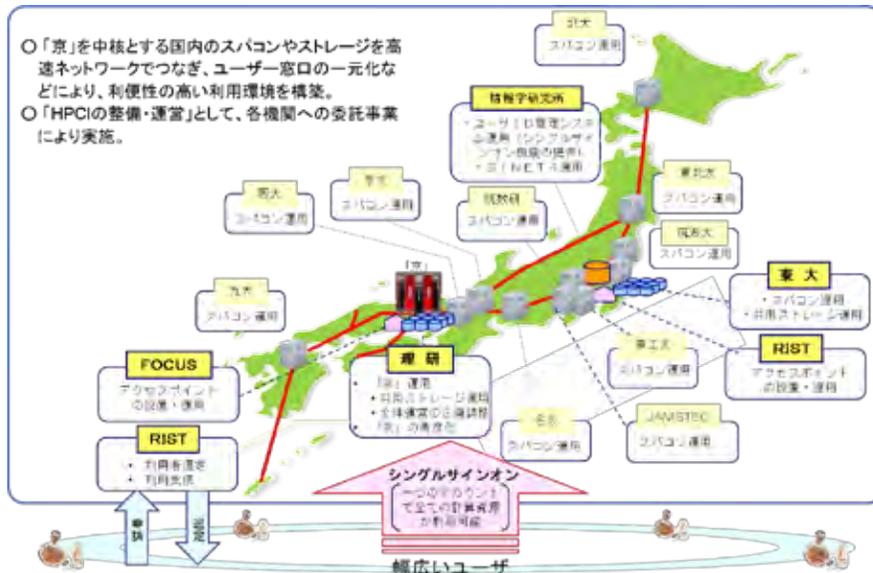


(3) 利活用と効果 (有効性)

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。

- 国内のスパコン群は、「京」の商用版、ベクトルコンピュータ、PCサーバで使われている汎用型CPUを使ったスパコンなどから構成される。
- これらスパコン群と「京」を高速インターネット経由で利用できるHPCI(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)が整備されている。ポスト「京」においてもこの枠組みを継承する。
- ポスト「京」と同型の中規模小規模スパコンが国内のスパコンセンターにも整備されるようセンター群のニーズを設計に反映させる。
- ポスト「京」上のシステムソフトウェアは他の汎用型スパコンでも動作するように開発を進めており、汎用型スパコンでこれらシステムソフトウェアを使用して開発されたアプリは、ポスト「京」へスムーズな移行が可能となる。
- また、国内の既存スパコンで開発されたアプリ群がポスト「京」に移植改良され、それらが再び国内のスパコンで利用されるというサイクルとなる。必然的にポスト「京」のアプリは国内のスパコン群でも使われる。

HPCI



情報基盤センターのスパコン調達計画(2013年8月時点)

Fiscal Year	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	
Hokkaido		Hitachi SR16000M1 (172 TF, 22TB) Cloud System Hitachi BS3200 (44TF, 14TB)							10+ PF 1.5 MW			100 PF 2 MW	
Tohoku		NEC SX-9 + Exp800 (31TF)				-1PF -1PB/s -2MW				30+PF, 30+PB/s -5.5MW(max)			
Tsukuba		HA-PACS (800 TF) [Manycore system] (700+TF)							60 PF 2MW				
Tokyo		T2K Toke (140 TF) Fujitsu FX10 (1PFlops, 150TB, 408 TB/s) Hitachi SR16000M1 (54.9 TF, 10.9 TB, 5.376 TB/s)							Post T2K, 30+ PF 4MW			100+ PF 4MW	
Tokyo Tech.		Tsukuba 2.0 (2.4PF, 177TB, 344 TB/s) 1.5MW Tsukuba 2.5 (5.7PF, 110+ TB, 190 TB/s) 1.1MW					Tsukuba 3.0 (20+30 PF, 2+8PB/s) 1.8MW (Max. 3MW)			Tsukuba 4.0 (100+200 PF, 20+40PB/s), 2.3-1.3MW (Max. 3MW)			
Nagoya		Fujitsu M5000 (94.5 TF, 1100 TB/s) Fujitsu FX10 (90 TF, 31.8 TB/s) CX400A10 (6TF, 55 TB/s) Upgrade (3.6PF) 3MW							50-100 PF 4MW			100~200 PF 4MW	
Kyoto		Cray XE6 (300TF, 92.6TB/s) GreenBlade 8000 (243TF, 61.5 TB/s)							6-10 PF 1.8 MW			100+ PF 1.8-2.4 MW	
Osaka		SX-8 + SX-9 (21.7 TF, 3.3 TB, 50.4 TB/s)				500+ TB/s 1.2 MW						5+ PB/s 1.3 MW	
Kyushu		Hitachi SR16000M1 (172 TF, 22TB) Fujitsu FX10 (1PFlops)+FX10 (1180TF) CX400GPGPU (768TF, 383 TB)							5-10 PF 2.0MW			100-150 PF 3MW	

