

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  
報告書

今後の HPCI 計画推進の在り方について

平成 26 年 3 月

文部科学省研究振興局

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

- 今後の HPCI 計画推進の在り方についてのポイント
- 今後の HPCI 計画推進の在り方について〈概要〉
- 今後の HPCI 計画推進の在り方について
- 別冊 参考資料集
- 別添 1 システム検討サブワーキンググループ報告書 要旨
- 別添 2 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



# 今後のHPCI計画推進の在り方についてのポイント(1/4)

## 計算科学技術を巡る状況

### 計算科学技術の意義

- ◆ スーパーコンピュータ(スパコン)は科学技術振興、産業競争力の強化、安全・安心の国づくりに不可欠な基盤。その重要性はますます増加。

### 国外・国内の状況

- ◆ 国際的にスパコンの開発利用が積極的に進められている。
  - 米国・欧州は、主要なスパコンベンダを巻き込んで2020年から2022年頃を目途とするエクサスケールの実現に向けて研究開発を推進。
  - 中国はCPUの自主開発を進めるとともに、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。ロシアやインドでもスパコンの自主開発を推進。
- ◆ 我が国でもハイ・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。
  - 2011(H23)年11月、「京」により世界に先駆けて10ペタフロップスを達成。
  - 最先端のCPUやネットワーク技術を獲得するとともに、利用研究でも2年連続でゴードンベル賞を受賞。
  - 国際的な自主開発の拡大の中で、「京」で蓄積した技術・経験・人材を適切に維持・発展させていくことが重要。

※エクサ=100万兆=1,000ペタ

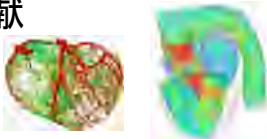


### 利用の状況

- ◆ 「京」を利用し、分子レベルからの心臓丸ごとシミュレーションやものづくりの設計・開発の大幅な効率化などで、画期的な成果をあげている。

#### ✓ 心臓治療等への貢献

心臓丸ごと  
シミュレーション



#### ✓ 製品設計の効率化への貢献

全乱流渦  
シミュレーション



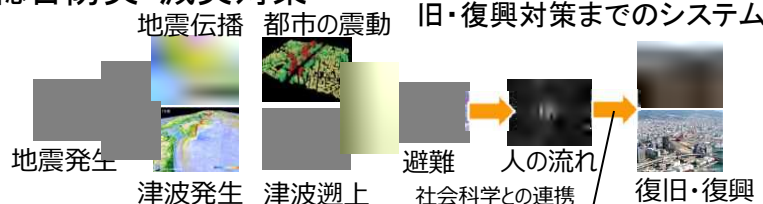
- ◆ 今後、更に能力の高いコンピュータを開発することにより、副作用の予測も含めた効率的な新薬の設計、地震・津波・複合災害・避難・復興対策など統合した防災対策の実現など、多くの社会的・科学的課題の解決が期待。

#### ✓ 画期的な新薬開発

複数の蛋白質への新薬候補物質の作用を解析



#### ✓ 総合防災・減災対策



- ◆ 経済・金融、伝染病の伝搬など社会科学の分野でのスパコン利用や、ビッグデータの処理などの新しい課題への対応も重要。
- ◆ 産業界でのスパコン利用のニーズは高く、今後さらなる裾野の拡大など利用促進が重要。

# 今後のHPCI計画推進の在り方について のポイント(2/4)

## 我が国の計算科学技術インフラの在り方と研究開発の方向性

### 我が国の計算科学技術インフラの開発・整備に係るグランドデザイン

- ◆ トップレベルやその次のレベルのスパコンを複層的に配置し、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世界最高水準のインフラの維持強化が重要。
- ◆ 我が国のトップレベルスパコン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パコンを各層に普及させ、計算科学技術インフラ全体を引き上げることが重要。
- ◆ 計算科学技術インフラの戦略的整備とともに、HPCIのように、用途に応じた多様なシステムの利用、データの共有や共同での分析等の様々なユーザーニーズに応える仕組みを構築していくことが重要。
- ◆ 我が国の計算科学技術を発展させ、科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献できる、世界トップレベルの性能を持つ以下のシステムを、リーディングマシンとして、国が戦略的に整備していくことが重要。
  - 我が国を代表し、世界トップレベルの高い計算性能と幅広い分野における適用性を有する一つのフラッグシップシステム。
  - 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。
- ◆ 長期的な計画を策定し、戦略的に我が国の計算科学技術システムの開発・整備を進める。
  - エクサスケールコンピューティングを実現するフラッグシップシステムを開発・整備。その次のフラッグシップシステムについても、その検討やそれに資する要素技術の基礎的研究を並行して進めることが必要。
  - それ以外の計算科学技術インフラを、フラッグシップシステムの特徴や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などを踏まえた分類<sup>(※)</sup>に即して整備。

(※)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がカバーできない領域を支援するシステム、将来のHPC基盤に向けた先端システムなど。
  - 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、実効性能や電力性能等の向上に対する技術的ブレークスルーを目指すことも検討することが必要。同時に、将来的な性能向上のため、革新的なコンピュータに関する研究も着実に進めることが必要。

### リーディングマシンの開発・整備の戦略的・継続的推進

- ◆ フラッグシップシステムについては、利用のニーズや諸外国の動向等を踏まえ、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とし、開発するシステムの基本的な構成や性能、開発方針等は以下のとおり。
  - 2020年頃にエクサスケールの理論ピーク演算性能の実現を目指す。
  - 自主開発を基本方針とする。
  - システム設計の詳細等は平成26年度前半に改めて評価する。

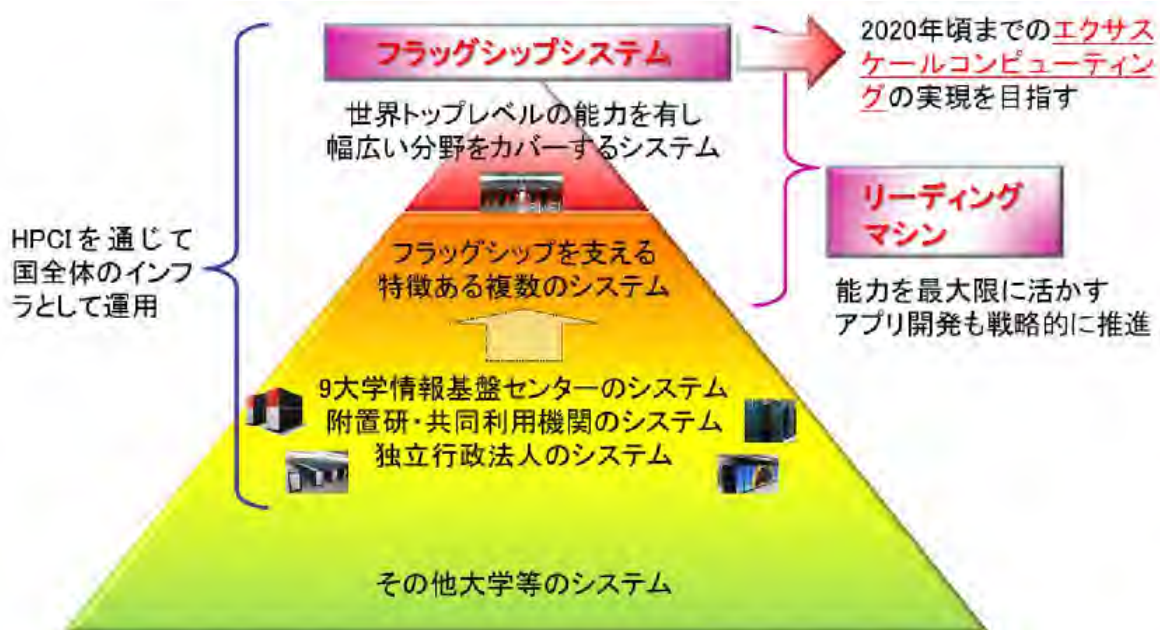
⇒平成26年度からフラッグシップシステムの開発プロジェクトが開始。



## 今後のHPCI計画推進の在り方について のポイント(3/4)

- ◆ フラッグシップシステムを支える特徴あるシステムについては、「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」や「将来のHPC基盤に向けた先端システム」のうち、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、その開発については、フラッグシップシステムの基本設計が確定した段階で、同システムの特徴を踏まえ、必要性等を評価した上で、公募により具体化。
- ◆ リーディングマシンの研究開発計画は、メリハリをつけ、効率的に実施。

### <我が国の計算科学技術インフラのイメージ>



### アプリケーションの開発・計算科学技術に関する国際協力、国際展開

- ◆ 早期の成果創出や国際展開のため、リーディングマシンの開発と並行して、新たな課題や社会的ニーズに対応し、マシンの能力を最大限に発揮するアプリケーションを協調的に開発するとともに、その利用を促進することが重要。また、共通基盤となるライブラリやミドルウェアの整備も重要。
- ◆ 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、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。
- ◆ アプリケーションを広く普及・活用していくためには、画期的・先導的な機能を重視して計画的な研究開発を行うとともに、コミュニティとして維持・管理する体制を構築することが必要。
- ◆ 国際協力の推進が重要であり、システムソフトウェアについては日米協力の具体化を期待。
- ◆ 開発した技術やシステム、アプリケーションについては、国際競争力強化のため、商業ベースでの輸出をはじめ、積極的な国際展開の推進が重要。

# 今後のHPCI計画推進の在り方について のポイント(4/4)

## 利用の在り方・人材育成等

### 利用の在り方

- ◆ スパコンの利用促進のためには、利用手続の簡素化、利用者支援等の利用環境の整備を行うとともに、アプリケーション環境をはじめとして産業界のスパコン利用を促進する環境の整備を行うことが必要。
- ◆ このための方策として、以下のことが重要。
  - ユーザニーズを踏まえた利用者支援の充実やシステム運用の改善。
  - 各インフラの特徴や適した使い方に関する情報を利用者に提供。
  - 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。
  - 商用アプリケーション等の開発者や利用者がアプリケーションをトップレベルスパコンへ移植する際の負担軽減のため、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)を設けるとともに、国やベンダが協力した技術支援体制を構築。
  - 画期的・先導的な機能を重視したアプリケーションを国が主導して計画的に開発するとともに、維持・管理体制を構築。

### 人材育成

- ◆ 我が国の計算科学技術の継続的な発展を担う人材、特に超並列化などのスパコン技術の進展に対応できる人材を育成することが重要。また、先端的な研究を行う人材ばかりではなく、幅広くスパコン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人材を育成することが重要。
- ◆ これまでも人材育成に係る様々な取組が実施されているが、今後は以下の方針が必要。
  - 育成すべき人材像(※)を明確化した上で、それぞれに必要な教育を整理し、大学や分野毎の専門性を持った機関がそれぞれの特性に応じて役割分担。(※)「作れる人」、「使える人」、「支える人」、「つなげる人」、「まとめる人」、「教える人」
  - 当該教育を受ける人材のレベルや目指す人材像に対応した教育の達成基準や体系的な教育プログラムを明確化するとともに、その前提となるスキル標準(人材像毎に求められる能力や経験を具体的に整理してまとめたもの)を確立。
  - シミュレーションを設計・製造に活用する際の論点を踏まえ、産業界で求められる人材の育成を見据えた教育等を実施。
- ◆ 時代の変化に対応した人材育成を担保するため、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。

### その他

- ◆ 計算科学技術の各施策の推進に当たっては、
  - HPCIコンソーシアムにより集約された計算科学技術に関するコミュニティの意見を聞くことが必要。
  - スパコンに係る現状、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。

# 今後のHPCI計画推進の在り方についてのポイント(参考)

## ＜計算科学技術インフラの継続的強化のイメージ＞



## ＜今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討WGについて＞

### ○趣旨

HPCI計画の推進にあたり、国として必要事項を調査検討するため、平成22年7月に設置したHPCI計画推進委員会(研究振興局長決定)(主査:土居範久 慶応義塾大学名誉教授)のもとに、平成24年2月、今後10年程度を見据えたHPCI計画推進の在り方に関する検討のためのワーキンググループ(主査:小柳義夫 神戸大学特命教授)を設置。

### ○検討スケジュール

平成24年	2月	WG設置(平成24年4月から平成26年3月まで25回のWG開催)
平成24年	5月30日	(第3回WG) 今後の調査・検討課題取りまとめ
平成25年	3月11日	(第13回WG) 論点整理取りまとめ
	5月8日	(第16回WG) 中間報告(案)取りまとめ
	5月14日～6月12日	パブリックコメント
	6月25日	中間報告取りまとめ
平成26年	3月14日	報告書取りまとめ

### ○WGメンバー(平成26年3月14日現在)

青木 慎也 (京都大学基礎物理学研究所教授)	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)
秋山 泰 (東京工業大学大学院情報理工学研究所教授)	常行 真司 (東京大学大学院理学系研究科/物性研究所教授)
天野 吉和 (富士通株式会社常勤監査役)	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)
石川 裕 (東京大学情報基盤センター長)	中島 浩 (京都大学学術情報メディアセンター長)
宇川 彰 (筑波大学数理物質系教授)	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)
小柳 義夫 (主査, 神戸大学特命教授)※	平尾 公彦 (理化学研究所計算科学研究機構長)
加藤 千幸 (東京大学生産技術研究所教授)	牧野 淳一郎 (東京工業大学地球生命研究所主任研究員)
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)	松尾 亜紀子 (慶応義塾大学理工学部教授)
喜連川 優 (国立情報学研究所所長)	松岡 聡 (東京工業大学学術国際情報センター教授)
小林 広明 (東北大学サイバーサイエンスセンター長)	村上 和彰 (九州大学大学院システム情報科学研究院 教授)※
関口 和一 (日本経済新聞社論説委員兼産業界編集委員)※	室井 ちあし (気象庁予報部数値予報課数値予報班長)
関口 智嗣 (産業技術総合研究所副研究統括)	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)
善甫 康成 (法政大学情報科学部教授)	

(50音順, ※はHPCI計画推進委員会メンバー)



## 今後の HPCI 計画推進の在り方について〈概要〉

### 1. 計算科学技術を巡る状況

#### 【計算科学技術の意義】

計算科学技術，特にスーパーコンピュータ(スパコン)を用いたシミュレーションは，科学技術の様々な分野において不可欠な研究開発基盤であり，産業競争力の強化や安全・安心の国づくりの観点からも重要になっている。さらに，スパコンは，社会的・科学的課題の解決に向けて今後ますます重要性は高まっていく。

#### 【国際的な状況】

計算科学技術の重要性が増加している中で，国際的にもスパコンの開発・利用が積極的に進められている。

米国は，HPC(ハイパフォーマンスコンピューティング)法のもと計画的にスパコンの開発・利用を推進しており，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，2022年頃を目途とするエクサスケールコンピューティングの実現を目指した取組を実施している。欧州においても，着実にスパコンの整備・利用が進められており，エクサスケールコンピューティングを目指して，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。中国は，2013年6月及び11月のTOP500では天河2号が1位となっている。また，CPUの自主開発を進めるとともに，エクサスケールコンピューティングの実現に向けて計画的に研究開発を推進している。さらに，ロシアやインドにおいてもスパコンの自主開発が進んでおり，韓国においては HPC 法を制定し，同法に基づく中長期計画を策定している。

#### 【国内の状況】

我が国においても，計算科学技術の振興を積極的に図ってきており，第4期科学技術基本計画においても，HPC 技術を国家安全保障・基幹技術として位置づけている。こうした方針を踏まえ，文部科学省では平成18年度から「京」の開発・整備及び「京」を中核とした HPCI の構築とその利用の推進を図ってきている。既に，「京」は平成23年11月に世界に先駆けて10ペタフロップスを達成するとともに，HPCIは平成24年9月に運用を開始している。

このような中，我が国の計算資源の使用量は今後とも増加していくものと考えられるが，世界の総計算能力に対する我が国の計算能力は減少傾向とな

っており、今後の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である。また、「京」の開発により、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を獲得するとともに、「京」を利用した研究が2年連続でゴードンベル賞(コンピュータシミュレーション分野で最高の賞)を受賞するなど、様々な研究成果を創出している。「京」で蓄積した技術・経験・人材を活用し、スパコン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。

#### 【利用技術の動向】

自然科学の分野では、様々な分野でシミュレーションが活用されている。特に「京」の利用により、分子レベルからの心臓のシミュレーションや、ものづくりの設計・開発の効率化などの画期的な成果を創出している。

一方で、副作用の予測も含めた効率的な新薬の設計や、地震・津波・複合災害・避難・復興対策などを統合した防災・減災対策の実現など、「京」の能力を持ってしても解決困難な社会的・科学的課題も多くあり、更に能力の高いスパコンを利用したシミュレーションの実現が期待されている。さらに、経済・金融、伝染病の伝搬など社会科学分野におけるスパコンの利用や、ビッグデータの処理などの新しい課題への対応も重要である。

また、産業界におけるスパコン利用のニーズは高く、産業利用促進策が重要になると考えられる。

## 2. 我が国における計算科学技術システムの在り方

我が国の計算科学技術インフラ全体のグランドデザインとしては、世界トップレベルのスパコンやその次のレベルのスパコンを複層的に配置し、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、それらのスパコン全体で対応す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パコン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パコン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、当該システム及び共用ストレージ、それらを結合するネットワーク等の計算科学技術インフラの戦略的整備とともに、HPCIのように、用途に応じた多様なシステムの利用、データの共有や共同での分析等の様々なユーザーニーズに応える仕組みを構築していくことが重要である。

その上で、我が国の計算科学技術全体を発展させ、世界における当該分野の優位性を維持し、我が国の科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献するため、世界トップレベルの高い性能を持つリーディングマシンを国が戦略的に整備をしていくことが重要である。

この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フラッグシップシステムとして一つ開発・運用するとともに、当該システムを支える特徴ある複数のシステムを開発・整備することも視野に入れて具体的に検討する。

また、我が国の計算科学技術インフラを適切に維持・強化していくために、文部科学省において長期的なインフラの整備計画を策定し、数年ごとに見直しを行いながら、戦略的に開発・整備を進めていくことが必要である。その際、フラッグシップシステムに関しては、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やそれに資する要素技術の基礎的研究を、当該開発・整備と並行して行う必要があり、さらに、フラッグシップシステムの開発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わせて行う必要がある。また、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しては、フラッグシップシステムの特徴や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を踏まえつつ、主に、「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がカバーできない領域を支援するシステム」、「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」及び「将来のHPC基盤に向けた先端システム」の4つの分類に則して、整備を進めていくべきである。

計算科学技術インフラの開発・整備を支える技術動向に関しては、2020年代に開発するフラッグシップシステムについて、現在実用化されている技術の連続的発展の中で理論演算性能の向上を追求することはもちろんであるが、実効性能や電力性能等の向上に対する技術的ブレークスルーを目指すことも検討する必要がある。一方で、これだけではいずれ性能向上の限界が訪れるとの見解が多いため、並行して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に関する研究を着実に進める必要がある。

### 3. 研究開発の方向性

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、我が国の計算科学技術インフラ全体を維持強化するとともに、システムとアプリケーションの両者のバランスをとりつつ、計算科学技術の研究開発を着実に進めていくことが必要である。その際、社会的・科学的課題への対応という観点から、システムの研究者とアプリケーションの研究者が共同(co-design)で進めていくという考え方が重要である。

また、リーディングマシンの開発は今後の計算科学技術をリードできること、早期の画期的な成果創出が可能となること、国内産業への波及効果が期待できることから、国内で継続的に実施することが重要である。

リーディングマシンのうちフラッグシップシステムについては、2020年頃にエクサスケールの計算能力を持つシステムの開発を目指すことが適当である。なお、平成26年度から、フラッグシップシステムの開発プロジェクト(ポスト「京」開発プロジェクト)が開始される。

一方、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については、「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」や「将来のHPC基盤に向けた先端システム」に該当するシステムのうち、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のが適当であるが、その開発については、フラッグシップシステムの基本設計が確定した段階で、同システムの特徴を踏まえ、必要性、将来性、経済性等を適切に評価した上で具体化することが適当である。

また、計算科学技術に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、高性能なシステムだけでなく、ユーザが実際にシミュレーションやデータ処理を行うための高性能なアプリケーションソフトウェアを開発し、その利用を促進することが不可欠である。さらに、アプリケーション開発の効率化やシステム利用の最適化のため、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を整備することも重要である。

