

資料 5-1

「京」運用中間評価説明資料

理化学研究所計算科学研究機構 (AICS)
と「京」の概要

AICSのミッション

2010年7月に設立。わが国を代表する計算機科学・
計算科学の研究所

ミッション

- 共用法に基づき、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
- 「京」を核とした、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
- ポスト「京」の開発、我が国の計算科学技術の在り方、将来構想の策定

上記ミッションに基づき、以下に従事

- 共通基盤技術開発、分野融合研究、将来重要となる領域の開拓を行い、我が国の計算科学及び計算機科学を先導
- 戦略分野の研究者、理論研究者や実験研究者との連携
- 計算科学、計算機科学の両方がわかる人材、将来の学際計算科学を担う人材を育成
- HPCIの中核として、他のスパコンセンター等との連携を促進
- HPCIコンソーシアムの牽引役として我が国の計算科学技術のコミュニティーの強化に貢献
- 先端的研究の下、産学協働を支援、促進
- 計算科学技術と人、社会をつなぐためのOutreach活動の拠点、研究集会、広報等の企画立案

機構長

副機構長

運用技術部門 29名

研究部門 132名
16 チーム 3 ユニット

(うち、専任研究者80名、
外国人研究者15名、
女性研究者3名)

フラッグシップ2020プロ
ジェクト 33名

(うち、専任研究者25名、
外国人研究者3名、
女性研究者1名)

事務部門 63名

2016年2月 259名

「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)
○超高速電子計算機の開発
○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) [23年10月に選定
24年4月から業務開始]
○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

連携推進会議
構成員: 理研計算科学研究機構
5分野の戦略機関
登録機関
オブザーバ: 文科省
議長: 機構長(2ヶ月に1回開催)

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

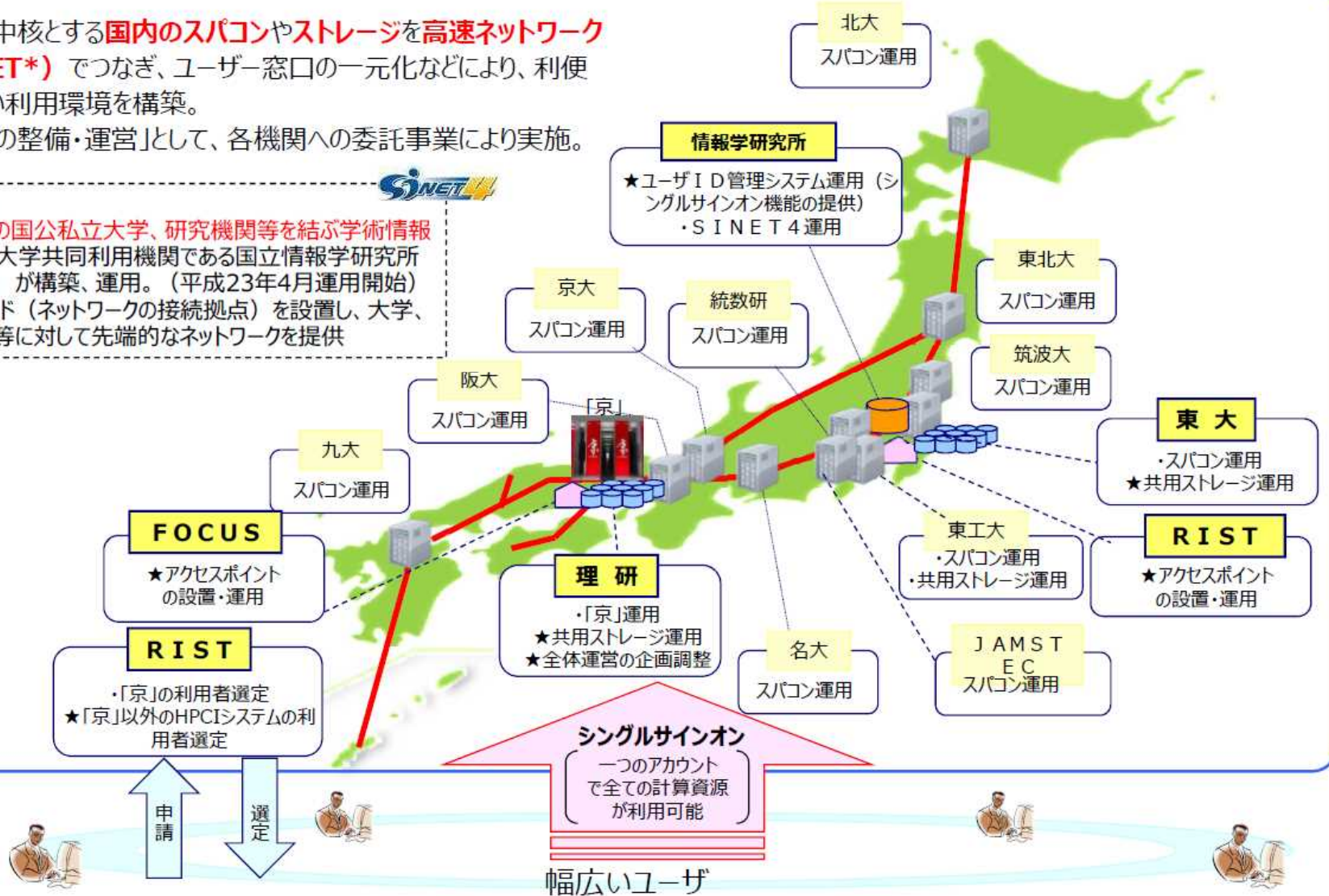
戦略機関(社会が期待する画期的な成果創出のため、「京」を中核とするHPCIの重点的・戦略的な利用)
利用者(大学、独立行政法人、産業界等、基礎研究から産業利用まで幅広い利用)

H P C I (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) の枠組み

- 「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 (SINET*)** 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。
- 「HPCIの整備・運営」として、各機関への委託事業により実施。

* SINETとは

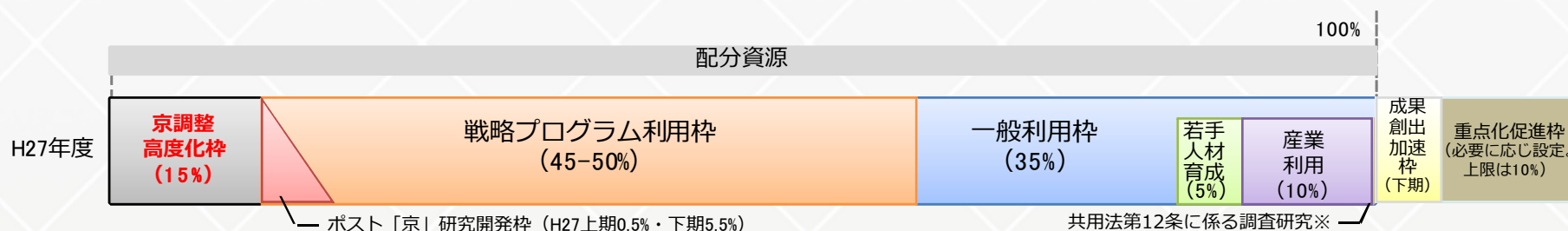
- 日本全国の国公立大学、研究機関等を結ぶ**学術情報基盤**として大学共同利用機関である国立情報学研究所 (NII) が構築、運用。(平成23年4月運用開始)
- 全国にノード(ネットワークの接続拠点)を設置し、大学、研究機関等に対して**先端的なネットワーク**を提供



「京」の計算資源配分

● 「京」の利用枠と配分方針

利用枠	配分方針
京調整高度化枠	「京」の安定運転のためのシステム調整、ユーザ利用支援のための研究開発、幅広い分野のユーザの利用に資する高度化研究を実施
戦略プログラム利用枠	戦略機関が提案した利用希望課題について、文部科学省が配分内容を決定（非公募）
ポスト「京」研究開発枠	重点課題実施機関が提案した利用希望課題について、文部科学省が配分内容を決定（非公募）
一般利用枠	共用開始後の利用のニーズ等も踏まえ、柔軟に対応し、必要に応じて弾力的に見直し（公募）
成果創出・加速枠	一般利用において実施中の課題の中から、早期の成果創出に向け、加速すべき課題への追加配分の枠として設定（非公募）
重点化促進枠	政策的、重要かつ緊急な課題の実施（当初は留保せず、課題が設定されれば、他の利用枠より優先的に実施）（非公募）



