

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」指摘事項への対応状況等 (第1回検討会資料2-1の修正版)

平成18年9月11日

1. 計画の概要と変更の有無

| 平成17年度の事前評価における計画概要  | 変更内容と変更理由及びその影響 (文部科学省)   | (事務局使用欄) |
|--|---|----------|
| <p>期間<br/>平成18年度～24年度(7年間)</p> <p>予算<br/>総事業費 1154億円(国費)</p> <p>目的<br/>世界最先端・最高性能の汎用京速計算機システムの開発・整備及び利用技術の開発・普及。</p> <p>目標</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築<br/>グリッドミドルウェアにより、スーパーSINETで接続された全国のスパコンセンターから京速計算機を利用できる環境を提供。</li> <li>・ アプリケーションの達成目標(例示) <ul style="list-style-type: none"> <li>) ナノテクノロジー分野<br/>全く不可能だった酵素反応解析が実現可能になる。</li> <li>) ライフサイエンス分野<br/>水中のウイルス構造やその動作を解析、ウイルスの感染機構や免疫機構を解明できる。</li> </ul> </li> <li>・ 京速計算機の性能目標 <ul style="list-style-type: none"> <li>) Linpackで10ペタFLOPSを達成する(平成23年6月のスーパーコンピュータサイトTOP500でランキング第1位を奪取)。</li> <li>) HPC CHALLENGE 全28項目中、過半数以上の項目で最高性能を達成する。</li> </ul> </li> </ul> | <p>期間<br/>【変更なし】</p> <p>予算<br/>【変更なし】</p> <p>目的<br/>【変更なし】</p> <p>目標</p> <p>【追加】</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 世界最高水準の研究施設を幅広く共同利用する体制の整備<br/>(追加理由)<br/>「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」の制定、施行に伴い追加。</li> </ul> |          |

## 内容

事前評価時の説明資料においては「内容」の項目が立てられていなかったが、参考資料等では以下のような内容が示された。

）スーパーコンピュータを最大限活用するためのソフトウェア等の開発・普及

（ア）目指すグランドチャレンジ

- 次世代ナノ統合シミュレーション

- 次世代生命体統合シミュレーション

（イ）学術情報ネットワーク（サイバー・サイエンス・インフラストラクチャ構想）上で、場所や時間の制約なく、分野毎及び分野横断的な研究を行えるよう、国際水準のグリッドミドルウェアの開発・普及

）世界最先端・最高性能の汎用京速計算機システムの開発・整備

【京速計算機システムの構成（イメージ）】

<消費電力：30メガW>

- 大規模処理計算機部・・・0.5ペタ FLOPS

- 逐次処理計算機部・・・1ペタ FLOPS

- 特定処理計算加速部・・・20ペタ FLOPS

## 【補足説明】

- ・ 次世代スーパーコンピューティング技術は、「第三期科学技術基本計画」・「分野別推進戦略」において、「我が国の科学技術を牽引し、最先端の研究開発を行うために不可欠な研究開発基盤」であり、国家による集中的な研究開発投資が不可欠であることから「国家基幹技術」と位置づけられた。
- ・ 本プロジェクトを契機として、次世代スーパーコンピュータ（次世代スパコン）の開発と利用のみならず、スーパーコンピュータのハードウェアとアプリケーションの開発を国家的な長期戦略の下で継続的に推進することとしている。

## 内容

### 【追加】

）世界最高水準の研究施設の共用利用

- 「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」に則り、登録施設共用促進機関に利用者の選定や支援を行わせ、共用の促進を図る。

（追加理由）

「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」の制定、施行に伴い追加。

【京速計算機システムの構成（イメージ）】

### 【変更予定】

（理由）

今後、概念設計において、コストや実効性能を詳細に評価して、システムの最適化を行い、実効性能の高い、優位性のあるシステムを実現してゆく予定であり、現在計算機システムの構成について検討中であることから。

次回のフォローアップにおいては、詳細なシステムイメージを提出する予定である。

研究水準向上と世界をリードする創造的  
人材の育成の総合的な推進

- 上記 ) 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。

#### 実施体制

- ・ 平成 17 年 10 月…整備主体を決定。
- ・ 平成 18 年 1 月…文部科学省に推進本部  
を設置。

#### 研究者

プロジェクトリーダーとして研究振興官  
(民間出身) を置く。主要研究者は未定。

#### 評価体制

- ・ 毎年 7 月頃…科学技術・学術審議会 研究  
計画・評価分科会 情報科学技術委員会にて  
進捗評価。
- ・ 平成 19 年 7 月…外部評価により計画本  
格化を判断。
- ・ 平成 22 年度…外部評価によりシステム  
性能・機能等を評価。
- ・ 平成 24 年度…外部評価により利用状況、  
研究成果、人材育成状況等を評価。

#### 【補足説明】

- ・ 既存のアプリケーションのうち将来的に重要なもの (= ターゲット・アプ  
リケーション)、ナノテクノロジー及びライフサイエンス分野で開発するグ  
ランドチャレンジ・アプリケーション、概念設計や技術調査を通じたハード  
ウェアの検討、また、海外状況の調査、等を勘案しながらシステム構成を最  
適化し、「世界最高性能」を実現する予定。(詳細は 2 . 指摘事項への対応  
状況にて説明)

#### 実施体制

#### 【進捗状況】

- ・ 平成 17 年 10 月: 理化学研究所を開発主体に決定
- ・ 平成 18 年 1 月: 文部科学省に「スーパーコンピュータ整備推進本部」を  
設置  
渡辺 研究振興官(プロジェクトリーダー) 着任
- ・ 同: 理化学研究所「次世代スーパーコンピュータ開発実施本  
部」発足(本部長: 野依理事長)
- ・ 平成 18 年 7 月: 「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」施  
行(理化学研究所が正式に開発主体として活動開始)
- ・ 平成 18 年 8 月: 理化学研究所が開発主体として体制を強化(プロジェク  
トリーダーを理化学研究所に移籍等)

