

平成25年度予算額 : 7,499百万円
 (平成24年度予算額 : 7,501百万円)
 ※SPring-8分の利用促進交付金を含む

X線自由電子レーザー施設(SACLA)の整備・共用

- SACLAは、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・分析できる世界最高性能の研究基盤施設。
- 国家基幹技術として平成18年度より整備を開始、24年3月に共用開始。
- 平成25年度は、幅広い研究者等への最大限の供用を図り、重点戦略課題を推進するとともに、研究環境の充実を図る。



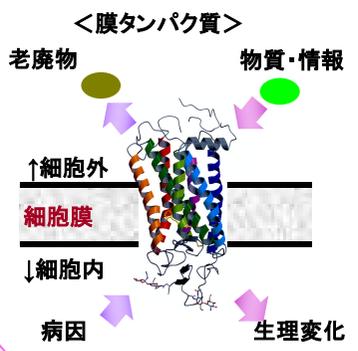
兵庫県
播磨科学公園都市

- **SACLAの最大限の共用運転を実施** 4,901百万円 (4,821百万円)
 ・施設の運転・維持管理等に必要な経費
- **SACLAの情報通信基盤の整備** 230百万円 (270百万円)
 ・SACLA情報通信基盤(スパコン「京」との連携)の整備
- **特定放射光施設(SPring-8・SACLA)の利用促進(※)** 1,368百万円 (1,410百万円)
 ・利用促進(利用者選定・利用支援)に必要な経費
 (※)SPring-8及びSACLAの利用促進業務を一体化・効率化して実施
- **SACLA重点戦略課題の実施による先導的な成果創出** 1,000百万円 (1,000百万円)
 ・SACLA重点戦略課題の推進に係る研究費

◆ X線自由電子レーザーの特徴

- 【短波長】** 硬X線
 → 原子レベルでの解析が可能
- 【短パルス】** フェムト秒パルス
 → 化学反応等の極めて早い動きの解析が可能
- 【質の良い光】** 干渉性
 → 試料を調製(結晶化など)せずとも生きたままで解析が可能

【重点戦略分野】～ 生体分子の階層構造ダイナミクス～

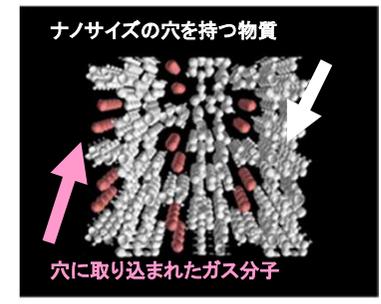


医療、創薬に極めて有用であるが、脂質(階層構造の細胞膜)が結合しており、結晶化が極めて困難

SACLAにより、結晶化を経ることなく構造解析が可能に。
 → 疾病に多く関連するとされる膜タンパク質の構造解析により、医薬品開発への貢献に期待

【重点戦略分野】～ ピコ・フェムト秒(※)ダイナミクスイメージング～

※1兆～1000兆分の1秒

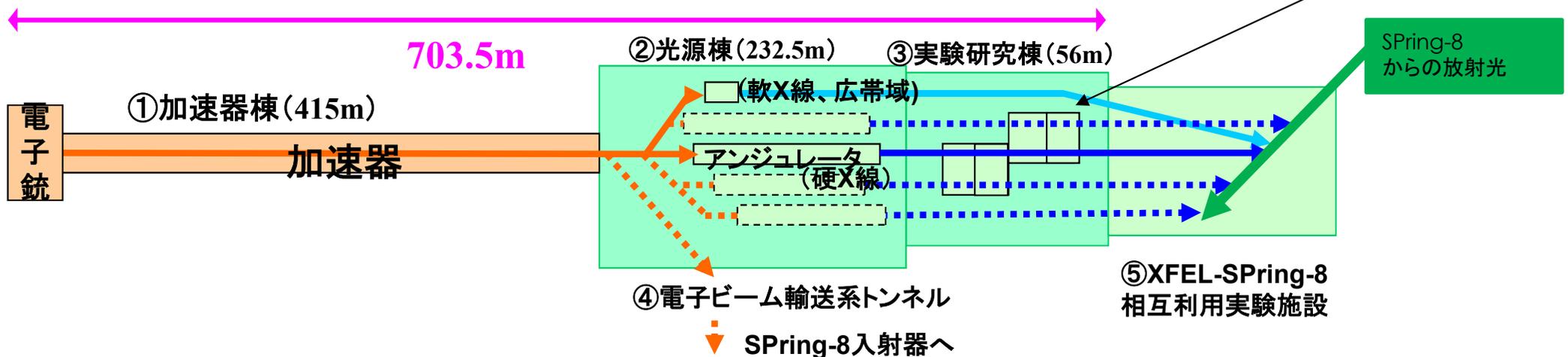


特定分子を取り込む新素材の開発では、細孔にガス分子が吸着される際の分子レベルのメカニズムが不明

SACLAにより、分子の超高速動態・変化の解析が可能に。
 → メタンなどの燃料捕捉・貯蔵や有害物質の除去・吸着などの機能を持つ新素材開発への貢献に期待。

X線自由電子レーザー施設「SACLA」の概要

- 従来の10億倍を上回る高輝度のX線レーザーを発振し、原子レベルの超微細構造、化学反応の超高速動態・変化を瞬時に計測・分析できる世界最高性能の研究基盤施設として、グリーンイノベーションやライフイノベーションといった成長戦略分野をはじめとする様々な分野への貢献に期待。
- 国家基幹技術として平成18年度より整備を開始。
- 供用開始：平成24年3月
- 理化学研究所が設置・運転維持管理、登録施設利用促進機関（JASRI）が課題選定及び利用者支援を実施。
- 共用施設の運用経費：約62億円／年（7,000時間運転の場合）
※但し、SPring-8分の利用促進交付金を含む
- 利用研究環境の整備（スパコン京等との連携）：約3億円（24年度）
- SACLA重点戦略課題の実施による先導的な成果創出：10億円（24年度）



