

スーパーコンピュータ

(事業名)

- 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(HPCI)の構築
(HPCI戦略プログラムを除く)【文部科学省】(一般会計 15,868百万円)
- HPCI戦略プログラム【文部科学省】(一般会計 0円) ※平成27年度終了
- ポスト「京」の開発【文部科学省】(一般会計 7,664百万円)

(事業概要)

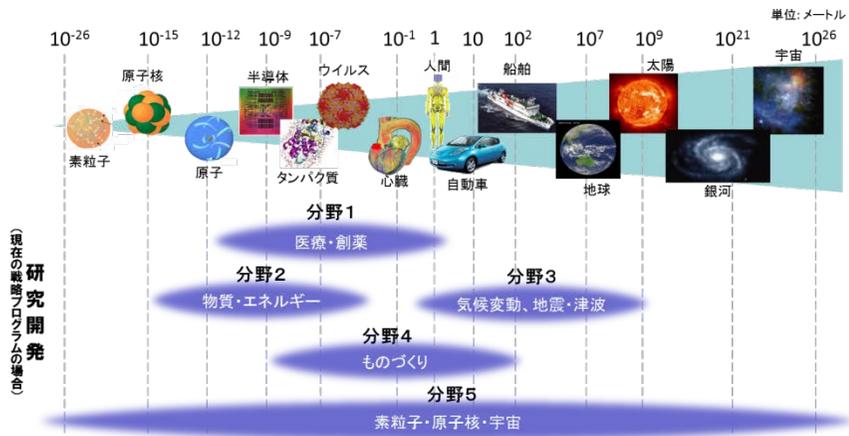
- 我が国の科学の発展、産業競争力強化に資するため、スーパーコンピュータ「京」を中核として国内の大学等のスーパーコンピュータを高速ネットワークでつなぐ計算環境(HPCI)を構築し、全国のユーザの利用に供するもの。
- 2020年をターゲットとする世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータのポスト「京」の実現に向けた取組。

平成27年11月
文部科学省研究振興局

●「京」やHPCIの運営に年間約130億円の国費が投入されているが、これに見合う成果が得られているのか。

<背景等>

- 科学技術の更なる進展により、その成果をイノベーション創出に具体化させる上で、超大規模コンピュータシミュレーションの持つ可能性は極めて大きい。
 - 素粒子から、宇宙全体まで、様々な大きさの自然現象のすべてを実験・観測するのは限界。そこで、最先端シミュレーションにより、新たな発見の可能性を飛躍的に高める。
- これまで、経済成長に具体的に貢献しうる分野(例、物質・エネルギー、ものづくり)、国民の安心・安全(医療・創薬、気候変動・地震・津波)など重要課題を設定し、産学官をあげて、その研究開発と体制構築に取り組んできた。



<これまでの成果>

- ①「京」でなければできない「**限界突破**」
- 様々なテーマで、「京」でなければ得られないデータにより、従来の技術的な限界を突破した研究成果。
 - 従来は、部分的な計算に限られ、精度も不十分だったのに対し、「京」ではより高い精度で「丸ごと計算」出来る(近似を減らし、信頼性が高い)。
- 【例】
- ・小児マヒウイルス丸ごと(従来は一部) → **ワクチン開発に向けた共同研究が開始**
 - ・患者の心臓を世界で初めてコンピューター上に再現 → **心臓を分子レベルで解析し、肥大型心筋症の病態を明らかに(心臓疾患の死亡は年19万人)**
 - ・電池の分子と電子の動きを一緒に計算(従来は別) → **高性能化・高安全化に貢献(リチウムイオン電池市場は数年後に年1兆円を超える見通し)**
 - ・抗がん剤候補化合物やがん細胞に関する抗体医薬を選定 → **前臨床試験の対象として試験中**

- ② **オープンイノベーションの実現**
- 「京」と「HPCI」を活用した「戦略プログラム」では、支援対象の研究者に加え、最先端シミュレーションに価値を見出す関係者として、理論や実験・観測に関する研究者、産業界・自治体・病院の関係者が多く参画し、**共同で成果創出を目指すオープンイノベーション**の環境が創出。
- 【例】
- ・新材料に係る研究開発においては、45機関が参画する、物性分野、分子分野、材料分野が結集した「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)」を構築。
 - ・生命科学に係る研究開発においては、約40機関が参画する体制を構築。 など

