

総合科学技術会議 評価専門調査会
「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」
評価検討会（第2回）
議事概要

日 時：平成25年6月11日（火）9：59～12：34

場 所：中央合同庁舎第4号館 共用第2特別会議室（4階）

出席者：白井座長、相澤委員、射場委員、玉起委員、小柳委員、
木槻委員、西尾委員、古村委員

間議員、原山議員

事務局：森本審議官、佐藤参事官、岡野参事官、井上企画官、山向補佐

説明者：下間課長（文部科学省研究振興局情報課）
林室長（文部科学省研究振興局情報課 計算科学技術推進室）
平尾機構長（理化学研究所計算科学研究機構）
横川運用技術部門長（理化学研究所計算科学研究機構）
姫野情報基盤センター長（理化学研究所情報基盤センター）
常行教授（東京大学）

議 事：1．開会
2．論点の確認
3．文部科学省からの追加説明と質疑応答
4．討議
5．閉会

（配布資料）

資料1 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」事後評価の論点

（参考1） 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」の事後評価に関する調査検討の視点に対応した意見・コメント（委員限り）

資料2 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」文

- 部科学省に追加の説明及び追加の資料提出を求める事項
- 資料 3 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」文部科学省に追加説明を求める事項及び追加提出を求める資料への回答（文部科学省）
- 資料 4 情報科学技術に関する研究開発課題の評価結果（「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」事後評価結果を抜粋）（文部科学省）
- 参考資料 1 第 1 回評価検討会議事概要（未定稿）（委員限り）
- 参考資料 2 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」のフォローアップ結果（平成 18 年 10 月 5 日 評価専門調査会）
- 参考資料 3 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」の調査検討の視点
- 参考資料 4 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」について（文部科学省）
- 参考資料 5 過去に行った国家的に重要な研究開発の事後評価結果の例（抜粋）

（机上資料）

科学技術基本計画（平成 23 年 8 月 19 日 閣議決定）

国の研究開発評価に関する大綱的指針（平成 24 年 12 月 6 日）

総合科学技術会議が実施する国家的に重要な研究開発の評価「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」について（平成 17 年 11 月 28 日 総合科学技術会議）（冊子）

総合科学技術会議が実施する国家的に重要な研究開発の評価「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」について（平成 19 年 9 月 13 日 総合科学技術会議）（冊子）

【座長】 ただいまから「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」評価検討会の第 2 回を開催いたします。事務局のほうから出席状況の説明をお願いいたします。

【事務局】 今回新たに電気機械分野での利活用といった観点を中心にご意見を賜りたいといった趣旨で、三菱電機株式会社開発業務部の木槻部長に外部識者委員としてご出席をいただいております。よろしくお願いいたします。

【座長】 本日は評価検討会としての取りまとめに向けた議論ということで、文科省からの説明、それからその質疑、議論を進めてまいりたいと思います。

前回の第1回検討会の時の文部科学省からの説明を踏まえまして、委員の皆様からそれぞれコメントをいただいております。これを基にいたしまして事務局のほうで論点の整理をしていただきました。この資料1につきまして、事前に委員の皆様と文部科学省に事務局から送付させていただいております。

また、前回の検討会で追加のご質問いただいたこと、その後に提出いただきました追加質問、それ等についても文部科学省からその回答をいただいております。これが資料3になります。

本来であれば質問に対する回答を踏まえた上で論点の整理ということになりますけれども、時間の関係上同時並行で進めさせていただきました。従って、論点については必ずしも文科省からの回答を反映したものではございませんので、その点をご理解のほどお願いいたします。

本日の具体的な進め方については、論点を確認させていただいた上で、文部科学省から質問に対する回答の説明をしていただき、これに対する質疑応答で行っていきたいと思います。その上で文部科学省にはご退席いただいて、論点に基づいた取りまとめの議論をこの委員の間で進めさせていただきたいと思います。では、まず論点について少し事務局から説明いただきたいと思います。。

【事務局】 資料1の論点ペーパーについて説明させていただきます。

第1回検討会の折、平成17年、19年の事前評価での指摘事項を基に作成しました「調査検討の視点」に沿って議論をさせていただきました。これは参考資料3として今回つけさせていただきます。この資料3と第1回検討会の後に委員の皆様からいただきましたご意見、これは資料1-1というA3の紙にまとめてございますが、これらを基にして今回、論点ペーパーをまとめてさせていただきました。

まず1ページ目には1.として、本プロジェクトにおける目標の達成状況について記載しております。項目として①、②、③とございまして、①が「京」のハードウェアに関する目標、②がソフトウェアの開発と普及に関する目標でございます。それから、③は「京」を核とした世界最高水準のスーパーコンピューティングの研究教育拠点の形成を行うこと、とこれら3つの目標が掲げられてございました。

①と③に関しては、目標は達成されたのではないかと書かせていただいております。また、ソフトウェアの開発に関しましては委員の皆様からのご意見等を見させていただきまして、かなりできており、概ね目標は達成されたと判断させていただいております。一方、ソフトウェアの普及に関しましては今の段階では判断するのが難しいので、本日この場におきまして討論させていただいた上で評価いたしたいと考えてございます。

それから、次のページにいきまして2. ですね、ここでは本プロジェクトで

得られた成果による効果について、「京」の利活用という観点で論点としてまとめさせていただいております。

(1) といったしまして、「京」が学术界、産業界のどのような分野で活用されてどのような効果を与えると期待されるか、という観点で書かせていただいております。①のが学术界での利活用、②のが産業界での利活用という観点で書いてございます。学术界のほうではグランドチャレンジアプリケーションというソフトウェアが開発されており、広い分野で活用されております。実際、2年連続でゴードン・ベル賞を受賞した等の成果も出ておりますので、今後さらなる活用による効果が期待できるのではないかという評価を書かせていただいております。

産業界のほうですけれども、こちらも主に三つの分野において利活用が開始されております。ただ、共用が開始されてから半年程度しかたってございません。とはいえ、一部のソフトウェアですね、例えば、新素材ゴムの開発や創薬関係において今後の利活用が期待できるような成果が得られつつあることになってございます。あと、一部の委員の方から、今後、産業界での「京」の利活用を更に進めるには、産業界利用者の視点でのアプリケーションソフトウェアをもっと充実させていく必要があるのではないか、という意見をいただきましたので、ここに書かせていただいております。

それから、(2)と(3)は国際的な効果という観点でまとめさせていただいております。(2)は国際的に見た時に「京」が世界最先端の科学技術に到達していると言えるかということで、前回の検討の視点では外国製品との比較という形で視点書かせていただきましたが、ここでは「京」が演算性能、実行性能、消費電力、信頼性等において他国のスーパーコンピュータよりも高い水準にあり、その観点から世界トップレベルの科学技術水準にあるのではないかというふうな評価を書かせていただいております。

(3)としましては「京」による国際的な効果としてどのようなものが期待されるかということで書いてございます。実際、計算科学研究機構(AICS)におきましてアメリカ、ドイツ、オーストラリアと国際交流協定(MOU)を結び、海外で「京」を試験的に使ってもらおうとしております。海外で「京」が活用されることで国際貢献が期待できるのではないかというような論点を書かせていただいております。

それから、(4)として「京」の利活用について、その性能を十分活かすよう戦略的に進められているかという観点でございます。これは5月13日の評価専門調査会で橋本委員からご指摘がございました非常に重要な事項と判断しております。

実際、「京」の利用に関する時間枠でございますが、①に書いてございます

ように、全体の約50%を戦略プログラムに配分する等、決して民主的に均等割りして使っているわけではなくて、本当に「京」の性能を活用しなければいけないところに時間枠を設けるといった配慮等がなされております。このような取り組みは妥当と評価できるのではないかと書かせていただいております。

それから、②といたしまして、今後「京」をより戦略的な利活用に向けた使い方として何か提案することありませんか、という意味で書かせていただいております。これは委員のほうからお話をいただきまして、例えば「京」以外で実行できないビッグデータを使った複数アプリケーション連携による連成シミュレーション等、このような新たな戦略的な「京」の使い方として提案はないかというような観点で書かせていただいております。

それから、(5)といたしまして「京」のユーザーサポートの話を書かせていただいております。これは平成19年の事前評価でも指摘されており、とても重要な案件と判断しております。実際に「京」の利活用において、ユーザーを支援するようなサポート体制の整備が進められ機能しているか。それから、このような運用サポートを行う人材はどのように育成すべきか、という観点で書いてございます。

①に書いてございますが、高度情報科学技術研究機構(RIST)におきまして、利用者支援のための相談窓口を設けて、「京」の利用者にワンストップサービスというのをやっているのですが、果たしてこれが十分だといえるか、さらにもっと強化していく必要があるのではないかと、というような観点で書かせていただいております。

②といたしまして、そういうサポート人材を育成する上において、どのように進めていくのが有効か、どういう課題があるかということを書いてございます。

③では、「京」を有効利用するため、さらに高度なプログラミング技術が各応用分野ごとに必要になってくるのではないかと。それを促進する部分において各応用分野の利用者からの要求に応じて十分なコンサルティング体制を構築していく必要があるのではないかと、というような観点で書いてございます。

(6)ですが、こちらは人材育成の話でございます。これも事前評価で指摘されている非常に重要な案件であるといえます。①には、スーパーコンピュータ技術におけるハードウェア、ソフトウェア、利活用、に関して人材育成を図る体制がきちんと整備され、人材育成が進んでいるかという観点で書いてございます。

実際、文部科学省からの資料によりますと、AICSにおきまして、研究教育拠点を神戸に形成し、そちらで人材育成の取り組みを進めているという話を聞いてございます。ここに6つの項目挙げさせていただいております。これらに

関しましては後ほど文部科学省から詳細な説明をいただく予定になってございます。

②といたしまして、前回の第1回検討会でも議論に出てございましたが、計算機科学分野と対象応用分野の両方の知見に精通した人材育成というのが今後必要になってくるということでございます。これらに関して、長期的かつ戦略的な検討というのが必要ではないかというふうに書いてございます。

続きまして3. です。こちらは研究開発マネジメントの妥当性に関する論点でございます。

(1) には、本プロジェクトにおいて、実効あるマネジメント体制が構築され、運営されたか、ということを書いてございます。実際、プロジェクトリーダーの下に複数のグループがございまして、各グループにグループディレクターが置かれ、グループ間できっちりと連携がとられ、開発が進められる体制が組まれたと聞いております。また、当初に立てた目標も達成されていることから、本プロジェクトにおけるマネジメント体制は妥当であったのではないかと、評価してございます。また、文部科学省の中間評価を踏まえ、本体制に対して外部評価機関として諮問委員会を設置するなどについても評価できるのではないかと考えてございます。

それから、②ですが、これも前回の検討会で話題に上がりました。当初ベクトル・スカラ複合型のシステムを予定していたのが、途中でスカラ単独型に変わった、参加企業3社のうち2社が途中撤退したなど、プロジェクトの計画にかなり大きな変更が発生しましたが、その折にも適切なマネジメントが行われたとかということも論点に入れさせていただいております。

あと(2) としまして、これも事前評価で指摘されていたのですが、ハードウェア開発とソフトウェア開発が相互に連携した開発体制がとられたのかということでございまして。ターゲットアプリケーションを設定し、それに適合するようハードウェア設計が行われたということから、ハードウェア・ソフトウェア協調設計が実施されたと言えるかという観点で書かせていただいております。

最後に4. としまして、その他、を入れさせていただいております。ここでは主に、今後のプロジェクトの話について挙げさせていただいております。

(1) は文部科学省で行いました事後評価の話です。今回、資料4として、文部科学省の事後評価の結果をつけさせていただいております。文部科学省では2013年の1月から3月の間に計4回委員会を開催してございます。外部から大学関係者に加えまして、持田製薬、朝日新聞社から外部有識者に加え、1回2時間の検討会をやりまして、「目標の達成状況」、「成果」、「マネジメントの妥当性」、「今後の展望」について評価・審議を行ってございます。

個々の評価結果については概ね妥当であったと考えてございます。

(2)には、これも非常に重要な事項と考えられますが、本プロジェクトにおける反省点です。今後のスーパーコンピュータの開発に活かせる教訓として書いてございますが、要改善点、反省点等、そういうのがないかということで。これも、文部科学省に追加質問という形で前回上げさせていただいてございますので、後程、詳細な説明があると思っております。

