

# HPCI戦略プログラムの 取り組みについて

平成28年3月9日

プログラムマネージャ

土居 範久

- ◆ HPCI戦略プログラムの推進体制
- ◆ 点検結果 (報告案)ポイント
- ◆ 主な研究成果事例
- ◆ 計算科学技術推進体制の構築における主な取組事例

# HPCI戦略プログラムの推進体制

国として、5つの戦略分野の進捗状況を定期的に把握し、評価を行うために、全体を統括する「推進委員会」を設けている。その下に、分野ごとの状況を把握し、指導・助言を行う「作業部会」を設置している。

## HPCI戦略プログラム推進委員会

〔全体の進捗状況の把握し、提言・指導。〕

○プログラムマネージャ 土居 範久（慶應義塾大学 名誉教授）

○分野マネージャ

- [分野1] 中村春木（大阪大学 蛋白質研究所 所長/教授）
  - [分野2] 寺倉清之（物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 フェロー）
  - [分野3] 矢川元基（原子力安全研究協会 評議員会長）
  - [分野4] 小林敏雄（日本自動車研究所 顧問）
  - [分野5] 小柳義夫（神戸大学 計算科学教育センター 特命教授）
- 理化学研究所 平尾公彦（理化学研究所計算科学研究機構 機構長）

## 分野別作業部会

〔実施計画や進捗状況を把握し、指導・助言。〕

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

## 戦略機関（実施者）

〔各分野の「実施責任者会合」や「運営委員会」が進捗を管理。〕

分野1  
統括責任者  
柳田敏雄  
理研

分野2  
統括責任者  
常行真司  
東大物性研  
分子科学研  
東北大金属研

分野3  
統括責任者  
今脇資郎  
JAMSTEC

分野4  
統括責任者  
加藤千幸  
東大生産研  
JAXA  
JAEA

分野5  
統括責任者  
青木慎也  
筑波大  
KEK  
国立天文台

## 点検結果(報告案)ポイント(1/2)

プログラム全体として、戦略目標を着実に達成している。

### ■ 研究開発目標の達成状況

- 研究開発については、全ての戦略分野で目標に沿った研究開発が推進され、全ての研究開発目標が着実に達成されたと判断する。
- 計算科学技術推進体制については、各戦略分野において大きな広がりを持って構築され、当初の想定以上に機能していると評価できる。

### ■ 研究開発成果および、成果の利活用

- 研究開発成果等については、5つの戦略分野全てで、「京」の性能を活かした数多くの成果が創出されており、独創性も高く、優位性にも富んでいると評価でき、適切であると判断する。
- 成果の利活用については、産業界や実験研究者、臨床現場、他分野との連携も着実に進んでおり、また開発したプログラムの公開や成果の広報、利用支援等の活動が積極的に行われており、各分野における計算科学を用いる研究者層も拡大しているなど、着実に進展したと判断する。

## 点検結果(報告案)ポイント(2/2)

### ■ 今後に向けて

- 経済的波及効果も含め、成果等を実感できる形で分かりやすく広報し、社会的理解を得ていく努力が引き続き必要である。
- 今後、ポスト「京」の開発プロジェクトにおけるアプリケーション開発を含め、成果の適用対象や実用化対象の拡大について、継続して戦略的な検討を行っていくことが必要である。
- 人材育成については、プロジェクト終了後のキャリアアップも含め、我が国全体の計算科学技術人材の育成確保の観点も念頭にしつつ、ポスト「京」での取組も含め、継続的に取り組んでいくことが重要である。
- 最先端のスーパーコンピュータで可能となった技術やソフトウェアを普及・展開していく体制や仕組みを構築することが重要である。
- 本プログラムで構築された研究開発体制やコンソーシアムを、引き続き、我が国の先端的な計算科学技術の研究開発の場として有効に機能させていくことが重要である。

## 主な研究成果事例(分野1)

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

世界初の分子から臓器まで通じた統合的な心臓シミュレーション

課題代表者:

東京大学大学院工学系研究科 高木周

#### 【背景】

- 心臓血管病は人類最大の死因であり、我が国においても65歳以上の医療費の26.5%を占め、2位のガンの約2倍にもなっている(平成25年政府統計)。このため合理的な診断と治療法の開発が望まれている。
- 根本的な解決には分子細胞レベルでの異常とマクロな現象である病態の因果関係を明らかにすることが必要であるため、計算科学的アプローチは大規模にならざるを得ず、「京」の開発が待たれていた。

