

# 次世代スーパーコンピュータ作業部会報告書

—次世代スパコンの共用促進と研究機能の構築に向けて—

平成20年7月

科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 情報科学技術委員会

次世代スーパーコンピュータ作業部会

## 目次

はじめに .....	1
I. プロジェクトの進捗状況 .....	3
1. プロジェクトの概要 .....	3
2. プロジェクトの進捗状況 .....	3
II. 次世代スパコンの共用のあり方 .....	5
1. 制度の概要 .....	5
2. 基本方針の見直し .....	5
3. 次世代スパコンの共用のあり方 .....	6
(1) 基本的な考え方 .....	6
(2) 次世代スパコンを利用した研究 .....	6
(3) 次世代スパコンにおける研究支援 .....	8
(4) 研究成果の取扱い等 .....	10
(5) 次世代スパコンを活用した人材育成 .....	10
(6) 情報発信及び理解増進等 .....	11
(7) 関係機関との連携 .....	12
III. 次世代スパコンにおける研究機能の構築 .....	13
1. 戦略的利用のあり方 .....	13
(1) 基本的な考え方 .....	13
(2) 具体的な制度設計 .....	13
2. 研究機能の充実 .....	15
(1) 共通基盤的な研究開発 .....	15
(2) 連携体制の構築等 .....	15
3. 次世代スパコンにおける諸機能の有機的な形成 .....	16
参考資料	
1. 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト .....	18
2. 戰略的研究開発プログラムのイメージ .....	24
3. 次世代スパコンにおける諸機能の構築 .....	25
附属資料	
附属資料1 次世代スーパーコンピュータ作業部会の設置について .....	26
附属資料2 審議経過 .....	29

## はじめに

計算科学技術は、科学技術の諸分野において、実験や試験、観測が困難な現象の解明、技術開発における信頼性や精度の向上などに大きく寄与する、今後の科学技術の発展や、我が国の国際競争力の向上のために極めて重要である。このような認識のもと、第3期科学技術基本計画（平成18年3月閣議決定）においては、次世代スーパーコンピューティング技術を国家的な大規模プロジェクトとして、国家的な目標と長期戦略を明確にしつつ、基本計画期間中に集中的に投資すべき基幹技術（国家基幹技術）であると位置付けている。

これを踏まえ、国（文部科学省）においては、平成18年度から、「次世代スーパーコンピュータプロジェクト」を開始し、平成24年の完成を目指した次世代スーパーコンピュータ（以下、「次世代スパコン」という。）の開発、及び次世代スパコンを最大限利活用するソフトウェアの開発等を進めている。

一方、本プロジェクトがその目的を達成するためには、これらの研究開発を着実に進めるとともに、次世代スパコンの完成後をにらみ、その利活用のあり方を検討することが重要である。特に、次世代スパコンについては、共用施設として産学官の多様な研究者等の利活用に供せられることを念頭に、利用者にとって使いやすく、かつ優れた成果が創出される仕組み作りについて検討する必要がある。また、世界最先端・最高性能の計算機として、計算科学技術の飛躍的な発展や我が国の国際競争力の強化に貢献していくためには、次世代スパコンを中心とした研究開発等の機能形成のあり方についても検討することが必要である。

このような認識に立ち、科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 情報科学技術委員会では、平成19年11月に同委員会の下に「次世代スーパーコンピュータ作業部会（以下、「本作業部会」という。）」を設置し、次世代スパコンを中心とした教育研究のグランドデザイン、特に共用の基本的考え方及びこれを踏まえた機能形成のあり方等について検討を行ってきた。

この報告書は、本作業部会におけるこれまでの審議の結果をとりまとめたものである。審議に当たっては、専門家からの意見聴取を行うとともに、文部科学省が実施した「特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針」に対する意見募集の結果なども参考とした。

報告書においては、後述のとおり、次世代スパコンは、多くの研究者等に活用

されるとともに、優れた成果が創出される環境であるべきとの観点から、多様な研究者のニーズに応える利用形態(一般的利用)とともに、社会的・国家的見地から特定分野の研究を戦略的・重点的に推進する「戦略的利用」の考え方を導入することが必要である旨、提言している。

また、我が国の計算科学技術の飛躍的な発展を図るためにには、将来のこの分野を担う人材の育成を着実に進めることが重要であるとともに、次世代スパコンを中心として、研究機能を構築することはもとより、産業利用や人材育成などの諸機能を全体として有機的に形成することが必要であることも指摘している。

次世代スパコンが、その運用開始後、速やかに優れた成果を創出していくためには、運用開始までの準備期間における取組が極めて重要である。

文部科学省及び関係機関においては、この点を十分認識しながら、関係府省等とも連携しつつ、今後の検討・準備を進めていくことが必要である。特に、本報告書においても指摘したように、次世代スパコンを支える人材の育成など研究支援体制の構築等には一定の時間を要することから、今後、こうした課題については速やかな取組が必要である。

本報告書が、次世代スーパーコンピュータプロジェクトの実現はもとより、将来のスーパーコンピュータの開発を含めた我が国の計算科学技術の継続的な発展に寄与することを期待したい。また、大型放射光施設(SPring-8)や大強度陽子加速器施設(J-PARC)をはじめとした我が国が有する先端的かつ大型の研究施設とともに、我が国の科学技術のフロンティアを切り拓く重要な研究開発基盤として、その期待される機能を十分に發揮することをあわせて期待する。

## I. プロジェクトの進捗状況

### 1. プロジェクトの概要

次世代スーパーコンピュータプロジェクトは、計算科学技術をさらに発展させ、広汎な分野の科学技術・学術研究及び産業における幅広い利用のための基盤を提供することにより、我が国の競争力強化に資するとともに、材料や医療をはじめとした多様な分野で社会に貢献する研究成果を挙げること、並びに、我が国において、継続的にスーパーコンピュータを開発していくための技術力を維持及び強化することを目的とし、平成18年度に開始されたプロジェクトである。具体的には、

- ① 世界最先端・最高性能の「次世代スーパーコンピュータ」の開発・整備
- ② 次世代スパコンを最大限利活用するためのソフトウェア(ナノテクノロジー分野及びライフサイエンス分野のグランドチャレンジアプリケーション)の開発・普及
- ③ 上記①を中心とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点(COE)の形成

を産学官の密接な連携の下、一体的に推進するものである。

### 2. プロジェクトの進捗状況

本プロジェクトは、開始から2年が経過したが、これまでのところ概ね順調に進展している。現在までの進捗状況及び今後の予定は以下のとおりである。

#### ①立地地点の決定

平成19年3月、開発主体である理化学研究所(以下、「理研」という。)が、客観的・科学的な観点から立地地点を検討するために設置した立地検討部会の評価結果に基づき、神戸市を立地地点とすることを決定した。

#### ②次世代スパコンのシステム構成

平成18年4月、理研においてシステム構成案の検討を開始し、平成19年4月に富士通及びNEC・日立の提案を基礎に、以下の特徴を有するシステム構成案(以下、「理研案」という。)を作成した。

- ・スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システムであり、あらゆるシミュレーションに対応可能な高い汎用性
- ・計算能力に関する高い拡張性
- ・大学や研究機関向けの高性能な計算機への展開性

これを受け、科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 情報科学技術委員会の下に設置された次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会（主査：土居範久 中央大学理工学部教授）において、理研案の妥当性等を評価した結果、当該案は、性能目標の達成、拡張性、展開性、技術力の強化への寄与等の観点から適切なものであり、引き続き研究開発を進めるべきとの報告書を平成19年6月にとりまとめた。

また、総合科学技術会議 評価専門調査会（会長：奥村直樹総合科学技術会議議員）においても、文部科学省の評価結果を概ね妥当とした上で、引き続き研究開発を推進すべきとの評価報告書を平成19年9月に決定した。

これらを踏まえ、理研はシステム構成を正式決定し、現在、演算部の詳細設計を実施している。平成21年度初旬に詳細設計を完了し、その後、試作・評価の段階に入る予定である。

