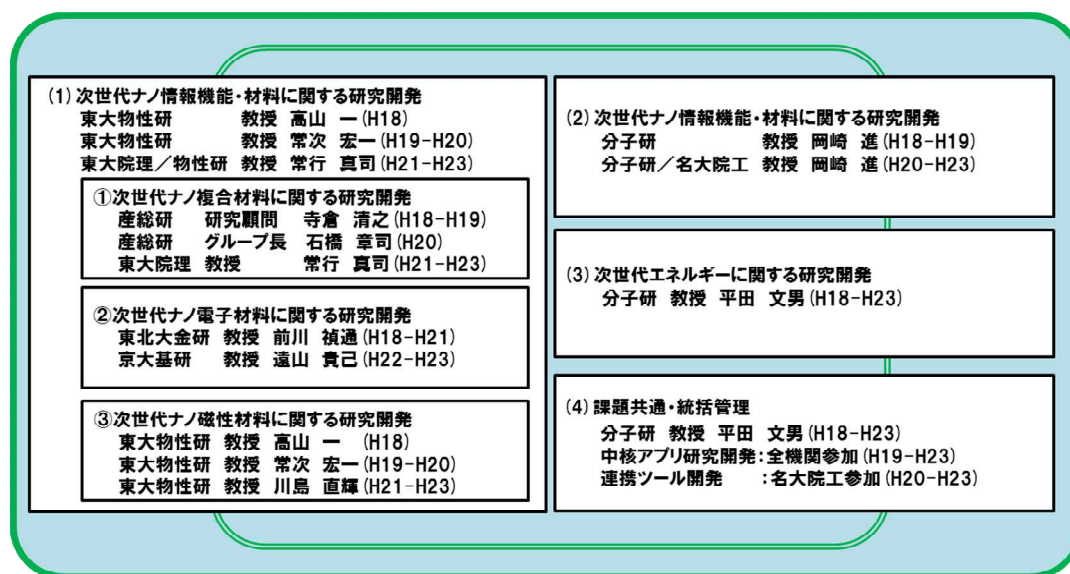
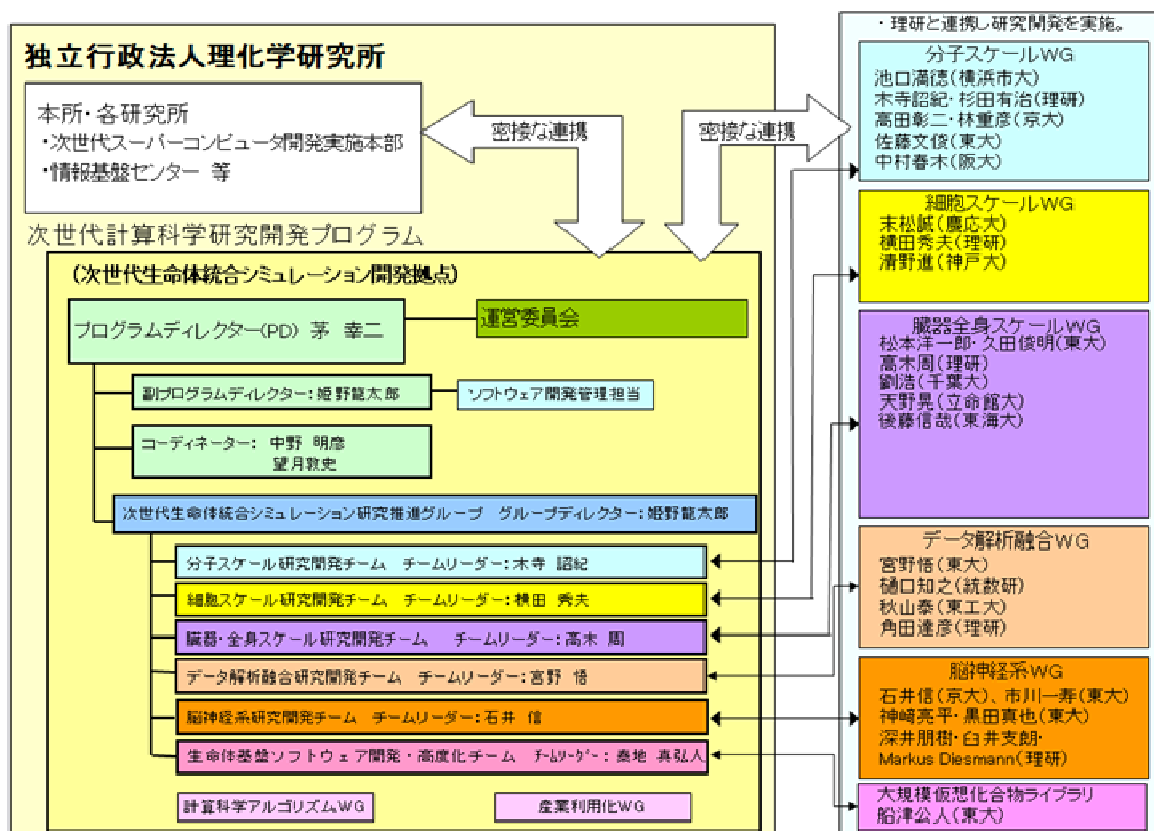


