

理化学研究所

計算科学研究機構 研究部門



シミュレーションが
未来をひらく



RIKEN
Advanced Institute for
Computational Science

計算科学研究機構 研究部門について

研究部門長あいさつ

計算科学研究機構 研究部門は、計算科学から計算機科学にまたがる多数の研究チームを有して、この二つの分野間の連携・協業により、科学技術の飛躍的な発展を実現する世界的な研究拠点をめざしています。

今日のスーパーコンピュータは、何百万個ものコア（コンピュータの中核部）を同時・並列に動作させることにより、莫大な量の演算や情報処理を瞬時に行います。このようなスーパーコンピュータを開発し、そのもてる能力を十分に引き出すには、スーパーコンピュータを利用する計算科学 (Computational Science) とスーパーコンピュータを開発する計算機科学 (Computer Science) が密接に連携・協業する必要があります。

研究部門の各チームでは、計算科学・計算機科学の最先端の研究を推進すると同時に、研究チーム間の高度な分野間連携を追求し、また、スーパーコンピュータ「京（けい）」の高度利用を可能とする基盤的研究を実施しています。

さらに、「京」の後継機、ポスト「京」の開発プロジェクトの開始にともない、最先端スーパーコンピュータシステムの開発とアプリケーションプログラムの開発のコーデザイン（協調設計）にも積極的に協力しているところです。

研究部門は、このような幅広い研究活動を通じて、素粒子・宇宙、物質・材料、地球環境、生物・医学、工学など、科学と技術のあらゆる分野においてなくてはならない存在となっているスーパーコンピュータの開発と、それを利用した科学技術の先端的な研究を推進していきます。



計算科学研究機構
副機構長／研究部門長

宇川 彰

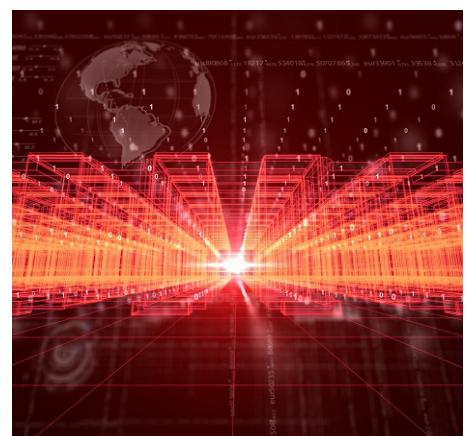
基本コンセプト

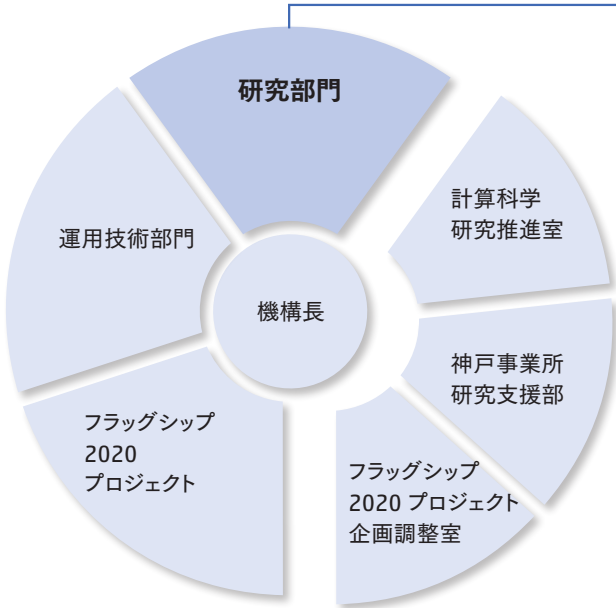
コンピュータ・シミュレーションにより、科学的に未来を見通す「予測の科学」の確立をめざし、以下のことを実行します。

