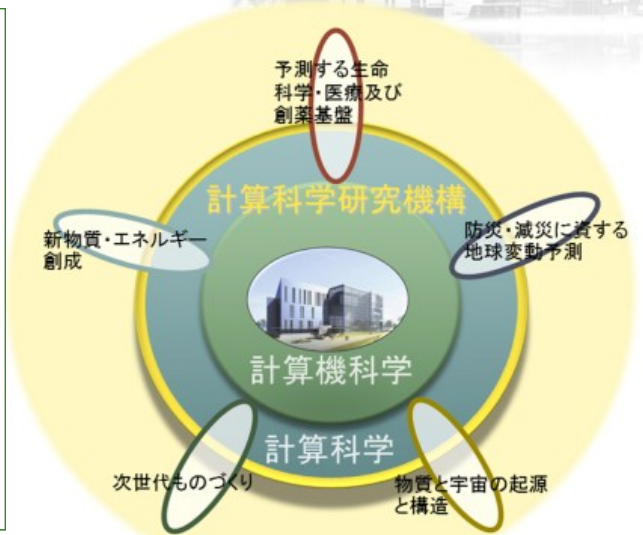


# 最先端コンピューティング研究教育拠点の整備・連携体制の構築



次世代スパコン施設を中核拠点、戦略機関を分野別中核拠点とし、大学(情報基盤センター等)等と連携した計算科学技術研究ネットワークを形成し、以下を達成する。

- 1 次世代スパコン施設における研究機能構築(研究者、技術者が常駐)
  - 2 次世代スパコンを核とした全国の計算資源の連携活用
  - 3 各拠点が連携した研究推進・支援
  - 4 各拠点が連携した人材育成、産業利用の促進
  - 5 各拠点における情報発信、海外連携、理解増進活動
- (「次世代スパコンを中核とした研究教育拠点形成の具現化に向けた基本的考え方」(平成21年1月9日)より引用)



- ・平成22年10月に、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ため、計算科学研究機構の中に研究部門を設立。
- ・戦略機関の計算科学研究機構の施設内における拠点整備に協力して、これを実現。  
⇒最先端コンピューティング研究教育拠点の整備完了
- ・計算科学研究機構と戦略機関とで、定期的に連携推進会議を開催(平成22年3月以降11回開催)。  
⇒連携体制を構築

## 計算科学研究機構の概要

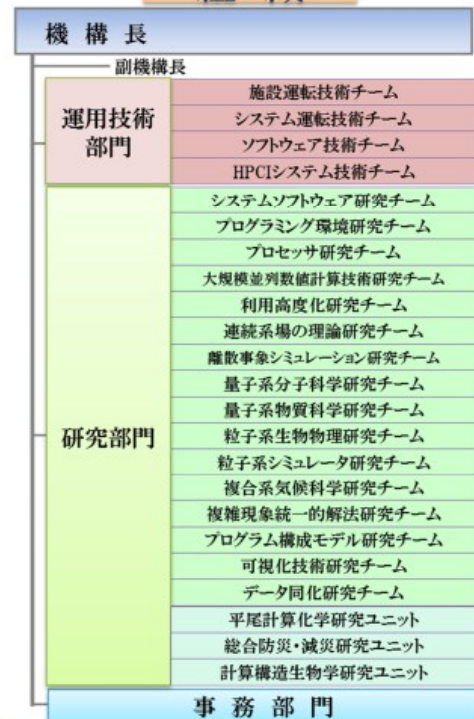


＜職員数＞ 171人(2013年2月1日現在)  
(兼務および非常勤を含む。)

