

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21年4月2日
文部科学省 研究振興局

次世代スーパーコンピュータプロジェクト

平成21年度予算額 19,000百万円
 平成20年度補正額 5,498百万円
 (平成20年度予算額 14,500百万円)
 総事業費 115,447百万円(平成18~24年度)

次世代スーパーコンピュータの目的・事業内容

理論、実験と並び、現代の科学技術の方法として確固たる地位を築きつつある計算科学技術をさらに発展させるとともに、広範な分野の研究及び産業における利用のための基盤を提供し、我が国の競争力強化等に資するため、長期的な国家戦略を持って取り組むべき重要技術「国家基幹技術」である「次世代スーパーコンピュータ」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。

具体的には、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べく、

- (1) 世界最先端・最高性能の次世代スパコン(注)の開発・整備
- (2) 次世代スパコンを最大限利活用するためのソフトウェアの開発・普及
- (3) 上記(1)を中核とする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)の形成

を文部科学省のイニシアティブにより、開発主体(理化学研究所)を中心に産学官の密接な連携の下、一体的に推進する。

(注) 10ベタFLOPS級の計算性能を有するスパコン(1ベタFLOPS:1秒間に1千兆回の計算)

平成21年度予算のポイント

次世代スーパーコンピュータ施設(計算機棟、研究棟)の整備を本格化

6,131百万円

次世代スーパーコンピュータのシステム開発について試作・評価を実施

10,992百万円

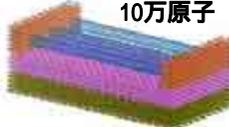
ソフトウェアの開発について、引き続き、グランドチャレンジアプリケーションの開発・製作・評価を実施

1,877百万円

次世代スーパーコンピュータの幅広い応用

ナノテクノロジー

新しい半導体材料の開発



10万原子
デバイス全体

原子一つ一つをシミュレーションすることにより、試行錯誤で行っていた材料開発が画期的に進歩する。

10万原子の計算時間
現状 800年 → 次世代スパコン 2ヶ月

ライフサイエンス

薬の開発



シミュレーションでの予測とデータの組合せで、薬の副作用などの予測が可能になる。

副作用の予測
現状 動物実験など → 次世代スパコン シミュレーションで予測

ものづくり

自動車の衝突の解析

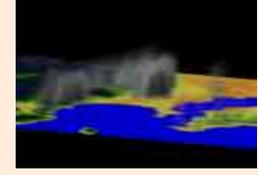


人手で数ヵ月かかるモデル作成等が1~2時間で自動化でき、安全性の向上や産業競争力強化に繋がる。

人手モデル作成
現状 数ヶ月 → コンピュータ自動モデル作成 1~2時間

地球環境

台風の進路や集中豪雨の予測



1Km四方以下でのシミュレーションにより、集中豪雨や台風進路の精度の高い予測が可能になる。

シミュレーションスケール
現状 3.5km → 次世代スパコン 約400m

開発の年次計画

		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
施設	計算機棟		設計	建設				
	研究棟		設計	建設				
システム	演算部	概念設計	詳細設計	試作・評価	製造・据付調整			
	制御フロントエンド (トータルシステムソフトウェア)		基本設計	詳細設計	製作・評価		性能チューニング・高度化	
	共有ファイル		基本設計	詳細設計	製造・据付調整			
ソフトウェア	次世代ナノ統合シミュレーション	開発・製作・評価					実証	
	次世代生命体統合シミュレーション	開発・製作・評価					実証	
	グリッドミドルウェア	設計・製作						1

次世代スーパーコンピュータプロジェクトの目標・目的

< プロジェクトの目標 >

次世代スーパーコンピュータの性能目標

- (ア) Linpack で10 ペタFLOPS を達成する(平成23年6月のスーパーコンピュータサイトTOP500でランキング第1位を奪取)。
- (イ) HPC Award 4項目において最高性能を達成する。

アプリケーションの達成目標(例示)

