

## グランドチャレンジアプリケーションについて

1. グランドチャレンジアプリケーションについては、実機を想定した実行性能の評価を以下の通り進めている。

① 「次世代ナノ統合シミュレーションの研究開発」においては、平成19年度後半に6本の中核ソフトウェアのコア部分について、富士通、NECに委託してピーク性能に対する演算効率を調査した。

具体的には、並列環境を整えた実機において得たプログラムの実測値を演算時間と通信時間を考慮した理論的な並列数まで外挿することにより、実効性能を想定したものである。

例えば、10万原子系を扱える電子状態計算と効率的位相空間探索プログラムであるRSDFTでは、通信性能の向上などといった条件付ながら、概ね10%を超える実行性能を有するとされた。

② 「次世代生命体統合シミュレーションの研究開発」においては、平成21年度に生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チームが、優先的に高速化に取り組んでいるソフトウェア（分子動力学計算、量子化学計算、構造流体連成）について実行性能等の評価を実施する計画である。

2. また、開発中のソフトウェアに関する並列化は、中核機関を始めとした研究参画機関が保有するマシンや大学法人の基盤情報計算センター等のマシンを用いて、大規模並列時の性能を改善している。

① 「次世代ナノ統合シミュレーションの研究開発」においては、例えばRSDFTであれば、つくば大学のマシンを用いて、1,024並列までの性能を確認している。

② 「次世代生命体統合シミュレーションの研究開発」においても、例えば臓器スケールにおけるボクセル構造流体連成解析であれば、理化学研究所のマシンを用いて、1,024並列までの実証を行っている。

アプリケーションソフトウェアの開発が進んでいるものと認識している。

3. 一方、システムコネクタ部の機能評価に資する連成ソフトウェアについては、理研開発実施本部開発グループにおいて、RISM-OpenFM0（九州大学との共同研究）MSSG-放射モデル（JAMSTECとの共同研究）を選定している。

（参考）

○RISM-OpenFM0（九州大学との共同研究）

溶質（タンパク質など）と溶媒（水など）を含む系全体の振る舞いをシミュレーション。溶質部分をFM0法によりスカラ部で解き、溶媒部分をRISM法によりベクトル部で解き、全体を連携させるシミュレーション。

○MSSG-放射モデル（JAMSTECとの共同研究）

ヒートアイランド現象等の都市部の局地的な気象現象をシミュレーションする。ビル壁等からの放射現象をスカラ部で解き、気象現象をMSSGコードによりベクトル部で解き、全体を連携させるシミュレーション。

4. なお、平成18年から平成19年にかけて、理化学研究所においては、次世代スーパーコンピュータのアーキテクチャ検討に資するため、2010年頃に重要となる「ターゲットアプリケーション」を選定するとともに、性能評価を実施しているが、ターゲットアプリケーションがそのままグランドチャレンジアプリケーションとして開発されているものではない。

ターゲットアプリケーションについては、理化学研究所が引き続き実機での最適化を目指したチューニング等に取り組んでいる。