

ポスト「京」の開発等について

平成31年2月15日

文部科学省 研究振興局

参事官 (情報担当) 付 計算科学技術推進室

総合科学技術・イノベーション会議(CSTI)における中間評価結果(概要)

事業概要

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・整備し、産業競争力強化、安全・安心の国づくり等に貢献する。2021年～22年の運用開始を目標に、**システムとアプリケーションを協調的に開発**することにより、成果の早期創出を目指す。

開発目標

- ・最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
- ・30～40MW の消費電力（「京」は12.7MW）

【CSTIの評価結果】

※平成30年11月22日のCSTI本会議にて実施

<https://www8.cao.go.jp/cstp/siryu/haihui040/haihu-040.html> (内閣府サイトへのリンク)

■ システム設計の結果に基づき、**製造・設置を遅延なく推進していくことが適当と認められる。**

- 第5期科学技術基本計画に位置付けられた Society5.0の実現や、統合イノベーション戦略、未来投資戦略2018及び経団連の提言等において、スーパーコンピュータの整備・共用を推し進めるとされていることから、本事業を進めていく意義・必要性は認められる。
- 中間評価時点において開発目標は達成されているものと認められる。
- 消費電力性能や演算性能等とともにユーザの利便性・使い勝手についても世界最高水準であることから、世界の他のシステムに対して総合力で卓越するものとして評価できる。
- シミュレーションを中心にした計算科学の研究基盤であることに加え、Society5.0に必要なAIやビッグデータ等の分野にも対応していると評価できる。
- 成果報告会や、シンポジウム等により、広く周知し普及を図るとともに、共用開始後の戦略的な利活用に向けた外部有識者による検討を開始している等、ユーザの利便性・使い勝手の良さの向上に努めていると認められる。
 - ✓ 共用開始後の戦略的な利活用の推進に当たって、具体的なあり方について検討する。

<指摘事項>

- ✓ Society5.0の実現のためには、ビッグデータの活用について総合科学技術・イノベーション会議を軸とするなど国全体で進めていくことが重要であり、本事業を今後進めるに当たって、関係府省庁と横の連携を図りながら利用の仕組みをつくる。
- ✓ 製造段階において、研究開発計画が遅延することになった場合は、遅延状況を確認する。

ポスト「京」の開発

2019年度予算額（案）：9,910百万円

（前年度予算額）：5,630百万円

2018年度第2次補正予算額：20,860百万円



文部科学省

背景・課題

- 全ての人とモノがつながり、今までにない新たな価値を生み出す超スマート社会の実現を目指すSociety5.0においては、シミュレーションによる社会的課題の解決や人工知能（AI）開発及び情報の流通・処理に関する技術開発を加速するために、**スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠**

【成長戦略等における記載】（未来投資戦略2018）

- 産学官連携を支え、生産性の飛躍的向上の基盤となる先端的な研究施設・設備の整備・共用や**ポスト「京」の開発を進める。**

事業概要

【事業の目的】

- 我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心の確保につながる最先端の研究基盤として、**2021～22年の運用開始を目標に、世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指す。**

【事業の概要】

- システムとアプリケーションを協調的に開発することにより、**世界最高水準の汎用性、最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能を目指す。**
- アプリケーションの対象として、健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の社会的・科学的課題を選定。
- 消費電力：30～40MW（「京」は12.7MW） ○ 国費総額：約1,100億円

