

HPCI計画推進委員会
ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ
(平成29年度)

コスト及び性能の評価に係る報告書

平成29年10月
文部科学省研究振興局
HPCI計画推進委員会
ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ

コスト及び性能の評価に係る報告書

－ 目 次 －

はじめに	1
I. コスト及び性能の評価について	3
1. ポスト「京」システム開発・製造のコストについて	3
2. ポスト「京」システムの性能について	4
3. まとめ	7
II. これまでの評価における指摘事項への対応について	8
1. 性能予測の確度や比較評価対象等について	8
2. コスト削減について	1 1
3. 「ユーザの利便・使い勝手の良さ」について	1 3
4. 「画期的な成果の創出」について	1 7
5. その他	1 8
III. 参考資料	2 5
1. 平成29年度SWGについて	2 5
2. 指摘事項について	3 1

はじめに

世界最高水準のスーパーコンピュータ技術は、科学技術の振興、産業競争力の強化、国民生活の安全・安心の確保等に不可欠な基盤技術である。国際的にも、CPU等の要素技術からシステム全体までを一貫して開発できる国が限られている中で、米欧中を中心に国主導でのスーパーコンピュータの研究開発が活発に進められている。

我が国では、フラッグシップシステムとしてのスーパーコンピュータ「京」を中核とするHPCI (High Performance Computing Infrastructure) システムが、平成24年の共用開始以来5か年にわたり、関係機関によって着実に運用され、多くの成果を創出し、計算科学技術のみならず我が国全体の科学技術の発展等に大きく貢献してきた。

「京」の後継機となるポスト「京」については、世界最高水準のスーパーコンピュータにより、我が国が直面する社会的・科学的課題解決に資するため、平成26年度よりシステムの基本設計を開始し、世界最高水準の消費電力性能、計算能力、ユーザの利便・使い勝手の良さ、画期的な成果の創出というシステムの特徴を兼ね備えた、総合力のあるスーパーコンピュータを実現すべく、現在、システムの詳細設計とアプリケーション開発が協調的に進められている。

ポスト「京」の開発に向けては、これまで、平成25年度に総合科学技術会議（当時）における事前評価を経て、平成27年度には、HPCI計画推進委員会次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループにおける基本設計についての評価が取りまとめられている。

また、平成30年度には中間評価が予定され、総合科学技術・イノベーション会議においても当該中間評価結果が確認され、これをもって製造フェーズへの移行判断がなされる予定である。

なお、基本設計評価後に、ポスト「京」のシステム開発に必要な最先端の半導体の設計・製造について、加工技術開発の困難さ等から、国際的な競合相手も含め世界的な遅延が生じた。

これを受け、平成28年8月に、HPCI計画推進委員会において、ポスト「京」の国費総額、開発目標及び開発スケジュールについて検証を行い、新たな技術を採用して、国費総額を変更せずに、当初の開発目標を達成する見込みを得た。

一方、開発スケジュールに12か月から24か月の遅延が生じることとなったが、この期間を生かし、ユーザの利便性や使い勝手の良さを更に向上するため、新たな付加価値の創出に向けた取組を行うこととされた。

以上を背景として、HPCI計画推進委員会ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ（以下、「SWG」という。）において、ポスト「京」の詳細設計に基づくこれまでの開発の状況を踏まえ、Ⅰ．コスト及び性能の見通しについての評価を行うとともに、Ⅱ．基本設計評価をはじめとする上記の評価等の際の指摘事項（新たな付加価値の創出を含む）への取組状況の確認を行った。

I. コスト及び性能の評価について

- SWGにおいて、平成29年9月から10月まで3回にわたり、ポスト「京」のコスト及び性能の見通しについて、文部科学省、開発主体、開発担当企業、重点課題実施機関等からのヒアリングに基づき審議を行った。

1. ポスト「京」システム開発・製造のコストについて

- ポスト「京」プロジェクトのコストに関しては、文部科学省より、国費総額約1,100億円で進めていることが改めて示された。
- 開発主体より、開発・製造における上記のコストの見積りを確実に実現するため、CPUについての適切な半導体テクノロジーの採用やフロアプランの最適化を図るとともに、今後、歩留りの改善のためのフィードバックを行うことが予定されている旨の説明があった。
- また、メモリ、光モジュール、PCB^{※1}について、複数の企業からの調達あるいは複数の材料の利用が可能な技術に変更し、供給リスクに備えるとともに、今後のコストダウン交渉の余地を残している旨の説明があった。

※1 : Printed Circuit Board, プリント基板.

2. ポスト「京」システムの性能について

○ ポスト「京」システムの性能にかかる詳細設計について、開発主体及び開発担当企業より、以下の項目について説明がなされた。

(1) プロセッサ、インターコネク트의論理設計

- ・ 計算ノード用プロセッサ及び計算兼I/Oノード用プロセッサの構成は、計算コア及びアシスタントコア（OS用コア）を装備したものとすること。
- ・ CPU設計については、論理設計を完了し、論理検証が着実に進展していること。

(2) システム全体設計

- ・ インターコネクトで使われる光モジュールの部材について、複数供給メーカーから入手可能なものとする事により、コスト削減を図ること。
- ・ PCBやコネクタの部材について、伝送路特性を見極めることにより、コスト削減を図ること。

(3) システム構成

- ・ 本体システム、階層化ストレージ及び周辺装置群から構成されるシステムとすること。
- ・ 本体システムは計算ノード及び計算兼I/Oノードから構成されること。
- ・ 計算兼I/Oノードに第1階層ストレージが装備されること。
- ・ 階層化ストレージの容量については、引き続き価格動向を見ながら、当該ストレージの設置開始までに決定すること。
- ・ ポスト「京」ソフトウェアは、プログラミング環境、数値計算ライブラリ、通信ライブラリ、ファイルシステム・ファイルI/O、OS、運用ソフトウェア及び運用・利用支援ツールから構成されること。

(4) ターゲットアプリケーションの性能目標

- ・ 9つのターゲットアプリケーションのうち、2つについて、シミュレータと机上計算の結果から、「京」の100倍の実行性能が達成できる見込みであること。
- ・ その他のターゲットアプリケーションについても、シミュレータと机上計算の結果から、中間評価までには基本設計評価時に設定したそれぞれの性能目標をおおむね達成できる見込みであること。

(5) 新たな付加価値の導入

- ・ 半精度浮動小数点演算 (FP16^{※2}) を導入し、Deep Learning等のA Iを含む幅広い応用に適用できるように設計を変更したこと。
- ・ その他、システムの拡張の可能性について検討し、また今後も引き続き検討することとしたこと。