※共用法第12条に係る調査研究・・・共用法第12条(*)に係る調査研究を実施する課題で、利用支援に資する調査研究、及び研究実施相談者のスキルアップを目的として、「京」の一般利用枠を利用する研究課題

「京」コンピュータ

特徴

- 超並列スカラーマシン、汎用機
- ピーク性能: 11.28 Petaflops
- システム: 864 ラック、88,128 ノード
- メモリー: 1.27 PB、30 PB ディスク
- ネットワーク: 6次元メッシュ・トーラス (Tofu)

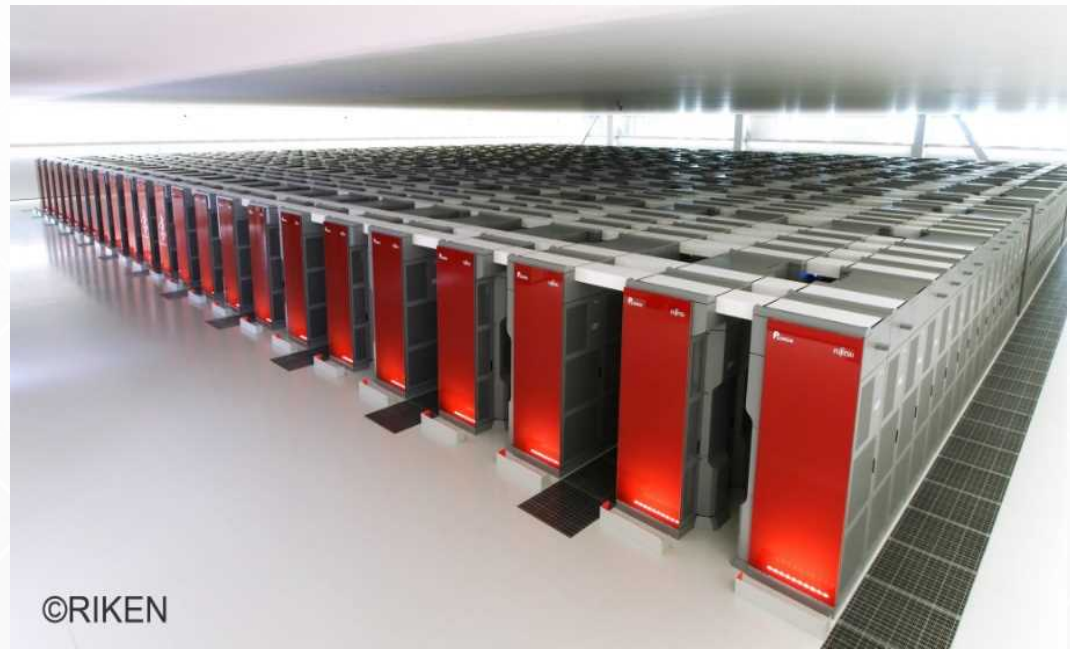
Top 500 ランキング

- LINPACKは密行列の連立1次方程式を直接法で解くスピードを測定
- 2011年6月、11月で世界のトップ LINPACK性能: 10.51 Petaflops
- 「京」は2015年11月現在、世界4位

Graph 500 ランキング

“ビッグデータ” スパコンランキング

- グラフ処理における速度を計測するベンチマーク
- 2014年6月、世界一を獲得
- 2014年11月、世界2位
- **2015年7月、世界一を奪還**
- **2015年11月、二期連続世界一**



HPCG ランキング

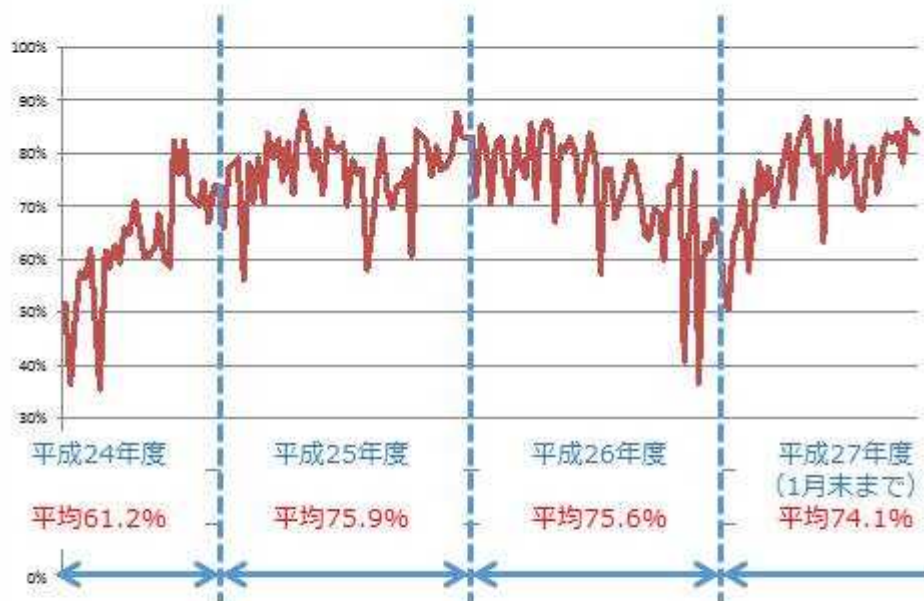
- 共役勾配法による疎行列の連立1次方程式を解くスピードを測定、実アプリで使われる計算手法に比較的近い処理速度を評価するもの
- 2014年11月、2位 2015年6月、11月においても2位 「京」が産業利用などにおいても高い性能を発揮できることを意味

「京」はプロセッサのスピード、メモリー、通信の**バランスがとれたスパコン**

「京」の運転

ジョブ充填率

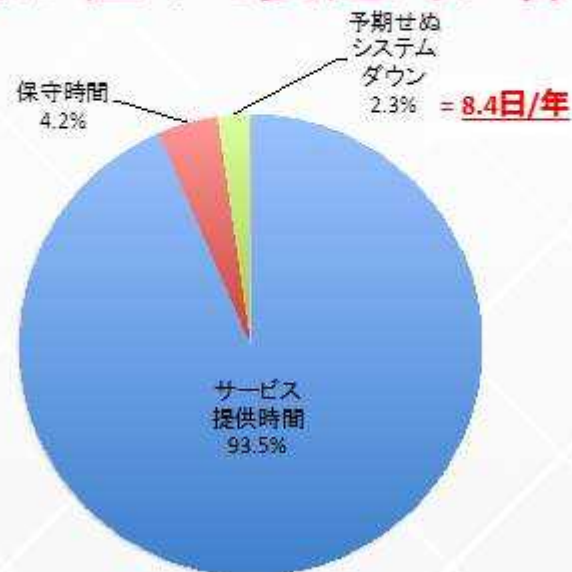
(利用可能な計算資源のうち実際に利用された割合)



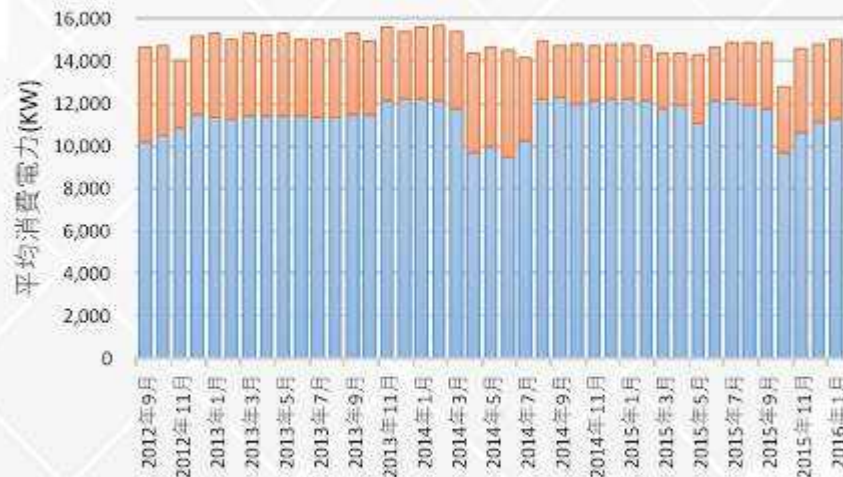
- 大規模実行期間※(3日/月)を除き、ほとんどの期間で80%前後のジョブ充填率をキープ
- 平均のジョブ充填率は75%以上の高水準を維持。今年度も最終的には同程度と想定
- H26年度末からH27年度初にかけて、やや利用が落ち込んだものの、現在は回復。
- 平準的な利用を促進するための改善策を来年度から実施予定