そのため、リーディングマシンの開発と並行して、当該システムの能力を最大限に発揮するようなアプリケーション等についても、開発主体、大学等の連携と役割分担のもと、協調的に開発を進めることが重要である。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。なお、アプリケーション開発に当たっては、HPCI 戦略プログラムを参考として、当該開発を通じた人材育成や開発したアプリケーションの普及等、当該開発をプラットフォームとした各研究分野の計算科学の振興を同時に進めることが重要である。

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、商用ソフトウェアを含む既存のソフトウェアには無い画期的で先導的な機能を重視し、計画的な研究開発を行うことが重要である。また、アプリケーションを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。

さらに、国際協力の戦略的な推進が重要であり、日米のシステムソフトウェアに関する協力や、アジアの国々との連携も視野に入れたアプリケーションの共同開発・利用なども推進していく。また、開発した技術やシステム、アプリケーションについては、我が国の国際競争力強化のため、商業ベースでの輸出をはじめ、積極的な国際展開の推進も重要となる。例えば、新たな市場の獲得につなげるため、フラッグシップシステム等の開発と並行してその商用機の開発を進め、最先端の商用機を速やかに市場に投入するとともに、利用支援や人材育成等のユーザサポートと一体的に展開していくことが重要である。

#### 4. 利用の在り方，人材育成等

##### 【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行くためには、利用者の裾野拡大を含めて、その利用の促進を図り、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ことが不可欠である。特に、産業利用は、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。

そのため、利用環境の整備に関しては、可能な限り、希望するときに平易な方法でスパコン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ステップアップできる環境を整備すること等が重要である。また、アプリケーションの開発・移植作業の負担軽減のためにテストベッドが用意されることや技術的支援体制が構築されること、利用者支援体制を含む維持・管理体制が

構築されること等が重要である。

また、産業利用の促進に関しては、産業界では、主に「京」を頂点とした HPCI 資源と国プロ開発アプリケーション等を利用し、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実施されること、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、更に、自社や HPC クラウドサービス等がそれまでに整備するであろう計算機において、実証研究の際と同規模の計算資源を用いた実用段階に進むこと、実用段階においては、多くの場合、機能や利用支援が充実している商用ソフトウェアを利用した計算が行われていること等の、アカデミアとは一部異なる現状を踏まえ、促進方策を講じていくことが重要である。

#### 【人材育成】

超並列化などのスパコン技術の進展に伴い、それに対応できる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、スパコン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。

そのため、我が国の計算科学技術を担う人材の育成に関しては、育成すべき人材像を明確化した上で、それぞれに必要な教育を整理し、大学や分野ごとの専門性を持った機関がそれぞれの特性に応じて役割分担すること、当該教育を受ける人材のレベルや目指す人材像に応じて、必要とされる教育内容等が過不足なく実施されることを担保するため、それぞれの人材像に対応した教育の達成基準や体系的な教育プログラムを明確化すること等が重要である。

また、産業界で求められる人材の育成に関しては、課題に合った解析モデルをつくることのできる人材、結果を理解・解釈して製品開発に反映できる人材、解析全体を俯瞰できる人材等、使いこなせる人材が不足していることを踏まえた教育等を実施することが重要である。

#### 【その他】

計算科学技術の各施策の推進に当たっては、HPCI コンソーシアムにより集約された計算科学技術に関するコミュニティの意見を聞くこと、及び、スパコンに係る現状、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。

# 今後の HPCI 計画推進の在り方について

平成 26 年 3 月

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 .....	12
5. システム技術の動向 .....	23
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. 各機関のシステム等の位置付け・役割 .....	32
4. 開発・整備の戦略的・継続的推進 .....	36
第3章 研究開発の方向性 .....	40
1. 研究開発の進め方 .....	40
2. リーディングマシンの研究開発 .....	40
3. アプリケーション開発の在り方 .....	46
4. 計算科学技術に関する国際協力・国際展開 .....	49
第4章 利用の在り方, 人材育成等 .....	52
1. 利用の在り方 .....	52
2. 人材育成 .....	58
3. その他 .....	62
おわりに .....	64
参考資料 .....	67
用語集 .....	77

## 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年から2022年頃を目途とする「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ようとしている。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利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25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、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。

## 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ている。

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、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ている。

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11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364.56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11月の同ランキングでは28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、2012年11月時点では7か国23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）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スケールのシステムの研究開発を進めていることに加え、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、2022年頃を目途とするエクサスケールコンピューティングの実現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 (2007～2013, 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、ハードウェアとソフトウェアの研究開発を実施してきた。

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), 龍芯 (Loongson) や飛騰 (Feiteng) 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 年までの 100 ペタフロップス級コンピュータの開発を経て、エクサスケールコンピューティングの実現を目指す研究開発を推進することとされている。

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。

#### 【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、2012 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1.9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。

#### 【我が国の計算科学技術インフラ】

我が国の計算科学技術インフラとしては、「京」や大学等のシステム、共用ストレージ（HPCI 共用ストレージ等）及びこれらを結ぶネットワーク（学術情報ネットワーク（SINET）等）が、それぞれの目的・役割に応じて整備されている。以下に、代表的なものを示す。

国内のシステムについては、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。

HPCI 共用ストレージについては、後述の HPCI 利用時における大量のデータの格納、コミュニティでのデータの共有等を目的に、東京大学情報基盤センター（東拠点）と理化学研究所計算科学研究機構（西拠点）に設置されている。当該ストレージは、広域分散ファイルシステム Gfarm を採用することで、複数のファイルシステムノードをひとつの大容量ファイルシステム（総容量 21.5 PB）として運用しており、また、データを複数のデータノードに複製しておくことや通信内容を暗号化することが可能となっている。

学術情報ネットワーク(SINET)(現在の SINET4 の通信速度は 2.4~40Gbps)

については、国内の大学・研究機関等の基盤となることを目的として、国立情報学研究所（NII）が構築・運用しているネットワークであり、一般ユーザとは異なる学術系特有の大容量データ転送、共同研究環境形成、学術国際連携等といった要求に応えるべく設計・運用されている。

#### 【HPCI の構築】

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システムや共用ストレージを SINET で結び、全国の利用者が、一つのユーザアカウントにより用途に応じて多様なシステムを利用でき（シングルサインオン）、また、計算したデータの共有や共同での分析を実施できるようにするなど、様々なユーザニーズに応える 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か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。

#### 【「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

ーパソコン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」はシステムとしての成果のみならず、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。2011年にはシリコン・ナノワイヤの第一原理計算で、2012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(6次元メッシュ/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。

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 (2013 年 11 月) において 4 位(10.5PF)	2013 年 11 月現在，全体で 23 システム，総理論演算性能：11,456TF（平均性能：約 1,200TF/センター）。各センターのシステムの総演算性能は 31.2TF～5,787TF TOP500 (2013 年 11 月) 内に 11 システム；東工大(2,843TF/150TF)，東大(1,043TF)，九大(905TF /167TF)，筑波大(422TF/277TF)，名大(318TF)，京大(252TF/135TF)，北大(122TF) 東工大 TSUBAME-KFC が Green500, 1 位獲得
運用	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 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</li> <li>・ 計算機資源の約 85%を共用に供し，うち約 50%分を HPCI 戦略プログラムが利用し，約 35%分を一般公募利用に割り当て</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 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</li> <li>・ 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</li> </ul>
その他		<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 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</li> <li>・ 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</li> <li>・ 筑波大は単独で共同利用・共同研究拠点として認定</li> </ul>

(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（2013年11月）内に2システム ・ 東北大 金属材料研究所（244TF） ・ 東大 物性研究所（162TF）	TOP500（2013年11月）内に5システム ・ 高エネルギー加速器研究機構（537TF×2システム） ・ 国立天文台（420TF） ・ 核融合科学研究所（253TF） ・ 分子科学研究所（238TF）	TOP500（2013年11月）内に2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）
・ 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））

#### 【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、ファブライト、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。

## 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り、「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り、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り、「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、演算性能だけではなく、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なるためには、「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”を行う必要があり，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り、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ス材料といった、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、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商用ソフトウェアを利用することが多いが、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。

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ト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ト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ト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

り階層の有効利用，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、システム全体に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システム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」の開発とともに、「京」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、着実に整備されている。

一方で、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。

このような中で、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、当該システム及び共用ストレージ、それらを結合するネットワーク等の計算科学技術インフラ全体の整備を戦略的に進めていくとともに、HPCI のように、全国の利用者が一つのユー

ザアカウントにより用途に応じて多様なシステムを利用でき（シングルサインオン）、また、計算したデータの共有や共同での分析を実施できるようにするなど、様々なユーザーニーズに応える仕組みを構築していくことが重要である。

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、むしろ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の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. 各機関のシステム等の位置付け・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及び共用ストレージ、それらを結合するネットワークが、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等の役割・位置づけは、以下のように考えられ、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。

## (1) 各機関の有するシステムについて

### (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やシステム及びその利用技術に関する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「HPCI 資源」という。)として、大規模な計算や多様なユーザ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、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。<sup>(※)</sup>

※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。<sup>(※)</sup>

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。

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。<sup>(※)</sup>

※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。

## (2) HPCI 共用ストレージ

東京大学情報基盤センター(東拠点)と理化学研究所計算科学研究機構(西拠点)に設置されている HPCI 共用ストレージは、ネットワーク共用ファイルシステムを用いて東西の拠点間の相互利用性を確保し、HPCI 利用時の大規模なデータの格納やコミュニティでのデータの共有等を実現しており、今後も着実に整備・運用を行うことが適当である。その際、第1章5.において述べた技術動向に留意する必要がある。

## (3) 学術情報ネットワーク (SINET)

国立情報学研究所 (NII) が構築・運用している学術情報ネットワーク (SINET) は、特定高速電子計算機施設を中核とした HPCI 資源やそのほかの各機関のシステム、共用ストレージの間を高速につなぐ情報通信ネットワークであり、上記の計算科学技術インフラの利便性を高め、有効活用するには、科学技術・学術審議会学術分科会学術情報委員会 (以下「学術情報委員会」という。)における議論を踏まえつつ、着実に SINET を強化する必要がある。

なお、第1章4.で述べた利用技術の動向から、ネットワークに関しては、大規模なデータ転送の要求だけではなく、社会科学分野において必要となるリアルタイム性等の要求も高まると考えられるため、今後の SINET の整備に当たっては、そのような要求の多様化への対応も検討する必要がある。

## 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、長期的な見通しを明らかにしつつ、同時に、システム技術・ネットワーク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、システム技術・ネットワーク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. で述べ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には、計算科学技術インフラの強化に資する要素技術の基礎的研究を着実に進めるとともに、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わ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や第1章4.で述べた利用技術の動向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（以下「連続発展」という。）と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に関する研究（以下「革新研究」という。）の2つの方向性を考える必要がある。すなわち、

- ・ 2020年代に開発するフラッグシップシステムについては、連続発展の中で理論演算性能の向上を追求することはもちろんであるが、その場合、性能が発揮できるアプリケーションに限られるという課題がいずれ顕在化してくる。そのため、実効性能や電力性能等の向上に対する技術的ブレークスルーを目指すことも検

討する必要がある。

- ・ 一方で、連続発展だけではいずれ性能向上の限界が訪れるとの見解が多い。そのため、当面は連続発展を図りつつも、並行して超伝導物質や有機分子などを用いたコンピュータ、光コンピュータや量子コンピュータ等の革新研究を着実に進める必要がある。

## 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、システム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。なお、ネットワークについては、計算科学技術インフラの利便性を高め、有効活用するために着実に整備を行う必要があるが、現在、学術情報委員会において SINET5 が議論されていることから、かかる研究開発についてはその議論を踏まえて着実に進めていく必要がある。

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、シミュレーションだけでなく、社会科学分野におけるリアルタイム性が要求される処理やビッグデータの処理にも利用されることを念頭に、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システムの研究開発に反映するとともに、システム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

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、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。

##### (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. で述べ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のが適当であるが、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、システムの利用方法に関する様々な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。

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

【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。

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。なお、システムソフトウェアについては、超並列システムの実現に伴い、プログラム整備の複雑化によるアプリケーション開発者の負担の増加やデータの膨大化に対応すること、また、リアルタイム性が要求される処理やビッグデータの処理に対応することが必要となる。

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、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。その際、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。

#### 【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、詳細は別添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年頃にエクサスケー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年度から開発を行い、平成32年度（2020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、計算科学及び計算機科学の 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、フラッグシップシステムの開発プロジェクト（ポスト「京」開発プロジェクト）に平成 26 年度から着手し、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、

- ・ 解決すべき社会的・科学的課題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こと。
- ・ 汎用部及び加速部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を検討すること。
- ・ 技術開発の遅れに対する代替案を検討すること。
- ・ 海外の技術の利用も含めた国際協力を視野に入れること。
- ・ チェックポイントを設けて HPCI 計画推進委員会等の評価を受けること。
- ・ コストを精査すること。

等のシステムサブ WG における留意事項や本ワーキンググループの提言が十分に尊重されることを期待する。

### 3. アプリケーション開発の在り方

計算科学技術に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、高性能なシステムだけでなく、ユーザが実際にシミュレーションやデータ処理を行うための高性能なアプリケーションソフトウェアを開発し、その利用を促進するこ

とが不可欠である。また、アプリケーション開発の効率化やシステム利用の最適化のため、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を整備することが重要である。さらに、システム完成後における早期の成果創出や後述する国際展開等のためには、Co-designにより、システムの開発とアプリケーション等の開発を並行して行うべきである。

アプリケーション開発に当たっては、HPCI戦略プログラムを参考として、当該開発を通じた人材育成や開発したアプリケーションの普及等、当該開発をプラットフォームとした各研究分野の計算科学の振興を同時に進めることが重要である。

なお、共通基盤としてのソフトウェア及びアプリケーションの研究開発の在り方並びにその利用促進として以下のものが考えられる。

#### (1) 共通基盤としてのソフトウェア開発の在り方

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す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ィアを募り、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。

### (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、国プロ開発アプリケーション等と商用ソフトウェア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。

国プロ開発アプリケーション等については、既存のソフトウェアからの乗換えコストをカバーするべく、既存のソフトウェアでは対応してい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、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。

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。

#### (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・国際展開

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を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。

また、自国で開発する技術やシステム、アプリケーションに関しては、我が国の競争力強化のため、商業ベースでの輸出をはじめ、国際展開を積極的に進めていくことが重要である。

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、その限りにおいては、現時点で国が主導して国際協力を進めることは現実的ではないが、要素技術の研究レベルでは国際協力を進めていく必要がある。また、国際展開に関しては、フラッグシップシステム等の開発と並行してその商用機の開発を進め、最先端の商用機を速やかに市場に投入するとともに、利用支援や人材育成等のユーザサポートと一体的に展開していくことで、新たな市場の獲得、それによる産業競争力の強化につなげることが重要である。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<sup>(\*)</sup>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。また、自国で開発するアプリケーションについては、上述のハードウェアの国際展開と一体的に展開していく方策を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，その利用の促進を図り，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ことが不可欠である。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う必要がある。また，共用法に基づく登録機関，HPCI 運用事務局，HPCI 資源を提供する機関等の運用に関わる機関（以下「運用機関」という。）や国は，より一層の相互連携を図り，HPCI 資源を円滑に運用することが重要である。

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、運用機関は、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。

さらに、計算科学に関する分野別中核拠点である戦略機関（HPCI 戦略プログラムにおける戦略機関、又は将来におけるこれと同様の機能を有する組織）が、産業界をはじめとする利用者や利用を検討している者の相談窓口として機能し、利用者等を HPCI へ橋渡ししていくことが重要である。具体的には、戦略機関が、利用者等が抱える課題に対応したスーパーコンピュータ活用の相談や、革新的アプリケーション、利用事例・ノウハウ等の提供を行う。なお、これにより、戦略機関にとっても、アプリケーションや利用事例データベースの充実、企業との共同研究への発展等が期待される。

#### ○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任せられているが、将来的には運用機関が、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、戦略機関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、運用機関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・将来展望】

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、更に実用段階へと進む。実証研究では主に「京」を頂点とした HPCI 資源が利用されるが、その数年後の実用段階では、自社や HPC クラウドサービス等がそれまでに整備するであろう計算機において、実証研究の際と同規模の計算資源を用いた計算が行われることになる。

また、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。

さらに、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。

#### 【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、国やシステムベンダは、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。

## 2. 人材育成

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。

#### 【基本方針】

そのため、HPC 人材の育成に関しては、

- ・ 効果的・効率的な人材育成のため、育成すべき人材像を明確化した上で、それぞれに必要な教育を整理し、大学や分野ごとの専門性を持った機関がそれぞれの特性に応じて役割分担すること。
- ・ 当該教育を受ける人材のレベルや目指す人材像に応じて、必要とされる教育内容等が過不足なく実施されることを担保するため、それぞれの人材像に対応した教育の達成基準や体系的な教育プログラムを明確化すること。
- ・ シミュレーションを設計・製造に活用する際の論点を踏まえ、産業界で求められる人材の育成を見据えた教育等を実施すること。

などが重要である。

#### 【HPC 人材の育成方策】

上記の基本方針を踏まえると、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

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、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。

基礎教育・ベーシックレベルの教育に関しては、一般化された内容を実施することから、大学が主体となって行うことが適当である。一方、アドバンスレベル・エキスパートレベルの教育に関しては、内容を一般化することが難しいため、それぞれの分野に特化した教育を、理化学研究所、戦略機関、9大学情報基盤センター等の専門性を持った機関が行うことが適当である。なお、それぞれの教育に関しては、次に述べるスキル標準をもとにして、体系的な教育プログラムが組まれることが重要となる。

#### ○スキル標準の確立と運用

それぞれの人材像に対応した教育の達成基準や体系的な教育プログラムの明確化のためには、各人材像ごとに求められる能力や経験を具体的に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とっては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、また、産業界側にとっては、社会貢献・地域貢献等の機会のみならず、指導を担当する社員の育成の機会として、インターンシップの枠組みを整備することが考えられる。インターンシップの期間については、講義の期間を考慮すると、学部学生・修士課程の学生は1、2か月程度、博士課程の学生は数か月程度が適当と考えられるが、いずれにして

も、インターンシップに参加する又はインターン生を受け入れる動機付けやインターンシップの対象学年・実施期間等を含め、インターンシップの在り方については、更に議論を深める必要がある。

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。その際、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。

### 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、計算科学技術に関するコミュニティの意見を幅広く聞くとともに、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を得ることが不可欠である。このため、国及び運用機関は、HPCI コンソーシアムにより集約された、HPCI システムの整備・運用方針や我が国の計算科学技術の振興策、将来のスーパーコンピューティング等に関わる意見を聞くことが必要である。また、国、運用機関、HPCI コンソーシアム、関係研究者等は、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。

## おわりに

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。また、今後は、自然科学系のシミュレーション研究に、社会現象や人間活動等の人文社会系の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処理等を統合し、成果を実際の社会に実装していくことで、これまで以上にスーパーコンピュータが社会的・科学的課題の解決、それを通じた国民生活の向上に貢献することが期待される。そのような状況の下、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おり、その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利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。

そのため、本ワーキンググループでは、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係る新たな戦略の調査検討を行い、その結果を本報告書に取りまとめたところであり、

### a. 計算科学技術インフラのグランドデザイン

- ・スーパーコンピュータを複層的に配置することによる世界最高水準の計算科学技術インフラの維持・強化

### b. 計算科学技術インフラの開発・整備の方向性

- ・フラッグシップシステムとそれを支える複数の特徴あるシステムから構成されるリーディングマシンの戦略的整備
- ・フラッグシップシステムについては、2020年頃までのエクサスケールコンピューティングの実現と将来世代のシステム検討の同時並行的推進
- ・特徴あるシステムについては、リーディングマシンの必要性や在り方に照らして厳選
- ・フラッグシップシステム等の開発と並行して、新たな課題や社会的ニーズに対応し、当該システムの能力を最大に発揮するアプリケーションの協調的な開発
- ・リーディングマシン開発における国際協力と国際展開

### c. 計算科学技術インフラの利活用

- ・利用手続の簡素化、利用者支援等の利用環境の整備や、アプリケーション

ン環境をはじめとして産業界の利用を促進する環境の整備を通じた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技術の進展に対応できる人材や幅広くスーパーコンピュータを利用できる人材，特に，産業競争力の強化に貢献する人材の育成

