

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する
検討ワーキンググループ最終報告書(案)

HPCI 計画推進委員会

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ

目次

はじめに.....	1
第1章 計算科学技術を巡る状況.....	3
1. 計算科学技術の意義.....	3
2. 国際的な状況.....	4
3. 国内の状況.....	6
4. 利用技術の動向.....	13
5. システム技術の動向.....	24
6. 今後の方向性.....	28
第2章 我が国における計算科学技術インフラの在り方.....	30
1. 総論.....	30
2. リーディングマシンの必要性.....	31
3. 各機関のシステムの位置付け・役割.....	32
4. 開発・整備の戦略的・継続的推進.....	35
第3章 研究開発の方向性.....	39
1. 研究開発の進め方.....	39
2. リーディングマシンの研究開発.....	39
3. アプリケーション開発の在り方.....	45
4. 計算科学技術に関する国際協力.....	48
第4章 利用の在り方, 人材育成等.....	50
1. 利用の在り方.....	50
2. 人材育成.....	56
3. その他.....	60
参考資料.....	62
用語集.....	71

はじめに

スーパーコンピュータによるシミュレーションは、理論、実験と並ぶ科学技術における第3の手法として、我が国の国際競争力を強化し、国民生活の安全・安心を確保していくために不可欠な基盤となっている。

こうしたことから、文部科学省においては、従来より計算科学技術を積極的に振興してきている。平成18年度に、スーパーコンピュータ「京」の開発を開始するとともに、「京」を中核として、多様なユーザーニーズに応える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）の構築とその活用による成果創出、社会への還元に向けた取組を推進してきている。

一方、スーパーコンピュータの性能は非常に速いスピードで進展しており、計算科学技術を巡る国内外の状況は常に変化している。既に「京」の計算能力を上回るスーパーコンピュータが米国及び中国において開発整備されるとともに、米国、欧州等においては2020年頃に「京」の100倍の計算能力を持つエクサスケールコンピューティングの実現に向けた研究開発が進められている。また、従来我が国と米国のみが開発をしていたプロセッサについて、最近では中国においても自主開発を行うようになってきている。さらに、米国においてはINCITE、欧州においてはPRACEなど、複数のスーパーコンピュータを一つの研究基盤として研究者が効果的・効率的に利用するための枠組みが整備されてきている。

このように、国際的にスーパーコンピュータの整備・利用が大きく進んでいる中で、我が国が激しい国際競争を勝ち抜いていくためには、HPCIを構成するシステムを戦略的に高度化し、世界最高水準の計算環境の実現とその活用により新たなイノベーションを創出していくことが重要となっている。

このような状況を踏まえ、今後10年程度を見据えた我が国のHPCI計画の推進の在り方について新たな戦略を調査検討するため、文部科学省研究振興局では、平成24年2月にHPCI計画推進委員会のもとに「今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」（以下「ワーキンググループ」という。）を設置し調査検討を開始した。以降、本ワーキンググループでは 2518 回にわたり議論を積み重ねてきたところである。

また、この政策的な調査検討に加え、文部科学省においては、5年から10年後におけるHPC技術等の技術的知見の獲得を目的として、平成24年度から「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」を開始し、この調査研究の内容についても適時・適切にワーキンググループの調査検討に反映してきた。

本ワーキンググループでは、まず、スーパーコンピュータ利用の必要性、意義、重要性について産業界を含む有識者からのヒアリングや、HPC 技術の動向に関する有識者からのヒアリングなどを行い、~~「今後の調査・検討課題」を平成 24 年 5 月にとりまとめ、引き続き、その調査・検討課題にしたがって議論を進めてきた。この議論の中で、委員の共通認識が得られたものや引き続き検討を行う必要があるものを整理し、平成 25 年 3 月に論点整理をとりとまとめた。~~

~~その後、検討項目とされた事項のうち、早急に方向性を示す必要がある「我が国における計算科学技術インフラの在り方」や「研究開発の方向性」について重点的に議論を進め、平成 25 年 6 月に今般中間報告書としてとりまとめを行った。~~

~~その後、残された検討課題であった利用環境や産業利用促進等の利用の在り方、人材育成などに加えて、今後の計算科学技術インフラの戦略的開発・整備についても本ワーキンググループで更に調査検討を進め、今般最終報告書としてとりまとめを行った。~~

~~今後、残された検討課題である利用環境や産業利用促進等の利用の在り方、人材育成などについても本ワーキンググループで更に調査検討を進め、平成 25 年度末を目途に最終的な報告書をとりとまとめる予定である。~~

第1章 計算科学技術を巡る状況

1. 計算科学技術の意義

計算科学技術は、計算科学（コンピュータを活用して科学技術上の問題を解決する学問）及びこれに係る計算機科学（情報処理に関する基礎理論とそのコンピュータ上への実装に関する学問）、並びにそれらに関連する科学技術である。中でもスーパーコンピュータを用いたシミュレーションは、理論、実験に並ぶ科学技術の第3の手法として、科学技術の様々な分野において不可欠な研究開発基盤となってきた。

例えば、シミュレーションにより、気象・気候や地震・津波といった自然現象のように実際には実験できないような現象、高温・高圧・高速・微少スケールといった極限環境での現象、生命現象のような様々な要素が関わる複雑な現象、星や銀河の形成といった実時間では再現できない現象などを計算機上に再現することにより、その現象を支配する理論を理解したり、未来や未知の状況を予測したりすることができる。最先端の科学研究では、こうした現象を取り扱うことが多くなっており、シミュレーションの活用により、新たな知の発見や創出が期待されている。

また、最近の計算機の能力の進展に伴い、様々な物質における原子や分子の挙動、電子の状態などを量子力学などの基本的な法則(第一原理)をベースにシミュレーションすることが可能となりつつある。これにより新しい材料の性質や薬候補物質の効果などを詳細に予測する、いわゆる「予測の科学」が現実のものとなってきており、その活用により新たなイノベーションの創出などが期待されている。

さらに、最近ではものづくりの現場において試作・試験・評価のプロセスをシミュレーションで代替することにより、効果的・効率的に新しい製品の開発を進めることとなり、また、地震や津波による被害をあらかじめシミュレーションを用いて予測することにより、国及び地方自治体等において効果的な防災・減災対策を講じることができるようになっている。

加えて、ビッグデータのような膨大なデータの処理・解析やデータ同化などについても、様々な分野の共通基盤技術として計算科学技術の重要な分野となってきた。

このように、スーパーコンピュータを利用したシミュレーションを中心とした計算科学技術は、科学技術の振興のみならず、産業競争力の強化や安

全・安心な国作りの観点からも重要な手法となっており、今後更にその重要性は高まっていくと考えられる。特に、これからの社会的・科学的課題はますます複雑化していくと考えられ、その解決は極めて広い範囲の科学技術を総合的に活用していくことが必要になってくる。スーパーコンピュータは様々な分野や産学官の間を横串的に結びつけ、統合させていくことのできるツールでもあり、こうした観点からも計算科学技術は今後ますます重要になっていくと考えられる。

2. 国際的な状況

このように計算科学技術の重要性が増加している中で、国際的にもスーパーコンピュータの開発・利用が積極的に進められている。2013年 ~~116~~月のTOP500スーパーコンピュータランキングでは、1位から500位までのスーパーコンピュータの総計算能力(ピーク値)は ~~364.56325.78~~ペタ FLOPSで、この10年間で毎年約1.9倍になっている。また、高性能のスーパーコンピュータを整備する国も増えており、2013年 ~~116~~月の同ランキングでは ~~2827~~か国のスーパーコンピュータがエントリされており、このうち1ペタ FLOPS以上のスーパーコンピュータが2011年11月時点では4か国10システムであったものが、~~20122013~~年 ~~116~~月時点では7か国 ~~2326~~システム、~~2013~~年11月時点では8か国 ~~31~~システムに拡大している。

【米国の状況】

各国の状況を見てみると、米国においては1991年に策定されたHPC法(High Performance Computing Act)のもと国家的投資により計画的にスーパーコンピュータの開発利用が進められ、世界のスーパーコンピュータの総計算能力の約半分をコンスタントに米国のシステムが占めるようになっていく。

また、米国は世界トップのシステムを数多く開発してきている。2012年にLLNL(Lawrence Livermore National Laboratory)のSequoia(20ペタ FLOPS)、ORNL(Oak Ridge National Laboratory)のTitan(27ペタ FLOPS)など、20ペタ FLOPSを超えるスーパーコンピュータを世界に先駆けて開発・利用するとともに、2016年から2017年までに100ペタ ~~フロップス~~ FLOPS 超級コンピュータをORNL、ANL(Argonne National Laboratory)、LLNLに導入する

ことを計画している。また、米国エネルギー省（DOE）をが中心となり、IBM, Intel, NVIDIA 等の主要なスーパーコンピュータベンダを巻き込んだエクサフロップスシステムので、2020年過ぎのエクサフロップスシステムの整備を目指して研究開発を進めていることに加え、を進めている。2013年12月には開発計画を策定することを定めた法律が成立するなど、2020年過ぎのエクサフロップスシステムの整備を目指した取組を実施している。

さらに、最先端のスーパーコンピュータを幅広い研究者が利用するための枠組みとして、INCITE(Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment)が実施されており、Titan, Mira (10 ペタ FLOPS) 等の計算資源を地球気候変動, 生命科学, 新物質探求, 代替エネルギーなどの課題に配分している。

【欧州の状況】

欧州でも着実にスーパーコンピュータの整備・利用が進められており、世界のスーパーコンピュータの総計算能力に対する割合では日本を超える20%前後を常に確保している。特に2008年には、欧州各国のスーパーコンピュータを欧州全体の計算基盤として利用する PRACE(Partnership for Advanced Computing in Europe)を開始し、その枠組みの中で複数のペタフロップス級のスーパーコンピュータについても整備を行っている。

また、2020年頃のエクサスケールコンピューティング実現を目指し、FP7 (The Seventh Framework Programme) による Mont-Blanc, DEEP, CRESTA の三つのプロジェクトを開始しており、ハードウェアとソフトウェアの研究開発を実施している。

さらに、FP7 に続く HORIZON 2020 (2014~2020, the EU framework programme for research and innovation) では HPC 関連予算を倍増し、取組を強化することとされている。

【中国ほか各国の状況】

中国は近年急激にスーパーコンピュータの整備・利用を進めており、2013年6月には世界のスーパーコンピュータ総計算能力の20%程度を占めるとともに、2013年6月及び2013年11月のTOP500では天河2 (54.9 ペタ FLOPS) が1位となっている。また、プロセッサの自主開発も進めており、既に申威1600 (Shenwei) や龍芯 (Loongson) などのプロセッサが開発されている。

中国の国家科学技術重大プロジェクト（第 12 次，第 13 次 5 か年計画：2011 年から 2020 年）では，HPC 関連に重点的な投資をし，2015 年までに 100 ペタ フロップス FLOPS 級コンピュータを開発，2020 年にはエクサスケールの実現に向けて計画的に研究開発を推進することが発表されている。

さらに，ロシアやインドにおいてもスーパーコンピュータの自主開発を含め，その整備・利用が積極的に進められている。また，韓国では HPC 法（National Supercomputing Promotion Act）を制定し，超高性能コンピュータを国家レベルで重点育成するための中長期計画（第 1 次国家最高性能コンピュータ育成基本計画）を策定している。

【その他の動向】

このように各国がスーパーコンピュータの整備・利用を強化している中で，国際協力の動きも拡大している。先に述べたように，欧州ではこれまで各国が個別にスーパーコンピュータの整備・利用を行っていたが，各国の協力により欧州全体の計算基盤として整備・利用を行う PRACE プロジェクトを開始している。また，2009 年から 2012 年に実施された日米欧中の研究者による IESP(International Exascale Software Project)において，エクサスケールコンピューティングの実現に向けた課題の抽出とロードマップの作成が行われた。

3. 国内の状況

我が国としても，計算科学技術の重要性や海外のスーパーコンピュータ整備・利用の動向を踏まえ，計算科学技術の振興を積極的に図ってきている。平成 23 年に策定された第 4 期科学技術基本計画においても，世界最高水準のハイパフォーマンス コンピューティング 技術を国家安全保障・基幹技術と位置づけ，国として強力に推進していくこととされているとともに，シミュレーションを含む高度情報通信技術を科学技術の共通基盤として位置づけ，その研究開発を推進していくこととされている。

文部科学省では，平成 18 年度から「京」の開発・整備と，「京」を中核として国内の大学等の計算機やストレージを高速ネットワークで結び，多様なユーザーニーズに応える HPCI の構築とその利用促進を図ってきた。「京」は平成 23 年 11 月に世界に先駆けて Linpack10 ペタ FLOPS を達成するとともに，

計算速度のみならず優れた実行効率、信頼性等を有し、我が国の技術力を世界に発信したところである。既に、「京」及び HPCI は平成 24 年 9 月末に運用を開始し、多くの研究者の利用が進んでいるところである。

この HPCI の構築により、世界最高水準のスーパーコンピュータやその他の計算資源を、ユーザがそれぞれの多様なニーズに応じて容易に利用できる環境が整備されたことは、スーパーコンピュータの利用の促進、さらには成果の創出という観点から大きな意義を有しており、引き続きその維持・強化をしていくことが重要である。また、様々な研究分野にまたがる計算機ユーザの意見を取りまとめ、HPCI の構築・運用を、ユーザニーズをもとに先導していくために、計算科学技術に関わるすべての者に開かれた計算コミュニティ代表組織として HPCI コンソーシアムが設立されたことは大きな意味を持つものであり、我が国の計算科学技術の発展に向けて、今後とも活発な活動が期待される。

【国内の総計算能力の推移】

こうした中で、我が国の総計算能力は着実に増加しており、平成 24 年 10 月時点では 20 ペタ FLOPS 超となっている。また、国内主要スーパーコンピュータの計算資源の使用量もコンスタントに増加しており、2001 年から 2012 年の間、毎年平均 1.8 倍の伸びとなっている。これまでの傾向として、システムの増強が行われるとそれに伴い使用量が急激に増加していることから、現在の計算能力は利用者のニーズを完全には満たしていないと考えられ、また、計算科学技術が今後ますます重要になってくるという状況を踏まえると、計算資源に対するニーズは引き続き増加していくものと考えられる。

一方、世界の総計算能力に対する我が国の計算能力を見ると、我が国の総計算能力の割合は「地球シミュレータ」や「京」などの大規模システムが整備されると一時的に上昇するものの、長期的な傾向としては緩やかに減少してきている。特に、近年は状況が改善しつつあるものの、大学情報基盤センターにおけるスーパーコンピュータの能力が世界に比較して相対的に低くなっていると考えられ、今後、我が国の計算科学技術インフラを全体としてどのように維持・発展させていくかが重要な課題と考えられる。

【国内のスーパーコンピュータシステム】

国内のシステムは大きく分類すると、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律（以下「共用法」という。）に基づく特定高速電子計算機施設

のシステム，全国共同利用・共同研究を進めている北海道大学，東北大学，筑波大学，東京大学，東京工業大学，名古屋大学，京都大学，大阪大学，九州大学の情報基盤センター等（以下「9 大学情報基盤センター等」という。）のシステム，附置研・大学共同利用機関法人の共同利用システム，独立行政法人のシステム等に分類される。これらの現状を表 1 にまとめている。

【「京」の開発による効果】

既に述べたように，我が国は平成 18 年度からスーパーコンピュータ「京」の開発・整備を進め，平成 24 年度にシステムが完成し，共用を開始したところである。

「京」は 10 ペタ FLOPS という高い演算性能のみならず，Linpack の計算において実行効率 93%，また全プロセッサフル稼働時の連続実行時間が 29 時間以上を達成し，高い実行効率や信頼性を誇っている。これにより世界のスーパーコンピュータランキングで 1 位を獲得したほか，より多角的な性能指標である HPC Award の 4 項目でも最高性能を達成するなどの成果をあげている。さらに，水冷システムや効率的なプロセッサにより，消費電力についても，汎用性の高いシステムとしては優れた性能（12.7MW）を達成している。

また，「京」はハードウェアの成果のみならず，利用研究の面でも戦略分野を中心に成果を上げつつある。平成 23 年にはシリコン・ナノワイヤの第一原理計算で，平成 24 年にはダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算で，2 年連続ゴードン・ベル賞を受けているほか，創薬，医療，ものづくりの分野においても，新たなアイデアに基づく新製品開発への貢献や開発コストの削減，開発期間の短縮などの成果や，地震・津波の被害予測などの成果が創出されつつあり，社会的課題解決やイノベーション創出による産業競争力強化への貢献も期待されている。

「京」の運用については，共用法に基づいて施設の運転を独立行政法人理化学研究所が，利用者選定・支援を登録施設利用促進機関（以下「登録機関」という。）である一般財団法人高度情報科学技術研究機構が互いに協力しながら行っており，産業界を含め幅広い分野の研究者・技術者による「京」の利用が行われている。

「京」を国内で開発したことの波及効果としては，高性能・低消費電力のプロセッサや，8 万個以上のプロセッサ間を相互に接続する超並列システムを高い信頼性のもと効率的に運用できる Tofu インターコネクト(6 次元メッシ

