

スーパーコンピュータの利活用等 について

平成27年2月

文部科学省研究振興局参事官(情報担当)

計算科学技術推進室

【 趣 旨 】

- ✓ スーパーコンピュータは、我が国の競争力等の源泉となる最先端の成果を創出する研究開発基盤であり、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国家基幹技術です。
- ✓ 国の競争力等を左右するため各国が熾烈な競争開発を行っており、その重要性は産業界も含め様々な分野において今後益々高まっていくものと考えられることから、文部科学省においてはスーパーコンピュータ「京」を中核とする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（H P C I：国内の大学等のスパコン等を高速ネットワークでつないだ利便性の高い利用環境）を構築し、画期的な成果の創出、人材の育成、教育研究拠点の形成に向けた取組等を推進しております。
- ✓ このような中、我が国の次期リーディングマシンとして、2020年の共用開始を目指し、最大で「京」の100倍の性能を有するポスト「京」の開発を、本年度より着手いたしました。総額1,000億円以上のプロジェクトとして、諸外国に対して競争力のあるスーパーコンピュータの開発とともに、社会ニーズに応えた世界を先導する成果を創出することで我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に貢献することが求められています。
- ✓ 併せて、ポスト「京」に向けたアプリケーション開発については、昨年8月に九の重点課題を設定し、12月には代表機関を選定、今後、本格的な研究開発を進めていくところです。
- ✓ 文部科学省といたしましては、国家的に解決を目指す重要課題等に優先的に取り組むとともに、スパコンの利活用を更に促進する必要があると考えており、皆様におかれましては、スパコン「京」及びポスト「京」並びに大学基盤センター等のスパコンの活用について、是非御検討いただけますようお願い致します。

【ポイント】

■ 「京」の利用には、様々な“支援”が受けられます。

- ・登録機関（高度情報科学技術研究機構RIST）がワンストップサービス。
- ・HPに各種情報がまとめられています。（<https://www.hpci-office.jp/>）

■ 「京」には様々な利用枠があります。

- ・一般利用枠、若手人材育成枠（無償・年に1度秋頃公募）
- ・競争的資金枠（本年4月より随時募集・有償・審査一部免除）
- ・重点化促進枠（随時募集・無償・政策上重要かつ緊急な課題）

<産業利用>

- ・トライアルユース制度（随時募集・無償）
- ・実証利用（無償）
- ・個別利用（随時募集・有償：1ペタフロップス1時間約12万円）

■ 大学のスパコンも利用可能です。

- ・「京」同様、ワンストップの支援が受けられます。
- ・戦略5分野の代表機関が技術的な相談に乗ってくれます。（別紙参照）
- ・無償（HPCI制度において） ※大学独自の有料利用も別途あります。
- ・活用できるソフトの一覧が公開されています。（http://www.hpci-office.jp/pages/h27_boshu_hpci_resource）