#### 【「京」による成果】

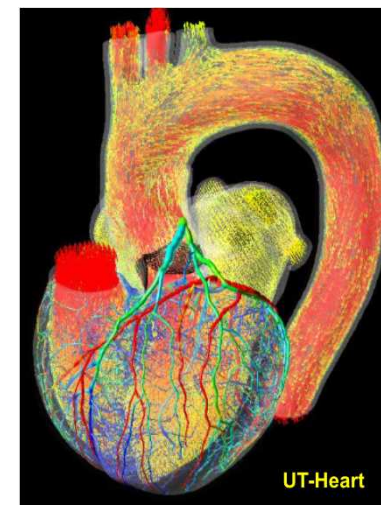
- 心臓の拍動を分子レベルからコンピュータ上に精密に再現することに成功。シミュレーション結果は超音波エコー、流速ドップラー、心電図、カテーテル検査など臨床医学的データとも一致。
- 肥大型心筋症の病態を再現。(従来はサルコメア分子の異常と病気との相関のみが示されていたが、病態発生のメカニズムを「京」を用いたシミュレーションで世界で初めて明らかにした)
- 先天性心疾患など患者の個別心臓を世界で初めてコンピュータ上に再現し仮想治療することに成功。
- CG分野で最も権威のあるSIGGRAPH2015で“BEST VISUALIZATION and SIMULATION”を受賞。

#### 【今後の課題】

- 心臓は負荷に適応して変化していくため、10年後、20年後の長期にわたる予測を行うには、さらなるモデルの精緻化と「京」のパワーを超えた計算機が必要。

#### 【社会への活用】

- シミュレーションによる手術手法の最適化
- 心疾患(死亡者数年19万人)に取り組む医療への貢献



## 主な研究成果事例(分野2)

### 「京」による100,000原子シリコン・ナノワイヤの電子状態の第一原理計算

次世代半導体の新しい設計基本技術を確立

課題代表者:

東京大学大学院工学系研究科 押山淳

#### 【背景】

- 半導体材料は、高分子材料とともに精密機器や電化製品等の現代社会の産業基盤を形成しており、半導体は微細化(集積度を上げる)することで、その性能を向上させてきました。しかし、微細化がこれ以上困難となってきている現在、微細化限界を突破する新しい技術の確立が不可欠となっている。
- 「京」以前は、デバイス設計のために必要な、実際にデバイスを構成するシリコン原子10万個規模の計算をすることは不可能であった。

#### 【「京」による成果】

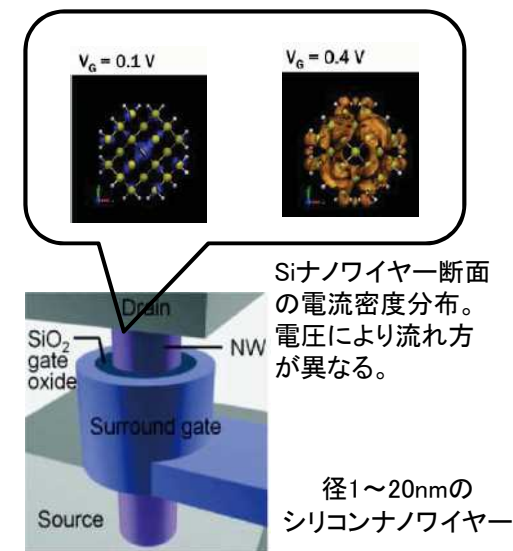
- 微細化で生じる電子の粒子性と波動性の両方の効果(量子効果)を考慮した、従来にないデバイス設計の基本技術を確立。
- 「京」を最大減活用した大規模な計算により、ナノワイヤー(10万個のシリコン原子で構成)に流れる量子効果を考慮した電流密度分布を世界で初めて計算。
- これにより、微細化限界を突破したデバイス設計に道筋をつけた。
- シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞を受賞。(平成23年度)

#### 【今後の課題】

- 複雑な界面や不均一性を考慮したより現実的なデバイスを扱うためにより大規模計算が必要となる。

#### 【社会への活用】

- 市場の急成長が予想される化合物系半導体(H26:150億円⇒H32:3000億円予測)をコンピュータ上で設計し開発先導へ。





## 主な研究成果事例(分野3)

### 都市全域の地震等自然災害シミュレーションに関する研究

#### 地震等の自然災害シミュレーションの開発

課題代表者:

