

情報科学技術に関する 研究開発課題の評価結果

平成 25 年 4 月 17 日

研究計画・評価分科会

目次

- 情報科学技術委員会 委員名簿 1

<事後評価>

- 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用 3
- HPCI の整備 49

情報科学委員会 委員名簿

平成25年4月現在

主査	有川節夫	九州大学総長
	伊藤公平	慶應義塾大学工学部教授
	岩野和生	科学技術振興機構研究開発戦略センター上席フェロー
	宇川彰	筑波大学計算科学研究センター数理物質系教授
	碓井照子	奈良大学名誉教授
	押山淳	東京大学大学院工学系研究科教授
	笠原博徳	早稲田大学理工学術院基幹理工学部教授
主査代理	喜連川優	国立情報学研究所長、東京大学生産技術研究所教授
	國井秀子	芝浦工業大学大学院工学マネジメント研究科教授
	五條堀孝	国立遺伝学研究所副所長
	辻ゆかり	NTT情報ネットワーク総合研究所企画部担当部長
	中小路久美代	株式会社SRA先端技術研究所長
	樋口知之	統計数理研究所長
	松岡茂登	大阪大学サイバーメディアセンター教授
	宮内淑子	メディアスティック株式会社代表取締役社長
	宮地充子	北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科教授
	村岡裕明	東北大学電気通信研究所教授・センター長
	村上和彰	九州大学大学院システム情報科学研究院教授
	安浦寛人	九州大学理事・副学長
	矢野和男	株式会社日立製作所中央研究所主管研究長

敬称略、50音順

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの
開発利用」
事後評価結果

「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」の概要

1. 課題実施期間及び評価実施時期

- スーパーコンピュータ「京」の開発・整備

平成18年度～平成24年度

中間評価 平成21年7月、事後評価 平成25年3月

- 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

平成18年度～平成23年度

中間評価 平成21年1月、事後評価 平成25年1月

- 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

平成18年度～平成24年度

中間評価 平成20年10月、平成22年12月、事後評価 平成25年3月

2. 研究開発概要・目的

【平成18年4月プロジェクトスタート時】

『最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用』

＜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（平成23年6月のTOP500でランキング第1位を奪取）。

- 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。（※）

※概念設計評価作業部会における評価（平成19年6月）において、「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。

- 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。

- 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。

（文部科学省科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会情報科学技術委員会次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会（第1回・平成19年3月12日）「資料3「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」（「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト）について」より引用）

【平成21年12月HPCI計画への展開後】

『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）の中核となる次世代スーパーコンピュータの開発・整備』

<概要>

多様なユーザーニーズに応えるとともに全てのユーザーに開かれた革新的な計算環境を実現するため、①次世代スーパーコンピュータ（愛称：京（けい））の開発・整備、②次世代スーパーコンピュータと国内のスーパーコンピュータをネットワークでつなぎデータの共有や共同分析を可能とする「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）」を構築・運用するとともに、この利用を推進する。

<プロジェクト目標>

- ① 平成24年6月までにLinpackで10ペタFLOPSを達成する次世代スーパーコンピュータを開発する
- ② HPCIを用いた画期的な研究成果の創出を図る
- ③ 次世代スーパーコンピュータ施設及び計算科学技術を先導する主要分野の中核的な機関において研究教育拠点を整備し、連携体制を構築する

（文部科学省科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会情報科学技術委員会（第68回・平成22年8月20日）「資料2-1：「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築」に係る平成23年度概算要求に向けた事前評価用参考資料」より引用）

3. 研究開発の必要性等

（1）次世代スーパーコンピュータ開発について

次世代スーパーコンピュータは、我が国の研究力・競争力強化に資するとともに、多様な分野で社会に貢献する研究成果をあげること、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・強化するためにも必要であり、第3期科学技術基本計画において我が国として開発すべき「国家基幹技術」に位置付けられている。国として着実な開発が必要である。

（2）グランドチャレンジアプリケーション開発について

ナノテクノロジー分野においては、ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性を解明するシミュレーション技術確立し、飛躍知の発見・発明にとどまらず、産業力の強化をもたらすことが求められている。また、ライフサイエンス分野においては、その複雑さゆえに基礎方程式から出発して計算で到達できる範囲でこれまで生命現象を計測できていなかったが、次世代スーパーコンピュータの開発や計測技術の進歩によって、これらの問題

が解決されるのではないかという期待が高まっている。これらを実現するために、ペタフロップス規模の次世代スーパーコンピュータの性能を最大限に発揮することを目標とした、超並列処理を効率よく利用することを可能とする計算科学の新しいアルゴリズム開発や方法論の開発が必要である。

(3) 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) 形成について

人材育成の観点では、ハードウェア開発者やアプリケーションソフトウェア開発者のみに留まらず、ハードウェアの高度な知識を持ち、アプリケーションソフトウェアをハードウェアに最適化させ、ハードウェアの性能を十分に使いこなすことが可能な人材が必要である。また、産業界においては計算科学技術を適切に利用して、革新性・信頼性のあるものづくりに応用することが可能な人材が求められている。これらの人材を育成するため、各地に散在しているハードウェア研究開発者、ソフトウェア研究開発者、計算機利用者などの人的資源を結集して、次世代スーパーコンピュータを中核にした計算科学技術分野における拠点 (COE) を形成することが必要である。

4. 予算の変遷

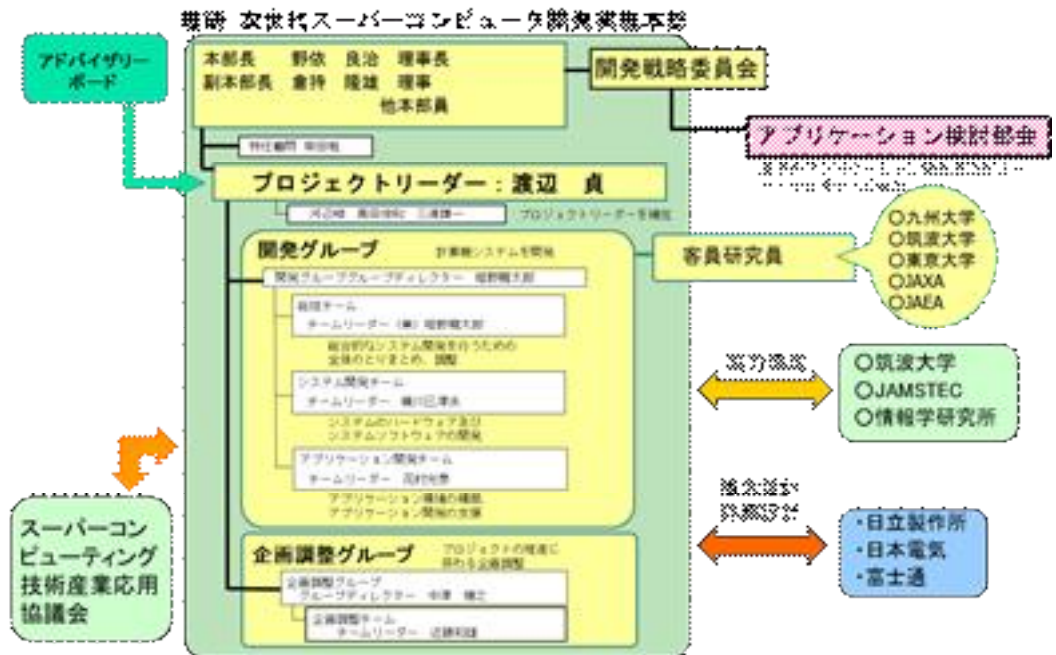
年度	H18 (初年度)	H19	H20	H21	H22	H23	H24	総額
予算額	35億	120億	200億	190億	397億	119億	50億	1,111億
(内訳)	「京」12億 施設1億 グランドチャレンジ22億	「京」53億 施設34億 グランドチャレンジ32億	「京」111億 施設67億 グランドチャレンジ22億	「京」110億 施設61億 グランドチャレンジ19億	「京」353億 施設29億 グランドチャレンジ15億	「京」110億 — グランドチャレンジ10億	「京」45億 — グランドチャレンジ6億	「京」793億 施設193億 グランドチャレンジ126億

