

「京」を中核としたHPCIの構築と HPCI戦略プログラムについて

平成24年12月12日

文部科学省 情報課計算科学技術推進室

林 孝 浩

本日お話しすること

- HPCIに係る基本的考え方
- HPCI関連施策の推進
 - 次世代スーパーコンピュータ「京」
 - HPCIの整備・運営
 - 戦略プログラムの推進
 - 今後のHPCI技術の研究開発
- 戦略プログラムへの期待

HPCIに係る基本的考え方

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

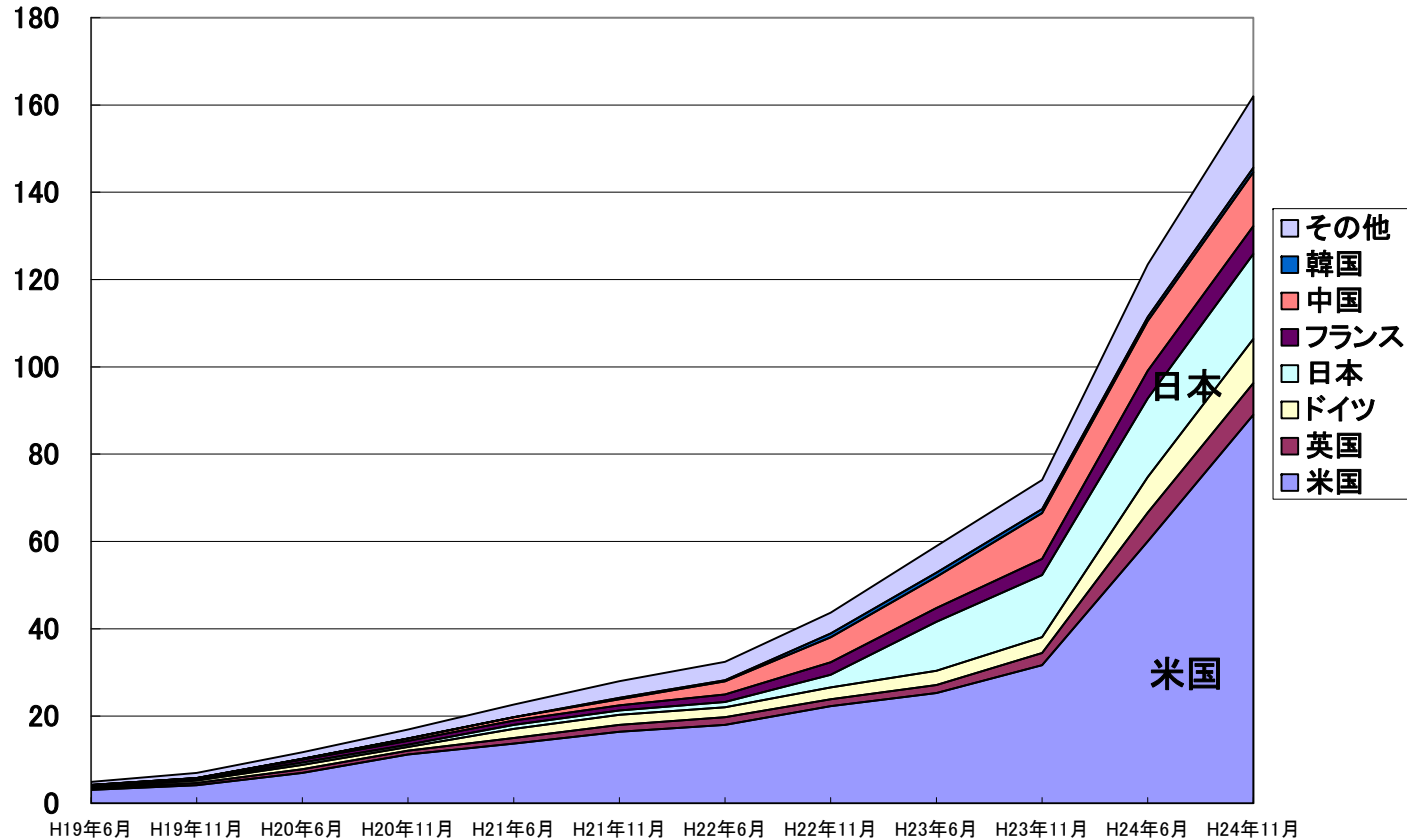


世界のスパコンの動向

国別計算資源量の推移(平成19年～平成24年)

