

次世代スーパーコンピュータプロジェクト  
中間評価報告書

平成 21 年 7 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  
次世代スーパーコンピュータプロジェクト  
中間評価作業部会

## 目次

1. はじめに.....	2
2. 評価方法等.....	2
3. プロジェクトの進捗状況等.....	4
3-1. システム開発の進捗状況.....	4
3-1-(1) スカラ部	
3-1-(2) ベクトル部	
3-1-(3) コネクト部	
3-2. アプリケーション開発等の進捗状況.....	5
3-2-(1) アプリケーション開発	
3-2-(2) サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築	
3-2-(3) 世界最高水準の研究施設を幅広く共同利用する体制の整備	
4. 評価結果.....	6
4-1. システム構成に係る評価.....	6
4-1-(1) システム構成再検討の要請	
4-1-(2) 新たなシステム構成案の提案	
4-1-(3) 新たなシステム構成案についての評価	
4-2. その他事項に係る評価.....	8
4-2-(1) アプリケーション開発	
4-2-(2) サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築	
4-2-(3) 世界最高水準の研究施設を幅広く共同利用する体制の整備	
4-2-(4) その他	
4-3. まとめと今後のプロジェクト遂行に当たっての留意事項.....	8

## 1. はじめに

計算科学技術は、科学技術の諸分野において、実験や試験、観測が困難な現象の解明、技術開発における信頼性や精度の向上などに大きく寄与し、今後の科学技術の発展や、我が国の国際競争力の向上のために極めて重要である。このような認識のもと、第3期科学技術基本計画(平成18年3月閣議決定)においては、次世代スーパーコンピューティング技術を国家的な大規模プロジェクトとして、国家的な目標と長期戦略を明確にしつつ、基本計画期間中に集中的に投資すべき基幹技術(国家基幹技術)であると位置付けている。

これを踏まえ、国(文部科学省)においては、平成18年度から、「次世代スーパーコンピュータプロジェクト」を開始し、理化学研究所を実施主体として、次世代スーパーコンピュータ(以下、「次世代スパコン」という。)の開発、及び次世代スパコンを最大限利活用するソフトウェアの開発等を進めているところである。

本プロジェクトは、平成17年度に科学技術・学術審議会 研究計画評価分科会において事前評価が行われ、「早期に実施すべき課題と判断する」と評価されるとともに、総合科学技術会議においても、「本プロジェクトは実施することが適当である」との評価を受けている。また、平成19年度には、情報科学技術委員会の下に設置された次世代スーパーコンピュータ概念設計評価作業部会において、システムの概念設計評価が行われ、「理化学研究所が作成したシステム構成案は、我が国の最先端・高性能汎用スーパーコンピュータのシステムを構築する上で、適切なものであり引き続き研究開発を進めるべきである」と評価されるとともに、総合科学技術会議においても、「文部科学省の評価結果は概ね妥当である」とされ、「引き続き研究開発を推進すべきである」との評価を受けている。

現在、本プロジェクトは、平成22年度末の一部稼働、平成24年の完成に向けて、開発・整備が進捗しているが、平成20年度がプロジェクトの3年目にあたること、また、システム開発が設計から製造に移行する節目を迎えることから、平成21年3月に情報科学技術委員会の下に次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価作業部会を設置し、プロジェクトの進捗状況及び今後の方向性等に関して、中間評価を行った。

## 2. 評価方法等

本作業部会においては、プロジェクト目標<sup>\*</sup>を念頭に置き、プロジェクトの進捗状況、概念設計評価における指摘への対応状況等について、文部科学省及び理化学研究所等からヒアリングを実施し、「文部科学省における研究及び開発に関する評価指針」(平成21年2月文部科学大臣決定)を踏まえ、その状況について評価を行った。以下、具体的な評価方法を記す。

## ※プロジェクト目標 (注1)

### ○次世代スーパーコンピュータの性能目標

(ア) Linpack で 10 ペタ FLOPS を達成する (平成 23 年 6 月のスーパーコンピュータサイト TOP500 でランキング第 1 位を奪取)。

(イ) HPC Award 4 項目において最高性能を達成する。

### ○アプリケーションの達成目標(例示)

(ア) ナノテクノロジー分野：全く不可能だった酵素反応解析が実現可能になる。

(イ) ライフサイエンス分野：水中のウイルス構造やその動作を解析、ウイルスの感染機構や免疫機構を解明できる。

### ○サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築

グリッドミドルウェアにより、学術情報ネットワーク (SINET3) で接続された全国のスーパーコンピュータセンターから次世代スーパーコンピュータを利用できる環境を提供する。

### ○世界最高水準の研究施設を幅広く共同利用する体制の整備

(注 1) 総合科学技術会議が実施する国家的に重要な研究開発の評価「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」について (平成 19 年 9 月 13 日 総合科学技術会議) における文科省提出資料より抜粋

## (1) システム構成

以下の評価項目により評価を行った。

### <評価項目>

#### ①目標達成に向けた進捗状況について

○Linpack10 ペタ FLOPS 達成に向け、システム開発が適切な進捗状況にあるか。

○平成 23 年 6 月のスーパーコンピュータサイト TOP500 でのランキング第 1 位奪取に向け、システム開発が適切な進捗状況にあるか。

○HPC Award 4 項目における最高性能達成に向け、システム開発が適切な進捗状況にあるか。

#### ②システム構成について

○現在のシステム構成を変更する必要があるか。また、変更の必要がある場合には、どのような方向性で変更すべきか。

## (2) アプリケーション

アプリケーションを開発する事業である「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」及び「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」については、既に各研究分野を所管する委員会 (研究計画・評価分科会) の下のナノテクノロジー・材料委員会及びライフサイエンス委員会) において中間評価を実施しているため、本作業部会では、それぞれの評価結果等の報告を受け、プロジェクト全体の遂行の観点から、必要な意見を述べた。

### (3) サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築

サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築に必要なグリッドミドルウェアとして NAREGI の開発が行われ、これについては、既に情報科学技術委員会において事後評価が終了している。本作業部会では、当該評価結果等の報告を受け、プロジェクト全体の遂行の観点から、必要な意見を述べた。

### (4) 世界最高水準の研究施設を幅広く共同利用する体制の整備

現在の検討状況を聴取し、必要な意見を述べた。

## 3. プロジェクトの進捗状況等

### 3-1. システム開発の進捗状況

#### (1) スカラ部

平成19年7月から詳細設計が開始されており、平成21年8月に試作・評価に移行予定となっている。

CPUについては、世界最先端の45nm 半導体プロセスによる1CPUあたり128GFLOPS の高密度実装。相互結合網については、共用施設としての利活用を重視し、利便性・高信頼性に優れたものとすべく、プログラムビューは3次元トーラスとなり、物理的にはシステム全体として多次元メッシュ／トーラス結合である独自のインターコネクトを採用している。

