

報 告

ものづくり分野における
スーパーコンピューティングの推進



平成23年（2011年）9月30日

日 本 学 術 会 議

計算科学シミュレーションと工学設計分科会

この報告は、日本学術会議第三部総合工学委員会・機械工学委員会合同 計算科学シミュレーションと工学設計分科会（第 21 期）内に設置された、ものづくり分野におけるスーパーコンピューティング技術推進検討小委員会における審議を反映して纏め、公表するものである。

日本学術会議第三部総合工学委員会・機械工学委員会合同
計算科学シミュレーションと工学設計分科会

委員長	萩原 一郎	(連携会員)	東京工業大学大学院理工学研究科教授
副委員長	松宮 徹	(連携会員)	新日本製鐵(株) 顧問
幹事	杉原 正顕	(連携会員)	東京大学大学院情報理工学系研究科教授
幹事	高橋 桂子	(連携会員)	(独) 海洋研究開発機構地球シミュレータセンタープログラムディレクター
	笠木 伸英	(第三部会員)	東京大学大学院工学系研究科教授
	岸浪 健史	(第三部会員)	(独) 国立高等専門学校機構・理事、釧路工業高等専門学校校長
	岸本 喜久雄	(第三部会員)	東京工業大学大学院理工学研究科教授
	北村 隆行	(第三部会員)	京都大学工学研究科教授
	木村 文彦	(第三部会員)	法政大学理工学部教授
	矢川 元基	(第三部会員)	東洋大学計算力学研究センター・センター長・教授
	久保 司郎	(連携会員)	大阪大学大学院工学研究科教授
	小林 敏雄	(連携会員)	日本自動車研究所副理事長・研究所長
	白鳥 正樹	(連携会員)	横浜国立大学名誉教授、同安心・安全の科学研究教育センター特任教授
	杉原 厚吉	(連携会員)	明治大学研究・知財戦略機構先端数理科学インスティテュート副所長・教授
	鈴木 宏正	(連携会員)	東京大学先端科学技術研究センター教授
	田端 正久	(連携会員)	早稲田大学理工学術院教授
	中橋 和博	(連携会員)	東北大学大学院工学研究科教授
	中尾 充宏	(連携会員)	(独) 佐世保工業高等専門学校校長
	福田 収一	(連携会員)	Stanford University, Consulting Professor、放送大学客員教授
	藤井 孝蔵	(連携会員)	(独) 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所副所長・教授
	松尾 亜希子	(連携会員)	慶應義塾大学理工学部教授
	三井 斌友	(連携会員)	同志社大学理工学部教授
	水野 毅	(連携会員)	埼玉大学大学院理工学研究科教授

宮内 敏雄	(連携会員)	東京工業大学大学院理工学研究科教授
宮崎 則幸	(連携会員)	京都大学工学研究科教授
室田 一雄	(連携会員)	東京大学大学院情報理工学系研究科教授
吉村 忍	(連携会員)	東京大学大学院工学系研究科教授
加藤 千幸	(特任連携会員)	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長・教授

ものづくり分野におけるスーパーコンピューティング技術推進検討小委員会

委員長	加藤 千幸	(特任連携会員)	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長・教授
幹事	中島 研吾		東京大学情報基盤センター教授
幹事	松岡 聡		東京工業大学学術国際情報センター教授
	矢川 元基	(第三部会員)	東洋大学計算力学研究センター・センター長・教授
	萩原 一郎	(連携会員)	東京工業大学大学院理工学研究科教授
	藤井 孝蔵	(連携会員)	(独)宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所副所長・教授
	宮内 敏雄	(連携会員)	東京工業大学大学院理工学研究科教授
	吉村 忍	(連携会員)	東京大学大学院工学系研究科教授
	青木 尊之		東京工業大学学術国際情報センター副センター長・教授
	秋葉 博		(株)アライドエンジニアリング・社長
	姫野 龍太郎		(独)理化学研究所 情報環境室室長
	松岡 浩		(独)理化学研究所 計算科学研究機構副機構長

(所属・役職は、平成23年9月におけるもの)

要 旨

1 背景と問題点

スーパーコンピュータの性能は3年間で約10倍、10年間で約1,000倍という急速なペースで年々向上している。2006年度から大型国家プロジェクトとして研究開発が推進され、本年（2011年）6月には世界最速の性能を達成したスーパーコンピュータ「京（けい）」も来年11月に本格的な運用に入る予定である。「京」は1秒回に1京回（ 10^{16} 回）という超高速な計算能力を有するものとなる。このような状況の中で、産業界においても従来のシミュレーションとは質的にも規模的にも異なる、超高速計算を駆使した計算科学シミュレーションによるものづくり設計の変革が期待されている。しかしながら、このような変革を現実のものとし、我が国の産業競争力の強化に資するためには解決すべき課題も山積している。

これらの課題は、計算機科学、計算科学、および各専門工学の極めて広範囲な学術分野に関連するものである。そこで、第21期日本学術会議第三部総合工学委員会および同機械工学委員会は合同で「計算科学シミュレーションと工学設計分科会」を設置し、その中の「ものづくり分野におけるスーパーコンピューティング技術推進検討小委員会」において、これらの課題について具体的に審議すると同時に、その解決策の検討を行った。

2 審議の内容

本小委員会では、まず、ものづくり分野でスーパーコンピュータを駆使したシミュレーションに対して期待される貢献に関して、代表的な産業分野を対象として議論し、次に、そのような貢献を達成するための諸課題に関して議論を進め、最後に、それを解決するための方策を検討した。諸課題の審議や解決策の検討にあたっては、ハードウェアの開発、ミドルウェアやアプリケーション・ソフトウェアの開発、設計データとシミュレーションデータの連携、シミュレーション結果の設計へのフィードバックといったそれぞれのテーマ毎に、専門家を招聘した講演、あるいは専門家からのヒアリングなどをもとにして議論をおこなった。

3 まとめ

ものづくり分野においてスーパーコンピューティングの利活用を推進し、それにより我が国の産業競争力を飛躍的に強化するとともに、スーパーコンピューティング分野において我が国が国際的優位性を維持するために、関係機関に対して以下のことを提案する。

まず、国に関しては、「京」の開発に留まることなく、スーパーコンピュータの開発プロジェクトを今後も引き続いて牽引するとともに、我が国のハイ・パフォーマンス・コンピューティングの基盤整備に関連して、産業利用を促進するための具体策を策定したり、共通基盤技術の研究開発拠点としても機能するような、世界有数のスーパーコンピュータセンターを国内に複数設置したりすることが重要だと思われる。また、スーパーコンピューティングの利用効果が大きいと考えられる分野を特定し、当該分野で必要となる基盤的ア

アプリケーション・ソフトウェアの開発を、ソフトウェアのデファクト・スタンダード化も視野に入れて戦略的に推進することも効果的である。一方、スーパーコンピューティングを活用した、ものづくりの将来ビジョンを産・学・官で議論する場を提供し、ビジョンを実現する上で必須となる要素技術開発、アプリケーション・ソフトウェア開発、ならびに、実証研究等に関して、三者が認識を共有できるようにすることは、関係する学協会の重要なミッションの一つである。大学等教育・研究機関では、上記のビジョンを実現する能力を有した人材育成プログラム（教育カリキュラム）を開発し、早期に実践に移すことが必要であろう。最後に産業界に関しては、我が国のハイ・パフォーマンス・コンピューティングの基盤整備事業やものづくり分野の基盤的アプリケーション・ソフトウェアの研究開発プロジェクトに積極的に関与し、スーパーコンピューティングを駆使した産業上の成功事例を早期に創出することが、ものづくり分野におけるスーパーコンピュータの利活用の推進、引いては、我が国におけるスーパーコンピューティング技術の発展に大きく寄与することが期待される。

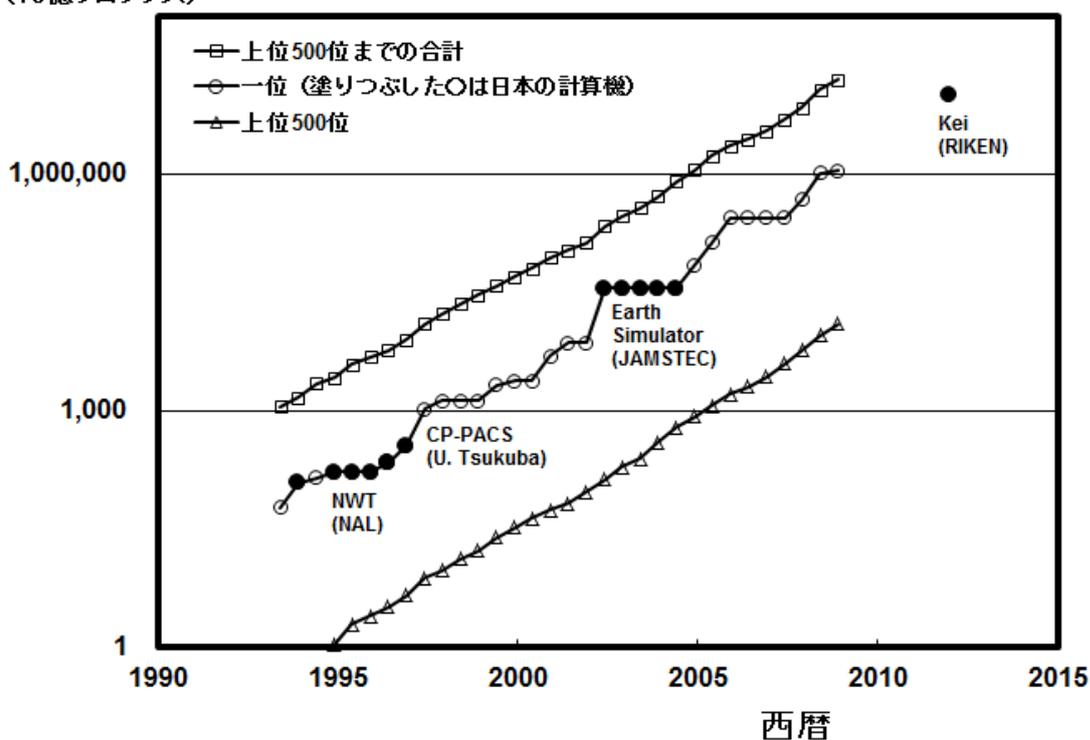
目 次

1	はじめに.....	1
2	背景.....	5
	(1) ものづくりにおけるスーパーコンピューティングの重要性.....	5
	(2) 産業競争力の強化とスーパーコンピューティングの発展.....	5
3	スーパーコンピュータの開発の歴史と今後の動向.....	7
	(1) スーパーコンピュータの開発競争の歴史.....	7
	(2) 中国の台頭.....	9
	(3) 今後のスーパーコンピュータの開発動向.....	9
4	アプリケーション・ソフトウェアの開発動向.....	11
5	スーパーコンピューティングにより期待されるブレークスルー.....	13
	(1) 現象の解明と工業製品の性能向上.....	13
	(2) 試作の代替えと開発期間・開発コストの大幅な削減.....	14
	(3) 最適設計の実現.....	15
	(4) 新材料・新物質の創成.....	16
	(5) 安心・安全社会の実現.....	18
6	スーパーコンピュータの産業利用において解決すべき問題.....	20
	(1) 三位一体の開発の重要性.....	20
	(2) 基盤的アプリケーション・ソフトウェアの研究開発とその普及施策.....	21
	(3) 設計におけるスーパーコンピューティングの利用の促進.....	22
	(4) テストベッド環境の構築と産業上の成功事例の創出.....	23
	(5) ものづくり分野におけるスーパーコンピューティングの長期ビジョンの策定..	23
7	まとめ.....	24
	<参考文献>.....	26
	<参考資料> 審議経過.....	27