### ③アプリケーションソフトウェアの開発

次世代スパコンを最大限利活用するためのソフトウェア（グランドチャレンジアプリケーション）の開発については、ナノテクノロジ一分野及びライフサイエンス分野を対象とした取組を展開している。

ナノテクノロジ一分野については、分子科学研究所を中心核拠点として、ナノ電子デバイスの設計やバイオ燃料生成用の酵素設計等に資するシミュレーションソフトウェアの研究開発を実施している。また、ライフサイエンス分野については、理研を中心核拠点として、たんぱく質の反応や、細胞・臓器の働きの詳細な解析により、製薬・医療に資するシミュレーションソフトウェアの研究開発を実施している。

### ④施設整備

次世代スパコン施設の整備については、計算機棟は平成20年3月に設計を完了して建設に着手しており、平成22年5月に完工の予定である。また、研究棟については平成21年1月に設計を完了し、建設に着手する予定である。

## II. 次世代スパコンの共用のあり方

### 1. 制度の概要

次世代スパコンは、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律（平成6年6月29日法律第78号、以下、「共用法」という。）に基づき、開発・整備・運用されることとなっている。

共用法は、大規模な研究施設の共用を促進することにより、研究等の基盤強化や研究者等の多様な知識の融合等をはかり、もって科学技術の振興に寄与することを目的とする法律であり、現在の対象施設は大型放射光施設（SPring-8）と現在整備中のX線自由電子レーザー（XFEL）及び次世代スパコンである。

次世代スパコンの開発及び整備・維持管理は理研が行うこととなっているが、利用者の選定や利用者への支援に関する業務（以下、「利用促進業務」という。）については、次世代スパコンが科学技術の広範な分野における多様な研究等に活用される施設であることに鑑み、利用促進業務が公平かつ効率的に行われるよう、第三者機関が実施することが適当とされている。このため、一定の要件を満たす機関の登録を求め、当該機関（以下、「登録機関」という。）に利用促進業務を行わせることを想定している。

国（文部科学省）は、共用法に基づき、理研、登録機関、施設利用者が各自実施する共用の促進のための活動の基本的な方針を明らかにするため、共用の促進に関する基本的な方針（以下、「基本方針」という。）を定めることとされている。

### 2. 基本方針の見直し

文部科学省においては、平成18年7月に現行の基本方針を作成したが、基本方針は次世代スパコンの運用開始後を視野に入れて策定するものであることから、広く学会・研究機関等から意見を募集し、基本方針に反映させていくこととした。

平成18年7月から平成20年3月まで実施された上記の意見募集に対して、17の学会・研究者コミュニティ等から意見が提出された。これらの意見については本作業部会でも紹介され、その内容も十分踏まえて検討を行ってきたところであ

る。

今後、文部科学省における基本方針の見直しが予定されるが、見直しに当たっては、本報告書が以下に示す戦略的利用や一般的利用、研究支援等の考え方を基本方針に確実に反映するよう期待する。

### 3. 次世代スパコンの共用のあり方

#### (1) 基本的な考え方

次世代スパコンは共用法に基づき運用される研究施設であり、その利活用のあり方を考えるにあたっては、次世代スパコンの有する以下の特徴を踏まえることが必要である。

- ① 次世代スパコンは共用法に基づき、科学技術の広範な分野における多くの研究者等の利用に供される施設として運用されること
- ② 次世代スパコンは世界最先端・最高性能の計算機(10ペタフロップス級の計算能力、スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システム)であること

このような特徴を有する次世代スパコンが、我が国の科学技術の振興や国際競争力の向上に寄与していくためには、何よりも研究者等にとって魅力ある施設となり、科学技術の広範な分野において多くの研究者等に活用されることが重要である。また、次世代スパコンを研究開発基盤として積極的に活用し、優れた成果が創出される仕組みや環境を構築していくことが必要である。

このような観点に立ち、次世代スパコンの整備及び運営等を行っていくことが必要である。

#### (2) 次世代スパコンを利用した研究

次世代スパコンは、世界最先端・最高性能の計算機であり、この計算機の能力を最大限に活用することによってはじめて可能となる研究課題が存在する。このため、次世代スパコンにおいては、研究課題の学術的・社会的価値を前提として、その特徴を活かすような課題を優先して実施することが適当である。

一方、次世代スパコンの能力を最大限に引き出すアプリケーションの開発や研究者等の育成には、より並列度の小さな計算機による試行などステップバイステップの取組が不可欠である。こうした課題に対しては、次世代スパコンのみならず、大学や公的研究機関等が有する計算機との連携も含めて対応することが必要である。

また、産業界の研究者等による利用については、利用しようとするアプリケーションや研究支援に対するニーズ、利用に際しての情報管理の徹底、研究成果の取扱い等の面で、大学や公的研究機関等の研究者とは異なるニーズが存在する。次世代スパコンは産学官の多様な研究者等が利用する共用施設として、産業利用の積極的な促進が求められていることから、こうした特性を踏まえ、産業利用に適切に対応した運営を行っていくことが必要である。

上記の考え方を踏まえ、次世代スパコンの利用のあり方としては、以下に示すような社会的・国家的見地から取り組むべき課題に係る利用（戦略的利用）、科学技術の広範な分野における多様な研究者のニーズに応える利用（一般的利用）等を可能とする仕組みを設けることが必要である。

#### ①戦略的利用

戦略的利用は、国（文部科学省）が戦略分野及び戦略目標を設定し、選定された者（戦略機関）に対して次世代スパコンの優先的な利用を認めること等により、当該戦略分野の研究を重点的・戦略的に推進するものである（詳細は13ページ参照）。

#### ②一般的利用

一般的利用は、幅広い分野を対象として、基礎・応用・開発といった研究フェーズや学術研究・営利目的研究等の研究目的を限定することなく、定期的に利用課題を募集し、科学的観点、産業的観点、緊急性等を考慮しつつ、適切に審査を行い、選定された課題に対して、次世代スパコンの利用を認めるものである。

一般的利用においては、産業利用を促進するための産業利用枠や人材育成のための教育利用枠等を設定することが必要である。

研究課題の具体的な選定は、登録機関が選定委員会の意見を聞きつつ行うことになるが、公正な課題選定が行われるよう、研究分野別に審査を行う組織を整備する等、適切な体制を構築するとともに、手続きの透明性を確保することが必要である。

③このほか、次世代スパコンの利用に関しては、設置者である理研に、一定時間次世代スパコンの利用を認めることにより、次世代スパコンの高度化など施設運用の効率化や利用者の利便性の向上のための研究等を実施することが必要である。

具体的な利用区分や計算機資源の配分の考え方等については、上記の基本的な考え方に基づき、利用者のニーズや次世代スパコンの具体的運用形態等を踏まえつつ、今後、文部科学省、登録機関において検討することが適当である。

### (3) 次世代スパコンにおける研究支援

次世代スパコンは高い汎用性を有するものの、これまでにない超高並列の計算機である。このため、次世代スパコンを利用する研究者等がその能力を最大限に活用するためには、利用者への支援業務を行う登録機関に、計算科学技術に関する専門的知見を有する専任の職員を配置し、きめ細かい研究支援を行うことが不可欠である。

登録機関に期待される研究支援業務は、概ね以下の3つに整理することができる。

#### ① 利用者への情報提供

- ・ 施設や施設利用に関する最新情報の提供
- ・ 次世代スパコンのシステムに関する技術情報の提供、利用講習会の実施等

#### ② 利用に関する相談及び利用支援

- ・ 研究課題の申請の前段階での技術的相談
- ・ 機器の操作等に関する支援
- ・ アプリケーションの実行やデータ処理、可視化等に関する支援
- ・ 産学官の共同研究等に関するコーディネート
- ・ 研究成果の公開や理解増進活動 等

#### ③ アプリケーションの調整のための支援

- ・ アプリケーションの調整を円滑に行うために必要な技術情報の提供、技術

## 的指導・助言、講習会の実施 等

利用者が次世代スパコンを活用した研究を行う際に、そのアプリケーションが次世代スパコンで高い実効性能を発揮するとともに、計算機資源を効率的・効果的に活用するためには、当該アプリケーションを次世代スパコンのハードウェアやライブラリなどの計算環境に最適化すること(アプリケーションの調整)が必要となる。

