

調査・検討課題に対する議論の整理(案)

1. 国内外の動向

【調査・検討課題】

○国内外における計算科学技術に係る状況、利用や技術の動向はどのようになっているか

【ポイント】

(1)スーパーコンピュータの活用が、科学技術面・経済面で国の将来に影響を及ぼすという認識が定着し、国際的にスーパーコンピュータの導入・開発がこれまで以上に積極的に進められているのではないか。

- 導入のグローバル化(TOP500 リストは 2011 年 6 月の 28 か国から 2012 年 6 月の 30 か国、1 ペタ FLOPS 以上のマシンは、4 か国から 7 か国へ)
- 自主開発の拡大(中国ではプロセッサまで自主開発、フランス Bull 社はフランス原子力庁に TERA-100 を納入、ロシアでは T-Platforms 社がモスクワ州立大学に Lomonosov を納入、インドでも SAGA-220 を開発、など)
- 米国や欧州などのエクサスケールを目指した動き(米国:政府として DOE を中心にエクサフロップスをサポート、欧州: EESI(European Exascale Software Initiative)から EESI2 への移行と FP7(The Seventh Framework Programme)による MontBlanc、DEEP、CRESTA の3つのプロジェクト)
- 米国や韓国では、国家的投資によるスーパーコンピューティングの強化を図るため HPC 法を制定(米国: High Performance Computing Act、韓国: National Supercomputing Promotion Act)

(2)国内においては、「京」の整備や革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築が進み、また、国内の総計算資源は本年6月に完成する「京」も含め、20 ペタ FLOPS 超と推測されるなど、計算環境の整備が世界上位の水準に戻りつつあるのではないか。(※今後のニーズについて、調査の結果等を踏まえ追加)

(文部科学省関係機関の総計算資源)

- 国公立大学合計 6,272 テラ FLOPS(平成 23 年 5 月現在、うち基盤センター(計 5,590 テラ FLOPS)は平成 24 年 5 月現在)
 - 大学共同利用機関法人、及び文部科学省関係の独法等 3,007 テラ FLOPS(平成 24 年 5 月現在)
- ※平成 24 年 7 月以降「京」(11.28 ペタ FLOPS)が追加

(文部科学省以外の機関)

- 2012 年 6 月の TOP500 においては、上記機関の他、研究機関として 1,701 テラ FLOPS、民間 1,659 テラ FLOPS、合計 3,360 テラ FLOPS

(国産マシンについて)

- 2012 年 6 月の TOP500 においては、国内設置の 22,090 テラ FLOPS のうち国産マシンは 16,527 テラ FLOPS(「京」を含む)

(3)また、2. で述べるように、幅広い科学技術の分野でスーパーコンピュータは研究の発展に不可欠なものになってきているとともに、産業界でもスーパーコンピュータの利用が普及しつつあり、今後、その重要性は高まっていくのではないかと。

(4)一方で、「京」及び HPCI で画期的な成果を創出し、その社会への還元が求められるとともに、今後の計算科学技術の推進にあたって、いくつかの課題が明らかになっており、これらの課題に適切に取り組んでいくことが必要ではないかと。

- 消費電力等の制約条件の中で各 HPCI システムの性能向上
- システムの超並列化に対応した耐故障性の向上、システムソフトウェアやアプリケーションの開発等

(5)また、スーパーコンピュータを巡る技術面・利用面で新しい動きが出てきており、これらの動きにも適切に対応していくことが必要ではないかと。

(技術面)

- コンピュータ関係企業を中心プレーヤの変化 (IBM、Cray、SGI のようなシステムベンダから、Intel、NVIDIA、ARM などのプロセッサベンダへの変化)
- スピン・アウトからスピン・インへ (大型計算機の技術をコモディティに活かすスピン・アウトから、市場の大きなコモディティの技術をスパコン

の技術に活用するスピン・インへの流れ)

- 研究開発のグローバル化(欧州におけるエクサスケールに向けた国際連携。IESP(International Exa-scale Software Project)による米国、欧州、日本、中国の国際連携。ハードウェア、システムソフトウェアの共同開発への期待。)
- 新しいシステム開発におけるハードウェアの研究者とアプリケーションの研究者の共同(Co-design)の重要性の高まり
- 国内資本による半導体製造については、最先端プロセスでの量産がほぼ不可能な状況であり、プロセスと一体となった設計についても極めて困難になりつつある。

