

将来のスーパーコンピュータの技術開発・利用・運用に関するアンケート調査（アプリケーション・回答一覧）

<p>【Q1. ナショナルフラッグシップマシンの必要性】(ユーザ側、システム側) どのくらいの期間(間隔)で、どの程度の規模やレベル(世界的に)のマシンが、どのような目標を達成するためにあるべきか、また、どのような形態(①ナショナルフラッグシップとして単体システムを整備するのか、②複数拠点に分散システムを配置してグリッド技術等で統合するのか 等)で作られるべきか、理由とともに教えてください。</p>	<p>【Q2. 作業部会報告/FSのテーマを踏まえた次々世代システムへのアプローチ】(ユーザ側、システム側) エクサスケールの計算機を用いて解決する問題について、作業部会報告(参考1 P.13-14参照)を基にFS(参考2-1~3参照)で検討されている3つのアーキテクチャ(①汎用(従来)型、②メモリ容量削減&演算重視型、③容量・帯域重視型)それぞれについて、これらに基づくシステムを運用する、あるいはこれらアーキテクチャに対応するアプリケーションの移植・開発を行う観点で、アプリケーション性能の期待値、開発工数、技術的困難さなどについての定量的あるいは定性的な見解を教えてください。(①~③の3つのアーキテクチャのうち、特定のアーキテクチャについてのみのご回答でも結構ですが、できれば3つそれぞれについて教えてください。) (※)参考資料は、国の「今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討WG」の会議資料です。参考2-1~3はFS関連の資料になります。 参考1:「今後のHPCI技術開発に関する報告書」(第2回資料2) 参考2-1:「レイテンシコアの高度化・高効率化による将来のHPCIシステムに関する調査研究」(第5回資料2) 参考2-2:「演算加速機構を持つ将来のHPCIシステムに関する調査研究」(第5回資料3) 参考2-3:「高メモリバンド幅アプリケーションに適したHPCIシステムのあり方に関する調査研究」(第5回資料4) 第2回配布資料: http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/shiryo/13218_87.htm 第5回配布資料: http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/shiryo/13245_74.htm</p>	<p>【Q3. 大学/独法センターのシステムロードマップ】(システム側) 2018年~20年頃に貴センターで稼働又は導入を想定している基幹システムについて、作業部会報告を参考に、その主要スペック(消費電力性能以外で何処に導入判断のポイントを絞るか等)及びシステム導入の考え方(〇〇のようなユーザーリクエストに応えるため等)について教えてください。</p>	<p>【Q4. 重点的な研究開発対象とすべきハードウェア/ソフトウェアの要素技術】(ユーザ側) (※ システム側は、ユーザ側の意向を取りまとめた上で改めて相談させていただきます) ハードウェアの要素技術(プロセッサ、メモリ、結合網、ストレージなど)やソフトウェアスタックの構成要素(OS、通信ミドルウェア、コンパイラ、数値・科学計算ライブラリ、アプリ開発フレームワーク、ジョブスケジューラ、ワークフローツール、プリ・ポスト・可視化処理ツール、計算実験マネージメントツールなど)の中で、国として特に力を入れるべき項目(複数可)と、その理由や具体的な技術開発の方向性について教えてください。</p>	<p>【Q5. アプリケーション研究開発投資の方法論】(ユーザ側) これまでに国が行ってきたHPCアプリケーション研究開発投資の形態として、対象分野を特定した複数機関参画の大規模プロジェクトによるもの(戦略プログラム、グランドチャレンジ)、特定の機関に研究開発資源を集中して実施するもの(AICSによる開発、調整)、広く募った研究開発提案に基づくもの(RSS-21、CREST)などがあります。次のナショナルフラッグシップマシンの利用に向けて、「京」におけるアプリケーション開発段階時以上の努力が明らかに必要となる中、国費を投じて進めるアプリケーション研究開発の適切なスキームやマネージメント手法について教えてください。またこのような取組みの他に、アプリケーション研究開発を進める上で国に期待する施策(プログラム開発支援など)があれば教えてください。