

「京」を中核としたHPCIの現状と 今後のスパコン開発・利用のあり方について

平成25年5月13日

文部科学省 大臣官房審議官（研究振興局担当）

菱山 豊

本日お話する内容

- I. スーパーコンピュータについて**
- II. 国際的な状況について**
- III. 我が国における現在の取り組み**
- IV. 将来のスーパーコンピュータの開発に向けて**

1. スーパーコンピュータについて

最先端の科学技術には スパコンによるシミュレーションが不可欠

◆科学技術の3つの方法

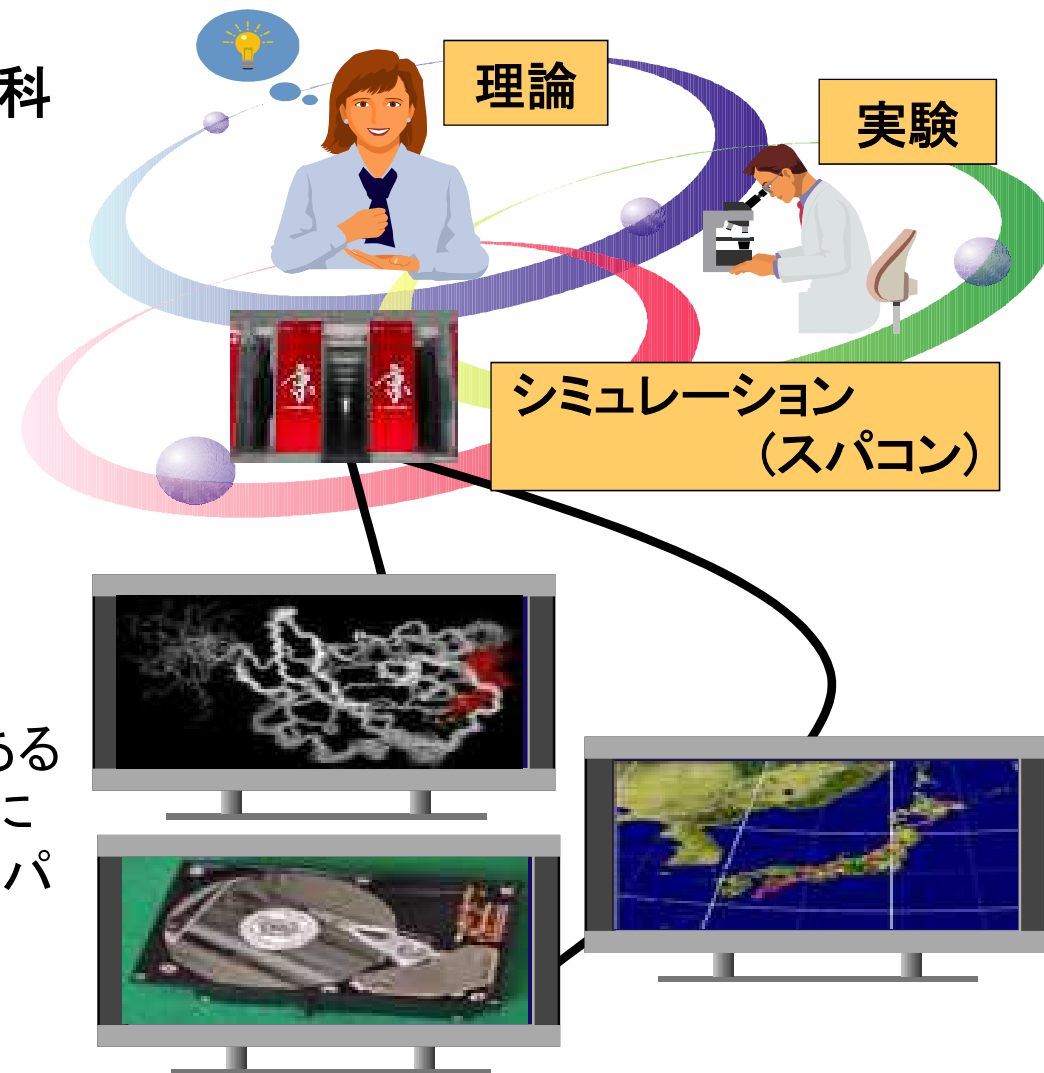
シミュレーションは、理論、実験と並ぶ、第3の科学技術の方法

- ・実験が困難な現象の解明や実験に時間がかかりすぎる場合、スパコンを用いて仮想的に実験
- ・スパコンを用いたシミュレーションの規模や対象分野は、スパコンの能力や計算手法の向上、計測機器の高度化などにより、絶えず拡大

