

計算処理能力の新旧構成比較(重点課題別の試算)

健康長寿
社会の実現

防災・環境
問題

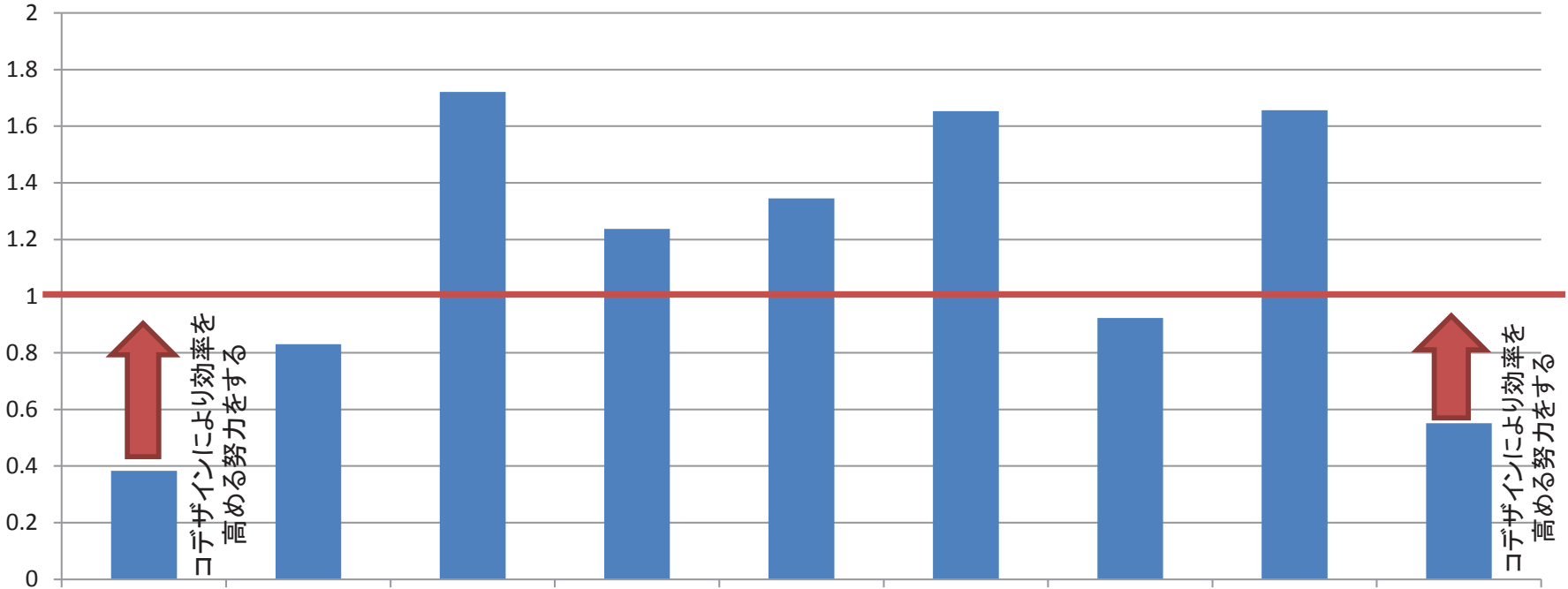
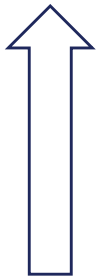
エネルギー
問題

産業競争力の
強化

基礎科学
の発展

従来のシステム(旧)に対する
新しいシステム(新)の計算処理
能力比
(新旧同じの場合を1とする。)

Better



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

個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

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

エネルギーの効率的な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

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

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

宇宙の基本法則と進化の解明

注: 本データは、計算科学ロードマップに記載されている関係分野の課題群の見積もりデータに基づいた試算である。

システムの評価結果

- H P C I 計画推進委員会 次期フラッグシップシステムに係るシステム検討WGにおいて、理研の提案システムを評価しているところ、以下の見解が中間的に取りまとめられている。

