

情報科学技術に関する 研究開発課題の評価結果（案）

平成25年4月

情報科学技術委員会

目次

- 情報科学技術委員会 委員名簿 2

<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 5
- HPCI の整備 52

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	慶應義塾大学理工学部教授
	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

研究開発課題の事後評価結果

平成25年4月

情報科学技術委員会

「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、「HPCC 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に、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を確認し、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

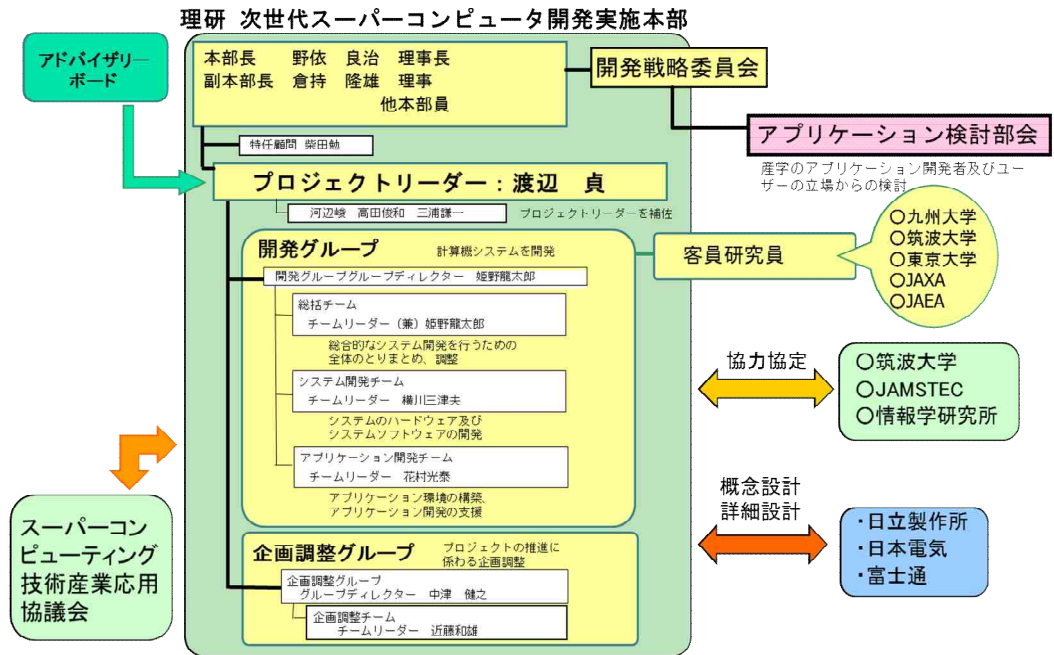
年度	H18 (初年度)	H19	H20	H21	H22	H23	H24	総額
予算額	35億	120億	200億	190億	397億	119億	50億	1,111億
(内訳)	「京」12億 施設1億 グラント・チャレンジ 22億	「京」53億 施設34億 グラント・チャレンジ 32億	「京」111億 施設67億 グラント・チャレンジ 22億	「京」110億 施設61億 グラント・チャレンジ 19億	「京」353億 施設29億 グラント・チャレンジ 15億	「京」110億 — グラント・チャレンジ 10億	「京」45億 — グラント・チャレンジ 6億	「京」793億 施設193億 グラント・チ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

