

1. スーパーコンピュータ「京」の完成までの経緯

(1)「次世代スーパーコンピュータ・プロジェクト」の立ち上げまでの経緯

＜スーパーコンピュータの開発・利用の意義(資料1参照)＞

スーパーコンピュータによるシミュレーションは、理論、実験と並ぶ科学技術の第3の手法として、最先端の科学技術や産業競争力の強化に不可欠な基盤となっている。例えば、シミュレーションにより、研究やものづくりに要する時間やコストの削減が図れるとともに、これまで実験や観測では解明できなかった現象を解析し新しい科学的知見を得ることが可能となることから、様々な分野の科学技術や産業の発展に大きく貢献する。

また、その開発は、低消費電力半導体技術の獲得など、今後、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の維持・強化を図ることができ、産業競争力強化の観点からも極めて重要である。

諸外国でもスーパーコンピュータの開発・利用に力を入れており、我が国としても長期的な視点から継続的に進めていくことが必要である。

＜計算科学技術に関する長期戦略(資料2-1、資料2-2参照)＞

こうしたことから、平成17年8月、科学技術・学術審議会情報科学技術委員会計算科学技術推進ワーキンググループでとりまとめられた第二次中間報告書¹において

- 我が国のスーパーコンピュータ開発をリードする最高水準の汎用システム(NLS(ナショナル・リーダシップ・システム))の開発を、長期ロードマップに従い戦略的に行うこと
- 物質・材料、ライフサイエンス、ものづくり、防災などの8つの幅広い分野においてペタスケール・コンピューティングを実現することにより大きな成果が期待できること
- 米国のスーパーコンピュータ戦略、半導体技術トレンド等も勘案しつつ、10ペタフロップス級の汎用スーパーコンピュータの研究開発プロジェクトを平成18年度には開始させる必要があること

などが提言された。

＜次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトの立ち上げ＞

これを踏まえ、文部科学省において、

- 計算科学技術を更に発展させ、広範な分野の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、我が国の競争力の強化に資すること
- ライフサイエンス、物質材料分野、防災・減災分野など多様な分野で社会に貢献する研究成果を挙げること
- 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、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・整備する「次世代スー

¹計算科学技術ワーキンググループ 第2次中間報告書(http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu2/shiryo/05091401/008_2.pdf)

「スーパーコンピュータ・プロジェクト」を立ち上げた。

平成17年11月、本プロジェクトについて、総合科学技術会議の事前評価²を受け、システム構成について再検討を行うべき等のいくつかの指摘を受けたが、「本プロジェクトは実施することが適当」とされた。

また、平成18年3月に策定された第三期科学技術基本計画³において、本プロジェクトは世界最高水準の科学技術の発展基盤として、国家的な目標と戦略の下に集中的に投資すべき大規模プロジェクトとして国家基幹技術として位置づけられた。

これらを踏まえ、平成18年4月に「次世代スーパーコンピュータ・プロジェクト」が開始された。

(2)次世代スーパーコンピュータ「京」のシステム構成について(資料3参照)

<複合型を選択した経緯>

次世代スーパーコンピュータ「京」のシステム構成については、開発主体である独立行政法人理化学研究所(理研)において概念設計等を行い、その結果、スカラ型・ベクトル型両方の特徴を勘案し、スカラ・ベクトル複合型にすることにより、

- スカラプロセッサ向けに開発された多くのアプリケーションと、地球シミュレータに代表されるベクトルプロセッサ向けに最適化されたアプリケーションの両方を容易かつ発展的に利活用でき、ソフトウェア資産のより多様な有効活用が可能となる。
- スカラ型・ベクトル型の両者を同時に用いた複合シミュレーションを実行できるシステム環境を構築することにより、気象観測データのリアルタイム解析での連携計算など、より複雑な問題に対するシミュレーションの革新を先導できる。
- 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、我が国が強みを持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、将来の我が国のスーパーコンピュータ開発の技術力、国際競争力等の向上に一層貢献する。