1 はじめに

自然界で起こる現象を支配する方程式は解析的に解ける場合は限られているが、解析的には解けない場合でも、計算機を使って近似解を求めることは可能である。対象とする現象の支配方程式の近似解を求め、自然現象を仮想的に再現する手法である計算科学シミュレーションは、多くの理学・工学分野において、理論・実験に次ぐ第三の方法論として期待が集まっており、また、21世紀に最も大きな進展が期待されている研究分野でもある。この理由は数値解析方法の進歩も然ることながら、計算機の性能が3年間で約10倍、10年間で約1,000倍という割合で急速に向上しているからである（第1図）。

計算速度
(10億フロップス)



第1図 世界のスーパーコンピュータの性能の推移[1]

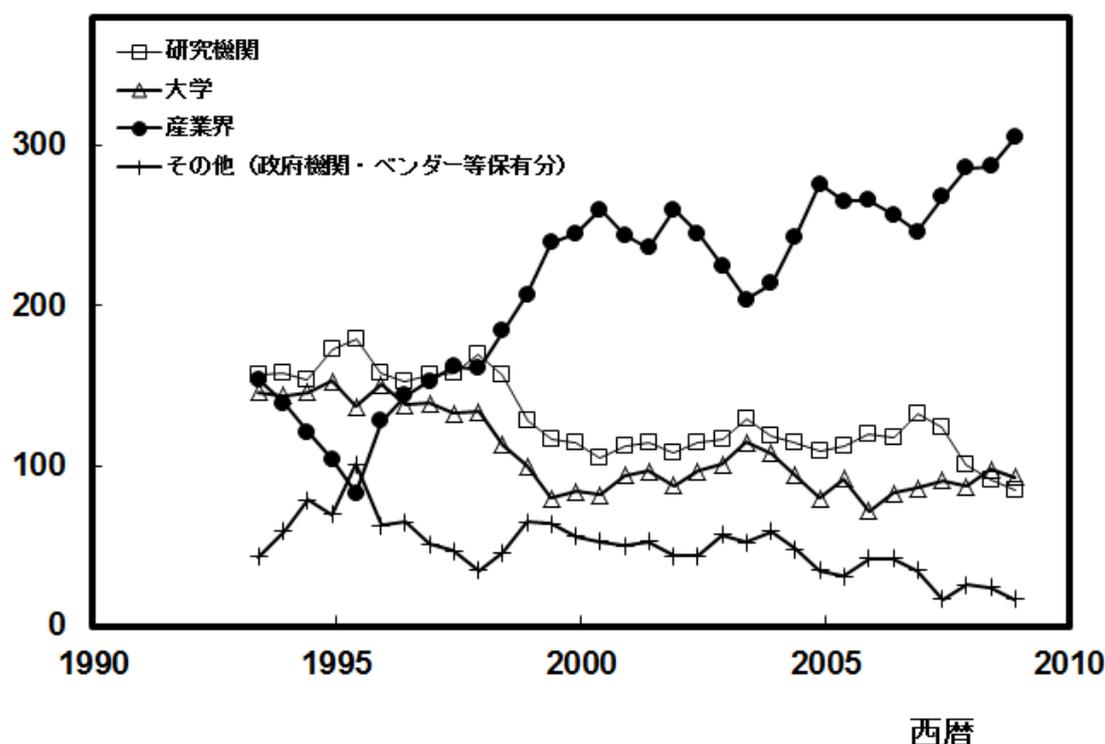
(3本の線は上から、上位500番目までの計算機の性能の合計値、最高性能の計算機の計算速度、500番目の性能の計算機の計算速度、をそれぞれ表す。なお、上位500番目までの計算機の性能の合算値は先端科学・技術分野における計算能力の推移を示していると考えられる。)

総合科学技術会議が平成17年度に策定した第3期科学技術基本計画[2]では「スーパーコンピューティング¹」は日本の国家基幹技術の一つに位置付けられており、国内では(独)

¹ スーパーコンピューティングとはスーパーコンピュータ(計算機ハードウェア)の開発、オペレーティングシステム・コンパイラ・ミドルウェア・アプリケーションソフトウェアの開発、およびその利用技術の開発など、スーパーコンピュータに係わる総合的な技術を意味する。

理化学研究所が開発主体となり、平成 18 年度から 24 年度までの 7 年計画で兵庫県神戸市のポートアイランドに、スーパーコンピュータ「京」の建設が進められている[3]。「京」は世界最速の CPU (Central Processing Unit、中央演算処理装置) を 8 万個以上搭載し、ピーク性能は、10 ペタ・フロップス (Peta Floating Points Operations per Second、1 ペタ・フロップスは、1 秒間に 1,000 兆回の浮動小数点演算を実行する演算能力) 以上になる予定である。「京」の開発目標の一つに、稼動開始時点で世界最速のスーパーコンピュータとなることが掲げられているが²、スーパーコンピュータの利用分野の一つとして産業利用が大きく謳われている[3]。世界のスーパーコンピュータの利用状況を概観しても産業界における利用の割合が急速に増大している (第 2 図)。

計算機の台数



第 2 図 世界のスーパーコンピュータの利用分野の推移[1、4]
(性能上位 500 位までの計算機の利用分野別台数を表す。)

スーパーコンピュータ「京」の研究開発の一環として、文部科学省では HPCI (ハイ・パフォーマンス・コンピューティング・インフラ) 戦略プログラムを平成 21 年度から推進している[5, 6, 7]。本プログラムは「京」を始めとしたスーパーコンピュータの利用により、

² 「京」の本格運用は来年 (2012 年) 11 月に開始される予定であるが、前記のように、本年 (2011 年) 6 月に「京」は既に世界最速の計算速度を達成した。

計算科学の大きな発展が見込まれる分野（戦略分野）を選定し、その推進を牽引する代表機関（戦略機関）が策定する計画を実施するための補助事業である。本事業では5つの戦略分野³が激論の末に平成21年7月に決定され、同年度に行われた実施可能性調査研究を経て戦略機関が決定され、さらに平成22年度の準備研究期間を経て、平成23年度からは本格実施期間に移行している。5つの戦略分野にはものづくり分野もその中の一つに入っており、スーパーコンピューティングの戦略的利用が産業界においても推進されつつある。

このように、スーパーコンピュータの性能は年々急速に向上している中で、ものづくり分野においてもスーパーコンピュータの利活用によるイノベーションの創出に大きな期待が集まっている。どのような期待が高まっているかに関しては、第5章で具体例とともに詳述する。しかしながら、現在産業界で行われている計算科学シミュレーションは高々数CPUの計算機を用いた小規模の計算であり、このような状況の中、上記のような期待を現実のものとし、日本のものづくり産業の国際競争力の強化に資するためには解決すべき課題も山積している。産業界で小規模な計算しか実施されていない理由は幾つかあるが、その中で最も重要と思われることは、スーパーコンピュータを駆使した大規模な計算のメリット、つまり、産業上の効果が実証されていないことが挙げられる。このことに関しては第6章で改めて触れる。さらに、スーパーコンピュータの性能は今後、少なくとも5年から10年の間はこれまでと同じペースで年々向上していくものと推定されており、したがって、スーパーコンピューティングは今後ともますますその重要性が増すものと予想される。しかしながら、10年間、20年間というスパンで考えた場合に、我が国がこの分野において国際競争力を維持し続けるための明確なビジョンが関係者の間で共有されているとは言えない状況にある。

このような状況の中、スーパーコンピューティングの産業利用に関する長期的ビジョンを策定し、それを達成するためには具体的なマイルストーンを設定する必要がある。このための議論は、ものづくりにおいてスーパーコンピュータを利用する各専門工学分野に加えて、計算機アーキテクチャ、オペレーティングシステム、ファイルシステム等を専門とする計算機科学（コンピュータ・サイエンス）、大規模行列解法や超並列計算アルゴリズムなどを専門とする応用数学など、きわめて広範囲な学術分野に関連するものである。そこで、第21期日本学術会議第三部総合工学委員会および同機械工学委員会は合同で「計算科学シミュレーションと工学設計分科会」を設置し、その中の「ものづくり分野におけるスーパーコンピューティング技術推進検討小委員会」において、ものづくり分野におけるスーパーコンピューティングの長期的ビジョンならびにこれを達成するための様々な課題に関して議論した。本報告はこれらの議論を反映して、関係する諸機関に対する提案として纏めたものである。

本報告書は以下のような構成となっている。まず、第2章において、ものづくり分野においてなぜ、スーパーコンピューティングの活用を推進する必要があるのかという理由を

³ 5つの戦略分野とは、それぞれ、「予測する生命科学・医療および創薬基盤」、「新物質・エネルギー創成」、「防災・減災に資する地球変動予測」、「次世代ものづくり」、ならびに、「物質と宇宙の起源と構造」である。

述べる。次いで、第3章においては、スーパーコンピュータのこれまでの開発経緯や今後の開発動向に関して説明する。ここでは、日米欧ならびに中国といった世界の主要諸国が如何にスーパーコンピュータの開発を戦略的に推進しているかということが示される。第4章においてはスーパーコンピュータの利用を推進する上で極めて重要な要素である、アプリケーション・ソフトウェアの研究開発動向に関して説明する。第5章では第3章で説明したようなスーパーコンピュータの発達や数値解析手法の進歩などにより、今後のものづくり分野においてスーパーコンピューティングに期待されているブレークスルーを具体的に説明する。第6章では前章で説明したブレークスルーを実現するために解決する必要がある課題に関して検討した結果を説明し、第7章において、この検討結果を提案という形で纏めている。

