

京コンピュータシンポジウム2013
2013年5月13日

持続可能社会に向けた HPCへの期待

中村道治

独立行政法人 科学技術振興機構

目次

- 持続可能社会におけるHPCの役割
- HPC技術の動向
- HPCの期待

持続可能社会における HPCの役割

持続可能社会に向けた科学技術 イノベーションの課題

課題解決のための革新的
技術開発と実用化

持続可能社会の
ビジョン構築

社会、産業構造、
生活様式の変革

教育、科学コミュニケーション、
合意形成

持続可能社会におけるHPC適用拡大の可能性

新しい動き、傾向

- ・環境にやさしいものづくり(リサイクル、分解、無害)
- ・材料のグローバル化、物流の変化
- ・レジリエントなシステム
- ・大量生産と個人の好み生産の共存、ものづくり多様化
- ・サービスやソリューションの進化(全ての情報が活用)
- ・科学技術コミュニケーションの活性化



- ・経験できないものを事前に経験する(疑似体験)機会の必要性和高精度な体験ができる技術
- ・複雑・大規模現象(ものづくり、サイエンス、社会、他)、未来像(社会、災害、環境等)を予測、制御する技術

JSTの取り組み: HPC関連の主な戦略的創造研究

F Y	200 2	200 3	200 4	200 5	200 6	200 7	200 8	200 9	201 0	201 1	201 2	201 3	201 4	201 5	201 6	201 7
--------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

CREST/さきがけ シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築

○超並列シミュレータ時代の到来を見据えた高性能計算技術
および統合的シミュレーション技術の研究開発

CREST 情報システムの超低消費電力化への技術革新と統合

○回路・デバイス、アーキテクチャ、システムソフトウェア等の各階層を統
合した
低電力制御方式の研究開発



研究総括
矢川 元基

CREST マルチスケール・マルチフィジックス現象の
統合シミュレーション

○マルチスケール・マルチモーダルフィジックス現象の高分解能の解を超高速に
求める技術の研究開発
○プロジェクト途中より21研究課題中、6課題について「京」を指向した技術開発
を強化

京コンピュータ開発プロジェクト



研究総括
米澤 明憲

CREST ポストペタスケール高性能計算に
資するシステムソフトウェア技術の創出

○ポストペタスケール世代あるいはそれ以降の
HPCにおいて、高効率・高信頼なアプリケーショ
ン実行を実現するためのシステムソフトウェア、
アプリケーション開発環境等の研究開発

