

H P C I 戦略プログラム 概要説明資料

平成25年12月4日

文部科学省 研究振興局

参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室

- ◆ 全体概要
- ◆ 推進体制
- ◆ 「京」の戦略的利用
- ◆ 計算科学技術推進体制の構築
- ◆ 中間評価実施の全体像、進め方

H P C I 戦略プログラム

事業概要

スーパーコンピュータ「京」を中核とするH P C I を最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進する。

具体的取り組み

- 平成21年度に実施可能性調査(実施計画の取りまとめ)を行い、平成22年度の準備研究(本格実施に向けた計画の具体化やアプリケーション整備)を通じて課題の絞り込みを実施。
 - 平成23年度から成果創出に向けた本格実施を開始。(～平成27年度)【今回の中間評価の対象】
- 各分野4～7の研究開発課題に取り組むとともに、計算科学技術推進体制の構築のため、研究支援体制整備、HPCI資源の効率的マネジメント、人材育成等を実施。

【マネジメント体制】

戦略プログラム推進委員会

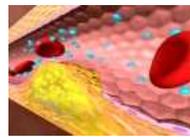
分野別作業部会 (5分野)

プログラム全体を統括するP M (プロジェクトマネージャ)と各戦略分野ごとにF M(分野マネージャ)を設置し、戦略分野の実施計画等についてフォローアップ・改善提言・指導を実施

(分野1)

理研

「予測する生命科学・医療および創薬基盤」



(分野5)

筑波大

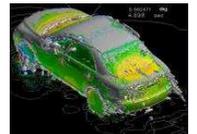
「物質と宇宙の起源と構造」



(分野4)

東大生産研

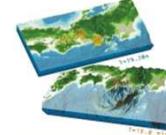
「次世代ものづくり」



(分野3)

JAMSTEC

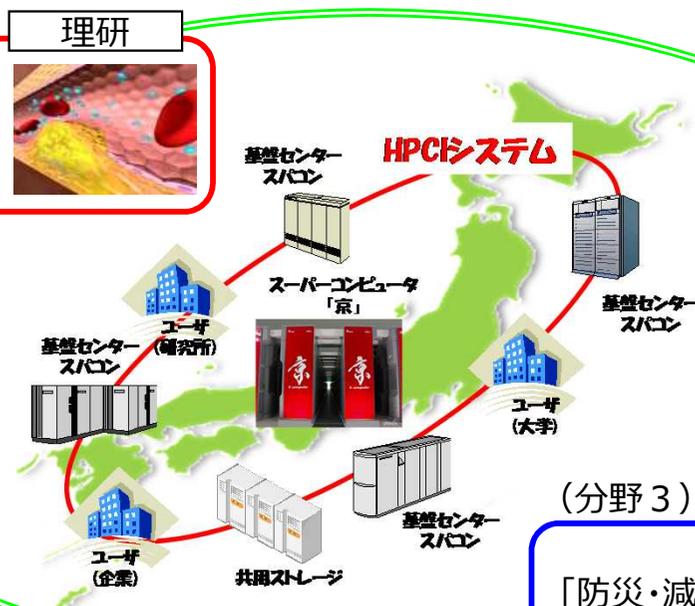
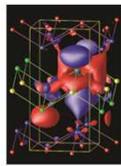
「防災・減災に資する地球変動予測」



(分野2)

東大物性研

「新物質・エネルギー創成」



戦略的な計算科学技術基盤の構築により画期的な成果を創出

戦略分野検討経緯

次世代スーパーコンピュータ戦略委員会（平成21年7月22日）＜平成20年12月3日～平成21年9月29日 全16回＞

次世代スーパーコンピュータ戦略委員会において、次世代スーパーコンピュータの計算資源を必要とし、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「戦略分野」について検討を実施。

検討に当たっては、

- ①次世代スパコンの能力でなければできない課題があるかどうか
- ②社会的・国家的見地から見て高い要請があるかどうか
- ③次世代スパコン稼働後5年間で具体的な成果を出せる見通しがあるかどうか

