

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  
意見のまとめと議論のたたき台

1. 特定高速電子計算施設の共用の促進に関する基本的な方向

現行の基本的な方針の記述

特定高速電子計算機施設が、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、研究者等にとって魅力のある施設となり、科学技術の広範な分野における多くの研究者等に活用されることが重要である。  
このため、多様な利用者にとって使いやすく、優れた成果が創出されるよう、本施設の整備及び運営等を行うこととする。

提出された意見

- ・研究者にとって魅力的な施設として、以下の機能を有することが必要。(3)
  - －最先端の研究技術開発拠点（ハード・ソフト）であること。
  - －学生・ポストク・教員にとっても魅力的な、教育施設として効率的な人材育成のための機能を持つこと。
  - －計算科学の研究教育拠点として新たな観点で人材登用をすること。
  - －ソフトウェアのメンテナンス、実装、チューニングなどを専門に行う人材育成と雇用の創出を行うこと。
- ・材料科学・工学は種々の分野との融合と連携で成り立つ学問研究領域であり、幅広い分野の研究者にとって魅力あるコンピュータであるべき。(4)
- ・異分野融合を加速させ、科学技術全体の発展につながることを期待。(12)

1. 共用の促進に関する基本的な方向

- 世界最先端・最高性能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、本施設が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ける多くの研究者等に活用されることが重要。
- このためには、多様な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ことを重視して、本施設の整備及び運営等を行っていくことが不可欠。

## 2. 特定高速電子計算機施設の整備に関する事項

### 現行の基本的な方針の記述

計算科学技術の分野では研究開発が急速に発展しており、常に新たな技術や知識が生み出されている。このため、超高速電子計算機の開発については、最先端かつ最高の性能を達成すること及び優れた成果の創出が継続的に行われることを目指して、国際的な研究開発状況にも注意を払いながら、適時に、かつ、適切な方法で評価を行い、厳しい財政状況を踏まえ、経費の効率化を図りつつ、適切に進めることとする。

また、特定高速電子計算機施設を利用者にとって利用しやすく、優れた成果が創出されるものとするためには、施設の整備に当たり利用者のニーズ等が適切に反映されることが重要である。このため、理化学研究所においては、国内外の研究開発動向の把握に努めるとともに、利用者と適切に情報交換を行いその意見に十分配慮することとする。

### 提出された意見

- ・整備に当たり重要と思われる項目は以下のとおり。(7, 8)
  - －ハードウェアの信頼性・安定性
  - －インターネット経由の対話型利用環境
  - －きめ細かく柔軟なジョブ管理システム
  - －チューニング実施の容易さ
  - －ノードの等価性
  - －コードの移植容易性
  - －実行効率及び信頼性の高いコンパイラ
  - －実行効率の高い標準的な数値計算及び通信ライブラリ
- ・大規模計算、データ出力、計算データ解析、データ可視化と続く処理過程においてデータ転送のボトルネックが発生しないようなシステム構成を構築することが必要。(5)
- ・高速ネットワークを介したりリモートアクセスによる計算機利用や技術支援を提供すべき。(4, 5, 7, 8, 11, 12, 13, 16)
- ・大規模データを扱うために、磁気ディスクシステムの設置またはユーザーが持ち込める環境を構築すべき。また、大規模な計算結果を画像データの形でユーザーに提供するようなシステムが望ましい。(5, 13, 16)
- ・可視化アプリケーションが必要。(5)
- ・数学ライブラリなど各分野に共通するソフトウェア基盤の提供が不可欠。(3, 17)
- ・各地の計算機センターとシームレスなスパコン利用を推進するためにも、グリッド環境を整備し、どのサイトでも確実に動いて inter-operability が提供されるような技術的枠組みが必要。(4, 10, 12)
- ・グリッド技術の適用にあたっては、インターフェースの統一、認証システムの基盤整備、グリッド利用教育の推進等が必要。(10)
- ・教育に利用できるレベルのシミュレータがあるのが望ましい。(3)
- ・データ通信の信頼性確保、データベースへのリンクなどへの対応も必要。(11)
- ・多数の利用者用端末設備を整備した研究室、打ち合わせなどのための会議室、食堂、喫茶店、宿泊施設などの附帯施設の整備が必要。(12, 13)

## 2. 施設の整備に関する事項

○次世代スパコンの開発については、最先端かつ最高の性能を達成すること及び優れた成果の創出が継続的に行われることを目指して、国際的な研究開発動向にも留意しながら、適時・適切に評価を行い、財政状況等も踏まえつつ、適切に進めることが必要。その際、以下の点を考慮することが必要。