ユ／トラス結合)といった最先端の技術を獲得するとともに、獲得した技術、人材、ノウハウ等をスーパーコンピュータやサーバの新製品開発や、汎用半導体の設計・開発・製造に活用し、我が国の情報科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献している。また、こうした「京」の開発実績によるブランド力の向上を通して、外国における環境問題の解決への IT 活用など、スーパーコンピュータのみならず IT を活用した幅広いビジネスで、諸外国のプロジェクトに参画するなどの波及効果も生じている。

さらに、様々な分野の研究者が利用できる汎用性の高いシステムとして利用の枠組みを構築することにより、産業界も含めた様々な分野の計算科学の研究者が「京」の開発・利用に参画することができ、我が国全体の計算科学技術の底上げに大きく貢献している。

【スーパーコンピュータ開発の動向】

国内のスーパーコンピュータ関連企業を巡る状況も変化している。将来のスーパーコンピュータ開発に向けて、プロセッサも含めた技術開発を継続する企業がある一方で、PC クラスタのようなコモディティの技術をベースにしたシステムが普及するにつれて、プロセッサの開発は行わずコモディティベースのシステムを開発する企業があるなど、異なった方向性での展開になりつつあると考えられる。また、国内資本による半導体製造については、ファブライツ、ファブレス化が進展し、その結果最先端プロセスでの半導体の量産がほぼ不可能な状況であり、また、プロセスと一体となった設計能力の維持についても極めて困難になりつつある。

一方、国際的には、最先端のスーパーコンピュータの開発を加速することにより、社会の発展に不可欠なインフラとなる研究開発基盤を構築するため、各国によりスーパーコンピュータの自主開発が拡大してきている。社会的・科学的課題の解決と豊かで活力のある国づくりにおける今後の計算科学技術の重要性を踏まえると、我が国としても、「京」の開発により獲得した高性能なプロセッサやネットワーク、優れた省電力機構などの技術や、その開発を通じて蓄積された人材や経験を生かしながら、スーパーコンピュータの開発に必要な技術を適切に維持・発展させていくことが重要である。

表 1 国内システムの現状

	特定高速電子計算機施設のシステム (スーパーコンピュータ「京」)	全国共同利用・共同研究を進めている 9 大学 (注) 情報基盤センター等のシステム
位置付け	特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律（共用法）に基づき理化学研究所に設置	学校教育法及び同施行規則に基づき、全国共同利用を目的として大学に設置された施設に置かれるシステム
役割	産業界も含めた幅広い分野の研究者等に共用	学術利用を中心に幅広い分野の研究者に共同利用
能力	極めて高度な演算処理を行う能力を有する電子計算機(浮動小数点演算を每秒 10 ペタ回以上実行する能力) ※「京」の理論演算性能は 11.28PF, TOP500 (H25 年 <u>116</u> -月) において 4 位(10.5PF)	H25 年 <u>114</u> -月現在、全体で 23 システム、総理論演算性能： <u>11,456TF</u> 6,508TF (平均性能：約 <u>1,200TF</u> 700TF /センター)。各センターのシステムの総演算性能は 31.2TF ~ <u>5,787TF</u> 2,400TF TOP500 (H25 年 <u>116</u> -月) 内に <u>119</u> システム；東工大(<u>2,843TF</u> 1,500TF / <u>1,192TF</u>)、東大(1,043TF/ 102TF)、九大(<u>905TF</u> 460TF /167TF)、筑波大(422TF/ <u>277TF</u>)、 <u>名大</u> (<u>318TF</u>)、京大(252TF/135TF)、北大(122TF) <u>東工大 Tsubame-KFC が Green500, 1 位獲得</u>
運用	・ 共用法に基づき、理化学研究所が維持管理等、登録施設利用促進機関（登録機関）が中立・公正の立場から利用者選定・利用者支援を行う ・ 計算機資源の約 85%を共用に供し、うち約 50%分を <u>HPCI</u> 戦略プログラムが利用し、約 35%分を一般公募利用に割 <u>り</u> 当て	・ 各センターにおいて学内外の研究者等を対象に利用者の公募・選定を実施 ・ 資源の一部を HPCI に提供し、国の委託により高度情報科学技術研究機構が 9 大学共通の公募・課題選定を実施
その他		・ 研究開発機能として、新しく開発された技術を実践する場としての役割や、人材育成、学内の支援等の役割があることにも留意 ・ 7 大学と東工大の情報基盤センターは学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) として認定 ・ 筑波大は単独で共同利用・共同研究拠点として認定

(注) 北海道大学, 東北大学, 筑波大学, 東京大学, 東京工業大学, 名古屋大学, 京都大学, 大阪大学, 九州大学

表 1 国内システムの現状（続き）

附置研において 共同利用しているシステム	大学共同利用機関法人の システム	独立行政法人のシステム （「京」を除く）
学校教育法及び同施行規則に基づき、全国共同利用を目的として大学に設置された施設に置かれるシステム	国立大学法人法に基づき設置された大学共同利用機関に置かれるシステム	独立行政法人の設置目的の研究を実施するために設置
特定分野の研究者を対象に共同利用	特定分野の研究者を対象に共同利用	主として設置法人の研究者に計算資源を提供。ただし、機関の研究開発業務の遂行に支障がない範囲で外部にも提供している例がある
TOP500（H25年 116 -月）内に 23 システム ・ 東北大 金属材料研究所（244TF） ・ 東大 物性研究所（162TF） → 東大 医科学研究所（101TF）	TOP500（H25年 116 -月）内に 5システム ・ 高エネルギー加速器研究機構（ 518TF 537TF ×2システム） ・ 核融合科学研究所（253TF） → 国立天文台（420TF） ・ 核融合科学研究所（253TF） ・ 分子科学研究所（ 117TF 238TF ）	TOP500（H25年 116 -月）内に 24 システム ・ 日本原子力研究開発機構（191TF） ・ 海洋研究開発機構（地球シミュレータ: 122TF） → 宇宙航空研究開発機構（111TF） → 理化学研究所情報基盤センター（98TF）
・ 各機関において学内外の特定分野の研究者等を対象に利用者の公募・選定を実施	・ 各機関において機関内外の特定分野の研究者等を対象に利用者の公募・選定を実施	・ 主として設置機関の研究者に対し、所定の手続に沿って計算資源を提供 ・ 地球シミュレータは計算資源の30%を一般公募枠、30%を特定プロジェクト枠、40%を機構戦略枠としている

※上記の他、大学等に設置された様々なシステムがある（理論性能合計：国立大学 1204.12TF，公立大

学 141.44TF，私立大学 82.30TF（平成 24 年 5 月調べ）、~~TOP500（H25 年 6 月）内に 1 システム：~~
~~北陸先端科学技術大学院大学（105TF）~~

4. 利用技術の動向

(1) 自然科学分野

自然科学分野においては、研究推進のために従来からスーパーコンピュータの利用が盛んに行われており、物質科学、地震・津波、気象・気候、素粒子・宇宙、生命科学、医療・創薬といった様々な分野でシミュレーションが活用されてきている。

【HPCI 戦略プログラムなどの状況】

シミュレーションによる研究を高度化し、ペタスケールコンピューティングを実現するため、文部科学省においては「京」の開発・利用と並行して、ナノテクノロジー分野やライフサイエンス分野で「京」を利用する先導的なアプリケーション開発を行うグランドチャレンジアプリケーションの開発や、「京」を中核とする HPCI を最大限に活用し、画期的な成果の創出、人材の育成及び最先端のコンピューティング研究教育拠点の形成を目指した HPCI 戦略プログラムを推進してきている。

HPCI 戦略プログラムでは、社会的・科学的に大きなブレークスルーが期待できる分野として、「予測する生命科学・医療及び創薬基盤」（戦略分野 1）、「新物質・エネルギー創成」（戦略分野 2）、「防災・減災に資する地球変動予測」（戦略分野 3）、「次世代ものづくり」（戦略分野 4）、「物質と宇宙の起源と構造」（戦略分野 5）を選定し、グランドチャレンジなどで開発した最先端のアプリケーションソフトウェアを活用しつつ、戦略的な研究を推進している。

これら戦略分野における研究では、「京」の能力をフルに活用することにより、以下のようにこれまで困難であった世界初のシミュレーションを実現し、我が国発のイノベーション創出に貢献している。

- ・ 心臓の難病の一つである肥大型心筋症の病態をサルコメア・タンパク質という分子レベルの変異から、細胞、心臓の動きまでを計算して解析することに成功し、医療に貢献。
- ・ 数万原子からなるシリコン・ナノワイヤ中の電子状態をまるごと計算。これにより、ワイヤ中の電流分布の断面形状や結晶方位依存性を解明し、次世代半導体デバイスの性能向上に貢献（2011 年のゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞）。
- ・ 全球雲解像モデル（NICAM）を用いた熱帯季節内変動の延長予測実験に

において、現状は約 2 週間先が限界であったところを、約 1 か月先の有効な予測に成功。

- ・ 宇宙初期（約 137 億年前の宇宙誕生から約 200 万年後から 1 億年後まで）の数兆個に及ぶダークマター粒子の重力進化のシミュレーションにより、ダークマターの密度分布を計算。星や銀河の形成など、宇宙の構造形成過程に関する科学的成果の創出に貢献（2012 年のゴードン・ベル賞を受賞）。

また、産業応用という観点でも、以下のようなシミュレーションを実現している。項目（3）でも述べるように、産業界でのシミュレーションの活用も進んでおり、こうした研究開発の成果は、我が国の産業競争力の強化に貢献できるものと期待されている。

- ・ 創薬応用シミュレーションにおいては約 300 種類の新規化合物について、病気の原因となるタンパク質の働きを妨げる強さを高精度で計算。新薬の候補となる可能性の高い化合物をその中から見いだすことに成功し、「京」を利用することにより医薬品の開発期間を大幅に短縮。
- ・ ものづくりのシミュレーションでは、自動車、船舶、ターボ機械などについて、これまでになく精度でのシミュレーションを実施し、風洞実験の補完という段階から、風洞実験では解析できない現象をシミュレーションにより解析。

【シミュレーションにより解決が期待される社会的・科学的課題】

このように「京」の利用によりイノベーション創出に向けた成果が創出されつつある一方で、「京」の能力をもってしても解決困難な社会的・科学的な課題も多く残されており、具体的には、以下のような例が考えられる。

○創薬・医療分野の例

画期的な創薬・医療技術の創出のために、その基盤として分子から人体までの多階層にわたる生命現象の理解が不可欠である。しかしながら、生命現象は余りに多くの要素が絡む複雑な現象であり、疾病因子の解明といった医療への応用や新しい創薬、医療機器の開発のためには、細胞スケールを越えて、組織さらには人体に近い状況を再現した大規模な計算が必要となる。

例えば、より効果的で副作用の少ない最適な新薬開発のためには、標的

タンパク質(病気の原因物質)に対する薬候補化合物の結合強度の評価や、細胞環境内における化合物の作用等を解明する必要がある、「京」において、数百種類の化合物を対象とした標的タンパク質への高精度な結合シミュレーションによる新薬候補化合物の絞り込みの実現や、分子動力学シミュレーションによる細胞内環境でのタンパク質の安定性や機能ダイナミクスの解析が行われている。今後、SACLA(X線自由電子レーザー施設)を始めとする実験技術の進展により、これまで対象とすることができなかったタンパク質の立体構造解析が加速されることが期待されており、それに呼応して副作用の少ない画期的な新薬を世界に先駆けて開発するためには、より複雑な細胞環境下でのタンパク質の挙動の解析や、標的タンパク質並びに標的タンパク質以外のタンパク質と数万種類の化合物との相互作用を網羅的かつ短期間に調べるといった、細胞環境を考慮した複数のタンパク質と薬剤の関係を解明する必要がある、そのためには、「京」の100倍から1,000倍程度の性能が必要となる。

医療への実用化のためには、より具体的に病態の解明や治療法の改善を検討する必要がある、「京」では、心疾患や脳血管疾患を対象に、心筋細胞の集合体を均質化法により粗視化した心臓シミュレーションや、血栓生成シミュレーション等といった、分子、細胞レベルから、血管さらには臓器レベルまでの連成シミュレーションにより、生体に近い状態での病態予測を行うための研究を行っている。しかしながら、臨床現場への応用や適切な治療法に向けた検討のためには、様々な条件下、症例に対しての影響を評価する必要や、病理に関わる長時間にわたる血栓生成プロセスの解析が必要であり、例えば、心臓シミュレーションにおいて、現状、1拍動に1日程度かかる計算を10分程度で実行するためには「京」の150倍程度の性能が必要である。

また、ヒトゲノムのシーケンスのコストが激減し、米国・カナダなどを中心にして、個々人のゲノム情報や遺伝子発現情報等に基づく個別化医療の実施体制が急速に整備されつつあり、病院のスーパーコンピュータ及び大規模ストレージの利用が各所で進んでいる。一方、我が国の死因の第1位はがんであり、国民の二人に一人が人生の中でがんと直面する。そのがんの複雑さの理解の第一歩はゲノムシーケンス及び遺伝子発現情報解析であり、現状「京」では、遺伝子ネットワークを解析して、遺伝子のシステム異常を把握することで、がんの悪性度や治療応答性、副作用の出やすさ等を解明する手法の開発が行われている。一方、複雑ながんの病態

を理解し、臨床に応用するためには、臨床データの解析が不足しており、現在急速に発展を遂げている最先端のシーケンサから出力されるがんに関する膨大な量のビッグデータの解析が必要である。このためには、恒常的に現在の 1,000 倍程度のデータ量を解析する計算需要が想定される。様々ながんの病態の遺伝子ネットワークを網羅的に解析することにより、病気の予防や、効かない薬の使用や重篤な副作用の回避、不必要な治療法を避ける精度の高い医療が可能になり、個人にフィットした効果的な治療法戦略にもとづく個別化医療の潮流に乗ることができる。また、このようなビッグデータ解析においては、演算性能だけでなく、ストレージの容量やネットワーク速度、メモリ容量などのデータ関連の充実も必要である。

○総合防災分野の例

東日本大震災では、広い地域にわたる地震・津波の直接的な被害のほか、倒壊物や漂流物による被害の拡大など、広域複合災害が発生した。今後、このような大規模自然災害に対し適切に対応していくためには、想定される様々な地震発生シナリオについて、広域にわたり高精度な構造物と都市全体のシミュレーションにより被害予測を行い、それを踏まえて適切な防災・減災対策を講じていくことが重要である。

「京」においては、こうした高精度の被害予測を目指して、地震の発生、地震の伝播、都市全体の震動、構造物への被害、津波の発生、津波の伝播、津波の遡上といったそれぞれのパーツごとに高精度のシミュレーション手法を開発するとともに、一つの都市という限られた地域を対象に、それらのシミュレーションを統合し、高精度な被害予測手法を確立することを目指している。

一方で、被害の予測を更に精度良くするためには、例えば「京」では 5m 程度の解像度である津波の遡上の広域シミュレーションを、津波の遡上経路となる道路を適切に再現できる 2m 以下の解像度まで細かくするなど、さらなる高精度化を図るとともに、シミュレーション間のデータ交換に伴う精度の低下を防ぐため、全体を統合して地震の発生から広い地域にわたる被害の予測を一つのシミュレーションとして行うことが必要である。その上で、1,000 程度のシナリオについて計算し、想定される大小の地震・津波の災害データベースを構築することにより、それらのデータをもとに効果的な防災・減災対策に貢献することが可能となる。そのためには、一つのケースのシミュレーションの計算時間を数時間程度とする必要があ

る。また、この程度の短期間で統合的なシミュレーションができるようになれば、地震の発生の際に実際のデータをもとに再計算を行うことにより、被害状況の推定が行えるようになり、効率的・効果的な救援活動に貢献できるようになる。

全体を統合した詳細な広域シミュレーションを仮に「京」で計算したとすると数百時間以上かかることが見込まれ、それを数時間で行うようにするためには、「京」の100倍以上の性能が必要となる。

また、近年増加している集中豪雨や局地的大雨のような気象現象の高精度予測も大きな課題である。このため、「京」では1kmから2kmの解像度で積乱雲の大まかな表現を行い、積乱雲の発生やそれに伴う集中豪雨の発生メカニズムの解明と集中豪雨予測システムの開発を目指して研究開発を進めている。

しかしながら、実際に集中豪雨の精度良い予測を行うためには、積乱雲の内部構造を適切に表現する必要がある。また、最近大きな問題となっている竜巻などの予測をするためには、メソサイクロン（スーパーセルと呼ばれる発達した積乱雲において発生する小規模な低気圧性の循環構造）等の現象を初期値に取り入れてシミュレーションを行う必要がある。このためには100mオーダーの解像度が必要であり、「京」の100倍以上の性能が必要になる。

○クリーンエネルギー創出・環境問題解決分野の例

クリーンエネルギー創出、環境問題、資源問題の解決に向けて、自然エネルギーによる発電の高効率化、エネルギー貯蔵、省エネルギー、排熱の回収と再利用等を実現するため、高効率のエネルギー変換システムとエネルギー変換材料の開発が急務となっている。その開発のための基礎研究として計算科学的手法への期待が高まっており、高効率の太陽電池、希少金属元素を使わない強力永久磁石（発電機）、安価で高性能な燃料電池電極材料、安全性の高い大容量二次電池、光合成をモデルとした光エネルギー変換システム、省電力で高速動作する半導体デバイス、排熱を使って発電する熱電材料、優れた強度・じん性、耐熱性をもつ構造材料等、様々な材料特性の解明のために、電子状態理論に基づく大規模な計算機シミュレーションが使われ始めている。また、エネルギー利用がもたらす地球環境への影響をモニタリングし、近未来の予測を速やかに行うことも重要であり、二酸化炭素、窒素、炭素循環など、生態系を含めた地球システムモデルの