- (ア) ナノテクノロジー分野
全く不可能だった酵素反応解析が実現可能になる。
- (イ) ライフサイエンス分野
水中のウイルス構造やその動作を解析、ウイルスの感染機構や免疫機構を解明できる。

サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築

グリッドミドルウェアにより、スーパーSINET(SINET3)で接続された全国のスーパーコンピュータセンターから次世代スーパーコンピュータを利用できる環境を提供する。

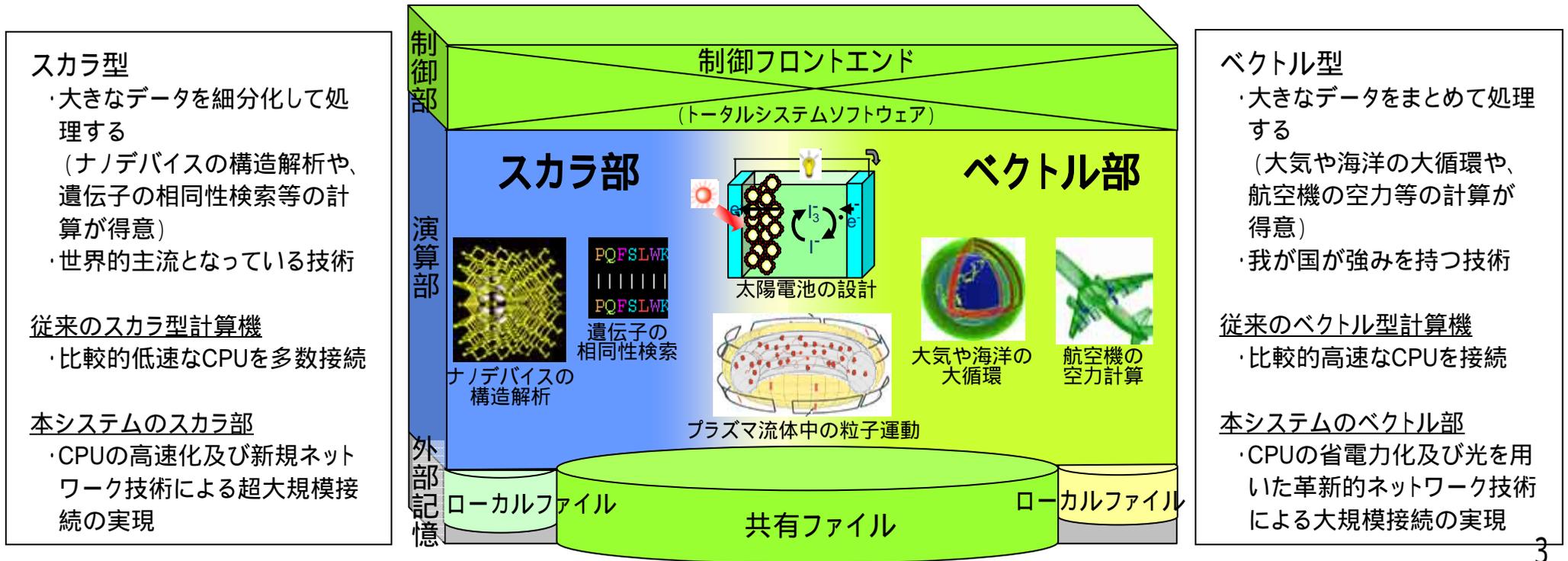
世界最高水準の研究施設を幅広く共同利用する体制の整備

システムの基本的な構成

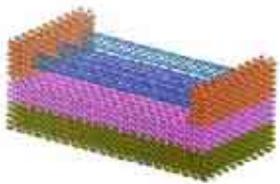
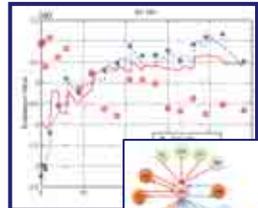
[システムの特徴]

スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システム

- ・異なる2つの演算部の特性を活かし、あらゆるシミュレーションに対応可能な高い汎用性
- ・計算能力に関する高い拡張性
- ・大学や研究機関向けの高性能な計算機への展開性
- ・スカラ及びベクトルの両技術の確保による、我が国の技術力の強化と、国際競争力の向上



