

最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用 (追加説明資料)

平成 19 年 7 月 6 日

文部科学省

1. システム性能について

**(1) “HPCC Award 4 項目”でトップなら OK とする根拠を明確に。
それで世界が認めてくれるか。**

昨年 10 月の総合科学技術会議によるフォローアップ時における議論及び本年の文部科学省の次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会（以下、「作業部会」という。）における議論等を踏まえ、開発プロジェクトの目標については、

多様なアプリケーションの実効性能の評価に資するものであること
ある程度世界的にも認知されていること

との視点から、「HPCC Award 4 項目(G-HPL、G-RandomAccess、EP-STREAM/system、G-FFT)^{注1)}において最高性能を達成する」こととした。

HPCC は、米国国防総省高等研究計画局(DARPA)の HPCS(High Productivity Computing System)プログラム^{注2)}で開発されたベンチマークであり、このうち、HPCC Award 4 項目は、システムの全体性能を評価するもので、これらの性能値が最高位のシステムは、毎年米国で開催されるスーパーコンピューティング国際会議(IEEE&ACM 主催、参加者 7000 名規模)において表彰されている。

現時点で、4 項目の全てにおいて最高性能を有しているのは BlueGene/L であり、これは Linpack 性能での首位と合わせて、世界的に最高性能と認められていることから、「HPCC Award 4 項目において最高性能を達成」したシステムは世界が認めるものと考えている。

注 1) G-HPL: LINPACK により主として CPU の総合性能を評価
 G-RandomAccess: 主としてネットワーク性能を評価
 EP-STREAM/system: メモリの総合転送性能(バンド幅)を評価
 G-FFT: 主として CPU とネットワークの性能を評価

注 2) HPCS プログラム: DARPA が主導するスーパーコンピュータ開発プロジェクト。2010 年までに、計算機性能のみならず、より総合的な生産性を重視したペタフロップス級のスーパーコンピュータを構築。

(2) 10PF をターゲットに開発することになっているが、世界の動向は流動的であり、予想以上に進歩が早い。世界最高速をうたうのであれば、適当な時期に最終ターゲットを見直すなど、より柔軟な対応をする必要があるのではないか。

10 ペタ FLOPS の性能目標については、作業部会でも議論があり、報告書では、次のとおり言及されている。

「Linpack 10 ペタ FLOPS の達成については、本システム構成案において達成可能であると考える。平成 23 年 6 月のランキング第 1 位の獲得については、世界的な開発競争の中で不確定要素を含むものであることから、将来的なシステムの拡張に対応できるようなシステム設計が望まれる。」

現在のシステム構成案については、作業部会の報告書でも、十分な拡張性を有するものと評価されているが、今後、海外において、我が国の計画を上回る性能のスーパーコンピュータを開発する計画が明らかになった場合には、文部科学省としては、最終目標について、柔軟に検討することも考慮したい。

2. 複合システム選択の根拠について

文部科学省の評価において理研案の複合システムがベストであると評価した根拠を、以下の各項目に触れつつ、目標（Linpack10 ペタ Flops、Top500 で首位を奪取、HPC Award4 項目で首位）の達成、設置面積や、消費電力の制約、開発するシステムの革新性・発展性・普及性、技術開発上のリスク等を俯瞰して、論理的に説明してください。

複合システムによるプロジェクトの目標の達成可能性については、作業部会は、Linpack 性能 10 ペタ FLOPS の達成は可能であると判断した。作業部会は、HPCC Award 4 項目での最高性能の達成についても、ほぼ妥当であると評価した。

また、システム構成案を実現するための要素技術については、システムの製作時期までに開発可能であり、スケジュールに従いシステムの開発を進めることが可能であると判断した。

さらに、作業部会においては、この複合システムに関して、多様なアプリケ

ーションの効率的な実行、 高い拡張性と下方展開性、 技術オプションの確保による技術力の強化と国際競争力の向上等の観点から、非常に有効であるとの評価を行った。

下方展開性については、作業部会では、システム構成案を基に、大学や研究機関向けの計算機に下方展開することは可能であると判断した。具体的には、本システムの各演算部を下方展開した場合、大学や研究機関のスーパーコンピュータセンターが必要とする演算能力を許容範囲内の設置面積や消費電力で実現可能である。また、機関ごとのニーズに合わせて、複合システム型、スカラ型、ベクトル型それぞれの構成により、計算機の構築が可能であり、有用性が高い。(第1回評価検討会資料 2-10 P16 参照)

また、作業部会は、世界的傾向に沿ったスカラ部と、従来から我が国の技術が強みを有するベクトル演算機構を持つベクトル部とを合わせて開発することで、独自の技術を維持しつつ世界で認められる計算機を開発する基盤を強化するとともに、LSI 製造技術のみならず、論理 LSI アーキテクチャの設計技術力の強化に寄与するものと期待している。また、3社との共同開発による複合システムを推進することも、技術力の強化に資するとも指摘している。(第1回評価検討会資料 2-10 P14-15 参照)

