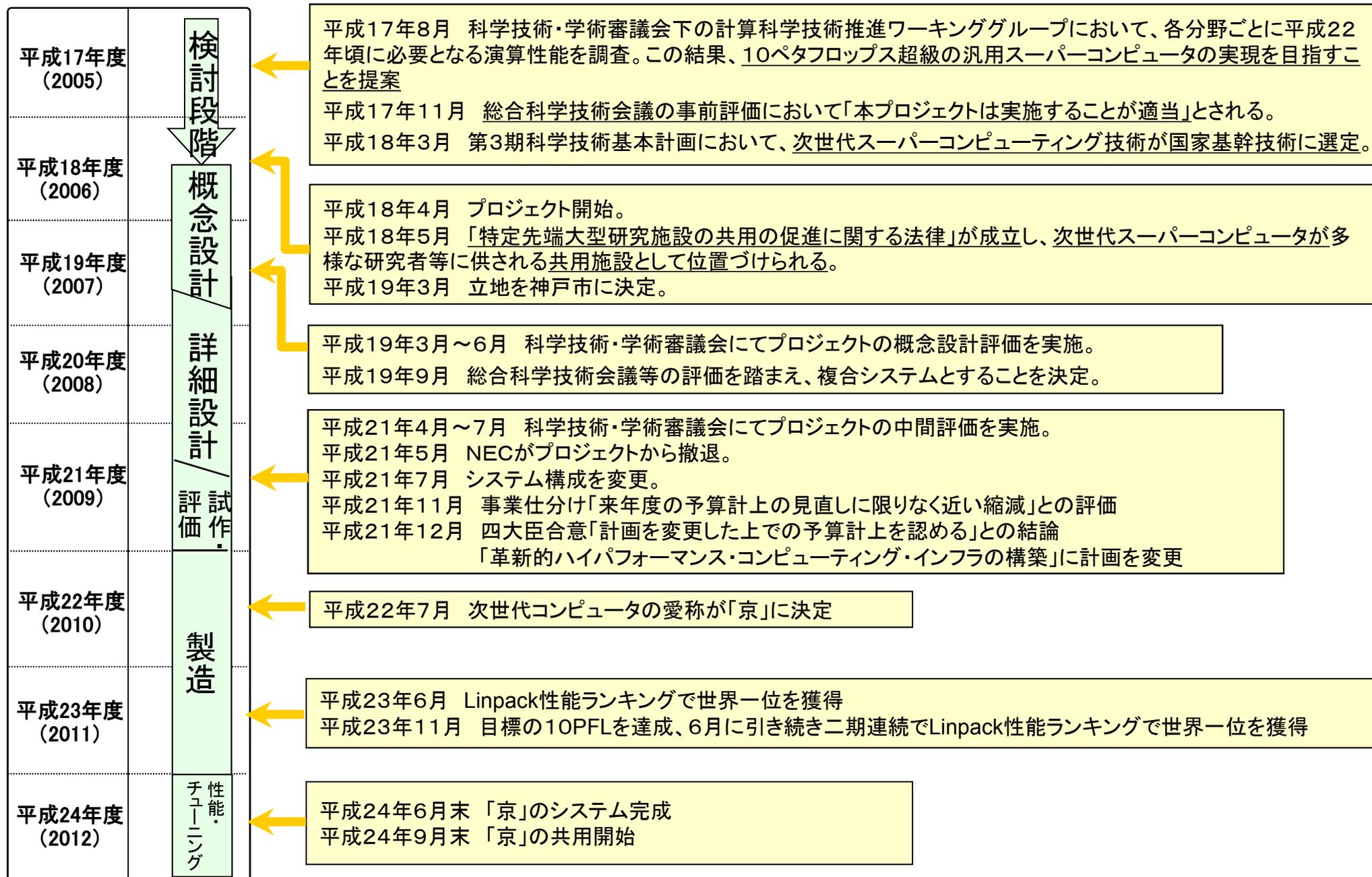


スーパーコンピュータ「京」の開発・整備  
（「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト）  
について

