

6. 各分野での代表的なアプリケーションと、利用課題ごとの規模感

6.1. 調査内容

スーパーコンピュータを利用した研究成果の創出や社会課題への対応のためには、アプリケーションの開発が不可欠である。本節では各分野で代表的なアプリケーションと、利用課題ごとの規模感を把握するための調査を行った。

まず、前章で調査した公的支援で研究開発が行われているプロジェクトに関してアプリケーション分野ごとに整理した。次に各分野で利用される代表的なアプリケーションを具体的に特定し、その概要・ライセンス（オープンソース、商用または非公開）・開発元・解析分野について整理した。また、利用に関連する研究支援プログラムや計算資源提供プラットフォームの公開情報から利用課題の規模感（主な成果、計算時間の割り当て、論文数など）を探った。さらに利用統計情報を公開しているスーパーコンピュータセンターの年報等からも同様に利用課題の規模感について調べた。

6.2. 米欧の公的支援プロジェクトにおけるアプリケーション分野

米国エネルギー省（DOE）による ECP（Exascale Computing Project）と欧州の EuroHPC のプロジェクトからアプリケーションの研究開発が行われている（ECPは2016～2024年まで実施）ものに関して、前章の調査結果から抽出してアプリケーション分野ごとに整理すると、表 6.1 のようになる。プロジェクト数が多いアプリケーション分野は「製造・設計・エンジニアリング」であることが分かる。

米国・欧州の両プロジェクトでは、HPC コミュニティに対して、エクサスケールでの HPC の利用拡大に向けたアプリケーションの開発だけではなく、スーパーコンピュータ利用におけるエコシステム（生態系のように相互に関連する要素が集まり、一つの統合されたシステムとして機能する環境）の構築を目指している。それは計算資源、アプリケーション、データ、ユーザー、サポートサービスなどが相互に作用する仕組みであり、近年のスーパーコンピュータ活用におけるキーワードとなっている。

表 6.1 米欧の公的支援プロジェクトにおけるアプリケーション分野

アプリケーション分野	米国のプロジェクト (ECP)	欧州のプロジェクト (EuroHPC)
宇宙・天文	ExaSky ExaStar	SPACE Plasma-PEPSC
素粒子	QMCPACK WarpX LatticeQCD	—
気象・気候変動	E3SM-MMF	ESIWACE3 MAELSTROM HiDALGO2
固体地球	EQSIM	ChEese-2P

バイオインフォマティクス	—	MICROCARD-2 BioExcel
分子生命科学	ExaBiome	—
医療応用	CANDLE	dealii-X
低炭素・脱炭素	ExaSGD	EoCoE-III
再生可能エネルギー	ExaWind	—
原子力・核融合	ExaSMR WDMApp	Plasma-PEPSC
製造・設計・ エンジニアリング	Combustion-PELE ExaFEL ExaAM MFIx-Exa	MultiXscale EXCELLERAT P2 SCALABLE CEEC exaFOAM NextSim
ナノテクノロジー	EXAALT GAMESS	NWChem MaX
AI フレームワーク	—	DCoMEX

6.3. 代表的なアプリケーションの分類

各分野で利用される代表的なアプリケーションを具体的に特定し、その概要・ライセンス・開発元・解析分野について整理する。表 6.2 にオープンソース・ソフトウェア（OSS）のアプリケーションを表 6.3 に商用またはソースコード非公開（申請により許可を得ることで利用が可能なものを含む）のアプリケーションを示す。ただし、日本で開発されたものについては、表 6.4 に分けて示す。さらに AI に関連するライブラリやフレームワーク等も別に表 6.5 に示す。これらのアプリケーションを特定するための情報源としては、以下を参照した。

- ・各スーパーコンピュータセンターの利用者向け情報
- ・各スーパーコンピュータセンターの発行資料（年報など）
- ・OSS については、GitHub などのソースコード公開サイト
- ・商用のものはソフトウェアベンダー（ISV）のサイト

国内については、下記の URL と関連するプロジェクトについて調査して特定した。

- ・プリインストールされたアプリケーションソフトウェア（HPCI）
https://www.hpci-office.jp/for_users/appli_software
- ・HPCI Computing Resource Handbook 2025
- ・<https://www.j-focus.or.jp/focus/application.html>
- ・次世代 IT 基盤構築のための研究開発（革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発）
- ・HPCI 戦略プログラム（戦略 5 分野）

・「富岳」成果創出加速プログラム

表 6.2. 代表的なアプリケーション (OSS)

アプリケーション	説明	開発元	解析分野
ALPS	強相関電子系を扱うためのシミュレーションコード。量子モンテカルロ法などを用いて、ハバードモデルやハイゼンベルクモデルなどの模型を解析できる。	ALPS collaboration	量子モンテカルロ法
AMR-Wind	風力エネルギーのための AMR (適合格子細分化法) シミュレーションコード。複雑な地形や風況を考慮した高精度なシミュレーションが可能。	NREL	流体解析
Athena	天体物理学向けの磁気流体力学用コード。グリッドベースで主に星間物質、星形成、および降着流の研究のために開発された。	プリンストン高等研究所	宇宙物理
Auto Dock	分子モデリングシミュレーションソフトウェアで主にタンパク質-リガンドドッキングに利用される。2009 年から OSS 化され、非商業的利用に関しては無料。	Scripps Research Institute	バイオインフォマティクス
BLAST	シーケンスアラインメントツール。DNA やタンパク質の配列を比較し、類似度を評価する。	NCBI	バイオインフォマティクス
Bowtie	ゲノムシーケンスアラインメントツール。高速かつメモリ効率の高いアラインメントが可能。	Johns Hopkins University	バイオインフォマティクス
BWA	ゲノムシーケンスアラインメントツール。次世代シーケンサーで得られた大量のリードをリファレンスゲノムにマッピングできる。	Sanger Institute	バイオインフォマティクス
CP2K	固体・液体・分子・材料・結晶および生物学的システムの原子論シミュレーションを行うことができるソフトウェアパッケージ。	www.cp2k.org	量子化学計算
CCSM	大気、海洋、陸域、海氷などの相互作用を考慮した気候変	NCAR	気候モデル

	動のシミュレーションが可能。		
CESM	CCSM をベースに、炭素循環や生物地球化学などのプロセスを追加したモデル。	NCAR	地球システムモデル
Cholla	銀河形成、星形成、超新星爆発などの現象を解析するための流体シミュレーションコード。	LANL	宇宙物理
Chroma	クォークやグルーオンの振る舞いをシミュレートし、強い相互作用の性質の研究に使用される。	USQCD collaboration	格子 QCD
CitcomS	有限要素法を用いて、地球のマントル対流によるプレート運動や火山活動をシミュレーションするコード。	University of California, Berkeley	マントル火山
CppLatticeQCD	C++記述された格子 QCD シミュレーションコード。高性能な計算が可能な点が特徴。	University of Regensburg	格子 QCD
COAWST	ROMS と SWAN を結合したモデルで、沿岸域の海洋循環、波浪、水質などが解析できる。	Rutgers University	海洋モデル
DMRG++	密度行列繰り込み群法を用いた量子多体系のシミュレーションコード。低次元系の基底状態や励起状態を計算できる。	ORNL	量子多体系
E3SM	地球システムモデルでエネルギー、水、生物地球化学の相互作用に焦点を当てたモデル。	DOE	地球システムモデル
Elmer	有限要素法ソルバー。構造解析、流体解析、電磁場解析など、様々な物理現象をシミュレートが可能。	CSC	構造解析 流体解析 電磁界解析
ENZO	宇宙物理学流体シミュレーションコード。AMR を用いて、宇宙の大規模構造形成をシミュレートする。	UC San Diego	宇宙物理
FDS	火災の発生、成長、延焼、煙の拡散などをシミュレーションすることができる。	NIST	火災
FEBio	有限要素法による生体力学シミュレーションソフトウェア。臓器、組織、細胞などの	University of Utah	医療工学

	力学的な挙動を扱うことができる。		
FEniCS	有限要素法に基づいた偏微分方程式ソルバー。数学的な記述から数値解法を自動生成する機能を持ち、複雑な形状や境界条件を持つ問題にも柔軟に対応できる。	FEniCS Project	流体解析 構造解析
FLASH	宇宙物理学向けの流体シミュレーションコード。AMR を用いて、超新星爆発、銀河衝突などの現象をシミュレーションすることができる。	University of Chicago	宇宙物理
FVCOM	非構造格子を用いた有限体積法に基づいたモデルで、複雑な海岸線や海底地形を表現できる海洋モデル。	University of Massachusetts Dartmouth	海洋モデル
GADGET	重力多体系と流体のハイブリットシミュレーションコードで宇宙論や星形成に関する問題を扱うことができる。	Max Planck Institute	重力多体系 流体解析
GAMESS	分子電子状態計算プログラム。ハートリーフォック法、密度汎関数理論、配置間相互作用法など、様々な計算方法が実装されている。	Iowa State University 他	第一原理計算
GeoClaw	浅水波方程式を解いて、津波の伝播を計算することができる。	University of Washington	津波
Grid	格子 QCD シミュレーションコード。並列計算に最適化されており、大規模な計算が可能。	University of Bielefeld	格子 QCD
GROMACS	タンパク質、脂質、核酸などの生体分子や、高分子材料、溶液などの分子動力学シミュレーションに広く利用可能で高速なアルゴリズムと並列計算により、大規模な系にも対応している。	GROMACS development team	分子動力学
HemeLB	格子ボルツマン法を用いて、特に血管内の血液の流れを解析するシミュレーションコード。	University of Oxford	医療工学
H ϕ	格子 QCD シミュレーションコード。HPC システムでの利用に最適化されている。	Columbia University	格子 QCD

LAMMPS	分子動力学シミュレーションのためのソフトウェアパッケージで古典力学、量子力学、メソスケールなど、様々なレベルのシミュレーションに対応している。材料科学、物理学、化学、生物学などの幅広い分野で利用される。	Sandia National Laboratories	分子動力学
LIGGGHTS	離散要素法シミュレーションソフトウェア。粉体・粒子の挙動を解析できる。	University of Edinburgh	粒子解析 粉体解析
MACE	材料探索のためのソフトウェア。機械学習を用いて、新しい材料の探索を高速に行うことができる。	Citrine Informatics	マテリアルインフォマティクス
MATSim	都市や地域の交通流をシミュレーションすることができる。	TU Berlin	交通工学
MILC	様々なフェルミオン作用に対応した格子 QCD コード。	USQCD collaboration	格子 QCD
MITgcm	全球規模の海洋循環をシミュレーションすることができる。	MIT	海洋モデル
MOOSE	マルチフィジックスシミュレーションフレームワークで様々な物理現象を組み合わせたシミュレーションを構築できる。	Idaho National Laboratory	マルチフィジックス
NAMD	生体分子、特にタンパク質の分子動力学シミュレーションに特化したソフトウェア。	University of Illinois	分子動力学
NBODY6	重力多体系シミュレーションコードで銀河や星団などの進化をシミュレーションすることができる。GPU に対応している。	University of Cambridge	重力多体系
NequIP	グラフニューラルネットワークを用いた機械学習ポテンシャルを構築し、利用するためのオープンソースソフトウェア。読み込み可能な構造・エネルギー・原子間力データを用いた学習が可能で学習済みのポテンシャルを用いて LAMMPS による分子動力学計算を行うことが可能。	Harvard University	分子動力学
NWChem	計算化学のための汎用プログラム	PNNL	計算化学