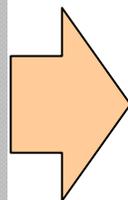
次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するための ソフトウェアの研究開発(グランドチャレンジアプリケーション)

	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バイオ燃料生成用の酵素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	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
応用例	<p>10万原子</p>  <p>ナノ電子デバイス</p> <p><u>現状</u> 2千原子程度(デバイスの一部)の計算が可能</p> <p>↓</p> <p><u>次世代スパコン</u> 10万原子(デバイス全体)の計算が可能</p> <p>↓</p> <p><u>アウトカム</u> 高速、低消費電力のナノ電子デバイスの実現を加速</p>	<p>副作用の予測</p>  <p><u>現状</u> 計算量やデータが膨大で、既存の計算資源や計算手法ではシミュレーションが不可能</p> <p>↓</p> <p><u>次世代スパコン</u> シミュレーションが実現可能</p> <p>↓</p> <p><u>アウトカム</u> シミュレーションで副作用などを予測することが可能になり、薬の開発や医療の現場で患者のリスクを軽減 医薬品の開発が、効率的で効果的に</p>
体制	分子科学研究所を中核に、東京大学物性研究所、東北大学金属材料研究所、産業技術総合研究所等、6機関と連携した研究開発体制を構築	理化学研究所を中核に、東京大学医科学研究所、慶應義塾大学等、13機関と連携した研究開発体制を構築

次世代スーパーコンピュータ施設の整備

整備の基本方針

- (1) 次世代スーパーコンピュータの性能を最大限引き出す設備・能力の確保
- (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)として相応しい研究・教育環境の整備
- (3) ランニングコストと環境負荷の低減化



施設の特徴

- (1) 計算機の性能を常時保証できる床耐荷重及び免震構造とするとともに、必要な電源設備及び冷却設備を整備
- (2) 共用施設としての運用上の利便性を高めるとともに、研究交流や多様な知識の融合を促進するため、計算機棟と研究棟を一体的に整備
- (3) 廃熱利用の推進や排水処理への配慮などによりランニングコストと環境負荷の低減を実現



【計算機棟】

延床面積 約10,500㎡
建築面積 約4,300㎡
構造 鉄骨造り地上3階地下1階

【研究棟】

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

その他、電源を供給する特高受変電設備、計算機棟の空調機を冷却する冷却設備、及び環境負荷低減のためのCGS(自家発電)設備等を設置

サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築(1)

サイエンスグリッドNAREGIプログラムの研究開発

平成15年度より開始した「サイエンスグリッドNAREGIプログラムの研究開発」において、グリッド環境構築のためのグリッドミドルウェア開発を実施。平成20年5月にNAREGIミドルウェア(v1.0)が完成・公開。

< 開発方法 >

国立情報学研究所(NII)、分子科学研究所、東京工業大学、大阪大学、九州大学、九州工業大学、産総研、原子力機構、富士通、日立製作所、日本電気等との産学連携により実施。

< NAREGIミドルウェアの特徴 >

- ・仮想組織(VO: Virtual Organization)による計算資源やデータの共有を可能とする。
- ・研究機関等において個別に開発されたシミュレーションプログラムを、アーキテクチャの異なる計算機上で容易に連携・実行するための同時予約によるジョブ実行機能を有する。(世界初)
- ・国際的なグリッドのコミュニティであるOGF(Open Grid Forum)や海外のグリッド運営機関であるEGEE(欧州)、TeraGrid(米国)等と連携して、ミドルウェアを開発。一部機能がOGF(Open Grid Forum)の標準仕様として承認される。また、欧米のグリッドとの相互運用に向けた技術的検討を実施。
- ・100テラフロップス級のグリッド環境が構築可能。

