

スーパーコンピュータセンター調査報告書

平成18年6月6日

文部科学省スーパーコンピュータ整備推進本部

理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部

目次

| | |
|---|----|
| 1.はじめに | 1 |
| 2.調査目的および内容 | 2 |
| (1)調査目的 | 2 |
| (2)調査対象 | 3 |
| (3)調査方法 | 5 |
| (4)調査日程 | 6 |
| 3.調査結果 | 7 |
| (1)各スーパーコンピュータセンターの概要について | 7 |
| (2)各スーパーコンピュータセンターにおける現在の状況について | 9 |
| 現状の計算資源 | 9 |
| 利用状況 | 19 |
| 運用体制 | 26 |
| その他の設備 | 30 |
| (3)各スーパーコンピュータセンターにおける現状の問題と対応策について | 35 |
| 自スーパーコンピュータセンターの役割と位置付け | 35 |
| システムの信頼性 | 36 |
| システムの利用率 | 36 |
| データ管理 | 37 |
| その他 | 38 |
| (4)各スーパーコンピュータセンターにおける次期システム計画について | 38 |
| (5)各スーパーコンピュータセンターにおける平成22年度以降のシステム 導入計画について | 40 |
| アーキテクチャ | 40 |
| 性能、機能等 | 41 |
| 消費電力、設置面積 | 41 |
| (6)次世代スーパーコンピュータとその運用に関する要望について | 42 |
| システム | 42 |
| 運用・課金 | 43 |

| | |
|--|-----|
| 次世代スーパーコンピュータと既存のスーパーコンピュータセンター の連携 | 4 4 |
| 次世代スーパーコンピュータで実行するアプリケーション | 4 5 |
| その他 | 4 6 |
| 4.まとめ | 4 8 |
| (参考資料) | 5 1 |

1. はじめに

平成18年度より、文部科学省の「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトが開始された。

本プロジェクトでは、世界最高性能のスーパーコンピュータの開発と、それを用いた計算科学分野におけるブレークスルーが期待されている。同時に、本プロジェクトによってもたらされる各種の成果は、広く社会に還元されることが求められている。その具体例の一つが世界最高性能のスーパーコンピュータにおける技術の垂直展開である。地球シミュレータ、CPACS、数値風洞の過去のナショナルリーダーシップシステム(以下、NLS)がそうであったように、今回開発されるスーパーコンピュータの計算機アーキテクチャをベースとした計算機が商用化され、全国の大学および研究機関に広く導入されることで、我が国全体のスーパーコンピューティング環境が重層的に強化されることが期待されている。そのためには、スーパーコンピュータを保有・運用している機関の現在の状況と将来計画を調査し、次世代スーパーコンピュータの計算機アーキテクチャの検討に役立てる必要がある。

また、本プロジェクトで開発される次世代スーパーコンピュータは、完成後、我が国の新たなNLSとして運用される。実際の運用においては、次世代スーパーコンピュータの運用・共用を行う機関と、NLSに次ぐ規模のナショナルインフラストラクチャシステム(以下、NIS)を所有する機関が密に連携を取りながら、各スーパーコンピュータセンターの役割・位置付けが全体として相互補完的な関係を構築することで、計算科学分野の基盤環境として有機的に機能するよう、十分に調整を図っておく必要がある。

さらに、本プロジェクトで開発する次世代スーパーコンピュータは、幅広い分野に適用できる汎用性が求められているため、現状および将来のアプリケーションについての情報、あるいは将来の計算機システムに対する利用者側のニーズ等について十分に把握した上でアーキテクチャの検討を進める必要がある。

以上のような理由から、文部科学省スーパーコンピュータ整備推進本部と、理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部¹は、合同で全国の主要なスーパーコンピュータを所有する機関に対する調査を実施した。

本報告書では、今回実施したアンケート調査およびヒアリング調査の結果を各項目について整理し、次世代スーパーコンピュータの設計・開発および運用等に関するさまざまな検討に資することを目的とする。

1：文部科学省は、本プロジェクトの実質的な開発業務を行う開発主体として、独立行政法人 理化学研究所を平成17年10月26日に選定した。

2. 調査目的および内容

(1) 調査目的

今回の調査は、以下の3点を主な目的として実施した。

- ・ 大学・研究機関等の計算機システムに、次世代スーパーコンピュータの技術が垂直展開される状況、条件等を予測するための基礎データの収集。
- ・ 次世代スーパーコンピュータ完成後、運用・共用を行う機関の運営検討のための基礎データの収集。
- ・ 次世代スーパーコンピュータのアーキテクチャの評価と、それに資する主要なアプリケーションの利用状況に関する情報収集。

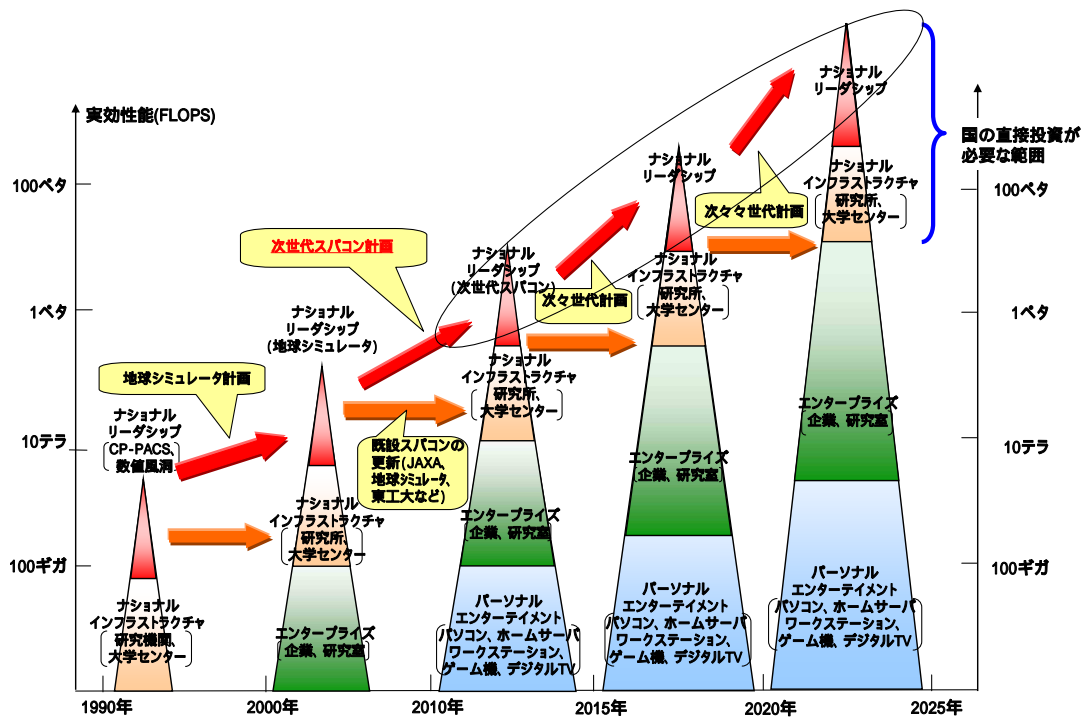


図1 NLSの継続的開発と技術の垂直展開

(2) 調査対象

今回の調査は、全国の大学・研究機関のスーパーコンピュータまたはそれに準ずる計算機を保有する施設の中から、計算資源の規模を元に25施設(以下、本報告書では「スーパーコンピュータセンター」という。)を対象とした。以下に調査対象のリストを示す。(以下五十音順)

表1 調査対象の機関とスーパーコンピュータセンター

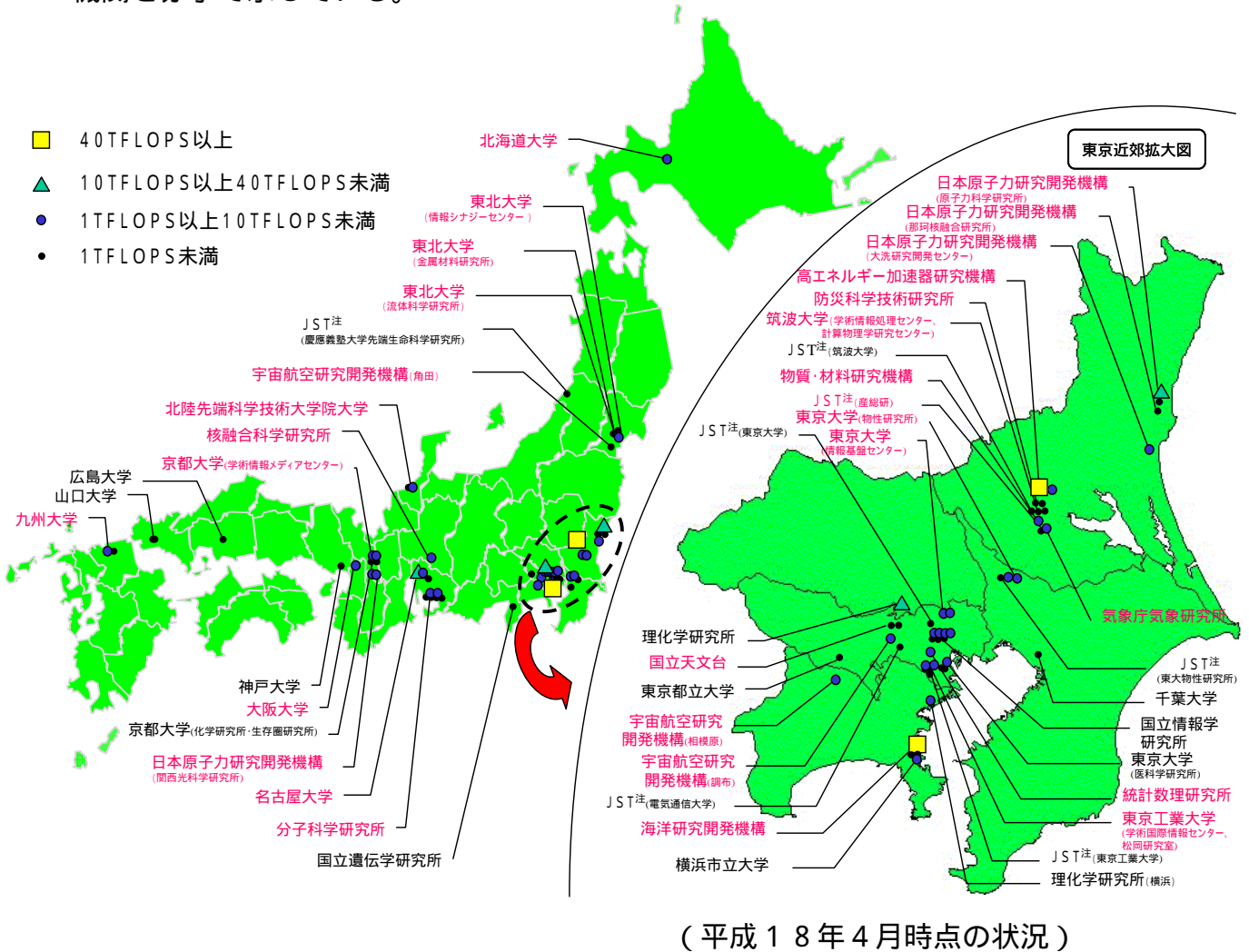
| 機関名 | スーパーコンピュータセンター名 |
|---------------|-----------------|
| 宇宙航空研究開発機構 | 情報・計算工学センター |
| 大阪大学 | サイバーメディアセンター |
| 海洋研究開発機構 | 地球シミュレータセンター |
| 気象庁 | 気象研究所 |
| 九州大学 | 情報基盤センター |
| 京都大学 | 学術情報メディアセンター |
| 高エネルギー加速器研究機構 | 計算科学センター |

表1 調査対象の機関とスーパーコンピュータセンター（続き）

| 機関名 | スーパーコンピュータセンター名 |
|---------------------|-------------------|
| 産業技術総合研究所 | グリッド研究センター |
| 自然科学研究機構 核融合科学研究所 | 理論・シミュレーション研究センター |
| 自然科学研究機構 国立天文台 | 天文学データ解析研究センター |
| 自然科学研究機構 分子科学研究所 | 計算科学研究センター |
| 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 |
| 筑波大学 | 計算科学研究センター |
| 東京工業大学 | 学術国際情報センター |
| 東京大学 | 情報基盤センター |
| 東京大学 | 物性研究所 |
| 東北大学 | 金属材料研究所 |
| 東北大学 | 情報シナジーセンター |
| 東北大学 | 流体科学研究所 |
| 名古屋大学 | 情報連携基盤センター |
| 日本原子力研究開発機構 | システム計算科学センター |
| 物質・材料研究機構 | 計算材料科学研究センター |
| 防災科学技術研究所 | 防災基盤科学技術研究部門 |
| 北陸先端科学技術大学院大学 | 情報科学センター |
| 北海道大学 | 情報基盤センター |

（上表のスーパーコンピュータセンター名は、平成18年3月時点の名称である。）

図2では、文部科学省所管機関における100ギガFLOPS以上のスーパーコンピュータ、および、気象庁気象研究所の配置状況を示し、本調査の対象機関を赤字で示している。



注：独立行政法人 科学技術振興機構（JST）所管のスーパーコンピュータを設置。

図2 調査対象スーパーコンピュータセンター分布図

(3) 調査方法

巻末の参考資料にあるアンケート調査票を、各スーパーコンピュータセンターに送付し回答してもらう形の、アンケート調査を中心に実施したが、より実態に即した情報を得るために、本プロジェクトの構成員が各調査対象機関の担当者から直接聞き取りを行うヒアリング調査も同時に実施した。アンケート調査においては、スーパーコンピュータ側の都合で回答できない部分について回

答を強要していない。また、各スーパーコンピュータセンター固有の情報が判別できる形では調査報告書に記載しない点を調査対象機関に提示している。

(4) 調査日程

平成18年1月中旬より調査内容の検討を含めた予備調査を開始し、1月下旬に質問内容等を確定した後、各スーパーコンピュータセンターにアンケート調査票を送付した。アンケートの回答については2月末を締切りとした。一方ヒアリング調査は、1月下旬から3月上旬にかけて実施した。

3. 調査結果

(1) 各スーパーコンピュータセンターの概要について

(有効回答数 24 件)

各スーパーコンピュータセンターがターゲットとする研究分野は以下の通りである。なお、分野については選択肢から複数回答可とし、分野を特定しないスーパーコンピュータセンターについては、計算機の負荷から見て主要な分野を選択するように回答をお願いした。

以下の表では、スーパーコンピュータセンターの名称はアルファベットで表記し、ターゲットとする研究分野は「」で示している。

表2 スーパーコンピュータセンターがターゲットとする研究分野

| | 物質・ 材料 | ライフ サイエ ンス | ものつ くり | 防災 | 地球 環境 | 原子力 | 航空・ 宇宙 | 天文・ 宇宙 物理 | その他 |
|---|-----------|------------------|-----------|----|----------|-----|-----------|-----------------|-----|
| A | | | | | | | | | |
| B | | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | | |
| D | | | | | | | | | |
| E | | | | | | | | | |
| F | | | | | | | | | |
| G | | | | | | | | | |
| H | | | | | | | | | |
| I | | | | | | | | | |
| J | | | | | | | | | |
| K | | | | | | | | | |
| L | | | | | | | | | |
| M | | | | | | | | | |
| N | | | | | | | | | |