◆高性能計算機(スパコン)とシミュレーション

先端科学技術の実験に高度な実験装置が必要であるのと同様、より高精度なシミュレーションにより、世界に先駆けて、結果を出すためには、世界最高性能のスパコンが必要

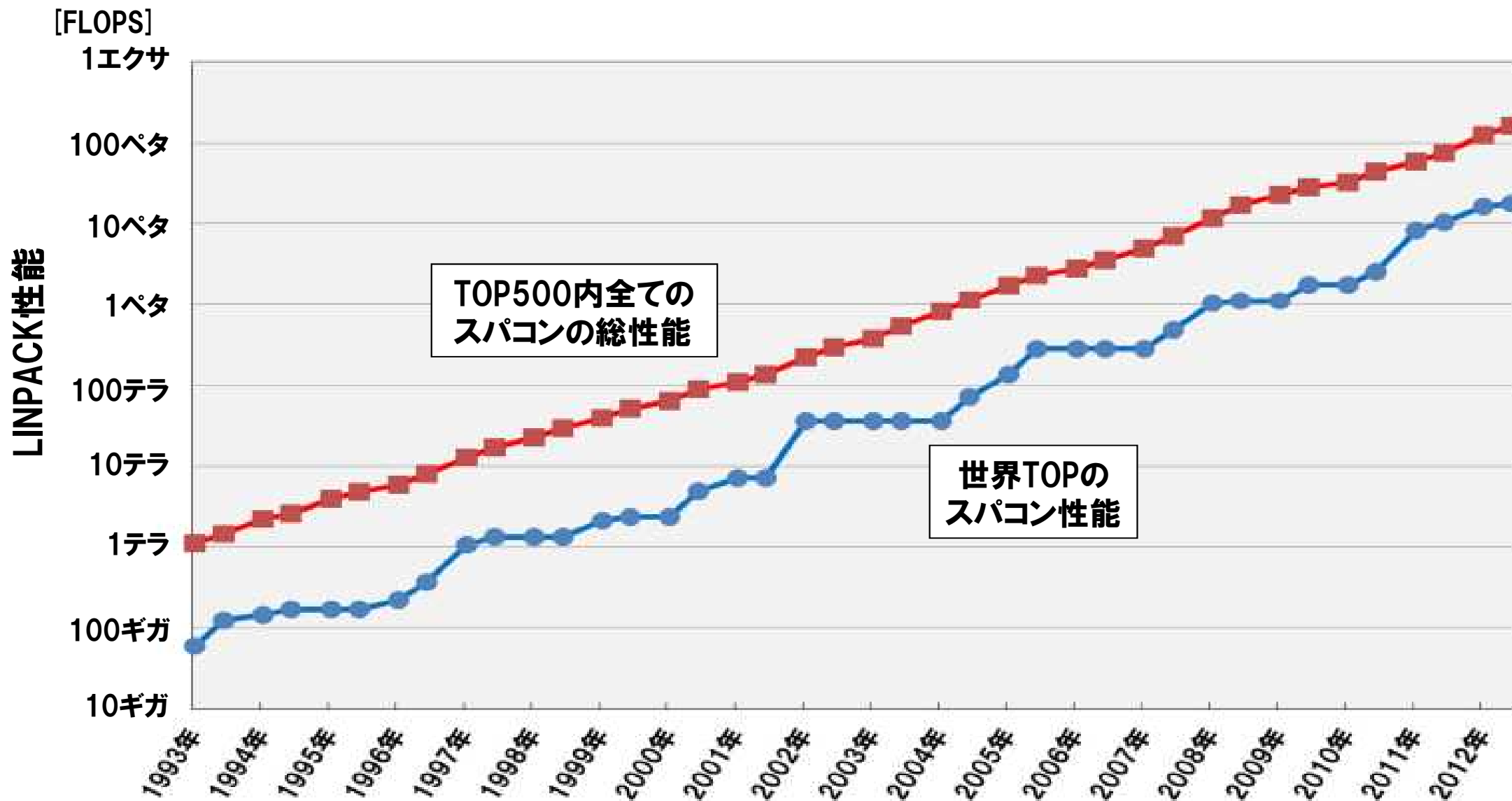
→ 世界的にスパコンの開発・整備が
加速している状況



II. 国際的な状況について

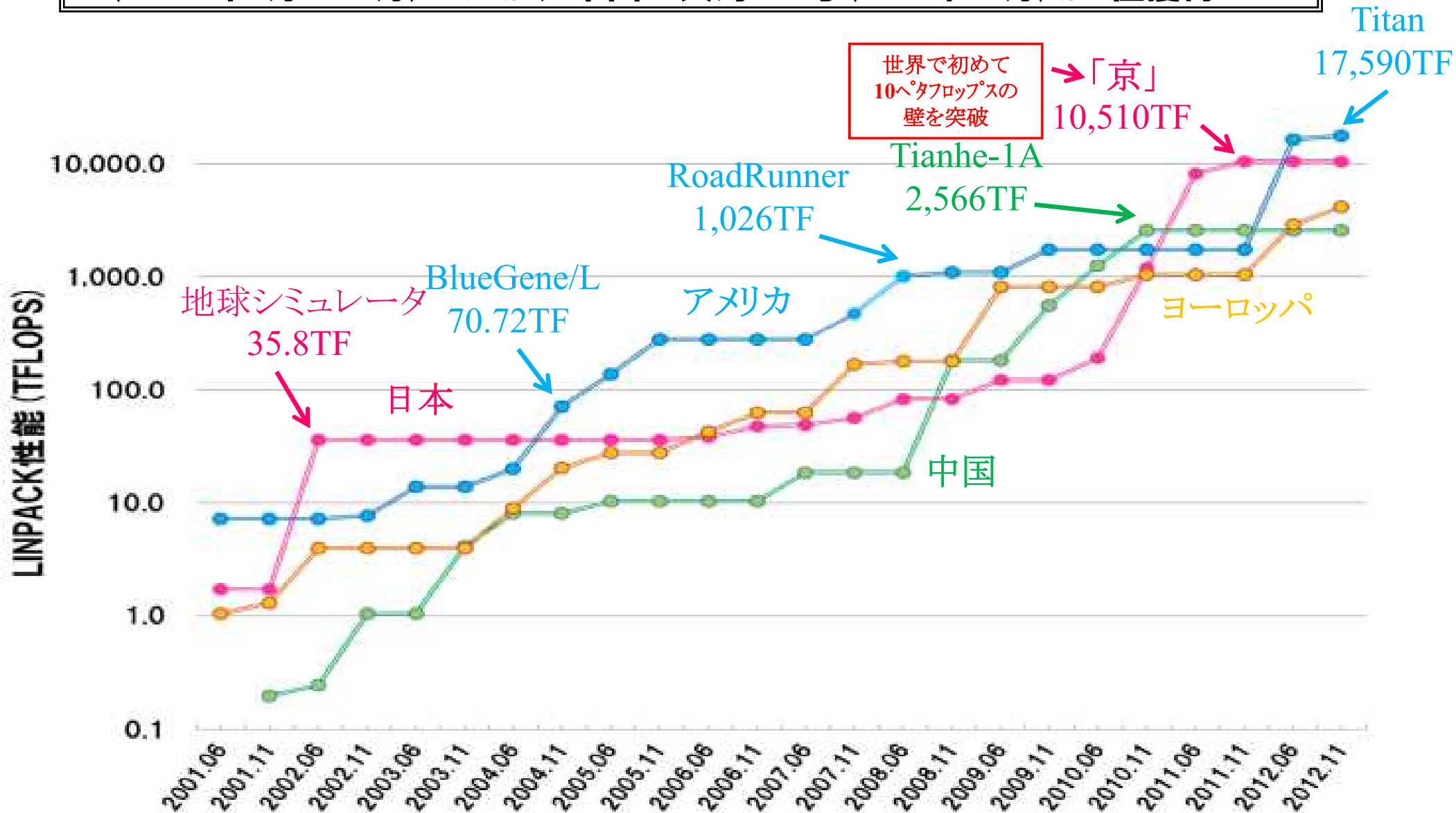
世界のスパコン性能推移

TOP500内全てのスパコンの総性能及び世界TOPのスパコン性能は堅調に増加。



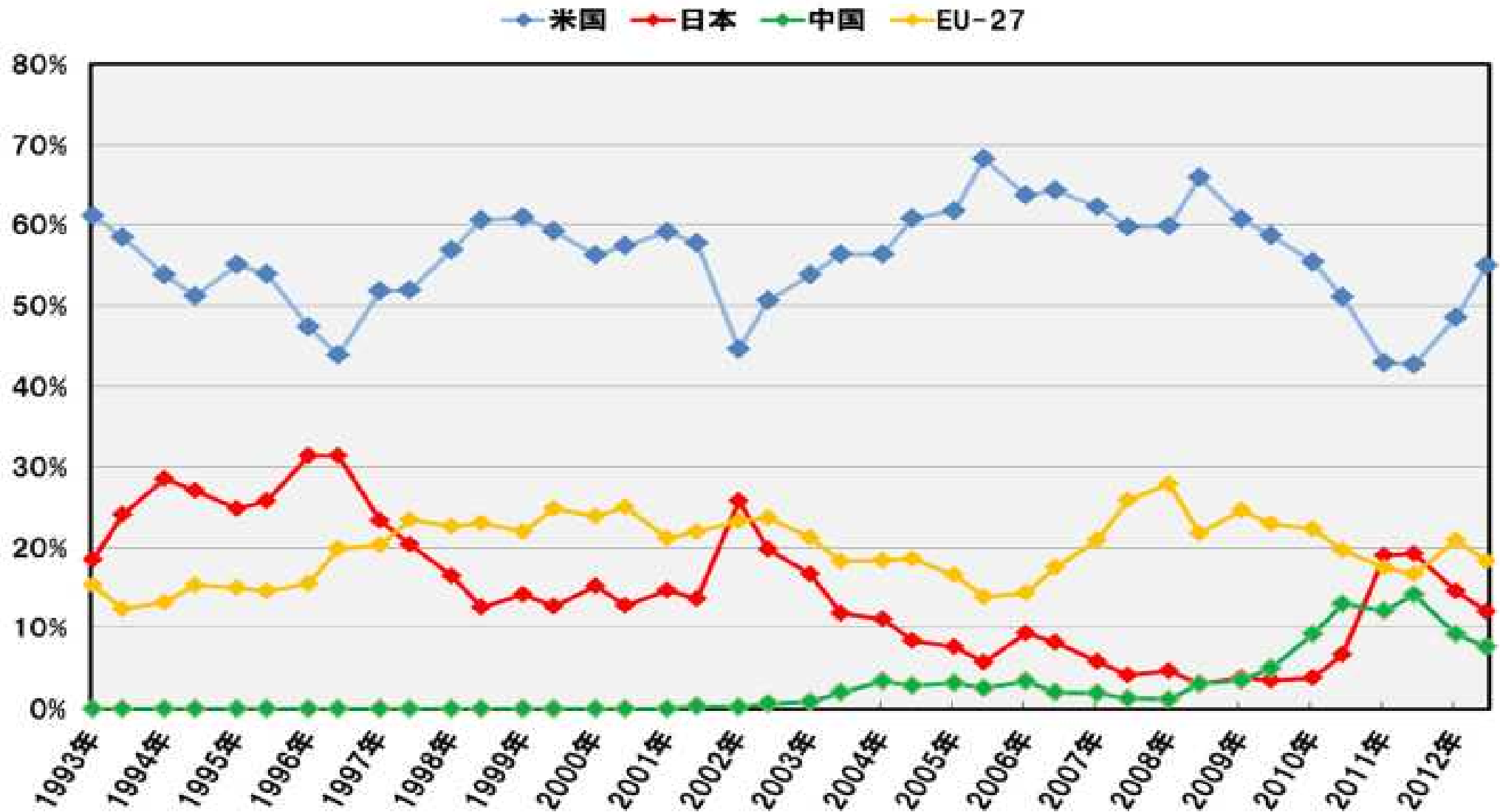
TOP500の各国1位の推移

- ・ 米国が直近2回をはじめとして、大半のランキングで1位を獲得
- ・ 米国以外では日本の地球シミュレータ (2002年6月～2004年6月) 及び「京」 (2011年6月・11月) のほか、中国の天河1A号 (2010年11月) が1位獲得



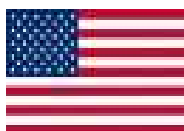
TOP500 国別性能割合推移

- ・ 米国は直近20年にわたり世界の計算能力の約半分を保有
- ・ 中国の躍進が目覚ましい一方、日本は長期的には減少傾向



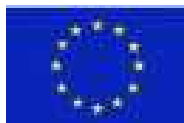
世界各国のハイパフォーマンス・コンピューティング（HPC）への取組

- 各国とも、経済成長、国家安全保障、産業競争力・科学技術力強化に必須という共通認識の下、HPC関連の技術開発を重要政策と位置づけ、国主導で研究開発を推進。
- エクサスケール(1エクサ=1000ペタ=100京)コンピューティングの2020年頃の実現を見据えて、技術開発プロジェクトが世界各国において活発に実施。



米国

- ・HPC法(1991年制定)のもと、国家的投資により計画的にスパコンの開発・利用を推進し、世界に先駆けて20ペタFLOPSを超えるスパコンを開発するなど、世界トップのスパコンシステムを数多く開発。
