

平成17年度における大規模新規研究開発の事前評価
第2回評価検討会提出資料

**最先端・高性能
汎用スーパーコンピュータの開発利用**
(第1回追加宿題に対する回答)

平成17年10月11日
文部科学省研究振興局
情報課

目次

	ページ
追加1	2
追加2	3
追加2(1)	4
追加2(2)	5
追加2(3)	6
追加2(4)	10
追加2(5)	13
追加3	14
追加4	15
追加5	17

追加1 フィージビリティスタディを行った結果があれば提示されたい。

ポイント

複合型システムのフィージビリティスタディとしては、理研スーパー・コンバインド・クラスタ(RSCC)を利用した統合ソフトウェアの開発と運用の実証を進めている。

- ・ RSCCは統合ソフトウェアとして、リアルワールドコンピューティングプロジェクト(RWCP; 平成4年度～13年度)で開発されたScoreをベースにしており、異なる複数の通信インターフェースを持つ異機種計算機を一体的に運用してアプリケーションを実行し、高い実行効率を得ている。
- ・ また、複合型システムに対する利用者側からの必要性やペタスケール・コンピューティングの実現性などに関する議論は、計算科学技術推進ワーキンググループ第2次中間報告概要(平成17年8月24日)【第1回検討会資料2-3】にまとめられている。

追加2 9月20日の補足説明資料の27ページの「京速計算機システムの構成（イメージ）」によれば、大規模処理計算機部の理論性能は0.5PFLOPS、逐次処理計算機部の理論性能は1PFLOPS、特定処理計算加速部の理論性能は20PFLOPSで、「京速(=10PFLOPS)」といわれる性能のほとんどは、特定の計算を行うことが想定される特定処理計算加速部によるものであり、目標とするシステムは汎用の「京速コンピュータ」とは言えないと思われる。

ポイント

システム構成の詳細は、ターゲットアプリケーションに応じて検討を行うことが前提であるが、現段階でイメージしている構成を以下のとおり回答する。

特定処理計算加速部を GRAPE-DR ベースのものとした場合、単独でプログラムを実行することは想定しておらず、逐次処理計算機部との連携が必要である。

複合型計算機については、利用者側からの要求があり、具体的な利用方法について多数提案がある。また、京速計算機システムの開発は、国家プロジェクトとして推進するだけのインセンティブが強く働く目標設定が重要であり、汎用製品の購入ではなく国のプロジェクトとして開発を行う必要がある。

平成24年時点での大規模処理計算機部と他のタイプの計算機を比較すると、価格あたりの実効性能と実効性能あたりの消費電力で、ほぼ同等となることが予測される。また、地球シミュレータで開発されたアプリケーション資産の有効利用のためにも、大規模処理計算機部の開発は有意義である。

平成23年時点での逐次処理計算機部と他のタイプの計算機を比較すると、ターゲットとする性能、消費電力等についてはほぼ同等となることが予測される。また、プログラミングの容易さ・柔軟性から共有メモリ方式を採用した逐次処理計算機部の開発は有意義である。

異機種計算機間の接続にIPを使用することには賛否両論があるため、設計に際して最適な方法を検討する。

目標とするシステムの汎用性については、特定処理計算加速部に GRAPE-DR を導入した場合を仮定して回答する。GRAPE-DR については、【資料3 参考資料】のとおりである。

追加 2 (1) 特定処理計算加速部のみを開発すれば良いのではないかと。もしくは、特定処理計算加速部に絞って、その汎用性を強化することにより、高性能汎用スーパーコンピュータを実現してはどうか？

GRAPE-DR の開発目標と差別化するために、利用する半導体を 45nm ベースとし、特定処理計算加速部の完成時期を 2010 年から 2012 年以降とすべきではないか？

1 . 特定処理計算加速部以外も開発が必要な理由

特定処理計算加速部を GRAPE-DR ベースのものとした場合、特定処理計算加速部は逐次処理計算機部と協働することを前提とした言わばアクセラレータであり、独立してアプリケーションを実行することを想定していない。

GRAPE-DR の開発目標と差別化するために利用する半導体を 45nm ベースとすることは、相応の時間と相当の投資を必要とするので別途考えるべきである。

(注： 特定処理計算加速部を GRAPE-DR ベースのものとした場合の最大のメリットは、平成 20 年度に完成する GRAPE-DR の成果、特にソフトウェア資産を活用できることにある)

2 . 平成 22 年度に 65nm プロセスで特定処理計算加速部を開発する理由

本プロジェクトでは、平成 22 年度 (2010 年度) に運用を開始することを大きな目標としていることから、平成 21 年度中に 65nm ベースで発注する必要がある。

追加 2(2) 「複合型」の場合、3 種類の計算機部と異機種間接続超高速インターフェースを並行して開発することになり、巨額の予算を必要とし、資源投入効率が必ずしも良いとは言えないと思われる。「複合型」を進める必要性を説明されたい。さらに、特定処理計算加速部以外を購入せずに国のプロジェクトとして開発する理由を示されたい。

1．複合型の必要性

複合型計算機に対する利用者側からの要求があり、また具体的な利用方法について多数提案がある。詳細は、計算科学技術推進ワーキンググループ第 2 次中間報告概要（平成 17 年 8 月 24 日）【第 1 回検討会資料 2-3】の P.3 を参照されたい。

2．特定処理計算加速部以外を購入せずに国のプロジェクトとして開発する理由

京速計算機システムの開発においては、国家プロジェクトとして推進するだけのインセンティブが強く働く目標設定が重要である。その際、最終的にスパコンを作り上げるのは民間のハードウェア技術力に負うところが大きいため、「スパコン製造ベンダーにおけるハードウェア技術の進歩に資すること」、「開発されるスパコンをベースとした製品シリーズ化が導かれる方向性を重視すること」が重要である。

