

情報科学技術に関する 研究開発課題の事前評価結果

(「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)」
事前評価結果)

平成 25 年 8 月

科学技術・学術審議会

研究計画・評価分科会

目 次

科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 情報科学技術委員会委員	2
○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） 概要	3
○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） 事前評価票	5

科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会 情報科学技術委員会委員

敬称略、50音順

主査	有川 節夫	九州大学総長
	伊藤 公平	慶應義塾大学理工学部教授
	岩野 和生	科学技術振興機構研究開発戦略センター上席フェロー
	宇川 彰	筑波大学数理物質系教授
	碓井 照子	奈良大学名誉教授
	押山 淳	東京大学大学院工学系研究科教授
	笠原 博徳	早稲田大学理工学術院教授
主査代理	喜連川 優	国立情報学研究所長／東京大学生産技術研究所教授
	國井 秀子	芝浦工業大学大学院工学マネジメント研究科教授
	五條堀 孝	国立遺伝学研究所副所長
	辻 ゆかり	西日本電信電話株式会社技術革新部研究開発センター 開発戦略担当部長
	中小路 久美代	京都大学学際融合教育研究推進センター特定教授／ 株式会社 SRA 先端技術研究所長
	樋口 知之	統計数理研究所長
	松岡 茂登	大阪大学サイバーメディアセンター教授
	宮内 淑子	メディアステック株式会社代表取締役社長
	宮地 充子	北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科教授
	村岡 裕明	東北大学電気通信研究所教授
	村上 和彰	九州大学大学院システム情報科学研究院教授
	安浦 寛人	九州大学理事・副学長
	矢野 和男	株式会社日立製作所中央研究所主管研究長

(平成 25 年 8 月 7 日現在)

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）について

概要：

国家の基幹技術である世界最高水準のスーパーコンピュータを国として戦略的に開発・整備することで、科学技術の振興、産業競争力の強化、安全・安心の国づくり等を実現していくため、「①エクサスケールスーパーコンピュータの開発・整備」と「②エクサスケールスーパーコンピュータを活用するためのアプリケーションの開発」について、迅速な成果創出を図る観点から両者を協同的に推進し、我が国の様々な社会的・科学的課題が要求する性能や諸外国の動向を考慮して、**平成32年（2020年）頃までにエクサスケールコンピュータテイングを実現する。**

プロジェクト推進方策：

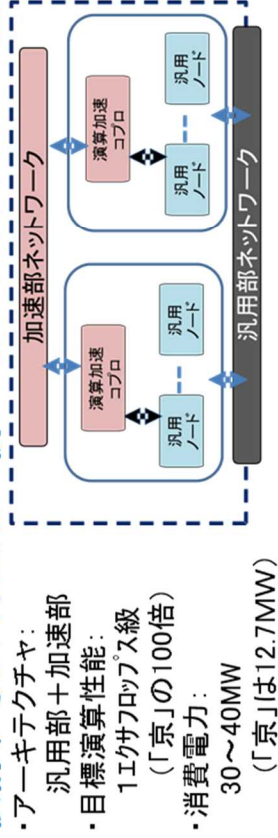
HPCI計画推進委員会等の議論や今年度末に取りまとめる「将来のHPCIシステムのあるい方に関する調査研究」の結果等を踏まえながら、我が国のフラッグシップシステムとして主要な社会的・科学的課題の要求性能に対応でき、かつ、コスト/パフォーマンスに優れたエクサスケールスーパーコンピュータについて、**加速部（加速機構）を含むアーキテクチャの検討をはじめとする様々な視点からの検討を行う。**その際、基本設計や詳細設計が終了した段階でHPCI計画推進委員会等の評価を受けることにより、技術的進展の早いスーパーコンピュータ分野における本プロジェクトの方向性、進捗の妥当性、合理性等を検証する。

また、**CPU等のキーとなる技術**については、システムソフトウェアやアプリケーションの開発、人材育成等の観点で国内開発の利点があることから、今後国内外の技術動向を評価し、柔軟に対応していくことを前提として、**現時点では、新たに自主開発することを基本方針とする。**