#### (2) ベクトル部

平成19年7月から詳細設計が開始されており、平成21年8月に試作・評価に移行する予定となっている。

CPUについては、世界最先端の45nm 半導体プロセスによる1CPUあたり256GFLOPS の高密度実装。相互結合網については、運用性を重視し、光インターコネクトを採用した2段のFat tree 構成となっている。

#### (3) コネクト部

コネクト部は、統合スケジューラ機能及び統合ユーザ管理機能を備えたトータルシステムソフトウェア、共有ファイルシステム、統合MPI等から構成されている。連携計算<sup>(注1)</sup>を実施する際のスカラ部ーベクトル部間の帯域は100GB/s程度となっている。

平成20年4月から詳細設計を開始しており、平成21年8月にプロトタイプ作成等を開始し、平成24年9月にスカラ部及びベクトル部を統合するシステムを構築する予定となっている。

(注1) 異なるタイプの計算機で、異なる計算を同時に行い、結果を相互にやり取りしながら計算を行うこと。

## 3-2. アプリケーション開発等の進捗状況

### (1) アプリケーション開発

文部科学省においては、次世代スパコンの性能を最大限発揮するアプリケーション（グランドチャレンジアプリケーション）を開発するため、「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」及び「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」を実施している。「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」については、平成21年1月にナノテクノロジー・材料委員会において中間評価が実施されており、「研究開発計画は概ね適切であり、順調に進捗している」と評価されている。また、「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」については、平成20年8月にライフサイエンス委員会において中間評価が実施されており、「プロジェクト全体を俯瞰すると、概ね妥当な成果、計画をあげていると言える」と評価されている。

### (2) サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築

サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築については、平成15年度より世界水準の高速グリッドコンピューティング環境を構築するため「サイエンスグリッド NAREGI プログラムの研究開発」が実施され、NAREGI ミドルウェア（v1.0）が完成し、平成20年5月に公開されている。当該事業については、平成21年1月に情報科学技術委員会において事後評価が実施されており、「一部機能がOGF (Open Grid Forum) の標準仕様として承認される等の実績を挙げており、また一部機能の産業利用、製品化等も実現していることは評価できる」等と評価されている。

現在、NAREGI ミドルウェアについては、開発の中心となった国立情報学研究所及び9大学の情報基盤センター等でグリッド運用のための試験を実施している。また、次世代スパコンとの連携については、理化学研究所と国立情報学研究所との間において、次世代スパコンをグリッドで遠隔利用するためのインターフェース（ゲートウェイ機能）の仕様等の検討を開始したところである。また、理化学研究所において、次世代スパコン側の連携ソフトウェア群の開発の検討を行うなど、両者間でサイバー・サイエンス・インフラストラクチャにおけるシームレスな遠隔利用を可能とするための共同研究に向けた検討が進められている。

### (3) 世界最高水準の研究施設を幅広く共同利用する体制の整備

次世代スパコンの利活用については、平成20年7月に情報科学技術委員会の下で次世代スーパーコンピュータ作業部会において、共用の基本的考え方等に関する報告書がとりまとめられ、①社会的・国家的見地から取り組むべき課題のための「戦略的利用」と、多様な研究者のニーズに応える「一般的利用」を設定すること（一般的利用においては、産業利用を促進するための「産業利用枠」や人材育成のための「教育利用枠」等を設定）②「戦略的利用」を具体化するために、戦略分野<sup>(注1)</sup>、戦略目標

(注2)の下で研究開発や人材育成を重点的・戦略的に実施する「戦略的研究開発プログラム」を創設することなどが示された。当該報告書を受け、文部科学省においては、平成20年11月に「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」を設置しており、次世代スパコンの幅広い共同利用体制や人材育成等といった利活用に係る具体的方策を検討することとしている。

(注1) 次世代スパコンの計算機資源を必要とし、かつ、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野

(注2) 戦略分野における重点開発事項や人材育成等の目標

## 4. 評価結果

### 4-1. システム構成に係る評価

#### (1) システム構成再検討の要請

理化学研究所は、汎用複合型計算機の実現を求めた情報科学技術委員会計算科学技術推進ワーキンググループ報告書(平成18年7月)等を踏まえ、複合システムを採用しているが、連携計算を実施する際のスカラ部-ベクトル部間の帯域が十分でない等、複合システムとしての性能が十分でない点が認識される。更に、現時点で連携計算が必須な具体的なアプリケーションを見出すことができず、複合システムの設計に反映できていない点も問題である。一方、システムの主要な演算部であるスカラ部については、順調に開発が進捗しており、スカラ部のみでもシステム全体としての性能目標を達成する可能性があることが認められた。特に、スカラ部のインターコネクトについては、概念設計評価時の構成と比較して、アプリケーションの実効性能や共用の際のユーザー利便性が向上するよう通信帯域を倍増するなど改善されており、妥当である。

以上の認識の下、本作業部会においては、理化学研究所に対し、複合システムの在り方を含めプロジェクトの目標達成を念頭に置いた最適なシステム構成を再検討することを要請した。(システム構成再検討の要請については資料1参照。)

#### (2) 新たなシステム構成案の提案

理化学研究所においてはシステム構成の再検討が実施され、本作業部会においては再検討された新たなシステム構成案について評価を行った。

なお、理化学研究所におけるシステム構成再検討の過程で、ベクトル部の開発を担うNECから、経営環境の悪化などを総合的に考えた上での経営判断として、製造段階への不参加が表明された(これに伴い、NECと共に計画に参画していた日立も製造段階に参加しないこととなった)。

理化学研究所からは、新たなシステム構成案として、Linpack性能10ペタFLOPSを達成するスカラ型単一のシステムが提案された。

### (3) 新たなシステム構成案についての評価

#### ①システム構成

スカラ型単一のシステムは、プロジェクトの目標達成を念頭に置いたシステム構成として妥当である。一方、当初計画の複合システムを止めることになる影響について考慮する必要がある。利用面においては、ベクトル部での利用を想定しているアプリケーションに影響がある。この点については、インターコネクティブ性を倍増していることも考慮すれば、プログラムの書き換え等の調整を行うことにより、スカラ部でも相当程度（※）の実行効率<sup>(注1)</sup>が確保できる見込みがあると判断する。ただし、ベクトルユーザーの負担は増えることになるので、登録施設利用促進機関<sup>(注2)</sup>による支援等により、これを軽減することが求められる。以上により、これまでの複合システムからスカラ型単一のシステムに変更することの利用者への影響については、限定的であると評価する。