</p>	<p>【Q6. 次々世代システムの利用・運用形態】(ユーザ側、システム側) 【Q6-1.】京の①利用率の配分比率(戦略プログラム利用率50%、一般利用率30%、…)、②利用時間の想定(ノード時間積…)等に関し、限られたマシンタイムで研究を進める前提で、割り当ての考え方や必要な改善点について、理由とともに教えてください。 【Q6-2.】これまでのシステム運用は、主に、ES型、京型、大学情報基盤センター型等(①~④参照)のような形態で行ってききましたが、次のナショナルフラッグシップマシンについて望ましい利用・運用方法等について、理由とともに教えてください。 ① ES型:当初は特定の目的のために利用を限定して運用。その後、一般にも利用率を開放。利用料は、運用主体が負担、公募型の課題選定を行い、有償利用も可。 ② 京型:共用施設として、トップダウンの戦略分野や公募型の一般枠を設置。利用料は、運用主体が負担、公募型の課題選定を行い、有償利用も可。 ③ 大学情報基盤センター型:アカデミアにおける研究、教育利用を中心に、企業利用も含めて広く門戸を開放。利用料は、大学から支出される運用費に加え、利用者から料金を徴収、課題選定は行わない ④ 大学附置研型:特定分野のアカデミアにおける研究、教育利用を対象。利用料は、運用主体が負担、コミュニティに閉じた課題選定を実施</p>	<p>【Q7. 産業利用に関する課題】(ユーザ側、システム側) これまでにESや大学基盤センターでは、民間利用率を設けるなどしてスパコンの産業利用を促してきましたが、その利用状況は必ずしも活発ではないように見受けられます。産業利用に携わったご経験がある場合、次のナショナルフラッグシップマシンの産業利用を考える上で、その阻害要因(たとえば高並列化が困難などの技術的問題、コストやセキュリティの問題 など)や解決方法について教えてください。</p>
<p>回答①</p>	<p>5年から10年の期間で、京コンピュータの1000倍の性能の計算機が、物質中の弱いので高精度計算が必要であるが長距離にわたって働くためにその大域的な性質を左右する相互作用を実用的に扱えるようにすること、強い電子相関に対応できる第一原理的な計算手法を物質構造の多様性が議論できる1000から10000原子程度のサイズで実用的に利用可能にすること、物質の長時間にわたる構造変化を実用的に追跡可能にすること、に必要である。この計算機的能力/総コスト比が高いことも重要なので、合理的ならば単体システム①とし、運用コストを削減し、可能な総合性能を向上するべきである。分散すればそれだけその間の通信や運用にコストが必要になり、また可能な最大計算システムサイズ(総合性能)は小さくなるからである。</p>	<p>物性分野においては物性研究所スーパーコンピュータ共同利用が行われてきたが、2000年、2005年、2010年のシステム更新で段階的にスカラ並列化が進みベクトル的なハードの割合が小さくなっている。これはコミュニティの段階的な技術習得に合わせたものであるが、次世代、次々世代のシステムにおいては完全なスカラ並列が前提となるであろう。ただ、この分野において手法の多様性は重要なので、これが担保できるような汎用性のある計算ノードやネットワークを備えていることが必要である。アクセラレータ技術などのより新しい展開はこの観点からどの程度受け入れ可能か検討されると思われる。</p>	<p>上記のいずれも重要であり、国としていずれの技術についても世界水準のものにアクセスできるよう活動するべきである。このうち現状で特に世界最高水準から遅れており問題と思われるものは、数値・科学計算ライブラリの演算性能であり、何らかの推進が必要である。この開発はプロセッサの開発と連携して性能を最大に引き出すものとすべきである。また、プロセッサ/メモリの構成を複雑化するならそれに対応できるOS、コンパイラの開発も行うべきである。</p>	<p>重要なアプリケーションにおいては、同種のアプリケーション間で競技と表彰を行うと、開発の動機付けや現状の見える化に役立つと考えられる。国際的におこなっても良いかもしれない。プログラムが巨大化/複雑化する方向にあるので、重要なアプリケーションについてはその開発に専念できるポジションを用意するべきではないかと。少なくとも開発者のキャリアパスをはっきりさせ、何らかの魅力を持たせる必要がある。また先の競技は、キャリア形成に役立つのではないかと。