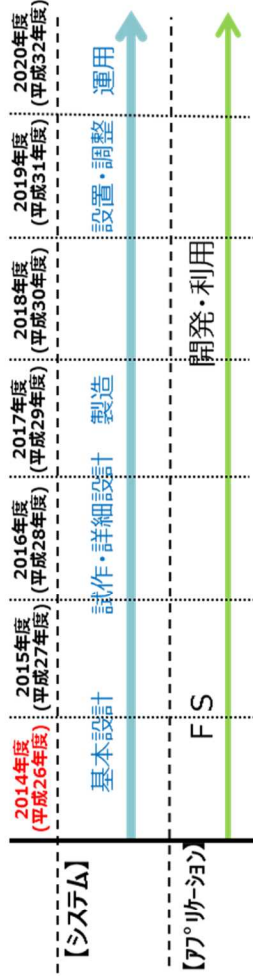
プロジェクト推進体制：

開発主体（現時点では独立行政法人理化学研究所が開発主体候補）を中心として、**大学・研究機関、開発企業、ユーザー団体等から構成される実施体制とする。**その際、「京」で蓄積した技術・経験・人材を活用する。また、Co-designの観点から、ハードウェアの開発とアプリケーションの開発は密接に連携して進める。

検討するシステムの一例：【アーキテクチャのイメージ図】



スケジュール：



エクサスケール・スーパーコンピュータで解決すべき主な社会的・科学的課題

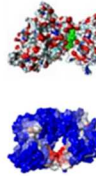
● 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

【現状】 特定の**標的タンパク質**（病気の原因物質）に対するシミュレーションにより、新薬候補物質の絞り込みを効率化。

【将来】 **複数タンパク質**（病気の原因物質と必須機能物質）に対する新薬候補物質の影響解析を、**複雑な細胞環境**下で行い、**副作用の少ない画期的な新薬の早期発見**に貢献。



新薬候補物質の標的タンパク質への高精度結合シミュレーション

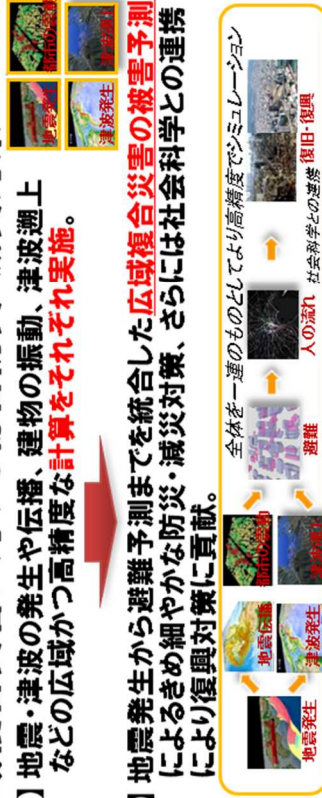


必須機能タンパク質への新薬候補物質の作用も解析

● 広域複合災害に対する総合防災・減災対策

【現状】 地震・津波の発生や伝播、建物の振動、津波遡上などの広域かつ高精度な**計算をそれぞれ実施**。

【将来】 地震発生から避難予測までを統合した**広域複合災害の被害予測**によるきめ細やかな防災・減災対策、さらには**社会科学との連携**により復興対策に貢献。

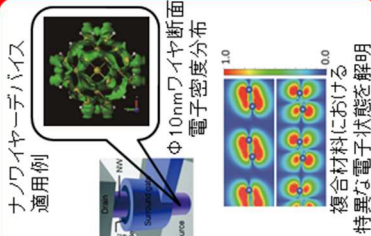


全体を一連のものとしてより高精度でシミュレーション
地震発生 津波発生 避難 人の流れ 社会科学との連携 復旧・復興

● ナノの世界を操る次世代デバイス科学

【現状】 次世代半導体として期待されているシリコン/ワイヤーの**10万原子レベルの電子状態計算**で、**今まで見えなかった電子分布を世界で初めて提示**。

【将来】 **100万原子レベルの精緻なシミュレーション**により、**ナノ形状がもたらす複合材料や化合物半導体の特異な物性を予測・解明し、画期的な次世代ナノデバイスの開発**に貢献。



ナノワイヤーデバイス適用例

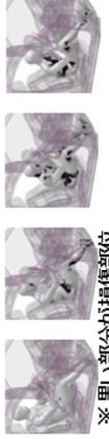
φ 10nmワイヤー断面電子密度分布

複合材料における特異な電子状態を解明

● 安全性の高い自動車開発

【現状】 様々な衝突条件に対して、**車体の衝突変形**の定量的評価を実現。

【将来】 車への影響だけでなく、**乗員の体への影響**（骨や内臓等の損傷）も評価し、**より安全性の高い車体の開発**に貢献。

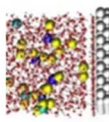


※ 黒い部分が損傷部位

● 安全性・耐性に優れた高性能電池の開発

【現状】 燃料電池等の電極とその周りの電解質との反応を、**簡略化されたモデルで計算**し、**電極材料や電解質の電池性能への影響を定性的に評価**。

【将来】 複雑な電子の挙動を、**現実の電極構造のもとで定量的に評価**し、**最適な電極材料や電解質の組合せを実現**。**安全性・耐性に優れた高性能電池開発**に貢献。