(6) 国際連携、互換性、普及の施策

- ・ 米欧の研究機関とのシステムソフトウェアや性能指標に関する共同研究の実施がなされていること。
 - ・ 広く使われているLinuxディストリビューションを採用し、オープンソースコミュニティと協力することで、ソフトウェアの充実を図り、ARMエコシステムを構築していくこと。
- ポスト「京」システムの性能にかかる詳細設計のうち、CPUの特長について、開発担当企業より、以下の説明がなされた。
- ・ SVE^{※3}搭載のハイエンドARMプロセッサ^{※4}を開発すること。
 - ・ SVEについては、開発担当企業の協力によりARM社^{※5}が策定し、柔軟な高性能ベクトル演算処理が可能な命令体系とすること。
 - ・ SVEにおいては、A I等のアプリケーションに用いられるFP16演算をサポートするため、A I分野にも対応可能とすること。
 - ・ HPCアプリケーションの特性を生かした電力制御機能により、高性能かつ低消費電力を実現すること。
 - ・ 大規模な並列プログラムの高効率な実行を可能とするアシスタントコアを装備すること。
- あわせて、開発担当企業より、CPUチップの製造に用いる半導体テクノロジーの進捗が、おおむね想定通りの状況であることが報告された。
- 複数のSWG委員より、ポスト「京」のCPUが、同時期に運用開始予定の他のスーパーコンピュータのCPUに比較して、特定の項目において高い特性を有すると予想されることについて、開発担当企業としてどのように努力して差異化したのか明らかにすべきであるとの指摘があった。

※2：16bit幅 Floating Point.

※3：Scalable Vector Extension, HPC向け拡張命令セット.

※4：電力性能に優れ、幅広いユーザを持つARM社の命令セットが動作するプロセッサ.

※5：CPUの設計技術等を知的財産権として各社にライセンス提供する英国企業.
自社でCPUの生産は行っていない.

これを受け、開発担当企業により、実施した取組についての説明があり、適切な工夫により、当該項目について高い特性を実現しているとして、SWG委員から高い評価がなされた。

3. まとめ

- 以上1. 及び2. の状況を踏まえた審議の結果，詳細設計に基づくポスト「京」システム及びアプリケーションの全体として，所与のコスト制約の中で，プロジェクトの性能目標である最大で「京」の100倍の実効性能及び30～40MW以下の消費電力を達成する見込みであり，世界最高水準の汎用的な計算機システムの実現に向けた開発が着実に進展していることから，コスト・性能評価の結果はおおむね妥当であると判断された。

Ⅱ. これまでの評価における指摘事項への対応について

- 「はじめに」で述べたように、これまでの累次に渡る評価の際に指摘された事項への対応についても、以下1.～6.のとおり評価を行った。
- なお、平成30年度に予定されているポスト「京」のシステムの間接評価においては、本コスト・性能評価までの指摘事項のうち必要なものを取り扱い、製造段階への移行の可否判断を行うことになる。言い換えれば、本コスト・性能評価はプレ中間評価ともいうべき性格を有するものである。

1. 性能予測の確度や比較評価対象等について

(1) 性能予測の確度・不確定要素について

→02, 07 (□内の項番についてはⅢ. 2.「指摘事項について」参照。)

- コスト・性能評価の前提として、コストや性能に影響を与えうる主な要因や、性能予測^{*6}の確度等について明らかにすべきであるとの指摘に対し、開発主体より、以下の事項が示された。
 - ・ ポスト「京」実機の性能は、メモリやCPUに用いられる実シリコンの性能により、性能予測の結果から変動する可能性があること。
 - ・ 性能予測の確度は手法に依存し、当該手法の高度化により確度を高めることが可能であること。
 - ・ そのため、今回の性能予測に当たっては、以下の②のとおり、基本設計評価時の性能予測時の手法①と比較して新たな手法を採用したこと。
 - ① 基本設計評価時の性能予測
 - ー アプリケーション実行時間の大半を占めるカーネルコード群とその他の処理部分のうち、カーネルコード群のみについて、電力性能を予測するツールを用いて性能予測。
 - ② コスト・性能評価時の性能予測
 - 1) 基本設計評価時にその他処理部分であったものの一部についてもカーネルコード化することで、全体としてカーネルコードの数を増加。
 - 2) CPU設計の進捗に伴い電力性能を予測するツールのデータを更新することにより予測の確度を向上。

※6：本報告書では、SWGが行う評価を「コスト・性能評価」又は単に「評価」と、開発主体又は開発担当企業が行う評価を「性能予測」と、それぞれ用法を区別することとする。

- 今回のコスト・性能評価に当たり実施した性能予測結果は、ポスト「京」実機の性能と±1割程度の差が出る可能性があり、この点の精緻化については、中間評価において改めて報告されることとなった。
- また、SWG委員より、数万個のCPU同士やCPUチップ内においても性能にはバラツキがある点について、開発担当企業としてこのバラツキを利用して電力性能を改善する取組がなされているかについての確認が求められた。
これに対し、開発担当企業より、取組状況の説明がなされた。この説明に対し、SWG委員より、微細化プロセスに対応した適切な処置がなされている旨の意見が出された。
- さらに、SWG委員より、オンチップ電源回路の採用の検討状況についての確認が求められた。
これに対し、開発担当企業より、以下の回答がなされた。
 - ・ 一般アナログ回路の電源としてオンチップ電源回路を採用。
 - ・ 一般デジタル回路については電力削減効果が得られないと判断し採用せず。
 - ・ 電源ユニットについては、世界最高水準の電圧変換効率を目標にした取組を実施。

(2) 比較評価対象（海外の最新動向）について →05, 06

- DOE^{*7}やEUのスーパーコンピュータの波及効果の調査実績を有するITコンサルタント企業である米国Hyperion Research社^{*8}より、2020～2021年頃の設置（Delivery）が計画されている海外の主なスーパーコンピュータについての情報が示された（表1参照）。
なお、本情報は2017年10月までに当該ITコンサルタント企業が行った調査による予測に基づいており、今後変更されることがありうるということである。
- 本情報に関連し、開発主体より、ポスト「京」が設置時に世界最高水準の消費電力性能及び計算能力を実現可能である見通しが得られている旨の説明がなされた。

※7：Department of Energy, 米国エネルギー省.

