

次世代スーパーコンピュータ概念設計 評価報告書

平成19年6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概念設計評価作業部会

目次

．はじめに	1
．評価の方法	
（１）評価の進め方の概要	3
（２）作業部会の活動の経緯	4
（３）評価項目及び評価の視点又は基準	6
．評価結果	
（１）「評価項目及び評価の視点又は基準」に基づく評価	8
（２）結論	24
参考資料 1 次世代スーパーコンピュータの概念設計の実施について	26
参考資料 2 理化学研究所提出資料	28
参考資料 3 理化学研究所提出資料	30
参考資料 4 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概念設計評価作業部会 委員名簿	34

．はじめに

次世代スーパーコンピュータプロジェクト（「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」）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に、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ている。

具体的には、

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

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（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

スーパーSINET で接続された大学・研究機関のスーパーコンピュータと連携し、次世代スーパーコンピュータを幅広く共同利用するための体制を整備することによる、柔軟性のある計算環境の提供

次世代スーパーコンピュータを中核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の形成

を文部科学省のイニシアティブにより、開発主体である理化学研究所を中心に、産学の密接な連携の下、一体的に推進するものである。

スーパーコンピュータを用いた研究手法は、多くの分野で実験、理論と並ぶ重要な方法であり、その利用は今後の科学技術の発展及び我が国の国際競争力の向上のために極めて重要である。第3期科学技術基本計画（平成18年3月28日閣議決定）においては、次世代スーパーコンピューティング技術が、国家基幹技術（国家的な大規模プロジェクトとして基本計画期間中に集中的に投資すべき基幹技術）の一つとして取り上げられ、また、分野別推進戦略においては、情報通信分野の最も重要な研究開発基盤の一つとして、世界最高レベルのスーパーコンピュータの構築そのものが、総合的な科学技術力の結果であり、「国家の源泉を創る」ことに直接的に貢献するとされている。

我が国においては、これまでに、数値風洞（平成5年：理論性能280ギガ^{注2)}FLOPS）、CP-PACS（平成8年：理論性能614ギガFLOPS）、地球シミュレータ（平成14年：理論性能41テラ^{注3)}FLOPS）などのスーパーコンピュータを開発・整備してきた。これらのスーパーコンピュータは、開発終了後からテクノロジードライバとなり商用機として製造され、研究や教育のインフラストラクチャとして大学や研究機関へと垂直展開してきた。しかし、地球シミュレータ以降は国としての開発プロジェクトがなく、我が国における商用機の性能向上ペースが落ち、スーパーコンピュータ資源量の拡大ペースについ

ても鈍化が見られる。

また、これらのスーパーコンピュータは、航空宇宙分野（数値風洞）、素粒子物理学分野や宇宙物理学分野（CP-PACS）、海洋地球科学分野（地球シミュレータ）などの分野を中心に、科学技術と産業の進展に大いに寄与してきた。一方、科学技術分野において必要とされる数値計算の対象分野は、研究開発の進展とともに絶えず拡大を続けており、ナノサイエンス・材料、ライフサイエンス、環境・防災、原子力などの幅広い研究分野において、スーパーコンピュータの利用分野拡大と高速化が求められている。

さらに、高精度シミュレーションによる自動車設計や個人差に応じた医薬品の開発など、最先端のものづくりにおいても、10 ペタ FLOPS 級の計算環境におけるシミュレーションや高度なデータマイニングなどが必要とされている。

本プロジェクトは、このような計算資源量の需要と、広範な利用ニーズとの増加に対応べく、国家基幹技術として高性能かつ汎用なスーパーコンピュータの開発に取り組むものである。

本プロジェクトの目的を達成するためには、次世代スーパーコンピュータの概念設計が適切に実施されることが極めて重要であることから、平成 18 年 11 月、「文部科学省における研究及び開発に関する評価指針」（平成 17 年 9 月文部科学大臣決定）に基づき、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「次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会」（以下、作業部会という）を設置し、理化学研究所が作成したシステム構成案の妥当性について評価を行うことが決定された。

本作業部会では、その後 8 回の会議を開催し、評価項目等について検討を行い、その上で理化学研究所から説明を聴取し、具体的な評価作業を行ってきた。本報告書は、本作業部会において実施したシステム構成案に関する評価の結果をとりまとめたものである。

注 1) ペタ : 10^{15} (1000 兆)

FLOPS : floating-point operations per second
(浮動小数点演算の命令実行速度の単位)

注 2) ギガ : 10^9 (10 億)

注 3) テラ : 10^{12} (1 兆)

・評価の方法

(1) 評価の進め方の概要

平成 18 年度より開始した「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(以下、「プロジェクト」という。)は、平成 18 年 9 月より、開発主体である理化学研究所において概念設計が実施されているが、プロジェクトの目的及び目標^{注4)}を達成するためには、概念設計が適切に実施されることが極めて重要である。

このため、「文部科学省における研究及び開発に関する評価指針」(平成 17 年 9 月文部科学大臣決定)に基づき、理化学研究所が作成したシステム構成案の妥当性を評価し、評価結果を今後の次世代スーパーコンピュータの開発に反映していくこととされた。

評価の実施にあたっては、理化学研究所が設定したシステム開発方針の適切性、及び理化学研究所が作成したシステム構成案の妥当性を評価するとともに、今後の開発に当たって留意すべき事項をとりまとめることとされた。

実施体制としては、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、情報科学技術委員会運営規則第 2 条第 1 項に基づき、「次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会」(以下、「作業部会」という。)を設置し、評価を行うこととされた。

本作業部会においては以上のような経緯を踏まえ、「評価項目及び評価の視点又は基準」を設定した上で、理化学研究所から関係資料の提出及び説明を受け、システム構成案の内容が評価項目等に照らして妥当であるかどうか評価するとともに、今後実施するシステムの詳細設計及び製作に当たって留意すべき事項をとりまとめた。

なお、評価にあたっては、総合科学技術会議 評価専門調査会において行われたプロジェクトの事前評価(平成 17 年 11 月)やフォローアップ結果(平成 18 年 10 月)における指摘、及び平成 19 年度に実施される予定の評価の対象等にも十分留意した。(参考資料 1 参照)

注 4) 文部科学省のプロジェクトの目的・目標

【目的】

- ・計算科学技術を発展させ、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。
- ・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。

【目標】

- ・世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータを開発し、汎用性を重視しつつ、以下の性能を達成するとともに、大学・研究機関等が必要とする多種多様な計算機としての展開、及び開発を通じて獲得した技術の他の製品開発への展開に道筋をつける。
(Linpack で 10 ペタ FLOPS を達成する、等)
- ・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(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)を開発し、普及させること。
等

(2) 作業部会の活動の経緯

本作業部会は、以下のようなスケジュールにより 8 回会議を開催し、理化学研究所が作成したシステム構成案を評価するための「評価項目及び評価の視点又は基準」について検討を行い、その上で理化学研究所から説明を聴取し、評価を行った。

第 1 回 (平成 19 年 3 月 12 日)

- 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代理の指名について
- 次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会の運営について
- 次世代スーパーコンピュータプロジェクトの進捗について
- ・文部科学省からのヒアリング

第 2 回 (平成 19 年 3 月 27 日)

