

『次世代スーパーコンピュータ』について

- 国家基幹技術として推進 -

平成17年4月5日

理化学研究所 情報基盤センター長

姫野龍太郎

目次

1. スーパーコンピュータ(スパコン)は国家基幹技術の中核 最先端の科学技術に欠かせないシミュレーション	P 1
スパコンは国家基幹技術	P 2
スパコンの種類と特色	P 3
スパコンを活かすグリッド技術	P 5
2. 日本のとるべき戦略 日米スパコン開発競争	P 6
スパコン開発を牽引した利用分野の変遷	P 7
利用分野の広さは複合型が有利	P 8
日米スパコン開発戦略	P 9
3. 次世代スパコン活用の姿 - 利用分野の具体例をひもときながら - スパコンの利用分野 ~現状と展望~	P 11
・創薬応用 ・医療応用 ・創薬応用と医療応用の統合 ~めざすべき方向~ ・知的ものづくり ・気象	
次世代スパコンを活用する仕組み	P 16
次世代スパコンの実現に向けて ~課題と挑戦~	P 17
4. 次世代スパコンについて最後に一言	P 18
(参考1)~(参考4)スパコンの利用分野 ~現状と展望~	P 19
・たんぱく3000プロジェクト ・RNA機能解析と遺伝子統計解析 ・システムバイオロジー ・半導体技術	
(参考5)未来のコンピュータ	P 23

最先端の科学技術に欠かせない シミュレーション(計算科学技術)

科学技術の3つの方法:

理論、実験、そして、シミュレーション

実験困難な現象の解明や実験に時間がかかりすぎる場合
コンピュータを用いて仮想的に実験

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なのも同様、
より高精度なシミュレーションで、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

シミュレーション:

「科学的未来予測」と「知的ものづくり」の切札

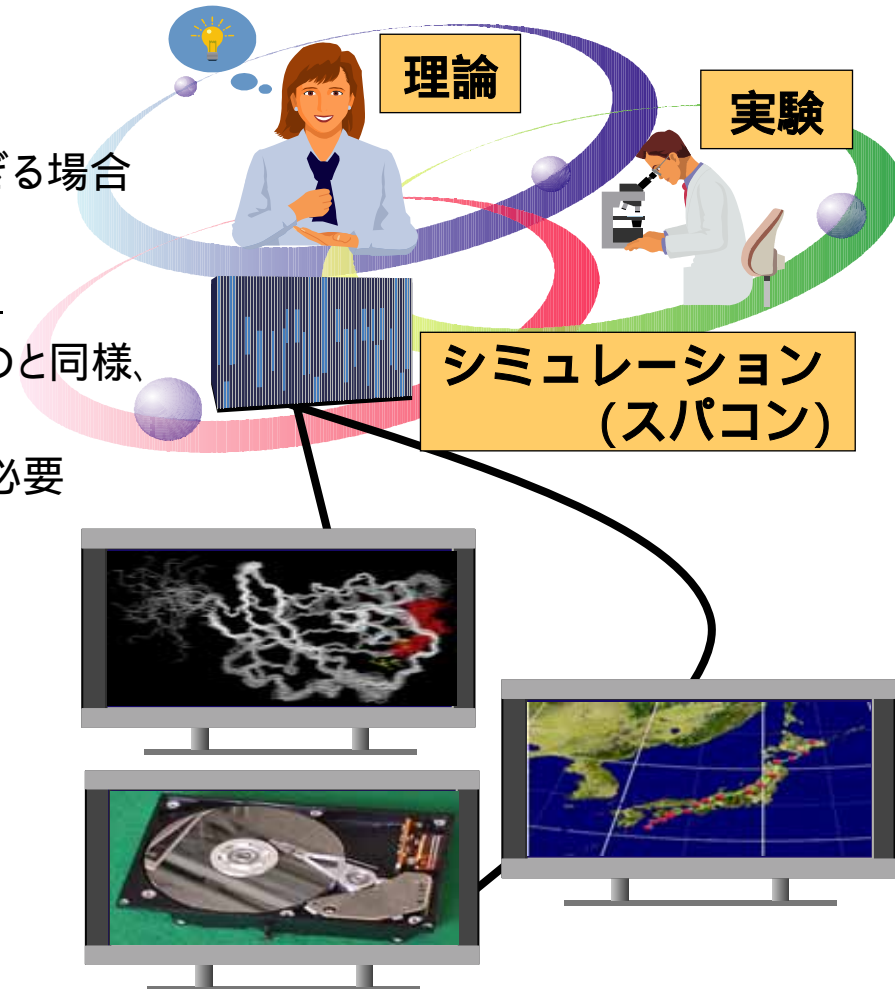
● 未踏科学の探求

(例)宇宙、銀河や星の誕生や死を解明、
未来の地球環境の変動を予測など

● 安全・安心な社会の構築

(例)地震や津波の伝播予測に基づく影響評価、台風の進行経路の予測など

● 産業競争力の強化、発展 (例)自動車開発、半導体開発など



スパコンは国家基幹技術

● 競争力の維持・強化

- 高い競争優位性を有する領域の維持・発展

● 自立性・自律性の確保

- 国民の生命・財産、我が国が有する社会インフラの保護

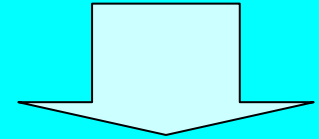
● 存在感・魅力の発揮

- 地球的な規模の問題への適切な貢献
- 先端技術の保持・活用によるリーダーシップの発揮

- 設計から製品化までのコスト、時間を大幅に低減する
「知的ものづくり」(飛行機全機統合設計)や人体全身・感染症・創薬設計の統合シミュレーションなど、従来の技術では不可能なシミュレーションを実現

- 地球環境の変動予測に基づくイニシアティブの発揮
- 国際共同研究の拠点として世界の英知を日本に結集

- 世界最高性能のスパコンは世界一の競争力の源泉
- つまり、世界最高性能が維持されなければ、科学技術・学術研究のみならず産業界の国際競争力の低下を招く



世界最高性能の
スパコンを開発

スパコンの種類と特色

- 利用分野の拡大にあわせて多種多様なスパコンが生まれた -

◆ベクトル（1976年～）

- 多くのデータをまとめて計算するので、大規模な計算に向く
- 高価だが利用分野は広く、性能向上の余地がある

例) 大気や海洋の大循環、
航空機の空力計算

地球シミュレータ(海洋機構)



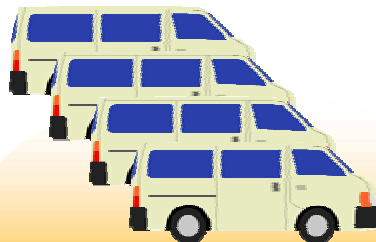
荷物(データ)の積みこみ方が重要

◆スカラー（1993年～）

- データを細かく分けて逐次的に処理する計算に向く
- 安価で、並列台数により性能を向上させてきた

例) 遺伝子の相同性検索、
新材料・触媒の設計

Columbia (NASA)



荷物(データ)の分け方、
車を多く並べることが重要

◆専用計算機（1990年代～）

- 処理は限定されるが、特定分野では低電力で極めて高い性能が得られる
- 処理の方法が異なるとそれに対応したハードの開発が必要

例)

- 分子動力学専用(細胞内の高分子の振る舞いの解析等) → MD-GRAPE
- 量子化学計算専用(化学反応の精密解析等) → EHPC



特定のコース(計算方法)でのみ動けるので
コースに合わせた開発が重要(多様化)

GRAPE(東大)

EHPC(九大)

MD-GRAPE(理研)

BlueGene(DOE/IBM)

◆複合型（目指すべき姿）

- ・超高速インターコネクトで、ベクトル（大規模計算）、スカラー（逐次処理）、専用計算機(特定処理に高性能)を結合して、幅広い分野で高い性能が得られる
- ・高価なベクトル^(注)と安価なスカラー・専用計算機を組み合わせることで、優れた価格性能比（コストパフォーマンス）を実現

注：地球シミュレータ(ベクトル、約40テラFLOPS)の開発(1997～2002年)には、ハード約400億円、建屋・付帯設備約100億円、関連ソフト約100億円、総額600億円以上を要した。

