

次世代スーパーコンピューティング
シンポジウム 2008

スーパーコンピューティングの国家戦略

平成20年9月16日

倉持 隆雄

文部科学省
大臣官房審議官（研究振興局担当）
スーパーコンピュータ整備推進本部長

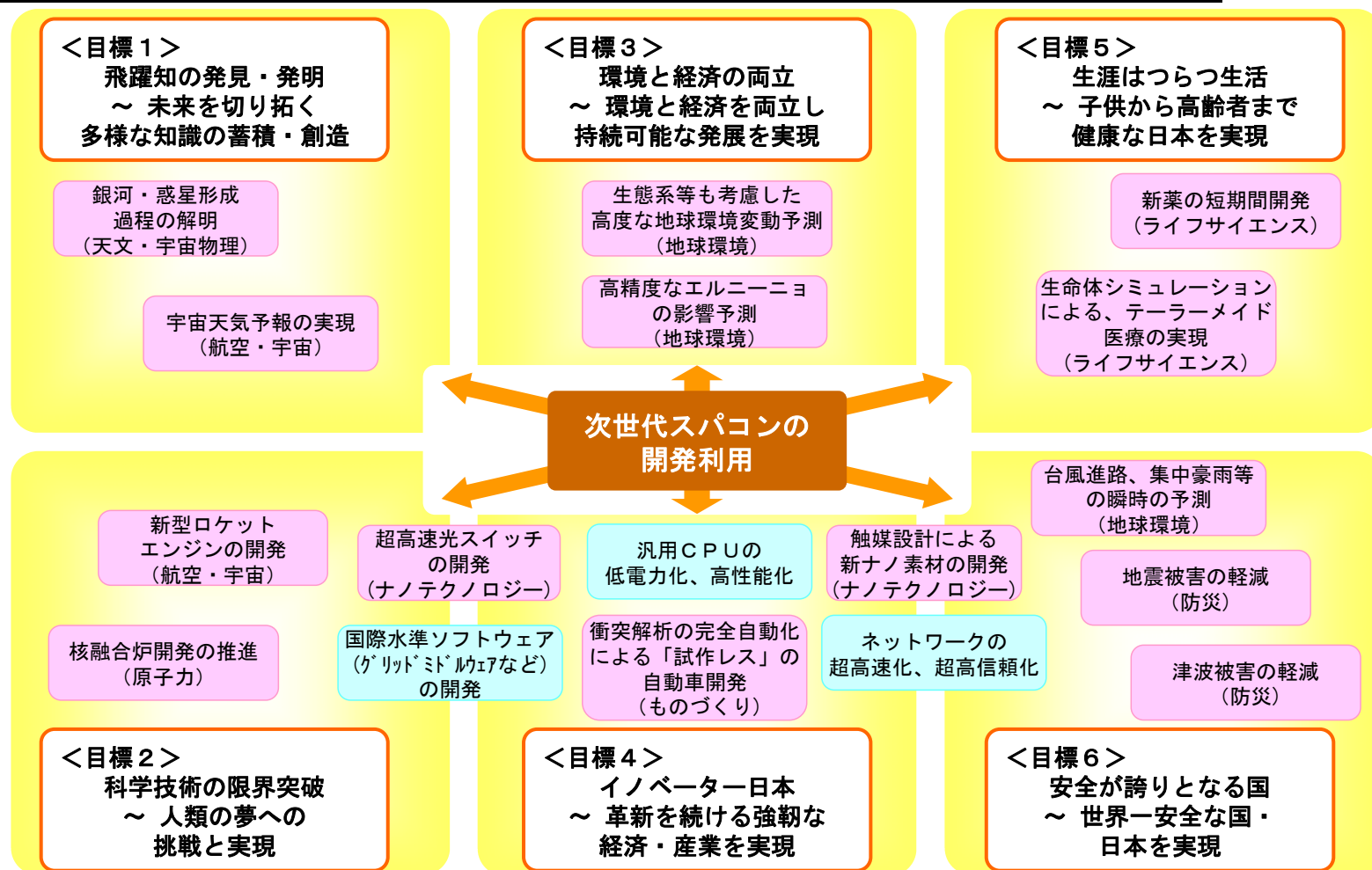
1. プロジェクトの背景

2. プロジェクトの概要

3. さらなる利活用の促進

1. 次世代スーパーコンピュータの開発による 我が国の社会の広範な分野への貢献

(1)「第3期科学技術基本計画」における6つの政策目標実現への貢献



(2) 我が国の「科学技術創造立国」としての国際的評価の確立

スパコンは科学技術創造立国実現のために極めて重要なツール

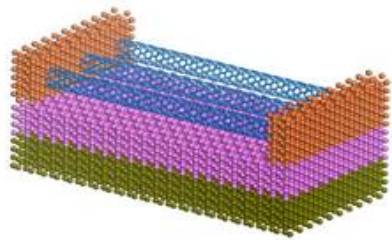
➡ **世界最高性能スパコンの開発・利用により、「科学技術創造立国」としての国際的評価を確立**

