スーパーコンピュータ「京」の利用成果がゴードン・ベル賞を受賞 2011年

概　要

理研、筑波大、東大、富士通のチームによる『「京によるシリコン・ナノワイヤの第一原理計算』が、コンピュータシミュレーション分野で最高の賞であるゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞。日本人によるこの受賞は2004年以来7年ぶりの快挙。

（参考）ゴードン・ベル賞
米国計算機学会（ACM）が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。毎年11月に開催される米国スーパーコンピュータ会議にて表彰式が行われる。このうち実行性能部門の最高性能賞は最も栄誉ある賞とされている。

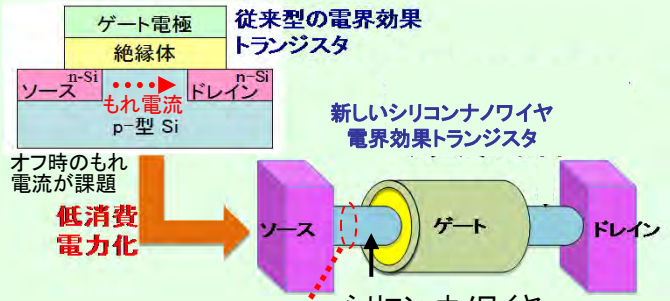
研究内容

【背　景】

○22nm以下の微細構造をもつ次世代半導体において、漏れ電流による消費電力の解決が課題。このため、シリコン・ナノワイヤが次世代半導体の材料として期待されているが、その実現には、ナノワイヤ内の原子・電子の解析が不可欠。

○しかし、このような微細材料での実験はできず、また、シミュレーションでは計算機の能力不足から、2,000原子程度（ごく一部分）までしか計算できなかった。

シリコン・ナノワイヤを用いた次世代半導体のイメージ

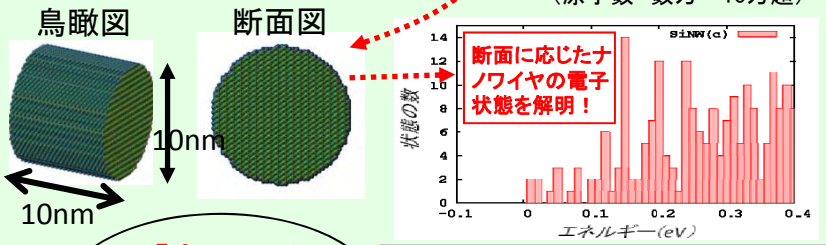


【京による成果】

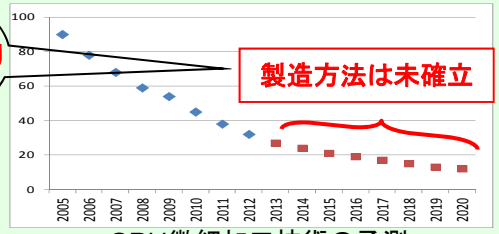
○現実の材料サイズに近い10万原子規模のナノワイヤの電子状態の計算し、世界で初めてナノレベルの高精度シミュレーションを可能にした（3ペタフロップスでの計算）。（→従来のシステムでは30年以上かかる計算が、「京」により1週間で実施可能に）