(3) 利活用と効果 (有効性)

スーパーコンピューティング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ことは考えられないか。

- すでに「京」においても、研修生の受け入れ(インターンシップ)や研究協力等を通して、海外の機関のスーパーコンピューティング利用に協力。
- スーパーコンピュータを有さない新興国からの要望があれば、現在の枠組みで対応可能である。

海外からの外国人受け入れ状況

計算科学研究機構では、これまでに、20カ国(米国、中国、韓国、台湾、マレーシア、ニュージーランド、エジプト、イラン、ロシア、リトアニア、フィンランド、フランス、スイス、スウェーデン、ドイツ、オーストリア、イギリス、オランダ、スペイン、アルゼンチン)から、46人の外国人研究員や研修員を受け入れて、「京」についての共同研究、技術協力を行っている。

(3) 利活用と効果 (有効性)

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。

- 各課題が貢献する「社会的・科学的課題の課題」及び「国家競争力の強化」については、(1)目的と意義における質問項目及び の回答に述べたとおりである。
- 「京」での実績・経験、“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”での議論、HPCIコンソーシアム提言等を踏まえ、ポスト「京」の計算資源配分の骨子を決定。
- 配分枠の詳細(重点課題枠における各重点課題への配分割合を含む)については、各重点課題ごとに策定される実施計画や、アプリケーション開発状況等を踏まえ、運用開始までの間に、詳細を検討のうえ決定する必要がある。
- 重点課題や萌芽的課題に含まれない課題については、重点課題枠以外のポスト「京」の計算資源や、ポスト「京」以外のスパコンの計算資源を利用することにより、我が国の計算科学技術インフラ全体を有効活用することを想定。
- ポスト「京」共用開始後は、利用のニーズ等も踏まえ、柔軟に対応し、必要に応じて弾力的に見直しを行う必要がある。
- 本プロジェクトについては、成果創出フェーズまでに(平成31年までに)評価を行い、評価結果を踏まえ、重点課題・萌芽的課題の見直しや、その後の計算資源配分等を検討することを想定。



重点課題枠

重点課題に対し、文部科学省が配分内容を決定。

一般利用枠、分野振興枠

一般利用枠は、幅広い研究課題が対象。分野振興枠は、分野コミュニティに対し、文部科学省が配分内容を決定。

産業利用枠

産業界による自社および企業コミュニティの研究課題が対象。

政策対応枠

政策的、重要かつ緊急な課題の実施(課題が設定されれば、他の利用枠より優先的に実施)。

調整高度化枠

ポスト「京」の安定運転のためのシステム調整、ユーザ利用支援のための研究開発、幅広いユーザの利用に資する高度化研究を実施。

一般利用枠、産業利用枠の対象となる研究課題は、公募により決定。

(3) 利活用と効果 (有効性)

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。

- 現在、完成後の増強計画については策定していないが、今後、運用形態と共に計画していく。
- 現時点で次々世代製造技術である7nm微細加工技術がいつ、どのくらいの省電力が可能になるのか明らかになっていない状況であり、具体的なアップグレード時期の見通しを示すことはできない。

(3) 利活用と効果 (有効性)

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。

すべての重点課題から画期的な成果が出ると考えている。これらの重点課題は、「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」(小宮山委員会)の議論を十分に踏まえたものであり、ポスト京共用後、社会的・科学的に重要でありつつ、速やかに成果が期待できる課題として選定されている。

◆ 創薬: 副作用を考慮した創薬シミュレーション

【現状】

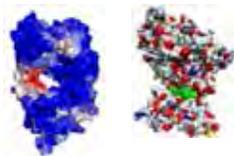
「京」では、はじめて薬剤の候補物質とタンパク質の結びつきやすさをシミュレーションし、**単一**のタンパク質の機能阻害を考慮した薬候補のスクリーニングまでを実現。

標的タンパク質(緑)と
薬剤候補化合物(赤) 【将来】



ポスト「京」では、大規模高精度計算により、薬剤の候補物質と**多数**のタンパク質からなる生体分子システムの相互作用をシミュレーションし、スクリーニングのみならず、**副作用の原因等も分析**が可能になり、有効性の高い創薬が期待される。