等の利点も踏まえ、技術的により高度である複合型システムに挑戦することとした。このことについては、平成19年6月の科学技術学術審議会⁴や同年9月の総合科学技術会議⁵の評価において、妥当との評価を得ている。

<複合型から単一型にした経緯>

平成21年4月、文部科学省科学技術・学術審議会⁶で実施した中間評価において、

- 米国のスーパーコンピュータ開発が加速しており、従来の計画では世界に先駆けて10ペタフロップス級の汎用計算機を開発・整備するという目標を達成することが困難
- 複合システムとしての性能が十分でなく、一定の見直しが必要。

との評価を受け、複合システムの在り方を含め、プロジェクトの目標達成を念頭に置いた最適なシステム構成を再検討することとされ、これを踏まえ、理研において、システム構成の再検討を開始した。

そうした中、平成21年5月、当該企業等のうち、ベクトル部の開発を担っていた NEC が経営環境の悪化等を理由に「京」の製造には参加しない旨表明した。

² 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」について (平成 17 年 11 月 28 日)P5-6(http://www8.cao.go.jp/cstp/output/iken051128_1.pdf)

³ 第三期科学技術基本計画 p14-15(<http://www8.cao.go.jp/cstp/kihonkeikaku/honbun.pdf>)

第三期科学技術基本計画分野別推進戦略 P69 (<http://www8.cao.go.jp/cstp/kihon3/bunyabetu3.pdf>)

⁴ 概念設計評価作業部会概念設計評価報告書(http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu2/toushin/07061321.htm)

⁵ 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」について (平成 19 年 9 月 13 日) P6

(<http://www8.cao.go.jp/cstp/output/iken070913/iken070913.pdf>)

⁶ 次世代スーパーコンピュータ中間報告書(http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/22/01/_icsFiles/afiedfile/2010/01/26/1289511_1.pdf)

これを受けて、理研において、複合型ではなくスカラ部のみで構成されるシステム構成案へと見直しを行い、これについて、同審議会において中間評価を受け、同年7月、

- スカラ部のみでもシステム全体としての性能目標を達成する可能性がある
- ベクトル部の利用を想定していたアプリケーションに対する影響については、プログラムの書換え等の支援を行うことにより限定的なもの

との結論を得て、複合型ではなくスカラ型単一システムとして10ペタフロップス級のスーパーコンピュータを開発・整備することとした。

以上のように、当初は技術的により高度である複合システムを選定したが、その後の進捗や状況変化を踏まえ、早期に10ペタフロップス級を達成するというプロジェクトの目標に鑑みて、より適切なシステム構成に変更し、弾力的に計画を推進してきたものである。

なお、このシステム構成の変更については、10ペタフロップス達成などのプロジェクトの目標を変更するものではなく、平成19年9月の総合科学技術会議の評価における、「海外の動向にも常に注視しつつ、世界最先端・最高性能を達成するという本プロジェクトの目標に鑑み、計画の弾力的な推進に配慮すべきである」という指摘に沿ったものである。

(3)HPCI 計画への展開(資料4、資料5参照)

「次世代スーパーコンピュータ・プロジェクト」は、平成21年11月から12月に行われた事業仕分けやパブリックコメント等を経て、同年12月、開発者視点から、引き続き世界最高水準を目指しつつ、利用者側の視点に立った多様なユーザーニーズに応える「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」を構築する計画(HPCI 計画)⁷へと展開した。

具体的には、「京」や東京大学等の全国の9つの大学が保有するベクトル型のものを含むスーパーコンピュータや大規模ストレージシステムをネットワークで結ぶとともに、これらのスーパーコンピュータ等を一つのユーザアカウントにより利用することなどができるようにするシステムを構築するもので、その共用を平成24年9月末に開始することを予定している。

これにより、全国の利用者が当該ネットワークを通じて「京」やベクトル型のものを含むスーパーコンピュータ等を利用できるようになるなど多様なニーズに応えられるものと考えている。

2. 「京」によって獲得される技術及び期待される効果(資料6、資料7、資料8参照)

