



計算科学研究機構(AICS)のロゴマーク

3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。2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イクスルーを生み出す研究組織を表現しています。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ます。スーパーコンピュータの開発・運用も含め、さまざまな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す。

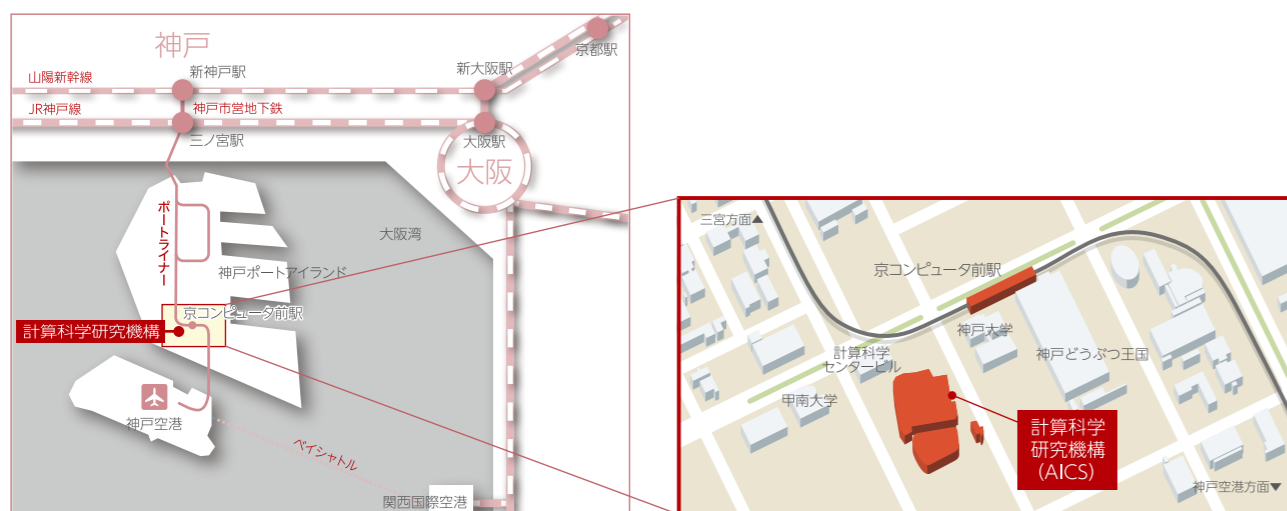
「京」のロゴマーク

「京」(けい、英語表記は"K computer")は、一般公募して1529件の候補の中から2010年7月に選定された愛称です。「京」は目標性能の10ペタを表す万進法の単位で、「単位」で表現するという新規性を評価しました。一説では「京」はもともと大きな門を表し、「計算科学の新たな門」にもつながり、歴史と未来が同居する言葉といえます。また、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から、「京」を選定しました。漢字一文字とシンプルで分かりやすく、外国人も発音しやすい愛称となりました。ロゴマークの書は、武田双雲先生に日本の科学技術を支える「京」の力強さを表現していただいたものです。

「京」利用の方法

「京」を利用するためには課題申請が必要です。課題申請は原則としてどなたでも可能ですが、課題の種類によって応募資格等が異なります。詳細については、利用者選定・利用支援業務を担う登録施設利用促進機関「一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)」が運営しているホームページをご覧ください。

<http://www.hpci-office.jp/pages/guide/>



理化学研究所
計算科学研究機構

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26
TEL:078-940-5555 FAX:078-304-4956
<http://www.aics.riken.jp/>



理化学研究所 計算科学研究機構

シミュレーションが未来をひらく



Computer simulations create the future

シミュレーションが未来をひらく

科学技術の発展により社会がますます進化を遂げる一方で、その急速な変化が引き起こす社会課題はこれまでにないほど複雑化・高度化しています。いまだ解の存在しない課題に対して、私たちは世界中の知を結集し、最適な解決策をいち早く示していくことが求められています。

複雑で困難な課題に潜むさまざまな要素を、膨大なデータから科学的に読み解き、コンピュータ上で再現し、最適な解決策を導き出す。この科学的に未来を見通す「予測の科学」を支えるのが、スーパーコンピュータを活用した高度なシミュレーションです。

シミュレーションの最先端をゆく理化学研究所計算科学研究機構(AICS)では、世界トップレベルの性能を誇る「京」を開発・運用し、社会課題の解決や産業競争力の向上に貢献してきました。そしていま、後継機となるポスト「京」では、システムとアプリケーションを協調的に設計開発し、前人未達の高度なシミュレーションの実現を追求しています。