東京大学地震研究所・堀宗朗

#### 【背景】

- 具体的な防災・減災対策を講じるためには、さまざまなケースの地震が起こったときにどのような災害が発生するかを、科学的・合理的に予測しておくことが必要。
- 「京」以前は、地盤の揺れ、建物の振動など個々の限定的なシミュレーションにとどまっていた。

#### 【「京」による成果】

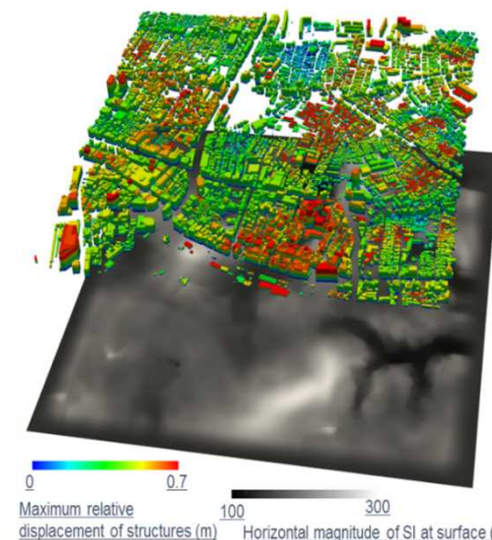
- 「京」を最大限活用し、地盤の揺れ・地震による建物などの振動の計算により、世界で初めて、地震災害と建物被害を統合した大規模シミュレーションを実現。
- 東京23区の一部(3.5km四方)に対し、約10m間隔で地盤の揺れを再現。地盤と建物などの揺れを複合的に計算し、地盤の揺れや建物の振動などの複合的なシミュレーションが、実用的なレベルで可能であることを証明。
- シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞ファイナリストに。(平成26年、平成27年)

#### 【今後の課題】

- 地震・津波の発生や伝播、建物の振動、津波遡上などの広域かつ高精度な計算をそれぞれ実施している。地震発生から非難予測までを統合した予測には更に大規模な計算が必要。

#### 【社会への活用】

- 地震等の自然災害に対応した防災・減災対策の実施
- 将来起こりうる被害の低減(南海トラフ巨大地震による経済被害は220兆円と想定)



最大層間変位(各階の相対的な変形)の分布

## 主な研究成果事例(分野4)

### 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発

従来よりも格段に精度の高い、流れの予測を実現し、その産業上の効果を実証

課題代表者:

東京大学生産技術研究所 加藤千幸

#### 【背景】

- 従来より、乱流の計算は行われていたが、製品試作の代替となり得るような信頼性の高い予測を行う事に限界があった。そのため、設計した製品の採取的な性能確認のためには、製品を実際に試作し、風洞試験等の実施により性能や信頼性を評価する事が必須であった。

#### 【「京」による成果】

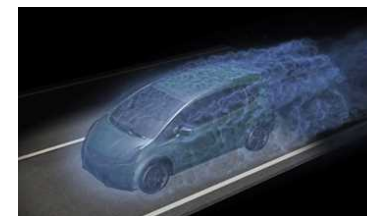
- 自動車が走行する際、車体回りには複雑な空気の流れが発生している。「京」を用いた流体シミュレーションにより、世界で初めて、その空気の流れを忠実に実現。風洞実験をシミュレーションで代替できることを実証。
- 具体的には、自動車の空気抵抗を対風洞実験値に対して誤差2%以内で予測する技術、並びに実走行状態を模擬できる車両運動連成解析システムを構築。
- また、車両運動と空力解析を連成させるとで、従来の風洞実験では難しかった横風時の安全性や操縦安定性予測を可能とした。

#### 【今後の課題等】

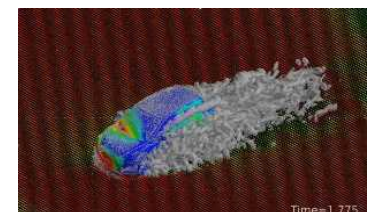
- 民間利用を進めていく為には、製品丸ごとで実験と同等以上の精度を確保し、現実的な開発・設計期間内に実施可能な計算が必要。

#### 【社会への活用】

- 自動車コンソーシアムを形成し、開発中のシステムに関するディスカッション、試用などを進めている。
- 開発コスト・開発期間の大幅な削減が期待される。



高精度空力解析  
提供: 理研、ホンダ、  
神戸大、北大



横風運動挙動解析  
提供: 日産、神戸大、北大



## 主な研究成果事例(分野5) 「京」によるダークマターシミュレーション

### ダークマターシミュレーションによる天体形成過程の理解

課題代表者:  
理化学研究所 牧野淳一郎

#### 【背景】

- 銀河団の運動から目に見えない物質であるダークマターの存在が示唆され、宇宙誕生から星・銀河が生まれるためにはこの未知の物質「ダークマター」の役割が不可欠と言われているが、直接観測することが極めて困難。

