

フラッグシップ2020プロジェクト (ポスト「京」の開発)について

平成26年10月28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) 目的と意義 (必要性)

スパコンの先端開発において、世界的な潮流がどのようなようになっており、その中で「京」やポスト「京」がどのような位置づけとなっているのか、長期的な技術ロードマップのうえで示していただきたい。

「京」、ポスト「京」で日本がその時点での瞬間的世界No.1を獲得できることはあっても、国別スパコン総計算資源の推移をみると、日本は他国に比較して相対的に低下傾向にある。スパコン活用が重要であれば、このスパコン総計算資源の拡大の方に重点が置かれるべきではないのか。スパコンの開発で世界No.1を獲得することが最優先される理由を再度確認したい。各国におけるスパコンの開発状況を踏まえ、フラッグシップ2020の特徴、特に国際競争/協調において優位性を発揮する点があれば、明記して欲しい。

「社会的・科学的課題の解決に貢献する」との目的を設定されているが、「社会的・科学的課題」をもう少し具体的にご説明いただきたい。特に想定している「社会的課題」とは何か。

説明資料p.6 - 7にポスト「京」で期待される成果や「京」での成果があげられているが、ノーベル賞を取ることで宇宙の130億年の歴史を解明することが、我が国の「主要課題」なのか。

p.9に「スーパーコンピュータによる課題解決が国家の競争力を左右する」とあるが、「国家の競争力」についてももう少し具体的にご説明いただきたい。例えば、国家の競争力を定量的に捉える指標(KPI)が分かりやすい。(複数あると思われる。国際競争力順位、GDP、輸出入収支、科学論文数やその引用数、特許数や特許収支 などさまざま考えられる)

プロジェクトの名称を昨年度の「エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト」から「フラッグシップ2020プロジェクト(ポスト「京」の開発)」に変更した理由を教えてください。

(1) 目的と意義 (必要性)

スパコンの先端開発において、世界的な潮流がどのようになっているか、その中で「京」やポスト「京」がどのような位置づけとなっているのか、長期的な技術ロードマップのうえで示していただきたい。
各国におけるスパコンの開発状況を踏まえ、フラッグシップ2020の特徴、特に国際競争/協調において優位性を発揮する点があれば、明記して欲しい。

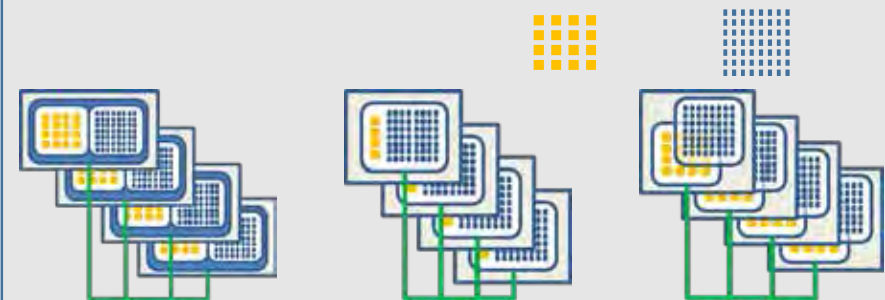
- 米国は2019年までにペタスケールプロトタイプシステム、2022年までにエクサスケールプロトタイプシステムを構築する予定で、汎用CPUの核部分(コア)を多数搭載するメニーコア型スパコン、グラフィックス処理分野で使われているCPUを搭載したGPGPU型スパコンの2つのアプローチで進めている。オークリッジ研究所、アルゴンヌ研究所、ローレンスリバモア研究所の3機関が進めているCORALプロジェクトでは、汎用CPU型スパコンとGPGPU型スパコンの2つのタイプのスパコンが2機関にそれぞれ設置され、2タイプのどちらかのスパコンがもう一機関に設置される。2017年にマシン設置が開始し、2018年に納品完了する。ピーク性能は20MW消費電力制限下で100PF以上としている。
- ポスト京は汎用CPU型スパコンであるが、米国とは異なる汎用CPUを独自開発する。
- フラッグシップ2020は、演算性能のほか、電力性能(CPUアーキテクチャとアプリおよびシステムソフトウェアの協調設計により実現)、耐故障性(京の持つ高い信頼性技術を継承)について優位性のあるシステムの実現を目指す。
- 将来、メニーコア技術とGPGPU技術は融合されていくとみられている。

GPGPU：グラフィックス処理で使われる単純な数値計算を実行できるコアを1000基以上搭載したもの。連続して配置されたデータ(規則データ)を計算するのが得意とし、汎用CPUに比べて電力性能が高い一方、不連続に配置されたデータ(不規則データ)を計算するのは不得意。

メニーコア：データセンターで使われているサーバ系計算機で使われているCPUは数値計算やデータ検索処理など様々な処理を効率よく実行できるため汎用CPUと呼ばれている。汎用CPUの核部分(コア)を数十~100基搭載したチップをメニーコアCPUと呼ばれている。GPGPUと違い規則データ、不規則データ両方の処理を得意とする一方、GPGPUに比べて電力性能は低い。