- 次世代スーパーコンピュータの概念設計の進捗について
- ・理化学研究所からのヒアリング

第 3 回 (平成 19 年 4 月 12 日)

- 次世代スーパーコンピュータの概念設計に関する評価について
- ・「評価項目及び評価の視点又は基準」についての議論

第 4 回 (平成 19 年 4 月 27 日)

- 次世代スーパーコンピュータの概念設計に関する評価について
- ・「評価項目及び評価の視点又は基準」についての議論
- ・評価の取りまとめ方についての議論
- ・理化学研究所からのヒアリング

第 5 回 (平成 19 年 5 月 9 日)

- 次世代スーパーコンピュータの概念設計に関する評価について
- ・理化学研究所からのヒアリング

第 6 回 (平成 19 年 5 月 21 日)

- 次世代スーパーコンピュータの概念設計に関する評価について
- ・性能目標についての議論
- ・理化学研究所からのヒアリング
- ・「評価項目及び評価の視点又は基準」に基づく評価の実施

第7回（平成19年5月28日）

次世代スーパーコンピュータの概念設計に関する評価について

- ・性能目標についての議論
- ・理化学研究所からのヒアリング
- ・「評価項目及び評価の視点又は基準」に基づく評価の実施

第8回（平成19年6月6日）

次世代スーパーコンピュータの概念設計に関する評価について

- ・評価報告書（案）についての議論

(3) 評価項目及び評価の視点又は基準

作業部会では、理化学研究所が作成したシステム構成案の評価を行うに当たり、評価項目と評価にあたっての視点又は基準を設定した。

具体的には、評価項目として2つの大項目を設けた。1つはシステム開発の方針の適切性、すなわち、理化学研究所の開発方針が文部科学省のプロジェクトの目的・目標に照らして妥当かどうかを評価するものである。もう1つはシステム構成案そのものの妥当性に関するものであり、これについてはさらに、(1) システム構成案の詳細及び性能、(2) システムの機能、(3) システムの運用の3つの小項目を設けた。

また、これらの評価項目に沿って評価を行う際の視点又は基準は以下の通り定めた。

評価項目	評価の視点又は基準
1 . システム開発方針の適切性	理化学研究所が設定したシステム開発方針 (システム最適化の考え方を含む) は、文部科学省におけるプロジェクトの目的及び目標に照らして妥当か。
2 . システム構成案の妥当性	<p>(1) システム構成案の詳細及び性能</p> <p>次の性能目標を実現する上で、システム構成案 (プロセッサ、メモリ、ネットワーク等の構成) は適切か。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ Linpack で 10 ペタ FLOPS を達成する (平成 23 年 6 月のスーパーコンピュータサイト TOP500 でランキング第 1 位を奪取) 。 ・ HPC CHALLENGE 全 28 項目中、過半数以上の項目で最高性能を達成する。 <p>システム構成案は、消費電力及び設置面積あたりの演算性能において妥当であるか。</p> <p>システム構成案を実現するための要素技術は、現在の技術水準及び今後の見通しから判断して、システムの製作時期までに開発可能か。</p> <p>システム構成案は、革新性、発展性、拡張性及び展開性を有するものであるか。また、我が国が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の強化に寄与するものであるか。</p> <p>システム構成案は、それを基に大学や研究機関向けの計算機システムを構築することを可能とするものか。また、それ</p>

		を実施する場合に、消費電力、設置面積及び将来の拡張性の面で、適当なものとなるか。
	(2) シ ス テ ム の 機 能	<p>ターゲット・アプリケーションについての実効性能は、十分であると評価されるか。</p> <p>その他の広範な分野におけるアプリケーションについても十分な実効性能を出すことが可能か。</p> <p>システムソフトウェア（OS、ライブラリ、コンパイラ等）はシステムの性能を十分引き出すものであるか。</p> <p>システムソフトウェア（OS、ライブラリ、コンパイラ等）は幅広い利用者が利用することが可能なものか。</p>
	(3) シ ス テ ム の 運 用	<p>計算機資源の効率的な配分等により、多数の利用者がシステムを多様な用途に利用することが可能か。</p> <p>システムの部分的な故障時等に、全体の運用に影響を及ぼさない仕組みは構築されているか。また、迅速な修理等は可能か。</p>

・ 評価結果

(1) 「評価項目及び評価の視点又は基準」に基づく評価

1 . システム開発方針の適切性

理化学研究所が設定したシステム開発方針（システム最適化の考え方を含む）は、文部科学省におけるプロジェクトの目的及び目標に照らして妥当か。

【理化学研究所による説明の概要】

システム開発は、以下のような基本方針及び具体的な開発方針の下に行っている。

基本方針

- ・ 計算機シミュレーションにより、科学技術・産業の競争力を維持・高める。
- ・ スーパーコンピュータの開発力を国内に保持し、継続的な開発を可能とする。
- ・ 完成時に世界最速と内外から広く認められる。

システム開発方針

- ・ 理論性能や Linpack 性能(10 ペタ FLOPS 以上)を考慮しつつ、実効性能（アプリケーション性能）を重視したシステム構築を目指す。
- ・ 幅広い活用を促すため、低コストを実現しつつ、利便性の高い汎用機により目標性能を達成することを目指すとともに、アクセラレータの検討も行う。
- ・ 低消費電力 CPU など、新規性の高い技術をベースとした波及効果の高いハードウェア技術の開発を目指す。

また、システムの最適化の考え方として、 グランドチャレンジからの要求要件、ターゲット・アプリケーションによるシステム検討、 電力、設置面積、コスト等の制約条件、 海外動向、要素技術等の状況等を総合的に勘案した上で、システム構成案を決定した。（参考資料2 図1、参考資料3 参照）

【評価】

理化学研究所のシステム開発方針及び最適化の考え方は、文部科学省のプロジェクトの目的・目標に照らして妥当である。特に、利便性・汎用性を確保しつつ目標性能を達成しようとするものであること、下方展開を行う際に重要な低消費電力や設置面積などの制約を強く意識した開発方針であることは評価できる。

2. システム構成案の妥当性

(1) システム構成案の詳細及び性能

次の性能目標を実現する上で、システム構成案（プロセッサ、メモリ、ネットワーク等の構成）は適切か。

- ・Linpack 性能 10 ペタ FLOPS を達成する（平成 23 年 6 月のスーパーコンピュータサイト TOP500 でランキング第 1 位を奪取）
- ・HPC CHALLENGE 全 28 項目中、過半数以上の項目で最高性能を達成する（以下、「HPCC 過半数目標」という）

【理化学研究所による説明の概要】

本システム構成案は、汎用性、アプリケーションからの要求、電力・設置面積等の制約条件、費用対効果、革新性、発展性、展開性等を重視しつつ、Linpack で 10 ペタ FLOPS を達成することが可能なものである。

【評価】

Linpack10 ペタ FLOPS の達成については、本システム構成案において達成可能であると考える。

平成 23 年 6 月のランキング第 1 位の獲得については、世界的な開発競争の中で不確定要素を含むものであることから、将来的なシステムの拡張に対応できるようなシステム設計が望まれる。

HPC CHALLENGE については、文部科学省が性能目標の一つとして設定したものであるが、28 項目にはシステムの部分的な性能を評価する項目が多く含まれており、システム全体の性能を評価するものでは必ずしもないこと等から、平成 18 年 10 月の総合科学技術会議によるフォローアップ時にその妥当性について問題提起がなされており、本作業部会においても性能目標としての妥当性について検討を行った。