などの提言を行った。本提言は，これまでにない総合的観点から今後の方向性を提示したものと考えている。

一方で，将来的な技術動向や今後のフラッグシップシステム開発に影響される事項，人材育成の具体的な進め方等については宿題としており，それらについては，HPCI 計画推進委員会等において引き続き議論されることを期待する。

文部科学省やそのほかの関係者においては，今後，本報告書を踏まえた取組を推進し，計算科学及び計算機科学の相乗的・継続的發展を図ることにより，世界に誇る最先端システムの開発・整備や高性能アプリケーションの開発・普及，さらにシステムやアプリケーションを将来にわたって高度化する体制・環境の整備を実現していくことが重要である。

それらが実現していくことで，スーパーコンピュータが，我が国を取り巻く様々な社会的・科学的課題の解決に貢献し，まさに「研究開発の基盤」から「社会の基盤」へと昇華していくこととなる。本報告書がその一助となれば幸いである。



## 参考資料

---

- 参考 1 HPCI 計画推進委員会の設置について
- 参考 2 HPCI 計画推進委員会委員名簿
- 参考 3 ワーキンググループの設置について
- 参考 4 ワーキンググループ委員名簿
- 参考 5 ワーキンググループの検討経緯

## HPCI 計画推進委員会の設置について

平成 22 年 8 月 10 日  
文 部 科 学 省  
研 究 振 興 局

### 1. 設置の趣旨

次世代スーパーコンピュータを中核とす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(以下、HPCI という)の構築については、ユーザ機関等からなるコンソーシアムの主導で行うこととしている。このコンソーシアム主導の進め方を有効かつ円滑に機能させていくためには、国が適切に関与することが必要であり、HPCI 計画について、国として必要な検討等を行う HPCI 計画推進委員会を設置する。

### 2. 調査事項

- (1) HPCI 計画の推進にあたり国として必要な事項の検討
- (2) コンソーシアムより提出された HPCI 計画案等の評価
- (3) HPCI 計画に係る進捗状況の評価
- (4) その他 HPCI 計画に関すること

### 3. 構成及び運営

- ・ HPCI 計画推進委員会は、研究振興局長の私的諮問機関として設置する。
- ・ HPCI 計画推進委員会の構成員は、別紙のとおりとする。
- ・ HPCI 計画推進委員会の運営に係る事項は委員会において定める。

### 4. 設置期間

平成 22 年 8 月 16 日～調査事項の終了までとする。

### 5. その他

- ・ HPCI 計画推進委員会の庶務は、研究振興局情報課計算科学技術推進室が処理する。
- ・ 委員の委嘱は2年ごとに行うものとする。



HPCI 計画推進委員会 委員名簿

- 小柳 義夫 神戸大学大学院システム情報学研究科特命教授
- 笠原 博徳 早稲田大学理工学術院教授
- 関口 和一 株式会社日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員
- 鷹野 景子 お茶の水女子大学副学長兼附属図書館長  
学術・情報機構長
- 所 眞理雄 株式会社ソニーコンピュータサイエンス研究所  
エグゼクティブ アドバイザー
- ◎ 土居 範久 慶應義塾大学名誉教授
- 土井 美和子 株式会社東芝研究開発センター首席技監
- 根元 義章 独立行政法人 情報通信研究機構  
耐災害 ICT 研究センター センター長
- 村上 和彰 九州大学大学院システム情報科学研究院教授
- 矢川 元基 東京大学名誉教授  
公益財団法人原子力安全研究協会理事長

(50 音順)

平成 26 年 3 月

## 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	株式会社富士通システムズ・ウエスト取締役会長
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26年3月14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（小柳主査，関口（智）委員）
- ・ 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）
- ・ 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

第 25 回（平成 27 年 3 月 14 日（金）15 時～17 時）

- ・ 最終報告取りまとめ



## 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の力学を解くための数理的手法。例えば、マルチスケール心臓シミュレーションでは、内部構造まで模擬した細胞のモデルと、細胞の集合体を粗視化した心臓モデルとをつなぐためにこの手法が用いられる。
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が実行する機械語（実行形式）に翻訳するソフトウェア。実行時間を最小にするよう最適化（並列化を含む）された実行形式を自動的に生成する機能を有する。
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重なり合い、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 <sup>12</sup> , ペタ=10 <sup>15</sup> , エクサ=10 <sup>18</sup> 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。
Green500	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。
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。

HPCC Award	<p>HPC Challenge Award Competition</p> <p>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。</p>
Linpack	<p>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 TOP500 リスト（⇒「TOP500 リスト」参照）を作成するために使われている。</p>
MPI	<p>Message Passing Interface</p> <p>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）。</p>
OpenACC	<p>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。</p>
OpenMP	<p>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。</p>
PGAS 言語	<p>Partitioned Global Address Space 言語</p> <p>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。</p>
SIMD 演算ユニット	<p>Single Instruction Multiple Data</p> <p>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。</p>
SoC 技術	<p>System on a Chip 技術</p> <p>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。</p>
TOP500 リスト	<p>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。</p>

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。



# 別冊

## 参考資料集

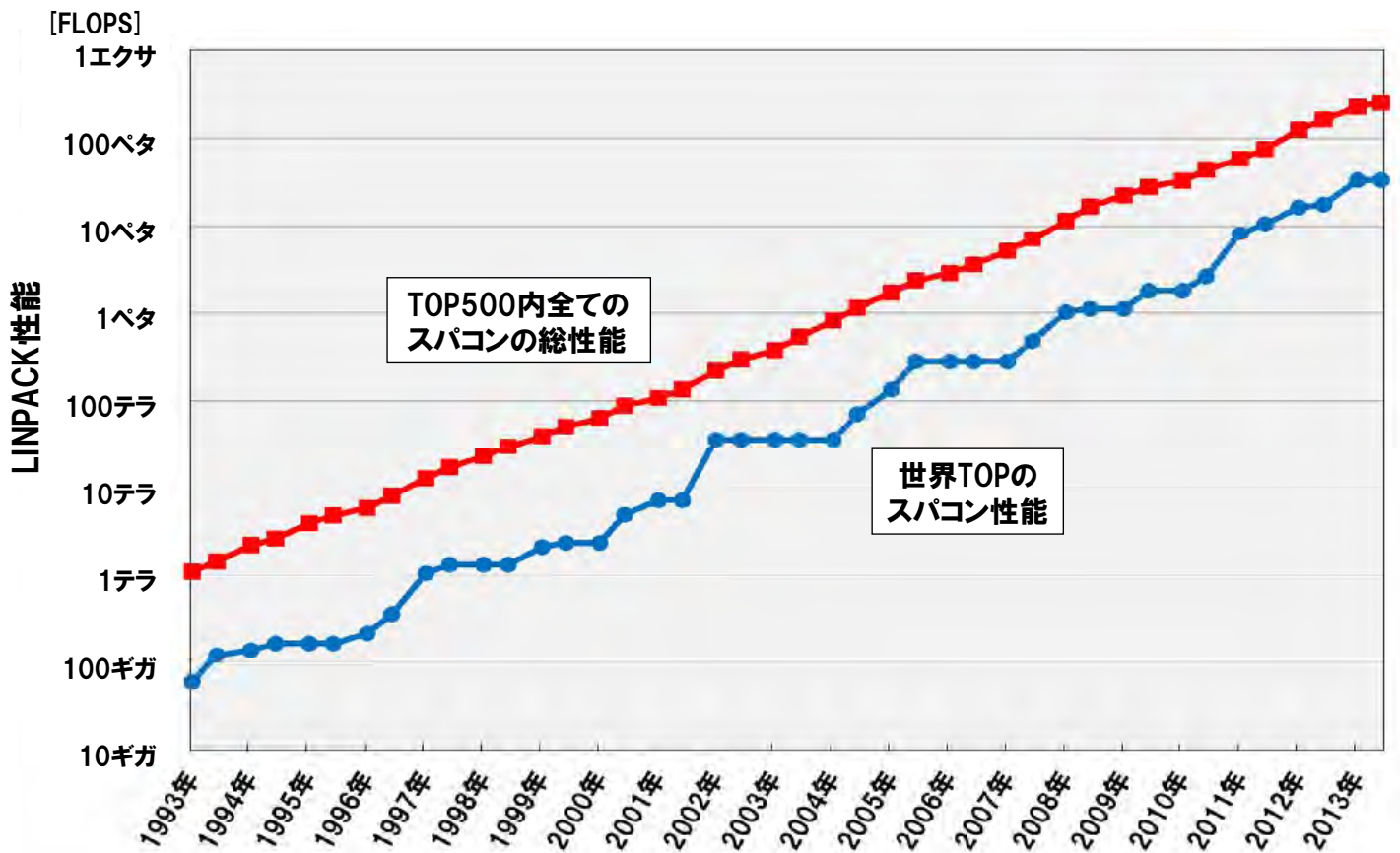
1. 国際的な状況.....	1
2. 国内の状況.....	7
3. HPCI の利用, 課題選定 .....	17
4. スパコンによる成果例 .....	25



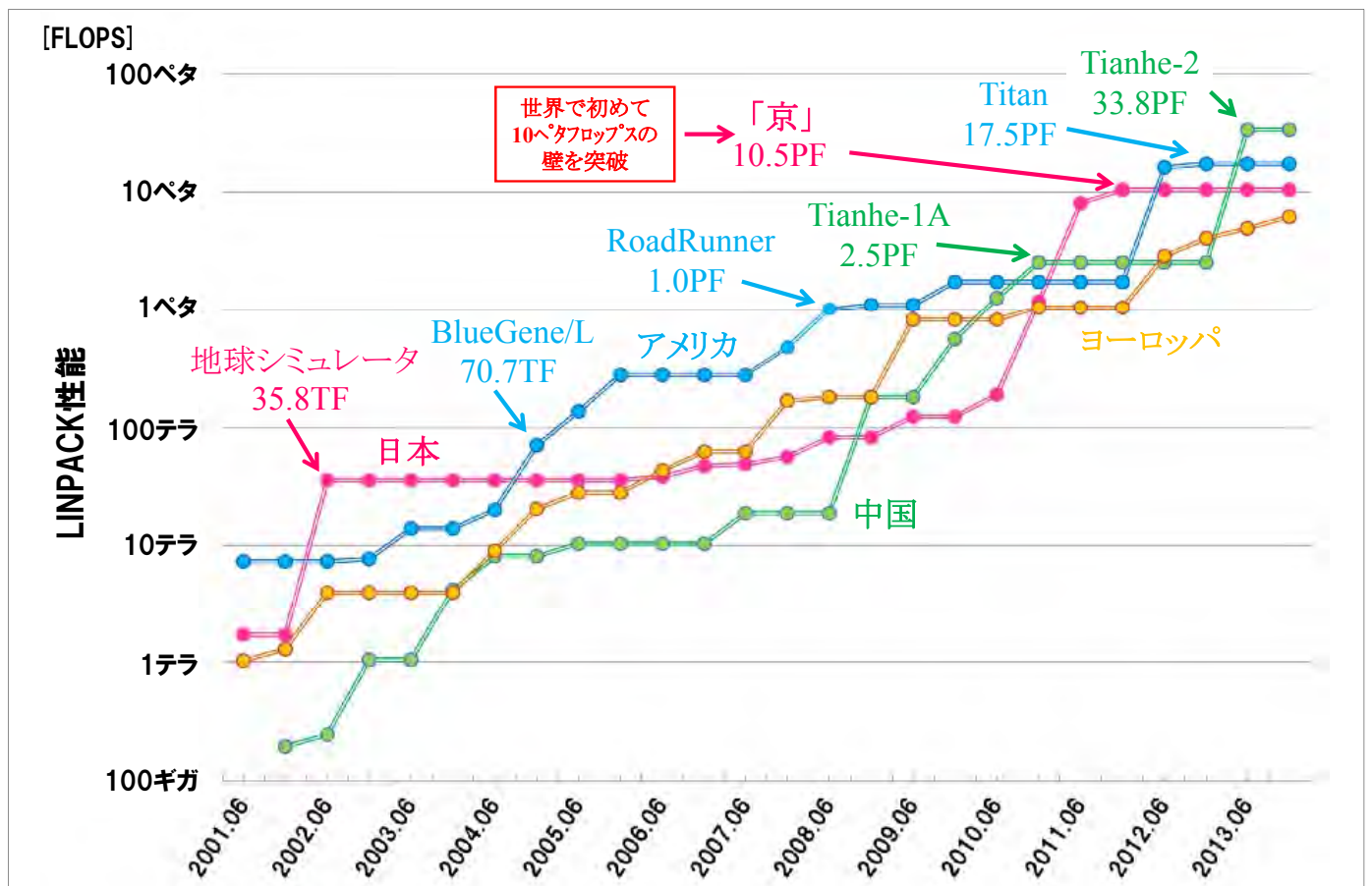
# 1. 国際的な状況

---

# 世界のスパコン性能推移



# TOP500の各国1位の推移



# スーパーコンピュータ性能ランキングの変遷

○今回1位となった**中国・国防科学技術大学(NUDT)のTianhe-2(天河2号)**は、**LINPACK性能33.86ペタFLOPS、実行効率61.6%**。Tianhe-2(天河2号)は、**前回(2013年6月)に引き続き、2回目の世界1位**。

○TOP10ランクイン数は、**米国(5システム)が1位、ドイツ(2システム)が2位、日本、中国及びスイスが各1システム**。  
TOP100ランクイン数は、**米国が45システムと圧倒的優位な状況で、次いで、日本(10システム)が2位、英国及びフランス(8システム)が3位、中国(7システム)が5位、ドイツ(5システム)が6位と続いている**。

平成24年11月

平成25年6月

平成25年11月

順位	システム名称	サイト	ベンダ	国名	Linpack 演算性能 (テラFLOPS)
1	Titan	オークリッジ研	Cray	米	17,590
2	Sequoia	ローレンスリバモア研	IBM	米	16,325
3	「京」(K computer)	理研 計算科学研究機構(AICS)	富士通	日	10,510
4	Mira	アルゴンヌ研	IBM	米	8,162
5	JUQUEEN	ユーリヒ総合研究機構(FZJ)	IBM	独	4,141
6	SuperMUC	ライプツィヒスーパーコンピュータセンター(LRZ)	IBM	独	2,897
7	Stampede	テキサス大学	Dell	米	2,660
8	Tianhe-1A(天河1A号)	天津スパセンター	NUDT	中	2,566
9	Fermi	Cinecaコンピュータセンター	IBM	伊	1,725
10	DARPA Trial Subset	DOO国防高等研究計画局 IBM開発セ	IBM	米	1,515
15	Helios	国際核融合エネルギー研究センタ	Bull SA	日	1,237
17	TSUBAME2.0	東工大術国際情報センタ(GSIC)	NEC/HP	日	1,192
21	Oakleaf-FX	東大情報基盤センタ	富士通	日	1,043
39	SGI Altix X	電力中央研究所	SGI	日	582
41	HIMAWARI	高エネルギー加速器研究機構	IBM	日	518
42	SAKURA	高エネルギー加速器研究機構	IBM	日	518
45	PRIMERGY CX400	九州大学	富士通	日	460
51	HA-PACS	筑波大計算科学研究センタ	Appro/Cray	日	422
95	Hibachi SR16000	核融合科学研究所	日立	日	253
97	Camphor	京都大学	Cray	日	251.7
100	Hibachi SR16000	東北大学 金属材料研究所	日立	日	243.9

順位	システム名称	サイト	ベンダ	国名	Linpack 演算性能 (テラFLOPS)
1	Tianhe-2(天河2号)	国防科学技術大学	NUDT	中	33,863
2	Titan	オークリッジ研	Cray	米	17,590
3	Sequoia	ローレンスリバモア研	IBM	米	17,173
4	「京」(K computer)	理研 計算科学研究機構(AICS)	富士通	日	10,510
5	Mira	アルゴンヌ研	IBM	米	8,587
6	Stampede	テキサス大学	Dell	米	5,168
7	JUQUEEN	ユーリヒ総合研究機構(FZJ)	IBM	独	5,009
8	Vulcan	ローレンスリバモア研	IBM	米	4,293
9	SuperMUC	ライプツィヒスーパーコンピュータセンター(LRZ)	IBM	独	2,897
10	Tianhe-1A(天河1A号)	天津スパセンター	NUDT	中	2,566
20	Helios	国際核融合エネルギー研究センタ	Bull SA	日	1,237
21	TSUBAME2.0	東工大術国際情報センタ(GSIC)	NEC/HP	日	1,192
26	Oakleaf-FX	東大情報基盤センタ	富士通	日	1,043
43	PRIMERGY CX400	九州大学	富士通	日	621
47	SGI Altix X	電力中央研究所	SGI	日	582
50	SAKURA	高エネルギー加速器研究機構	IBM	日	537
51	HIMAWARI	高エネルギー加速器研究機構	IBM	日	537
62	HA-PACS	筑波大計算科学研究センタ	Appro/Cray	日	422
63	Cray XC30	国立天文台	Cray	日	420

順位	システム名称	サイト	ベンダ	国名	Linpack 演算性能 (テラFLOPS)
1	Tianhe-2(天河2号)	国防科学技術大学	NUDT	中	33,863
2	Titan	オークリッジ研	Cray	米	17,590
3	Sequoia	ローレンスリバモア研	IBM	米	17,173
4	「京」(K computer)	理研 計算科学研究機構(AICS)	富士通	日	10,510
5	Mira	アルゴンヌ研	IBM	米	8,587
6	Piz Diant	スイス国立スーパーコンピュータセンター(CSCS)	Cray	スイス	6,271
7	Stampede	テキサス大学	Dell	米	5,168
8	JUQUEEN	ユーリヒ総合研究機構(FZJ)	IBM	独	5,009
9	Vulcan	ローレンスリバモア研	IBM	米	4,293
10	SuperMUC	ライプツィヒスーパーコンピュータセンター(LRZ)	IBM	独	2,897
11	TSUBAME 2.5	東工大術国際情報センタ(GSIC)	NEC/HP	日	2,843
24	Helios	国際核融合エネルギー研究センタ	Bull SA	日	1,237
30	Oakleaf-FX	東大情報基盤センタ	富士通	日	1,043
36	HA8000-ic H210/PRIMERGY CX400	九州大学情報基盤研究開発センタ	日立/富士通	日	905
54	SGI ICE X	電力中央研究所	SGI	日	582
57	SAKURA	高エネルギー加速器研究機構	IBM	日	537
58	HIMAWARI	高エネルギー加速器研究機構	IBM	日	537
73	HA-PACS	筑波大計算科学研究センタ	Cray	日	422
74	Aterui	国立天文台	Cray	日	420

## Tianhe-2 (天河2号) について

### 概要

■中国が進める科学技術第12次5カ年計画の一環として、研究や教育に対するオープンプラットフォームとして、南中国におけるハイパフォーマンスコンピューティングサービスとしての活用を目的として開発されたスーパーコンピュータ。

■中国湖南省長沙に設置され(2013年11月に広東省広州の国立スーパーコンピュータ・センター(National Supercomputer Centre in Guangzhou)に移転)、国防科学技術大学(NUDT: National University of Defense Technology)と、中国Inspur社が中心に開発。ピーク性能は54ペタフロップス(「京」の約4.8倍)。

■米国製の汎用CPU(Intel)とアクセラレータチップ(Intel Xeon Phi)を組み合わせた構成。ネットワークは自国製(中国製)。

■乱流解析シミュレーションや核融合プラズマシミュレーション等での利用を想定し、アプリケーションを移植中。

■Tianhe-2号ではアクセラレータ部分が総演算性能の87%を担うことで、対性能比での省スペースと省電力を実現。

※ Tianhe-2の性能については現在調査中のもの(今後変更もあり得る)。

### Tianhe-2の外観

(TOP500ホームページより引用)



### 「京」との性能比較

	Tianhe-2*	「京」
ノード数	16000 (CPU: 32000+Phi: 48000)	88128 (88128CPU)
1ノードあたりの演算性能(GFLOPS)	3431.4 (CPU: 422.4+Phi: 3009)	128.0
理論ピーク性能(PFLOPS)	54.9 (CPU: 6.75+Phi: 48.14)	11.28
リンパック性能(PFLOPS)	33.86	10.51
リンパック実行効率(%)	61.6	93.2
メモリ容量(PB)	1.4 (CPU: 1.0+Phi: 0.3)	1.3
演算性能あたりのメモリ容量(TB/PFLOPS)	25.6 (CPU: 151.5, Phi: 7.9)	122.1
演算性能あたりのメモリ帯域(B/FLOP)	CPU: 0.28 Phi: 0.31	0.5
演算性能あたりのインターコネクト帯域(B/FLOP)	0.018	0.39
設置面積(m <sup>2</sup> )	約720	約1500
消費電力(MW)	17.8	12.7