	ラムパッケージで分子や固体の電子状態計算、分子動力学シミュレーション、反応経路探索など、幅広い機能を備えている。		
OpenFOAM	流体解析のためのオープンソースの CFD ソフトウェア。非圧縮性流れ、圧縮性流れ、多相流など、様々な流れ場を解析できる。カスタマイズ性が高く、多くの物理モデルや数値解法が実装されている。	OpenFOAM Foundation or OpenCFD Ltd	流体解析
OpenGamma	金融リスク管理のためのプラットフォーム。デリバティブの価格付け、リスク評価などを行うことができる。	OpenGamma	金融
OpenMC	モンテカルロ法により中性子、光子などの粒子の輸送を扱うことができる。	MIT	粒子輸送モンテカルロ
OpenQCD	MILC と同種の格子 QCD コード。	University of Regensburg	格子 QCD
OpenSeeS	地震動の伝播、地盤の液化化などをシミュレーションすることができるシミュレーションコード。	UC Berkeley	地震
PFLOTRAN	多孔質媒体中の流体シミュレーションコード。地下水の流れ、石油の回収、CO ₂ 貯留などのシミュレーションに利用される。	LANL	CCS 解析
QMCPACK	量子モンテカルロ法による電子状態計算プログラム。強相関電子系の基底状態を計算することができる。	ORNL	量子モンテカルロ
QPhiX	格子 QCD シミュレーションコード。HPC システムでの利用に最適化されている。	Jülich Supercomputing Centre	格子 QCD
QUDA	格子 QCD シミュレーションコード。GPU を用いた高速な計算が可能。	Boston University	格子 QCD
QuantLib	金融計算ライブラリでデリバティブの価格付け、リスク管理などに利用できる。	QuantLib project	金融
Quantum ESPRESSO	密度汎関数理論に基づく第一原理計算プログラム。平面波基底と擬ポテンシャルを用いた計算を行う。	Quantum ESPRESSO Foundation	第一原理計算

RAMSES	FLASH と同種のシミュレーションコード。	CEA Saclay	宇宙物理
ROMS	全球規模から沿岸域まで、様々なスケールの海洋現象をシミュレーションできるモデル。	Rutgers University	海洋モデル
Rosetta	タンパク質構造予測ソフトウェアでアミノ酸配列からタンパク質の立体構造を予測することができる。	University of Washington	バイオインフォマティクス
SCHISM	非構造格子を用いた有限体積法に基づいたモデルで、複雑な海岸線や海底地形を正確に表現できる。	USACE	海洋モデル
SimVascular	医療画像データから患者固有の血流シミュレーションおよび分析まで可能な完全なソフトウェアパッケージ。	Stanford University	医療工学
SPECFEM2D/3D	スペクトル要素法を用いて、地震波の伝播をシミュレーションすることができる。	Princeton University	地震
SU2	航空宇宙分野の設計で利用されている流体解析ソフトウェア。	Stanford University	流体解析
SUMO	交通シミュレーションソフトウェア。ミクロなレベルで交通流をシミュレーションすることができる。	DLR	交通工学
SUNTANS	非静水圧近似で、沿岸域の複雑な流れを扱うことができる。海洋モデル。	Stanford University	海洋モデル
SW4	有限差分法を用いて、地震波の伝播をシミュレーションすることができる。	Caltech	地震
TEPHRA2	火山噴火による火山灰の拡散をシミュレーションすることができる。	USGS	火山
Titan2D	火山噴火による溶岩流、火砕流などをシミュレーションすることができる。	State University of New York	火山
TRANSIMS	交通シミュレーションソフトウェア。都市の交通需要を考慮したシミュレーションが可能。	LANL	交通工学
WRF	メソスケールの気象現象をシミュレーションできるソフトウェアで広く利用されている。	NCAR	気象モデル

	る。		
--	----	--	--

表 6.3 代表的なアプリケーション（商用または非公開）

アプリケーション	説明	ライセンス	開発元	解析分野
Abaqus	有限要素法で構造解析、熱解析、流体解析、電磁場解析など、様々な物理現象をシミュレーションすることができるソフトウェア。	商用	Dassault Systems	構造解析 流体解析 熱解析 電磁場解析
Actran	音響、振動音響、航空音響などを対象とした響解析ソフトウェア。自動車・航空宇宙・防衛・製品メーカーなどに採用され、設計における音響性能の解析に利用されている。	商用	Hexagon	音響解析
AcuSolve	有限要素定式化に基づいた汎用流体解析ソフトウェア。	商用	Altair Engineering	流体解析
AIMSUN	交通流のシミュレーション、交通計画の評価、交通管理システムの設計などに利用される。	商用	TSS	交通工学
AMBER	生体分子、有機分子、材料などの分子動力学シミュレーションに利用される。	商用	University of California, San Francisco	分子動力学
ANSYS CFX	回転機器の熱流体解析に特化したソフトウェア。離散化手法は ANSYS Fluent と同じ。	商用	ANSYS	流体解析
ANSYS Fluent	流体の流れ、熱伝達、化学反応など広範な流体解析ができる汎用流体解析ソフトウェア。航空宇宙、自動車、エネルギーなどの様々な分野で利用されている。	商用	ANSYS	流体解析
ANSYS HFES	電磁波の伝播、アン	商用	ANSYS	電磁界解析

	テナの設計、電磁干渉の解析などに利用される。			
ANSYS LS-DYNA	衝突、爆発、衝撃波などの現象をシミュレートできる。有限要素法のソフトウェア。自動車、航空宇宙、防衛などの分野で利用されている。流体解析（SPH 法を使用）と連成も可能。	商用	ANSYS	衝突解析 構造解析 流体解析
ANSYS Mechanical	構造解析、熱解析、振動解析などに利用される有限要素法のソフトウェア。	商用	ANSYS	振動解析 熱解析 構造解析
AREPO	宇宙物理学シミュレーションコードで銀河形成、星形成、宇宙の大規模構造などが対象。AMR 法を採用し、高精度なシミュレーションが可能。	非公開	MPA	宇宙物理
ART	放射線と物質との相互作用を解析できる。医療、原子力、宇宙開発などの分野で利用されている。モンテカルロ法を採用しており、複雑な形状にも対応できる。	非公開	LANL	放射線輸送
Aspen Plus	化学プラント、石油精製、エネルギーシステムなどの設計、運転、最適化に利用されるプロセス解析のためのソフトウェア。	商用	Aspen Technology	最適化
CHARMM	生体分子、特にタンパク質のシミュレーションに特化した分子動力学シミュレーションのソフトウェア。	商用	Harvard University	分子動力学

CO2-PENS	CO ₂ 地中貯留シミュレーションコード。 CO ₂ の地中貯留による圧力変化、流体移動、地盤変形などをシミュレーションすることができる。	非公開	LANL	CCS 解析
COLMINA CAE	構造解析、流体解析、最適設計などに利用されるソフトウェア。	商用	COLMINA	流体解析 構造解析
COMSOL Multiphysics	複数の物理現象を連成したシミュレーションが可能なソフトウェア。	商用	COMSOL	マルチフィジックス
CONVERGE	自動車エンジン、ガスタービン、燃焼器などの流体シミュレーションに特化したソフトウェア。詳細な化学反応モデルを扱うことができる。	商用	Convergent Science	流体解析
Coulomb	断層のずれ、マグマの貫入、または岩脈の拡大／縮小によって生じる静的変位、ひずみ、および応力を任意の深さで計算できるように設計されたソフトウェアで特に特にクーロン応力変化を計算できる。	非公開	USGS	構造解析
CRUNCH CFD	一般化された非理想的な状態方程式、非定常ハイブリット LES/RANS モデル、反応流をモデル化する高度な化学ツールを備えた高度な多相定式化を特徴とする流体解析ソフトウェア。	商用	CRAFT Tech	流体解析
CST STUDIO SUITE	モーターおよび電磁波を伝播するような電磁界を対象として設計・解析・最適化	商用	Dassault Systems	電磁界解析

	が可能なソフトウェア。			
Dytran	陽解法ベースの有限要素法と有限体積法を基盤とするシミュレーションソフトウェアで衝突、爆発、流体構造連成など、短時間で発生する大変形や流体の挙動を解析できる。	商用	Hexagon	衝突解析 構造解析 流体解析
ECMWF-IFS	ヨーロッパ中期予報センターが開発した気象予報モデル。数値予報に利用されている。	非公開	ECMWF	気象モデル
ELMFIRE	トカマク型核融合炉におけるプラズマ乱流をシミュレーションするためのジャイロ運動論コード。	非公開	Aalto University	核融合
FEHM	地下水流動、熱輸送、物質輸送、地盤変形などをシミュレートできるマルチフィジックスコード。	非公開	LANL	マルチフィジックス
FINCAD	金融リスク管理ソフト。デリバティブの価格付け、リスク評価、ポートフォリオ管理などに利用されるソフトウェア。	商用	FINCAD	金融
GAMS	線形計画法、非線形計画法、混合整数計画法などを解くことができるソフトウェア。	商用	GAMS Development Corporation	数理最適化
GEODYN	人工衛星の軌道決定、軌道予測、軌道制御などに利用されるソフトウェア。	非公開	NASA	軌道力学
GYRO	計算プラズマ物理コードでジャイロ運動論-マクスウェル方程式を解く。プラズマ平衡データから粒子、運動量、エネルギー	非公開	General Atomics	核融合

	ギーの乱流輸送率を決定できる。			
Gaussian	量子化学計算の標準的なソフトウェアとして、広く利用されている。	商用	Gaussian Inc.	量子化学計算
HOMER	再生可能エネルギーを利用したマイクログリッドの設計、シミュレーション、最適化に利用される。	商用	HOMER Energy	最適化
HYCOM	全球規模の海洋循環、水温、塩分、海流などをシミュレートできる海洋モデル。	非公開	HYCOM Consortium	海洋モデル
Materials Studio	材料科学や化学分野の新しい材料を開発で利用されるモデリング・シミュレーションツール。分子構造や結晶構造の持つ特性と挙動の関係を予測することができる。	商用	Dassault Systems	マテリアルインフォマティクス
Marc	非線形有限要素法解析ソフトウェアで構造解析、熱解析、材料解析、製造プロセス解析などに対応している。連成解析にも対応している。	商用	MSC Software	マルチフィジックス
MCNP	モンテカルロ粒子輸送シミュレーションコード。中性子、光子、電子などの粒子の輸送をシミュレート。原子力、放射線医学、宇宙開発などの分野で利用されている。	非公開	LANL	粒子輸送モンテカルロ
MSC Nastran	有限要素法で構造解析、熱解析、振動解析などができるソフトウェア。航空宇宙、自動車、機械などの分野で広く利用	商用	Hexagon	構造解析 熱解析 振動解析