各分野(※)の有識者からヒアリングを実施し、それぞれの分野における現状と課題、ニーズや期待等を確認。（産業界からは、ものづくり分野やライフ分野においてヒアリングを実施。）

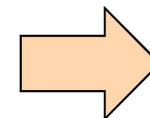
※ナノ分子分野、ナノ物性物理分野、ものづくり分野、ライフ分野、地球環境分野、防災分野、エネルギー(光合成、原子力、核融合)分野、素粒子・原子核分野、流体分野、航空宇宙分野

ということを判断の軸としながら、我が国における研究開発の現状と研究者コミュニティの広がり、世界の研究開発動向と世界における我が国の立ち位置等を考慮。

また、戦略分野の研究開発を担う戦略機関については、我が国の計算科学技術を牽引し世界を先導していくことが求められ、戦略機関を中心に関係機関が連携をし、我が国全体として力を発揮できる体制を整えることが必要であり、このような体制整備の観点もあわせて考慮。

以上のような検討の結果、次世代スーパーコンピュータ戦略委員会として、戦略分野を以下のとおり決定。

- 分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤
- 分野2 新物質・エネルギー創成
- 分野3 防災・減災に資する地球変動予測
- 分野4 次世代ものづくり
- 分野5 物質と宇宙の起源と構造



公募により戦略機関を決定

戦略機関公募結果

●公募期間

平成21年8月11日～平成21年10月13日

●審査検討会

書類審査：平成21年10月15日～22日

ヒアリング審査：平成21年10月29日～30日

●審査項目

(1) 研究開発課題

- 1) 戦略目標が戦略分野の趣旨に沿ったものであること。
- 2) 次世代スパコン稼働後5年間で世界最高水準の成果を出せる可能性が高いこと。
- 3) 次世代スパコンの能力を効果的に活用するものであること。
- 4) 実施体制が適切なものであること。

(2) 計算科学技術推進体制

- 1) 計算資源の効率的マネジメント、人材育成等の計画が、戦略委員会の議論の趣旨に沿ったものであること。
- 2) 実施体制が戦略分野の一定のコミュニティを代表できるものとなっていること。
- 3) 提案機関がコミュニティを取りまとめていくための高い実績、ポテンシャルを有していること。

	決定した戦略機関
分野1	理化学研究所
分野2	東京大学物性研究所(※) 分子科学研究所 東北大金属材料研究所
分野3	海洋研究開発機構
分野4	東京大学生産技術研究所(※) 宇宙航空研究開発機構 日本原子力研究開発機構
分野5	筑波大学(※) 高エネルギー加速器研究機構 国立天文台

(※)代表機関

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

推進体制

HPCI戦略プログラム推進委員会

HPCI戦略プログラムの推進

HPCI戦略プログラム全体の進捗状況の把握、提言・指導

プログラムマネージャ：全体的な観点からプロジェクトの実施計画や進捗に関し提言を行う。

土居範久（慶応義塾大名誉教授）

分野マネージャ：統括責任者等のプロジェクト実施者との意見交換とプロジェクト実施に係る指導・助言を行う。

[分野1] 中村春木（大阪大理事補佐/蛋白研筆頭副所長）

[分野2] 寺倉清之（北陸先端大シニアプロフェッサー）

[分野3] 矢川元基（東洋大名誉教授）

[分野4] 小林敏雄（日本自動車研究所顧問）

[分野5] 小柳義夫（神戸大システム情報学研究科特命教授）

計算科学研究機構長：機構と戦略プログラムの連携・協力の観点からプロジェクト実施に係る意見を述べる。

平尾公彦機構長

具体的な審議内容：

- ✓「京」の戦プロ利用枠における計算資源配分方針
- ✓「京」の計算資源を重点的に配分する課題選定
- ✓戦略機関の実施計画、進捗管理・評価(特に重点課題)

