

フラッグシップ2020プロジェクト (ポスト「京」の開発)について

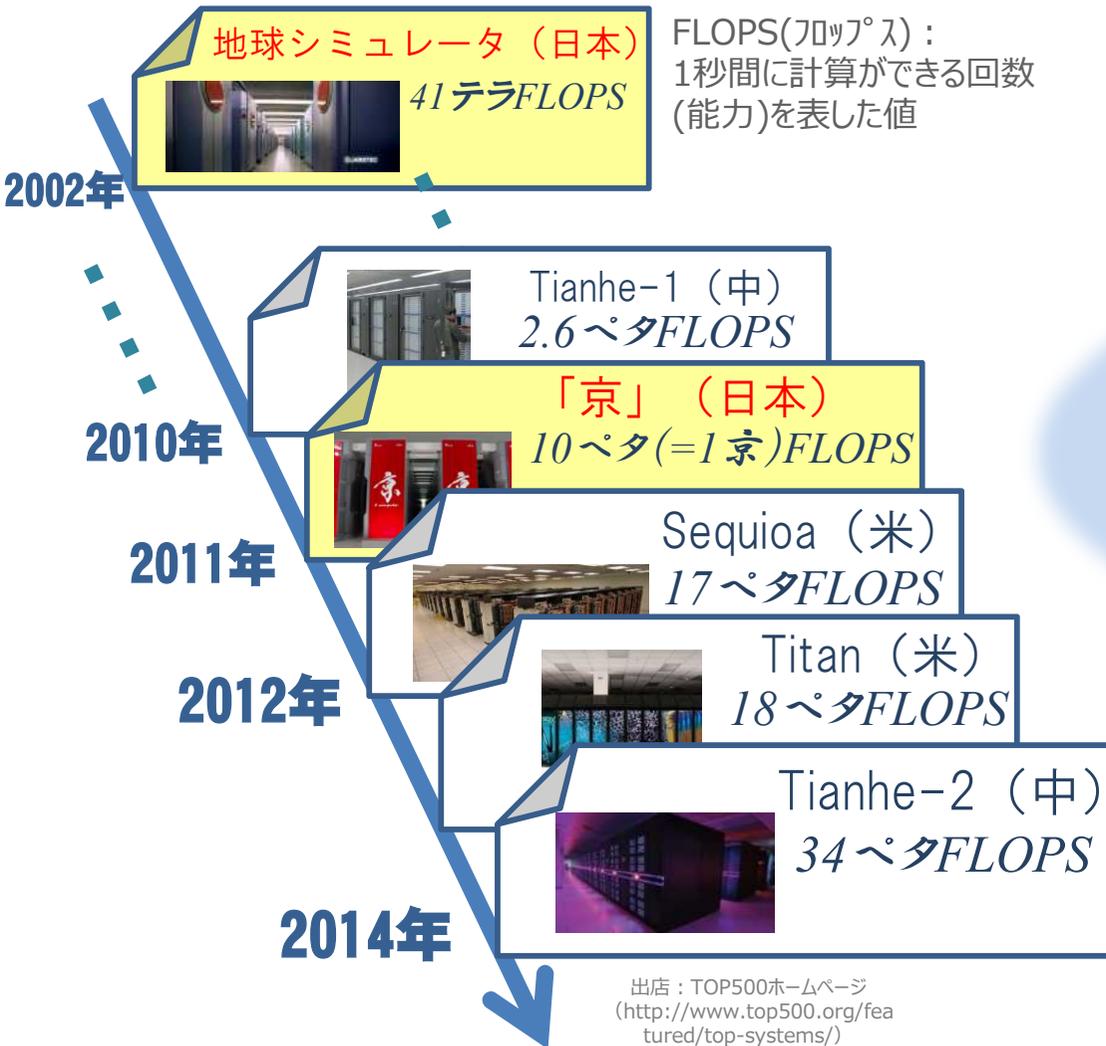
平成27年3月19日
文部科学省 研究振興局
参事官(情報担当)付

スーパーコンピュータの歴史

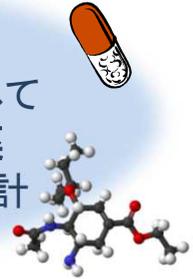
- 最先端のスパコンは国の競争力等を左右するため、各国が熾烈な開発競争を展開
- これまでも、シミュレーションが社会の変革を生み出してきた