(世界スパコン性能ランキング(TOP500)内のスパコンの能力を国別に合計した)

単位:ペタフロップス



- ・世界的に必要とする計算資源量は年々増加
- ・現在、米国が世界の計算資源量の約55%を占める
- ・日本は、19%で世界第2位



文部科学省

MINISTRY OF EDUCATION, CULTURE, SPORTS,
SCIENCE AND TECHNOLOGY-JAPAN

第4期科学技術基本計画（HPCI関連部分）

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。

文部科学省としてもHPCIを強力に推進

H24年度概算要求額 169億円
(H23年度予算額 199億円)

システムの整備・運用

- 次世代スパコン「京」の整備・運用
- HPCIの整備・運用

HPC技術の高度化 に関する検討

- WGによる今後10年程度を見通した政策議論
- 技術的知見を獲得するための調査研究

HPCI利用の推進

- グランドチャレンジ・アプリケーションの開発
- 戦略プログラムの推進

HPCI関連施策の推進

スーパーコンピュータ「京」

事業概要

我が国の研究力・競争力強化の基盤確立のため、産学官の密接な連携の下、以下を一体的に推進(総額約1,100億円)

- (1) 10ペタフロップス(1秒間に1京回の計算性能)級の次世代スパコンの整備・運用
〔 H24年6月システム完成、9月末共用開始
SC2012において、2年連続になるゴードンベル賞を受賞 〕
- (2) 次世代スパコンを最大限利活用するためのソフトウェアの開発・普及
- (3) 上記(1)を中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点(COE)の形成



筐体試作機



次世代スパコン「京」(H23年10月)



施設全景

「京」の利用成果がゴードン・ベル賞を受賞

11月、「京」による『約2兆個のダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算』が、ゴードン・ベル賞を受賞。日本のグループによるゴードン・ベル賞受賞は2年連続。

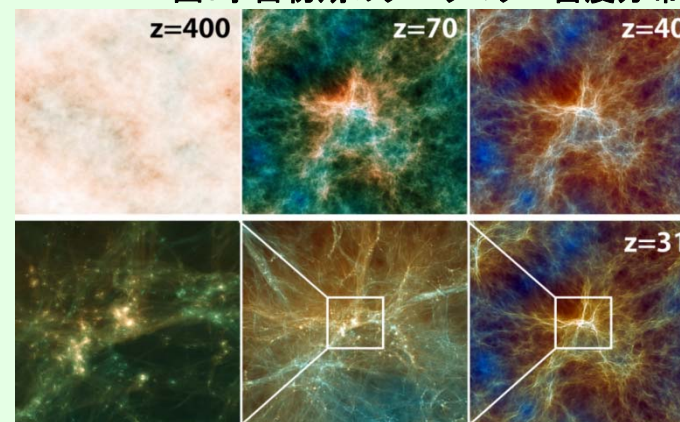
【「京」による成果】

○世界最大規模である数兆個におよぶダークマター粒子の重力進化を、実用的な時間内にシミュレーションすることを可能とした(5.67ペタフロップスでの計算)。(パソコン1台で数百年かかる計算が「京」により3日で実現)

○宇宙初期(約137億年前の宇宙誕生から約200万年後～約1億年後)のダークマターの密度分布を計算(右図参照)