< グリッド運用 >

NIIが9大学情報基盤センター連携のため、以下を実施。

インストール支援、稼動サポート、VO管理(サーバ運用、ソフトウェア設定)、9センターでの設定情報のとりまとめ、配布、グリッド証明書の発行

基盤センターは学内(地域内)ユーザーの窓口としての役割を担当。(ユーザーは最寄りの基盤センターにて利用申請)

< NAREGIミドルウェアの機能一覧 >

計算科学をサポート

- ・予約によるジョブ実行によるアーキテクチャの異なる計算資源間での連成解析(世界初)
- ・バルクジョブ実行
- ・GridMPI、GridRPCの組み込み
- ・資源管理と連携したデータグリッド

研究コミュニティをサポート

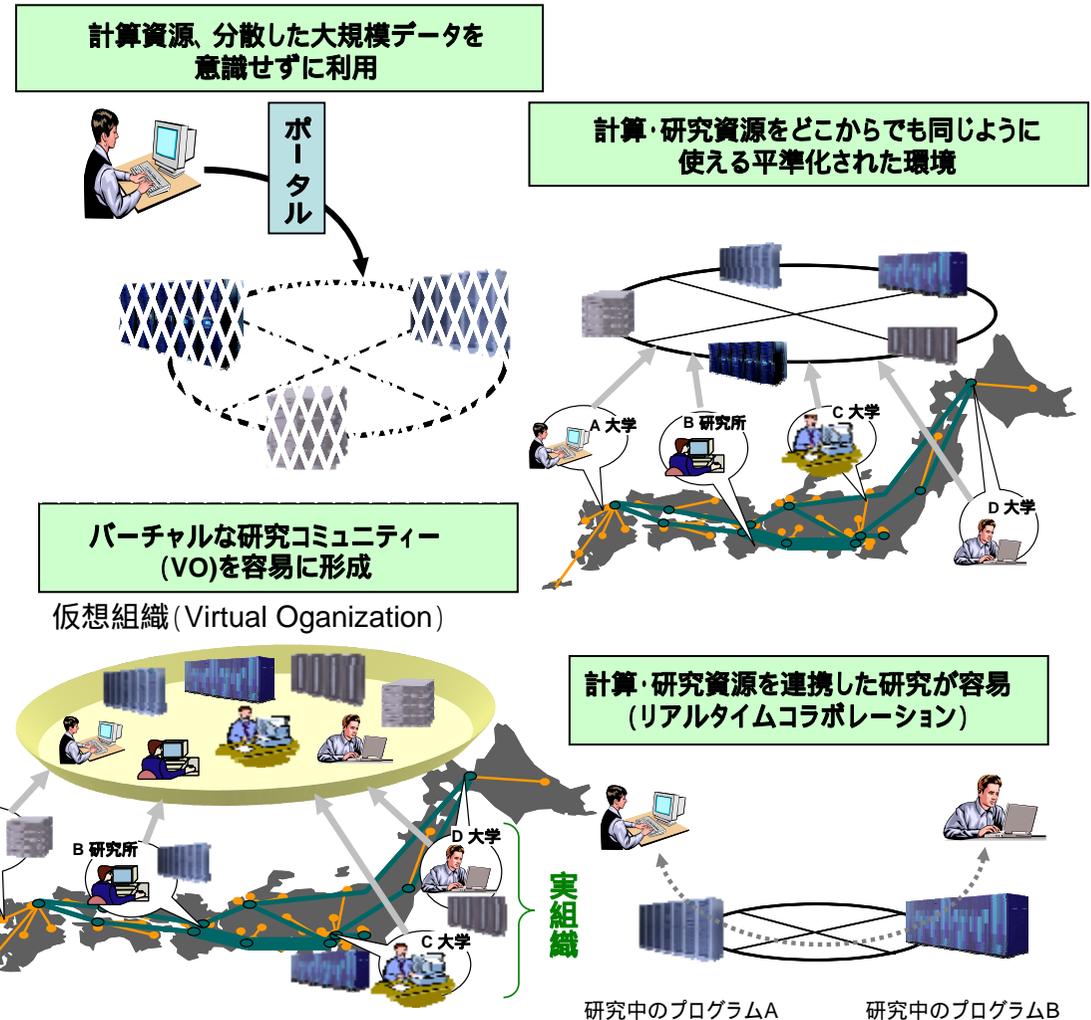
- ・VO (Virtual Organization) 単位のサービス
- ・VO管理に必要なアクセス管理・制御・管理機能設定
- ・ITBLとの連携ミドルウェア