(※) ベクトル部の利用を想定していた地球環境シミュレーションコード(主要部)について、スカラ部の単一 CPU では 20%程度の実行効率を確保できる見込み。

(注1) 実行効率 = 実効性能/ピーク性能

(注2) 次世代スパコン施設の利用支援業務や利用者選定業務を行う機関。

#### ②留意事項

今後のシステム開発においては、試作・評価を着実に実施し、当該結果を製造・量産化に適切に反映させることが必要である。ネットワークやシステムソフトウェアの開発についても、CPUの製造状況を考慮しつつ、適切に開発を進めるべきである。

このため、理化学研究所においては、システム完成までの技術的な問題点の抽出や開発現場の状況把握を通じてリスク管理を行うなど、適切なプロジェクトマネジメントを行うことが必要である。さらに、第三者による評価・助言機能の強化など、実効性ある体制構築を検討する必要がある。

なお、ベクトル部についてはプロジェクト目標の達成やメーカーの経営判断を踏まえた結果、製造段階には移行しないことになったが、これはこのプロジェクトにおいて開発が進められてきたベクトル部そのものの技術的な意義・特徴を否定するものではない。理化学研究所においては、詳細設計を通して得られる成果を、今後継続的に展開されるスーパーコンピュータの要素技術開発やシステム構築、アプリケーション評価などに有効に活用することができるよう、適切に成果をとりまとめおくことが期待される。



## 4-2. その他事項に係る評価

### (1) アプリケーション開発

グランドチャレンジアプリケーションの開発については、より高効率なペタスケールのシミュレーションを可能とするため、新たなシステムの情報を適切に反映することができるよう、システム開発側とアプリケーション開発側とが適切に連携することが重要である。また、開発したアプリケーションについて、産業界を含めた様々な分野での利活用の促進を継続すべきである。

### (2) サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築

今後、次世代スーパーコンピュータをグリッドで遠隔利用できる環境を構築することが重要である。このため、理化学研究所と国立情報学研究所の次世代スーパーコンピュータの遠隔利用環境に関する共同研究を着実に進め、「サイエンスグリッド NAREGI プログラムの研究開発」における成果を有効に活用するとともに、世界のグリッド技術の動向に鑑み、適切な環境構築が推進されることを期待する。

### (3) 世界最高水準の研究施設を幅広く共同利用する体制の整備

次世代スパコンの利活用については、現在、「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」で具体的方策の検討がなされているが、今後、次世代スパコンの幅広い共同利用体制の構築及び次世代スパコンを中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点（COE）形成に向けた検討が進むことを期待する。

また、「戦略的研究開発プログラム」や「教育利用枠」を通じた人材育成の促進、「産業利用枠」を通じた産業利用の促進により、今後、将来の計算科学技術を担う人材が育成されるとともに、次世代スパコンの産業利用により我が国の競争力が強化されることを期待する。

### (4) その他

我が国が今後ともスパコン開発を継続し、国際競争力を強化する観点から、次世代スパコンで開発されたシステムの技術が、国内に留まらず世界中の大学や研究機関等に下方展開されることを期待する。そのためには、今後更に製造コスト等が低減され、市場競争力のあるシステムとすることが重要である。

さらに、システム構成の変更を受け、将来の次世代スパコン施設の共用を視野に入れたベクトルユーザーの支援を的確に行うことが重要である。

## 4-3. まとめと今後のプロジェクト遂行に当たっての留意事項

次世代スパコンは、第3期科学技術基本計画において「国家基幹技術」に位置づけられており、「科学技術創造立国」を国家戦略とする我が国にとっては無くてはなら

ない研究開発基盤である。また、次世代スパコンへは大学や産業界における広範な分野の研究者をはじめとした多くの国民の期待が寄せられており、平成24年の完成後には、産学官の多様な研究者等に供され、多くのブレークスルーが創出されることが期待されている。

今後とも、「科学技術創造立国」たる我が国が、技術力を維持・強化し、世界最高水準のスパコンを継続して開発していくためにも、本プロジェクトを着実に推進していく必要がある。

本プロジェクトは国家的に重要であり、今後、本作業部会の評価結果が適切に反映され、プロジェクトが目標の達成に向け着実に推進されることを期待する。

## 次世代スーパーコンピュータのシステム構成の再検討について

平成21年4月22日  
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  
次世代スーパーコンピュータプロジェクト  
中間評価作業部会 決定

本作業部会においては、次世代スーパーコンピュータのシステム構成について、これまで3回に亘って理化学研究所から説明を受け、検討を実施してきた。これらの結果、複合システムの将来的な可能性は認めるものの、現時点の開発状況を踏まえれば複合システムとしての性能は十分でなく、一定の見直しを行うことが必要という状況にあることが認識された。

このため、本作業部会は、理化学研究所に対し、複合システムの在り方を含め、プロジェクトの目標達成を念頭に置いた最適なシステム構成を再検討することを要請する。ただし、この際、プロジェクト予算(1,154億)の著しい増加を避けるとともに、利用による成果創出に与える影響を極力抑えたものにする。

また、新しいシステム構成案については、以下の点について現行計画との対比により言及した上で、速やかに本作業部会に提案すること。

- ・ プロジェクトの目標に対するシステム構成案の妥当性（システムの理論ピーク性能及びLinpack性能並びにHPC Award 4項目性能についての推定値を必ず含むこと）
- ・ 開発における技術的問題点等を含めた留意事項
- ・ プロジェクト全体の新たなスケジュール（概要）及び現行の資金計画に与える影響

## 次世代スーパーコンピュータプロジェクト 中間評価作業部会の設置について

平成 21 年 3 月 31 日  
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

### 1 設置の趣旨

次世代スーパーコンピュータプロジェクトは、科学技術・学術審議会及び総合科学技術会議において実施された事前評価を踏まえ、平成 18 年度から実施されている。また、平成 19 年には科学技術・学術審議会及び総合科学技術会議において、概念設計等に係る評価が実施されている。

現在、本プロジェクトは、平成 22 年度末の一部稼動、平成 24 年の完成に向けて、開発・整備が進捗しているが、平成 20 年度がプロジェクトの 3 年目にあたることから、次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価作業部会を設置し、次の事項について調査する。