表2 スーパーコンピュータセンターがターゲットとする研究分野（続き）

| | 物質・ 材料 | ライフ サイエ ンス | ものつ くり | 防災 | 地球 環境 | 原子力 | 航空・ 宇宙 | 天文・ 宇宙 物理 | その他 |
|---|-----------|------------------|-----------|----|----------|-----|-----------|-----------------|-----|
| O | | | | | | | | | |
| P | | | | | | | | | |
| Q | | | | | | | | | |
| R | | | | | | | | | |
| S | | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | | |
| U | | | | | | | | | |
| V | | | | | | | | | |
| W | | | | | | | | | |
| X | | | | | | | | | |
| 計 | 16 | 13 | 8 | 10 | 14 | 8 | 10 | 11 | 16 |

(2) 各スーパーコンピュータセンターにおける現在の状況について

以下に、アンケート調査票の回答から得られた、各スーパーコンピュータセンターにおける計算資源の規模や利用状況等の現状に関する情報を示す。

現状の計算資源

・演算性能

(有効回答数 23 件)

図3では、平成8年度から平成18年度までの各スーパーコンピュータセン

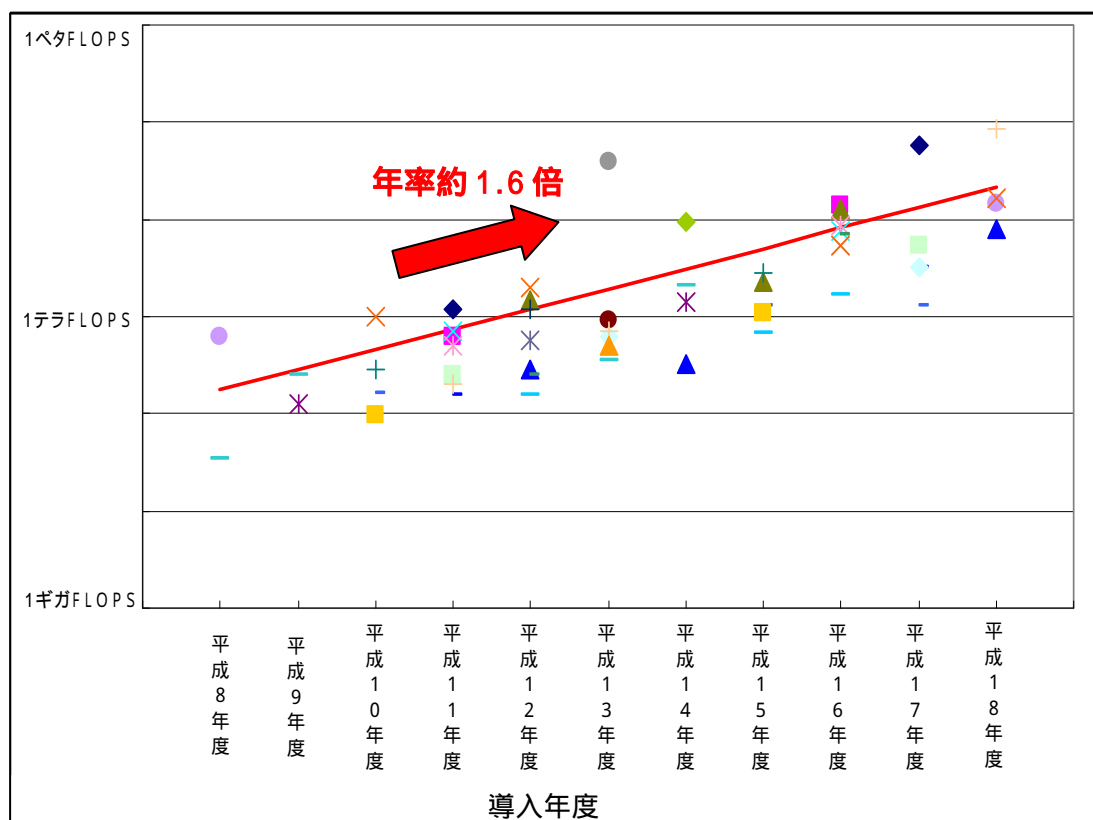


図3 各スーパーコンピュータセンターの主力計算機システムの理論演算性能の推移

ターの主力計算機システムの理論演算性能を、導入年度でプロットしており、平成18年度分については導入予定のシステムも含んでいる。なお、実効性能

による集計および評価は困難なため、以下では理論演算性能に基づいて考察している。

図3より、各年度で多少ばらつきはあるものの、ほぼ一様に性能が向上していることがわかる。図中の赤色の直線は、各年度の平均値を最小二乗法により直線で近似したものである。この直線の傾きから、理論演算性能の平均値は、毎年約1.6倍のペースで上昇しており、若干ではあるが、ムーアの法則²よりも性能向上が速いことがわかる。この直線を外挿してみると、平成22年度の平均値は現状の約10倍の約1.43テラFLOPS³と推定できる。

一方、世界的な傾向を見るために、以下にTOP500⁴で提供されている情報から作成した図を示す。図4では、TOP500での1位、上位10位の平均、上位100位の平均、および、図3で示した主力計算機システムの理論演算性能の推移を示している。

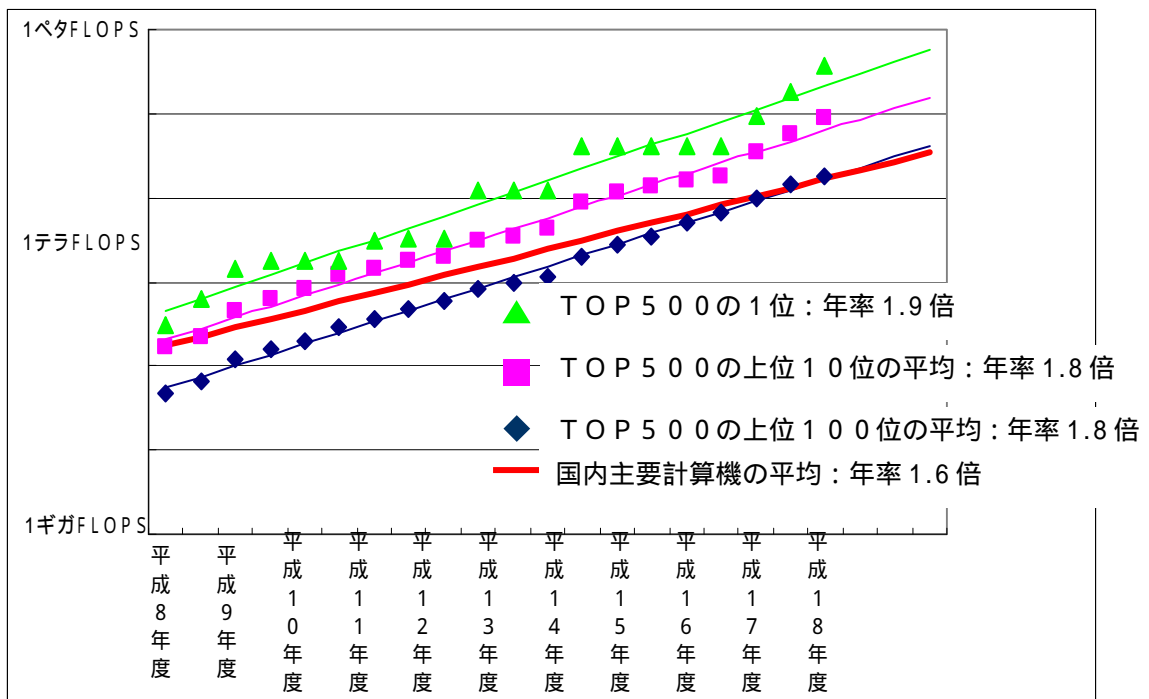


図4 TOP500でランキングされている計算機の理論演算性能の推移

なお、TOP500では、LINPACK⁵の実効性能でランク付けを行っているが、図3でのデータとの比較を行うために、理論演算性能にのみ注目している。

図4から明らかなように、国内主要計算機の平均は、平成8年度頃では、TOP500の上位10位の平均と同等であったが、その後乖離が進み、平成18年度にはTOP500の上位100位の平均さえ下回る可能性が高い。

伸び率について見てみると、TOP500の上位10位までと上位100位までについては、1年に約1.8倍、第1位については、1年に約1.9倍のペースで上昇しており、今回の調査で判明した日本国内の主要なスーパーコンピュータセンターの計算機性能の伸び率、1年で1.6倍と比較すると、大きな差があることがわかる。

- 2：米インテル社の設立者ゴードン・ムーアが1965年に提唱した、半導体技術の進歩に関する経験則。『半導体チップの集積度は、およそ18～24カ月で2倍になる』というもの。このことから、『マイクロプロセッサの性能は18～24カ月で2倍になる』というように使われる場合もある。
- 3：演算性能の単位。FLOPSは一秒あたりに実行可能な浮動小数点演算数。テラは10の12乗。
- 4：世界中のスーパーコンピュータの性能を計測し、そのランキングを公表するプロジェクト。URLは<http://www.top500.org>
- 5：米テネシー大学のジャック・ドンガラ博士らが開発した、コンピュータの性能計測（ベンチマーク）プログラム。連立一次方程式の解を求めるプログラムで、主に浮動小数点演算の性能を計測することができる。TOP500の指標となっている。

・アーキテクチャ

(有効回答数 25 件)

各スーパーコンピュータセンターに導入されているもので、アンケート回答のあった全ての計算機をアーキテクチャ別に分類し、図 5 にそれぞれの台数に基づくシェアの年度別変化を示した。

また、以後アーキテクチャを「ベクトル型(分散メモリ)」、「ベクトル型(共有メモリ)」、「スカラー型(分散メモリ)」、「スカラー型(共有メモリ)」、「PC クラスタ型」の 5 種類に分類する。ここでは、3 つ以上の CPU コアでメモリを共有しているものを共有メモリ型、共有メモリ型ではないものを分散メモリ型とし、分散メモリ型のスカラーの中でも、汎用の CPU やネットワーク部品から構成されているものを「PC クラスタ型」、それ以外を「スカラー型(分散メモリ)」と分類する。

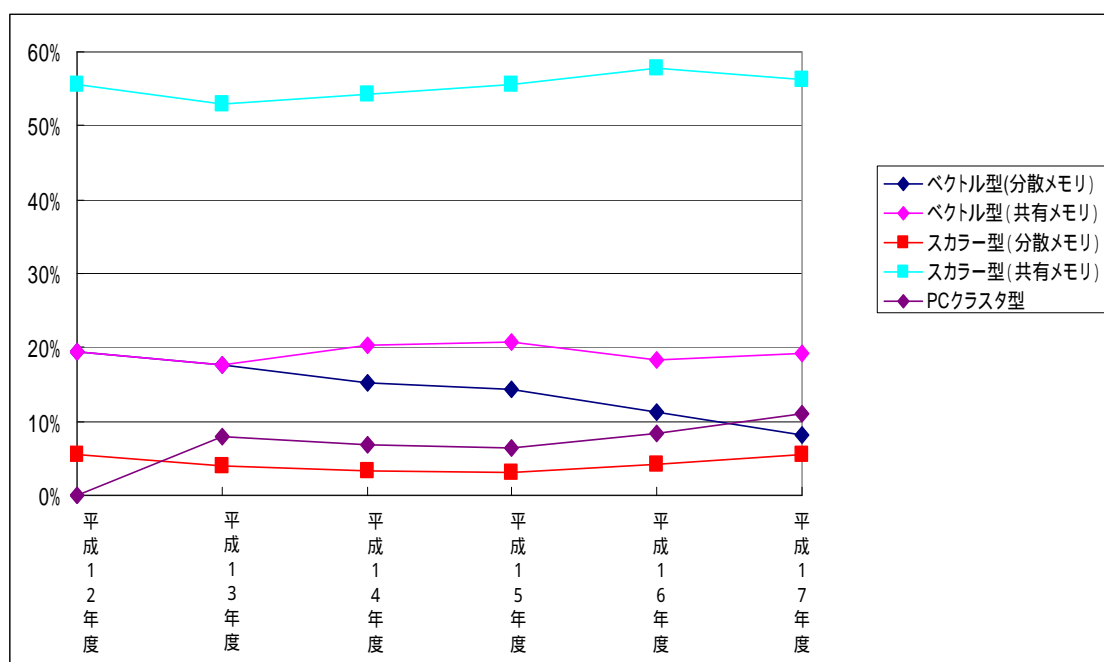


図 5 計算機のアーキテクチャの割合(設置台数ベース)

図 5 から、共有メモリ型が非常に高いシェアを保っていることがわかる。特にスカラー型(共有メモリ)は多少変動があるものの 6 割近くの水準を長期間にわたり維持している。一方、分散メモリ型は全体として横ばいもしくは微

減傾向にあり、その内訳は、スカラー型（分散メモリ）の割合が微増傾向であるのに対し、ベクトル型（分散メモリ）の割合は減少傾向にある。ベクトル型（分散メモリ）については後継機種が開発されていないことが影響していると思われる。ただし、同じ分散メモリ型の中でもPCクラスタ型は徐々に増えてきており、平成17年度では初めて10%を上回った。PCクラスタ型の増加傾向については、研究室レベルでの普及等、本調査では把握できていない部分があるため、慎重に評価する必要がある。

ベクトル型とスカラー型に分けて見ると、ベクトル型の割合は全体として微減傾向にあるが、メモリ共有型は2割弱でほぼ横ばいになっている。スカラー型については、共有メモリ型が圧倒的な割合を占めるが、平成16年度から平成17年度にかけて若干ではあるが減少している。かわりにPCクラスタ型とスカラー型（分散メモリ）の割合が増加している。

一方、図6ではアーキテクチャ別の総演算性能の全演算性能に対する割合を示している。

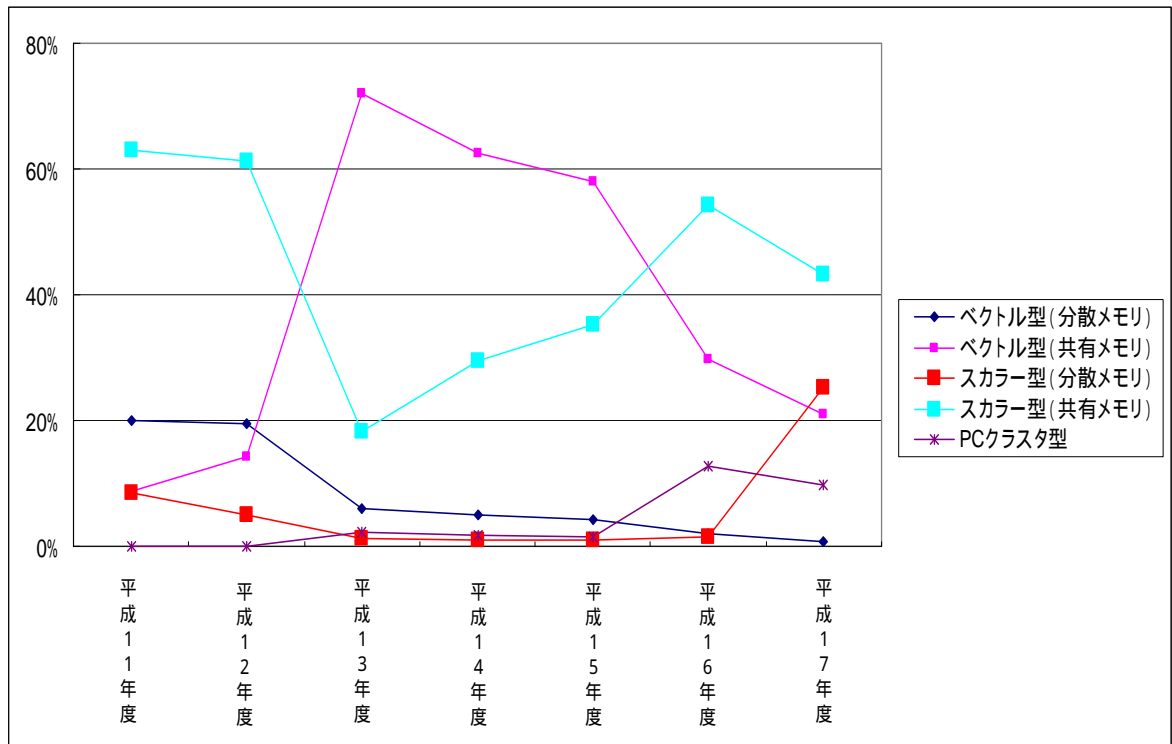


図6 計算機アーキテクチャの割合（理論演算性能ベース）

理論演算性能ベースのデータと、設置台数ベースのデータを比較すると、共有メモリ対分散メモリという意味では、傾向としては大きな違いはないと見ることができ、平成13年度に運用を開始した地球シミュレータに影響されてベクトル型（共有メモリ）の割合が大きく上昇していることがわかる。そのため、参考までに過去のNLS、つまりCP-PACSと地球シミュレータの寄与を除いた図7を併せて示す。

