

今後の HPCI 計画推進の在り方について(中間報告)＜概要＞

1. 計算科学技術を巡る状況

【計算科学技術の意義】

計算科学技術，特にスーパーコンピュータを用いたシミュレーションは，理論，実験に並ぶ科学技術の第 3 の手法として，科学技術の様々な分野において不可欠な研究開発基盤となってきた。また，科学技術の振興のみならず，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，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，スーパーコンピュータは，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，今後ますますその重要性は高まっていくと考えられる。

【国際的な状況】

このように計算科学技術の重要性が増加している中で，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。

米国は，HPC 法のもと計画的にスーパーコンピュータの開発・利用を推進しており，世界の計算能力の約半分を占めるとともに，世界トップのシステムを数多く開発している。また，主要なベンダを巻き込んで，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いる。

欧州においても，着実にスーパーコンピュータの整備・利用が進められており，欧州全体の計算能力は日本を超えている。また，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。

中国は，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，2013 年 6 月の TOP500 では天河 2 号が 1 位となっている。また，CPU の自主開発を進めるとともに，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。

さらに，ロシアやインドにおいてもスーパーコンピュータの自主開発が進んでいるとともに，韓国においては HPC 法を制定し，同法に基づく中長期計画を策

定している。

【国内の状況】

我が国においても、計算科学技術の振興を積極的に図ってきており、第4期科学技術基本計画においても、ハイパフォーマンスコンピューティング技術を国家安全保障・基幹技術として位置づけ、国として強力に推進していくこととされている。

こうした方針を踏まえ、文部科学省では平成18年度から「京」の開発・整備及び「京」を中核にユーザの多様なニーズに対応するHPCIの構築とその利用の推進を図ってきている。既に、「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するとともに、「京」を中核としたHPCIは平成24年9月に運用を開始し、多くの研究者による利用が進んでいるところである。

このような中、我が国の計算資源の使用量は毎年約1.8倍という伸びでコンスタントに増加してきており、今後とも増加していくものと考えられる。一方、世界の総計算能力に対する我が国の計算能力は、「地球シミュレータ」や「京」などの大規模システムの整備により一時的に増加するものの、長期的には減少傾向となっており、今後の我が国の計算科学技術インフラを全体としてどのように維持・発展させていくかが重要な課題と考えられる。

また、「京」の開発により、我が国は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するとともに、「京」の利用研究でも2年連続でゴードンベル賞(コンピュータシミュレーション分野で最高の賞)を受賞するなど、様々な研究成果を創出している。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「京」で蓄積した技術・経験・人材を活用し、スーパーコンピュータの開発に必要な技術を適切に維持・発展させていくことが重要である。

【利用技術の動向】

自然科学の分野では、既に様々な分野でシミュレーションが活用されている。特に「京」の能力を最大限活用することにより、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。(参考1参照)

一方で、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・科学的課題も多くあり(参考 2 参照), 更に能力の高いスーパーコンピュータを利用したシミュレーションの実現が期待されている。

さらに, 経済・金融, 伝染病の伝搬など社会科学分野におけるスーパーコンピュータの利用や, ビッグデータの処理などの新しい課題への対応も重要となっており, このような点にも留意しつつ, 我が国の計算科学技術インフラの整備を進めていくことが必要である。

また, 自動車・船舶・航空機の開発や新材料開発などをはじめとして, 産業界におけるスーパーコンピュータ利用のニーズは高く, 今後, 産業利用の裾野を広げイノベーション創出につなげていくため, 産業利用促進策が重要になると考えられている。

2. 我が国における計算科学技術システムの在り方

このような状況を踏まえ, 我が国の計算科学技術インフラ全体のグランドデザインとしては, 世界トップレベルのスーパーコンピュータやその次のレベルのスーパーコンピュータを複層的に配置し, 全体として多様なユーザニーズに対応できる世界最高水準の計算科学技術インフラを維持・強化するという考え方が重要である。

その上で, 我が国の計算科学技術全体を発展させ, 世界における当該分野の優位性を維持し, 我が国の科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献するため, 世界トップレベルの高い性能を持つリーディングマシンを国が戦略的に整備をしていくことが重要である。

このリーディングマシンとしては, 高い計算性能を持ち幅広い分野をカバーするシステムをフラッグシップシステムとして一つ開発・運用するとともに, 当該システムを支える特徴ある複数のシステムを開発・整備することも視野に入れて具体的に検討する。

また, 全国共同利用・共同研究を進めている 9 大学情報基盤センターのシステムは, 次のレベルのシステムとして, 我が国のトップレベルの計算能力を先端又は大規模な計算を行う幅広い分野の研究者に提供する役割を果たすことが必要である。これらのシステムについては戦略的に更新・整備していくと

ともに、必要に応じて、大学内のシステムの集約や複数機関での共同導入・運用についても検討していく。

さらに、我が国の計算科学技術インフラを適切に維持・強化していくために、文部科学省において、リーディングマシン整備計画や 9 大学情報基盤センターのシステムの更新計画を含む長期的な整備計画を策定し、数年ごとに見直しを行いながら、戦略的にインフラの整備を進めていくことが必要である。

3. 研究開発の方向性

我が国の計算科学技術を今後とも発展させ、科学技術の振興やイノベーションの創出に貢献していくためには、2. で述べたように我が国の計算科学技術インフラ全体を維持強化するとともに、ハードウェアとアプリケーションの両者のバランスをとりつつ、計算科学技術の研究開発を着実に進めていくことが必要である。その際、社会的・科学的課題への対応という観点から、システムの研究者とアプリケーションの研究者が共同(co-design)で進めていくという考え方が重要である。