白金電極上の電子状態シミュレーション



燃料電池等の活性や安定性を高精度計算で精緻に予測

● 宇宙の起源と進化の探求

【現状】 宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成のシミュレーションを**それぞれ実施**。

【将来】 宇宙の大規模構造形成から**惑星形成**にいたる**宇宙全体のシミュレーション**により、**銀河系や惑星系の多様性の起源や進化を解明し、天文学・宇宙物理学の発展**に貢献。



宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成といった宇宙全体を一連のものとしたシミュレーション



※ Matthew New (UPenn-UPenn)

事前評価票

(平成25年8月現在)

1. 課題名 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）
2. 開発・事業期間 平成26年度～平成31年度
3. 課題概要 <p>国家の基幹技術である世界最高水準のスーパーコンピュータを国として戦略的に開発・整備することで、科学技術の振興、産業競争力の強化、安全・安心の国づくり等を実現していくため、</p> <p>①エクサスケールスーパーコンピュータの開発・整備 ②エクサスケールスーパーコンピュータを活用するためのアプリケーションの開発</p> <p>について、迅速な成果創出を図る観点から両者を協調的に推進し、我が国の様々な社会的・科学的課題が要求する性能や諸外国の動向を考慮して、平成32年（2020年）頃までにエクサスケールコンピューティングを実現する。これにより、我が国の計算科学技術インフラの継続的発展、スーパーコンピュータ及びアプリケーション開発に係る技術の維持・強化及び人材の育成・確保、要素技術やアプリケーションの商用展開、国内産業への波及などを図り、もって、世界に冠たる国際競争力の獲得に貢献する。</p> <p>本プロジェクトでは、現時点での HPCI 計画推進委員会等の議論を踏まえ、また、今後とも、「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」の結果（今年度末取りまとめ）、HPCI 計画推進委員会の評価、HPCI コンソーシアム等のユーザーの意見等を踏まえながら、「京」の後継機たる我が国のフラッグシップシステムとして主要な社会的・科学的課題の要求性能に対応でき、かつ、コスト/パフォーマンスに優れたエクサスケールスーパーコンピュータについて、加速部（加速機構）を含むアーキテクチャの検討をはじめとする様々な視点からの検討を行う。その際、基本設計（平成26年度予定）や詳細設計（平成27、28年度予定）が終了した段階で HPCI 計画推進委員会等の評価を受けることにより、技術的進展の早いスーパーコンピューティングの分野における本プロジェクトの方向性、進捗の妥当性、合理性等を検証する。</p> <p>プロジェクトの実施に当たっては、開発主体を中心として、大学・研究機関、開発企業、ユーザー団体等から構成される実施体制とし、「京」で蓄積した技術・経験・人材を活用する。また、CPU 等のキーとなる技術については、自主開発することにより、設計段階からコンパイラ及びシステムソフトウェアの開発が可能であること、同時並行でアプリケーションの評価及びチューニングが可能であること、人材育成が加速すること等の利点があることから、今後も国内外の技術動向を評価し、柔軟に対応していくことを前提として、現時点では、新たに自主開発することを基本方針とする。</p> <p>また、ハードウェアとアプリケーションの開発の中で、システムの研究者とアプリケーションの研究者の協調設計（Co-design）により、ハードウェア開発へのアプリケーション</p>

ニーズの反映とハードウェアの技術動向を踏まえたアプリケーション開発を可能とし、ハードウェア完成後に当該アプリケーションを利用して迅速に成果が創出されるようにする。