国際的なスパコンランキングで米国に席卷されつつある現状を打破するためには、大規模処理計算機部、逐次処理計算機部も汎用製品の購入ではなく、国のプロジェクトとして開発する必要がある。

追加 2(3) 大規模処理計算部は、ピーク性能に対する実行性能の高さがポイントと理解するが、それでも投入する予算額と、予定ピーク性能の低さ(0.5PFLOPS)、消費電力の高さを考慮すると、予算額あたりの実効性能、消費電力あたりの実効性能は、現在主流であるクラスタを下回る懸念がある。

具体的なアプリケーションに基づいて、最新のクラスタ(例えば Opteron クラスタ)とベクトル計算機の性能比較をされたい。その上で、この部分を開発する必要性について、説明されたい。

1. 大規模処理計算機の必要性・意義について

(1) 大規模処理計算機の必要性・意義

キャッシュのような局所記憶から溢れてしまうほど計算処理毎に区切ったデータが大規模になる計算の場合は、大規模処理計算機が高い実行効率を持つことが知られている。地球シミュレータで開発されたアプリケーション資源を継承し、有効利用するためにも、大規模処理計算機の開発には意義がある。

(2) 必要な開発

平成 22 年に実際に運用に耐えうる 0.5 ペタ FLOPS のシステムを実現するために、主に以下のような技術開発が必要である。

- ・省電力化に向けた電力制御、LSI プロセス開発、回路技術開発
- ・光伝送技術のブレークスルーによるメモリ転送性能の強化

2. 大規模処理計算機とクラスタ諸元比較

平成 22 年頃の予想されるクラスタの諸元から、理論性能あたりの消費電力及び価格差は、以下の様に予測される。

	価格 (百万円/テラ FLOPS)	消費電力 (W/ギガ FLOPS)	インターコネクト性能 (バイト/FLOPS)
PC クラスタ ^(*2)	2	1	0.1
BlueGene 後継	8	2	0.4
CRAY XT3 後継	20	4	0.3
京速計算機大規模処理計算機部	57	11.2	0.2

(*1)現状からの想定値。京速計算機については目標値。

(*2)現状の AMD Geode GX533(400MHz, 1.1W)後継の低消費電力化 CPU を使用した、クラスタを想定。

3. 平成22年頃の大規模処理計算機とクラスタの実行効率予測

現在の大規模処理計算機(S X-8)の性能仕様と京速計算機の大規模処理計算機部の目標性能を以下の表で比較すると理論性能あたりのインターコネクション性能は1.3倍向上する。

【大規模処理計算機の性能仕様】

	現在	平成22年頃	/
理論性能	128ギガFLOPS/node	1テラFLOPS/node	8
メモリ転送性能	4Byte/演算	4Byte/演算	1
ノードあたりの インターコネクト性能	16ギガByte/s(0.125 ⁻¹)	160ギガByte/s(0.16 ⁻¹)	10(1.28)

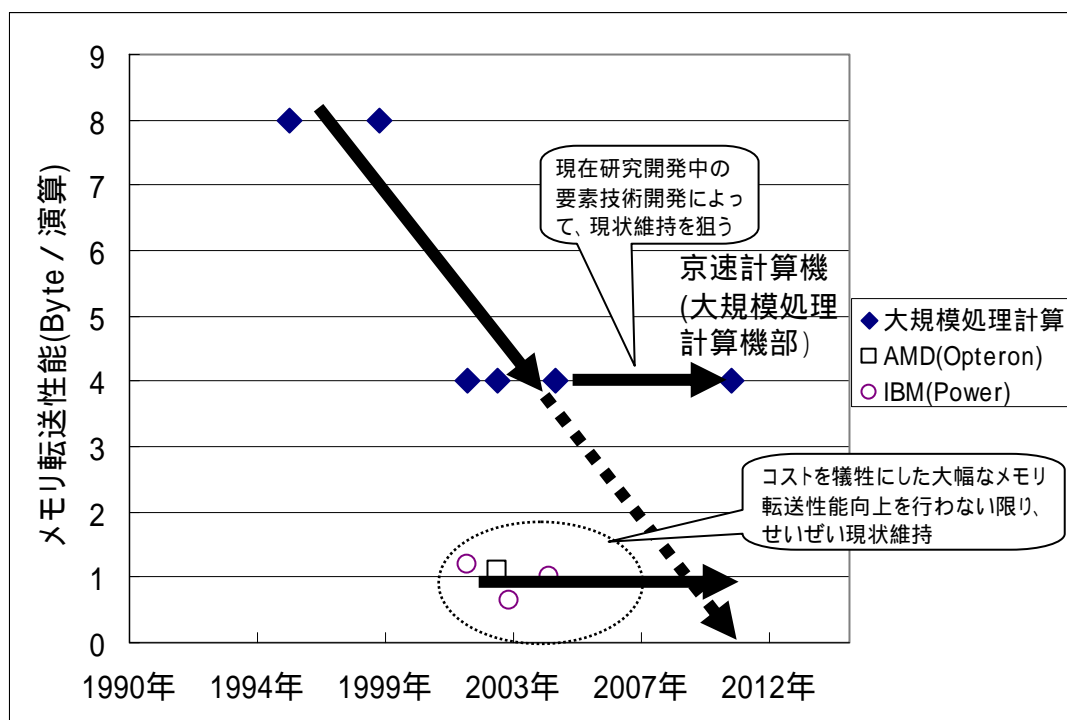
1:理論性能あたりのインターコネクト性能

一方で、クラスタの現在と将来の性能仕様を比較し、以下の表で示す。理論性能あたりのインターコネクション性能は今後減少傾向にある。その結果、FFTで使われる配列の転置のようなインターコネクト性能がボトルネックになるアプリケーションにおいては、実行効率は減少する(CRAY XT3の場合は、約0.5)と予想される。