平成25年1月

文部科学省  
研究振興局情報課

# スーパーコンピュータ「京」開発・整備の経緯



# HPCI計画

	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		性能チューニング	Linpack 10PFLOPS達成 (目標: H24年6月→実績: H23年11月) 平成24年9月末共用開始	
	<システム開発経費小計> 12億		53億	111億	110億	353億	110億		45億
					(うち、システム製造費) 国庫債務負担行為(3年間の総額490億円) 348億円		102億円	40億円	合計 793億円
「京」施設	1億		34億	設計 67億	建設 61億	29億	完成	合計 193億円	
「京」ソフトウェア (Grand Challenge アプリケーション)	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 ※H23,24年度のソフトウェア実証16億は、HPCI戦略プログラムの中で実施。
費用	35億	120億	200億	190億	397億	119億	50億	1,111億円	
「京」の運用等経費					14億	65億	97億		
「京」の利用者選定・利用支援							9億	共用法に基づく登録機関が実施。	
HPCIの構築					HPCIシステム基本設計・詳細設計		整備・構築		
					0.5億	1.8億	19億※	※将来のHPCIシステムのあり方の調査研究のための経費4.4億円を含む。	
HPCI戦略プログラム				FS 準備研究 0.3億	3億	HPCI戦略プログラム 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(当初):228億 H22補正:186億円	H23予算 211億円	H24予算 199億円		

# プロジェクトの目的及び目標

科学技術・学術審議会  
次世代スーパーコンピュータプロジェクト  
概念設計評価作業部会 第1回(H19.3.12)  
資料より抜粋

## 【プロジェクトの目的】

- 計算科学技術を発展させ、広汎な分野の科学技術・学術研究及び産業における幅広い利用のための基盤を提供することにより、我が国の競争力強化に資するとともに、材料や医療をはじめとした多様な分野で社会に貢献する研究成果を挙げる。
- 我が国において、継続的にスーパーコンピュータを開発していくための技術力を維持及び強化する。

## 【プロジェクトの目標】

- 世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータを開発し、汎用性を重視しつつ、以下の性能を達成するとともに、大学・研究機関等が必要とする多種多様な計算機としての展開、及び開発を通じて獲得した技術の他の製品開発への展開に道筋をつけること。
  - i) Linpackで10ペタFLOPSを達成する。
  - ii) HPC CHALLENGE 全28項目中、過半数以上の項目で最高性能を達成する。(※)
- 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(ナノテクノロジー分野及びライフサイエンス分野のグランドチャレンジ・アプリケーション)を開発し、普及させること。
- スーパーSINETで接続された大学・研究機関のスーパーコンピュータと連携し、次世代スーパーコンピュータを幅広く共同利用するための体制を整備することにより、科学技術に係る広範な研究活動の基盤となる柔軟性のある計算環境の提供を可能とすること。
- 次世代スーパーコンピュータを中核として、世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点(COE)を形成すること。

※なお、概念設計評価作業部会における評価の後、「HPC Award 4項目において最高性能を達成する」とすることが適当とされ、目標が変更された。

# 国家基幹技術(第3期科学技術基本計画(平成18年3月))

## ○次世代スーパーコンピューティング技術が**国家基幹技術**に選定

第3期科学基本計画(第2章) 3. (3) ③国家的な機関技術として選定されるもの

本章2. (3)③に該当する科学技術に対しては、**国家的な大規模プロジェクトとして基本計画期間中に集中的に投資すべき基幹技術(「国家基幹技術」という。)**として国家的な目標と長期戦略を明確にして取り組むものであり、**次世代スーパーコンピューティング技術**、宇宙輸送システム技術などが考えられる。これらの技術を含め総合科学技術会議は、国家的な長期戦略の視点に配慮して、戦略重点科学技術を選定していく中で国家基幹技術を精選する。また、国家基幹技術を具現化するための研究開発の実施に当たっては、総合科学技術会議が予め厳正な評価等を実施する。

