

# 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

参考資料3

平成26年度予定額 : 15,052百万円  
(平成25年度予算額 : 16,416百万円)

## 事業概要

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ため、スーパーコンピュータ「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)を構築するとともに、この利用を推進し、地震・津波の被害軽減や、創薬プロセスの高度化等の科学的・社会的課題の解決に貢献。

## (1) HPC(ハイパフォーマンス・コンピューティング) 基盤の運用 12,805百万円(13,802百万円)

### ①「京」の運営 11,287百万円(11,484百万円)

(内訳)・「京」の運用等経費 10,416百万円(10,587百万円)  
・特定高速電子計算施設利用促進 870百万円(897百万円)

- 平成24年9月末に共用開始した「京」の運用を着実に進めるとともに、その利用を推進。
- 産業界を含む幅広い利用者から公募で選定した一般利用枠104課題、国が戦略的な見地から選定した戦略プログラム利用枠29課題のほか、政策的に重要かつ緊急な重点化促進枠課題として首都直下地震等による被害予測シミュレーションを実施するなど、産業界85社を含む1,000人以上が利用。
- 共用開始以降、論文101本を発表、特許2件を出願。(平成25年12月時点)

## (2) HPCI利用の推進 2,247百万円(2,614百万円)

### ○HPCI戦略プログラム 2,247百万円(2,614百万円)

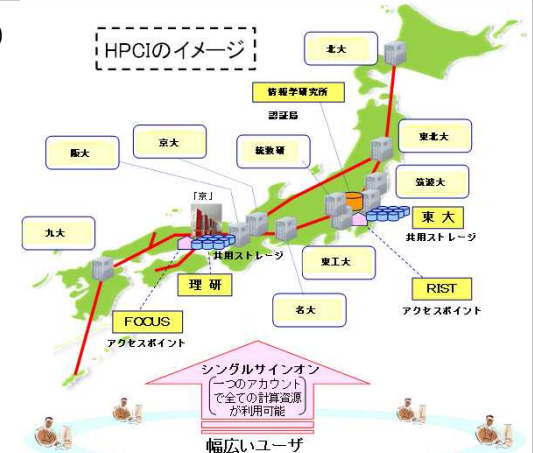
「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端計算科学技術研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略5分野における「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進。

#### <戦略分野(戦略機関)>

- 分野1: 予測する生命科学・医療および創薬基盤(理化学研究所)
- 分野2: 新物質・エネルギー創成(東大物性研、分子研、東北大金材研)
- 分野3: 防災・減災に資する地球変動予測(海洋研究開発機構)
- 分野4: 次世代ものづくり(東大生産研、JAXA、JAEA)
- 分野5: 物質と宇宙の起源と構造(筑波大、高エネ研、国立天文台)

### ②HPCIの運営 1,518百万円(2,318百万円)

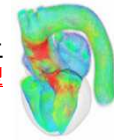
「京」を中核として国内の大学等のコンピュータやストレージを高速ネットワークでつなぎ、多様な利用者のニーズに応える利便性の高い研究基盤であるHPCIシステムの着実な運用を行う。



## 画期的な成果の創出 ~最先端の計算環境を利用し重要課題に対応~

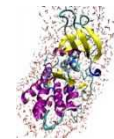
### 心臓シミュレーション

分子レベルから心臓全体を精密再現することにより、心臓の難病のひとつである**肥大型心筋症の病態を解明**。臨床現場とも連携し、**治療法の検討や薬の効果の評価**に貢献。



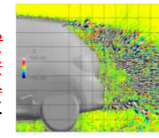
### 創薬開発

新薬の候補物質を絞り込む期間を半減(約2年から約1年)。ガン治療の**新薬の候補となる化合物を効率的に発見**。製薬企業と協働し、新薬開発を推進。



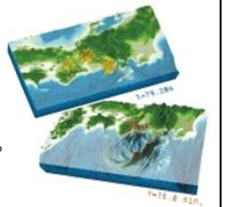
### 製品設計の効率化

自動車などの設計プロセスを革新。**風洞実験などを完全に代替し、実験では解析できない現象を解明**。設計期間**短縮**、**コスト削減**による産業競争力強化に貢献。



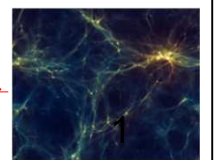
### 地震・津波の被害予測

50m単位(ブロック単位)から**10m単位(家単位)の精密な予測**を実施。津波浸水、構造物被害、避難シミュレーションも一体での南海トラフ巨大地震の複合被害評価を高知市等の都市整備計画へ活用。**災害に強い街作りやきめ細かな避難計画の策定**等へ貢献。



### 天体形成、銀河形成過程の解明

宇宙の形成過程を明らかにするために不可欠なダークマター粒子の重力進化シミュレーションを、数兆個におよぶ**世界最大規模で実現し**、**宇宙初期のダークマター密度分布の計算に成功**。宇宙の構造形成過程に関する科学的成果の創出に貢献。