- ③ **成果の実用化への展望**
- 左の研究成果とオープンイノベーションにより、
 - ・経済成長に貢献する産業界の活動、
 - ・国民の安心・安全、
 への波及が具体化しつつある。
- 通常のスーパーコンピュータ

スーパーコンピュータ「京」
- 自動車開発:** 風洞実験を代替すると開発コスト削減(風洞実験コストは一車種で約12億円→シミュレーションでは3,000万円)。
- 雲一つひとつを再現し、巨大積雲群の発達・移動を予測:
気象災害被害は、過去20年間で年約5,000億円。その低減に貢献。
- 2012年8月25日 NICAM (水平解像度0.87km)

●「京」の高い演算性能を必要とする研究利用のニーズは十分にあるか。

<大規模計算の必要性>

- 「京」の能力をフルに活用し、世界最高水準のシミュレーションが実現し、我が国発のイノベーション創出に貢献している。
- 国内では、ほぼ同時期に設置された「京」に次ぐ規模の大型スパコンとして、東京大学のスパコン (FX10)があり、これは「京」の約1/8規模。「京」は約8万ノードあるため、1万ノード以上の計算は「京」でしかできない規模のもの (全体の15.2%(H26年度))。

- 例えば、気象シミュレーションでは、三次元空間を細かく区切り (例: 地球全体を870m間隔で区切る)、その全地点の気温・湿度・気圧・風速・風向などのデータを記憶させて、大気状態を全地点同時に計算する。このため各地点における大量メモリが必要であり、大規模計算機が不可欠。
- 複数の小中規模計算を同時実行すべき課題を別サイトで分散計算すると、計算後にデータを一か所に移動させる移動コスト・手間が膨大 (例: 1回の計算で312TBのファイルが生成される)。

<「京」を最大限活用した研究事例>

- 分子から臓器まで通じた統合的な心臓シミュレーションを実現 (世界初)
- 電子の量子効果を考慮したデバイス設計の基本技術確立 (世界初、ゴードンベル賞)
- 小児マヒウイルスを原子レベルで丸ごとシミュレーションし、感染機構を解明 (世界初)
- 地震災害と建物被害を統合した大規模シミュレーションを実現 (世界初)
- 脳の神経回路シミュレーションを実現 (世界最大)
- ダークマターシミュレーションによる天体形成過程の研究 (世界最大、ゴードンベル賞)

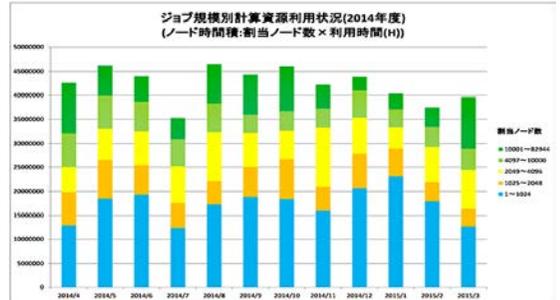
※ゴードンベル賞:シミュレーション分野で世界最高の賞

<「京」の役割等>

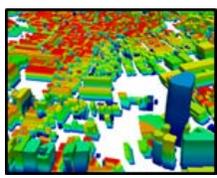
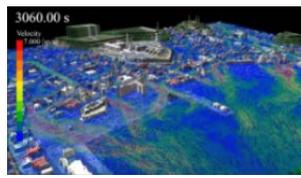
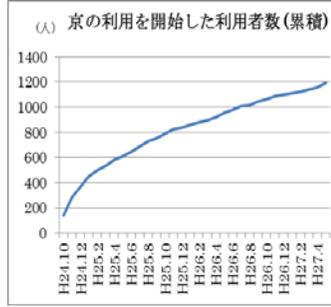
- コンピュータ性能の向上が続くと、「京」の大規模計算は、将来的には相対的に中小規模の計算になると想定される。そこで、画期的な成果を創出するソフトウェア開発をあらかじめ進めて、将来的な普及・活用に備えることは、国際的な競争力確保と成果創出に有意義。こうしたソフトウェア開発には数年を要するため、今から「京」を駆使して開発する必要がある。