(利用面)

- 大規模で多種多様なデータの効率的な処理・分析など、いわゆるビッグデータへの対応
- ストレージとHPCIを組み合わせたビジネスの台頭(Google や Amazon、Microsoft など)
- 自然科学以外の分野での利用(経済、金融などでのシミュレーションの利用)
- PRACE など、複数のスーパーコンピュータを1つの基盤として運用(欧州各国で共同利用可能なハイエンドシステム(Tier-0)の充実など)

(6)国内のスーパーコンピュータ関係企業については、エクサスケールに向けて CPU も含め技術開発を継続する企業、高実行効率や高電力効率など使いやすさを追求する企業など、それぞれ今後の展開の方向性が異なりつつあるのではないか。

2. 計算科学技術の利用状況、今後の必要性

【調査・検討課題】

○科学技術分野で計算科学技術がどのように利用されてきているか。また今後の必要性はどうか。

【ポイント】

(1)工学や科学が目指すもの、その中で計算科学がどのように貢献するのかを考えることも必要ではないか。

- 理論、実験に次ぐ「第 3 の科学」、予測の科学としての計算科学技術（計算科学とはなにか）
- 第4期科学技術基本計画における国家存立の基盤や、科学技術の共通基盤としての計算科学技術
- 細分化されてきた基礎科学の分野、階層などを統合、融合できる可能性
- 演繹的なものだけでなく、帰納的な利用による科学技術への貢献
- 政策立案への貢献という視点も必要

(2) 科学技術の分野では、実験だけではわからない、もしくは実験できないような部分を理論計算で補うという側面もあり、例えば極限環境の研究が可能になるなど、計算科学的な手法は不可欠なものとなっているのではないかと。

- 物質科学、地震・津波、気象・気候、素粒子・宇宙、生命科学、医療・創薬分野におけるシミュレーションの利用
- 物質科学において、実験の補完、新しい物質設計を目指すには、より信頼性の高い方法論で計算する必要がある、膨大な計算量が必要
- 地震津波被害の減災のためにはシミュレーション研究が必要不可欠であり、より精緻な計算をするためには膨大な計算量が必要
- 研究開発における、単一モデルによるシミュレーションサイズの拡大の方向性と、複数のモデルを用いたアンサンブル計算の2つの方向性

(3) ゲノムデータ処理に代表されるように、シミュレーションだけではなく、データ処理にスパコンが利用される側面も増えてきているのではないかと。

- シークエンサの発展による膨大なゲノムデータの取得（次世代シークエンサにより、ゲノムが安価に高速に得られるようになってきた）

(4) 一方、シミュレーションの解像度をあげることにより、計算で用いるモデルを新たに検討する必要もあり、単純に解像度をあげるだけではうまくいかない場合もあるのではないかと。

- パラメタリゼーションと第一原理計算のバランス、新たな物理法則のモデル化
- 地震シミュレーションにおける高精度な地殻情報の入手など、解像度に応じた観測データの必要性

(5) 社会的ニーズに応える実際のシステムを考えた場合には、長期的視点に立ったシステムの整備計画と、観測データの取得からデータ入力、プリ・ポスト処理を含めた全体のシステム構築が必要になっているのではないか。

- システムを更新してもすぐには性能を引き出すプログラムはできないため、長期的な視点に立ったシステム整備が必要
- 高精細な地震・津波シミュレーションに必要な詳細な地形データ、建築物等のデータセットの整備が必要
- 地震・津波のサブリアルタイム処理や、リアルタイム観測データの入力
- 予測結果の評価と、社会への発信方法についても検討が必要
- 「知のフロンティアとしての科学」と「社会への出口」は異なる視点での議論が必要

(6) これまでの議論はスパコンを使っている人を想定しているが、実際にはスパコンを使ったことのない分野や研究者・技術者も多いのではないかと。そのような分野にもスパコンの利用を進め、成果を創出できるようにしていく必要があるのではないかと。