※大規模実行期間の詳細はP.54参照

「京」は極めて安定的に稼働



月別平均消費電力の推移



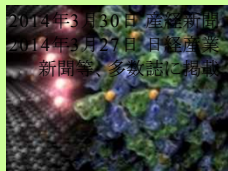
■ 関西電力からの平均受電電力 (kW) ■ ガス発電機による平均発電電力(kw)

「京」によってはじめて実現した成果

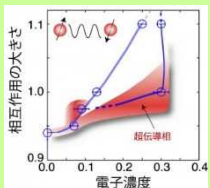
材料・エネルギー

リチウムイオン電池 充電時間1/3に高濃度電解液の動作原理を解明

▶ リチウムイオン電池の新規電解液について、「京」による分子レベルの解析を行った。従来の1/3以下の急速充電や、5V以上の高電圧下での動作が可能になることが分かった。高性能電池の開発に大きく貢献する。



2014年3月30日 産経新聞
2014年3月27日 日経産業新聞等、多数誌に掲載



鉄系高温超伝導状態をスパコン内に再現

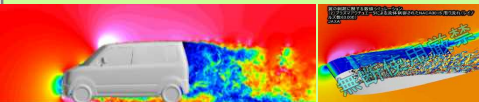
電子密度の揺らぎと超電導の出現が連動—超電導現象の機構解明へ

次世代半導体として注目されているシリコン・ナノワイヤ材料の電子状態計算でゴードンベル賞受賞

ものづくり

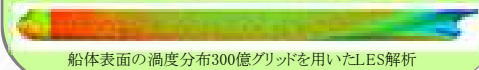
大規模空力シミュレーションで自動車開発を加速

▶ 「京」による大規模数値計算で、今までの風洞実験では難しかった実際の運転状況下でのシミュレーションを実現



流体制御シミュレーションで輸送機器開発を推進

▶ 「京」を用いて特殊条件下における多パターンの流体制御計算を行い、航空機、船舶をはじめとする輸送機器の性能向上や低騒音化に必要な多数の知見を得た。



船体表面の渦度分布300億グリッドを用いたLES解析

防災・減災

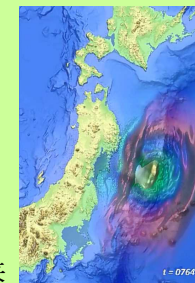
超高解像度の気象シミュレーション実現、積乱雲をより正確に

▶ 「京」では水平格子間隔1km未満の超高解像度の気象シミュレーションが可能となった。積乱雲の詳細な表現により台風予測



地震動、地殻変動、津波を同時にシミュレーション

▶ 「京」の利用で、地震動、地殻変動、津波をまとめてシミュレーションすることが可能になった。将来的には、大地震に伴う、強震動、地殻変動、津波襲来の総合的な災害予測が期待される。

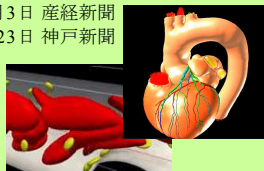


ライフサイエンス

血流シミュレーション、心臓シミュレーションで医療支援

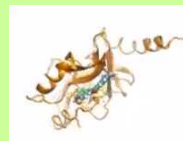
▶ 「京」の活用により、2年近く掛かっていた細胞内の構造を精密に再現した心臓モデルの1回収縮分の計算が1日のできるようになった。「京」を用いて、直径約100 μ mの大きさの血管で、赤血球の変形や血小板の粘着などを考慮に入れたシミュレーションを実施した。医療分野へ貢献

2014年2月3日 産経新聞
2013年9月23日 神戸新聞



血流や心臓の階層統合シミュレーション

2013年7月4日 WIRED.jp



タンパク質と化合物の相互作用シミュレーション

高速シミュレーションでIT創薬を支援

▶ 従来の汎用コンピューターでは、標的タンパク質と薬の候補化合物の結合シミュレーションを高い精度で行うために、20年かかっていた。京の登場でタンパク質と化合物の結合計算が、約1週間のできるまでになった。創薬のスピードが加速し、田辺三菱製薬など民間企業の本格的な参入も始まった。