これからのモノ・コト作り

背景

安全・安心な社会、製品の高機能・高密度化、
高度な情報活用、多様な生き方、製品性能と持続性の両立



複雑系における製品や社会等の予測と制御が必要



- ・複雑な世界を早く俯瞰する技術が必要(全体を見渡す)
- ・知識のネットワーク(異種分野の連携)活用



大規模なシミュレーションとデータ処理・制御・分析が必須

- ⇒バラツキも入れた複雑系モデル＋知識活用
- ⇒多様な解を活用するための探索設計へ
- ⇒配慮ある安全・安心設計

HPC技術の動向

HPCに期待される技術の方向性

新しいシミュレーション技術活用

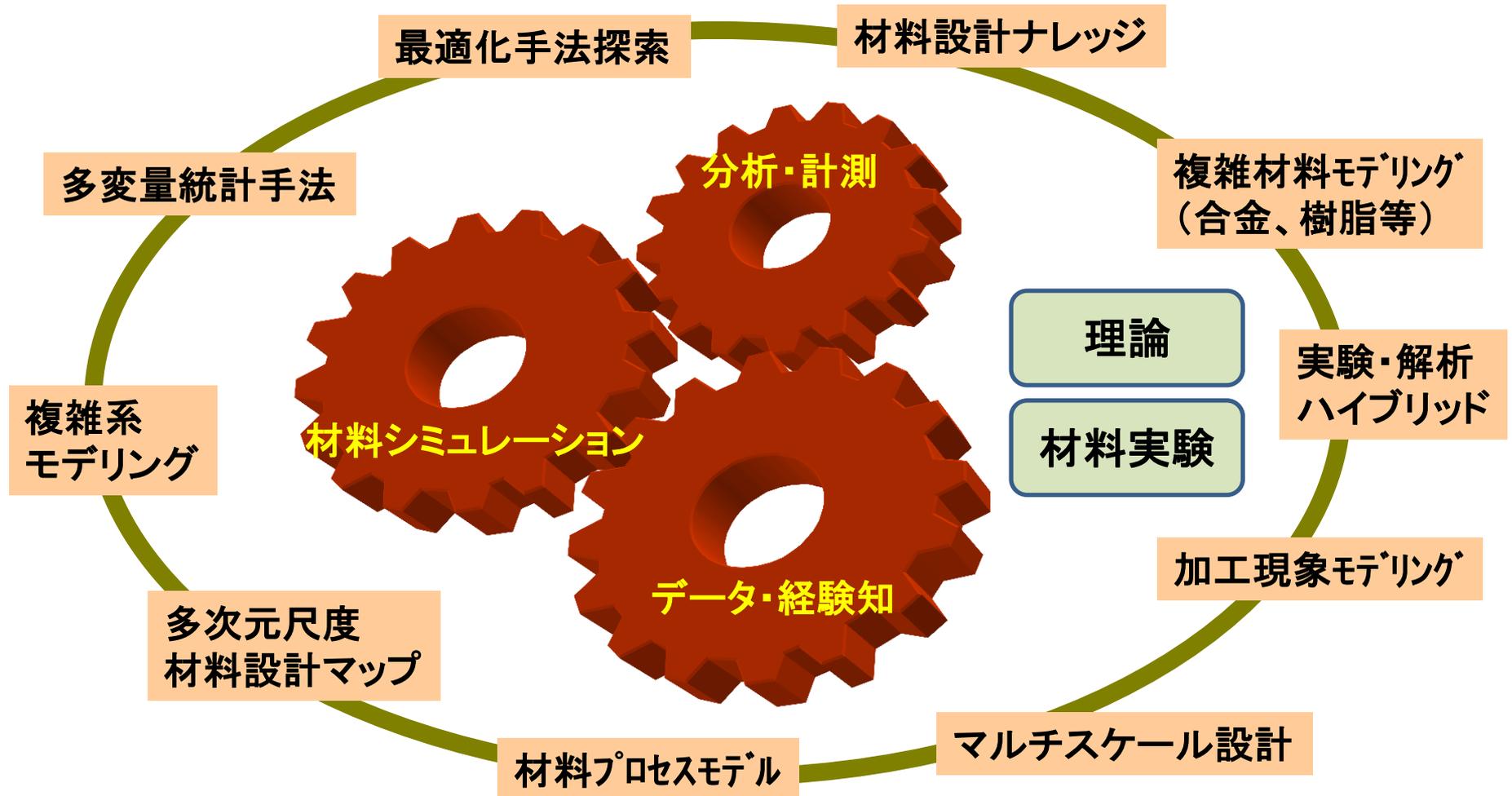
- 新しいものづくり (IT応用、3Dプリンタ、メーカーズ等)
- 革新的材料、材料製造プロセスの開発
- 物理シミュレーションから物理 + 社会シミュレーションへ
- 実空間と仮想空間の交わり、ハイブリッド、仮想設計
- 予測から制御へ

学際的連携によるシミュレーション技術の進化

- 計算機の進展、次世代計算機、Bigデータとの連携、
計算機活用の多様化、人工知能
- データと計測、シミュレーションの連携、データ同化、
知的ビジュアライゼーション
- サービス > システム > 要素部品 > 材料等のマルチ
スケール技術

