

HPCI 計画推進委員会

次期フラッグシップシステムに係る
システム検討ワーキンググループ報告書

平成 26 年 10 月

HPCI 計画推進委員会

次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ

目次

はじめに	1
1. これまでの検討	1
2. システムの開発方針について	3
3. 基本的なシステム構成及びその詳細について	4
4. 研究開発推進方策について	8
まとめ	14
参考資料	17

はじめに

最先端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「国家基幹技術」であり、各国がその開発競争にしのぎを削っている。

そのような中でも、CPU等の要素技術からシステム全体までを開発できる国は現時点では日本と米国のみである。我が国では、「京」の開発・整備を進め、10ペタフロップスという高い演算性能を実現するのみならず、Linpackの計算において実行効率93%、また全プロセッサ稼働時の連続実行時間29時間以上を達成し、高い実行効率や信頼性を実現した。さらに、高信頼性にも資する水冷システムの構築やプロセッサの効率化により、消費電力についても優れた性能(12.7 MW)を実現した。

しかし、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、欧米や中国では、数年の内に100ペタフロップス級のシステムを導入するという計画がある。

我が国としても、2020年を1つのターゲットイヤーとし、諸外国に対して競争力のあるフラッグシップシステム(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)を国家基幹技術として開発するとともに、その開発成果を国内外に展開することにより、社会的・科学的課題の解決に貢献していくことが必要である。

以上の状況を受け、平成26年度より、次期フラッグシップシステム、すなわち、ポスト「京」に係る開発プロジェクトを実施し、当該システムの開発主体である(独)理化学研究所(以下、「理研」という。)において、基本設計が実施されている。この検討されている次期フラッグシップシステムの基本設計について検討・評価を行うため、HPCI計画推進委員会の下で「次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ」(以下、「システム検討WG」という。)を開催し、開発主体から計5回のヒアリングを実施した。その評価結果を、今般報告書として取りまとめた。

1. これまでの検討

理研において次期フラッグシップシステムの基本設計を実施するに当たり、平成25年度にHPCI計画推進委員会の下で開催した「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」及び「システム検討サブワーキンググ

ループ」において、開発主体（当時は開発主体候補）が提案するシステムのイメージの技術的妥当性の評価を行った。その結果、システム構成や性能については、

- ・ 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
- ・ スケジュール及びコストについては、開発主体候補が提示したものとすること

は妥当であり、基本設計に着手していくことは適当と評価されたことから、平成26年度より基本設計が開始された。他方で、

- ・ フラッグシップシステムに求められる性能を、適切な根拠に基づいて明確化する必要がある。その際、求められる性能を精緻化するのみならず、解決すべき社会的・科学的課題について、引き続きその妥当性や十分性を検証するとともに、優先順位を検討する必要がある。
- ・ 加速部については、有効に機能するアプリケーションの見積りの精査や Cooperation Model 及び Offloading Model での活用可能性の検証を含め、引き続き必要性・有効性を検討する必要がある。
- ・ 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。

と指摘され、理研が引き続き検討を続けた上で、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」（以下、「FS」という。）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 HPCI 計画推進委員会の下で改めて評価することとしている。

また、平成25年秋に実施された総合科学技術会議の事前評価においても、

- ・ ターゲットアプリケーション及び開発目標等の設定
- ・ システム構成及び工程表
- ・ Co-design に基づく開発の推進体制
- ・ 共用後の広汎な利活用の促進
- ・ 人材育成の取組
- ・ その他

- ✓ 高性能スーパーコンピュータに関するベンチマーク
- ✓ 生み出される研究成果に係る知的財産権の取扱い、ベンチマークや開発仕様等の国際標準化
- ✓ 説明責任

について指摘され、その必要性や意義を踏まえ基本設計を実施することが適当であるが、ターゲットアプリケーションや開発目標の設定、これらを踏まえた全体事業費の精査を含めた工程表の具体化等、今後明確にすべき事項があるため、平成 26 年秋頃を目途に総合科学技術会議において評価を実施することとされている。

以上を踏まえ、本システム検討 WG において、開発主体からの提案をヒアリングし、次期フラッグシップシステムに係る「要求されるシステム性能」、「基本的なシステム構成及びその詳細」、「研究開発の工程表」、「開発・製造のコスト」について、検討・評価を実施した。以下、評価結果について、システムの開発方針、基本的なシステム構成及びその詳細、研究開発推進方策、に大別して述べる。

2. システムの開発方針について

本項では、「フラッグシップ 2020 プロジェクト（ポスト「京」の開発）」における次期フラッグシップシステムに係るシステムの開発方針について述べる。

次期フラッグシップシステムの開発方針としては、開発主体より以下の 5 点が提示された。

- ・ 重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（以下、「重点課題」という。）のターゲットアプリケーションに基づく基本設計を実施し、アプリケーション及びシステムの Co-design による開発目標を設定した、課題解決型システムとする。
- ・ 2020 年時点において世界トップレベルの性能を持ち、演算性能、電力性能及びコストで国際競争力のある汎用システムを実現する。
- ・ 我が国が強みを持つコア技術は確保した上で、国際協力を戦略的に活用する。
- ・ 「京」で確立された技術・人材・アプリケーション等を最大限に活用するため、「京」の資産を継承する。

- ・ 2020 年以降も半導体技術の進展等に応じて効果的・効率的に性能拡張できるシステムを実現する。

なお、重点課題については、文部科学省において、平成 26 年度に開催された『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会』（以下、「重点課題検討委員会」という。）において議論され、別紙のとおりと設定されている。

○システム検討 WG の見解

平成 25 年度に開催した「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」の最終報告では、「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」とされ、リーディングマシンの中で「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」フラッグシップシステムは、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。

このフラッグシップシステムの考え方を踏まえると、後述のとおり幾つかの留意事項があるものの、提示されているシステムとアプリケーションの Co-design により、社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを実現する等の基本方針は妥当である。

3. 基本的なシステム構成及びその詳細について

システムの構成及びその詳細に関しては、幅広いアプリケーションに対応できるシステムの在り方、開発目標（性能目標）、Co-design の方法、消費電力及び省電力化技術等について議論した。また、システムソフトウェアの開発方針に関して、オープンソースソフトウェアによる高度システムソフトウェアの実現、超大規模並列用高効率システムソフトウェアの構築、超大規模並列用高効率プログラミング環境の構築、システムソフトウェアの開発目標について議論した。

1) システムの構成及びその詳細について

①システム構成の考え方

昨年度のプロジェクト事前評価においては、エクサスケールを目指し、多くの課題に対応できる「汎用部」と、特定の課題で高い電力性能と演算性能を発揮する「加速部」を組み合わせたシステムが提案され、それらの割合については今後検討することとされた。

一方、重点課題検討委員会において選定された重点課題の多様性を考えると、高い汎用性を持つシステムが不可欠である。また、加速部については、FSにおいて検討を進めてきたが、その最終段階として、「幾つかの重要な社会的・科学的課題の達成において有効活用が期待できるが、現時点では、それ以外の課題における有効活用に限界がある。」、「消費電力については、基本的に妥当である。」、「技術自体の実現可能性は十分に見込まれるが、開発・製造経費が多額であり、システムとして競争力を持つためには広い需要を得る必要がある。」と評価された。

これらの状況を踏まえ、総合的な検討を行った結果、新たなシステムとして、

- ・ 幅広いアプリケーションが高い実効性能で利用できる汎用部によるシステムを開発する。
- ・ Co-design に基づく基本設計を進める。
- ・ 2020 年をターゲットに、世界トップレベルの性能のシステムを実現し、エクサスケールを目指す。
- ・ 総事業費約 1,300 億円（うち、国費分約 1,100 億円）で開発する。

ことが提示された。なお、安全・安心の実現や産業競争力の強化に資する課題では、総じて汎用部を中心とした利用が想定されることから、高い実行性能を得ることができるとの分析が示されている。また、「京」の後継機として、「京」で確立された技術・人材・アプリケーション等を最大限活用できるとの提案理由が示されている。

②システムの概要

システムの概要については、高い汎用性、幅広いアプリケーション実行に利点のある汎用プロセッサを用いたメニーコア型のアーキテクチャを用い、さらに、高い通信性能、大規模並列処理の利点のため、インターコネクティブインターフェイスをチップ内に内蔵したプロセッサを用いることが提示された。

汎用プロセッサについては、コア数の増加及び SIMD（Single Instruction/Multiple Data）幅の拡張等により、ノード当たりの性能や Linpack 実

行時のノード当たりの性能対電力比を向上させること、及び、最先端の半導体製造技術（10 nm テクノロジーを想定）を用いることが提示された。

さらに、インターコネクットの構造には、高い移植性、「京」の資産を生かす利点のある多次元トラスネットワークポロジを踏襲したものを採用し、メモリ技術としては、高メモリバンド幅の実現を目的に、3次元実装積層メモリ技術を採用することが提示された。なお、メモリバンド幅について、産業界で多く使われている流体計算等への対応のためには、より大きなメモリバンド幅が求められることから、当該性能については、今後実施される基本設計において精査すること、また、汎用プロセッサ、インターコネクット等の具体化についても基本設計において検討を進めることが説明された。

省電力化として、Power Knob を用いて、アプリケーションの実行パターンに応じたシステムレベル電力制御を実現し、性能対電力効率を最大化することが説明された。

機能拡張可能性として、次期フラッグシップシステムで利用予定の 10 nm テクノロジーの次の 7 nm テクノロジーを利用した次世代 CPU に交換することや機能拡張により、電力性能等を更に向上できる設計とすることが提示された。

また、マルチビットエラーを含めたソフトエラーが起こる確率が高くなることに備えた RAS (Reliability Availability Serviceability) 機能を実装し、「京」と同程度の信頼性を確保することを目指すことが提示された。

なお、上述のとおり次期フラッグシップシステムでは 10 nm の半導体製造技術を利用するため、CPU 設計を含むシステム設計や性能評価などについては、国内で実施する予定であるが、CPU の製造については海外企業に委託する予定である。ここで、システムの大規模化に伴う消費電力の増大やシステムの複雑・高難度化といった課題を解決し、スーパーコンピュータ開発の国際競争力を高めるために、CPU 設計を含むシステム設計を通じて次世代の技術を実現することが必要であることから、システム設計については、コア技術として自主開発を進める意義があることが説明された。