利用区分、審査基準の基本的考え方について

X線自由電子レーザー利用推進計画 (H24.2.1) (抜粋)

- 「重点戦略分野」及び「重点戦略課題」を設定し、早期成果の創出と実験手法の確立・開拓を進める。
- 当面、成果非専有(公開)利用を原則とし、重点戦略課題を優先しつつ一般課題も進める。

利用区分

成果公開型 (年2回の公募)	一般課題	
	重点戦略課題 (右の2分野を指定)	<p>生体分子の階層構造ダイナミクス 膜タンパク質等の構造や、生体内の様々なダイナミクスを原子レベルで解明することで、新たな創薬技術の開発等に基づくライフイノベーションや、光合成機能の解明によるグリーンイノベーションの推進を目指す</p> <p>ピコ・フェムト秒ダイナミクスイメージング 物質・材料中の反応過程などの超高速変化について、原子レベルで可視化することにより、革新的な蓄電池や太陽電池、気体吸蔵材料の開発等を促進し、グリーンイノベーションをはじめ、様々な分野での革新的な成果創出を目指す。</p>

審査基準

審査基準	成果非専有課題	
	一般課題	重点戦略課題
(1) 科学技術的妥当性として、①又は②に該当 ①最先端の科学技術的価値(斬新性、革新性)を有する、又はSACLAの新たな可能性の開拓に貢献するとともに、(イ)、(ロ)のいずれかに該当 (イ)学術的な貢献度が高い、(ロ)産業利用の推進に貢献する ②重要な社会的意義を有する又は社会経済へ寄与する	○	○
(2) 研究手段としてSACLAの必要性	○	○
(3) 科学技術基本法や社会通念等に照らして課題実施の妥当性	○	○
(4) 実験内容の技術的な実施可能性	○	○
(5) 実験内容の安全性	○	○
(6) 課題解決に向けた筋道の明確性について重視	—	○

※ 配分可能ビームタイムが利用研究課題の実施に必要なビームタイムを下回る場合、ビームタイム配分可否境界上の重点戦略課題及び一般課題において、選定に際し同等の評価を得た課題については、重点戦略課題の重要性に鑑み、その課題を優先する。

文部科学省委託事業「SACLA重点戦略課題の推進による先導的な成果創出」について

○ 事業の概要

- ・ 第三期科学技術基本計画において国家基幹技術として整備されたSACLAについて、その性能を最大限発揮できる利用技術・装置を確立し、世界に先駆けて先導的な成果を創出することが重要。
- ・ そのため、ライフ・グリーンイノベーション等の実現に向けXFEL利用推進戦略会議が設定した「重点戦略課題」について、研究機関や大学等が一体となったチームを編成し、重点的かつ強力に利用研究を開拓・推進する。

○ 実施体制（下記の2つの体制で実施）

- ・ 「大型利用研究推進プログラム」
大型の研究テーマのもとに、複数の機関の研究者が大規模な実施体制を組んで新規の装置開発や解析手法等の開発を含め強力に利用研究を推進。
- ・ 「個別利用研究推進プログラム」
革新的な利用研究から早期に成果を創出することを目指して、一つの研究機関又は複数の研究機関からなるチームが既存装置や既開発された手法を活用して研究を推進。

利用成果の取扱いの基本的考え方（SPring-8と同様）

○ 利用成果は公開

原則として3年以内に課題番号が明記されている査読付論文※を提出。

○ 特許出願、事業化等のための公開延期は認めない。

※論文等の発表に至らなかった課題の場合、利用研究成果集に掲載するレポートを提出し、JASRIが設置する成果審査委員会の査読審査により適切との評価を受け承認され、WEBへ公開されるという手続きを踏めば、成果公開の扱いとなる。また、企業については、所属機関等で独自に査読編集される公開技術報告書の情報量・信頼性・完成度等が成果審査委員会で認められれば、当該報告書の提出により成果公開の扱いとすることが可能。

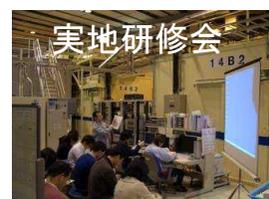
利用者への技術的支援について



個別の実験に応じた利用実験技術支援を実施。



取得された生データについて、適切なデータ処理等の技術支援を実施。



利用研究技術相談(利用目的に応じたBL、手法、装置、条件、試料形態等のアドバイス、スタッフ間での打合せ検討)に対応。



採択された課題について、実施の事前相談、および利用実験のための準備調整に対応。

※写真はイメージ

利用開始前

利用時

利用後

○JASRIにおいて「XFEL研究推進室」を設置し、SACLA専門の支援体制を構築。理研と協力しつつ、幅広く柔軟な支援を実施。

他施設との連携状況について

- SPring-8との相互利用を実施するための枠組みを今後検討する。
- 国内の他施設との利用システムについて、明確な連携・統一化は図っていない。
- ただし、SACLAについては、京との相互利用によるデータ解析が必要となる課題も今後予想されることから、登録機関間で連携を図り、相互利用の枠組みを構築することを検討する。