○本アプリケーションは、アルゴンヌ研グループの6倍程効率が良く、アプリケーション開発でも世界をリードしていることが示された。

図:宇宙初期のダークマター密度分布



明るさはダークマターの空間密度を表し、明るいところは密度が高い。また、 z は赤方偏移の量を表しており、数値が大きいほど過去を見ている(天文学では時間や距離の尺度として用いられる)。

【上段左】宇宙誕生時はほぼ一様。 $z=400$ は宇宙誕生から約200万年後であり、1辺約5光年。

【上段中】時間の経過につれて重力により集まり、大きな構造が形成される。

【下段】下段右は、誕生から約1億年後の宇宙の姿(約136億年前、1辺約65光年)。中心部を拡大したものが下段中、更に拡大したものが下段左。(zは全て31)

「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

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

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

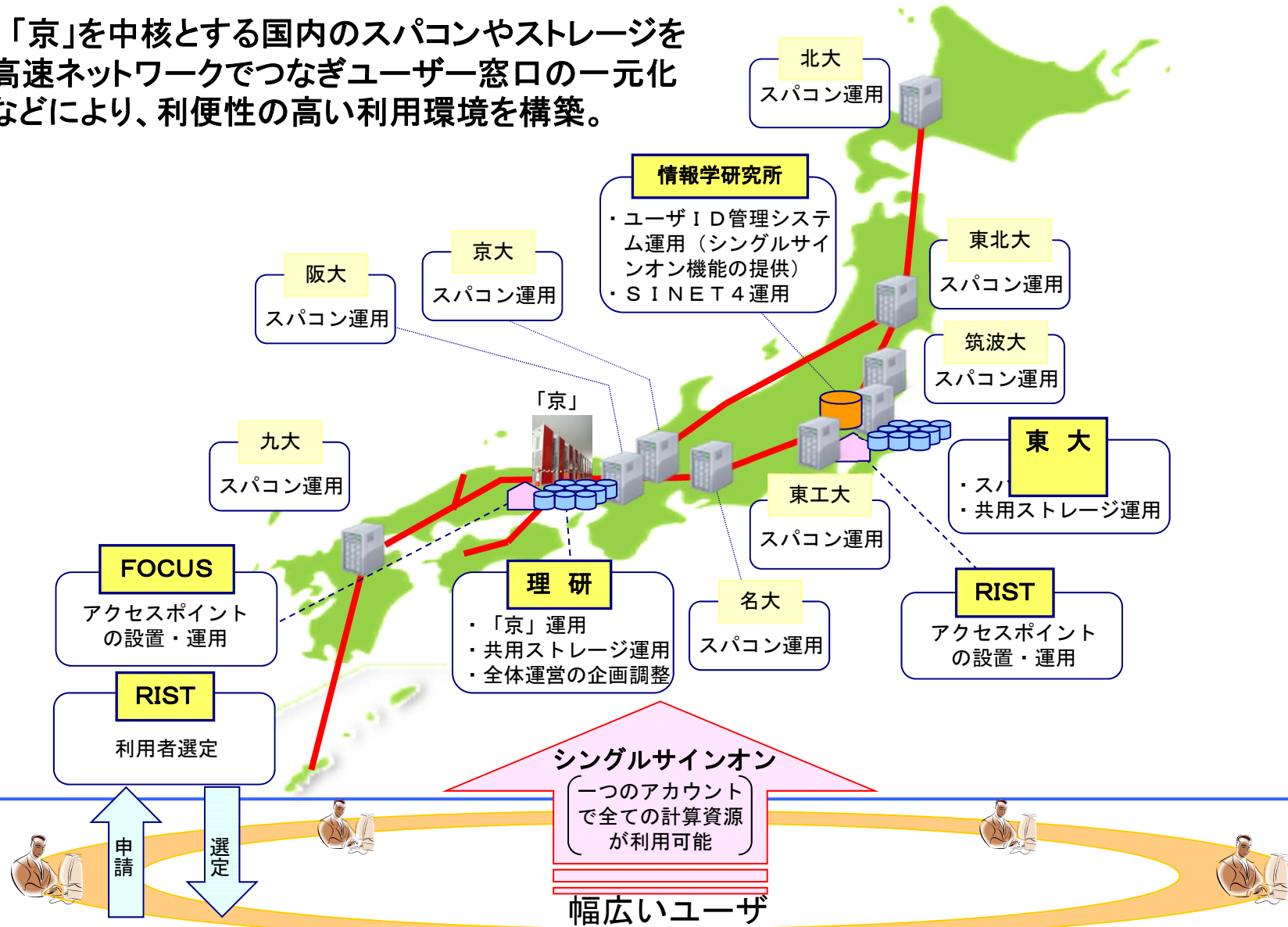
利用者のニーズ

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)



HPCIの構築について

「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。



戦略プログラムについて

【目的】

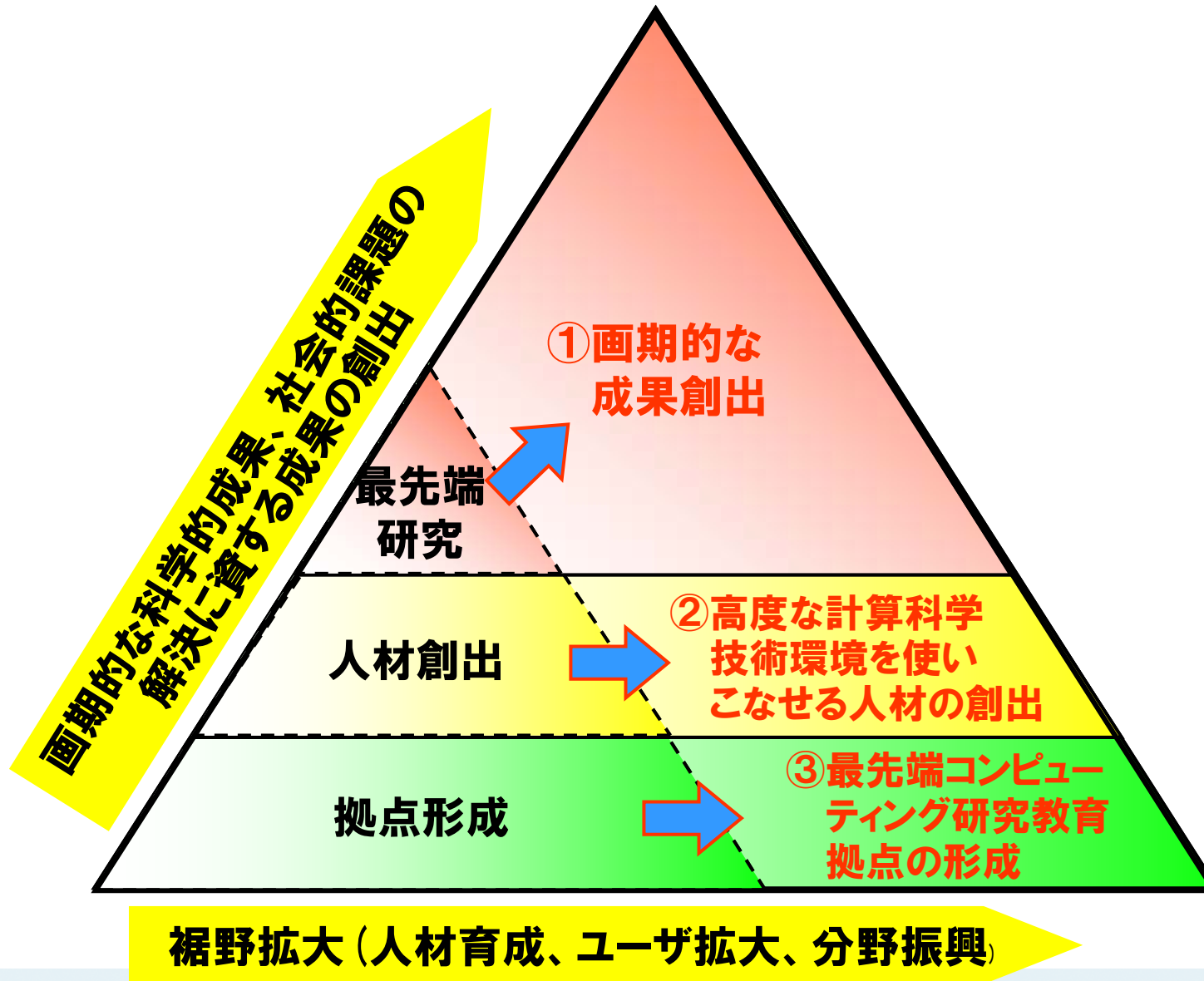
「京」の性能を最大限活用し、画期的な成果を創出するとともに、人材の育成、最先端コンピューティング教育研究拠点の形成を目指す。