分野別作業部会

分野マネージャ及び外部有識者（4名～7名）から構成され、分野ごとにプロジェクトの実施計画や進捗状況を把握し、指導・助言等を行うために開催

分野1
作業部会

分野2
作業部会

分野3
作業部会

分野4
作業部会

分野5
作業部会

具体的な審議内容：

- ✓分野内の「京」の計算資源配分
- ✓戦略機関の実施計画、進捗管理・評価(課題ごとのレベルまで掘り下げ)

戦略機関（実施者）

研究開発課題への取り組みによる成果創出と、計算科学技術推進体制の構築を実施

分野1
理研

分野2
東大物性研

分野3
JAMSTEC

分野4
東大生産研

分野5
筑波大

連携

- ✓効果的・効率的運用
- ✓アプリ高度化

計算科学 研究機構

「京」の運用

分野別作業部会 委員一覧

分野1	(分野マネージャ) 中村 春木	大阪大学理事補佐/蛋白研筆頭副所長
	茅 幸二	理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラムディレクター
	児玉 龍彦	東京大学先端科学技術研究センター教授
	菅野 純夫	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授
	長田 重一	京都大学大学院医学研究科教授
	松本 洋一郎	東京大学理事・副学長
	美宅 成樹	豊田理化学研究所客員フェロー
分野2	(分野マネージャ) 寺倉 清之	北陸先端科学技術大学院大学シニアプロフェッサー
	粟野 祐二	慶應義塾大学理工学部電子工学科教授
	幾原 雄一	東京大学大学院工学系研究科総合研究機構教授
	魚崎 浩平	物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 ナノグリーン分野コーディネータ・主任研究者
	加藤 雅治	東京工業大学大学院総合理工学研究科教授
	高梨 弘毅	東北大学金属材料研究所副所長
分野3	(分野マネージャ) 矢川 元基	東洋大学名誉教授
	鬼頭 昭雄	筑波大学生命環境系主幹研究員

分野3 (続き)	住 明正	国立環境研究所理事長
	萩原 一郎	明治大学先端数理学インスティテュート副所長 研究知財戦略機構・特任教授
	長谷川 昭	東北大学名誉教授
分野4	(分野マネージャ) 小林 敏雄	日本自動車研究所顧問
	天野 吉和	富士通システムズ・ウエスト取締役会長
	奥田 基	富士通TCソリューション事業本部 エグゼクティブアーキテクト
	押山 淳	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻教授
	笠 俊司	IHI技術開発本部管理部技術企画グループ部長
	後藤 彰	荏原製作所風水力機械カンパニー理事副開発統括
分野5	澤田 隆	日本原子力学会理事・事務局長
	古川 雅人	九州大学大学院工学研究院機械工学部門教授
	(分野マネージャ) 小柳 義夫	神戸大学システム情報学研究科特命教授
	相原 博昭	東京大学大学院理学系研究科教授
	海老沢 研	宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所教授
	延與 秀人	理化学研究所仁科加速器研究センター長
	岡 眞	東京工業大学大学院理工学研究科教授
	川合 光	京都大学大学院理学研究科教授
佐藤 勝彦	自然科学研究機構長	

「京」の戦略的利用

■ H23年度～H24年度上期：「京」試験利用期間

「京」の共用開始(H24年9月末)後の本格利用に向け、計算科学研究機構と連携し、「京」の性能を最大限に発揮するアプリケーションの準備(高度化)を実施。

- ▶ 30本以上のアプリケーションで、「京」の24,576ノード(※1)で十分な並列化効率を達成。
- ▶ 『「京」によるシリコン・ナノワイヤーの第一原理計算』が2011年ゴードン・ベル賞(※2)を受賞。

