

研究教育拠点（COE）形成推進事業に係る研究助成



理化学研究所計算科学研究センター

【助成元】公益財団法人計算科学振興財団 【事業期間】平成29年度～令和6年度

スーパーコンピュータ「富岳」を活用し、防災・減災や創薬など地域の課題解決等に資する分野において、Society5.0社会の実現を見据えて進められる最先端の研究に対する助成事業。本事業により「富岳」を中核とする計算科学分野の研究教育拠点（COE）の形成と、計算科学分野の振興を図るとともに、事業の普及啓発を通じて地域への成果還元を促進する。

	研究課題名	研究代表者
1	ポスト「京」、ポスト・ポスト「京」をみすえたハードウェア・アルゴリズム・ソフトウェアの総合的研究（※令和3年度終了）	粒子系シミュレーション研究チームTL 牧野 淳一郎
2	シミュレーションとインフォマティクスの融合による新エネルギー材料設計	量子系分子科学研究チームTL 中嶋 隆人
3	異なる時間スケールを考慮したレジリエント社会形成に資する計算科学研究	総合防災・減災研究チームTL 大石 哲
4	テンソルネットワーク(TN)スキームに基づく異分野融合型計算科学研究	量子系物質科学研究チームTL 柚木 清司
5	ハイパフォーマンスコンピューティングによる構造生物学の革新	計算構造生物学研究チームTL Florence Tama
6	分子シミュレーションに基づくゲノム医療・ゲノム創薬基盤の構築	HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門部門長 奥野 恭史
7	Society5.0を担う学際的人材育成のための研究開発	副センター長 中島 研吾
8	Society5.0を支える大規模研究施設連携によるビッグデータ収集・解析・利活用基盤の研究開発	高性能ビッグデータ研究チームTL 佐藤 賢斗
9	「富岳」による社会シミュレーションの研究	離散事象シミュレーション研究チームTL 伊藤 伸泰

ポスト「京」、ポスト・ポスト「京」をみすえたハードウェア・アルゴリズム・ソフトウェアの総合的研究

牧野 淳一郎

■研究内容と目的

- 現在の汎用メニーコアプロセッサがいくつかの意味で限界に到達しつつあることを踏まえ、アプリケーションについて性能の理論限界を明らかにし、それを実現できるようなハードウェアアーキテクチャを提案する。

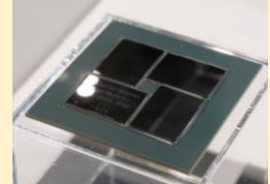
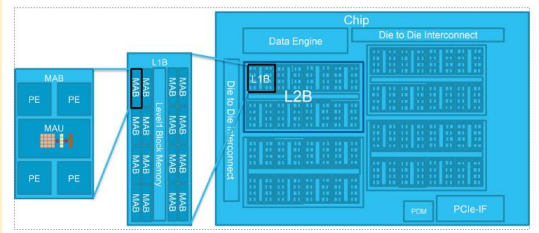
■成果と展望

- これまでの成果の取りまとめ、著書を出版。
Principles of High-Performance Processor Design For High Performance Computing, Deep Neural Networks and Data Science Springer, 2021
- 人工知能(深層学習)を主なターゲットとしたプロセッサ開発 (PFN 社との共同研究)の進展
- 最新の半導体技術による超並列プロセッサの電力性能・動作速度の評価

■社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- 兵庫県立大学 鷺津研究室と共同で、開発している大規模粒子系シミュレーションフレームワーク FDPS の産業応用を進めた
- 本研究から派生した PFN 社との共同研究において、本研究で検討してきた次世代プロセッサのアーキテクチャを実装し、世界一の電力性能 (現在までで 2020 年6月、2021 年6月、11 月の3度 Green 500 リストで No.1を獲得)と世界最高レベルの深層学習性能を実現した

次世代チップ開発(NEDO「高効率・高速処理を可能とするAIチップ・次世代コンピューティングの技術開発」採択)、ES完成、評価中。



シミュレーションとインフォマティクスの融合による新エネルギー材料設計

中嶋 隆人

■ 研究内容と目的

- 「富岳」と「NTChem」を主に利用したシミュレーション技術とインフォマティクス技術を融合的に活用したマテリアルズ・インフォマティクス技術確立し、エネルギー・環境問題の解決に繋げる高機能な新エネルギー変換材料の分子設計・探索を実現する
- 産業界や実験Gと連携することで提案した新エネルギー変換材料を実証し、製品化へ繋げる

