

わが国のシミュレーション技術の振興について

林 孝浩

文部科学省研究振興局 情報課計算科学技術推進室長

スーパーコンピュータによるシミュレーションは、理論、実験に並ぶ第3の手法であり、その活用により研究開発システムの革新、新たな学問分野の開拓、わが国の競争力の強化が期待されるなど、今後のわが国の科学技術や産業の発展の基礎となる大きな役割を担うものです。

こうしたことから、第3期科学技術基本計画において次世代スーパーコンピュータを「国家的大規模プロジェクトとして基本計画期間中に集中的に投資すべき基幹技術」である国家基幹技術と位置づけるとともに、昨年8月に決定された第4期科学技術基本計画においても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は国家存立の基盤となる研究開発課題と位置づけられ、国みずからが長期的視点に立って継続的に研究開発を進めていく旨が定められています。

文部科学省としても、このような政策を踏まえ、平成18年度から次世代スーパーコンピュータ計画を進めて参りました。この計画は、事業仕分け等の議論を踏まえ、平成22年度予算において、開発者側視点から利用者視点へ転換し多様なユーザーのニーズに応える「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（HPCI）」を構築する計画となりました。具体的には、「京」を中核に大規模ストレージや大学等の有するスパコン等をネットワークで接続し、計算資源を最適に活用するとともに、データの共有や共同分析を可能とするものです。

HPCIの整備・運用については、ユーザーのさまざまなニーズを踏まえ行うことが重要であることから、ユーザコミュニティの中核となっている機関、大型スパコンを有する大学や独法、ネットワーク構築を支援する機関から構成されるHPCIコンソーシアムが主導して実施しています。平成22年7月に準備段階のコンソーシ

アムが発足し、HPCIの構築・運用の具体化とコンソーシアムの本格的な運営に向けた検討を進めてきました。

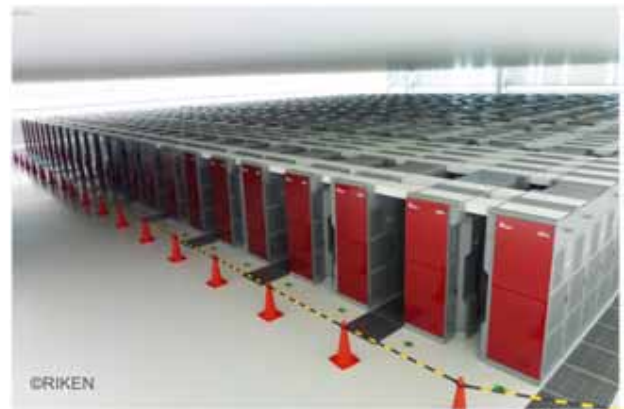


図1 京速コンピュータ「京」

写真提供：独立行政法人 理化学研究所

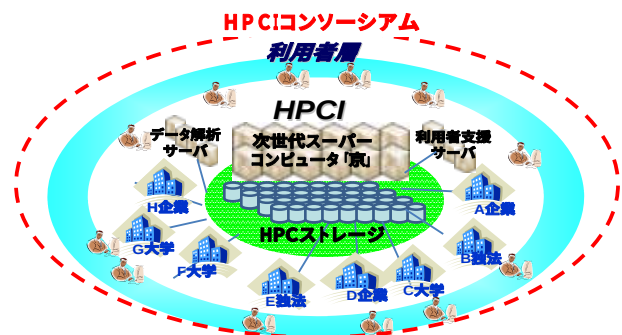


図2 革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）のイメージ図

それを受けて、コンソーシアムは平成24年4月2日に一般社団法人化により本格段階へ移行し、計算科学技術に関わる全ての者（計算科学技術関連コミュニティ）に開かれたものであることを理念のもと、計算科学技術に関わるコミュニティの幅広い意見集約の場として、HPCIシステムの整備・運用方針やわが国の計算科学技術の振興策並びに将来のスーパーコンピューティング等について検討し、国や関係機関に提言する等の活動を行うこととしています。HPCI