開発が求められている。同時に、理論化学、計算化学分野においても、地球環境問題の解決に向け、新しい触媒や環境浄化触媒、窒素や二酸化炭素固定化反応、メタン変換反応などに関する研究開発においてシミュレーションが不可欠となっている。

例えば、次世代デバイスの研究開発においては、有力な次世代デバイス候補であるシリコン・ナノワイヤにおける 10 万原子レベルの信頼性の高い静的な電子状態計算が「京」において初めて実現され、デバイス特性の解明に貢献している。今後、様々な新しいデバイス材料の動作特性や効率の予測、熱力学的な安定性の検証、新材料や新しいナノ構造の系統的探索を可能とするためには、異種材料界面特性の考慮や動作時の時間的变化等も考慮した“まるごと計算”を行う必要がある、そのシミュレーションにおいては、計算する原子数を 10 万原子から 100 万原子以上に、時間的变化を数ピコ秒から数ナノ秒のオーダーに増やす必要がある。

電池電極反応過程の解明においては、上記と同じシミュレーション技術を活用して、様々な仮定のもとに数千原子レベルでの時間発展シミュレーションが行われ、電極材料に対する電解質の影響を見ることができるようになってきている。今後、より複雑・大規模なエネルギー変換材料等の新規材料発見につなげるためには、仮定をおかずに実際の状態により忠実なモデルでの計算を行う必要がある、そのシミュレーションにおいては、計算する原子数を数千原子から数万原子以上に、時間的变化を数ナノ秒から数マイクロ秒のオーダーに増やす必要がある。

また、新規触媒による効率的な反応の開発や石油にかかわるメタンの分離、貯蔵、輸送、化学原料としての利用技術の確立にも数万原子の高精度量子化学計算と数百万原子のマイクロ秒オーダーの MD シミュレーションを融合させ、数百から数千の全反応経路の網羅的・総合的探索が不可欠である。

このように、空間スケールや時間スケール、パラメータサーチの枠を広げたシミュレーションを実現するためには、「京」の 100 倍から 1,000 倍程度の性能が必要となる。

さらに、高度な実験装置から得られるサイエンスビッグデータの解析とマルチスケール計算手法を連動させることで、材料開発の加速も期待される。

○ものづくり分野の例

我が国の今後のものづくりにおいては、強みである製品の品質性・高機能性に加え、国際的な価格競争に打ち勝つための低コスト化を実現していくことが課題となっている。そのため、その両方を可能とする効率的かつ効果的な製品開発手段として、スーパーコンピュータによる高精度なシミュレーションにより、ものづくりの過程における様々な試作試験を代替していくことが重要になっている。

例えば、「京」においては、空調機などの産業用ファンや自動車など空気の流れの渦スケールが大きな製品については、100 マイクロメートルの解析メッシュを用いた直接シミュレーションにより極めて高精度な空気の流れの予測が可能となっており、製品開発期間の短縮や低コスト化に貢献している。具体的には、スーパーコンピュータによる自動車の高精度の空力解析シミュレーションにより、風洞実験の置き換えや低燃費車体形状の解明が可能となっている。

一方、こうした空力解析シミュレーションは、航空機やタービンなど、空気の流れの渦スケールが小さい製品開発への貢献も期待されているが、20 マイクロメートルの解析メッシュでの直接シミュレーションが必要とされており、「京」の能力をもってしても解析が困難である。これは、「京」の100倍程度の性能のスーパーコンピュータを利用することにより、航空機（機体、エンジン等）やタービンをはじめとした工学的に重要なほぼ全ての製品の空気の流れの直接シミュレーションが可能となり、我が国の産業競争力の強化に著しく寄与するものと期待される。また、大量にエネルギーを消費する航空機においては、高性能で高効率な航空機エンジンの開発により、省エネルギーへの貢献も期待される。

さらに、社会的にニーズの高い自動車の衝突安全性の評価についてもシミュレーションによる試作試験の代替が進んでおり、車体自体のクラッシュ解析（衝突時圧力、変形、破損）が可能になっている。今後は乗員への影響（骨や内臓等の損傷）を含めた解析が求められており、このためには多数の人体モデルを車体に載せて、様々な条件下で衝突から車体変形、インパクト、人体損傷までをトータルにシミュレーションし、総合的に評価を行う必要がある。これらのシミュレーションを現実的な時間内で実施するには、「京」の100倍から200倍程度の性能が必要とされている。

○基礎科学分野の例

素粒子物理学においては、「京」を上回る計算能力のスーパーコンピュータを利用し、これまでは計算能力の制限から取り入れることが困難であったボトムクォークやトップクォーク、電弱相互作用の効果を取り入れた精密計算を実施することにより、スーパーKEKB（電子・陽電子衝突型加速器）や J-PARC（大強度陽子加速器施設）で行われる精密実験との比較が可能となり、新たな物理法則の発見、新理論の構築に貢献することが期待される。例えば、バリオン間相互作用の計算においては、メモリ容量の要求は少ないものの「京」の 250 倍程度の性能のスーパーコンピュータで計算しても約 8,000 時間の計算が必要になる。

物性物理学においては、エネルギー損失のない送電線や最先端医療機器に必要な高温超伝導材料、革新的な電子デバイスやエネルギー変換デバイスの材料として期待されるマルチフェロイック材料といった、いわゆる強相関量子多体系の新物性・新機能に関する基礎研究が、実験、理論、計算科学の協働により進められている。

例えば、「京」では 1,000 格子点規模のシミュレーションにより鉄系超伝導特性の物質依存性が明らかにされつつあるが、更に優れた新しい超伝導材料の設計指針を確立するためには、より高い精度での理論予測の検証や実験系との定量的な直接比較による新機能発現機構の解明が必要である。そのためのシミュレーションには、多軌道効果や格子歪効果を取り入れた数万格子点規模の計算が必要であり、「京」の 100 倍程度の性能が必要となる。

また、宇宙環境の理解においては、「京」では 11 年の太陽黒点周期の磁場変化を行っているが、今後は 100 年以上の太陽活動の長周期変化のメカニズムと巨大フレアの発生条件を明らかにし、地球環境に影響を及ぼす宇宙環境の変動予測に貢献することが期待される。地球の磁場変化のシミュレーションにおいては、「京」の 100 倍程度の性能があれば十分な精度で計算が可能となり、宇宙天気予報の実用が視野に入ると考えられる。

○社会科学分野との連携・融合

これらの様々な分野における成果を連携・融合させ、課題を社会現象や人間活動を含めたシステムとして理解し、持続的な社会、安全・安心な社会構築に貢献しイノベーション創出につなげていくことも今後の計算科学技術に求められている。例えば、「京」では地震・津波の被害予測に基

づく避難予測のシミュレーションに社会科学から推定される個々人の動きを取り込むことにより、災害発生時に避難がスムーズに行われるような都市計画、避難誘導の在り方等を明らかにし、人の動きを考慮に入れたより現実的な避難計画の策定への貢献を目指している。さらに、「京」の能力を超えるスーパーコンピュータを活用することにより、最近社会科学の分野で行われている人の動きや経済のシミュレーションなども取り込み、想定される被害に対する経済的な影響や防災・減災対策の経済評価、また実際に災害が発生した際の被害を受けた地域の効果的な復旧・復興対策を明らかにすることも可能になると期待されている。

このようなことを実現していくためには、それぞれの分野で研究開発を進めていくのはもちろんのこと、それに加えてビッグデータ処理技術、可視化技術、データ同化技術、知識処理といった共通基盤的な技術開発にも横断的に取り組むことが必要である。

また、スーパーコンピュータと SPring-8（大型放射光施設）、SACLA（X線自由電子レーザー施設）、J-PARC（大強度陽子加速器施設）など、我が国が誇る世界最高水準の大規模実験施設との連携により、それらの施設から得られる膨大な実験データの処理やシミュレーションと精密実験との比較等を可能とし、他国が追従できない画期的成果の創出を目指すことも重要である。

（2）社会科学分野

スーパーコンピュータの利用は自然科学分野が先行してきたが、最近では自然科学以外の分野においてもスーパーコンピュータが必要とされる場面が増えており、その利用が進んできている。例えば、社会科学分野では人間が織りなす様々な社会現象についても、その再現、理解、予測を目指して研究が進められており、金融市場、伝染病の流行、交通流の研究などがスーパーコンピュータを用いて進められている。

【金融、流通等での利用】

金融市場の分析では、為替市場について市場価格を統計学的に分析することにより、確率微分方程式によってモデル化し、様々な様相の変動を持つ現実の市場を的確に記述することが可能となっている。現在の為替市場はコン

コンピュータ端末による自動取引が中心となっており、そのシステムに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を行う大規模計算の両面が求められている。

一方、社会で発生する様々なデータを蓄積し、解析することも重要な社会科学の手法である。社会全体が電子化されたことにより、スーパーやコンビニの小売データの解析による需要予測シミュレーションや、ブログ上のデータを用いることにより 1 日ごとの景気判断を行うことも可能になりつつある。そのためには、膨大なデータを蓄積し解析できる大きなリソースが必要であり、このような分野でもスーパーコンピュータの利用が進みつつある。

【社会システムのシミュレーション】

SARS（重症急性呼吸器症候群）や鳥インフルエンザ等、伝染病の国境を越えた大規模な流行への拡大が懸念されており、国際的にも緊急かつ長期の取組が必要となっている。この伝染病の流行についても、伝染病流行の基礎モデルである SIR モデル（S：未感染の個体数，I：感染した個体数，R：回復した個体数の時間発展を表した常微分方程式系）を基本として、スーパーコンピュータによる解析により伝染病の拡大予測や有効な拡散防止策の政策立案へ貢献が可能となりつつある。複雑な社会構造，空間構造，環境の時空間変動や，病原体の形質の進化などの要因を取り入れた伝染病研究はまだ緒についたばかりであり，今後，より高性能なスーパーコンピュータの活用により更なる発展が期待される分野である。

また長期的には，社会現象をその構成要素のふるまいのモデルに基づいてシミュレーションする統計物理学的モデルが，次世代のブレークスルーとして期待されている。例えば，個々の人間を基本最小要素としてモデル化したエージェントに基づいて社会システムをシミュレートすることにより，社会の多様な課題に柔軟に対応できるシステムが実現し，イノベーション創出に貢献することが期待されている。ここでは，社会システム全体を客観的に議論し，また寸秒を争う意志決定及び実現する手段を構築することも可能になると期待されている。

このように，社会科学分野においては自然科学分野で求められるものとは異なるスペック，例えば，浮動小数点演算性能以外のリアルタイム性や膨大なデータを処理するためのビッグデータの処理技術などが必要となる可能性があり，このような点にも留意しつつ，今後の我が国の計算科学技術イン

フラの整備を進めていくことが必要である。

(3) 産業利用

産業界におけるスーパーコンピュータの利用は、まさにイノベーション創出に直結しており、自動車のまるごとシミュレーションのような、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や重要性は高まっているものと考えられる。

例えば、民間企業では航空機の設計にシミュレーションを用いることにより、YS-11 以来 2 機目となる国産旅客機の開発に成功し、他の同サイズの旅客機に比べ 20%の燃費改善と圧倒的低騒音の実現にも貢献している。また他の民間企業では、タイヤ用ゴム内部を分子・ナノレベルで忠実に再現し解析する大規模分子シミュレーションが行われており、得られる成果を活用し、高性能・高品質タイヤの新材料開発技術を更に進化させ、新商品の開発につなげていくこととしている。

そのほかにも、先に述べたような「京」の利用により、高効率な二次電池・太陽電池や優れた強度・じん性、耐熱性をもつ構造新材料の設計や、自動車・船舶・飛行機などの開発・設計における製品試作をシミュレーションで代替することにより、これまでの実験では解析が困難であった領域の研究が可能となり、新たなアイデアに基づく新製品開発への貢献や、開発コストの削減、開発期間の短縮が期待されている。

その一方、産業界でスーパーコンピュータの利用の実態もを進めていくためには、幾つかの課題も明らかになっている。大企業ではシミュレーションそのものは普及しているものの、実際のものづくりの現場で活用できる企業はまだ少なく、特に中小の企業では人材の育成、技術やノウハウの継承が求められているのが現状である。

また、産業界での利用は、その時代の世界トップの計算機の能力の 1/10 から 1/100 程度の能力に相当する計算資源を用いて実証研究が行われ、また、高精度で時間のかかる計算よりも、設計最適解の探索を目的にパラメータサーベイのように多くのパターンで計算する要求があり、大学・研究機関での大規模計算とはスーパーコンピュータ利用の在り方が異なっている。利用するソフトウェアに関してはも、企業が利用するスーパーコンピュータ上でサポートされているでは商用ソフトウェアを利用することが多いがため、アカデミアとの協力の下で、国のプロジェクトで開発されたアプリケー

ションやオープンソース・ソフトウェア（以下「国プロ開発アプリケーション等」という。）も利用されている利用したいソフトウェアがサポートされていることも利用の条件となる。

さらに、同じ産業界でも業種によりスーパーコンピュータの利用状況やスーパーコンピュータに対する要求が異なるとともに、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は求めるものが異なるなど、様々な利用パターンが考えられる。

このような多様な産業界のニーズに対応し、産業利用の裾野を広げ、イノベーション創出につなげていくためには、適切な利用料設定の在り方にも留意しつつ、利用環境の整備や支援体制構築など、産業利用促進策が重要になると考えられる。

5. システム技術の動向

世界的な技術動向としては、近年のPC クラスタの普及などに見られるように、大型計算機の技術をコモディティに活用する流れから、市場の大きなコモディティの技術をスーパーコンピュータの技術に統合・活用する流れ（スピン・アウトからスピン・インへ）がある。こうした流れの中で、従来からある IBM, Cray, SGI といったシステムベンダに加え、Intel, NVIDIA, AMD, ARM などのプロセッサベンダやプロセッサ IP ライセンサ、更にハイエンドネットワークやストレージ等の各社が、スーパーコンピュータ開発の重要なプレーヤとして台頭してきている。

また、Intel Xeon に代表されるコモディティサーバ向けプロセッサの採用が中位から下位のスーパーコンピュータにおいて一般的である一方で、最先端の大規模スーパーコンピュータシステムでは、性能電力比を追求するために、「京」や BlueGene/Q のようなスーパーコンピュータ専用のプロセッサを持つシステムや、GPU やメニーコア型の**新型**プロセッサにより演算性能を向上させているシステムも多く見られるようになっている。

スーパーコンピュータで用いられる IT 技術は、多くの場合最先端のものであり、今後はスーパーコンピュータ技術主導のスピン・アウトとスピン・インの機能的な連動が重要性を増す。特に、スーパーコンピュータからの派生技術が、よりマーケットの大きなクラウド・モバイル・ビッグデータ等の分野で活用され、それらの技術的発展が再びスーパーコンピュータ側にフィ

ードバックされることにより, IT 全体の進化をけん引していく技術的なエコシステムの構築が重要となる。

【プロセッサ技術】

過去には半導体プロセスの微細化とそれに伴うクロック周波数の向上, さらに, 増加するトランジスタを高度な演算処理などに用いることで, プロセッサコアの単体性能を急激に向上させてきた。しかしながら, 消費電力や発熱等の関係から, 既にクロック周波数や単体コアの性能向上は困難になってきており, 複数コアによる性能向上を目指したマルチコアプロセッサが一般的になっている。

スーパーコンピュータにおいては, これらのプロセッサを多数用いてシステムを構成するため, 個々のプロセッサやメモリの消費電力, 電力性能比がシステム全体の消費電力や電力性能比に大きな影響を与える。そのため近年では, 多数の比較的単純な構造のコアと高速メモリを用いることで, 電力性能比に優れた GPU やメニーコア型のプロセッサを用いたシステムも増えてきている。しかし 2018~2020 年頃までに, これまでと同じペースでスーパーコンピュータの性能向上を維持していくためには, その時点で最新の半導体プロセス技術を使用した上で, 電力当たりの性能を更に現在の数十倍程度以上にまで高める必要がある。そのためには, コア中の演算器の高効率化のみならず, プロセッサとインターコネク機能との統合による高効率化, メモリ階層制御の高効率化などの検討が必要である。加えて, コンパイラ開発と一体となった効率の良いプログラミング言語の支援機構, より高度な信頼性確保のための機能などの検討も必要である。さらに, それだけでは大幅な電力性能比の向上は容易ではないため, 限られた電力を最大限有効に活用するために, 未使用ノードやインターコネク, あるいは未使用のコアやメモリなどへの電力供給の停止や, 動作速度を制限して供給電圧を落とすなど, システム全体でバランスを取った省電力技術も重要になる。

【メモリ技術】

メモリ技術については, 将来は計算に費やされる電力より, 相対的にデータを動かす電力の方が支配的になるため, 結果として, 既存技術の延長ではソケット当たりのメモリバンド幅はそれほど大きな性能改善が期待できない。一方で, ソケットに含まれるコア数は増加するため, B/F 値は相対的に低下していくと見込まれる。この状況を打破する技術として, 3次元実装又