2. 次世代スーパーコンピュータで初めて可能になる応用分野例

ナノテクノロジー

新しい半導体材料の開発

10万原子



デバイス全体

原子一つ一つをシミュレーションすることにより、試行錯誤で行っていた材料開発が画期的に進歩する。

現状

10万原子の計算時間
800年



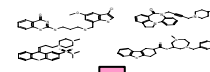
次世代スパコン

10万原子の計算時間
2ヶ月

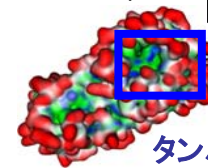
ライフサイエンス

新薬の開発

様々な薬剤候補物質



新薬設計



タンパク質の
活性部位

高精度な新薬候補物質の絞込み、最適化により、新薬の開発期間を短縮し、新薬開発の国際競争力の強化に資する。

現状

最適化に要する計算時間
150年



次世代スパコン

最適化に要する計算時間
6ヶ月

ものづくり

自動車の衝突の解析



人手で数か月かかるモデル作成等が1~2時間で自動化でき、安全性の向上や産業競争力強化に繋がる。

現状

人手メッシュ作成
数ヶ月



次世代スパコン

コンピュータ自動メッシュ作成
1~2時間

原子力

原子力施設の耐震解析



原子力施設の全容シミュレーションによる、プラントの各種設計や危険予知に関する総合的な解析・評価が可能になる。

現状

原子力施設の全体解析
5年半

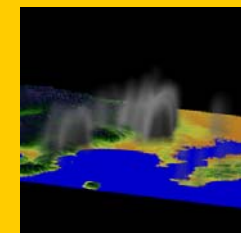


次世代スパコン

原子力施設の全体解析
2週間

地球環境

台風の進路や集中豪雨の予測



1Km四方以下でのシミュレーションにより、集中豪雨や台風進路の精度の高い予測が可能になる。

現状

シミュレーションスケール
3.5km



次世代スパコン

シミュレーションスケール
400m

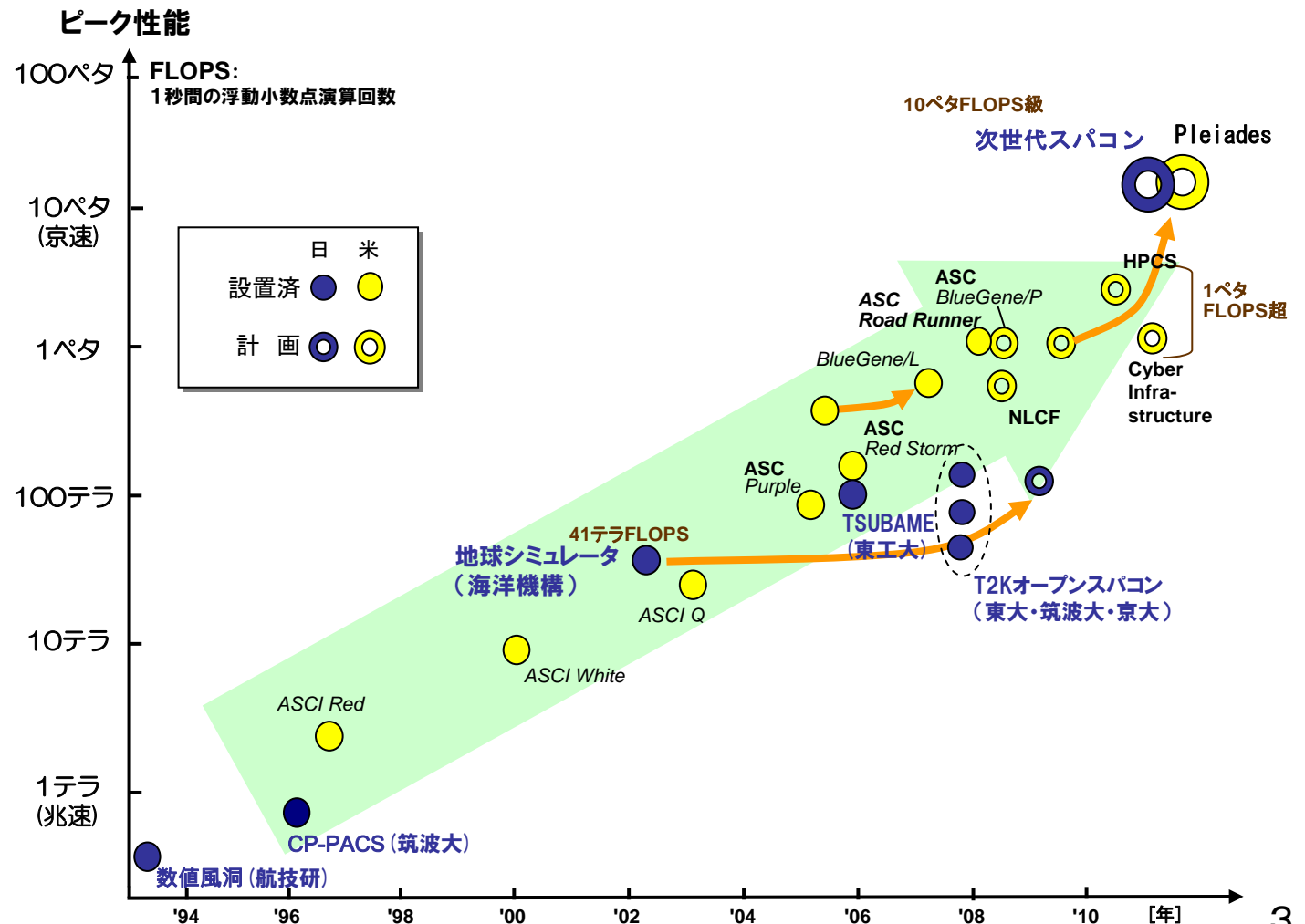
3. 日米のスパコン開発競争と米国の戦略

米国は、軍事利用を中心に産業、科学技術・学術研究での利用のため、複数の大規模プロジェクトを並行して推進。

日本は、地球シミュレータ計画(平成9('97)~14('02)年)の後、平成16('04)年11月以降、米国の後塵を拝していることから、次世代スーパーコンピュータプロジェクトで巻き返しを図る。

- エネルギー省(DOE)**
- ASC計画(旧ASCI計画)-
ターゲットを絞って世界最速を目指す(BlueGene)
 - NLCF※1計画-
ライフサイエンスや核融合分野といった幅広い分野での利用を目指す
- 国防省(DOD)**
- HPCS※2計画-
既存技術の延長線上にない新世代スパコンの開発を目指す
- 米国科学財団(NSF)の活動**
- Cyber Infrastructure計画-
2011年に1ペタFLOPS超を目指す
- 米国航空宇宙局(NASA)**
- Pleiades計画-
2009年までに1ペタFLOPS、2012年までに10ペタFLOPSを目指す

※1 NLCF: National Leadership Computing Facility
 ※2 HPCS: High Productivity Computing System



1. プロジェクトの背景

2. プロジェクトの概要

3. さらなる利活用の促進

1. 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト

1. 目的 世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータの開発・整備及び利用技術の開発・普及

2. 概要

理論、実験と並び、現代の科学技術の方法として確固たる地位を築きつつある計算科学技術をさらに発展させるため、長期的な国家戦略を持って取り組むべき重要技術（国家基幹技術）である「次世代スーパーコンピュータ」を平成22年度の稼働（平成24年の完成）を目指して開発する。

今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるべく、

(1) 世界最先端・最高性能の「次世代スーパーコンピュータ（注）」の開発・整備

(注) 10ペタFLOPS級

(1ペタFLOPS: 1秒間に1千兆回の計算)

(2) 次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するためのソフトウェアの開発・普及

(3) 上記(1)を中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点(COE)の形成を文部科学省のイニシアティブにより、開発主体(理化学研究所)を中心に産学官の密接な連携の下、一体的に推進する。さらに、施設の利用促進のため、戦略的な利用の先行的調査等を推進する。

3. 体制

(1) 開発主体である独立行政法人理化学研究所を中心とした産学連携体制を構築。

(2) 特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律を整備し(平成18年7月施行)、産学官の研究者等に幅広く開かれた共用施設として位置付け。

