

ポスト「京」重点課題 全体概要

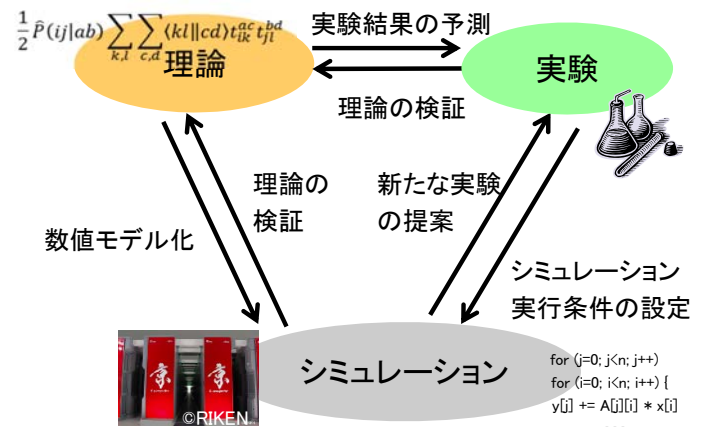
平成28年1月29日

研究振興局参事官（情報担当）付
計算科学技術推進室

計算機シミュレーションの意義

<シミュレーションとは>

- ・ 自然現象や社会現象について、理論から得られる数式を数値モデル化し、コンピュータ上で数値計算を行い、模擬的に実験を行うこと。
- ・ 理論、実験と並ぶ第3の科学的手法である。



<シミュレーションにより実現できる「限界の突破」>

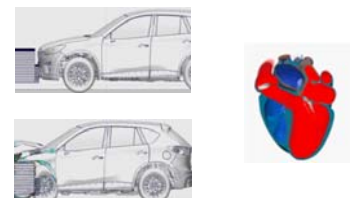
①実験・観測上の限界を突破する

- 物理的に実験・観測困難なもの
 - 実際の実験にリスクが伴うもの
 - 実験・観測にコストがかかりすぎるもの
- 例)
- ・顕微鏡で見ることのできない分子・原子レベルの材料解析
 - ・超新星爆発の様子再現
 - ・地震・津波の被害予測



②コストと精度・信頼性の限界を突破する

- 実験回数・開発期間・開発コストを削減
 - より精密な結果を得る
- 例)
- ・自動車の衝突シミュレーション
 - ・心臓手術をコンピュータ上で再現し、術後の状態を予測



我が国が直面する課題に対応するため、2020年をターゲットに、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。

背景

- ◆ 世界最高水準のスーパーコンピュータは、理論、実験と並ぶ科学技術の第3の手法であるシミュレーションのための強力なツールとして、我が国の競争力の源泉となる先端的な研究成果を生み出す研究開発基盤。
- ◆ 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基幹技術であり、国の競争力等を左右するため、各国が熾烈な開発競争。

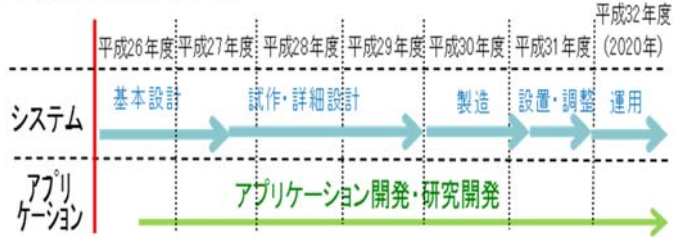


理化学研究所計算科学研究機構
 (兵庫県神戸市)

概要

- ◆ 汎用性の高いシステムとアプリケーションを協調的に開発。
- ◆ 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社会的・科学的課題について、アプリケーションを開発。
 (重点的な応用分野の明確化として、九つの重点課題と、新たにに取り組むべきチャレンジングな課題である四つの萌芽的課題を設定)
- ◆ 総事業費 約1,300億円(うち国費分 約1,100億円)

開発スケジュール



期待されるアウトカム例

航空機	実機・実スケールの超高精度解析を実施し、航空機の燃費改善や安全性の向上に貢献	個別化医療	医療ビッグデータ解析等により、個人ごとのがんの予防と治療戦略を実現 <i>個々人のがんがわかる!</i>	新物質創成	ナノスケールでの特性を予測し、最適な材料の探索・創製により次世代のデバイスを設計	気象・気候	観測ビッグデータを活用した高速シミュレーションで、リアルタイム・ピンポイントな豪雨予測を実施