	されている。			
NBODY7	NBODY6 の後継コード。	非公開	University of Cambridge	重力多体系
OMNIS	汎用 CFD プラットフォームで船舶および海洋構造物向けの CFD ソルバー (FINE/Marine) とターボ機械向けの CFD ソルバー (FINE/Turbo) が利用できる。	商用	Cadence (NUMECA)	流体解析
OptiStruct	有限要素法を用いた構造解析ソフトウェアで、主に構造物の強度や耐久性を評価するために使用される。線形・非線形静解析向け。	商用	Altair Engineering	構造解析 音響解析 熱解析
POP	全球規模の海洋循環を扱うことができる海洋モデル。	非公開	LANL	海洋モデル
PowerFLOW	格子ボルツマン法を用いた流体解析ソフトウェア。自動車、航空宇宙などの分野で利用される。	商用	EXA Corporation	流体解析
ProMax	プロセスシミュレーションのためのソフトウェア。石油精製、ガス処理、化学プラントなどの設計、運転の最適化に利用される。	商用	Bryan Research & Engineering	最適化
Q-Chem	分子の構造、反応性、振動、電子および NMR スペクトルを正確に予測するための非経験的な量子化学計算の統合パッケージ。	商用	Q-Chem Inc.	量子化学計算
RADIOSS	開発元が同じである OptiStruct が線形・非線形静解析向けであるのに対して、RADIOSS は非線形動解析に対応した構	商用	Altair Engineering	構造解析 衝突解析

	造解析ソフトウェア。			
RELAP5	原子炉過渡解析ソフトウェア。原子炉の過渡現象を扱うことができる。	非公開	INL	原子力
SCALE	原子炉物理、放射線輸送、臨界安全などの解析ができるソフトウェア。	非公開	ORNL	原子力
SERPENT	原子炉の炉心解析、燃料サイクル解析などで利用されるソフトウェア。	非公開	VTT	原子力
STAR-CCM+	様々な流体现象をシミュレーションすることができる汎用流体解析ソフトウェア。	商用	Siemens	流体解析
STOMP	地下環境シミュレーションソフトウェアで多相流、熱輸送、化学反応、汚染物質の拡散などをシミュレーションすることができる。主に環境モデリング、地下水管理、放射性廃棄物の挙動解析などに利用される。	非公開・OSS版あり	PNNL	マルチフィジックス
TOUGH2/3	地熱貯留層シミュレーションコード。熱水流動、物質輸送などを扱う。	非公開	LBNL	流体解析
TRANSP	プラズマ輸送シミュレーションコード。核融合プラズマ中の熱輸送、粒子輸送などを扱う	非公開	PPPL	核融合
VASP	商用の第一原理計算ソフトウェア。密度汎関数理論に基づいて、材料の電子状態、構造、特性などを計算できる。	商用	VASP Software GmbH	第一原理計算
VOL-CALPUFF	大気汚染物質の輸送、拡散をシミュレ	非公開	Environ Corporation (現・Ramboll)	火山

	ーションできるソフトウェア CALPUFFを火山放出物に特化して改良したもの。		Environ)	
WIEN2k	密度汎関数理論を使用して固体の電子構造計算できる。	商用	Vienna University of Technology	第一原理計算
XGC	磁氣的に閉じ込められた熱核融合プラズマのエッジ領域のシミュレーションに特化したジャイロ運動学的粒子コード。	非公開	PPPL	核融合

表 6.4 代表的なアプリケーション（日本）

アプリケーション名	説明	ライセンス	開発元	解析分野
ABINIT-MP	密度汎関数理論に基づいた第一原理計算プログラム。材料の電子状態、構造、特性などを計算できる。並列計算に最適化されており、大規模な系にも適用可能。	OSS	ABINIT group	第一原理計算
Advance/FOCUS-i	非構造格子に対応した圧縮性流体解析ソルバー。特に遷音速や超音速の流れの解析に適しており、高い並列化効率で計算をすることが可能。	商用	アドバンスソフト株式会社	流体解析
Advance/FrontFlow/MP	二流体モデルで混相流計算や壁面熱伝達・高濃度固体粒子を伴う固気液三相流に対応した混相流解析ソフトウェア。	商用	アドバンスソフト株式会社	流体解析

Advance/ FrontNoise	音源の位置と大きさ等を入力として、解析領域内の音圧レベルを評価することができる有限要素法を利用したソフトウェアで大規模解析にも対応している。	商用	アドバンスソフト株式会社	音響解析
Advance/ FrontFlow/red	次世代 IT 基盤構築のための研究開発（革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発）で開発された FrontFlow/red をベースとする汎用流体解析ソフトウェア。	商用	アドバンスソフト株式会社	流体解析
Advance/ FrontSTR	次世代 IT 基盤構築のための研究開発（革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発）で開発された FrontSTR（現 FrontISTR）をベースとする構造解析ソフトウェア。	商用	アドバンスソフト株式会社	構造解析 熱解析
Advance/ ParallelWave	電磁波の支配方程式である Maxwell 方程式を解くことにより、電磁波の挙動とそれを起源とする物理諸量を算出することができる大規模並列計算にも対応した電磁界解析ソフトウェア。	商用	アドバンスソフト株式会社	電磁界解析
Advance/PHASE	次世代 IT 基盤構築のための研究開発（革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発）で開発された PHASE（現 PHASE/0）をベースとする第一原理計算ソフトウェア。	商用	アドバンスソフト株式会社	第一原理計算

ADVENTURE	有限要素法または差分法を用いて数千万～1億自由度を超えるような大規模な構造解析に対応したソフトウェア。	商用	株式会社アライドエンジニアリング	構造解析
AkaiKKR	KKR 法による電子状態計算プログラム。コヒーレントポテンシャル近似などを用いて、合金や不規則系の電子状態を計算できる。	OSS	東京大学	電子状態計算
ALAMODE	格子熱伝導率を計算するためのコード。分子動力学シミュレーションの結果から、フォノン輸送特性を解析し、熱伝導率を計算する	OSS	筑波大学	熱物性解析
Ash3D	地震波伝播の3次元シミュレーションコード。有限差分法を用いて、地震波の伝播をシミュレートする。	OSS	防災科学技術研究所	地震
Athena++	Athena コードを C++ 言語で完全に再設計した新しい宇宙物理学用の輻射磁気流体シミュレーションコード。	OSS	プリンストン高等研究所 東北大学	宇宙物理
Cafemol	粗視化分子モデル計算により大規模生体分子（タンパク質、核酸、脂質）の長時間シミュレーションを行うことができるソフトウェア。	OSS	理化学研究所 京都大学	分子動力学
CONFLEX	分子の配座空間を探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造を探索できる。材料開発、創薬研究、有機合成、分子設計などの分野で幅広く利用されてい	商用	コンフレックス株式会社	バイオイノベーション

	る。。			
ComWAVE	有限要素法により、構造物や医療における超音波検査などが可能な音響解析ソフトウェア。	商用	伊藤忠テクノソリューションズ株式会社	音響解析
DSMC-Neutrals	非構造格子を用いた3次元希薄気体解析用のソフトウェア。クヌーセン数が高くて非平衡性が強い原子分子流れのシミュレーションを得意とする。	商用	株式会社ウェーブフロント	流体解析
e-flow	移動物体問題や自由表面問題に特化した熱流体解析ソフトウェア。独自の離散化手法が採用されている。	商用	株式会社環境シミュレーション	流体解析
EMSolution	静磁界・過渡磁界・渦電流場解析等が可能な電磁界解析ソフトウェアで様々な電気機器の解析を行うことができる。	商用	サイエンスソリューションズ株式会社	電磁界解析
ERmod	ソフト分子集団系の自由エネルギーを計算するソフトウェア。分子動力学法とエネルギー表示溶液理論を組み合わせ、ソフト分子集団への物質結合の自由エネルギーを早く精度よく計算することができる。	OSS	大阪大学 日本原子力研究開発機構	分子動力学
FDAPIII	地盤－構造物連成モデルなどを対象とした3次元等価線形解析プログラム。材料特性のひずみ依存性および周波数依存性を考慮した周波数応答解析、渡応答解析および定常応答解析ができる。	商用	株式会社アーク情報システム	構造解析

FINAS/CFD	非構造格子の熱流体解析ソフトウェア。流体/構造連成解析を目的に開発された。	商用	伊藤忠テクノソリューションズ株式会社	流体解析
FINAS/STAR	自動車・機械などの製造業界、橋梁・ビルなどの建設業界および原子力業界を対象とする非線形大規模構造解析ソフトウェア。	商用	伊藤忠テクノソリューションズ株式会社	構造解析
FrontFlow	流体シミュレーションソフトウェア。有限体積法を用いて、様々な流れ場を解析できる。有限体積法の FrontFlow/red と有限要素法の FrontFlow/blue および有限差分法・有限体積法（直交格子）の FrontFlow/violet がある。	公開 （一部）	文科省国プロ※	流体解析
FrontFlow/red-HPC	FrontFlow/red をスーパーコンピュータ用にチューニングしたもの。	非公開	理化学研究所 北海道大学 神戸大学	流体解析
FrontISTR	有限要素法構造解析ソフトウェア。大規模な構造解析に適している。次世代 IT 基盤構築のための研究開発（革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発）で開発された FrontSTR を OSS 化したもの。	公開	文科省国プロ※ FrontISTR Commons	構造解析 熱解析
FFVHC-ACE	流体解析ソルバー。高レイノルズ数条件下に適した壁面モデル、階層型直交格子に安定かつ非散逸な計算スキームが採用されている。	非公開	東北大学	流体解析
FFX (FrontFlow/X)	格子ボルツマン法による流体解析ソフト	非公開	東京大学	流体解析

	ウェア。			
GAMERA	「京」全系で動作実績のある非線形地盤震動解析用のソルバー。	非公開	東京大学	振動解析
GETFLOWS	陸域における水問題をシミュレーションすることを目的として開発され、空気・水の流れを基本として、熱・化学物質・土砂輸送を解析可能な地圏流体シミュレーションシステム。	商用	株式会社地圏環境テクノロジー	流体解析
GENESIS	生体分子、高分子材料、溶液などの分子動力学シミュレーションに利用できる。	公開	理化学研究所	分子動力学
Geofem	地盤解析汎用プログラムで地盤の静力学的挙動を弾塑性モデル、弾・粘塑性モデルを用いて、圧密現象を考慮した二次元及び三次元の地盤の変形とその安定を解析することができる。	非公開	港湾空港技術研究所	構造解析
GreeM	「京」向けに最適化された重力多体問題シミュレーションコードで宇宙論的 N 体シミュレーションに用いられる。	非公開	筑波大学	重力多体系
iGRAF	離散要素法に基づく粉体シミュレーションと流体シミュレーションの両方が可能なシミュレーションソフトウェア。	商用	株式会社構造計画研究所	粉体解析 流体解析
J-OCTA	材料やライフサイエンスの研究開発で役立つマルチスケール・シミュレーション機能を搭載したソフトウェアパッケージ。	商用	株式会社 JSOL	量子化学計算 第一原理計算 分子動力学