世界第1位のスパコンの歴史

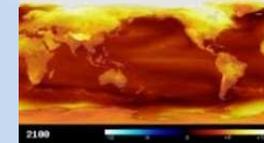
シミュレーションによる成果例



1996年
シミュレーションを活用して
インフルエンザ治療薬
(商品名:タミフル)を設計



2009年
IPCC報告書に対し
地球温暖化長期予測の
知見を提供

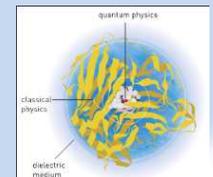


※ IPCC: 気候変動に関する政府間パネル
※ 地球シミュレータで実施

2013年
計算科学分野でノーベル賞を受賞



巨大分子の化学反応を
コンピュータで計算する手法が
ノーベル化学賞を受賞



出典: <http://www.nobelprize.org/>

将来社会におけるスパコンの役割

- インターネットの普及により、大量かつ多様なデジタルデータ、いわゆるビッグデータが
生み出され、世界中で発信・流通される時代が到来
- 実社会のニーズに則した有用な情報を抽出し、分析・解析を行う技術が求められている

(2020年に2010年の約40倍)
世界のデジタルデータ量は急増

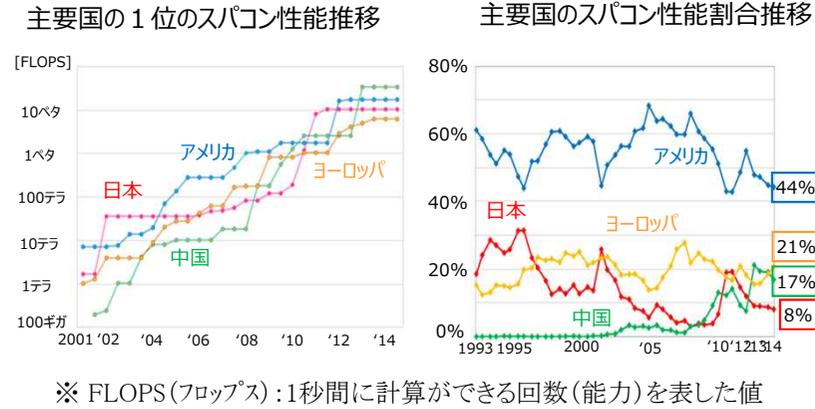


スーパーコンピュータを含む情報科学技術は、そのために欠かせない基盤的ツールであり、
超サイバー社会における我が国の趨勢を左右する重要技術

ポスト「京」の開発（フラッグシップ2020プロジェクト）

平成27年度予定額 : 3,972百万円
 (平成26年度予算額 : 1,206百万円)

- ◆最先端のスーパーコンピュータは、我が国の競争力等の源泉となる最先端の成果を創出する研究開発基盤であり、科学技術の振興、産業競争力の強化、国民生活の安全・安心の確保等に不可欠な「国家基幹技術」。
- ◆科学技術や産業の発展など国の競争力等を左右するため、各国が熾烈な開発競争。
- ◆我が国として、2020年までに世界トップレベルの性能を有し、幅広い課題に対応できるスーパーコンピュータ(フラッグシップシステム)を開発し、社会ニーズに応えた世界を先導する成果を創出することで、課題解決・イノベーション創出に貢献。



概要 ～利用者サイドに立った開発の推進～

- ◆ **システム** (演算性能、電力性能及びコストで国際競争力のある汎用システム) と **アプリケーション** を協調的に開発 (Co-design)。
- ◆ 健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等から選定された **重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(重点課題)** について、**アプリケーション** を開発。
- ◆ 理化学研究所が中心となって研究開発を推進。