- ・利用者の利便性を高めるため、高速ネットワークを介した利用が可能となる計算機環境を整備すること。
- ・計算結果等の大規模データの保管と円滑な提供が可能となる計算機環境を整備すること。
- ・アプリケーションの実効速度や高度化・高並列化に影響する数学ライブラリやコンパイラなどのシステムソフトウェア基盤を整備すること。

○次世代スパコン施設の整備については、本施設が利用者にとって利用しやすく、優れた成果を創出するものとなるよう、利用者のニーズ等を適切に反映しながら進めることが必要。具体的には、共用施設として多様な利用者の利用が見込まれることを考慮し、研究室や会議室、事務室、食堂等の諸設備を整備すること。この際、研究室等については、企業の利用なども想定した機密性の保持に留意することが必要。

- ・企業の利用などを想定し、機密保持の観点から、個室になっている端末室の整備が必要。(13)

### 3. 特定高速電子計算機施設の施設利用研究に関する事項

#### (1)実施すべき施設利用研究

##### 現行の基本的な方針の記述

特定高速電子計算機施設が、将来にわたって最大限有効に活用され、画期的な成果を創出していくには、本施設を利用してどのような研究等が実施されるかが重要である。このため、今後行われる本施設の設計の具体化とあわせて、研究分野や計算規模等に留意した計算資源の配分等、施設利用研究の考え方について定めることとする。その際、基礎的、応用的及び開発的な研究等の調和のとれた発展が可能となるよう配慮する必要がある。

また、個別具体的な研究課題の選定は、上記の施設利用研究の考え方に基づいて、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選定委員会の下に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とする。

さらに、本施設を活用した国際交流の推進は、科学技術分野における国際協力を図りつつ、我が国の科学技術力の強化を図るという観点から重要である。また、超高速電子計算機に係る技術は第三期科学技術基本計画にいう国家基幹技術であり、我が国が国際競争に勝ち抜く上で不可欠な研究開発課題であることにも留意する必要がある。本施設を活用した国際交流を行う際には、こうした点も踏まえ、相手国や状況に応じて、競争と協調等のアプローチを使い分けつつ、戦略的に進めることとする。

##### 提出された意見

###### [施設利用研究の考え方]

- ・スパコンの極限的な利用により科学技術の最先端の問題解決に結びつく課題を推進すべき。(7, 8, 9, 14, 15)
- ・次世代スパコンの計算資源は挑戦的課題(次世代スパコン以外では実行不可能、学問的に最先端、社会的インパクトが大きい課題)に割り当てるべき。(12)
- ・次世代スパコンの圧倒的計算パワーを駆使し、先進的計算科学及び計算工学問題を解き、様々な応用分野において従来なしえなかった規模での計算を実現すること(Capability Computing)と、小中規模のアプリケーションを大量に実行する(Capacity Computing)ことと理想的な融合が必要。(10)
- ・利用分野の選定に際しては、科学技術基本計画の重点推進4分野以外の科学研究分野にも幅広く利用の機会が提供されるべき。(14, 17)
- ・応用に直結した成果を目指す研究ばかりでなく基礎研究に対して十分な計算機資源の配分を行うことが重要。(7, 8, 14)
- ・国家プロジェクト的な研究に加え、他の分野、萌芽的な研究など広い研究分野に資するため、利用体制は開かれたものにすべき。(13)
- ・申請の段階で実用研究と基礎研究を区別し、それぞれ別の審査基準、選定委員会を設け、計算リソースは実用・基礎研究で均等に配分すべき。(14)
- ・基礎的・応用的及び開発的な研究等の調和のとれた発展との観点で、流体力学や計算科学、生物物理学等の基礎分野をライフサイエンスや環境といった応用や開発分野と対等に扱っていくことが不可欠。(9)

### 3. 施設利用研究に関する事項

#### (1)実施すべき施設利用研究

- 次世代スパコンは世界最先端・最高性能の計算機であり、この施設の特長を最大限に活かすことができるような観点から、研究分野や計算資源の配分等、施設利用研究の考え方を定めることが必要。
- 次世代スパコンにおいては、基本的に研究課題の学術的・社会的価値を前提として、次世代スパコンの性能や特性を活かすような課題(例えば、計算規模の大きなものや複合汎用システムである次世代スパコンの特性を活かしたもの等)を優先して実施することが適当。
- また、本施設は共用施設であり、産業利用の積極的な促進が求められていることから、産業利用に適切に対応した施設利用を行っていくことが適当。
- 上記の考え方を踏まえ、次世代スパコンで実施する研究課題については、大別して、社会的・国家的見地から取り組むべき領域・分野等の課題(戦略的課題)と、それ以外の課題(一般的課題)に区分することが適当。
- 戦略的課題については、例えばその領域・分野等をあらかじめ国が設定し、実施機関を公募により選定した上で、当該機関に対して優先的な利用を認めることにより、当該領域・分野等の研究を重点的・戦略的に推進することなどが考えられる。  
一般的課題については、幅広い領域・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、緊急性等を考慮して、適切に課題を選定し、研究を推進することが考えられる。
- 研究課題の具体的な選定は、上記の基本的な考え方に基づき、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、選定委員会の下に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。
- 次世代スパコンを活用した国際交流の推進は、科学技術分野における国際協力を図りつつ、我が国の科学技術力の強化を図るという観点から重要。一方、次世代スパコンは第三期科学技術基本計画にいう国家基幹技術であり、本施設を活用した国際交流を行うに当たっては、こうした点も考慮しつつ、相手国や状況に応じて、「競争と協調」の観点から、戦略的に進めることが適当。