(1)「京」によって獲得される技術

「京」は昨年11月に世界に先駆けて演算性能10ペタフロップスを達成し、昨年6月及び11月において世界スーパーコンピュータ性能ランキングにおいて二期連続で1位となった。このことにより、我が国が世界最高水準のスーパーコンピュータ技術を獲得するとともに、世界各国が激しい開発競争を展開している中で、我が国の技術力の高さを示すことができたと考えている。具体的には、10ペタフロップスという高い演算性能に加え、

- 長時間わたる計算においても確実に遂行する高い信頼性(全CPUフル稼働時の連続実行時間29時間以上で世界最高水準)
- 高いシミュレーションの実施効率(平成24年6月の世界トップ10の平均が76.3%の効率のところ、「京」では93%を達成)

などの特長を有し、多くのユーザーにとって利便性の高いスーパーコンピュータとなっている。

⁷ HPCI の構築について(参考資料三枚目) (http://www.mext.go.jp/a_menu/kaihatu/jouhou/hpci/_icsFiles/afiefieldfile/2012/06/26/1307375_01.pdf)

(2)期待される成果

本プロジェクトでは、「京」を利用するアプリケーションも並行して開発を進めており、「京」が世界に先駆けて10ペタフロップスを達成したことにより、これらのアプリケーションを活用したシミュレーションを世界に先駆けて実施し、様々な成果を得られると期待されており、例えば、

○心臓の動きについて、これまで細胞・組織・臓器の部分的にしか再現できなかったものを、細胞・組織・臓器を全て含めた統合シミュレーションで心臓全体をありのままに再現することが可能となる。大学病院とも連携をして、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価を効率的に実施する

○地震・津波の被害予測について、今までの50m単位(ブロック単位)のモデルによる予測から、より実際に近い地盤沈下や液状化などの複合災害を加味した10m単位(家単位)での予測等を可能とする。地方自治体とも連携を進めており、都市整備計画への活用による災害に強い街作りや、きめ細かな避難計画の策定等に貢献する

○薬の開発にあたって、病気の標的タンパク質と薬の候補物質との結合をこれまでできなかった精度で高速にシミュレーションすることにより、新薬候補の物質を選び出す期間を約2年から約1年へと半減できる。製薬企業とも連携し研究開発を進め、画期的な薬剤の開発に貢献する

など、10ペタフロップス級の「京」でしかできない様々な研究成果の創出⁸が期待されている。

(3)産業利用の促進

産業界における利用については、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会等を通じ、産業界の意見も聞くことにより、スーパーコンピュータの利用についての情報提供や支援体制の不足、ネットワークが不便等の課題があることを把握するとともに、これに対応して、

○一元的な情報提供や事前相談等を行う体制の構築

○研究開発に係る機密保持に配慮した利用環境を備え「京」とネットワークでつながるアクセスポイントを東京と神戸に設置

○産業利用の開拓に向けた波及効果が高い課題を選定する産業利用課題枠の設定など、産業界に配慮した環境の構築をすすめている。

また、戦略プログラムにおいては、ものづくり、創薬など産業界との連携を積極的に進めるとともに、「京」の一般利用枠の産業利用課題枠には「京」の計算資源の5%をあてることを目安としているが、利用の状況も踏まえ、その割合については、柔軟に対応することとしている。

3. 「京」以降の計算科学技術に関する戦略について(資料9参照)

世界の情勢として、今後もスーパーコンピュータの開発競争は続き、性能も進化していくことを考えれば、我が国としても引き続き長期的な視点から戦略的に研究開発を推進することが必要である。また、第4期科学技術基本計画においても、世界最高水準のハイパフォーマンス・コンピューティング技術は、我が国が国際的な優位性を保持し、安全な国民生活を実現していくため、国自らが長期的視点に立って研究開発を推進すべき国家存立の基盤に関わる研究開発として位置づけられている。

⁸ 「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の構築について」うち「HPCI 戦略プログラム」
(http://www.mext.go.jp/a_menu/kaihatu/jouhou/hpci/1307375.htm)