また、開発するハードが特殊化、専門化するのであれば、それに対応するアプリケーション開発を奨励するために、そのハードへのアクセスを広く薄く確保し、プログラムを書く/書ける人口を確保すべきである。</p>	<p>【Q6-1.】京はまだ本格運用前であるので、この質問は時期尚早であると考えます。まずはしばらく運用してみてからではないかと。 【Q6-2.】ナショナルフラッグシップマシンから大学情報基盤センターや大学附置研への垂直展開が行われる前提のもとで、2京型: でのよいのではないかと考える。ただし、現状の大学情報基盤センターや大学附置研をこのナショナルフラッグシップマシンに統合するならば、対応するこれらの運用形態をナショナルフラッグシップマシンの相当分の資源割合について行う必要がある。</p>	<p>産業利用に直接関わった経験はないので良く分からない。</p>
<p>回答②</p>	<p>各プログラムについての移植性の問題ですが、ここは、FSマターではないかと思えます。</p>	<p>システム側であるので、ノーコメントです。</p>	<p>これはアプリによるので、私の専門の地球科学、特に気象気候の観点から申し上げます。 ハードウェアの要素技術:メモリ速度、結合網は、プロセッサに見合ったものが必要。理由は、ステンスル計算があるからです。大気海洋モデルは、その他物理過程が入ってきますが、これは、メモリよりもプロセッサスピードが重要です。ソフトウェアスタックの構成要素:コンパイラの充実。数値・科学計算ライブラリは現在当該分野ではそれほど必要と見られていませんが、重要になってくると思います。プリ・ポストツールは、当該分野は、重要です。莫大な計算結果を処理することになります。</p>	<p>戦略・グラチャン系は、開発はほんの一部だと思います。位置づけは、これまでのアプリソフトウェアを使って大規模に計算し、その時代での最大科学的成果を得るものです。一方、AICS系は、始まったばかりで何とも言えませんが、補助金の性質上、「京」の高度化に資するものでなければならず、その先のポスト京を見据えた開発というものが求められていません。広く募った研究開発提案は、ややもすれば成果が散漫になりがちであると印象を受けます。これは個人的見解です。今、求められているのは、計算科学と計算機科学の強い連携です。それも今そのある計算機だけでなく、先を見据えたものでなければなりません。AICSはそれを目指そうとしております。なお、話はそれですが、大規模プロジェクトで雇っている多くの研究者のことも考えなければなりません。本当に頑張った研究者が報われるような先行きを見据えたプロジェクトなり研究開発体制が必要だと感じます。</p>	<p>【Q6-1.】リーディングマシンのリソースの割り当て方について: 戦略プログラムでは、当初一律一分野10%としていたようですが、この戦略プログラムも各分野で京でなにかができるかのFS期間がありました。その中で、詳細に提案されている課題に関して、全戦略分野で優先順位をつけるべきだと思います。しかし、何もオーソライズされていない状態で、これが一番の課題、これは2番、というような順位はつけられず、5分野均等になったのだと思います。本当は、この課題の重要度はどうで、だから優先順位としてはこうで、リソースはこのぐらい必要という、もう少し社会的科学的課題をもとにトップダウン的な割り当て方があると思います。そのためには、社会的科学的課題の情報を共有しておく必要がありますし、それが学会を含めて多くの人たちに認識してもらっておく必要があります。アプリFSでは、この部分が大きなミッションであると考えています。 【Q6-2.】「京」タイプでいいと思うが、各分野での社会的科学的課題の優先順位づけがある程度必要。</p>	<p>本件、現段階では、ノーアイデアです。</p>