その結果、HPCC 過半数目標はシステム全体の性能を評価するものとしては必ずしも適切ではないこと、HPCC 過半数目標を達成するシステムは、Linpack 性能、汎用性、消費電力、設置面積などの目標及び予算上の制約を満足しないことが明らかになった。これを踏まえ、作業部会においてこれら目標間のプライオリティに関する議論を行った結果、HPCC 過半数目標より汎用性、消費電力、設置面積などの目標の達成がより重要であることから、HPCC 過半数目標そのものを変更すべきであるとの結論に至った。

新たな性能目標のための評価項目としては、

多様なアプリケーションの実効性能の評価に資するものであること

ある程度世界的にも認知されていること

との視点から、「HPCC Award 4 項目」が適切であり、新たな性能目標としては、「HPCC Award 4 項目において最高性能を達成する」とすることが適当であると考えられる。

本作業部会においては、「HPCC Award 4項目において最高性能を達成する」との観点でシステム構成案における推定性能を理化学研究所より聴取し、追加的に評価を行ったが、ほぼ妥当であると考える。

システム構成案は、消費電力及び設置面積あたりの演算性能において妥当であるか。

【理化学研究所による説明の概要】

理化学研究所は、概念設計を行うに当たっての消費電力及び設置面積の性能目標を、完成時の技術水準、下方展開の可能性及び米国の動向等の観点から設定した。

国内の大学や研究機関におけるスーパーコンピュータセンターの受電設備容量は約1.5MW以下、設置面積は約600 m²以下であり、下方展開性の確保の検討に当たってはこれらのデータを考慮した。また、次世代スーパーコンピュータセンターの設備制約条件なども考慮して、消費電力及び設置面積を設定した。

本体システムの理論性能あたりの消費電力及び設置面積は、国内外における1994年（平成6年）以来の主要なスーパーコンピュータシステム及び現在計画されている他のシステムとの比較において妥当である。（参考資料2 図2参照）

【評価】

システム構成案の消費電力及び設置面積あたりの演算性能は、従来のスーパーコンピュータの実績値及び計画中の他のスーパーコンピュータの推定値と比較して、より高い値であり、かつ下方展開の観点では国内の大学や研究機関の許容値と考えられることから、妥当である。

一方、これらの値は、最先端の半導体プロセスで直面するパラメータの変動、インターコネクットの遅延、信頼性の劣化などの要因により、悪化することがあり得ると考える。また、更なる低消費電力化について、組込み分野において発達している技術も参考とするなど検討を進めることが期待される。

システム構成案を実現するための要素技術は、現在の技術水準及び今後の見通しから判断して、システムの製作時期までに開発可能か。

【理化学研究所による説明の概要】

理化学研究所においては、各演算部を構成する要素技術の開発スケジュールを計画している。

主な要素技術は以下のとおりである。

- ・ 論理 LSI の高性能技術、低消費電力技術、高信頼技術等（45nm 半導体プロセス技術にて製作）
- ・ インターコネクットの高速信号伝送技術等
- ・ 部品単位水冷技術
- ・ コンパイラ技術 等

これらのいずれについても、2010 年度（平成 22 年度）運用開始、2012 年（平成 24 年）完成というプロジェクトの全体スケジュールを見据えたシステムの製作時期に合わせて開発スケジュールを計画している。

【評価】

システム構成案を実現するための要素技術は、現在の技術水準及び今後の見通しから、必ずしも余裕のある開発スケジュールとはいえないものの、システムの製作時期までに開発可能である。

冷却技術や光を含むインターコネクット技術は我が国が進んでいる分野でもあり、スケジュールどおりの実用化が可能であると考ええる。

45nm 半導体プロセス技術の利用は我が国の半導体における技術力維持の上で非常に重要であるが、最先端の技術であることから、採用に当たっては十分な検討が必要である。当該技術の実現の時期については、半導体技術の国際的ロードマップ検討委員会（ITRS）の想定に大きな隔たりはない。特に ITRS が前提とするハーフピッチに基づく加工技術の指標に照らした場合には、2010 年度（平成 22 年度）からの 45nm 量産は確実ではないものの、今回のプロジェクトで必要な論理 LSI の速度性能に大きな影響を有する電界効果トランジスタの実効ゲート長の観点に着目すれば、45nm 技術相当の速度性能を持つ LSI の実現の可能性は十分に期待できると考える。

一方、微細化に伴って予想される、物理的な要因によるしきい値や消費電力等の変動の影響が、消費電力及び設置面積の目標に反映されているかは明らかでないが、システムの製作に支障が出ないようにするために、これらの検討を十分に行う必要がある。

システム構成案は、革新性、発展性、拡張性及び展開性を有するものであるか。また、我が国が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の強化に寄与するものであるか。

【理化学研究所による説明の概要】

本システム構成案は、次の通り革新性、発展性、拡張性及び展開性に優れたものである。

革新性

多機能、高信頼性を実現したスカラ型 CPU を搭載するスカラ部と、従来のベクトル型の課題を解決する新規のアーキテクチャによる CPU を搭載するベクトル部の複合システムである。本システムは、複雑系シミュレーションなど計算科学の質的向上につながる計算環境を提供することができ、また、メモリ量やアプリケーションの実効性能を確保しつつ、性能あたりの電力、設置面積を極めて低く押さえている。各演算部の CPU は先端技術（45nm 半導体プロセス技術）により製造される。

発展性

シミュレーション技術の向上により、複合システムのニーズは高まっていくことが予想される。また、両 CPU 技術を発展させることにより、次々世代以降の CPU 開発において、両者の技術を融合させることも視野に入れることができる。

拡張性

両演算部とも、10 ペタ FLOPS を大きく上回ることが可能なスケーラブルなシステム構成となっており、さらに、両演算部それぞれが拡張可能なため、単一アーキテクチャに比しても拡張性が高い。

展開性

ユーザのニーズに応じ、両演算部のそれぞれの展開及び複合システムとしての展開が可能である。

技術力の強化

世界的主流となっているスカラプロセッサに演算加速機構を付加したプロセッサと、我が国が強みをもつベクトルプロセッサの改良型となる新しい汎用プロセッサを同時に開発することにより、次世代以降のプロセッサ技術のオプションを発展させ、我が国として将来の国際競争力の一層の向上を図ることができる。

【評価】

革新性

システム構成案は、スカラプロセッサ、ベクトルプロセッサ、各演算部内部のネットワーク構成、両演算部のアーキテクチャなどについて、革新性の高い部分を有する。

ただし、両プロセッサについては、基本的に従来のプロセッサ構成の延長上にあることから、改良はなされているものの、新規の系統の技術という観点においては、革新性は限定的である。一方、コンピュータ技術は積み重ねで成り立っており、単に独創的だけでは、技術として定着しないことにも留意すべきである。

今後、両演算部を一つのシステムとして活用するシステムソフトウェアの開発に期待したい。

発展性

両演算部のプロセッサ構成や柔軟なネットワーク構成等に発展性が認められる。特に光インターコネクト技術は、少なくともシステムワイドなネットワーク技術として発展する可能性が高い。一方、ベクトル部におけるベクトル型 CPU については、種々の境界条件・制約条件の下での最適性を追求して設計されたものであり、本システムの開発を通じてソフトウェア面での技術蓄積・発展がなされれば、ベクトル型の新たな発展につながる可能性が高い。