4. 各観点からの評価

(1) 必要性

- a. スーパーコンピュータは、理論、実験に並ぶ科学技術の第3の手法であるシミュレーションのための強力なツールとして、科学技術の様々な分野における不可欠な研究開発基盤であるのみならず、様々な分野の共通基盤技術となりつつあるビッグデータの処理・解析やデータ同化のための重要なツールにもなる。
- b. また、ものづくり現場や防災・減災対策などにおいてもシミュレーションの活用が進みつつあり、スーパーコンピュータは産業競争力の強化や安全・安心の国づくりの観点からも重要になりつつある。さらに、ますます複雑化する社会的・科学的課題の解決に向けて、様々な分野や産学官の間を結びつけ統合させていくことのできるツールでもあり、イノベーション創出の観点からも今後ますますその重要性は高まっていくと考えられる。
- c. 世界最高水準のスーパーコンピューティング技術は、科学技術の振興、産業競争力の強化、安全・安心の国づくり等の実現に不可欠な国家の基幹技術であることから、第4期科学技術基本計画で「世界最高水準のハイパフォーマンスコンピューティング技術」が国家安全保障・基幹技術に位置付けられている。
- d. 国際的にもスーパーコンピュータの開発・利用が積極的に進められている。例えば、米国では2020年過ぎのエクサフロップスの性能を有するシステムの整備を目指して研究開発を進めており、欧州でも2020年頃のエクサスケールコンピューティングを目指してハードウェアとソフトウェアの研究開発を実施している。さらに、中国では、近年急激にスーパーコンピュータの整備利用を進めており、エクサスケールコンピューティングの実現に向けて計画的に研究開発を推進している。
- e. 世界最高水準のスーパーコンピュータの開発は、国内産業への波及効果を持つのみならず、広い意味で安全保障とも関係することから、我が国において継続的にスーパーコンピュータを開発していくための技術力を維持・強化することが重要である。
- f. 世界最高水準のスーパーコンピュータにより社会的・科学的課題の解決に資する成果を迅速に創出するためには、ハードウェアの開発と協調して、当該ハードウェアの能力を最大限活用するアプリケーションを開発することが重要である。

以上のことから、本プロジェクトは、科学的・技術的意義、社会的・経済的意義及び国費を用いた研究開発としての意義を十分に有していると考えられる。したがって、現時点では、我が国の国際競争力の観点から、平成32年頃までにエクサスケールコンピューティングの実現を目指し、本プロジェクトを国として重点的に推進する必要がある。その際、主要な社会的・科学的課題の要求性能に対応でき、かつ、コスト/パフォーマンスに優れたエクサスケールスーパーコンピュータについて、HPCI計画推進委員会等の評価や議論を踏まえることを前提として、加

速部（加速機構）を含むアーキテクチャの検討をはじめとする様々な視点からの検討を行うことは合目的であるが、当該検討において汎用部及び加速部（加速機構）の機能、技術的詳細、開発・保守体制等を引き続き精査していく中で、特に加速部（加速機構）については、その必要性も含めて一層の精査が必要である。

（２）有効性

- a. スーパーコンピュータは、それを利用したシミュレーションにより、実際には実験できないような現象、極限環境での現象、様々な要素が関わる複雑な現象、実時間では再現できない現象などを再現することができ、新たな知の発見や創出に貢献するツール、様々な分野の共通基盤技術となりつつあるビッグデータの処理・解析やデータ同化のためのツール、社会科学分野を連携・融合させて社会現象や人間活動を取り込むシミュレーションのためのツールとなる。
- b. また、スーパーコンピュータは、様々な分野や産学官の間を横串的に結びつけて統合させていくことに貢献するツール、産業界においてニーズと重要性が高まっている大規模計算のためのツールともなり、a. の観点も含め、世界最高水準のスーパーコンピューティング技術は国家の競争力の源泉である。
- c. 我が国では、「京」が戦略分野を中心に成果を上げつつあり、平成 23 年にはシリコン・ナノワイヤの第一原理計算で、平成 24 年にはダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算で、2 年連続ゴードン・ベル賞を受けているほか、分子レベルからの心臓の詳細なシミュレーションや、ものづくりの設計・開発の大幅な効率化などで画期的な成果を創出している。このように、現在でも「京」の利活用が進んでいるところではあるが、副作用の予測も含めた効率的な新薬の設計や、地震・津波・複合災害・避難・復興対策などを統合した防災・減災対策の実現など、「京」の能力を持ってしても解決困難な社会的・科学的課題もいまだ多い。したがって、それらの課題解決に貢献できるようなさらに能力の高いスーパーコンピューティング技術を開発する本プロジェクトは、我が国の計算科学技術及び計算機科学技術全体を発展させて国際的にも当該分野の優位性を維持するのみならず、行政施策決定の迅速化・高度化や経済的価値の創出などに貢献することが期待される。
- d. 本プロジェクトは、国際的にスーパーコンピュータの自主開発が拡大する中で、我が国としても必要な技術や経験を継承・発展させ、それを支える人材を育成・確保していくことが期待される。
- e. また、我が国は、「京」の開発により、高性能なプロセッサやネットワーク、優れた省電力機構などの技術を獲得したことから、世界最高水準のスーパーコンピューティング技術を開発する本プロジェクトは、我が国IT産業の競争力を高めるのみならず、国内産業への様々な波及効果を有することが期待される。
- f. さらに、本プロジェクトでは、ハードウェアの開発と協調的にアプリケーションを開発することにより、世界最高水準のスーパーコンピュータの能力を最大限活用して社会的・科学的課題の解決に資する成果を迅速に創出することが期待され、また、アプリケーション開発に係る技術の継承や人材の育成、開発したアプリケーションの商用展開も期待される。