材料設計学：材料開発の新パラダイム

- ・計測・ミュレーション・データ科学の統合による新材料の設計
- ・革新的材料の発見から実用化までの時間短縮



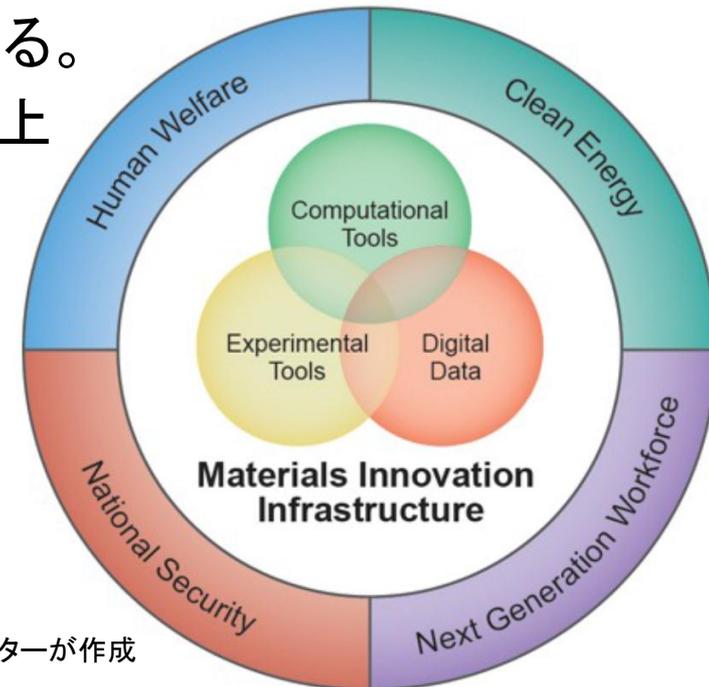
マテリアル・ゲノム・イニシアティブ

Materials Genome Initiative
for Global Competitiveness

June 2011



- 米国NSTCより2011年6月末に発表した戦略レポート
 - 実験室での新材料の発見から、開発、製造までのスピードを2倍にする野心的計画。
 - 材料設計技術、コンピュータ能力の向上、データ管理、の統合的アプローチによる。
 - 特に計算科学と分析技術がkey
 - 材料開発のインフラ、データ共有、解析。
- ゲノム:「設計図(情報を含んでいる)」の意味
 - 遺伝子を実際に使うわけではない
- 国家の競争力維持、先端材料の発見に資する。
- クリーンエネルギー、国家安全保障、生活向上のために必須。
- Materials Deployment という表現を使用。
- FY2012
 - \$100million
- DOE, DOD, NSF, NISTが対象

