

別添 1

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

システム検討サブワーキンググループ報告書

要旨

平成 25 年 8 月

目次

0. はじめに.....	1
1. 解決すべき社会的・科学的課題及び要求されるシステム性能について.....	1
2. 基本的なシステム構成及びその詳細について.....	3
3. プロセッサ開発の必要性について.....	5
4. 開発・製造のスケジュール及びコストについて.....	7
5. まとめ.....	8
参考資料.....	10

0. はじめに

本サブWGでは、フラッグシップシステムについて、開発主体候補である独立行政法人理化学研究所（以下「理研」という。）から計4回のヒアリングを実施し、

- ・開発するシステムについては、どのような社会的・科学的課題を解決できるのか、どのような成果が期待されるのか、それら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
- ・プロセッサを中心とする要素技術開発については、海外のベンダ等の技術動向はどうか、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 等

の観点に立って、理研が提案するシステムイメージの技術的妥当性の評価を行った。

1. 解決すべき社会的・科学的課題及び要求されるシステム性能について

○理研からの提案

我が国が直面する問題や分野連携による新しい科学的課題の解決、ものづくり等の産業界への下方展開に貢献する観点から、今後5年から10年程度の短期的スパンで解決すべき社会的・科学的課題（以下「短期課題」という。）として、創薬・医療、総合防災、クリーンエネルギー創出と環境問題解決、社会科学、基礎物理と物性物理の連携等の分野における各課題が示された。この中で、各課題の解決に貢献するアプリケーションが要求する演算性能、メモリバンド幅及びメモリ量が提示され、それによると、要求実効演算性能で見た場合、500ペタフロップスでは61%、800ペタフロップスでは65%、1エクサフロップスでは87%のアプリケーション群がカバーされることが示された。さらに、同ロードマップが提示する社会的・科学的課題に貢献するアプリケーションを実行した場合、提案の1エクサフロップス級の理論ピーク演算性能をもってしても数年間を要することから、短期課題だけを考えても、フラッグシップシステムの理論ピーク演算性能としてはエクサフロップスレベルが必要条件であることが示された。

○サブ WG の見解

フラッグシップシステムについては、「今後の HPCI 計画推進の在り方について（中間報告）」において、「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」であり、「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」とされている。したがって、我が国の次期フラッグシップシステムとしては、「京」の能力をもってしても解決困難である様々な短期課題の中で、主要なものが要求する性能は満たしつつ、そのほかのものにも幅広く対応していく必要があり、その意味では、9 割近くアプリケーション群をカバーする実効演算性能（1 エクサフロップス）に見合うレベルの理論ピーク演算性能を実現する必要がある。実効演算性能と理論ピーク演算性能を単純比較することはできないが、想定される 2020 年頃の技術的限界を考えると、現時点では、フラッグシップシステムとしては理論ピーク演算性能で 1 エクサフロップスレベルを目指しつつ、同時にアプリケーション側で実効性能を高めていく方策をとることが妥当である。また、諸外国が 2020 年頃に理論ピーク演算性能でエクサスケールコンピューティングの実現を目指していることを考慮しても、我が国が理論ピーク演算性能で 1 エクサフロップスレベルを目指すことは、技術的な実現可能性及び競争力の観点から妥当と言える。

【留意事項】

理研からの説明でも触れられているようにアプリ分野の「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」は取りまとめ中なので、それに基づく数値については引き続き精査を続け、フラッグシップシステムに求められる性能を、適切な根拠に基づいて明確化する必要がある。その際、求められる性能を精緻化するのみならず、解決すべき社会的・科学的課題について、引き続きその妥当性や十分性を検証するとともに、優先順位を検討する必要がある。

なお、理研から提示された解決すべき社会的・科学的課題は今後 5 年から 10 年程度を想定したものであるが、計算科学技術で解決すべき社会的・科学的課題は今後も増えるとともに、スーパーコンピュータの要求性能も上がっていくことが予想されるので、10 年以上先を見通した中長期課題に対応する取り組みにも留意が必要である。

2. 基本的なシステム構成及びその詳細について

1) 基本的なシステム構成

○理研からの提案

基本的なシステム構成に係る将来動向について、今後のプロセッサとして不規則非構造データ処理など柔軟な処理が可能な汎用コアと高い電力性能比を実現できる演算加速コアが統合されていくことがまず示された。その上で、当該将来動向や国際的な技術動向、冷却などを含めたシステム全体の消費電力の制限（30～40MW）、さらに、①上記 1. で掲げた演算性能やニーズ（Science-driven System）、②「京」の資産の継承、2020 年頃の競争力・競合力、将来にわたって我が国の HPC の発展に貢献すること（Sustainable System）、③低電力、ソフトウェア高移植性、高耐故障性（TCO(Total Cost of Ownership)-aware System)等を考慮すると、我が国のフラッグシップシステムとしては、汎用部に加速部を加えたシステム構成を基本とする旨の提案が示された。

また、当該システムの利用イメージとして、Cooperation Model（汎用部と加速部で協調して計算を実行する方法）、Offloading Model（計算の一部を加速部にオフロードする方法）、Separation Model（汎用部のみ又は加速部のみで計算を実行する方法）の3つが示された。

電力消費に関しては、加速部を加えたシステムは、汎用部のみのシステムを使った場合に比べて大幅に削減されることが示された。

なお、今後、加速部のメモリ容量を増やすことを検討するとともに、メモリ容量不足で実行できないアプリケーションについては要求メモリ容量の削減の可能性を検討することが示された。

○サブ WG の見解

2020 年頃に 1 エクサフロップスレベルの理論ピーク演算性能を実現しようとした場合、現在の技術動向から外挿される 2020 年頃の汎用部の性能や現実的な消費電力等の境界条件を考えると、汎用部のみのアーキテクチャで 1 エクサフロップスレベルを目指すことには限界がある。そのような状況の中で、今後の技術動向、システムの利用イメージやシステム開発後の発展等を考えると、新たなフラッグシップシステムを開発する本国家プロジェクトとしては、我が国の HPC 分野における将来像を示し、今後のハードウェア及びアプリケーション開発の方向性を先導するという観点から、幅広いアプリケーションに対

応しつつ電力演算性能を向上させていくアーキテクチャとして「汎用部に加速部を加えたアーキテクチャ」に挑戦する意義は十分にあると言える。

したがって、理研が提案する基本的なシステム構成は、現時点では妥当である。

なお、加速部を加えたアーキテクチャとする場合、これまでの資産を生かしつつ当該アーキテクチャを活用して早期に成果を創出する観点から、「京」のアプリケーションの移植に必要な対応を含めて、新たなモデルやアルゴリズムの開発、加速部を活用するアプリケーションの開発等をハードウェアの開発と並行して進め、Co-design を実現していくことが重要である。

【留意事項】

異なるシステムをつなぐことには様々な困難やトラブルがつきものなので、引き続き、システム設計分野の「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」等において、両システムの開発体制（シングルベンダー又はマルチベンダー、メインコントラクターの存否など）に係る利害得失や両システム開発の相互影響（一方のシステム開発が万が一困難となった場合における全体又はもう一方のシステム開発への影響）のリスクも十分に検討する必要がある。また、半導体プロセスやメモリ技術、デバイス用インタフェース等の技術開発の遅れに対する代替案についても検討する必要がある。さらに、加速部については、有効に機能するアプリケーションの見積りの精査や Cooperation Model 及び Offloading Model での活用可能性の検証を含め、引き続き必要性・有効性を検討する必要がある。

2) システム構成の詳細

○理研からの提案

システムは、汎用プロセッサと一部に演算加速コプロセッサが搭載された計算ノード、汎用プロセッサ間を接続するインターコネクト、演算加速コプロセッサ間を接続する演算加速チップ間ネットワーク及びストレージで構成されることが示されるとともに、システム全体の構成並びに汎用プロセッサ、演算加速プロセッサ及びネットワーク・インターコネクトの詳細が示された。

○サブ WG の見解

提案のシステム構成の詳細については現時点で個々の要素の妥当性を論じられる段階ではないが、当該詳細により基本的なシステム構成の実現可能性が

示されているという点では、全体の方向性として一定の合理性はあると考えられる。

【留意事項】

理研の設計思想及びその論点が明確化されたことから、今後は、汎用プロセッサ及び演算加速コプロセッサ、ネットワーク・インターコネクト、メモリ、消費電力等に係る技術的詳細や汎用プロセッサと演算加速の割合について、引き続き検討する必要がある。

3. プロセッサ開発の必要性について

○理研からの提案

我が国は「京」における汎用プロセッサ及びインターコネクト技術開発の実績並びに Grape-DR などのアクセラレータ技術開発の実績があることから、米国や中国がスーパーコンピュータの開発に力を注いでいる状況において、我が国の国際競争力の維持、技術の継承及び将来に渡る人材育成の観点でプロセッサの自主開発が必要である旨の提案が示された。また、電力性能比向上や信頼性向上のためチップ内にプロセッサとインターコネクトを統合していくことがトレンドであることも示された。

汎用部プロセッサの自主開発に関しては、利点として、マシン開発に並行してアプリ成果の創出及び共用開始のリードタイム短縮が可能であること、世界の先端研究者が参集し、人材育成が加速されること、中長期計画が立案可能といったことが示される一方で、欠点として、開発コストがかかる、製造及び保守コストを下げるのが難しくなる可能性があること、半導体プロセスが1世代遅れる可能性があるといったことが示された。

また、加速部コプロセッサに関しては、利点として、電力性能が向上すること、低レイテンシ通信及び強スケーリングへの対応が可能であることといったことが示され、欠点として、開発コストがかかる、リスクが高いといったことが示された。

○サブWGの見解

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いるため、「京」の開発で蓄積された技術や人材、さらには研

究開発段階の技術やそれに関わる研究者・技術者を最大限活用することで、世界と戦えるプロセッサを自主開発し、我が国の情報科学技術の発展や産業競争力の強化につなげていくことは十分に可能であると考えられる。

実際、世界に伍して「京」を自主開発したことにより、我が国は高性能・低消費電力のプロセッサや、8万個以上のプロセッサ間を相互に接続する超並列システムを高い信頼性のもと効率的に運用できる Tofu インターコネクト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、ノウハウ等が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・製造に活用され、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。

このように、プロセッサをはじめとする要素技術から自主開発することで、

- ・我が国における重要技術の維持・発展及び人材の育成・確保
- ・国内産業の育成及び競争力の向上
- ・技術の核心部分を国内に維持するという意味での技術安全保障

が実現することとなる。

さらに、

- ・システム全体を統合的に開発して最適化
- ・設計段階からコンパイラ及びシステムソフトウェアを開発
- ・同時並行でアプリケーションを評価及びチューニング

していくためには、自主開発によってプロセッサをブラックボックス化させないことが不可欠であること、また、プロセッサとインターコネクトを統合するトレンドの中で我が国として実績のあるインターコネクト技術を維持・発展させる必要があることも、重要な観点である。

したがって、我が国のポテンシャル及びプロセッサ自主開発の利点・必要性を考えると、現時点では、プロセッサの自主開発を基本方針とすることは妥当である。

【留意事項】

自主開発の詳細については開発主体候補において引き続き検討していく必要がある。

その際、海外ベンダが技術的に先行している部分もある中では、上記の利点

も勘案して性能・コスト比較を行い、自主開発が合理的かどうかを不断に検証するとともに、必ずしも国内ベンダのみの開発に固執することなく、海外の技術の利用も含めた国際協力を視野に入れて検討していく必要がある。

また、2. 1) でも述べた両システムの開発体制に係る利害得失や両システム開発の相互影響のリスクに関し、開発後の商用展開やメンテナンスを含めてシステム全体に責任を持つ者を明確にするとともに、やむを得ない場合にはコモディティの製品で代替できる柔軟性等も検討しておく必要がある。このことは、現在国内ベンダが開発を行っていない演算加速コプロセッサに関して特に重要である。

なお、ハードウェアの商用展開とアプリケーションの商用展開は密接に関係していることから、アプリケーションも巻き込んだ戦略的な対応が求められることに留意が必要である。

4. 開発・製造のスケジュール及びコストについて

1) スケジュール

○理研からの提案

今後の技術動向を見ながら可能な限り前倒しすることを前提としつつ、現時点での計画としては、開発は2014年度から、システム全系の運用は2020年度頃から開始するとともに、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が示された。

○サブWGの見解

「京」の際の開発・製造スケジュール及び現時点での各国の技術動向を踏まえれば、2014年度から開発を開始することを含めて、現時点では妥当なスケジュールである。

【留意事項】

スーパーコンピューティングの分野は技術的進展が早いため、引き続き諸外国の技術動向を注視し、様々なリスクへの対応の観点も含め、基本設計や詳細設計が終了した段階などの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ながら、順次大きなシステムに拡張していく必要がある。

2) コスト

○理研からの提案

2014 年度から 2019 年度の 6 年間における、汎用部，システムソフト，加速部，数値計算ライブラリ等の開発費の累計及び製造費の累計が示された。

○サブ WG の見解

現在示されているコストについては、「京」のプロジェクトの基本設計が終了した段階で見積もられた開発・製造費を考慮すれば、おおむね妥当な規模と評価できる。

【留意事項】

コスト算出の前提条件（システム設計の詳細やプロセッサ自主開発の有無，チップ製造に使用する半導体プロセス技術）が流動的であることをはじめ，比較検討の際に比較対象となるシステムのコストや性能が定量的に示されていないため，引き続き精査が必要である。

5. まとめ

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，本サブ WG では，1. から 4. で述べたように，我が国のフラッグシップシステムについて，

- ①基本的なシステム構成及びシステム性能については，汎用部に加速部を加えたアーキテクチャで，2020 年頃に 1 エクサフロップスレベルの理論ピーク演算性能の実現を目指すこと

②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

③スケジュール及びコストについては、開発主体候補が提示したものとする

を、現時点では妥当と評価したことから、今後、この方針で基本設計に着手していくことは適当であると言える。

一方、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・充分性、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、引き続き開発主体候補が各項目で求めた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ーの意見等を踏まえ、来年度の前半を目途に、HPCI 計画推進委員会等において改めて評価することとする。

なお、1. で論じた短期課題については、1 エクサフリップスレベルの理論ピーク演算性能をもってしても、解決困難なものがあり、また、多くのものに対応しようとするとな数年単位の時間を要することとなる。さらに、将来的には中長期課題への対応が必要になるとともに、ある課題について今後解決が進むことでさらに高いシステム性能が要求される可能性や現在は想定できていない新たな社会的・科学的課題が生じる可能性も十分にある。したがって、今後のフラッグシップシステムに係る検討においては、長期戦略を持ち、人材育成を含めてエクサスケールの次のシステムも見据えていくことが重要である。

参考資料

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

(参考1)

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
システム検討サブワーキンググループの設置について

平成 25 年 6 月 25 日
検 討 W G 決 定

1. 趣旨

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「検討 WG」という。）の中間報告では、リーディングマシンの研究開発の方向性として、開発主体候補において、期待される成果、必要なスペック、要素技術等に関するイメージを明らかにした上で、フラッグシップシステムの具体的な方向性及び要素技術開発に係る方針を検討することとしている。

この検討を実施するため、検討 WG の下にシステム検討サブワーキンググループを設置する。

2. 設置期間

平成 25 年 6 月 25 日から調査検討の終了までとする。

(参考2)

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
システム検討サブワーキンググループ委員名簿

- | | |
|-------|------------------------------|
| 浅田邦博 | 東京大学大規模集積システム設計教育研究センター長・教授 |
| 宇川 彰 | 筑波大学数理物質系教授 |
| ○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 |
| 加藤千幸 | 東京大学生産技術研究所教授 |
| 小林広明 | 東北大学サイバーサイエンスセンター長 |
| 関口智嗣 | 産業技術総合研究所情報通信エレクトロニクス分野副研究統括 |
| 中島 浩 | 京都大学学術情報メディアセンター長 |
| 平木 敬 | 東京大学大学院情報理工学系研究科教授 |
| 松岡 聡 | 東京工業大学学術国際情報センター教授 |

○：主査

(50 音順)

システム検討サブワーキンググループ検討経緯

第1回 7月3日(水) 15時～17時

- ・システム検討サブワーキンググループの設置と運営について
- ・システム検討サブワーキンググループの今後の進め方について
- ・理化学研究所からのヒアリング

第2回 7月18日(木) 17時～19時

- ・理化学研究所からのヒアリング及び意見交換

7月22日(月) 17時～19時

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(第19回)

- ・システム検討サブワーキンググループの報告

第3回 7月29日(月) 10時～13時

- ・理化学研究所からのヒアリング及び意見交換
- ・論点整理

第4回 8月9日(金) 10時～12時

- ・理化学研究所からのヒアリング
- ・取りまとめ

8月30日(金) 15時～17時

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(第20回)