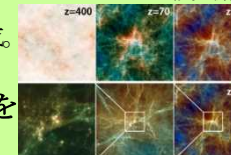
10兆個の結合の世界最大の脳神経シミュレーション

宇宙

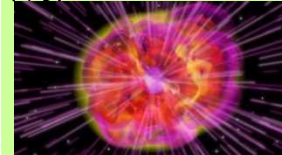
ダークマターの動きを再現した成果でゴードンベル受賞

▶ 約2兆個のダークマター粒子の重力計算に成功。「京」全体の約98%を使用し、実効性能5.67ペタフロップスを達成。ゴードン・ベル賞を受賞した

2012年11月17日
読売新聞



世界最高の解像度で太陽の対流層を計算



2014年4月25日 マイナビニュース

超新星爆発の大規模計算を実現

▶ 「京」を用いて初めて現実に近い形で超新星爆発を計算。ニュートリノ加熱説を支持する強い証拠を示した。超新星爆発の詳細な研究の進展につなげる。

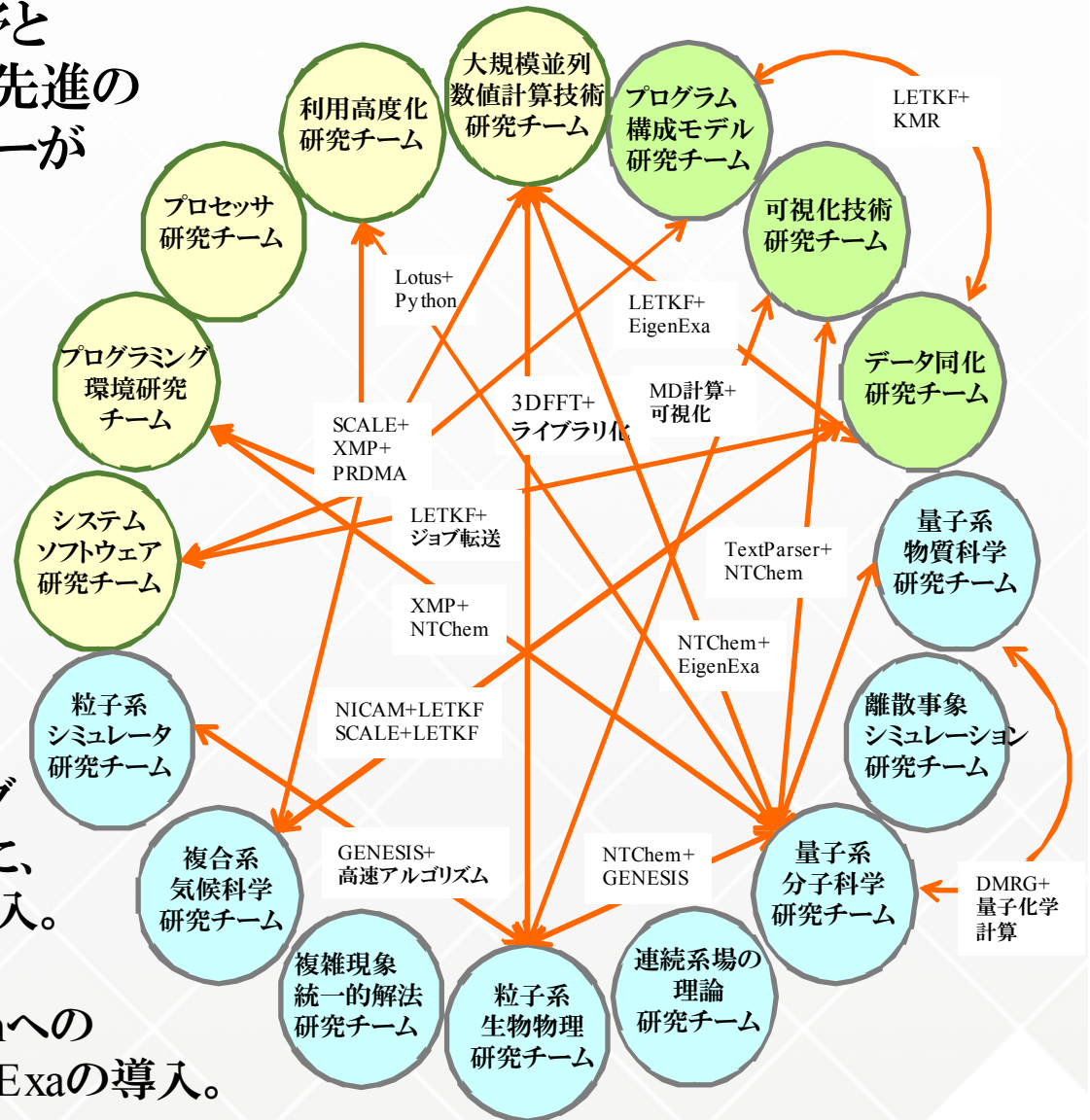
AICS研究チーム間における連携について

AICSに集積する計算機科学分野と
計算科学分野の連携、融合により先進の
科学的成果と技術的ブレークスルーが
創出され始めている。

(AICS Café 85回開催、
研究進捗ミーティング 34回開催)
※ 2016年2月現在

【共通基盤的連携事例】

- 局所アンサンブル変換カルマン
フィルタLETKFへのMapReduce
データ処理ツールKMRの導入
- 気象シミュレーション用ライブラリ
SCALEの一部を並列プログラミング
言語XcalableMPで開発するとともに、
隣接通信ソフトウェアPRDMAに導入。
- 電子状態計算ソフトウェアNTChemへの
高性能固有値計算ライブラリEigenExaの導入。



AICSの基盤研究

2016年2月現在30本のソフトウェアを公開

<代表事例>

■ **XcalableMP (XMP)**

並列プログラミング言語、SC13、SC14でHPC Challenge(Class2)賞受賞

■ **EigenExa**

高性能固有値ソルバ、100万次元の密行列のすべての固有値、固有ベクトルが1時間以内に解ける

■ **HIVE**

「京」上で直接大規模データを可視化するシステム

■ **GENESIS**

生体高分子材料向け分子動力学シミュレーションソフトウェア。高並列化に対応し、レプリカアンサンブル法等の高度な手法も実装。巨大生体分子システム(1億原子系)のMDシミュレーションを実現

■ **NTChem**

分子科学計算ソフトウェア。数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現

■ **SCQS**

量子モンテカルロ法と密度行列繰り込み群法による強相関量子系に対するソルバーパッケージ

■ **CUBE**

ものづくり分野での流体・熱・構造・音響・反応・粒子等の複合流体現象を統一的に扱うソフトウェア

■ **SCALE**

次世代気象気候科学における基盤ライブラリ。気候・気象科学を専門とする科学者と計算機科学を専門とする科学者が共同で開発

■ **OASIS**

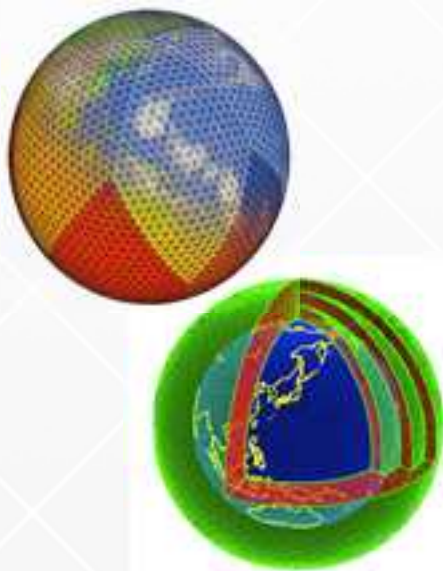
離散事象を扱うソフトウェア

■ **GAMERA**

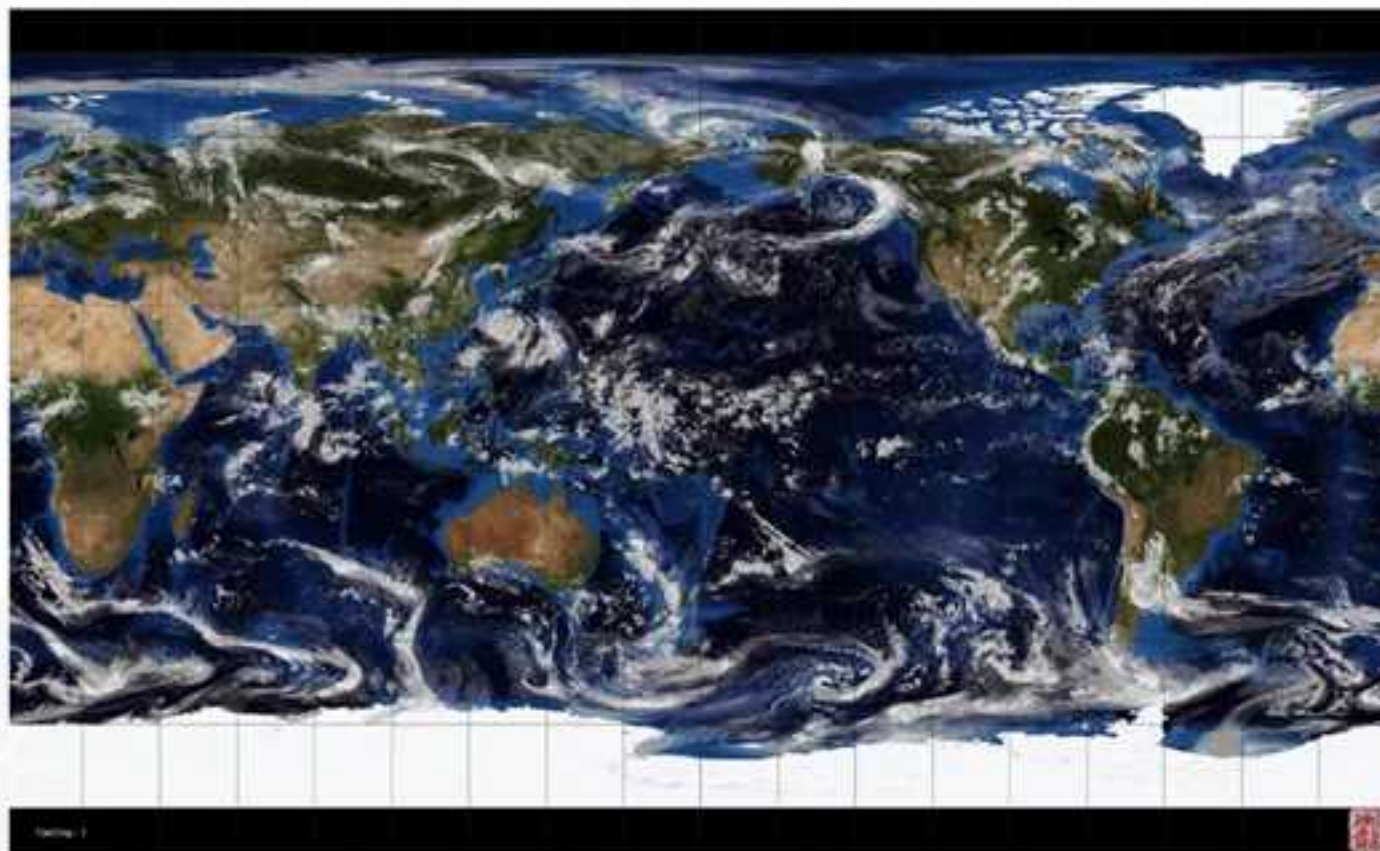
都市地震シミュレーションを実現するソフトウェア。SC14、SC15でゴードン・ベル賞のファイナルリストに選ばれている

大気大循環シミュレーション 富田チーム(AICS)

スパコンによるシミュレーションは集中豪雨の予測の改善や新しい豪雨予測システムの構築、台風・集中豪雨などの発生メカニズムの解明や雲の気候への影響を解明。「京」以前には全球大気のシミュレーションは3.5km程度が最高解像度であったが、「京」では水平格子間隔1km未満の超高解像度の全球帯域シミュレーションが可能となり、個々の積乱雲から全球規模の積乱雲群との相互の関係(MJ振動(※)の1ヶ月先までの予測、台風発生 の2週間前の予測など)をより正確に調べることが可能になった。