次に(4)として書いてございます。これは今後のスーパーコンピュータの研究開発プロジェクトを立案する時に留意すべきことということで書いてございます。次のスーパーコンピュータの研究開発プロジェクトを立案しようとしているようでございますが、その時に注意すべきことということです。特に①に関しましては前回の検討会でも議論になりましたが、単に演算性能10ペタフロップスという数字を目標として追い求めるのではなく、実際、ユーザーの視点に立ち、本当に要求されている機能・性能・使い勝手、産業界を含めて使い道を新たに目標に立てるような配慮というのが必要になってくるのではないかとということで、今回論点として挙げさせていただいてございます。以上が論点の説明になります。

【座長】 論点そのものについては後ほど議論させていただきますので、この段階で何かご質問ございましたら出していただければと思いますが、何かご質問ございますでしょうか。

よろしければ、本日の文部科学省からの追加説明、それから質疑応答、これから入らせていただいて、その後で、この論点を基にまたご議論していただくことにしたいと思います。

(文部科学省 入室)

【座長】 これから文部科学省から検討会として質問いたしました事項についてのご説明を中心にしていただきたいと思います。また、説明の中で事前にお示ししています論点につきましても事実関係との齟齬、あるいはそれに対する見解等ありましたらご発言をお願いしたいと思います。時間の制約がございますので、説明は30分程度でお願いしたいと思います。

なお、前回同様、本評価検討会は非公開で行いますけれども、資料については原則公開となっております。もし非公開扱いを要請される内容がございましたらその旨理由とあわせてお伝えくださるようお願いいたします。

【文部科学省】 それでは、まず資料3に基づきまして、資料2でいただいた追加説明事項に関する説明をいたしたいと思います。

資料3のほうでございますけれども、大部にわたるものですから、まず私のほうからざっと説明をいたしまして、その後、質疑応答で適宜関係者のほうか

らお答えをするというようなやり方でやっていきたいと思います。

資料3でございますけれども、まず1ページ目をめくっていただきまして、2ページ目から始まります。ご質問にあった数値目標等、目的の関係ということだと思っておりますけれども。そこに書いてありますように、本プロジェクトの目的というものは、科学技術・学術研究及び産業におけるその基盤を提供する、そういうことによって我が国の競争力の強化であるとか、多様な分野で社会に貢献する研究成果を上げるというようなこと。我が国において継続的にスーパーコンピュータを開発していくための技術力を維持、強化すると。こういうことを目的に前回説明しました目標を立ててやっている、ということになってございます。

特に数値目標につきましてはLINPACKで10ペタフロップスをとって世界で1番をとるという点と、HPC Challenge Award 4項目で最高性能というのが当初に立てられた目標でございますけれども、こういったものを達成すると、10ペタフロップスというのを世界にさきがけて達成するというので、この10ペタフロップスの能力をフルに活用することによって、そこにいろいろ例を書いてありますけれども、心臓のシミュレーションであるとか材料のシミュレーションであるとか気象・気候のシミュレーション、また基礎物理のダークマター粒子のシミュレーションであるとか、こういった今までできなかったものについて世界初のシミュレーションを実現したというような成果が上げられていると。

また、HPC Challenge Award 4項目というもので最高性能をとる、ということに関しては、これが実際「京」が幅広い分野に使えるものであるということを証明するものであって、その目的に照らし合わせてそういった目標というのは妥当だったのではないかと考えております。

また、世界にさきがけて10ペタ、HPC Challenge Award 4項目というものを達成することによって世界最高水準の技術を獲得したと。これによって我が国の技術力の維持強化ということにも大きく貢献できたのではないかとございまして、目的の①、②に照らし合わせて立てた数値目標というのは妥当であったのではないかと考えているところでございます。

次の3ページでございますけれども、これは今回のプロジェクトの中での教訓ということで、文部科学省の評価の中でどういうことが挙げられているかというご指摘だと思います。下に書いてありますけれども、何個かに分かれていますが、プロジェクトの進め方につきましては幾つかあったのは、幅広い人材が開発に参加できるような開発体制。ともすると、特に最初の段階では理化学研究所を中心にしてなかなか中に他の機関が入れなかったというような意見もございまして、もし次の開発を行う場合にはそういった開発体制の構築を図るべき

と、こういった意見がございました。

また、研究開発のあり方や開発の進捗、プロジェクトの意義、こういったものについて国民に十分伝えられていたのかと、こういった意見もございました。したがって、今後はもしくは「京」そのもの、「京」の運用でもそうかもしれませんが、「京」の運用や今後のプロジェクトに対して国民にどう伝えていくか、この辺をきちんと取り組むべきというようなことも言われています。

3 番目としては、やはり我が国としてもスーパーコンピュータの開発・整備というのは重要であるので、本プロジェクトを通じて得られた技術、経験、人材、体制を維持・強化して戦略的に進めていくことが必要ではないかという、そういったご指摘もありました。

後ほど出てきますけれども、「京」のプロジェクトの中でアーキテクチャの構成が変わったと。最初スカラとベクトルの2本立てで複合型と言われているものが最終的にはスカラだけのものになったと、こういったことも議論になりました。最終的には技術動向について十分見通して計画を立案していくと、そういうことが重要なのではないかと、こういった指摘になってございます。

「京」の利活用についてというのが次でございますが。共用の前倒しということで公募期間が十分でなかったと、こういった意見もありましたので、それは今後改善していきますと。これはまた後からちょっと出てきますけれども、既に追加公募では改善を図っているところでございます。

また、国内にある大規模実験施設、これはSPRING-8、SACLA、J-PARCなどがございますが、これら施設との連携というのを実施したほうがいいのではないかと、こういったご指摘もありました。

また、コスト・消費電力につきましては、汎用性の高いスーパーコンピュータとしてはすぐれた性能ではあるものの、海外の最新システムと比較するとまだまだ劣っている部分があるので、今後「京」で培った経験、技術、そういったものを維持・強化することによってその解決を図っていくべきだと、こういった指摘も受けております。

獲得された技術等については、システム、アプリケーション、システムソフトウェア、ネットワーク、そういったものを総合的に推進するべきだというような意見であるとか、システムソフトウェアやアプリケーションについては国際協力、こういうのも重要ではないかというようなこと。さらに、開発したアプリケーションについては利用促進の取り組みをさらに充実させていく。特に企業等の共同研究によるそういったシミュレーション結果の応用というものを継続する必要があると考えております。

こういったことが指摘を受けておりまして、次回プロジェクト、もし立てるとすればこういったものをきちんとやって欲しい、こういったような評価にな

ってございます。

次のページでございますけれども、「京」の機能・性能の改善・向上といったものについてでございます。ハードウェアにつきましては、システム完成時期に最適なシステム構成としているので、途中でCPUを取り変えるとかネットワーク用のLSIを変えるとかこういうことはそこだけバランスを崩してしまうことになるので基本的にはできないと、いったような状況でございます。また、メモリ容量というのは技術的には可能でありますけれども、これを全部取り替えるとなるとコスト面でも相当かかりますし、できたシステムの消費電力も上がってきますので、基本的には余りハードウェアを変更するというのは現実的ではないと思っています。

したがって、性能・機能の向上は、システムソフトウェアの高度化とかアプリケーション性能の高度化等によって実現するという事で、現在理研の計算科学研究機構のほうで、例えば下を書いてありますように、言語処理系、言語のソフトウェアの改良であるとか運用管理のソフトウェアの改良であるとか、より良いプログラミング環境整備であるとか、数値計算ソフトウェアライブラリの研究開発等を行うことにより、より使いやすい、よりプログラミングしやすい、そういったものの機能向上を図っているということになってございます。

次に5ページ目になりますが、これは先ほど申し上げましたが、もともとベクトル部、スカラ部からなる複合システムだったものが最終的にはスカラシステムだけになったということで、もし複合システムが完成していたらどうだったのかと、こういった質問でございます。

これは仮定の話になるのでご説明しにくい部分がございます、もし仮にそのままベクトル部をつくっていたらコストがどれぐらいかかって、実際にできたものがどういう性能になったのかというのは、今の段階ではわからないということでございます。

一方で、その時点で中間評価を行って、スカラ部だけのものにしてもきちんと目標は達成できるだろうという評価を受けて、結果的には下に出てありますように、効率的なシミュレーションの実行、最適システムの運用の観点であるとか、技術力向上への観点でありますとか、波及効果を最大化するといったような観点でありますとか、スカラ部のみでも十分達成できたであろうと思っています。

また、最後のほうに書いてございますけれども、このシステムの変更ということにつきましては、もともと平成19年9月の総合科学技術会議の評価においても、海外の動向に常に注視しつつ本プロジェクトの目標に鑑み、計画の弾力的な推進に配慮すべきであると、こういった指摘も受けていまして、それに沿ったものであらうと思っています。

また、先ほど申しましたけれども、文部科学省の事後評価においては、柔軟に対応したのは評価できるというような意見があった一方で、もう少し技術的な動向について十分見通して計画を立案すべきではなかったのかと、このような意見もございまして、評価としては先ほども申しましたように、技術的動向について十分見通して計画を立案することが望まれると、こういった指摘になっているところでございます。

次に6ページになりますが。これはもともと予定していたターゲットアプリケーションの性能をどれくらい達成したのかといったものでございます。前回説明しましたけれども、概念設計の段階ではアプリケーションを21本選定して、システム構成の検討の参考にしたと、こういった経緯がございまして。さらにシステムをつくり込んでいく段階で、これを全部チューニングしながらシステムを評価するというのは余り現実的ではなかったので、21本の中から特徴的かつ典型的なアルゴリズムを持つ6本のアプリケーションを重点アプリケーションとして選定して、これをさらにチューニングをしながら評価に役立てていったということになります。

最終的には6本のうち4本のアプリでペタスケールの性能、5本目のNICAMもほぼ1ペタに達しているので、4本から5本と言っているのではないかなと思うのですが、それぐらいのものはもともとペタスケールのシミュレーションをやるといった目標を達成しているといった状況でございまして。

7ページ目でございますが、これはインターコネクト強化のことでございます。この図が上と下に二つございますけれども、上の図が最初的设计であったインターコネクト。ちょっと小さくて見えづらいかもしれませんが、CPUが18個外に○で囲んでいて、少し黄色っぽいやつですね、18個CPUがあって、それに対して9個のICC、ICCというのはネットワークを制御するLSIのことでございますけれども、つまりCPU2個に対してそのネットワークを制御するICCというものが1個組になっていて、その組がまず完全結合、それぞれ2.5ギガバイトのネットワークでつながると。その組をさらに15ギガバイトのネットワークでトラス状につなぐと、こういったような構成になっていたわけですが、これだとプログラミングをするときに中と外でネットワークの種類が違う、速さ等々が違うので、プログラミングがしにくいのではないかと、運用面でも非常に負荷がかかるのではないかと。このようなことで、中間評価の段階でこれを見直して、下の図のように一つのCPUに一つのICC、一つのCPUに一つのネットワークを制御するLSI、これを組にしてこれを全体をトラス状に5ギガバイトのネットワークで結んだと、こういった改良をしています。これのためにICCが2倍にふえた。もともと2個のCPUに1個のICCだったのが、1個のCPUに1個のICCになった

ので2倍になったと。また、通信ケーブルもI C C当たり3倍になっていますので、通信ケーブルの本数も3倍に増えた。こういうものにかかる経費が90億円だということでございます。

また、こういうことをやることによって、先ほども申し上げましたけれども、プログラミングが容易になるというようなことと、システムの運用面でもジョブをこの中にどういうふうに配置していくかというようなことでも柔軟性を持たせることができた、というようなことになってございます。

8ページ、9ページがライフ系での成果、どのような状況になっているかというようなことで4つぐらい挙げてございます。まず、心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションということで、これは1個1個の分子レベルのシミュレーションから組織全体のシミュレーションを積み上げて全体をシミュレーションするというもので、これによって肥大型心筋症の病態というのを解析することに成功しているというようなことでございます。

8ページの下が創薬シミュレーションということで、これはタンパク質と薬剤候補物質がどういうふうに反応するかといったものをシミュレーションするものです。がん治療の標的タンパク質に対して300個の新規化合物を考えて、それをここでシミュレーションした結果、薬になりそうな化合物というのを11個見つけだすことに成功したと、このような成果を示してございます。