※四捨五入のため合計額が一致しない場合がある。

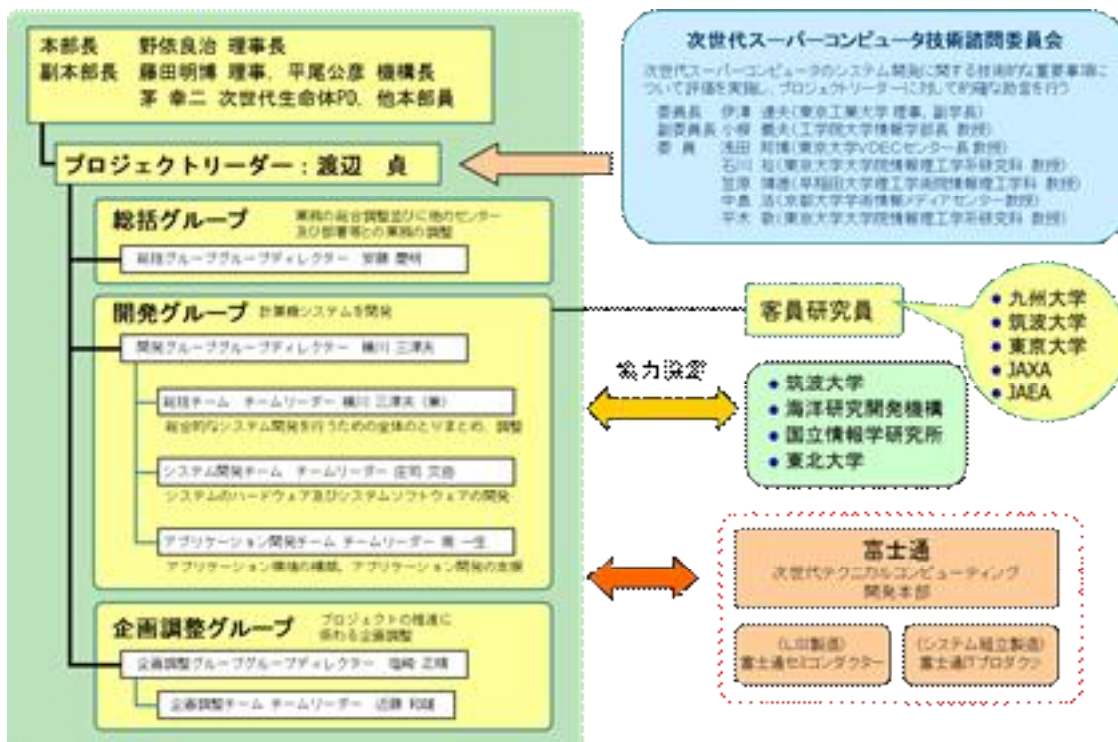
5. 課題実施機関・体制

<スーパーコンピュータ「京」の開発・整備>

○中間評価以前の体制



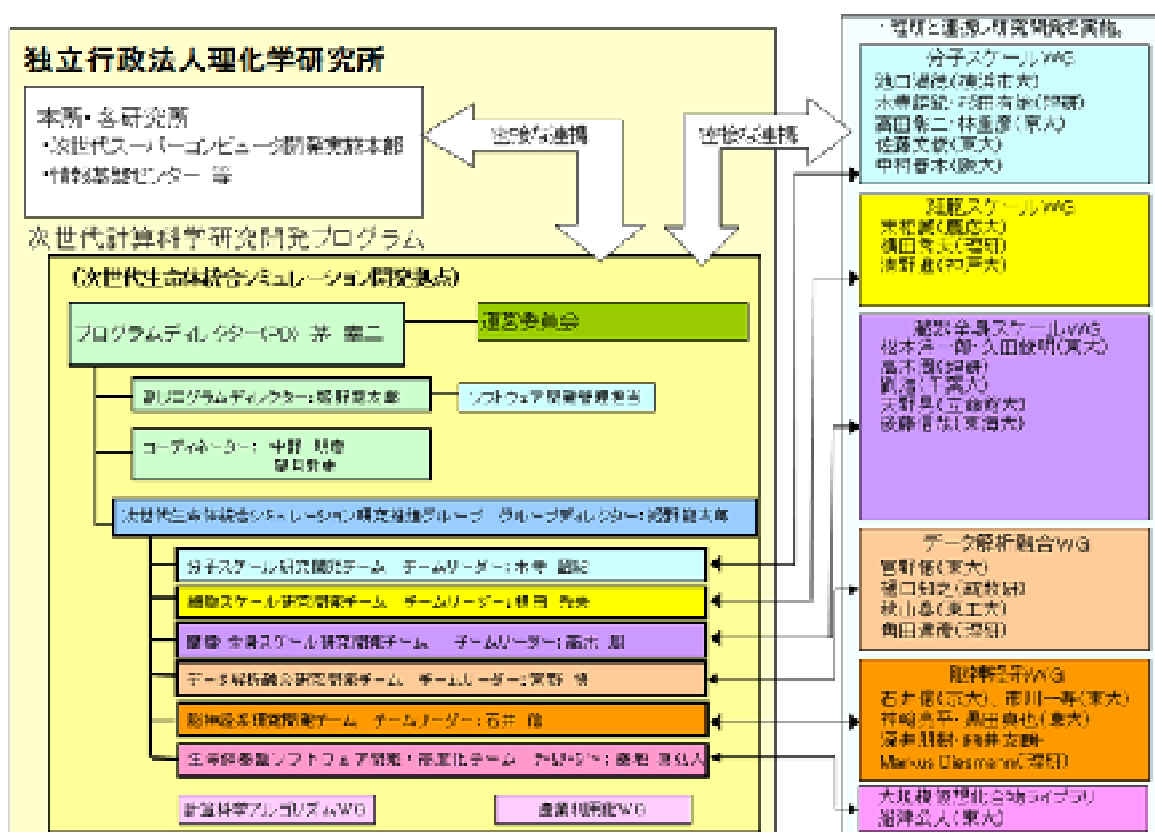
○中間評価以降の体制（平成 21 年 9 月～平成 24 年 6 月）



<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		性能チューニング	Linpack 10PFLOPS達成 (目標: H24年8月—実績: H23年11月) 平成24年9月末共用開始 合計 793億円	
	<システム開発総費小計> 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	建設 61億	29億	完成		合計 193億円	
「京」ソフトウェア (システム・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 <small>(H23-24年度のソフトウェア開発費は、HPCI領域以外も含む)</small>
費用	35億	120億	300億	190億	387億	118億	50億	1,111億円	
「京」の運用開始					14億	65億	97億		
「京」の利用者選定・利用支援							9億	共同基に基づく整備費が実額。	
HPCIの構築					HPCIシステム基本設計・詳細設計/ 整備・検証			※日本東部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 300億円	H21予算 190億円	H22予算(追加): 228億 H23予算 118億円		H24予算 50億円		

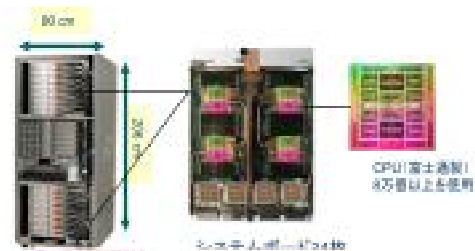
スーパーコンピュータ「京(けい)」について

<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8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



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 〔次世代生命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、製薬・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(HP-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・高機能、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>高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト(MODYLAS) ウイルスとセプタや抗体の特異な相互作用の解析を、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、新薬の効率化に貢献する。</p> 	<p>多剤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/Platyus/CafeMol) 多剤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)での解析を可能とし、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・マルチフィジックス心臓シミュレーション(LIT-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(例えば電能タンパクの異常)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	理化学研究所を中核に、東京大学医科学研究所、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

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

機構長	
副機構長	
運用技術部門	施設運転技術チーム
	システム運託技術チーム
	ソフトウェア技術チーム
	HPDCシステム技術チーム
研究部門	システムソフトウェア研究チーム
	プログラミング環境研究チーム
	プロセス研究チーム
	大規模並列数値計算法研究チーム
	利用高度化研究チーム
	連続系場の理論研究チーム
	離散事象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
	量子系シミュレータ研究チーム
	複合系気候科学研究チーム
	核融合プラズマ物理研究チーム
	プログラム構成システム研究チーム
	可視化技術研究チーム
データ同化研究チーム	
平易計算化学研究ユニット	
統合数値・運託研究ユニット	
計算構造生物学研究ユニット	
事務部門	