※マッデン・ジュリアン振動:
主にインド洋で発生する水平
規模が数千kmにも及ぶ巨大
な積乱雲群が赤道に沿って
東進する、周期が30~60日
の大気変動

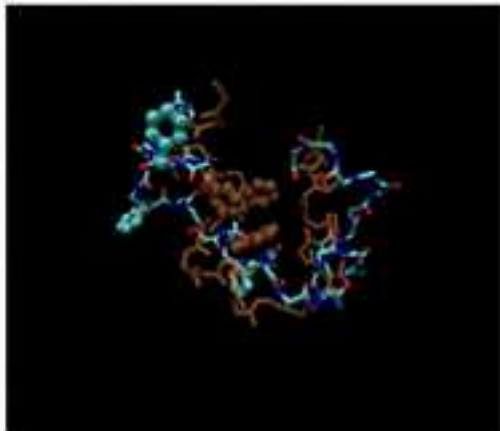


シミュレーションでタンパク質の動きを見る

杉田有治(AICS)

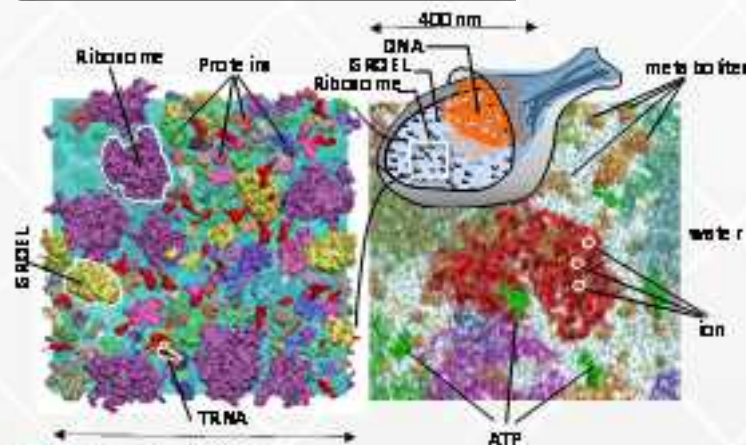
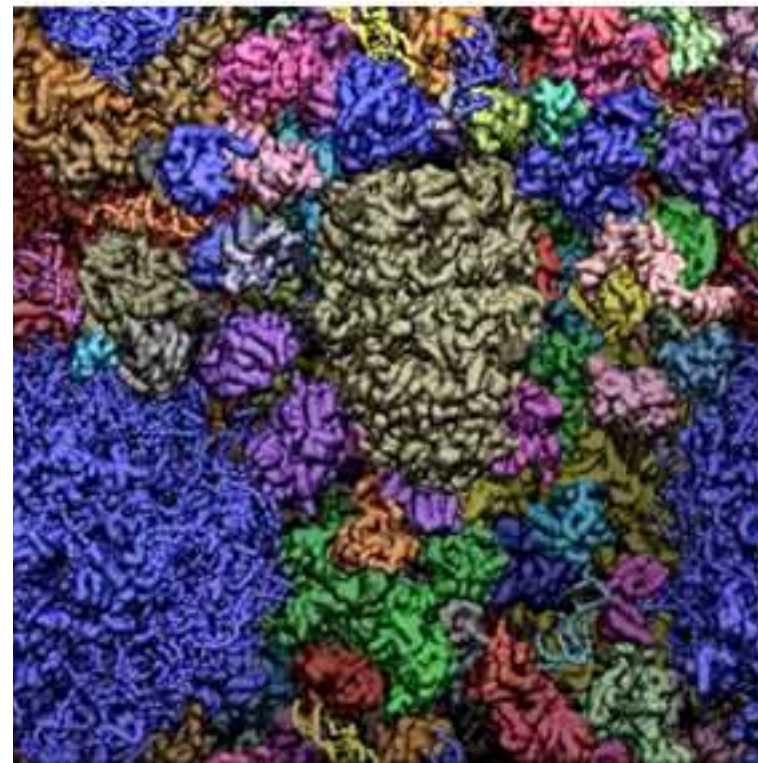
タンパク質のシミュレーション

- 新しいタンパク質のデザイン
- アルツハイマー病などの原因解明
- 創薬、分子設計への応用
- 細胞まるごとモデリング



タンパク質折れ畳み、Villin (アミノ酸36残基)マイクロ秒で折れ畳む小タンパク質

「京」による細胞内のタンパク質のシミュレーション



バクテリア細胞質の全原子分子動力学

- 生体分子系に関する世界最大級のシミュレーション
- 細胞内のタンパク質動態を初めて解析

「京」が拓いたHPC-CAE(風洞実験主体からスパコン活用設計へ)

坪倉誠(AICS)

- 風洞実験に匹敵するシミュレーションの実現(対実験誤差1~2%)
- 風洞ではできない、走行中に遭遇するリスク・安定性シミュレーション(追い越し、追い抜き、突風、急ハンドル操作)の実現

風洞代替シミュレーションの国内経済効果

風洞実験主体の開発からシミュレーション主体の計測へ。これにより開発費用の削減や空気抵抗低減が加速。

- 風洞実験代替に伴う開発費用削減効果:200億円/年
- 高精度解析により空気抵抗削減等で5%燃費が向上した場合、新車400万台導入により燃料節約効果:200億円/年

- 世界中の自動車会社等(例:シュツットガルト大学自動車研究所、ベンツ社)が同様のシミュレーションに取り組んでいるが、「京」の1/10以下の規模の解析しかなされていない。

リアルワールドシミュレーションの国内経済効果

開発最終段階で評価していたリアルワールド評価を上流段階で、これにより設計変更を減らすことが可能。

- 設計変更を85%削減した場合、開発コストを30%に削減可能:120億円/車種×20車種/年=2400億円/年
(「京」のみでは無理、ポスト京に向けた課題)

海外機関との連携

AICSは計算科学の世界的ネットワークの中心になりつつある

○海外機関との研究協力協定等に基づく研究協力、研究者交流等

相手国	相手機関名
アメリカ	National Center for Supercomputing Applications(NCSA)※更新中
	Argonne Leadership Computing Facility(ALCF)
	University of Maryland
ドイツ	Jülich Supercomputing Center
オーストラリア	National Computational Infrastructure (NCI)※更新中
フランス	Maison de la Simulation(MDLS),Centra National de la Recherche Scientifique(CNRS)
イタリア	THE SCUOLA INTERNAZIONALE SUPERIORE DI STUDI AVANZATI (SISSA)
アメリカ、ヨーロッパ	The Joint-Laboratory for Extreme-Scale Computing(JLESC) The University of Illinois , INRIA, Argonne NL, Barcelona Supercomting Center, Jülich Supercomputing Center and the Riken AICS



ALCFとの覚書調印



International Summer School@NYC

○海外機関との合同研究会やスクール等の開催(最近の主な実績例)

開催時期	名称
2016年2月	The 6 th AICS International Symposium (過去実績5件)
2015年6月	International Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences 2015 (過去実績2件)
2014年9月	US-Japan Workshop on Exascale Applications

この他、エクサスケールスパコンのシステムソフトウェア開発に向けた日米科学技術協力(文部科学省と米国DOEがMOU締結)、日米欧の研究プロジェクトや、ソフトウェア等の性能評価のためのスパコン相互利用等の取り組みに参加。また、国内においても、大学、HPCI関連機関との連携を進めている。

AICSの人材育成事業

計算科学研究機構では、国際頭脳循環の中核的拠点として、国内外への幅広い情報提供や、海外の研究機関等との連携による研究者等の交流を推進している。

○各種スクーリングの実施

- RIKEN AICS HPC サマースクール及びスプリングスクールの実施

(参加実績)	平成23年度	平成24年度	平成25年度	平成26年度	平成27年度
サマースクール	43名	41名	37名	21名	22名
スプリングスクール	—	—	22名	17名	(3月開催予定)

- International Summer School on HPC Challenges in Computational Science への参加
(参加実績) 平成25年度:73名(14か国、日本からは11名が参加)
平成26年度:80名(19か国、日本からは10名が参加)
平成27年度:80名(21か国、日本からは8名が参加)

