

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(HPCI)の取組について(追加報告)

## 参考資料 「京」の成果事例

# 成果トピック

「京」以外のHPCI一般利用課題;「スーパーコンピュータで解き明かす超弦理論の物理」  
課題番号hp120162、課題代表者:花田政範氏(京都大学基礎物理学研究所)

## HPCIの研究成果が2013年のnature.comで 最も読まれたニュースに!

「京」以外のHPCI一般利用課題「スーパーコンピュータで解き明かす超弦理論の物理」(課題番号hp120162、課題代表者:花田政範氏(京都大学基礎物理学研究所))で得られたシミュレーション結果がnatureのニュース(2013年12月10日付)に取り上げられ、このニュースがまた英国、米国の影響力の大きいプレスや雑誌\*に取り上げられ大きな話題になっています。



この「nature」のニュースに取り上げられた論文は、ごく最近「Science」に受理された。

このnatureの記事は花田氏と百武 慶文氏(茨城大学)、伊敷 吾郎氏(京都大学)、西村 淳氏(高エネルギー加速器研究機構)が執筆した論文(現在査読中)に基づいています。より多くの方々に成果を理解していただけるように、本論文が正式に学術誌に掲載された段階で正式なプレスリリースが行われ、専門家以外の方にも分かりやすい解説が行われる予定です。ともあれこのnatureの記事は当初の一週間にnature.comに直接アクセスがあっただけでも閲覧回数が120万回を超えて2013年にnatureで最も読まれたニュースとなりました。

上記のnatureや英国、米国のプレスや雑誌のオンライン記事(合計10件)に関する情報は、HPCI成果発表データベースに既に登録済みです。成果発表データベースの検索ボックスにhp120162と入力すれば、ヒットします。

### 研究成果の背景と意義

ブラックホールはあらゆるものを吸い込み、光さえも逃げ出せないとされる。しかし、これは古典力学の範囲での話であり、量子力学の効果を考慮すると事情は全く違ってくる。ブラックホールの表面では、量子力学の効果で粒子・反粒子対が生成・消滅を繰り返しているが、一方の粒子(又は反粒子)がブラックホールの地平面内に落ち込むと他方の反粒子(又は粒子)がブラックホールから飛び出す。すなわち、ブラックホールは粒子を徐々に放出し、蒸発する。ホーキングはブラックホールの蒸発過程を詳しく考察し、ブラックホールに何が吸い込まれても、出てくる粒子に差がない

(すなわち、ブラックホールに何が吸い込まれたかという情報が失われてしまう)と予言した。しかし、量子力学において情報は失われることはない。これは、永らく「一般相対性理論」と「量子力学」の矛盾と考えられてきた。この矛盾を解くゲージ-重力対応と呼ばれる理論が1997年にマルダセナにより提唱された。マルダセナの理論を検証するための数値シミュレーションはこれまで非常に困難であったが、花田氏らは新しいシミュレーション技術を開発し、本理論が蒸発するブラックホールの正確な量子力学的記述を与えることを示した。

花田氏らの研究成果の詳しい解説は次号の『京算百景』に掲載する予定です。

\*The Daily Telegraph, The Independent, The Times, The Daily Mail, The Huffington Post, The Epoch Times, Slate Magazine, Physics Today, Scientific American

「京算百景」第5号記事(平成26年3月10日発行)

2013年12月5日プレスリリース

## 「京」の計算能力を引き出す新開発ソフトウェア「EigenExa(アイゲンエクサ)」

### 【概要】

新開発のソフトウェア、「EigenExa(アイゲンエクサ)」が、「京」のシミュレーションで使用するアプリケーションの計算速度を飛躍的に向上させることを実証しました。実際にこのソフトウェアを「京」で使い、世界最大規模である計算(100万×100万の行列での固有値計算)を行った結果、「京」登場以前は1週間程度かかると考えられてきた計算時間を、わずか1時間に短縮することに成功。

今後、半導体のデバイス設計や新材料開発、新薬の探索などを行うための大規模コンピュータシミュレーションに加え、バイオインフォマティクス(※)や社会科学などで用いられるデータの相関関係を解析するスピードアップに期待が寄せられます。この「EigenExa」は一般にも公開されています。