■ 成果と展望

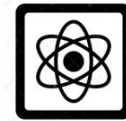
- 「富岳」のCPU環境を有効利用したMI技術の確立
- 太陽電池、光触媒・人工光合成、次世代二次電池、海洋生分解性ポリマーに対する新材料提案
- 地元企業との連携で新エネルギー材料を社会実装し、SDGsとSociety5.0を達成

■ 社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- 実施・協力機関は兵庫県に設置されている国家基幹技術(「富岳」、SPring-8、SACLA)の利用実績がある関西圏のグループから主に構築し、融合利用することで地元基幹技術をアピール
- 対象とするエネルギー材料は地元企業のニーズに基づき検討することで、地元の産業力競争力を強化
- 開発するMI技術や「富岳」を地元企業が活用できるように、技術指導やコンサルトを実施し、企業からの研究者を受け入れる体制を構築
- 材料分野の研究者の育成を目指し、近隣大学の学生をインターン生として受入
- 本計画をもとに新エネルギー材料開発に関する地元根ざした研究協同組合設置を検討

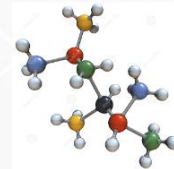
量子化学
シミュレーション

NTChem

マテリアルズ
インフォマティクス

新材料提案

製品化と社会実装



富岳MIで高機能エネルギー材料の分子設計・探索を実現し、社会実装

異なる時間スケールを考慮したレジリエント社会形成に資する計算科学研究

大石 哲

■ 研究内容と目的

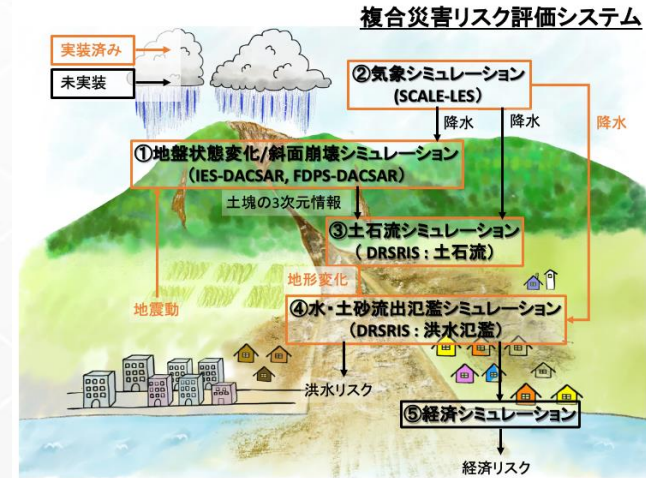
- 複合災害リスク評価システムの構築
- 不可避ハザードがもたらす被害に含まれる不確実性の幅の評価
- 個別地域の都市計画への提言を目指す

■ 成果と展望

- 地震動・津波・高潮・地盤変化・集中豪雨・洪水・土砂災害までを一気通貫に評価するシステムの構築
- 特に、南海トラフ地震を想定した関西地域を対象とすることで、兵庫県神戸市を中心とした関西地域の都市計画に直接資する

■ 社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- 西日本豪雨シミュレーションおよび洪水・土砂移動シミュレーションを、兵庫県武庫川流域を対象に構築
- 兵庫県立大学、神戸大学などとの共同研究
- 関連企業と共同で技術組合を立ち上げて活動し、行政と連携
- 神戸大が兵庫県立大・関西学院大・甲南大と共同で実施しているROOTプログラム（国際的科学技术人材育成挑戦プログラム）にて、中・高校生を対象に気候モデル・気候計算に関するセミナーを実施