○また、約4万原子のナノワイヤの電子状態を断面の形状を変えて計算し、断面の形状による電子輸送特性の変化を初めて明らかにした。

直径10nm（40,000原子）シリコン・ナノワイヤの断面形状と電子密度分布（例）



「京」によるシミュレーションにより実用化に貢献



CPU微細加工技術の予測
（国際半導体技術ロードマップ2010年版より）

【今後の展開】

○22nm以下の微細構造を持つ次世代半導体の製造方法の確立

○高速・高機能、省エネルギーなどの特長をもつ新しいデバイスの設計に貢献

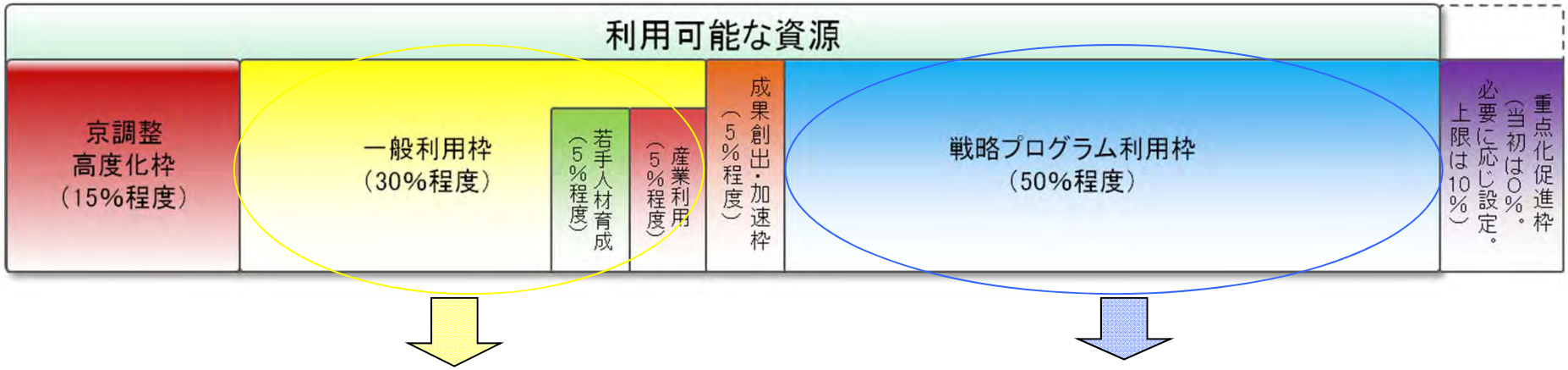
「京」の利活用について

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（平成23年7月14日）

第二 施設利用研究に関する事項

一 超高速電子計算機の供用

特定高速電子計算機施設の共用に当たっては、産業界を含め、多様な分野の研究者等に対して、透明かつ公正な手続きにより利用機会が提供されなければならない。その上で、特定高速電子計算機施設の性能を最大限効果的に活用する方法により、共用開始後いち早く、重点的・戦略的な利用を進め、社会が期待する画期的な成果の創出が求められている。このため、施設利用研究に対する超高速電子計算機の供用については、公募に基づく一般利用枠とともに、公募を行わない戦略利用枠（HPCI戦略プログラムその他国又は理化学研究所が提案し、国において国の重要政策・重要プロジェクトの推進上必要な研究であると認めたものを実施するための特別利用枠）を設けるものとする。



＜一般利用枠＞

産業界を含め幅広い利用者を対象に公募し、申請のあった者の中から課題審査委員会の審査を経て利用者が選定される。

＜戦略プログラム利用枠＞

文部科学省が戦略的見地から配分内容を定め、登録機関によるプロセス審査を経て利用者が選定される。

HPCI戦略プログラム戦略分野

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進する。

	＜戦略分野＞	＜戦略機関＞
分野1	**予測する生命科学・医療および創薬基盤** ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測をおこなう。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。	・理化学研究所
分野2	**新物質・エネルギー創成** 物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。	・東大物性研（代表） ・分子研 ・東北大金材研
分野3	**防災・減災に資する地球変動予測** 高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。	・海洋研究開発機構
分野4	**次世代ものづくり** 先端的要素技術の創成～組み合わせ最適化～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を行う。	・東大生産研（代表） ・宇宙航空研究開発機構 ・日本原子力研究開発機構
分野5	**物質と宇宙の起源と構造** 物質の究極的微細構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。	・筑波大（代表） ・高エネ研 ・国立天文台

※ スーパーコンピュータ「京」で、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野を「戦略分野」（5分野）とする。
※ 各戦略分野の研究開発、分野振興等を牽引する機関を「戦略機関」とする。

利活用の運用サポート体制（「京」の共用の枠組み）

国（文部科学省）：特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に基づく共用の促進に関する基本的な方針の策定

提言

実施計画の認可

実施計画・業務規程の認可

理化学研究所（設置者・実施主体）
［計算科学研究機構（神戸）］

（法定業務）
- ○「京」の開発
- ○施設の建設・維持管理
- ○超高速電子計算機の供用

連携

「京」【共用施設】

登録施設利用促進機関（登録機関）
［高度情報科学技術研究機構］

23年10月に選定
24年4月から業務開始

（法定業務）
- ○利用者選定業務
- ○利用支援業務
  （情報の提供、相談等の援助　等）

理研、登録機関、コンソーシアム
三位一体の連携により
広範な分野での活用を促進

提言

利用の応募

戦略機関については、優先的に利用枠を確保

公正な課題選定、情報提供、研究相談、技術指導等

HPCIコンソーシアム

計算資源提供機関やユーザーコミュニティ機関等

HPCIの整備・運用や、
計算科学技術振興に関わる意見を
幅広く集約し提言

利用者のニーズ

戦略機関（社会が期待する画期的な成果創出のため、「京」を中核とするHPCIの重点的・戦略的な利用）

利用者（大学、独立行政法人、産業界等、基礎研究から産業利用まで幅広い利用）