利用環境の高度化・平準化

- ・ポータルにより平準化された利用環境
- ・GUIによる計算資源を意識しない操作、利用
- ・適合した計算資源の自動選択
- ・コマンドラインインターフェイスによるジョブ実行

運用をサポート

- ・計算資源利用効率向上(予約ジョブ実行と非予約ジョブ実行の両立等)
- ・管理者支援機能
- ・グリッドジョブとローカルスケジューリングジョブの共存
- ・インストール・運用性の向上



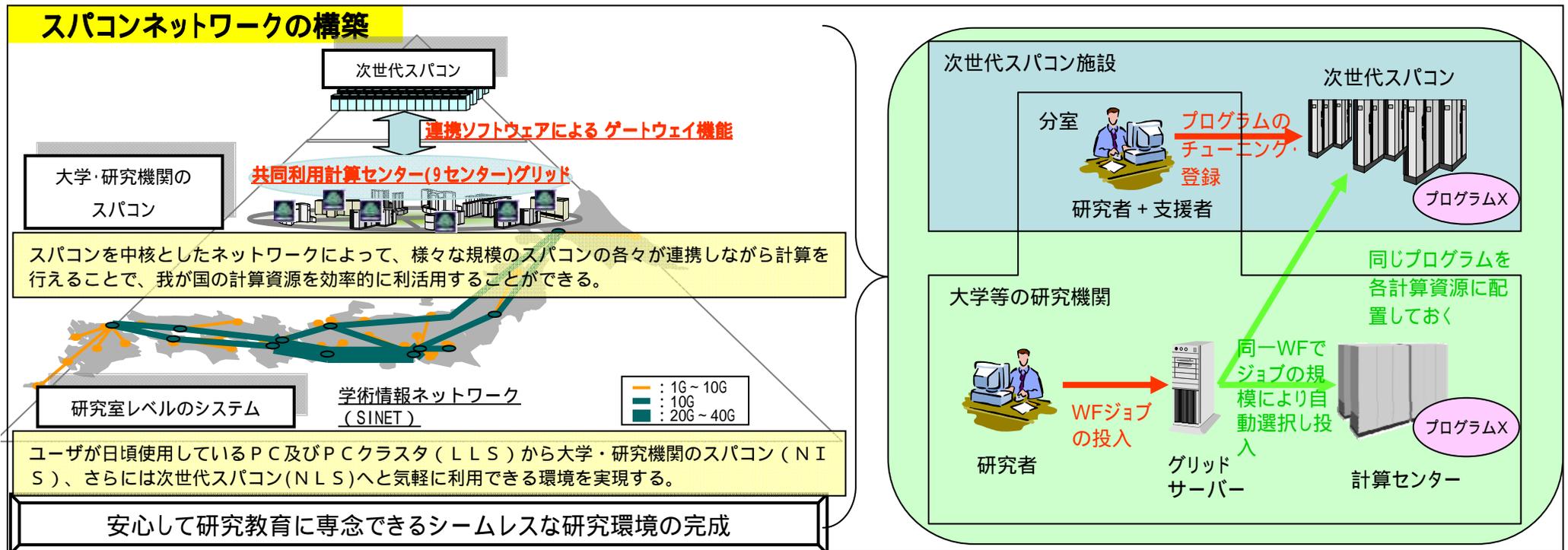
< 現在の検討状況 >

- ・現在、国立情報学研究所においてNAREGIミドルウェアを管理。各大学基盤センターでは、NAREGIミドルウェアの接続試験を終了し、試験運用を開始(実際に他大学のスパコンに接続しての動作確認等)するとともに、NAREGIを用いた場合のスパコン使用料等の運用方針を検討中。

サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築(2)