<p>回答③</p>	<p>一般的な意見として10-15年に一度2-3年続く世界トップを狙う単体のマシンをつくりこくのは有益だと思います。世界トップの看板は大きくてトップになった期間の二倍程度の期間は世界トップレベルであり、スパコン・サイエンスにかなりプラスの影響を与えらると思うからです。現在において、いろいろ批判はあるにせよ、また、アーキテクチャーの変遷を横目に多くのプロジェクトが10ペタを断念した中で、Kの数十万の並列が容易に投入できていることは他ではできない試行・アドバンテージを生むと思います。その裾野はスパコンだけでなく、10年スパンで一般的な計算科学に影響を与え、計算科学だけでないコンピュータの商用利用に対しても大きな安心感を与えらると思います。</p> <p>ただし、10年より短いスパンでそのような世界トップを狙うなら、それはコスパ次第、スパコン以外への波及次第かとということかなと。思います。</p> <p>②グリッド統合ということあまり意味はないと思います。単純に通信コストの問題で、同じものを複数箇所につくるよりは一カ所につくったほうがよい。ただし、コンピューテーションの対象は一般的に多様であり、一つのアーキテクチャーが王道でありつづけるということには疑問があります。ある時期には一つのフラグシップ、ある時期には数個のより専門化されたアーキテクチャーというサイクルで行うほうが健全で、より豊かな波及効果が望めらると思います。</p>	<p>2010年代の動向としてはコモディティとしてはPCクラスターの普及が様々なに広がっていかで、ハイエンドではソフトウェアのフレームワークの革新が要請されているというところが、重用かと思えます。京ではopenMP+MPIのハイブリッド並列が推奨でしたが、次世代はMPIは残るにせよopenMPIは(キャッシュのフルコントロールをソフトで行うように)複雑化するか、(細かいところはコンパイラに任せて)単純化するかも読めない難しいところにあります。また、システムの電力コントロールがどのようになるかは重要な要素で、それによって、京で言われてきたソフトウェアにおける主な指標の(並列化を含めた)『実行効率』という概念は捨て去って、ワットパフォーマンスを大規模計算ソフトウェアの第一の指標としないといけない可能性があると思えます。</p> <p>①汎用(従来)型、メリットはソフトウェアの移植がやりやすいことと思えます。ただし、京ですら、この点のサポートは(そこらのインテルベースのものに比べはつきり劣るので)充分とはいえず、独自CPUでやるならxeonベースのものどくらべて、充分に性能がでるかというのが問題かと思えます。この方向ならintel MIGを採用するかそれを(どこかで)超えることが前提とおもいますが、numaで性能を最適化するののはかなりの労苦はあると思えます。おそらく実効効率でいって、20%未満までは出しやすく、80-90%というのはアプリでは普通はでないということになるかと思えます。しかし、前述のように本当の問題は実効効率ではなく、電力効率ということになりそうで、そこは、私にはまだわかりません。(チップ内の電力制御をどれだけ細かくやって、コントロールできるかという挑戦かと思えます)</p> <p>②メモリ容量削減&演算重視型、電力効率的にはわかりやすいアプローチで、かつ性能もでらると思えます。ただし、メモリがないと、とりあえずどうしようもないというソフトは多く存在するので、本当の使えるマシンにするには多少のヘテロジニアスな(少数のコアにメモリを持たせ汎用性をもたせる的な)構成は必要かと思えます。しかし、複雑にすればするほどソフトウェアが追いつけるかという問題が生じるので、そのへんのバランス次第かと。</p> <p>③容量・帯域重視型 ネットワークにはバンド幅のみならずレイテンシーが重用で、そのあたりをクリアできるかどうかというのがまずあります。また、ベクトル型は少なくともPCとはかけ離れたアーキテクチャーであり、これを進めらるなら、10年単位の長期的な覚悟が必要になるかと思えます。</p>	<p>ユーザ側のため回答を控える。</p>	<p>ハードウェアの要素技術：我々のソフトでは通信のレーテンシーが最大のネックになっているため、ノード間の結合網を最重要視。プロセッサについてもその時代の最高性能相当が望ましい。ストレージはあまり問題としない。</p> <p>ソフトウェアスタックの構成要素：上記と同じ理由により、通信ミドルウェアを最重要視。目標とする1サイクルあたりmicrosec - milisecオーダーの計算では、OSジッタの影響が大きく、現状の改善を期待する。数値・科学計算ライブラリについては、行列演算以外にも重力多体計算のライブラリの充実が望ましい。この種のライブラリを利用するアプリ候補は多く、またライブラリを開発する側には既に十分な知識の集積があるはず。</p>	<p>アプリ開発については、小グループがそれなりにたくさんいていいとおもいます。その点、京のグランドチャレンジは悪いものではなかったです。