人類の前に立ちはだかる難題に挑み、人々の想像を超えるような科学のブレイクスルーにも果敢に挑戦する——シミュレーションの進化は、私たちの未来をひらく力と希望です。



理化学研究所
計算科学研究機構
機構長 平尾 公彦

ごあいさつ

スーパーコンピュータは現代の科学技術の発展にとって不可欠なツールです。宇宙や素粒子あるいは生命科学の研究などの基礎科学は言うに及ばず、地球温暖化の科学的予測、地震や津波、集中豪雨や台風の予測による被害軽減、遺伝子治療の基礎となるヒトゲノムの解析やタンパク質の解析によるドラッグデザイン、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設計など、私たちの生活に直結する最先端の研究開発に欠くことのできないものです。

計算科学研究機構は、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月に発足しました。スーパーコンピュータ「京(けい)」を運用し、ユーザに対して使いやすい計算環境を提供するとともに、「京」を中核として計算科学分野と計算機科学分野を連携させた研究を行い、先進的成果を創出しています。

「京」は、震災など数々の困難を乗り越え、世界のスーパーコンピュータの性能ランキングTOP500において、2011年6月と11月二期連続で世界一になりました。現在でもGraph500やHPCGなどといった、より実用性を重視した性能ランキングにおいて世界トップクラスの表彰を受けています。その並はずれたスピードやパワーに加え、使いやすさを重視したスーパーコンピュータとして「京」は世界から高い評価を受けています。

現在「京」は基礎研究から産業利用まで幅広い分野の研究で活用され、国が定めたHPCI戦略プログラムの各分野、また一般利用課題の利用者から、多くの優れた成果が発表されています。また企業との共同研究も活発に行われており、製品化への取り組みも進められています。

私たちは、国内外の各機関、大学、企業の研究者の協力のもと、「京」が持つ能力を最大限に引き出し、我が国の計算科学技術を飛躍的に発展させ、世界をリードしたいと考えています。我が国の科学技術の推進、産業の国際競争力の強化に貢献し、国民と国際社会の期待に応え、世界から人が集まる国際的な知の拠点を目指します。新たな挑戦に果敢に臨み、世界がギクリとする成果、国民がワクワクするような成果を生み出します。

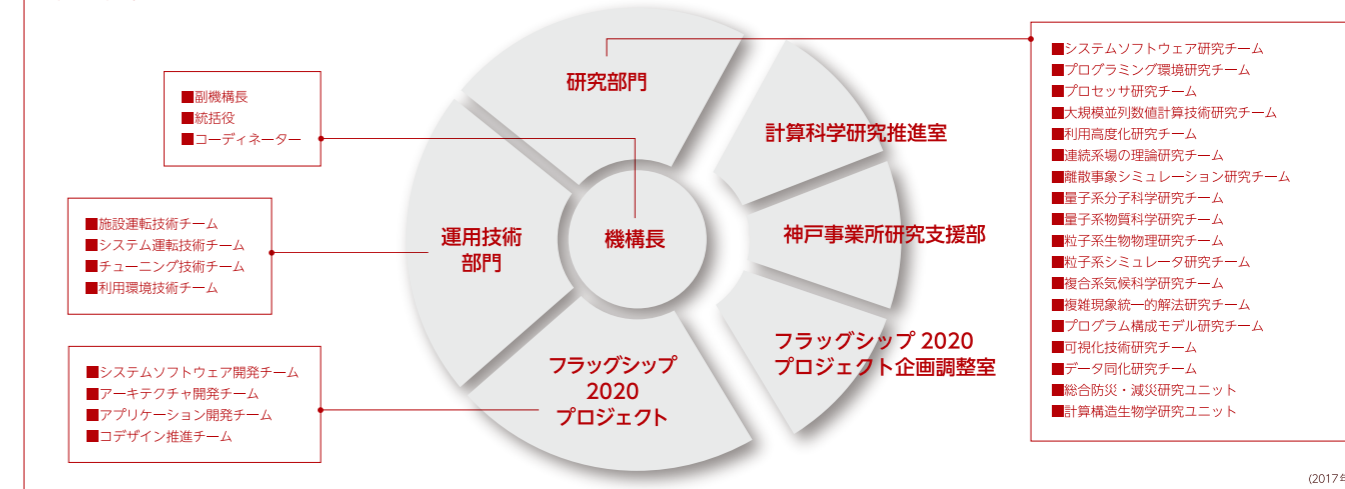
また私たちは文部科学省が推進する「フラッグシップ2020プロジェクト」の下、「京」の後継機であるポスト「京」スーパーコンピュータ開発プロジェクトをスタートさせ、2020年頃からの本格稼働を目指しています。計算科学研究機構は「京」の運用・成果創出とポスト「京」の開発というふたつの大きな使命を果たすため、全力をあげて取り組んでいます。引き続きご支援をよろしくお願いいたします。