### 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

### 組織

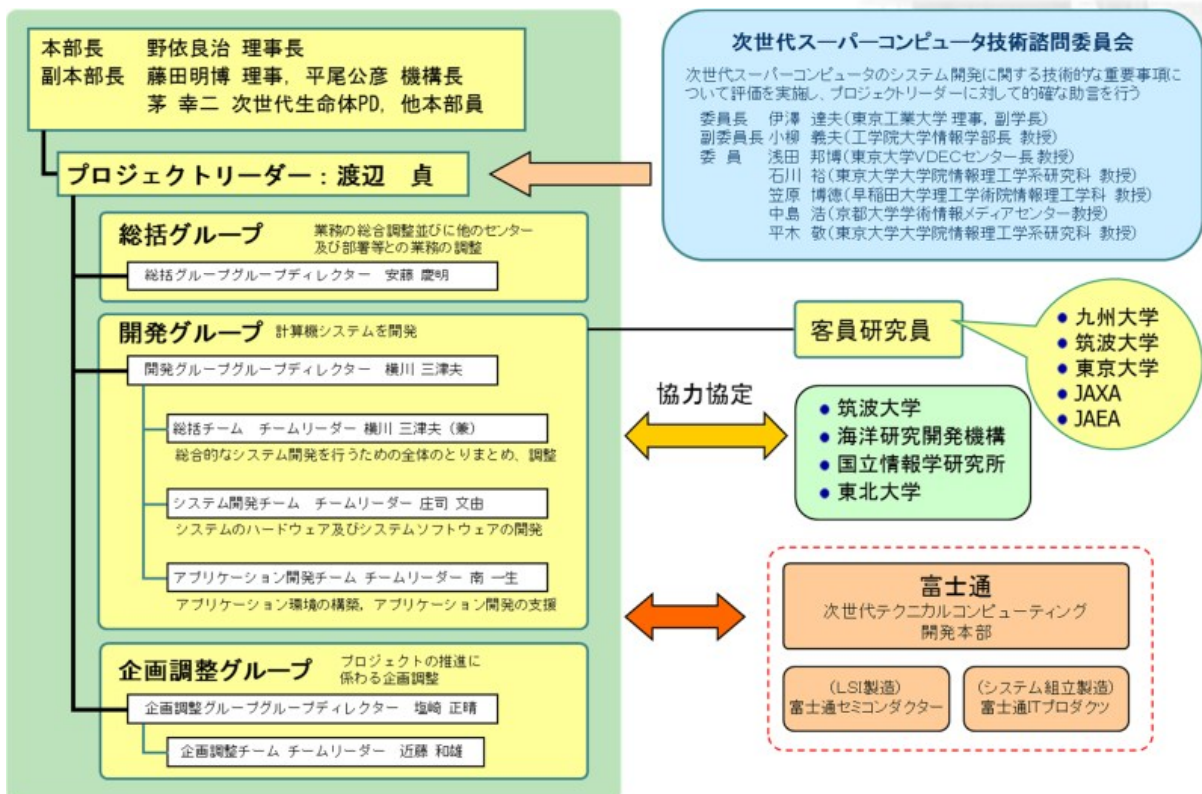




# 3. 課題の達成状況等

## (2) 研究開発体制について

### システム開発体制(中間評価後)



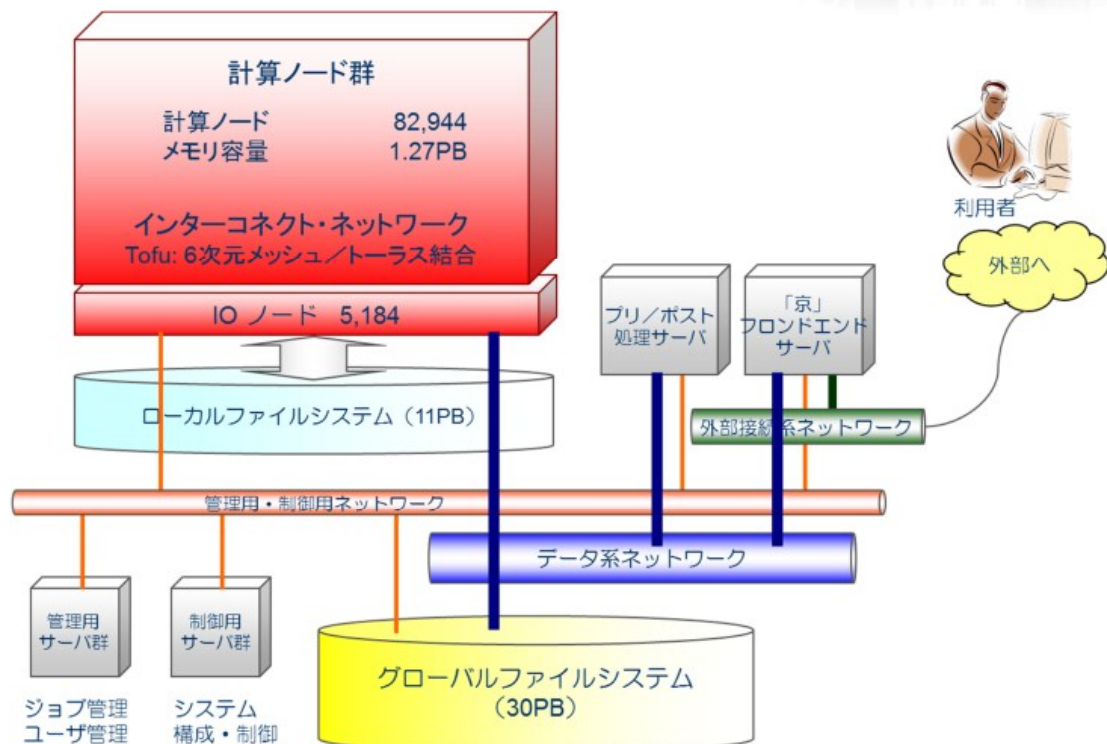


# 4. 研究開発の成果等

## (1) 研究開発の成果について

### 1) システム開発成果

# システム構成概要



- 世界の「京」に対する評価
  - 高い信頼性  
高負荷下、29時間以上連続走行
  - 高効率システム  
効率93%(多くのアプリで高性能)

平成24年11月@SC12

平成23年11月@SC11

順位	システム名称	サイト	ベンダー	国名	Linpack 演算速度(効率) (ペタFLOPS/%)
1	Titan	オークリッジ研	IBM	米	17.50(64.88)
2	Sequoia	ローレンスリバモア研	IBM	米	16.325(81.09)
3	「京」 K computer	理研計算科学研究機構	富士通	日	10.510(93.17)
4	Mira	アルゴンヌ研	IBM	米	8.162(81.09)
5	JuQUEEN	ユーリッヒ総合研究機構(FZ)	IBM	独	4.141(82.28)
6	SuperMUC	ライプニッツスパコン センタ(LRZ)	IBM	独	2.897(90.96)
7	Stampede	テキサス先端計算センタ	Dell	米	2.660(67.19)
8	Tianhe-1A (天河1A号)	天津スパコンセンタ	NUDT	中	2.566(54.58)
9	Fermi	Cinecaコンピューティン グセンタ	IBM	伊	1.725(82.28)
10	DARPA Trial	IBM社内施設	IBM	米	1.515(77.93)