※四捨五入のため合計額が一致しない場合がある。

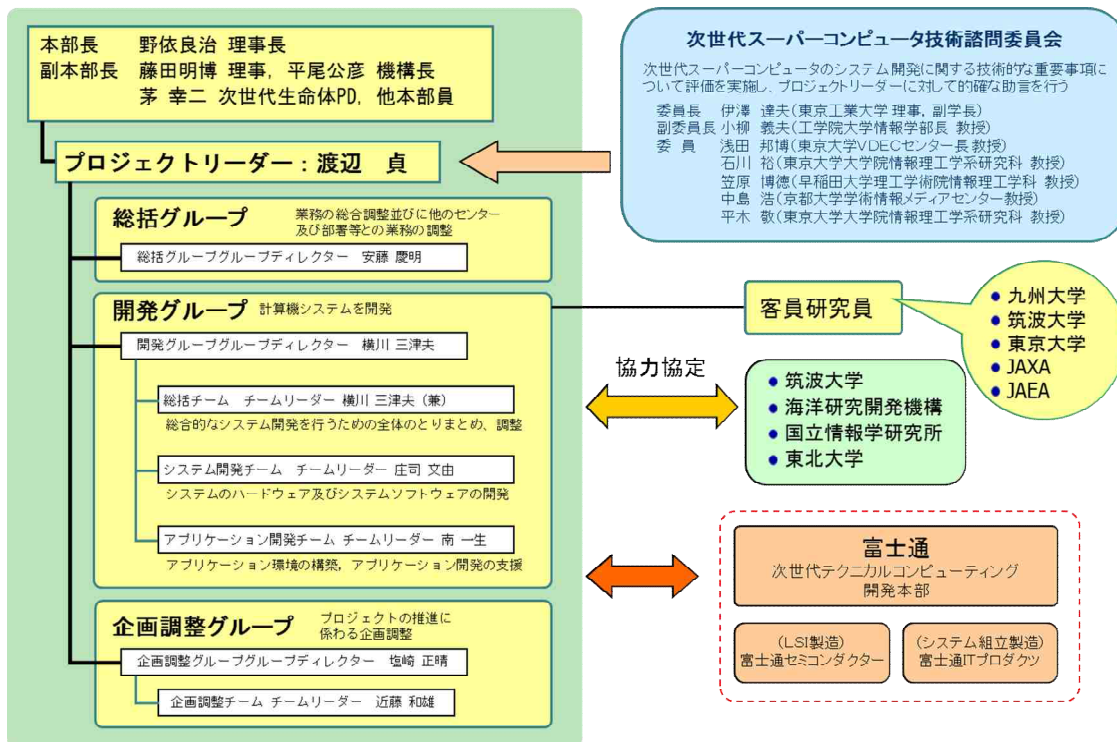
5. 課題実施機関・体制

<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



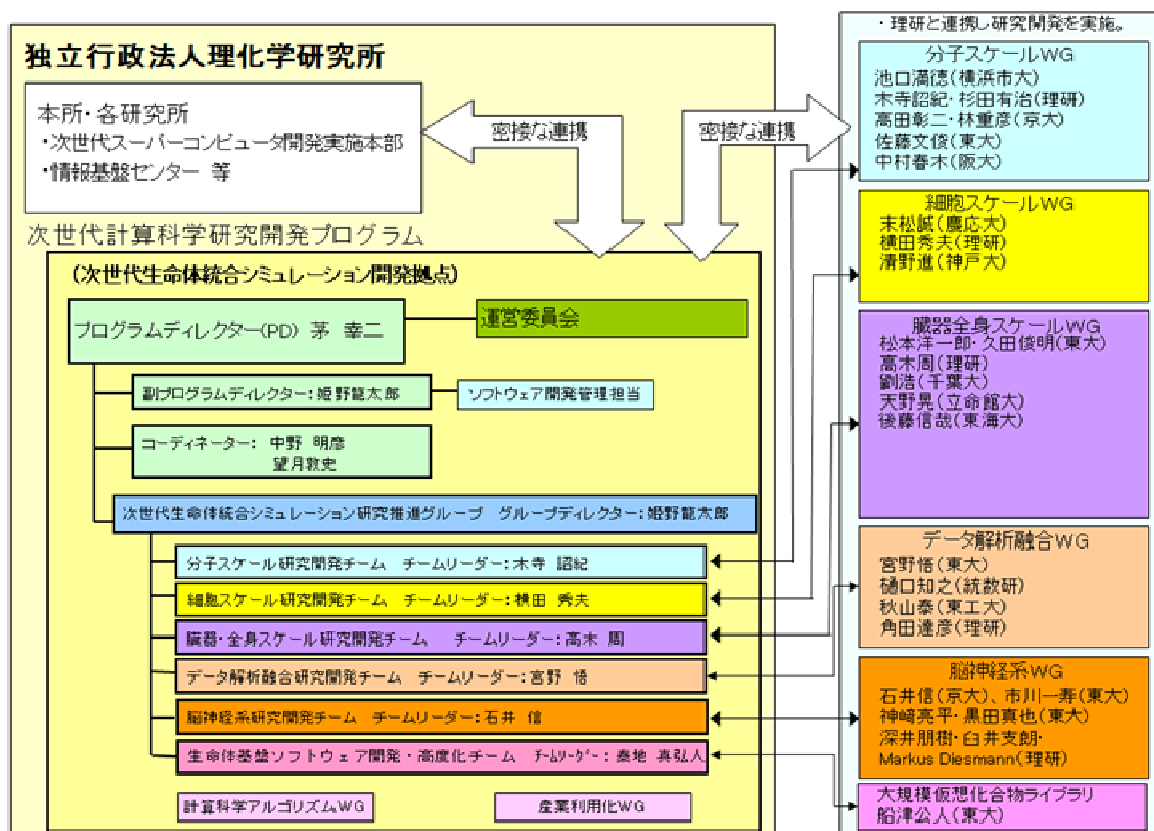
○中間評価以降の体制（平成 21 年 9 月～平成 24 年 6 月）



<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6月→実績:H23年11月) 平成24年9月末共用開始 合計 793億円
	<システム開発経費小計> 12億		53億	111億	110億	353億	110億	
「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 (プラットフォー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 ※H23,24年度のソフトウェア実証16億は、HPCI戦略7の枠の中で実施。
費用	35億	120億	200億	190億	397億	119億	50億	1,111億円
「京」の運用等経費					運用 14億	65億	97億	
「京」の利用者 選定・利用支援							9億	共用法に基づく登録機関が実施。
HPCIの構築					HPCIシステム基本設計・詳細設計 0.5億	1.8億	整備・構築 19億※	※将来的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戦略プログラム				FS 準備研究 0.3億	3億	HPCI戦略プログラム 35億	31億	
	H18予算 35億円	H19予算 120億円	H20予算 200億円	H21予算 190億円	H22予算(当初):228億 H22補正:186億円	H23予算 211億円	H24予算 199億円	

1

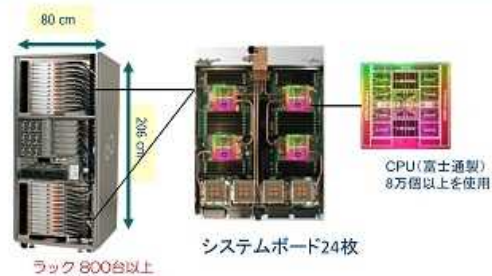
スーパーコンピュータ「京(けい)」について

<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

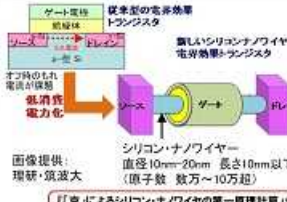
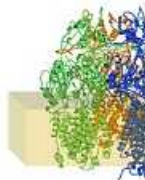
<特徴>

- ◆「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**



2

次世代スーパーコンピュータを最大限活用するための 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) ウイルスとレセプター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、創薬の効率化に貢献する。</p> <p>画像提供: 名古屋大学工学研究所</p>	 <p>多剤排出トランスポーターにおける薬剤排出シミュレーション (MARBLE/Platypus/CafeMol) 多剤排出トランスポーターについて動作過程を、長時間のサブミリ秒(現状はサブマイクロ秒が限界)での解析を可能とし、薬剤の排出(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(UT-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(例えば機能タンパクの異常)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> <p>資料提供: 理化学研究所</p> <p>資料提供: 東京大学大学院新領域創成科学研究科</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を構築	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を構築

3

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)
(業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
	システム運転技術チーム
	ソフトウェア技術チーム
	HPCI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
	プロセッサ研究チーム
	大規模並列数値計算技術研究チーム
	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
	粒子系生物物理研究チーム
	粒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
	複雑現象統一的解法研究チーム
	プログラム構成モデル研究チーム
	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
総合防災・減災研究ユニット	
計算構造生物学研究ユニット	
事務部門	

4