2 背景

(1) ものづくりにおけるスーパーコンピューティングの重要性

我が国は世界に類をみない高品質の製品を作り出すことによって高い評価を受け、それが国際競争力の強化に大きな役割を果たしてきた。しかし、21世紀においてもその特長を生かしながら、我が国がさらなる発展を遂げるためには、ものづくりの生産性を抜本的に向上させるとともに、革新的な技術開発による製品の変革（あるいは新製品の創出）に対しても効果的な施策を打つことが必要不可欠とされている。これらの課題に対して、ITの活用が極めて重要な役割を果たすことはすでに周知の事実であり、特に前者（生産性向上）をターゲットにおいた取り組みとして、1990年代からいわゆるデジタルエンジニアリング化⁴の急速な進展が図られ大きな効果を上げてきた。

一方、後者（製品の変革）については、地球環境の維持・改善に対する極めて高い目標が設定されている状況下において、この課題に対応するためにはその芽となる、多分野にわたる先端的な技術手段の研究開発はもとより、それらを統合・最適化して実際の製品を設計するプロセスの質的・時間的な変革が不可欠である。ITを活用したものづくり全体の仕組みの中で、特に計算科学技術はそのための最も重要な手段であり、従来のイメージを大きく超えた役割を果たすことが期待されている。

具体的には、革新的製品設計において根幹を成すプロセスである、課題解決に有効なコンセプトの定量的評価・選定→全体組合せ最適化→形状最適化という、概念設計から詳細設計に至るプロセスの飛躍的な高度化・高速化を図ることが必要である。また、詳細設計完了後は製品全体の機能の確認、ならびに様々な稼動状態での動作予測を高精度に実施することが要求される。中国に代表される新興国との熾烈な価格・短納期競争、さらにはグローバル展開を図ろうとする欧米企業との技術競争に勝ち抜き、我が国の産業競争力を維持・強化していくためには、今後これらの課題に対する解決策の創出を、従来の計算機環境では到底不可能なスピード感をもって総合的に実現する必要がある。それにはスーパーコンピュータを駆使した、ものづくり分野における「戦略的な計算科学技術の推進」が必須と考えられる。

(2) 産業競争力の強化とスーパーコンピューティングの発展

基礎科学の分野であれば、従来よりも100倍速い計算機を利用して極めて精緻な計算を行い、今まで解明されていなかった現象が解明できればそれ自体が大きな成果になる。たとえば、スーパーコンピュータにより、鳥インフルエンザウイルスが突然変異して、人にも感染するようになるメカニズムに関する研究が進められている。このメカニズムが解明されれば、人への感染を防ぐための重要な知見が得られるであろう。ところが、工学、特にものづくり分野において、ある企業がスーパーコンピュータを高度に利用して自社製品の性能を向上させたとしても、そのこと自体の波及効果はさほど大きくはな

⁴ 製造業の競争力アップのために、コンピュータを使って部品管理、工程管理などを行い、開発期間の短縮や開発コストの削減などを図ること。

い。また、ある企業が自社製品の開発のために、国家プロジェクトで開発したスーパーコンピュータを長期間にわたり占有して利用することは考えられない。では、ものづくり分野におけるスーパーコンピュータの利活用を、前述した文部科学省の HPCI 戦略プログラムのような国家プロジェクトにより推進すべき理由は何であろうか。まず、この理由を明確にしておきたい。

一つは、スーパーコンピュータを高度に利用した、ものづくり分野における次世代の設計システムを諸外国に先駆けて構築するためである。このことにより、我が国の産業競争力の抜本的な強化が期待されているが、一民間企業が世界トップクラスのスーパーコンピュータを独自に購入し、このような取り組みを行うことは現実的ではない。ものづくり分野におけるスーパーコンピューティングの利活用を国家プロジェクトとして推進すべき理由の一つがそこにある。

前述したとおり、スーパーコンピュータの性能は数年経てば10倍になる。したがって、現時点では世界トップクラスのスーパーコンピュータを利用しなければならないような計算も数年経てばより身近な計算機でもできるようになる。スーパーコンピュータを高度に利用した新しい設計システムを構築し、実用に供するためには少なくとも2年から3年の年月を要する。したがって、世界トップクラスのスーパーコンピュータを利用して、次世代の設計システムのあるべき姿を明確にし、いち早くその構築に着手することにより、いわゆるリードタイムを確保することが可能になるのである。このリードタイムこそが産業競争力の源泉であるとも言える。つまり、我が国の企業がどんなに飛躍的な性能向上を達成したとしても、長い目で見れば、諸外国の企業もいずれは同様な性能を達成し、これに伴い、製品の価格は徐々に廉価になっていく。したがって、スーパーコンピューティングを高度に活用することにより、諸外国の企業に先駆けて、製品の性能・信頼性の向上や開発費や開発期間の削減を達成することができればそれが産業競争力の強化に繋がる。

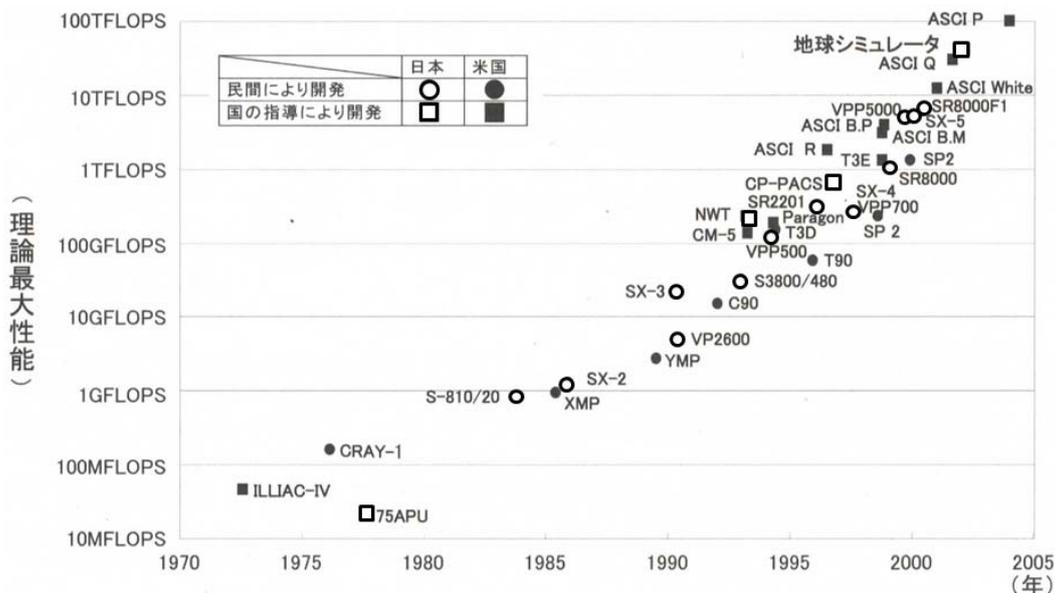
スーパーコンピュータの産業利用を推進すべきもう一つの理由は、スーパーコンピュータを多くの企業が設計に活用できるようになることにより、我が国のスーパーコンピューティング技術が全体的に発展することが期待されるからである。現在、日本の国民総生産（GDP）の3分の1以上は広い意味でのものづくり産業が占めている。多くのものづくり企業がスーパーコンピュータを利用することにより、超高速演算器やメモリー、ネットワーク、ファイルシステムなどのハードウェア技術、オペレーティングシステムやコンパイラ、アプリケーションなどのソフトウェア技術、ならびに、スーパーコンピュータの利用技術が相乗効果的に進歩することが期待される。これにより、ますます重要性が大きくなるスーパーコンピューティング分野において、我が国が国際的なリーダーシップを発揮できるようになるからである。

3 スーパーコンピュータの開発の歴史と今後の動向

産業界におけるスーパーコンピューティングの利用の推進を図るためには、これまでのスーパーコンピュータの開発経緯や今後の開発動向を正確に把握しておくことが重要である。本章では日米のスーパーコンピュータの開発競争の歴史や現在の日本の立ち位置、ヨーロッパ諸国の状況、新たにスーパーコンピュータの開発競争に参入してきた中国の状況、ならびに、各国の今後の開発動向などを説明する。

(1) スーパーコンピュータの開発競争の歴史

第3図に示すように、スーパーコンピュータの開発競争においては、2005年くらいまでは米国と日本が凌ぎを削っていた。たとえば、航空宇宙技術研究所〔現、(独)宇宙航空研究開発機構〕が中心となり開発されたNWT（Numerical Wind Tunnel、数値風洞）は1993年から1995年まで、世界のスーパーコンピュータの性能ランキング「TOP500」〔1〕で1位の座を維持した。また、海洋科学技術センター〔現・(独)海洋研究開発機構〕が中心となり開発された地球シミュレータは2002年4月、それまで世界最高速を誇っていた米国のASCI White Pacificの約5倍の性能を達成した。米国ではこの事実は「コンピュータニクショック」として大きく報道され、地球シミュレータは以後2年半にわたり世界最速の座を維持した〔8〕。しかしながら、これらのスーパーコンピュータは航空機の研究や気候・気象予報を主たる目的として開発されたものであり、産業界で広く利用されることはなかった。



第3図 日米のスーパーコンピュータの性能の推移〔8〕

その後は、文部科学省の主導で前述の「京」の開発プロジェクトが2006年にスタートするまでの間は、我が国においてはスーパーコンピュータの開発ための大型プロジェクト

トが推進されなかったこともあり、米国に大きく水を開けられていたが、本年（2011年）6月の性能ランキングで7年ぶりに我が国のスーパーコンピュータが1位の座を取り戻したのは周知の事実である。しかしながら、本年6月時点で世界のスーパーコンピュータの性能ランキングの上位50位以内に入っている我が国のスーパーコンピュータは「京」を含めて3台⁵しかなく、総合力ではまだ米国や欧州諸国にリードされている。

これに対して、米国はスーパーコンピュータの開発に関連した国家プロジェクトを継続的に推進している。これらのプロジェクトにおいては、エネルギー省（Department of Energy、DOE）や国防総省（Department of Defence、DOD）が所管する米国内の主要な研究所がIBM、Crayなどの米国内の主要メーカーと連携して世界最速のスーパーコンピュータを計画的に開発してきている。開発されたスーパーコンピュータは当該研究所に順次設置され、最先端の計算科学シミュレーションの研究開発に供されている。これらの研究所ではそれぞれの専門分野で鍵を握るアプリケーション・ソフトウェアの研究開発が行われている。平成23年6月の時点における、世界のスーパーコンピュータの性能ランキングを第1表に示すが、上位10以内に米国に設置されているスーパーコンピュータが5台を占めている。