基本コンセプト

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」を確立し、以下のことを実行します。

- スーパーコンピュータ「京」の運用を行い、ユーザに対して使いやすい計算環境を提供する
- 計算機科学分野と計算科学分野の連携・融合させた研究を行う国際的な研究拠点を形成し、先進的成果の創出や科学技術のブレイクスルーを生み出す
- ポスト「京」コンピュータとそれを活用するアプリケーション・ソフトウェアの開発、および計算科学技術のあり方や将来構想を策定する

組織図



(2017年4月~)

System システム

スーパーコンピュータ「京」システムの特徴

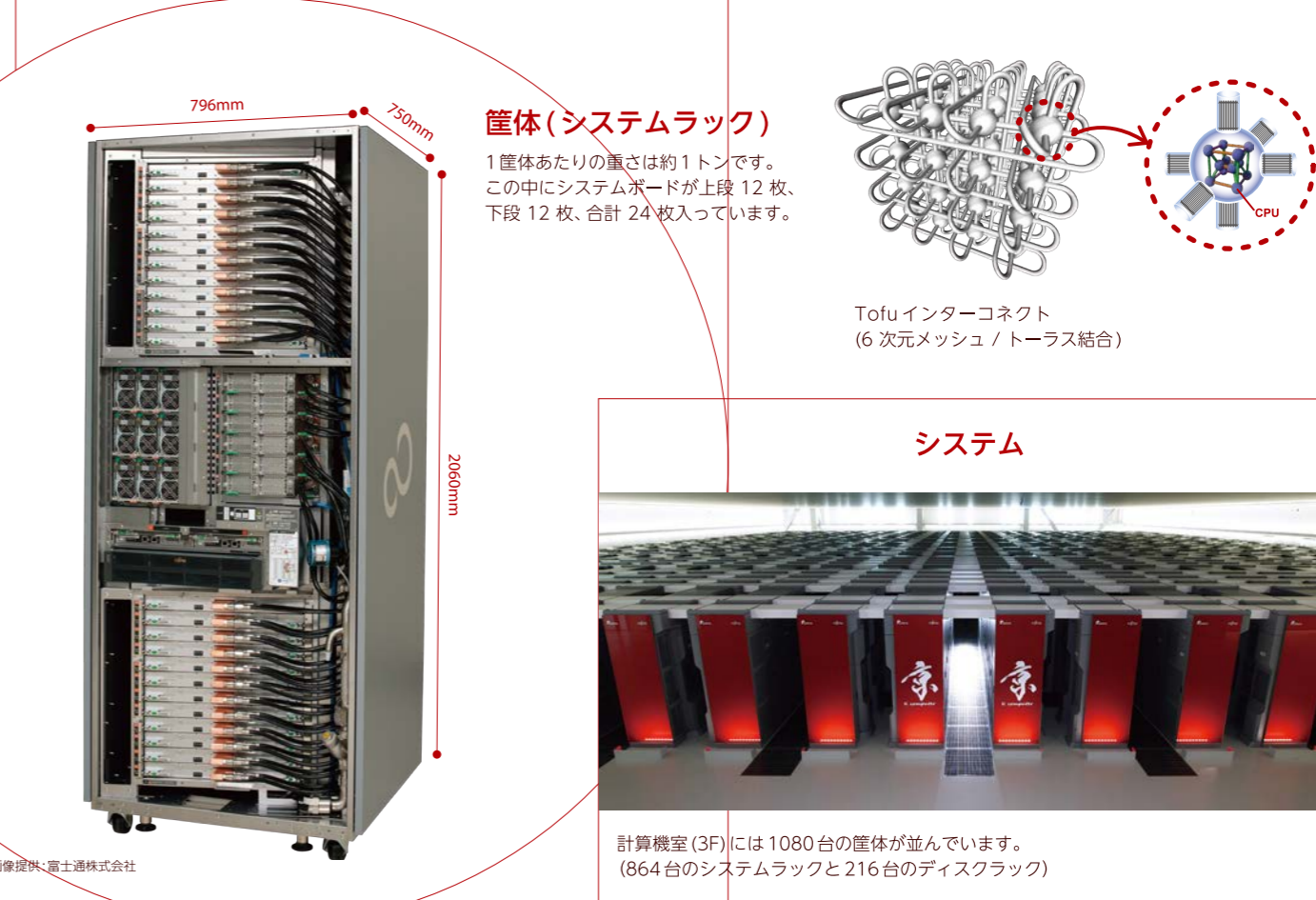
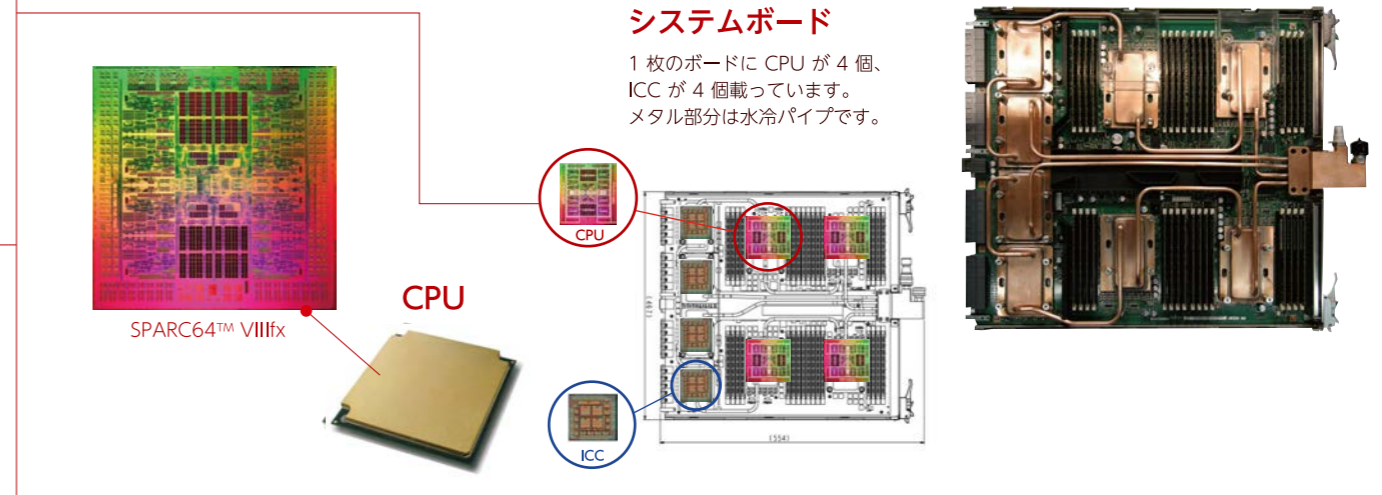
- 理化学研究所と富士通株式会社の共同開発、日本の粋を集めた純国産のスーパーコンピュータ
- LINPACK 10ペタフロップスの計算性能
- 高い信頼性
- 幅広い分野の科学技術計算に使用され、実アプリでペタフロップスを超える実行性能
- ・45ナノメートル半導体プロセス技術によるCPU (SPARC64™ VIIIfx、8コア、128ギガフロップス) を採用。高性能化・大規模化のための機能として、CPUが扱う細かいデータ単位を複数個まとめて扱えるよう拡張する (SIMD化) とともに、データ一貫性のためのチェック・訂正および再実行の機能を随所に備え、アプリケーション実行の高性能化・信頼性向上に寄与。
- ・計算ノード間ネットワークには、構成の柔軟性・拡張性が高く超大規模接続が可能な直接結合網*16次元メッシュ / トーラス結合 (ユーザービューは3次元トーラス) を採用。ユーザー利便性、耐故障性・運用性の向上に寄与。
- ・水冷システムを導入することにより、効率良くシステムを冷却して消費電力を削減するとともに、故障率を低減。
- ・年間30万本以上のジョブを実行。通年で93.3%の稼働率を実現。*2 (2014年度)
- ・30PBを超える世界最大級のユーザー領域を提供。