図：構築中の複合災害リスク評価システムの概要

テンソルネットワーク (TN) スキームに基づく異分野融合型計算科学研究

柚木 清司

■ 研究内容と目的

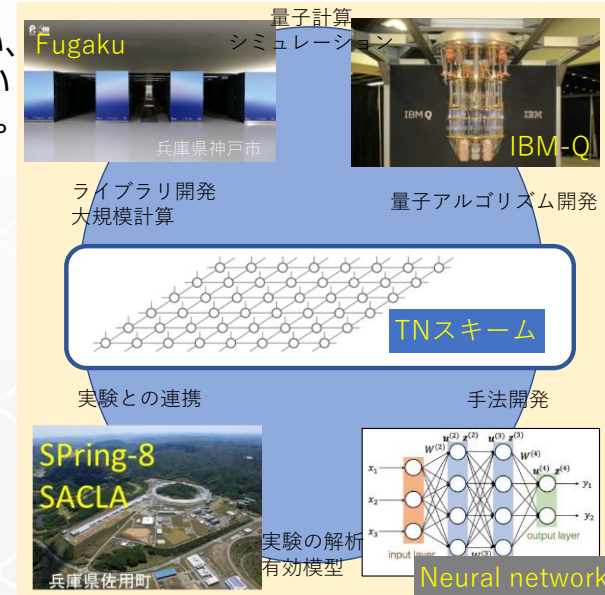
- TNスキーム (多体問題をテンソルネットワーク形式によって定式化し、高精度解析を行う一群の理論的・数値計算手法的枠組み) は、既存の計算手法と違い、モンテカルロ法における符号問題および複素作用問題がない。このスキームを用いて、異分野間連携による従来法を超える新たな計算科学研究の開拓を目指す。

■ 成果と展望

- 時間依存動的密度行列繰り込み群法の開発と「富岳」による低次元 Mott絶縁体の過渡光学伝導度スペクトルの数値シミュレーション
- U(1)対称性を持つ1000量子ビット級の量子回路を数値的厳密に演算するシミュレータの開発
- TN形式を用いた非一様系および正8面対古典模型の熱力学解析
- テンソル分解によるモデル近所、プログラマブルデバイスFPGAによる行列計算の高速化

■ 社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- 神戸大学、兵庫県立大、大阪大との共同研究
- 神戸大学での講義・集中講義実施、インターンシップ生の受入れ
- 計算プログラムの無償公開：MateriAppsLive!プログラム利用者のサポート
- IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023)の神戸開催を招致



ハイパフォーマンスコンピューティングによる構造生物学の革新

TAMA Florence

■ 研究内容と目的

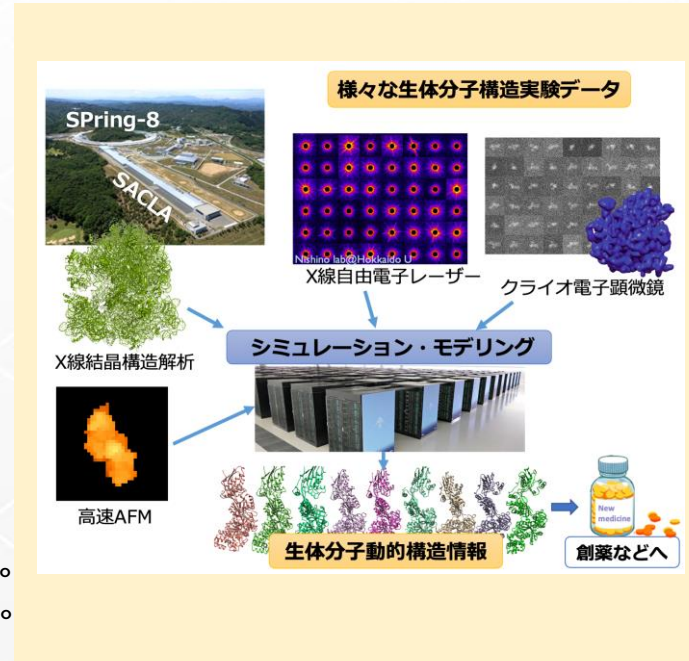
- 生体分子の動的構造に関する情報は機能理解や医薬への応用などSociety5.0の実現にもつながる重要なものであり、クライオ電子顕微鏡(cryo-EM)やX線自由電子レーザー(XFEL)、高速原子間力顕微鏡(HS-AFM)などの新しい実験観測技術の開発が進んでいる。
- 多量で複雑な実験データから生体分子の構造と運動に関する詳細で正確な情報を得るには計算機の活用が重要。
- 富岳を活用してXFELやcryo-EMなどのデータから新しいレベルの生体分子複合体の動的構造情報を得るため手法開発と応用
- 富岳とSPring-8/SACLAの利用拡大と地域コミュニティの発展