※8：“The new name for the former IDC high performance computing analyst team.”
（出典：Hyperion Research社ウェブサイト）

表 1 : Representative Supercomputers Around 2020/2021

Computer Name	Summit (OLCF4)	Sierra (ATS-2)	Aurora	A21	NERSC-9	Crossroads (ATS-3)	Pre-Exascale EU Systems	Exascale EU Systems	Exascale EU Systems	NUDT 2020	OLCF5
Overview	CORAL	CORAL	(Cancelled)	1st US Exascale System	APEX 2020	APEX 2020	Prototype Exascale systems (2 systems)	Exascale System #1	Exascale System #2	TianHe-3 Prototype Follow-on	Summit Follow-on
Prime Developer/ Industry Partner	IBM	IBM, NVIDIA & Mellanox	Intel /Cray	Intel /Cray	Likely Cray, IBM or Intel	Likely Cray, IBM or Intel	Atos/Bull & another vendor	Atos/Bull	?	NUDT	Likely Cray, IBM or Intel
Organization	ORNL	LLNL	ANL	DOE/ARNL	NERSC-9	LANL	EC&PRACE	EC&PRACE	EC&PRACE	NUDT	ORNL
Country	USA	USA	USA	USA	USA	USA	France? Germany?	France	Germany?	China	USA
Planned Delivery Date	2017, 3Q	2018, 3Q	2018, 4Q	2021	2020, 4Q	2020, 4Q	2020	late 2021 /2022	2022 /2023	2020, 4Q	2022
Processor Type	IBM POWER 9	IBM POWER 9	Intel KNH /Shasta architecture	X86 + new novel attribute ^{※9}	(Not decided)	(Not decided)	ARM and/or Intel	A new processor (ARM)	A new processor (ARM)/Intel	FeiTeng Follow-on	Heterogenous Processor /Accelerator
Planned Performance (PF)	200	120-150	> 180	1,000	150-300	150-300	250	1,000	1,000	1,000	1,500 -3,000
Estimated HPL /Peak Ratio (%)	80	80	70-80	70-80	50-60	50-60	60-70	60-70	60-70	70-80	60-70
HPL Performance (PF)	160	96-120	125-145	700-800	75-180	75-180	150-175	600-700	600-700	700-800	900-2,100
GF/Watt Goal	11.5-13.2	11.5-13.2	13	40	35+ peak, 10-12 LP	35+ peak, 10-12 LP	20-30	30-40	35-45	20-30	60-100

※9: "will require recompile and likely code redesign"

2. コスト削減について

- 開発主体より、以下の取組や推定結果についての説明がなされた。
- このうち、(2) 運用コストの削減については、ポスト「京」共用開始後の運用面での知見の蓄積や効率化、電力設備・冷却設備の増強や技術革新等により、さらなる進展が期待されるものである。したがって、この進展についての評価は、ポスト「京」運用開始後においてなされることが妥当である。

(1) 導入コストの削減について →08

- ・ CPUについて、適切な半導体テクノロジーを選定した他、フロアプランの最適化を図ったこと。また、今後、歩留り改善のためのフィードバックを行う予定であること。
- ・ メモリ、光モジュール、PCBについて、複数者からの供給が可能な技術とし、供給リスクに備えるとともに、コストダウン交渉の余地を残したこと。

(2) 運用コストの削減について →08, 10, 11, 15, 19

① 電力コストの削減

- ・ 複数のモードを開発し、実行するアプリケーションによって消費電力の最適化を図ること。
- ・ パワーオブAPI（アプリケーションの特性に応じた電力制御を可能とするAPI^{*10}）を提供する予定であること。

② 冷却コストの削減（特に温水冷却導入の検討について）

- ・ SWG委員より、温水冷却を導入した場合のシミュレーションを検討するようコメントが出された。
- ・ これを受け、開発主体より、以下の回答がなされた。
 - － 温水冷却を導入した場合、冷凍機における消費電力等が下がり年間の電力料金が低下する見通し。
 - － ただし、コジェネレーションシステム等の既存設備の活用を前提とすると、温水冷却が適用できるのは最大でも全体の熱負荷の半分以下であり、その場合、温水冷却のための設備の初期投資に対し、これを回収するためには運用期間を8～9年以上とすることが必要であることから、ポスト「京」で想定される運用期間に見合わない。

*10 : Application Programming Interface.

③ 保守コストの削減

- 「京」の運用経験を生かし、ポスト「京」に必要なサービスレベルを維持しつつ、コストダウンを図ること。
- 参考情報として、他国のスーパーコンピュータの導入コストに対する保守コストの割合を比較した場合に、ポスト「京」の当該割合が相対的に低いと見積もられること。

3. 「ユーザの利便・使い勝手の良さ」について

- 開発主体より、ユーザの利便・使い勝手の良さの向上に向けた以下(1)～(4)の取組についての説明がなされた。
- また、ユーザの利用支援については、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年法律第78号)に基づく登録施設利用促進機関の業務でもあるため、今後、当該機関並びに開発主体及び開発担当企業が連携して実施していく必要がある。

(1) システムの利便性の向上について →[16](#), [19](#)

- ・ 「京」において利便性の向上を阻害している課題を整理し、ポスト「京」で改善することや、アプリケーション記述を容易にするプログラミング言語、DSL (Domain Specific Language), ユーザヒアリングに基づく数値計算ライブラリを整備していくこと。
- ・ コンパイラによる自動並列化機能を提供するとともに、広く利用されているオープンソース・アプリケーション、ライブラリ、ツールを整備していくこと。

(2) ユーザへの情報の提供について →[09](#), [12](#), [17](#), [19](#)

- ・ Co-design^{*11}の成果に基づくチューニングマニュアルを整備し、ユーザに公開予定であること。

(3) ユーザからのニーズの把握について →[19](#), [20](#)

- ・ 重点課題実施機関に対して、数値計算ライブラリ、オープンソースのツール及びアプリケーションについてニーズ調査を実施したこと。
- ・ 「京」ユーザに対して、同様の調査を実施中であること。
- ・ ニーズ調査に基づき、開発担当企業と連携しつつ、ソフトウェア群を提供予定であること。

(4) アプリケーションの互換性の向上及び民間への普及について →[16](#), [17](#), [19](#)

- ・ 大学及び研究機関等に設置されている多くのスーパーコンピュータで使われているLinuxディストリビューションを採用し、オープンソース・コミュニティと協力することで、ソフトウェアの充実を図り、ARMエコシステムを構築していくこと。

※11 : CPUアーキテクチャ等(ハードウェア・システム)の設計者とアプリケーションソフトウェアの開発者による共同的・協動的開発。

○ この他、以下についても報告があった。

(5) 演算加速部を不採用としたことについての検証 →06

- 開発主体より、各重点課題のターゲットアプリケーションについて、GPUへの対応が可能なものの割合が、平成24年時点に比べて全体としては増加傾向にある。しかしながら、非構造格子系を扱う等GPUへのオフロードがなじまない分野については、対応が進んでいない状況である旨の説明がなされた。
- ITコンサルタント企業より、以下の説明がなされた。
 - － “NERSC-9”^{※12}については、約6,000人のユーザと約600のアプリケーションを擁する汎用機であって、CPUのみのアーキテクチャとCPU/GPUのアーキテクチャとのいずれにも対応する見通しであるものの、意志決定はいまだなされていない。アプリケーションのベンチマークについても、CPUのみとCPU/GPUで実施されている本数ベースでの比は約7：2であった。
- 複数のSWG委員より、演算加速部を不採用としたことについて、現段階では妥当であるとの評価がなされた一方、他の複数のSWG委員より、中間評価においても引き続き検証が必要ではないかとの意見が出された。