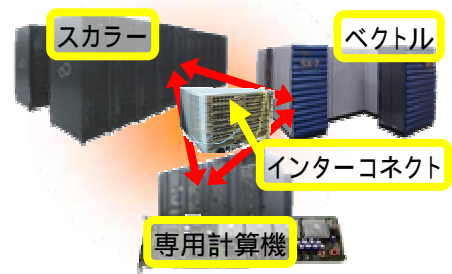
【課題】複合型を実現するために必要なブレークスルー

- ・プロセッサの高性能化：高速化と低消費電力化の両立
(既存技術で高速化すると電力消費の増加を招くためブレークスルーが必要)
- ・新たな処理方法の専用計算機の開発：ハードの多様化、複数の処理にも対応できるハードの開発
- ・超高速インターコネクトの開発：大規模データの超高速伝送に対応した光通信技術の革新
- ・システムソフトウェアの開発：ベクトル・スカラー・専用計算機を一体的に制御する新技術の研究開発

(参考1) 理研スーパー・コンバインド・クラスター(RSCC) (2004年3月～)
複合型スパコンの先駆け

特長

- 優れたコストパフォーマンス
約13テラFLOPS、約41億円^(注)
- 使いやすい(ユーザフレンドリー)
簡単な操作で最適なスパコンを選択



2005年3月「第34回日本産業技術大賞」の文部科学大臣賞を受賞
次世代の大型計算機センターのモデルとして、世界の研究所・大学・民間企業等から注目を集めている

注：ハード総額の計算式：(8億円 / 年リース×5年) + 専用機1億円 = 41億円

(参考2) ある政府系研究機関
利用者のニーズに応じて、多様なスパコンを個別に調達

先端情報計算センター(つくば)

- 多種多様なスパコン(スカラー)で幅広い利用分野をカバー
- SR11000(日立) 0.9テラFLOPS (2004年～)
 - AISTスーパークラス P-32(IBM) 8.6テラFLOPS (2004年～)
 - AISTスーパークラス M-64(IBM) 2.7テラFLOPS (2004年～)
 - AISTスーパークラス F-32(SGI) 3.3テラFLOPS (2004年～)等

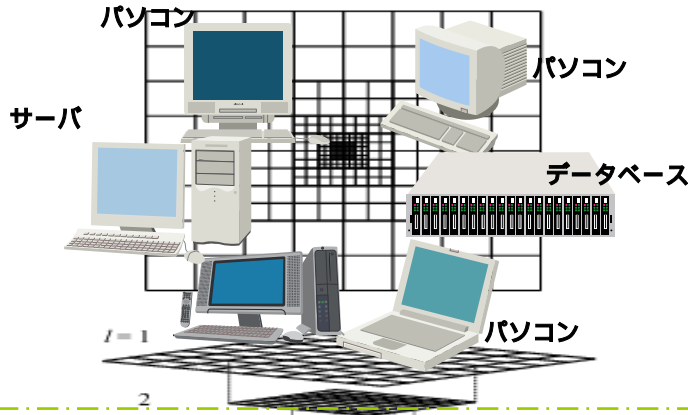
生命情報科学研究センター(お台場)

- 専用機でバイオ分野に特化
- BlueGene/L (IBM) 22テラFLOPS (2005年～)

(ウェブサイトの情報を基に作成)

スパコンを活かすグリッド技術

現在のグリッドコンピューティング



スパコンはグリッド技術でこそ生きる

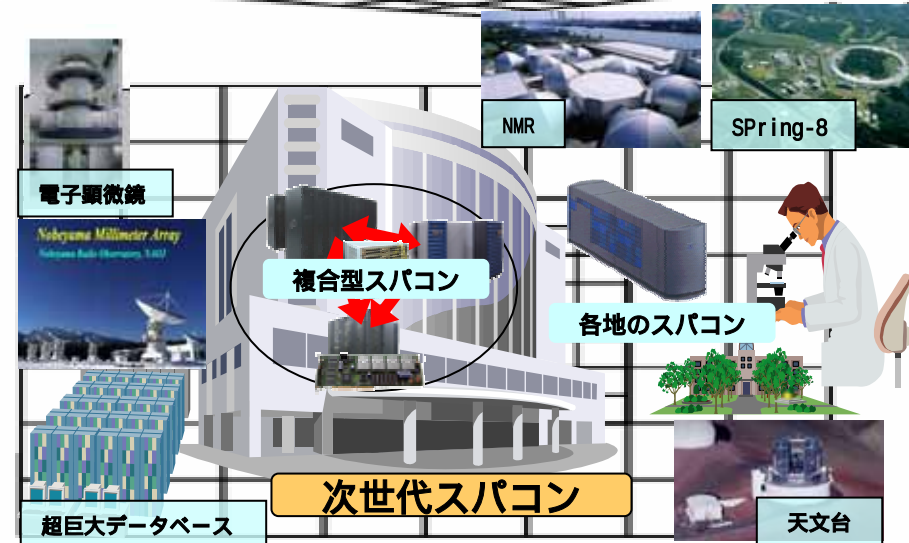
- ▶ スパコンの役割：複雑かつ大規模な計算を高速に処理
- ▶ グリッド技術：各地に散在する実験装置、データベース、スパコンを自在にどこからでも利用可能

膨大なデータの効率的利用のため、
スパコンの性能を最大限活用

グリッド技術の本質は、分散した計算機とデータの一体化

- ▶ 各地に散在する計算機とデータベースをつなぎ、自在にどこからでも利用可能とする技術
- ▶ 計算機間の通信を多用しない、同じ部分を見つけるような繰り返し計算を行う分野に最適
(ゲノム検索、実験データ処理など)

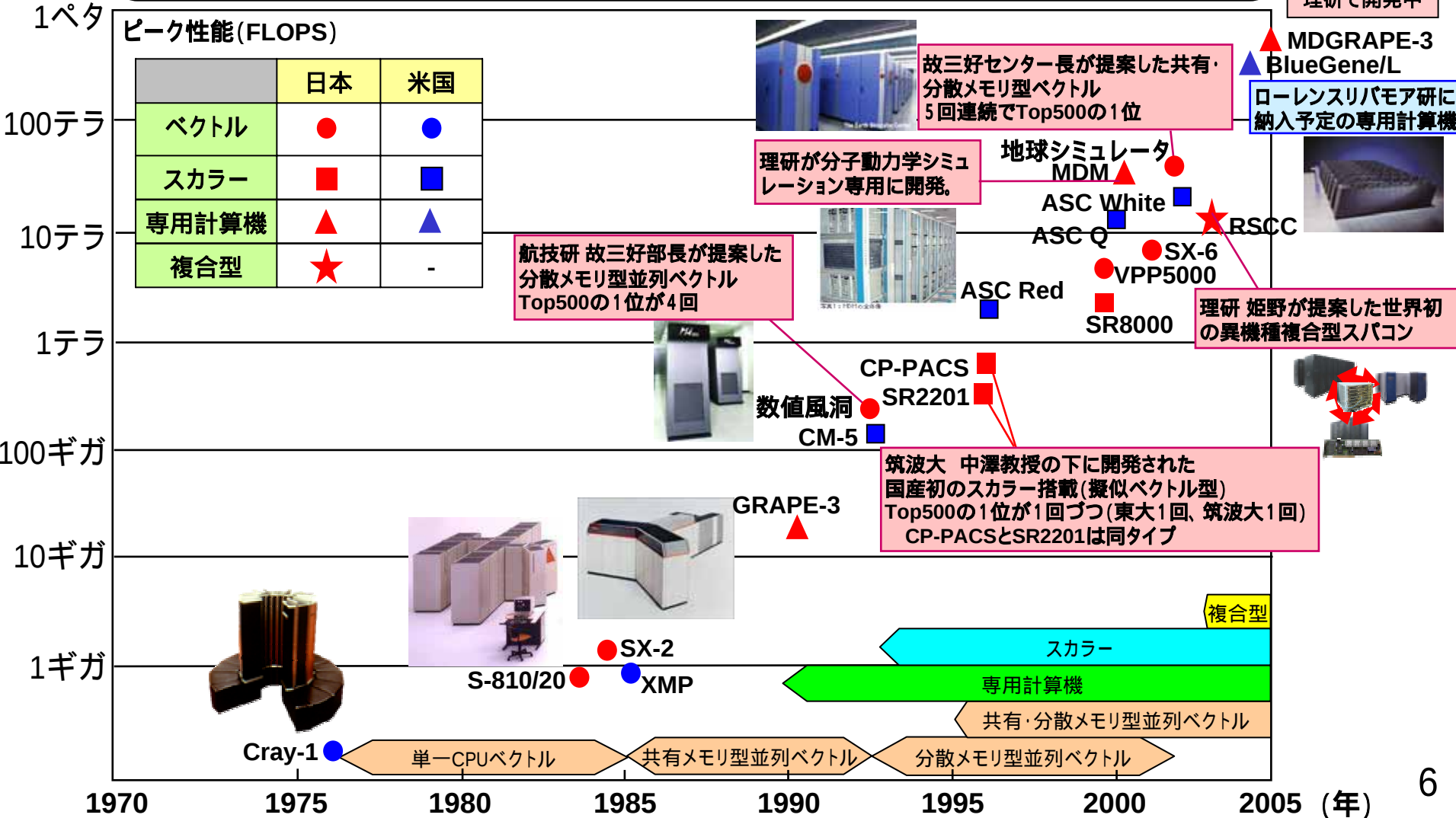
将来のグリッドコンピューティング



日米スパコン開発競争

- ピーク性能を基準にした場合 -

- ・日米が競い合ってスパコンの性能を向上させてきた。その裏には、新しい設計思想のスパコンの実現を通じた利用分野の開拓競争があった。(次ページ参照)
- ・スパコンは、ベクトルからはじまり、その後、専用計算機やスカラーが登場した。これから複合型の時代へ。