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) の構築

平成25年度予算額 : 16,416百万円
 (平成24年度予算額 : 19,941百万円)

事業概要

今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるため、スーパーコンピュータ「京」を中核とし、多様な利用者のニーズに応える革新的な計算環境(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)を構築するとともに、この利用を推進し、地震・津波の被害軽減や、グリーン・ライフイノベーション等に貢献。

(1) HPC(ハイパフォーマンス・コンピューティング)基盤の運用 13,802百万円 (16,866百万円)

(i) 「京」の運営 11,484百万円 (15,009百万円) ※H24年度は開発に係る経費含む

(内訳) ・「京」の運用等経費 10,587百万円 (9,653百万円)
 ・特定高速電子計算機施設利用促進897百万円 (897百万円)

我が国の高性能計算環境の中核となるスーパーコンピュータ「京」の運用を着実にすすめる。

(ii) HPCIの運営 2,318百万円 (1,856百万円)

多様な利用者のニーズに応じ、我が国の計算資源を最適に活用するとともに、データの共有や共同分析などを可能とするための研究基盤を構築する。平成25年度は、平成24年9月28日に共用開始したHPCIのシステムの着実な運用を行う。また、将来のHPCIのシステムのあり方の調査研究を行う。

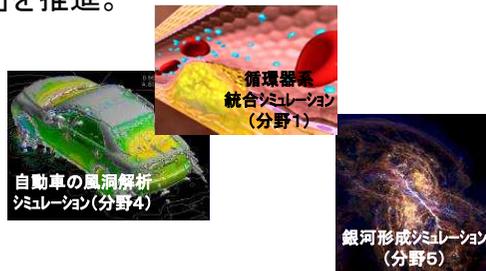
(2) HPCI利用の推進 2,614百万円 (3,075百万円)

(i) HPCI戦略プログラム 2,614百万円 (3,075百万円)

「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最先端計算科学技術研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に下記の戦略分野における「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進。

<戦略分野>

- 分野1: 予測する生命科学・医療および創薬基盤
- 分野2: 新物質・エネルギー創成
- 分野3: 防災・減災に資する地球変動予測
- 分野4: 次世代ものづくり
- 分野5: 物質と宇宙の起源と構造



○スーパーコンピュータ「京」の概要

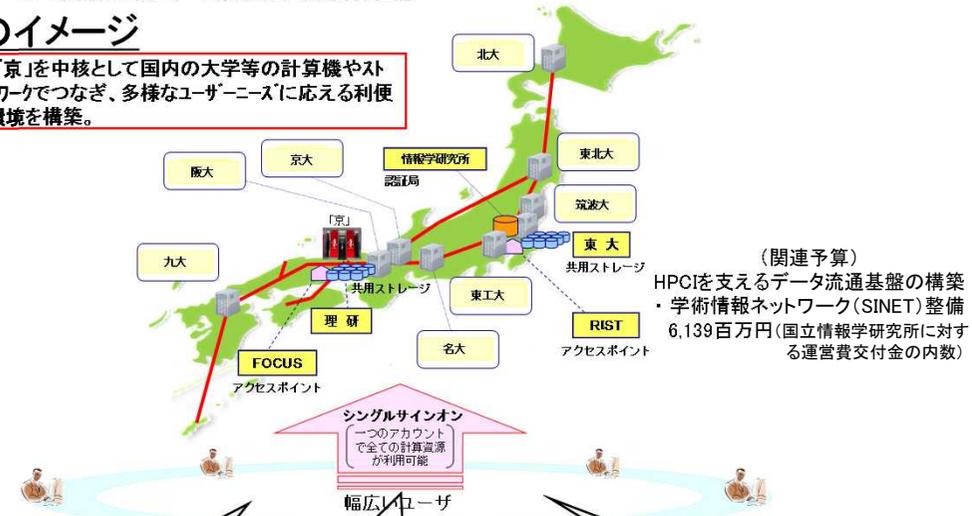
- ◆平成23年11月に性能目標のLINPACK 10ペタフロップス※達成。平成24年6月システム完成。
- ◆平成23年6月、11月と連続で世界スパコン性能ランキング(TOP500)において1位を獲得。
- ◆平成24年9月28日に共用開始。

※ 10ペタフロップス: 1秒間に1京回 (=10,000兆回) の計算性能



○HPCIのイメージ

スーパーコンピュータ「京」を中核として国内の大学等の計算機やストレージを高速ネットワークでつなぎ、多様なユーザーニーズに応える利便性の高い利用環境を構築。

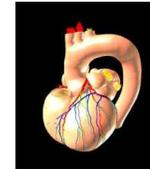


(関連予算)
 HPCIを支えるデータ流通基盤の構築・学術情報ネットワーク(SINET)整備 6,139百万円(国立情報学研究所に対する運営費交付金の内訳)