### 宇宙輸送システム

我が国が必要な時に宇宙空間に人工衛星等を打ち上げる能力を確保・維持



基幹ロケット「H-IIA」

### 海洋地球観測探査システム

衛星や海洋探査技術による全球的な観測・監視技術の開発を行うとともに、これらの観測データを社会的・科学的に有用な情報に変換し提供



地球深部探査船「ちきゅう」

### 高速増殖炉サイクル技術

ウラン・プルトニウム等の核燃料の有効利用による長期的なエネルギーの安定供給を確保



高速増殖原型炉「もんじゅ」

### 次世代スーパーコンピュータ

世界最高水準を目指した次世代スーパーコンピュータ(1秒間に1京回の計算性能)を平成22年度末の一部稼働、平成24年の完成を目指して開発するとともに、利用のためのソフトウェアの開発を推進



次世代スーパーコンピュータ施設のイメージ

### X線自由電子レーザー

原子レベルの超微細構造や化学反応の超高速動態・変化を瞬時に計測・分析が可能な世界最高性能の研究施設を整備し、欧米に先んじる成果を創出



X線自由電子レーザー(左奥の直線状の建物) 右の円は大型放射光施設SPring-8

# スーパーコンピュータ「京」のシステム構成について

## 複合システムの採用(平成19年3月～9月)

スーパーコンピュータ「京」のシステム構成について、概念設計の結果を踏まえ、

- ①スカラ型とベクトル型の2つの技術を維持・強化できること
- ②より多様なアプリケーションに対応できること

等の理由から、理研がスカラ部とベクトル部からなる複合型を提案。科学技術・学術審議会次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会や総合科学技術会議で妥当との評価。

## システム構成の再検討の指示(平成21年4月)

次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価作業部会において、詳細設計に対して中間評価を行い、

- ①米国のスパコン開発が加速しており、従来の計画では世界に先駆けて10ペタフロップス級の汎用計算機を開発・整備するという目標を達成することが困難
- ②複合システムとしての性能が十分でなく、一定の見直しが必要

との評価を受け、複合システムのあり方を含め、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を再検討することとされた。これを受けて、理研においてシステム構成案の再検討を開始。

## NECの製造段階への不参加表明(平成21年5月)

ベクトル部の開発を担うNECが、経営環境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を表明

## スカラ型単一システムの採用(平成21年5月～6月)

NECの不参加表明を受けて、複合型ではなくスカラ部のみで構成されるシステム構成案を理研において策定。これについて中間評価作業部会において評価を受け、

- ①スカラ部のみでもシステム全体としての性能目標を達成する可能性がある
- ②ベクトル部の利用を想定していたアプリケーションに対する影響については、プログラムの書換え等の支援を行うことにより限定的なもの

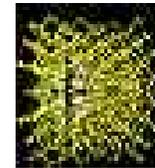
との結論を得て、スカラ型単一システムとして10ペタフロップス級のスパコンを開発・整備することとした。

# スカラ型とベクトル型について

スーパーコンピュータによる計算方法には、主に「スカラ型」と「ベクトル型」の2種類がある。

## スカラ型

- ・データを細かく分けて逐次的に処理する計算に向く  
(ナノデバイスの構造解析や、遺伝子の配列検索等の計算が得意)
- ・並列台数を多くすることにより性能を向上させてきた
- ・スーパーコンピュータ「京」(理研 計算科学研究機構)に採用されているのを始め、現在世界的主流となっている技術



ナノデバイスの  
構造解析



遺伝子の  
配列検索

## イメージ図



荷物(データ)の分け方、  
車を多く並べることが重要

## ベクトル型

- ・多くのデータをまとめて計算するので大規模な計算に向く  
(大気や海洋の大循環や、航空機の空力等の計算が得意)
- ・1 CPUあたりの計算能力を上げるにより性能を向上させてきた
- ・地球シミュレータ(海洋研究開発機構)に採用されているなど日本が強みを持つ技術