- ・次世代スパコンにおいては、計算機資源の有効活用の観点から、十分にチューニングされたプログラムのみで共用を許すべき。(16)

[研究課題の選定]

- ・資源配分の手続きにおける透明性、公正性には特に配慮すべき。(7, 8)
- ・課題選定はできるだけオープンな形で行われることが望ましい。(5)
- ・課題選定に際しては、判定基準と審議過程の公開、選定委員会における産業界の代表者の参加などを行うべき。(11)
- ・審査にあたっては、テーマの新規性、発展・進展性、国際的競争力の有無等の視点で評価されるべき。また、十分にチューニングされた計算効率の良いプログラムが優先されるべき。(14)
- ・アプリケーションの実効性能が高いことだけでなく、その必要性、独自性、アウトプット、インパクトなどの観点から評価すべきである。(5)
- ・教育用の計算資源枠を設けるべき。(3)
- ・デバッグやチューニングのための短時間で利用を可能とするような利用形態があることが望ましい。(5)
- ・1課題あたりの連続実行時間が長いものが想定され、配慮が必要。(5)
- ・情報基盤センターで大規模計算の実績があり、次世代スパコンで具体的な数値目標が達成できるような課題については、次世代スパコンでの実施課題とする枠組みを設定すべき。(16)
- ・選定委員会のもとに、各分野または基礎・応用・開発といったレベルに対応した分科会を設置して計算資源配分を決定すべき。(17)
- ・課題の選定に際し、学術的な価値はもちろん、研究目的とその波及効果について、各コミュニティの社会的な使命、要請など幅広い基準・価値判断から審査されるべき。(4)
- ・課題選定にあたっては、研究分野のコミュニティの果たしている役割を活用することが重要。(6)
- ・課題審査にあたり「計算材料科学」がカテゴリとして設定されるべき。(4)
- ・課題の選定にあたっては、産学官、基礎科学と応用、研究分野間のバランスを考慮した選定委員会、研究分野ごとの分野別審査委員会を設置すべき。(7, 8)
- ・課題選定の多くを分野別審査委員会にゆだねるとともに、分野全体に対する評価を行い、次年度の分野間の資源配分に反映させるべき。(7, 8)
- ・明確な課題選定基準を設定するとともに事後評価を実施すべき。(7, 8)
- ・課題のカテゴリは以下のとおり。(6, 7, 8)
  - －社会的・国家的見地から推進すべき戦略的課題
  - －分野別の先端的課題
  - －特定の研究分野に限定されない複合領域課題
  - －チューニング用課題
  - －科学技術の急速な展開が期待される、または時間を争う国際競争となる緊急的な課題
- ・研究期間は1年程度とし、年2回の申請の機会を設けるべき。(7, 8)
- ・挑戦的課題を①分野を超えて、②国際的に、③定量的に評価するため、選定委員会が分野を問わず一括して評価・審査し計算時間配分とともに採否を決定する。(12)
- ・全分野を横断する10～20人程度の選定委員会のもとに書類審査を行う100人規模のレフェリープールを設置。課題終了後は選定したレフェリーが事後評価を行い評価結果を公表。(12)

- ・単年度または複数年度にまたがる一般課題を公募し、第三者委員会が課題を選定。採択課題については毎年度評価し、複数年度課題については継続あるいは中止の判断を行う体制が望ましい。(13)

[国際交流の推進]

- ・国際交流に関しては、特にアジア諸国との共同研究等を実施するための制度を計算機資源の配分とともに制度化することが望ましい。(3)
- ・国際共同研究を促進するとともに、海外からのリモートアクセス環境を構築すべき。(7, 8)
- ・国際交流は重要であるが、国益重視を念頭に「競争と協調」を使い分け、産業界が国際競争で不利にならないように対応すべき。(11)
- ・国際交流に関しては選定委員会等で具体的内容について吟味することが必要。(17)

