

国内の主要なスパコンセンターの調査では、

- ・ 大学や研究機関等の計算機システムに、次世代スーパーコンピュータの技術が垂直展開される状況、条件等を予測するための基礎データの収集
- ・ 次世代スーパーコンピュータ完成後、運用・共用を行う機関の運営検討のための基礎データの収集
- ・ 次世代スーパーコンピュータのアーキテクチャの評価とそれに資する主要なアプリケーションの利用状況に関する情報収集

を行った。調査の結果、

- ・ 国内計算機センターのスーパーコンピュータの性能は世界のスーパーコンピュータセンターの性能向上に比し、長期低落傾向にある。
- ・ 世界的な傾向は年率約 1.8 倍で性能が向上するのに対し、国内のスーパーコンピュータセンターは年率約 1.6 倍の性能向上に留まっている。
- ・ 設置面積や受電設備の容量には、設置面積は約 600 m²以下、受電設備容量は約 1.5MW 以下と、強い制約がある。

ことが分かった (図 2)。

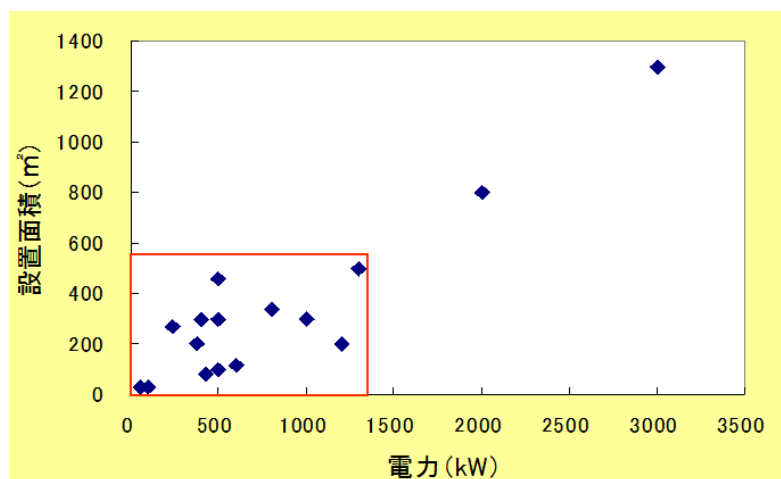


図 2 計算センターの電力的及び設置面積的制約

② システム決定までの成果

次世代スーパーコンピュータを開発するにあたって、具体的なアーキテクチャの提案のあった6組織（東京大学、筑波大学、国立天文台、富士通、日立製作所、日本電気（NEC））と、提案されたアーキテクチャに対するアプリケーションの性能評価に関する共同研究を実施し、平成18年6月末に評価結果をまとめ、システムを絞り込んだ（図3）。

汎用システムについては、ベクトル型プロセッサをベースとしている点で近いNECと日立製作所の提案を1案に集約し、スカラー型プロセッサをベースとする富士通案と共に概念設計を実施することとした。また、アクセラレータについては、どちらもSIMD型プロセッサアレイを採用しているなど、共通する部分が多かったため、国立天文台案と東京大学案を1案に集約し、概念設計を実施することとした。