この調整は、基本的に利用者の責任において実施することが適当であるが、登録機関においては、アプリケーションの調整が円滑に行われるよう、必要な技術情報の提供や技術的指導・助言、講習会の実施等の支援を適切に行うことが必要である。

また、アプリケーションの調整のための支援等をより広範かつきめ細かく行うため、登録機関において申請前の利用者に対して、利用に向けての技術的相談・助言を行ったり、大学の情報基盤センター等においても次世代スパコンに関する情報の提供や助言等の支援を行うこととするなど、幅広い支援体制を構築することが必要である。

さらに、産業界の利用にあたっては、次世代スパコンの利用目的や利用しようとするアプリケーションが大学・公的研究機関等と異なり得ることから、産業界の要望や具体的な利用形態等に応じて、登録機関においてアプリケーションの調整等の支援をより手厚く行うなど、産業利用を促進するための適切な支援体制を構築することが必要である。今後、こうした基本的な方向を踏まえ、産業利用枠のあり方も含めた具体的な検討を行うことが必要である。

なお、アプリケーションの中でも、その適用範囲が広く、次世代スパコンにおける利用許諾がなされており、かつ次世代スパコンの性能や特性に応じたアプリケーションの調整がなされているもの(例えば、現在、開発を進めているグランドチャレンジアプリケーション。なお、革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発等によって開発されたアプリケーションについても、今後、次世代スパコン向けに改良された場合は、これに該当する。)については、産業界をはじめとする多様な利用者が利用できるよう、次世代スパコンでその提供を行うとともに、利用に際しての指導・助言等必要な支援体制を構築することが必要である。

#### (4) 研究成果の取扱い等

次世代スパコンが我が国の科学技術の振興や国際競争力の向上に寄与していくためには、本施設を利用した研究の成果を広く社会に還元することが重要であり、このためには、研究成果については、研究期間の終了後、公開することを基本とすることが適当である。ただし、特許の取得や企業活動に係わる課題その他非公開とすることが適當な課題については、一定期間の公開の猶予や成果の専有の取扱いを認めることが必要である。

次世代スパコンにおける利用料金のあり方については、成果を専有する場合には原則として料金を徴収することが適當であるが、今後、計算機資源の利用量や課題実施の優先度等を考慮し、成果を公開する場合の取扱いも含めて、適切な料金体系を設定することが必要である。具体的には、次世代スパコンの利用の枠組みや施設の運用経費等の検討を踏まえつつ、平成21年度を目途に定めることが適當である。

#### (5) 次世代スパコンを活用した人材育成等

計算機を活用したシミュレーション研究や、計算機に関連する研究開発等の計算科学技術は、科学技術における広範な分野で活用される基盤技術であり、今後とも我が国の科学技術の発展や国際競争力の向上を図っていくためには、計算科学技術を担う人材の育成を着実に進めていくことは、極めて重要な課題である。

次世代スパコンにおいては、その有する性能を活用して人材育成に積極的に貢献していくことが重要であり、研究者を目指す学生等に対する教育や、高度な専門性を有する企業等における研究者・技術者の育成等に取り組むことが必要である。

具体的には、次世代スパコンの教育利用枠を活用して、学生や若手研究者に次世代スパコンを直接利用する機会を提供するとともに、次世代スパコンの利用と関連した特色ある人材育成の取組を奨励する人材育成支援プログラム等を実施することが必要である。

また、戦略機関は大学等と連携して、学生の研究への参画や研究者等による研究指導、連携講座の設定等を行うことにより、人材育成に積極的に取り組むことが必要である。

企業等の研究者・技術者の育成については、企業等が次世代スパコンを利用して行う研究活動を通して行われることが想定されるほか、利用者支援の一環として、登録機関が技術講演会やセミナーを実施することなどが期待される。また、企業等による次世代スパコンの利用に際して、学生を長期間当該企業に派遣するインターンシップ制度の創設も検討することが必要である。

なお、人材育成に関しては、次世代スパコンを活用した人材育成にとどまらず、我が国全体を見据え、将来の計算科学技術を担う人材の育成を着実に行っていくことが重要である。現在、一部の大学において、シミュレーションをはじめとする計算科学技術に関する実践的な教育活動が行われているほか、体系的な教育プログラムや計算科学に関する新たな教育研究組織の検討が行われている。今後、多くの大学等にこのような動きが広がることが期待される。こうした状況も見ながら、次世代スパコンにおける人材育成や、我が国全体としての計算科学技術を担う人材の育成の具体化については、人材の受け皿の拡充も含めて、今後、さらに検討を進めが必要である。

#### (6) 情報発信及び理解増進等

次世代スパコンがより広範な分野の研究者等に利用されるためには、本施設に係る情報が適時・適切に提供されることが重要である。このため、次世代スパコンの利用に係る情報や研究成果等を、各種広報誌やホームページ、シンポジウム、学会等を通じて、積極的に情報発信するとともに、利用者との情報交換等を通じて、利用者ニーズをきめ細かく把握することが必要である。

次世代スパコンは、国費を集中的に投資して開発・整備を行うものであり、その効果的な活用のためには幅広い国民の理解と支持が不可欠である。このため、本施設の重要性や研究成果等を可視化し、映像等によるわかりやすい形で発信することが必要であり、また、小・中学生や高校生等の青少年を対象に、未来の科学者を育成する観点から、大学等と連携した理解増進活動や教材の作成・提供等を行うことが必要である。

また、広く产学研官の研究者等の参加を得て、「次世代スーパーコンピュータ利用推進フォーラム(仮称)」を開催するなど、次世代スパコンの利用促進と計算科学技術の普及・振興を図るための全国的な活動を積極的に展開することが必要である。このような取組においては、次世代スパコンに関連した既存のユーザー

コミュニティの積極的な対応が期待される。

#### (7) 関係機関との連携

次世代スパコンは我が国の計算機資源の頂点に位置づけられる施設であるが、アプリケーションの調整や研究者の技能向上、計算機資源の効率的・効果的な活用を図るためにには、大学や公的研究機関等が有する計算機資源との適切な役割分担と有機的な連携を図ることが不可欠である。

特に、現在、大学の情報基盤センター等に演算性能が100テラフロップスを超える計算機が導入されつつあり、これらの機関や計算機資源との積極的な連携を図ることは、単に次世代スパコンの活用の観点から必要なだけでなく、我が国の計算科学技術をはじめとした科学技術全体の振興を図る上でも重要である。

このため、例えば、以下のような取組を念頭に置きつつ、今後、関係機関等との具体的な連携方策について、検討を本格化させることが必要である。

- ① 次世代スパコンにおいて利用するアプリケーションの開発に既存の大型計算機を活用すること
- ② 次世代スパコンと関係機関が有する計算機の資源量や特徴等を考慮し、利用者のニーズに応じた最適な計算環境を提供すること
- ③ 大学の情報基盤センター等において次世代スパコンに関する技術情報や技術的助言を行うこと
- ④ 計算機を活用したシミュレーション研究を行う計算科学や計算機に関連する研究を行う計算機科学などのカリキュラムを有する大学との連携により、効果的な人材育成を行うこと 等

### Ⅲ. 次世代スパコンにおける研究機能の構築

#### 1. 戦略的利用のあり方

##### (1) 基本的な考え方

次世代スパコンは世界最先端・最高性能の計算機であり、その有する性能を最大限活用することにより、様々な研究分野において画期的な成果を創出し、計算科学技術の飛躍的な発展を図ることが期待されている。このためには、共用施設として多様な研究者のニーズに応えるとともに、社会的・国家的見地から取り組むべき分野・課題について、戦略的・重点的に研究を推進することが必要であり、こうした観点から、前述のように「戦略的利用」の導入を提言したところである。