(2)適切な支援体制の構築

現行の基本的な方針の記述

特定高速電子計算機施設が多くの研究者等に効果的かつ効率的に利用されるためには施設に関する最新の情報を利用者へ提供すること、利用に関する相談へ対応すること及び適切な計算プログラムを調整すること等、中小企業を含む産業界の研究者等を始めとした利用者に対し、適切な支援が行われなければならない。

このため、今後行われる本施設の設計の具体化を踏まえ、利用者の幅広いニーズ等を恒常的に把握しつつ、登録機関に求められる支援に係る具体的な業務や体制等について定めることとする。

提出された意見

- ・並列化支援や最適な数値計算ライブラリやアルゴリズム等についての助言などの技術支援が必要。(3, 4, 6, 7, 8, 10, 13, 14, 15, 17)
- ・新しいシステムへの移植・チューニングのために、ハードウェアやアーキテクチャの専門知識を持った相談員(相談チーム)によるプログラム相談を実施すべき。(12)
- ・次世代スパコンにおいては、そのチューニングは個人の研究者にとっては困難であり、大学の情報基盤センターなどが支援すべき。(16)
- ・ネットワークを介したリモートアクセスによる技術支援を可能とすべき。(78)
  
- ・大企業のみならず、中堅・中小企業においてもシミュレーションの利活用を促進していくためには、産業コーディネータを配置し、可視化技術を活用した経常的な利用啓発や技術相談を実施することが必要。(2)
- ・施設や施設利用に関する最新情報の提供、企業等との共同研究推進のためのコーディネータを配置し、産学融合を促進すべき。(17)
- ・次世代スパコンの円滑な利用には、計算科学研究者と可視化研究者の間に立って、適切な可視化の支援を行うリサーチサイエンティストが必要。(2)
  
- ・次世代スパコン向けに開発されたソフトウェアの公開システムを構築するとともに、ドキュメント整備や著作権等に関するサポートがあることが望ましい。(3)
- ・大規模計算のための入力モデルの構築作業を支援する専門部隊を設置するとともに、開発された入力モデルや計算コードを共用のデータベースとして公開することが必要。(5)
- ・計算科学の専門的知識の提供、データの入力支援用プログラムの提供、可視化ツールの提供などの支援があることが望ましい。(5)
- ・領域分割による並列計算に対応したメッシュ作成ツールが整備されることが望ましい。(5)
- ・次世代スパコンを用いてのデータは、世界共有の貴重な資源であることからその有効利用ができる仕組み(国内外のネットワーク構築、管理、維持等の支援)が必要。(9)
- ・市販のアプリケーションの利用や守秘体制の確保など、産業界特有の利用形態への対応が必要。また、次世代スパコンの利用法、ライブラリ開発、法的課題等への対応に関する支援体制が必要。(11)
- ・技術相談ができる体制を早期に確立し、アプリケーションの超並列化・最適化などの準備ができるように配慮すべき。(13)
- ・次世代スパコンと同じアーキテクチャのテスト機を導入し、プログラムのテスト・実行を行え

(2)適切な支援体制の構築

○次世代スパコンの機能を最大限に活用するためには、施設利用研究を行う者の選定及び同研究の実施に係る支援を行う登録機関に、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、利用者に対して、以下のような支援業務を行うことが不可欠。

[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 等

[利用に関する相談]

- ・課題申請の前段階での技術的相談
- ・産学官の共同研究等に関するコーディネート
- ・研究成果の公表や理解増進活動 等

[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

○次世代スパコンの利用にあたっては、基本的に利用者がアプリケーションを持ち込むことが考えられる。その場合、当該アプリケーションが次世代スパコンにおいて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必要となるアプリケーションの調整(最適化)については、利用者が行うことが基本であるが、登録機関においては、利用者がこうした調整を円滑に行うために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。

○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には、登録機関と大学の情報基盤センター等のスパコンを有する既存の研究機関が連携して、次世代スパコンに関する情報の提供や助言などの支援を行う体制を構築することが必要。

○一方、産業利用にあたっては、利用者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。

○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に最適化されたアプリケーション(例:グランドチャレンジアプリケーションや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

- ・環境を整備すべき。(14)
- ・利用者向けのプログラミング講習会の開催が必要。(14)
- ・登録機関で行われる支援業務については、スパコン・センターと連携して支援体制を構築することが望ましい。(15)
- ・利用方法に関する専門的知識・情報・技術を提供すべき。(17)
- ・日本版 SC(Super Computing)の開催により関係者が一堂に会する機会の提供や関係者の情報のデータベース化等により研究交流を促進させるべき。(4, 14)
- ・学生に対する支援は無料とし、企業の研究者等の利用については有料とする。(3)

ーション)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において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。

(3)施設利用研究の成果の取扱い等

現行の基本的な方針の記述

幅広い分野の研究者等が特定高速電子計算機施設を利用し、その成果を社会へ還元するためには、適切な成果の取扱いを行うとともに、利用目的や成果の公表等に応じた適正な利用料金を設定することが必要である。