ただ、賛沢をいうなら、グランドチャレンジくらいのもなら、専用に数千ノードのマシンを先に手配して使わせてもよかつたとおもいます(というかグラチャレの場合は基盤ソフトができてないところでアプリを開発・移植するのはかなりつらいものがあり、もう少し期間がほしかつたとおもいますが・・・特に脳神経は時間が短くて)</p>	<p>【Q6-1.】 半期の割り当てを超えそうなきにどうなるかは心配で、ところどころ実績でneederに割り当てらる仕組みはあつてもいいとおもいます。1-2週間の期間を申し込みに対して集中運用するよなイメージで。</p> <p>【Q6-2.】 ナショナルフラッグということいえば京型は悪くないとおもいます。</p>	<p>経験がないので・・・ 一般論でいえば、料金が使用量に比例するところが少し敷居が高いかと。無料で大規模計算を1-3回くらいやらせないと釣れないではないかという気もします。</p>
<p>回答④</p>	<p>どのくらいの期間(間隔)：5年 どの程度の規模やレベル(世界的に)のマシン：システム全体で世界最高の演算性能*、かつ通信latency最小(実アプリからみてターゲットネットワークを装備 *ただし世界最速の計算速度を実現できるのであればFLOPS値にはそれほど拘ららない どのような目標を達成： 既知の問題を精度よく解くといった種の問題ではなく未知かつ専門分野でのインパクトが大きい問題。挑戦的な課題。 どのような形態：①ナショナルフラッグシップとして単体システムを整備 【理由】我々の分野での計算は1サイクルあたりの計算時間を短縮することが最重要であり、地理的に離れた分散システムをグリッド技術で遠隔接続するといった秒オーダーの通信を介することは上記目標達成の障害となるため。</p>	<p>①汎用(従来)型：アプリケーション性能は全体FLOPS値の40-50%程度が達成できる。開発工数は3-4年程度。現状の通信ルーチンを次世代の通信ルーチンに換装・最適化する点に技術的困難さを伴うことが予想される。</p> <p>②メモリ容量削減&演算重視型 アプリケーション性能は構築する新アーキテクチャに依存する(全体FLOPS値の30-40%程度?)。専用のプログラミング言語への対応を含め開発工数は4-5年。おそらく特異なアーキテクチャのため演算部、通信部両方の最適化に多大な技術的困難さが生じらると思えます。その一方で我々のソフトにとって、小規模問題については、開発対価は①よりも大きいと思わらる。</p> <p>③容量・帯域重視型 ベクトル計算機の使用実績が無いため回答を控えたい。通信の高速化は必要不可欠。</p>	<p>当該の担当ではありまらるので、回答は差し控えます。</p>	<p>ハードでは、メモリの大容量化と省電力化の技術開発をお願いしたいと思えます。未知数ですが、例えば東北大のスピンロニクスを応用するとかの新デバイスの投入とか。また、IOの階層化でSSDとHDDのシームレスな接続で計算に伴って生成される大規模データの扱いをスムーズに行うよな技術など。ソフトでは、国産で独自開発を行っているグループに対する支援を多面的に強化していただければうれしいです</p>	<p>アプリケーション研究開発の適切なスキームやマネジメント手法：開発者全般と計算科学分野の研究者とのオープンな連携の推進。計算科学の最新成果を計算科学分野の研究者が公の場でアプリ開発者に分かり易く伝達し、アプリ側で実装しやすくするよな環境整備が必要。開発者の個人的努力で世界の最新技術をリサーチしているのが現状で効率が悪くまた全ての技術をかバーできない。</p> <p>アプリケーション研究開発を進めらる上で国に期待する施策(プログラム開発支援など)：科学ソフトウェアのプログラマーのキャリアパスの整備。現状、プログラマーはその学問分野(物理、化学、生物 etc.)での異端児扱いで、ゴードンベル賞などの著名な賞を受賞しない限り、ソフトウェア開発がキャリアの主評価対象とならなことが大きな問題。</p>	<p>【Q6-1.】 ①利用率の配分比率 一般利用率は半年単位のインターバルで応募を受けつけ、随時枠の更新を行う方針が良いのではないかと。数年単位の更新だと後発組に不利。 ②利用時間の想定 ノード時間積の考えで妥当と思われるが、各自の判断でジョブを投げるためノード数・計算時間ともに不均一なジョブが増えて、利用期間を通して計算ノードの充填率が低いと感じた。大規模ジョブの多い戦略プログラム枠と小規模ジョブの多い一般利用率の、計算ノード単位での切り分けが必要と感じた。</p> <p>【Q6-2.】 京型において一般利用率の更新を頻繁に行う運用が望ましい。活発な施設の利用には、研究成果、開発努力を鑑み、後発組との入れ替えが必要と思われる。</p>	<p>産業利用に携わつた経験無しのため返答を控える。</p>