2. 開発スケジュール

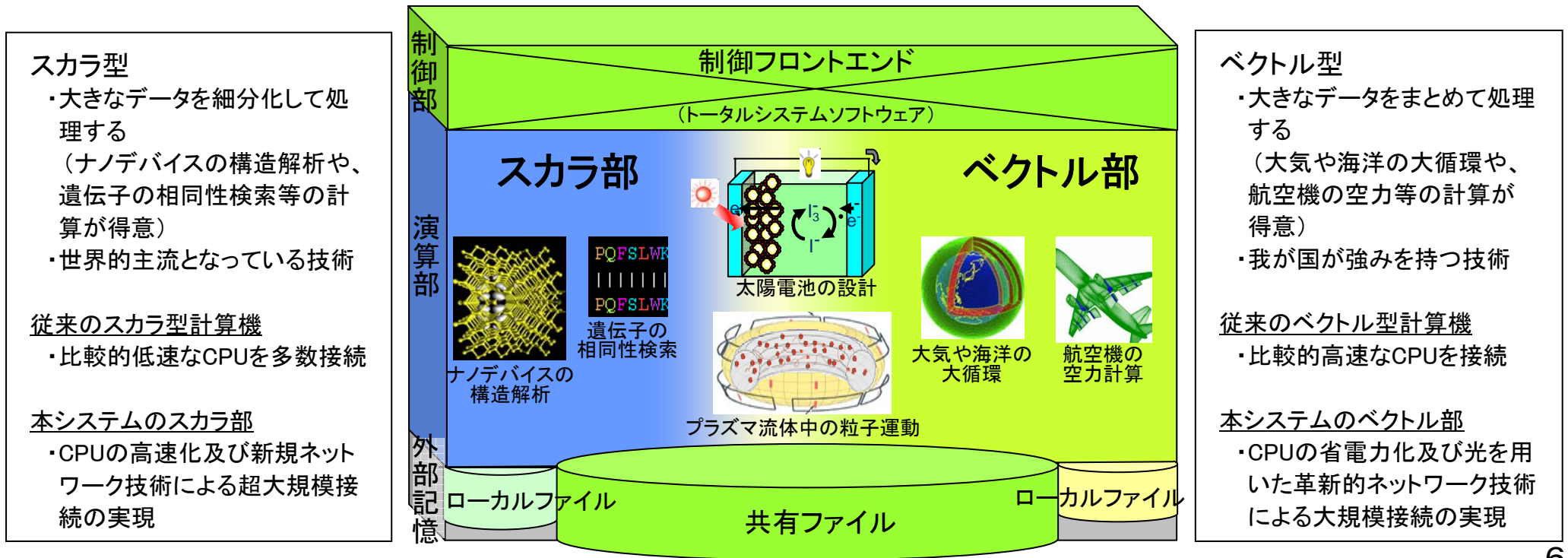
		平成18年度 (2006)	平成19年度 (2007)	平成20年度 (2008)	平成21年度 (2009)	平成22年度 (2010)	平成23年度 (2011)	平成24年度 (2012)
システム	演算部 (スカラ部、ベクトル部)	概念設計		詳細設計		試作・評価	製造・据付調整	
	制御フロントエンド (トータルシステム ソフトウェア)		基本設計	詳細設計	製作・評価		性能チューニング・高度化	
	共有ファイル		基本設計	詳細設計	製造・据付調整			
施設	計算機棟		設計	建設				
	研究棟		設計	建設				
ソフトウェア （アプリケーション ソフトウェア）	次世代ナノ統合 シミュレーション	開発・製作・評価					実証	
	次世代生命体統合 シミュレーション	開発・製作・評価					実証	

3. システムの基本的な構成

[システムの特徴]

スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システム

- ・異なる2つの演算部の特性を活かし、あらゆるシミュレーションに対応可能な高い汎用性
- ・計算能力に関する高い拡張性
- ・大学や研究機関向けの高性能な計算機への展開性
- ・スカラ及びベクトルの両技術の確保による、我が国の技術力の強化と、国際競争力の向上



4. 施設整備の進捗

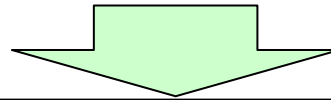
- 計算機棟は、平成20年3月に建設を開始し、現在基礎工事を実施中。
平成22年5月頃完工予定。
- 研究棟は、現在、設計を実施中。平成21年1月頃より建設を開始し、
平成22年5月頃完工予定。



※理化学研究所提供資料

5. グランドチャレンジの目指すもの

- **ペタスケール・コンピューティング**での目標たるにふさわしいアプリケーションについて検討
- 科学技術や産業を牽引する力、学際的な波及効果や意義に着目
- 計算機に対する要求性能が極めて高いものを選定



物質・材料(ナノテクノロジーなど)

- ナノ触媒、燃料電池などの触媒設計、超高速光スイッチなどの分子デバイス設計などを実現
- 近い将来、エレクトロニクス、エネルギー分野などにおけるものづくりに貢献

ライフサイエンス

- 遺伝子から全身の血流まで人体を丸ごと解析
- 将来的な課題として、テーラーメイド医療や創薬などを実現し、医学の進展に寄与

- 他の広汎な分野のアプリケーションにおいても利用可能なノウハウを提供
- 国際競争力を支える新産業創造などの政策目標の実現のために不可欠な分野

6. ナノテクノロジー分野の研究開発

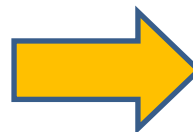
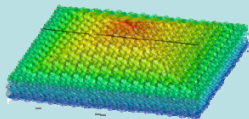
— 豊かな未来社会に貢献するナノ分野グランドチャレンジ —

●次世代ナノ情報機能・材料 高速、高機能、省エネルギー電子デバイスの開発へ

☆次世代スパコン☆

複合的ナノ電子デバイスシミュレーション

ナノ電子デバイス全体(10万原子系)の計算が
2ヶ月程度で可能。
(実効性能1ペタフロップス)



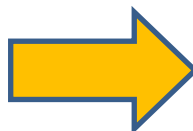
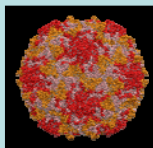
電子デバイスの高速応答・高機能、
省エネルギー、環境負荷の低減を可能に。
新たなデバイス創製に寄与する。

●次世代ナノ生体物質 感染症の克服に向けて

☆次世代スパコン☆

ウイルス全原子シミュレーション

ウイルスと抗ウイルス剤の結合による不活性化、
抗体との特異な相互作用の解析を実現。
1マイクロ秒の原子の動きをシミュレーションする:3ヶ月
(実効性能:1ペタフロップス)



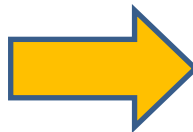
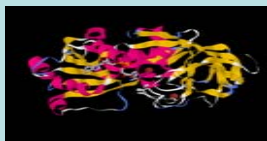
未克服のウイルスに対する予防法と
治療法の開発、将来的には創薬の
効率化に寄与

●次世代エネルギー セルロースからバイオマスエタノール生成へ

☆次世代スパコン☆

酵素反応のまるごと解析

従来の数千〜数万倍の計算量。
(従来型スパコンでは不可能)
1度のエネルギー計算が数秒で可能。
全体でも1日〜十数日で計算出来る!