将来マシンイメージ群

- 汎用コア、GPGPUコア、ネットワークが統合されていくが、統合方式は複数候補ある



MCM(multi Chip Module)で演算加速コアと汎用コアを統合

演算加速コア中心

同一プロセッサの中での統合

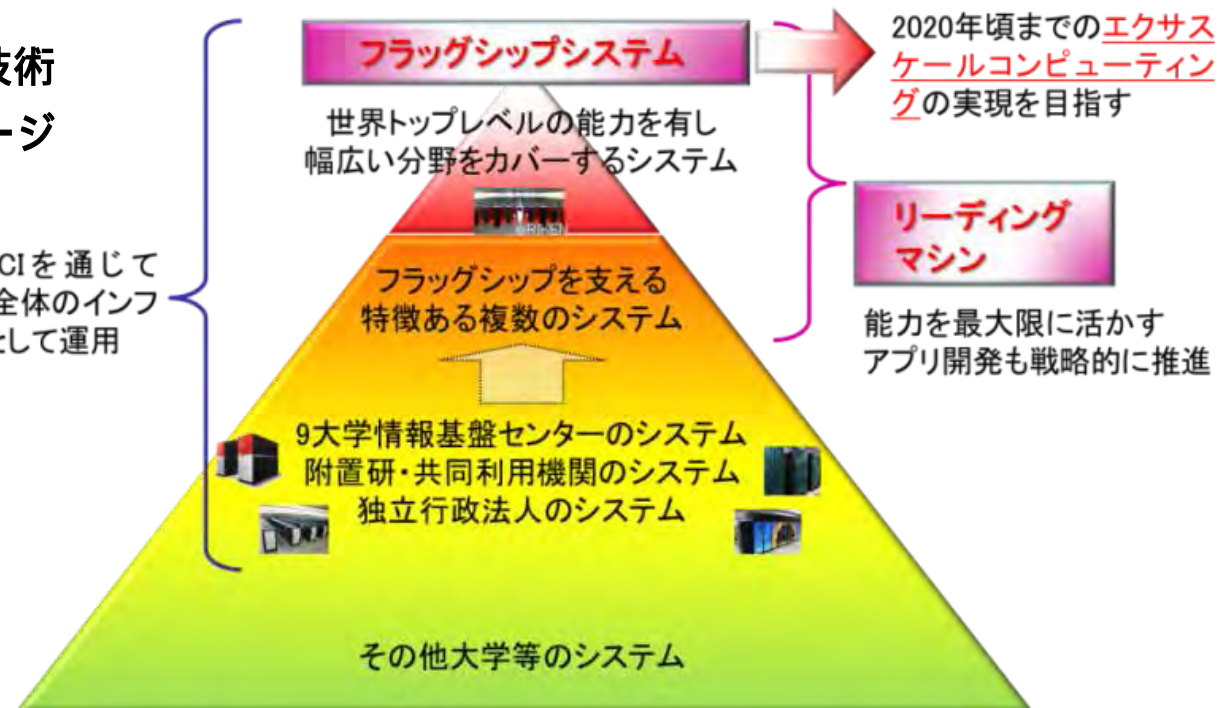
(1) 目的と意義 (必要性)

「京」、ポスト「京」で日本がその時点での瞬間的世界No.1を獲得できることはあっても、国別スパコン総計算資源の推移をみると、日本は他国に比較して相対的に低下傾向にある。スパコン活用が重要であれば、このスパコン総計算資源の拡大の方に重点が置かれるべきではないのか。スパコンの開発で世界No.1を獲得することが最優先される理由を再度確認したい。

- ポスト「京」については、我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に貢献するため、重点課題に関連するターゲットアプリケーションの実効性能に基づいた目標を設定している。
- 世界トップレベルのスーパーコンピュータやその次のレベルのスーパーコンピュータを複層的に配置し、計算資源量ニーズの高まりや利用分野・形態の多様化に対し、それらのスーパーコンピュータ全体で対応する世界最高水準の計算科学技術インフラを維持・強化するという考え方が重要である。
- また、我が国のトップレベルスーパーコンピュータの性能を世界トップレベルに維持していくとともに、その中で得られた技術によってコストパフォーマンスが向上したスーパーコンピュータを各層に普及させていくことで、裾野の拡大を含めて計算科学技術インフラ全体を引き上げていくという考え方にに基づき、検討を進めてまいりたい。

我が国の計算科学技術 インフラのイメージ

HPCIを通じて
国全体のインフラ
として運用



フラッグシップシステム

世界トップレベルの能力を有し
幅広い分野をカバーするシステム

2020年頃までのエクサスケールコンピューティングの実現を目指す

リーディングマシン

能力を最大限に活かす
アプリ開発も戦略的に推進

フラッグシップを支える
特徴ある複数のシステム

9大学情報基盤センターのシステム
附置研・共同利用機関のシステム
独立行政法人のシステム

その他大学等のシステム

(1) 目的と意義 (必要性)

