

第7章

スーパーコンピュータの活用とポスト「京」

《計算科学研究機構》

スーパーコンピュータとそれを駆使して行われる計算科学は、理論、実験と並び、現代の科学技術の発展にとって不可欠なものになっている。宇宙と素粒子の研究、物質の量子相の探求、生命現象の解明などの基礎科学はもちろんのこと、地球温暖化の科学的予測、地震や津波、台風や集中豪雨の予測による被害軽減、遺伝子治療の基礎となるゲノム解析、タンパク質の解析による新薬候補物質の発見、新しいデバイスや材料のデザイン、自動車の衝突シミュレーションやジェットエンジンのデザインなど、私たちの生活に直結する最先端の科学・技術に至るまで、重要な役割を果たしている。また、最近では、あらゆる種類のビッグデータを直接分析して将来や傾向を予測する技術・方法が大きな発展を遂げつつあり、ここにおいても大規模計算は欠くことのできない要素となっている。

第1節 スーパーコンピュータ「京」の開発

スーパーコンピュータと計算科学

わが国では、1980（昭和55）年代からスーパーコンピュータの開発と、それによる科学技術の推進が行われてきた。代表的なプロジェクトとして、数値風洞（航空宇宙技術研究所 1993年）、CP-PACS（筑波大学計算物理学研究センター 1996年）、地球シミュレータ（海洋研究開発機構地球シミュレータセンター 2002年）がある。

これらのプロジェクトの成功を受けて、2006年に開始されたのが次世代スーパーコンピュータ・プロジェクト（以下「次世代スパコンプロジェクト」）である。このプロジェクトでは、理化学研究所が開発主体となって「次世代スーパーコンピュータ」の開発が進められ、2012年6月に完成して「京」と名付けられた。

「次世代スパコンプロジェクト」では、「京」を開発・運用するだけでなく、同時に計算科学技術の世界的研究教育拠点（COE）を形成することも目標とされた。この目的に沿って2010年7月に設置されたのが、理研計算科学研究機構である。「京」の運用主体として、その能力を最大限に活用する基盤を提供するとともに、世界最先端の成果の実現を目指して、研究開発を進める任務を持っている（図1）。



図1 理研計算科学研究機構

「次世代スーパーコンピュータ・プロジェクト」の開始

スーパーコンピュータ「京」の開発構想は、2005年に始まる。文部科学省は、「国として戦略的に推進すべき基幹技術について（2004年12月）」や、科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会情報科学技術委員会などによる提言に基づき、2005年8月に「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトの予算要求を行った。これが、「京」開発プロジェクト、および、その次世代スパコンプロジェクトの一環として設立された計算科学研究機構の出発点である。

その開発主体については、機関の意志、スーパーコンピュータの開発実績、多様な研究者への研究環境提供能力、大型プロジェクトの実行実績および実施体制、スーパーコンピュータユーザとしての実績やベンダーとの良好な関係、広範なアプリケーションに対する知見・利用実績の観点から評価が行われた。その結果、2005年10月、科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会情報科学技術委員会による「京速計算機システムの開発主体に関する提言書」を踏まえ、文部科学省は理研を開発主体に選定した。

理研は、これを受けて、2006年1月「次世代スーパーコンピュータ開発実施本部」を設置した。本部長は野依良治（理研理事長）、プロジェクトリーダーは渡辺貞であり、組織は開発グループと企画調整グループからなるものであった。

次世代スパコンプロジェクト開始当時の研究開発目標は、スーパーコンピューティングにおいて、わが国が世界をリードし科学技術や産業の発展を牽引し続けるため、以下とすることとされた。

- (1)スーパーコンピュータを最大限利活用するためのソフトウェア等の開発・普及
- (2)世界最先端・最高性能の汎用京速（京速=10ペタFLOPS〈1秒間に1京回計算〉）計算機の開発・整備
- (3)上記(2)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「先端計算科学技術センター（仮称）」の形成

第3期科学技術基本計画における位置付けと「共用法」

次世代スーパーコンピュータは、2006年3月に閣議決定された第3期科学技術基本計画において、「国家的な大規模プロジェクトとして基本計画期間中に集中的に投資すべき基幹技術」として、「宇宙輸送システム」「海洋地球観測探査システム」「高速増殖炉サイクル技術」「X線自由電子レーザー」と並び、位置付けられた。

国は、国や関係する研究機関が設置する研究施設のうち、重複して設置することが多額の経費を要するため適当でないと認められる大規模なもので、かつ先端的な科学技術の分野において比類の無い性能を有し、科学技術の広範な分野における多様な研究等に活用されることにより、その価値が最大限に発揮されるものについて、広く研究者等の利用に供するため、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」（1994年6月施行、2006年7月改正）（以下「共用法」とい

う。)を制定している。次世代スーパーコンピュータは、この共用法に基づく共用施設であり、国の基本方針のもと、理研が設置者・運用実施主体となった。

概念設計・詳細設計と構成の見直し

次世代スーパーコンピュータの開発は2006年度から始まった。理研は、2006年4月より国内の産業界、大学、および研究機関と共同研究契約を締結し、次世代スーパーコンピュータ・システムに関する研究を実施した。それを踏まえ、2006年9月から概念設計が開始された。

概念設計では、目標性能を達成するために、プロセッサ、メモリ、システム内のネットワークなどのハードウェア構成、さらに、それに必要なソフトウェア構成について、具体的な仕様の検討が行われた。またそれらの構成については、理研のアプリケーション検討部会で選択された複数のベンチマークテストを用いて、その性能を予測することになった。以上の検討の結果、二つのシステム構成案について検討することとなり、1案を富士通株式会社（以下、富士通）、別の1案を日本電気株式会社（以下、日本電気）と株式会社日立製作所（以下、日立製作所）が協力して実施することになった。

2007年4月にはシステム構成案が取りまとめられ、文部科学省の評価、および総合科学技術会議による評価を経て、9月にシステム構成が決定された。そのポイントは以下のとおりである。

- スカラ部とベクトル部を持つ複合システムでLINPACK性能10ペタFLOPSを実現
- 理研、メーカー3社（富士通、日本電気、日立製作所）で共同開発
- 詳細設計を本格化させ、2012年完成を目指す

この内容は、理研および3社による4者共同のプレスリリースとして発表された。

2007年後半から2009年にかけて、複合システム構成案に沿って詳細設計が進

		平成18年度 (2006)	平成19年度 (2007)	平成20年度 (2008)	平成21年度 (2009)	平成22年度 (2010)	平成23年度 (2011)	平成24年度 (2012)
システム		概念設計		詳細設計		試作・評価・製造		性能チューニング
ソフトウェア (グラフィック アプリケーション ソフトウェア)	次世代ナノ統合 シミュレーション	開発・制作・評価					実証	
	次世代生命体統合 シミュレーション	開発・制作・評価					実証	
施設	計算機棟		設計	建設				
	研究棟		設計	建設				

図2 当初のシステム開発スケジュール（2009年）

められた。2009年5月にベクトル部の開発を担当していた日本電気が、製造段階への不参加を表明したことにより、複合システムの実現が困難な状況となった。理研では、スカラ部のみで目標性能が達成できるかどうかの検討が行われた。その見込みが得られたことから、当初目標どおり、LINPACK性能10ペタFLOPSの達成と、2012年の完成と共用開始のスケジュール実現を目指すこととし、スカラ型単独の構成とした。

スカラ型単独となった次世代スーパーコンピュータには、45nm半導体プロセスを用いた、当時で世界最高速（128ギガFLOPS）のCPUを採用し、ノード間ネットワークは、広帯域な通信経路を持つ直接結合網とした。このシステム構成により、低消費電力かつ大規模な並列計算機システムの構築が可能となった（図2）。

神戸立地と施設建設

次世代スーパーコンピュータ施設を設置する立地地点を客観的・科学的な観点から検討するため、次世代スーパーコンピュータ開発戦略委員会（委員長：坂田東一理研理事）に外部有識者からなる「立地検討部会」（部会長：黒川清内閣特別顧問）を設置し、2006年7月から15の候補地について評価を実施した。立地検討部会が3月に取りまとめた「次世代スーパーコンピュータ施設立地評価報告書」を踏まえ、神戸または仙台のいずれかを立地地点とすることとして総合的に評価、検討を行い、最終的に神戸（ポートアイランド〈第2期〉内）を次世代スーパーコンピュータ施設の立地地点とすることを決定した。



図3 完成間近の次世代スーパーコンピュータ施設
(2010年)

次世代スーパーコンピュータ施設は、計算機棟、研究棟、熱源機械棟、特高施設棟の4棟で構成されている。計算機棟は、巨大なスーパーコンピュータや空調機械などを効率よく収容するために、およそ60m×50mに及ぶ無柱の大空間として作られた。大空間はトラス柱やメガトラス梁などで設計され、鉄骨部材は直接、基礎部の免震装置と接合させることから、施工には非常に高い精度が要求された。そこでトラス柱やメガトラス梁鉄骨を地組みして、完成に近い状態に仕上げる「大ブロック化」で対応した。建物は、2010年5月に竣工した（図3）。

事業仕分けとHPCI計画への転換

2009年夏の衆議院議員総選挙により民主党が与党になった。11月には、行政刷新会議により、政府の事業についての事業仕分けによる見直しが行われた。事業仕分け第1弾3日目において、文部科学省の次世代スーパーコンピュータ開発事業が取り上げられ、「予算計上の見送りに限りなく近い縮減」と判定された。その理由には、「今後の700億円以上の投資に見合う効果検証が必要」「日本電気と日立製作所が今年5月に撤退し、大幅なシステムの仕様構成を変更しており見通しが不透明」「海外との競争を急ぎスケジュールに無理がある」などが上げら

れた。

しかしその後、ノーベル賞を受賞した科学者や、スーパーコンピュータを利用する研究者などを中心に、この事業仕分けの結果に対する反対意見が相次いだ。文部科学省に寄せられた意見においても、事業仕分けの結果に対する反対意見が多かった。総合科学技術会議においては、「10ペタFLOPS級の目標は達成できるものと評価されており確実に推進すべき」「国民の十分な理解を得ることが重要」といった見解が出された。その後、行政刷新会議での意見を踏まえ、プロジェクトの見直しが行われた。最終的に、4大臣（財務大臣、行政刷新大臣、国家戦略担当大臣、文部科学大臣）が「計画を変更した上での予算案への計上を認める」との結論に達した。合意の前提となった変更の内容は、以下であった。

- (1)スパコン開発側（供給者）視点から利用者側視点へ転換する。
- (2)ナンバーワンの性能を引き続き目指しつつ、多様なユーザのニーズに応える「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築（HPCI）」を目指す。
- (3)次世代スーパーコンピュータの開発スケジュールを変更（10ペタFLOPS達成時期を2011年11月から2012年6月とする）。

この変更を受けて、「次世代スーパーコンピュータ計画」は「HPCI計画」へと再編され、次の具体的目標が設定された。

- (1)2012年6月までにLINPACK性能で10ペタFLOPSを達成する次世代スーパーコンピュータを開発する。
- (2)ユーザ等からなるコンソーシアムを形成し、この主導により、2012年11月を目処に次世代スーパーコンピュータ、国内の主要スーパーコンピュータ、ストレージを用いた高度なコンピューティング環境を実現するインフラ（HPCI）を構築し、運用を開始する。
- (3)HPCIを用いた画期的な研究成果の創出を図る。
- (4)次世代スーパーコンピュータ施設および計算科学技術を先導する主要分野の中核的な機関において研究教育拠点を整備し、連携体制を構築する。