高効率の触媒・酵素の設計が可能に。

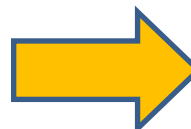
7. ライフサイエンス分野の研究開発

— 生命現象の統合的な理解 ヘルスサイエンスへの貢献 —

● 分子スケール

☆次世代スパコン☆

量子化学計算、分子動力学計算、粗視化モデル計算手法を連携した、タンパク質の機能発現の全過程をシミュレーション

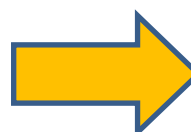
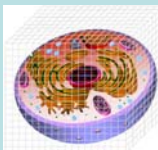


他の分子・細胞機能と共同的に生起する現象の理解を可能に

● 細胞スケール

☆次世代スパコン☆

イメージング研究との協力、実験研究の実証に基づく肝細胞の時空間シミュレーション、複数細胞(肝小葉)モデルの開発

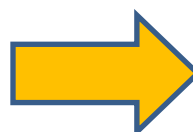


細胞間の物質輸送を考慮した複数細胞のシミュレーション、細胞の生理機能を積み上げた組織シミュレーションの確立

● 臓器全身スケール

☆次世代スパコン☆

連続体力学による臓器・循環器系を統一した全身血流モデルに、細胞レベルの血小板生理の機能を含めた血流シミュレータの開発

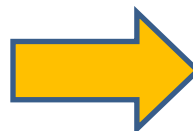
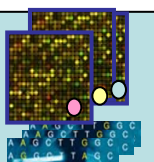


心筋の拍動、姿勢の変化による血管形状の変化、細胞レベルの生理を統合した血栓症シミュレーションの実現

● データ解析融合

☆次世代スパコン☆

ヒト全遺伝子規模のネットワーク解析、超大規模タンパク質相互作用推定、大規模遺伝子多型解析を実現する。




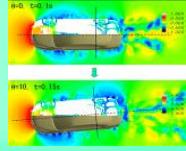
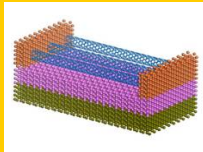
遺伝情報の網羅的解析に基づく個人差を考慮した投薬量、最適投与プロセスなどの開発や創薬ターゲットの探索法の解決に貢献




1. プロジェクトの背景

2. プロジェクトの概要

3. さらなる利活用の促進

1. シミュレーションへの取り組み

研究機関	アルゴリズムやモデル化等の研究	
CREST	超高速・大容量計算機環境における様々な分野のシミュレーション技術の開発 例) マルチスケール・マルチフィジクス シミュレーション技術の革新と実用化基盤	
革新的シミュレーション	実用的シミュレーションソフトウェアの開発 例) FrontFlow 等	
グランドチャレンジアプリケーション	次世代スーパーコンピュータ向けソフトウェアの開発 例) ライフサイエンス・ナノテクノロジー	
⋮		

- ハードウェア等の開発及び利用
 - ・次世代スーパーコンピュータ、T2K、グリッド技術 
 - ・共用法
 - ・共用イノベーション
- 要素技術開発 
- 高度化支援
- 普及、情報発信
- 人材育成 

社会的課題の解決



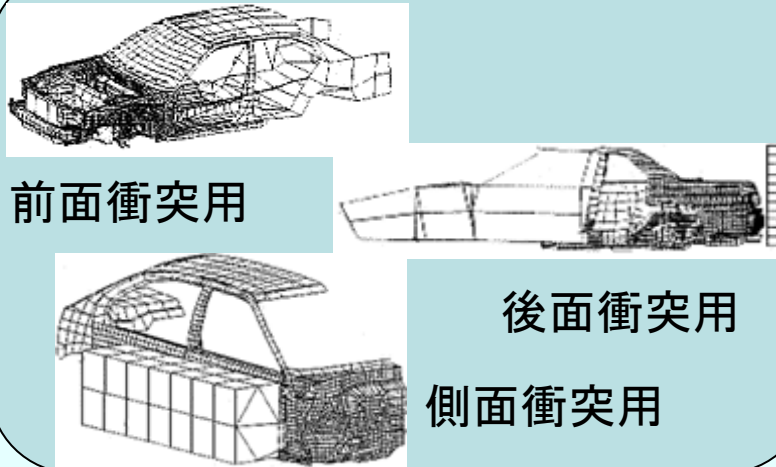
2. 次世代スパコンの活用により期待される成果例(1)

ものづくり分野

自動車衝突の解析

現状

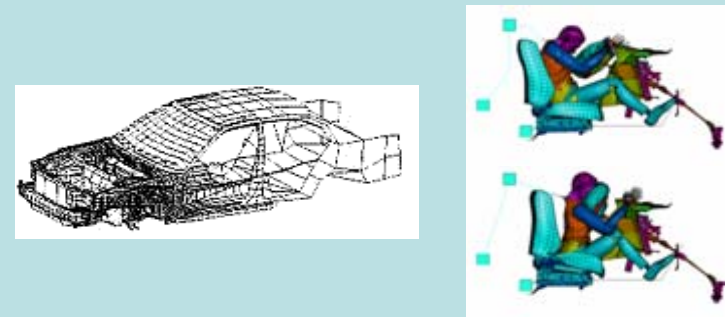
個別衝突モデル



人手モデル作成で**数ヶ月**。計算時間が約10時間（1テラFLOPS）

今後

統合衝突モデル



コンピュータの自動モデル生成で**約20分**、計算時間が**約100分**（1ペタFLOPS）

期待される具体的成果

従来、**人手で数ヶ月**かかっていたモデル作成が、自動車衝突解析自動化で**解析を含めて約1~2時間**で終わることで、自動車開発での革命を起こす。それによって、安全で高品質な自動車を高い確率で生み出すことができる。また、製造における環境への負荷を大きく低減できる。

3. 次世代スパコンの活用により期待される成果例(2)

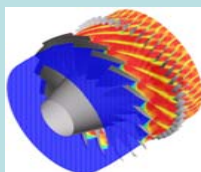
ものづくり分野

ジェットエンジンやガスタービンのシミュレーション

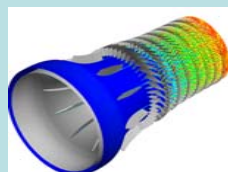
次世代スーパーコンピュータの活用により、ジェットエンジンやガスタービン全体のシミュレーションによる空力、伝熱、燃焼、構造の解析が可能となる。これにより、開発期間、コスト等の大幅な削減が期待できる。

各要素ごとの解析

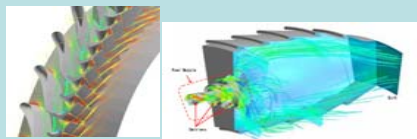
- 約10ヶ月/エンジン全体
- 各要素試験の一部代替が可能



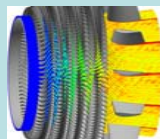
ファン



高圧圧縮機

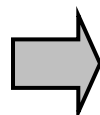


燃焼器



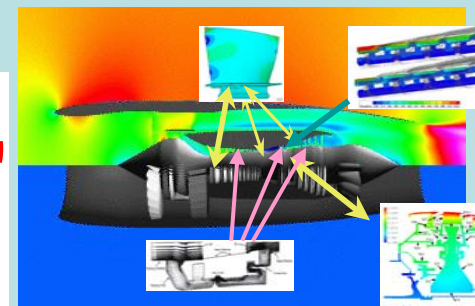
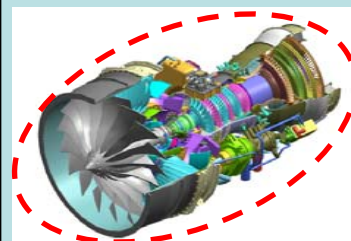
低圧タービン

