

フラッグシップ2020プロジェクト  
(ポスト「京」の開発)  
- 調査検討事項について -

平成30年9月25日  
文部科学省 研究振興局  
参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室

1 . 調査検討事項について・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1

2 . 文部科学省における中間評価・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 19

# 1 . 評価対象案件の実施府省における評価方法及び中間評価結果の妥当性

## 実施府省における中間評価結果は妥当であるか。

外部の専門家等の有識者で構成されたHPCI計画推進委員会で必要性、有効性、効率性等の観点から評価を実施しており、

- ・システム開発においては、開発目標について達成の見通しが得られており、ポスト「京」の製造・設置を着実に推進することが適当
- ・アプリ開発においては、目標の達成状況及び運営方法は適切であり、科学的成果の創出が期待されることから、おおむね妥当と評価されている。

初版CPUの評価結果は見込み通りであり、目標達成に向け順調に進捗していることが確認されている。

### 【初版CPUの評価結果】

#### ・試験結果

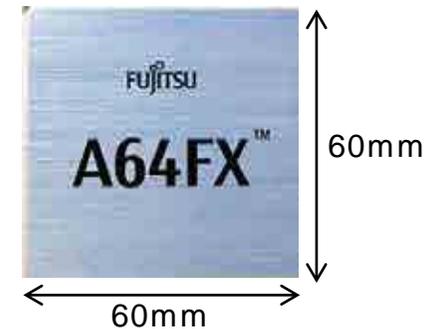
- 機能試験：問題なし
- 負荷試験：いくつかの軽微なバグを確認したものの、次版CPUで修正の見込みであり、製造計画に影響はない

#### ・開発目標

- 電力性能：消費電力30～40MWを達成見込み
- アプリケーション性能：最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能を達成見込み
  - ・GENESIS<sup>1</sup>において、「京」の106倍のアプリケーション実効性能を達成見込み
  - ・NICAM+LETKF<sup>2</sup>において、「京」の153倍達成見込み

1 生体高分子材料向け分子動力学シミュレーションソフト

2 観測データ同化を組み入れた全球の雲等をシミュレーションする非静力学大気モデル



# 1 . 評価対象案件の実施府省における評価方法及び中間評価結果の妥当性

成果・アウトカムはより具体化・明確化されているか。

【前回指摘事項】

文部科学省の中間評価において、アプリケーションの開発については、目標の達成状況及び運営方法は適切であり、科学的成果の創出が期待されることから、概ね妥当と評価されている。

アプリケーション開発実施機関において、諮問委員会や運営委員会等を設置し、目標達成状況の確認・評価を行うとともに、シンポジウム等により普及を図っている。

理化学研究所やHPCIコンソーシアム等により、シンポジウムの開催や広報誌の作成等を通じ、計算科学の成果やアウトカムについて広く普及を図っている。

アプリケーション開発実施機関においては、

- ・成果創出のための実施計画や事業方針を定める運営委員会を119回、
- ・事業の進捗状況の報告を受けて、実施計画や進捗に対して提言・指導を行う諮問委員会を58回、
- ・創出された成果について発表を行うシンポジウム・成果報告会等を96回、それぞれ実施。

理化学研究所等においては、

- ・「京」やHPCIの利用者のニーズに応え、受講者のスキルアップを目的としたセミナーやワークショップ、
- ・「京」やHPCIの利用研究課題実施により生み出された研究成果の発表や普及を目的とした、成果報告会やシンポジウム等を200回以上開催、
- ・「京」やHPCIの利用による、実社会への貢献や、顕著な研究成果事例等の特集として具体的に紹介する広報誌や成果事例集等を125誌発行。



重点課題7 ブース展示



パソコン体験塾  
パンフレット



成果報告会  
パンフレット



成果事例集



材料系ワークショップ

# 1 . 評価対象案件の実施府省における評価方法及び中間評価結果の妥当性

成果・アウトカムはより具体化・明確化されているか。

【前回指摘事項】

さらに、今後、ポスト「京」共用開始後の戦略的な利活用を推進するため、文部科学省において外部有識者による検討を開始する予定である。

## ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するWG

・ポスト「京」の戦略的な利活用を推進するため、HPCI計画推進委員会（平成30年9月4日）において開催を決定。

### 主旨

- ・全ての人とモノがつながり、今までにない新たな価値を生み出す超スマート社会の実現を目指すSociety5.0においては、シミュレーションによる社会的課題の解決や人工知能（AI）開発及び情報の流通・処理に関する技術開発を加速するために、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠である。
- ・我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心の確保につながる最先端の研究基盤であるポスト「京」の利活用によって、その成果創出を加速し、成果最大化を実現する必要がある。

### 検討事項

- ・ポスト「京」の利活用に係る基本方針並びに推進方策の検討。

### 今後の予定

- ・平成30年秋から、各分野の外部有識者を委員とし検討を開始する予定。

基本設計評価の確認（平成28年度）以降の科学技術の動向等を踏まえ、開発目標を変更する必要があるか。

総合科学技術・イノベーション会議において、累次の評価を実施し、本プロジェクトの意義・必要性が認められるとともに、基本設計評価においてはその内容が概ね妥当であると評価されている。

#### これまでのCSTIによる評価結果

##### 事前評価（平成25年度）

- ・我が国の競争力の源泉となる最先端の研究成果を創出する強力なツールであり、**国として主導的に開発に取り組むべき。**

##### 再評価（平成26年度）

- ・**世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指すものであり、意義・必要性は改めて認められる。**
- ・開発の意義、有効性を一般国民も実感できるよう、**アウトカムを更に具体化、明確化**すべき。

##### 基本設計評価結果の確認（平成27年度）

- ・開発目標の達成に向け、**基本設計の内容は概ね妥当**なものと認められる。
- ・**計算科学の研究基盤**となることを毅然と示すべき。
- ・**電力性能の向上**が主要開発課題であることを明確に示すべき。
- ・**アウトカムの更なる具体化・明確化**を図るべき。
- ・**総合力を国際的に比較検証する方法**を検討すべき。
- ・産業界との更なる協働など、**利活用の促進**を検討すべき。