【期待される成果例】

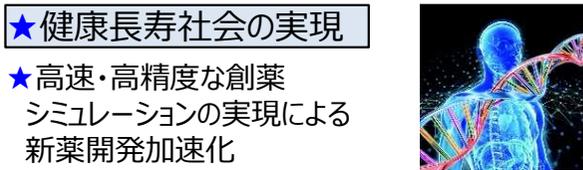
★健康長寿社会の実現

- ★高速・高精度な創薬シミュレーションの実現による新薬開発加速化

- ★医療ビッグデータ解析と生体シミュレーションによる病気の早期発見と予防医療の支援実現

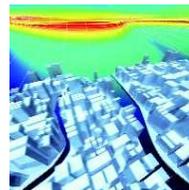
★基礎科学の発展

- ★宇宙でいつどのように物質が創られたのかなど、科学の根源的な問いへの挑戦



★防災・環境問題

- ★気象ビッグデータ解析により、竜巻や豪雨を的確に予測
- ★地震の揺れ・津波の進入・市民の避難経路をメートル単位でシミュレーション



【システムの特徴】

- ★消費電力性能
- ★計算能力
- ★ユーザーの利便・使い勝手の良さ
- ★画期的な成果の創出

⇒ 総合力のあるスーパーコンピュータ

★ 総合科学技術・イノベーション会議が平成30年11月22日に実施した中間評価において、「ポスト「京」の製造・設置に向け遅延なく推進していくことが適当」とされた。



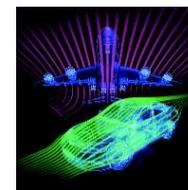
理化学研究所
計算科学研究センター
(兵庫県神戸市)

★産業競争力の強化

- ★次世代産業を支える新デバイスや材料の創成の加速化

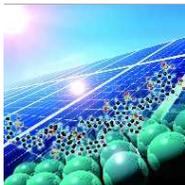


- ★飛行機や自動車の実機試験を一部代替し、開発期間・コストを大幅に削減



★エネルギー問題

- ★太陽電池や燃料電池の低コスト・高性能化や人工光合成メタンハイドレートからメタン回収を実現



- ★電気自動車のモーターや発電機のための永久磁石を省レアメタル化で実現

スーパーコンピュータ「京」及び 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) の運営

2019年度予算額 (案) : 10,123百万円
(前年度予算額 : 12,649百万円)



文部科学省

事業目的

- 「京」を中核とし、多様な利用者のニーズに応える革新的な計算環境 (HPCI: 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) を構築し、その利用を推進することで、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化、安全・安心な社会の構築に貢献する。

【成長戦略等における記載】 (統合イノベーション戦略)

- 文部科学省において、大学・研究機関等の先端的な研究施設・設備・機器等の整備・共用を進めつつ、周辺の大学や企業等が研究施設等を相互に活用するためのネットワーク構築を推進

事業概要

1. 「京」の運営 8,064百万円 (11,176百万円)

- 平成24年9月末に共用を開始した「京」の運用を着実に進めるとともに、その利用を推進。

※ポスト「京」への円滑な移行のため、2019年度中に「京」の運用を停止する。

- ①「京」の運営 7,222百万円 (10,336百万円)
- ②「京」の利用促進 842百万円 (840百万円)

2. HPCIの運営 2,059百万円 (1,473百万円)

- 「京」を中核として国内の大学等のスパコンを高速ネットワークでつなぎ、利用者が一つのアカウントにより様々なスパコンやストレージを利用できるようにするなど、多様なユーザーニーズに応える環境を構築し、全国の利用者に供する。特に来年度は「京」の停止も踏まえ、利用可能な計算資源を拡充する。

「京」の利用実績 (平成30年3月末時点)

- ・利用者 2,300人以上
- ・全体の3割が産業界 (180社以上)

「京」の運転実績 (平成29年度実績)

- ・運転時間 8,222時間
- ・稼働率 98.0%

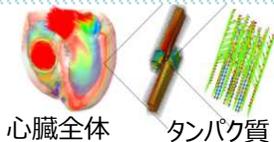
フラッグシップシステム



【これまでの成果例】

医療・創薬

心臓の拍動を世界で初めて分子レベルから精密に再現。特定の遺伝子異常と病気との相関性が知られていた**肥大型心筋症のメカニズム解明に貢献**。



タンパク質の結合の度合いを分子レベルでシミュレーション。新薬候補化合物を選定し、前臨床試験を実施中。**製薬メーカー等からなるコンソーシアムによる共同研究を実施** (32企業・機関等が参画)。



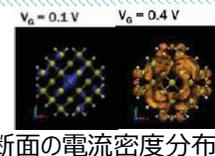
地震・防災・研究

長周期地震動による地表や超高層建築物の詳細な揺れを初めて明らかに。**内閣府による「南海トラフ巨大地震及び首都直下地震への対策」に貢献**。

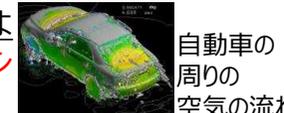


ものづくり

実際の材料に近い10万原子規模の第一原理計算により、**世界初のナノレベル高精度シミュレーションを実現。微細化限界を突破したデバイス設計に道筋** (2015年ゴードンベル賞受賞)。

