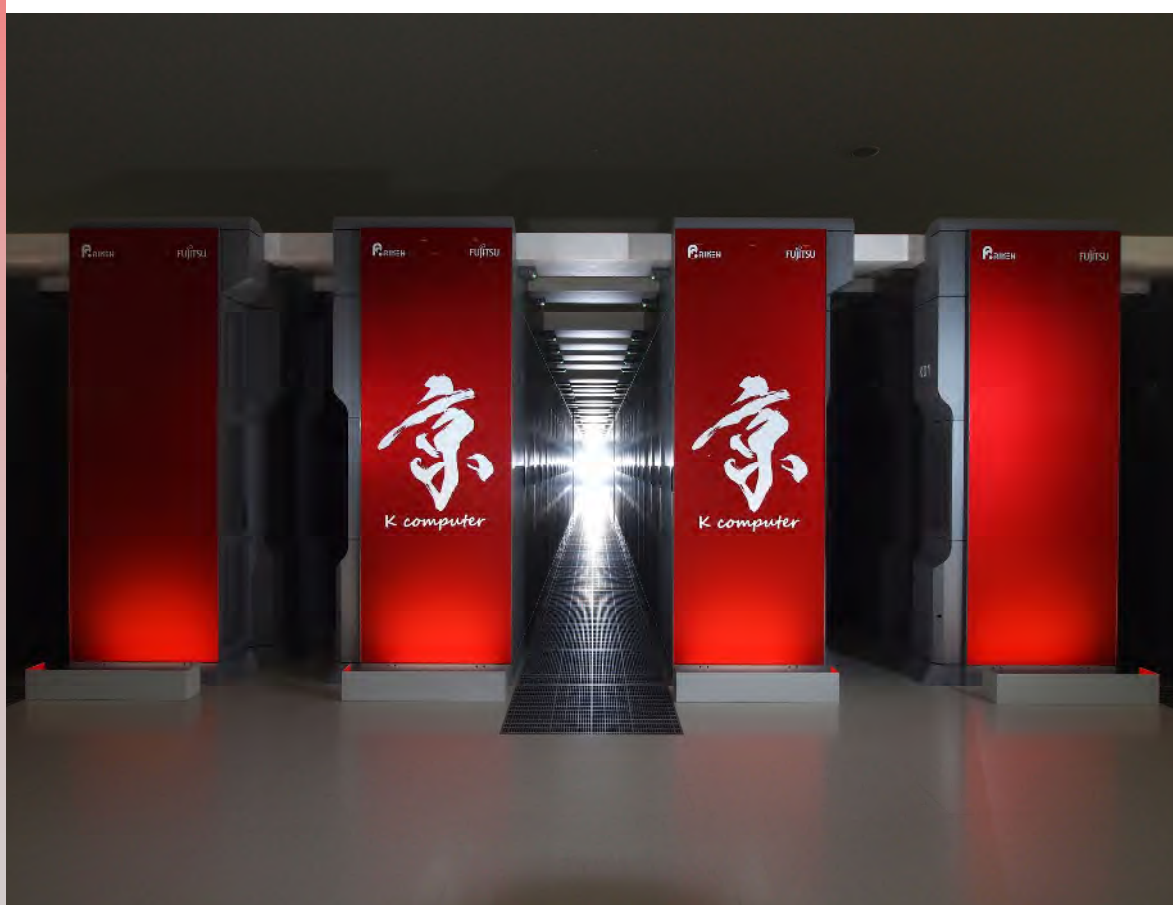


参考資料 3  
情報委員会（第15回）  
令和3年2月3日

## 「京」運用事後評価 自己点検結果報告書



2020年10月  
国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター

## 目次

1.課題概要	4	(2)大規模並列プログラム開発を容易にする 並列プログラミング言語とコンパイラの研究	31
2.報告書全体要旨	5	(3)データフロー計算プラットフォームの開発	31
3.事業の目標	7	(4)高性能・高並列な大規模数値計算技術 の研究	32
3-1.「京」の開発	7	(5)高性能計算環境(HPC)の利用高度化に 関する研究	32
3-2.事業の目標	7	(6)大規模データ処理を高度化するツール・ ライブラリの研究開発	33
(1)超高速電子計算機の開発	7	(7)大規模並列可視化技術の研究	33
(2)特定高速電子計算機施設の建設および 維持管理	8	(8)データ同化とシミュレーションの融合のた めの研究開発	34
(3)特定高速電子計算機施設の運転	8	(9)強相関量子多体系に対する量子シミュレ ータの研究開発とその応用	34
(4)施設利用研究を行う者に対する超高速 電子計算機の供用	8	(10)超並列環境に資する分子科学計算ソフ トウェアの研究開発	34
(5)特定高速電子計算機施設を中核とした研 究拠点の形成	8	(11)GENESISの開発による生体分子動力学 シミュレーション	35
(6)人材育成	8	(12)粒子系シミュレータ開発プラットフォーム の研究	35
(7)積極的な成果の公表および普及ならびに 啓発活動の実施	9	(13)格子上の場の理論シミュレーション手法 の基礎研究	36
(8)関係機関、地元自治体との連携	9	(14)HPC による離散事象の研究およびその シミュレーションの高度化	36
4.「京」における取り組み	10	(15)気象気候計算の基盤ライブラリの構築 とそれを使った実証研究	37
4-1.運用状況	10	(16)複雑現象を大規模計算するための共通 基盤研究開発	37
(1)稼働状況	10	(17)HPC システムの高効率化に関するコデ ザイン評価	38
(2)利用状況	14	(18)高性能・高信頼・高生産性のためのビッ グデータ処理基盤	38
4-2.施設管理	16	4-6.ソフトウェアの開発	39
(1)光熱水管理	16	(1)ソフトウェア開発および公開	39
(2)設備の運転保守	17	(2)ソフトウェアセンターの開設	41
(3)設備の維持管理	17		
(4)省エネルギーに向けた取り組み	18		
(5)施設運用効率化に向けた取り組み	18		
4-3.運用支援	19		
(1)利用者のニーズを収集する取り組み	20		
(2)利便性向上に向けた運用改善	20		
(3)情報セキュリティの確保	24		
4-4.拠点の形成	26		
(1)共用の枠組み	26		
(2)研究開発の推進	27		
(3)関係機関との連携	28		
4-5.高度化研究	29		
(1)「京」および「富岳」に向けたシステムソフ トウェア研究開発	30		

4-7.国際評価	41	5-7.地元自治体との連携	61
(1)スーパーコンピュータの主要性能ランキング	41	(1)研究教育拠点(COE)形成推進事業	61
(2)ゴードン・ベル賞	42	(2)その他	62
4-8.利用料収入	44	5-8.予算	62
4-9.「京」の貢献と課題	44	5-9.研究実績	64
(1)「京」の貢献	44	(1)成果発表件数	64
(2)「京」の課題	46	(2)受賞状況	65
<b>5.中核拠点(COE)としての R-CGS の取り組み</b>	<b>47</b>	<b>6.「富岳」に向けた取り組み</b>	<b>66</b>
5-1.研究センターの概要	47	6-1.「富岳」の開発	66
(1)ミッション	47	(1)世界トップ性能の汎用 CPU の開発	66
(2)組織	47	(2)コデザインによる性能向上	66
5-2.分野横断研究	49	(3)「富岳」テクノロジーの普及	67
(1)データ同化によるゲリラ豪雨予測	49	(4)利用者ニーズの反映	67
(2)ペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見	50	6-2.制度設計	69
(3)大規模研究施設の整備・利活用促進のための研究開発	50	(1)運用方針の検討	69
(4)量子シミュレーション研究	51	(2)クラウド利用の検討	69
5-3.コンソーシアム等によるコミュニティ形成	52	6-3. Society5.0 に向けた取り組み	70
5-4.国内外との連携	54	(1)DL4Fugaku プロジェクト: AI、データ科学を支える処理基盤の確立	70
(1)国内における連携	54	(2)「富岳」コロナ対策利用の推進	70
(2)国外との連携	55	6-4.未来を見据えた取り組み	70
(3)共同研究	56	<b>付録</b>	<b>72</b>
5-5.広報活動	57		
(1)マスメディアを通じた情報発信	57		
(2)ウェブサイトおよび製作物を通じた広報活動	57		
(3)イベントの開催	57		
(4)見学・視察および若年層に向けた広報活動	58		
(5)その他	58		
5-6.人材育成	59		
(1)インターンシップ	59		
(2)連携大学院	60		
(3)基礎科学特別研究員制度	60		
(4)スクーリング事業	60		
(5)その他	61		

## 1.課題概要

本業務は、特定高速電子計算機施設を中核とした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（以下「HPCI」という。）を、利用者視点に立って構築し、世界最高水準の成果創出と成果の社会還元を推進するものである。

特定高速電子計算機施設は、国立研究開発法人理化学研究所（以下「理研」という。）が設置、運用する、極めて高度な演算処理を行う能力を有する電子計算機（以下「京」という。）を使用して研究等を行う施設である。

特定高速電子計算機施設が、HPCI の中核として、科学技術の振興や国際競争力の向上に寄与していくために、理研、利用促進業務を行う登録施設利用促進機関（以下「登録機関」という。）およびスーパーコンピュータを利用する機関等からなるコンソーシアム（以下「HPCI コンソーシアム」という。）が連携・協力し、一体となって目標の達成に大きな役割を果たしていく。

理研は、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律（以下「共用法」という。）および同付属文書、特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針（以下「基本方針」という。）に基づき、HPCI の中核である超高速電子計算機を含む特定高速電子計算機施設を適切に運転・維持管理し、保守等に要する期間を除き、必要十分な計算資源を研究者等への共用に供する。さらに、特定高速電子計算機施設の高度化研究を行うとともに、登録機関その他の関係機関と適切な役割分担の下、計算科学技術の人材育成を推進し、最先端コンピューティング研究教育拠点として発展を図る。

## 2. 報告書全体要旨

「京」は、国家プロジェクトとして開発が推進され、8万2千ノードを高いレベルで超並列化させることにより、世界で初めて10ペタフロップスを超える計算性能を発揮した超並列大規模計算機である。2012年6月にシステム全体が完成し、2012年9月の共用開始から2019年8月までの約7年間、「ナショナル・フラッグシップ・マシン」として年間約1,400課題を実行する我が国の重要な研究開発基盤として稼働し続けた。「京」の運用に当たっては、計算科学研究機構および計算科学研究センター（以下、「研究センター」という。）が担い、「京」の設置主体として「京」の安定的運用と、その計算資源を広く共用すべく運用し、稼働率は通期で93.6%と極めて安定的な運用がなされた点は、世界的にも誇れる成果である。併せて、研究センターが主となり、「京」の利用拡大、スーパーコンピュータの高度化にも取り組み、ハード的な性能向上だけでなく、アプリケーションの開発等も積極的に進め、我が国における研究コミュニティを超並列大規模計算へと導いた点は大きな成果であり、当該分野の人材育成に関しても国際機関や大学等と連携して積極的に進めてきた。

「京」の開発および約7年間の共用期間で果たしてきた貢献は、①超並列大規模計算に基づく研究開発基盤の確立、②ナショナル・フラッグシップ・マシンとしての高い汎用性、③産業界へのインパクトに集約される。数値風洞(NWT)やCP-PACS、地球シミュレータは世界一の演算性能を達成したものの、特定のアプリケーション分野での利用を前提としていたため汎用性に乏しい点が指摘されていた。一方、「京」開発検討時のHigh Performance Computing (HPC)システムの世界的な潮流は、プロセッサのクロック周波数の向上が頭打ちとなったことから、計算性能を向上させるためには、システム中の演算器の数を大幅に増加させ、並列に処理するクラスタマシンの開発へと移っていく。そのような状況の中で開発された「京」は、超並列大規模計算に基づく研究開発基盤として確立され、ナショナル・フラッグシップ・マシンとしての高い汎用性を持つこととなり、そのコンセプトは、我が国の多くの研究者および技術者にとって待ち望んだものであることは間違いなく、「京」があったからこそ思い浮かんだ研究の発想や、研究の方向性を導き出し、シミュレーション科学を発展させた。さらに、デジタル技術により新しい創造的破壊が起こる、ディスラプティブ・イノベーションにつながる成果創出に貢献したことは特筆すべき点である。

また、産業界に対するインパクトも計り知れないものがあった。大規模並列計算による高性能かつ汎用性の高さにより、スーパーコンピュータの活用方策を産業界に示すことにつながり、産業界による「京」の利用を促進することとなり、産業利用上の効果の数多くが「京」により初めて実証された。具体的には、時間・コストの削減、製品性能の向上、従来にない設計上の最適解の探索である。これにより、あらかじめ効果が分からないものへの投資に消極的な企業であっても、今後のスーパーコンピュータ利用が期待できることとなった。最先端のスーパーコンピュータでのプログラミングやアルゴリズム構築は容易ではないが、適切な支援を行うことで、企業のニーズに対する潜在的技術革新への挑戦を導き出し、スーパーコンピュータの産業利用に対する在り方に道筋を付けた貢献は大きい。以上、「京」が果たした貢献に関しては、研究センターが実施した「京」の波及効果の調査結果にも如実に現れており、先に述べた貢献を裏付ける結果に加え、「京」のもたらした経済的波及効果は、総収入4,990億円(47.08億ドル)、総利益(コスト削減)7,394億円(69.75億ドル)、総影響1兆2,384億円(116.83億ドル)にも上る。

また、「京」の登場は、我が国を代表する計算科学拠点の形成にもつながった。新たな計算科学の研究拠点となった研究センターは、ナショナル・フラッグシップ・マシンである「京」の設置主体として共用法に基づく運用を任せられ、利用者視点に立ったユーザーにとって使いやすい計算環境を提供してきた。併せて、「京」の共用による成果創出のためには、新たな理論、手法等の創出、効果的利用が重要であり、そのための高度化研究を進めつつ、計算科学および計算機科学の先導的研究開発を行ってきた。その結果、計算科学に関する国際的な研究拠点の一角を担うとともに、計算機科学・計算科学の推進に必要な人材の育成、登録機関である一般財団法人高度情報科学技術研究機構（以下「RIST」という。）と連携してスーパーコンピュータに対する関心の想起などの理解増進にも取り組んできた。さらに、「京」の後継機である、次世代超高速電子計算機システム（以下、「富岳」という。）の開発拠点として、主導的な役割を果たしてきただけでなく、次世代計算基盤の構想立案や、スーパーコンピュータを用いた分野連携、分野融合、産業連携のハブ機能の発揮も期待されている。

一方、優れた成果をあげた「京」であるが、いくつかの点において課題が見出された。ナショナル・フラッグシップ・マシンとして汎用性の高いスーパーコンピュータとして利用された「京」であったが、計算機性能とアプリケーション性能のバランスという面では改善の余地があった。この点は、国家プロジェクトとしてコデザインを（協調設計）を進めることの大事さを改めて浮き彫りにし、次世代機となる「富岳」の開発に当たってはアプリケーションサイドのニーズを捉えつつも、オーバースペックでもなく、アンダースペックでもないマシン設計を行い、さらには挑戦的な技術開発を取り込むことの重要性を問うこととなる。「富岳」は、これらの点を踏まえつつ、さらなる汎用性の高さ、業界標準を踏まえたシステム設計、電力性能を意識したエコシステムの導入などに活かされることとなった。また、スーパーコンピュータの利用範囲は拡がり、ビッグデータ処理や AI 性能など、「京」の開発時点では想定していなかった利用が求められており、ソフトウェアのチューニングによりビッグデータ処理などでは高性能を発揮しているものの、ハードウェア的な対応については限界があった。この点については、改めて次世代機開発に求められる性能の一つとして掲げられることとなった。

「京」は、超並列大規模計算の可能性を問うデモンストレーション・マシンとして大いにその存在感を発揮した。後継機の「富岳」の開発は、「京」が敷いた超並列大規模計算のルールの上を、「京」の汎用的な性能を受け継ぎつつも、決して「京」の延長だけではなく、コデザインを踏まえた上で、ムーショット的な目標を打ち立て、リスクの高い革新技术を導入し、さらにはハードウェア性能とアプリケーション性能のバランスをとりながら、アプリケーション・ファーストで進められることとなった。試行的運用段階から「富岳」がアプリケーション性能におけるベンチマークテストを含め 4 冠を達成し、新型コロナウイルス対策に対して、候補薬の探索や飛沫シミュレーションなどで成果を発揮できたのは、「京」におけるアプリケーション開発、メソドロジーの確立が進んでいた上に、「富岳」の高いレベルでの性能が達成されたからこそである。研究センターが実施した「京」の波及効果調査では、最高性能のスーパーコンピュータの開発に当たっては、企業や市場原理に任せては達成できず、国家プロジェクトだから成し得る点であったとの評価を受けている。「富岳」の次世代機の開発に当たっては、引き続き、国家プロジェクトとして推進することが期待されており、その推進に当たっては、研究センターが中心的な役割を果たしていくことを目指している。

### 3.事業の目標

#### 3-1.「京」の開発

スーパーコンピュータを最大限活用するためのアプリケーション等の開発・普及、世界最先端・最高性能の汎用京速(10 ペタフロップス)計算機システムの開発・整備およびこれ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の形成を行い、研究水準の向上と世界をリードする創造的人材の育成を総合的に推進するため、理研を実施研究機関として「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」(実施期間:2006年度から2012年度、国費総額:約1,111億円)が行われた。

「京」は2006年3月の第三期科学技術基本計画の閣議決定を受け、同年5月にアーキテクチャ検討のための共同研究を開始した。7月には「共用法」が施行され、理研が設置者となり、続いて9月より概念設計を開始し、関係各所と連携のうえ、2010年9月に第1号筐体を搬入、2012年6月にシステムが完成した(付録表1参照)。

計算ノード	CPU	SPARC64™ VIIIfx 2GHz
	CPU性能	128GF (16GF×8cores)
	メモリ容量	16GB
筐体の数		864
ノードの数		82,944
ネットワーク		Tofu インターコネクト (6D Mesh/Torus)
ピーク性能		10.62PF
メモリ容量		1.26PB
ファイルシステム		Fujitsu Exabyte File System (FEFS)
ストレージ		30PB

表 3-1.「京」の基本性能

#### 3-2.事業の目標

研究センターでは、「京」の設置主体として「京」の安定的運用と、その計算資源を広く共用に供するべく、以下の目標を掲げ事業を実施した。

##### (1)超高速電子計算機の開発

特定高速電子計算機施設における施設運用の効率化や利用者の利便性の向上などを目指し、システムソフトウェアの機能強化やアプリケーションプログラムの実行性能の向上、先進的なアルゴリズムの開発をはじめとする共通基盤構築などの高度化研究を実施する。

## (2) 特定高速電子計算機施設の建設および維持管理

特定高速電子計算機施設の能力を最大限に活用し、施設利用研究を行う者(以下「利用研究者等」という。)に対する研究等に必要な計算資源を提供するために不可欠な、特定高速電子計算機施設の維持管理、高度化を行う。

## (3) 特定高速電子計算機施設の運転

特定高速電子計算機施設の能力を最大限に活用し、利用者のニーズに可能な限り応えるために、効果的・効率的な運営を図りつつ、特定高速電子計算機施設の運転を行い、利用研究者等に対する研究等に必要な計算資源を提供するため、超高速電子計算機について年間を通じて安定的かつ効率的な運転を目指し、それに対応する運營業務を行うとともに、維持管理、高度化等を行いつつ、可能な限り利用計算資源の確保に努める。「京」については、8,000 時間以上の運転を行う。

なお、その実施に当たっては、特定高速電子計算機施設の建設および維持管理に関する計画と相まって、利用者の意見に十分配慮し、「京」の性能向上といった観点も含め、利用者本位の考え方による。また、特定高速電子計算機施設全体を通じた情報セキュリティの確保を図る。さらに、登録機関と協力して、安全衛生管理および緊急時対応業務などの安全管理を実施し、万全を期する。

## (4) 施設利用研究を行う者に対する超高速電子計算機の供用

特定高速電子計算機施設については、利用研究者等に対し、研究等に必要な計算資源の提供を行う。「京」の運転調整等を行いつつ、可能な限り利用計算資源の確保に努めるとともに、利用研究ニーズに対応しながら、安定した計算資源を提供する。「京」については、663,552,000 ノード時間(82,944 ノード×8,000 時間)以上の計算資源を研究者等への共用に供する。

「京」の安定運転のための運転調整、施設運用の効率化や利用者の利便性の向上などのための特定高速電子計算機施設の高度化研究に利用可能な計算資源は、計画停止および故障保守期間を除く全体の 15%程度とする。

## (5) 特定高速電子計算機施設を中核とした研究拠点の形成

HPCI の中核である特定高速電子計算機施設が、研究者等にとって魅力のある施設として、多くの研究者等により積極的に活用されるようにするとともに、優れた研究開発成果を世界に向けて発信していくため、登録機関、HPCI コンソーシアムや HPCI 戦略プログラムの実施機関等と連携・協力する。

また、国際頭脳循環の中核的拠点として、国内外への幅広い情報提供や、海外の研究機関等との連携による研究者等の交流を推進する。

## (6) 人材育成

将来においても計算科学技術の継続的な発展が必要との観点より、利用者のニーズ等を踏まえつつ、登録機関その他の関係機関と適切な役割分担のもと、人材の育成に関する機能を果たす。

最先端コンピューティング研究教育拠点として発展を図るため、基礎科学特別研究員制度や連携大学院制度等により、計算機科学および計算科学研究に関する研究者等の育成に努め、今後の超高速電子計算機の開発・整備および利用研究等の中核を担える人材を育成する。



## **(7) 積極的な成果の公表および普及ならびに啓発活動の実施**

施設公開、シンポジウム、セミナー、講演会等を通じて、広く国民に対して情報提供を行う。

## **(8) 関係機関、地元自治体との連携**

RIST や HPCI コンソーシアム構成機関を始め、大学、研究機関、産業界との積極的な連携を図り、特定高速電子計算機施設の円滑かつ有効な整備・運営等に活かして行く。また、特定高速電子計算機施設が、今後も地域における科学技術活動の活性化や地域の社会経済の発展に寄与するよう、兵庫県、神戸市および地域の大学、企業、公益財団法人計算科学振興財団（以下、「FOCUS」という。）等との連携を図る。

## 4.「京」における取り組み

### 4-1.運用状況

「京」は、プロセッサのスピード、メモリ、通信のバランスがとれたスーパーコンピュータであり、8万2千ノードを用いた大規模計算を行い、10ペタフロップスの演算速度を世界で初めて実現した。この優れた「京」の能力を最大限活用し、利用者のニーズに可能な限り応えるために、効果的かつ効率的な運営が研究センターには求められており、特に「京」を利用する研究者等が研究開発に必要とする計算資源を安定的かつ効率的に提供することが極めて重要である。それに対応するため、研究センターの運用技術部門が中心となり、運用技術の高度化を図り、利用計算資源量の最大化に努めてきた。

#### (1)稼働状況

「京」は2012年6月末に完成した後、同年7月30日から9月14日までの試験利用期間を経て、9月28日よりフルノード(82,944ノード)を課題採択された利用者に対して提供を開始した。2019年8月末の運用終了までの約7年間にわたり、稼働率は通期で93.6%と極めて安定的な運用がなされた。

共用期間	2012年9月28日～2019年8月16日(2,514日間)
共用期間中の実行ジョブ数	4,178,431ジョブ
共用期間中の消費ノード時間積	3,637,258,658ノード時間
利用者数	11,095人(HPCI課題利用者の延べ人数)

表 4-1.運用実績

運用期間中に発生した障害の多くは、ファイルシステムに関するもので、障害状況の分析結果から、ファイルシステムが高負荷状態に陥り障害が発生することが多くあることが判明した。この分析結果に基づき、高負荷状態を引き起こす恐れのあるジョブの監視機能等を実装するなどの対策を行った。また、運用ログの分析やハードウェア性能を定期的に測定したほか、障害発生の際を検出する等、障害回避の取り組みを行ったことで、2018年度以降はファイルシステムに関する障害発生を大幅に改善した。

サービス提供時間のうち、実際にジョブを処理した時間の割合を示すジョブ充填率は、2012年度のみ他の年度と比較して著しく低いですが、これは共用開始直後のスケジューラの不具合などの影響によるもので、スケジューラの改修や運用上の工夫によりジョブ充填率は改善し、翌2013年度以降は75%から79%を維持しており、全期間の平均ジョブ充填率は約75.6%であった。

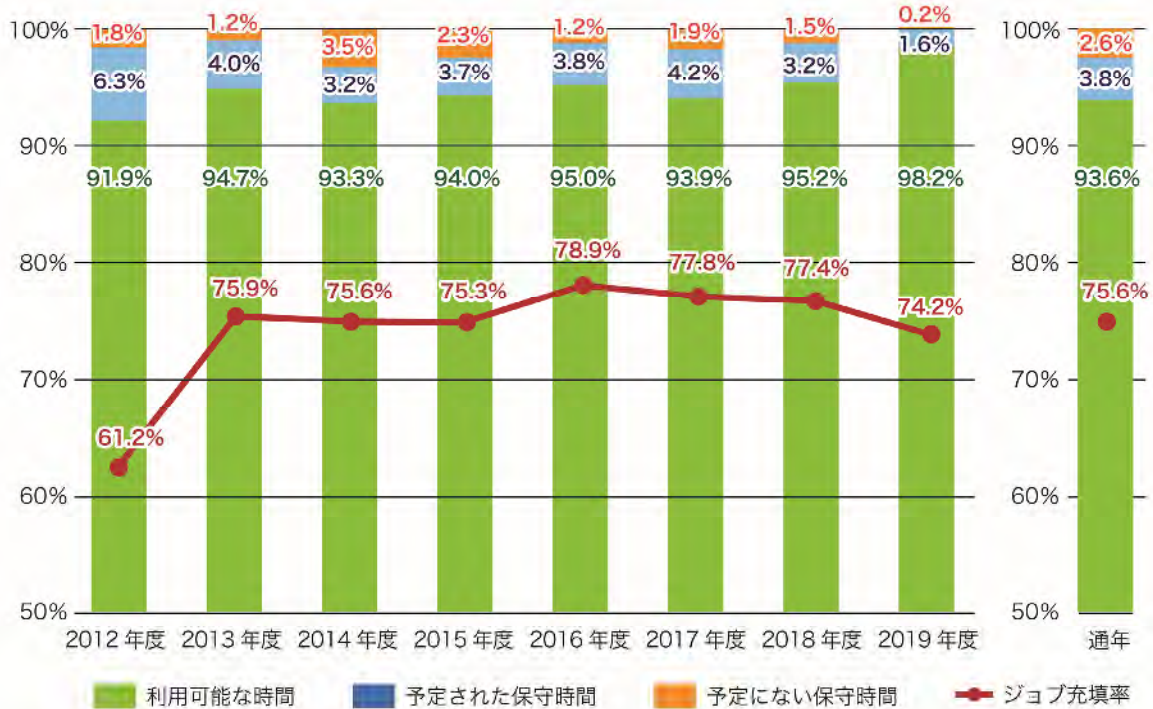


図 4-1.稼働率およびジョブ充填率の推移

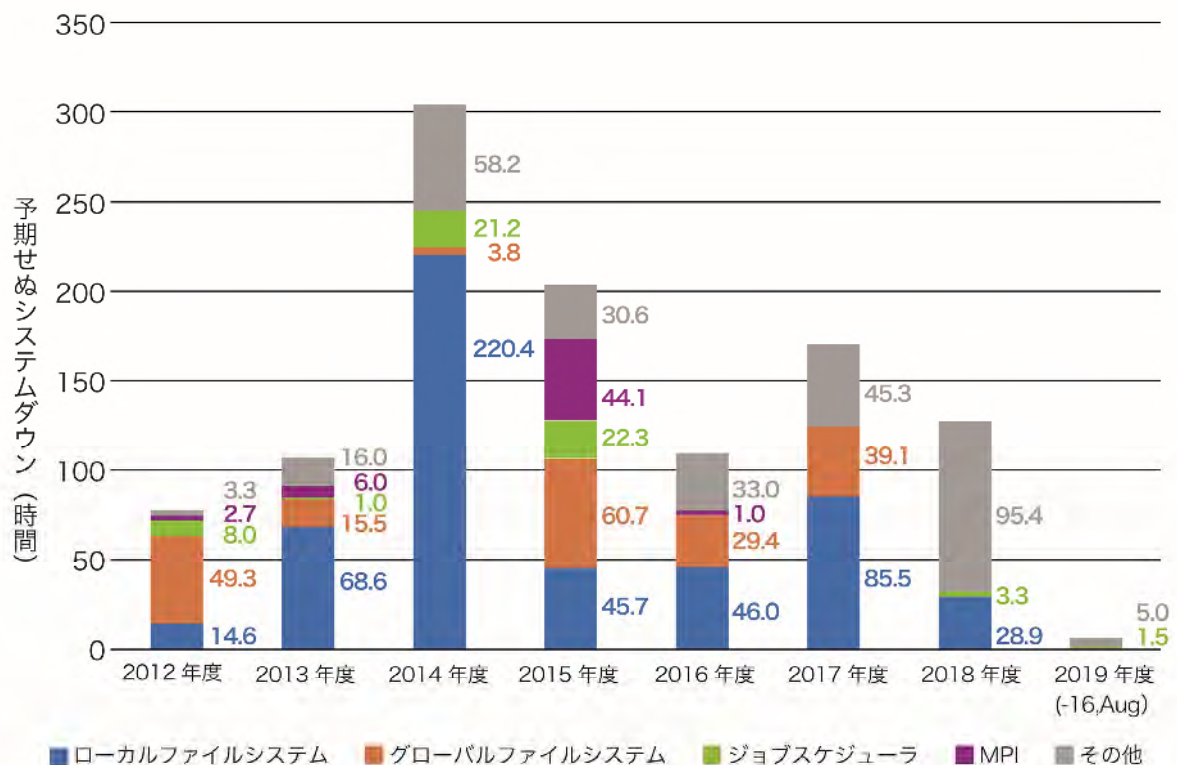


図 4-2.予期せぬシステムダウンの内訳

次に、ジョブが投入されてから実行されるまでの待ち時間の推移を、ジョブの規模や指定経過時間別に集計した結果を図 4-3 から図 4-7 に示す。

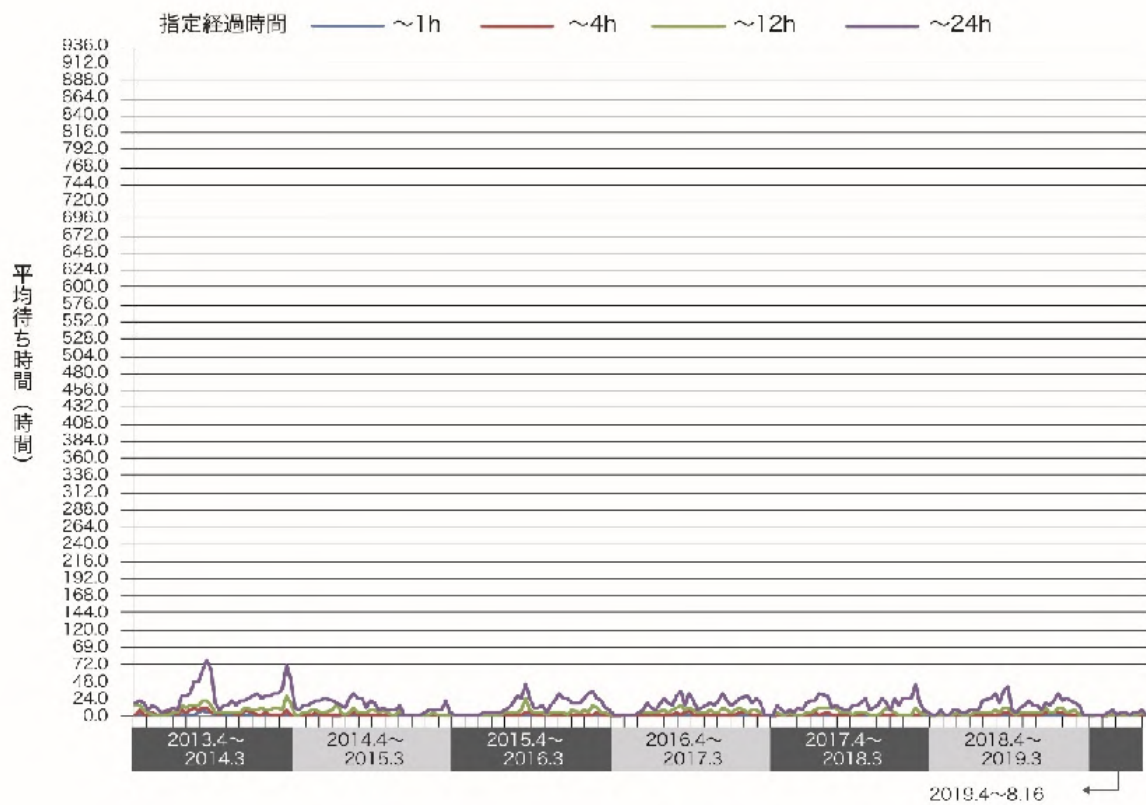


図 4-3.待ち時間の推移(1-384 ノード)

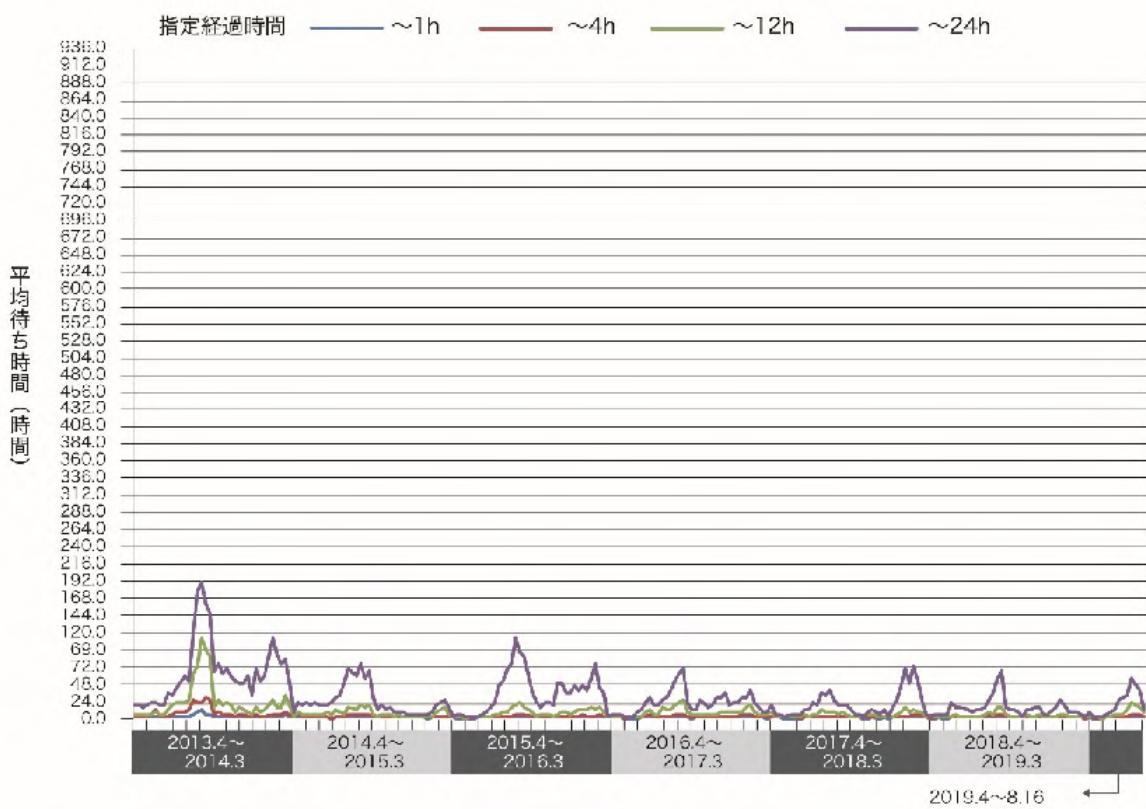


図 4-4.待ち時間の推移(385-1,024 ノード)