スパコン開発を牽引した利用分野の変遷

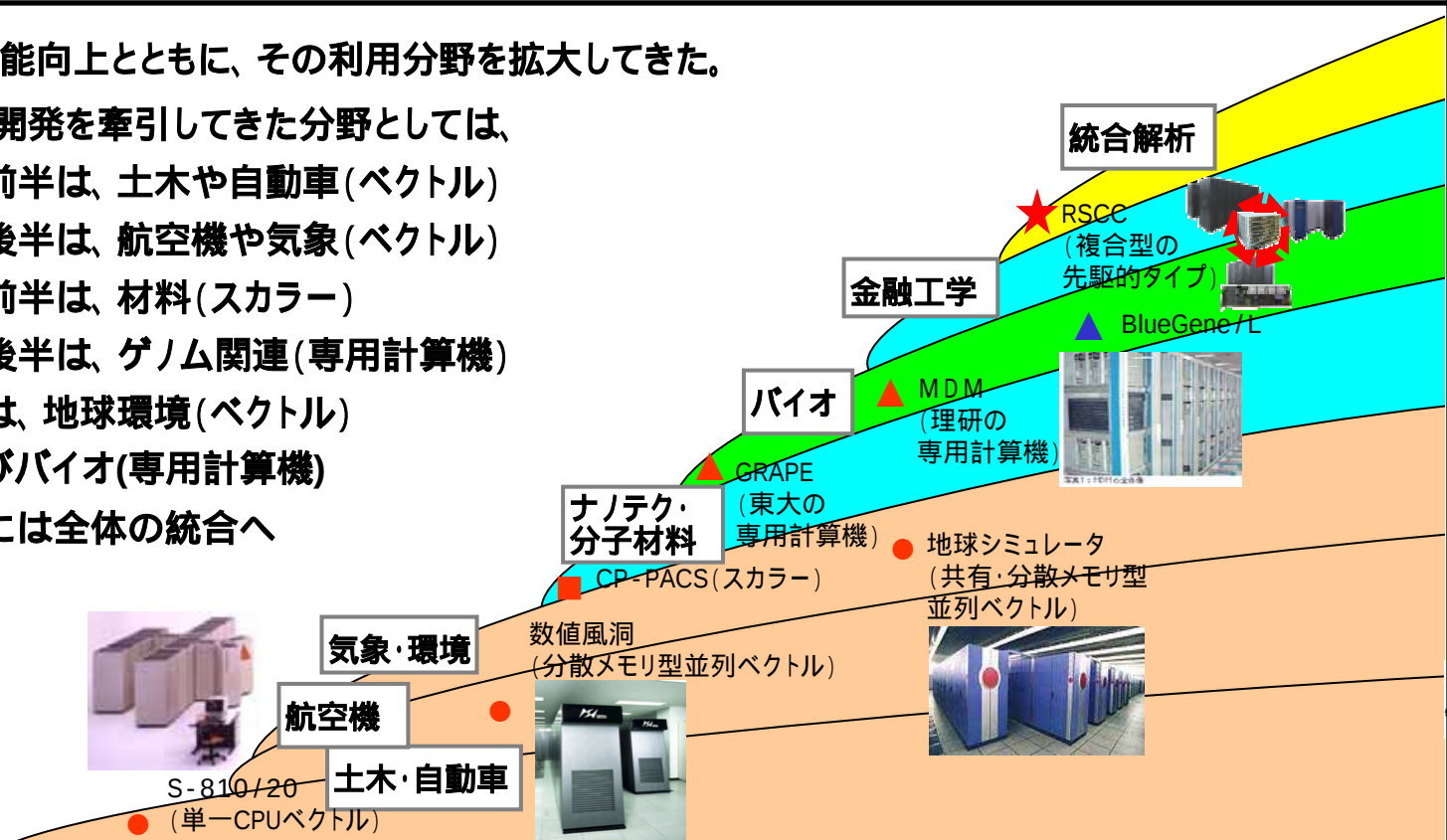
1980 1985 1990 1995 2000 2005 2010 2015 (年)

性能		ギガFLOPSクラス	テラFLOPSクラス	ペタFLOPS超クラス
種類	ベクトル	単一CPUベクトル	共有メモリ型並列ベクトル	分散メモリ型並列ベクトル
	専用計算機			共有・分散メモリ型並列ベクトル
	スカラー			スカラー
	複合型			複合型

スパコンは、性能向上とともに、その利用分野を拡大してきた。

特に、スパコン開発を牽引してきた分野としては、

- ・1980年代前半は、土木や自動車(ベクトル)
- ・1980年代後半は、航空機や気象(ベクトル)
- ・1990年代前半は、材料(スカラー)
- ・1990年代後半は、ゲノム関連(専用計算機)
- ・2000年代は、地球環境(ベクトル)
- ・現在は、再びバイオ(専用計算機)
- ・2010年代には全体の統合へ



利用分野の広さは複合型が有利

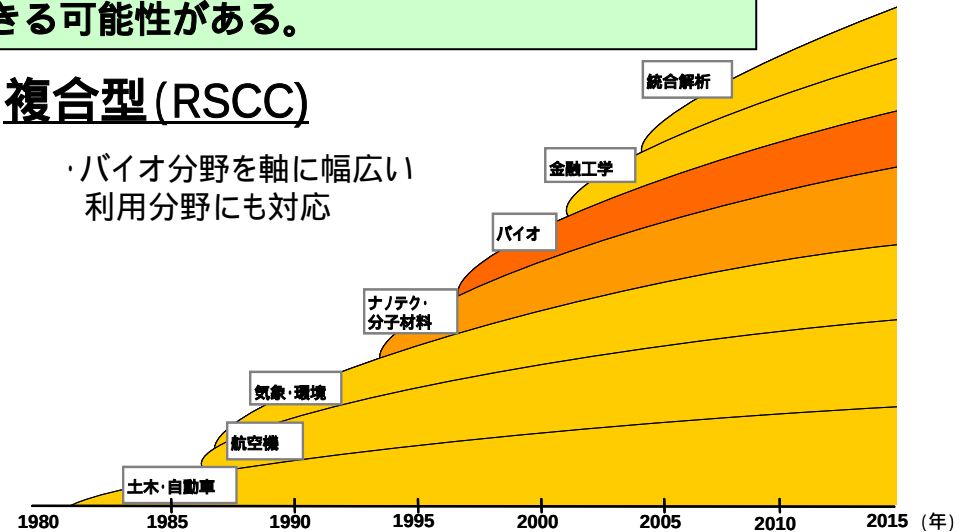
- ・スパコンの性能を「利用分野の広さ」で見ると、ピーク性能が高ければ良いわけではないことが分かる。
- ・特に、複合型はあらゆる分野に幅広く利用できる可能性がある。

実効性能から見たイメージ



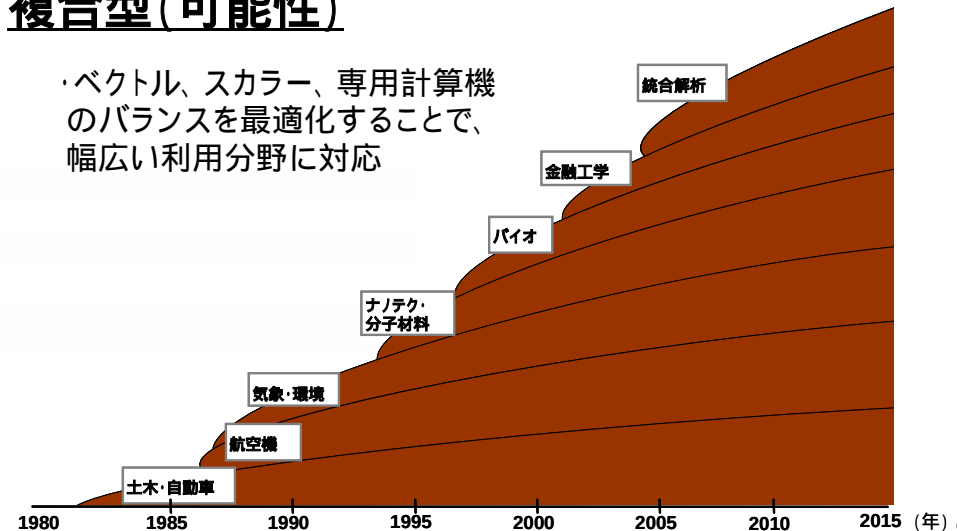
複合型(RSCC)

