

総合科学技術会議が実施する
国家的に重要な研究開発の評価

「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

総合科学技術会議

はじめに

研究開発の評価は、研究開発活動の効率化・活性化を図り、優れた成果の獲得や研究者の養成を推進し、社会・経済への還元等を図るとともに、国民に対して説明責任を果たすために、極めて重要な活動である。中でも、大規模な研究開発その他の国家的に重要な研究開発については、国の科学技術政策を総合的かつ計画的に推進する観点から、総合科学技術会議が自ら評価を行うこととされている（内閣府設置法 第26条）。

このため、総合科学技術会議では、新たに実施が予定される国費総額が約300億円以上の研究開発について、あらかじめ評価専門調査会が、必要に応じて専門家・有識者を活用し、府省における評価結果も参考として調査・検討を行い、その結果を受けて評価を行い、その結果を公開するとともに、評価結果を推進体制の改善や予算配分に反映させることとしている。

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」は、平成18年度予算概算要求において文部科学省が新たに実施することとした研究開発であり、平成18年度予算概算要求額41億円、7年間で国費総額1154億円の大規模新規研究開発である。総合科学技術会議では、評価専門調査会において当該分野の専門家や有識者を交え調査・検討を行い、その結果を踏まえて評価を行った。

本報告書は、この評価結果をとりまとめたものである。総合科学技術会議は、本評価結果を関係大臣に意見具申し、推進体制の改善や予算配分への反映を求めるとともに、評価専門調査会においてその実施状況をフォローすることとする。

審議経過

- 9月16日 評価専門調査会
評価対象、担当議員・委員、進め方を確認
- 9月20日 第1回評価検討会
ヒアリング、追加質問と論点候補の抽出
⇒追加質問を回収し文部科学省へ対応を要請
- 10月11日 第2回評価検討会
追加ヒアリング、論点整理
⇒評価コメントを回収し評価原案を作成
- 11月 4日 評価専門調査会
評価案の検討
- 11月28日 総合科学技術会議
評価案に基づく審議・結論

評価専門調査会 名簿

会長	柘植 綾夫	総合科学技術会議議員
	阿部 博之	同
	薬師寺 泰蔵	同
	岸本 忠三	同
	黒田 玲子	同
	松本 和子	同
	吉野 浩行	同
	黒川 清	同
(専門委員)		
	伊澤 達夫	NTTエレクトロニクス株式会社 取締役相談役
	大石 道夫	財団法人かずさDNA研究所長
	大見 忠弘	東北大学未来科学技術共同研究センター 客員教授
	垣添 忠生	国立がんセンター総長
	笠見 昭信	株式会社東芝常任顧問
	川合 眞紀	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授
	北里 一郎	明治製菓株式会社取締役会長
	小舘香椎子	日本女子大学理学部教授
	小林 麻理	早稲田大学政治経済学術院教授
	土居 範久	中央大学理工学部教授
	中西 準子	独立行政法人産業技術総合研究所化学物質 リスク管理研究センター長
	中西 友子	東京大学大学院農学生命科学研究科教授
	西尾 道德	元筑波大学農林工学系教授
	原山 優子	東北大学大学院工学研究科教授
	平澤 冷	東京大学名誉教授
	平野 眞一	名古屋大学総長
	畚野 信義	株式会社国際電気通信基礎技術研究所社長
	虫明 功臣	福島大学理工学群教授

評価検討会 名簿

	柘植	綾夫	総合科学技術会議議員
	伊澤	達夫	評価専門調査会専門委員
	笠見	昭信	評価専門調査会専門委員
	小林	麻理	評価専門調査会専門委員
座長	土居	範久	評価専門調査会専門委員
	虫明	功臣	評価専門調査会専門委員
	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	吉和	トヨタ自動車株式会社常務役員
	岩崎	洋一	筑波大学長
	小柳	義夫	東京大学大学院情報理工学系研究科教授
	北浦	和夫	産業技術総合研究所計算科学研究部門 総括研究員