順位	システム 名称	サイト	ベンダー	国名	Linpack 演算速度 (ペタFLOPS)
1	K computer	理研 計算科学研究機構	Fujitsu	日	10.51
2	天河1A号	天津スパコンセンタ	NUDT	中	2.566
3	Jaguar	オークリッジ研	Cray	米	1.759
4	Nebulae (星雲)	深圳スパコンセンタ	Dawning	中	1.271
5	TSUBAME2.0	東京工業大学	NEC/HP	日	1.192
6	Cielo	ロスアラモス研(サテライト研)	Cray	米	1.110
7	Pleiades	NASA・エムズ研究センタ	SGI	米	1.088
8	Hopper	ローレンス・バークレー研	Cray	米	1.054
9	Terra-100	原子力庁(エネルギー研)	Bull	仏	1.050
10	Roadrunner	ロスアラモス研	IBM	米	1.042

## HPCC(HPC Challenge Award)

- 平成23年11月16日発表のHPCチャレンジアワードの4部門すべてで第一位を獲得

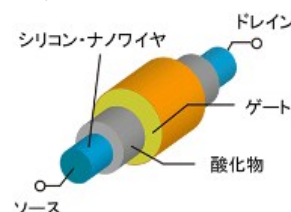
- HPCチャレンジアワード: 科学技術計算で多用される計算パターンから抽出した28項目の処理性能によって、スパコンの総合的な性能を評価するHPCチャレンジベンチマークプログラムから、特に重要な4つのベンチマークをHPCチャレンジアワードとして、毎年11月のSCIにて表彰
  1. Global HPL(大規模な連立1次方程式の求解における演算速度)
  2. Global RandomAccess(並列プロセス間でのランダムメモリアクセス性能)
  3. EP STREAM(Triad) per system(多重負荷時のメモリアクセス速度)
  4. Global FFT(高速フーリエ変換の総合性能)