*1 ネットワークには直接結合網と間接結合網という2つの方式がある。直接結合網は2ノード間の結合をさまざまに拡張して全体を構成する方式で、間接結合網は複数ノードの間の接続に切り替え装置 (スイッチ) などを用いて全体を構成する方式。3次元トーラスネットワークは直接結合網の一種であり、3次元の立方体に配置したノードをそれぞれ6方向で結合し、各次元がそれぞれリング状に結合されるネットワーク構成をとる。
*2 定期点検などの保守期間を除く。

スーパーコンピュータ「京」の性能

ピーク性能	10.62PFLOPS	帯域	5GB/s×2 (双方向)	CPU数	82,944個
メモリ総容量	1.26PB (16GB/node)	バイセクションバンド幅*3	30TB/s	コア数	663,552個
ネットワーク	Tofuインターコネクト (6次元メッシュ / トーラス結合)				

*3 ノード群を2等分した場合のグループ間のネットワークの双方向通信帯域。



Awards 受賞



TOP500 1位獲得!

(2017年6月現在)

規則的な行列演算である連立一次方程式を解くベンチマーク: LINPACKを用い、スーパーコンピュータの性能を評価するランキング。2011年6月と11月に1位を獲得しました。



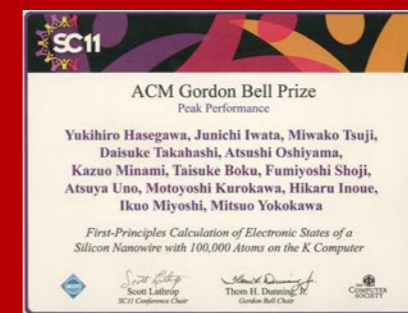
HPCG 1位獲得!

産業利用など実際のアプリケーションで良く使われる計算手法である共役勾配法を用いた新たなベンチマーク: HPCGを用い、スーパーコンピュータの性能を評価するランキング。2016年11月と2017年6月に1位を獲得しました。



Graph500 1位獲得!

ビッグデータの処理などで使用される、グラフの幅優先探索を行うベンチマーク: Graph500を用い、スーパーコンピュータの性能を評価するランキング。2014年6月と2015年6月~2017年6月、通算6期1位を獲得しています。



ゴードン・ベル賞 受賞!

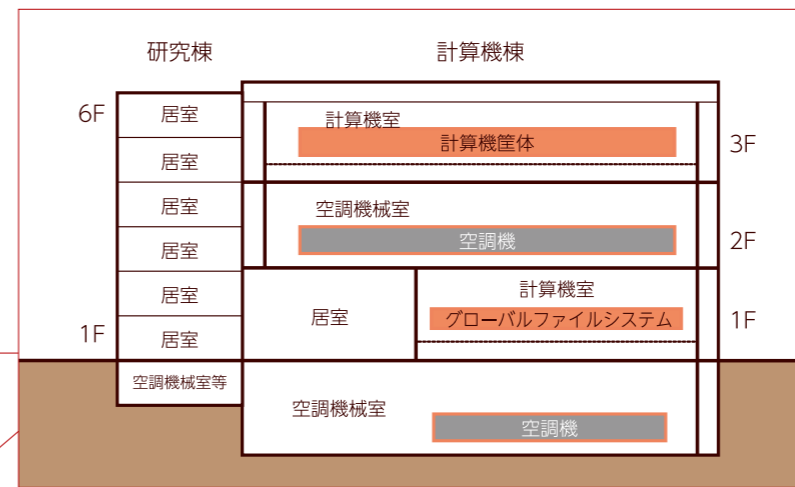
ハードウェアとアプリケーションの開発において最も優れた成果を挙げた論文に与えられる賞。計算機設計者として著名な米国のゴードン・ベル氏により、並列計算機技術開発の推進のため1987年に創設されました。2011年にはシリコン・ナノワイヤ材料の電子状態計算にて、2012年にはダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算にて受賞しました。



HPCチャレンジ賞 1位獲得!