「社会的・科学的課題の解決に貢献する」との目的を設定されているが、「社会的・科学的課題」をもう少し具体的にご説明いただきたい。特に想定している「社会的課題」とは何か。

説明資料p.6 - 7にポスト「京」で期待される成果や「京」での成果があげられているが、ノーベル賞を取ることで宇宙の130億年の歴史を解明することが、我が国の「主要課題」なのか。

- 『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、社会的・国家的見地から高い意義がある、世界を先導する成果の創出が期待できる、ポスト「京」の戦略的活用が期待できる課題として、次のページに示す“ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題”を選定。
- 例えば、重点課題 ~ は我が国が取り組むべき「社会的課題」にも該当。
- なお、説明資料(第1回評価検討会)p.6-7の内容は、ポスト「京」で期待される成果や「京」での成果ではなく、過去のスパコン(あるいはコンピュータ)による画期的な成果の一事例である。

<参考> 科学技術イノベーション総合戦略2014(平成26年6月閣議決定) より抜粋

第2章 科学技術イノベーションが取り組むべき課題

総合科学技術・イノベーション会議は、平成25年6月に閣議決定した科学技術イノベーション総合戦略に基づく政策運営を進め、新次元日本創造への挑戦を行ってきた。この中で、現下の喫緊の課題である経済再生を強力に推進するため、科学技術イノベーション政策が当面特に取り組むべき5つの政策課題(クリーンで経済的なエネルギーシステムの実現、 国際社会の先駆けとなる健康長寿社会の実現、 世界に先駆けた次世代インフラの整備、 地域資源を‘強み’とした地域の再生、 東日本大震災からの早期の復興再生)を設定し、この解決に資するよう資源配分の最適化を主導した。

(1) 目的と意義 (必要性)

< 重点課題 (9 課題) >

・重点課題の中からターゲットアプリケーションを選定の上、コデザイン及び性能目標の明確化に活用する。公募による代表機関決定後、代表機関により実施計画を策定し、平成27年度からアプリケーション開発に着手する。

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	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 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までをも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。
	個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。
防災・環境問題	地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。
	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 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。

(1) 目的と意義 (必要性)

< 重点課題 (9 課題) > (つづき)

カテゴリ	重点課題
エネルギー問題	エネルギーの高效率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高效率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。
	革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。
産業競争力の強化	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 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。
	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 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。
基礎科学の発展	宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。

(1) 目的と意義 (必要性)

< 萌芽的課題 (4 課題) >

ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、今後、調査研究を通じて実現化を検討する。調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定する。

萌芽的課題	
将来性を考慮し、 今後、実現化を 検討する課題	基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦 極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答の出していない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。
	複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究 複雑且つ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済など社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。
	太陽系外惑星 (第二の地球) の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明 宇宙、地球・惑星、気象、分子化学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取り組みにより、観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子化学を探究する。
	思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用 革新技术による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」での大規模シミュレーションにより人間の精神活動を脳の物理的実体にねざして再現し、人工知能への応用をはかる。

(1) 目的と意義 (必要性)

p.9に「スーパーコンピュータによる課題解決が国家の競争力を左右する」とあるが、「国家の競争力」についてももう少し具体的に説明いただきたい。例えば、国家の競争力を定量的に捉える指標(KPI)が分かりやすい。(複数あると思われる。国際競争力順位、GDP、輸出入収支、科学論文数やその引用数、特許数や特許収支 などさまざま考えられる)

- “ポスト「京」で取り組むべき社会的・科学的課題”は、健康長寿社会の実現、防災・環境問題、エネルギー問題、産業競争力の強化、基礎科学の発展等に取り組むもの。
- 「科学技術イノベーション総合戦略2014」においても言及されているように、健康長寿社会の実現や、エネルギー問題への対応、産業競争力の強化等は我が国の競争力の確保につながるものであり、ポスト「京」を活用した研究開発で、これらの課題解決に貢献する成果の創出が期待される。
- なお、代表的な国際競争力ランキング(IMD、WEF)では、R&Dの総支出や国内の研究開発者数など、科学技術イノベーションに関する評価指標を設けているが、スパコンについての直接的な指標は無い。

<参考1> 科学技術イノベーション総合戦略2014(平成26年6月閣議決定) 第1章より抜粋

2. 科学技術イノベーション政策の基本的方向性

今後本格的な人口減少・少子高齢化社会を迎え、厳しい資源・エネルギー制約や国際経済環境が予想される中で、将来においても、国際競争力を確保し持続的発展を実現させるためには、イノベーションを機軸とする以外に選択肢はない。

<参考2> 代表的な各国・地域の国際競争力ランキングの例

・IMDランキング

発表元 : スイス・国際経営開発研究所 (International Institute for Management Development)