このため、今後運用段階までに、産業界の研究者等による利用も視野に入れ、施設利用研究における成果の取扱い及び利用料金等の考え方について定めることとする。

提出された意見

- ・多様な利用主体、利用方法を想定した成果公開・課金制度の設計が必要。(11)
- ・研究成果は原則的に一般公開されるべき。(14)
- ・研究成果は原則として公開すべき。特許に係るテーマについては、一定期間公開を遅らせることを認める。成果を公開できないものについては利用を認めることは適当でない。(6)
- ・成果は広く公開されることは当然であるが、計算材料科学においては材料開発・技術開発との関連があり得るため、こうした成果の公表については注意が必要。また、特許や企業活動が絡む問題について、事前のルール作りが必要。(4)
- ・成果の取扱いに関する取扱い指針を明確にすることが必要。(11)
- ・研究成果を一部非公表にするなどの選択肢を提供すべき。また、公開度の程度に応じて利用料金を設定すべき。(11)
- ・研究成果を公表する課題については課金をしないという原則が望ましい。(7, 8, 12, 13)
- ・利用料金について、実用研究と基礎研究では別の基準が設定されることが望ましい。また、成果を公開する研究に関しては利用料金を下げるなどの柔軟な対応が望ましい。(14)
- ・学術目的の利用については公開を前提として利用料金を徴収しない。成果の非公開を前提とする施設利用については課金する。(17)
- ・大企業のみではなく、開発意欲の高い中小企業の利活用を促進する料金体系や技術支援、受託計算の実施などの環境整備が必要。(2)
- ・利用目的に応じた適正な利用料金とすべき。(教育関係の利用料金は無料とすべき)(3)
- ・コスト意識は重要であるが、利用料の設定に当たっては、企業での研究も含め、意欲的な挑戦課題を阻害することのないような配慮が必要。(4)
- ・有償利用については、全体の計算機資源に対して4分の1程度を限度とすべき。(7, 8)

(3)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。ただし、特許の取得や企業活動に係わる課題等については、一定期間の公開の猶予や非公開(成果の専有)の取扱いを認めることが必要。

○利用料金の在り方については、成果専有の場合には原則として料金を徴収することが適当であるが、今後、計算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。具体的には、次世代スパコンの利用の枠組みや次世代スパコン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当。

(4)理解増進活動の実施

現行の基本的な方針の記述

より広範な科学技術の分野における研究者等による特定高速電子計算機施設の利用が促進されるためには、本施設とその利用についての情報が多くの研究者等に対して適時にかつ、的確に提供されることが重要である。このため、理化学研究所においては、本施設の整備段階から、各種広報誌やホームページ、各種シンポジウム、学会等の場を利用して積極的な情報発信を行い、利用者の裾野を広げるとともに、利用者との情報交換等を活発に行うこととする。

また、本施設は、国費を集中的に投資してその開発・整備が行われるものであり、その効果的な活用のためには国民の理解と支持が必要である。このため、本施設の重要性等について、国民に対しわかりやすい形で成果の発表や公開を行うこととする。さらに例えば、運用開始後に、大学等と連携して、青少年等を対象とした科学技術に対する理解増進に貢献する取組等を行うことも重要である。

提出された意見

- ・シミュレーションの活用事例をわかりやすく発信していくことが重要。(2)
- ・全ての研究成果の可視化を義務づけ、国はそのための資金・人材等の措置を講ずるべき。(2)
- ・全国の科学館、博物館等と連携し、制作したコンテンツを活用すべき。(2)
- ・納税者だけでなく、技術継承者(例えば高校生など)への広報活動が重要。(3)
- ・成果を広く公開する計算科学振興のための施設を全国各地に設置すること。(3)
- ・研究成果を様々なルートを通じて広く公開・普及すべき。(4)
- ・開発主体の理研のみならず国も積極的な情報発信を行うべき。(11)
- ・研究成果を公開する際に適切な助言を与えられる広報専門のアドバイザーの設置など積極的に支援する体制の構築が必要。(14)
- ・研究会や成果報告会、広報誌、報告書、ホームページ等により情報発信を積極的に実施する。(17)
- ・小・中・高校などの世代へ研究成果をわかりやすく説明するとともに、そのための教材を提供すべき。(17)

(4)理解増進活動の実施

○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。このため、国や理化学研究所においては、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のニーズをきめ細かく把握することが必要。

○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国民の理解と支持が不可欠。このため、本施設の重要性や研究成果等を国民に対してわかりやすい形で発信することが必要。特に、高校生等の青少年に対しては、人材育成の観点からも、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。

