

# スーパーコンピュータ「京」の開発・整備 説明資料

平成25年2月18日

独立行政法人理化学研究所  
計算科学研究機構

スーパーコンピュータ「京」事後評価委員会(第2回)資料

## 1. 課題の概要

# 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト(当初計画)



平成18～24年度(総事業費) : 1,154億円\*  
\*プロジェクト開始時点における総事業費。

1. 目的 世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータの開発・整備及び利用技術の開発・普及

## 2. 概要

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年度の稼働(平成24年の完成)を目指して開発する。

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「次世代スーパーコンピュータ(注)」の開発・整備

(注) 10ペタFLOPS級

(1ペタFLOPS:1秒間に1千兆回の計算)

(2) 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。

## 3. 体制

(1) 開発主体である独立行政法人理化学研究所を中心とした産学連携体制を構築。

(2) 特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律を整備し(平成18年7月施行)、産学官の研究者等に幅広く開かれた共用施設として位置付け。

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

2

## 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(平成22年度～)



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ため、我が国の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を平成24年の完成を目指し開発・整備する(平成22年度一部稼働、平成24年6月までにLinpack実効性能10ペタフロップスを達成)。

【開発年次計画】		平成18年度 (2006)	平成19年度 (2007)	平成20年度 (2008)	平成21年度 (2009)	平成22年度 (2010)	平成23年度 (2011)	平成24年度 (2012)
システム		概念設計		詳細設計		試作・評価・製造・性能チューニング		
施設	計算機棟	設計		建設		6月末完成 9月28日 共用開始		
	研究棟	設計		建設				

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

3



## 2. 研究開発目標

### 研究開発目標



次世代スーパーコンピュータ「京」を中核とし、多様なユーザーニーズに応える革新的な計算環境を実現するHPCI(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)を構築するとともに、この利用を推進する。

**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ユーザ等からなるコンソーシアムを形成し、この主導により、平成24年11月を目途に次世代スーパーコンピュータ、国内の主要スーパーコンピュータ、ストレージを用いた高度なコンピューティング環境を実現するインフラ(HPCI)を構築し、運用を開始する

③HPCI を用いた画期的な研究成果の創出を図る

**④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**

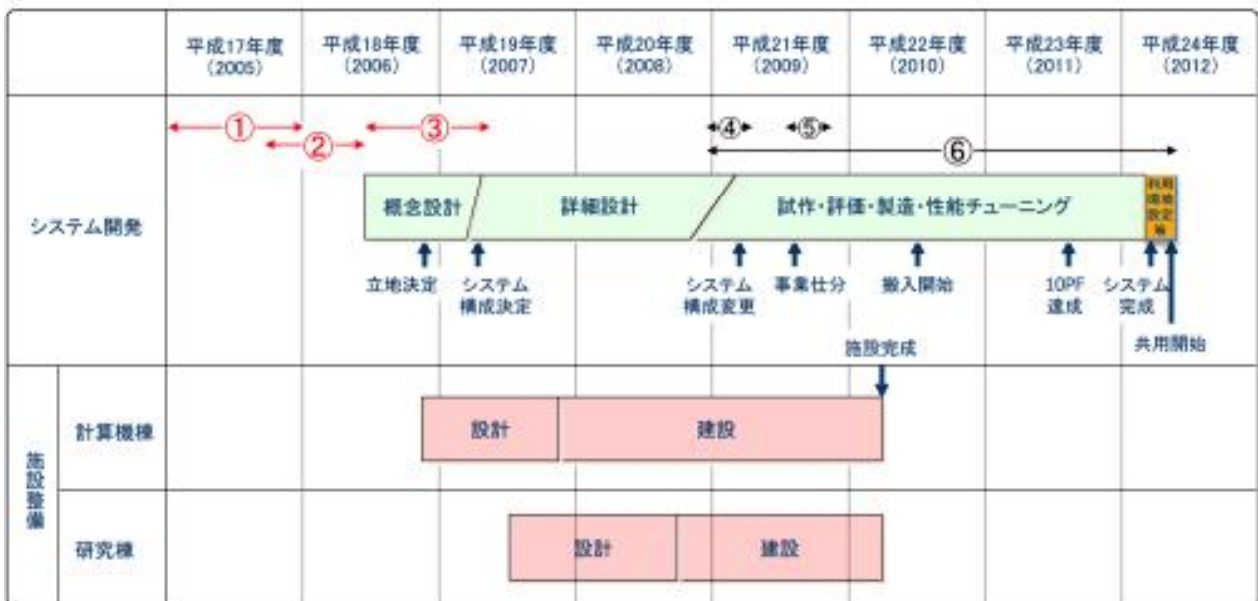
(文部科学省科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会情報科学技術委員会(第68回・平成22年8月20日)「資料2-1:「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築」に係る平成23年度概算要求に向けた事前評価用参考資料」より引用)