- ・システム検討サブワーキンググループの報告



フラッグシップシステムについて

平成25年8月30日
理化学研究所計算科学研究機構

1

フラッグシップシステム開発の基本理念

2020年頃までに、電力・設置面積・予算等を勘案しつつ、エクサフロップス級の演算性能をもち、幅広い計算科学プログラムをサポートできるシステムを開発し、科学技術のブレークスルーを達成するとともに産業の国際競争力を高める。

このためアプリFSの要望に幅広く応え、HPCシステムの発展動向も踏まえて、汎用プロセッサと演算加速用コプロセッサを組み合わせたヘテロジニアス・アーキテクチャを提案する。京の後継機として京アプリの移植性も重視する。

1. 汎用プロセッサをメインに十分な性能をもたせ、幅広いアプリをカバーする
2. 将来のHPCの発展動向を見据え、演算加速プロセッサの開発にもチャレンジする。汎用部に電力演算性能が優れた演算加速部を組み合わせることによりシステムを構成する
3. 演算加速部については、開発のみならず共用マシンとして保守および運用を含めた実現可能性を精査する必要がある
4. 汎用部と演算加速部の比率については、使いやすさや電力性能等を勘案しつつ、さらなる検討を重ね、最適比率を決定する
5. 汎用部と演算加速部を一体的なシステムとして開発せねばならない。インターフェースを含めたシステム一体化、ビジネス展開可能性についてもさらなる検討を進める
6. 汎用プロセッサと演算加速コプロセッサを組み合わせたヘテロジニアス・アーキテクチャについては、HPCIコンソーシアムを中心としたアプリケーションユーザに対し、その利用方法およびアプリケーション移行に関わるコストに関して議論していく必要がある

プロセッサ技術は我が国にとって重要な技術であり、また、汎用プロセッサ、演算加速用プロセッサのいずれも、我が国には開発する力を持ったメーカーがあり、関係する研究者がいる。まずは国内で、国際競争力をもったプロセッサ開発を実施すべきである。同時に、この重要な技術が将来にわたって国際競争力を維持できるように配慮すべきと考えている。

2

目次

1. 解決すべき社会的・科学的課題について
2. 基本的なシステム構成について



解決すべき社会的・科学的課題

- 解決すべき課題・期待される成果
 - 創薬・医療／エネルギー環境問題／総合防災／社会経済予測など我が国が喫緊に解決すべき問題を計算科学から貢献を目指す
e.g. 総合防災においては1000を超えるシナリオを想定し科学的根拠に基づく被害想定
 - 分野連携による新しい科学課題の解決
e.g. ものづくり、生命科学、物質科学の知の結集および大型実験設備との連携による生体分子の構造解析
 - モノづくり等産業界への下方展開への指向
e.g. 最適化設計によるモノづくりのコストダウン
- 要求されるシステム性能
 - 社会的・科学的課題を解くアプリケーション群のカバー率

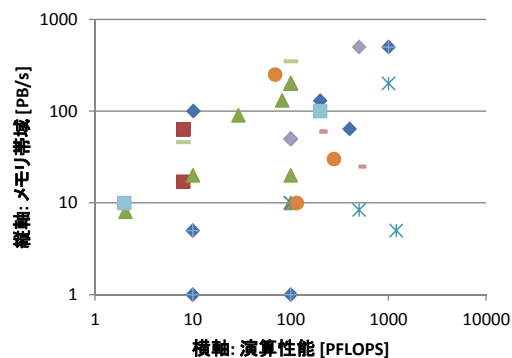
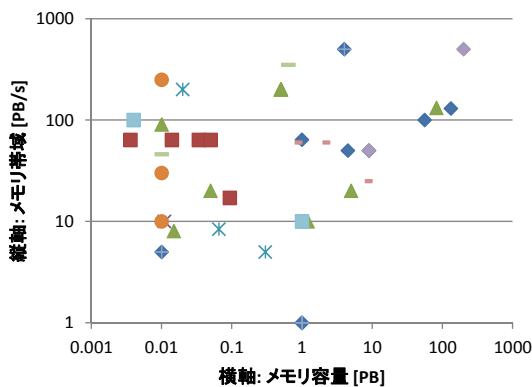
科学的基盤から社会的基盤への転換

～1 PB	～2 PB	～3 PB	～4 PB	～5 PB	～10 PB
55%	65%	66%	68%	71%	81%

～100 PF	～200 PF	～400 PF	～500PF	～800 PF	～1000 PF
45%	54%	58%	61%	65%	87%

注：メモリ容量と性能に相関があるわけではない

要求メモリ容量および要求演算性能については、今後、アプリ側とともに精査していく必要がある



解決すべき社会的・科学的課題と計算量 (1/2)

計算科学ロードマップ白書(第2版)の「2章解決すべき社会的課題」から推定

例えば、下表黒枠で囲んだ総合防災アプリでは、1ケース3時間かかる。これを5000ケース実行することを想定。5000ケース実行することにより課題が解ける。それに必要な総演算量は430000 Exa Flop必要である。

$$\begin{aligned} \text{総演算量(EFLOP)} &= 1 \text{ ケースジョブで必要とされる演算量} \times \text{ケース数} \\ \text{要求性能(PFLOPS)} &= (\text{総演算量(EFLOP)} / \text{ケース数} / 1 \text{ ケース要求計算時間(hour)} / 3600) * 1000 \end{aligned}$$

分野	課題	要求性能 / ケース (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 / ケース (PB/s)	メモリ量 / ケース (PB)	計算時間 / ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)
創薬医療	個人ゲノム解析	100	50	9	700	200	50457600
	遺伝子ネットワーク解析	100	50	4.5	10	26000	93600000
	創薬などMD・自由エネルギー計算	10	5	0.01	1.2	100000	4320000
	細胞環境・ウィルス	1000	500	4	48	10	1728000
	高精度創薬	10	1	1	1	100	3600
	バイオデバイス設計	100	1	1	1	100	36000
	血流シミュレーション	400	64	1	174	10	2505600
	超音波シミュレーション	200	130	132	240	10	1728000
総合防災	脳神経系シミュレーション	10	100	56	210	30	230000
	地震発生		64	0.014			20000
	波動伝搬		17	0.094			60000
	地震動増幅	8	64	0.034	3	5000	200000
	建物震動		64	0.05			100000
	津波遡上		64	0.0036			50000
	避難誘導シミュレーション	0.1		0.0001	1	5000	1800
	電子材料の電子状態計算・手法1	100	20	5	240	10	864000
クリエーションエネルギー	電子材料の電子状態計算・手法2	100	10	1.2	96	10	345600
	強相関電子系の理解	82	131	82	42	10	124000
	プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流	100	200	0.5	24	50	432000
	プラズマ乱流計算・大域的非常乱流	100	200	0.5	170	10	612000
	熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題)	200	400	1	28	50	1010000
	熱流体シミュレーション(自動車、ハイエンドベンチマーク)	100	200	0.5	28	10	101000
	風力発電立地条件アセスメント	29	90	0.01	72	100	760000
	近未来地球環境予測システム	2	8	0.015	720	50	106000
科社会	自動車交通流のリアルタイムシミュレーション	100	10	0.011	2.78E-05	10	0.1
	株式取引所ルールの最適化	208	1E-05	1E-05	24	10	180000

5

解決すべき社会的・科学的課題と計算量 (2/2)

計算科学ロードマップ白書(第2版)の「3章分野連携による新しい科学的ブレークスルー」から推定

分野	課題	要求性能 / ケース (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 / ケース (PB/s)	メモリ量 / ケース (PB)	計算時間 / ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)
基礎物理と物性物理との連携	自己重力N体流体シミュレーション	1200	5	0.3	30	100	12960000
	宇宙天気予報	1000		2	100	50	18000000
	カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用	500	8	0.066	0.28	31536	15768000
	閉殻を仮定しない殻模型計算	100	10	1	27.8	100	1000000
	超新星爆発のシミュレーション	1000	200	0.02	1200	1	4320000
宇宙科学・地球科学の連携による惑星科学	惑星系形成	278	3	0.00003	1000	1	1000000
	地球・惑星の形成シミュレーション	116	10	0.01	24	10	100000
	惑星表層環境の形成と進化シミュレーション	69	250	0.01	100	100	2500000
タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析	創薬などMD・自由エネルギー計算	10	5	0.01	1.2	10000	432000
	高精度創薬	10	1	1	1	100	3600
	バイオデバイス設計	100	1	1	1	100	36000
計算科学基盤技術の創出と高度化	細胞環境・ウィルス	1000	500	0.000008	48	10	1728000
	並列レンダリング	200	60	0.8	0.5	1	360
	並列レンダリング	200	60	2	0.5	1	360
	データ圧縮	500	25	8	0.5	1	900
衛星・観測データの有効利用	ゲリラ豪雨・熱帯気象の高度予測	100	350	0.64	216	2	155520
	統合地球環境再解析	8	46	0.01	18	80	41600
ゲノム解析	個人ゲノム解析	100	50	9	700	200	50457600
	疾患遺伝子発見のための統計的解析	500	500	200	140	5	1260000
大型研究施設との連携が切り開く生命科学	大量実験データ解析による4次元イメージング	2	10	1	28	1	201.6
	実験解析結果に基づく動的構造モデリング	200	100	0.004	240	10	1728000

6

社会的・科学的課題とシステム設計の基本的考え方

- Science-driven System
 - 計算科学ロードマップ(第2版)に基づく概念設計
 - アプリFSにおいて社会的・科学的課題および必要とする計算資源量について精査を行っている
 - ロードマップで見えてくる使い方は
 - 大規模、精密、長時間発展といったcapability computingのニーズ
 - 複雑な現象を対象とした課題におけるensemble computingのニーズ
 - Big data computing、社会科学シミュレーションのニーズ
 - これらの要求に応えるシステムの設計が前提
- Sustainable System

京の後継機として京の資産が受け継げる、そして、将来の計算機システム発展動向を見据えたシステム

 - 2020年ころの世界の最先端システム、競争力、競合力あるシステム
 - 将来の我が国のHPCの発展につながるシステム
- TCO(Total Cost of Ownership)-aware System
 - 白書で必要とされる計算資源量に対して、低電力、ソフトウェア高移植性、高耐故障性を有するシステム設計



システム設計基本的考え方

- 将来動向
 - 高い性能電力比と不規則非構造データ処理もできるCPUとして、汎用コアと演算加速コアが統合されていく。しかし、どのように統合されていくかは今後の研究成果に依存
 - ノード単体の演算性能向上に比べ搭載可能メモリ容量はさほど増えない
- 開発に関する考え方
 - システム設計

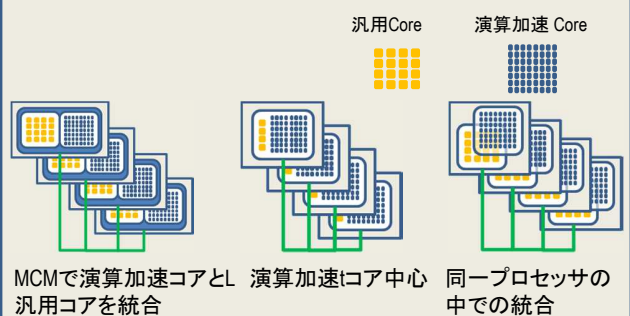
汎用部(汎用コア)と演算加速部(演算加速コア)を有するマシン

 - 汎用コアでないと性能がだせないアプリケーション、演算加速コアで性能だせるアプリケーション、両コアを使って性能がだせるアプリケーションを棲み分け、全電力時間積削減
 - 将来にわたって有効な統一プログラミングモデル、ライブラリ、フレームワークを提供
 - 早期成果創出のためにキラーアプリケーションの同時開発を通してシステム設計に反映

	汎用コア (Server)	演算加速コア (GPU, SIMD)
データ構造	不規則・非構造	規則構造
性能電力比	低 Ex. 4.27GF/W, 22nm	高 Ex. 7GF/W, 28nm
メモリ階層の現状	キャッシュと主メモリ	GPU側とホスト側メモリ

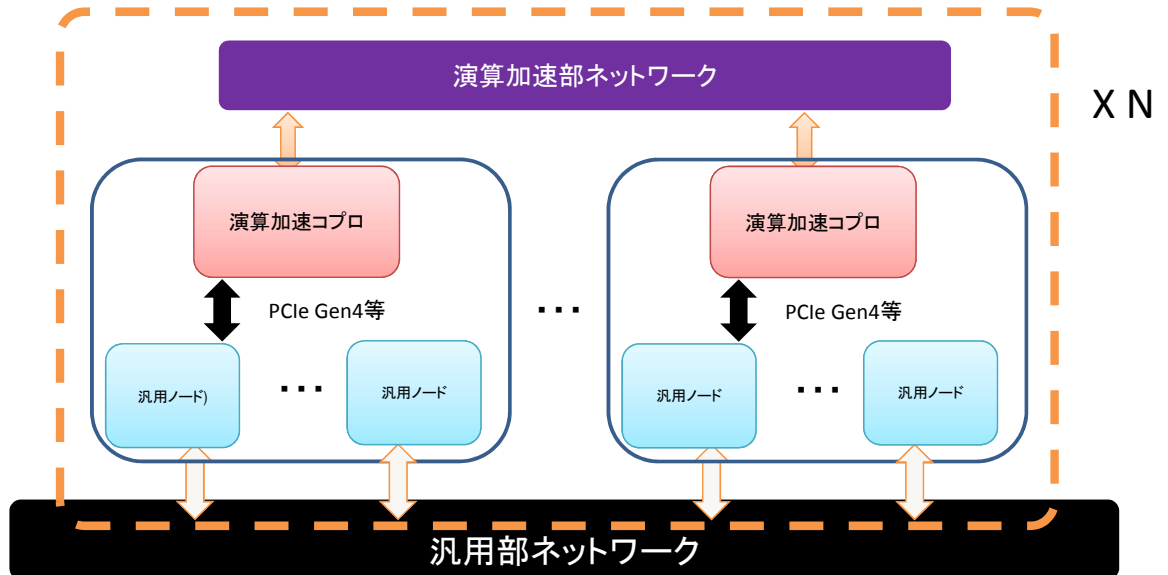
将来マシンイメージ群

- 汎用コア、演算加速コア、ネットワークが統合されていく
- 統合方法および搭載メモリ容量とメモリバンド幅は、実装技術によって変わっていく
- 3D実装可能メモリ容量以上が必要な場合、低速メモリが導入される



汎用部・演算加速部構成

- 汎用部
 - 京で開発されたアプリケーションの継承を重視したCPU
- 演算補助部
 - SIMDアーキテクチャによる電力性能に優れたCPU



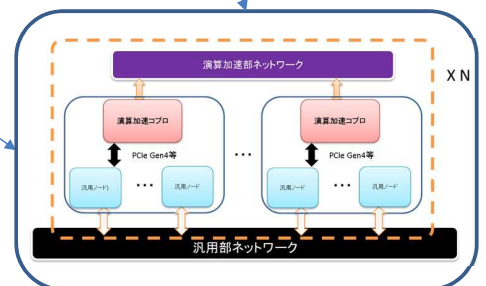
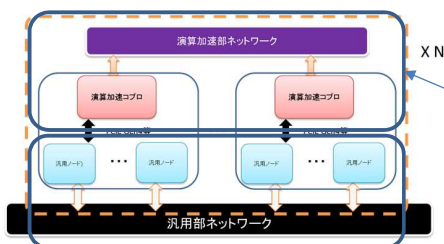
システム利用イメージ

Offloading Model

- OpenACCコンパイラディレクティブ等を用いてコードの一部を演算加速コ・プロセッサにオフロード
 - 演算加速コ・プロセッサで動作するライブラリを呼び出す
- 適応可能アプリケーション**
- 量子化学など対角化や直交化が必要なアプリ
 - 原子核のシェルモンテカルロ等
 - UT-Heartなど大規模な行列を多数反転するアプリ
 - 大規模粒子系

Cooperation Model

- 汎用部と演算加速部それぞれで協調するアプリ実行
 - 複数の汎用部プログラムと複数の演算加速部コプロプログラムによる協調動作
- 適応可能アプリケーション**
- 前処理を汎用で、カーネルを加速機構で実行
 - 連成計算等のMPMD実行(例: 気候、気象のカプラー)



Separation Model

- 汎用部だけで計算するアプリ
 - 演算加速部のグループで実行されるアプリ
- 適応可能アプリケーション**
- 主に、ステンシル計算(メモリに入る場合)、QCD等
 - 分子動力学計算(MD)

解決すべき社会的・科学的課題と計算量 (1/2)