大気や海洋の  
大循環



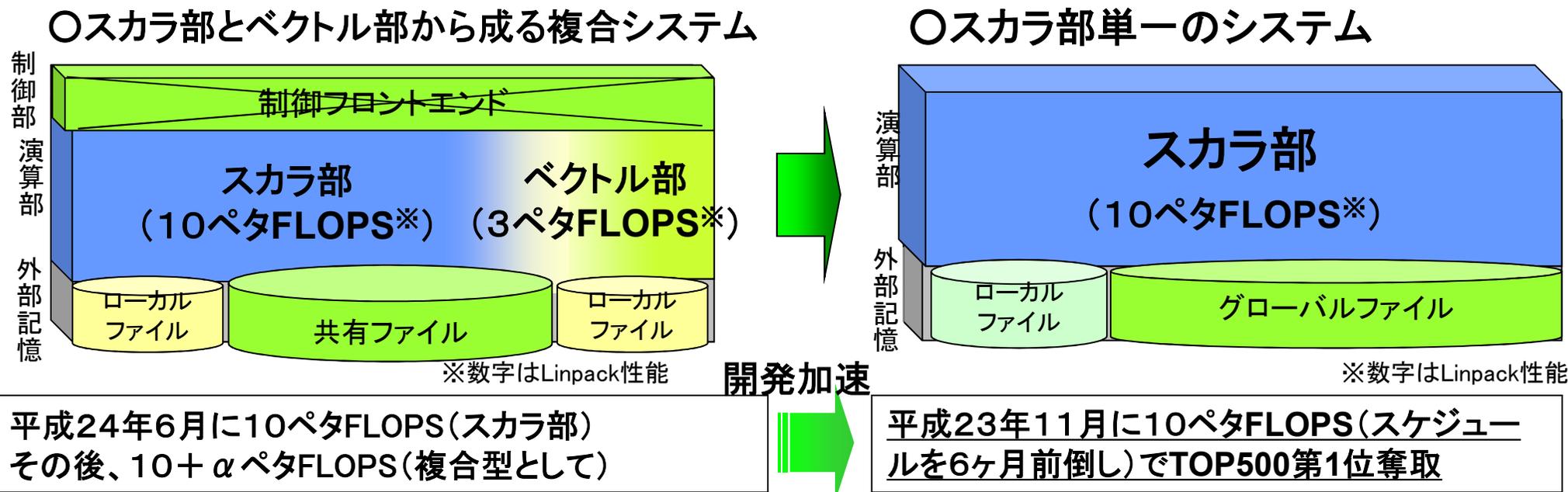
航空機の  
空力計算

## イメージ図



荷物(データ)の積みこみ方が重要

# 中間評価を踏まえたシステム構成変更のポイント



※その後の事業仕分けの評価等を踏まえ、開発加速は取止めている。

## <予算計画の見直し>

○ベクトル部の開発中止(H22年度・H23年度)  $\Delta$ 124億円

※ H21年度予算28億円については、NECに支払っていない。

○利便性向上※のため必要な経費の増(H22年度・平成23年度合計) 90億円

⇒インターコネクト(スパコン内部のネットワーク)性能を倍増(ネットワーク用のチップ数を2倍、通信用のケーブル本数を3倍に増設等)

※ 具体的には、①アプリケーションの実効性能の向上、②耐故障性の向上、③ユーザーが記載するプログラムの簡略化

○スカラ部の開発を加速するため必要な経費の増(H22年度・平成23年度合計) 110億円 → 取止め

⇒システム製造設備の増強等(回路パターン焼付け装置、加熱試験装置、基板への部品取付装置等を増設(ラインの増設))

(参考) スカラ型: 大きなデータを細分化して処理(ナノデバイスの構造解析等が得意)

ベクトル型: 大きなデータをまとめて処理(大気の大循環等の計算が得意)

# 政府の事業仕分け(平成21年11月)を受けた次世代スーパーコンピュータ計画の変更について

◎事業仕分けの評価結果(「来年度の予算計上の見送りに限りなく近い縮減」)等を踏まえた平成22年度予算編成過程における4大臣合意(※1)に基づき、以下のように変更した。

※1菅副総理兼国家戦略担当大臣、仙谷行政刷新担当大臣、藤井財務大臣、川端文部科学大臣により平成21年12月16日に合意。

◎平成22年度予算編成過程における計画の変更点

○スパコン開発側視点から利用者側視点に転換

○次世代スパコンを引き続き開発するとともに、国内の様々なスパコンとネットワークで結び、より多くのユーザーが利用できる革新的な基盤構築を目指す(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(HPCI))。

○システム開発費総額から開発加速のための経費110億円を削減。

●システム製造に係る経費(国庫債務負担行為)