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。

(参考資料)

各事後評価委員会における事後評価票

スーパーコンピュータ「京」事後評価委員会

ナノテクノロジー・材料科学技術委員会

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 事後評価委員会

スーパーコンピュータ「京」の開発・整備 事後評価結果

平成25年3月

スーパーコンピュータ「京」事後評価委員会

スーパーコンピュータ「京」事後評価委員会 委員

浅田 邦博 東京大学 大規模集積システム設計教育研究センター長・教授

○有川 節夫 九州大学 総長

宇川 彰 筑波大学 副学長・理事

大峯 巖 自然科学研究機構 分子科学研究所 所長

笠原 博徳 早稲田大学 理工学術院 基幹理工学部 教授

熊谷 教孝 公益財団法人 高輝度光科学研究センター 専務理事

辻 篤子 朝日新聞社 論説委員

土居 範久 慶應義塾大学 名誉教授

土井美和子 株式会社東芝 研究開発センター 首席技監

西島 和三 持田製薬株式会社 医薬開発本部 専任主事

平木 敬 東京大学大学院 情報理工学系研究科 教授

南 学 神奈川大学 人間科学部 特任教授

合計 12名
(50音順、○主査)

「スーパーコンピュータ「京」の開発・整備」の概要

1. 課題実施期間及び評価実施時期

平成18年度～平成24年度

中間評価 平成21年7月、事後評価 平成25年3月

2. 研究開発概要・目的

【平成18年4月プロジェクトスタート時】

『最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用』

＜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（平成23年6月のTOP500でランキング第1位を奪取）。

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。（※）
※概念設計評価作業部会における評価（平成19年6月）において、「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。

●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。

（文部科学省科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会情報科学技術委員会次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会（第1回・平成19年3月12日）「資料3 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」（「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト）について」より引用）

【平成21年12月HPCI計画への展開後】

『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）の中核となる次世代スーパーコンピュータの開発・整備』

<概要>

多様なユーザーニーズに応えるとともに全てのユーザーに開かれた革新的な計算環境を実現するため、①次世代スーパーコンピュータ（愛称：京（けい））の開発・整備、②次世代スーパーコンピュータと国内のスーパーコンピュータをネットワークでつなぎデータの共有や共同分析を可能とする「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）」を構築・運用するとともに、この利用を推進する。

<プロジェクト目標>

①平成24年6月までにLinpackで10ペタFLOPSを達成する次世代スーパーコンピュータを開発する

②次世代スーパーコンピュータ施設及び計算科学技術を先導する主要分野の中核的な機関において研究教育拠点を整備し、連携体制を構築する

（文部科学省科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会情報科学技術委員会（第68回・平成22年8月20日）「資料2-1：「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築」に係る平成23年度概算要求に向けた事前評価用参考資料」より引用）

3. 研究開発の必要性等

（1）次世代スーパーコンピュータ開発について

次世代スーパーコンピュータは、我が国の研究力・競争力強化に資するとともに、多様な分野で社会に貢献する研究成果をあげること、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・強化するためにも必要であり、第3期科学技術基本計画において我が国として開発すべき「国家基幹技術」に位置付けられている。国として着実な開発が必要である。

（2）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）形成について

人材育成の観点では、ハードウェア開発者やアプリケーションソフトウェア開発者のみに留まらず、ハードウェアの高度な知識を持ち、アプリケーションソフトウェアをハードウェアに最適化させ、ハードウェアの性能を十分に使いこなすことが可能な人材が必要である。また、産業界においては計算科学技術を適切に利用して、革新性・信頼性のあるものづくりに応用することが可能な人材が求められている。これらの人材を育成するため、各地に散在しているハードウェア研究開発者、ソフトウェア研究開発者、計算機利用者などの人的資源を結集して、次世代スーパーコンピュータを中核にした計算科学技術分野における拠点（COE）を形成することが必要である。

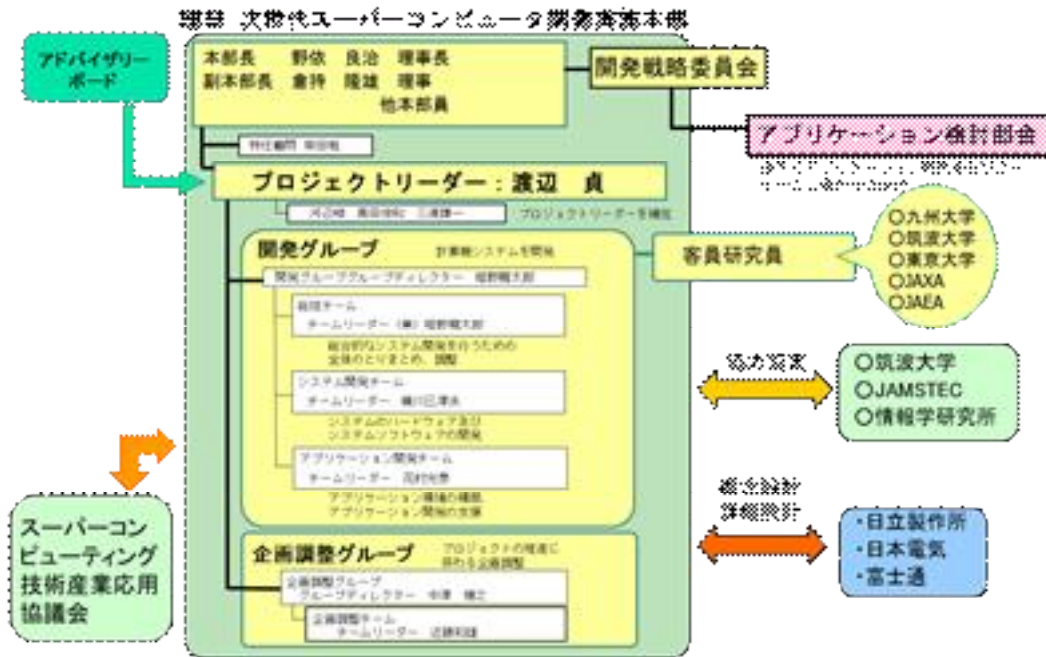
4. 予算の変遷

年度	H18 (初年度)	H19	H20	H21	H22	H23	H24	総額
予算額	13億	87億	178億	171億	382億	110億	45億	986億
(内訳)	「京」12億 施設1億	「京」53億 施設34億	「京」111億 施設67億	「京」110億 施設61億	「京」353億 施設29億	「京」110億 -	「京」45億 -	「京」793億 施設193億

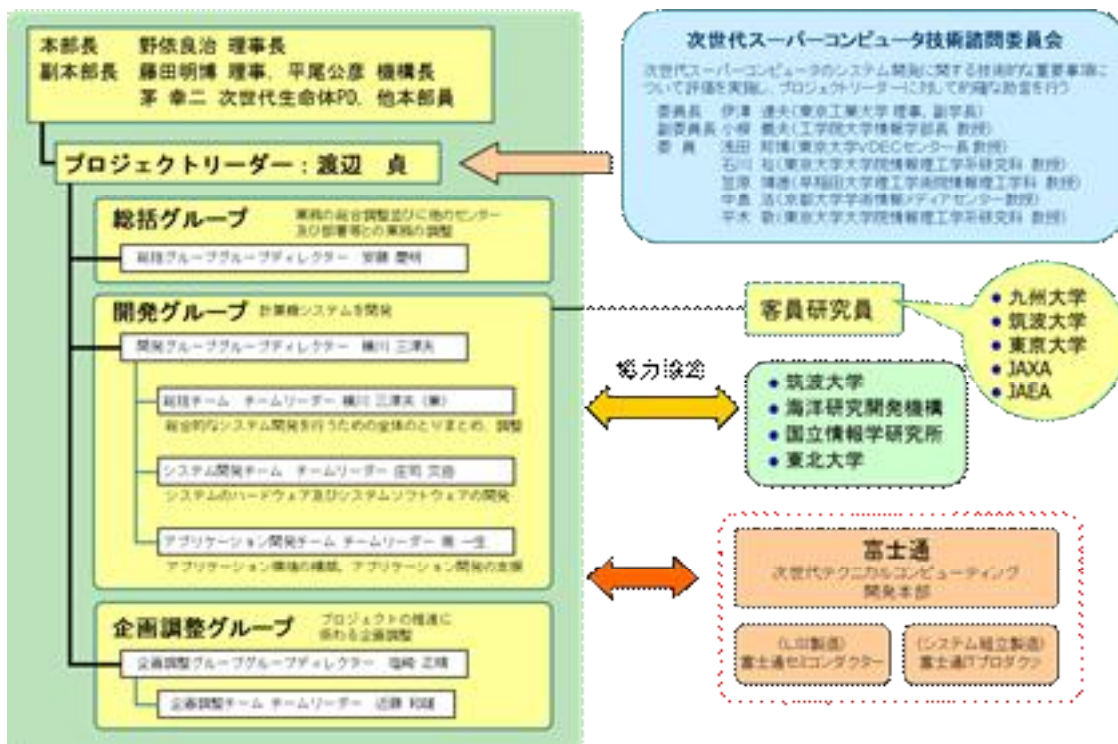
※今回の事後評価の対象ではないグランドチャレンジアプリケーション開発事業（126億円）を含めたプロジェクト総額は1,111億円。