科学技術計算で多用される28項目の計算パターンによって、スーパーコンピュータの総合的な性能を多角的に評価するベンチマーク。ベンチマークの性能を競うクラス1と、ベンチマークを実装するプログラミング言語の生産性を競うクラス2があり、いずれも1位を獲得しています。(クラス1は4部門同時受賞)

Facilities 施設 / 設備



- <敷地面積> 約2ha (準工業地域)
- <電力設備> 77kV 特高受電、
コージェネレーション発電(約5MW)併用
- <冷却設備> 蒸気吸収式冷凍機(コージェネレーションシステムからの廃熱回収蒸気を活用)
高効率インバーターターボ冷凍機

施設の耐震性・耐久性



地下ピットの免震装置 (左から、積層ゴム、鋼製U型ダンパー、鉛ダンパー)

スーパーコンピュータ「京」の性能を最大限引き出す設備・能力の確保

◆基礎

- ・地盤支持力の強化、液化現象対策を目的として、埋立て部分(20m)の地盤改良を実施(神戸市)。
- ・地盤改良部を支持層とする2mの直接基礎+沈下抑制杭。

◆耐震性

- ・研究棟および計算機棟は免震構造。積層ゴムによる免震装置を49箇所設置。さらに、震動をすばやく抑える鉛ダンパーや鋼製U型ダンパーを設置。
- ・耐震グレードはSグレード。震度6強レベルの大地震が起きてても主要な機能を確保可能。

◆耐久性(海浜地区の塩害対策)

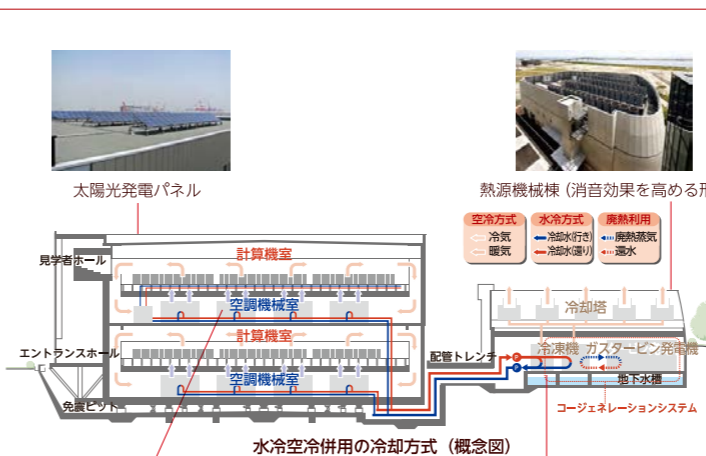
- ・重要な構造体には防錆対策などを実施。
- ・計算機棟外壁をアルミパネル、研究棟外壁をガラス調として建設、耐塩害性に優れた部材を採用。

◆計算機室構造

- ・設置レイアウトの自由度の確保、スパコンの相互接続時の通信線長の短縮化および均一化に対応するため、計算機室は無柱化。
- ・計算機設置フロアの床耐荷重は平均1トン/m²。

環境への配慮

ランニングコストと環境負荷の低減化



計算機棟空調機械室



熱源機械棟: 冷凍機

◆省エネへの配慮

- ・最も省エネ性能が優れている機器(トップランナー)以上の性能目標を設定し、それを達成する高効率機器を採用(トップランナー方式)。
- ・コージェネレーション発電で生じた廃熱の有効活用。
 - ✓ 廃熱を回収し、施設の冷暖房に再利用。
 - ✓ 電気事業者の火力発電よりもエネルギーを高効率で利用。(総合効率75%以上)
- ・計算機棟屋根面に太陽光発電パネルを設置し、最大50kWの電力を創出。

◆計算機室の空調方式

- ・計算機筐体を水冷および空冷併用の冷却方式を採用し、筐体の発熱を効率よく除去。

◆雨水および冷却塔ブロー水の再利用

- ・植栽灌漑水および便所洗浄水として利用。
- ・地下ピット利用雑用水槽に蓄水、各所へ給水。

◆騒音の低減化

- ・消音効果を高める建屋形状とし、周囲の環境に配慮。

「京」の安定稼働を支える最先端技術

Outline of development of the post-K computer

ポスト「京」開発と概要

文部科学省が推進する「フラッグシップ2020プロジェクト」の下、スーパーコンピュータ「京」の後継機となるポスト「京」の開発とポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に対応したアプリケーションの開発を行い、世界を先導する成果の早期創出を目指すプロジェクトが開始されました。理化学研究所はポスト「京」の開発主体として開発・整備を進めており、2020年頃の運用開始を目指しています。

● 社会と科学の課題の解決を最優先

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します。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します。

● 世界トップレベルの性能へ

世界最高水準の汎用的なシステムを実現します。

● 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・国際標準となる技術の実現を目指します。

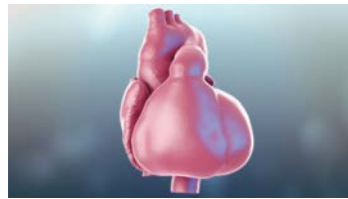
● 「京」の資産を継承

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します。

Research

「京」を用いた研究成果 (一例)