※ゴードン・ベル賞(2012年)受賞

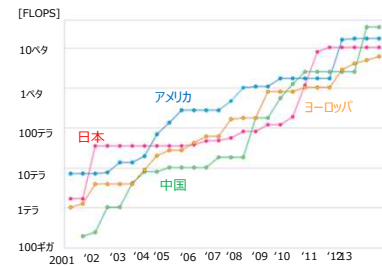
# ポスト「京」(エクサスケール・スーパーコンピュータ)の開発

平成26年度予定額 1,206百万円(新規)

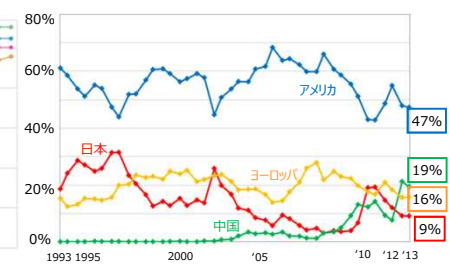
## 背景

- スーパーコンピュータは科学技術の発展、産業競争力強化、安全安心の国づくりに不可欠な国家の基幹技術であり、米国、EU、中国をはじめ国際的に開発・整備・導入が活発
  - : 世界の計算性能の約半分,2020年頃のエクサ級スパコン開発・稼働予定
  - : 日本を超える総計算能力,2020年頃のエクサ級スパコンを整備予定
  - : 最新ランキングで一位獲得,CPUの自主開発を進めエクサ開発に着手
- 少子高齢化やエネルギー・環境問題、産業の国際競争激化、巨大な自然災害など、我が国を取り巻く様々な社会的・科学的課題の解決には最先端のスパコンが必要不可欠

主要国の1位のスパコン性能推移



主要国のスパコン性能割合推移



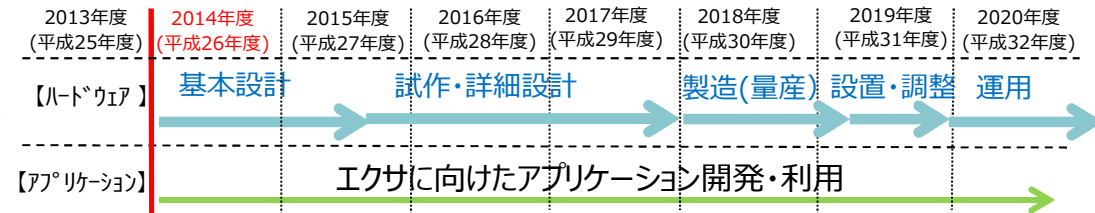
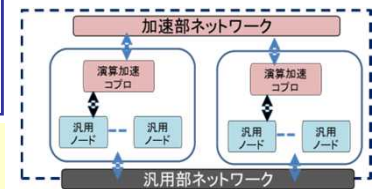
※FLOPS(フロップス):1秒間に計算ができる回数(能力)を表した値

## 開発の概要

- 2020年までにエクサスケールのスーパーコンピュータを開発し、実際のシミュレーションでも、「京」の100倍の性能を実現
- 世界一の成果を創出できるアプリケーションをハードウェアと一体的に開発(Co-design)し、社会的・科学的課題の解決に貢献
- 自主開発によりIT技術の波及効果が得られ、海外展開に貢献するとともに、我が国に蓄積された高度なICT技術・人材を維持・強化
- ポスト「京」を設置するために必要なインフラを備え、計算科学分野の優秀な研究者等を有している理化学研究所が主体となって開発
- 総事業費 約1,400億円(うち国費分 約1,100億円)

- ・アーキテクチャ:汎用部+加速部
- ・目標演算性能:1IKワット級(「京」の100倍)
- ・消費電力:30~40MW(「京」は12.7MW)

平成26年度は汎用部と加速部の基本設計を行い、ハードウェア仕様の詳細を検討

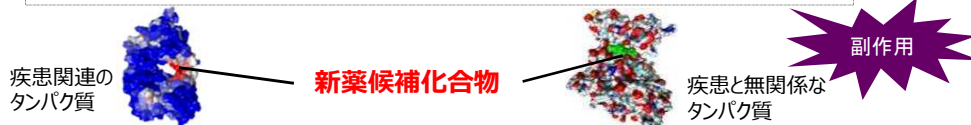


## エクサスケール実現により期待される成果

### <新薬の開発>

- ・限られた時間内に探索できる新薬候補化合物の種類が大幅に増大し、新薬の開発期間の大幅な短縮に貢献
- ・より複雑な細胞環境下のシミュレーションが可能となり、有効な新薬候補化合物の検出の可能性が高まるとともに、副作用の有無の予測も可能に

タンパク質と化合物との結合作用を予測、「京」で約2.4年かかる計算が約5.5日で可能に



### <ものづくり(自動車開発)>

- ・走行、燃費、対衝突性能等の解析プロセスを統合した自動車設計手法を開発。設計の大幅な効率化により低コストかつ短期間で開発が実現
- ・自動車衝突時の影響を、車体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

個別解析プロセスを統合したシミュレーション、「京」で約1.4年かかる計算が約3日で可能に