5. 課題実施機関・体制

○中間評価以前の体制



○中間評価以降の体制（平成 21 年 9 月～平成 24 年 6 月）



事後評価票

(平成 25 年 3 月現在)

1. 課題名 スーパーコンピュータ「京」の開発・整備

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。

○研究開発体制

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。

(2) 成果

○研究開発成果

「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。

○研究開発成果の利活用

「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。

○人材育成

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。

(3) 今後の展望

(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。

研究開発課題の事後評価結果

【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】

平年 25 年 1 月

ナノテクノロジー・材料科学技術委員会

ナノテクノロジー・材料科学技術委員会 委員名簿

伊丹 敬之	東京理科大学大学院イノベーション研究科教授
射場 英紀	トヨタ自動車株式会社電池研究部長
潮田 浩作	新日本製鐵株式会社技術開発本部フェロー
大林 元太郎	東レ株式会社研究本部顧問
岡野 光夫	東京女子医科大学先端生命医科学研究所長・教授
長我部信行	株式会社日立製作所中央研究所長
片岡 一則	東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻教授
◎ 川合 知二	大阪大学産業科学研究所特任教授
北川 進	京都大学物質-細胞統合システム拠点副拠点長
栗原 和枝	東北大学原子分子材料科学高等研究機構教授
小池 康博	慶應大学理工学部教授
小長井 誠	東京工業大学大学院理工学研究科電子物理工学専攻教授
小林 昭子	日本大学文理学部化学科教授
○ 榑 裕之	豊田工業大学学長
袖岡 幹子	独立行政法人理化学研究所基幹研究所主任研究員
曾根 純一	独立行政法人物質・材料研究機構理事
田中 一宜	独立行政法人科学技術振興機構研究開発戦略センター上席フェロー
中村 栄一	東京大学大学院理学系研究科化学専攻教授
橋本 和仁	東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻教授
松下 祥子	東京工業大学大学院理工学研究科准教授

(◎主査、○主査代理)

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に係る

事後評価検討会 構成員名簿

○ 魚崎 浩平	(独) 物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス拠点 コーディネータ
栗原 和枝	東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授
小池 康博	慶應義塾大学 理工学部 教授
◎ 榑 裕之	豊田工業大学 学長
志賀 昭信	ルモックス技研 主宰
高尾 正敏	大阪大学 特任教授
塚田 捷	東北大学 特任教授
樋渡 保秋	金沢大学 名誉教授

(◎主査、○主査代理)

「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」の概要

1. 課題実施期間及び評価時期

平成18年度～平成23年度

(中間評価:平成20年度に実施)

2. 研究開発概要・目的

ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性について、ペタフロップス超級最先端・高性能汎用スーパーコンピュータを利用することにより解析、予測することが可能となる計算科学理論・方法論を確立するとともに、そのためのソフトウェアの開発を行う。これにより、ナノテクノロジー・材料分野はもとより、ライフサイエンス分野やエネルギー分野等との融合領域も対象とし、飛躍知の発見・発明及び産業力の強化につなげることを目的とする。

具体的には、以下の3つのグランドチャレンジアプリケーションの開発（（1）～（3））及びこれらに共通する項目（（4））に係る開発等を行う。

（1）次世代ナノ情報機能・材料

次世代情報化社会に必要とされる新たな原理による超高集積回路、光・電流等に対する超高速応答素子、更には超高密度磁気記憶素子に対する計算科学的開発基盤の確立を目指して、

- ① 超高集積デバイス、高強度情報材料等の次世代ナノ複合材料
- ② 新機能スピントロニクス材料、光スイッチ等の次世代ナノ電子材料
- ③ 超高密度磁気記録デバイス等の次世代ナノ磁性材料

等の次世代ナノ情報機能・材料について、その探索、設計を可能とする理論を構築し、実空間密度汎関数法、密度行列繰り込み群法や量子・古典モンテカルロ法を中心とした計算手法の高速化を探るとともに、シミュレーションソフトウェアの開発を行う。

（2）次世代ナノ生体物質

生命現象が示す多様な階層構造の中で、分子スケールの生体物質が携わるナノプロセスを解明し、難病の克服、創薬、ドラッグデリバリー等バイオ分野の課題解決に資するため、生体物質にかかわる計算科学のナノ基盤を確立する。このため、タンパク質、イオンチャンネル高度シミュレーション技術の確立、ウイルスの分子科学、がん細胞の細胞膜、生体物質輸送のナノプロセス、新規ナノ生体物質の創製等、次世代ナノ生体物質にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行う。

（3）次世代エネルギー

化石燃料からの脱却を目指して、アルコール燃料サイクルの確立、燃料電池、光触媒や光合成によ

る太陽エネルギーの固定、スーパーキャパシタの開発、高効率物質変換等の課題を解決するために、ペタフロップス超級スーパーコンピュータを活用する高精度・大規模量子化学計算、統計力学計算を中軸として、分子動力学法等とも連携した次世代エネルギー技術にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行う。

(4) 共通項目

次世代ナノアプリケーション連携ツール：開発された多様なアプリケーションソフトを、プログラムに変更を加えることなく任意に組み合わせ、これを容易に連携・結合し、効率的に実行するための疎結合型の連携ツールの開発を行う。

① システム運用（平成18年度～平成20年度）

平成15年度に導入された実証研究用スーパーコンピュータにグリッドミドルウェア等を導入し、グリッド環境を整備し、運用する。また、システムの効率的な運用を実現するために、ハードやソフトの構成から利用ルール等にいたるまで、実際のナノシミュレーションに即して、実運用レベルでの最適化を行う。

② 次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用（平成21年度～平成23年度）

本プロジェクトで開発されたソフトウェアを統合した次世代ナノ統合ソフトウェアの開発と管理運用を行う。

3. 研究開発の必要性等

【必要性】

ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性を解明するシミュレーション技術確立し、次世代情報機能・材料分野、次世代生体物質分野、次世代エネルギー分野、及びこれらの融合領域において、飛躍知の発見・発明にとどまらず、産業力の強化をもたらすことが求められている。その実現のために、超並列プロセッサを組み込んだペタフロップス規模の次世代スーパーコンピュータ性能をフル発揮することを目標とした、超並列処理を効率よく利用することを可能とする計算科学の新しいアルゴリズム開発や方法論の研究開発が必要である。

【有効性】

本プロジェクトは、次世代情報機能・材料分野では、超高密実装を実現するナノ電子デバイス、光スイッチ、磁気記録など、次世代生体物質分野では、ウィルスの克服、ドラッグデリバリーシステム、タンパク質制御など、次世代エネルギー分野では、バイオマスからのエタノール生成などの実現に活用できる計算科学の確立を研究開発の目標としており、これらを通じて、我が国の産業競争力や豊かな未来社会の実現に貢献するものである。