戦略的利用の導入により、

- ①これまでの計算機ではその性能上困難であった課題が解明され、当該研究分野において大きなブレークスルーがもたらされる
- ②戦略的利用による研究成果がもたらす計算科学技術への理解増進や、分野横断的・共通基盤的な研究開発の進展等により、様々な分野で計算科学技術が定着し、我が国の研究開発そのものに革新をもたらす
- ③戦略的利用の成果が、一般的利用や大学・公的研究機関で行われるシミュレーション研究にも好影響を及ぼし、我が国全体としてより高いレベルの研究の展開が期待できる

など、大きな波及効果が期待できる。

戦略的利用は、次世代スパコンにおける研究開発の推進に不可欠な制度であると同時に、今後の我が国におけるシミュレーション研究のあり方を方向付ける施策であり、導入の意義は極めて大きいものと考える。

##### (2) 具体的な制度設計

戦略的利用を具体化するためには、以下に示すような「戦略的研究開発プログラム」(以下、「戦略プログラム」という。)を創設し、我が国の計算科学技術に

関する研究ポテンシャルを結集することが必要である。

#### ① 戦略分野及び戦略目標の設定

国(文部科学省)が、次世代スパコンの計算機資源を必要とし、かつ、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野(戦略分野)、及び当該戦略分野における重点開発事項や人材育成等の目標(戦略目標)を設定する。戦略分野及び戦略目標は、戦略プログラム全体のマネジメントを行う組織として、有識者から構成される戦略委員会(仮称、国の審議会を想定)を設置し、当該委員会における検討を踏まえて設定する。

#### ② 戦略機関の選定・決定等

国(文部科学省)は、戦略分野、戦略目標ごとに研究機関(大学、大学共同利用機関、大学附置研究所、研究開発を行う独立行政法人や財団法人、民間企業等を想定、複数の研究機関によるネットワーク型の組織も可とする)を対象として公募を行い、戦略委員会における選定を踏まえ、戦略機関を決定する。

なお、戦略機関の選定にあたっては、例えば以下のような選定の考え方を踏まえ、戦略分野及び戦略目標に沿った研究開発を推進する機関を選定する。

- ・ 戦略目標を達成するための研究課題や研究体制、研究実績
- ・ 戦略目標を達成するための人材育成、人材確保方策 等

登録機関は、国が選定した戦略機関からの申請を受け、次世代スパコン(研究棟を含む)の利用について審査を実施する。

#### ③ 研究期間及び戦略機関による優先的な利用

戦略機関としての研究期間は原則5年間とする。戦略機関はこの期間中、一定の計算機運転時間の割り当てを受けることなどにより、次世代スパコンを優先的に利用しながら研究開発を実施する。

#### ④ 研究開発及び人材育成

各戦略機関は各自の戦略目標に沿って、当該分野における全国の大学や研究機関等との連携のもと、研究開発や人材育成等を実施する。

#### ⑤ マネジメント及び評価

上述の戦略委員会、及びこの下に設置する各戦略分野のマネジメントを行

う戦略分野専門部会において、各戦略機関を対象として、研究の進捗状況や戦略目標に対する達成状況等の評価を実施する。特に、3年目の中間評価及び最終評価においては、評価の結果に基づき、国(文部科学省)は研究期間の打ち切り又は延長を決定する。

- ⑥ 戦略機関には戦略目標の達成のために必要な研究費を措置することを検討する。

## 2. 研究機能の充実

### (1) 共通基盤的な研究開発

戦略プログラムを創設することにより、次世代スパコンには高い研究ポテンシャルを有する研究機関や研究者が集積するが、様々な分野を通じてレベルの高い研究を行っていくためには、計算科学技術の幅広い分野を支える共通基盤的な研究開発についても、研究ポテンシャルを蓄積・形成していくことが重要である。こうした研究開発としては、例えば、計算機の開発・高度化等に関する研究開発、シミュレーション研究におけるモデル化やアルゴリズム等の研究開発、分野連携に関する取組等が考えられる。

これらについては、設置者である理研が、次世代スパコンの高度化など施設運用の効率化や利用者の利便性の向上のための研究として、実施することが適当と考えられるが、今後、必要に応じて、共通基盤的な研究開発を戦略分野に位置づけることもあわせて検討することが必要である。

### (2) 連携体制の構築等

戦略プログラムがその目的を達成するためには、戦略委員会における国レベルの検討・取組とともに、次世代スパコン施設においても、戦略機関、理研、登録機関の3者がより緊密に連携・協力をし、効率的・効果的に研究開発や人材育成を行っていく体制を構築することが重要である。

このためには、理研が中心となり、これらの機関で構成する連携推進会議を設置することが必要であり、こうした取組を通じて、理研が次世代スパコン施設における関係機関間のハブ的な機能を担っていくことが適当である。

また、連携推進会議の構成員が中心となり、一般的利用の利用者を含めた

幅広い関係者からなるオールジャパンの「次世代スーパーコンピュータ利用推進フォーラム(仮称)」を開催し、次世代スパコンの利用促進と計算科学技術の普及・振興を図る観点から、例えば以下のような活動を行うことが適当である。

- ・ 利用者等の情報交流・研究交流等の推進
- ・ 研究成果や知見等の集約・蓄積・発信
- ・ 共同研究などによる分野連携や産学連携の推進方策の検討・実施 等

今後、上記の考え方を基本として、一般的の利用も含め、次世代スパコンを効果的・効率的に利用するという観点から、戦略機関や、登録機関、連携推進会議等の適切な役割分担と連携体制のあり方について、早急に検討を進めることが必要である。

なお、上記の理研のハブ的な機能については、次世代スパコンの運用開始後の状況を見ながら、必要に応じてその業務の一部を登録機関に移管することも検討する必要がある。

### 3. 次世代スパコンにおける諸機能の有機的な形成

次世代スパコンは、世界最先端・最高性能の計算機として、卓越した研究成果の創出が期待されているが、同時にこの施設における活動を通して、計算科学技術の飛躍的な発展を図り、科学技術の振興や我が国の国際競争力の強化に大きく寄与することが求められている。このためには、研究機能の構築のみならず、産業利用や人材育成など、次世代スパコンに期待される諸機能が本施設において、全体として有機的に形成されることが必要である。

こうした観点から、研究開発面においては、特に戦略機関は、ネットワークを介した遠隔利用だけでなく、次世代スパコン施設において研究スペースを利用した活動を行うことにより、次世代スパコンの利用に係る諸機能の効果的な形成に貢献していくことが期待される。

また、戦略機関の他、理研や登録機関等が全国の大学や研究機関等とさらに連携を図りながら、より重層的に諸機能の形成を図っていくことが期待される。

産業利用面においては、次世代スパコンにおける産業利用枠の設定や登録機関による手厚い研究支援、共同研究に関するコーディネート等により、民間企

業等が次世代スパコンを利用しやすい環境を整えるとともに、分野やセクターを超えた研究者等の交流を図ることが必要であり、これにより、次世代スパコン施設において産業イノベーションが創出されることが期待される。

人材育成の面では、Ⅱ. 3. (5)において述べたとおり、次世代スパコンにおける教育利用枠の活用や戦略機関における人材育成への積極的な取組を促進するとともに、将来の計算科学技術を担う人材の育成方法について具体的検討を行っていくことが必要である。

一方、次世代スパコンは、ネットワークを介して全国各地からの遠隔利用が可能であり、また、今後のグリッド技術の発展等を考慮すると、次世代スパコン施設において機能形成を図ると同時に、全国に存在する計算機資源や大学・公的研究機関等との連携を図りながら、全体としてネットワーク型の機能形成を図っていくことにも留意することが必要である。

## 目次

1. 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト .....	18
(1) 全体スケジュール .....	18
(2) 立地 地点の選定 .....	19
(3) システム構成について(概念設計の実施) .....	19
(4) 次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するためのソフトウェアの 研究開発(グランドチャレンジアプリケーション) .....	20
(5) 次世代スーパーコンピュータ施設の整備 .....	21
(6) 特定先端大型研究施設の共用の枠組み.....	21
(7) 次世代スーパーコンピュータにより期待される成果 .....	22
2. 戦略的研究開発プログラムのイメージ .....	24
3. 次世代スパコンにおける諸機能の構築 .....	25