(※1)試験利用期間中に1ジョブで利用可能なノード数。

(※2)ゴードン・ベル賞：米国計算機学会(ACM)が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。

■ H24年度下期

各課題への基礎的配分は分野ごとの裁量を尊重しつつ、早期の成果創出を図るため、分野全体を通じてトップダウン的に重点化する課題と追加配分資源量を決定。

- ✓ 各分野に計算資源を均等配分し、各課題への基礎的配分は分野内で決定。
- ✓ その上で、プログラム全体を通して優先課題を選定し、計算資源を追加配分。

■ H25年度

最終目標達成に向けて分野ごとの裁量拡大を図るため、重点化する課題を各分野で選定する方式に変更しつつ、重点化課題の追加配分資源量は分野全体を通じてトップダウン的に決定。

- ✓ 各分野に計算資源を均等配分し、各課題への基礎的配分は分野内で決定するとともに、分野ごとに重点課題を選定。
- ✓ その上で、プログラム全体を通して重点課題の一部に計算資源を追加配分。
- ✓ さらに、プログラム全体を通して早期の成果創出が期待される課題に計算資源を追加配分。

「京」の戦略的利用（H23年度～H24年度上期：「京」試験利用期間）

「京」の共用開始後の本格利用に向けた準備を実施 （「京」の性能を最大限に発揮するためのアプリケーション高度化）

H23年4月より、整備中の「京」本体の一部を用いた試験利用が開始され、「京」向けのアプリケーション高度化を実施。試験利用においては、アプリケーション高度化（並列性能等）の進捗具合に応じて、順次、実行アプリケーションの本数や実行ノード数を拡大。

- ▶ 試験利用期間中に、30本以上のアプリケーションが、24,576ノード(※1)で十分な並列化効率を達成。
- ▶ 理研・筑波大・東大・富士通のチームによる『「京」によるシリコン・ナノワイヤの第一原理計算』が、2011年のゴードン・ベル賞(※2)の最高性能賞を受賞。

(※1) 試験利用期間中に1ジョブで利用可能なノード数。

(※2) ゴードン・ベル賞：米国計算機学会(ACM)が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。

「京」の戦略的利用（H24年度下期：「京」共用開始後）

「京」の利用枠



戦略プログラム利用枠

一般配分枠
(一般課題)

25%

重点配分枠
(優先課題)

20%

加速枠

5%

【重点配分枠の評価項目】

- ✓ 画期的な科学的成果、又は社会的課題の解決に資する成果が見込まれること。
- ✓ 「京」の能力を最大限活用しなければ解決できない大規模計算。
- ✓ 早期の成果創出のための研究体制。
- ✓ 超高並列実行の準備状況。
- ✓ 特に、H24年度内又はH25年度早期に画期的な成果が上げられると見込まれること。

【一般配分枠】

- ◆ 各分野に均等配分する一般配分枠を設定し、各分野内での研究計画に基づき計算資源を配分(分野別作業部会にて審議・決定)。一般配分枠については、各課題の進捗状況に応じて、分野内での計算資源の再配分が可能。

【重点配分枠】

- ◆ 「京」の共用開始後、早期に画期的な科学的成果、又は社会的課題の解決に資する成果を創出するため、戦略プログラム全体を通して優先課題を選定し、優先課題に追加配分する計算資源として重点配分枠を設定。優先課題については、HPCI戦略プログラム推進委員会に外部有識者を加えた選定会議にて審議・決定し、計算資源の追加配分に加えて、ジョブ投入制限数を緩和。

【加速枠】

- ◆ 利用実績と期待される成果創出加速内容に基づき、計算資源を追加配分する加速枠を設定。(ただし、H24年度については、「京」の共用開始直後で利用実績が十分に蓄積されておらず、各分野における機動的な差配を可能とするため、各分野に1%ずつ均等配分し、分野内において資源を配分。)

「京」の戦略的利用（H25年度）

「京」の利用枠



戦略プログラム利用枠

分野配分枠
(一般課題＋重点課題)