- ・最先端のスパコンを幅広い研究者が利用するための枠組みとしてINCITE(DOE:2003年～)を実施中。(地球気候変動、生命科学、新物質探求などの課題に計算資源を配分。)
- ・主要スパコンベンダ(IBM、Intel、NVIDIA等)を巻き込んで、2020年頃のエクサFLOPSシステムの整備に向けた研究開発を推進。



EU

- ・欧州各国スパコンを欧州全体の計算基盤として利用するPRACE(2008年～)の枠組みの中で、複数のペタFLOPS級のスパコンについても整備。
- ・2020年頃のエクサスケール実現を目指して、ハードとソフトの研究開発を実施中。



中国

- ・2015年までに100ペタFLOPS級コンピュータを開発、2020年にはエクサスケールの実現に向けて推進。(HPC関連に重点的投資をし、計画的に研究開発を推進することを発表。)



ロシア



インド



韓国

- ・ロシアやインドにおいてもスパコンの自主開発を含め、その整備・利用が積極的に進められている。
- ・韓国ではHPC法を制定し、超高性能コンピュータを国家レベルで重点育成するための中長期計画(第1次国家最高性能コンピュータ育成基本計画)を策定。

III. 我が国における現在の取り組み

第4期科学技術基本計画 平成23年8月19日閣議決定 (HPCI関係抜粋)

Ⅲ. 我が国が直面する重要課題への対応

2. 重要課題達成のための施策の推進

(4) 国家存立の基盤の保持

i) 国家安全保障・基幹技術の強化

有用資源の開発や確保に向けた海洋探査及び開発技術、情報収集や通信をはじめ国の安全保障や安全な国民生活の実現等にもつながる宇宙輸送や衛星開発及び利用に関する技術、地震や津波等の早期検知に向けた陸域、海域における稠密観測、監視、災害情報伝達に関する技術、独自のエネルギー源確保のための新たなエネルギーに関する技術、**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**、地理空間情報に関する技術、さらに能動的で信頼性の高い(ディペンダブルな)情報セキュリティに関する技術の研究開発を推進する。