複数タンパク質への新薬候補物質の作用を解析



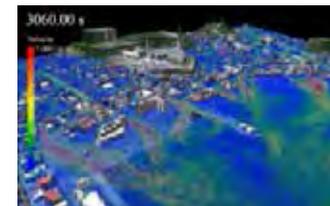
◆ 防災・減災: 地震・津波による総合災害予測システムの構築

【現状】

「京」では、強い揺れと大津波生成原因を解明し、**特定の限定された数例のシナリオ**に基づく被害予測を実現。また、従来不可能であった建造物と都市の直接被害の予測・評価、地盤と建造物の振動、津波の遡上、避難時の人の流れなどの**各種個別シミュレーション**を実現。

【将来】

ポスト「京」では、**現実の震源や地下構造の違いによる不確定さをも考慮**したシナリオ(1000を超える)に基づく被害予測を実現でき、より現実的な防災・減災計画に貢献。また、個別シミュレーションを統合しはじめて被害の相互作用をも考慮した**都市全体の防災予測**、さらにはより現実的な**避難状況等の予測**が可能に。



複合災害予測のベースとなる3次元津波遡上計算

◆ ものづくり: 革新的設計・製造プロセスの開発(自動車の製造)

【現状】

「京」では、従来不可能であった**試作実験(風洞実験)に匹敵**する精度での空気抵抗等の予測が可能となり、実験の代替手法となりえることを実証し、一定程度、既に活用されている。

【将来】

ポスト「京」では、より複雑で現実的な状況の解析が可能となることで、はじめて車のコンセプトから構造・機能・性能設計にいたる主要な設計フェーズの**シミュレーションで統合的に扱う**ことが可能に。(開発期間短縮・コスト低減・品質向上に貢献)

マツダ・北大提供



蛇行走行時の高速走行安定性解析



黒い部分が損傷部位

3b-5. Toshio Kobayashi(plenary talk), Makoto Tsubokura, Shinichi Takayama: Aerodynamics and Crash Simulations in the Automobile Industry, The 11th Asian Symposium on Visualization (2011.6.5-9, Niigata,japan)(2011)

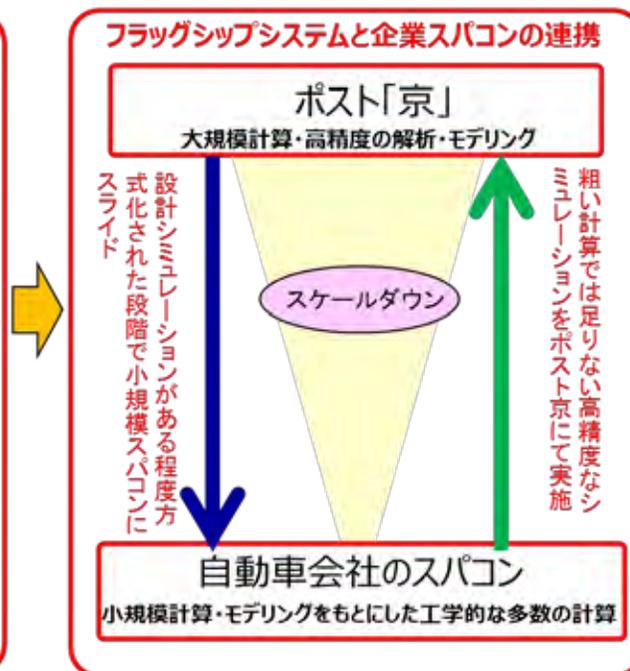
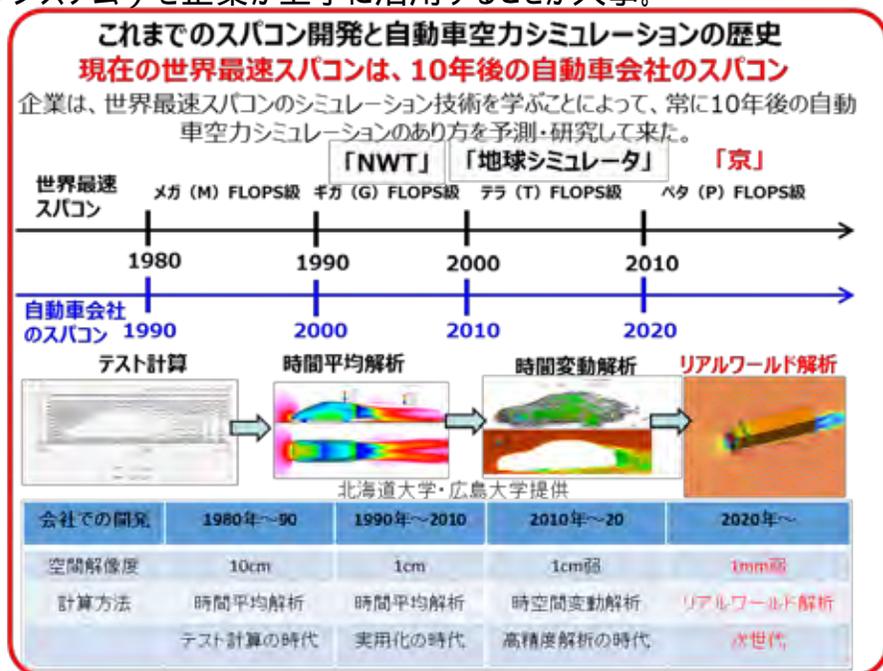
(3) 利活用と効果 (有効性)