◆ 総事業費 約1,300億円 (うち国費分 約1,100億円)。



ポスト「京」で期待される成果例

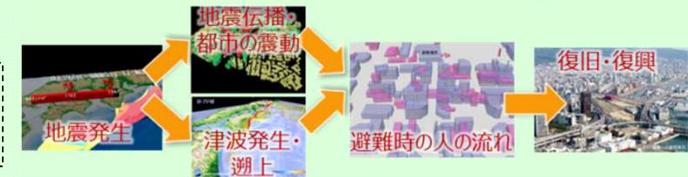
多数のタンパク質、多数の薬剤候補物質を使用したシミュレーションを実施。

候補物質の探索だけでなく、副作用の原因等も分析可能に。



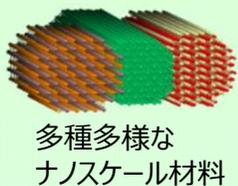
都市全体の被害シミュレーションを行い、地震・津波の影響を統合的に予測。

自治体等の防災・減災計画の策定に貢献。



マテリアルズ・インフォマティクス等を活用しつつ、シミュレーションによる効果的な材料探索を実現。

重要材料の知的財産獲得など、材料・デバイス開発で世界に先行。



車のコンセプトから構造・機能・性能設計に至る主要な設計段階のシミュレーションを統合的に実施。

開発期間短縮・コスト低減・品質向上に貢献。



開発の目的・狙いとスケジュール

【目的・狙い】

国家的に解決を目指す、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題を予め選定し、

- これら課題の解決に資するアプリケーションの開発や課題に関する研究開発の推進に必要な体制を構築するとともに、
- これらのアプリケーションとポスト「京」のシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を協調的に設計開発（Co-design）し、更には、これらのアプリケーションを利活用して行う重点課題に関する研究開発に対し、ポスト「京」の計算資源を重点的に配分する、

ことを通じて、戦略的にポスト「京」を活用し、世界を先導する成果の早期創出を図るとともに、ポスト「京」システム全体として成果を最大化し、国際競争力のあるシステムを実現することを狙いとする。

【スケジュール】



ポスト「京」開発 最近の動き

【基本設計担当企業選定】

平成26年10月 基本設計を担当する企業を富士通株式会社に決定

【システム設計等の評価】

平成26年 7月 ・文部科学省H P C I 計画推進委員会システム検討ワーキンググループ
中間取りまとめ

9月 ・総合科学技術・イノベーション会議（CSTI）評価専門調査会

10月 ・CSTI 評価検討会（2回開催）【非公開】

・文部科学省H P C I 計画推進委員会システム検討ワーキンググループ
取りまとめ

11月 ・CSTI 評価専門調査会（評価取りまとめ）

平成27年 1月 ・総合科学技術・イノベーション会議本会議（評価の決定）

※CSTI評価においては、以下事項が論点として議論された。

- ・ ポスト「京」開発の必要性・意義（一般国民が実感できる具体的なアウトカム）
- ・ プロジェクトでの成果の利活用（下方展開） など

【重点課題アプリケーション開発】

平成26年10月～12月 ・重点課題ごとの実施機関公募

12月25日 ・重点課題実施機関決定・公表

平成27年 1月～ ・事業開始（開発計画策定、推進体制構築着手）

平成27年度 ・アプリケーション開発開始

フラッグシップ2020プロジェクト（ポスト「京」の開発）【文部科学省】 評価結果（案）の概要

（平成25年12月の事前評価の結果を踏まえ、再度の評価を実施）

【概算要求時点での事業計画】

＜実施期間＞平成26(2014)年度～平成31(2019)年度

＜予算額＞平成27年度概算要求額:約47億円、国費総額:約1100億円

事業概要

2020年をターゲットとし、幅広いアプリケーションソフトウェアを高い実効性能で利用できる**世界最高水準のスーパーコンピュータ**と、我が国が直面する課題の解決に資する**アプリケーション**を協調的に**開発**する。

開発目標

- ・最大で「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ソフトウェアを実行した場合の演算速度）
- ・**30～40MW**の消費電力（「京」は12.7MW）