なお、これらの技術の将来については不透明な部分もあるが、各演算部の異なる技術はそれらの融合も含め、今後の発展に様々なオプションを提供するものであると考える。

拡張性

異なる演算部の結合は、将来のスーパーコンピュータアーキテクチャへの一つの提案と考えることができ、拡張性に優れている。また、各演算部ともに柔軟な結合ネットワーク構成をとっていることから、拡張性を有する。

展開性

2つの演算部による複合システム構成とすることにより、各演算部の異なる技術に基づき、中・小規模のシステムに展開させる可能性が広がった。また、複合システムとしての展開の可能性もある。

技術力の強化

世界的傾向に沿ったスカラ部と、従来から我が国の技術が強みを有するベクトル演算機構を持つベクトル部とを合わせて開発することで、独自の技術を維持しつつ世界で認められる計算機を開発する基盤を強化するとともに、LSI 製造技術のみならず、論理 LSI アーキテクチャの設計技術力の強化に寄与するものと期待される。

また、3社との共同開発による複合システムを推進することも、技術力の強化に資

すると考える。

なお、スーパーコンピュータそのものの市場は必ずしも小さくなく、今後の急激な拡大も期待できないことから、プロセッサ技術を情報家電の国際的競争力の強化に活用できるようにするなどの視点も重要である。

システム構成案は、それを基に大学や研究機関向けの計算機システムを構築することを可能とするものか。また、それを実施する場合に、消費電力、設置面積及び将来の拡張性の面で、適当なものとなるか。

【理化学研究所による説明の概要】

国内の大学や研究機関等のスーパーコンピュータセンターの大部分において、設置面積約 600m² 以下、受電設備容量 1.5MW 以下、という制約がある。本システム構成案は、各演算部の構成を基に、大学や研究機関向けの計算機に下方展開した場合に想定される消費電力や設置面積から判断して、その制約条件を満足している。

なお、スーパーコンピュータセンターの多様なアプリケーションのニーズに対応し、複合システム、スカラ部、ベクトル部それぞれの構成による下方展開が可能である。

【評価】

システム構成案を基に、大学や研究機関向けの計算機に下方展開することは可能である。大学や研究機関等のスーパーコンピュータセンターの計算機の設置面積は 600m² 以下、消費電力は 1.5MW 以下であるが、本システムの各演算部を下方展開した場合、大学や研究機関のスーパーコンピュータセンターが必要とする演算能力を許容範囲内の設置面積や消費電力で実現できると考える。また、機関ごとのニーズに合わせて、複合システム型、スカラ型、ベクトル型それぞれの構成により、計算機の構築が可能であり、有用性が高い。

スカラ部については、テラ FLOPS レベルの小規模システムまで展開可能である。なお、システム構成案のネットワーク構成が 10 ペタ FLOPS 級のシステムを想定したものであるため、そのような小規模システムへの展開の際には、ネットワーク構成の検討が必要となる可能性もある。

ベクトル部についても、大学や研究機関のスーパーコンピュータセンター向けの高性能システムを構築することは十分可能である。

(2) システムの機能

ターゲット・アプリケーションについての実効性能は、十分であると評価されるか。

【理化学研究所による説明の概要】

理化学研究所では次世代スーパーコンピュータ開発戦略委員会の下に設置したアプリケーション検討部会において、平成 18 年 1 月から平成 19 年 3 月まで計 7 回の会議を開催し、2010 年（平成 22 年）頃に重要となるアプリケーション・ソフトウェアの検討を実施した。具体的には、ナノ、バイオ、物理・天文、地球科学、工学の 5 分野 100 本以上のアプリケーションから、ターゲット・アプリケーション 21 本を選定した。その中の主要なアプリケーション 7 本（SimFold, GAMESS, Modylas, RSDFT, NICAM, LatticeQCD, LANS）に対して、システム構成案はペタ FLOPS 級の実効性能が見込まれることから、ターゲット・アプリケーションについての実効性能は十分であると判断する。

【評価】

ライフサイエンス、ナノテクノロジー、地球科学、計算物理及び工学分野における 7 種類の主なターゲット・アプリケーションについて実効性能の推定結果が示された。現在提示されている性能推定では、アプリケーションのコア部分だけの検証も含まれているなど、演算の特徴の把握が困難な部分もあるが、いずれのアプリケーションでもペタ FLOPS 級の性能を示していることから、実効性能は十分であると考えられる。

また、スカラ部、ベクトル部はアプリケーションごとに実効性能の優劣があるが、その優劣にしたがってスカラ部、ベクトル部いずれかを使用することにより、計算資源の有効活用を図ることができる。

その他の広範な分野におけるアプリケーションについても十分な実効性能を出すことが可能か。

【理化学研究所による説明の概要】

選定したターゲット・アプリケーションには代表的なアルゴリズムが含まれており、これらの実効性能がペタ FLOPS 級であることから、その他の広範なアプリケーションにおいても、アプリケーションの特性に適合した演算部を選択し、高い実効性能を得ることが可能であると推測される。(参考資料 2 図 3 参照)

【評価】

システム最適化に用いたターゲット・アプリケーションには多くの異なるアルゴリズムが含まれること、アプリケーションの特性に応じた適切な演算部の活用により良好な実効性能が得られることから、広範な分野におけるアプリケーションについても高い性能を出すことが期待できる。

一方、複合システム全体を活用する観点からは、そのようなアプリケーションが十分明確になっていないことから、十分な実効性能を出すことが可能かどうかを現時点で判断することは困難である。

システムソフトウェア（OS、ライブラリ、コンパイラ等）はシステムの性能を十分引き出すものであるか。

【理化学研究所による説明の概要】

理化学研究所では、次世代スーパーコンピュータの効率的運用のために、計算資源の管理、ソフトウェア構成の管理、障害管理、ジョブ状況表示及びソフトウェア開発等を、両演算部について統合的に実施可能とするトータルシステムソフトウェアを開発する予定である。これにより、一体的なシステムとして、次世代スーパーコンピュータを利用することができるようになる。

システム構成案の各演算部におけるコンパイラに対しても、自動並列化をはじめとした高速化技術を適用する予定である。

また、各演算部においても、以下のようなライブラリの最適化を実施する。

- ・並列度の大規模化への対応及びネットワークトポロジに適した通信性能を実現するとともに、計算ノード間の通信性能を最適化する MPI ライブラリ
- ・マルチコアの効率利用及び分散メモリ型に適応した科学技術計算用ライブラリ

これらのシステムソフトウェアにより、本システムの性能を十分引き出すことが可能である。また統合機能により各演算部に適したアプリケーション実行を分担することにより、システム全体の性能を引き出すことが可能である。

なお、トータルシステムソフトウェアの機能の詳細については、システム構成決定後の詳細設計において、詳しく検討することとしている。（参考資料 2 図 4 参照）

【評価】

各演算部のシステムソフトウェアについては、現時点で提示されている情報が少なく、正確な評価は難しいが、各演算部の固有のシステムソフトウェアは確立された技術に基づくものであり、全自動とは限らないがシステムの性能を従来通り引き出すことが期待される。