H22概算要求時 総計600億円 → 変更後 総計490億円(▲110億円)  
(H22-23:2年間) (H22-24:3年間)

●10ペタフロップス達成時期

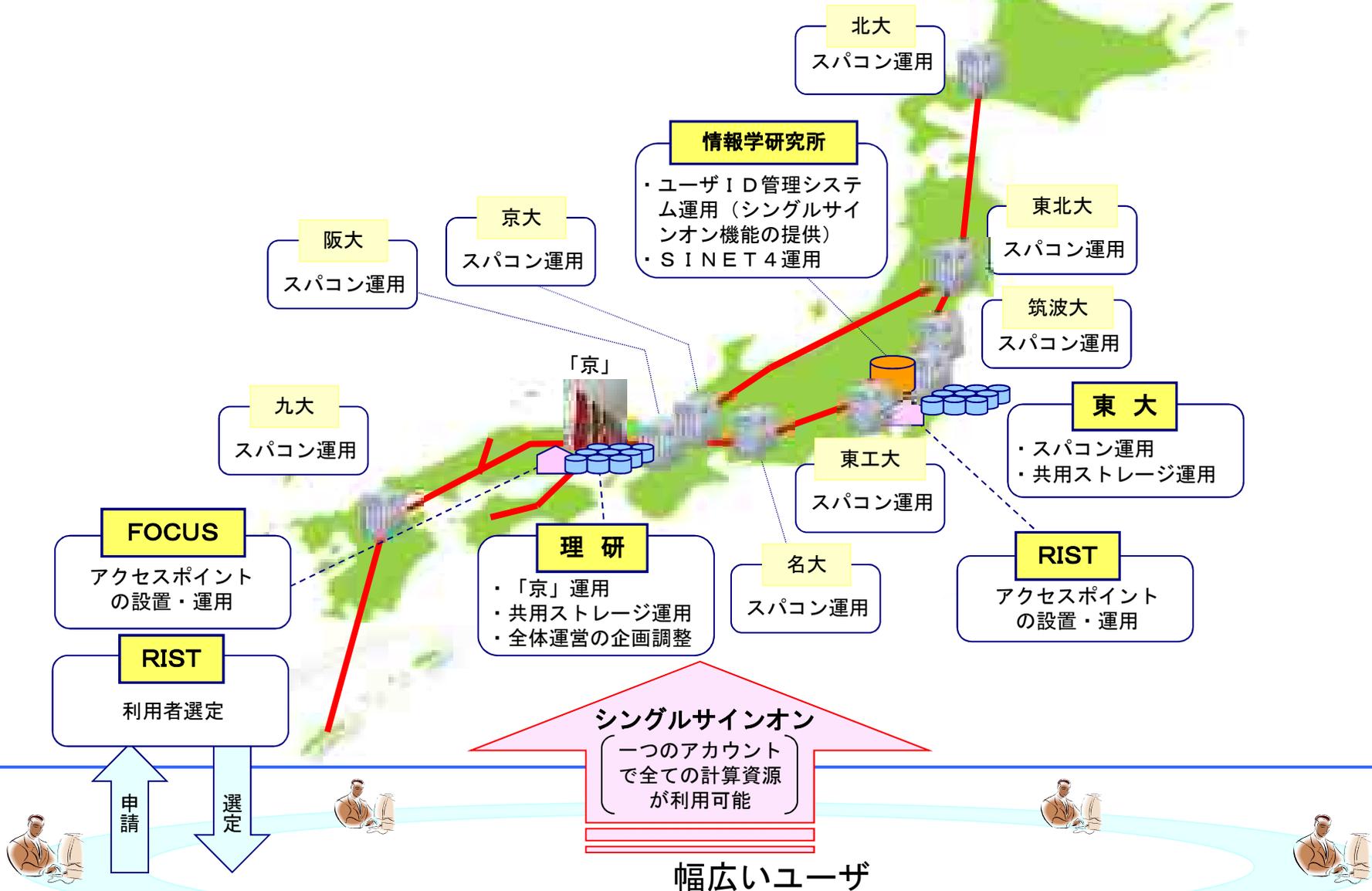
平成23年11月 → 平成24年6月までに

◎事業仕分けにおける指摘事項

事業仕分け第3WG評価コメント	コメントに関する検討・対応
○スパコンの国家戦略を再構築すべき。現状はスパコンの巨艦巨砲主義に陥っていないか。	○スパコン開発側(供給者)始点から利用者側視点に移し、多様なユーザーニーズに応えるための革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラを開発。 ○10ペタ級スパコンの開発のみならず、国内の小規模なスパコンとの連携・協力を行い、より多様で効果的な利用を目指す。
○世界一の頂のみを目指す時代ではない。 ○世界一を目指す必要はない。	○世界一の速度性能の追求から脱却し、10ペタFLOPS級達成時期を「H23年11月」から「H24年6月までに」に変更。開発加速のため計上していた110億円を削減。

# H P C I の構築について

「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。



# スーパーコンピュータ「京」開発・整備に係る経費の推移について

	当初計画	システム構成見直し後	事業仕分け後	平成24年度 政府予算案決定時 (H23年12月時点)
	中間評価前	中間評価後： 平成22年度概算要求時 (H21年10月時点)	平成22年度 政府予算案決定時 (H21年12月時点)	
	834億円	907億円	797億円	793億円
システム 開発・整備 (総額)	うち、 スカラ部 574億円	774億円 ※スカラ部開発加速： 0億円 → 110億円 ※スカラ部インターコネクト増強： 0億円 → 90億円	665億円 ※スカラ部開発加速取り止め： 110億円 → 0億円	※整備費用の見直しに よる効率化：4億円減
	うち、 ベクトル部 205億円	85億円 ※ベクトル部等製造取止め： 120億円 → 0億円	85億円	
	うち、 コネクト部 6億円	2億円 ※コネクト部製造取止め： 4億円 → 0億円	2億円	
ソフトウェア開発 (総額)	128億円	131億円 ※ベクトル部用アプリケーションのスカラ部対応書き換え：3億円増	131億円	125億円 ※実施体制の見直しに よる効率化：6億円減
施設整備 (総額)	193億円	193億円	193億円	193億円
総事業費	約1,154億円	約1,231億円	約1,121億円	約1,111億円

なお、平成21年度における予算の執行にあたって、NECの撤退にともない、ベクトル部の詳細設計等に係る28億円のNECとの契約については支払いをしていない。この分を含め、その他効率的執行等により、予算額と決算額の差額は合計約34億円になる。