評価結果

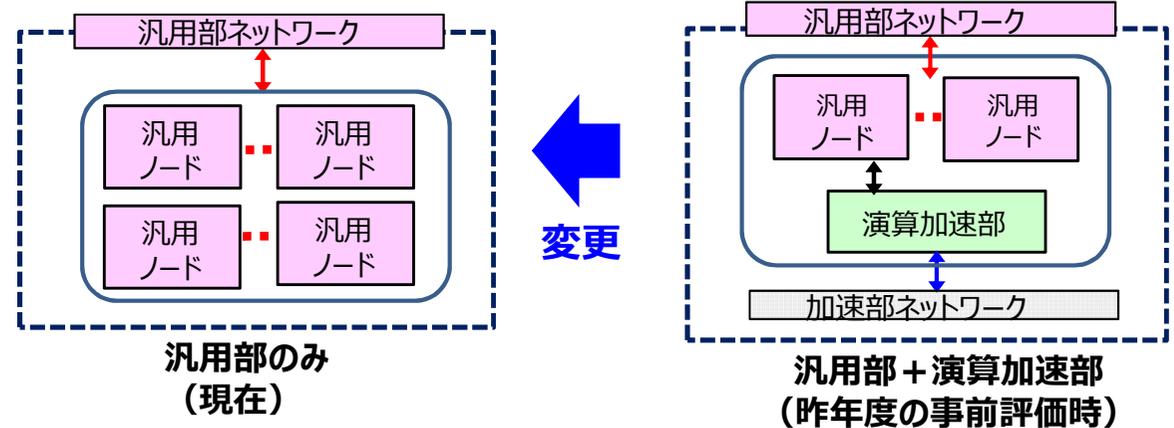
総合評価

- **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**ものであり、**意義・必要性は改めて認められる**。
- ・システム構成の見直しにより、様々なアプリケーションに対応可能な**汎用性の高いシステムを開発**
- ・**世界最高水準の計算機システム**に対応した**開発目標**を設定
- **9つの重点課題の設定**、ターゲットアプリケーションについての適切な方針設定等、**事前評価での指摘事項に対応**。
- 平成28年度に**フォローアップ**を行うほか、平成29年度の文部科学省の中間評価結果を踏まえ、CSTIでの**中間評価**の実施を判断。

主な指摘事項

- ・スパコン開発の**意義・必要性、有効性**を一般国民も実感できるよう、**アウトカムを更に具体化、明確化**すべき。
- ・継続して競争力を確保するための**長期的な技術開発戦略**の検討が必要。
- ・CPU製造の海外委託に際しての歩留りの確保等、**想定されるリスクへの対応策**の検討が必要。

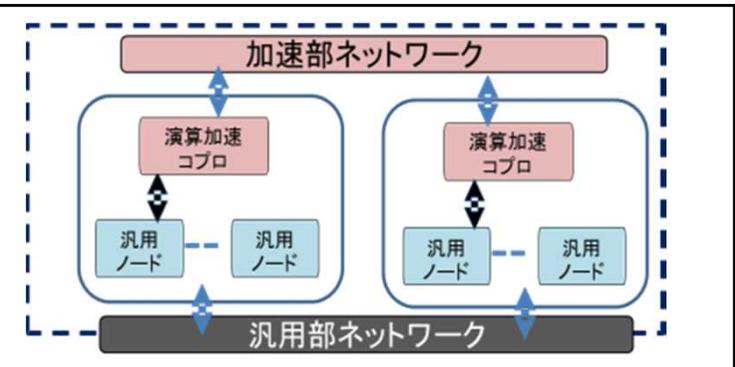
【事前評価後のシステム構成の見直し】



システム構成の見直し

従来の検討システム

多くの課題に対応できる「汎用部」と、特定の課題で高い電力性能と演算性能を発揮する「演算加速部」を組み合わせたシステムにより、エクサスケールを目指す。



重点課題が多様であるため、高い汎用性を持つシステムが不可欠。

演算加速部は、開発・製造コストが高く、有効活用できる課題が少ない。

新たなシステム

- 幅広いアプリケーションが高い実効性能で利用できる汎用システム(汎用部のみのシステム)を開発。
- 2020年をターゲットに、世界トップレベルの性能のシステムを実現し、エクサスケールを目指す。

ポスト「京」 システム開発方針

・課題解決型

- 重点課題及びターゲットアプリケーションに基づく基本設計
(ターゲットアプリケーションの実効性能に基づいた開発目標を設定)
- アプリケーション及びシステムを協調設計
(Co-design)

・国際競争力

- 演算性能、電力性能及びコストで国際競争力のある汎用システムを実現
(汎用性を高めることで理論ピーク演算性能は従来の検討システムより下がるものの、2020年における世界トップレベルの性能を実現)

・国際協力

- 我が国が強みを持つコア技術は確保した上で、国際協力を戦略的に活用
(システムソフトウェアの開発については、平成26年6月、米国と協力取極を締結)