- ・システムとアプリケーションのCo-designにより、社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを実現する、との基本方針は妥当である。
- ・重点課題が幅広い分野にわたることから、2020年までに、世界トップレベルで多くの課題に対応できる汎用のシステムを、国際競争力のあるシステムとして実現し、エクサスケールを目指す、との方向性は現時点で妥当である。

- 今後、同基本方針や方向性に従い、ポスト「京」が、成果を最大化できるシステムとなるよう、また、国際競争力のあるシステムとなるよう、その技術的詳細等については基本設計の中でしっかりと検討していく。

【次期フラッグシップシステムに係るシステム検討WG メンバー】

浅田 邦博	(東京大学大規模集積システム設計教育研究センター長・教授)
梅谷 浩之	(スーパーコンピューティング技術産業応用協議会企画委員会委員/トヨタ自動車株式会社エンジニアリング IT部主幹)
小柳 義夫	(主査, 神戸大学計算科学教育センター特命教授)
笠原 博徳	(早稲田大学理工学術院教授)
加藤 千幸	(東京大学生産技術研究所教授)
工藤 知宏	(産業技術総合研究所情報技術研究部門研究部門長)
小林 広明	(東北大学サイバーサイエンスセンター長)
善甫 康成	(法政大学情報科学部教授)
中島 浩	(京都大学学術情報メディアセンター教授)
平木 敬	(東京大学大学院情報理工学系研究科教授)
藤井 孝藏	(HPCIコンソーシアム理事長/宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部宇宙輸送工学研究系教授)
松岡 聡	(東京工業大学学術国際情報センター教授)
宮内 淑子	(メディアスティック株式会社代表取締役社長)

理論ピーク性能とアプリケーション実効性能

- システムの理論ピーク性能を向上したとしても、アプリケーション実効性能が同様に向上するわけではない。
 - 実効性能向上比が理論ピーク性能向上比に揃わないのは、メモリ、通信、ファイルI/Oといった要素部品の性能向上がピーク性能(CPU性能)の向上と異なるためである。
 - アプリケーションとハードウェアとのCo-designによって、アプリ自体のデータの取り込み方や取り込み量、処理方法を改善することによって対応する予定である。
- 米国においても、理論ピーク性能やLINPACK性能ではなく、**実アプリケーションの実効性能を見据えたスパコン開発を実施。**

例1 : 「Trinity」 (ロスアラモス国立研究所に2016年に設置予定)

【HPCwireの記事 (2014年8月22日) より引用 → <http://www.hpcwire.jp/archives/4965>】

- ロスアラモス国立研究所のHPC部門のリーダーであるGary Griderと深い議論をする機会を持つことができた。(中略) 彼はFLOPSは気にしておらず、彼らの「Cielo」マシンの6倍から8倍の性能を気にしているだけだ
- 業者が頼んで来ない限り、彼らはLINPACKを計画していない

例2 : 「Cori」 (国立エネルギー研究スーパーコンピュータセンターに2016年に設置予定)

【HPCwireの記事 (2014年8月20日) より引用 → <http://www.hpcwire.jp/archives/3515>】

- LINPACKのような計算ベースのベンチマークをアピールするためではない
- 本当の魅力は、実際のアプリケーションの要件であり、計算馬力では全くない

例3 : 「CORAL」 (国立エネルギー研究スーパーコンピュータセンターに2018年に設置予定)