<次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発>



<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>



HPCI計画

参考

	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度	平成23年度	平成24年度	合計
スーパーコンピュータ「京」	概念設計		詳細設計			試作・評価・製造		Lipack 10PFLOPS達成 1日 24年6月—実績 H23年11月 平成24年6月末実用開始 合計 793億円
	12億	53億	111億	110億	353億	110億	45億	
「京」施設	1億	34億	設計 67億 / 評価 61億	29億	完成			合計 193億円
「京」ソフトウェア 開発・評価	22億	32億	開発・製作・評価 22億	19億	15億	10億	実証 6億	合計 126億円 <small>※H23年度のソフトウェア開発費は、HPCI施設建設費から計上されています。</small>
費用	35億	120億	200億	190億	597億	119億	60億	1,111億円
「京」の運用等経費					14億	65億	97億	
「京」の利用者 誘致・材料支援							9億	高付法に基づく委託費が実施。
HPCIの構築					HPCIシステム基本設計・詳細設計 / 整備・構築			※日本初HPCIシステムの設計・構築 研究のための経費4.4億円を要。
HPCI構築 プログラム				0.3億	3億	HPCI構築プログラム 35億		31億
	H18予算 35億円	H19予算 120億円	H20予算 200億円	H21予算 190億円	H22予算(前期): 228億(23予算 H22補正: 186億円 211億円)		H24予算 169億円	

1

スーパーコンピュータ「京(けい)」について

<概要>

- ◆平成18年度からプロジェクトを開始し、平成23年11月に性能目標のLINPACK10ペタフロップス[※]達成
- ◆平成23年6月、11月と連続で世界スーパーコンピュータ性能ランキング(TOP500)において1位を獲得
(平成24年11月のTOP500では3位)
- ◆平成24年6月にシステム完成、平成24年9月28日に共用開始
- ◆これまでに産業利用28件を含む合計100件の課題が採択されている。(平成25年3月現在)
※10ペタフロップス:一秒間に1京回(=10,000兆回=10¹⁶回)の足し算、掛け算が可能な性能


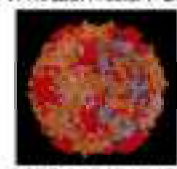


<特徴>

- ◆「京」の開発により、世界最高水準の技術力を獲得し、我が国の技術力の高さを世界に発信
 - ・高い演算性能:世界に先駆けて10ペタフロップスを達成
 - ・高い信頼性:全CPUフル稼働時の連続実行時間は29時間以上で世界最高水準
 - ・高い実行効率(理論性能に対する実際の性能の比率):世界トップ10の平均約78%に対し「京」では93%
- ◆世界に先駆け10ペタ級のスパコンを用いたシミュレーションを実現し、様々な研究成果を創出。ハイパフォーマンスコンピューティング分野で最も権威あるゴードン・ベル賞を平成23年・24年と2年連続で受賞



2

次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するための ソフトウェアの研究開発(グランドチャレンジアプリケーション)