#### 研究者

#### 【進捗状況】

主要研究者を含む研究開発体制については 2 . 指摘事項への対応状況にて説明

#### 評価体制

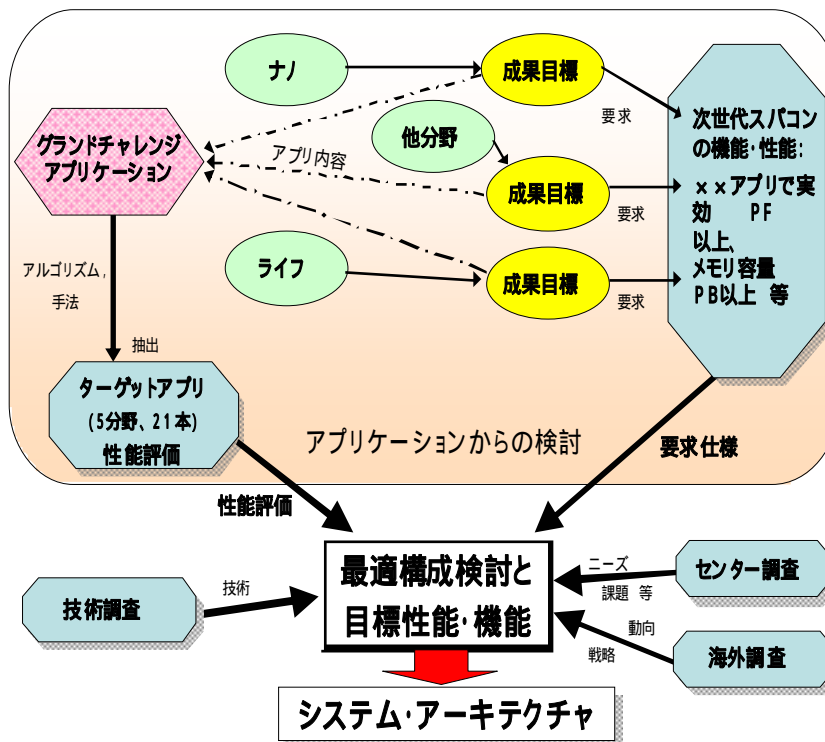
#### 【追加】

平成 20 年後半: 外部評価により、設計内容の適否を判断  
(変更理由)  
詳細設計終了時に詳細な技術評価を行い、製造のための投資の可否を判断す  
る。

2. 指摘事項への対応状況

| 平成17年度の事前評価における指摘事項  | 自己判定<br>(注)   | 対応状況と判定期理由 (文部科学省) | (事務局使用欄) |
|--|---|--------------------|----------|
| <p>ターゲットを明確にした開発の推進について<br/>10ベタ 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を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。</p> <p>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。</p> | <p><b>A</b></p> <p><b>〈 総合〉</b></p> <p>1-1. 開発の進め方 (資料2-2参照)</p> <p>次世代スパコン開発の第一の目的は、最先端の計算科学技術により我が国の科学技術・産業の競争力を高めることである。稼働開始が予定されている平成22年頃以降にペタスケールの計算を必要とする重要なアプリケーション・ソフトウェアを設定し、それらが最も効率よく動作するようにシステムアーキテクチャを決めることが必要である。</p> <p>このため、本プロジェクトでは、次の2つの方向からアプリケーション側の要求をシステムアーキテクチャ等に反映していくこととしている。</p> <p>(1) 既存のアプリケーションのうち将来的に重要なもの(=「ターゲット・アプリケーション」)を選定し、これらの実行速度をできるだけ上げるようにハードウェアの開発を進める。</p> <p>(2) 次世代スパコンの性能を最大限に引き出すことで画期的な成果を挙げるために新たに開発する「グランドチャレンジ・アプリケーション」の要求を取り入れてハードウェアの開発を進める。また、このためグランドチャレンジ・アプリケーションの実現に必要な機能を抽出し、ターゲット・アプリケーションの選定に反映する。</p> <p>また、今回の研究開発成果が普及しプロジェクトの目的が達成されるためには、アプリケーション・ソフトウェアの実行性能のみならず、消費電力や設置面積、コスト等もシステム最適化のための重要な考慮事項である。これらを総合的に勘案し、積極的に新規の技術に取り組みながら、システム開発を進めていくこととしている。(次頁図・システムアーキテクチャ決定までの概念図参照)</p> |                    |          |

図．システムアーキテクチャ決定までの概念図



1 - 2 . 進捗状況

本年1月以降、技術調査、スーパーコンピュータセンター調査等を実施し、メーカー、大学等との共同研究などを行なった結果、9月から2～3の有望な基本アーキテクチャ案について概念設計を行い、システムアーキテクチャの詳細な検討を進めることとしている。年度内には次世代スパコンの基本仕様を固める予定。

この間、理化学研究所に「アプリケーション検討部会」を設置し、4月までに21本のターゲット・アプリケーションの選定を行った。これらについてベンチマークテストプログラムを作成し、これまでに順次アーキテクチャ案の性能評価を行ってきた。今後の概念設計作業の中で評価を精緻化し、システム評価の重要な要素とすることとしている。(資料2 - 3参照)

Grand Challenge Applicationの開発の進捗状況については後述する。

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( 1 )を行うとともに、

## 2. 自己判定に至った理由

前述の通り、ターゲット・アプリケーションによる性能評価、グランドチャレンジ・アプリケーションからの性能要求、消費電力、コスト等を総合的に勘案して開発を進めることとしている。