次に9ページにいまして、血栓の形成と血流解析に関する研究ということで、血管という柔らかい構造と血液という流体、その連成問題、これ非常にシミュレーションとしては難しい問題なのですが、それを革新的な手法を開発して、血栓症、血液が固まるような初期過程のシミュレーションに成功していると、こういったものでございます。

次に、多剤耐性菌。これは病院でも院内感染で問題になっているわけですが、これがどうして起こるかというようなメカニズムをやはりマルチスケールですね、量子科学の計算、分子動力学の計算、さらにそれを大きくした粗視化分子動力学計算、そういったマルチスケールの解析で解明していったと、こういったような成果が上がっているところでございます。

10ページになりますけれども、セミナーの評価、効果でございます。ライフ分野においては医薬品産業向けセミナー、これは計4回、のべ330名、アプリケーション講習会、計5回、のべ320名、こういうふうの実施し、産業界からは19社ほど参加しています。セミナーのアンケート結果を右下に書いてございますけれども、参加者の8割以上から今後役に立つという回答をいただいています。ディスカッション自体も実際の利用に向けて現実的な質問が出て、非常に活発なディスカッションが行われたと、こういった状況だったということをお聞きしております。

11 ページ目でございますけれども、アプリケーションソフトウェアの使用実績でございます。ナノ分野とライフ分野で終わった時期が1年違って運用の時期がナノ分野のほうが1年長いので、少しその辺の差が出ていますけれども、ナノ分野では使用の確認がとれている件数が102件ございます。そのうちの20%が産業界ということになってございます。

また、それとはちょっと重なりがあったり、なかったりするのですが、それ以外に戦略プログラムで20本使われているとか、一般利用、一般課題という中で「京」で11件、「京」以外で7件、そういったものでも使われているということでございます。

ライフ分野はまだダウンロード件数ということで使用の確認がどれぐらいとれているかというのはまだ不明でございますが、ダウンロードだけで見ると130件、そのうちの17%が産業界ということになってございます。

また、これとは別に戦略プログラムでの使用本数が14本で、一般課題その他でも10件ぐらい使われていると、こういったような状況になってございます。

それで、質問の中にソフト開発の関係者にとどまっているのかというのがあります。戦略プログラムで使っているものやHPCIの一般利用の「京」で使っているもの、これは多分ソフトウェアを開発した関係者が使っているものだと思いますけれども、左側のインターネットで引き出して使っている部分、これはソフトウェアの開発者以外の方が使われていると思います。

成果の活用で、世間をあっと言わせるような強いインパクトを与えるような活用例ということで、これは説明が繰り返しになるところでございます。今まで説明した中でもいろいろな成果がございますので、そういったものに加えて、心臓は説明しましたがけれども、例えば地震のハザードマップの作成、50m単位でのシミュレーションを10m単位の詳細な予測にすることによって都市計画の活用であるとか避難計画の策定等に貢献しているという成果。その下の船のシミュレーションでありますけれども、従来の1万倍の計算規模で実験を完全に代替すると。船だと水槽で浮かべていろいろ試作実験するわけですがけれども、それをシミュレーションで代替できるのではないかと、こういった可能性を示している。

次のページで、2カ月前倒ししたことによるメリット、デメリットというのはどんなものがあつたか伺いたいということでございます。「京」の共用の開始時期はもともと平成24年11月というふうになっていたわけですがけれども、平成23年の決算行政監視委員会の議論等々も踏まえまして、これについて少し前倒しを検討したと。これは完成の時期が6月でありまして、やはりその後利用者選定であるとかシステム調整にどうしても必要な期間がございます。

したので、それがどれだけ短くできるのかというようなことをそれぞれ関係機関と相談をしまして、9月末を目指して準備を進めていくというようなことで、当初より2カ月前倒しをしました。

これによって「京」の利用という観点で言いますと、一般のユーザーが早く「京」を利用することが可能になって、早期の成果創出と、こういうことができるようになったというようなことがありました。しかし、公募期間が短くなったということがございまして、最終的には資源量の6倍を超えるというような応募でそれなりに周知徹底できたのではないかと考えていますけれども、やはり短かったのではないかとという意見もありましたので、今年3月から5月に行われた追加公募ではより長い公募期間を設けましたし、来年度の課題公募においてもできるだけ長い公募期間の確保に努めると、そういうことをやろうと考えています。

ハードウェアの調整という意味では、もともとシステムの安定化や動作確認、「京」の運転員の技能獲得のために予定していた時間というのは短くなったものの、それをうまく効率的にやることによって時間を短縮し、今は順調に共用を実施できていると、こういったような状況です。

アプリケーション、特にライフ分野のグランドチャレンジが平成24年度までやっていたということで、その開発計画の見直しが多少必要になったということもありましたが、ただ、そこで足りない分は一般利用に応募してやってくださいというような整理をした上で、アプリケーションの開発自体は目標どおり達成することができています。また、そういった今できたグランドチャレンジのアプリケーションも戦略プログラムで引き継がれてやっているのです、余り大きな混乱等々はなく、アプリケーションのさらなる高度化、利用研究が取り組まれていると、こういうふうに認識しているところです。

15ページ目が、今後のアプリケーションの拡大に関してもう少し詳しい状況の説明となっています。ちょっと繰り返しになるようなところがございますが、ライフ分野では先ほど申しましたけれども、講習会・報告会やセミナー、さらにはシンポジウム、こういったものを行うことによってアプリケーションの普及拡大に向けた取り組みを実施しています。

そういった中で開発されたアプリケーションというのは今ウェブ上で公開をしていて、「京」の利用はもちろんのこと、大学・研究所、研究室、企業、そういったスパコンでも利用が可能な状況になっているということでございます。そうした中で、下にもちょっと書いてありますけれども、開発されたアプリケーションで戦略プログラムの中で引き続き研究が行われるであるとか、製薬メーカーや医療メーカーとの共同研究、こういったものも行われていると、こういった状況でございます。

次に16ページでございますが、理研の計算科学研究機構、AICSの国内外の連携先が「京」を利用しているのか、または理研が連携先のスパコンを利用しているのか、こういったものでございます。理研は前回ご説明をしたと思いますけれども、「京」の可能な資源量のうち15パーセントの部分を調整高度化枠ということで使っています。その中でいろいろな機関と連携しながらそういった活動をしているということもやっておりまして、そういった外部機関がAICSの共同研究を通して「京」を利用することは可能であると。実際、これまでに3機関が利用されているケースがあるということでございます。

さらに、これまでケースはないですけれども、逆にAICSが連携先の機関におけるスーパーコンピュータの利用を図っていくと、これも十分考えられることであるということでございます。

次、17ページでございますけれども、計算資源の有効活用の観点からの課題ということでございます。まず1. で資源の消費状況ということで、共用当初はジョブスケジューラの性能などちょっと問題があったようで、ジョブの充填率が50%程度という状況もありましたけれども、その後、そのジョブスケジューラや運用の改良によって最近では70から80%に充填率が上がってきていて効率的に使われていると、こういったようなことがございます。

また、4万ノード以上の大規模ジョブだとどうしても待ち時間が増えてしまうということがございます。これは他の使っているジョブを除かないといけないということもあるのでそうゆうことになるわけですが、これはなかなか大きく改善ということは難しいのですけれども、その一方で混雑状況に関する情報をウェブ等で載せることによって利用者がより使いやすい環境の提供、そういった仕組みの構築を進めているということでございます。

また、計算資源を有効に活用するという観点から、資源の中には加速枠というものを一般利用で5%、戦略利用で5%程度つけております。これは課題を選定した後、その実際の利用状況や成果創出の見込み等も勘案しながら追加的に資源配分を行うと、こういった枠組みでございまして、これは計算資源を有効に活用して早期の成果創出に役立てていっているというふうに思っております。

利用枠全体のあり方、特に追加公募の産業利用の状況を見ていますと、ニーズが高まっているというようなこともございますので、こういった利用枠の拡大も含めて利用枠の検討というのが必要になってくるのではないかとというのが今の課題として考えているところでございます。

18ページでございますけれども、「京」の利用枠の内訳というものはだれがどんなような戦略に基づいて決めたのかということでもあります。まずそもそもSPRING-8、J-PARCの同じ共用法の施設を見ますと、基本的に

は利用の在り方というのは公募で一般利用するという考え方なのですが、「京」の場合はそれだけではなかなかすぐには成果が出ないのではないかと、いうことで、一般利用に加えて戦略利用というのをきちんとやるべきだという考え方が平成20年6月の次世代スーパーコンピュータ作業部会で示されたところでございます。それに基づきまして、共用法に基づいて基本方針の中でも戦略利用と一般利用をつくるのだと、こういったものを明確にしていると、そういったような状況になっています。

では、具体的にそれを何%にしていくのかというのは、これはユーザーコミュニティの機関からなるHPCIコンソーシアムの中で議論を行いまして、最終的には文部科学省の局長の諮問委員会であるHPCI計画推進委員会で「京」の利用枠の配分を決定をしていったと。それによって戦略プログラムが50%、一般利用枠が30%、成果創出加速枠が5%、調整高度化枠が15%、こういう結果になったということでございます。

19ページにアプリケーション、人材育成のどういうことに気を付けてやっていたかというようなことを書いてございます。最初にちょっと書いてあるのが一般的な研究者の価値観ということで、これはやはり単にシミュレーションのプログラムをつくるということだけだとサイエンス研究が評価されないので、評価が低くて研究者のモチベーションが相対的に低くなる傾向にあるわけです。本プロジェクトではそうは言っても「京」の性能を最大限に引き出すアプリケーションを開発するんだというような目標を明確に示して、定期的にどれぐらいそれがうまくいっているかというようなことを把握することによってプロジェクトの参加者、研究者に目標を共有してすぐれたアプリケーションの開発に成功してきたといったようなことがございます。

また、こういったアプリケーションを高度化する、これは計算機科学、計算科学、どちらかというよりもその分野の人というよりも計算科学、計算機科学に特化したような人なのですから、こういった人たちもやはり新しいアルゴリズムを開発するというレベルでなければなかなか論文にすることができないというようなことで、なかなかモチベーションが上がらないというようなことがございます。ただ、最終的な形態としては一人の研究者がすべて行うのではなくて、やはりその分野の研究者とそういった高度化をする研究者との分業、協業体制をつくった上で、やはりお互いの分野を理解すると、そういった素養が必要ではないかというふうに考えているところで。今回のプロジェクトの中では特に若手研究者の育成という観点からそういった分野の研究者のみならず、計算機科学の研究者も含めてサマースクールやウィンタースクールというのを若手で企画してみんなで議論することによって価値観を共有していったということです。その結果、プロジェクトが終わった今もそういった組合せというも

のが継続しており、一緒にファンドを取りにいくなどの活動も見られているというような状況でございます。

また、戦略プログラムの中では計算機科学、計算科学、両方の知見を持つ人材育成を工夫しながら行っている状況でございます。

次に20ページでございますが、文科省単独で遂行されてきたところで何か困難はなかったのかというような質問でございます。このプロジェクトには2段階あると思うのですけれども、まず計算機をつくって共用に供するといった段階と、それを利用して活用していくという段階と両方あると思いますけれども、つくるところでありますと、これは研究基盤の整備という観点からやっております、基本的には産業政策というものとはちょっと一線を画してやっているものでございます。もちろん大きな予算を使うものなのでなるべく競争力のあるものをつくろうということではやりますけれども、基本的には研究基盤の整備という観点から文部科学省の役割ということで、局の関係課・室、さらには予算の獲得に当たっては省全体の協力を得ながら遂行を担っていったということで。特に経産省と連携をしていないということで何か困難があったのかというようなことは今のところ感じていないということでございます。

一方で、ではこれをどう使っていくのかということに関してはやはりなるべく広い分野で使っていくということが必要でございますので、特に戦略プログラムにおいても、大学や文科省関係の研究機関のみならず、他省庁、産総研、国環研、気象研であるとか、そういった研究機関も入ってもら。さらには民間企業に入ってもらということで、やはり日本の知識・技術を結集するような形で戦略プログラムをやっていると、こういった状況です。

こういった利用の分野での協力というのはやはり今後も必要だと思いますし、次をやるということになればそういった文科省以外の関係省庁、関係機関というのをなるべく巻き込みながらやっていくということも必要なんだろうと思っております。

また最後書いてありますけれども、できた後、我々も研究基盤として整備したわけですが、それをベースに商用機などを富士通でつくっておりますけれども、それを海外に輸出していくという段階では経産省とも連携を入れながらやっているというような状況でございます。