### 2 調査事項

次世代スーパーコンピュータプロジェクトについて、進捗状況、概念設計評価における指摘への対応状況、及び今後の方向性等に関して、中間評価を実施する。

### 3 設置期間

平成 21 年 3 月 31 日～調査事項の終了までとする。

### 4 その他

次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価作業部会の庶務は、研究振興局情報課が処理する。

## 次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価作業部会 委員名簿

## 主査

土居 範久 中央大学 理工学部 情報工学科 教授

## 委員

浅田 邦博 東京大学 大規模集積システム設計教育研究センター長

天野 英晴 慶應義塾大学 理工学部 教授

小柳 義夫 工学院大学 情報学部 教授

笠原 博徳 早稲田大学 理工学部 教授

河合 隆利 エーザイ（株） コア・テクノロジー研究所 BIグループ統轄課長

川添 良幸 東北大学 金属材料研究所 教授

鷹野 景子 お茶の水女子大学大学院 人間文化創成科学研究科 教授

田中 英彦 情報セキュリティ大学院大学 情報セキュリティ研究科  
研究科長、教授

土井 美和子 （株）東芝 研究開発センター 首席技監

中島 浩 京都大学 学術情報メディアセンター 教授

南谷 崇 東京大学 先端科学技術研究センター 教授

平木 敬 東京大学大学院 情報理工学系研究科 教授

松尾 亜紀子 慶應義塾大学 理工学部 教授

米澤 明憲 東京大学大学院 情報理工学系研究科 教授、情報基盤センター長

合計 15名

## 次世代スーパーコンピュータ中間評価作業部会 開催経緯

第1回：平成21年4月2日（木）17:00～19:30

- (1)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価作業部会主査代理の指名について
- (2)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価作業部会について
- (3)次世代スーパーコンピュータプロジェクトについて
- (4)「次世代ナノ統合シミュレーションの研究開発」の中間評価結果等について
- (5)「次世代生命体統合シミュレーションの研究開発」の中間評価結果等について
- (6)総合科学技術会議の評価における指摘への対応等について
- (7)次世代スーパーコンピュータ設計・製造計画評価結果及び詳細設計の進捗状況等について
- (8)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価の評価項目等について
- (9)その他

第2回：平成21年4月9日（木）10:00～12:00

- (1)電子メールによる秘密情報の取り扱いについて
- (2)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価について
- (3)その他

第3回：平成21年4月22日（水）17:00～19:00

- (1)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価について
- (2)その他

第4回：平成21年5月25日（月）17:00～19:00

- (1)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価について
- (2)その他

第5回：平成21年6月2日（火）17:30～19:30

- (1)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価について
- (2)その他

第6回：平成21年6月5日（金）17:30～19:30

(1)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価について

(2)性能目標について

(3)その他

第7回：平成21年6月11日（木）10:00～12:00

(1)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価について

(2)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価報告書案について

(3)その他

第8回：平成21年7月17日（金）11:00～12:00

(1)次世代スーパーコンピュータプロジェクト中間評価報告書案について

(2)その他

# 次世代スーパーコンピュータ プロジェクト概要



# 次世代スーパーコンピュータプロジェクト

平成21年度予算額 19,000百万円  
 平成20年度補正額 5,498百万円  
 (平成20年度予算額 14,500百万円)  
 ※総事業費 115,447百万円(平成18~24年度)

## ○次世代スーパーコンピュータの目的・事業内容

理論、実験と並び、現代の科学技術の方法として確固たる地位を築きつつある計算科学技術をさらに発展させるとともに、広範な分野の研究及び産業における利用のための基盤を提供し、我が国の競争力強化等に資するため、長期的な国家戦略を持って取り組むべき重要技術「国家基幹技術」である「次世代スーパーコンピュータ」を平成22年度末の一部稼働（平成24年の完成）を目指して開発する。

具体的には、今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるべく、

- (1) 世界最先端・最高性能の次世代スパコン(注)の開発・整備
- (2) 次世代スパコンを最大限活用するためのソフトウェアの開発・普及
- (3) 上記(1)を中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点(COE)の形成

を文部科学省のイニシアティブにより、開発主体(理化学研究所)を中心に産学官の密接な連携の下、一体的に推進する。

(注) 10ペタFLOPS級の計算性能を有するスパコン(1ペタFLOPS:1秒間に1千兆回の計算)

## ○次世代スーパーコンピュータの幅広い応用

### ナノテクノロジー

#### 新しい半導体材料の開発



10万原子

原子一つ一つをシミュレーションすることにより、試行錯誤で行っていた材料開発が画期的に進歩する。

デバイス全体

10万原子の計算時間

現状 800年

次世代スパコン 2ヶ月

### ライフサイエンス

#### 薬の開発



シミュレーションでの予測とデータの組合せで、薬の副作用などの予測が可能になる。

副作用の予測

現状 動物実験など

次世代スパコン シミュレーションで予測

### ものづくり

#### 自動車の衝突の解析



人手で数ヵ月かかるモデル作成等が1~2時間で自動化でき、安全性の向上や産業競争力強化に繋がる。

人手モデル作成

現状 数ヶ月

コンピュータ自動モデル作成

次世代スパコン 1~2時間

### 地球環境

#### 台風の進路や集中豪雨の予測



1Km四方以下でのシミュレーションにより、集中豪雨や台風進路の精度の高い予測が可能になる。

シミュレーションスケール

現状 3.5km

次世代スパコン 約400m

## ○平成21年度予算のポイント

- ① 次世代スーパーコンピュータ施設(計算機棟、研究棟)の整備を本格化  
6,131百万円
- ② 次世代スーパーコンピュータのシステム開発について試作・評価を実施  
10,992百万円
- ③ ソフトウェアの開発について、引き続き、グランドチャレンジアプリケーションの開発・製作・評価を実施  
1,877百万円

## ○開発の年次計画(システム変更前:予算ベース)

		平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度	平成23年度	平成24年度
施設	計算機棟		設計	建設				
	研究棟		設計	建設				
システム	演算部	概念設計	詳細設計		試作・評価	製造・据付調整		
	制御フロントエンド(トータルシステムソフトウェア)		基本設計	詳細設計	製作・評価		性能チューニング・高度化	
	共有ファイル		基本設計	詳細設計	製造・据付調整			
ソフトウェア	次世代ナノ統合シミュレーション	開発・製作・評価				実証		
	次世代生命体統合シミュレーション	開発・製作・評価				実証		
	グリッドミドルウェア	設計・製作						

# システムの基本的な構成(変更前)

[システムの特徴]

## スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システム

- ・異なる2つの演算部の特性を活かし、あらゆるシミュレーションに対応可能な高い汎用性
- ・計算能力に関する高い拡張性
- ・大学や研究機関向けの高性能な計算機への展開性
- ・スカラ及びベクトルの両技術の確保による、我が国の技術力の強化と、国際競争力の向上

### スカラ型

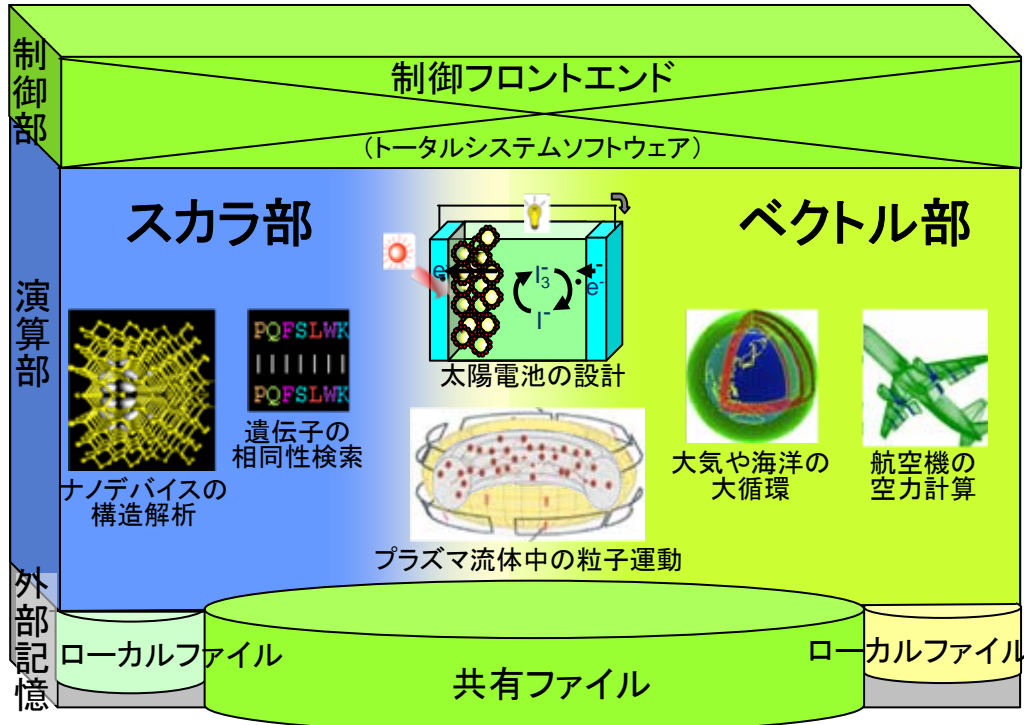
- ・大きなデータを細分化して処理する  
(ナノデバイスの構造解析や、遺伝子の相同性検索等の計算が得意)
- ・世界的主流となっている技術

### 従来のスカラ型計算機

- ・比較的低速なCPUを多数接続

### 本システムのスカラ部

- ・CPUの高速化及び新規ネットワーク技術による超大規模接続の実現



### ベクトル型

- ・大きなデータをまとめて処理する  
(大気や海洋の大循環や、航空機の空力等の計算が得意)
- ・我が国が強みを持つ技術

### 従来のベクトル型計算機

- ・比較的高速なCPUを接続

### 本システムのベクトル部

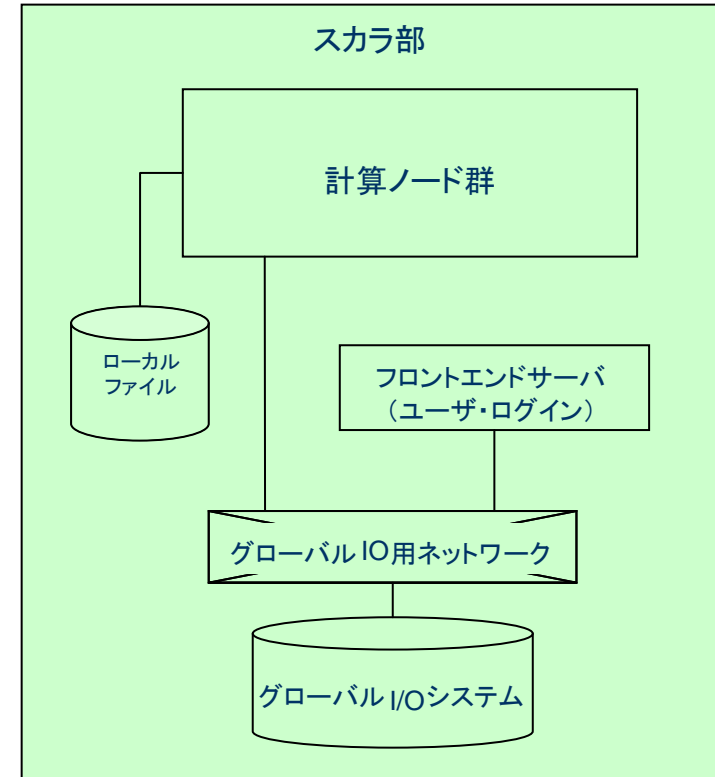
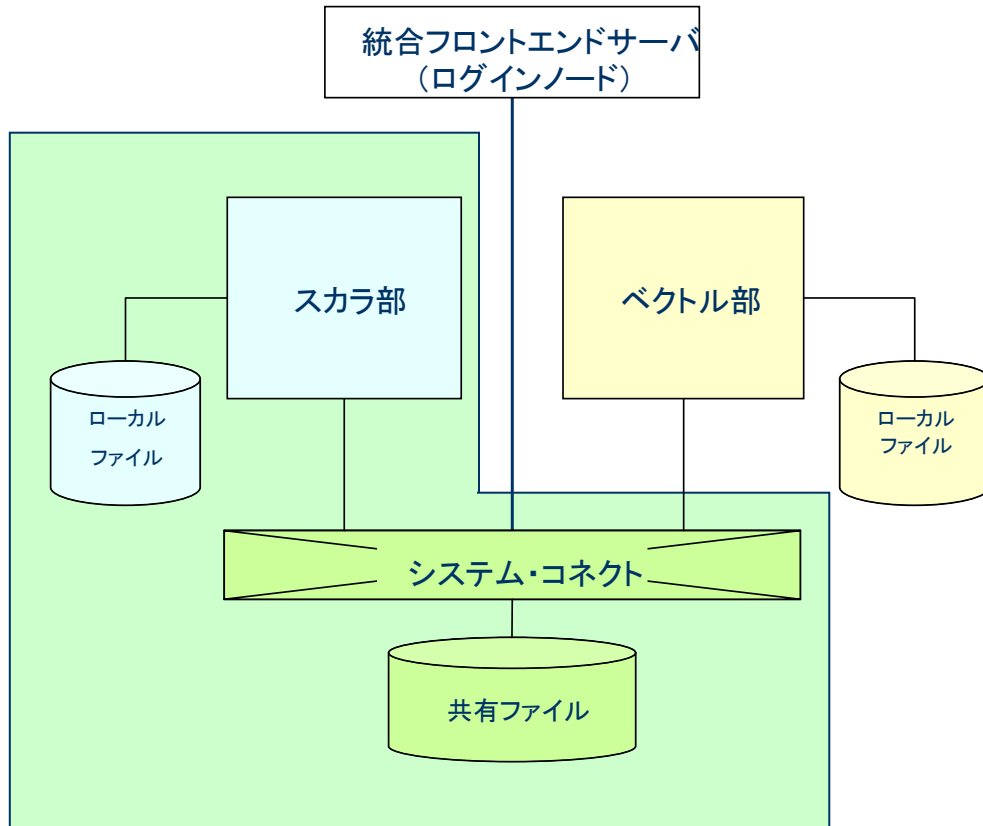
- ・CPUの省電力化及び光を用いた革新的ネットワーク技術による大規模接続の実現