■ 成果と展望

- XFEL単粒子解析実験データから3次元構造を決定する手法を開発、実験データへの応用に成功。データ選択と解像度の高度化。
- HS-AFMデータからの構造変化を記述するアルゴリズムの開発応用に成功。
- MDを活用したcryo-EMデータ動的構造解析の手法開発と応用。

■ 社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- SPring-8/SACLAの研究者や施設を利用している実験グループとの密接な共同研究
- 県市の大学や企業研究機関との情報共有と成果還元、人材育成、セミナーや講義を実施



分子シミュレーションに基づくゲノム医療・ゲノム創薬基盤の構築

奥野 恭史

■ 研究内容と目的

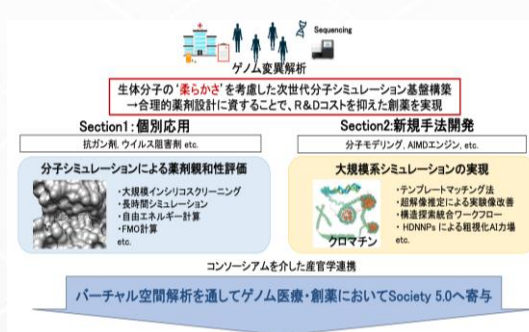
- 合理的かつ効率的なゲノム医療・ゲノム創薬の実現に向け、HPCI環境を最大限に活用すべく、実験×シミュレーション×AIを融合した次世代医薬計算基盤を開発すると共に、個別具体的な薬剤を対象とした応用研究を実施することでHPC/AI駆動型医療・創薬を推進する。

■ 成果と展望

- 遺伝子変異に起因するタンパク質-薬剤の構造変化や薬剤感受性変化を効率的に評価する方法論を開発し、がん患者のゲノム解析から同定されたHER2遺伝子上の変異 (E401G) を対象に、その分子メカニズムにせまった。
- データ同化の概念を取り入れた分子モデリング手法であるTM法を開発し、構造多形解析統合ワークフローを富岳に実装することで、COVID-19/SARS-CoV-2 ウイルス 由来のS-Proに対する cryo-EM実験データ解析を実施し、その多様な構造状態にせまった。
- 展望：次世代医薬計算基盤を用いて、変異体解析や抗体との複合体解析へ展開しHPC/AI駆動型医療・創薬の実現を目指す

■ 社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- 各課題においてSPring-8/SACLA、理研R-CCS、RCH、兵庫県立大、神戸医療産業都市機構、神戸大学とコラボレート
- アカデミア、製薬企業、IT企業により設立されたLINC等で産官学連携促進
- 兵庫県立大学における講義実績
- LINCや健康医療創生会議の人材育成事業において、医薬分野におけるAI・シミュレーション教育の実施



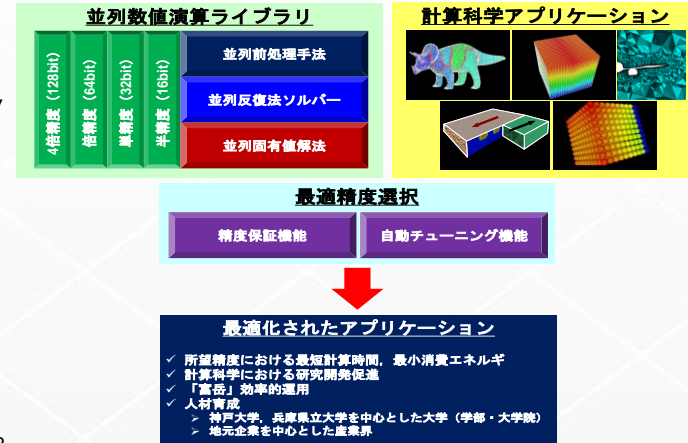
生体分子の‘柔らかさ’を考慮した次世代分子シミュレーション基盤。HPCとAIを活用し個別応用と新規手法開発を進め、バーチャル空間解析を通じて医療・創薬においてSociety 5.0へ寄与します。