一方、平成17年8月に科学技術・学術審議会で示された戦略については、策定後5年以上経過していることから、スーパーコンピュータに関する最新の技術的動向や今後の科学的・社会的ニーズ、「京」プロジェクトから得られた成果等も踏まえつつ、我が国の技術力の獲得・継承や人材育成等も含め新しい戦略の策定が必要不可欠である。

また、「京」の開発においては、当初、どちらかと言えば開発側の視点を重視して進められてきたが、これを改め、利用者視点に立ったHPCIの構築に展開した経緯を踏まえ、多様な利用者ニーズに応じる基盤として検討を進めることが重要である。

このために本年度からシステムの高度化に必要な技術的知見の獲得を目的とした調査研究に着手するとともに、有識者からなるワーキンググループ⁹を設置し、今後10年程度を見据えたHPCI計画の推進のあり方に関する調査・検討を進めており、平成25年夏頃を目途に中間報告において方向性を明らかにすることとしている。

⁹ 今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ (http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/index.htm)

<資料1>スーパーコンピュータの開発・利用の意義

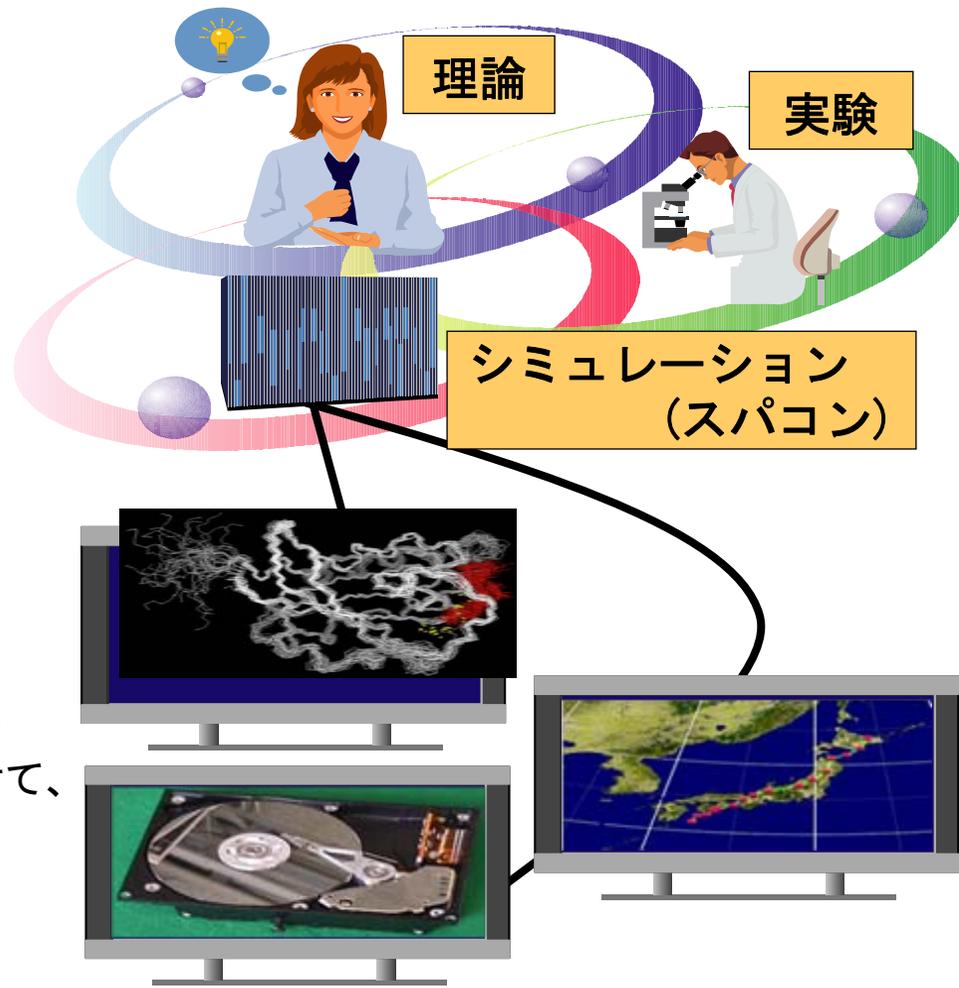
◆科学技術の3つの方法

理論、実験、そして、シミュレーション

- ・スーパーコンピュータによるシミュレーションは、多くの分野で理論、実験と並ぶ重要な方法
- ・実験が困難な現象の解明や実験に時間がかかりすぎる場合、コンピュータを用いて仮想的に実験
- ・スーパーコンピュータを用いたシミュレーションの規模及び対象分野は、研究開発の進展と共に絶えず拡大