※12：National Energy Research Scientific Computing Center（米ローレンス・バークレー国立研究所に設置された国立エネルギー研究科学計算センター）のスーパーコンピュータシステム。

(6) 利便性, 使い勝手に関する海外のスーパーコンピュータの情報 →16, 19

- ITコンサルタント企業より, 表2のとおり報告がなされた。
- 本報告に対し, 開発主体は, 以下の理由から, ポスト「京」は利便性, 使い勝手の観点からも優れたシステムになるとの見解が示された。
 - ー ポスト「京」のCPUアーキテクチャはARM(「京」はSPARC)となるが, 汎用CPU路線を継続しており, GPUや加速器付きのシステムに比べ従来のソフトウェア資産が容易に移行可能。
 - ー 重点課題実施機関とのCo-design結果を基にしたチューニングマニュアルを整備し, ユーザのアプリケーションチューニングを容易にしていく。
- 今後, ポスト「京」の利便性, 使い勝手に関して評価を進めていく必要があるのではないかとSWG委員から意見が出され, 今後の検討課題とされた。

表 2 : Summary of Ease-of-use Comparisons

Computer Name	Taihu Light	Cheyenne	Summit (OLCF4)	TianHe 2A	Sierra (ATS-2)	UK 3 System Upgrade	Aurora	A21	NERSC-9	Cross-roads (ATS3)	Sunway 2020	NUDT 2020
Overview	Sunway	-	CORAL	TianHe2 upgrade	CORAL	S&T Facilities Council	(Cancelled)	ANL Replacement	APEX 2020	APEX 2020	-	TianHe-3 Prototype Follow On
Country	China	USA	USA	China	USA	UK	USA	USA	USA	USA	China	China
Planned Delivery Date	2016, 2Q	2017, 1Q	2017, 3Q	2017, 4Q	2018, 3Q	2018, 3Q	2018, 4Q	2021, 4Q	2020, 4Q	2020, 4Q	2020, 4Q	2020, 3Q /4Q
New Ease-of-use Features Planned	2	4	5	3	5	5	5	4	5	5	2	2
Initial writing/porting of new codes on new computers	2	5	4	2	4	3	4	2 / 3	4	4	2	2 / 3
Ease-of-use for existing running codes (porting/certification)	2	5	4	2	4	3	5	2 / 3	4	4	2	2 / 3
Investments (or technologies) planned to improve ease-of-use	2	4	5	3	5	5	5	4 / 5	5	5	2	2
Ability to run leadership class problems	3	5	4	3	4	3	5	5	4	4	2	2

5 : Very easy to use

the system employs evolutionary technology, overwhelmingly uses a long-standing CPU, all of which and takes advantage of standard programming environments and other standard software tools.

4 : Fairly easy to use

the system employs evolutionary technology, along with a heterogeneous mix of processing elements, all of which take advantage of standard programming environments and other standard software tools.

3 : Moderately difficult to use

the system employs evolutionary technology, along with a heterogeneous mix of processing elements, only some of which take advantage of standard programming environments and other standard software tools.

2 : Fairly difficult to use

the system employs immature technology, such as a novel architecture or CPU, along with a heterogeneous mix of processing elements, only some of which take advantage of standard, proven programming environments and other standard software tools.

1 : Very difficult to use

the system employs immature technology, such as a novel architecture or CPU that requires existing applications to be fundamentally re-conceived and rewritten, and the system also requires users to learn how to use a new or immature programming language and software tools.

4. 「画期的な成果の創出」について

(1) Co-designの取組 →03, 09, 18

○ 開発主体より、以下の説明がなされた。

- ① ターゲットアプリケーションの選定方針として、他のアプリケーションにも幅広く貢献するよう、以下の2点のいずれも満たすものを条件としたこと。
 - ・ HPCで実際に用いられるアプリケーションであること。
 - ・ ターゲットアプリケーション全体として、HPCで用いられる計算手法が網羅されること。
- ② Co-designの手法として、マクロなアーキテクチャ（システム全体の最適化）とマイクロなアーキテクチャ（ノード内の最適化）のプロセスを繰り返し実施したこと。
- ③ Co-designの成果として、システムとアプリケーションの最適化の方針が同時に得られたこと。Co-designによるターゲットアプリケーションについて、更なるチューニングにより性能向上を図っていること。
- ④ また、成果の普及のため、今後、非開示情報の範囲に留意しつつ（→（4）「非開示情報の範囲の精査等について」参照）、Co-design報告書やチューニングマニュアル等の整備・公開、チューニング環境の提供を予定していること。

(2) 重点課題の取組 →09, 13

○ ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発（以下、「重点課題」という。）を実施する機関（以下、「重点課題実施機関」という。）から、ポスト「京」により創出される成果の見通し等について、それぞれ以下のとおり説明がなされた。

なお、ヒアリング対象とした重点課題の分野は、SWG委員の専門分野を考慮して文部科学省において選定したものであるため、重点課題の全てを対象としたものではない。

① 創薬分野

重点課題実施機関より、「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」について、以下の説明がなされた。

- ・ 創薬シミュレーションの革新のためには、1) 長時間の分子動力学 (MD) シミュレーションと2) 大規模な生体分子システムのシミュレーションの両方が必要であり、これらが3) ポスト「京」システムとアプリケーションのCo-designにより実現可能である見通しであること。
- ・ 具体的な例として、
 - 1) 「京」で実現した17マイクロ秒のMD／マルコフ状態モデル^{※13} (MSM) を、ポスト「京」及びAIアプローチにより数10ミリ秒まで拡張
 - 2) 「京」で実現した1億個以上の原子を含む大規模な細胞内のタンパク質の分子運動解析を、ポスト「京」により細胞内のタンパク質－薬剤相互作用解析まで拡張
 - 3) マルチタイムステップ (MTS) 法によりポスト「京」ターゲットアプリケーションであるGENESIS^{※14}を高度化

② 気象分野

重点課題実施機関より、「観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化」について、以下の説明がなされた。

- ・ 気象シミュレーションの革新のためには、1) 全球モデルの高分解能化による台風等の予測時期の長期化と2) 領域モデルの高分解能化による豪雨等の予測精度の向上及び予測時期の長期化が必要であり、特に1) について3) ポスト「京」システムとアプリケーションのCo-designにより実現可能である見通しであること。
- ・ 具体的な例として、
 - 1) 全球モデルの精度を5 km格子に高分解能化
 - 2) 領域モデルの精度を100m格子に高分解能化
 - 3) 高分解能化に伴うメモリ圧迫を回避するための単精度変数の導入、降水等空間的に非一様かつ並列化に向かない物理過程解析に対するチューニング等により、ターゲットアプリケーションであるNICAM-LETKF^{※15}を高速化

※13：不規則に変化するシステムをモデル化するための確率モデルの一種。未来の状態は現在の状態のみに左右され、過去に起きた事象には影響されない（マルコフ性を有する）と仮定する。