NAREGIを利用した理化学研究所と国立情報学研究所(NII)との共同研究

- ・国立情報学研究所(NII)は、次世代スーパーコンピュータの遠隔利用環境として、SINET接続時に次世代スーパーコンピュータ遠隔利用に特化したNAREGIミドルウェア整備および必要な環境整備を行う。
- ・理化学研究所は、スーパーコンピュータ側のNAREGIミドルウェア連携ソフトウェア群の開発、SINET接続機器及び連携に必要なサーバ設置等の環境整備を行う。



実施計画

2009年10月
2012年4月

理研が連携ソフトウェアの開発開始、NIIはNAREGIの情報提供で支援
SINET接続(予定)

次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討

科学技術・学術審議会 情報科学技術委員会の下に、次世代スーパーコンピュータ作業部会(主査:土居範久 中央大学理工学部教授)を設置し、次世代スパコンの利活用について検討を行った。

1. 次世代スパコンの共有のあり方

次世代スパコンは、多くの研究者等に活用されるとともに、優れた成果が創出される環境であるべきとの観点から、下記の仕組みを設けることが必要。

- ・戦略的利用(社会的・国家的見地から取り組むべき課題に係る利用)
- ・一般的利用(多様な研究者のニーズに応える利用。産業利用枠や教育利用枠等も設定)

次世代スパコンを最大限に活用するためには、利用者へのきめ細かい研究支援が不可欠。(情報提供、利用に関する相談及び利用支援、アプリケーションの調整のための支援等)

次世代スパコンと大学や公的研究機関等が有する計算機資源との適切な役割分担と有機的な連携を図ることが不可欠。

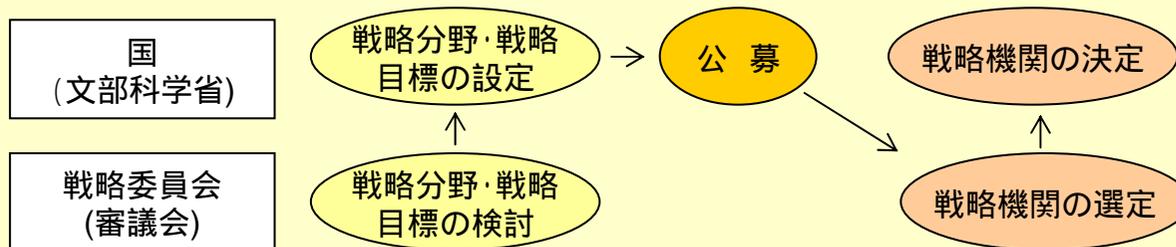
次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討

2. 次世代スパコンを中核とした研究機能の構築

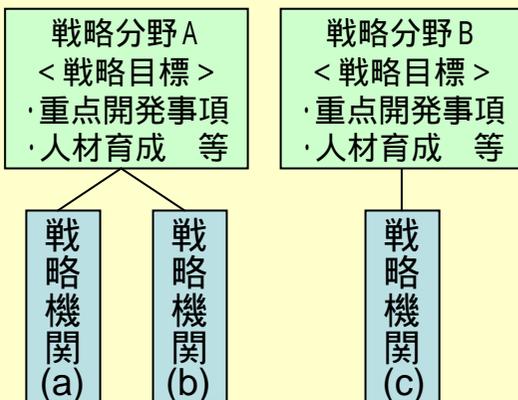
戦略的利用を具体化するために、戦略分野、戦略目標の下で研究開発や人材育成を重点的・戦略的に実施する「戦略的研究開発プログラム」を創設。