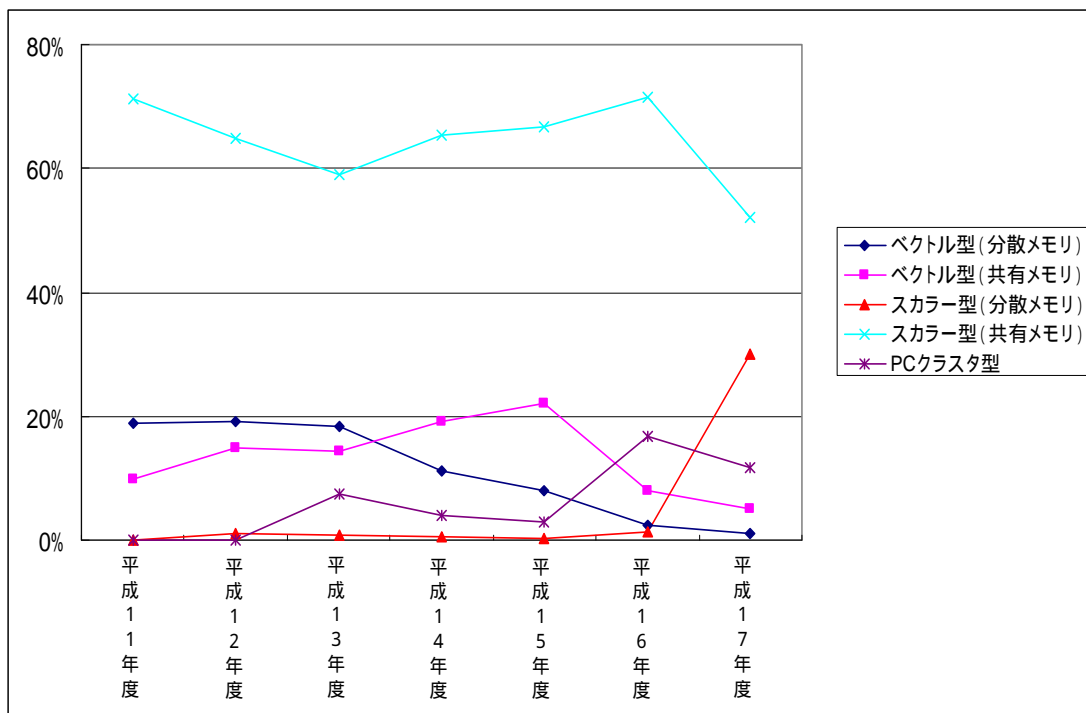


図7 NLSを除いた計算機アーキテクチャの割合（理論演算性能ベース）

図7を見ると、共有メモリ型、特にスカラー型（分散メモリ）の割合が圧倒的であることがより顕著になる。一方、図5で示した台数ベースで見た場合とは異なり、ベクトル型（共有メモリ）は、近年シェアを落としていることがわかる。また、PCクラスタ型やスカラー型（分散メモリ）のような計算機が、高いコストパフォーマンスを背景に理論演算性能の割合としても近年増加の傾向にあることがわかる。ちなみに平成16年度から平成17年度にかけて、スカラー型（分散メモリ）が急激に増加し、他が相対的に減少しているように見えるのは、平成17年度に高エネルギー加速器研究機構に導入された IBM eServer Blue Gene Solution（理論演算性能57テラFLOPS）の影響である。

・理論演算性能に対するメモリ容量

(有効回答数 20 件)

図 8 は、理論演算性能に対するメモリ容量の割合をヒストグラム化した図である。

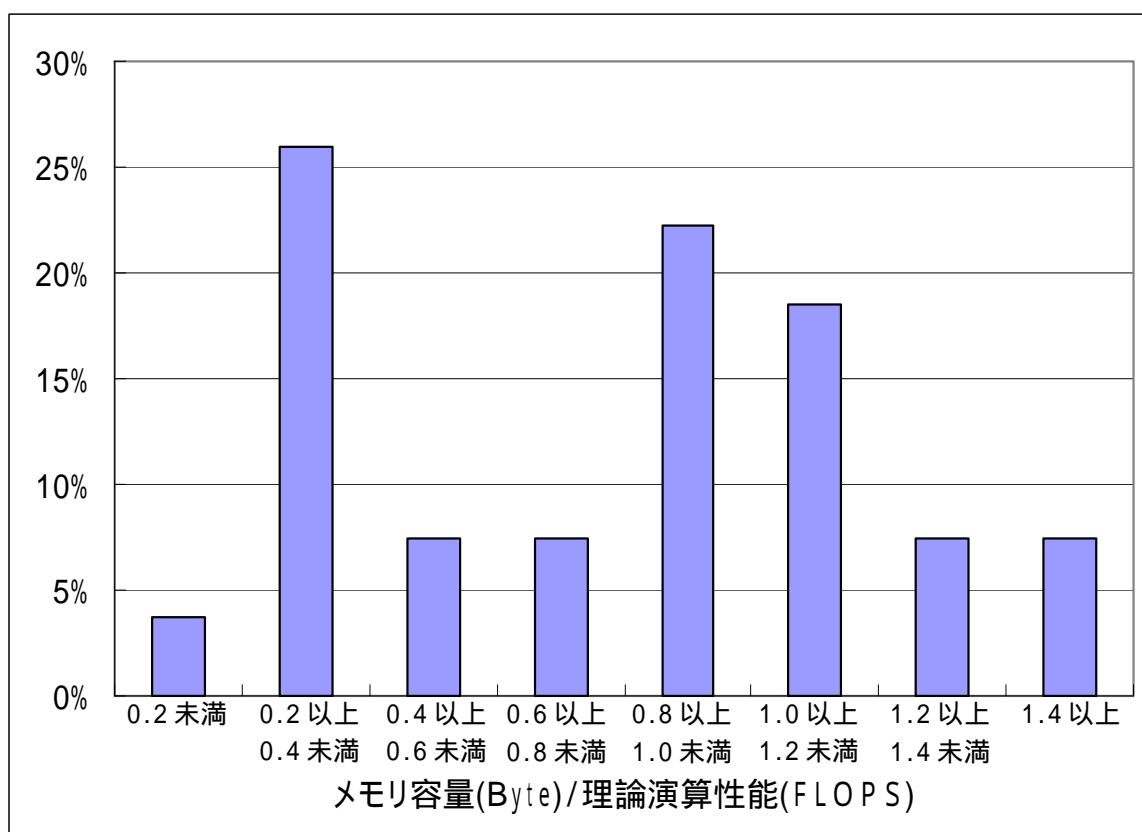


図 8 理論演算性能に対するメモリ容量の割合のヒストグラム

図 8 の数値は、各計算機に搭載されている単位理論演算性能 (F L O P S) あたりのメモリ容量 (B y t e) であり、数値が大きいほどメモリ容量を重視したシステム設計であることを意味する。

図 8 では、0.8 から 1.2 にかけてピークがあり、多くのスーパーコンピュータセンターで、演算性能とメモリ容量の比がおおむね 1 になるようにシステム設計していることがわかる。幅広い利活用を考えた場合、演算性能とメモリ容量はこの程度の割合以上が運用上適切であることを示している。一方で、0.4 未満でもピークがあることから、コスト的な制約あるいはアーキテクチ

ャ的な制約から、メモリ容量をある程度犠牲にし、演算性能に振り向けるケースも見受けられる。

・演算性能に対するディスク容量

(有効回答数 20 件)

図 9 は、理論演算性能とディスク容量の比をヒストグラム化した図である。

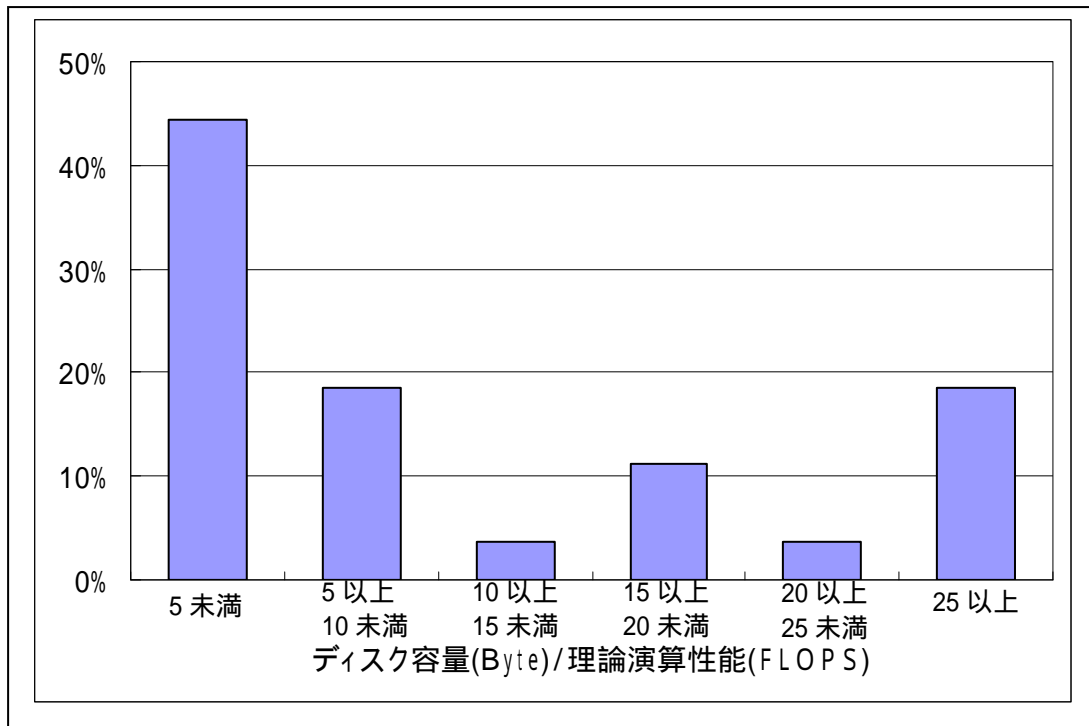


図 9 理論演算性能に対するディスク容量の割合のヒストグラム

4割強のスーパーコンピュータセンターでは、演算性能に対するディスク容量の割合が5未満、つまり、仮に1テラFLOPSの計算機であれば5テラByte以下のディスク装置を割り当てている。一方、25以上にもピークがあるが、これは主に流体分野のスーパーコンピュータセンターに多い傾向である。

また、ディスク装置の構成について見てみると、信頼性と容量あるいは高速性と容量は、トレードオフの関係にあるため、例えば信頼性の高い小容量のディスクと費用対効果を重視した大容量のディスクを併用した、階層的なストレージシステム等の、システム設計における工夫がいくつかあった。さらに、近年のストレージ製品の容量の増大傾向から、いくつかのスーパーコンピュータ

センターでは、テープバックアップを廃止し、安価で大容量のディスクに置き換えるケースも見られた。

・メモリ容量に対するディスク容量

(有効回答数 20 件)

図 10 は、ディスク容量とメモリ容量の比をヒストグラム化した図である。

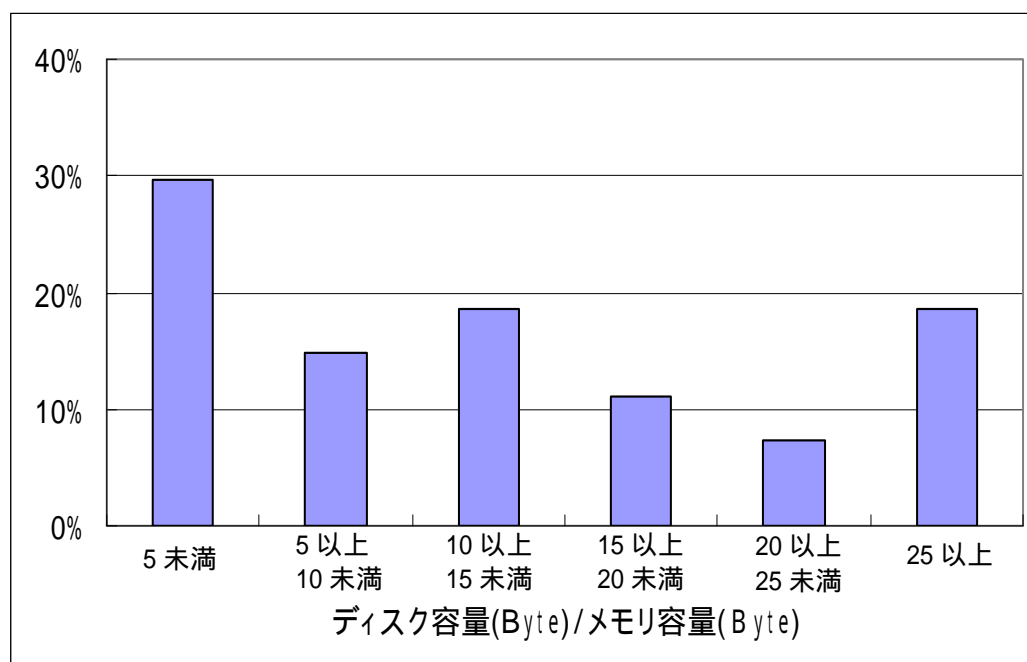


図 10 ディスク容量に対するメモリ容量の割合のヒストグラム

傾向としては、理論演算性能に対するディスク容量の場合と同じであるが、比較的均等に分布している。ここでも 25 以上にピークがあるが、理論演算性能に対するディスク容量の場合と同様、流体分野のスーパーコンピュータセンターに多く見られる傾向である。

利用状況

・プログラミング言語

(有効回答数 25 件)

利用者が使用しているプログラミング言語について、各スーパーコンピュータセンターからの回答をまとめたのが図 1 1 である。ただし、以下は各プログラミング言語の環境が提供されているスーパーコンピュータセンターの割合を示したものであり、各言語の利用者の割合を示すものではない。例えば、100%の場合、全てのスーパーコンピュータセンターで、そのプログラミング言語の環境がインストールされていることを意味する。