はシリコンインターポーザを用いた 2.5 次元実装技術による、スタックメモリを用いたメモリバンド幅の改善が期待されており、今後の動向が注目される。例えば、米 Micron 社は HMC(Hybrid Memory Cube)を提案しており、また標準化団体の JEDEC(Joint Electron Device Engineering Council)においては既に Wide I/O 2, 更に高性能プロセッサ用の HBM(High Bandwidth Memory)の規格化が進んでいる。

このほかにも、大容量と低コスト・低電力を両立させるための不揮発性メモリをメモリ階層の一部のレイヤに導入する研究開発も進んでいる。

【インターコネクタ技術】

スーパーコンピュータシステムのノード数は飛躍的に増加しており、現在のスーパーコンピュータシステムは、数万ノードから構成されている。これらのノード間における高速通信を実現するインターコネクタが、スーパーコンピュータシステムやアプリケーションプログラムの実効的な性能を決定する上で大きな役割を担っており、影響力が大きくなってきている。InfiniBand QDR/FDR や 10/40Gb イーサネットなど汎用の超高速・低レイテンシネットワーク技術が広く用いられ、それらが今後 100 ギガビット級以降に進化していく一方、トップクラスのシステムでは大規模に多次元トラス結合や High-Radix ネットワークを実現するための Tofu, Cray Aries 等の独自ネットワーク技術が用いられ、システムを特徴付けていることが多い。また、これまでインターコネクタは別チップで構成されることが多かったが、プロセッサインターコネクタ間のレイテンシ削減・バンド幅向上や消費電力削減、ひいては部品点数減少による信頼性の向上を狙って、コモディティプロセッサを含め BlueGene/Q のようにインターコネクタがプロセッサチップに統合される方式が主流になりつつある。同様に、特定のアプリケーションの加速を行うハードウェアを、SoC(System on a Chip)技術でメインのプロセッサの近くに統合する方向性もある。さらに、今後はノード間のみならずノード内のボード間、チップ間でも信号伝送速度が電気による伝送の限界を超える可能性もあり、光による信号伝送も重要な技術になってくる。

【ストレージ技術】

ストレージに関しては、高信頼性の確保(チェックポイント等の Defensive I/O), 大規模データの計算中(in-situ)の視覚化, シミュレーションの結果データや観測データの大規模化, さらには社会的なデータの解析など, アプ

リケーションの多様化や需要の増大から、大規模データ(ビッグデータ)の処理にストレージの高速化・高容量化と低電力・低コスト化が必要である。しかしながら、従来のHDDの並列化及びその上の並列ファイルシステムでは、物理的な制約からHDDの高速化に限界があるため、不揮発性メモリを有効に活用するアーキテクチャへの転換が求められている。

【信頼性，省電力技術】

スーパーコンピュータは多数のコンポーネントからなるシステムであるため、少なくとも1日程度のアプリケーションの実行を阻害しないために高い信頼性や耐故障性が必要であり、ソフトウェアと一体化した耐故障技術が重要である。また、スーパーコンピュータシステムのスケーラビリティの律速は今や電力であり、スーパーコンピュータ自身の電力の高効率化から先進的な冷却や電力伝送まで、種々の高度な省電力技術やその制御技術も重要となる。

【システムソフトウェア技術】

今後のスーパーコンピュータを有効に利用するためには、100万を超えるようなプロセッサコアを協調して動作させるだけでなく、各コア中でのメモリ階層の有効利用、SIMD演算ユニットの有効利用が必要であり、アクセラレータを持つシステムでは更にその演算器とホストプロセッサとの通信インタフェースの有効利用が必要となる。並列化のためのプログラミングモデルとして、分散メモリ環境ではMPIによるメッセージ通信、共有メモリ環境ではOpenMPが広く使われている。しかし、大規模並列に対応するためには、ノード内はOpenMPを用いた並列化、ノード間はMPIによる明示的なメッセージ通信、さらにアクセラレータ向けには異なるプログラミング言語、といったように複数の手法を組み合わせる必要に迫られており、メモリ階層やSIMDユニットへの対応が必要なことと合わせ、アプリケーション開発者の負担が極めて大きくなっている。これらを解決するためのアプローチとして、全ノードで共通のグローバルメモリ空間を提供するPGAS言語や、様々なアクセラレータ向けの指示文を用いたプログラミングを統一化するOpenACCなどが実用化されつつある。また、ドメイン特化言語(DSL)やアプリケーションフレームワーク、さらにそれらの自動チューニングにより、抽象度の高い記述から個別システムに最適化された実行コードを生成するアプローチも注目されている。

このような枠組みを用いて記述されたアプリケーションが高い性能を発揮するためには、優れた最適化を実現するコンパイラ技術のみならず、システム内の多数のコアをアプリケーションが有効に使用するために、そのバックエンドで用いられる高性能ノード間通信ライブラリや、メニーコア対応のオペレーティングシステムといったシステムソフトウェアの支援が必要不可欠である。また、スーパーコンピュータのアーキテクチャに最適化された使いやすい数値計算ライブラリや並列アルゴリズムライブラリも、アプリケーション開発には極めて重要である。また、スーパーコンピュータ上でのアプリケーション実行に欠かせないデータやファイルを入出力するための並列ファイルシステム、並列 I/O、不揮発性メモリに適した I/O ミドルウェアやメモリ階層の制御技術も、特にビッグデータ向けの処理において重要性を増している。一方、数十万を超える並列性を持つ超並列のプログラムでは、わずかな性能のばらつきでも並列性が低下し、性能が大幅に低下する要因になる。加えて、多数のプロセッサコアや各ノードに分散されたメモリを複雑に組み合わせて利用するアプリケーションにおいては、従来のツールではデバッグが困難であるため、超並列に対応した性能解析やモデリング、デバッグなどのツールも重要となる。

さらに、システムを有効に活用するためのミドルウェアとして、ユーザのジョブをシステム上のノード群に有効に割り当てるためのジョブスケジューリングシステム、ハードウェアが備える省電力機能に対応してシステム全体で高度に電力を制御する電力管理機能、ハードウェア故障に即時対応できるような、耐故障性・故障回復機能も求められており、またそれらが有機的に連動してシステム利用を最適化する必要がある。特に省電力と耐故障性は今後の超並列システムの鍵となる技術であり、今後はハードウェアや OS、ミドルウェアなどのシステムソフトウェアだけでなく、アプリケーション側からの寄与も含めて、システム全体で対応する技術や枠組みの構築が求められている。

6. 今後の方向性

これまで述べてきたように、計算科学技術は現代の科学技術の発展、イノベーションの創出等を通じた産業競争力の強化や安全・安心の国づくりの実現に不可欠な国家の基幹技術となっている。

実際に「京」及びこれを中核とした HPCI の活用により、戦略 5 分野に代表

される科学技術の個々の課題を解明し、我が国の科学技術の進展と国際競争力の向上に貢献しつつある。さらに、能力の高いスーパーコンピュータによるシミュレーションを行うことにより、様々な社会的・科学的課題の解決に貢献することが期待されている。

一方で、本分野での技術の進展は速く、スーパーコンピュータシステムの超並列化の流れに対応し、プロセッサやシステム全体の省電力化、ネットワーク技術の高度化、信頼性の向上、システムソフトウェアやアプリケーションの高度化などの技術に関し、様々な研究開発が進められつつある。

こうしたことを踏まえ、今後とも我が国の計算科学技術を発展させていくためには、諸外国のスーパーコンピュータ開発利用の動きや技術的な動向にも留意しつつ、計算科学技術インフラの維持・発展とそれを支えるハードウェア及びアプリケーションの研究開発、利用の促進、人材育成等の取組を着実に進めていくことが必要である。

特にトップレベルのシステムについては、研究開発の基盤という位置づけばかりではなく、サイエンスやテクノロジーを切りひらく最先端の装置という位置づけもある。今後シミュレーションで期待される最先端の研究を実施し、社会的・科学的課題の解決や画期的なイノベーションの創出を図っていくためには、我が国が有している最先端のスーパーコンピュータ技術を適切に維持発展させつつ、利用するアプリケーションの研究者とシステムの研究者が共同して、必要な経費にも留意しつつ、新しいシステムを開発していくことが有効と考えられる。

こうした中で、これまでそれぞれの分野で行われていたシミュレーション研究を統合し、更に自然科学系のみならず社会現象や人間活動等の人文社会系研究の中で行われていたシミュレーション研究や、最近重要性が高まっているビッグデータの処理なども統合し、様々な社会的・科学的な課題の解決に適用するとともに、「京」の利用で培った様々なペタスケールのシミュレーション技術を医療、防災対策、ものづくりなど実際の社会の現場に実装し、国民生活の向上に貢献することにより、スーパーコンピュータが「研究開発の基盤」であるとともに「社会の基盤」へと発展していくことが期待されている。

第2章 我が国における計算科学技術インフラの在り方

1. 総論

第1章で論じてきたように、我が国の計算科学技術インフラは「京」の開発や HPCI の構築により着実に整備されているが、世界の総計算能力に占める我が国の割合で見ると、「地球シミュレータ」や「京」などの最先端のスーパーコンピュータの開発により一時的に増加するものの、長期的には低下傾向となっている。

一方で、利用者の計算資源量に対するニーズは高く、今後ともそのニーズは増加していく見通しであるとともに、利用の分野や形態は多様化しており、大規模な計算を行うための最先端のシステムから、比較的小規模な計算を手軽に行えるシステム、また大規模なデータ処理を高速にできるシステムなど様々なシステムが求められている。また、今後の計算科学技術の発展のためには、利用者の裾野の拡大や若手人材の育成が不可欠であるが、そうした点にも留意が必要である。

【グランドデザイン】

このようなことから、我が国の計算機科学技術インフラ全体のグランドデザインとしては、必要な予算にも留意しつつ、世界トップレベルのスーパーコンピュータやその次のレベルのスーパーコンピュータを複層的に配置し、計算資源量ニーズの高まりや利用分野・形態の多様化に対し、それらのスーパーコンピュータ全体で対応する全体として多様なユーザーニーズに対応できる世界最高水準の計算科学技術インフラを維持・強化するという考え方が重要である。また、我が国のトップレベルスーパーコンピュータの性能を世界トップレベルに維持していくとともに、その中で得られた技術によってコストパフォーマンスが向上したスーパーコンピュータを各層に普及させていくことで、裾野の拡大を含めて計算科学技術インフラ全体を引き上げるという考え方が重要である。そして、その基本的な考え方のもと大学、附置研・共同利用機関法人及び独立行政法人の有するシステムの役割・位置付けを明確にしつつ、戦略的に計算科学技術インフラの整備を進めることが重要である。

その際、各システムの配置については、リスク分散の観点からある程度の地理的な分散も必要であるが、ネットワーク経由で利用できることから、む

しる電力や設置スペースなどの設置条件が整備されていることがより重要である。このためにも、スーパーコンピュータの性能に応じた高速ネットワークの整備を今後も着実に進めていくことが必要である。

また、ユーザ窓口や研究拠点となる組織については、地理的な分散も重要であり、利用の促進という観点から、その体制・機能の在り方についてはより具体的な検討が必要である。

なお、システムを整備するに当たっては、性能目標として Linpack による性能評価を完全に無視するわけにはいかないが、より重要なのは、そのシステムで何を達成するのかであることに留意が必要である。

2. リーディングマシンの必要性

【リーディングマシンの必要性】

上記の基本的考え方に基づき、我が国の計算科学技術インフラを全体として維持・強化する中で、我が国の計算機科学及び計算科学全体をけん引し、科学技術の新たな展開を切りひらいていくシステムとして、世界トップレベルの高い性能を持ち、最先端の技術を利用して開発されるシステムを、リーディングマシンとして整備していくことが必要である。

このリーディングマシンの整備は、我が国の計算科学技術を発展させ、世界における当該分野の優位性を維持すること、またそれにより我が国の科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献できるものであり、国として戦略的に整備を進めていくことが重要である。

【リーディングマシンの在り方】

リーディングマシンは我が国の最先端システムとして、様々な分野における先端・大規模計算を効率的に実施するために、幅広い分野における高い実効性能とメモリ容量を有していることが求められる。また、産業界も含め幅広い分野のユーザが利用できるシステムであれば、当該システムを中核に研究交流が促進され、我が国の計算科学技術全体の発展に貢献することが期待できる。

一方、計算科学の発展に伴い演算性能、メモリ容量、メモリ帯域に対する要求には幅があり、一つのシステムだけでは全て^①分野の様々な計算ニーズに的確に対応することは難しくなりつつあり、複数の特徴あるリーディング

マシンを求める意見もある。また、平均の実行効率が高ければ単一のシステムよりも複数のシステムの方が全体としての計算量が高くなるということも期待される。しかしながら、高い実効性能とメモリ容量を有するシステムを複数開発・運用するのはコストが高くなるというデメリットもある。

こうしたメリット・デメリットを総合的に勘案し、また、HPCI コンソーシアムでとりまとめられたコミュニティの意見も踏まえ、リーディングマシンとしては、高い計算性能を持ち、幅広い分野をカバーするシステムを我が国のフラッグシップシステムとして一つ整備・運用するとともに、当該システムでは実行効率が低いアプリケーションの一定程度の実効性能の確保や重要な社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーションの実効性能を向上させることができるシステムを、フラッグシップシステムを支える特徴あるシステムとして開発・整備することも視野に入れて具体的に検討する。

3. 各機関のシステムの位置付け・役割

我が国の計算科学技術インフラを全体として維持・強化していくためには、リーディングマシンのみならず、大学、附置研・大学共同利用機関法人、独立行政法人等の有するシステムが、それぞれの目的・役割に応じて適切に整備され、人材育成や利用の裾野拡大も含め、様々な計算ニーズに対応できるようにしていくことが必要である。

これら各機関のシステムの役割・位置づけは、以下の(a)から(f)のように考えられ、このような方向性に沿って整備・運営していくことにより、我が国の計算科学技術インフラ全体の底上げを図っていくことが望ましい。

(a) 特定高速電子計算機施設のシステム

特定高速電子計算機施設のシステムは、共用法に基づき整備されるものであり、引き続き世界トップレベルの演算処理能力を有する我が国のフラッグシップシステムとして、産業界も含め幅広くその計算資源を共用に供していくことが適当である。このため、計算機技術の発展を先導する研究開発を行い、その能力を高度化していくとともに、幅広い分野で利用できるシステムとすることが必要となる。

(b) 全国共同利用・共同研究を進めている 9 大学情報基盤センター等のシステム

全国共同利用・共同研究を進めている 9 大学情報基盤センター等は、今後とも HPC の分野において、適切な規模の利用者支援機能・研究開発機能を維持しつつ、我が国のトップレベルの演算処理能力（例えば世界トップレベルのシステムの数分の 1 から数十分の 1 程度）を、先端又は大規模な計算を行う幅広い分野の研究者に提供する役割を果たしていくことが必要である。

また、その計算資源の一定割合は HPCI 一括課題選定の対象とする計算資源(以下「~~9 大学情報基盤センター等が担う~~HPCI 資源」という。)として、大規模な計算や多様なユーザーニーズに応えるための我が国全体の計算基盤として運用を行うことが適当である。

このため、国は大学の自主性・自立性に配慮しつつ将来の我が国における計算科学技術インフラの整備・運用に関する計画を策定し、各情報基盤センターはその計画に沿って、~~9 大学情報基盤センター等が担う~~HPCI 資源を戦略的に更新・整備していく。システム導入に当たっては、各機関が抱えているユーザー層に考慮しながら、大学内におけるシステムの集約や複数機関での共同導入・運用などについても検討していく。

こうした計算資源提供や研究開発実施の役割を十分に担える体制・システムを整備し、各情報基盤センターがそれぞれの得意分野を強化しつつ、これらのセンターが協力し学際的なグランドチャレンジ的な課題を解決するための共同研究・拠点事業の推進や、計算科学技術全体の発展に資する人材育成の役割も果たしていくことが重要である。

(c) 附置研において共同利用しているシステム

附置研において共同利用しているシステムは、特定研究領域の研究の実施のために整備しているものであることから、基本的にその目的に沿った能力の計算機を整備し、運用を行うことが適当である。ただし、このような考え方を基本としつつも、学術研究は、関係分野が相互の連携を通じて発展していく方向性であり、従来のような個別分野的なシステム整備ではなく、関係分野が連携して最先端のシステム整備を行う方向性についても検討が必要である。

また、これらのシステムについても、リーディングマシンとして国の戦略

に沿って開発・整備する場合や、対象としている研究分野が横割りのな分野（例えば統計数理学など）などの場合は、自らの研究の遂行に支障のない範囲で、HPCI 資源 HPCI 一括課題選定の対象とする計算資源として、我が国全体の観点から HPCI への資源提供も検討していくべきと考えられる。^(※)

※附置研の場合は、当該研究施設の目的たる研究と同一の分野の研究を目的とすることが求められ、運用上ある程度の制限がある可能性を考慮する必要がある。

(d) 大学共同利用機関法人のシステム

大学共同利用機関法人のシステムは、附置研において共同利用しているシステムと同様、特定研究領域の研究の実施のために整備しているものであることから、基本的にその目的に沿った能力の計算機を整備し、運用を行うことが適当である。ただし、このような考え方を基本としつつも、学術研究は、関係分野が相互の連携を通じて発展していく方向性にあり、従来のような個別分野的なシステム整備ではなく、関係分野が連携して最先端のシステム整備を行う方向性についても検討が必要である。