※四捨五入のため合計額が一致しないところがある。

# 理化学研究所 計算科学研究機構(運営主体)について

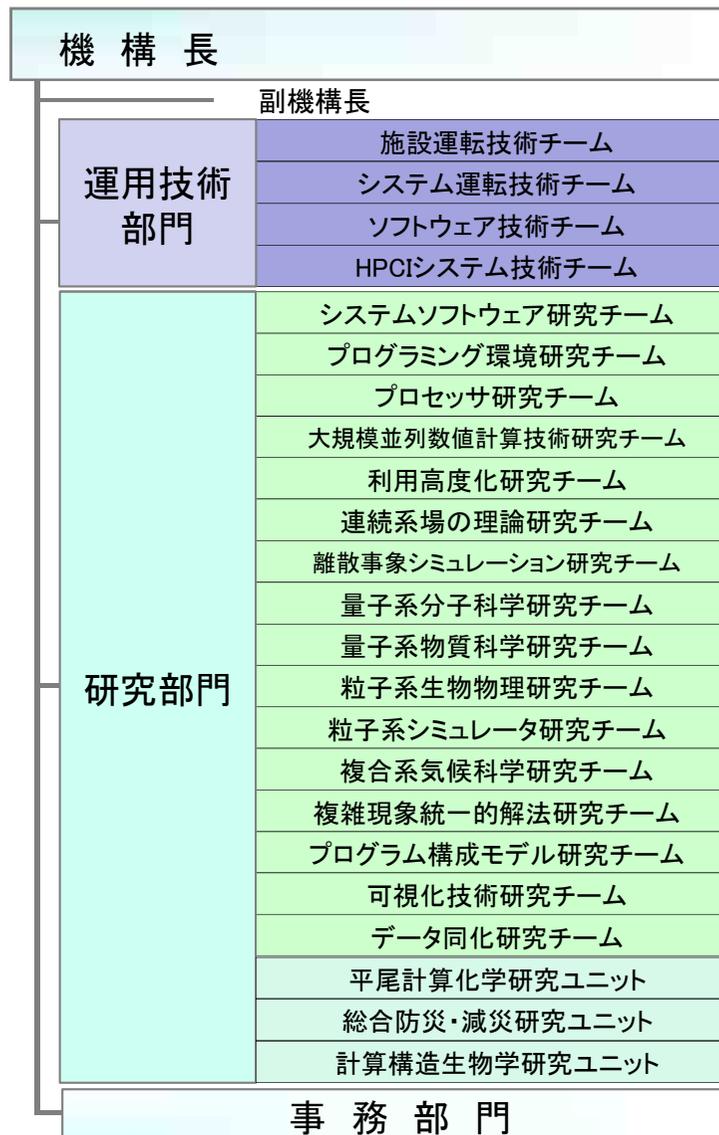
## 基本コンセプト

- 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)  
 (兼務および非常勤を含む。)



## 組織



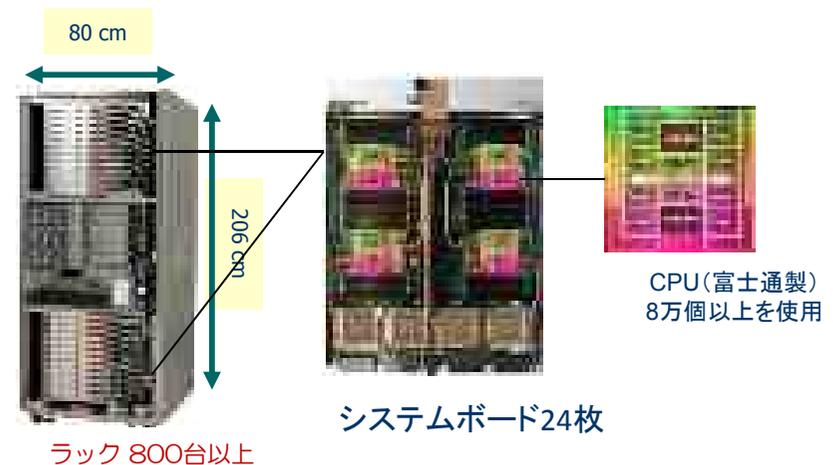
# スーパーコンピュータ「京(けい)」について

## <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月と連続で世界スパコン性能ランキング( 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**
- ◆現在、140課題の利用研究が進められており、利用者の数は1215人(1日当たり100人程度が利用)  