# 1. 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト

平成20年度予算額	:	145	億円
平成19年度補正予算額	:	42	億円
平成19年度予算額	:	77	億円
平成18～24年度（総事業費）	:	1,154	億円

## 1. 目的 世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータの開発・整備及び利用技術の開発・普及

### 2. 概要

理論、実験と並び、現代の科学技術の方法として確固たる地位を築きつつある計算科学技術をさらに発展させるため、長期的な国家戦略を持って取り組むべき重要技術（国家基幹技術）である「次世代スーパーコンピュータ」を平成22年度の稼働（平成24年の完成）を目指して開発する。

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べく、

(1) 世界最先端・最高性能の「次世代スーパーコンピュータ（注）」の開発・整備

(注) 10ペタFLOPS級

(1ペタFLOPS: 1秒間に1千兆回の計算)

(2) 次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するためのソフトウェアの開発・普及

(3) 上記（1）を中心とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点（COE）の形成を文部科学省のイニシアチブにより、開発主体（理化学研究所）を中心に产学研官の密接な連携の下、一体的に推進する。

### 3. 体制

(1) 開発主体である独立行政法人理化学研究所を中心とした产学研連携体制を構築。

(2) 特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律を整備し（平成18年7月施行）、产学研官の研究者等に幅広く開かれた共用施設として位置付け。

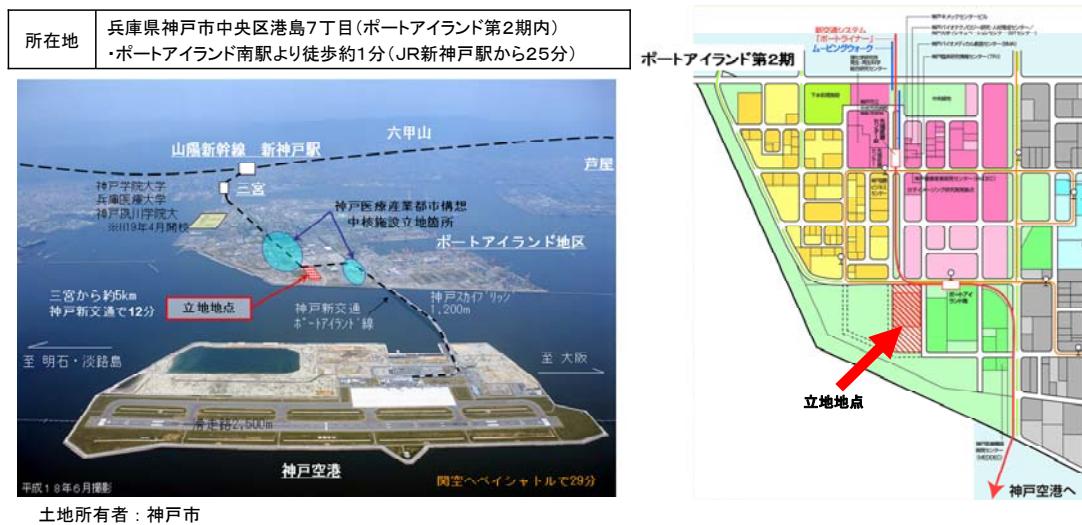
## （1）全体スケジュール

		平成18年度 (2006)	平成19年度 (2007)	平成20年度 (2008)	平成21年度 (2009)	平成22年度 (2010)	平成23年度 (2011)	平成24年度 (2012)
						移動▲	完成▲	
システム	演算部 (スカラ部、ベクトル部)		概念設計	詳細設計	試作・評価	製造・据付調整		
	制御フロントエンド (トータルシステム ソフトウェア)		基本設計	詳細設計	製作・評価		性能チューニング・高度化	
	共有ファイル		基本設計	詳細設計		製造・据付調整		
ソフツエア開発アレジデンス	次世代ナノ統合 シミュレーション			開発・製作・評価		実証		
	次世代生命体統合 シミュレーション			開発・製作・評価		実証		
施設	計算機棟		設計	建設				
	研究棟		設計	建設				

## (2) 立地地点の選定

理化学研究所において、次世代スーパーコンピュータ施設の立地地点を客観的・科学的な観点から検討するため、外部有識者からなる立地検討部会(部会長：黒川 清 内閣特別顧問)を設置し、平成18年7月より、15の候補地について評価を実施。

理化学研究所は立地検討部会の評価報告書に基づき、有力とされた神戸及び仙台について総合的に評価・検討を行い、平成19年3月に、神戸(ポートアイランド第2期内)を立地地点とすることを決定。



## (3) システム構成について(概念設計の実施)

【世界最速のシステム】⇒1秒間に1京(ケイ=10の16乗)回の計算性能

(現最速計算機の約10倍)

【汎用システム】⇒科学技術・産業で用いられる多様なアプリケーションやこれまで不可能だった複雑かつ大規模なシミュレーションが実行可能

【革新的なシステム】⇒先端技術の積極的導入により、画期的な省電力、省スペースを実現

理化学研究所とメーカー3社(富士通、NEC、日立)による共同開発により、日本の技術力の総力を結集して開発

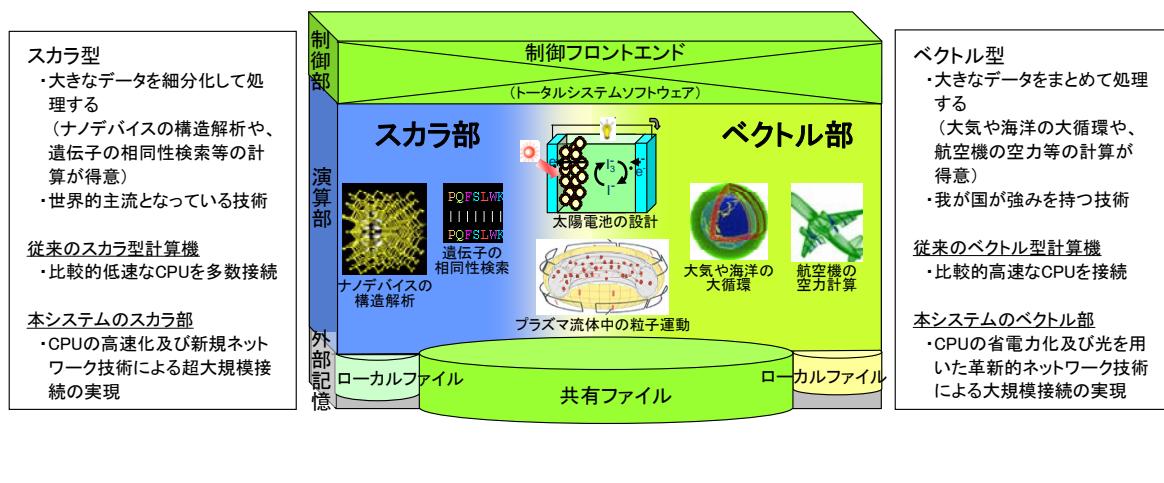
### [検討経緯および今後の予定]

平成18年4月	理化学研究所において、システム構成案の検討を開始
平成19年4月	富士通、NEC・日立の提案を基礎に、理化学研究所においてシステム構成案を作成。
平成19年3～6月	文部科学省において、概念設計評価作業部会を設置し、理化学研究所のシステム構成案について評価を実施
平成19年6～9月	総合科学技術会議において評価を実施
平成19年9月	文部科学省及び総合科学技術会議の評価を踏まえ、理化学研究所においてシステム構成を正式決定
平成19～20年度	詳細設計

### [システムの特徴]

#### スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システム

- 異なる2つの演算部の特性を活かし、あらゆるシミュレーションに対応可能な高い汎用性
- 計算能力に関する高い拡張性
- 大学や研究機関向けの高性能な計算機への展開性
- スカラ及びベクトルの両技術の確保による、我が国の技術力の強化と、国際競争力の向上