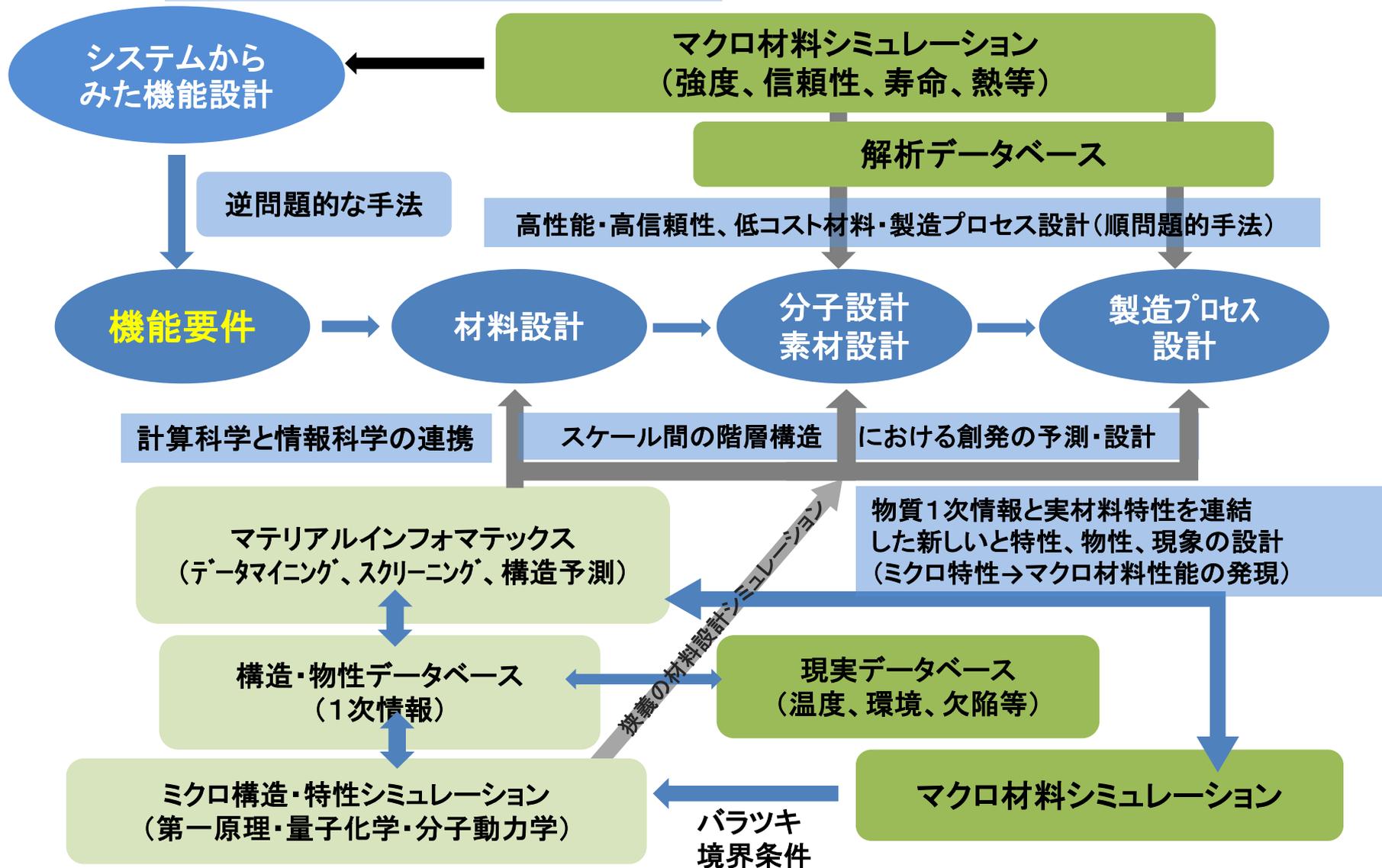


HPCと情報科学連携による新材料設計(例)

狙い：新材料機能→複雑現象スケール間の複雑構造における気づきが必要

システムにおける材料特性の予測と設計

※出典：COCN(産業競争力懇談会)研究会報告書



HPCへの期待

企業アンケートにみる産業界の意識(COCN)

※出典:COCN(産業競争力懇談会)研究会報告書

COCNにおけるHPC応用研究会を発足
(2011年6月から活動):

メンバ:COCN企業、京大、産総研、理研、産応協

- ・企業アンケート(中小から大企業まで広く実施、
(31社、41名)により課題を抽出。
- ・57の質問に対して、各企業から回答。

※COCN(産業競争力懇談会: Council on Competitiveness-Nippon)

