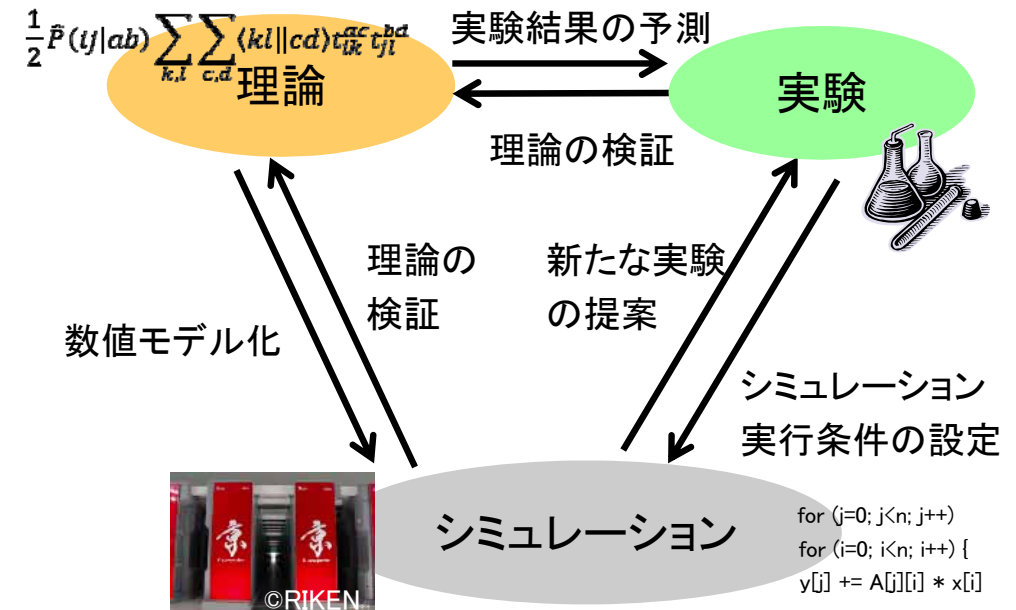


# 参 考

# 計算機シミュレーションの意義

## < シミュレーションとは >

- ・ 自然現象や社会現象について、理論から得られる数式を数値モデル化し、コンピュータ上で数値計算を行い、模擬的に実験を行うこと。
- ・ 理論、実験と並ぶ第3の科学的手法である。



## < シミュレーションにより実現できる「限界の突破」 >

### 実験・観測上の限界を突破する

- 物理的に実験・観測困難なもの
- 実際の実験にリスクが伴うもの
- 実験・観測にコストがかかりすぎるもの

例)

- ・顕微鏡で見ることのできない分子・原子レベルの材料解析
- ・超新星爆発の様子再現
- ・地震・津波の被害予測



### コストと精度・信頼性の限界を突破する

- 実験回数・開発期間・開発コストを削減
- より精密な結果を得る

例)

- ・自動車の衝突シミュレーション
- ・心臓手術をコンピュータ上で再現し、術後の状態を予測



# 計算機シミュレーションの概要 (流体の一例)

## 運動方程式

cf. 流体の基礎方程式

$$\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla)v = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 v + F$$

運動方程式を解き、結果を得る  
手段として、**シミュレーション**  
を利用

初期条件・境界条件の設定

空間を格子に分割

求めるべき量の計算

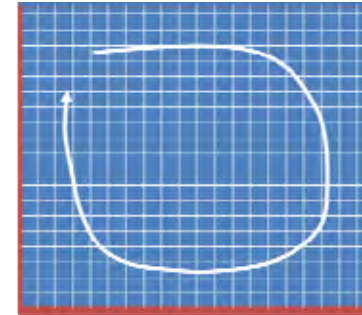
並列化により高速化

時間の更新  
(繰り返し計算)

end

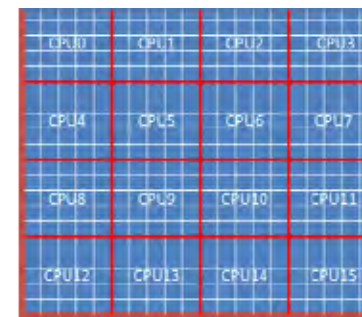
結果の表示  
可視化

格子生成の例



小さな渦の振る舞い  
を観測するには、  
格子間隔を狭くする  
必要あり  
(格子より小さな渦  
は再現できない)