	ナノテクノロジー分野 〔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	ライフサイエンス分野 〔次世代生物体統合シミュレーション〕 ソフトウェアの研究開発
概要	ナノ電子デバイスの設計や高効率の触媒・酵素の設計等に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発(46本のシミュレーションソフトを開発)	タンパク質分子の反応や、細胞・臓器の働きの詳細な解析により、薬業・医療に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発(31本のシミュレーションソフトを開発)
応用例	 <p>実空間第一原理ナノシミュレータ(HF-RSDFT) ナノワイヤー等の原子構造、電子状態の量子論的計算を10万原子系(現状は2,000原子程度が限界)で可能とし、高速・高精度、省エネルギーなどの特長を持つ新しいデバイスの設計に貢献する。</p> <p>高生体汎用分子動力学シミュレーションソフト(MODYLAS) ウイルスとレセプターや抗体の特異な相互作用の解明を、1,000万原子系(現状は5万原子程度が限界)で可能とし、ウイルス性疾患に対する予防法と治療薬の開発、創薬の効率化に貢献する。</p> 	 <p>多刺抽出トランスポーターにおける薬剤抽出シミュレーション [MARBLE/Platypus/CafeMol] 多刺抽出トランスポーターについて動作過程を、長時間のサブミクロ秒(現状はサブマイクロ秒が限界)での解明を可能とし、薬剤の抽出(薬剤の取込、輸送、排出)を再現し、抗生物質等の薬剤が効かなくなるメカニズムの解明に貢献する。</p> <p>マルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレーション(JT-Heart) 細胞レベルから心臓の拍動や血液の拍出などの再現を可能とする心臓シミュレーションを実現し、今までは推測の域を出なかった、ミクロ事象(例えば細胞タンパクの異常)とマクロ事象(例えば拡張型心筋症など)の関係を合理的に解明し、医学・医療に貢献する。</p> 
体制	分子科学研究所を中核に、東京大学物性研究所、京都大学、名古屋大学等、6機関が連携した研究開発体制を構築	理化学研究所を中核に、東京大学薬科学研究所、大阪大学、慶應義塾大学等、15機関が連携した研究開発体制を構築


3

理化学研究所 計算科学研究機構(運営主体)について

基本コンセプト

- 利用者視点に立った共用施設としての「京」コンピュータの運用
- 計算機科学と計算科学の連携により科学技術のブレークスルーを生み出す国際的な研究開発拠点の構築

< 設立 > 2010年7月1日
< 職員数 > 167人(2013年1月1日現在)
(業務および常勤を中心)



組織

機構長	
副機構長	
運用技術部門	<ul style="list-style-type: none"> 基幹運用技術チーム システム運用技術チーム ソフトウェア開発チーム HP/システム技術チーム
研究部門	<ul style="list-style-type: none"> システムソフトウェア研究チーム プログラミング環境構築チーム プロセス研究チーム 大規模並列計算基盤研究チーム 利用高度化研究チーム 接続基盤の構築研究チーム 数値計算シミュレーション研究チーム 量子系分子科学研究チーム 量子系物質科学研究チーム 量子系生物物理研究チーム 量子系シミュレーション研究チーム 複合基盤科学研究チーム 産院院外統一併設研究チーム プログラム構成モデル研究チーム 可視化技術研究チーム データ解析研究チーム 半導体計算化学研究ユニット 創薬研究・創薬研究ユニット 計算構造生物学研究ユニット
事務部門	

4

事後評価票

(平成 25 年 4 月現在)

1. 課題名 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用

2. 評価結果

(1) 課題の達成状況

○研究開発目標

<スーパーコンピュータ「京」の開発・整備>

スーパーコンピュータの開発については、Linpack 性能 10 ペタフロップスを所期の目標である平成 24 年 6 月よりも早い平成 23 年 11 月に達成したことは非常に高く評価できる。また、平成 23 年 6 月及び 11 月にスーパーコンピュータの世界ランキングである TOP500 で第 1 位を獲得するとともに、平成 23 年 11 月に HPCG Award (多角的でより現実的なスーパーコンピュータの性能指標となる 4 項目のベンチマークテストランキング) の全項目で最高性能を達成し、最終的な目標のみならず当初の目標も達成していることは特筆すべき成果である。