スーパーコンピュータ「京」の運用を行い、
ユーザに対して使いやすい計算環境を提供する

計算機科学分野と計算科学分野を連携・融合させた
研究を行う国際的な研究拠点を形成し、
先進的成果の創出や科学技術のブレークスルーを生み出す

ポスト「京」コンピュータとそれを活用する
アプリケーション・ソフトウェアの開発、
および計算科学技術のあり方や将来構想を策定する





計算科学研究機構 研究部門について.....2
 システムソフトウェア研究チーム.....4
 プログラミング環境研究チーム.....5
 プロセッサ研究チーム.....6
 大規模並列数値計算技術研究チーム.....7
 利用高度化研究チーム.....8
 連続系場の理論研究チーム.....9
 離散事象シミュレーション研究チーム.....10
 量子系分子科学研究チーム.....11
 量子系物質科学研究チーム.....12
 粒子系生物物理研究チーム.....13
 粒子系シミュレータ研究チーム.....14
 複合系気候科学研究チーム.....15
 複雑現象統一的解法研究チーム.....16
 プログラム構成モデル研究チーム.....17
 可視化技術研究チーム.....18
 データ同化研究チーム.....19
 総合防災・減災研究ユニット.....20
 計算構造生物学研究ユニット.....21
 人材育成.....22



機構長
平尾 公彦



副機構長
兼 研究部門長
宇川 彰



副機構長
兼 理化学研究所副理事
岡谷 重雄

国内外との連携

理化学研究所では研究成果を社会に普及させるため、国内外の大学や研究機関、民間企業との連携を推進しています。計算科学研究機構でも、多様な機関・組織と共同研究や連携協定等を締結しています。

- 共同研究：大学、研究機関、民間企業等 45 件（うち海外機関 3 件）
- 研究にかかる協定：13 件（うち海外機関 10 件）

2017 年 9 月現在

主な協定機関・組織

国内	神戸大学、筑波大学、東北大学
アメリカ	イリノイ大学 国立スーパーコンピュータ応用センター (NCSA) メリーランド大学 (UMD)
イギリス	レディング大学 (UoR)
イタリア	国際高等学院 (S.I.S.S.A.)
フランス	国立科学研究センター (CNRS) 原子力・代替エネルギー庁 (CEA)
ドイツ	ユーリッヒ総合研究所 ユーリッヒ スーパーコンピュータセンター (JSC)
オーストラリア	オーストラリア国立大学 国立計算機インフラストラクチャー (NCI)
中国	北京計算科学研究センター (CSRC)
その他	JLESC (Joint Laboratory for Extreme-Scale Computing : フランス・アメリカ・スペイン・ドイツの研究機関等 6 者による)

※計算科学研究機構との連携については、計算科学研究推進室 連携促進グループまでお問い合わせください。(P23)



システムソフトウェア研究チーム

System Software Research Team

チームリーダー 石川 裕 yutaka.ishikawa@riken.jp

チーム・ウェブサイト <http://www-sys-aics.riken.jp>

高性能計算・ビッグデータ・AIのためのシステムソフトウェア開発

当研究チームは、「京」、ポスト「京」、ポスト「京」の次システムに対して、ユーザ環境の継続性と利便性を考慮しながら先端的システムソフトウェアスタックの整備および研究開発を行っている。具体的には、以下のシステムソフトウェアスタックに取り組んでいる。

• OS カーネル

メニーコア型並列計算機向け軽量カーネル McKernel を開発している。Linux API を有し Linux で動作するアプリケーションは McKernel 上で効率よく動作する。Intel 社の最新 Xeon Phi である KNL 上で稼働している。

• MPI 通信ライブラリ

アルゴンヌ国立研究所が中心となって開発している MPI 通信ライブラリの一実装である MPICH 通信ライブラリを、「京」およびポスト「京」に実装している。特に、ポスト「京」の通信ハードウェアを効率よく利用できる機構を開発している。

• ファイル I/O ミドルウェア

実時間ジョブ間ファイル I/O を実現する DTF、tar フォーマットを有する並列 I/O ライブラリ FTAR を開発している。

チームリーダー略歴

- 1987 慶應義塾大学大学院工学研究科電気工学専攻博士課程修了（工学博士）
- 1987 通商産業省電子技術総合研究所（現産業技術総合研究所）
- 2006 東京大学大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻教授
- 2014 AICS システムソフトウェア研究チーム、システムソフトウェア 開発チーム チームリーダー、フラッグシップ 2020 プロジェクト プロジェクトリーダー（現職）