【クラスタの性能仕様の予想】

	現在	平成22年頃	/
理論性能	Opteron: 約10ギガFLOPS/node	約100ギガFLOPS/node	10
	Xeon: 約12ギガFLOPS/node		
メモリ転送性能	Opteron: 約1Byte/演算	約1Byte/演算	1
ノードあたりの インターコネクト性能	約1ギガB/s(0.1 ⁻¹)	Opteron: 1~30ギガB/s (0.01~0.3 ⁻¹)	1~30(0.1~3)
	CRAY XT3: 6.4ギガ Byte/s(0.64 ⁻¹)	CRAY XT3後継機: 30ギガ Byte/s(0.3 ⁻¹)	4.68(0.47)

1:理論性能あたりのインターコネクト性能



【メモリ転送性能のトレンド】

これは、汎用マイクロプロセッサ（例えば、AMD 社の Opteron や IBM の Power）は、H P C 領域よりは、市場の大きなビジネス領域を意識したアーキテクチャであるからである。ビジネス領域のアプリケーションでは、特にメモリ転送性能を必要としないために、コスト高の主要原因となる L S I のピンを増加させるメモリ転送性能の強化は、製品戦略上考えにくい。

4 . 大規模処理計算機と P C クラスタ / ベンダー供給クラスタの性能測定結果の比較

アプリケーションによって異なるものの、ナノテクノロジー分野など、産業界で使われるアプリケーションにおいても、P C クラスタやベンダー供給クラスタとの実効性能について、以下のような性能が測定されている。

（１）P C クラスタ

【大規模処理計算機と P C クラスタの性能測定結果の比較】

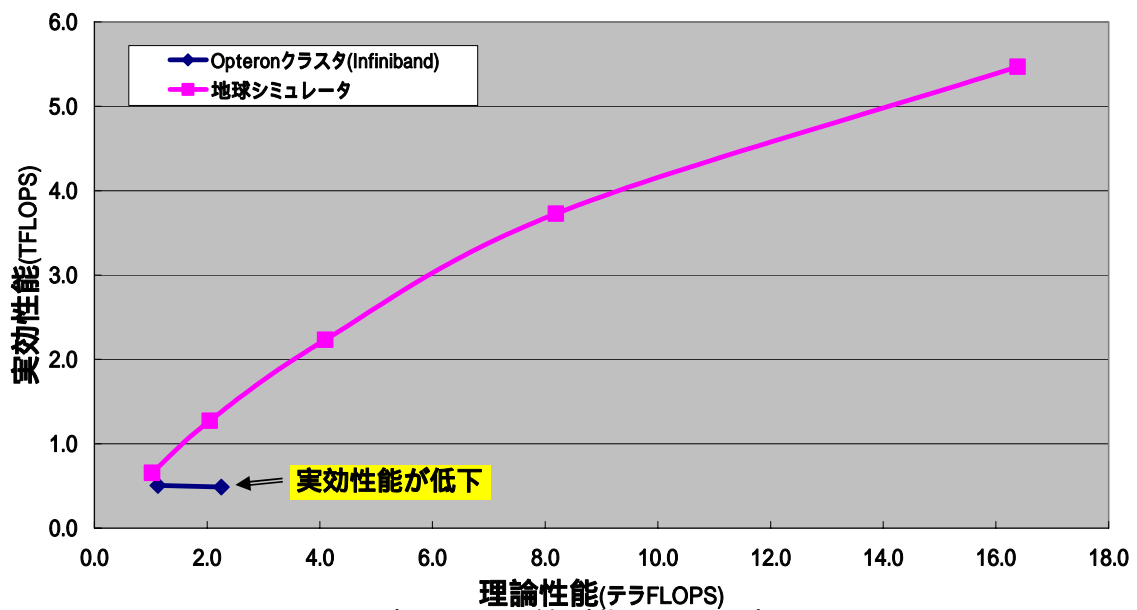
アプリケーション		大規模処理計算機	P C クラスタ	比率
ナノテク分野				
第一原理ケース1	構成 ピーク性能 実効性能 実行効率	SX-6/8CPU 64ギガFLOPS 18.3ギガFLOPS 29%	Opteron(2GHz) 64node(128CPU)/Infiniband 512ギガFLOPS 1.20ギガFLOPS 0.23%	126 倍
第一原理ケース2	構成 ピーク性能 実効性能 実行効率	地球シミュレータ/512CPU 4,096ギガFLOPS 2,232ギガFLOPS 54%	Opteron(2.2GHz) 256node(512CPU)/Infiniband 2,253ギガFLOPS 487ギガFLOPS 22%	2.5 倍

・ 第一原理ケース 1

126 倍の実効性能があり、かつ、ここで計算されている F F T は、配列の転置のためのグローバル通信が必要なアプリケーションである。そのため、P C クラスタのようなノード間伝送パスが十分強化されていないシステムでは、大規模処理計算機でなければならない。この計算は、ナノテクノロジー分野において重要なアプリケーションである。

・ 第一原理ケース 2

実行効率で 2.5 倍にしかないが、以下のグラフのように、並列化率が上がらないケースもある。P C クラスタ（Infiniband で接続された Opteron クラスタ）では、並列化が進むほど（プロセッサ数が増し、理論性能が増すほど）やや性能が低下している。