- (1) ベクトル型一本に絞り込めない理由を明確に。世界の主流であるスカラ型では勝負できないということか。
- (2) 消費電力あたりの Tera Flops 値でスカラ部とベクトル部を比較した図には説得力があった。主要な 7 つのアプリケーションで、ベクトル部が必要となる妥当性に関する第 1 回評価検討会への質疑応答は不明確で難解であった。同じ図をつかって明確な理由を述べてほしい。
- (4) ベクトル部とスカラ部の消費電力性能比を考慮すると、7 つのアプリケーションのベンチマークによるベクトル部とスカラ部の優位性の比較に関する説明には、説得力がない。
- (6) スカラ部とベクトル部を個別に切り離して開発してもよいのではないか。

理化学研究所（以下「理研」という。）においては、概念設計の過程において、ベクトル型及びスカラ型の性能を比較したところ、両提案がいずれも要求仕様（ピーク性能 10 ペタ FLOPS 以上、消費電力 30MW 以下、設置面積 3,200m² 以下等）を満足すること、主要 7 本のターゲット・アプリケーションによるベンチマーク・テストによる性能推定を行った結果、アプリケーションのプログラム特性に応じて、スカラ部及びベクトル部のいずれかが優れていること、総合的には両者の性能がほぼ同程度であると判断されることが示された。

隣接作用を重視したターゲット・アプリケーション（実空間密度汎関数法 RSDFT など）では、スカラ部が適しており、メモリへの連続アクセスや大きなメモリ空間を必要とするターゲット・アプリケーション（雲解像大気大循環モデル NICAM 及び航空機設計における乱流解析コード LANS）では、ベクトル部で高性能が得られた。

一方、多くの利用者がいる PC クラスタや並列サーバによる開発・実行環境からの連続性、プログラムの移植性を重視すると同時に、地球シミュレータなどベクトルプロセッサ向けのプログラム資産の有効利用を図ることも重要と考えられる。この面からも、スカラ部及びベクトル部から成る複合型システムは多様なユーザーのニーズに適するものと評価できる。

また、例えば太陽電池設計など、スケールの異なる現象が複雑に絡み合った系のシミュレーションにおいては、構成要素毎に異なるシミュレーション手法が必要とされ、それぞれの要素に対するシミュレーション手法に適した効率の良い演算部を選択することにより、全体のシミュレーション時間の短縮が図られ、この結果、設計期間の短縮が見込まれる。このため、スカラ部及びベクト

ル部を切り離さずに開発することが適当である。

作業部会は、複合システムについて、目標達成が可能であることを確認するとともに、汎用性の確保や、将来予想される複合システムの発展性、スカラ及びベクトルの両技術の維持による技術戦略的な優位性等を総合的に考慮して、当該システム構成案は適切であるとの判断に至ったものである。

- (3) 文部科学省の議論の中でスカラ部だけでも十分という意見はなかったのか。
- (5) スカラ部とベクトル部の開発コスト配分額の開示。Peta Flops あたりの開発コストが、ベクトル部がスカラ部より大きい場合は、問題になるであろう。
- (7) 性能評価結果は大差ないように見えたが、システムアーキテクチャ候補の絞り込みの結果、2 企業グループを採用することの妥当性。
- (8) システム構成の評価において、NH 案、F 案および統合案の3 者について、開発困難性、開発スピード、開発コストの観点から、十分な議論と的確な評価がなされたか。

作業部会においては、複合システムとすることの得失や、スカラ部又はベクトル部のみでシステムを構成することの可能性についても、議論が行われた。また、開発スケジュールや費用対効果等については、それぞれの場合の比較が行われた。その結果、いずれの場合もスケジュール通りの開発が可能であるが、費用対効果については、複合システムとした場合にはスカラ部又はベクトル部単独でシステムを構成した場合と比較し、民間負担分は増加するが、投入する国費が同等であること、システムの汎用性が向上するなど、投入する国費に対する効果は大きくなることが確認された。

なお、複合システムの製作費については、ペタ FLOPS あたり、スカラ部とベクトル部でほぼ同等である。

3．開発システムの革新性、発展性、普及性等について

(1) 文部科学省による評価において、システム構成案の革新性について「新規の系統の技術という観点においては、限定的」、また「コンピュータ技術は積み重ねで成り立っており、独創的なだけでは技術として定着しない」という留意点が、本研究開発の進展に与える重要度について説明を求めたい。これらの留意点をクリアすべき方策を組み込む必要はないのか伺いたい。

一定の期間の中で具体的な目標を掲げ、その達成を目指す本件のようなプロジェクトにおいては、確実に目標を達成するべくプロジェクトを進めることが最も重要である。技術力と国際競争力を強化するためには、革新的な技術に挑戦することも必要であるが、本件のようなプロジェクトにおいては、まずは確実に目標を達成できる技術を採用することを重視すべきものとする。

作業部会の報告書では、スカラプロセッサ、ベクトルプロセッサ、ネットワーク構成、両演算部のアーキテクチャなどについて、革新性の高い部分があると評価されている。同時に、「両プロセッサについては、基本的に従来のプロセッサ構成の延長上にあることから、改良はなされているものの、新規の系統の技術という観点においては、革新性は限定的である。一方、コンピュータ技術は積み重ねで成り立っており、単に独創的なだけでは、技術として定着しないことにも留意すべき」とされている。