MAGNA/TDM	アンテナ・導波管・マイクロストリップライン・フィルタ・シールド等のマイクロ波関連の機器・部品の研究開発や、EMC 対策向けの電磁波解析ソフトウェア。	商用	伊藤忠テクノソリューションズ株式会社	電磁界解析
MIZUHO/ BioStation	フラグメント分子軌道法プログラムとその専用プリポストから構成される量子化学計算ソフトウェア。	商用	みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社	量子化学計算
MIZUHO/ FrontFlow/blue	次世代 IT 基盤構築のための研究開発（革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発）で開発された FrontFlow/blue をベースとする汎用流体解析ソフトウェア。	商用	みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社	流体解析
MODYLAS	汎用古典分子動力学シミュレーションソフトウェア。長距離静電相互作用の高速多重極展開法による取り扱いを含め、ナノ分野・バイオ分野における分子動力学計算に必要な各種手法に対応している。	非公開	名古屋大学	分子動力学
mVMC	量子モンテカルロ法を用いた多体問題のシミュレーションコード。	公開	東京大学	量子多体系
NMRI CFD	船舶用の流体解析ソフトウェア。格子生成プログラム・格子変形／加工プログラム・重合格子情報生成プログラムなどから構成されている。	非公開	海上安全技術研究所	流体解析
NuFD/ FrontFlow	次世代 IT 基盤構築のための研究開発（革	商用	数値フローデザイン	流体解析

	新的シミュレーションソフトウェアの研究開発)で開発された FrontFlow/red をベースとする汎用流体解析ソフトウェア。			
NICAM	非静力学正 20 面体格子で全球の雲解像を目的として開発された大気モデル。	非公開	理化学研究所 東京大学 海洋研究開発機構	気象モデル
NTChem	Gauss 型基底に基づいた量子化学計算ソフトウェア。様々な量子化学計算手法や機能が利用できる。大規模な分子に対して高効率な並列計算が可能。	非公開	理化学研究所	量子化学計算
JMAG	電気機器の開発における有限要素法に基づく電磁界解析ソフトウェア。	商用	株式会社 JSOL	電磁界解析
OpenFDTD	時間領域差分法 (FDTD 法) を用いて、電磁波の伝播を計算することができる。電磁界解析ソフトウェア。	公開	株式会社 EEM	電磁界解析
OpenMOM	モーメント法によりアンテナや電磁界の解析に利用することができるソフトウェア。	公開	株式会社 EEM	電磁界解析
OpenMX	密度汎関数理論に基づく第一原理計算プログラムで擬ポテンシャル法と局所基底関数を用いて、高速な計算を実現する。	公開	東京大学	第一原理計算
OpenSTF	差分法により電極と誘電体から成る系の電圧分布や電界分布を計算できる電磁界解析ソフトウェア。	公開	株式会社 EEM	電磁界解析
Particleworks	MPS 粒子法を用いた	商用	プロメテッ	流体解析

	最先端の流体解析シミュレーションソフトウェア。		ク・ソフトウェア株式会社	
PHASE/0	密度汎関数理論に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理電子状態計算プログラム。全エネルギー、電荷密度分布、電子の状態密度、バンド構造、安定な原子構造などの計算ができる。	公開（商用版・非公開版もあり）	文科省国プロ※	第一原理計算
PHITS	粒子輸送モンテカルロによるシミュレーションコード。様々な種類の粒子、エネルギー範囲、物質に対応。	非公開	日本原子力研究開発機構	粒子輸送モンテカルロ
Phonopy	フォノン計算ソフトウェアで結晶の格子振動を計算し、フォノン分散関係や熱力学量（比熱など）を求めることができる。	公開	Atsushi Togo	物性計算
Poynting	時間領域差分法（FDTD 法）を用いた電磁界解析ソフトウェア。	商用	富士通株式会社	電磁界解析
ProteinDF	タンパク質向けの量子化学計算パッケージ。	公開	文科省国プロ※	量子化学計算
RAIKOU	一般相対論的多波長輻射輸送計算コードでブラックホール周囲の光の伝搬を極めて高精度に解くことが可能。	非公開	筑波大学	宇宙物理
RSDF	実空間差分法と擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算プログラム。結晶・界面・分子などの広範な物理系に対して密度汎関数法による電子状態計算を行う。	公開	東京大学	第一原理計算

	高速フーリエ変換が不要で高並列計算が可能。			
R-FLOW	MPS 粒子法と離散要素法により流体解析と粉体解析が可能なソフトウェア。	商用	株式会社アールフロー	流体解析 粉体解析
R2D2	輻射磁気流体力学方程式を高精度かつ安定に解くことで太陽表面付近と太陽内部を一貫して解くことが可能なシミュレーションコード。	非公開	神戸大学	宇宙物理
SALMON	第一原理計算に基づく電子状態計算プログラム。時間依存密度汎関数理論を用いて、励起状態を計算することができる。	公開	東京大学	第一原理計算
scFLOW	ポリヘドラルメッシュ（多面体）に対応した有限体積法ベースの熱流体解析ソフトウェア。	商用	株式会社ソフトウェアクレイドル	流体解析
SCRYU/Tetra	非構造格子（四面体、五面体・六面体）有限体積法ベースの熱流体解析ソフトウェア。	商用	株式会社ソフトウェアクレイドル	流体解析
SMASH	高速かつ高効率な並列計算手法により、ナノサイズ分子を分割せずに Hartree-Fock 法、DFT 法、MP2 法でエネルギーや構造最適化計算を実行することができる。	公開	Kazuya Ishimura	量子化学計算
STREAM	電子機器、建築土木などさまざまな業界で使われる構造格子系の汎用熱流体解析ソフトウェア。	商用	株式会社ソフトウェアクレイドル	流体解析
TDAPIII	土木・建築分野を対象とした 3 次元非線形時刻歴応答解析プ	商用	株式会社アーク情報システム	構造解析

	ログラム。静解析から動解析まで、一連の解析をサポートしており、土木・建築分野に特化した要素群、材料非線形モデルを利用できる。			
TOMBO	全電子混合基底法を用いた第一原理計算のプログラム。孤立系、表面・界面、結晶などの広範な物理系を対象とし、芯電子から価電子までのすべての電子状態を計算することができる。	公開	東北大学 横浜国立大学	第一原理計算
UT-Heart	文部科学省スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムで開発された心臓シミュレーションソフトウェア。	非公開	東京大学 株式会社 UT-Heart 研究所	マルチフィジックス
WindPerfect	有限体積法に基づく熱流体シミュレーションソフトウェア。風環境・空調・換気などを主なターゲットとしている。	商用	株式会社環境シミュレーション	流体解析

※文科省国プロ：次世代 IT 基盤構築のための研究開発（革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発）で開発されたソフトウェアを指す

表 6.5 AI に関連するライブラリやフレームワーク等

名称	説明	ライセンス	開発元	解析分野
BLOOM	大規模言語モデル。自然言語処理タスクに利用できる。	公開	Hugging Face	大規模言語モデル
Caffe	深層学習向けのフレームワーク。ニューラルネットワークのモデルをテキストベースで定義でき、トレーニングや評価の際に高速な処理を可能。	公開	University of California	深層学習
cuDNN	畳み込み・活性化関数・テンソル変換などの機能	公開	NVIDIA	深層学習

	を備えた深層学習向ライブラリ。			
DALL-E	画像生成 AI。テキストによる指示から画像を生成できる。	非公開	OpenAI	画像生成
Darknet	深層学習フレームワークで YOLO 特徴量による物体認識などに使用される。	公開	Joseph Redmon	深層学習
DEAP	遺伝的アルゴリズムを構成するための Python モジュール。	公開	github.com/DEAP	機械学習
DeepLab	画像セグメンテーションのための深層学習モデルで画像内のオブジェクトをピクセル単位で分類することができる。	公開	Google	画像解析
DeepXDE	科学技術計算のための深層学習ライブラリ。偏微分方程式の解を深層学習で近似するなどの応用も可能。	公開	Brown University	深層学習
Fugaku-LLM	「富岳」の性能を最大限に活用した分散並列学習により開発された日本語能力に優れた大規模言語モデル。	公開	東京科学大学 東北大学 富士通株式会社 理化学研究所 名古屋大学 株式会社サイバーエージェント Kotoba Technologies Inc.	大規模言語モデル
Hugging Face Transformers	Transformer、BERT、GPT などの自然言語処理モデルが実装されたライブラリ。	公開	Hugging Face	自然言語処理
Microsoft Cognitive Toolkit	以前は CNTK と呼ばれていた深層学習向けのフレームワーク。	公開	Microsoft Research	深層学習
Megatron-LM	大規模言語モデルで自然言語処理ができる。	公開	NVIDIA	大規模言語モデル
MXNet	深層学習フレームワーク。様々な言語で使え、スケーラビリティが高くいろんな規模の深層学習に対応している。	公開	University of Washington Carnegie Mellon University	深層学習
NetworkX	ネットワーク分析のためのライブラリでグラフ構	公開	LANL	情報科学

	造の解析、可視化、モデリングなどができる。			
NVIDIA GauGAN	画像生成 AI。セグメンテーションマップから写実的な画像を生成する。	非公開	NVIDIA	画像生成
OpenAI Codex	コード生成 AI。自然言語による指示からコードを生成できる。	非公開	OpenAI	生成 AI
PaLM	大規模言語モデル。自然言語処理タスクに利用される。	非公開	Google	大規模言語モデル
PyTorch	深層学習フレームワーク。柔軟性が高く、研究開発に広く利用されている。	公開	Facebook (現・Meta)	深層学習
ROMNet	偏微分方程式の解の近似のための深層学習ライブラリ。高次元の偏微分方程式を効率的に解くことができる。	公開	California Institute of Technology	深層学習
scikit-learn	Python で書かれた機械学習ライブラリ。	公開	scikit-learn.org	機械学習
SimNet	深層学習フレームワーク。画像認識、自然言語処理などに利用される。	公開	Huawei	自然言語処理
SNAP	ネットワーク分析のためのライブラリ。大規模なネットワークの解析に適している。	公開	Stanford University	情報科学
Stable Diffusion	画像生成 AI でテキストから画像を生成することができる。	公開	Stability AI	画像生成
TensorFlow	深層学習フレームワークで画像認識、音声認識、自然言語処理、強化学習などの様々な分野で広く利用されている。	公開	Google	深層学習

6.4. 研究支援プログラムや計算資源提供プラットフォーム等からの情報

利用に関連する研究支援プログラムや計算資源提供プラットフォームの公開情報から利用課題の規模感（主な成果、計算時間の割り当て、論文数など）を探った。調査対象は米国 NFS のプログラム（XSEDE, ACCESS）と米国 DOE のプログラム（ALCC, INCITE）および欧州 EuroHPC JU のプログラム（PRACE）とした。

6.4.1. XSEDE

米国の XSEDE（eXtreme Science and Engineering Discovery Environment）は NSF が資金提供した科学研究の支援・共同研究の促進・教育と普及のためのプログラムである。実施期間は、2011 年 7 月～2022 年 8 月（表 6.6 に示すように XSEDE1 と XSEDE2 に分けられる）であり、予算規模は 257M ドル（386 億円）であった。以下に「XSEDE: The Extreme Science and Engineering Discovery Environment (OAC 15-48562) Final Project Report」から得た情報をまとめる。

