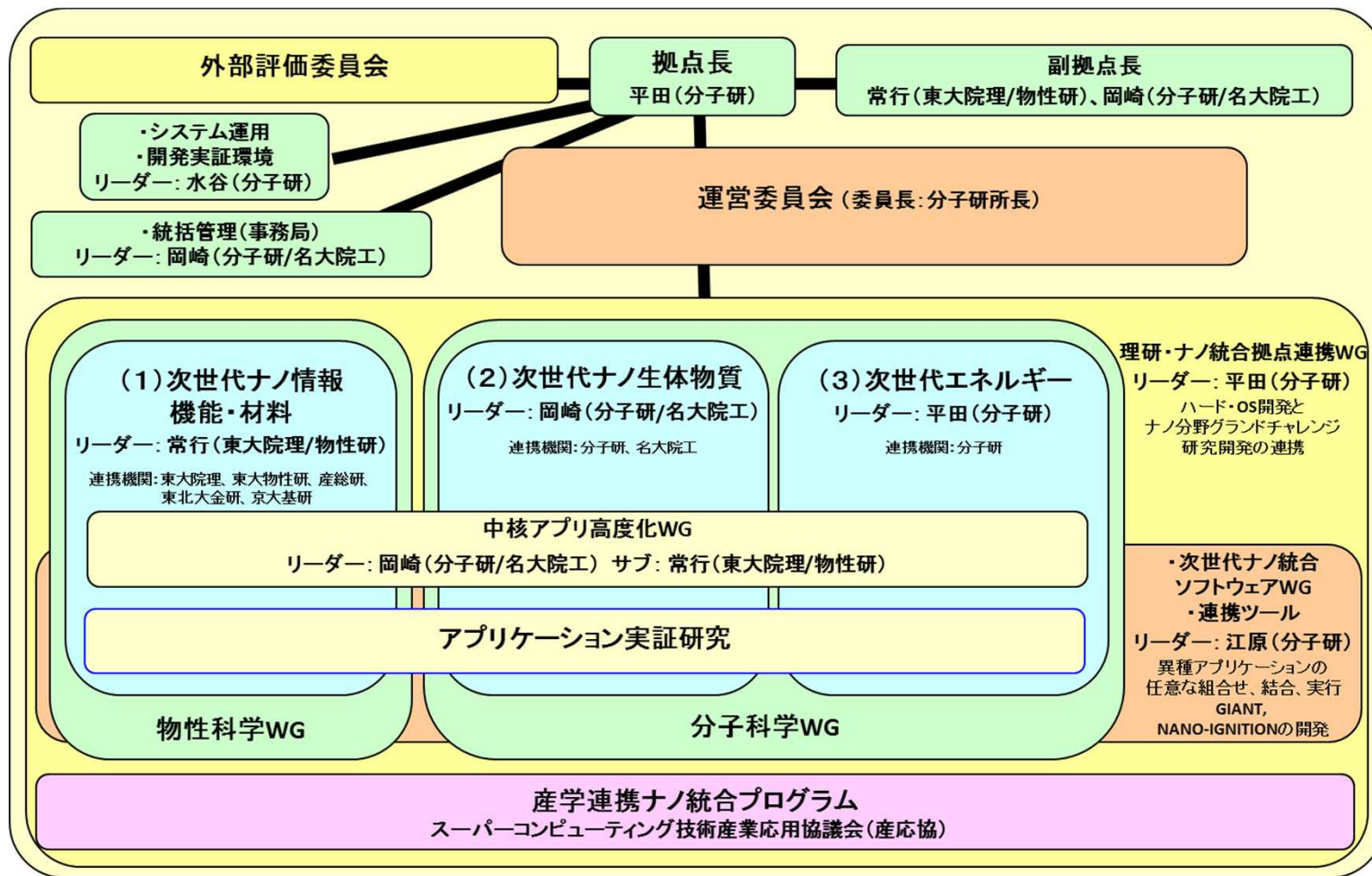


(1)-5 研究開発体制(次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発)

- ◆ 各チームリーダーを中心に、関係機関のメンバーが連携して開発を推進。
- ◆ 運営委員会にて各チームリーダーから進捗状況の確認を行い、アプリの開発管理を実施。
中核アプリについては高度化WGを設置し、計算機科学の専門家とも共同で高度化を推進。
- ◆ 外部評価委員会を設置し、外部の視点からプロジェクトの実施計画・進捗の評価や運営委員会への助言を行う仕組みを構築。
- ◆ 中核アプリ高度化WGを通じて、計算科学と計算機科学の学際連携と人材育成を推進。