○神戸大学大学院との連携大学院の実施

神戸大学大学院システム情報学研究科(計算科学専攻)に連携講座として大規模計算科学講座を設置し、大規模数値シミュレーションに関する授業科目を平成25年度より開始。

○インターンシップ受入

平成26年度より、大学院生を対象にインターンシップの受入を開始。機構の研究チームにおいて、その研究を実習・体験することを通じて、計算科学技術への理解を深め、最先端の計算科学の研究開発に従事する人材を指向してもらうことを目的とする。平成26年度は6研究チームに13名、平成27年度は9研究チームに10名の受入を行った。

○講義の動画アーカイブ作成

機構及び戦略機関のスクール等講義の動画・資料をアーカイブし、平成26年度に開設。計算科学技術に係る自己学習に役立ててもらうことを目的とし、現在約150コンテンツをUPしている。

また、この他にも他機関からのリサーチアソシエイト、大学等からの研修生の受け入れ等も積極的に実施。



AICSの広報活動

▶ ミッション

- 京・ポスト「京」を含むスパコン開発の意義やAICSの理念、計算科学・シミュレーションの役割を、一般国民の視点に立ってわかりやすく伝え、相互の信頼関係を構築する。

▶ 主な広報活動 (2015年度の実績: 1月末まで)

・マスメディアを通じた幅広いターゲットへの広報

- 重要案件に関する記者会見の実施・リリースの発信: リリース9件(イベント含む)
- 新聞、雑誌、テレビ、専門誌からの取材対応: 掲載・放送 340件
- 記者向け見学会・勉強会: 3回開催(生命科学、スパコンランキング、重点9課題)

・ウェブやコンテンツによる深い情報の発信

- ホームページ・フェイスブック: 訪問者数 145,000人
- 機構パンフレット: ポスト京開始に伴う改訂中(約11,000冊配布)
- 一般向け広報誌「計算科学の世界」: 11号発行、12号発行予定
- 成果動画: 自動車空力制作、防災減災制作中
- 若年層向け: バーチャルツアー、神戸市中学生向け副読本等

・イベントを通じた直接対話

- シンポジウム いまこれ(「京」シンポ): 講演、パネルディスカッション、ポスタ、記者勉強会を実施
- 海外カンファレンスへの参加: ISC15、SC15に出展
- 知る集い開催: 富山、高松、仙台で開催。教育委員会や高校からのバックアップ
- 神戸市、科学館など他施設との連携や展示会への参加: 産業メッセ、サイエンスフェア兵庫、等
- 若年層向け: 夏休みイベント、子ども霞ヶ関ディ

・見学者の受け入れ・交流

- 見学者の受入: 10,300人
- 内、教育機関からの見学受け入れ: 小・中・高・大・専(80件、約2,600人)
- 神戸地区理研一般公開開催: 医療産業都市各機関と連携
- 理研他事業所における一般公開への参加: 和光・播磨・横浜等



NHKサイエンスZERO (2015年10月)



スパコン成果動画

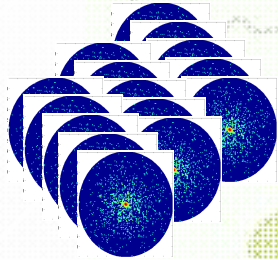


知る集い 高松

大型施設との連携 (SACLA)

SACLAから発生する輝度の高い高速短パルスにより、情報量の多いX線画像を高速・大量に取得
→『京』との連携により、大量の回析像データをリアルタイムに解析
解析結果をSACLAの実験にフィードバックし、2次元・3次元の高解像度イメージングを構築

大量の回析像データ

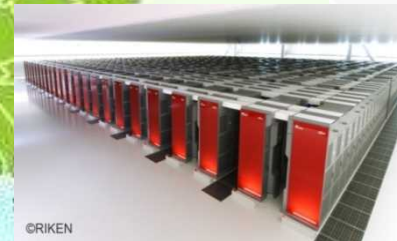
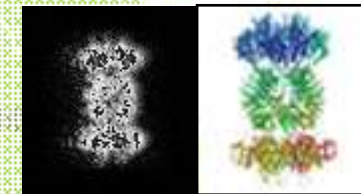


SACLA

ビームライン研究開発グループ
矢橋 牧名グループディレクター

～兵庫県内の2つの
国家基幹技術～

スパコンによる
高解像度イメージング (2D or 3D)



『京』

粒子系生物物理研究チーム 杉田有治チームリーダー
計算構造生物学研究ユニット Tama Florenceユニットリーダー

AICSにおける外部評価実績について

□ 運営諮問委員会：

- 産学官から9名の委員（外国人1名）に委嘱。計算科学研究機構の業務運営に関する基本的事項について審議し、計算科学研究機構長に助言する。
- 計算科学研究機構設立以降、1～2回/年程度の頻度でこれまで8回開催。平成27年度で終了。
 - ①平成22年7月23日、②平成23年6月17日、③平成25年1月15日、④平成25年7月26日、⑤平成26年2月21日、⑥平成26年10月10日、⑦平成27年3月13日、⑧平成27年8月31日
- 主な諮問事項および対応：

諮問事項	対応
医療・創薬分野における京の成果をもっと積極的に発信すべき。	京が出来たことにより創薬企業によるコンソーシアムが発足するなど、創薬分野によるシミュレーションの活用が進みだしており、SACLAと京の連携なども進めている。
AICSや戦略分野が開発したアプリケーションをユーザが使える仕組みが必要。	AICS研究部門が開発、または「京」向けに最適化したライブラリ等のソフトウェアを利用者向けに公開している。平成25年度は20本のソフトウェアを公開している。
京の運用方針について、ドラステックに変更するなど、ジョブ充填率向上の為の工夫を行うべき。	ジョブスケジューラの改良、ジョブ管理等、充填率の向上の為の方策を進めている。

□ アドバイザリー・カウンシル（平成28年度より）：

- 研究センター等の運営に関する事項並びにその研究開発又は事業の評価に関する事項について、理事長又は研究センター等の長の諮問に応じて審議し、理事長又は研究センター等の長に答申する。
- 国内外の科学技術及び研究機関等の運営に関する有識者及び専門家9名（外国人5名）を委嘱。

まとめ(1)

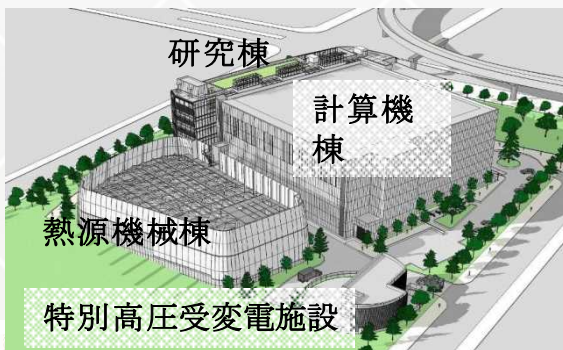
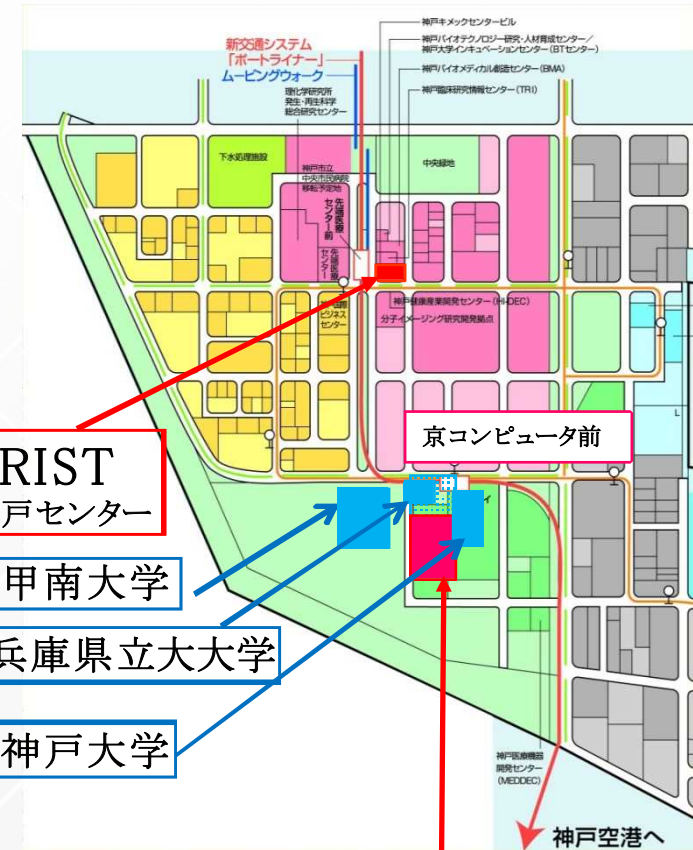
- 毎年、「京」を8,000時間以上運転し、663,552,000ノード時間(82,944ノード×8,000時間)以上の**計算資源を安定的に提供**した。80%前後と高いジョブ充填率を維持するとともに、施設運用の効率化にも努めた。
- 利便性向上を目指し、システムソフトウェアの開発、「京」へのチューニング、スケーラビリティの評価、アプリケーションプログラムやライブラリーの開発・検証といった様々な**共通基盤研究・高度化研究を着実に実施**し、成果を挙げた。計算科学と計算機科学の連携に力を入れ、「京」でしか成し得ないシミュレーション研究を実施し、世界に発信した。
- 国際的な性能ランキングGraph500で世界第1位を獲得、「HPCチャレンジ賞クラス1」の多部門で第1位を獲得、プログラム言語の総合性能を評価する「HPCチャレンジ賞クラス2」をXMPが2年連続授賞、HPCGベンチマークで世界第2位を獲得等、**世界から高い評価**を得た。