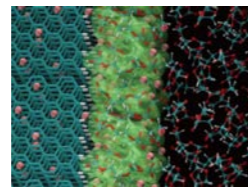
超並列計算によるマルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレーション
UT-Heart



物理的、生理的に本物の心臓と同じ動きをするヒトの心臓を「京」の上に再現しました。細胞内の分子の振る舞いから出発し、心筋の収縮弛緩、心臓の拍動を経て血液の流れに至る総ての現象をシームレスに接続しシミュレートしています。

HPCI戦略プログラム 分野1
株式会社UT-Heart研究所/協力 富士通株式会社

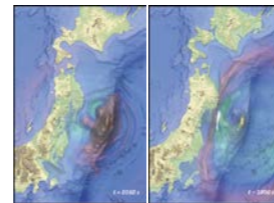
「京」を用いてリチウムイオン電池電解液—電極界面の還元分解と被膜形成機構を解き明かす
～リチウムイオン電池の性能と安全性向上に向けた計算機材料設計の道を拓く～



「京」上で化学反応シミュレーションを実行し、リチウムイオン電池の性能と安全性の鍵となる被膜「SEI膜」の形成につながる電解液の還元分解反応を分子レベルで明らかにすることに成功しました。

HPCI戦略プログラム 分野2 物質・材料研究機構 館山佳尚、袖山慶太郎、富士フイルム 奥野幸洋、後高敬介/論文発表: J. Am. Chem. Soc., 2013, 135, 11967-11974.

2011年東北地方太平洋沖地震地震動・津波・地殻変動の同時シミュレーション



巨大地震により引き起こされる強い揺れ、地殻変動、そして津波を一度に再現しました。「京」の計算力を用いて地震津波の基本方程式の直接計算ができるようになり、強震動と津波とを同時に評価することができるようになりました。

HPCI戦略プログラム 分野3 東京大学地震研究所 前田拓人・古村孝志/論文発表: Maeda et al., Bull. Seism. Soc. Am., 2013, 103, 1456-1472.

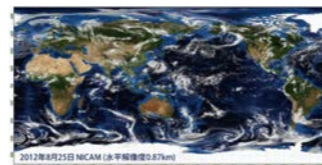
自動車空力シミュレーション
～実走行時の自動車周りの空気の流れを再現～



実走行時の自動車に発生する空気の渦は燃費や走行安定性と関連しています。「京」で自動車の運動と空気の流れを連成させて計算することで、今までのスパコンでは再現できなかった実走状態の細かい渦を再現することができました。

HPCI戦略プログラム 分野4
神戸大学、広島大学、理化学研究所計算科学研究機構、マツダ株式会社

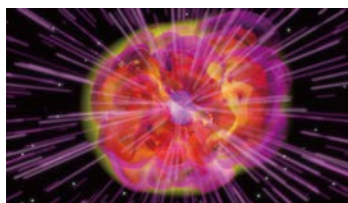
「京」を利用した世界初の超高解像度全球大気シミュレーションで積乱雲をリアルに表現
～台風や集中豪雨などの発生メカニズムの解明に寄与～



「京」を使って水平格子間隔870mの超高解像度の全球大気シミュレーションを行うことに世界で初めて成功し、これまでは詳細に表現することが難しかった積乱雲を非常に良く表現できることを明らかにしました。

海洋研究開発機構・東京大学大気海洋研究所 (HPCI戦略プログラム 分野3) および理化学研究所計算科学研究機構の共同研究/可視化: 理化学研究所計算科学研究機構 (複合気象観測科学チーム) 吉田龍二

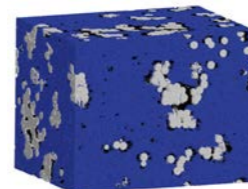
スーパーコンピュータ「京」を用いた計算で超新星爆発のニュートリノ加熱説が有望に



「京」を用いて大規模なシミュレーションを行い、超新星爆発がニュートリノ加熱によって起こる可能性を示しました。現実に近い超新星爆発の計算を行い、自然な仮定の下に超新星が爆発する初めての例を得ることができました。