※14：分子動力学アプリケーション。

※15：NICAM…全球規模の気象現象を微細構造も含め適切に再現可能な全球非静力モデル。LETKF…データ同化手法。

③ デバイス・材料分野

重点課題実施機関より、「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」について、以下の説明がなされた。

- デバイス・材料シミュレーションの革新のためには、1) 異なる物理理論に基づくシミュレーション手法を高度化・統合したデバイスシミュレータ及び、2) 異なるスケールのプログラムを高度化・連結した材料シミュレータが必要であり、これらが3) ポスト「京」システムとアプリケーションのCo-designにより実現可能である見通しであること。
- 具体的な例として、
 - 1) 密度汎関数法RSDFT^{※16}と非平衡グリーン関数NEGFとの統合により、シリコンナノワイヤの量子デバイス特性をシミュレーション可能に
 - 2) 局在基底法OpenMX・大規模MD等による第一原理計算と粗視化手法であるPhase Field法との連結により、金属材料の凝固から粒成長、組織形成までの特性をマルチスケールでシミュレーション可能に
 - 3) メモリ使用量にかかる制約条件等の情報が共用開始前に入手可能となることで、ターゲットアプリケーションであるRSDFTの開発が迅速化・効率化され、ポスト「京」実機の完成に合わせて速やかに科学的成果が創出可能に

④ ものづくり分野

重点課題実施機関より、「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」について、以下の説明がなされた。

- ものづくりプロセスの革新のためには、1) 高品質化・コスト最小化のために改善すべき性能指標（目的関数）が多数ある問題（多目的設計最適化問題）への対応と2) 解析計算の短縮や必要な計算資源量の削減とが必要であり、これらが3) ポスト「京」システムとアプリケーションのCo-designにより実現可能である見通しであること。
- 具体的な例として、
 - 1) 制約条件が厳しい多目的設計最適化問題でも効率的に最適解を探索可能なアルゴリズムや、最適解を得るために必要な計算時間を1/2～1/10に短縮する多目的設計最適化アルゴリズムの開発が進展
 - 2) 格子生成の完全自動化及びソルバーの高速化並びに新たな乱流モデルの研究開発が進展

※16：実空間第一原理シミュレーション手法。国際会議SC11においてゴードンベル賞（アプリケーションの最高性能賞）を受賞。

3) 不要ループの削除等のアルゴリズム改良による演算数の削減及び要求バイト数あたりの演算速度の向上により、ターゲットアプリケーションである FrontFlow/blue^{*17}が高速化

- 上記の説明に対し、SWG委員より、主に以下のコメントがあった。
 - ・ ポスト「京」によりシミュレーションが質的に新しくなり、これまで困難あるいは不可能であった現象の予測、例えば、数値天気予測において、台風の発生後の予測のみならず、これまで困難であった台風の発生そのものの予測等が可能になることを期待する。
 - ・ ターゲットアプリケーション以外のアプリケーションであって、良い成果が期待できるものについても、ターゲットアプリケーション開発とのリソース配分に留意しつつ、開発主体と重点課題実施機関との連携の下、高度化が図られることを期待する。
 - ・ Co-designによって、それぞれの物理モデルに対する数値精度の必要性や、チューニングの有効性等についての知見が得られ、それらが同様の物理モデルを用いた他のシミュレーションにも応用可能となることを期待する。
 - ・ Co-designによって、データ科学とシミュレーションとの連携が推進されること、例えば機械学習データの供給速度に対し必要となるシステム側のデータI/O速度等についての知見が得られることを期待する。

※17：ターボ機械の性能・騒音予測，自動車の空力開発，車内騒音予測，船舶の推進抵抗の予測等，多くの製品に適用された実績を有する流体解析コード.

(3) 産業界の取組と期待 →09, 13

○ スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協）^{※18}のアソシエイト会員である一般社団法人日本自動車工業会（自工会）^{※19}より、ポスト「京」の意義について、以下の説明がなされた。

- ① 実際の製品を用いて実施していた評価のシミュレーションによる置き換えが可能になる。具体的には、新興国での冠水路における自動車の走行のように、製品の使用環境がより複雑な場合にも適用可能なシミュレーション等。
- ② シミュレーションを用いた新たな製品開発手法の開発が可能になる。具体的には、耐久性の向上や軽量化等、複数の要求性能を同時に実現する手法等。
- ③ 実験室と実世界との性能の乖離の低減が可能になる。具体的には、自動車のロールオーバー等の挙動、操縦安定性、車外騒音について等。

○ また、自工会より、ポスト「京」を含めたHPCIの在り方について、以下の要望がなされた。

- ④ 「京」からポスト「京」への円滑な移行。具体的には、ポスト「京」システム開発の加速化と、「京」運用停止期間にHPCI全体で能力低下が起こらない切替の検討。 →23
- ⑤ 産業利用を促進するためのアプリケーションのさらなる整備。具体的には、市販アプリ移植・高速化等の実行準備環境・体制の整備。 →24
- ⑥ 産業利用を促進するための利用環境のさらなる整備。具体的には、データ作成、結果評価等も含めたトータルな利用環境の整備。 →25
- ⑦ 汎用機としては小さいメモリ容量への対応。 →26

※18：産業界においてスーパーコンピューティング技術の利活用を促進し、日本の産業競争力の強化を目指すことを目的として、2005年に任意団体として設立。シミュレーションソフトウェアの研究開発成果の普及、スーパーコンピューティング技術の産業界における人材の育成といった活動を実施。HPCIの産業界におけるユーザコミュニティ代表としてHPCIコンソーシアムに加盟。

※19：我が国の自動車産業の健全な発達を図り、もって経済の発展と国民生活の向上に寄与することを目的として、1967年に前身である自動車工業会と日本小型自動車工業会との合併により設立し、2010年4月に一般社団法人へ移行。国内自動車メーカー14社によって構成。

- これを受け、ポスト「京」の産業利用の促進を図るための方策が議論された。具体的には以下のとおり。
- ・ ④に関し、
システム開発の加速化に関しては、開発主体において努力を継続するとともに、「京」運用停止期間の対応については、国及びHPCIコンソーシアムにおいて、HPCI第2階層の計算資源の提供可能量及びユーザニーズ等も踏まえつつ、引き続き検討することとなった。
 - ・ ⑤に関し、
本年8月にHPCI計画推進委員会において取りまとめられた「今後のHPCI計画の推進に向けた提言」にあるように、「これまで培われたアプリケーション資産が継続して活用できる環境の整備」を図るべきであることが再確認された。このためには、ポスト「京」重点課題アプリケーション開発とは別途の取組が必要であるため、引き続き国及び関係機関が連携し、産業界の意見も踏まえながら、その方策を検討することとなった。
 - ・ ⑥に関し、
開発主体において、「京」からポスト「京」へのデータ移行及び前処理・後処理のための計算環境整備が進められている旨の説明がなされた。
 - ・ ⑦に関し、
ポスト「京」システムのメモリ容量は所与のものであるため、アプリケーションの並列化及び運用の工夫等により、今後対応していくべきことが確認された。