これは、従来のプロセッサ構成をベースに目標性能を達成しつつ、できるだけ革新性のある改良を加えることで、着実にシステムを開発するという本システム構成案の実現方法が、確実性の高い技術開発戦略として適切であると評価しているものとする。

(2) 次世代でも世界をリードするためには、今からそれへの準備が必要である。このマシン選択が、それにどう繋がるかの根拠を聞きたい。例えば、今回の次のプロセッサ開発を考えると、現方式選択がそれに向けて適切である根拠、また、今回の2種のプロセッサ開発が、今後の諸分野における発展的で様々な用途を開くプロセッサ開発にどのように繋がるか、などに対する検討結果を聞きたい。

本システム構成案により開発を進めることについて、作業部会は、次のように評価している。

- ・世界的傾向に沿ったスカラ部と、従来から我が国の技術が強みを有するベクトル演算機構を持つベクトル部を合わせて開発することで、独自の技術を維持しつつ世界で認められる計算機を開発する基盤を強化する。
- ・両演算部のプロセッサ構成や柔軟なネットワーク構成等に発展性が認められる。特に光インターコネクト技術は、少なくともシステムワイドなネットワーク技術として発展する可能性が高い。一方、ベクトル部におけるベクトル型 CPU については、種々の境界条件・制約条件の下での最適性を追求して設計されたものであり、本システムの開発を通じてソフトウェア面での技術蓄積・発展がなされれば、ベクトル型の新たな発展につながる可能性が高い。

一方、本プロジェクトにおいて開発されるプロセッサは、低消費電力、高性能という特性を活かし、サーバ等の情報機器に使われていくことが期待される。また、このプロセッサ用に開発された低電力・高性能半導体技術は、ルーター等のインターネット機器など、多くの情報機器の半導体チップに活用されていくことが期待される。

なお、文部科学省においては、次世代以降のスーパーコンピュータを見据えたより長期的な視点に立った研究開発にも取り組んでいるが、これらについても着実に推進していく考えである。

(3) スカラ部とベクトル部をもつ複合システムは現在殆ど普及していないというニュアンスの説明であったが、今後世の中に普及する可能性はあるのか？ 普及する可能性が少ない場合、トータルシステムソフトウェアの実現にコストをかける必要があるのか。

複合システムは、作業部会の報告書において、多様なアプリケーションの効率的な実行、高い拡張性や下方展開性、技術オプションの確保による技術力の強化や国際競争力の向上等の観点から、非常に有効であると評価されている。

その発展の可能性については、例えば、米国においても、DARPA が HPCS (High Productivity Computing Systems) プログラムにおいて Cray が提案している複合システムを採用するなど、複合システムは HPC システムの有力な将来像の一つと考えられている。

また、国内においても、平成 18 年にスーパーコンピュータを有する全国 25

の大学・研究機関を対象に行った調査によると、平成22年度以降の導入計画について回答のあった12ヶ所のうち、想定するアーキテクチャを検討中とした4ヶ所を除き、具体的な回答のあった8ヶ所の全て（スカラー型＋ベクトル型は5ヶ所）で何らかの複合システムの導入を検討しているとの結果であった。

トータルシステムソフトウェアは、複合システムを効率的に運用し最大限に活用するための鍵であるが、前述のようなスーパーコンピュータに対する国内外の状況を踏まえると、今回の開発プロジェクトが成功すれば、複合システムが普及する可能性は十分にあると考えている。

なお、作業部会の報告書においても、「本システムを一体的に運用するためのトータルシステムソフトウェア開発は非常にチャレンジングであるが、本プロジェクトにおける同ソフトウェアの開発は本システムの成否を左右するものであり、また、当該分野における技術開発が促進され我が国の技術力を向上させる効果が期待できることから、詳細設計段階での十分な検討を期待したい」と指摘されている。

4．開発計画、項目、資源分担について

（１）複合機選択の根拠について、片方を選び、それに全資源を投入する場合(相互接続のソフトが不要)との比較を説明してもらいたい。相互接続ソフトが完成した場合のそのライフタイムや利用効果はどれくらいと想定しているか。

複合システムの選択根拠については2．で述べたとおり。概念設計に当たっては、Linpack 10 ペタ FLOPS の性能目標を、消費電力、設置面積等の制約条件を満たしつつ確実に達成するべく、実際に開発及び製造にあたるメーカーと協議を行ってきた。その結果、開発費用については、複合システムとした場合は、どちらか一方のメーカーを選択した場合に比較して開発総額は高くなるが、国費投入額は変わらない。これは、システムの規模がやや大きくなるためにプロジェクト総額が増加する一方、参加するメーカー数の増加により全体としてメーカーの負担分が増加すること及び各メーカーも各負担分をやや増加させたことによる。

トータルシステムソフトウェアは、計算資源の管理、ソフトウェア構成の管理、障害管理、ジョブ状況の表示等を両演算部について統合的に実施可能とす

るものであり、本システムの効率的な運用に不可欠である。また、3.(3)で述べたとおり、本システムの他にも複合システムのニーズが存在することから、トータルシステムソフトウェアの開発意義は高いものとする。