表 6.6 XSEDE1 と XSEDE2 の特徴

特徴	XSEDE1	XSEDE2
実施期間	2011～2016	2016～2022
重点目標	リソースの統合 利用基盤の構築	AI 利用などの新興分野への対応 利用者の拡大
重点分野	科学技術分野 (伝統的な HPC の分野が中心)	学際的分野 (HPC 利用がこれまで されていなかった分野も含む)
利用者支援	基本的なトレーニングとサポート	高度な技術支援 (ECSS)

XSEDE の中核的なプログラムの 1 つは ECSS（Extended Collaborative Support Service）であり、これは XSEDE に参画する機関（SDSC、TACC、PSC など）の技術者や研究者と外部専門家から構成される人員の中から、各プロジェクトに適した専門家を選定して高度な技術支援を研究者やプロジェクトに提供するもので、利用者が HPC のリソースを最大限に活用できるよう支援するために設計されている。ECSS では、具体的には以下のような支援が受けられる。

- ・ 技術的な専門知識の提供

HPC やデータ解析、シミュレーション、ソフトウェア開発など、専門的な技術支援を必要とする研究プロジェクトに対して、専門家を割り当てる。これにより、複雑な計算モデルの最適化、プログラムの効率化、新しいアルゴリズムの設計などが可能となる。

- ・ プロジェクト単位の支援

特定の研究プロジェクトの課題に対するカスタマイズされたサポートを提供する。数週間から数ヶ月にわたる短期支援から、プロジェクトの全期間にわたる長期支援まで、柔軟に対応している。

- ・ 分野横断的支援

生物科学、物理科学、エンジニアリング、化学、地球科学、AI など多岐にわたる分野に対応しており、提供されるサービスも多様で、ソフトウェアの最適化とスケールリング（HPC リソースに適したコード改良）、並列計算アルゴリズムの設計と実装、データ解析や可視化ツールの開発、特定の科学アプリケーションのカスタマイズなど。

利用状況としては、NaIP（Novel and Innovative Projects）プログラムのプロジェクト数で 587、全体のプロジェクト数では 7,899（ただし、アクティブなものは 6,509）にも及ぶ。XSEDE2 の期間における総割り当てノード時間は約 1.3 兆 NUs（ノード時間）となっており、HPC 向けで 1.257 兆 NUs（利用者 29,132）、データ集中型の処理で 8.93 億 NUs（利用者 1,166）、クラウドリソースの利用で 47.9 億 NUs（利用者 3,562）、高スループットコンピューティングでの利用で 14.1 億 NUs（利用者 78）、データの可視化利用で 582.5 万 NUs（利用者 267）となっている。分野ごとの割り当ては図 6.1 に示す。

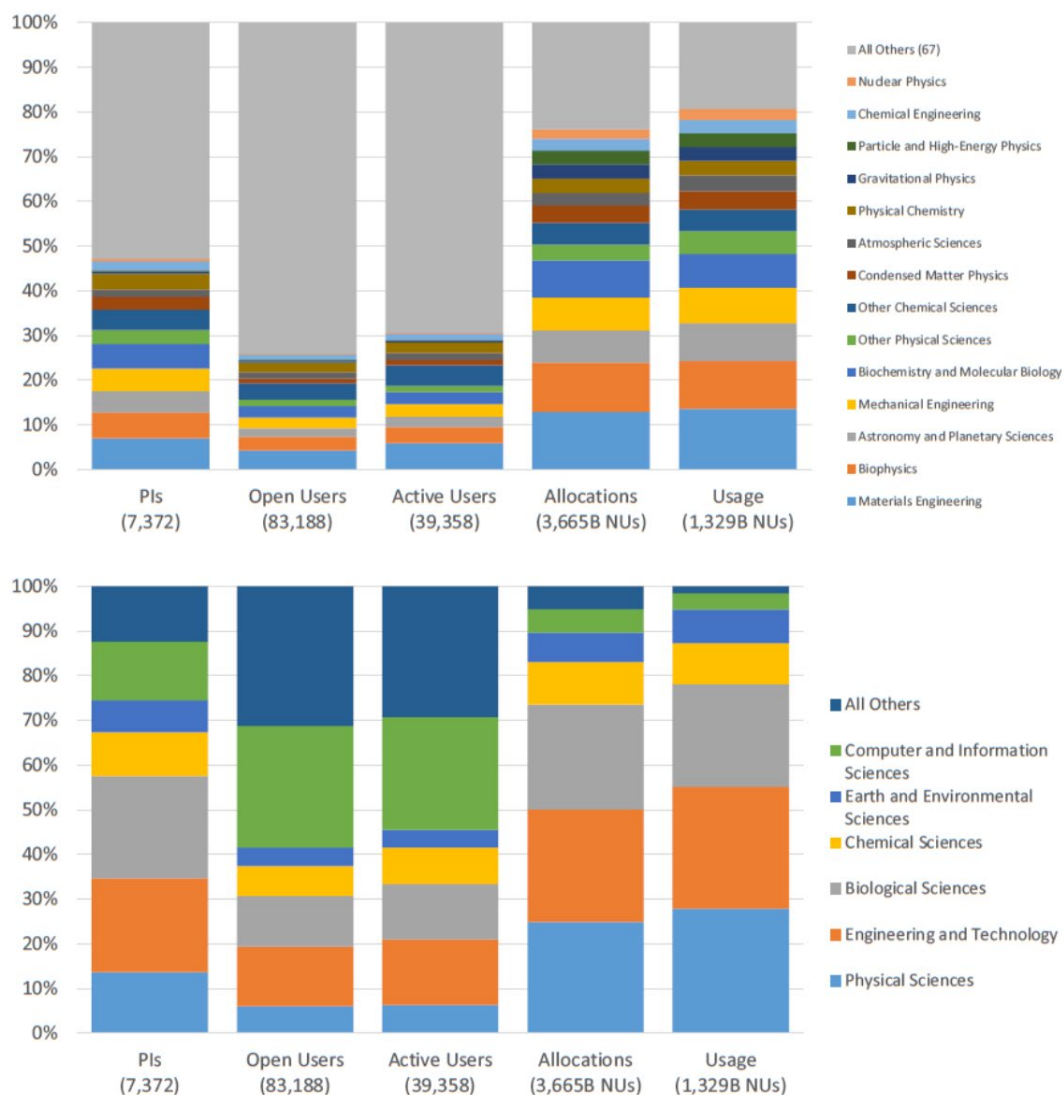


Figure 2: (top) XSEDE user, allocation, and usage summary by field of science, in order by usage, excluding staff projects during all of XSEDE2. The data show more than 80 detailed fields of science selected by PIs for their projects. (bottom) The same data summarized according to the 13 parent fields of science. Note: PIs and users may appear under more than one field of science.

図 6.1 XSEDE2 期間における分野ごとの利用状況（割り当てノード時間）

図 6.1 を見ると Allocations と Usage の差が大きい、その理由としてはリソースの超過申請があることが指摘されていた。具体的には、毎四半期ごとに申請される NUs は利用可能なリソースを大幅に超える傾向があり、例えば、2022 年第 3 四半期では、申請された NUs は利用可能量の 150% に達しており、多くのプロジェクトが希望するリソースをすべて割り当てられることはなく、XRAC（XSEDE Resource Allocation Committee）の推薦と割り当てのギャップもあって、推薦 NUs が利用可能リソースの 48% 程度にとどまる場合もあったとのことである。また、特定の分野やプロジェクトでは、割り当てられた

NUs を完全に利用しない場合もあり、これは計画の変更や予期せぬ問題、リソースの利用効率の問題などが原因として挙げられていた。さらに科学ゲートウェイを通じた利用もあり、用途は多岐に渡るが、これらは通常の個別プロジェクトと異なる使用パターンを持つため、NUs の使用が割り当てを下回ることがあったと指摘されていた。実際のリソースの使用量を見ると、1つの分野に集中することはなく **Physical Sciences・Engineering and Technology・Biological Sciences** で同程度となっている。

- ・科学ゲートウェイ (Science Gateway)

専門的なプログラミング知識がなくても科学計算リソースやデータ分析ツールを利用できるように構築されたウェブベースのプラットフォームで、科学ゲートウェイを介した利用では、多くの計算リソースが一時的に「予約 (Allocation)」されても、必ずしもすべてが実際の使用に繋がるとは限らないケースがある。特に科学ゲートウェイを介して送信されるタスクは、通常、多くの小規模ジョブに分割されるため、リソース割り当てに対して実際の使用量が低くなることが多い。

ここで、主要な成果と使用された計算機システムについて、表 6.7 に示す。定量的な評価（論文数、被引用数など）としては、期間中、約 16,000 件の論文等が発表（XSEDE から支援を受けた旨を明記したもの）された。そのうち、84.4%がジャーナル論文であり、11.8%が会議論文、3.8%が書籍やデータセットなど約 70%に DOI が付与されている。引用数については、h-index（少なくとも h 回引用された論文の数）が 336、g-index（被引用上位 g 番目までの論文の被引用数の総和が g の 2 乗以上となる最大の g）が 643 となっている。また、2022 年 6～8 月までの四半期で追加された総引用数は 158,477 件である。

XSEDE については、事業が終了していることもあり、政策効果についても定量的な評価がなされている。独自の代替指標としての ROI (ROIproxy) を定義している。これは、科学的アウトプットそのものの経済的価値を評価するのではなく、アウトプットが達成されるために必要なサポート（計算時間、トレーニング、技術支援）の価値を、代替手段のコストと比較して算出している。その結果は、XSEDE に 1 ドルを投資するごとに、少なくとも 1.80 ドル、場合によっては 3.00 ドル以上のサービス価値を得られたとしている。より詳細には、MCE (Most Conservative Estimate) の推定値は 1.87 (XSEDE 1 の 4 年目から XSEDE 2 の 6 年目までの平均) で BAE (Best Available Estimate) の推定値だと 3.33 (XSEDE 1 の 4 年目から XSEDE 2 の 6 年目までの平均) となっており、これは英国の研究投資に関する報告書 (1.20～1.25) よりも高いと主張している。

- ・ROIproxy の補足説明

XSEDE が提供するサービスや活動（トラブルシューティング、トレーニングセッション、データ保存、計算時間など）の場合、商業的なサービスの価格を基準にし

て市場価値を推定。例えば、クラウドサービスプロバイダーが提供する計算時間やデータ保存の料金を参考にして、同等のサービスの市場価値を見積もる。また、高い被引用数や影響力のある論文は、他の研究者や学術的分野における基盤を提供するという点で価値があると考ええる。さらに科学的ブレークスルーの社会的・経済的波及効果や専門家パネルにおいて、潜在的な経済的・社会的価値を定性的に評価した結果も考慮している。