Society5.0を担う学際的人材育成のための研究開発

中島 研吾

■ 研究内容と目的

- 「富岳」は、幅広いワークロードをカバーし、半精度から4倍精度までの演算精度を利用可能である。様々な演算精度に対応した変動精度行列演算法、所望の計算精度の下で、計算時間・消費エネルギーを最小とする最適精度を自動的に選択する手法を開発し、ライブラリとして整備する。
- 本研究の成果は、富岳の次の世代、ポストムーア時代に向けた計算科学、計算機科学の研究開発にも資する。
- 計算科学、データ科学、AI等幅広いアプリケーションをカバーする「富岳」の特性を生かした教育プログラムを策定、教材を作成し、講義・講習会などへ展開し、Society 5.0を担う広い視野を持つ人材の育成に貢献する。



■ 成果と展望

- 対称行列に対する固有値に対する最近点丸めを用いた精度保証法を提案した。
- 行列方程式の混合精度計算や高精度計算を効率的に計算する2ステップ型反復改良法を提案し、従来型手法と比較して計算時間を低減可能であることを検証した。
- 実数演算において倍精度 (FP64)、単精度 (FP32)、半精度 (FP16) の中間であるFP42、FP21を世界に先駆けて汎用CPU向けに実装し、悪条件問題向けの前処理付き反復法においても、有効であることを検証した。
- 次年度以降も「富岳」上で変動数値演算手法の研究開発を継続する

■ 社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- 様々な人材育成活動を実施した
- 2021年度活動は全てオンラインで実施した

2021年度事業 (全てオンライン実施)	開催日程	合計 参加者 (人)	合計のうち (神戸大+県立大) および海外	合計のうち 海外参加者 (人)
EU-ASEAN HPC Summer School 2021	2021/2/21(1)~9(金)	75	全てASEAN諸国 からの参加	-
KOBE HPCサマースクール	2021/9/16(1)~10(金)	36	14(神戸大+県立大+13)	学生:19,社会:0
KOBE HPCブライダースクール	2022/8/21(1)~9(金)	30	3(神戸大+3,県立大+0)	学生:3,社会:0
RIKEN International HPC Summer School	2021/9/13(1)~15(木)	33	1(神戸大+0,県立大+1) NSC+1,その他海外:9	学生:2,社会:0
CEA-RIKEN HPC School	2022/2/25(火)~27(木)	11	5 (神戸大+0,県立大+0) CEA:6,その他海外:1	学生:5,社会:0
RIKEN R-CCS 計算科学 インターンシッププログラム	2021/9~2022/3	9	1(神戸大+0,県立大+1)	学生:3
RIKEN R-CCS Computational Science Internship Program	2021/4~2022/3	2	海外:2	-
International HPC Summer School	2021/2/18(1)~30(金)	日本滞在:8	0 (神戸大+0,県立大+0) その他海外:8	学生:1
英語訳読: 計算科学は面白い! (大阪大学1社)	2021/4/28(水)~7/29(木) 毎隔木曜11(1)~12(0)	0登録 365	平均参加者数 ※登録27人(登録率75%) 累計1,370 (※登録767名(登録率56%))	不明
英語訳読: 計算科学の基礎 (神戸大学1社)	2021/10/6(水)~ 2022/2/25(木) 毎隔木曜11(1)~12(0)	0登録 1,364	56(神戸大+3,県立大+13)	学生:132
The IPR-CCS International symposium	2022/2/21(1)~8(火)	0登録 260	-	-