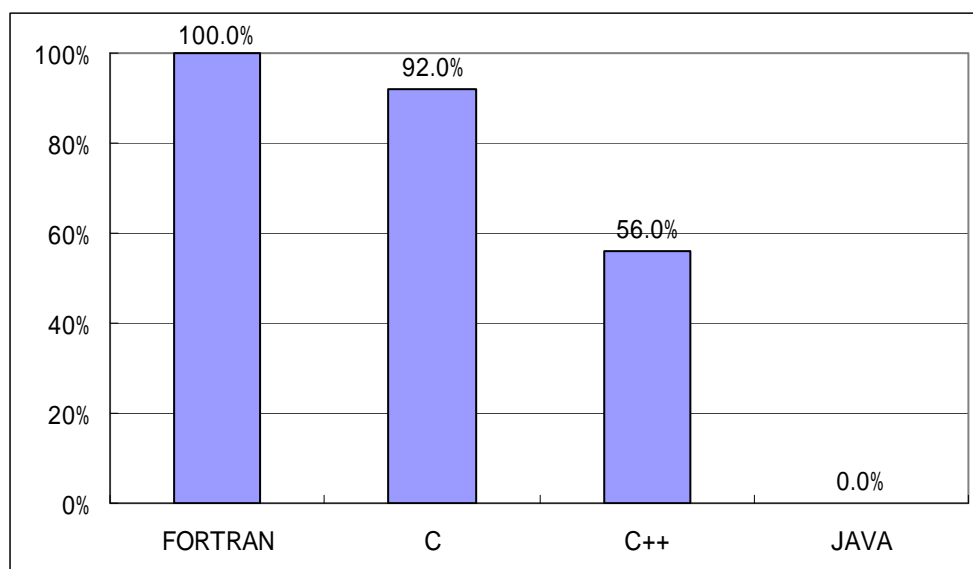


図 1 1 提供されているプログラミング言語環境の割合

図 1 1 から明らかなように F O R T R A N は全てのスーパーコンピュータセンターで利用されており、多くの利用者が F O R T R A N でプログラムを記述している。ただし、F O R T R A N 7 7、F o r t r a n 9 0 等、その内訳については今回の調査では汲み取ることができなかった。一方で、C および C ++ の利用者数も近年増加傾向にあるが、コンパイラ等の最適化がまだ不十分という意見もあった。その他、スーパーコンピュータセンターからのコメントから、F O R T R A N 7 7 から F o r t r a n 9 0 への移行、あるいは C ++

への移行等、より記述性や生産性の高い言語への移行が進んでいる印象を受けた。

並列用プログラミング言語については、十分な回答が得られなかったが、共有メモリ環境では、OpenMP⁶や各ベンダーが提供する自動並列化機能を利用するケースが多い。一方、分散メモリ環境では、MPI⁷が主流で、一部にHPF⁸やVPP/XP Fortran⁹を利用しているという回答もあった。

また、共有メモリと分散メモリが混在している環境では、多くの場合、それぞれの環境に適合したプログラミングモデルを複合的に使用している。例えば、共有メモリ型のノードを並列に結合したような計算機アーキテクチャの場合、共有メモリ環境であるノード内では、OpenMP等を使用し、分散メモリ環境であるノード間については、MPI等を使用する、といった形である。ただし、このようなハイブリッドなプログラミングモデルでは、プログラムコードについての記述性が既存の言語では十分に確保できず、結果として生産性に大きく影響するという意見もあった。

6：共有メモリ環境におけるプログラミングモデルの標準仕様。

7：分散メモリ環境におけるプログラミングモデルの標準仕様。

8：High Performance Fortranの略。分散メモリ環境にも対応したプログラミング言語。

9：富士通(株)製の分散メモリ環境にも対応したプログラミング言語。

・利用者数

(有効回答数 22 件)

図 1 2 は、年度別利用者数を全てのスーパーコンピュータセンターについて平均を取ったものである。

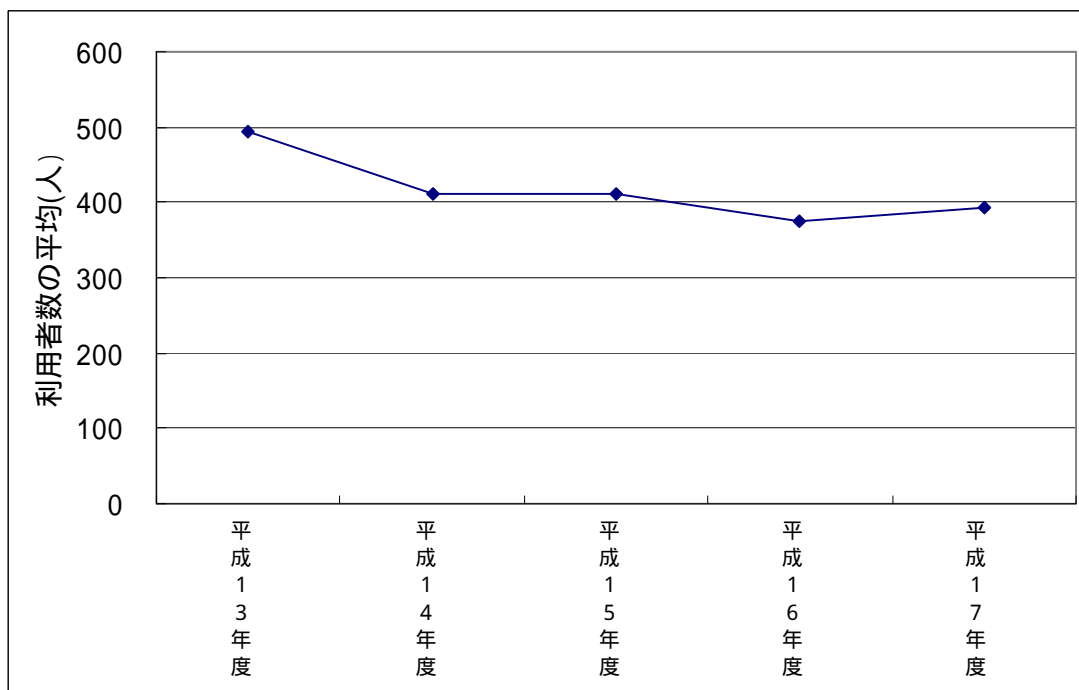


図 1 2 利用者数の平均の年度別推移

基本的に各スーパーコンピュータセンターには、実際に利用しているユーザー実数での回答を求めたが、一部のスーパーコンピュータセンターのデータは登録者数となっており、実態に即していない可能性がある。したがって、数値としては実利用者数よりは若干多めの数字になっていると思われる。また、利用者数の規模について各スーパーコンピュータセンター間で大きな差があり、単純な平均で評価している点については注意が必要である。

上記の点を差し引いて考えても、実利用者数は全体として微減傾向にある。背景としては、研究の現場における PC 等の急速な普及によるスーパーコンピュータセンター離れが一因として考えられるが、今回の調査ではそのような傾向を客観的な数値等で裏付けるまでには至らなかった。

図 1 3 に各スーパーコンピュータセンターの利用者数の推移を示す。(有効回答数 2 0 件) 平成 1 3 年度を 1 とした割合で表している。

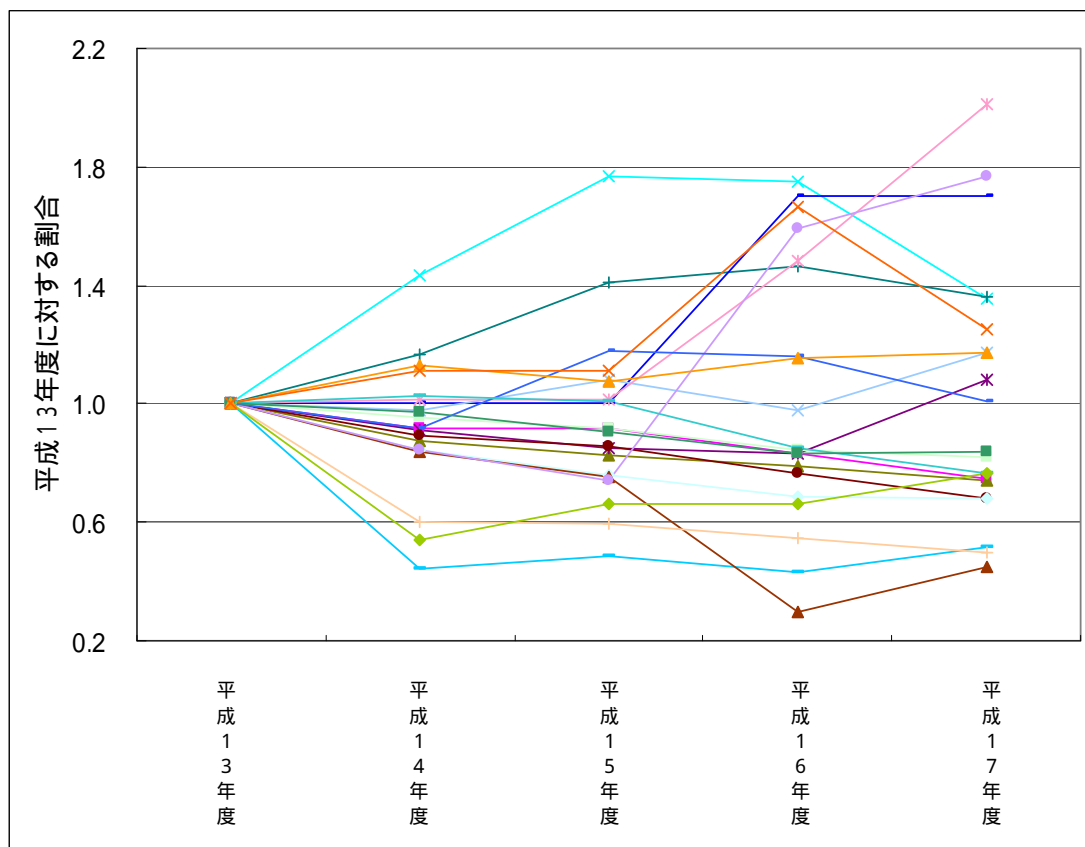


図 1 3 利用者数の推移

平成 1 7 年度実績では、平成 1 3 年度から利用者数が減少したスーパーコンピュータセンター数と増加したスーパーコンピュータセンター数を比較すると、減少したスーパーコンピュータセンターの方が若干多い。しかしながら内訳を見ると、いったん減少傾向に陥ってその後増加に転じるケースも見られ、利用者拡大に向けた各スーパーコンピュータセンターの努力が伺える。

・アプリケーションの利用状況

(有効回答数 18件)

以下は、各スーパーコンピュータセンターにおいて提供されているアプリケーションのリストである。

以下のリストの種類で、「ISV¹⁰」は特定のハードウェアメーカーと関係を持たない独立系のソフトウェアベンダーが作成・販売しているアプリケーション、「無償アプリ」は無償で利用できるアプリケーション、「自作」は研究者が自ら作成したアプリケーション、「業者委託」は研究者が業者に委託して作成したアプリケーション、という意味である。上記の分類に当てはまらないものは「その他」としている。

10 : Independent Software Vendor の略。

表3 スーパーコンピュータセンターで提供されているアプリケーション

| アプリケーション名 | 種類 | 分野 |
|-----------|-----------|----------------|
| ABAQUS | ISV | 構造解析 |
| AMBER | ISV | 分子動力学、原子力、分子科学 |
| ANSYS | ISV | 構造解析 |
| AQUA | その他 | 原子力 |
| CASINO | 無償アプリ | 物質材料 |
| CAMUS | 自作および業者委託 | 物質材料 |
| CFD2000 | ISV | 流体 |
| decaft | 無償アプリ | 物質・材料 |
| DINUS | その他 | 原子力 |
| Dmol3 | ISV | 物質・材料 |
| ENVI/IDL | ISV | リモートセンシング |
| FLUENT | ISV | 流体解析 |
| Gamess | 無償アプリ | 分子科学 |

表3 スーパーコンピュータセンターで提供されているアプリケーション
(続き)

| アプリケーション名 | 種類 | 分野 |
|-------------|-----------|----------|
| Gaussian | I S V | 計算化学 |
| GT3D | 自作 | 原子力 |
| LS-DYNA | I S V | 構造 |
| Maple7 | I S V | 数式処理 |
| MASPHYC | I S V | 材料科学 |
| Mathematica | I S V | 数式処理 |
| MATLAB | I S V | データ解析 |
| MHFDSP | 自作 | 原子力 |
| MM5 | 無償アプリ | 防災 |
| Molpro | I S V | 分子科学 |
| MOM2 | 無償アプリ | 防災 |
| MOPAC | I S V | 計算化学 |
| MSC.Marc | I S V | 構造計算 |
| MSC.Nastran | I S V | 構造解析 |
| MSC.Patran | I S V | 構造解析 |
| NOPIC | 自作 | 原子力 |
| OpenMX | 無償アプリ | 物質材料 |
| PCUBE | 自作 | 原子力 |
| Phase | 自作および業者委託 | 物質材料 |
| Phoenix | I S V | 物質・材料 |
| PV-Wave | I S V | 可視化データ解析 |
| REMP | 自作 | 原子力 |
| SAS | I S V | データ解析 |
| SERAPHIM | 自作 | 原子力 |
| SIESTA | I S V | 物質・材料 |
| SIMMER | その他 | 原子力 |

表3 スーパーコンピュータセンターで提供されているアプリケーション
(続き)

| アプリケーション名 | 種類 | 分野 |
|-------------|------------|-----------|
| Simulink | I S V | モデリング |
| SpaceFinder | I S V | データ管理 |
| SPLUS | I S V | 統計解析 |
| SPSS | I S V | 統計解析 |
| STAR-CD | I S V | 流体解析 |
| STATE | 無償アプリおよび自作 | 物質材料、地球環境 |
| STREAM | I S V | 流体解析 |
| TPFIT | 自作 | 原子力 |
| VASP | I S V | 原子力 |
| WIEN2k | I S V | 物質材料 |
| -FLOW | I S V | 流体解析 |

アンケート調査票では、自作、パブリックドメイン(無償アプリケーション)等を含んだ全てのアプリケーションの利用割合を回答として求めたが、一部のスーパーコンピュータセンターではジョブレベルでの利用状況を把握していなかったこともあり、ここではリストの提示に留める。

実際には、上記のリスト以外にも、大量の自作アプリケーションが存在し、多くのCPU時間を消費していると思われる。

運用体制

(有効回答数 24 件)