研究教育拠点 (COE) の形成については、平成 22 年 7 月に理化学研究所において「計算科学研究機構」を発足させ、その後「京」の運用にあたる運用技術部門 4 チーム、計算科学及び計算機科学の研究にあたる研究部門 16 チームを整備し、海外の研究機関等と MOU を締結する等、国際的な研究開発拠点として活動を開始している。戦略機関とも連携して連携推進会議、国際シンポジウム等を度々開催しており、所期の目標を十分に達成している。

中間評価における指摘事項についても、システムの変更に伴う影響への対処について、ベクトル向けアプリケーションのチューニング支援を実施することなどにより、利用者への影響を最低限にする方策がとられているなど、適切に対応できており、全体として十二分に研究開発目標を達成したと評価できる。

<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>

ナノテクノロジー分野及びその融合領域を対象としたグランドチャレンジアプリケーションの開発については、実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT) など、6 本の中核アプリケーションが開発され、次世代ナノ材料の解析やナノ生体物質の挙動のシミュレーション等でその有効性が示されるとともに、38 本の付加機能ソフト及び 2 本の連携ツールが開発された。また、中間評価における指摘事項に対しては、おおむね必要な対応がなされている。

<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>

ライフサイエンス分野及びその融合領域を対象としたグランドチャレンジアプリケーションの開発については、マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータ（UT-Heart）など、31本のアプリケーションが開発され、細胞や全身での統合的なシミュレーション、データの高度な解析が可能となり、ライフサイエンス分野における計算科学技術を大きく発展させるとともに、医用工学等への計算科学技術を駆使した新技術へ道筋を明らかにした。また、中間評価結果を受け階層固有のテーマを絞った結果、個別アプリケーションの完成度が飛躍的に高まり、「京」のライフサイエンス分野への応用のための先駆けとして十分機能するものとなった。この意味で、公募時の課題は十分達成している。

○研究開発体制

<スーパーコンピュータ「京」の開発・整備>

スーパーコンピュータの開発については、開発主体である理化学研究所内に「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ーの下で開発グループが実際のシステム開発を、企画調整グループがプロジェクト進行に関わる企画調整を行う体制を構築した。スーパーコンピュータの開発に経験と実績のある企業との委託契約に基づき、綿密な連携の下、開発が進められたことは研究開発体制として妥当であった。システム構成の大幅な変更の際にも、中間評価の指摘を踏まえ、マネジメント体制を強化するため、プロジェクトリーダーへの助言を行う「次世代スーパーコンピュータ技術諮問委員会」を設置するなどプロジェクトの推進体制を見直すことにより、この困難な状況を乗り越えて所期の目標を達成した研究開発体制は高く評価できる。

また、戦略機関との協力体制の下、早い時期からアプリケーションの最適化作業を実施することにより、「京」の共用開始後早期に成果創出が可能な環境を整えることができ、「京」の利用研究が平成23年11月及び平成24年11月に2年連続のゴードンベル賞受賞につながったことは、システムの整備のみならずアプリケーション開発の観点からも研究開発体制として評価できる。

<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>

グランドチャレンジアプリケーションの開発（ナノテクノロジー分野）については、実験研究者、企業研究者との連携において、これらの研究者及び計算科学者を含む「連続研究会」を実施するなど評価される取組がなされているが、その結果が実際の研究に反映されるまでには至っておらず、今後の課題である。

<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>

グランドチャレンジアプリケーションの開発（ライフサイエンス分野）については、並列化を指標とした進捗管理を導入し、進捗に応じた技術支援を行う等プロジェクトとしてのマネジメントが発揮された。これは中間評価結果への対応の努力が見られるところである。また、技術支援チームを設置したことは、プロジェクト全体の成果に大きく

