

調査・検討課題に対する議論の整理(案)

1. 国内外の動向

【調査・検討課題】

○国内外における計算科学技術に係る状況、利用や技術の動向はどのようになっているか

【ポイント】

(1)スーパーコンピュータの活用が、科学技術面・経済面で国の将来に影響を及ぼすという認識が定着し、国際的にスーパーコンピュータの導入・開発がこれまで以上に積極的に進められているのではないか。

- 導入のグローバル化(TOP500リストは2011年6月の28ヶ国から2012年6月の30ヶ国、1ペタFLOPS以上のマシンは、4カ国から7カ国へ)
- 自主開発の拡大(中国ではプロセッサまで自主開発、フランス Bull 社はフランス原子力庁に TERA-100 を納入、ロシアでは T-Platforms 社がモスクワ州立大学に Lomonosov を納入、インドでも SAGA-220 を開発、など)
- 米国や欧州などのエクサスケールを目指した動き(米国:政府として DOE を中心にエクサフロップスをサポート、欧州: EESI([European Exascale Software Initiative](#))から EESI2 への移行と FP7([The Seventh Framework Programme](#))による MontBlanc、DEEP、CRESTA の3つのプロジェクト)
- 米国や韓国では、国家的投資によるスーパーコンピューティングの強化を図るため HPC 法を制定(米国: High Performance Computing Act、韓国: National Supercomputing Promotion Act)

(2)国内においては、「京」の整備や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)の構築が進み、また、国内の総計算資源は本年6月に完成する「京」も含め、20ペタ FLOPS 超と推測されるなど、計算環境の整備が世界上位の水準に戻りつつあるは進んできているのではないか。(※今後のニーズについて、調査の結果等を踏まえ追加)

(文部科学省関係機関の総計算資源)

- 国公立大学合計 6,272 テラ FLOPS(平成 23 年 5 月現在、うち基盤

センター(計 5,590 テラ FLOPS)は平成 24 年 5 月現在)

- 大学共同利用機関法人、及び文部科学省関係の独法等 3,007 テラ FLOPS(平成 24 年 5 月現在)

※平成 24 年 7 月以降「京」(11.28 ペタ FLOPS)が追加

(文部科学省以外の機関)

- 2012 年 6 月の TOP500 においては、上記機関の他、研究機関として 1,701 テラ FLOPS、民間 1,659 テラ FLOPS、合計 3,360 テラ FLOPS

(国産マシンについて)

- 2012 年 6 月の TOP500 においては、国内設置の 22,090 テラ FLOPS のうち国産マシンは 16,527 テラ FLOPS(「京」を含む)

(3)また、2. で述べるように、幅広い科学技術の分野でスーパーコンピュータは研究の発展に不可欠なものになってきているとともに、産業界でもスーパーコンピュータの利用が普及しつつあり、今後、その重要性は高まっていくのではないか。

(4)一方で、「京」及び HPCI で画期的な成果を創出し、その社会への還元が求められるとともに、今後の計算科学技術の推進にあたって、いくつかの課題が明らかになっており、これらの課題に適切に取り組んでいくことが必要ではないか。

- 消費電力等の制約条件の中で各 HPCI システムの性能向上
- システムの超並列化に対応した耐故障性の向上、システムソフトウェアやアプリケーションの開発等

(5)また、スーパーコンピュータを巡る技術面・利用面で新しい動きが出てきており、これらの動きにも適切に対応していくことが必要ではないか。

(技術面)

- コンピュータ関係企業を中心プレーヤの変化 (IBM、Cray、SGI のようなシステムベンダから、Intel、NVIDIA、ARM などのプロセッサベンダのチップベンダへの変化)
- スピン・アウトからスピン・インへ (大型計算機の技術をコモディティに活かすスピン・アウトから、市場の大きなコモディティの技術をスパコンの技術に活用するスピン・インへの流れ)
- 研究開発のグローバル化 (欧州におけるエクサスケールに向けた国

際連携。IESP([International Exa-scale Software Project](#))による米国、欧州、日本、中国の国際連携。ハードウェア、システムソフトウェアの共同開発への期待。)

- 新しいシステム開発におけるハードウェアの研究者とアプリケーションの研究者の共同 (Co-design) の重要性の高まり
- [国内資本による半導体製造については、最先端プロセスでの量産がほぼ不可能な状況であり、プロセスと一体となった設計についても極めて困難になりつつある。半導体製造の海外への委託増加](#)

(利用面)