主な評価指標: 経済状況、政府の効率性、インフラ(技術インフラ(一人当たりコンピュータ台数)、科学インフラ(R&Dの総支出、国内の研究開発者数)等) 等

・WEFランキング

発表元 : 世界経済フォーラム (World Economic Forum)

主な評価指標: マクロ経済環境、市場規模、イノベーション(イノベーション能力、企業の研究開発) 等

(1) 目的と意義 (必要性)

プロジェクトの名称を昨年度の「エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト」から「フラッグシップ2020プロジェクト(ポスト「京」の開発)」に変更した理由を教えてください。

- ポスト「京」は、我が国のスーパーコンピュータの階層の中で、2020年において国を代表する 世界トップレベルのスーパーコンピュータであり、また、第2階層以下の数あるスーパーコンピュータを先導するものである。その位置付けを体現する“フラッグシップ()”と、ターゲットイヤーである “2020”を組み合わせている。

()フラッグシップ(大辞泉より)

- 1 旗艦。
- 2 そのグループの中で、最も重要なものや優秀なもの。主力商品など。

(補足) 今後10年程度を見据えて我が国のHPCI計画の在り方を議論してきた有識者会議(主査:小柳義夫 神戸大学特命教授)においても、右絵の通り、次世代最先端スパコンを“フラッグシップシステム”と呼称している。

< 我が国の計算科学技術インフラのイメージ >



HPCI計画推進委員会 今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討WG 報告書より

また、フラッグシップは、単なる計算速度だけでなく、次世代の技術に基づき、誰もが使いやすく、成果の出せるスーパーコンピュータであることを名称に込めている。

FLAGSHIP = Future Latency core-based General-purpose Supercomputer with High Productivity
(将来のレイテンシ・コアに基づく汎用・高生産性スーパーコンピュータ)

(2) 目標設定等の妥当性

「汎用CPU + アクセラレータ」構成から、「汎用CPU」のみのマシン構成のへ変更は大きな転換である。前回の説明では、アクセラレータの導入経費が見込めないこと、多くの研究者が使いやすい汎用性を重視したこと、消費電力が大きいこと、について言及していたが、汎用CPU(とメモリ)開発自体に大きな進展があり、汎用CPUだけでも性能の見込みが立ったということか。アーキテクチャ変更の経緯を詳しく教えてもらいたい。

重点課題10題のうち8題は「大規模単一問題型計算」ではなく「多重ケース処理型計算」を必要としている。フラグシップマシンにそうした計算が求められるのであれば、全ノードを結合した巨大マシンではなく、複数のクラスタから構成されるマシンのほうが開発経費や運用効率が良いのではないか。

本プロジェクトにおいて、技術的なブレイクスルーにつながるような何か新しいチャレンジングな取組を進めることを検討しているのか。(例えば、ポスト「京」の一部に新たな低消費電力デバイスを適用してみる等)

ターゲットアプリケーションは、基本的にシミュレーション系が中心であるが、2020年代のHPCの利用において、他のアプリケーションを考えなくても良いかと言う点をお尋ねする。特に、シミュレーションによる解析だけでなく、設計などに利用するための解の効率よい探索に関するアプリケーションなども考慮しておかなくてよいかと言う点について見解を伺いたい。昨年度提出の計画と比較して、消費電力量の目標値は30-40MWと変更がない。加速度の廃止などアーキテクチャ上の大きな変更があり、昨年度計画とは状況が変わっている中で、電力消費量の目標値についてどのような再評価が行われたのか。

p.8に他国との比較において、トップ機種のパフォーマンスを比較している図と、計算能力の総量を比較している図がある。設置目的である社会的・科学的課題の解決、国家競争力の強化にとってどちらが重要と考えているのか。また、トップ機種のパフォーマンス、計算能力の総量の両方において、目標値をどう設定しているのか。

フラグシップマシンを開発するにあたり、世界最速のマシンを目指すこと自体は当然の達成目標であり、国民の納得を得ることと思う。説明資料では、現計画では世界最速達成は難しいようにも、あるいは達成できるがTop500競争はあえて意識しないようにも両方に読めるが、目標をどう考えるのか。

外国製CPUを購入して用いた場合、自主開発CPUを用いた場合に比べて演算性能はどのくらいになると予想されるのか。(自主開発する意味を明確にする上で外国製CPUを用いた場合との演算性能の比較は必要と考えられる)