【第一原理計算（ケース2）の並列処理性能】

（2）ベンダー供給クラスタ（C R A Y X T 3）

大規模処理計算機（S X - 8）とベンダー供給クラスタ（C R A Y X T 3）の実効性能を比較する。F F T はナノテクノロジー分野などにおいて重要なプログラムである。以下の表から、S X - 8 と C R A Y X T 3 の実行効率比は、1.28 に過ぎない。

【H P C C H A L L E N G E の F F T の性能（G - F F T E）】

	理論性能 (ギガ FLOPS)	G - F F T E (ギガ FLOPS)	実行効率
C R A Y X T 3	24,960	644.73	2.6%
S X - 8 (6 C P U)	96	3.188	3.3%

F F T は、演算性能そのものより、データ転置のためのインターコネクション性能が重要な要因である。「3．平成24年頃の大規模処理計算機とクラスタの実行効率予測」にあるように、インターコネクション性能が0.47倍に低下すると予測されることから、平成22年の大規模処理計算機とベンダー供給クラスタの実行効率比が $3.3 \div 2.6 \div 0.47 = 2.7$ 倍となると予想される。また、大規模処理計算機の場合は、インターコネクション性能は1.3倍向上することから、結局 $2.7 * 1.3 = 3.51$ 倍の実行効率比まで向上が見込まれる。大規模F F T については、実効性能あたりの消費電力および性能あたりの価格の両方で、大規模計算機部は、C R A Y X T 3 後継機に比べて高い性能を確保できる見込みである。

4．その他

地球シミュレータで生み出されつつあるアプリケーションソフトウェアの資産を確実に継承するとともに、その普及促進に努めることは、我が国発のソフトウェアを育成・利用拡大を図る上で重要なアプローチである。そのためには、地球シミュレータと同タイプの大規模処理計算機を導入することが必要である。

追加 2(4) 逐次処理計算機部は、特定処理計算部との差異を明確にし、開発する必要性について、説明されたい。その上で、予定ピーク性能 1PFLOPS では米国で開発されるマシン(BlueGene シリーズ)と同等以下となる可能性が高いが、我が国として独自に開発する必要性は如何。予定ピーク性能以外で我が国の独自性が期待できるのか？(計算速度あたりの電力消費効率の著しい低下、非常に安価、超高速ネットワークへの接続性の確保等)

システム構成の詳細は、ターゲットアプリケーションに応じて検討する必要がある。その前提の下、本回答は平成 23 年度における逐次計算機部と他のタイプの計算機の性能予測の下に比較を行ったものである。

1. 逐次処理計算機の開発の必要性・意義について

(1) 逐次処理計算機の必要性・意義

逐次処理計算機で、多数のアプリケーションが既に利用されている。一方で、特定処理計算加速機を GRAPE-DR ベースのものとした場合、行列積など幾つかの限定的なプログラム(アプリケーション)では理論性能に近い実効性能を期待できる。しかし、広い範囲の多数のアプリケーションに対しては高い実行効率を早期に実現することに困難が予想される。このため、全ての既存逐次処理計算機用アプリケーションの膨大な資産を有効利用するためには、高性能な逐次処理計算機が必要となる。

逐次処理計算機としては、並列プログラミングの容易さ・柔軟性、既存資産の有効活用を考えると、ノード内に多数の CPU を備える共有メモリ方式の採用が望ましいと考えられる。

(2) 必要な開発

平成 22 年の汎用プロセッサを利用したシステムで実際に運用に耐えうる 1 ペタ FLOPS のシステムを実現することは消費電力、実装密度、性能の面で困難である。ここでは以下の開発を行い、世界最高速を狙った逐次処理計算機向けプロセッサを開発する。

- ・スパコン向けの浮動小数点演算の強化、マイクロアーキテクチャのスパコン向け最適化
- ・省電力化に向けた電力制御・クロック制御の精密化
- ・45nm プロセスの活用による、性能・機能向上、消費電力削減

さらにこのプロセッサの性能を最大限に発揮できる、高密度の実装を行った逐次処理計算機を開発する。

また汎用アプリケーションを実行する上では、逐次処理計算機部のシステム性能はインターコネクト技術にも大きく依存するため、本プロジェクトにおいて固有の光技術にもとづいた超高速・高機能ネットワークを開発し、CPU のアーキテクチャ・機能・性能と共にバランスのとれたシステムを開発することが望まれる。

これらの技術開発により、IBM BlueGene、CRAY XT3 それぞれの後継機に互する性能を確保できる。(P11 の表を参照)

(3) 開発の意義

これらの技術開発により、膨大なアプリケーション資産を活用しやすい形でユーザーの利用環境を確保しつつ、計算速度あたりの消費電力の著しい削減、超高速ネットワークへの接続性を確保し、逐次処理計算機における我が国の優位性を確立する。

2 . 他のタイプの計算機との比較^(*) (平成 23 年度を想定)

	価格 (百万円/テラ FLOPS)	消費電力 (W/ギガ FLOPS)	インターコネクト性能 (バイト/s/FLOPS)
PC クラスタ ^{(*)2}	2	1	0.1
BlueGene 後継	8	2	0.4
CRAY XT3 後継	20	4	0.3
京速計算機逐次 処理計算機部	17.5	2.5	0.3 ^{(*)3}