また、これらのシステムについても、リーディングマシンとして国の戦略に沿って開発・整備する場合や、対象としている研究分野が横割りのな分野（例えば統計数理学など）などの場合は、自らの研究の遂行に支障のない範囲で、HPCI 資源 HPCI 一括課題選定の対象とする計算資源として、我が国全体の観点から HPCI への資源提供も検討していくべきと考えられる。^(※)

なお、情報・システム研究機構統計数理研究所統計科学技術センターの計算資源の一定割合は、平成 26 年度より HPCI 資源として提供されることになっており、国は、当該 HPCI 資源についても、上記の整備・運用計画の策定や戦略的整備・更新に関して、9 大学情報基盤センター等に準じた取扱いを検討していくべきである。

※大学共同利用機関法人の場合は、当該研究施設の目的たる研究と同一の分野の研究を目的とすることが求められ、運用上ある程度の制限がある可能性を考慮する必要がある。

(e) 独立行政法人のシステム

独立行政法人のシステムは、基本的に設置者の自らの目的に使用するもの

であるため、それぞれの必要性和予算に応じて必要な能力のシステムを整備し、それぞれ運用を行うことが適当である。ただし、このような考え方を基本としつつも、研究開発は、関係分野が相互の連携を通じて発展していく方向性であり、従来のような個別分野的なシステム整備ではなく、関係分野が連携して最先端のシステム整備を行う方向性についても検討が必要である。

一方、自らの研究開発業務の遂行に支障がない範囲で、積極的に外部の利用に供することも求められており、その際には利用者の利便性も考え、HPCIの共通運用の計算資源として提供することも検討すべきである。

また、リーディングマシンとして国の戦略に沿って開発・整備する場合は、HPCI 資源 HPCI 一括課題選定の対象とする計算資源として、我が国全体の観点から HPCI への資源提供を検討することが適当である。^(※)

※独立行政法人の場合は、設置法で定められた業務の範囲での利用となるため、運用上ある程度の制限がある可能性を考慮する必要がある。

(f) 大学等のシステム（(b) 及び (c) を除く）

9 大学情報基盤センター、及び附置研を除く大学等のシステムは、基本的に設置者の自らの目的に使用するものであるため、それぞれの必要性和予算に応じて必要な能力のシステムを整備し、それぞれ運用を行うことが適当である。

また、大学等においては、それぞれのシステムを活用し、我が国の計算科学技術の発展に向け、多様な計算機科学及び計算科学を発展させるとともに、人材育成やユーザの裾野拡大等の役割を果たすことも期待できる。そうした中で、これらの大学等において、リーディングマシンの開発や比較的大規模なシステムの整備・運用が行われる可能性も視野に入れておくことも必要である。

4. 開発・整備の戦略的・継続的推進

計算科学技術が、科学技術の振興、産業競争力の強化、国民の安全・安心の実現等において不可欠であることは論を俟たない。かつては一部の特別の人のものであったコンピュータが、今や万人の日常生活の中で当たり前ものとなっているように、計算科学技術は、今後ますます我々の生活・仕事に

大きな影響を与え、欠かせないものとなるであろう。その意味では、計算科学技術は国の将来発展の基盤となるものであり、各国ともその認識の下で積極的な関係投資が行われていることは先に述べたとおりである。

そのような中で、我が国の計算科学技術インフラを適切に維持・強化し、更にその技術の水平展開・下方展開によって我が国の IT 技術全般の発展へ貢献していくためには、1. から 3. に示したグランドデザインに基づいてもとづいて、長期的な見通しを明らかにしつつ、同時に、ハードウェア技術の動向やアプリケーション分野のニーズ、我が国全体の計算資源の状況、リーディングマシン群におけるシステム間の相互補完関係等を踏まえて、その時々において適切な目標設定を行い、戦略的・継続的にシステムの開発・整備を進めていく必要がある。

そのためには、計算科学技術インフラを担う機関の取組を定期的に評価する枠組みを含めて、国として必要な関与を行っていくことが適当であり、文部科学省は今後 10 年程度を視野に、

- ・ リーディングマシンの計画について、ハードウェア技術の動向やアプリケーション分野のニーズ、我が国全体の計算資源の状況、中核となるフラッグシップシステムの特徴等を踏まえ、どのようなスペックのシステムをどのようなスケジュールで整備・運用するか。
- ・ 9 大学情報基盤センターも含めた HPCI 一括課題選定に計算資源を提供しているシステムの更新計画。（各大学等のシステム更新計画をベースにした全体の整合性を見る観点から、ユーザコミュニティの意見を聴きつつ、必要に応じて調整。）

などの内容を盛り込んだ計画を策定し、数年ごとに見直しを行いながら、計算科学技術インフラの開発・整備を進めていくことが必要である。以下に、開発・整備の方向性を示す。

フラッグシップシステムに関しては、当面、第 3 章 2. に掲げる方策に従って開発・整備を進めていくべきである。ただし、計算科学技術は急速に発展し、また、我が国を取り巻く社会的・科学的課題も目まぐるしく変化することから、我が国の計算科学技術インフラ全体を強化してそれらに対応していくため、既に開発・整備に取り組んでいるフラッグシップシステムの次世代のフラッグシップシステムに係る検討を、当該開発・整備と並行して行う必要がある。なお、世界に先駆けたフラッグシップシステムの開発には数年間を要することから、その間も増え続け

る我が国の計算資源量に対するニーズに的確に対応していくためには、計算科学技術インフラ全体として計算資源量を確保する方策の検討もあせて行う必要がある。

フラッグシップシステム以外の計算科学技術インフラに関しては、フラッグシップシステムの特徴を踏まえて検討されることになるが、当該インフラを整備・運用する組織が抱えるユーザニーズと将来の HPC 技術動向を見据えた各組織のポリシーを尊重しつつ、フラッグシップシステムを支える特徴あるシステムの方向性も考慮すると、主に以下の 4 つの分類に則して、整備を進めていくべきである。

(a) フラッグシップシステムと同様のアーキテクチャを有するシステム

フラッグシップシステムへの橋渡しを担う、フラッグシップシステムと同様のアーキテクチャを有するシステム。

(b) フラッグシップシステムがカバーできない領域を支援するシステム

フラッグシップシステムで実行しても効率よく実行できない応用領域のユーザニーズに沿ったシステム。

(c) コモディティクラスタからの大規模並列処理を支援するシステム

コモディティクラスタを利用するユーザが、より大規模並列処理へと向かうように整備されたシステム。

(d) 将来の HPC 基盤に向けた先端システム

応用分野が要求する計算手法や計算資源量を勘案し、市場には投入されていない先端マシンを設計・試作しながら整備されたシステム。

また、開発・整備の前提となる技術動向に関しては、現在実用化されている技術の連続的発展だけでは、少なくとも理論演算性能についてはある一定以上の向上は見込めないとの見解が多い。その限界がどこなのかを指摘することは難しいが、2020 年代に開発するフラッグシップシステムについては、理論演算性能の向上を追求しつつも、実効性能、電力性能等の向上に重点を置いた開発にシフトすることも視野に入れるべきである。一方で、非連続的な革新技術を用いて圧倒的な性能を実現するコンピュータとしては、現在、超伝導物質や有機分子などを用いたコンピュータ、量子コンピュータ等が研究されている。これらは、今後 10 年

程度では実用化されないと考えられるが、計算科学技術インフラの重要性が今後ともますます高まることを踏まえれば、更に先を見据え、それぞれの概念に基づいた研究を着実に進める必要がある。

また、我が国の計算科学技術インフラの整備を計画に基づき適切に進めていくためには、各機関の取組を定期的に評価する枠組みを含め、国として必要な関与を行っていくことが適当である。

第3章 研究開発の方向性

1. 研究開発の進め方

我が国の計算科学技術を今後とも発展させ、科学技術の振興やイノベーションの創出に貢献していくためには、第2章で述べたように我が国の計算科学技術インフラを全体として維持・強化していくことのみならず、技術的な動向や諸外国のスーパーコンピュータ開発・利用の動きも見据え、ハードウェアとアプリケーションの両者のバランスをとりつつ、計算科学技術に係る研究開発を着実に進めていくことが必要である。

その際、計算科学技術により具体的な社会的・科学的課題に対応するという観点から、システムの研究者とアプリケーションの研究者の共同（Co-design）により、アプリケーションのニーズをハードウェアの研究開発に反映するとともに、ハードウェアの技術動向を踏まえたアプリケーションの研究開発を行っていくことが重要となってきた。

また、研究開発を効果的・効率的に行うとともに、開発した技術を国際標準にしていくなどの観点から、国際協力についても戦略的に進めていくことが重要である。

2. リーディングマシンの研究開発

第2章で述べたように、リーディングマシンは世界最高水準の能力を有し、最先端の技術を利用し新たに開発されるシステムである。その開発に当たっては、最先端の技術開発により新たな社会的・科学的ニーズに対応して今後の計算科学技術をリードすることや、アプリケーション開発者と計算機開発者との密接な連携によりアプリケーションを効率的・効果的に実行可能な計算環境の構築が可能となり、早期の画期的な成果創出が可能となるとともに、我が国におけるIT全般の技術進化等を通じ国内産業への波及効果が期待できることなどから、国内で実施することが重要である。

また、リーディングマシンの開発については、我が国の計算科学技術インフラの継続的な発展及び我が国のスーパーコンピュータ開発技術の維持強化、さらにその技術を水平展開・下方展開することにより我が国のIT技術全般の発展への貢献が期待できることなどから、技術動向やニーズの状況を

踏まえ、その時々において適切な目標設定を行いつつ、継続的にリーディングマシンを開発していくことが重要である。

なお、~~リーディングマシンを~~フラッグシップシステム、及びそれを支える複数の特徴あるシステムで構成されるリーディングマシンとした場合、~~それ~~ ~~ぞれ~~の研究開発の在り方として以下のものが考えられる。

【リーディングマシンの研究開発の方向性】

(1) フラッグシップシステム

フラッグシップシステムは、我が国が直面する社会的・科学的課題を解決するため、世界トップレベルの高い計算性能を持ち、多くの分野のアプリケーションが高い実効性能で利用できるシステムであり、我が国トップのシステムとして、我が国全体の計算科学技術の発展に貢献することが期待されている。

このため、フラッグシップシステムの計算性能については、第1章において述べた社会的・科学的課題の解決、諸外国の動向や技術的な動向を踏まえ、2020年頃までにエクサスケールコンピューティングの実現を目指すことが適当である。

~~その際、開発主体候補において、開発するシステムによってどのような社会的・科学的課題が解決されるのか、どのような成果が期待されるのか、それを実現するために必要なスペック、スケジュール、要素技術、コストはどのようなものか等に関するイメージを明らかにした上で、具体的な方向性について検討を行うことが有効である。~~

(2) フラッグシップシステムを支える複数の特徴あるシステム

これらのシステムは、フラッグシップシステムを支え、フラッグシップシステムでは実行効率が低いアプリケーションの一定の実効性能の確保や重要な社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーションの実効性能を向上させることにより、我が国の計算科学技術インフラを補強し、我が国全体の計算科学技術の発展に貢献していくことが期待されている。

そのため、これらのシステムとしては、第2章4. に掲げたフラッグシップシステム以外の計算科学技術インフラに関する分類 (b) や (d) に該当するシステムのうち、重要な社会的・科学的課題の解決や産業競争力の強化へ

の貢献など、リーディングマシンの必要性や在り方に照らして厳選されたものとすることが適当であるが、いずれにしても、その開発については、フラッグシップシステムの特徴を踏まえ、どの分野のアプリケーションをターゲットとするかなどのスペックやスケジュール等を国で定めた上で、具体的な計画については、フラッグシップシステムの基本設計が確定した段階で、HPCI一括課題選定の対象となる計算資源を提供している機関、若しくは提供する意思のある機関の中から公募し、必要性、将来性、経済性等を適切に評価し定めることが適当である。

(3) 研究開発の留意事項

リーディングマシンの研究開発に当たっては、以下の点にも留意が必要である。

- ・ フラッグシップシステム及びそれを支える特徴あるシステム、いずれのシステムについても、社会的・科学的課題の解決という観点から、その必要性やスペックについて適切に判断していくことが必要である。
- ・ フラッグシップシステムを開発・整備する主体は、当該システムをなるべく多くの分野のアプリケーションが効率よく利用できるものとし、全体としてのアプリケーションの実効性能を大きくするとともに、企業機密等を適切に管理しつつ、計算科学技術コミュニティ全体が当該システムの開発・整備・利用に参画できるようにする。
- ・ フラッグシップシステムを支える特徴あるシステムの開発に当たっては、その必要性、将来性、経済性を適切に評価するとともに、HPCI資源への提供等を通じ、ある特定の分野の研究者に閉じたシステムにならないようにする。
- ・ ビッグデータへの対応や、システム全体を使った大規模計算から比較的小規模の計算を大量に処理する利用など、様々な計算要求があることにも配慮する。
- ・ それぞれの計画にメリハリをつけて、「京」に要した経費や費用対効果にも留意しつつ、全体としてのコスト縮減を目指して費用の精査をする。

【要素技術開発の方向性】

リーディングマシンの開発に当たって、どのような技術を国内開発するかは重要な検討事項である。一般的にスーパーコンピュータの開発に必要とされる要素技術を分類すると、表2のようになる。

表2 スーパーコンピュータ開発に必要とされる要素技術

カテゴリ		要素技術
ハードウェア	ノード内	半導体プロセス
		プロセッサ
		メモリ
		3次元実装
		チップ間/プロセッサコア間光配線
		ボード間光配線
		ホスト・デバイス間インタフェース
		信頼性
	ノード間	インターコネクト
	ストレージ	不揮発メモリ (SSD など)
		HDD
		アーカイブ装置
		ストレージシステム
	電力	省電力制御
冷却	冷却システム	
システムソフトウェア	OS カーネル	
	通信ライブラリ	
	耐故障機能	
	コンパイラ	
	ファイルシステム	
	スケジューラ	
	数値計算ライブラリ&アプリフレームワーク	
	デバッガ・チューニングツール等	

※要素技術にはビッグデータ対応への観点もある

これらの要素技術のうち、インターコネクト、省電力制御、冷却システム、システムソフトウェアは、それぞれ、100万コアを超えるような超並列シス

テムの時代に大量のプロセッサ間やノード間を高信頼・高速につなぐ技術、大量のコンポーネントによって構成されるシステムの消費電力を効率よく制御する技術、大量のプロセッサ等から放出される熱を効率よく取り除く技術、大量のプロセッサ等を一つのシステムとして動かす技術で超並列の時代にいずれもキーとなる技術であることから、一般的にスーパーコンピュータの開発において開発すべき技術である。

これら以外の要素技術については、どのようなスペックのものを、どの程度のコストで開発するかにより判断が異なることから、一般論での議論は困難であるが、いずれにしても、要素技術開発に係る方針の検討に当たっては、

~~このため、まずは開発主体候補において、開発するシステムによってどのような社会的・科学的課題を解決するのか、どのような成果が期待されるのか、それを実現するために必要なスペック、スケジュール、要素技術、コストはどのようなものか等に関するイメージを明らかにした上で、要素技術開発に係る方針を検討していくことが有効である。~~

~~その際、~~海外のベンダ等の技術動向も踏まえつつ、

- ・ 我が国として強みを持てる技術かどうか
- ・ 技術安全保障上保持すべき技術かどうか
- ・ 当該システムでキーとなる技術かどうか
- ・ 当該システムが目指す社会的・科学的課題の解決に必要なアプリケーションの効率的・効果的な実行のために必要な技術かどうか
- ・ 民間への展開も含め、発展性、波及性がある技術かどうか

~~などの観点~~が重要であるから、検討を行うことが適当である。

その際なお、プロセッサの開発には経費も必要であるが、

- ・ 我が国は高性能プロセッサを開発できる数少ない国の一つであり、高い信頼性技術を有しており、その貴重な技術の維持という視点
- ・ コンパイラ、システムソフトウェア、インターコネクト、アプリケーションソフトウェアの研究開発の加速が期待されるという視点
- ・ システムの中核であり、競争力の高いシステムを計画通りに開発するためには、その特性を熟知していることが有効であるという視点
- ・ 国内のスーパーコンピュータ関連企業を巡る状況

等にも留意する必要がある~~して検討することが適当である。~~

【フラッグシップシステムの具体的検討】

フラッグシップシステムについては、中間報告書において、研究開発及

び要素技術開発の方向性に関して、開発するシステムによってどのような社会的・科学的課題が解決されるのか、どのような成果が期待されるのか、それを実現するために必要なスペック、スケジュール、要素技術、コストはどのようなものか等に関するイメージを明らかにした上で検討していくことが有効である、との提言を行った。

これを受けて、本ワーキンググループの下にシステム検討サブワーキンググループ（以下「システムサブWG」という。）を設置し、前述の観点や留意点を踏まえ、本ワーキンググループがフラッグシップシステムの開発主体候補に選定した理化学研究所の提案するシステムイメージについて、その技術的妥当性の評価を行った。システムサブWGの提言（平成25年8月）の概要は以下のとおりであるが、詳細は添付の報告書要旨を参照されたい。