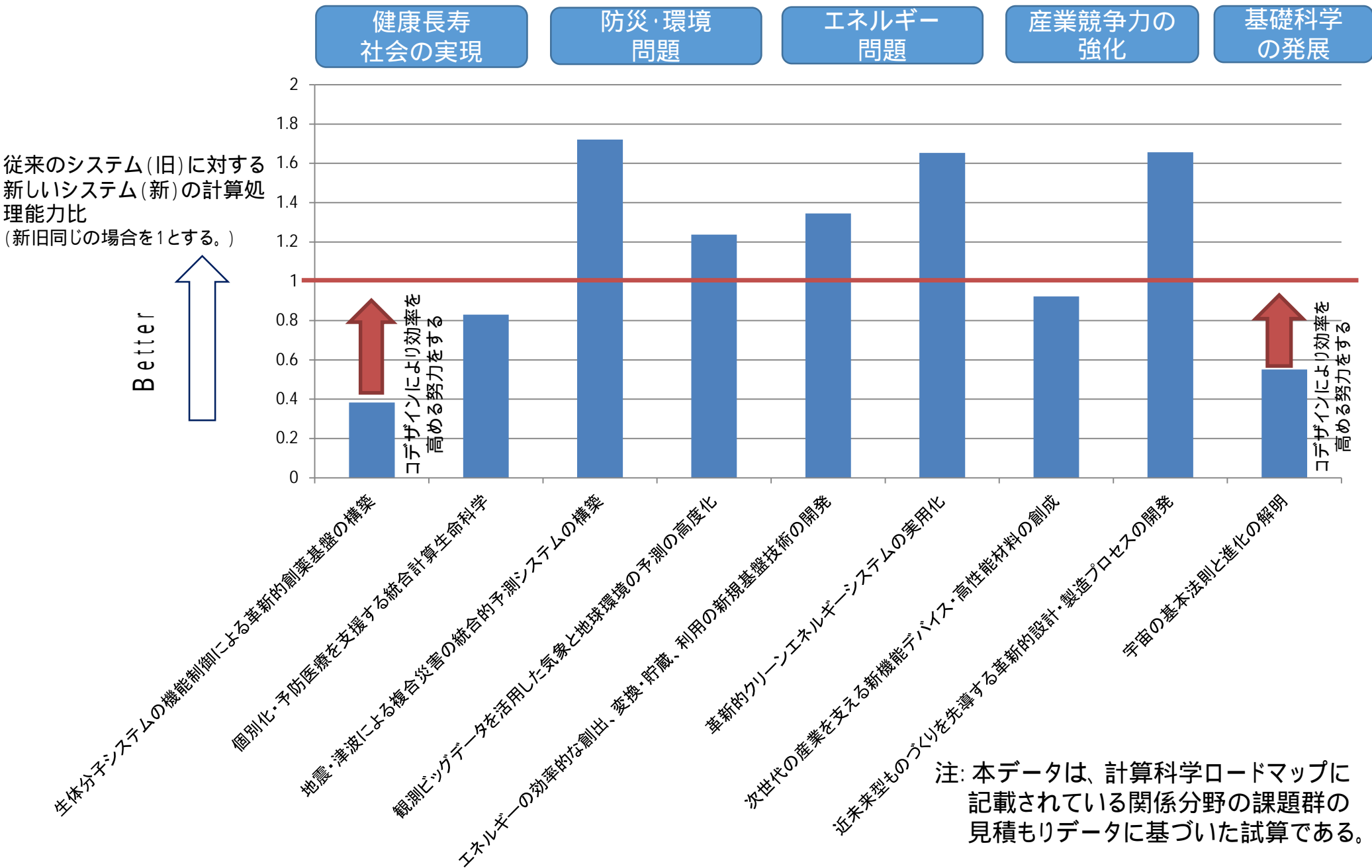
重点課題は9つあるが、ポスト「京」マシンを設計するにあたり、何に重点を置くのか(どの課題のどの計算を重点的に速くするように設計するのか)について教えて欲しい。例えば、p.42で課題 の「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」では目標性能が京の100倍となっているが、当初から の演算性能100倍をめざした設計を行うのか、あるいは別の計算に重点を置いて設計した結果、 の演算性能が100倍になったのか。

(2) 目標設定等の妥当性

「汎用CPU + アクセラレータ」構成から、「汎用CPU」のみのマシン構成への変更は大きな転換である。前回の説明では、アクセラレータの導入経費が見込めないこと、多くの研究者が使いやすい汎用性を重視したこと、消費電力が大きいこと、について言及していたが、汎用CPU(とメモリ)開発自体に大きな進展があり、汎用CPUだけでも性能の見込みが立ったということか。アーキテクチャ変更の経緯を詳しく教えてもらいたい。