- ・バイオ分野を軸に幅広い利用分野にも対応



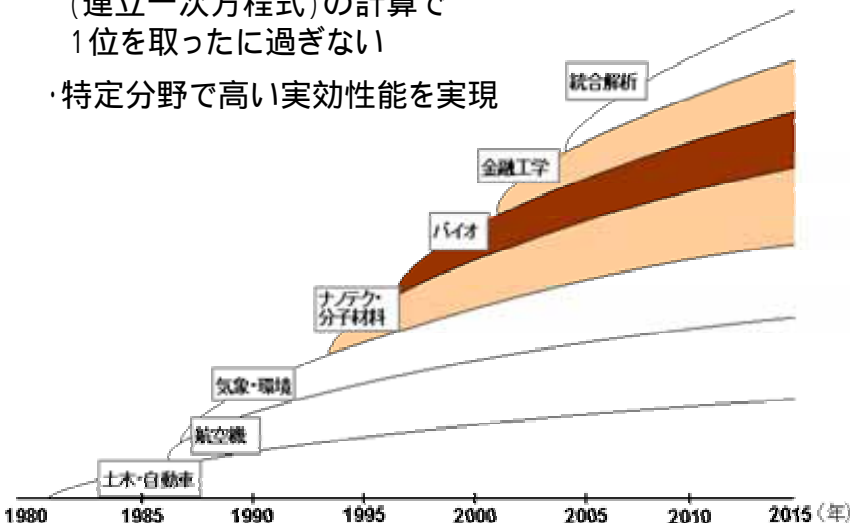
複合型(可能性)

- ・ベクトル、スカラー、専用計算機のバランスを最適化することで、幅広い利用分野に対応



専用計算機(BlueGene/L)

- ・Top500のベンチマークテスト(連立一次方程式)の計算で1位を取ったに過ぎない
- ・特定分野で高い実効性能を実現



日米スパコン開発戦略

米国は、利用分野を特定して、性能向上を加速。しかし、スパコン開発の真の目的(軍事利用、幅広い産業や科学技術研究での利用)を果たすためには、利用分野の拡大が大きな課題となっている。

我が国は、幅広い利用分野に対応したスパコンの開発で米国よりも優位。新しい利用分野(バイオ、ナノ等)を開拓しつつ、今後もこの方向性を一層強化すべき。

米国の戦略

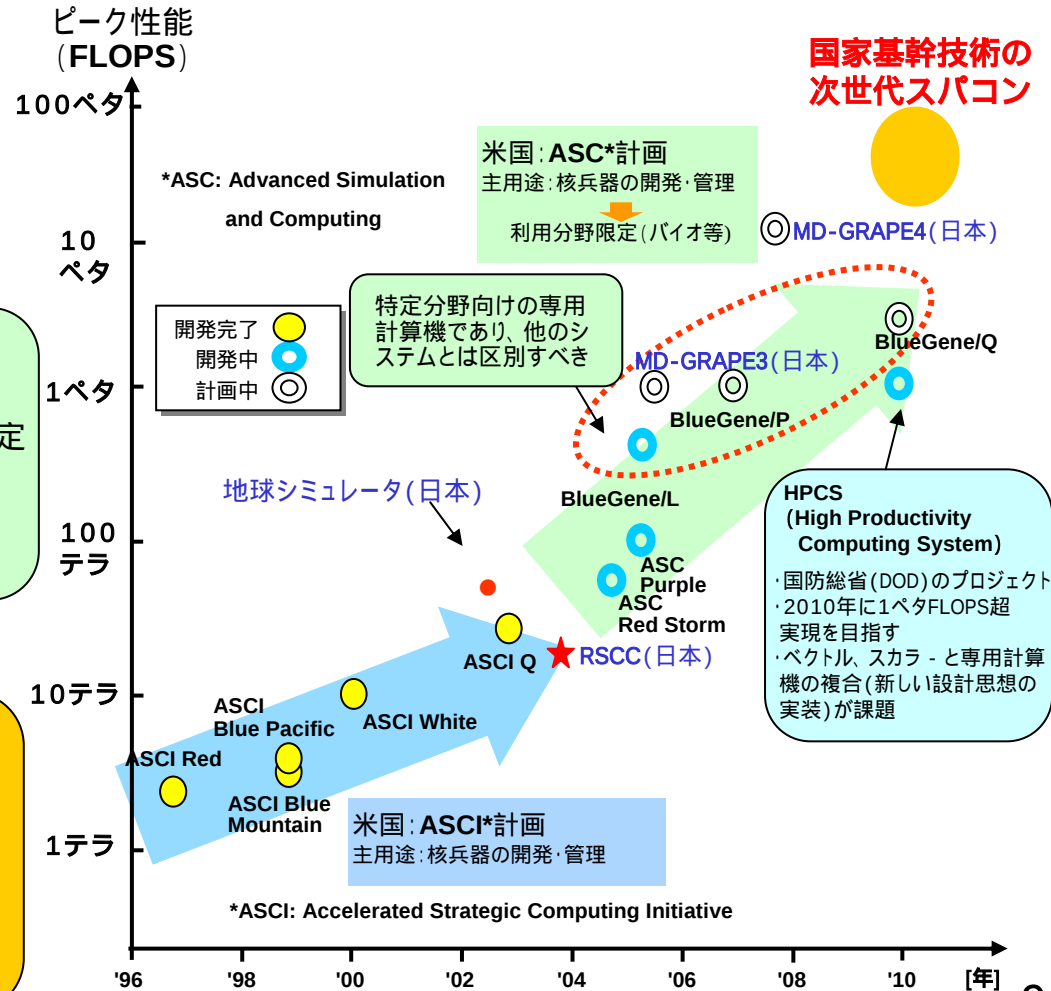
- ・地球シミュレータによる「コンピュータック」ショックを背景に、政府(特にDOE)主導でスパコン開発を強化
- ・2003年に「HECRTF(高性能コンピューティング再生タスクフォース)」を設置
- ・約900億円/年の政府資金を投入

エネルギー省(DOE)のイニシアティブ

- ASC計画(旧ASCI計画) -
- ・2004年「DOE高性能コンピューティング再生法」制定
- ・2010年頃に数ペタFLOPS実現を目指す(BlueGene)
- ・実効性能の向上と応用分野の拡大が最大の課題(現状では、特定分野(バイオ等)でしか使えない。)

日本としてとるべき戦略

- ・米国よりも優位にある技術で対抗
 - 高性能プロセッサ技術
 - 超高速ネットワーク技術
 - 専用計算機技術
- 「複合型スパコン」の実現に有利
- ・RSCCの実績を活用
- ・複合型スパコンで、高い実効性能を出すシステムソフトウェア等の開発が課題



ここまでの説明のポイントを整理すると

科学技術の方法は、理論、実験、シミュレーション。世界最高性能スパコンで、世界に先がけたシミュレーション。

スパコンには種類(ベクトル、スカラー、専用計算機、複合型)と特色があり、次第に種類が増え、利用分野が拡大。

最近、バイオ分野がスパコン開発を牽引(BlueGene)。将来は、統合シミュレーションがスパコン開発を牽引。

統合シミュレーションには複合型スパコン。日本の強みは、世界に先駆けて開発した実績を活用できること。

日本の開発戦略は、「実績のある得意な技術」で、幅広い利用分野で高い実行性能を達成し、米国を圧倒。

- 地球シミュレータによる米の「コンピュータニク」ショックの本質は、広範な利用分野で高い実効性能が出せること -

ここから先は

10ペタFLOPS超級スパコンが拓く、将来のシミュレーションを紹介。

次世代スパコンによる国家基幹技術の推進の仕組みについて提案。

最後に、次世代スパコンの実現に向けたロードマップ(課題と挑戦)を提示。

スパコンの利用分野 ~ 現状と展望 ~ <創薬応用>

- ・ スカラーは薬剤候補の絞り込みが得意、化合物データベースから薬剤候補を選択
 - ・ 専用計算機は精度の高い結合能予測により薬剤の設計が可能
- 今後、両者を密接に連携させることが重要