【効率性】

従来にない設計思想である超並列コンピュータに適合するソフトウェアの構築を効率的に実行するために、先行事業である超高速コンピューター網形成プロジェクトの中で実施されてきた、ナノテクノロジー分野の計算科学に資するソフトウェア開発成果を継承し、その中から最終的に六つの中核アプリケーションと、これら

と連携する38の付加機能ソフトウェアを抽出し、開発に取り組むこととしている。さらに、これらのアプリケーションを連携して運用するために二つの連携ツールの開発に取り組み、これらは全て開発完了時には公開とし、速やかに成果を社会還元する体制を構築することとしている。

4. 予算(執行額)の変遷

プロジェクト予算(執行額)額(単位:百万円)

年度	H18	H19	H20	H21	H22	H23	総額
執行額	496.0	650.5	612.7	594.0	369.5	288.0	3,010.7
内訳 (間接経費含)	分子研 東大 東北大 産総研	分子研 東大 東北大 産総研	分子研 東大 京大 東北大 名大 産総研	分子研 東大 京大 東北大 名大	分子研 東大 京大 名大	分子研 東大 京大 名大	分子研 東大 京大 東北大 名大 産総研

5. 課題実施機関・体制

研究代表者: 平田 文男

研究機関: 自然科学研究機構 分子科学研究所

業務項目	担当機関等	研究担当者
(1)次世代ナノ情報機能・材料	東京大学 物性研究所 理学系研究科 京都大学(H20~H23) 東北大学(H18~H21) 産業技術総合研究所(H18~H20)	○高山 一(H18) ○常次 宏一(H19~H20) 川島 直輝(H21~H23) ○常行 真司(H21~H23) 遠山 貴己(H20~H23) 前川 禎通(H18~H21) 寺倉 清之(H18~H20)
(2)次世代ナノ生体物質	分子科学研究所 名古屋大学(H20~H23)	平田 文男 ○岡崎 進
(3)次世代エネルギー	分子科学研究所	○平田 文男
(4)課題共通・統括管理	分子科学研究所 名古屋大学(H20~H23)	◎平田 文男 ○岡崎 進

◎課題代表者、○サブテーマ代表者

事後評価票

1. 課題名 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

2. 評価結果

(1) 課題の進捗状況

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おいて、以下のとおり、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。

① 次世代ナノ情報機能・材料

中核アプリ：「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT)」、「動的密度行列繰り込み群法 (DDMRG)」、「大規模並列量子モンテカルロ法 (ALPS/looper)」

付加機能ソフト：20本

② 次世代ナノ生体物質

中核アプリ：「高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト-Modylas-」、「高速量子化学計算ソフト(FMO/MP2)」(③との共同開発)

付加機能ソフト：6本(うち1本は、③と共通)

③ 次世代エネルギー

中核アプリ：「液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM」、「高速量子化学計算ソフト(FMO/MP2)」(②との共同開発)

付加機能ソフト：13本(うち1本は、②と共通)

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。その中で、実験研究者、企業研究者との連携については、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。

(2) 研究成果の評価と今後の研究開発の方向性

次世代コンピュータは、従来の計算機とは全く異なる超並列プロセッサであり、これを効率よく利用する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が必要とされてきた。本プロジェクトではこの課題を十分に解決して、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。

なお、現時点で完成とされているソフトウェアについても、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、開発されたソフトウェア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。

(3) 今後の展望

プロジェクトで開発されたソフトウェアをより多くの研究者が活用できるようにするためには、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、ソフトウェア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。

研究開発課題の事後評価結果

【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】

平成25年3月

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

事後評価委員会

「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」
事後評価委員会 委員名簿

青柳 睦	国立大学法人九州大学情報基盤研究開発センター センター長
甘利 俊一	独立行政法人理化学研究所脳科学総合研究センター 特別顧問
小原 雄治	大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 国立遺伝学研究所 特任教員
佐久間 一郎	国立大学法人東京大学大学院工学系研究科 教授
清水 謙多郎	国立大学法人東京大学大学院農学生命科学研究科 教授
富田 勝	学校法人慶應義塾大学先端生命科学研究所 所長 環境情報学部 教授
○長洲 毅志	エーザイ株式会社 理事

○ 主査 計 7 名（敬称略 50音順）

「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」の概要

1. 課題実施期間及び評価実施時期

平成18年度～平成24年度

中間評価（第1回）平成20年10月，（第2回）平成22年12月，

事後評価 平成25年3月

2. 研究開発概要・目的

基礎方程式に基づく解析的アプローチと大量の実験データから未知の経路と法則に迫る実験的アプローチの二つを同時に進めることで、ペタスケールという桁違いの性能を持つスーパーコンピュータの性能をフルに発揮できるソフトウェアを開発し、従来の計算機性能では不可能であった規模で計算することで、生体现象の深い理解と新たな発見を目指すと同時に、医薬品や医療機器、診断や手術方法の開発につなげることを目的とする。

具体的には、以下の六つの研究開発チーム・ワーキンググループを設置し、グランドチャレンジアプリケーションの開発等を行う。

（1）分子スケール研究開発

量子化学、全原子分子動力学、粗視化モデルの三つの階層のソフトウェアとそれらの階層を接続するソフトウェアを完成させ、これらのソフトウェアを「京」上で大規模に動作するように高度化することによって、タンパク質系のマルチスケールシミュレーションを実現する。

具体的には、以下のソフトウェア開発を行う。

- （i）密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算（ProteinDF）
- （ii）量子化学計算（Platypus-QM），量子化学計算/分子動力学計算（Platypus-QM/MM）
- （iii）ハイブリッドQM/MM反応自由エネルギー計算（Platypus-QM/MM-FE）
- （iv）全原子分子動力学計算（MARBLE）
- （v）レプリカ交換分子動力学計算インターフェイス（Platypus-REIN）
- （vi）マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法開発の基盤となるクラスライブラリ（Platypus-MM/CG）
- （vii）粗視化モデル計算（CafeMol）

（2）細胞スケール研究開発

これまでは、細胞内を均一な場と仮定した解析がなされていた細胞シミュレーション研究に対し、細胞内に存在するオルガネラなどの不均一な場を有する細胞モデルを構築し、そのモデル中において代謝や物質の移動等の現象を統一的に記述し、様々なシミュレーション機能を搭載して、細胞内の時空間シミュレーションを実現することを目標とする。

具体的には、以下のソフトウェア開発を行う。

- (i) 肝細胞シミュレータの開発
- (ii) 肝小葉シミュレータの開発と病態予測解析への応用
- (iii) 細胞シミュレーション統合プラットフォーム (RICS) の開発

(3) 臓器全身スケール研究開発

病態の予測や治療法の検討のための生体力学シミュレーションを行い、シミュレーションによる次世代型治療器の設計支援や、より低侵襲な治療法の開発支援を目標とする。

具体的には、以下のソフトウェア開発を行う。

- (i) 血栓シミュレータ (ZZ-THROM (=ZZ-EFSI + Kinetic MC+MD))
- (ii) 超音波治療シミュレータ (ZZ-HIFU)
- (iii) 心臓シミュレータ (UT-Heart)
- (iv) 全身血管網シミュレータ (ZZ-VASC)
- (v) 重粒子線シミュレータ (ZZ-DOSE)

(4) データ解析融合研究開発

ゲノムと疾患の間にあるシステムと薬剤応答を解析するソフトウェアを、ゲノムデータ解析、遺伝子ネットワーク解析、タンパク質ネットワーク解析、及びデータ同化によるシミュレーションの観点から開発し、最適な数十遺伝子規模のネットワークからゲノムワイドネットワークまで、動的・静的・パーソナルネットワークの推定することで疾患の理解と新たな知見を見いだすことを目標とする。

具体的には、以下のソフトウェア開発を行う。

- (i) 大規模遺伝子ネットワーク推定プログラム (SiGN)
- (ii) 網羅的タンパク質ドッキング解析プログラム (MEGADOCK)
- (iii) 大規模ゲノム関連解析 (ParaHaplo, EXRat, NGS analyzer)
- (iv) 生命体データ同化プログラム (LiSDAS)
- (v) データ解析融合プラットフォーム (SBiP: Systems Biology integrative Pipeline)