21ページでございますけれども、グランドチャレンジアプリケーションで雇用した研究員がほとんどアカデミアに行っている理由でございます。最初書いてあるのは、ポスドクというのは一般的にアカデミア志向が強いということなので、機会があれば基本的にアカデミアへの就職にチャレンジするというような状況でございます。したがって、アカデミアに相当就職したということは優秀な研究者が育成されたということでもあらうと思っております。

一方、真ん中に書いてありますけれども、民間につきましてはやはり景気の影響もありますので、非常に応募が限られていた、採用が限られていたというような状況もありますし、特にライフ分野ではまだ企業でのH P Cの活用がまだまだ浸透していないというような状況もあってなかなか採用に至らないと、こういったこともあったのではないかと考えています。

それで、民間への就職状況を改善するためには、やはり民間企業の中でのH P Cの利用なんかも促進していく必要があるだろうということで、やはり戦略プログラムの中で産学連携のシンポジウムであるとか、産業界への情報の提供といったようなこともやっておりますので、こうしたことで民間の中でも計算科学というものが普及してくれば民間へのキャリアパスももっともっと広がっていくと、こういうことが期待されると考えています。

次、22ページでございますけれども、理化学研究所につくった研究教育拠点でどのような人材育成、どのような成果が得られているのかということで、幾つか書いてありますけれども、人材育成に関してはポスドク、若手研究員の育成ということで、今現在28名ほどのポスドクが在籍して研究をしながらその育成をしています。また、「京」の試験利用期間において講習会を開催してのべ650人が参加して、そういった人材育成に貢献しています。今でも他の機関からのリサーチアソシエート、研修生を積極的に、実績20名ですけれども、受け入れているなど。また、ウィンタースクール、サマースクールを実施していろいろな方々の講習、人材育成、そういったものを行っている。さらに神戸大学との連携大学院の実施、そういったものの人材育成の貢献を行っているということでございます。

それから、次の23ページでは理研のA I C Sでの連携の内容ということでございますけれども、国際連携でありますと、これも前回ちょっと説明したと思いますけれども、アメリカ、オーストラリア、イギリス、イタリアの大学・研究機関と協力協定を結んで研究者の交流等々を行っている。あと、合同研究会でも、例えばA I C Sの国際シンポジウムを大体毎年3回やっているというようなことがあります。また、国内連携であると、神戸大、筑波大、東北大との包括協定であるとか、先ほども申しましたけれども、神戸大学との連携大学院。さらには大学との共催のサマースクール、こういったもので連携しながら、特に国内連携での人材育成多いと思いますけれども、やっているという状況でございます。

24ページでございますけれども、アプリケーションの利用状況の実績報告ということで、これは11ページの図と大体重なっておりますが、ナノとライフでそれぞれ分かれていて、先ほど申し上げましたけれども、ナノのところでは使用が102件、ライフではダウンロード件数が130件ということで、使

用領域の内訳としては右に書いてありますけれども、ナノ分野でも結構医薬品とか化学、そういうところが多く、次に電気機器、繊維製品、そういったように続くと。ライフの分野だと使用領域ということで、これは対象になっているのが分子レベルのシミュレーションだとゲノムのシミュレーションであるとか細胞のシミュレーションであるとかそういったものが多く使われていると、そういったような状況でございます。

あと25ページで、広報体制に関するものでございますが。「京」に関する広報というと、今「京」の運用責任を持っている理化学研究所と利用促進に責任を持っている登録機関である高度情報科学技術研究機構でそれぞれの広報を連携しながらやっているという状況でございます。理化学研究所のほうでは「京」ハードウェアそのものであるとか、機構でやっている研究開発の広報。登録機関のほうでは課題の成果であるとか、どうやったら「京」を使えるのか、利用の面での広報と、こういったようなものを行っているところでございます。

具体的には26ページに書いてございますけれども、マスメディアを通じた広報であるとか、ウェブや広報誌を通じた広報であるとか、イベント、シンポジウムなど。さらには理研では「京」を知る集いということをやっていると。あとは見学者を受け入れるなど、そういったようなことで連携をしながら広報をしていると、こういったところでございます。

産業利用を含む「京」の一般利用の応募状況を示す資料をいただきたいということで、27ページでございますけれども、(1)が平成24年度の定期募集ということで、定期募集の場合、応募件数全体で227件ございました。この選定件数は62件ということで、件数だけで見ると選定率は27%であったと。特に、一般利用、若手人材利用につきましては、選定率が非常に競争率が高かったということになってございます。一方、産業利用は応募件数は多かったんですけれども、資源をなるべく調整して多くの人に使ってもらうというポリシーのもと、なるべく多く使わせるということをやっております。

また、トライアルユースにつきましては随時受付ということで、これまで11件受け付けて11件選定したというようなことです。

平成25年度の追加募集、これは3月から5月にかけてやっておりましたけれども、73件の応募件数がございます、想定していた資源量の4倍以上の応募があったと、こういったような状況になってございます。

さらに28ページで、システムソフトウェア、コンパイラなどの波及効果、この辺の成果はどうかということです。「京」の開発とともに「京」のハードウェアの持つさまざまな機能を活用するためのコンパイラであるとかライブラリーの開発をしております。そういったものを活用することによって、2番目の○になりますけれども、例えばRSDFTというナノ材料のシミュレーシ

ョンのアプリケーションですけれども、「京」のネットワーク構成を活かした通信関数を用いることにより通信性能が約3.7倍高速化したとか、こういったようなものがございます。また、こうやって「京」でつくったものを標準規格にすることによって「京」の商用機版であるF X 1 0などの計算機でも利用できるということで、シームレスな利用というようなことが可能になっているというような状況でございます。

次に29ページ、特許、知的財産でございます。「京」の本体の開発による知財につきましては、単独発明の場合は理研／開発メーカーにそれぞれ帰属、共同開発の場合は共有ということでございます。ただ、開発の形態が基本的には理研から開発メーカーのほうに請負契約で出しているというようなこともございまして、特許につきましては基本的に今のところ開発メーカーのほうで取得しているというもののみになっています。富士通におきましてはC P Uの高密度実装であるとか、S I M Dの演算装置制御、そういったものに関して141件の特許を申請しており、25件取得しているという状況です。こういったものは富士通の今後の活動で戦略的に活用されるのだろうと考えております。また、富士通以外にも日立、N E Cで13件の特許が出願をされていると、こういった状況でございます。

また、アプリケーションにつきましては、これは著作権自体は各アプリケーションの開発者が有しておりますけれども、アプリケーション自体はポータルサイトを通じて公開済みということで、使いたい方には連絡をとっていただいて、そういった著作権のもとで利用しているというようなことでございます。開発されたアプリケーションは先ほど申しましたけれども、「京」のみならずさまざまなスーパーコンピュータで利用可能ということになっておりますので、ユーザーは身近な計算機環境から「京」に至る大型計算機環境までシームレスにアプリケーションを利用できると、こういったような状況になっているところでございます。資料3の説明は以上でございます。

【座長】 ご回答、ご説明ありがとうございました。

それでは、ここから質疑に移らせていただきたいと思いますので、ただいまの文部科学省からのご回答、ご説明に対してご質問あれば委員のほうからお願いいたします。

【委員】 これまで何回か「京」でしかできない計算をやるんだというお話を聞いていて、そのとおりの利用成果、共用開始からそんなに期間がない中でたくさんの利用成果を本日ご報告いただいたんですけれども、それはそれですばらしいことだと思いました。

そのためのマネジメントのご説明もあったんですけれども、一つ聞きたいの

は、戦略プログラムと一般利用枠等々の比率ありますね。ここがマネジメントの一番キーになると思うんですけれども。どういう根拠に基づいて決められているのでしょうか。

【文部科学省】 これは先ほども申し上げましたけれども、コンソーシアムの議論の中で決まっていたわけですが、もともと戦略プログラムというのは「京」を早くから準備をして中心になって使って成果を上げていくといったプログラムでございますので、やはり相当程度使わないとそこで成果は出てこないだろうというような考え方があると。ただ一方で、それでは今使っている人だけに「京」を専有させてしまうと今度は裾野が広がっていかないし、産業界等も使いにくいだろうということで、そのバランスをある程度とって、やはり戦略的に使うのだといったからには全体の半分ぐらいを使うことが適切なのではないかなというように、コンソーシアムのほうではほかのユーザーの、さらに戦略プログラムではないユーザーはもっと使いたいという希望もあったとは思いますが、戦略プログラムの趣旨に鑑みてユーザーの納得を得て50%という大規模な資源量を使っていると、そういう状況だと思います。

【委員】 もともと戦略プログラムは「京」のためによく練られたテーマになっていると思うんですけれども、今ご説明いただいたような利用成果はほぼ戦略プログラムに基づくものと考えていいのですか。

【文部科学省】 今この段階で成果として発表しているものはほとんど戦略プログラムのものか、もしくはグランドチャレンジでやっていたものです。グランドチャレンジから戦略プログラムに移るとというのがほとんどなのですが、移ってないのもたまにありますので、そういうものでございます。

【委員】 この後は見直していく計画はあるのでしょうか。

【文部科学省】 利用の状況を見ながら必要があれば見直していくと、こういうことになるかと思います。

【委員】 最後にご説明をいただきました知財権の扱いについてでございます。今回の方針は大変よくご説明いただいたのですが、今後に向けて今回のような運用の評価と言いますか、今後はこうしたほうがいいとかこれでよかったといったような指針のようなものがありましたらお聞かせいただけますでしょうか。

【文部科学省】 こういった知財をメーカーで持つのがいいのか理研で持つのがいいのかという考え方は多分あるのかなとは思いますが、やはりスーパーコンピュータの開発というのはどちらかというとメーカーが主体になってやっているということなので、余り国側で持って押さえてしまうよりもメーカー側で持ってもらってそれをきちんと活用してもらいたいかなという

ことで、こういった状況になっていると理解しているのですが、それはそれで十分活用されているのではないかと考えております。

【委員】 特に国として知財権を持つべきではないとか、そういうことではなくて、たまたま開発の過程でそういうようになったという理解でよろしいでしょうか。

【文部科学省】 活用ということを考えると、こういうものを国で持っているよりも、企業で持っていたほうが多分活用されると。したがってバイドール条項なんかもこれまで整備されてきているという理解でございますので、契約形態が理研からメーカーへの請負契約であるということもあってほとんどメーカーに帰属しておりますけれども、それはそれでよかったのではないかと考えております。

【委員】 今のご質問に続くのですが、結局これだけのお金を使って開発した成果をもちろん富士通がお持ちになるのは結構なのです。ですが、富士通が他社に有償公開するのかどうかというより、1メーカーが持って1メーカーが使うということが国民の理解を得られるのかという観点ではいかがですか。

【文部科学省】 それは結局どう活用されるかということだと思いますので、こういった開発で国が持ってほかのメーカーも含めて使わせることによって本当に特許が生きるのかどうかというよりも、やはり開発したメーカーがきちんと戦略的に使っていくというほうが結果的には我が国全体としてはいいのではないかと思います。

【委員】 そういう意味で言うと、ソフトウェアはもちろん理研のほうでやられた成果も、その他の方がやられた成果も多いと思うのですが、もう少し広く公開して使うほうが望ましいのではありませんか。ハードウェアはなかなか他のメーカーが使うのは難しいのかもしれませんが。ハードウェアの特許とソフトウェアの特許が各々、どういう件数なのか分かるのでしたら教えていただけないでしょうか。

【理化学研究所】 今のソフトウェアという観点ですが、システムを動かすためのソフトウェアとアプリケーションのソフトウェアというのが二つ大きく分かれると思うのですが、アプリケーションは本日の資料29ページの下の方に書いてあるとおり、開発者に所有権があるということになっています。システムに関するほうのハードウェアとソフトウェアの比率についてはちょっと今わかりかねますが、特にシステムを動かす固有の部分についてはこれまでのスパコンをつくってきた経験、その知財権がありますので、大部分は富士通、今回「京」の開発を担当した富士通側にあります。理研はそれらを利用する技

術で利用する部分について富士通と協力しながら開発してきたわけですので、その部分については今後新たに新しいアイデアがあれば特許出願も考えていきたいと考えているところです。

【座長】 よろしいでしょうか。今の話ですと、アプリケーションの部分について特許や知財権はあまり主張されていない、できるだけオープンにされているということで考えてよろしいですか。