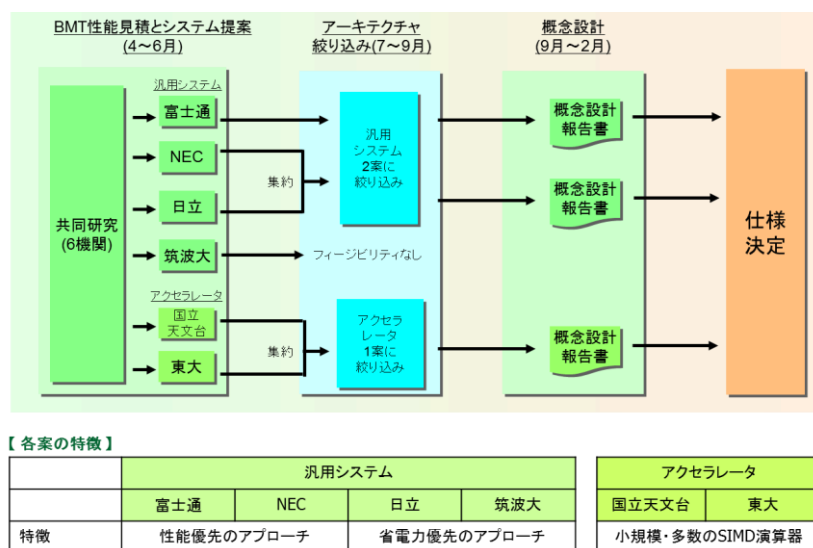


図3 システム候補の絞り込み

③ システム開発における成果

システムは、計画通りに平成24年6月に完成させ、平成24年9月に共用を開始した。システム概要を図4に示す。

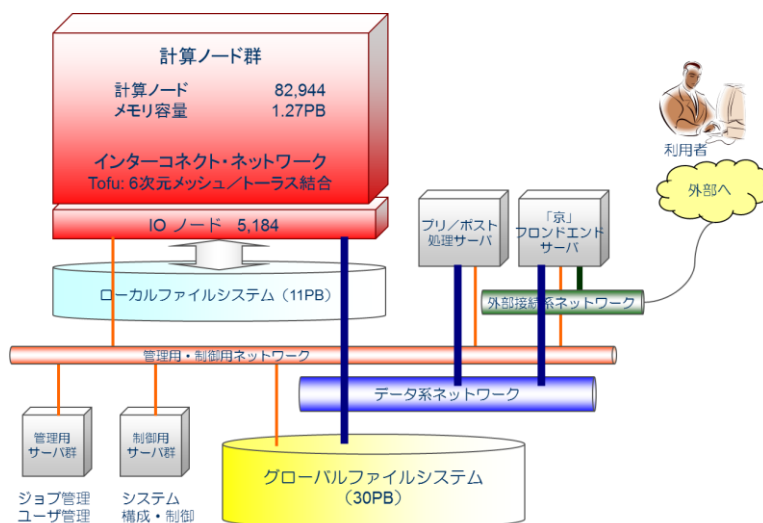


図4 「京」システム概要

性能実証の面では、第 37 回 TOP500 リスト（平成 23 年 6 月）において整備途中の 672 筐体の構成による LINPACK 性能 8.162 ペタフロップスで世界第一位を獲得した。平成 23 年 10 月に、目標としてきた LINPACK 性能 10 ペタフロップスを世界で初めて達成し、第 38 回 TOP500 リスト（平成 23 年 11 月）において全 864 筐体の構成による LINPACK 性能 10.51 ペタフロップスで 2 期連続して世界第一位を獲得した。また、平成 23 年 11 月には同時に HPCG Award（多角的でより現実的なスパコン性能指標となる 4 項目のベンチマークテストランキング）の全 4 項目で最高性能を達成した。HPCG Award 4 項目の値、および 2、3 位の値を表 2 に示す。

表 2 HPCG Award 4 項目の値とその他のシステムの値

Global HPL	性能値 (TFLOP/s)	システム名	設置機関
1 位	2.118	「京」	理化学研究所 計算科学研究機構
2 位	1.533	Cray XT5	米国オークリッジ研
3 位	736	Cray XT5	UTK
Global RandomAccess	性能値 (GUPS)	システム名	設置機関
1 位	121	「京」	理化学研究所 計算科学研究機構
2 位	117	IBM BG/P	LLNL
3 位	103	IBM BG/P	ANL
EP STREAM(Triad) per system	性能値 (TB/s)	システム名	設置機関
1 位	812	「京」	理化学研究所 計算科学研究機構
2 位	398	Cray XT5	ORNL
3 位	267	IBM BG/P	LLNL
Global FFT	性能値 (TFLOP/s)	システム名	設置機関
1 位	34.72	「京」	理化学研究所 計算科学研究機構
2 位	11.88	NEC SX-9	海洋研究開発機構
3 位	10.70	Cray XT5	UTK

この他、計算ノード数（CPU 数）8 万以上という規模でのアプリケーションプログラムのチューニングを行い、スーパーコンピューティング分野で権威のあるゴードン・ベル賞を 2 年連続で受賞した（平成 23 年 11 月には、シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算で、実効性能 3.08 ペタフロップス（実行効率約 43.6%）を達成し、筑波大学・東京大学・富士通と共同受賞。平成 24 年 11 月には、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で、実効性能 5.67 ペタフロップス（実行効率約 55%）を達成し、筑波大学、東京工業大学と共同受賞）。HPCI 戦略プログラムのアプリケーション 5 本を含む合計 9 本のアプリケーションプログラムでペタスケールの実効性能を実現し、高性能 CPU の設計技術、大規模システムの構築技術といっ

た我が国における国家に必要な最先端 I T 技術を獲得し、超高並列計算機による高効率のシミュレーション技術や大規模システムにおける信頼性の高い安定的な運用技術を実証した。

【参考】世界最速獲得の考えられる理由：

世界最速を平成 23 年 6 月及び 11 月の二期にわたって獲得した直接的な理由は以下のとおりである。

- 予想以上に設計品質及び製造品質が良かった。
 - CPU 及び ICC の量産開始後、設計変更はまだ及ぶ不具合がまったくなかった。
 - チップの製造が予想以上に順調であり、チップの製造がラック生産のボトルネックにはならなかった。
- 富士通 IT プロダクツにおいては、ラックの製造を計画的且つ円滑に行えるよう生産設備を整備、組み立て・検査の工夫、部品の手配・納入方法の工夫などを行い、生産体制を整えた。
- 神戸においては、ケーブルの先行手配・事前の床下配線等を行い、ラックの設置・評価が途切れなく行えるよう十分な準備をした。
- 東日本大震災による影響を最小限にとどめることが出来た。
- システムの信頼性が非常に高かった（10PFLOPS の LINPACK 測定時、約 29 時間半、高負荷下で連続稼働）
- 早期に LINPACK 走行を実施し、LINPACK プログラム及びシステムのチューンアップが出来た。
- 平成 22 年度補正予算（183 億円）により、平成 23 年度に予定されていた生産工程を前倒しする予算上の措置が取られた。