③システムの開発目標

要求されるシステム性能については、重点課題検討委員会によって選定された重点課題を踏まえて決定することとしており、重点課題から選ばれたアプリケーション（ターゲットアプリケーション）が合理的な時間で遂行できることや、システム構成の特性、総事業費などを踏まえ、システムの開発目標を設定

している。

次期フラッグシップシステムの開発目標としては、消費電力を 30～40 MW とした上で、ターゲットアプリケーションについて、多重ケース処理型計算で最大「京」の 100 倍、大規模単一問題型計算で最大「京」の 50 倍の性能を、システムとアプリケーションの Co-design により達成することが提示された。なお、ターゲットアプリケーションには、各重点課題の要となる計算手法を有するアプリケーションであること、幅広い分野でのアプリケーションをカバーするために計算科学的手法の網羅性を有していること、Co-design の成果を広く活用・展開するためにノウハウのドキュメント化ができること等が備わるよう選定されている。

2) システムソフトウェアの開発方針について

現在のスーパーコンピュータ開発において直面している最大の課題として、システムの大規模化に伴う消費電力の増大だけでなく、システムの複雑・高難度化（アプリケーションの効率低下、システムの安定性低下など）があげられる。これらの問題を解決し、スーパーコンピュータ開発の国際競争力を高めるためには、システムソフトウェアについても、大規模システムでの高信頼性技術等の獲得やユーザの利便性の向上を実現すること、最先端システムソフトウェア技術をいち早く取り込むことができることが重要となる。以上を踏まえ、システムソフトウェアの開発目標として、以下が提示された。

- ・ 超大規模並列（CPU コア 1000 万基以上並列）での効率的動作が可能なシステムソフトウェアを開発する。
- ・ 開発するシステムソフトウェアは、他のシステムで開発された、既存のオープンソースソフトウェア（OSS）等のシステムソフトウェアを簡単かつ効率的に実行できるようにする。
- ・ 超大規模並列（CPU コア 1000 万基以上並列）での効率的動作が可能なプログラミング環境を実現するために、並列プログラミングを容易にする並列プログラミング言語やアプリケーション分野に適したプログラミング言語（Domain-Specific Language（DSL）：ドメイン特化言語）等を開発し、ユーザに提供する。
- ・ 開発するシステムソフトウェアはオープンソース化し、同時に、国際連携することによって、最先端システムソフトウェア技術をいち早く取り込みユーザニーズに応える。

○システム検討 WG の見解

システムの概要については、重点課題が幅広い分野にわたることから、2020年までに、世界トップレベルで多くの課題に対応できる汎用のシステムを、国際競争力のあるシステムとして実現し、エクサスケールを目指す、との方向性は現時点で妥当である。また、システムの詳細については、「京」の資産を生かすことのできるインターコネクトを採用すること、性能対電力効率を最大化する省電力化を実現すること、及び「京」と同程度の信頼性の確保を目指すこと等が示されており、以下に示すとおり、要素技術等の具体化については今後も精査していくことを前提に、その考え方は妥当である。

開発されるシステムは重点課題の解決に資することを目的として設置されることから、Co-design の考え方が重要である。Co-design については、幅広い分野でのアプリケーションをカバーし、Co-design により得られたノウハウを効率的に展開するという取組が提示されており、成果の早期創出及び最大化に向けた観点から、その考え方は妥当である。

システムソフトウェアについては、超大規模並列システムのユーザ利便性に配慮することが考えられており、その方針は妥当である。

【留意事項】

理研からの提案では、プロセッサ、インターコネクト等の要素技術や超大規模並列システムのユーザ利便性の実現の具体化については、基本設計において精査していくとされており、今後その進捗を適宜評価していく必要がある。

信頼性については、超大規模並列においては提示された RAS 機能の技術のみでは不十分ではないかとの懸念があり、目標としている「京」と同程度の信頼性の獲得のためには、その方策について今後更に検討する必要がある。機能拡張可能性については、拡張後の機能の見通しと拡張に係るコストについて、基本設計において精査していく必要がある。

なお、社会貢献への観点から、開発されるシステムが、エネルギーの効率的な利用に関してのモデルになることが望ましいことに留意する必要がある。

4. 研究開発推進方策について

研究開発推進方策に関しては、研究開発体制、国際協力の考え方、研究開発の工程表、開発・製造のコスト、システムの下方展開・海外展開の考え方、国民の理解促進の考え方について議論した。

1) 研究開発体制について

研究開発体制に関しては、理研計算科学研究機構の中にシステムソフトウェア開発チーム、アーキテクチャ開発チーム、Co-design 推進チーム、アプリケーション開発チームを設置し、プロジェクトリーダーの指揮のもと企業と共同で研究開発を実施する、また、大学・研究機関に研究委託することやシステムソフトウェアにおける国際連携を実施するといった、幅広い機関と連携することが提示された。

アーキテクチャに関する Co-design の手法に関しては、企業がシステムの設計・実装・設置を担うと同時に、アーキテクチャ開発チームは機能・性能検証環境の構築と基本性能検証・コンパイラを含むプログラミング環境等の協調設計を、Co-design 推進チームは検証環境を用いた協調設計、DSL 等のアプリケーション開発環境の開発を、アプリケーション開発チームはターゲットアプリケーションの高度化、ミニアプリ開発、ベンチマーク開発、アプリケーションの基盤となるライブラリ等の開発等を担い、そして、大学・研究機関には協調設計に関する提案・評価・フィードバックを依頼することが説明された。また、アーキテクチャの Co-design に加えて、ファイル I/O などのシステムソフトウェアに関する Co-design も行うことが説明された。

人材育成に関して、「京」の完成後実施してきた研修生の受入れ（インターンシップ）やスクール・講習会を次期フラッグシップシステムについても引き続き実施するとともに、HPCI を基盤とした大学との教育・人材育成の連携や、国際共同研究プロジェクトにおける若手研究者交流において、積極的に若手研究者・学生を活用することで、計算機科学・計算科学の最先端研究をけん引する人材育成に貢献する。特に、プロセッサ等の中核となる技術については、Co-design の観点から、ハードウェアとアプリケーションの開発を密接に連携して進めることで、計算機科学分野と計算科学分野の双方、又は、計算科学分野と応用分野の双方に精通する人材の育成も期待できることが説明された。

知的財産に関して、ハードウェアに関する知的財産の扱い及びシステムソフトウェアに関する知的財産の扱いについて説明された。

2) 国際協力について

次期フラッグシップシステムでは、超大規模並列システムでの効率的動作が可能となるシステムソフトウェアの開発が重要となっている。日米科学技術協力協定のもと、「スーパーコンピュータに関する協力取極」が締結され、シス

テムソフトウェアの開発に関し、最先端技術に関する研究協力、共通化による開発コストの低減、開発されるソフトウェアの国際標準化・普及を推進することが提示された。

また、ミニアプリについての国際標準化へ向けた取組として、性能評価に用いられてきた Linpack Top500 などのベンチマークについては多くの問題点が指摘され、実際のアプリケーションから重要部分を抽出したミニアプリによる評価が重要になっていることを踏まえ、これまでのミニアプリに関する取組を更に進めるとともに、Joint Laboratory on Extreme Scale Computing (JLESC)等の国際コミュニティの場を活用し、国際標準化・普及を推進することが提示された。

3) 研究開発の工程表について

①開発計画について

開発計画は次のとおりとすることが提示された。

- ・ 基本設計を 2015 年度中頃まで、試作・詳細設計を 2017 年度末頃まで、製造（量産）を 2019 年度始め頃まで実施し、2018 年度以降順次設置・調整を実施する。
- ・ 2019 年度からは全系の運用試験を実施し、システム全系の運用は 2020 年度から開始する。
- ・ システムソフトウェアの設計・試作及び数値計算ライブラリの設計を 2015 年度までに実施し、その後全系運用までにシステムソフトウェアの制作・改良及び数値計算ライブラリの構築を実施する。
- ・ この間、人材育成を実施する。

Co-design については、グループ I（ハードウェアの根幹に関わる詳細に取り組むべきアプリケーション）とグループ II（グループ I 以外のアプリケーション）に分けられたターゲットアプリケーションのそれぞれに対して、

- ・ 2015 年 6 月までの第 1 フェーズとして、グループ I のアプリケーションを用いたアーキテクチャパラメータ等の早期に決定する必要があるプロセッサデザインに係る協調設計を実施するとともに、2 つのグループのアプリケーションを用いたシステムソフトウェア（通信ライブラリ、入出力システム等）に係る協調設計を進める。
- ・ 2015 年 7 月から 2018 年 3 月までの第 2 フェーズとして、第 1 フェーズにおける Co-design の成果を取り入れて、コンパイラやシステムソフトウェア、プログラミング環境、ライブラリの協調設計及び詳細設計の

実施，及び，基本設計で決定したアーキテクチャを念頭に，アプリケーション実効性能の向上を図る。

- ・ 2018 年 4 月以降には，性能向上に向けたターゲットアプリケーションのチューニング等を引き続き実施する。

ことが提示された。

②文部科学省における評価について

評価に関しては，基本設計評価を基本設計終了の段階（2015 年度）に，コスト・性能評価を試作・詳細設計の中間の段階（2016 年度）に，プロジェクトの中間評価を製造（量産）に移る前の段階（2017 年度）に実施することが提示された。それぞれの評価の観点は，

- ・ 基本設計評価では，プロセッサ・インターコネクトの基本設計，階層ストレージ設計，システムソフトウェア設計・実装に係る基本設計について，ベンチマークプログラム群の妥当性，基本設計レベルの性能評価の妥当性，ファイル I/O 設計，CPU・メモリ・インターコネクトの製造コストの見積りの妥当性の評価
- ・ コスト・性能評価では，プロセッサ・インターコネクトの論理設計，システム全体設計（ボード，冷却，きょう体），システム構成について，コスト及び性能が目標に達成する見込みがあるかを評価
- ・ 中間評価では，製造承認を目的に，プロセッサ・インターコネクトの論理設計，CPU 試作及び改良，システム全体設計（ボード，冷却，きょう体），システムソフトウェア実装・改良，システム構成について，詳細設計レベルの性能評価の妥当性，目標達成の進捗度，及び，開発の進捗度と妥当性の評価

であることが説明された。

③危機管理計画について

危機管理計画に関して，技術開発の遅れの原因として CPU 論理回路瑕疵の場合及び半導体製造技術の未成熟により，目標性能の未達や製造歩留りが悪くコスト高になるような場合が考えられ，それぞれの場合に対する，2020 年度の運用を目指した危機管理計画が提示された。