【事業概要】

- 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（戦略分野）と当該分野における研究開発等を牽引する機関（戦略機関）を決定
- 各戦略分野において達成する目標（戦略目標）に沿った研究開発の推進
- 各戦略分野において、計算科学技術推進体制の構築（人材育成、研究支援、成果普及等）を図る



戦略プログラムで期待される効果

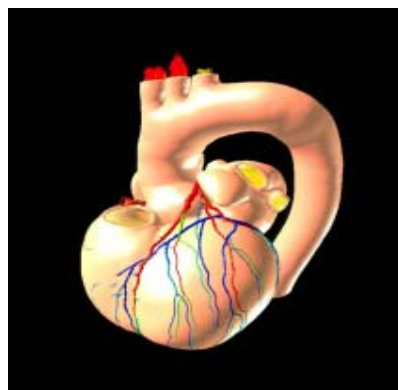


分野1: 予測する生命科学・医療および創薬基盤

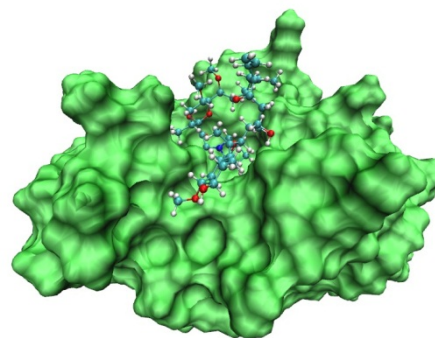
戦略機関: 独立行政法人 理化学研究所

戦略目標: 大規模シミュレーション・高度なデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、およびそれを通じた薬剤・医療のデザインの実現

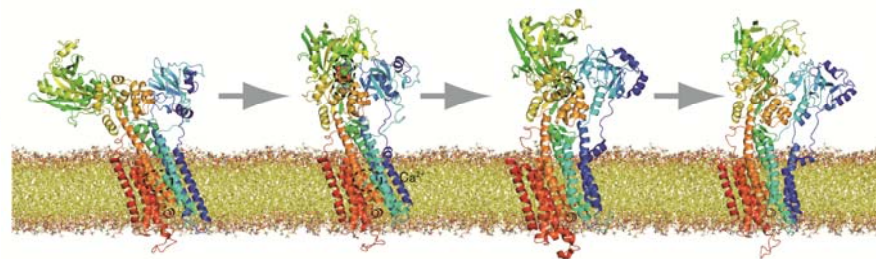
ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測をおこなう。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。



心臓シミュレーション



薬候補のタンパク質への結合シミュレーション



膜輸送蛋白質の大規模構造変化のシミュレーション

分野2:新物質・エネルギー創成

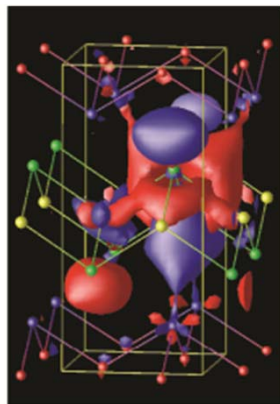
戦略機関: 国立大学法人 東京大学 物性研究所(代表機関)