(2) CPUは2種類開発するのか。

CPUについては、世界的主流となっているスカラ型プロセッサに演算加速機構を付加したプロセッサと、我が国が強みをもつベクトル型プロセッサの改良型となる新しい汎用プロセッサの2種類を同時に開発する。

(3) 45nm プロセスなど全体スケジュールの遅延につながる要素に対する対策。

(4) 45nmLSIの開発がキーとなるが、開発スケジュールは大丈夫か。スケジュールキープのための施策は。

作業部会においては、本プロジェクトは、45nm 半導体プロセス技術の実用化時期やそれを踏まえた CPU の製造など、プロジェクト全体のスケジュールの遅延につながりうる要素を含んでいると認識されているが、論理 LSI の速度性能に大きな影響を有する電界効果トランジスタの実効ゲート長の観点に着目すれば、45nm 技術相当の速度性能を持つ LSI の実現の可能性は十分に期待できると評価されており、現時点では実現可能であると理解している。

ただし、計画については、詳細設計の終了や製造段階等の節目の時点における状況を見ながら、今後とも、柔軟に検討することが必要であると考えている。

(5) スカラ部の CPU あたりの消費電力は、実現できれば世界の市場をリードできる。一方で目標設定が若干高すぎるという危惧もある。詳細設計がまとまった時点で、仮に実現可能でない場合のフォローアップ対策（下方修正の許容範囲と開発打ち切りの基準）を明確にして欲しい。

消費電力については、国内の大学や研究機関におけるスーパーコンピュータセンターの受電設備容量は約 1.5MW 以下、設置面積は約 600 m²以下であることを考慮し、それらのセンターに対する下方展開性が確保されるよう決定したものである。作業部会においても、部品単位の水冷技術を用いて CPU の動作温

度を低く保つことにより消費電力を低減化していることから、大学や研究機関のスーパーコンピュータセンターが必要とする演算能力を許容範囲内の設置面積や消費電力で達成できると判断している。

なお、理研においては、詳細設計を十分な工程管理の下、進捗状況を把握しながら進め、詳細設計がまとまった時点で、設計製造日程や目標の達成度などを勘案して、必要に応じて柔軟な対応を行うこととしている。文部科学省としても、フォローアップを含む適切な評価を適宜行い、プロジェクト遂行のための適切な対策をとることとしている。

(6) 資料 2 - 6 の全体スケジュールにあるファイルシステムについて、資料 2 - 4 には項目がないのはなぜか？

ファイルシステムに係る見積額は、ハードウェアの見積額に含まれる。

5 . 海外の研究開発動向について

(1) Blue Gene/Q のシステム構成はどう推測しているか。

BlueGene/Q のシステム構成についての公開資料はないことから、作業部会において、特段、推測は行わなかった。

なお、BlueGene シリーズの開発動向からすれば、スカラ型で、全体システムの理論性能は約 10 ペタ FLOPS と推測している。

6 . システムソフトウェアについて

(1) トータルシステムソフトウェアの開発責任体制。

トータルシステムソフトウェアの開発にあたっては、開発体制を早期に確立するとともに、着実な開発を進めることが重要である。このため、理研においては、トータルシステムソフトウェアの開発について、同研究所の管理・監督の下、開発全体に責任を負う幹事会社を決定し、幹事会社を中心とした共同開発を実施する体制を確立することとしている。

(2) グリッドミドルウェアの開発の進捗状況を聞きたい。

次世代スーパーコンピュータと大学等や研究機関が有しているコンピュータを超高速ネットワークで接続し、ソフトウェア、コンテンツ及びデータベース等を共有するサイバー・サイエンス・インフラストラクチャ（CSI）構想の実現に当たっては、計算資源やデータの共有基盤形成に不可欠なグリッドミドルウェアの開発は極めて重要である。

グリッドミドルウェアの開発においては、複数の組織が有する計算資源の管理機能や相互認証を可能とするセキュリティ機能、及び超高速ネットワークを介して大容量のデータの転送・複製・共有・検索を可能とするデータグリッド機能等の開発を、国際標準に基づいて行ってきた。

現在、次世代スーパーコンピュータを共同利用する環境の整備を視野に入れ、大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所（以下「分子研」という。）及び国立大学の情報基盤センター群の一部に開発中のグリッドミドルウェアをインストールし、運用に向けた実証・評価・改良を実施している。

今後、全国の計算資源の有機的連携を目指す CSI 構想の具体化に合わせ、ユーザーのニーズを反映させながら、次世代スーパーコンピュータのシステム構成も勘案して、グリッドミドルウェアにおいて開発すべき機能等についてさらに検討していくこととしている。

7. グランドチャレンジアプリケーションについて

(1) ソフトウェア開発費用のうち 97 億円がグランドチャレンジアプリ分だが、その課題ごとの大まかな内訳と主担当は。

- 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
(平成18～22年度)

課題	見積額(億円)	主担当
次世代ナノ情報機能・材料	4.7	東大物性研 常次教授
次世代ナノ生体物質	2.2	分子研 岡崎教授
次世代エネルギー	2.4	分子研 平田拠点長
計算機運用、ソフトウェア作成 等	11.0	—
合計	20.3	—