- 利用環境の整備(簡単な手順で使えるマシンや、ジョブ待ちでプログラムがなかなか実行されないなど)
- サポート体制、窓口の整備など

【調査・検討課題】

○ 自然科学以外の分野における利用の状況と今後の見通しはどうか。

【ポイント】

(1) 自然科学以外の分野においても、計算機が必要とされる場面があり、その利用は進んできているのではないかと。

- 人間集団の科学的研究や、経済現象を研究するときにはスパコンが用いられている
- インフルエンザの拡大予測や有効な介入政策立案のためには、シミュレーションが必要であり、スパコンによる計算が必要となる(122万人のパンデミックシミュレータなど)
- 金融市場のデータ、スーパーやコンビニの小売データなどは膨大であり、それを蓄積し解析するためには大きなリソースが必要となる

- ビッグデータである小売りデータの解析をとおして、需要予測シミュレーション技術が求められている。また、ブログ上のデータを用いることにより1日ごとの景気判断ができる可能性があるが、このためには「京」を上回るスパコンが必要になるとと思われる

(2) 社会への出口と近いものも多く、自然科学分野で求められるスペックとは異なるものがあるのではないか。

- 金融市場のアプリケーションでは、ミリ秒オーダーでの取引に対応するためのリアルタイム性と、精度のよいリスク推定などの要求から大規模計算の両面が求められる

【調査・検討課題】

○ 計算科学技術の産業利用の状況や、今後の必要性はどうか。

【ポイント】

(1) 産業界の利用は、より現実に近い状態での解析や、ものづくりにおける製品の設計など、大規模計算へのニーズはまだまだあるのではないか。

(2) 一方、大規模、高度解析を活用できる企業はまだ少なく、実際のものづくりではシミュレーションが十分普及しているとはいえ、その裾野をひろげていく必要があるのではないか。

- 解析技術、製品開発に結びつける知識の必要性(課題に対する適切な計算モデルの構築と解析結果の解釈、結果から得られた知見による改善や創造)
- シミュレーションができる人材の育成、技術やノウハウの継承
- 使い勝手のよいソフトウェアの必要性(大学のソフトウェアでは、インタフェースにまで注力して開発することは難しい場合がある)

(3) 産業界におけるスパコン利用の実情としては、維持費、コストなどによりトップマシンの100分の1から1000分の1規模のスパコンを利用するのが主流となっているなど、大学・研究機関と産業界ではスパコンの在り方が異なっているのではないか。

- パラメータサーベイなど(高精度で時間のかかる計算より、多くのパタ

ーンで計算したい場合がある)

- 大学の研究とは異なり、企業では既存の商用ソフトウェアを利用することが多いため、利用したいソフトウェアがシステムにのるかどうかが問題
- 長期の製品開発は共用のシステムを利用する場合もあるが、すぐに製品化に結びつくようなシミュレーションは、セキュリティ上社内のマシンで行うことになる

(4) 業種によりスパコンの利用状況やスパコンに対する要求が異なるので、利用パターンに沿った議論が必要ではないか。

- 業種による違いとともに、ユーザ企業とベンダ企業でも考え方が異なる(ユーザは安くて速ければベンダにはこだわらない場合がある、また中小の企業ではハードもソフトも人材もない)
- 業種により、製品の企画段階から製品化までの時間が異なる(例えば材料分野や製薬などは製品化に時間を要する)
- 同じ企業でも、研究開発部門で必要とされる用途と、ものづくりの現場とで求めるものが異なる

3. 将来の我が国における計算科学技術システムの在り方

【調査・検討課題】

- リーディングマシンの必要性についてどう考えるか。
- 汎用システム・専用システムを含め、どのようなシステムを整備・運用すべきか。
- スパコンの運用に関し、大学基盤センター、附置研、独法の役割はどうあるべきか。
- 必要な計算資源はどの程度か。また、どのような能力のスパコンをどのように配置すべきか。