【文部科学省】 アプリケーションというのは、グランドチャレンジのアプリケーションですか。これはただいろいろな出自があって著作権が結構入り組んでいるようなところもあるようで、それはアプリケーションによって事情は異なってくる。ただ、基本的には公開して使わせるというようなことで、そこは使った場合にその著作権をどういうふうに保護していくかというのはそれぞれで契約を結んだりしてやってもらっていると、そういった状況であります。

【座長】 かなり知財のほうに質問がきましたけれども、成果とかマネジメント、その他ご質問ございましたらお願いいたします。

【委員】 最後のほうで「京」に関する開発体制の構築といいますか、推進母体が文部科学省で行われたということに関してご説明をいただきました。この点については「京」に関しては、今までずっとこのような体制でなされたということで、現時点でとやかく言うべきことではないと思います。そこで今後のことを考えたときに、例えば「京」の場合においても資料3の2ページ目の最初の書き出しにおいて、広範な分野の科学技術・学術研究及び産業における幅広い利用のための基盤を提供すると書かれており、人材育成に関してもどちらかというと継続的にスーパーコンピュータを開発していくための技術力を維持及び強化すると記述されております。これはやはり産業競争力の観点から、該当分野の技術力を維持していく、あるいは強化するということがうたわれています。そういうことを考えたときに、今後も文部科学省単独で推進していくべきことなのかということについて、ご意見いただけないでしょうか。

【文部科学省】 これは先ほどもちょっと申し上げましたけれども、こういった大規模なスーパーコンピュータをつくって整備して運用していくということはやはり我が国の計算科学技術研究基盤、これの整備運用ということを主目的にやっているわけでございます。そういう観点から言うと、産業政策、我が国のスーパーコンピュータの産業が弱いからそこにお金を入れて強くすると、そういう政策としてやっているものでは基本的にはないということでございます。

したがって、どういうものをつくるかというような観点もどういうふうにご利用していくかということ踏まえまして、どういう利用があるからどういうハードウェアが必要だ、という流れの中で決めていく話になってきますので、

基本的には産業政策というよりも科学技術政策基盤、今産業界の中にある技術を用いながら科学技術の基盤をつくっていくとこういったようなものになろうと思いますので、経産省と連携をしないとできないと、こういうことでもないのかなとは思っています。もちろん経産省のほうでいろいろ産業技術力の強化ということで新しい半導体であるとかそういったデバイスの技術であるとかそういった研究開発はしていますので、そういった成果もうまく使えるといいなと、より効果的かというようなことで、経産省の担当課・室のほうとは連携、連絡を取り合いながらやっています。

最終的にはどういうものをつくるかというのはどういう目標を達成するのかというようなこと。それはハードウェアの目標というよりもアプリケーションでどういう成果を出していくのかと、こういったものからくるものですから、それに合ったハードウェアというのをつくっていくということで、必ずしも経産省と連携しなければいけないと言われるとそうでもないのかなというふうに考えているという状況です。

【委員】 今のお話ですと、本来は連携したほうが良いと思っておられるということと考えてよろしいですか。

【文部科学省】 経産省のほうで行っているいろいろなデバイスの研究開発等々が新しいスーパーコンピュータをつくるのに活用できるなら、それはそれでいいというふうには思います。

【委員】 今のお話で、産業界の立場からすると、やはり産業利用をぜひしたいという観点は当然ございます。ただし、それが「京」を使うかという話には必ずしもならないわけで。むしろ一般的な期待としては、先ほどお話があったように、作成されたソフトウェアやシステム、例えば並列化のコンパイラであるとか、それからシミュレーションの基本的なテクニックであるとかそういう成果は、「京」ほどの高速もいらないし、精度もいらないし、材料設計をしたいであるとか、そういうシミュレーションの要求というのは多々あって、産業振興としては非常に大きなポイントであるというふうに考えております。シミュレーション技術の産業応用という観点でやはり成果をできるだけ展開していただきたいと考えます。

【委員】 6 ページ、7 ページに関してですが、この「京」の開発に関してアプリとハードに対する協調設計をしたという最初の事例ですからここを重視したいのですが、その過程で最初の 21 本のアプリで必要な性能、最初から要求されている部分を幾つか切り捨てたのがあるのではないのかというのが私の懸念

です。それに対するご回答は、最終的にペタを達成しているアプリがこれだけあるから結果的にいいんじゃないかというような論旨での回答を受けたと思うのですが。その中には表に出てこないというか、つまり負け組のアプリも幾つかやはりあるような気がするんですね。それがつまりこの「京」の開発、もちろんマルチパーパスな本当の汎用機というのは現実には無理だから仕方がないんだというあきらめも納得はいくんですが、そうではなくて、ひょっとしたら例えばLINPACKを最優先にした世界一を最優先にしたためにかなり無理をして、それで本来ここで動かして成果が上がることを期待されたものを犠牲にしてハードの開発が行われたんじゃないかという、そういう非常に不安が残るんですが。

そういう目で見ると、例えばこの21本のアプリの中から、例えばメモリ性能を非常に必要としてけれども、それは犠牲になったとか、そういうようなアプリというのは具体的にはないんでしょうか。

【理化学研究所】 ご指摘の点はメモリ性能を要求するアプリとしては、例えば流体、特に有限要素を用いた流体、ここで6ページのグラフで言いますとFrontFlow/Blue、これは非常にメモリへの要求が非常に高いプログラムでありまして、そういう意味ではフルノードを使っても1ペタを達成していないという面からすれば、「京」でも十分な性能が出ていないことはこの資料からもわかると思います。

しかしながら、ご指摘の点、10ペタフロップスという性能を目標に置いた時点で、かつその対電力性能比ですね、低電力ということを求める以上、これからのハードウェアの方向性としては世界的にもそういう潮流にありますし、やむを得なかった部分もあると。しかしながら、これらのメモリの要求が大きいNICAMであるとかSeism3Dにおいてもフルノードを使えばペタ性能に近いところまでいく、そういう技術を獲得する意味でも今回のハードウェアをユーザーに提供するのには十分意味があったというふうに考えています。

【理化学研究所】 各アプリの「京」における実行ノード数、最初にやった21本のターゲットアプリですけれども、実はライフは6本あってどれもだめだったというふうに読めますが、実際にはライフ分野のグランドチャレンジでアルゴリズムから見直すことで結果的に例えば実行効率43%の血流解析ソフトを開発するなど、この当時と「京」をターゲットにとってアルゴリズムを見直すことで結果的に性能を高めることができたというものもあります。やはり何もない状態で既存のソフトでターゲットアプリを選んだことのデメリットの部分というのもやはりあったのではないかと思います。

【委員】 前に同じ国家基幹技術のSACLAのお話を伺ったときに、かなり

「京」でのデータ処理との組合せを期待されているようなお話があったんですけども、この部分はお互いの連携というのはある程度具体的には進んでいるのでしょうか。

【文部科学省】 まずSACLA側では「京」にデータを転送するためのいろいろな情報機器、要はそのままのデータを全部流すわけにもいかないんでSACLA側で一次処理をして、ある程度圧縮して流していくと。そのための予算というものを要求してつくっていると、そういう状況になっています。そして計算機構側、「京」側のほうではもらってきたデータをどういうふうに解析できるのかというようなことをそのSACLA側と、機構の中にいるライフサイエンスのシミュレーションの研究者と連携して、「京」を使うとそうしたデータが「京」でちゃんとシステム上使えるのかとかそういったシステムの検討などそういったものも協力して始めているといったところでございます。

【委員】 ハード的には今準備段階でやって、具体的なテーマはライフサイエンスの分野で進めていくという理解ですか。

【文部科学省】 具体的には複雑なタンパク質の構造解析なんかをテーマにそうした協力ができないかということを検討しているという状況です。

【委員】 SACLAと「京」の各々のメリットを活かした部分というのはどういうところになるのでしょうか。

【文部科学省】 やはりSACLAでは非常に細かいデータというか詳細な写真、X線写真が撮れますので、たくさんのデータが出てくると。それを解析することによって次にどういうふうな解析をしていったらいいかというようなことに、X線の照射条件とかそういうものに反映できるのではないかなというようにも聞いています。もともとX線で撮った写真を実際のタンパク質の形に画像をつくるときに、シミュレーションを併用しながらつくることによってより正確な画像ができるようになるのではないかなど、そういったことで協力できるのではないかと聞いております。

【理化学研究所】 既に連携は進んでおりまして、SACLA側から得られたデータ、これは本当にたくさんの情報があって、その中から本当の例えばタンパクならタンパクの立体構造を見たいということなのですが。そのまま生のデータからすぐそういう実測値には至らないものですから、その間の処理というのは大変でございます。それは「京」のほうで処理をして、そういう三次元の立体構造を見るような形に、そういう今プロジェクトが進んでおります。

片方でそれだけでは十分でなくて、「京」を使いますとタンパクの立体構造そのものを本当にシミュレーションから予測することができますので、そういうシミュレーションの結果と、それからSACLAで得られてくる立体構造等を突き合わせながら実際に本当の意味の要求の中の例えばタンパクの構造なん

かを解明したいということで今お互い一生懸命連携を進めて、プロジェクトを進めているという段階でございます。

【委員】 S A C L AはS A C L A自体の共用の問題もあると思いますけれども、あとはS P r i n g－8とかJ－P A R Cについてはもう既に実績はあります。

【文部科学省】 むしろそっちは材料分野のほうが進んでおりまして、例えば元素戦略なんかでもS P r i n g－8やJ－P A R Cを活用しつつ、それをシミュレーションするとか、そういうことがやられているのではないかと思います。今戦略プログラムのほうでそういった実験、研究者との連携をしようということで毎年1回シンポジウム等を開いて、J－P A R CやS P r i n g－8から人を呼んできて、そういう実験装置でどういうことをやっている、また今度シミュレーションでこういうことをやっているというようなこともお互いにやっているの、そういう中でいろいろな連携が進みつつあるのではないかと考えております。

【東京大学】 今ご紹介いただいたとおりなのですが、大規模な実験施設というのはとにかく大量のデータが出てきて、それをそのまま使っても何の役にも立たないといえますか、物理的情報に落としていくというのは本当に大変なことです。それに対してシミュレーションというのは直接材料の情報わかりますけれども、必ずしも完全に計算を信じていいわけではない。つまり、実験とシミュレーションというのは相互に補い合うと非常に力を発揮するものであるということで、現在戦略分野2号のほうではS P r i n g－8、S A C L A、それからJ－P A R Cとの間で相互に情報交換しながら、例えば元素戦略等を中心に研究交流を進めているということです。

【文部科学省】 先ほどの知財権をどう使うかというお話あった中で、説明をし忘れていた部分があるのですけれども、そもそもこのプロジェクトで「京」の設計開発をしたときに、費用分担が国1に対して大体民間企業が2ぐらい出していると。それは当然そこで得られた成果というのは、今後その企業の商品開発であるとかそういうものに活かされるというようなことが込みでそういったような費用分担になってございますので、やはりそういう中で得た知財というのは企業で活かしてもらおうと、そういう観点もあるというようなことを説明し忘れておりましたので追加させていただきます。

【座長】 ありがとうございます。ご質問いかがでしょうか。

【委員】 これは本当に好奇心の質問ですけれども、顕著な成果として心臓のシミュレーションで、細胞組織、臓器を部分ではなく心臓全体をありのままに

再現するということなのですからけれども、これ人体全部やるとすると「京」の何倍ぐらいが必要でしょうか。

【文部科学省】 どれぐらいのレベルでやるかということにもよると思うんですが、これと同じようなレベルということですよ。これと同じようなレベルだともう100倍、1,000倍、1,000倍では足りないですね。

【理化学研究所】 1,000倍ではきかないですね。これ実は心臓は「京」のコア数と細胞の数がちょうど一致するぐらいで、「京」を全部使うとちょうど心臓の1個1個の細胞が一つのコアで計算できるというのに比例しています。人間の全細胞数は60兆ですから、64万に対して、という比率でございます。

【委員】 100倍とか1,000倍ぐらいないとできないものというのがちょっと何か出ているといいかなとちょっと思いました。

【理化学研究所】 心臓に関してはちょうど実際には心筋細胞一つ一つからモデル化していますけれども、ほかの臓器に関しては一つ一つまでをモデル化する必要まではないと思うので、もっとずっと簡略化できるというふうに思っています。ですから、そこまでは、1,000倍ぐらいでおさめたいですね。