※バイオインフォマティクス…生物情報科学ともいい、ゲノムなど生物に関係する膨大なデータをコンピューターで解析する研究分野。

### 【理化学研究所】

(プレスリリース: [http://www.riken.jp/pr/press/2013/20131205\\_1/](http://www.riken.jp/pr/press/2013/20131205_1/))

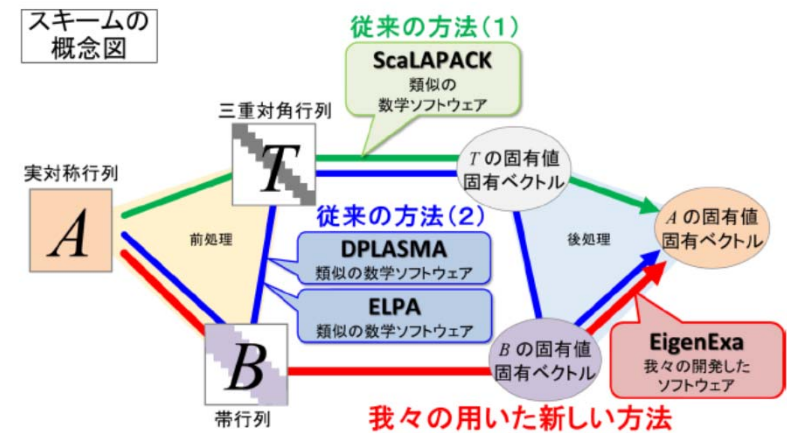


図 今回考案した「新しい1段階スキーム」

2013年9月20日プレスリリース

「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～

## 【概要】

理化学研究所計算科学研究機構、海洋研究開発機構、東京大学大気海洋研究所の共同研究チームは、スーパーコンピュータ「京」を使って水平格子間隔1km未満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、この結果から水平格子2km未満の解像度にするだけで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。本研究により、一つ一つの積乱雲から全球規模の積乱雲群との相互の関係をより正確に調べることが可能となり、甚大な被害をもたらす積乱雲群である台風や、集中豪雨などの発生メカニズムの解明、雲の気候への影響の研究などに寄与することが期待できます。

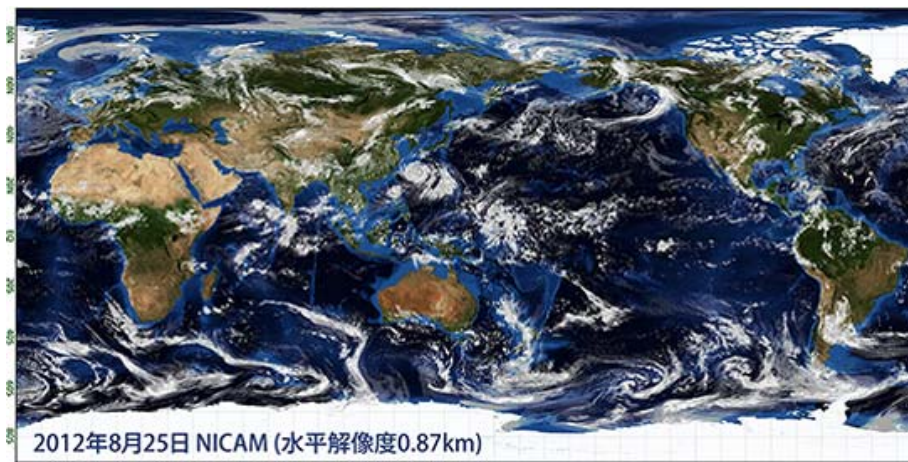


図: 2012年8月25日12時(世界標準時)の全球の雲分布

## 【理化学研究所】

(プレスリリース: [http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20130920\\_1/](http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20130920_1/))

2013年9月5日プレスリリース

## 磁性材料の材料設計に活用できる新たなシミュレーション技術を開発 ～ジスプロシウムなどの重レアアースを使用しない新規磁石材料の開発に期待～

### 【概要】

富士通株式会社は、スーパーコンピュータ「京」を用いた大規模磁化反転シミュレーション技術を開発し、永久磁石が磁化反転する過程を大規模にシミュレーションすることに世界で初めて成功した。