(5) 脳神経系研究開発

神経細胞、局所回路レベルでの情報処理、また、脳全体レベルでの入出力（刺激－運動）変換の処理及びその処理の学習を対象としたソフトウェアの研究開発を実施、具体的には下記の項目を目標とする。

具体的には、以下のソフトウェア開発・シミュレーションを行う。

- (i) 神経細胞シミュレーション (NeuroMorphoKit)
- (ii) 局所回路シミュレーション (NEST, CMDN)
- (iii) 視覚系シミュレーション (NEST)
- (iv) 昆虫嗅覚系シミュレーション (IOSSM)

(6) 生命体基盤ソフトウェア開発・高度化

本プロジェクトが完了するまでの期間、特に「京」の性能実証、及び他チームのアプリケーション

高速化への貢献に注力し、以下の目標のため、ソフトウェア開発等を行う。

- (i) 2012年のゴードンベル賞を目標に、本プロジェクトで開発するアプリケーションの中でも第一優先度で「京」上での走行を計画している第一走者アプリケーションの高度化を進め、「京」での科学的成果創出・性能デモンストレーションに貢献する。
- (ii) プロジェクトで開発されたアプリケーションの「京」への移植支援、性能チューニングを実施する。
- (iii) 10億化合物規模の大規模仮想化合物ライブラリの開発を行う。また、その公開・実利用を推進する。

3. 研究開発の必要性等

【必要性】

過去においては、生命科学分野では他の分野（物理、工学、気象など）に比べて計算科学技術、とりわけスーパーコンピュータの活用が行われてこなかった。生命科学では他分野と異なり、その複雑さゆえに基礎方程式から出発して計算で到達できる範囲で今まで生命現象を計測できなかった、若しくは基礎方程式が明らかになっていなかった。しかし、次世代スーパーコンピュータの開発や計測技術の進歩によって、これらの問題が解決されるのではないかという期待が高まっていた。

解析的アプローチと大量の実験データから未知の経路と法則に迫る実験的アプローチの二つを同時に進めることで、ペタスケールという桁違いの性能を持つスーパーコンピュータの性能をフルに発揮できるソフトウェアを開発し、従来の計算機性能では不可能であった規模で計算することで、生体現象の深い理解と新たな発見を目指すと同時に、医薬品や医療機器、診断や手術方法の開発につなげることができるかと期待される。

【有効性】

生命科学に関連した分野において分子・細胞・臓器全身・データ解析・脳神経系などの計算科学は、このプロジェクト以前はそれぞれ別々の研究領域であった。次世代スーパーコンピュータ「京」のソフトウェア開発のために、これらの研究領域を統合して一つのプロジェクトとして実施することにより、複雑な現象が多階層で関連する生命体の本質に迫っていく上で、大変意義がある。世界的に見てもこれだけの領域が一つにまとまったプロジェクトは過去に類がなく、我が国が「京」によって開発された計算技術によってリードしていく上でも、生命科学を統合的にシミュレーションするためにも、貢献するものである。

【効率性】

そのような背景の中で、本プロジェクトでは、集中的に「京」に向けて、生命科学分野の計算科学技術の研究開発を行い、他の科学技術分野を凌駕するソフトウェア群を開発する。これはスーパーコンピュータの専門であるソフトウェアの高度化チームが各研究者と密接に連携し、始めてなし得ることである。このように開発されたソフトウェア群は、高速なスーパーコンピュータを生命科学分野で活用する上で重要な資産となっていくことと考える。

また開発ソフトウェアについては、ホームページ等での公開を行うとともに、代表機関である独立

行政法人理化学研究所において HPCI 計算生命科学推進プログラム及び情報基盤センターが協力して、今後も引き続き利用者への提供、利用支援を行っていくことで、社会還元、計算生命科学分野に貢献する体制を構築することとしている。

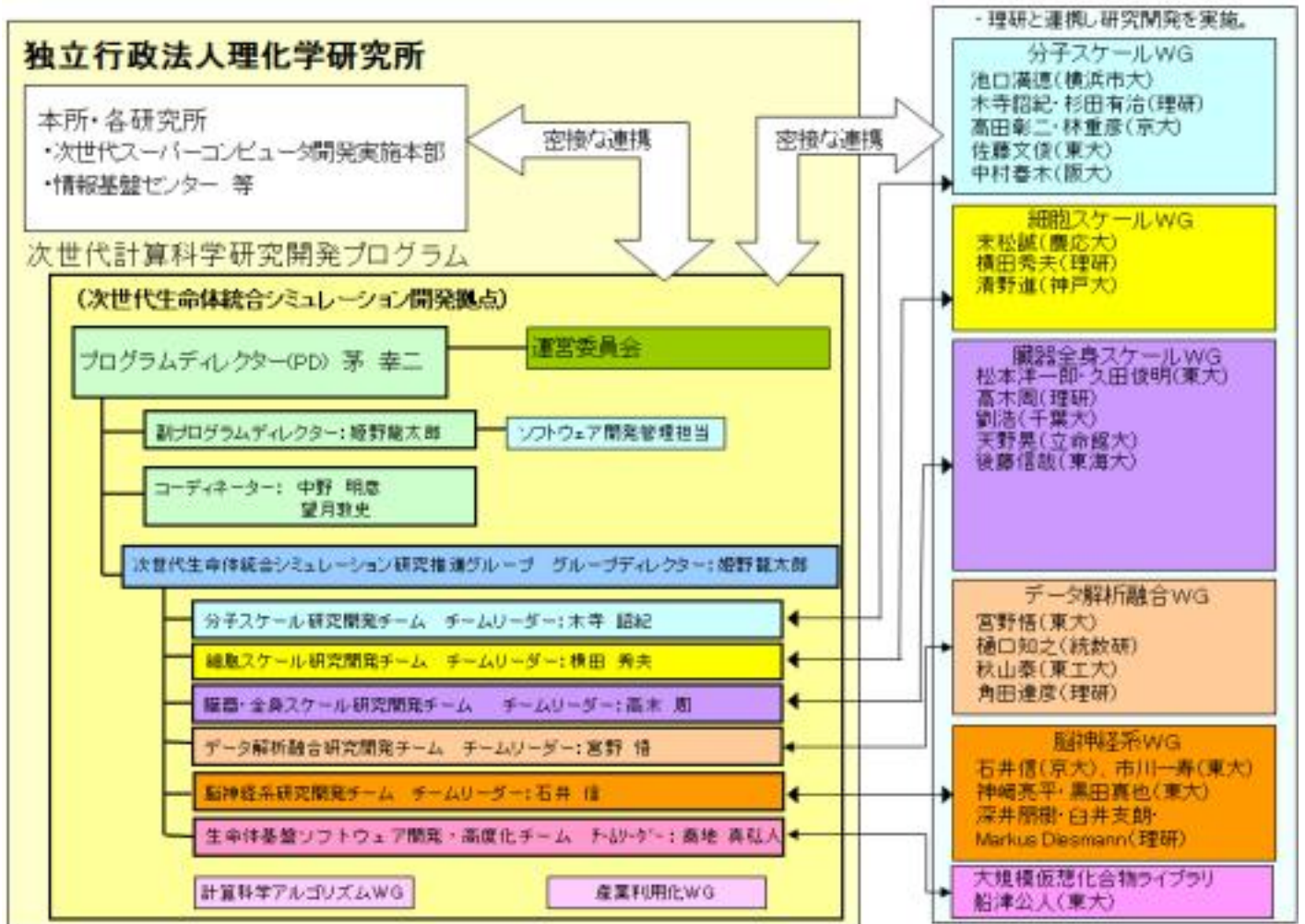
4. 予算の変遷

年度	18年度	19年度	20年度	21年度	22年度	23年度	24年度
予算額(百万円)	166	1,600	1,500	1,423	1,095	675	552
実施機関	理化学研究所	理化学研究所 横浜市立大学 京都大学 東京大学 大阪大学 慶應義塾大学 神戸大学 千葉大学 東海大学 統計数理研究所 東京工業大学 北陸先端科学技術大学院大学 東北大学 広島大学	理化学研究所 横浜市立大学 京都大学 東京大学 大阪大学 慶應義塾大学 神戸大学 千葉大学 東海大学 統計数理研究所 東京工業大学 北陸先端科学技術大学院大学 東北大学 広島大学	理化学研究所 横浜市立大学 京都大学 東京大学 大阪大学 慶應義塾大学 神戸大学 千葉大学 立命館大学 東海大学 統計数理研究所 東京工業大学 北陸先端科学技術大学院大学 東北大学 広島大学	理化学研究所 横浜市立大学 京都大学 東京大学 大阪大学 慶應義塾大学 神戸大学 千葉大学 立命館大学 東海大学 統計数理研究所 東京工業大学 北陸先端科学技術大学院大学 東北大学 広島大学	理化学研究所 横浜市立大学 京都大学 東京大学 大阪大学 慶應義塾大学 神戸大学 千葉大学 立命館大学 東海大学 統計数理研究所 東京工業大学	理化学研究所 横浜市立大学 京都大学 東京大学 大阪大学 慶應義塾大学 神戸大学 千葉大学 立命館大学 東海大学 統計数理研究所 東京工業大学