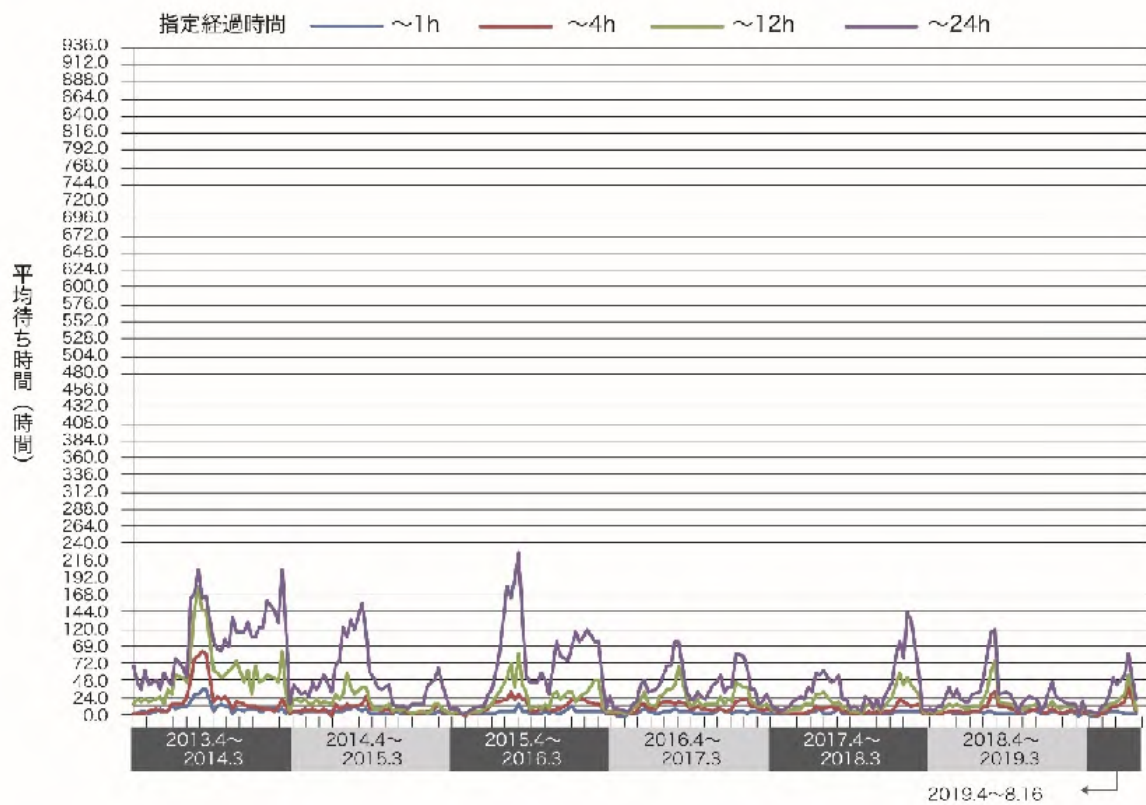


図 4-5.待ち時間の推移(1,025—4,096 ノード)

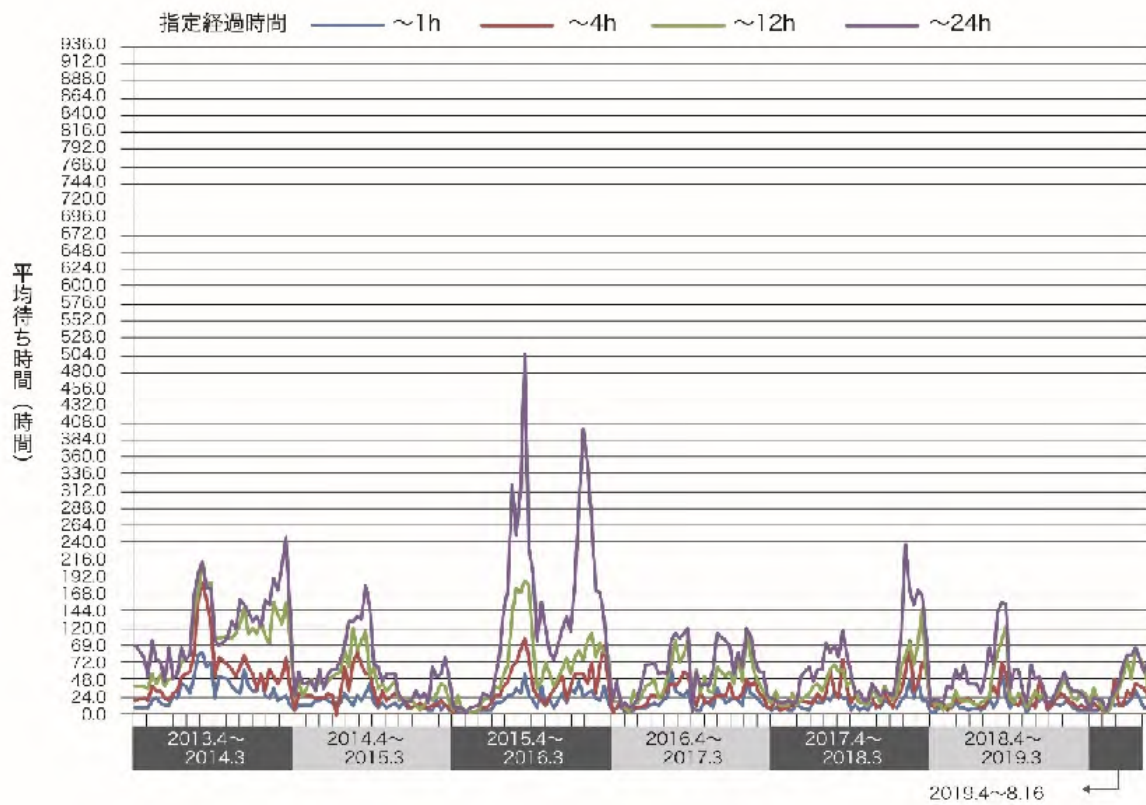


図 4-6.待ち時間の推移(4,097—12,288 ノード)

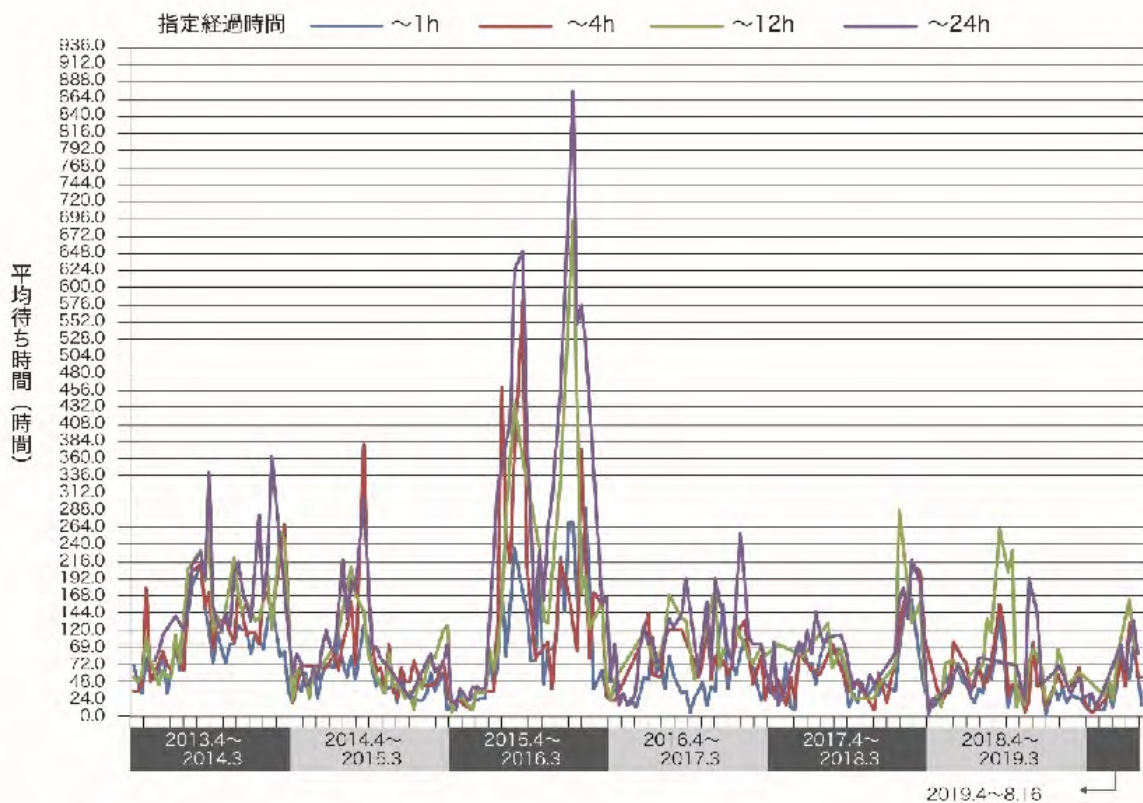


図 4-7.待ち時間の推移(12,289—36,864 ノード)

すべての規模のジョブで、各期末(9月および3月)に待ち時間が顕著に増加していることがわかる。これは、「京」で割り当てられる計算資源量が前後期に分割されており、利用者が各期の計算資源量を使い切るためにジョブを多く投入した影響である。特に、2015年度は前期の待ち時間が非常に長くなった。これは2014年度から導入した優先利用制度を利用して実行されたジョブと使用ディスク量を過大に使用したジョブの2種類が規模の大きい通常優先度のジョブのスケジューリングを阻害したことによるものであった。この対策として、優先度の違うジョブのスケジューリングの領域を調整するとともに、使用ディスク量を適切に指定するようユーザーに促すなどの改善を行った。さらに優先度スケジューリングのアルゴリズム改善も行ったことで、待ち時間を大幅に改善した。

## (2) 利用状況

「京」の利用者数および課題数の推移を図 4-8 に示す。ここで示す「京」を利用した利用者数および課題数とは、実際にジョブを実行した利用者数および課題数を表しており、毎年新規に 100~200 程度の新規課題が実施され、300~400 人程度の新規ユーザーが「京」を利用していたことがわかる。

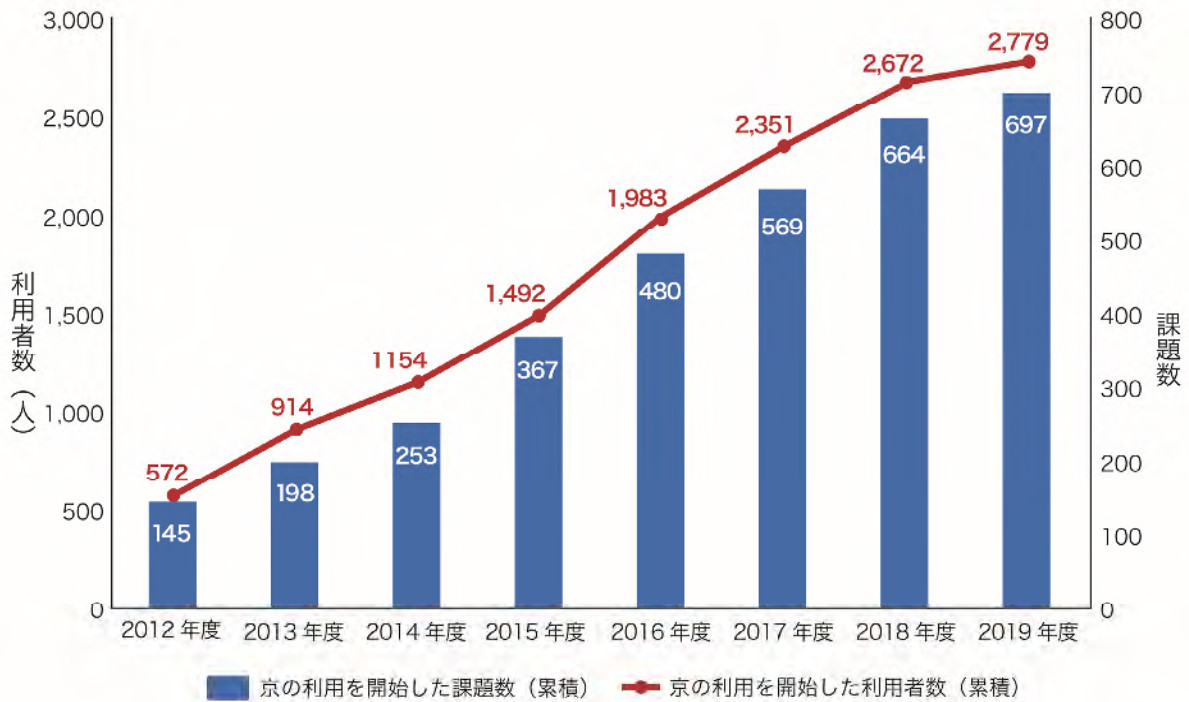


図 4-8.年度ごとの利用者数／課題数の推移

また、図 4-9 に示すとおり、「京」で実行されたジョブ数は、稼働期間が短かった 2019 年度を除き、毎年増加した。特に 2018 年度は、ジョブ数が大きく増加したが、これは無償で利用できる小規模の micro ジョブの利用を開始した影響である。

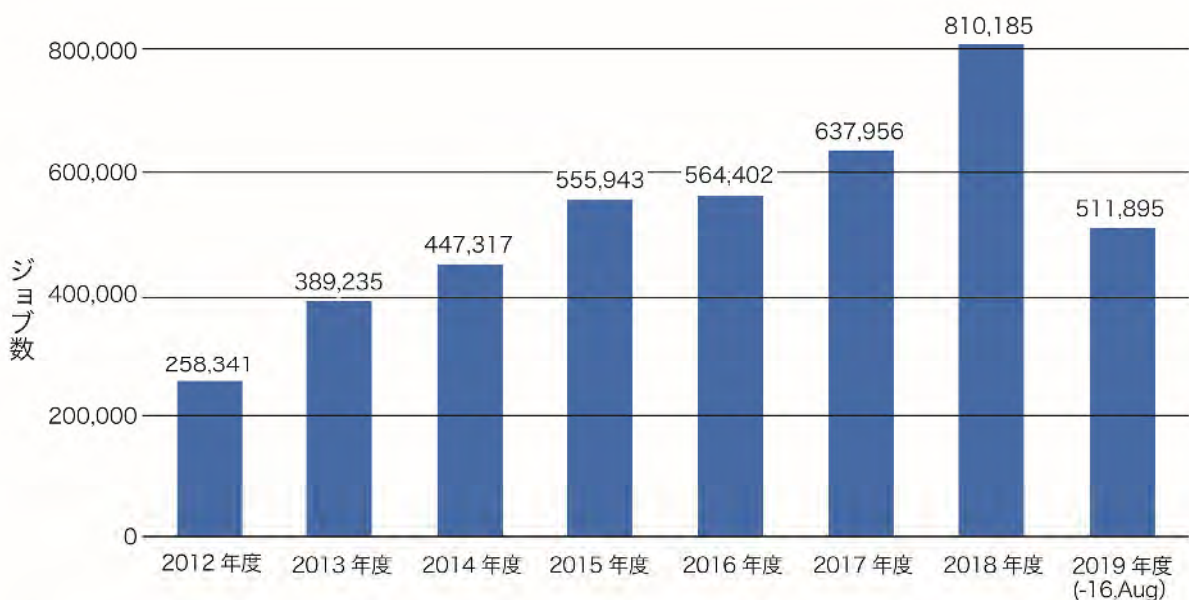


図 4-9.年度ごとの実行されたジョブ数

## 4-2.施設管理

研究センターは、施設全体の稼働率を上げ、共用施設である「京」を最大限に利用可能とするため、電気設備、空調冷却設備などユーティリティ施設の運転、維持管理を行ってきた。設備の運転管理においては、「京」が24時間連続稼働であることから、24時間体制で施設管理を実施した。また、設備の性能を維持するため、計画的に保守点検を実施し、「京」を停止させることのないように努めたほか、研究チームや外部機関が持ち込むサーバー類について設置場所の整備、電源や空調の増設工事を行い、研究環境の維持および改善整備を実施した。

### (1)光熱水管理

研究センターの電力は、電力会社からの受電と、コージェネレーションシステム常用自家発電設備（以下、「CGS」という。）による発電により供給されており、受電電力と発電電力の連携により一次エネルギー消費量を最小化するとともに、万が一の停電時にも重要負荷に対して無電力で電力を供給できる環境を整備した。また、契約電力を過大なものとしなため、電力および熱需要にあわせてCGSの発電量を調整した。共用開始以降、研究センター全体の消費電力は徐々に増加してきたが、節電努力の効果もあり、平均15MW程度で落ち着いていることから、CGS1機のみでの稼働で運転することができた。特に、ベンチマーク測定時や大規模ジョブ実行時には、大電力の需要が見込まれるため、状況に応じて2機のCGSを稼働させ、「京」の電力需要ならびに熱需要に追従させるとともに、契約電力を超過しないよう運用した。

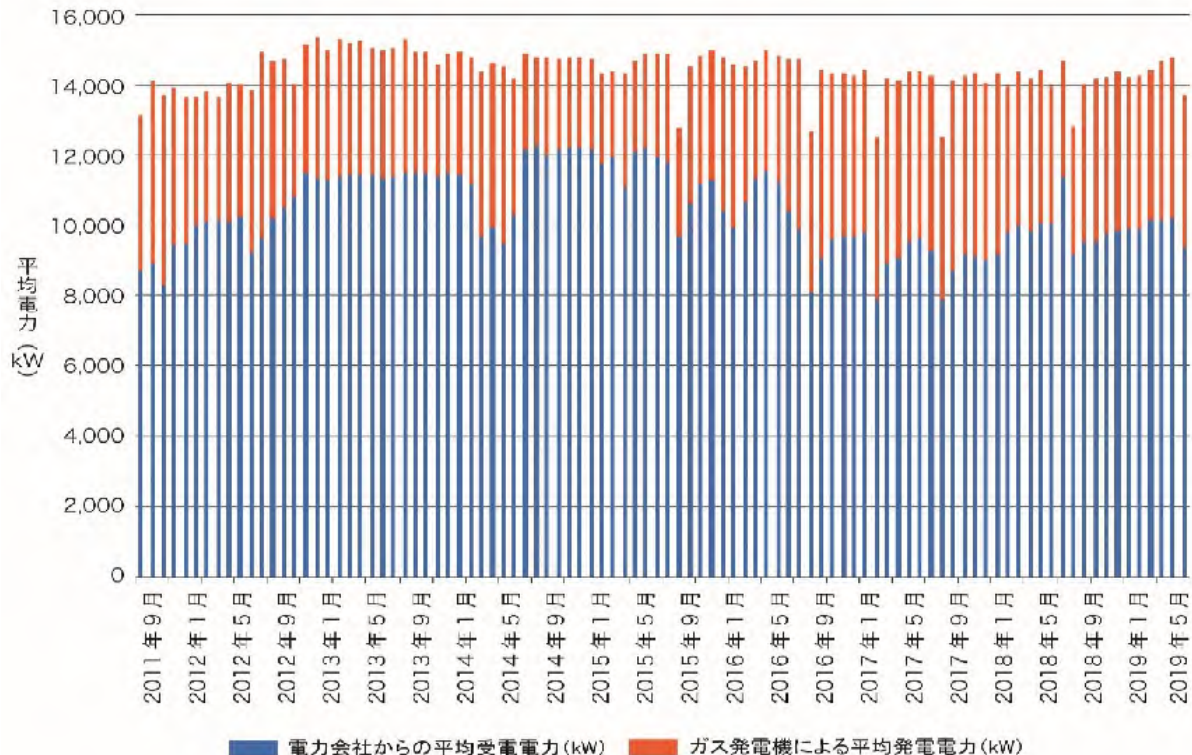


図 4-10. 電力量の推移

都市ガスは大阪ガス(株)より供給されており、ほぼ全量をCGSが消費している。また、CGSから回収される排熱を利用することにより、高いエネルギー効率で運用している。燃料価格や電力単価の変



動にあわせて CGS の出力を調整する等の取り組みを実施した。

## (2) 設備の運転保守

「京」の運転計画に基づき、年間、月間、週間、日単位で施設運転計画を作成し、設備の運転保守を確実に実施した。設備の運転監視については、熱源機械棟中央監視室に常時 2 名以上の監視員を置き、24 時間体制で実施した。また、日勤者平日 7 名、休日 1 名を配置し、構内設備類の巡回点検、薬液補充、フィルター清掃、水質管理等を計画的に実施することにより、安定した施設運用に努めた。さらに、毎朝設備担当スタッフによるミーティングを実施し、前日に行った保守作業の確認と不具合の報告を受け、対応内容の精査と情報共有と当日実施予定の保守作業の確認を行い、必要な指示を出すことで確実な保守作業を実施した。

## (3) 設備の維持管理

### ① 電気設備

電気設備の定期点検は、電気事業法に基づく内規「自家用電気工作物保安規程」に則り行うものであり、保安の確保により電気事故を防ぎ、電力の安定的な使用を確保している。2011 年度と 2012 年度では、構内全停電により各施設の点検を実施し、すべての電気設備が健全であることを確認した。2013 年度から 2014 年度は、全停電での点検は行わず日常点検のみとし、保安規定に基づき 2015 年度に構内全停電点検を実施した。また、電気主任技術者による従事者への安全教育を計画的に実施し、事故時の対応等の訓練を行った。

設備導入後 5 年を経過し電子機器の故障率が高まる傾向にあったため、機器の保守整備を念入りに実施し、消耗部品の定期交換を進めた。また、機器障害が全体運用に及ぼす影響を考慮し、構内停電を伴う電気設備点検を毎年実施するよう保安規定の改訂を行った。この規定に基づき、今後の重大事故の発生を未然に防ぐために計画的な保守整備を実施した。

2016 年度から 2018 年度の計画停電では、外部電源を仮設することで基幹ネットワークスイッチ装置および電話交換機を通電した状態で必要な照明および内線電話による通信手段も確保し、確実な保守点検を実施することができた。

### ② CGS 常用自家発電設備

CGS の点検は、電気事業法ならびに保安規程およびボイラ安全規則に則り行うものであり、保安の確保ならびに労働災害を防止し、発電設備ならびに排熱回収ボイラの安定運用を確保するものとしている。毎年 6 月にボイラ安全規則による排熱回収ボイラの法定点検を中心に本体および補機類の点検を実施した。点検にあたっては 1 機ずつ交互の点検とし、「京」の運転計画に影響を与えないように常時 1 機は運転した状態で点検を実施した。また、保安規程に定められたボイラタービン主任技術者による従事者への安全教育ならびにボイラ安全規則に定められた安全教育を計画的に実施し、事故時の対応等の訓練も行った。

CGS ガスタービンの運転時間が 32,000 時間に達したため、オーバーホール点検を 2017 年度に 1 号機、2018 年度に 2 号機に対して実施した。

### ③冷凍空調設備

2014 年度以降、熱源機械棟内にある蒸気吸収式冷凍機 4 台、ターボ冷凍機 3 台、スクリーウ冷凍機 1 台の精密点検を定期的実施しており、冷却水系統凝縮器、蒸発器のチューブ清掃ならびに制御機器等精密点検を行った。実施にあたっては、冷凍機を 1 台ずつ停止・点検することにより、「京」の冷却に支障がないように留意した。2017 年度は、稼働時間が 3 万時間を超えてきた冷凍機のオーバーホール点検を実施した。2018 年度では、冷却塔およびポンプ系統のオーバーホール点検を実施することで、冷却システム全体の能力改善を図った。さらにターボ冷凍機を 1 台増設し、冷却能力の強化に取り組んだ。

各空調機については、日常保守作業の計画の中で、フィルター清掃、グリスアップ、老朽部品の交換等を行い、健全性の維持に努めた。定期点検としては、中央監視装置主装置に加えて、ローカル機器の点検を実施した。いずれも「京」の冷却に支障のないように 1 台ないし数台ずつ停止して点検を行った。

CPU 冷却設備については、毎日水質チェックを行い、必要に応じてフィルター、デミナー、脱気膜の交換を行い、水質を維持した。溶存酸素濃度計など純水維持装置のセンサー校正点検を実施し、維持管理が適正に行えるようにした。また、故障によって CPU 冷却系が停止しないように、ポンプの点検整備を予防保守的に計画的に実施した。

### (4)省エネルギーに向けた取り組み

研究センターは、2012 年 1 月 20 日付でエネルギーの使用の合理化に関する法律における第一種エネルギー管理指定工場等に指定されており、理研全体の省エネルギー管理のもと省エネ活動を推進してきた。2012 年度は「京」の安定稼働を最優先させるため積極的な省エネ対策は実施できなかったが、2013 年度から 2017 年度にかけて、表 4-2 のような取り組みを継続的に実施することで、設備系の年間平均消費電力を 5 年間で約 1080kW 削減することができた。

年度	取り組み内容	削減電力	費用換算
2013 年度	「京」空冷の風量と温度差(吹出し/戻り)の調整による 2 階空調機の運転台数削減	約 450kW	58.1 百万
2014 年度	2 階空調機の対故障機能活用	約 200kW	28.5 百万
2015 年度	地下 1 階空調機の対故障機能活用	約 40kW	5.7 百万
2016 年度	冷却塔のプーリー交換による風量アップおよび熱源棟屋上パネルの一部撤去による冷却塔ショートサーキット防止	約 190kW	24.9 百万
2017 年度	冷凍機と蓄熱槽の効率運用	約 200kW	25.6 百万

表 4-2.省エネルギーに向けた取り組み内容と前年度に対する削減効果

### (5)施設運用効率化に向けた取り組み

経費削減の観点から、「京」の運転経験やノウハウの蓄積等を踏まえた運用の最適化をさらに進めることが求められている。運用効率化に向けた取り組みの一例として、消費電力推定方法の確立が挙げられる。

「京」の全ノードを利用するような大規模ジョブを実行する場合に、システム全体の消費電力が想定

値を超える事例が何度か発生した。ジョブの実行前にその消費電力を推測することができれば施設等で事前に対策を行うことが可能となる。さらに推測した消費電力をもとにジョブのスケジューリングを行うことで、システム全体の消費電力を制限内で最大限に活用できるようにシステムを運用することも可能となる。これを実現するために、ジョブごとの消費電力を計測し蓄積評価した上で、ジョブごとの時系列の消費電力を推定する方法を検討した。この手法ではジョブ投入時に得られる情報をもとに機械学習を行いジョブごとの時系列の消費電力を推測する。図 4-11 にシステム全体の消費電力の推定値と実際の消費電力を示す。過去に実行されたことのないジョブは推測誤差が大きくなることがあるが、対象期間中の誤差平均は約 22%で推測できている。

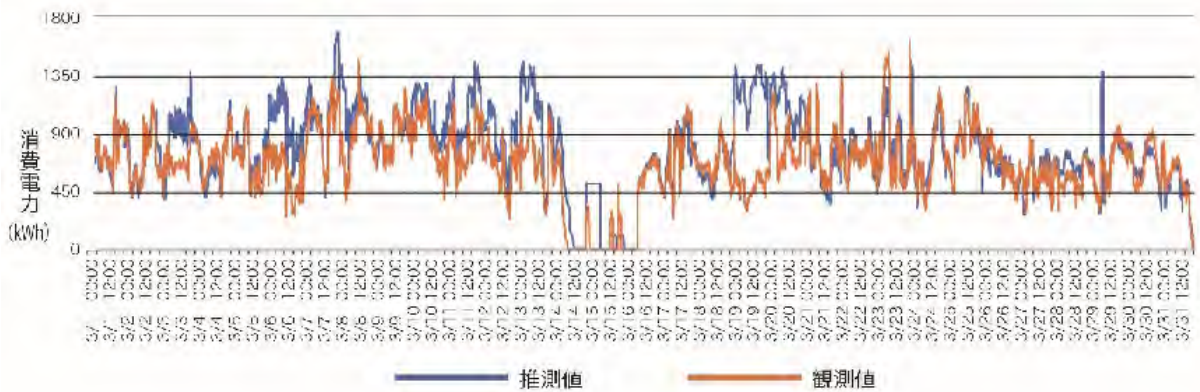


図 4-11. システム全体の消費電力の推定値と観測値

研究センターでは、このほかにも設備の運転状況を把握して異常を早期に検出するために、電力のみならず水温、水量を計測するセンサー群を整備し、熱フローの見える化を行うことで、効率的な施設運用を実現した。また、「京」の急峻な電力変動に対する電気回路での対応策について、富士電機株式会社と共同研究を 2014 年度から 2015 年度にかけて実施し、「電力変動緩和システム」に関する基本特許を 2016 年度に出願した。2019 年 10 月 29 日に米国での登録が完了し、日本国内および欧州の主要3か国(独、仏、英)での登録に向けて手続を進めている。

### 4-3.運用支援

「京」の保守業務および理研が実施する「京」のシステム管理および運用に関するサポート業務は「京」の制作・構築を行った富士通への業務委託により実施した。「京」の運用は、保守時間を除き原則 24 時間 365 日の連続運用である。保守業務は平日 9 時～17 時の対応で、障害検知は 24 時間体制で実施した。システム管理サポートおよび運用サポート業務の主な内容は、システム稼働管理、ユーザーデータ管理、ジョブ管理、セキュリティ管理、利用者サポートなどである。

「京」のユーザーは大別すると HPCI 課題とそれ以外に分類できる。HPCI 課題ユーザーの窓口は RIST が、それ以外は研究センターの運用技術部門がそれぞれの窓口として対応した。RIST で解決できない問題は運用技術部門が対応し、運用技術部門は保守業務を委託している富士通株式会社とともに問題の解決にあたった。また、ユーザーサポートをスムーズに実施するために RIST と運用技術部門間でチケットシステムの共有化による情報共有の体制を構築した。

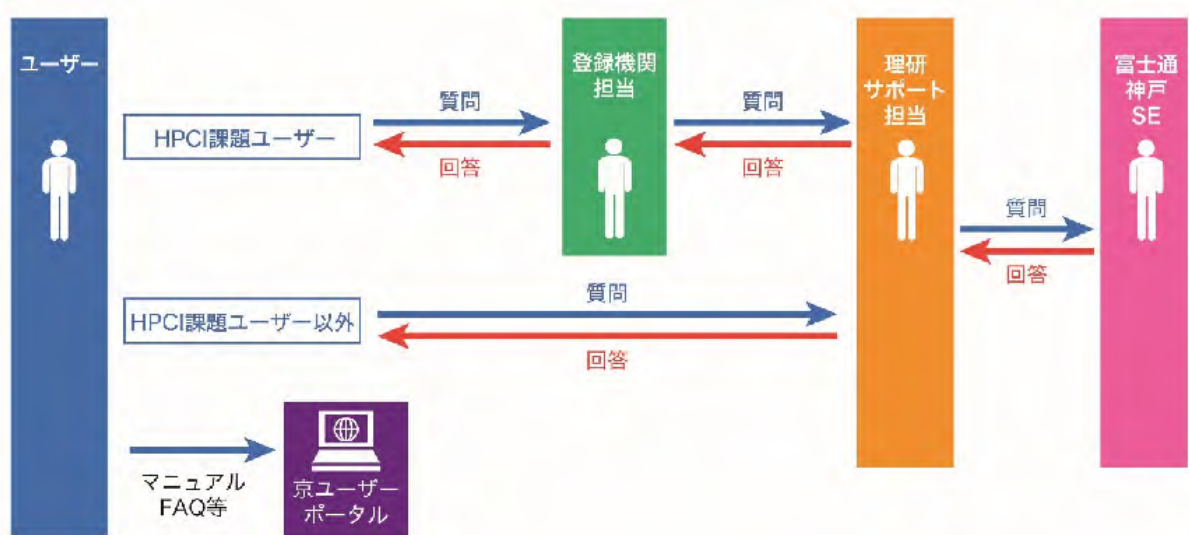


図 4-12.ユーザーサポート体制

### (1) 利用者のニーズを収集する取り組み

特定高速電子計算機施設の設置・運用者である理研、RIST および HPCI コンソーシアムは、連携・協力し、一体となって特定高速電子計算機施設の共用の促進に努めた。

具体的には、「京」利用者のニーズを踏まえた円滑かつ有効な運営のため、RIST や HPCI と連携しユーザーブリーフィングや運用懇談会、重点課題ミーティングといった場を設け、利用者からの意見収集を行い、利用者の意見を反映したソフトウェア、アルゴリズム等の公開、外部プログラムの「京」向け実装を行うとともに、運用計画等に適宜反映した。

また、「京」を利用することを検討しているユーザーや、初めて「京」を利用するユーザーを対象にした初級者向け講習会を RIST と共催で毎年 4、5 回開催し、「京」の運用に関する説明や、RIST の FX10 を利用したハンズオンなどを実施した。

### (2) 利便性向上に向けた運用改善

利用者のニーズを随時収集し、利便性向上に資する以下のような運用改善に取り組んだ。

#### ① 有償課題等に対するジョブ実行の優遇方法の変更

優先課題向けの制度として、一部のノードを特定期間占有するサービスを提供していたが、利用者の希望通りの占有日数や規模の確保、割り当てられた計算資源の消費が困難である等の問題が発生した。そのため、ノード占有ではなく、ジョブ単位で優先度を調整する方式に変更したほか、一般利用者有償課題向けの優先サービスについて、リソースグループの範囲を緩和する等の改善を行った。

#### ② 大規模実行期間のジョブ実行の運用方法見直し

これまで月あたり 2 日 × 2 回実施していた大規模実行を月あたり 3 日 × 1 回の実施に変更したほか、試行的に大規模ジョブの隙間に小中規模のジョブが入るように設定を変更し、ジョブ充填率の改善に努めた。