■ ポスト「京」の利用について

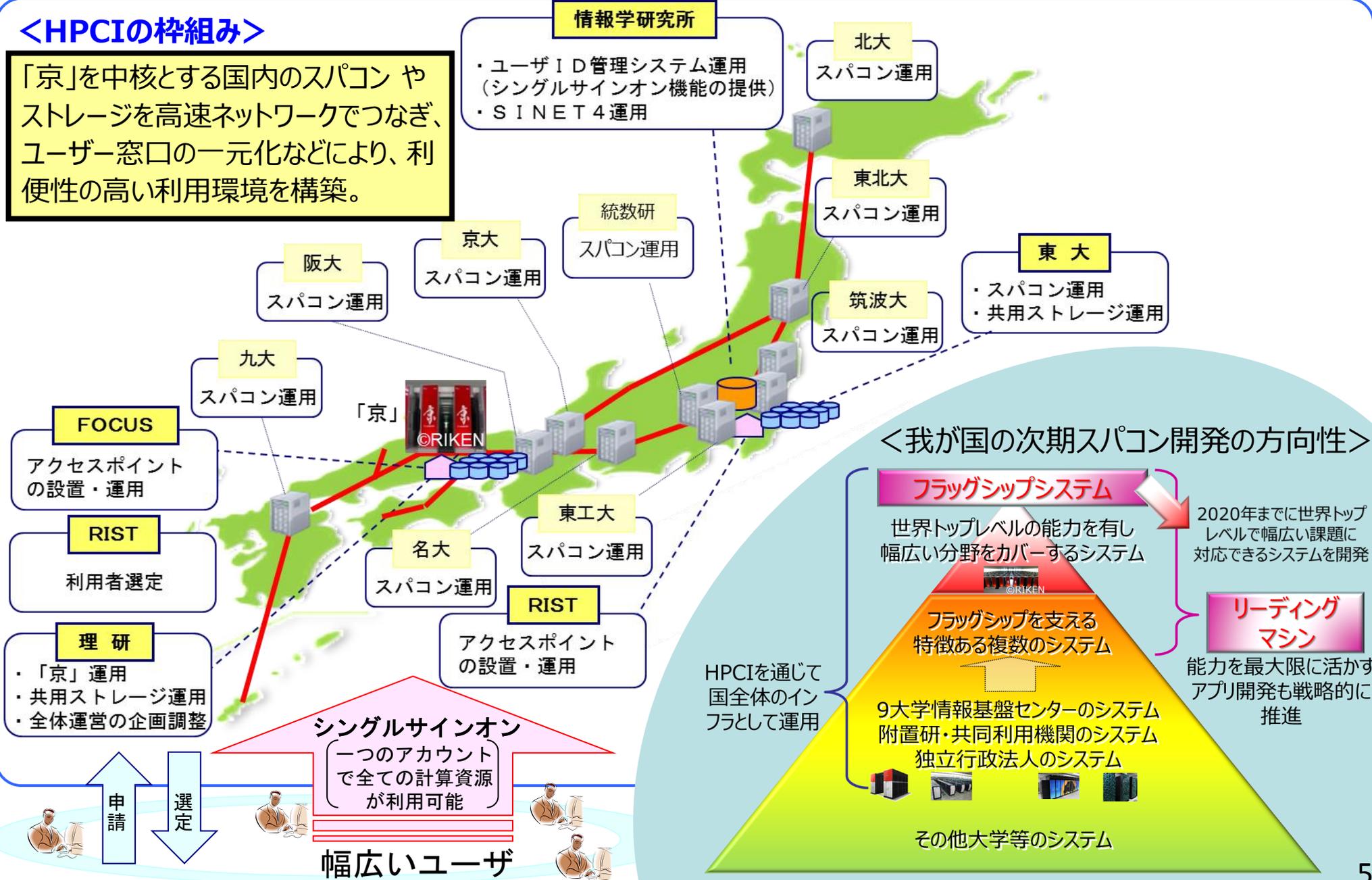
- ・9の重点課題、4の萌芽的課題での協力・連携が考えられます。
- ・「政策対応枠」の新設を検討しています。
- ・ご要望等を今後の制度設計等への反映を検討いたします。

スパコン「京」の利用・支援 について

我が国の計算科学技術インフラ

<HPCIの枠組み>

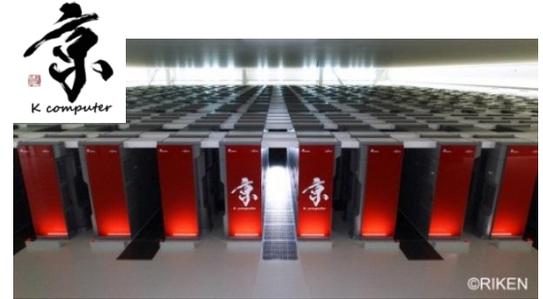
「京」を中核とする国内のスパコン や ストレージを高速ネットワークでつなぎ、ユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。



スーパーコンピュータ「京」

1. 概要

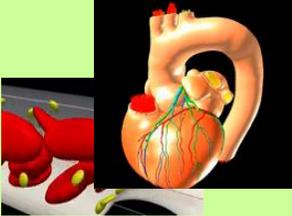
- 平成18年4月に国家基幹技術として、プロジェクトを開始。富士通と理化学研究所が共同開発。
- 平成23年6月、11月と連続で世界スパコン性能ランキング（TOP500）において1位を獲得。
- 平成24年9月28日に供用開始。
- 分野で最高の賞である「ゴードン・ベル賞」を2年連続（平成23,24年度）で受賞。
- 実用に近い総合的な性能を評価する「HPCチャレンジ賞」を4年連続（平成23～26年度）で受賞。
- 平成26年6月にビックデータの解析性能を評価するランキング（Graph500）において1位を獲得。
- 平成26年7月に「京」のネットワーク技術が(公財)発明協会から最も優れた発明として恩賜発明賞を受賞。
- プロジェクト経費：約1,110億円（平成18年度～平成24年度）