<p>回答⑤</p>	<p>条件付きの①といたします。 AICS-京(神戸)の拠点としての存在感・広がりにはES1/2(横浜)の時とは比べようもなく、ここをベースに次期スパコンを開発・展開することが望ましいと思わられます。電力、あるいは冷却用の水という点でも、余裕はありそうです。 スパコン群としましたのは、現時点で3タイプ(下記質問に符合)のBF条件の異なるアーキテクチャのFSが走っていることから、それぞれの形態が生き残る可能性があるためです。 国内に散らばらる計算センタ(7大学や東工大、ESCなど)はスケールダウンされた計算資源で特徴あるソフトの開発や運用を行っていく住み分けもありそうです。</p>	<p>小職の専門分野(量子化学)では、BF値は"ある程度大きい"方が性能は出やすいことから、様々な実問題に対する適用まで考えたバランスの取れた構成のマシンとしましては③の利用を期待いたします。 ①については、コア数あたりのメモリ容量は京より大きいことが強く望まれます。②は、QEDや古典天文など分野5的な研究開発には好適と思わられますが、他分野での汎用性・性能の担保性についてはあまり期待できないように思わられます。</p>	<p>当該の担当ではありまらるので、回答は差し控えます。</p>	<p>ハードでは、メモリの大容量化と省電力化の技術開発をお願いしたいと思えます。未知数ですが、例えば東北大のスピンロニクスを応用するとかの新デバイスの投入とか。また、IOの階層化でSSDとHDDのシームレスな接続で計算に伴って生成される大規模データの扱いをスムーズに行うよな技術など。ソフトでは、国産で独自開発を行っているグループに対する支援を多面的に強化していただければうれしいです</p>	<p>依然らCRESTにありました、ソフト(アプリ)開発を指向した島の復活を願っています。また、その審査もフェアでオープンであることが望まれます。その際、ベースになるソフトが自主開発であるのか、あるいは外国から導入したものを改造・機能拡張しているだけなのか、も支援や資金配分の重要なポイントになるかと思えます。ものづくりと同じで、一度フルスクラッチでコードを開発出来らる人材・力は散逸してしまうとその復活はきわめて困難です。オープンソースの時代ですが、コア部を握らるかどうかは決定的なところではないでしょうか。</p>	<p>【Q6-1.】 9月頭に公開になつた結果を見ますと、まずは妥当な配分が行われたように思わられます。ただ、審査については今後専門家の増員などの改善が必要かもしれまらせん(時間がかかっていたように拝見しました)。</p> <p>【Q6-2.】 ②でよろしいかと思えます。</p>	<p>やはり応用問題が企業の製品開発に直結しますので、計算内容の秘匿性をどこまで担保出来らるか、ということかと思えます(特に製薬分野)。企業では有料の定番ソフトを使いたいこともあるかと思えますが、その場合、ノードあたり単価ということだけでなく、従量制のような柔軟な運用・サポートも有効ではないでしょうか。</p>

回答 ⑥	<p>現在および将来の最先端のサイエンス・エンジニアリングの実アプリでは、アプリに要求される演算性能および記憶領域量はこれからも線形以上に増加すると予想され。そこで、その需要に答えられるように、8-10年に1台、世界トップレベル(Top500 1-5位程度)のマシンが整備されるのを期待する。理論計算やシミュレーションなどの実アプリでは膨大なデータ量を記憶領域に保持しながらノード間で通信を行いデータをやり取りするケースが非常に多いので、ノード間の高速なインターコネクが装備されているシステムが望ましく、その点は分散システムとグリッド技術では対応困難であると予想される。</p>	<p>回答者が開発に携わっている量子化学計算プログラムに関しては、以下のような状況になると予想される。</p> <p>①汎用(従来)型 既存の開発環境・実行環境と近いシステムになるので、コードの移植作業が容易かつ、実装されている既存のアルゴリズムの改良・チューニングも容易であり、事前の性能予測も確実にでき、実際にある程度の性能を出すことも期待できる。