基本設計評価の確認後に、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の世界的な遅延により、ポスト「京」においては開発スケジュールが12か月から24か月遅延したものの、目標性能及び経費等の観点から確認を行い、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であると評価されている。

計算科学におけるポスト「京」の位置付けのみならず、人工知能等のデータ科学への対応は適切か。  
【前回指摘事項】

全ての人とモノがつながり、今までにない新たな価値を生み出す超スマート社会の実現を目指すSociety5.0において、シミュレーションによる社会的課題の解決や人工知能（AI）開発及び情報の流通・処理に関する技術開発を加速するためには、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠である。

- ・第5期科学技術基本計画（平成28年度～平成32年度）の柱である「超スマート社会」（Society5.0）を世界に先駆けて実現するためには、新たな価値創造の基盤としてのスーパーコンピュータが必要不可欠  
（文部科学省 中間評価）

・（1）データ駆動型社会の共通インフラの整備

研究生産性の向上

産学官連携を支え、生産性の飛躍的向上の基盤となる  
高速電子計算機施設等の先端的な研究施設・設備の  
整備・共用やポスト「京」の開発を進める

（未来投資戦略2018（平成30年6月15日閣議決定））

< 超スマート社会における人々の生活 >



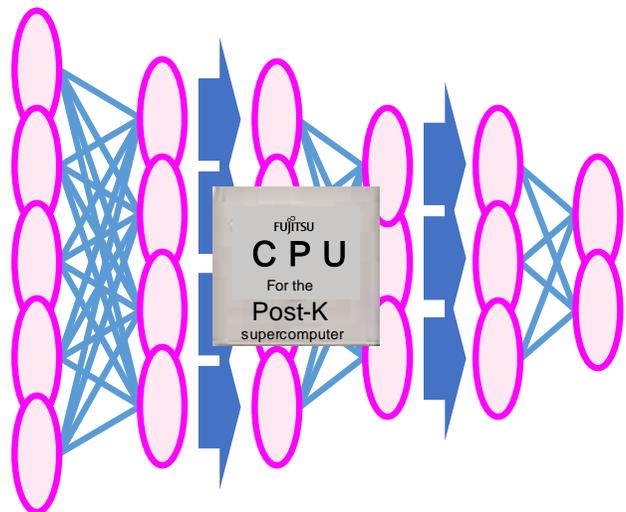
（出典：JST/CRDS 曾根純一上席フェロー講演資料）

計算科学におけるポスト「京」の位置付けのみならず、人工知能等のデータ科学への対応は適切か。  
【前回指摘事項】

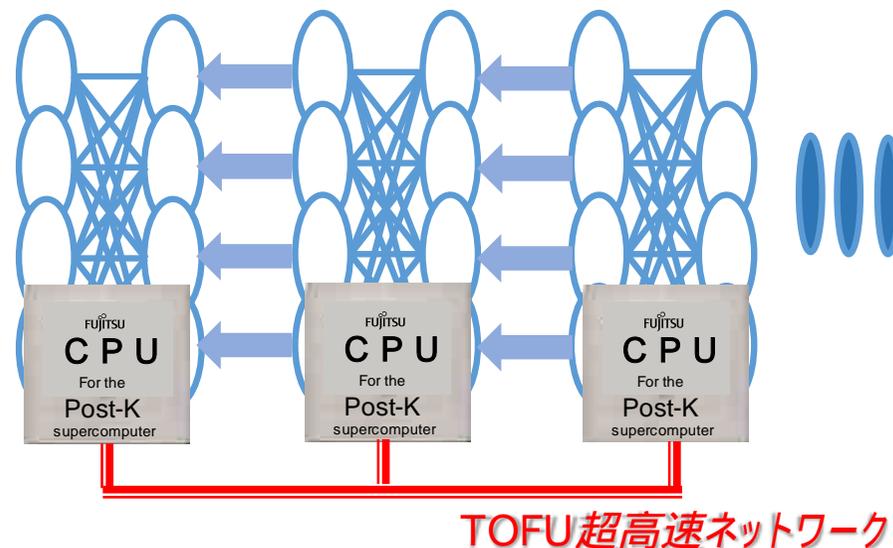
半精度浮動小数点演算の導入による演算性能の向上のほか、高いメモリバンド幅や汎用高性能ネットワークの実現により、AI・ビッグデータなどの分野に対応したハードウェア基盤を提供しているとともにArmエコシステム構築により豊富なソフトウェアの充実を図る。

【AI分野におけるポスト「京」の優位性】

深層学習におけるチップ単位の高い畳み込み演算性能  
(FP16+INT8と高速メモリ)



高いネットワーク通信性能による深層学習のスケールアウト  
(超並列化 : Data+Model Parallelism)



ポスト「京」の電力性能等の向上に向けた取組は適切か。

【前回指摘事項】

アプリケーションの実行速度や消費電力の最適化を可能とするエコモード等の複数のモードの導入や、アプリケーションの特性に応じた消費電力のコントロールを可能とするパワーノブAPI の導入等、運用における電力削減に向けた取組を実施している。