ポスト「京」で期待される成果

出口を見据え戦略的にアウトカムを導出

例:ものづくり

- “製品の企画段階から、デジタル化・自動化” 企業の開発コスト・期間を削減。
- 世界に先駆けて、高性能な製品を開発。
- 多数の企業と協働して社会実装。

例:地震・津波対策

- “地震が起きたとき、街がどうなるのか” 建物の損壊や人の流れも考慮した、現実的な防災計画が実現。
- 自治体と協働して社会実装。

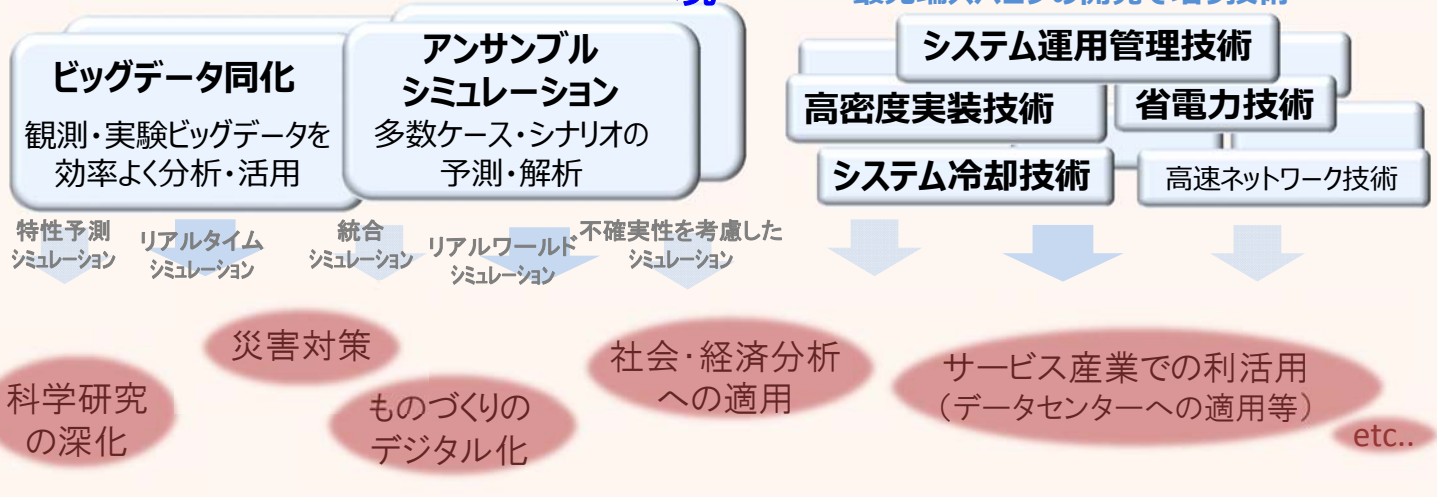


分野横断的・国際的に、将来につながる技術の波及を実現

最先端スパコンの利用で培う技術

現

最先端スパコンの開発で培う技術



検討の経緯

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4月～平成26年3月)

- 今後10年程度を見据えた合計25回の検討の後、我が国の計算科学技術インフラの在り方と研究開発の方向性及び利用の在り方・人材育成等についてとりまとめられた(平成25年6月中間取りまとめ、平成26年3月最終取りまとめ)。
- 我が国の計算科学技術インフラの開発・整備に係るグランドデザインが検討され、我が国を代表し、世界トップレベルの高い計算性能と幅広い分野における適用性を有する一つのフラッグシップシステムと、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を、国が戦略的に整備していくことが重要。

【将来のHPCIシステムのあり方の調査研究(～平成26年3月)】 国家存立の基礎である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を発展させ、我が国の国際競争力の強化、社会の安全・安心の確保等をはかるため、ハードウェアの技術動向調査、システム設計研究のほか、我が国の社会的・科学的課題の抽出、システムを評価するアプリの抽出等を行い、将来のHPCIシステムの開発に必要な技術的知見を獲得する。

システム検討サブワーキンググループ(平成25年7月～8月)
次期フラッグシップシステムの基本設計を実施するに当たっての検討・評価を実施。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会 (平成26年4月～8月)

- 重点的に取り組む社会的・科学的課題や早期の成果創出に向けた研究開発体制等を検討。
→創薬、防災・環境、エネルギー、ものづくり、宇宙など**9つの重点課題を選定**。
→社会経済現象、人工知能など新たに取り組むチャレンジングな**4つの萌芽的課題を選定**。

HPCI計画推進委員会 次期フラッグシップシステムに係るシステム検討WG (平成26年6月～)

- 要求されるシステム性能やシステム構成の詳細を検討。
- 基本的なシステム構成及び性能について評価。
→社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを実現する、との**基本方針は妥当**。
→**基本設計が終了した段階で、HPCI計画推進委員会等において、改めてその検討結果について評価**。