まとめ(2)

- 登録機関をはじめとする関係機関と協力し、HPCIコンソーシアムの中核機関として、我が国の計算科学技術の発展、分野振興に貢献した。また海外機関との研究協力協定等に基づく研究協力、研究者交流を進め、国際シンポジウム、ワークショップを開催し、計算科学技術の**世界的ネットワークの中心**としての役割を果たした。地元自治体や地元大学との連携にも力を入れた。
- 国内向けスプリング・サマースクールの開催、欧州PRACE・米国XSEDEとの国際サマースクールの共同開催により、**国内外の若手研究者育成**に努めた。さらに平成26年度より、国内の大学院生を対象とした計算科学インターンシップ・プログラムも実施している。若手研究者の育成に努めた。
- 広報活動にも力を入れ、見学者を年間1万人以上受け入れる等、国民一般への**理解増進を積極的に図る**と共に、高校生向けの計算科学教育プログラムの開発、見学対応や出前授業・出張講演を積極的に実施し、若い世代の計算科学への興味を促進するための活動も展開した。

以下、ご参考

AICS と「京」



- <所在地> 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26
- <敷地面積> 約2ha(準工業地域)
- <総電力> 最大約15MW(計算機システム)
- <電力設備> 70kV特高受電、コージェネレーション発電併用
- <冷却設備> 計算機棟空調機台数: B1F計14台、2F計50台
- <免震システム> 震度6強レベルの大地震でも主要な機能を確保

理研 AICS

RIST一元化窓口
事務所(AICS内)

AICSの施設



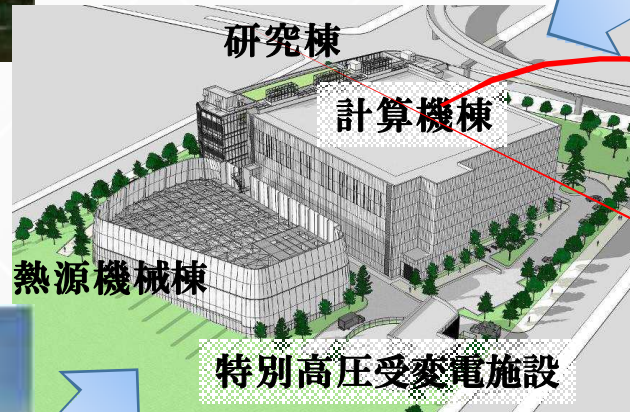
【研究棟】

- 延床面積 約9,000㎡
- 建築面積 約1,800㎡
- 構造 鉄骨造
地上6階地下1階



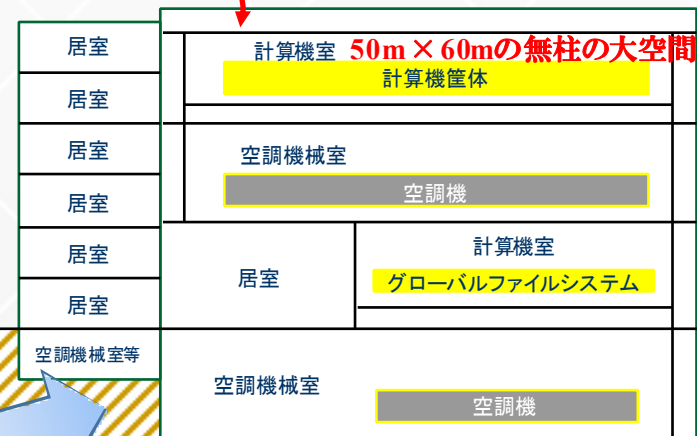
【計算機棟】

- 延床面積 約10,500㎡
- 建築面積 約4,300㎡
- 構造 鉄骨造・地上3階地下1階
- 冷却設備 空調機台数: B1階14台、2階50台



【熱源機械棟】 【特別高圧受変電施設】

- 総電力 最大約15MW (計算機システム)
- 電力設備 70kV特高受電
コジェネレーション発電併用



【研究棟・計算機棟の断面図】

【免震システム(研究棟・計算機棟)】

震度6強レベルの大地震でも主要な機能を確保

これまでの歩み

2005年	10月		文科省において理研を開発主体として選定
2006年	1月	1日	次世代スーパーコンピュータ開発実施本部設置
	9月		概念設計開始（NEC／日立、富士通）
2007年	3月	28日	立地地点を神戸に決定
	7月		詳細設計開始（NEC／日立、富士通）
	9月		総合科学技術会議（本会議）においてシステム構成決定
2008年	3月		計算機棟 着工
2009年	1月		研究棟 着工
	5月		NECが製造段階への不参加を表明
	7月		文科省中間評価作業部会においてスカラ単一の新システム構成案は妥当との評価
	11月		行政刷新会議事業仕分けにおいて「来年度の予算計上の見送りに限りなく近い縮減」と判定
	12月		文科省によるプロジェクトの見直し（開発側の視点から利用者側の視点へ転換をはかる）
2010年	3月		詳細設計及び試作・評価の完了
	5月		建屋施設竣工
	7月	1日	計算科学研究機構設立 愛称が「京」に決定
	9月	29日	第一号筐体搬入
2011年	3月末		システムの一部稼働開始
	6月		TOP500で世界一を達成（8.162ペタフロップス）
	10月末		文科省において登録施設利用促進機関を高度情報科学技術研究機構に決定
	11月		衆議院決算行政監視委員会行政監視に関する小委員会 TOP500で2期連続世界一を達成（10.51ペタフロップス） HPCチャレンジ賞4部門全てで第一位獲得、ゴードン・ベル賞で最高性能賞受賞
	12月	8日	衆議院決算行政監視委員会における「行政監視に基づく事業の見直しに関する」決議
2012年	6月	29日	システム完成 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部を計算科学研究機構に統合
	9月	7日	「行政監視に基づく事業の見直しに関する決議」のフォローアップに基づく決議
	9月	28日	共用開始

これまでの歩み（つづき）

2012年	11月	ゴードン・ベル賞で最高性能賞受賞(2年連続)
2013年	3月	スーパーコンピュータ「京」の研究開発目標の達成状況、研究開発成果等に関する事後評価結果
2015年	6月 16日	「HPCI戦略プログラム」平成27年度行政事業レビュー（公開プロセス）
2015年	11月 12日	「科学技術ビッグプロジェクト（I）スーパーコンピュータ」平成27年度秋の行政事業レビュー