戦略的研究開発プログラムのイメージ

(1) 戦略分野、戦略目標の設定と戦略機関の選定



(2) 戦略機関のイメージ



例：戦略分野：
ライフサイエンス、ナノサイエンス、エネルギー等
戦略目標：
を可能とするシミュレーション技術の開発
分野における優秀な若手研究者の育成

戦略機関としては、大学、大学共同利用機関、大学附置研究所、独立行政法人や、財団法人、民間企業等を想定、複数の研究機関によるネットワーク型の組織も可とする

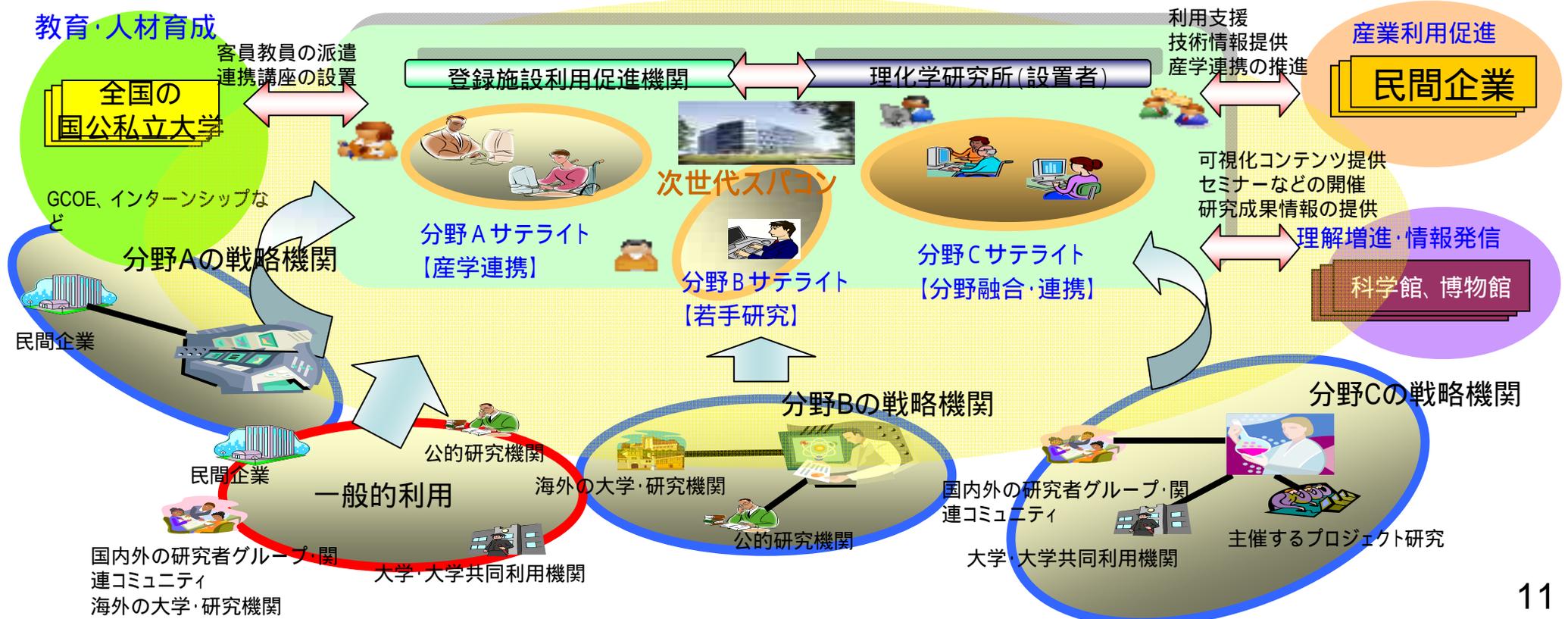
次世代スパコン施設の幅広い共同利用体制の構築 (神戸次世代スパコン拠点イメージ)

次世代スパコンは、産学官の幅広い研究者等の利用に供する共用施設。

次世代スパコンの利活用については、社会的・国家的に重要な研究開発を行う「戦略的利用」及び、多様な研究者のニーズに応える「一般的利用」を設定。「一般的利用」には、産業利用のための「産業利用枠」、人材育成のための「教育利用枠」を設定。

リモートアクセスを可能とするなど、全国の研究者が利用しやすい環境を構築。

理化学研究所、登録施設利用促進機関、戦略機関が緊密に連携・協力し、効果的・効率的に研究開発や人材育成を実施する体制を構築。



プロジェクトの推進体制