【ポイント】

- (1) まず我が国の計算科学技術基盤インフラについてグランドデザイン描き、その中で大学、附置研、共同利用機関及び独法の有するシステムの役割・位置付けを検討すべきではないか。
- (2) グランドデザインとしては、必要な予算にも留意しつつ、世界トップレベルのスパコンや、その次のレベルのスパコンを複層的に配置し、全体として世界最高水準の計算科学技術基盤インフラを維持・強化するという考え方が重要ではないか。
- (3) トップレベルのシステムについては、基盤と言うよりもサイエンスやテクノロジーを切り拓く最先端の装置という位置づけとすべきではないか。
- (34) 情報基盤センターを巡る状況は設立当初と変わってきており、その役割や位置付けについて改めて検討する必要があるのではないか。
 - 現在は、アカデミアの大半の計算需要は情報基盤センターではないところでのみならず、附置研や共同利用機関のスパコンでも賄われており、情報基盤センターの役割は大きく変わっているのではないか
 - 以前は、情報基盤センターにおいてプログラムの開発からシミュレーションや解析まで全てを行っていたが、今はその流れの中でどこに位置すべきかということ、それぞれのセンターが検討すべき状況になっているのではないか
 - 現状でも情報基盤センターは学内外のユーザのニーズには応えてい

るが、ただ計算能力が不足しているということだと考える

- 情報基盤センターのユーザは、大規模ジョブのみならず、小規模のジョブを動かしたい方もいるので、両方をサポートする必要がある
- 教育や人材育成は、大学の情報基盤センターでしかできないことであり、それを行うことがセンターへの期待が大きい重要な役割と考える

(45) 近年、世界のスーパーコンピュータの能力に比較して、大学情報基盤センターのスーパーコンピュータの能力が相対的に低くなってきているのではないか。これは、電力や設置スペースの問題に加えて、戦略の問題でもあるのではないか。

(56) 整備するシステムの性能を設定するにあたり、Linpack による性能評価を完全に無視するわけにもいかないが、より重要なのは、そのシステムで何を達成するのかということではないか。

(67) 専用、汎用システムについて、整備するシステムのアーキテクチャの特徴は、市場から調達するのかそれとも開発するのかということや、そのシステムがどのようなサイエンスを目的にしているかなどによって決まるものであり、一律にその良し悪しを議論することは適当ではないのではないか。

(78) 今後の我が国の計算科学技術システムの在り方について、一つ一つのシステムの能力を向上させるため、複数の機関が共同でシステムの導入・運用をすることも視野に入れるべきではないか。その際、これまでのやり方をベースにしたシナリオと、既存の施設も活用しつつ、いくつかのシステムを集約することにより大規模なシステムを導入していくというシナリオについてシミュレーションし、検討することが必要ではないか。

- 現状でも各情報基盤センターは、各センターが協調と競争をしながら、特徴のあるシステムを導入し、良い形になっているのではないか
- 昨今の HPC 技術は複雑になってきており、下の世代への技術の継承という点を考えても、機関が連携して大規模なシステムを導入することは良いのではないか
- 今後のビッグデータの対応を考えると、システム同士をなるべく近くに設置するということが重要ではないか
- 物理的にマシンを集約して配置していくとしても、オペレーションについ

では様々なユーザコミュニティの意見を反映できるような柔軟なものにするべきではないか

4. 計算科学技術に係る研究開発の方向性

【調査・検討課題】

○今後の計算科学技術に係る研究開発をどのように進めていくべきか。

【議論のポイント】

- 我が国の計算システムの整備について、長期的なロードマップを作成し、計画的に研究開発・整備を進めていくべきとの意見についてどう考えるか
- リーディングマシンの開発の在り方についてどう考えるか(位置付け、進め方)
- ハードウェアとアプリケーションの研究開発を、どうバランスをとりながら進めていくか
- その他留意すべき事項としてどのような点があるか
 - ・ ビッグデータへの対応やリアルタイムのデータ処理
 - ・ 計算科学と計算機科学の連携
 - ・ 我が国で開発した技術やシステムのビジネス展開

【主な意見】

- 米国のように、今後10年程度を視野にどのようなマシンをどの組織に配置していくかの計画を立てるべき。
- HPC を国の研究開発として位置付け、長期的に研究開発を進めていくことが必要ではないか。
- 今後の計算科学技術の推進に当たって、計算科学と計算機科学、工学と理学の連携を進めることが重要。
- ある先端のハードやアプリが開発されてから、それをどう普及させて、5年、10年後にどういう成果が広がっているか、全体を見据えた長期的な検討が重要。
- HPC 技術の主導権を持つためには、ハードウェアとソフトウェアと両面の研究開発をしていくべき。
- 当面はアーキテクチャよりも、計算科学などの計算機を活用した研究に投資し、リーディングマシンの開発としては京の次の次くらいを考えた方が良いのではないか。
- 国の予算は限られているので、IT産業全体の振興という視点で、ビジネス展開も考える必要があると思う。