<参考> 事前評価 (科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会決定・平成25年8月)
「プロジェクトの推進に当たっては、(中略)段階ごとにHPCI 計画推進委員会の評価を受ける必要がある。」

4

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ングな課題(萌芽的課題)を選定。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会 (平成26年4月～8月)

○趣旨

スーパーコンピュータ「京」の次を担うポスト「京」については、大規模な研究開発プロジェクトであり、そこから高いインパクトのある成果を創出することが期待される。スーパーコンピュータで解決できる問題は、基礎科学から産業利用まで幅広いものであるが、ポスト「京」においては、国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に優先的に取り組むべきである。

こうした状況を踏まえ、ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題や課題解決による早期の成果創出に向けた研究開発体制等を検討するため、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会を設置。

○メンバー(平成26年8月現在)

安西 祐一郎 (日本学術振興会理事長)	関口 和一 (日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員)
内山田 竹志 (スーパーコンピューティング技術産業応用協議会運営委員長/トヨタ自動車代表取締役会長)	瀧澤 美奈子 (科学ジャーナリスト)
大隅 典子 (東北大学大学院医学系研究科教授)	土屋 裕弘 (田辺三菱製薬代表取締役会長)
◎小宮山 宏 (三菱総合研究所理事長)	○土居 範久 (慶應義塾大学名誉教授)
城山 英明 (東京大学公共政策大学院院長)	土井 美和子 (独立行政法人情報通信研究機構監事)
住 明正 (国立環境研究所理事長)	林 春男 (京都大学防災研究所巨大災害研究センター教授)
	平尾 公彦 (理化学研究所計算科学研究機構長)

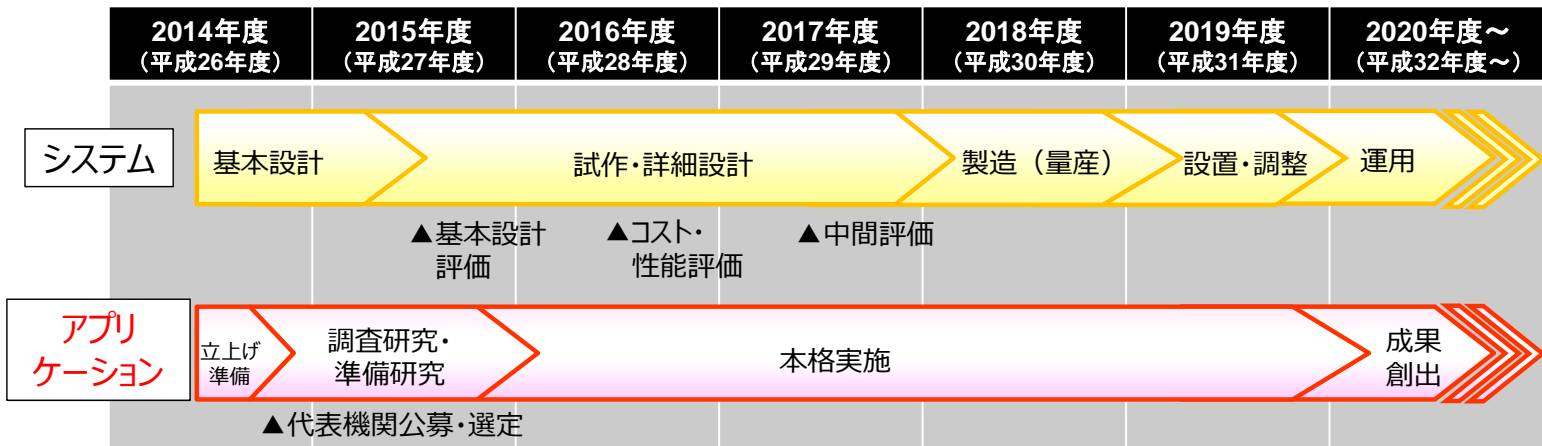
(◎:主査、○:主査代理)(合計13名)(50音順)

5

<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（コデザイン）**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>



6

我が国の計算科学技術インフラ

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）

「京」と国内11機関のスパコンを、高速ネットワークでつなぎ、ユーザー窓口を一元化して、利便性の高い利用環境を構築。



7

・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行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(コデザイン)

・国際競争力

- 演算性能及び電力性能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

ポスト「京」でのコデザイン(1)