第1表 計算速度で上位10位までの世界のスーパーコンピュータと設置場所等[1、4]

順位	実行性能 理論性能	名称(愛称)	プロセッサ	ベンダー	設置場所	設置国
					設置年	
1	8162 8773	京	Fujitsu Cluster 548,352 SPARC64 VIIIfx	Fujitsu	理化学研究所(AICS) 2011	日本
2	2566 4701	天河一号A	NUDT YH Cluster 136,368 Xeon+NVIDIA GPU	NUDT	国立スーパーコンピュータセンター天津 2010	中国
3	1759 2331	Jaguar	CRAY XT5-HE 224,162 OPTERON	CRAY	オークリッジ国立研究所 2009	米国
4	1271 2964	Nebulae(星雲)	DAWNING TC3600 BLADE 55,680 Xeon+64,960 Tesla	DAWNING	国立スーパーコンピュータセンター深圳 2010	中国
5	1192 2287	TSUBAME2.0	HP Cluster Platform 3000SL 73,278 Xeon, NVIDIA GPU	NEC/HP	東京工業大学 2010	日本
6	1110 1365	Cielo	Cray XE6 142,272 Opteron 8 Core	CRAY	ロスアラモス国立研究所 2011	米国
7	1088 1315	Pleiades	SGI Altix ICE 8200EX/8400EX 111,104 Intel Xeon (Harpertown)	SGI	NASA AMES研究センター 2011	米国
8	1054 1288	Hopper	Cray XE6 153,408 Opteron	CRAY	ローレンス・バークレー国立研究所 2010	米国
9	1050 1254	Tera-100	Bull Bullx Super-Node S8010/S8030	BULL SA	フランス原子力庁 2010	仏国
10	1042 1375	Roadrunner	Blade Center QS22/LS21 122,400 PowerXCell/Opteron	IBM	ロスアラモス国立研究所 2009	米国

(2011年6月時点。第2カラムの性能の単位はテラ・フロップスとあって、1秒間に1兆回の浮動小数点演算を実行する能力を表す。)

ヨーロッパ諸国では2009年にドイツが中心となってPRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) というプロジェクトを立ち上げ、スーパーコンピューティングの利用を推進している[9]。このプロジェクトでは、科学および産業の両分野において

⁵ 残りの2台としては東工大のTUBAME2.0が5位、(独)日本原子力研究開発機構のAltix ICEが38位にランクインしている。

ヨーロッパ諸国の国際競争力を維持するためにはスーパーコンピューティングは必須であるという認識のもと、ヨーロッパ圏内にペタ・フロップス級の計算機やストレージ装置（ディスク装置）を利用するためのインフラ・ストラクチャーを構築することを目的としている。プロジェクト期間内にペタ・フロップス級のスーパーコンピュータを最大6台設置し、加盟する各国からの学術利用ならびに産業利用を可能とする。また、長期的には2019年までにエクサ・フロップス級（1エクサ・フロップスとは1秒間に100京回の浮動小数点演算を実行する能力であり、「京」の100倍の計算速度に相当する）のスーパーコンピュータを設置することも計画されている。

(2) 中国の台頭

スーパーコンピューティングの分野で世界最大の国際会議・展示会である SC⁶が毎年11月に米国で開催されている。昨年は SC10 が米国ニューオーリンズで開催されたが、そこで最も注目を集めたことの一つは中国におけるスーパーコンピュータの開発である。昨年11月のスーパーコンピュータの性能ランキングで中国のスーパーコンピュータが1位と3位に躍り出たのである（注：現在はそれぞれ2位と4位）。1位になった Tianhe-1A、ならびに3位になった Nebulae はともに米国インテル社製の CPU と同 NVIDIA 社製 GPU（Graphics Processing Unit、画像処理用のチップであるが、最近では汎用計算にも使用されている）を多数使用し、これらの CPU や GPU を接続するネットワークのみ、中国が自主開発したものを使用している。しかし、中国科学技術院（Chinese Academy of Sciences、CAS）は米国ミップス社と技術提携し、国産 CPU を開発中である。2011年度中には出現するものと思われる Dawning（曙光）社製スーパーコンピュータ、Dawning 6000 には国産 CPU であるロンサン（Loongson）3B あるいはその後継機である Loongson 3C が使用されることになっている。中国はスーパーコンピュータに関する国家計画である第12次5ヵ年計画（2011年から2015年）に基づき、スーパーコンピューティング技術の純国産化を着実に推進している。

(3) 今後のスーパーコンピュータの開発動向

「京」の本格的な運用開始が予定されている2012年には米国内でも合計3台の10ペタ・フロップス級のスーパーコンピュータが稼働を開始する予定である。その内最大のものが米国エネルギー省（DOE）の予算でローレンス・リバモア研究所が進めているプロジェクトで開発中の Sequoia（セコイヤ）とよばれる計算機であり、2011年内には設置され、2012年に稼働が開始される予定である。Sequoia のピーク性能は「京」を上回る20ペタ・フロップス（「京」は10ペタ・フロップス）程度になるものと推定され、主記憶装置の容量は1.6ペタバイト、演算コア数は160万程度になるものと予想されている。また、全米科学財団（National Science Foundation、NFS）の基金で米国立スーパーコンピュータ応用研究所（Center for Supercomputing Applications、NCSA）が進めてい

⁶ SC は SuperComputing を表す。

る Blue Waters (ブルー・ウォーターズ) プロジェクトは IBM の Power7 という CPU を使用し、2011 年内に実際のアプリケーション・ソフトウェアで 1 ペタ・フロップスを超える性能を実現することを目標としている。計算機自体のピーク性能はやはり 10 ペタ・フロップスを超えるものと予想されている。さらに、米国国防総省 (DOD) 所管の研究所であるアメリカ航空宇宙局 (National Aeronautics and Space Administration, NASA) AMES 研究所では Pleiades (プレイアデス) というプロジェクトを進めており、2012 年にピーク性能 10 ペタ・フロップスの計算機サービスを開始することを予定している。ヨーロッパ諸国は前述のように PRACE プロジェクトの中でペタ・フロップス級計算機を EU 圏内に 5、6 台設置し、HPC 用のインフラを構築することが計画されている。中国は米国の MIPS 社と提携し Loongson-3 という国産の CPU を開発中であり、これを利用した 10 ペタ・フロップス級のスーパーコンピュータの開発に着手するものと推察されている。

このように日本・米国・欧州各国、および中国において、10 ペタ・フロップス級のスーパーコンピュータは既に稼働の直前となっており、現在はその 100 倍の性能である、エクサ・フロップス級のスーパーコンピュータの開発が次のターゲットとなっている。各国ともにまだ具体的な計算機の開発には入っていないが、米国ではその予備的なプロジェクトが既に開始されている。たとえば、エネルギー省 (DOE) と全米科学財団 (NSF) では、エクサ・フロップス級のスーパーコンピュータに必要な技術開発事項を検討する会合を開催し、将来的な取り組みのロードマップを作成することを目的とした、国際エクサスケール・ソフトウェア・プロジェクト (International Exascale Software Project) を推進している。本プロジェクトの会合には日本からも専門家が参加している。また、2009 年にスタートした、国防総省 (DOD) 高等研究計画局 (Defense Advanced Research Projects Agency, DARPA) のユビキタス・ハイパフォーマンス・コンピューティング (Ubiquitous High Performance Computing, UHPC) 計画では実効性能で 1 ペタ・フロップス級の計算能力を有するスーパーコンピュータを 1 台の 19 インチ・ラックシステムとして実現することを目標としているが、既に、試作と性能評価を行うチームの選定が終了している。さらに、EU の第 7 次研究枠組み計画 エクサスケールコンピューティング・ソフトウェア・シミュレーションプログラムでは 2020 年までにエクサ・フロップス級の計算を実現できるポテンシャルを持つ、100 ペタ級スーパーコンピュータのハードウェア、ソフトウェアを 2014 年までに開発することを目標としている。また、我が国では科学技術振興財団 (JST) の戦略的想像研究推進事業 (CREST) において、ポスト・ペタフロップス級の計算科学のためのシステム・ソフトウェア技術の研究課題が公募され、今年度から幾つかの研究課題がスタートしている。

このような状況の中、我が国もスーパーコンピューティング技術の開発とその産業利用を戦略的に推進していかなければグローバル時代における産業競争力の維持・強化が困難になることが危惧される。

4 アプリケーション・ソフトウェアの開発動向

ものづくり分野で利用されるアプリケーション・ソフトウェアに関しては、これまで我が国は欧米に対して大きく遅れをとっていた。すなわち、現在産業界で用いられている CAE (Computer Aided Engineering、計算機を利用した設計) 分野のソフトウェアは何れも欧米製であり、残念ながら我が国で開発されたソフトウェアはほとんど用いられていない。たとえば、構造解析分野では NASA で開発された NASTRAN (ナストラン) とよばれるソフトウェアが業界標準 (デファクト・スタンダード) ソフトウェアと位置付けられており、流体解析分野では、英国インペリアル・カレッジ・ロンドンで開発された STAR-CD (スターシーディー) や米国の Create Inc. という企業で開発された Fluent (フルーエント) が標準ソフトウェアとして広く使われている。化学工業分野で普及している量子化学計算ソフトウェア Gaussian (ガウシアン) は米国カーネギーメロン大学で開発されたものであるし、燃焼計算の代表的ソフトウェアである CHEMKIN (ケムキン) は米国サンディア国立研究所で開発されたものである。これらのソフトウェアのほとんどは元々大学や研究所等で開発されたものであるが、その後、民間会社に技術移転され、現在は完全に商用ベースでその維持・改良が続けられている。

上記のような傾向は 1980 年代から続いてきたが、ここに来て、新たな転機を迎えようとしている。本報告の第 6 章で詳述するように、これからのスーパーコンピュータの性能を発揮させるためには、アプリケーション・ソフトウェアは数万台以上の演算コアを並列に動作させる必要があるが、現在業界標準となっているアプリケーション・ソフトウェアはこのような超並列計算には対応していないからである。また、解析プログラムだけがあっても、ものづくりの設計現場で大規模計算を活かすことは不可能であり、計算格子を生成する前処理プログラムや計算結果から効率的に設計にフィードバックを掛けることができる後処理プログラムがあつて初めて、ものづくりの現場でスーパーコンピューティングが威力を発揮するのである。このため、計算機ハードウェアの長足の進歩に伴い、アプリケーション・ソフトウェアにもパラダイムシフトが起こりつつある。