(5) 科学技術の共通基盤の充実、強化

i) 領域横断的な科学技術の強化

先端計測及び解析技術等の発展につながるナノテクノロジーや光・量子科学技術、**シミュレーションやe-サイエンス等の高度情報通信技術**、数理科学、システム科学技術など、複数領域に横断的に活用することが可能な科学技術や融合領域の科学技術に関する研究開発を推進する。

Ⅳ. 基礎研究及び人材育成の強化

4. 国際水準の研究環境及び基盤の形成

(1) 大学及び公的研究機関における研究開発環境の整備

②先端研究施設及び設備の整備、共用促進

<推進方策>

・国は、公的研究機関を中心に、世界最先端の研究開発の推進に加えて、幅広い分野への活用が期待される**先端研究施設及び設備の整備**、更新等を着実に進めるとともに、**その着実な運用や、「共用法」に基づく施設など世界最先端の研究施設及び設備について共用を促進するための支援**を行う。

・公的研究機関等は、保有する**施設及び設備の共用を促進**するとともに、これを利用する研究者や機関の利便性を高めるため、安定的な運転時間の確保や利用者ニーズを把握した上での技術支援者の適切な配置など、利用者支援体制を充実、強化する。また、優れた研究成果が創出できるよう、共用に際して、研究課題の公募や選定の在り方を含め、より成果が期待される研究開発を戦略的に実施するための方策を講じる。

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、グリーン・ライフイノベーション等に貢献。

(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 138億円 (169億円)

(i) 「京」の運営 115億円 (150億円)

(内訳) ※H24年度は開発に係る経費含む

- ・「京」の運用等経費 106億円 (97億円)
- ・特定高速電子計算機施設利用促進9億円 (9億円)

我が国の高性能計算環境の中核となるスーパーコンピュータ「京」の運用を着実にすすめる。

(ii) HPCIの運営 23億円 (19億円)

多様な利用者のニーズに応じ、我が国の計算資源を最適に活用するとともに、データの共有や共同分析などを可能とするための研究基盤を構築する。平成25年度は、平成24年9月28日に共用開始したHPCIのシステムの着実な運用を行う。また、将来のHPCIのシステムのあり方の調査研究を行う。

(2) HPCI利用の推進 26億円 (31億円)

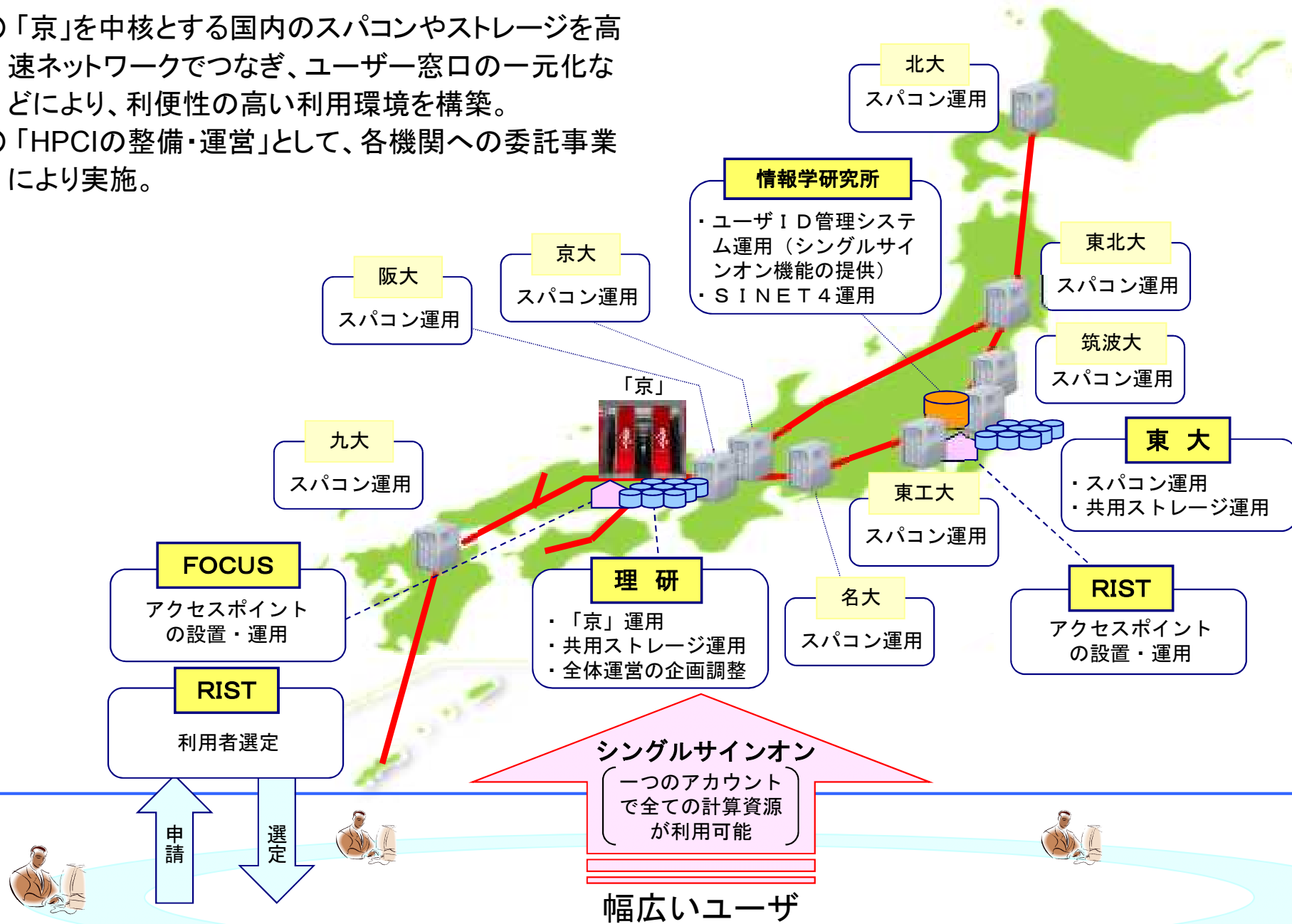
HPCI戦略プログラム 26億円 (31億円)

「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、戦略機関を中心に下記の戦略分野における「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進。

HPCIの枠組み

- 「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎ、ユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。
- 「HPCIの整備・運営」として、各機関への委託事業により実施。



スーパーコンピュータ「京（けい）」の概要

- ・2011年6月と11月の二期連続で世界スパコン性能ランキング(TOP500)において1位を獲得
- ・「京」の利用研究が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の最高の賞)を受賞