# 新システム構成案


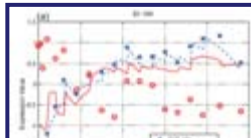

従来の構成  
(スカラ部とベクトル部から成る  
複合システム)



新システム構成  
(スカラ部による単独構成)



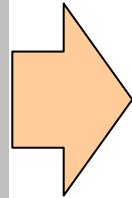
# 次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するための ソフトウェアの研究開発(グランドチャレンジアプリケーション)

	<p style="text-align: center;"><b>ナノテクノロジー分野</b></p> <p style="text-align: center;">〔 次世代ナノ統合シミュレーション ソフトウェアの研究開発 〕</p>	<p style="text-align: center;"><b>ライフサイエンス分野</b></p> <p style="text-align: center;">〔 次世代生命体統合シミュレーション ソフトウェアの研究開発 〕</p>
<p style="text-align: center;">概要</p>	<p>ナノ電子デバイスの設計やバイオ燃料生成用の酵素設計等に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発</p>	<p>タンパク質分子の反応や、細胞・臓器の働きの詳細な解析により、製薬・医療に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発</p>
<p style="text-align: center;">応用例</p>	<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="text-align: center;">  <p>10万原子</p> <p>ナノ電子デバイス</p> </div> <div style="text-align: center;"> <p><u>現状</u></p> <p>2千原子程度(デバイスの一部)の計算が可能</p> <p>↓</p> <p><u>次世代スパコン</u></p> <p>10万原子(デバイス全体)の計算が可能</p> <p>↓</p> <p><u>アウトカム</u></p> <p>高速、低消費電力のナノ電子デバイスの実現を加速</p> </div> </div>	<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="text-align: center;">  <p>副作用の予測</p>  </div> <div style="text-align: center;"> <p><u>現状</u></p> <p>計算量やデータが膨大で、既存の計算資源や計算手法ではシミュレーションが不可能</p> <p>↓</p> <p><u>次世代スパコン</u></p> <p>シミュレーションが実現可能</p> <p>↓</p> <p><u>アウトカム</u></p> <p>○シミュレーションで副作用などを予測することが可能になり、薬の開発や医療の現場で患者のリスクを軽減</p> <p>○医薬品の開発が、効率的で効果的に</p> </div> </div>
<p style="text-align: center;">体制</p>	<p>分子科学研究所を中核に、東京大学物性研究所、東北大学金属材料研究所、産業技術総合研究所等、6機関と連携した研究開発体制を構築</p>	<p>理化学研究所を中核に、東京大学医科学研究所、慶應義塾大学等、13機関と連携した研究開発体制を構築</p>

# 次世代スーパーコンピュータ施設の整備

## 整備の基本方針

- (1) 次世代スーパーコンピュータの性能を最大限引き出す設備・能力の確保
- (2) 世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点 (COE) として相応しい研究・教育環境の整備
- (3) ランニングコストと環境負荷の低減化



## 施設の特徴

- (1) 計算機の性能を常時保証できる床耐荷重及び免震構造とするとともに、必要な電源設備及び冷却設備を整備
- (2) 共用施設としての運用上の利便性を高めるとともに、研究交流や多様な知識の融合を促進するため、計算機棟と研究棟を一体的に整備
- (3) 廃熱利用の推進や排水処理への配慮などによりランニングコストと環境負荷の低減を実現



施設イメージ図

### 【計算機棟】

- 延床面積 約10,500㎡
- 建築面積 約4,300㎡
- 構造 鉄骨造り地上3階地下1階

### 【研究棟】

- 延床面積 約9,000㎡
- 建築面積 約1,800㎡
- 構造 鉄骨造り地上6階地下1階

その他、電源を供給する特高受変電設備、計算機棟の空調機を冷却する冷却設備、及び環境負荷低減のためのCGS(自家発電)設備等を設置



# サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築(1)

## ●サイエンスグリッドNAREGIプログラムの研究開発

平成15年度より開始した「サイエンスグリッドNAREGIプログラムの研究開発」において、グリッド環境構築のためのグリッドミドルウェア開発を実施。平成20年5月にNAREGIミドルウェア(v1.0)が完成・公開。

### <開発方法>

国立情報学研究所(NII)、分子科学研究所、東京工業大学、大阪大学、九州大学、九州工業大学、産総研、原子力機構、富士通、日立製作所、日本電気等との産学連携により実施。

### <NAREGIミドルウェアの特徴>

- ・仮想組織(VO: Virtual Organization)による計算資源やデータの共有を可能とする。
- ・研究機関等において個別に開発されたシミュレーションプログラムを、アーキテクチャの異なる計算機上で容易に連携・実行するための同時予約によるジョブ実行機能を有する。(世界初)
- ・国際的なグリッドのコミュニティーであるOGF(Open Grid Forum)や海外のグリッド運営機関であるEGEE(欧州)、TeraGrid(米国)等と連携して、ミドルウェアを開発。一部機能がOGF(Open Grid Forum)の標準仕様として承認される。また、欧米のグリッドとの相互運用に向けた技術的検討を実施。
- ・100テラフロップス級のグリッド環境が構築可能。