このような状況の中、米国では主にエネルギー省 (DOE、Department of Energy) や国防総省 (DOD、Department of Defense) の傘下にある研究所で大規模なマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションの研究開発が行われており、その成果が共同研究などを介して、民間にも技術移転されつつある。たとえば、Boeing 社が流体・構造解析ソフトウェアを活用して、Boeing 787 の翼の試作回数を大幅に削減したことは良く知られているし、タイヤメーカーである GoodYear 社が動的構造解析シミュレーションを駆使して、走行安定性に優れたタイヤの開発に成功した事例などが報告されている [10, 11]。

一方、我が国でも 2000 年代になってからスーパーコンピュータ向けのアプリケーション・ソフトウェアの開発を目的とした幾つかの国家プロジェクトが推進されている。たとえば、2002 年の 7 月に開始された、文部科学省の IT 基盤構築のための研究開発プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト [12] はその後、同省の次世代 IT 基盤構築のための研究開発プログラム「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト」 [13]、さらに、同「イノベーション創出基盤となるシミュレーションソフトウェ

アの研究開発」[14]プロジェクトへと発展的に継承されきたが、これらのプロジェクトでは大学等の研究機関で開発されたソフトウェアを産業界のニーズに直接適合するように改良することにより、設計現場でも活用できる実用的なアプリケーション・ソフトウェアを開発している。プロジェクトの成果である、開発されたソフトウェアはフリーウェアとしてホームページに公開されているが、ソフトウェアのダウンロード件数は7万件を超えており、産業界からの関心の高さがわかる。さらに、文部科学省の次世代スーパーコンピュータ・プロジェクト（正式名称はハイ・パフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築）の一環として研究開発が進められている、ライフサイエンス分野、ナノサイエンス分野における最先端アプリケーション・ソフトウェアの研究開発プロジェクト[15, 16]もその成果の出口としては、基礎研究分野のコミュニティで活用されるソフトウェアに留まることなく、産業界で応用されることも目指している。したがって、これらのプロジェクトの成否が我が国のものづくり分野におけるスーパーコンピューティングの普及の大きな鍵を握っていると言える。

5 スーパーコンピューティングにより期待されるブレークスルー

本章では、ものづくり分野においてスーパーコンピューティングの活用により実現されることが期待されているブレークスルーに関して検討した結果を具体例とともに示す。なお、ここに示した例は、1 ペタ・フロップスの性能を有するスーパーコンピュータが設計現場で自由に活用できるような状況において実現されることが期待されているブレークスルーであり、おおよそ、2015 年頃にその時代は到来するものと予想される。

(1) 現象の解明と工業製品の性能向上

研究開発や製品設計の初期の段階において、目的とする機能を実現するための基本的な方式や原理の検討にスーパーコンピュータを活用し、製品の性能を支配している現象を詳細に解明することにより、従来は達成できなかったような高い性能を実現することが期待されており、すでにそのような効果が実証され始めている。

たとえば、自動車の空気抵抗を低減するためにスーパーコンピュータを駆使したシミュレーションを活用した例を第4図に示す。車体に働く空気抵抗は走行速度の2乗に比例して増大するため、低速走行では空気抵抗が燃料消費に与える影響は比較的小さいが、時速 100km 程度の高速走行になると燃料消費の半分近くは空気抵抗に対して費やされるようになる。このため、車体に作用する空気抵抗を 10%低減することができれば高速走行時における車の燃費は約 4%向上する。

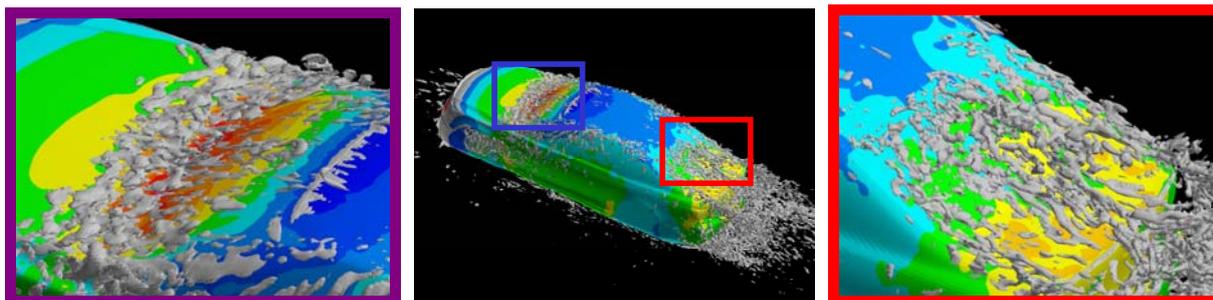
車体まわりの空気の流れには 1 m 程度の大きな渦から 1 mm 以下の非常に小さな渦まで大小さまざまな大きさの渦が存在しており、それらの相互干渉の結果として、車体周りの空気の流れが決定される。流れの数値計算は対象とする領域を計算格子とよばれる微小な領域に分割し、それぞれの領域において支配方程式の近似式を解くことにより各格子点における流速や圧力を求めるものである。したがって、必要となる計算時間ならびに記憶容量はほぼ計算格子の数に比例して増大する。従来の計算機では計算速度ならびに記憶容量の制約から流れの中にある非常に小さな渦の運動までは計算することは不可能であったが、「京」に代表されるような最先端のスーパーコンピュータ⁷を利用すれば、最大 1 兆点程度の計算格子を用いることも可能であり、このような全ての渦の相互作用を明らかにすることができる。その知見に基づいて渦を制御すれば、抵抗低減の限界を打破できることが期待される。

風洞試験では流れの中の渦の構造を詳細に調べることは不可能であるが、スーパーコンピュータを用いた数値シミュレーションでは時々刻々変化する空気の流れを再現することができる。これにより、自動車の空気抵抗に最も寄与している渦の構造を解明することが可能となり、空気抵抗を約 7%低減できる車体形状を見出すことに成功した。

従来から数値シミュレーションは工業製品の研究開発・設計に使われている。たとえば、1970 年代には有限要素法が強度設計に適用され始め、また、1980 年代からは航空

⁷ 現在の最先端のスーパーコンピュータの性能は 5 ペタ・フロップスから 10 ペタ・フロップス程度であり、また、記憶容量は 1 ペタ・バイトから 2 ペタ・バイト程度である。

機の翼の設計に流れの数値計算が使われている。さらに、1990年代からは衝突解析が自動車の安全設計に適用されている。しかしながら、従来の数値シミュレーションでは予測や解明ができる現象が限られていた。一方、計算機の性能は長足の進歩を遂げており、たとえば、1990年と比較すると現在のスーパーコンピュータは100万倍にも性能が向上している。したがって、現在のスーパーコンピュータを駆使すれば従来は経験や試行錯誤に基づいて設計していた製品を理論的に最適化することが可能となり、自動車以外にも航空機、タービン、燃料電池など多くの工業製品の飛躍的な性能向上が期待されている。



第4図 自動車の周りの詳細な気流解析[17]

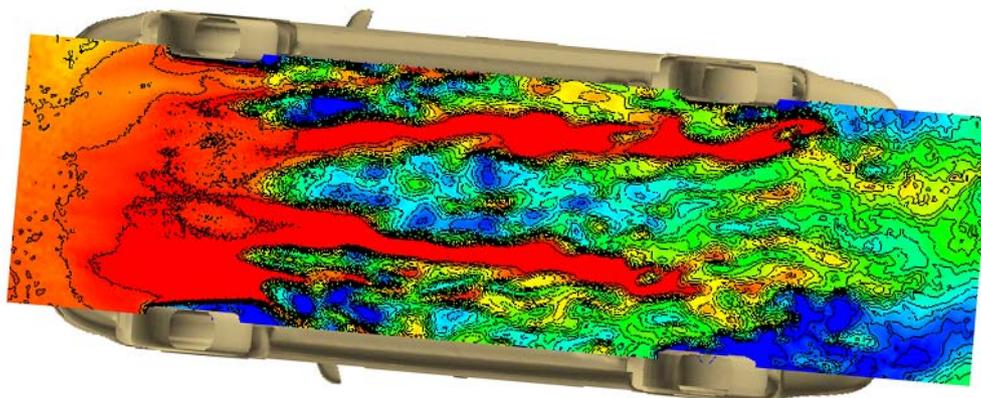
(車体の周りの泡状の等値面は乱流中の微細な渦を表す。また、車体表面の色は圧力を表し、濃い色の部分は圧力が低下している領域であり、薄い色の部分は圧力が高くなっている領域である。)

(2) 試作の代替えと開発期間・開発コストの大幅な削減

製品開発のさまざまなフェーズにおいては、設計した製品が所定の性能を発揮し、想定される動作環境において十分な強度を有し、さらに、振動・騒音などの問題が発生しないことを確認するための試作を実施する必要がある。これらの評価結果が思わしくない場合には設計からやり直す必要がある。次世代のものづくりにおいては、このような試作の一部、あるいは全部をスーパーコンピュータを利用したシミュレーションによって代替えさせることが可能になり、試作回数が少なくなる、あるいは試作が全く不要になることが期待されている。試作が不要になればそれに要していた費用が大幅に削減されるが、さらに大きな効果として、製品開発の手戻りを無くすことが期待されている。すなわち、スーパーコンピューティングを駆使すれば、詳細設計と仮想的な評価を同時並行的に実施することが可能になるため、製品の開発期間を大幅に短縮できる可能性がある。

たとえば、前述のように自動車の車体形状の設計においては、クレイモデルを用いた風洞試験により、空気抵抗やダウンフォース（地面に向かう方向に働く力であり、この力が大きいほど走行安定性に優れる）などの空気力の大きさを確認している。1ペタ・フロップス級のスーパーコンピュータを用いたシミュレーションを駆使すればクレイモデルによる風洞試験と同程度の精度でこれらの力を予測することが可能となり、クレイモデルを作成して風洞試験を実施する必要がなくなる。さらに、実際に道路を走行中

の自動車に対しては、まわりを走行する自動車や風の影響により、風洞試験には現れない空気力が作用するが、数値シミュレーションではこれらの状況も再現することが可能になる。このため、単に風洞試験の代替えとしての機能を果たすのみならず、より走行安定性に優れた車体形状を開発できる可能性も秘めている。第5図は走行中の自動車が突然横風を受けた場合の車体床下の空気の流れをシミュレーションにより再現した例である。このようなシミュレーションを用いて、車両が突然横風を受けた場合の車体まわりの時々刻々の流れの変化やそれに伴う横力やダウンフォースの変化が予測できるようになり、より走行安定性に優れた自動車の設計に貢献することが期待されている。



第5図 突然横風を受けた自動車の床下の空気の流れ

(時速 100 km[秒速 27 m]で走行していた自動車が突然、進行方向右から[図では下から]秒速 10 mの横風を受けた場合の車両床下の流速分布を示す。タイヤまわりの色が濃い部分で流速が遅くなっている。一方、床下で色が濃くなっている2本の筋状の部分で流速が速くなっている。)