今後、メモリ容量を増やすことを検討するとともに、メモリ容量不足で実行できないアプリについては、アプリ側とともに要求メモリ容量削減の可能性を検討する

- 演算加速コア: 演算加速のコアメモリだけで実行できるアプリ
- 演算加速モジュール: 演算加速のモジュールメモリを使って実行できるアプリ
- 汎用: 汎用部で実行すべきアプリ

分野	課題	要求性能 /ケース (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 /ケース (PB/s)	メモリ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	主な計算部分の 想定ハードウェア	プログラミングモデル
創薬・医療	個人ゲノム解析	100	50	9	700	200	50457600	---	
	遺伝子ネットワーク解析	100	50	4.5	10	26000	93600000	汎用	Separation model
	創薬などMD・自由エネルギー計算	10	5	0.01	1.2	100000	4320000	演算加速コア	Separation model
	細胞環境・ウイルス	1000	500	4	48	10	1728000	演算加速コア	Separation model
	高精度創薬	10	1	1	1	100	3600	演算加速モジュール	Offloading model (FMOなので密行列処理)
	バイオデバイス設計	100	1	1	1	100	36000	演算加速モジュール	Offloading model (FMOなので密行列処理)
	血流シミュレーション	400	64	1	174	10	2505600	演算加速モジュール	Separation model
	超音波シミュレーション	200	130	132	240	10	1728000	---	
	脳神経系シミュレーション	10	100	56	210	30	230000	---	
	総合防災								
決クリンエネルギー創出と環境問題	地震発生		64	0.014			20000	演算加速コア	Separation model
	波動伝搬		17	0.094			60000	演算加速モジュール	Separation model
	地震動増幅	8	64	0.034	3	5000	200000	演算加速モジュール	Offloading model (陰解法の場合)
	建物震動		64	0.05			100000	演算加速モジュール	Offloading model (陰解法の場合)
	津波遡上		64	0.0036			50000	演算加速コア	
	避難誘導シミュレーション	0.1		0.0001	1	5000	1800	汎用	Separation model
	電子材料の電子状態計算・手法1	100	20	5	240	10	864000	演算加速モジュール	Offloading model (ブロック疎行列の部分)
	電子材料の電子状態計算・手法2	100	10	1.2	96	10	345600	演算加速モジュール	Offloading model (GS直交化部分)
	強相関電子系の理解	82	131	82	42	10	124000	---	
	プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流	100	200	0.5	24	50	432000	汎用	Separation model
プラズマ乱流計算・大域的非常乱流	100	200	0.5	170	10	612000	演算加速モジュール	Separation model	
科学	熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題)	200	400	1	28	50	1010000	汎用 (場合によっては演算加速コアが使える可能性あり)	Separation model
	熱流体シミュレーション(自動車、ハイエンドベンチマーク)	100	200	0.5	28	10	101000	汎用	Separation model
	風力発電立地条件アセスメント	29	90	0.01	72	100	760000	演算加速コア	Separation model
	近未来地球環境予測システム	2	8	0.015	720	50	106000	演算加速コア	Separation model (場合によってはCooperation model)
	自動車交通流のリアルタイムシミュレーション	1.00	10	0.011	2.78E-05	10	0.1	汎用	Separation model
	株式取引所ルールの最適化	208	1E-05	1E-05	24	10	180000	汎用	Separation model

解決すべき社会的・科学的課題と計算量 (2/2)

今後、メモリ容量を増やすことを検討するとともに、メモリ容量不足で実行できないアプリについては、アプリ側とともに要求メモリ容量削減の可能性を検討する

- 演算加速コア: 演算加速のコアメモリだけで実行できるアプリ
- 演算加速モジュール: 演算加速のモジュールメモリを使って実行できるアプリ
- 汎用: 汎用部で実行すべきアプリ

分野	課題	要求性能 /ケース (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 /ケース (PB/s)	メモリ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	主な計算部分の 想定ハードウェア	プログラミングモデル	
基礎物理と物性物理との連携	自己重力N体流体シミュレーション	1200	5	0.3	30	100	12960000	演算加速モジュール	Offloading model	
	宇宙天気予報	1000		2		100	50	18000000	汎用	Separation model
	カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用	500	8	0.066	0.28	31536	15768000	演算加速コア	Separation model	
	閉殻を仮定しない殻模型計算	100	10	1	27.8	100	1000000	演算加速モジュール	Offloading model	
	超新星爆発のシミュレーション	1000	200	0.02	1200	1	4320000	汎用	Separation model	
宇宙科学・地球科学の連携による惑星科学	惑星系形成	278	3	0.00003	1000	1	1000000	演算加速コア	Separation/offloading	
	地球・惑星の形成シミュレーション	116	10	0.01	24	10	100000	演算加速コア	Separation/offloading	
	惑星表層環境の形成と進化シミュレーション	69	250	0.01	100	100	2500000	演算加速コア	Separation model	
タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析	創薬などMD・自由エネルギー計算	10	5	0.01	1.2	10000	432000	演算加速コア	Separation model	
	高精度創薬	10	1	1	1	100	3600	演算加速モジュール	Offloading model	
	バイオデバイス設計	100	1	1	1	100	36000	演算加速モジュール	Offloading model	
	細胞環境・ウイルス	1000	500	0.000008	48	10	1728000	演算加速コア	Separation model	
計算科学基盤技術の創出と高度化	並列レンダリング	200	60	0.8	0.5	1	360	汎用	Separation model	
	並列レンダリング	200	60	2	0.5	1	360	汎用	Separation model	
	データ圧縮	500	25	8	0.5	1	900	---		
衛星・観測データの有効利用	ゲリラ豪雨・熱帯気象の高度予測	100	350	0.64	216	2	155520	演算加速モジュール	Cooperation model	
	統合地球環境再解析	8	46	0.01	18	80	41600	汎用	Cooperation model	
ゲノム解析	個人ゲノム解析	100	50	9	700	200	50457600	---		
	疾患遺伝子発見のための統計的解析	500	500	200	140	5	1260000	---		
大型研究施設との連携が切り開く生命科学	大量実験データ解析による4次元イメージング	2	10	1	28	1	201.6	汎用	精査中	
	実験解析結果に基づく動的構造モデリング	200	100	0.004	240	10	1728000	演算加速コア	精査中	

今後の課題

- 今回の構成を決めるに当たっては、
 - システムFSにおける現時点での概念設計の検討結果に基づいている
 - 性能見積もり、電力見積もりの精度は荒い
 - アプリケーションが要求する性能については、アプリFSにおける現時点での計算機要求に基づいている
 - 要求の精度にばらつきがある
 - アプリケーションが演算加速部で実行できるかの判断はラフ
- 従って、今回提示している構成および総演算性能等の数値は今後も見直していく
 - 特に、演算加速部だけを使った、あるいは演算加速部と汎用部を使ったアプリケーションに移行できるかどうか重要であり、コミュニティの意見を聞きながら検討を継続していく必要がある



別添 2

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

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

平成 25 年 9 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

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

目次

序章 はじめに.....	1
第1章 スーパーコンピュータの産業利用の位置付け.....	2
1.1 産業利用を推進する理由.....	2
1.2 リーディングマシンの産業利用.....	2
第2章 スーパーコンピュータの産業利用の現状と将来展望.....	3
2.1 産業利用の現状.....	3
2.2 産業利用の将来展望.....	4
第3章 産業界で利用されるアプリケーションの将来展望.....	4
3.1 技術的な課題と将来動向.....	4
3.2 市販ソフトウェアの将来展望.....	5
3.3 国プロ開発アプリケーションの将来展望.....	6
3.4 オープンソース・ソフトウェア（OSS）の将来展望.....	7
第4章 アプリケーションの観点からのスーパーコンピュータ利用の推進.....	7
4.1 市販ソフトウェアと国プロアプリ等との関係.....	8
4.2 市販ソフトウェアに対する支援.....	9
4.3 国プロアプリ等の普及促進.....	10
4.4 産業利用アプリケーションの中長期的高度化.....	11
第5章 おわりに.....	12
参考資料.....	13

序章 はじめに

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である。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をベースとしたシミュレーションが可能となり、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ことが現実のものとなってきている。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関しても、スーパーコンピュータの利用が進みつつある。この際、シミュレーションをはじめとして、産業界等におけるスーパーコンピュータの利活用が進む中で、それによる新たなイノベーションの創出が期待されている。

このような背景のもと、今後とも産業界におけるスーパーコンピュータの利活用を促進し、イノベーションの創出を加速していくためには、産業界が利用するアプリケーション・ソフトウェア（以下「アプリケーション」という。）の検討が欠かせない。産業界におけるスーパーコンピュータの利活用とは、スーパーコンピュータ上で実行されるアプリケーションの利活用と言い換えても過言ではなく、したがって、アプリケーションのあり方を踏まえ、スーパーコンピュータの利用促進方策を検討する必要がある。このため、産業界が利用するアプリケーション（以下「産業利用アプリケーション」という。）の利用の現状及び将来の見通し並びにそれに対する開発計画などについて調査検討し、「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」の議論に反映するべく、当該ワーキンググループの下に「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」（以下「サブWG」という。）が設置された。

本サブWGでは、エクサスケール時代（2020年頃）に実用化されている、あるいは、実用化のための実証研究が実施されていることが想定される、市販ソフトウェア、国のプロジェクトで開発されたアプリケーション（以下「国プロ開発アプリケーション」という。）、オープンソース・ソフトウェア（OSS）（※）のそれぞれに関して、現状ではどのような使われ方をしているか、エクサスケール時代におけるそれらの使われ方に関するビジョン及びこれらのアプリケーションの開発者がどのような将来展望や開発計画を持っているかを調査し、アプリケーションが実用化されるまでの過程を見通した上で、支援のあり方を提

言としてまとめた。

※本報告書では、ソースが公開されているアプリケーションのうち、国プロ開発アプリケーション以外のものを、OSS と称している。

第1章 スーパーコンピュータの産業利用の位置付け

1. 1 産業利用を推進する理由

「序章 はじめに」で述べた背景の中で、国全体としてスーパーコンピュータの産業利用を積極的に推進する理由としては、以下のことが挙げられる。

- ・スーパーコンピュータの高度な利用により、我が国の国際的な産業競争力の強化が期待される。
- ・産業界でのスーパーコンピュータ利用が進むことにより、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が期待される。
- ・スーパーコンピュータの産業利用が進むことで将来的な社会的・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のさらなる進展が期待される。

1. 2 リーディングマシンの産業利用

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（リソース）を用いた計算に対する実証研究が行われ（「京」の産業利用を例にとると、1,000 ノードから 1 万ノードを利用した実証研究）、実証研究が成功した場合には、数年後の実用化を目指した実用化研究が実施される。あるアプリケーションが実用化された場合、企業の直接的な生産活動のためのアプリケーションの実行には、民間の HPC クラウドサービスや企業が自社で整備した計算機が使われることになる。なお、リーディングマシン（現時点では「京」を頂点とした HPCI 資源がこれに相当するが、エクサスケール時代のリーディングマシンについては今後議論される。）は基本的には上記の実証研究に対して供されるべきものであるが、バルクジョブを利用した実証研究においては、実証研究の過程において得られた成果が直ちに実用化されることも期待される。

そのような実証研究と実用化の関係を踏まえると、実証されたアプリケーションに大幅な変更を加えずに実用化するためには、実証研究に供されるリーデ

イングマシンのアーキテクチャは、実用化の際に使用される計算機のアーキテクチャと親和性の高いものであることが必須である。

さらに、上記の構造を踏まえると、我が国に世界トップレベルのリーディングマシンが存在しなければ、当該マシンを実証の場とするような、将来の産業競争力強化に資する先端的应用は生まれず、我が国の産業利用アプリケーションはじり貧になるおそれがある。その意味では、我が国として世界トップレベルのリーディングマシンを開発・整備することは、アカデミアと産業界の両者にとって将来の競争を勝ち抜くための先行投資である。また、ハードウェアの開発だけで終わることなく、同時に、世界トップレベルのリーディングマシンを活用して、競争力に資する我が国発のアプリケーションを開発していくことが重要である。

第2章 スーパーコンピュータの産業利用の現状と将来展望

2. 1 産業利用の現状

現在、産業界では市販ソフトウェアが最も多く利用されているが、その理由は、これらのソフトウェアは検証が十分に行われており、また、プリ・ポスト処理等の機能やサポートが充実しているからである。スーパーコンピュータの利用形態としては、64 コア程度の並列計算によるバルクジョブ的な利用が多く、今後、並列規模は大きくなるが、この傾向は将来的にも続くものと思われる。

一方、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。しかし、市販ソフトウェアの多くは使用コア数に比例したライセンス料を要求するので、市販ソフトウェアで大規模並列計算を実行することが困難なことも多く、64 コア程度の並列計算にとどまっており、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もまだ実用的に利用されている状況にはない。そこで、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、アカデミアの協力の下で、国プロ開発アプリケーションや OSS（以下「国プロアプリ等」という。）を利用して、1,000 コアから数万コアを使用した大規模並列計算が実証研究として実施されている。このための計算機リソースとしては、京を頂点とした HPCI 計算機資源の利用が進んでいる。

上記のいずれの使い方をする場合も、企業内で実務としてシミュレーションを利用するためには、解析のためのデータ作成、解析の実行、結果の処理も含めてシミュレーションの利用に伴う時間を長くても 1 ケースあたり数日以内に抑

える必要がある。

OSS に関しては利用サービスなどのビジネスが展開され始めている一方で、国プロ開発ソフトウェアを実用化するためにはしばらく時間がかかるものと予想され、開発済みのソフトウェアの維持や改良、普及のための努力を継続する必要がある。

また、産業界では実務で使用しているソフトウェアを乗り換える場合、検証計算の実施、所定の精度を確保するためのノウハウの蓄積、設計データからシミュレーションの入力データの作成、シミュレーション結果の後処理と設計への反映方法の検討などに関して相当なコストがかかる点にも留意する必要がある。

2. 2 産業利用の将来展望

2020 年頃のエクサスケール時代には、現在の「京」の 1/10 程度の能力を有するスーパーコンピュータが産業界でも自社で設備整備されたり、あるいは、HPC クラウドサービスなどを利用したりして、実務に供されているものと予想される。また、ものづくりの現場の試作・試験・評価プロセスにおいてシミュレーションによる実験の代替は更に進み、産業界におけるシミュレーションの重要性はますます高まっていると予想される。この時代には、以下のような利用がされているものと予想される。

- ・現在と同じ規模の計算を多数（数千から数万）同時に実行して、設計最適解を探索するためのバルクジョブ的な利用が進展する。
- ・大規模並列計算により、高精度（高解像度メッシュ）計算や高速化された計算が実行されている。
- ・現状できていない全系を対象としたマルチフィジックス・マルチスケール現象を解析するような、高度なシミュレーションも実用化、あるいは、実証研究フェーズにある。

以上のような利用に伴い、非常に膨大な量のデータを扱うことになることが予想される。

第3章 産業界で利用されるアプリケーションの将来展望

3. 1 技術的な課題と将来動向

産業界で利用されるアプリケーション・ソフトウェアは、市販ソフトウェア、国プロ開発アプリケーション、OSS 及びインハウス・ソフトウェアに大別されるが、そのいずれにも共通する、エクサスケール時代に想定される技術的な課

題を整理する。

まず、エクサスケール時代のスーパーコンピュータは大規模並列化とともに、ノード（CPU）のメニーコア化が進み、相対的にメモリ性能は悪化すると考えられ、このためアプリケーションの実効性能を担保することがますます困難となる。特に、現在産業界で最も多く用いられている熱・流体・構造解析等のアプリケーションで実現される計算速度は、現状のままでは、ピーク性能比で1%～5%程度になることが予想されている。また、分子動力学（MD）計算などのように、長時間のシミュレーション（膨大な数の時間積分計算）を行う要求もあるシミュレーションでは、大規模並列によって空間スケールを大きくすることはできても、時間スケールを大きく取ることは一般に難しい。さらに、現在使用されているアルゴリズムによっては基本的に大規模並列化に適していないものもあり、アプリケーションによっては大規模並列化に向かえないものも出てくるものと考えられる。すなわち、向き・不向きの観点から、アプリケーションごとにある程度の選択が行われていくことになる。

エクサスケール時代のアプリケーションに対するニーズとしては、マルチフィジックスに対応したソフトウェアの整備や、設計パラメータの最適化に対する自動化といった事柄がある。また、シミュレーションで扱うデータ量が膨大化することから、プリ・ポスト処理機能、ユーザインタフェース、大規模データの可視化機能の整備への要望が更に強まるものと予想される。アプリケーションの研究開発状況としては、上記のニーズに対応するためのソルバーの改良が引き続き行われるとともに、コンピュータ支援設計（CAD）といったツールへの集約が進むものと考えられる。