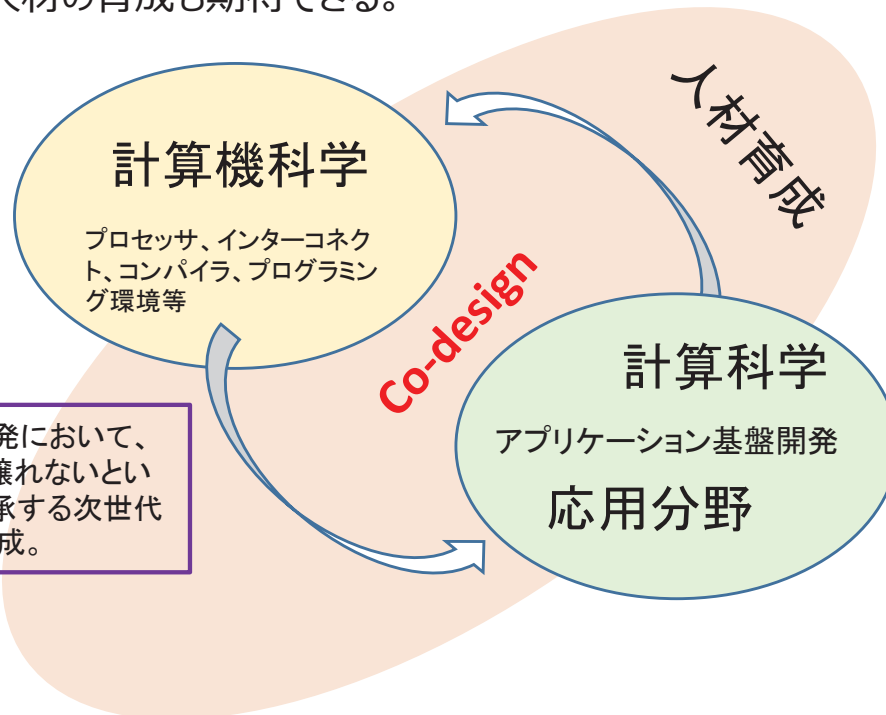
【米国先端計算科学諮問委員会提出資料 (2014年3月31日) より引用 → <http://science.energy.gov/~media/ascr/ascac/pdf/meetings/20140331/>

- アプリケーション性能要求を満たすのが最優先
- 現行マシンの4~8倍の大規模単一問題型計算性能、6~12倍の多重ケース処理型計算性能

人材育成

人材育成については、「京」の開発・整備等を通して、以下のとおり数々のノウハウや技術が蓄積されるとともに、そうしたノウハウや関連技術を有する人材が育成された。フラッグシップ2020プロジェクトにおいても、プロジェクトを通して同様の人材育成の効果が期待できる。「京」の完成後実施してきた研修生の受け入れやスクール・講習会を引き続き実施し、ポスト「京」についても取り上げていくことで、計算科学・計算機科学の最先端研究を牽引する人材育成に貢献する。

本プロジェクトにおいては、プロセッサ等の中核となる技術について、Co-designの観点から、ハードウェアの開発とアプリケーションの開発を密接に連携して進めることで、計算機科学分野と計算科学分野の双方あるいは計算科学分野と応用分野の双方に精通する人材の育成も期待できる。



AICSでの大学院生・若手研究者向け計算科学・システム開発のインターンシップ・スクールを若手に広げる

1. インターンシップ

大学院生を対象として、実習・体験により将来の最先端の計算科学研究開発の担い手を育成。

2. サマースクール

スパコンを駆使して新しい課題に挑戦したいと考えている大学院生・若手研究者等を育成。

- ① AICSサマースクール・AICSスプリングスクール
 - ・ 大学院生・若手研究者向け
- ② HPC国際サマースクール
 - ・ 米国及び欧州のHPC機関と共同開催

3. e-learningアーカイブ

計算科学と高性能計算のためのe-learningアーカイブの公開を準備中。

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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点

ポスト「京」で可能となる長時間ダイナミクス計算により、副作用因子を含む多数の生体分子の機能を予測し、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現

(2) 有効性の観点

創薬関連ビッグデータ(疾病、副作用等に関わるタンパク質群や医療情報)や最先端計測データを活用し、製薬企業およびその関連団体との密接な連携体制で新たな創薬基盤を構築

(3) 戦略的活用の観点

ポスト「京」をフルに活用した生体分子シミュレーションにより、創薬計算の大幅な加速を実現。さらに創薬の阻害から制御への革新(タンパク質の機能阻害から生体分子システムの制御へ)を目指す。