# TITAN(タイタン)について

## TITANの外観

(米国オークリッジ国立研究所ホームページより引用)



## 「京」との性能比較

	TITAN ※2	「京」
ノード数	18688 (CPU+GPU:18688)	88128 (88128CPU)
1ノードあたりの演算性能 (GFLOPS)	1452.8 (CPU:140.8+GPU:1310)	128.0
理論ピーク性能(PFLOPS)	27.11 (CPU:2.63+GPU:24.48)	11.28
リンパック性能(PFLOPS)	17.59	10.51
リンパック実行効率(%)	64.8	93.2
メモリ容量(PB)	0.67 (CPU:0.57+GPU:0.10)	1.3
演算性能あたりのメモリ容量(TB/PFLOPS)	25.7 (CPU:221.9, GPU:4.4)	122.1
演算性能あたりのメモリ帯域(B/FLOP)	CPU:0.36 GPU:0.19	0.5
演算性能あたりのインターコネクタ帯域(B/FLOP)	CPU部分のみ:0.19 全体(GPU含む):0.019	0.39
設置面積(m <sup>2</sup> )	約400	約1500
消費電力(MW)	8.2	12.7

※2 TITANの性能については現在調査中のもの(今後変更もあり得る)

## 概要

■米国エネルギー省が進めるAdvanced Simulation and Computing (ASC) プログラムの一環として、自然科学の幅広い分野での活用を目的として開発されたスーパーコンピュータ。

■米国オークリッジ国立研究所に設置され、CRAYが中心に開発。目標性能は27ペタフロップス(「京」の約2.4倍)。

■汎用CPUに加えて、GPU※1 と呼ばれるチップを搭載した構成。(日本国内では、東工大TSUBAME2.0などが同じアーキテクチャを既に採用。)

■TITANではGPU部分が総演算性能の90%を担うことで、対性能比での低コストと省電力等を実現。一方、性能を引き出すためには専用の言語でのプログラミングが必要となるため、ソフトウェアの開発や既存のソフトウェアの継承が難しい。また、一般的に実効性能がCPUだけのシステムに比べて劣る。

※1 GPUとは

Graphics Processing Unit(画像処理装置)の略。画像処理に必要な計算処理を行う半導体チップ。

# Sequoia(セコイア)について

## Sequoiaの外観

(TOP500ホームページより引用)



## 「京」との性能比較

	Sequoia	「京」
ノード数(CPU数)	98304	88128
1ノードあたりの演算性能 (GFLOPS)	204.8	128.0
理論ピーク性能(PFLOPS)	20.13	11.28
リンパック性能(PFLOPS)	16.32	10.51
リンパック実行効率(%)	81.1	93.2
メモリ容量(PB)	1.5	1.3
演算性能あたりのメモリ容量(TB/PFLOPS)	76.3	122.1
演算性能あたりのメモリ帯域(B/FLOP)	0.20	0.5
演算性能あたりのインターコネクタ帯域(B/FLOP)	0.10	0.39
設置面積(m <sup>2</sup> )	約300	約1500
消費電力(MW)	7.9	12.7

## 概要

■米国エネルギー省のAdvanced Simulation and Computing (ASC) プログラムの一環として、国家核安全保障局が主導的に進めている核兵器の性能、安全性、信頼性を解析・予測することを主たる目的として開発されたスーパーコンピュータ。

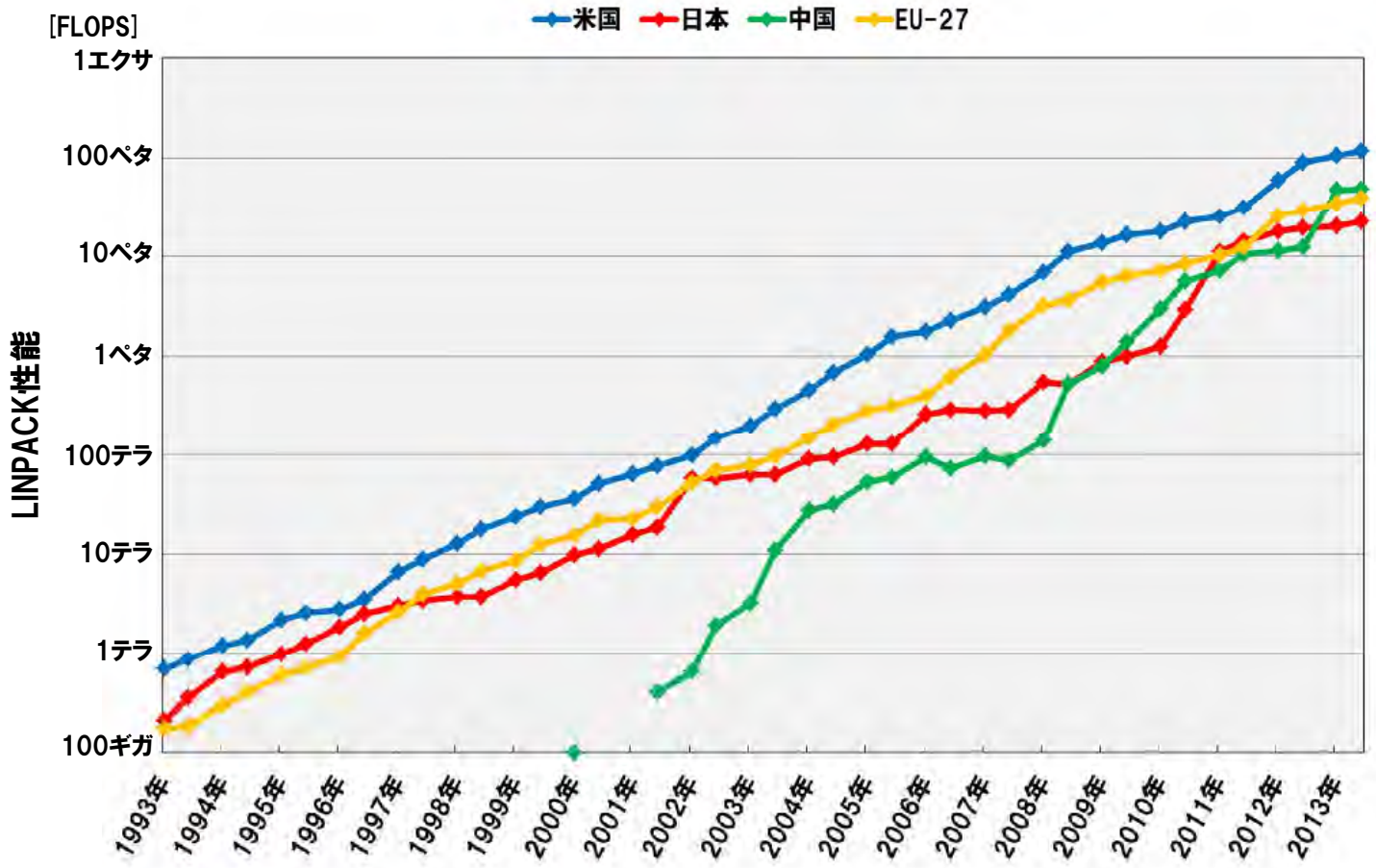
■米国ローレンス・リバモア国立研究所に設置され、IBMが開発。目標性能は20ペタフロップス(「京」の約2倍)。

## 「京」とセコイアの比較

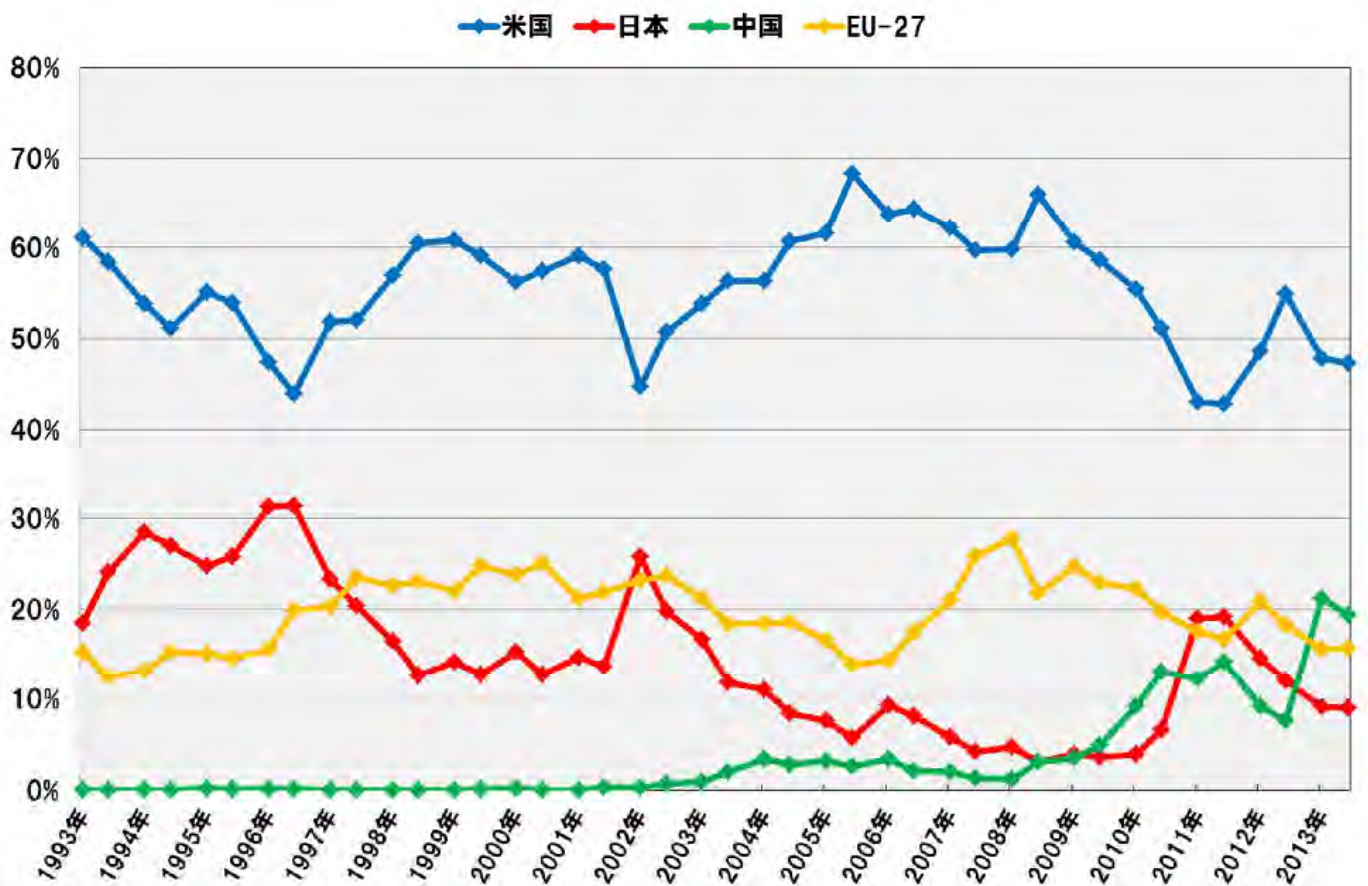
■アプリケーションプログラムの実効性能や使いやすさに関係する演算性能あたりのメモリ容量、CPU・メモリ間のデータ転送性能やCPU間のデータ転送性能では、「京」が優位となっており、幅広い分野での活用が可能と考えられる。

■一方、Sequoiaは理論ピーク性能で「京」の約2倍となっているほか、消費電力性能や設置面積で「京」よりも優位となっている。

# TOP500 国別性能推移



# TOP500 国別性能割合推移



## 世界各国のハイパフォーマンス・コンピューティング(HPC)への取組(1/2)

- スーパーコンピュータの活用が経済成長、国家安全保障、産業競争力・科学技術力強化に必須であることが、米国、欧州を中心に国際的な共通認識となり、各国においてはHPC技術の強化等を目的とした法律を制定するなど、HPC関連の技術開発を重要政策と位置づけ、活発に研究開発が実施されている。
- また、米国、欧州に加えて中国の台頭が目覚ましく、いずれも国家存立の基盤技術と位置づけ、国主導で研究開発が進められている。
- さらに、2020年から2022年頃を目途とするエクサスケール(1エクサ=1000ペタ=100京)コンピューティングの実現を見据えて、技術開発プロジェクトが世界各国において活発に実施されている。



米国

- HPC法(High-Performance Computing Act)を1991年に制定
  - DOD/DARPA, DOEを中心にHPC計画, CIC計画, NITRD計画等を継続的に実施。
  - DOE/NNSAの核兵器応用を目的としたASCI計画, ASC計画やDOE/SCのNLCF計画, ASCR計画で開発・整備されたスパコンが1997~2001年, 2004~2009年, 2012年のTOP500の1位を堅持。
- 2012年以降, LLNLのSequoia(20PFLOPS), ORNLのTitan(27PFLOPS)など10ペタ超コンピュータが続々と稼働。
  - 2013年11月現在, 10ペタ超コンピュータを4システム, 1ペタ超コンピュータを20システム超保有。
- 超並列スーパーコンピュータ利用促進プログラムINCITE(DOE:2003年~)を実施中。
  - Titan, Mira(10PFLOPS)等の計算資源を, 2012年は計1.7Bコア時間(60課題), 2013年は計4.7Bコア時間(61課題), 2014年は計6Bコア時間(59課題)配分予定であり, 配分資源量は着実に増加。
- 2018年までに100ペタ超コンピュータの稼働, 2022年頃を目途とするエクサスケールコンピューティングの実現に向け, 以下の取組を推進。
  - NITRD計画のスパコン関連予算は2012~2014年度は約1.4B\$/年で推移。
  - FastForward(DOE:2012~2014年, 総額62M\$), DesignForward(DOE:2013~2015年, 総額25M\$)で, IBM, Intel, AMD, NVIDIA, Cray等とエクサ向けCPU・メモリ・インターコネクト等の要素技術開発を実施中。
  - Xstack(DOE:2012~2015年), Argoプロジェクト(DOE:2013~2015年)で, エクサ向けソフト開発を実施中。
  - DOE/NNSAとDOE/SCの合同調達により, 2015年に2台の10ペタ超コンピュータ(NERSC-8, Trinity)をNERSC, LANLに, 2016~2017年までに100ペタ超コンピュータをORNL, ANL, LLNLに導入予定(CORAL: Collaboration Oak Ridge Argonne Livermore)。
  - 2013年12月, 核管理計画の実現に向け, エクサスケールコンピューティングの実現を目指した計画を策定することを定めた法律(2014 National Defense Authorization Act)が成立。

## 世界各国のハイパフォーマンス・コンピューティング(HPC)への取組(2/2)



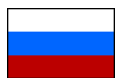
EU

- FP7(2007~2013年)の枠組で, Mont-Blanc, DEEP, CRESTA(総額42Mユーロ)等のエクサ関連プロジェクトにより, ハードとソフトの研究開発を実施。
  - FP7に続くHorizon 2020(2014~2020年)では, HPC関連予算案は総額5.6Bユーロ。
- 欧州25か国の参加を得た超並列スーパーコンピュータ利用促進プログラムPRACE(2008年~)を実施中。
  - 仏, 独, 西, 伊から400Mユーロの資金を獲得し, JUQUEEN(独FZJ:5.87PFLOPS), HERMIT(独HLRS:5PFLOPS), CURIE(仏CEA:2PFLOPS), FERMI(伊CINECA:2PFLOPS)他計6機のペタ超コンピュータを整備し, 計算資源を配分。
- EESI2(European Exascale Software Initiative)で, 引き続きエクサ実現の課題抽出とロードマップ作成を継続。
- Human Brain Project(2013~2023年, 総額1Bユーロ)が承認され, エクサスケールに繋がるコンピュータを段階的に整備予定。
- ETP4HPC(European Technology Platform for HPC)は, 欧州を中心とした主要ハード・ソフトベンダ及びスパコンセンターの総意として, 欧州におけるHPCへの取組に対する提言や取り組むべき戦略的研究課題を取りまとめ。
- 2013年11月のTOP500では, ドイツが総LINPACK性能13.6PFLOPS(計20システム)で4位, フランスが同9.4PFLOPS(計22システム)で5位, 英国が同9.0PFLOPS(計23システム)で6位の実績。また, Piz Daint(スイスCSCS:7.7PFLOPS)が, TOP500で第6位, Green500で第4位を獲得。



中国

- 国家科学技術重大プロジェクト(第12&13次5か年計画:2011~2020年)の枠組に基づき, MOST-863(国家ハイテク研究発展計画)やMOST-973(国家重点基礎研究発展計画)等を通じてHPC関連に重点投資。
  - CPU, ネットワーク及びソフトの自主開発を重視して国主導で研究開発促進。
  - 天河2号(54.9PFLOPS)が, 2013年6月, 11月のTOP500の1位を獲得。
  - 2015年までの100ペタ級コンピュータを経て, エクサスケールコンピューティングを目指す。
- 2013年11月のTOP500では, 総LINPACK性能48.5PFLOPS(計63システム)で米国に次いで2位の実績。



ロシア

- ロシア科学アカデミーが最大10PFLOPS級まで拡張可能なコンピュータのプロトタイプシステム(MVS-10P, 523TFLOPS, RSC Group製)を導入。また, RSC Groupはラックあたり1PFLOPS(2015年頃にラックあたり3PFLOPSに対応予定)のシステムを発表。
- 2013年11月のTOP500では, 総LINPACK性能2.0PFLOPS(計8システム)で10位の実績。



インド

- インド政府が第12次5か年計画(2012~2017年)で350M\$を投じ, ペタ級コンピュータ及びエクサ向け要素技術を開発中。
- 2013年11月のTOP500では, 総LINPACK性能3.0PFLOPS(計12システム)で8位の実績。



韓国

- HPC法(National Supercomputing Promotion Act)を2011年に制定。
- 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(2013~2017))を策定。
- 2013年11月のTOP500では, 総LINPACK性能1.2PFLOPS(計5システム)で13位の実績。



## 2. 国内の状況

---

# 第4期科学技術基本計画 平成23年8月19日閣議決定(HPCI関係抜粋)

## Ⅲ. 我が国が直面する重要課題への対応

### 2. 重要課題達成のための施策の推進

#### (4) 国家存立の基盤の保持

##### i) 国家安全保障・基幹技術の強化

有用資源の開発や確保に向けた海洋探査及び開発技術、情報収集や通信をはじめ国の安全保障や安全な国民生活の実現等にもつながる宇宙輸送や衛星開発及び利用に関する技術、地震や津波等の早期検知に向けた陸域、海域における稠密観測、監視、災害情報伝達に関する技術、独自のエネルギー源確保のための新たなエネルギーに関する技術、**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**、地理空間情報に関する技術、さらに能動的で信頼性の高い(ディペンダブルな)情報セキュリティに関する技術の研究開発を推進する。

#### (5) 科学技術の共通基盤の充実、強化

##### i) 領域横断的な科学技術の強化

先端計測及び解析技術等の発展につながるナノテクノロジーや光・量子科学技術、**シミュレーションやe-サイエンス等の高度情報通信技術**、数理科学、システム科学技術など、複数領域に横断的に活用することが可能な科学技術や融合領域の科学技術に関する研究開発を推進する。