3. 2 市販ソフトウェアの将来展望

現在、産業界で最も利用されているアプリケーションは市販ソフトウェアであり、多くの企業ユーザが、現在利用している市販ソフトウェアを大規模並列計算環境でも使用することを望んでいる。その理由の一つとして、国プロアプリ等へ乗り換えるためのコストがかかることが挙げられる。

シミュレーションの全体的な動向としては並列化が進むことは自明なので、市販ソフトウェアもそのような方向に向かい、エクサスケール時代には、数百コアから数千コアを利用した中規模な並列計算まではカバーすると予想されるが、前述のように、全ての市販ソフトウェアが大規模並列化に向いているわけではなく、また、大規模並列化に対応したライセンス形態なども定着している状況とは言えない。

このように、現状との親和性という観点で市販ソフトウェアへの期待が大きいが、大規模並列化の問題やライセンスの問題を解決する必要がある。一方で、ソフトウェアベンダはユーザのニーズに敏感であり、そのニーズに応じて上記問題が解決されることも期待されるが、そのスピードを上げるための取組が必要となる。

3.3 国プロ開発アプリケーションの将来展望

大規模並列計算を実行する場合や新規機能を利用する必要がある場合、それに対応していない市販ソフトウェアの利用は考えにくい。アカデミアの協力の下で、国プロアプリ等が使われる。しかし、これまでに蓄積された知見を簡単には捨てることができないため、業務に浸透したソフトウェアを変えることは難しい。例えば、数倍速度が速くなった程度では乗り換えないと声がある。

一方で、市販ソフトウェアは直近の産業界のニーズを重視して開発を進める傾向にあるのに対して、国プロ開発アプリケーションはその時代のリーディングマシンへの対応などといった研究課題への挑戦が可能であり、当該リーディングマシンレベルのスペックを活用する市販ソフトウェア開発の機運が高まるまでは、国プロ開発アプリケーションの担う役割は大きい。また、国プロ開発アプリケーションは、得られた成果の公表には著作権者記載が求められるなどの条件はあるが、自由なライセンス形式をとっており、市販化につなげることができるなど、他のプロジェクトや企業との共同研究に利用が可能になっている。これらに加えて、先端的なスーパーコンピュータでアプリケーションが効率的に実行可能であるかどうかの見極めも、国のプロジェクトに求められている役割であると考えられる。

市販ソフトウェアは堅ろう性の向上や多機能化、高速化など、ユーザのニーズに応じた改良をして産業界の信頼を獲得しているため、国プロ開発アプリケーションを普及していくためには、市販ソフトウェアと差別化しつつ先導するべく、マルチフィジックス化などの複数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など、市販ソフトウェアにはない画期的な機能、先導的な機能を優先的に研究開発し、独自性をもたせることが必須となる。

また、開発者にとって、国プロ開発アプリケーションをその時代のリーディングマシンに移植することは、その移植自体が研究課題になるとはいえ、大変な労力を要することになるので、ハードウェアに詳しい専門的な技術者のサポートが必要となる。さらに、開発者へのサポートだけでなく、国プロ開発アプ

リケーションをはじめとしたオープンソースのソフトウェアの場合、普及のために、ソフトウェアを使うユーザの技術向上のためのサポートも必要となる。

3. 4 オープンソース・ソフトウェア（OSS）の将来展望

OSS は、ソースコードを公開し、営利・非営利の区別なく自由な利用、及び自由な再配付や派生物の作成を認めているソフトウェアである。このような形態をとることで、多数の有志が開発、検証、サポートを行うことで透明性の保証、開発や知識共有のスピードアップがはかれるという開発側の利点がある。このこととともに、目的に合わせたカスタマイズ（コードの最適化・大規模並列化・大規模化、独自の機能拡張や設計・解析システムへの組み込みなど）が自由であり、多くの場合、無償での利用が可能という利用者への利点もある。これらのため、産業界でも市販ソフトウェアの代替として OSS の利用が期待されている。一方で、ユーザによる開発や検証、サポートが加速すれば、OSS の強みとなりうるが、市販ソフトウェアと比較したときのサポート不足、堅牢性の低さなどによる導入・トレーニング・検証コストの高さもあり、産業界にとってまだ容易に乗換えができるものとはなっていないのが現状である。また、独自改良版として商品化されているアプリケーションの中には、元の OSS のブランドとなってしまい、ユーザによる開発や検証、サポートが行われなくなってしまうものがある。

今後、ハードウェアのアーキテクチャが発展していく中で、それを活用できるソフトウェアの開発・利用を続けるには、ソースが公開されたソフトウェアの発展が求められることから、国プロ開発アプリケーションと同様に、OSS への期待感は高い。その一方で、OSS は、成果をオープンにしていくことが基本姿勢として求められるので、OSS を用いたビジネスを育てることが難しいという課題があるとともに、開発者や有志による自由なカスタマイズが特徴であることから、その開発や普及を国が直接主導することは難しいことに留意が必要である。

第4章 アプリケーションの観点からのスーパーコンピュータ利用の推進

第1章から第3章までの議論を踏まえ、エクサスケール時代に向けて産業界におけるスーパーコンピュータの利活用を推進するため、産業利用アプリケーションの開発はどうあるべきか、さらに、そのために国等は何をすべきかを検討した。その際、単にアプリケーション開発に関する議論だけではなく、アプリケーションの移植の考え方や市販ソフトウェアのライセンス形態等について

も検討した。以下に検討結果をまとめる。

4. 1 市販ソフトウェアと国プロアプリ等との関係

市販ソフトウェアはユーザニーズに基づくベンダの経営・開発戦略に従って改良・高度化され、国プロ開発アプリケーションは政策的な要求（例えば大規模並列化や産業利用促進）に従って改良・高度化され、OSS は開発者やユーザコミュニティの意向に従って改良・高度化されていくことが基本である。その中で、特に国プロ開発アプリケーションについては、市販化される、市販ソフトウェアに取り込まれる、あるいは OSS に移行することなどによって、ある時点以降は自立化していくものもある。

以上のような発展の状況を踏まえ、市販ソフトウェアと国プロアプリ等のターゲットを使われるフェーズで整理すると、

- ・ 実用化後や実用化の手前のフェーズでは主に市販ソフトウェアや一部の普及した国プロアプリ等が使われる。
- ・ 実証研究のフェーズでは主に国プロアプリ等が使われ、このフェーズで産業界に受け入れられて普及すると、実用フェーズでも使われる。

こととなる。なお、実証研究より以前のフェーズでは、産学連携のプロジェクト（基礎基盤的な研究開発）等において、基本的には数年後の実証を目指したより先進的な国プロアプリ等が開発される。

また、同ターゲットをエクサスケール時代において各アプリケーションがカバーする並列コア数で整理すると、

- ・ 数百コアから数千コアを利用した中規模な並列計算までは主に市販ソフトウェアがカバーする。
- ・ 数万コア以上の大規模並列計算や連成解析などは主に国プロアプリ等がカバーする。

こととなる。

すなわち、市販ソフトウェアは直近の産業界のニーズ（実用フェーズのニーズ）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は、市販アプリケーション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るべきである。

そのため、国は、上記の役割分担を踏まえ、画期的・先導的なアプリケーションを開発していく必要がある。

以下、上記のようなフェーズにある各アプリケーションに対して、国等がど

のような支援をすべきかを議論した結果をまとめる。

4. 2 市販ソフトウェアに対する支援

市販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、市販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。しかしながら、ソフトウェアがバイナリで提供されることが多いため、ユーザ自身が大規模並列化に対応することができず、また、現状では市販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。

そのため、「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、新たなハードウェアの開発に当たっては、国やハードウェアベンダは、アプリケーションの大規模並列化・大規模化の実現やその新規のハードウェア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（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、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。

上記のテストベッド環境はリーディングマシンを含む HPCI システムに構築することが考えられるが、高並列環境に移植された市販のアプリケーションが実際に産業利用される際には、第 1 章で述べたとおり、民間の HPC クラウドサービスや企業が独自に整備した計算機が利用されることになるため、HPCI システムとこれらの計算機とは、アーキテクチャや用意されるライブラリ等が同一あるいは類似のものでなければ、市販ソフトウェアの高並列化の大きな障害となる。このことは、スーパーコンピュータの産業利用を推進するための、HPCI システムの構築の際の重要な留意事項である。

また、産業利用アプリケーションはユーザのニーズに応じた改良や充実したサポートによって産業界の信頼を獲得しているため、ハードウェアのアーキテクチャが大きく変更されたとしても、そのアーキテクチャに対応したアプリケーションの開発・実証が進むまでの間は、既存のアプリケーションがそのまま利用される。この間に、新たなアーキテクチャのハードウェアと既存のアプリケーションとの親和性を担保し、そのハードウェアの産業利用を促進するために、ハードウェア開発者あるいはシステムソフトウェア開発者はエミュレータを開発し、ユーザに適宜提供すべきである。

一方、上記の支援等により市販ソフトウェアの高並列化が進展したとしても、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、例えば使用するノード数に比例してライセンス料が要求されるとすると、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。しかし、ソフトウェアのライセンス料は、開発コスト等を回収するための原資であり、また、市場原理に基づいて決定されるものなので、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により、中長期的にライセンス料の問題はおのずと解決されることが期待されるが、産業界におけるスーパーコンピュータの利用促進のためには、引き続きその解決を加速するための検討を行っていくことが重要である。

4. 3 国プロアプリ等の普及促進

産業界では国プロアプリ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市販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、国プロアプリ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、国プロアプリ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。

しかしながら、国プロアプリ等については、市販ソフトウェアとの役割分担の点や市販ソフトウェアにはない画期的・先導的な機能を有する点で、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、ひいては将来的な市販ソフトウェアの高度化にも資することとなる。

そのため、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サポート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、市販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。その際、国プロ開発アプリケーションの商用化も含めて考えていく必要がある。

OSS についても、公募事業等を通じて国プロ開発アプリケーションになるこ

とや、逆に国プロ開発アプリケーションがプロジェクト終了後に OSS になることもあるので、そのようなダイナミックなアプリケーションの発展過程を前提として、画期的・先導的な機能を有するものやそのコミュニティの中で育ち、新しい重要な機能を持つことが見込めるものに対しては、国やユーザ等がテストベッド環境を提供するとともに、国プロ開発アプリケーションと同様の支援を検討する必要がある。

計画的な開発や利用支援の充実を図るに際しては、ユーザニーズを把握するためにユーザと開発者が情報共有できる場を設けるとともに、開発者のみによるサポートには限界があるので、それを補完するためにユーザ同士で情報交換できる場を設けることが望まれる。既に、一部の国プロアプリ等でもユーザコミュニティが形成されているが、産業利用の更なる促進のためには、そのほかの国プロアプリ等についても、例えば開発者を主体として、ユーザを含めたコミュニティを形成し、両者が一体となってその充実を図ることが重要であり、そのため、活動が活発になることが望まれるコミュニティに対しては、その活動が軌道に乗るまでの間は、例えばユーザ間の情報共有を目的とした会議の開催などといった活動を支援する方策について検討する必要がある。

4. 4 産業利用アプリケーションの中長期的高度化

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（リソース）を用いた計算に対する実証研究が行われ、数年後の実用化を目指すことは第 1 章で述べたが、その際、同時代に、現存のアプリケーションにはない機能を有し、数年後の実証研究に利用されるアプリケーションの開発を目指したニーズ主導の基礎基盤的な研究開発が、当該計算機の数分の 1 程度の能力（リソース）を用いて進められていることも重要である。

すなわち、産業利用アプリケーションの中長期的な発展のためには、実証研究フェーズ以降にあるアプリケーションだけに着目するのではなく、プリ・ポスト処理も含めて、産業上の課題をシミュレーションによって解決することに資する、その時代の世界トップの計算機を活用した基礎基盤的な研究開発にも着目し、当該研究開発の成果が普及されることで次世代の実証研究に利用されるアプリケーションが質的に高度化される、という流れを創り出す取組を行うべきである。

そのため、国は、HPCI 戦略プログラムやいわゆるポスト「京」に向けたアプリケーション開発プロジェクト等の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。

第5章 おわりに

スーパーコンピュータの産業利用は、イノベーション創出等を通じた我が国の産業競争力の強化や、計算科学技術の成果の社会への還元などの観点から重要であり、その促進を図る必要がある。

そのため、本サブ WG では、これまでにない取組として、産業利用アプリケーションに注目し、アプリケーションの観点からスーパーコンピュータの利用促進を調査・検討した。その中で、産業利用の状況と現時点での将来展望を正確に把握するため、産業利用の支援組織、アプリケーションユーザとしての産業界及び産学連携研究者並びにアプリケーションプロバイダとしてのハードウェアベンダ、市販・OSS ソフトウェアベンダ及び国プロ開発アプリケーションの開発者からヒアリングを行い、その結果、第4章に示した提言を含む報告書を取りまとめた。

この報告書に関しては、国に対する提言を中心としつつベンダやユーザに対する問題提起も含まれており、また、4. 3や4. 4で述べた提言のように直ちに実行できること及び4. 2で述べた提言のようにいわゆるポスト「京」の開発に当たって今後重要になること並びにライセンスに係わる提言のように更なる検討が必要なことが複層的に含まれている。

国（国プロアプリの開発者を含む。）及びベンダ並びにユーザは、この報告書を踏まえ、実証研究と実用化、さらには実証研究の前段階の基礎基盤的研究開発という連続的なフェーズと、技術的・金銭的な乗換えコスト、利用支援の不足、ライセンス料等という市販・国プロ・OSS ごとの隘路を意識し、各々が適切に役割分担することで、全員野球で、我が国全体の産業利用アプリケーションを高度化し、そしてスーパーコンピュータの産業利用を促進していく必要がある。

本サブ WG 及びこの報告書が、スーパーコンピュータの産業利用を促進するための一助になれば幸いである。

参考資料

- 参考1 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
- 参考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委員名簿
- 参考3 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検討経緯

HPCI 計画推進委員会

今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ
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

平成 25 年 7 月 22 日
検 討 W G 決 定

1. 趣旨

今後とも産業界におけるスーパーコンピュータの活用を促進し、イノベーションの創出につなげていくためには、産業界が利用するアプリケーション・ソフトウェアの在り方を踏まえ、その利用促進方策を調査検討する必要がある。

このため、産業利用アプリケーションの開発・利用の現状及び将来の見通し等について調査検討し、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議論に反映するべく、当該ワーキンググループの下に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を設置する。

2. 調査検討事項

- ・産業界において利用されているアプリケーションの現状及び見通し
- ・今後の産業利用アプリケーションの開発・利用のあり方
- ・ポスト「京」時代における産業界のスーパーコンピュータ利用

3. 設置期間

平成 25 年 7 月 22 日から調査検討の終了までとする。

(参考2)

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
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

- 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
- 伊藤 聡 理化学研究所計算科学研究機構コーディネーター
- 奥野恭史 京都大学大学院薬学研究科特定教授（寄附講座）
- 笠 俊司 株式会社 IHI 技術開発本部技術企画グループ部長／
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
- 加藤千幸 東京大学生産技術研究所教授
- 塩原紀行 高度情報科学技術研究機構神戸センター産業利用推進室長
- 善甫康成 法政大学情報科学部教授
- 常行真司 東京大学大学院理学系研究科・物性研究所教授
- 吉村 忍 東京大学工学系研究科教授
- 渡邊國彦 独立行政法人海洋研究開発機構地球シミュレータセンター長

○：主査

(50 音順)

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検討経緯

第1回 8月21日(水) 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今後の進め方について
- ・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共通認識の確認
- ・産業界におけるアプリケーションの利用の現状についてのヒアリング

第2回 9月3日(火) 10時～12時

- ・前回の議論について
- ・産業界におけるスーパーコンピュータの将来的な利用方法に関するヒアリング
- ・シミュレーションの産業利用に関する調査報告の紹介

第3回 9月17日(火) 17時～19時

- ・前回までの議論について
- ・市販ソフトウェアの産業利用に対する将来展望についてヒアリング
- ・国のプロジェクトで開発されたアプリケーションの実証・実用化についてヒアリング
- ・オープンソース・ソフトウェアの産業利用についてヒアリング

第4回 9月30日(月) 14時半～16時半

- ・国やソフトウェアベンダの支援のあり方について
- ・報告書取りまとめ

9月30日(月) 17時～19時

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(第21回)

- ・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

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
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