# 3. 課題の達成状況等

## (1) 研究開発目標の達成状況等について

## システム開発経緯



## ①プロジェクトの立ち上げ

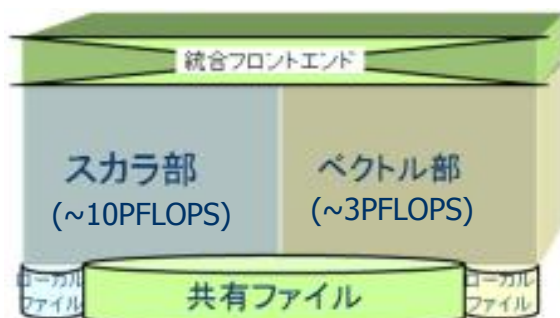
- 平成16年8月：  
文部科学省 科学技術・学術審議会 研究計画・評価部会  
情報科学技術委員会の下に、「計算科学技術推進WG」を設置
- 平成17年8月(平成18年度予算概算要求)：  
「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト(案)  
期間 H18年度～H24年度  
総事業費 1,154億円
- 平成17年10月：  
文部科学省は、理化学研究所を開発主体として選定
- 平成17年11月：  
総合科学技術会議(CSTP)にて、プロジェクト事前評価  
評価結果:実施することが適当  
指摘事項(システム): 計算機システムの構成そのものを基本に戻って  
練り直し、最適化を行っておく必要がある
- 平成18年4月：  
第3期科学技術基本計画開始: 次世代スーパーコンピューティング技術  
が国家基幹技術に  
次世代スーパーコンピュータプロジェクト開始

## ②事前調査・共同研究・概念設計

- 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部設置(平成18年1月1日)
  - 本部長: 野依理事長
- スーパーコンピュータセンター調査(平成18年1月～5月)
  - 将来のセンター運用の在り方・要望・アプリケーション動向等調査
- アプリケーション検討部会(平成18年4月)
  - 部会長: 平尾東大教授(当時)
  - システム評価用に21本のターゲットアプリケーション選定
- 共同研究の実施(平成18年6月～9月)
  - システム概念構築
  - 8機関: 日立、九大、筑波大、東大、国立天文台、JAMSTEC、NEC、富士通
- 概念設計(平成18年9月～平成19年9月)
  - 平成18年9月より、以下3案につき概念設計を実施
  - スカラ型プロセッサ主体のシステム: 富士通
  - ベクトル型プロセッサ主体のシステム: NEC/日立
  - アクセラレータ主体のシステム: 国立天文台/東大

### ③概念設計とその評価(1/2)

#### ■ 概念設計結果のシステム構成



#### ■ 複合システムの採用

- 効率的なシミュレーションの実行及びシステムの運用が可能
- 将来の我が国のスパコン開発の技術力、国際競争力等の向上に一層貢献する
- 本プロジェクトの波及効果を最大化できる