(4) 非開示情報の範囲の精査等について →34

- SWG委員より、ポスト「京」のユーザの利便性や使い勝手の良さを向上させ、成果の創出を促す観点から、非開示情報の範囲を改めて精査し、可能なものからユーザにポスト「京」システムの情報を開示するべきではないかとのコメントがあり、今後の検討課題とされた。

5. ポスト「京」システム開発スケジュール遅延に伴う影響について

- 基本設計評価後、最先端の半導体の設計・製造について、加工技術開発の困難さなどから、世界的な遅延が発生し、ポスト「京」システム開発スケジュールに12か月から24か月の遅延が生じることとなり、平成28年8月のHPCI計画推進委員会にて報告された。

- その際、ポスト「京」に新技術を採用し、国費総額を変更せずに当初の開発目標を達成する見込みを得たことと、延伸期間を生かしてFP16演算機能を新たな付加価値として追加するとともに、さらなる拡張の可能性についても検討し、また今後も引き続き検討することとした旨が併せて報告されたところ、今回のコスト・性能評価において、改めてそれらの妥当性が確認された。

6. その他中長期的な課題等について

(1) 評価の合理化 →35

- SWG委員より、開発主体等がポスト「京」の開発及び運用等に注力できるよう、国は評価の観点を精査し、必要な項目に限るよう合理化を行うことが望ましいとの意見が出された。

(2) ポスト「京」の必要性・効率性を定量的に示す新たな手法の検討 →36

- 複数のSWG委員より、ポスト「京」の必要性・効率性をより定量的かつ明確に示すことが望ましいとの意見が出された。

具体的には、ポスト「京」アプリケーションの中から代表的なアプリケーションを選定し、ポスト「京」における目標推定性能を、同時期の運用開始が見込まれる諸外国のスーパーコンピュータにおける推定性能と比較することにより、国産のスーパーコンピュータとして技術開発を進めていることの優位性や、Co-designの効果を示すことが提案され、特定のターゲットアプリケーションによりこれを行った場合の具体例が示された。

- ただし、当該手法による評価については、本コスト・性能評価及び平成30年度に予定されている中間評価等の対象とするものではなく、フラッグシップ2020プロジェクトの意義を、より分かりやすく、かつ、定量的に説明するために実施すべきものと位置づけ、今後、国、開発主体及び重点課題実施機関において、実施の可否も含めて、具体的な実施方法を検討していくことになった。
- これに関連し、開発主体より、JLESC^{※20}における新たなスーパーコンピュータ性能指標策定に向けた検討及びその標準化に向けた取組状況についての説明がなされた。

(3) スーパーコンピュータの開発における目標設定の妥当性についての検証 →37

- スーパーコンピュータの技術動向を予測し、特に国家プロジェクトとして何年も先の将来を見越し、当該時点で総合力・国際競争力を有するスーパーコンピュータを適切に設計することは、技術進歩の動向の変革等が起こることによって一般的に容易ではないため、本ポスト「京」開発プロジェクトにおける目標設定の妥当性についてこれを改めて検証し、中長期的に今後のスーパーコンピュータを新たに設計する際の目標設定の方法のフィードバックとすべきではないかとSWG委員から意見があり、今後の検討課題とされた。

※20 : Joint Laboratory for Extreme Scale Computing.

Ⅲ. 参考資料

1. 平成29年度SWGについて

- (1) SWGの開催について…………… (参考1)
- (2) SWG委員名簿…………… (参考2)
- (3) SWGの議事運営等…………… (参考3)
- (4) SWGの検討経緯…………… (参考4)

2. 指摘事項について

- (1) 指摘事項一覧…………… (参考5)

(参考1)

HPCI計画推進委員会
ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ
(平成29年度)の開催について

平成26年6月2日
HPCI計画推進委員会決定
平成27年8月31日改訂
平成29年6月29日改訂

1. 趣旨

文部科学省においては、我が国を取り巻く社会的・科学的課題の解決に貢献するため、世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータであるポスト「京」の実現を目指している。

ポスト「京」に係るシステムについては、HPCI計画推進委員会において、平成25年度に事前評価、平成26年度に再評価、平成27年度に基本設計評価を実施してきたところである。

当該基本設計評価では、コスト・性能評価を試作・詳細設計の途中段階において実施するとされているため、平成29年度において、ポスト「京」システムに係る要素技術、コストの詳細等の検討及び評価のため、「ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ」(以下、「WG」という。)をHPCI計画推進委員会の下に開催する。

2. 検討事項

(1) ポスト「京」に係る以下の事項

プロセッサ・インターコネクットの論理設計、システム全体設計(ボード、冷却、きょう体)、システム構成について、コスト及び性能並びにそれらの評価

(2) その他

3. 構成及び運営

(1) WGの構成員は、別紙のとおりとする。

(2) WGの運営に係る事項は、WGにおいて定める。

4. 開催期間

平成29年6月29日から調査事項の終了までとする。

5. その他

WGの庶務は、研究振興局参事官(情報担当)付計算科学技術推進室が処理する。

(参考2)
(別紙)

HPCI計画推進委員会
ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ
(平成29年度) 委員名簿

- 石田 純一 気象庁予報部数値予報課 数値予報班長
- 梅谷 浩之 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会企画委員会委員
- ◎小柳 義夫 神戸大学計算科学教育センター 特命教授
- 加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授
- 金山 敏彦 国立研究開発法人産業技術総合研究所 フェロー
- 小林 広明 東北大学大学院情報科学研究科 教授
東北大学サイバーサイエンスセンター センター長特別補佐
- 桜井 貴康 東京大学生産技術研究所 教授
- 白井 宏樹 アステラス製薬株式会社モダリティ研究所 専任理事
- 土居 範久 慶應義塾大学名誉教授
- 平木 敬 東京大学名誉教授
- 松岡 聡 東京工業大学学術国際情報センター 教授

(◎：主査，○：主査代理，50音順，敬称略)

(参考3)

HPCI計画推進委員会
ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ
の議事運営等について

平成26年6月2日
平成27年8月31日改訂
平成29年9月4日改訂
ポスト「京」に係る
システム検討ワーキンググループ

(趣旨)

第1条 HPCI計画推進委員会ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ
(以下「システム検討WG」という。)の議事の手続その他の運営に関し必要な事項は、以下に定めるところによる。

(システム検討WG)

第2条 システム検討WG(以下「SW」という。)の会議は、主査が招集する。

- 2 主査は、SWの会議の議長となり、議事を整理する。
- 3 SWに主査代理を置き、SWに属する構成員のうちから主査があらかじめ指名する者が、これに当たる。
- 4 主査代理は、主査の職務を補佐し、主査がSWに出席できないときは、その職務を代理することができる。
- 5 HPCI計画推進委員会の主査は、SWに出席し、発言することができる。
- 6 SWの主査は、必要があると認めるときは、SWに必要とする者の出席を求め、意見を述べさせ、又は説明させることができる。