上期40%
下期35%

重点課題
追加配分枠

上期10%
下期10%

加速
枠

上期0%
下期5%

【重点課題追加配分枠の評価項目】

- ✓ 画期的な科学的成果、又は社会的課題の解決に資する成果が見込まれること。
- ✓ 「京」の能力を最大限利活用しなければ解決できない大規模計算。
- ✓ 成果創出のための適切な研究体制。
- ✓ 超高並列実行の準備状況。
- ✓ H24年度の成果実績。
- ✓ 計算資源の追加配分による効果。

各課題の最終目標達成に向けて、分野あたりの配分量を増やし分野の裁量分を多くするため、分野に均等配分する計算資源割合(分野配分枠)を増加。

【分野配分枠】

- 分野配分枠において、画期的な科学的成果、又は社会的課題の解決に資する成果が見込まれ、計算資源を重点的に配分する必要があるものを重点課題として選定(分野別作業部会にて審議・決定)するとともに、各分野内での重点課題については、ジョブ投入制限数を緩和。また、分野内での計算資源の再配分が可能(重点課題の資源を減ずることは×)。

【重点配分枠】

- 戦略プログラム全体を通して、重点課題に追加配分する計算資源として重点課題追加配分枠を設定(重点課題ごとの追加配分量については、HPCI戦略プログラム推進委員会に外部有識者を加えた選定会議にて審議・決定)。

【加速枠】

- 利用実績と期待される成果創出加速内容に基づき、計算資源を追加配分する加速枠を設定(HPCI戦略プログラム推進委員会にて審議・決定)。

計算科学技術推進体制の構築

『高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出』、『最先端計算科学技術研究教育拠点の形成』のため、HPCI戦略プログラムの各戦略機関を中心に、計算科学技術推進体制の構築を進めている