最先端の計算環境を利用し、重要課題に対応

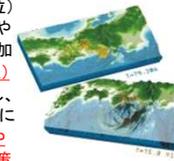
心臓シミュレーション

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



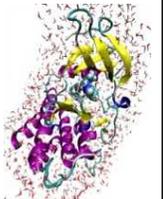
シミュレーションによる地震津波の被害予測

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



シミュレーションによる創薬開発

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**)し画期的な新薬の開発に貢献



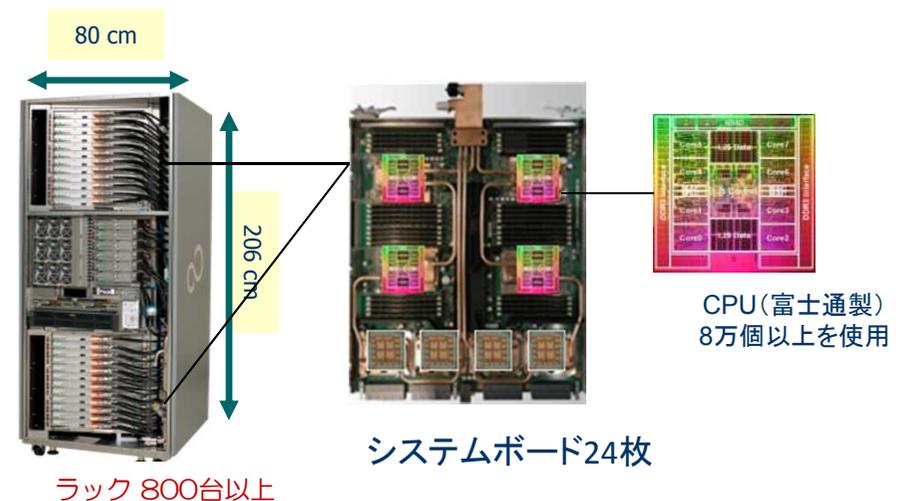
スーパーコンピュータ「京(けい)」について

<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**
- ◆これまでに産業利用34件を含む合計100件の課題が採択されている。(平成25年5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

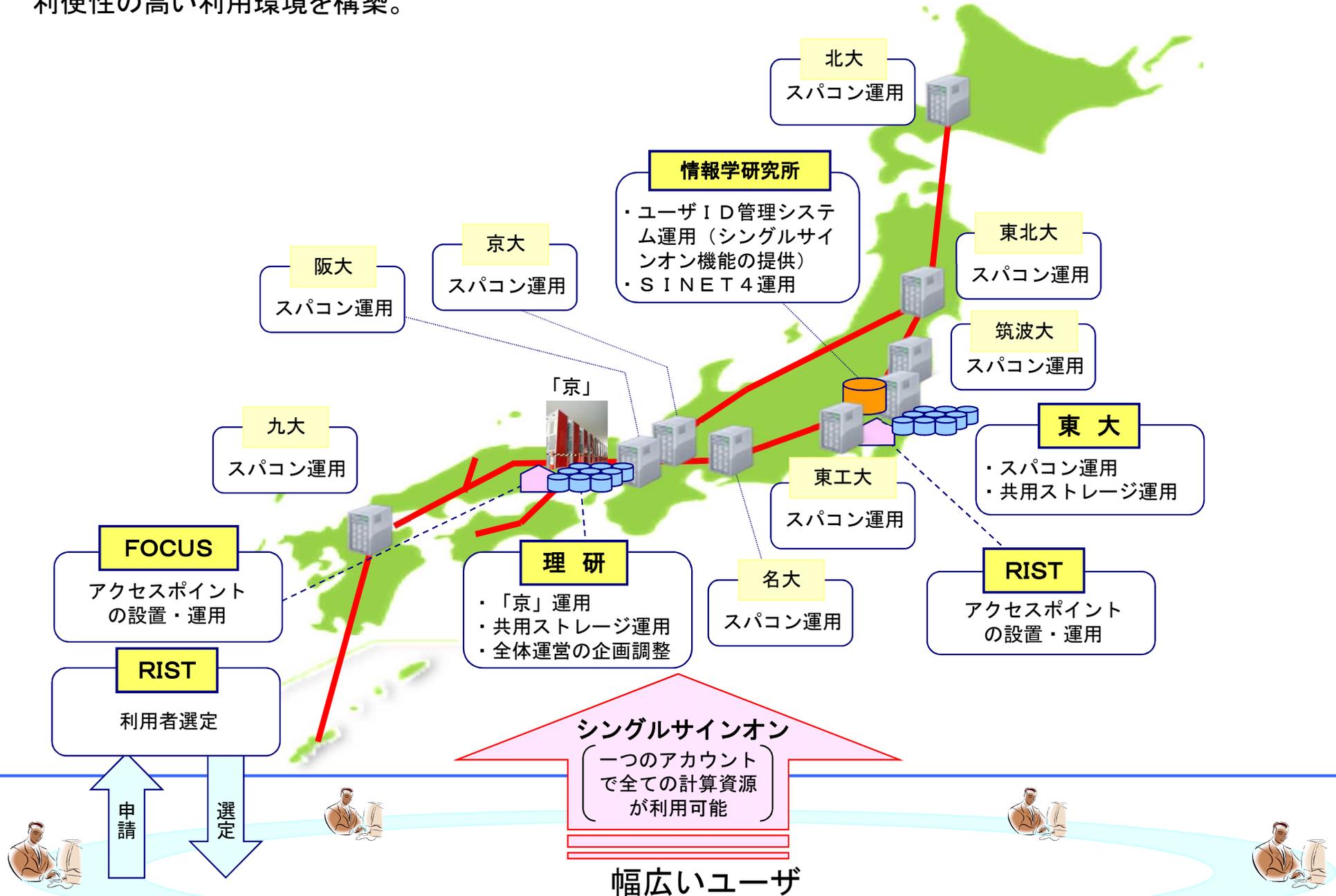
<特徴>

- ◆「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**



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。



一般社団法人HPCIコンソーシアムの概要

<経緯>

○平成22年7月、HPCI準備段階コンソーシアム発足。HPCIの構築・運用とコンソーシアムの形成に向け検討。平成24年1月30日に最終報告をとりまとめ、法人発足に向け準備開始。