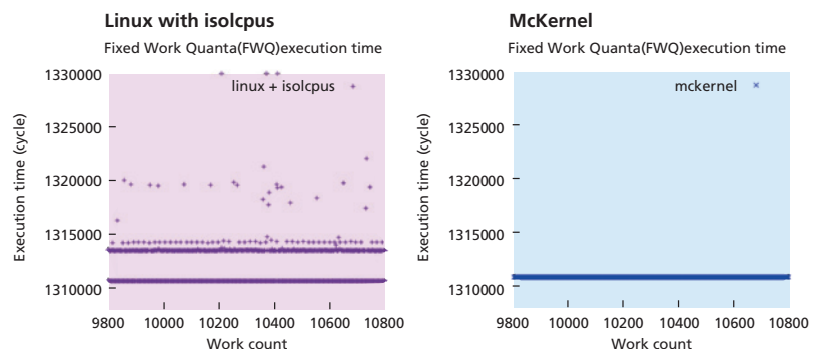
主要論文

1. M. Hatanaka, M Tanaka, A.Hori and Y.Ishikawa.: "Offloaded MPI Persistent Collectives using Persistent Generalized Request Interface," EuroMPI/USA 2017, (2017).
2. B.Gerofi, M.Takagi, G.Nakamura, T.Shirasawa, A. Hori and Y. Ishikawa.: "On the Scalability, Performance Isolation and Device Driver Transparency of the IHK/McKernel Hybrid Lightweight Kernel," IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS), (2016).
3. M. Si, A. J. Pena,Hammond, P. Balaji, M. Takagi and Y. Ishikawa.: "Casper: An Asynchronous Progress Model for MPI RMA on Many-Core Architectures," Proceed-ings of 2015 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS), pages 665-676, 2015.

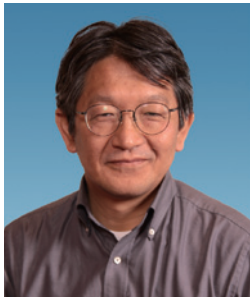
おもな研究成果

Linux 互換軽量カーネル McKernel の開発 HPC 分野では、超並列性と深いメモリ階層の導入によりさらなる計算性能向上を図ろうとしている。これらを効率よく利用する新しい実行時環境が必要とされている。実現手法の一つとして新しい軽量カーネル（LWK）を用いる方法があるが、LWK は一部の POSIX API のみしか提供していない。しかし、近年ニーズが高まっている in-situ ビッグデータ解析やワークフローなどでは POSIX / Linux のもつ豊富な API が必要とされる。これら矛盾する要求を満たすために、我々は Linux と軽量カーネル（LWK）が計算ノード上で同時に稼働するハイブリッドカーネルを設計・実装してきた。この LWK を McKernel、Linux カーネルと LWK の間のインタフェースを IHK と呼ぶ。McKernel はハードウェアを再起動せずに Linux カーネルから起動される。Linux で動作するバイナリは McKernel でも動作する。McKernel ではメモリ / プロセス / スレッド管理などの性能を重視する機能の

みが実装され、残りは Linux に委譲される。McKernel の特徴の一つは OS ノイズの少ない環境を提供していることである。サンディア国立研究所が提供する Fixed Work Quanta ベンチマークは、固定 CPU 負荷をかけたときに実行時間がどれだけずれるかを計測する。このベンチマークで、McKernel では実行時間が一定だが、Linux では大きな実行時間差が生じることが示された。



Results of Fixed Work Quanta(FWQ)



プログラミング環境研究チーム

Programming Environment Research Team

チームリーダー 佐藤三久 msato@riken.jp

チーム・ウェブサイト <http://pro-env.riken.jp>

エクサスケール計算のための高性能 高生産性プログラミング環境の研究開発

当研究チームでは、「京」のような大規模な並列システムの能力を引き出し、かつ、難しいといわれる並列プログラミングの生産性を向上させるためのプログラミング言語およびプログラミングモデルの研究開発を行ってきた。その一つが、PGAS (Partitioned Global Address Space) モデルをベースとした新しいプログラミング言語「XcalableMP」の開発である。我々は、Omni XMP コンパイラというレファレンス実装を行い、「京」に向けた最適化や PGAS モデルの性能評価、さらに「京」以外の演算加速機構をもつ並列システムへの適用を行ってきた。また、「京」の大規模並列プログラム向けの性能チューニング・解析ツール「Scalasca」を研究用に移植し、ユーザに提供した。