論文発表件数

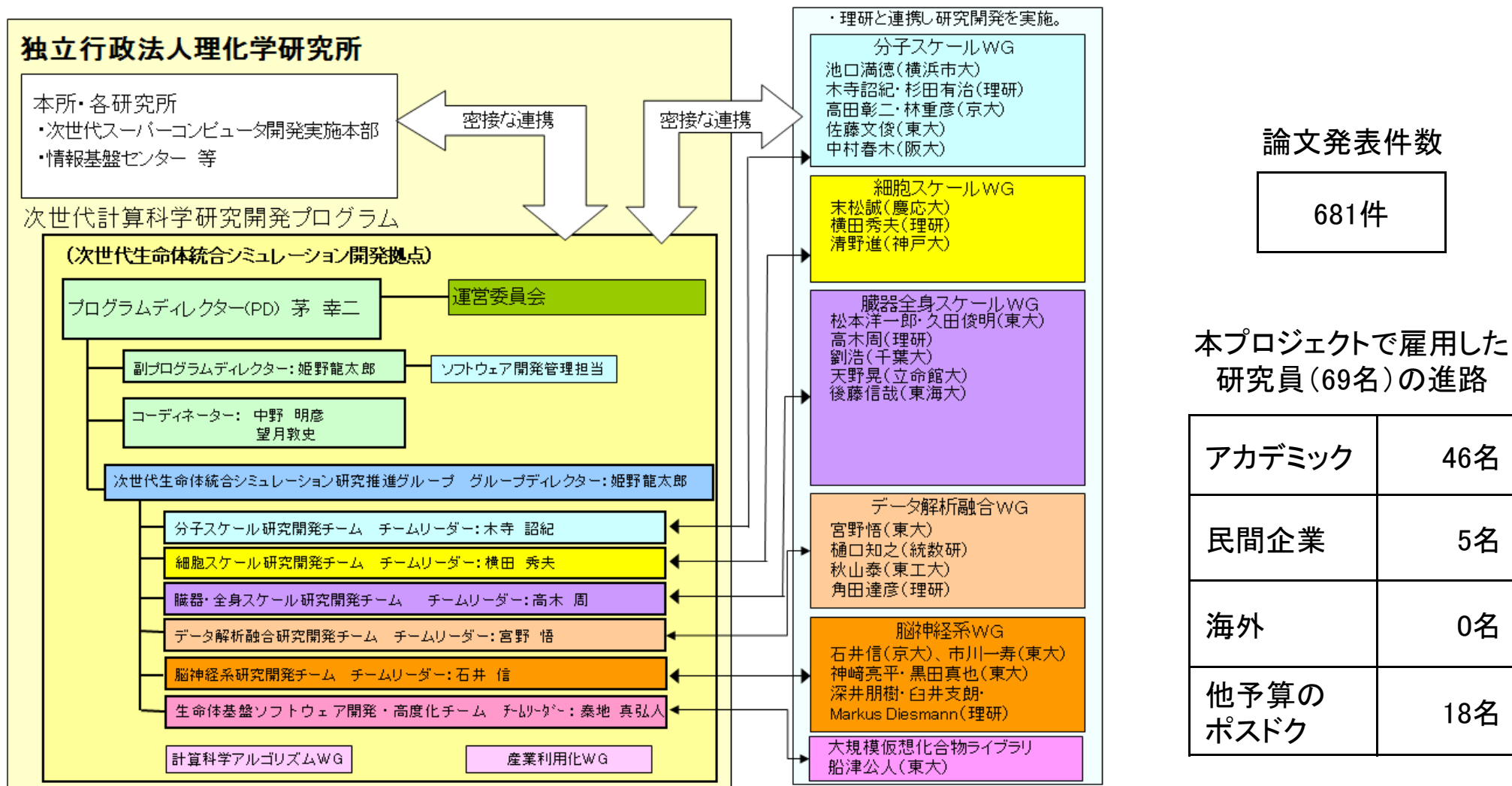
1,887件

本プロジェクトで雇用した
研究員(62名)の進路

アカデミック	25名
民間企業	4名
海外	8名
他予算の ポスドク	25名

(1)-6 研究開発体制(次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発)

- ◆ 各チームリーダーを中心に、関係機関のメンバーが連携して開発を推進。
- ◆ 毎月のチームリーダー会で進捗状況の確認を行い、アプリの開発管理を実施。
技術的問題がある場合は、高度化チームが連携して対応。
- ◆ 外部有識者を含めた運営委員会を年に1~2回開催し、プロジェクトの実施計画を決定。
- ◆ 若手研究者による集中研究会を企画し人材育成を推進。



(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