以上の理由により、平成 23 年 6 月までにシステムのおよそ 8 割（約 8PFLOPS）を整備するとともに、平成 24 年 6 月までに 10PFLOPS 達成の目標を、およそ半年前倒しして整備することが出来た。また、米国において、イリノイ大学の Blue Waters プロジェクトからの IBM の撤退、LLNL に納入予定だった Sequoia システムに、半年から 1 年の開発遅れがあったこともひとつの理由と考えられる。

④ 試験利用の成果

平成 23 年 3 月末に一部稼働をさせ、グランドチャレンジ実施機関及び HPCI 戦略プログラム 5 分野のユーザに対し、システムの一部の試験利用を開始した。

○試験利用によるアプリケーション性能向上の成果

平成 23 年 4 月～平成 24 年 9 月まで行われた試験利用では、システム性能の確認のために 6 つの重点アプリケーション（表 3）の高性能化を実施するとともに、グランドチャレンジアプリケーション開発（ナノ分野、ライフ分野）及び HPCI 戦略プログラムの 5 分野のアプリケーションに対する高度化に対する助言を行った。

表 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
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)
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)
PHASE	ナノ	平面波展開第一原理電子状態解析	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
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)
RSDFT	ナノ	実空間第一原理電子状態解析	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
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

試験利用期間中にグランドチャレンジ(ナノ、ライフ)及びHPCI戦略プログラム5分野が、高並列実行を目標に高度化したアプリケーションの本数は合計65本である。表4にアプリケーション例を示す。また、図5は、65本のアプリケーションの確認済みの並列度数である。このうち、39本が10,000並列以上の並列度を達成した。

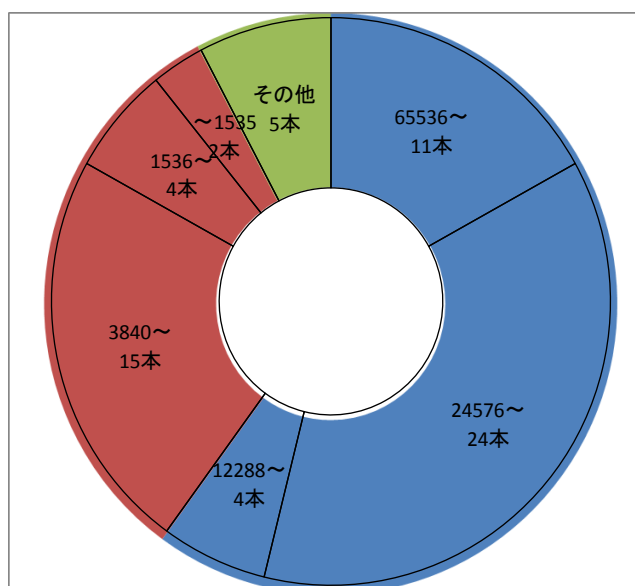


図 5 試験利用期間のアプリケーション並列度

表 4 高度化されたアプリケーション例

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)

試験利用期間中のアプリケーション開発及び最適化を通して確認されたシステムソフトウェアの機能性能に関する障害及び要望に対しては、システムソフトウェアの開発担当者にフィードバックし、修正、改善等を行うことにより、安定したシステム完成に大きく寄与した。この期間の障害、要望、質問などの総件数は791件である。障害、要望、質問等の内訳を図6に示す。また、システムソフトウェアで分類した件数を図7に示す。

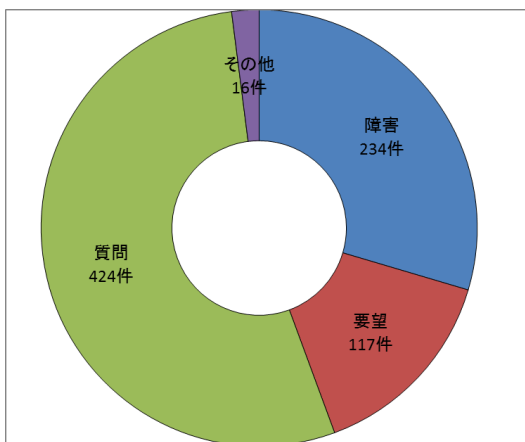


図6 障害、要望、質問の件数

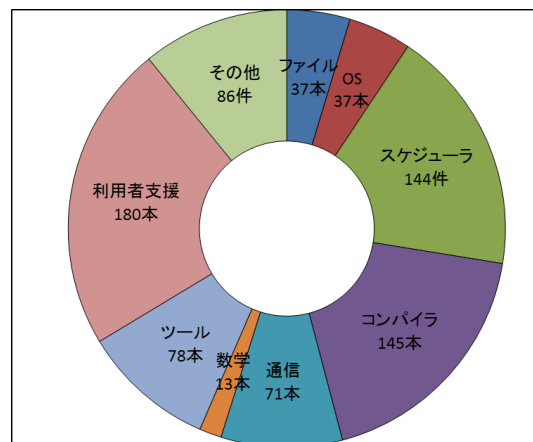


図7 システムソフトウェアによる件数分類

[添付資料1 発表リスト](#)

[添付資料2 受賞リスト](#)

[添付資料3 広報活動の状況](#)