- 「京」は、計算科学技術全体を引き上げることで、産業界も含めた利用者を拡大させ、サイエンスやテクノロジーの新たな可能性を切り開く最先端装置としての役割を担っている。

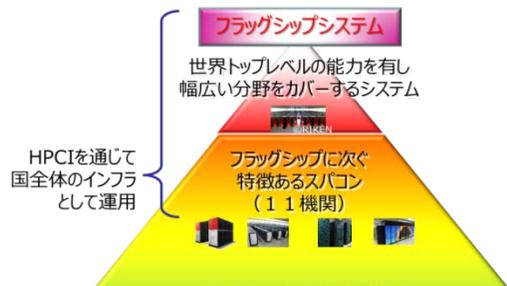
- 具体的には、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」に基づき整備・運用されており、理研の一施設というよりも、我が国全体として有効活用を進める観点から、先導的・先端的な研究成果を創出し、その成果を公共知として共有することで、科学技術の振興等に貢献している。



月別の「京」で実行されたジョブの規模別の計算資源利用状況 (ノード時間積)。色は、ジョブが使用した計算ノード数に対応。



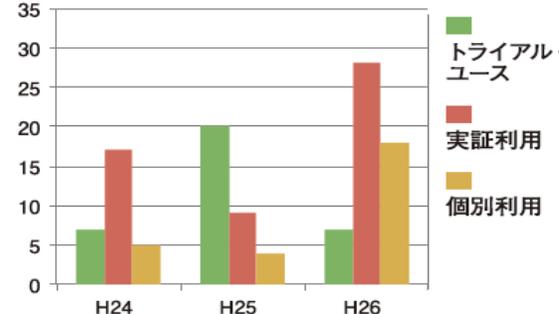
自然災害に対応した防災・減災対策
将来の被害の低減 (南海トラフ巨大地震の被害は220兆円と想定)



●産業競争力強化に資するという目的に鑑み、「京」の産業利用は適切かつ十分か。

<産業利用の状況>

- 産業利用を促進するため、①トライアルユース(成果公開・無償)、②実証利用(成果公開・無償)、③個別利用(非公開・有償)の3つの制度を設けている。
- 産業利用の応募は増加傾向。利用枠や利用制度を充実させている。
 - 「京」を利用する総計算資源量の約29%が企業が参画する課題
 - 「京」の全利用者の3割以上が企業の利用者(1249人中422人)(平成26年度)
 - 参画企業数は100社以上



<産業利用の成果事例>

- **自動車用次世代空力設計システムの研究開発**: 実験費用の大幅削減により自動車産業の競争力強化に貢献(コンソーシアム(企業13社、研究機関7機関)による共同研究)。「京」のシミュレーションは風洞実験に匹敵→風洞実験の大幅削減に(1車種当たり、風洞実験:約12億円→シミュレーション:3,000万円)
- **電池の材料開発**: リチウムイオン電池の高性能化・高安全性化につなげ、部材産業の発展と国際競争力強化に貢献(「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」に企業15社が参加)。電池内部の電極付近の化学反応過程を分子レベルで再現。
- **新薬開発を加速するインシリコ創薬基盤の構築**: 医薬品開発の成功確率向上と迅速化により医薬品産業の競争力強化に貢献(製薬企業22社、IT企業2社他が参画。タンパク質と化合物の190億の組合せを約6時間で予測)。