2. 主な成果

ライフサイエンス

血流シミュレーション、心臓シミュレーションで医療支援



HPCI戦略プログラム 分野1
HPCI戦略プログラム 分野1
東京大学 久田・杉浦・藤尾・岡田研究員
協力 富士通株式会社

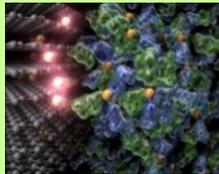


高速シミュレーションでIT創薬を支援

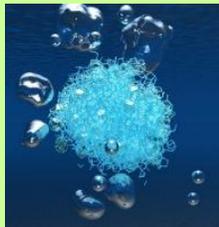
HPCI戦略プログラム 分野1
東京大学 先端科学技術研究センター 藤谷 秀章

材料・エネルギー

リチウムイオン電池
充電時間1/3に
高濃度電解液の
動作原理を解明



出典:
<http://www.t.u-tokyo.ac.jp/pepage/relas/e/2014/2014032401.html>(HPCI戦略プログラム 分野2 館山グループで実施)

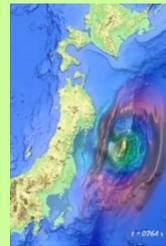


メタンハイドレート
からメタン発生の
仕組みを解明

2014年4月16日
朝日新聞に掲載

防災・減災

地震動、地殻変動、
津波を同時にシミュレーション



HPCI戦略プログラム 分野3
東京大学地震研究所 前田拓人・古村孝志

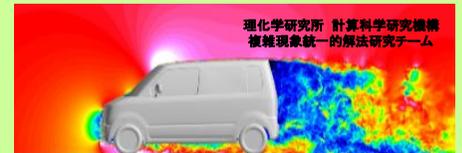
地球規模の大気
変動現象の1カ
月予測の実現可
能性を実証



海洋研究開発機構

ものづくり

大規模空カシミュレーションで
自動車開発を加速

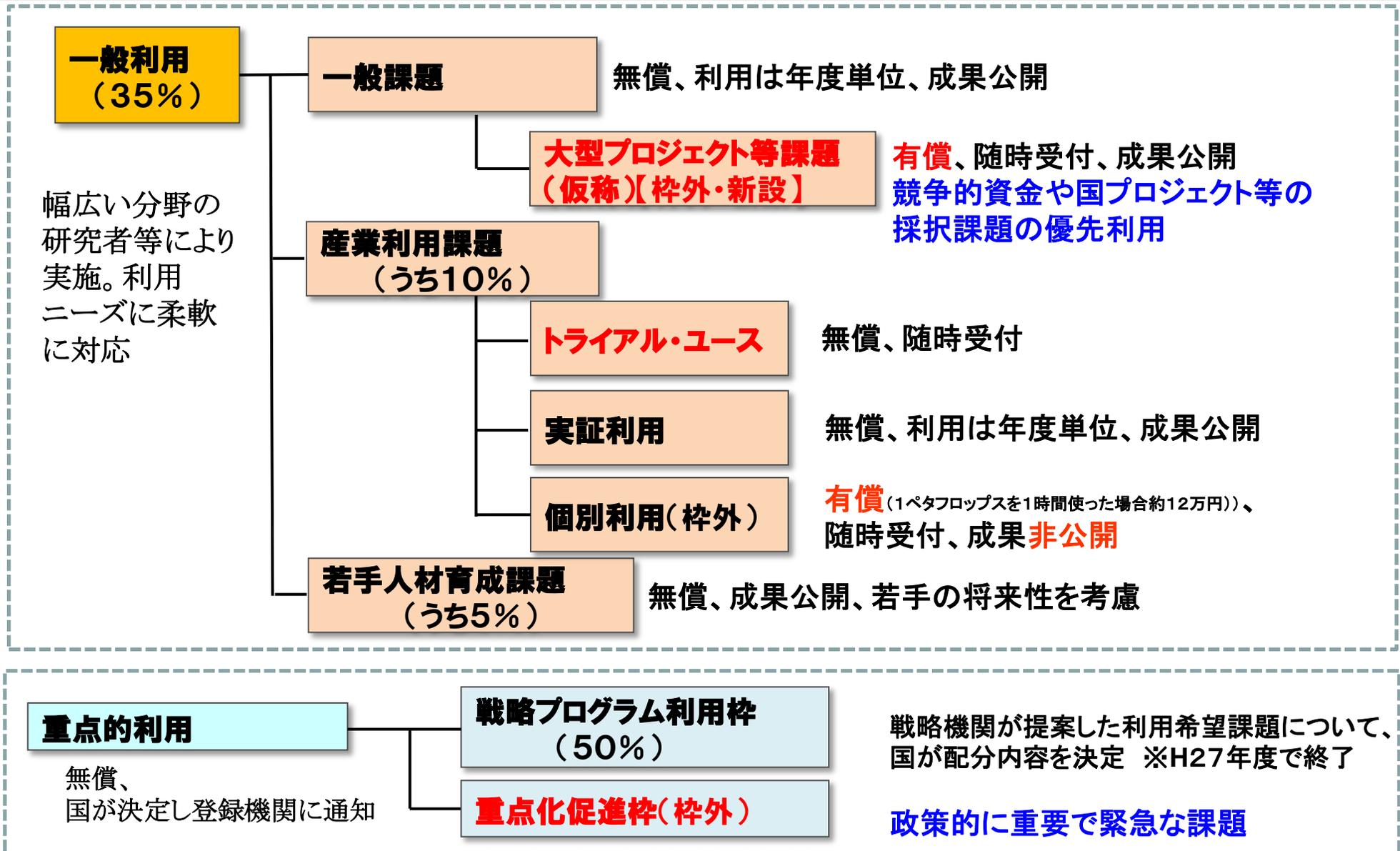


理化学研究所 計算科学研究機構
複雑現象統一の解法研究チーム



HPCI戦略プログラム 分野4
宇宙航空研究開発機構
流体制御シミュレーションにより
輸送・流体機器
開発に革新の芽を育成

「京」における利用区分/利用料について



※海外の利用については、国際交流推進の観点から、利用することが可能。
