

プロジェクト概要について



理化学研究所計算科学研究機構

平尾 公彦

これまでの検討経緯

○技術的事項の検討

今後のHPC技術の研究開発の検討WG
(平成23年4月～7月)

「今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発について」
(平成23年7月)

アプリケーション作業部会
コンピュータアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会
(平成23年7月～平成24年2月)

「今後のHPCI技術開発に関する報告書」(平成24年2月)

将来のHPCIシステムのあり方の調査研究
略称：FS (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

WG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WG
(平成24年2月～)

- ・研究振興局長の諮問会議であるH P C I 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、H P C I システム構成のあり方、H P C I 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。
- ・**平成25年6月25日に中間報告がとりまとめ、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すことが適当とされた。**
- ・**平成26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計画推進のあり方に関する検討WG
システム検討サブWG (平成25年6月～8月)

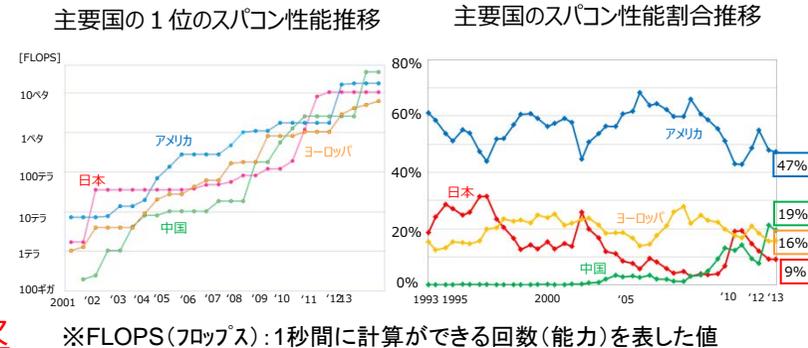
- ・**中間報告**において、リーディングマシンの研究開発の方向性として、開発主体候補(理研)において、期待される成果、必要なスペック、要素技術等に関するイメージを明らかにした上で、フラッグシップシステムの具体的な方向性等を検討。
- ・開発主体候補からのヒアリングを実施。
- ・**平成25年8月30日報告書要旨公表**

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**

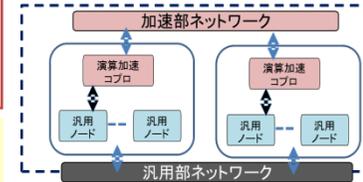


開発の概要

- 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：1E17フロップス級 (「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の開発が実現**
- ・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



現代におけるスーパーコンピュータの意義

- 科学技術のブレークスルー達成

Excellent science

- 産業の国際競争力強化

Industrial leadership

- 安全・安心な社会の構築

Safe and Secure Society

- 社会的課題の解決

Societal challenges

「京」が実現したシミュレーション

- 創薬・・・10種類以上の抗がん剤候補、リード化合物を発見
- 10兆個の結合の世界最大の脳神経シミュレーション(小型霊長類の全脳規模)パーキンソン病のモデル確立へ
- 人の心臓を精緻に再現、肥大型心筋症の病態を蛋白質レベルの変異から解析
- 血流シミュレーター+心臓シミュレーターで心筋梗塞のシミュレーション
- ウイルスの営みを分子レベルで解明ー抗ウイルス剤やワクチン開発への道を拓くー
- シリコンナノワイヤー等の次世代半導体設計手法を開発、世界初でナノ領域に流れる電子分布
- 高温超電導、量子スピン液体の機構解明に向けてのシミュレーション
- リチウムイオン電池の電解液反応、負極表面の保護膜ができる反応を分子レベルで解明
- 磁性材料の材料設計に活用できる新たなシミュレーション技術を開発
- メタンハイドレートの融解機構を解明、より効率的なメタンの回収
- 全球雲解像モデル(NICAM)による気候研究、一月先までMJOの予測可能性
台風発生10日程度前から60%の確率で台風の発生を予測
- 世界初の1km以下解像度で地球全体での積乱雲の描像を明らかに
- 発生の日～1日前からの計算で高い確率で2012年7月の九州北部豪雨を予測
- 2012年5月6日のつくば竜巻のアンサンブル予報実験
- 南海トラフ巨大地震 広域詳細な高精度地震動・津波シミュレーション
- ものづくり 自動車の空力、船体の推進抵抗、ファンの性能と騒音、超高精度シミュレーション
- 超新星爆発のシミュレーションに成功
- ...