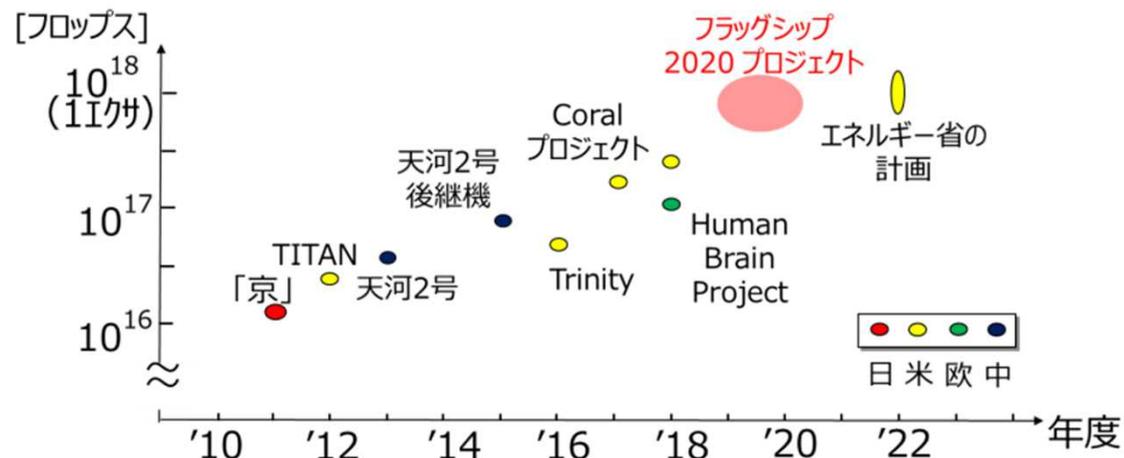
・「京」の資産継承

- 「京」の後継機として、「京」で確立された技術・人材・アプリケーション等を最大限活用

・性能拡張性

- 2020年以降も半導体技術の進展等に応じて効果的・効率的に性能拡張できるシステム

＜各国スパコンの理論ピーク演算性能予想＞



※フロップス：1秒間に計算ができる回数（能力）を表した値

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

有識者会議（主査：小宮山宏 三菱総合研究所理事長）において、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）と、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジな課題（萌芽的課題）を選定。その後、公募で重点課題を実施する機関を決定。

＜重点課題（9課題）＞

- ①社会的・国家的見地から高い意義がある、
- ②世界を先導する成果の創出が期待できる、
- ③ポスト「京」の戦略的活用が期待できる課題を「重点課題」として選定。

カテゴリ	重点課題名	選定実施機関
健康長寿社会の実現	①生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築	理化学研究所生命システム研究センター (課題責任者:奥野 恭史・客員主管研究員) 他5機関
	②個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	東京大学医科学研究所 (課題責任者:宮野 悟・教授) 他5機関
防災・環境問題	③地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	東京大学地震研究所 (課題責任者:堀 宗朗・教授) 他4機関
	④観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化	海洋研究開発機構地球情報基盤センター (課題責任者:高橋 桂子・センター長) 他3機関
エネルギー問題	⑤エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	自然科学研究機構分子科学研究所 (課題責任者:岡崎 進・教授) 他8機関
	⑥革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	東京大学大学院工学系研究科 (課題責任者:吉村 忍・教授) 他11機関

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

＜重点課題（9課題）続き＞

カテゴリ	重点課題名	選定実施機関
産業競争力の強化	⑦次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成	東京大学物性研究所 (課題責任者:常行 真司・教授) 他8機関
	⑧近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発	東京大学生産技術研究所 (課題責任者:加藤 千幸・教授) 他6機関
基礎科学の発展	⑨宇宙の基本法則と進化の解明	筑波大学計算科学研究センター (課題責任者:青木 慎也・客員教授) 他7機関

＜萌芽的課題（4課題）＞

ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジな課題として、今後、調査研究を通じて実現化を検討する。
調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定する。