(5)研究機能等の構築

現行の基本的な方針の記述

特定高速電子計算機施設が最大限に活用されるとともに、計算科学技術の分野における将来の継続的な発展が確保されるためには、本施設を活用することにより高度な研究及び人材育成に関する機能等を構築することが重要である。

このため、本施設の将来展望や利用者のニーズ等を踏まえつつ、理化学研究所及び登録機関等の関係機関が適切な役割分担のもと研究及び人材育成に関する機能を果たしていくこととする。

提出された意見

[拠点形成]

- ・神戸に設置される CLOE は次世代スーパーコンピュータによって開かれる新しい科学技術・学術の総合的拠点として以下の機能を果たすことが望まれる。(6)
  - －次世代スパコンの圧倒的な計算能力に基づいたシミュレーション研究の推進
  - －多様な大規模シミュレーションの研究開発分野間において研究情報や計算機利用技術が集積する研究センター
  - －研究と教育を結びつけるハブ（連携大学院におけるインターンシップに対する窓口）となり、かつ産学官連携に対する情報センターや人材供給としての役割
- ・次世代スパコンを頂点とした全国の共用計算資源を活用した研究推進と、計算科学全般の振興を図るために CLOE (Cluster of Excellence) の形成を提案。(7, 8)
  - －CLOE の構成組織が参加し、計算科学の全体的な推進を目指す計算教育推進機構を設置。
  - －計算科学を振興する研究教育推進機構と次世代スパコンの利用を促進する登録機関は密接に連携。
  - －研究教育推進機構の設置のための設立準備委員会を文部科学省に設置すべき。
- ・全国共同利用の性格を持ち、研究教育推進機構の中核的研究センターである神戸研究センター（仮称）を設置すべき。(7, 8)
  - －分野横断的研究の推進
  - －計算科学と計算機科学の連携の推進
  - －分野間交流、研究集会、国際協力、広報等の企画立案と実施
  - －教育・人材育成
  - －次々世代スパコンの開発・研究 等
- ・次世代スパコンが広範な分野の多くの研究者等に活用され、我が国の科学技術振興や国際競争力の向上に寄与していくために、CLOE (Cluster of Excellence) として全体構造を整備し運営がなされることが望ましい。(17)
- ・分野の計算科学研究に責任を持つ分野拠点（分野ごとのCOE）を構成し、全国の分野拠点と神戸センターとの緩やかな連合体としてCLOEを構成。各分野拠点は当該分野における計算機利用者の教育・育成の任も負う。(17)
- ・各分野拠点を中心に全国の大学、研究機関の協力のもと、専門性の高いアプリケーションの開発研究者、実践的なユーザーの育成、融合分野や新領域を積極的に開拓出来る研究者を育成すべき。(17)
- ・人材育成の一環として、大学院生、博士研究員、企業研究者に対して研修、サマースクール等

(5)研究機能等の構築

現在検討中の拠点形成のあり方の議論を踏まえて記述。

- を行う場の提供が必要。(17)
- ・オールジャパン体制に基づき、ナノサイエンスを担う分野拠点として理論・計算ナノサイエンス特別研究センターを分子研に設置し、強力に研究開発を推進。(17)
- ・ナノサイエンス分野拠点は以下の機能を有する。(17)
  - －研究開発
    - ・次世代スパコンの利用研究プロジェクトの推進
    - ・ソフトウェアの継続的開発
    - ・大規模計算需要の発掘
  - －専門的知見の提供や利用者支援などの観点での登録機関への協力
  - －人材育成
- ・重要分野に領域設定された提案公募型の予算措置が必要。(17)
- ・次世代スパコンは、ユーザーに計算資源を提供する計算センターの機能だけではなく、計算科学の研究開発、専門家養成を行う中核拠点としての機能を有することが必要。その際、全国の研究拠点と有機的な連携体制を構築することが必要。(12)
  - －次々世代計算機に向けた調査・企画・設計
  - －ソフトウェアの保守・管理
  - －アルゴリズム開発

#### [研究開発]

- ・次世代スパコンの開発を契機に、従来のプログラムを方法論から見直し、よりユーザーがプログラミングしやすい、何らかの言語あるいは計算モデルを構築していくことが必要。(10)
- ・大規模アプリケーションの開発にはユーザー側とシステム側の研究者等が共同作業を行うことが必要。このため、これらを学際的に推進する仕組みや共同研究プログラムが必要。(10)
- ・我が国における計算科学技術の発展及び産業利用の促進にあたって、次世代スパコンと連携し、可視化研究・技術に関する中核的な拠点を設置し、戦略的な投資を行うことが必要。(2)
- ・各要素レベルのミクロ階層とシステムレベルのマクロ階層の相互作用を総体的に捕らえるシミュレーションの実現が課題。従来個別要素的に開発されてきたモデルを相互に連結するための新たな計算手法の開発が必要であり、組織や分野を超えたシミュレーション科学の学際的融合領域を確立することが極めて重要。(6)