2) 独創性・優位性について

「京」の CPU、インターコネクト、及びシステムソフトウェアの独創性、優位性は以下の通りである。

① CPU

「京」で採用した新規開発の SPARC64 VIIIfx は、8 個のプロセッサコアを備えたマルチコア構成である。コアあたりの演算器は 2way-SIMD (Single Instruction Multiple Data) による動作により 8 演算 (4 積和算) /1 サイクルの演算が行える。また、256 本の浮動小数点レジスタを有する。CPU チップには、6MB の共有キャッシュで利用可能なセクタキャッシュ機構、コア間の同期をハードウェアで行うバリア同期機構など他の CPU には無い新機能を盛り込んだ。特に、セクタキャッシュ機構では、プログラム中のディレクティブ指示により、キャッシュメモリを 2 つの領域 (セクタ) に分け、どちらの領域にデータを配置するのかをユーザが指定できるようにした。演算性能は CPU チップあたり 128GFLOPS を有し、64GB/s という高いメモリバンド幅を持つことで、広範なアプリケーションに対して高性能を実現している。

また、動作周波数を 2GHz に抑え、コールドプレートによる直接水冷を用いてトランジスタのジャンクション温度を 30 度以下とすることで、消費電力は最大 58W と高いエネルギー効率を有している。

② Tofu ネットワークの特徴、性能、利点

インターコネクト・ネットワーク Tofu は、高性能・高信頼性を両立する超大規模並列システム用に新規開発したものである。Tofu の構成は、ノード間を直接接続する直接結合網で、物理的な接続トポロジは 6 次元メッシュ/トーラスである。Tofu は ICC (Interconnect Controller) チップにより構成され、ICC に実装された 10 本のリンクで 6 次元メッシュ/トーラスを実現している。

Tofu では、ユーザはジョブの割当形状として、論理的な 1~3 次元トーラスのネットワークとして利用でき、各ノードは論理的に各方向に対して 5GB/s (双方向) の帯域幅を持つリンクで接続されている。

ネットワークに経路障害が発生しても、代替経路やルーティングの変更により、自動的に迂回ルートを構成し、運用に影響を与えない。10 本のリンクを活用することで、通信経路の短縮や高いバイセクションバンド幅によるアプリケーション性能が向上する。

③ システム信頼性

CPU チップの低い動作温度 (30°C) により、故障率低減に大きな効果がある。また、CPU や ICC には「エラー検出・訂正機能」を備えており、また CPU には命令再実行機能を持っている。

Tofu インターコネクトでは、ICC に実装された 10 本のリンクを活用することで部分的な故障ノードの回避が行える。そのため、故障が発生してもその影響範囲を局所化することができ、ネットワーク帯域の減少なしに、故障ノード以外のシステムは通常の運用を継続することができる。

これらの機能に加えて、運用・管理系の各種サーバ（ログインサーバ、ファイルサーバや管理サーバなど）の二重化、RAID 装置やスイッチ機器の二重化、さらに、それらのデータパスの二重化などの HA（High Availability）構成によって、ハードウェア的な単一障害によるシステム全停止が無い構成とし、システム全体の信頼性、可用性の向上を図っている。

④ システムソフトウェアの独創性・優位性

a) 運用管理ソフトウェア

「京」では、ノード管理やプロセス管理といった膨大な数のリソースを管理する方法として階層構造を取り入れ、負荷分散および効率のよい管理を実現している。また、一点故障によるシステムの全系停止を防止するため、重要な管理ノード群はすべて冗長構成とし、トラブル発生時には自動的にノードを切り替え、ファイルシステムを含めた計算ノード以外のノード故障ではジョブが停止しない設計となっている。

b) ジョブ管理システム

大規模並列ジョブだけでなく、大量ジョブの同時投入、ノード割当て、ジョブ実行、ジョブ終了等の処理を高速にかつ安定して動作させるために、今回開発したスケジューラでは、内部の処理ブロック毎に複数のスレッドを割り当て、各処理の動作がスケジューラ全体のスループットに影響しないような設計とした。そのため、大量のジョブが実行開始・終了するような高負荷状況においても、システム全体のスループットは低下しない。また、ユーザの様々なニーズに対応できるように、複数のスケジューリングポリシーを実装している。グループ/グループ内ユーザ階層を持つフェアシェア、各種優先度、各種制限値等のポリシーの評価順序を自由に設定することが可能で、ジョブが使用できるノード数、経過時間等の制限値データを管理する「ジョブ ACL 機能」と組み合わせる柔軟なシステム運用及びカスタマイズが可能である。

c) ジョブスケジューリング

Tofu インターコネクトの高可用性を活用し、ジョブ単位で 1 次元、2 次元、3 次元論理トラスネットワークを構成することが可能となっている。これは他のシステムにはない機能である。

d) オペレーティングシステム

ユーザ資産が継続的に利用できることを目的に Linux OS をベースに拡張・強化した。CPU や Tofu インターコネクトなどのハードウェアをアプリケーションから直接利用できるような機能拡張し、アプリケーションの高速化を実現している。その他、システムを長期にわたって安定動作させるため、OS レベルでの耐故障性の強化及び向上を行っている。運用管理システムは、OS から故障通知を受け取ると、故障ノードの運用からの切り離し等を行い、システムの運用へ影響を及ぼすことなく故障個所の復旧を行うことができるようになっている。