### A 【 1 】

#### 1. グランドチャレンジ・アプリケーションの開発の概要と進捗状況

科学技術基本計画における重点推進分野で、かつ、計算科学技術の成果の幅広い活用が期待できるナノテクノロジー及びライフサイエンス分野を対象としてグランドチャレンジ・アプリケーションの開発を行うこととしている。また、具体的な研究開発課題は、分野別推進戦略において戦略重点科学技術として位置づけられている。

なお、それぞれの研究開発拠点に産学連携体制を構築し、研究成果の産業界への展開を図っていくこととしている。

##### (1) ナノテクノロジー(資料2 - 3 参照)

###### 目的

ベタスケールのシミュレーション技術により、ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性を解明し、予測することのできる計算科学理論・方法論を確立することで、ナノテクノロジー・材料分野はもとより、ライフサイエンス分野やエネルギー分野等との融合領域において、飛躍知の発見・発明にとどまらず、産業力の強化に繋げることを目的とする。

###### 研究開発の概要

次世代スパコンの能力をフルに活用し、電子・原子・分子からのアプローチに基づき、ナノスケールでの物質のふるまいについてのシミュレーションによって、革新的な新材料等の創出を可能とすべく、以下を実現するソフトウェアを開発する。

###### ( ) 次世代ナノ情報機能・材料

超大規模電子状態計算のための実用的計算手法等の確立により、10 ナノメートルレベルの基本ナノ部品(量子細線等)の特性の解析及び予測を実現するデバイスシミュレーション技術

###### ( ) 半導体、金属、カーボンナノチューブ等で構成されるポストシリコンを睨んだ超微細化技術を実現するナノ複合電子デバイス設計のためのシミュレーション)

###### ( ) 次世代ナノ生体物質

ナノスケールの生体物質(例えば、ウイルス等)について、原子

レベルから、構成する物質全体に至るまで、その動きや構造を現実の状態をふまえて解析を行う全原子シミュレーション技術

( 感染機構や免疫機構解明につながるウイルスとタンパク質・細胞膜との相互作用シミュレーション )

( )次世代エネルギー

バイオマスから化学エネルギーへの酵素または触媒を使用した高効率な変換のために、電子・原子レベルでの高速量子化学計算や現実の溶媒効果を取り入れた統計力学的理論等を踏まえた、化学反応シミュレーション技術

( 草本質系バイオマス(セルロース)からのエタノールの生成に欠かせない「酵素反応」のシミュレーション )

( )異種アプリケーション連携

上記( )、( )、( )のシミュレーション実行に必要な異種アプリケーション連携ツールの開発

( 必要に応じて異種アプリケーションの組み合わせ、結合、実行が容易に行なえるソフトウェア )

進捗状況

平成18年度は個別の方法論についての要素技術が確立しつつあり、並行して、それらを核とするグランドチャレンジ・アプリケーションの概念設計を進めている。

(2)ライフサイエンス(資料2-4参照)

目的

ペタスケールのシミュレーション技術によって、ライフサイエンスの諸課題解決にブレークスルーをもたらす新たな手段を提供し、生命現象の統合的な理解と医薬品・医療機器、診断・治療方法の開発に繋げる。

研究開発の概要

異なるスケール及びデータ解析の研究開発を有機的連携の下で統合的に進め、生体で起こる種々の現象を理解し医療に結びつけるためのソフトウェアを開発する。

( )分子スケールシミュレーション

量子化学、分子動力学、粗視化モデルの3階層を統合した生体分子のシミュレーション技術の開発

( 生物機能の解明、新規薬剤開発等のための「巨大生体分子複合体シミュレーション」 )

( )細胞スケールシミュレーション

細胞モデルの精緻化、細胞集団シミュレーション技術等の開発

|   |   |  |
|---|---|--|
| <p>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、<u>定量的かつ挑戦的な目標を定め( 2 )</u>、開発を進めることが必要である。</p> | <p>( 新規薬剤開発のための「薬剤反応シミュレーション」、脳梗塞等の予防及び治療に資する「血栓形成シミュレーション」)</p> <p>( )臓器全身スケールシミュレーション<br/>筋骨格、種々の臓器、循環器系、神経系等を備えた人体のモデル化技術の開発</p> <p>( リハビリや補助具開発のための人体運動シミュレーション、超音波や重粒子線による癌治療のための姿勢変化に伴う臓器移動予測、血栓などの疾患の治療、診断支援等)</p> <p>( )データ解析融合<br/>高度なデータマイニング技術に基づいた大量のゲノムや遺伝子発現データの解析技術とデータ同化によるデータとシミュレーションモデルの融合技術の開発</p> <p>( 個人差を考慮した投薬量・最適投与プロセス、創薬ターゲット・毒性関与パスウェイ探索法)</p> <p>(v)全体統合化<br/>各スケールのモデルとデータ解析の統合化を図る。<br/>( 「生命現象の統合的全体像の理解」に資するマルチスケールシミュレーション、高度診療統合システム)</p> <p>進捗状況<br/>提案公募方式により、8月18日に理化学研究所和光研究所が研究開発拠点となることが決定。同研究所では、「生命体統合シミュレーション研究委員会」を設置し国内の有力な研究者の参加を得るとともに、大学との共同研究も行き、オールジャパン体制で研究開発を行うこととしている。現在、研究開発の本格実施に向けた準備作業中。</p> <p><u>2. 自己判定に至った理由</u><br/>グランドチャレンジとして開発するアプリケーション・ソフトウェアの内容と目標を明らかにした。</p> <p><b>A 【 2 】</b></p> <p><u>1. 対応状況等</u></p> <p>(1)グランドチャレンジ・アプリケーションからのハードウェアへの計算能力の要求は次のとおり。また、今後、概念設計においても、アプリケーションの性能要求を取り入れてシステム仕様を決定していくこととしている。</p> <p>( )ポストシリコンデバイスを創出するため、10万原子系の電子・格子集団の電子状態の第一原理計算</p> |  |
|---|---|--|