国は「HPCI計画」を推進するために「HPCI計画推進委員会」（主査：土居範久中央大学研究開発機構教授）を2010年8月に設置した。また、9月には、HPCIの構築を主導するHPCI準備段階コンソーシアムが立ち上げられ、HPCI並びにコンソーシアムの在り方について検討が行われた。その結果は、「HPCIとその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて—最終報告—」（2012年1月）にまとめられ、HPCI計画推進委員会に報告了承された。同報告には、コンソーシアムの理念と活動が明記されると共に、HPCIシステムの計算資源、その共通運用並びに課題選定の仕組み、産業利用の促進、利用者支援等についての具体策が記載され、以後、HPCIの構築はこの報告書に沿って進められた。2012年度には一般社団法人HPCIコンソーシアムが正式に発足した。2012年9月に、「京」の共用が開始されると同時に、HPCIの運用が始まった。計算科学研究機構は、HPCIコンソーシアムの中核機関として、わ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いる。

HPCI戦略プログラム

スーパーコンピュータ「京」の幅広い分野における利活用を目指す準備は2009年から行われ、HPCI計画の下で「HPCI戦略プログラム」となり、2010年度の準備研究を経て、2011年4月から本格開始された。同プログラムでは国により五つの戦略分野が選定され、「京」の戦略的利用によって科学技術上のブレークスルーを実現すると共に、将来にわたり各分野の計算科学技術を支える全国的な体制の構築が目標とされた（図4）。

戦略分野と戦略機関	
<戦略分野>	<戦略機関>
分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤 ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測を行う。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。	・理化学研究所
分野2 新物質・エネルギー創成 物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。	・東京大学物性研究所(代表) ・分子科学研究所 ・東北大学金属材料研究所
分野3 防災・減災に資する地球変動予測 高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。	・海洋研究開発機構
分野4 次世代ものづくり 先端的要素技術の創成～組合せ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。	・東京大学生産技術研究所(代表) ・宇宙航空研究開発機構 ・日本原子力研究開発機構
分野5 物質と宇宙の起源と構造 物質の究極的微細構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。	・筑波大学(代表) ・高エネルギー加速器研究機構 ・国立天文台

図4 HPCI戦略プログラムの5分野および戦略機関

計算科学研究機構の設立

計算科学研究機構は、2010年7月に平尾公彦を機構長として発足した。発足当初、計算科学研究機構の任務は、スーパーコンピュータ「京」の運用と、国際的な計算科学の研究拠点の形成であった。その後、「京」の後継機の開発と利活用においても主要な役割を果たすこととなった。

愛称の一般公募

「次世代スーパーコンピュータ」システムに親しみを持ってもらえるよう、愛称を一般公募した。2010年4月から5月までの募集期間に1979件の応募があった。同名重複等を除いた純粋な候補数1529件について、厳正なる選考を行い、愛称は「京」に決定した。

選考理由は、「京」が開発目標性能の10ペタを表す万進法の単位で、ほかの科学技術分野の名称・愛称と重複が無いこと、漢字一文字とシンプルで分かりやすいこと、外国人も発音しやすいこと、日本人は漢字に意味を込め、語呂や響きを大切にすること、また「京」はもともと大きな門を表し、「計算科学の新たな門」にもつながること、などであった。

同時に、2010年の10月には、「京」の愛称に沿ったロゴマークを、書道家の武田双雲氏に依頼して制作していただいた。日本の科学技術を支える「京」の力強さが表現されている（図5）。

スーパーコンピュータ「京」の完成

「京」の製造は2010（平成22）年8月から開始され、2010年秋からは計算機棟への搬入が始まった。順次据え付けおよび調整が進められ、2011年3月末までに、アプリケーションソフトウェア開発者自らが「京」の一部を用いてプログラムを開発、実証できる試験利用環境が暫定的に整備された。早期の成果創出を目指すため国によって選定されていたグランドチャレンジプログラムやHPCI戦略プログラムの実施機関に対して、整備された範囲内で限定的に試験利用環境の提供が開始された。

2011年8月末には予定の864筐体全ての搬入・据え付けが完了し、「京」は、2012年6月29日に最終的な動作確認試験を終えて完成した。その後、運用環境設定や、調整運転、ユーザ登録など共用に供するための環境整備を、一部先行利用を継続しながら実施し、9月末からの共用開始に備えた（図6）。



図5 愛称「京」のロゴマーク

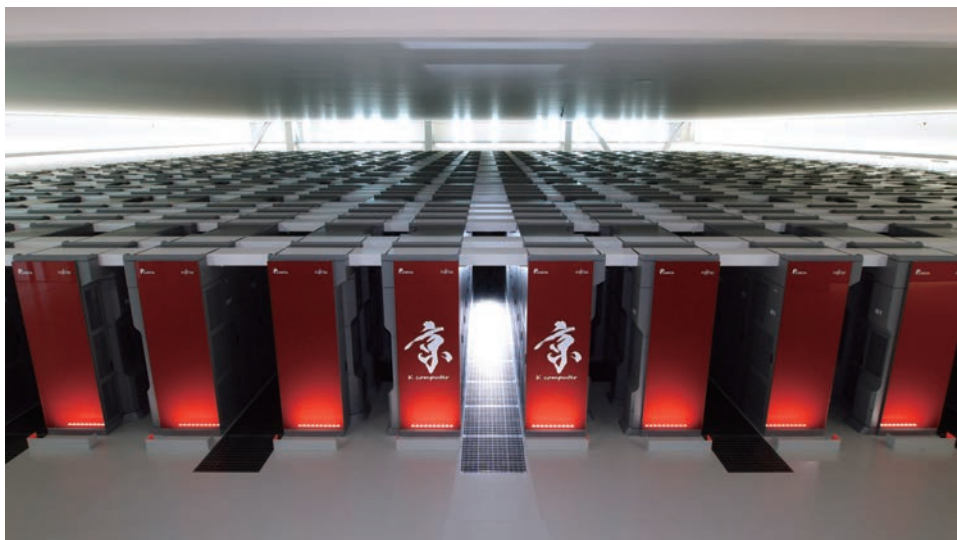


図6 スーパーコンピュータ「京」全景

「京」は、共用法に基づく共用施設である。そのような施設に関する利用者の選定や利用支援などの利用促進業務については、登録を受けた第三者機関に行わせることで、利用者に対する公正性・透明性を確保する仕組みとなっている。この登録を受けた第三者機関は登録施設利用促進機関とよばれ、2011年9月、高度情報科学技術研究機構（RIST）が登録された。

世界トップの性能の達成

2011年6月、ドイツ・ハンブルクで開催された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）に関する国際会議ISC11にて発表された第37回TOP500リストにおいて、「京」はスーパーコンピュータ性能ランキング第1位

を獲得した。その当時の「京」は、まだ整備途中段階のもので、672筐体（CPU数6万8544個）の構成での結果であったが、LINPACK性能ベンチマークで、世界最高性能の8.162ペタFLOPSを達成した。また、実行効率は93.0%と高水準の記録を達成した。日本のスーパーコンピュータがTOP500リストで第1位となるのは、2004年6月の地球シミュレータ以来であった（図7）。



図7 2011年6月第37回TOP500第1位の共同記者会見をする野依理事長

さらに、5カ月後の2011年11月、米国ワシントン州シアトルで開催されたハイパフォーマンス・コンピューティングに関する国際会議SC11 (International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis) において公開された第38回TOP500リストにおいて、「京」は世界最高速と認定され、2011年6月の第37回に続き第1位を獲得した。この時TOP500リストに登録した「京」のシステムは、864筐体（CPU数8万8128個）の構成で、LINPACK性能は10.51ペタFLOPS、実行効率は93.2%を記録した（図8）。



図8 2011年11月第38回TOP500第1位を受領する渡辺プロジェクトリーダー

「京」は、スパコンの総合的な性能を評価するHPCチャレンジベンチマークの実測結果においても、2011年「HPCチャレンジ賞」の4部門全てで第1位を獲得し、これにより、「京」が汎用スパコンとしての総合的な性能においても高い評価を得た。

加えて、筑波大学、東京大学、富士通と理研の共同研究により「京」を用いた研究成果が、ゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞した。同賞は、並列計算機を実用的な科学技術計算に応用し、科学的成果を含め優れた成果を出したグループに与えられる。受賞の対象となった成果は、次世代半導体の基幹材料として注目

されているシリコンナノワイヤ材料の電子状態を計算したものであった。現実の材料のサイズに近い10万原子規模（直径20nm、長さ6nm）のナノワイヤの電子状態について、計算性能を確認するための量子力学的計算を行い、実効性能3.08ペタフロップス（実行効率約43.6%）を達成した。また、1万個から4万個の原子規模からなるシリコンナノワイヤについて電子状態を詳細に計算した結果、断面の形状によって電子輸送特性が変化することも明らかにした（表1）。

表1 スーパーコンピュータ「京」開発年表

スーパーコンピュータ「京」開発に関わる主な出来事	
2005年4月	文部科学省が「将来のスーパーコンピューティングのための要素技術の研究開発プロジェクト」開始
2005年8月	文部科学省が「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトの提案（概算要求）
2005年10月	文部科学省が理研を開発主体として選定
2006年1月	理研が次世代スーパーコンピュータ開発実施本部設置
2006年3月	第3期科学技術基本計画においてスーパーコンピュータを「国家基幹技術」に位置付け（閣議決定）
2006年7月	共用法改正、理研が設置者となる
2006年9月	概念設計開始、日本電気、日立製作所、富士通が参加
2007年3月	立地地点を神戸に決定
2007年9月	システム構成決定
2009年7月	スカラ部のみの新システム構成を決定
2009年11月	事業仕分け（行政刷新会議）、予算計上の見送りに限りなく近い縮減
2009年12月	プロジェクトの見直し。関係大臣合意によりHPCIプロジェクトの一環として開発継続
2010年5月	施設竣工
2010年7月	計算科学研究機構の設立
2010年7月	愛称が「京」に決定
2010年10月	「京」のロゴマーク決定
2011年3月	システムの一部稼働開始
2011年6月	TOP500で世界一を達成（8.162PF）
2011年11月	TOP500で二期連続世界一を達成（10.51PF）
2011年11月	HPCチャレンジ賞の4部門全てで第1位獲得
2011年11月	ゴードン・ベル賞で最高性能賞受賞
2011年4月	HPCI戦略プログラム 本格実施
2011年9月	高度情報科学技術研究機構が登録施設利用促進機関に決定
2012年6月	システム完成
2012年9月	共用開始

第2節 計算科学研究機構の活動と成果

計算科学研究機構のミッション

計算科学研究機構は、「京」を運用する共用施設であるとともに、わが国の計算科学・高性能計算機科学のCOEの形成を目的に設置された。そのミッションは、以下の3項目にまとめることができる。

- (1)利用者視点に立った共用施設として、わが国のフラッグシップ・スーパーコンピュータシステムを運用
- (2)計算機科学分野と計算科学分野の連携・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を形成
- (3)将来のフラッグシップ・スーパーコンピュータの開発とわが国の計算科学

技術の在り方・将来構想を策定

これらの任務を実現するため、計算科学研究機構は、「京」の運用を担う運用技術部門、計算科学技術の共通基盤的研究および先端の計算科学・計算機科学の研究を行う研究部門、「京」の後継のフラッグシップ・スーパーコンピュータであるポスト「京」を開発するフラッグシップ2020プロジェクト、機構の運営と広報などを担う事務部門から成る（図9）。

