上で解決されるべき諸問題とその見通しなどは、上記調査研究において「計算科学ロードマップ（概要、中間報告書）」（<http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/document.html>）としてまとめられており、今後、ターゲット課題の絞り込みを行った上で、開発実施主体である理化学研究所計算科学研究機構を中心に、アプリケーション設計開発と連携協調したシステム構成の検討が進め

られることとなった（図1右⁶）。

さて、このような状況下において惑星科学に携わる研究者はどう振舞うべきか（あるいは、振舞わざるべきか）、今後何らかの形で高性能計算機に関わっていくであろう惑星科学関連研究者・学生が情報に接し、意見表明・交換する場の必要を、遅ればせながらではあるが感じて企画されたのが「計算惑星科学シンポジウム」である。「計算科学ロードマップ」に纏わる情勢を概観し、エクサフロップス級計算機の開発の方向について情報の共有をはかるとともに、惑星科学研究における課題の具体化とそれに必要となる研究開発体制等について議論する場とすることが有志主催者（すなわち、「計算科学ロードマップ」での惑星科学分野の

1. HPCI=High Performance Computing Infrastructure. 以下の脚注で説明するように固有名詞でもある。
2. 文部科学省HPCI計画推進委員会（第9回）資料1-「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究の進め方について（案）」
http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/020/shiryo/attach/1319672.htm
3. 文部科学省「今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」
http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/ は、文部科学省の「HPCI推進委員会」（http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/020/、「京」コンピュータの建設に伴い文部科学省研究振興局長の私的諮問機関として2010年8月設置）の下に「京」以後を検討するべく設置。2012年4月から2013年11月現在までに23回の会合が行われている。固有名詞の「HPCI」あるいは「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ」とは「京」コンピュータを中核に、拠点大学基盤センター等のスーパーコンピュータを高速ネットワークで接続して連携運用を可能とすることによって、我が国における研究開発用高性能計算環境の提供を実現するシステムあるいは組織のことで、RIST（高度情報科学技術研究機構）により運用されている（<http://www.hpci-office.jp/>）。
4. 総合科学技術会議（第116回）資料1-2「総合科学技術会議が実施する国家的に重要な研究開発の評価『エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト（仮称）』の評価結果（案）」
<http://www8.cao.go.jp/cstp/siryo/haihu116/siryo1-2.pdf>

1. 神戸大学 理学研究科 地球惑星科学専攻・惑星科学研究センター
2. 名古屋大学 太陽地球環境研究所
3. 筑波大学 計算科学研究センター
4. 東京大学 総合文化研究科
5. 愛媛大学 地球深部ダイナミクス研究センター
6. 東京工業大学 地球生命研究所
7. 国立天文台 理論研究部
8. 東北大学 理学研究科 地球物理学専攻
9. 東京工業大学 理工学研究科 地球惑星科学専攻
10. 理化学研究所 計算科学研究機構 複合系気候科学研究チーム
comps-staff@cps-jp.org

エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト（仮称）【文部科学省】

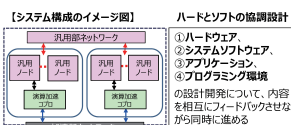
【概算要求時点での事業計画】＜実施期間＞平成26年度～平成31年度
＜予算額＞平成26年度概算要求額：約30億円、国費総額：約1200億円

事業概要

演算性能1エクサフロップス級のスーパーコンピュータの開発・整備とそれを活用するためのアプリケーションソフトウェアの開発を2020年頃までに行う。

開発目標

- ・「京」の100倍のアプリケーション実効性能
(ターゲットとするアプリケーションを実行した場合の性能)
- ・30~40MWの消費電力(「京」は12.7MW)



評價結果

総合評価
世界最高水準のスーパーコンピュータは我が国の競争力の源泉となる最先端の研究成果を創出する強力なツールであり、イノベーション創出の拠点を形成することが期待され、国として主体的に関与に取り組むべき。