## Ⅳ. 基礎研究及び人材育成の強化

### 4. 国際水準の研究環境及び基盤の形成

#### (1) 大学及び公的研究機関における研究開発環境の整備

##### ②先端研究施設及び設備の整備、共用促進

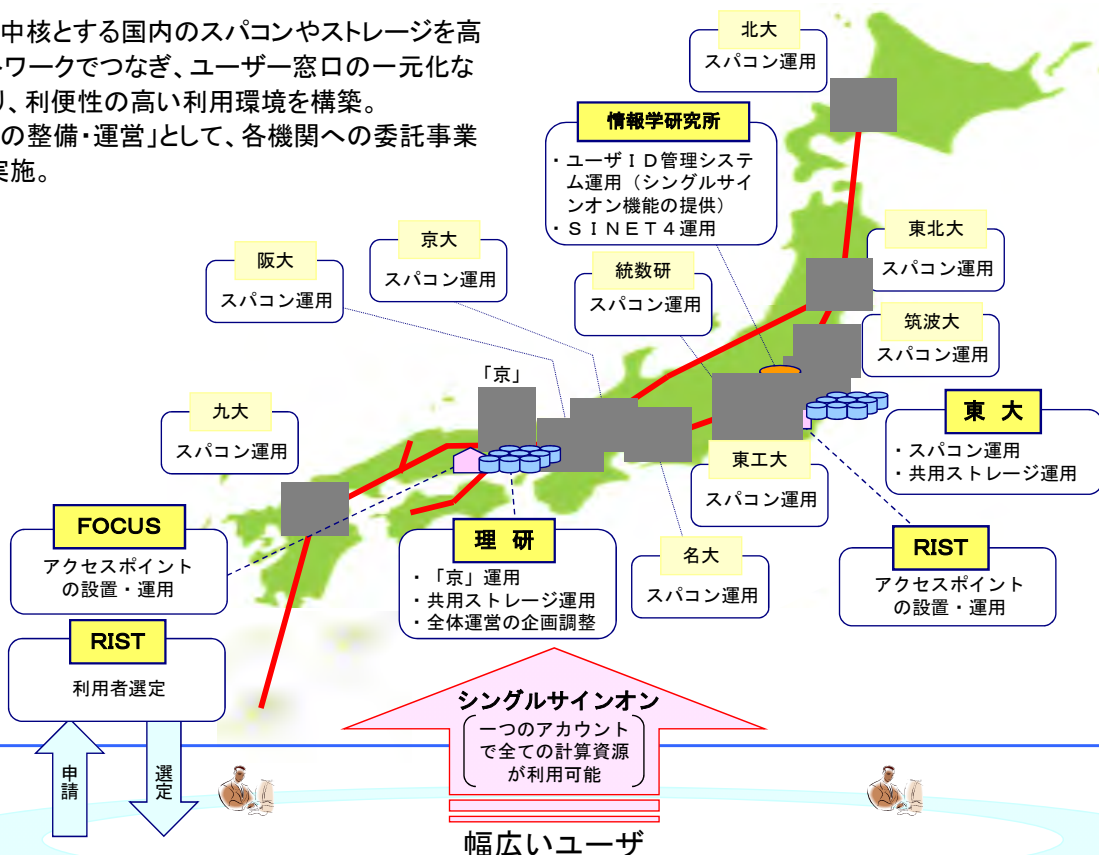
###### <推進方策>

・国は、公的研究機関を中心に、世界最先端の研究開発の推進に加えて、幅広い分野への活用が期待される**先端研究施設及び設備の整備**、更新等を着実に進めるとともに、**その着実な運用や、「共用法」に基づく施設など世界最先端の研究施設及び設備について共用を促進するための支援**を行う。

・公的研究機関等は、保有する**施設及び設備の共用を促進**するとともに、これを利用する研究者や機関の利便性を高めるため、安定的な運転時間の確保や利用者ニーズを把握した上での技術支援者の適切な配置など、利用者支援体制を充実、強化する。また、優れた研究成果が創出できるよう、共用に際して、研究課題の公募や選定の在り方を含め、より成果が期待される研究開発を戦略的に実施するための方策を講じる。

## HPCIの枠組み

- 「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎ、ユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。
- 「HPCIの整備・運営」として、各機関への委託事業により実施。



# 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

平成26年度予算額：15,052百万円  
(平成25年度予算額：16,416百万円)

## 事業概要

今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるため、スーパーコンピュータ「京」を中核とし、多様な利用者のニーズに応える革新的な計算環境(HPCI: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)を構築するとともに、この利用を推進し、地震・津波の被害軽減や、創薬プロセスの高度化等の科学的・社会的課題の解決に貢献。

### (1)HPC(ハイパフォーマンス・コンピューティング)基盤の運用 12,805百万円(13,802百万円)

#### ①「京」の運営 11,287百万円(11,484百万円)

(内訳)・「京」の運用等経費 10,416百万円(10,587百万円)  
・特定高速電子計算機施設利用促進 870百万円(897百万円)

- ・平成24年9月末に共用開始した「京」の運用を着実に進めるとともに、その利用を推進。
- ・産業界を含む幅広い利用者から公募で選定した一般利用枠104課題、国が戦略的な見地から選定した戦略プログラム利用枠29課題のほか、政策的に重要かつ緊急な重点化促進枠課題として首都直下地震等による被害予測シミュレーションを実施するなど、産業界85社を含む1,000人以上が利用。
- ・共用開始以降、論文101本を発表、特許2件を出願。(平成25年12月時点)

### ②HPCIの運営 1,518百万円(2,318百万円)

「京」を中核として国内の大学等のコンピュータやストレージを高速ネットワークでつなぎ、多様な利用者のニーズに応える利便性の高い研究基盤であるHPCIシステムの着実な運用を行う。



### (2)HPCI利用の推進 2,247百万円(2,614百万円)

#### OHPCI戦略プログラム 2,247百万円(2,614百万円)

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端計算科学技術研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略5分野における「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進。

#### <戦略分野(戦略機関)>

- 分野1: 予測する生命科学・医療および創薬基盤(理化学研究所)
- 分野2: 新物質・エネルギー創成(東大物性研、分子研、東北大金材研)
- 分野3: 防災・減災に資する地球変動予測(海洋研究開発機構)
- 分野4: 次世代ものづくり(東大生産研、JAXA、JAEA)
- 分野5: 物質と宇宙の起源と構造(筑波大、高エネ研、国立天文台)

### 画期的な成果の創出 ~最先端の計算環境を利用し重要課題に対応~

<h4>心臓シミュレーション</h4> <p>分子レベルから心臓全体を精密再現することにより、心臓の難病のひとつである<b>肥大型心筋症の病態を解明</b>、臨床現場とも連携し、<b>治療法の検討や薬の効果の評価</b>に貢献。</p>	<h4>地震・津波の被害予測</h4> <p>50m単位(ブロック単位)から<b>10m単位(家単位)の精密な予測</b>を実施。津波浸水、構造物被害、避難シミュレーションも一体での南海トラフ巨大地震の複合被害評価を高知市等の都市整備計画へ活用。<b>災害に強い街作りやきめ細かな避難計画の策定</b>等に貢献。</p>
<h4>創薬開発</h4> <p>新薬の候補物質を絞り込む期間を半減(約2年から約1年)、がん治療の<b>新薬の候補となる化合物を効率的に発見</b>。製薬企業と協働し、<b>新薬開発を推進</b>。</p>	<h4>天体形成、銀河形成過程の解明</h4> <p>宇宙の形成過程を明らかにするために不可欠なダークマター粒子の重力進化シミュレーションを、数兆個におよぶ<b>世界最大規模で実現し</b>、<b>宇宙初期のダークマター密度分布の計算に成功</b>。宇宙の構造形成過程に関する科学的成果の創出に貢献。 ※ゴードン・ベル賞(2012年)受賞</p>
<h4>製品設計の効率化</h4> <p>自動車などの設計プロセスを革新。<b>風洞実験などを完全に代替し、実験では解析できない現象を解明</b>。<b>設計期間短縮、コスト削減</b>による産業競争力強化に貢献。</p>	

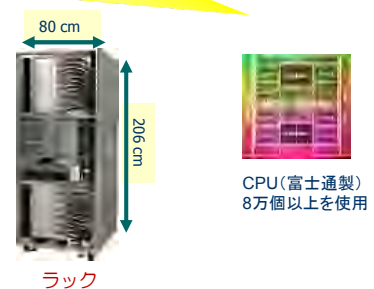
# スーパーコンピュータ「京(けい)」の概要

・2011年6月と11月の二期連続で世界スパコン性能ランキング(TOP500)において1位を獲得

・「京」の利用研究が2年連続でゴードン・ベル賞(コンピュータシミュレーション分野での最高の賞)を受賞

## ○概要

- ◆平成23年11月にLINPACK性能※1 10ペタフロップス※2達成。
  - ◆平成24年6月システム完成済(兵庫県神戸市の理化学研究所に設置)
  - ◆平成24年9月28日に共用開始
- ※1 スーパーコンピュータの性能を測るための世界的な指標(ベンチマークプログラム)  
※2 10ペタフロップス:一秒間に1京回(=10,000兆回=10<sup>16</sup>回)の足し算、掛け算が可能な性能

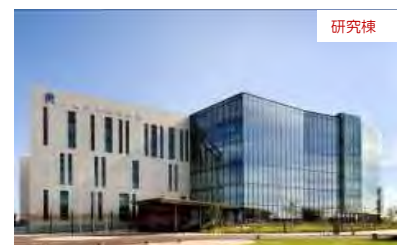


CPU(富士通製)  
8万個以上を使用

## ○プロジェクト経費 1,111億円(H18~H24)

## ○特長

- ◆全CPUフル稼働時の連続実行時間は29時間以上で世界最高水準の**信頼性**
- ◆世界トップ10の**実行効率**(理論性能に対する実際の性能の比率)平均が78%のところ、「京」は93%
- ◆アプリケーションプログラムの**実行性能や使いやすさ**に関して高い性能
- ◆**水冷システム**の導入により消費電力の削減や故障率の低減に寄与
- ◆**六次元メッシュ/トラス**結合の採用による高い利便性・耐故障性・運用性
- ◆**共用法**に基づき、登録機関(高度情報科学技術研究機構)と理化学研究所が連携し、「京」を利用する体制を構築。



# スーパーコンピュータ「京」プロジェクト関連予算

	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度	平成23年度	平成24年度	合計
スーパーコンピュータ「京」	概念設計	詳細設計	試作・評価・製造	性能チューニング	Linpack 10PFLOPS達成 (目標: H24年6月→実績: H23年11月)			合計 793億円
	<システム開発経費小計> 12億	53億	111億	110億	353億	110億	45億	
「京」施設	1億	設計 34億	67億	建設 61億	29億	完成		合計 193億円
「京」ソフトウェア (グランドチャレンジアプリケーション)	22億	32億	開発・製作・評価 22億	19億	15億	10億	実証 6億	合計 126億円 ※H23,24年度のソフトウェア実証16億は、HPCI戦略プログラムの中で実施。
費用	35億	120億	200億	190億	397億	119億	50億	1,111億円
「京」の運用等経費					14億	65億	97億	
「京」の利用者選定・利用支援							9億	共用法に基づく登録機関が実施。
HPCIの構築					HPCIシステム基本設計・詳細設計 0.5億	1.8億	整備・構築 19億※	※将来のHPCIシステムのあり方の調査研究のための経費4.4億円を含む。
HPCI戦略プログラム				FS 0.3億	準備研究 3億	HPCI戦略プログラム 35億	31億	
	H18予算 35億円	H19予算 120億円	H20予算 200億円	H21予算 190億円	H22予算(当初):228億 H22補正:186億円	H23予算 211億円	H24予算 199億円	

最先端・高性能汎用スーパーコンピュータ開発利用プロジェクト

## 9大学情報基盤センターの計算リソースの概要

- 大型計算機を運用管理するとともにその整備を図る
- 学術研究等の共同利用に供する
- 計算機の高度利用に関する研究および開発を行う

平成25年11月現在総理論演算性能 11,456Tflops

HPCI共用計算資源総理論演算性能 2,526Tflops(平成25年11月現在)  
[平成26年度募集: 2,879Tflops]

**北海道大学:**  
SR16000/M1 (172.6Tflops, 22TB)

**大阪大学:**  
SX-9 (16.4Tflops, 10TB)  
SX-8R (5.3Tflops, 3.3TB)  
Express5800/120Rg-1 (6.1Tflops, 2TB)  
Express5800/53Xh (16.6Tflops, 2.6TB)

**東北大学:**  
SX-9 (26.2Tflops, 16TB)  
SX-9 (3.3Tflops, 2TB)  
Express5800(1.7Tflops, 3TB)

**京都大学:**  
Cray XE6 (300.8Tflops, 59TB)  
APPRO GreenBlade8000 (242.5Tflops, 38TB)  
APPRO 2548X (10.6Tflops, 24TB)

**筑波大学:**  
T2K-Tsukuba (95.4Tflops, 21TB)  
70ソリア計算機システム (1166Tflops, 42.49TB)

**九州大学:**  
PRIMEHPC FX10 (181.6Tflops, 24.6TB)  
PRIMERGY CX400 S1 (811.9Tflops, 185TB)  
HA8000-tc (712.5Tflops, 247TB)  
SR16000/VM1 (8.2Tflops, 16TB)

**東京大学:**  
T2K (140.1Tflops, 31TB)  
SR16000/M1 (54.9Tflops, 11TB)  
PRIMEHPC FX10 (1135.2Tflops, 150TB)

**名古屋大学:**  
FX10 (90.8Tflops, 12TB)  
CX400 (470.6Tflops, 43TB)

**東京工業大学:**  
TSUBAME2.5 (5787Tflops, 116TB)

# スパコンの保有状況

○大学(最大理論性能が100GFLOPS以上)(平成24年5月現在)

※「学術情報基盤実態調査」による調査結果をもとに集計。調査対象は国立86、公立82、私立610の計778大学。

	学内利用(人)	学外利用(人)	最大理論性能 (TFLOPS)
国立大学(22大学)	9,409	5,190	6,793.94
公立大学(4大学)	372	186	141.44
私立大学(13大学)	2,061	19	82.30
合計	11,842	5,395	7,017.67

※うち、情報基盤センター(9大学) 5,589.82TFLOPS

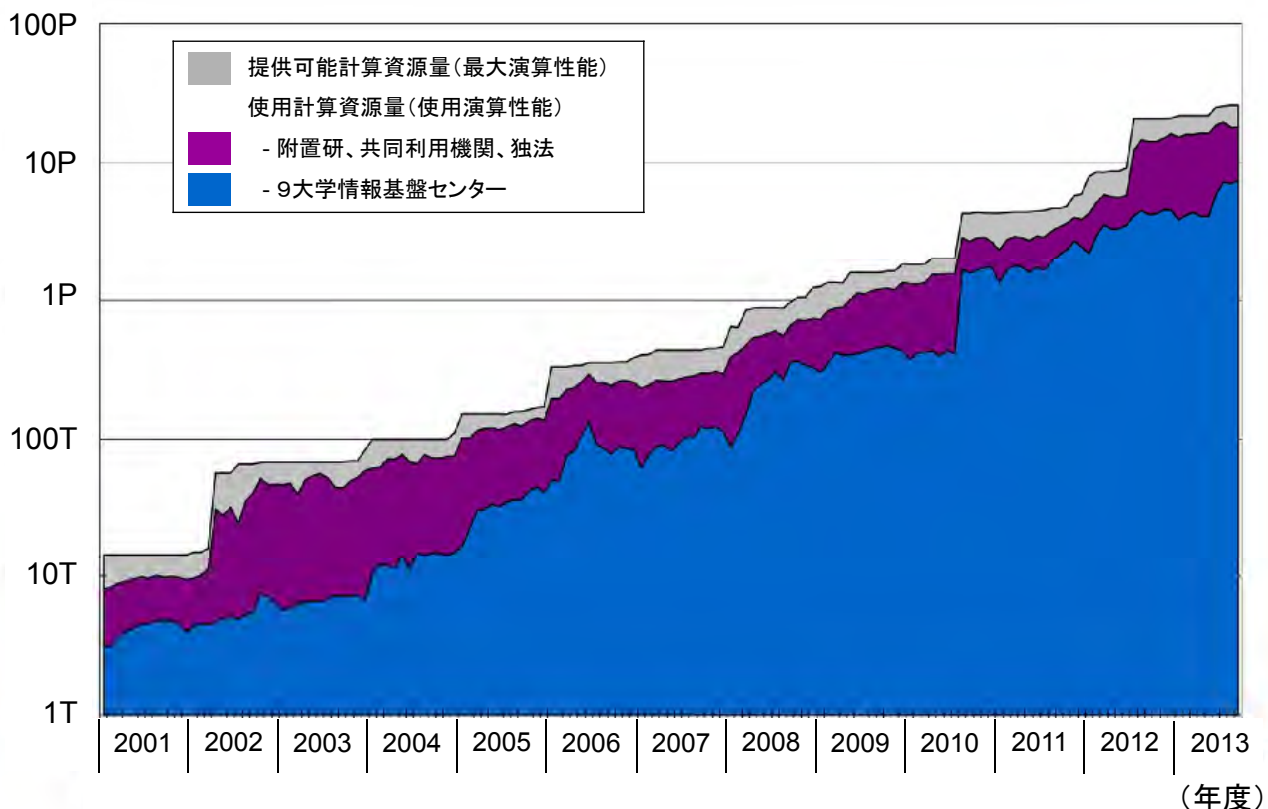
○大学共同利用機関法人、独立行政法人(最大理論性能が1.5TFLOPS以上)

(利用者数は平成24年5月現在、最大理論性能は平成24年10月現在)

	機関内利用(人)	機関外利用(人)	最大理論性能 (TFLOPS)
大学共同利用機関法人	946	3,297	1,949.19
独立行政法人	3,084	844	12,566.08
合計	4,030	4,141	14,515.27

## 9大学情報基盤センター、附置研、共同利用機関、独法の計算資源量合計

(FLOPS)



## TOP500(平成25年11月)のうち日本に設置されているスパコン

順位	サイト	ベンダ	システム名称	Linpack 演算性能 (テラFLOPS)	Green500 順位
4	理研 計算科学研究機構(AICS)	富士通	「京」(K computer)	10,510	123
11	東工大学術国際情報センター(GSIC)	NEC/HP	TSUBAME 2.5	2,843	6
24	国際核融合エネルギー研究センター	Bull SA	Helios	1,237	181
30	東大情報基盤センター	富士通	Oakleaf-FX	1,043	99
36	九州大学情報基盤研究開発センター	日立/富士通	HA8000-tc HT210/ PRIMERGY CX400	905	498
54	電力中央研究所	SGI	SGI ICE X	582	127
57	高エネルギー加速器研究機構	IBM	SAKURA	537	23
58	高エネルギー加速器研究機構	IBM	HIMAWARI	537	24
73	筑波大計算科学研究センター	Cray	HA-PACS	422	59
74	国立天文台	Cray	Aterui	420	176
108	名古屋大学情報基盤センター	富士通	PRIMERGY CX400	318	314
134	筑波大計算科学研究センター	Cray	HA-PACS TCA	277	3
152	核融合科学研究所	日立	Plasma Simulator	253	214
155	京都大学	Cray	Camphor	252	325
162	東北大学 金属材料研究所	日立	SR16000 Model M1	244	197
168	分子科学研究所	富士通	PRIMERGY CX250 & RX300	238	183
178	サービスプロバイダ	HP	DL160 Gen8	227	438
211	日本原子力研究開発機構(JAEA)	富士通	PRIMERGY BX900	191	316
229	サービスプロバイダ	HP	BL460c Gen8	187	254
264	九州大学情報基盤研究開発センター	富士通	PRIMEHPC FX10	167	179
272	東京大学 物性研究所	SGI	SGI Altix ICE 8400EX	162	319
311	東工大学術国際情報センター(GSIC)	NEC	TSUBAME-KFC	150	1
364	エレクトロニクス関係	IBM	iDataPlex DX360M4	139	128
378	京都大学	Cray	Laurel	135	168
443	サービスプロバイダ	HP	DL360p Gen	126	429
459	金融関係	IBM	xSeries x3650M3	126	379
472	地球シミュレータセンタ	NEC	地球シミュレータ	122	496
476	北海道大学情報基盤センタ	日立	SR16000 Model M1	122	216