世界最高水準のスーパーコンピュータは、科学技術の振興、産業競争力の強化、国民生活の安全・安心の確保等に不可欠な「国家の基幹技術」であり、その開発による様々な効果を含めて、競争力の源泉であることが国際的な共通認識となっている。そのため、各国でスーパーコンピュータの自主開発が拡大してきている中で、社会的・科学的課題の解決と豊かで活力のある国づくりにおける今後の計算科学技術の重要性を踏まえると、スーパーコンピュータを自主開発するポテンシャルを有する我が国としては、「京」の開発により獲得した高性能なプロセッサやネットワーク、優れた省電力機構などの技術や、その開発を通じて蓄積された人材や経験を生かしながら、スーパーコンピュータの開発に必要な技術を適切に維持・発展させていくことが重要である。

この認識の下、我が国のフラッグシップシステムについて、

- ・ 基本的なシステム構成及びシステム性能については、汎用部に加速部を加えたアーキテクチャで、2020年頃に1エクサフロップスレベルの理論ピーク演算性能の実現を目指すこと。
- ・ プロセッサについては、汎用部及び加速部ともに自主開発を基本方針とすること。
- ・ 開発スケジュールとして、平成26年度から平成27年度中ごろにかけて基本設計を行い、その後、平成29年度までに試作・詳細設計、平成31年度の早期までに製造（量産）、平成31年度中に設置・調整の実施を経て、2020年度（平成32年度）のシステム全系の運用を目指すとともに、その間、システムソフトウェアの整備

や数値計算ライブラリの構築なども行うこと。
などは、現時点で妥当であり、今後、この方針で基本設計に着手すること
が適当である。一方で、社会的・科学的課題が要求する性能、将来展
望も含めた課題の妥当性・十分性、コストやシステム設計の詳細につい
ては、「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」や基本設計の中で引
き続き検討していくものである。したがって、引き続き開発主体が本提
言の留意事項等への対応を続けることとし、その結果については、「将
来の HPCI システムのあり方の調査研究」の結果、HPCI コンソーシアム等
のユーザの意見等を踏まえ、平成 26 年度の前半を目途に改めて評価す
ることとする。

なお、システムサブ WG の提言等を踏まえ、文部科学省では、「京」の開
発・運用主体であり、計算科学の COE でもある理化学研究所をフラッグシ
ップシステムの開発主体に選定するとともに、「京」の 100 倍のアプリケ
ーション実効性能を開発目標として、フラッグシップシステムの開発プロジ
ェクト（エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト）に平成
26 年度から着手し^(注)、平成 32 年（2020 年）からの本格運用を目指すこと
としている。当該プロジェクトの推進に当たっては、引き続き、本ワーキン
ググループやシステムサブ WG の提言等が十分に尊重されることを期待す
る。

(注) 平成 26 年度政府予算案の段階。

3. アプリケーション開発の在り方

(1) 共通基盤としてのソフトウェア開発の在り方

今後のアプリケーションソフトウェアの開発に当たっては、分野横断的に利用できる共通基盤となるライブラリやミドルウェアの整備が重要であり、その開発をシステムの開発と並行して行うべきである。

ライブラリ等の開発には、開発しているシステムの知見が不可欠であるとともに、計算機科学の研究者とアプリケーション開発者の連携が重要である。また、特定の分野のみではなく、分野横断的に活用できるものであることから、様々な分野の研究者の意見を聞きつつ実施することが重要である。さら

に、アプリケーション開発者が容易に大規模並列システムの性能を引き出しうるライブラリ等が用意されていることが重要となる。なお、ライブラリを整備する際には、システムの性能を十分に引き出すための革新的なアルゴリズムが必要となる場合があることに留意が必要である。

このようなことから、リーディングマシンを開発・整備する主体が、ライブラリ等の整備の中核拠点として、9大学情報基盤センターや大学等とも連携しつつ、計算科学と計算機科学の研究者が共同して開発していくことが効率的・効果的であると考えられる。

(2) 各研究分野におけるソフトウェア開発の在り方

次期リーディングマシンのアプリケーション開発に向けて、新たな課題や社会的ニーズにも対応していくことが必要である。特に、フラッグシップシステムのターゲットアプリケーション開発については、我が国を取り巻く社会的・科学的課題やシステム特性、開発目標等を踏まえて、我が国唯一のフラッグシップシステムの計算資源を優先的に供する分野・課題を決めることになるため、計算科学技術の観点とともにアカデミアや産業界から我が国の将来を俯瞰した観点も入れていくべきである。

そのほか、次期リーディングマシンのアプリケーション開発については、下記の新たな分野のアプリケーション開発やアルゴリズム開発に向けた準備研究の成果を踏まえた上で、着手する必要がある。また、産業界での利用を進めるためには、開発者の視点のみではなく、ユーザである産業界やさらには社会のニーズを反映して開発すべきであり、ユーザから開発者にフィードバックする体制の構築にも留意すべきである。さらに、多様なコンピュータ言語への対応や、使いやすいユーザインタフェースの構築など技術面にも留意が必要である。

次期リーディングマシンのアプリケーション開発の具体的方策については、戦略5分野以外の新たな分野を対象としたに、次期リーディングマシンのアプリケーション開発に向けた準備研究や、HPCI戦略プログラムで実施している既存の5分野における次期リーディングマシンに向けた新たなアルゴリズム開発などの準備研究を実施することが重要である。さらに、画期的・先導的なアプリケーションを生み出すための研究を持続的に実施することも重要であり、これらの研究に関しては、次期リーディングマシンの開発・整備と並行して実施することが求められる。なお、これらの研究開発は、

幅広く様々なアイデアを募り、シーズを育てるという観点から、公募により行うことが考えられる。

~~その際、リーディングマシンのアプリケーション開発については、新たな分野のアプリケーション開発やアルゴリズム開発に向けた準備研究の成果を踏まえた上で、着手する必要がある。また、産業界での利用を進めるためには、開発者の視点のみではなく、ユーザである産業界やさらには社会のニーズを反映して開発すべきであり、ユーザから開発者にフィードバックする体制の構築にも留意すべきである。さらに、多様なコンピュータ言語への対応や、使いやすいユーザインタフェースの構築など技術面にも留意が必要である。~~

(3) ソフトウェアの利用促進について

開発したアプリケーションを広く普及し活用していくためには、商用ソフトウェア、国プロ開発アプリケーション等の特性の違いを認識し、それぞれの特性に応じた対応が必要となる。なお、本件に関しては、第4章及び別添の産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループ報告書も参照されたい。

産業界で多く利用されている商用ソフトウェアについては、大規模並列化に対応したライセンス形態が定着している状況とはいえ、リーディングマシンによる大規模並列化された実証研究では、莫大なライセンス料が必要になることが懸念されるため、開発コストを軽減することや大規模並列化アプリケーションの市場を拡大することなどにより、これらを解決していく必要がある。

国プロ開発アプリケーション等については、乗換えのコストをカバーするべく、既存のソフトウェアにはない画期的で先導的な機能（例えば、マルチフィジックス化などの複数のソフトウェアの統合や、より現実に近い新規な物理モデルの導入等）を重視した計画的な研究開発を行い、独自性を持たせることが必須となる。その際には、ユーザインタフェースの強化（プリ・ポスト処理機能、大規模データの可視化機能の強化）に取り組み、シミュレーションの大規模化・大規模並列化によるデータ量の膨大化に対応することも重要である。

また、国プロ開発アプリケーション等の維持管理を個人に頼るのではなく、コミュニティとして維持管理する体制、若しくは企業との連携も含めた体制

を構築することが必要である。このため、基盤となる重要なアプリケーションソフトウェアの将来を見据えた上で選定し、それらのソフトウェアについてユーザへの提供、バグの修正、バージョンアップ等を行う機能を有する体制を構築し、その運営についてはユーザ等から何らかの料金をとることなどにより、効率的に行えるようにすることが必要である。なおまた、対象となるアプリケーションソフトウェアについては、開発終了後の利用状況や得られた成果等について、一定期間ごとに評価していくことが必要である。

(4) その他

上記(1)及び(2)で述べたライブラリ等の開発や公募研究開発を行うに当たっては、平成24～25年度に実施している「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」を活用し、それぞれの分野におけるライブラリ等へのニーズや新規アルゴリズムの必要性、新しい分野として立ち上げるべき分野について、あらかじめ調査・研究しておくことが、円滑なアプリケーション開発の観点から重要である。

また、アプリケーションソフトウェアを開発する人材については、サイエンスとしての成果だけではなく、ソフトウェア開発に対する評価もコミュニティとして考えていく必要がある。

4. 計算科学技術に関する国際協力

今後のスーパーコンピュータの開発・利用については、解決すべき多くの技術的課題があり、我が国が強い分野は自国で開発を行い、海外が強い分野は協力して開発することにより、効果的、効率的な開発ができるため、国際協力を積極的に進めていくことが重要である。

国際協力を進めるに当たっては、まず我が国として他国との協力に必要な技術力を保持していることが重要であり、その上でどの部分を協力し、どの部分を競争するのかなど、我が国の競争力を維持するための戦略が必要である。こうした点に十分留意しつつ国際協力を進めていく必要がある。

国際協力の分野としては、ハードウェア、システムソフトウェア、アプリケーションの開発及びその利用研究等が考えられるが、スーパーコンピュータのハードウェアについては、主として民間企業が商業ベースで開発を行っ

ていることなどから、現時点で国際協力のニーズは明らかではない。

他方、システムソフトウェアについては、システムのさらなる超並列化に対応するための解決すべき研究開発課題も多く、一国で実施することは効率的ではないことや、国内外のベンダ間で基本的な部分は共通化されていることが、ユーザにとってもメリットがあることなどから、日本及び米国との間で、日米科学技術協力協定及び同協定に基づく文部科学省と米国エネルギー省との間の実施取極^(*)の下、協力の枠組み、具体的な協力プロジェクト等の検討が進められており、実現に向けて検討が進められていくことが期待される。

さらに、アプリケーションの共同開発やスーパーコンピュータを利用した共同研究などについても、欧米に限らずアジアの国々との連携も視野に入れ、国際協力の推進方策について検討していくことが重要である。

* IMPLEMENTING ARRANGEMENT BETWEEN THE MINISTRY OF EDUCATION, CULTURE, SPORTS, SCIENCE AND TECHNOLOGY OF JAPAN AND THE DEPARTMENT OF ENERGY OF THE UNITED STATES OF AMERICA CONCERNING COOPERATION IN RESEARCH AND DEVELOPMENT IN ENERGY AND RELATED FIELDS

第4章 利用の在り方，人材育成等

1. 利用の在り方

計算科学技術により我が国の科学技術の一層の発展，産業競争力の強化を図っていくためには，計算科学技術インフラの整備・運用のみならず，利用者の裾野拡大を含めて，その利用促進が不可欠である。特に，スーパーコンピュータの産業利用は，イノベーション創出等を通じた我が国の産業競争力の強化だけでなく，計算科学技術の成果の社会への還元などの観点からも，その利用の促進を図ることが重要である。

このためには，利用手続の簡素化，使いやすいアプリケーションの提供，利用者支援などの利用環境の整備を行うとともに，実用化を目指した実証研究段階から実用的な利用の段階まで，産業界の利用段階にあわせた枠組みの構築や，産業界が利用するアプリケーション環境の整備を行い，利用者がより効果的・効率的に成果を創出できるようにする必要がある。

以下にスーパーコンピュータの利用促進方策をまとめるが，（1）では利用全般で見られる現状に対する促進方策について，（2）では主に産業界の利用で見られる状況を考慮した促進方策について提言する。なお，（2）に関しては，別添の産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループ報告書も参照されたい。

（1）スーパーコンピュータの利用促進

スーパーコンピュータが広く社会で活用され，科学技術の一層の発展，産業競争力の強化に貢献していくためには，「京」だけでなく，HPCI 資源全体で，利用者がその利用目的やスキルに応じ，適切にスーパーコンピュータを利用できるようにすることが重要である。

【基本方針】

そのため，HPCI 等のシステムの運用に関しては，

- ・ 審査・採択に要する期間やシステム運用上の制約等を考慮した上で，可能な限り，希望するときに，平易な方法でスーパーコンピュータを利用できるようにすること。
- ・ 利用者のスキルや希望に応じ，より大規模なスーパーコンピュータに

ステップアップできるようにすることや、必要な支援を受けられるようにすること。

などが重要である。また、アプリケーションに関しては、

・ トップレベルのスーパーコンピュータを対象としたアプリケーションの開発・移植作業の負担軽減のための機会として、テストベッド(アプリケーションの性能測定や移植ができる環境)が用意されることや、技術的支援体制が構築されること。

・ 画期的・先導的な機能を有する使いやすいアプリケーションが持続的に開発されることや、利用者支援体制を含む維持・管理体制が構築されること。

などが重要である。

【利用促進方策】

上記の基本方針及び現在のスーパーコンピュータの利用に係る課題を踏まえると、以下のような促進方策が考えられる。

○スーパーコンピュータ利用の容易化

スーパーコンピュータの潜在的な利用要求はアカデミア及び産業界共に多いと考えられるが、HPCI 資源を利用する場合の採択条件や運用条件といったハードルに加えて、これまでスーパーコンピュータを用いてこなかった者にとっては、その利用自体をハードルに感じてしまう傾向にあるため、ユーザがそれらを克服することを支援することが必要である。

このため、共用法に基づく登録機関や HPCI 運用事務局・HPCI 資源を提供する機関等の運用側は、相談窓口等における利用申請の相談や利用方法の丁寧な説明等の利用者支援を引き続き実施することが重要である。また、相談窓口等に寄せられたユーザニーズを踏まえて、利用者支援の充実を図るとともに、成果の創出の観点も考慮した上で、システムの運用に適宜反映することが重要である。その際、9 大学情報基盤センター等の一般利用においては、ユーザニーズを聞きながら時間をかけて適切な利用システムを構築してきた実績があることを手本として、HPCI 資源についても、これまで以上にユーザニーズに配慮したサービス提供を心がけるべきである。

○HPCI 資源の有効利用

我が国のスーパーコンピュータ資源を効率的に活用していくためには、「京」だけでなく、HPCI 資源全体が利用目的や計算規模に応じて適切に利用できるようにすることが必要である。

このため、HPCI 資源を提供している機関はそれぞれのシステムの特徴（システムに適したアルゴリズム情報等を含む。）を打ち出し、その特徴に適した使い方を勧めるという方法も考えられる。また、HPCI 運用事務局は、システムの特徴やそこで得られた成果を広く公表し、「京」以外の HPCI 資源の知名度を上げていくことで、ユーザを広げていくことも必要である。

さらに、HPCI 資源の利用のメリットの一つとしては、HPCI 共用ストレージの整備によって、大容量のデータに場所を気にせずにアクセスできること等である。HPCI コンソーシアムや 9 大学情報基盤センター等は、このようなメリットを強調し、これら HPCI システムにおいて共用されているシステムの利用を促すことが必要である。

○スーパーコンピュータ利用におけるステップアップ

スーパーコンピュータ利用の裾野を広げるためには、ローエンドのシステムから「京」等のトップレベルのシステムまでステップアップできる環境を整備することが必要である。また、トップレベルのスーパーコンピュータにおいて、アプリケーションの開発と検証が簡単にできる環境が必要である。

このため、現状では HPCI 資源におけるステップアップの手段は利用者に任されているが、将来的には運用側が、スキルや計算の規模に応じてステップアップできる環境に利用者を誘導する必要がある。例えば、HPCI 戦略プログラムにおける戦略機関（以下、単に「戦略機関」という。）等が様々なステップアップの方法を検証しているので、それをロールモデルとして、HPCI 運用事務局といった利用促進業務を行う機関が、当該ロールモデルに基づく取組を実施することが考えられる。

また、トップレベルのスーパーコンピュータにおけるアプリケーションの開発と検証については、前述のとおり、運用側による利用者支援の充実を図るとともに、下記（2）の商用ソフトウェアに係る課題と解決方策の中で示すように、アプリケーションの大規模並列化・大規模化の実現のためやトップレベルスーパーコンピュータへの移植作業の負担軽

減のために、テストベッドを設けることなどが重要である。

(2) スーパーコンピュータの産業利用の促進

スーパーコンピュータの産業利用により、

- ・ 我が国の国際的な産業競争力が強化されること。
- ・ スーパーコンピュータ本体事業、アプリケーション事業及び利用に関連する事業（HPC クラウドなど）が進展し、全体として、我が国のスーパーコンピューティング技術の競争力の強化に資すること。
- ・ 将来的な社会的・科学的課題が明確になり、それをアカデミアへフィードバックをかけることによって、大学等における研究が更に進展すること。

が期待されるため、アカデミアとは一部異なる利用の現状を踏まえ、産業利用を促進していくことが重要である。

【産業利用の現状】

現在、産業界では、基本的にその時代の世界トップの計算機の能力の 1/10 から 1/100 程度の能力に相当する計算資源を用いた実証研究が行われ（「京」の産業利用を例にとると、1,000 ノードから 1 万ノードを利用した実証研究）、実証研究が成功した場合には、数年後の実用化を目指した実用化研究が実施される。実用段階においては、多くの場合、プリ・ポスト処理等の機能や利用支援が充実し、検証が十分に行われている商用ソフトウェアを利用して、数十コアレベルまでの並列計算が行われている。

また、大規模並列化による、シミュレーションの高速化・高精度化やマルチフィジックス・マルチスケール現象のシミュレーションの実用化にも大きな期待が集まっているが、まだ実用的に利用されている状況にはない。このような大規模並列化によるシミュレーションの高度化・新展開の目的のためには、実用化を目指した実証研究段階において、アカデミアの協力の下で、国プロ開発アプリケーション等を利用して、1,000 ノードから 1 万ノードレベルの大規模並列計算が実施されている。このための計算資源としては、「京」を頂点とした HPCI 資源が利用されている。