磁性材料における磁化反転の過程は従来から研究されてきたが、ネオジム磁石の忠実なモデル化は膨大な計算量を要することから、その過程をシミュレーションで再現することが困難だった。今回開発した技術により、従来のシミュレーターでは扱うことができなかった磁性体の微細な磁区構造(図)を解析することができるようになった。

ハイブリッド電気自動車(HEV)のモーターにはジスプロシウムなどの重レアアースを使用したネオジム磁石が採用されているが、今後、重レアアースを使用しない強力なネオジム磁石など、新たな磁性材料の研究開発の促進が期待される。本技術は、独立行政法人物質・材料研究機構と連名で、第37回日本磁気学会学術講演会(9/5)で発表した。

### 【富士通】

(プレスリリース: <http://pr.fujitsu.com/jp/news/2013/09/5-1.html>)

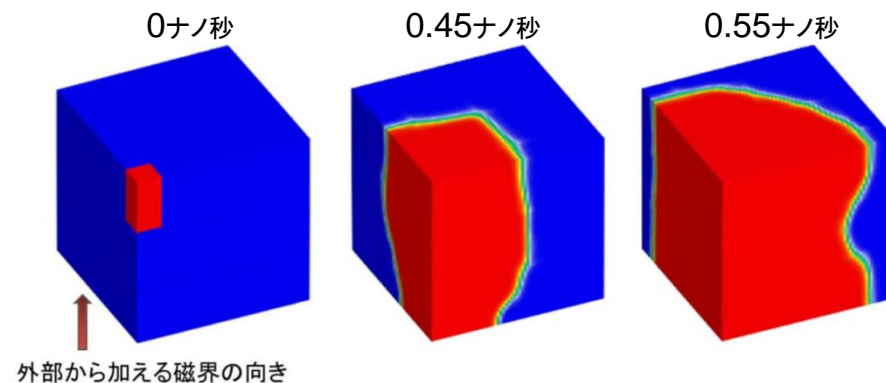


図: 多結晶モデルの磁化反転シミュレーション

2013年8月30日プレスリリース

## 京コンピュータによる平成24年7月九州北部豪雨の予測について

### 【概要】

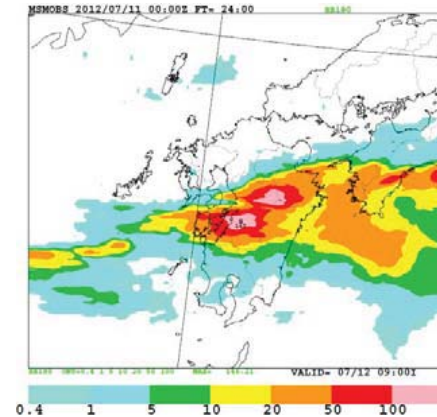
熊本県、大分県、福岡県などに大きな災害を引き起こした平成24年7月九州北部豪雨による大雨について、発生半日～1日前からの計算で高い確率で予測できる例があることが気象研究所による研究で分かった。

図2は、大雨前日15時を初期値とする京コンピュータによる予測で、図1に示す観測された大雨を良く予測している。図3と図4はアンサンブル予報による最大降水量と50mm以上の降水確率の分布を示す。このような場所や強度を特定した確率的な大雨予測や最大雨量に関する予測が半日～1日前に出来れば、事前に防災対策をとるために大変有用な情報になると期待される。この計算には、50メンバーの局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LETKF)を用いた。今回の結果は、気象防災に関する京コンピュータを用いる研究の最初の本格的な成果で、将来的な集中豪雨の予測の改善にもつながるものと期待される。

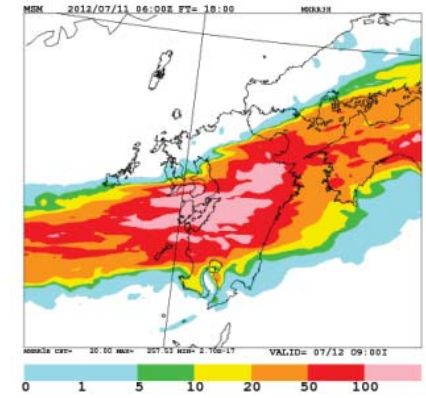
【気象研究所/海洋研究開発機構】HPCI戦略プログラム(分野3)