API : Application Programming Interface

性能を重視しつつ最先端の省電力設計により、CPUとして世界最高水準の電力性能効率を達成し、全体では開発目標である30～40MW以下の消費電力を達成する見込み。

#### 【消費電力の低減の取組】

・エコモード：利用する演算回路を半分にすることによって、底上げ電力を半分に低減するモード。

メモリバンド幅が律速するアプリケーション開発において、大きな電力削減効果。

・リテンションモード：ジョブを割り当てられていないノードをアイドル状態ではなく、節電状態にすることにより、消費電力を約半分に削減するモード。

ノードが使われない時の電力を大幅に削減。

・パワーノブAPI：プログラム及びジョブスケーラから、プログラムの特性に応じた電力制御を可能とし、運用時の電力効率を向上。

### 3 . 中間評価以降の成果予定と目標の達成見込み

ポスト「京」が世界の他のシステムに対し総合力で卓抜するものであることが示されているか。

【前回指摘事項】

世界の他の汎用的なシステムと比較して、消費電力当たりの性能が世界最高水準であることが見込まれる。

計算能力を左右する要素であるCPUの演算性能やメモリバンド幅、ノード間通信性能について、汎用的なシステムとしてはそれぞれ世界最高水準であることが見込まれる。

#### 【最新のチップ等との比較】

	ピーク性能 (倍精度浮動小数点演算)	メモリバンド幅 (STREAM triadベンチマーク)	Linpack効率	電力性能	ネットワーク性能 (Interconnect)
ポスト「京」 / A64fx	2.7 TFlops以上	840 GB/sec	85 %以上	約15 GFlops/Watt	40.8GB/sec
Oakforest-PACS / Xeon Phi KNL	3.0464 TFlops	490 GB/sec	54.4 %	4.986 GFlops/Watt	12.5 GB/sec <sup>3</sup>
Niagara / Xeon Skylake <sup>1</sup>	1.536 Tflops	104.5 GB/sec	66.7 %	4.546 GFlops/Watt	6.3 GB/sec <sup>3</sup>
Summit / GPU Volta GV100 <sup>2</sup>	7.8 Tflops	855 GB/sec	65.2 %	13.889 GFlops/Watt	4.2 GB/sec <sup>3</sup>
DGX-1 SaturnV Volta / GPU Tesla V100 <sup>2</sup>	7.8 Tflops	855 GB/sec	58.8 %	15.113 GFlops/Watt	6.3 GB/sec <sup>3</sup>

1 Skylake ( Xeon Gold 6148 20C 2.4GHz ) の 1 CPUあたりの性能は2ソケット版性能公開情報に基づき、1ソケット性能を計算。

2 NVLINK接続におけるGPU 1ソケットのピーク性能。メモリバンド幅はGPU 1ソケットあたりの性能。

3 ネットワークコントローラをチップに内蔵しておらず、100Gbps ( 12.5GB/sec ) の外付けInfiniband等を有する。

Niagaraの場合CPUが2ソケットに100Gbps Infinibandを1つ搭載、Summitの場合GPUが6ソケットに100Gbps Infinibandを2つ搭載、

DGX-1 SaturnV Voltaの場合GPUが8ソケットに100Gbps Infinibandを4つ搭載、それぞれのネットワーク性能はソケット当たりの値を計算 ( 小数点第2位四捨五入 ) 。

### 3 . 中間評価以降の成果予定と目標の達成見込み

ユーザの利便性・使い勝手の良さについては、企業などでも使われている一般のソフトウェアを容易に利用でき、また、Armエコシステム構築により豊富なソフトウェアが利用できるようになる。

#### 【ユーザの利便性・使い勝手についての調査】

- ・ ユーザの利便性・使い勝手について、ハイペリオンリサーチ社 に2020～2021年頃に設置が見込まれる世界の他のシステムとの比較調査を委託。

ハイペリオンリサーチ社：米国のIT専門調査会社。顧客にはIBM、Intel、Arm、富士通などのベンダや米国エネルギー省など。

<https://hyperionresearch.com/>

#### 【結果概要】

- ・ ポスト「京」は、システムとアプリケーションの協調開発（Co-design）により、既存ソフトウェアの移植や新しいソフトウェアの開発を支援するエコシステム幅広い分野のアプリケーションに対し高い性能と信頼性を発揮するアーキテクチャであることから、ユーザの利便性・使い勝手について高い評価。
- ・ アメリカは、既存ソフトウェアの移植や新しいソフトウェアの開発に対して投資をしており、ユーザの利便性・使い勝手について高い評価。  
しかしながら、2021年に導入予定のA21は、チャレンジングな最新技術によるチップを採用する予定であり、ユーザの利便性・使い勝手についての評価は低い。
- ・ ヨーロッパは、市販システムの導入を進めるとともに、プロトタイプシステムの研究開発を進めている。市販システムについてはユーザの利便性・使い勝手についての評価は高いが、プロトタイプシステムについては22か国が参加する研究開発について幅広いユーザやアプリケーションに対する要求を調整するのは困難であり、ユーザの利便性・使い勝手についての評価は低い。
- ・ 中国は、世代ごと、システムごとに独立して開発されており、共通のエコシステムが形成されていないため、ユーザの利便性・使い勝手についての評価は低い。

# 3 . 中間評価以降の成果予定と目標の達成見込み

## 【調査結果】

	国	導入時期	プロセッサ	性能/開発目標 <sup>2</sup>	使い勝手 向上のための 新機能 <sup>5</sup>	新規コード 開発の 容易性 <sup>5</sup>	既存コードの 移植性 <sup>5</sup>
ポスト「京」	日本	2020年	富士通 A64FX ( Armv8-A+SVE )	最大で「京」の100倍の アプリケーション実効性能	5/5	5/5	5/5
Summit	米国	2018年 第2四半期	IBM POWER9、 NVIDIA Volta/Tesla	アプリケーション <sup>3</sup> でTitan ( 27.1PF ) の 4倍の実効性能と6倍のスループット	5/5	4/5	4/5
Sierra	米国	2018年 第2四半期	IBM POWER9、 NVIDIA Tesla V100	アプリケーション <sup>3</sup> でSequoia ( 20.1PF ) の 4倍の実効性能と6倍のスループット	5/5	4/5	5/5
NERSC-9	米国	2020年 第4四半期	Intel Xeon Phi系列の 可能性	ミニアプリケーション群 <sup>4</sup> の実効性能結果に 基づく指標 <sup>5</sup> において	5/4	4/4	4/4
Crossroads	米国	2020年 第4四半期	Intel Xeon Phi系列の 可能性	Edison ( 2.6PF ) の20倍、 NERSC-8 ( 27.9PF ) の4倍	5/5	4/5	5/5
A21	米国	2021年	Intel Cascade Lake-AP 後継の可能性	1エクサ以上の能力、50,000ノード以上、 5 PB主記憶、高いメモリバンド幅	2/4	2/4	3/4
EU Pre-Exascale #1	独	2021 ~ 2022年	EPI Arm CPU Gen1、 EPI Risc-V Accelerator Chip	EPIによるArm CPU設計をベースにした プロトタイプシステムの実現	2/2	2/3	2/3
EU Pre-Exascale #2	仏	2021 ~ 2022年	製品ベース	既存および計画されたアプリケーション実行に 合致する調達ベースの仕様になる可能性	4/4	4/4	5/4
Sunway 2020	中国	2020年 第4四半期 <sup>1</sup>	国産	LINPACK効率60%以上、1PBメモリ、 30GF/W電力性能	2/1	2/2	3/2
Sugon Exascale	中国	2020年 第4四半期 <sup>1</sup>	プロトタイプはHygon製x86 ( AMDからのライセンス )		2/1	2/1	2/1
NUDT 2020	中国	2020年 第4四半期 <sup>1</sup>	国産		2/2	2/3	2/3