【理化学研究所】 実はこの心臓のシミュレーターも実は「京」全体を使っても1心拍に2日ぐらいかかるんです。もちろん精密な計算をして、そして少しモデルを簡素化して実際に使いたいと思っていますし、現在ではもう個々の患者の心臓までもちゃんと再現できるようになっております。ですから、例えばそれぞれの心臓に疾患のある患者さんがいても、このシミュレーターを使うことによってどこに原因があり、何がどういうふうにすればいいかということがわかりつつあります。ただ、「京」を使っても先ほど言いましたように非常に時間がかかります。

私たちこれから先に特に脳の働きというんでしょうか、人間の高度な情報解析をどういうふうにやっているかということを知りたいと思ってこういうシミュレーションが非常に有効ではないかということを考えているわけですが、「京」の100倍ぐらい使っても昆虫の脳ぐらいしか実はできなくて、人間の脳なんかの解析をするにはまだまだやはりパワー不足というところがあるように思います。いろいろな意味でアルゴリズムとか理論といった論理的なところももちろん解決しないといけないですが、まだまだやはり挑戦すべき課題というのはたくさんございます。

【座長】 私のほうから、資料3の2ページで、目標設定についての質問への回答があります。今回のご回答では数値目標の立て方が妥当であったという評価をされているわけです。今後また新たなスーパーコンピュータの開発もあるかと思いますが、今回のLINPACKのような数値目標を中心とした数値目

標の設定に対して、今後もそういう設定のされ方をされると考えられているのか、それともあるいはまた違った見方をされようとしているのか、伺いしたいと思います。

【文部科学省】 今、次の戦略をどうしようかということをもさに文部科学省のほうで検討しているわけですがけれども、その議論の中では先ほどもちょっと申し上げましたけれども、何をするか、どういうシミュレーションを実現して、どういう課題を解決していくかと、こういうことに照らし合わせてどういう性能が必要であるか、こういうようなことを考えていくべきではないかというような議論になっております。

ただ、一方で性能を測る指標、それを試していく指標というのものもそんなにいっぱいあるわけでもないので、LINPACKを完全に無視するというわけにもいかないだろうと、こういった議論なのですがけれども。中心はやはり何をするのか、何を、課題を解決するのかと、そういったような考えの中からハードウェアを設定していくと、これが基本的な考え方になってくると思います。

その評価の仕方は、今フィージビリティスタディというところでいろいろな将来スーパーコンピュータでどういうアプリケーションを使わないといけないのかと、こういったものを議論しながら、それをミニアプリという形、それをベースに評価用のアプリというものもつくっていきまして、そういったような実際に将来に使うようなアプリケーションをベースにした評価というようなことをしていくのかなというふうには考えております。

【座長】 皆さんのほうからほかにご質問がございましたらお願いいたします。

【事務局】 COEのスーパーコンピューティングの研究教育拠点に関して伺いたいことが1点ございます。第1回検討会の折に文部科学省から出していただいた資料の中で、国内外の優秀な人材の登用活用による緊急推進をCOEで行おうとしているという話があったかと思います。今回ご説明いただいた資料3の22ページ、23ページに書かれていると思うんですが。具体的にどのような国から何人ぐらいの方が来られ、どのような研究されているかというところを教えてくださいたいと思います。

【理化学研究所】 今研究チームが19ございますけれども、大体研究員の15%から20%が外国人でございます。チームリーダーとしては今のところまだ外国からお呼びしたのは一人でございますが、ポスドクあるいは研究員は随分たくさんの方が海外から来て一緒に研究活動をやっているという状況でございます。

【事務局】 アジア系の方が多いのですか、それともヨーロッパ系ですか。

【理化学研究所】 いえ、それはほとんど万遍なくいろいろなところから来て

おります。同時に今MOUを結んで、これはアメリカ、それからヨーロッパはユーリッヒ研究所なのですが、それからオーストラリア、それ以外にも今アルゴンヌとかそういうところとも連携が進んでいますし、お互いに人の交換というか交流もやりたいと思っていますし。それから、日本の国内でも理研が中心になって夏の学校というサマースクールをやっているんですが、これの国際版というのがありまして、アメリカ、それからヨーロッパ、日本で交互に回して、そして若い方々を育てようということで、そういう試みもスタートしておりますので、いろいろな形でこれから先もどんどん人的な交流も進んでいくのではないかなと思っています。

【文部科学省】 冒頭に座長のほうから論点について何かコメントがあればという話を伺って、事実関係、コメント等してもよろしゅうございますか。

【座長】 何かございますか。ご指摘いただければ。

【文部科学省】 資料1の3ページの(4)の②のところである、「京」以外では実行できないビッグデータを扱った複数アプリケーションの連携による連成シミュレーションというのがちょっとどういうものがあるかわかりにくいところがあったので、もう少し具体化していただきたいなというようなことと。

あと、4ページの一番上に書いてあるコンサルティング体制の話なのですが、これは今、基本的にはコンサルティング体制というのが構築されております。現在は利用料金を設定せずに無償でサービスを提供すると、こういうふうにしてやっているところでございます。したがって、過剰なサービスをするときには利用料金を取るということもあっていいのかなとは思いますが、このように書かれてしまうと、今何もしてなくて、サービスをするのであれば料金取ってやってくれというような感じにも見えます。

やはりこういった支援サービスに対して料金を取るか取らないかというのは、SPRING-8の感じを昔見ていても非常に思うのは、やはり料金を取ると利用しなくなるというようなことが起こり得るので、そこは少し分けた議論というのをさせていただいたほうが良いと思います。無料でサービスをする部分とこういう部分は料金取ってやらないといけないというような、そこをもう少し明確にさせていただいたほうがありがたいと思います。それは3ページの(5)の①のサポート体制の強化ということともつながってくると思います。以上です。

【座長】 ビッグデータアプリケーションは確か委員からコメント出されたかと思います。

【委員】 ビッグデータの解析によって新たな知見を得るとか、新たな科学的な発見をするとかというときには、今、どちらかというとき重要視されているよ

うに、一つの分野を一つのアプリケーションで深く探究していく、その分野でより計算として徹底的に行うということの方向よりも、ある分野のシミュレーションと別の分野でのシミュレーションを連成させながら、その二つのことの関連等を導くことによって新たな知見が得られるとか新たな発見があるというものが結構多いんですよ。例えば震災に関する大量のデータがあり、もう一方で気象関係の大量のデータがあると、どのような関連性をもってどういう現象が起きたのかということが、その両方のところをうまく連携させないと結果が出てこない。逆に両方というか複数のものを連携させると非常に価値のある発見があったり、産業応用ができると思われます。

「京」の中で、もしその「京」の持ってる計算的なパワー、そういうものをうまく使いながら他ではできないけど「京」だからできた、というようなものがあると非常にこれは価値があるし、今後のいわゆるスーパーコンピューティングということをビッグデータと絡めて行う上では価値があると思われます。そういうものが何かないでしょうかということをお願いしたかったということです。

【理化学研究所】 もちろん現代の科学技術が扱う課題というのは非常に複雑化していますし、巨大化しております。そういうところにはシミュレーションがもう本当に必須なのですが、同時に、先生が言われるように、ビッグデータと言われている大量のデータが片方でたまりつつあると。それをいかにシミュレーションとうまく連携させて使うか、そして新しい知見を得るかというのは非常に重要なことだろうと思います。

既に「京」を使って例えばゲノムのデータの解析、それから例えばがんとかそういう疾患に対するゲノムのアトラスをつくろうという動きもあって、それは「京」を使っております。それから、例えば気候変動なんかで大量の観測データがございますので、そのデータを、いわゆるデータ同化という新しい手法でシミュレーションの中に組み込むという形で新しいアルゴリズムを開発したり、方法論を開発するということで今「京」を使ってそういう方向でやっております。それから、先ほど言われたように、総合防災に関してはシミュレーションの結果、それからその避難経路をどうするかというようなこと、そういうことも含めて大量のデータをいかに活用するかということが非常に重要で、いろいろなところでそういう試みはスタートしておりますが、まだやはり本格的にできているかというところにはまだ至っていないかもしれません。ただ、これから先の問題としては非常に大きな問題として私たちもとらえておりますし、もしこれから先にそうしたいろいろな複雑な問題を解決するにはやはりシミュレーションとビッグデータとの連携ということは非常に重要な課題であると思っていますし、そういう方向に力を入れていきたいと私どもも思っております。

ます。

【委員】 ぜひそこら辺を考えていただきますと。もう既になさっているということですが。どうもありがとうございました。

【座長】 ありがとうございます。先ほどの利用料金云々の件につきましては、議論するための具体的な例として挙げさせていただいたものだと思います。この後、委員の間での議論の中でもう少しもませていただきたいと思います。ほかにご質問やご意見ございますか。では、そろそろ時間もまいりましたし、ここで質疑のほうは終了させていただきたいと思います。

なお、文部科学省におかれましては今後の議論でまた追加の質問が出る場合もございますかと思いますが、その場合には事務局から連絡いたしますので、よろしくご対応をお願いいたします。どうも今日は丁寧なご説明ありがとうございました。

(文部科学省 退室)

【座長】 それでは、引き続きまして今の文部科学省からのご説明、ご質問、それから質疑応答、その結果を踏まえまして、先ほどの資料1にあります論点に沿ってまずはご意見出していただければよいかと思います。項目としましては1番に目標達成の状況、2番目に科学技術、社会経済的、国際的な効果と波及効果、3番目にマネジメントの妥当性、4番目にその他となっております。まず1番の目標達成状況等に関してのご意見ございましたらお願いいたします。

【委員】 ここに書いている目標というのは手段、道具としての「京」の性能が十分発揮できるようになっているかというところだけを目標として考えるのであれば、それはもう定量的なデータで達成できているという評価でいいと思います。この後の利用成果のところはプロジェクトの今後の活用に対しての意見を言うところであって、その成果についての評価はまた別という位置付けでいいわけですね。

【座長】 そうなりますね。これは平成17年ですか、その時点での目標設定の仕方としてやはりLINPACK、ないしそういう数値目標でもって目標設定がなされているので、それに対する達成評価ということになると無事に目標達成されたということになるのではないかと思います。ただ、それが今の新しい大綱的指針で示されているアウトカムと言われるものですか、波及効果まで含めて評価するとなると、活用成果などについて議論になると思います。それは後ほど議論しようかと思います。まずは、最初に設定された目標に対しては達成状況はどうかということに議論を集中させていただきたいと思います。

【委員】 3番目のCOE形成なのですが、COEを形成するというのは、つまりそういう枠組みをつくるということが目標ではなくて、センターオブエク

セレンスをつくるという、つまり拠点だけをつくるのではなくて、実際にそれを運用し、そして成果を上げるというところまでが目標ですよね。それで言うと、今はMOUを結んだとか、いろいろな拠点をつくった、講習会を開催したというのは、ちょうどそのCOEの形成に向けた活動が着実に進められているという段階であり、今後、その成果が求められるという状況ですよね。これで終わったというわけではないということでもいいんですよね。

【座長】　そういうことですね。着手されたあるいは最初の段階としての形成ができたというところまでは評価できると表現できるのではないかと思います。

【委員】　そうするとこれも目標が達成された、という書き方ではなくて、その目標に向けた着実な準備が、確実な活動が続けられている、計画されて進められているという評価になりますね。

【事務局】　事務局のほうから少し補足させていただきます。ご指摘のとおりCOEの形成を図るということで、実際にこういった取り組みを進めておりますという事実関係はあります。それが実際にCOEの形成に向けて効果的なものとして機能しているかどうかといった観点も含めて最終的にはフォローしたいと思っております。

国内外の優秀な人材の登用活用による研究推進といった取り組みもある中で、実際にどういった海外の研究者がどのような活動をしているのか、また世界最高水準の拠点にふさわしい活動がどのように行われているのかといったところも、ある程度フォローはしていきたいと考えております。後ほど人材育成の部分でAICSの人材育成についてどうかといったところを改めて確認するような項目を挙げております。それも含めて少し確認をしたいと事務局としては理解しております。

【委員】　今の点ですけれども、多くの方が心配しているように、この後、どうというようなアウトカムというか実質の成果を上げたか、ということの評価する機会はあるのでしょうか。それとも制度上、これで終わりということなんでしょうか。