「京」を含むHPCI環境を効果的に利用するための実行環境およびソフトウェア環境の整備

HPCIの利用普及、情報発信と理解増進、研究教育の人材育成

▶ 計算機資源の効率的なマネジメント

- 「京」を利用するアプリケーションの進捗状況の把握
- 「京」の計算資源の効果的な分野内配分
- HPCI環境を利用するための分野内計算機環境の整備

▶ 各分野における「京」等のHPCIシステム利用に際しての研究支援協力

- 「京」等を利用する研究者への利用支援
- 「京」等を利用するアプリケーションの高度化支援
- 分野共通アプリケーションの公開支援

▶ 人材育成

- 大学、研究所と連携した人材育成、教育プログラムの実施
- サマースクール、集中実習

▶ 人的ネットワークの形成

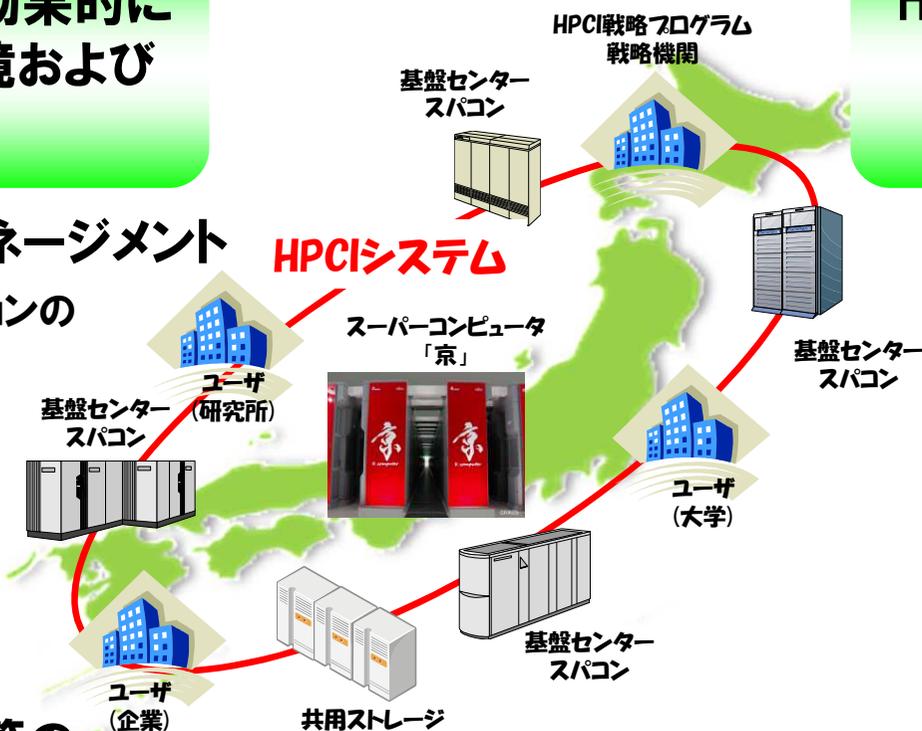
- 研究会、講習会
- プロジェクト外の研究者への認知度向上、シンポジウム開催

▶ 研究成果の普及

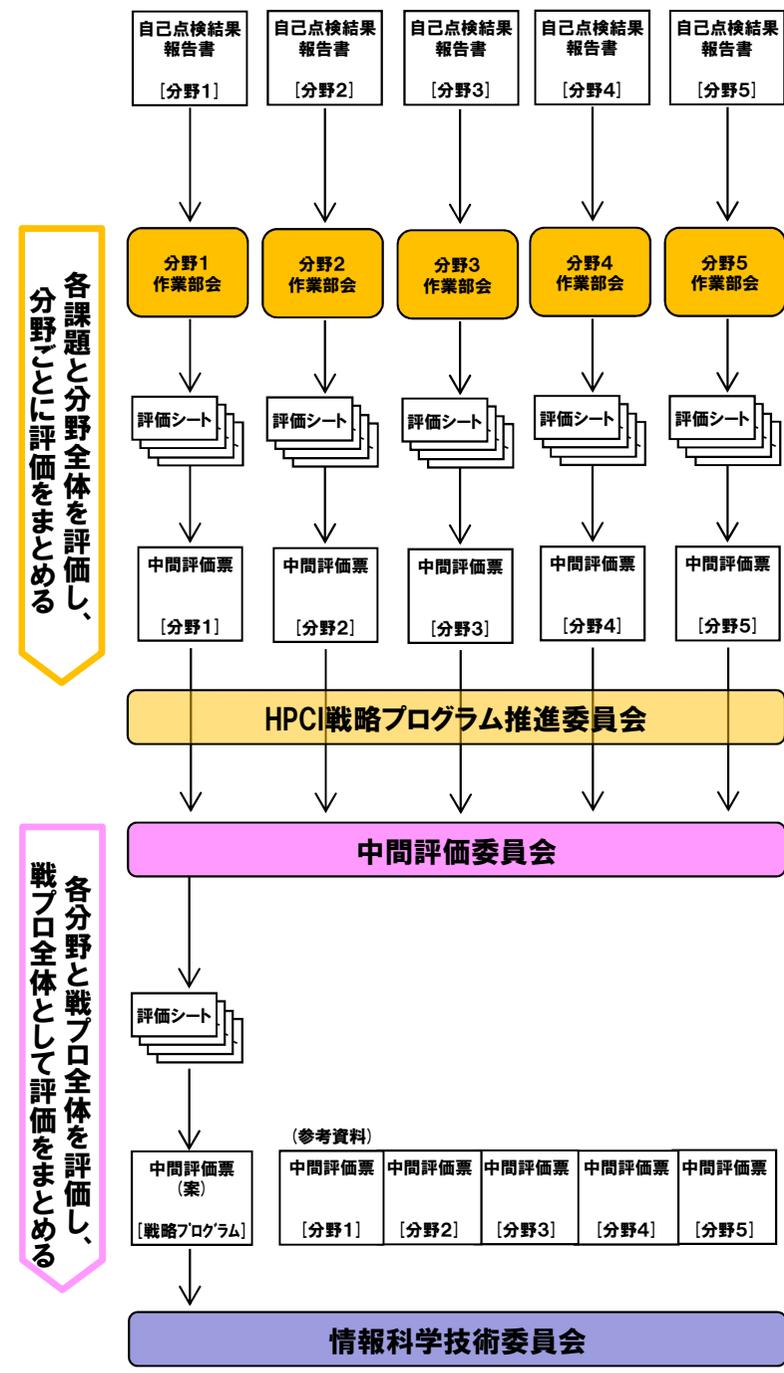
- 各種媒体を用いた情報発信（広報誌、HP、アプリケーション公開）

▶ 分野を超えた取り組みの推進

- 実験グループとの連携
- 他の戦略分野との合同シンポジウム



HPCI戦略プログラム 中間評価の進め方



參考資料

H24年度優先課題選定委員

HPCI戦略プログラム推進委員会		
プログラムマネージャ	土居 範久	慶応義塾大学名誉教授
分野マネージャ(分野1)	中村 春木	大阪大学理事補佐/蛋白研筆頭副所長
分野マネージャ(分野2)	寺倉 清之	北陸先端科学技術大学院大学シニアプロフェッサー
分野マネージャ(分野3)	矢川 元基	東洋大学名誉教授
分野マネージャ(分野4)	小林 敏雄	日本自動車研究所顧問
分野マネージャ(分野5)	小柳 義夫	神戸大学システム情報学研究科特命教授
計算科学研究機構長	平尾 公彦	理化学研究所計算科学研究機構長
外部有識者		
ライフサイエンス関係	松田 道行	京都大学大学院生命科学研究科教授
物質・材料関係	小池 康博	慶應大学理工学部教授