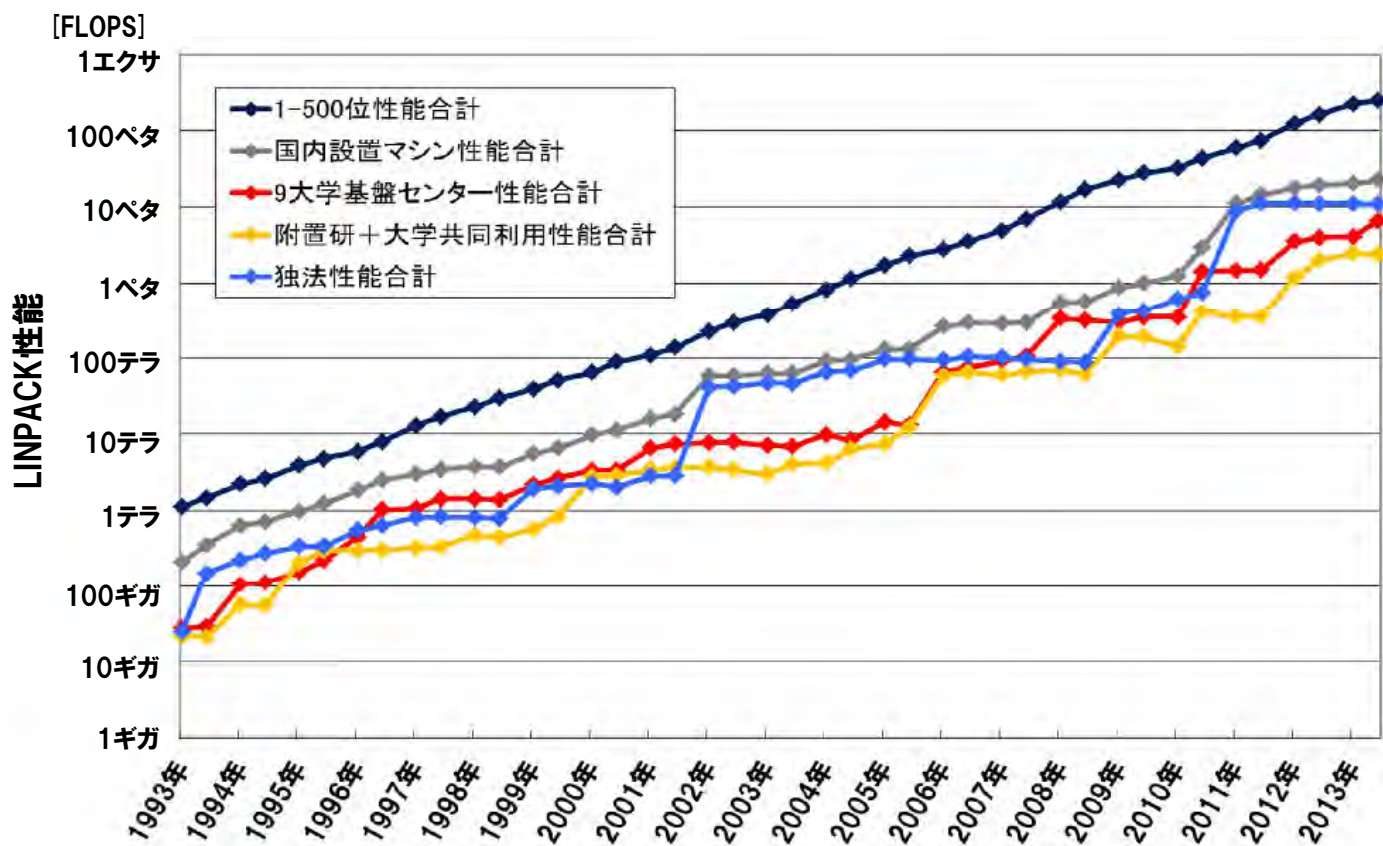
## TOP500における国内マシンの性能推移

	平成24年6月	平成24年11月	平成25年6月	平成25年11月
総Linpack性能 <sup>(注1)</sup> (FLOPS)	18.00ペタ (14.5%)	19.44ペタ (12.0%)	20.33ペタ (9.1%)	22.47ペタ (9.0%)
	123.41ペタ	161.97ペタ	223.53ペタ	250.08ペタ
国内設置台数 <sup>(注2)</sup> (システム数)	35 (7.0%)	32 (6.4%)	30 (6.0%)	28 (5.6%)
日本製スパコン設置台数 (システム数)	14 (2.8%)	17 (3.4%)	16 (3.2%)	16 (3.2%)

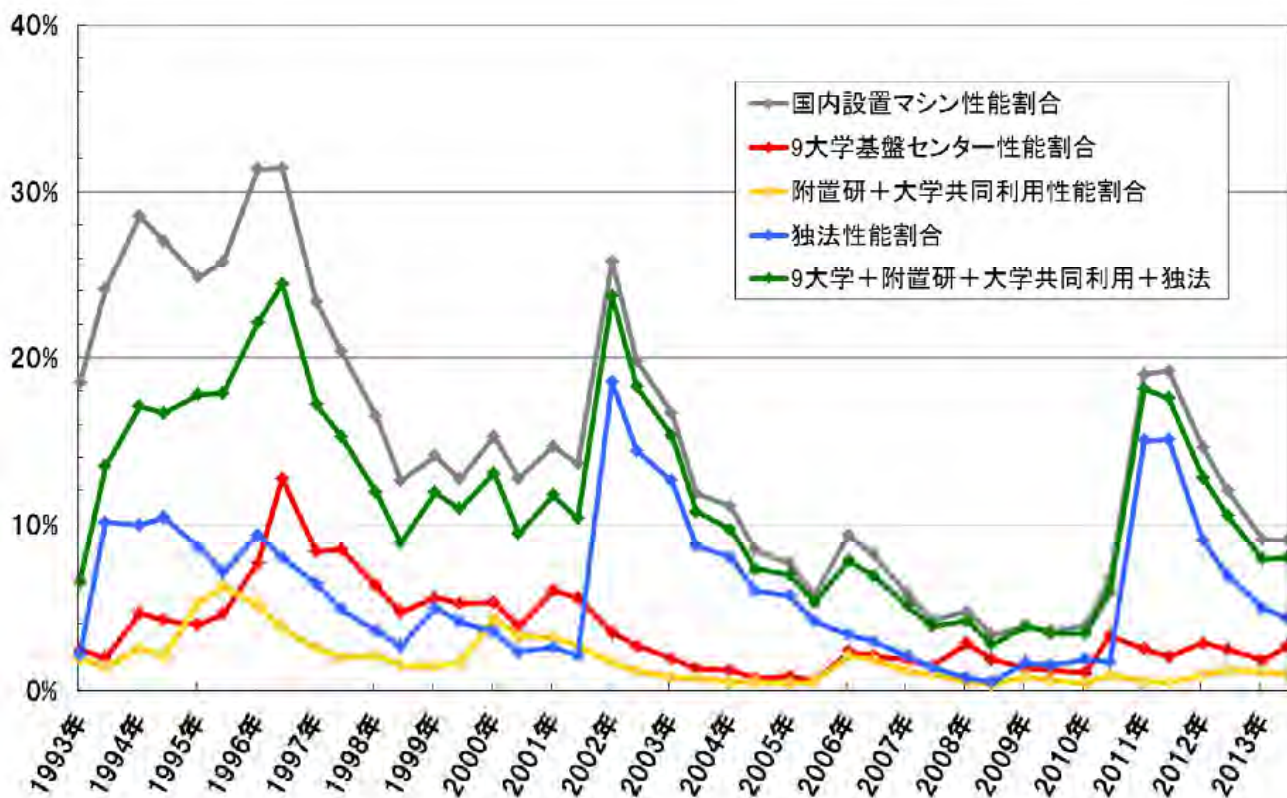
括弧内はTop500に占める割合

(注1)最下段はTop500全体の性能  
(注2)海外メーカー分を含む

# TOP500における国内マシンのLINPACK性能トレンド



# TOP500の1-500位合計性能に対する国内マシン性能の割合(LINPACK性能)



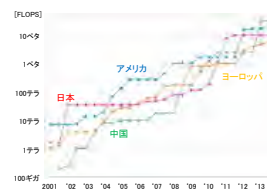
# ポスト「京」(エクサスケール・スーパーコンピュータ)の開発

平成26年度予定額 1,206百万円 (新規)

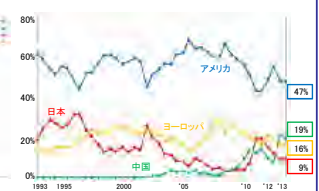
## 背景

- スーパーコンピュータは**科学技術の発展、産業競争力強化、安全安心の国づくりに不可欠な国家の基幹技術**であり、**米国、EU、中国をはじめ国際的に開発・整備・導入が活発**
- 🇺🇸: 世界の計算性能の約半分、2020年頃のエクサ級スパコン開発・稼働予定
- 🇪🇺: 日本を超える総計算能力、2020年頃のエクサ級スパコンを整備予定
- 🇨🇳: 最新ランキングで一位獲得、CPUの自主開発を進めエクサ開発に着手
- 少子高齢化やエネルギー・環境問題、産業の国際競争激化、巨大な自然災害など、我が国を取り巻く様々な**社会的・科学的課題の解決には最先端のスパコンが必要不可欠**

主要国の1位のスパコン性能推移



主要国のスパコン性能割合推移



※FLOPS(フロップス): 1秒間に計算ができる回数(能力)を表した値

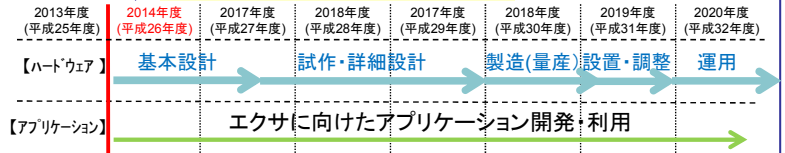
## 開発の概要

- 2020年までに**エクサスケールのスーパーコンピュータを開発し、実際のシミュレーションでも、「京」の100倍の性能を実現**
- 世界一の成果を創出できる**アプリケーションをハードウェアと一体的に開発(Co-design)**し、社会的・科学的課題の解決に貢献
- 自主開発によりIT技術の波及効果が得られ、海外展開に貢献**するとともに、我が国に蓄積された**高度なICT技術・人材を維持・強化**
- ポスト「京」を設置するために必要なインフラを備え、計算科学分野の優秀な研究者等を有している**理化学研究所が主体となって開発**
- 総事業費 約1,400億円(うち国費分 約1,100億円)

- ・アーキテクチャ: 汎用部+加速部
- ・目標演算性能: 1エクサフロップス級(「京」の100倍)
- ・消費電力: 30~40MW(「京」は12.7MW)



平成26年度は汎用部と加速部の基本設計を行い、ハードウェア仕様の詳細を検討



## エクサスケール実現により期待される成果

### <新薬の開発>

- ・限られた時間内に探索できる新薬候補化合物の種類が大幅に増大し、**新薬の開発期間の大幅な短縮に貢献**
- ・より複雑な細胞環境下のシミュレーションが可能となり、有効な新薬候補化合物の検出の可能性が高まるとともに、**副作用の有無の予測も可能に**

タンパク質と化合物との結合作用を予測、「京」で約2.4年かかる計算が約5.5日で可能に

### <ものづくり(自動車開発)>

- ・走行、燃費、対衝突性能等の解析プロセスを統合した自動車設計手法を開発。**設計の大幅な効率化により低コストかつ短期間での開発が実現**
- ・自動車衝突時の影響を、車体だけでなく乗員の体への影響(骨や内臓等の損傷)も評価し、**より安全性の高い車体の開発に貢献**

個別解析プロセスを統合したシミュレーション、「京」で約1.4年かかる計算が約3日で可能に

疾患関連のタンパク質

新薬候補化合物

疾患と無関係なタンパク質

副作用

マツダ・北大提供  
蛇行走行時の高速走行安定性解析

※黒い部分が損傷部位

# 9大学情報基盤センター運用&整備計画

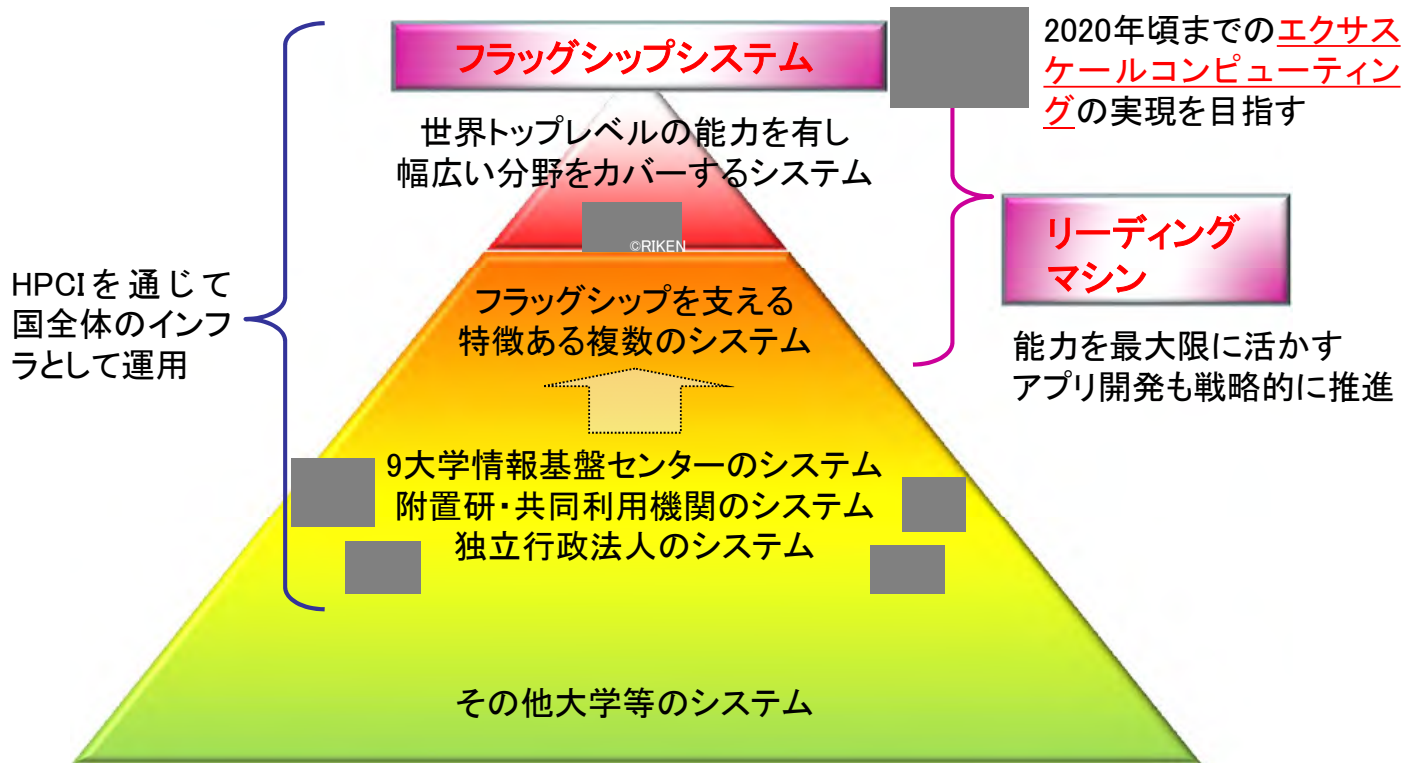
Fiscal Year	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023
<b>Hokkaido</b>		Hitachi SR16000/M1 (172 TF, 22TB) Cloud System Hitachi BS2000 (44TF, 14TB)						10+ PF			50+ PF	
<b>Tohoku</b>		NEC SX-9 + Exp5800 (31TF)				~1PFlop/s				30+ Pflop/s		
<b>Tsukuba</b>			HA-PACS (800 TF) (Manycore system) (700+ TF)									
<b>Tokyo</b>		T2K Todai (140 TF)				PostT2K (20+ PF, (100+ TiB, 600TiB, 4.0+ PB/s, 0.68+ PB/s))				100+ PF		
<b>Tokyo Tech.</b>		Fujitsu FX10 (1PFlops, 150TiB, 408 TB/s), Hitachi SR16000/M1 (54.9 TF, 10.9 TiB, 5.376 TB/s)					Tsubame 3.0 (20+ PF)			50+ PF		
<b>Tokyo Tech.</b>		Tsubame 2.0 (2.4PF, Tsubame 2.5 (5.7 PF, 97TB, 744 TB/s)	110+ TB, 1160 TB/s)								Tsubame 4.0 (100+ PF)	
<b>Nagoya</b>		Fujitsu M9000(3.8TF, 1TB/s), HX600(25.6TF, 6.6TB/s), FX1(30.7TF, 30 TB/s)		Fujitsu FX10 (90.8TF, 31.8 TB/s), CX400(470.6TF, 55 TB/s) Upgrade (3.6PF)						50+ PFlops		
<b>Kyoto</b>		Cray XE6 (300TF, 92.6TB/s), GreenBlade 8000 (243TF, 61.5 TB/s)		Cray XC30 (400TF) 600TF			10+ PF				50+ PF	
<b>Osaka</b>		SX-8 + SX-9 (21.7 TF, 3.3 TB, 50.4 TB/s)				(500+ TiB/s)					(5+ PiB/s)	
<b>Kyushu</b>		Hitachi SR16000(25TF)		Hitachi HA8000tc/HT210(500TF, 215 TiB, 98.82TB/s), Xeon Phi (212TF, 26.25 TiB, 67.2 TB/s), SR16000(8.2TF, 6 TiB, 4.4 TB/s)				10+ PF				50+ PF
<b>Kyushu</b>												Fujitsu FX10 (270TF, 65.28 TB/s), CX400(510TF, 152.5 TiB, 151.14 TB/s), GPGPU(256TF, 30 TiB, 53.92 TB/s)