HPCI戦略プログラム 分野5
滝脇知也、岡武慶、諏訪雄大 ©国立天文台

モーターショーで「京」を使った新材料開発技術が生み出した新しいタイヤ公開
～安全性・低燃費性・耐摩耗性の実現のために～



大型放射光施設「Spring-8」と大強度陽子加速器施設「J-PARC」で得られたゴムの高解像度の内部構造や分子の運動を「京」で再現・シミュレーションを行い、ゴム内部の破壊や発熱のしくみを明らかにしました。

住友ゴム工業株式会社

Research Subjects of the post-K computer

ポスト「京」の研究課題

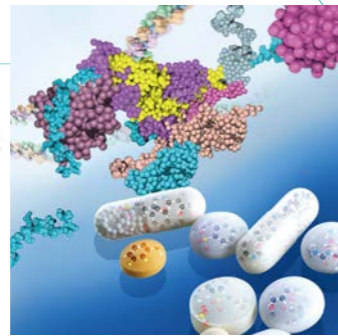
世界を先導する成果創出が期待され、またポスト「京」を有効に活用できる課題として、文部科学省により選定されました。

健康長寿社会の実現

重点課題 1

生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

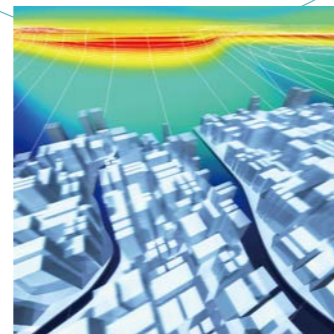
理化学研究所生命システム研究センター 他6機関



重点課題 3

地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

東京大学地震研究所 他4機関



重点課題 2

個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

東京大学医科学研究所 他4機関



重点課題 4

観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

海洋研究開発機構 他5機関



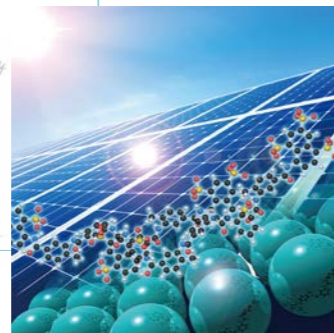
防災・環境問題

エネルギー問題

重点課題 5

エネルギーの効率的な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

自然科学研究機構分子科学研究所 他8機関



重点課題 6

革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

東京大学大学院工学系研究科 他11機関



産業競争力の強化

重点課題 7

次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

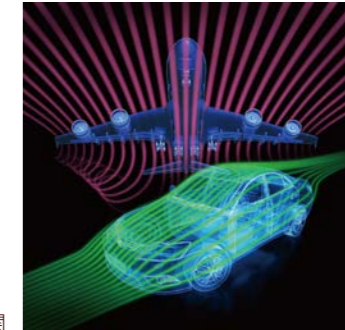
東京大学物性研究所 他9機関



重点課題 8

近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

東京大学生産技術研究所 他7機関

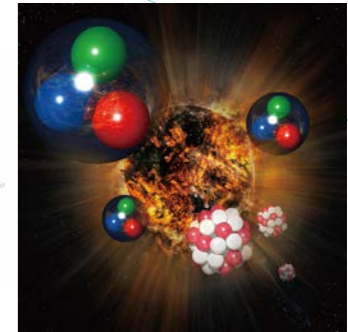


基礎科学の発展

重点課題 9

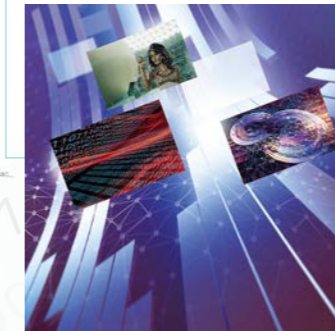
宇宙の基本法則と進化の解明

筑波大学計算科学研究センター 他10機関



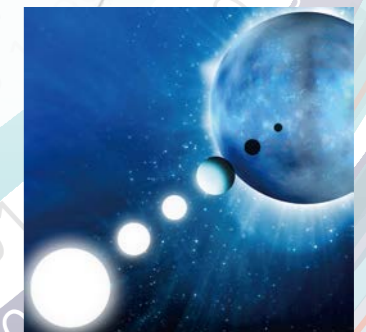
萌芽的課題 1

基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦 -



萌芽的課題 3

太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明



萌芽的課題 2

複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究



萌芽的課題

ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジな課題として、今後調査研究を通じて実現化が検討される4課題です。

萌芽的課題 4

思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用