気象・気候関係	住 明正	東京大学サステナビリティ学連携研究機構教授
地震・防災関係	目黒 公郎	東京大学生産技術研究所教授
産業界	半沢 宏之	第一三共研究開発本部機能分子第二研究所第五グループ長
	大富 浩一	東芝研究開発センター参事
基礎物理関係	武田 廣	神戸大学理事・副学長
基盤センター・数理科学関係	中島 研吾	東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング研究部門教授
	関口 智嗣	産業技術総合研究所副研究統括情報通信・エレクトロニクス分野担当
その他	瀧澤 美奈子	科学サイエンスジャーナリスト

H25年度重点課題追加配分枠選定委員

HPCI戦略プログラム推進委員会		
プログラムマネージャ	土居 範久	慶応義塾大学名誉教授
分野マネージャ(分野1)	中村 春木	大阪大学理事補佐/蛋白研筆頭副所長
分野マネージャ(分野2)	寺倉 清之	北陸先端科学技術大学院大学シニアプロフェッサー
分野マネージャ(分野3)	矢川 元基	東洋大学名誉教授
分野マネージャ(分野4)	小林 敏雄	日本自動車研究所顧問
分野マネージャ(分野5)	小柳 義夫	神戸大学システム情報学研究科特命教授
計算科学研究機構長	平尾 公彦	理化学研究所計算科学研究機構長
外部有識者		
ライフサイエンス関係	四方 哲也	大阪大学大学院情報科学研究科教授
物質・材料関係	中村 振一郎	理化学研究所社会知創成事業イノベーション推進センター特別研究員
	魚崎 浩平	物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス拠点主任研究者
気象・気候関係	岩崎 俊樹	東北大学大学院理学研究科教授
地震・防災関係	林 春男	京都大学防災研究所巨大災害研究センター教授
産業界	天野 吉和	富士通常勤監査役
	笠 俊司	IHI技術開発本部管理部技術企画グループ部長
基礎物理関係	武田 廣	神戸大学理事・副学長
基盤センター関係	青柳 睦	九州大学情報基盤開発研究センター長・教授
	小林 広明	東北大学サイバーサイエンスセンター長・教授
その他	瀧澤 美奈子	科学サイエンスジャーナリスト