5. 課題実施機関・体制

研究代表者 茅 幸二 (独立行政法人理化学研究所
次世代計算科学研究開発プログラム プログラムディレクター)

【平成 22 年度 12 月 第 2 回中間評価後の体制】



事後評価票

(平成25年3月現在)

1. 課題名 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

2. 評価結果

(1) 課題の達成状況

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おいて、以下のとおり、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、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。

具体的に6つの研究開発チームを設置し、以下のアプリケーションを開発した。

- ① 分子スケールでは密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算 (ProteinDF-K) をはじめとする8本のアプリケーション
- ② 細胞スケールでは、統合解析プラットフォーム (RICS-K) の1本の統合アプリケーション
- ③ 臓器全身スケールでは、心臓シミュレータ (UT-Heart) をはじめとする4本のアプリケーション
- ④ データ解析融合では、ハプロタイプ関連解析における統計検定ソフト (ParaHaplo-K) をはじめとする9本のアプリケーション
- ⑤ 脳神経系では、神経細胞シミュレーションツール (NEST) をはじめとする5本のアプリケーション
- ⑥ 生命体基盤ソフトウェアとして大規模並列用 MD コアプログラム (cppmd-K) をはじめとする4本のアプリケーション

産業利用化ワーキンググループを設置し、計31本中25本のアプリケーションについて、一般公開・ダウンロード可能としており、利用マニュアル等の利用者へ提供、利用支援を行っていることは高く評価できる。またチームリーダーを中心にマネジメントがよく機能しており、チーム内の効果的な連携を行っている。また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ている。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。

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る。このようなグループは必要であり、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べきである。また一部アプリケーションについては、固有のテーマを扱うため研究開発チーム内での孤立が見られるため、チームの枠を越えた解析に対する連携、マルチスケール解析等による統合的な解析まで発展させ、有機的な連携を更に進めてほしかった。

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と言える。

(2) 成果

「京」で使用するアプリケーションの開発としては、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。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ている点など高く評価できる。

ライフサイエンス分野のモデリング、シミュレーション手法についてはまだ開発途上の技術でありもう少し長いスパンでの研究が必要である。継続的なプロジェクトなどのもとの、さらなる展開に期待したい。

特にビッグデータ時代を迎えるバイオインフォマティクスにとってはライフサイエンスのための新しいアルゴリズムは非常に重要である。本プロジェクトにおいては、既存の確固としたアルゴリズムが存在する中での超並列化がほとんどであり、例えばベイズ解析と非線形解析との結合を行って新規アルゴリズムへのチャレンジが見られた点などは評価できるが、本格的なビッグデータの時代に向けてさらなる努力が必要である。

全体として、応用を意識したシミュレーションと出口にこだわりつつも、基礎的検証が必要な部分については地についた深掘りした研究姿勢が随所に見られ、プロジェクトとして今後の広がりに期待が持てる。適切なシミュレーションモデルを設定し、並列計算の効果を有効に活用して、生命現象の一端の再現・解析が可能となっており、高く評価できる。

開発したアプリケーションによるシミュレーションについて、十分な計算時間を確保することで、ライフサイエンス全体に影響を与えるような計算結果を出すようなプロジェクトが推進されることを期待する。今後の、アプリケーションプログラムのさらなる改善・発展と社会への還元をこれから期待したい。

本プロジェクトで雇用した研究員69名は、プロジェクト終了後、アカデミックへ46名（うち9名が研究所PI職、24名が大学教員）、民間企業へ5名、残りが他プロジェクトの研究員として輩出しており、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、人材育成は良好であったと言える。

(3) 今後の展望

アプリケーション開発については、HPCI 戦略プログラム分野1で一部課題の継続が決まっている。また HPCI 戦略プログラムの課題からはずれたテーマでも今後も着実に進めていく展望を述べており、今後の継続・発展に期待できる。

今後、更に発展するには現状の延長線だけでなく、各シミュレータ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、さら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見まで期待したい。しかし、HPCI や新しいバイオインフォマティクスに裏打ちされたライフサイエンス分野の研究は基礎だけでなく直接ヒトの健康医療に結びつく知見を生み出すものである。

したがって、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。

HPCI 戦略プログラムでの継続課題については、産業応用として、創薬・医療へと更に結びつくことを期待したい。また、スーパーコンピュータの利活用は今後も継続・発展させていく必要があるため、今回実施した並列化支援の技術、ノウハウをどのように生かし発展させていくかも重要な課題である。開発した「京」及び「京」以外のスーパーコンピュータに対するアプリケーションの公開・利用者支援については、代表機関である独立行政法人理化学研究所で行うことが決まっているが、アカデミアばかりでなく応用分野を担う産業界の利用がカギとなるので情報発信等の利用促進のさらなる充実も重要である。

「HPCI の整備」 事後評価結果

HPCI 計画推進委員会

平成 25 年 4 月 12 日現在

氏名	所属・職名
小柳 義夫	神戸大学大学院システム情報学研究科特命教授
笠原 博徳	早稲田大学理工学術院教授
関口 和一	株式会社日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員
鷹野 景子	お茶の水女子大学副学長兼附属図書館長/学術・情報機構長
所 眞理雄	株式会社ソニーコンピュータサイエンス研究所代表取締役会長
主査 土居 範久	慶応義塾大学名誉教授
土井美和子	株式会社東芝研究開発センター首席技監
根元 義章	独立行政法人情報通信研究機構 耐災害 ICT 研究センター センター長
村上 和彰	九州大学大学院システム情報科学研究院教授
矢川 元基	東京大学名誉教授

合計10名

(50音順)

「HPCIの整備」の概要

1. 課題実施期間及び評価実施時期

平成22年度～平成24年度
事後評価 平成25年3月

2. 研究開発概要・目的

HPCIの整備・運営に関するプロジェクト目標は下記のとおり。

ユーザ等からなるコンソーシアムを形成し、この主導により、平成24年11月を目途に次世代スーパーコンピュータ、国内の主要スーパーコンピュータ、ストレージを用いた高度なコンピューティング環境を実現するインフラ(HPCI)を構築し、運用を開始する。

このうち、HPCIの整備に関する各項目の研究開発目標は次のとおり。

1)利用者支援システム整備(東京大学)

ヘルプデスク及び情報共有コンテンツマネジメントシステム(CMS)の整備を行う。実運用環境に合わせたワークフロー、グループ構成、アクセス権、運用手順等の調整とそれに対応するマニュアルの整備、障害・インシデント対応マニュアルの整備を図る。

2) 運用ツール群整備(大阪大学)

2-1) 認証基盤サブシステム整備として、HPCI 共通運用システムにおける認証基盤の運用に際し、大学共同利用機関法人情報・システム研究機構と連携協力して、ID 連携によるシングルサインオン機能を実現するための認証基盤サブシステムの整備を行う。

2-2) 運用事務局ソフトウェア整備として、HPCI の利用促進における課題選定及び共通窓口の運用に際し、登録機関と連携協力して、HPCI 運用事務局による課題公募や申請受付、利用課題選定、成果報告を支援するシステムの整備を行う。

2-3) 資源管理・検索システム及びアカウント集計ツール整備として、HPCI 運用事務局と HPCI システム構成機関が円滑な情報共有を行うための支援システムを整備する。