スカラーが得意な分野

約百万の
化合物
データ
ベース

約百万の化合物
反応性指標を計算

現在

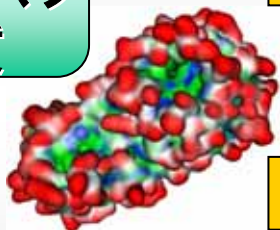
約3テラFLOPSで
20時間

将来

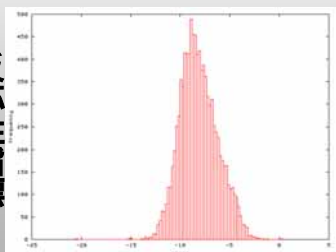
10ペタFLOPSで
約20秒

薬剤候補を数百
選び、実験

標的
タンパク
質



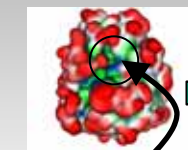
反応性指標



候補化合物

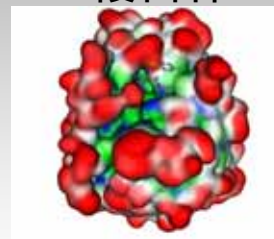
専用計算機が得意な分野

タンパク質



薬剤

タンパク質
複合体



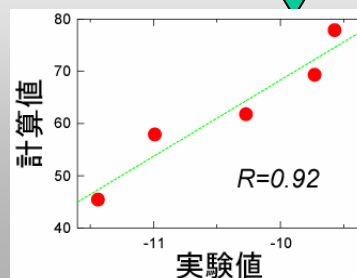
シミュレーションによる
精度の高い結合能予測

現在

20テラFLOPSで
1ケース/日

将来

10ペタFLOPSで
1000ケース/日

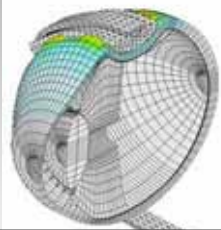


実験結果を再現:
計算機上で薬剤
の設計が可能に

スパコンの利用分野 ～現状と展望～ <医療応用>

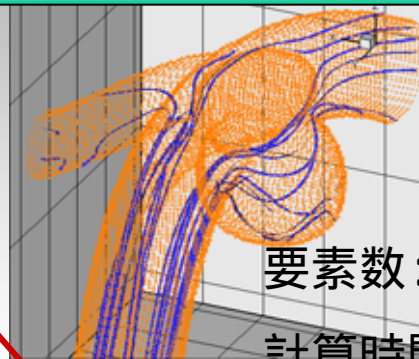
ベクトル計算機が得意な分野

眼球網膜剥離手術シミュレーション



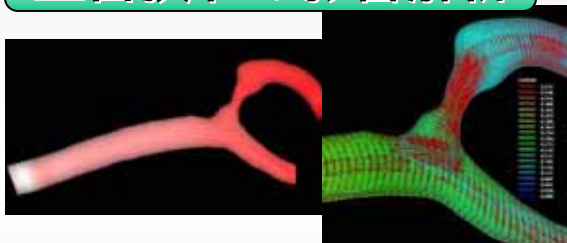
接点数: 100万
計算時間: 1時間

脳動脈瘤手術事前検討



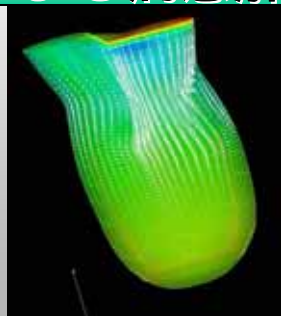
要素数: 300万
計算時間: 5時間

血管狭窄の影響解析



接点数: 50万
計算時間: 3時間

心臓の血流状況による病態解析



接点数: 50万
計算時間: 3時間

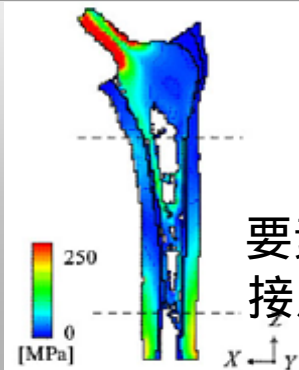
現在

約1テラFLOPSで
200-400時間

将来

10ペタFLOPSで
数時間

人工股関節置換



要素数: 100万、計算時間: 6時間
接点数: 100万、計算時間: 7時間

動脈瘤やバイパス手術の計画検討

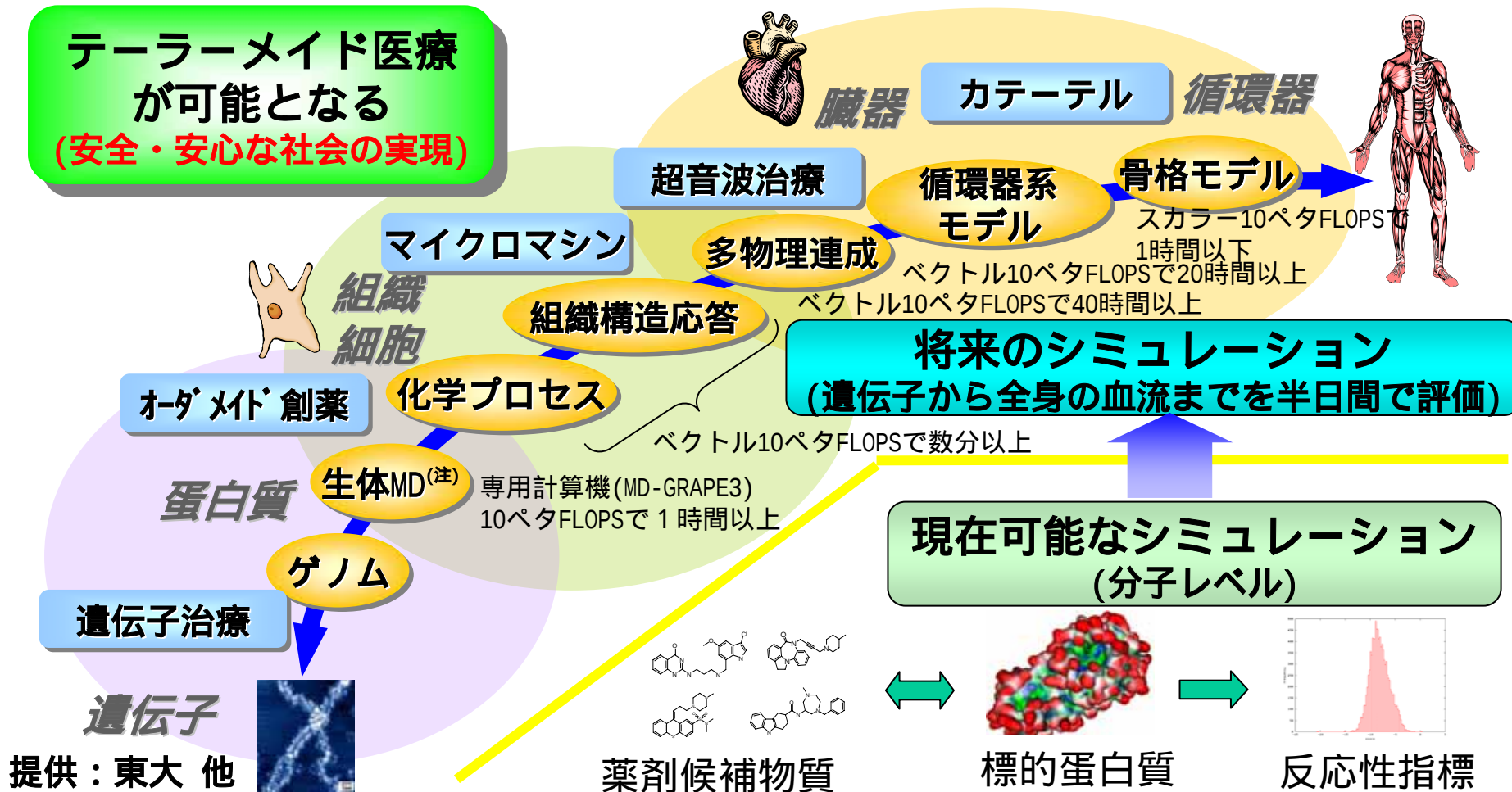


スパコンの利用分野 ~めざすべき方向~

< 創薬応用と医療応用の統合 >

- ・ 分子レベルシミュレーション（創薬）と生体シミュレーション（医療）の統合シミュレーションが理想
- ・ そのため、複合型スパコンにより、スカラー（薬剤候補の絞り込み）、専用計算機（薬剤の設計）、ベクトル（生体レベルの解析）のシミュレーションを一体化 → テーラーメイド医療の可能性を拓く