#### [教育・人材育成]

- ・様々な教育段階に対応する教育プログラムを整備すべき。特に、計算科学と計算機科学の融合を促進するための教育を積極的に取り入れたカリキュラムが必要。(3)
- ・大学院生等に対する次世代スパコンの一部を用いた講義付き演習事業の実施や、計算プログラムコンテスト等の開催など次世代スパコンに特定した実践的教育が有効。(3)
- ・計算科学は学際科学であり、体系的な教育を実現するためには他分野の連携が必須。(4)
- ・各大学、企業、研究所等をネットワークで結び、計算材料科学の連携教育を行うべき。(4)
- ・次世代スパコンは、①各種ソフトウェア群の教育カリキュラムへの提供、②スクーリングの場の提供が期待される。(4)
- ・大学院生を現場で指導育成する特別研究員制度や独立行政法人、民間企業等の研究機関との人材交流を図る連携大学院制度の活用なども重要。(5)
- ・大学における計算科学と HPC 技術に関するカリキュラムを確立させ、これまで経験的に行われてきた研究を体系化するとともに、予算措置を含めたバックアップを行うべき。(10)
- ・次世代スパコンを高度利用者だけでなく、学生などの利用者にも門戸を広げ、人材育成の初期段階からこれらのシステムを手軽に利用できるようなプログラム作りも必要。(10)

- ・計算モデル、アルゴリズム、並列プログラミング言語、アーキテクチャなどを体系的に学べるカリキュラムを持つ大学と連携し、次世代スパコンでの人材育成体制を整備すべき。(15)

4. 特定高速電子計算機施設の運営に関する事項

現行の基本的な方針の記述

特定高速電子計算機施設の共用に当たっては、グリッド技術等を活用し、地理的に離れた計算資源を連携させて利用できること、各種データの取得、蓄積及び有効活用等を容易に行えること、利用者に対する窓口の一元化及び手続きの簡素化が行われること等、多くの研究者等にとって使いやすい運営が行われることが重要である。また、本施設から優れた成果が創出されるような運営が行われることも重要である。

このため、適時に、かつ、適切に利用者のニーズ等を反映させつつ、今後運用段階までに本施設が効果的かつ効率的に活用されるような適切な運営方針について定めることとする。

また、運営に係る業務の実施に当たっては、透明性を確保しつつ、公正な手続きにのっとり、全体的な施設の運営が効果的かつ効率的に行われるようにするとともに、理化学研究所と登録機関が適切に連携を図っていくこととする。

提出された意見

- ・各地の計算機センターとシームレスなスパコン利用を推進するためにも、グリッド環境を整備し、どのサイトでも確実に動いて inter-operability が提供されるような技術的枠組みが必要。(4, 10, 12)
- ・グリッド技術の適用にあたっては、インターフェースの統一、認証システムの基盤整備、グリッド利用教育の推進等が必要。(10)
- ・施設の具体的な運用にあたっては、透明性の確保、コミュニティの要望や質問を踏まえた運営が望ましい。(4)
- ・既存プロジェクトの経験を整理し、その結果を踏まえた運営方針や具体的な運営体制を早い時期に情報開示すべき。(11)
- ・国・地方自治体は、可視化研究・技術の中核的拠点となる組織の設置、次世代スパコン等との連携方策、中小企業等が次世代スパコンを活用できる環境作りなど具体的な環境整備が必要。(2)

4. 運営に関する事項

○次世代スパコンの共用にあたっては、多くの研究者等にとって使いやすい運営が行われること、また、本施設から優れた成果が創出されるような運営が行われることが重要。このためには、利用者のニーズ等を適切に反映するとともに、これまでの類似プロジェクトの経験等を踏まえた運営を行っていくことが必要。具体的には、例えば、地理的に離れた場所からの利用を可能とする高速ネットワークの整備や、利用者に対する窓口の一元化、利用に際しての手続きの簡素化等を図ることが必要。

○また、運営に係る具体の業務の実施にあたっては、透明性や公正な手続きの確保等に留意しつつ、施設の全体的な運営が効果的・効率的に行われるよう、理化学研究所と登録機関が適切な役割分担と連携を図っていくことが必要。

5. その他特定高速電子計算機施設の共用の促進に際し配慮すべき事項

現行の基本的な方針の記述

特定高速電子計算機施設は、我が国における計算科学技術を始めとした科学技術全体の振興に貢献することが重要である。このため、本施設と大学・研究機関等のスーパーコンピュータを始めとする計算環境との適切な役割分担及び有機的な連携を図っていくこととする。