主要な指摘事項
・ターゲットアプリケーションを設定し、これに基づきシステム構成や工程表などを早期に具体化。
・ハードウェア、ソフトウェアの協調設計を効率的に進めるための体制やオペレーション方法の具体化。

六

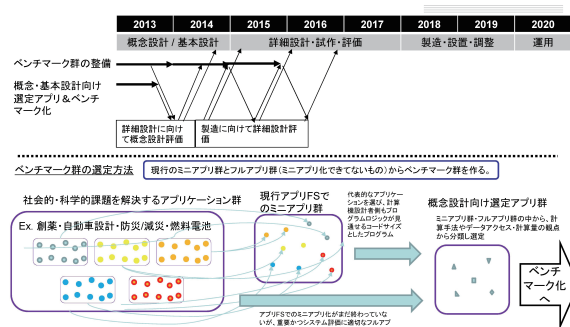


図1: (左)エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト⁶。(右)エクサスケール・スーパーコンピュータ開発スケジュールイメージ アプリケーション設計開発と連携協調するシステム設計開発⁷

執筆者ら)の目論見である。あるいは、より一般に、惑星科学における今後の計算科学の展開を展望し、必要とする計算資源をイメージし、その実現と運用に必要となる企画・研究・運営等の体制を当該分野関係者が主体的に検討・議論し描いていけるような雰囲気作り、流れ作りにつなげていければ、ということを期待した試みである。

本来なら、そのようないわゆる科学現場からのボトムアップな議論検討によって、計算環境や人的配置の実現がもたらされるのが望ましいことは言うまでもない。我が国が惑星探査を続ける限り、これを支援するシミュレーションやデータ解析の人材育成とソフトウェア開発能力の担保、その管理提供維持を担う情報基盤的組織の立ち上げは急務である。また、我が国が計算機開発を国策の一つに掲げる限り、これを必要とし応分の成果を提供する能力がある科学分野には計算資源の優先配分がなされること、従って、これに参入しうる〈以下同文〉もまた現実である。1990年代後半から始まる、地球シミュレータ「京」コンピュータ

と続く計算機開発と計算科学の振興の流れにおいては、指定された重点投資分野に対しソフトウェア開発や利用のための人材予算措置がなされてきた。「京」コンピュータ計画においてはHPCI戦略プログラム5分野^{*7}が設定され投資を受けるとともに、これら戦略分野で活動する人々が次世代HPCI計画の策定に大きく関わっている。惑星科学においては、地球科学あるいは天文学という経路で参入している人々を除けば、これまで残念ながらこの重点投資の流れからは外れてきており、人材育成やソフトウェア開発力の蓄積に遅れをとってきた懸念がある。今回の「計算科学ロードマップ」では、惑星科学研究が重点分野課題の候補の一つとして盛り込まれており、これまでの状況から離陸できる可能性を秘めているが、一方で、惑星科学分野においてHPCIに関わってきた人材は少なく、いわゆる“受注倒産”に至る危険性もはらんでいる。「計算惑星科学シンポジウム」の主催者企画意図は、そのような政策的な流れに巻き込まれない、という類の選択肢まで含めて、このような動きに関連しうる人々が科学的必要や戦術的・戦略的メリット・デメリットを議論し、意思疎通をはかることにある。

以上のような意図をもった活動のなんらかの継続性を期待して、「計算惑星科学シンポジウム」の主催者は有志個々人名ではなく、CPS(惑星科学研究センター)の協力によりにわかに立ち上げた任意グループ「計算惑星科学フォーラム」(<http://www.cps-jp.org/~comps/>)とした。企画意図に賛同いただいた、HPCI戦略プログラム分野5、日本惑星科学会、SGEPSS地球電磁気・地球惑星圏学会、国立天文台、CPS惑星科

5. 総合科学技術会議(第116回)資料1-1 総合科学技術会議が実施する国家的に重要な研究開発の評価「エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト(仮称)」の評価結果(案)