**テーラーメイド医療
が可能となる
(安全・安心な社会の実現)**



注: 分子動力学。原子間ポテンシャルの下に、古典力学におけるニュートン方程式を解いて、系の静的、動的安定構造や、ダイナミクスを解析する手法。

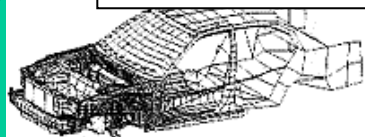
スパコンの利用分野 ～現状と展望～

< 知的ものづくり(自動車の場合) >

自動車の衝突計算はメッシュ生成にかかる時間が問題
メッシュ生成の自動化には計算速度のアップが不可欠

現状

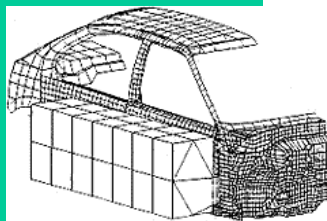
個別衝突モデル



前面衝突用



後面衝突用



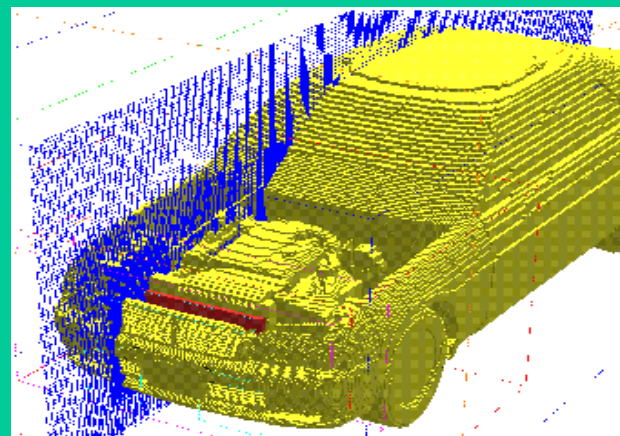
側面衝突用

人手でメッシュ生成 (作成数ヶ月)

10時間(ベクトル: 1テラFLOPS)

今後

ボクセル^(注)衝突モデル



コンピュータで自動生成

10分(ベクトル: 10ペタFLOPS)

注: 立方体要素のこと。

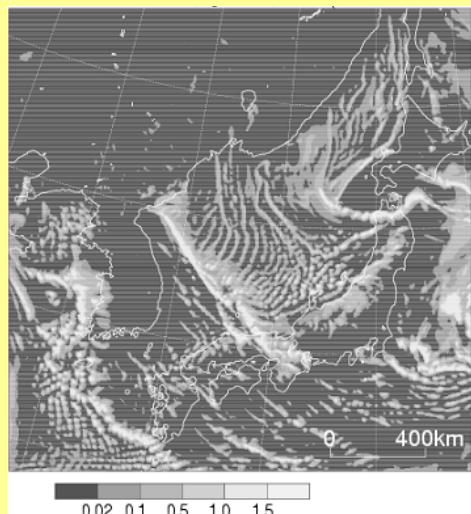
小さなサイコロを積み上げてモデル化する手法

スパコンの利用分野

～ 現状と展望 ～

< 気象 >

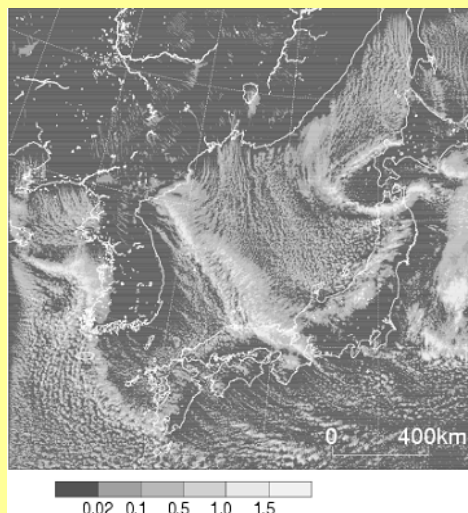
現在の雲解像モデル解析



5 kmメッシュアジア域

現時点での雲解像モデル解析

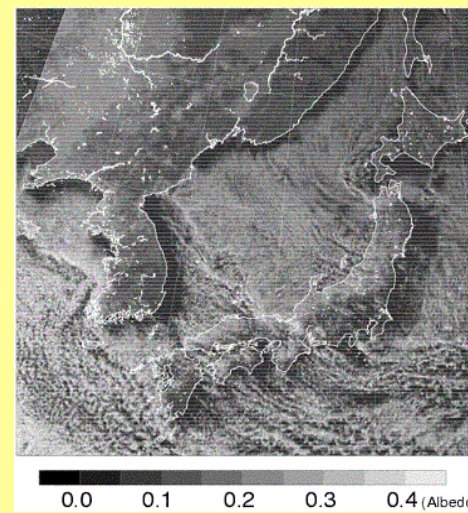
ベクトル：約 1 テラFLOPSで 2 4 時間分予測、2 時間計算



1 kmメッシュアジア域

地球シミュレータによる雲解像モデル解析

ベクトル：約 1 0 テラFLOPSで 2 4 時間分予測、1 2 時間計算



実画像(ひまわり 5 号)

地球シミュレータの利用によって、雲解像モデル解析精度が向上

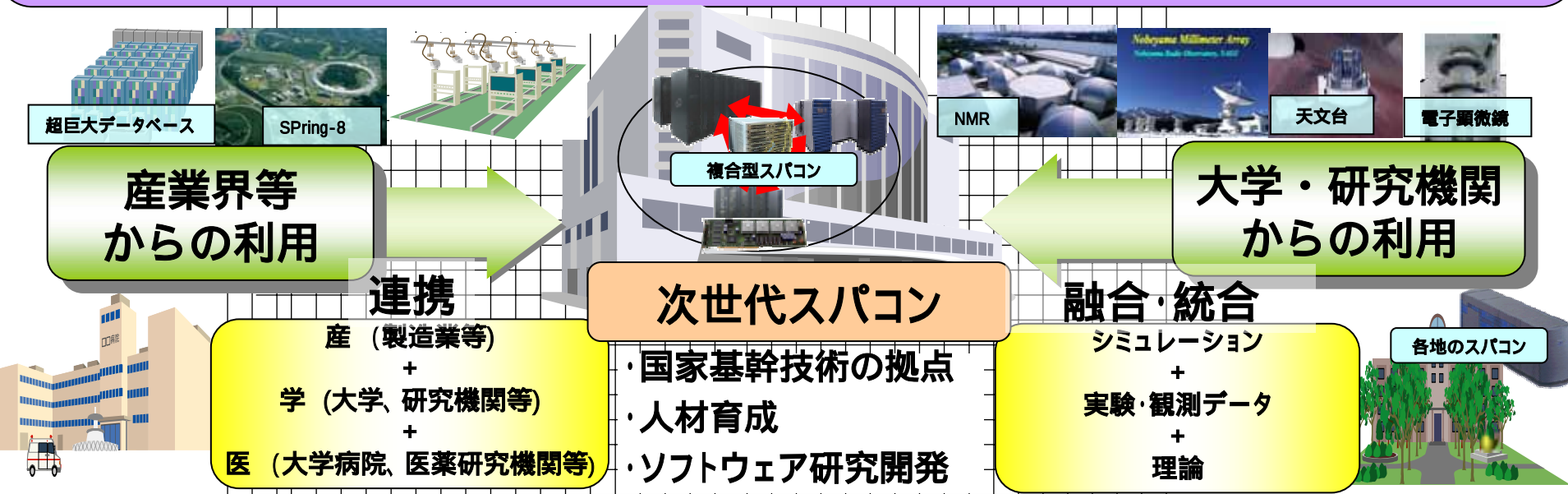
将来の雲解像モデル解析

1 0 ペタ F L O P S ベクトル機では

1 kmメッシュ全球	2 4 時間分予測	2 時間計算
1 kmメッシュアジア域	2 4 時間分予測	1 分計算

次世代スパコンを活用する仕組み

- ・単にスパコンを開発するのではなく、『国家基幹技術』として推進、我が国の科学技術・学術研究、産業、医・薬など広範な利用分野での国際競争力を強化
- ・世界の英知を結集し、人材育成機能やソフトウェア研究開発機能をも併せ持つ、国際的なCOE（教育研究拠点）とすることも重要



次世代スパコンのコンセプト

- バイオ分野やナノ分野を軸に新興・融合領域に適応した複合型スパコンが中核
- 米国のスパコンを凌駕する世界最高性能(10ペタFLOPS超)の実現
- スパコンの高度利用を支える体制との一体的運用(人材育成、ソフトウェア研究開発)
- 産業界を含む幅広い分野の利用者に使いやすいシステム(ユーザフレンドリー)
- グリッド技術で全国の実験施設、超巨大データベース、スパコン等と接続