貢献したと言え、プロジェクト開始後速やかに設置したことは評価される。

(2) 成果

○研究開発成果

<スーパーコンピュータ「京」の開発・整備>

「京」は高性能・低消費電力の CPU (SPARC64 VIIIfx) や Tofu インターコネクト (6 次元メッシュ/トラス結合) など高い独創性・優位性を有するハードウェアにより、Linpack において 29 時間以上の連続実行で 93% を超える実行効率を実現するなど、計算速度のみならず、優れた実行効率、信頼性を誇っている。特に消費電力については、12.7MW という汎用性の高いスーパーコンピュータとして優れた性能を達成しつつ、世界に先駆けて Linpack10 ペタフロップスを達成したことは非常に高く評価できる。

また、平成 23 年 6 月及び 11 月に TOP500 で第 1 位を獲得、HPC Award 全 4 項目で最高性能を達成、「京」の利用研究がゴードンベル賞を 2 年連続で受賞したことは、汎用性の高いスーパーコンピュータであることを実証しており、我が国の技術力の高さを世界に発信するとともに、震災からの復興に向けて歩み始めていた国民を科学技術の面から勇気づけることとなった点についても高く評価できる。

<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>

グランドチャレンジアプリケーションの開発 (ナノテクノロジー分野) では、従来の計算機とは全く異なる超並列プロセッサである「京」を効率よく利用し、超並列処理を可能とする計算科学の新しい方法論やアルゴリズム開発という課題を十分に解決し、特に「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT) 」(ゴードン・ベル賞最高性能賞を受賞) や「液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM」など、中核アプリケーションの高度化を中心に卓越した成果が達成された。

<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>

グランドチャレンジアプリケーションの開発 (ライフサイエンス分野) では、「京」で使用するアプリケーションの開発として、並列化が難しい問題に対し、並列度を上げることに努力し、一定の成果を上げている。また、臨床という重要な応用に貢献する成果があり、更に成果が産業応用されるなど高く評価できる。

○研究開発成果の利活用

<スーパーコンピュータ「京」の開発・整備>

「京」の利用については、これまで戦略機関を中心にアプリケーションの整備が進められてきており、世界的に見て優れた成果が出つつあり、今後、早期に先導的な成果の創出が期待されている。また、戦略機関の利用に加えて、産業利用・若手人材枠を含めた公募による一般利用枠で門戸を広げ、幅広い利用者・分野での成果創出が期待される利用の仕組みとされていることは評価できる。今後、利用者支援体制をさらに充実させ

ることにより、成果創出の更なる加速が期待される。

技術の波及効果については、富士通が、「京」に適用した技術をさらに向上させ、高性能、高拡張性、高信頼性を合わせ持ち、かつ省電力性に優れたスーパーコンピュータ PRIMEHPC FX10 の販売を平成 23 年 11 月より開始し、国内の研究機関や海外に販売しており、学術や産業等の多くの分野で基盤装置としての利用が期待されている。

また、今回開発された高い計算性能と信頼性を有する「京」のハードウェアの技術は、今後の IT 技術全般に活用できるものであり、得られた特許をはじめとする知的財産の戦略的な活用にも期待したい。

<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及び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>

グランドチャレンジアプリケーションの開発では、開発されたアプリケーションは、ホームページにおいて一般公開し、ダウンロード可能としており、より多くの研究者が利用できるように、利用マニュアル等の利用者への提供や利用支援、民間企業への利用促進のための取組も行っていることは高く評価できる。

○人材育成

<スーパーコンピュータ「京」の開発・整備>

本プロジェクトに参画した理化学研究所においては大型研究開発プロジェクトを通して、世界最先端の研究施設の開発という国家プロジェクトの開発を担う高度な人材が育成された。特に当初の概念設計からのシステム変更や事業仕分けによる計画の変更などプロジェクトの幾度の状況変化にも柔軟かつ的確に対応し、プロジェクトを完遂したことにより、マネジメント面での貴重な人材が育成されたと言える。

また、富士通においても独創性・優位性を有するハードウェア等の開発を通じて有能な人材が育成されている。また、様々な重責に堪えて世界一位を獲得した成功体験も人材育成という観点で大きな意味がある。

今後は今回のプロジェクトで育成された幅広い人材が「京」の運用や今後のスーパーコンピュータの開発に参画していく体制を整えることが重要である。

<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及び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>