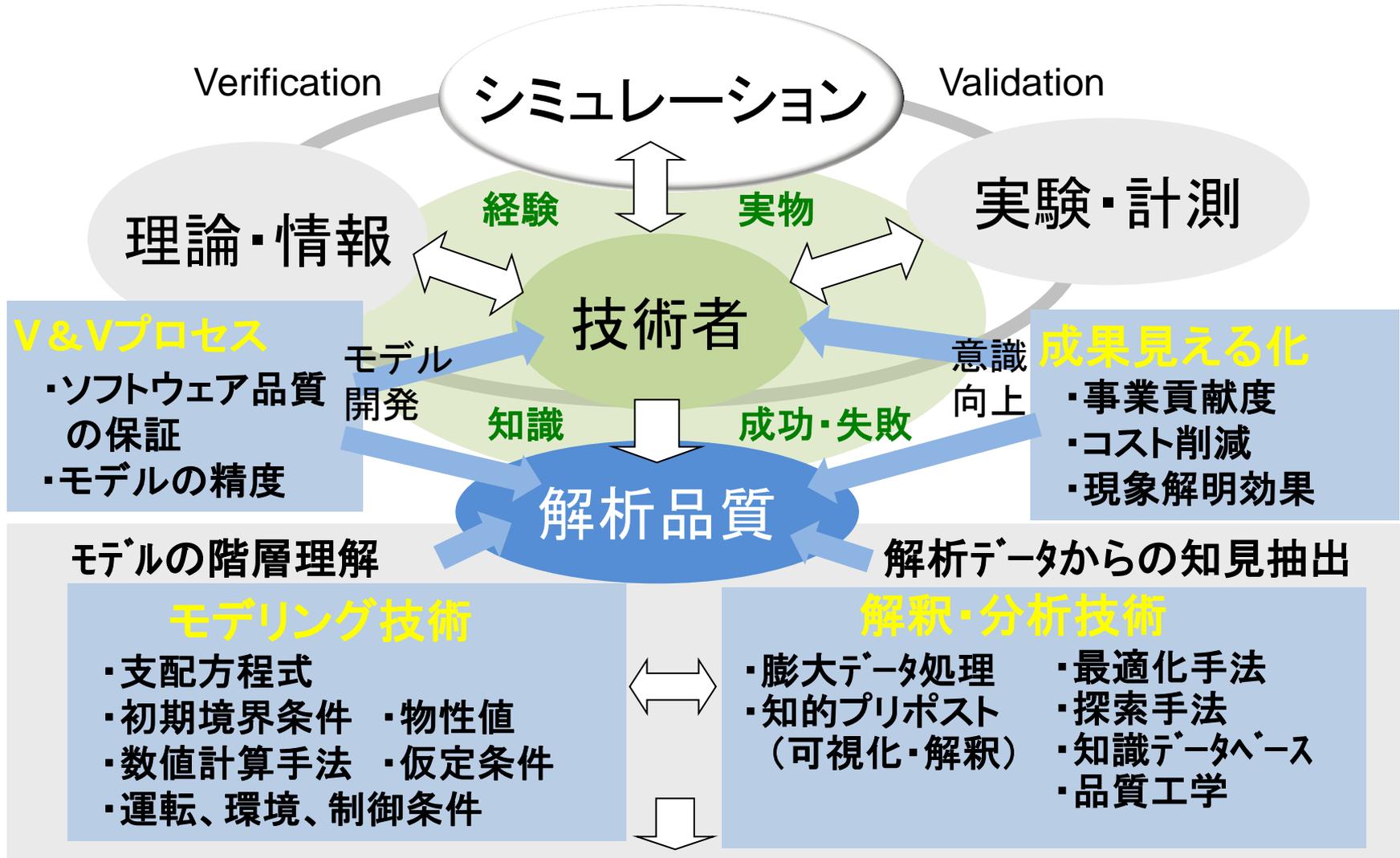
Q:シミュレーションを設計・製造に活用する時の 問題点は何ですか。(複数回答可)

- 課題の設定とそれに合う解析モデル構築の困難さ (27%)
- 計算モデルの効果的作成 (13%)
- シミュレーションモデルの精度不足 (16%)
- シミュレーションモデルの検証不足 (16%)
- シミュレーションモデルのパラメータの組合せ論的増大 (6%)
- シミュレーション結果の解釈が出来ない (10%)
- シミュレーションができたが、良いアイデア・改良点が
発想できない (9%)