各スーパーコンピュータセンターの運用に関わる人員数について図 1 4 から図 1 9 に示す。

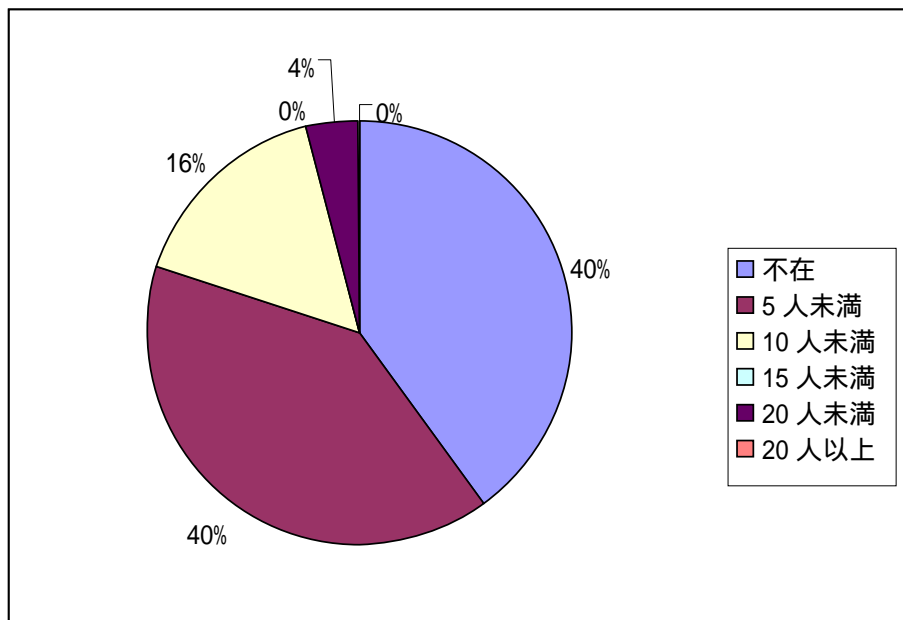


図 1 4 運用に関わる計算機科学の専門家の分布

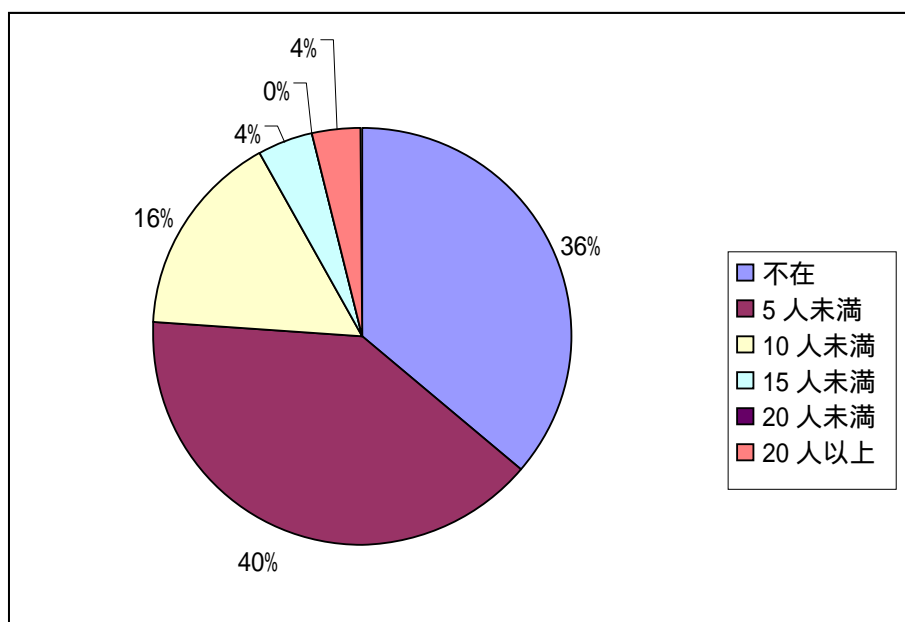


図 1 5 運用に関わるプログラミング支援者の分布

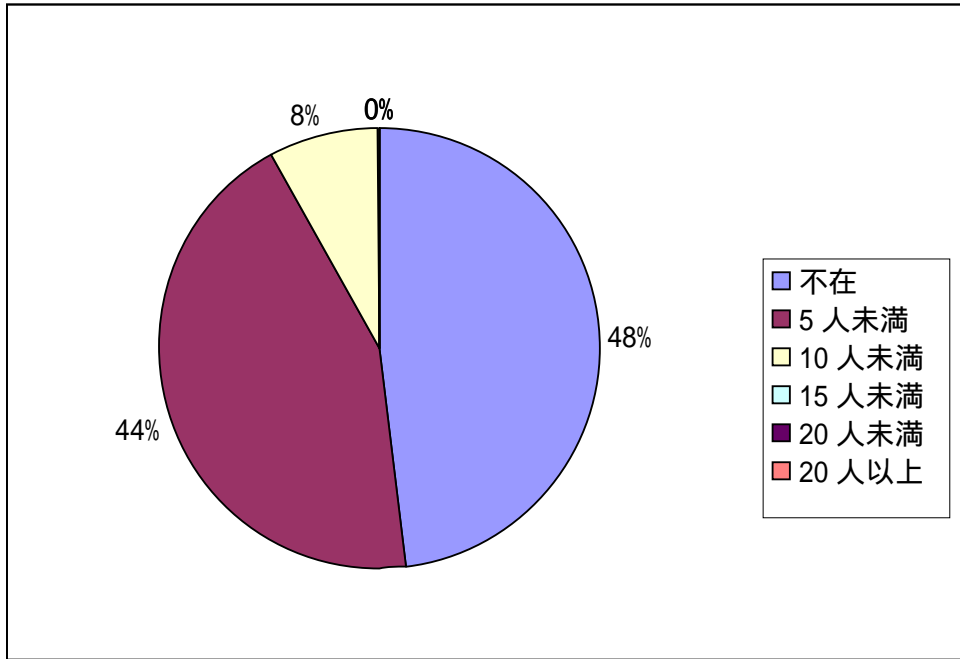


図 1 6 運用に関わるオペレータの分布

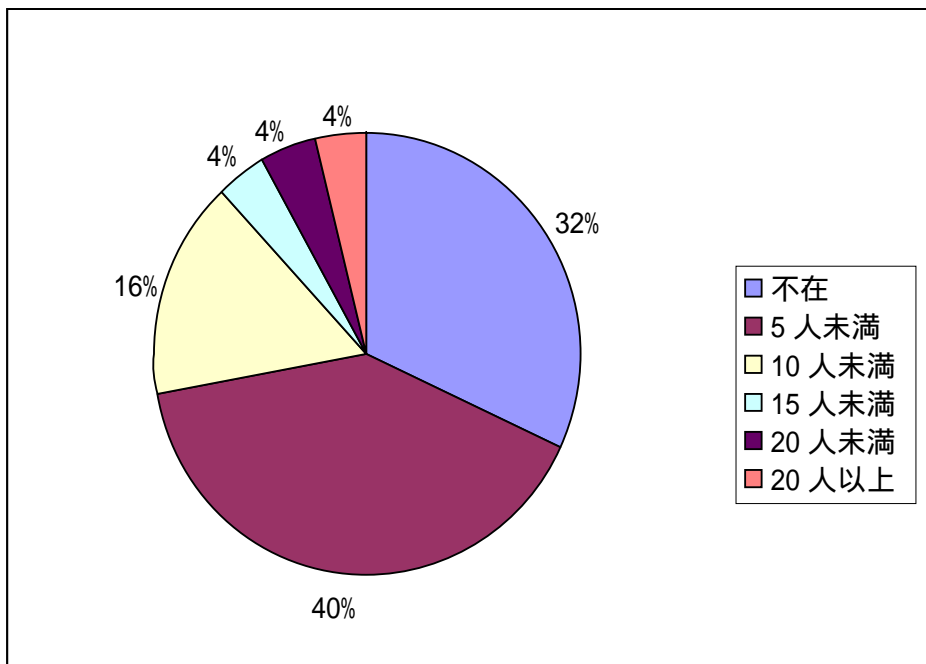


図 1 7 運用に関わるSE (センター側スタッフ) の分布

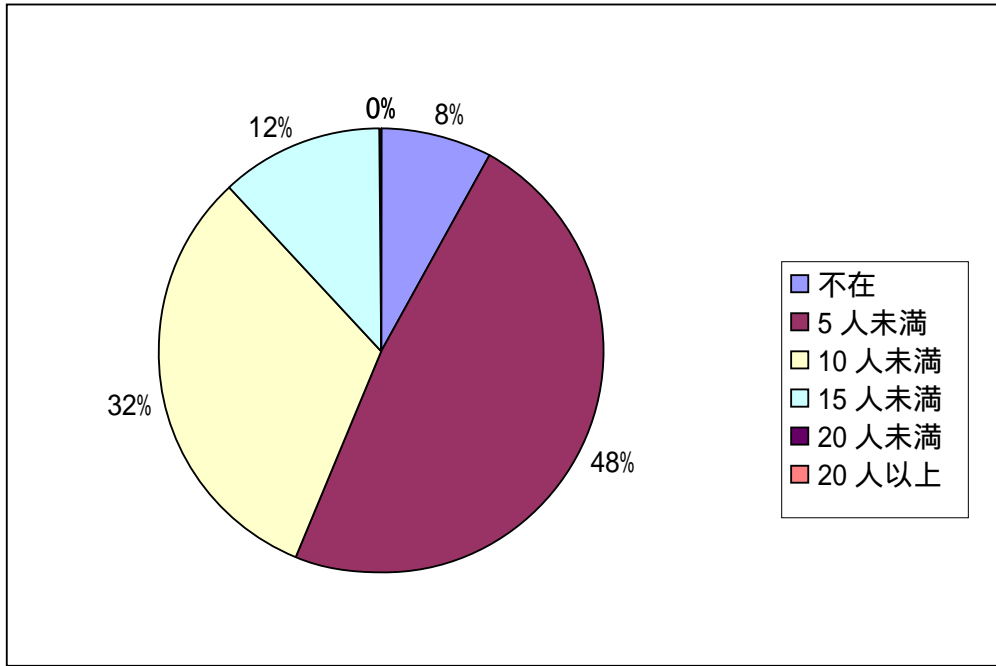


図 1 8 運用に関わる S E (ベンダー) の分布

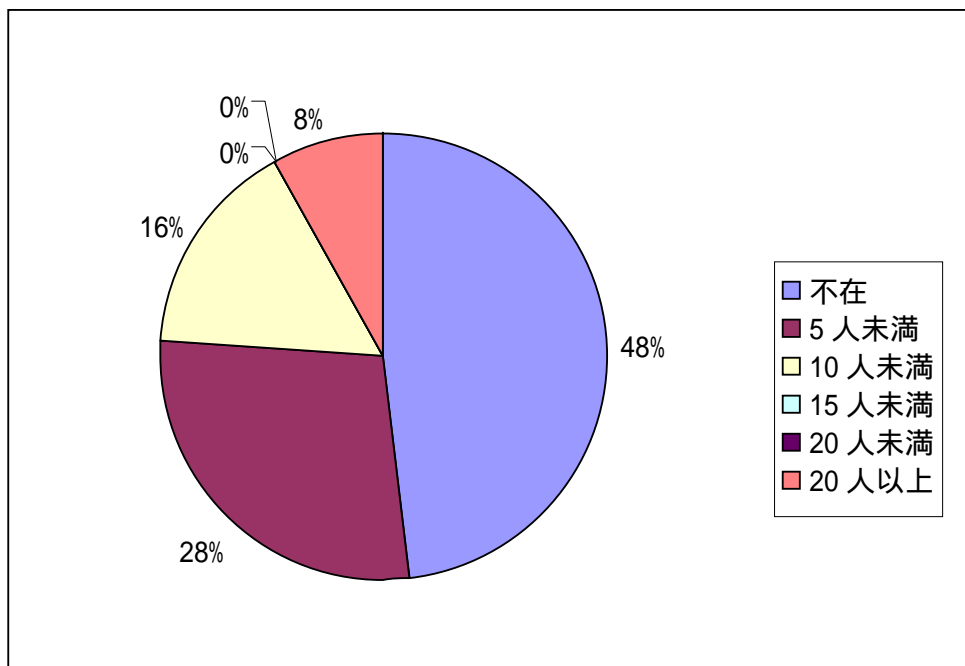


図 1 9 運用に関わる人員数の分布 (その他)

今回の調査では、図にあるように、「計算機科学の専門家」、「プログラミング支援者」、「オペレータ」、「S E (センター側スタッフ)」、「S E (ベンダー)」、「その他」の分類で調査を行った。しかしながら、一部の回答には、一人が複数の分類に該当するケースや、明確に分類することが困難である等の理

由で、上記の分類には当てはめることができない、という意見もあり、結果的に実態を十分に汲み取れていない可能性もある。

全体としては、計算機の規模にも依ると思われるが、極めて少ない人数で運用が行われている状況がわかる。特に、図15にあるように、利用者支援に直結するプログラミング支援者が不在のスーパーコンピュータセンターが4割近くあり、計算資源の円滑な利用という観点からも大きな懸念が残る。その一方で、学生アルバイト等を活用して、プログラミング支援体制の強化を図っているスーパーコンピュータセンターもあり、各スーパーコンピュータセンターの運用上の工夫が見られる。

その他の設備

(有効回答数16件)

各スーパーコンピュータセンターが次期システムの運用の際に想定している電源容量および設置面積を以下に示す。

図20は、各スーパーコンピュータセンターが次期システムで想定している消費電力の分布を示している。なお、消費電力の回答については、単位がKW(ワット)のケースとKVAのケースがあったため、力率100%と仮定し、以下、KWに統一して表記する。

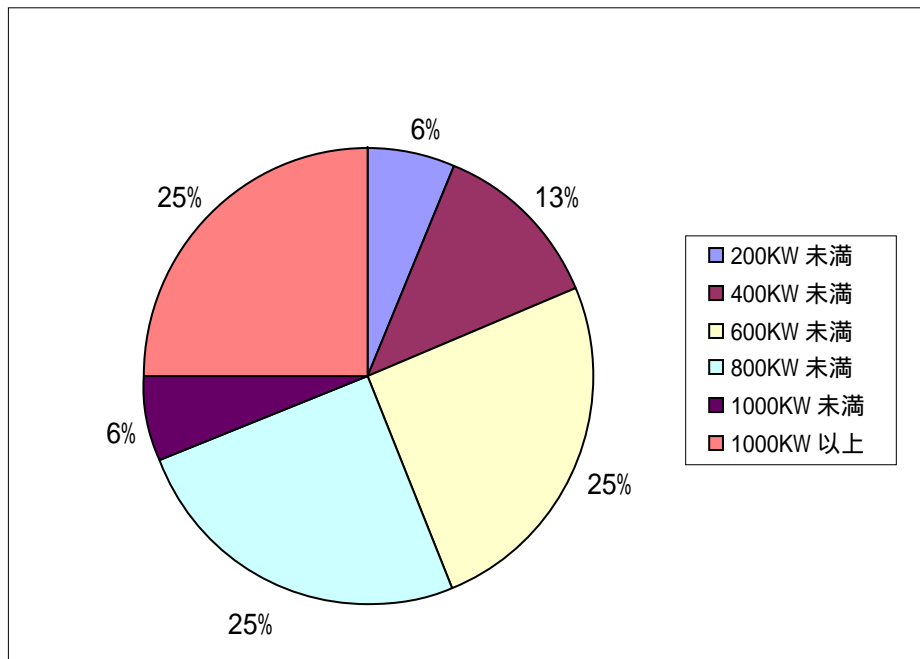


図20 次期システムにおいて想定される消費電力の分布

半数近くのスーパーコンピュータセンターが600KW以下のシステムを想定している。一般的に、電源設備の拡張は容易でないケースが多いことを想定すると、今後のシステム調達では、最大消費電力量が大きな制約となることが予想される。また、稼働時の消費電力についても、ランニングコストに直接影響する要素であるため、消費電力あたりの演算性能が高いシステムが今まで以上に求められている。