【事務局】　今回はお配りしておりますが、もともとCSTPにおける評価の行い方について、平成17年の総合科学技術会議で、どのようなものを対象とし、どのような時期に評価を行っていくのかといったところを決定しております。その中で、追跡評価といったものがございまして、評価専門調査会が特に必要性を認めたものについて行う、という形になっております。適宜必要に応じて追跡評価あるいはフォローアップといったことについてはご指摘等踏まえて必要性が認められた場合については行うということはあると理解をしております。

【座長】　今のフォローアップについてですが、事前評価の後のフォローアッ

プではなくて、こういう事後評価の後のフォローアップも存在するんですか。

【事務局】 過去に行いました事後評価の例を見ますと、「X線自由レーザの開発・共用」ですね。実際の効果の発現は施設の共用以降に確認できるという性質のものについて、5年後を目途に専門調査会でフォローアップを行う、という指摘をしている事例がございます。

【座長】 ほかに目標達成状況に関するご意見ございましたらお願いします。ソフトウェアの普及については、先ほどの質問・回答を聞いてからもう一度議論するとしてましたが、その辺いかがでしょうか。

【委員】 論点の中でアプリケーションのことが書いてございまして、それについては確かに実現されてちゃんとシミュレーションできて成果出ていると思います。1番の①の演算性能についても達成されていると思います。一方、実際、先ほど質問させていただいたようなシステムソフトウェア、シミュレーションを有効に活用するための基盤的なソフトウェア、それから特に利用者にとっては大きなポイントになる並列度を抽出して自動的に並列化して計算機に割り当ててくれるようなソフトウェアというところの説明がありました。それらがどの程度一般化されて使えるものなのか。ソフトウェアの場合は必ずしもプラットフォーム依存でない部分がございますので、そのあたりの評価は今回の範囲では難しかったかなと考えております。

【委員】 今の点ですが、日本のいろいろな計算機関係のプロジェクトの中で京のアプリケーションソフトに関する取り組みというのは日本の中では例を見ないほど頑張っているというふうに私は見ています。ただ、この場合の対抗相手は商用ソフトで、産業界では多くの場合、そういう商用ソフトを使っている状況です。それと対抗して、ここで今回開発されたようなソフトが産業界で使えるかということ、残念ながらまだその段階までいっていないというわけです。それをいかに近づけるかということが、今後の課題ではないかと思っております。

【座長】 ありがとうございます。ほかに皆さんのほうからございますか。では、議論を少し先進めたいと思います。二つ目の科学技術的、社会経済的、国際的な効果について。これは狭い意味での目標設定だけでなく、波及効果を含めての成果を議論すべきかと思いますが、ここに対する評価についてはいかがでしょうか。

【委員】 事務局には昨日にコメントを差し上げたのですが。この2ページの下にある(2)の①ですが、この表現は余りいただけないなという感じを受けました。このことをコメントしておきたいと思います。

御存じのように2011年で2回トップを取った後、アメリカの二つの計算

機に先を越されて、現在3位、来週発表されますが、多分4位か5位になっていると思います。1位でなくなったということについていろいろ言いわけみたいなことが書いてあるわけですが。私はこれを余り強調すると非常に悪いメッセージを世の中に出すのではないかと思います。つまり、ここではタイタンはまだ正式に稼働していない、これも確かにそのとおりで、セコイヤは原水爆関連のことが中心ですので、そういう意味でここに書いてあることはもちろん事実的には正しいのですが、それをわざわざ出して、「その二つを別にすればトップだよ」という言い方になっているのは、ミスリーディングではないかと思います。私は、タイタンやセコイヤがちゃんと動いているとしても、やはりこの「京」というのは最先端の世界水準に到達していると理解しています。それは、この前に書いてあるような応用等も含めてですね。「1位、2位はインチキだから3位でもトップだと」というような言い方はやめたほうがいいんじゃないかというのが私の意見でございます。

【座長】 ありがとうございます。他の方はこの点に関してはいかがでしょうか。

【委員】 同感です。つまりここでやはり強調すべきなのは、単にLINPACKで世界一をねらったマシンではないんですよということです。それで、LINPACKで負けるというのはこれ世の中の趨勢でしょうがないけれども、この実際の重要なアプリ、必要なアプリで性能を発揮しているし、これからも研究者にとって非常に使いやすいマシンである続ける。繰り返しですが、これは「LINPACKで世界一をねらうだけのマシンだけではないんですよ」ということを強調するのが重要かと思いますね。

【委員】 私も次につなげる意味でも両先生のご意見に賛成です。

【座長】 よろしいでしょうか。ここは客観的な評価をすべき場であり、言いわけをするような表現は避けたほうが良いという意見と理解します。では、この点についてはよろしいでしょうか。ほかにご意見ございましたらお願いいたします。

【委員】 2.の(1)の②の産業界からの期待ですけれども、製薬業界ではスパコンをタンパク質と化合物の結合の解析に使っていると思います。実際に使う立場からすると、新しいアプリケーションの開発も重要だと思いますが、既に産業界で使っているアプリケーションの高度化目にも目を向けてほしいと思います。

【座長】 ありがとうございます。それは今後のことでしょうか、それとも今回の開発の過程での反省点として指摘しておきたいということでしょうか。

【委員】 アプリケーションソフトウェアの開発がどういう過程で選ばれたかわかりませんが、産業界からはそういうことも要望はしていたと思います。

ですが、そうできていないので、今後、例えばポスト「京」ではそういうことにも取り組んでいただきたいというところです。

【委員】 今の（１）の②の産業界ということで、ここではバイオ・ライフ、工学・ものづくり、物質・材料・化学というようなテーマが挙げられており、目標を立ててグランドチャレンジアプリケーションを形成してやるという意味ではある程度の達成が得られているのかと考えています。ただ、前回の資料を読ませていただき、今回の資料を見させていただいても、ものづくりのところは、実際何をおやりになったのかよくわからないところがあります。この辺は追加資料が出せるようであればお出しいただくほうがいいのかと思います。資料を見ても、ナノ材料やライフは非常に詳細に幾つかテーマ挙げられている。一方、「ものづくり」に関しては、前回の資料を見ると、先端要素技術の創生、組合せ最適化、丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発、と書いてありますが、これらは一体何のことなのか分からないし、これをシミュレーションでやるというのは一体どういうことなのかわかりません。産業界としては、これからどうやってものを作って生産性を上げていくかということが競争力強化の意味でも大きなポイントです。この辺をもう少しはっきりさせていただき、活用を考えていただければいいかと思います。

【事務局】 ものづくりに関しまして、もう少し詳細な情報を文部科学省に確認をさせていただきたいと思います。

【委員】 この（１）の③のところですが、海外市場展開のところ、台湾やオーストラリアの受注にこぎつけたといいますが、こんなものでいいのでしょうか。本来はもっと売れてもいいはずですが、海外に限らず日本でもこれがもっと売れて、いろいろなところに導入されて、システムアーキテクチャに適合したソフトウェアも含めてもっと普及する。それによって「京」を基幹とする大きなピラミッド構造でシミュレーション分野全体の底上げができれば最終的な理想に到達したと言えらると思います。底上げは思ったほどいってないような懸念があります。

ここでは「京」の勝因として、F X 1 0を含むスーパーコンピュータとして商用化され、これから海外展開を図られているとかいう進行形ならいいと思うんですが。今の説明のままだでは逆のことを言っているような気がします。かつ、心配なのは、F X 1 0の前の機種であるN E C製のS XとかF X、これらのほうがまだ売っていたのではないかという気がしてすごく心配ですね。

【委員】 2の(1)の書き出しの、「学术界」と「産業界」という二つに分けているところに疑問を感じます。①の医薬・創薬とか、新物質・エネルギー、次世代ものづくり、これら全部産業界のニーズですよ。学术界ではそれに対する成果が得られていると思ったんですけれども。産業界と書いてあるほうも、必ずしも産業界だけが求めているものでもないと思います。先ほどの議論を聞いていると、この①、②というのは、戦略プログラムと一般利用枠との区別ではないんですか。

【事務局】 学术界と産業界というのは基本的に戦略プログラムに関しまして、実施機関が学术界における大学や研究機関が中心になっていて、基本的に主体で分けているという理解です。従って、産業等で活用される研究内容であっても直接的に研究機関等が行っているものについては学术界と申し上げおります。産業界については全体の5%の産業利用枠内で行っている、直接的には産業界が主体となってやっているという意味で、ここはそういう分け方をさせていただいております。ご指摘のとおり内容的にはやや入り込んでいる形になっておりますので、整理の仕方として再度整理させていただきたいと思います。

【委員】 実際、戦略プログラムには民間も入ってニーズをいろいろ聞いてもらっているんで、そこは書き方の工夫をお願いします。

【委員】 サポートを有料化することがプラスなのかマイナスなのか、あるいは国の政策としてどうすべきかという点は微妙なところがあります。確かに非常に高度なプログラムの高速化みたいなものを無料でいいのかということは大きな問題です。ただ、「京」に限りませんが、相談に行くたびにお金を取られるというようなのもどうかと思うので。この辺何か切り分けをしないといけないと思います。本当に高度なものが有償なのは当然だと思うんですが。③の書き方は少しその辺があいまいかという印象でございます。

【事務局】 ③にこういう形で書かせていただいているのは、特に運用サポート体制、コンサルティング体制についての人材の確保といったところが現場で課題であるというお話をお聞きしているからでございます。そこに対し、ノウハウのある人材を手当するという仕組みをどのようにつくっていくかといったところについて、いろいろな考え方があるだろうといったことです。

一つのアイデアとしまして、サービスモデル的なもので実際に料金を取るという形でやるというものもございます。文部科学省からお話あった利用度との関係とかそういったところも踏まえてトータルで考える必要があるだろうと思っております。ここにつきまして、そういった仕組みづくりが必要ではないかということに関しましてご議論を賜りたいという趣旨で、論点として書かせていただいております。一方で、CSTPとしての評価としてその仕組みのビ

ルドアップについて、どこまで提言し得るかといった問題があります。最終的にどのように書けるかについてはご意見をいただき、十分に吟味させていただきたいと思います。

【委員】 今のお話の中で③は人材育成、特に高度な人材育成との関連でというお話があって、それは大変よく理解できます。ですが、人材育成の観点で高度な人材を優遇するためにいろいろな施策を考えているんだ、ということがよく読み取れません。その人材育成との関連をもう少し明記されたらいいのではないかと思います。

【座長】 今の点について、私も人材育成や人材確保が困難であるという課題の指摘があればそれを優先して書くべきで、具体的な施策案は評価で踏み込む範囲を超えているのかなとも思います。前回出ていましたご意見の中で、計算機科学のエキスパートと、対象アプリケーション領域のエキスパート、その両方の知見を持ち合わせた人材の育成の課題がありました。ですが、先ほどの文部科学省からのご説明を聞いていますと、それを目指しているとは書いてありますが、実際には計算機科学的なところはメーカーの技術者に任せるよ、という意向を若干感じました。このような人材育成に関してはまだまだ課題があるのかなという感覚を私は持ちました。そのあたりは皆さまはいかがでしょうか。

【委員】 私も、もう少し踏み込んだご回答がいただけると良いと思ったのですけれども。①で書かれている6項目の中でそのような視点も考えられているのかどうなのかというところを伺えると良かったのですが。例えば神戸大学の大学院の連携講座について、そのようなところまでを一応考えた講座なのかとか、今後、重要な問題だと思いますので、何らかのもう少し具体的な方向性を示していただけるとありがたいと思いました。

【座長】 では、この点については再質問、追加質問しますか。論点（6）の①にある具体的な事例について問うてみるかですね。

【委員】 再質問するか、こういうことの重要性を報告書に書いておくかですね。

【事務局】 今の情報レベルで結論として評価してしまうよりは、もう少し事実確認をさせていただいたほうが公正な評価につながるかと思います。そこは少し補足させてください。

【座長】 了解しました。

【委員】 座長からお話があったように、ソフトウェアは理研がおやりになって、ハードウェアはかなりの部分を富士通がおやりになっているというような印象は受けております。ですから、知財権にしろ、計算機を設計していく上でのいろいろなノウハウにしても、一般に開放されているかどうかは若干疑義があるのかなと、感じるところがございます。

前回、システム拡張に関する質問があり、今回それに対してメモリを増やすなど、そういうことでは増強はできないというご回答になっているわけです。もともと拡張性のあるアーキテクチャを選ばなかったのか、次のスーパーコンピュータではどう考えてどう改めて行くのか、という点も一つ課題としては残っていくと思います。

