「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

(評価検討会各委員からのコメント、意見を基に整理)

平成25年6月11日 評価専門調査会 評価検討会

1. 目標の達成状況等

- (1)本プロジェクトにおける当初目標の達成状況は。
 - ①「世界最先端・最高性能の汎用京速計算機システム(京)の開発・整備」
 - (1) 平成24年6月までにLINPACK性能で10PFLOPSを達成する。
 - (2) HPC Challenge Award4項目で最高性能を達成する。

当初の計画よりも早い平成23年11月にLINPACK性能で10PFLOPSを達成。また、HPC Challenge Awardの全4項目で最高性能を達成。

以上から、本項目における目標は達成されたと言えるのではないか。

②「京の性能を最大限活用するためのソフトウェアの開発と普及」

グランドチャレンジアプリケーションとして、ナノテクノロジー及びライフサイエンス分野において計77種のソフトウェアを開発。これらのうち24本で8000並列(「京」で約1PFLOPS)以上の大規模並列計算を実現、5本でPFLOPS級の実効性能を達成しており、「ソフトウェアの開発」に関しては概ね目標は達成されたと言えるのではないか。

また、「ソフトウェアの普及」についても、グランドチャレンジアプリケーションは一般向けに公開され、これらを活用した研究が進められ、既に幾つかの成果が出ていることは評価できるのではないか。

③「京を核とした世界最高水準のスーパーコンピューテイング研究教育拠点 (COE)の形成」

理化学研究所に計算科学研究機構(AICS: Advanced Institute for Computational Science)を発足し(2010年7月1日、神戸)、「計算機科学」、「シミュレーション科学」分野の研究拠点となり、国際的な連携(海外研究機関との国際交流協定「MOU」締結等)を構築しつつある。

また、教育という観点では、「国内外の優秀な人材の登用・活用による研究推進」、「京の利用者を対象とした講習会の開催」、「大学院生や若手研究者を対象としたサマースクール開催」等の活動を進めている。

以上から、「COE形成」という目標は達成されたと言えるのではないか。

2. 科学技術的、社会経済的、国際的な効果

- (1)「京」は学術界、産業界のどのような分野で活用され、どのような効果・インパクトを与えると期待されるか。
 - ①学術界では、「医療・創薬」、「新物質・エネルギー開発」、「次世代ものづくり」、「災害予測」、「天文宇宙」など広範な分野で活用されている。実際、2年連続でゴードン・ベル賞を受賞したのに加え、共用開始から僅か半年間に543件(論文57件、国際会議421件、新聞報道61件、知財4件)の成果を発表している。今後、「京」の更なる活用による効果が期待できるのではないか。
 - ②産業界では主に「バイオ・ライフ」、「工学・ものづくり」、「物質・材料・化学」の 3分野において「京」の利用が開始されている。共用開始からまだ半年程度 であるが、一部のソフトウェアで、今後の産業界での利活用が期待できるよ うな成果が得られつつある。

今後、産業界での「京」の活用を促進するには、産業利用者目線でのアプリケーションソフトウェアの充実が必要ではないか。

- ③インフラ・システム輸出促進調査委託事業(グローバル市場における事業可能性調査:経済産業省)を通じて、「京」及びソフトウェアをパッケージとして海外市場に展開することを検討。「京」の商用機である「FX10」を含むスーパーコンピュータの台湾や豪州からの受注に漕ぎ着けた。この点についても社会経済的な効果の一つとして評価できるのではないか。
- (2)国際的に見て、「京」は最先端の科学技術水準に到達しているといえるか。
 - ①「京」は完成した2011年時点で、演算性能、実行効率、消費電力、信頼性、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った。また、2013年時点でも、一般向けに開放された汎用スーパーコンピュータとしては、LINPACK性能の点でなお世界1位である。

(LINPACKで1位のタイタンは未だ正式に稼働していない。また、2位のセコイアは軍事目的用であり、共に一般向けに開放されていない)

以上の点から、「京」は国際的に見て世界トップレベルの科学技術水準に 到達しているスーパーコンピュータと言えるのではないか。

- (3)「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。
 - ①計算科学研究機構(AICS)では、米国、独国、豪州と国際交流協定(MOU) を結び、「京」を利用した国際共同研究を進めるための取り組みを開始して いる。本研究成果の活用により、国際的貢献が期待できるのではないか。
- (4)「京」の利活用については、その性能を十分に活かすよう戦略的に進められているか。
 - ①利用枠のうち50%を「戦略プログラム」に配分するなど、戦略的利活用の枠組みが設けられている。また、「京」の能力を最大に活用しなければ解決できないような大規模計算(>3PFLOPS)について、「4日/月」の重点配分枠(大規模実行期間)を設けるといった配慮がなされている。これらの取り組みは妥当と評価できるのではないか。
 - ②今後の「京」の戦略的な利活用に向けた重要な観点として、提案することはあるか。例えば、「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」の推進など。
- (5)「京」の利活用において、ユーザを支援する運用サポート体制の整備は進められ、機能しているか。また、運用サポートを行う人材はどのように育成すべきか。
 - ①高度情報科学技術研究機構では、利用者支援のための一元的相談窓口 (ヘルプデスク)を設け、「京」の利用者にワンストップサービスを提供する運用サポート体制を整備し、利用者への情報提供、利用相談を行っている。このような現状の運用サポート体制は十分だと言えるか。更なる強化が必要ではないか。
 - ②今後、一般ユーザによる「京」の利活用を促進する上で、運用サポート体制の果たす役割は一層重要になると考えられる。運用サポートを行う人材の育成は、具体的にどのように進めるのが有効か。また、このような人材育成を進める上で、どのような課題が予想されるか。