表 6.7 XSEDE における主要な成果と使用された計算機システム

分野	主要成果	使用された 計算機システム
Physical Sciences	①ブラックホールのイベントホライズンの画像化 (EHT プロジェクトでの理論モデル提供) ※ECSS の成果としても言及 ②銀河分類のための深層学習の利用 (大規模天文学データ解析を自動化) ③分子動力学による炭素構造のシミュレーション (ナノテクノロジーへの応用可能性) ④量子物理学におけるシミュレーション (高エネルギー物理学での基礎研究支援)	①Stampede2 (TACC) ②Bridges (PSC) , Blue Waters (NCSA) ③Stampede2 (TACC) ④Frontera (TACC)
Engineering and Technology	①波エネルギー変換装置のモデリングと最適化 (再生可能エネルギー分野への応用) ※ECSS の成果としても言及 ②高効率バッテリー材料である Li-air 電池、Li-S 電池の開発 (電気自動車向けの新技術開発) ③自律運転車のデータ解析支援 (ビッグデータ処理の最適化) ④構造材料の最適化シミュレーション (新合金設計のためのデータ提供)	①Stampede2 (TACC) ②Comet (SDSC) ③Jetstream (IU) ④Frontera (TACC)
Biological Sciences	①HIV-1 ウイルスのリポソームモデル化 (脂質二重層の構造解析とシミュレーション) ②ウイルス複製のメカニズム研究 (DNA ポリメラーゼの塩基付加メカニズム解明) ③魚類ゲノム (California Yellowtail) の解読と注釈 (水産業への応用可能性の検討) ④タンパク質自己組織化のシミュレーション (高分子設計への応用) ⑤鳥類の気候適応遺伝子の特定 (遺伝子と気候変動の相互作用を解析)	①Stampede2 (TACC) Bridges-2 (PSC) ②Stampede2 (TACC) ③Comet (SDSC) ④Comet (TAC) ⑤Jetstrea (IU)
Earth and Environmental Sciences	①風力タービンの応答モデリング (タービン寿命向上のためのシミュレーション) ②大気汚染物質のモデリング (N_2O_5 の反応メカニズム解析) ③地球温暖化に関連するデータ解析 (気候モデルの改良に寄与)	①Stampede2 (TACC) ②Comet (SDSC) ③Jetstream (IU)

Chemical Sciences	①炭素回収と変換のための新材料設計 (環境保護技術としての利用可能性) ②化学シミュレーションによる触媒反応の最適化 (産業化学プロセスの効率向上) ③酸性スイッチを持つ電子輸送プロセスの研究 (バイオエネルギー応用の可能性検討)	①Comet (SDSC) ②Stampede2 (TACC) ③Bridges (PSC)
Social Sciences	①17 世紀の書籍印刷者特定のための AI 利用 (歴史的文書のデジタル化と解析) ②社会科学データのビッグデータ分析 (経済・政治分野での応用研究)	①Jetstream (IU) ②Bridges-2 (PSC)
Interdisciplinary Sciences	①COVID-19 治療薬探索の高速化 (AI を利用した薬剤スクリーニング) ※ECSS の成果としても言及 ②深層学習を活用した AI アプローチ (多分野での応用可能性を模索) ③エネルギー変換と保存に関する学際的研究 (技術と環境科学の融合)	①Jetstream (IU) Bridges-2 (PSC) ②Bridges (PSC) ③Stampede2 (TACC)

6.4.2. ACCESS

ACCESS (Advanced Cyberinfrastructure Coordination Ecosystem: Services & Support) プログラムは、XSEDE プログラムの後継として設立された。XSEDE プログラムは多くの科学研究を支援してきたが、ACCESS プログラム (2022 年 9 月から開始) はその実績を基盤としつつ、新たな研究モードに対応する能力を拡充し、より幅広い研究者コミュニティへの参加を促進することを目指している。ここでは、主に現在までに公開されている報告書「NSF ACCESS program 2022-2023 Highlights」と「NSF ACCESS program Program Year Two」からプログラムの概要と成果を記す。

ACCESS プログラムは、科学と工学のあらゆる分野における新たな思考と変革的な発見を推進することを使命としている。また、そのためのキーワードとして、アジャイル・統合・堅牢・信頼性・持続可能性を掲げている。これは単にリソースを提供するだけでなく、その長期的な可用性と研究者にとってのシームレスな使いやすさを保証することに重点が置かれていることを意味している。このような特性は、国家レベルのインフラストラクチャプログラムにとって重要である。ACCESS は、その目標達成に向けて連携して機能する 5 つの主要なサービス (または機能領域) で構成されている。具体的には、リソース配分・サポート・オペレーション・評価・調整である。計算資源やストレージなどのリソースを配分し、ユーザーがこれらのリソースを効果的に利用できるように技術的な支援やトレーニングを提供する。また、プログラムの基盤となるインフラストラクチャの運用と維持管理を行う。さらにプログラムの成果や利用状況を評価するための指標を開発して分析する。これらプログラム全体の活動を調整し、内部および外部の関係者との連携を促進する。このように機能領域を分けることで、複雑なインフラストラクチャを効率性と有効性の高いエコシステムとして機能させることを目標としている。その目標の 1 つは新たな研究に対応する能力を拡充しつつ、より多くの研究者が高度なインフラストラクチャを利用できるようにすることであり、分野、計算方法、所属機関、そして申請者の属性に関わらず、多様な研究コミュニティを支援することである。また、研究者とリソースを結びつける際の障壁を減らすために、効率的でスケーラブルかつ簡素化された申請および審査の枠組みを実装することで新たなユーザーコミュニティにサービスを拡張し、多様な利用を包含するための堅牢で分散化された柔軟なソフトウェアプラットフォームを開発することも重要な目標としている。ACCESS では、リソース配分に関して新しい枠組みを確立した。その中核となるのが、eXtensible Resource Allocation Service (XRAS) と呼ばれるソフトウェアプラットフォームである。XRAS は、新しいアロケーションポリシーにて運用される。新しいアロケーションポリシーは、制度の規模、計画された作業の規模、研究分野、申請者の属性に関わらず、公平性を保証することを目的とし、研究ニーズに応じて選択できる 4 つの異なるアロケーションプロジェクトタイプを設けている。4 つのタイプとは、EXPLORE、DISCOVER、ACCELERATE、MAXIMIZE である。EXPLORE は小規模な利用から始めたい研究者向け、DISCOVER は中規模の研究プロジェクト向け、

ACCELERATE はより大規模な計算ニーズに対応し、MAXIMIZE は最も大規模な研究活動をサポートする。XRAS の導入と、様々なプロジェクトタイプの定義は、以前のシステムからの改善を目指した意図的な取り組みであり XSEDE からのフィードバックに対応したものである。

ACCESS プログラムは、ユーザーに対して幅広いサポートサービスを提供し、研究コミュニティの構築とエンゲージメントを目的とした様々なイニシアティブを展開している。プログラムの目標を支援する活動を調整し促進する役割を担う ACCESS コーディネーションオフィス (ACO) は、その中心的な存在となっている。ACO により組織・監督されたチームには、インフラストラクチャやリソースに関する情報を提供し迅速な計算時間の初期割り当てを支援するチーム、より専門的な技術サポートを提供するチーム、特定の研究コミュニティ向けにカスタマイズされた Web ベースのポータル (科学ゲートウェイ) を通じてリソースへのアクセスを容易にするチーム、研究コミュニティのための Q&A フォーラムを提供するチームがある。ACCESS では、単に高度なコンピューティングリソースへのアクセスを提供するだけでなく、ガイダンス、トレーニング、そして共同作業環境も提供することを重要視しており、コミュニティ構築とサポートサービスに重点が置かれていることが伺える。この包括的なアプローチは、プログラム参加者の障壁を下げ、リソースの有効活用を最大化することに寄与する。

ACCESS プログラムの成果としては、2022 年から 2023 年の期間において、リソースを利用した注目すべき研究プロジェクトがいくつか報告されている。アプリケーション分野ごとに分けると、基礎物理・気象・材料科学 (各 1 件)、生物学 (3 件)、教育利用 (2 件) となっている。具体的には、量子重力の研究、ハリケーンの洪水被害予測の研究、リチウムイオン電池の開発、細胞核の膜機能の研究、海洋生物やウイルスの研究などである。利用の規模感としては、現在も実施中のプログラムであることもあり、XSEDE のような統計情報は公開されておらず、限られた情報のみ提供されている (表 6.8)。

表 6.8 ACCESS プログラムの利用の規模感 (実施 2 年目のある月の集計時点)

実施プロジェクト数	413
関与した研究者と教育者	404 (所属機関の数 142)
ユーザー数	7186
ジョブ数	2,771,214
報告された出版物数	57
科学分野数	26

6.4.3. INCITE, ALCC

米国 DOE が 2003 年から実施している INCITE (Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment) は、科学研究と技術革新を加速することを目的としたプログラムである。INCITE プログラムの目的や仕組みを述べたのち、プログラムを通じて実施された近年のプロジェクトで計算時間の割り当てが大きなものをアプリケーション分野ごとに挙げて、INCITE プログラムの計算資源の利用の規模感を示す。また、5.3.2 節で取り上げた Advanced Scientific Computing Research (ASCR) プログラムの ALCC (ASCR Leadership Computing Challenge) との違いについても言及する。どちらも、DOE によるアルゴンヌ国立研究所 ALCF、オークリッジ国立研究所 OLCF、ローレンス・バークレー国立研究所 NERSC にある LCCF (Leadership-Class Computing Facility) であるスーパーコンピューティングリソースへのアクセスを提供する主要なイニシアティブである。

INCITE プログラムの特に「グランドチャレンジ」に対処するために大規模で計算負荷の高いプロジェクトに対して、実質的な計算割り当て時間と支援リソースを提供することにより、科学的発見と技術革新を加速することを目指している。また、INCITE では、大学、国立研究所だけでなく産業界からの提案も奨励しており、多様な研究主体による HPC の活用を推進することを目的としている。その目標は多岐にわたり、科学的ブレークスルーの達成だけでなく、学术界、政府機関、産業界（米国および米国以外の機関も含む）を含む協力的なエコシステムの育成を目指している。多様な関係者を含めることで、INCITE は HPC の利点が広く共有され、実施される研究が基礎科学と実用的な応用の両方に関連することを示し、各セクターの独自の専門知識と視点を活用することも目的とする。プロジェクトの提案は毎年 4 月中旬から 6 月にかけて受け付けられ、競争的プロセスを通じて採択される。すべての提案は、国際的な専門家パネルによる査読と、計算準備状況のレビューという 2 段階の審査プロセスを経る。採択は、研究の質と影響、および要求されたリソースに対する提案されたシミュレーションの適合性に基づいて行われる。採択されたプロジェクトには、1 年から 3 年間の計算時間が割り当てられる。2022 年からは、博士号取得後 10 年以内の主任研究者を対象とした早期キャリアトラックが導入され、割り当て可能な計算時間の 10% がコミットされている。採択されたプロジェクトは科学的に優れているだけでなく、提供される膨大な計算資源を効果的に活用できることが保証され、国際的な専門家による査読は、選考プロセスに多様な視点と高い基準をもたらしている。計算準備状況のレビューは、これらの高価なリソースから最大限の科学的成果を得るために不可欠であり、プロジェクトがスーパーコンピュータの能力を十分に活用する準備ができていないことを保証する。早期キャリアトラックは、この専門分野における次世代の研究者の育成への取り組みを示している。