## <NAREGIミドルウェアの機能一覧>

### ○計算科学をサポート

- ・予約によるジョブ実行によるアーキテクチャの異なる計算資源間での連成解析(※世界初)
- ・バルクジョブ実行
- ・GridMPI、GridRPCの組み込み
- ・資源管理と連携したデータグリッド

### ○研究コミュニティをサポート

- ・VO (Virtual Organization) 単位のサービス
- ・VO管理に必要なアクセス管理・制御・管理機能設定
- ・ITBLとの連携ミドルウェア

### ○利用環境の高度化・平準化

- ・ポータルにより平準化された利用環境
- ・GUIによる計算資源を意識しない操作、利用
- ・適合した計算資源の自動選択
- ・コマンドラインインターフェイスによるジョブ実行

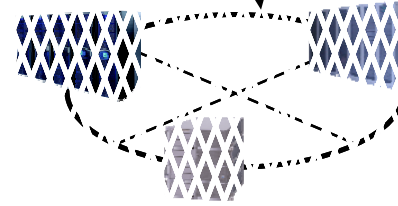
### ○運用をサポート

- ・計算資源利用効率向上(予約ジョブ実行と非予約ジョブ実行の両立等)
- ・管理者支援機能
- ・グリッドジョブとローカルスケジューリングジョブの共存
- ・インストール・運用性の向上

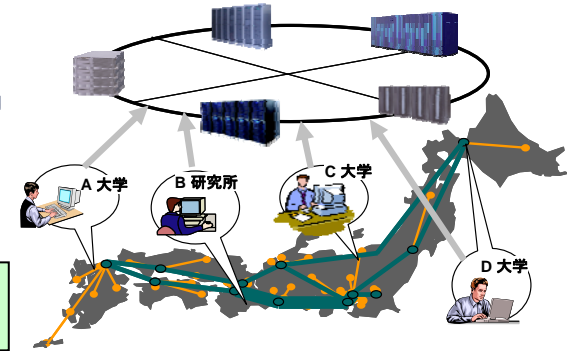
計算資源、分散した大規模データを意識せずに利用



ポータル

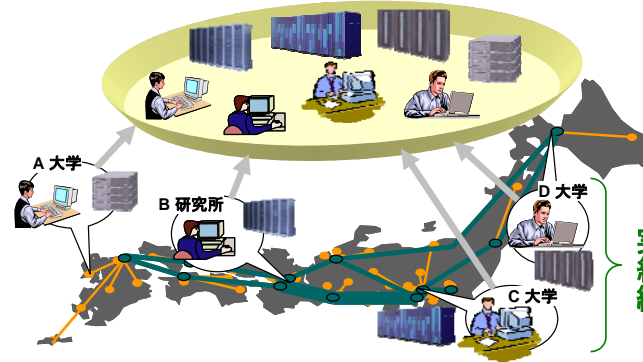


計算・研究資源をどこからでも同じように使える平準化された環境

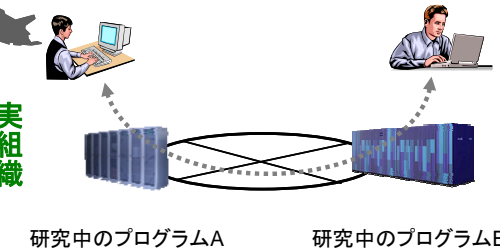


バーチャルな研究コミュニティ (VO) を容易に形成

仮想組織 (Virtual Organization)



計算・研究資源を連携した研究が容易 (リアルタイムコラボレーション)



## <現在の検討状況>

- ・現在、国立情報学研究所と9大学基盤センター等では、NAREGIミドルウェアの接続試験を終了し、グリッド運用のための試験を実施(実際に他大学のスパコンに接続しての動作確認等)

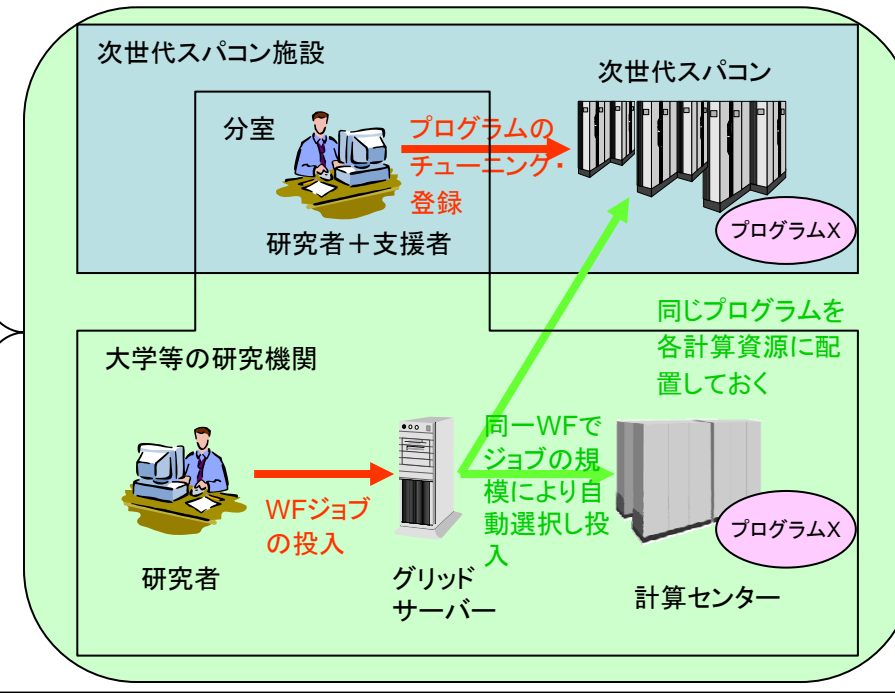
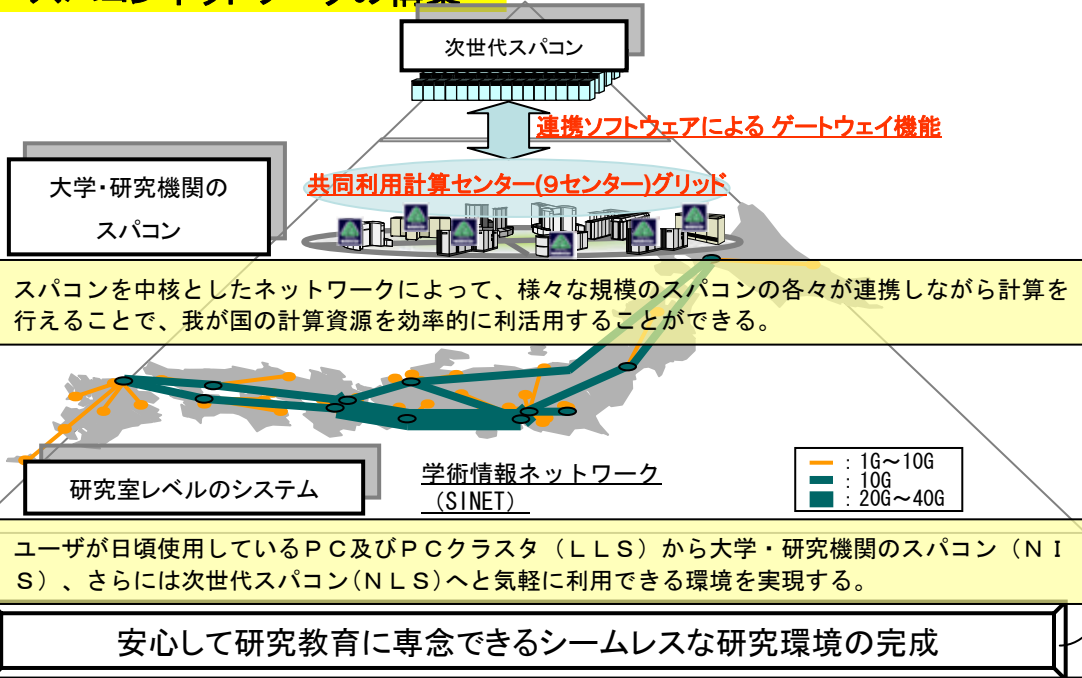
# サイバー・サイエンス・インフラストラクチャの構築(2)