グランドチャレンジアプリケーションの開発において雇用された研究員は、プロジェクト終了後、多くが関連分野での研究者として研究を継続することとなっており、スーパーコンピュータの利活用面での人材が着実に育成されている。

(3) 今後の展望

<スーパーコンピュータ「京」の開発・整備>

(総論)

「京」は所期の目標を十二分に達成し、昨年 9 月に共用を開始しており、その利用による成果創出が期待される段階となりつつある。

「京」の利用については、文部科学省において取り組んでいる戦略プログラムの利用枠や産業利用枠を含めた一般利用により、成果創出に向けた利用の枠組みが構築されるとともに、計算科学技術の研究教育拠点である理化学研究所計算科学研究機構において利用の高度化研究を進める体制が整えられている。それに加え、「京」の利用の推進にあたっては、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き、登録施設利用促進機関がなお一層の利用者支援を行うことにより、早期の画期的な成果創出につなげることを期待したい。なお、「京」の第一回の一般公募については、共用開始の前倒しの影響もあり、公募期間が十分でなかったとの意見もあったことから、今後改善が望まれるところである。

また、スーパーコンピュータは計算科学技術の発展のみならず科学技術の発展を牽引する基盤であり、産業競争力の強化にも寄与するものであることから、今後とも我が国としてもスーパーコンピュータの開発・整備を行っていくことが重要である。今後のスーパーコンピュータの開発・整備に際しては、本プロジェクトを通じて得られた技術や経験、人材や体制を維持・強化し、戦略的に進めていくことが必要である。

(HPCI 計画への発展)

事業仕分けの指摘等を踏まえた計画の変更により、「京」の開発計画は、利用者などからなるコンソーシアムの主導の下、「京」を中核として国内の主要なスーパーコンピュータ等をネットワークで結び、多様な利用者ニーズに応える高度な計算環境を実現するインフラである HPCI（革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ）を構築する計画の一部と位置づけられた。これにより、大学等のスーパーコンピュータと連携し、「京」を幅広く共同利用するための体制を整備するという、プロジェクト開始当初の目標をさらに発展させ、全国の幅広い利用者が国内の計算資源を効率よく利用できる仕組みにより、スーパーコンピュータの幅広い利用と成果創出に資する体制が構築されたことは特筆すべき成果である。今後もコンソーシアム及び HPCI を維持し、ネットワークの強化も含め有効に機能させることにより、我が国の計算科学技術の発展に寄与することを強く期待する。

(システム構成の変更)

「京」のシステム構成については、平成 21 年 4 月に実施した中間評価作業部会において、①米国の開発が加速している中、現行計画ではプロジェクトの目標達成は困難、②複合システムの将来的な可能性は認めるものの、現時点の開発状況を踏まえれば複合システムとしての性能は十分でなく、一定の見直しを行うことが必要、と認識され、理化学研

研究所に対し、複合システムの在り方を含めプロジェクトの目標達成を念頭に置いた最適なシステム構成の再検討を要請した。これを受けて、理化学研究所において再検討が実施され、その過程で、ベクトル部の開発を担う NEC から、経営環境の悪化などを総合的に考えた上での経営判断として、製造段階への不参加が表明された。その後、新たなシステム構成案として、平成 23 年 11 月のスーパーコンピュータサイト TOP500 で Linpack 性能 10 ペタ FLOPS を達成するスカラ型単一のシステムが提案され、同作業部会において、プロジェクトの目標達成を念頭に置いたシステム構成として妥当であると評価されたことから、スカラ型単一システムに変更されることとなった。プロジェクト開始段階でその後の様々な状況変化をすべて見通すことは難しいという事情はあるものの、今後同様のプロジェクトを実施する場合には、技術動向等について十分見通し、計画を立案することが望まれる。