【産業利用促進方策】

(1) で述べた基本方針や上記の産業利用の現状を踏まえると、以下のよ

うな促進方策が考えられる。

○商用ソフトウェアと国プロ開発アプリケーション等との関係の整理

商用ソフトウェアは直近の産業界のニーズ（実用段階のニーズ）を重視して開発を進めるため、国プロ開発アプリケーション等は、商用ソフトウェアを先導する観点も含め、その時代のトップレベルのスーパーコンピュータ、すなわち数年後の産業界において実用に供される規模のスーパーコンピュータを利用した実証研究に資するアプリケーションとすべきである。

○商用ソフトウェアに対する支援

商用のソフトウェアは既に検証も十分に行われており、産業界においてもその利用のための豊富なノウハウが蓄積されているため、商用ソフトウェアを高並列環境で利用したいというニーズは大きく、この傾向は今後ますます強まることが予想される。しかし、現状では商用のソフトウェアの開発者やベンダも大規模並列環境にソフトウェアを移植したり、チューニングしたりする環境が十分に整っているとは言い難い。

このため、「京」の産業利用枠の確保及び利用支援を引き続き確実に実施するとともに、国やハードウェアベンダは、アプリケーションの大規模並列化・大規模化の実現やトップレベルスーパーコンピュータへの移植作業の負担軽減のための機会として、テストベッドを設け、希望するアプリケーション開発者やそのアプリケーションを利用するユーザがそれを利用できる環境を整える必要がある。また、アプリケーションの高度化を目指して移植を希望する者に対しては、国やベンダが協力した技術的支援体制も必要である。

○国プロ開発アプリケーション等の普及促進と中長期的高度化

産業界では、商用ソフトウェアにはない画期的・先導的な機能を有する国プロ開発アプリケーション等に対する期待が大きい一方で、その利用が進まない理由としては、産業界においては伝統的な商用ソフトウェアの利用が大部分を占めており、蓄積されているデータも当該ソフトウェアを利用して作成されたものなので、国プロ開発アプリケーション等を利用するには多大な乗換えコストが発生することや、国プロ開発アプリケーション等の中には必ずしもユーザの要望や使いやすさを意識して

いないものもあるので、乗換えコストばかりが際立ってしまうことが考えられる。しかし、国プロ開発アプリケーション等については、それらが持っている画期的・先導的な機能がスーパーコンピュータの産業利用の促進及び高度化には不可欠なものなので、開発までで終わることなく、責任を持って普及させていくべきである。それにより、産業界の研究開発を大規模並列化へと誘導することとなり、ひいては将来的な商用ソフトウェアの高度化にも資することとなる。

このため、国は、国プロ開発アプリケーションについて、画期的・先導的な機能を重視して計画的な開発を行うとともに、アプリケーションの利用支援（使いやすくするための機能や膨大な量のデータを扱うことができるプリ・ポスト処理機能等の導入を行うこと、ユーザニーズの高いアプリケーションを対象として支援体制の構築を含む継続的な維持・管理を行うことなど）を充実させることで、商用ソフトウェアとの住み分けを意識しながら、その普及を加速する必要がある。

さらに、次世代の実証研究に利用されるアプリケーションを高度化するため、国は、産業界のニーズを踏まえた基礎基盤的な研究開発を推進し、その成果を普及するとともに、画期的・先導的な機能を持続的に生み出すため、アプリケーションの基礎となる理論（モデル、解法）を精緻化する研究や人材育成を支援していく必要がある。

計算科学技術により我が国の科学技術の一層の発展、産業競争力の強化を図っていくためには、計算科学技術インフラの整備・運用のみならず、利用手続の簡素化、使いやすいアプリケーションの提供、ユーザサポートなどの利用環境を整備し、利用者がより効果的・効率的に成果を創出できるようにするとともに、利用者の裾野の拡大を図っていくことが重要である。

また、我が国の計算科学技術インフラの整備・運用を今後とも継続的に進めていくため、適切な利用料金の考え方について検討していくことも必要である。特にスーパーコンピュータの産業利用は、イノベーション創出等を通じた我が国の産業競争力の強化や、計算科学技術の成果の社会への還元などの観点から重要であり、その利用の促進を図ることが重要である。

そのためには、試験利用から本格利用まで、企業の利用段階にあわせた枠組みの構築、地理的バランスも含めた利用支援の実施、産業界が利用するアプリケーション環境の整備等が有効と考えられる。

こうしたことも踏まえ、産業利用も含めたスーパーコンピュータの利用促

進の方策については、今後のシステム整備の方向性や企業の利用状況にも留意しつつ、更に具体的な検討が必要である。

2. 人材育成等

我が国の計算科学技術を今後とも継続的に発展させていくためには、それを担う人材（以下「HPC 人材」という。）をいかに育成していくかが重要である。特に、超並列化などのスーパーコンピュータ技術の進展に伴い、それに対応できる人材の確保が困難になっており、そうした人材の育成が大きな課題になっている。また、我が国の生産性向上や各種課題解決のためには、先端的な研究を行う人材ばかりではなく、幅広くスーパーコンピュータを適切に利用できる人材、特に、産業競争力の強化に貢献するような「産業界で求められる人材」を育成することは重要である。

また、計算科学の人材の育成だけではなく、国家基幹技術である世界最高水準のスーパーコンピュータの開発技術の発展的継承と人材の持続的な育成・確保のためには、計算機科学の人材（ハードウェアを設計できる人材、システムソフトウェア等を開発設計できる人材）の育成も重要である。

【これまでの取組の例】

HPC 人材の育成に係る提言はこれまでも行われており、それらも踏まえて、例えば以下のような取組が実施されている。

アカデミアを中心とした人材育成に関しては、大学等において、大規模計算機におけるプログラミング技術の習得を目的とした教育プログラムを実施しており、また、産業界の人材も対象とした実習付の講習会を開催し、スーパーコンピュータの利用法・プログラミング言語、共通基盤としての数値計算法、チューニング・並列化技術の教育を実施している。また、受講者個人に適したカリキュラムを提案し、必要な教育のみを受けられるようにする仕組みの整備も実施している。

これらの他、理化学研究所では、産業界から出向者やインターンシップを各研究チームに受け入れ、その中でライブラリやアプリケーションの開発に関わることを通して、利用支援技術者の育成を行うことが検討されている。また、戦略機関では、成果公開のためのシンポジウムを開くだけでなく、開発したアプリケーションを使った実習を含めた講習会が実施されており、その普及活動が行われている。

産業界における人材の育成に関しては、コミュニティが中心になって、アプリケーションの講習会・実習会を実施するだけでなく、大学のスーパーコンピュータや「京」などを利用できる環境を用意することで、大規模シミュレーションを適切に実施できる人材の育成を行っている。

このように、大学教育や理化学研究所、戦略機関等が開講している講習会の中で、様々な取組が実施されているものの、効果的・効率的な人材育成のためには、キャリアパスや業績評価も考慮した教育の達成基準や体系的な教育プログラムを明確にする必要がある。また、大学教育においては、設計・製造にシミュレーションで得られた知見を活かす力など、産業界で求められる力を育て、すぐに活躍できる人材を育成することが期待されている。さらに、産業界における人材の育成に関しては、現状の短期的な講習会では十分に対応できていない内容、すなわち、産業界で求められる力をつけるための体系だった教育を受ける機会を増やす必要がある。

【HPC 人材の育成方策】

HPC 人材の育成に係るこれまでの取組や現状を踏まえると、以下のような育成方策が考えられる。

○育成すべき人材像等の明確化

HPC 人材の効果的育成のためには、育成すべき人材像を明確化した上で、必要な教育を整理する必要がある。これまでの提言や昨今の産業界で求められる人材像からすると、HPC 人材としては、以下の 6 つのタイプが考えられる。

・ 作れる人

大規模並列アプリケーションを開発できる人材。

・ 使える人

既存の大規模並列アプリケーションを適切に利用できる人材。

・ 支える人

既存の大規模並列アプリケーションを最適化等研究支援できる人材。

・ つなげる人

社会的問題の解決や創造的開発のために計算科学以外の他分野も含めたシーズとニーズをつなぐ人材。

・ まとめる人

教育機関や産業界において、プロジェクトを戦略的にマネジメント

できる人材。

・教える人

教育機関や産業界において、教育的立場にある人材。

これらのうち、「作れる人」・「使える人」・「支える人」の育成については、大学における基礎教育・ベーシックレベルの教育を受けた人材が、それぞれのタイプの育成に応じた専門的な教育（アドバンスレベル・エキスパートレベルの教育）に移行するといった教育段階が考えられる。「つなげる人」・「まとめる人」の育成については、「作れる人」・「使える人」・「支える人」のそれぞれに応じた力を個別に持つのではなく、どれか一つ（場合によっては、複数）の深い専門性とその周りの幅広い知識による複合的な力が必要であり、そのような力をつけるための教育段階が必要である。

○スキル標準の確立と運用

それぞれの教育は、それを受ける人材が望むタイプやレベルに応じて、必要とされる内容等が過不足なく実施されることが重要であるため、それぞれのタイプに応じた教育の達成基準や体系的な教育プログラムが明確である必要がある。

それら明確化のためには、各人材のタイプ毎に求められる能力や経験を具体的に示し整理してまとめたスキル標準を確立することが考えられる。このスキル標準は、アカデミアと産業界で求められる人材のニーズギャップを防ぐことに有効であると期待され、また、自身が利用できる計算資源の最大規模が明確になるので、スーパーコンピュータ利用のステップアップの際の選択基準になり得ると期待される。なお、スキル標準の構築・運用には、産業界のニーズを踏まえる必要があるが、今後それらをどこが担うか等について、更に議論を深める必要がある。

○産業界で求められる人材の育成

産業界においては、シミュレーションを設計・製造に活用する際の論点として、

- ・シミュレーション技術の不足よりも、課題の設定や、それに合う解析モデルを作ることや境界条件をうまく設定できる人材が不足している。また、実行して得た結果を理解、解釈できる人材や、その解析結果を製品開発に反映できる人材が不足している。

- ・ ソフトウェアの中身を理解している人材が不足しており、そのソフトウェアの限界の把握ができていない。
- ・ 知識や技術を伝授するコーディネータや、問題の解析規模等に対応した複数の技術を用いた解析全体を俯瞰できる人材が不足している。

というように、使いこなせる人材の不足が挙げられている。

そのため、人材育成の内容に関しては、使いこなせる人材を見据え、「作れる人」・「使える人」・「支える人」に必要な力のうち、どれか一つ（場合によっては、複数）の深い専門性とその周りの幅広い知識による複合的な力を持つ人材の育成や、マルチフィジックスなどの要求される横断的な課題に対応できる人材の育成を行う必要がある。この際、一般化された枠組みの中で対応することが難しいため、必要な内容に特化した教育を広く実施するためには、戦略機関がその役割を担うことが重要になる。

また、人材育成のタイミングに関しては、産業界を目指す学生に対し、産業界の現場に出ないと知ることができない事柄を学ぶための機会として、長期間に亘るインターンシップの枠組みを整備する必要がある。この際、インターン生自身・インターン生を受け入れる側が共にメリットとなる動機付けについての検討をする必要がある。さらに、産業界の人材がアカデミアに戻って更に深い教育を受けられる機会を作ることも重要である。この際、受入れ機関は、一般化された教育にとどまることなく、教育を受ける側の目的に応じた教育を実施することが重要であり、これに加えて、動機付けとして、学位や資格の取得の仕組みを設ける必要がある。場合によっては、産業界の者（その出身者も含む。）による、産業界の実情やニーズを考慮した教育を実施することが考えられる。

○その他

本節では現時点における HPC 人材の育成方策を議論したが、HPC システムによる大規模シミュレーションの利用自体が始まったばかりであり、時代の変化に対応した人材育成を担保するため、国や HPCI コンソーシアム等は、今後も定期的に各機関の人材育成をフォローアップすることが重要である。また、以下の項目については更に議論を深める必要がある。

- ・ 特定の分野だけに限られることなく、分野を超えた高度なアプリケーションを開発できる人材を育成するため、その評価の在り方やキ

キャリアパス・ロールモデルを確立すること。

- ・ 9 大学情報基盤センター等や理化学研究所、戦略機関等における特徴的な取組の連携を強化すること。また、当該取組の情報を一元的にまとめ、発信すること。

~~我が国の計算科学技術を今後とも継続的に発展させていくためには、それを支える人材をいかに育成していくかが重要である。特に、超並列化などのスーパーコンピュータ技術の進展に伴い、それに対応できる人材の確保が困難になっており、そうした人材の育成が大きな課題になっている。~~

~~また、人材育成の方策を検討する際には、育成する人材を~~

- ~~・ HPC 技術の研究開発をする人材（計算機科学と計算科学そのものを研究対象としている人材）~~
- ~~・ HPC 技術を利用する人材~~
- ~~・ 産業界で求められる人材~~

~~に分け、それぞれの目的に応じた育成策を実施することが適当である。その際、アカデミアの研究者を育てるための人材育成とともに、企業の間がアカデミアに戻って更に深い教育を受けられるような機会を作ることも重要である。~~

~~また、特定の分野だけではなく、分野を越えて高度なアプリケーションを開発できる人材の育成が求められており、評価の在り方やキャリアパスも含めて、研究コミュニティとしても考えていく必要がある。~~

~~こうしたことも踏まえ、今後の人材育成の方策について今後更に具体的な検討が必要である。~~

3. その他

今後とも計算科学技術の各施策を着実に進めていくためには、スーパーコンピュータの開発・利用について国民の理解と支持が不可欠である。このため、国、スーパーコンピュータ運用組織、関係研究者は、積極的に広報や情報発信等のアウトリーチ活動を行い、スーパーコンピュータ利用や研究開発の状況、得られた成果や今後期待される成果等について適切に国民に説明していくことが必要である。

なお、この章で示した利用の在り方、人材育成などについては、本ワーキンググループで更に調査検討を進め、平成 25 年度末を目途にとりまとめる最終報告に反映していくこととする。

参考資料

- 参考 1 ワーキンググループの設置について
- 参考 2 ワーキンググループ委員名簿
- 参考 3 ワーキンググループの検討経緯

HPCI 計画推進委員会

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループの設置について

平成 24 年 2 月 10 日

HPCI 計画推進委員会

1. 趣旨

現在、文部科学省では、計算科学技術政策の柱として、京速コンピュータ「京」を中核とし、多様なユーザーニーズに応える革新的な計算環境を実現する HPCI 計画を推進している。

一方、計算科学技術を巡る国内外の情勢は変化してきている。来年度には、「京」を中核とした HPCI の共用が始まり、システム整備からシステム活用による成果の創出が求められる段階に入るとともに、スーパーコンピュータ技術の今後の進展も見据え、HPCI システムを戦略的に高度化していくことも求められている。また、世界的には平成 30 年頃の実現を目指して、エクサスケールコンピューティングに向けた検討が本格化している。

こうした状況を踏まえ、今後 10 年程度を見据え、我が国の HPCI 計画の推進の在り方について必要事項を調査検討するために、HPCI 計画推進委員会のもとに、今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ（以下「ワーキンググループ」という。）を設置する。

2. 調査検討事項

- ・ 国内外の計算科学技術の動向
- ・ HPCI に対する利用者のニーズの把握
- ・ HPCI の活用で実現する科学的・社会的成果
- ・ 我が国において将来必要となる計算資源量の把握
- ・ HPCI システム構成の在り方

（HPCI を構成する計算機資源、ストレージ等の①配置についての地域特性、②規模特性、③利用に応えるシステム特性の在り方など）

- ・ HPCI 全体のネットワークや利用体制の在り方
- ・ 今後の研究開発の在り方
- ・ 必要となるコスト、費用対効果

3. 設置期間

平成 24 年 2 月 10 日から調査事項の終了までとする。

HPCI 計画推進委員会

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ委員名簿

	青木 慎也	京都大学基礎物理学研究所教授
	秋山 泰	東京工業大学大学院情報理工学研究科教授
	天野 吉和	富士通株式会社常勤監査役
主査代理	石川 裕	東京大学情報基盤センター長
	宇川 彰	筑波大学数理物質系教授
主査	小柳 義夫	神戸大学システム情報学研究科特命教授
	加藤 千幸	東京大学生産技術研究所教授
	金田 義行	海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクトリーダー
	喜連川 優	国立情報学研究所長／ 東京大学生産技術研究所教授（第15回より）
	小林 広明	東北大学サイバーサイエンスセンター長
	坂内 正夫	情報・システム研究機構理事／ 国立情報学研究所長（第14回まで，所属は当時）
	関口 和一	日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員
	関口 智嗣	産業技術総合研究所副研究統括
	善甫 康成	法政大学情報科学部教授
	高田 章	旭硝子株式会社中央研究所特任研究員／ スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
	常行 真司	東京大学大学院理学系研究科／物性研究所教授
	富田 浩文	理化学研究所計算科学研究機構 複合系気候科学研究チームチームリーダー
	中島 浩	京都大学学術情報メディアセンター長
	中村 春木	大阪大学理事補佐／大阪大学蛋白質研究所筆頭副所長
	平尾 公彦	理化学研究所計算科学研究機構長
	牧野 淳一郎	東京工業大学地球生命研究所主任研究員
	松尾 亜紀子	慶應義塾大学理工学部教授
	松岡 聡	東京工業大学学術国際情報センター教授
	村上 和彰	九州大学大学院システム情報科学研究院教授
	室井 ちあし	気象庁予報部数値予報課数値予報班長
	渡邊 國彦	海洋研究開発機構地球シミュレータセンター長