1 1 1.5年の遅延する可能性

2 演算性能はPEAK性能 ( 小数点以下2位を四捨五入 )

3 実効性能評価プログラム : LSMS、QBO、HACC、Nekbone等、スループット評価プログラム : miniFE、SANP、QMCPack 等

4 SNAP、PENANT、HPCG、MiniPIC、UMT、MILC、MiniDFT、GTC、Meraculous

5 SSP : sustained system performance

6 X/Y : Xの値はシステム開発者が想定するユーザおよびアプリケーションに対する評価であり、Yの値は設置されるスパコンセンターのユーザおよびアプリケーションに対する評価。評価基準については次頁に記載

# 3 . 中間評価以降の成果予定と目標の達成見込み

## ユーザの利便性・使い勝手の良さの評価基準

- 1 . 非常に使いにくい : 既存のアプリケーションを根本的に再設計し書き直す必要がある新規アーキテクチャやCPUなど、未成熟なテクノロジーを採用しているシステムであり、新しい若しくは未成熟なプログラミング言語やソフトウェアツールの使用方法をユーザが習得しなければならないシステム。
- 2 . 使いにくい : 異なる種類のプロセッサの組み合わせに新規アーキテクチャやCPUなど、未成熟なテクノロジーを採用しているシステム。  
システムの一部だけにおいて、実績のある標準的なプログラミング環境やその他の標準的なソフトウェアツールが活用されている。
- 3 . やや使いにくい : 異なる種類のプロセッサの組み合わせに発展的なテクノロジーを採用しているシステム。  
システムの一部だけにおいて、実績のある標準的なプログラミング環境やその他の標準的なソフトウェアツールが活用されている。
- 4 . 使いやすい : 異なる種類のプロセッサの組み合わせに発展的なテクノロジーを採用しているシステム。  
システム全体において、実績のある標準的なプログラミング環境やその他の標準的なソフトウェアツールが活用されている。
- 5 . 非常に使いやすい : 発展的なテクノロジーを採用してあるシステム。長年にわたりCPUが使用されており、その全てにおいて、標準のプログラミング環境やその他の標準的なソフトウェアツールが活用されている。

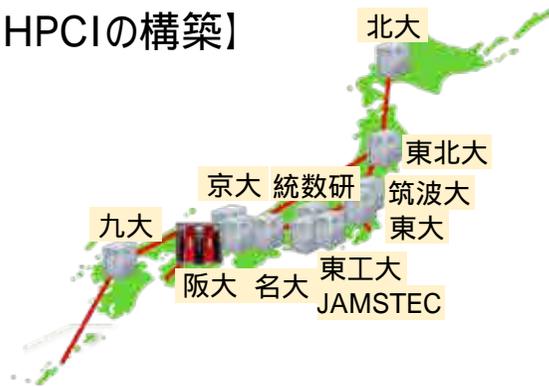
### 3 . 中間評価以降の成果予定と目標の達成見込み

「京」及び大学等に設置された既存システムのユーザをはじめ、産業界も含めたポスト「京」のユーザの利便性向上への対応は適切か。  
【前回指摘事項】

我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、「京」・ポスト「京」を中核として国内の大学等のスパコンを高速ネットワークでつなぎ、産業界も含めた多様な利用者のニーズに応える計算環境（HPCI）を構築し、その利用を促進している。

ポスト「京」の仕様等に関する説明会を開催し、Co-designの成果に基づくチューニングマニュアル等の整備・公開を進めるとともに、チューニング環境の提供を実施するなど、ユーザの利便性向上の取組を継続している。