コンソーシアムが今後のわが国の計算科学技術の発展に大きな役割を果たしていけるよう、関係者の皆様の積極的な参画を期待しています。

HPCI の中核となる「京」の開発・整備については、平成 23 年 11 月に性能目標である 10 ペタフロップスを達成し、また、平成 23 年 6 月及び 11 月のスーパーコンピュータ性能ランキング TOP500 において世界 1 位を獲得するなど、平成 24 年 6 月の完成、秋の共用開始に向け順調に進んでいます。

「京」の運用については、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律（共用法）に基づき、多様な分野のさまざまなユーザーが活用できるよう、透明かつ公正な手続きによる利用機会の提供や適切なユーザー支援を行うこととしています。

一般財団法人 高度情報科学研究機構（RIST）が利用促進業務実施機関として今年 4 月より業務を開始しており、秋の共用開始に向けて課題選定業務などの準備が進められています。

このように「京」及び HPCI の整備・構築は着実に進んでおり、本年秋にはユーザーに利用しやすいコンピュータインフラの運用が開始されることとなります。

今後は、この「京」を中核とした HPCI を有効に活用し、多くの画期的な成果を出すことが重要であり、文部科学省としてもこれを積極的に推進しています。

そのため、文部科学省では、平成 18 年度よりナノテクノロジー分野及びライフサイエンス分野において、「京」を最大限活用するためのソフトウェアを研究開発すべく、グランドチャレンジアプリケーション開発を推進してきました。

その中で開発されたアプリケーションソフトを用いて「京」の試験利用により実施された『「京」による 10 万原子シリコン・ナノワイヤの電子状態の第一原理計算』が、平成 23 年 11 月にゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞しました。グランドチャレンジアプリケーションの実用的価値と「京」のアプリケーション実行で

の性能が高く評価された結果だと考えています。

さらに、「京」を中核にした HPCI の能力を最大限活用して世界的な成果をいち早く創出するため、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる 5 つの分野を戦略分野として設定し、それらの分野の核となる戦略機関を中心に研究開発とその体制構築を進めていく戦略プログラムを平成 23 年度から本格実施しております。

完成後の「京」を用いたシミュレーションにより、地震・津波の被害軽減や、薬の開発や循環器の統合シミュレーション、高効率の太陽電池の開発などさまざまな成果が創出されるよう、こうした取組を着実に進めていきます。

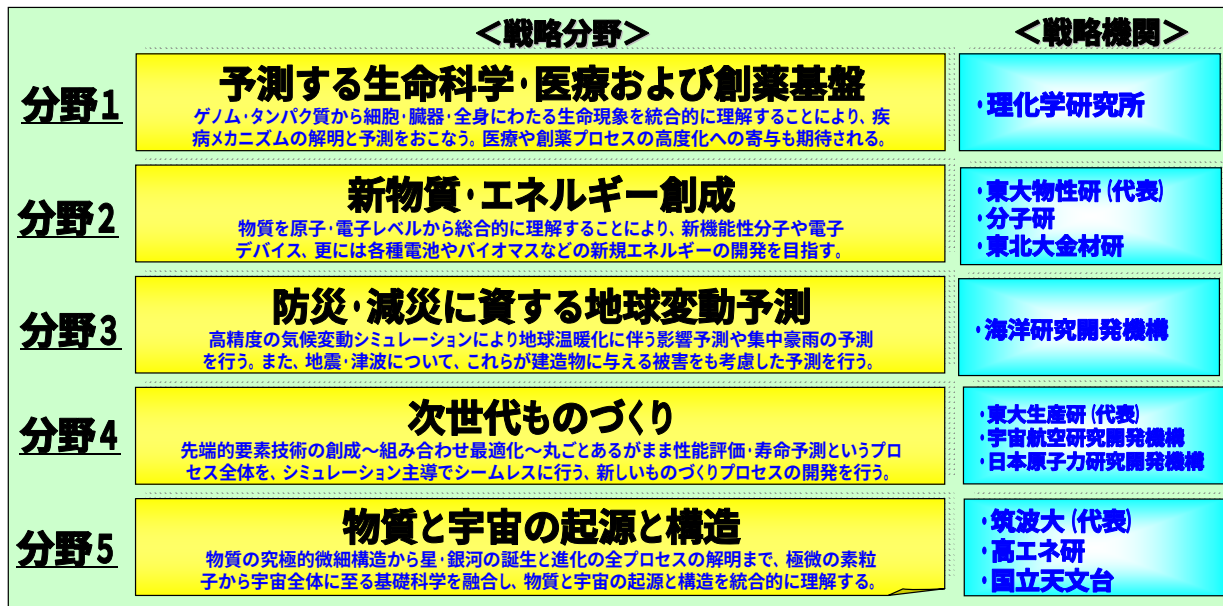
科学技術の成果の社会への還元を一層促進することは、国の科学技術政策の重要な課題の 1 つであり、「京」をはじめとした先端大型研究施設をいかに産業界の利用促進につなげるかが重要であります。