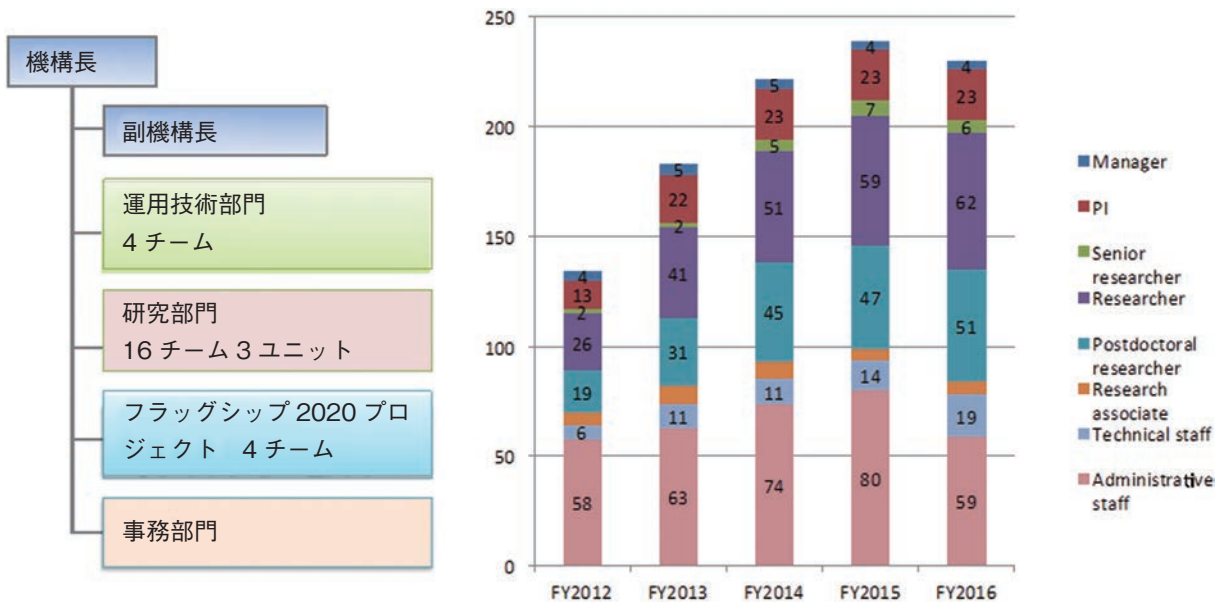


図9 計算科学研究機構組織図および職員数の変遷

計算科学研究機構は、国からの補助金、運営費交付金、県市助成金、それに加えてJSTや科学研究費補助金などの外部資金等、により活動している。この中で最大を占めるのが国からの補助金である。「京」の運営の補助金は、「京」の運用に関わる保守費、光熱水費、通信ネットワーク等の運営費、人件費、および「京」の利用高度化に関わる研究のための資金である。研究部門の研究チームは「京」の利用高度化に関わる研究の補助金で支えられている。地元の兵庫県・神戸市からは「京」を中核とした計算科学の研究教育拠点の形成と計算科学分野の振興のために、研究教育拠点（COE）形成事業（県市助成金）のサポートを受けており、研究の推進に大いに貢献している。さらに、フラッグシップ2020プロジェクトは、ポスト「京」の開発・整備の補助金により推進されている。

スーパーコンピュータ「京」の運用

わが国のフラッグシップスーパーコンピュータシステムである「京」を利用者視点に立って運用することは、計算科学研究機構の主要なミッションの一つである。「京」を中心とする計算機システムの運用、空調・電源・冷却等施設の維持管理・運転、システム高度化・ユーザ利用高度化等は、運用技術部門により行われている。

運用技術部門は4チームから構成されている。「施設運転技術チーム」では、

「京」を安定稼働させるために、電力設備や冷却設備等の運転・維持管理を行うと共に、電源と冷却の設備の観点から、最適化技術の研究開発を行っている。「システム運転技術チーム」では、「京」の運用・維持管理、ユーザ管理、ユーザサポートのほか、「京」の管理運用に関する研究開発を行っている。「ソフトウェア技術チーム」では、「京」の性能を最大限に引き出すために、アプリケーションのチューニングおよび、そのためのシステム作りを行っている。また、「HPCIシステム技術チーム」は、「京」を含むHPCIシステムの運用の中心になって、HPCIシステム構成機関等との技術調整、共用ストレージの運用、並びに研究開発を行っている（表2）。

表2 運用技術部門（部門長 庄司文由）

チーム名 (チームヘッド)	主要な実績
施設運転技術チーム (塚本俊之)	「京」を安定稼働させるための、電力設備や冷却設備等の運転・維持管理を行う。商用電源とCGS電源のコスト最適化、空調最適化によるPUEの改善（2012年度1.447から2015年度1.335）等を実現。
システム運転技術チーム (宇野篤也)	「京」の運用・維持管理、ユーザ管理、ユーザサポートを行う。ジョブ・スケジューリングの改善、グローバル・ファイル・システムの設定、通信ミドルウェアの改善、ユーザジョブの使用電力予想技術の開発等により、「京」の高い利用効率を実現。
ソフトウェア技術チーム (南一生)	システム性能を最大限に引き出すためのアプリケーションの高度化、アプリケーション性能を最大限に引き出すためのシステム作り。NICAM等六つのアプリケーションに対し全系計算で高い効率を達成。ジョブプロファイルから自動的に電力消費量や実行性能を引き出すシステムを開発。
HPCIシステム技術チーム (平川学)	HPCI全体の運用について、HPCIシステム構成機関等との技術調整、共用ストレージの運用を行う。GfarmによるHPCIストレージ運用およびテープアーカイブシステムの構築運用等を実施。

このような努力の結果、「京」は極めて安定に運用されている。毎年の運用時間は8000時間を超え、6億6355万2000ノード時間（8万2944ノード×8000時間）以上の計算資源を提供している。共用開始以降、大規模実行期間（3日/月）を除き、ほとんどの期間で80%前後のジョブ充填率を維持している。また、平均のジョブ充填率は75%以上の高水準であり、予期せぬシステムダウンは2.3%（年に8.4日）と、この規模の大型システムとしては低い。安定稼働に努めるとともに、高いエネルギー効率での運用や温度管理など効率化にも努めている（図10）。



図10 「京」の運用統計

スーパーコンピュータ「京」の共用

スーパーコンピュータ「京」は、広く学術・産業分野向けにその計算資源を提供するため、2012年9月28日から共用を開始した。「京」を中核とするHPCIも同日に運用を開始した。

HPCI戦略プログラムは、選定された五つの戦略分野に対して、「京」の戦略的利用によって科学技術上のブレイクスルーを目指すプロジェクトである。したがって、その実施期間中（2011-2015年度）には優先的に「京」の計算資源が割り当てられた。

一方で、一般利用枠は研究者からの課題申請に基づく利用である。一般課題、若手育成課題、産業利用課題からなる。登録施設利用促進機関である高度情報科学技術研究機構により、選定委員会と課題審査委員会からなるピアレビューの仕組みが運営され、課題の選定と計算資源の割り当てが行われる。

共用が開始された2012年度の利用配分は、HPCI戦略プログラムの利用枠が50%、成果創出・加速枠が5%程度、一般利用枠が30%、そして京調整高度化枠が15%であった。京調整高度化枠は、計算科学研究機構が「京」の高度化利用の研究開発を行うための計算資源である。成果創出・加速枠は機動的に「京」の利用を行い迅速かつ有効な成果を得るための計算資源として設定された。産業利用枠は当初5%程度であったが、年を追って増加し、2016年度には15%程度となっている。また、2015年度でHPCI戦略プログラムが終了し、2016年度からはポスト「京」重点課題の本格実施フェーズが始まったことに伴い、ポスト「京」研究開発に40%程度が配分されている（図11）。

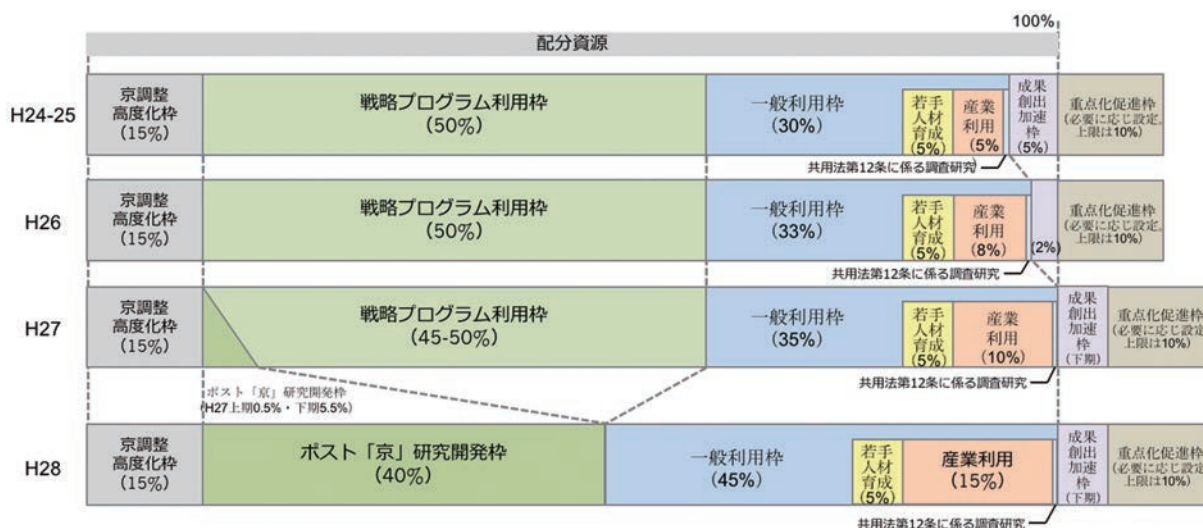


図11 「京」の資源配分とその変遷

スーパーコンピュータ「京」の共用による成果

「京」の利用は前述のとおり、一般利用課題、若手人材育成課題、産業利用課題、そしてHPCI戦略プログラム利用枠（2015年度まで）、重点課題利用枠（2014年度から）に対する課題と多岐にわたる。このような研究の中から、さまざまな成果が創出されている。「京」を使うことにより、初めて可能となった成果を以下