プロジェクト開始の当初は、政府機関と大学の研究のための大規模で集中的なスーパーコンピュータの利用を必要とするプロジェクトに焦点が当てられていたが、2005 年半ばに

は産業界も対象とするように拡大された。ALCF と OLCF によって共同で運営されるようになったのは 2010 年である。その結果、プログラムを通じて提供される計算資源は大幅に増加し、2004 年の 500 万コア時間から現在では数十億コア時間またはノード時間に達している。INCITE プログラムは、採択されたプロジェクトに対して、単に計算リソースを提供するだけでなく、専門的なサポートが提供される（予算面については、プログラムの運営費や施設維持費、サポートスタッフ人件費などは DOE の予算でカバーされており、ASCR プログラム予算の一部として恒常的に措置されている）。表 6.9 に近年で大きな計算時間が割り当てられたプロジェクトを示す。

表 6.9 INCITE プログラムにおける成果（計算時間の割り当てが大きなもの）

アプリケーション分野	プロジェクト内容 (採択年)	使用システム	計算時間の 割り当て
材料科学	エネルギー貯蔵のための新しい電解質の発見と最適化 (2014 年)	Titan	4800 万コア時間
気候変動	地球システムモデルによる気候変動の理解 (2023)	Summit Frontier	45 万ノード時間 (Summit) 125 万ノード時間 (Frontier)
天文学	コア崩壊型超新星爆発のメカニズムの理解の深化 (2023)	Theta Polaris	250 万ノード時間 (Theta) 30 万ノード時間 (Polaris)
核融合	磁場閉じ込めプラズマによる核融合における実験研究の加速 (2018 年)	Theta	75 万ノード時間
計算機科学	科学のための大規模言語モデル (AuroraGPT) の開発 (2025 年)	Aurora Polaris	77 万ノード時間 (Aurora) 15 万ノード時間 (Polaris)

ALCC プログラムを通じた計算リソースの割り当てでも INCITE と同様に厳格な査読に基づく競争的プロセスに従う。提案は、科学的および技術的なメリット、DOE や他の政府機関の優先事項への対応、計算の準備状況など、いくつかの主要な基準に基づいて評価される。また、提案された方法論の適切性、要求されたリソースの正当性と妥当性について慎重に検討される。計算リソースの割り当てに関しては、3 つの LCCF (ALCF, OLCF, NERSC) のそれぞれで、計算リソースの割り当て可能時間の 10% 程度（最大で 30%だが、25%を超えると却下される可能性も高い）となっている。そのため、非常に大規模な割り当て時間（最大 60%）を必要とするプロジェクトは INCITE プログラムへの申請が適切で

あることが明示されている。また、標準的なプロジェクト期間は 1 年である（プロジェクトの進捗状況とプログラムの優先順位に応じて更新の可能性もある）。このようにリソース要求の上限がある年間サイクルによって、より広範な研究活動に対して LCCF へのアクセスをより広く分配できるようにしている。このように ALCC と INCITE は DOE の高性能コンピューティングにおけるエコシステムにおける相補的なイニシアティブであることが分かる。

本節の主な情報源（参照 URL）は以下の通り。

<https://www.energy.gov/science/ascr/advanced-scientific-computing-research>

<https://doeleadershipcomputing.org/about/>

<https://www.anl.gov/article/us-department-of-energys-incite-program-seeks-proposals-for-2025-to-advance-science-and-engineering>

<https://www.alcf.anl.gov/science/incite-allocation-program>

<https://www.ornl.gov/news/incite-grants-awarded-56-computational-research-projects>

<https://www.ornl.gov/news/us-department-energys-incite-program-seeks-proposals-2022>

<https://www.anl.gov/article/us-department-of-energys-incite-program-seeks-proposals-for-2024-to-advance-science-and-engineering>

<https://www.anl.gov/mcs/article/argonne-researcher-to-participate-in-incite-project>

https://sc.osti.gov/-/media/sc-2/pdf/cov-ascr/2008/incite_cov_report.pdf

<https://research.njit.edu/ascr-leadership-computing-challenge-alcc>

<https://www.nersc.gov/users/accounts/alcc/>

<https://www.alcf.anl.gov/science/alcc-allocation->

<https://eesm.science.energy.gov/news/doe-accepting-applications-ascr-leadership-computing-challenge-program>

<https://www.alcf.anl.gov/science/incite-allocation-program>

6.4.4. PRACE

5.2.15 節で取り上げた欧州の PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) から利用の規模感を見ておく (予算については 5.2.15 節を参照のこと)。以下は PRACE の年次報告書 (2012~2021 年) とファクトシート「PRACE in Numbers」を主な情報源としている。

PRACE は 2010 年のサービス開始以来、7 つのスーパーコンピュータを通じて、累計で 210 億コア時間以上のリソースが提供された。提供されたマシンの総計算能力は約 110 ペタフロップスにのぼり、これまでに 688 件の科学・産業プロジェクト (42 か国) に及ぶ。プロジェクト公募は平均して 2~5 倍の競争倍率となっており、需要の高さが継続している。特に COVID-19 パンデミック時には、迅速対応のための治療法、ワクチン開発、疫学分析、感染メカニズムの理解に関する研究を支援し、5 億コア時間以上が割り当てられ、22 か国から 90 件のプロジェクト提案があり、33 件が採択された。PRACE の主要な目的は、様々な分野において影響力の大きい科学的発見と工学的研究開発を可能にすることであるが、このような機動的な計算リソースの提供も行われている。また、PRACE では HPC が学術研究から産業応用まで、多様で広範な科学的探求と技術革新を支援する基盤であるとの認識から、欧州の競争力を高め、その成果を社会全体の利益に結びつけることを目標としている。

PRACE は世界最高水準の高性能な計算リソースへのアクセスを提供することで欧州の研究者が自国の計算機システムだけでは不可能であった画期的な研究に取り組むことを可能とするだけでなく、コード開発やテストといった多様な計算機のニーズにも対応しているという特徴がある。また、ユーザーサポートとアプリケーション最適化サービスを提供しており、特にヘテロジニアスなアーキテクチャ向けのアプリケーション最適化を支援することで、研究者は技術的な課題を克服し、より高いパフォーマンスを達成することを可能としている。さらに PRACE は PRACE Advanced Training Centers (PATCs)、季節学校、国際 HPC サマースクール、MOOC (Massive Online Open Courses) などのプログラムを通じて、HPC におけるトレーニングと教育にも力を入れている。これは、ハードウェアへのアクセスだけでは不十分であるとの認識の下、次世代の HPC ユーザーと開発者を育成し、インフラストラクチャの効果的な活用を保証するための重要な投資となっている。産業界に向けては、イノベーションと競争力を促進するために、PRACE は SHAPE (SME HPC Adoption Programme in Europe) などのイニシアティブや産業諮問委員会を通じて、産業ユーザーへのサポートも提供している。

PRACE の統計情報から規模感が分かるグラフを以下に示す。全てのグラフは以下のページから見られる。

Impact of HPC Statistics & KPIs

<https://prace-ri.eu/achievements/statistics-kpis/>

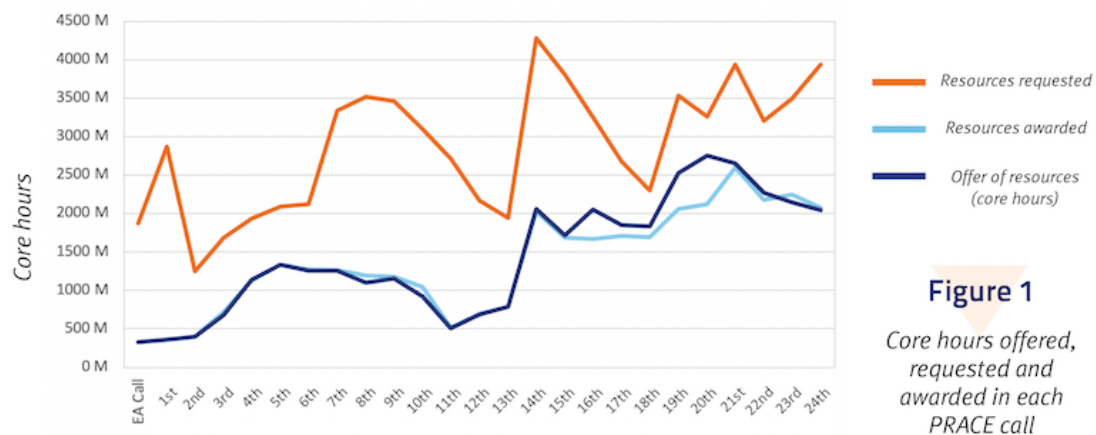


図 6.1 PRACE 公募における提供コア時間と申請コア時間の推移

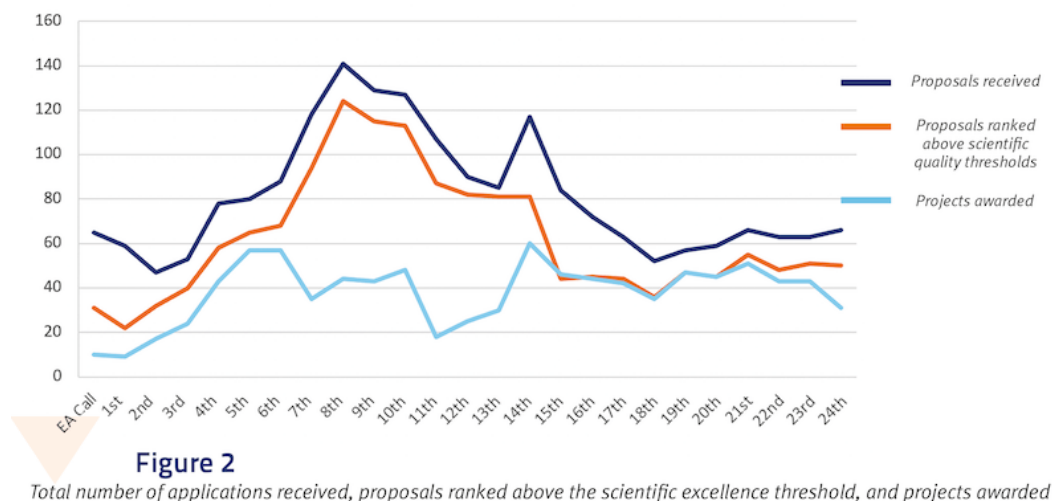


図 6.2 PRACE プロジェクト申請数・科学的評価通過数・採択数の推移

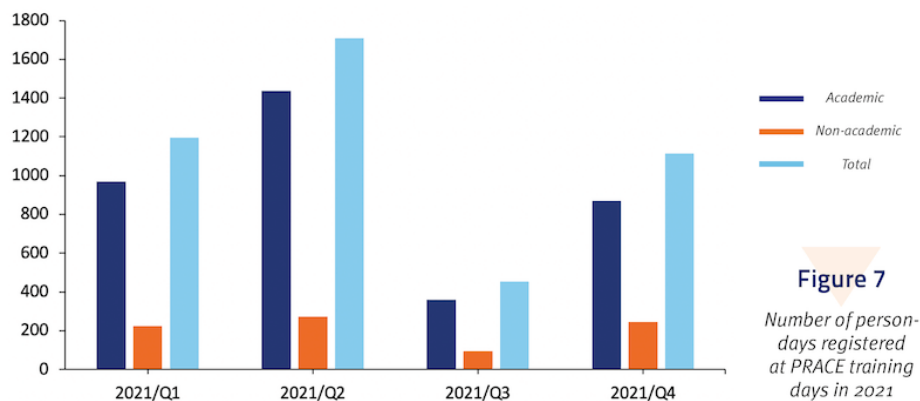


図 6.3 PRACE トレーニング参加者数（人日）の年次推移（2008-2021）

6.5. スーパーコンピュータセンターの利用統計等からの情報

各分野における利用課題ごとの規模感について、各センターに特徴の違いが見られるかを確認するため、2 章で調査対象とした各センターの利用統計等から求めた利用課題における分野ごとの割合を確認した（表 6.10）。なお、元データは計算資源（ノード時間積）の割当や課題数、アプリケーション数など統一の指標ではないことに注意する必要がある。スーパーコンピュータセンターによって集計単位が異なるが、ここでは 8 分野（その他を含めると 9 分野）になるように仕分けしている。また、視覚的に円グラフを示しているだけで数値化されていないスーパーコンピュータセンターも存在するが、可能な範囲で数値化を試みた。