「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、検討を進めてもらいたい。

- 「京」を利用する総計算資源量の約29%が企業参画課題であり、産業利用が活発に行われている状況である。一方、例えば自動車空力シミュレーションにおいては、企業が10年後に自社スパコンで同種のシミュレーションを実施すべく研究開発を進めており、産業界としては「京」の成果を直ちに用いると言うよりも、将来の活用を意識して参加している状況である。
- 産業界による「京」を用いた研究開発に対しては、高度情報科学技術研究機構(RIST)や計算科学振興財団(FOCUS)による「京」の利用支援や、HPCI戦略プログラムの戦略機関による産業界への橋渡しを含めた分野振興活動が行われている。
- 一方、国民生活への還元が期待されるものとしては、中央防災会議の下で検討されている首都直下地震等の被害予測において、内閣府(防災担当)が「京」を利用したシミュレーションを実施し、精緻な被害予測を行っている。
- ポスト「京」についても、産業競争力の強化や国民生活の向上等に資する橋渡し機能が発揮されるよう検討して参りたい。

産業界への波及効果 (例：自動車産業の場合)

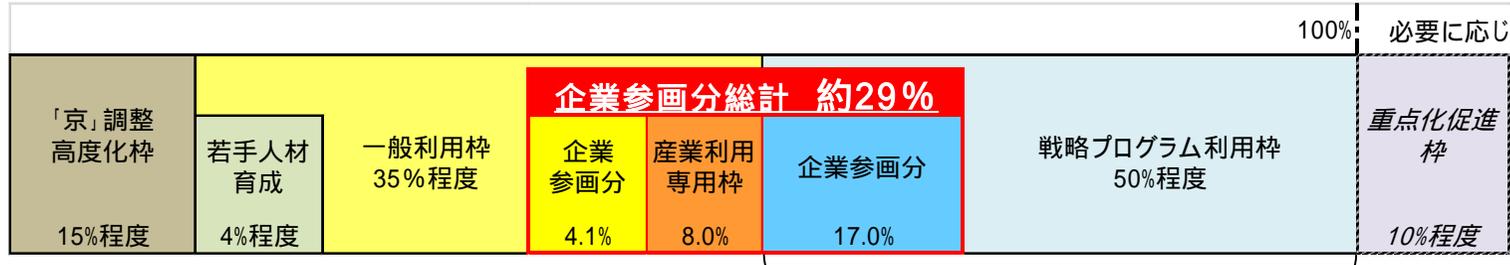
自動車産業においては、スパコンを用いたシミュレーションにより、製品の開発をより効率的に(速く・安く)進められるようになった。最先端スパコン(フラッグシップシステム)を企業が上手に活用することが大事。



(参考)「京」の産業利用の状況について

産業利用の状況

「京」を利用する総計算資源量の約29%が企業参画課題（平成26年度当初配分実績ベース）



画期的な成果創出を目指し、以下5分野について国が重点的に課題を選定
1：医療・創薬、2：物質材料、3：防災・減災、
4：次世代ものづくり、5：物質と宇宙の起源

「京」の全利用者の約3割が企業の利用者（1062人中302人）

全課題における参画企業数は総勢100企業以上

産業利用課題の高い課題採択率（一般利用28.9%に対し産業利用は83.3%（H26年度実施課題））

産業利用促進策

（継続的な取組）

- ・企業の成果の機密性や情報管理に配慮した成果非公開課題の設定
- ・企業の利用者に対する手厚い技術支援

（平成26年度からの新規取組）

- ・産業利用専用枠の拡大（5% 8%）
- ・企業が応募しやすくなるよう、随時応募可能な利用枠を新規に導入
- ・「京」を一定期間、予約的に利用できる制度を導入（その期間は待ち時間なしで利用可）