(プレスリリース: <http://www.mri-jma.go.jp/Topics/press/20130830/press20130830.html>)

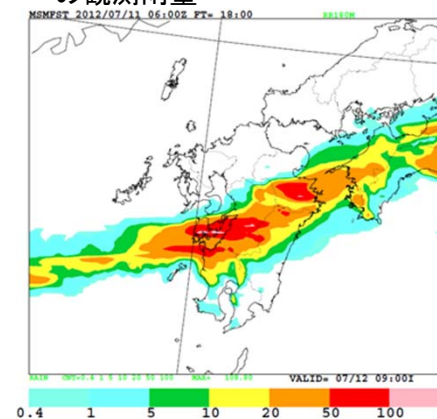
(TBS報道特集で9月7日(土)に全国放送)



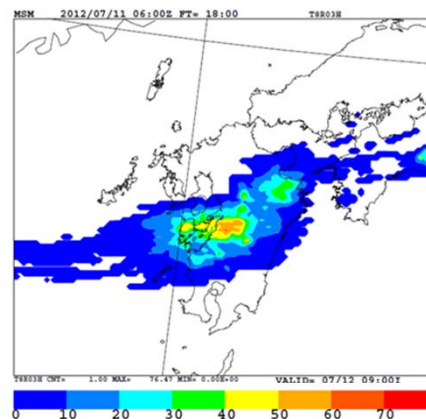
(図1) 平成24年7月12日6-9時の観測雨量



(図3) アンサンブル予報による最大降水量の分布図



(図2) 前日15時を初期値とする京コンピュータによる予測



(図4) アンサンブル予報による50mm以上の降水確率分布

2013年8月2日プレスリリース

## 「京」を使い10兆個の結合の神経回路のシミュレーションに成功 —世界最大の脳神経シミュレーション—

### 【概要】

「京」を使って世界最大の脳神経シミュレーションに成功した(理研、ユーリッヒ研究所(ドイツ)、沖縄科学技術大学院大学の共同チームによる研究)。10兆個の結合の神経回路のシミュレーションは、過去最大の規模であるが、これは巨大な人間の脳の神経回路の1%程度の規模に過ぎない。

今回の成功では人間の脳全体のシミュレーションに必要なメモリー量と計算速度の比率が分かり、その結果を今後のスパコンの開発やソフトウェアの設計に活かし、脳全体のシミュレーションの研究を進めていくことが期待されている。

### 【理化学研究所】

(プレスリリース: [http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20130802\\_2/](http://www.riken.jp/pr/topics/2013/20130802_2/))

### 【OIST(沖縄科学技術大学院大学)】

(プレスリリース: <http://www.oist.jp/ja/news-center/news/2013/8/8/11615>)

### 【ユーリッヒ研究所】

(プレスリリース(英語): <http://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/EN/2013/13-08-02LargestSimulation.html>)

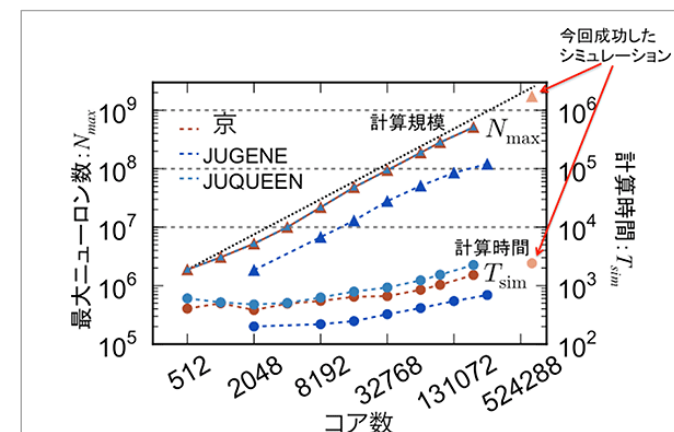


図: JUQUEEN によるNESTと「京」によるNESTのシミュレーション結果の比較

※ユーリッヒ研究所が保有するスパコン「JUGENE」(前システム)、「JUQUEEN」(現システム)と理研が保有するスパコン「京」それぞれによるNESTのシミュレーション結果の比較。青がJUGENE、水色がJUQUEEN、赤が「京」による計算を示す。「京」の方がコアあたりのメモリー量が多いため、大規模なシミュレーションが可能となった。