### ③概念設計とその評価(2/2)

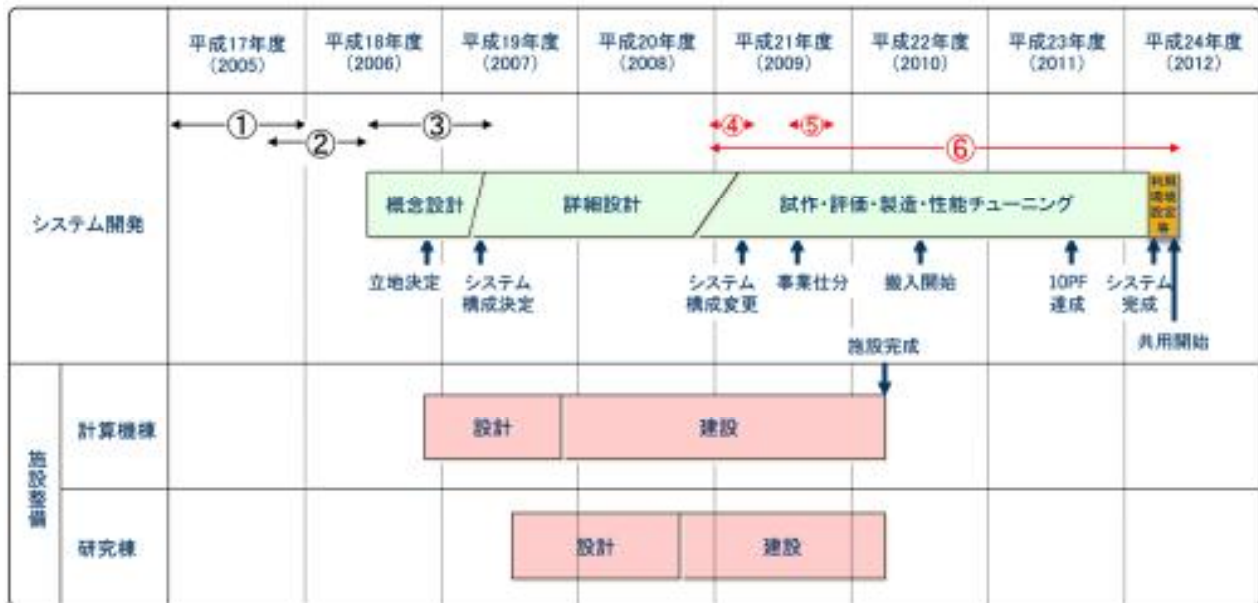
#### ■ 文部科学省概念設計評価作業部会の評価(平成19年6月6日)

- システム構成案は、適切なものであると評価する
- 主な指摘事項
  - Linpack10ペタFLOPSの達成を目指した研究開発は妥当であると考えているが、世界的な開発競争の中で不確定要素を含むものであるなど、将来的な不確定要素に柔軟に対応できる取組みが必要であると考えている
  - 本システムを一体的に運用するためのトータルシステムソフトウェアの開発について、より一層の検討・取組みが必要である

#### ■ 総合科学技術会議の評価(平成19年9月13日)

- システム構成案については、(中略)革新性のあるものとなっており、計算速度に関する定量的な性能目標については達成可能であると判断される
- 多様なアプリケーションに適用できる汎用性(中略)の観点からも、複合システムには有効性が認められる
- (前略)理研が作成したシステム構成案が適切なものであり引き続き研究開発を進めるべきであるとした、文部科学省の評価結果は概ね妥当である

# システム開発経緯



## ④ 中間評価とその結果(1/2)



- 中間評価開始時点の計画
  - 平成23年6月: LINAPCK 5PF程度
  - 平成24年6月: LINPACK 10PF達成
- 第3回中間評価作業部会(平成21年4月22日)からの指摘と構成見直し
  - 米国の開発が加速している中、現行計画ではプロジェクトの目標達成は困難
  - 複合システムの将来的な可能性は認めるものの、現時点での開発状況を踏まえれば複合システムとしての性能は十分ではなく、一定の見直しが必要
  - 複合システムの在り方を含め、プロジェクト目標を念頭に置いた最適なシステム構成を再検討すること
- NEC製造段階への不参加表明(平成21年5月13日)
  - 理由: 経済状況の悪化により製造に関する投資が業績に大きな影響を与える