特に、本システムのような大規模マルチプロセッサシステムの性能を引き出すコンパイラの開発は大きな課題であり、今後の開発が期待される。また、各演算部に対してシステムソフトウェアの開発・最適化が必要となることから、コスト面での十分な配慮が必要である。

トータルシステムソフトウェアについては、十分な検討がなされていないため、現時点では十分な性能を引き出すものであるかどうか判断は困難である。

多数の演算ユニットを効率的に運用し、特に 2 つの演算部を有機的に運用するためのソフトウェア開発は、世界的に見ても大きな課題であると考えられる。しかしながら、トータルシステムソフトウェアの開発は本プロジェクトにおけるシステムの成否を左右する重要課題であり、また当該分野における我が国の技術力を向上させる効果が期待できるため、詳細設計段階での十分に検討する必要がある。

開発に当たっては、開発体制を早期に確立するとともに、プロトタイプハードウェアを連結して、早い時期からトータルシステムソフトウェアの問題点を検討しながら詳細設計を行っていくなど、着実な開発を進めることが望まれる。本項目については、今後、十分な検討を重ねて、本システムにおける真の有機的な連携のためのソフトウェア構想を検討する必要がある。

システムソフトウェア（OS、ライブラリ、コンパイラ等）は幅広い利用者が利用することが可能なものか。

【理化学研究所による説明の概要】

システムソフトウェアについては、トータルシステムソフトウェア機能に加え、標準仕様に準拠した各演算部の機能を予定している。これにより、既存プログラムの移植や次世代スーパーコンピュータ向けプログラムの小規模な計算機向けの転用が容易であることから、幅広い利用者が利用可能である。

トータルシステムソフトウェアの機能の詳細については、システム構成決定後の詳細設計において詳しく検討する。各演算部はともに POSIX 規格に準ずる UNIX 系 OS、Fortran95、C99、JIS 規格 C++ に準拠するコンパイラ及び広く利用されている標準的な科学技術計算用ライブラリ等が利用可能となる。並列化については、OpenMP、HPF、MPI、ScaLAPACK 等が利用可能となる。

【評価】

各演算部において、標準的なシステムソフトウェアが利用可能となる予定であり、特に利用困難な点は見当たらない。ただし、計算性能が 10 ペタ FLOPS に達する本システムを利用するにあたっては、高度な専門知識と経験が求められることから、システムを使いこなすための専門知識を共有かつ伝承するための体制整備が必要である。

さらに、従来のライブラリベースのものから一段進んだコンパイラ技術が検討され、システムソフトウェア技術の進展に貢献することを期待する。

一方、トータルシステムソフトウェアについては、現時点で提示されている情報は少ない。このため、複合システムとしての性能を引き出す機能が、詳細設計段階で十分検討されることを期待する。

(3) システムの運用

計算機資源の効率的な配分等により、多数の利用者がシステムを多様な用途に利用することが可能か。

【理化学研究所による説明の概要】

システム構成案は複合システムであることから、多数の利用者が次世代スーパーコンピュータを多様な用途に利用可能である。また、両演算部は用途に合わせて計算機資源を配分するためのジョブマッピング及びパーティショニング機能を有している。

両演算部とも、計算資源を一括して管理し、計算ノード、ファイルシステムと連携し、システム全体又はパーティション毎の資源管理及びジョブ実行管理を実現する運用ソフトウェアを作成する予定である。

システム全体としての効率的な利用を可能とするトータルシステムソフトウェアの機能については、今後の詳細設計においてさらに検討する。なお、運用方針については、今後検討することとしている。

【評価】

システム構成案においては、スカラ部及びベクトル部から構成されており、多様な応用ソフトウェアのアルゴリズムに合わせて、最適な計算環境を選択することが可能である。このため、多様な用途でシステムを利用することが可能である。

計算資源の効率的な配分の実現のために、各演算部において適切なパーティショニング及びジョブマッピングを実現するハードウェア構成と、計算資源管理及びジョブ実行管理を行う運用ソフトウェアが計画されている。

一方、両演算部を統合的に運用し、システム全体として効率的な資源配分を行う上で、トータルシステムソフトウェアの整備が重要である。ただし、全自動の最適なジョブ管理を実現する技術は研究段階にあることから、その実用化には困難を伴うが、トータルシステムソフトウェアにおける半自動のジョブ管理機能によっても、ある程度の効率的な資源配分を達成できるものと評価する。

計算機資源の効率的な配分等を行うためには、システム全体を運用するためのソフトウェアが非常に重要であり、今後さらなる検討を行い、適切な運用システムが構築されることを期待したい。

システムの部分的な故障時等に、全体の運用に影響を及ぼさない仕組みは構築されているか。また、迅速な修理等は可能か。

【理化学研究所による説明の概要】

システム構成案は、CPU の ECC 機能、計算ノード間ネットワークの障害対策、パスの二重化によるディスクの障害対策等のハードウェアの基本的 RAS 機能を装備している。

また、トータルシステムソフトウェアに障害管理機能を用意し、故障等の障害に対応することとしている。なお、運用方針に沿ったソフトウェアを含むシステム全体の保守、運用については、詳細設計で検討することとしている。

【評価】

次世代スーパーコンピュータのような多数の要素から構成されるシステムでは、障害への対策は必要不可欠であることから、システム構成案においては、従来から汎用システムに用いられているハードウェアの RAS 機能を基にした信頼性確保の対策がなされている。

また、システム構成案では、一方の演算部の障害を他の演算部から切り離せる余地が、単一の演算部から構成されシステムに比較して大きいと考えられ、トータルシステムソフトウェアの機能を充実することで、より高い障害対応能力を持つことが可能であると評価する。

CPU やノードの信頼性向上については、キャッシュの ECC 機能、内蔵 RAM のパリティ検査など、故障診断のための十分な対策も取られており、評価できる。ただし、システム規模を考慮すると、それらの対策による構成要素の信頼性の向上に加え、更なる故障への対策が必要であると考えられる。また、システム構成案では、CPU の LSI を 45nm 半導体プロセス技術で設計・製造する予定であるが、45nm 半導体プロセスにおいては、MOS-FET のしきい値、性能及び消費電力の変動が大きくなることが、ITRS で指摘されている。このため、従来の概念に基づくハードウェアの RAS 機能で十分かどうかについて更に検討が必要であり、システムソフトウェアの一層の充実や、運用時の誤操作や保守の不徹底への対応などを検討しつつ、開発を進めていく必要がある。

(2) 結論

本作業部会においては、これまで8回にわたる会議を開催し、次世代スーパーコンピュータのシステム構成案について、「評価項目及び評価の視点又は基準」を整理した上で、開発主体である理化学研究所からの説明を聴取し、評価を実施してきた。

理化学研究所のシステム開発方針及び最適化の考え方は、文部科学省のプロジェクトの目的・目標に照らして妥当である。また、そのシステム開発方針及び最適化の考え方に基づき、理化学研究所が作成したシステム構成案は、我が国の最先端・高性能汎用スーパーコンピュータのシステムを構築する上で、適切なものであり引き続き研究開発を進めるべきであると評価する。