- 昨年度のプロジェクト事前評価においては、エクサスケールを目指し、多くの課題に対応できる「汎用部」と、特定の課題で高い電力性能と演算性能を発揮する「演算加速部」を組み合わせたシステムが提案され、それらの割合については今後検討することとされた。
- その後、『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検討委員会』において9つの重点課題が選定されたが、これらのうち、流体解析など防災・減災や産業応用に用いられるアプリの多くでは、演算加速部の貢献は期待できない。こうした重点課題の多様性を考えると、高い汎用性を持つシステムが不可欠と言える。
- 一方、将来のHPCIシステムのあり方の調査研究(FS)で、演算加速部について計画していたよりも開発・製造コストが高くなり、従来のシステムのままでは、相当程度総事業費が上振れすることが分かった。
- これらの状況を踏まえ、ポスト「京」のシステム構成について、総合的な検討を行った結果、以下内容のシステムを開発することを決定した。
 - ・演算加速部は採用せず、幅広いアプリケーションが高い実効性能で利用できる汎用部によるシステムを開発する。
 - ・Co-designに基づく基本設計を進める。
 - ・2020年をターゲットに、世界トップレベルの性能のシステムを実現し、エクサスケールを目指す。
 - ・従前の総事業費の範囲内で開発する。
- なお、演算加速部の活用が期待されていたシミュレーションについては、Co-designによるハードウェア・計算アルゴリズムの両方の改善により、新たなシステムでも相当程度の実効性能を確保するべく基本設計に着手している。
- また、『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WG』においても、見直し後のシステム内容が提示され、同WGでの検討の結果、開発の方向性は妥当との評価を受けている。
- 消費電力目標30～40Wおよび全体予算の中で、幅広いアプリケーションのニーズに応えられる汎用プロセッサのみによるシステム構成とした。汎用CPUの電力性能向上をアプリとの協調設計で実施することによりアプリケーション性能の向上を図る。

(2) 目標設定等の妥当性



(2) 目標設定等の妥当性

重点課題10題のうち8題は「大規模単一問題型計算」ではなく「多重ケース処理型計算」を必要としている。フラグシップマシンにそうした計算が求められるのであれば、全ノードを結合した巨大マシンではなく、複数のクラスタから構成されるマシンのほうが開発経費や運用効率が良いのではないか。

- ポスト京の作り(ネットワークポロジ)では、巨大マシンでも複数のクラスタ構成にしても開発費・製造費も運用効率も同じである。むしろ、一つのマシンとして運用する方が、様々な規模のアプリケーションを実行できることになり運用面で有利である。
- 科学的成果を出すために多重ケース処理型計算が多くなっているが、ポスト京の次の時代のスパコンに向けてはポスト京を全系使用した大規模単一問題型計算を行っていく必要がある。この計算による科学的成果はポスト京の次世代では多重ケース処理型計算として扱われる。従ってフラッグシステムマシンは全系運用できる必要があり複数のクラスタから構成すべきでない。

(2) 目標設定等の妥当性

ターゲットアプリケーションは、基本的にシミュレーション系が中心であるが、2020年代のHPCの利用において、他のアプリケーションを考えなくても良いかという点をお尋ねする。特に、シミュレーションによる解析だけでなく、設計などに利用するための解の効率よい探索に関するアプリケーションなども考慮しておかなくてよいかという点について見解を伺いたい。

- ターゲットアプリケーションの多くはシミュレーションに関する解析手法であるが、“ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題”の重点課題（個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学）においては、ビッグデータ解析にかかるアプリケーションを選定している。
- 指摘の、設計探索についても重要な課題であり、現在文部科学省で実施しているHPCI戦略プログラムにおいても、研究開発課題の一つに「多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発」を挙げている。
- しかしながら、設計探査にかかるアプリケーションそのものは大きな計算量を必要とするものではない。むしろ、設計探査を行うために、多数のシミュレーションを行うことが必要であることから、設計探査問題においても、シミュレーションの実効性能を上げることが重要であると考えている。
- 以上のことから、設計探査にかかるアプリケーション自体は、ターゲットアプリケーションとしては選定していない。ただし、設計探査問題への対応は、プロジェクトの中で検討していきたいと考えている。
- また、組み合わせ最適化問題のような意思決定に直接結びつくようなアプリについては、萌芽的課題の中の「複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究」の一部として検討していきたい。

(2) 目標設定等の妥当性

フラグシップマシンを開発するにあたり、世界最速のマシンを目指すこと自体は当然の達成目標であり、国民の納得を得ることと思う。説明資料では、現計画では世界最速達成は難しいようにも、あるいは達成できるがTop500競争はあえて意識しないようにも両方に読めるが、目標をどう考えるのか。

- ポスト「京」については、我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に貢献するため、重点課題に関連するターゲットアプリケーションの実効性能に基づいた目標を設定している。ここで、Top500ランキングに用いられるLinpack性能は、実際に用いられるアプリケーション性能との乖離があることが指摘されていることから、開発のための目標としては用いない。
- 一方、ポスト「京」を諸外国のスパコンの性能と比較するための国際的な指標の一つとして、Top500を用いることは意味があると考えており、他の性能指標と併せて多面的に評価する予定である。

<スパコン性能の国際的な指標>

Top500

単純な計算を解く速度を評価するランキング。理論ピーク演算性能に近い性能を示すものであり、**現時点で国際的に最も通用している指標**である。2014年6月時点で「京」は第4位であり、第1位は中国のマシン（Tianhe-2）。

HPC Challenge

HPCチャレンジベンチマークというプログラムによりスパコンの総合的な性能を多角的に評価するもの。計算速度を競う**Top500と異なり実用に近い総合性能が評価**できる。