1. 評価の実施方法

(1) 評価対象

『最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用』

【文部科学省】

○平成18年度予算概算要求額：41億円

○全体計画：7年間・国費総額1154億円

民間資金持出額：約100億円（ただし、平成19年度までの予定額）

(2) 評価目的

国の科学技術政策を総合的かつ計画的に推進する観点から、新たに開始が予定されている最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用の評価を行う。

評価においては、当該研究開発の必要性、効率性、有効性という視点のみならず、スーパーコンピューティング分野全体の中における評価対象案件の意義、当該研究分野における他の研究開発との関係等も視野に入れ、高い次元から検討する。

(3) 評価者の選任

評価専門調査会において、有識者議員、専門委員数名が中心になり、さらに外部より当該分野の専門家、有識者の参加を得て、評価検討会を設置した。

当該分野の専門家、有識者の選任においては、評価専門調査会会長がその任に当たった。

(4) 評価時期

予算概算要求された大規模新規研究開発を対象とする評価であり、その結果を推進体制の改善や予算配分に反映させる必要があるため、予算概算要求提出後、9月より調査・検討を開始し、年内に評価結論を得ることとした。

(5) 評価方法

① 過程

- 第1回評価検討会において、当該研究開発の担当課長ほかから研究開発概要のヒアリング[参考1]を行い、②の調査・検討項目を念頭に問題点や論点候補について議論した。これを踏まえ、評価検討会委員から追加質問を回収し、文部科学省へ対応を要請[補足1]した。
- 第2回評価検討会において、質問事項についての追加ヒアリング[参考2]を行い、本研究開発における評価の論点(案)[補足2]を参考にして、問題点や論点に対する考え方を議論した。
- 評価検討会委員から、第1回、第2回評価検討会での調査・検討内容を踏まえた評価コメントを回収[補足3]した。また、文部科学省から後日提出された資料[参考3]を評価検討会委員に配布した。
- 回収した評価コメントと評価検討会における調査・検討内容に基づき評価原案を作成した。
- 評価専門調査会において、評価原案を基に評価案を検討し、総合科学技術会議本会議において、審議を行い結論を得た。

② 項目

評価検討会では下記項目について調査・検討した。

- A. 科学技術上の意義
当該研究開発の科学技術上の目的・意義・効果。
- B. 社会・経済上の意義
当該研究開発の社会・経済上の目的・意義・効果。
- C. 国際関係上の意義
国際社会における貢献・役割分担、外交政策との整合性、及び国益上の意義・効果。
- D. 計画の妥当性
目標・期間・資金・体制・人材や安全・環境・文化・倫理面等からの妥当性。
- E. 成果（見込み）、運営、達成度等

投入資源に対する成果（見込み）、運営の効率性、及び目標の達成度等。評価結果の反映状況の確認等。（ただし、Eについては、新規研究開発であることから、その内容を考慮。）

③ その他

評価検討会は非公開としたが、資料は原則として検討会終了後に公表し、議事概要は発言者による校正後に発言者名を伏して公表した。

2. 評価結論

(1) 総合評価

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」は、スーパーコンピューティング分野において今後とも我が国が世界をリードし、科学技術や産業の発展を牽引し続けるために、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等の開発・普及、世界最先端・最高性能の汎用京速（京速＝10ペタ FLOPS^{注1)}）計算機システムの開発・整備、及び、これ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行い、研究水準向上と世界をリードする創造的人材の育成を総合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に不可欠である。また、近年、製品サイクルが短縮している中で、スーパーコンピュータの利用は、産業界における製品設計・開発にも大きく寄与するものであり、我が国の国際競争力の向上のためにきわめて重要である。