領域分割による並列化



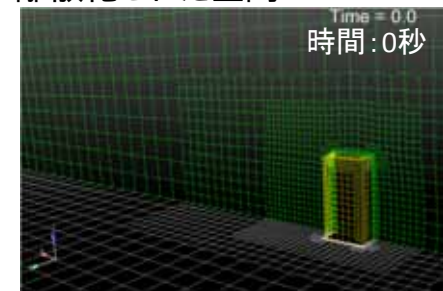
計算領域を分割し、  
各領域をCPUに割  
り当てて、同時に  
計算が可能

「京」では最大で64  
万並列まで可能

## 計算例

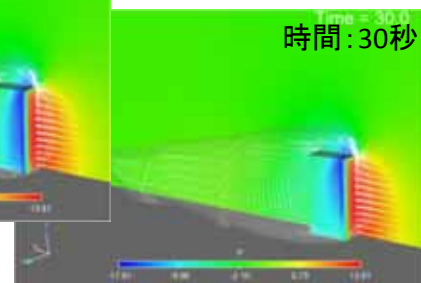
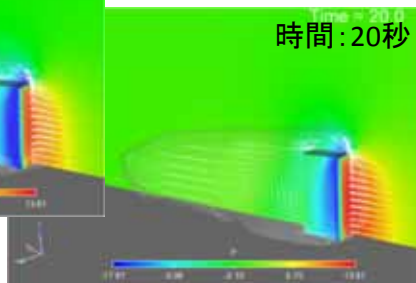
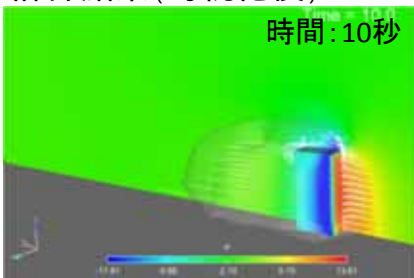
◆ 四角柱周りの風の流れ

離散化された空間



格子数: 8208

計算結果(可視化後)



# スパコンで用いられるアプリケーションについて

- 「京」は8万2千個のCPU（ノード）を持つ。市販のアプリケーションには、1万個以上のCPUを超並列で効率よく処理できるものはない。そのため、「京」のフルノードクラスで用いるアプリケーションは、多くの場合、研究の目的に応じて開発する必要がある。（既存のアプリケーションを改良・拡充する場合と、まったく新規に開発する場合の2種類がある）
- 各分野では、各種のアプリケーションを開発しながら、その実証実験を行い、科学技術の画期的な成果創出に取り組んでいる。スーパーコンピュータで用いられるアプリケーションは、1万～30万程度の行数を要する。本事業では、平均的に一つのアプリケーションにつき、各分野に精通し、かつプログラムの高度化に秀でた1～2人のプロジェクト雇用者が開発に携わっており、プロジェクト雇用者以外の研究者と協力しながら取り組んでいる。  
（一般に、アプリケーション開発は、10万行だと6～10人により2～3年、100万行では50～100人により3～5年を要すると言われる。行数が増えるほど、動作テストが格段に難しくなる。（「アドバンスシミュレーション」2014.4 Vol.11））
- これまでに作成されたアプリケーションは、合計89本。これらのうち、科学技術の戦略上公開に適さないものを除き基本的に無償で公開、もしくは、プロジェクト終了時まで公開される予定である。  
現時点で、これらのアプリケーションは、各分野の関係者以外の1,000人以上に活用されていることが確認されている。また、WEBページからアプリケーションをダウンロードした人数を含めると6,800人以上となる。