<p>材料・エネルギー</p> <p>リチウムイオン電池 充電時間1/3に 高濃度電解液の動作原理を解明</p> <ul style="list-style-type: none"> リチウムイオン電池の新規電解液について、「京」による分子レベルの解析を行った。従来の1/3以下の急速充電や、5V以上の高圧電下での動作が可能になることが分かった。高性能電池の開発に大きく貢献する。  <p>鉄系高温超伝導状態をスパコン内に再現 電子密度の揺らぎと超伝導の出現が連動—超伝導現象の機構解明へ</p> <p>次世代半導体として注目されているシリコン・ナノワイヤ材料の電子状態計算でゴードン・ベル賞受賞</p>	<p>2014年3月30日 産経新聞 2014年3月27日 日経産業新聞等、多数誌に掲載</p> 
<p>ものづくり</p> <p>大規模空力シミュレーションで自動車開発を加速</p> <ul style="list-style-type: none"> 「京」による大規模数値計算で、今までの風洞実験では難しかった実際の運転状況下でのシミュレーションを実現 <p>流体制御シミュレーションで輸送機器開発を推進</p> <ul style="list-style-type: none"> 「京」を用いて特殊条件下における多パターンの流体制御計算を行い、航空機、船舶をはじめとする輸送機器の性能向上や低騒音化に必要な多数の知見を得た。 	<p>2014年2月3日 産経新聞等、多数誌に掲載</p>   <p>船体表面の過度分布300億グリッドを用いたLES解析</p>
<p>防災・減災</p> <p>超高解像度の気象シミュレーション実現、積乱雲をより正確に</p> <ul style="list-style-type: none"> 「京」では水平格子間隔1km未満の超高解像度の気象シミュレーションが可能となった。積乱雲の詳細な表現により台風予測 <p>地震動、地殻変動、津波を同時にシミュレーション</p> <ul style="list-style-type: none"> 「京」の利用で、地震動、地殻変動、津波をまとめてシミュレーションすることが可能になった。将来的には、大地震に伴う、強震動、地殻変動、津波襲来の総合的な災害予測が期待される。 	<p>2013年10月18日 日経産業新聞に掲載</p>  
<p>ライフサイエンス</p> <p>血流シミュレーション、心臓シミュレーションで医療支援</p> <ul style="list-style-type: none"> 「京」の活用により、2年近くかかっていた細胞内の構造を精密に再現した心臓モデルの1回収縮分の計算が1日のできるようになった。「京」を用いて、直径約100μmの大きさの血管で、赤血球の変形や血小板の粘着などを考慮に入れたシミュレーションを実施した。医療分野へ貢献 <p>高速シミュレーションでIT創薬を支援</p> <ul style="list-style-type: none"> 従来の汎用コンピュータでは、標的タンパク質と薬の候補化合物の結合シミュレーションを高い精度で行うために、20年かかっていた。京の登場でタンパク質と化合物の結合計算が約1週間のできるまでになった。創薬のスピードが加速し、田辺三菱製薬など民間企業の本格的な参入も始まった。 <p>10兆個の結合の世界最大の脳神経シミュレーション</p>	<p>2013年2月3日 産経新聞 2013年9月23日 神戸新聞</p>  <p>血流や心臓の階層統合シミュレーション</p> <p>2013年7月4日 WIRED.jp</p>  <p>タンパク質と化合物の相互作用シミュレーション</p>
<p>宇宙</p> <p>ダークマターの動きを再現した成果でゴードン・ベル賞受賞</p> <ul style="list-style-type: none"> 約2兆個のダークマター粒子の重力計算に成功。「京」全体の約98%を使用し、実行性能5.67ペタFLOPSを達成。ゴードン・ベル賞を受賞した。 <p>世界最高の解像度で太陽の対流層を計算</p> <p>超新星爆発の大規模計算を実現</p> <ul style="list-style-type: none"> 「京」を用いて初めて現実に近い形で超新星爆発を計算。ニュートリノ加熱説を支持する強い証拠を示した。超新星爆発の詳細な研究の進展につなげる。 	<p>2012年11月17日 読売新聞</p>  <p>2014年4月25日 マイナビニュース</p> 

図12 「京」で初めて可能となった成果

に上げる。計算科学研究機構の研究者は、その多くに寄与している（図12）。

材料・エネルギーでは、基礎的な研究から材料開発まで幅広い研究が行われた。鉄系高温超電導の実験相図を第一原理計算で再現することに初めて成功し、さらに鉄系超電導が密度ゆらぎと相分離を伴う現象であることを示して、強相関電子特有の発現機構を特定した。リチウムイオンでは、超高濃度の新型電解液を用いれば、従来の3分の1以下の急速充電や、5V以上の高電圧下での動作が可能になり、高性能なリチウムイオン電池開発に大きく貢献することが示された。

ものづくりでは、高分解能・大規模な自動車空力シミュレーションにより風洞実験に劣らない精度を実現し、さらに、高速運転中の車線変更や横風の影響など、今までの風洞実験では難しかった実際の運転状況下でのシミュレーションが可能となった。また、プラズマアクチュエータ等のマイクロデバイスの流体制御機能について多数のパターンの計算を行い、航空機をはじめとする輸送機器の性能向上や低騒音化に必要な知見が得られた。

防災・減災では、全球雲システム解像モデル（NICAM）を用いた水平格子間隔0.87kmの超高解像度の気象シミュレーションが行われ、積乱雲の詳細な表現可能となった結果、気候・気象分野で長年の懸案であった、個々の雲の表現に必要な解像度や、気象擾乱などの雲の形態の違いが明らかにされた。また、従来は別々に行われていた地震・津波と都市の地震被害をまとめてシミュレーションすることが可能になり、2011年3月の東日本大震災の再現・分析に成功した。このシミュレーションの基盤は地震波動解析であり、開発された超大規模有限要素法は「京」でも優れた性能を発揮し、防災のみならず計算科学の分野でも高い評価を得た。

ライフサイエンスでは、創薬応用において、従来の汎用コンピュータでは20年もかかるため実質不可能であった、標的タンパク質と薬の候補化合物の高精度結合シミュレーションが、「京」の登場によって約1週間で可能となり、創薬のスピードが加速して民間企業の本格的な参入も始まった。また、心臓について、分子レベルから出発して心臓全体をモデル化し、その拍動をシミュレーションすることに世界で初めて成功し、血流全体や血栓症を世界で最も詳細に再現した。医療分野への貢献が期待されている。

基礎科学では、宇宙の進化に重要な役割を果たすダークマターの分子動力学計算において、約2兆個のダークマター粒子の重力計算に成功した。この計算は、「京」全体の約98%を使用し、実効性能5.67ペタFLOPS（1秒間に0.567京回計算）を達成して、ゴードン・ベル賞を受賞した。また、星の最後を彩る超新星爆発のメカニズムは長年の懸案であったが、球対称性を仮定しない現実に近い形での3次元計算を行い、ニュートリノ加熱説を支持する強い証拠を示した。これは超新星爆発の詳細な研究の進展につながる。

計算科学研究機構研究部門の研究活動

計算科学研究機構の研究開発機能を担う研究部門は、計算科学と計算機科学の研究チーム群で構成されている。

計算科学の研究チーム群は、超大規模な並列システムである「京」を使いこなすための高性能計算技術の研究開発、さらには将来の高性能計算技術について研究を行っている。「京」のような大規模並列システムを使いこなすためには、通信や入出力のためのライブラリ、プログラミング、数値計算ライブラリなどさまざまなソフトウェアを工夫し開発しなくてはならない。

既存の入出力を行う並列アプリケーションを「京」で実行すると、数万以上のファイルを同時に利用することがあるため、ファイルの読み書き処理時間が大幅に増える場合がある。「システムソフトウェア研究チーム」では、この課題を解決するための汎用の高性能IOライブラリの開発を行った。また、通信処理の最適化が行われていないため、使用するCPU数を増やしても性能向上しない、あるいは最適化のために記述が複雑化する等の問題点がある。これを解決する、大規模な並列システムを効率的に利用するための高速通信ライブラリ（PRDMA）を、開発した。

「京」での計算では大量の計算結果のデータが生成され、その大量のデータを処理・解析する基盤ソフトウェアが必要である。「プログラム構成モデル研究チーム」では、並列処理ライブラリmapreduceをベースに、「京」で高性能に実行することができる大規模並列データ解析ツールKMapReduceを開発し、実際のアプリケーションで利用されている。

「京」のような数万コアを超える超並列システムにおいては、並列性を十分引き出すための数値計算ライブラリの研究は必須である。「大規模並列数値計算技術研究チーム」では、多くの科学技術計算に必要とされる固有値計算を大規模並列システムで利用可能とする固有値計算ライブラリEigenExaを開発した。

大規模な並列システムである「京」を使うには、並列プログラミングが必須であるが、現在、使われているMPI通信ライブラリによる並列プログラミングは煩雑で、生産性の向上を妨げている。「プログラミング環境研究チーム」では、並列プログラミングを容易にするプログラミング言語XcalableMPを開発した。このプログラミング言語は、プログラミング言語の性能と生産性を競うコンテストであるSC14 HPC class2で受賞するなど高く評価され、現在、普及に向けて活動が行われている。

計算科学の研究においては、大規模なシミュレーションだけでなく、生成された大量の計算結果に対する可視化イメージ生成やデータ抽出・分析手法が、シミュレーション結果の有効活用に直結する。「可視化技術研究開発チーム」では、構造・非構造・粒子データなどのさまざまなデータを扱うことができる、大規模並列可視化ライブラリHIVEを開発した。

「京」を多くのユーザに利用してもらうためには、遠隔地からの簡便な利用やユーザのニーズに合わせた計算資源の提供についての研究も必要である。「利用高度化研究チーム」では、簡便なユーザインタフェースでアプリケーションを実行してくれるようなサービス（計算ポータルシステム）や、京のシステムの一部を、あたかも一人のユーザが占有し利用できるようなための仮想化技術の研究を行った。

将来の高性能計算技術に向けては、以上の「京」での研究を踏まえて、これから必要となる技術について検討を行っている。「プロセッサ研究チーム」では、「京」の低レベルのハードウェア機能を活かしたプロセッサを活用する技術を検討するとともに、将来のプロセッサアーキテクチャの研究を行った。システムソフトウェアに関しては、これからコア数が増えてメニーコアになることを想定し、メニーコアに適したオペレーティングシステムとして、軽量カーネルMcKernelを開発した。プログラミング言語XcalableMPや数値計算ライブラリEigenExaとともに、「京」の後継機であるポスト「京」に向けて開発が進められている。

計算科学の研究チーム群は、方法論を軸として計算科学全般を俯瞰的・横断的に捉えることができるよう組織編成されている。量子系、粒子系、連続系、離散系、複合系といった計算科学分野（系）からなる。

分子軌道法に基づいた分子科学計算ソフトウェアは物質科学、生物科学、エネルギー問題など幅広く利用されている。Gaussianなど既存のプログラムは多いが、必ずしも超並列向けに開発されたものではなく、十分とは言い難い。「量子系分子科学研究チーム」では、他の分子科学計算プログラムでは扱うことのできない大規模分子向け分子計算法、高速計算法、高精度分子計算法の理論とアルゴリズムを研究開発し、それを実装したわが国独自の分子科学計算ソフトウェアNTChemを開発した。一方で、量子多体模型に対するシミュレーション法（量子モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法、厳密対角化法など）は、物性・統計物理学、原子核物理学、素粒子物理学、量子化学、量子情報などの分野に広く利用されている。「量子系物質科学研究チーム」では、量子モンテカルロ法等で現れる基本行列計算の分散メモリを効率的に活用する並列アルゴリズムの開発を行い、2次元DMRG法並列プログラム等の開発を行った。

分子動力学などの粒子法に基づく計算手法は、生物物理のみならず宇宙物理、流体解析、構造解析などさまざまな分野においても広く用いられている。また、構造生物学において、実験データを用いた構造最適化などの用途にも使われている。「粒子系生物物理研究チーム」では、巨大な生体分子を主たるターゲットとして、位相空間を効率よく探索できる新しい拡張アンサンブル法などの手法・アルゴリズムを組み込んだ並列ライブラリGENESISを開発した。「粒子系シミュレータ研究チーム」では、「京」のような大規模並列型スパコンで高性能を実現でき、しかも汎用性に富む粒子法のソフトウェアFDPSを開発した。

モデリング・計算方法の多様化や、現象の統一的理解のためのモデル結合によって、計算方法の組み合わせは急速に増大している。「複合系気候科学研究チーム」では、地球科学を対象に、このような計算方法組み合わせの比較や計算方法の評価を行う必要があることから、気候気象シミュレーションのための並列化基盤ライブラリSCALEを開発した。

計算機の高度化によって、これまで実現できなかった大規模な系や長時間の時間発展を必要とする複雑な現象のシミュレーションが、可能となりつつある。この進歩を活用してより精度の高い結果を得るためには、シミュレーションのような原因から結果を導く方法と、データ解析のような結果から原因を導く方法とを

融合するデータ同化が重要であり、さまざまな分野での応用が期待されている。「データ同化研究チーム」では、シミュレーションと実世界をつなぐデータ同化の研究開発をしており、LETKFとNICAMおよびSCALEを結合することにより、気候気象シミュレーションへのデータ同化システムを開発した。