現状



エンジン全体の解析

- 約1ヶ月/エンジン全体
- エンジン試験の一部代替が可能となる



エンジン全体の空力-構造-伝熱連成解析
エンジン全体の非定常解析

次世代スーパーコンピュータ

期待される成果

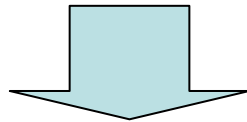
- ①開発期間を2/3に短縮
従来と比べて2/3の期間で開発が可能となる(従来10年に対して7年弱)
- ②開発コストの半減
1台当りの開発費が、従来は1500億円~2000億円として、750億円~1000億円へ削減
- ③開発リスクの極少化
従来は3回程度の設計変更が必要、ほぼゼロにすることが可能

4. 次世代スパコンの活用により期待される成果例(3)

地球環境分野

全球雲解像大気大循環モデルの台風・集中豪雨の予測への活用

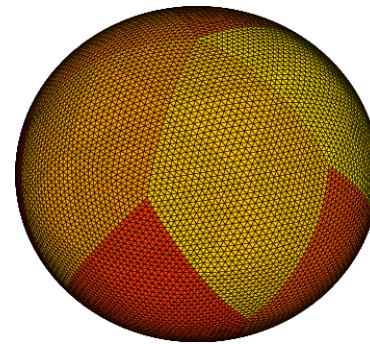
全球を対象とした気象シミュレーション



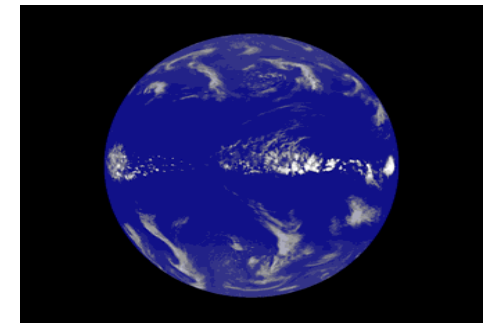
次世代スパコン

従来の3.5kmスケールが、400mスケールでシミュレーションが可能になる。

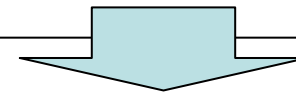
現在のモデル



正20面体格子モデル



3.5kmメッシュ全球雲解像モデルによる水惑星実験の雲画像



400mスケールが可能に

期待される具体的成果

- より精度の高い気候予測が可能になる。
- 気候変動に伴う台風や集中豪雨など極端現象の予測情報を提供できる。

5. 次世代IT基盤構築のための研究開発

ー イノベーション創出の基盤となるシミュレーションソフトウェアの研究開発(H20年度～) ー

【概要】

我が国のシミュレーションソフトウェアの開発・活用環境の抜本的強化を図り、ものづくり分野を中心とした産業イノベーションの創出やシミュレーション研究の飛躍的發展を図るため、以下の研究開発を実施する。

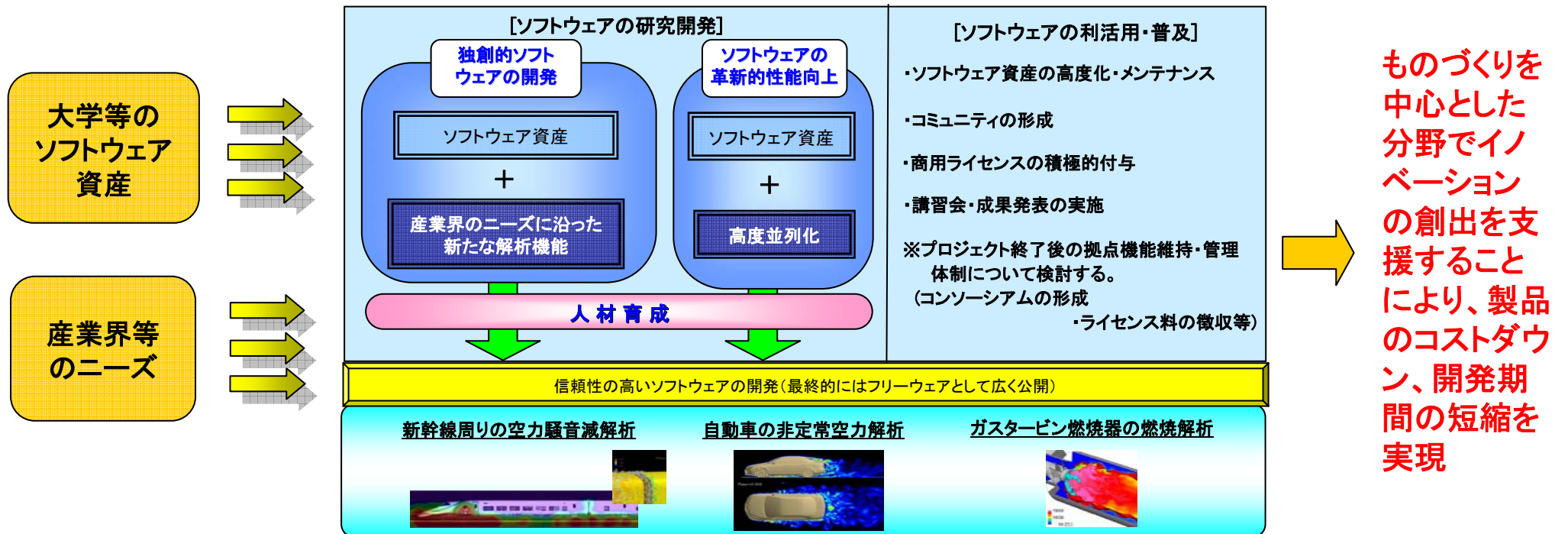
○ソフトウェアの研究開発

- ・産業イノベーションに資する高性能・精緻化した**独創的な複雑・大規模シミュレーションソフトウェアの開発(解析機能の強化)**
- ・次世代スパコンなど計算機環境の劇的な性能向上を踏まえた**ソフトウェアの革新的性能向上の研究開発(高速化)**