【概要】 1 http://www8.cao.go.jp/cstp/siryo/haihul16/sirvol-1_1.pdf より

6. 文部科学省「今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ(第22回)」

資料3 フラッグシップシステムに関する検討状況

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/shiryo/_icsFiles/afieldfile/2013/11/07/1341268_04.pdf より、
図中のアプリはアプリケーションの略

7. 文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築について」http://www.mext.go.jp/a_menu/kaihatu/jouhou/hpci/1307375.htm

学研究センターには共催をお願いした。かくして、「計算惑星科学シンポジウム」は2013年11月23日(土)、惑星科学会秋季講演会の機会を利用し、石垣島離島ターミナル会議室にて話題提供者10名を含む38名の登録参加者+若干の飛び入り参加者の参集を得て開催された。以下提供された各話題の簡単な要約を記載する。各話題の資料のうち公開が許されたものは「計算惑星科学シンポジウム」のホームページ(<http://www.cps-jp.org/~comps/pub/2013-11-23/>)にPDFで格納しているので参照されたい。

プログラム

- ・林 祥介(神戸大・理/CPS):趣旨説明
- ・中本泰史(東工大・理工学):「計算科学ロードマップ」での惑星科学
- ・牧野淳一郎(東工大・ELSI):今後の計算機と計算科学…なぜ我々は7年前の間違いを繰り返す、したのか
- ・小久保英一郎(国立天文台・理論):惑星系形成進化における計算科学と計算機
- ・玄田英典(東工大・ELSI):惑星形成研究における計算科学と計算機
- ・小河正基(東大・総合文化)・亀山真典(愛媛大・地球深部ダイナミクスセンター):惑星内部研究における計算科学と計算機
- (昼休)
- ・高橋芳幸(神戸大・理):惑星表層研究における計算科学と計算機
- ・梅田隆行(名大・STEL)・寺田直樹(東北大・理):惑星圏研究における計算科学と計算機, 6次元計算(エクサ)に向けた, 現状(京)を踏まえ
- (休憩)
- ・梅村雅之(筑波大・計算科学研究センター):宇宙生命計算科学連携拠点(CAB)について
- ・総合討論:次世代高性能計算機ってどうよ?
- (懇親会)

計算科学ロードマップでの惑星科学

中本は、「計算科学ロードマップ」の惑星科学分野の主要著者の一人であり、「計算科学ロードマップ」での惑星科学に関する扱いについて解説を行った。「計算科学ロードマップ」ではエクサスケール計算機が貢

献する社会的課題に重点が置かれているが、既存分野の連携により創出される新しい科学についても検討がなされた。惑星科学は、現在の「京」コンピュータの戦略5分野に含まれている「宇宙」および「地球科学」との連携強化により発展が期待される科学と位置づけられている。「計算科学ロードマップ」では、エクサスケール計算機により発展が期待できる惑星科学の課題として次の3つがあると述べている。すなわち、(1) 惑星系の形成、(2) 地球・惑星の形成、(3) 惑星表層環境の形成と進化、である。これらは執筆に携わった有志が選んだ茫漠としたものであり、十分な検討に基づくものとは言えない。今後、このような各課題に対する意見や、さらに、課題提案や次世代HPCI計画全般に対してなどの全般にわたっての意見を広くコミュニティから集めること、これらを「計算科学ロードマップ」最終版に反映していくことが必要である。

今後の計算機と計算科学…なぜ我々は7年前の間違いを繰り返す、したのか

牧野は、「京」の開発過程を振り返り、その問題点をまとめ、エクサスケール計算機を目指す方向について議論した。「京」では、できた計算機は要求仕様通りのものになっているが、半導体製造技術の進歩の方向から見ると、演算速度に対してメモリバンド幅や通信バンド幅に重点をかけすぎであり、しかも並列化効率を大きく左右する通信レイテンシについてはあまり重点がおかれていなかった。言い換えると、「独自RISCプロセッサによる大規模スカラー並列」という90年代に世界の主流であった方向を極限まで進めたものである。エクサスケール計算機ではアプリケーションの多様な要求に対して、その少なくとも一部については「現在ないし過去の主流」ではなく、半導体技術の発展方向からくるべきアーキテクチャで応える、という方向で進めようとしている。具体的には、「汎用部」+「加速部」で、加速部ではメモリ容量はある程度犠牲にして、メモリバンド幅と通信レイテンシを改善することで小規模な計算でも高い並列効率をあげることを目標にしようとしている。つまり、超大規模計算だけのためのスパコンではなく、やりたい計算を速く、を目指す。