(3) 最適設計の実現

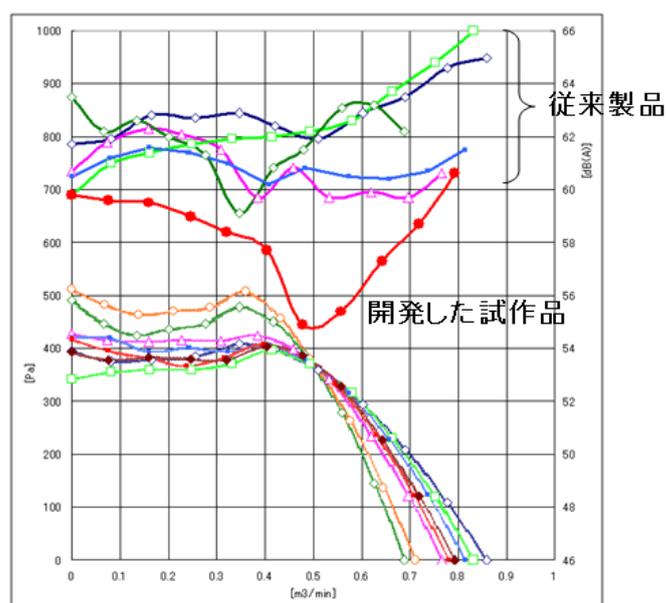
所定の機能を実現するための方式や材料などが決定された後、性能や信頼性、重さ、大きさ、コストなど多数の評価項目を考慮して種々の設計パラメータを決定するプロセスである詳細設計を行う。スーパーコンピュータを活用したシミュレーションにより、詳細設計の変革も期待されている。従来から種々の設計パラメータを決定するために数値シミュレーションが用いられていた。しかし、多くのパラメータを最適化するためには膨大な数のシミュレーションを実行する必要があるため、これに要する計算時間がボトルネックになり、数値シミュレーションを用いた本格的な最適化は実用化されていなかった。しかしながら、スーパーコンピュータは数万個以上のCPUから構成されているため、多数のCPUを用いて多数のケースを同時に計算することができる。このため、スーパーコンピュータを駆使した最適設計の実現にも大きな期待が集まっている。

数値シミュレーションを駆使した最適化により、PC クラスタなどの計算機サーバー用冷却ファンから発生する騒音を大幅に低減した例を第6図に示す。CPU などの発熱量は

年々増大しており、この熱を除去するためのファンの回転数も増大している。流れから発生する騒音の大きさは理論的には流速の6乗に比例して大きくなるため、回転数の増大に伴い騒音も急激に増大する。したがって、冷却ファンの低騒音化は重要な技術課題となっているが、従来手法によるファンの低騒音化は限界に達していた。

ファンの形状は数十個のパラメータの組み合わせにより決定されるが、従来の計算機的能力ではこのような多数のパラメータの組み合わせのそれぞれに対して性能や騒音を数値シミュレーションにより予測し、その中から最適なパラメータの組み合わせを探索することは不可能であった。しかし、スーパーコンピュータを利用すれば数百ケースのパラメータスタディを数時間で実施することができるため、数値シミュレーションによる最適化が可能となる。このケースでは6 dB以上の騒音低減が達成された。

さらに、以上述べてきた概念設計、詳細設計、試作評価の全ての設計・開発プロセスに統一的なデータベースに基づいたシミュレーションを活用することにより、これらの各プロセスをオーバーラップさせながら同時並行的に進行させることが可能になる。これにより設計・開発に要する期間とコストの大幅な削減も期待されている。



第6図 数値シミュレーションによるファンの騒音低減例 [18]

(グラフの横軸は風量を表し、縦軸は圧力(左軸)と騒音値(右軸)を表す。同一の風量・圧力で比較した場合、開発したファンは従来製品と比較して6dB以上騒音が低減している。)

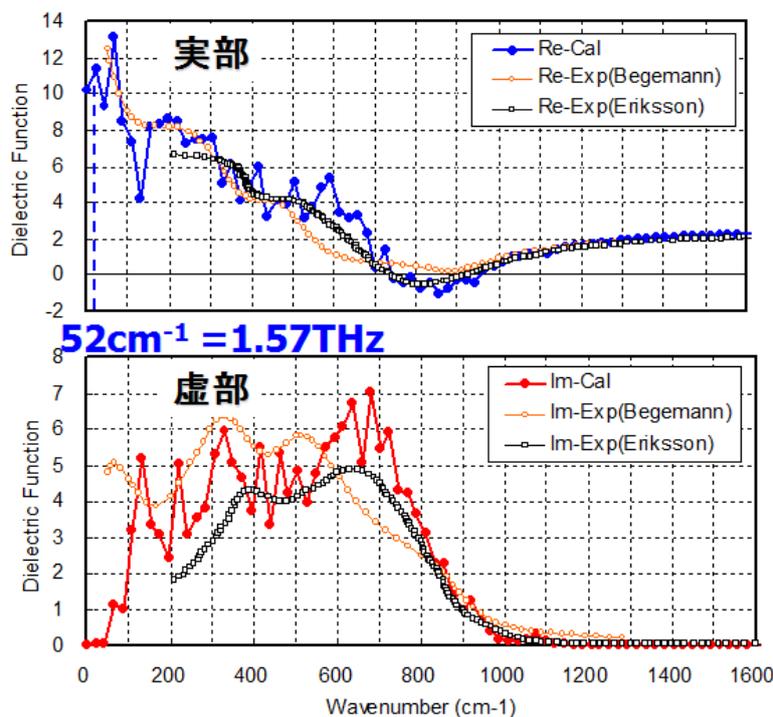
(4) 新材料・新物質の創成

① 材料科学分野

流体設計や構造設計だけではなく、材料の探査や新規材料の開発に関してもスーパーコンピュータを利用したシミュレーションに対して大きな期待が集まっている。特に、ナノ物質・ナノ構造は今後のものづくりにさまざまな技術革新をもたらす可能性

を秘めており重要な研究分野であるが、物質のスケールが小さくなると連続体としての材料特性の評価だけでは不十分であり、電子状態まで考慮して材料の特性や機能を評価する必要がある。しかし、ナノスケール構造の特性やナノデバイスの機能を実験的に正確に評価することは困難である。このため、材料の電子状態に基づき機能や特性を評価することができる、量子力学（第一原理計算）に立脚したナノシミュレーションには新材料の探査・開発ツールとして大きな期待が寄せられている。

たとえば、大規模な第一原理計算⁸を利用して、次世代半導体用ゲート絶縁膜の候補材料の誘電率を解析した結果を第7図に示す。現在実用化されている最新の半導体のゲート長は40nm程度であるが、20nm程度のゲート長を有した半導体が研究開発されている。デバイス構造が小さくなると、トンネル効果によるリーク電流が無視できなくなり、消費電力や発熱量が増大してしまう。そこで、高誘電率を持ったゲート絶縁膜（High-k ゲート膜）の開発が重要な課題となっている。このシミュレーションは、High-k ゲート膜の候補材料の一つであるアモルファス構造のアルミナ(Al_2O_3)の誘電率を第一原理計算により予測し、実測値と比較したものであるが、このような計算により誘電率が定量的に予測できることが明らかとなった。このように第一原理計算は次世代材料の探索に実際に利用され始めており、「京」の登場を契機にさらに大きな発展が期待されている分野の一つである。



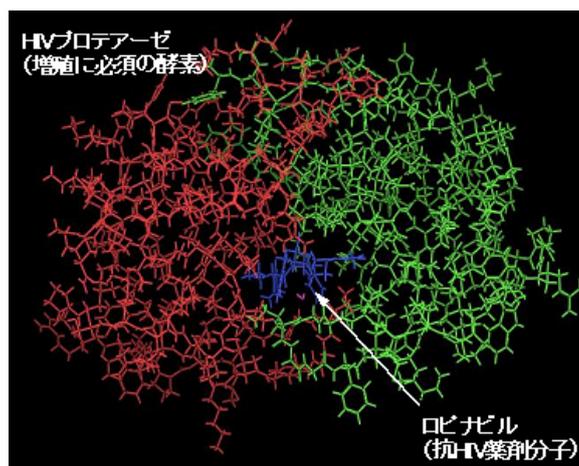
第7図 第一原理計算によるアモルファス Al_2O_3 の誘電率の予測結果[19, 20]
 (誘電率の実部[上図]は絶縁性を表し、虚部[下図]は損失を表す。また、図中のシンボルの説明は

⁸ ここでは、物質の電気的エネルギーが最少になるという原理から電子状態を求める密度汎関数法 (Density Functional Theory, DFT) のことを意味する。

一番上が第一原理計算の結果であり、真ん中および下はそれぞれ出展が異なる実験値を表す。)

② 生命科学分野

生命科学分野、特に、薬の開発に関しても、今後のシミュレーションの貢献に対して大きな期待が集まっている。たとえば、タンパク質の量子化学計算は創薬設計に本質的な変革をもたらす可能性を秘めている。タンパク質は数十から数十万のアミノ酸残基から構成された巨大分子であり、その機能の解析には古典力学的な手法や重要な部分のみを量子力学的に解析し、残りの部分は古典力学により解析する手法 (QM/MM 法) がこれまでは主として用いられていた。しかしながら、巨大分子であるタンパク質をモノマーやダイマーとよばれるアミノ酸残基1つあるいは2つからなるフラグメントに分割し、全てのフラグメントの組み合わせに対して軌道計算をすることにより、タンパク質分子全体の軌道を一度に扱うことなく、数 kcal/mol という高精度でエネルギー計算が可能な FMO 法 (Fragment Molecular Orbital Method) とよばれる手法が近年開発された。これにより、数百残基からなるタンパク質と薬の候補となる低分子化合物の結合性を数分というオーダーで予測できるようになっている (第8図参照)。



第8図 HIV ウイルスと医薬品候補化合物の量子化学計算[21]

(5) 安心・安全社会の実現

スーパーコンピュータの活用は安全・安心社会の実現にも貢献することが期待されている。たとえば、平成23年3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震はマグニチュード9.0という、ビルや施設的设计上の想定をはるかに超える強さであり、地震および津波により東北地方を中心に極めて甚大な被害をもたらした。同地域沿岸に立地する4か所の原子力発電所(東京電力・福島第一原子力発電所、同第二原子力発電所、東北電力・女川原子力発電所、日本原子力発電・東海第二原子力発電所)も大きな影響を受け、地震発生当時稼働中であった11機全ての原子炉は制御棒が挿入され緊急停止された。その中でも、福島第一原子力発電所の6機の原子炉の内4機において冷却機能が喪失し、