○ソフトウェアの利活用・普及

- ・開発したソフトウェアの自立的な維持・管理体制の構築に向けた取組

研究開発体制：公募により中核となる機関を選定し、5カ年間実施する。



6. 産業利用促進への取り組み

— 先端研究施設共用イノベーション創出事業 — 大学や研究機関のスーパーコンピュータ資源の活用

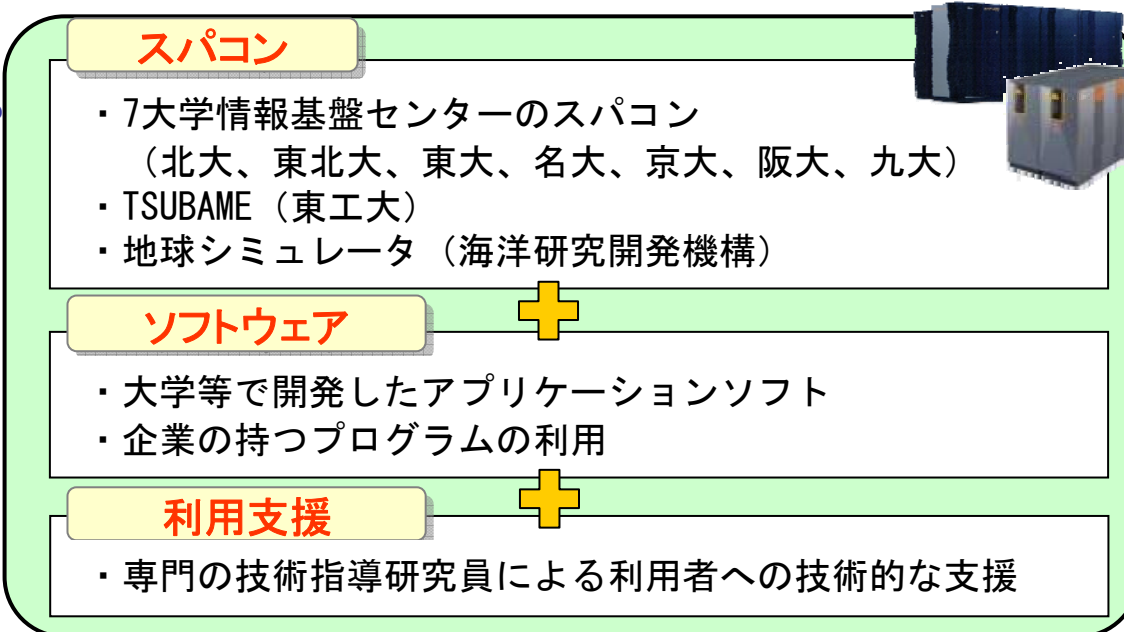
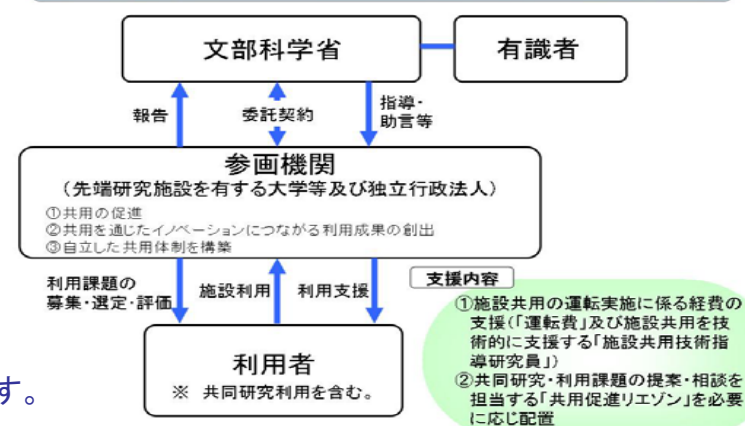
【概要】

- ・大学や研究機関のスパコン施設を民間企業へ無償で開放し、具体的な技術課題の解決等を行い、イノベーションを創出。
- ・企業から提案された課題について選考を行い、マシンタイムと技術指導研究員等を提供し、企業が利用しやすいサービスを実施。

→ **共用ナビ** (募集状況※、相談等)
<http://kyoyonavi.mext.go.jp/>

※ 利用課題の募集を随時行っている施設もあります。

先端研究施設共用イノベーション創出事業の仕組み



技術課題の
解決による
イノベー
ション創出

なお、利用者は終了後に利用報告書を提出(原則公開)。ただし、特許取得等の理由により最大2年間の公開を延期可能。

7. 産業界との協力体制

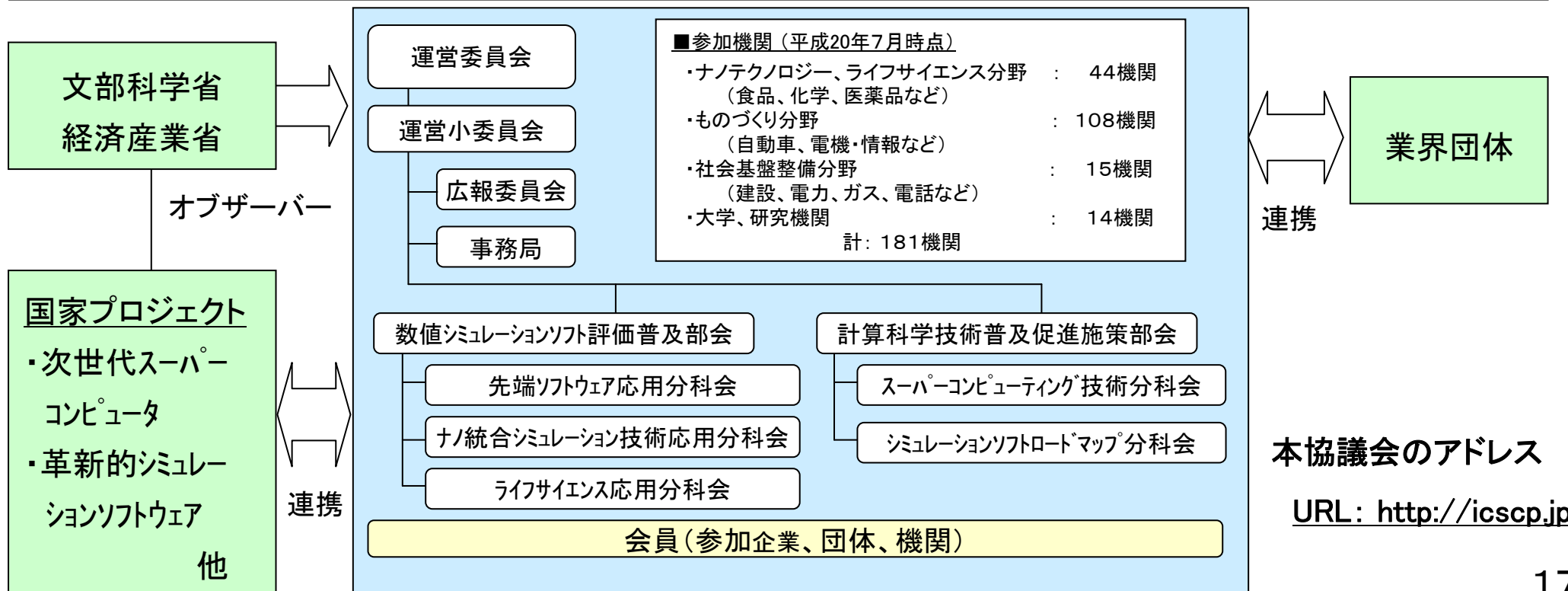
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

[設立趣旨]

産業界におけるスーパーコンピューティング技術の利活用を推進するため、スーパーコンピュータ用の先進的応用ソフトウェアの評価、利用技術の開発、普及や超高速コンピュータ網を活用したスーパーコンピュータ利用技術の開発、普及などを推進する目的で平成17年12月に設立

[活動内容]

2つの部会を設置し、スーパーコンピュータを活用したシミュレーションソフトウェアの産業界での利用技術の普及、次世代スーパーコンピュータ開発に関する産業界からの要望事項の検討・取りまとめなどを実施



8. 特定先端大型研究施設の共用の枠組み

国(文部科学省) 共用の促進に関する基本的な方針の策定

実施計画の認可

実施計画の認可
業務規程の認可

(設置)