### (4) 次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するためのソフトウェアの研究開発(グランドチャレンジアプリケーション)

	ナノテクノロジー分野 〔次世代ナノ統合シミュレーション ソフトウェアの研究開発〕	ライフサイエンス分野 〔次世代生命体統合シミュレーション ソフトウェアの研究開発〕
概要	ナノ電子デバイスの設計やバイオ燃料生成用の酵素設計等に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発	タンパク質分子の反応や、細胞・臓器の働きの詳細な解析により、製薬・医療に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発
応用例	<p>現状 2千原子程度(デバイスの一部)の計算が可能</p> <p>↓</p> <p>次世代スパコン 10万原子(デバイス全体)の計算が可能</p> <p>↓</p> <p>アウトカム 高速、低消費電力のナノ電子デバイスの実現を加速</p>	<p>様々な薬剤候補物質</p> <p>↓</p> <p>新薬設計</p> <p>↓</p> <p>次世代スパコン 6ヶ月(更なる短縮を検討)</p> <p>↓</p> <p>アウトカム 新薬候補物質の最適化を効率化し、新薬開発の期間短縮及びコスト削減を実現</p>
体制	分子科学研究所を中心、東京大学物性研究所、東北大金属材料研究所、産業技術総合研究所等と連携した研究開発体制を構築	理化学研究所を中心、東京大学医科学研究所、慶應義塾大学等、13機関と連携した研究開発体制を構築

## (5) 次世代スーパーコンピュータ施設の整備

### 施設の建設

- ・現在、理化学研究所において、計算機棟の建設及び研究棟等の設計を実施中。
- ・平成22年度に完工予定。

### 整備の基本方針

- (1) 次世代スーパーコンピュータの性能を最大限引き出す設備・能力の確保
- (2) 世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点(COE)として相応しい研究・教育環境の整備
- (3) ランニングコストと環境負荷の低減化



### 施設の特徴

- (1) 計算機の性能を常時保証できる床耐荷重及び免震構造とともに、必要な電源設備及び冷却設備を整備
- (2) 共用施設としての運用上の利便性を高めるとともに、研究交流や多様な知識の融合を促進するため、計算機棟と研究棟を一体的に整備
- (3) 廃熱利用の推進や排水処理への配慮などによりランニングコストと環境負荷の低減を実現

#### 【計算機棟】

- 延床面積 約 11,000m<sup>2</sup>
- 建築面積 約 4,500m<sup>2</sup>
- 構造 鉄骨造り地上3階地下1階

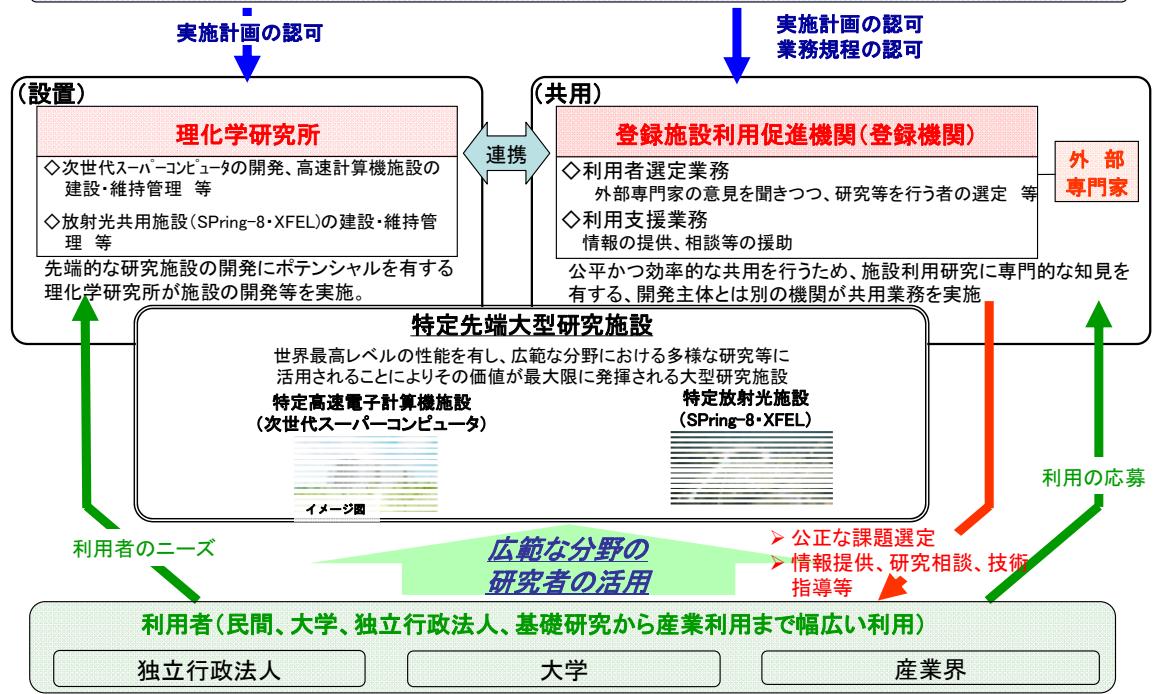
#### 【研究棟】

- 延床面積 約 8,500m<sup>2</sup>
- 建築面積 約 2,000m<sup>2</sup>
- 構造 地上6階地下1階

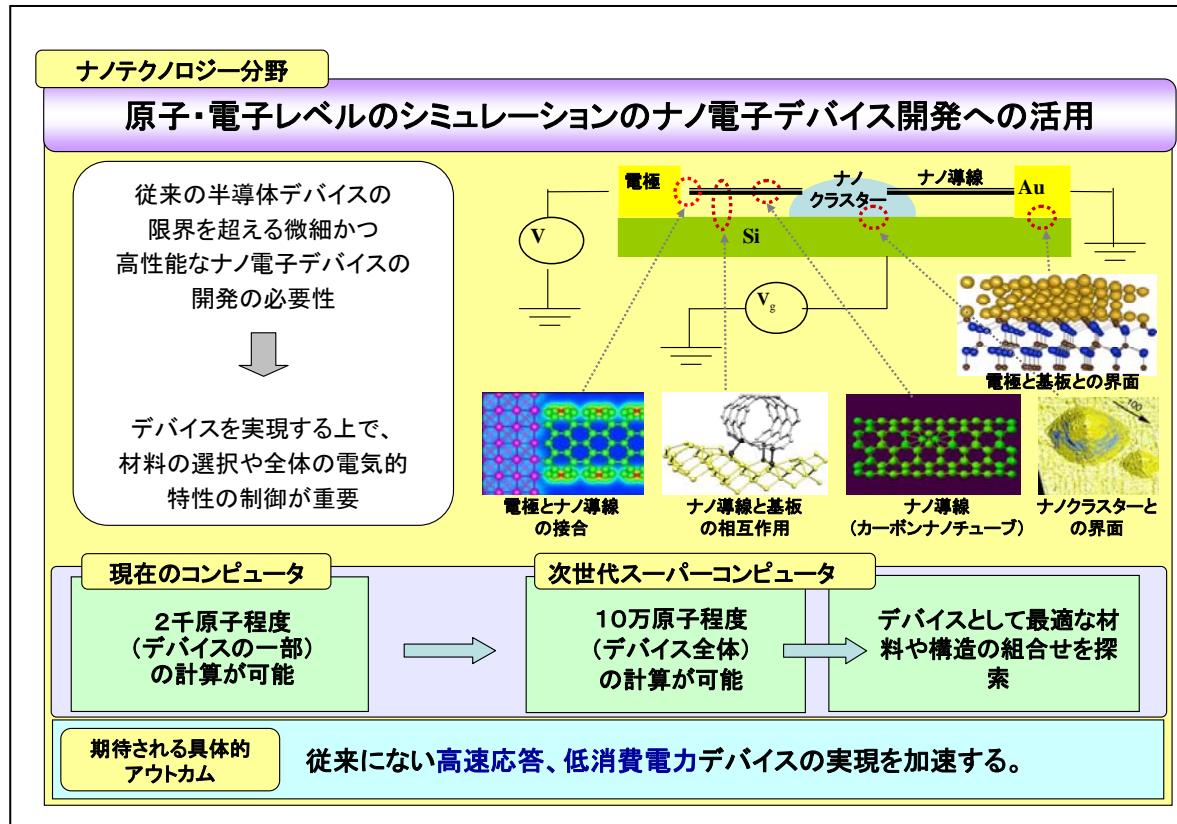
その他、電源を供給する特高受変電設備、計算機棟の空調機を冷却する冷却設備、及び環境負荷低減のためのCGS(自家発電)設備等を設置