#### 【「京」による成果】

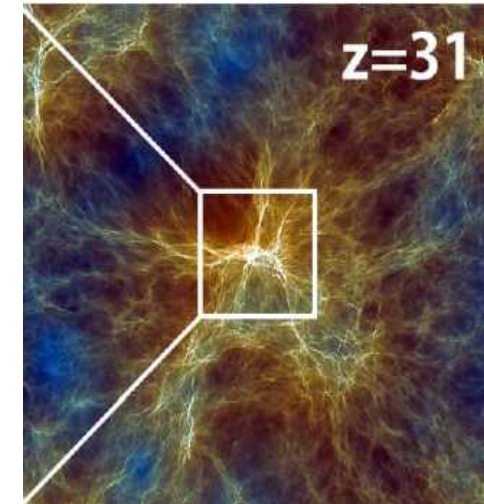
- 「京」を最大限活用し、世界最大規模の数千億から約2兆個のダークマター粒子の運動をシミュレーションすることで、宇宙の構造形成過程を計算。(パソコン1台で数百年かかる計算が「京」では3日で実現)
- 詳細なダークマター構造のシミュレーションにより、今後、ダークマター粒子の探査に貢献。
- シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞を受賞(2012年)。

#### 【今後の課題等】

- ダークマターだけでなく、星や銀河が生まれる過程を含んだ宇宙モデルをシミュレーションするには、さらに高速・大規模のスーパーコンピュータが必要。

#### 【社会への活用】

- 開発したシミュレーション手法・「京」を高効率で利用する方法は他分野への応用、シミュレーションの高度化に大きく寄与している。
- 多数の大規模シミュレーションにより観測と比較、宇宙論パラメータの精密決定が可能になる。



宇宙誕生から1億年後のダークマター空間分布

# 計算科学技術推進体制の構築における主な取組事例

## 研究支援 「京」等のHPCIシステムの利用支援、アプリケーションの高度化支援を実施

- 計算科学研究機構等が開催する会合での意見交換、研究者のソフトウェアの高度化支援、講習会を実施(分野1)
- 計算科学研究機構内にCMSI(計算物質科学イニシアティブ)分室を設置し、高度化支援体制を強化(分野2)
- 情報サイト「高性能計算の扉」の整備等によるユーザ支援体制を確立(分野5)

## 研究成果の普及 各種媒体を用いた情報発信を実施

- 視覚的に非常に分かりやすい、心臓シミュレータや蛋白質のシミュレーション結果の可視化等を活用した、一般市民等に対するアウトリーチ活動を実施(分野1)
- プラットフォームを構築し、開発したシステムを国のプロジェクトで開発した多数のシミュレータに適合させ、実証事例を示した(分野4)
- 開発コードの共用化体制を構築し、世界中の研究者と協力しコンフィギュレーションデータを蓄積・公開(分野5)

## 人材育成と人的ネットワークの形成 大学・研究所と連携した教育プログラムを実施

- 計算科学技術特論を作成・配信(講義アクセス数3万件)。また、超並列計算に関する新たな講義の立ち上げを実施(分野2)
- 防災、減災に関連して大学、研究機関、国、地方自治体、民間、NPO法人等を対象に研究会やセミナーを開催し、分野間、分野内のコミュニケーションの場を創出(分野3)
- 利用者層の拡大及び人的ネットワークの形成として、「京」を使うためのハンズオンセミナー、産業利用スクール、解析結果200件の公表データベース化やアウトリーチサイトである「計算工学ナビ」の開設などを実施(分野4)

## スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメント

## 「京」利用の進捗状況の把握、分野内計算機環境の整備を実施

- 年度毎の重点化、月次の進捗管理を実施。また「京」と互換生のあるシステムを整備することにより、大学や製薬関連企業等の研究者のHPCI環境への導入を実施(分野1)
- 東京大学物性研究所、分子科学研究所、東北大学金属材料研究所の共同利用スーパーコンピュータの資源を、本プログラムの遂行のために割当て、「京」の計算資源を「京」でなければならない計算に集中(分野2)
- 「京」のみならず大学の大型計算機センター及び地球シミュレータを戦略的に有効活用(分野3)