深刻な状況に陥った。特に、タービン建屋から極めて高い放射性物質が検出されたが、この発生経路なども直ぐには解明されず、これが冷却機能の回復の上で大きな障害となった。我が国の原子力発電所は地震力と津波に関する国の指針と設計基準に基づき耐震設計や原子炉の運転が行われているが、施設設計上の想定をはるかに超えるような巨大地震の発生により、上述したような深刻な事態に陥ってしまった。

このような状況に対して、スーパーコンピューティングは原子力発電施設の安全性の向上に寄与することも期待されている。たとえば、津波による波高の高精度な予測が可能となる。また、地殻および地盤中の地震波動の伝播、コンクリート建屋の振動応答、格納容器や原子炉容器などの振動応答、燃料棒とまわりの冷却材の流体構造連成振動などのマルチスケール・マルチフィジックス現象が予測可能になれば、設計上想定した地震波の入力に対して、建屋や各機器・各部位の安全裕度がどの程度であるのか、正確に評価することが可能となる。スーパーコンピューティングは安全・安心社会の構築に対して今後、ますます大きな役割を果たすことが期待されている。

6 スーパーコンピュータの産業利用において解決すべき問題

前章では、21世紀においてはものづくりのさまざまな分野でスーパーコンピューティングの大きな貢献が期待されていることを、具体例とともに示した。しかし、今後、我が国のスーパーコンピューティングをさらに発展させ、このような期待に応えていく上では幾つかの問題点もある。また、我が国がこの分野で国際的なリーダーシップを発揮するための長期的ビジョンも、国、大学等研究機関、および産業界の関係者の間で共有されている状況ではない。そこで、本報告では中・長期的な視点からさまざま問題点を具体的に議論するとともに、その解決策を検討した結果に関して述べる。

(1) 三位一体の開発の重要性

第3章で述べたとおり、欧米諸国や中国はスーパーコンピューティングを今後も発展を続け、21世紀における基礎科学の発展と産業競争力の強化に欠かすことができない技術と位置付けており、長期的な展望の下、国の主導でその開発が進められている。このような状況の中、国際的な産業競争力の維持・強化のためには、我が国がスーパーコンピューティング技術全般において国際的なリーダーシップを発揮していくことが重要である。

特に、計算機のピーク性能は年々急速に向上しているが、実際のアプリケーション・ソフトウェアで計算機の性能を発揮することは逆に難しくなりつつあり、今後とも、この傾向はさらに強まることが予想されている。この理由は計算機の演算コア数が増大していることと、CPUの性能向上と比較した場合にメモリーからCPUへのデータ転送能力が相対的に低下しているからである。すなわち、2005年以降CPUやメモリーの動作周波数はほとんど速くなっておらず⁹、計算機の性能向上は専ら演算コア数の増大によりもたらされている。たとえば、「京」は64万個以上の演算コアを搭載する予定であり、アプリケーション・ソフトウェアはこれらの演算コアを同時並列的に動作させることができないと計算機の性能を発揮させることはできない。また、CPUの性能向上と比較した場合、メモリーからCPUへデータを転送する能力は相対的に年々低下しており、アプリケーション・ソフトウェアとしては極力メモリーへのアクセス回数を抑えて、かつ、一端メモリーからCPUに転送したデータを何回も効率的に利用するような工夫が必要となる。したがって、これからのスーパーコンピューティング技術の開発においては計算機ハードウェアのこのような特性を十分に考慮しながらアプリケーション・ソフトウェアの開発を進める必要があり、このためには、ハードウェアの開発者、ソフトウェアの開発者、およびソフトウェアの利用者が三位一体となって開発を進めないと、スーパーコンピューティングの能力を発揮し、科学・技術においてブレークスルーを引き出すことがますます困難になりつつある。

中国が計算機ハードウェアの開発では追い上げてきているものの、スーパーコンピュ

⁹ もし、CPUやメモリーの動作周波数が速くなっていればアプリケーション・ソフトウェアは手を加えなくとも周波数の向上分、計算速度が速くなることが期待される。

ータ用のプロセッサ（CPU など）を開発できる独自技術を持っているのは日本と米国のみであり、その優位性を活かして、アプリケーション・ソフトウェア、スーパーコンピューティングの利用技術と三位一体で、スーパーコンピューティングの技術開発を行えば、長期的に我が国がこの分野でリーダーシップを発揮することが可能になると思われる。

(2) 基盤的アプリケーション・ソフトウェアの研究開発とその普及施策

スーパーコンピュータの能力を最大限に利用するためには優れたアプリケーション・ソフトウェアの開発が必須であるが、現実にはアプリケーション・ソフトウェアの開発には立ち遅れが目立ち、特に、産業界で利用できる先端的アプリケーション・ソフトウェアは少ない。さらに、現在の CPU アーキテクチャを用いたスーパーコンピュータの性能向上には限界があり、次々世代のスーパーコンピュータの CPU はいわゆるアクセラレータを具備したものになるか、あるいは数百以上の演算コアを内蔵するメニーコア・システムとなることが予想されている。何れの場合においても、次々世代のスーパーコンピュータの性能を発揮するためには、CPU 間の並列計算の実現に加えて、CPU 内の多数のコアを同時に稼働させたり、アクセラレータを有効に使ったりすることが必須となる。また、前述のように、メモリーから演算コアにデータを供給する能力は CPU の性能向上ほどは向上しておらず、相対的にはこの能力は年々低下してきており、今後ともこの傾向は続くものと予想されている。このような状況の中、実効性能が上がるアプリケーション・ソフトウェアを開発することはますます困難な状況となりつつある。

産業競争力の強化に資するような基盤的アプリケーション・ソフトウェアがなければスーパーコンピュータだけを開発しても産業競争力の強化には繋がらない。このような状況の中で、一つの大学研究室、一民間企業やソフトウェア・ハウスで基盤的なアプリケーション・ソフトウェアを開発することはもはや不可能となっている。その理由としては、アプリケーション・ソフトウェアがこれからのスーパーコンピュータ上で高い実効性能（計算速度）を達成するためには、計算機ハードウェアやコンパイラーなどのシステム・ソフトウェアの特性に関する高度に専門的な知識が必要となることに加えて、設計現場でも利用可能なシステムとするためには、単に、流体解析プログラムや構造解析プログラムだけでは十分ではなく、計算格子などの入力データ作成用の前処理プログラムや計算結果から設計者に有用な情報を提供するための後処理プログラムの開発も必須となり、大規模なシステム開発が必要となるからである。したがって、今後とも国の主導の下、スーパーコンピューティングの利用により計算科学の飛躍的な発展が見込まれ、産業競争力の強化に繋がることが期待される分野を特定し、その分野における基盤的なアプリケーション・ソフトウェアの開発を戦略的に推進すべきである。また、このようなアプリケーション・ソフトウェアの開発はソフトウェア開発に従事する研究者や技術者だけでは不可能であるため、スーパーコンピュータの開発の初期の段階からハードウェアの開発者と協業して実施すべきである。

基盤的アプリケーション・ソフトウェアに関してはその維持・管理も重要な課題とな

る。最終的には開発した基盤的アプリケーション・ソフトウェアが産業利用上のデファクト・スタンダードとなり、その受益者である民間企業の資金で維持・管理・改良などが実施されるようになるべきものである。しかしながら、開発したアプリケーション・ソフトウェアが業界標準となるまでには研究開発が終了してから少なくとも数年の年月を要する。したがって、国は開発したソフトウェアをデファクト・スタンダードとして定着させる方策も視野に入れてプロジェクトを推進すべきである。

さらに、アプリケーション・ソフトウェア開発の裾野を広げるための努力も必要である。このためには、スーパーコンピューティングを推進する全国的拠点において、さまざまなアプリケーション・ソフトウェアの開発に活用される、大規模行列計算ライブラリや可視化ソフトウェアなどの共通基盤的ソフトウェアの研究開発を推進するとともに、高度な最適化やチューニングを支援する人員を確保することも重要である。また、ハードウェアに関する知識を持たない大学等の研究者でも大規模な並列アプリケーション・ソフトウェアが比較的容易に開発できるようにするために、自動並列化を支援したり、支配方程式や数値的な離散化手法など記述するだけで自動的に最適なプログラムを生成したりするミドルウェアの開発にも注力すべきである。

(3) 設計におけるスーパーコンピューティングの利用の促進

ものづくり分野においては、基盤的なアプリケーション・ソフトウェアの開発は必須であるが、それだけでは製品設計に生かすことはできない。高度な計算科学シミュレーションをものづくり設計に生かすためには、設計データを用いて迅速に計算を実行することを可能にする前処理プロセスや、計算結果を効率的に設計にフィードバックするための後処理プロセス、さらに、設計の最適化を支援する機能などを有した、次世代のCAEシステムを構築する必要がある。たとえば、流体の数値解析を例にとれば、数年後には数百億点の計算格子を用いた直接計算が実用的なレベルで可能になることが予想されるが、ユーザーが大規模な計算格子を意識しなくとも解析が実行できるようなシステムがないと設計では使い物にはならない。このようなシステムは従来のプリ・ポスト処理の延長では実現することは不可能であり、ユーザーが接するプリの情報にCADデータ、あるいは比較的小規模な計算格子であり、また、ポストの情報は高度に集約された流れ場の情報とすべきであり、この間の全ての処理は超並列計算により実現することが重要である。つまり、流れ解析システムのパラダイムシフトが必要となる。また、材料定数などのデータベースを完備したり、大規模解析の実行例などが再利用できるようにしたりすることにより、設計システムとしてのユーザーの使い勝手を向上させることがきわめて重要となる。

前述のように国の指導で戦略的に開発する基盤的なアプリケーション・ソフトウェアをベースとして、これからの設計システムを構築していくことが望ましい。このためにはそれぞれの専門工学分野に関連した学協会が主体となり、産学官が連携したコンソーシアム・プロジェクトを立ち上げ、このような設計システムの開発と利用を推進すべきである。

(4) テストベッド環境の構築と産業上の成功事例の創出

基盤的なアプリケーション・ソフトウェアやそれをベースとして開発された設計システムを産業界が活用するようになるためには、スーパーコンピューティングを活用した、産業上の成功事例が数多く創出されることが必須である。このような成功事例が創出されればされるほど、これまでスーパーコンピューティングを利用していなかった企業もそれを利用するようになり、我が国のスーパーコンピューティング技術が全体として進展することが期待される。