## ●NAREGIを利用した理化学研究所と国立情報学研究所(NII)との共同研究

○理化学研究所と国立情報学研究所においては、シームレスな遠隔利用を可能とするための共同研究の実施に向けて、以下の検討が進められている。

- ・理化学研究所と国立情報学研究所(NII)との間において、次世代スーパーコンピュータをグリッドで遠隔利用するためのインターフェイス(ゲートウェイ機能)の仕様等を検討
- ・理化学研究所において、スーパーコンピュータ側のNAREGIミドルウェア連携ソフトウェア群の開発、SINET接続機器及び連携に必要なサーバ設置等の環境整備を検討

### スパコンネットワークの構築



### 実施計画

2009年10月  
2012年4月

理研が連携ソフトウェアの開発開始、NIIはNAREGIの情報提供で支援  
SINET接続(予定)



# 次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討

科学技術・学術審議会 情報科学技術委員会の下に、次世代スーパーコンピュータ作業部会(主査:土居範久 中央大学理工学部教授)を設置し、次世代スパコンの利活用について検討を行った。

## 1. 次世代スパコンの共用のあり方

- 次世代スパコンは、多くの研究者等に活用されるとともに、優れた成果が創出される環境であるべきとの観点から、下記の仕組みを設けることが必要。
  - ・戦略的利用(社会的・国家的見地から取り組むべき課題に係る利用)
  - ・一般的利用(多様な研究者のニーズに応える利用。産業利用枠や教育利用枠等も設定)
- 次世代スパコンを最大限に活用するためには、利用者へのきめ細かい研究支援が不可欠。(情報提供、利用に関する相談及び利用支援、アプリケーションの調整のための支援等)
- 次世代スパコンと大学や公的研究機関等が有する計算機資源との適切な役割分担と有機的な連携を図ることが不可欠。

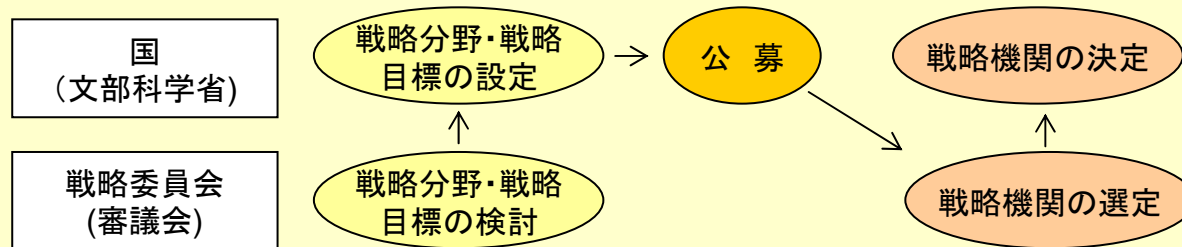
# 次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討

## 2. 次世代スパコンを中核とした研究機能の構築

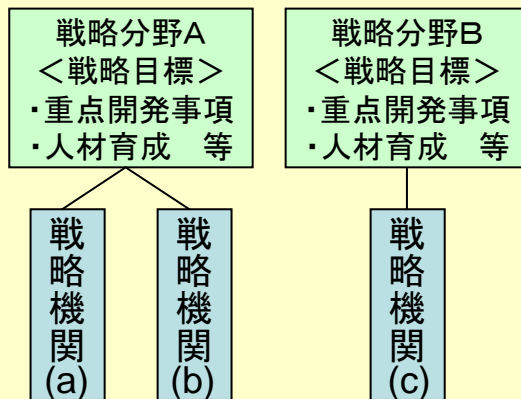
- 戦略的利用を具体化するために、戦略分野、戦略目標の下で研究開発や人材育成を重点的・戦略的に実施する「戦略的研究開発プログラム」を創設。

### 戦略的研究開発プログラムのイメージ

#### (1) 戦略分野、戦略目標の設定と戦略機関の選定



#### (2) 戦略機関のイメージ



例：戦略分野：

ライフサイエンス、ナノサイエンス、エネルギー等

戦略目標：

〇〇を可能とするシミュレーション技術の開発

〇〇分野における優秀な若手研究者の育成

戦略機関としては、大学、大学共同利用機関、大学附置研究所、独立行政法人や、財団法人、民間企業等を想定、複数の研究機関によるネットワーク型の組織も可とする

# 次世代スパコン施設の幅広い共同利用体制の構築 (神戸次世代スパコン拠点イメージ)

- 次世代スパコンは、産学官の幅広い研究者等の利用に供する共用施設。
- 次世代スパコンの利活用については、社会的・国家的に重要な研究開発を行う「戦略的利用」及び、多様な研究者のニーズに応える「一般的利用」を設定。「一般的利用」には、産業利用のための「産業利用枠」、人材育成のための「教育利用枠」を設定。
- リモートアクセスを可能とするなど、全国の研究者が利用しやすい環境を構築。
- 理化学研究所、登録施設利用促進機関、戦略機関が緊密に連携・協力し、効果的・効率的に研究開発や人材育成を実施する体制を構築。