また、リーディングマシンの開発は今後の計算科学技術をリードできること、早期の画期的な成果創出が可能となること、国内産業への波及効果が期待できることから、国内で継続的に実施することが重要である。

リーディングマシンのうちフラッグシップシステムについては、2020 年頃にエクサスケールの計算能力を持つシステムの開発を目指すこととし、具体的な内容(スケジュール、スペック、使用する要素技術等)については開発主体候補の検討に基づき、具体的な方向性について検討を行うことが有効である。

一方、フラッグシップシステムを支える複数の特徴あるシステムについては、フラッグシップシステムの特徴を踏まえ、国が利用分野、スペックやスケジュール等を定め、公募により必要性、将来性等を評価した上で、主体を定め進めていくことが適当である。

なお、リーディングマシンの研究開発に当たっては、様々な計算要求に配慮しつつ、社会的・科学的課題の解決の観点からその必要性やスペックを適切に判断していくとともに、「京」に要した経費や費用対効果にも留意し、費用の精査を行う必要がある。

また、リーディングマシンの開発と並行して、当該システムの能力を最大限に発揮するようなアプリケーションについても、開発主体、大学等の連携と役割分担のもと、開発を進めることが重要である。

さらに、国際協力の戦略的な推進が重要であり、日米のシステムソフトウェアに関する協力や、アジアの国々との連携も視野に入れたアプリケーションの共同開発・利用なども推進していく。

4. 利用の在り方, 人材育成等

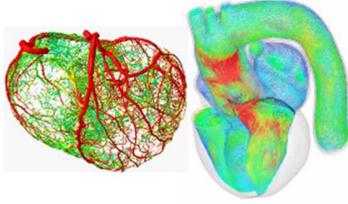
計算科学技術により、我が国の科学技術の一層の発展、産業競争力の強化を図っていくためには、産業利用も含め利用の促進を図ることや、計算科学技術を支える人材の育成が重要であり、今後更に具体的な検討が必要である。

また、今後とも計算科学技術の各施策を着実に進めていくため、積極的に広報や情報発信等を行い、スーパーコンピュータの利用や研究開発の状況、成果等について適切に国民に説明していくことが必要であり、その在り方については今後更に検討を行う。

なお、「4. 利用の在り方, 人材育成等」については、本ワーキンググループで更に調査検討を進め、平成 25 年度末を目途にとりまとめる最終報告に反映していくこととする。

「京」の活用により、心臓全体を精密に再現し、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価への貢献やものづくりの設計・開発の大幅な期間短縮、コスト削減などで**画期的な成果をあげつつある。**

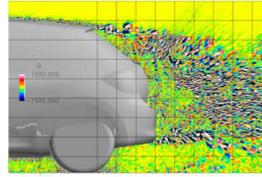
● 心臓病治療等への貢献 (研究代表者: 東京大学・久田俊明)



分子レベルからの心臓まるごとシミュレーション

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**。これにより、**治療法の検討や薬の効果の評価**に貢献。

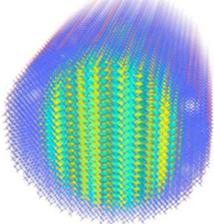
● 製品設計の効率化への貢献 (研究代表者: 東京大学・加藤千幸)



車両挙動を解明する全乱流渦のシミュレーション

自動車などの設計に「京」を活用することにより、**風洞実験などを完全にシミュレーションで代替**。さらに、**実験では解析できない現象を、シミュレーションにより解明**。これにより、**設計の期間短縮、コスト削減**に貢献。

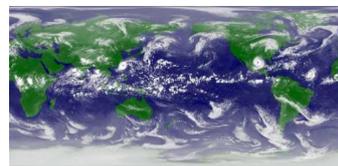
● 次世代半導体デバイスの開発への貢献 (研究代表者: 東京大学・押山淳、岩田潤一)



シリコン・ナノワイヤ内の電流の通り道の解析

数万原子の精密シミュレーションにより、**次世代半導体として有望視されているシリコン・ナノワイヤ中の電子状態等をまるごと計算**。これにより、**次世代半導体の性能向上**に貢献。

● 長期の台風発生予測への貢献 (研究代表者: JAMSTEC・時岡達志、東京大学・木本昌秀、佐藤正樹)



全球雲解像モデルによるシミュレーション

これまで**2週間先の気象予測が限界であったところ**、雲まで解像できる世界初の高解像度の**大気モデル**を用いて、**約1ヶ月先の有効な予測に成功**。これにより、**長期の台風発生予測**に貢献。

「京」からの発展: 将来の計算科学技術で期待される成果

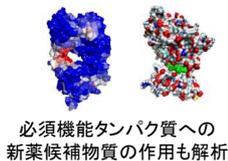
● 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

【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**。



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

【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。



必須機能タンパク質への新薬候補物質の作用も解析

● 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。



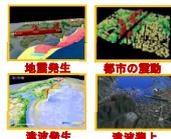
【将来】車への影響だけでなく、**乗員の体への影響** (骨や内臓等の損傷) も評価し、**より安全性の高い車体の開発**に貢献。



※黒い部分が損傷部位

● 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**。

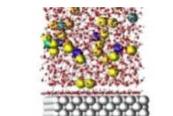


【将来】地震発生から避難予測までを統合した**広域複合災害の被害予測**によるきめ細やかな防災・減災対策、さらには**社会科学との連携**により復興対策に貢献。



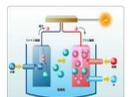
● 安全性・耐性に優れた高性能電池の開発

【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**。



白金電極上の電子状態シミュレーション

【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。



燃料電池等の活性や安定性を高精度計算で精緻に予測