## ④中間評価とその結果(2/2)

- 新システム構成と日程
  - システム構成 : スカラ型単一システム(LINPACKで10PFLOPS)
  - 日程 : 平成23年6月5PFLOPS、平成23年11月10PFLOPS
  - 追加経費 : 約110億円
  
- 評価結果
  - LINPACK10PFLOPSクラスのシステムを最大限加速する最も実現性の高い案であり、妥当であると評価する。追加経費は、国において、予算措置が適切になされることを期待する

## ⑤事業仕分けと計画変更

※スーパーコンピュータ「京」事後評価委員会(第1回)資料3より抜粋

### 政府の事業仕分け(平成21年11月)を受けた次世代スーパーコンピュータ計画の変更について

◎事業仕分けの評価結果(「未年度の予算計上の見送りに限りなく近い縮減」等を踏まえた平成22年度予算編成過程における4大臣合意(※1)に基づき、以下のように変更した。

※1菅副総理兼国家戦略担当大臣、仙谷行政刷新担当大臣、藤井財務大臣、川端文部科学大臣により平成21年12月16日に合意。

◎平成22年度予算編成過程における計画の変更点

- スパコン開発側視点から利用者側視点に転換
- 次世代スパコンを引き続き開発するとともに、国内の様々なスパコンとネットワークで結び、より多くのユーザーが利用できる革新的な基盤構築を目指す(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))。
- システム開発費総額から開発加速のための経費110億円を削減。

●システム製造に係る経費(国庫債務負担行為)  
 H22概算要求時 総計600億円 → 変更後 総計490億円(▲110億円)  
 (H22-23:2年間) (H22-24:3年間)

●10ペタフロップス達成時期  
 平成23年11月 → 平成24年6月までに

◎事業仕分けにおける指摘事項

事業仕分け第3WG評価コメント	コメントに関する検討・対応
○スパコンの国家戦略を再構築すべき。現状はスパコンの巨艦巨砲主義に陥っていないか。	○スパコン開発側(供給者)始点から利用者側視点に移し、多様なユーザーニーズに応えるための革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラを開発。 ○10ペタ級スパコンの開発のみならず、国内の小規模なスパコンとの連携・協力を進め、より多様で効果的な利用を目指す。
○世界一の頂のみを目指す時代ではない。 ○世界一を目指す必要はない。	○世界一の速度性能の追求から脱却し、10ペタFLOPS級達成時期を「H23年11月」から「H24年6月までに」に変更。開発加速のため計上していた110億円を削減。



## ⑥製造開始とシステム完成(平成21年3月～平成24年9月)(1/2)



- a) 試作評価から製造開始(平成21年3月～平成22年8月)
  - 平成21年3月:CPUチップ試作・評価開始
  - 平成22年度初め頃:CPUチップ量産開始(製造開始)
  - 平成22年5月末:計算科学研究機構建屋・施設完成
  
- b) 搬入・設置から一部稼働(平成22年9月～平成23年3月)
  - 平成22年9月末:筐体搬入・設置開始
  - 平成22年11月:SC10に最初のLINPACK値登録
    - 48.03TFLOPS、効率91.97%、  
電力性能比828.67MFLOPS/W (GREEN500 第4位)
  - 平成23年1月:LINPACK測定 1PFLOPSを超える
  - 平成23年3月11日:東日本大震災
    - 3~4週間の生産停止で復旧
  - 平成23年3月末:一部稼働 ⇒試験利用開始

## ⑥製造開始とシステム完成(平成21年3月～平成24年9月)(2/2)



- c) TOP500第一位から共用開始(平成23年4月～平成24年9月)
  - 平成23年6月:ISC11にLINPACK登録
    - 8.16PFLOPS(効率93.03%):世界一獲得
  - 平成23年10月:目標性能10PFLOPS達成
  - 平成23年11月:SC11にLINPACK登録
    - 10.51PFLOPS(効率93.17%):2期連続して世界一獲得
  - 平成24年6月末:システム評価を完了し、システム完成
  - 平成24年9月28日:計画を約2か月早めて共用開始