理化学研究所

- ◇次世代スーパーコンピュータの開発、高速計算機施設の建設・維持管理 等
- ◇放射光共用施設(SPring-8・XFEL)の建設・維持管理 等

先端的な研究施設の開発にポテンシャルを有する理化学研究所が施設の開発等を実施。

連携

(共用)

登録施設利用促進機関(登録機関)

- ◇利用者選定業務
外部専門家の意見を聞きつつ、研究等を行う者の選定 等
- ◇利用支援業務
情報の提供、相談等の援助

外部
専門家

公平かつ効率的な共用を行うため、施設利用研究に専門的な知見を有する、開発主体とは別の機関が共用業務を実施

特定先端大型研究施設

世界最高レベルの性能を有し、広範な分野における多様な研究等に活用されることによりその価値が最大限に発揮される大型研究施設

特定高速電子計算機施設
(次世代スーパーコンピュータ)

特定放射光施設
(SPring-8・XFEL)



利用の応募

利用者のニーズ

**広範な分野の
研究者の活用**

- 公正な課題選定
- 情報提供、研究相談、技術指導等

利用者(民間、大学、独立行政法人、基礎研究から産業利用まで幅広い利用)

独立行政法人

大学

産業界

9. 次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討

共用のあり方

- 共用法に基づく、世界最先端・最高性能の計算機
- 特定分野の研究を戦略的・重点的に推進
 - ・ 戦略的利用
- 多様な利用者のニーズに応える利用
 - ・ 一般的利用（産業利用枠、人材利用枠）
- 設置者による高度化のための利用
- 登録機関によるきめ細かい研究支援

10. 次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討(つづき)

研究機能の構築

○戦略的研究開発プログラム

- ・戦略委員会による分野及び目標の設定
- ・国による戦略機関の決定(公募)
- ・研究期間は5年間、スパコンの優先利用

○効果的・効率的な連携体制

- ・戦略機関、設置者などで構成する連携推進会議
- ・幅広い関係者からなるフォーラム

○産業利用や人材育成機能などを全体として有機的に形成

○ネットワーク型の機能形成

11. 次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討(つづき)

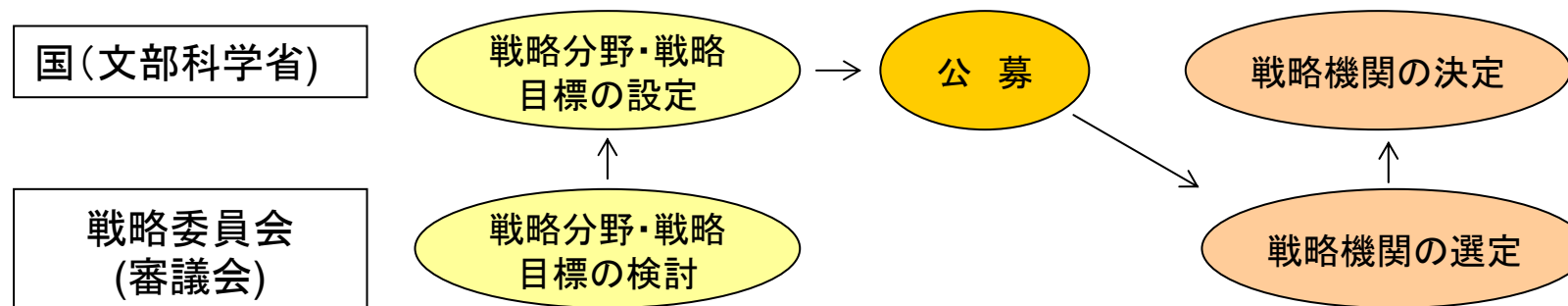
人材育成

- 研究者を目指す学生や企業等の研究者・技術者の育成
- 人材育成支援プログラム
 - ・スパコンを直接利用する機会を提供(教育利用枠)
 - ・大学等と連携し、学生や研究者への研究指導、連携講座の設定(戦略機関)
- スパコン利用による研究活動を通じた人材育成
- 登録機関による技術講演会やセミナー
- インターンシップ制度

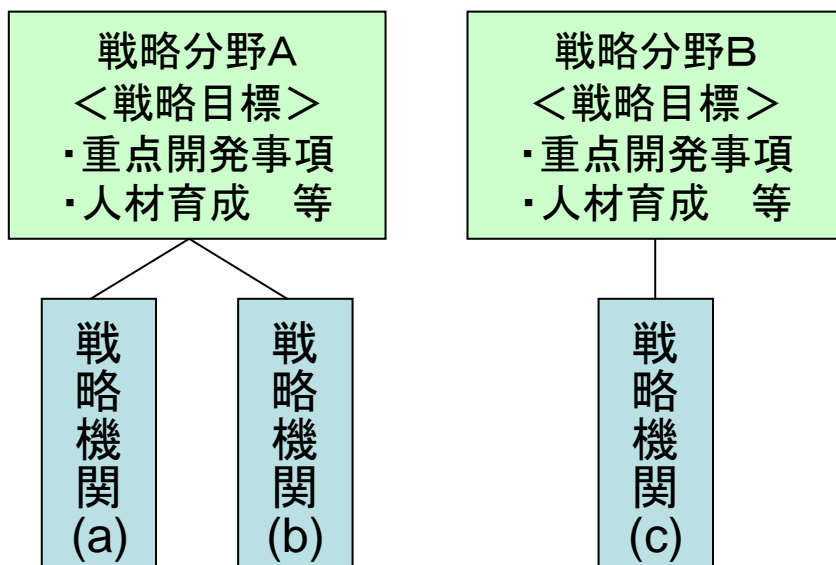
(平成20年7月 次世代スーパーコンピュータ作業部会報告書より抜粋)

12. 戦略的研究開発プログラムのイメージ

1. 戦略分野、戦略目標の設定と戦略機関の選定



2. 戦略機関のイメージ



例: 戦略分野: ライフサイエンス、ナノサイエンス、エネルギー等
戦略目標: ○○を可能とするシミュレーション技術の開発
○○分野における優秀な若手研究者の育成

戦略機関としては、大学、大学共同利用機関、大学附置研究所、独立行政法人、財団法人、民間企業等を想定。

13. 戦略的研究開発プログラムのイメージ(つづき)