4) 開発・製造のコストについて

事業費（国費）としては，開発のコスト，製造のコスト，施設設計・工事の

コスト、アプリケーション開発のコストが提示され、全体予算として約 1,100 億円を予定していることが提示された。また、開発のコストについては、「京」の開発時に比べて国費負担が大幅に減少することが提示された。

5) システムの下方展開・海外展開について

システムの下方展開としては、ダウンサイジングできる設計とすることで、次期フラッグシップシステムの小規模システムを情報基盤センターに導入すること、情報基盤センターに向けた Co-design の検討がされており、また、次期フラッグシップシステム導入開始と同期を取った商用機の導入を国内外に働きかけ、国際的 HPC エコシステムの構築を推進する考えが提示された。

システムの商用展開としては、産業界で広く利用可能な重点課題のターゲットアプリケーションを高速化することにより、ハードウェア商用展開を加速させ、次期フラッグシップシステム上で各計算科学分野でのアプリケーションの基盤となるライブラリ等を開発し、様々な科学分野で使いやすいシステムを目指すことが提示された。

システムの海外展開としては、海外ユーザとの連携を図り、キラーアプリケーションを次期フラッグシップシステムに移植を行う取組が提示された。

6) 国民の理解促進について

国民の理解促進方策として、各年代層、対象者のバックグラウンドに応じた広報・普及活動を開発段階から実施していくことが提示された。

○システム検討 WG の見解

1) の研究開発体制については、理研の他、様々な機関を巻き込んだ体制を構築することが提示されており、Co-design、国際協力及び人材育成等を十分に推進できるよう配慮しつつ、今後もこの方向で推進することは妥当である。

2) の国際協力については、既に米国との「スーパーコンピュータに関する協力取極」が締結され、また、ミニアプリについての国際標準化へ向けた取組がされており、今後もこの方向で推進することは妥当である。

3) の研究開発の工程表については、開発を 2017 年度末までに終了し、2020 年におけるシステム全系の運用を目指した開発計画については妥当である。Co-design については、アプリケーションを二つのグループに分けた上で、二つのフェーズに大別して推進することが提案されており、現時点では妥当である。また、文部科学省における評価については、基本設計評価、コスト・性能

評価、中間評価を適時実施する予定となっており、その計画は妥当である。危機管理計画については、予期しない問題には柔軟に対応することが求められるが、明らかになっている課題に対し 2020 年度の運用開始を目指した対応策が立てられており、現時点においては妥当である。

4) の開発・製造のコストについては、開発のコストについては、「京」の開発時に比べて国費負担が大幅に減少することが提示されており、その提案は妥当である。また、他の汎用 CPU 価格のトレンドを意識して設定された製造のコストについては、今後引き続き精査をする必要があるものの、コスト削減について基本設計において検討することに言及しており、その方向性は妥当である。

5) のシステムの下方展開・海外展開については、ダウンサイジングできる設計とすることや産業界で広く利用可能な重点課題のターゲットアプリケーションを高速化すること等、下方展開・海外展開を加速する方策が考えられており、その考え方は妥当である。

6) の国民の理解促進については、次期フラッグシップシステムの利用促進のみだけでなく、その他のリーディングマシンをはじめとした我が国の計算科学技術インフラ全体の利用の裾野拡大のためにも、国民の理解を得ていくことは重要であり、提示された方向性で進めることは妥当である。

【留意事項】

研究開発の工程表の危機管理計画について、今後様々な技術的課題が生じることが予想されるため、それらへの対応は柔軟に取り組む必要がある。

製造コストについては、基本設計を通じて、更なるコスト削減に努め、基本設計が終了した段階で改めて評価すべきである。

システムの下方展開・海外展開に関連して、開発されたシステムだけでなく、海外のベンダ等と連携し、それに利用されるプロセッサ、インターコネクト、システムソフトウェア等、個々の要素技術の展開を進めることも検討すべきである。

また、運用開始後直ちに次期フラッグシップシステムで実行可能なアプリケーションが整備されている必要があり、運用開始前に同様のアーキテクチャを持つシステムで実行可能なアプリケーションを整備すべきである。この実現のためには、5) にも記述されているが、それを担う大学情報基盤センターや独立行政法人等との協力体制を十分に整える必要がある。

なお、「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」

の最終報告に記述されているとおり、我が国の計算科学技術インフラは、フラッグシップシステムを中核として国内の大学等の有するシステムや共用ストレージを高速ネットワークで結んだ HPCI の構築により整備されており、利用環境の整備、セキュリティ環境の構築等のため、運用に先駆けて関係機関との連携を進めていく必要があることに留意すべきである。

まとめ

幅広い分野における成果の創出・国際競争力・コスト・パフォーマンス等の観点から、次期フラッグシップシステムに係る開発主体（理研）の提案を評価した。その評価結果は以下のとおりである。

本システム検討 WG では、

- ・ 課題解決型システムとする。
- ・ 国際競争力のある汎用システムを実現する。
- ・ 国際協力を活用する。
- ・ 「京」の資産を継承する。
- ・ 性能拡張できるシステムを実現する。

の 5 点を次期フラッグシップシステムの開発方針とし、エクサスケールを目指すという方向性は妥当であると評価したことから、この基本方針のもと、基本設計を継続していくことは適当である。

一方、次期フラッグシップシステムが、成果を最大化できるシステムとなるよう、また、国際競争力のあるシステムとなるよう、要素技術、コストの詳細等の留意事項について、開発主体において基本設計の中で検討を進める必要がある。その上で、基本設計が終了した段階で、HPCI 計画推進委員会等において、改めてその検討結果について評価することとする。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、更に安全な創薬を実現する。
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション(心臓, 脳神経等)により、個々人に適した医療, 健康寿命を延ばす予防を目指した医療を支援する。
防災・環境問題	③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる, 大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し, 過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。
	④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で, 局地的豪雨や竜巻, 台風等を高精度に予測し, また, 人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災, 健康対策へ貢献する。
エネルギー問題	⑤ エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い, 高効率なエネルギーの創出, 変換・貯蔵, 利用の全過程を実験と連携して解明し, エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により, 詳細に予測・解明し, 超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。
産業競争力の強化	⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料, 機能化学品等の開発を, 大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し, 次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。
	⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法, コストを最小化する革新的製造プロセス, 及びそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し, 付加価値の高いものづくりを実現する。
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し, 大型実験・観測のデータと組み合わせて, 多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。
萌芽的課題	
将来性を考慮し, 今後, 実現化を検討する課題	⑩ 基礎科学のフロンティア — 極限への挑戦 極限を探究する基礎科学のフロンティアで, 実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答えの出ない難問に, ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み, 解決を目指す。
	⑪ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究 複雑かつ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために, 交通や経済等, 社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。
	⑫ 太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明 宇宙, 地球・惑星, 気象, 分子科学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取組により, 観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し, 地球型惑星の起源, 太陽系環境, 星間分子科学を探究する。
	⑬ 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用 革新技術による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し, ポスト「京」での大規模シミュレーションにより思考を実現する脳の大規模神経回路を再現し, 人工知能への応用をはかる。

参考資料

- 参考 1 次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループの開催について
- 参考 2 次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ委員名簿
- 参考 3 次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループの検討経緯

HPCI 計画推進委員会
次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ
の開催について

平成 26 年 6 月 2 日
HPCI 計画推進委員会決定

1. 趣旨

文部科学省においては、我が国を取り巻く社会的・科学的課題の解決に貢献するため、平成 32 (2020) 年までに次期フラッグシップシステム（世界トップレベルの性能を持ち、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）を開発することを目指している。

次期フラッグシップシステムについては、平成 25 年度に本委員会の下で開催したワーキンググループ（※）において「基本設計に着手していくことは適当」と評価したことから、平成 26 年度より基本設計が開始されたところである。他方、同ワーキンググループにおいて、コストやシステム設計の詳細等については、開発主体（（独）理化学研究所）が引き続き検討を続けた上で、ユーザーの意見等を踏まえ、平成 26 年度の前半を目途に本委員会の下で「改めて評価する」こととしている。また、平成 25 年秋に実施された総合科学技術会議の事前評価においても、システム構成や工程表の具体化等については、「平成 26 年秋頃を目途に評価を実施する」とされている。

以上の状況を受け、次期フラッグシップシステムのシステム構成の詳細等を検討するため、本委員会の下で標記ワーキンググループを開催する。

（※）「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」及び「システム検討サブワーキンググループ」

2. 検討事項

○次期フラッグシップシステムに係る以下の事項

- ・要求されるシステム性能
- ・基本的なシステム構成及びその詳細
- ・研究開発の工程表
- ・開発・製造のコスト

○その他

3. 開催期間

平成 26 年 6 月 2 日から検討の終了までとする。

HPCI 計画推進委員会
次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ
委員名簿

浅田邦博 東京大学大規模集積システム設計教育研究センター長・教授

梅谷浩之 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会企画委員会委員

／トヨタ自動車株式会社エンジニアリングIT 部主幹

◎ 小柳義夫 神戸大学計算科学教育センター特命教授

笠原博徳 早稲田大学理工学術院教授

加藤千幸 東京大学生産技術研究所教授

工藤知宏 産業技術総合研究所情報技術研究部門研究部門長

小林広明 東北大学サイバーサイエンスセンター長

善甫康成 法政大学情報科学部教授

○ 中島 浩 京都大学学術情報メディアセンター教授

平木 敬 東京大学大学院情報理工学系研究科教授

藤井孝藏 HPCI コンソーシアム理事長

／宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所教授

松岡 聡 東京工業大学学術国際情報センター教授

宮内淑子 メディアステック株式会社代表取締役社長

◎：主査

○：主査代理

(50音順, 平成26年10月22日現在)

次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ
の検討経緯

第1回（平成26年6月11日（水）17時～19時）

- ・ 次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループの開催について
- ・ 次期フラッグシップシステムに係るこれまでの検討状況について
- ・ 「将来 HPCI システムのあり方の調査研究」について
- ・ HPCI コンソーシアム最終提言について
- ・ 次期フラッグシップシステムについて
- ・ 今後のスケジュール等について

第2回（平成26年7月4日（金）10時～12時）

- ・ ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会の議論について
- ・ 理化学研究所からの追加説明（第1回ワーキンググループにおける指摘事項への回答を含む）
- ・ 中間取りまとめについて