- 幅広いアプリケーションを高速かつ効率的に実行可能なシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を開発するとともに、これらの性能を最大限に引き出すアプリケーションの開発を目的として、ハードウェア開発者とアプリケーション開発者が連携・協力して一体的にコデザインを推進
- 具体的には、重点課題から提案されたターゲットアプリケーションをベースに、性能評価ツール・シミュレータを使い、システムの基本構成・パラメータの決定を行い、明らかとなったいくつかの性能制限要因への対応により、アプリケーションの予測性能向上の見込み



<ターゲットアプリケーション>

重点課題	主な計算手法	コデザイン観点 (重要なアーキテクチャパラメータ)	アプリケーション名
①	分子動力学法	局所および集団通信レイテンシ、演算性能	GENESIS
②	大容量データ解析	入出力	Genomon
③	非構造・構造格子ステンシル複合の有限要素法	通信・メモリバンド幅	GAMERA
④	構造格子ステンシル有限体積法 + 局所アンサンブル変換カルマンフィルター法	通信・メモリバンド幅、入出力、SIMD幅	NICAM + LETKF
⑤	高精度分子軌道法 (疎+密行列計算)	演算性能/SIMD幅/集団通信レイテンシ	NTChem
⑥	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅、SIMD幅	Adventure
⑦	密度汎関数法 (密行列計算)	演算性能/集団通信レイテンシ	RSDFT
⑧	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅、SIMD幅	FFB
⑨	構造格子経路積分モンテカルロ法	通信・メモリバンド幅、局所および集団通信レイテンシ	CCS-QCD

<ターゲットアプリケーションの特徴>

- 1) 各重点課題の要となる計算手法を有するアプリケーションであること
(補足) 各重点課題のアプリケーションはサブ課題に対応して複数から構成されると想定されるが、戦略的かつ効率的にコデザインを進めるため、重点課題ごとに要となるアプリケーションを一つずつ選定する。
- 2) アプリケーションの開発体制やライセンス形態が、コデザインできるものであること
(補足) 早期の成果最大化のため、コデザインに責任を持つポスト「京」開発主体とアプリケーション開発元が一体となって、システムとアプリケーションのコデザインに取り組み、コデザインにより得られたノウハウを展開できるようにする。
- 3) 全ターゲットアプリケーション群は、計算科学的手法の網羅性を有しており、コデザインおよびチューニングのノウハウのドキュメント化ができること
(補足) 幅広い分野でのアプリケーションをカバーし、コデザインにより得られたノウハウを効率的に展開する。

10

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)

<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」の戦略的活用ができる課題を「重点課題」として選定。

カテゴリー	重点課題	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 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。	代表機関:理化学研究所(課題責任者:奥野 恭史・客員 主管研究員) 分担機関:京都大学、東京大学、横浜市立大学、名古屋大学、産業技 術総合研究所
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 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モデルによる生体シミュレーション(心臓、脳神経など)により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。	代表機関:東京大学(課題責任者:宮野 悟・教授) 分担機関:京都大学、大阪大学、株式会社UT-Heart研究所、自治医 科大学、岡山大学
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 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。	代表機関:東京大学(課題責任者:堀 宗朗・教授) 分担機関:海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学
	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 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。	代表機関:海洋研究開発機構(課題責任者:高橋 桂 子・センター長) 分担機関:理化学研究所、東京大学、東京工業大学

<重点課題（9課題）>（つづき）

カテゴリー	重点課題	実施機関
エネルギー問題	<p>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 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。</p>	<p>代表機関：<u>自然科学研究機構（課題責任者：岡崎 進・教授）</u> 分担機関：神戸大学、理化学研究所、東京大学、物質・材料研究機構、名古屋大学、岡山大学、北海道大学、早稲田大学</p>
	<p>⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学（課題責任者：吉村 忍・教授）</u> 分担機関：豊橋技術科学大学、京都大学、九州大学、名古屋大学、立教学院立教大学、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構、物質・材料研究機構、自然科学研究機構核融合科学研究所、みずほ情報総研株式会社、株式会社風力エネルギー研究所</p>
産業競争力の強化	<p>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 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学（課題責任者：常行 真司・教授）</u> 分担機関：筑波大学、大阪大学、自然科学研究機構分子科学研究所、名古屋工業大学、東北大学、産業技術総合研究所、東京理科大学</p>
	<p>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 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学（課題責任者：加藤 千幸・教授）</u> 分担機関：神戸大学、東北大学、山梨大学、九州大学、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所、東京理科大学</p>
基礎科学の発展	<p>⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。</p>	<p>代表機関：<u>筑波大学（課題責任者：青木 慎也・客員教授）</u> 分担機関：高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学、理化学研究所、大阪大学、自然科学研究機構国立天文台、千葉大学、東邦大学、広島大学</p>