実効3ペタフロップス

( )植物セルロースをエタノールに変換する酵素を設計するため、水中1万原子の酵素反応シミュレーション

実効1ペタフロップス

( )ウイルスの感染機構解明につながるウイルスとタンパク質・細胞膜との相互作用の解析のための1000万原子系の1μ秒の全原子シミュレーション

実効1ペタフロップス

( )数十万原子のタンパク質の動的構造解析(フォールディングのシミュレーション)

実効3ペタフロップス

( )脳梗塞など脳動脈や細動脈を再現する0.3mmの分解能の人体モデルのシミュレーション

実効1ペタフロップス

( )ヒトの遺伝子ネットワーク(数万遺伝子)のシミュレーション  
実効1ペタフロップス

(注)実効性能：アプリケーションを実行させた時の動作性能。これに対し、理論性能はハードウェアの理論上の最大性能。

(2)また、以下のとおり、アプリケーション開発と計算機システム開発が密接に連携する体制を構築している。

次世代ナノ統合シミュレーション開発については、分子科学研究所に設置されている「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア運営委員会」に理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部の開発グループディレクターが委員として参加している。

次世代生命体統合シミュレーション開発については、理化学研究所の副拠点長が次世代スーパーコンピュータ開発実施本部の開発グループディレクターを兼務するなど、アプリケーション開発とシステム開発が一体となった体制を理化学研究所に整備することとしている。

理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部の開発グループに「アプリケーションソフトウェア開発チーム」を設置し、システム開発とアプリケーション開発との連携をとるほか、アプリケーションのチューニング等のサポートを行うこととしている。

2. 自己判定に至った理由

計算機システムの開発において、アプリケーション開発者側からの定

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（ 3 ）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（ 3 ）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（ 3 ）ことが必要である。

量的かつ挑戦的な要求を踏まえ開発を進めているところであり、アプリケーション開発者と密接に連携して開発を進める体制となっている。

**A 【 3 】**

1. 対応状況等

アプリケーションの高速実行、大規模システムの運用・安定稼働を実現するための技術群について整理を行い（第1回検討会資料2-5参照）、他の研究開発プロジェクトの成果利用の可能性について検討を行っている。今後の概念設計作業において、次世代スパコンに適用する技術を検討し明らかにしていく。この際、「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プロジェクト」等で既に研究開発を行っている技術については、それらの成果の適用の可否についての検討を行うとともに、それ以外の技術については、必要に応じて新規に開発を行う。

2. 自己判定に至った理由

他の研究開発プロジェクトの成果利用の可能性について検討を行うとともに、概念設計作業において詳細な検討を行い、当該技術の最終的な適用の可否を判断することとしている。

また、先行する研究開発プロジェクトの成果を活用するのみならず、新規の技術に積極的に取り組んで開発を行うこととしている。

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。

A

## 〈 総合〉

### 1. 対応状況等

(1)システム構成の最適化にあたっては、以下の方針に沿って、低消費電力、低コスト等を実現しつつ、ターゲット・アプリケーションによる性能評価やグランドチャレンジ・アプリケーション開発からの性能要求に基づき、アプリケーション性能を極大にすべくシステム構成を最適化することとしている。

理論性能や Linpack を考慮しつつアプリ性能を重視する

汎用システムによる目標達成と並行してアクセラレータの検討も行う

低消費電力CPUなど新規性の高い技術をベースとした波及効果の高いハードウェア技術の開発を目指す

(2)これまでに、技術調査やスーパーコンピュータセンター調査を踏まえた上で、メーカー及び大学等との共同研究により、4種類の汎用システムと2種類のアクセラレータについて、ターゲット・アプリケーションによる性能評価を行ってきている。これらの案を絞込んだ上で、概念設計を行い、より詳細な評価とシステム構成の最適化を行って年度内に仕様を決定する予定。(次頁図「仕様決定に向けて」参照)

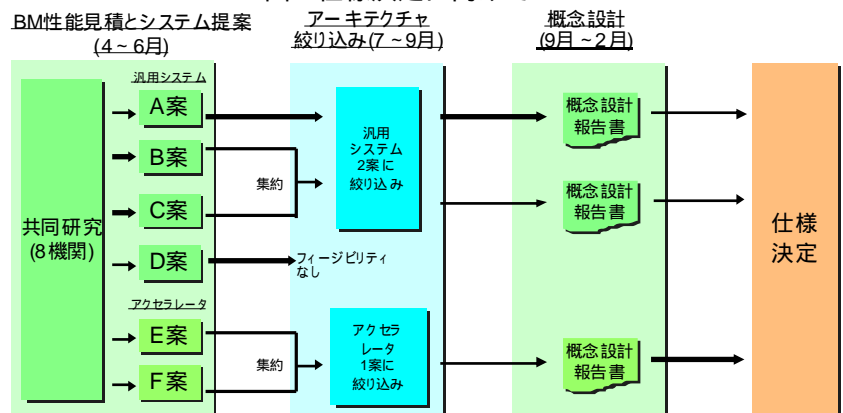
### 2. 自己判定に至った理由

目標達成の見通しがある4種類の汎用システムと2種類のアクセラレータの案を絞り込み、概念設計を行うことによって、理論性能、実効性能、消費電力、コスト等を総合的に考慮して計算機システムの構成の最適化を図ることとしている。

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、設備規格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なっていない( 1 )。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( 2 )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向きのものになる可能性がないか( 3 )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が必ずしも明確でなく( 4 )、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( 4 )。