惑星系形成進化における計算科学と計算機

小久保は、惑星系形成進化の問題における計算科学的展開をN体シミュレーションの具体例を用いて述べた。太陽系とは様相の異なる系外惑星系が多数発見されている現在、太陽系も含めた多様な惑星系の起源と進化を一般的に理解することは惑星科学ならびに天文学の最重要課題の一つである。現在の惑星系形成の標準シナリオでは、固体惑星やガス惑星の固体核は微惑星とよばれる小天体の衝突合体によって形成される。この過程で、微惑星は互いの重力散乱によって軌道を進化させながら、衝突合体／破壊によって質量分布を進化させる。この進化は重力多体問題として近似することができる。例えば、太陽系の微惑星数は1000億個程度と見積もられ、惑星集積の時間スケールは10億年になる。この問題の難しさは、系が衝突系であるため高精度計算が必要なこと、そして惑星集積の時間スケールが長いこと長期計算が必要なことである。現在の最大規模の多体シミュレーションは、重力多体問題専用計算機GRAPEを用いたもので10万体を10万年である。次世代計算機では惑星系の構造形成を理解するために1億体1億年規模の多体シミュレーションを実現したいが、そのためにはガスとの相互作用などの物理素過程の理解と高効率な並列化計算法の開発が必須である。

惑星形成研究における計算科学と計算機

玄田は、惑星形成の問題における計算科学的展開を、主に天体衝突に注目して述べた。惑星形成において、天体衝突は必然かつ頻繁におこる重要なプロセスである。例えば、微惑星形成時のダストの合体成長、原始惑星形成時の微惑星同士の衝突、地球型惑星形成時の原始惑星同士の巨大天体衝突などが挙げられる。惑星形成を理解するためには、詳細な衝突プロセスの検討が必須である。最近玄田らが行った微惑星同士の数値シミュレーションによると、衝突破壊が起こる条件が、数値計算の解像度に強く依存し、従来よりもかなり容易に壊れることがわかった。計算結果が収束するためには約1億粒子の解像度が必要であり、微惑星から原始惑星が形成されるまでのプロセスをカバーするためには様々な衝突条件(1000通り以上)での数値計算が必要である。また、巨大天体衝突は、地球型惑星の多

くの特徴に影響を与えたと考えられており、これまで多くの数値シミュレーションが行われてきたが、その解像度はそれほど高くはない。巨大天体衝突によるコアとマンツルの混合や、大気・海との相互作用など、地球化学的に重要な事柄を検討するためには、従来よりも3桁以上解像度を挙げる必要がある。