産業利用の促進については、HPCI コンソーシアムにおける検討の中でも議論がされてきました。例えば、有効性が実証できる枠組み作りとして、トライアルユース枠の設定、また、利用支援を強化するための取組として、情報の一元的提供、コンシェルジュ的相談窓口の設置、ソフトウェア移植・チューニング支援など、さらに、利用環境の整備のため、SINET4 への産業界からのスムーズな接続、アクセスポイント（東西 2 ヶ所）、成果の帰属と知財権の明確化などの提案をいただいております。こうした提言を踏まえた産業利用の促進の取組を進めています。

このように「京」を中核とした HPCI の整備が着実に進む一方、スーパーコンピュータの性能は、これまで 10 年間で約 1000 倍のペースで進展し、今後も同様の傾向が続くと予想されており、将来を見据え、ハード・ソフトに関わる HPCI システムの高度化を総合的かつ戦略的に推進していくことが必要です。また、世界各国が激しい開発競争を展開しており、欧米ではエ

HPCI戦略プログラム戦略分野

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進する。



※ 京速コンピュータ「京」で、社会的・学術的に大きなブレイクスルーが期待できる分野を「戦略分野」(5分野)とする。
 ※ 各戦略分野の研究開発、分野振興等を牽引する機関を「戦略機関」とする。

図 3 HPCI 戦略プログラム戦略分野



図 4 イノベーション創出の基盤となる最先端研究環境の構築

クサフロップス級の HPC 技術の開発に向けた取組を進めています。わが国としてもこうした動きに遅れることなく研究開発を進めていくことも必要です。

そのため、HPC 技術等の HPCI システムの高度化に必要な技術的知見を獲得することを目的とした調査研究を平成 24 年度、平成 25 年度に実施することとしています。10 年後のわが国の社会的・科学的課題の解決という視点から複数のシステムを厳選し、各システムについて、ハードウェアの技術動向調査、システム設計研究・システムソフトウェアの検討等を行い、5～10 年後のわが国の HPCI システムに必要な技術的知見を獲得するとともに、事業終了年度に各システムに関し評価を行い、その結果を踏まえ、今後の HPCI 構成システム等のあり方に反映することとしています。

このような技術的検討に加え、今後 10 年程度を見据え、わが国の HPCI 計画の推進のあり方について必要事項を調査検討するために、平成 24 年 2 月に、HPCI 計画推進委員会のもとに、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(WG)を設置しました。WGでは、国内外の計算科学技術の動向、HPCI の活用で実現する科学的・社会的成果、HPCI システム構成のあり方、HPCI 全体のネットワークや利用体制のあり方等について調査検討し、平成 24 年 5 月末頃に基本的な考え方、今後さらに検討すべき事項等を整理し、平成 25 年夏頃を目途に中間報告を、平成 26 年 3 月頃を目途に最終報告をとりまとめることとしています。

冒頭にも申し上げたように、スーパーコンピュータによるシミュレーションは今後のわが国の科学技術や産業競争力の発展の基礎となる重要な分野です。文部科学省としても、長期的視点に立って、スーパーコンピュータに関する技術力の維持・強化を図るとともに、革新的な計算環境を構築し、その利用の推進を図ることにより、コンピュータシミュレーションにより、人類の直面するさまざまな課題の解決に資する画期的な成果の創出と、その社会への還元を引

き続き進めていきます。