以下は、各スーパーコンピュータセンターが次期システムで想定している設置面積の分布である。

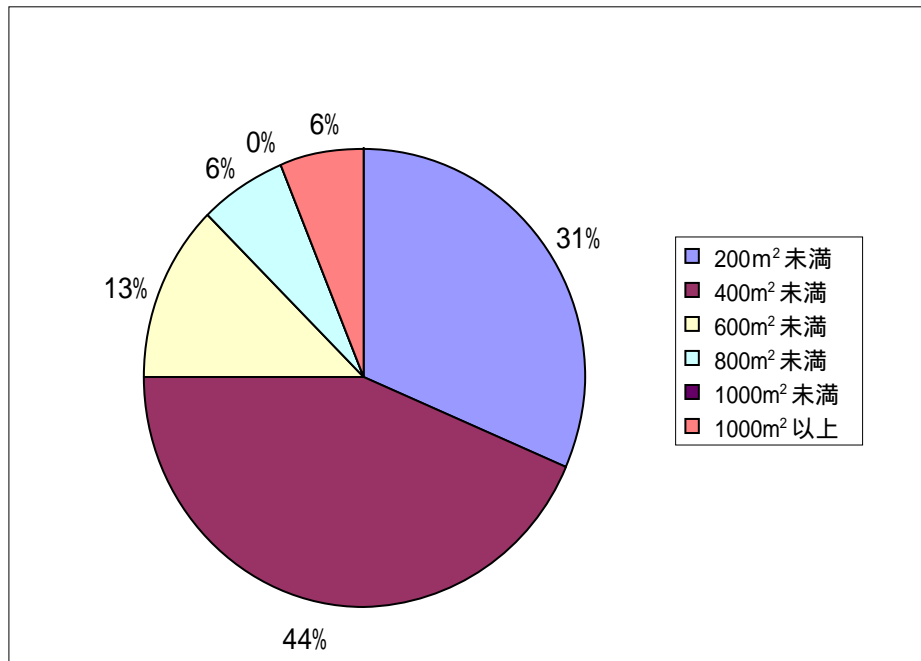


図 2 1 次期システムにおいて想定される設置面積の分布

約3割のスーパーコンピュータセンターは200m²未満の設置面積を想定している。設置面積の拡大は電源設備の増強と比較して、より困難な場合が多く、今後のシステム設計・開発においては、設置面積あたりの演算性能も電力の場合と同様、重要度が増してくると考えられる。

図 2 2 は、各スーパーコンピュータセンターが次期システムで想定している消費電力量と設置面積の相関を示した図である。

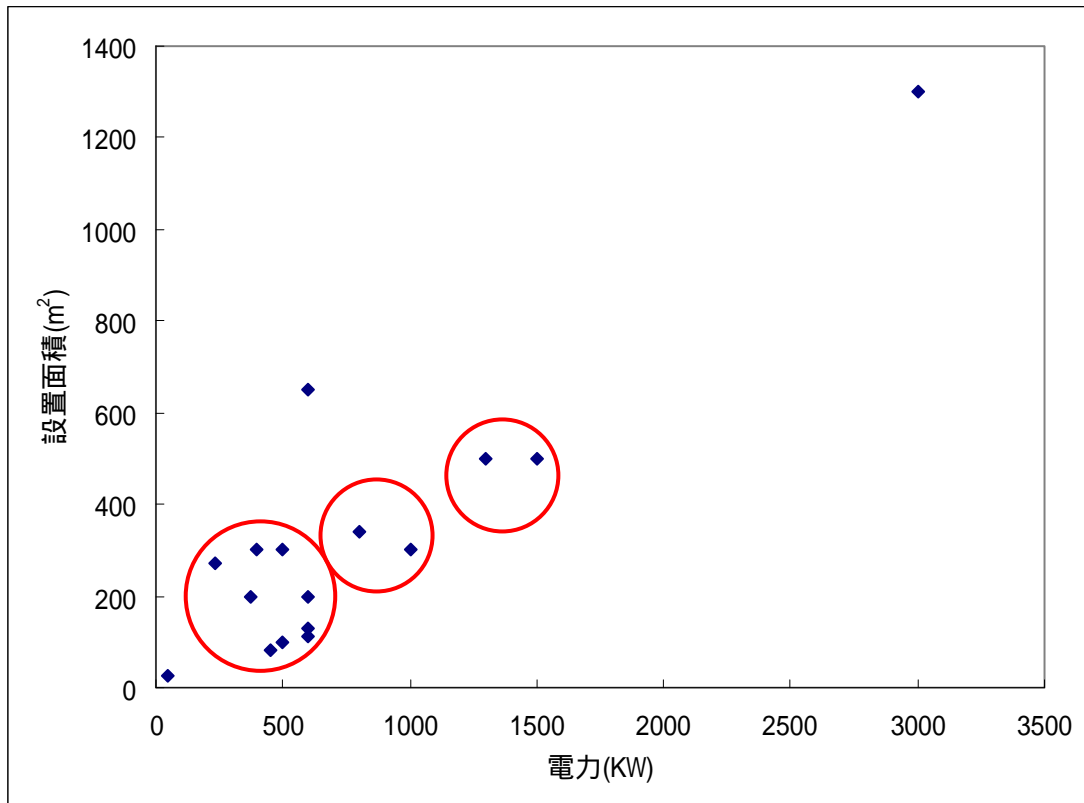


図 2 2 消費電力と設置面積の相関

図 2 2 から明らかなように、消費電力と設置面積には相関が認められる。消費電力と設置面積がお互いにバランスしながら規模を変えられるようなシステム設計が必要である。

図2.3及び図2.4は、各スーパーコンピュータセンターが想定している次期システムの理論演算性能と、想定している消費電力および設置面積についての割合を、導入を予定している年度毎に示した図である。なお、次期システムで想定している理論演算性能について幅があるケースについては、中間の値を取った。

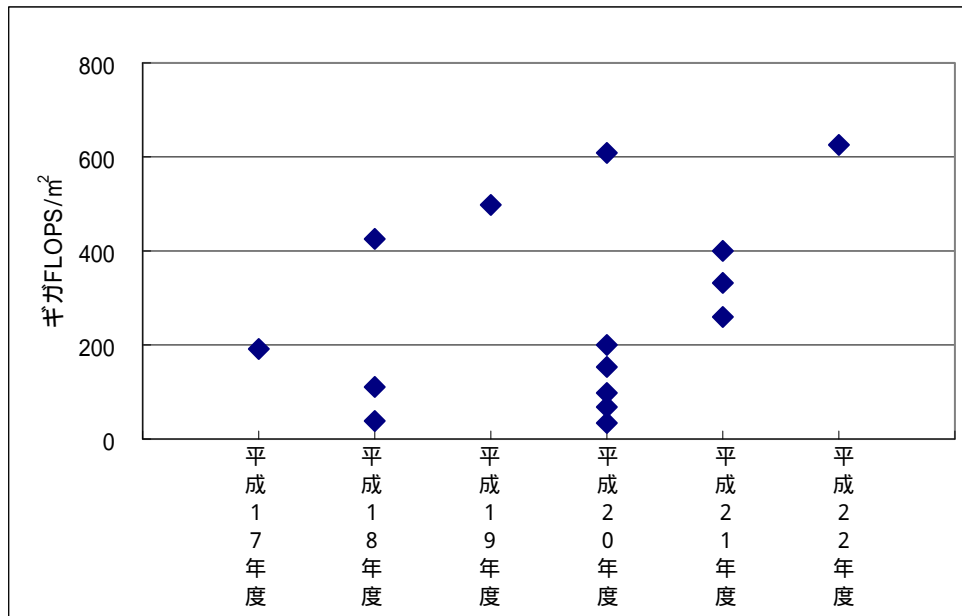


図2.3 単位設置面積あたりの理論演算性能の推移

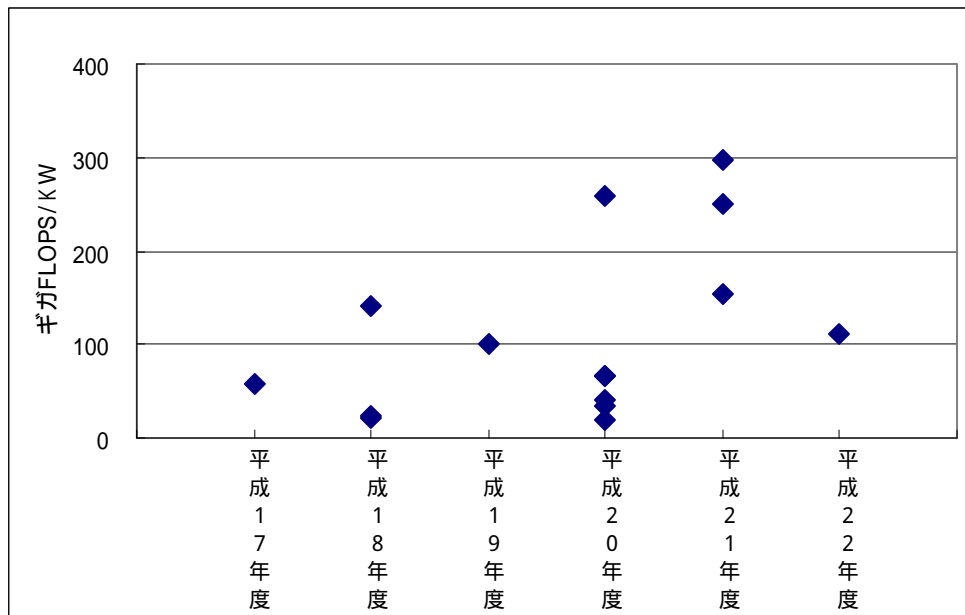


図 2 4 単位消費電力あたりの理論演算性能の推移

スーパーコンピュータセンター間でやや開きがあるものの、どちらの図も、設置面積あたりの理論演算性能、あるいは消費電力あたりの理論演算性能が今後一定の割合で向上していくことが求められていることを示している。もっとも厳しい要求では、3年で約3倍の設置性と電力効率の向上が求められているが、技術的には非常に困難である。しかし、特に消費電力あたりの理論演算性能については、運用経費に直接影響するため、今後ますます重要視されると考えられる。

(3) 各スーパーコンピュータセンターにおける現状の問題と対応策について

自スーパーコンピュータセンターの役割と位置付け

全国共同利用施設となっている7大学の情報基盤センター¹¹には、大規模・高速計算サービスの提供、人材の育成、地域の計算および研究拠点という明確な位置付けがある。また地球シミュレータ利用のための準備計算の環境提供など、NLSへの橋渡しの役割も担っている。将来的には次世代スーパーコンピュータとのシームレスな連携が期待されている。また、グリッドサービスの提供を積極的に考えているスーパーコンピュータセンターもある。

他の大学の情報処理センター等については役割がそれぞれに違い、学内の計算サポートである場合と特別な研究用システムである場合がある。それぞれに将来の固有価値を高めるための研究やサービスを模索している。

専門分野の研究機関は、各専門分野のその多くは共同利用施設として運用され、研究の拠点となっている。特定分野の大規模計算サービスが主であり、分野別専門家の利用者支援を行っている。また実験施設と計算機の融合の試みや、計算機自体を実験装置としている例も見られる。将来の見通しでは、NISとして、次世代スーパーコンピュータの利用を想定したプログラム開発や準備のための小規模計算等のための環境の提供を検討しているスーパーコンピュータセンターもある。

地球シミュレータについては、現行のNLSとして継続的な強化による維持運用を目指している。

その他、独立行政法人の研究機関では、汎用的なニーズに応えるスーパーコンピュータセンターとして利用されている例もあった。

11：北海道大学情報基盤センター、東北大学情報シナジーセンター、東京大学情報基盤センター、名古屋大学情報連携基盤センター、京都市大学学術情報メディアセンター、大阪大学サイバーメディアセンター、九州大学情報基盤センター

システムの信頼性

全国共同利用施設となっている7大学の情報基盤センターに関しては、現状ではシステムの信頼性に不満は無い。ベンダーの手厚い保守もその一因である。運用に関して、ユーザーのデータについてはスーパーコンピュータセンターとしてのバックアップは、データの一部しか保障しない等、限定的であり、基本的にユーザー責任におけるデータ保全を前提としている。また、ジョブ実行中の障害対策としてチェックポイント機能を提供しているケースもいくつかある。

他の大学の情報処理センター等は、システム障害に対する対策を工夫し、スーパーコンピュータセンターによるユーザーのデータのバックアップ等のサービス向上に努めている。

専門分野の研究機関も故障に対してのシステムの工夫に努めている。ホームディレクトリのバックアップはスーパーコンピュータセンターが行うが、ユーザーによるデータ保全およびチェックポイントの採取が一般的である。

地球シミュレータに関してはシステムの信頼性を前提に効率重視の運用をしている。また、稼働中の保守が可能である等、故障に対するシステム設計上の工夫が見られる。

システムの利用率

全国共同利用施設となっている7大学の情報基盤センターに関して、その使命を実現するため、利用率向上を目指した様々な運用の工夫が見られた。その一方で、ベクトル機のニーズが高く、計算機資源の供給が需要に追いついていないという例もあった。一方で経費の問題で縮退運転やサービス時間短縮を余儀なくされている例もあるが、国立大学法人化による経費配分の一時的な混乱や、運用経費の慢性的不足などに原因があると考えられている。ユーザー数の減少を問題視するスーパーコンピュータセンターもあり、教育・普及活動に努力している例も見られる。

他の大学の情報処理センター等に関しては、学会前や修士/博士論文の締切り前などの利用が集中する時期と、長期休暇などの利用率が低下する時期があり、このような負荷バランスの季節的変動が大きな課題となっている。

専門分野の研究機関は、一般的に非常に高い利用率を保っており、利用者へのCPU配分方法が大きな問題となっている。利用者へのプログラミング教育等の教育・普及活動が重要との共通認識がある。

地球シミュレータに関しては年度毎に公募課題を選定し、利用者へ配分する方式により運用されており利用率は非常に高い。

データ管理

全国共同利用施設となっている7大学の情報基盤センターには、一般的にデータ量の爆発的な増加が見られ、100テラByte規模のストレージ管理が必要となっている。そのためデータ管理がスーパーコンピュータセンターの計算サービスとしての大きな課題となりつつある。

他の大学の情報処理センター等についても、データ量の増大に伴い、データ管理の重要性が増大しつつある。

専門分野の研究機関に関しても、データ量の増大によるストレージの肥大化が見られる。ディスクストレージからテープストレージへのデータ移行は、データ量の増大とテープストレージのI/O速度のバランスから見て、運用上の限界を超えつつあり、システム的な工夫が必要となっている。

地球シミュレータにおいては、RAID¹²とテープストレージによってデータ保全を行っているが、I/Oの集中化やテープの性能問題が顕在化している。また計算結果として出てくる大規模データの扱いについて改善の余地が認識されている。

12 : Redundant Arrays of Inexpensive Disks の略。複数のハードディスクにデータを分割して保存することで、入出力の高速化と冗長化を実現する手法。高速性や冗長性のレベルにより、RAID - 0 から 5 までの6つのレベルが存在する。

その他

特に全国共同利用施設となっている7大学の情報基盤センターにおいて、設備条件と運用コスト、スーパーコンピュータの利用のために運転経費の一部を利用者に負担してもらおう利用負担金制度等の経営的な問題が顕在化している。また、ユーザー支援の人材不足が深刻な問題となっている。