#### 【HPCIの構築】



#### フラッグシップシステム



#### フラッグシップに次ぐ 特徴あるスパコン（11機関）

HPCIを通じて、我が国の  
計算科学技術インフラ  
として運用

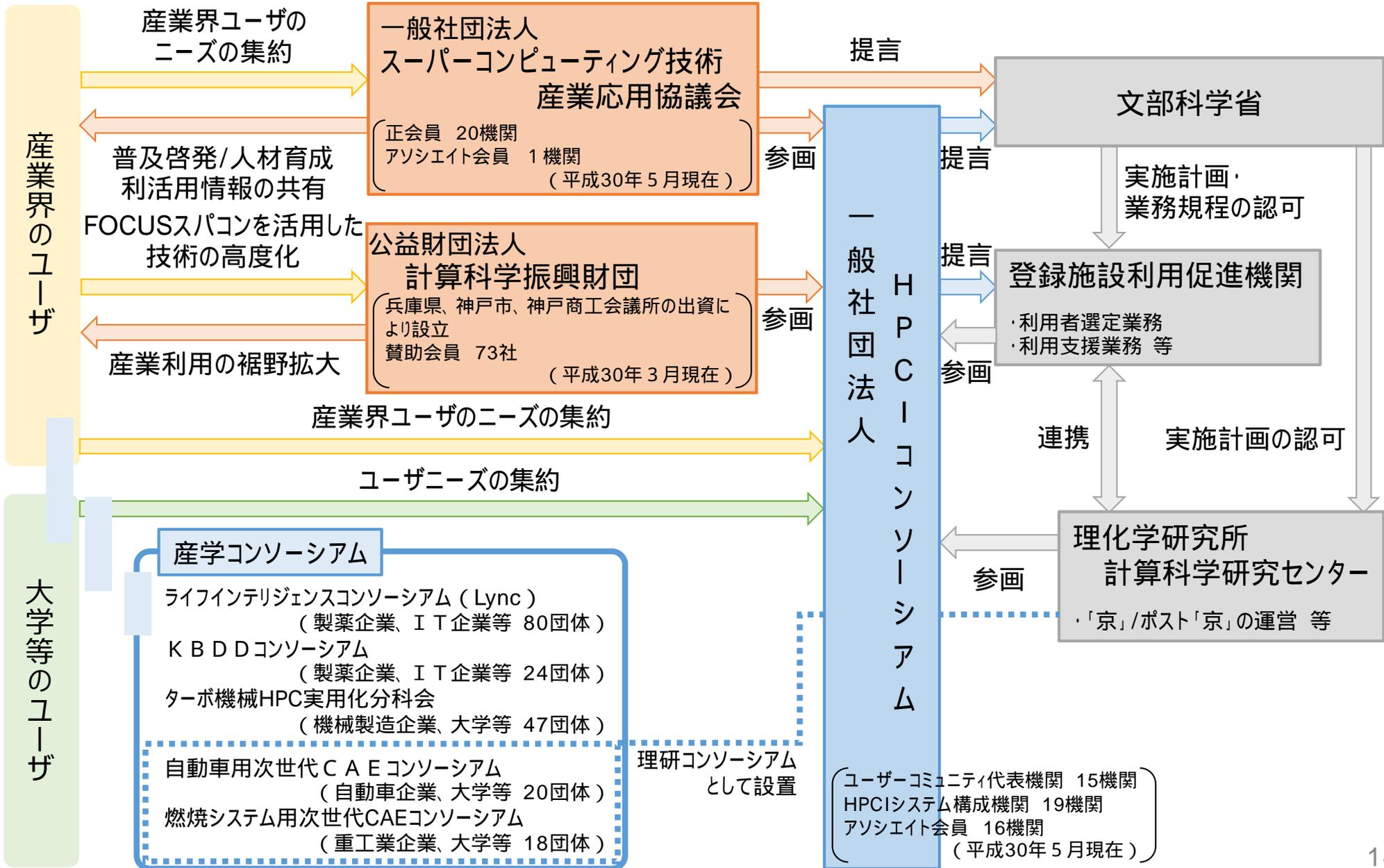
#### 【ユーザの利便性向上の取組】

- ・ポスト「京」の仕様等に関する説明会を開催（平成30年1月）し、さらに2回程度の開催を予定。
- ・アプリケーション開発者が、最適化の検討等を行えるようにするため、平成30年9月よりアプリケーション性能評価環境を一般のユーザに提供。
- ・Co-designの成果に基づくチューニングマニュアルを整備し、公開予定。

#### 【移行に関する説明会（第1回）】



# 3 . 中間評価以降の成果予定と目標の達成見込み



## 4 . 今後の波及効果の見込み

知的財産の適切な運営に加え、ソフトウェアの民間への移転促進方策やシステムソフトウェアの普及を意識した取組は検討されているか。 【前回指摘事項】

システム開発に係る知的財産権はオープン＆クローズ戦略により、成果について理研 / 開発担当企業において幅広い展開・活用を検討している。

### 【システム開発に係る知的財産の取扱い】

- ・ポスト「京」のプロジェクト成果を**幅広く展開**するために、
  - モバイル機器では国内外で幅広く普及しているArmのアーキテクチャを採用。
  - Linuxを含めたArm向けソフトウェアのエコシステム構築を推進する非営利団体であるLinaroと連携。
- ・一方、理研/開発担当企業における**付加価値を創造**するために、
  - CPUの性能を左右する内部構造については、開発担当企業が独自開発。
  - ハードウェアの性能を引き出すための制御機能、大規模システムを安定運用するためのエラー訂正機能、セキュリティ機能については、開発担当企業が独自開発。

アプリケーション開発に係る知的財産権は、分野の特性に応じて、実施機関によるアプリケーションの成果の展開を実施している。

### 【アプリケーション開発に係る知的財産の取扱い】

- ・アプリケーションを展開する上で、分野の特性に応じた対応が必要。
  - **世間に広く展開し、幅広く利用することが望ましい**基礎的な研究分野。  
(例) ソースコードの配布による自由な競争 (複雑な物理現象の第一原理計算による詳細な予測・解明 等)
  - アプリケーションの利用に**一定の制限を設け、知的財産を保護することが望ましい**産業応用が期待される分野。  
(例) 知的財産を共有可能な限定されたグループのみに公開 (製品コンセプトを評価し最適化する革新的設計手法 等)

## 4 . 今後の波及効果の見込み

ポスト「京」で得られた成果を展開するための取組がなされているか。

【前回指摘事項】

Armアーキテクチャの採用、Linuxディストリビューションを含むオープンソースの活用及びOpen HPCやArm HPCユーザコミュニティとの連携によりArmエコシステムの構築を目指し、多様なアプリケーションユーザの利用を促進している。

- ・Linuxを含めたArm向けソフトウェアのエコシステム構築を推進する非営利団体であるLinaro等との連携や、ワークショップを通じた情報の発信を推進。

2017年	7月	Linaro汐留ワークショップ「ARM IoT クラウド&セキュリティ」
	9月	Going ARM workshop
	9月	Linaro Connect San Francisco 2017 - OpenHPCのArmサポート・機能強化計画の決定に理研・開発担当企業が協力
	11月	SC17 BoF Arm user Experience
	12月	Arm HPC Workshop in Japan (RIKEN AICS and Linaro)
2018年	3月	Linaro Connect Hong Kong 2018 -Linaro CEOがキーノートにおいて、Arm HPCエコシステムに向けた開発担当企業の取組を高く評価。 - OSSコンパイラでのSVEサポート・最適化機能強化への協力を開発担当企業が表明。
	6月	ISC18 GoingArm for HPC Workshop
	8月	Arm Partner meeting
	9月	Arm Research meeting
	10月	Arm TechCon Linaro Connect : Linaroメンバ企業が参加する総会

- ・開発担当企業により、技術開発成果を学会・関連コミュニティにて、これまで約30件発表し、関連分野における技術進歩へ貢献。

- ・Cavium Armプロセッサを用いた複数機関による調査において、現在、Intel Xeonで動作しているソフトウェアは、容易にArmで動作し、性能的にも遜色はないという結果が出ている。