AICS公開ソフトウェア一覧

AICSの研究部門、及び運用技術部門が共通基盤研究の一環として開発、または「京」用に最適化したソフトウェアをAICS公開ソフトウェアとして提供

2016年2月現在

名称	機能概要
システムソフトウェア研究チーム	
NetCDF	プラットフォームに独立なファイルを扱うためのライブラリ。Parallel netCDF、HDF5、Szip のライブラリを含む。Frontend、シリアル、MPIのそれぞれの環境でSzipありとなしの合計6環境を提供。
PRDMA (Persistent Remote DMA)	Remote DMA (RDMA)が利用可能なインターコネクト上で通信レイテンシや計算と通信の並行処理を改善するため、MPI標準の永続通信(Persistent Communication)プリミティブの高速実装を提供するライブラリ。
プログラミング環境研究チーム	
Omni XcalableMP	Fortran および C の拡張として定義された指示文ベースの並列言語 XcalableMP のコンパイラ。
Scalasca	MPI、OpenMP、MPI/OpenMPハイブリッドを使ったプログラムや並列プログラミング言語(XcalableMP/C)のプログラムの性能最適化を支援するためのツール。特に通信や同期でのボトルネックになっているところを特定し、その原因を調査するために使う。
MUMPS	連立一次方程式を直接解法で解く高並列数学ライブラリ。
大規模並列数値計算技術研究チーム	
EigenK	「京」コンピュータのアーキテクチャを意識して開発された標準固有値問題のための固有値計算ライブラリ。密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算できる。
EigenExa	EigenKの後継として「京」コンピュータでの性能チューニングが施された標準固有値問題のための高性能固有値計算ライブラリ。EigenK同様に密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算できる。
KMATH_RANDOM	高品質な乱数として知られるメルセンヌツイスター乱数生成器を並列分散環境で使用するための数学ライブラリ。Fortran90, C, C++から利用可能。
離散事象シミュレーション研究チーム	
OACIS(Organizing Assistant for Comprehensive and Interactive Simulations)	MacやLinux系OSがインストールされた計算機上でウェブサーバとして動作するシミュレーション実行管理ソフト。ユーザが、シミュレーション条件を与えると、OACISは、実行スクリプトの生成、京コンピュータなどの計算ホストでの実行、そして、シミュレーション結果の取り込みを自動的に行う。

AICS公開ソフトウェア一覧(つづき)

2016年2月現在

名称	機能概要
利用高度化研究チーム	
Xcrypt	並列ジョブ制御スクリプティング言語Xcryptを「京」上に実装。統一的で使いやすいユーザインターフェイスを提供。
TAU	Fortran, C, C++ で書かれた並列プログラムの性能解析ツール群である。プログラムの性能測定、解析、可視化などの機能を持ち、総合的に性能解析を支援する。プロファイル機能を使用することによって、各関数の実行時間 (inclusive/exclusive)、関数呼び出し回数、一回の呼び出しにあたっての平均実行時間などを知ることができる。またトレース機能を使用することで、プログラム実行中の各イベント(MPI通信など)がいつ・どこで発生したか、プロセスやソースコード等の単位で知ることができる。
Eclipse PTP for K and FX10 computers	Eclipse PTPという統合ソフトウェア開発環境を「京」コンピュータおよびFX10で使うために必要なソフトウェア。以下の2つのパッケージを含んでいる。(1)「Target System Configurations」Eclipse PTPから京やFX10でジョブを実行するときに必要なものである。(2)「LML DA Driver for PJM」京やFX10のユーザーのホームディレクトリーにインストールするもので、モニタリングに必要なものである。
量子系分子科学研究チーム	
NTChem	一から設計をした新しい国産分子科学計算ソフトウェア。既存ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーしつつ、他のプログラムでは利用することのできない多くの量子化学計算法を含んでいる。「NTChem」の第一版には数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現するための分子科学理論が実装されている。さらに、京コンピュータなどのマルチコア超並列クラスタ計算システムの性能を引き出すことが可能な並列アルゴリズムが実装されている。
量子系物質科学研究チーム	
2D-DMRG	強相関係の研究を目的として開発された密度行列繰り込み群法(Density Matrix Renormalization Group, DMRG)のプログラム。京コンピュータの利用を想定して開発されており、大規模並列計算に対応。密度行列繰り込み群法は、通常、1次元系の研究に利用されるが、この2D-DMRGは2次元系を初めとする多次元系への応用を想定して開発されており、任意の形状、様々なタイプの量子格子模型に対応している。
粒子系生物物理研究チーム	
GENESIS	高機能・超並列な分子動力学計算ソフトウェア。SPDYN、ATDYNという二つのプログラムが存在しており、SPDYNは超並列計算、ATDYNはマルチスケールシミュレーションやレプリカ交換分子動力学法を可能としている。
粒子系シミュレータ研究チーム	
FDPS (Framework for Developing Particle Simulators)	「京」のような超大規模並列計算機の上で効率的に実行できる粒子系シミュレーションソフトウェアを容易に開発できるようにするためのアプリケーション開発プラットフォームである。FDPSを使えば、チューニングや並列化の経験がない人でも数万ノードまで性能がスケールする粒子系アプリケーションを開発できる。
複合系気候科学研究チーム	
SCALE	気象シミュレーション用のライブラリおよびそれを利用した気象ラージエディターシミュレーションモデル。超並列計算機システムで性能を出せるよう、計算科学と計算機科学の専門家とのコデザインにより設計されている。

AICS公開ソフトウェア一覧(つづき)

2016年2月現在

名称	機能概要
プログラム構成モデル研究チーム	
KMR (K Map-Reduce)	ポスト処理等のデータ処理を容易に記述するためのライブラリ。定評のあるデータ処理ツールmap-reduceを「京」上で提供。
可視化技術研究チーム	
Polylib	領域分割型の並列計算で物体の形状情報等を管理するライブラリ。シミュレーション入力データ作成および結果の可視化に使用。
Cutlib	ポリゴンデータと背景格子との交点計算を行うライブラリ。直交格子、BCM格子、8分木格子に対応。
CPMlib	領域分割型のアプリケーションを記述するためのミドルウェア。データ領域確保、並列領域管理、通信などの機能を提供。
TextParser	YAML的な記述方式の構造化されたテキストファイルを読み・書きするライブラリで、シミュレータの入力パラメータ記述などに利用。
PMlib	プログラムの性能測定と統計情報を表示するツールで、プロセスグループやPAPIにも対応。被測定ルーチンは利用者が指定可。
CIOlib	直交等間隔格子の分散並列ファイルの管理機能を提供する。
HIVE	大規模並列環境で高い性能を発揮する利便性の高い可視化システムで、「京」の上で多数のノードを用いた並列レンダリングが可能。「京」以外にも多くの計算プラットフォームで動作し、リモート/ローカル動作、高並列性能、機能拡張性、移植性、メンテナンス性などを考慮して開発されている。現在、ベータ版で、Mac, Linux向けのバイナリパッケージを配布している。
FFV-C	直交格子を用いて、短時間で複雑な形状まわりの流れをシミュレートできる三次元非定常熱流体シミュレータ。本シミュレータは、流体解析における困難な課題である格子生成を自動化し、大規模な計算を短時間で行えることが特徴。また、「京」の全てのプロセスサを用いて90%以上の弱スケール性を達成するチューニングが施され、工学分野の実設計課題を支援できるように様々な機能開発を行っている。
KFoundation	AICSで開発された汎用C++APIを収集。以下のAPIが含まれる。(1)自動メモリ管理を備えた定数時間計算複雑性の性能および向上の安定性とデバッグ機能(2)XMLとJSONなどとの互換性のオブジェクトのシリアル化・逆シリアル化(3)ネットワークI/Oを含む、多様なI/Oストリーム(4)マルチチャンネル・マルチレベルのロガー(5)エクセプションを備えた出力・シリアル化可能なスタックトレース(6)分散ステンシル計算をアシストするための「Range Arithmetics」(7)Thread, Mutex, ConditionおよびJavaに類似するSystemクラス
libKnoRBA	KnoRBAエイジェント作成のためのC++ライブラリ。知識リクエスト・プロカー・アーキテクチャ又はKnoRBA(ノルバ)技術は汎用コンポーネント・モデルとして「オブジェクト」の代わりに「エイジェント」が使う世界初の分散システム開発プラットフォーム。高度な抽象化レベルでの自律性、ポータビリティ、柔軟性、拡張性、および安定性の提供を目的としている。このライブラリで作成したエイジェントはKnoRBA Agent Runtime Environment (ARE)を使用し、クラスターや他の分散システムでの実行が可能。
ソフトウェア技術チーム	
K-scope	Fortran向けプログラム解析ツール。本ツールを用いることでコードの全体把握が容易となる。(本ソフトは「京」上ではなくユーザの端末上で動作する。)
システム運転技術チーム	
Kを待ちわびて	ジョブが実行されるまでの予想待ち時間を計算、表示するツール群。