社会現象・経済予測、感染症伝搬予測、ネットワーク解析等のスパコンによるシミュレーションには、大規模離散事象の分析・予測のための共通基盤的研究開発が必要である。「離散事象シミュレーション研究チーム」では、多次元パラメータ空間でのシミュレーションを実行するためのジョブ管理システムOACISを開発し、神戸地区、日本全体、世界全体等の交通シミュレーションを可能としている。

計算機が高度化するにつれ、より複雑な現象や形状に関する研究課題が増えているが、複雑な現象の計算は、流体・構造・熱・電磁波・化学反応など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。「複雑現象統一的解法研究チーム」では、ものづくりに必要な、流体、熱、構造、音、化学反応等が複合した現象のシミュレーションについて研究し、直交階層メッシュによるソフトウェアCUBEを開発した。

「連続系場の理論研究チーム」は、素粒子の記述等で重要な連続系場の理論の計算法の研究を中心に、大規模一次方程式の逐次解法を研究している。またモンテカルロ法は、量子力学が重要な役割を果たす計算科学の幅広い分野において、必須のアルゴリズムであるが、「負の重みの問題」を持つ物理システムを、効率的に大規模並列シミュレーションすることが困難であり、その解決方法について研究している。

以上のチームのほかに、県市の助成金により、「総合防災・減災研究ユニット」では、地震・津波等による自然災害の大規模シミュレーションの研究、「計算構造生物学研究ユニット」では、実験データから生体分子構造のモデル構築する手法の開発と創薬への応用についての研究を行っている。

計算科学の研究チームは、計算機科学のチームが開発したソフトウェアを利用し、計算機科学の研究チームは、そのフィードバックを受けて改善・改良するなど、両分野にまたがる融合的な研究が行われている。たとえば、局所アンサンブル変換カルマンフィルターLETKFは、MapReduceデータ処理ツールKMRを用いて実装されている。また、気象シミュレーション用ライブラリSCALEの一部を並列プログラミング言語XcalableMPで開発し、隣接通信ソフトウェアPRDMAを用いて実装が試みられている。分子科学計算ソフトウェアNTChemでは、高性能固有値計算ライブラリEigenExaを利用している。

計算科学の成果

計算科学の研究チームでは、共通基盤的な研究だけでなく、自ら開発したソフトウェアを用いて、計算科学での実証研究も行われている。

素粒子・宇宙分野では、ビッグバン直後の宇宙初期に高温のクォークガスからハドロンガスへと相転移する状況が、クォークの質量や種類に応じてどのように

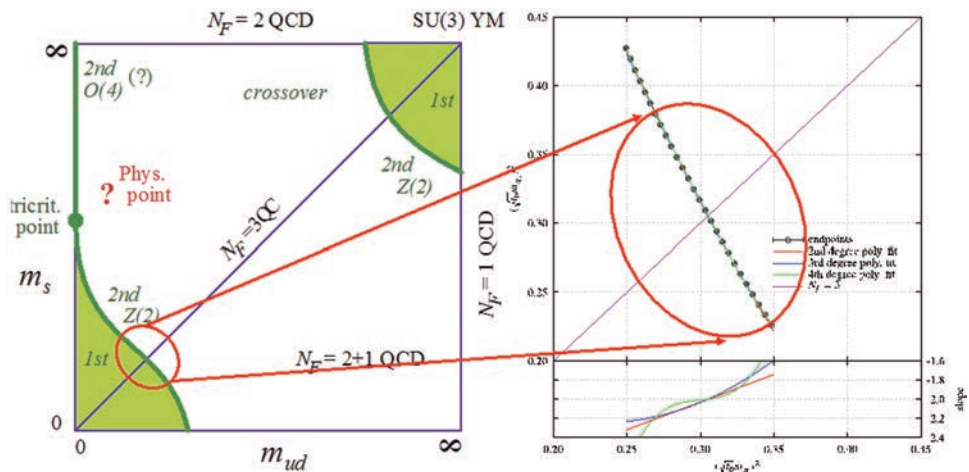


図13 QCD高温相転移のクォーク質量依存性

変わるのか、研究が進められた (図13)。

ダークマターシミュレーションでは、筑波大学計算科学研究センターと協力して、10万並列規模まで高効率で動作するTreePM法コードを開発し、約2兆個のダークマター粒子のシミュレーションが現実的に可能であることを示した (2012年度ゴードン・ベル賞)。さらに、「京」のような大規模並列型スパコンで高性能を実現でき、しかも汎用性に富む粒子法のソフトウェア・フレームワークFDPSを開発し、さまざまな応用が期待されている (図14)。

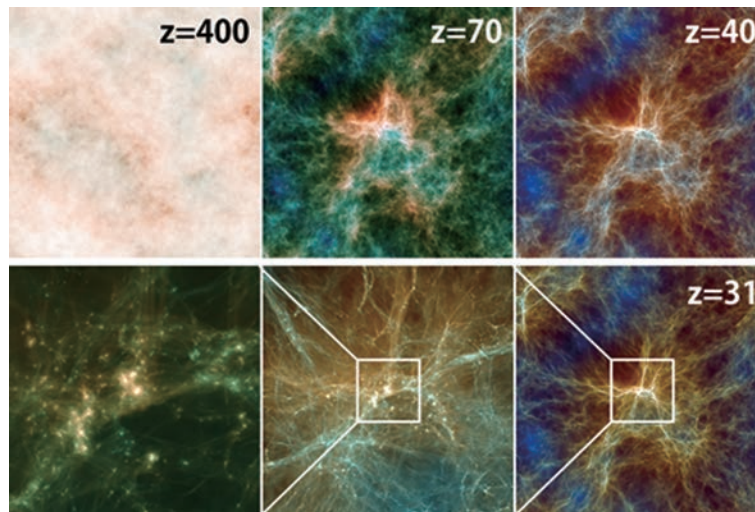


図14 約2兆個のダークマター粒子による「京」全系シミュレーション

物質・材料研究では、新材料として注目されているC₆₀フラーレン分子と高次フラーレン分子 (C₇₀、C₇₆、C₇₈、C₈₄、C₉₀、C₉₆、C₁₈₀、C₂₄₀とC₃₂₀) の合計10種類の大規模分子系の生成熱がNTChem用いて計算された。この計算により、フラーレン分子を大きくすることによる物性の変化を実験に先んじて理論予測することに成功し、新材料として利用するための計算基盤が作られた (図15)。

2次元ディラック (Dirac) 電子系の金属絶縁体相転移に関して、「京」による世界最大規模の計算により、スピン液体状態はこの系では存在しないこと、また

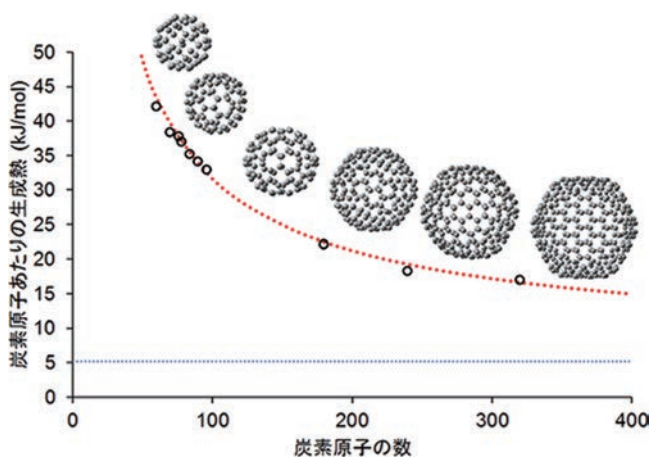


図15 高次フラレン分子の生成熱の炭素原子数依存性

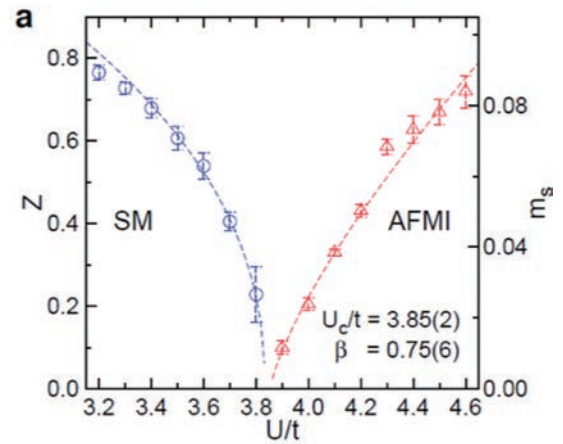


図16 2次元ディラック電子系の金属絶縁体相転移

臨界指数の計算から、この量子相転移が新しいユニバーサリティクラスに属することが発見された (図16)。

超並列向きに開発された分子動力学ソフトウェアGENESISは生命科学の研究への応用が進んでいる。特に、世界最小のバクテリアであるマイコプラズマ・ジェニタリアの細胞質全体の分子モデルを構築し、GENESISを用いたシミュレーションが実行され、混雑した環境化でのタンパク質構造の安定性等や代謝物がタンパク質に与える影響について新たな知見を提供している (図17)。

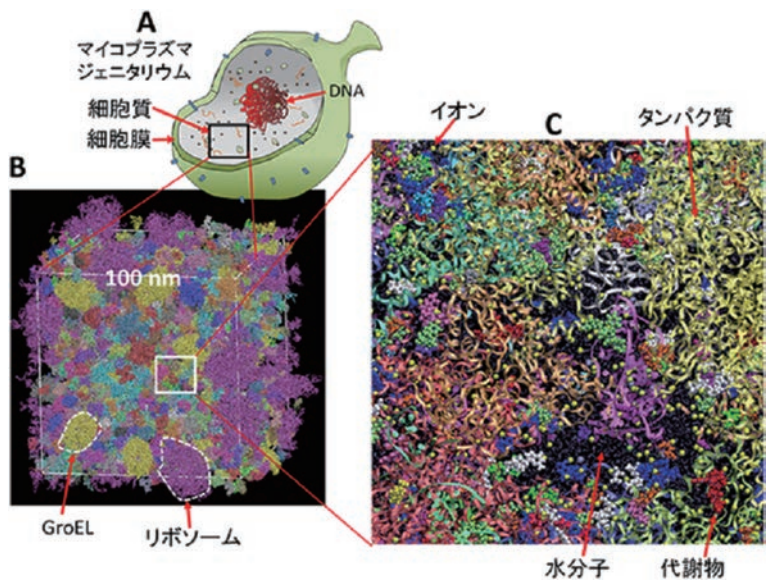


図17 細胞質内のタンパク質分子動力学シミュレーション

電子顕微鏡や自由電子レーザー

SACLAによる生体分子の構造とダイナミックスの解析は大きな進歩を遂げつつある。自由電子レーザーによる回折像から直接生体分子の立体構造を区別する方法等が開発されている (図18)。