</p> <p>②メモリ容量削減&演算重視型 量子化学計算プログラムでは、中間データ保持のために計算に非常に大容量のメモリおよびディスク装置が必要となる。さらにメモリデータ移動量を考えると高速なメモリバンド幅も要求される。以上の点から言って、本システムは量子化学計算においては性能を出すことはほとんど期待できず、不適當である。</p> <p>③容量・帯域重視型 量子化学計算プログラムでは、中間データ保持のために計算に非常に大容量のメモリおよびディスク装置が必要となる。さらにメモリデータ移動量を考えると高速なメモリバンド幅も要求される。したがって、本システムは②のメモリ容量削減&演算重視型よりも量子化学計算用に好適であり、ある程度の性能を出すことが期待される。ただし、性能を出すために本システムに向けたアルゴリズムを採用・開発し新たにコードを実装し直す必要があると予想され、開発にはそれ相応の人材・時間等のコストを要する考えられる。</p>		<p>次世代のスパコンにおいては、データの保持・通信技術の差がスパコンシステムの差別化に影響してくと考えられる。今後のアプリにおいては、アプリの計算に必要なデータの増大に伴い、膨大なデータ量をメモリ・ディスク記憶装置に保持しながら、大量のデータを高頻度にノード間通信を行っていくような大容量データのハンドリングが要求されるため、この処理に対処可能な結合網、メモリ、ストレージ技術の発達が特に望まれる。ソフトウェアについては既存のプログラムの開発・移植の容易さを考慮して標準的に用いられている世界標準の開発環境を提供するのが望ましく、独自規格の国産システムソフトウェアを開発するメリットはあまり感じられない。Fortran、C++といった標準的かつ数値計算に適した高級言語、MPI、OpenMPといった標準的仕様として広く用いられる並列インターフェース、最適化BLAS、Lapackといった標準的な数値計算ライブラリを整備すれば十分である。</p>	<p>スパコンはアプリするためのものだと考えているので、システム開発以上に重要だが立ち遅れているアプリ研究開発を支援する仕組みや予算がこれまでに以上に必要だと考える。あと、若いアプリの研究開発者を育成するために、場当たりのかつ形式的なだけの教育システムや任期付きのプロジェクト雇用ではなく、継続的な教育システムや安定した雇用形態を提供する必要があると強く考える。</p>	<p>【Q6-1.】 時間配分の割り当てとしては京型と良いと考えられる。</p> <p>【Q6-2.】 開発時および供用初期は京型で運用し、他の大規模システムが整備されてきた段階でES型に移行していくのが望ましいと考えられる。</p>	
回答 ⑦	<p>稼働時にTOP5程度のスペックのマシンが2年おき程度にされる状況がベース。これに加え、稼働時にTOP1を狙えるマシンが5年おき程度に整備されるのが望ましい。</p> <p>京の場合は、他のNISと比較して飛び抜けた性能のため、ユーザにとってステップが大きすぎる。また、大規模から小規模まで、多様なニーズを持つユーザが混在しているため、利用効率を維持するのが難しい。したがって、ベースとしてTOP5程度のマシンが導入時期をずらして3セット程度あり、その上で、ある程度の間隔でTOP1を狙えるマシンがあることが望ましい。</p> <p>単体がグリッドかという問題は、導入時に重要と思われるアプリがどちらの形態に合っているかで決めるべき。ただ、京の経験を見れば、重要なアプリを一定の数以下に絞り込むことはほぼ不可能であることは明らか。とすれば、どちらのケースにも対応できる体制を常にとっておくべき。</p>	<p>運用面から見ると、設置面積、消費電力、故障率およびジョブスケジューリングの柔軟性等がポイントとなる。これらについては、どのアーキテクチャでも重要だが、特に②については、故障率とジョブスケジューリングの柔軟性、③については設置面積と消費電力について改良が必要ではないかと思われる。</p> <p>アプリケーションの観点では、②はコードの改変が必要となる(可能性が高い)こと、性能を引き出しやすいアプリのタイプが限定されること、③は全体の規模がそれほど大きくできないと予想されるので、大規模なジョブに対応できないこと、が懸念。</p>	<p>今のところ、次期機種導入の計画はない。</p>	<p>ハードウェアとしては、プロセッサの設計技術と結合網、ソフトウェアについては、通信ミドルウェア(左記、結合網の特性を活かす部分)、コンパイラ(プロセッサの特性を活かす部分)、数値・科学計算ライブラリ(システムの特性を活かす部分)</p> <p>ハードウェア、ソフトウェアともに、現在の強みをできるだけ活かし、資源を集中した方が良いという趣旨です。