- 大規模で多種多様なデータの効率的な処理・分析など、いわゆるビッグデータへの対応
- ストレージとHPCIを組み合わせたビジネスの台頭 (Google や Amazon、Microsoft など)
- 自然科学以外の分野での利用 (経済、金融などでのシミュレーションの利用)
- PRACE など、複数のスーパーコンピュータを1つの基盤として運用 (欧州各国で共同利用可能なハイエンドシステム (Tier-0) の充実など)

(6) 国内のスーパーコンピュータ関係企業については、エクサスケールに向けて CPU も含め技術開発を継続する企業、高実行効率や高電力効率など使いやすさを追求する企業など、それぞれ今後の展開の方向性が異なりつつあるのではないか。

2. 計算科学技術の利用状況、今後の必要性

【調査・検討課題】

○ 科学技術分野で計算科学技術がどのように利用されてきているか。また今後の必要性はどうか。

【ポイント】

(1) 工学や科学が目指すもの、その中で計算科学がどのように貢献するのかを考えることも必要ではないか。

- 理論、実験に次ぐ「第 3 の科学」、[予測の科学](#)としての計算科学技術 ([計算科学とはなにか](#))

- 第4期科学技術基本計画における国家存立の基盤や、科学技術の共通基盤としての計算科学技術
- 細分化されてきた基礎科学の分野、階層などを統合、融合できる可能性
- [○ 演繹的なものだけでなく、帰納的な利用による科学技術への貢献](#)
- [○ 政策立案への貢献という視点も必要](#)

(2) 科学技術の分野では、実験だけではわからない、もしくは実験できないような部分を理論計算で補うことという側面もあり、例えば極限環境の研究が可能になるなど、計算科学的な手法は不可欠なものとなっているのではないか。

- 物質科学、地震・津波、気象・気候、素粒子・宇宙、[生命科学](#)、医療・創薬分野におけるシミュレーションの利用
- 物質科学において、実験の補完、新しい物質設計を目指すには、より信頼性の高い方法論で計算する必要があり、膨大な計算量が必要
- 地震津波被害の減災のためにはシミュレーション研究が必要不可欠であり、より精緻な計算をするためには膨大な計算量が必要
- 研究開発における、単一モデルによるシミュレーションサイズの拡大の方向性と、複数のモデルを用いたアンサンブル計算の2つの方向性

(3) ゲノムデータ処理に代表されるように、シミュレーションだけではなく、データ処理にスパコンが利用される側面も増えてきているのではないか。

- シークエンサの発展による膨大なゲノムデータの取得(次世代シークエンサにより、ゲノムが安価に高速に得られるようになってきた)

(4) 一方、シミュレーションの解像度をあげることにより、計算で用いるモデルを新たに検討する必要もあり、単純に解像度をあげるだけではうまくいかない場合もあるのではないか。

- パラメタリゼーションと第一原理計算のバランス、新たな物理法則のモデル化
- 地震シミュレーションにおける高精度な地殻情報の入手など、解像度に応じた観測データの必要性

(5) 社会的ニーズに応える実際のシステムを考えた場合には、長期的視点に

立ったシステムの整備計画と、観測データの取得からデータ入力、プリ・ポスト処理を含めた全体のシステム構築が必要になっているのではないか。

- システムを更新してもすぐには性能を引き出すプログラムはできないため、長期的な視点に立ったシステム整備が必要
- 高精細な地震・津波シミュレーションに必要な詳細な地形データ、建築物等のデータセットの整備が必要
- 地震・津波のサブリアルタイム処理や、避難シミュレーションのためのリアルタイム観測データの入力
- 予測結果の評価と、社会への発信方法についても検討が必要
- 「知のフロンティアとしての科学」と「社会への出口」は異なる視点での議論が必要

(6)これまでの議論はスパコンを使っている人を想定しているが、実際にはスパコンを使ったことのない分野や研究者・技術者も多いのではないか。そのような分野にもスパコンの利用を進め、成果を創出できるようにしていく必要があるのではないか。

- 利用環境の整備(簡単な手続きで使えるマシンや、ジョブ待ちでプログラムがなかなか実行されないなど)
- サポート体制、窓口の整備など

【調査・検討課題】

○自然科学以外の分野における利用の状況と今後の見通しはどうか。

【ポイント】

(1)自然科学以外の分野においても、計算機が必要とされる場面があり、その利用は進んできているのではないか。

- 人間集団の科学的研究や、経済現象を研究するときにはスパコンが用いられている
- インフルエンザの拡大予測や有効な介入政策立案のためには、シミュレーションが必要であり、スパコンによる計算が必要となる(122万人のパンデミックシミュレータなど)
- 金融市場のデータ、スーパーやコンビニの小売データなどは膨大であり、それを蓄積し解析するためには大きなリソースが必要となる