(*)1)現状からの想定値。京速計算機については目標値。

(*)2)現状の AMD Geode GX533(400MHz,1.1W)後継の低消費電力化 CPU を使用した、クラスタを想定。

(*)3)トランキングにより、必要なノードあたりのバンド幅を確保する。詳細については、今後の設計のフェーズで決定する。

平成23年度頃の消費電力、インターコネクト性能のターゲットとしては、BlueGene 後継、XT3後継、京速計算機の逐次処理計算機部のいずれも、ほぼ同等の値を目指している。価格性能比については、京速計算機の逐次処理計算機部はXT3後継と同程度となる。BlueGene後継と比較した場合、価格性能比は劣る。しかしながら、BlueGene は各プロセッサ当りのメモリ量が小さいため、プログラミングが難しく、アプリケーションの柔軟性が乏しい。実際、汎用アプリケーションでは、BlueGeneのようにメモリが小規模なプロセッサでの超並列化に向かないものが多く(Gaussian等)、現時点の BlueGeneは必ずしも幅広い分野での利用には適していない(詳細については、追加質問 5 の回答を参照)。一方、逐次処理計算機は、広いメモリ空間を利用でき、プログラミングのしやすさ、アプリケーションの柔軟性の面で優れている。並列プログラミングの容易さを考慮すれば、京速計算機の逐次処理計算機部は、幅広いアプリケーションに対して、同等以上の性能を発揮すると期待できる。

また、以下の観点からも、大規模共有メモリ方式を採用した逐次処理計算機部を開発することの意義はある。

- 逐次処理計算機部としては、ノードあたり32CPU程度の構成を想定している。これにより、32並列まではOpenMP等の共有メモリ向け並列プログラミングが可能であり、新規プログラムの高速実行が早期に可能となる。また、OpenMP等で記載された既存プログラム資産をそのままの形で高速に実行することが可能となる。

さらに、MPI並列、MPI+OpenMPを組み合わせた実行等、柔軟でアプリケーションの特性に応じたプログラミングを行うことが可能となる。

- 逐次処理計算機部のノード間通信のバンド幅は、BlueGene、XT3後継機と同等の性能演算比を達成することが可能である。さらに、ノード内における通信については、高速な性能を達成する予定（ターゲット性能：0.5～1 バイト/s/FLOPS）なので、大部分の通信をノード内に閉じるようにできるようなアプリケーションにおいては、高い実行性能を達成できる。
- BlueGene後継、XT3後継のいずれのシステムとも隣接通信において最大限に性能が出る構成となっている（3次元トラス）。京速計算機のインターコネクトとして、要素技術プロジェクトで研究開発を行っている、システムインターコネクトを採用した場合（ファット・ツリー構造） 大局的通信においても、高い効率での通信性能が達成される予定である。

追加 2(5) 異機種計算機間の接続超高速インターフェースとして、外部との接続性及び波及効果を考えると、IP 対応が必要と思われるが、如何。

異機種計算機間の接続に IP を使用することには賛否両論があるため、設計に際して最適な方法を検討する。

追加３ 「京速計算機システム」の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消費電力の内訳見積もりを示されたい。

現段階のイメージに基づく各計算機部の消費電力の内訳は、資料 3-1 の P.13 及び p.46 を参照されたい。

追加 4 (主として大規模処理計算機部) 地球シミュレータの演算速度：消費電力比 = 40TFLOPS : 6MW から単純に予測すると、0.5PFLOPS の大規模処理計算機部の消費電力として対応するのは 75MW であり、「京速計算機システムの構成(イメージ)」の数 MW という消費電力を達成するためには、計算性能当たりの消費電力を 10 分の 1 以下(半導体技術の進歩による自然な消費電力の削減では困難)にするブレークスルーと考える。

消費電力大幅削減の見通しと共に、グランドチャレンジに値する数値目標(2010 年または 2012 年での GFLOPS 当たりの消費電力)を示していただきたい。

ポイント

消費電力削減のために、アクティブ電力、リーク電流の低減技術の開発に取り組んでいる。

以下のような目標を達成するための消費電力削減の見通しを得ている。

大規模処理計算機部：11.2W/ギガ FLOPS(平成 22 年) 5.6 メガ W(500 テラ FLOPS)

逐次処理計算機部：2.5W/ギガ FLOPS(平成 22 年) 2.5 メガ W(1 ペタ FLOPS)

特定処理計算加速部：0.35W/ギガ FLOPS(平成 22 年) 7 メガ W(20 ペタ FLOPS)

1. 消費電力大幅削減(大規模計算機部)の技術的見通し

大規模計算機における CPU に関する消費電力削減技術としては、次のものがある。

(1) アクティブ電力の低減

- ・配線容量の低減 Low 配線絶縁膜(誘電率の低い絶縁膜)
- ・動作率の低減 クロックゲーティング(クロックの動作を制御)
- ・スロットリング 命令動作を細かく制御

など

(2) リーク電流の低減

- ・オフリーク低減 マルチ V_{TH}、マルチ V_{DD} 制御、基板バース制御、低温化
- ・ゲートリーク低減 マルチ Tox、High ゲート絶縁膜(誘電率の高い絶縁膜)

以上の消費電力低減策から

200W / CPU (地球シミュレータ：140W / CPU)

を目標に置くことが妥当である。これが実現できると、ノードあたりの消費電力は

約 10 キロ W

となり、大規模計算機部全体の消費電力は次のようになる。

$$10 \text{ キロ W} \times 512 \text{ ノード} + \text{ノード間接続スイッチ} = \underline{\text{約 5.6 メガ W}} \\ (0.48 \text{ メガ W})$$

これは以下のとおり、理論性能あたりの消費電力で地球シミュレータの 10 分の 1 以下(ブレークスルー)の達成を意味する。

京速計算機システム(大規模計算機部)	11.2W/ギガ FLOPS
地球シミュレータ	141.8W/ギガ FLOPS

(参考)

地球シミュレータの消費電力

ノード当たり	8.25 キロW × 640 ノード
インターコネクション	6 キロW × 65

=====

合計	5,670 キロW
----	-----------

2. その他消費電力削減技術

(1) 文部科学省では、「低電力高速デバイス・回路技術・論理方式」の研究開発プロジェクトを平成 17 年度に開始し、低電力高速デバイス、低電力高速回路技術、低電力高速論理方式の研究開発を行っている。