自動車用次世代空力設計システムの研究開発におけるコンソーシアム

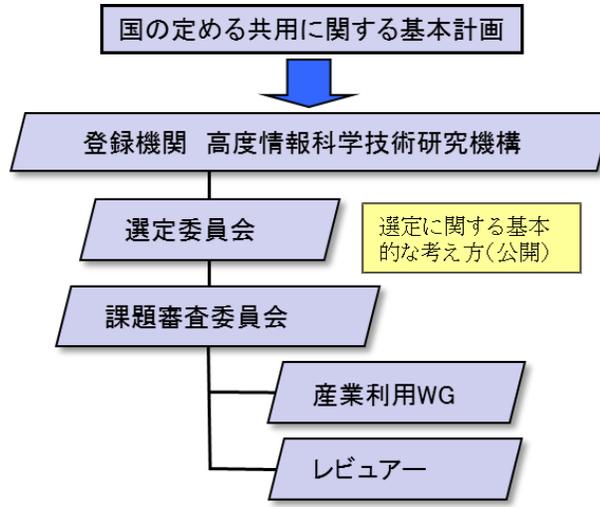
●「京」の利用者の選定手続について透明性は十分か。

<選定について>

- 利用者・利用課題の選定は、「共用促進法」に基づき、登録機関として選定された高度情報科学技術研究機構が中立公正な立場で利用者の選定を行う。具体的には「選定委員会」「課題審査委員会」により、選定方針の策定、個別の課題の審査を行う。
- 選定基準、選定の流れ、選定結果(応募数・採択数、採択課題名・代表者・所属機関・利用する計算機名・配分資源量)は、プレスリリース等で公開。選定委員会の議事概要はHPで公開。採択・不採択の理由は、課題代表者宛に課題審査委員会からのコメントとして通知。

<選定基準>

- 科学的に卓越し、又は社会的に意義が高く、ブレークスルーが期待できること。(産業利用課題は除く)
- 「京」の計算資源を必要とすること。
- ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析手法等が十分に検証済みであること。また、利用計画や研究体制が妥当であること。
- 科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること(平和目的に限定される等)



課題選定の枠組み ※利用枠毎の課題選定

●ポスト「京」の開発・製造費として約1,300億円(うち、国費1,100億円)に加え、毎年多額の運営費が見込まれるが、これに見合う成果が得られるのか。

<開発の意義>

- **最高の成果を最速で創出**
 - 「京」で培った世界最高水準の技術・人材を用いた自主開発により、ハードの中身をブラックボックス化させず、ハードとアプリを一体的に開発することで、最高の成果を最速で創出できる。
 - 海外からのマシン導入では最先端のCPUは得られず、他国に比べて成果創出は少なくとも3～4年遅れる。
- **高い技術波及効果**
 - 最先端スパコンはIT技術の結晶であり、自主開発を通じて、技術の波及効果(スピノフ)が得られる。ビッグデータやクラウドなど重要な技術を使いこなす人材の輩出に貢献できる。
- **技術立国ニッポンとしての技術継承**
 - 世界最高水準のCPU開発は、日本と米国のみが有する技術。高い技術を持つ人材により成果を出すスパコンの開発技術の保有は、我が国の産業の重要テーマ。

<ポスト「京」で見込まれる成果例>

- 我が国が直面する課題に具体的に貢献。特に、我が国の経済成長(ものづくり、エネルギー等)と、国民の生命・身体の安心・安全(医療、防災等)。
- 「京」では、シミュレーションを産業や医療等に適用する手法を確立した。ポスト「京」では、現実の社会・自然現象が複雑であることに対応し、複合的な事象を対象とし、経済成長と国民の安心確保にさらに貢献する。