ただし、海外の企業に所属する者については、国内の法人に所属する者との共同申請とする。

「京」における競争的資金獲得課題等の利用について

競争的資金を獲得した課題や国のプロジェクトで採択された課題は、すでに国レベルで重要性・緊急性が高い課題であると評価を受けているため、「京」においてもそれを考慮した課題選定や優先利用を実施する。これにより、革新的成果の早期創出に資する。

なお、SPring-8でも競争的資金獲得課題に対して有償優先利用制度を適用している。

- 実施開始: 平成27年4月より
- 提供資源量: 2400万ノード時間(3～5課題)/年
- 利用料金: 有償 (個別利用と同額)
- 応募時期: 随時受付
- 利用期間: 1年間
- 応募資格: 競争的資金獲得課題または国のプロジェクト採択課題
(課題の種類や予算額等の制限は設けない)
- 審査基準: 科学的・社会的意義は二重審査となるため実施せず、
「京」の規模の必然性やソフトの準備状況等は引き続き審査を実施
- 成果: 公開

利用支援体制について

「京」の利用者

問合せ

ヘルプデスク

回答

<https://www.hpci-office.jp/>



(1) 申請前の事前相談

- 応募手続きについての相談
- 課題申請書類の記入方法についての相談
- 「京」の計算機環境 (HW,SW) の問合せ



(2) 利用相談

- コンパイルエラー、実行時エラー等
- 他システムからの移行
- ライブラリ、ツール等
- 性能情報採取方法
- 実行結果不正



登録機関

(4) 情報提供

- 一元的に各種の情報をポータルサイトで提供
- HPCIシステムの提供機関と計算機資源の一覧
- お知らせ
- 課題募集開始、説明会、講習会の案内など
- 高速化ノウハウなど

(3) 技術支援

- 利用者からの高速化支援の依頼
- 重点的に支援するプログラムをピックアップ
- プログラム性能情報の採取
- ボトルネック調査(通信特性分析, インバランス評価, 単体性能評価) など
- 高速化支援