大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所

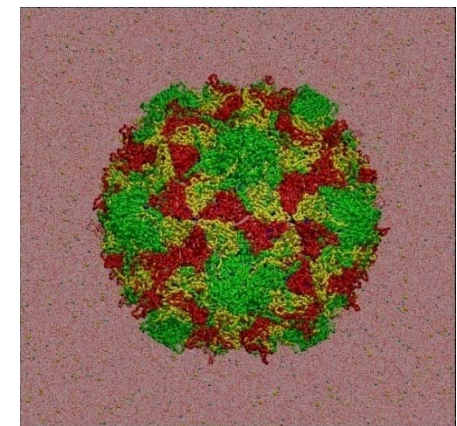
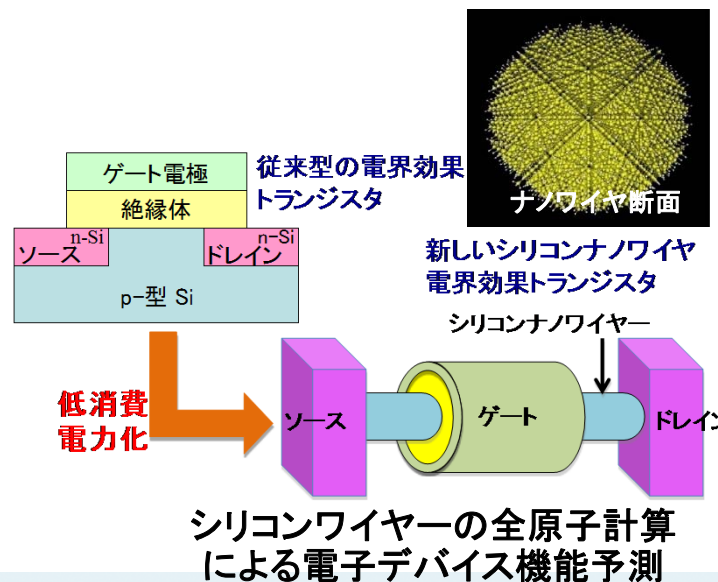
国立大学法人 東北大学 金属材料研究所