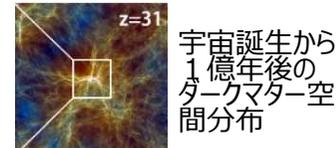


世界で初めて、空気の流れを忠実に実現し、シミュレーションによる風洞実験の代替を実証。**自動車メーカー等からなるコンソーシアムによる共同研究を実施** (22企業・機関等が参画)。



宇宙

宇宙の構造形成過程の解明のため、**世界最大規模の数兆個のダークマター粒子のシミュレーション** (2012年ゴードンベル賞受賞)。



ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するWG 概要

ポスト「京」の戦略的な利活用を推進するため、HPCI計画推進委員会（平成30年9月4日）において開催を決定。

主旨

- ・全ての人とモノがつながり、今までにない新たな価値を生み出す超スマート社会の実現を目指すSociety5.0においては、シミュレーションによる社会的課題の解決や人工知能（AI）開発及び情報の流通・処理に関する技術開発を加速するために、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠である。
- ・我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心の確保につながる最先端の研究基盤であるポスト「京」の利活用によって、その成果創出を加速し、成果最大化を実現する必要がある。

検討事項

- ・ポスト「京」の利活用に係る基本方針並びに推進方策の検討。
- ・議事録・配布資料については文部科学省WEBサイトに掲載。

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/051/index.htm (文科省サイトへのリンク)

委員一覧(H31.1月現在)

○ 合田 憲人	国立情報学研究所・アーキテクチャ科学研究系 教授	住 明正	東京大学 サステナビリティ学連携研究機構 特任教授
伊藤 宏幸	ダイキン工業株式会社テクノロジー・イノベーションセンター リサーチ・コーディネーター	田浦 健次郎	東京大学 情報基盤センター センター長
宇川 彰	日本学術振興会世界トップレベル拠点形成推進センター センター長	高田 章	ロンドン大学 特任教授/ (元)AGC株式会社先端技術研究所 特任研究員
臼井 宏典	プラナスソリューションズ株式会社 代表取締役社長	辻井 潤一	産業技術総合研究所 人工知能研究センター 産総研フェロー/研究センター長
梅谷 浩之	トヨタ自動車株式会社 IT革新推進室	常田 佐久	自然科学研究機構国立天文台 理事/台長
加藤 千幸	東京大学生産技術研究所 教授	原田 慶恵	大阪大学 蛋白質研究所 教授
栗原 和枝	東北大学未来科学技術共同研究センター 教授	藤井 孝藏	東京理科大学工学部情報工学科 教授
白井 宏樹	アステラス製薬株式会社モダリティ研究所 専任理事	◎ 安浦 寛人	九州大学 理事・副学長

ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するWG 検討状況

第1回 平成30年11月8日(木) 16:00-18:00

- スパコンプロジェクトの総括とポスト「京」の利活用に向けて
- ポスト「京」システム開発の概要について
- 「京」及びHPCIの利用実績について

事務局・宇川委員
R-CCS 松岡センター長
RIST 高津センター長

第2回 平成30年12月18日(火) 15:30-17:30

- 「京」及びHPCIの利用者の声について
- 内閣府(防災担当)における「京」の利活用について
- ポスト「京」の利活用に関する産業界からの提言について
- 計算創薬の近未来戦略に関する報告書について

RIST 高津センター長
内閣府(防災担当) 岩村参事官補佐
スーパーコンピューティング技術産業応用協
議会 金澤主査
理化学研究所 情報システム本部 姫野
コーディネータ

第3回 平成31年1月21日(月) 12:30-14:30

- データ科学、AI時代におけるHPCの新展開
- HPCによる計算社会科学
- 機械学習による分子動力学シミュレーションの高速化
- 人工知能とシミュレーション

理化学研究所 AIP上田副センター長
産業技術総合研究所 人工知能研究セン
ター 野田総括研究主幹
慶應義塾 泰岡教授
辻井委員