e) ファイルシステム

オープンソースの並列ファイルシステムである Lustre をベースとし、数千規模の OST (Object Storage Target: ファイルデータの実態を格納する論理 Volume) への対応や、QoS (Quality of Service: 優先制御や帯域制御) によるファイルサーバの処理能力の割り当て制御などといった機能拡張を行い、大規模システムでの運用を可能とした。ユーザアプリケーションからは MPI-IO などの API を利用して数万に及ぶ IO ノードで並列に IO 処理を実行し、ペタバイトオーダーの大規模ファイルに高速にアクセスすることができる。また、複数のジョブを実行する際には、ジョブが実行される計算ノードが使用する IO ノードとディスクをそのジョブが専有できるようにファイルを配置し、複数の並列プログラムのファイルアクセスがネットワーク上で競合しないようにしている。

f) コンパイラ及び MPI ライブラリ

「京」のハードウェアが持つ様々な機能を活用するための Fortran、C/C++ 言語コンパイラを開発した。アプリケーション中のループ内演算だけでなく非ループ部分の演算も SIMD 命令化する機能、256 本の浮動小数点レジスタの割付けの最適化、命令スケジューリングの強化、4 倍精度演算の高速化、及びコア間ハードウェアバリア機構などの GPU 機能と自動並列化機能を組み合わせたスレッド並列化などが組み込まれている。なお、言語仕様は、Fortran、C/C++ の標準の言語仕様に加えて、GCC 拡張仕様もサポートしている。

MPI ライブラリでは、RDMA 通信をベースにインターコネク ト Tofu の特徴を最大限に活かす集団通信アルゴリズムや低遅延通信を実現するアルゴリズムを採用している。

g) 開発支援ツール

「京」のような超並列システム上でのプログラム開発を円滑に行い、かつ高性能チューニングを容易に行うことのできる数学ライブラリ、会話型デバッガや、可視化によるプロファイラなどを新たに開発した。

【参考】 Sequoia、Titan との比較

平成 24 年 6 月には米国ローレンス・リバモア国立研究所の Sequoia、平成 24 年 11 月には米国オークリッジ研究所の Titan が、TOP500 リストで第一位となったが、これらは「京」より後に開発したものであり、より最先端の技術が利用できることにより、電力性能比を良くしている面がある。以下に、Sequoia と Titan のシステム内容、及び「京」との比較を示す。

Sequoia は、米国エネルギー省の Advanced Simulation and Computing (ASC) プログラムの一環として、国家核安全保障局が主導的に進めている核兵器の性能、安全性、信頼性を解析・予測することを主たる目的として開発されたスーパーコンピュータであり、米国ローレンス・リバモア国立研究所に設置されたシステムである。IBM が目標性能 20 ペタフロップスとして開発した。アプリケーションプログラムの実効性能や使いやすさに関係する演算性能あたりのメモリ容量、CPU・メモリ間のデータ転送性能や CPU 間のデータ転送性能では、「京」が優位である。一方、Sequoia は理論ピーク性能で「京」の約 2 倍となっているほか、

消費電力性能や設置面積で「京」よりも優位となっている。

Titanは、米国エネルギー省が進める Advanced Simulation and Computing (ASC) プログラムの一環として、自然科学の幅広い分野での活用を目的として開発されたスーパーコンピュータであり、米国オークリッジ国立研究所に設置された。Cray が中心に目標性能 27 ペタフロップスとして開発した。汎用 CPU に加え、GPGPU による演算加速ボードにより構成。GPGPU 部分が総演算性能の 90% を担うことで、対性能比での低コストと省電力等を実現しているが、性能を引き出すためには専用の言語でのプログラミングが必要となるため、ソフトウェアの開発や既存のソフトウェアの継承が難しいと考えられる。また、一般的に実効性能が GPU だけのシステムに比べて劣る。

	「京」	TITAN	Sequoia
ノード数	88128 (88128CPU)	18688 (CPU+GPU: 18688)	98304
1ノードあたりの演算性能(GFLOPS)	128	1452.8 (CPU: 140.8+GPU: 1310)	204.8
理論ピーク性能(PFLOPS)	11.28	27.11 (CPU: 2.63+GPU: 24.48)	20.13
リンパック性能(PFLOPS)	10.51	17.59	16.32
リンパック実行効率(%)	93.2	64.8	81.1
メモリ容量(PB)	1.3	0.67 (CPU: 0.57+GPU: 0.10)	1.5
演算性能あたりのメモリ容量 (TB/PFLOPS)	122.1	25.7 (CPU: 221.9、GPU: 4.4)	76.3
演算性能あたりのメモリ帯域 (B/FLOP)	0.5	CPU: 0.36 GPU: 0.19	0.2
演算性能あたりのインターコネク ト帯域(B/FLOP)	0.39	CPU部分のみ: 0.19 全体(GPU含む): 0.019	0.1
設置面積(m ²)	約1500	約400	約300
消費電力(MW)	12.7	8.2	7.9

(2) 成果の利活用について

1) アプリケーション最適化技術の取得とその展開

共用開始に先立ち、システム性能を実証するために重点アプリケーション(表 3)の最適化を行った。最適化において、重点アプリケーションの超並列性を最大限に引き出し、またプロセッサに導入された新機能や強化された機能を十分活用するためのプログラミング技術の習得を行った。