特に、既に我が国において開発され、成果をあげている地球シミュレータについては、アプリケーション作成における活用等、本施設の整備・運営等に当たって積極的な連携が図られることが重要である。

提出された意見

- ・次世代スパコンだけでなく、大学・公的研究機関の有する計算環境・資源を有機的に捉えて、我が国のスーパーコンピューティング技術全体を利活用していく制度設計が必要。(11)
- ・大学や研究機関との計算資源の適切な役割分担、有機的な連携を進めることが望ましい。(4, 13, 15, 16)
- ・各分野拠点をはじめとする全国の共同利用マシンとの重層的かつ有機的なネットワーク網が構築される必要がある。(17)
- ・挑戦的課題のための次世代スパコン、中小規模計算・萌芽的研究を推進する全国共同利用研究所等、基礎研究等の各大学・研究室レベルでの計算機が、相互補完的に機能する研究体制を構築・推進することが必要。(12)
- ・次世代スパコンと大学等のスパコン・センターとの具体的連携は以下のとおり(15)。
  - [認証基盤の整備・利用] スパコン・センターを中心にユーザーの認証のための基盤を整備し、次世代スパコンの利用に活用すべき。登録機関はスパコン・センターと連動した運営を検討すべき。
  - [人材育成] 計算モデル、アルゴリズム、並列プログラミング言語、アーキテクチャなどを体系的に学べるカリキュラムを持つ大学と連携し、次世代スパコンでの人材育成体制を整備すべき。
  - [利用者支援に関する連携・役割分担] 登録機関で行われる支援業務については、スパコン・センターと連携して支援体制を構築することが望ましい。また、T2Kの3センターのスパコンは高並列度であり、次世代スパコンのプログラム開発の場として利用することが可能。
  - [計算資源の効果的な運用] プリ・ポスト処理はスパコン・センターのスパコンやサーバーを用いることが望ましい。最適な計算機の利用と計算資源の配分ができるような体制を構築すべき。
- capability マシンである次世代スパコンと capacity マシンを有するスパコン・センターは、グリッド的な認証基盤の整備のみならず、シームレスな連携体制の構築が必要。
- [計算機科学の拠点としてのスパコン・センターとの連携] 計算機科学と計算科学の連携による研究開発を進めるためには、計算機科学分野を有するスパコン・センターとの連携が必要。

5. 配慮すべき事項

○我が国における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ためには、次世代スパコンと大学・公的研究機関等が有する計算環境・資源との適切な役割分担と有機的な連携を図ることが必要。例えば以下のような取組みが必要。

- ・次世代スパコンと各機関の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
- ・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
- ・計算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

○運用当初から、次世代スパコンの能力を最大限に活用していくためには、運用の開始前から、競争的資金制度等を活用して、次世代スパコンで展開すべきアプリケーション開発等を幅広い分野にわたり推進することが必要。

○次世代スパコンのシステムに関する技術情報については、企業秘密や知的財産権に係わるものを除き、アプリケーション開発や既存のスパコンとの有機的連携の促進等の観点から、国際的な研究開発動向や次世代スパコンの詳細設計の進捗状況等を踏まえながら、適時・適切に提供していくことが必要。

- ・第2層に位置づけられる計算機資源(情報基盤センターなど)を、企業の研究・開発に一部公開することが望ましい。(7, 8)
- ・情報基盤センターが計算科学と計算機科学の連携推進の場としての役割を果たすことが重要。(7, 8)
- ・次世代スパコンの規模を一桁程度ダウンさせたシステムが各地の計算センター等に分散配置されることが重要。(10, 14)
- ・高速回線で結合された全国数箇所の中核機関にデータセンターを設置し、そこで若手研究者や大学院生が研究や議論する場を恒常的に用意し、実空間としての研究コミュニティ形成を図ることが望まれる。(5)
  
- ・運用開始の前段階から、次世代スパコンの利用に必要な基礎技術開発のための研究助成・補助制度を積極的に立ち上げるべき。(13, 14)
- ・利用者の円滑な準備のため、計算機アーキテクチャ、利用条件・制限、ネットワーク環境、プレ処理・ポスト処理環境等の情報を詳細かつ積極的に公開すべき。また、これにより利用者の準備を奨励することが必要。(14)
- ・地球科学技術をはじめとする重要なアプリケーション開発にも着手すべき。(13)
- ・グリッド技術など他のプロジェクト成果を有効に活用していくことが必要。(11)
  
- ・次世代スパコンとスパコン・センターとの連携構築に向けた検討を行うためには、次世代スパコンのハードウェア、ソフトウェアのアーキテクチャに関する詳細な情報の開示が必要。(15)
- ・なるべく早期に次世代スパコンの仕様に関する情報が開示されることが望ましい。(17)