出展: 情報基盤センターとHPCIの今後に関する意見交換会



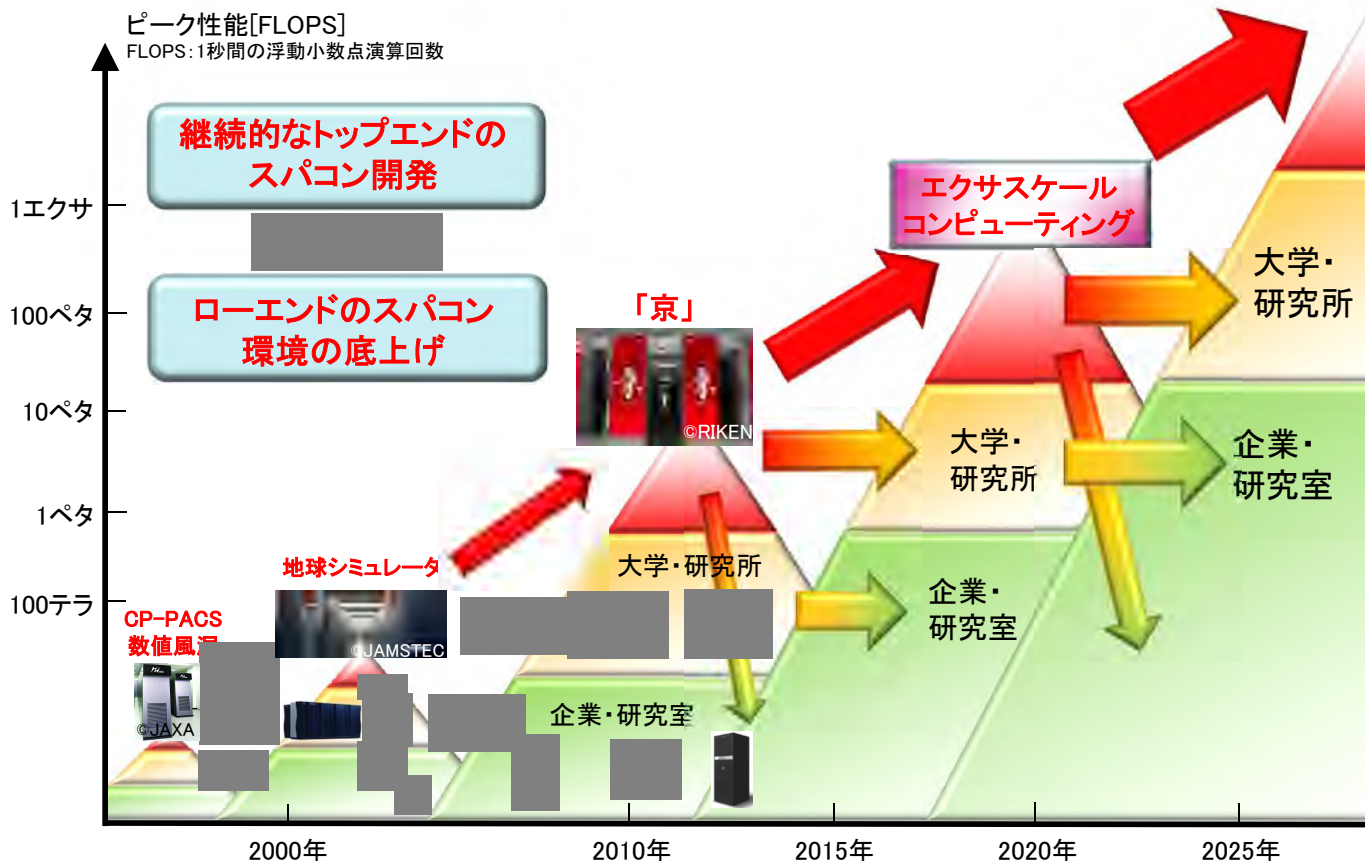
# 我が国の次期スパコン開発の方向性

<我が国の計算科学技術インフラのイメージ>



# 継続的な世界最高水準のスパコン開発の必要性

<計算科学技術インフラの継続的強化のイメージ>

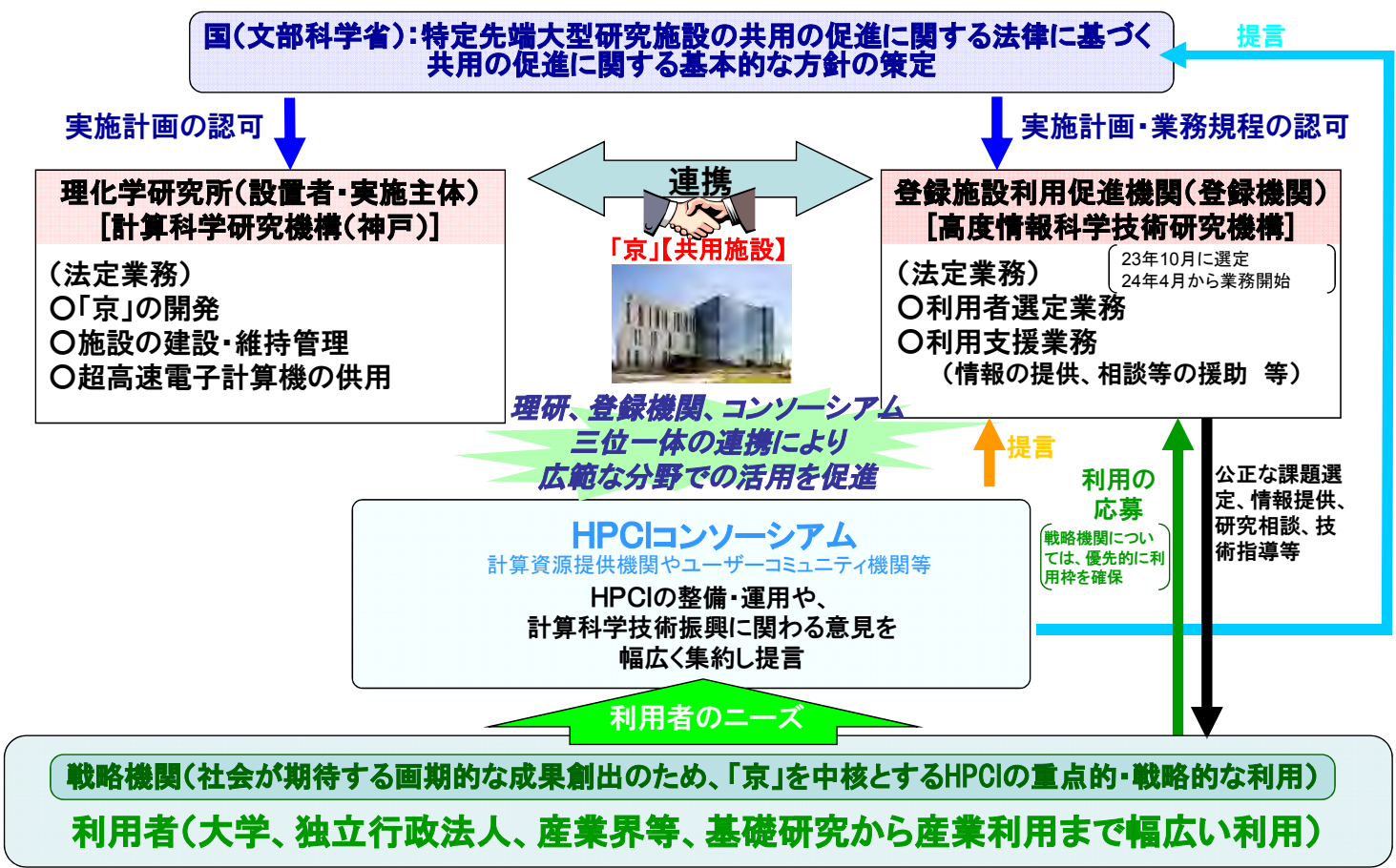




### 3. HPCIの利用, 課題選定

---

# 「京」の共用の枠組み



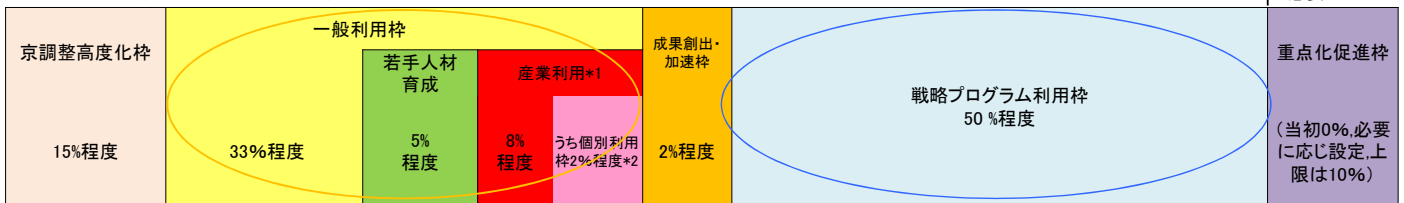
# 「京」の利用状況について

## ＜京の利用枠＞

京の利用については公募に基づいて選定する一般利用枠と公募によらず重要なテーマ・課題を選定する戦略プログラム利用枠等がある。

※以下の利用枠配分は平成26年度より適用

100%⇒必要に応じて



\*1 産業利用は実証利用(無償)と個別利用(有償)からなる。

\*2 産業利用8%のうち2%については個別利用枠とし、随時募集も実施する。

## ＜一般利用枠＞

産業界を含め幅広い利用者を対象に公募し、申請のあった者の中から課題審査委員会の審査を経て利用者が選定される。

○平成25年度実施課題数  
(計106課題 追加募集課題含む)

- 一般課題:36課題
- 産業利用:58課題(※)
- 若手人材:12課題

※このうちトライアルユースとして23課題選定(H25.12.27現在)  
※利用料金については産業利用で成果非公開の場合有償  
(1ペタフロップスを1時間使った場合約10万円)

## ＜重点化促進枠＞

国などが示した政策的に重要かつ緊急な課題の随時の提案に基づき、文部科学省に設置された委員会が課題を選定し配分を決定する。

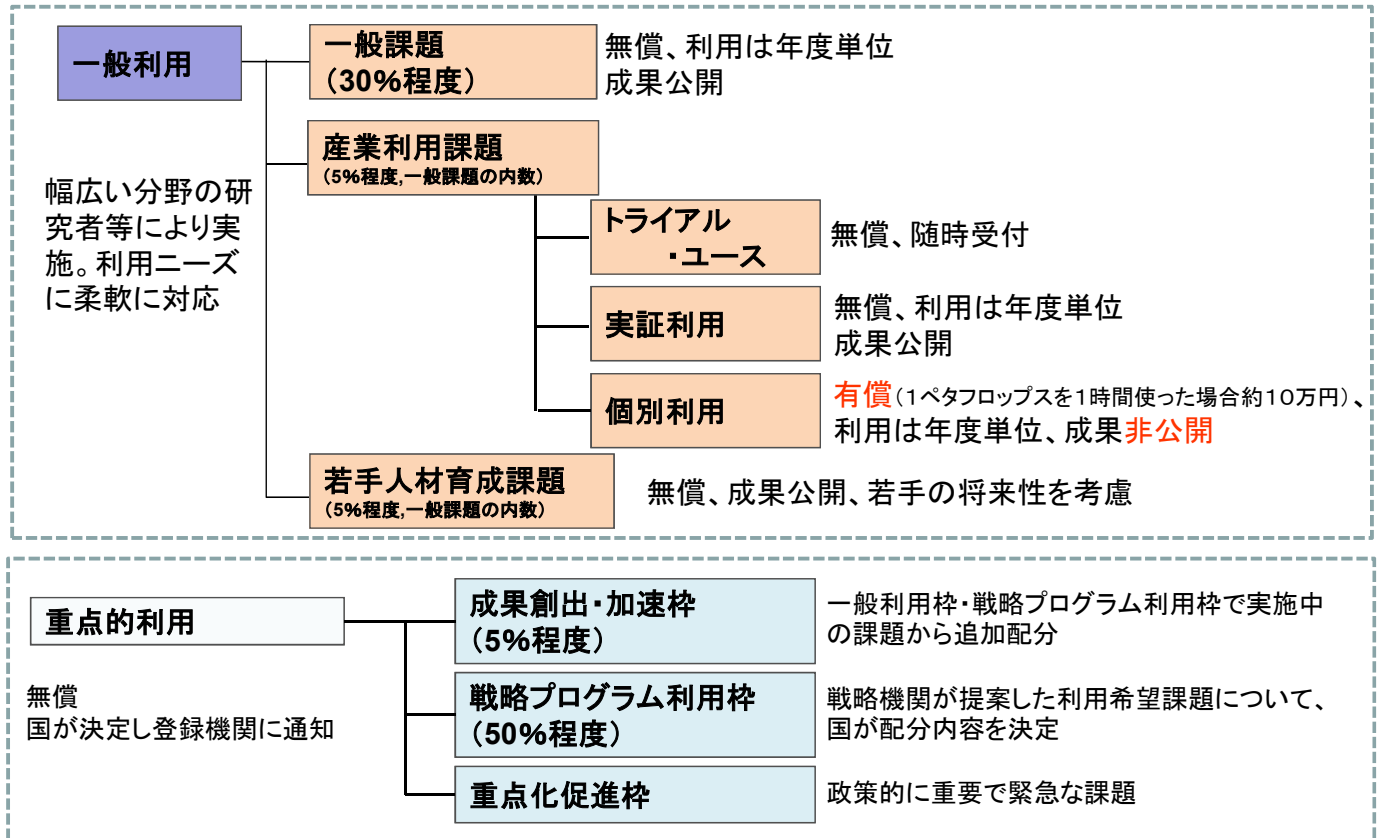
- 平成25年度実施課題 1課題
- 内閣府政策統括官(防災担当)
- 「南海トラフ巨大地震及び首都直下地震による被害予測」

## ＜戦略プログラム利用枠＞

文部科学省が戦略的見地から配分内容を定め登録機関によるプロセス審査を経て利用者が選定される。

- 平成25年度実施課題数(計29課題)
- 分野1(医療・創薬):5課題
- 分野2(物質材料):8課題
- 分野3(防災・減災):5課題
- 分野4(次世代ものづくり):6課題
- 分野5(物質と宇宙の起源):5課題

# 「京」における利用区分、利用料の基本的考え方



※海外の利用については、国際交流推進の観点から、利用することが可能。ただし、海外の企業に所属する者については、国内の法人に所属する者との共同申請とする。

# 「京」における課題選定について

## ＜選定の枠組み＞

- 利用者及び利用課題の選定に当たっては、「特定大型施設の共用に関する法律」に基づき、登録機関として選定された高度情報科学技術研究機構が中正公立な立場で利用者の選定を行う。
- 具体的には、登録機関の下におかれた選定委員会が選定方針の策定、利用者の選定等を行い、課題審査委員会が個別の課題の審査を行う。

## ＜選定の基準＞

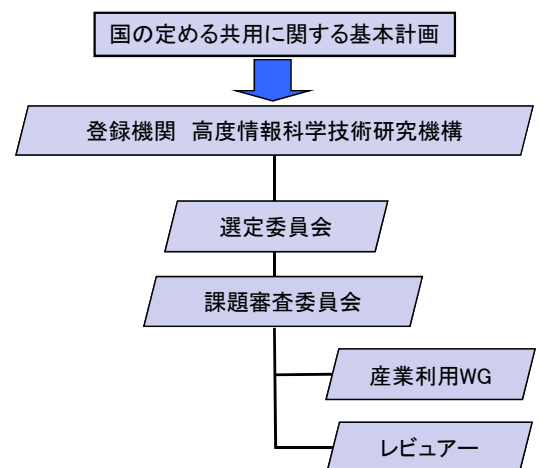
- 科学的に卓越し、又は社会的に意義が高く、ブレークスルーが期待できる課題であること
- 「京」が有する計算資源を必要としていること
- ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析手法等が十分に検証済みであるとともに、各種資源の利用計画や研究体制が妥当であること
- 提案課題の実施及び成果の利用が平和目的に限定される等、科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること

## (若手人材育成課題)

- 将来の発展が期待できる優れた着想を持つ研究計画であること。(2. ~4. は上記同様)

## (産業利用課題)

- 自社内では実施できない解析規模や難易度の課題であること
- 産業応用出口戦略が明確な課題であること
- 産業利用の開拓に向けた波及効果(社会への貢献)が十分期待できる課題であること(4は上記同様)



課題選定の枠組み

# 登録機関における「京」に関する利用支援



## HPCI戦略プログラム

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進する。

「京」利用率約50%

＜戦略分野＞		＜戦略機関＞
<b>分野1</b>	<p><b>予測する生命科学・医療および創薬基盤</b></p> <p>ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測をおこなう。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・理化学研究所</li> </ul>
<b>分野2</b>	<p><b>新物質・エネルギー創成</b></p> <p>物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・東大物性研(代表)</li> <li>・分子研</li> <li>・東北大金材研</li> </ul>
<b>分野3</b>	<p><b>防災・減災に資する地球変動予測</b></p> <p>高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・海洋研究開発機構</li> </ul>
<b>分野4</b>	<p><b>次世代ものづくり</b></p> <p>先端的要素技術の創成～組み合わせ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・東大生産研(代表)</li> <li>・宇宙航空研究開発機構</li> <li>・日本原子力研究開発機構</li> </ul>
<b>分野5</b>	<p><b>物質と宇宙の起源と構造</b></p> <p>物質の究極的微小構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・筑波大(代表)</li> <li>・高エネ研</li> <li>・国立天文台</li> </ul>

※ スーパーコンピュータ「京」で、社会的・学術的に大きなブレイクスルーが期待できる分野を「戦略分野」(5分野)とする。

※ 各戦略分野の研究開発、分野振興等を牽引する機関を「戦略機関」とする。

# HPCI戦略プログラムにおける計算科学技術推進体制の構築

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、『①画期的な成果創出』、『②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出』、『③最先端計算科学技術研究教育拠点の形成』のため、HPCI戦略プログラムの各戦略機関を中心に、計算科学技術推進体制の構築を進めている

「京」を含むHPCI環境を効果的に利用するための実行環境及びソフトウェア環境の整備

HPCIの利用普及、情報発信と理解増進、研究教育の人材育成

## ▶ 計算機資源の効率的な管理

- 「京」を利用するアプリケーションの進捗状況の把握
- 「京」の計算資源の効果的な分野内配分
- HPCI環境を利用するための分野内計算機環境の整備

## ▶ 各分野における「京」等のHPCIシステム利用に際しての研究支援協力

- 「京」等を利用する研究者への利用支援
- 「京」等を利用するアプリケーションの高度化支援
- 分野共通アプリケーションの公開支援

## ▶ 分野を超えた取り組みの推進

- 実験グループとの連携
- 他の戦略分野との合同シンポジウム

## ▶ 人材育成

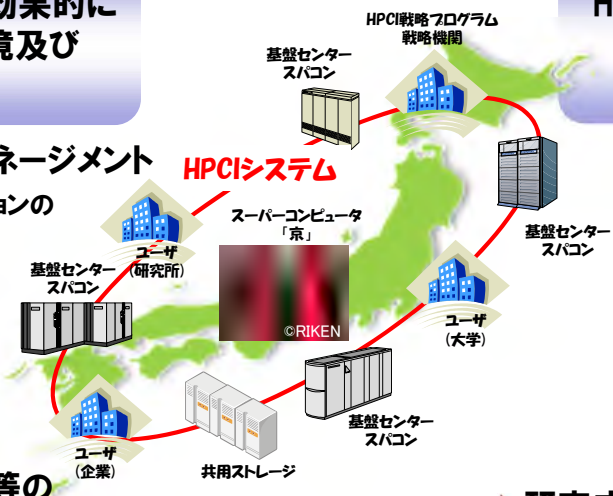
- 大学、研究所と連携した人材育成、教育プログラムの実施
- サマースクール、集中実習

## ▶ 人的ネットワークの形成

- 研究会、講習会
- プロジェクト外の研究者への認知度向上、シンポジウム開催

## ▶ 研究成果の普及

- 各種媒体を用いた情報発信（広報誌、HP、アプリケーション公開）



# HPCIの課題選定について

## <選定の枠組み>

- 利用者及び利用課題の選定に当たっては、「京」の枠組みと連携しながら、一括した課題選定の一部として、委託事業により高度情報科学技術研究機構が中正公立な立場で課題選定を行う。
- 具体的には、登録機関の下におかれた選定委員会が選定方針の策定を行い、公募を実施。
- 公募された課題について、課題審査委員会が審査により課題を選定。
- 選定結果を選定委員会に報告。

## <選定の基準>

### ■ 「京」以外のHPCI共用計算資源

1. 大規模、大容量計算に挑戦する計算課題であること
2. 将来的に「京」やそれに続く大規模の計算機利用につながり得る研究課題であること
3. 複数計算機資源を利用することが期待される研究過大であること

### ■ 産業利用課題

1. 自社内では実施できない解析規模や難易度の課題であること
2. 産業応用出口戦略が明確な課題であること
3. 産業利用の開拓に向けた波及効果（社会への貢献）が十分期待できる課題であること
4. 提案課題の実施及び成果の利用が平和目的に限定される等、科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること

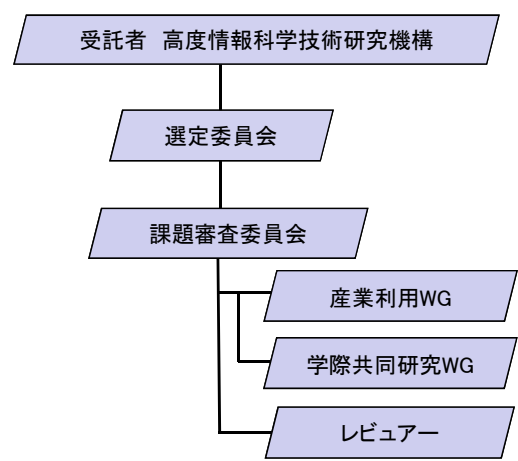
## <対象となる計算資源>

### ■ スーパーコンピュータ

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

### ■ 共用ストレージ

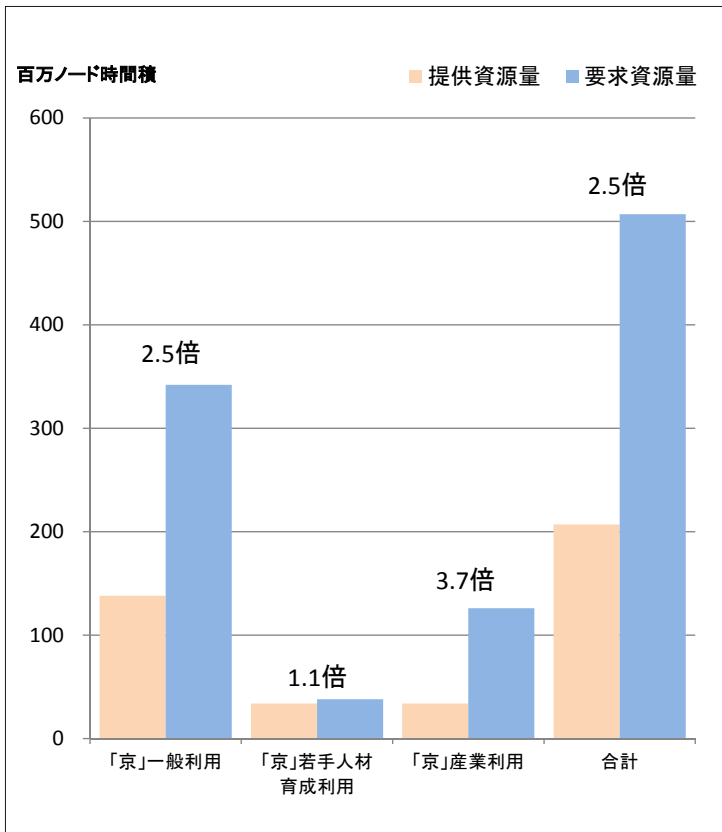
東拠点：東京大学内、西拠点：計算科学研究機構内



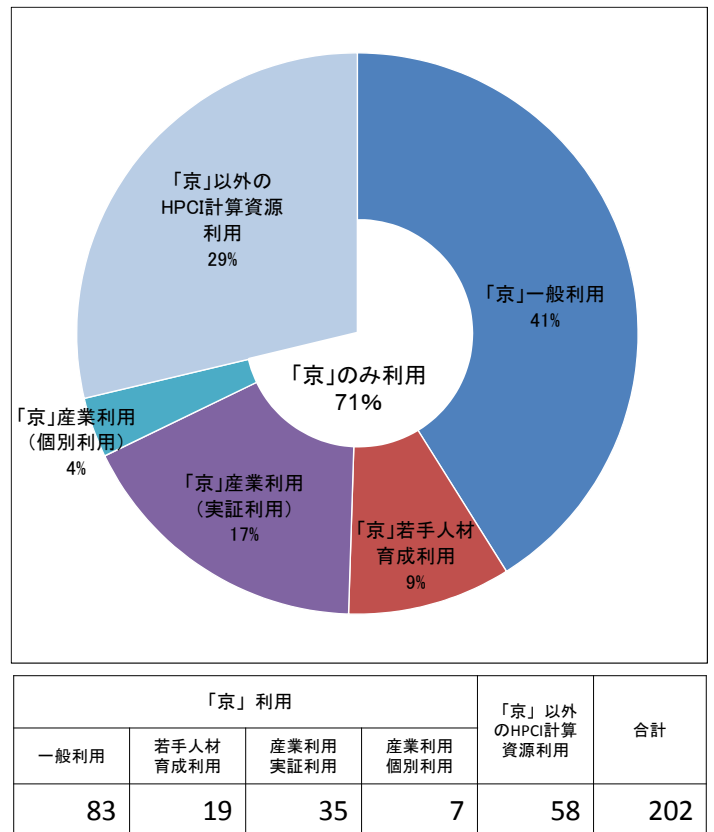
課題選定の枠組み

# 「京」の要求計算資源量(平成26年度 定期公募)

＜「京」要求資源量＞



＜申請件数＞

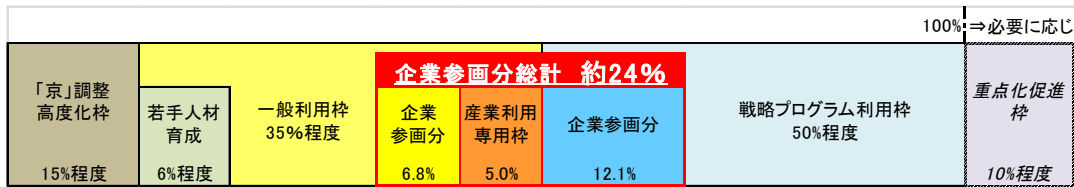


※高度情報科学技術研究機構発表資料より

## 「京」の産業利用の状況について

### 産業利用の状況

○「京」を利用する総計算資源量の約24%が企業参画課題(平成25年度当初配分実績ベース(※))



画期的な成果創出を目指し、以下5分野について国が重点的に課題を選定  
 1: 医療・創薬、2: 物質材料、3: 防災・減災、  
 4: 次世代ものづくり、5: 物質と宇宙の起源

○「京」の全利用者の約3割が企業の利用者(1431人中410人)

○全課題における参画企業数は総勢100企業以上

○産業利用課題の高い課題採択率(一般利用28.9%に対し産業利用は83.3%(平成26年度実施課題))

### 産業利用促進策

(継続的な取組)

- ・企業の成果の機密性や情報管理に配慮した**成果非公開課題の設定**
- ・企業の利用者に対する手厚い**技術支援**(詳細は別添)

(平成26年度からの新規取組)

- ・**産業利用専用枠の拡大**
- ・企業が応募しやすくなるよう、**随時応募可能な利用枠**を新規に導入
- ・「京」を一定期間、**予約的に利用できる制度**を導入(その期間は待ち時間なしで利用可)



# 「京」の産業利用課題の利用アプリケーション

No	分類	利用ソフトウェア	ソフトウェア形態
1	工学・ものづくり	OpenFOAM	オープンソース・ソフトウェア
2	工学・ものづくり	MuDIAN	商用ソフトウェア
3	工学・ものづくり	FrontISTR	国プロ開発アプリケーション
4	工学・ものづくり	LS-DYNA	商用ソフトウェア
		PAM-MEDYSA	商用ソフトウェア
		ADVENTURECluster	商用ソフトウェア
5	工学・ものづくり	FINAS/CFD	商用ソフトウェア
6	工学・ものづくり	FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション
7	工学・ものづくり	ADSTEFAN	商用ソフトウェア
8	工学・ものづくり	FrontFlow/red	国プロ開発アプリケーション
9	工学・ものづくり	FrontFlow/red	国プロ開発アプリケーション
10	工学・ものづくり	LIGGGHTS	オープンソース・ソフトウェア
11	工学・ものづくり	FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション
12	工学・ものづくり	LS-DYNA	商用ソフトウェア
13	工学・ものづくり	FrontFlow/red	国プロ開発アプリケーション
14	工学・ものづくり	FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション
15	工学・ものづくり	FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション
16	工学・ものづくり	FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション
17	工学・ものづくり	ADVENTURECluster	商用ソフトウェア
18	工学・ものづくり	LS-DYNA	商用ソフトウェア
19	工学・ものづくり	FrontISTR	国プロ開発アプリケーション
20	工学・ものづくり	FrontFlow/red	国プロ開発アプリケーション
21	バイオ・ライフ	GROMACS	オープンソース・ソフトウェア
		AMBER12	商用ソフトウェア
22	バイオ・ライフ	CGBVS	商用ソフトウェア
		MP-CAFFEE	オープンソース・ソフトウェア
23	バイオ・ライフ	MP2-FMO	オープンソース・ソフトウェア
24	バイオ・ライフ	modylas	国プロ開発アプリケーション

No	分類	利用ソフトウェア	ソフトウェア形態
25	物質・材料・化学	VSOP	商用ソフトウェア
26	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア
27	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア
28	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア
29	物質・材料・化学	modylas	国プロ開発アプリケーション
30	物質・材料・化学	Car-Parrinello MD	オープンソース・ソフトウェア
31	物質・材料・化学	PHASE	国プロ開発アプリケーション
32	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア
33	物質・材料・化学	WIEN2K	商用ソフトウェア
34	物質・材料・化学	RMC++	オープンソース・ソフトウェア
35	物質・材料・化学	OCTA/SUSHI	オープンソース・ソフトウェア
36	物質・材料・化学	ELSES	オープンソース・ソフトウェア
37	物質・材料・化学	WIEN2K	商用ソフトウェア
38	物質・材料・化学	VASP	商用ソフトウェア
39	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア
40	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア
		OCTA/SUSHI	オープンソース・ソフトウェア
41	防災・減災、その他	OpenFOAM	オープンソース・ソフトウェア
42	防災・減災、その他	OpenFOAM	オープンソース・ソフトウェア
43	防災・減災、その他	OpenFOAM	オープンソース・ソフトウェア
44	情報・計算機科学	LuxRender	オープンソース・ソフトウェア

【対象】平成24年度定期公募・平成25年度追加公募による  
京の一般利用枠の産業利用課題(実証利用、トライアル・ユース)

高度情報科学技術研究機構



## 4. スパコンによる成果例

---

# スーパーコンピュータ「京」の利用成果がゴードン・ベル賞を受賞 2011年

## 概要

理研、筑波大、東大、富士通のチームによる『京によるシリコン・ナノワイヤの第一原理計算』が、コンピュータシミュレーション分野で最高の賞であるゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞。日本人によるこの受賞は2004年以来7年ぶりの快挙。

(参考)ゴードン・ベル賞

米国計算機学会(ACM)が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。毎年11月に開催される米国スーパーコンピュータ会議にて表彰式が行われる。このうち実行性能部門の最高性能賞は最も荣誉ある賞とされている。

## 研究内容

### 【背景】

- 22nm以下の微細構造をもつ次世代半導体において、漏れ電流による消費電力の解決が課題。このため、シリコン・ナノワイヤが次世代半導体の材料として期待されているが、その実現には、ナノワイヤ内の原子・電子の解析が不可欠。
- しかし、このような微細材料での実験はできず、また、シミュレーションでは計算機の能力不足から、2,000原子程度(ごく一部分)までしか計算できなかった。

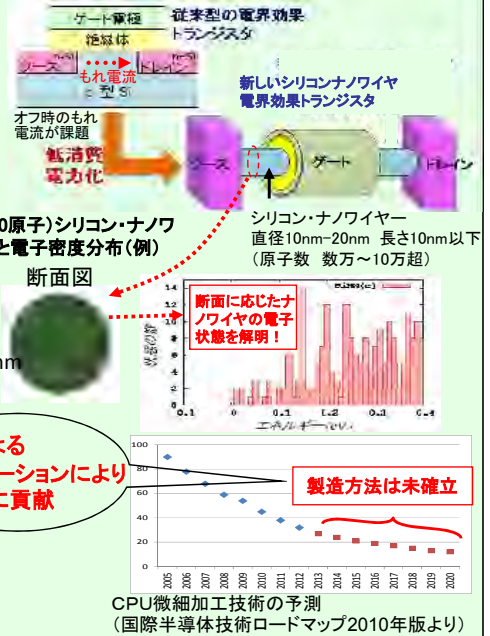
### 【京による成果】

- 現実の材料サイズに近い10万原子規模のナノワイヤの電子状態の計算し、世界で初めてナノレベルの高精度シミュレーションを可能にした(3ペタフロップスでの計算)。(→従来のシステムでは30年以上かかる計算が、「京」により1週間で実施可能に)
- また、約4万原子のナノワイヤの電子状態を断面の形状を変えて計算し、断面の形状による電子輸送特性の変化を初めて明らかにした。

### 【今後の展開】

- 22nm以下の微細構造を持つ次世代半導体の製造方法の確立
- 高速・高機能、省エネルギーなどの特長をもつ新しいデバイスの設計に貢献

### シリコン・ナノワイヤを用いた次世代半導体のイメージ



# スーパーコンピュータ「京」の利用成果がゴードン・ベル賞を受賞 2012年

## 概要

筑波大、理研、東工大の研究グループによる『約2兆個のダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算』が、コンピュータシミュレーション分野での最高の賞であるゴードン・ベル賞を受賞。日本のグループによるゴードン・ベル賞受賞は2年連続で、今回は筑波大グループの単独受賞。

(参考)ゴードン・ベル賞

米国計算機学会(ACM)が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。毎年11月に開催される米国スーパーコンピュータ会議(SC)にて表彰式が行われる。

## 研究内容

### 【背景】

- 宇宙の形成過程を明らかにするには、ダークマターの重力進化の解明が不可欠。(ダークマターとは:宇宙全体の物質エネルギーのうち約2割を占め重力相互作用だけが働く物質であり、素粒子としての正体は解明されていない)
- しかし、1兆個以上におよぶダークマター粒子のシミュレーションは計算機の能力が不足し、実施できなかった。(現在は筑波大グループの他、米国・アルゴンヌ研グループも実施中)

### 【「京」による成果】

- 世界最大規模である数兆個におよぶダークマター粒子の重力進化を、実用的な時間内にシミュレーションすることを可能とした(5.67ペタフロップスでの計算)。(→パソコン1台で数百年かかる計算が、「京」により3日で実現)
- 宇宙初期(約137億年前の宇宙誕生から約200万年後～約1億年後)のダークマターの密度分布を計算(右図参照)
- 筑波大グループのアプリケーションは、アルゴンヌ研グループの6倍程効率が高く、アプリケーション開発でも世界をリードしていることが示された。

### 【今後の展開】

- 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が期待される。
- より微細なダークマター構造を解明でき、ダークマター粒子の探査、正体解明に貢献。

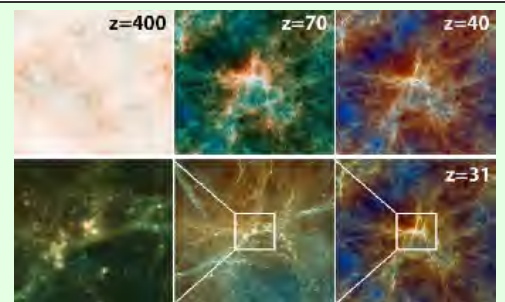


図:宇宙初期のダークマター密度分布

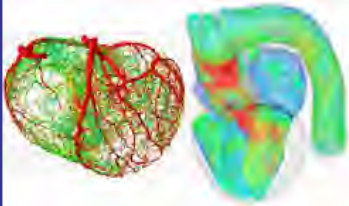
明るさはダークマターの空間密度を表し、明るいところは密度が高い。また、zは赤方偏移の量を表しており、数値が大きいくほど過去を見ている(天文学では時間や距離の尺度として用いられる)。

- 【上段左】宇宙誕生時はほぼ一様。z=400は宇宙誕生から約200万年後であり、1辺約5光年。
- 【上段中】時間の経過につれて重力により集まり、大きな構造が形成される。
- 【下段】下段右は、誕生から約1億年後の宇宙の姿(約136億年前、1辺約65光年)。中心部を拡大したものが下段中、更に拡大したものが下段左。(zは全て31)

# スーパーコンピュータ「京」の成果

画期的な成果の創出 ～最先端の計算環境を利用し重要課題に対応～

## ● 心臓病治療等への貢献 (研究代表者: 東京大学・久田俊明)



分子レベルからの心臓まるごとシミュレーション

分子レベルから心臓全体を精密再現することにより、心臓の難病のひとつである**肥大型心筋症の病態を解明**。これにより、**治療法の検討や薬の効果の評価**に貢献。

## ● 製品設計の効率化への貢献

(研究代表者: 東京大学・加藤千幸)



車両挙動を解明する全乱流渦のシミュレーション

自動車などの設計に「京」を活用することにより、**風洞実験などを完全にシミュレーションで代替**。さらに、**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明**。これにより、**設計の期間短縮、コスト削減**に貢献

## ● 創薬応用シミュレーション

(研究代表者: 東京大学・藤谷秀章)



薬候補のタンパク質への高精度結合シミュレーション

新薬の候補物質を絞り込む期間を半減(**約2年から約1年**)。ガン治療の**新薬の候補となる化合物を効率的に発見**。製薬企業と協働し、新薬開発を推進。

## ● 地震・津波の予測精度の高度化に関する研究

(研究代表者: 東京大学・古村孝志、東北大学・今村文彦)



50m単位(ブロック単位)から**10m単位(家単位)の精密な予測**を実施。津波浸水、構造物被害、避難シミュレーションも一体での南海トラフ巨大地震の複合被害評価を高知市等の都市整備計画へ活用。**災害に強い街作りやきめ細かな避難計画の策定**等に貢献。

# 産業界による「京」の利用成果について

## 1. 自動車用次世代空力設計システムの研究開発

コンソーシアム(企業13社、研究機関5機関)による共同研究

(参画企業(13社))

トヨタ、日産、ホンダ技研、スズキ、マツダ、富士重工業、三菱自動車、三菱ふそう、日野自動車、デンソー、ブリヂストン、ダイハツ、横浜ゴム



提供: 広島大学、北海道大学、マツダ(株)

車の高速走行安定性のシミュレーション

**従来の実験費用の大幅削減や精度の大幅向上**により自動車産業の競争力強化に大きく貢献

## 2. ターボ機械用次世代設計システムの研究開発

コンソーシアム(企業14社、研究機関7機関)による共同研究

(参画企業(14社))

千代田化工建設、三菱重工業、荏原製作所、新日本造機、IHI、東芝、神戸製鋼所、電業社機械製作所、日立製作所、富士電機、川崎重工ほか



ファンの騒音発生シミュレーション

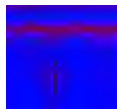
**騒音の少ない革新的なターボ機械の設計実現**により機械製造業の競争力強化に大きく貢献

## 3. 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築

製薬企業11社、IT企業2社ほか参画し、タンパク質と化合物の結合予測を約190億規模で達成。

(参画企業(13社))

アスピオファーマ、エーザイ、小野薬品工業、キッセイ薬品工業、参天製薬、塩野義製薬、大日本住友製薬、田辺三菱製薬、日本新薬、科研製薬、杏林製薬ほか



タンパク質と化合物の結合シミュレーション

**医薬品開発の成功確率向上と迅速化**により医薬品産業の競争力強化に大きく貢献

## 4. 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発

「京」により大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションを実現。

(参画企業)住友ゴム工業(株)

ゴムの性質が分かるレベル

分子・原子レベル

大

小



タイヤの分子・原子レベルのシミュレーション

**タイヤの大幅な高性能化・低燃費化・長寿命化**により化学産業の競争力強化に大きく貢献

# ポスト「京」で解決が期待できる主な社会的・科学的課題

## ● 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

【現状】 特定の標的タンパク質（病気の原因物質）に対するシミュレーションにより、新薬候補物質の絞り込みを効率化。

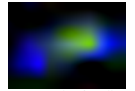
新薬候補物質の標的タンパク質への高精度結合シミュレーション

【将来】 複数タンパク質（病気の原因物質と必須機能物質）に対する新薬候補物質の影響解析を、複雑な細胞環境下で行い、副作用の少ない画期的な新薬の早期発見に貢献。

必須機能タンパク質への新薬候補物質の作用も解析

## ● 安全性の高い自動車開発

【現状】 様々な衝突条件に対して、車体の衝突変形の定量的評価を実現。



（図例、富士通（株））

【将来】 車への影響だけでなく、乗員の体への影響（骨や内臓等の損傷）も評価し、より安全性の高い車体の開発に貢献。

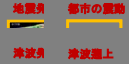


※黒い部分が損傷部位

3b-6. Toshio Kobayashi (plenary talk), Makoto Tsubokura, Shinichi Takayama, Aerodynamics and Crash Simulations in the Automobile Industry, The 11th Asian Symposium on Visualization (2011.8.5-9, Niigata, Japan)(2011)

## ● 広域複合災害に対する総合防災・減災対策

【現状】 地震・津波の発生や伝播、建物の振動、津波遡上などの広域かつ高精度な計算をそれぞれ実施。



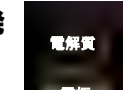
【将来】 地震発生から避難予測までを統合した広域複合災害の被害予測によるきめ細やかな防災・減災対策、さらには社会科学との連携により復興対策に貢献。



全体を一連のものとしてより高精度でシミュレーション

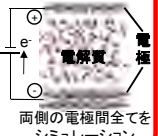
## ● 安全性・耐性に優れた高性能電池の開発

【現状】 燃料電池等の電極とその周りの電解質との反応を、簡略化されたモデルで計算し、電極材料や電解質の電池性能への影響を定量的に評価。



電解質  
電極  
片側の電極周辺の一部をシミュレーション

【将来】 複雑な電子の挙動を、現実の電極構造のもとで定量的に評価し、最適な電極材料や電解質の組合せを実現。安全性・耐性に優れた高性能電池開発に貢献。



両側の電極間全てをシミュレーション

## ● ゲリラ豪雨のリアルタイム予測

【現状】 数時間ごとの観測データを用いた数km解像度のシミュレーションにより、10数時間後の集中豪雨を予測。

集中豪雨予測シミュレーション

【将来】 次世代の超高精細シミュレーションと高解像度観測機器から得られるビッグデータを高速処理することで、数100m解像度で30秒ごとに更新するリードタイム30分の革新的なゲリラ豪雨のリアルタイム予測の実現に貢献。

次世代時空間高解像度観測機器



超高解像度・超高速豪雨予測シミュレーション

## ● 宇宙の起源と進化の探求

【現状】 宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成のシミュレーションをそれぞれ実施。



【将来】 宇宙の大規模構造形成から惑星形成にいたる宇宙全体のシミュレーションにより、銀河系や惑星系の多様性の起源や進化を解明し、天文学・宇宙物理学の発展に貢献。

宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成にいたる宇宙全体を一連のものとしたシミュレーション



※ Matthew Burt (1994) 大学