惑星内部研究における計算科学と計算機

小河・亀山は、惑星内部研究における計算科学的展開を、主に地球型惑星のマンツル対流に着目して解説した。マンツル対流シミュレーションが対象とする科学的課題の1つとして、地球型惑星内部の熱・化学状態とその進化過程の解明を挙げるができる。この自己無撞着な取り扱いには、固体マンツル物質の(部分)融解やこれに伴う物質分化過程を含んだ火成活動のモデル化が決定的に重要である。しかしながら、こうした火成活動とマンツル対流とを結合させた系のシミュレーションでは、時間刻みの制約や両者のフィードバックに伴う計算不安定が存在することもあり、これまでは主に2次元モデルによって基本的な性質を解明することに留まっており、3次元あるいは球殻ジオメトリを用いたモデリングの実現が強く望まれている。マンツル対流シミュレーションの技術的な課題は、その流れ場を各時間ステップでいかに高速かつ高精度で解くかに集約されている。そもそもマンツル対流とは、「岩石が固体状態のままゆっくりと流れる」という非常に特殊な流れであり、その流れ場は力学的定常状態を記述する悪条件な大規模連立一次方程式を解くことで定められる。連立一次方程式を数値的に解く作業は、頻繁な通信を伴うなど、計算の大規模並列化には本質的に不向きであるという困難がある。このような現状を受けて亀山らは近年、多重格子法と独自の緩和計算アルゴリズムを用いた3次元シミュレーションプログラムを開発した。この方法には、大規模並列計算に適用した場合でも性能の劣化がさほど深刻ではないという利点がある。これに加えて特に低レイテンシ・高速なPE間通信の可能なハードウェアを利用することができれば、火成活動・マンツル対流結合系の3次元シミュレーションの実現に向けた強力なプラットフォームの構築が可能となるであろう。

惑星表層研究における計算科学と計算機

高橋は、惑星大気を例に惑星表層シミュレーションモデルでの技術的問題を解説した。惑星の大気循環構造は、ハドレー循環のような惑星規模の運動構造から、局所的な熱対流や波動・乱流のような惑星よりも非常に小さなスケールの運動構造まで様々なスケールの運動の相互作用の結果として決定される。また、それらの循環による熱輸送と物質輸送は、大気中の物質分布や雲の分布を定め、それらの分布は翻って放射伝達による惑星大気全体のエネルギー収支と平均的な気候状態を定め、輸送構造を規定する。このような惑星大気の循環構造や気候の表現と理解に向けた数値計算において、今後の開発される大型計算機に期待される計算課題は、1) 惑星サイズに比べて小さな循環・擾乱を陽に表現する高解像度計算、2) 時定数の長い厚い大気や大気進化を直接的に扱うことのできる長時間計算、3) 様々な物理過程を考慮した計算、4) 多数のアンサンブル計算、であるだろう。数値モデルの信頼性を高め、太陽系内惑星および太陽系外惑星の循環構造や気候の研究の大きな進展につながるためには、これらの問題が有機的に解決できるような計算環境と人材育成が必要である。

惑星圏研究における計算科学と計算機

梅田・寺田は、「6次元計算(エクサ)に向けた、現状(京)を踏まえ」というサブタイトルで、エクサスケールコンピューティングに向けた惑星圏シミュレーションの課題を外観した。それらは、(1) MHD(磁気流体力学)近似の限界を超える超高解像度での惑星圏グローバルMHDシミュレーション、(2) ブラソフコードや全粒子コードを用いた6次元惑星圏グローバルシミュレーション、(3) 惑星放射線帯の粒子・流体混成シミュレーションなどである。(1)のMHDシミュレーションでは、従来の計算は惑星圏の大局的構造の再現に注力していたが、今後は大局的構造の再現に加えて、境界層乱流や、ホール項などの非MHD効果を含む、メソスケールの境界層過程の解像が可能となる。これにより、太陽風-惑星圏相互作用のメソ-マクロシミュレーションの実現が期待される。(2)(3)のブラソフコードや粒子コードにおいては、実空間(3次元)に加えて速度空間(3次元)も取り扱うため、さらに大規模な