次世代スパコンの実現に向けて ～課題と挑戦～

◆課題

スパコンの性能向上に不可欠な、超高性能プロセッサ、超高速ネットワーク技術、超高速専用計算機の開発

複数の現象の解析や、シミュレーションを統合するためのシステムソフトウェアの開発

多種多様な利用者の誰もが使いやすいユーザフレンドリーの実現

2007年頃にスパコン開発のベテラン技術者が大量引退し、技術伝承が困難に

◆取組状況と次なる挑戦

「ハードウェア要素技術の研究開発」(2005年度～)を文科省が開始。

今後、実装に向けた研究開発が必要

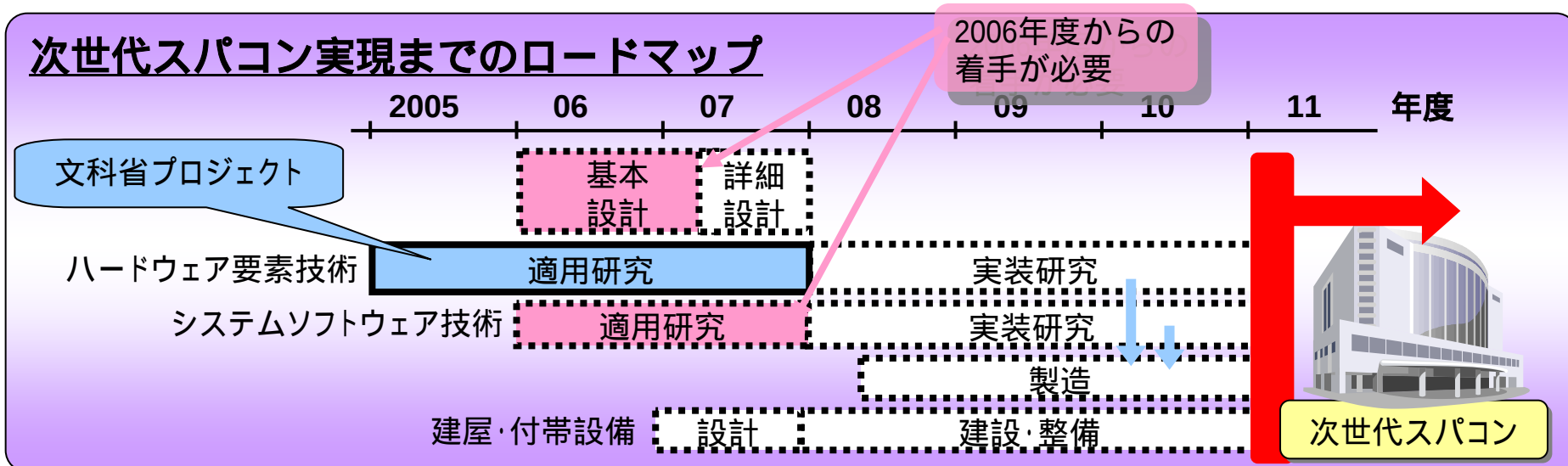
「RSCC」(2004年～)を理研が世界に先駆けて開発

今後、10ペタFLOPS超級の複合型スパコン用にシステムソフトウェアの研究開発が必須

直ちに、次世代スパコンに向けた設計活動を開始しなければならない

プロジェクトを通じ、若手技術者の育成を強化し、円滑な技術伝承を進めることが不可欠

次世代スパコン実現までのロードマップ



次世代スパコンについて最後に一言

- ・我が国が優位な技術を結集すれば、必ず米国を圧倒できる！
- ・次世代スパコンを中核とした「国家基幹技術の推進」を！
- ・国際的な人材育成、ソフトウェア研究開発のCOEに！

ご静聴ありがとうございました。

スパコンの利用 ～現状と展望～ (参考1)

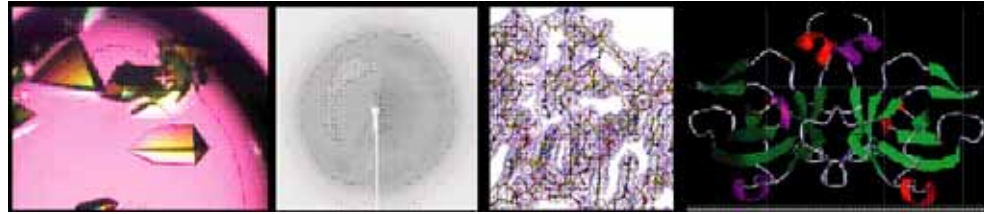
<たんぱく3000プロジェクト>

放射光からの構造決定



Spring-8 (播磨)

RSCC
(和光)



タンパク質結晶のX線回折像を元に電子密度計算を行い、構造を決定

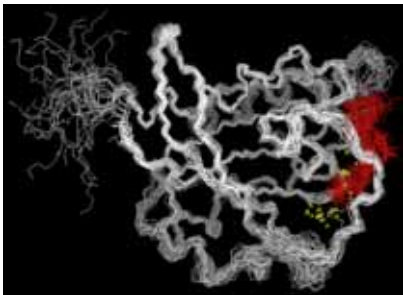
現状

スカラー: 約0.1テラFLOPS / 人手で3ヶ月

今後

平成17年度のMD-GRAPE3(100テラFLOPS)
増強で精度向上と時間短縮(1日)

NMRによる構造決定



NMR (横浜)

初期値を仮定、NMRからの信号に合うように分子構造をコンピュータで自動計算

現状

スカラー: 約0.7TFLOPSで24時間

今後

実験数の増加と処理時間短縮のため、RSCC
(1.5TFLOPS)も活用し14時間に短縮

スパコンの利用 ～現状と展望～ (参考2)

< RNA機能解析と遺伝統計解析 >

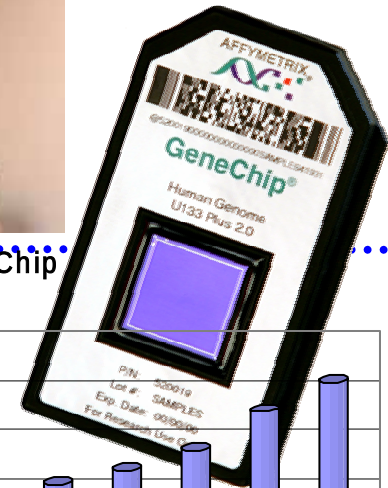
RNA機能解析

RNA^(注1)の機能を解明するのが目標

現在：ネズミDNAの解析、
0.5テラFLOPSのスカラー機で1時間/ケース

今後：ヒトDNAでは計算量が100万倍以上

10ペタFLOPSのスカラーで10～100時間
または
10ペタFLOPSのベクトルで1～10時間

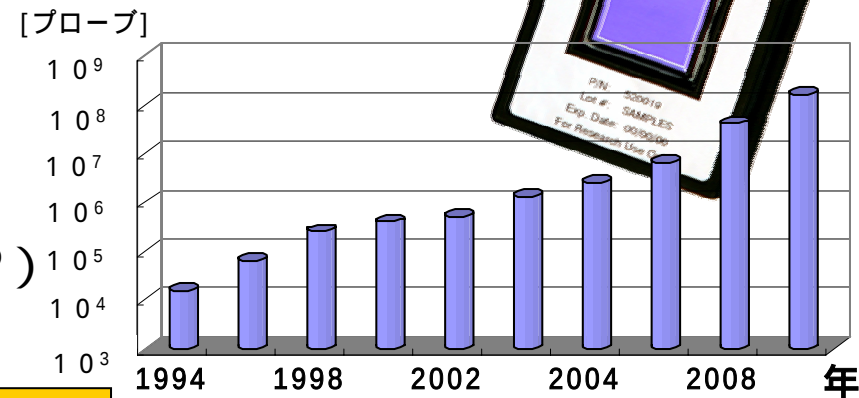


遺伝統計解析

人の遺伝子と遺伝病の関係を網羅的に
調べ上げ、遺伝病の原因遺伝子を特定する。

現在：RSCC(14テラFLOPS)で30家族(9座位^(注2))
の計算が100日→あり得ない。

今後：この計算が 10ペタFLOPSのスカラーで2時間



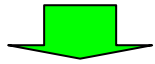
注1: DNAの遺伝子情報の伝達やタンパク質の合成を行う。

注2: 遺伝地図上で遺伝子が存在する場所。ゲノム上での遺伝子の存在位置。

スパコンの利用 ～現状と展望～ (参考3)