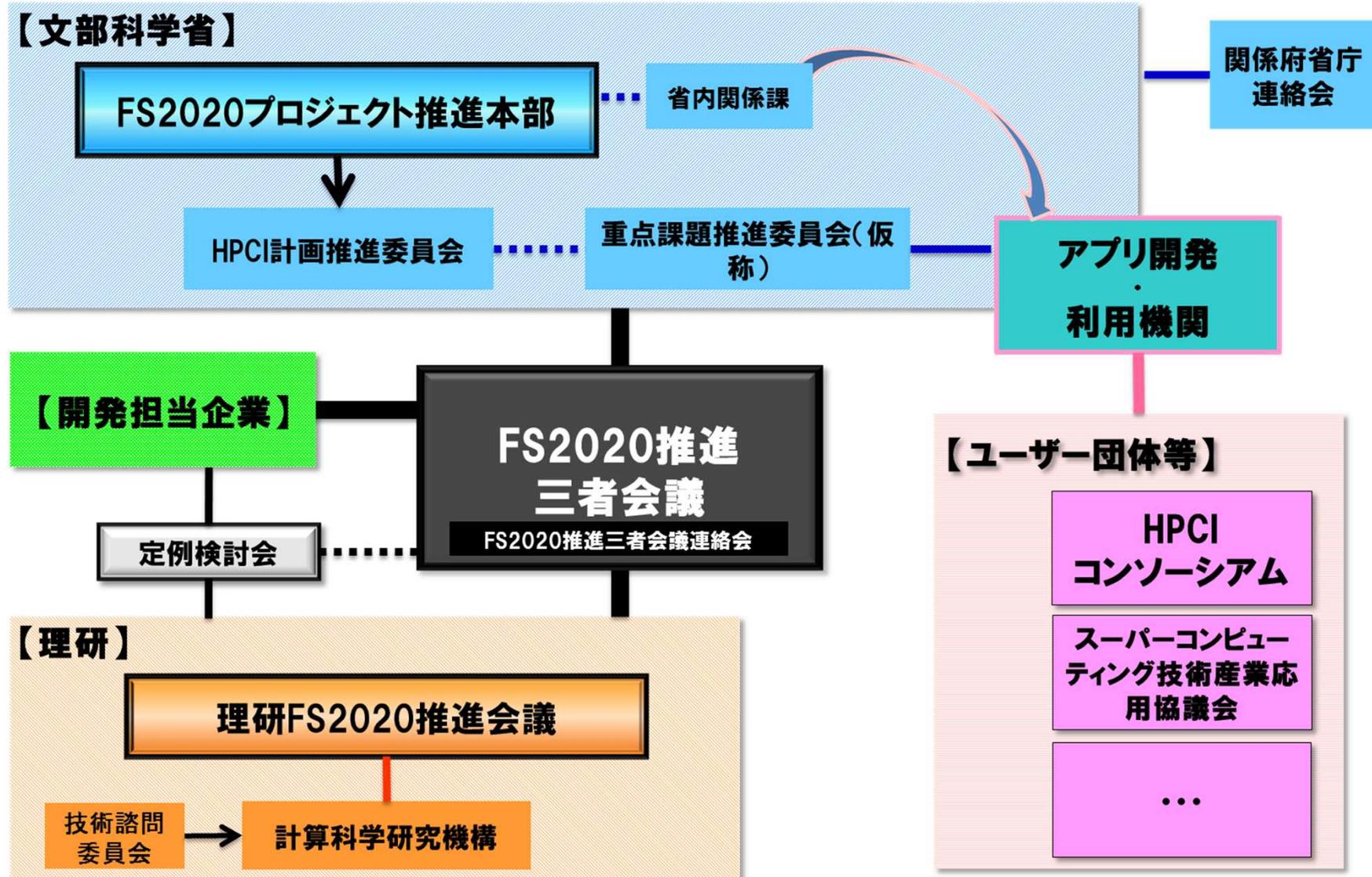
萌芽的課題

将来性を考慮し、今後、実現化を検討する課題	⑩ 基礎科学のフロンティア — 極限への挑戦
	⑪ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究
	⑫ 太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明
	⑬ 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用