◆高性能計算機(スパコン)とシミュレーション

先端科学技術の実験に高度な実験装置が必要であるのと同様、より高精度なシミュレーションにより、世界に先駆けて、結果を出すためには、世界最高性能のスパコンが必要



<資料3>次世代スーパーコンピュータ「京」のシステム構成について

決算行政監視委員会行政監視に関する小委員会への文部科学省提出資料(H24.6)

複合システムの採用(平成19年3月～9月)

スーパーコンピュータ「京」のシステム構成について、概念設計の結果を踏まえ、

- ①スカラ型とベクトル型の2つの技術を維持・強化できること
- ②より多様なアプリケーションに対応できること

等の理由から、理研がスカラ部とベクトル部からなる複合型を提案。科学技術・学術審議会次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会や総合科学技術会議で妥当との評価。

システム構成の再検討の指示(平成21年4月)

次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価作業部会において、詳細設計に対して中間評価を行い、

- ①米国のスパコン開発が加速しており、従来の計画では世界に先駆けて10ペタフロップス級の汎用計算機を開発・整備するという目標を達成することが困難
- ②複合システムとしての性能が十分でなく、一定の見直しが必要

との評価を受け、複合システムのあり方を含め、プロジェクトの目標達成を念頭に置いた最適なシステム構成を再検討することとされた。これを受けて、理研においてシステム構成案の再検討を開始。

NECの製造段階への不参加表明(平成21年5月)

ベクトル部の開発を担うNECが、経営環境悪化などを総合的に考えた上での経営判断として、製造段階への不参加を表明

スカラ型単一システムの採用(平成21年5月～6月)

NECの不参加表明を受けて、複合型ではなくスカラ部のみで構成されるシステム構成案を理研において策定。これについて中間評価作業部会において評価を受け、

- ①スカラ部のみでもシステム全体としての性能目標を達成する可能性がある
- ②ベクトル部の利用を想定していたアプリケーションに対する影響については、プログラムの書換え等の支援を行うことにより限定的なもの

との結論を得て、スカラ型単一システムとして10ペタフロップス級のスパコンを開発・整備することとした。

<資料4>次世代スーパーコンピュータ計画変更の経緯

決算行政監視委員会行政監視に関する小委員会への文部科学省提出資料(H23.11)

平成21年

11月13日 事業仕分け:「来年度の予算計上の見送りに限りなく近い縮減」との評価

12月 9日 総合科学技術会議における見解付け:「10ペタ級の目標は達成できるものと評価されており確実に推進すべき」「国民の十分な理解を得ることが重要」等の評価

12月16日 4大臣(財務大臣、行政刷新大臣、国家戦略担当大臣、文科大臣)合意:「計画を変更した上での予算案への計上を認める」との結論

○スパコン開発側(供給者)視点から利用者側視点へ

○ナンバーワンの性能を引き続き目指しつつ、多様なユーザーのニーズに応える「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築」を目指す。