(5) 利用講習会の実施

- 利用開始後に利用講習会を適宜開催
- 利用環境, 開発環境, システムの説明
- 性能分析手法, 高速化のノウハウ



【問い合わせ先】 (一財) 高度情報科学技術研究機構 神戸センター
TEL : 078-940-5795 E-mail : helpdesk@hpci-office.jp

産業利用の促進に向けた利用支援

■「京」を中核とするHPCIシステム利用者に対し、産業界向けの利用拠点（アクセスポイント）を東西に設置。

- **セキュリティに配慮**した作業用個室（2室／各拠点）とHPCI利用端末を用意。自社からHPCIにアクセスすることが難しい産業利用ユーザーに利用環境を提供。
- 技術相談窓口において**専任の技術スタッフ**による、利用環境から大規模計算資源利用に至るまでの**利用支援・指導・助言**。

HPCIアクセスポイント神戸 （運営：計算科学振興財団）

住所：兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-28計算科学センタービル1階
連絡先：078-599-5025 <http://www.j-focus.or.jp/ap-kobe/>



「京」直結ワークステーション



「京」直結ジョブ管理用端末
HPCI利用端末

HPCIアクセスポイント東京 （運営：高度情報科学技術研究機構）

住所：東京都品川区北品川2-32-3六行会総合ビル7階
連絡先：03-6433-0670 <http://tokyo.rist.jp/ap-tokyo/>



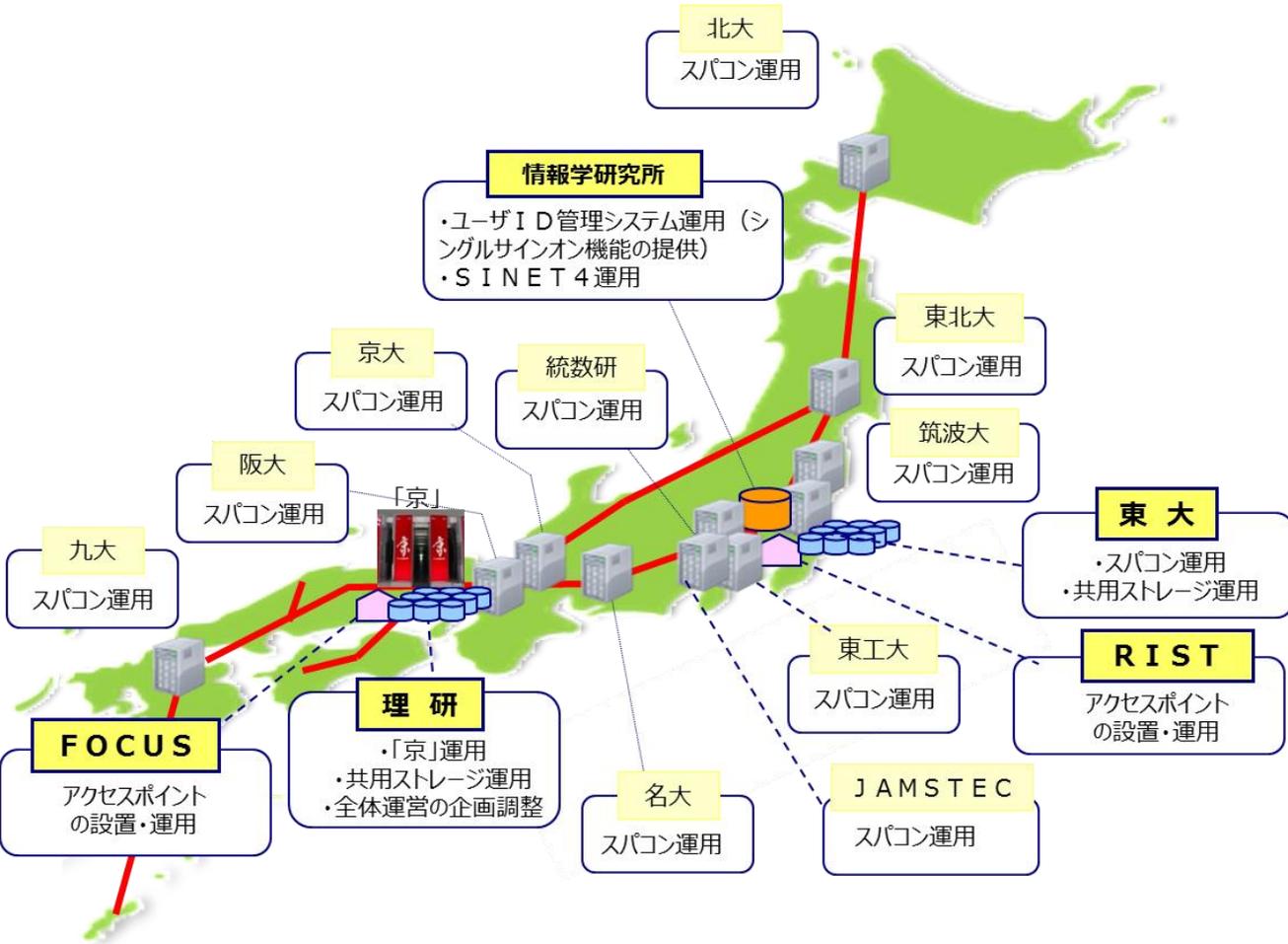
HPCI利用端末

大学基盤センター等のスパコン 利用・支援について

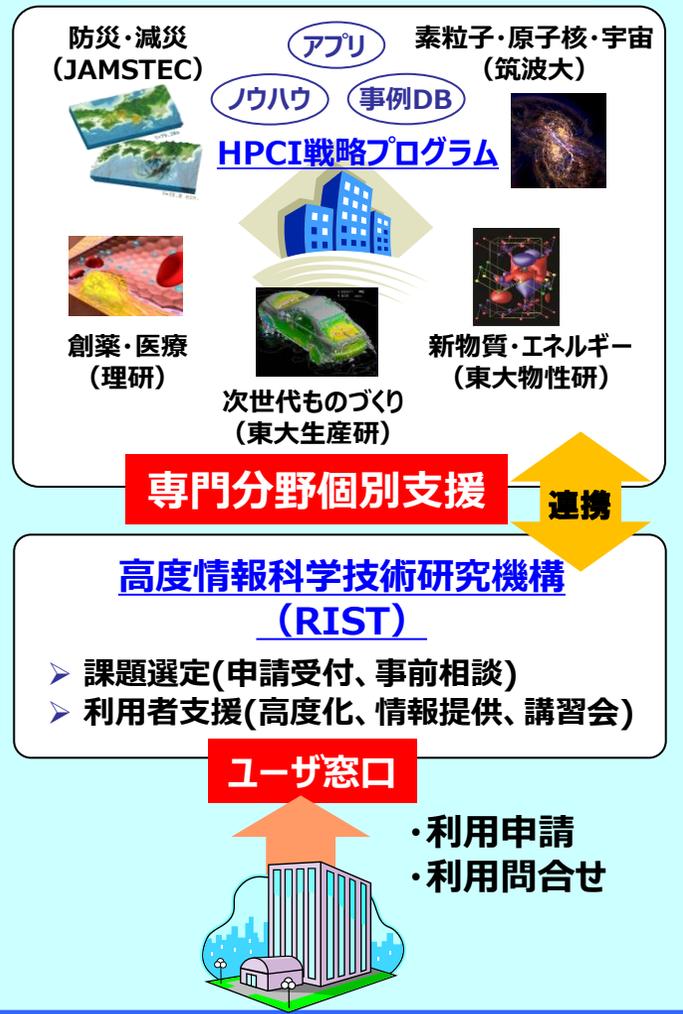
H P C I (革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ) の枠組み

「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 (SINET※) でつなぎ、ユーザ窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。無償で利用可能。

※SINET :
日本全国の国公立大学、研究機関等を結ぶ学術情報基盤として大学共同利用機関である国立情報学研究所(NII)が構築、運用。



HPCI利用イメージ



(参考) お問い合わせ先など

【ユーザ窓口】高度情報科学技術研究機構(RIST)