### ③「京」と外部との間で高速なデータ転送が可能なリファレンス環境の構築および拡充

「京」は、学術情報ネットワーク SINET を経由して外部とネットワーク接続を行っているが、その帯域は 100Gbp/s であり、大量のデータを転送するのに時間を要する。これを解決する一つの方法として、研究センターに隣接する建物にデータ転送用のサーバーを設置し、「京」のユーザーのデータ等を保管しているグローバルファイルシステムから高速にデータを転送することができるネットワークを構築した(実測値で約 360MiB/s)。ユーザーは HDD 等をこのデータ転送用のサーバーに接続することで、「京」から高速にデータを保存することが可能となった。

また、「京」での解析結果を迅速に分析・可視化することを目的に、隣接する神戸大学のサーバーと「京」のフロントエンドサーバーを専用線で接続した。通常の接続では SINET を経由するためレイテンシ等が長くなるが、この方式により高速なデータ転送を可能とした。

### ④運用ソフトウェアと独立したジョブ管理支援機能の提供

ジョブ管理支援機能を開発し、ジョブ投入、ジョブ状態表示などの利用者向けコマンドを提供した。また、運用ソフトウェア(ジョブマネージャー)と独立させることによりジョブの受付数の制約を受けることなく、投入されたジョブを運用ソフトウェアの同時受付数制限の範囲内で自動的に転送(pjsub)することで、ジョブマネージャの負荷を上げることなく同時受付数制限の実質緩和を実現した。

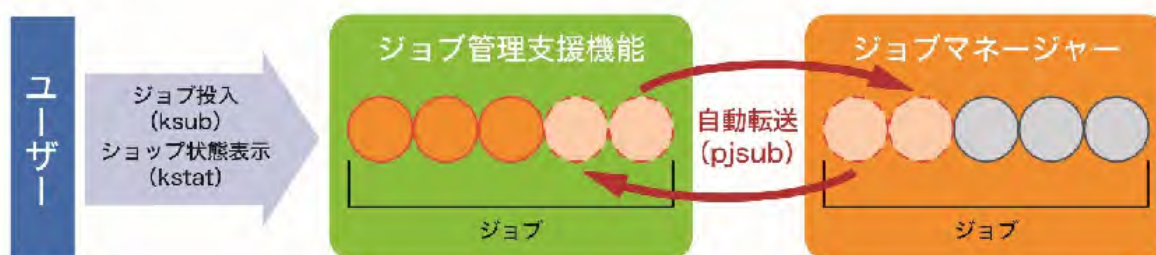


図 4-13.ジョブ管理支援機能

### ⑤ジョブスケジューリングの改善

優先課題向けの制度としてジョブ単位で優先度を高くするジョブスケジューリングを実施したが、大量の高優先度ジョブが投入されると通常優先度のジョブの待ち時間が長くなるという問題が発生した。これを改善するために、待ち時間を考慮した優先度制御アルゴリズムを開発した。このアルゴリズムにより、優先利用ジョブと通常ジョブ間のジョブ投入時の優先度差を保ちつつ、すべてのジョブに対して投入時刻からの経過時間に基づいたスケジューリングを行うことが可能となった。

また、ユーザーへのジョブの実行状況の情報提供として、ユーザーのジョブのスケジューリング状況を 3 次元で確認できるツールをユーザーに提供した。利用者ポータルからユーザーごとのジョブの実行情報をダウンロードできるようにし、このツールでジョブのスケジューリング状況を三次元で確認することができる。本ツールは「富岳」でも提供する予定である。

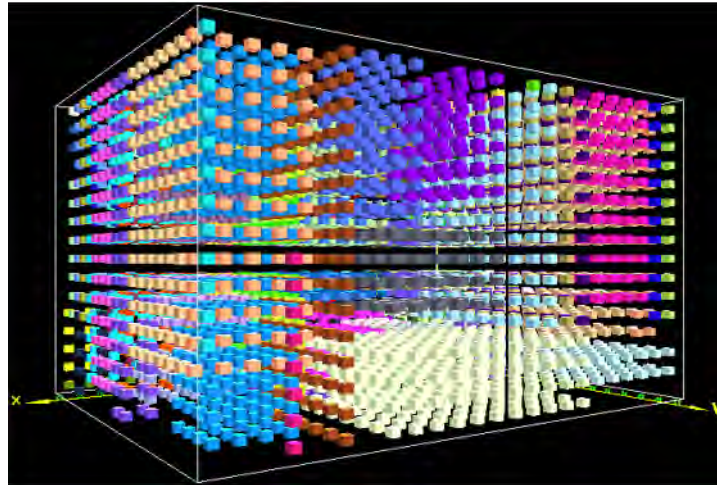


図 4-14.ジョブスケジューリング状況の3次元表示例

#### ⑥ニーズの高いオープンソースソフトウェアの重点整備

「京」の利用高度化を目的として、HPC 分野で多く利用されておりユーザーのニーズが高いオープンソースソフトウェアを選定・整備し、「京」ユーザーに公開した。

#### ⑦保守作業時間の短縮

「京」では月に 1 回大規模実行期間を設けており、毎回大規模ジョブの実行前にハードウェア保守を実施していた。保守作業の内容にもよるが、作業時間は当初 6 時間程度必要であった。保守作業の短縮はユーザーへのシステム提供時間を増やすことにつながるため、保守作業の内容を分析し、実施順序の最適化等を行うことで保守作業時間を 1 時間程度短縮した。

#### ⑧ジョブの待ち時間に関する詳細情報の提供

利用者がジョブを投入する際、当該ジョブのおおよその待ち時間がどの程度なのかを類推するための情報として、ジョブの規模(ノード数)や経過時間指定に対する待ち時間の情報を利用者ポータルで提供した。また、投入したいジョブのノード数と経過時間から、その瞬間のノードの使用状況に基づいたおおよその待ち時間を算出するコマンド(K を待ちわびて)をログインノードで提供するなど、利用者が効率的にジョブを投入できる環境を整備した。

#### ⑨ジョブ実行環境の最適化

大量のジョブをより効率的に処理するために、小規模ジョブと大規模ジョブの割当て領域を住み分けするとともに、全ノードを使用するような超大規模ジョブを実行する期間を設定した。また、さらなるジョブ充填率の向上を実現するために、スケジュールの隙間を埋められるような小規模かつ短時間のジョブ向けのキューを新設した。これらにより、投入されたジョブが効率的に処理される環境を整備した。

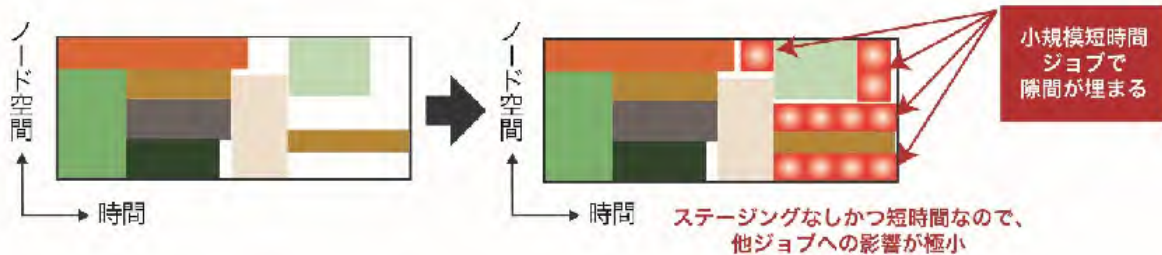


図 4-15.小規模短時間ジョブ向けキューのイメージ

導入後の利用状況を図 4-16 に示す。無償利用の試験運用を開始した 2018 年度の後半から利用が急増しており、5%を超える利用が続いた。それまでは 1.5%前後の利用であったが、それでも本来ジョブの隙間として使われなかったはずの資源が有効に活用されたという意味では、十分に大きな成果であったと言える。

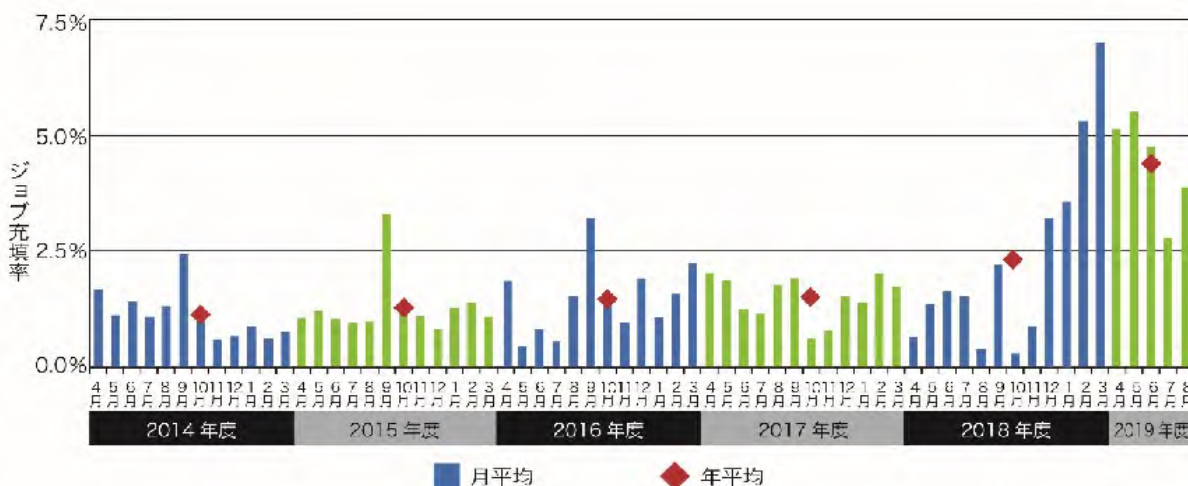


図 4-16.小規模短時間ジョブ向けキュー導入後の利用状況

加えて、産業利用における要請に応じ、従来連続 24 時間に制限されていた計算時間を 72 時間まで実行できる枠組みを整備した。

#### ⑩ソースコード解析ツールの開発

Fortran や C のソースコードを静的に解析するツールを開発し、オープンソースで公開した。このツールにより、チューニングを行う際に有用となるソースコードに関する様々な特性に関する情報を得ることができた。

#### ⑪故障率の高いハードディスク(HDD)を除外した運用

「京」は、最終年度では設置当初から数えて 8 年以上が経過し、経年劣化の影響がみられた。特に利用者のデータが格納されているグローバルファイルシステム(GFS)を構成する HDD の障害件数が増加傾向にあった。GFS は冗長構成(RAID 6)だが、同一 RAID 内の HDD の故障数が増加すると冗長度でカバーすることができずデータが消失する。これを未然に防ぐため、HDD の故障を予想し、同一 OST(Object Storage Target)内に故障率の高い HDD が複数ある場合にはその OST を運用から切り離す運用を検討した。HDD の故障の予測にあたり、HDD ごとにデータを読み出す際のエ

ラーログを収集し HDD の故障状況と合わせて分析した。その分析結果をもとに、HDD の故障の可能性を判定する手法を検討した。この手法に基づき故障率の高い HDD を除外する運用を 2019 年度から実施し、2019 年 8 月までの運用期間中、HDD の故障による重大障害の発生を回避することができた。

### ⑫ジョブ実行待ち時間の改善

2015 年度の上期末に発生したジョブ実行待ち時間の長期化に対する改善策として、ジョブスケジューリング時の優先度制御方式の改善を行った。「京」のジョブのスケジューリング時の順序は、基本的にジョブの投入順に決定される(FCFS:First Come First Served)が、優先利用ジョブと通常ジョブ間では投入順に関係なく、常に優先利用ジョブ(prior, semiprior)が優先されるという運用上の制限があり、特に優先利用ジョブが数多く投入されると規模の大きい通常ジョブの待ち時間が長期化するという問題があった。そこで、優先利用ジョブと通常ジョブ間のジョブ投入時の優先度差は保ちつつ、すべてのジョブに対して投入時刻からの経過時間に基づいたスケジューリングが行えるように優先度制御を改善した。図 4-17 にシミュレーションによる変更前後のジョブの平均待ち時間を示す。変更前は経過時間が長く規模の大きい通常ジョブの待ち時間が長いほか、優先度の高い prior と semiprior の平均待ち時間にほとんど差がなかったが、変更後は優先度順(prior > semiprior > large)に応じた待ち時間となり、経過時間が長く規模が大きい通常ジョブの待ち時間も大きく改善された。

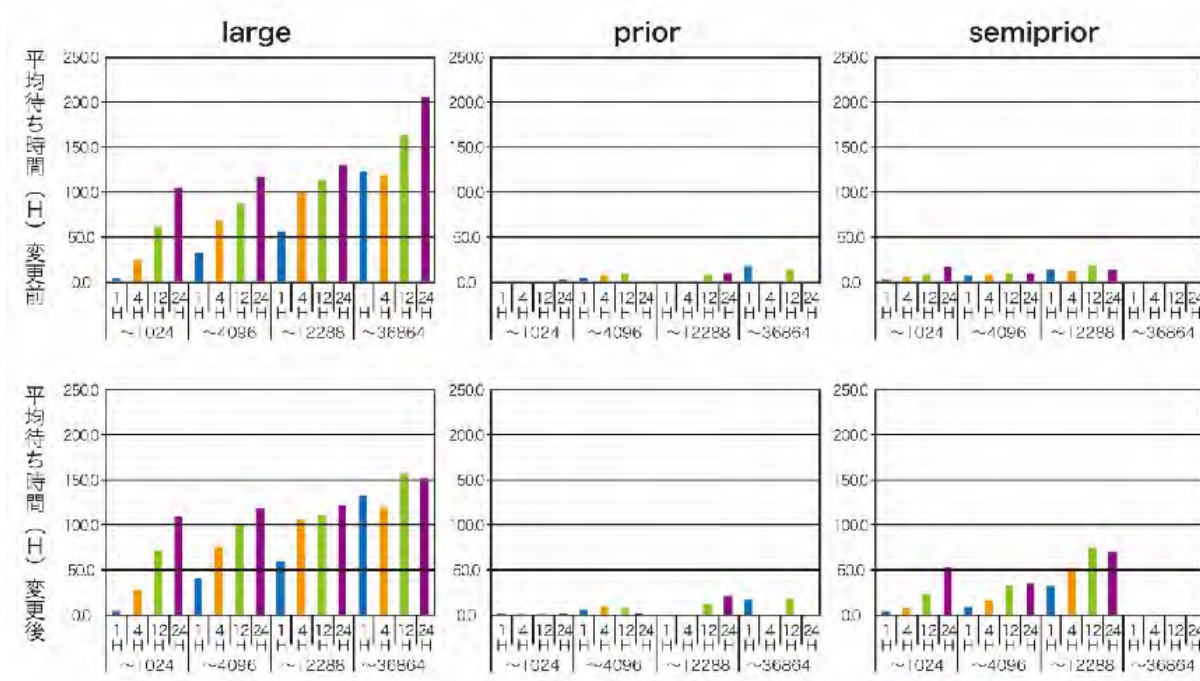


図 4-17.ジョブの平均待ち時間

### (3)情報セキュリティの確保

理研全体の情報セキュリティポリシーに従い、図 4-18 に示す体制を構築した。研究センターの長が統括情報セキュリティ責任者を、運用技術部門長が統括情報セキュリティ担当者をそれぞれ担当している。また、研究センターの各組織にもそれぞれ情報セキュリティ責任者および担当者を定めており、各部署にはネットワーク担当者および情報システム管理者を定め、情報セキュリティの管理を実施し



ている。また、研究センターの長を部会長とする情報セキュリティ作業部会を設け、研究センター内における情報セキュリティに関する議論および意思決定を行っている。また、不正アクセスについては、不正アクセスの有無をIDS(侵入検知システム)により研究センターのネットワーク機器(「京」を除く)に対するアクセスを常時検知している。これまでのところ、ホームページの改ざん、不正なログイン、root権限の奪取など、不正アクセスが成功したことはない。2016年2月にネットワーク機器が悪意ある者のNTPリフレクション攻撃のNTPリフレクタとして悪用され、政府機関を含む他機関のサーバーに負荷を与えた可能性がある。当該時間帯における外部向けの通信トラフィック量から推定して、特定のネットワーク機器の機能を麻痺させたり、ダウンさせたりするだけのダメージを与えたとは考えにくい。DDoS攻撃の特性上、他にも同じ攻撃に参加している機器があった可能性があり、最終的に攻撃対象となった機器にどの程度の影響があったかについては不明である。なお、事象検知後すぐに、機器の設定を変更し関係するパケットを遮断した。これにより今後同様の攻撃に悪用されることはない。また、ポートスキャンによる調査で、同様の攻撃に悪用される可能性がある機器がないことを確認している。



図 4-18.セキュリティ体制

#### 4-4.拠点の形成

1960年代より我が国では、国立大学の大型計算機センターや後の情報基盤センター（以下、「基盤センター」という。）、公的研究機関が、メーカーが開発した商用のスーパーコンピュータを調達し、運用を行ってきた。また、特定の研究分野での利用を前提とした開発された数値風洞（NWT）や地球シミュレータ等の技術を取り入れ、より汎用性を高めたスーパーコンピュータが基盤センターに導入されたこともあったが、開発の主体はやはりメーカーであり、我が国全体の HPC 拠点の形成には至らなかった。

ナショナル・フラッグシップ・マシンとなる「京」の開発に併せ、我が国の計算科学の発展を目指して HPC の中核拠点設置の検討が進められた。中核拠点の役割として、「京」の運用を進めつつ、HPC に関わる研究開発を主体的に行い、基盤センターと連携してスーパーコンピュータの利用拡大、人材育成等を行うことが期待された。さらに「京」の共用による成果創出に当たっては、新たな理論、手法等の創出、効果的利用が重要であり、そのためには利用技術の高度化を進める必要性があった。また、「京」を契機とした超並列大規模計算の進展が見込まれる中、分野横断的なアプローチも必要とされた。

このような機運の中、共用法に基づく「京」の設置主体であり、スーパーコンピュータの運用、利用技術の高度化、研究開発の推進、人材育成等を行う研究組織、計算科学研究機構（AICS）が 2010 年 7 月、理研に設置された。2012 年には、「京」の利用促進のための体制が RIST に設けられたほか、計算科学技術に関わるユーザーによって形成された「HPCI コンソーシアム」が置かれ、2012 年 9 月から共用が開始に向けた体制が整った。また、基盤センター等と連携し、「京」を中心とした全国の HPC システムのリソースを、我が国の幅広いスーパーコンピュータのユーザー層が全国の HPC システムの計算資源を効率よく利用できる体制と仕組みづくりの検討が行われ、HPCI の構築という形で結実し、HPC の幅広い利用者コミュニティの形成が進むこととなった。

##### (1) 共用の枠組み

「京」は共用法に基づく共用施設であり、「京」の共用にあたっては、国の基本方針の下、「京」の設置者・運用実施主体である研究センターおよび登録機関である RIST が、連携・協力して業務を実施している。また、業務の実施においては、計算科学技術に関わるユーザーによって形成された HPCI コンソーシアムをはじめとする関係機関とも協力している。

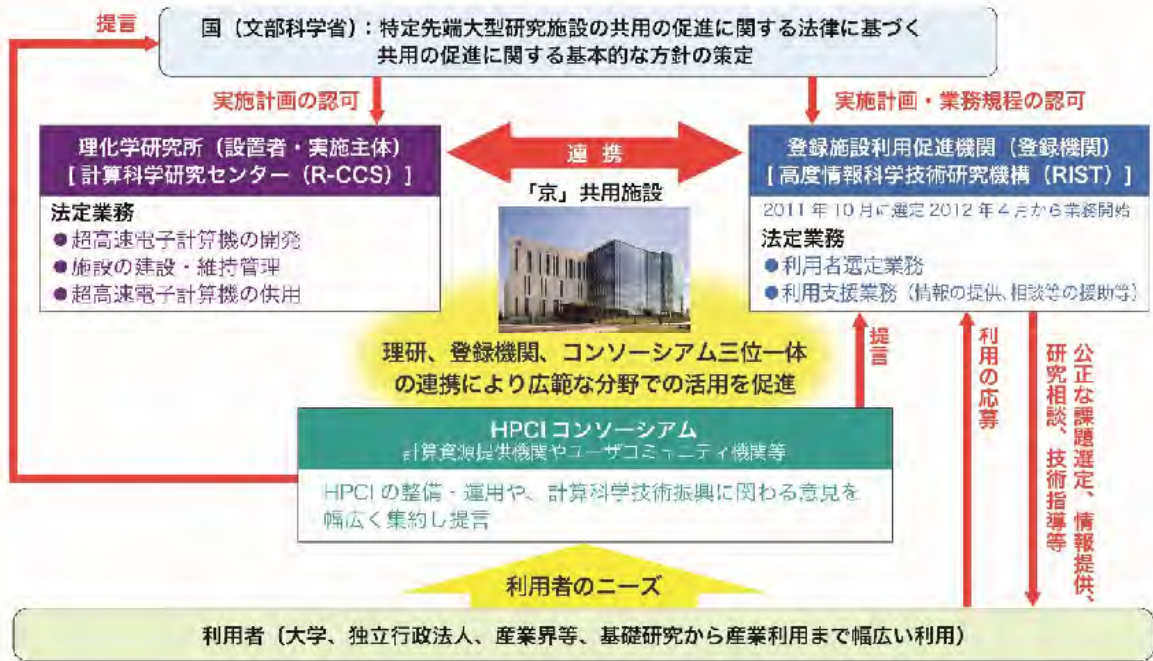


図 4-19.「京」の共用の枠組み

## (2) 研究開発の推進

研究センターは、研究チーム及びユニットにおいて、新たな理論、手法等の創出、効果的利用を進める高度化研究を国からの補助金で進めるとともに、外部資金や理研の運営費交付金等を活用し、自ら開発した理論や手法、それに基づいて開発されたソフトウェア等を用いた先端的研究を行ってきた。また、高度化研究で得られた知見を踏まえつつも、「京」の高度化にとらわれない新たな計算科学、計算機科学における先端的研究を外部資金や運営費交付等を充てて行い、高度化研究と先端的研究とは相補的な役割を果たしてきた。なお、その際には、研究資金ごとに達成目標を区別したうえで、研究員等の人件費についてはエフォート分割するなど、効果的な研究推進を、研究センターを挙げて支援している。

高度化研究と先端的研究の相補的な具体的な事例として、計算科学分野における「分子動力学計算の高機能化のための研究開発」があげられる。高度化研究の成果としては、「京」の能力を最大限引き出すことを主眼に置いた高機能・高性能な分子動力学ソフトウェア「GENESIS」の開発がある。一方、外部資金等の活用により「GENESIS」を活用した先端的研究が行われ、その成果が論文化されることにより、開発したソフトウェアの国際的評価にもつながるほか、ソフトウェアの分野コミュニティでの活用が推進されることとなった。また、データ同化に関わる研究開発においては、「京」を生かした大規模計算に適した効率的かつ高精度なデータ同化アルゴリズムの研究開発を高度化研究として行うとともに、外部資金を用いた先端的研究においては、他機関との連携により実際の観測データを用いることでゲリラ豪雨の予測に活用するなど、気象予報の革新に向け貢献している。

一方、計算機科学分野では、数十万のプロセッサを持つ「京」を使いこなすため、それぞれのプロセッサを協調させて計算を行うための並列プログラミングが必須となる。高度化研究においては、新たに並列プログラミング言語「XcalableMP」を設計し、そのコンパイラを開発した。本成果は、「京」の高度化に留まることなく、ポストペタスケール・コンピューティングのためのプログラミングについてのプロジェクトや、演算加速機構を持つクラスタへの言語拡張など、次世代のプログラミング・モデルの研究にも

つながっている。また、「京」利用時の最適化をツール・ライブラリ側で行い、ワークフロー開発コストの大幅な削減を目指し、大規模並列システム上のデータ処理基盤の構築を進めてきた。適合格子細分化法(AMR)は、シミュレーションにおいて頻繁に用いられる手法の一つであるが、必要な計算およびメモリ使用量を大幅に削減できるため、シミュレーションの高速化に有効である。大規模なスーパーコンピュータ上で簡単に、AMR を利用できる環境を整えたシミュレーションソフトウェアの開発は、ハイパフォーマンス・コンピューティング(高性能計算技術)に関する世界最高峰の国際会議である SC16 において最優秀論文賞を受賞し、学術的に高い評価を得ることとなった。

このように高度化研究で得られた成果は、「京」に留まらず、外部資金等を活用し、HPC に関わる先進的な共通基盤技術や新たな科学的な発見などにつながっており、論文やソフトウェアとして発信されている。また、研究センターの研究チーム、ユニットが、HPCI 戦略プログラム、その後継の重点課題、大学や研究機関等のアカデミアや産業界との研究者、技術者との間における橋頭堡となることで、計算科学、計算機科学のより一層の発展につながっている。このことは研究面だけでなく、HPC における研究コミュニティの形成、大学生や大学院生、若手研究者等の人材育成の推進、HPC に対する啓発活動、産業利用の促進等、研究分野の発展、利用者の拡大に関して HPCI コンソーシアムによるオールジャパン体制の原動力として機能していることに他ならない。

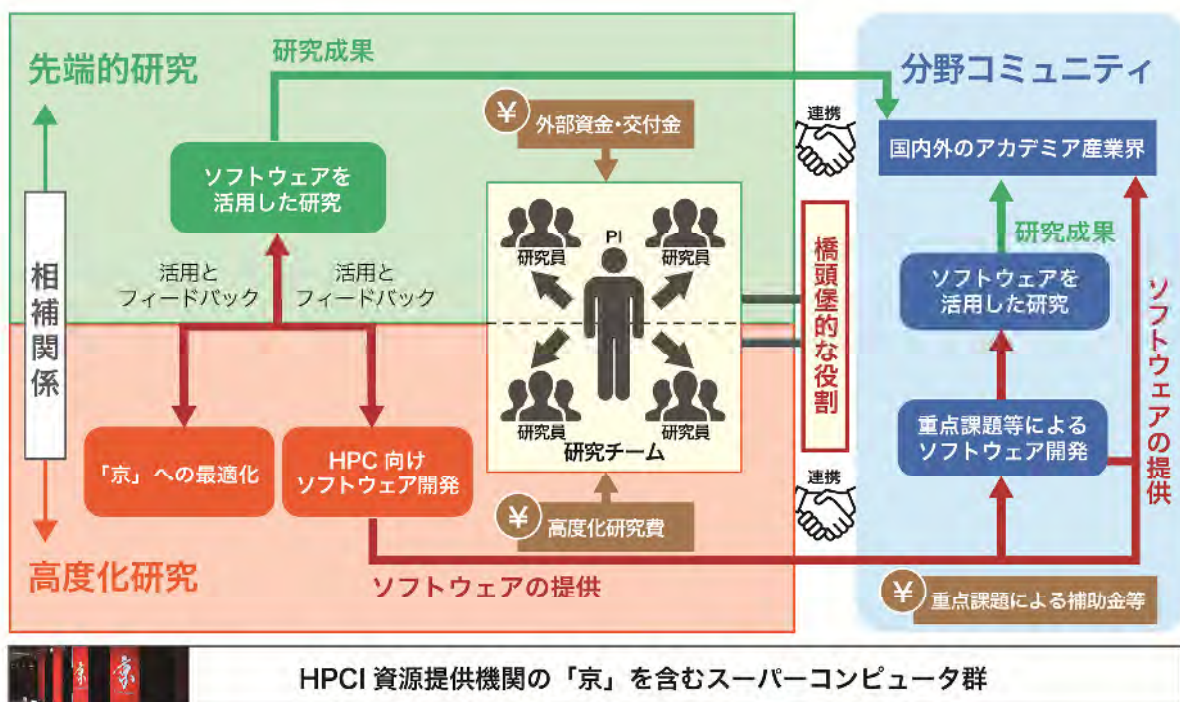


図 4-20. 研究開発の推進体制(研究センターの研究者を中心として)

### (3) 関係機関との連携

HPCI は、我が国の幅広い HPC システムユーザー層が、「京」を中核とした全国の HPC システムのリソースを効率よく利用できる仕組みとして文部科学省科学技術試験研究委託事業により整備された。研究センターでは、RIST をはじめとする関係機関と連携を図りながら、HPCI 共用ストレージ(西拠点)の運用・保守を行った。この結果、全国規模でニーズとリソースのマッチングが可能となり、萌芽的研

究から大規模研究まで、また産業利用にわたる幅広い HPC システムの活用が加速された。また、計算科学技術関連コミュニティを醸成・拡大し、成果の社会還元にも貢献した。

また、FOCUS と連携し、産業界における「京」の利用拡大に向けた取り組みを実施した。FOCUS は、「京」をはじめとするスーパーコンピュータの産業利用促進や研究支援、普及啓発など、計算科学分野の振興のために兵庫県および神戸市、神戸商工会議所により 2008 年に設立された組織であり、HPCI アクセスポイント神戸として「京」と 40GBps の回線で直結され、「京」から生みだされる巨大データを高速にハードディスクに転送するサービスや産業利用への環境整備などで協業してきた。「京」の産業利用企業の 6 割が、FOCUS により整備されたスパコンをまずは利用しており、「京」利用の入り口となることで、「京」の産業利用の促進に寄与している。

さらに研究センターでは、SPring-8/SACLA の J-PARC/MLF、関連する戦略プログラムまたは重点課題とも連携し、SPring-8/SACLA や J-PARC/MLF 等の大型実験施設と「京」をはじめとするスーパーコンピュータとの連携利用を推進した。

#### 4-5.高度化研究

高度化研究において、「京」の高度利用のため、幅広い分野の利用を支える共通基盤的研究を実施した。研究センターの計算科学のチームにおいては、新たな理論・手法に基づく先進モデル・プログラムの開発とユーザーへの提供を目標とした。一方、計算機科学のチームにおいては、「京」のシステム・プログラミング環境の充実・改善のための研究により、アプリケーションのより効果のある利用につなげるソフトウェアの研究を実施した。さらに、この高度化研究を通じて、計算科学および計算機科学、計算科学内の分野融合型研究、すなわち、学際計算科学の創出を目指した。なお、計算科学のそれぞれの分野の研究は、戦略プログラム(5 分野)で行われており、高度化研究においては戦略プログラムと連携し、分野の研究者に貢献するアプリケーションプログラムの開発、さらには分野横断的な計算科学の方法論の研究に重点が置かれた。

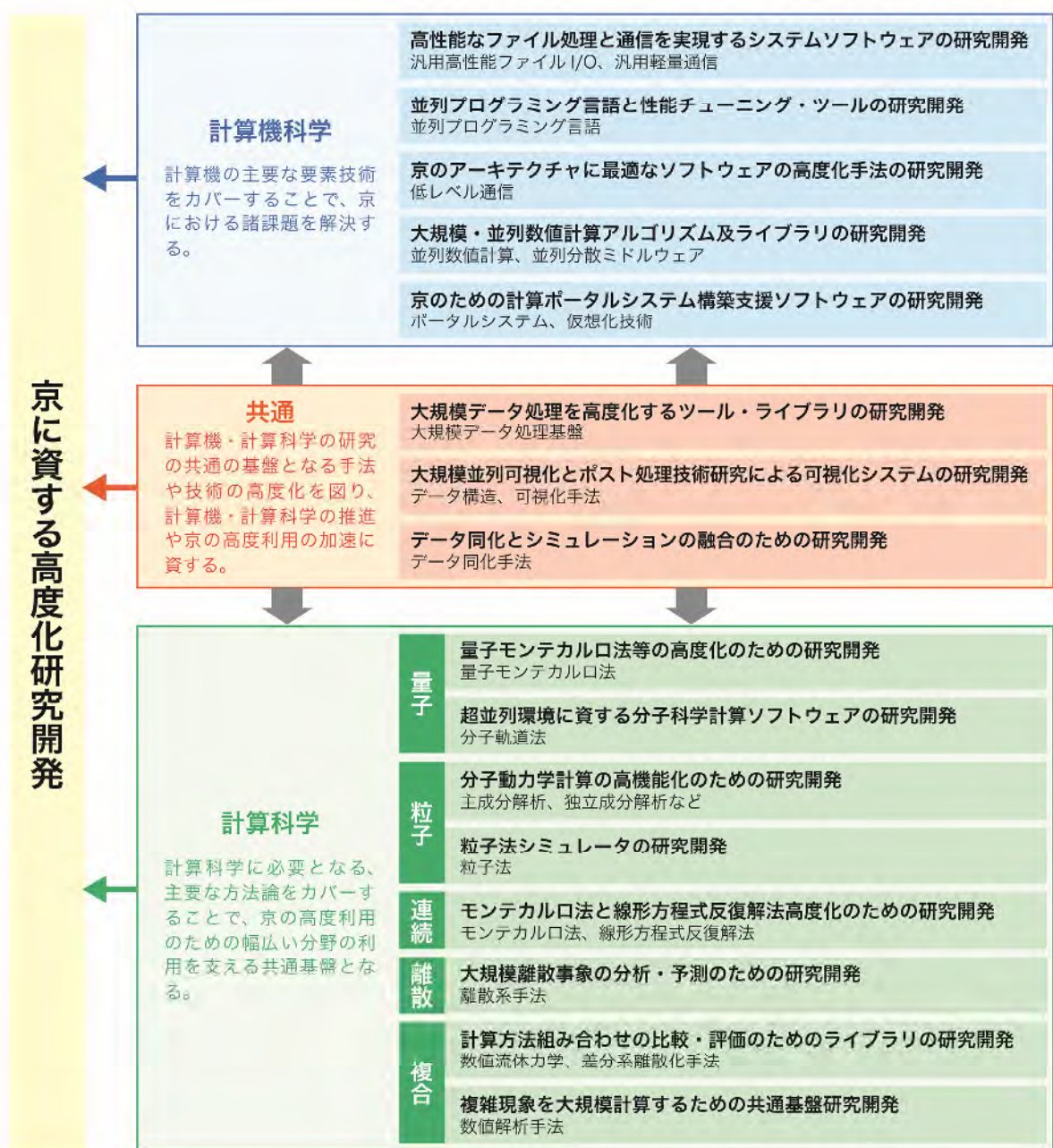


図 4-21. 研究センター発足時の高度化研究テーマ一覧

さらなる計算科学の発展のためには、計算機利用の裾野を広げ、また将来の計算機の進化も見据えて、次世代計算機に向けた計画的・継続的な研究やそのための人材育成の重要性も指摘されていた。高度化研究は、あくまでも京の利用に直接貢献するものとして位置づけられたため、これらの課題については、高度化研究の成果を基に将来の計算機開発・利用につながる研究に発展することを想定しているが、京とは直接に関係しないために、高度化研究の一部とはしなかった。

以下に、高度化研究の成果についてまとめる。なお、(1)～(16)については、研究センター発足当時の研究チームによる成果、(17)および(18)については、後発の研究チームによる成果である。