※10ペタフロップス:一秒間に1京回(=10,000兆回=10<sup>16</sup>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**



# 「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]

(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)

23年10月に選定  
24年4月から業務開始

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

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

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

利用者のニーズ

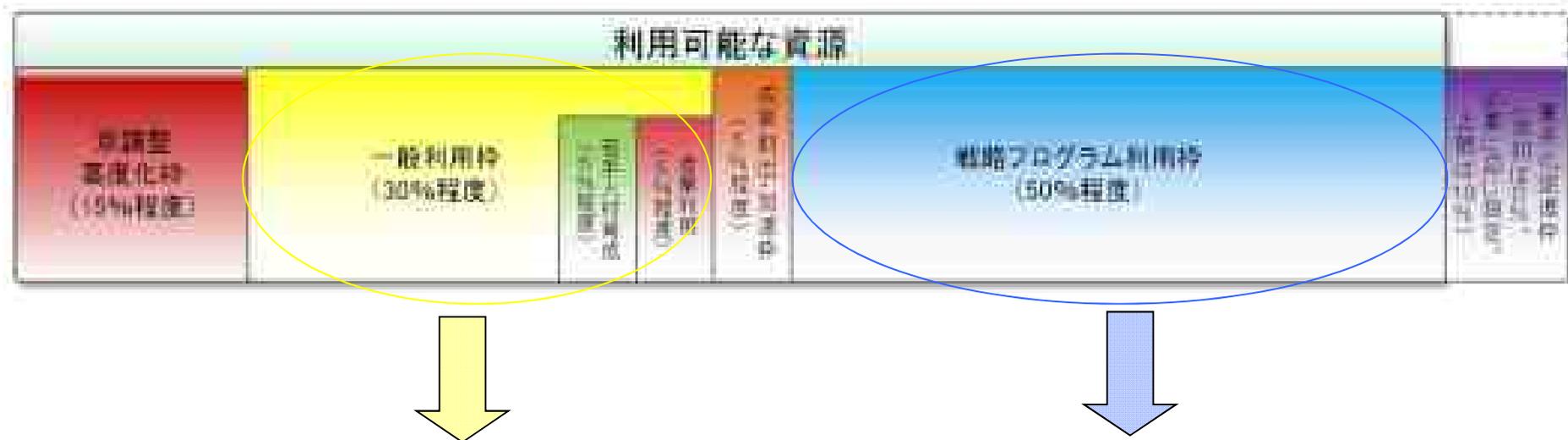
戦略機関(社会が期待する画期的な成果創出のため、「京」を中核とするHPCIの重点的・戦略的な利用)