(50音順，平成25年6月25日現在)

ワーキンググループの検討経緯

第1回（平成24年4月18日（水）17時～19時）

- ・ ワーキンググループの今後の進め方
- ・ HPCIに関わるこれまでの取組等
- ・ スパコン利用の必要性、意義、重要性に関するヒアリング
（東京大学物性研究所，海洋研究開発機構，スーパーコンピューティング
技術産業応用協議会）
- ・ 意見交換

第2回（平成24年5月14日（月）17時～19時）

- ・ 合同作業部会の報告
- ・ HPC技術の動向に関するヒアリング（東京工業大学，科学技術政策研究所）
- ・ 今後の調査・検討課題について

第3回（平成24年5月30日（水）15時～17時）

- ・ HPC技術の動向に関するヒアリング（東京工業大学，日本電気株式会社，
株式会社日立製作所，富士通株式会社）
- ・ 国内の計算資源について
- ・ 今後の調査・検討課題について

第4回（平成24年7月4日（水）17時～19時）

- ・ スパコン利用に関するヒアリング（統計数理研究所，東京工業大学）
- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（国内外の動向，計算科学技術の
利用状況，今後の必要性）

第5回（平成24年8月10日（金）10時～12時）

- ・ 将来のHPCIシステムのあり方の調査研究からの報告
- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（将来の我が国における計算科学
技術システムの在り方）

第6回（平成24年9月11日（火）17時～19時）

- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（将来の我が国における計算科学技術システムの在り方）

第7回（平成24年10月10日（水）17時～19時）

- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（計算科学技術に係る研究開発の方向性）

第8回（平成24年10月31日（水）15時～17時）

- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（計算科学技術に係る研究開発の方向性）

第9回（平成24年11月21日（水）15時～17時）

- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（計算科学技術に係る研究開発の方向性，利用の在り方）

第10回（平成24年12月6日（木）17時～19時）

- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（利用の在り方，その他）

第11回（平成25年1月25日（金）17時～19時）

- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（将来の我が国における計算科学技術システムの在り方）

第12回（平成25年2月18日（月）17時～19時）

- ・ 今後の調査・検討課題について意見交換（アプリケーション開発の在り方）
- ・ これまでの議論の論点整理（案）について

第13回（平成25年3月11日（月）17時～19時）

- ・ 「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」のヒアリング(アプリチーム)
- ・ HPCIコンソーシアムの提言についてヒアリング

第 14 回（平成 25 年 3 月 27 日（水）16 時～19 時）

- ・ 「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」のヒアリング（システム設計研究チーム）
- ・ 「京」の波及効果に関するヒアリング（富士通株式会社）
- ・ リーディングマシンについて

第 15 回（平成 25 年 4 月 19 日（金）10 時～12 時）

- ・ スーパーコンピュータ「京」の事後評価について
- ・ 中間報告案の取りまとめに向けた検討

第 16 回（平成 25 年 5 月 8 日（水）17 時～19 時）

- ・ 中間報告（案）の取りまとめ
- ・ HPCI システムの利用についてヒアリング（高度情報科学技術研究機構）

第 17 回（平成 25 年 6 月 3 日（月）17 時～19 時）（非公開）

- ・ フラッグシップシステムについて（理化学研究所からのヒアリング）

第 18 回（平成 25 年 6 月 25 日（火）17 時～19 時）

- ・ 中間報告の取りまとめ
- ・ 産業利用の現状と課題，利用促進の取組についてヒアリング（高度情報科学技術研究機構，計算科学振興財団）

第 19 回（平成 25 年 7 月 22 日（月）17 時～19 時）

- ・ 産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループの設置について
- ・ 利用の在り方についてヒアリング（スーパーコンピューティング技術産業応用協議会，東洋紡株式会社，株式会社竹中工務店）
- ・ システム検討サブワーキンググループの報告

第 20 回（平成 25 年 8 月 30 日（金）15 時～17 時）

- ・ システム検討サブワーキンググループの報告
- ・ 利用の在り方中間整理（前回までの取りまとめ）
- ・ 計算科学技術インフラの戦略的開発・整備についてヒアリング（東北大学，海洋研究開発機構）

第 21 回（平成 25 年 9 月 30 日（月） 17 時～19 時）

- ・ 計算科学技術インフラの戦略的開発・整備についてヒアリング（東京大学，京都大学，東京工業大学）
- ・ 人材育成についてのヒアリング
- ・ 産業利用アプリケーション検討サブワーキンググループからの報告

第 22 回（平成 25 年 10 月 21 日（月） 15 時～17 時）

- ・ 利用の在り方について
- ・ 人材育成についてのヒアリング（スーパーコンピューティング技術産業応用協議会，NPO 法人バイオグリッドセンター関西，理化学研究所計算科学研究機構）

第 23 回（平成 25 年 11 月 13 日（水） 17 時～19 時）

- ・ 人材育成について（神戸大学，HPCI 戦略プログラム分野 2 からのヒアリング）
- ・ エクサスケール時代以降のフラッグシップシステムについて

第 24 回（平成 26 年 1 月 31 日（金） 10 時～12 時）

- ・ HPCI コンソーシアムの提言についてヒアリング
- ・ 最終報告（案）について

|

用語集

アクセラレータ	主プロセッサを補助して演算速度を加速する装置。
確率微分方程式	偶然が支配する現象の記述に用いられる微分方程式。
均質化法	マルチスケール構造（細胞から心臓）の力学を解くための数的手法。具体的には、心臓全体のモデルを形作る要素数分だけ内部構造まで模擬した細胞のモデルを用意して、すべての細胞モデルと心臓モデルを同時に解くことを行う。
結晶方位依存性	固体の物性が原子配列の方向に応じて異なるという性質。
格子歪効果	同一の結晶構造を持つ物質群で、原子の種類ごとに大きさが異なることで、結晶構造が歪むことにより異なる物性が生じる効果。
コンパイラ	プログラムをプロセッサコアが実行する機械語に翻訳するソフトウェア。
サルコメア	サルコメア（筋節）は、筋細胞における筋繊維の最小単位。モータータンパク質であるミオシンが連なってできるミオシンフィラメントとアクチンフィラメントが互いに入れ子のように入り合い、規則的に繰り返した構造になっており、この二つのフィラメントが滑り運動することが筋繊維の収縮のもととなっている。
サルコメア・タンパク質	サルコメア（⇒「サルコメア」参照）を構成するタンパク質（ミオシン、アクチンなど）の総称。
疾病因子	疾病の発症要因で、特定が可能な場合は疾病を引き起こすタンパク質（標的タンパク質）にまで絞られる。がんなどに代表される生活習慣病は多因子によるもので、個人の持つ遺伝的要因と生活習慣などが複雑に関係して発症すると考えられ、関連する一群のタンパク質として同定される。
重力進化	自然界に存在する四つの相互作用のうち、重力相互作用による時間発展の効果。

シリコン・ナノワイヤ	直径数～数十ナノメートルのワイヤ状に加工したシリコン。トランジスタとして応用する際、通常は電極を平板状のシリコンに積み重ねて形成するのに対し、シリコン・ナノワイヤでは、円筒形の周囲を囲むように電極を形成する。次世代半導体として有望視されている。
シリコンインターポーザ	複数の半導体チップを取り付け、それらの電気信号を相互接続する回路を持つシリコン基板。
スタックメモリ	メモリチップを複数積層したもの。
ダークマター粒子	ダークマターは宇宙全体の物質エネルギーのうち約2割を占め、重力以外にはほとんど相互作用がない物質であり、素粒子としての正体は解明されていない。ダークマターを質量を持った粒子として表現したものがダークマター粒子。
多軌道効果	電子が入る軌道が複数あることにより、異なる物性が生じる効果。
多次元トーラス結合	トーラス結合（⇒「トーラス結合」参照）の次元を3次元以上に増やしたもの。3次元では立方体を構成する。BlueGene/Qでは5次元トーラス、「京」では6次元トーラスを基本としたTofuネットワークを使用している。
強相関量子多体系	電子間の複雑な相互作用で、高温超伝導などの多彩な物性を示す物質群。
低レイテンシ	主にノード（⇒「ノード」参照）間の通信において、通信を開始してから相手に届いて完了するまでの遅延時間（レイテンシ）が短いこと。
データ同化	シミュレーションに実測データを取り込み、現実で起こっていることをより精密に再現する手法。例えば、気象気候分野では初期値の作成のほか、過去数十年間の全球大気運動の時系列を作成するのに用いられる。手法自体は他分野への応用が可能で、今後期待される手法の一つ。
テラ、ペタ、エクサ	テラ=10 ¹² ，ペタ=10 ¹⁵ ，エクサ=10 ¹⁸ を表す。

電弱相互作用	電磁気力と弱い力を統合した相互作用。この理論を電弱統一理論という。弱い力は電磁気力と比較して力が非常に弱いことから名付けられ、素粒子レベルの非常に近い範囲にしか作用しない。
トーラス結合	ノード（⇒「ノード」参照）間の結合方式の一つ。二次元の場合、平面格子上で格子点にノードを配置し、4本の腕（リンク）で水平方向、垂直方向を相互に接続する。さらに上端と下端、左端と右端を接続し端のない構造になる。
熱帯季節内変動	熱帯大気中には、季節変化より短い30～60日程度の周期で対流活動活発域が強弱を繰り返す変動が見られ、これを熱帯季節内変動と呼んでいる。特に、赤道に沿って対流活動活発域が東進する現象をマッデンジュリアン振動と呼ぶ。熱帯季節内変動に伴う対流活動活発域からしばしば台風が発生する。
ノード	計算を実行する一つの基本単位。一つの基本ソフト（OS）が動作しているプロセッサとメモリの組を指し、1台の独立した計算機として振る舞う。
バリオン	素粒子であるクォーク三つから構成される複合粒子。陽子、中性子など。
肥大型心筋症	高血圧、心臓弁膜症などの明らかな原因がないにも関わらず、心臓の壁が局所的に厚くなる（肥大）疾患で心不全や若年の突然死の原因ともなる。家族性に発症することが多いため遺伝子解析が進められミオシンを中心としたサルコメア・タンパク質の遺伝子異常が発症と関係していることが同定されているが、心肥大や突然死に至るメカニズムについてはいまだ不明の点が多い。
標的タンパク質	疾病の原因に関わっているタンパク質で、創薬の対象（標的）となるタンパク質のこと。このタンパク質の働きを制限する（化合物を使ってその機能を阻害する）ことで疾病の治療が可能となる。
不揮発性メモリ	電源を供給しなくても記憶を保持できるメモリ。フラッシュメモリなどがある。
浮動小数点演算	コンピュータ内部で実数を表現するための形式である浮動小数点数を用いた演算を言う。一般に、整数演算より演算に時間がかかるため、整数演算とは区別して扱うことが多い。

分散メモリ，共有メモリ	ある計算ノードから別の計算ノードのメモリを直接参照することができないのが分散メモリであり，参照可能なのが共有メモリである。メモリを参照できない場合は，参照する前にデータ通信が必要となる。
分子動力学シミュレーション	原子一つ一つに対するニュートンの運動方程式を数値的に解いて，物質の構造や動きを研究するシミュレーションの方法。
マルチコアプロセッサ	一つの半導体チップの中に数個から十数個程度の演算コア（演算装置）が含まれているもの。各コアはそれぞれ異なる処理を行うことができる。現在は組み込み用からサーバ用までマルチコアプロセッサが広く使われている。
マルチスケール計算手法	ナノスケール，メゾスケール，マクロスケールを組み合わせた計算を行う手法。
マルチフェロイックス材料	電場をかけると磁石になったり，磁場をかけると電子の分布が変化する材料。
ミドルウェア	オペレーティングシステム（OS）とアプリケーションとの中間に位置し，アプリケーションとは別のプログラムとして動作するソフトウェア。
メッセージ通信	ある計算ノード（⇒「ノード」参照）のデータを他の計算ノードに送るための機能。
メニーコアプロセッサ	1つの半導体チップの中に50個程度以上の演算コア（演算装置）が含まれているもの。各コアはそれぞれ異なる処理を行うことができる。マルチコアプロセッサ（⇒「マルチコアプロセッサ」参照）に比べると，単純なコアを多数搭載することでより高い性能，電力効率を実現する。
メモリ階層	プログラムやデータはメモリ上に置かれ，プロセッサが次々に読み込んで処理をしていく。このとき，プロセッサコアに最も近い方から，最も高速なレジスタ，キャッシュメモリ（高速小容量から中低速大容量までの複数のレベルを組み合わせる），低速な主記憶（メインメモリ，いわゆる「メモリ」と言うところの部分を指す）のような複数の階層から構成される。
メモリバンド幅	プロセッサとメモリとの間で単位時間あたりにやりとりできるデータ量。

ライブラリ	ソフトウェアを部品化し、ユーザがよく使う機能をまとめたもの。例えば行列演算など線形代数ライブラリとして BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) などが広く使われている。
理論演算性能	プロセッサ中の演算器の総数と各演算器が単位時間あたりに処理できる演算数などを元に計算した理想的な条件での性能値。
B/F 値	Byte per Flop 値 システムが提供できる理論メモリバンド幅 (⇒「メモリバンド幅」参照) と理論浮動小数点演算性能 (⇒「浮動小数点演算」「理論演算性能」参照) の比。B/F 値が小さいということは、演算能力に比べてプロセッサメモリ間のデータ転送能力が低いことを意味する。頻繁にメモリを参照しながら計算を進めるアプリケーションでは高い B/F 値が要求される。
DSL	Domain Specific Language 特定分野のアプリケーションに向けたプログラミング言語の一種で、プログラム開発を容易にしたり、高い性能を得やすくするなどの利点がある。
GPU	Graphics Processing Unit 元々は画像表示の際に必要な様々な処理を行うために設計された半導体チップ。近年は汎用の計算にも使えるように工夫されている。汎用プロセッサに比べて理論性能が高く、コストパフォーマンス、電力効率に優れている。
<u>Green500</u>	<u>TOP500 リスト (⇒「TOP500 リスト」参照) にランキングされたスーパーコンピュータによる、電力当たり性能のランキング。</u>
High-Radix ネットワーク	ノード (⇒「ノード参照」) 間の結合方式の一種で、ノードからトーラス結合 (⇒「トーラス結合」参照) などよりも多数の腕 (リンク) を出す (=High-Radix) ことによって、相手ノードにたどり着くまでの距離 (中継ノード数) を短くすることができる。Cray 社 Aries チップによる Dragonfly ネットワークがある。
HPC	High Performance Computing 大規模かつ非常に高い処理性能を要求する計算やデータ処理。

HPC Challenge Award Competition	HPC Challenge Award Competition 年 1 回、HPC システムを様々な性能指標で評価し、上位のシステムを表彰する。Global HPL (Linpack の一種)、Global Random Access (メモリのランダムアクセス)、EP STREAM Triad (メモリバンド幅)、Global FFT (高速フーリエ変換) の 4 部門がある。
HPCC Award	
Linpack	米国のテネシー大学の J. Dongarra 博士らによって開発された行列計算による連立一次方程式の解法プログラムで、スーパーコンピュータの性能をランキングしたの世界的な順位を示す TOP500 リスト (⇒「TOP500 リスト」参照) (毎年 6 月と 11 月に発表) を作成するために使われている。
MPI	Message Passing Interface 分散メモリ型の計算に必要なメッセージ通信を行うための標準規格ライブラリ (⇒「ライブラリ」参照)。
OpenACC	アクセラレータを持つシステムにおいてプログラム記述を容易にするための記法。OpenMP に似た指示文でアクセラレータへのプログラムを指定する。
OpenMP	マルチコアプロセッサなどにおいて並列プログラムを記述するための標準化された記法。指示文を使って簡易に並列化を指示できる。
PGAS 言語	Partitioned Global Address Space 言語 分散メモリ環境において、実際にはノード (⇒「ノード」参照) ごとに異なるメモリを、システム全体で単一のメモリとして扱う記法を取り入れたプログラミング言語。
SIMD 演算ユニット	Single Instruction Multiple Data プロセッサに内蔵され、一つの命令で複数のデータを同時に処理する演算器からなる。同時処理数を増やすことで高い理論演算性能を得られ電力効率も高いが、有効に活用するには優れたコンパイラが必要になる。
SoC 技術	System on a Chip 技術 一つの半導体チップ上にシステムとして必要な一連の機能を集積する技術。
TOP500 リスト	<u>世界のスーパーコンピュータの性能ランキング。Linpack (⇒「Linpack」参照) による演算性能を上位 500 位までランキングしたもので、毎年 6 月及び 11 月に更新される。</u>

2.5 次元実装	複数の半導体チップ（プロセッサと DRAM など）をシリコンインターポーザ（⇒「シリコンインターポーザ」参照）を使って一体化すること。3次元実装（⇒「3次元実装」参照）と違い、チップ内を貫通する配線を作る必要がない。
3次元実装	半導体チップを複数（プロセッサと DRAM など）積層すること。チップ内に上下層間を貫通する配線を作る必要がある。