○概要

- ◆平成23年11月にLINPACK性能※1 10ペタフロップス※2達成。
- ◆平成24年6月システム完成済(兵庫県神戸市の理化学研究所に設置)
- ◆平成24年9月28日に共用開始

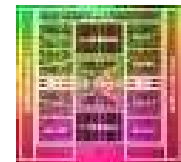
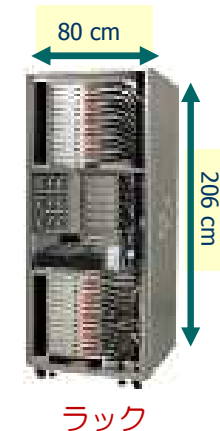
※1 スーパーコンピュータの性能を測るための世界的な指標(ベンチマークプログラム,

※2 10ペタフロップス:一秒間に1京回(=10,000兆回=10¹⁶回)の足し算, 掛け算が可能な性能

○プロジェクト経費 約1,110億円(H18~H24)

○特長

- ◆全CPUフル稼働時の連続実行時間は29時間以上で世界最高水準の信頼性
- ◆世界トップ10の実行効率(理論性能に対する実際の性能の比率)平均が78%のところ、「京」は93%
- ◆アプリケーションプログラムの実効性能や使いやすさに関して高い性能
- ◆水冷システムの導入により消費電力の削減や故障率の低減に寄与
- ◆六次元メッシュ/トーラス結合の採用による高い利便性・耐故障性・運用性
- ◆共用法に基づき、登録機関(高度情報科学技術研究機構)と理化学研究所が連携し、「京」を利用する体制を構築。



CPU(富士通製)
8万個以上を使用



「京」のハードウェア構成

システム全体

計算ラック 864



計算速度：1京回/秒
=10ペタフロップス
メモリ容量：1.27PB

計算ラック群

計算ラック×8



計算速度：98.4兆回/秒
メモリ容量：12TB

計算ラック

システムボード×24
IOシステムボード×6

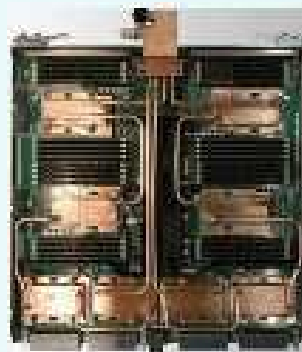


計算速度：12.3兆回/秒
メモリ容量：1.5TB

図提供：富士通

システムボード

ノード×4

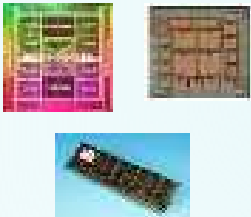


計算速度：5120億回/秒
メモリ容量：64GB

図提供：富士通

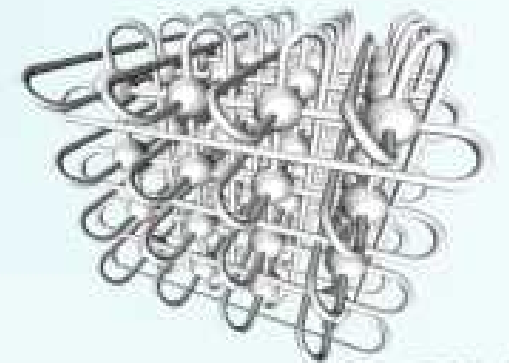
ノード

CPU×1
ICC×1
メモリ



計算速度：1280億回/秒
メモリ容量：16GB

図提供：富士通



図提供：富士通

ノード間NW(Tofu)

「京」の共用の枠組み

国(文部科学省): 特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に基づく
共用の促進に関する基本的な方針の策定

提言

実施計画の認可

実施計画・業務規程の認可

理化学研究所(設置者・実施主体)
[計算科学研究機構(神戸)]

(法定業務)

- 「京」の開発
- 施設の建設・維持管理
- 超高速電子計算機の供用

連携

「京」【共用施設】



登録施設利用促進機関(登録機関)
[高度情報科学技術研究機構]

(法定業務)

- 利用者選定業務
- 利用支援業務
(情報の提供、相談等の援助 等)

23年10月に選定
24年4月から業務開始

理研、登録機関、コンソーシアム
三位一体の連携により
広範な分野での活用を促進

提言

利用の
応募

(戦略機関につい
ては、優先的に利
用枠を確保)

公正な課題選
定、情報提供、
研究相談、技
術指導等

HPCIコンソーシアム

計算資源提供機関やユーザーコミュニティ機関等

HPCIの整備・運用や、
計算科学技術振興に関わる意見を
幅広く集約し提言

利用者のニーズ

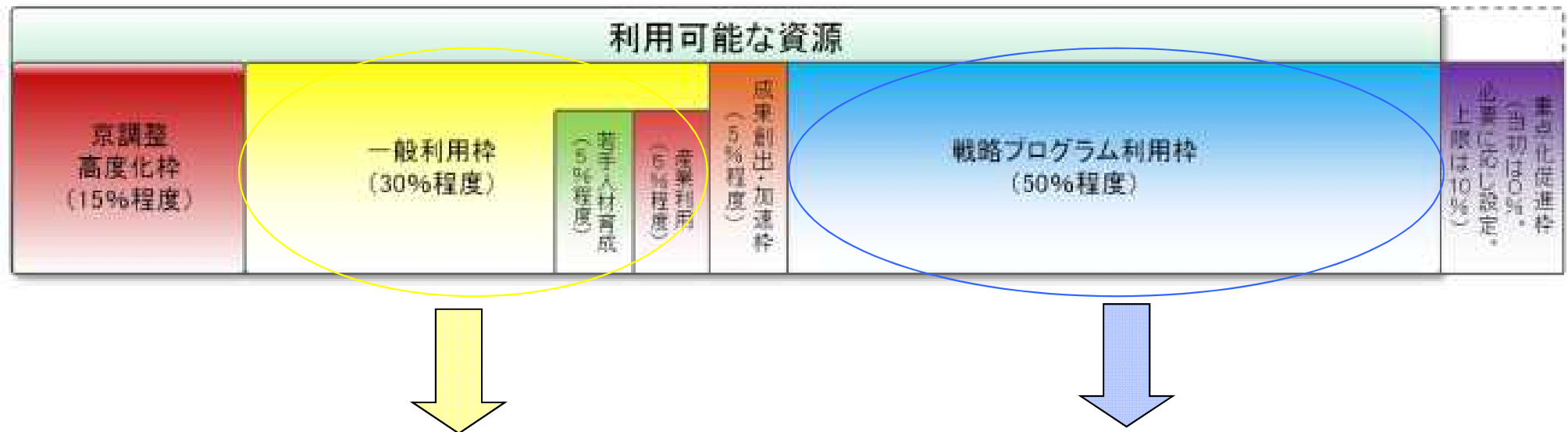
戦略機関(社会が期待する画期的な成果創出のため、「京」を中核とするHPCIの重点的・戦略的な利用)