○平成24年4月2日、一般社団法人化。同年6月6日第1回社員総会を開催。

<理念>

○計算科学技術に関わる全ての者(計算科学技術関連コミュニティ)に開かれたものであること

<活動内容>

○計算科学技術に関わるコミュニティの幅広い意見集約の場として、HPCIシステムの整備・運用方針や我が国の計算科学技術の振興策並びに将来のスーパーコンピューティング等について検討し、国や関係機関に提言すること。

【理事長】 宇川 彰(筑波大学 副学長・理事) 【副理事長】 藤井 孝藏(一般社団法人日本流体力学会)

ユーザコミュニティ代表機関(14機関)

【HPCI戦略プログラム】

柳田 敏雄 分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」
常行 真司 分野2「新物質・エネルギー創成」
今脇 資郎 分野3「防災・減災に資する地球変動予測」
加藤 千幸 分野4「次世代ものづくり」
青木 慎也 分野5「物質と宇宙の起源と構造」

【国公立大学・国立大学附置研究所・大学共同利用機関法人】

武田 廣 神戸大学
堀内 利得 自然科学研究機構核融合科学研究所
松見 豊 名古屋大学 太陽地球環境研究所

【独立行政法人】

高木 亮治 独立行政法人宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所

【上記以外の機関】

安井 宏 公益財団法人計算科学振興財団
下條 真司 特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西
藤井 孝藏 一般社団法人日本流体力学会
高木 周 “
笠 俊司 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
沢田 龍作 一般社団法人 日本計算工学会

アソシエイト会員(13機関)

【国公立大学・国立大学附置研究所・大学共同利用機関法人】

小久保 英一郎 自然科学研究機構国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト
九後 太一 京都大学 基礎物理学研究所
太田 勲 兵庫県立大学大学院 シミュレーション学研究科

【独立行政法人】

姫野 龍太郎 独立行政法人理化学研究所 情報基盤センター
渡邊 國彦 独立行政法人海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター
谷 正行 独立行政法人日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター
潮田 資勝 独立行政法人物質・材料研究機構

【上記以外の機関】

鈴木 真二 一般社団法人日本航空宇宙学会
古川 一夫 一般社団法人 情報処理学会
村瀬 洋 一般社団法人 電子情報通信学会 情報・システムソサイエティ
加古 孝 一般社団法人日本応用数理学会
柴山 悦哉 一般社団法人日本ソフトウェア科学会
岡崎 進 分子シミュレーション研究会

HPCIシステム構成機関(20機関)

【国立大学情報基盤センター等】

高井 昌彰 北海道大学 情報基盤センター
宇川 彰 東北大学 サイバーサイエンスセンター
梅村 雅之 筑波大学 計算科学研究センター

石川 裕 “
佐伯 元司 東京大学 情報基盤センター
伊藤 義人 東京工業大学 学術国際情報センター
中島 浩 名古屋大学 情報基盤センター
西尾 章治郎 京都大学 学術情報メディアセンター
青柳 睦 大阪大学 サイバーメディアセンター
九州大学 情報基盤研究開発センター

【国公立大学・国立大学附置研究所・大学共同利用機関法人】

保坂 淳 大阪大学 核物理研究センター
新家 泰弘 東京大学 物性研究所
中野 純司 東北大学 金属材料研究所
斉藤 真司 情報・システム研究機構 統計数理研究所
金子 敏明 自然科学研究機構分子科学研究所 計算科学研究センター
喜連川 優 高エネルギー加速器研究機構 共通基盤研究施設・計算科学センター
独立行政法人 情報・システム研究機構 国立情報学研究所

【独立行政法人】

平尾 公彦 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構
米澤 明憲 “
関口 智嗣 独立行政法人産業技術総合研究所 情報技術研究部門
藤田 直行 独立行政法人宇宙航空研究開発機構 情報計算工学センター

【上記以外の機関】

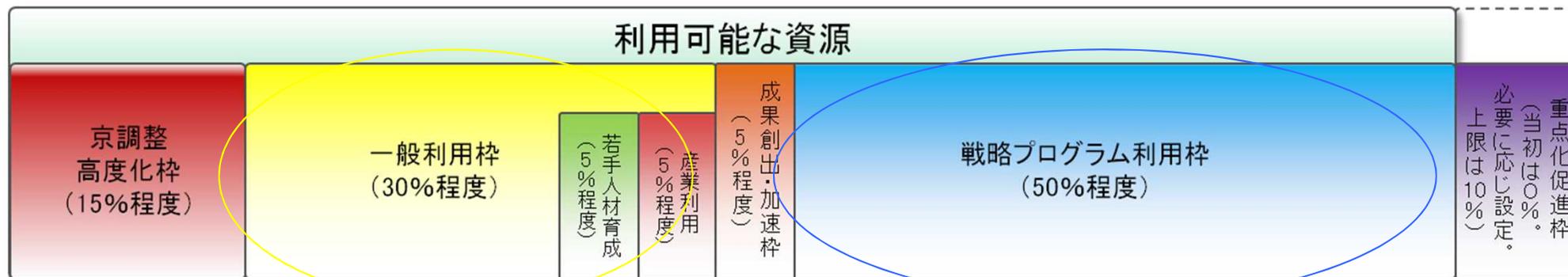
中村 壽 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