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)

# 「京」の利用者選定について

## <京の利用枠>

京の利用については公募に基づいて選定する一般利用枠と公募によらず重要なテーマ・課題を選定する戦略プログラム利用枠等がある。



## <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。

※なお、利用料金については産業利用で成果非公開の場合有償とする。  
(1ペタフロップスを1時間使った場合約10万円)

# 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。

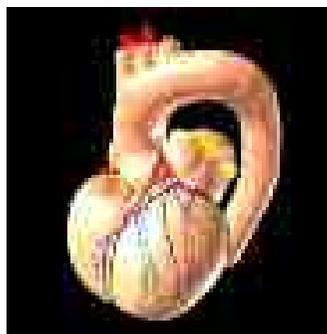
	＜戦略分野＞	＜戦略機関＞
<b>分野1</b>	<p><b>予測する生命科学・医療および創薬基盤</b></p> <p>ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測をおこなう。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・理化学研究所</li> </ul>
<b>分野2</b>	<p><b>新物質・エネルギー創成</b></p> <p>物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・東大物性研(代表)</li> <li>・分子研</li> <li>・東北大金材研</li> </ul>
<b>分野3</b>	<p><b>防災・減災に資する地球変動予測</b></p> <p>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。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・海洋研究開発機構</li> </ul>
<b>分野4</b>	<p><b>次世代ものづくり</b></p> <p>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。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・東大生産研(代表)</li> <li>・宇宙航空研究開発機構</li> <li>・日本原子力研究開発機構</li> </ul>
<b>分野5</b>	<p><b>物質と宇宙の起源と構造</b></p> <p>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。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・筑波大(代表)</li> <li>・高エネ研</li> <li>・国立天文台</li> </ul>

※ 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。

# HPCI戦略プログラムによって期待される成果の例

## ● 心疾患のマルチスケール・マルチフィジックス シミュレーション (研究代表者: 東京大学・久田俊明)



心臓シミュレーション

細胞・組織・臓器を部分ではなく、**心臓全体をありのままに再現し**、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価に貢献

## ● 創薬応用シミュレーション (研究代表者: 東京大学・藤谷秀章)



薬候補のタンパク質への  
高精度結合シミュレーション

新薬の候補物質を絞り込む**期間を半減 (約2年から約1年)**して画期的な新薬の開発に貢献

## ● 地震・津波の予測精度の高度化に関する研究 (研究代表者: 東京大学・古村孝志、東北大学・今村文彦)



シミュレーションによる  
地震・津波の被害予測

50m単位 (ブロック単位) での予測から地盤沈下や液状化現象等の影響も加味した**10m単位 (家単位) の詳細な予測**を可能とし、都市整備計画への活用による**災害に強い街作りやきめ細かな避難計画の策定等**に貢献

## ● 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの 研究開発 (研究代表者: 東京大学・加藤千幸)



車両挙動を解明する全乱流渦  
のシミュレーション

乱流の直接計算を工業製品の熱流体設計に適用することにより、従来行われていた**風洞実験などを完全にシミュレーションで代替し**、設計の効率化に貢献