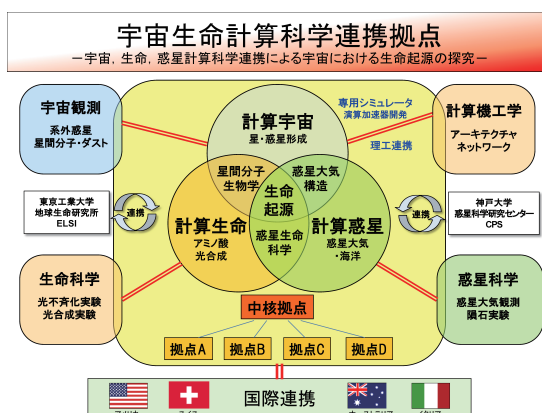


図2: 宇宙生命計算科学連携拠点(CAB, Computational Astro-Biology)のイメージ(梅村による)。

計算資源を必要とする。近年の計算機能力の発達によって、太陽風相互作用の全体とマイクロ過程を同時に記述する、5次元のマイクロ-マクロシミュレーションが行えるようになりつつあるが、今後は弱磁化天体周辺のプラズマ環境ならびに表層環境への影響の理解などを目標として、6次元のマイクロ-マクロシミュレーションを実現していく。惑星圏シミュレーションは、MHDコード、粒子コード、ブラソフコードなどの多様なコードから成るが、コードによって必要とする計算機が異なる。例えばMHDコードは高メモリバンド幅を必要とし、粒子コードは大きな共有メモリを必要とする。

宇宙生命計算科学連携拠点(CAB)

梅村は宇宙生命計算科学連携拠点(CAB)についてその概要を述べた(図2, http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/CCS/research/research_promotion/comp-astrobio)。この10数年、系外惑星観測、星間分子観測、アストロバイオロジーの様々な取り組みにより、宇宙における生命起源探究の機運は急速に高まってきているが、宇宙分野と生命分野が密に連携して、計算科学により探究する拠点はまだない。本拠点は、宇宙分野、生命分野、惑星分野の協働なくしては探究できない宇宙生命起源に関わるキープロセスを探究し、宇宙生命計算科学の確立を目指すものである。本計画では、連携の中核拠点を置き、共同研究推進体制を作る。本拠点が取り組む研究課題は、星間分子生物学、惑星生命科学、星・惑星形成の3つを柱とし、これらを宇宙・

生命・惑星計算科学の連携の下で大規模シミュレーションによって探究する。具体的な課題は次のとおりである。(1)惑星形成：ダスト形成，ガス・ダスト系力学，微惑星形成，原始惑星形成，惑星大気・海洋形成，(2)星間分子生物学：星間分子化学，アミノ酸生成過程，アミノ酸ホモキラリティ(円偏光波による不斉化)，(3)惑星生命科学：惑星大気科学，惑星分子化学，バイオマーカー(光合成，レッドエッジ)。現在，22研究機関54名(天文・宇宙分野10名，生命・物質分野22名，惑星科学分野16名，計算機工学分野 6名)で活動中である^{*8}。

総合討論「次世代高性能計算機ってどうよ？」は，予想通り(?)時間が押して，あまりゆったりとした議論ができなかったのが残念ではあった。当然一回の会で，今後エクサスケール計算機にむけての惑星科学研究における課題の具体化とそれに必要となる研究開発体制等について議論することは困難であるわけだが，エクサスケール計算機計画は進行中であり，今後も同様な機会を設けていく必要は減じていない。今後，惑星計算科学フォーラムは，上記CAB等の諸組織・諸活動との連携をとりつつ，HPCIの展開だけでなく，惑星探査や系外惑星観測に付随するべき計算情報インフラから個々の研究現場での諸問題に至るまで，広い意味での惑星科学に関する様々なシーンでの計算科学的，技術的，政治行政的問題を論じ，交流していく場として活動を続けていくつもりである。幅広い関係者の参加あるいは運営協力をお願いしたい^{*9}。

謝 辞

国立天文台水沢石垣島天文台の宮地氏と東工大の坪内さんには会場の手配，設営，懇親会の準備等で大変お世話になりました。ありがとうございます。おかげさまで懇親会では素晴らしい夕日を拝むことができました。懇親会でのさまざまな情報交換・交流活動を促進するのに大きな貢献であったと思います。

8. 宇宙生命計算科学連携拠点(CAB)問い合わせ先：筑波大学 計算科学研究センター 梅村雅之 umemura@ccs.tsukuba.ac.jp

9. 計算惑星科学フォーラム 問い合わせ先 e-mail: comps-staff@cps-jp.org