### (1)「京」および「富岳」に向けたシステムソフトウェア研究開発

本研究は、システムソフトウェア研究チームによる「高性能なファイル処理と通信を実現するシステ

ムソフトウェアの研究開発」の一部として行われた。「京」の利便性向上を目的として、オープンソースの NetCDF ファイル I/O ライブラリおよび MPI 通信ライブラリ実装の一つである MPICH を「京」に移植し、ユーザーに提供した。また、「京」の高度化に関しては、「京」の Tofu ネットワークインターフェイス能力を引き出すために、MPI 通信ライブラリ仕様書で規定されている永続通信 (Persistent Communication) の高速化技術を研究開発し、PRDMA (Persistent Remote Direct Memory Access) ライブラリとしてユーザーに提供したほか、MPI 通信ライブラリ仕様書で規定されている MPI-IO ファイル IO 機能を「京」のファイルシステム向けに最適化したファイル I/O ミドルウェアとして EARTH (Effective Aggregation Rounds with Throttling) を研究開発しユーザーに提供した。

さらに、理研放射光科学研究センターデータ処理系開発チームとの連携プロジェクトの一環として、XFEL (X-ray Free Electron Laser) 施設で観測されるビッグデータを処理するためのファイル I/O ライブラリ Carp を開発した。加えて、研究センターのデータ同化研究チームが実施する気象データ同化プロジェクト向けに、観測データを「京」上で実行されるアプリケーションに実時間でデータ転送するソフトウェア JIT-DT を開発した。

## (2) 大規模並列プログラム開発を容易にする並列プログラミング言語とコンパイラの研究

本研究は、システムソフトウェアプログラミング環境研究チームによる「並列プログラミング言語と性能チューニング・ツールの研究開発」の一部として行われた。数十万ものプロセッサを持つ「京」を使いこなして計算科学の研究を行うには、それぞれのプロセッサを協調させて計算を行うための並列プログラミングが必須となる。本研究では、大規模並列プログラム開発を容易にする並列プログラミング言語として XcalableMP と呼ぶ言語を設計し、そのコンパイラを開発した。

XcalableMP は、従来のプログラム (C や Fortran) に指示文と呼ばれる並列実行に関する指示文を加えることで、なるべく少ない手間で並列プログラムを作成することができる並列プログラミング言語である。仕様は、PC クラスタコンソーシアムの XcalableMP 規格部会でコミュニティの議論を経て、検討・決定した。この言語のためのコンパイラとして、研究センターと筑波大学で Omni XcalableMP コンパイラを開発し、「京」に対してはその高い性能と特徴を引き出せるように工夫を行った。なお、このコンパイラは、オープンソースソフトウェアとして公開しており、他の並列システムにも対応している。

「京」の性能を引き出せるように設計したコンパイラを用いて、ベンチマークコードを評価し、その性能と高生産性に対して、国際会議 SC13 において、HPC チャレンジ・クラス 2 (プログラミング言語の性能および生産性を競う) 部門において日本で初めて受賞した。引き続き、SC14 においても同賞のパフォーマンス賞を連続して受賞した。10 件を超える招待講演や学術論文が出版され、さらに、この言語の研究をベースに、日仏のポストペタスケール・コンピューティングのためのプログラミングについてのプロジェクトや演算加速機構を持つクラスタへの言語拡張である XcalableACC、タスク並列プログラミングなど、次世代のプログラミング・モデルの研究につながっている。

## (3) データフロー計算プラットフォームの開発

本研究は、プロセッサ研究チームによる「京」のアーキテクチャに最適なソフトウェアの高度化手法の研究開発」の一部として行われた。「京」のような大規模・複雑化した計算機システムでは、現状のプログラミング方式を用いて高い効率で高性能計算を実現するにはプロセッサ・メモリ・ネットワークの構造や挙動を理解した上での高度な最適化が必要となり、生産性の低下が問題となっている。これを解決

する方法として、システム全体での通信や同期を明示的に指定する大域的なプログラミングではなく、各計算ノードまたは計算タスクの近傍におけるデータ移動や同期という局所的な処理に基づいて並列計算を記述する新しいプログラミング方式や、その為の処理系が有望視されている。

本開発では、高効率かつ大規模な並列計算を高い生産性で実現することを目指し、局所的なプログラミングによる並列計算の実現のために、1)データフロー計算モデルとそのコンパイラ、および 2)データフロー計算のための計算機アーキテクチャとアプリケーションの高性能化方式の研究を行った。回路再構成可能デバイスである FPGA(Field-Programmable Gate Array)を用いたデータフロー計算向け計算機アーキテクチャを設計した上で、計算問題に特化した計算回路を抽象度の高い記述から自動生成するコンパイラに取り組んだ点、複数の FPGA デバイスが専用ネットワークで相互に接続された試作システムを構築した点、試作システム上に実際に動作する高性能データフロー計算ハードウェアモジュールを実装し、HPC 分野の問題について性能を評価した点が、独創的である。

#### (4)高性能・高並列な大規模数値計算技術の研究

本研究は、大規模並列数値計算研究チームによる「大規模・並列数値計算アルゴリズムおよびライブラリの研究開発」の一部として行われた。「京」の高性能マルチコアプロセッサ(SPARC 64V8fx 8 コア)・高性能ネットワーク(Tofu)を活用し、10 万並列以上の超並列計算に対応する数値線形計算基盤、シミュレーション構築に必須となる並列数値計算ソフトウェア(行列ソルバー、固有値ソルバー、3次元 FFT、並列疑似乱数など)を構築した。同時に優れた並列数値計算アルゴリズムならびに通信削減アルゴリズム、高精度演算、低精度演算、混合精度演算、個別化+混合 BLAS ルーチン開発など、「富岳」につながる将来の基盤技術の研究開発を推進した。特に、固有値ソルバ EigenExa は「京」の全計算ノードを使用して、世界最大規模の固有値計算(行列サイズ 100 万次元)を1時間弱で成功し、超並列環境下における並列固有値アルゴリズムの有効性と従来不可能とされた規模の計算が次世代機でプロダクトランの中でも現実的な問題であることを示した。

#### (5)高性能計算環境の利用高度化に関する研究

本研究は、利用高度化研究チームによる「京のための計算ポータルシステム構築支援ソフトウェアの研究開発」の一部として行われた。スーパーコンピュータの利便性を向上し、より多くの人々に利用してもらうことを目標として、「スーパーコンピュータのためのポータルシステム」、「仮想計算環境技術を応用したスーパーコンピュータのためのプログラム開発・実行の支援」、「スーパーコンピュータのためのプログラムの解析・検証」などの研究・開発を行った。

具体的には、スマートフォン等から「京」上の計算を簡単に操作できるポータルシステムを開発するとともに、1 台の計算機上で大量の仮想計算環境を再現可能な技術の研究を行い、実際の「京」の計算ノード 2 千台上で、仮想的な計算ノード 4 万台を再現した。また、軽量コンテナ技術のスーパーコンピュータへの応用を検討し、K-scope を軽量コンテナ内で実行することで利便性を向上する等の成果を上げた。他にも、並列実行プログラムが期待通りに動作するか検査するためのモデル検査理論の研究開発を進めた。さらに、従来職人芸に頼るところがあったプログラムの性能チューニングに関しては、機械学習を応用してより具体的な根拠に基づいて行う研究や、従来開発生産性の低かったスーパーコンピュータ向けソフトウェアを、現代的な言語である Python を用いて性能劣化を抑えつつ開発生産性を高める研究、性能解析ツールの「京」への移植・公開などを行った。



加えて、高性能計算に対する潜在的な需要はあるものの「京」の利用に至っていない用途をターゲットに、ボトルネックを解消する技術開発を目指した。新たな用途の候補としてあげたのは、人手不足問題を解決することを目指し、大型機械やシステムの状況をシミュレーションによって把握し、人工知能技術と併せて自動運用の実現である。デジタルツイン向けシミュレーションの構築、実行の技術ハードルを下げるため、プログラミングが容易な Python 言語で逐次プログラムを書くのみで、「京」等の大型計算機向けのプログラムが生成できるプログラミングフレームワーク Pyne を開発し、その基本設計を論文として発表した。デジタルツインの構築のためには、対象システムに関するドメイン知識と、シミュレーションモデル作成および並列プログラミングに関する知識が必要であり、3つの分野での一流の技術力が必要であったが、Pyne によって後者 2 つについての技術ハードルを下げるができる可能性を示すことができた。

## (6) 大規模データ処理を高度化するツール・ライブラリの研究開発

本研究は、プログラム構成モデル研究チームによる「大規模データ処理を高度化するツール・ライブラリの研究開発」の一部として行われた。データ同化気象予測やレプリカ交換分子動力学法などのアンサンブル計算や、ゲノム解析などの観測データ解析など、大規模データ処理を伴うワークフローは、従来個々のアプリケーション開発者が独自に開発しており、アプリケーション間で共通する項目も多く、それらをツール・ライブラリとして抽出できれば、「京」利用時の最適化をツール・ライブラリ側で行うことができ、ワークフロー開発コストの大幅な削減が可能となる。

本研究では、大規模並列システム上のデータ処理基盤として MapReduce 処理系の研究開発を実施し、開発したソフトウェア K MapReduce (KMR)を「京」ユーザーへ提供およびサポートを行ってきた。特に「京」の様な数千～数万規模のノード環境での高いスケーラビリティを実現するために、オンメモリでのデータ処理や、ネットワーク・ストレージアーキテクチャを考慮した Key-Value ペアの Shuffling、ファイルアクセスを提案・実現した。KMR は「京」ユーザーのみならず、広くオープンソースソフトウェアとしても公開し、利用講習会等を開催し普及に努めた。さらに KMR を基盤としてデータ並列処理を要求する計算科学アプリケーションのワークフロー構築を容易に行うためのフレームワークを開発した。これらの開発したソフトウェアによる知見は国際学会等で論文として発表した。

## (7) 大規模並列可視化技術の研究

本研究は、可視化技術研究チームによる「大規模並列可視化とポスト処理技術研究による可視化システムの研究開発」の一部として行われた。「京」で実行される大規模並列シミュレーションが生成する巨大なデータを効率よく可視化するためのスケーラブルな並列可視化システムを構築するために必要な要素技術として、大規模分散並列可視化システムアーキテクチャ設計、大規模並列に対応した画像重畳アルゴリズムとライブラリの開発、大規模分散データ圧縮、大規模データの分析手法開発、大規模分散並列環境における粒子追跡法の開発など、またこれらの要素技術を組み込んだ大規模並列可視化システムのプロトタイプ HIVE の開発を推進した。特に「京」の全系を利用した高速な画像重畳技術、およびデータ圧縮技術として有用な固有直交展開(POD)の大規模並列アルゴリズムの核となる独創的な 234 スケジューリングアルゴリズムを開発し、それぞれライブラリとして公開している。これらの要素技術は、今後の超並列計算機環境において低速なファイルアクセスを回避する In-Situ 可視化処理においても重要な役割を果たし、次世代計算機においても有用な技術である。

## (8) データ同化とシミュレーションの融合のための研究開発

本研究は、データ同化研究チームによる「データ同化とシミュレーションの融合のための研究開発」の一部として行われた。データ同化は、力学系理論、統計数理などの数理科学に基づき、シミュレーションと実測データをつなぐ学際的科学であり、気象シミュレーションでは天気予報の精度を左右する重要な役割を果たす。具体的には、シミュレーションと観測データとの相乗効果を生み出すための共通基盤として、特に「京」を生かした大規模計算に適した効率のかつ高精度なデータ同化アルゴリズムを研究開発し、さまざまな応用研究における利用に供することを目的としてきた。これまでの成果の一端として、「京を使い世界最大規模の全球大気アンサンブルデータ同化に成功」、「京にて現実大気の世界最大規模アンサンブルデータ同化に成功」、「京と最新鋭気象レーダを生かしたゲリラ豪雨予測」、「30 秒更新 10 分後までの超高速降水予報を開始」、「京と気象衛星ひまわり 8 号による天気予報の革新」が挙げられる。本研究で開発されたデータ同化システムはポスト「京」重点課題のターゲットアプリとして選定されるなど、「富岳」においても本研究の知見が生かされる予定である。

これまでのアンサンブルデータ同化では、100 個程度以下のアンサンブルを用いていたが、本研究では、全球大気データ同化システムを用いて、これを世界最大規模の 10,240 個に増やすことに成功した。また、領域を限った天気予報シミュレーションは、通常 1km より粗い解像度で、1 時間ごとに新しい観測データを取り込んで更新するが、本研究では解像度 100m で 30 秒ごとに新しい観測データを取り込んで更新する、空間的・時間的に桁違いの天気予報シミュレーションを実現した。これらは「京」がなければ実現できなかった。

## (9) 強相関量子多体系に対する量子シミュレータの研究開発とその応用

本研究は、量子系物質科学研究チームによる「量子モンテカルロ法等の高度化のための研究開発」の一部として行われた。銅酸化物高温超伝導体の発見を契機にして、電子間相互作用が本質的に重要である強相関量子系に関する研究は四半世紀にわたり集中的に行われてきた。それにも関わらず、最も基本的な理論モデルの基底状態についてさえ、必ずしも一致した理解は得られておらず、現代物性物理学の最も基礎的で重要な研究課題の一つとして残っている。この問題では強い量子揺らぎと多体問題の困難さが同時に存在しており、解析的手法で解ける領域は極めて限定される。また、「多体問題」を陽に取り扱うという観点に立てば、平均場近似等の一体描像に基づく取扱いや摂動論アプローチは相補的ではあるが決定的な手法とはなりにくい。

本研究では、効率的な強相関量子系に対するシミュレーション手法として知られている量子モンテカルロ(QMC)法や密度行列繰り込み群(DMRG)法について「京」利用のための高度化研究開発を行った。開発したプログラムは「京」、およびポスト「京」重点課題や萌芽的研究課題、および「京」を中核とする HPCI 一般利用課題(25 課題以上)等で用いられ、多くの研究成果が上げられた。

QMC 法においては、グラフェン等の模型である 2 次元ハバード模型に対する基底状態計算において当時世界最大規模の計算を「京」を活用することにより実現したほか、DMRG 法では空間次元 2 次元の強相関量子系の量子ダイナミクス計算を可能にしており、SPring-8 をはじめとした大型実験施設での実験の解析や量子コンピュータのシミュレーションなど多くの応用を可能とした。

## (10) 超並列環境に資する分子科学計算ソフトウェアの研究開発

本研究は、量子系分子科学研究チームによる「超並列環境に資する分子科学計算ソフトウェアの研究開発」の一部として行われた。「京」の計算能力を最大限に発揮できる理論分子科学の計算手法とその計算ソフトウェア「NTChem」を開発し、共用利用できるように整備・公開した。「NTChem」は一から設計した新しい国産分子科学計算ソフトウェアである。既存量子化学ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーしつつ、他のソフトウェアでは利用することのできない多くの量子化学計算法を実装した。特に、「京」などのマルチコア超並列クラスタ計算システムの性能を引き出すことができる並列アルゴリズムを実装することで大規模で高精度な量子化学計算を実現した。また、数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現するための分子科学理論を実装した。相対論の影響を考慮した計算が可能で、重原子分子系の化学反応や物性値を精度良く計算することができる。

多くのユーザーに利用してもらうため、研究センター内の連携及び RIST の協力のもと、ユーザー支援体制や公開環境を構築中であり、「京」の他、9つの HPCI 機関（北海道大学、東北大学、最先端共同 HPC 基盤施設(JCAHPC)、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学)、分子科学研究所、FOCUS スパコンで公開した。また、「NTChem」は、ポスト「京」重点課題 5 のターゲットアプリとして採用され、実施機関との連携・協力によりアプリケーション高速化等のノウハウ・知見を蓄積しており、今後の利活用が期待される。

## (11) GENESIS の開発による生体分子動力学シミュレーション

本研究は、粒子系生物物理研究チームによる「分子動力学計算の高機能化のための研究開発」の一部として行われたものである。超並列分子動力学ソフトウェア「GENESIS」を開発し、「京」を用いて初めて実現できる大規模な生体分子動力学シミュレーションを行った。高速・超並列計算を行うために空間分割法などの基礎基盤技術を新たに開発し、GENESIS に導入した。戦略機関1と連携して、生体分子系として世界最大規模となるバクテリア細胞質の全原子分子動力学シミュレーションを行い、細胞内でのタンパク質動態を初めて計算科学で明らかにした。その結果をわかりやすいアニメーション動画として YouTube 等でも公開し、計算科学の秘めた可能性を広く伝えた。また、ポスト「京」重点課題1と協力し、タンパク質・薬剤の結合自由エネルギー計算法を新たに開発し、キナーゼ阻害剤などに応用することで創薬開発のための新しい手法を提案した。このような最新の計算科学技術を含む GENESIS をホームページ上でフリーソフトウェアとして、ソースコード、チュートリアルなどとともに公開し、その利用者拡大につなげた。

分子動力学ソフトウェアの開発は、欧米を中心に活発に行われており、先行するソフトウェアが広く使われている。我々は「京」を用いた超並列計算の可能性を信じて、その演算能力を最大限に発揮する基盤的アルゴリズム (Inverse Lookup Table, Midpoint Cell, 3D decomposition FFT など)を開発することで、1 億原子を超える超大規模な生体分子系の全原子分子動力学シミュレーションを世界に先駆けて実現した。このシミュレーションは世界的にも注目を集め、2016 年に発表した論文は既に 150 回以上引用され、WOS の Top1%論文として評価されている。

## (12) 粒子系シミュレータ開発プラットフォームの研究

本研究は、粒子系シミュレータ研究チームによる「粒子法シミュレータの研究開発」の一部として行

われたものである。粒子を使ったシミュレーションは、分子レベルでの創薬シミュレーションから防災・減災のための離散要素法や流体、その複合シミュレーション、宇宙全体の構造形成シミュレーションまで、多様な分野で使われている。粒子間相互作用は分子レベルでの分子間力、クーロン相互作用といったものから、流体シミュレーションでの偏微分方程式の離散化から導かれるもの、宇宙全体での重力等多様である一方、並列化、高速化のために必要なプログラム開発には共通の部分が多い。本研究では、粒子系シミュレーションの並列化、高速化を実現するソフトウェア FDPS を粒子データや粒子間相互作用の詳細とは独立な汎用性をもつものとして提供し、様々な粒子系シミュレーションの高速化・高度化に資する研究を実施した。2015年に最初のバージョンを提供し、現在までに既に50以上の査読論文で使われている。

粒子間相互作用や粒子のデータ形式によらない汎用的なものは多くなく、代表的なものとしては TU Dresden の OpenFPM が挙げられるが、これは「京」のような大規模並列実行までを目指すものではなく、並列化、大規模実行での実行効率においては我々のグループが開発した FDPS が世界をリードしている。実際のソフトウェア開発・研究の現場で使われているという点でも、引用数、関連論文の数で FDPS が世界をリードしている。

### (13) 格子上の場の理論シミュレーション手法の基礎研究

本研究は、連続系場の理論研究チームによる「モンテカルロ法と線形方程式反復解法高度化のための研究開発」の一部として行われたものである。格子上の場の理論を用いたシミュレーションは、宇宙の基本物理法則として精密検証が行われている素粒子標準模型の非摂動力学を数値的に解き明かすための基盤技術である。

高温な初期宇宙の状態や標準模型を超える物理法則の探求のための物理量の計算は、基盤技術の改良と京から富岳に至る計算機能力の増大により、より理想的なモデルを使った、より大規模な計算を可能とし、自然法則の新しい知見を与えてくれると期待される。特にカイラル対称性が保たれる格子 QCD を用いた大規模シミュレーションで、高温相と低温相を分ける相転移の探索や、重いクォークまで含めた現実的パラメータを用いた計算は、「富岳」ではじめて意味のある結果を導くことが期待される。「京」では、大体積真空配位の高精度解析手法の実証実験を、陽子崩壊行列要素をターゲットとして行うとともに、カイラルフェルミオンによる有限温度シミュレーションのパラメータチューニングを行った。また、場の理論に留まらず利用可能な高性能疑似乱数メルセンヌツイスターのパラメータ探索を行った。

陽子崩壊行列要素は、物理点直上の数値解析により、従来の重いクォークのシミュレーションからの外挿による系統誤差を完全に排除することに成功し、アメリカで行われている同種の計算とともに大統一理論のパラメータ決定や棄却に用いられることになる。カイラルフェルミオンを用いた QCD の有限温度計算により、他の手法では手が届かない、宇宙がたどってきた QCD 転移におけるカイラル対称性の果たすメカニズムの完全解剖が「富岳」で可能になる。

### (14) HPC による離散事象の研究およびそのシミュレーションの高度化

本研究は、離散事象シミュレーション研究チームによる「大規模離散事象の分析・予測のための研究開発」の一部として行われたものである。異質な状態が共在し、互いの関係性にに基づき高度かつ複雑なふるまいをする現象がどのように生じ、どのようにふるまうのか、そうした研究に「京」をはじめと

するスーパーコンピュータを活用し物理現象と社会現象とを主な対象として研究を行った。

物理現象では気液相転移のダイナミクスと破壊現象とを扱った。前者では分子運動からキャビテーションとプール沸騰を、後者では破壊応力より小さい応力下での経年破壊を解析した。社会現象では自動車交通・人流・経済活動の「京」ほかスーパーコンピュータでのシミュレーション技術を開発し、また協力関係のゲーム理論的研究を行った。こうした研究のためのツールとして、多数のシミュレーションを柔軟に実行管理するアプリケーション「OACIS」、「CARAVAN」を開発し、活用している。

以上は現実世界にみられる離散事象現象だが、複雑な現象を記述し認識する過程の数理モデルであるコンピュータ自身、離散事象系である。この先端である量子コンピュータの、スーパーコンピュータを使ったシミュレータを開発した。さらに、全球スケールでの自動車交通のシミュレーション、都市スケールのシミュレーションから自動車交通の状況を自動認識する人工知能技術の可能性、津波避難などの行動計画をシミュレーションと人工知能技術により最適化する技術の実証、大並列計算機による証券取引シミュレーション技術の開発、3人のくりかえし公共財ゲームで協力状態が実現することの発見、世界最大(発表当時)の48qubitの量子コンピュータのシミュレーション達成といった成果が得られた。

#### (15) 気象気候計算の基盤ライブラリの構築とそれを使った実証研究

本研究は、複合系気候科学研究チームによる「計算方法組み合わせの比較・評価のためのライブラリの研究開発」の一部として行われたものである。研究チームの目標は、「京」の上で信頼できる気候の計算手法・解析手法を提案し、将来のモデリングの方向性を示すことである。このため、気候モデルの中の様々なコンポーネントが交換可能な基本的なライブラリを開発してきた。「京」での高速化はもとより、コードの可読性、ユーザーの利便性、計算結果のトレーサビリティを考慮して構築し、このライブラリを使ってより洗練された独自の気候モデルを開発した。

このモデルを使用しライブラリの有用性を示すとともに、気象学/気候学での大きな問題に取り組むために、外部の研究所と協力しながら「京」を駆使して、現象の基本的な理解から環境評価まで幅広く行ってきた。具体的な例として、高解像度化による全球での雲表現の改善、雲-エアロゾル-放射線のフィードバック機構の新しい知見、火星のダストデビルの統計的性質、地域の将来気候予測手法などである。いずれも一級の学術誌に掲載し、プレスリリースを行った。

国内外で利用できる気象・気候シミュレーションコードは、一部を除きクローズドライセンスである。本研究で開発したコードは、国内では唯一、整備されたオープンな気象気候アプリケーションである。また、既存のコードは、「完成品としてのモデル」であるのに対し、本研究開発では「コンポーネントライブラリ」という形態をとっており、この分野では独創的である。これにより、他のモデルでもコンポーネントの利用が可能であること、ライブラリを利用することで比較的簡単に質の異なるモデルが構築できることなどの柔軟性が高く、他と比べて研究インフラとしての優位性が高い。

#### (16) 複雑現象を大規模計算するための共通基盤研究開発

本研究は、複雑現象統一的解法研究チームによる「複雑現象を大規模計算するための共通基盤研究開発」の一部として行われたものである。計算機の高度化に伴い、より複雑な現象や形状に関する研究課題が増えている一方、その計算には流体・構造・熱・電磁波・化学反応等の複数の支配方程式が複雑に関係しており、方程式の型やパラメータを決定することが困難である。複雑な現象を同時

に計算できるアルゴリズムやツールの開発が、幅広い分野の共通基盤技術として切望されていた。

本研究では、「京」から「富岳」へと向かう次世代アーキテクチャに対応した手法のさらなる高速化(リアルタイムシミュレーション)と、実験を超えた実運転環境下での予測の精度向上(リアルワールドシミュレーション)をめざし、次世代デジタルエンジニアリングを具現化するために、統一的データ構造に基づく統合シミュレーションフレームワーク「CUBE」の多目的最適化、利用技術の高度化に関する研究を実施した。

CUBE に埋め込み境界法(IBM)に基づくオイラー・ラグランジュハイブリッド移動境界法を実装することで、6 軸自由運動する自動車と車体周りの空気の流れを連成させたシミュレーションが可能となり、実際に車体開発に用いられている詳細車体 CAD データから、データ修正なしに BCM 階層直交格子を作成し、自動車コーナリング時のタイヤホイールの回転や前輪舵角変化も考慮したリアルワールドシミュレーションを行うことに成功した。将来的には CAD データから高速走行性能評価を行うことが可能となり、試作車両が存在しない設計上流側で、車両のさまざまな性能を統合的に最適化する新たな自動車ものづくりの可能性を示すことができたといえる。

### (17)HPC システムの高効率化に関するコデザイン評価

本研究は、次世代高性能アーキテクチャ研究チームによる研究の一部として行われたものである。スーパーコンピュータの性能向上は消費電力の増大を招き、消費電力がシステム設計や実効性能を制約する最大の要因となりつつある。このような中で、システムが持つ省電力機能などをアプリケーションの特徴に合わせて適切に利用しつつ、今後の高性能化を目指していく必要がある。さらに、ムーアの法則の終焉が叫ばれる中、将来的な HPC システムのアーキテクチャを検討するためにもこの解析は重要である。本研究では、アプリケーションの振る舞いを「京」のパフォーマンスカウンタ情報を利用して解析し、将来的なアプリケーションの特徴に応じた電力制御戦略構築のベースとなるデータを収集しつつ、電力削減効果の検討、および将来の HPC システム設計のコデザイン評価を行うことを目的とする。「京」上で様々なベンチマークプログラムを異なるパラメータ(データサイズや利用ノード数)を用いて実行し、パフォーマンスカウンタのデータを収集し、そのデータをもとに電力制御機能を利用した場合の電力削減効果や、どの部分に実行サイクルが費やされているかを解析する。

大規模実運用マシンである「京」上で、その豊富なプロファイリング機能を利用しつつ、電力削減戦略の検討や将来的な HPC システムのアーキテクチャを検討するためのデータが取得できる点で、優位性があると考えられる。

### (18)高性能・高信頼・高生産性のためのビッグデータ処理基盤

本研究は、高性能ビッグデータ研究チームによる研究の一部として行われたものである。「機械学習、深層学習および大規模ビッグデータ処理(AI 技術)」の高速化・スケール化のためのシステムソフトウェアの研究開発(HPC for AI)、AI 技術を用いた高性能科学技術計算や高性能計算機の高速化・スケール化(AI for HPC)および計算機の高度化に関する研究・開発のために、以下に関して技術検討を行った。①次世代不揮発性メモリを活用した大規模並列 I/O などのビッグデータのスケール化・高速化、②次世代不揮発性メモリを活用したチェックポイント等の高信頼化技術のスケール化・高速化、③メモリ・ストレージ階層の深化に対応する超並列アルゴリズムやプログラミング、④マルチペタバイトデータのテラビット級ネットワークにおける高速転送、⑤ビッグデータ、機械学習、HPC のソフトウェア

スタックの統合、およびそのスケール化・高速化、⑥超大規模ビッグデータの視覚化や対話型操作。その中で特に「京」のように階層構造を持つストレージシステムの性能を引き出すためのファイルシステムの研究開発を行った。

これまで CPU、キャッシュ、メインメモリー間のデータ移動アルゴリズムの開発は広く行われてきたが、ストレージ階層間のデータ移動の最適化は数少ない。そこで我々のチームでは、広く使われている LRU(Least recently used)アルゴリズム以外のデータ移動アルゴリズムと比較検証を行った。具体的には、FIFO (First-in-first-out)、LFU(Least-frequently used)、LFUDA(LFU with dynamic aging)とシミュレーションにより性能比較を行った。その結果、LRU 以外のアルゴリズムの方が高速化に繋がるビッグデータアプリが存在することがシミュレーションにより明らかになった。

## 4-6.ソフトウェアの開発

### (1)ソフトウェア開発および公開

研究センターでは、研究チームや運用技術部門において、「京」の利用者の利便性向上などを目指し、システムソフトウェアの機能強化やアプリケーションプログラムの実行性能の向上、先進的なアルゴリズムの開発をはじめとする共通基盤構築に向けた高度化研究を推進している。スーパーコンピュータの利用者視点や、先端的な研究を踏まえた上で「京」に最適化されたソフトウェア 30 本が研究センターのホームページ等を通じて公開されている。

ソフト名称	機能概要
<b>システムソフトウェア研究チーム</b>	
NetCDF	プラットフォームに独立なファイルを扱うためのライブラリ。Parallel netCDF、HDF5、Szip のライブラリを含む。Frontend、シリアル、MPI のそれぞれの環境で Szip ありとなしの合計 6 環境を提供。
PRDMA (Persistent Remote DMA)	Remote DMA (RDMA)が利用可能なインターコネクト上で通信レイテンシや計算と通信の並行処理を改善するため、MPI 標準の永続通信(Persistent Communication)プリミティブの高速実装を提供するライブラリ。
<b>プログラミング環境研究チーム</b>	
Omni XcalableMP	Fortran および C の拡張として定義された指示文ベースの並列言語 XcalableMP のコンパイラ。
Scalasca	MPI、OpenMP、MPI /OpenMP ハイブリッドを使ったプログラムや並列プログラミング言語(XcalableMP/C)のプログラムの性能最適化を支援するためのツール。特に通信や同期でのボトルネックになっているところを特定し、その原因を調査するために使う。
MUMPS	連立一次方程式を直接解法で解く高並列数学ライブラリ。
<b>大規模並列数値計算技術研究チーム</b>	
Eigen K	「京」のアーキテクチャを意識して開発された標準固有値問題のための固有値計算ライブラリ。密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算できる。
EigenExa	EigenK の後継として「京」での性能チューニングが施された標準固有値問題のための高性能固有値計算ライブラリ。EigenK 同様に密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算できる。
KMATH_RANDOM	高品質な乱数として知られるメルセンヌツイスター乱数生成器を並列分散環境で使用するための数学ライブラリ。Fortran90,C,C++から利用可能。
<b>利用高度化チーム</b>	

Xcrypt	並列ジョブ制御スクリプティング言語 Xcrypt を「京」に実装。統一的で使いやすいユーザーインターフェイスを提供。
TAU	Fortran, C, C++ で書かれた並列プログラムの性能解析ツール群。プログラムの性能測定、解析、可視化などの機能を持ち、総合的に性能解析を支援する。プロファイル機能を使用することによって、各関数の実行時間 (inclusive/exclusive)、関数呼び出し回数、一回の呼び出しにあたっての平均実行時間などを知ることができる。またトレース機能を使用することで、プログラム実行中の各イベント(MPI 通信など)がいつ・どこで発生したか、プロセスやソースコード等の単位で知ることができる。
Eclipse PTP for K and FX10 computers	Eclipse PTP という統合ソフトウェア開発環境を「京」および FX10 で使うために必要なソフトウェア。以下の 2 つのパッケージを含んでいる。(1)「Target System Configurations」Eclipse PTP から京や FX10 でジョブを実行するときに必要なものである。(2)「LML DA Driver for PJM」京や FX10 のユーザーのホームディレクトリーにインストールするもので、モニタリングに必要なものである。
<b>離散事象シミュレーション研究チーム</b>	
OACIS (Organizing Assistant for Comprehensive and Interactive Simulations)	Mac や Linux 系 OS がインストールされた計算機上でウェブサーバとして動作するシミュレーション実行管理ソフト。ユーザーが、シミュレーション条件を与えると、OACIS は、実行スクリプトの生成、「京」などの計算ホストでの実行、そして、シミュレーション結果の取り込みを自動的に行う。
<b>量子系分子科学研究チーム</b>	
NTChem	一から設計した新しい国産分子科学計算ソフトウェア。既存ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーしつつ、他のプログラムでは利用することのできない多くの量子化学計算法を含んでいる。NTChem の第一版には数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現するための分子科学理論が実装されている。さらに、「京」などのマルチコア超並列クラスタ計算システムの性能を引き出すことが可能な並列アルゴリズムが実装されている。
<b>量子系物質科学研究チーム</b>	
2D-DMRG	強相関係の研究を目的として開発された密度行列繰り込み群法 (Density Matrix Renormalization Group, DMRG) のプログラム。京コンピュータの利用を想定して開発されており、大規模並列計算に対応。密度行列繰り込み群法は、通常、1 次元系の研究に利用されるが、この 2D-DMRG は 2 次元系を初めとする多次元系への応用を想定して開発されており、任意の形状、様々なタイプの量子格子模型に対応している。
<b>粒子系生物物理研究チーム</b>	
GENESIS	高機能・超並列な分子動力学計算ソフトウェア。SPDYN、ATDYN という二つのプログラムが存在しており、SPDYN は超並列計算、ATDYN はマルチスケールシミュレーションやレプリカ交換分子動力学法を可能としている。
<b>粒子系シミュレータ研究チーム</b>	
FDPS (Framework for Developing Particle Simulators)	「京」のような超大規模並列計算機の上で効率的に実行できる粒子系シミュレーションソフトウェアを容易に開発できるようにするためのアプリケーション開発プラットフォーム。FDPS を使えば、チューニングや並列化の経験がない人でも数万ノードまで性能がスケールする粒子系アプリケーションを開発できる。
<b>複合系気候科学研究チーム</b>	
SCALE	気象シミュレーション用のライブラリおよびそれを利用した気象ラージエディターシミュレーションモデル。超並列計算機システムで性能を出せるよう、計算科学と計算機科学の専門家との Co-design により設計されている。
<b>プログラム構成モデル研究チーム</b>	
KMR(K Map-Reduce)	ポスト処理等のデータ処理を容易に記述するためのライブラリ。定評のあるデータ処理ツール map-reduce を「京」で提供。
<b>可視化技術研究チーム</b>	
Polylib	領域分割型の並列計算で物体の形状情報等を管理するライブラリ。シミュレーション入力データ作成および結果の可視化に使用。
Cutlib	ポリゴンデータと背景格子との交点計算を行うライブラリ。直交格子、BCM 格子、8 分木格子に対応。
CPMlib	領域分割型のアプリケーションを記述するためのミドルウェア。データ領域確保、並列領域管理、通信などの機能を提供。