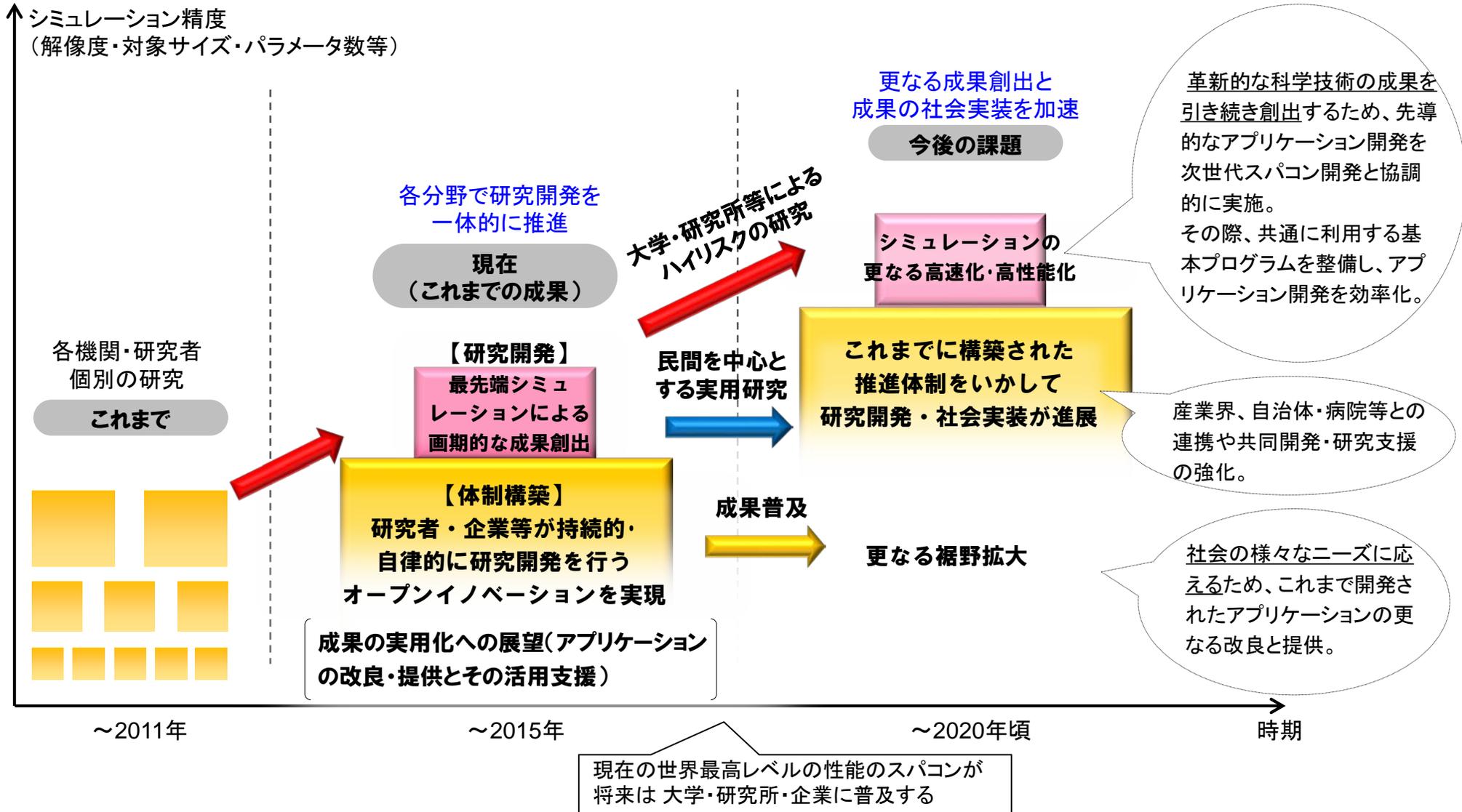
	「京」での実現	ポスト「京」で目指す成果と社会への貢献(例)
副作用を考慮した創薬シミュレーション	はじめて薬剤の候補物質とタンパク質の結びつきやすさをシミュレーションし、単一のタンパク質の機能阻害を考慮した10種類程度の薬候補スクリーニングを実現。	薬剤の候補物質と多数のタンパク質からなる生体分子システムの相互作用をシミュレーションし、 副作用の原因等も分析 が可能になり、有効性の高い創薬が期待される。 → 10年以上、数百億円を要するとされる新薬開発の短縮化。(創薬でよく用いられるシミュレーションで、「京」で約1年の計算が、ポスト「京」では約5日)(がん罹患者は98万人。抗がん剤の輸入額は年5,000億円)
革新的設計・製造プロセスの開発	従来不可能であった自動車の 試作実験(風洞実験) に匹敵する 精度 での空気抵抗等の予測が可能に。	飛行機における実機・実スケールの空力シミュレーション で、現象が複雑でこれまで解析できなかった離着陸時の空力特性・失速・騒音などを高精度な解析の実現を目指す。 → 飛行機の燃費改善や安全性向上に貢献し、実機飛行試験(数千億円規模)の一部代替。
観測ビッグデータを活用した気象予測	従来不可能であった半日から一日前に、 地域レベルの集中豪雨 を予測できる可能性を示した。	高機能レーダーの観測ビッグデータの同化により、「京」では不可能だった 甚大災害 につながるいわゆる ゲリラ豪雨等の高精度な再現が可能 となり、 30分から数時間前の予測が現実的 。 → 気象災害による被害(過去20年間で年平均約5,000億円の経済被害)の低減に貢献。

科学技術ビッグプロジェクト（Ⅰ）
（スーパーコンピュータ）
（参考資料）

平成27年11月12日
文部科学省

計算科学技術の進展について

ポスト「京」に向けた アプリケーション開発の課題



戦略機関の実施体制(詳細)(分野1(生命科学・医療・創薬基盤)の場合)