Global HPL	Performance (TFLOP/s)	System	Institutional Facility
1 <sup>st</sup> place	2,118	K computer	RIKEN
1 <sup>st</sup> runner up	1,533	Cray XT5	ORNL
2 <sup>nd</sup> runner up	736	Cray XT5	UTK
Global RandomAccess	Performance (GUPS)	System	Institutional Facility
1 <sup>st</sup> place	121	K computer	RIKEN
1 <sup>st</sup> runner up	117	IBM BG/P	LLNL
2 <sup>nd</sup> runner up	103	IBM BG/P	ANL
EP STREAM (Triad) per system	Performance (TB/s)	System	Institutional Facility
1 <sup>st</sup> place	812	K computer	RIKEN
1 <sup>st</sup> runner up	398	Cray XT5	ORNL
2 <sup>nd</sup> runner up	267	IBM BG/P	LLNL
Global FFT	Performance (TFLOP/s)	System	Institutional Facility
1 <sup>st</sup> place	34.7	K computer	RIKEN
1 <sup>st</sup> runner up	11.9	NEC SX-9	JAMSTEC
2 <sup>nd</sup> runner up	10.7	Cray XT5	ORNL

# ペタスケール性能の実証:ゴードン・ベル賞



- 2年連続「ゴードン・ベル賞」受賞
  - ゴードン・ベル賞: スパコン分野においてアプリケーションの成果と達成された性能に与えられる賞
  - 平成23年: 次世代半導体の基幹材料として注目されているシリコン・ナノワイヤ材料の電子状態を計算。現実の材料のサイズに近い10万原子規模のナノワイヤの電子状態について、形状や特性を明らかにすることができた。実効性能3.08ペタフロップス(実行効率約43.6%)。
  - 平成24年: 約2兆個のダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算。実効性能5.67ペタフロップス(実行効率約55%)。