しかしながら、前述のようにほとんどの企業が高々数 CPU を用いた数値シミュレーションしか活用していない現状を鑑みると、産業上の成功事例の創出も戦略的に推進する必要がある。国や国が主導するプロジェクトにおいて、民間企業が製品開発の前段階でスーパーコンピュータの利用効果を検証することが可能なテストベッド環境を構築し、産業界におけるスーパーコンピューティングの利用を推進すべきである。

(5) ものづくり分野におけるスーパーコンピューティングの長期ビジョンの策定

2018 年頃に実現されるものと予想されているエクサ・スケールのスーパーコンピュータ¹⁰を利用すれば、現在のペタ・スケールのスーパーコンピュータで実行可能な計算のさらに二桁上の超大規模計算が可能になるものと外挿される。しかしながら、本章の第 1 節、第 2 節でも述べたとおり、アプリケーション・ソフトウェアはこれからの計算機ハードウェアの特性を十分に考慮して開発されたものでなければ高い実効性能を発揮することはできない。現在用いられている計算アルゴリズムを抜本的に見直す必要性が生じる場合もある。また、超大規模データを効率的にとり扱うために、現在とは全く異なったアプローチの解析手法の研究開発も必要になることが予想される。さらに、解析の大規模化・高精度化に伴い解析結果に含まれる情報も質的に変化していくため、これらの情報を有効に活用できる、新たな物理モデルの構築も重要な課題となる。

スーパーコンピューティングの産業利用という観点では、どのようなアプリケーション・ソフトウェアの開発が新たに必要となり、そのためには、要素技術としてどのようなブレークスルーが必須となるかを明確にし、要素技術の研究開発、ソフトウェアの開発・検証、設計現場における有効性の実証までの一連の研究開発を戦略的・効率的に推進するための具体的な計画を早期に策定することが重要となる。しかしながら、産業界と大学等の教育・研究機関との間でこのような認識が共有されているとは言い難い。したがって、学協会においては、10 年後のものづくり分野におけるスーパーコンピュータの利用のあるべき姿に関して、産業界と学术界が議論できる場を提供し、将来ビジョンの共有とそのための課題の抽出、課題の解決のためのマイルストーンの設置を推進すべきである。

¹⁰ エクサ・スケールのスーパーコンピュータとはエクサ・フロップス、すなわち、1 秒間に 10^{18} 乗回の浮動小数点演算を実行可能なスーパーコンピュータを意味する。

7 まとめ

以上述べてきた議論の纏めとして、ものづくり分野においてスーパーコンピューティングの利活用を推進し、それにより我が国の産業競争力を飛躍的に強化するために、関係機関に対して以下の提案を行う。

【国に対する提案】

- (1) 現在進めている「京」の開発に留まることなく、今後も引き続いて、スーパーコンピュータの開発プロジェクトを牽引することが重要である。その理由としては、以下の3点が挙げられる。
 - ① スーパーコンピュータによる計算科学シミュレーションは基礎科学の発展や産業競争力の強化など、我が国の科学・技術を牽引する極めて高度な基盤技術であり、国家基幹技術として位置づけられること。
 - ② ハードウェア単独の技術開発によりスーパーコンピューティング技術を発展させることは不可能であり、ミドルウェア、アプリケーション・ソフトウェア、および利用技術の開発と一体となって技術開発を進める必要がある。このような開発をハードウェア・メーカーだけで進めることには限界があり、国のリーダーシップの下に戦略的に進めることが有効であること。
 - ③ スーパーコンピュータの開発は半導体、高速光通信、大容量記憶装置、大規模データ処理技術など、民生産業に転用可能な多くの技術要素を包含しており、我が国のIT産業の競争力強化に対する大きな派生効果が期待できること。
- (2) 現在国が検討を進めている、ハイパフォーマンス・コンピューティングインフラ(HPCI)の構築・整備に関する議論に関して、スーパーコンピューティングの産業利用を促進するための具体的な方策の検討も重要であると考えられる。特に、民間企業がスーパーコンピュータを利用した効果を検証できるテストベッド環境の構築・整備が有効であると思われる。また、セキュリティの確保や知的財産権の帰属、成果の公表、課金制度等に関して、HPCIの産業利用が早期に進展するような具体策を検討し、実施することが重要であると思われる。
- (3) 上記のHPCIの構築・整備にあたっては、将来的には、世界有数のスーパーコンピュータを保持する主要な計算機センターを国内に数ヶ所設置し、そのようなセンターは、単に超高速・大容量の計算機リソースを提供するのみではなく、大規模行列計算ライブラリーの研究開発、大規模データの可視化処理技術の開発など、スーパーコンピューティングを推進する上で必須となる共通基盤技術の研究開発の中核的拠点としても機能するようにすることが有効であると考えられる。また、その研究成果を産業利用にも展開することが効果的である。

- (4) 超高速計算による計算科学シミュレーションの産業利用を促進するためには、その基盤となるアプリケーション・ソフトウェアの開発が必須である。スーパーコンピューティングの利用効果が大きいと考えられる分野を特定し、今後も継続して、当該分野における実用的な基盤ソフトウェアの研究開発を推進することが重要である。
- (5) 上記の基盤ソフトウェアの研究開発の推進において、開発したソフトウェアが産業界のデファクト・スタンダードになり、最終的にはその受益者である民間の資金により、ソフトウェアの維持、管理、および改良が継続的に行われるようになるような長期的なビジョンの下に、戦略的な開発を牽引していくことが重要である。

【学協会に対する提案】

- (6) 2018年頃に達成されると予想されている次々世代のスーパーコンピュータの産業利用に関しては、超大規模データの取扱いや数値計算アルゴリズムの抜本的見直し、ソフトウェア開発環境の変革、新たな物理モデルの構築など、さまざまなブレークスルーが要求される。学協会においては、10年後のものづくり分野におけるスーパーコンピュータの利用のあるべき姿に関して、産業界と学术界が議論できる場を提供し、将来ビジョンの共有とその実現のための課題の抽出、課題の解決のためのマイルストーンの設置を目指すべきである。

【大学等教育・研究機関に対する提案】

- (7) ものづくり分野においてスーパーコンピューティングの利用を推進するためには、ミドルウェアや基盤的アプリケーション・ソフトウェアを開発できる人材や基盤的アプリケーション・ソフトウェアをカスタマイズして、設計システムに実装したりすることができる能力を有した人材、さらに、そのような設計システムを駆使して、製品開発上のブレークスルーを実現することができる人材の育成が必須である。我が国においてはこのような能力を有する人材が圧倒的に不足しているものと思われる。上記(6)で検討された具体的な課題やマイルストーンを考慮し、このような人材育成のためのカリキュラムを開発し、早期に実践に移すべきである。

【産業界に対する提案】

- (8) スーパーコンピューティングの産業利用を推進するための最も重要な要素の一つは、このような大規模かつ超高速計算を利用した産業上の成功事例の創出である。産業界が上記のようなシミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクトの推進や学協会における議論に積極的に参画し、多くの成功事例が早期に創出されることを期待する。また、産業界はこのようなソフトウェアが産業利用上のデファクト・スタンダードになり、研究開発終了後は民間の資金によりソフトウェアの維持・改良・発展がなされるように支援すべきである。

<参考文献>

- [1] スーパーコンピュータの性能ランキング. <http://www.top500.org/project>
- [2] 第3期科学技術基本計画. <http://www8.cao.go.jp/cstp/kihonkeikaku/kihon3.html>
- [3] 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2006 資料集 (2006-9) .
- [4] ニューヨークだより、(独) 情報処理推進機構発行、2010年2月号.
- [5] HPCI 計画推進委員会.
http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/020/index.htm
- [6] 次世代スーパーコンピュータ戦略委員会.
http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/016/index.htm
- [7] 第1回戦略プログラム5分野合同ワークショップ資料集 (2011年1月).
- [8] 地球シミュレータ開発史、(独) 海洋研究開発機構、2011年.
- [9] 欧州 PRACE プロジェクト <http://www.prace-project.eu/>
- [10] “HPC Case Study: Council Showcases Power of High Performance Computing at AII.” ,
米国競争力協議会 (Council on Competitiveness, CoC)、2011年4月.
- [11] 「平成21年度先端シミュレーション技術による機械構造設計の精度向上に関する調査
研究報告書」、社団法人 日本機械工業連合会、2010年3月.
- [12] 文部科学省 IT プログラム第1回「戦略的基盤ソフトウェアの開発」シンポジウム 講
演集、2002年12月.
- [13] 文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発 第1回「革新的シミュレーションソ
フトウェアの研究開発」シンポジウム 講演集、2006年7月.
- [14] 文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発 第1回「イノベーション基盤シミュ
レーションソフトウェアの研究開発」シンポジウム 講演集、2009年7月.
- [15] 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト.
<http://www.csrp.riken.jp/index.html>
- [16] 次世代ナノ体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト.
<http://ccinfo.ims.ac.jp/nanogc/>
- [17] 平成20年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム成果報告書、2009年.
- [18] 特願 2010-278343 【二重反転式軸流送風機】、2010年.
- [19] 濱田智之、他、「第一原理計算による誘電応答解析ソフトウェアの開発」、極薄シリコ
ン酸化膜の形成・評価・信頼性 (第9回研究会) 75、応用物理学会、2004年.
- [20] Momida, H., et al., 2006, “Theoretical study on dielectric response of
amorphous alumina”, *Physical Review B*, **73**, 054108.
- [21] Mochizuki, Y., et al., 2005, “Configuration interaction singles method with
multilayer fragment molecular orbital scheme”, *Chemical Physics Letters* **406**,
pp. 283-288.

<参考資料> 審議経過

1. 計算科学シミュレーションと工学設計分科会審議経過

平成 21 年

4 月 15 日 第 1 回分科会

○主査等選出、各小委員会の審議テーマを審議

11 月 18 日 第 2 回分科会

○各小委員会の審議の状況等を確認

平成 22 年

3 月 25 日 第 3 回分科会

○各小委員会の中間報告を審議、シンポジウムを開催し意見徴収

7 月 13 日 第 4 回分科会

○分科会としての報告・提言等の纏め方を審議

11 月 10 日 第 5 回分科会

○報告書の提案を審議

2. ものづくり分野におけるスーパーコンピューティング技術の推進検討小委員会審議経過

平成 21 年

9 月 7 日 第 1 回小委員会

○委員長など選出、今後の議論の進め方に関する審議

10 月 28 日 第 2 回小委員会

○小委員会名を変更、議論のポイントを整理、成果の纏め方等を審議

12 月 25 日 第 3 回小委員会

○スーパーコンピューティングの将来ビジョンと課題を審議

平成 22 年

3 月 11 日 第 4 回小委員会

○スーパーコンピューティングの将来ビジョンと課題を継続審議