TextParser	YAML 的な記述方式の構造化されたテキストファイルを読み・書きするライブラリ。シミュレータの入力パラメータ記述などに利用。
PMlib	プログラムの性能測定と統計情報を表示するツール。プロセスグループや PAPI にも対応。被測定ルーチンは利用者が指定可。
CIOlib	直交等間隔格子の分散並列ファイルの管理機能を提供。
FFV-C	直交格子を用いて、短時間で複雑な形状まわりの流れをシミュレートできる三次元非定常熱流体シミュレータ。流体解析における困難な課題である格子生成を自動化し、大規模な計算を短時間で実行できることが特徴。また、「京」のすべてのプロセッサを用いて 90%以上の弱スケール性を達成するチューニングが施され、工学分野の実設計課題を支援できるように様々な機能開発を行っている。
HIVE	大規模並列環境で高い性能を発揮する利便性の高い可視化システム。「京」の上で多数のノードを用いた並列レンダリングが可能。「京」以外にも多くの計算プラットフォームで動作し、リモート/ローカル動作、高並列性能、機能拡張性、移植性、メンテナンス性などを考慮して開発されている。現在ベータ版で、Mac, Linux 向けのバイナリパッケージを配布している。
KFoundation	AICS で開発された汎用 C++API を収集。以下の API が含まれる。(1)自動メモリ管理を備えた定数時間計算複雑性の性能および向上の安定性とデバッグ機能(2)XML と JSON などの互換性のオブジェクトのシリアル化・逆シリアル化(3)ネットワーク I/O を含む、多様な I/O ストリーム(4)マルチチャンネル・マルチレベルのロガー(5)エクスプレッションを備えた出力・シリアライズ可能なスタックトレース(6)分散ステンシル計算をアシストするための「Range Arithmetics」(7)Thread, Mutex, Condition および Java に類似する System クラス。
libKnoRBA	KnoRBA エージェント作成のための C++ライブラリ。知識リクエスト・ブローカ・アーキテクチャまたは KnoRBA(ノルバ)技術は汎用コンポーネント・モデルとして「オブジェクト」の代わりに「エージェント」が使う世界初の分散システム開発プラットフォーム。高度な抽象化レベルでの自律性、ポータビリティ、柔軟性、拡張性、および安定性の提供を目的としている。このライブラリで作成したエージェントは KnoRBA Agent Runtime Environment (ARE)を使用し、クラスターや他の分散システムでの実行が可能。
<b>ソフトウェア技術チーム</b>	
K-scope	Fortran 向けプログラム解析ツール。本ツールを用いることでコードの全体把握が容易となる。(本ソフトは「京」ではなくユーザーの端末上で動作する。)
<b>システム運転技術チーム</b>	
Kを待ちわびて	ジョブが実行されるまでの予想待ち時間を計算、表示するツール群。

表 4-3.公開ソフトウェア一覧(チーム名は開発当時のもの)

## (2)ソフトウェアセンターの開設

ソフトウェアセンターは、研究センターで開発されたソフトウェアの普及を効果的かつ戦略的に進める目的で 2017 年に設立された。設立以降、7 回の公開ソフト講習会を開催し、ソフトウェアの普及促進に努めている。さらに高度化研究で開発され、公開されているソフトウェアの中から、重点的に支援するソフトウェアとして「FrontFlow/red-HPC」、「GENESIS」、「OACIS」、「NTChem」、「SCALE」の 5 つを選び出し、チュートリアルビデオの作成や、英語サイトを含めたソフトウェア独自のホームページの開設支援、利用者を対象としたワークショップの実施、ソフトウェアの機能強化など、ソフトウェアの普及・促進を図っている。

## 4-7.国際評価

### (1)スーパーコンピュータの主要性能ランキング

スーパーコンピュータの能力を示す指標は年に 2 回、欧州と米国で開かれる国際会議に合わせて計測され、性能ランキングとして発表される。

LINPACK(密行列の連立一次方程式の直接解法)の実行性能を指標として、世界で最も高速なスーパーコンピュータの上位500位までをランク付けするTOP500では、2011年6月、11月と2期連続で世界1位を獲得した。一方、産業利用など実際のアプリケーションで利用されるCG法のプログラムで性能を評価し、演算性能よりもメモリアクセス性能に大きく依存する、疎行列の連立一次方程式の反復解法である共役勾配法を用いたベンチマークであるHPCGでは、2016年11月以降、3期連続で1位を獲得し、2019年6月まで3位以内を維持し続けた。

さらに、超大規模グラフの探索能力で計算機を評価する指標Graph500は、2014年11月こそ2位だったものの、2014年6月から運用終了直前の2019年6月まで9期連続(通算10期)で1位を獲得した。大規模グラフ解析の性能は、大規模かつ複雑なデータ処理が求められるビッグデータの解析において重要となるもので、運用開始から7年以上が経過しているにも関わらずビッグデータ解析に関して世界トップクラスの極めて高い能力を有することが実証された。これは、「京」の設計思想の高さ、アプリケーションの高度化および最高レベルの運用により得られた成果であると言える。

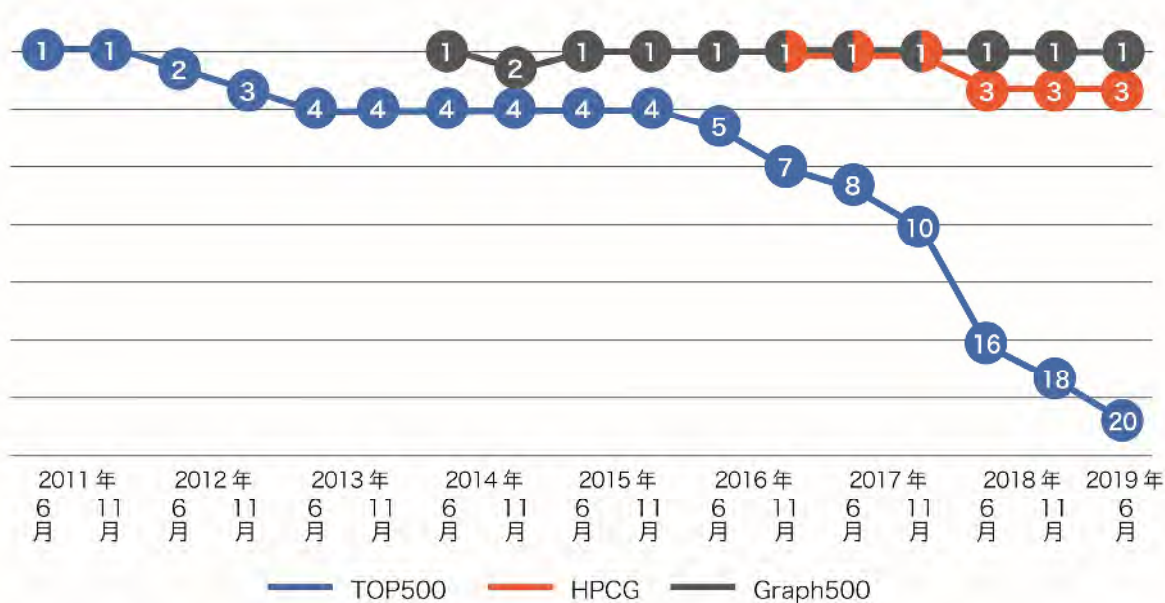


図 4-22.スーパーコンピュータの性能に関する主要ランキング推移

## (2)ゴードン・ベル賞

ゴードン・ベル賞(ACM Gordon Bell Prize)は、HPCシステムを用いた高性能計算における卓越した業績を顕彰するために毎年授与される。科学、工学、データ解析等の大規模なアプリケーションについて、世界トップクラスの計算機システム上でその性能を最大限引き出すための革新的なHPC技術を開発・適用して、科学的、技術的に有用な知見を得ることに重点が置かれ、実行時の計算性能(Peak Performance)とスケーラビリティ(Scalability)が評価される。ACM(Association for Computing Machinery)が主催し、ACMとIEEE(Institute of Electrical and Electronics Engineers)により組織された委員会が審査を行い、複数のチームがファイナリストとして選出され、毎年11月に米国で開催されるSC-XY(International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage & Analysis)でのプレゼン発表後に受賞チームが決定する。「京」を用いた研究によるゴードン・ベル賞の受賞またはファイナリスト選出の実績は、表4-4の通りである。

SC11	
受賞	Sustained Performance
ファイナリスト	Yukihiro Hasegawa, Jun-Ichi Iwata, Miwako Tsuji, Daisuke Takahashi, Atsushi Oshiyama, Kazuo Minami, Taisuke Boku, Fumiyoshi Shoji, Atsuya Uno, Motoyoshi Kurokawa, Hikaru Inoue, Mitsuo Yokokawa
タイトル	First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer
概要	密度汎関数理論に基づく第一原理電子構造計算である実時間 DFT (RSDFT) による最大 107,202 原子のシリコンナノワイヤの電子状態に関するシミュレーションを実施し、京コンピュータ (初期性能評価フェーズ) の 442,367 コアを使用して 3.08PFLOPS (ピーク性能 7.07PFLOPS の 43.63%) を達成した。
SC12	
受賞	Scalability and Time to Solution
ファイナリスト	Tomoaki Ishiyama, Keigo Nitadori, Junichiro Makino
タイトル	4.45 Pflops astrophysical N-body simulation on K computer: the gravitational trillion-body problem
概要	天体物理学における N 体シミュレーションコードについて、短距離力のための高度に最適化された重力カーネルと、長距離力のための新しい通信アルゴリズムを開発し、京コンピュータ上で世界初の 1 兆粒子レベルのシミュレーションを実施した。82,944 ノード (663,552 コア) を使用して 4.45PFLOPS (ピーク性能 10.60PFLOPS の約 42%) を達成した。
SC14	
受賞	—
ファイナリスト	Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Seizo Tanaka, Muneo Hori, Lalith Madgededara, Yoshihisa Shizawa, Hiroshi Kobayashi
タイトル	Physics-based urban earthquake simulation enhanced by 10.7 BlnDOF × 30 K time-step unstructured FE non-linear seismic wave simulation.
概要	非線形三次元有限要素法による地震波伝播解析コード「GAMERA」を使用して京コンピュータ上で東京地方における 13,275 の建造物を含む大規模地震応答解析を実施した。294,912 CPU コアを 11 時間 32 分間使用して、30 K タイムステップの 107 億自由度のシミュレーションを実施した。
SC15	
受賞	—
ファイナリスト	Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Pher Errol Balde Quinay, Lalith Madgededara, Muneo Hori, Seizo Tanaka, Yoshihisa Shizawa, Hiroshi Kobayashi, Kazuo Minami
タイトル	Implicit Nonlinear Wave Simulation with 1.08T DOF and 0.270T Unstructured Finite Elements to Enhance Comprehensive Earthquake Simulation
概要	非線形三次元有限要素法による地震波伝播解析とエーゼットモデルによる避難解析を組み合わせた総合的な地震シミュレーションを京コンピュータ上で実施した。82,944 ノード (663,552 コア) を使用して 1.08 兆自由度規模の問題に対して 1.97PFLOPS (ピーク性能 10.60PFLOPS の 18.6%) を達成した。SC14 と比較して、問題規模が 40.1 倍多く、計算性能は 2.68 倍向上し、計算時間が 3.67 倍短くなっている。
SC16	
受賞	—
ファイナリスト	Takayuki Muranushi, Hideyuki Hotta, Junichiro Makino, Seiya Nishizawa, Hirofumi Tomita, Keigo Nitadori, Masaki Iwasawa, Natsuki Hosono, Yutaka Maruyama, Hikaru Inoue, Hisashi Yashiro, Yoshifumi Nakamura
タイトル	Simulations of Below-Ground Dynamics of Fungi: 1.184 Pflops Attained by Automated Generation and Autotuning of Temporal Blocking Codes
概要	科学技術計算で広く用いられているステンシル計算最適化のための DLS (Domain Specific Language) である Formura を使用して、京コンピュータ上で電磁流体力学 (MHD) と地中生物学 (Belowground Biology) に関するシミュレーションを実施し、82,944 ノード (663,552 コア) を使用して 1.184 PFLOPS (ピーク性能 10.60PFLOPS の 11.62%) および 31.26% のメモリスループット効率を得た。
SC18	
受賞	—
ファイナリスト	Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Takuma Yamaguchi, Akira Naruse, Jack C. Wells, Thomas C. Schulthess, Tjerk P. Straatsma, Christopher J. Zimmer, Maxime Martinasso, Kengo Nakajima, Muneo Hori, Lalith Madgededara

タイトル	A Fast Scalable Implicit Solver for Nonlinear Time-Evolution Earthquake City Problem on Low-Ordered Unstructured Finite Elements with Artificial Intelligence and Transprecision Computing
概要	大規模シミュレーションと人工知能を組み合わせ、さらに変動精度演算など最新の計算機構を活用した次世代超高分解能都市地震シミュレータに関する研究を実施した。Summit システム (ORNL) を利用した計算が主であるが、本研究で開発した線形ソルバは、京コンピュータ上で SC14 時のものよりも約 4 倍高速であることが紹介されている。

表 4-4.ゴードン・ベル賞ファイナリスト一覧

#### 4-8.利用料収入

「京」は多くの利用研究課題において無償で利用することが可能であるが、成果非公開の産業利用課題など、一部有償となるものもある。利用料金については、共用法第 6 条第 1 項に基づく実施計画において、他の特定先端大型研究施設の利用料金算定方式と同様に、運営費回収方式により算出している。共用期間の利用料収入の平均は約 6,073 万円であった。

	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度	2019 年度
利用料収入(円)	5,571,983	46,234,643	74,795,740	66,574,343	104,958,080	145,646,993	33,773,019	8,311,010

表 4-5.利用料収入の推移(2012 年 11 月-2019 年 8 月)

#### 4-9.「京」の貢献と課題

##### (1)「京」の貢献

現代の科学技術における知識の獲得、発見には、スーパーコンピュータは必須となっている。同時に、スーパーコンピュータは、一般市民の毎日の生活を陰で支えている重要な共通基盤であり、国民の共通財産である。2011 年から稼働した「京」は、8 万 2 千ノードを超並列化させ、大規模で稼働させることにより世界で初めて 10 ペタフロップスを超えるマシンとなっただけでなく、我が国のナショナル・フラッグシップ・マシンとして高い汎用性を確立することにより、多くの超並列大規模計算を行い、成果を上げてきた。特に大きく貢献した点は以下の点である。

##### ①超並列大規模計算に基づく研究開発基盤の確立

これまで我が国では、特定の分野で高い性能を発揮する NWT や CP-PACS、地球シミュレータ等の開発を進めてきた。これらは、CPU 性能を向上させることによりマシン全体の速度性能を高め、世界一を達成している。2000 年以降、プロセッサのクロック周波数の向上は、ほぼ頭打ちとなり、性能を向上させるためにはシステム中の演算器の数を大幅に増加させ、並列に処理するマシン開発が世界の主流となった。「京」は、この世界的なトレンドを踏まえて開発が進められ、CPU 単体の性能を向上させるのではなく、並列性(コア数)を増加させることとなり、約 20 年前に開発された NWT に比べコア数で約 4,000 倍となった。さらに、ノード間のネットワークとして Tofu(Torus fusion)インターコネクトを新たに開発・搭載することにより、約 10 万プロセッサでの動作に耐えられる高性能、高

信頼性、高可用性を備えたシステムを実現した。加えて、アプリケーション開発においても計算性能を発揮するため、高い並列処理を踏まえた設計を行うことで生産性の向上を目指す方向へと導いた。このことは、我が国の HPC やシミュレーション科学といった日本のコミュニティを超並列大規模計算へと牽引し、「京」および「京」を中心とした HPCI は重要な研究開発基盤として位置付けられることとなった。

## ②ナショナル・フラッグシップ・マシンとしての高い汎用性

NWT や CP-PACS、地球シミュレータは、特定のアプリケーション分野での利用を前提としていた。一方で、「京」はあらゆる研究開発分野での活用を視野に置いた汎用性の高いスーパーコンピュータとして開発された。その結果、HPCI 戦略プログラムとして推進された「予測する生命科学・医療および創薬基盤」や「新物質・エネルギー創生」、「防災・減災に資する地球変動予測」、「次世代ものづくり」、「物質と宇宙の起源や構造」などで課題となる現象の数多くをシミュレーションすることが可能となったほか、大量の観測データや実験データを計算に取り込むことが可能となった。例えば、地盤と建物の揺れおよびこれによる建物被害を統合した詳細な大規模シミュレーションや、従来再現できなかった集中豪雨現象をシミュレーションすることができるようになり、「予測の科学」ともいべきものが実現しつつある。汎用性の高さは、速度性能だけでなく、ビッグデータ処理の指標となる Graph500 で高い性能を発揮するなどベンチマークテストの結果にも表れるとともに、年間約 1400 課題を実行する共用施設として日本全体の計算科学技術の底上げにつながった。

## ③産業界へのインパクト

大規模並列計算による高性能かつ汎用性の高さにより、スーパーコンピュータの活用方策を産業界に示すことにつながり、産業界による「京」の利用を促進することとなった。「京」は、産業界で活用されているソフトウェアを動作させることができる汎用環境（標準的なライブラリの実装等）を整備することが重視されたことから、独立系ソフトウェアベンダ（ISV:Independent Software Vender）が開発したアプリケーションへの対応等が可能となった。その結果、時間・コストの削減、製品性能の向上、従来にない設計上の最適解の探索などにおいて、これまでは考えられなかったスーパーコンピュータの産業応用への有効性が「京」により初めて実証されたものも多い。また、国家プロジェクトとして開発されたスーパーコンピュータを、民間企業が利用するための制度設計が共用開始当初から行われた。さらに、RIST や FOCUS により、産業利用の制度設計をより有効なものに改善しつつ、民間企業が利用する際のプログラミングやアルゴリズム構築に関する適切な支援体制を構築することにより、企業のニーズに対する潜在的技術革新への挑戦を導き出し、スーパーコンピュータの産業利用に対する在り方に道筋を付けた貢献は特筆すべき点である。

これらの貢献面に関しては、研究センターが実施した「京」の経済波及効果に対する結果にも表れ、「京」の利用者からは、「京」は大規模な計算を実用的な時間で計算できるばかりでなく、「京」があるからこそ着想できる研究があり、研究の流れを変えた」と評価されている。また、「5 年～10 年後に産業界で利用される計算技術を先取りすることもできた」としている。さらに、「京」が無ければ研究の流れは変わらなかっただろうし、成果を出すことができず、外国に取られていたであろう」との回答もあり、「京」は日本の産業界に計算機を利用した研究開発の新たな流れを生み出すとともに、新たなコミュニ

ティを形成してきたといっても過言ではない。

さらに、「京」の運用および高度化、HPC に関わる先端的研究の推進、人材育成への貢献などを目指して発足した計算科学研究機構は、我が国の HPC 研究開発のハブ拠点となり、その後さらなる発展を遂げ、計算科学研究センターとして衣替えし、HPC に関わる国際的な中核拠点(COE)としての機能を発揮している。

## (2)「京」の課題

優れた成果をあげた「京」であるが、研究センターを中心に「京」の運用及び、絶えず高度化研究等を進めていくことによって、いくつかの点において課題が見出された。ナショナル・フラッグシップ・マシンとして汎用性の高いスーパーコンピュータとして利用された「京」であったが、計算機性能とアプリケーション性能のバランスという面では改善の余地があった。特にネットワーク性能は高過ぎる性能を持っていたが、データの入出力(I/O)や設計時に想定した計算パターンが十分でなく、アプリケーションの性能を上げる際のハードウェア的な制約があった。この点は、アプリケーションサイドのニーズを捉えつつも、オーバースペックでもなく、アンダースペックでもないマシン設計を行いつつ、さらには挑戦的な技術開発を取り込むことの重要性を問うこととなる。

一方、「京」を設計・製造した経験を踏まえ、初めて分かった教訓もあった。現在、命令セットアーキテクチャ(ISA)として何を採用するかは、ソフトウェアのエコシステムの観点で極めて重要である。当時、「京」が採用した ISA は SPARC(Scalable Processor Architecture)であり、その後の主流となる X86 ではなかったことで、ツール(コンパイラ、デバッカーなど)の提供が限定的となり、汎用的なソフトウェアの開発に支障が出ることになる。IT 全体のプロダクトにおける汎用化によるソフトウェアのプラットフォームが重要視される流れが、スーパーコンピュータにも押し寄せてくる過渡期で致し方ない面もあるが、汎用性の向上という意味では道半ばだったという点は否めない。また、CPU 単体の性能に関して、HPC に特化させた設計を行った上で、当時の先端 CPU と同等レベルとして大規模超並列化を進めたことにより、総体としてのスーパーコンピュータの性能向上は達成できたものの、競合 CPU を凌駕する性能向上といった個別テクノロジーの導入・開発、CPU 性能向上に伴うダウンサイズ化による商業的アウトリーチという意味では改善の余地があった。「富岳」においては、これらの教訓を糧として、CPU 単体の性能向上、業界標準を踏まえたシステム設計、電力性能を意識したエコシステムの導入など「富岳」テクノロジーの確立に活かされることとなり、より汎用性が高く、世界を凌駕するような高性能な超並列大規模計算機の開発につながった。

一方、スーパーコンピュータの利用範囲は拡がり、ビッグデータ処理や AI 性能など、「京」開発時点では想定していなかった利用が求められており、ソフトウェアのチューニングによりビッグデータ処理などで高性能を発揮しているものの、ハードウェア的な対応については限界があった。また、「京」での深層学習など AI 技術を取り入れた計算は「京」の得意とするものではなく、Society5.0 によって実現するスマート社会などの実証について必要な、仮想区間と実空間との比較等によるデジタルツインなどのシミュレーション技術の高度化に対しては、「富岳」による飛躍を待つこととなった。

「京」の利用面では、利用者層の裾野の拡大、特に産業利用に関しては、利用のための制度設計を含めさらなる検討の余地がある。また、ライフサイエンスおよび医療分野でのスーパーコンピュータの導入は、他の分野に比べ進んでおらず、今後は意識的にスーパーコンピュータと医療の連携を図る必要がある。

## 5.中核拠点(COE)としての R-CCS の取り組み

### 5-1.研究センターの概要

研究センターは、コンピュータ・シミュレーションにより、科学的に未来を見通す「予測の科学」の確立を目指し、2010年7月に平尾公彦機構長のもと、計算科学研究機構(AICS)として発足。2018年4月には松岡聡センター長を迎え入れ、高性能計算科学の中核拠点として、「計算の科学」と「計算による科学」両者の相乗効果による「計算のための科学」を探求するために、理研の研究センターの一つとして、組織名称を計算科学研究センター(R-CCS)として再発足した。

研究センターは、両組織を通じて「京」の運用を行い、利用者視点に立ったユーザーにとって使いやすい計算環境を提供するとともに、計算科学および計算機科学の先導的研究開発を推進しつつ、計算科学技術(HPC)の国際的な研究教育拠点の一角を担ってきた。また、「京」の後継機である「富岳」開発の拠点としての役割を果たしてきただけでなく、次世代計算基盤に係る技術開発や、スーパーコンピュータを用いた分野連携、分野融合のハブ機能としての役割も期待されている。

#### (1)ミッション

研究センターは、HPCIの中核として我が国全体の計算科学技術の発展に中心的な役割を担っており、以下をミッションとしている。

- 共用法に基づく、利用者視点に立った共用施設としての「京」の運用。
- 計算機科学と計算科学の連携・融合により先進の科学的成果と技術的ブレークスルーを生み出す国際的な研究拠点の形成。
- ポスト「京」の開発、我が国の計算科学技術の在り方、将来構想の策定。

R-CCS発足後は、研究センターのミッションを以下の通り掲げている。

- 「京」および「富岳」を効果的に運用し、共用に供するとともに、利用の拡大、利便性の向上および人材育成を推進する。
- 「京」および「富岳」による研究活動を支える基盤技術の整備や、利用の高度化研究、世界最高水準の運用技術の開発を行う。
- 科学技術の新たな価値創出のコアとなる高性能計算のテクノロジーおよびソフトウェアの発展、国内外での普及、成果の創出を推進する。

#### (2)組織

研究センターは、研究部門(R-CCS発足後は研究開発機能のフラット化のため部門は廃止され各チームはセンター直属となる)、運用技術部門、フラッグシップ2020プロジェクトの3つの部門により構成された。研究部門においては、計算科学の共通基盤的研究、分野融合研究を進めるとともに、将来重要となる領域の開拓を行い、「京」を核として我が国の計算科学を先導するとともに、戦略機関等とも密な連携を取り、優れた成果の創出を目指している。運用技術部門においては、「京」を中心とする計算機システムの運用や、空調、電源、冷却施設等の維持管理・運転、システム高度化等を実施している。また、フラッグシップ2020プロジェクトにおいては、「富岳」の開発を実施している。

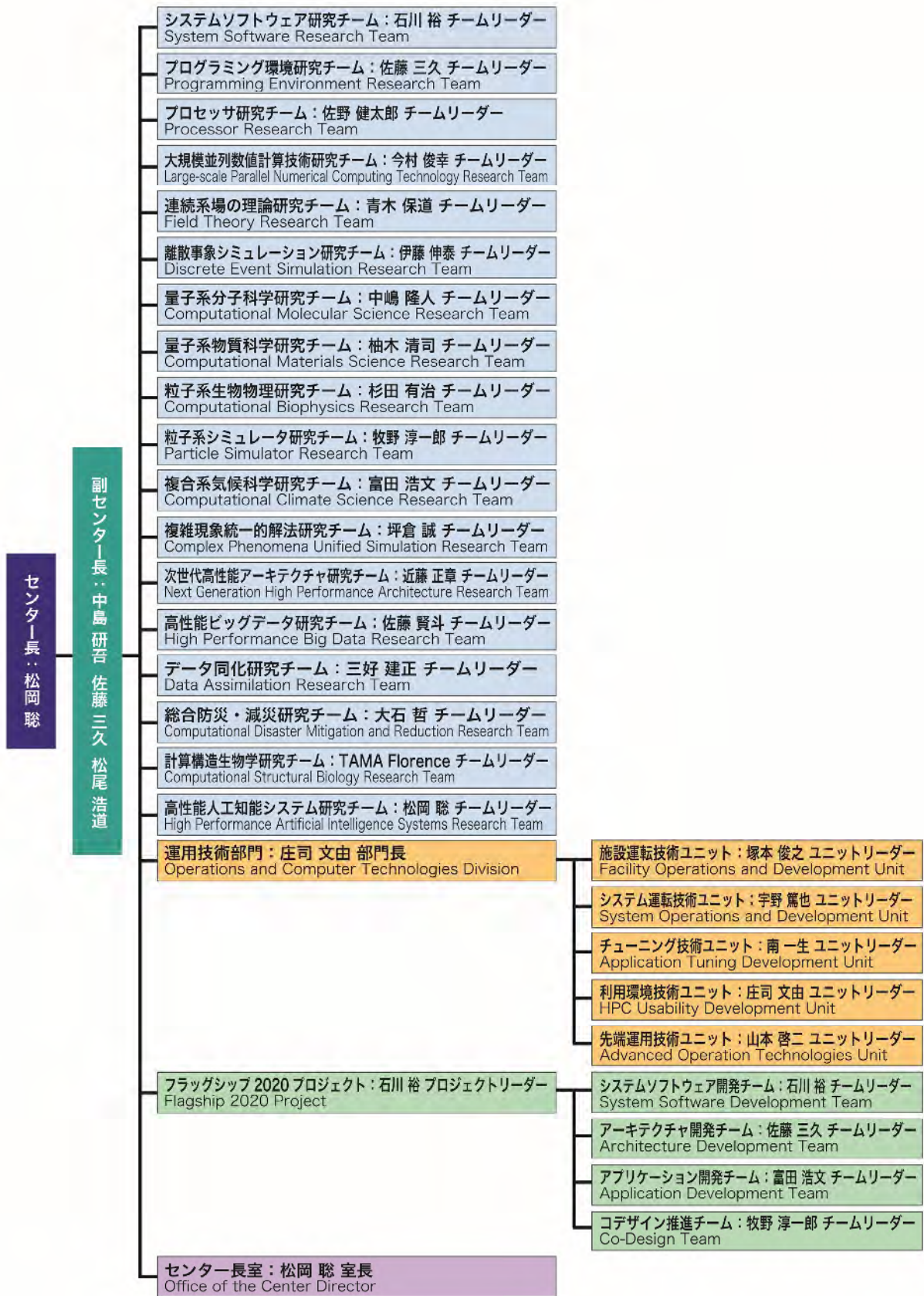


図 5-1.研究センター組織図(2020 年 9 月 1 日時点)



## 5-2.分野横断研究

### (1) データ同化によるゲリラ豪雨予測

スーパーコンピュータを使った天気予報シミュレーションは、通常 1km より粗い解像度で、1 時間ごとに新しい観測データを取り込んで更新する。しかし、ゲリラ豪雨の場合、わずか数分の間に積乱雲が急激に発生・発達するため、1 時間の更新間隔では予測が困難であった。また、1km より粗い解像度では、ゲリラ豪雨を引き起こす積乱雲を十分に解像できなかった。

「京」と最新鋭のフェーズドアレイ気象レーダの双方から、高速に得られる膨大なデータを組み合わせることで、解像度 100m で 30 秒ごとに新しい観測データを取り込んで更新する、空間的・時間的に桁違いの天気予報シミュレーションを実現し、実際のゲリラ豪雨の動きを詳細に再現することに成功した。

天気予報の根幹をなすのは、シミュレーションと実測データを組み合わせる「データ同化」である。次世代の高精細シミュレーションと高性能センサーを組み合わせる革新的な技術により、「ビッグデータ同化」を実現した。解像度 100m で 30 秒ごとという桁違いなデータを生かすデータ同化は本研究が初めてであり、研究センター内連携をはじめ、最新鋭レーダを開発した情報通信研究機構 (NICT) と大阪大学、気象庁との連携によって初めて可能となった。

さらに最新の研究成果として、この技術をさらに発展させ、データ同化を用いた領域気象モデルによる予報により、30 分後までの降水予報を 30 秒間隔でリアルタイム実行することが可能となった。本研究の成果に基づき、AIP 加速課題「ビッグデータ同化と AI によるリアルタイム気象予測の新展開」(2019-2022; 2013-2019CREST ビッグデータ応用領域研究課題の後継)の一環として、NICT、大阪大学、株式会社エムティーアイ、筑波大学、東京大学などと共同で、2020 年 8 月に東京でのゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験を行った。ピンポイントで高精度な降水予測は Society5.0 において実現が期待されているスマートシティへの応用等、社会的インパクトが大きく期待される。

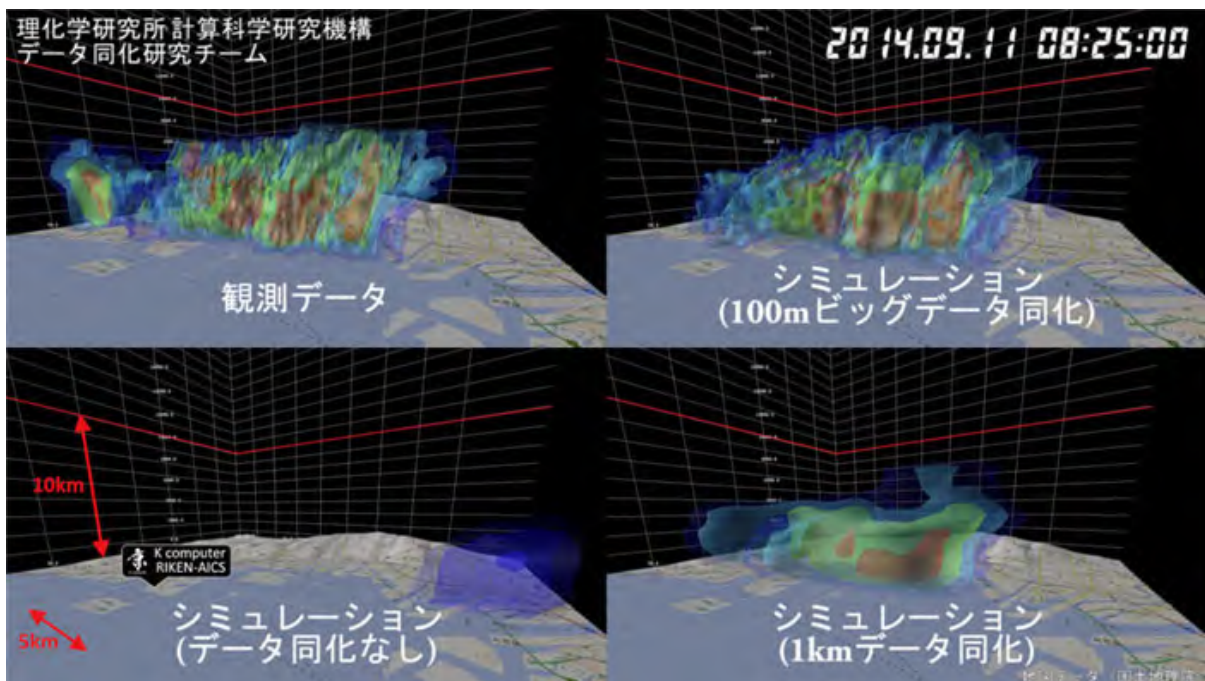


図 5-2.2014 年 9 月 11 日午前 8 時 25 分の神戸市付近における雨雲の分布

## (2) ペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見

次世代太陽電池の有望な材料としてペロブスカイト結晶構造を持つ有機と無機のハイブリッド材料（ハイブリッド型ハライドペロブスカイト）が注目を集めている。代表例として、メチルアンモニウム鉛ヨウ素やホルムアミジン鉛ヨウ素といった鉛化ハロゲン化合物が挙げられるが、鉛化ペロブスカイトは低コストで容易に合成できる一方、鉛による毒性の問題があるため、非毒性元素を用いたペロブスカイト材料の開発が求められている。

本研究では、「二重ペロブスカイト」と呼ばれる「A<sub>2</sub>BB'X<sub>6</sub> 型」の化合物を対象として、A、B-B'、X のそれぞれのサイトに各 3 種類、49 種類、3 種類の元素を当てはめることで、合計 11,025 個という膨大な数の組み合わせの化合物を選出し、「京」を用いた第一原理計算を実施し、元素戦略的な材料スクリーニングに基づいたマテリアルズ・インフォマティクス手法により、ペロブスカイト太陽電池としてふさわしい適切な材料を効率よく探索した結果、51 個の低毒性元素だけからなる非鉛化材料の候補化合物を初めて発見した。

本研究で構築した開発技術や材料ライブラリをさらに拡充することで、より高効率な非鉛化ペロブスカイト太陽電池材料のシミュレーション設計への貢献が期待される。本研究の成果に基づき、現在、中国・華南科技大学の王グループと連携し、シミュレーションインフォマティクス実験を融合利用することで、高効率で安定な非鉛化ペロブスカイト太陽電池を提案するプロジェクトを MOST-RIKEN 共同支援課題の一環として実施している。また、神戸大学と NIMS の実験グループともペロブスカイト太陽電池の光誘起メカニズムの解明に向けた基礎研究の実施につながった。