## 4. 研究開発の成果等

### (1) 研究開発の成果について

#### 1) システム開発成果

#### ④ 試験利用の成果



# ペタスケールアプリケーションの整備(1/3)



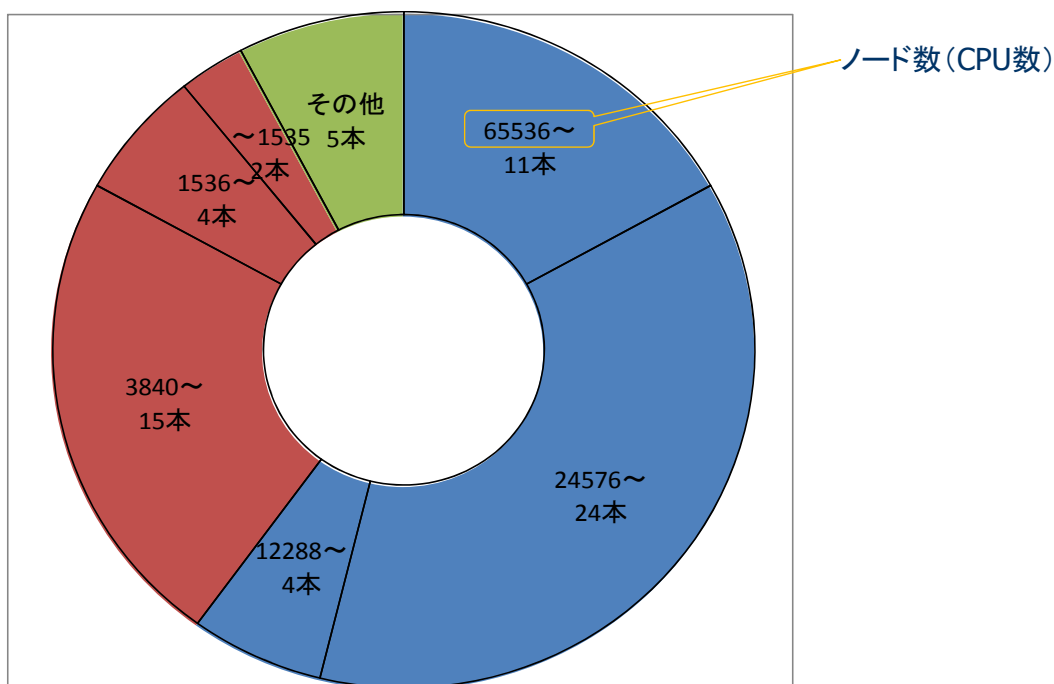
## 重点アプリケーション

プログラム名	分野	アプリケーション概要	期待される成果	手法	効率
NICAM	地球科学	全球雲解像大気大循環モデル	大気大循環のエンジンとなる熱帯積雲対流活動を精緻に表現することでシミュレーションを飛躍的に進化させ、現時点では再現が難しい大気現象の解明が可能となる。	FDM (大気)	81,920ノード 並列 約10%
Seism3D	地球科学	地震波伝播・強震動シミュレーション	既存の計算機では不可能な短い周期の地震波動の解析・予測が可能となり、木造建築およびコンクリート構造物の耐震評価などに応用できる。	FDM (波動)	82,944ノード 並列 約19%
PHASE	ナノ	平面波展開第一原理分子動力学解析	第一原理計算により、ポスト35nm世代ナノデバイス、非シリコン系デバイスの探索を行う。	平面波DFT	82,944ノード 並列 約20%
FrontFlow/Blue	工学	Large Eddy Simulation (LES)に基づく非定常流体解析	LES解析により、エンジニアリング上重要な乱流境界層の挙動予測を含めた高精度な流れの予測が実現できる。	FEM (流体)	82,944ノード 並列 約6%
RSDFE	ナノ	実空間第一原理分子動力学計算	大規模第一原理計算により、10nm以下の基本ナノ素子(量子細線、分子、電極、ゲート、基盤など)の特性解析およびデバイス開発を行う。	実空間DFT	82,944ノード 並列 約55%
LatticeQCD	物理	格子QCDシミュレーションによる素粒子・原子核研究	モンテカルロ法およびCG法により、物質と宇宙の起源を解明する。	QCD	82,944ノード 並列 約15%

# ペタスケールアプリケーションの整備(2/3)



## 試験利用期間のアプリケーション並列度



## ペタスケールアプリケーションの整備(3/3):京上のアプリ例



グランドチャレンジアプリケーション開発事業 (ナノ)	実空間第一原理ナノ物質シミュレータ(ゴードンベル賞)
	大規模並列量子モンテカルロ法
	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
	動的密度行列繰り込み群法
	液体の統計力学理論計算
グランドチャレンジアプリケーション開発事業 (ライフ)	高速量子化学計算ソフト
	全原子分子動力学計算によるタンパク質・細胞動態シミュレーション
	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
	全ゲノムをカバーするSNP遺伝子型を用いた高速計算のための関連解析手法の開発
	無脊椎動物嗅覚系シミュレーション
戦略分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法による生体分子構造サンプリング
	HIFUシミュレータ
戦略分野2 新物質・エネルギー創成	創薬応用シミュレーション
	次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムの開発
戦略分野3 防災・減災に資する地球変動予測	第一原理計算に基づく物質の低エネルギー有効模型導出と有効模型の多変数変分モンテカルロ法を用いた解析
	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測
戦略分野4 次世代ものづくり	防災・減災に資する気象・気候・環境予測研究
	3次元不均質場での地震波と津波の伝播シミュレーション
戦略分野5 物質と宇宙の起源と構造	階層型直交格子を用いた実用複雑系流体解析システムの開発
	原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションの研究開発
	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定
	ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成(ゴードンベル賞)

平成25年2月18日

スーパーコンピュータ「京」事後評価委員会(第2回)資料

32

## 4. 研究開発の成果等

(1) 研究開発の成果について

2) 独創性・優位性について