重点アプリケーションについては、以下の性能が得られ、「京」の優れたシステム性能を実証する事ができた。

NICAM:	81920 ノード並列、ピーク性能比約 10%
Seism3D:	82944 ノード並列、ピーク性能比約 19%
PHASE:	82944 ノード並列、ピーク性能比約 20%
RSDFT:	82944 ノード並列、ピーク性能比約 55%
FrontFlow/Blue:	82944 ノード並列、ピーク性能比約 6%(現在も最適化中)
LatticeQCD:	82944 ノード並列、ピーク性能比約 15%

また、最適化によって得られたチューニング技術は、他のアプリケーションの高度化に活用された。図8は主なアプリケーションの並列度である。ペタスケールのアプリケーション実行を実現することにより、「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出来た。

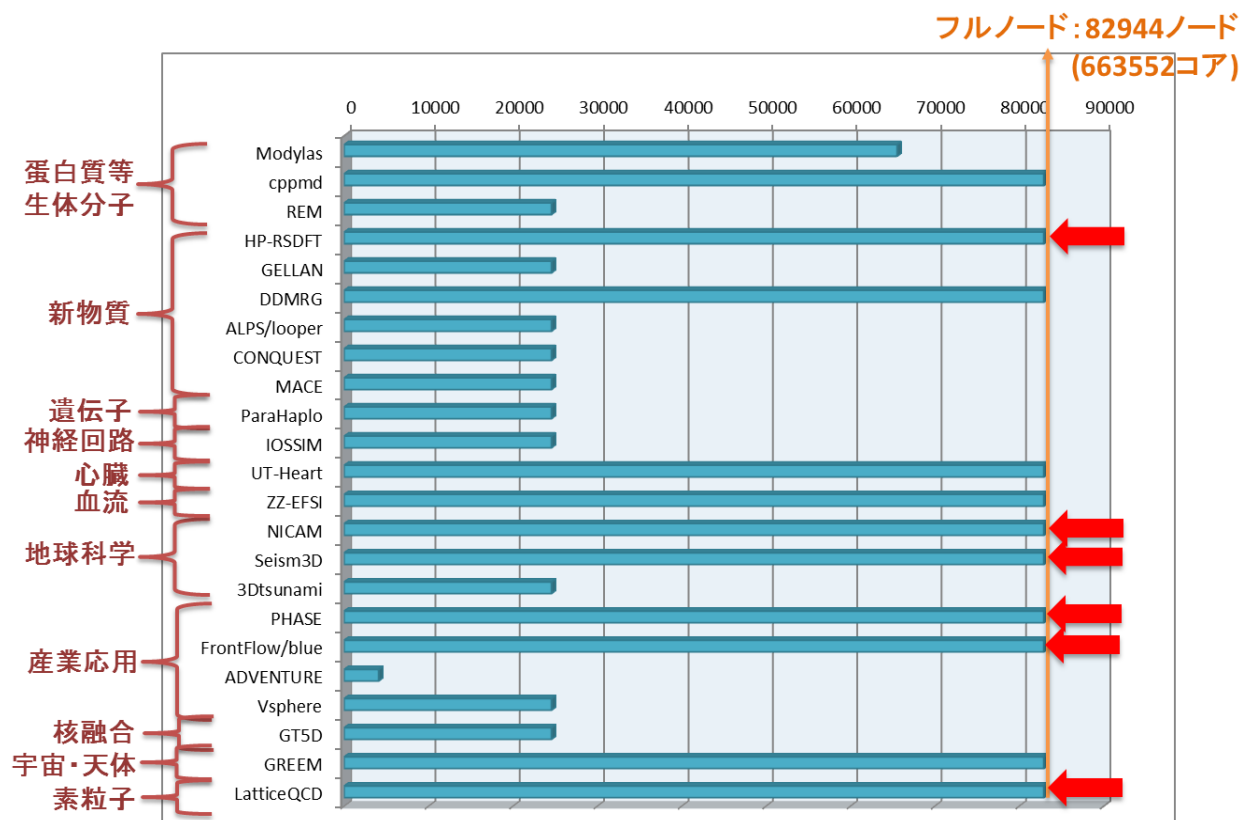


図8 主なアプリケーションの並列度

2) システムソフトウェアで得られた成果の活用

① OpenMPI フォーラムへの貢献

「京」で用いている MPI ライブラリは、OpenMPI をベースとしており、Open MPI の開発者用メーリングリスト devel@open-mpi.org に対して、発見した 20 件のバグレポート（平成 24 年 12 月時点）を行うとともに、バグ修正に関するパッチ提供を実施した。

② Lustre ファイルシステム・コミュニティへの貢献

富士通が検出したバグ修正（平成 24 年度は 9 件）をコミュニティにフィードバックした。最新の Lustre 2.3 のリリースノートには、コントリビュータとして富士通の名前が掲載されている。

また、富士通が拡張した部分については、Lustre コミュニティの開発主体である Intel（旧 Whamcloud）と協業し、Lustre 2 ソースにマージする作業を実施中であり、拡張全 28 項目中、平成 25 年度末で 20 項目までマージする作業が完了する予定である。