■HPCIサービス窓口

TEL : 078-940-5795 (平日9:00-17:00)

e-mail : helpdesk@hpci-office.jp

HPCIの詳細情報については、こちらをご参照ください。

http://www.hpci-office.jp/pages/h27_boshu_hpci_resource



提供ソフトウェア一覧を含む
詳細は各資源名をクリック
して下さい。

【専門分野個別支援窓口】HPCI戦略プログラム戦略機関

■分野1 創薬・医療

理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム企画調整グループ

e-mail : stpr1-life@riken.jp

■分野2 新物質・エネルギー

東京大学物性研究所 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)事務局

e-mail : adm-office@cms-initiative.jp

■分野3 防災・減災

海洋研究開発機構 HPCI戦略プログラム担当

e-mail : ispg-jutaku@jamstec.go.jp

■分野4 次世代ものづくり

東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター事務局

e-mail : office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

■分野5 素粒子・原子核・宇宙

筑波大学 計算基礎科学連携拠点事務局

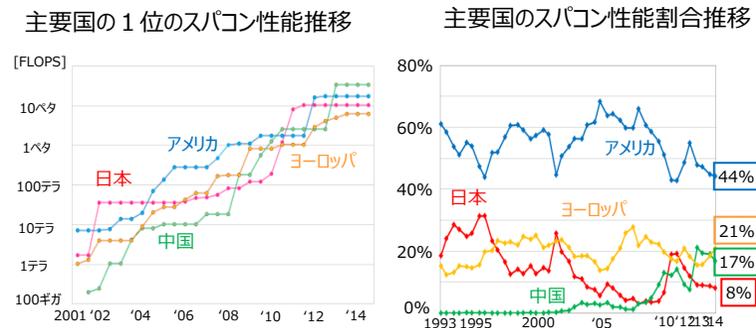
e-mail : jicfus-jimu@ccs.tsukuba.ac.jp

ポスト「京」について

ポスト「京」の開発（フラグシップ2020プロジェクト）

平成27年度予算案額 : 3,972百万円
 (平成26年度予算額 : 1,206百万円)

- ◆最先端のスーパーコンピュータは、我が国の競争力等の源泉となる最先端の成果を創出する**研究開発基盤**であり、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「**国家基幹技術**」。
- ◆科学技術や産業の発展など国の競争力等を左右するため、各国が熾烈な開発競争。
- ◆我が国として、**2020年までに世界トップレベルで幅広い課題に対応**できるスーパーコンピュータを開発し、社会ニーズに応えた**世界を先導する成果を創出**することで、**課題解決・イノベーション創出に貢献**。



※ FLOPS (フロップス): 1秒間に計算ができる回数(能力)を表した値

概要 ~利用者サイドに立った開発の推進~

- ◆**システム** (演算性能、電力性能及びコストで国際競争力のある汎用システム) と**アプリケーション**を協調的に開発 (Co-design)。
- ◆理化学研究所が中心となって研究開発を推進。
- ◆総事業費 約1,300億円 (うち国費分 約1,100億円)。

- ◆健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等から、**重点的に取り組むべき社会的・科学的課題 (重点課題)**を選定。
- ◆重点課題について、**公募で決定した代表機関を中心にアプリケーションを開発**。



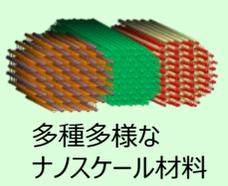
ポスト「京」で期待される成果例

車のコンセプトから構造・機能・性能設計に至る**主要な設計段階のシミュレーションを統合的に実施**。
 開発期間短縮・コスト低減・品質向上に貢献。



都市全体の被害シミュレーションを行い、地震・津波の影響を統合的に予測。

自治体等の防災・減災計画の策定に貢献。



マテリアルズ・インフォマティクス等を活用しつつ、**シミュレーションによる効果的な材料探索を実現**。
 重要材料の知的財産獲得など、材料・デバイス開発で世界に先行。



新型センサ・衛星による**観測データと融合した** 台風・集中豪雨等の**予測シミュレーションを実施**。
 高解像度・高速の気象予測シミュレーションを実現し、リアルタイム予測への道を開拓。

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。その後、公募で重点課題を実施する機関を決定。

<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」の戦略的活用が期待できる課題を「重点課題」として選定。