具体的には、システム構成案について、性能目標の達成、消費電力及び設置面積当たりの演算性能、システム構成案を実現するための要素技術の開発可能性、革新性、発展性、拡張性、展開性及び技術力の強化への寄与、大学や研究機関等への下方展開、アプリケーション性能、システムソフトウェア、計算機資源の適切な配分等によるシステム運用、故障等への対応等について、網羅的かつ詳細に検討・評価を行った。各々の評価結果についてはこれまで述べてきたとおりであり、理化学研究所のシステム構成案はこれらの評価項目及び評価の視点又は基準に照らして適切であると評価する。

一方、これまでの評価を通じて、いくつかの課題も見えてきた。

本プロジェクトの大きな目標の一つに、「世界最先端・最高性能」を獲得することが挙げられている。現時点で計画されている他のプロジェクトや技術開発動向等を勘案して設定されたLinpack10ペタFLOPSの達成を目指した研究開発は妥当であると考えながら、世界的な開発競争の中で不確定要素を含むものであることから、これに柔軟に対応できる取組みが必要であると考えられる。

これまで述べてきたとおり、本システム構成案は複合システムであるという大きな特徴を有し、世界的主流となっているスカラプロセッサに演算加速機構を付加したプロセッサと、我が国が強みをもつベクトルプロセッサの改良型となる新しい汎用プロセッサを同時に開発するものである。

この複合システムは、

- ・ 多様なアプリケーションの効率的な実行
- ・ 高い拡張性、下方展開性
- ・ 技術オプションの確保による技術力の強化、国際競争力の向上

等の観点から非常に有効であるが、同時に本システムを一体的に運用するためのトータルシステムソフトウェアの開発について、より一層の検討、取組みが必要である。特に、

世界最先端のシステムを効率的に運用し最大限に活用するためには、システム全体の効率的な資源配分、高いユーザビリティの確保等が不可欠である。このようなトータルシステムソフトウェアの開発は非常にチャレンジングであるが、本プロジェクトにおける同ソフトウェアの開発は本システムの成否を左右するものであり、また、当該分野における技術開発が促進され我が国の技術力を向上させる効果が期待できることから、詳細設計段階での十分な検討を期待したい。同様に、各演算部のシステムソフトウェアについても、検討体制の構築を含め、詳細設計段階での十分な検討を期待したい。

今後、詳細設計の段階においては、工程管理が一層重要となる。本プロジェクトは研究開発要素が多く、特に 45nm 半導体プロセス技術の実用化時期やそれを踏まえた CPU の製造など、プロジェクト全体のスケジュールの遅延につながりうる要素を含んでいる。理化学研究所においては、工程管理を徹底するとともに、このような事態への対応の検討も必要であると考えます。

本プロジェクトは、国家基幹技術として我が国の威信をかけた国家プロジェクトである。開発主体である理化学研究所においては、本報告書の趣旨を踏まえ、今後のプロジェクトの円滑な推進に万全を期していただきたい。

次世代スーパーコンピュータの概念設計の評価の実施

1. 基本的な考え方

平成18年度より開始した「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（以下、「プロジェクト」という。）は、現在、開発主体である理化学研究所において概念設計を実施しているが、プロジェクトの目的及び目標を達成するためには、概念設計が適切に実施されることが極めて重要である。このため、「文部科学省における研究及び開発に関する評価指針」（平成17年9月文部科学大臣決定）に基づき、理化学研究所が概念設計を行い作成したシステム構成案の妥当性を評価し、評価結果を今後の次世代スーパーコンピュータの開発に反映していくこととする。

2. 評価の実施

（1）評価の概要

理化学研究所が設定したシステム開発方針の適切性、及び理化学研究所が作成した次世代スーパーコンピュータのシステム構成案の妥当性を評価するとともに、今後の開発に当たって留意すべき事項をとりまとめる。

（2）実施体制

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、情報科学技術委員会運営規則第2条第1項に基づき、「次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会」（以下、「作業部会」という。）を設置し、評価を行う。

（3）実施方法

作業部会においては、評価項目等を設定した上で、理化学研究所から関係資料の提出及び説明を受け、システム構成案の内容が評価項目等に照らして妥当であるかどうか評価するとともに、今後実施するシステムの詳細設計及び製作に当たって留意すべき事項をとりまとめる。

（4）評価項目等

評価項目と評価の視点又は基準は別紙1（略：本文6～7頁参照）のとおり。

（5）スケジュール

別紙2（略：本文4～5頁参照）のとおり。

(6) その他

評価にあたっては、総合科学技術会議 評価専門調査会において行われたプロジェクトの事前評価やフォローアップ結果における指摘、及び平成19年度に実施する評価の対象等にも十分留意する。

3 . 評価の取り扱い

文部科学省においては、評価結果を理化学研究所に対して提示し、それを踏まえて開発を行うよう指示するとともに、評価結果を踏まえて理化学研究所が講じた取り組みや開発のその後の進捗を把握し、情報科学技術委員会に報告するなど、適切なフォローを行っていく。