報告書別冊

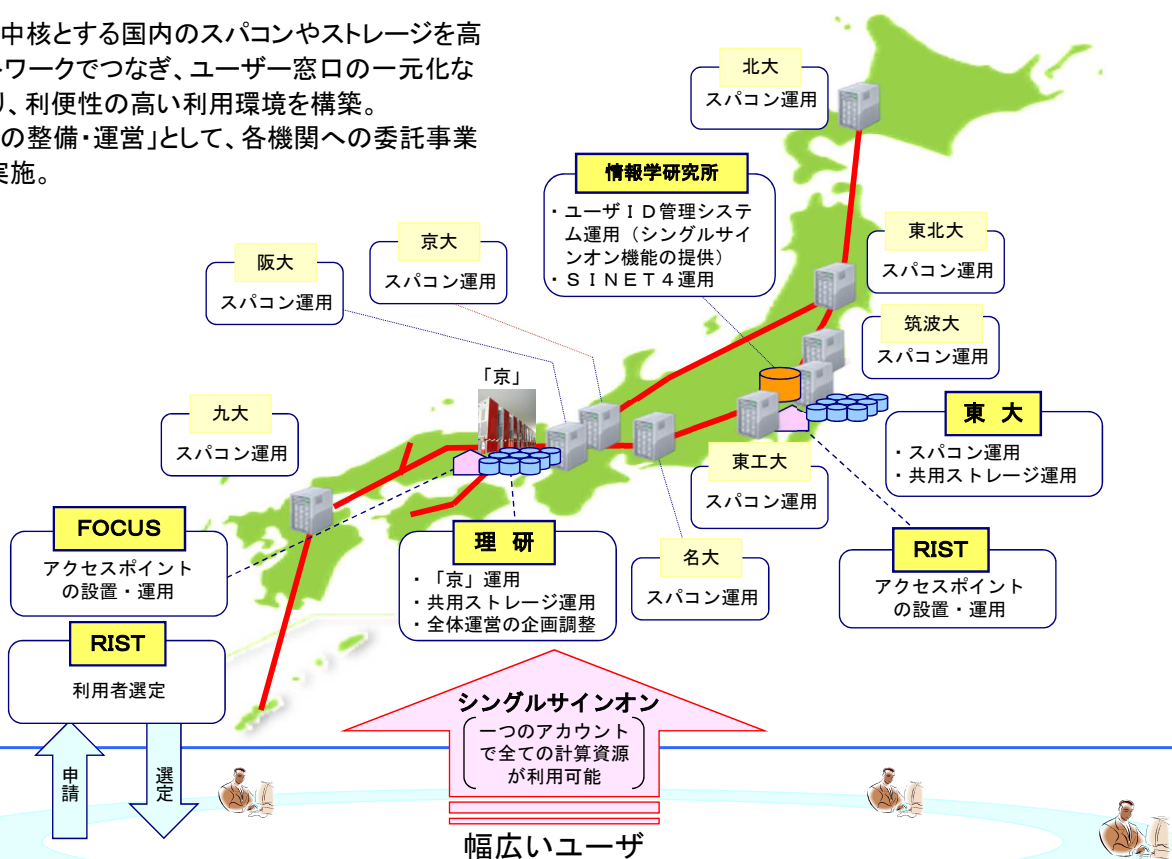
参考資料集

1. スーパーコンピュータ利用環境について.....	1
2. スーパーコンピュータの産業利用の現状.....	7
3. 産業利用アプリケーション開発の取組み.....	12
4. スーパーコンピュータの産業利用の展望.....	15
参考 HPC 産業利用に関するこれまでの提言.....	17

1. スーパーコンピュータ利用環境について

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。



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=10¹⁶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 約1,110億円(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。



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4月現在総理論演算性能 6,509Tflops

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, 60TB)
APPRO GreenBlade8000 (242.5Tflops, 38TB)
APPRO 2548X (10.6Tflops, 24TB)



筑波大学：
T2K-Tsukuba (95.4Tflops, 21TB)
70ノティア計算機システム (802Tflops, 34TB)



九州大学：
PRIMEHPC FX10 (181.6Tflops, 24.6TB)
PRIMERGY CX400 S1 (811.9TF, 185TB)
SR16000/L2 (25.3Tflops, 5.5TB)

名古屋大学：
FX1 (30.7Tflops, 24TB)
HX600 (25.6Tflops, 10TB)
M9000 (3.84Tflops, 3TB)



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



東京工業大学：
TSUBAME2.0 (2400Tflops, 99TB)

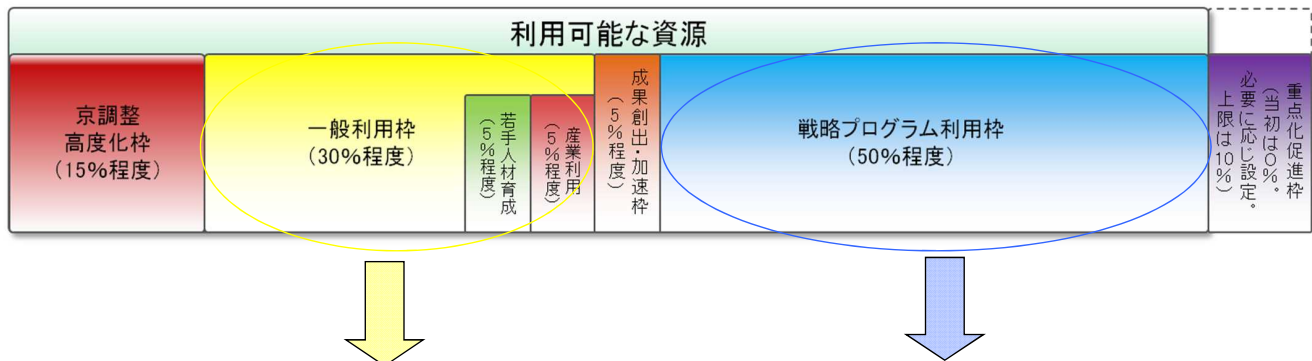


2013年4月現在

「京」の利用者選定について

＜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。



＜一般利用枠＞

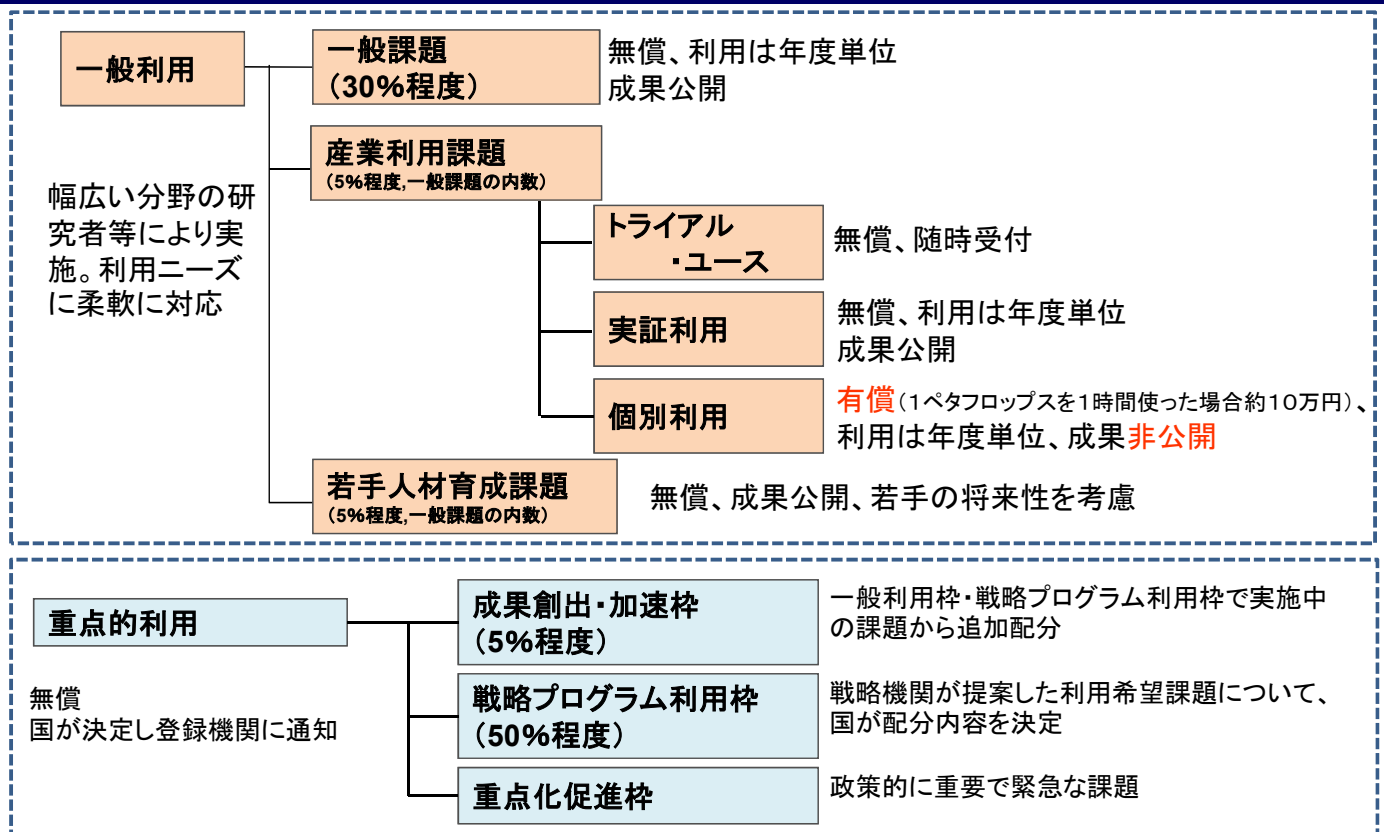
産業界を含め幅広い利用者を対象に公募し、申請のあった者の中から課題審査委員会の審査を経て利用者が選定される。

＜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。

※なお、利用料金については産業利用で成果非公開の場合有償とする。
(1ペタフロップスを1時間使った場合約10万円)

「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＞

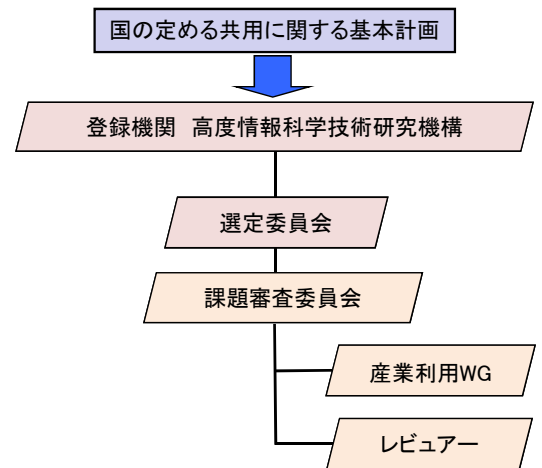
1. 科学的に卓越し、又は社会的に意義が高く、ブレークスルーが期待できる課題であること
2. 「京」が有する計算資源を必要としていること
3. ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析手法等が十分に検証済みであるとともに、各種資源の利用計画や研究体制が妥当であること
4. 提案課題の実施及び成果の利用が平和目的に限定される等、科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること

（若手人材育成課題）

1. 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）

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は上記同様)



課題選定の枠組み

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

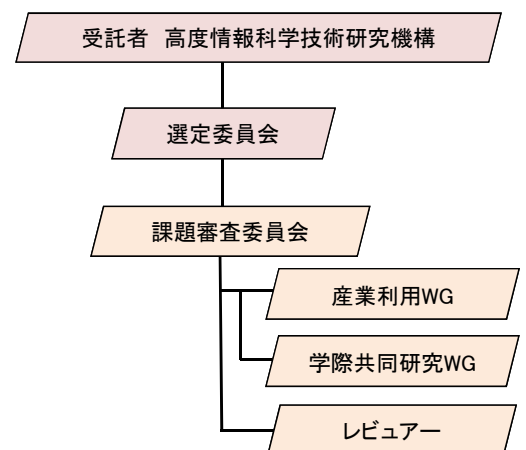
＜対象となる計算資源＞

■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

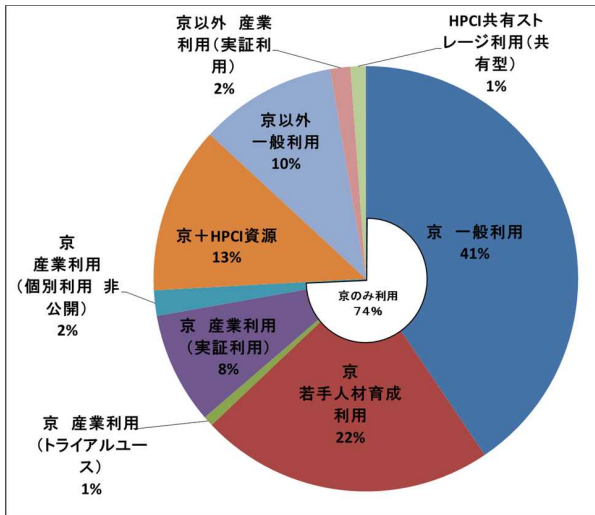
東拠点：東京大学内、西拠点：計算科学研究機構内



課題選定の枠組み

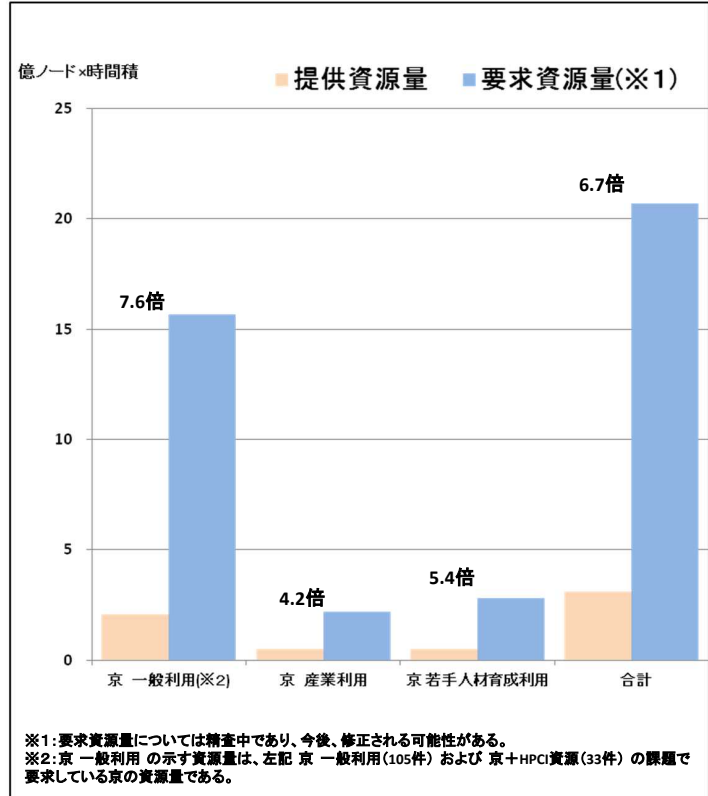
「京」の要求計算資源量(平成24年度 定期公募)

<申請件数>



京 一般利用	京 若手人材育成利用	京 産業利用(トライアルユース)	京 産業利用(実証利用)	京 産業利用(個別利用 非公開)	京+HPCI資源	京以外 一般利用	京以外 産業利用(実証利用)	HPCI共有ストレージ利用(共有型)	合計
105	58	2	22	5	33	27	4	3	259

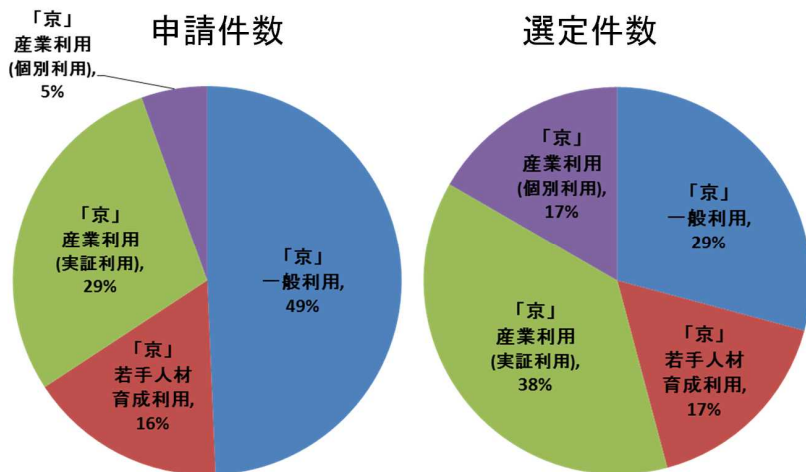
<「京」要求資源量>



※高度情報科学技術研究機構発表資料より

平成25年度 追加公募における「京」の課題件数と計算資源量

<申請件数と選定件数>

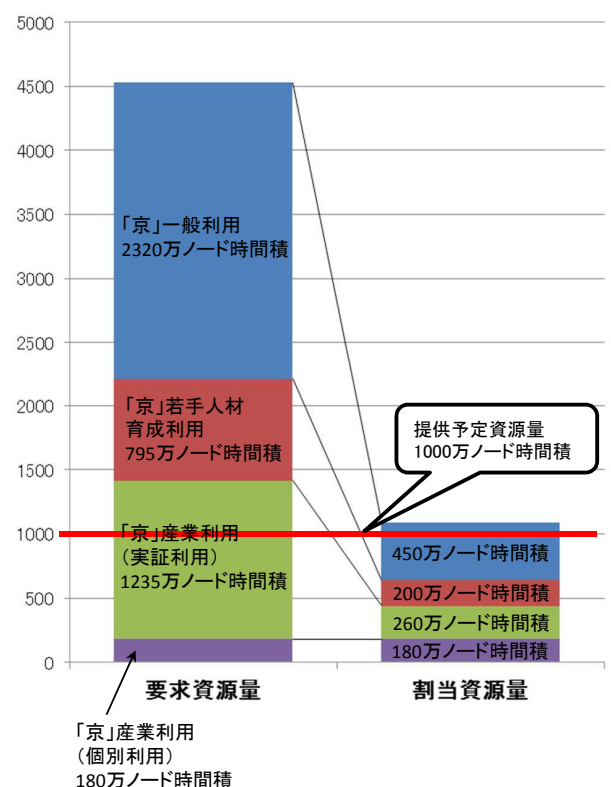


	「京」利用(HPCI資源の併用含む)					HPCI資源のみ利用	合計
	一般利用	若手人材育成利用	産業利用(実証利用)	産業利用(個別利用)	小計		
申請件数	36	12	21	4	73	8	81
選定件数	7	4	9	4	24	11*	35