利用者(大学、独立行政法人、産業界等、基礎研究から産業利用まで幅広い利用)

「京」の利用者選定について

＜京の利用枠＞

京の利用については公募に基づいて選定する一般利用枠と公募によらず重要なテーマ・課題を選定する戦略プログラム利用枠等がある。



＜一般利用枠＞

産業界を含め幅広い利用者を対象に公募し、申請のあった者の中から課題審査委員会の審査を経て利用者が選定される。

＜戦略プログラム利用枠＞

文部科学省が戦略的見地から配分内容を定め、登録機関によるプロセス審査を経て利用者が選定される。

※なお、利用料金については産業利用で成果非公開の場合有償とする。
(1ペタフロップスを1時間使った場合約10万円)

HPCI戦略プログラム戦略分野

「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最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進する。

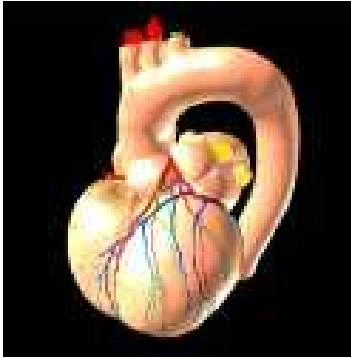
<戦略分野>		<戦略機関>
分野1	予測する生命科学・医療および創薬基盤 ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測をおこなう。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。	・理化学研究所
分野2	新物質・エネルギー創成 物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。	・東大物性研(代表) ・分子研 ・東北大金材研
分野3	防災・減災に資する地球変動予測 高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。	・海洋研究開発機構
分野4	次世代ものづくり 先端的要素技術の創成～組み合わせ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。	・東大生産研(代表) ・宇宙航空研究開発機構 ・日本原子力研究開発機構
分野5	物質と宇宙の起源と構造 物質の究極的微細構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。	・筑波大(代表) ・高エネ研 ・国立天文台

※ スーパーコンピュータ「京」で、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野を「戦略分野」(5分野)とする。

※ 各戦略分野の研究開発、分野振興等を牽引する機関を「戦略機関」とする。

「京」によって期待される成果の例（1）

● 心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション（研究代表者：東京大学・久田俊明）



心臓シミュレーション

細胞・組織・臓器を部分ではなく、**心臓全体をありのままに再現**し、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価に貢献

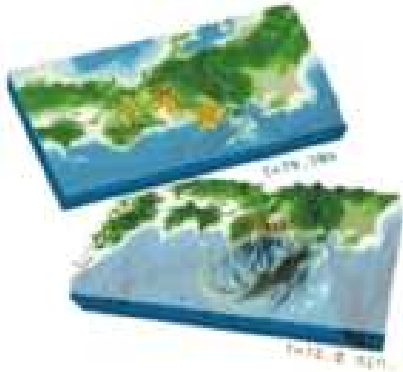
● 創薬応用シミュレーション（研究代表者：東京大学・藤谷秀章）



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）**して画期的な新薬の開発に貢献

薬候補のタンパク質への高精度結合シミュレーション

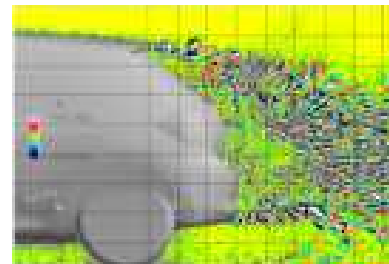
● 地震・津波の予測精度の高度化に関する研究（研究代表者：東京大学・古村孝志、東北大学・今村文彦）



シミュレーションによる地震・津波の被害予測

50m単位（ブロック単位）での予測から地盤沈下や液状化現象等の影響も加味した**10m単位（家単位）の詳細な予測**を可能とし、都市整備計画への活用による**災害に強い街作りやきめ細かな避難計画の策定**等に貢献