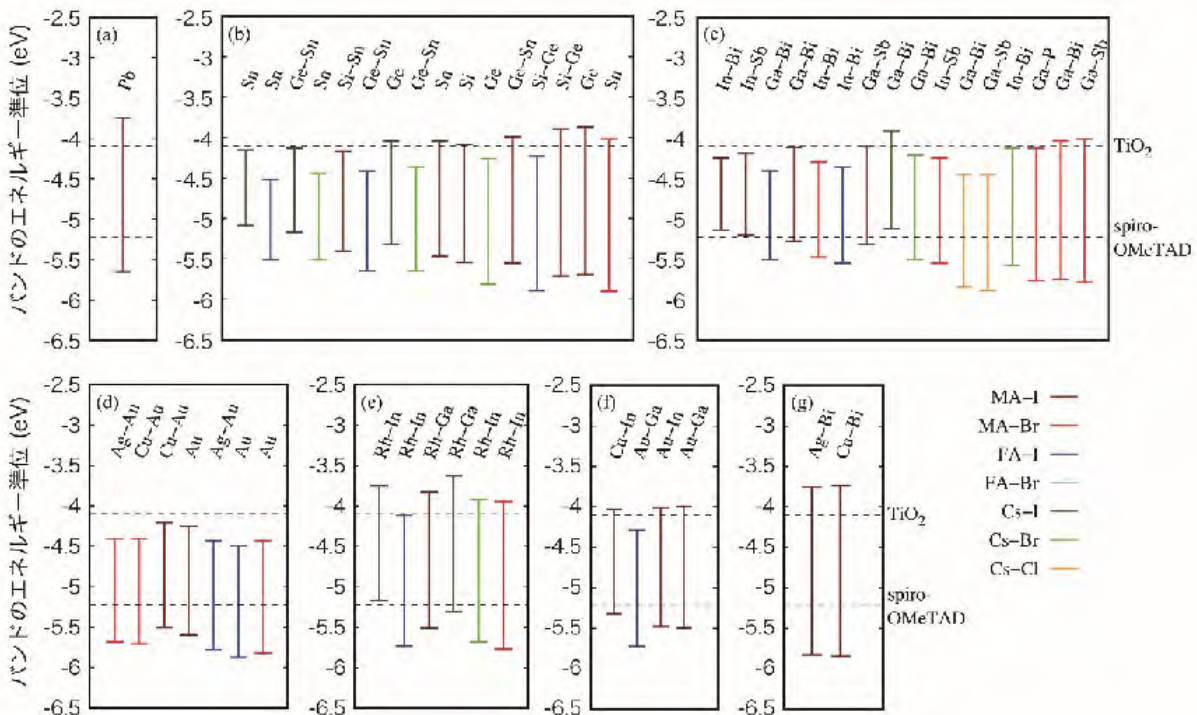


図 5-3.太陽電池にふさわしい 51 個の新たな候補ペロブスカイトとそのバンド端の位置

## (3) 大規模研究施設の整備・利活用促進のための研究開発

「富岳」や大型放射光施設「SPring-8」、X 線自由電子レーザー施設「SACLA」は、Society5.0 を支える最先端大型研究施設として位置付けられており、これらの施設の整備・利活用を促進するための新

たな共用プラットフォームの構築が重要となる。しかし、この実現のためにはセンサー側で効率的なデータ取得・変換、高速ネットワークやストレージなどのインフラ整備と、その上での高速なデータ転送技術の開発など様々な技術的課題がある。

そのため、この共用プラットフォームの利活用促進に向けて、研究センターの高性能ビッグデータ研究チーム、プロセッサ研究チーム、利用環境技術ユニットと理研放射光科学研究センター(RSC)、フロリダ州立大学(FSU)と連携し、「SPring-8においてFPGAを用いたエッジコンピューティングのためのデータ処理の高速化」、「SPring-8と富岳を高速ネットワークで繋ぎ共用型高性能ビッグデータ転送・処理プラットフォームの構築」および「SPring-8から生成されるビッグデータの高速データ転送を実現するためのデータ圧縮技術」の研究開発を実施している。さらに、SPring-8をHPCIストレージとも連結し、データ収集、集積および利活用のためのコミュニティ形成を計画している。

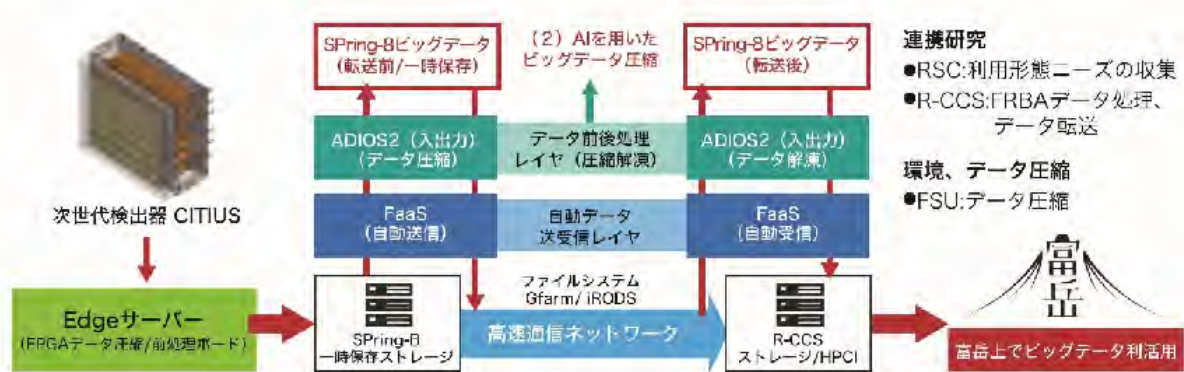


図 5-4.SPring-8-Fugaku プラットフォーム(案)

#### (4)量子シミュレーション研究

量子コンピュータ開発は IBM や Google 等の巨大企業が巨額を投じ世界的に競って行われている。イジング模型の基底状態探索に適したアニーリング型量子コンピュータでは 2020 年現在 2000 量子ビット級の計算が実行可能であり、組合せ最適化や機械学習等の様々な実問題に応用され始めている。一方、万量子コンピュータとして期待されているゲート型量子コンピュータは、2020 年現在 50 量子ビット級の実機が開発されている。研究センターでは、ゲート型およびアニーリング型双方に対するスーパーコンピュータを駆使した量子計算シミュレータの開発を行っている。このような量子計算シミュレータの開発は、量子アルゴリズムの開発や量子超越性の検証、また加速度的な実機開発を実現するためにも極めて有用である。

具体的には、離散事象シミュレーション研究チームにおいて、スーパーコンピュータを駆使したゲート型量子計算の数値的厳密シミュレータの開発を継続して行っている。特筆すべき研究成果としては、「京」を活用することにより世界最大規模となる 48 量子ビット量子計算シミュレーションの実現が挙げられる(図 5-5)。これは、Tofu インターコネクトを考慮した大規模並列計算により可能となった。本研究の成果の一部は、近年、Google によって発表された「量子超越の検証」研究(Nature 574, 505, '19)にも活用された。本研究は、Groningen 大(オランダ)、Julich スーパーコンピュータセンター(ドイツ)、RWTH Aachen 大(ドイツ)、Wuhan 大(中国)との共同研究である。「富岳」を活用することにより、50 量子ビット級の量子計算シミュレーションの実現が期待される。

量子系物質科学研究チームにおいては、量子多体系を適用対象とする密度行列繰り込み群

(DMRG)法について、独自の大規模並列 DMRG 法プログラムの開発を行っている。開発したプログラムの超高実行性能として、「京」全ノードを用いたベンチマークにおいて理論性能比:約 70%となる約 7.2PFlops を達成している。さらに、DMRG 法のボトルネックの一つである縮約密度行列の厳密対角化に、大規模並列数値計算技術研究チームにより開発された「EigenExa」を適用することで、より高効率な計算が実施できることも示した。さらに、開発した大規模並列 DMRG 法を応用したアニーリング型、およびゲート型量子コンピュータの近似的な量子計算シミュレータの開発とその応用研究を進めている。ここで開発された大規模並列 DMRG 法プログラムを用いた量子アニーリングシミュレーション結果と、アニーリング型量子コンピュータである D-Wave 社の D-Wave 2000Q による計算結果を比較すると、100 量子ビット級の規模においては両者の結果は同じであるが 1000 量子ビット超級の規模においては古典コンピュータ上の DMRG 計算がその精度において勝ることが確認された。

また、アニーリング型、およびゲート型量子計算に関する研究を東京工業大学および米国の California 大学、Lawrence Berkeley Nat. Lab.、Oak Ridge Nat. Lab.、南 California 大学(アメリカ)と共同で実施した。

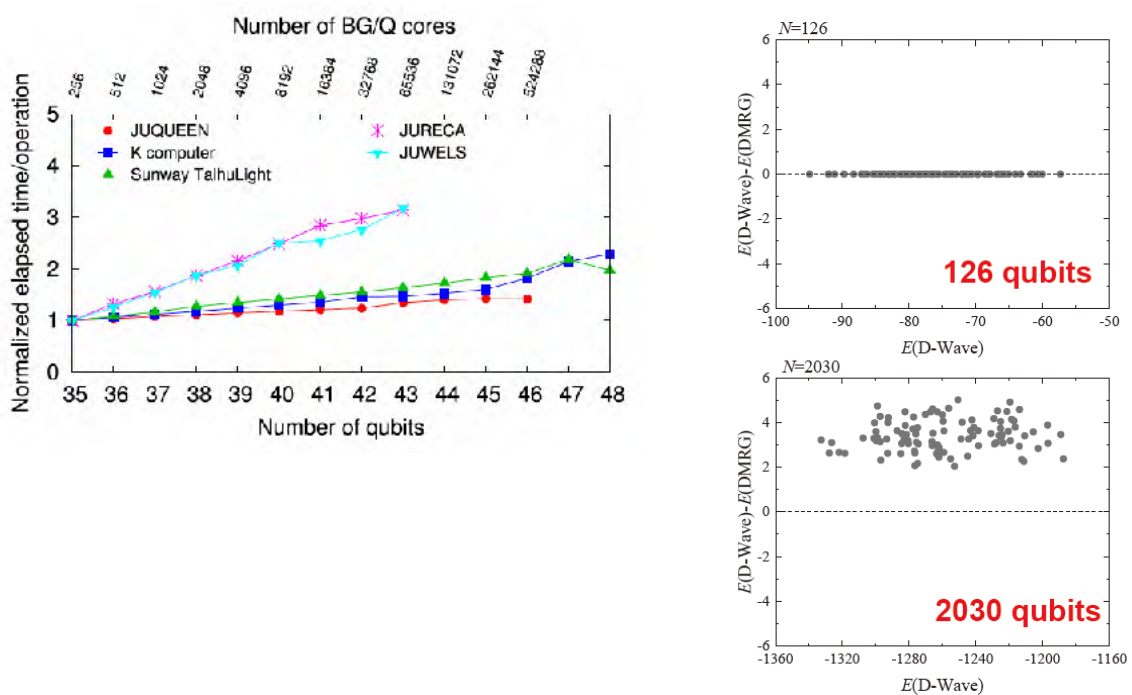


図 5-5.「京」を含む様々なスーパーコンピュータにおけるベンチマーク(左)、DMRG 法と D-Wave2000Q を用いたエネルギー計算の比較(右)

### 5-3.コンソーシアム等によるコミュニティ形成

研究成果の産業展開の一環として、産学官連携により研究所の研究成果の利用促進を図ることを目的に、特定の分野または課題を設定し、産学官における研究情報等の交換、社会・産業ニーズや技術シーズ等の課題の共有および課題解決に向けた連携内容の検討等を行う「理研コンソーシアム」の制度を活用し、次の 2 つのコンソーシアムによる活動を中核機関として実施している。なお、コンソーシアムの設立等にあたっては、民間企業において知的戦略、企業広報等経験者を複数名雇用して体制を整備した。

自動車用次世代 CAE コンソーシアム		
概要	「富岳」等の次世代 HPC 環境を想定して、既存の熱流体や構造解析の大規模シミュレーションソフトウェアのデータ構造やアルゴリズムの最適化をはかり、既存の CAE 技術とは抜本的に異なる新たなシミュレーションフレームワークの設計を検討し、そのプロトタイプを産学連携での実証解析により有用性を実証し、また、学术界から産業界への HPC 解析技術の伝承を行うことで、次世代の自動車ものづくりのフレームワークを産学官で連携して構築し、迅速に実用化することを目的として、2017 年 11 月に設立した。	
参画企業	トヨタ自動車株式会社	日産自動車株式会社
	株式会社本田技術研究所	マツダ株式会社
	株式会社 SUBARU	三菱自動車工業株式会社
	スズキ株式会社	日野自動車株式会社
	株式会社デンソー	マレリ株式会社
	アイシン精機株式会社	株式会社ブリヂストン
	TOYOTIRE 株式会社	株式会社小糸製作所
参画大学・機関	東京大学	北海道大学
	神戸大学	山梨大学
	広島大学	豊橋技術科学大学
	宇宙航空研究開発機構	
燃焼システム用次世代 CAE コンソーシアム		
概要	燃焼を扱う装置の設計や最適操作条件の選定を支援するためのツールとしての CAE の信頼性、有用性の検証、およびその「京」や「富岳」等の高性能コンピュータを利用した高精度化、高速化について検討を行うほか、学术界と産業界の緊密な議論および情報交換を促すことで、次世代の燃焼器ものづくりのフレームワークを産学官で連携して構築し、その迅速な実用化を目指すことを目的として 2018 年 5 月に設立した。	
参画企業	三菱重工業株式会社	株式会社 IHI
	株式会社 IHI エアロスペース株式会社	川崎重工株式会社
	東芝エネルギーシステムズ株式会社	東京ガス株式会社
	日本製鉄株式会社	株式会社豊田中央研究所
	株式会社本田技研工業	一般財団法人電力中央研究所
	宇宙航空研究開発機構	京都大学
参画大学・機関	大阪大学	北海道大学
	九州大学	神戸大学
	徳島大学	島根大学
	名城大学	

表 5-1.コンソーシアムの概要

本活動を通じて大規模シミュレーション技術の産業界への普及・展開、さらには「富岳」へ向けた新たな課題について検討を行った。この一環として Society5.0 の実現に向けたサイバー空間でのデジタルツインの実現について議論し、この結果、2 件の研究課題が文部科学省によるスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムのサブ課題として採択されている。

さらに、国土交通省データプラットフォームを構築するための「都市丸ごとのシミュレーション技術研究組合」(組合員:2 個人、14 社、3 団体 2020 年 8 月現在)にオブザーバーとして参画している。総合防災・減災研究チームで開発中の DPP 技術(都市モデル構築のコア技術)を都市丸ごとのシミュレーション技術研究組合に提供し建設コンサルティング会社の主要ツールとしての利用者拡大・普及促進活動を行うほか、業界主要企業と社会実装システムの開発を進めている。

## 5-4.国内外との連携

国際的な計算機科学および計算科学分野の中核拠点として、同分野の発展と成果の創出を推進すべく、国内外の大学や研究機関との連携を進めてきた研究センターではこれまでに、43件の協定を締結し、うち24件は海外の研究機関等と締結している。

### (1)国内における連携

国内においては、高性能スーパーコンピュータの活用に関する協定を筑波大学と結んでいるほか、東北大学とはスーパーコンピュータに関する分野包括・基本協定を結んでいる。また、「京」の高度化利用や「富岳」の機能向上につながる FPGA に関する研究協力、協定に基づく研究者等の受け入れなど人材育成にも積極的に取り組んでいる。

協定相手研究機関・大学	主な目的・内容	期間
筑波大学	高性能スーパーコンピュータを活用し、先端的な計算科学を協力的に推進	2006年9月～2016年3月 2017年2月～2025年3月
計算科学振興財団	特定高速電子計算機施設の利用の促進および研究教育拠点の構築について連携・協力	2008年3月～2021年3月
東北大学	スーパーコンピュータに関する分野包括・基本協定	2009年4月～2018年3月
高度情報科学技術研究機構	研究センターの施設使用	2011年11月～(協力協定第9条準拠)
神戸大学	計算科学、計算機科学および関連分野、神戸大学施設利用	2012年4月～2021年3月
東京工業大学情報理工学院	計算科学および計算機科学の分野における研究の推進	2018年10月～2023年10月
長崎大学大学院工学研究科	FPGA クラスタを用いた計算システムに関する共同研究実施を検討	2019年7月～2020年3月
会津大学	FPGA クラスタを用いた計算システムに関する共同研究	2019年8月～2021年3月
広島市立大学大学院情報科学研究科	FPGA クラスタを用いた計算システムに関する共同研究	2019年8月～2021年3月
京都大学大学院情報学研究科	FPGA クラスタを用いた計算システムに関する共同研究	2019年8月～2021年3月
東京工業大学工学院	FPGA クラスタを用いた計算システムに関する共同研究	2019年11月～2021年3月
富士通株式会社	富士通が管理・運営する富岳試作機評価環境の利用	2019年11月～未定
熊本大学大学院先端科学研究部	FPGA クラスタを用いた拡張に関する検討	2020年1月～2021年3月
北陸先端科学技術大学院大学情報社会基盤研究センター	「富岳」における FPGA クラスタを用いた拡張に関する検討	2020年1月～2021年3月
東京大学情報基盤センター	大規模シミュレーション、並列アルゴリズム、省電力技術、「計算・データ・学習」融合、大規模システム運用	2020年2月～2022年3月
国立環境研究所	気象アプリケーションの研究開発	2020年3月～2021年3月
国立情報学研究所アーキテクチャ科学研究系鯉淵研究室	FPGA クラスタの高度研究	2020年3月～2021年3月
兵庫県立大学シミュレーション学研究科	社会・経済シミュレーション分野の開拓を協力	2020年8月～2021年3月
計算基礎科学連携拠点拡大協定	素粒子原子核と、宇宙惑星分野の2つのプログラムを推進	署名交換中 (2020年9月現在)

表 5-2.国内機関との協定一覧

## (2) 国外との連携

米国とは、先進の計算科学、計算機科学と世界トップクラスのスーパーコンピュータを有する多くの研究機関が存在しており、2014年には、米国エネルギー省と文部科学省が結んだエクサスケール・コンピュータ開発に関する協定に基づいて、研究センターとアルゴンヌ国立研究所がエクサスケール・コンピュータ向けのソフトウェア研究協力の協定締結が行われた。また、「富岳」の本格運用に向け調整中の現在も、COVID-19対策の課題解決に関する協力が米国との間で進められている。

協定相手研究機関・大学	主な目的・内容	期間
イリノイ大学・国立スーパーコンピュータ応用センター	相互のペタスケールコンピューティングプロジェクトを活用	2012年10月～2019年8月
メリーランド大学	数値計算モデリングやデータ同化に関する分野での研究交流	2013年2月～2025年6月
Argonne Leadership Computing Facility	システムソフトウェア、科学・工学用アプリケーション開発および評価	2015年11月～2018年11月
Intel Corporation 国立大学法人東京大学 国立大学法人筑波大学	Oakforest-PACS(東京大学、筑波大学)と開発中のソフトウェア(理研、Intel)を利用した研究協力	2017年1月～未定
ペンシルベニア州立大学	データ同化、データ解析、応用数学・統計数理に関する分野での研究協力	2019年3月～2024年3月

表 5-3.米国の研究機関との協定一覧

欧州で特筆すべき研究協力としては、フランス原子力・代替エネルギー庁(CEA)との計算科学・計算機科学の協力があげられる。これは文部科学省が日仏科学技術協力協定のもと、国民教育・高等教育・研究省との間で、計算科学および計算機科学分野における協力を係る実施取決めを締結し、それをもととして2017年にCEAと理研が同分野での研究協力を結んだ。その具体的な活動内容(課題、担当者、スケジュール等)について、Statement of Work(SOW)を作成した。

協定相手研究機関・大学	主な目的・内容	期間
国際高等学院(S.I.S.S.A.)(イタリア)	計算科学分野の協力	2011年5月～2021年5月
ユーリッヒ研究所(ユーリッヒ・スーパーコンピュータセンター)(ヘルムホルツ協会)(ドイツ)	計算科学・計算機科学分野での相互の現存・将来ペタスケールコンピューターの科学・工学アプリケーションのスケールリングや性能調査	2013年10月～2019年10月
国立研究センター(CNRS)・計算施設(MDLS)(フランス)	将来アルゴリズム設計・計算科学工学、高速計算機のプログラム概念・言語開発、計算科学研究とそれらを用いた高等教育・訓練	2014年4月～2019年4月
原子力・代替エネルギー研究所(CEA)(フランス)	Open Software Library構築等に関する協力、アプリケーションに関する協力、マネジメントに関する協力、AIとビッグデータ	2017年1月～2022年1月
レディング大学(イギリス)	データ同化における観測誤差相関の扱い	2017年2月～2022年2月
IMT Atlantique(フランス)	主にデータ同化、データ解析、応用数学・統計数理	2019年3月～2024年3月
コンラッド・ツーゼ・ベルリン情報技術研究所(ZIB)(ドイツ)	計算機科学、並列・高性能計算、グラフ最適化アルゴリズム、数値計算アルゴリズム	2020年2月～2023年2月

表 5-4.欧州の研究機関との協定一覧

アジア・オセアニア地域においては、ASEAN 諸国との連携を進めるため、シンガポール諸機関との関係を強化している。文部科学省および研究センター等により提案したアジアハブ構想のもと、「富岳」へのアクセス環境を整え、HPC 利用を通じて ASEAN 諸国の社会的課題解決に資するほか、シンガポールを中心に人材育成にも貢献していく予定である。また、中国や韓国、オーストラリアの関係機関と特定分野の協定を結び、積極的な研究交流を進めている。

協定相手研究機関・大学	主な目的・内容	期間
オーストラリア国立大学・国立計算機インフラストラクチャー(NCI)	構造・アプリ開発環境等評価、科学・工学アプリケーションのモデリングや性能シミュレーション	2012年11月～2018年11月
北京計算科学研究センター(中国)	Computational and theoretical biology(計算理論生物学)における連携協力	2017年7月～2021年7月
国立交通大学・理学部(台湾)	格子場の理論を用いた基本物理法則の探究	2019年11月～2021年3月
台湾 国立中央大学(台湾)	数値モデル、データ同化を含む理論科学・数学・計算科学に関連する分野の研究・人材育成	2019年12月～2024年12月
韓国 大邱大学	分子科学分野でのソフトウェア NTChem の普及、共同研究	2020年3月～2021年3月
シンガポール科学技術研究庁計算資源センター(A*CRG)	アセアン諸国を主な対象国とする HPC ハブ構想の支援、HPC 共用ストレージ テストベッドの設置・設定、Gfarm ファイルシステムの技術者育成支援	2020年4月～2023年4月
シンガポール国立スーパーコンピューティングセンター(NSCC)	人材養成、研究員交換、高速データ通信による両センター間のデータ共有、高インパクト・コンソーシアム・プロジェクト支援(SYNAPSE ブレインマッピングなど)	2020年9月～2023年9月

表 5-5.アジア・オセアニアの研究機関との協定一覧

さらに、前述のほか、HPC システムの開発等に関する国際組織に加盟することによって、最新の研究成果の共有、多くの外部ソースの活用、開発したシステムソフトウェアの第三者による評価やフィードバックを得るなどしている。またこれら活動を通じて、開発したソフトの向上と同時にコミュニティでの普及を図るなどしている。

協定相手研究機関・組織	主な目的・内容	期間
JLESC (Joint Laboratory for Extreme-Scale Computing)	エクサスケール・コンピュータの開発等を目指して相互に連携・協力	2015年3月～2022年4月
Open HPC	Open HPC は Linux Foundation のプロジェクトの一つ。システムの動作検証	2016年3月～未定
Open ACC	指示文ベースのプログラミング環境。FGPA プログラム開発効率化	2019年8月～未定
SYNAPSE	脳神経マッピングのためのスーパーコンピュータの共同利用	2020年1月～2025年1月
The Accelerated Data Analytics and Computing Institute (ADAC)	ADAC は、東京工業大学、ETH Zurich、UT-Battelle が共同で、潜在的な将来連携を探る目的で設立	署名交換中 (2020年9月現在)

表 5-6.国際プロジェクト、メンバーシップに関する協定一覧

### (3) 共同研究

研究センターでは、国内外の研究成果を社会に普及させるため、国内外の大学や研究機関、民間



企業との連携を推進している。2012年9月から2020年8月までに、計134件の新規契約を締結している。

	2012年度 (9月-)	2013年度	2014年度	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度	2020年度 (-8月)
実施件数(カッコの数字は新規件数)	24(9)	32(13)	33(9)	50(22)	49(13)	46(15)	45(12)	53(15)	62(26)

※2020年度は契約締結予定案件を含む。

表 5-7.共同研究契約締結状況

## 5-5.広報活動

研究センターでは、「京」の高度化につながる研究成果の発信、「富岳」開発の意義等を一般国民の視点に立って、分かりやすく伝え、研究センターの活動に対する理解の増進を図っている。情報の発信に当たっては、マスメディアを通じたプレス発表のほか、「京」や「富岳」利用者および利用を検討している企業関係者、将来の計算科学および計算機科学を支える高校生や大学生といった青少年等、それぞれの対象に応じた広報活動を行っている。

### (1) マスメディアを通じた情報発信

「京」に関する取り組みや「富岳」開発、研究センターの活動を広く社会に発信するため、2011年度から2019年度までに147件のプレス発表を行ってきた(付録表2参照)。また、プレス発表に加え、記者の理解度向上を図るため、スーパーコンピュータのランキングの意義などを詳しく説明する勉強会を適宜企画し、マスメディアを通じた国民への正確な情報を発信につながるよう努めてきた。

### (2) ウェブサイトおよび製作物を通じた広報活動

研究センターでは、ウェブサイトを活用した広報活動を積極的に行っている。2012年度の研究センター発足時から展開したホームページには2019年度までに累計で164万2千人が訪問し、その数は、年々増加しておりスーパーコンピュータに関わる情報発信元として定着してきている。また、広報誌「計算科学の世界」を2011年10月から作成し、2020年3月までに20号発行し、研究者のインタビュー記事を掲載するなど、研究センターを身近に感じる取り組みを進めている。さらに、ホームページに加え、TwitterやFacebookといったSNSを活用した積極的な情報発信を行っている。

### (3) イベントの開催

専門的な情報から、一般にわかりやすい情報まで、イベントを通じた直接対話形式の広報活動を実施している。国内では「京」の成果紹介や産業界での活用に向けたシンポジウム(京シンポ)を、これまで7回開催し、1,641人が参加した。また、スーパーコンピュータや計算機シミュレーションの役割・重要性に対する理解の増進を目的として、一般市民向けのイベント「知る集い」を2019年度までに29の都道府県で33回開催し、7,204人が参加した。さらに、神戸医療産業都市の関係機関と合同で行う

一般公開では「京」の見学、研究チームの活動等を紹介してきたほか、理研の本部が置かれている和光地区の一般公開にも参加し、積極的な情報発信を行ってきた。

海外においては、スーパーコンピュータに関する国際会議、「International Supercomputing Conference (ISC)」(独国)および「Supercomputing Conference (SC)」(米国)でのブース展示に 2011 年度から参加し、研究センターの研究活動や成果を紹介する特別講演のほか、研究センターで研究活動を行うことを希望する研究者や学生らと対面する機会となるジョブフェアも実施してきた。また、2018 年度からは、アジアで行われる国際会議「Supercomputing Asia」(シンガポール)にも参加している。

#### (4) 見学・視察および若年層に向けた広報活動

国・地方自治体関係者や研究機関、企業、学校等、様々なステークホルダーを対象に、要望に応じて視察・見学を受け入れてきた。2011 年度からの視察・見学者の受入数は累計 90,949 人に上る。また、若年層に訴求力の強い媒体であるアニメを活用した動画の作成、一般公開での研究者ミニ講演会、「富岳ポスタープロジェクト」に取り組んだほか、地元高校を訪問し、授業時間を活用して「京」の取り組みの紹介や、広報誌コンテンツの共同制作など、スパコンをより身近に感じてもらえるような取り組みを実施した。

#### (5) その他

「京」や「富岳」に対する期待感を醸成させるため、「京」の名称決定に当たっては一般から広く公募を行い、約 2,000 件の応募があった。「京」の共用終了時には、シャットダウンセレモニーを開催したほか、子どもや学生のスーパーコンピュータに対する理解増進に活用してもらうため、「京」の筐体や化粧パネルを科学館等 13 館に寄贈し、その様子はメディア等で広く報道され、関心を集めた。さらに、「富岳」の名称決定にあたっては、「京」の名称決定時に比べ約 2.5 倍の約 5,200 件の応募があった。

	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度	2019 年度	合計
<b>マスメディアを通じた情報発信</b>										
プレス発表(件)	15	17	15	13	16	21	14	12	24	147
<b>ウェブサイトおよび製作物を通じた広報活動</b>										
HP 訪問者累計(千人)	-	159	161	156	175	199	204	297	290	1,642
<b>イベントの開催</b>										
京シンポ(人)	-	389	321	299	207	150	197※1	148※1	-	1,711
一般公開(神戸)(人)	-	3,435	2,150	2,500	2,590	2,254	3,509	4,404	1,143	21,985
一般公開(和光)(人) ※2	-	-	8,481	2,537	1,100	640	600	500	950	14,808
ISC 展示ブース訪問者(人)	-	-	170	520	170	340	300	446	350	2,296
SC 展示ブース訪問者(人)※3	-	249	147	780	500	560	500	566	590	3,892
<b>見学・視察</b>										
視察・見学者数(人)	2,959	12,646	11,537	9,419	11,303	12,322	12,905	13,693	4,165	90,949

※1 別途 ネット中継を実施  
 ※2 研究センターの展示への訪問者数  
 ※3 2012 年度、2013 年度はアンケート回答者数

表 5-8. 広報活動に関する状況

## 5-6.人材育成

研究センターは、事業目標に定められた人材育成に関して、日本の計算科学技術の発展に中心的な役割を担う活動を通じて得た先進的な技術・知見を積極的に活用し、関係機関と連携して計算科学技術を支える人材の育成を推進している。

人材育成に当たっては、主に大学院生、若手研究者、企業技術者等を対象とし、理研の各種制度等を活用しながら、「計算科学および計算機科学の連携・融合を図る人材の育成」、「高度な計算科学技術を使いこなせる人材の育成」、「産業界をはじめとした高度な計算科学技術の利活用推進に寄与する人材の育成」を目指した取り組みを実施してきた。併せて、大学や研究機関等と連携して、各機関の実施事業の共有・広報等を行ってきた。

また、2015年度より戦略分野および重点課題実施機関と人材育成について議論するタスクフォースを立ち上げ、2016年度からは HPCI コンソーシアムの人材育成検討と共同し、コンソーシアムのメンバー（情報基盤センター、RIST、大学、産業界等）を加えて、コミュニティの人材育成に係る情報・意見交換を行ってきた。これらにより、研究センターの Web サイト内に e ラーニングアーカイブサイトとして、研究センターだけでなく他機関の計算科学・計算機科学に係るコンテンツが、また HPCI コンソーシアムポータルに、コミュニティの人材育成に係るイベント情報がそれぞれ集約されている。

### (1) インターンシップ

2012年度よりインターンシップを希望する学生等に対しては、その目的に応じて、研修生や実習生、研究生としての身分を付与し、各研究チームおよび運用技術部門において、大学生等を受け入れ、研究指導を実施してきた。



※実習生などは2013年度以降から受入  
 ※実習生数に、インターンシッププログラムでの受入れ学生数を含む

図 5-6. 研修生・実習生等受入れ数推移(2013年4月-2020年7月)

また、大学生の夏休み期間中等で集中的に国内機関在籍の大学院生等を受け入れる「RIKEN R-

CCS HPC 計算科学インターンシッププログラム(2019 年度に改称)を 2014 年度から実施しているほか、2017 年度から海外機関在籍の大学院生を対象とした「R-CCS HPC International Internship Program(2019 年度に改称)」を実施し、さらに多くの学生を受け入れ、次代を担う若手の人材育成に取り組んだ。

	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度	2019 年度	2020 年度
計算科学インターンシップ	13 人 (6)	10 人 (9)	13 人 (10)	14 人 (9)	15 人 (8)	10 人 (7)	受入手続中
International Internship	—	—	—	4 人 (4)	5 人 (4)	5 人 (4)	調整中

※カッコ内の数字は受入研究チーム数

表 5-9. インターンシップ実績

## (2) 連携大学院

理研の連携大学院制度を活用し、2015 年度より、神戸大学大学院システム情報学研究科(計算科学専攻)に連携講座「大規模計算科学講座」を設置、また 2019 年度より、東北大学大学院情報科学研究科(情報基礎科学専攻)に連携講座「先進的計算システム論講座」を設置し、講義、学生指導等を実施している。

	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度	2019 年度	2020 年度
神戸大学大学院システム情報学研究科	教授:6 人 准教授:3 人 非常勤講師:4 人	教授:6 人 准教授:3 人 非常勤講師:4 人	教授:4 人 准教授:2 人 非常勤講師:6 人	教授:4 人 准教授:2 人 非常勤講師:10 人	教授:4 人 准教授:2 人 非常勤講師:11 人 その他:1 人	教授:4 人 准教授:2 人 非常勤講師:10 人 その他:1 人	教授:6 人 准教授:3 人 非常勤講師:6 人 その他:1 人	教授:6 人 准教授:3 人 非常勤講師:5 人 その他:1 人
東北大学大学院情報科学研究科	—	—	—	—	—	—	教授:1 人 准教授:1 人	教授:2 人

表 5-10. 連携大学院客員教員推移

また、兵庫県立大学とは 2020 年度現在、研究センターの研究員がクロスアポイントメントにより准教授として 2 名着任し、学生の指導等に当たっている。加えて、2021 年度の兵庫県立大学情報科学研究科の開設に伴い、さらなる共同研究や人材育成事業における協力・連携を推進するため、包括的な連携協定の締結に向け調整を行っている。

## (3) 基礎科学特別研究員制度

理研の「基礎科学特別研究員制度」により、若手研究者の育成にも努めている。本制度は、創造性、独創性に富んだ若手研究者が、自由な発想で主体的に研究できる場を提供するものである。また、国際的に活躍することが期待される外国籍の若手研究者に門戸を開いた「国際特別研究員制度」も活用し、人材育成に貢献した。

	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	2018 年度	2019 年度	2020 年度
基礎科学特別研究員	2 人	—	1 人	1 人	—	4 人	3 人	1 人
国際特別研究員制度	—	—	2 人	1 人	1 人	—	—	—