*:「京」の利用を第1希望としたものの「京」以外のHPCI資源を用いる課題として選定された4件含む

※高度情報科学技術研究機構発表資料より

<「京」要求資源量と割当資源量>



その他のスーパーコンピュータの例

FOCUSスパコンの利用目的と対象者

目的		内容	対象者
技術 高度 化 支 援	1. HPCスタートアップ支援	小規模のHPC利用を目的とする利用	パソコンやワークステーション等を利用している企業等
	2. HPCステップアップ支援	現状よりも大規模なHPC利用を目的とする利用	ある程度の規模の並列計算機を利用している企業等
	3. HPCを活用した新産業の振興	HPCを活用した新産業の振興に寄与する利用	外部HPC環境を活用した受託解析、クラウドサービス提供事業者、気象情報サービス事業者等
	4. 国産アプリケーションのインキュベート	HPC向けの国産アプリケーションソフトウェアの振興を目的とする利用	HPC向けの国産アプリケーション開発に取り組む企業、新たに国産アプリケーションのトライアル利用をする企業等
	5. 公的アプリケーションソフトの利活用支援	次世代スパコン戦略プログラムの研究成果の産業界への普及を目的とする利用	次世代ものづくり分野等で開発された高並列計算対応アプリを利用する企業等
6. 産学連携研究の推進		理研や戦略機関など、次世代スパコンを中核に集積する大学・研究機関と企業等による産学連携研究を目的とする利用	
7. 実践的な企業の技術者の育成		関西の主要な大学等との連携による実践的な企業技術者の育成 (科学技術振興調整費事業『企業を牽引する計算科学高度技術者の育成』等)	
8. 「京」を中核とする研究教育拠点形成		「京」を中核とする研究教育拠点(COE)形成に資する利用	

利用状況

- 並列化目的の「スタートアップ支援」と「ステップアップ支援」の合計が55%を占めている。
- 日本国内で開発されたアプリケーション利用目的は「国産アプリインキュベート」と「公的アプリ活用支援」の合計で16%を占めている。

(公財)計算科学振興財団提出資料より

2. スーパーコンピュータの産業利用の現状

「京」の産業利用について

- 「京」の産業利用は、我が国の産業競争力強化とともに、「京」の成果を社会に還元する上でも重要。
- 平成24年度に行った「京」の一般公募では、産業利用課題の応募は29件(全体申請件数の約1割)で要求資源量が4倍以上の競争率になるなど、産業界からも想定を上回る利用の申し込み。
- 平成25年度においても産業利用枠を含む追加公募を実施(平成25年度下期分)し、全体申請件数に占める割合が約3割へと大幅に増加する等、産業利用のニーズの高まりが顕著(選定された全24課題のうち13課題が産業利用課題)。

<産業利用促進策>

- 「京」を試用して有用性を見極めと本格利用の準備を行う「トライアル・ユース」を随時募集。
- 「京」の産業利用に当たって、「コンシェルジュ的相談窓口」を設置し、情報提供、技術相談をきめ細かく行うなど、利用支援を強化。
- 産業利用拠点である「アクセスポイント」を東西2カ所に設置し、成果の帰属や知財権を明確にするなど利用環境を整備。

産業利用枠(配分資源量は「京」全体の5%程度) 利用の企業

<成果公開型 (26件)>

清水建設、竹中工務店、ブリヂストン、住友ゴム工業、武田薬品工業、大日本住友製薬、富士フイルム、東洋紡、住友化学、日東電工、川崎重工業、コベルコ科研、みずほ情報総研、トヨタ自動車、トヨタテクニカルディベロップメント、日本自動車工業会、日本造船技術センター、JSR、日立アプライアンス、IHI、日本ゼオン など

<成果非公開型 (9件)>

大日本住友製薬、第一三共、富士通アドバンステクノロジー、アスムス、数値フローデザイン、本田技術研究所、JFEスチール、フォーラムエイトなど

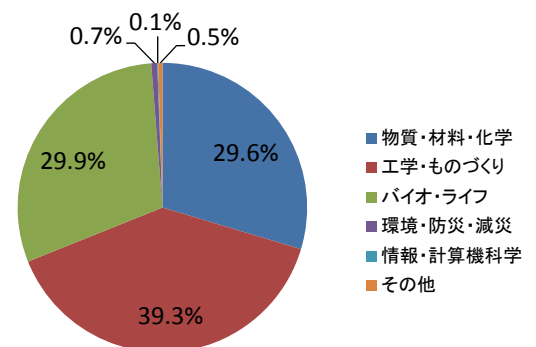
<トライアル・ユース (19件)>

三ツ星ベルト、東洋ゴム工業、茨城日立情報サービス、半導体理工学研究センター、本田技術研究所、昭和電工、地震工学研究開発センター、住友ベークライト、川崎重工業、フォーラムエイト、応用地質、日本ゼオン、新日鐵住金、ヒューリンクス、住友電気工業、ヴァイナス、CAEソリューションズ、三菱電機、富士重工

上記括弧内は課題の件数。(平成25年10月10日現在)

これまでに「京」利用した企業は、一般・戦略プログラム課題の企業含め**総勢83企業**。

産業利用枠課題の利用分野



産業利用枠課題における利用分野別の配分資源量の割合

(平成25年10月7日現在)

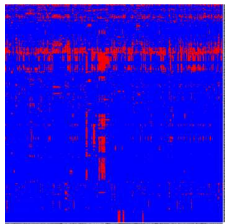
「京」の産業利用における成果事例

● 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築(研究代表者: 京都大学・奥野恭史)

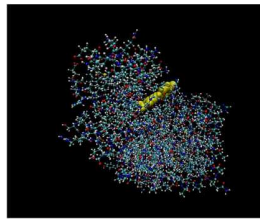
製薬企業11社が参画し、タンパク質と化合物の結合予測を世界最大規模で達成。医薬品開発の成功確率向上と迅速化に貢献。

医薬品の開発には10年以上の長い年月と500億円以上の巨額の費用が掛かると言われており、シミュレーションによる開発期間・コスト縮減が期待されている。

そこで、製薬企業11社と共同で「京」を用いた医薬品開発の研究プロジェクトを推進。論文等で結合することが分かっているタンパク質と化合物の結合ペア(12万ペア)をもとに、大量のタンパク質と化合物の結合データを学習し、結合パターンの統計ルール化を行い、「京」による超高速計算で、世界最大規模(189.3億ペア)の結合予測に成功。今後は、予測結果をもとに、各製薬企業が独自に医薬品開発につなげる。



化合物 (500種)
(→最終的には3000万種)



タンパク質と化合物の結合シミュレーション

タンパク質 (388種)
(→最終的には631種)

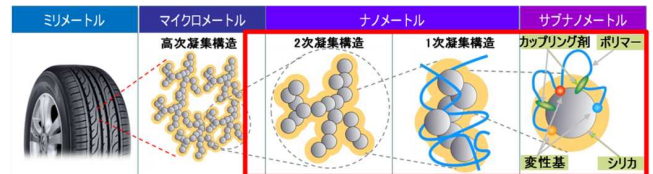
「京」による結合予測結果
(赤色が相互作用あり)

● 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発(研究代表者: 住友ゴム工業(株)・岸本浩通)

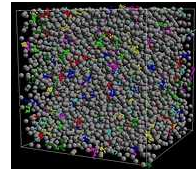
「京」による大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションにより、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。

低燃費・安全性(グリップ性能)・省資源(ゴム強度)といった相反するタイヤ性能を両立させ、タイヤゴムを高機能化させるためには、分子・ナノレベルでの構造解析が必要となるが、企業レベルでのスパコン性能の制限から従来は困難であった。

「京」を用いることで、大規模でありながら、分子レベルの詳細なシミュレーションが可能となり、ゴム内部の複雑な構造を大スケールでシミュレーション。タイヤを高機能化させるための研究に活用し、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。



この領域すべてを分子レベルで丸ごとシミュレーション



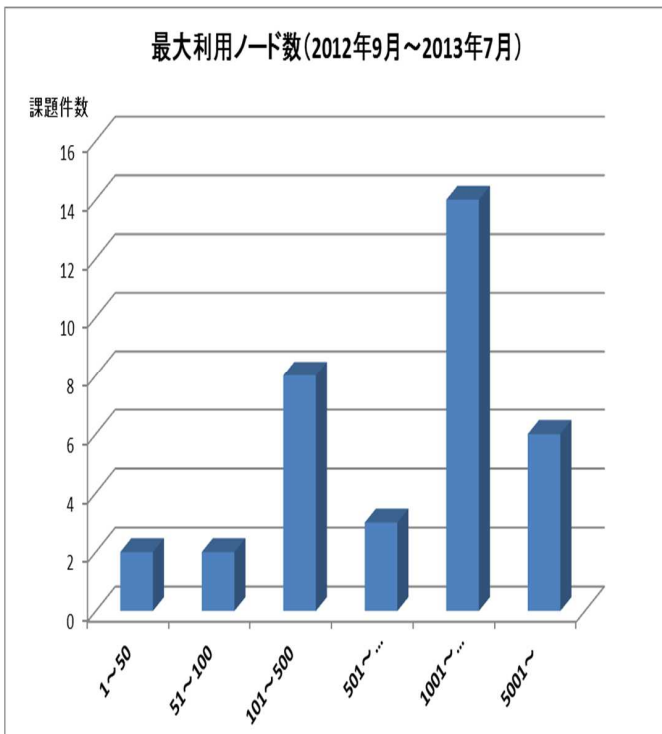
タイヤ材料のナノレベルでのシミュレーション

「京」の産業利用課題の利用アプリケーション

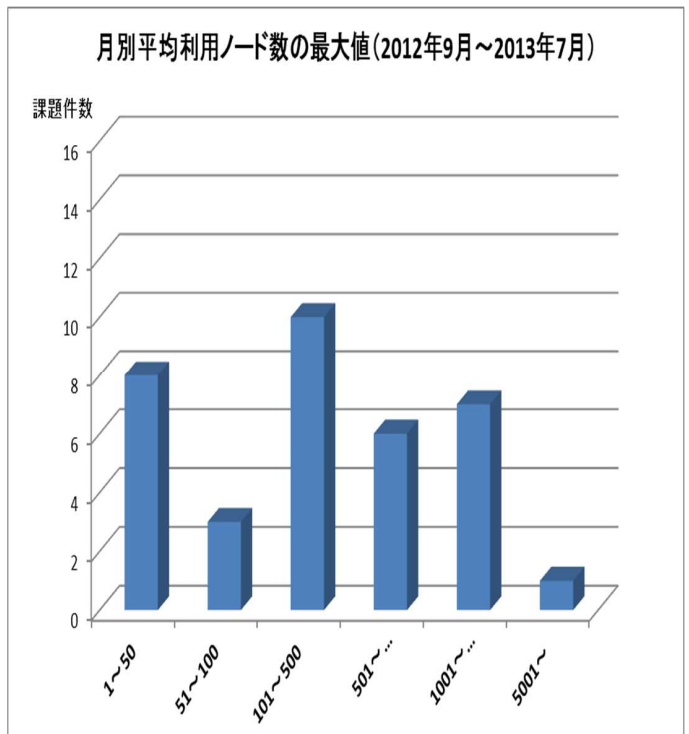
No	分類	利用アプリケーション	アプリケーション形態	利用形態
1	バイオ・ライフ	GROMACS	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
		AMBER12	市販ソフトウェア	バルクジョブ
2	バイオ・ライフ	MP-CAFEE	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
		GROMACS	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
3	バイオ・ライフ	MP-CAFEE	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
4	バイオ・ライフ	MP2-FMO	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
5	バイオ・ライフ	modylas	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
6	バイオ・ライフ	modylas	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
7	物質・材料・化学		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
8	物質・材料・化学	VSOP	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
9	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
10	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
11	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
12	物質・材料・化学	modylas	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
13	物質・材料・化学	PHASE	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
14	物質・材料・化学	Car-Parrinello MD	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
15	物質・材料・化学	PHASE	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
16	物質・材料・化学	LAMMPS	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
17	物質・材料・化学	WIEN2K	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
18	物質・材料・化学	RMC++	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
19	物質・材料・化学	OCTA/SUSHI	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
20	防災・減災、その他	OpenFOAM	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
21	防災・減災、その他	OpenFOAM	オープンソース・ソフトウェア	大規模ジョブ
22	防災・減災、その他		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
23	工学・ものづくり		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
24	工学・ものづくり	NuFD/FrontFlowRed	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
25	工学・ものづくり	FrontISTR	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
26	工学・ものづくり		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
27	工学・ものづくり	LS-DYNA	市販ソフトウェア	1ジョブの時間短縮
		PAM-MEDYSA	市販ソフトウェア	1ジョブの時間短縮
		ADVENTURECluster	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
		FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
28	工学・ものづくり	FrontISTR	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
			インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
			インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
29	工学・ものづくり		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
		FINAS/CFD	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
			国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
30	工学・ものづくり	FrontFlow/blue	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
31	工学・ものづくり	ADSTEFAN	市販ソフトウェア	大規模ジョブ
32	工学・ものづくり	HyENEXSS	オープンソース・ソフトウェア	1ジョブの時間短縮
33	工学・ものづくり	FrontFlow/red	国プロ開発アプリケーション	大規模ジョブ
34	工学・ものづくり	HyENEXSS	オープンソース・ソフトウェア	1ジョブの時間短縮
35	工学・ものづくり	LuxRender	オープンソース・ソフトウェア	バルクジョブ
36	工学・ものづくり		インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ
			インハウス・ソフトウェア	大規模ジョブ

「京」で利用されているソフトウェアの実行規模別グラフ

① 計算実行ジョブの最大ノード数
(平成24年9月～平成25年7月末までの最大)



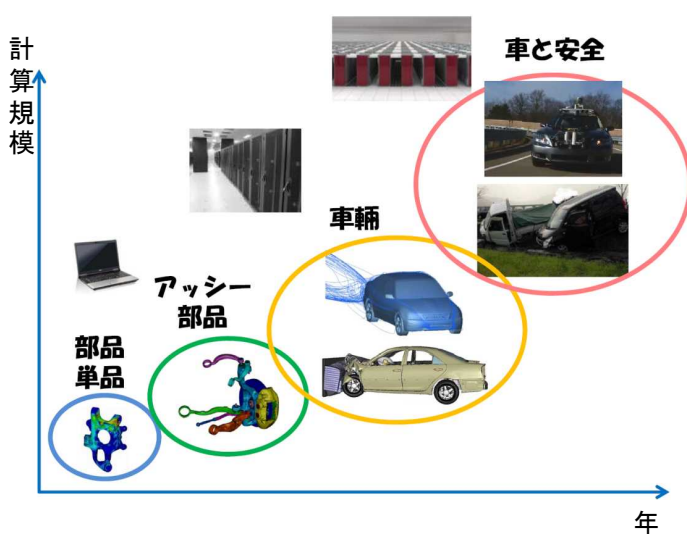
② 計算実行ジョブの平均ノード数
(平成24年9月から25年7月度までの最大月)



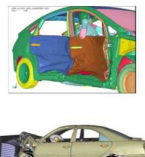
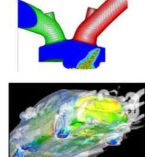
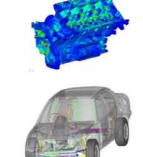
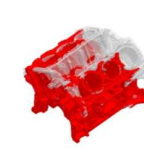
塩原委員提出資料より