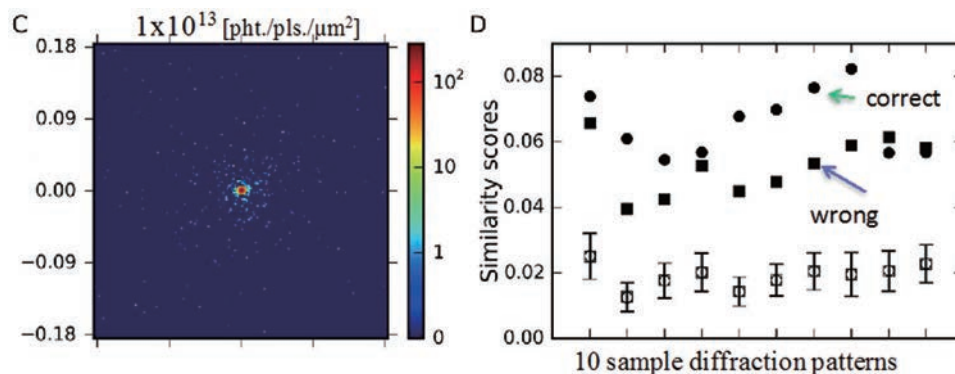


図18 SACLAによるリボソームの立体構造解析

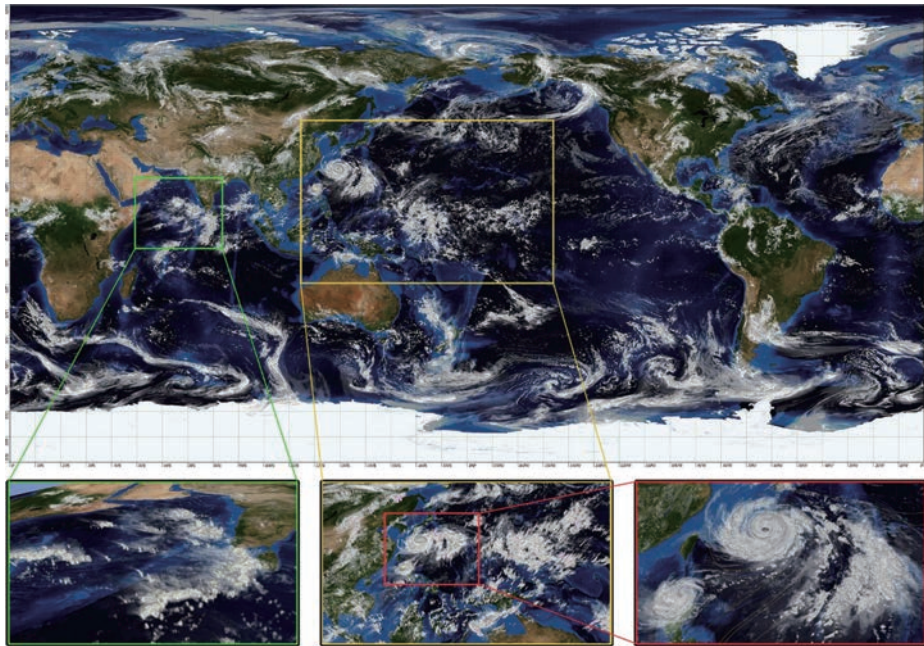


図19 NICAM0.87km全球シミュレーション

気候モデルNICAMは「京」に最適化されると同時に、「京」を用いて、世界で初めて1kmを切る水平分解能0.87km・垂直96層の大気大循環シミュレーションを実現した。この結果を用いて積乱雲対流の統計的性質を分析し、収束には2km以下の水平解像度が必要なことを示すと共に、さらに台風や熱帯雲大規模擾乱、中緯度前線帯に分けて詳細な分析を行っている（図19）。

データ同化研究は最近急速に進展している。データ同化エンジンである局所カルマンフィルターLETKFをSCALEと組み合わせ、これに最新鋭のフェーズドアレイ気象レーダの観測データの同化を行うことにより、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ている（図20）。

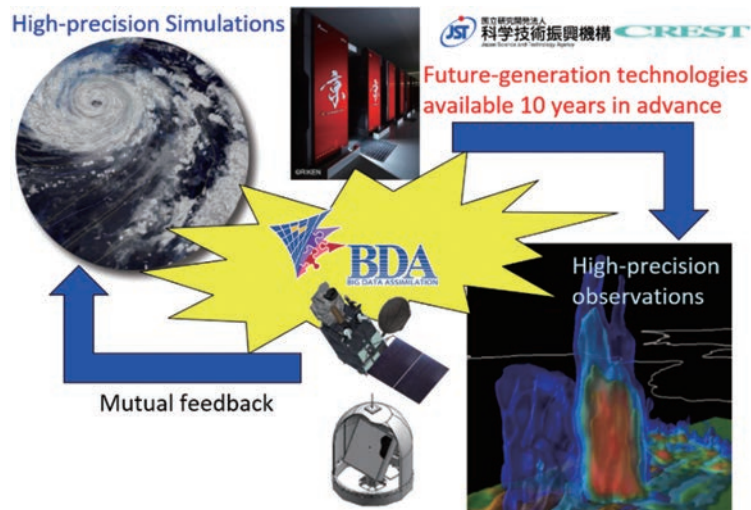


図20 データ同化によるゲリラ豪雨予測

空力シミュレーションは自動車設計に欠かせない道具となっている。階層構造格子を用いた複雑流体コードCUBEにより、解像度1mm以下のメッシュの高速自動生成や、高速道路でのレーン変更時の空力解析など、風洞実験を超えたシミュレーションが実現されている（図21）。



図21 高解像度の6次元実環境空力シミュレーション

社会・経済現象のシミュレーションは着実に進展している。神戸市の実データに基づく交通流シミュレータが開発され、交通流のシミュレーションが実現しただけでなく、交通流の多変量解析によりその特徴を明らかにする研究が進んでいる（図22）。

都市の地震被害予測に関しては、地盤や構造物の物理モデルについて公開データ等を使って自動生成し、地盤と建物の揺れから統合的に被害を予測するシステムが開発された。東京や神戸等の実都市に適用されている。計算に使われる非線形有限要素法は高い並列化効率を達成している（図23）（表3）。

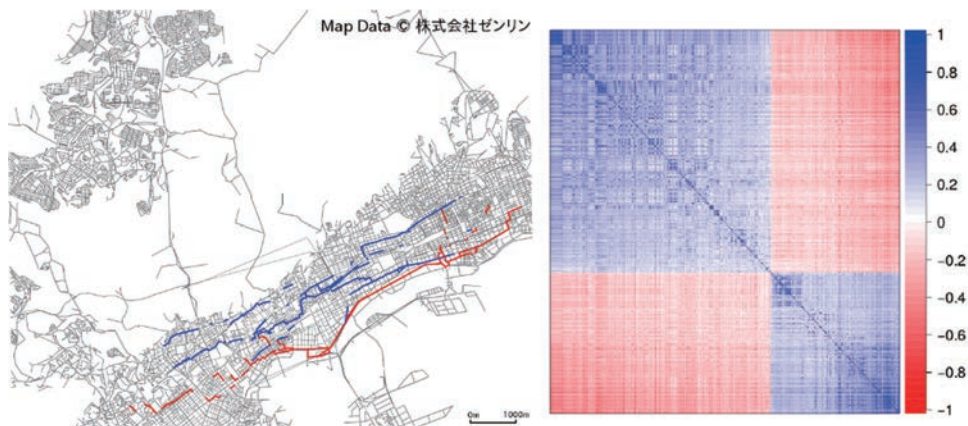


図22 神戸市の交通シミュレーション

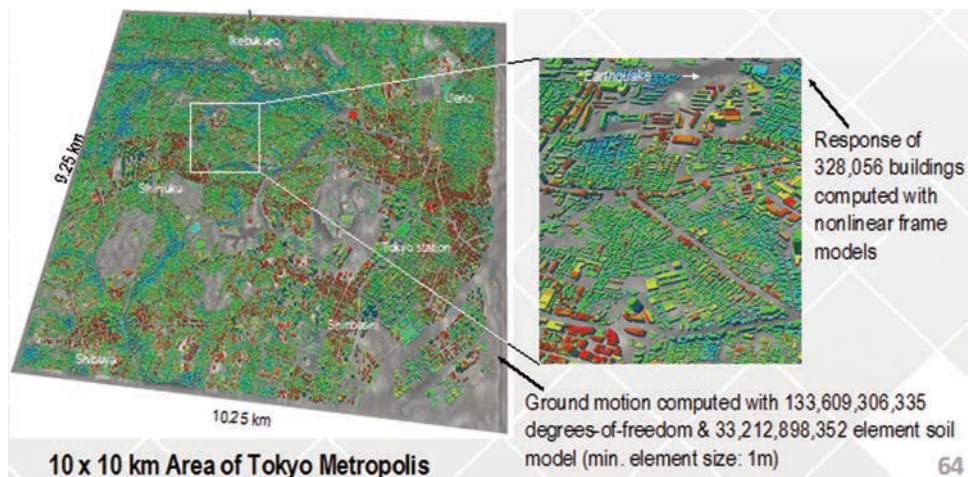


図23 地震都市災害統合シミュレーション

表3 研究部門（部門長 宇川彰）

	チーム名 (チームリーダー)	主要な実績
計算機科学チーム	システムソフトウェア研究チーム (石川 裕)	スーパーコンピュータ向けシステムソフトの研究開発（OS、通信およびI/Oライブラリ等）。軽量OSカーネル（MC Kernel）、高速通信ライブラリ（PRDMA）等を開発。MC Kernelはポスト「京」に実装予定。
	プログラミング環境研究チーム (佐藤三久)	超並列システム向け言語の研究開発。指示文ベースの言語XscalableMP等を開発。ポスト「京」で実装予定。XscalableMPは、言語の性能と生産性を競うHPC Challenge class 2において一位獲得（2013、2014）。
	プロセッサ研究チーム (泰地真弘人)	性能向上のためのプロセッサハードウェアデザインの研究開発。
	プログラム構成モデル研究チーム (丸山直哉)	「京」の性能を活用できるアプリケーション作りを支援する研究開発。大規模並列データ解析ツールKMapReduceの開発等。KMapReduceは気候気象アンサンブルシミュレーションプログラムNICAM-LETKFにおいて利用。Graph500一位（2014、2015、2016）。
	利用高度化研究チーム (前田俊行)	幅広いユーザが「京」を利用可能とするポータルの研究開発。プログラムの検証ポータルおよび「京」の仮想化等の基盤技術を研究開発。
	可視化技術研究チーム (小野謙二)	大規模並列可視化技術の研究開発。可視化アプリHIVEを開発し公開。HIVEではデータモデルとして構造・非構造・粒子系のデータが扱え、京の全系での高品位可視化が可能。性能可視化とデータ分析技術も統合。
	大規模並列数値計算技術研究チーム (今村俊幸)	高速高精度な並列数値アルゴリズムとライブラリの研究開発。固有値計算ライブラリEigenExa等を開発公開。NTChem、LETKF、RSDFT等複数の並列アプリケーションにて利用。
計算科学チーム	連続系場の理論研究チーム (蔵増嘉伸)	素粒子の記述等で重要な連続系場の理論の計算法を研究開発。大規模一次方程式の逐次解法や負符号問題を研究開発し公開。
	粒子系シミュレータ研究チーム (牧野淳一郎)	「京」のような大規模並列型スパコンで高性能を実現でき、しかも汎用性に富む粒子法のソフトウェア開発。このような目標を実現する枠組みFDPSを開発公開。
	量子系物質科学研究チーム (柚木清司)	強相関電子系を中心とする物質の解明のために計算法等を研究開発。2次元DMRG法並列プログラム等を開発公開。これらを用いて、2次元金属絶縁体の新たな量子ユニバーサリティクラスを発見するなどの成果。
	量子系分子科学研究チーム (中嶋隆人)	「次世代理論分子科学」の構築を目標として、さまざまな環境にある複雑で大きな分子を精度よく扱える分子理論と計算手法を研究開発。これを実現する並列ライブラリNTChemを開発公開。高い並列化性能を実現し、既に多数のユーザに利用されている。
	粒子系生物物理研究チーム (杉田有治)	生体分子シミュレーションを高速に行うための計算法とプログラムの研究開発。これを実現する並列ライブラリGENESISを開発公開。1億原子シミュレーションを実現し、細胞内の混雑環境でのタンパク質動力学を開拓。
	複合系気候科学研究チーム (富田浩文)	より正確な気候気象シミュレーションのための高度な気候モデルの研究開発。気候気象シミュレーションのための並列化基盤ライブラリSCALEを開発公開。1km以下のメッシュでの全球シミュレーションを実現。
	データ同化研究チーム (三好建正)	シミュレーションと実世界をつなぐデータ同化の研究開発。気候気象シミュレーションへのデータ同化システムをLETKFとNICAMおよびSCALEと結合することにより開発。1万ケースの全球アンサンブルシミュレーションによる1万kmを超える誤差相関の発見、ゲリラ豪雨予測の開拓等。
	離散事象シミュレーション研究チーム (伊藤伸泰)	社会事象等離散事象のシミュレーションの研究開発。多次元パラメータ空間でのシミュレーションを実行するためのジョブ管理システムOACISを開発公開。神戸地区、日本全体、世界全体等の交通シミュレーションを実行。
	複雑現象統一的解法研究チーム (坪倉誠)	ものづくりに必要な、流体、熱、構造、音、化学反応等が複合した現象のシミュレーションの研究開発。直交階層メッシュによるソフトウェアCUBEを開発し、実世界の自動車空力シミュレーション、高層建築物シミュレーション等に適用。
	総合防災・減災研究ユニット (堀宗朗)	地震・津波等による自然災害の大規模シミュレーション研究。効果的な防災・減災のために、地盤や構造物の解析モデルから構成される次世代都市モデルを構築し、大規模数値シミュレーションを行う科学的な災害・被害予測を実現。
	計算構造生物学研究ユニット (フロハンス・タマ)	「京」などの高性能計算機を利用して実験データから生体分子構造のモデル構築する手法の開発と創薬への応用。低温電子顕微鏡データの解析手法の開発、X線自由電子レーザー（XFEL）による構造解析等。