第3回（平成26年8月18日（月）17時～19時）

- ・ 理化学研究所からの追加説明（第2回ワーキンググループにおける指摘事項への回答を含む）

第4回（平成26年10月8日（水）15時～17時）

- ・ 理化学研究所からの追加説明（第3回ワーキンググループにおける指摘事項への回答を含む）
- ・ 論点整理

第5回（平成26年10月22日（水）15時～17時）

- ・ 理化学研究所からの追加説明（第4回ワーキンググループにおける指摘事項への回答を含む）
- ・ 最終取りまとめについて

フラッグシップ2020プロジェクト （ポスト「京」の開発）について

1. システムの開発方針について	1
2. 基本的なシステム構成及びその詳細について	2
3. 研究開発推進方策について	8

1. システムの開発方針について

システム開発方針

・課題解決型

- 重点課題及びターゲットアプリケーションに基づく基本設計
(ターゲットアプリケーションの実効性能に基づいた開発目標を設定)
- アプリケーション及びシステムを協調設計 (Co-design)

・国際競争力

- 演算性能、電力性能及びコストで国際競争力のある汎用システムを実現
(汎用性を高めることで理論ピーク演算性能は従来の検討システムより下がるものの、2020年における世界トップレベルの性能を実現)

・国際協力

- 我が国が強みを持つコア技術は確保した上で、国際協力を戦略的に活用
(システムソフトウェアの開発については、平成26年6月、米国と協力取極を締結)

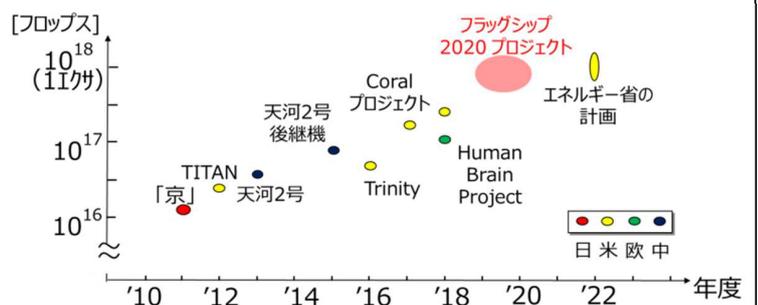
・「京」の資産継承

- 「京」の後継機として、「京」で確立された技術・人材・アプリケーション等を最大限活用

・性能拡張性

- 2020年以降も半導体技術の進展等に応じて効果的・効率的に性能拡張できるシステム

＜各国スパコンの理論ピーク演算性能予想＞



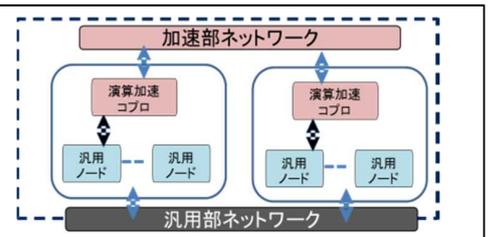
※フリップス：1秒間に計算ができる回数（能力）を表した値

2. 基本的なシステム構成及びその詳細について

検討後のシステム構成

従来の検討システム

多くの課題に対応できる「汎用部」と、特定の課題で高い電力性能と演算性能を発揮する「演算加速部」を組み合わせたシステムにより、エクサスケールを目指す。



重点課題が多様であるため、高い汎用性を持つシステムが不可欠。

演算加速部は、開発・製造コストが高く、有効活用できる課題が少ない。

新たなシステム

- 幅広いアプリケーションが高い実効性能で利用できる汎用システム(汎用部のみのシステム)を開発。
- 2020年をターゲットに、世界トップレベルの性能のシステムを実現し、エクサスケールを目指す。

プロジェクト見直しの検討

【新構成】汎用部のみでのシステムとする

- ・将来のHPCIシステムのあり方の調査研究（～平成26年3月）において確実な結果が出ている汎用部のみで、2020年までにできる限り高性能なスパコンを開発する。

【可能性1】2020年代前半までプロジェクト期間を延長する

- ・総事業費を分割して、
 - ① 2020年までに汎用部のみで先行モデル機を開発する。
 - ② その後、半導体技術が発展する2020年代前半にエクサスケールを目指す2段階目のスパコンを開発する。

【可能性2】外国企業から加速部を導入する

- ・汎用部は国内開発するが、加速部は開発実績のある米国企業の市販品を導入し、2020年にエクサスケールのスパコンの開発を目指す。

システム概要

○ 幅広いアプリケーションに対応できる汎用のシステム

➤ CPU

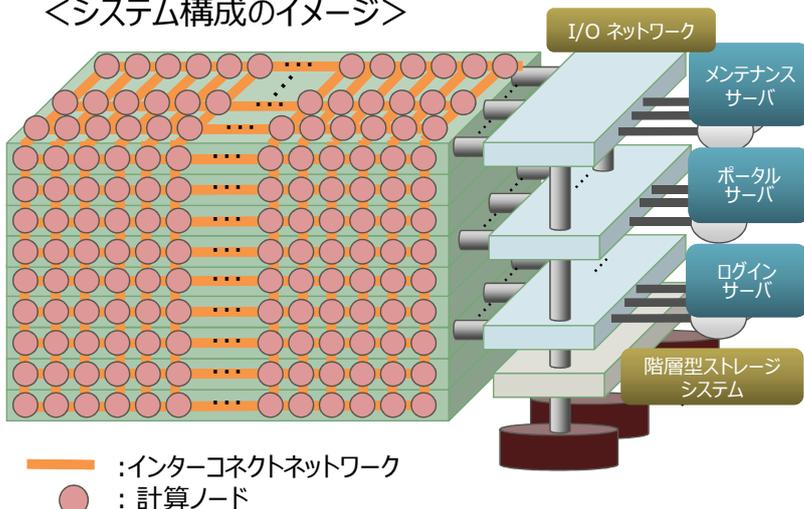
- ・汎用CPUを用いたメニーコア型アーキテクチャ → 高い汎用性、幅広いアプリ実行に利点。
- ・ネットワークインターフェイスをチップ内に内蔵 → 高い通信性能、大規模並列処理に利点。

➤ ネットワーク構造

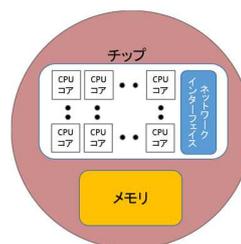
- ・「京」の多次元トラスネットワークポロジを踏襲 → 高い移植性、京の資産を生かす利点。

○ 総事業費約1,300億円（うち、国費分約1,100億円）

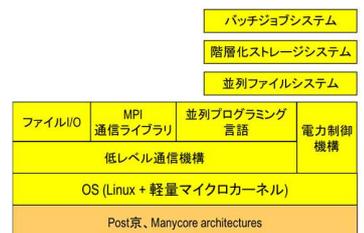
<システム構成のイメージ>



<計算ノード>



<ポスト「京」で想定されるシステムソフトウェア群>



※システムソフトウェア・・・ハードウェアを管理・制御し、アプリケーションプログラムを安全かつ効率よく実行するための環境を提供するソフトウェア群

開発目標

- 重点課題のターゲットアプリケーションとシステムのCo-designにより、以下の性能目標を実現
 - ➡多重ケース処理型計算で最大「京」の100倍、大規模単一問題型計算で最大「京」の50倍
- 消費電力は30～40MW（※「京」の消費電力は約13MW）

カテゴリ	重点課題	目標性能 (対「京」比)	目標性能によって可能となる計算例と想定できる アウトカム	計算の種類	想定 プログラム
健康長寿 社会の実現	① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築	100倍	全原子分子動力学シミュレーションにおいて、10万原子の10万ケース計算によるスクリーニングにより、より効果的で安全な創薬候補物質のスクリーニングが可能に。（「京」では1000ケース程度の計算スクリーニングまで。）	多重ケース処理型計算	GENESIS
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	15倍 *注1	個人ゲノム解析（パターンマッチング）については、20万人規模を目指す。（「京」では数千検体の解析まで。）	多重ケース処理型計算	Genomon
防災・環境 問題	③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	15倍 *注2	有限要素法（複雑な要素を表現できる計算法）を用いた複雑な地盤構造および建物の振動の1領域につき1000ケース程度を目指したシミュレーションにより、想定外を出来るだけ無くした地震災害想定が可能に。（「京」では、数十ケースの予測まで。）	多重ケース処理型計算	GAMERA
	④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化	75倍	構造格子の有限体積法による3.5km解像度での1000のアンサンブル計算と次世代観測データ用いたデータ同化により、局地的豪雨や竜巻などの高精度な予測を実現。（「京」では、数十アンサンブル程度で雲や台風の構造の再現まで。）	多重ケース処理型計算 +大規模単一問題型計算	NICAM +LETKF

※多重ケース処理型計算（Capacity Computing）：

小・中規模のプログラムを大量に実行する計算。分子動力学シミュレーションや気象、気候シミュレーションなどの分野では、初期パラメータを変えてシミュレーションし、それらの結果から予測値を得る手法が取られる。（例：「京」で80ノード使って動作するプログラムを1000個同時に動かす。）

※大規模単一問題型計算（Capability Computing）：

従来技術でなし得なかった規模の計算。（例：「京」で8万ノード使わないと動かせないプログラム）

*注1 本暫定版目標性能では、Genomonで使われているゲノム配列アライメントアプリBLATを扱った。今後、アプリ全体の目標性能を決める。

*注2 昨年度評価時に100倍向上するアプリ例として挙げていたが、その時の当該重点課題アプリは演算加速部で高速に実行可能な差分法に基づくアプリであった。今回想定しているアプリはポスト「京」ではメモリバンド幅律速となるアプリのため目標性能が下がっている。