# 4 . 今後の波及効果の見込み

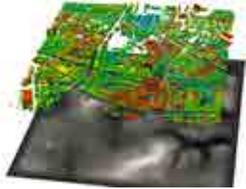
ポスト「京」で得られた成果を展開するための取組がなされているか。

【前回指摘事項】

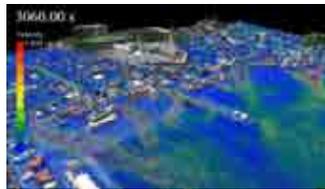
さらに、今後、ポスト「京」共用開始後の戦略的な利活用を推進するため、文部科学省において外部有識者による検討を開始する予定である。

## ポスト「京」成果創出フェーズ

- ・地震と津波が引き起こす複合災害、またその災害によって引き起こされる建築物の被害、さらにその被害によって生じる人々の避難、交通障害、経済活動復旧を都市全体でシミュレーションすることで、より合理的な防災計画の立案に貢献。
- ・具体的には、ポスト「京」を用いて、複数の地震シナリオを想定した地震と津波等の複合災害の「都市丸ごと」シミュレーションを実施するとともに、群衆避難・交通障害等の被害対応の予測を実施。



地盤の揺れと建物の被害



津波の侵入



建物被害が引き起こす交通障害

これらを一体的に都市全体でシミュレーション



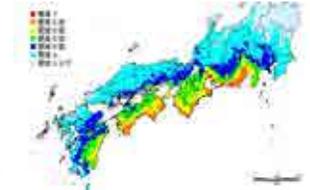
観測調査で収集されるデータを随時反映



## 成果創出の担い手

### 内閣府防災

- ・最先端の知見に基づくシミュレーション結果等を踏まえ、被害想定を作成。



### 民間コンサル等

- ・最新の地震モデル等を活用して地震動予測を計算し、耐震設計手法や各種リスク評価に活用。

### 国・地方自治体の 防災担当部局

- ・各種防災計画等に反映。



### 民間企業

- ・事業継続計画（BCP）等に反映。
- ・耐震設計等に反映。

## 5 . 研究開発マネジメントの妥当性

### ( 1 ) 技術の進展や社会情勢の変化を踏まえたPDCAプロセス

研究開発の進捗や社会の情勢にあわせて、研究開発計画の評価・見直しを行っているか（PDCAの運用実態）。

開発主体である理化学研究所外部有識者によりレビューを受けるとともに、文部科学省及び総合科学技術・イノベーション会議においても外部有識者により累次の評価を行っており、委員会の指摘事項が開発主体にフィードバックされる等、PDCAサイクルが適切に機能している。

### ( 2 ) 関連する政策・施策等へのフィードバック

他の研究開発課題との連携について、文部科学省の政策面のフィードバックとしての検討が行われているか。

科学技術基本計画（平成28年1月22日閣議決定）に位置付けられたSociety5.0において、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要であるとされるとともに、未来投資戦略2018（平成30年6月15日閣議決定）のほか、統合イノベーション戦略（平成30年6月15日閣議決定）や健康・医療戦略（平成26年7月22日閣議決定、平成29年2月17日一部変更）などの政府の重要戦略にも位置付けられている。

文部科学省の情報科学技術委員会において、情報分野全体におけるポスト「京」の意義等を検討しているとともに、健康長寿や防災・減災、エネルギー、ものづくり等、情報分野以外の分野との連携についても、文部科学省において外部有識者による検討を行う予定である。

1 . 調査検討事項について・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1

2 . 文部科学省における中間評価・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 19

# 文部科学省における中間評価 概要

## 開発目標

- ・ 最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
- ・ 消費電力 30～40MW（「京」は12.7MW）



☆ 中間評価  
○ コスト・性能評価

## 評価結果

【アプリケーション開発に係る中間評価】（平成29年8月 HPCI計画推進委員会 ポスト「京」重点課題推進課題WG、平成29年12月 HPCI計画推進委員会）

必要性、有効性、効率性の観点から評価を実施し、目標の達成状況及び運営方法は適切であり、科学的成果の創出が期待されることから、**おおむね妥当**と評価された。

【システム開発に係るコスト・性能評価】（平成29年10月 HPCI計画推進委員会 ポスト「京」に係るシステム検討WG、平成29年12月 HPCI計画推進委員会）

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の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、**おおむね妥当**であると判断された。

【システム開発に係る中間評価】（平成30年6月 HPCI計画推進委員会）

必要性、有効性、効率性の観点から評価を実施し、**開発目標について達成の見通し**が得られており、システムの設計結果に基づき**ポスト「京」の製造・設置を着実に推進することが妥当**であると判断された。

# 文部科学省における中間評価 評価体制

## HPCI計画推進委員会（平成30年6月現在）

伊藤 公平 慶應義塾大学理工学部長  
 伊藤 宏幸 ダイキン工業株式会社テクノロジー・イノベーションセンター リサーチ・コーディネーター  
 梅谷 浩之 トヨタ自動車株式会社IT革新推進室CAEG グループ長  
 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  
 大石 進一 早稲田大学理工学術院 教授  
 小柳 義夫 東京大学 名誉教授  
 高度情報科学技術研究機構神戸センターサイエンスアドバイザ  
 喜連川 優 情報・システム研究機構国立情報学研究所 所長  
 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

土井 美和子 情報通信研究機構 監事  
 奈良先端科学技術大学院大学 理事  
 中川 八穂子 株式会社日立製作所研究開発グループ  
 デジタルテクノロジーイノベーションセンタ シニアプロジェクトマネージャ  
 中村 宏 東京大学大学院情報理工学研究所 教授  
 西尾 章治郎 大阪大学 総長  
 藤井 孝藏 東京理科大学工学部 教授  
 安浦 寛人 九州大学 理事・副学長

13名 : 主査、 : 主査代理（50音順、敬称略、肩書は当時）

## ポスト「京」に係るシステム検討WG（平成30年6月現在）

天野 英晴 慶應義塾大学理工学部 教授  
 石田 純一 気象庁予報部数値予報課 数値予報モデル開発推進官  
 梅谷 浩之 トヨタ自動車株式会社IT革新推進室CAEG グループ長  
 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 東京大学 名誉教授  
 高度情報科学技術研究機構神戸センターサイエンスアドバイザ  
 加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授  
 金山 敏彦 産業技術総合研究所 特別顧問  
 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  
 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  
 吉本 雅彦 神戸大学 名誉教授