(4) 各スーパーコンピュータセンターにおける次期システム計画について

次期システムについては、

- ・ 更新は4～5年間隔
- ・ 予算規模はほぼ現状横ばい
- ・ 性能は現行システムの10～20倍高速化を想定

がほとんどのスーパーコンピュータセンターに共通した計画のイメージである。

次期システムとして考えているアーキテクチャについては17ヶ所のスーパーコンピュータセンターから回答を得た。

- 6ヶ所のスーパーコンピュータセンターについては、特定のアーキテクチャに決めてはおらず、価格性能比等を見ながら調達時点で決める方針を採っている。
- 7ヶ所のスーパーコンピュータセンターについては、単一アーキテクチャではなく、複合システムによる構築を検討している。このうち、
 - 4ヶ所のスーパーコンピュータセンターがスカラー型とベクトル型の複合システム
 - 3ヶ所のスーパーコンピュータセンターが、スカラー型(共有メモリ)とPCクラスタ型の複合システム

を検討している。また、専用計算機を含めた複合を考えているスーパーコンピュータセンターはこのうち1ヶ所である。

- 4ヶ所のスーパーコンピュータセンターは単一システムを考えているが、

- 3ヶ所のスーパーコンピュータセンターはスカラー型(共有メモリ)
 - 1ヶ所のスーパーコンピュータセンターはスカラー型(分散メモリ)
- を計画していて、ベクトル型単一でのシステム構築を考えているスーパーコンピュータセンターはない。

表4 次期システムの想定アーキテクチャ分類

| 次期システムで想定するアーキテクチャ | | センター数 | 備考 |
|--------------------|---|-------|--------------------------|
| 未定 | 価格性能比等を見て 調達時に決定 | 6 | |
| 複合システム | スカラー型 ^(注) + ベクトル型 ^(注) | 4 | 1センターが 専用計算機組 入れ検討 |
| | スカラー型(共有メモリ) + PCクラスタ型 | 3 | |
| 単一システム | スカラー型(共有メモリ) | 3 | |
| | スカラー型(分散メモリ) | 1 | |
| 計 | | 17 | |

(注): 共有メモリ型と分散メモリ型の区別に関する記述がなかった。

(5) 各スーパーコンピュータセンターにおける平成22年度以降のシステム導入計画について

平成22年度以降の導入計画に関して12ヶ所のスーパーコンピュータセンターより回答があった。総論的には以下のとおりである。

- ・ 何れのスーパーコンピュータセンターも4、5年間隔で更新を計画している。
- ・ 2ヶ所のスーパーコンピュータセンターについては次期システムの導入が平成22年度になり、質問項目が重複する旨の回答であった。
- ・ 予算処置は厳しい状況にあり、2ヶ所のスーパーコンピュータセンターからは年度ごとに予算が漸減されることを考慮する必要があるとしている。
- ・ 利用されるアプリケーションについては現状の延長にあると考えられている。

アーキテクチャ

全てのスーパーコンピュータセンターで基本的には検討中の事項であるとの回答であったが、単一のアーキテクチャを想定しているセンターはなかった。

- ・ 8ヶ所のスーパーコンピュータセンターでは複合システムを想定している。複合の形態はスカラー型とベクトル型、あるいは専用計算機との組み合わせ等、複数検討されている。詳細は次頁の表に示した。
- ・ 4ヶ所のスーパーコンピュータセンターはいずれも検討中であり、特別な想定はしておらず、市場動向を注視している状況である。

表5 平成22年度以降のシステムの想定アーキテクチャ

| 想定アーキテクチャ | | センター数 | 備考 |
|-----------|---|-------|---|
| 検討中 | 今後の動向を見て決定 調査中 | 4 | |
| 複合システム | スカラー型 ^(注) + ベクトル型 ^(注) | 3 | 「専用計算機」はライブラリレベルの加速ボードを想定している。「特殊装置」は物理乱数発生器等を想定している。 |
| | スカラー型 ^(注) + ベクトル型 ^(注) + 専用計算機 | 1 | |
| | スカラー型 ^(注) + ベクトル型 ^(注) + スカラー型(分散メモリ) | 1 | |
| | スカラー型(共有メモリ) + 特殊装置 | 1 | |
| | スカラー型 ^(注) + 専用計算機 | 1 | |
| | スカラー型(共有メモリ) + P C クラスタ型 | 1 | |
| 計 | | 12 | |

(注): 共有メモリ型か分散メモリ型かについて記述がなかった。

性能、機能等

11カ所のスーパーコンピュータセンターより処理能力の想定に関する回答を得た。現状保有する計算機能力に対して10倍から80倍とばらつきはあるものの、少なくとも1桁以上の能力向上を期待していることが分かった。メモリ容量について回答があったのは9件で、メモリ容量と理論演算性能の比(Byte/FLOPS)で見ると、最小ケースは0.1、最大で2.0の範囲内であり、0.5以上を要求するものが6件と大半を占めた。

消費電力、設置面積

各スーパーコンピュータセンターとも現状の消費電力、及び、設置面積の延長で想定している。

(6) 次世代スーパーコンピュータとその運用に関する要望について

システム

多くのスーパーコンピュータセンターから共有メモリノードでシステム構築を行って欲しいという要望があった。特に、高い単体性能を持ち、かつByte / FLOPS値が適切なメモリ転送性能を有するCPUと、大規模なメモリが利用可能なノード、つまり、小規模ノードによる超並列システムを構築するのではなく、ある程度大規模なノードによるシステムが望まれているということであった。それに関連してMPIは、プログラムコードの保守性を大幅に低下させてしまうため、あまり利用したくないという意見があった。また、複合型アーキテクチャの場合、ベクトル計算機の割合を上げて欲しいという意見もあった。また、垂直展開を意識した場合、1メガW / ペタFLOPS程度の単位理論演算性能あたりの消費電力が低いシステムを望む声もあった。その他にも連続運転時の高信頼性や複数ユーザー利用時のシステムの分割利用機能等の提言があった。

また、アプリケーションやプログラミングの立場から、既存プログラムに対してアーキテクチャやプログラミングモデル等に継続性が有るシステムが重要であること、数多くの既存ISVアプリケーションが実行可能である必要があることも述べられていた。さらに、アプリケーションを高速・安定に実行するためには高速・高信頼なファイルシステムを有した大規模なストレージが必要であるとの意見があった。加えて、運用方針にも絡むがグリッドでの利用や遠隔可視化等のシステムが必要であるとの意見もあった。

他方、既存のアプリケーションがそのまま使えることを望むスーパーコンピュータセンターが多い中で、更なる高い性能を目指すシステムを導入し、高い実効性能を得るためにはアプリケーションを大きく変更することも時には必要という意見も少数だがあった。

加えて、インテルやAMD等のPCアーキテクチャであるX86プロセッサ¹³と互換機能を備え、コモディティを意識した高性能インターコネクトを搭載することや並列のSIMD¹⁴エンジンやGRAPE¹⁵等の専用計算機を備えるべき、あるいは、ベクトル計算機も採用すべきであるとの意見もあった。

- 1 3 : 米インテル社が開発したマイクロプロセッサのシリーズ名。主にパソコンのCPUとして使われ、市場をほぼ独占している。
- 1 4 : Single Instruction/Multiple Data の略。マイクロプロセッサにおいて、1つの命令で複数のデータを扱う処理方式。
- 1 5 : 東京大学杉本教授(当時)を中心とするグループが開発した、重力多体問題解析用の専用計算機。

運用・課金

運用対象となるシミュレーションの規模に関して、大きく分けて2つの意見があった。一つはこのシステムでのみ実行可能な超大規模あるいはグランドチャレンジのシミュレーションを行うための運用を行い、特定のシミュレーションに利用を集中させることで他の追従を許さないような成果を上げるという意見である。もう一方は、プログラムの規模にこだわらず、研究実績を踏まえた実質的な研究を行っている研究者の計算に重点を置き、CPU数や計算時間に制限を設けずに、利用資格を広くする運用が必要という意見である。実際の利用形態としては、利用者の利便性という観点で、ネットワークを通じたりリモートからの利用の必要性やグリッド技術が利用可能であることも重要であるという意見が少なからずあった。

利用課題の選定については、課題選定委員会等を設置し、選定プロセスが十分に透明性を有し、かつ選定に際して慎重で公平な審査が行われることが極めて重要であるという意見が多く見られた。また、課題分野や運用において、公平性を確保できているか、客観的にチェックできる仕組みが必要であるという意見があった。

課題選定や運用方針は、NLSとNISの役割分担や連携を踏まえた課題選定・運用方針・課金制度を設計して欲しいという要望があり、その枠組みの中で、NLS側とNIS側が協調しつつ、研究者を相互補完的に支援する体制が望ましいという意見も多く見られた。それに伴う意見として、既にNIS上で実績のあるアプリケーションについては、通常の課題選定とは別枠で優先的に資源を割り当てられる仕組みの検討への要望があった。

課金に関しては、学術目的や研究成果の公開の場合には原則無料あるいはできるだけ廉価にすべきという意見があった。課金する場合は、大規模ジョブの実行が後回しにならないこと、高額な大規模ジョブに対してはある程度割引するなどの配慮など等、できるだけ大規模計算を利用する研究者の負担を軽減させることへの要望や、全国共同利用施設となっている7大学の情報基盤センターと同レベルの料金が望ましいという意見があった。民間利用に関しては、学術利用を上回る課金をすべきという意見があった。また、課金システムのみにとどまらず、スーパーコンピュータセンターのサービスに関するマーケティングを実施し、経営体制を充実するためのビジネスモデルの確立が必要であるという提言があった。

次世代スーパーコンピュータセンターはNLSとして従来のスーパーコンピュータセンターとしてのサービスだけではなく、人材プールとして計算科学に関する幅広い人材をそろえることが重要であり、運用における利用者のソフトウェア開発支援等を通じて、シミュレーション技術や最適化等のチューニング技術等の進展が見込まれ、結果として次世代以降のスーパーコンピュータの開発や運用のためのさまざまな知見を蓄積することができる、という意見もあった。

また、少数の意見として、運用にはお金をかけず、ユーザーアプリケーションをコモディティシステムへ移植することこそお金をかけるべきであるという意見や、基礎科学に重点をおき、特定分野のキラードアプリケーションにのみ資源を割り当てるべきという意見もあった。

次世代スーパーコンピュータと既存のスーパーコンピュータセンターの連携

スーパーコンピュータセンター間の連携に関して2つの回答傾向があった。次世代スーパーコンピュータ稼働後のスーパーコンピュータセンター間におけるジョブの連携や人材の交流に関するものと、次世代スーパーコンピュータ開発での連携に関するものである。

稼働後の連携における意見の大きな傾向は、ジョブ連携に関するものである。意見の多くは、大規模ジョブを次世代スーパーコンピュータで行い、それ以下のジョブを自スーパーコンピュータセンターで行い、スーパーコンピュータセンター間の役割分担としてジョブの大小によるシームレスな連携を行うものである。それらの意見の中で、全国のスーパーコンピュータセンターは全体としてピラミッド構造で、かつ地域的に分散されている必要があるという意見や、アプリケーション開発やアルゴリズム開発を自スーパーコンピュータセンターで行い、小規模なジョブおよび初心者ユーザーを、大規模ジョブおよびトップエンドユーザーに育成するといった意見が多い。少数意見としては、自スーパーコンピュータセンターの特殊ハードウェア、例えば物理乱数生成器等をグリッド技術で次世代スーパーコンピュータから利用できるようにしたいという意見や、技術要員の人材交流の促進を図りたい、という意見があった。

また、稼働前の開発フェーズでの連携として、開発・製作にも積極的に協力したいという意見や、人材育成や現在導入されているハードウェアやシステムソフトウェアを用いた実験を行うことで協力可能であるという意見、また現在のNLSを用いてプログラムの最適化、運用システムのノウハウや、次世代スーパーコンピュータ完成後早急に成果を出すための、事前検証の場を提供可能であるという意見があった。

次世代スーパーコンピュータで実行するアプリケーション

回答数が少ない設問だったが、その中で明確なミッションを持つスーパーコンピュータセンターからは、それぞれのミッションに沿ったアプリケーションが挙げられた。また、ISVやフリーソフトウェアを動作させることも必要という意見や、開発中のソフトウェアや最適化を行う作業も円滑に実行できるようにした方がよいという提言もあった。

また、単一の大規模アプリケーションにこだわるのではなく、例えば単体のアプリケーションとしては小規模でも、入力データを少しずつ変えながら大量に実行することでワークフロー全体として大規模になるようなアプリケーションも対象とすべきであり、そのためには、ノード単位のByte/FLOP

S (理論演算性能あたりのメモリ容量)等の単純な指標だけではなく、本当にその規模でアプリケーションを動かした時の性能モデリングをきちんとすべきという意見があった。

その他

その他、調査対象機関から様々な意見・提言があった。以下箇条書きで示す。

- ・「実績のあるアプリケーションでの利用に限定してしまうと、将来ブレークスルーをもたらすかもしれない分野およびアプリケーションの進展が望めない。したがって、完成度は低くても、最新の理論・アルゴリズムを取り入れたようなチャレンジングな計算にも十分な資源配分がなされるような制度的な環境整備を希望する。」
- ・「スーパーSINETを活用して、直接アクセスして利用したい。厳選した超大規模シミュレーションを行い、新物質・材料・素材の原子構造と物性を予言し、最先端のナノテクノロジーの先鞭をつける研究体制の確立に努めたい。原子レベルの制御による新材料の設計開発が重要であり、そのための第一原理シミュレーション計算が重要である。」
- ・「次世代スーパーコンピュータについては、積極的な情報公開と関係機関との連携強化を今後も御願いたい。」
- ・「計算システムの構築は複数のプロジェクトが同時並行で走る『競争的』関係が必須である。その結果はユーザーの獲得数や利用率、ギガバイト秒等で評価が可能である。」
- ・「ユーザー側の融通の利くシステムにして欲しい。次世代スーパーコンピュータでは、『スーパーコンピュータセンターがユーザーの要望に合わせる』思想が必須だと考える。恐らく詳細な運用規則ができると予想されるが、原則は規則に従った運用としつつも、例外的な利用も簡便な手続きで広く認めるようにして欲しい。例えば本学では、以下のようなユーザーからの特別な要望にも応えつつ運用している。
 - ・ 特殊なソフトのインストールを可能にして欲しい。

- ・特殊なデバイスを接続させて欲しい。
- ・一時的に大きな計算機資源を確保したい。

など」

- ・「ハードウェア性能も重要であるが、ユーザーの利便性も重要である。多様なプログラミングモデルに対応したシステムであることや、ジョブの効率的な処理が可能であることが必要である。コンパイラによる自動並列化機能や最適化機能の強化、さらに新たなプログラミングモデルによる言語の創出も重要である。また、高性能な数値計算ライブラリ、使いやすいデバッガや、チューニングツール等の整備も重要である。」
- ・「次世代スーパーコンピュータの目標を低くおいてはならない。非公開ではあるが、2011年～2012年には米国では理論演算性能で10ペタFLOPSを実現し、かつ、100テラFLOPSから1ペタFLOPS程度のスーパーコンピュータセンターが米国や欧州に早晚多数整備してグリッド化する動きを示す情報にも触れている。」
- ・「ペタFLOPS級のマシンの有効利用にはMPIを中心とした従来のプログラミングモデルでは性能を十分に活かし切れない。例えば米国のHPCSS¹⁶ではUPC¹⁷等で共有メモリ環境のプログラミングモデルを探求し、スカラー型のアーキテクチャ上でも、従来のベクトル型アーキテクチャに近い性能を上げている例の報告もある。また、次世代のSIMD技術も大いに活用すべきであるが、そのためにも従来のベクトル向けソフトウェア技術がそれらに適合されなくてはならない。このようなソフトウェアへの投資が大変重要である。」
- ・「民間との共同プロジェクトのような場合、確実なセキュリティやジョブ実行の自由度が担保される必要がある。」
- ・「地球シミュレータの運用経験を次世代スーパーコンピュータの開発に活かすべきである。」