現在、エクサスケール計算のための高性能高生産性プログラミング環境に向けて、XcalableMP の次のバージョンである XcalableMP 2.0 の研究開発を進めている。大規模なメモリアプローチ並列システムを活用するためのプログラミングが重要な課題となるため、マルチタスク機能と PGAS の片方向通信を統合したモデルを提案している。これにより、時間のかかる大域的な同期を排除し、RDMA による軽量の通信機構と計算のオーバーラップを可能にして、効率化が図れると期待している。また、ポスト「京」に向けては、wide SIMD に関するコンパイラの最適化の研究も進めている。

チームリーダー略歴

- 2001 筑波大学 システム情報系教授
- 2007 同大学計算科学研究センターセンター長
- 2010 AICS プログラミング環境研究チーム チームリーダー (現職)
- 2014 フラッグシップ 2020 プロジェクト 副プロジェクトリーダー、アーキテクチャ開発チーム チームリーダー (現職)

主要論文

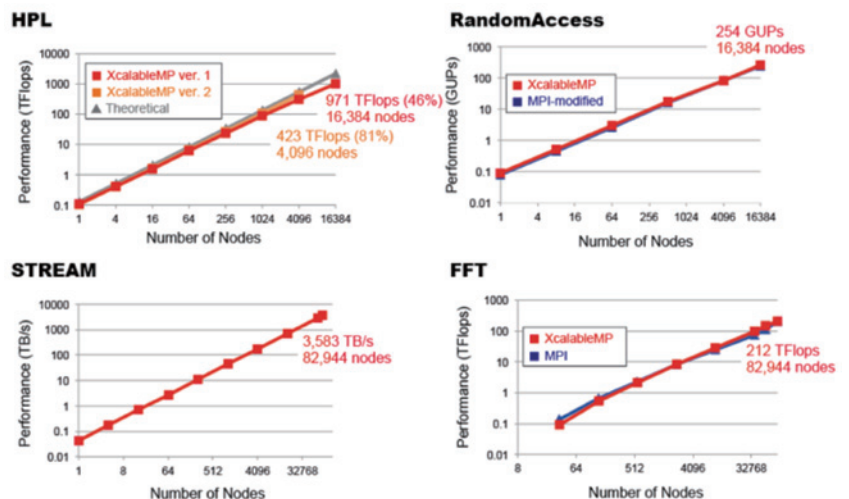
1. Y. Kodama. "Preliminary Performance Evaluation of Application Kernels using ARM SVE with Multiple Vector Lengths," Re-Emergence of Vector Architectures Workshop (Rev-A), HI, USA, Sep. 2017.
2. M. Nakao, H. Murai, H. Iwashita, T. Boku, M. Sato. "Implementation and evaluation of the HPC Challenge benchmark in the XcalableMP PGAS language," International Journal of High Performance Computing Applications, Mar. 2017. doi: 10.1177/1094342017698214
3. M. Tsuji, M. Sato. "Fault Tolerance Features of a New Multi-SPMD Programming/Execution Environment," Proceedings of First International Workshop on Extreme Scale Programming Models and Middleware, Texas, USA, Nov. 2015. doi: 10.1145/2832241.2832243

おもな研究成果

XcalableMP が HPC の Class2 部門賞を 2 年連続受賞

XcalableMP を「京」で用いた際の性能が、スーパーコンピュータに関する国際会議 SC の HPC チャレンジベンチマークコンテストにおいて、2013、14 年と続けて Class2 部門賞を受賞した。この部門では、提案する並列プログラミング言語で RandomAccess、FFT、HPL、STREAM などのベンチマークを実装したときの性能と生産性を評価する。我々は典型的なステンシル計算である Himeno ベンチマークも加え、これらを「京」で性能評価した結果を提出した (最大の場合「京」の全ノードを用いた)。2014 年には、「京」に向けてコンパイラをチューニングした他、アルゴリズムの工夫を行った結果、XcalableMP を用いたプログラムは、MPI によるレファレンス実装とほぼ同じ性能を達成できた (図)。また、生産性の一つの指標として、XcalableMP によるコードの行数が MPI を用いた