(2) その他、マイクロアーキテクチャの改良(汎用マイクロプロセッサの並列性を最大に引き出すための種々の最適化)についても取り組まれている。

3. グランドチャレンジに値する数値目標 (GFLOPS 当たりの消費電力)

大規模処理計算機部: 11.2W/ギガ FLOPS (平成 22 年) 5.6 メガ W (500 テラ FLOPS)

逐次処理計算機部: 2.5W/ギガ FLOPS (平成 22 年) 2.5 メガ W (1 ペタ FLOPS)

特定処理計算加速部: 0.35W/ギガ FLOPS (平成 22 年) 7 メガ W (20 ペタ FLOPS) *

* 特定処理計算加速部はホストサーバ部分を除く

(参考)

BlueGene/P 1.5W/ギガ FLOPS (平成 21 年)

BlueGene/Q 0.5W/ギガ FLOPS (平成 22 年): 予測

追加 5 2004 年 11 月 8 日に 70TFLOPS でスーパーコンピュータ・ランキング Top500 の 1 位となった BlueGene/L は、2005 年 6 月 22 日には 136.8TFLOPS を達成し、2005 年中に 360TFLOPS=0.36PFLOPS を達成する予定である。BlueGene ベースのシステムは、単純予測でも、2010 年に数 PFLOPS 以上（場合によっては数十 PFLOPS）の性能を達成し、その消費電力も数 MW 程度となると想定できる。「京速計算機システムの構成（イメージ）」の大規模処理計算機部と逐次処理計算機部の性能が BlueGene ベースのシステムに達しないことは明らかで、消費電力や設置面積でも圧倒的に不利である。

一方、BlueGene ベースのシステムを計算性能的に凌駕する可能性が高い特定処理計算加速部は、現時点ではソフトウェア開発環境やアプリケーションが無く、既に開発環境が存在し、AMBER、Gaussian 等のアプリケーションが移植されている BlueGene システムとは、2010 年におけるプログラムの開発効率や利用効率において、かなり不利になることが予想される。

約 1,000 億円の国家予算を費やすスーパーコンピュータにふさわしい性能を達成するための打開策は如何？

ポイント

現在、BlueGene で性能を発揮するアプリケーションの分野は限られており、共用には、大多数のアプリケーションソフトウェア資産の継承性に優れる大規模処理計算機部と逐次処理計算機部及びグランドチャレンジアプリケーション用のアクセラレータ（特定処理計算加速部）が望まれる。

「特定放射光施設の共用の促進に関する法律（共用法）」を改正し、京速計算機を幅広く共用する仕組みを整える。膨大なアプリケーション資産が動作する計算機を整備するとともに、それを大学・研究機関等へ普及していくことが重要である。

1 . BlueGene に対する大規模処理計算機部と逐次処理計算機部の有利性

BlueGene 上で稼働している独立系ソフトウェアベンダーのソフトウェアは AMBER, NAMD, GAMESS などバイオ・化学系のみである（平成 17 年 9 月末現在）。一方、大多数のアプリケーションを高速に実行可能な大規模処理計算機部及び逐次処理計算機部は、民間企業を含む多くの利用者にとって使い慣れたシステムであり、これまでのアプリケーションソフトウェア資産の継承性といった側面の恩恵が大きく共用施設としての運用に際して有利である。

2 . 特定処理計算加速部と BlueGene の違い

特定処理計算加速部に GRAPE-DR ベースのものを採用した場合、ハードウェアは逐次処理計算機部相当のサーバに加速器を付加する構造となる。プログラムの本体はサーバ部分で実行され、加速が必要な部分について計算加速部で実行される。このシステムのオペレーションシステム、コンパイラ、ライブラリ等は、サーバ側のシステムを利用するため、現時点で既に存在している開発環境でアプリケーション開発が可能である。

一方、BlueGene に対するアプリケーションの移植は、AMBER についてはローレンスリバモア研究所で移植（並列化）が行われているものの、逐次型計算機で 23,000 原子系、16 C P U の利用で 50～60% の並列化効率と発表されており、非常に低い効率となっている（BlueGene/L についての報告はなし）。Gaussian については、Gaussian Inc.

社は並列化が大変なため BlueGene/L のサポートを行わないと表明している。

このように、BlueGene ベースのシステムを高効率に利用するためには、ソフトウェアの開発環境を整備する必要がある。BlueGene はプロセッサあたりのメモリー量が小さく、並列度が極めて高いため、プロセッサ間、ノード間の通信量が増大しやすい。そのため、BlueGene を効率的に動作させるための労力は非常に大きく利用者にとって、いわば「使い勝手の悪い」ものとなる恐れがある。

したがって、BlueGene ベースのシステムを民間企業を含む多種多様な利用者の共用システムに導入するためには、平成 17 年に発足予定の「スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（仮称）」等の意見も伺いつつ検討する必要がある。

3. 1000 億円にふさわしいものとするための方策

(1) 地球シミュレータ計画の経緯

地球シミュレータ計画は総額 600 億円以上の国費を投じたプロジェクトとして、5 ヶ年計画で進められた。この計画によって誕生したスパコン「地球シミュレータ」は、地球環境分野を中心に計算科学技術分野において多大なる貢献をしている。

しかしながら、地球シミュレータをベースとしたシステム(ベクトル計算機)は、スパコンのマジョリティとして普及したわけではなかった。また、地球シミュレータの開発段階は、必ずしも民間企業を含む幅広い利用者に共用することについて十分に考慮されていたわけではなく、開発の初期段階に検討されていた地球シミュレータをネットワーク環境に置いて外部からの遠隔利用を可能とする構想は実現しなかった。