● 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発（研究代表者：東京大学・加藤千幸）



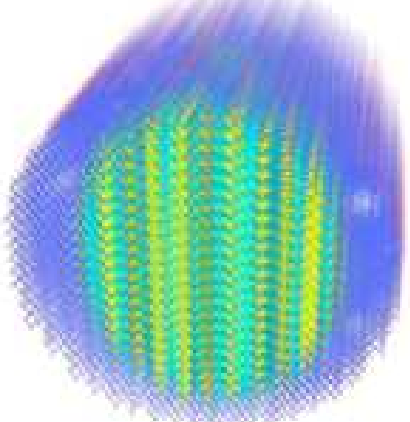
車両挙動を解明する全乱流渦のシミュレーション

乱流の直接計算を工業製品の熱流体設計に適用することにより、従来行われていた**風洞実験などを完全にシミュレーションで代替**し、設計の効率化に貢献

「京」によって期待される成果の例（2）

● シリコンナノワイヤーのシミュレーション

（研究代表者：東京大学・押山淳、岩田潤一）

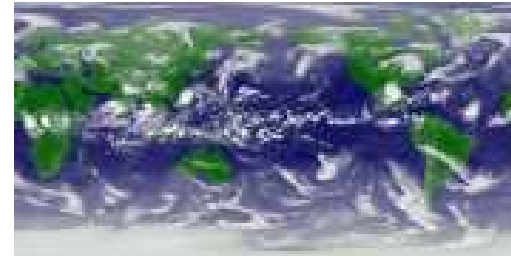


シリコンナノワイヤー内の
電流の通り道の解析

ナノレベルの精密シミュレーションにより、**低消費電力トランジスタなどの新しいデバイスや高効率な電池材料などの機能性材料の開発等に貢献**

● 地球規模の気候・環境変動予測

（研究代表者：JAMSTEC・時岡達志、東京大学・木本昌秀、佐藤正樹）

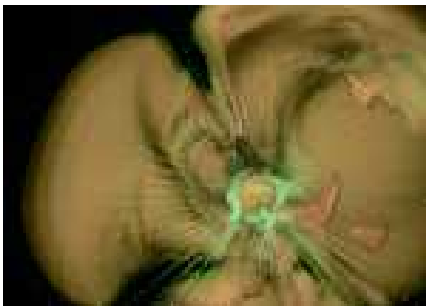


全球雲解像モデルNICAM
によるシミュレーション

世界初の雲まで解像できる高解像度の大気モデルを用いて、熱帯の巨大積雲群の東進を予測。**2週間以上先の天気予報の可能性を切り開く**

● 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明

（研究代表者：京都大学・柴田大）

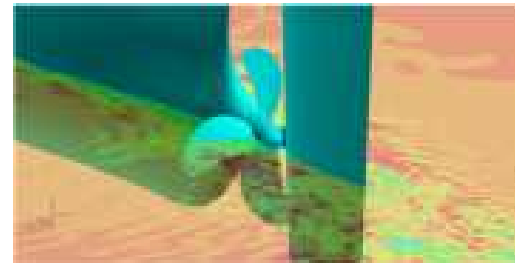


超新星爆発の
3次元シミュレーション

高精度な一般相対論的流体計算及びニュートリノ輻射輸送計算で、従来再現に成功していない**重力崩壊型超新星爆発及びブラックホール誕生過程を解析、評価する**

● 船体まわりの流れのシミュレーション

（研究代表者：東京大学・加藤千幸）



プロペラ回転や波の影響も考慮した、
300億格子規模の超大規模実用計算

（財団法人 日本造船技術センター 提供）

ミクロンオーダーの渦まで再現することにより、予測精度を飛躍的に向上させ、**実験を完全にシミュレーションで代替し、開発コスト・開発期間を大幅に削減することを目指す**

産業利用促進に向けた取り組み

- 「京」及びHPCIの産業界の利用は、我が国の産業競争力強化とともに、「京」等の成果を社会に還元する上でも重要。
- 一方で、「京」等の産業界の利用に当たって、様々な課題に適切に対応することにより、産業利用の促進を図っている。
- 平成24年5月から6月にかけて行った「京」の一般公募では、産業利用課題の応募は29件で要求資源量が4倍以上の競争率になるなど、産業界からも想定を上回る利用の申し込み。
- 平成25年度においても産業利用枠を含む追加公募を実施(平成25年度下半期分)するなど、産業利用促進に向けた取り組みを加速。

産業利用促進策

- 有効性が実証できる枠組み
 - ✓トライアル・ユース枠の設定 等
- 利用支援の強化
 - ✓情報の一元的提供
 - ✓利用者講習会の実施
 - ✓コンシェルジュ的相談窓口の設置
 - ✓ソフトウェア移植・チューニング支援 等
- 利用環境の整備
 - ✓SINET4への産業界からのスムーズな接続
 - ✓アクセスポイント(東西2カ所)の設置
 - ✓成果の帰属と知財権の明確化 等



「京」の技術支援



「京」の利用者講習会

「京」を利用している主な民間企業

(平成25年3月現在)

＜成果公開型(17件)＞

富士フイルム、ブリヂストン、トヨタ自動車、住友ゴム工業、武田薬品工業、住友化学、清水建設、竹中工務店、など

＜成果非公開型(5件)＞

大日本住友製薬、第一三共、など

＜トライアル・ユース※(6件)＞

三ツ星ベルト、東洋ゴム工業、など

これまでに「京」を利用した企業は**総勢46企業**

※トライアル・ユースについては随時募集中

IV. 将来のスーパーコンピュータ の開発に向けて

将来のスーパーコンピュータの開発戦略についての 文科省の取り組み

※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

○技術的事項の検討

将来のHPCI(※)システムのあり方の調査研究 (平成24年度から2カ年)

- ・公募により システム設計研究チームとアプリケーションソフトウェアチームを選定。
- ・システム設計研究チームでは、技術動向調査、システム設計研究、システムソフトウェアの検討等を行う。
- ・アプリケーションソフトウェアチームでは、サイエンスロードマップの策定、評価用アプリの抽出、それを用いたシステムの評価等を行う。
- ・これらの活動をもとに、**5～10年後の我が国のHPCIシステムに必要な技術的知見を獲得**する。

【選定結果】

分野	主管事業実施機関
アプリ	理化学研究所
システム設計	東京大学
	筑波大学
	東北大学

ワーキンググループ
の議論に反映

○政策に関する検討

今後のHPCI(※)計画推進のあり方に関する 検討ワーキンググループ(平成24年2月～)

- ・研究振興局長の諮問会議であるHPCI計画推進委員会の下に設置
- ・今後10年程度を見据え、国内外の計算科学技術の動向、HPCIシステム構成のあり方、HPCI全体のネットワークや利用体制のあり方、今後の研究開発のあり方等について調査検討を実施。
- ・**本年5月8日に中間報告案をとりまとめ。パブリックコメントを経て6月に中間報告をとりまとめ予定。**
- ・**来年3月頃を目途に最終報告をとりまとめる予定。**

今後のHPCI計画推進のあり方を決定

中間報告（案）のポイント（1）

～我が国の開発・整備に係るグランドデザイン～

- ◆ トップレベルやその次のレベルのスパコンを複層的に配置し、全体として世界最高水準のインフラの維持強化が必要。
- ◆ 我が国の計算科学技術を発展させ、科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献できる、世界トップレベルの性能を持つリーディングマシンを国として戦略的かつ継続的に整備。
- ◆ その次のレベルのスパコンとして、9大学※情報基盤センターのシステムを着実に更新し、HPCIを通じ我が国全体の基盤としていく。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。
※9大学：北大、東北大、筑波大、東大、東工大、名大、京大、阪大、九大
- ◆ 長期的な計画を策定し、リーディングマシンの開発や9大学情報基盤センターのスパコンの更新など、戦略的に我が国の計算科学技術システムの整備を進める。

中間報告（案）のポイント（2） ～リーディングマシン1～

- ◆リーディングマシンは、我が国の計算科学技術の発展や我が国産業の競争力強化等の観点から、国内で継続的に開発していくことが重要。
- ◆その際、ハードウェアの研究者とアプリケーションの研究者の共同（Co-design）により、研究開発を進めていくことが重要。
- ◆また、様々な社会的・科学的課題に的確に対応できるよう以下のシステムの開発・整備を視野に入れ具体的に検討。それぞれの計画はメリハリをつけ、効率的に実施。
 - 世界トップレベルの高い計算能力を持ち幅広い分野をカバーする1つのフラッグシップシステム
 - フラッグシップシステムを支える特徴的な複数のシステム

中間報告（案）のポイント（3） ～リーディングマシン2～

フラッグシップシステム

利用のニーズや諸外国の動向等を踏まえ、2020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、その詳細は、開発主体候補からのヒアリングを踏まえ、今後具体化。