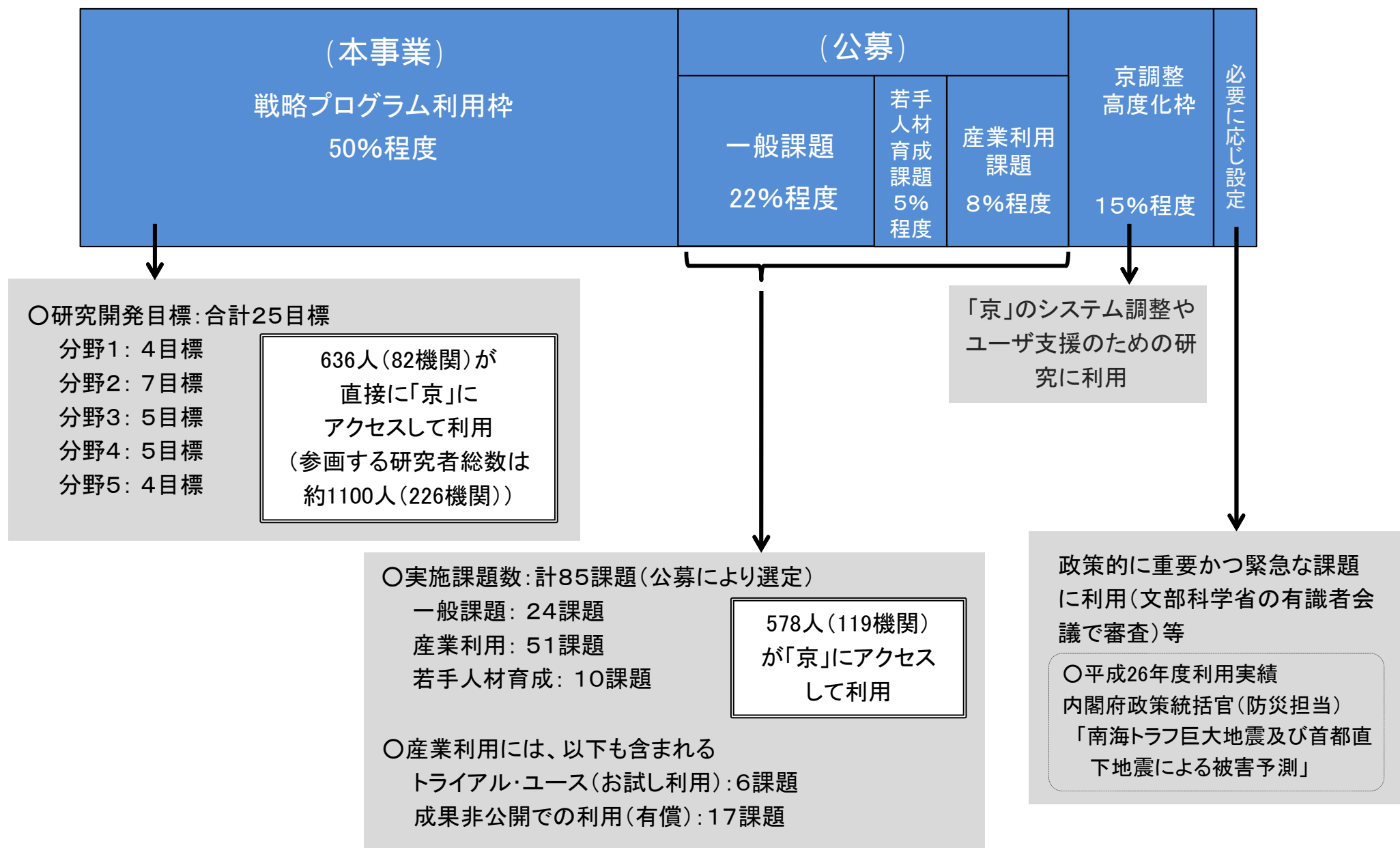
## 【開発されたアプリケーションの例】

- ・ UT-Heart：細胞下の分子レベルの電気化学・力学現象を再現した心筋細胞モデルを使って心臓を組み上げて、心臓の鼓動・血流などを再現。（→ 将来的には、心臓疾患の患者のために、手術前シミュレーションの実現を視野）
- ・ OpenMX：電気伝導計算やスピン軌道相互作用などを計算する。  
（世界20カ国以上で応用計算に活用され、OpenMXを用いた約300報の学術論文が出ている）
- ・ NICAM：地球全体の雲の振る舞いを最小870メートル間隔で計算。従来の数百キロ間隔より大きく改善し、地球温暖化予測の確実性の向上が見込まれる。（NHKスペシャルMEGA DISASTERなどテレビ・新聞で多数取り上げられた）