理化学研究所提出資料

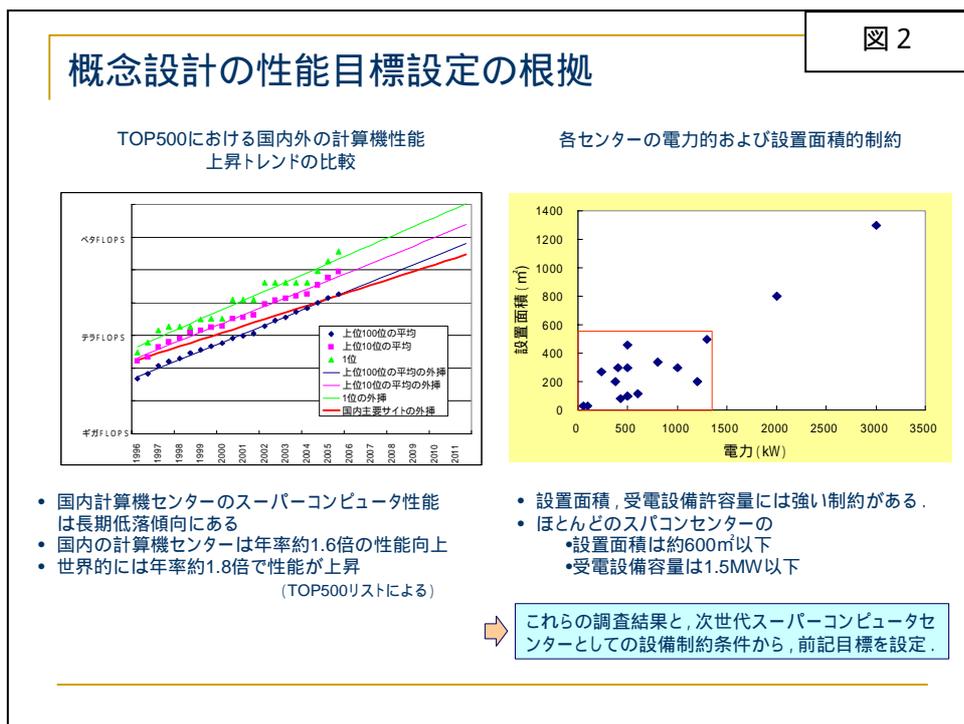
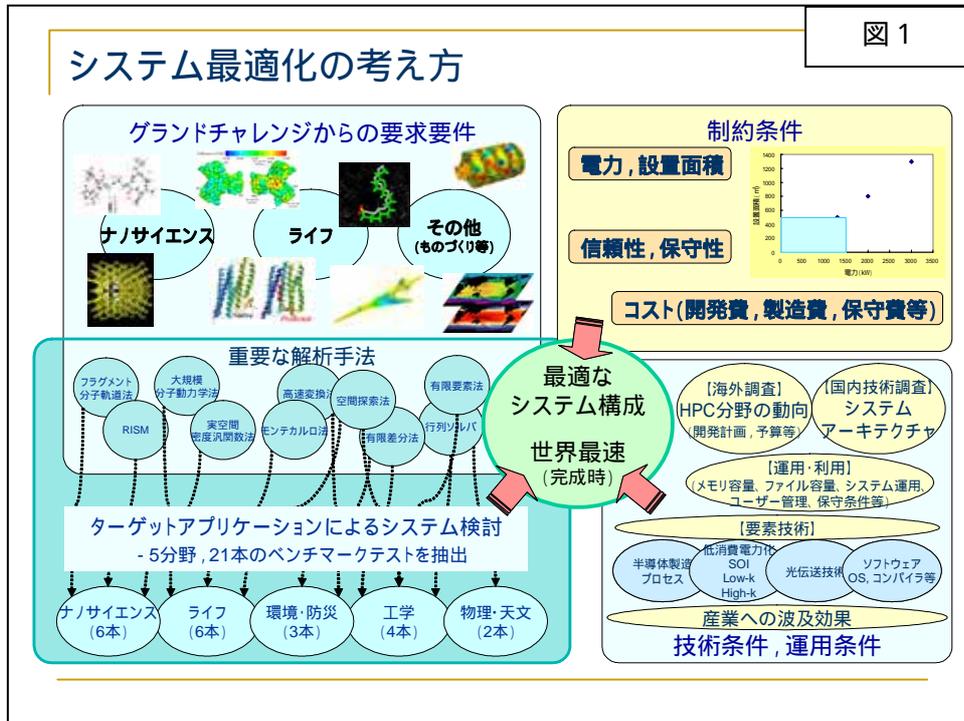
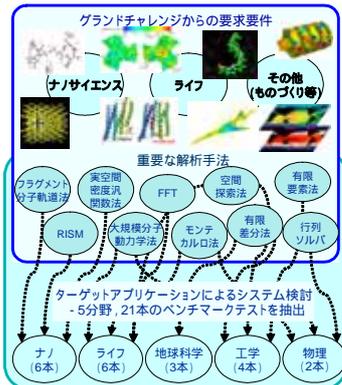


図 3

評価したターゲット・アプリケーション

- 代表的なアルゴリズムを含む主要なアプリケーションを評価した。その他の広範なアプリケーションにおいても、高い実効性能が得られると推測。



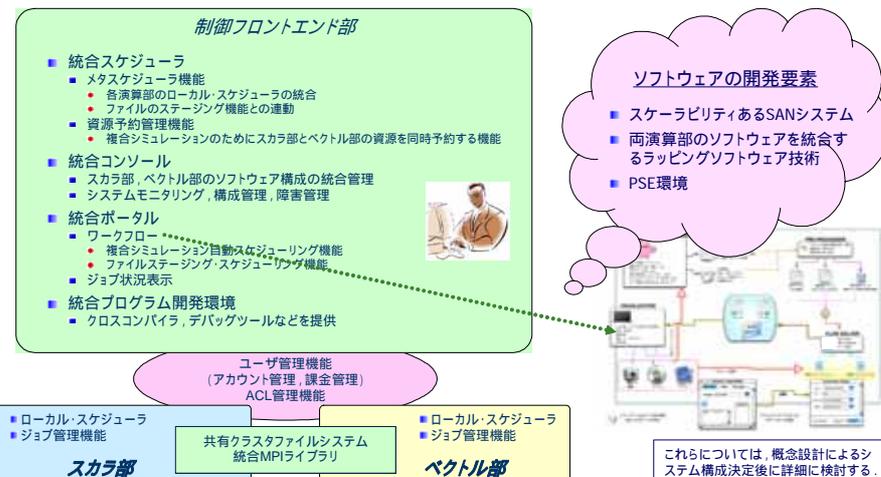
ベンチマーク	分野	アプリケーション
SimFold	ライフ/ナノ	ライフトタンパク質立体構造の予測
GAMESS/FMO		分子軌道法計算
Modyas		高並列汎用分子動力学計算
RSDFE		実空間第一原理分子動力学計算
NICAM	地球科学	全球雲解像大気大循環モデル
LatticeQCD	物理	格子QCDシミュレーション
LANS	工学	圧縮性流体計算

- アプリケーションの特性に適した演算部を選択し、高い実効性能を得ることが出来るシステムである。

図 4

複合システムとしての機能

- 複合汎用スーパーコンピュータシステムの効率良い運用のために、以下のトータルシステムソフトウェア機能の開発を予定。



理化学研究所提出資料

次世代スーパーコンピュータのシステム
構成案について

次世代スーパーコンピュータシステムの概要

【世界最速を達成する最先端システム】

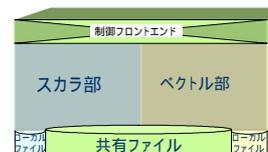
- > Linpack性能10ペタFLOPSの達成のみならず、アプリケーションの実行においても世界最高性能
- > 先端技術(45nm半導体プロセス,光インターコネクなど)により画期的な省電力、省スペースを実現
- > 理研とメーカー3社が共同で開発

【科学技術・産業の競争力を発展させる将来型システム】

- > 高機能スカラ部と革新的ベクトル部から構成される複合汎用システム
- > 複雑系問題、多階層問題などシミュレーションの革新を先導する計算環境を提供
- > 次々世代以降の開発と利用を見据え、我が国の国際競争力を牽引

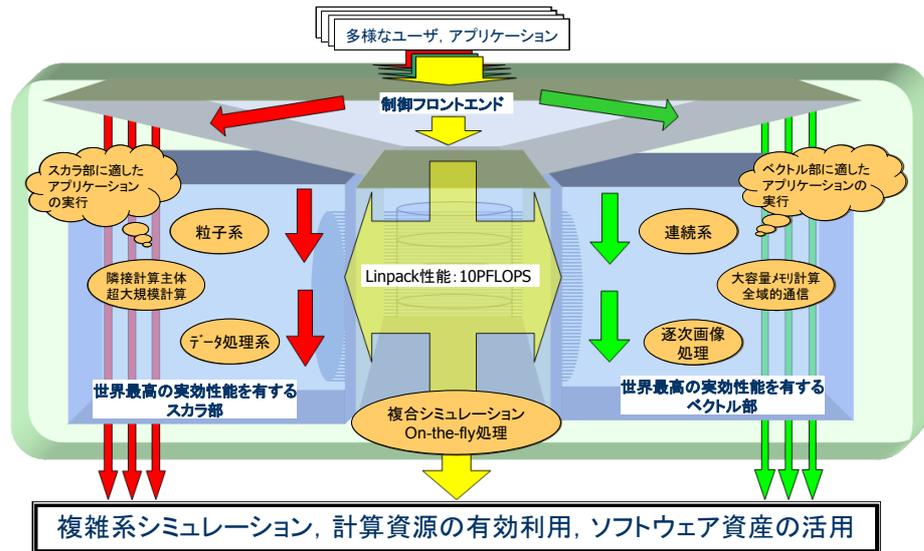
【我が国の科学技術基盤となる複合汎用システム】

- > 様々なアプリケーションを効率よく実行する複合汎用システム
(より多くのユーザーが利用可能)
- > 全国の産学の研究者等の共用施設
- > アプリケーション資産を最大限活用
- > 大学等のスパコンセンターへの展開性大
(我が国の計算機環境を質的にも量的にも革新)