16 : High Productivity Computing Systems の略。米国防総省が推進するスーパーコンピュータプロジェクト。

17 : Unified Parallel C の略。プログラミング言語Cの並列環境向けの拡張版。

4. まとめ

今回の調査から、以下のことが言える。

1. 国内の主要な計算機システムの理論演算性能の上昇トレンド

国内と国外では、主要な計算機システムの理論演算性能の向上速度に大きな差があり、現状のまま推移すると、国内の計算環境は、計算科学分野で国際的に十分な競争力が維持できない水準にまで低下する恐れがあることがわかった。したがって、本プロジェクトにおいて、演算性能としてインパクトを与える計算機システムを開発することは当然であるが、これと併せて、将来的に日本国内の計算資源の重層的な強化に資することが求められている。また、海外、特に米国の動向を十分に調査・分析し、状況の変化に柔軟に対応しながら、プロジェクトを推進していくことが重要である。

2. 次世代スーパーコンピュータの機能

現状のソフトウェア資産および利用環境が継承でき、かつ容易に演算性能を引き出せるようなアーキテクチャが広く望まれている。そのため、計算環境の移行に際して、プログラムコードの大幅な修正が必要となったり、十分な演算性能を得るまでにチューニング等で多大な労力を必要とするような計算機アーキテクチャは、利用者には受け入れられない可能性が大きい。この課題を克服するためには、可能な限り大規模なメモリ容量やCPU-メモリ間およびノード間のデータ転送能力の確保等のハードウェア的な検討を今後も深めていく必要がある。

プログラミング言語については、現状ではFORTRANのニーズが高いものの、ハードウェアの進化・複雑化に対応した、より記述性、保守性に優れた生産性の高い言語および開発環境が求め

られている。したがって、本プロジェクトにおいては、言語の拡張を含めて、コンパイラ、数値計算ライブラリ等のソフトウェア開発環境に関する検討が不可欠である。

次世代スーパーコンピュータの構成部品は、過去に例がない規模の部品点数に上がることが予想される。その一方で、計算科学分野に画期的成果をもたらす強力な研究基盤施設として、安定的に運用されることが望まれている。そのため、システム設計においては、垂直展開も念頭に置きながら、高信頼性、耐故障性等の可用性に十分に配慮し、検討を進めることが重要である。

3. 次世代スーパーコンピュータの運用のあり方

次世代スーパーコンピュータの運用については、公正な課題選定に基づいた大規模なグランドチャレンジ型のアプリケーションに集中的に資源配分すべきという意見と、その一方で、将来大きな科学的な発展に寄与する可能性のあるアプリケーションについても十分な資源的な割り当てを検討すべきという意見があった。また、NIS上で実績のあるアプリケーションについては、通常の課題選定とは別枠で資源を割り当て、なおかつ次世代スーパーコンピュータでシームレスに実行できるような技術的・制度的な整備が必要との意見もあった。さらに、単体のプログラムで大量の資源を必要とするようなアプリケーションばかりでなく、単体のプログラムは小規模でも、それを大量の入力パラメータで並列実行することで全体として大規模となるようなアプリケーションの実行も、運用上考慮すべきという意見もあった。運用のあり方の検討においては、上記の意見も考慮しながら、他のスーパーコンピュータセンターとの役割分担にも配慮する必要がある。

次世代スーパーコンピュータは、日本国内の計算資源の中核として、NISをはじめとする他のスーパーコンピュータ等とのグリッド等を介した連携が望まれている。そのためには、外部との高速・広帯域なネットワークを整備するとともに、高度なセキュリ

ティ管理や資源の仮想化等に対応したグリッド機能が必須である。同時に、さまざまな利用形態に対応できる柔軟な運用が求められる。

4. 次世代スーパーコンピュータのアーキテクチャ等

各スーパーコンピュータセンターが想定している次期システムでは、低い消費電力と高い実装密度が今まで以上に求められている。したがって、本プロジェクトにおける計算機アーキテクチャの検討においては、省電力化技術および設置面積削減のための高密度実装技術を垂直展開の必須要件として位置付け、これらについては特に留意しながらシステム開発を進めていくことが重要である。

多くのスーパーコンピュータセンターが次期システムの要件として、既存のプログラムコードおよびI S V製ソフトウェア等を含んだ、既存のソフトウェア資産が可能な限り無変更で動作するようなアーキテクチャを望んでいる。また多くの場合、高い演算性能を得るために、高度なチューニングを必要とするようなアーキテクチャは運用上、受け入れられる状況にない。したがって、既存システムとの互換性と、プログラミングから結果の出力までのユーザーのワークフロー全体を通じて高い生産性を確保できるアーキテクチャおよびソフトウェア環境が求められている。

5. 人材育成

各スーパーコンピュータセンターの運用に関わる人員、特に利用者支援に係る人員が不足している状況に鑑み、本プロジェクトでは、例えばソフトウェアのポータリングやチューニング等に関する高度なスキルを備えた人材の育成に資することはもちろんのこと、日本全体として、計算機システムとアプリケーションの橋渡しができるような人材を安定的に育成していくための今後の枠組み作りについての検討が望まれる。

(参考資料)

アンケート調査では、以下のような調査票を用いて調査を実施した。

(様式)

次世代スーパーコンピュータにおけるユーザーニーズのアンケート調査票

平成18年 月 日

| | |
|----------|----------------|
| 1. 機関代表者 | 〔所属機関〕〔役職〕〔氏名〕 |
|----------|----------------|

| |
|-----------------|
| 2. 貴センターの概要について |
|-----------------|

貴センターの位置づけを以下から選択し、 で囲んで下さい。

- ・ 特定分野の研究のための施設
- ・ 分野を特定しない共同利用施設

研究分野を で囲んでください。(複数回答可、共同利用施設の場合は計算機負荷から見て主要な研究分野があれば記入をお願いします)

- ・ 物質・材料(ナノテクノロジー)
- ・ ライフサイエンス
- ・ ものづくり
- ・ 防災
- ・ 地球環境
- ・ 原子力
- ・ 航空・宇宙
- ・ 天文・宇宙物理
- ・ その他(分野:)
- ・ 不明

[補足する事項があれば以下に記入してください]

3.現在の状況について

A) システム構成について

1) 計算機名と仕様

平成13年度から現在までの過去5年間について、貴センターで運用していた(いる)主要な計算機システムを以下の要領で記入してください。

| 項番 | 計算機名 | 種類 (注) | 理論性能 (ギガFLOPS) | ノード 台数 | ノード内 CPU数 | ノード あたりのメモ リ容量 | 導入年 度 |
|----|------|-----------|-------------------|-----------|--------------|----------------------|----------|
| 1 | | | | | | | |
| 2 | | | | | | | |
| 3 | | | | | | | |
| 4 | | | | | | | |
| | | | | | | | |

(注): システムを構成しているノードのアーキテクチャについて次から選択してください。“ベクトル”、“スカラ(SMP)”、“スカラ(クラスタ)”、“専用機”、“その他”。ここでは、ノードが3台以上のCPUから構成されるものを「スカラ(SMP)」、ノードが2台以下のCPUから構成されるものを「スカラ(クラスタ)」と定義します。

システム構成図等を添付していただくようお願いします。

[補足する事項があれば以下に記入してください]

2) 周辺装置について

ディスク容量、可視化装置等の構成について、装置毎に箇条書きで記述願います。

3) 貴センター内で利用者が使用しているプログラム言語について

Fortran、C、JAVA等可能ならば割合もお答えください。

B)運用状況について

1) 運用状況に関する数値データ

以下の項目についてお答えください。

- ・利用者数(平成13年度から現在までの年度別で。平成17年度については現時点の情報で結構です。)

実際に利用したことのある利用者の実数でお答えください。

| 年度 | 利用者数(人) |
|------|---------|
| 13年度 | |
| 14年度 | |
| 15年度 | |
| 16年度 | |
| 17年度 | |

- ・研究分野別利用状況割合(平成13年度から現在までの年度別で。平成17年度については現時点の情報で結構です。)

| 研究分野 | 研究分野別の割合(%) | | | | |
|-----------------|-------------|----------|----------|----------|----------|
| | 13年 度 | 14年 度 | 15年 度 | 16年 度 | 17年 度 |
| 物質・材料(ナノテクノロジー) | | | | | |
| ライフサイエンス | | | | | |
| ものづくり | | | | | |
| 防災 | | | | | |
| 地球環境 | | | | | |
| 原子力 | | | | | |
| 航空・宇宙 | | | | | |
| 天文・宇宙物理 | | | | | |
| その他(分野：) | | | | | |
| 不明 | | | | | |

[補足する事項があれば以下に記入して下さい]

2) 計算機毎の利用状況

設問「A)システム構成について」の「1) 計算機名と仕様」でお答えいただいた計算機毎の年度別利用状況についてお答えください。

- 計算機毎の利用率（平成13年度から現在までの年度別で。平成17年度については現時点の情報で結構です。）

| 計算機名 | 利用率(%) | | | | |
|------|--------|------|------|------|------|
| | 13年度 | 14年度 | 15年度 | 16年度 | 17年度 |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |

- 計算機毎のジョブ本数でみた並列度の分布（平成13年度から現在までの年度別で。平成17年度については現時点の情報で結構です。）

例) 計算機Aについて

| | ジョブの本数で見た並列度の分布 | | | | |
|-----------------|-----------------|------|------|------|------|
| | 13年度 | 14年度 | 15年度 | 16年度 | 17年度 |
| 1 CPU | 50% | | | | |
| 2CPU ~ 4CPU | 20% | | | | |
| 5CPU ~ 8CPU | 5% | | | | |
| 9CPU ~ 32CPU | 2% | | | | |
| 33CPU ~ 64CPU | 2% | | | | |
| 65CPU ~ 128CPU | 10% | | | | |
| 129CPU ~ 256CPU | 10% | | | | |
| 257CPU ~ 512CPU | 1% | | | | |
| 513CPU以上 | 0% | | | | |

[補足する事項があれば以下に記入して下さい]

3) アプリケーション別の利用状況

貴センターの計算機システムで現状実行されているアプリケーションについて、以下の要領でお答えください。

| 項番 | 主要 アプリケーション 名 | コード の種別 (注1) | 分野 | 実行される 計算機名 | 使用 割合(注2) |
|----|---------------------|--------------------|----|---------------|--------------|
| 1 | | | | | |
| 2 | | | | | |
| 3 | | | | | |
| 4 | | | | | |
| | | | | | |

注1：自作、業者委託で作成、ISV、パブリックドメイン、その他から選択してください。

注2：実行される計算機における使用割合（％）を記述願います。実行される計算機名は、設問「A)システム構成について」の「1)計算機名と仕様」の中の計算機名に対応させてください。

[補足する事項があれば以下に記入してください]

- ・特に過去5年の中で、実行されたアプリケーションの傾向の変化について記述してください。

4) 運用体制について

貴センターにおける運用に関わる現状の体制について、以下の分類毎に人数をお答えください。

| 分類 | 人数 |
|---------------------|----|
| 計算機科学の専門家 | |
| プログラミング支援者 | |
| オペレータ | |
| システムエンジニア(センタースタッフ) | |
| システムエンジニア(ベンダ) | |
| その他 | |

[補足する事項があれば以下に記入してください]

4.現状の問題と対応策

現在の計算機システムを運用している中で抱えている問題と、それに対してどのように対応しているかについてお聞きします。

1) 貴センターの役割・位置づけについて

貴センターの役割・位置づけについて、将来的な見通しを含めてご意見をお願いします。

2) システムの信頼性について

システムの信頼性に対する考え方をお聞かせください。現状で問題を抱えている場合は、その対応方針についても、併せて記述してください。

例) ジョブ実行時に、利用者自身がチェックポイントを取る。センターで定期的にチェックポイントを取る。センターで定期的にデータのバックアップをする。等。

3) システムの利用率について

システムの利用率について問題をお持ちの場合は以下に記述してください。その問題についての対応方針についても、もしあれば併せて記述してください。

4) データ管理について

データ量の増大に伴うストレージの肥大化、バックアップ、データ共有等について問題をお持ちの場合は以下に記述してください。その問題についての対応方針についても、もしあれば併せて記述してください。

5) その他

5. 貴センターにおける次期システムの計画について

1) 導入計画の概略

導入時期、レンタル(リース)年数、調達方法(2段階調達等)、予算規模等について記述してください。

2) 現時点で想定している導入機種の様について

想定するアーキテクチャ

例)ベクトル、スカラ、専用機、特にアーキテクチャは想定していない、等(専用機の場合は対象とするアプリケーション分野についても記述をお願いします)

想定する性能(処理能力・メモリ容量等)、機能(OS・サポートアプリ・ツール等)

想定する最大消費電力

想定する最大設置面積

想定するサポート体制

利用が想定されるアプリケーションとその割合（わかる範囲で結構です）

| アプリケーション | 割合 | 計算タイプ ^(注) |
|----------------------|----|----------------------|
| 物質・材料（ナノテクノロジー） | | |
| ライフサイエンス | | |
| ものづくり | | |
| 防災 | | |
| 地球環境 | | |
| 原子力 | | |
| 航空・宇宙 | | |
| 天文・宇宙物理 | | |
| その他（分野： ） | | |
| 不明 | | |

（注）計算タイプの例：流体計算、構造計算、分子軌道計算、等

その他

6.貴センターにおける2010年(次世代スーパーコンピュータ完成後)のシステム導入計画について(書ける範囲でお願いします)

1) 導入計画の概略

導入時期、レンタル(リース)年数、調達方法(2段階調達等)、予算規模等について記述してください。

2) 現時点で想定している導入機種の様について

想定するアーキテクチャ

例) ベクトル、スカラ、専用機、特にアーキテクチャは想定していない、等(専用機の場合は対象とするアプリケーション分野についても記述をお願いします)

想定する性能(処理能力・メモリ容量等)、機能(OS・サポートアプリ・ツール等)

想定する最大消費電力

想定する最大設置面積

想定するサポート体制

利用が想定されるアプリケーションとその割合(わかる範囲で結構です)

| アプリケーション | 割合 | 計算タイプ ^(注) |
|-----------------|----|----------------------|
| 物質・材料(ナノテクノロジー) | | |
| ライフサイエンス | | |
| ものづくり | | |
| 防災 | | |
| 地球環境 | | |
| 原子力 | | |
| 航空・宇宙 | | |
| 天文・宇宙物理 | | |
| その他(分野:) | | |
| 不明 | | |

(注) 計算タイプの例：流体計算、構造計算、分子軌道計算、等

その他

7.次世代スーパーコンピュータとその運用に関するご要望

1) システムについて

次世代スーパーコンピュータの性能、アーキテクチャ、メモリ容量等についてご要望を記入してください。

2) 運用について

次世代スーパーコンピュータの運用についてご要望があれば記入してください。

3) 課金について

次世代スーパーコンピュータを利用する場合の課金方法についてご要望があれば記入してください。

4) 次世代スーパーコンピュータと貴センターの連携について

次世代スーパーコンピュータと貴センターの連携についてご要望があれば記入してください。

5) 次世代スーパーコンピュータで実行するアプリケーションについて

6) その他

以上