11名 : 主査、 : 主査代理（50音順、敬称略、肩書は当時）

## ポスト「京」重点課題推進WG（平成29年8月現在）

相原 博昭 東京大学大学院理学系研究科 教授  
 安達 泰治 京都大学ウイルス・再生医科学研究所 教授  
 伊藤 公平 慶應義塾大学理工学部長  
 宇川 彰 理化学研究所計算科学研究機構 副機構長  
 大石 進一 早稲田大学基幹理工学部 教授  
 小柳 義夫 神戸大学計算科学教育センター 特命教授  
 河合 理文 株式会社IHI技術開発本部 技師長  
 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会会員  
 栗原 和枝 東北大学未来科学技術共同研究センター 教授  
 白井 宏樹 アステラス製薬株式会社バイオサイエンス研究所専任理事  
 住 明正 東京大学サステナビリティ学連携研究機構 特任教授  
 福和 伸夫 名古屋大学減災連携研究センター長・教授  
 松岡 聡 東京工業大学学術国際情報センター 教授

12名 : 主査、 : 主査代理（50音順、敬称略、肩書は当時）

# システム開発に係る中間評価

## 必要性

評価項目： 国費を用いた研究開発としての意義  
(国や社会のニーズへの適合性、国の関与の必要性・緊急性)  
評価基準： ポスト「京」により、独創性、優位性の高い成果が期待できるか。

「超スマート社会」(Society5.0)を世界に先駆けて実現するためには、**新たな価値創造の基盤としてのスーパーコンピュータが不可欠**

Co-designにより、**最大で「京」の約100倍のアプリケーション実効性能及び30～40MW以下の消費電力を達成する見込み**

最先端の研究開発基盤としてユーザに利用され、画期的な成果が創出されるよう、**ユーザの利便性の向上及びユーザへの情報公開等の取組**を実施

- ・ユーザコミュニティで広く利用されているLinuxディストリビューションの採用、コンパイラによる自動並列化機能、高並列なプログラミングを容易にするための並列プログラミング言語、DSL (Domain Specific Language)、オープンソース・アプリケーション等を提供予定
- ・Co-designの成果に基づくチューニングマニュアルを整備し、公開予定
- ・アプリケーション開発者が性能改善度の評価や最適化の検討を行えるようにするため、アプリケーション性能評価環境を提供
- ・平成30年1月にポスト「京」の仕様等に関する説明会を開催し、平成30年度も2回程度の開催を予定

内閣府(防災担当)による南海トラフの巨大地震による被害予測の高度化等に「京」が活用されており、ポスト「京」についても**政府の重要政策等へのさらなる貢献**が期待

**研究開発基盤としてのスーパーコンピュータの必要性は変わらず**、将来的には、量子コンピュータ等の新たな種類のコンピュータとポスト「京」をはじめとするスーパーコンピュータによるシミュレーションとが相互に補完することで、課題解決に貢献することが期待

# システム開発に係る中間評価

## 有効性

評価項目：新しい知の創出への貢献、研究開発の質の向上への貢献

評価基準：世界を先導する成果の創出が期待できるか

CPUアーキテクチャ等の設計者とアプリケーションソフトウェアの開発者などが共同・協調して最適化を行うCo-designの取組を導入し、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、性能が向上

国際的に広く使われている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ための取組を実施

- ・ポスト「京」のCPUとして、柔軟な高性能ベクトル演算処理が可能なSVE（Scalable Vector Extension；HPC向けの拡張命令セット）搭載のハイエンドArm-CPUを開発し、採用
- ・新たなメモリデバイスの導入とそれに対応するCPU側のメモリ技術の導入

FP16演算（16bit幅Floating Point演算）を導入し、Deep Learning等のAIを含む幅広い応用に適用

# システム開発に係る中間評価

## 効率性

評価項目： 計画・実施体制の妥当性、目標・達成管理の向上方策、費用構造や費用対効果向上方策の妥当性

評価基準： 研究開発プログラムの実施方法、体制、費用対効果向上方策について、見直しが適切かつ効率良く行われているか

- **運用コスト削減のため**、アプリケーションの実行速度及び消費電力の最適化を可能とするエコモード等の複数のモードの導入や、アプリケーションの特性に応じた消費電力のコントロールを可能とするパワーノブAPI（Application Programming Interface）の導入等、**適切な工夫**を実施
- 理化学研究所は、「京」という大規模並列計算機を5年間にわたり年間8,000時間以上安定的に共用に供した実績と知見を、**ポスト「京」の運用に適切に継承し、効率的な運用を実施**する予定

（参考）「京」の運用実績（平成29年度実績）

年間稼働実績 約8,222時間

年間稼働率 約98.0%

- 「京」の立地自治体である兵庫県及び神戸市より、これまで「京」の共用に関する有形無形の支援がなされてきており、ポスト「京」の共用に際して、引き続き、**兵庫県及び神戸市からの支援**がなされる予定
- 開発主体と開発担当企業の間での定期的なレビュー、開発主体としての外部有識者によるレビュー、政府（文部科学省、総合科学技術・イノベーション会議）における外部有識者による累次の評価を行っており、委員会の指摘事項が開発主体にフィードバックされる等、**PDCAサイクルが適切に機能**

# アプリケーション開発に係る中間評価

## ○ 本事業では、

- ・ポスト「京」の特長を生かした超並列・大規模シミュレーション手法の開発が着実に進展
- ・Science、Nature等への論文発表をはじめとする科学的成果の創出  
(論文発表数...H27:205編、H28:476編、H29第1四半期:121編、累計:802編)  
(学会発表数...H27:891件、H28:2,200件、H29第1四半期:324件、累計:3,415件)
- ・マルチスケールシミュレーション、数値計算の精度保証や全脳シミュレーションといった萌芽的かつチャレンジングな分野における進展
- ・異なる研究分野間での人材交流による融合分野創出に向けた取組の進展