戦略目標: 計算物質科学: 基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ

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。



第一原理からの
強相関物質機能予測



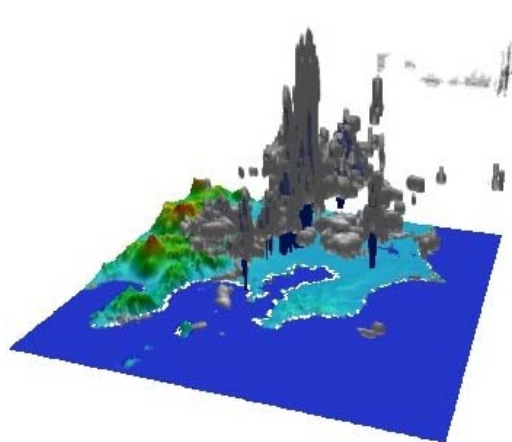
ウイルスの全原子シミュレーションによる感染初期過程の分子機構の解明

分野3:防災・減災に資する地球変動予測

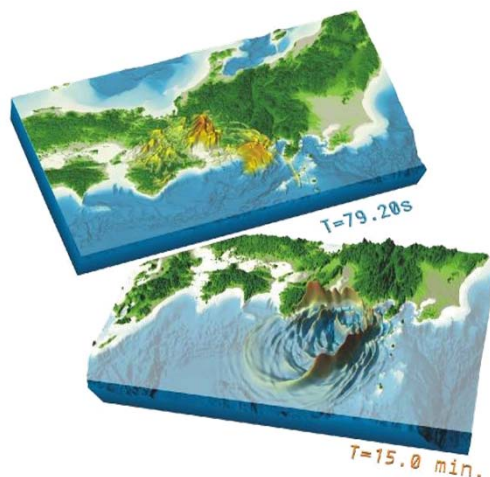
戦略機関:独立行政法人 海洋研究開発機構

戦略目標:地球温暖化時の台風の動向の全球的予測と集中豪雨の予測実証、および次世代型地震ハザードマップの基盤構築と津波警報の高精度化

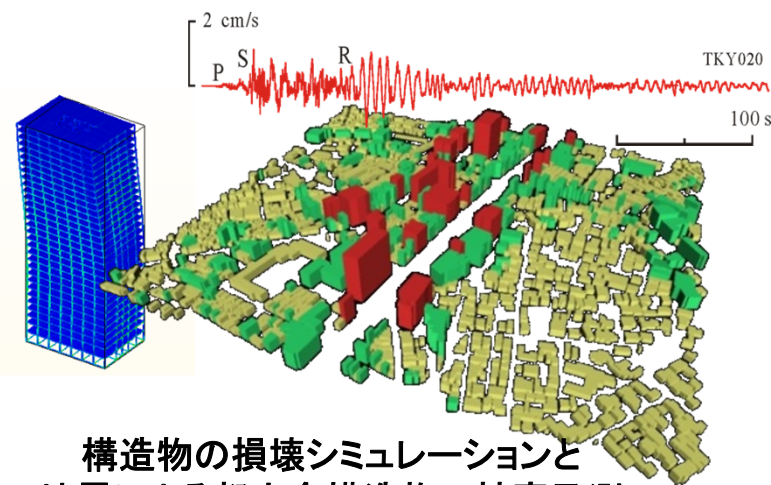
高精度の気象・気候シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。



集中豪雨や局地的大雨の予測
(気象庁気象研究所 川畑拓矢)



地震波伝播計算と津波発生伝播の連成シミュレーション
(東京大学大学院情報学環 古村孝志)



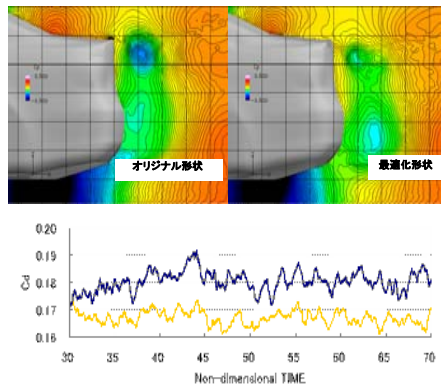
建造物の損壊シミュレーションと地震による都市全建造物の被害予測
(東京大学地震研究所 堀宗朗)

分野4: 次世代ものづくり

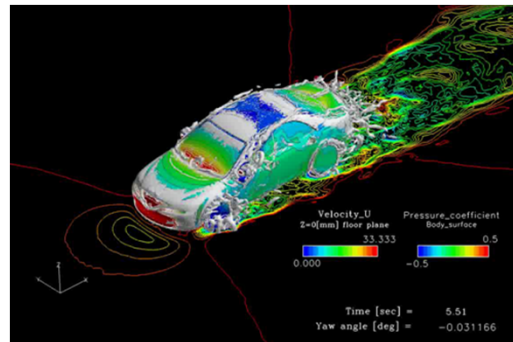
戦略機関: 国立大学法人 東京大学 生産技術研究所(代表機関)
独立行政法人 日本原子力研究開発機構
独立行政法人 宇宙航空研究開発機構