2013年8月1日プレスリリース

## 京コンピュータを用いてリチウムイオン電池電解液の還元反応機構を解明 ～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～

### 【概要】

パソコンやスマホなどに広く普及しているリチウムイオン電池。今後、高容量・高出力が必要な電気自動車や家庭用蓄電装置などの利用が増えていく。普及には長寿命化や安全性の向上が課題であり、それを左右するのが、電解液が還元反応して電極上に形成される被膜「SEI膜」の性能である。この被膜ができる過程は直接観察することができず、どのようにして被膜ができるのかが、謎のままであった。

独立行政法人物質・材料研究機構は、富士フィルム株式会社と共同で、「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た。この成果を長寿命で高い安全性を有するリチウムイオン電池の開発に利用していく。

### 【物質・材料研究機構、科学技術振興機構】

(プレスリリース: <http://www.nims.go.jp/news/press/2013/08/p201308010.html>)

### 【富士フィルム】

(プレスリリース: [http://www.fujifilm.co.jp/corporate/news/articleffnr\\_0796.html](http://www.fujifilm.co.jp/corporate/news/articleffnr_0796.html))

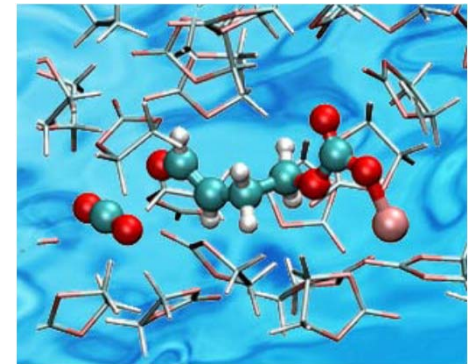


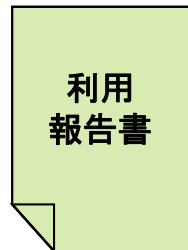
図: EC溶媒中の重合反応の最終生成物  
⇒添加剤導入時のSEI形成の素材となる



補足

# 1. 成果の取扱い

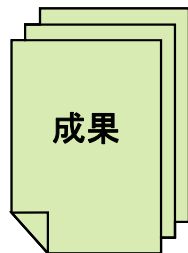
## □ 利用者による成果の公表・登録と登録機関による成果の取扱い



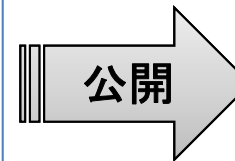
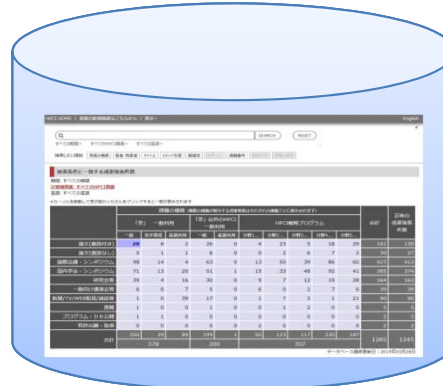
課題終了後60日以内



成果発表データベース



課題終了後3年以内



- 広く国民に向けた成果の公表を促進
- 異分野間の利用者相互の情報交換、研究・技術交流の促進
- 知的公共財としての成果を社会に積極的に公表・普及・還元

以下のいずれかを発表・登録

- ・査読付き論文
- ・「京」利用研究成果集等
- ・企業の公開技術報告書
- ・特許

成果公表を促進する方策

## 2. 広く国民に向けた成果の公表促進

### □ 京コンピュータ・シンポジウム

- 対象: 一般、報道機関
- 目的: 「京」により創出された成果及びその成果が国民生活へもたらす効果をアピールするとともに、エクサスケールコンピュータ実現へ向けた理解増進を支援
- 内容: 「京」により創出された成果紹介を含む講演と展示