- ・以上のほか、平成15～17年度において、「超高速コンピュータ網形成プロジェクト」の一部として、シミュレーションソフトウェアの開発やグリッド実証を行った。

開発コスト：14.4億円

- 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
(平成18年～24年度)

課題	見積額(億円)	主担当
分子スケール	7.5	横浜市大 木寺教授
細胞スケール	7.0	川崎医療福祉大 梶谷教授
臓器・全身スケール	7.5	理研 高木チームリーダー
データ解析融合	7.0	東大 宮野教授
新規課題(年内に公募予定)	9.0	—
計算機運用、ソフトウェア作成 等	39.7	—
合計	77.7	—

(以上の額は、現時点での見積額であることから、今後変更があり得る。)

(2) 中核アプリケーションの開発とそれをグランドアプリでのブレークスルーにつなげていくマスタースケジュールは。

グランドチャレンジアプリケーションの研究開発においては、産業界や大学・研究機関との共同研究等により、多様なニーズに対応したシミュレーションソフトウェアの研究開発を行う。開発されたシミュレーションソフトウェアは、例えば新薬の開発や新材料の開発等に活用され、製品開発の迅速化や先端研究の活性化等の観点で大きなブレークスルーをもたらすものと期待される。

「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」においては、グランドチャレンジアプリケーション課題を達成するために不可欠な共通基盤的シミュレーションソフトウェアである6本の中核アプリケーションと連携ツール、及び多様な機能付加ソフトや解析ソフトを開発する。そして、ナノ電子デバイス、ウィルス、酵素反応など研究目的に応じてこれらを連携させることにより、平成22年度末までに、ペタフロップス級の計算環境における産業界のニーズに合ったシミュレーションを可能とするソフトウェアを開発する予定である。

「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」においては、分子スケール・細胞スケール・臓器全身スケール・データ解析融合の各研究チームが平成20年度までに基盤アプリケーションを開発、平成22年度までに、疾患や血栓・梗塞の解明など研究目的に応じてそれらを連携させるソフトウェアを開発する。平成23年度以降の次世代スーパーコンピュータ稼働後にプログラムの高度化を重ね、平成24年度までに創薬や新規の医療技術の実用化に役立つシミュレーションソフトウェアを完成させる。

これに向け、平成19年度より、理研和光研究所（以下「和光研」という。）にアプリケーション開発支援チームを設置して、ナノ・生命体の両グランドチャレンジで共通に用いるソフトウェアの連携、研究者に対するプログラムの並列化・高性能化の支援、エンドユーザーとなる産業界等のニーズの吸収とアプリケーションの利用促進に向けた取組み等を実施する。

さらに、理研開発実施本部におかれたアプリケーション開発チームにおいて、グランドチャレンジアプリケーションが次世代スーパーコンピュータ上で効率的に性能を出すための技術支援等を行う。同開発チームでは、システム構成案が固まりつつあることを受け、分子研及び和光研のグランドチャレンジアプリケーション開発者とともに、開発するアプリケーションソフトウェアを次世代

スーパーコンピュータ上で効率良く動作させるための技術的検討（双方の役割分担を含む）を開始したところである。

（３）上記のうち本スパコンPJの責任範囲はどこまでか。

本プロジェクトは、「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」、「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」により、次世代スーパーコンピュータの能力を活用し、大きなブレークスルーをもたらすシミュレーションソフトウェアを開発し、それを普及させることを目的としている。（その後の製造までをプロジェクトの対象とするものではない。）

この目的を達成するため、産業界や大学・研究機関の多様なニーズの把握に努めるとともに、これらのニーズを踏まえた理論・方法論等の研究、産学連携によるソフトウェアの高度化・実証を行うこととしている。

（４）グランドチャレンジアプリの開発については、理研の開発実施本部はどこまで責任をもつか。

グランドチャレンジアプリケーションの開発は、開発拠点である分子研及び和光研が、文部科学省からの委託を受けて実施しており、一義的な開発責任は両開発拠点にある。

ただし、グランドチャレンジアプリケーションの開発は、計算機システムの開発と密接な連携のもとで行っていくことが必要である。そのため、理研の開発実施本部においては、ターゲットアプリケーションの選定やシステム構成案の検討の際に、グランドチャレンジアプリケーションの開発者のニーズや意見を取り入れながら進めてきた。

また、理研開発実施本部の開発グループグループディレクターが、次世代ナノ及び次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発の運営委員会に参画するとともに、開発実施本部のアプリケーション検討部会には、次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの開発拠点長が参画するなど、両者が連携を図りながら開発を進めていく体制を整備している。

さらに、理研開発実施本部のアプリケーション開発チームは、グランドチャ

レンジアプリケーションが次世代スーパーコンピュータ上で効率的に性能を出すための技術支援等を行う。同開発チームでは、システム構成案が固まりつつあることを受け、分子研及び和光研のグランドチャレンジアプリケーション開発者とともに、開発するアプリケーションソフトウェアを次世代スーパーコンピュータ上で効率良く動作させるための技術的検討（双方の役割分担を含む）を開始したところである。