内容の詳細

単純な阻害剤をめざす創薬ターゲットが枯渇

生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)のダイナミクスを考慮した機能制御をめざす創薬が必要

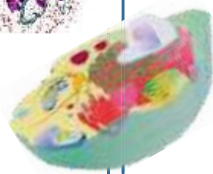
創薬関連ビッグデータを解析することで、多数のタンパク質からなる疾患原因、副作用、薬剤輸送に関わる生体分子システムを同定し、薬剤による制御対象を網羅する

ポスト「京」を駆使する分子シミュレーション法を開発

ポスト「京」を駆使して、多数のタンパク質の創薬計算を大幅に加速、さらにそれらのダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用を予測し、機能制御をする薬剤を設計

細胞環境を考慮したシミュレーションを行うことで、細胞に対する最先端計測実験と定量的に比較する

創薬関連ビッグデータ



ポスト「京」利用の必要性

今後の創薬には、ポスト「京」ではじめて可能となる、疾患に関わる多数のターゲットからなる生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)の同定とそれらの長時間シミュレーションによるダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用予測が不可欠

ポスト「京」分子シミュレーションによって、細胞環境における長時間シミュレーションがはじめて可能となり、先端計測機器からもたらされるデータに対応する情報を与えることで、細胞機能発現の機構がはじめて原子レベルのモデルから明らかとなる

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

生体分子システムの動的構造予測等に約45日
創薬の結合自由エネルギー計算に約35日(10万ケース)



期待される成果・波及効果

多数タンパク質を含んだ網羅的なターゲットシステムの選択、膨大な計算量による超高精度相互作用予測、単純な機能阻害ばかりでなく、副作用因子を含んだより複雑な機能制御による有効性の高い創薬を可能にする。これによって、創薬プロセスを革新し、製薬産業の活性化に貢献する。

様々な生体分子システムの最先端計測データ(SACLA, SPring8 等の大規模施設からの情報や、一分子計測情報などのin-house実験によるものなど)に対して、ポスト「京」を用いた分子シミュレーションは原子レベルでそれら実験情報に対する機能発現モデルを提供することができ、生体分子システムの理解、予測、操作に大きく貢献することができる。

② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点

ポスト「京」によるビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合することにより、革新的な予防法や早期診断法の開発、安全で有効性の高い治療の実現などを推進し、国際社会の先駆けとなる健康長寿社会の実現に貢献

(2) 有効性の観点

史上最大規模のビッグデータ解析と、心臓シミュレータ、脳神経シミュレータなど世界最先端の生体シミュレーション技術を医療機関、医療プロジェクト等と密接に連携した体制で推進することで、着実に医療応用を実現

(3) 戦略的活用
の観点

ポスト「京」による膨大な演算能力とストレージを活用し、ビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合して利用することで、個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開

内容の詳細

統合計算生命科学(ビッグデータ解析とそこから得られるモデルを用いる生体シミュレーション)による個別化・予防医療の支援

エクサスケールデータ解析

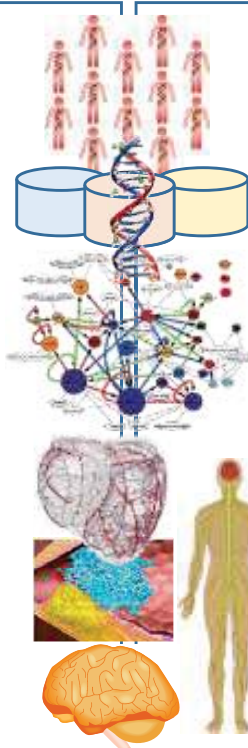
巨大なストレージと演算能力を活用した健康・医療ビッグデータ(個人ごとのオミックスデータと医療・計測情報など)を一挙に解析する技術を開発し、その基盤を確立

それらを活用し、個々人にフィットした薬、病気の予測・予防・治療法を見出し、個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開