47機関(平成25年5月27日現在)
※機関数で記載。

「京」の利用状況について

＜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。

○実施されている課題数(計71課題)

一般課題:29課題

産業利用:34課題(※)

若手人材:8課題

※このうちトライアルユースとして12課題選定(H25.5.28現在)

＜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。

○実施されている課題数(計29課題)

分野1(医療・創薬):5課題

分野2(物質材料):8課題

分野3(防災・減災):5課題

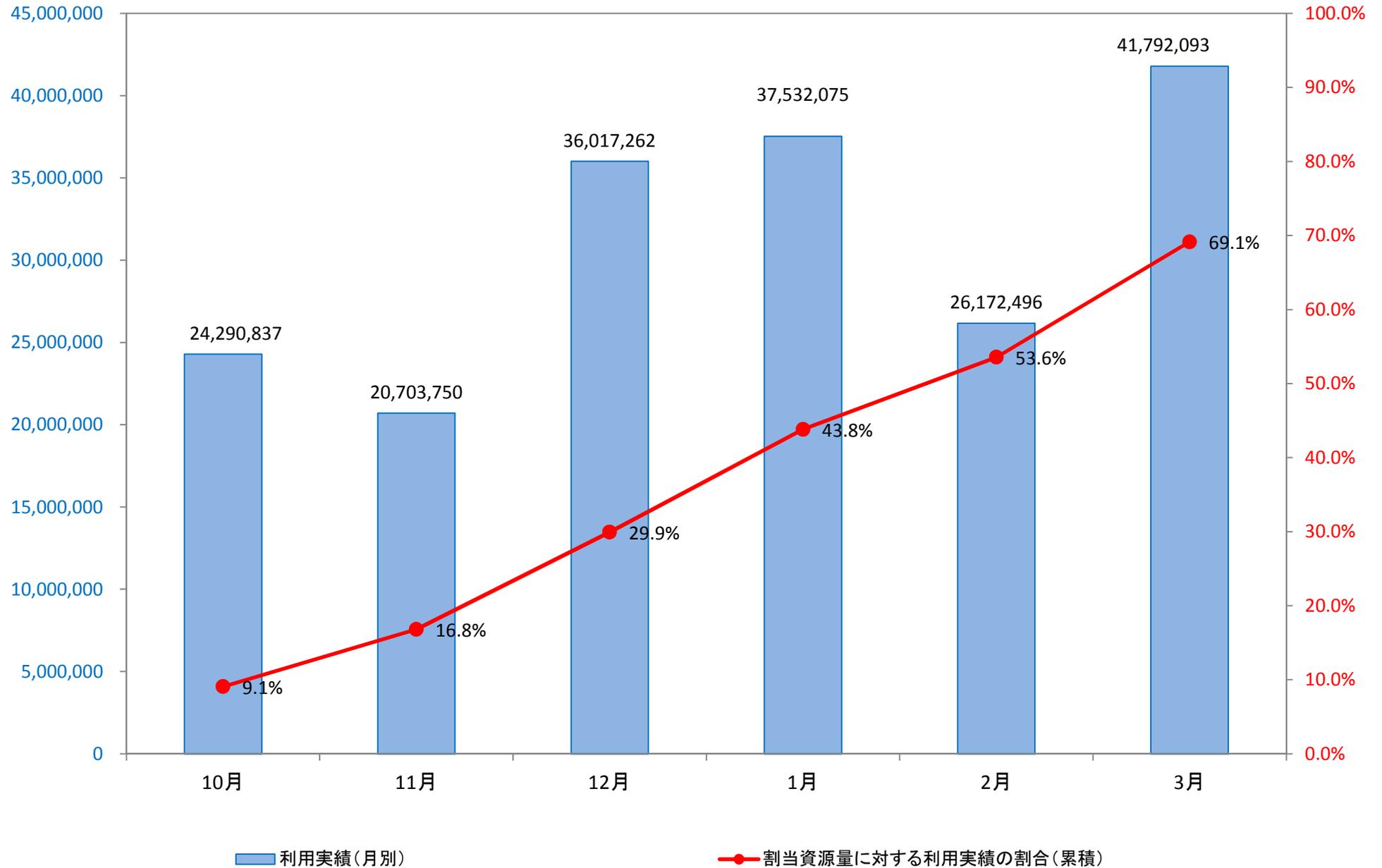
分野4(次世代ものづくり):6課題

分野5(物質と宇宙の起源):5課題

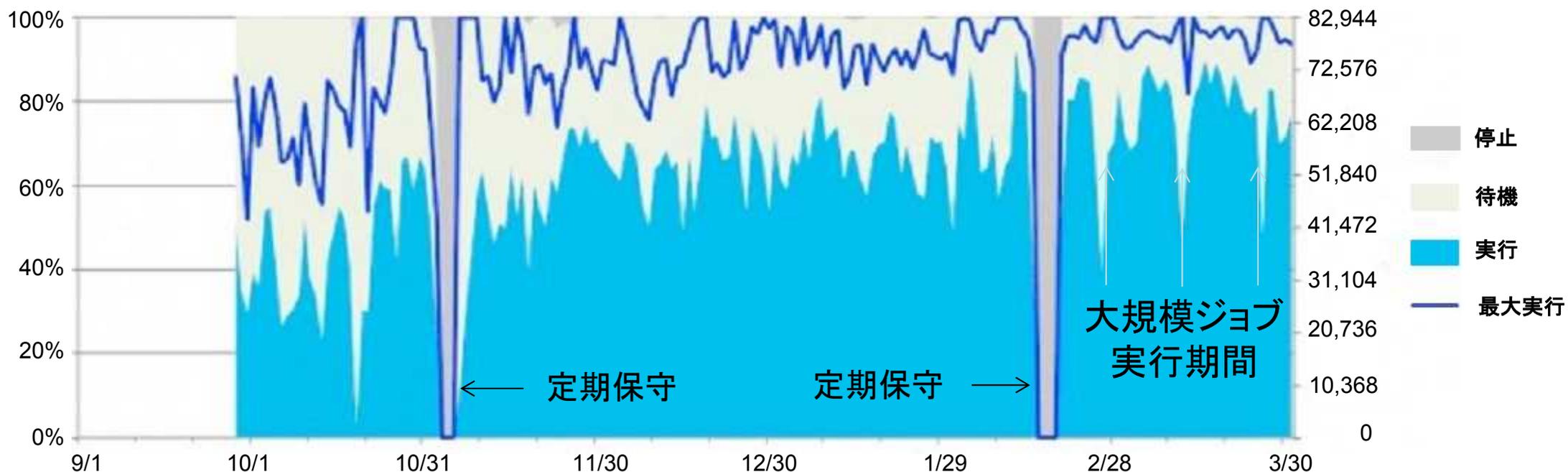
「京」の利用実績について

ノード時間

京全体システム利用実績



「京」の稼働状況(ノード使用状況)について



上のグラフは、「京」の82,944個の計算ノードの使用状況を表しています。

(「最大実行」以外は、1日単位の平均値)

「停止」... システム保守等によりシステムが停止し、ジョブが受け付けられない計算ノード数

「待機」... ジョブの受付を待っている計算ノード数

「実行」... ジョブを実行している計算ノード数

「最大実行」... ジョブを実行している計算ノード数の一日の中での最大値