Society5.0を支える大規模研究施設連携による ビッグデータ収集・解析・利活用基盤の研究開発

佐藤 賢斗

■ 研究内容と目的

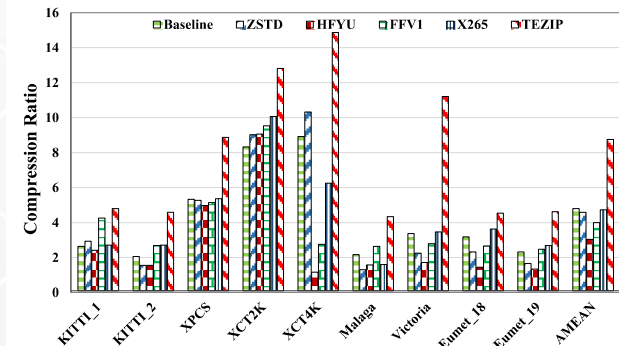
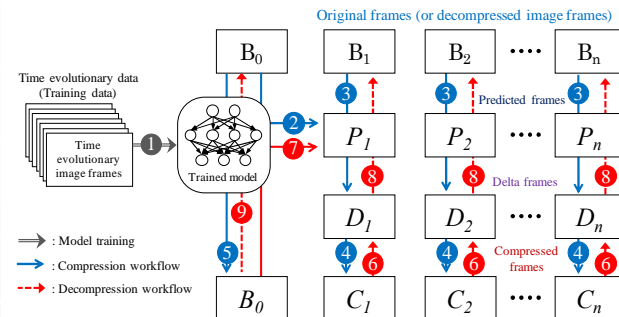
- Society5.0を支える世界最高水準の大規模研究施設であるSPring-8/SACLAとスーパーコンピュータ「富岳」間のデータ収集・解析・利活用を実現する「ビッグデータ基盤」を構築する。
- 研究チームおよびユニットで連携しこのビッグデータ基盤を構築するために (1)データ前処理基盤、(2)データ圧縮・転送基盤、(3)データ解析基盤、(4)データ利活用基盤 における研究開発を行う。

■ 成果と展望

- 放射光科学研究センター (RSC) と連携し、X線自由電子レーザー(XFEL)施設「SACLA」で得られた実験データの大規模解析のため、HPCI共用ストレージへのデータ転送サービスを2021年5月14日より開始。
- データ転送高速のためのAIを用いたデータ圧縮技術TEZIPの開発し論文発表を行なった。

■ 社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- Society5.0やSDGsにつながる科学技術および産業分野向けワークショップの開催、SPring-8ワークショップにおいて富岳と大規模施設とのデータ連携に向けた講演の実施、兵庫県立大学院生のインターンシップ受入れ、等啓発活動を行った。



「富岳」による社会シミュレーションの研究

伊藤 伸泰

■ 研究内容と目的

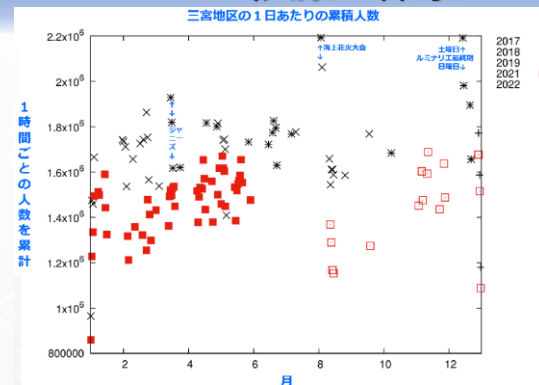
- 社会現象をその構成員・構成要素に基づいてシミュレートする方法の研究を通して、個々人のしあわせを増進するよりよい社会のあり方を提案する技術の開発。
- 兵庫県立大学・神戸大学の研究者とも連携し、地域の課題を考慮した研究・開発の推進および人材育成。特に神戸市・兵庫県でのスマートシティ構想および関西圏でのイベント（新型コロナウイルス感染症対策・2025年大阪万博ほか）での交通・人流の最適化および経済活動への影響評価のための技術開発。

■ 成果と展望

- 交通と経済とを構成要素に基づいてシミュレートする技術を確立し、さらに両者の連携による社会現象モデルの開発に着手。
- 三宮地区のスマートシティ・デジタルツインを目指した研究開発を神戸市・NTTドコモとの協力の下、着手。人流シミュレーションを開発し、イベント・災害避難時への応用に着手。

■ 社会還元(地域貢献、外部機関連携)

- 兵庫県立大学院生のインターンシップを受け入れ、三ノ宮周辺交通を例とし、人工知能技術による交通量予測の研究および自動運転車の影響評価の研究を指導。



三宮地区の人流
(上) ビッグデータマイニングによる実績
(下) シミュレーション例