（５）ハードウェアおよびシステムソフトウェアと比較して、グランドチャレンジアプリケーションの開発体制や開発コストについての議論と評価は充分であったか。

グランドチャレンジアプリケーションの研究開発においては、分子研及び和光研を拠点機関とし、全国の大学等との連携を構築するとともに、その運営に当たり民間企業、大学及び研究機関からの意見を取り入れる、適切な産学連携体制が構築されているものとする。

なお、作業部会はハードウェアのシステム構成案を評価するために設置したものであることから、グランドチャレンジアプリケーションの開発体制や開発コストについてまで評価は行わなかったが、グランドチャレンジアプリケーションを含めた幅広いアプリケーションにおいて十分な実効性能が得られるかという観点からは評価を実施し、その結果、本システム構成案が妥当であるとの結論に至った。

（６）資料２－１の２頁と３頁冒頭にある、ナノテクノロジー分野の記述は、全く乖離しているがこれでよいのか疑問。

同資料３頁でアウトカムとして挙げたものは一例である。なお、２頁にプロジェクトにおけるアプリケーションの達成目標として例示した、「全く不可能だった酵素反応解析が実現可能になる。」ことについてアウトカムを示すとすれば、以下の通り。

近年、次世代エネルギーとしてバイオマスエタノールが脚光を浴びているが、すでに食糧資源との競合などが問題となっている。そこで食糧資源と競合しない、セルロースからのエタノール生成が不可欠となる。

セルロースからのエタノール生成にはセルラーゼによる酵素触媒反応が有効であるが、反応効率は高くない。本研究開発においては、シミュレーションにより理論的に酵素反応を解析することによって、より効率の高い反応設計を行う。このためには酵素反応には酵素による分子認識の問題や溶媒との相互作用、化学反応などが複雑に絡み合うため 3D-RISM 理論と FMO 法を組み合わせた統計力学的・量子力学的アプローチが必要になる。

この方法はすでに小さいタンパクの分子認識などに適用され多大な成功を収めているが、ここでターゲットとしている酵素触媒反応は巨大な分子の多くの自由度を扱わねばならないため、これまでの計算資源では実現は不可能である。実際、従来の計算機を用いると、計算に 100 年以上かかると試算されている。

しかしながら、次世代スーパーコンピュータの導入によって、約 20 日と現実的な時間での計算が可能になり、高効率酵素触媒反応の設計が可能になる。

これにより、セルロースからのエタノール生成に有用なより効率の高い酵素触媒反応の設計が可能となり、エタノール生成に技術的な見通しを与えることができるようになる。(資料 2 - 21 参照)

8 . 本技術の波及効果等について

(1) 国内各拠点の制約 (設置面積 600 m²以下、電力 1.5MW 以下) のなかで、本複合システムが有効な拠点はどの程度有るか。

理研では、国内の大学や研究機関が 1 ペタ FLOPS 程度の計算性能を有する計算機を導入する場合を想定し、それらにおけるスーパーコンピュータセンターの設備要件を考慮して概念設計を行っており、本システムの下方展開性にも十分配慮している。

平成 18 年の国内の大学や研究機関 (25 ヶ所) におけるスーパーコンピュータセンターに関する調査によると、平成 22 年度以降の導入計画について回答のあった 12 ヶ所のうち、想定するアーキテクチャを検討中とした 4 ヶ所を除き、具体的な回答のあった 8 ヶ所の全て (スカラ型 + ベクトル型は 5 ヶ所) で何らかの複合システムの導入を検討しているとの結果であった。

また、海外においても、例えば、米国 DARPA が HPCS プログラムにおいて

Cray が提案している複合システムを採用するなど、複合システムは HPC システムの有力な将来像の一つと考えられている。

このため、本システムが開発されれば、相当程度のセンターにおいてそれをベースとした複合システムが採用されるものと考ええる。(地球シミュレータについては、同調査の対象機関のうち、延べ 12 ケ所のセンターにおいて下方展開された計算機が導入された。)

(2) 本PJで開発したプロセッサ技術は今後情報家電等の国際競争力に貢献できるか。

作業部会の報告書においては、スーパーコンピュータそのものの市場は必ずしも大きくなく、今後の急激な拡大も期待できないことから、プロセッサ技術を情報家電の国際的競争力の強化に活用できるようにするなどの視点も重要であると指摘されており、この点は今後の詳細設計等の各開発段階においても、十分留意していきたい。

本プロジェクトで開発される低消費電力・高性能のプロセッサ技術は、サーバやルーター等の情報機器で広く利用されることが期待されるほか、電力削減技術は情報家電等の半導体技術に広く適用されていくものと考えられ、国際的な競争力の保持に寄与するものと考えている。

(3) 必要経費総予算について、民間企業負担を含めた算定がなされているが、この部分の負担と受益の基本的考え方をどのように考えるのか、さらに説明を求めたい。国費によることを基本としながら、「蓄積した技術を製品等に利用し、受益することが見込まれる」としているが、本研究開発は、オールジャパンによる実施が強調されるとともに、また現実として企業の参加が効果的な研究開発の推進に不可欠な要素であると考えられる。したがって、企業のコミットメントを組み込んだプロジェクト運営が必要である。