(書面による調査審議)

第3条 主査は、やむを得ない理由によりSWを開く余裕がない場合においては、事案の概要を記載した書面等を構成員に送付し、その意見を徴し、又は賛否を問うことにより、調査審議を行うことができる。

- 2 前項の規定により調査審議を行った場合は、主査が次の会議において報告しなければならない。

(会議の公開)

第4条 SWの会議及び会議資料は、原則として公開とする。ただし、次に掲げる場合は非公開とすることができる。

- 一 非公開情報を使用して議事を運営する場合その他の主査が非公開が適当と認める場合
- 二 前号に掲げるもののほか、審議の円滑な実施に影響が生じるものとして、委員会において非公開とすることが適当であると認める場合

2 SWにおいて、前項ただし書の規定に基づく非公開の調査審議が行われた場合には、構成員は、当該調査審議において知り得た内容について他に漏らしてはならない。ただし、公開された会議資料及び公表された議事録に係る情報については、この限りではない。

(議事概要の公表)

第5条 主査は、SWの会議の議事概要を作成し、構成員に諮った上で、これを公表するものとする。

2 SWが前条第一項ただし書の規定に基づいて非公開の調査審議を行った場合には、主査が構成員に諮った上で当該調査審議に係る議事概要を非公表とすることができる。

(議事)

第6条 SWは、構成員の過半数が出席しなければ、会議を開くことができない。

(雑則)

第7条 この規則に定めるもののほか、SWの議事の手続その他SWの運営に関し必要な事項は、主査がSWに諮って定める。

HPCI計画推進委員会
ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ
(平成29年度) 検討経緯

第1回 9月4日(月) 10時～12時

- (1) ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ(平成29年度)の開催について
- (2) ポスト「京」システム開発状況について
- (3) 基本設計評価等における指摘事項について
- (4) 今後のスケジュール等について
- (5) その他

第2回 9月21日(木) 10時～12時

- (1) ポスト「京」コデザインの状況について
- (2) ポスト「京」システム開発の状況について
(ポスト「京」シミュレータによる性能推定結果の分析と今後について)
- (3) ポスト「京」の意義について
- (4) その他

第3回 10月23日(月) 10時～14時

- (1) 海外動向調査について
- (2) ポスト「京」システム開発の状況について
(ポスト「京」シミュレータによる性能推定結果の分析と今後について)
- (3) CPUの開発状況について
- (4) コスト・性能評価に係る報告書(素案)について
- (5) その他

指摘事項一覧

- 01 コスト・性能評価では、プロセッサ・インターコネク트의論理設計，システム全体設計（ボード，冷却，きょう体），システム構成について，コスト及び性能が目標を達成する見込みがあるか
- 02 コスト・性能評価は，試作・詳細設計の途中段階で実施することとなるが，開発主体においては，何がコストや性能に影響が大きいものなのか，その時点での見通しの確度，不確定要素が何かなどについて明確にすることが必要である。
- 03 開発目標である最大で「京」の100倍のアプリケーション実行性能が達成できるか否かの詳細な見通しについて
- 04 100倍でどのような成果が得られるのか，また他で計算する場合と比べどのような強みがあるのかについて
- 05 性能と電力の関係について，海外の最新動向も踏まえた最新の比較検討及び電力性能に係る技術的な検証ができる詳細な情報について
- 06 平成26年のSWGにおいて，システム構成として演算加速部は採用しないこととなったが，海外の最新動向等も踏まえ，ポスト「京」の役割や利便性などの観点も踏まえ，採用しなかった結果の検証について
- 07 電力制御機能に関して想定通りの性能が出せるかについて
- 08 新しい技術やコスト面等において条件のよい部材の導入可能性について
- 09 Co-designの取組内容とその成果等について
- 10 冷却設計の詳細な技術的検証について
- 11 運用費についての詳細な見通しについて

12 汎用システムとして開発を進めているが、当然ながらシステムとして得意・不得意があり、利用者等へ情報提供の観点も含め、自動並列化機能などの本システムの利便性や優位性、強み等について

13 アウトカムを含め、本システムで何がなし得るのか、期待されるのかについて

14 世界最高水準の各特徴（①消費電力性能、②計算能力、③ユーザーの利便・使い勝手の良さ、④画期的な成果の創出）の検証方法及びポスト「京」と2020年代の世界の他のシステムによる総合力の比較検証方法について

※ コンティンジェンシープランを踏まえつつ、この時点で達成見込みが極めて厳しい場合や、計画に大幅な遅延や変更があった場合などにおいては、我が国全体のHPCI計画の推進の観点から、今後の取組方針について改めて検討することとする。

15 電力性能の向上が主要な開発課題であることを明確に示すべき

理化学研究所のSPRING-8や高エネルギー加速器研究機構のSuper KEKB等の大型研究施設では、電力削減の観点から夏場の稼働を止める等、研究者のニーズに十分応えられない事態が発生しており、いまや消費電力は先端研究推進における大きな制約事項となっている。一方、これにより科学技術の発展が阻害されるようなことがあってはならず、多額の資金を投入して建設された大型研究施設が有効に活用されるための工夫が不可欠である。

こうした我が国の電力事情や財政状況、世界の趨勢であるエレクトロニクスの電力消費量の増大やその克服に向けた競争が激化していること等に鑑み、我が国が重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の解決を図る上で、電力性能の向上がポスト「京」の主要な開発課題であることを明確に示していくべきである。

文部科学省においては、最大で「京」の100倍の実効性能、消費電力30～40MWの必達を前提としたうえで、運用費のコスト縮減、ひいてはトータルコストの縮減を図っていく観点から、この電力性能の向上に向けた取組は必要不可欠なものである。

16 (ソフトウェア互換性の向上)

ユーザの利便性向上に向けては、アプリケーションレベルでの他の計算機資源との互換性が重要である。ソフトウェアは、ハードウェアよりも長期間にわたって使われる場合が多いことを踏まえ、「京」及び大学等に設置された既存のシステムとの互換性の向上に留意して、開発を進める必要がある。

17 (知的財産)

本プロジェクトで期待される成果については、計算機本体やシステムソフトウェアのみならず、アプリケーションソフトウェア等を含め、民間等への移転促進方策や、他産業への展開が抑制されることのないよう、知的財産等の取扱いについて明確化しておくことが求められる。また、知的財産は資源の少ない我が国にとって大きな重要性を持つことに鑑み、上記の成果を対象に、権利化や国際標準化、ノウハウとしての秘匿化等を組み合わせたオープン・アンド・クローズ戦略について十分に検討し、知的財産を適切に運営することが求められる。