プロジェクトの推進体制

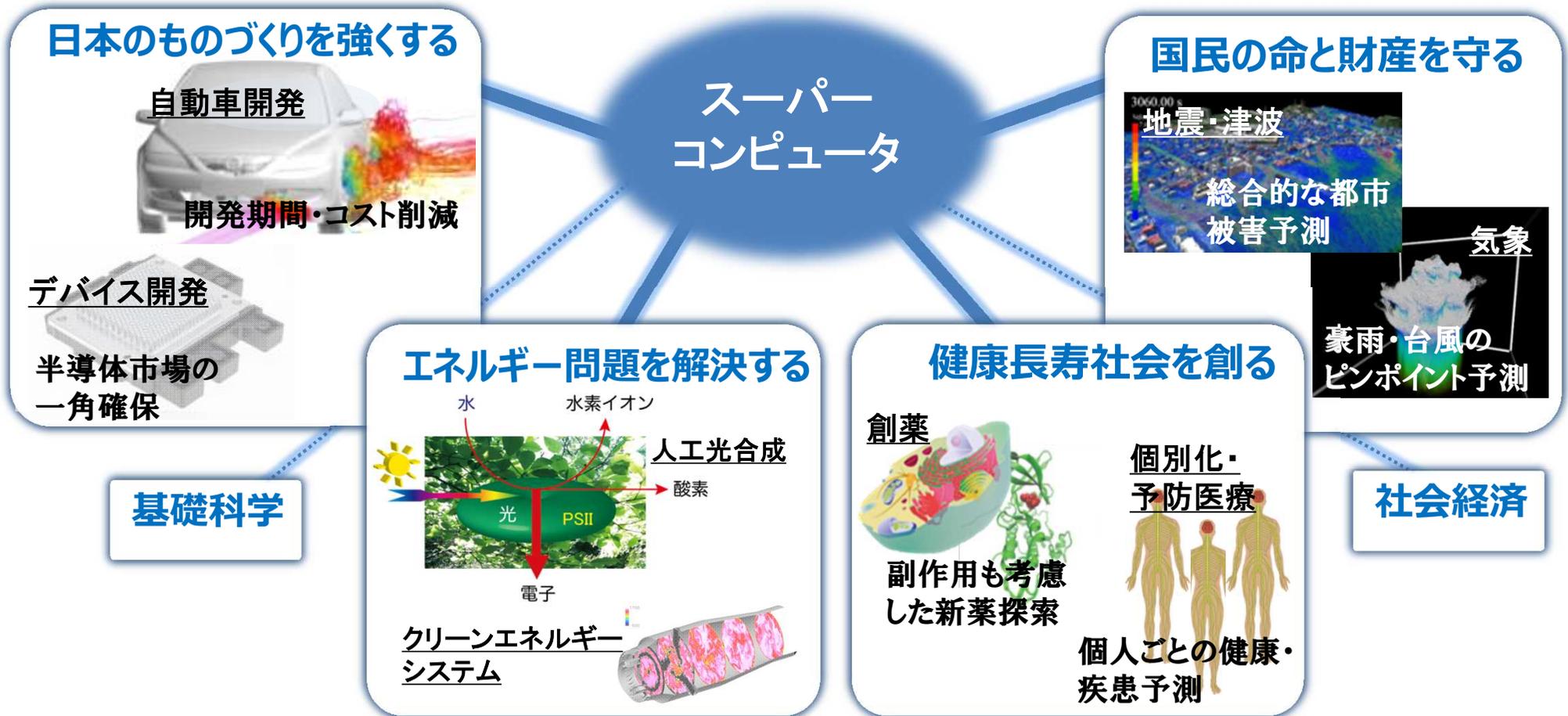
最先端スパコン開発は、将来導入されると見込まれる技術を前提に開発を進めるものであり、不確実性や予見不可能性が高いため、国、開発主体（理化学研究所）及び開発担当企業（富士通株式会社）が密接な連携を取って、プロジェクトを推進するため、「**フラッグシップ2020プロジェクト推進三者会議**」を設置。

さらに、「スーパーコンピュータの利活用に係る関係府省庁連絡会」を開催し意見交換等を行ったほか、今後も引き続き、研究機関・企業・団体等と意見交換を実施し、課題の抽出を行う予定。



まとめ

○超サイバー社会において、ビッグデータとシミュレーションは社会的・科学的課題解決の鍵



- 利用者ニーズに応えたスパコン利用環境を整備、産業利用を促進
- 課題解決に向けた先導的アプリケーションを最大限活かすシステムを構築し、2020年に“ポスト「京」”の共用開始を目指す
- 成果の社会実装を見据え、各科学技術分野の研究開発政策等との連携を深化

ご参考

ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム(1/3)

医療・創薬

ポスト「京」で実施する計算

多数のタンパク質、多数の候補物質を使用したシミュレーションや、健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーションを実施。



スパコンを活用し、候補物質の探索だけでなく、副作用の原因も分析。さらに、個人の医療計測データに基づくシミュレーション手法を構築。

社会への貢献内容

薬のつくり方そのものを革新する薬剤設計技術確立するとともに、個別化・予防医療を支援。

- ✓ 個人ごとのがんの予防と治療戦略の支援を実現し、がんによる死亡者を減少する。

治療困難な
疾病の克服

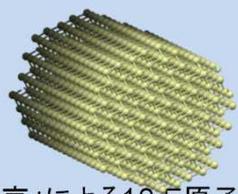


個々人のがんがわかる!

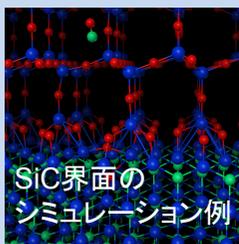
デバイス

ポスト「京」で実施する計算

10万原子以上からなる、SiC（シリコンカーバイド）等の異種物質の界面の構造などに対し、多様な条件下で計算を実施。



「京」による10万原子シリコンワイヤ



SiC界面のシミュレーション例

ナノデバイスをコンピュータ上で設計・解析し、特性を把握。

社会への貢献内容

マテリアルズ・インフォマティクス等を活用しつつ、新奇機能デバイスを先行開発。

- ✓ 半導体市場(30兆円)の一角確保。(2025年頃まで)