このため、ハードウェア、ソフトウェアの

図．仕様決定に向けて



A 【 1 】 , 【 2 】 , 【 3 】 , 【 4 】

1. 対応状況等

( 前述 )

2. 自己判定に至った理由

前述のとおり、高い目標の汎用システムをベースとし、アクセラレータの検討も行いながら、システム構成の最適化を行っていくこととしている。

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( 5 )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( - 6 )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考慮( 7 )することも必要である。

A 【 5】 , 【 6】

1. 対応状況等  
( 前述 )

2. 自己判定に至った理由

昨年提示したシステム構成イメージを前提とはせず、技術調査やスーパーコンピュータセンター調査等を行い、ターゲット・アプリケーションによる性能評価、グランドチャレンジ・アプリケーションからの性能要求、消費電力、コスト等を総合的に勘案してシステム構成を最適化することとしている。

- 【 7】

1. 対応状況等

本プロジェクトにおいて最も優先すべきことは、グランドチャレンジ・アプリケーションをはじめとする将来的に重要なソフトウェアを次世代スパコン上で実行することにより、科学技術上の重要かつ画期的な成果を挙げることである。

今後、CPUがマルチコア化し多数の演算器を搭載するようになっていく中、ハードウェアの互換性確保とシステムの高効率化を両立させることは、技術上困難な状況となっている。また、今後ベタスケールで高効率な計算を行うためには、アプリケーションは、高並列化に対応して、新規に開発するか既存のものを大きく書き換えることが必須となる。

このため、本プロジェクトでは、ハードウェアの互換性の確保よりも、科学技術及び産業の競争力の向上にとって重要となる新たに開発するアプリケーションの実行性能を上げることをより重視して計算機システム等の開発を進めることとしている。

今回の開発の投資効率を高めるためには、将来のハイパフォーマンスコンピュータの標準となるようなシステムを開発し、下方展開により開発したハードウェアとアプリケーションの双方の普及を図るとともに、それを我が国全体の計算科学技術の向上に繋げることが重要。

|  |   |  |
|--|---|--|
| <p>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、<u>経費見積もりを厳格に行う( 8 )</u>とともに、<u>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( 9 )</u>が必要である。</p> | <p>A</p> <p><u>2. 自己判定に至った理由</u><br/> 多大な開発投資の無駄を生じさせないためには、将来的に重要なアプリケーション・ソフトウェアを次世代スパコン上で実行し、科学技術上の画期的な成果を挙げることである。そこに優先度を置いて、開発を進めている。</p> <p><b>【 8 】</b></p> <p><u>1. 対応状況等</u><br/> ( 前述 )</p> <p><u>2. 自己判定に至った理由</u><br/> 概念設計を通じて、設置面積(建屋建設コスト)、製造コスト、開発コスト、運用コスト(電力、保守費用等)などを詳細に見積もりシステム最適化に反映させることとしている。</p> <p>A</p> <p><b>【 9 】</b></p> <p><u>1. 対応状況等</u><br/> ( 前述 )</p> <p><u>2. 自己判定に至った理由</u><br/> 省電力化は特に重視して取り組む技術的課題として開発を進めている。また、設置面積や保守費用等についても概念設計において詳細に見積もった上でシステム構成を決定することとしている。</p> |  |
|--|---|--|

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り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( 1 )しつつ効率的に事業を遂行すべきである。

A **《 総合 》** ( 状況報告のみ )

1. 対応状況

本年9月より概念設計を開始し、本年度中には基本仕様を決定する予定。

本プロジェクトにおける重要な課題は、適切なアーキテクチャを決定することである。最適なシステム構成を決定するため、グランドチャレンジ・アプリケーション、ターゲット・アプリケーションからの要求を踏まえつつ、産業への波及効果や運用時のコスト縮減を考慮の上、性能評価を含む概念設計を行い、かつ、基本仕様の変更が最小限となるよう、フロントローディングを充実させて開発を進めている。

2. 自己判定に至った理由

効率的な投資を行えるよう対応している。

A **【 1 】** ( 状況報告のみ )

1. 対応状況

本プロジェクトにおける重要な課題は、適切なアーキテクチャを決定することである。このため、平成22年頃のペタスケールクラスのコンピュータを必要とする重要なアプリケーション分野を設定し、その中から次世代スパコンの性能評価に使用するターゲット・アプリケーションを選定した。次世代スパコンの概念設計の中でターゲット・アプリケーションの詳細な性能評価を行い、アプリケーションの性能面からの要求事項、条件や問題点等を基本仕様の決定前に洗い出すこととしている。このようなフロントローディングを行なうことで、最適なシステム構成を決定することができる。

また、国内スパコンセンターのニーズ等の調査を概念設計に先立って実施し、基本仕様の中に盛り込むこととしている。

なお、どこまでの作業をフロントローディングとするかの定義は、必ずしも明確ではないが、本プロジェクトでは、アーキテクチャの決定までが、フロントローディングの期間であると認識している。

平成17年度(着手時点)では、平成18年夏をアーキテクチャ決定時期とし、それまでにフロントローディングを完了させる予定でいた。その後、総合科学技術会議のご指摘も踏まえ、フロントローディングの充実を図り、その一環としてシステム構成を基本に立ち返って検討し直す

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( 2 )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( 3 )すべきである。

とともに、概念設計作業の結果に基づきアーキテクチャの決定を行うこととしたため、アーキテクチャの決定時期(=フロントローディングの完了時期)が約半年後ろにズレ込むこととなった。

なお、フロントローディングの期間は延長することとなったが、概念設計の終了時期やその後の開発スケジュールに遅れは生じていない。

## 2. 自己判定に至った理由

フロントローディングを充実させつつ効率的な開発を進めている。

### A 【 2 】 (状況報告のみ)

#### 1. 対応状況

本年1月より、技術調査、共同研究によるアプリケーション性能評価等を行いながら、計算機システムの基本アーキテクチャの検討、絞込みを行ってきた。その結果、前述のとおり9月から概念設計を行い、今年度中に最適なシステム構成を決め、基本仕様を決定することとしている。