開発目標

カテゴリ	重点課題	目標性能 (対「京」比)	目標性能によって可能となる計算例と想定できる アウトカム	計算の種類	想定 プログラム
エネルギー 問題	⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	40倍	量子力学に基づく700原子規模の20ケースのシミュレーションにより、光化学反応のメカニズムを解明し、光エネルギー変換のための材料候補物質のスクリーニングが可能に。（「京」では、数百原子程度の数ケースまで。）	多重ケース処理型計算	NTChem
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	20倍	有限要素法に基づき、複雑な形状の構造物まわりの流体（例えば、ターボ機械の熱流動など）を1兆要素規模で計算することにより、熱発生率、冷却・排気損失、ノッキング、サイクル変動等の予測の正確な評価が可能。（「京」では、数百億要素規模で予測技術の確立まで。）	大規模単一問題型計算	FFB
産業競争力の 強化	⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成	35倍	量子力学的第一原理計算に基づき、10万原子のシミュレーションを10ケース程度行うことにより、複数の異種物質から構成されるナノ界面を解明。（「京」では、ナノ界面の一部を切り出した部分系での理解。）	多重ケース処理型計算	RSDFT
	⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発	15倍	有限要素法に基づき複雑な形状の構造解析（例えば、ターボ機械全体）を10～20億要素規模で時間的に予測する計算を大量に行うことにより、最適な全体設計を実現。（「京」では、個別のシミュレータまで。）	多重ケース処理型計算	Adventure
基礎科学の 発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明	50倍	クォークを192 ⁴ 個の格子上の場として計算することにより、素粒子から宇宙全体にわたる物質創成史を解明。（「京」では、96 ⁴ 格子上で、星、銀河、巨大ブラックホールなど、宇宙における諸階層の構造形成過程まで。）計算量は「京」時代の計算内容の60倍程度。	大規模単一問題型計算	CCS-QCD

- 注：
- ・表中の記載内容は、新構成の総演算性能に基づき、概念設計レベルにおける性能予測を行ったもの。
 - ・今後は、本暫定版目標性能に基づく基本設計を進め、重点課題実施機関決定後、速やかに再見直しを行い当該実施機関の提案に基づき修正。これをもって最終的な開発目標とする。

成果の早期創出及び最大化に向けた取組

<重点課題に関する今後の取組>

- 各課題ごとに、アプリケーション開発の実施機関を公募し、平成27年度から課題解決に資するアプリケーション開発の準備研究を実施予定。

<Co-designの実施>

- ポスト「京」は、多くの社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムであることが必要。
- その実現に向け、ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関との間で、システムアーキテクチャ、システムソフトウェア等とアプリケーションを協調的に設計開発（Co-design）することで、幅広いアプリケーションを高速かつ効率的に実行可能なシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を開発するとともに、これらの性能を最大限に引き出すアプリケーションの開発を通じて、成果の早期創出及び最大化を目指す。

<ターゲットアプリケーションの選定>

- 戦略的かつ効率的にCo-designを進めるため、重点課題の中からCo-designのターゲットとするアプリケーション（ターゲットアプリケーション）を選定し、ターゲットアプリケーションの目標性能を設定する。
- 重点課題ごとにひとつのターゲットアプリケーションを選定。全ターゲットアプリケーション群は計算科学的手法を網羅することが必要。

※萌芽的課題については、調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定が行われた後、改めてターゲットアプリケーションの選定について検討する。

ターゲットアプリケーションの選定

<ターゲットアプリケーションの選定基準>

- 1) 各重点課題の要となる計算手法を有するアプリケーションであること
(補足) 各重点課題のアプリケーションはサブ課題に対応して複数から構成されると想定されるが、戦略的かつ効率的にCo-designを進めるため、重点課題ごとに要となるアプリケーションを一つずつ選定する。
- 2) アプリケーションの開発体制やライセンス形態が、Co-designができるものであること
(補足) 早期の成果最大化のため、Co-designに責任を持つポスト「京」開発主体とアプリケーション開発元が一体となって、システムとアプリケーションのCo-designに取り組み、Co-designにより得られたノウハウを展開できるようにする。
- 3) 全ターゲットアプリケーション群は、計算科学的手法の網羅性を有しており、Co-designおよびチューニングのノウハウのドキュメント化ができること
(補足) 幅広い分野でのアプリケーションをカバーし、Co-designにより得られたノウハウを効率的に展開する。

※ターゲットアプリケーションの選定は、Co-designに責任を持ち、また、課題間の連携や共通基盤技術の整備を行うポスト「京」開発主体が中心で行うものとする。

ターゲットアプリケーション候補と今後の流れ

○各重点課題において要となると想定される計算手法を有するアプリケーションから、暫定的にターゲットアプリケーション候補を選定。

重点課題	主な計算手法	Co-design観点 (重要なアーキテクチャパラメータ)	ターゲットアプリ 候補名称	グループ
①	分子動力学法	局所および集団通信レイテンシ、 演算性能	GENESIS	グループ I
②	大容量データ解析	入出力	Genomon	グループ II
③	非構造・構造格子ステンシル複合の有限要素法	通信・メモリバンド幅	GAMERA	グループ I
④	構造格子ステンシル有限体積法 + 局所アンサンブル変換カルマンフィルタ法	通信・メモリバンド幅、 入出力、SIMD幅	NICAM +LETKF	NICAMはグループ I、 LETKFはグループ II
⑤	高精度分子軌道法 (疎+密行列計算)	演算性能/SIMD幅/集団通信レイテンシ	NTChem	グループ I
⑥	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅SIMD幅	FFB	グループ I
⑦	密度汎関数法 (密行列計算)	演算性能/集団通信レイテンシ	RSDFT	グループ I
⑧	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅、SIMD幅	Adventure	グループ I
⑨	構造格子経路積分モンテカルロ法	通信・メモリバンド幅、局所および集団通信レイテンシ	CCS-QCD	グループ I

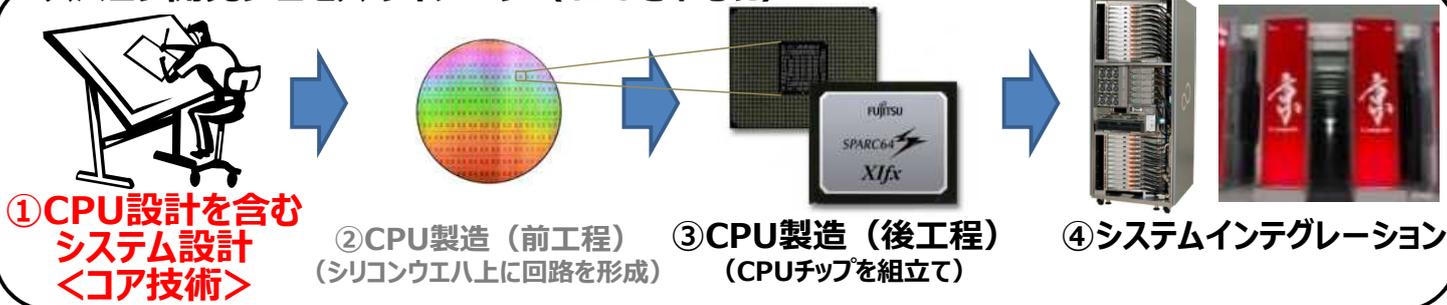
(※) グループ I ……ハードウェアの根幹に関わるため詳細に取り組みべきアプリケーション、グループ II ……グループ I 以外のアプリケーション

- 今後、公募による重点課題の代表機関決定後、代表機関の意見や選定基準等も踏まえ、必要に応じて見直しを行い、ターゲットアプリケーションを決定する。
- 重点課題決定後速やかに、各ターゲットアプリケーション候補の目標性能を設定。この際、問題規模等は、「計算科学ロードマップ」を参考にする。
 - ・重点課題代表機関決定後ターゲットアプリケーションの見直しが行われた場合でも、先に進めているCo-designやチューニングのノウハウが新しく選定されたターゲットアプリケーションへ反映できるよう留意してCo-designを進める。
 - ・選定基準を遵守することにより、ターゲットアプリケーションの入れ替えがあったとしても、掲げた目標性能が大幅に下方修正されることがないようにする。

最先端スーパーコンピュータ開発における国際分業について

スパコン開発プロセスのイメージ (CPUを中心に)

画像提供: 富士通(株)・(独)理化学研究所



【ポスト「京」プロジェクトの状況】

(※) ポスト「京」製造開始時点における世界最先端の半導体技術

- ポスト「京」は、世界最高性能を実現するため、「10nm」の半導体技術^(※)を利用する予定。
- しかし、「10nm」の回路を形成できる半導体製造工場は日本には無いため、上記②のCPU製造(前工程)については海外企業に委託することになる見込み。

このことについては、以下の理由から、国際分業を活用した合理的開発であると考えている。

1. ポスト「京」の開発で重要となる、“システムとアプリケーションの協調設計 (Co-design) ”や“省電力化”の実現のためには、CPU設計を含むシステム設計の技術が不可欠 (コア技術) である。
2. CPU製造 (前工程) は、最先端工場の新設には兆円単位の投資が必要となる一方で、現時点では競争力の決め手となる技術ではない。実際、エレクトロニクス業界では、半導体製造の水平分業化が世界的潮流になっている。
3. CPU製造 (前工程) に関して海外企業に支払う金額については、ポスト「京」全体の製造費からすれば一部であり、また、当該海外企業が日本製の半導体製造装置を購入することで、一定程度は国内に還元されるとも言える。
4. なお、CPU製造を海外企業に委託したとしても、コア技術たるCPU設計技術は海外に流出しない。

次世代の技術への挑戦

○現在のスパコン開発において直面している最大の課題は、システムの大規模化に伴う消費電力の増大やシステムの複雑・高難度化（アプリケーションの効率低下、システムの安定性低下など）にある。CPU設計を含むシステム設計を通じて下記の技術を実現することで、これらの課題を解決し、スパコン開発の国際競争力を高める。

1. Co-designによるアプリ実効性能の向上・低電力化

最新の科学的社会的課題は解くべき数式の複雑化や計算量の大幅な増加により、従来スパコンでは解決が困難になってきている。いくつかの代表的なアプリケーションに対して、各アプリケーションのアルゴリズムの改良とアーキテクチャの最適化設計を同時に行うことにより、幅広いアプリケーションに対して高い性能電力比を有するシステムを実現。

2. 省電力化技術

- ・チップ内回路を最適化することにより、省電力高性能システムを実現する。
- ・CPU内部回路、メモリインターフェイス回路、ネットワーク回路など、細かいレベルで回路の消費電力を制御する機構を開発し、アプリケーションの性質により性能に影響しない回路の消費電力を制御する。これにより、実効性能を維持しながら電力消費を抑えることを実現する。

3. オープンソースソフトウェア（OSS）による高度システムソフトウェアの実現

従来のスパコンはシステムソフトウェアの新規開発部分が多く開発コストが高かつ最新技術取り込みが遅かった。既存OSSと親和性の高いシステムソフトウェアを開発・オープンソース化し同時に国際連携することによって、最先端システムソフトウェア技術をいち早く取り込みユーザーニーズに応えられる画期的システムを開発する。