<システムバイオロジー>

現状: 実験データを
パソコンで処理
スパコンは未使用

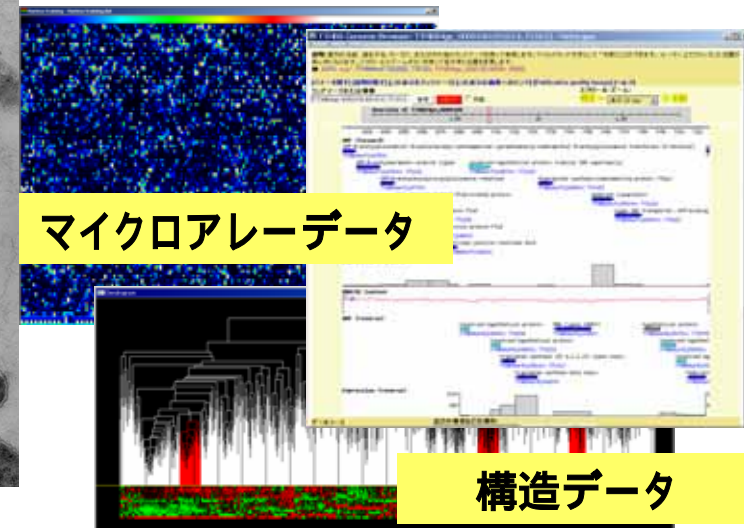
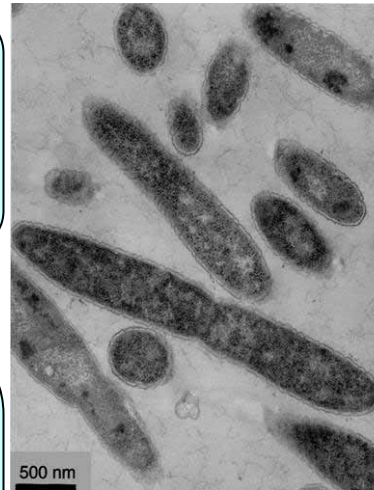


今後: 実験データの急増
(新たな実験装置の導入)

豊富なデータを活かし
シミュレーションへ移行

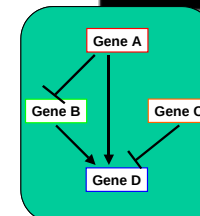
MD-GRAPE3(専用計算機)

10ペタFLOPSでも1ヶ月以上

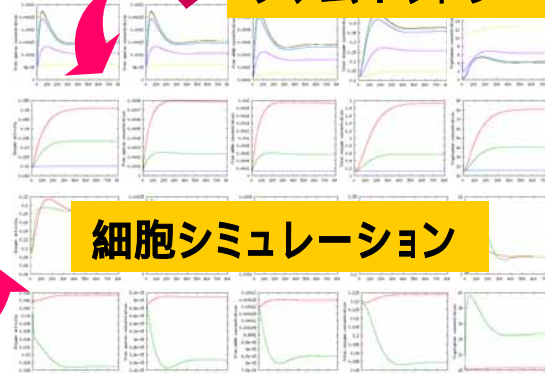


マイクロアレーデータ

構造データ



ゲノムネットワーク予測



細胞シミュレーション



MDシミュレーション



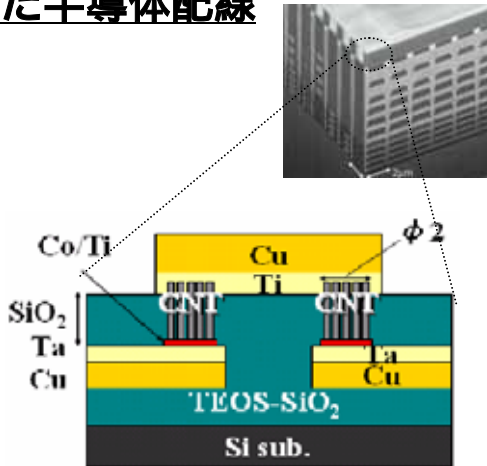
代謝経路地図

スパコンの利用 ～現状と展望～ (参考4)

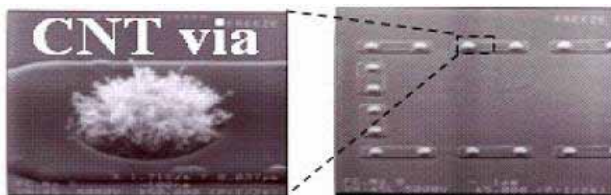
<半導体技術>

カーボンナノチューブ配線による半導体実現のために
原子・分子レベルからトランジスタ全体までを解析

カーボンナノチューブを利用
した半導体配線



半導体の配線試作研究の例
(電子顕微鏡写真)

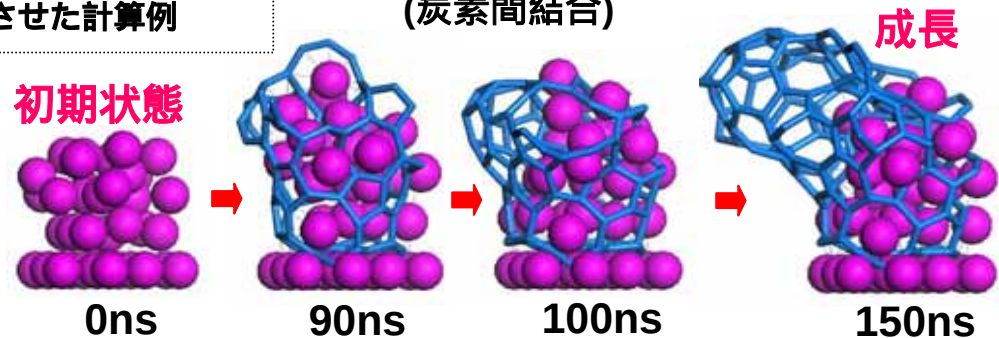


生成させたカーボンナノチューブの束

カーボンナノチューブ生成計算例

Niを核としてカーボンナノチューブを成長させた計算例

● Ni
— C-C (炭素間結合)



解析する規模と必要な計算性能

	現状(地球シミュレータ: 40TF)		将来
性能	1 TF	100TF	1 PF
1日で計算可能な規模	300原子	3千原子	1万原子
	配線1本	複数の配線	トランジスタ全体

ナノ材料を利用した新しいLSIが実現、電子部品の革新が起こる
(ものづくり方法の革新)

未来のコンピュータ

(参考5)

2000

2010

2020

2030

ノイマン型コンピュータ(注)

ペタフロップス超級
スーパーコンピュータ

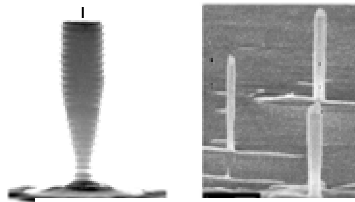
膨大なソフトウェア資産

数十年にわたる開発により、現在利用されている多種多様なソフトウェアが蓄積されている。

シリコン半導体 (CMOS)

ポストシリコン (SFQ等)

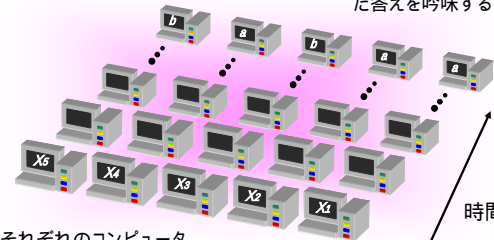
量子コンピュータ



単一光子発生器

ノイマン型と量子コンピュータの計算方式

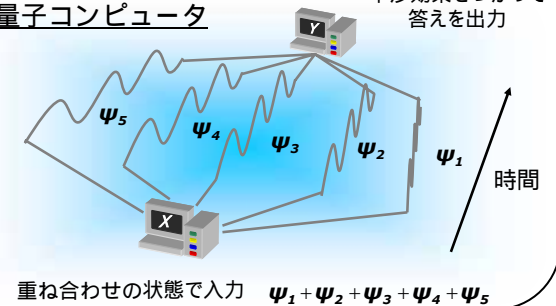
ノイマン型コンピュータ



それぞれのコンピュータ
に別々の値を入力

それぞれ出力され
た答えを吟味する

量子コンピュータ



干渉効果をつかって
答えを出力

理論研究・実現研究 → システム実現

普及へ？

他にも、

- ・ニューロコンピュータ
- ・DNAコンピュータ 等

の新原理のコンピュータが研究されているが、実現の目処は立っていない。

素子や動作原理に加えて応用も未開発

量子コンピュータでは、ソフトウェアを新たに作り直さなければならないが、現在利用できるとわかっているアルゴリズムは、ほんの一部（因数分解など）しか見出されていないため、幅広い分野で利用できる目処は立っていない。

注:1946年に米の数学者ノイマン（コンピュータの父）が考案した方式のコンピュータ。現在のコンピュータはこの方式。