- 最先端の研究開発に必要なアプリケーションはより行数が増え、高度で複雑になってくるため、ポスト「京」に向けた先導的なアプリケーション開発については、より効率的に進める仕組みを検討する必要がある。その試みとして、分野2で開発した量子化学計算ソフト（SMASH）の一部機能を分野1と分野4のアプリケーションに取り入れている。今後、分野横断的に利用可能な機能単位のプログラムを統合してアプリケーションを作成することになっている。

# 「京」の計算資源の利用内訳

【平成26年度】



# HPCIの直接の利用者数

- 「京」と国内11機関のスーパーコンピュータの利用者数は、共用開始初年度（平成24年度下半期～平成25年度）1,316人から平成26年度で1,562人と、約250人増加している。
- 「京」の利用者は、戦略プログラムの参加者のほか、産業界の者の利用が206人から381人に増えている。

（単位：人）

	「京」							(公募) 国内11機関 のスパコン	合計
	(本事業) 戦略 プログラム	(公募)				その他	合計		
		一般 課題	若手 人材 育成 課題	産業 利用 課題	計				
平成26年度	636	187	10	381	578	2	1,216	346	1,562
平成24年度 下半期～25年度	539	398	8	206	612	－	1,151	165	1,316

○HPCIのための共通アカウントを持つ人数を集計している。

○「京」の共用開始が平成24年度下半期であり、平成24年度には、平成25年度を含む1年半にわたる利用が募集されたため、表下段は、その人数を掲載している。なお、共用開始前である平成23年度と平成24年度上半期の間、HPCI戦略プログラムは、一部稼働中の「京」を用いていた。

○「国内11機関のスパコン」には、HPCIのための共通アカウント者と別に、各機関で登録された利用者がある。そうした者を含めて、国内大学の高速計算機（最大理論性能1.5TFLOPS以上）の利用者の合計は、約1.6万人となっている（文部科学省「平成26年度学術基盤実態調査」）。



# HPCI戦略プログラムにおけるスパコン使用実績(平成26年度)

1. 「京」 約2.9億ノード時間

2. 国内11機関のスーパーコンピュータ等

(単位:ノード時間)

	平成26年度	(参考)平成25年度
北海道大学	13.4万	23.0万
東北大学	133.1万	0.3万
筑波大学	84.6万	133.7万
東京大学	2475.9万	1968.0万
東京工業大学	37.2万	19.8万
名古屋大学	69.0万	24.8万
京都大学	147.6万	85.4万
大阪大学	32.4万	46.7万
九州大学	136.3万	49.4万
統計数理研究所 ※	2.0万	—
海洋研究開発機構	5.6万	4.4万
その他 (例:気象研究所、 分子科学研究所など)	854.8万	623.8万
合計	3991.9万	2979.4万

・ ノード…演算装置(CPUやメモリで構成)のこと。スパコンの計算を行う最小単位。

・ 1ノード時間…一つのノードを1時間使用すること。

※統計数理研究所は平成26年度よりHPCIに参画。

# HPCI戦略プログラムにおけるスパコン使用実績(分野別・平成26年度)

(単位:ノード時間)

	分野1	分野2	分野3	分野4	分野5	合計
「京」	0.60億	0.62億	0.54億	0.58億	0.52億	2.9億
国内11機関の スーパーコンピュータ等	1237.4万	1037.0万	85.7万	726.7万	905.1万	3991.9万
(内訳)						
北海道大学	—	13.4万	—	—	—	13.4万
東北大学	—	133.1万	—	—	—	133.1万
筑波大学	—	13.9万	—	—	70.7万	84.6万
東京大学	1078.5万	508.7万	31.2万	691.0万	166.6万	2475.9万
東京工業大学	10.0万	24.2万	—	—	3.0万	37.2万
名古屋大学	—	37.2万	—	—	31.8万	69.0万
京都大学	—	50.0万	—	14.4万	83.2万	147.6万
大阪大学	—	—	—	—	32.4万	32.4万
九州大学	50.4万	56.4万	2.0万	—	27.5万	136.3万
統計数理研究所	—	2.0万	—	—	—	2.0万
海洋研究開発機構	—	—	5.6万	—	—	5.6万
その他	98.5万	198.0万	47.0万	21.3万	489.9万	854.8万
(例:気象研究所、 分子科学研究所など)						