【調査・検討課題】

○ハードウェア、システムソフトウェアについて、どのような要素技術に我が国として重点を置くべきか。

【議論のポイント】

- スーパーコンピュータのハードウェアやシステムソフトウェアなどについて、どのような要素技術に、どのような観点から重点をおいて進めていくべきか

（観定の例）

- ・ 我が国として強みのある技術かどうか
 - ・ 国家安全保障上保持すべき技術かどうか
 - ・ スパコン開発でキーとなる技術かどうか
 - ・ 民間に展開できる(ビジネスとして成り立つ)技術かどうか
 - ・ 省エネ性に優れた技術かどうか
 - ・ 技術開発にかかるコストはどうか
- 特に CPU などの半導体の設計・製造についてはどう考えるか

【主な意見】

- スーパーコンピュータの開発動向を把握するためにも、また、国家安全保障的な観点からも、CPUの設計技術は自国で持つべき。また、CPUはミドルソフトウェアの開発にも関連しており、その意味からも重要。
- スパコンは総合技術でありCPUの技術のみにこだわる必要はないのではないか。
- どのような技術を自国で持つかは、その技術がコモディティレベルでどう展開できるかによって決めるべき。CPUについても、そうした展開ができないのであれば、自国で開発する意味はないのではないか。
- 最近ハスカラ型 CPU でもベクトルの技術を使うようになってきており、日本の優位性を失わないためにもベクトル技術の継続的な研究開発が必要ではないか。
- CPU以外で今後重要となる要素技術としては、インターコネクト、ネットワーク、システムソフトウェア、コンパイラなどがあり、CPUの国内開発が困難な場合であっても、これらの技術を国際競争力のある技術として育てる必要はある

【調査・検討課題】

○今後のアプリケーション開発の在り方についてはどう考えるか。

【議論のポイント】

- 今後のスパコンの技術動向も踏まえ、システム整備と並行してアプリケーションの開発も行うべきと考えるがどうか
- 「京」の場合はグランドチャレンジや戦略プログラムを実施してきたが、今後のアプリケーション研究開発の具体的な方策についてどう考えるか
- 高度なアプリケーションを開発する人材の育成の在り方や、そうした人材と各アプリケーション分野の研究者が共同でアプリケーションを開発する体制の構築についてどう考えるか
- 日本発のソフトウェアの普及方策についてどう考えるか

【主な意見】

- 2018 年から 2020 年にスパコンがどうなっており、アプリはどのように開発すべきかとの共通認識を持った上で、今後のアプリの研究開発の在り方を検討すべき。
- 今後ハードの並列化が進んでいくと、アプリ開発が大変になるので、今からでも基盤となるアプリケーションソフトウェアの整備や人材育成を図る必要があるのではないか。
- 高度なアプリを開発する人材を育成に取組、そうした人材と分野の研究者が共同で開発する体制を構築すべき。
- 日本で作られたソフトが世界で使われていないのは問題。これを変えていくには、グローバルなオープン開発のようなことを考えていくべきではないか。

【調査・検討課題】

○計算科学技術に関する国際協力をどのようにしていくべきか。

【議論のポイント】

- システムソフトウェアについては日米の国際協力が進みつつあるが、今後の国際協力の在り方についてどう考えるか
- アプリケーション分野など、システムソフトウェア以外の国際協力についてはどう考えるか

【主な意見】

- 日本が強い分野は日本で行い、米国が強い分野は協力して開発するべき。そのためにも自国で技術ポテンシャルを持つことは重要。

5. 利用の在り方(利用環境、産業利用促進等)

【調査・検討課題】

- スパコンの利用を促進し、成果の創出を図るために、運営や利用環境の在り方はどうあるべきか。
- 自然科学以外の分野におけるスパコンの利用をどのように進めていくか。
- 産業利用の促進を図るために必要なことはどのようなことか。

6. その他

【調査・検討課題】

- 将来を見据え、計算科学技術に関する人材育成をどのようにしていくべきか。
- 国民への広報や情報発信といったアウトリーチ活動をどのようにしていくべきか。