# 目標達成状況

研究開発項目	達成状況
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	<ul style="list-style-type: none"> <li>○平成23年10月にLINPACK性能 10.51ペタフロップスを達成した。</li> <li>・第37回TOP500(平成23年6月):整備途中の672筐体で8.162ペタフロップスを達成し、世界第一位獲得</li> <li>・第38回TOP500(平成23年11月):全864筐体で10.51ペタフロップスを達成し、2期連続して世界第一位獲得</li> <li>・HPC Awardの全4項目で最高性能を達成(平成23年11月)</li> </ul>
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	<ul style="list-style-type: none"> <li>○「京」の搬入が開始される前までに建屋を完成させるという目標通りに、平成22年5月末に建屋を竣工させた。</li> <li>○平成22年7月に計算科学研究機構を、平成22年10月には計算科学研究機構の中に研究部門を設立し、さらに、HPCI戦略プログラムの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、これを実現し、最先端コンピューティング研究教育拠点を整備した。</li> <li>○計算科学研究機構とHPCI戦略プログラムの戦略機関とで、定期的に連携推進会議を開催し、連携する体制を構築している。</li> </ul>

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

18

# 立地と施設整備

立地検討部会(座長:黒川元日本学術会議議長)による評価を踏まえて、理研が決定(平成19年3月)

所在地	兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目 (ポートアイランド第2期内)
-----	------------------------------------

### 【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

この他、電源を供給する特高変電施設、計算機棟の空気を冷却する冷凍機、及び環境負荷低減のためのCGS(自家発電)設備等を設置



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

19

# 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

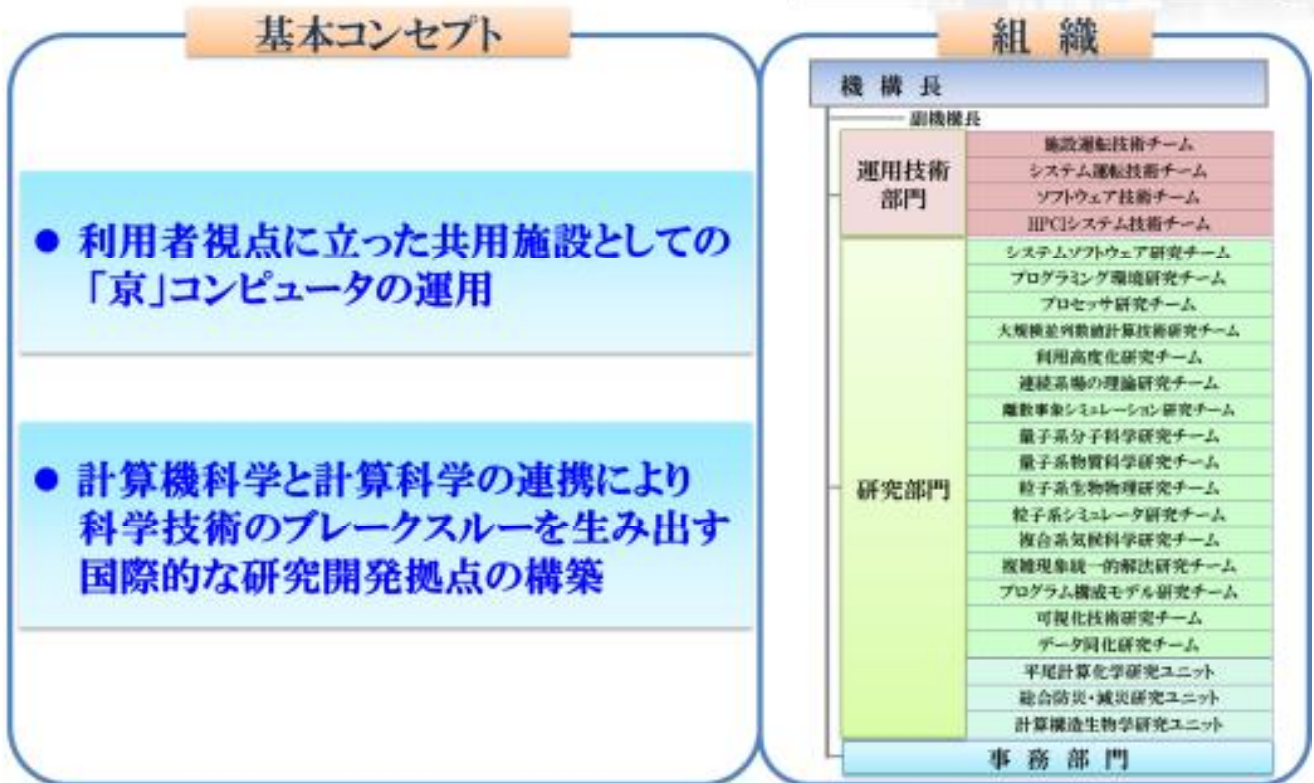
(「次世代スパコンを中核とした研究教育拠点形成の具現化に向けた基本的考え方」(平成21年1月9日)より引用)