## (6) 特定先端大型研究施設の共用の枠組み

### 国(文部科学省)共用の促進に関する基本的な方針の策定



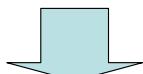
## (7) 次世代スーパーコンピュータにより期待される成果



地球科学分野(地球環境)

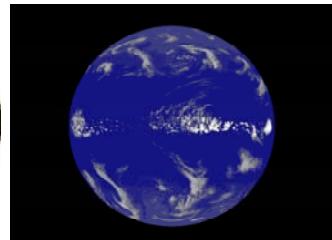
## 全球雲解像大気大循環モデルの台風・集中豪雨の予測への活用

全球を対象とした気象シミュレーション



次世代スパコン

従来の3.5kmスケールが、400mスケールでシミュレーションが可能になる。



正20面体格子

3.5kmメッシュ全球雲解像モデルによる水惑星実験の雲画像

### 期待される具体的なアウトカム

- ・雲に関する任意性の少ない、より精度の高い気候予測が可能になる。
- ・背の高い積雲(高さ 10 km)から浅い層積雲(高さ 1 km)までの雲を直接計算することが可能になる。
- ・気候変動に伴う台風や集中豪雨など極端現象の予測情報を提供できる。

製造業

## ジェットエンジンやガスタービンのシミュレーション

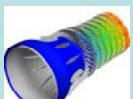
次世代スーパーコンピュータの活用により、ジェットエンジンやガスタービン全体のシミュレーションによる空力、伝熱、燃焼、構造の解析が可能となる。これにより、開発期間、コスト等の大幅な削減が期待できる。

### 各要素ごとの解析

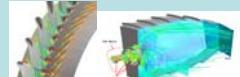
- ・約10ヶ月／エンジン全体
- ・各要素試験の一部代替が可能



ファン



高圧圧縮機



燃焼器

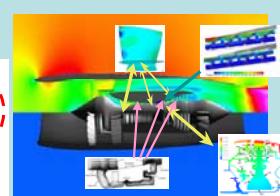
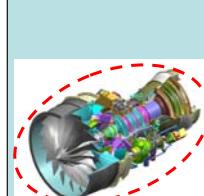


低圧タービン

現状

### エンジン全体の解析

- ・約1ヶ月／エンジン全体
- ・エンジン試験の一部代替が可能となる



エンジン全体の空力・構造・伝熱連成解析  
エンジン全体の非定常解析

次世代スーパーコンピュータ

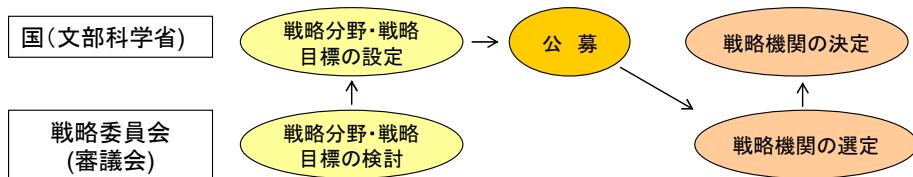
### 期待される成果

- ①開発期間を2／3に短縮  
従来と比べて2／3の期間で開発が可能となる(従来10年に対して7年弱)
- ②開発コストの半減  
1台当たりの開発費が、従来は1500億円～2000億円として、750億円～1000億円へ削減
- ③開発リスクの極少化  
従来は3回程度の設計変更が必要、ほぼゼロにすることが可能

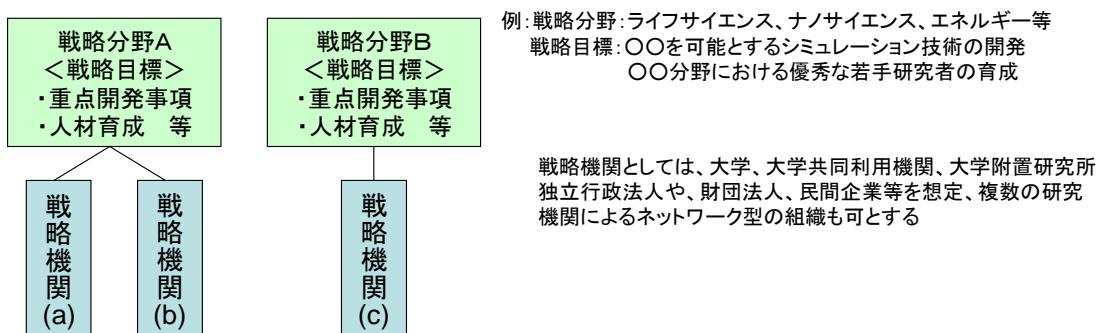
注)スーパコンピューティング技術産業応用協議会の資料を基に文部科学省作成

## 2. 戰略的研究開発プログラムのイメージ

### (1) 戰略分野、戦略目標の設定と戦略機関の選定



### (2) 戰略機関のイメージ



### (3) 戰略的研究開発プログラムの運営

#### ○戦略委員会

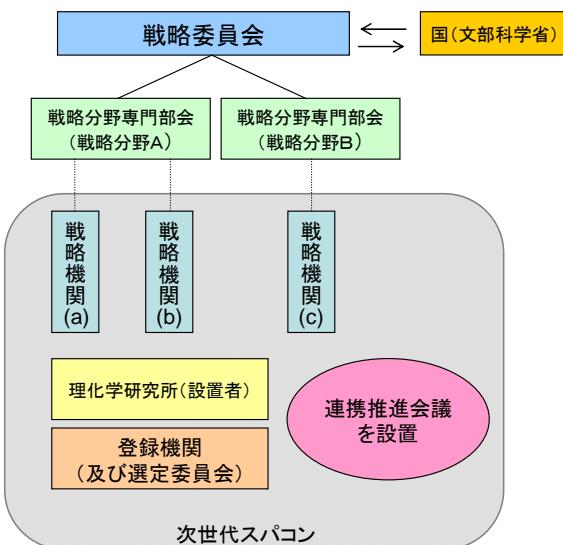
- 各戦略分野の専門家を含む有識者で構成。
- 本委員会の主な機能は以下のとおり。
  - 戦略機関の選定
  - 戦略プログラム全体の研究教育の進捗状況の把握・評価
  - 分野間の研究費の配分計画の策定 等