国内・海外機関との連携

計算科学研究機構は、国際的な拠点として、海外の計算科学の主要な研究機関やスーパーコンピュータを運営する組織と研究協力協定等を積極的に締結し、研究協力や研究者交流を進めている。一部の機関とは、ソフトウェア等の性能評価のためにスーパーコンピュータの相互利用を行うなど、「京」の活用に留まらない研究に取り組んでいる。また、県市助成金を活用して招聘・派遣などのプログラムを運営し、人材交流による連携強化について取り組んでいる。

「Joint Laboratory for Extreme Scale Computing (JLESC)」は、スーパーコンピュータの分野で最先端の研究活動を行っている世界の主要な六つの研究機関による、共同研究のための枠組みである。計算科学研究機構は、わが国の代表的な機関として、JLESCのメンバーとなり、参加各組織のグループとの共同研究を積極的に行っている。

ポスト「京」の開発にあたっては、国際的な共同研究による研究開発を積極的に実施している。米国とは、エクサスケールコンピューティングのシステムソフトウェア開発に向けた日米科学技術協力（文部科学省と米国エネルギー省がMOU締結）の下に、主にシステムソフトウェア分野の共同研究開発を行っている。また、2017年1月に、日本の文部科学省とフランスの国民教育・高等教育・研究省との間で締結された、計算科学および計算機科学分野における協力に係る



図24 仏CEA／計算科学研究機構調印式（2017年）

表4 海外の連携協定機関

相手国	相手機関名
アメリカ	National Center for Supercomputing Applications (NCSA)
	Argonne Leadership Computing Facility (ALCF)
	University of Maryland
ドイツ	Jülich Supercomputing Center
オーストラリア	National Computational Infrastructure (NCI)
フランス	Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA)
	Maison de la Simulation (MDLS), Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)
イタリア	THE SCUOLA INTERNAZIONALE SUPERIORE DI STUDI AVANZATI (SISSA)

実施取り決めの下で、理研は、フランス原子力・代替エネルギー庁（CEA）と、計算科学・計算機科学に関する包括的な共同研究を進めている（図24）（表4）。

人材育成

人材育成の取り組みは、計算科学研究機構の重要な活動の一つである。毎年、国内向けのHPCサマースクール（入門編）・スプリングスクール（高度編）の開催、EUのPRACE、米国のXSEDEおよびカナダのCompute Canada（2014年から参加）と共同開催しているHPC国際サマースクールへの講師の派遣と学生の選定・派遣を行っている。さらに2014年度より、国内の大学院生を対象とした計算科学インターンシップ・プログラムを実施し、機構の研究チームにおいて、その研究を実習・体験することを通じて、計算科学技術への理解を深め、最先端の計算科学の研究開発に従事する人材の育成に取り組んでいる。この活動は、2017年度から海外からのインターンシップ受け入れに拡大している。

また、2016年度には、研究者を志す国内外の学生を対象とし、議論を行うための若手のワークショップを開催するなど、国内に留まらない、国際的な人材の育成を目指している。

スクールでの講義を幅広く活用してもらうために、計算科学分野のeラーニングアーカイブ（AICSウェブサイト内）を開設し、豊富な内容のコンテンツを配信して広く学習機会を提供するなど、さまざまな取り組みを実施している。

神戸大学大学院システム情報学研究科（計算科学専攻）とは連携講座として大規模計算科学講座を設置し、大規模数値シミュレーションに関する授業科目を2013年度より開始した。

広報活動

計算科学研究機構では、設立以来広報活動にも力を入れている。「京」・ポスト「京」を含むスパコン開発の意義やその利活用の成果、AICSの理念、計算科学・シミュレーションの役割を、一般国民の視点に立って分かりやすく伝え、相互の信頼関係を構築することを広報活動のミッションとしている。

この目的を実現するため、ウェブやコンテンツを利用して、成果などを分かりやすく解説するとともに、毎年全国各地でスーパーコンピュータを知る集いの講演会を開催している。国民一般への理解増進を積極的に図るとともに、若い世代の計算科学への興味を促進するため、教育委員会・学校との積極的な連携、高校生向けの計算科学教育プログラムの開発、学校向け見学対応や出前授業・出張講演なども実施している。計算科学研究機構への見学者は、年間1万人以上に上る（図25）。

また、マスメディアに対して、スーパーコンピュータ「京」を利用した研究内容や、期待される成果等についての理解度を高めるための取り組み等を推進している。積極的な取材対応のほか、記者向け勉強会を開催し理解を深めている（表5）。



図25 スパコンを知る集い in 岡山 (2017年)

表5 主要な広報活動 (2015年度実績)

主要な広報活動 (2015年度実績)	
□	マスメディアを通じた幅広いターゲットへの広報 <ul style="list-style-type: none"> 重要案件に関する記者会見の実施・リリースの発信：リリース12件（イベント含む） 新聞、雑誌、テレビ、専門誌からの取材対応：掲載・放送 約580件 記者向け見学会・勉強会：3回開催（生命科学、スパコンランキング、重点9課題）
□	ウェブやコンテンツによる深い情報の発信 <ul style="list-style-type: none"> ホームページ・フェイスブック：訪問者数 約17万5000人 機構パンフレット：ポスト「京」開始に伴う改訂 研究チーム紹介： <ul style="list-style-type: none"> 一般向け広報誌「計算科学の世界」：11-12号発行 成果動画：防災減災制作 ポスト京紹介：ポスト「京」紹介映像、展示エリア用パネル 若年層向け：iPadを使うバーチャルツアー、神戸市中学生向け副読本等
□	イベントを通じた直接対話 <ul style="list-style-type: none"> みらスパ（「京」シンボ）：講演、パネルディスカッション、ポスタセッション、記者勉強会を実施 海外カンファレンスへの参加：ISC15、SC15に出展 知る集い開催：富山、松山、仙台で開催。教育委員会や高校からのバックアップ（若年層の参加 約4割） 神戸市、科学館など他施設との連携や展示会への参加：産業メッセ、サイエンスフェア兵庫、等 校外学習、出前授業の受け入れ：出前授業 若年層向け：夏休みイベント、子ども霞ヶ関デー等
□	見学者の受け入れ・交流 <ul style="list-style-type: none"> 見学者の受け入れ：約1万1000名 神戸地区理研一般公開開催：医療産業都市各機関と連携 理研他事業所における一般公開への参加：和光・播磨・横浜

第3節 フラッグシップ2020プロジェクト —ポスト「京」の開発—

スーパーコンピュータの開発とそれによる計算科学技術は世界各国で追求されている。進歩は極めて早く、米国・欧州はもちろんのこと、中国においても、

2020年代のエクサスケールコンピューティングの実現を見据えて、研究開発が進められている。わが国では、「京」の完成と同時に後継機の検討が開始され、2014年度からプロジェクトが開始された。理研は、「京」の後継機であるポスト「京」の開発主体に選定された。計算科学研究機構では、「フラッグシップ2020プロジェクト」を設置し、「京」で確立された技術・人材・アプリケーション等を最大限に活用し、2020年ごろからの運用開始を目指して開発を進めている。

次期フラッグシップシステム開発に関する検討

「京」の完成した2010年に、計算科学および高性能計算機技術のコミュニティと国の双方で、将来のスーパーコンピュータ開発についての議論が開始された。

コミュニティでは「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 (Strategic Direction/ Development of HPC : SDHPC)」が組織された。SDHPCは2010年から2011年にかけて計6回開催され、自由参加形式にて今後のハイパフォーマンスコンピューティングに関する技術動向の調査、課題の同定、研究開発の方向性について議論が行われた。

一方、国では、HPCI計画推進委員会の下に、「今後のHPC技術の研究開発のあり方検討ワーキンググループ」が2011年7月に設置され、「コンピュータアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会（主査：石川裕）および「アプリケーション作業部会」（主査：富田浩文）の二つの部会で検討が行われた。

この二つの検討の流れは2011年10月以降一本化され、その結果として10年後のハイパフォーマンス・コンピューティングに向けた技術課題およびそれに向けた研究開発ロードマップについての白書「今後のHPC技術開発に関する報告書」がまとめられ、HPCI計画推進委員会に提言として提出された（2012年2月）。

引き続きHPCI計画推進委員会の下に、「今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発の検討ワーキンググループ」（主査：小柳義夫神戸大学特命教授）が組織され、これからの研究開発の方針について、議論が開始された。また、「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」が公募され、2012年7月から2014年3月の2年間にわたり、以下の四つの調査研究が行われた。

- 「レイテンシコアの高度化・高効率化による将来のHPCIシステムに関する調査研究」

東京大学が中核となり、九州大学、富士通、日立製作所、日本電気が参画。（研究代表者：石川裕東京大学情報基盤センター長）

- 「演算加速機構を持つ将来のHPCIシステムに関する調査研究」

筑波大学が中核となり、東京工業大学、独立行政法人理化学研究所、会津大学、日立製作所が参画。（研究代表者：佐藤三久筑波大学計算科学研究センター長）

- 「高メモリバンド幅アプリケーションに適した将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」

東北大学が中核となり、独立行政法人海洋開発研究機構、日本電気が参画。

(研究代表者：小林広明東北大学サイバーサイエンスセンター長)

- 「アプリケーション分野からみた将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」

理研が中核となり、東京工業大学をはじめとし、産学の幅広い分野の研究者が連携した体制で検討された。(研究代表者：富田浩文理研計算科学計算機構チームリーダー)

ポスト「京」開発プロジェクトの開始

このような検討の背景のもと、文部科学省は2013年8月に次世代超高速電子計算機システム（以下「ポスト「京」」と言う）の開発に関する予算要求を行った。この時の提案システムは、「今後のHPCI計画のあり方に関する検討ワーキンググループ」の下に設置された「システム検討サブワーキンググループ」（2013年7月-8月）における検討結果を踏まえた、汎用プロセッサと演算加速機構を組み合わせたシステムをベースとしたもので、エクサフロップスの性能を狙ったものであった。