マルチフィジックス生体シミュレーション

多様な医療分野のシミュレータを連成したマルチフィジックス生体シミュレーション法(分子、細胞から臓器・脳・全身)を確立

健康・医療ビッグデータの解析結果に基づいた個々人に合わせたモデルを用いた生体シミュレーションによる疾患の予測と治療法の検討を実施し、さらに新しい医療機器の開発に応用



ポスト「京」利用の必要性

今後の個別化・予防・参加型医療には、大規模な個々人のオミックスデータの解析とマルチフィジックス生体シミュレーションにより、がんなどの疾患における多数の遺伝子システムの異常の解明と生活習慣病などにおける正確なリスク評価が不可欠。

個別化・予防医療には、個人ごとの健康・医療ビッグデータの解析と個人ごとの違いに応じた生体シミュレーションによる手術や治療法の適用が必要になる。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)



遺伝子ネットワーク解析等に
約35日(1万5千ケース)
マルチフィジックス生体シミュレーションに約45日

期待される成果・波及効果

大規模なオミックスデータ解析により、恒常性破綻と疾患の関係、がんなどの疾患における多数の遺伝子異常と遺伝子ネットワークの関係を解明し、予防・個別化型の医療に貢献し、さらに参加型医療への展開を図る。

分子、細胞レベルから、血管・組織、さらには臓器レベルまでの生体シミュレーションにより、病態予測を可能にして、疾患の早期発見、最適な治療法の選択に寄与するとともに、世界最先端の医療機器開発に寄与する。

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

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点 被害経験からでは予測困難な複合災害に対する、統合的予測は国土強靱化のために必要不可欠。
- (2) 有効性の観点 内閣府・自治体等で利用できる、HPCを使った地震・津波、一次被害、二次被害の統合的予測システムは、高度な被害予測を実現し、防災・減災対策を合理化。
- (3) 戦略的活用の観点 多数地震シナリオの想定は、不確実性の高い地震・津波の複合災害の予測にとって必要不可欠であり、1シナリオの計算に京の全系が必要なため、ポスト「京」は必須。

内容の詳細

サブ課題A: 地震津波災害予測システムの実用化研究

- 自然災害・一次被害・二次被害の計算コンポーネントを統合した予測システムを構築し、多様性を考慮し想定外を無くす1000以上の地震シナリオ(*)で、大規模シミュレーションを実施することで、確率評価の可能な複合災害予測データベースを構築する。
- (*)断層広がり12x4通りxすべり不均質 C_2 通りx振幅3通り=1440通り
- 各計算コンポーネントに関する科学的課題を解決し、予測システムの信頼度を向上

サブ課題B: 統合的予測のための社会シミュレーションの開発

- 二次被害に大きく影響する都市全体を対象とした交通シミュレーション等を実施する社会シミュレーションの開発。
- 効果的・効率的な国土強靱化に向けて、多数地震シナリオを用いた被害予測を行い、行政に発信する。

ポスト「京」利用の必要性

- 詳細な幾何形状等を考慮した地震・津波・構造応答の計算を行うために、億を超える自由度の非線形有限要素計算が必要。
- 京の全系でスケールするコードは開発済みだが、1回の計算に1日程度かかるため、不確定さを考慮した多数計算は、京では数年以上かかる課題であり、ポスト「京」が必要。
- 交通シミュレーションについても、地震以外の状況も考慮した多数ケースの計算が必要。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト京では、5領域(千島海溝、日本海溝、南海トラフ、伊豆・小笠原海溝、琉球海溝)で行ったとして、占有日数は、最低で70日程度(避難シミュレーションでのシナリオを最小限に絞った場合)。絞らないと最大4倍必要となる。

期待される成果・波及効果

- 地震津波の複合災害予測データベースの構築。
- 経済的な波及効果: 直接効果だけでも6500億円(三菱総研調べ)。
- 将来的にリアルタイムシミュレーションへの展開。
- 計算コンポーネントの高度化を継続し、統合的予測システムを持続的に利用。
- 行政(内閣府・自治体)の防災・減災計画への反映。



複合災害予測のベースとなる3次元津波遡上計算



10万人規模のエージェントシミュレーション