表 5-11. 各年度の新規受け入れ実績

## (4) スクリーニング事業

大規模並列スーパーコンピュータによるシミュレーションを活用するためには、並列アプリケーション

の開発に必要な基本的な並列計算法についての知識が求められる。研究センターでは、並列計算についての知識と基本的な並列プログラミング技術の習得、「京」に代表されるスパコンによる大規模な計算機シミュレーションを駆使し、新しい計算科学の世界を開拓したいと考えている若手研究者、企業の研究者を育成することを目的として、計算機を使った演習を含む講義や、計算科学技術の最新情報の講演等を交えたスクーリング事業を 2011 年度より実施し、10 年間に 6 プログラムを開催している。また、2011 年度に KOBE HPC サマースクール(旧 RIKEN AICS HPC サマースクール)、2013 年度よりそのアドバンス版としてスプリングスクールを、神戸大学、兵庫県立大学との共催にて実施しており、サマースクールの講義は兵庫県立大学の単位認定と連動している。

海外機関と連携したスクーリングとしては、2013 年度より、「International Summer School on HPC Challenges in Computational Science(IHPCSS)」に参画し、2019 年度は日本(神戸)にて、R-CCS がホスト(PRACE、XSEDE、SciNet との共催)となり開講した。また 2017 年度より「CEA RIKEN HPC School」を、Maison de la simulation と研究センターとで隔年実施している。

また、2018 年度には演習で「京」を利用する「RIKEN International HPC Summer School」を開講している。さらに、2016 年度より、多分野の学生等の交流に主眼をおき、講演だけでなくプレゼンテーションや議論を取り入れたグループワークを行う「RIKEN R-CCS HPC Youth Workshop」を実施している。

	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度
KOBE HPC サマースクール	43	41	37	21	22	19	40	36	32
International HPC Summer School	-	-	73 (11)	80 (10)	80 (8)	80 (8)	80 (9)	79 (10)	80 (13)
KOBE HPC スプリングスクール	-	-	22	17	12	17	19	18	コロナにより中止
RIKEN R-CCS HPC Youth Workshio	-	-	-	-	-	17	19	25	16
CEA RIKEN HPC School	-	-	-	-	-	-	約10 (4)	16 (11)	約10 (3)
RIKEN International HPC Summer School	-	-	-	-	-	-	-	23	HPCS 日本開催の点なし

※カッコ内の数字は日本からの参加者数

表 5-12.スクーリング事業等実績

## (5)その他

2020 年度より民間企業を対象にデータ同化実装技術に関する技術指導、太陽電池用材料の物性シミュレーション手法の技術指導等を実施している。

## 5-7.地元自治体との連携

### (1)研究教育拠点(COE)形成推進事業

兵庫県、神戸市の協調のもと「京」の立地効果を最大限に活用し、防災・減災や創薬など地域の課題解決等に資する分野において、「京」を活用した最先端の研究への助成を行うとともに、研究成果の地域への還元を図るための普及啓発を通じて、「京」を中核とする計算科学分野の研究教育拠点(COE)の形成と、計算科学分野の進行を図ることを目的に、FOCUS が運営する研究教育拠点

(COE)形成推進事業の採択を受けて、2012年度から2016年度までの間に7課題、2017年度からは6課題の研究を実施し、兵庫県、神戸市、地元の大学・研究機関との連携等を通じて、計算科学・計算機科学のCOE形成・振興および研究成果の地元還元に取り組んだ。

事業期間	課題名
2011年度 ～ 2016年度	計算構造生物学による生体超分子解析と創薬応用研究
	関西地域を対象とした都市防災の計算科学研究―地震津波と集中豪雨被害のハザードマップの作成―
	京コンピュータ利用による新材料設計
	超並列プログラムの開発・利用環境技術の展開と人材育成
	ポストベタスケールに向けたアプリケーション・アルゴリズム・アーキテクチャの融合型開発
	ビッグデータ創薬とシミュレーション創薬をつなぐ計算創薬基盤の構築
2017年度 ～ 2024年度(予定)	シミュレーションによる天然光合成の解明と人工光合成の構築
	ポスト「京」、ポスト・ポスト「京」をみすえたハードウェア・アルゴリズム・ソフトウェアの総合的研究
	シミュレーションと実験の協働による強相関人工光合成系の実現
	複数の災害リスク評価に基づく都市計画に資する計算科学研究
	テンソルネットワーク(TN)スキームに基づく異分野融合型計算科学研究
	ハイパフォーマンスコンピューティングによる構造生物学の革新
分子シミュレーションに基づくゲノム医療・ゲノム創薬基盤の構築	

表 5-13.研究教育拠点(COE)形成推進事業

## (2)その他

神戸医療産業都市の一般公開や兵庫県・神戸市が主催する一般向けスパコンセミナー等での「京」の一般公開や講演の実施等の協力を通じて、市民への積極的な情報発信を支援した。また、兵庫県・神戸市など地元15団体が主催する産業総合展示会「国際フロンティア産業メッセ」へのFOCUSと連携した出展や、地元の地域情報化推進団体等での講演等を通じて地元企業との連携を促進する取り組みを行った。

## 5-8.予算

研究センターの主な予算は、文部科学省が進める「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)の構築」の一環として国からの補助金で措置されており、「京」および「富岳」の運営に関わる経費は2010年度から手当てされている。また、2014年度からは「富岳」の開発・整備等に関わる国からの補助金として「次世代超高速電子計算機システムの開発・整備等」が措置された。さらに、中核研究機関として、スーパーコンピュータとAI技術の融合を目指した萌芽的な研究、要素開発を理研内の連携等で行う「計算科学技術研究事業」に関わる予算(主に人件費)は、理研の運営費交付金が充当されている。

(千円)

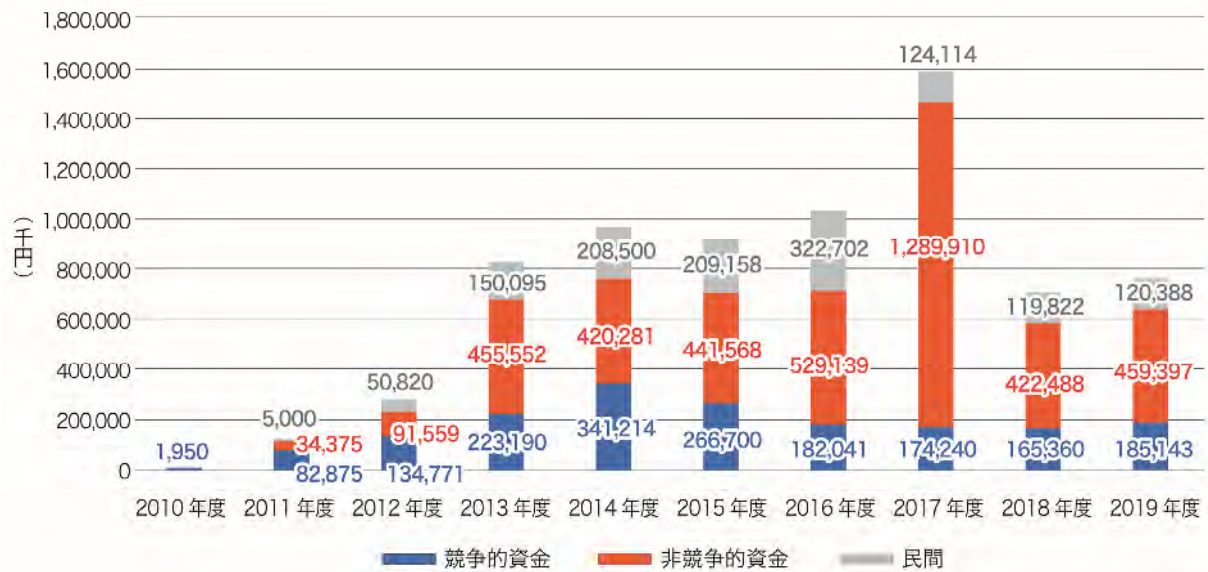
	2010年度	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度
高性能汎用計算機システム利用・運転維持費補助金 *1	1,060,539	6,499,827	9,653,322							
うち高度化予算	180,000	360,000	900,000							
特定高速電子計算機施設の運営(補助金) *1	—	—	—	10,587,077	10,416,499	10,373,167	10,257,569	10,341,765	10,335,829	7,222,292
うち高度化予算				900,000	584,599	551,395	512,114	512,114	512,114	512,114
次世代超高速電子計算機システムの開発・整備等(補助金) *1	—	—	—	—	1,150,444	3,524,312	4,017,272	3,854,881	1,821,918	1,234,881
計算科学技術研究事業費(運営費交付金) *2	—	—	—	81,490	77,416	62,984	83,223	86,223	106,734	86,212

\*1 特定先端大型研究施設運営費等補助金 \*2 理研内部連携のための運営費交付金

表 5-14.研究センターの予算

一方、研究センターの研究機関としての活動を支えるため、外部資金の獲得に努めており、国からの委託事業として進める「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)の運営」のほか、競争的資金の獲得を積極的に進めている。特に後者に当たっては、Society5.0 社会の実現に向けた研究開発や、新たな研究分野の開拓・推進に向けた研究に関しては、総合科学技術・イノベーション会議(CSTI)が推進する戦略的イノベーション推進プログラム(SIP)の「スマートバイオ産業・農業技術基盤」における研究開発課題の一つを担っているほか、科学技術振興機構(JST)で進める戦略的創造研究事業の中で、複数の共同研究グループを組織し実施するネットワーク型研究(CREST)等に研究代表者を送り出している。また、次世代の計算機開発に向けた要素技術の探索研究に当たっては、新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の資金を得て推進している。

さらに、共同研究を通じた民間企業等からの研究資金の獲得にも努めているほか、2019年度からは、Society5.0に向けた様々な高性能計算科学に係る研究活動の支援や人材育成事業を推進するための寄付金を募っている。



年度	2010年度	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度
間接経費	450	23,856	27,659	54,235	77,373	59,694	42,021	39,777	38,062	42,248

図 5-7.外部資金獲得状況と間接経費の推移

## 5-9.研究実績

### (1) 成果発表件数

研究センターでは、計算科学の中核拠点として、計算科学および計算機科学に関する研究活動を積極的に実施してきた。「京」を利用した成果発表件数が 7,019 件である一方、2011 年度から 2019 年度の研究センターとしての論文および口頭による成果発表件数は 4,022 件にのぼる。また、全体の約 40%にあたる 1,641 件が英語論文および国外発表によるものである。特に、2019 年度については、「京」の運用が終了した時期であるにもかかわらず、例年と同程度の成果発表件数であり、研究活動の活発さがうかがえる。



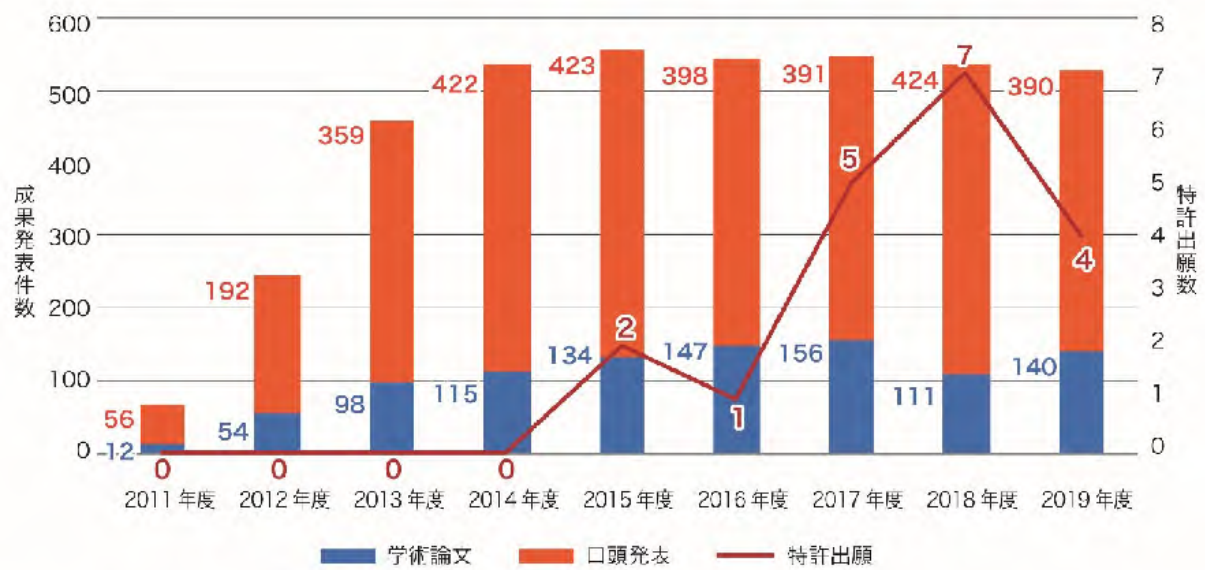


図 5-8.成果発表件数

## (2) 受賞状況

研究センターでは、これまでに 63 件の賞を受賞した(詳細は付録表 3 参照)。

## 6.「富岳」に向けた取り組み

### 6-1.「富岳」の開発

「富岳」の開発は、世界最高水準のスーパーコンピュータにより、我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に資するため、2010年から2011年に我が国のHPCコミュニティによる「戦略的高性能計算システム開発に関するワークショップ(SDHPC)」が開かれ、次世代機の技術検討と白書の執筆が行われた。それを下地に2012年から2013年にかけて、文部科学省委託研究「将来のHPCIのあり方の調査研究(アプリケーション分野)」が行われ、候補となるマシンアーキテクチャやコデザインで進めるアプリケーションが検討された。それらを踏まえ2014年度から、研究センターが主体となりFS2020プロジェクトが開始された。

新たなプロジェクトは、世界最高水準の消費電力(30~40MW以下)を達成しつつ、高性能な汎用CPUを開発するとともに、コデザイン(協調設計)により最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能を達成する計算能力を実現するといったムーンショット的な目標設定を打ち立てた上で、国家プロジェクトとして、リスクの高い革新技术の導入・開発を目指した。さらに、高性能なスーパーコンピュータでありながら、ユーザーの利便・使い勝手の良さを志向し、多くの研究開発への利用を促すことで画期的な成果の創出につなげることを第一義とした。

理研は2014年、「富岳」の開発主体として指名され、その開発・整備を推進するため、同年10月より富士通株式会社とともに「富岳」の設計・開発を進めてきた。2020年5月には432筐体の搬入が完了し、現在システム調整を実施している。同年6月に開催されたISC2020(International Supercomputing Conference 2020)において、「Top500」、「HPCG」、「HPL-AI」、「Graph500」の4部門で世界1位を獲得した。「京」の課題を踏まえた「富岳」開発のポイントは以下の通りである。

#### (1)世界トップ性能の汎用CPUの開発

「富岳」のCPUとして、柔軟な高性能ベクトル演算処理が可能なSVE(Scalable Vector Extension; HPC向けの拡張命令セット)搭載のハイエンドArm-CPUを開発するとともに、新たなメモリデバイスの導入とそれに対応するCPU側のメモリ技術を導入する等、Armエコシステムの構築に取り組んだ。その結果、プロトタイプながら2019年11月に開催されたSC19において、スーパーコンピュータの消費電力性能を示すランキング「Green500」において、世界1位を獲得した。GPUマシンがランキングの上位を占める中で、汎用CPUマシンがこれらを上回るのは非常に画期的なことである。この汎用CPUが新たなスタンダードとなることで、革命的なHPCの成果創出のみにとどまらず、Society5.0を実現するAI(人工知能)やビッグデータなどの新しい技術への適用が期待される。

#### (2)コデザインによる性能向上

文部科学省が選定した「ポスト「京」スーパーコンピュータで重点的に取り組むべき社会的・科学的課題」実施機関におけるアプリケーション開発担当者とともに、「富岳」の開発をシステムとアプリケーションとのコデザインにより進めてきた。具体的には、「富岳」をターゲットマシンとしたアプリケーションの性能チューニングを実施するとともに、最新のコンパイラ等、システムソフトウェアやミドルウェア環

境を実際のアプリケーションに適用し、その機能・性能の検証を行った。この検証により、システムソフトウェアやミドルウェア環境に問題点が発見された場合は、ソフトウェア環境へのフィードバックを実施するなど、システムとアプリケーションの最適化の方針が同時に得られたことにより、性能の向上に貢献した。このことは、「京」における課題、計算機性能とアプリケーション性能のバランスを強く意識した点であり、アプリケーションサイドのニーズを捉えつつも、オーバースペックでもなく、アンダースペックでもない究極のマシンを目指したことに他ならない。

### (3)「富岳」テクノロジーの普及

研究センターでは、「富岳」の開発により得られた「富岳」テクノロジーの普及を目指し、様々な取り組みを行っている。具体的には Arm エコシステムを採用し、「富岳」に実装されている ISA、A64FX プロセッサが、日本製 CPU としては初めて米国の HPC マシンに採用されたことは大きな成果であり、今後も富士通による CPU の外販が世界市場で予定されている。また、産学連携による開発体制で PyTorch、TensorFlow 等の高速実装を DNNL for A64fx、Eigen 等をベースとした「富岳 AI」の開発やその他各種 HPC と AI の融合に向け取り組んでいるほか、「富岳クラウドサービス (FUGAKU Web Service(FWS))」に向け、クラウドプロバイダーと連携しつつ研究・開発を実施している。

### (4)利用者ニーズの反映

研究センターでは、「富岳」に向けたプログラムの移植やアプリケーションの開発に際し、性能改善度や最適化の検討を実施したいユーザーに向け、「富岳」の 1 ノードにおける性能推定を行える「ポスト『京』性能評価環境」を、RIST を窓口として 2018 年 8 月より提供している。本環境のユーザーからは利用終了時に報告書の提出を受けており、この際に要望事項も併せて受け付けることで、利用者ニーズの把握および「富岳」開発へのフィードバックへ活かしている。

総ラック数		432 ラック	
総ノード数		158,976 ノード 384 ノード x 396 ラック = 152,064 ノード 192 ノード x 36 ラック = 6,912 ノード	
総理論性能	総演算性能	通常モード (CPU 動作 クロック周波数 2GHz)	倍精度理論最高値 (64bit) 488 ペタフロップス 単精度理論最高値 (32bit) 977 ペタフロップス 半精度 (AI 学習) 理論最高値 (16bit) 1.95 エクサフロップス 整数 (AI 推論) 理論最高値 (8bit) 3.90 エクサオップス
		ブーストモード (CPU 動作クロック周波数 2.2GHz)	倍精度理論最高値 (64bit) 537 ペタフロップス 単精度理論最高値 (32bit) 1.07 エクサフロップス 半精度 (AI 学習) 理論最高値 (16bit) 2.15 エクサフロップス 整数 (AI 推論) 理論最高値 (8bit) 4.30 エクサオップス
	総メモリ容量		4.85 PiB
	総メモリバンド幅		163 PB/s
ノード単体 性能	命令セットアーキテクチャ		
	計算コア数		
	演算性能	通常モード (CPU 動作 クロック周波数 2GHz)	倍精度 : 3.072 TF 単精度 : 6.144 TF 半精度 : 12.288 TF
		ブーストモード (CPU 動作クロック周波数 2.2GHz)	倍精度 : 3.3792 TF 単精度 : 6.7584 TF 半精度 : 13.5168 TF
	キャッシュ		L1D/core: 64 KiB, 4way, 256 GB/s (load), 128 GB/s (store) L2/CMG: 8 MiB, 16way L2/node: 4 TB/s (load), 2 TB/s (store) L2/core: 128 GB/s (load), 64 GB/s (store)
	メモリ		HBM2 32 GiB, 1024 GB/s
	インターコネクト		Tofu Interconnect D (28 Gbps x 2 lane x 10 port)
	I/O		PCIe Gen3 x16
テクノロジー		7nm FinFET	

表 6-1.「富岳」基本性能

## 6-2.制度設計

「富岳」の利用枠の検討は国主導で行われており、この中で産業界のコンソーシアムによる利用などを想定する「Society5.0 推進枠(仮称)」が設定された。また、「富岳」のクラウド型利用を、調整・高度化利用拡大枠内で試行的に実施することとされている。

研究センターとしても「富岳」共用に向けての技術的・制度的運用方針やクラウド型利用について検討している。また、「富岳」として新たなミッションでもある Society5.0 の実現に貢献するという役割を果たすべく制度設計を行っている。

### (1)運用方針の検討

「富岳」の共用開始に向け、技術的運用および制度的な運用方針等について検討するための「富岳」運用方針検討タスクフォースを設置し、以下のような項目について定期的に検討を行っている。この他にも、発生した共用開始後における技術的・制度的な項目についても検討する予定である。

- 電力削減機能の利用方針
- 利用率(ジョブ充填率)向上のための方針
- シンギュラリティなどの新規利用形態での利用についての方針(クラウド的利用を除く)
- 「富岳」で提供するオープンソース保守についての方針
- 理研外部および内部の利用者にかかる利用規程等の整備方針
- アカウンティング(課金)の方針 等

### (2)クラウド利用の検討

「富岳」の利用者・利用分野の拡大、そのための利便性の向上は重要な課題である。研究センターでは、基盤センターやNIIなどにも参加してもらい、クラウド利用について広く関係機関との連携体制を構築して対応している。

また、HPC 運用ノウハウを擁する理研とクラウド技術やアプリケーションサービス技術を擁するサービスプロバイダー事業者との共同研究により、「富岳」のクラウド的利用形態に関する実現可能性と効果を検証するとともに、世界最先端の HPC システムである「富岳」のハードウェアおよびソフトウェア技術や、クラウド的利用において培われる先端的な利用サービスや運用技術等の「富岳」に関連する技術をクラウドインフラに広く展開することにより、IT 産業発展に寄与することを目的として、複数のサービスプロバイダー事業者と以下の観点に沿って 2020 年度から共同研究を実施している。

- プロバイダーを通して「富岳」の計算資源をエンドユーザーへ提供する方法について幅広く試行(既存サービスの「富岳」への展開を含む)
- それぞれの効果を可能な限り定量的に評価することで有効性を検証するとともに課題を整理
- 得られた知見は、「富岳」のクラウド的利用形態の本格運用に向けた制度設計に反映

### 6-3. Society5.0 に向けた取り組み

研究センターでは、従来 HPCI を通じて様々な分野におけるコミュニティと積極的に連携し、とりわけ重点課題においてはコミュニティと一体となって取り組んできた。また、未踏領域に関するテーマ設定についてもコミュニティと連携し、「京」のみならず HPCI 参画機関のスーパーコンピュータを用いてコデザインを推進した。これらの取り組みにより得られた成果は、HPCI コミュニティの代表として様々なシンポジウムやワークショップ等において積極的に公表するとともに、産業コンソーシアムを設立し、研究成果の産業界への波及を目指した。重点課題等で検討されている社会的課題は、まさに「富岳」が目指す Society5.0 への貢献に向けた早期の成果創出という「富岳」の設計思想の策定に大きく寄与した。

#### (1) DL4Fugaku プロジェクト: AI、データ科学を支える処理基盤の確立

2018 年 11 月の総合科学技術・イノベーション会議 (CSTI) の提言を受け、「富岳」を AI・データ科学をさらに推進するためのプラットフォームとすべく、AI のためのインフラ整備プロジェクト「DL4Fugaku」立ち上げ、チューニング技術ユニット、高性能人工知能システム研究チーム、高性能ビッグデータ研究チーム、大規模並列数値計算技術研究チームが連携し、他の Arm ベース CPU や「富岳」試作機上で深層学習フレームワーク (TensorFlow、PyTorch、Chainer) の移植やチューニングを実施している。「富岳」の共用開始前の早期に、富岳実機で深層学習フレームワークを利用できる環境の構築を目指し、FS2020 プロジェクトの開発チームとも協力し、深層学習フレームワークが必要とする Python ライブラリや数値計算ライブラリが正常かつ効率よく動作するよう、研究開発を行っている。

#### (2) 「富岳」コロナ対策利用の推進

研究センターは、文部科学省と連携し、開発・整備の途上である「富岳」を、国難ともいえる新型コロナウイルスの対策に貢献する成果をいち早く創出するために、可能な限り計算資源を関連研究開発に供出することとし、2020 年 4 月から「富岳」コロナ対策利用を推進している。具体的には、理研からの協力を踏まえて文部科学省が決定する研究開発の実施課題に対して、「富岳」の計算資源を開発・整備に支障がない範囲で優先して供出するとともに、実施される研究開発に対して技術的サポートを行っている。飛沫シミュレーションは、これまで、エンジン内での燃料噴射のシミュレーションのために開発されたソフトウェアが応用されているほか、新型コロナウイルスの動態を探るためのソフトウェアは、「富岳」開発のコンセプトであるコデザインにより「富岳」に最適化、高度化されており、即座に成果を出すことができた。

### 6-4. 未来を見据えた取り組み

「富岳」は、2010 年秋に HPCI の情報基盤センターを中心とした任意組織である「戦略的高性能計算システム開発に関するワークショップ (SDHPC)」として検討がはじまり、2012-2013 年の 4 チームによる文部科学省の「将来 HPCI 調査研究 (Feasibility Study)」を経て、2014 年に「フラッグシップ 2020」として理研-富士通による文部科学省の国家プロジェクトとして開始された。つまり、「富岳」の検討は、2012 年 9 月に京が共用を開始する約 2 年前から検討が開始されていたことになる。

「富岳」の最終整備が進んでいるが、さらなる先を見据えたスーパーコンピュータの在り方に対する検討の取り組みは、2014 年からは計算科学ロードマップと計算科学フォーラムを通じて行われてきたほか、2018 年からは、新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の資金を得て、研究センターを中心に、次世代の計算機開発に向けた要素技術の探索研究が行われている。さらには、大学の基盤センターやメーカーの中堅研究者と連携して NGACI (Next-Generation Advanced Computing Infrastructure) 白書の作成をこなし、富岳 NEXT に向けた検討の準備が進められている。

## 付録

2005年	10月		文部科学省(文科省)において理化学研究所(理研)を開発主体として選定
2006年	1月	1日	次世代スーパーコンピュータ開発実施本部設置
	9月		概念設計開始(NEC/日立、富士通)
2007年	3月	28日	立地地点を神戸に決定
	7月		詳細設計開始(NEC/日立、富士通)
	9月		総合科学技術会議(本会議)においてシステム構成決定
2008年	3月		計算機棟 着工
2009年	1月		研究棟 着工
	5月		NECが製造段階への不参加を表明
	7月		文科省中間評価作業部会においてスカラ単一の新システム構成案は妥当との評価
	11月		行政刷新会議事業仕分けにおいて「来年度の予算計上の見送りに限りなく近い縮減」と判定
	12月		文科省によるプロジェクトの見直し(開発側の視点から利用者側の視点へ転換をはかる)
2010年	3月		詳細設計及び試作・評価の完了
	5月		建屋施設竣工
	7月	1日	計算科学研究機構設立 愛称が「京」に決定
	9月	29日	第一号筐体搬入
2011年	3月	末	システムの一部稼働開始
	6月		TOP500で世界一を達成(8.162ペタフロップス)
	10月	末	文科省において登録施設利用促進機関を高度情報科学技術研究機構に決定
	11月		衆議院決算行政監視委員会行政監視に関する小委員会 TOP500で2期連続世界一を達成(10.51ペタフロップス) HPCチャレンジ賞4部門全てで第一位獲得、ゴードン・ベル賞で最高性能賞受賞
	12月	8日	衆議院決算行政監視委員会における「行政監視に基づく事業の見直しに関する」決議
2012年	6月	29日	システム完成 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部を計算科学研究機構に統合
	9月	7日	「行政監視に基づく事業の見直しに関する決議」のフォローアップに基づく決議
	9月	28日	共用開始
	11月		ゴードン・ベル賞で最高性能賞受賞(2年連続)
2013年	3月		スーパーコンピュータ「京」の研究開発目標の達成状況、研究開発成果等に関する事後評価結果
2015年	6月	16日	「HPCI戦略プログラム」平成27年度行政事業レビュー(公開プロセス)
	11月	12日	「科学技術ビッグプロジェクト(1) スーパーコンピューター」平成27年度秋の行政事業レビュー

付録表 1.「京」開発年表



リリース日	リリースタイトル	リリース機関	研究成果
2010/9/14	「計算科学研究機構設立式典」、「第4回次世代スパコンについて知る集い」を開催 —京速コンピュータ「京(けい)」の搬入がスタート—	理化学研究所	
2011/4/25	「次世代スーパーコンピュータ『京(けい)』向け超高性能 CPU 『SPARC64 Vioxx』が、「日本産業技術大賞 文部科学大臣賞」を受賞	理化学研究所 富士通株式会社	
2011/6/20	京速コンピュータ「京」が世界1位に —世界最高性能 8.162 ペタフロップスを達成し、TOP500 リストで首位獲得—	理化学研究所 富士通株式会社	
2011/11/2	京速コンピュータ「京」が 10 ペタフロップスを達成 —11月発表の TOP500 に LINPACK 性能 10.51 ペタフロップスを登録—	理化学研究所 富士通株式会社	
2011/11/2	独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構における「京」の見学会のお知らせ	理化学研究所	
2011/11/14	京速コンピュータ「京」が2期連続世界1位に —世界最高速 10.51 ペタフロップス、実行効率 93.2%で達成—	理化学研究所 富士通株式会社	
2011/11/15	「京」が 2011 年度の HPCwire 年間賞を受賞！	理化学研究所	
2011/11/16	京速コンピュータ「京」が HPC チャレンジ賞 4 部門すべてで第1位を獲得 —LINPACK に続き、スパコンの総合的な性能を評価するベンチマークでも高性能を実証—	理化学研究所 筑波大学 富士通株式会社	
2011/11/18	京速コンピュータ「京」による成果がゴードン・ベル賞を受賞 —実アプリケーションで実効性能 3 ペタフロップスを達成—	理化学研究所 筑波大学 東京大学 富士通株式会社	
2011/12/2	第5回「京速コンピュータ「京」を知る集い」を福岡にて開催 —自動車の次世代空カシミュレーションや宇宙天気予報などを例に「京」の魅力を紹介—	理化学研究所	
2011/12/22	「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトに係る調停事案の処理について	理化学研究所	
2012/1/6	第6回「京速コンピュータ「京」を知る集い」を名古屋で開催 —「地震と津波の高精度予測と災害軽減」や「生命の不思議」などを例に「京」の魅力を紹介—	理化学研究所	
2012/1/20	産業利用促進に向けた商用ソフトウェアの「京」への移植・高並列化の共同実施	理化学研究所	
2012/2/1	『世界一の「京」を書いて、見よう。』を神戸で開催 —書道家武田双雲氏を招いて対談、「京」の書コンクール、「京」見学会を実施—	理化学研究所 神戸市青少年科学館	
2012/2/2	第7回「スーパーコンピュータ「京」を知る集い」を松山で開催 —「計算機で観る蛋白質の形と動き」、「京」が映し出す未来の気候」などで「京」の魅力を紹介—	理化学研究所	
2012/2/22	第8回「スーパーコンピュータ「京」を知る集い」を札幌で開催 —「光る有機材料の開発」、「海の今と将来を見せるシミュレーション」などで「京」の魅力を紹介—	理化学研究所	
2012/5/11	神戸大学と理化学研究所 計算科学研究機構が計算科学・計算機科学分野における連携協定を締結	神戸大学 理化学研究所	
2012/6/8	独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構における記者懇談会(勉強会)	理化学研究所	

	「スーパーコンピュータ『京』成果創出に向けた準備状況」の開催について		
2012/7/2	スーパーコンピュータ「京」が完成	理化学研究所 富士通株式会社	
2012/7/2	完成した「京」の見学・撮影会および懇談会のお知らせ	理化学研究所	
2012/7/12	第9回『スーパーコンピュータ「京」を知る集い』を金沢で開催 —「スパコンで作る自動車」、「スパコンが解き明かす生命の不思議」などで「京」の魅力を紹介—	理化学研究所	
2012/9/11	「京」共用開始 記念式典・見学会の取材のお知らせ	理化学研究所 高度情報科学技術研究機構	
2012/9/27	第10回『スーパーコンピュータ「京」を知る集い』を広島で開催 —「スパコンで挑む地震と津波」「医薬品設計の科学とコンピュータ」などで「京」の魅力を紹介—	理化学研究所	
2012/9/27	スーパーコンピュータ「京」9月28日から共用開始	理化学研究所 高度情報科学技術研究機構	
2012/10/29	「京」を利用した研究に関する記者勉強会のお知らせ	理化学研究所 高度情報科学技術研究機構	
2012/11/9	スーパーコンピュータ「京」による世界最大規模のダークマターシミュレーションに成功 —ゴードン・ベル賞ファイナリストにノミネート—	筑波大学 理化学研究所 東京工業大学	
2012/11/14	スーパーコンピュータ「京」で HPC チャレンジ賞 3部門の第1位を獲得 —スパコンの総合的な性能を評価するベンチマークで昨年に続き高性能を実証—	理化学研究所 筑波大学 富士通株式会社	
2012/11/16	スーパーコンピュータ「京」によるダークマターシミュレーションがゴードン・ベル賞を受賞	筑波大学 理化学研究所 東京工業大学	
2012/11/22	第11回『スーパーコンピュータ「京」を知る集い』を東京で開催 「スパコンで見る血液の流れ」、「地球を作る実験-星くずから惑星へ」などで「京」の魅力を紹介	理化学研究所	
2013/1/10	第12回『スーパーコンピュータ「京」を知る集い』を長崎で開催 —「医薬品開発」、「国際産業競争」などで威力を発揮する「京」の魅力を紹介—	理化学研究所	
2013/1/23	「京」を利用した研究に関する第2回記者勉強会のお知らせ	理化学研究所 高度情報科学技術研究機構	
2013/2/1	日欧米共同の HPC サマースクールを NY で開催 “4th International Summer School on HPC Challenges in Computational Science”	理化学研究所	
2013/3/1	第13回『スーパーコンピュータ「京」を知る集い』を秋田で開催 —「スパコンで心臓を再現」、「最先端の天気予報」などで「京」の魅力を紹介—	理化学研究所	
2013/4/25	「京コンピュータ・シンポジウム 2013」開催	理化学研究所	
2013/7/4	第14回『スーパーコンピュータ「京」を知る集い』を新潟で開催	理化学研究所	
2013/7/19	計算科学ロードマップに関する意見募集	理化学研究所	
2013/8/2	「京」を使い 10 兆個の結合の神経回路のシミュレーションに成功	理化学研究所 ユーリツヒ研究所 沖縄科学技術大学院大学	○
2013/8/7	山本内閣府特命担当大臣(科学技術政策担当)視察のご連絡	理化学研究所 放射光科	