</p>	<p>I have no idea</p>	<p>【Q6-1.】 まず、NISでもできるものとNLSでしかできないものを峻別すべき。NISで済むはずの人までNLSに流れ込み、全体として効率低下しているのが現状。サイエンスの結果を求めるとすれば、課題数をもっと絞り込み、1課題あたりの資源量を潤沢に割り当てるべき。現状のままだと、NISクラスの課題が有利となり、本当に大規模かつチャレンジングな課題は結果を出しにくい。</p> <p>【Q6-2.】 アーキテクチャが進む方向を考えると、ひとつのアーキテクチャでカバー出来る範囲は狭くなると予想される。すなわちある程度ターゲットを絞ったアーキテクチャが複数あるのがもっとも費用対効果が高くなると思われる。その意味で、特定の分野毎にある程度の規模のマシンがあり、それらをHPCIを通じて他の分野のユーザも使えるというのがベターではないか。</p>	<p>I have no idea</p>
回答 ⑧	<p>計算科学技術分野は日進月歩であり、研究目的に応じて迅速に運用開始されるのが望ましい。スパコンの利用分野は多岐にわたり、問題・解法に応じて最適な計算機システムは異なるはずである。今後のスパコンは、LINPACK1つの評価だけでなく、様々な視点からの評価を受けるようになるだろう。ナショナルフラッグシップとして汎用的な単体システムを構築するよりも、独自性のあるスパコンでNo.1ではなく世界的にonly-oneを目指すべきと考える。したがって、用途毎、複数拠点にシステムを構築することになるが、必ずしも統合する必要はない。</p>	<p>アプリケーションを開発・移植する観点からすれば、①②③のどのタイプのアーキテクチャにおいても、OSと通信ミドルウェア、コンパイラが十分にアーキテクチャの違いを吸収するのであれば、その上位のレイヤであるアプリケーションの開発工数がさほど必要になるものではない。ハードウェアの開発に比べ、ソフトウェアの開発が高価であることから、既存のソフトウェアがそのままでも十分に性能を発揮できるハードウェアが望ましい。</p>		<p>これらの要素技術は、スパコンが達成すべき目的に即して、有機的に構成されるべきである。汎用的・全方向的になればなるほど、どれかを重点的に開発する、またはどれかを疎かにすることは許されない。このことは、スパコン単体が高額になるとともに、すべてのユーザーを満足するスパコンは達成できないということになる。まずはESのように当初の目的を明確にした上で、その目的を達成するために重点的な要素技術を高めるべきではないだろうか。</p>	<p>国費を投じて進めるアプリケーション開発では、特定の計算機に特化したアプリケーションではなく、移植性のある開発を進めるべきである。したがって、ハードウェアの開発に付随したアプリケーション開発ではなく、独立した取り組みで開発を進めるのが良い。アプリケーションは継続した開発・メンテナンス・サポートが必要であるため、大規模プロジェクトとして開発するのではなく、組織として継続した開発が必要と思われる。</p>	<p>【Q6-1.】 研究目的である以上、想定外のことが起こりうるため、予め計算機の利用時間を正確に見積もることは難しい。また、利用率から外れた場合は利用する機会を奪うことになる。スパコンでなければできない研究を重点的に遂行するために、許可制にするなどユーザーを選抜する必要があるが、少ない利用時間ではあるが自由に利用できる自由枠も必要と思われる。</p> <p>【Q6-2.】 ③大学情報基盤センター型が良いと思われる。利用者から料金(またはそれに代わるもの)を徴収することで有用な利用者を選定できるとともに、運用側も利用者の獲得のために良質なサービスを提供できるよう努力することになる。</p>	<p>産業利用する場合、利用したいのはスパコンではなく、アプリケーションである。公共スパコンにおいて、アプリケーションの動作確認やサポートを受けることは難しい。ライセンス管理の問題で利用できなかったり、専有できないにもかかわらず総CPU数のライセンス代が必要な場合もある。使用するアプリケーションに特化した計算機を購入する方が、使い勝手や総合的なコストの面からも有利であり、このままではスパコンの産業利用は難しいのではないかと。</p>