産業利用例(自動車産業)

自動車産業におけるスパコン利用の歴史



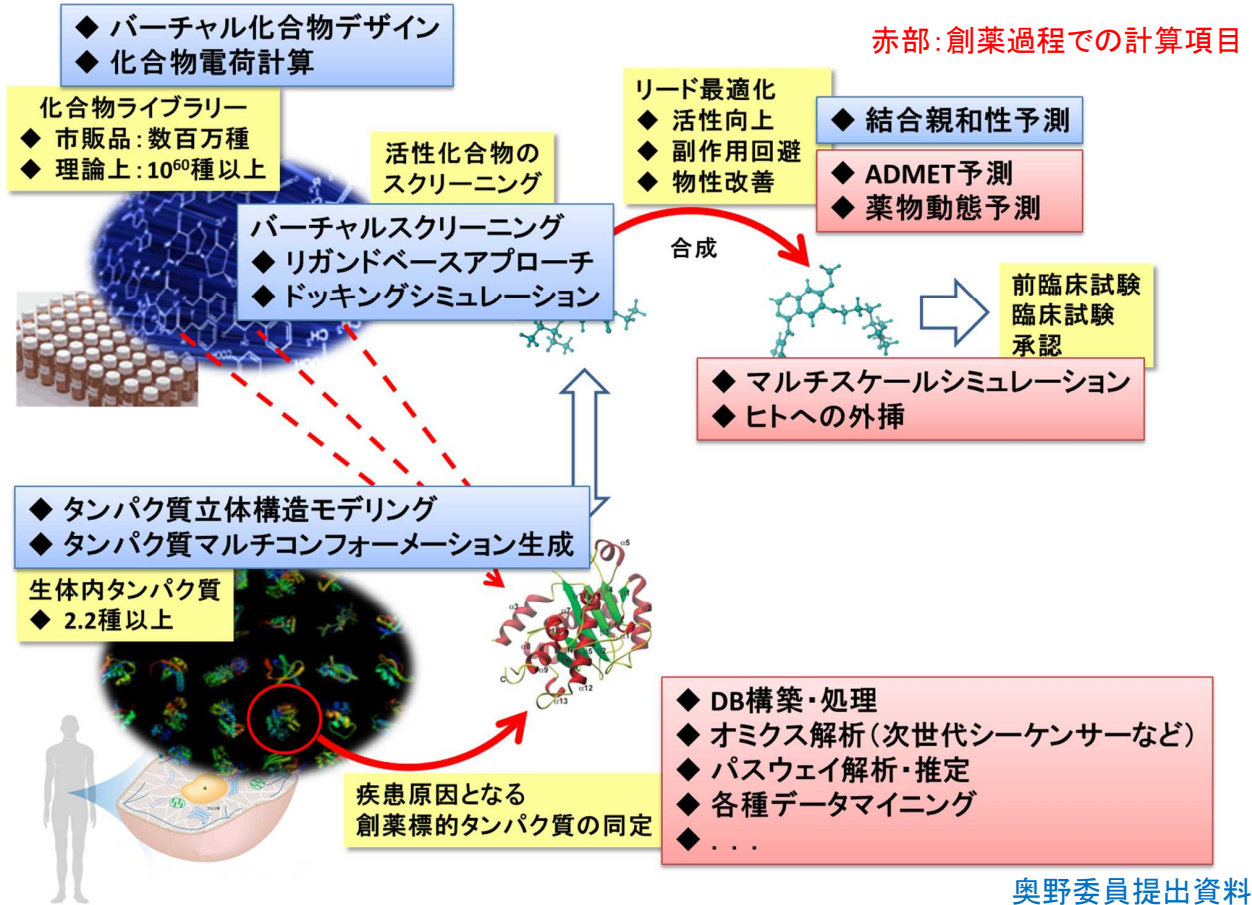
自動車産業で使われている主なソフトウェア

衝突	流体	振動・強度	製造
			
<ul style="list-style-type: none"> •LS-Dyna •Pam-Crash •Radioss 	<ul style="list-style-type: none"> •STAR-CD •Fluent •Power Flow •Scryu •Open Foam •Front Flow 	<ul style="list-style-type: none"> •Nastran (MSC,NX) •ABAQUS •ANSYS •ADVC •Actran 	<ul style="list-style-type: none"> •MAGMA •Mold Flow •3DTIMON •Auto Form •Forge

- これまで部品単品, アッシー部品の解析を行ってきており, 現在では車両全体の解析ができるようになっている。
- 2020年ごろには車と車, 車と人, 車と社会/環境についての解析を行いたいという要望がある。
- ハードウェアについても, パソコンのレベルのものから, PCクラス, 地球シミュレータ, そして「京」のように規模が大きくなっている。

産業利用例(創薬)

創薬(分子標的創薬)の流れ



産業利用されているアプリケーション(創薬)・その1

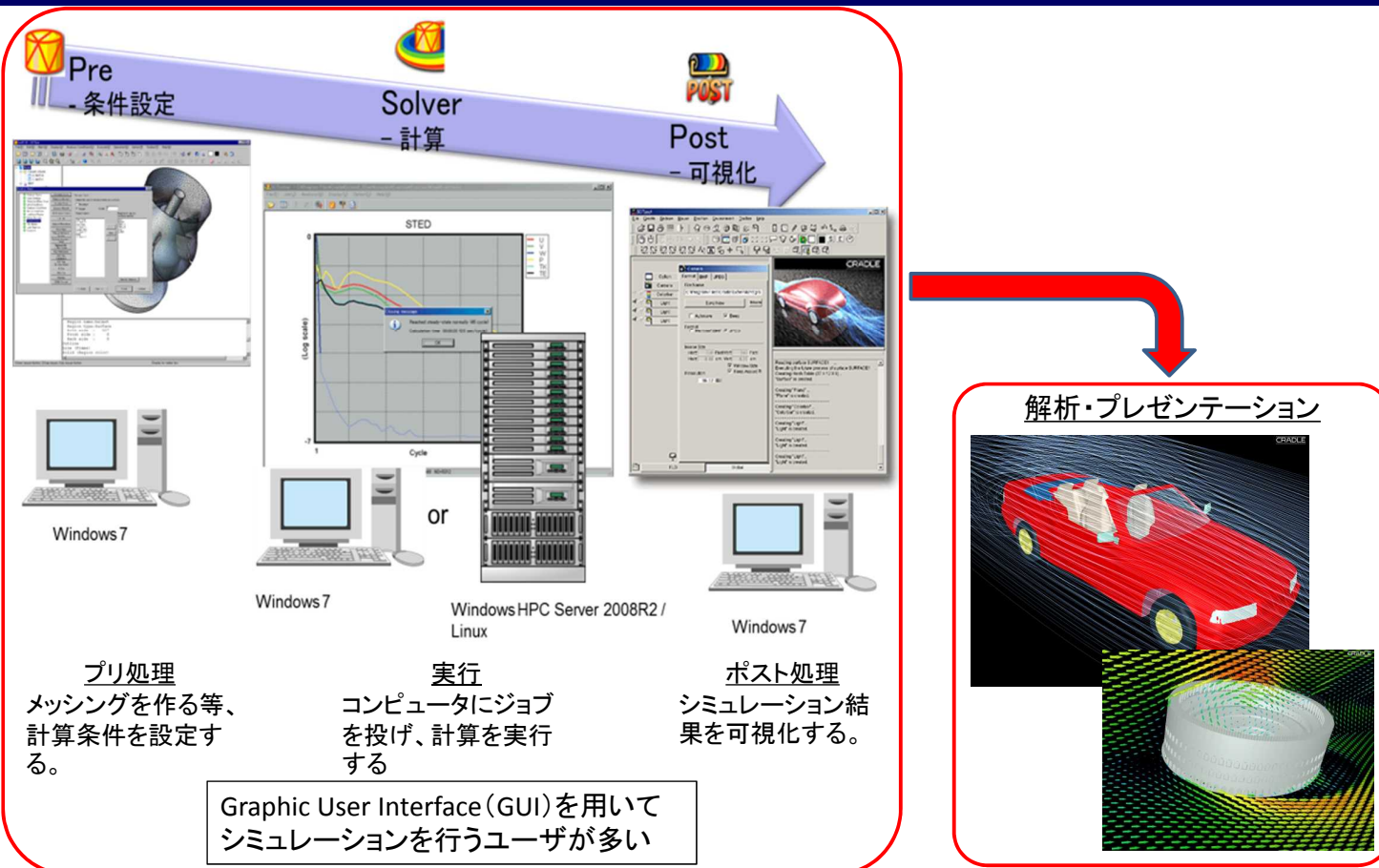
	アプリケーション	計算規模 (計算時間は汎用計算サーバー、数10~数100コアを目安)	実行の形態	ユーザの要望	その他
DB構築・処理	SQL(オープンソース)	最大10の7乗程度(数万遺伝子×数千サンプル)のエントリー数に対し、数秒から数分で検索	インタラクティブジョブ	現状では実験の手間やコストによるサンプル数の制約が大きいが、近い将来はサンプル数が急増する可能性大。よって、将来的に大規模データの高速処理のニーズが高くなる。	
オミクス解析(次世代シーケンサー(NGS)など)	各種バイオインフォマティクスツール(オープンソース、インハウス、市販)	最大10の7乗程度、または、NGSの場合は10の11乗程度(30億塩基×数百サンプル)のエントリー数に対し、数分から数時間で計算	シングルジョブ or バルクジョブ (10負荷のため比較的インメモリ容量大)	同上	理研・東大(宮野G)らにより「京」アプリを開発
パスウェイ解析・推定	バイオインフォマティクスツール(オープンソース、インハウス、市販)	最大10の4乗程度(数百遺伝子×数百サンプル)のエントリー数に対し、数時間から数日で計算	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	同上
各種データマイニング	各種バイオインフォマティクスツール(オープンソース、インハウス、市販)	最大10の7乗程度のエントリー数に対し、数分から数時間で計算	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	同上
パーチャル化合物デザイン	市販、インハウス	10の数10乗の化学構造発生が可能だが、メモリも問題や、発生後の計算(ドッキング計算など)の制約から、最大でも数万の発生する程度	ドッキングプログラムなどのプラグインツールとして実行することが多い	・発生後の計算(ドッキング計算など)の処理速度が高速になれば、発生する化合物数も増加できる。 ・発生した化学構造の実際に合成可能かどうかの推定も重要(現有の反応可能性予測は、予測精度が良いとは言えない。)	
化合物電荷計算	市販: Gaussian, MOPAC フリー: GAMESS, MOPAC ホモロジーモデリングツール	分子量1000以下の1化合物のHF/RESP電荷計算には数分から数時間程度、AM1電荷計算では数秒程度。	シングルジョブ or バルクジョブ	仮想スクリーニング目的などの大規模な化合物数の電荷計算には、簡易なGasteiger電荷やAM1電荷を利用しているが、計算速度がアップすれば、より正確なHF/RESP電荷計算の適用も可能になる。	
タンパク質立体構造モデリング	フリー: MODELLER, SWISS-MODEL等 市販: Mo, Pr等	1つのタンパク質について数秒から数分程度。GUIを使ってモデリングすることも多い	インタラクティブ		ホモロジーモデリングとは、そのものの結晶構造は無い場合に、類縁タンパクの構造を用いてモデリングする。
タンパク質マルチコンフォメーション生成	フリー: GROMACS 市販: AMBER等 国プロ: myPresto/cosgene	1つのタンパク質について数時間程度	バルクジョブ(数10ps~数nsのMD)	・長時間MDへの期待 ・Platypus-REIN(レプリカ交換法)などにも期待	この後、複数のコンフォメーションモデルに対するドッキング計算を必要とするため、計算負荷の問題から現状では当該計算を行わない事も多い。

産業利用されているアプリケーション(創薬)・その2

	アプリケーション	計算規模 (計算時間は汎用計算サーバー、数10~数100コアを目安)	実行の形態	ユーザの要望	その他
バーチャルスクリーニング: リガンドベースアプローチ	類似化合物検索(市販:Pi, Mo, Dr, Op, Ch等)	100万化合物のスクリーニングに、数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	現状では、最大でも数1000万化合物程度を対象とした計算規模であるが、計算速度がアップすれば、対象化合物数の増加や、複数の標的タンパク質に対する計算も可能になる。	
	ファーマコフォア検索(市販:Co, Li, Mo等)	100万化合物のスクリーニングに、数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	
	CGBVS(市販、フリー)	100万化合物のスクリーニングに、数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	京大(奥野G)らにより「京」アプリを開発
バーチャルスクリーニング: ドッキングシミュレーション	市販:Go, Gl, Mo等 フリー:AutoDock 国プロ:myPresto/sievgene	100万化合物のスクリーニングに、数時間から数日程度	シングルジョブ or バルクジョブ	同上	
結合親和性予測	QM/MM(国プロ:Platypus、市販:Q等)	10数化合物の計算に数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	・対象化合物数を増やすために、計算速度のアップが望まれる。 ・現場利用には、ドッキング計算の結果を開始構造とした計算が必須であるが、十分な検証がなされていない。	
	FMO(フリー:GAMESS)	10数化合物の計算に数時間程度	シングルジョブ or バルクジョブ	・対象化合物数を増やすために、計算速度のアップが望まれる。 ・現場利用には、ドッキング計算の結果を開始構造とした計算が必須であるが、十分な検証がなされていない。	神大(北浦G)らにより「京」アプリを開発
	MM-PB/SA(市販:AMBER等)	10数化合物の計算に数時間から数日程度	シングルジョブ or バルクジョブ	・対象化合物数を増やすために、計算速度のアップが望まれる。 ・現場利用には、ドッキング計算の結果を開始構造とした計算が必須であるが、十分な検証がなされていない。	
	MP-CAFEE(フリー:GROMACS)	10数化合物の計算に数週間程度(京をフル利用した場合は、5日程度)	シングルジョブ or バルクジョブ	・現場利用には計算速度の劇的アップが必須。 ・現場利用には、ドッキング計算の結果を開始構造とした計算が必須であるが、十分な検証がなされていない。	東大(藤谷G)、京大(奥野G)らにより「京」アプリを開発
ADMET予測	市販:Ad等 インハウス:回帰モデル、判別モデル	数10化合物の計算に数分程度	シングルジョブ	予測精度に難があり、現状では汎用的な利用されていない。	
薬物動態予測	市販:Ga, Di等	数11化合物の計算に数分程度	シングルジョブ	予備実験無しで、新規な化合物の予測が望まれる。	現在の方法論は、動物などを用いて初期パラメータを取得する実験が予め必要であり、実験無しで新規の化合物の予測はできない。
マルチスケールシミュレーション	—	—	—	・東大(杉浦G)らによる心臓シミュレーション(京アプリ)の薬物作用応用に期待。 ・心臓以外の臓器への適用にも期待。	
ヒトへの外挿	—	—	—	同上	

奥野委員提出資料より

解析作業の流れと環境のイメージ

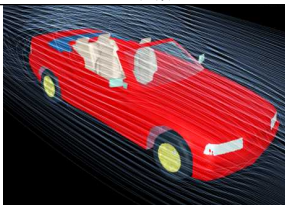
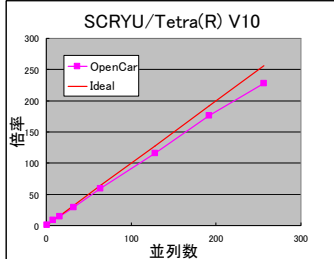


3. 産業利用アプリケーション開発の取組み

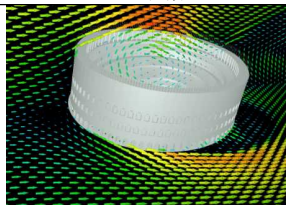
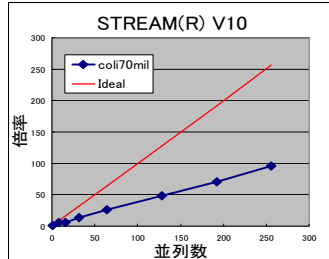
市販ソフトウェアの大規模化への対応例(ソフトウェアクレイドル)

並列処理対応例

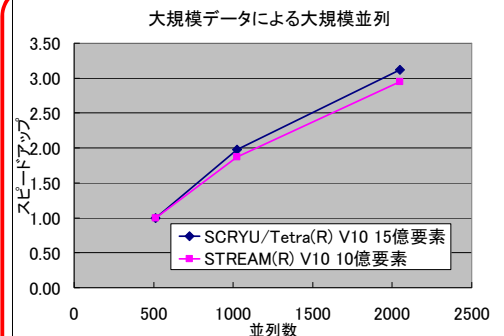
OpenCar (7000万要素、空力解析)