以上のことから、本プロジェクトは、新しい知の創出、研究開発の質の向上、実用化・事業化、行政施策への反映、人材の養成及び知的基盤の整備の観点から十分に意義があると考えられる。

(3) 効率性

- a. 文部科学省では平成 18 年度から「京」の開発・整備を推進してきており、「京」は平成 23 年 11 月に世界に先駆けて 10 ペタフロップスを達成し、数多くの研究者による利用が進んでいる。したがって、我が国には「京」の開発・利用の過程で蓄積した技術・経験・人材やアプリケーションがあり、それらを活用した効率的なプロジェクトの推進や成果の創出が可能である。
- b. 本プロジェクトでは、その計画・立案段階において、エクサスケールスーパーコンピュータの開発主体候補(現在は独立行政法人理化学研究所)が提示する、解決すべき社会的・科学的課題とそれに必要な仕様、国内外の技術動向、開発体制、独自開発すべき要素技術、下方展開した場合の競争力、開発スケジュール、開発コスト等を有識者が精査した上で開発主体を決定するプロセスを設けることで、効率的な推進を担保している。
- c. エクサスケールコンピューティングの実現に向けては、平成 24、25 年度の 2 年間で、5～10 年後を見据えた技術的知見を得ることを目的とした「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」を実施しており、エクサスケールコンピューティング環境におけるアプリケーション側のニーズの把握と、それに適したシステム構成の検討を進めている。今後、当該調査研究の結果を本プロジェクトの計画に反映させることで、効率的な推進が可能である。
- d. 本プロジェクトでは、ハードウェアの開発と協調的に様々なアプリケーションを開発することにより、世界最高水準のスーパーコンピュータの能力を最大限活用して社会的・科学的課題の解決に資する成果を効率的に創出することが期待される。
- e. 本プロジェクトは、その検討段階及びプロジェクト開始後も、多様なユーザーで構成される HPCI コンソーシアムの意見を踏まえつつ、有識者で構成される HPCI 計画推進委員会の評価を受けながら進めることから、b. に掲げた項目やユーザーニーズの状況に応じた効率的なプロジェクト管理が可能である。

以上のことから、本プロジェクトは、計画・実施体制、目標・達成管理の向上方策、費用構造や費用対効果向上方策及び研究開発の手段やアプローチにおける妥当性が十分にあると考えられるが、技術的变化・国際的状況変化等への対応方策は引き続き検討していく必要がある。

5. 総合評価

- a. 世界最高水準のスーパーコンピューティング技術は競争力の源泉たる国家の基幹技術であり、また、国際的にもスーパーコンピュータやアプリケーションの自主開発が拡大している。そのような状況の中で、本プロジェクトは、我が国の計算科学技術インフラを発展させ、科学技術の振興、産業競争力の強化、安全・安心の国づくり等の実現に貢献するとともに、我が国として必要な技術や経験の継承・発展及びそれを支える人材の育成・確保、さらには広い意味での安全保障にも貢献するものであることから、国として着実に推進することが適当である。

ただし、相当額の国費が投入されるプロジェクトなので、その内容、必要性、期待される成果等について、引き続き、合理的かつ分かりやすい説明に努める必要がある。

- b. ハードウェアの開発のみならず、当該ハードウェアを最大限活用して様々な社会的・科学的課題の解決に貢献するアプリケーションの開発を協調的に進めることで、相当額の国費が投入されるプロジェクトとして、その成果を国民に見える形で早期に創出していく必要がある。
- c. 本プロジェクトを開始するに当たっては、開発主体候補の提案を引き続き精査し、また、「将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究」の結果等も踏まえ、現段階で最善の選択をすることは当然のことであるが、スーパーコンピューティングの分野は技術的な進展が早いいため、プロジェクトの推進に当たっては、解決すべき社会的・科学的課題とそれに必要な仕様、国内外の動向、開発体制、自主開発すべき要素技術、下方展開した場合の競争力、開発スケジュール、開発コスト、コスト/パフォーマンス等について引き続き検討を続け、HPCI コンソーシアム等のユーザーをはじめとして幅広い意見を踏まえながら、当該検討事項について段階ごとに HPCI 計画推進委員会の評価を受ける必要がある。