<次世代汎用スーパーコンピュータシステム概念図>

=多様な計算ニーズに対して最適な計算環境を提供する複合型システム



2

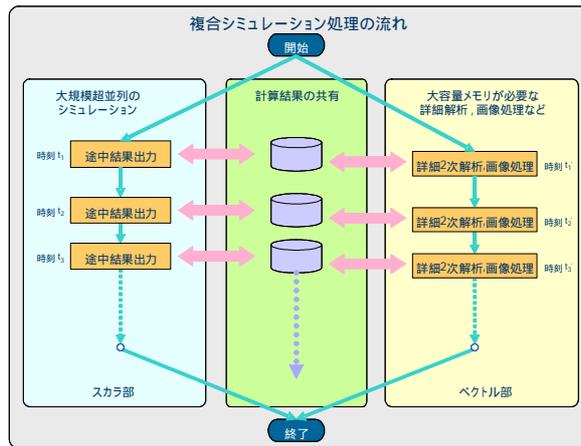
次世代汎用システムの特長

- 新世代のスーパーコンピューティング環境の実現
 - 両演算部の使い分けにより、アプリケーションの実行に適した計算環境を提供(⇒アプリ資産の活用&スループットの向上)
 - 両演算部を同時に使うことにより、多階層問題やOn-the-fly処理など、将来の主流となる複雑系のシミュレーションのための研究開発環境を提供
- 一体的なジョブ管理により、一般ユーザーは両演算部を意識せずに最適環境を利用可能
- 大学等の計算センターへ、計算機利用者のニーズに応じて、多様な下方展開が可能
 - 我が国全体の計算機資源の量的・質的向上へ貢献

3

On-the-fly複合シミュレーション

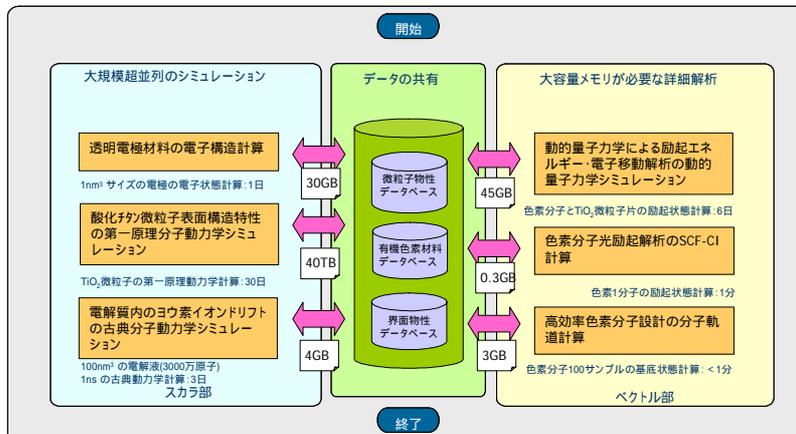
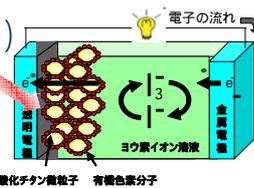
- 複合シミュレーションにおいて、ある時刻ごとに出力される途中結果の流れ作業的なデータ解析、及び画像処理に最適なシステム。
- 各演算部の連携により、一連のデータ処理の短縮化が可能。
- 大規模かつ長時間シミュレーションの途中結果のモニタリングによる計算資源の有効活用が可能。



4

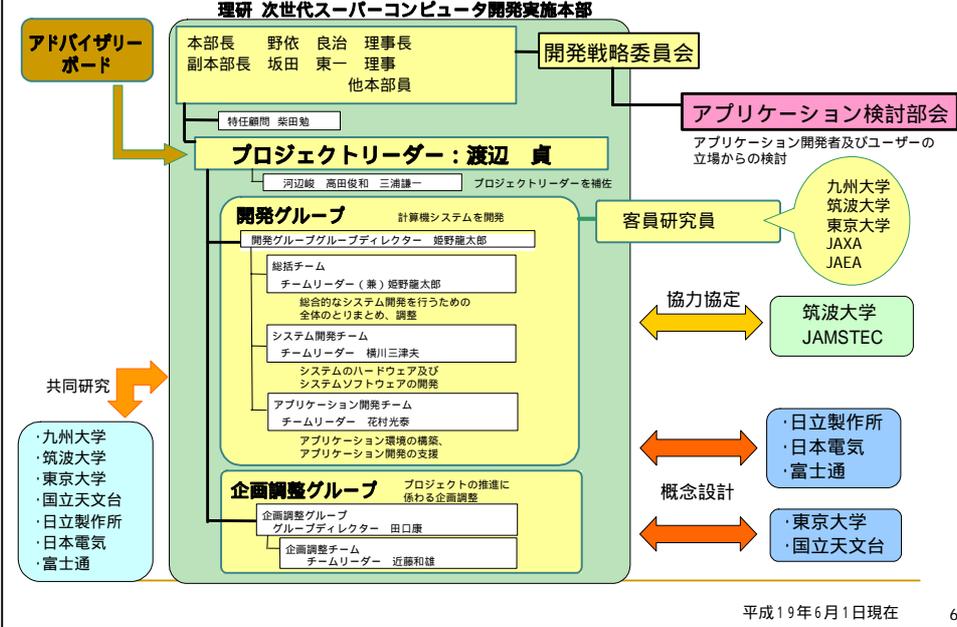
複合シミュレーション(太陽電池設計の例)

- 色素増感型太陽電池の構成要素のシミュレーション
- 構成要素毎に異なるシミュレーション技術が必要
- スカラ部とベクトル部の複合計算でデバイス設計が可能



5

検討体制



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概念設計評価作業部会 委員名簿

主査

土居 範久 中央大学 理工学部 情報工学科 教授

委員

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

天野 英晴 慶應義塾大学 理工学部 教授

小柳 義夫 工学院大学 情報学部長 教授

笠原 博徳 早稲田大学 理工学術院 教授、アドバンスチップマルチプロセッサ研究所 所長

河合 隆利 エーザイ(株) コア・テクノロジー研究所 BIグループ統轄課長

川添 良幸 東北大学 金属材料研究所 教授、情報シナジーセンター長

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

土井 美和子 (株)東芝 研究開発センター 技監

中島 浩 京都大学 学術情報メディアセンター 教授

南谷 崇 東京大学 先端科学技術研究センター 教授

松尾 亜紀子 慶應義塾大学 理工学部 准教授

米澤 明憲 東京大学大学院 情報理工学系研究科 教授、情報基盤センター長

(五十音順)

科学官

西尾 章治郎 大阪大学大学院 情報科学研究科長 教授