円形競技場 (7000万要素、風解析)



大規模化への対応例



Intel Xeon E5-2670 2.6Ghz x 2 x 256nodes,
Infiniband FDR, LINUX

256 cores(Xeon E5-2960(2.9GHz,
8 cores) x 2 CPUs x16 nodes)
Infiniband FDR, CentOS 6.2

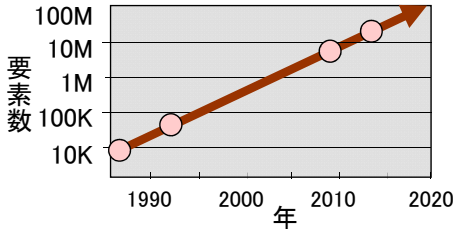
エクサスケール時代へ向けて

- ✓ CFDでは、まだまだリソースを必要とするテーマがある。
 - 音: 大規模 + Strong Scaling
 - 最適化: (中規模 + Strong Scaling) * バルクジョブ実行
 - キャビテーションなど複雑現象を含む全体解析
 - 構造との連成及び上記組み合わせなど
- ✓ 精度向上を目指して、実モデル(詳細モデル)・実環境(境界条件としての正確性)に近い解析のニーズがあり、大規模化の要因となっている。

市販ソフトウェアの大規模化への対応例(富士通)

利用ニーズ

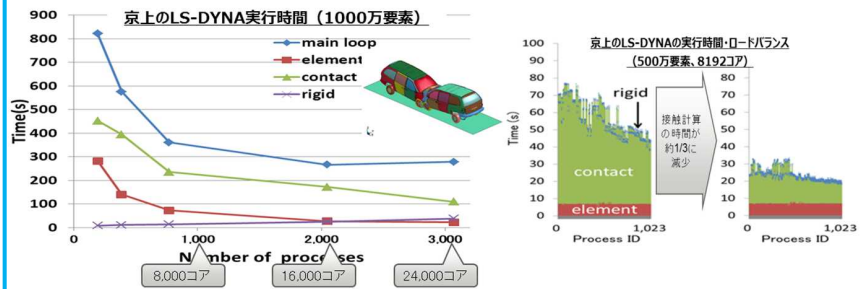
- モデルの大規模化・高精度化
 - 例:自動車衝突解析 ⇒高精度化
 - 安全規制の強化
 - 部品レベルのモデル化



- バルク実行(ロバスト設計、多ケース評価等)
 - 最大規模より1桁程度小さいモデルを、数百から数千ケース実行
- 解析ターンアラウンド時間短縮により、ものづくりプロセスが変わる
 - 「試作レス」(数日~数週間)から「設計時の実時間解析」(数時間~半日)

LS-DYNAの大規模・高精度解析ニーズに対する取組み

- 自動車衝突モデル(1000万要素)で、2万CPUコアまで性能向上(自工会、理研、開発元と共同で実施)
- さらなる性能改善に向けた課題
 - 「接触」計算における通信待ち時間増大
 - プレ・ポストの大規模モデル対応
 - 大規模計算機の利用環境
- 対策:「接触」計算部分の改善
 - 「接触」計算に非同期通信を導入
 - 開発元と共同で数千並列で性能改善を実証
 - アプリの新機能として組込まれユーザ定義により利用可能
- ユーザや開発元と連携し、数年かけて実証計算、実用適用を推進



大規模解析ニーズに応じて、先進ユーザや開発元と共同で、アプリケーションの整備を促進

富士通(株)提出資料より

国プロ開発アプリケーションの展開例

ADVENTUREシステム

自然物や人工物を丸ごと詳細にモデル化し、多様な並列分散計算機環境のもとで固体の変形や熱・流体の流れ等の力学解析から可視化、設計最適化までを行える汎用並列計算力学システム

ADVENTUREシステムの特徴

- 数百~数10億自由度メッシュによる丸ごと解析
- 数千~数万プロセッサの超並列計算機環境でも90%超の高並列効率
- 優れた移植性
 - 単一プロセッサ, PCクラスター, 超並列計算機(ES, ES2, 京など), 非均質計算機環境(ITBLなど)
 - 2005.3.10 Windows版公開(登録ユーザ数3,584人)
- ライセンスフリー/オープンソース
 - 登録ユーザー数7,791人
 - ダウンロードされたモジュール数38,359本
 市販バージョン ADVENTUREcluster (アライドエンジニアリング)
 - IEEE/ACM SC2006 Gordon Bell Award finalist
 - 2008年日本機械学会賞(技術)
 - 2009年科学技術分野の文部科学大臣表彰
 - 2013年日本計算工学会賞・技術賞
- 拡張性と保守性:モジュール構造とIOの標準化、Commodity技術

ADVENTURE vs ADVENTUREcluster

ADVENTURE(国プロ開発アプリケーション)

- ◎コード再利用
- ◎超並列対応
- △汎用性
- ◎チャレンジングな研究課題へ挑戦(ペタ・エクサ対応、連成、国家PJ)
- △開発の計画性

研究成果・ノウハウを無料で提供

モデル作成、解析、可視化を有料で提供

ADVENTUREcluster(市販バージョン)

- ×コード再利用
- ◎超並列対応
- ◎汎用性
- 国PJ対応
- ◎直近の産業界ニーズを重視
- ◎開発の計画性

京やエクサが産業界ニーズにまで高まらない間は、国の動機づけ及び支援が必要

オープンソース・ソフトウェアの展開例

OpenFOAMの特徴

- 豊富な機能
 - 外部ツールへのデータ変換
 - CADからのメッシュ自動生成
 - 多様な物理モデル
- 柔軟な拡張性
 - C++によるオブジェクト指向のコード設計
- MPIによる並列化
- GPLによるライセンス
- 国際的なユーザーの活動が活発
 - 欧米を中心としたユーザー会
 - Web上での情報共有 (ForumやOpenFOAM Wikiなど)
 - 日本では: オープンCAE学会
 - 2013年、アジア太平洋ユーザー会の組織

OpenFOAMの現状

- ◆ 研究での利用に加えて、商用化されたものの利用も進みつつある
- ◆ ユーザーによる開発や検証、サポートが加速すれば、OSSの強みとなりうる

期待されている役割	OpenFOAMの利点
商用ソフトの代替	無償で利用可能
超並列・大規模解析	最適化、ライセンス料不要
独自の機能拡張	拡張性
設計・解析システムへの組み込み	拡張性、多機能性

利用例

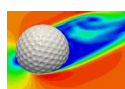
- Volkswagen, Audi (自動メッシュ生成を含めた空力・熱解析ツール)
- 清水建設 (1億メッシュ規模での津波解析や京による10億メッシュ規模の解析)
- 日立 (高精度の燃焼解析ツールの開発)
- その他、学会発表などではIHI、三井造船、BASF、日東電工など

OpenFOAMの課題

- ◆ 商用ソフトと比較したときのサポート不足、ロバスト性の低さなどによる導入・トレーニング・検証コストが高い

- 発散しやすい
 - 自力で調べないと情報がない
 - 機能が不十分なまま
 - バグが潜んでいる
- ➡ 「無償だから」というだけの理由で安易に使えるものではない

みずほ情報総研(株)提出資料より

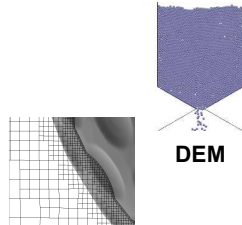


乱流解析



二相流VOF

燃焼



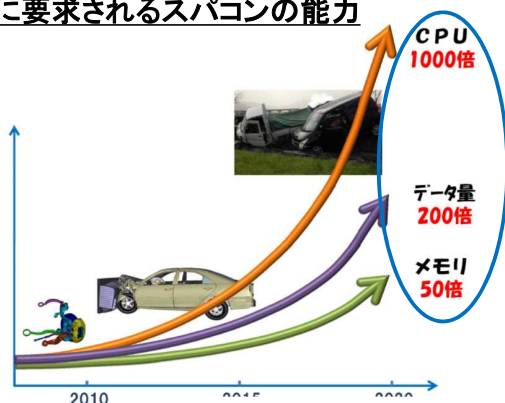
DEM

CAD適合メッシュ

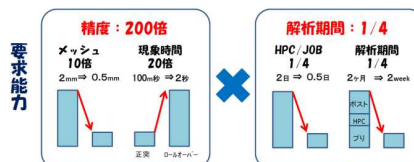
4. スーパーコンピュータの産業利用の展望

スーパーコンピュータの産業利用の展望(自動車産業)

2020年ごろに要求されるスパコンの能力



『精度向上』と『期間短縮』の両立

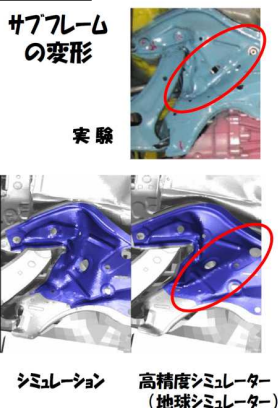


必要能力の爆発的な増大

CPU: 1000倍 データ量: 200倍 メモリ: 50倍

精度200倍, 解析期間1/4を実現するための必要能力

シミュレーションの成功例



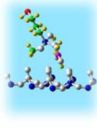
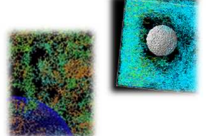
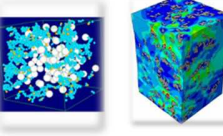
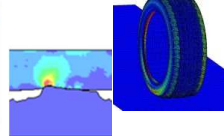
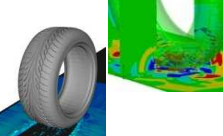
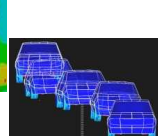
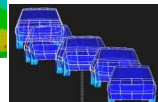
- 地球シミュレータを用いた高精度シミュレーションにより, 実験結果を再現
⇒ 高精度シミュレーションの重要性が実証された

将来計算が望まれる系



- 全系丸ごとシミュレーションなどの実行が望まれる
- 安全性も含めた, 社会とのかかわりや環境に関連したシミュレーションが増える (流体・強度・衝突・振動シミュレーション)

スーパーコンピュータの産業利用の展望(材料)

スケール	nm	~	μm	~	mm	~	m			
	反応・結合	破壊起点成長	ゴム物性	タイヤ単体特性	タイヤ路面環境	タイヤノイズ	タイヤ車両特性			
										
	ファイラー界面挙動	ファイラー分散ネットワーク		路面接触挙動						
現状	MO	全原子MD	MD	粗子化MD	構造FEM	熱連成	流体FVM	流体構造連成	音響FEM	機構
	「京」での大規模MD									
見通し	<ul style="list-style-type: none"> ・予測精度の向上 → 詳細化による精度向上 → 大規模計算 ・予測性能の拡大 → 長時間現象の表現 ・予測範囲の拡大 → 連成現象の表現 ・多くの計算によるスクリーニング → 速度向上、計算安定化 ・モデリング、結果処理の簡易化、自動化 									

今後の産業利用アプリケーションに望むこと

	開発のあり方	利用のあり方
材料	<ul style="list-style-type: none"> ・マルチスケール／マルチフィジックスに対応したアプリケーションの開発 →産学官が目標・目的を共有し、問題に対し速やかに取り掛かれる開発 ・放射光施設などと連携し、実験検証まで含めた開発 	<ul style="list-style-type: none"> ・サポート、コンサルティング体制の充実 ・超並列化に対応した価格設定 ・産業目的に応じた計算機選択自由度の拡大
構造 流体 熱 音響	<ul style="list-style-type: none"> ・産業界が現場で有効利用できる開発目標の設定 →定番市販ソフト等のベンチマークから、差別化できる性能、機能等の明確化 →マルチフィジックスに対応したアプリケーションの開発 ・産業界の現場での課題を対象としたアプリケーションの開発 →産学官連携での開発 	

住友ゴム工業(株)提出資料より

参考 HPC産業利用に関するこれまでの提言

理研次世代スパコン開発実施本部共用体制検討WG報告書要旨

アプリケーション(ソフトウェア) 次世代スパコン向けにチューニングされたアプリケーション

チューニングされることが保証されているソフトウェア

- ✓ “GC”ソフトウェア
- ✓ イノベーション基盤ソフト
- ✓ CRESTなどで次世代スパコン向けに開発されたもの

- 産業界のさまざまな要求に対しては十分でない
- 従来、産業界で使ってきたソフトウェアとの親和性がない

- 成功事例を積み重ねて有効性／実用性を実証
- 普及・教育の推進

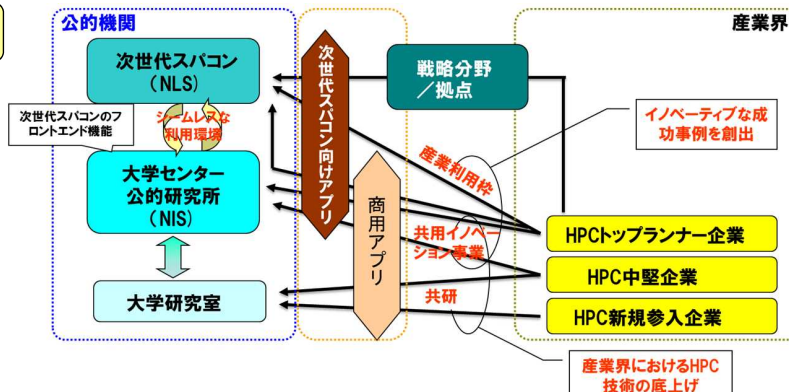
今後チューニングしていかなければならないソフトウェア

- ✓ インハウスソフト(各社自主開発)
- ✓ 商用ソフトウェア

- 次世代スパコンへの移植に技術的な壁
- ライセンス問題がある
- 商用ソフトが搭載できればHPC新規参入企業も利用

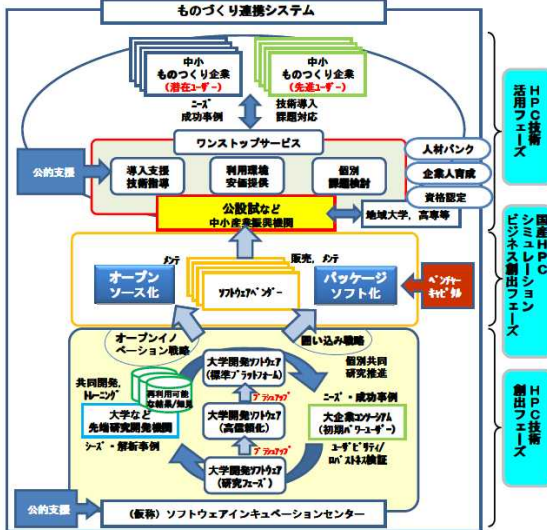
- 移植に対する十分な技術支援
- ライブラリの提供
- ソフトベンダの協力

シームレスな利用環境



産業競争力懇談会(COCN)報告書要旨

COCN HPC応用研究会報告書(平成23年度)

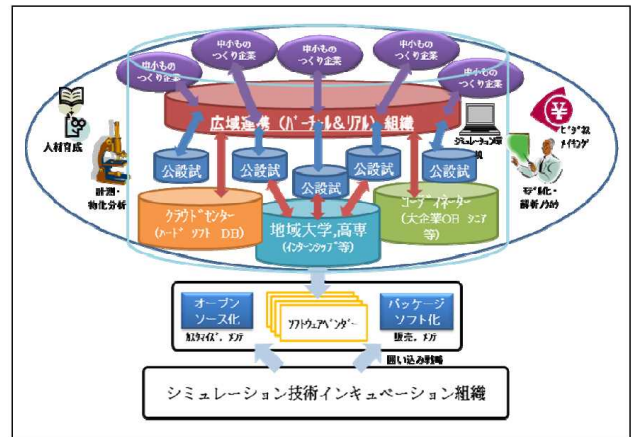


アンケート・ヒアリングをもとにシミュレーション技術の活用の関する意識・問題点を調査

- シミュレーション技術の重要性・可能性は認識
- シミュレーション技術をどう活用するか、ノウハウ・人材等が十分ではない。
- ソフトウェアの自律的成長を可能とする場とノウハウを提供する場の連携システムの提案

<http://www.cocn.jp/common/pdf/thema48-L.pdf>

COCN HPC応用研究会報告書(平成24年度)



次世代クラウドシステムによるものづくり連携プラットフォーム

公設試へのヒアリングをもとにした中小企業での活用・普及促進策の検討

- 柔軟なクラウドシステムにおいて、①課題解決向けモデル化技術、②知識継承実現の人材育成・活用システムを実装
- クラウドシステムに合致したソフトウェアライセンス、自律的成長システム、実験・計測との連携

<http://www.cocn.jp/common/pdf/thema51-L.pdf>

伊藤委員提出資料より