## 2. 自己判定に至った理由

平成22年度末の運用開始に向けて開発の目的を最大限達成するため、システム構成の最適化に計画的に取り組んでいる。

### A 【 3 】 (状況報告のみ)

#### 1. 対応状況

平成19年度予算において、グランドチャレンジ・アプリケーションの開発に重点を置くよう予算配分の見直しを行うこととしているほか、産業界のニーズも踏まえた新規のアプリケーション開発や既存の重要アプリケーションの最適化等にも取り組んでいくこととしている。

また、基本ソフトウェアの本格的な開発はシステム仕様の決定後となるが、理化学研究所は、海洋研究開発機構及び筑波大学と基本協力協定を締結し、理化学研究所のRSCC(Riken Super Combined Cluster)のみならず、海洋研究開発機構の地球シミュレータや筑波大学のCP-PACS等の開発・運用経験等を活かしていくこととしている。

## 2. 自己判定に至った理由

予算配分の見直しを行うなど、重要なアプリケーション・ソフトウェアの高速実行を第一の目的としてプロジェクトを進めている。



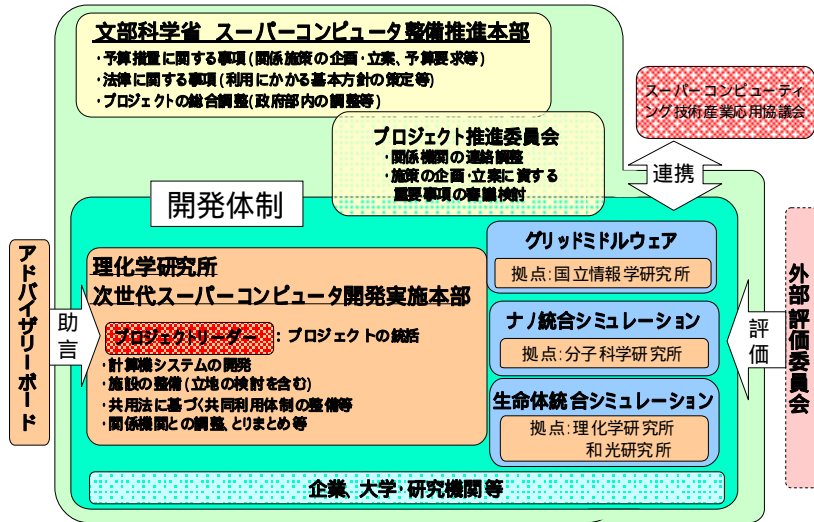
マネジメント体制の構築について

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。

A

〈 総合〉

プロジェクト体制



1 - 1 . 開発体制

次世代スパコンの開発・運用主体である理化学研究所を中心として、効率的・効果的にプロジェクトを実施する体制を構築している。

理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部においては、プロジェクトリーダーの統括の下、グリッドミドルウェア及びグランドチャレンジ・アプリケーションの開発と密接な連携をとりつつ、企業、大学等と協力して計算機システムの開発を実施する。

グリッドミドルウェアの開発は、NAREGIプロジェクトの成果の活用及び次世代スパコンの利用環境の効率的な整備を図るため、国立情報学研究所を開発拠点とし、全国の大学、企業等の有力な研究者・技術者が参加するオールジャパンの産学連携体制を構築して実施する。

グランドチャレンジ・アプリケーションの開発は、分子科学研究所及び理化学研究所（和光研究所）を開発拠点とし、全国の大学、企業等の有力な研究者や技術者が参加するオールジャパンの産学連携体制を構築して実施する。

グリッドミドルウェア、ナノ統合シミュレーション、生命体統合シミュレーション開発の各拠点との調整及び取りまとめは、理化学研究所が行うが、加えて、「プロジェクト推進委員会」を設置し、関係機関間の

調整の場とするとともに、必要な施策の実施等に関して文部科学省に対する提言等を行うこととしている。

また、産業界が設置した「スーパーコンピューティング技術産業応用協議会」と密接に連携し、本プロジェクトへの産業界のニーズの反映及び研究成果の普及・産業応用を図っていくこととしている。

#### 1 - 2 . 運用体制

運用については、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」(平成六年法律第七十八号)(以下、「共用法」)に基づき、特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針(以下、「共用の基本方針」)を告示し、運用のあり方について、産学の科学者・技術者コミュニティに対して、広く意見を募っているところ。これに基づき、策定される「共用の基本方針」に沿って運用体制の詳細が検討される予定。

#### 1 - 3 . 評価体制

開発体制とは独立して第三者評価<sup>(注)</sup>を行うため、科学技術・学術審議会の下部組織である情報科学技術委員会等を活用する予定。

(注)「評価の対象となる研究開発を行う研究開発実施・推進主体とは別の独立した機関が評価実施主体となる評価をいう。」

(「国の研究開発評価に関する大綱的指針」(平成17年3月29日内閣総理大臣決定)より抜粋)