ソフトウェアは、特に民間での利活用が期待され、その経済波及効果が大きいものであることから、民間への移転促進方策を検討すべきである。システムソフトウェアはオープンソース化するとの方針が示されているが、単に公開するだけでなく、普及を意識したドキュメント化やアピール、ユーザサポート体制の整備等についても検討する必要がある。

18 Co-designにおいて、複数の重点課題に係るオペレーションサイドの意見をシステム開発に適切に反映することが重要であり、そのための有効なオペレーション方法の明確化が必要である。

19 それぞれの事項の詳細設計での進捗とともに、特に電力性能と、利用者の使いやすさをどのように高めるかについては、重点的に確認していくこととする。

20 産業界の利用者も含め「京」からポスト「京」への円滑な移行が出来るように、少なくとも「京」で利用されているアプリケーションが利用でき、更に現時点で利用されているアプリケーションのみではなく共用開始後の利用ニーズを念頭に、最大限配慮して、開発を推進することが必要である。

21 システムソフトウェアの開発等については、米国との連携・協力について、引き続き検討を進めることが重要である。

22 システムの動作モードと対応する消費電力について

23 「京」からポスト「京」への円滑な移行。具体的には、ポスト「京」システム開発の加速化と、「京」運用停止期間にHPCI全体で能力低下が起こらない切替えの検討

24 産業利用を促進するためのアプリケーションのさらなる整備。具体的には、市販アプリ移植・高速化等の実行準備環境・体制の整備

- 25 産業利用を促進するための利用環境のさらなる整備。具体的には、データ作成、結果評価等も含めたトータルな利用環境の整備
- 26 汎用機としては小さいメモリ容量への対応
- 27 ポスト「京」の必要性・効率性を定量的に示す新たな手法の検討
- 28 アプリケーションによっては全てのコアを有効利用できないことも想定されるが、その際の有償利用課金の在り方については、今後、利用者の意見等も踏まえよく調整することが必要である。
- 29 政府全体として利活用を促進する観点から、関係府省庁等との連携等についても推進していくことが必要である。
- 30 計算科学の研究基盤であることを毅然^{きぜん}として示すべき
これからの科学技術は、理論科学、実験科学、計算科学に加え、ビッグデータ解析等に代表されるデータ科学によって構成されるものと想定されている。ポスト「京」が本格的に利活用される2020年代における計算科学やポスト「京」の位置づけ、他の科学的手法との関係を明らかにする必要がある。
すなわち、ポスト「京」の本質は、シミュレーションを中心にした計算科学の研究基盤を担うものであり、シミュレーション技術の高度化を行うためのものであることを毅然^{きぜん}として示していくべきである。
なお、昨今脚光を浴びているビッグデータ解析や人工知能等について、計算科学との関係やポスト「京」を有効に活用できる領域等を明らかにする必要がある。

31 アウトカムの更なる具体化・明確化

アウトカムの具体化・明確化については、科学的な成果の明示が進むとともに、今後、経済波及効果の算出に着手することが示されている等、具体化への努力は評価できる。一方で、多額の国費に見合う成果・アウトカムを一般国民に実感できる形で分かりやすく示すための取り組みについては、いまだ課題が残されている。

このため、ポスト「京」でなければ解決できない課題とその成果・アウトカムについて、例えば一般国民に身近な健康医療や防災等の分野で国民がどんな恩恵を享受できるかを事例等で説明したり、定量化できるものについては国費投入に見合うリターンが得られているかどうかを数値として説明する等、わかりやすい説明のための努力を継続していく必要がある。

ただし、重点課題又は萌芽的課題に携わる研究者がこうした指摘によりアウトカムの分かりやすいテーマを安易に選択することのないようにするとともに、ポスト「京」を真に必要とする研究開発の科学的・社会的・経済的・国際的な位置づけを分かりやすく説明する努力を怠らないように研究者に対して強く促していく必要がある。

32 総合力を国際的に比較検証する方法の検討

ポスト「京」の特色として、「①消費電力性能、②計算能力、③ユーザの利便・使い勝手の良さ、④画期的な成果の創出をそれぞれ世界最高水準で備えた、2020年頃において世界の他のシステムに対して総合力で卓抜するもの」とすることが示されている。

これまでスパコンの性能を測る指標としては、Linpack性能が用いられてきたが、Linpack性能の創始者であるJ. Dongarra教授の発言として「Linpack性能にデザインしたシステムは現実のアプリケーションにとって悪い選択、あるいは不必要な複雑なシステムであるという結論に至った」ことが示されている。

文部科学省においては、ポスト「京」の特色として示された4つの指標における現時点の日本のスーパーコンピュータの位置づけと、ポスト「京」で目指す姿を十分に説明することが必要である。また、これを踏まえ、ポスト「京」の特色を適切に表現でき、その総合力を国際的に比較検証する方法について検討し、ポスト「京」が世界の他のシステムに対して総合力で卓抜するものであることを示すことが重要である。

33 産業界との協働

重点課題の実施機関が決まり、大学や公的研究機関に加えて多くの民間企業が参画していることや、産業利用枠を拡充する計画があることは評価できる。本当に実用化に資する成果を多く出していくためには、産業利用枠のさらなる拡充など、産業界がより活用しやすい環境の整備、あるいは大学や公的研究機関から民間企業への研究成果の円滑な橋渡し等、産業界が積極的に関わるための取り組みを更に強化すべきである。

34 非開示情報の範囲の精査等

ポスト「京」のユーザの利便性や使い勝手の良さを向上させ、成果の創出を促す観点から、非開示情報の範囲を改めて精査し、可能なものからユーザにポスト「京」システムの情報を開示すべきこと。

35 評価の合理化

国は、開発主体等がポスト「京」の開発及び運用等に注力できるよう、評価の観点を精査し、必要な項目に限るよう合理化を行うこと。

36 ポスト「京」の必要性・効率性を定量的に示す新たな手法の検討

ポスト「京」の必要性・効率性をより定量的かつ明確に示すこと。

具体的には、ポスト「京」アプリケーションの中から代表的なアプリケーションを選定し、ポスト「京」における目標推定性能を、同時期の運用開始が見込まれる諸外国のスーパーコンピュータにおける推定性能と比較することにより、国産のスーパーコンピュータとして技術開発を進めていることの優位性やCo-designの効果を示すこと。

37 スーパーコンピュータの開発における目標設定の妥当性についての検証

スーパーコンピュータの技術動向を予測し、特に国家プロジェクトとして何年も先の将来を見越し、当該時点で総合力・国際競争力を有するスーパーコンピュータを適切に設計することは、技術進歩の動向の変革等が起こることで一般的に容易ではないため、本ポスト「京」開発プロジェクトにおける目標設定の妥当性についてこれを改めて検証し、中長期的に今後のスーパーコンピュータを新たに設計する際の目標設定の方法のフィードバックとすべきこと。