4. 超大規模並列用高効率システムソフトウェアの構築

CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なシステムソフトウェアを実現し、大規模システムでの高信頼性技術等を獲得。（京は約70万CPUコア並列で動作する。）

5. 超大規模並列用高効率プログラミング環境の構築

CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なプログラミング環境を実現し、大規模システムでのユーザーの利便性を向上。（京は約70万CPUコア並列で動作する。）

次世代の技術への挑戦

システムソフトウェアの開発目標

- ① CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なシステムソフトウェアを開発し、ポスト京において運用に供する。
- ② 開発するシステムソフトウェアは、他のシステムで開発された、既存OSSなどのソフトウェアを簡単かつ効率的に実行できるようにする。
- ③ CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なプログラミング環境を実現するために、並列プログラミングを容易にする並列プログラミング言語やアプリケーション分野に適したプログラミング言語（DSL:ドメイン特化言語）等を開発し、ユーザーに供する。
- ④ 開発するソフトウェアはオープンソース化し同時に国際連携することによって、最先端システムソフトウェア技術をいち早く取り込みユーザーニーズに応えられるようにする。

システムの拡張性と機能拡張可能性

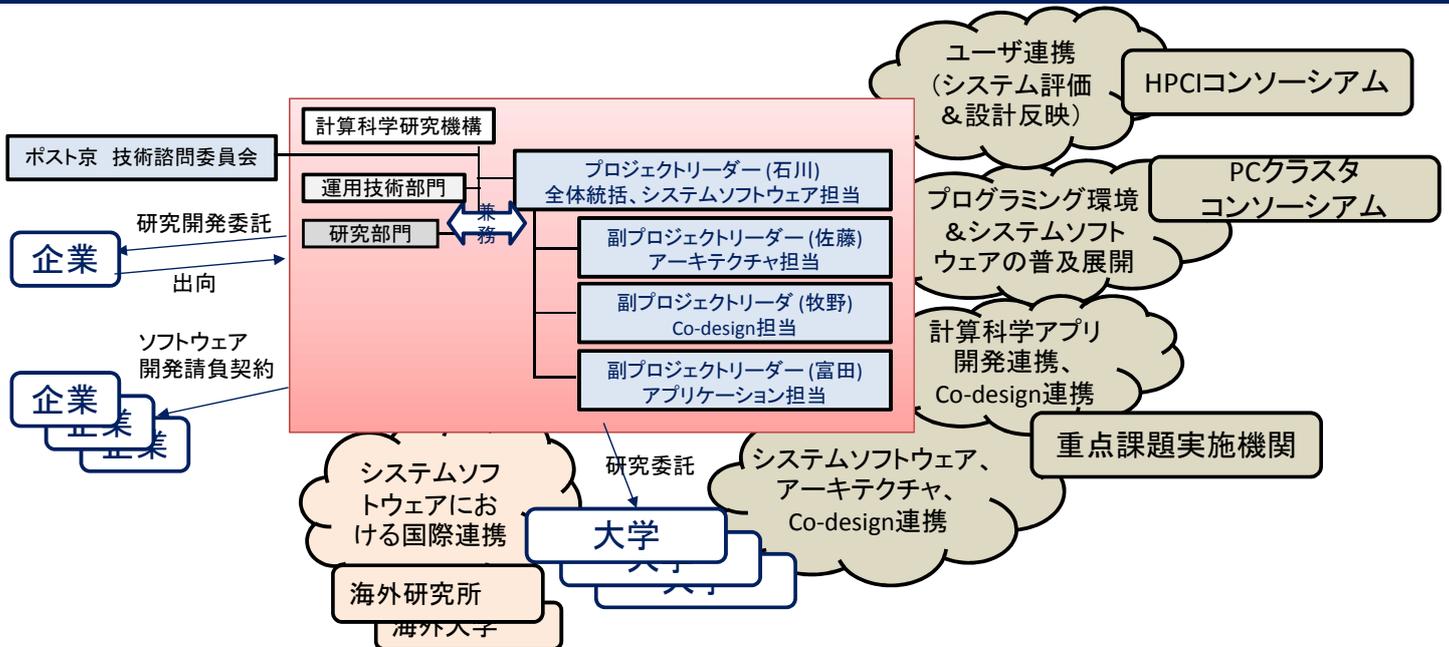
- ・ボード交換および機能拡張でポスト京の次世代CPUにアップグレード可能な設計としている。
- ・次世代CPUにおいて、ポスト京で利用予定の10nmテクノロジーの次の7nmテクノロジーが利用可能となる見込み。
- ・次世代CPUのボードに交換できれば、電力性能をさらに向上できる可能性がある。
⇒ 同じ電力であれば、全体性能が向上。同じ性能であれば、電力削減が可能

システムの下方展開・海外展開

- ・標準ラックに搭載できる、小規模なシステムへダウンサイジングできる設計とする計画
⇒ 1ラックでも商用展開可能に！
- ・ポスト京導入開始と同期をとった商用機導入を国内外へ働きかけ
⇒ 国際的HPCエコシステム構築の推進（システムソフトウェアの国際協力とともに）

3. 研究開発推進方策について

システム開発体制



海外研究所等(国際連携) ・システムソフトウェア(OS、通信) ・省電力技術、FT技術、等	・プログラミング環境 ・ミニアプリ
--	----------------------

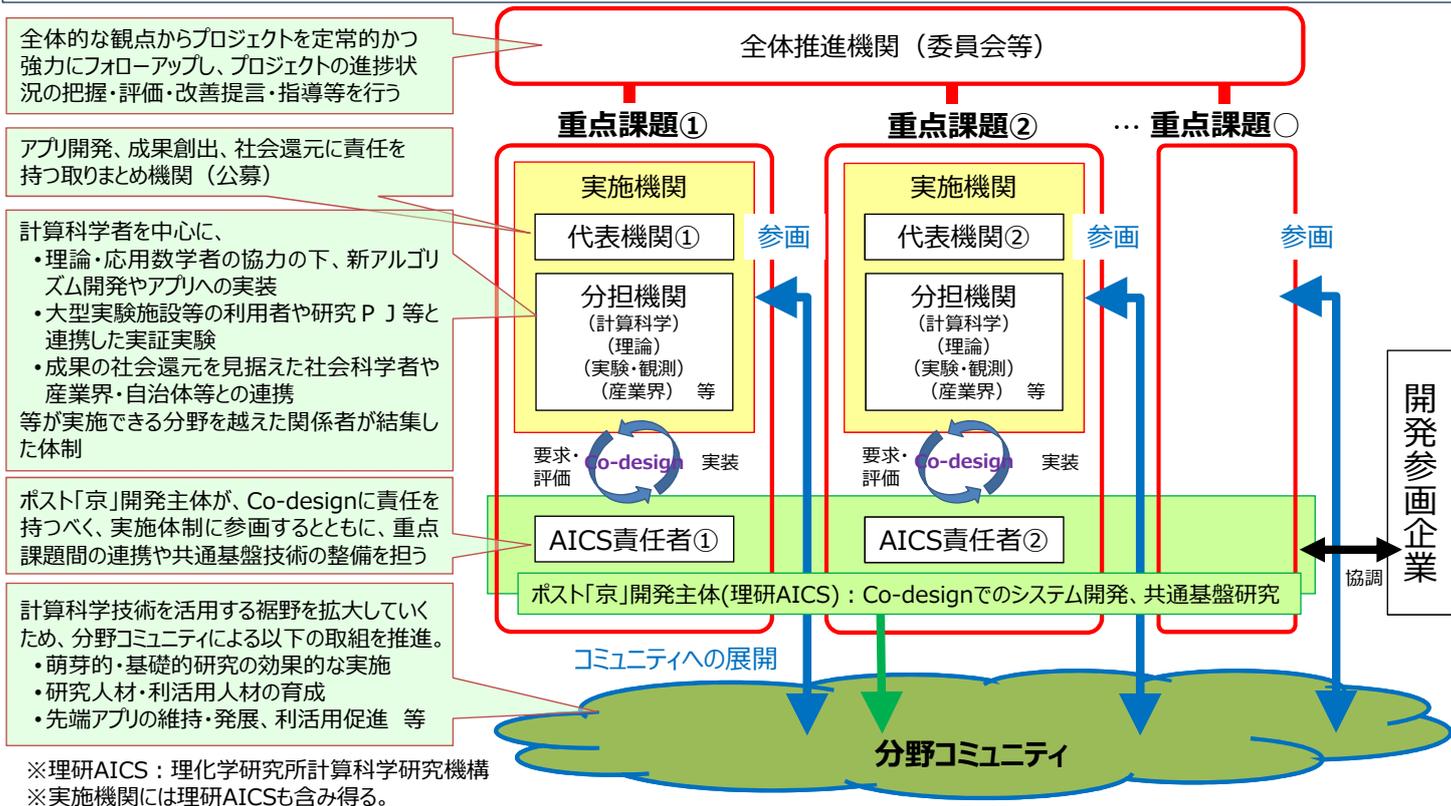
大学 標準API策定、ベンチマークコード策定 ・電力制御API、FT API、等 ・アーキテクチャ評価&Co-design検討評価 ・キャッシュ、SIMD強化、省電力機構等

重点課題実施機関 ・ターゲットアプリを使ったCo-design連携／主要アプリ高速化 ・アルゴリズムの連携開発
--

HPCIコンソーシアム ・ユーザ意見 PCクラスターコンソーシアム ・システムソフトウェア普及 & 広報

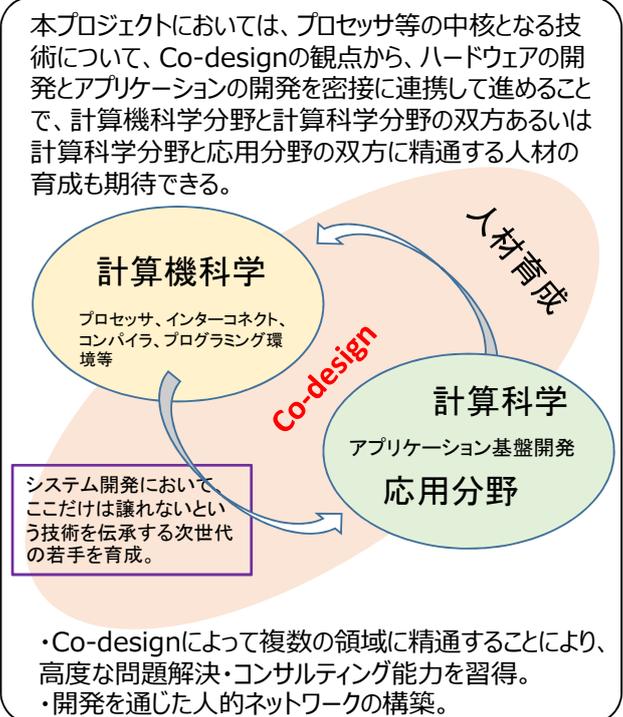
参考：アプリケーション開発体制

- 開発主体である理化学研究所と、重点課題実施機関、開発参画企業および連携機関が協力して開発体制を構築。
- 重点課題ターゲットアプリケーションを中心に、アプリケーション開発者と計算機システム開発者の協調によりアプリケーションおよびシステムを協調設計(Co-design)していく。