このような経緯もあって、地球シミュレータは、運用段階になって後、民間企業を含む多様な利用者への利用促進に向けた具体的な検討や取り組みに着手するとともに、運用開始から 2 年半が過ぎたところで学術情報ネットワーク(スーパー S I N E T)に接続された。

ただし、地球環境問題とりわけ気候変動に関する政府間パネル(I P C P)へのデータ提供という重要なミッションを負った中での利用拡大には大きな制約があり、未だに「600 億円プロジェクトに相応しい利用として十分か？」との問いかけがある現状にある。地球シミュレータ計画を運用面から総括すると、計画段階から地球環境分野以外の外部利用者の利活用に向けた準備が進められていなかったことが反省点である。

現在、地球シミュレータは積極的に利用の拡大と利便性の向上に努めており、今後、民間の利用を含む幅広い分野で成果が挙げられることが期待される。また、ここで生み出されつつあるアプリケーションソフトウェアの資産を確実に継承するとともに、その普及促進に努めることは、我が国発のソフトウェアの育成・利用拡大を図る上で重要なアプローチである。

(2) ソフトウェアと計算機システムを巡る現状

汎用スパコンをシステム別に俯瞰すると、地球シミュレータと同タイプのいわゆる「ベクトル計算機」の占める割合は小さい(1 割に満たない)。ただし、伝統に裏打ちされた膨大なソフトウェア資産が充実しており、アプリケーションによっては他タイプのスパコンに比べタイムトゥソリューションに圧倒的に優れているもの(流体分野など)がある。

現状の汎用スパコンにおけるマジョリティは、「スカラー計算機」(9 割以上)であり、米国製ソフトウェアを中心にアプリケーションソフトウェアも充実している。

このため、ベクトル機との実行性能の格差が小さなアプリケーション（量子化学分野など）ではベクトル計算機に取って代わりつつあり、特に、民間で利用されている商用アプリケーションソフトウェアは「スカラー計算機」を前提とした米国製が主流となっている点に注意を要する。ただし、「スカラー計算機」の中でも近年急速に主流となりつつある「Linux クラスタ」においては、我が国発で独自性がある商業的に国際展開している（IBM、Dell、hp 等もサポート製品を販売している）ものとしてクラスタシステムソフトウェアの SCore がある。（注：SCore は通商産業省（プロジェクト開始当時）の「リアル・ワールド・コンピューティング（RWC）」プロジェクト（1992～2001）の代表的な成果の一つ。）

さらに今のところアプリケーションソフトウェアの種類が限られているものの、安価かつ低消費電力の組込プロセッサをベースとした BlueGene が登場し、Linpack ベンチマーク・テストを指標とする世界的なスパコンランキングいわゆる「TOP500」では上位を占めつつあるが、利用分野の拡大が課題となっている。（注：BlueGene/L の理論性能はシステムの最大構成で 360 テラ FLOPS。）

このほか、我が国発の独自性が高く、かつ得意とする計算機としては、特定の計算の処理を助ける専用計算加速機（アクセラレータ）として GRAPE をベースとしたシリーズが知られている。（注：現在進行中の GRAPE-DR プロジェクトでは、平成 20 年に 2 ペタ FLOPS の実現を目指している。）

いずれにせよソフトウェアと計算機システムの選択はグランドチャレンジ分野におけるターゲットアプリケーションに応じて判断する必要がある。

（３）次期スパコン計画に向けての方向性

フラッグシップ

国家プロジェクトとして推進するだけのインセンティブが強く働く目標設定が重要である。その際、最終的にスパコンを作り上げるのは民間のハードウェア技術力に負うところが大きいこと、他方で革新的なソフトウェアの研究開発は大学・公的研究機関において生み出されてはいるものの、それを産業化（製品化し、普及を促進し、保守・改良をビジネスとしつつ、また新たなソフトウェアの開発に繋げるサイクル）するために、より一層の努力が求められている点に十分な注意を払うことが肝要である。

かかる観点から、スパコン製造ベンダーにおけるハードウェア技術の進歩に資すること、開発されるスパコンをベースとした製品シリーズ化が導かれる方向性を重視すること、我が国発のソフトウェアの産業化を強力に促進させること、これら 3 点を一体的に進める必要がある。

このような一体的な取り組みの中で、フラッグシップ・スパコンを開発することが、国際的なスパコンランキングで米国に席巻されつつある現状を打破する唯一の方策である。このプロジェクトを突破口とすることで、現在、スーパーコンピューティングに携っている技術者のモラルの向上に資するのみならず、情報科学技術を志す生徒・学生に勇気と元気を与え、広く情報科学技術の発展にとって有益なものとしてすることができる。

確実性（可用性）

膨大な国費を無駄にしないためにも、極端な冒険をするのではなく、開発時点で採用可能な最新の技術を導入しつつも、確実性の高い方法を追求する必要がある。これは、ハードウェアのみならず、ソフトウェアについても同様に考えなければな

らない。即ち、上記（１）（２）の経験と成果を活かした対応が不可欠である。

利便性

開発されるスパコンは国民の共有財産であり、アカデミアでの利用のみならず民間を含む多種多様な幅広い利用者を視野に入れる必要がある。このため開発段階から利用者の声を反映可能な体制を構築することが肝要である。