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）

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）、CPACS（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、開発時点における最高水準の性能を有する計算機として開発され、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（CPACS）、海洋地球科学分野（地球シミュレータ）など、それぞれがターゲットとする分野を中心に、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規模および対象分野は、研究開発の進展とともに絶えず拡大を続けており、現在、流体力学、基礎物理、海洋地球科学など従来のスーパーコンピュータがターゲットとしてきた分野だけでなく、ライフサイエンス、ナノテクノロジーなど、各種の応用分野からスーパーコンピュータの利用分野の拡大と高速化が求められている。例えば、ライフサイエンス分野においては、個人に適した安全な医薬品の適用を検討する上で重要な副作用・安全性の評価や、病因タンパク質の構造解明、新たな未知の疾病等に迅速に対応する新薬の開発を短時日で行うため、膨大な化合物データベースから効率的に薬剤候補を絞り込んでシミュレーションを行う必要があるが、10ペタFLOPS級の計算能力なくしては、実用に耐えうる規模の解析をすることができないため、実際の治療で適時に検討されるべき薬剤の選択や新薬の開発が遅れることが懸念される。また、自動車設計などのものづくり分野における高度なシミュレーションによる試作レス化や津波予測などの防災分野における予測の精緻化等、広範な分野においてブレークスルーを図る上で必要とされる数値計算についても、現時点において我が国最高の性能

注2) ギガ： 10^9 （10億）

注3) テラ： 10^{12} （1兆）

を有する地球シミュレータをもってしても能力不足であり、これらの要求に応えるためには10ペタ FLOPS 級の性能を有し、広範な利用ニーズに対応可能な計算機が必須となっている。

本プロジェクトは、この広範な利用ニーズと計算資源量需要に応えるべく、汎用かつ高性能なフラッグシップ機と位置付けて開発に取り組むものであり、計画の達成により、画期的な新薬の開発や高機能ナノ材料の開発など、活力があり健康で安全な国を実現していくための基盤を築くことができるものと期待される。

また、科学技術分野における数値計算の需要及び規模の増大に対応するため、本プロジェクトにおいて開発を目指すスーパーコンピュータは、トップエンドの汎用・大規模計算機として位置付けて、地球シミュレータ等既存のスーパーコンピュータでは対応が困難な大規模・高速計算を受け持つこととしている。他方、既存のスーパーコンピュータは、本プロジェクトで開発する計算機システムの完成後も、例えば地球シミュレータについては、これまでに蓄積してきたアプリケーションソフトウェアを活用して効果的・効率的に海洋地球科学分野を主とした計算を担当するなど、それぞれが得意とする各分野を中心として、目的や性能に応じた計算に対応するとの役割分担の下に、今後も増大が予想される我が国の計算機需要に応えることとしている。

さらに、これまでに取り組まれてきた地球シミュレータ等の開発に伴う技術革新が、我が国におけるスーパーコンピューティング環境の充実に貢献してきたように、本プロジェクトにおいて開発される京速コンピュータについても、その開発成果は、スーパーコンピューティング環境の更なる充実と、その波及効果として全国の大学や研究機関等における様々な分野の研究開発成果の創出に大いに寄与するものと期待される。

以上のことから、本プロジェクトは実施することが適当

である。なお、投資規模に見合った成果を着実に上げ、国民に還元していくために、以下の指摘事項に適切に対応していくことが必要である。

(2) 指摘事項

① ターゲットを明確にした開発の推進について

10ペタ FLOPS の計算性能を目標とした汎用の計算機を開発することは、スーパーコンピュータの広範な研究分野での利用や産業応用の拡大に向け重要であるが、単に汎用性に着目した計算機の開発を狙うのではなく、本プロジェクトにおいては当該計算機を使用して具体的に成果を出すことを目指すアプリケーションを設定し、開発を進めるべきである。