2015年4月1日時点



これまでの成果と将来の社会への活用(例)

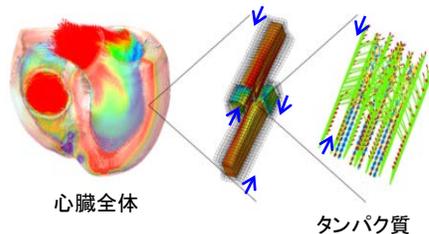
科学技術の現状

神経・筋肉や血管など、人体の一部機能の限定的な再現



HPCI戦略プログラムによる成果

心臓の動きを精密に再現
→ **肥大型心筋症の病態を明らかにした**



将来の社会への活用

シミュレーションによる手術手法の最適化



心疾患(死亡者数年19万人)に取り組む医療への貢献

医療

医療費(39兆円)の抑制・効率化

一部のがんで原因遺伝子を特定するも、局所的な原因把握まで

局所的にしか見えなかった



がんは変化する→薬が効かなくなる

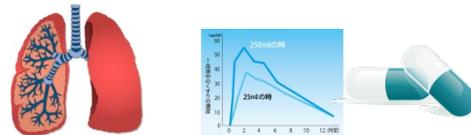
ゲノムデータをもとに

網羅的にがんの異常を解析

がんの全体像がやっと見えた



がんの個別化医療及び創薬基盤にがんの最適な薬の処方が可能に



がん罹患者(98万人)への最適医療
疾病発症時期の高齢化
生活習慣病治療の個別最適化による医療費削減

個別化医療

シミュレーションでは、新薬候補の選定できず

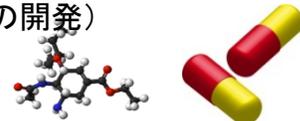


シミュレーションによる新薬候補の選別



→ **がん新薬候補として前臨床試験に到達(2種類)**

・がん新薬の実用化
・シミュレーションによる創薬の普及(開発期間・コストの短縮、今まで開発が難しかった薬の開発)



医薬品輸入超過額 2.9兆円
(抗がん剤 輸入額5000億円)の縮減

創薬

これまでの成果と将来の社会への活用(例)

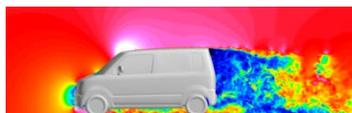
科学技術の現状

実験の代替を目指したシミュレーションはあるものの、誤差が大きい



HPCI戦略プログラムによる成果

自動車の風洞実験をシミュレーションが代替可能であることを実証



→自動車メーカーが有効性を実証

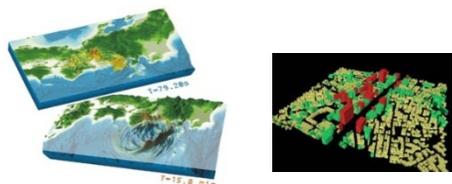
将来の社会への活用

自動車開発期間の短縮
コストの削減
(自動車メーカー全体で年間数百億円規模)

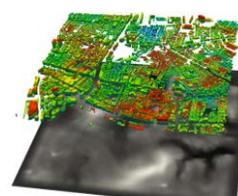


ものづくり

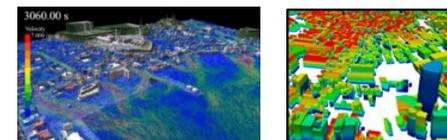
地震動、津波、建物振動の個々の評価にとどまる



地震発生、津波そして建物被害までの一連のプロセスが評価可能に



地震等の自然災害に対応した防災・減災対策の実施



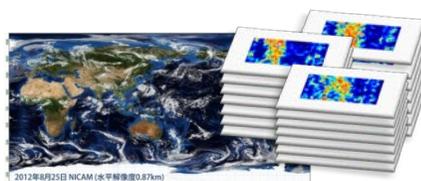
将来起こりうる被害の低減(南海トラフ巨大地震による経済被害は220兆円と想定)

地震・津波

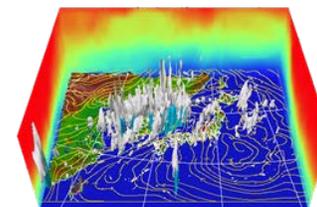
全球モデルでは雲を大きな塊として再現するにとどまるため、予測精度に更なる改善が必要