継続性

開発するスパコンは Only one のものとするのではなく、No. 1 のものと明確に位置づける必要がある。すなわち、No. 2 以下のスパコンが大学や公的研究機関、さらには民間へと商用機として展開される必要がある。そのためにも、システムのスペックに利用者の声を反映させることを第一義としつつも、スパコン・ベンダーにおける実現可能性の限界を見極め、また国際的な技術動向のベンチマークを適宜行いつつ、次期計画で達成すべき目標、次々期計画で達成すべき目標、さらにその次以降の計画で達成すべき目標と、常に先々のことを考えて取り組む姿勢が不可欠である。

このような継続的な開発を明示することで、スパコン・ベンダーにおいても継続的な研究開発投資を行いやすい環境が整備される。特に、ベンダーの研究開発投資環境の改善は、大学等の計算科学及び計算機工学から発信される新しい概念のスパコンの実現に向けた大学とベンダーの協力関係をより強化しやすくする。

このため、次期スパコン計画を契機として、将来にわたって継続的にNo. 1 スパコンをシリーズとして開発・整備するための戦略・戦術を、大学・公的研究機関等からの提案を集約し、具体的な方策として提案することが可能なヘッドクォーター（拠点）を構築することが重要である。

（４）次期スパコン計画に向けた布石

上記（３）の方向性に向けた取り組みは、ソフトウェアを中心として、以下の通り既に始まっている。

地球シミュレータの利活用促進＜利便性の向上＞

「先端大型研究施設戦略活用プログラム」(平成１７年度～)

産業化を目的としたソフトウェアの開発と普及促進＜利便性の向上＞

「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト

(平成１７年度～)

「高度シミュレーション人材の育成拠点形成プログラム」(平成１８年度～)

「超高速コンピュータ網形成プロジェクト」(平成１５年度～)

確実性・利便性の検証

「理研スーパー・コンバインド・クラスター（RSCC）」の活用

(平成１６年度～)

スパコンのハードウェア技術への先行投資＜確実性・可用性の向上＞

「将来のスーパーコンピューティングのための要素技術の研究開発」

(平成１７年度～)

（５）プロジェクトの進め方

上記（３）の方向性及び（４）の布石を活かして、フラッグシップ・プロジェクトを通じ、継続的にスーパーコンピューティングの発展を支え続けることの可能な「仕組み」と「体制」の構築を図る。

制度設計

このため、開発の当初段階から運用段階を視野に入れた制度設計を行う。具体的には、年内に利用者団体を組織するとともに、先端大型施設の共用を促進するための法制を整備する（次期通常国会に法案を提出；法案の概要は別紙参照）。

特色は、整備主体（スパコンの所有者）と運用主体（スパコン・センターの経営）を明確に分け、スパコンの所有者であっても、一利用者として第三者の審査を経た上で運用主体から資源配分を受けることで、共用施設としての公正さ・公平さを担保しつつ運営する点にある。

このような仕組みを通じて、上記（３）の「利便性」との「継続性」を実現する。

開発体制

スパコン開発の経験が豊富なプロジェクト・リーダーを任用し、高い目標と現実性のあるマイルストーンを掲げ、リーダーの強力な指導力のもとでチームを編成する。チームの人材は、アプリケーションソフトウェア（計算科学技術）、システムソフトウェア（情報科学技術）、ハードウェア（計算機工学）から有為の人材を集集する。

このような体制を通じて、上記（３）の「フラッグシップ」との「確実性（可用性）」を担保する。

プロジェクト立ち上げまでのスケジュール

資料３－１の２．（１４頁）を参照。

（６）１０００億円投資の「ふさわしさ」の証明

１０００億円施設に相応しい利用がなされること（アプリケーションの成果）
我が国の大学・公的研究機関のスパコンの演算資源量が、平成２６年度までに
ＧＤＰあたりで米国を上回ること（システムとしての成果）

本プロジェクト以降、継続的にフラッグシップ・スパコンが開発される手法の
確立やこの手法を通じた情報科学技術への幅広い寄与（技術的波及効果、優秀
な人材の確保等）

追加 5：参考説明 特定放射光施設の共用の促進に関する法律の一部を改正する法律の概要

1．基本的考え方

超高速スーパーコンピュータ等の最先端の研究装置については、単独の研究機関が使うのではなく、国が主体的に公平で効率的な共用を進め、産学官の幅広い研究者に利用機会を与えるのが、世界最高水準の研究成果を生む有効かつ効率的な方法。



「特定放射光施設の共用の促進に関する法律」において効率的な共用の促進に実績を上げてきたSPRING-8の場合が国内唯一の例



「特定放射光施設の共用の促進に関する法律」を改正し、超高速スーパーコンピュータについても産学官の研究者による幅広い共用を行えるように措置する。

2．法改正の概要

(1) 超高速スーパーコンピュータの共用（定義）

整備及び共用を促進する施設に特定放射光施設（SPRING-8）だけでなく、超高速スーパーコンピュータを加えることとする。

(2) 基本方針

文部科学大臣は、超高速スーパーコンピュータの整備及び共用の促進を計画的に実施するため、基本的な方針を定めることとする。

(3) 開発・共用の促進

超高速スーパーコンピュータの開発等を整備主体の業務とし、研究開発型独立行政法人の技術的ポテンシャルを活用し、有効かつ効率的な共用等を行えるようにすること。

(4) 実施計画の認可

整備主体は、超高速スーパーコンピュータの整備及び共用に関する業務について、実施計画を作成し、文部科学大臣の認可を受けることとする。

(5) 共用促進機構の指定（登録）及び国の事務の代行

公平で効率的な共用を実施するため、超高速スーパーコンピュータの共用促進事務を行う者を指定（登録）し、その者（共用促進機構）に共用促進事務を行わせることができることとする。国は、予算の範囲内において、共用促進機構に対して共用促進事務に要する費用の全部又は一部に相当する額を交付することができることとする。