#### ○戦略分野専門部会

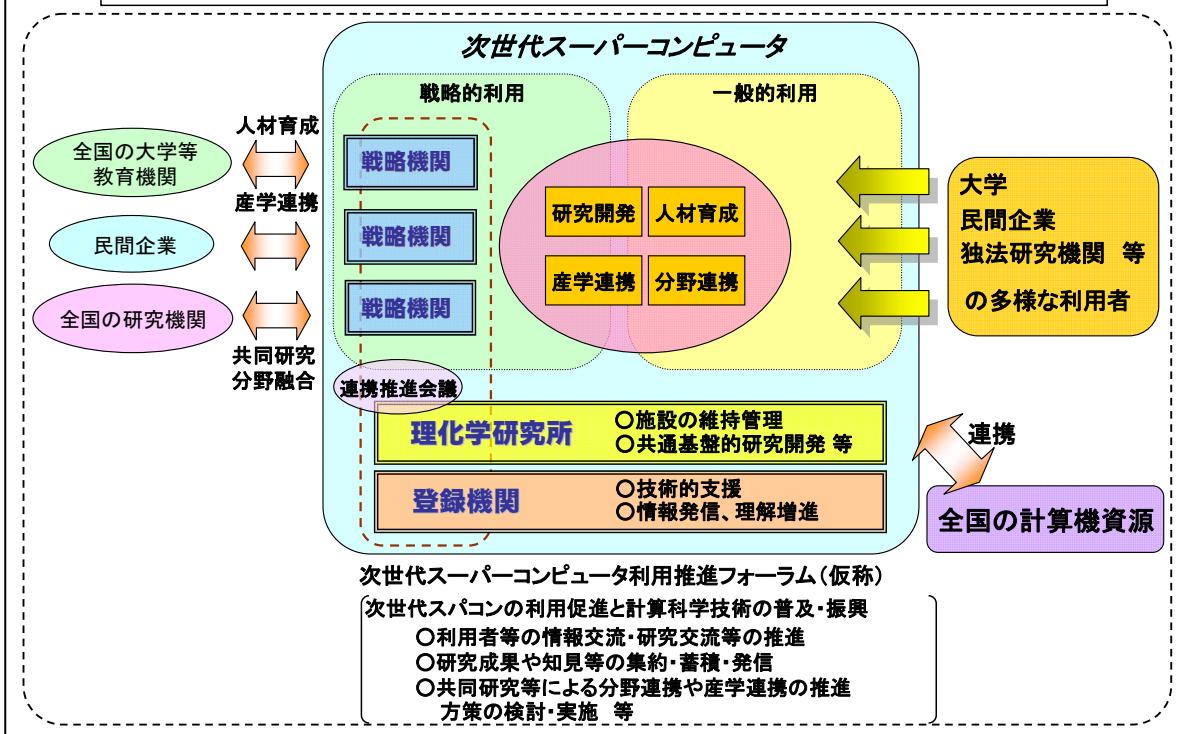
- 戦略分野ごとに、当該戦略分野の専門家等で構成。
- 本専門部会の主な機能は以下のとおり。
  - 当該戦略分野における研究教育の進捗状況の把握・評価
  - 当該戦略分野の戦略機関に対する研究費の配分計画の策定 等

#### ○連携推進会議

戦略的研究開発プログラムにおいて効果的・効率的な研究教育を実施するため、実施機関で連携推進会議を設置。



### 3. 次世代スパコンにおける諸機能の構築



## 次世代スーパーコンピュータ作業部会の設置について

平成19年11月7日  
科学技術・学術審議会  
研究計画・評価分科会  
情報科学技術委員会

### 1. 趣旨

第3期科学技術基本計画における国家基幹技術である「次世代スーパーコンピュータの開発・利用」プロジェクトは、我が国の科学技術の発展や国際競争力の強化等を図るため、世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータ（以下、次世代スパコン）を開発・整備するとともに、それを最大限利活用するためのソフトウェアの開発を行い、あわせて大学・研究機関のスーパーコンピュータとの連携による柔軟性のある計算環境の提供や、次世代スパコンを中心とするスーパーコンピューティング研究教育拠点の形成を行うものである。

平成18年度のプロジェクトの開始以来、これまでに特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律の制定（平成18年6月）、立地地点の決定（平成19年3月）、システム構成の決定（平成19年9月）など、本プロジェクトは着実に進展してきている。その一方で、平成19年9月の総合科学技術会議の評価により明らかになったように、今後、本プロジェクトを円滑に推進するためには、ソフトウェアの開発や産業界等との連携、人材育成、共用の在り方等についてより具体的な検討を行うことが必要となっている。

このため、今後の次世代スパコンプロジェクトの円滑な推進のために検討が必要な諸課題について総合的に調査審議するため、次世代スーパーコンピュータ作業部会を設置するものである。

### 2. 検討の体制

情報科学技術委員会の下に、「次世代スーパーコンピュータ作業部会」（以下、作業部会）を設置して検討を行う。なお、特に専門性が高く、詳細な検討を要する課題については、必要に応じて作業部会の下に検討の場を設置する。

### 3. 主な検討課題

- (1) 次世代スパコンプロジェクトの今後の推進方策について
- (2) 次世代スパコンプロジェクトに係る評価について
- (3) その他次世代スパコンプロジェクトに係る諸課題について

当面、作業部会では、以下の課題について検討を行う。

次世代スパコンを中心とした教育研究のグランドデザイン

- ・ 基本的な考え方
- ・ 求められる機能
  - － 研究開発機能（大学、独法等の共同利用による研究開発など）
  - － 人材育成機能（学部・研究科等による連携、連携大学院による人材育成など）
  - － 支援機能（理化学研究所、登録機関及びその他の関連組織による利用促進支援など）
  - － その他の機能（产学研連携、理解増進など）
- ・ これらの機能を整備するための役割分担（国、自治体、理研、産業界、大学等）

#### 4. スケジュール

- (1) 当面の検討課題である次世代スパコンを中心とした教育研究のグランドデザインについては、平成20年6月頃を目途に基本的考え方をとりまとめる。また、関係機関や地元自治体等における検討に資するため、必要に応じて審議経過を作成する。
  - (2) その他の検討課題については、上記の基本的考え方を踏まえつつ、平成20年度以降、プロジェクトの進捗状況を見ながら、隨時、本作業部会において検討を行う（必要に応じて本作業部会の下に別途検討の場を設ける）。
- (例)
- ・ 共用の在り方の検討
    - ・ 登録機関の果たすべき機能
    - ・ 大学のスパコンセンターとの連携
    - ・ 次世代スパコンプロジェクトに係る評価

**科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 情報科学技術委員会  
次世代スーパーコンピュータ作業部会 委員名簿**

(主査)

土居 範久 中央大学 理工学部 教授

(委員)

有川 節夫 九州大学 理事、副学長、附属図書館長  
大島 まり 東京大学 生産技術研究所 教授  
加藤 金芳 武田薬品工業株式会社 医薬研究本部検索研究センター リサーチマネージャー  
川添 良幸 東北大学 金属材料研究所 教授  
吉良 爽 財団法人 高輝度光科学研究センター 理事長  
坂内 正夫 情報・システム研究機構 国立情報学研究所長  
佐藤 哲也 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 特任上席研究員  
白井 克彦 早稲田大学 総長  
鷹野 景子 お茶の水女子大学 大学院 人間文化創成科学研究科 教授（第2回～）  
知野 恵子 読売新聞 東京本社 編集委員  
中村 稔 兵庫県 産業労働部長（第4回～）  
西尾 章治郎 大阪大学 理事、副学長  
平尾 公彦 東京大学 副学長  
表具 喜治 兵庫県 産業労働部長（～第3回）  
福山 秀敏 東京理科大学 理学部 教授  
松田 潔 三菱化学株式会社 理事  
松本 紘 京都大学 理事、副学長  
宮内 淑子 メディアスティック株式会社 代表取締役社長  
安岡 善文 独立行政法人 国立環境研究所 理事  
山根 一眞 ノンフィクション作家  
吉川 誠一 社団法人 日本経済団体連合会 産業技術委員会 重点化戦略部会長代行  
(第2回～)

※ 退任した委員の所属・役職については、退任時のものを記載。

その他の委員については、平成20年6月現在の所属・役職を記載。

## 審議経過

### 第1回 平成19年12月26日(水)

- ・プロジェクトの概要説明
- ・当面御議論いただきたい事項について

### 第2回 平成20年2月14日(木)

- ・「次世代スーパーコンピュータを中心とする拠点形成」について  
(小柳義夫 工学院大学情報学部長から意見発表)
- ・「地球シミュレータの経験に基づく次世代スーパーコンピュータへの提言」について  
(佐藤哲也 委員から意見発表)
- ・当面の検討の進め方について

### 第3回 平成20年3月12日(水)

- ・「研究中核拠点としての共用施設「ペタセンター」」について  
(福山秀敏 委員から意見発表)
- ・拠点における研究開発機能について

### 第4回 平成20年4月22日(火)

- ・「次期スパコンと東大情報基盤センター」について  
(米澤明憲 東京大学情報基盤センター長から意見発表)
- ・「共用促進法における登録機関の役割」について  
(吉良爽 委員から意見発表)
- ・特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針に対する意見について

### 第5回 平成20年5月21日(水)

- ・次世代スーパーコンピュータを中心とする研究拠点における研究開発機能について

### 第6回 平成20年6月19日(木)

- ・次世代スーパーコンピュータを中心とした教育研究のグランドデザインについて

### 第7回 平成20年6月25日(水)

- ・議論のとりまとめ