○ ビッグデータである小売りデータの解析をとおして、需要予測シミュレーション技術が求められている。また、ブログ上のデータを用いることにより1日ごとの景気判断ができる可能性があるが、このためには「京」を上回るスパコンが必要になると思われる

(2) 社会への出口と近いものも多く、自然科学分野で求められるスペックとは異なるものがあるのではないか。

○ 金融市場のアプリケーションでは、ミリ秒オーダーでの取引に対応するためのリアルタイム性と、精度のよいリスク推定などの要求から大規模計算の両面が求められる

【調査・検討課題】

○ 計算科学技術の産業利用の状況や、今後の必要性はどうか。

【ポイント】

(1) 産業界の利用は、より現実に近い状態での解析や、ものづくりにおける製品の設計など、大規模計算へのニーズはまだまだあるのではないか。

(2) 一方、大規模、高度解析を活用できる企業はまだ少なく、実際のものづくりではシミュレーションが十分普及しているとはいえ、その裾野をひろげていく必要があるのではないか。

○ 解析技術、製品開発に結びつける知識の必要性(課題に対する適切な計算モデルの構築と解析結果の解釈、結果から得られた知見による改善や創造)

○ シミュレーションができる人材の育成、技術やノウハウの継承

○ 使い勝手のよいソフトウェアの必要性(大学のソフトウェアでは、インタフェースにまで注力して開発することは難しい場合がある)

(3) 産業界におけるスパコン利用の実情としては、維持費、コストなどによりトップマシンの100分の1から1000分の1規模のスパコンを利用するのが主流となっているなど、大学・研究機関と産業界ではスパコンのあり方が異なっているのではないか。

○ パラメータサーベイなど(高精度で時間のかかる計算より、多くのパタ

ーンで計算したい場合がある)

- 大学の研究とは異なり、企業では既存の商用ソフトウェア開発が目的ではないためを利用することが多いため、利用したいソフトウェアがシステムにのるかどうかが問題
- 長期の製品開発は共用のシステムを利用する場合もあるが、すぐに製品化に結びつくようなシミュレーションは、セキュリティ上社内のマシンで行うことになる

(4) 業種によりスパコンの利用状況やスパコンに対する要求が異なるので、利用パターンに沿った議論が必要ではないか。

- 業種による違いとともに、ユーザ企業とベンダ企業でも考え方が異なる(ユーザは安くて速ければベンダにはこだわらない場合がある、また中小の企業ではハードもソフトも人材もない)
- 業種により、製品の企画段階から製品化までの時間が異なる(例えば材料分野や製薬などは製品化に時間を要する)
- 同じ企業でも、研究開発部門で必要とされる用途と、ものづくりの現場とで求めるものが異なる

3. 将来の我が国における計算科学技術システムのあり方

【今後の調査・検討課題】

- リーディングマシンの必要性についてどう考えるか。
- 汎用システム・専用システムを含め、どのようなシステムを整備・運用すべきか。
- スパコンの運用に関し、大学基盤センター、附置研、独法の役割はどうあるべきか。
- 必要な計算資源はどの程度か。また、どのような能力のスパコンをどのように配置すべきか。

(1)リーディングマシンについて

【議論のポイント】

- リーディングマシンの定義をどう考えるか。
- リーディングマシンの必要性についてどう考えるか。

(参考)

次世代スーパーコンピュータプロジェクトを立ち上げた際には、情報科学技術委員会計算科学技術推進 WG において議論を行い、数値風洞、CP-PACS 及び地球シミュレータのような、我が国における最高性能計算機であり、スーパーコンピュータ開発をリードする最高水準の汎用システムをナショナル・リーダーシップ・システム(NLS)として位置づけ、NLS を長期ロードマップに従い戦略的に開発する旨提言されている。

【主な意見】

- リーディングマシンについては、サイエンスの課題解決や、計算科学技術全体の底上げにつながることで、技術の蓄積が図れること等から必要ではないか。
- Linpack の性能だけでなく、計算機科学として新しいものがないとリーディングマシンにはならないのではないか。
- ユーザにとっては、待ち時間が長いリーディングマシンよりは、多少能力が低くても、比較的自由に使えるマシンの方が研究を進める上では役に立つ。

(2) システムのあり方

【議論のポイント】

- 汎用システムと専用システムについて整理すると、①アーキテクチャとしての専用システム、②アーキテクチャは汎用でも特定の研究目的で運用するシステム、③アーキテクチャも汎用で運用も特定目的を持たず幅広い利用を行うシステム、という3つでいいか。
- それぞれのシステムをスパコンの配置のあり方にどう反映させていくべきか。
- その他スパコンのシステムに関し、留意すべき事項はないか。