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	<p>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。</p> <p>代表機関：<u>理化学研究所（課題責任者：奥野 恭史・客員主管研究員）</u> 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</p> <p>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な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。</p> <p>代表機関：<u>東京大学（課題責任者：宮野 悟・教授）</u> 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</p>
防災・環境問題	<p>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。</p> <p>代表機関：<u>東京大学（課題責任者：堀 宗朗・教授）</u> 分担機関：海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学</p>

<重点課題（9課題）>（つづき）

カテゴリ	重点課題
防災・環境問題	<p>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</p> <p>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。</p> <p>代表機関：<u>海洋研究開発機構</u>（課題責任者：<u>高橋 桂子</u>・センター長） 分担機関：<u>理化学研究所</u>、<u>東京大学</u>、<u>東京工業大学</u></p>
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</p> <p>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</u>（課題責任者：<u>岡崎 進</u>・教授） 分担機関：<u>神戸大学</u>、<u>理化学研究所</u>、<u>東京大学</u>、 <u>物質・材料研究機構</u>、<u>名古屋大学</u>、<u>岡山大学</u>、<u>北海道大学</u>、<u>早稲田大学</u></p>
	<p>⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化</p> <p>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</u>（課題責任者：<u>吉村 忍</u>・教授） 分担機関：<u>豊橋技術科学大学</u>、<u>京都大学</u>、<u>九州大学</u>、 <u>名古屋大学</u>、<u>立教学院立教大学</u>、<u>日本原子力研究開発機構</u>、<u>宇宙航空研究開発機構</u>、 <u>物質・材料研究機構</u>、<u>自然科学研究機構核融合科学研究所</u>、<u>みずほ情報総研株式会社</u>、 <u>株式会社風力エネルギー研究所</u></p>

<重点課題（9課題）>（つづき）

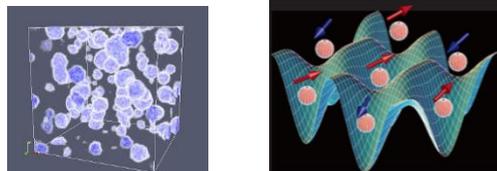
カテゴリ	重点課題
産業競争力の強化	<p>⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。</p> <p>代表機関：<u>東京大学</u>（課題責任者：<u>常行 真司</u>・教授） 分担機関：筑波大学、大阪大学、自然科学研究機構分子科学研究所、名古屋工業大学、東北大学、産業技術総合研究所、東京理科大学</p>
	<p>⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 製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</u>（課題責任者：<u>加藤 千幸</u>・教授） 分担機関：北海道大学、東北大学、広島大学、九州大学、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所</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</u>（課題責任者：<u>青木 慎也</u>・客員教授） 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</p>

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

<萌芽的課題（4課題）>

ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、**今後、調査研究を通じて実現化を検討**する。
調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定する。

萌芽的課題

<p>⑩ 基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦</p>	<p>極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答の出ない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。</p> <p><サブ課題(例)></p> <ul style="list-style-type: none"> A: 破壊とカタストロフィ: 材料、人工物から地球まで B: 相転移と流体が織り成す大変動: ナノバブルから火山噴火まで C: 極限環境での状態変化: 物質の理解から惑星深部へ D: 量子力学の基礎と情報: 計算限界への挑戦 
<p>⑪ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究</p>	<p>複雑且つ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済など社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。</p> <p><サブ課題(例)></p> <ul style="list-style-type: none"> A: 各社会要素モデルの統合化とその有効性実証研究 B: 各社会構成要素モデルの高度化(交通システムの高精度高信頼予測の実現、およびそれによる最適化の実現)
<p>⑫ 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明</p>	<p>宇宙、地球・惑星、気象、分子科学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取り組みにより、観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子科学を探究する。</p> <p><サブ課題(例)></p> <ul style="list-style-type: none"> A: 地球と地球型惑星（第二の地球）の誕生条件の解明 B: 太陽活動による地球環境変動の解明 C: 太陽系における物質進化の解明
<p>⑬ 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用</p>	<p>革新技术による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」での大規模シミュレーションにより思考を実現する脳の大規模神経回路を再現し、人工知能への応用をはかる。</p> <p><サブ課題(例)></p> <ul style="list-style-type: none"> A: 思考を実現する神経回路機構の解明 B: 脳アーキテクチャにもとづく人工汎用知能 