- ・ ノード…演算装置(CPUやメモリで構成)のこと。スパコンの計算を行う最小単位。
- ・ 1ノード時間…一つのノードを1時間使用すること。



# 戦略プログラムと企業との連携について

○HPCI戦略プログラムでは、将来の社会実装や商用化も見据えて、産業界（企業や企業の研究所の者）が参画している。

こうした活動により、HPCI戦略プログラムでの企業との連携として、

- ・創薬の分野では、国内製薬企業によるコンソーシアム「バイオグリッドHPCIプロジェクト」が組織化 [11社（平成24年）⇒23社（平成27年）]
- ・エネルギーの分野では、平成27年4月に、企業15社と研究機関による「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」が組織化
- ・ものづくりの分野では、中小企業も含む多くの企業が研究開発を進められる環境が整備（平成23年度～）など、個別の共同研究や、組織化された共同研究の枠組みが整ってきた。

○更に、心臓シミュレーション技術の波及を目指し、企業（株式会社UT-Heart研究所）が立ち上げられた事例もある。

○一方こうした連携は、実証研究（基礎研究の成果を基に、アプリケーションが求められる性能を出すか確認する研究）として取り組まれているものであり、これがただちに社会実装や商用化に至るものではない。

（企業が研究成果を基に実用化を見据えたシミュレーションを行う場合は、戦略プログラムの外で行われることになる。具体的には、企業は、①自社のスパコンを用いる、②「京」等のスパコンを有償で利用する、のいずれかとなる。）

○また、戦略プログラムでの共同研究を通じて、研究開発において、シミュレーションを取り入れる企業が増加してきている。

※「京」では、産業界からの利用者は、平成24年度→平成26年度で1.7倍に増加。有償利用件数も約3倍に増加。

# 戦略プログラムにおける国の推進体制

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

### ○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

(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3) 矢川 元基 原子力安全研究協会 理事長／東京大学 名誉教授  
／東洋大学 名誉教授

(分野4) 小林 敏雄 アイシン精機 取締役／日本自動車研究所 顧問／  
東京大学 名誉教授

(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

### ○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

## 作業部会（分野1の場合）

茅 幸二 理化学研究所 研究顧問

児玉 龍彦 東京大学先端科学技術研究センター  
教授(医師)

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 理化学研究所 理事(前 東京大学 副学長)

美宅 成樹 豊田理化学研究所 客員フェロー  
(分野2～5も同様に設置)

中間評価や事後評価を行う場合、上記委員会での議論の後、文部科学省の「科学技術・学術審議会」における外部評価を受けることで評価結果が確定する。

# 「戦略分野」「戦略機関」と「研究開発目標」の設定

## 【「戦略分野」の決定】

○「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」での16回の検討を通じて、平成21年7月、5つの「戦略分野」を決定。

- 【判断軸】
- ・次世代スパコンの能力を必要とする課題があること
  - ・社会的・国家的見地から高い要請があること
  - ・稼働後5年間で具体的な成果を出す見通しがあること

## 【「戦略機関」の公募と決定】

○平成21年8～10月に公募を行い、書類審査・ヒアリングを経て、平成22年7月「戦略機関」を決定。

（分野によっては、成果の最大化のため、研究機関の合同化を指示）

- 【審査の観点】
- ・事業の目標が「戦略分野」の趣旨に沿っていること
  - ・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
  - ・次世代スパコンの能力を効果的に活用すること
  - ・実施体制が適切であること
  - ・実施体制として、戦略分野において一定のコミュニティを代表できること
  - ・その分野のコミュニティを取りまとめるための実績と可能性があること

## 【「研究開発目標」の設定】

○平成22年度に「HPCI戦略プログラム推進委員会」の作業部会が、各「戦略機関」を強く指導・助言しながら「研究開発課題」を策定。平成23年度から事業開始。

- 【検討の観点】
- ・スパコンを最大に活用して成果に結びつけるべく「研究開発課題」の項目数と内容を検討する。  
（「作業部会」の指摘により「研究開発課題」の修正もなされた。）