Q:シミュレーションプロセスで、今後、課題と思われるプロセスを各プロセスの中で優先順位の高いものを上位3つ選択願います。

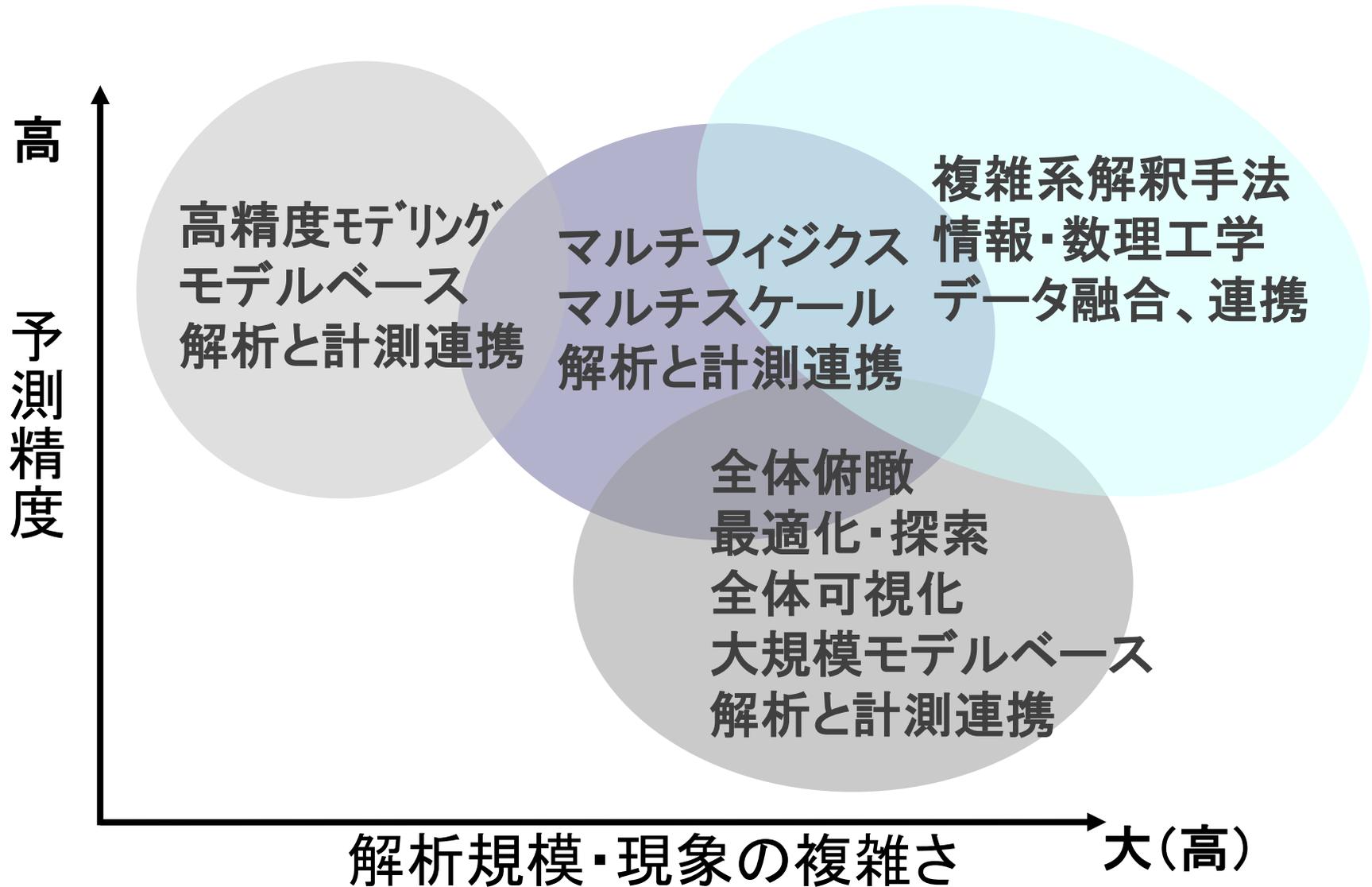
- 計算としての課題の設定 (14%)
- 計算(解析)モデルの作成 (24%)
- 境界条件の把握と設定 (14%)
- 解析作業 (8%)
- 解析結果の表示 (2%)
- 解析結果の理解、解釈 (24%)
- 解析から得られた知見による改善創造 (18%)