3) 共用ストレージソフトウェア整備(筑波大学)

共用ストレージシステムのソフトウェア整備を行う。整備に当たり、アクセス性能及び信頼性の向上のためのソフトウェア改良、性能モニタリングシステムの整備、負荷試験を実施する。ソフトウェア整備に伴う、ドキュメントの整備を行う。

4) 認証基盤整備(NII)

認証基盤運用に必要となるドキュメントの整備及び認証局ソフトウェアを開発する。

5) 先端ソフトウェア運用基盤整備(東工大)

仮想計算機システムの可用性向上、及び、利用者支援機能を向上する。

3. 研究開発の必要性等

HPCI は、世界トップクラスのスーパーコンピュータ「京」やその他の計算資源をユーザが容易に利用できる環境を実現するものであり、我が国の科学の進展、産業競争力の強化に資するとともに、グリーンイノベーションやライフイノベーション等のイノベーション創出の基盤となることが期待される。

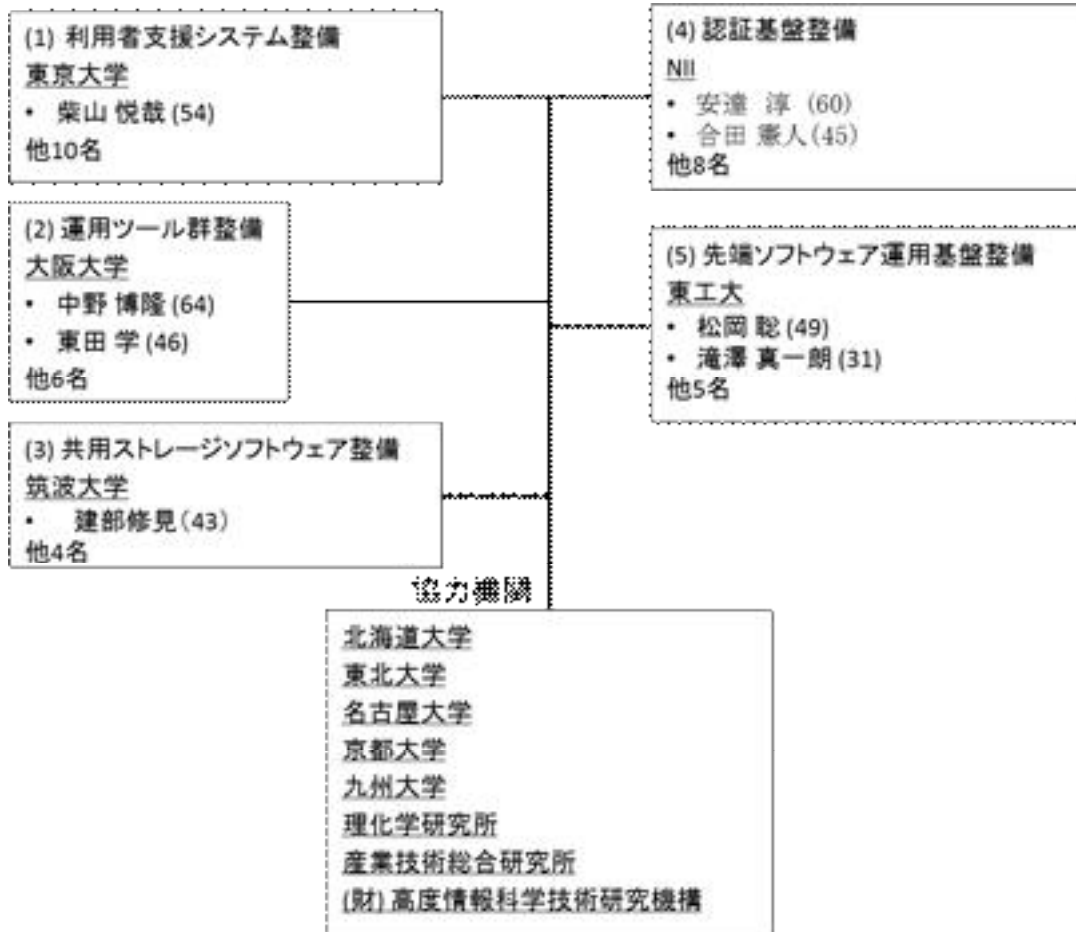
また、このような基盤の整備は、人材育成や利用者の拡大にも貢献すると考えられる。

4. 予算(執行額)額の変遷

年度	H22(初年度)	H23	H24	総額
予算額	0.5億	1.8億	2.4億	4.7億

5. 課題実施機関・体制

研究代表者 国立大学法人東京大学 情報基盤センター長 石川 裕
 主管研究機関 国立大学法人東京大学
 共同研究機関 国立大学法人大阪大学、国立大学法人筑波大学、国立大学法人東京工業大学、
 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構



事後評価票

(平成25年4月現在)

1. 課題名 HPCIの整備

2. 評価結果

(1)課題の達成状況

○研究開発目標

利用者支援システム、運用ツール群、共用ストレージソフトウェア、認証基盤及び先端ソフトウェア運用基盤の整備が着実に実施され、世界トップクラスのスーパーコンピュータやその他の計算資源をユーザが容易に利用できる環境が構築され、平成 24 年 9 月の共用開始が実現していることから高く評価できる。

○研究開発体制

東京大学(利用者支援システム)、大阪大学(運用ツール群)、筑波大学(共用ストレージソフトウェア)、大学共同利用機関法人情報・システム研究機構(認証基盤)及び東京工業大学(先端ソフトウェア運用基盤)のそれぞれの機関において、密な連携体制の下で研究開発を遂行した。その結果、統一的な視点を持って遅滞なく全体の開発が進められており高く評価できる。

(2)成果

○研究開発成果

HPCI 準備段階コンソーシアムがとりまとめた「HPCIとその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて(最終報告)」(平成 24 年 1 月 30 日)に基づき、平成 22 年度「HPCI の基本仕様に関する調査検討」、平成 23 年度「HPCI の詳細仕様に関する調査検討」を踏まえて平成 24 年度に HPCI システムの整備が行われている。

システム全体として、課題申請からアカウント発行、利用支援までの一括管理システムを実現したことは他にない大きな成果であり、特に外国における類似のプロジェクトと比較しても機能面で充足している点は評価できる。

共用ストレージソフト Gfarm は新しいコンセプトによるものであり、システムの再構築なしにストレージの増強が可能である。これをペタバイト級のファイルシステム上で実現したことは大きな成果である。

認証基盤については、NAREGI-CA を改良した実運用システムを可能にした。

先端ソフトウェアについてはサービス群を仮想計算機で実行する基盤を整備した。これは他にない独創的な環境である。

○研究開発成果の利活用

本事業によって各システム(利用者支援システム、運用ツール群、共用ストレージソフトウェア、認証基盤及び先端ソフトウェア運用基盤)が整備されたことにより、平成 24 年 9 月より HPCI システムの共用開始が実現している。

これにより、355 件の課題が申請されるとともに、1706 件の HPCI-ID、1018 件の HPCI アカウントが発行されるなど、着実な利用実績を重ねている。

さらに、認証基盤整備の中で開発された認証局ソフトウェア(NAREGI-CA)について、将来的にオープンソースとして公開することは評価に値する。

○人材育成

HPCI 運用基盤ソフトウェア群の整備・運用について、HPCI システムに参画する各大学の情報基盤センター系職員により実施されており、従来の外部委託による実施ではなく、基盤センター内において運用技術者の育成が行われたことは高く評価できる。

(3)今後の展望

このような実運用を目的としたシステムが大学を中心とした研究開発グループで開発されたことの意義は大きい。本事業によって整備された「京」を中核とする HPCI システムの利用により、HPCI の運用が促進され、多くの科学技術の発展に寄与できると考えられる。

本事業で整備されたシステムは、今後「HPCI の運営」の実施機関に引き継がれることとなっており、HPCI システムの円滑な運営を目的として HPCI システムを構成する機関からなる委員会が設置されている。今後、この仕組みを活用して、利用者からのフィードバックを受け、システムの問題点を継続的に改善できる体制を確立する必要がある。さらに、後継人材の育成にも取り組まれない。

HPCI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。