### □ 広報誌「京算百景」による成果紹介

- 対象: 一般、大学・法人、企業、京の利用者など
- 目的: 広報誌のCLOSE UP(トピックス)コーナーに利用事例を毎号掲載。広く一般向けに成果事例を紹介。
- これまで紹介記事
  - ✓ HPCIシステムによる宇宙最大爆発・ガンマ線バースト解明への調整
  - ✓ 京コンピュータにおけるペタスケール核融合プラズマ乱流シミュレーションの開発
  - ✓ リチウムイオン電池内の反応過程を解明 長寿命化と安全性向上への寄与に期待
  - ✓ 世界初! 全原子系大規模シミュレーションによる粘着剤の接着界面挙動解明
  - ✓ 全長100メートルの風洞を忠実に再現 建設業界で初めて最大100億格子の計算で風圧を予測

### □ 成果事例集による成果紹介

- 対象: 一般、大学・法人、企業など
- 目的: 京を含むHPCI利用研究課題の研究成果から、産業利用への応用に役立つもの、国民の関心が高いものを選び、広く国民に分かりやすく説明。
- 第1集の成果事例
  - ✓ 心臓疾患の原因解明、医薬品の開発を大幅に効率化 (医療・創薬分野)
  - ✓ リチウムイオン電池の高出力化、長寿命化と安全性向上に期待(物質・エネルギー分野)
  - ✓ 自動車の走行安定性、安全性向上をめざして(ものづくり分野)
  - ✓ 高精度津波遡上シミュレーションで正確な被害を予測(環境・減災分野)

# 3. 異分野間の利用者相互の情報交換、研究・技術交流の促進

## □ 中間報告会

- 対象: 利用研究課題の参加者及び計算科学に関心を持つ研究者
- 開催時期と参加者数:
  - 平成24年度下期(2013/3/14-15) のべ約330名参加
  - 平成25年度上期(2014/10/2-3) のべ約340名参加
- 目的: 京を含むHPCI利用研究課題の進捗報告を通じ、利用者の生の声を把握し、[利用促進に反映](#)するとともに、利用情報から必要な[資源の適切な配分](#)や[運用改善へのフィードバック](#)を推進。国内外の研究者間、異なる分野の研究者間の情報交換、研究・技術交流を促進。
- 内容: 平成24年度～平成25年度利用研究課題の進捗報告および成果について口頭発表とポスターセッションを実施。
- 効果: 「京」の利用実績(一般利用枠) 平成24年度下期57.3% ⇒ 平成25年度上期77.1%  
「京」における早期の成果創出に向け、加速すべき課題に資源を追加配分  
⇒ 「京」の利用可能な計算資源の5%相当(平成25年度下期)

## □ 成果報告会(計画)

- 対象: 利用研究課題の参加者及び計算科学に関心を持つ研究者
- 開催時期: 平成26年度中ごろ
- 目的: 「京」を含むHPCI利用研究課題実施により生み出された成果の発表を通じ、国内外の研究者間、また異なる分野の研究者間の連携、協力及び交流を促進、成果の普及を推進。
- 内容: 平成24年度～平成25年度利用研究課題の成果について口頭発表とポスターセッションを実施

# 4. 成果発表データベース

<https://www.hpci-office.jp/hpcidatabase/publications/search.html>

## [成果の種類]

論文(査読付き)、論文(査読なし)、国際会議・シンポジウム、国内学会・シンポジウム、研究会等、一般向け講演会・セミナー等、新聞・TV・Web配信・雑誌・広報誌等、書籍、プログラム・データベース公開、特許出願・取得

## [成果の登録]

利用者による随時登録

[成果情報の最新登録件数]: 1237件 (平成26年4月8日現在)

## ○検索画面

HPCI HOME | 成果の新規登録はこちら | 表示 | English

検索欄:  SEARCH RESET

すべての期間:  すべてのHPCI資源:  すべての言語:

検索したい項目:  発表の種類  著者・発表者  タイトル  メディア名等  開催地  参考URL  課題番号  課題名称  課題の種類

### 検索条件に一致する成果発表件数

期間: すべての期間  
 計算機資源: 「京」 + HPCI (「京」以外)  
 言語: すべての言語

\*カーソルを移動して色が変わったセルをクリックすると一覧が表示されます

	課題の種類 (複数の課題が関与する成果発表はそれぞれの課題ごとに表示されます)										合計	正味の成果発表件数
	「京」 一般利用			「京」以外のHPCI 一般利用		HPCI戦略プログラム						
	一般	若手育成	産業利用	一般	産業利用	分野1...	分野2...	分野3...	分野4...	分野5...		
論文(査読付き)	29	6	2	26	0	2	16	4	11	21	117	105
論文(査読なし)	5	1	1	4	0	0	2	6	6	2	27	24
国際会議・シンポジウム	98	15	4	61	0	13	53	40	96	54	434	419
国内学会・シンポジウム	73	16	20	52	1	15	34	48	99	41	399	388
研究会等	39	4	16	28	0	9	7	12	19	29	163	162
一般向け講演会等	6	0	7	5	0	6	0	2	7	6	39	39
新聞/TV/WEB配信/雑誌等	1	0	39	17	0	1	7	3	1	21	90	90
書籍	1	0	1	1	0	0	1	2	0	0	6	6
プログラム・DB公開	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	2	2
特許出願・取得	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	2	2
合計	253	43	90	194	1	48	120	117	239	174	1279	1237

データベース最終更新日: 2014年04月08日

## ○検索結果(一覧)

課題番号	著者・所属	タイトル	掲載誌 ページ番号
1 hp120011, hp130008	Y. Idomura, M. Nakata, S. Yamada, M. Machida(JAEA), T. Imamura(Riken), T.-H. Watanabe, M. Nunami(NIFS), H. Inoue, S. Tsutsumi, I. Miyoshi, N. Shida(Fujitsu)	Communication overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer	International High Performance Computing Applications, DOI:109434
2 hp120011, hp130008	S. Maeyama, Y. Idomura, M. Nakata(JAEA), T.-H. Watanabe, M. Nunami, A. Ishizawa(NIFS)	Computation-communication overlap techniques for parallel spectral calculations in gyrokinetic Vlasov simulations	Plasma Fusion Research, Vol.8, p.140
3 hp120011, hp130008	Yasuhiro Idomura(JAEA)	Full-f gyrokinetic simulation over a confinement time	Physics of Plasmas, Vol.21, p.022517
4 hp120011, hp130008	Y. Idomura, M. Nakata(JAEA)	Plasma Size and Power Scaling of Ion Temperature Gradient Driven Turbulence	p.020706
5 hp120035	M. Noda, T. Yasuike, K. Nobusada, M. Hayashi(Institute for Molecular Science)	Enhanced Raman spectrum of pyrazine with the aid of resonant electron dynamics in a nearby cluster	Chem. Phys. Lett., 550, 52-57 (2012)
6 hp120086	Masayuki Ochi(Department of Physics, The University of Tokyo), Keitaro Sodeyama(Elements Strategy Initiative for Catalysis and Batteries, Kyoto University, WPI International Center for Materials Nanoarchitectonics, National Institute for Material Science), Shinji Tsuneyuki(Department of Physics, ISSP, The University of Tokyo)	Optimization of the Jastrow factor using the random-phase approximation and a similarity-transformed Hamiltonian: Application to band-structure calculation for some semiconductors and insulators	J. Chem. Phys. 140, 074112

## ○検索結果(詳細)

著者・所属	Y. Idomura, M. Nakata, S. Yamada, M. Machida(JAEA), T. Imamura(Riken), T.-H. Watanabe, M. Nunami(NIFS), H. Inoue, S. Tsutsumi, I. Miyoshi, N. Shida(Fujitsu)
タイトル	Communication overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer
英文タイトル	
掲載誌・巻号 ページ番号 (発表年)	International Journal of High Performance Computing Applications, DOI:1094342013490973
発表年月	2013年5月
参考URL	<a href="http://hpc.sagepub.com/">http://hpc.sagepub.com/</a>
検索キーワード	
発表の種類	論文(査読付き)
分類	原著論文
言語	英語
使用した計算機資源	「京」, HPCI以外[Helios]
課題番号	hp120011
課題名	核融合プラズマの乱流輸送シミュレーション
資源利用枠	「京」 一般利用
担当資源	スーパーコンピュータ「京」 独立行政法人 理化学研究所 計算科学研究機構