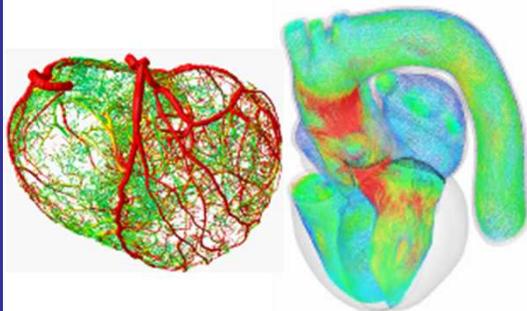
※2012年11月3～5日 電力設備の定期点検のための停電およびシステム保守のためシステムが停止しています。

※2013年2月14日12時～19日12時 定期保守のためシステムが停止しています。

「京」の主な成果事例

「京」の活用により、心臓全体を精密に再現し、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価への貢献やものづくりの設計・開発の大幅な期間短縮、コスト削減などで**画期的な成果をあげつつある。**

● 心臓病治療等への貢献 (研究代表者: 東京大学・久田俊明)

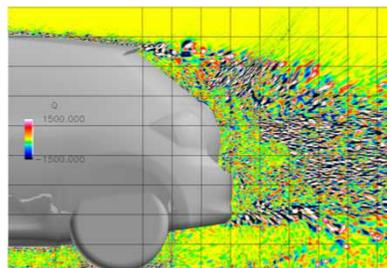


分子レベルからの
心臓まるごとシミュレーション

分子レベルから心臓全体を精密再現することにより、心臓の難病のひとつである**肥大型心筋症の病態を解明**。これにより、**治療法の検討や薬の効果の評価に貢献**。

● 製品設計の効率化への貢献

(研究代表者: 東京大学・加藤千幸)

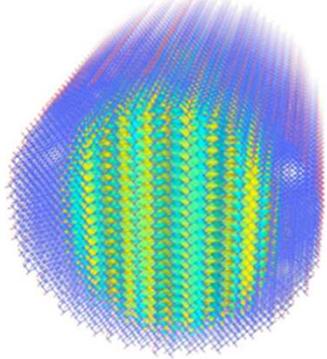


車両挙動を解明する
全乱流渦のシミュレーション

自動車などの設計に「京」を活用することにより、**風洞実験などを完全にシミュレーションで代替**。さらに、**実験では解析できない現象を、シミュレーションにより解明**。これにより、**設計の期間短縮、コスト削減に貢献**

● 次世代半導体デバイスの開発への貢献

(研究代表者: 東京大学・押山淳、岩田潤一)