(3) 利活用と効果 (有効性)

「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。

- 現在、以下の課題を洗い出しフラグシップシステム開発に生かしている
 - 京アーキテクチャ設計手法の経験を踏まえ、Co-design (協調設計)を進める
 - ファイルシステム運用経験を踏まえ、階層化ストレージの設計を進める
 - ジョブスケジューリング運用経験を踏まえ、使用電力を考慮した新たなジョブスケジューリングシステムの設計を進める
- Co-design
 - アーキテクチャが決まってからアプリをチューニングするという方式から同時協調設計への変革。京設計時にはアプリを変更することなくアーキテクチャを設計し、その後アプリをチューニングするという方式をとったことにより、アプリのチューニング時にアーキテクチャの改良点が見つかった
- 階層化ストレージ
 - 京ではローカルファイルシステムとグローバルファイルシステムに分かれていて、ユーザが陽にファイルの移動を指示する必要があった。このため利便性およびファイル移動に伴うオーバーヘッドが生じている。本方式からユーザがファイル移動を意識しない階層化ストレージ方式を設計している
- ジョブスケジューリング
 - ポスト京はジョブ毎に使用電力を制御する機構が実現される。例えばメモリを頻繁に参照しないアプリ実行ではCPU・メモリ間電力供給量を下げ、転送スピードを下げるのが可能である。京の運用実績に基づき、ジョブが必要とする電力を見積もる機構、複数の使用電力が異なるジョブを同時に実行する時に全体使用電力を一定電力以下になるジョブスケジューリング、を開発する

(4) 実施内容および工程表の妥当性

フラッグシップシステムでは1000万個以上のプロセッサ(10、7nmデザインルール)が掲載されるが、これらの信頼性の確保に、どのようにデバイス、アーキテクチャ、ソフトウェア的に対応するのか、もう少し詳しい説明をお願いしたい。

また、省電力化についても、デバイス、アーキテクチャ、ソフトウェア(OS)上、どのような対策が取られているか、ご説明願いたい
また、「京」とポスト「京」のスケラビリティ確保のための技術(並列化コンパイラ、自動チューニング技術など)についてもう少し詳しい説明をお願いしたい。

10nmの半導体製造技術は現時点では未知数だが、計画では2017年始めに初版CPU製造計画となっている。生産は海外の半導体製造請負工場に委託とのことだが、仮に10nm製造が間に合わなかった場合のリスク回避策等は検討しているのか。

フラグシップマシンの効果的な利活用やスケールマシンの普及を考えた場合、これから開発する重点課題の専用アプリだけでなく、社会で広く用いられているオープンソフトやコマースソフトのインプリメンテーションも必要と思われるが、こうした計画はあるのか。それとも、開発時点での機密保持の観点からアーキテクチャを公開し、また開発時点でベンダーに参画を求めるのは難しいのか。

汎用部の設計・試作費の合計(民間負担額も含めたもの)が昨年からほとんど変化がないが、汎用部のみのシステムにすることにより設計・試作が容易になる部分はないのか。

汎用部の製造費の昨年からの増加額はどのような積算によるものか、内訳を具体的に示していただきたい。

汎用部が多くなるのなら、それに比してストレージの製造費用が昨年と変化していないのはどのような理由によるのか、示していただきたい。

システムソフトの開発費が、汎用部のみになったにもかかわらず昨年より増加していることを論理的に説明しうる理由は何か、示していただきたい。

アプリケーション開発費は重点課題ごとに均等に配分されるのか、コデザイン等により傾斜配分されるのか、示していただきたい。

「京」については、メーカーが知財権を独占し、当該技術の展開に支障があるように思われた。フラッグシップ2020の成果については、どのような知財戦略を取る予定か。

(参考) フラッグシップ2020プロジェクト(ポスト「京」の開発)体制等について

- 最先端スパコンの開発は将来導入されると見込まれる技術を前提に開発を進めるものであり、不確実性や予見不可能性が大きいいため、国、開発主体、開発担当企業が密接な連携を取って、本プロジェクトを推進することが必要である。
- そのため、プロジェクトに関与する三者間によるプロジェクト管理の連絡調整(状況確認、意見交換、課題の抽出、必要な対応の検討等)を円滑に行い、国費総額1,100億円の大国家プロジェクトを着実に推進していくため、文部科学省、開発主体及び開発担当企業からなるプロジェクト推進三者会議を設置する。