第1回評価検討会の資料 2-1 2.(4) で説明したように、本プロジェクトに対して、民間企業としては、単に蓄積した技術を製品に利用するだけではなく、技術力の強化、人材の育成・確保、ブランド力の向上など、本プロジェクトに参加することによる有形無形のメリットを期待している。また、これらは我が国全体としての技術力の向上や人材の育成・確保につながるものでもあり、

完成したシステムは全国の研究者等の共用となる。このため、本プロジェクトにおいては、国と民間企業がコストとリスクを分担して負担することが適当であると考ええる。

今回の官民分担の考え方については、各企業において得られる利益とコスト（及びリスク）を勘案し、社長までのコミットメントが得られていることを確認した上で作成したものである。今後、詳細設計から製造へとプロジェクトが進むに従い、理研と各企業がそれぞれの責任とコミットメントを明確にしていくことが益々重要になるものと考えており、開発現場における協働作業の体制整備はもとより、ハイレベル（理事長 - 社長、理事 - 取締役など）の直接対話による協議や意思確認を行いながら、プロジェクトを進めていくこととしている。

（４）本プロジェクトの実施により期待される具体的アウトカムとして示されたもの（資料２－３）は、これらの研究開発に実際に取り組むことを現時点で決定しているものではなく、「次世代スパコン及びグランドチャレンジアプリケーションを使用することによりこのようなことが可能になる」として例示されたにすぎないように思われる。これだけのスパコンを開発する上では、少数でよいから明確な成果目標、すなわち「現在の技術ではここまでが限界であるが、次世代スパコンによりここまで達成することを目指す」ということを設定して進めるべきと考えるが、この点についての文部科学省の見解を聞きたい。

・ナノ電子デバイス

半導体の微細化が進み、半導体プロセス技術が 32nm より小さくなると、量子論的電気伝導を活用するナノ電子デバイスの実現が重要な課題となってくる。このようなデバイスの実現に当たっては、電極やナノ導線などのナノ部品、それらを組み合わせたデバイスの特性解析や挙動予測をシミュレーションによって実現する技術が必要である。

現在、分子研を中核拠点として実施している「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」においては、そのようなデバイスの設計に活用することを目指した、現在では実現不可能（現行では 800 年を要する）な 10 万原子系（ナノ電子デバイスを構成する全ての要素）の電子・格子集団の電子状態等を扱えるシミュレーション技術の研究開発を実施する。

具体的には、計算科学研究者、企業のデバイス開発研究者等が連携して、中核アプリケーションである実空間第一原理ナノ物質シミュレータと関連のソフトウェアを組み合わせることにより、上記のシミュレーションを可能とするソフトウェアの開発に取り組んでいる。本シミュレーションソフトウェアと次世代スーパーコンピュータの活用により、ナノ電子デバイスの設計時間の劇的な短縮や精度の大幅な向上が可能となる。

(資料2 - 22 参照)

・創薬

薬剤開発の効率化・低コスト化に向け、経験に基づいて実験的に行っている新薬候補物質の最適化をシミュレーションにより行うことが期待されている。

これを実現するためには、薬剤候補となる化合物と薬剤の標的となるタンパク質の相互作用を精密に予測するための量子化学シミュレーションが必要となる。このシミュレーションは現在実現不可能であるが、次世代スーパーコンピュータで計算しても6カ月を要すると予測されるので、シミュレーションのさらなる最適化・高速化により、精度を落とさずに計算時間を2週間に短縮させる研究開発を実施する。

具体的には、分子シミュレーション研究開発チームが高精度かつ高速な量子化学計算手法の研究開発を行い、ソフトウェア開発支援チームがユーザの視点に立った、使いやすいソフトウェアを作成する。これにより、薬剤候補物質の最適化のシミュレーションを実現する。

(資料2 - 22 参照)

(5) このシステムが1セットに留まらず、広く使われることが期待できると判断した根拠を説明して貰いたい。また、わが国、および世界で何台程出荷が期待できるか。

これまでに設計が遅れたことは、技術開発として斬新なものをを用いない理由にはならない。時間不足で不十分なものを開発する意義はない。もしそうであれば、今回はトップをあきらめ、次世代で勝つなどの戦略が必要である。この辺りの判断に対する考えを聞きたい。

国内のスーパーコンピュータセンターを対象とした調査により、将来は多くのセンターが何らかの複合システムの導入を検討していることが明らかになっている。また、海外の例を見ても複合システムは HPC システムの有力な将

来像の一つと考えられることから、相当程度のスーパーコンピュータセンターにおいて、複合システムが採用されるものとする。ただし、具体的な出荷台数については、各センターのシステム整備方針や、商品化にあたっての企業の経営戦略等複雑な要因が絡むので、現時点で、予測することは困難である。

また、本件のようなプロジェクトにおいては、一定の期間の中で達成する目標を掲げ、その達成を目指して、確実にプロジェクトを進めることが最も重要である。その上で、技術力、国際競争力の強化の観点から、革新的な技術を挑戦的に取り入れる必要が出てくるが、プロジェクトを確実に進めるためには、革新性と確実性という2つの要素のバランスをとって目標を達成することを重視する必要がある。本システムについては、従来のプロセッサ構成をベースに目標性能を達成しつつ、できるだけ革新性のある改良を加えることで確実にシステムを開発することとしており、進め方は妥当であるとする。