【委員】 一つ前の議論ですけれども、追加の回答19ページに回答があるのではと思います。一人の人が研究者と技術者が兼ねるのではなくて、研究者と技術者が協働して行う。両方とも、研究者のほうも技術的な素養が必要であるし、技術者もいろいろな分野の素養が必要であって、そういう人たちが協働することによって成果が生まれてくるのではと思います。技術者の方には自分が専門に係る分野の素養をつける教育とか訓練をしていただきたいと思います。

【座長】 そうですね。ただ一方で、先ほど先生が指摘された6つの実際の活動について、それが文科省の活動とリンクしているのかというところは追加で確認させていただいたほうがいいかなと思います。委員、どうぞ。

【委員】 ここで議論している人材育成というのは、また次のポスト「京」の研究開発するための人材育成の必要性を言っているのか、今の「京」を活用してライフとかナノとかで大きな成果を生むための研究者の育成を言ってるのか。両方混ざった議論になっているような気がするのですが、どうでしょうか。

【座長】 この開発プロジェクトの所期の目標で、人材育成はどういう定義になっておりましたでしょうか。

【事務局】 人材育成に関する目標設定に関しては世界最高のCOE形成で概ね達成できていると考えております。また、事前評価やフォローアップの中で、人材育成についてはスーパーコンピューティング技術にかかわる人材といった観点だけでなく、実際にソフトウェアなり運用サポートも含めたトータルな運用なり利活用の部分含めての人材育成が必要だという指摘等をしているところでございます。

【委員】 さらに今の(6)の②のところは、今度はユーザーサイドとしての人材育成の意味があって、いわゆる計算科学、シミュレーション学としての本当にスーパーコンピュータを使ってアプリケーション分野できっちりとプログラムを書けるためにはというところで、プログラムに関するコンピュータサイエンスの知見と、アプリケーションを書く場合の対象ドメインに関する知識が必要です。前にも言いましたが、例えば自動車の分野などにおいては流体計算が多分出てきますので、ナビエ・ストークスの方程式などに関して深い知見を持っているとか、対象・応用分野に関する知見を持っていないと有効なアプリケーションプログラムが書けない、という視点からの人材育成が配慮

されているかどうかは気がかりです。したがって、今の事務局のおっしゃっているところからすれば3段階あるのですかね。

【事務局】 ②に関しましてはご意見を踏まえて書かせていただいている部分について今のお話で少しクリアになりました。整理をさせていただきます。

【委員】 先ほどの質問の件ですが、今の先生の話もありましたけれども、こういう計算科学関連での計算機科学なりコンピュータサイエンスとしては、やはり二つがあると思うんですね。一つは与えられたケース、例えば「京」という計算機があったときにそれをいかにうまく使いこなしてシミュレーションなり計算科学をやるかというスキルを持った人材という意味でしょうけれども。先ほどおっしゃったように、では次の計算機のための人材どうなるのと、これはむしろ考えているアプリケーションから見てどういう計算機が必要かと、今度は計算機のあり方を考えていくという、全然別の専門知識がいるわけで。その二つはいわゆる関連はしていますけれども、やはり重要な問題と思われます。ここで言ってる人材というときには、その両方の側面がないといけないのではないかと考えております。

【委員】 大学において、今後の日本におけるスーパーコンピュータの研究開発を考えるとときに、今、先生がおっしゃったような人材が若手でどれだけ育つかというところが結構キーであり、真剣に考えていかなければならない大事な課題だと思います。量の勝負じゃなくて、どれだけ卓越した人材が育つかというところが、今後の日本のスーパーコンピュータの研究開発の重要なポイントになっていくと思います。

【座長】 人材に関しては多層な見方が必要だということですね。少し分けて評価をしないと何か間違えてしまうかもしれない。少し議論を先へ進めまして、3番目の研究開発マネジメント、それから、その他ということで文部科学省での事後評価結果や今後への課題、教訓、そういったところについてご意見ございましたらお願いいたします。

【委員】 この「京」の開発の歴史を見てみると、LINPACKで10ペタを実現するということがあります。これはいいんですが、当初、世界一を取るということを目的にしてやってまいりました。例の事業仕分けによって世界一という目標はなくなりました。私は世界一ということを経営に約束するというのは、こういう科学技術開発としては少し方向違いではないかと今でも思っております。これを評価結果に入れるべきかどうかは別として、入れるとしたらそのことに関するコメントがあってもいいと思います。

【事務局】 今回の6ページの(4)の①に、LINPACKの性能といったものを大前提に目標を立てるのではなく、さまざまなユーザーの視点を踏まえたトータルな性能を踏まえた目標設定という観点が重要ではないかということ

を書かせていただいております。

【座長】　そうですね、LINPACKについては、望んでいる方もいらっしゃるでしょうが、世界一そのものは特に望んでいるわけじゃないと思います。それはユーザーの視点に立った目標設定とは言えないという意見はあるかと思います。世界一がいけないという言い方は評価としてはできないかと思いますけれども。

【委員】　もちろん世界一を目指すことは大事ですけれども、世界一を約束するというのは、こういう政策としてはよくないのではないかというのがコメントです。

【委員】　産業利用という立場からすると、使用するときのハードルが高いと使いにくいので、アプリケーションソフトウェアを動かすときに特別なチューニングが必要であるとか、もうワンステップしないと使えないというのではなく、企業が使いやすいようにということを考えていただけたらと思います。

【座長】　それもまた今の目標設定の仕方についてのご意見と思ってよろしいですね。

【委員】　どこに入るかちょっとわかりませんが、前回からの議論になった、途中でベクトル部が撤退したことと、これに対する危機管理をどうするのかとか、そういうシステムの開発の進め方に無理はなかったのかというところなんです。これやはりベクトルに関して大事な点は二つあって、一つは日本の独自のお家芸である重要なベクトルの開発をやめてしまったという判断が正しかったのかどうかということ。もう一つは、この「京」においてベクトル部が途中でなくなったということがどう影響したのかということ。これら二つの論点は似てるようで全然別の話なので、分けて考えないといけない。

まず、このベクトルの開発を途中でやめたということはいいいのか、適切な判断だったのか。例えば、これはLINPACKねらいから考えて、あるいは対消費電力を考えてやむを得なかったのかどうか。あるいは今回の目的は気象とかいわゆる地球シミュレータの時の目標とは違って、ナノテク、それからライフなので、まさにスカラ向きのものであったのでそっちを重視しましたということなのか。それは恐らく何か判断はあったと思うんですね。

それとは別に、「京」の開発の途中で、いったんスカラでいきますとはっきり決まったのに、それがなぜかひっくり返されて、殆ど議論ないまま、ベクトルとスカラのタンデム機でいきますと方向が変わった。ここでベクトルの開発自身をやめてしまったら日本はもうベクトルは終わりになってしまうので、ここはタンデム機で両方やるという判断があったのかなと思ったんですが。結果的には、途中でベクトル部が下りて、当初の計画どおりスカラ1本になったと

というような話であったと思います。

それで、もしもこれが仮にタンデム機のままでいったら、とんでもない機械になってたんじゃないかと思うんですね。OSも違えばジョブ文も違えばコンパイラーも違えば運用体制も違う。いわゆる大学のスーパーコンピュータセンターに違うマシンが2台同時入るようなもの。マシン間がネットワークでつながっているわけでもないのに、LINPACKの時はいいんでしょうが、ユーザーから見ると2台のマシンがあるだけ。そういう開発が進んでいたら大変なことになってたんじゃないかなというような気がします。

例えば、今度はスカラで、今度はベクトルでと交互に開発するとか、あるいは二つのシステムを同時に開発していきますといったような判断はあるでしょう。その一方で、中途半端な判断をしてスカラとベクトルのタンデム機で行きますというのをやって、途中でそれが消えたからいいものの、そのままいつてたら今ごろとんでもないことになったんじゃないかと危惧します。

【座長】 その辺の議論は文部科学省で事後評価されていますか。

【事務局】 お配りしております資料4の「文部科学省の事後評価票」をご覧ください。15ページから16ページにかけてシステム構成の変更に関する記載がございます。中間評価の段階において、その時点での開発状況を踏まえた場合に複合システムとしての性能は十分でなく、一定の見直しを行うことが必要というような評価があり、それを踏まえてスカラ単独という形になったという経緯がございます。途中でシステム構成の変更がなされたということについて、当初の技術動向の見通しが甘かったのではないかといった観点から、今後、技術動向については十分見通しを立てて計画を立案することが望まれるといった指摘が16ページの最初のパラグラフでなされております。

あわせて、次の段落において、ベクトル型スーパーコンピュータも含めた今後の我が国のスーパーコンピュータシステムのあり方について更に検討がなされることを期待するとも記載されております。ベクトル型についてはどうするかといったところについても問題意識としては事後評価の視点として書かれていると認識しております。

【委員】 そちらでしっかり議論されているのであれば大丈夫、安心です。

【委員】 まずは今の先生の中でちょっと不正確なところがあります。ベクトル計算機の開発が日本でなくなったというのは正確でなくて、NECはベクトルの開発を続けていますということを公に表明しております。ですが、ご指摘のように日本の中でそういう技術を伸ばすべきかどうかという話と、将来の国家プロジェクトとしての計算機にどうそれを活かし得るかというのはやはり大変重要な問題だと思います。

【座長】 ほかにご議論はございますでしょうか。

【委員】 5 ページの（２）の①のターゲットアプリケーションを選定して、これに適合するようにハードウェア設計が行われたかというところですけども。協調設計ということを考えるときに、アプリケーションとハードウェアというだけではなくて、先ほど基盤ソフトウェアという言葉がありましたが、アプリケーションの背後にあるコンパイラとかデバッカとか検証ツールとか、そういったものとハードウェアという形での協調というのも重要かと思います。何かそういったことを書かれるとよろしいかと思います。

【座長】 これは具体的に協調性が少なかったと評価されるんでしょうか。

【委員】 いえ、今後の視点みたいな。評価自体は目標が恐らくここであったと思いますので、結構です。

【座長】 ありがとうございます。ほかにはいかがでしょうか。まだ議論すべきことあるかと思いますが、少し時間が押してまいりましたので、これぐらいで打ち切らせていただきたいと思います。よろしいでしょうか。

では、本日は非常に熱心にご議論いただきましてまことにありがとうございます。本日の討議の結果を踏まえまして私のほうで事務局と一緒に評価結果の原案つくらせていただき、それを出させていきたいと思います。その内容につきましては評価専門調査会に提出させていただきますが、原案ができましたところで各委員に内容を確認させていただきます。その後、最終的な取りまとめ、調整させていただきます。調整については私座長にご一任いただきたいと思いますけれども、よろしゅうございましょうか。ありがとうございます。

それから、先ほど申しましたように、文部科学省に対しては追加の確認事項あるかと思うしますので、それについては同時並行で進めさせていただきます。

最終的な取りまとめ結果につきましては、7月4日に評価専門調査会を予定しておりますので、そこで本検討会としての報告を私からさせていただきますと思います。

それでは、ほかにはないようでしたら、最後に今後の進め方について事務局から説明をお願いしたいと思います。

【事務局】 今、座長からお話ございましたとおり、7月4日予定の評価専門調査会におきまして座長のほうから評価結果をご報告いただき、評価専調としての評価結果案を取りまとめて、その後本会議にて決定をさせていただいて、総合科学技術会議長名で文科大臣宛てに結果を通知したいと想定しております。それに向けて評価結果原案につきましては各委員の皆様方に照会をさせていただきますと思っております。必要な文部科学省への事実関係の追加確認等を行わさせていただきます上で進めたいと思います。

評価結果案の確認につきましては、しっかり責任を持ったCS TPとしての評価案とするため、根拠の確認等いろいろとお問い合わせをさせていただくか

もしれません。その節には、大変ご多忙のところ申しわけございませんけれどもよろしく願いをいたします。以上でございます。

【座長】 ありがとうございます。今の進め方について何かご質問ございませんか。

では、これで評価検討会としては終了させていただきたいと思います。非常に慌ただしい中、お時間をとらせていただきましたが、大変ご熱心なご議論いただきましてありがとうございます。まだ、先ほども申しましたように、取りまとめのために皆様方に確認させていただいたり、協力をお願いすることもあるかと思いますが、引き続きよろしく願いいたします。では、本日は閉会とさせていただきます。ありがとうございました。

— 了 —