まず、物理学・天文学の分野では、特にポーランドの PSNC（48.5%）、ドイツの LRZ（34.3%）、JSC（34.2%）、HLRS（34.1%）などが高い割合を占めている。これは、欧州諸国では基礎科学研究にスーパーコンピュータのリソースを多く割り当てていることを示唆する。一方で、エンジニアリング・エネルギー分野の計算リソース割当が最も高いのは、米国の NERSC（69.0%）および ALCF（59.5%）であり、次いで HLRS（51.0%）や EPCC（27.0%）が続く。特に米国のスーパーコンピュータは、エネルギー省（DOE：Department of Energy）傘下の研究機関に配備されているものが多く、エネルギー関連のシミュレーションや高性能計算に大きくリソースを割り当てていることがわかる。例えば、OLCF は、DOE の ORNL に設置されており、エネルギー・気候・核融合分野のシミュレーションに重点を置いている。同様に、ALCF は、ANL に設置されており、材料科学や高エネルギー物理、流体力学のシミュレーションに活用されている。これらは、DOE の科学技術戦略に沿った形で利用されていることが示唆される。

計算化学・材料科学の分野では、EPCC（50.0%）、PSNC（33.0%）、OLCF（33.0%）などが高い割合を占めており、特に英国やポーランド、米国の ORNL でも材料科学や分子動力学シミュレーションへの利用が盛んなことがうかがえる。特に HECC は、NASA のエイムズ研究センターに設置され、航空宇宙シミュレーションに活用されているため、エネルギー分野とともに宇宙開発分野の計算需要も米国では高いことが分かる。

生物学・創薬・医療の分野では、フランスの GENCI（29.0%）、スペインの BSC（19.8%）、スイスの CSCS（17.0%）が比較的高い割合を占めており、ヨーロッパ諸国で医療分野の計算科学が活発であることがわかる。これに対して、米国のスーパーコンピュータは医療・バイオ分野への割当は比較的低く、エネルギー・宇宙・物理学分野にリソースを集中させている傾向が見られた。

数学・計算機科学の割合が特に高いのはフィンランドの CSC（55.3%）やオランダの SURF（30.0%）、スペインの BSC（29.6%）であり、これらの国では計算手法の研究や高性能計算のアルゴリズム開発が盛んなことが示される。また、社会科学・行動科学や経済学に関するスーパーコンピュータの利用は限られており、特にこれらの分野に特化した計算リソースを提供しているセンターは少ないことが分かった。

表 6.8 スーパーコンピュータセンターの利用統計等から求めた利用課題における分野ごとの割合

スーパーコンピュータセンター	物理学 天文学	地球科学 気候変動	エンジニアリング エネルギー	計算化学 材料科学	生物学 創薬・医療	数学 計算機科学	経済学	社会科学 行動科学	その他
CSC (フィンランド) ※1	16.7%	4.0%	4.0%	8.0%	0.0%	55.3%	8.0%	0.0%	4.0%
BSC (スペイン)	4.9%	17.4%	11.1%	5.4%	19.8%	29.6%	—	3.6%	8.2%
HLRS (ドイツ)	34.1%	1.3%	51.0%	6.0%	4.1%	0.0%	—	—	3.5%
JSC (ドイツ) ※1	34.2%	10.9%	15.0%	6.0%	7.4%	17.9%	—	—	9.1%
LRZ (ドイツ) ※1	34.3%	8.6%	22.9%	8.6%	17.1%	5.7%	—	—	2.8%
GENCI (フランス)	10.0%	19.5%	4.0%	20.5%	29.0%	16.0%	—	—	1.0%
CINECA (イタリア)	33.8%	7.2%	17.6%	11.4%	10.7%	9.0%	—	0.4%	11.7%
SURF (オランダ)	12.0%	11.0%	9.0%	3.0%	20.0%	30.0%	5.0%	9.0%	1.0%
PSNC (ポーランド)	48.5%	—	1.5%	33.0%	17.0%	—	—	—	—
EPCC (英国)	2.0%	8.0%	27.0%	50.0%	13.0%	—	—	—	—
CSCS (スイス)	28.0%	14.0%	11.0%	29.0%	17.0%	2.0%	—	—	—
ALCF (米国 ANL)	9.2%	1.9%	59.5%	11.2%	3.7%	4.1%	—	—	10.4% ※2
OLCF (米国 ORNL)	13.0	14.0	19.0	33.0	9.0	12.0	—	—	—
HECC (米国 NASA) ※3	38.4%	23.6%	14.4%	—	—	—	—	—	23.6 ※4
NERSC (米国 LBNL)	12.0%	7.5%	69.0%	—	7.5%	3.0%	—	—	1.0%

※1 円グラフやドーナツチャートの視覚的情報から概算

※2 内部向け（トレーニングを含む）に割り当てられたもので分野分けは不明

※3 Mission Directorate と Program を Total Usage で重み付けして割合を算出

※4 ESDMD と SOMD の割り当て時間

6.6. まとめ

公的支援で研究開発が行われているプロジェクトに関してアプリケーション分野ごとに整理した結果（表 6.1）、米国はエネルギー・素粒子物理・製造業向けのシミュレーションに重点を置き、欧州は気候変動、バイオインフォマティクス、エンジニアリング、AI 分野の支援が充実しているという傾向が見られる。これは、各地域の政策や技術戦略の違いがスーパーコンピュータを活用したプロジェクトの種類に影響を与えていることを示唆する。具体的なアプリケーションについても特定し、その概要・ライセンス・開発元・解析分野について整理（表 6.2～6.5）した。非常に多くのアプリケーションが特定されたが、高速化・並列化が十分でないもの、加速部を有効に活用できないものも含まれている。また、研究支援や計算資源提供プログラム等からも利用の規模感を探った。これらプログラムでは、アプリケーション分野の偏りは比較的に少ないことが分かったが、個々のセンターの利用統計等から求めたアプリケーション分野ごとの割合（表 6.10）では、それぞれに特徴があることが分かった。米国のセンターでは工学・宇宙・物理分野、欧州のセンターでは気候変動や医療、AI などの分野に重点が置かれている傾向が見える。各国はそれぞれの研究優先度に応じた分野にリソースを集中させる傾向があると思われ、基礎科学（物理学・天文学）を重視する国もあれば、工学・エネルギーや計算材料科学に重点を置く国もあり、各国の科学技術戦略がスーパーコンピュータの利用分野に反映された結果であろう。特に、DOE や NASA が管理するスーパーコンピュータは数も多く、エネルギー・工学・宇宙関連のシミュレーションで強みを持っていることが明確になった。

7. 結論

本業務における調査方法は、文献調査およびヒアリングを通じて以下の①～⑤の内容を実施した。文献調査では、文献および文献データベース検索による情報収集を行い、あわせて Web 調査により最新情報の収集を実施した。さらに、海外のスーパーコンピュータセンターに対するヒアリングを実施し、アドバンスソフト株式会社が保有する SC24 において収集された最新のスーパーコンピュータ技術および動向に関する情報を活用した。

① 主要国の代表的なスーパーコンピュータセンターに係る調査

文献および Web 調査により、欧米を中心とした約 30 か所の、国際的にスーパーコンピュータを活用した先進的な研究開発を実施しているスーパーコンピュータセンターをリストアップした。次に、そのリストをもとに、各スーパーコンピュータセンターの公式資料およびウェブサイトの情報を調査し、組織体制、人的構成、予算規模、所有・設置予定のスーパーコンピュータのシステム構成、主な研究開発内容等を整理した。また、収集した情報をもとに、国内のスーパーコンピュータセンターとの比較・考察を行った。

② 主要国のフラッグシップスーパーコンピュータに係る調査

文献調査、Web 調査、SC24 の情報に基づき、①で対象としたスーパーコンピュータセンターが存在する国（欧米、日本、中国）における、特に高性能なスーパーコンピュータについて、性能、システム構成、主要な利用分野・用途、今後の整備計画等を調査した。加えて、過去 20 年間に於いて当該国で運用されたシステムの性能および構成の変遷を網羅的に調査・整理した。あわせて、GPU 技術の動向や次世代スーパーコンピュータに関する技術動向についても調査を行い、国内のフラッグシップスーパーコンピュータとの比較と考察を実施した。

③ 主要国の加速部対応に関する調査

項目①で調査対象とした国々におけるスーパーコンピュータセンターを対象に、加速部導入の背景、加速部対応に向けた取り組み、取り組みの主体（個人か組織か）、ベンダー等の民間企業の関与、行政機関による支援、講習会など教育活動の実施状況、加速部対応によって生まれた主要な研究事例等について調査した。あわせて、加速部の技術動向を踏まえ、アプリケーションおよび運用体制に関する情報を整理した。

④ 国際的なスーパーコンピュータを利用した研究開発への公的機関の支援に係る調査

文献調査により、欧州の EuroHPC、米国の DOE・NSF 関連機関などを中心に、スーパーコンピュータを活用した計算科学分野の研究開発促進を目的とする公的支援制度について、プログラムの目標、予算規模、対象分野、システムおよびアプリケーションの配分方針、

主要成果等を調査した。併せて、過去数年間における予算推移を含めた公的支援の状況を整理した。また、調査結果を基に、各プログラムの特徴と国内への応用可能性について考察した。

⑤ 各分野における代表的なアプリケーションおよび利用課題ごとの規模感に関する調査文献および Web 情報に基づき、各研究開発分野で用いられている代表的なアプリケーションを分野別に特定し、それぞれの特徴、主な成果、必要な計算資源の目安、関連論文数など、利用の広がりを示す指標について調査した。アプリケーションの選定に際しては、HPC システムにおける活用状況、将来的な発展性、提供形態（OSS または商用）、公的研究機関による支援の有無等の観点を考慮した。