人材育成

人材育成については、「京」の開発・整備等を通して、以下のとおり数々のノウハウや技術が蓄積されるとともに、そうしたノウハウや関連技術を有する人材が育成された。フラッグシップ2020プロジェクトにおいても、プロジェクトを通して同様の人材育成の効果が期待できる。「京」の完成後実施してきた研修生の受け入れ（インターンシップ）やスクール・講習会をポスト「京」についても引き続き実施するとともに、HPCIを基盤とした大学との教育・人材育成の連携、国際共同研究プロジェクトにおける若手研究者交流において、積極的に若手研究者・学生を活用することで、計算科学・計算機科学の最先端研究を牽引する人材育成に貢献する。



1. AICSインターンシップ：大学院生を対象として、実習・体験により将来の最先端の計算科学研究開発の担い手を育成。
2. スクール・講習会：スパコンを駆使して新しい課題に挑戦したいと考えている大学院生・若手研究者等を育成。
3. HPC国際サマースクール（米国及び欧州のHPC機関と共同開催）による若手海外交流支援
4. 国際共同研究プロジェクトにおける若手派遣・研究者交流
5. e-learningアーカイブ：計算科学と高性能計算のためのe-learningアーカイブの公開を準備中。

- 各階層における人材育成の取り組み
- ・ハードウェア設計：主に、開発企業において、若手を積極的に参画させ、システム開発技術を維持・継承。
 - ・システムソフトウェア：開発企業、およびAICSにおけるインターンシップ、およびポストドク研究員での雇用による養成。
 - ・Co-designとアプリケーション開発：AICSにおけるインターンシップ、およびポストドク研究員での雇用による養成。大学連携、国際連携を積極的に活用
 - ・ユーザーサポート・運用：若手の登用。大学センターとの連携も検討。ユーザの高度なニーズに応える問題解決・コンサルティング能力の習得。

知的財産に関する方針

基本方針

- ハードウェアの扱い（京開発時と同じ）
 - ・単独発明: 知財は理研／開発メーカーに単独に帰属。
 - ・共同発明: 知財は理研と開発メーカーの共有。権利持分、維持管理、手続き等は両者協議。
- システムソフトウェアの扱い
 - ・日米科学技術協定に基づく実施取極めを踏まえつつ、基本オープンソース化。
 - ・国際連携及びコンソーシアムとの連携の下、ソフトウェアの普及展開に努める。

理研内の体制

理化学研究所

社会知創成事業

連携推進部（技術移転企画課、知財創出・活用課）
実用化コーディネーター、パテントリエゾン等
イノベーション推進センター（事業展開室）

計算科学研究機構

運用技術部門他
研究部門
エクサスケール・コンピューティング開発プロジェクト

- ・強い知財の確保
- ・知財のパッケージ化の推進
- ・ライセンス活動の展開
- ・共同研究拡大活動の有機的連携等

システムソフトウェアについての国際標準化へ向けた取り組み

ポスト京では、CPUコアが1千万基以上になり、超大規模並列システムでの効率的動作が可能なシステムソフトウェアの開発が重要となっている。日米科学技術協力協定のもとに「スーパーコンピュータに関する協力取極」に締結されており、この取組においてシステムソフトウェアの開発に関し、最先端技術に関する研究協力、共通化による開発コストの低減、開発されるソフトウェアの国際標準化・普及を推進する。

1. 背景

- ・エクサスケール計算機ではCPUコア数、ノード数がそれぞれ千万基オーダー、万台オーダーとなる。
- ・これらを効率よく動作させるためのシステムソフトウェアを実現するためには、多岐に渡る研究開発が必要。

2. 目的

- ・超大規模な並列システムでの効率的な動作が可能なシステムソフトウェアの研究開発
- ・国際協力による最先端技術および業界標準(de facto)システムソフトウェア等の開発により、ユーザにとっての機種依存性を低減させ、共通のプラットフォームでのソフトウェアの使用ができるようにする。
- ・1国で研究開発を行うのではなく、共通化できる部分は共通化することにより最先端技術を加速させ、開発コストが削減する。
- ・得られたソフトウェア技術を他の情報機器等に転用することにより産業競争力強化に貢献する。

3. 取り組み例

- ・オペレーティングシステム
- ・通信ライブラリ
- ・プログラム実行環境
- ・ファイルI/O
- ・電力制御



エネルギー等研究開発のための協力に関する実施取極
(文部科学省 (MEXT) - エネルギー省 (DOE) 間)
(2013年4月30日締結)

※本実施取極で明記された協力分野
(核融合科学, 高エネルギー物理学, 原子核物理学, 計算機科学, 量子ビーム技術, 基礎エネルギー科学, 生物及び環境科学, その他合意される分野)

スーパーコンピュータに関する協力取極

- 締結日: 2014年6月23日
- 実施主体: DOEアルゴンヌ研究所 (米国)、理化学研究所 (日本) 他
- 協力分野: システムソフトウェア
- 取極の主な内容
 - ・ 同取極下での研究協力による研究結果や情報の取り扱いについて明記
 - ・ 取極下で“Committee”を設け、年に一回以上実施し具体的な協力内容を調整

ミニアプリについての国際標準化へ向けた取り組み

これまで性能評価に用いられてきたLinpack(HPL)などのベンチマークについては多くの問題点が指摘されており、実際のアプリから重要部分を抽出したミニアプリによる評価が重要になっている。これまでのミニアプリに関する取組をさらに進めるとともに、JLESCなどの国際コミュニティの場を活用し、国際標準化・普及を推進する。

1. ミニアプリの重要性

TOP500, HPC Challenge, HPCG, Graph500などのマシンを評価するベンチマークは、それぞれが特定の性能を評価するものであり、今後、複数の計算手法の複合体であるアプリケーション全体の性能を適切に評価するためには、ミニアプリ標準化が必要である。

2. 現状と今後の方針

現在、計算科学研究機構では、京で培った典型的計算カーネル群、および、アプリFSで行った以下のミニアプリの整備が終わっている。

CCS-QCD(量子色力学アプリ), Modylas(分子動力学アプリ),
FFVC(構造格子流体解析アプリ), NICAM-DC(気象アプリ),
NGS-analyzer(ゲノム解析アプリ)、他

これらのミニアプリをもとに、今後更に、ターゲットアプリのいくつかに対してミニアプリ化を行い、計算科学的手法を網羅したミニアプリ群を整備する。

3. 推進体制と国際連携

プロジェクト内にミニアプリ標準化の専門チームを構成している。今後、ターゲットアプリのミニアプリ化については、それぞれのターゲットアプリの作成者と協同しながら進める。特に、知財やライセンス形態については、ターゲットアプリ提供者とあらかじめ十分に調整する。また、計算機科学的な観点から国内の各研究機関・大学と共同研究によって、更に促進する予定。

Joint Laboratory on Extreme Scale Computing (JLESC)などの国際集會等を通じて、ミニアプリの国際標準策定に積極的に貢献する。

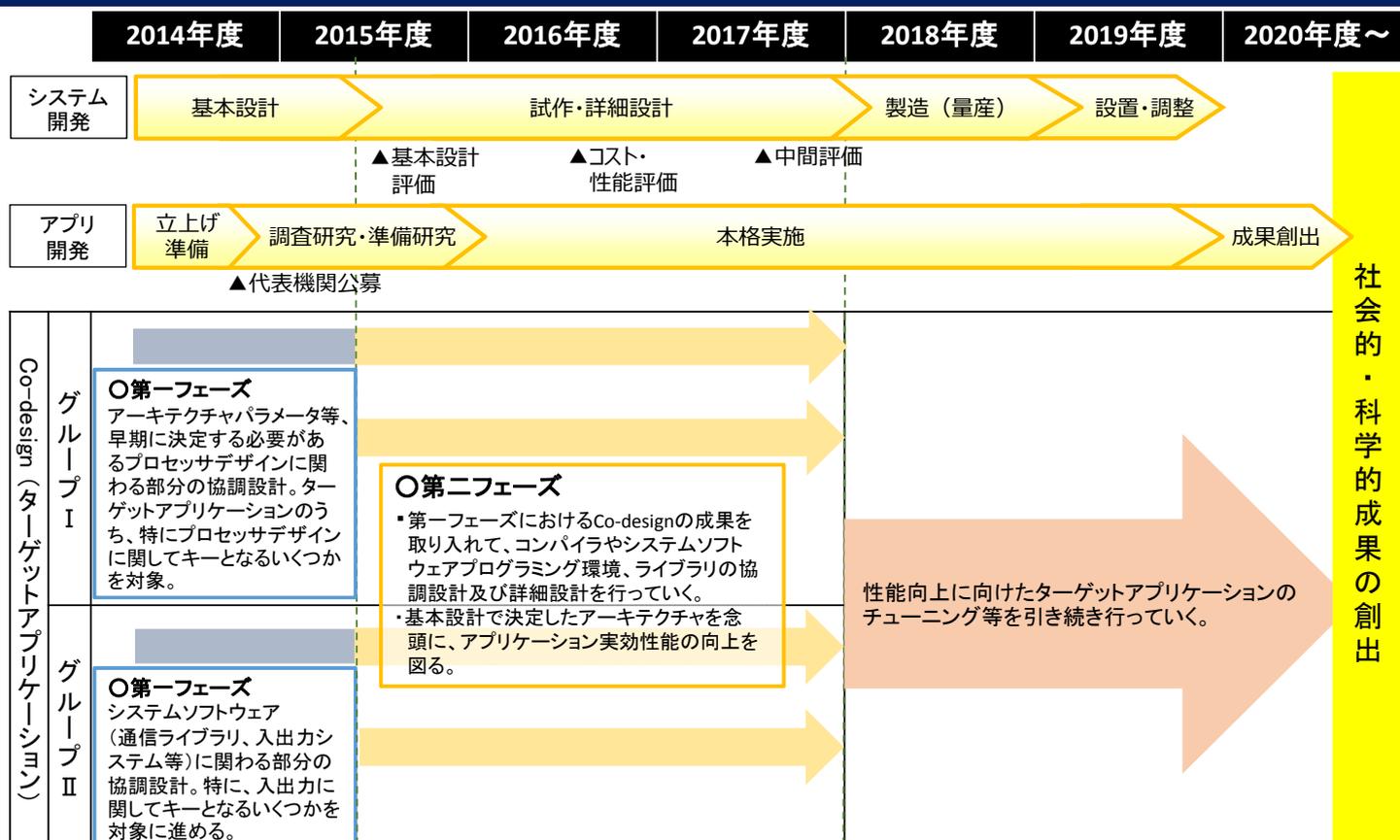
ミニアプリとは

実際のアプリケーションの重要な部分を抜き出し、性能評価のためのパラメータや入力を設定し、ベンチマークプログラムにしたもの。これにより、元の実際のアプリケーションの性能を推測することが期待できる。