3) システム開発技術の製品への展開

富士通は、「京」に適用したスパコン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 7 日より開始した。プロセッサからミドルウェアまで富士通で開発しており、高い信頼性と運用性を備え、また顧客の要望にあわせて 1 ラック、2.5TFLOPS から、1,024 ラック、23.2PFLOPS までの超高速、かつ高いスケールビリティを実現している。

4) 特許等

添付資料 4 特許申請一覧（富士通）

(3) 人材育成について

1) 理化学研究所

今回の開発プロジェクトを通して、大規模スーパーコンピュータ開発の経験が理化学研究所に蓄積された。「京」の開発・整備をすすめる過程で、大規模プロジェクトマネジメント手法、スーパーコンピュータの構築に関する知見・ノウハウ、アプリケーションのチューニング手法が、また一部稼働による試験利用・共用開始後の運用を通じて、10 ペタフロップス級のスーパーコンピュータの運用ノウハウなどが得られ、将来、同様の大規模なスーパーコンピュータ開発プロジェクトを遂行しうる人材が育成された。これらの人材が、得られた開発経験や知識等を生かして、「京」の運用業務や支援業務を統括・実施している。また、事務部門においても、大規模プロジェクト遂行で必要となる企画調整、契約、経理、建設などに関するノウハウが蓄積され、同様の大規模プロジェクトを遂行出来る人材が育成された。

さらに、研究部門の活動を通じ、「京」の高度化研究が進展し、計算機科学や計算科学、両者の連携を担う最先端の研究者が育成されている。

2) アプリケーション開発者の育成

試験利用期間内に 11 回の講習会を実施し、大規模アプリケーションの並列化手法、「京」のアーキテクチャ向けの最適化手法などの教育を行った。週 2 回の定例ミーティングを通して、システムの習熟を図り、また実際のアプリケーションの並列化作業を通して、アプリケーション開発者に大規模並列化技術を習得させ、計算科学と計算機科学の両分野に習熟した人材が育成された。

3) メーカーの人材育成

「京」の開発には設計・製造を担当した富士通だけでなく、富士通関連会社、または部品製造会社など多数の企業が参加した。これらの企業内には最先端の技術開発能力や製造技術が蓄積され、これらの技術に精通した多数の技術者が育成された。システムの設計・製造に関わった人数は、1,000 名規模である。

富士通本体では、大規模システム開発のプロジェクトマネジメント技術、大規模システム構築技術、超高速 CPU 設計技術、冷却技術、高密度実装技術、大規模ネットワーク技術、大規模システムソフトウェア開発技術等、多くの技術が蓄積され、関連の技術者が育成された。また、添付資料 5 に示す通りハードウェア関連の参加企業には、最先端の技術開発を行った企業も多くあり、開発を通して関連技術を有する人材育成が図られた。

5. 今後の展望

(1) 「京」利用による早期の成果創出

「京」の試験利用により、HPCI戦略プログラムの5分野の多くのアプリケーションが「京」上で動作しており、早期の成果が期待できる。例えば、以下のような成果が期待される。

心臓の動きについて、これまで細胞・組織・臓器の部分的にしか再現できなかったものを、細胞・組織・臓器をすべて含めた統合シミュレーションで心臓全体をありのままに再現することが可能となり、医学系とも連携して、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価を効率的に実施する

地震・津波の被害予測について、今までの50m単位(ブロック単位)のモデルによる予測から、より実際に近い地盤沈下や液状化などの複合災害を加味した10m単位(家単位)での予測などを可能にする。地方自治体と連携を進め、都市整備計画への活用による災害に強い街づくりやきめ細かい避難計画の策定等に貢献する。

薬の開発に当たって、病気の標的タンパク質と薬の候補物質との結合をこれまで出来なかった精度で高速にシミュレーションすることにより、新薬候補の物質を選別する期間を約2年から約1年へと半減できると考えられる。実際、創薬応用シミュレーションによりガン治療の標的タンパク質に対し、890の薬剤の候補の中から有力な2個の薬剤に絞り込むことが出来た。

産業利用については、産業界からの意見や要望を把握し、産業界が「京」を有効活用するための情報提供および支援体制の構築、産業利用課題枠の確保などを行い、産業利用の促進が図られつつある。今後は、「京」の利用を通して製品開発のコストダウン、製品開発期間の短縮、画期的な製品開発が行われ、産業の競争力向上に大きく貢献することが期待される。

また、共用開始以降の課題については、登録施設利用促進機関である一般財団法人高度情報科学技術研究機構が募集、選定を行い、表5の件数が採択されている。この中で、特に産業利用の課題も25件採択されており、自動車工業会や複数の製薬企業など我が国の代表的な企業が参加しており、成果の早期創出が大いに期待される。実際、図9に示す通り、平成24年9月末の共用開始以降、多くの利用者が「京」を利用しており、平成25年2月の時点で、一日平均146名のユーザが使用している(利用登録者数は1272人)。また、京の利用を開始した課題は143課題となっており、十分な利用実績を上げている。これらの課題の中から多くの成果が創出され、また産業界へのスーパーコンピューティング技術の普及が進むものと考えられる。