また、このシステム変更により、ベクトル部を含む複合システムの構築はできなかったが、一方、HPCI の構築により、全国の利用者は HPCI を通じて、それぞれのニーズに応じてベクトル型のスーパーコンピュータも利用できるようになってきている。また、「京」の高性能なスカラプロセッサの中に演算加速機構という形でベクトル部の理念が一部反映される形になっている。さらに、文部科学省が実施している「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」においても、ベクトル型システムの調査研究がなされており、将来に向けた技術的検討も進められている。こうした状況も踏まえ、ベクトル型スーパーコンピュータも含めた今後の我が国のスーパーコンピュータシステムのあり方について、利用者ニーズも勘案し、さらに検討がなされることを期待する。

(コスト・消費電力)

なお、消費電力に対する厳しい制約の中で、目標を達成したことは高く評価できるが、一方で、海外の最新のシステムと比較して、演算性能あたりのコストが高価であることや、性能あたりの消費電力が多いとの意見もあった。「京」は海外のシステムと比較して、優れた実行効率、信頼性、汎用性を有していることや、海外のシステムがその開発・整備にどの程度の国費を投入しているか正確には把握できないなどの状況もあり、全体としてのコストパフォーマンスを、一概に比較することは困難であるが、コストや消費電力は今後のスーパーコンピュータの開発において重要な技術的課題であることも事実である。この点については、海外の企業は、これまで継続的に開発を続けてきたことにより経験や技術が蓄積されていることによるとの指摘もあり、今後とも我が国としてスーパーコンピュータの開発を継続するのであれば、今回の「京」の開発で培った経験や技術的蓄積を適切に維持・強化することによって、これらの課題が解決されることを期待したい。

(その他の課題等)

また、プロジェクトの進め方に関し、以下のいくつかの指摘があった。これらについて、今後の「京」の運営またはスーパーコンピュータの開発・整備に適切に反映をされていくことを期待する。

- ・国内には SPring-8、SACLA、J-PARC など世界最高水準の大規模実験施設が多数あり、これらの施設と連携し、膨大なデータの情報処理・シミュレーション等で「京」の活用を図るべきである。
- ・プロジェクトの意義、研究開発のあり方や開発の進捗について国民に十分伝えられたといえず、納税者に対する責任として、次世代を担う子どもたちや若者の関心を喚起する上でも、そうした点について十分伝えられるよう取り組んでほしい。
- ・企業機密等を適切に管理しつつ、理化学研究所のみならず幅広い人材が開発に参画できる開発体制の構築を図るべき。
- ・超高速ネットワーク技術の取り組みが遅れており、今後の研究開発ではこれを含めたシステム本体、アプリケーション技術、システムソフトウェア技術、超高速ネットワーク技術の研究開発を総合的に推進してほしい。
- ・システムソフトウェアやアプリケーションの開発については、国際標準とするために、論文発表などの成果の発信とともに、米国などとの国際協力を進めることも検討すべき。

<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及び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>

グランドチャレンジアプリケーションの開発については、開発されたアプリケーションの今後更なる改良や最適化に努めることが重要である。また、本プロジェクトの成果を大きな経済的・社会的波及効果につなげる上で、開発されたアプリケーションを活用した研究開発課題の目標設定を計算科学者主導ではなく、実際に産業界や実験科学者が抱えている大きな課題の解決につなげるという観点から行うべきである。

ナノテクノロジー分野については、プロジェクトで開発されたアプリケーションをより多くの研究者が活用できるようにするために、優れた中核アプリケーションに加えて、それらの付加機能ソフト、連携ツール、ユーザーインターフェースなどを更に整備するとともに、アプリケーションの利用に係る専門的サポートや情報発信等の利用促進に係る取組を充実させていくことが重要である。

ライフサイエンス分野については、今後の更なる発展のためには、現状の延長線だけでなく、各アプリケーションの基本的な構想から高度化・発展させる必要がある。現時点でできることは達成したと考えるが、更なる発展の可能性を秘めているため、新たなモデルを構築する等の取組を行い、ライフサイエンスとしての予測を超えたメカニズムの理解や原理の発展まで期待したい。また、社会への還元についても企業との共同研究によるシミュレーション結果の応用を継続するよう期待したい。

グランドチャレンジアプリケーションの開発において開発されたアプリケーションは、HPCI 戦略プログラムの研究開発課題において活用されており、今後の継続発展を期待する。