- ③また、「京」を有効利用するためには、代表的な応用分野ごとに超並列実行を可能とするための高度なプログラミング技術が求められる。今後、「京」の利活用を促進する上で、各応用領域の利用者からの要求に応じ、このようなプログラムに関して、合理的な利用料金を設定するなどによる十分なコンサルティング体制を構築する必要があるのではないか。
- (6)スーパーコンピュータ技術に関わる人材育成を図るための体制は整備され、 人材育成は進んでいるか。
 - ①計算科学研究機構(AICS)において、スーパーコンピュータ技術に関する 人材育成として以下のような取り組みを実施している。現状の取り組みで 十分といえるか。更に人材育成の体制を強化する必要はないか。
 - ・「京」の高度化研究を通じて若手研究者の育成を実施中。(平成25年4月 現在でポスドク28人が在籍)
 - ・「京」の試験利用期間中に講習会を開催。新規利用者を対象とした初級者向けを9回、上級者向けを5回開催、延べ652人が参加した。
 - ・大学・企業からリサーチアソシエイト、研修生を積極的に受け入れて教育 を実施。(平成25年4月現在で計20名)
 - ・大学院生や若手研究者を対象としたサマースクールを開催。(平成23年 には43名、平成24年には41名が参加)
 - ・神戸大学大学院に連携講座として大規模計算科学講座を設置。学生に 大規模計算に関する教育を施す体制を構築。(平成25年度より開始)
 - ②「計算機科学分野」と「対象応用分野」の双方の知見に精通した人材の育成と、そうした人材の今後の活用に関して、長期的かつ戦略的な検討が必要ではないか。

3. 研究開発マネジメントの妥当性

- (1)本プロジェクトにおいて、実効あるマネジメント体制は構築され、運営された か。
 - ①理化学研究所内に「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の下で開発グループが実際の開発を、企画調整グルー

プがプロジェクト推進に関わる企画調整を行うマネジメント体制を整備。 研究開発を進めるにあたり、グループディレクターが統括する各グループ間、 及び委託契約を結んだ企業との間で綿密な連携が図られたことから、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と言えるのではないか。 また、文部科学省での中間評価を踏まえ、プロジェクトリーダへの助言を 行う「諮問委員会」を設置するなど外部評価体制を充実したことも評価できるのではないか。

- ②中間評価や事業仕分けにより、プロジェクトの計画内容に大きな変更が発生した際にも、適切なマネジメントは行われたと言えるか。
- (2)本プロジェクトにおいて、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推進体制はとられたか。
 - ①本プロジェクトにおいて、重要分野から21本のターゲットアプリケーションを選定し、これに適合するようハードウェア設計が行われたが、「ハードウェアとソフトウェアの協調設計」が実施されたと言えるか。

4. その他

- (1)本プロジェクトに関する文部科学省の事後評価結果は適切であるか。
 - ①文部科学省では2013年1月から3月の間に計4回の委員会を開催し、事後評価を実施している。これら委員会で、「目標の達成状況」、「研究開発成果」、「マネジメントの妥当性」、「今後の展望」について審議・評価している。各々の評価結果については概ね適切なものと判断できるのではないか。
- (2)本プロジェクトにおいて、今後のスーパーコンピュータ開発に活かせる教訓 (やり残された課題、プロジェクトを遂行していく上で新たに明らかになった 問題、要改善点)はないか。
- (3)本プロジェクトで得られた成果は、今後のスーパーコンピュータに関する研究開発施策や関連行政施策へ活用されるか。
 - ①地方自治体(高知県高知市)と協力し、地震・津波による大規模複合災害

を考慮したハザードマップの作成を実施していることは評価できるのではないか。

- (4)今後のスーパーコンピュータ研究開発プロジェクトの立案時に留意すべきこと。
 - ①ユーザの視点に立ち、真に要求されている、「機能・性能・使い勝手」、を 目標設定の中心に置くような配慮が必要ではないか。
 - ②「京」の開発を通じて得られた経験、技術、人材を次の開発で有効に活かせるようなマネジメント体制の構築が必要ではないか。