		学総合研究センター放射光 科学研究推進室 発生・再生科学総合研究セ ンター広報国際化室 計算科学研究機構	
2013/8/8	スパコン「京」の今後はどうなる？-スパコン「京」と我が国の今後の スパコン利活用・展開について初めのシンポジウムを開催-	理化学研究所	
2013/8/27	“「京」が切り拓くライフサイエンス最前線!”記者勉強会のお知らせ	理化学研究所	
2013/9/2	「スパコンが拓く未来の産業と生活-神戸ポートアイランドからの 発信-」開催		
2013/9/20	「京」を利用した世界初の超高解像度全球大気シミュレーションで 積乱雲をリアルに表現	理化学研究所 海洋研究開発機構 東京大学大気海洋研究所	○
2013/11/21	第16回『スーパーコンピュータ「京」を知る集い』を盛岡で開催- 「京」で脳を再現する」、「京」がひらく未来のものづくり」などで「京」 の魅力を紹介-	理化学研究所	
2013/11/22	HPC チャレンジ賞クラス1、クラス2(初)を受賞(SC13・米デンバー 開催)	理化学研究所 筑波大学 富士通株式会社	
2013/12/5	「京」の計算能力を引き出す新開発ソフトウェア~「EigenExa(アイ ゲンエクサ)」~	理化学研究所	
2014/1/17	エクサスケール・パコンピュータ開発プロジェクトに関する記者勉強 会のお知らせ	理化学研究所	
2014/2/3	第17回『スーパーコンピュータ「京」を知る集い』を熊本で開催- 「京」で行う充電電池材料開発」や「次世代の気候研究」などで「京」 の魅力を紹介-	理化学研究所	
2014/3/28	エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクトの開始に ついて	理化学研究所	
2014/5/7	熱帯域におけるマッデン・ジュリアン振動の1ヵ月予測が実現可能 であることを実証 ~スーパーコンピュータ「京」×次世代型超精密 気象モデル~	海洋研究開発機構 東京大学大気海洋研究所 同 理学系研究科 理化学研究所 計算科学 研究機構	○
2014/6/24	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 で世界第1位を獲得-ビ ッグデータの処理で重要となるグラフ解析でも最高の評価-	理化学研究所 東京工業大学 ユニバーシティ・カレッジ・ダ ブリン 科学技術振興機構	
2014/6/26	「HPC ユーザーフォーラム」を日本で9年ぶりに開催-2014年7 月16日 神戸・理研計算科学研究機構-	理化学研究所	
2014/7/22	未来をひらくスーパーコンピュータ~「京」からその先へ 限りなき 挑戦~開催 -「京」の成果やポスト「京」への期待を講演会と展 示で紹介-	理化学研究所 高度情報科学技術研究機 構	
2014/7/23	「京」を使い世界最大規模の全球大気アンサンブルデータ同化に 成功-天気予報シミュレーションの高精度化に貢献-	理化学研究所 科学技術振興機構	○
2014/9/18	『スパコンを知る集い in 大阪~「京」、そしてその先へ~』を開催	理化学研究所	
2014/10/1	ポスト「京」スーパーコンピュータの基本設計業務実施者の決定に ついて-社会的・科学的課題の解決に向けて基本設計を開始-	理化学研究所	
2014/10/2	”「京」で革新するエネルギー創成”記者勉強会のお知らせ	理化学研究所 東京大学	
2014/10/30	“ゴードン・ベル賞ファイナリストノミネート”記者勉強会のお知らせ ~大規模地震動シミュレーション・天の川銀河シミュレーション~	理化学研究所 海洋研究開発機構	

		筑波大学計算科学研究センター	
2014/11/19	スーパーコンピュータ「京」で HPC チャレンジ賞クラス 1、2 を受賞 —スパコンの総合的な性能と並列プログラミング言語の生産性について高い評価—	理化学研究所 筑波大学 富士通株式会社	
2014/11/20	「京」が新たな性能指標(HPCG)で世界トップレベルの高性能を達成 ～産業利用など実際のアプリケーションにおける高い性能を証明～	理化学研究所	
2014/11/28	『スパコンを知る集い in 静岡～「京」、そしてその先へ～』を開催 —「京」をはじめとするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介—	理化学研究所	
2015/2/2	『スパコンを知る集い in 松江～「京」、そしてその先へ～』を開催 —「京」をはじめとするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介—	理化学研究所	
2015/5/8	超並列分子動力学計算ソフトウェア「GENESIS」を開発—「京」を活用し巨大生体分子システムのシミュレーションを実現—	理化学研究所	
2015/7/14	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 で世界第 1 位を奪還 —ビッグデータの処理で重要となるグラフ解析でも最高の評価—	理化学研究所 東京工業大学 ユニバーシティ・カレッジ・ダブリン 九州大学 富士通株式会社 科学技術振興機構	
2015/7/15	HPCG ランキング 世界第二位	理化学研究所	
2015/8/13	日本近海の海面水温が関東の高温多湿な夏に寄与していることを発見	首都大学東京 理化学研究所 北海道大学 埼玉県環境科学国際センター 海洋研究開発機構	○
2015/9/11	第 2 回「京」が切り拓くライフサイエンス最前線！記者勉強会のお知らせ	理化学研究所	
2015/10/6	HPCI 戦略プログラム最終成果報告会 ～スパコン「京」がひらく科学と社会～を開催—「京」による成果からポストへ—	理化学研究所 高度情報科学技術研究機構 計算物質科学イニシアティブ 海洋研究開発機構 東京大学生産技術研究所 計算基礎科学連携拠点	
2015/10/30	“多様化するスーパーコンピュータランキング”記者勉強会のお知らせ	理化学研究所	
2015/11/10	「京」にて現実大気の世界最大規模アンサンブルデータ同化に成功	理化学研究所 海洋研究開発機構 科学技術振興機構	○
2015/11/18	2 期連続でスーパーコンピュータ「京」が Graph500 で世界第 1 位を獲得		
2015/11/19	HPCG ランキング 連続世界第二位	理化学研究所	
2015/12/4	『スパコンを知る集い in 富山～「京」からポスト「京」へ～』を開催 —「京」を中心とするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介—	理化学研究所	
2016/1/8	“ポスト「京」スーパーコンピュータとポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題”記者勉強会のお知らせ	理化学研究所 高度情報科学技術研究機	

	～シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」と同時開催～	構	
2016/1/27	『スパコンを知る集い』を高松で開催－「京」を中心とするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介－	理化学研究所	
2016/3/4	『スパコンを知る集い』を仙台で開催－「京」を中心とするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介－	理化学研究所	
2016/3/16	スーパーコンピュータでフラーレンの性質を探る－世界最大規模の電子状態計算で生成熱の正しい値を予測－	理化学研究所 シドニー大学	○
2016/3/19	ディラック電子系に潜む普遍性を実証－世界最大規模のシミュレーションで金属-絶縁体転移の臨界指数を決定－	理化学研究所	○
2016/5/25	北極域への「すす」の輸送メカニズムを解明－「京」を用いた超高解像度の全球大気汚染物質シミュレーション－	理化学研究所 東京大学 九州大学 国立環境研究所	○
2016/6/21	「京」が Graph500 で 3 期連続世界第 1 位 (ISC2016・独フランクフルト開催)－ビッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高の評価－	理化学研究所	
2016/7/13	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 で世界第 1 位を獲得－ビッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高の評価－	九州大学 東京工業大学 理化学研究所 バルセロナ・スーパーコンピューティング・センター 富士通株式会社	
2016/7/14	メニーコアに向けた新並列計算モデル～ビッグデータ処理などをより高速に、かつ省メモリで実行～	理化学研究所計算科学研究機構システムソフトウェア研究チーム	
2016/7/20	火星ダストデビルの性質を解明－火星天気予報や火星有人探査への一歩－	理化学研究所 北海道大学 神戸大学 松江工業高等専門学校 九州大学 京都大学	○
2016/8/5	京×産業シンポジウム ～つながりが未来をひらく～ 開催－産業界から創出された「京」の成果やポスト「京」への期待をご紹介－	理化学研究所 高度情報科学技術研究機構	
2016/8/9	「京」と最新鋭気象レーダを生かしたゲリラ豪雨予測－「ビッグデータ同化」を実現、天気予報革命へ－	理化学研究所 情報通信研究機構 大阪大学 科学技術振興機構	
2016/11/1	バクテリア細胞質の全原子分子動力学計算－スーパーコンピュータ「京」で複雑な構造と運動を明らかに－	理化学研究所 ミシガン州立大学	○
2016/11/2	系外惑星の巨大リングの回転は公転と逆向き－シミュレーションで巨大リングが破壊されない理由を解明－	理化学研究所 ライデン天文台	○
2016/11/10	『スパコンを知る集い』を宮崎で開催－「京」を中心とするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介－	理化学研究所	
2016/11/16	「京」が性能指標(HPCG)で世界第 1 位を獲得－産業利用など実際のアプリケーションにおける高い性能を証明－	理化学研究所 富士通株式会社	
2016/11/18	高性能計算技術の世界最高峰の会議で最優秀論文賞を受賞－スパコン向けアプリケーション開発を大幅に容易にする手法を開発－	理化学研究所 東京工業大学 科学技術振興機構	
2016/11/18	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 において4期連続で世界1位を獲得－ビッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高の評価－	九州大学 東京工業大学 理化学研究所	

		富士通株式会社 科学技術振興機構	
2016/12/2	式が書ければ「京」が使えるー高度なプログラムを自動生成できる新言語「Formura」を開発ー	理化学研究所 千葉大学 神戸大学 京都大学 富士通株式会社	
2017/1/5	理化学研究所とフランスの原子力・代替エネルギー庁が計算科学および計算機科学分野における研究協力取り決めで締結	理化学研究所	
2017/1/18	『スパコンを知る集い』を岡山で開催ー「京」を中心とするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介ー	理化学研究所	
2017/2/15	水力発電用ダムの運用高度化に向けた共同研究の開始について	東京電力ホールディングス株式会社 理化学研究所	
2017/2/16	『スパコンを知る集い』を宇都宮で開催ー「京」を中心とするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介ー	理化学研究所	
2017/2/23	見える化シンポジウム 2017～シミュレーションの価値～ 開催ースパコンのシミュレーションを社会に伝えるー	理化学研究所	
2017/3/1	理化学研究所×『3D 雨雲ウォッチ～フェーズドアレイレーダ～』～より早くて正確なゲリラ豪雨予測のサービス化を目指し、共同研究を開始～	株式会社エムティーアイ 理化学研究所	
2017/3/13	持続可能性のモデリングー自然と人間の双方向カップリングの必要性ー	理化学研究所 メリーランド大学	○
2017/6/20	「京」が性能指標(HPCG)において2期連続で世界第1位を獲得ー産業利用など実際のアプリケーションにおける高い性能を証明ー	理化学研究所 富士通株式会社	
2017/6/23	スーパーコンピュータ「京」がGraph500において5期連続で世界1位を獲得～ビッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高の評価～	九州大学 東京工業大学 理化学研究所 富士通株式会社 株式会社フィックスターズ 科学技術振興機構	
2017/7/4	30秒更新10分後までの超高速降水予報を開始ー最新鋭気象レーダを活用したリアルタイム実証ー	理化学研究所 情報通信研究機構 首都大学東京 大阪大学 科学技術振興機構	○
2017/9/20	スーパーエルニーニョの急激な終息の引き金を引いたのは赤道を旅する巨大な雲群 Madden-Julian 振動(MJO)～スーパーコンピュータ「京」× 新型超精密気象-海洋モデル～	東京大学大気海洋研究所 理化学研究所 海洋研究開発機構	○
2017/10/5	「京」でペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見ー膨大な数から適切な材料を効率よく探し出すー	理化学研究所	○
2017/10/31	「HPCを活用した自動車用次世代 CAE コンソーシアム」事前説明会の開催について	理化学研究所	
2017/11/15	「京」が性能指標(HPCG)において3期連続で世界第1位を獲得ー産業利用など実際のアプリケーションにおける高い性能を証明ー	理化学研究所 富士通株式会社	
2017/11/16	6期連続でスーパーコンピュータ「京」が Graph500 で世界第1位を獲得ービッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高レベルの評価ー	理化学研究所 九州大学 東京工業大学 バルセロナ・スーパーコンピューティング・センター 富士通株式会社	

		株式会社フィックスターズ 科学技術振興機構	
2017/11/24	『スパコンを知る集い』を長野で開催―「京」を中心とするスパコンについて、講演や動画上映などでわかりやすくご紹介―	理化学研究所	
2017/12/20	地域気候変動を理解する新評価手法の開発―平均的な気候変化と擾乱の質的变化、どちらが大事？―	理化学研究所	○
2018/1/18	10分ごとに更新する気象予測―「京」と気象衛星ひまわり8号による天気予報の革新―	理化学研究所 気象庁研究所 科学技術振興機構 海洋研究開発機構	○
2018/3/12	多剤排出トランスポーターの薬剤排出機構を解明―スーパーコンピュータ「京」で巨大分子機械の動きを計算―	理化学研究所 横浜市立大学 東京工業大学	○
2018/3/13	大気中のチリが雲に与える影響を正確に再現―「京」を用いた高解像度の気候シミュレーション―	理化学研究所 名古屋大学 東京大学大気海洋研究所 九州大学 国立環境研究所 宇宙航空研究開発機構	○
2018/3/26	ヒトの脳全体シミュレーションを可能にするアルゴリズム―脳シミュレーションの大幅な省メモリ化と高速化を実現―	理化学研究所	○
2018/5/15	1分子計測のデータ同化による生体分子構造ダイナミクス―小タンパク質が折り畳まれる際の中間構造・パスウェイを特定―	理化学研究所	○
2018/5/24	新粒子「ダイオメガ」―スパコン「京」と数理で予言するクォーク6個の新世界―	理化学研究所 京都大学 大阪大学	○
2018/6/29	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 において 7 期連続で世界第 1 位を獲得 ―ビッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高レベルの評価―	理化学研究所 九州大学 東京工業大学 バルセロナ・スーパーコンピュータ・センター 富士通株式会社 株式会社フィックスターズ 科学技術振興機構	
2018/8/11	原子核形状の2次相転移をスパコンシミュレーションで発見	東京大学 理化学研究所	○
2018/8/22	引っ張ったグラフェンの運命を「京」により予想―絶縁体化の新たなシナリオ―	理化学研究所	○
2018/10/2	水銀原子核はハムレット	東京大学 理化学研究所	○
2018/11/14	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 において 8 期連続で世界第 1 位を獲得	理化学研究所 九州大学 東京工業大学 バルセロナ・スーパーコンピュータ・センター 富士通株式会社 株式会社フィックスターズ 科学技術振興機構	
2019/1/30	磁気モーメントから分かる銅同位体の新たな姿―極限までスピン整列度を高めた RI ビームを駆使して測定に成功―	理化学研究所 東京大学大学院理学系研究科	○
2019/1/30	ALK 融合遺伝子陽性肺がんに対する薬剤耐性変異予測と、既存薬を活用した耐性克服法の発見―第 3 世代 ALK 阻害薬耐性の	がん研究会 京都大学	○

	克服を目指すー	理化学研究所 日本医療研究開発機構	
2019/2/15	ポスト「京」の名称を募集ー国内外の多くの方から名称を公募ー	理化学研究所	
2019/2/23	新しい光誘起超伝導メカニズムの発見ーパルス光照射による「 $\eta$ ペアリング状態」の実現を予言ー	理化学研究所	○
2019/3/26	2011年東北地方太平洋沖地震後に観測された余効変動の発生要因を岩石流動の実験則を組み込んだ大規模数値シミュレーションにより説明	海洋研究開発機構	○
2019/4/8	対馬海峡で複数の漁船の遭難事故をもたらした突風の正体に迫るーわずか直径1kmの竜巻状渦が繰り返し発生していた様子が明らかにー	海洋研究開発機構	○
2019/5/2	魔法数研究に金字塔ーついに中性子過剰なニッケル原子核の二重魔法性に結論ー	理化学研究所 東京大学大学院理学系研究科	○
2019/5/10	月は地球のマグマオーシャンからできた	海洋研究開発機構 神戸大学 理化学研究所	○
2019/5/21	理化学研究所 ポスト「京」名称決定に関する記者会見	理化学研究所	
2019/5/23	ポスト「京」の名称「富岳(ふがく)」に決定ー世界トップクラスのスーパーコンピュータであること等で選考ー	理化学研究所	
2019/5/30	「京」シャットダウンおよびセレモニー開催についてー「京」から「富岳」へー	理化学研究所	
2019/5/30	「Society 5.0に向けた高性能計算科学研究支援および研究者育成支援に関する寄附金」の募集について	理化学研究所	
2019/6/19	スーパーコンピュータ「京」が Graph500 において 9 期連続で世界第1位を獲得ービッグデータの処理で重要となるグラフ解析で最高レベルの評価ー	理化学研究所 九州大学 東京工業大学 バルセロナ・スーパーコンピューティング・センター 富士通株式会社 株式会社フィックスターズ 科学技術振興機構	
2019/7/3	スーパーエルニーニョに対する強い台風の数の変動ー台風の季節予測に向けた大気の内変動の予測の重要性ー	海洋研究開発機構 東京大学大気海洋研究所	○
2019/7/30	スーパーコンピュータ「京」から迫る肺がんの分子機構ー肺がんの増殖に関わる新規長鎖ノンコーディング RNA の発見ー	愛知県がんセンター 日本医療研究開発機構	○
2019/8/1	合金の複雑な構造をパラメータ無しで予測ー世界初の革新的マルチスケールシミュレーション新技術ー	横浜国立大学 物質・材料研究機構	○
2019/8/5	みんなで作る！スーパーコンピュータ「富岳」ポスタープロジェクトー公募した写真やイラストで「富岳」のイメージポスターを作成	理化学研究所	
2019/8/20	ありがとう「京」シャットダウンセレモニーの取材ご案内について	理化学研究所	
2019/8/27	スーパーコンピュータ「富岳」ロゴマークを決定ー「富岳」性能の高さとユーザーの広がりを表現ー	理化学研究所	
2019/8/29	潮の満ち引きが瀬戸内海を通過する流れを抑制することを解明ー東西どちらに流れているかも決着かー	海洋研究開発機構 東京大学大気海洋研究所	○
2019/9/6	酵素ー阻害剤結合の初期会合体を予測ー初期結合過程を標的とした新たな創薬分子設計の可能性を拓くー	理化学研究所	○
2019/10/7	酸素金属化に伴う電子状態変化を世界で初めて実測	兵庫県立大学 理化学研究所 国家同步輻射研究中心 高輝度光科学研究センター 愛媛大学地球深部ダイナミ	○



		クス研究センター	
2019/11/14	地球温暖化に伴う温帯低気圧の雨量増加を衛星観測から高精度に求める試み—高解像度気候シミュレーションから得られた示唆—	海洋研究開発機構 東京大学大気海洋研究所	○
2019/11/15	スーパーコンピュータ「富岳」クラウド的利用に向けた共同研究プロジェクト提案の募集	理化学研究所	
2019/11/18	スーパーコンピュータ「富岳」のプロトタイプが Green500 で世界 1 位を獲得 世界トップの消費電力性能を実証	富士通株式会社 理化学研究所	
2019/11/26	原子核の形の基本原理と量子系での自己組織化	東京大学 理化学研究所仁科加速器 科学研究センター 原子核科学研究センター ルーバン大学	○
2019/12/3	スーパーコンピュータ「富岳」搬入開始	理化学研究所	
2020/1/15	『スーパーコンピュータ「富岳」を知る集い』を金沢で開催	理化学研究所	
2020/3/5	新たなハイパー原子核「グザイ・テトラバリオン」—グザイ粒子の振る舞いを精密計算で解き明かす—	理化学研究所 九州大学 京都大学	○
2020/4/7	新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用について	理化学研究所	
2020/4/9	最大規模の横断的がんゲノム解析による新規発がん機構の解明—がんゲノム医療への応用が期待—	国立がん研究センター 京都大学 東京大学医科学研究所	○
2020/4/24	室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策	理化学研究所	○
2020/5/8	スーパーコンピュータ「富岳」記者勉強会のお知らせ—「富岳」を利用した新型コロナウイルス対策研究—	理化学研究所	
2020/6/11	スーパーコンピュータ「富岳」メディア向けイベント開催のお知らせ	理化学研究所	
2020/6/22	スーパーコンピュータ「富岳」TOP500、HPCG、HPL-AI、Graph500 において世界第 1 位を獲得	理化学研究所	
2020/6/22	スーパーコンピュータ「富岳」スパコンランキング世界第 1 位獲得に関する記者会見	理化学研究所	
2020/6/30	スーパーコンピュータ「富岳」記者勉強会のお知らせ	理化学研究所	
2020/7/1	理化学研究所、Oracle Cloud で「富岳」の高度な計算資源の有効活用と研究成果創出を促進	理化学研究所 日本オラクル	

付録表 2. プレスリリース一覧

2012 年度	1 月	HPCwire People to watch 2012	渡邊 貞(理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部)	世界最速のスパコン「京」の開発
	1 月	関西元気文化圏賞 ニューパワー賞	スーパーコンピュータ「京」の開発チーム	理研と富士通が共同で開発を進めているスーパーコンピュータ「京」が、計算性能ランキングTOP500において、今年 6 月と 11 月の 2 期連続で、世界 1 位を獲得。日本の技術力を世界に示すとともに、東日本大震災で沈みがちな日本を元気づけた。来年 11 月からの本格稼働後には、シミュレーション精度や解析計算速度の向上により、医療や防災、ものづくりなど様々な分野で大きな発展・革新が期待される
	3 月	電気設備学会賞 技術部門施設奨励賞	運用技術部門	京速コンピュータ「京」施設の電気設備

	11月	HPC Challenge Awards 3部門1位、1部門2位	スーパーコンピュータ「京」 理化学研究所	<第1位>①Global HPL(大規模な連立1次方程式の求解における演算速度)③EP STREAM(Triad) per system(多重負荷時のメモリアクセス速度)④Global FFT(高速フーリエ変換の総合性能) <第2位>②Global RandomAccess(並列プロセス間でのランダムメモリアクセス性能)
2013年度	2月	平成24年度 コージェネ大賞 民生用部門 理事長賞	理化学研究所	スーパーコンピュータ「京」を守る大型コージェネ～電源セキュリティと節電に大きく貢献～
2013年度	5月	先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS2013 優秀ポスター賞	井上 俊介、南 一生(運用技術部門ソフトウェア技術チーム)	スーパーコンピュータ「京」におけるメモリインテンスティブなアプリケーションの評価および高性能化(ポスター論文)
	5月	第51回空気調和・衛生工学会賞技術賞建築設備部門	理化学研究所	スーパーコンピュータ施設「京(けい)」の設備設計と施工
	7月	Asia-Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists 2013 Pople Medal	中嶋 隆人(量子系分子科学研究チーム)	For his innovative contributions to relativistic molecular orbital theory
	7月	一般社団法人情報処理学会コンピュータサイエンス領域奨励賞	島田 明男(システムソフトウェア研究チーム)	メニーコア OS 向け新プロセスモデルの提案
	11月	兵庫県科学賞	運用技術部門	スーパーコンピュータ「京」の安定運用技術の研究開発
	11月	HPC Challenge Class1 Award (Global HPL, EP STREAM(Triad) per system)	スーパーコンピュータ「京」	・Global HPL(大規模な連立1次方程式を解く演算速度) ・EP STREAM(Triad) per system(多重負荷時のメモリアクセス速度) ・Global FFT(高速フーリエ変換の総合性能)の3部門で第1位を獲得 ・Global RandomAccess(並列プロセス間でのランダムメモリアクセス性能)で第2位を獲得。
2014年度	1月	平成25年度省エネ大賞(省エネ事例部門)審査委員会特別賞	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」の高効率冷却システム
	3月	2013年度 PM 実施賞 エクセレントパートナーシップ賞	理化学研究所	スーパーコンピュータ「京」の開発
	4月	平成26年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞	三好 建正(データ同化研究チーム)	地球環境シミュレーションにおけるデータ同化の研究
2014年度	5月	14th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid'14) Best Paper Award	丸山 直也、松岡 聡(プログラム構成モデル研究チーム)	A User-level Infiniband-based File System and Checkpoint Strategy for Burst Buffers
	6月	平成25年度電子情報通信学会業績賞	庄司 文由(運用技術部門)ら	スーパーコンピュータ「京」の研究開発
	11月	HPC Challenge Class1 Award (Global HPL, EP STREAM(Triad) per system)	スーパーコンピュータ「京」	・Global HPL(大規模な連立1次方程式を解く演算速度) ・EP STREAM(Triad) per system(多重負荷時のメモリアクセス速度)で第1位を獲得 この他、

				<ul style="list-style-type: none"> <li>Global RandomAccess (並列プロセス間でのランダムメモリアクセス性能)</li> <li>Global FFT (高速フーリエ変換の総合性能) で第 2 位を獲得</li> </ul>
2015 年度	1 月	第 41 回建築物環境衛生管理全国大会事例報告部門優秀賞	瀧塚 博之、関口 芳弘 (運用技術部門施設運転技術チーム)	スーパーコンピュータ施設における低騒音空調機の省エネ運用
	2 月	The ISDA2015 Organizing Committee Best Poster Award	近藤 圭一 (データ同化研究チーム)	The 10,240-member ensemble Kalman filtering with an intermediate AGCM without localization
	5 月	地球惑星科学振興西田賞	三好 建正 (データ同化研究チーム)	局所アンサンブル変換カルマンフィルタによる数値データ同化手法の高度化の研究
	7 月	ISC2015 HPC IN ASIA POSTER AWARD	庄司 文由、塚本 俊之 (運用技術部門)、宇野 篤也、山本 啓二 (運用技術部門システム運転技術チーム)	LONG TERM FAILURE ANALYSIS OF 10 PETASCALE SUPERCOMPUTER
2016 年度	3 月	情報処理学会 山下記念研究賞	中尾 昌広 (プログラミング環境研究チーム)	XcalableACC: OpenACC を用いたアクセラレータクラスタのための PGAS 言語 XcalableMP の拡張
2016 年度	3 月	2016 年度日本気象学会賞	三好 建正 (データ同化研究チーム)	アンサンブルカルマンフィルタによるデータ同化の高度化に関する研究
	4 月	平成 28 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 開発部門	富田 浩文 (複合系気候科学研究チーム)ら	正二十面体分割格子を用いた全球非静力学大気モデルの開発
	5 月	日本地球惑星科学連合 The Most Accessed Paper Award 2016	三好 建正 (データ同化研究チーム)、富田 浩文、八代 尚、三浦 裕亮 (複合系気候科学研究チーム)ら	The Non-hydrostatic Icosahedral Atmospheric Model: description and development
	6 月	HPC イン・アジア ポスターセッション 最優秀賞受賞	廣田 悠輔 (大規模並列数値計算技術研究チーム)	4 倍精度固有値ソルバライブラリ QPEigenK (キューピーアイゲンケー) および QPEigenG (キューピーアイゲンジー) の京コンピュータにおける性能評価
	6 月	第 16 回日本蛋白質科学会年会 若手奨励賞優秀賞	松永 康佑 (粒子系生物物理研究チーム)	1 分子 FRET データと分子動力学シミュレーションによるタンパク質ダイナミクス解析
	6 月	Schrödinger Inc. Best Poster Award	Sandhya Premnath Tiwari (計算構造生物学研究ユニット)ら	Building a database of 3D biological shapes for the interpretation of XFEL diffraction patterns
	7 月	情報処理学会 山下記念研究賞	棕木 大地 (大規模並列数値計算技術研究チーム)	NVIDIA GPU におけるメモリ律速な BLAS カーネルのスレッド数自動選択手法
	9 月	日本ソフトウェア科学会 2016 年度 功労賞	石川 裕 (フラッグシップ 2020 プロジェクト)	日本ソフトウェア科学会の学会活動に対して、特に貢献が顕著と認められた
	9 月	理化学研究所 第 7 回研究奨励賞	小林 千草 (粒子系生物物理研究チーム)	
	10 月	埼玉県警察本部交通部長 感謝状	坪倉 誠 (構複雑現象統一的解法研究チーム)	死亡ひき逃げ事件の捜査における協力。空力シミュレーションにより事件発生メカニズムを解明
2016 年度	11 月	SC16 最優秀ポスター賞	藤田 航平、堀 宗朗 (総合防災・減災研究ユニット)ら	次世代地震被害予測システムのコア技術として期待されているシミュレーション手法に関する研究

	11月	SC16 最優秀論文賞	丸山 直也、モハメド・ワヒブ(プログラム構成モデル研究チーム)ら	スパコン向けアプリケーション開発を大幅に容易にする手法を開発
	11月	HPC チャレンジ賞(クラス1) 4部門1位	スーパーコンピュータ「京」(理研 AIGS) 宇野 篤也(運用技術部門-システム運転技術チーム)ら	<ul style="list-style-type: none"> <li>Global HPL(大規模な連立1次方程式を解く演算速度)</li> <li>EP STREAM(Triad) per system(多重負荷時のメモリアクセス速度)</li> <li>Global RandomAccess(並列プロセス間でのランダムメモリアクセス性能)</li> <li>Global FFT(高速フーリエ変換の総合性能)の4部門すべてで第一位を獲得</li> </ul>
	11月	The Fourth International Symposium on Computing and Networking Outstanding paper award	辻田 祐一(運用技術部門システム運転技術チーム)、堀 敦史、亀山 豊久、石川 裕(フラッグシップ2020プロジェクト システムソフトウェア開発チーム)	Topology-Aware Data Aggregation for High Performance Collective MPI-IO on a Multi-Core Cluster System
	12月	土木学会 応用力学委員会 応用力学シンポジウム講演賞	西口 浩司(複雑現象統一の解法研究チーム)	3次元 PLIC 法を用いた Euler 型固体接触解析手法
	12月	日本流体力学会 フェロー 会員認定	坪倉 誠(複雑現象統一の解法研究チーム)	永年にわたる流体力学と流体力学会への貢献
2017年度	1月	Editor's Award, Monthly Weather Review, American Meteorological Society	三好 建正(データ同化研究チーム)	For prompt and detailed reviews of a large number of manuscripts
	3月	理研研究奨励賞	Attia Mohamed Wahib Mohamed(プログラム構成モデル研究チーム)	高性能・高生産性を達成する並列 AMR フレームワーク
2017年度	3月	理研研究奨励賞	佐藤 陽祐(複合系気候科学研究チーム)	全球雲解像モデルを用いた黒色炭素の中緯度から北極への輸送過程の解明
	3月	理研研究奨励賞	岩澤 全規(粒子系シミュレータ研究チーム)	高性能粒子系シミュレータ開発フレームワーク FDPS の開発
	3月	2016 年度情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム 優秀論文賞	堀 敦史、石川 裕ら(システムソフトウェア研究チーム)	新しいタスクモデルによるメニーコア環境に適した MPI ノード内通信の実装
	4月	The Most Cited Paper Award 2017	三好 建正(データ同化研究チーム)、富田 浩文、八代 尚、三浦 裕亮(複合系気候科学研究チーム)	The Non-hydrostatic Icosahedral Atmospheric Model: description and development
	5月	自動車技術会創立 70 周年 記念表彰	坪倉 誠(構複雑現象統一の解法研究チーム)	日本自動車技術会会員として永年にわたり事業活動に参画し、日本自動車技術会の発展に多大な貢献をした。
	6月	PRACE-ISC RESEARCH POSTER AWARD	棕木大地、今村俊幸(大規模並列数値計算技術研究チーム)	Implementation & Evaluation of 2.5D Matrix Multiplication on K Computer
	6月	ROSS Committee in cooperation with ACM siphpc Best Paper Award	Balazs Gerofi、石川 裕(システムソフトウェア研究チーム)	Toward Full Specialization of the HPC Software Stack: Reconciling Application Containers and Lightweight Multi-kernels
	10月	日本機械学会流体工学部門 フロンティア表彰	坪倉 誠(構複雑現象統一の解法研究チーム)	複数の偏微分方程式群と異なる時空間スケールで支配される複雑な流体現象を統一的に扱うための連成シミュレーション手法を開発し、優れた業績を多数挙げた。自動車における次世

				代空力非定常解析の分野でも先駆的・先導的な役割を果たしてきた
	11月	日本機械学会創立120周年記念功労表彰	坪倉 誠(構複雑現象統一的解法研究チーム)	日本機械学会会員として多年にわたり日本機械学会の事業に尽力し、その発展に寄与した
2017年度	11月	SC17 最優秀ポスター賞	市村 強、藤田 航平、堀宗朗、Madgedara Lalithら(総合防災・減災研究ユニット)	AI with Super-Computed Data for Monte Carlo Earthquake Hazard Classification
	12月	日本気象学会 気象集誌論文賞	吉田 龍二、宮本 佳明、富田 浩文、梶川 義幸(複合系気候科学研究チーム)	熱帯低気圧発生における水蒸気の効果: PALAU2010 で観測された非発達擾乱の数値実験
2018年度	4月	ゴールド・メダル賞	三好 建正(データ同化研究チーム)	ビッグデータ同化によるゲリラ豪雨予測の研究
	5月	兵庫県功労者表彰 県勢高揚功労章	平尾 公彦(前 計算科学研究機構長)	県政の伸展、公共の福祉増進に対する功労への表彰
	6月	ACM HPDC 2018 Best Paper Award	堀 敦史、Balazs Gerofi、高木 将通、石川 裕(システムソフトウェア開発チーム)	メニーコア CPU における第3の並列実行モデルの新たな実装方式を提案
	6月	ACM HPDC 2018 Achievement Award	松岡 聡(計算科学研究センター長)	並列分散コンピューティングの分野における抜きんでの貢献への表彰
	11月	General Graph Deepest/Widest Improvement Award	中尾 昌広(プログラミング環境研究チーム)	Simulated Annealing (SA) の解探索性能と高速化の両方を達成できるアルゴリズムの開発
	12月	HiPC Best paper Awards	松岡 聡(計算科学研究センター長)	Adaptive Pattern Matching with Reinforcement Learning for Dynamic Graphs
2019年度	3月	Asia HPC Leadership Award	松岡 聡(計算科学研究センター長)	スーパーコンピュータのコミュニティにおいてすぐれたリーダーシップを発揮
	6月	HPCG 世界第3位	スーパーコンピュータ「京」熊畑 清、南 一生(運用技術部門チューニング技術チーム)	2014年から新たに始まったスーパーコンピュータの性能をはかるベンチマーク、HPCGにおいて、世界第3位
	6月	土木学会 応用力学委員会「応用力学論文奨励賞」	西口 浩司 特別研究員(複雑現象統一的解法研究チーム)	土木学会論文集 A2 分冊(応用力学)特集号に掲載された論文「非圧縮性固体-流体連成解析のための陰的 Particle-in-cell 法」に対する表彰
2019年度	9月	Russian Supercomputing Days 2019 Best Research Poster Award	椋木 大地 研究員(大規模並列数値計算技術研究チーム)	国際会議 Russian Supercomputing Days 2019 の研究ポスターセッションにおけるベストポスター賞
	10月	ドコモ・モバイル・サイエンス賞 社会科学部門 優秀賞	村瀬 洋介 研究員(離散事象シミュレーション研究チーム)	国家スケールの携帯電話や SNS の通信記録に基づいた社会ネットワークの理論モデルの構築等
	11月	Graph Golf 2019 で2年連続ダブル受賞	中尾 昌広 研究員(アーキテクチャ開発チーム)	未来のスーパーコンピュータのネットワークプロジを提案する競技会「Graph Golf」において2部門で1位

付録表 3. 研究センターの受賞歴