

## (2)-1 以下の事項に関するマネジメントについて

### ①ハードウェア部とソフトウェア部の設計を連携させながら同時並列で進める「協調設計」の実施

開発プロセスの最初の段階において、理化学研究所内にアプリケーション検討部会を設置し、幅広い分野から次世代スパコン稼動時に重要になるとと思われるアプリケーションを21本選定し、システムを行った。また、この中から6本の重点アプリケーションを選定し、システム設計の各段階での性能予測、及び実機での評価プログラムとして利用し、その結果はハードウェアの設計の一部に反映された。

### ②「使いやすさ」、「機能拡張性」を考慮したシステムの検討

メモリアクセス帯域、メモリ容量、インターコネクト帯域などの使いやすさ・性能の出しやすさに寄与する機能を充実させるとともに、システムソフトウェアのベースとして、広く普及しているLinux OSやLustreファイルシステムを採用することで、利用者の利便性の向上に努めた。また、計算ノード間を結合するTofuインターコネクトは、超大規模構成に対応できる拡張性と、故障が起きても運用を継続できる高い可用性を兼ね備えており、共用開始後の安定したシステム運用に大きく貢献している。

### ③様々なアプリケーション・ソフトウェアに対し、コンスタントに優れた計算能力を可能とするシステムの検討

選定した6本の重点アプリケーションを用いて、幅広い分野で様々な成果が発揮できるよう、コンパイラ(アプリケーションの翻訳能力)やMPIライブラリ(ネットワークを効率良く使うシステム側のソフトウェア)の最適化等、システムの検討を行ってきた。その結果、実効性能の観点では、少なくとも、5つの戦略分野を含む9本のアプリケーションでペタスケールのパフォーマンスが確認されており、その数は今後も増加する見込みである。その中でも、2011年と2012年のゴードン・ベル賞の受賞は特筆すべき成果である。それぞれ、シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算と、約2兆個のダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算による受賞であるが、幅広い分野の多様なアプリケーションで高い性能を発揮できるという京の特徴が端的に表れた成果と言える。

## (2)-2 ターゲットアプリケーション等について

### ターゲットアプリケーション(21本)

(このうち6本のアプリケーションを選び性能を評価)

分野	名称	プログラム名	重点アプリケーション(6本)
ライフ	巨大タンパク質系の第一原理分子動力学計算	ProteinDF	
	タンパク質立体構造の予測	SimFold	
	血流解析シミュレーション	MC-Bflow	
	オーダーメイド医療実現のための統計的有意差の検証	MLTest	
	遺伝子発現実験データからの遺伝子ネットワークの推定	GNISC	
	タンパク質 - 薬物ドッキング計算	Sievgene/myPresto	
ナノ	分子動力学計算	Modylas	
	FMO分子軌道法計算	GAMESS	
	疎視化分子動力学計算	Octa	
	実空間第一原理分子動力学計算	RSDFT	○
	平面波展開第一原理分子動力学計算	PHASE	○
	溶液中の電子状態の統計力学的解析	RISM/3D-RISM	
物理・天文	天体の起源を探る超大規模重力多体シミュレーション	NINJA/ASURA	
	格子QCDシミュレーションによる素粒子・原子核研究	LatticeQCD	○
地球科学	地震波伝播・強振動シミュレーションモデル	Seism3D	○
	全球雲解像大気大循環モデル	NICAM	○
	超高解像度海洋大循環モデル	COCO	
工学	有限要素法による構造計算	FrontSTR	
	有限差分法によるキャビテーション流れの非定常計算	Cavitation	
	航空機解析における圧縮性流体計算	LANS	
	Large Eddy Simulation (LES)に基づく非定常流体解析	FrontFlow/Blue	○

### ペタスケールが確認されたアプリケーション(9本)

Modylas  
cppmd  
UT-Heart  
ZZ-EFSI  
GREEM  
Seism3D  
PHASE  
RSDFT  
LatticeQCD

左記21本のアプリケーションに加えて、戦略プログラムやグランドチャレンジ等その後のアプリケーションも含めて、ペタスケールが確認されたアプリケーション

# (3) アプリケーションの拡大促進のための取組(1)

- ◆ ナノ、ライフともに、利用マニュアルも整備し、開発したアプリケーションをポータルサイトで公開。
- ◆ ナノでは、実験研究者や企業研究者との連続研究会を開催し、連携を実現。公開後1年間で、アカデミックと産業界合わせて、59件の利用(予定含む)、39件の引き合い。
- ◆ ライフでは、医薬品産業界を対象にしたセミナーを開催し、開発ソフトの紹介や利用事例を紹介。製薬企業を中心にのべ参加数は13社、330名。

ナノアプリ・ポータルサイト  
<http://pal.ims.ac.jp>

ライフアプリ・ポータルサイト  
[http://www.csrp.riken.jp/application\\_j.html](http://www.csrp.riken.jp/application_j.html)

番号	アプリケーション	コード名	開発責任者	所属
M-1	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法 開発の基盤となるクラスライブラリ	mu2lib-K(開発コード名 Platypus-MM/CG)	木寺昭紀	理化学研究所
M-2	レプリカ交換分子動力学計算インターフェイス	REIN-K(開発コード名 Platypus-REIN)	杉田有治	理化学研究所
M-3	全原子分子動力学計算	MARBLE	池口鴻徳	横浜市立大学
M-4	粗視化モデル計算	CafeMol	高田彰二	京都大学
M-5	密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算	ProteinDF	佐藤文俊	東京大学
M-6	ハイブリッドQM/MM反応自由エネルギー計算	Platypus-QM/MM-FE	林重彦	京都大学
M-7	量子化学計算	Platypus-QM	中村春木	大阪大学
M-8	量子化学計算/分子動力学計算	Platypus-QM/MM	中村春木	大阪大学