- ・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。)

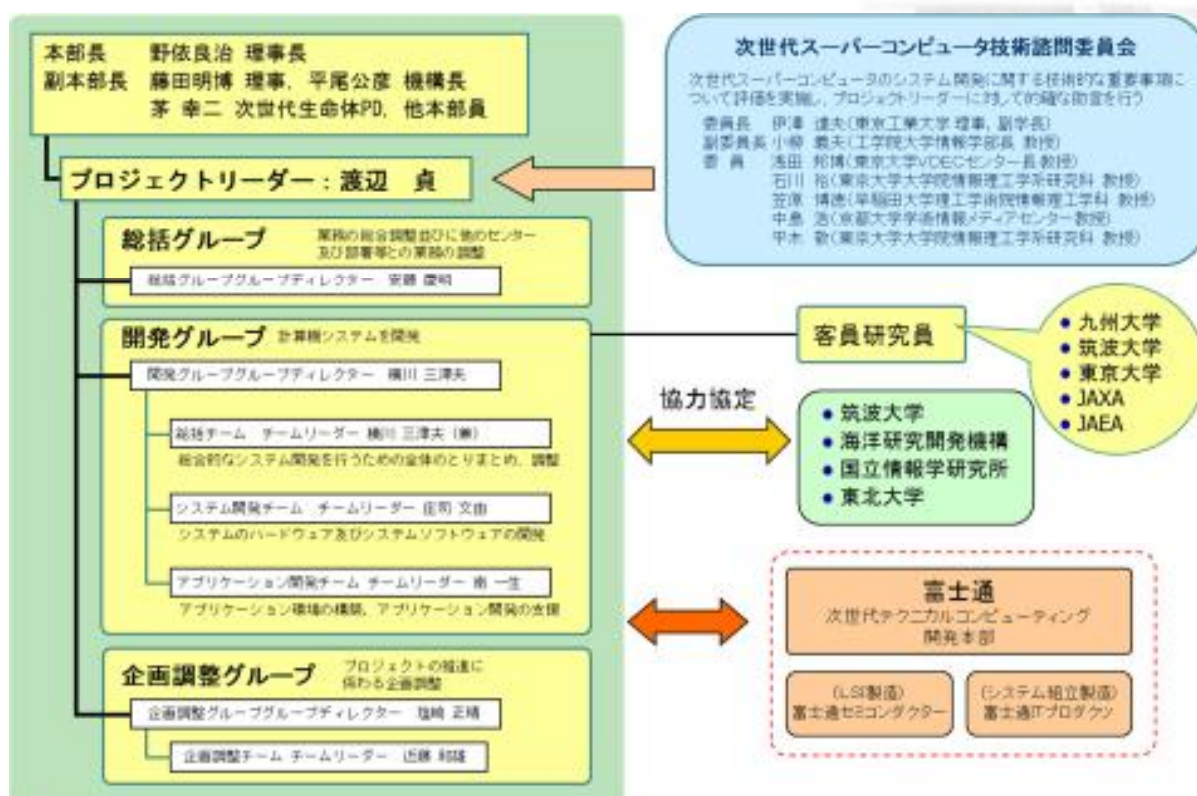




# 3. 課題の達成状況等

## (2) 研究開発体制について

### システム開発体制(中間評価後)



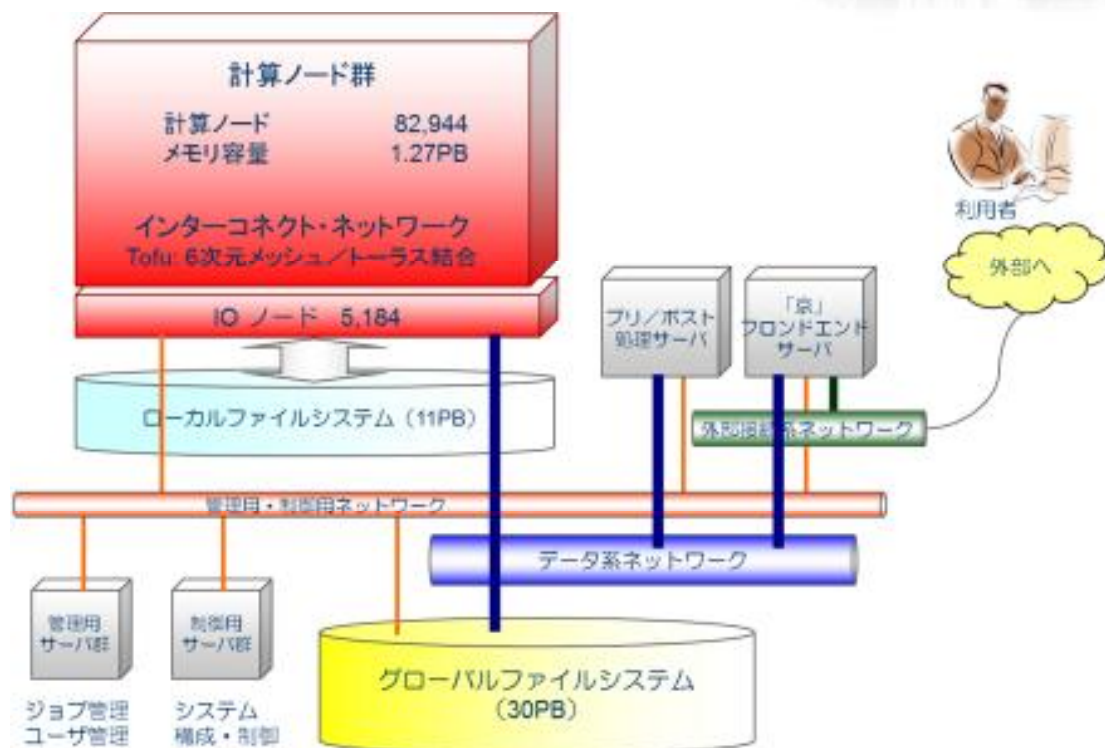


# 4. 研究開発の成果等

## (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	Tera-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

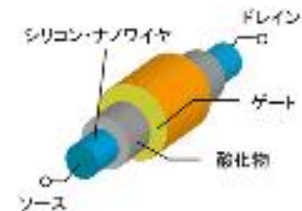
- HPCチャレンジアワード: 科学技術計算で多用される計算パターンから抽出した28項目の処理性能によって、スパコンの総合的な性能を評価するHPCチャレンジベンチマークプログラムから、特に重要な4つのベンチマークをHPCチャレンジアワードとして、毎年11月のSCIにて表彰
  1. Global HPL(大規模な連立1次方程式の求解における演算速度)
  2. Global RandomAccess(並列プロセス間でのランダムメモリアクセス性能)
  3. EP STREAM(Triad) per system(多重負荷時のメモリアクセス速度)
  4. Global FFT(高速フーリエ変換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

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