【主な意見】

- ユーザ層の広がりや将来的な技術の展開等を考えると、トップマシンや基盤センターはやはり汎用システムであることが必要ではないか。
- 専用システムは開発費も低く、分野によっては非常に有効なので、二者択一ではなく役割分担も含め、両方を視野に入れて開発を進めるべきではないか。
- 汎用システムか、専用システムかというより、何をターゲットにしたシステムを整備するのが重要と考える。
- ユーザから見れば、自分のアプリが速く動き、また、利用環境も整備されており、成果が出せるのであれば、どのようなシステムでもいい。

(3) 基盤センター等の役割

【議論のポイント】

- 大学基盤センターに関して、電力やスペースの制限から運用するスパコンが小粒になっている等という意見もあるが、基盤センターの役割、今後のあり方をどう考えるか。
- 附置研はその分野での幅広い利用であり、独法はミッションオリエンテッドな利用という考えでいいか。

【主な意見】

- 電力やスペースの制限から大学基盤センターに入るスパコンが小粒になってきており、そうした状況変化等を踏まえて、基盤センターの役割やあり方、機能強化について検討するべき。

- 大学は教育機関として基盤的なシステムは持つておくべき。また、基盤センターは新しいユーザの開拓や人材育成などに力を入れるべき。
- 分野内の評価が低くても、新しい芽としてやるべき研究も行えるよう、料金を払えば誰でもスーパーコンピュータが使えるという仕組みは残しておくべきと考える。
- 附置研はその分野での幅広い利用を支え、独法はミッションオリエンテッドな利用が中心となるのではないか。

(4) 配置のあり方

【議論のポイント】

- 演算性能やシステム構成を含め、地理的な配置のバランスをどう考えるか。
 - ・ 例えば、世界最高水準のスパコンを2台、もしくはそれ以上地理的なバランスを考慮して配置し、その次以降のレベルのスパコンを全国的にバランスよく配置するという考え方はどうか。
 - ・ 一つの種類のシステムだけではなく、いくつかの特長のあるシステムをバランスよく配置すべきではないか。
- 一方で、ネットワークを活用することにより、スパコンそのものの設置場所にこだわる必要はないのではないかという考え方もあるが、それについてどう考えるか。
- ある程度スパコンを集約してはどうかとの意見もあるが、それぞれの機関がそれぞれの目的でシステムを整備している中で、どう考えるか。
- その他スパコンの配置に関して留意すべき事項として、以下のような点をどう考えるか
 - ・ 最先端と基盤のバランスを取るべきではないか。
 - ・ スパコンは最先端研究を行うための装置として位置づけ、成果創出という観点からその配置を検討すべきではないか。

※計算資源の需要については現在調査中

【主な意見】

- スパコンを基盤という見方だけではなく、最先端の研究のための装置として、成果創出という観点からその配置等を検討すべき。
- 1台だけ突出した性能のマシンがあり、それを6、7年ごとに更新ということでは使いにくく、そうしたマシンが複数台、地理的にもバランスよく配置

され、全体で見れば数年で更新されていくという体制が望ましい。

- 最先端と基盤のバランスが大切であり、基盤は基盤として使えるスパコンが必要。
- 日本全体で見ると多くのスパコンがある。各基盤センターで役割分担をした上で、そこを核にある程度集約することも考えられるのではないか。
- 現在はネットワーク全体がコンピュータ的になっており、ネットワークに分散化したような次世代マシンという考え方もあるのではないか。

4. 計算科学技術に係る研究開発の方向性

【調査・検討課題】

- 今後の計算科学技術に係る研究開発をどのように進めていくべきか。
- ハードウェア、システムソフトウェアについて、どのような要素技術に我が国として重点を置くべきか。
- 今後のアプリケーション開発のあり方についてはどう考えるか。
- 計算科学技術に関する国際協力をどのようにしていくべきか。

5. 利用のあり方(利用環境、産業利用促進等)

【調査・検討課題】

- スパコンの利用を促進し、成果の創出を図るために、運営や利用環境のあり方はどうあるべきか。
- 自然科学以外の分野におけるスパコンの利用をどのように進めていくか。
- 産業利用の促進を図るために必要なことはどのようなことか。

6. その他

【調査・検討課題】

- 将来を見据え、計算科学技術に関する人材育成をどのようにしていくべきか。
- 国民への広報や情報発信といったアウトリーチ活動をどのようにしていくべきか。