等、**当初の想定以上の成果が得られつつある**

産学官で構成されるコンソーシアム等における利活用される等、**本事業の枠組みを超えた取組も精力的になされている**

- ・AI創薬コンソーシアム（製薬企業、IT企業等 80団体）
- ・KBDDコンソーシアム<sup>1</sup>（製薬企業、IT企業等 24団体）
- ・自動車用次世代CAEコンソーシアム（自動車企業、大学等 20団体）
- ・ターボ機械HPC実用化分科会（機械製造企業、大学等 47団体）
- ・「京」の重点化促進枠が内閣府（防災担当）の長周期地震動による被害予測への活用を踏まえ、気象庁と文部科学省との省庁間連携の開始及び気象研究所と国立研究開発法人海洋研究開発機構との研究機関間連携の深化

1 “K” Supercomputer-Based Drug Discovery project by biogrid pharma consortiumの略

2 コンソーシアムは、アプリケーション開発に係る中間評価（平成30年4月）時点

# アプリケーション開発に係る中間評価

## 必要性

評価項目： 国費を用いた研究開発としての意義

( 国や社会のニーズへの適合性、国の関与の必要性・緊急性 )

評価基準： ポスト「京」に向けたアプリケーション開発により、独創性、優位性の高い成果が期待できるか。

健康長寿社会の実現や防災・環境問題、エネルギー問題への対応が喫緊の課題である一方、創薬や地震・津波の再現、新規エネルギー源の探索には、多大なコストがかかるか、若しくは実空間での再現が不可能な現象

ポスト「京」を用いた大規模シミュレーションによって、**創薬や地震・津波の再現、新規エネルギー源の探索において、世界にさきがけた成果が期待**

## 【世界にさきがけた成果が期待される例】

### ○創薬・医療分野

- ・候補物質の探索のみならず副作用の原因も分析する薬剤設計技術
- ・個人の医療計測データを用いたシミュレーション手法の確立とそれに基づく個別化・予防医療

### ○防災・気象分野

- ・都市全体の一次・二次被害のシミュレーションにより、地震・津波災害の影響を統合的に予測するシステムの開発
- ・観測ビッグデータを用いた高解像度・高速での気象予測に基づく、台風からゲリラ豪雨・竜巻等まで異なるスケールでの気象災害をシームレスに予測する技術

### ○エネルギー分野

- ・天然光合成系の原理の解明及び当該原理に基づき人工光合成によりプラスチック原料等の基幹化学品を製造する技術
- ・海洋風況に大きく左右される洋上ウインドファームの発電性能予測及びブレードに作用する応力評価を定量的に行い、洋上ウインドファームの設計指針を得るための解析技術

# アプリケーション開発に係る中間評価

## 有効性

評価項目：新しい知の創出への貢献、研究開発の質の向上への貢献

評価基準：世界を先導する成果の創出が期待できるか。

材料科学やものづくりといった分野について、更なる進展を図るためには、多大な実験コストを要する新規材料組成の最適化や、自動車や航空機の実機による風洞実験・衝突実験等をシミュレーションによって代替し、研究開発の質や生産性を向上させることが有効

基礎科学の分野において、素粒子や宇宙開闢といった、極小・極大の時空間スケールの理論をシミュレーションによって再現し、新しい知の創出へ貢献することが有効

- 近年の計算科学技術を含む情報科学技術の進展を踏まえ、
  - ・マルチスケールシミュレーション
  - ・大規模な計算結果の精度を保証する手法の開発
  - ・コンピュータ上での脳・神経回路モデル構築と人工知能への応用 等、シミュレーション自体の質の向上や融合領域の開拓を図る萌芽的課題について、**世界を先導する成果の創出を期待**

## 【世界にさきがけた成果が期待される例】

- 材料科学分野
  - ・基底状態のみならず、量子効果を考慮し光反応のような励起状態も取扱い可能としたデバイスシミュレーション
  - ・ナノデバイスをコンピュータ上で設計・解析し、特性を把握する等、マテリアルズ・インフォマティクス等を活用した新機能デバイスの先行開発
  - ・リチウム / 水系の安全・安価な新しいリチウムイオン電池の実用化、新規の非白金燃料電池の能力向上等
- ものづくり分野
  - ・車のコンセプトから構造・機能・性能設計に至る主要な設計フェーズのシミュレーションを統合的に実施することにより生産性を引き上げる、新しいものづくりシステムの開発
  - ・数十億～数百億の格子点で接触問題等の大規模解析を可能とする多目的最適化設計プラットフォームの開発
- 基礎科学分野
  - ・ビッグバン直後の超音速ガス流がブラックホールの種を生み出すことを解明
  - ・2つの中性子星が合体する際に多量の物質が放出され、重い元素が合成されることを解明

# アプリケーション開発に係る中間評価

## 効率性

評価項目：計画・実施体制の妥当性、目標・達成管理の向上方策の妥当性

評価基準：研究開発プログラムの実施方法、体制について、見直しが適切かつ効率良く行われているか。

外部有識者により構成される「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会」において、9つの重点課題及び4つの萌芽的課題が設定され、実施機関をそれぞれ公募選定

外部有識者により構成される「H P C I 計画推進委員会 ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ」及び「萌芽的課題サブワーキンググループ」が、進捗状況を把握し、各実施機関に対しきめ細やかに提言・助言

各実施機関においては、これら提言・助言に基づき中間目標、最終目標及び実施計画を策定。また、「諮問委員会」（外部有識者により構成）や「運営委員会」、「課題責任者会合」により、階層的に事業の進捗管理と目標達成状況を確認・評価

- 実施機関においては、産業界を含めた内外への研究成果のフィードバックに積極的に取り組んでおり、**新しい知の創出、研究開発の質の向上への貢献が期待**

## 【外部有識者委員会からの提言・助言等に対する実施機関における対応例】

- ・ 目標を産業界の要望等を踏まえた形に修正
- ・ 研究をフォーカスするために体制の見直しを行い、複数のサブ課題を統合
- ・ 複数サブ課題を集めた基盤グループを設置し、当該グループ内で技術の共通化を試行
- ・ アウトリーチを考慮し、民間のアプリケーションの製作者との共同開発に着手
- ・ 異分野間でのポスドク交流を実施