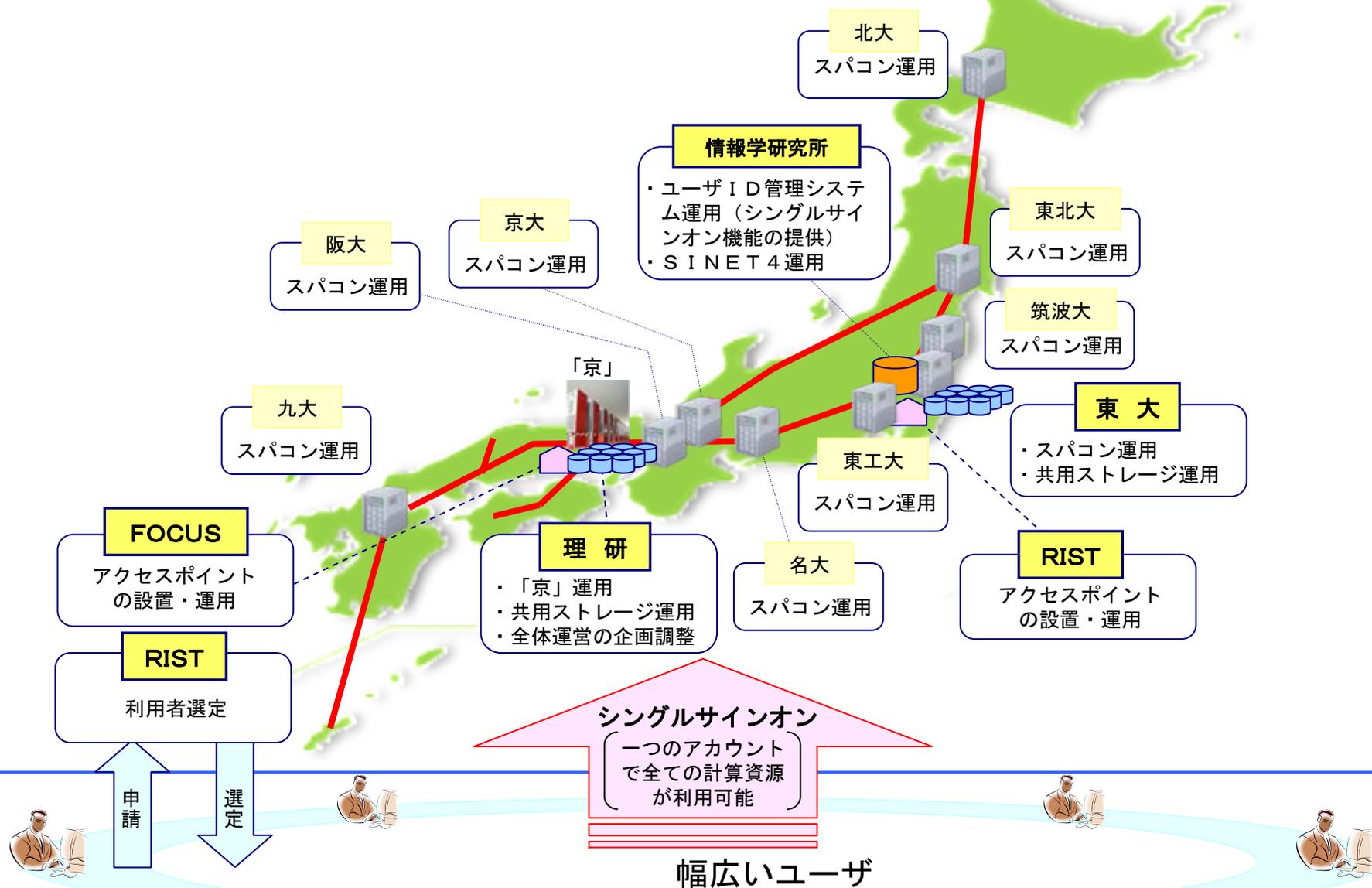
○次世代スーパーコンピュータの開発スケジュールを変更

(10ペタフロップス達成時期を平成23年11月→平成24年6月)

→平成22年度予算において国庫債務負担行為として、平成24年度までの3年間のシステム製造費を措置することを、国会にて議決(開発加速のための経費110億円を削減)

<資料5>HPCIの構築について

「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。



<資料6>「京」によって獲得される技術及び期待される効果

決算行政監視委員会行政監視に関する小委員会への文部科学省提出資料(H23.11)を基に作成

ライフ・イノベーション

新しい予測医学を開拓!