#### 2 . 自己判定に至った理由

共用法の制定、施行により、次世代スパコンの開発・運用主体を法定するとともに、理化学研究所を中心としたプロジェクト実施のための実効的なマネジメント体制を構築した。

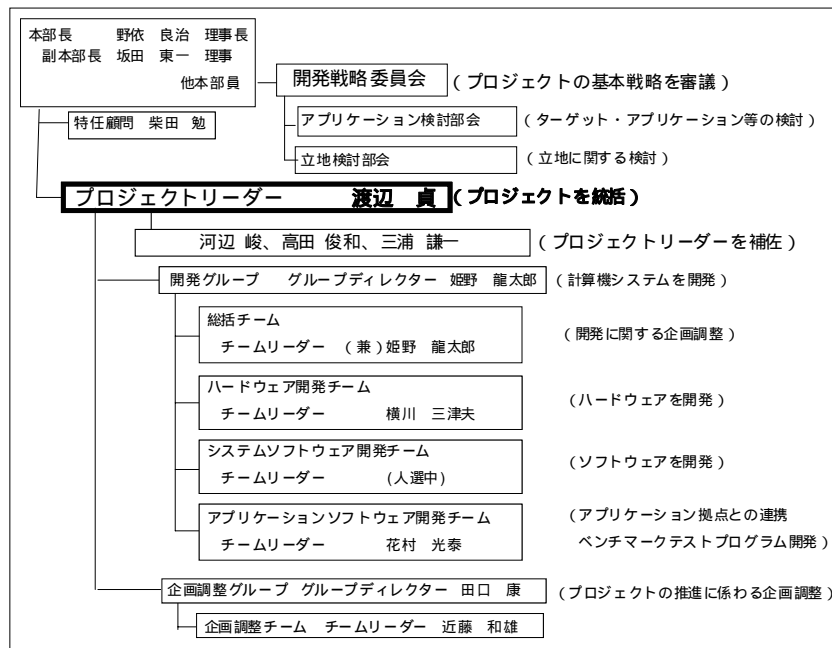
このため、整備主体と運用主体について、総括グループのプロジェクトリーダー、ソフトウェア開発グループリーダー、ハードウェア開発グループリーダー等の選定方法、選定基準を明確化（ 1 ）するとともに、それに基づく開発時及び運用開始後における権限と責任を明確化した上で、推進責任体制を速やかに構築（ 2 ）することが不可欠である。

A

【 1 】 【 2 】

1 - 1 . 理化学研究所における開発体制

理化学研究所 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部



(1)プロジェクトリーダー（第1回検討会資料2 - 6、第1回検討会資料2 - 7を参照）

渡辺貞プロジェクトリーダーは、国際的なレベルでスーパーコンピュータ開発を先導し、開発を統括する立場を長年経験したことを活かして、本プロジェクト全体を統括する。

同プロジェクトリーダーは、本プロジェクトの準備段階において、文部科学省が平成17年9月に公募を行い、本年1月に研究振興局研究振興官として任用された。本年7月、共用法が施行され、理化学研究所が同法で指定する開発主体となったことを受け、理化学研究所中心の開発体制へと移行し、8月、理化学研究所の次世代スーパーコンピュータ開発実施本部プロジェクトリーダーに就任した。

同プロジェクトリーダーは、平成17年12月まで所属していた日本電気株式会社から昭和58年に発売された同社における初代スーパーコンピュータ「SX - 2」の主設計者であり、当時世界最高速を誇った。

その基幹技術は現在発売中の「SX-8」にも引き継がれている。さらに同社の支配人として、スーパーコンピュータ事業執行における総責任者として、その手腕を発揮してきた。

(2)プロジェクトリーダーを直接支える人材(リーダー補佐)

(第1回検討会資料2-7を参照)

本プロジェクトは広範かつ多岐に亘る研究開発課題を解決しなければ実現困難なプロジェクトである。

このため、ハードウェア・システムソフトウェア、グリッドミドルウェア、アプリケーション・ソフトウェアの各分野について高度な専門知識を持ち、プロジェクトリーダーに匹敵する経験を有したリーダー補佐3名がプロジェクトリーダーにより選任され、進言・献策するとともに、プロジェクトに関係する大学・研究機関等との重要な調整等を行なっている。

(3)開発グループ

グループディレクター(第1回検討会資料2-7を参照)

次世代スパコンの開発・利用にはスーパーコンピュータセンターの開発・運用に関する十分な知識と経験が必要とされる。姫野理化学研究所情報基盤センター長は、RSCCの開発・運用について責任と権限を有し、スーパーコンピューティングに関する十分な知識と経験を持つ者である。理化学研究所が開発主体に選定されたことを受け、RSCCの開発・運用責任者である姫野情報基盤センター長が、同グループのグループディレクターに就任し、開発グループを統括している。

チームリーダー(第1回検討会資料2-7を参照)

チームリーダーについては、理化学研究所が広く有為の人材を募り、応募のあった人材の中からプロジェクトリーダー等による審査を経て、専門分野のチームリーダーとして相応しい知識・経験等が評価され、チームリーダーとして任用された。

2.運用体制(第1回検討会資料2-8、第1回検討会資料2-9を参照)

本年7月の「共用法」施行を受け、同法に基づく文部科学省告示「共用の基本的な方針」を公示したところ。なお、この告示に先立って、科学技術・学術審議会の下部組織として、次世代スーパーコンピュータ共用ワーキンググループを設置し、多様な利用者にとって使いやすく、優れた成果が生み出されるよう、次世代スパコンの共用に係る基本的な考え方等について調査審議を行った。

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（ 3 ）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共に、国際的な視点に立った評価を可能とするもの（ 3 ）である必要がある。

「共用の基本方針」は、次世代スパコンの運用後を視野に入れて策定すべきものであり、運用に際して必要となる事項については、今後、次世代スパコン整備の進捗状況に応じて検討を行い、改定することとしている。

文部科学省のウェブサイト等において、今後、次世代スパコン整備の進捗状況に応じて、「共用の基本方針」の検討を行うための意見を、産学の科学者・技術者コミュニティに対して、平成20年3月まで募っている。これを踏まえ、策定される「共用の基本方針」に沿って運用体制の詳細が検討される予定。