2013年11月、理研は、文部科学省の依頼を受けて、ポスト「京」の開発主体となった。これにより、計算科学研究機構は、「京」の成果創出に向けた運用・利用者への共用とポスト「京」の開発という二つの大きな使命を担うこととなった。

2014年4月からポスト「京」の開発が開始された。プロジェクト開始に伴い、計算科学研究機構内に「エクサスケールコンピューティング開発プロジェクト」（プロジェクトリーダー：石川裕）を設置し、その開発にあたることになった。またポスト「京」は、神戸市の計算科学研究機構内に設置することとなった。

2014年度に入り、システム基本構成について検討を進めた。前年度の予算要求の段階では、ポスト「京」については、消費電力を抑制しつつ世界最高水準の計算性能を実現するため、汎用プロセッサに演算加速機構を加えたシステム構成を検討してきた。演算加速機構の部分は、国内企業による開発実績の無い新規技術のため、文部科学省や総合科学技術会議の事前評価を踏まえ、演算加速機構の必要性・有効性やシステム構成について引き続き検討を進めた。その結果、文部科学省HPCI計画推進委員会「次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ」（2014年6月-10月）において、「幾つかの重要な社会的・科学的課題の達成において有効活用が期待できるが、現時点では、それ以外の課題における有効活用に限界がある」、「消費電力については、基本的に妥当である」、「技術自体の実現可能性は十分に見込まれるが、開発・製造経費が多額であり、システムとして競争力を持つためには広い需要を得る必要がある」と評価された。そして、汎用プロセッサのみのシステムでも、当初に目標とした成果を創出できる目処が立ち、汎用プロセッサのみのシステムとすることとなった。この見直した構成をもって、要求されるシステム性能やシステム構成の詳細を検討し、開発目標を以下とすることとなった。

- 最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能

- 30-40MWの消費電力

また、ポスト「京」の開発方針は以下のとおりとした。

- 課題解決を最優先：社会や科学分野のさまざまな課題を解決することを優先する。そのためにハードウェア開発とアプリケーション開発を協調的に設計（コデザイン）し、さまざまな分野で幅広く利用できることを目指す。
- 世界トップレベルの性能へ：国際競争力のある汎用的なシステムを実現する。
- 国際協力により高い次元へ：日本が持つ強みを活かしつつ、国際協力を戦略的に活用することで、世界最先端の技術を取り入れながら、開発するソフトウェア・ミニアプリの国際標準化・普及を促進する。
- 「京」の資産を継承：スーパーコンピュータ「京」の後継機として、「京」で培った技術・人材、そしてアプリケーションの蓄積を最大限に活用する。
- 性能拡張性：2020年以降も半導体技術の進展等に応じて効果的・効率的に性能拡張できるシステムを実現する。

重点課題アプリケーションの選定

次期フラッグシップシステムの開発においては、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に戦略的に取り組み、日本の成長に寄与し世界を先導する成果を創出することが期待されている。そこで(1)スーパーコンピュータ「京」の後継機であるポスト「京」の開発・整備を行うと同時に、(2)ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）に向けたアプリケーション開発の推進も並行して行われている。

ポスト「京」で取り組むべき課題は、文部科学省における学界・産業界の有識者からなる「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会」（主査：小宮山宏）において、以下の三つの選定方針に基づいて検討された。

- (1)社会的・国家的見地から高い意義があるか。【必要性の観点】
- (2)世界を先導する成果の創出が期待できるか。【有効性の観点】
- (3)ポスト「京」の戦略的な活用が期待できる課題か。【戦略的活用の観点】

その結果、2014年8月に九つの重点課題が決定され、同年12月に各課題の実施機関が公募により決定された。これらポスト「京」重点課題アプリケーション開発は、2015年2月より事業を開始し、2016年4月より本格実施フェーズが始まった。

またポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、四つの萌芽的課題が選定され、2016年6月にその実施機関が決まった。約2年間の調査研究・準備研究を経て本格実施フェーズに移行する予定である（図26）。

開発ベンダーの決定と基本設計

2014年10月、理研はポスト「京」の基本設計を富士通と共同で実施することを決定し、基本設計を開始した。

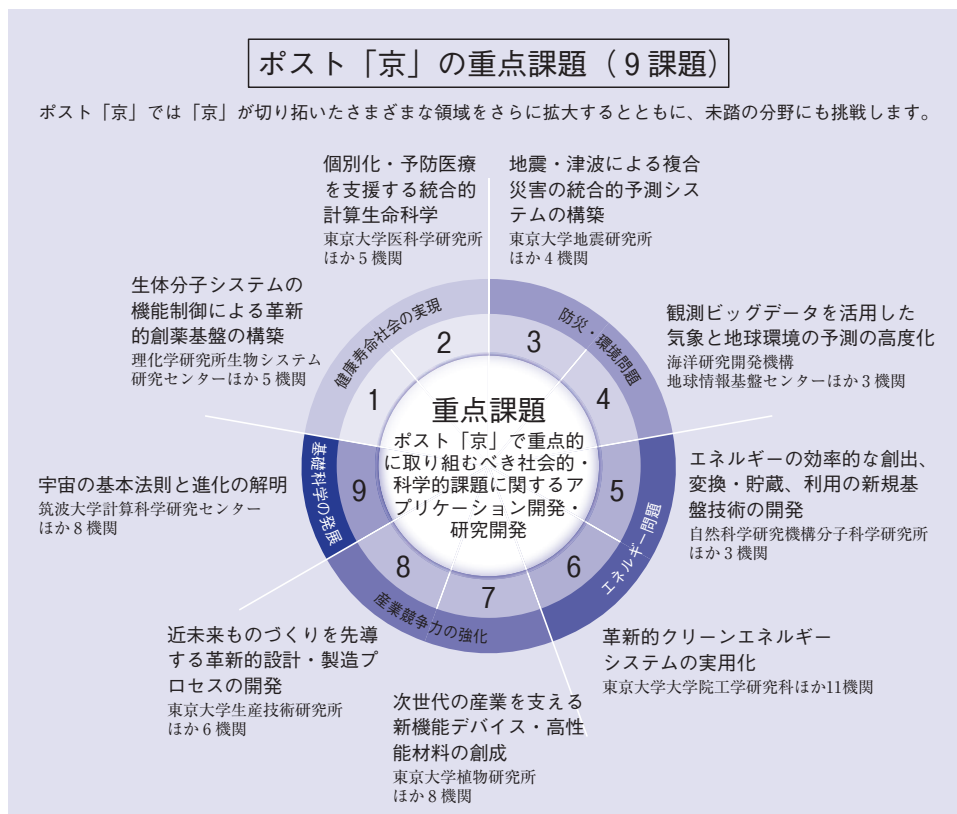


図26 重点課題と実施機関

プロジェクトの名称について、ポスト「京」が、わが国のスパコン群を先導することを体現する「フラッグシップ」とターゲットイヤーである「2020」を組み合わせて、「フラッグシップ2020プロジェクト」とよばれることになり、理化学研究所内の組織名称も変更された。

2014年9月から11月にかけて開催された総合科学技術・イノベーション会議評価専門調査会、評価検討会でフラッグシップ2020プロジェクトについて検討し、2015年1月の本会議において、「プロジェクトの意義・必要性は認められる」との評価を得た。

2015年8月末をもって、理研はポスト「京」開発の基本設計を終了し、基本設計報告書を文部科学省に提出した。文部科学省は、HPCI計画推進委員会「次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ」（2015年8月-2016年1月）において基本設計を検討し、「基本設計評価に係る報告書」を取りまとめた。この報告書において、「基本設計については、予算等のさまざまな制約条件がある中で、課題解決型であり国際競争力のある、世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現という開発目標に向けた設計がなされており、概ね妥当」という評価を得た。また、「世界最高水準の汎用的な計算機システム」の内容の詳述であるところの四つの柱というべき世界最高水準の特徴として、以下が挙げられた。

- (1)消費電力性能
- (2)計算能力

(3)ユーザの利便・使い勝手の良さ

(4)画期的な成果の創出を備えた2020年代において世界の他のシステムに対して総合力で卓抜するもの

さらに、2015年12月-2016年3月に総合科学技術・イノベーション会議評価専門調査会、評価検討会においてフラッグシップ2020プロジェクトの確認が行われ、2016年3月の本会議においても、「基本設計の内容については、開発目標の達成に向け、概ね妥当なもの」と認められた。

詳細設計の開始

文部科学省の「基本設計の評価に係る報告書」を受けて、2016年1月より試作・詳細設計を開始した。最先端の半導体の設計・製造については、微細化の進展に伴う加工技術開発の困難さなどにより、これまでの、いわゆる「ムーアの法則」に沿った進歩が鈍化し、近年、世界的な遅延が生じている状況にある。こうした中、理化学研究所では、メモリおよびCPUに係る半導体技術に関して、シ



図27 ポスト「京」開発スケジュール

表6 ポスト「京」開発年表

ポスト「京」開発に関する主な出来事	
2012年4月-2014年3月	文部科学省HPCI計画推進委員会「今後のHPCI計画の在りかたに関する検討ワーキンググループ」における検討
2012年7月-2014年3月	文部科学省（JST）「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」における検討
2013年6月-8月	HPCI計画推進委員会・今後のHPCI計画推進の在り方に関する検討ワーキンググループ・「システム検討和部ワーキンググループ」における検討
2013年8月	文部科学省が「エクサスケール・スーパーコンピュータ開発」プロジェクトの提案（概算要求）
2013年11月	文部科学省が理化学研究所開発を開発主体として決定
2013年12月	総合科学技術会議における事前評価
2014年4月	計算科学研究機構に「エクサスケールコンピューティング開発プロジェクト」を設置
2014年6月-10月	HPCI計画推進委員会「次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ」における検討
2014年8月	文部科学省が「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」を決定
2014年10月	基本設計を理研と共同で行う実施者を富士通に決定
2014年12月	文部科学省が、ポスト「京」重点課題アプリケーション開発の実施機関を決定
2015年1月	総合科学技術・イノベーション会議における評価
2015年8月	基本設計を終了
2015年8月-11月	HPCI計画推進委員会「次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ」における基本設計評価
2016年1月	詳細設計の開始
2016年3月	総合科学技術・イノベーション会議における基本設計評価の確認
2016年6月	文部科学省がポスト「京」萌芽的課題の実施機関決定

システム開発スケジュールに遅延が生じるものの、プロジェクトの開発目標達成のため、新たな技術を採用することが適切と判断した。これについて、文部科学省は、外部有識者により、メモリおよびCPUに係る半導体技術に関して、ポスト「京」の開発目標、開発スケジュールおよびコストへの影響を含めたシステム開発に係る技術的検証を行った。この結果、2016年8月のHPCI計画推進委員会において承認され、メモリおよびCPUに係る半導体技術について、新たな技術を採用することとなった。この計画変更については、8月のHPCI計画推進委員会において公表された（図27）（表6）。

計算科学研究機構（AICS）ロゴ *Key*^{キーワード}*word*

計算科学研究機構（AICS）ロゴの三つの四角形はスーパーコンピュータの筐体を表し、AICSのイメージカラーである赤系色を使用している。二つの円は計算科学と計算機科学を表し、専門性を高めながら交流を通じて新しいブレークスルーを生み出す研究組織を表現している。Cの文字は、Computational Science / Computer Science（計算科学／計算機科学）の2重の意味を持つため色を変えて強調している。スーパーコンピュータの開発・運用も含め、さまざま研究活動を行い発展してゆくAICSをイメージしたデザインである。