9．連携体制等

（１）ＳＣ産業応用協議会の位置づけが不明確である。理研を中心とした「開発体制」との「連携」とは何か。幅広いユーザー側のニーズがアプリケーションソフトの開発に反映される体制になっているか。

アプリケーションの開発に当たっては、ユーザーのニーズの把握が極めて重要であり、こうした観点から、産学の幅広いユーザーからのニーズを適切にこみ上げ、これらのニーズを開発に反映していく体制を構築することが不可欠である。

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（以下「産業応用協議会」という。）は、産業界におけるスーパーコンピューティングの活用を推進するために設立された組織であり、本プロジェクトの推進に当たって密接な連携を図っている。具体的には、

- ・ 文部科学省や理研が、産業応用協議会においてプロジェクトの進捗状況等の情報提供や意見交換を実施している。
- ・ 次世代スーパーコンピュータやグランドチャレンジアプリケーションの開発において、産業応用協議会の構成員が運営委員会等に委員として参画することにより、ユーザーとしての意見を取り入れている。
- ・ 産業応用協議会においては、産業界からの要望事項の取りまとめや本プロジェクトへの企業等の参画にかかる調整を行っている。

理研では、ユーザーのニーズを開発に適切に反映させるため、

- ・ 産業応用協議会の運営委員会、運営小委員会及びスパコン部会に参加し、プロジェクトの進捗状況等について情報提供するとともに、次世代スーパーコンピュータの産業界による利用に向けた議論等を行っている。
- ・ 産業応用協議会の代表者をアプリケーション検討部会等の委員とし、ターゲット・アプリケーションの選定などについて産業界の意見を取り入れている。

グランドチャレンジアプリケーションの開発においては、それぞれ分子研及び和光研を中核拠点として、全国の大学等や産業界との連携体制を構築している。

- ・ 同アプリケーションの開発に係る運営委員会は、大学や産業界を含む委員構成となっており、これにより、産学のニーズの把握を行うとともに、プロジェクトの企画運営面においても連携している。
- ・ 次世代ナノ統合シミュレーションの開発にあたっては、公募により民間企業等（触媒分野等の化学分野、製薬分野、磁性材料分野、シリコンナノデバイス分野等）と、開発したソフトウェア等を活用した共同研究を行うことにより、当該ソフトウェア等の実証を行っている。これにより、当該ソフトウェアの有効性の確認や民間企業等のニーズを踏まえたソフトウェアの高度化などを行っている。（ナノ設計実証）

（２）例えば、薬剤開発シミュレーションソフトの開発において、創薬研究者、薬理研究者、臨床研究者など実験系研究者との融合が果たせる体制にあるのか。

「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」においては、シミュレーションに必要なデータの取得と結果の妥当性検討のため、各研究チームにおいて実験研究者と密接な連携をとりながら研究開発を進めている。

例えば、分子スケール研究開発チームでは、NMR や X 線構造解析により推定したタンパク質の立体構造を基にシミュレーションを構築するため、分子生物学・構造生物学・バイオインフォマティクス・計算科学の分野の研究者が連携して研究開発を進めている。また、データ解析融合研究開発チームでは、疾患遺伝子データベースを用いた大規模統計解析による疾患原因遺伝子の推定等の高速化に向け、バイオインフォマティクス・遺伝学・数理学・計算科学・臨床医学の研究者が連携して研究開発を進めている。

「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」においては、開発の中心となる計算科学の研究者と実験系を含めた幅広い研究者との融合・連携を促進するために、本プロジェクト内に組織・分野横断的な分子科学WGおよび物性科学WGを組織している。

例えば、「次世代ナノ情報機能・材料」チームでは、開発の中心的役割を果たす計算科学系の研究者が、物性科学WGに参加している企業のデバイス開発研究者等と共同して、ナノ電子デバイスシミュレーションの開発に取り組んでいる。また、「次世代エネルギー」チームでは、計算科学系の研究者が、分子化学WGに参加している有機合成やナノ工学、酵素反応等の実験系の研究者と共同し、セルロース分解酵素モデルの開発を進めている。

（３）全体として、研究開発体制が産官学の協働によるオールジャパン体制というよりも、官中心のものであるという印象をぬぐえない。産官学の有意な発想、技術を生かすことができる効果的なプロジェクト推進体制の必要性和具体的な推進体制について一層の説明を求めたい。

本プロジェクトを円滑に推進するためには、我が国の産学官の総力を結集することが不可欠である。このため、プロジェクト全体の推進体制としては、第１回評価検討会資料２－８で説明したとおり、文部科学省のイニシアティブにより、理研を中心として、産学官の密接な連携の下、一体的に推進する体制を構築している。

本プロジェクトにおける産学官連携の具体的な取り組みは以下のとおり。

- ・次世代スーパーコンピュータシステムの開発については、理研とメーカーとの協働作業であり、理研ではプロジェクトの正式発足前から、情報管理や知財管理などについての契約を結びながらメーカーとの協議や協力作業を積み重ねてシステム構成を検討してきた。
- ・アプリケーションの開発については、９．（１）に述べたとおり。