3. 戦略的研究開発プログラムの運営

○戦略委員会

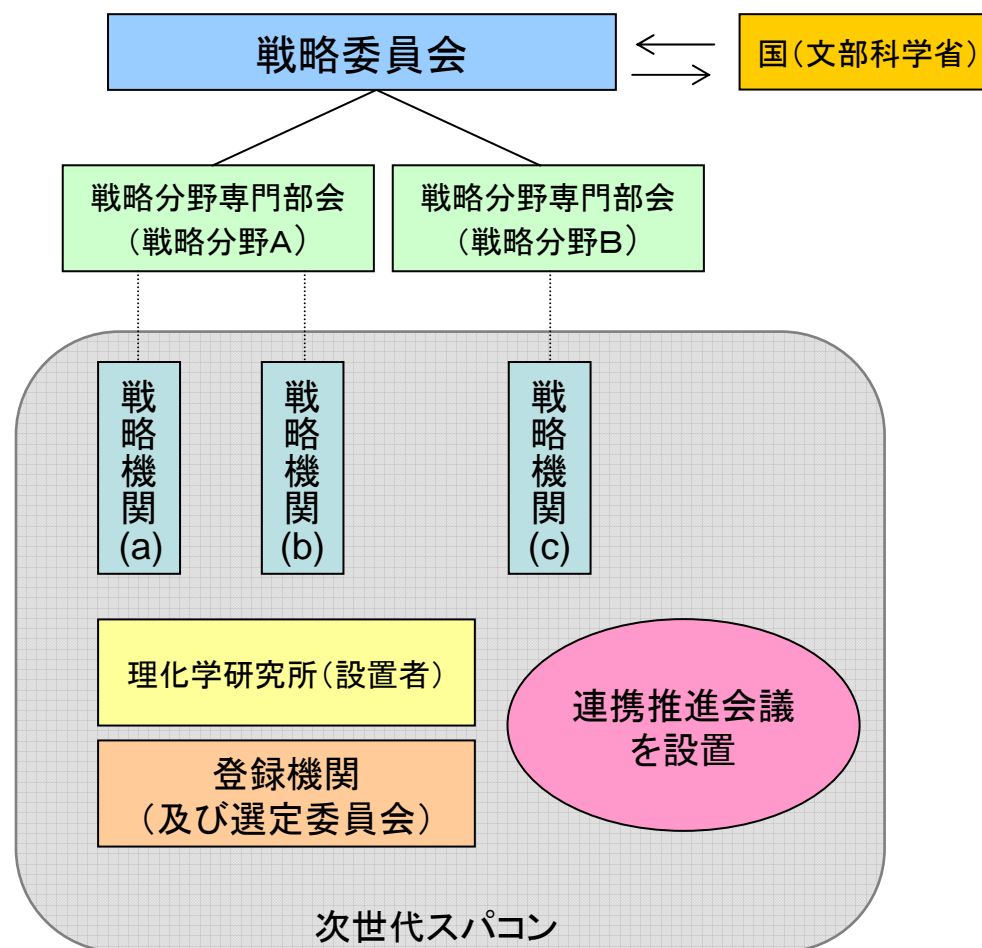
- ・各戦略分野の専門家を含む有識者で構成。
- ・本委員会の主な機能は以下のとおり。
 - 戦略機関の選定
 - 戦略プログラム全体の研究教育の進捗状況の把握・評価
 - 分野間の研究費の配分計画の策定 等

○戦略分野専門部会

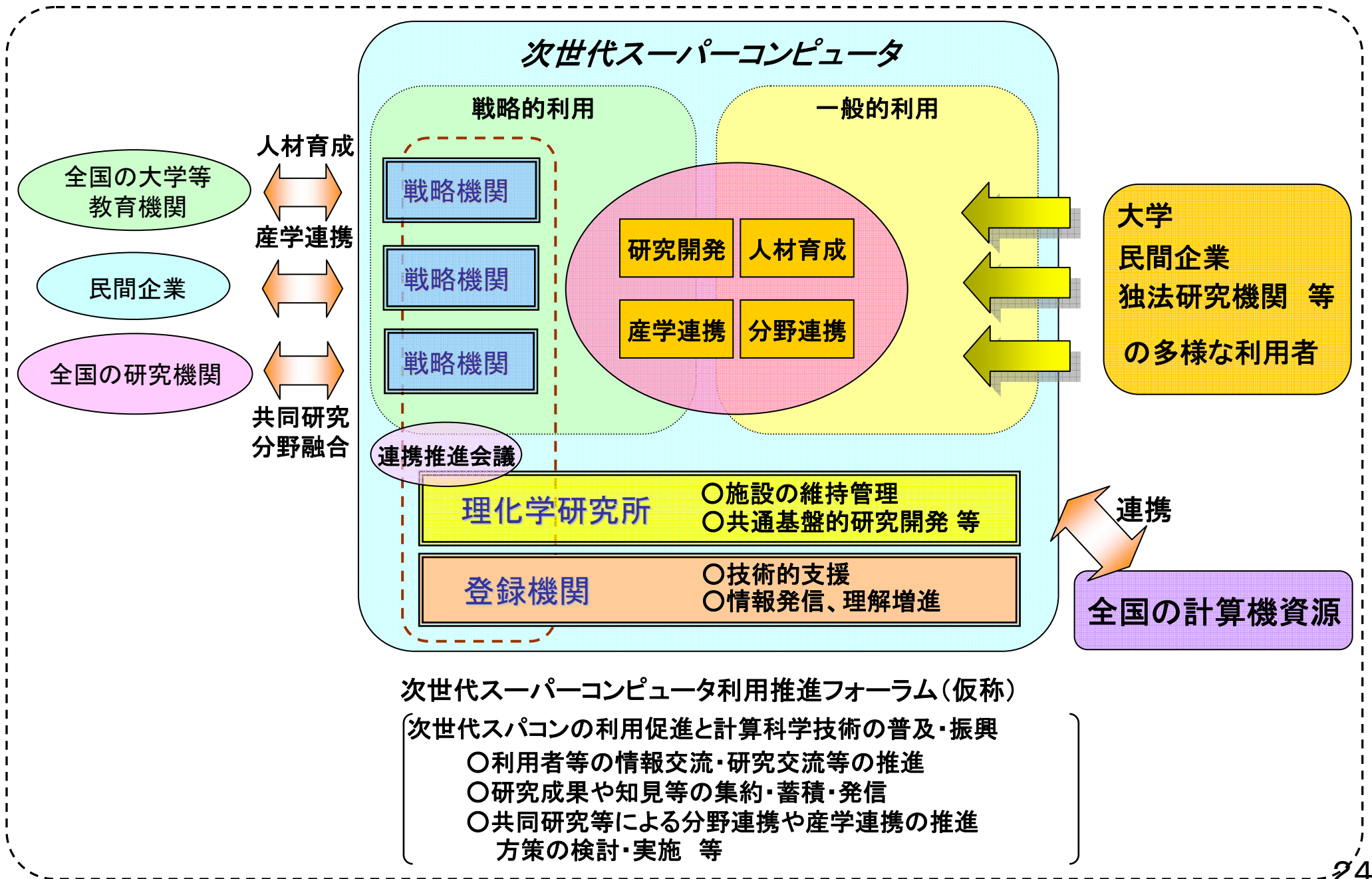
- ・戦略分野ごとに、当該戦略分野の専門家等で構成。
- ・本専門部会の主な機能は以下のとおり。
 - 当該戦略分野における研究教育の進捗状況の把握・評価
 - 当該戦略分野の戦略機関に対する研究費の配分計画の策定 等

○連携推進会議

戦略的研究開発プログラムにおいて効果的・効率的な研究教育を実施するため、実施機関で連携推進会議を設置。



14. 次世代スパコンにおける諸機能の構築



次世代スーパーコンピュータ利用推進フォーラム(仮称)

次世代スパコンの利用促進と計算科学技術の普及・振興

- 利用者等の情報交流・研究交流等の推進
- 研究成果や知見等の集約・蓄積・発信
- 共同研究等による分野連携や産学連携の推進
方策の検討・実施 等