年	Global HPL	Global RandomAccess	EPSTREAM(Triad) per system	Global FFT
2011	京	京	京	京
2012	京	Power775(IBM)	京	京
2013	京	Power775(IBM)	京	京

HPCG

Top500と比べ、**実アプリケーションの実効性能を反映**しやすいとされる。Top500を創始したジャック・ドンガラ氏（米・テネシー大学）が提唱。2014年6月時点で「京」は第2位だが、**実行効率で見ると第1位**。

ランキング	1	2	3	4	5
システム名称	Tianhe-2	京	Titan	Mira	Piz Diant
実行効率	1.1%	3.8%	1.2%	1.0%	1.3%

Graph500

大規模グラフ解析性能（大規模かつ複雑なデータ処理が求められるビッグデータ解析において重要となるもの）を評価する国際的なランキング。**計算速度だけでなく、アルゴリズムやプログラムを含めた総合的な能力を評価**。

順位	システム名称	国名
1	京	日
2	Sequoia	米

最新のランキング(2014年6月)
Top500で第1位である
Tianhe-2は本ランキングでは第6位

(参考) 開発目標

重点課題のターゲットアプリケーションとシステムのCo-designにより、以下の性能目標を実現
 ⇨ 多重ケース処理型計算で最大「京」の100倍、大規模単一問題型計算で最大「京」の50倍
 消費電力は30～40MW（「京」の消費電力は約13MW）

カテゴリ	重点課題	目標性能 (対「京」比)	目標性能によって可能となる計算例と想定できる アウトカム	計算の種類	想定 プログラム
健康長寿 社会の実現	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	100倍	全原子分子動力学シミュレーションにおいて、10万原子の10万ケース計算によるスクリーニングにより、より効果的で安全な創薬候補物質のスクリーニングが可能に。（「京」では1000ケース程度の計算スクリーニングまで。）	多重ケース処理型計算	GENESIS
	個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	15倍 *注1	個人ゲノム解析（パターンマッチング）については、20万人規模を目指す。（「京」では数千検体の解析まで。）	多重ケース処理型計算	Genomon
防災・環境 問題	地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	15倍 *注2	有限要素法（複雑な要素を表現できる計算法）を用いた複雑な地盤構造および建物の振動の1領域につき1000ケース程度を目指したシミュレーションにより、想定外を出来るだけ無くした地震災害想定が可能に。（「京」では、数十ケースの予測まで。）	多重ケース処理型計算	GAMERA
	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	75倍	構造格子の有限体積法による3.5km解像度での1000のアンサンブル計算と次世代観測データ用いたデータ同化により、局地的豪雨や竜巻などの高精度な予測を実現。（「京」では、数十アンサンブル程度で雲や台風の構造の再現まで。）	多重ケース処理型計算 +大規模単一問題型計算	NICAM +LETKF

多重ケース処理型計算（Capacity Computing）：

小・中規模のプログラムを大量に実行する計算。分子動力学シミュレーションや気象、気候シミュレーションなどの分野では、初期パラメータを変えてシミュレーションし、それらの結果から予測値を得る手法が取られる。（例：「京」で80ノード使って動作するプログラムを1000個同時に動かす。）

大規模単一問題型計算（Capability Computing）：

従来技術でなし得なかった規模の計算。（例：「京」で8万ノード使わないと動かせないプログラム）

*注1 本暫定版目標性能では、Genomonで使われているゲノム配列アライメントアプリBLATを扱った。今後、アプリ全体の目標性能を決める。

*注2 昨年度評価時に100倍向上するアプリ例として挙げていたが、その時の当該重点課題アプリは演算加速部で高速に実行可能な差分法に基づくアプリであった。今回想定しているアプリはポスト「京」ではメモリバンド幅律速となるアプリのため目標性能が下がっている。

(参考) 開発目標

カテゴリ	重点課題	目標性能 (対「京」比)	目標性能によって可能となる計算例と想定できる アウトカム	計算の種類	想定 プログラム
エネルギー 問題	エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	40倍	量子力学に基づく700原子規模の20ケースのシミュレーションにより、光化学反応のメカニズムを解明し、光エネルギー変換のための材料候補物質のスクリーニングが可能に。(「京」では、数百原子程度の数ケースまで。)	多重ケース処理型計算	NTChem
	革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	20倍	有限要素法に基づき、複雑な形状の構造物まわりの流体(例えば、ターボ機械の熱流動など)を1兆要素規模で計算することにより、熱発生率、冷却・排気損失、ノッキング、サイクル変動等の予測の正確な評価が可能。(「京」では、数百億要素規模で予測技術の確立まで。)	大規模単一問題型計算	FFB
産業競争力の 強化	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	35倍	量子力学的第一原理計算に基づき、10万原子のシミュレーションを10ケース程度行うことにより、複数の異種物質から構成されるナノ界面を解明。(「京」では、ナノ界面の一部を切り出した部分系での理解。)	多重ケース処理型計算	RSDFT
	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	15倍	有限要素法に基づき複雑な形状の構造解析(例えば、ターボ機械全体)を10~20億要素規模で時空間的に予測する計算を大量に行うことにより、最適な全体設計を実現。(「京」では、個別のシミュレータまで。)	多重ケース処理型計算	Adventure
基礎科学の 発展	宇宙の基本法則と進化の解明	50倍	クォークを 192^4 個の格子上の場として計算することにより、素粒子から宇宙全体にわたる物質創成史を解明。(「京」では、 96^4 格子上で、星、銀河、巨大ブラックホールなど、宇宙における諸階層の構造形成過程まで。)計算量は「京」時代の計算内容の60倍程度。	大規模単一問題型計算	CCS-QCD