雲一つひとつを再現できる解像度のシミュレーションにより、**熱帯の巨大積雲群の発達・移動を予測**



気象庁の予報の精度向上に貢献
(2週間以上先の台風等を予測)



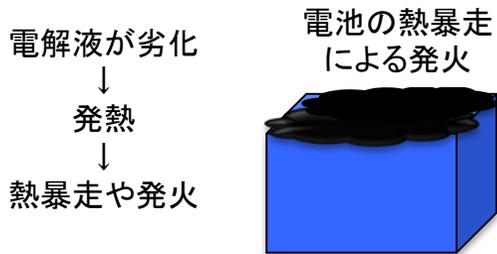
気象災害による被害(過去20年間で年平均約5,000億円の経済被害)の低減に貢献。

気象・気候

これまでの成果と将来の社会への活用(例)

科学技術の現状

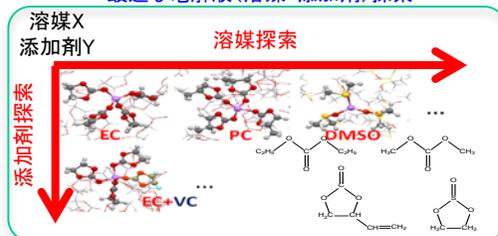
リチウムイオン電池の安全性に影響を及ぼす現象が理論的に解明されておらず、性能向上と安全性向上を手さぐりで実施



HPCI戦略プログラムによる成果

電池の中の化学反応を原子レベルでシミュレーションし、生成物を予測・解析
→ **高安全・高性能な材料の探索**が可能に

溶媒、添加剤などの組み合わせから最適な電解液(溶媒・添加剤)探索



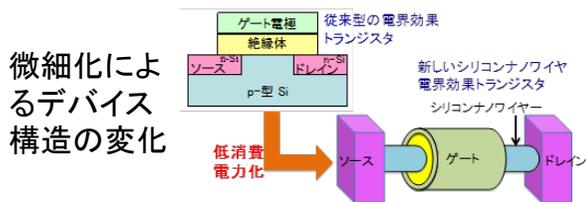
将来の社会への活用

電池メーカー・自動車メーカー等がシミュレーション技術を駆使し、世界に先駆け高性能電池材料を開発しデファクト化を目指す(数年後1兆円を超える市場に育つ電池のシェアを確保)

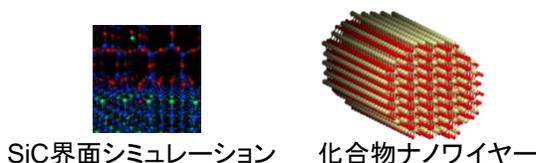


エネルギー創成

デバイス設計技術には、量子効果や欠陥による熱の効果等を考慮する必要があるが、そこまで至っていない



微細化された**デバイス1素子を丸ごと計算し特性をシミュレーション**する技術を開発(世界市場で巻き返しを目指し半導体産業研究所で検討開始(国内主要10社参加))



市場の急成長が予想される化合物系半導体(H26:150億円⇒H32:3000億円予測)をコンピュータ上で設計し開発先導へ

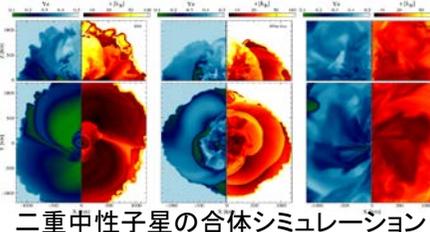


新物質創成

金やウランなど鉄より重い元素は超新星爆発でできたとされているが、実際はどこで合成されたか不明



現実に即した条件での計算により、**鉄より重い元素が合成される現象を再現**



最先端の観測装置による理論の検証



宇宙

ポスト「京」の開発について

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である。

(総合科学技術・イノベーション会議による国家的に重要な研究開発の評価(平成27年1月)より抜粋)

開発の概要

- ◆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。
- ◆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重点的に取り組むべき社会的・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、9つの重点課題と、新たに取り組むべきチャレンジングな課題である4つの萌芽的課題を設定)