戦略目標: 21世紀のものづくりを抜本的に変革する計算科学技術の戦略的推進

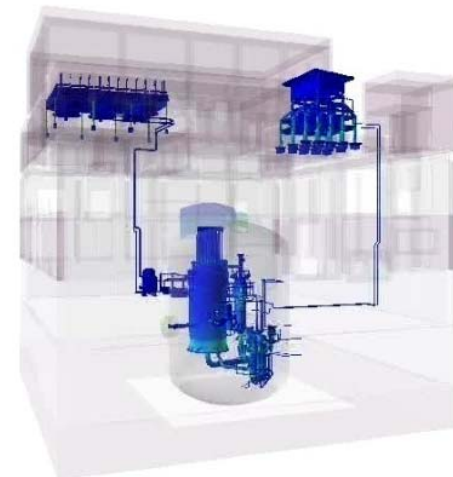
先端的要素技術の創成～組み合わせ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。



車体後部周りの超精緻解析による最適形状の究明



非定常空力・振動連成解析による、低空気抵抗、低揺動車の開発



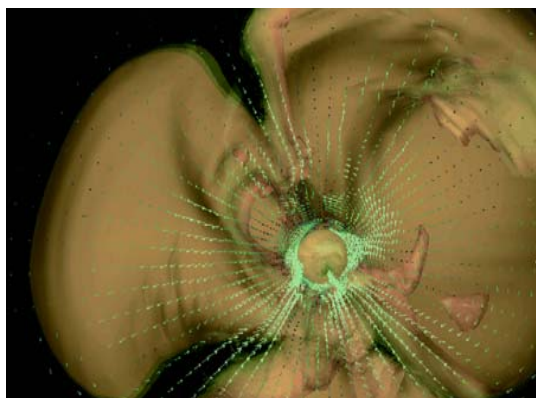
大型プラントの全体シミュレーションモデル

分野5:物質と宇宙の起源と構造

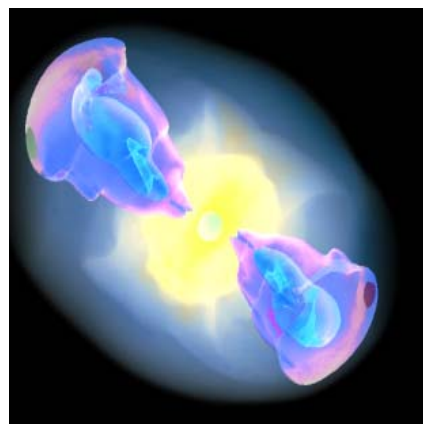
戦略機関:国立大学法人 筑波大学 計算科学研究センター(代表機関)
大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構
大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 国立天文台

戦略目標:ビッグバンに始まる宇宙の歴史に於ける、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、複数の階層を繋ぐ計算科学的手法で統合的に理解する。

物質の究極的微小構造から星・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。



超新星爆発の3次元シミュレーション



爆発時の密度分布



銀河形成シミュレーション

ハイパフォーマンス・コンピューティング（HPC）技術の 高度化に向けた文科省の取り組み

○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

○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、今後の研究開発のあり方、利用促進のあり方等について調査検討を実施。
- ・本年12月末までに論点整理。**平成25年夏頃までに中間報告、平成26年3月頃を目途に最終報告をとりまとめる予定。**

WGの議論
に反映

今後のHPCI計画推進のあり方を決定

戦略プログラムへの期待

戦略プログラムによる成果創出の先導

◇スパコン「京」及びHPCIは本年秋から共用開始。

→「京」を活用し、いかに成果を出していくかが重要な課題

◇戦略プログラムが大きな役割

①目標を定め、戦略拠点を中心に研究開発の推進

→第一歩として確実に実施。さらに、思っても見なかった新しい成果をいかに創出するかが重要。

②拠点の形成：人材育成、ネットワーク形成、研究成果の普及

→分野内の計算科学コミュニティーに閉じるのではなく、オープンな活動

→分野を超えた連携、理論・実験との連携、地方自治体や産業界との連携などを通じて、新しい科学の創出や成果の社会への還元を期待



ご清聴
ありがとうございました。