Joint Laboratory on Extreme Scale Computing (JLESC)

各国のエクサスケールコンピューティングに関して研究開発を行っている主要な研究機関で、情報交換のためのワークショップ、共同研究の構築を目的とする国際連携組織。現在、フランス・INRIAと米国のNCSA, アルゴンヌ国立研究所が中心として活動しており、スペイン・バルセロナコンピュータセンター(BSC), ドイツ・ユーリッヒスパコンセンター(JSC), 理研計算科学研究機構が参加予定。

開発スケジュール



社会的・科学的成果の創出

(※) グループ I ……ハードウェアの根幹に関わるため詳細に取り組むべきアプリケーション、グループ II ……グループ I 以外のアプリケーション

下方展開 & 産業利用

また、2. 1)でも述べた両システムの開発体制に係る利害得失や両システム開発の相互影響のリスクに関し、**開発後の商用展開**やメンテナンスを含めてシステム全体に責任を持つ者を明確にするとともに、やむを得ない場合にはコモディティの製品で代替できる柔軟性等も検討しておく必要がある。このことは、現在国内ベンダが開発を行っていない演算加速コプロセッサに関して特に重要である。なお、**ハードウェアの商用展開とアプリケーションの商用展開は密接に関係していることから、アプリケーションも巻き込んだ戦略的な対応が求められることに留意が必要である。** (今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討WG システム検討サブWG報告書より)

システムの下方展開・海外展開

- 標準ラックに搭載できる、小規模なシステムへダウンサイジングできる設計とする計画
 - ⇒ 1ラックでも商用展開可能に！
- ポスト京導入開始と同期をとった商用機導入を国内外へ働きかけ
 - ⇒ **国際的HPCエコシステム構築の推進**(システムソフトウェアの国際協力とともに)
- 情報基盤センターとの連携
 - 2018年～2019年設置予定のスパコンに対し、情報基盤センター向けコデザインを検討
 - 情報基盤センター群にポスト京の1/10規模マシン設置を目指す
- アプリケーションサイドからのハードウェア商用展開戦略
 - Adventure(重点課題ターゲットアプリケーション)等産業界で広く利用可能なアプリケーションを高速化することにより、ハードウェア商用展開を加速させる。
 - 本システム上で各計算科学分野でのアプリ基盤となるライブラリーやフレームワークを開発し、様々な科学分野で使いやすい商用機を目指す。
- 早期商用アプリのポスト京への移植
 - ISVとの連携により早期にポスト京への移植を実施

Fiscal Year	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023
Hokkaido	Hitech SR16000M1 (172 TF, 22TB) Cloud System/Hitech BS2000 (44TF, 14TB)							10+ PF 1.5 MW			100 PF 2 MW	
Tohoku	NEC SX-9 + Exp5800 (31TF)											
Tsukuba	HA-PACS (800 TF)											
Tokyo	T2K Tada (140 TF) Fujitsu FX10 (190PF, 150TB, 408 TBs) Hitachi SR16000M1 (54.9 TF, 10.9 TB, 5.376 TBs)											
Tokyo Tech.	Tsubame 2.0 (2.4PF, 4TB, 1.18MW) FTR, 144TB, 1.18MW											
Nagoya	Fujitsu FX10 (190PF, 150TB, 408 TBs) F11 (50 TF, 30 TBs)											
Kyoto	Cray XE6 (300TF, 62.6TBs) GreenPeak 9000 (243TF, 61.5 TBs)											
Osaka	SV-8 + SV-9 (217 TF, 3.3 TB, 50.4 TBs)											
Kyushu	Hitech SR16000M1 (172 TF, 22TB) SR16000M1 (172 TF, 22TB) Fujitsu FX10 (190PF, 150TB, 408 TBs) CX400GPGPU (26TF, 183 TB)											

情報基盤センターのスパコン調達計画(2013年8月時点)

- 国際展開
 - 海外ユーザとの連携によりキラーアプリケーションをポスト京に移植する等行なう

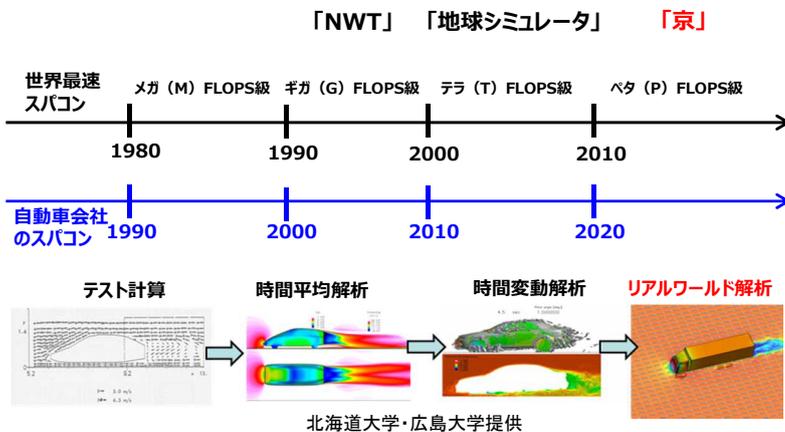
産業界への波及効果 (例：自動車産業の場合)

自動車産業においては、スパコンを用いたシミュレーションにより、製品の開発をより効率的に(速く・安く)進められるようになった。最先端スパコン(フラッグシップシステム)を企業が上手に活用することが大事。

これまでのスパコン開発と自動車空カシミュレーションの歴史

現在の世界最速スパコンは、10年後の自動車会社のスパコン

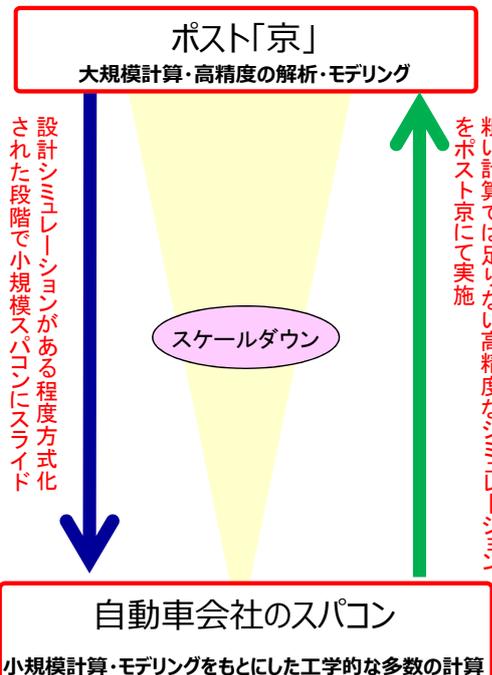
企業は、世界最速スパコンのシミュレーション技術を学ぶことによって、常に10年後の自動車空カシミュレーションのあり方を予測・研究して来た。



会社での開発	1980年～90	1990年～2010	2010年～20	2020年～
空間解像度	10cm	1cm	1cm弱	1mm弱
計算方法	時間平均解析	時間平均解析	時間変動解析	リアルワールド解析
	テスト計算の時代	実用化の時代	高精度解析の時代	次世代

ポスト京時代における自動車開発のシミュレーション

フラッグシップシステムと企業スパコンの連携



広報・普及活動

あらゆる層の一般国民・ユーザ・開発者に対する広報・普及活動を開発段階から実施

対象層	取り組み内容
小中学生・教職員	スパコンが拓く最先端科学技術を紹介し、スパコンおよび科学技術に対する知識と夢を持ってもらう(2020年代の利用者・開発者の卵であるという観点から)
高校生・大学生・教職員	スパコン利用技術・スパコン開発を紹介し、ユーザ・開発者の芽を育てる
大学院生・若手研究者	スパコン利用技術・アプリ開発に関する講習会やスパコン開発に関するワークショップ等を行い、計算科学(ユーザ)研究者、計算機科学(開発)研究者を育成する
企業ユーザ	スパコン利用技術・アプリ開発に関する講習会を行い、アプリケーション移植、ユーザ層を拡大する
企業ディベロッパ	スパコン利用技術・アプリ開発・運用技術・システムソフトウェア技術の講習会を行い、アプリケーション移植、ポスト京の企業へ導入の促進を図る
海外ユーザ	研究者招聘、インターンシップを受け入れ、ユーザ層を拡大する
一般国民	スパコンの意義を紹介し、スパコン開発の重要性を認識してもらう

具体的取組例

- マスメディアを通じた幅広いターゲットへの広報
- ウェブやコンテンツによる深い情報の発信
 - ポスト「京」に関するウェブページ、パンフレット等の拡充
- イベントを通じた直接対話
- サマースクール、ウィンタースクール
- 出張特別講義
- オープンソース利用技術講習会
- 各種研究集会主催・共催
 - 戦略的高性能計算システム開発に関するワークショップ
 - PCクラスタシンポジウム

協力機関例

 **HPCI** High Performance Computing Infrastructure

 **RIST** 高度情報科学技術研究機構

 **FOCUS** 公益財団法人 計算科学振興財団

 **PC Cluster Consortium** PCクラスタコンソーシアム

情報基盤センター等大学・研究機関