HPCにおける解析品質向上

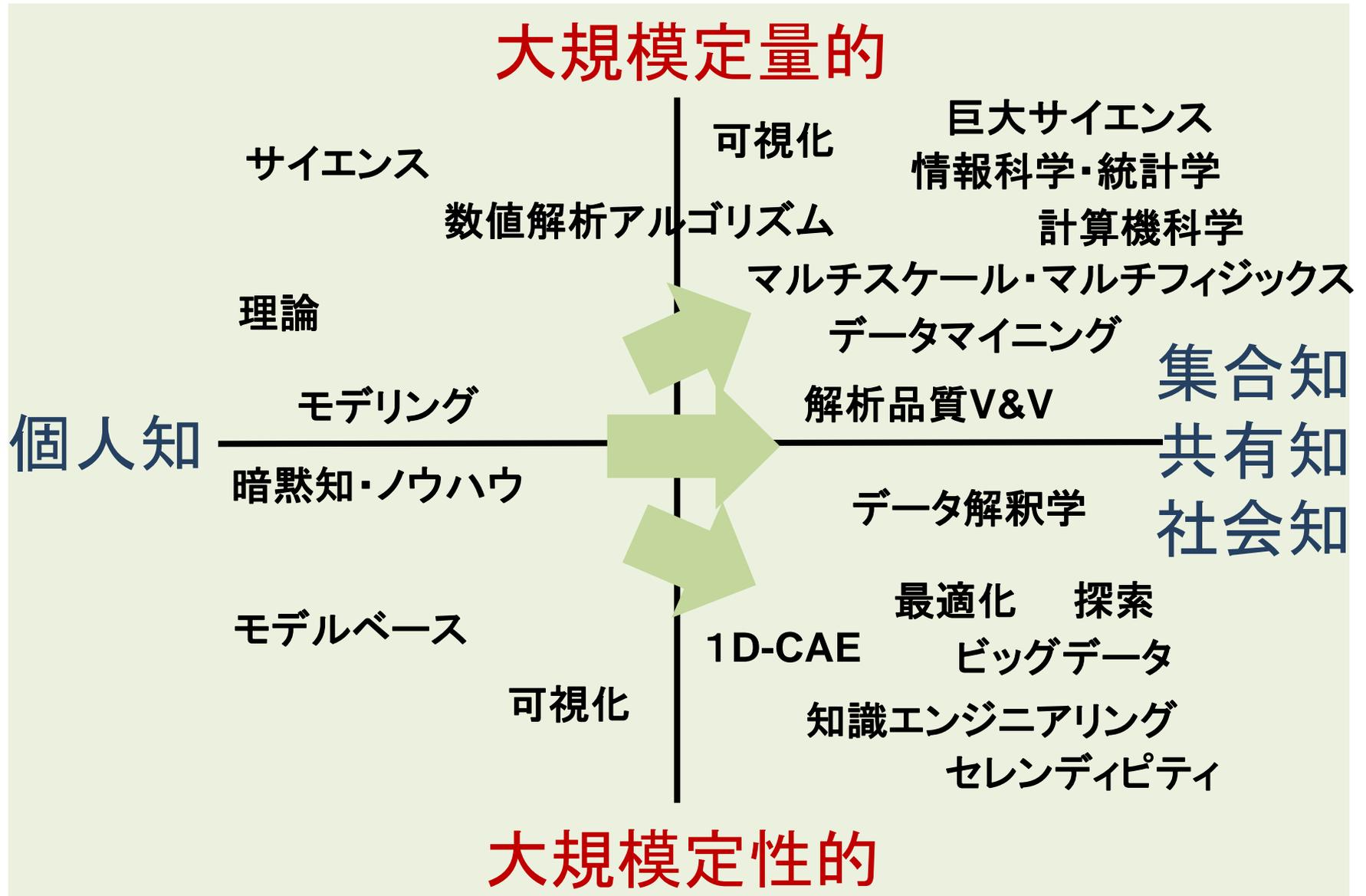


- ・課題設定、モデリング理解と解釈による完成度の高い設計
- ・学際的計算科学(情報科学、統計、DB)視点

HPC活用の多様性



HPCによる個の技術から共有・融合・創造へ



計算科学(HPC)の課題と期待(まとめ)

■ 大事なものはシミュレーションと思考をつなぐこと

課題

- ・課題に対する解くべき計算問題の設定
- ・解析品質がわかる人材育成
- ・複雑現象データの理解と解釈
- ・モデリング技術の限界、計算機性能限界
- ・人と計算機の乖離
- ・解析品質(手法の特徴・欠点、精度、限界、境界)
- ・プリ・ポストの重要性(理解する力)

期待

- ・複雑系解明、俯瞰、可視化→視覚的思考、創造へ
- ・計算科学への要求レベルの多様性
- ・従来にない計算手法の進化、アイデア
- ・デザイン工学としての計算科学、新しいインターフェース
- ・従来にない活用方法、異分野融合

ご清聴ありがとうございました

中村 道治

独立行政法人科学技術振興機構 理事長