# 戦略プログラムの「中間評価」とその対応について

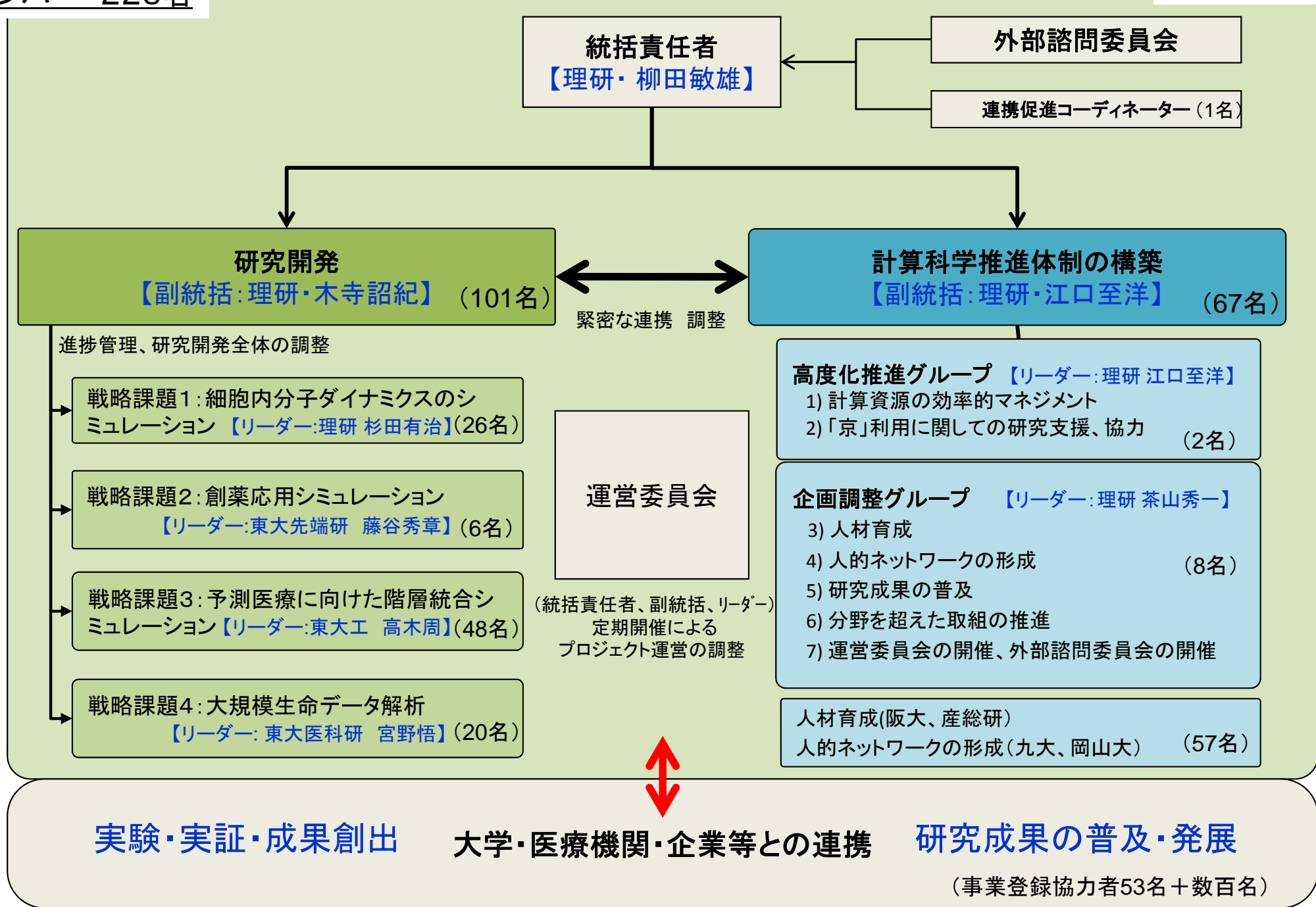
○HPCI戦略プログラムは、平成23年度に開始しており、平成25年度に「中間評価」を実施した。  
評価結果を踏まえて、事業の改善を行っている。