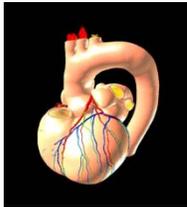
(例) 薬の開発

薬候補のタンパク質への高精度結合シミュレーションにより、創薬プロセスを革新し、画期的な薬剤の開発に貢献。



(例) 心臓シミュレーション

細胞レベルから心機能をありのままに再現する心臓シミュレーションによりミクロレベルの異常と心疾患の関係を合理的に解明し、医療に応用。

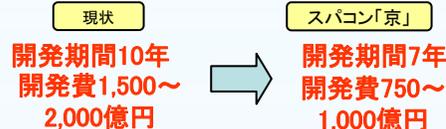


産業競争力強化

ものづくりプロセスを革新!

(例) ジェットエンジンの丸ごと解析

ジェットエンジン全体のシミュレーションによる空力、伝熱、燃焼、構造の解析が可能となる。



「京」によって獲得される高い技術

- ・世界に先駆けて10ペタフロップスを達成
- ・シミュレーションの高い実施効率(93%)
- ・高い信頼性(高負荷下、29時間以上連続実行)

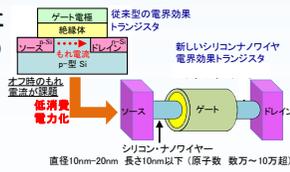
・多様なユーザーニーズに応える利用の推進!
・世界に先駆けた画期的な成果を創出!

グリーン・イノベーション

グリーン・イノベーション 創出を促進!

(例) 新しい省エネ半導体材料の開発

シリコン・ナノワイヤーをまるごと解析し、これまでできなかった次世代トランジスタの電子構造・特性や生成方法に関する知見を獲得。



情報通信システムの低炭素化に貢献!!

(例) スパコン用省エネ技術の市場展開



次世代スパコン用に開発された先端的技術の市場展開により、情報通信機器の消費電力を飛躍的に低減。現行のスパコン用CPUと比較して約7.4倍の消費電力性能!

次世代スパコン用 CPU Sparc64Vlllfx

国民生活の安定・安全

生活・社会の質向上に貢献!

(例) 地震・津波の予測精度高度化

観測データとシミュレーションの融合による津波予測の高精度・高速化、複合災害の予測



写真提供: 理化学研究所、(株)富士通、(株)IHI

<資料7> 産業利用の促進に向けて

- 「京」及びHPCIの産業界の利用は、我が国の産業競争力強化とともに、「京」等の成果を社会に還元する上でも重要。
- 一方で、「京」等の産業界の利用に当たって、いくつかの課題が指摘されており、それに適切に対応することにより、産業利用の促進を図っている。
- なお、本年5月から6月にかけて行った「京」の一般公募では、産業利用課題の応募は29件で4倍以上の競争率になるなど、産業界からも想定を上回る利用の申し込みがあった。

産業利用に当たっての課題

- ✓ 産業上の効果あまり明確ではない
 - ✓ 利用に必要な情報の不足
 - ✓ 膨大なソフトウェア移植の作業量
 - ✓ 支援体制の不足
 - ✓ 不慣れた使用環境(知財権の扱い、アクセスポイントやネットワーク) など
- (「平成24年1月 HPCIとその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて ~最終報告~」より抜粋)