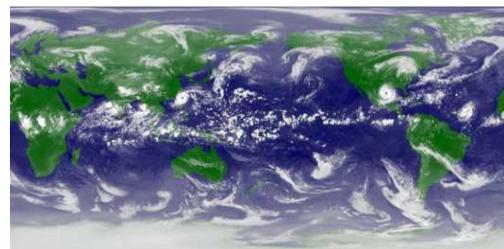


シリコン・ナノワイヤ内の
電流の通り道の解析

数万原子の精密シミュレーションにより、**次世代半導体として有望視されているシリコン・ナノワイヤ中の電子状態等をまるごと計算**。これにより、**次世代半導体の性能向上に貢献**。

● 長期の台風発生予測への貢献

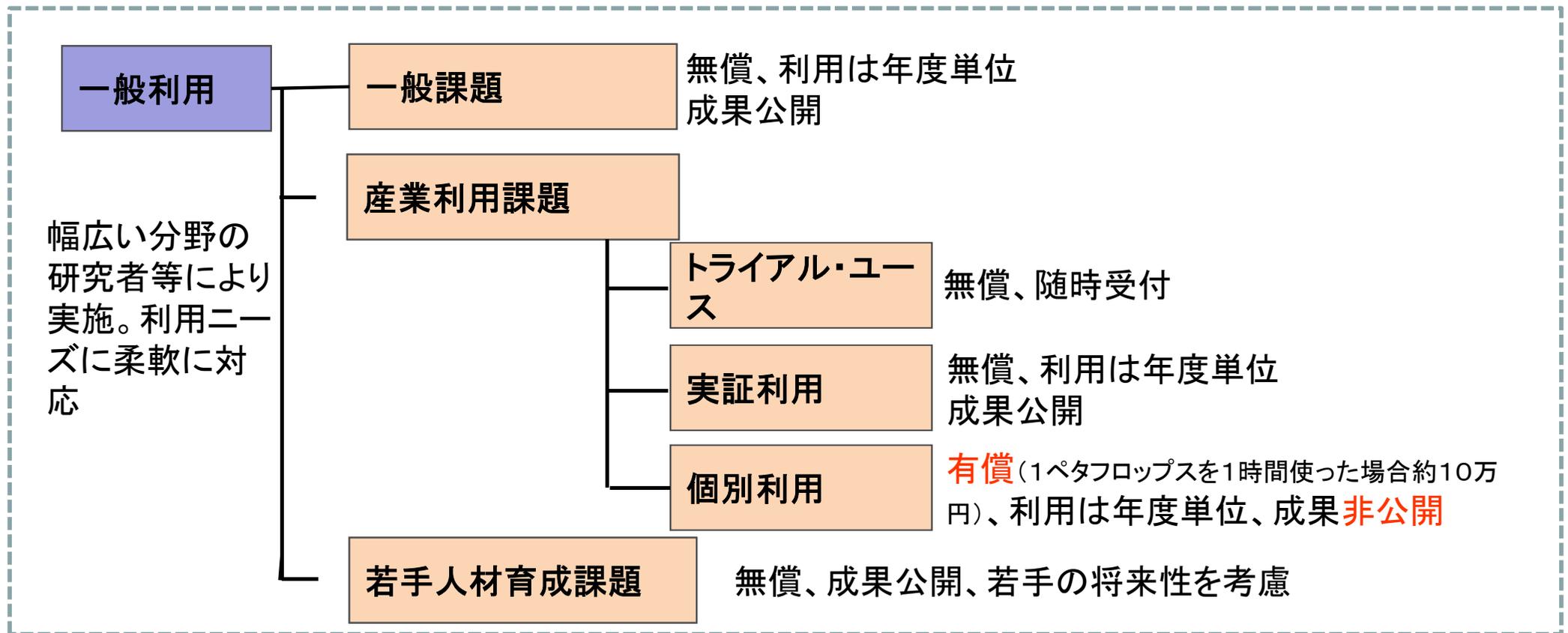
(研究代表者: JAMSTEC・時岡達志、東京大学・木本昌秀、佐藤正樹)



全球雲解像モデル
によるシミュレーション

これまで**2週間先の気象予測が限界であったところ**、雲まで解像できる世界初の高解像度の大気モデルを用いて、**約1ヶ月先の有効な予測に成功**。これにより、**長期の台風発生予測に貢献**。

「京」における利用区分、利用料の基本的考え方



※海外の利用については、国際交流推進の観点から、利用することが可能。ただし、海外の企業に所属する者については、国内の法人に所属する者との共同申請とする。

登録機関における「京」に関する利用支援

「京」の利用者

問合せ

ヘルプデスク

回答

(1) 申請前の事前相談

- 応募手続きについての相談
- 課題申請書類の記入方法についての相談
- 「京」の計算機環境(HW,SW)の問合せ



(2) 利用相談

- コンパイルエラー、実行時エラー等
- 他システムからの移行
- ライブラリ、ツール等
- 性能情報採取方法
- 実行結果不正



登録機関

(3) 技術支援

- 利用者からの高速化支援の依頼
- 重点的に支援するプログラムをピックアップ
- プログラム性能情報の採取
- ボトルネック調査(通信特性分析, インバランス評価, 単体性能評価) など
- 高速化支援



(4) 情報提供

- 一元的に各種の情報をポータルサイトで提供
- HPCIシステムの提供機関と計算機資源の一覧
- お知らせ
- 課題募集開始、説明会、講習会の案内など
- 高速化ノウハウなど



(5) 利用講習会の実施

- 利用開始後に利用講習会を適宜開催
- 利用環境, 開発環境, システムの説明
- 性能分析手法, 高速化のノウハウ