表 5 平成 24 年度の課題採択件数

	採択件数
「京」一般利用	29*
「京」若手人材育成利用	8
「京」産業利用	25
合計	62

*「京」を本格利用する準備のための機会を提供し、「京」の利用促進と裾野拡大に資するため、この 29 課題のほか、20 課題が選定された。

※この他、

- 1) HPCI 戦略プログラムの戦略機関が提案した利用希望課題について、文部科学省が配分内容を決定する「京」戦略利用として 35 課題、
- 2) 理化学研究所が、「京」の安定運転のためのシステム調整、幅広い分野のユーザの利用に資する高度化研究を実施する「京」調整高度化利用としての課題などがある。

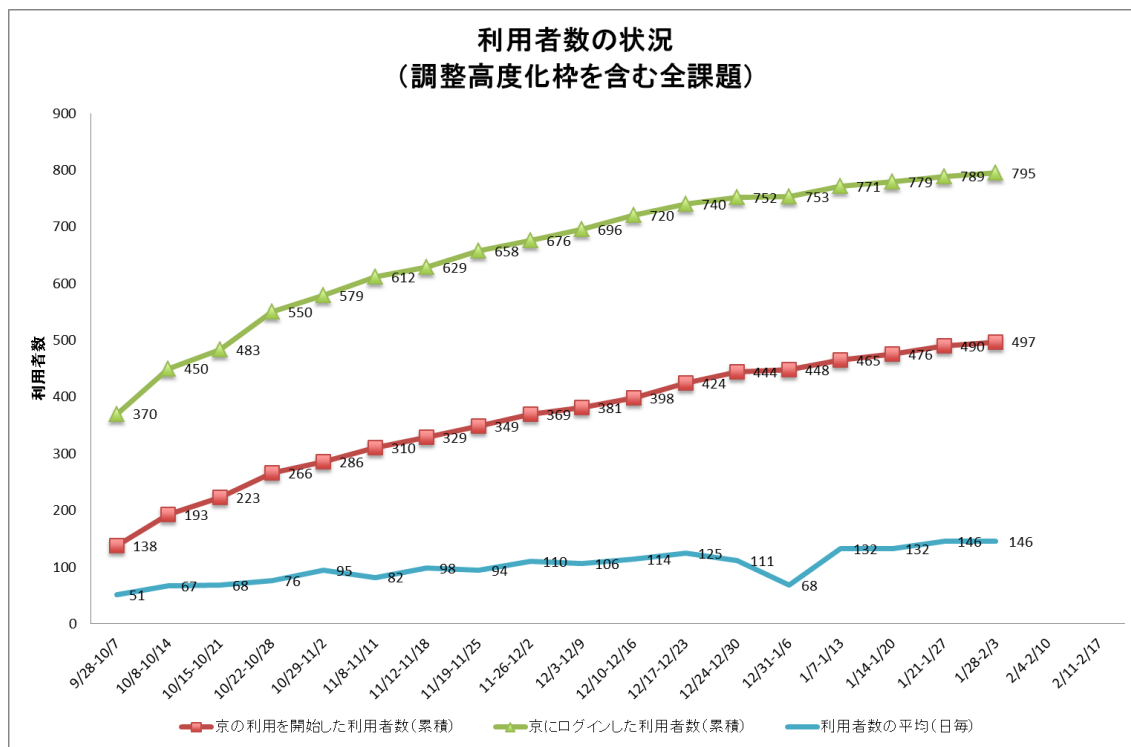


図 9 「京」の利用者数

(2) 神戸医療産業都市構想において「京」に期待されるもの

「京」が立地している地元の兵庫県と神戸市並びに産業界は、平成 18 年1月に、財団法人計算科学振興財団(FOCUS)を設立し、最先端の研究機関や大学と連携し、「京」での研究開発や産業利用を促進している。FOCUS が運営している計算科学センタービルには、「京」の利用を担う人材および計算科学分野における研究者・技術者の育成、国際的な大学連携拠点の形成を図るために開設された兵庫県立大学大学院が入居している。

HPCI 戦略プログラムが研究開発してきた「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア」を「京」で活用することによって、今まで不可能であった、人間体内の分子、細胞、臓器などの働きや現象を統合的に(=バラバラでなく全部丸ごと)理解・解析することが、世界で初めて可能となるが、その成果として、医薬品の革新的な開発や、新たな医療技術・診断システムの実用化につながるものとして、大きく期待されている。「京」は、ポートライナーの医療センター駅周辺に集積が進んでいる神戸医療産業都市の中核施設群から、約 500m 圏内という近接した位置に立地しており、中核施設群で研究開発を行っているライフサイエンス分野の研究者と、計算科学分野の研究者との交流の促進や、ライフサイエンス研究との連携により、今後、神戸医療産業都市の進展に大きく寄与すると期待されている。

また、兵庫県及び神戸市は、「京」周辺に、スパコンを利用する大学、研究機関、企業等の組織や人材が集積する研究教育拠点(COE)の形成に向けて取り組んでおり、その一環として、「京」の立地効果を最大限に活用し、防災・減災や創薬など、「京」を活用した最先端の研究に対して県市協調のもとに助成(平成 23 年度～平成 28 年度(予定))を行っている。

6. その他

「京」は、10 ペタフロップス規模のシステムとしては、早期に安定稼働状態に入っており、今後の幅広い成果創出が大いに期待される。