過去、数値風洞、CP-PACS、地球シミュレータでは、それぞれターゲットとするアプリケーションを特化して開発を行ったことにより、特化した分野だけでなくその他の多くのアプリケーションにおいても高い性能を得ることができた。しかしながら、本プロジェクトで提案されているグランドチャレンジとして示されたアプリケーションは、絞込みが必ずしも十分でなく、そこで期待される成果目標や、実現のために計算機システムに要求される機能、性能等、明瞭でない部分がある。したがって、速やかに、具体的なターゲットとなるアプリケーションの設定を行うとともに、そのアプリケーションの開発責任者と基本ソフトウェア及び計算機システムの開発責任者が密接に連携し、定量的かつ挑戦的な目標を定め、開発を進めることが必要である。

計算機システムのハードウェアについては、産業への波及効果を明確に意図し、積極的な新技術開発への取組を行うことが必要である。本プロジェクトの提案では、先行する計算機関連の研究開発プロジェクトの成果を利用することを前提としているが、ターゲットとして定めたアプリケーションを実現するために必要な技術群を整理し、その中

で、先行する研究開発プロジェクトの成果でカバーできない技術については、従来技術での対応だけでなく、積極的に新規の開発に取り組むことが必要である。

② 京速計算機システムの構成の最適化について

提案された計算機システムの構成は現段階ではイメージであるとされており、「大規模処理計算機部」、「逐次処理計算機部」及び「特定処理計算加速部」の構成をとる必要性は、まだ明確になっていない状況である。

例えば、「大規模処理計算機部」を構成するベクトル計算機は、計算性能を上げるために高いメモリバンド幅を要すると考えられるが、その性能が経費的、設備規模的に見合わない可能性があること、スーパーコンピュータサイトTOP500^{注4)}からは、ベクトル計算機の占める割合は、近年、台数減、計算能力のシェア減の傾向にあることが伺えること、さらに、本計算機の目標性能も0.5ペタ FLOPSと低いことから、国家プロジェクトとしてベクトル計算機の開発に本格的に着手する必要性が必ずしも明確とされていない。同様に、「逐次処理計算機部」についても、目標性能は1.0ペタ FLOPSと低いため、国家プロジェクトとして開発に着手する必要性が必ずしも明確ではないという点が挙げられる。また、提案システムの中で「特定処理計算加速部」が計算性能の大部分を担う構成となっているが、この部分は、特定のアプリケーションに対応した処理を高速化することに主眼を置いたものであって、多くのアプリケーションには不向きなものになる可能性がないかという点についても、今後、明確にしていく必要がある。さらに、仮に本プロジェクトの提案のとおり、「大規模処理計算機部」、「逐次処理計算機部」、「特定処理計算加速部」の3部構成をとることとした場合、それらを密に結合する必然性

注4) TOP500：スーパーコンピュータの最速ランキングで、上位500のシステムを選んでいる。1年に2回更新される。同ランキングでは、Linpackというテストで演算装置の性能を計測する。

が必ずしも明確でなく、したがって密な結合を担うこととしている「異機種間接続超高速インターコネクション部」を開発する必要性も明確ではない。

このため、ハードウェア、ソフトウェアの個々の具体的な設計を開始する前に、計算機システムの構成そのものを基本に戻って練り直し、最適化を行っておく必要がある。その際、ターゲットとするアプリケーションとシステム構成との関係を明確にしておくことが重要である。

ソフトウェア開発の面では、アプリケーションソフトウェアが計算機の構成に依存して開発される傾向があるという点から、計算機完成時におけるソフトウェアの世界的な動向に注意を払い、例えば、一般的な計算機との互換性を高める等、多大な開発資源の無駄を生じさせないように考慮することも必要である。

運営コストの面では、年間約80億円の費用を運営主体への運営費交付金や利用課金制度の導入等によりまかなうという計画であるが、経費見積もりを厳格に行うとともに、コスト意識を高め、消費電力や保守費用等の削減を重視したシステム構成を検討することが必要である。