中間評価（改善すべき事項のポイント）	中間評価後の改善
<b>【必要性】</b> ○「京」でなければ成し得ない成果を更に強く意識する必要がある。	○従来からの課題間の優先付けを強化し、戦略プログラム全体及び分野内でさらにメリハリをつけた重点課題選定や計算資源配分を推進（申請条件の厳格化・選定基準見直し、分野内計算資源の柔軟な再配分等）。
<b>【有効性】</b> ○実験系研究者との連携を図りつつ、結果の検証作業を強化すること。 ○本プログラムを通じた研究者等のキャリアアップをこれまで以上に意識していく必要があること。	○各分野において、実験系研究者及び産業界との連携をさらに強化し、結果の検証作業を推進（前臨床試験（2件）が進行中、大型実験・観測施設（SPRING-8、J-PARC、すばる望遠鏡等）による検証作業等）。 ○計算科学技術推進体制の構築のために、大学定年ポストを獲得（3件）、企業との共同研究への若手研究者の参加推進。
<b>【効率性】</b> ○大学・研究機関のスーパーコンピュータの性能が向上しており、「京」以外の計算資源の更なる有効活用を図ること。 ○実用化と応用へ向けた展開のために企業との更なる連携を深めること。	○成果の最大化に向け、各分野において大学情報基盤センター等のスパコンも有効活用（課題間の優先順位付けをし、「京」、大学情報基盤センタースパコン、戦略機関スパコンの計算資源を配分）。 ○企業が実用化を進められる体制や中小企業も含めた多くの企業が研究開発を進められる環境を構築（創薬コンソーシアム（製薬企業23社）及び電気化学界面シミュレーションコンソーシアム（企業15社及び研究機関）の構築、専用サイトを通じた解析事例やソフトウェア等の提供等）。

# 戦略機関の実施体制(分野1(生命科学・医療・創薬基盤)の場合)

総メンバー 223名

2015年4月1日時点





# 戦略機関の実施体制(詳細)(分野1(生命科学・医療・創薬基盤)の場合)

2015年4月1日時点



# 経費の内訳(分野1(生命科学・医療・創薬基盤)の場合)

平成27年度

項目	金額	備考
研究開発の課題	257百万円	
細胞内の分子ダイナミクスのシミュレーション	68百万円	(雇用者：研究者8名、補助者2名) 旅費、備品、消耗品
創薬応用のシミュレーション	43百万円	(雇用者：研究者4名) 旅費、備品、消耗品
予測医療に向けた階層統合シミュレーション	92百万円	(雇用者：研究者10名、補助者3名) 旅費、備品、消耗品
大規模生命データ解析(癌とメタボ)	54百万円	(雇用者：研究者5名) 旅費、備品、消耗品
推進体制の構築	141百万円	
効率的マネジメント	27百万円	アプリ高度化支援等(3~4アプリ/年、講習会17回)(雇用者：技術者1名)
人材育成	31百万円	人材育成プログラム、講習会(大学院生や社会人等70名が参加、講座単位取得者10名、eラーニング250名以上参加)(雇用者：教育担当3名、補助者3名)
人的ネットワーク形成	6百万円	シンポジウム(製薬企業等から延べ150名以上が参加)創薬コンソーシアム(20社以上)の支援
研究成果の普及(ポータルサイト、成果の出版)	11百万円	パンフレット、ニューズレター、ウェブサイト
事務体制	65百万円	事務職員5名
合計	398百万円	

## 【雇用者数】

研究者27人、教育担当3人、  
補助者8人、事務職員5人、  
技術者1人

(これはプロジェクトに専従義務がある者であり、指導的立場に当たる大学・研究機関の教員は雇用対象ではない)

○「合計」は、平成26年度の442百万円から、398百万円に効率化した。

○しかしながら、メリハリある配分のため、進展著しい「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」は、88百万円から92百万に増額した。

○こうした方針は、分野内の「外部諮問委員会」の議論を踏まえ、統括責任者が判断し、文部科学省の「分野別作業部会」等に諮って決定。