## 2. 自己判定に至った理由

理化学研究所に次世代スーパーコンピュータ開発実施本部を設置し、プロジェクトリーダーの統括の下、開発グループの各チームがハードウェア、システムソフトウェア、アプリケーションに関して役割を適切に分担して責任をもって開発を進めていくこととしている。

運用体制については、「共用の基本方針」を策定するための、意見募集を行っているところ。基本方針を踏まえて検討を行った上で計画的に体制を整備することとしている。

## 【 3 】

### 1. 評価体制

外部評価委員会は、開発体制とは独立して第三者評価<sup>(注1)</sup>を行うため、科学技術・学術審議会の下部組織である情報科学技術委員会等を活用する予定。

評価者は、スーパーコンピューティング分野に精通している国際的レベルの外部専門家<sup>(注2)</sup>や研究開発を取り巻く国内外の諸情勢について幅広い視野を有する国際的視点に立った評価が可能な外部有識者<sup>(注3)</sup>等で構成する。

設計がほぼ完了し製作に入る前（平成20年下期）に外部評価を実施する。評価の透明性を確保するために評価の手順を前もって公表するとともに、最終的な評価結果についてもできる限り公開する。

(注1) 評価の対象となる研究開発を行う研究開発実施・推進主体とは別の独立した機関が評価実施主体となる評価をいう。

(注2) 評価対象の研究開発分野及びそれに関連する分野の専門家で、評価実施主体にも被評価主体にも属さない者をいう。

(注3) 評価対象の研究開発分野とは異なる分野の専門家で、評価実施主体にも被評価主体にも属さない者をいう。

注1～3は、いずれも「国の研究開発評価に関する大綱的指針」（平成17年3月29日内閣総理大臣決定）による。

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（ 4 ）することも必要である。

A

## 【 4 】

### 1. 対応状況

理化学研究所においては、我が国の英知を結集して開発を実施するため、以下のとおり、アーキテクチャの検討に資する技術立案および分析・評価、ターゲット・アプリケーションによる性能評価、その他、次世代パソコン研究開発に有用と考えられる技術の評価等にあたり、外部の計算機工学者等の参画も得つつ、アプリケーション専門家、メーカーと密接に連携を図ってきたところ。

ナノテクノロジー、ライフサイエンス、ものづくり分野等各分野の我が国を代表する計算科学技術者で構成されるアプリケーション検討部会を設置し、ターゲット・アプリケーションによる性能評価をはじめとしてプロジェクトの実施にあたっての助言、協力を得ている。

共同研究機関を公募し、我が国を代表するメーカーや計算機工学者が所属する大学等の8機関の協力を得て、アーキテクチャの検討や性能評価等を進めている。

#### 【共同研究実施機関】

株式会社日立製作所

国立大学法人 九州大学

国立大学法人 東京大学

国立大学法人 筑波大学

大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 国立天文台

独立行政法人 海洋研究開発機構

日本電気株式会社

富士通株式会社

海洋研究開発機構、筑波大学及び国立情報学研究所と基本協力協定を締結し、地球シミュレータやC P - P A C S等の開発・運用経験等を活かすとともに、スーパーSINETによる利用環境の整備を図ることとしている。

また、グランドチャレンジ・アプリケーションの開発については、前述の通り、研究開発拠点を中心にオールジャパンの産学連携体制を構築するとともに、理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部と密接に連携を図る体制が構築されている。

|  |   |  |
|--|---|--|
|  | <p>2. 自己判定に至った理由</p> <p>開発主体である理化学研究所を中心に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が密接に連携している。</p>  |  |
| <p>その他</p> <p>数値風洞、CP-PACS、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、<u>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(1)、その下で、信頼性のある精緻なロードマップを作成(2)しておくことが必要</u>である。</p> <p>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、<u>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</u>というような中長期的な計画を明確に策定(3)することが必要である。</p> <p>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</p> | <p>- <b>【 総合 】</b> (状況報告のみ)</p> <p>1. 対応状況</p> <p>科学技術・学術審議会の下に置かれる委員会等において、文部科学省が所管するスーパーコンピューティング分野(注)全体の長期的戦略について、調査審議を行う。なお、総合科学技術会議が「第三期科学技術基本計画」・「分野別推進戦略」において、常設の「超高性能コンピュータ戦略委員会(仮称)」の設置について言及していることから、科学技術・学術審議会における議論を踏まえ、文部科学省として積極的に対応する。</p> <p>(注)スーパーコンピューティング分野全体としては次の通り。</p> <p>a)ハードウェア(計算機システム、アーキテクチャ、CPU、メモリ、周辺装置等)</p> <p>b)ソフトウェア(ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)用数値計算ライブラリ、プログラミング言語、ツール、データ管理、システム管理等)</p> <p>c)アプリケーション(ライフサイエンス、ナノテクノロジー・材料、情報通信、地球・環境、ものづくり、フロンティア、エネルギー等の各分野)</p> <p>d)ネットワーク(グリッドコンピューティング技術を含む)</p> <p>2. 自己判定に至った理由</p> <p>総合科学技術会議が「第三期科学技術基本計画」・「分野別推進戦略」において、「超高性能コンピュータ戦略委員会(仮称)」の設置について言及していることから、今後、文部科学省と総合科学技術会議事務局との間で調整が必要。</p> <p>- <b>【 1 】</b> (状況報告のみ)</p> <p>同上</p> |  |

|   |   |  |
|---|---|--|
| <p>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</p> | <p>- 【 2 】 (状況報告のみ)<br/>同上</p> <p>- 【 3 】 (状況報告のみ)<br/>同上</p> |  |
|---|---|--|

(注) 自己判定の基準

A : 完全に対応している

B :

C : } AからEまでの間を、判定者の物差で等間隔に区分して判断。

D :

E : まったく対応していない

: 判断できない