③ 開発投資の効率化について

約1000億円という莫大な予算を投入して行うプロジェクトであることから、効率的な投資を行い、投資額に見合った大きな成果を上げることが必要である。現段階の提案では、ターゲットとなるアプリケーションや取組むべき技術開発等の開発ターゲットが必ずしも明確でなく、京速計算機システムの構成も未確定であるため、フロントローディングを充実しつつ効率的に事業を遂行すべきである。この種の研究開発において当初よりすべてを明確にしておくことは困難であるとしても、速やかに概念設計に取組んで結論を得る必要がある。

また、ソフトウェアの開発に関しては、グリッドミドルウェアの開発に対し重点的に予算配分を計画しているが、

ターゲットとするアプリケーションの実現が重要であり、そのソフトウェアの開発に膨大なマンパワーと時間を要すると考えられるため、新規に開発するスーパーコンピュータの基本ソフトウェア及びアプリケーションソフトウェアの開発にも重点を置くよう配分の見直しを検討すべきである。

④ マネジメント体制の構築について

このような大規模な研究開発を効果的・効率的に推進し、より良い成果を生み出すためには、実効あるマネジメント体制を構築することが重要である。本プロジェクトにおいて解決すべき課題について責任を持って取り組むためには、現在想定しているマネジメント体制は、戦略的に十分精緻化されているとは言い難い。特に、概念設計に着手していない状況で開始する本プロジェクトにおいては、確固たるマネジメント体制の構築なくしては、プロジェクトの完遂は不可能と考えるべきである。このため、整備主体と運用主体について、総括グループのプロジェクトリーダー、ソフトウェア開発グループリーダー、ハードウェア開発グループリーダー等の選定方法、選定基準を明確化するとともに、それに基づく開発時及び運用開始後における権限と責任を明確化した上で、推進責任体制を速やかに構築することが不可欠である。同時に、推進責任体制とは独立して、適時適切に評価を実施し是正を勧告する機能を持たせた評価責任体制を固めるべきである。なお、評価責任体制は、公平・中立かつ透明性が確保されるとともに、国際的な視点に立った評価を可能とするものである必要がある。

また、開発体制の中で、国際的なレベルのメンバーで構成される、メーカー、計算機工学者（ハードウェア及びソフトウェア）、アプリケーション専門家の三者の綿密な共同作業体制を構築することも必要である。

⑤ その他

数値風洞、C P - P A C S、地球シミュレータは、それぞれ単発のプロジェクトとして構想・開発されたものであり、戦略性は必ずしも十分でなかったと考えられる。効果的・効率的なプロジェクトの立案、推進を行っていくためには、スーパーコンピューティング分野全体の確固たる長期的戦略を描き、その下で、信頼性のある精緻なロードマップを作成しておくことが必要である。

その中で、我が国における計算資源の展開に関する全体構想という点については、計算科学技術におけるテーマの規模やサイズはさまざまであり、すべてが京速計算機を必要とするわけではないことから、大規模、中規模計算機を重層的に各地に展開すべきと考えられる。その際、投入資源が限られる中で、工学分野、物理分野、生物科学分野等の各分野の次世代計算科学のニーズのうち、どれを本プロジェクトのような大規模な計算機で受け持ち、どれを他の中規模な計算機で受け持つかというような中長期的な計画を明確に策定することが必要である。

なお、マネジメント体制の構築、開発ターゲット、京速計算機システムの構成等については、文部科学省として正式に決定する時期（平成18年夏頃）を目途として、評価専門調査会においてフォローアップを実施し、平成19年度概算要求に関する優先順位付け等に活用することとする。さらに、評価専門調査会においては、詳細なハードウェア要件、LSIの論理構成概略仕様等について、その決定時期である平成19年3月にフォローアップを実施する。また、総合科学技術会議においても、概念設計の内容について、平成19年8月を目途に評価を実施し、その内容如何によっては、抜本的な見直しを検討する。