ポストシリコンテクノロジーで
半導体ビジネスの復権へ

三菱電機
パワー半導体



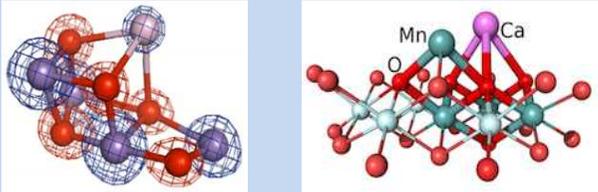
TOYOTA EV
15

ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム(2/3)

人工光合成

ポスト「京」で実施する計算

天然光合成系における酸素発生の状態について、タンパク質の影響を考慮した、数十万原子を取り扱う計算を実施。



天然光合成の酸素発生前中心のX線結晶構造 (左), 人工光合成の候補触媒の構造 (右) 引用: 大阪市大・神谷信夫教授, CALTEC・Agapie教授

天然光合成系の原理をシミュレーションで解明。

社会への貢献内容

CO₂と水から人工光合成でプラスチック原料等基幹化学品を製造。

- ✓ 基幹化学品の20% (250万トン/年) を製造。(2030年)
→ 約3,500億円/年規模に相当。
- ✓ 約800万トン/年のCO₂削減。
(経済産業省ARPCHEM資料より)

人工光合成によるエネルギー・環境問題の解決

ポスト「京」で実施する計算

試作試験では実現不可能な実走行データや人体損傷モデルを活用したシミュレーションや、試作実験(風洞実験等)を代替するシミュレーションを実施。



全体俯瞰設計

車のコンセプトから構造・機能・性能設計にいたる主要な設計フェーズのシミュレーションを統合的に実施。

社会への貢献内容

生産性を引き上げる新しいものづくりシステムを構築。(2025年頃まで)

- ✓ 実験ではできない解析により、性能の高い製品開発が可能に。
- ✓ 抜本的な開発工数削減により、安価・短期間での製品開発が可能に。(日本の自動車メーカー全体で、試作車削減・実験費用削減効果は数百億円/年)

産業競争力強化に貢献

革新的な車(デザイン、品質、性能)ができる!



エンジニア・デザイナーの働き方が変わる!

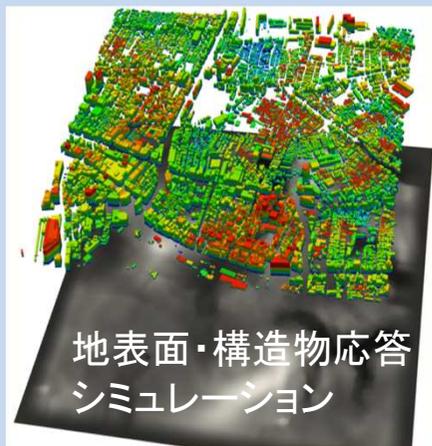
ものづくり

ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム(3/3)

防災(地震・津波)

ポスト「京」で実施する計算

地震の不確定さをも考慮し、津波の遡上、建造物の被害、避難・交通・経済活動の影響などを詳細な都市モデルを使って計算。



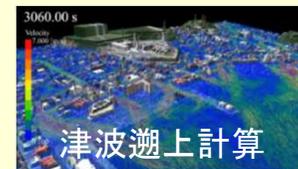
都市全体の一次・二次被害のシミュレーションを行い、地震・津波の災害の影響を統合的に予測。

社会への貢献内容

地震・津波による複合災害についての予測システムを構築。

- ✓ 行政(内閣府・自治体)の防災・減災計画への反映。
- ✓ 約6,500億円の経済的な波及効果。(直接効果・三菱総研調べ)

国土強靱化に貢献



防災(気象)

ポスト「京」で実施する計算

新型センサ・観測衛星によるビッグデータを融合した予測シミュレーションを実施。(台風の進路予測だけでなく、確率に基づいて発生も予測。また、ゲリラ豪雨・竜巻の突発的極端気象を予測。)



観測ビッグデータを用いた、高解像度・高速での気象予測。

社会への貢献内容

台風からゲリラ豪雨・竜巻等のグローバルからローカルまでの気象災害シームレス予測技術の革新により、安全・安心の確保の礎を築く。

- ✓ 例えば、局所的ゲリラ豪雨予測では100m以下の解像度で30秒毎に更新するリードタイム1時間の予測手法を確立(ポスト「京」開始後5年以内)

防災・危機管理に貢献