注：

- 表中の記載内容は、新構成の総演算性能に基づき、概念設計レベルにおける性能予測を行ったもの。
- 今後は、本暫定版目標性能に基づく基本設計を進め、重点課題実施機関決定後、速やかに再見直しを行い当該実施機関の提案に基づき修正。これをもって最終的な開発目標とする。

(参考) 開発目標

利便性、信頼性あるいはソフトの利用環境向上

CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なプログラミング環境を実現するために、並列プログラミングを容易にする並列プログラミング言語やアプリケーション分野に適したプログラミング言語（DSL:ドメイン特化言語）等を開発し、ユーザーに供する。

CPUコア1000万基以上での効率的並列実行・大規模ファイルI/O処理が可能なシステムソフトウェアを実現し、大規模シミュレーション、ビッグデータ処理を効率かつ安定的に運用できる環境を構築。

既存オープンソースソフトウェアと親和性の高いシステムソフトウェアを開発・オープンソース化し同時に国際連携することによって、最先端システムソフトウェア技術をいち早く取り込みユーザーニーズに応えられる画期的システムを開発。

システムの拡張性と機能拡張可能性

- ボード交換および機能拡張でポスト京の次世代CPUにアップグレード可能な設計としている。
- 次世代CPUにおいて、ポスト京で利用予定の10nmテクノロジーの次の7nmテクノロジーが利用可能となる見込み。
- 次世代CPUのボードに交換できれば、電力性能をさらに向上できる可能性がある。
同じ電力であれば、全体性能が向上。 同じ性能であれば、電力削減が可能

システムの下方展開・海外展開

- 標準ラックに搭載できる、小規模なシステムへダウンサイジングできる設計とする計画
1ラックでも商用展開可能に！
- ポスト京導入開始と同期をとった商用機導入を国内外へ働きかけ
国際的HPCエコシステム構築の推進（システムソフトウェアの国際協力とともに）

(3) 利活用と効果 (有効性)

p.10 に記載されている自主開発による技術の継承と技術波及について、具体的にどういう展開施策をとる予定か。

産業界へのスーパーコンピューティング技術の適用推進は我が国の国際競争力を強化する意味で重要と考えるので、技術移転、利用支援機関の設置、人材育成に向けた技術教育など必要な施策を検討いただきたい。

本プロジェクトで開発されたプログラムなどの技術資産の展開はどうされる計画になっているのか。また、プログラムの改良・高度化を進める仕組み、ユーザーからの要望を反映する仕組みについてはどう計画されているか。

フラグシップ2020を含めた2020年以降のスーパーコンピューティング環境、特にフラグシップ機の成果を広く展開するためのリーディングマシン以下について、どういう構成、運用を考えているか。

スーパーコンピューティング環境を持たない新興国などに対して、我が国の環境を使ってもらう事は考えられないか。

各課題は、いかなる「社会的・科学的課題の解決」ないし「国家競争力の強化」に貢献すると考えているのか。9重点課題+4萌芽的課題の各々に関して、どの程度の計算資源配分を考えているのか。また、13課題に含まれないテーマに対する資源配分はどう考えているのか。

重点課題・萌芽的課題の見直し、上記計算資源配分の見直しは実用に供された後、どのように行われる計画か。

完成後も、CPUボード交換により性能の向上や消費電力の削減など拡張性が望めるとの説明があったが、フラグシップマシン運用期間中にボード交換による拡張を行う計画はあるのか。あるとすれば、具体的に西暦何年頃にどのような半導体製造技術の変革が期待され、それによりどの程度の性能向上と消費電力の削減が見込めるのか。

2020年を見据えた計算科学の重点課題はよく分かるが、全てがフラグシップマシンにより2020年頃に画期的な成果が出せる課題ではないと思われる。重点課題の中から、フラグシップマシンによって画期的な成果が出ると期待されている具体例を紹介してもらいたい。

「京」による成果は、実際のところ産業競争力の強化や国民生活の向上等に対し、期待するほど役立っていないのではないか。(台風予測も心臓シミュレーションもやってみただけで実用化されていないのではないか) そこで、「京」やポスト「京」による成果の産業への橋渡しについての検討内容を示していただきたい。

「京」を実用に供したなかで出てきた課題としてどのようなものがあったか。「京」での課題をフラグシップ2020の計画にどのように反映しているのか。