対応策

課題を踏まえた産業利用促進策

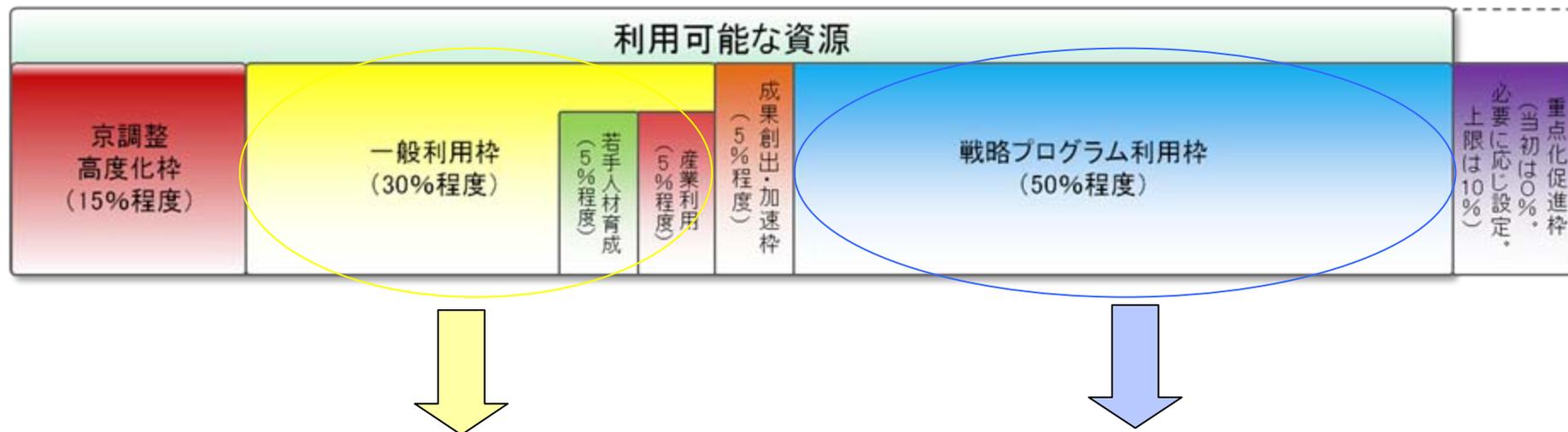
- 有効性が実証できる枠組み
 - ✓ トライアルユース枠の設定 など
- 利用支援の強化
 - ✓ 情報の一元的提供
 - ✓ コンシェルジュ的相談窓口の設置
 - ✓ ソフトウェア移植・チューニング支援 など
- 利用環境の整備
 - ✓ SINET4への産業界からのスムーズな接続
 - ✓ アクセスポイント(東西2カ所)の設置
 - ✓ 成果の帰属と知財権の明確化 など

<資料8>「京」の利用者選定について

決算行政監視委員会行政監視に関する小委員会への文部科学省提出資料(H24.6)

<京の利用枠>

京の利用については公募に基づいて選定する一般利用枠と公募によらず重要なテーマ・課題を選定する戦略プログラム利用枠等がある。



<一般利用枠>

産業界を含め幅広い利用者を対象に公募し、申請のあった者の中から課題審査委員会の審査を経て利用者が選定される。

<戦略プログラム利用枠>

文部科学省が戦略的見地から配分内容を定め、登録機関によるプロセス審査を経て利用者が選定される。

※なお、利用料金については産業利用で成果非公開の場合有償とする。
(1ペタフロップスを1時間使った場合約10万円)

<資料9>「京」以降の計算科学技術に関する戦略について

決算行政監視委員会行政監視に関する小委員会への文部科学省提出資料(H24.6)

○技術的事項の検討

将来のHPCIシステムのあり方の調査研究 (平成24年度から2カ年)

- ・公募によりシステム設計研究チームとアプリケーションソフトウェアチームを選定。
- ・システム設計研究チームでは、技術動向調査、システム設計研究、システムソフトウェアの検討等を行う。
- ・アプリケーションソフトウェアチームでは、サイエンスロードマップの策定、評価用アプリの抽出、それを用いたシステムの評価等を行う。
- ・これらの活動をもとに、**5～10年後の我が国のHPCIシステムに必要な技術的知見を獲得**する。

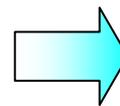
【選定結果】

分野	主管事業実施機関
アプリ	理化学研究所
システム設計	東京大学
	筑波大学
	東北大学

○政策に関する検討

今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ(平成24年2月～)

- ・今後10年程度を見据え、国内外の計算科学技術の動向、HPCIシステム構成のあり方、HPCI全体のネットワークや利用体制のあり方、今後の研究開発のあり方等について調査検討を実施。
- ・平成24年5月末に基本的な考え方、今後さらに検討すべき事項等を取りまとめ。
- ・**平成25年夏頃を目途に中間報告、平成26年3月頃を目途に最終報告を取りまとめる予定。**



ワーキンググループ
の議論に反映



今後のHPCI計画推進のあり方を決定