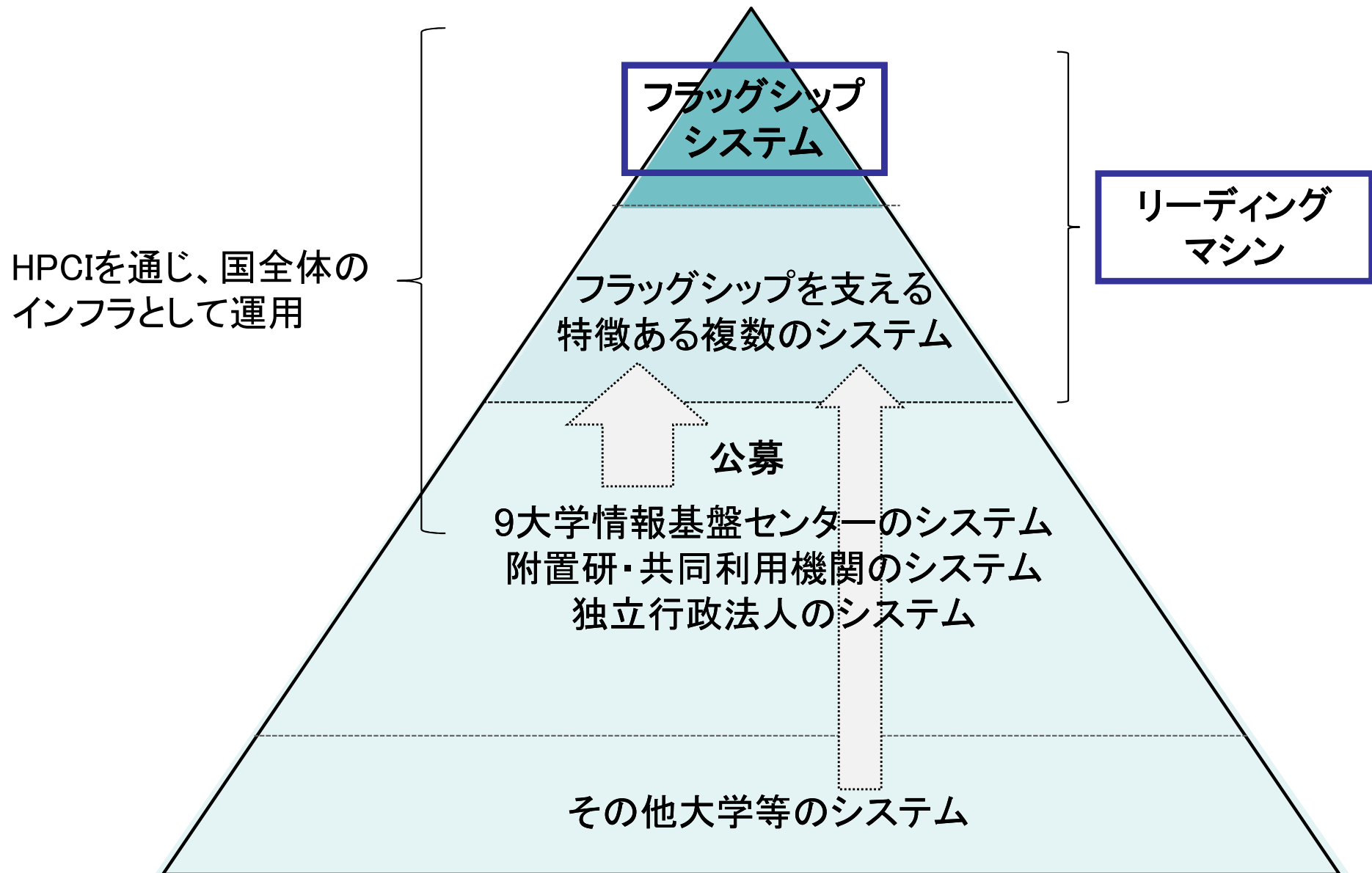
フラッグシップシステムを支える複数のシステム

フラッグシップシステムの内容を踏まえ、必要性等を評価した上で、公募により具体化。

※いずれのシステムについても、社会的・科学的課題の解決という観点から、その必要性やスペックについて適切に判断していくことが必要。

中間報告（案）のポイント（４） ～我が国の計算科学技術インフラのイメージ～

<我が国の計算科学技術インフラのイメージ>



中間報告（案）のポイント（5） ～アプリケーション開発他～

<アプリケーションの開発と国際協力>

- ◆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、開発を進めることが重要。
- ◆スパコンの効果的・効率的な開発のためには、国際協力の推進が重要であり、システムソフトウェアについては日米協力の具体化を期待。

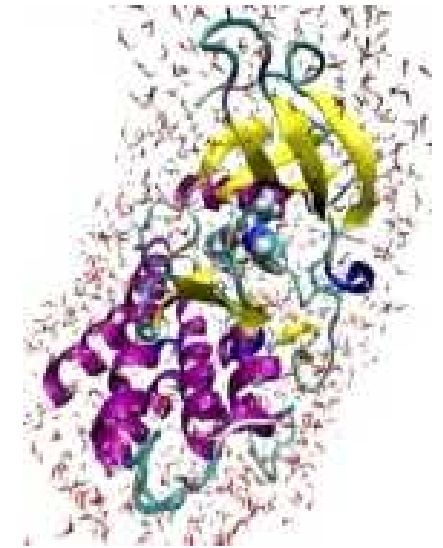
<その他>

産業利用を含めた利用の在り方，人材育成などについては，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。

● 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

現状

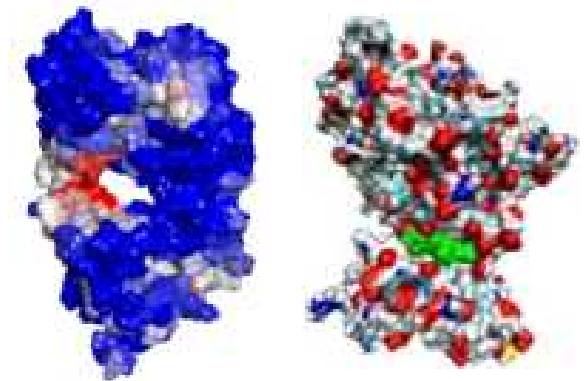
特定の標的タンパク質（病気の原因物質）に対するシミュレーションにより、新薬候補物質の絞り込みを効率化。



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

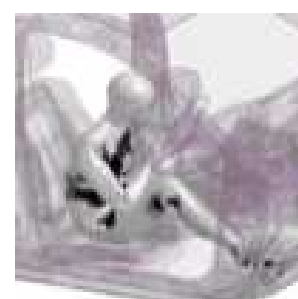
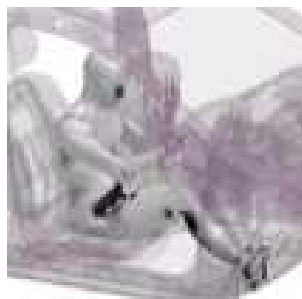
現状

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