場合のコードに比べて、少ないことがわかった。これらにより、XcalableMP が並列プログラミング言語として、良好な生産性と性能をもつことが示せた。



XcalableMP による HPC ベンチマーク (SC14) の結果



プロセッサ研究チーム

Processor Research Team

チームリーダー 佐野健太郎 kentaro.sano@riken.jp

チーム・ウェブサイト <http://www.riken.jp/research/labs/aics/research/processor/>

大規模高性能計算のための 並列計算モデルと計算加速機構を開発

「京」やポスト「京」では、ネットワークで接続された膨大な数の計算ノードが相互に通信し合いながら手分けして並列に処理を進めることにより、大規模な計算を高速で実行する。しかし、ノード数が多くなるにつれて通信や同期に時間がかかり、全体として計算機の規模に見合った性能を実現しにくくなる。また、昨今の大規模並列計算機は、複数のマルチコアプロセッサからなる共有メモリ型ノードを分散メモリ型並列計算機として相互に接続したものであり、その複雑な構造のために、性能を十分に引き出すためのプログラミングや最適化は困難で時間のかかる作業となっている。これに対し、当研究チームでは、処理単位である「タスク」の依存グラフとして記述した計算問題を自動的に並列化し、ハードウェア資源を適切に割り当てながら実行を進める「データフロー型」並列計算モデルの開発に取り組んでいる。依存するタスク間に限定された局所的なデータ移動や同期に基づくことにより、システム規模に応じた性能が容易に得られるようになる。

一方、機械学習やビッグデータ処理といった新しい種類の計算問題を高性能かつ低電力で実行するための計算加速機構の研究にも取り組んでいる。アルゴリズムを専用ハードウェア構造に変換し、それを回路再構成可能デバイスにプログラムし実行することで、従来のプロセッサが苦手とする処理の高速化をめざしている。

チームリーダー略歴

- 2000 東北大学大学院情報科学研究科情報基礎科学専攻修了
- 2005 東北大学大学院情報科学研究科情報基礎科学専攻助教授（2007年より准教授）
- 2006 インペリアルカレッジロンドン客員研究員
- 2017 AICS プロセッサ研究チーム
チームリーダー（現職）

主要論文

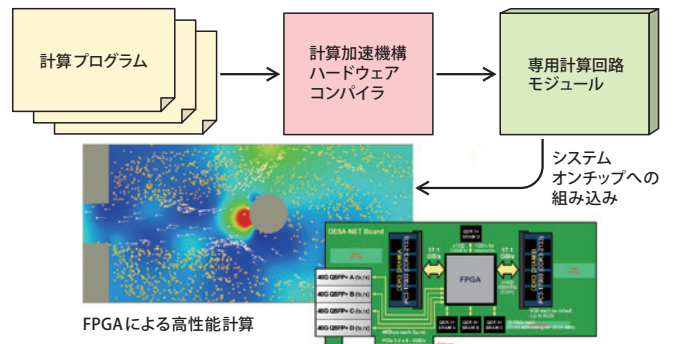
1. Kentaro Sano and Satoru Yamamoto, "FPGA-based Scalable and Power-Efficient Fluid Simulation using Floating-Point DSP Blocks," IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems (TPDS), DOI: 10.1109/TPDS.2017.2691770, (2017).
2. Tomohiro Ueno, Kentaro Sano, and Satoru Yamamoto, "Memory Bandwidth Compressor for FPGA-based High-Performance Custom Stream Computation," ACM Transactions on Reconfigurable Technology and Systems (TRETs), (2017).
3. Kohei Nagasu, Kentaro Sano, Fumiya Kono, and Naohito Nakasato, "FPGA-based Tsunami Simulation: Performance Comparison with GPUs, and Roofline Model for Scalability Analysis," Journal of Parallel and Distributed Computing, DOI:10.1016/j.jpdc.2016.12.015, (2016).

おもな研究内容

専用計算加速機構を生成するコンパイラを開発し低電力高性能数値計算を実現 ムーアの法則と呼ばれる半導体技術の進展が減速・停滞してきたことから、近い将来、メニーコア型の汎用マイクロプロセッサでは計算性能の向上が困難になるといわれている。この問題を解決する方法の一つとして、対象計算問題を専用の回路に変換し、回路再構成可能デバイス FPGA を用いて専用の計算加速機構を実現する試みが注目を集めている。これまで、数式による独自言語のプログラムから専用の計算加速機構ハードウェアを生成するコンパイラと、FPGA を用いてそれを動作させるための処理系の開発を行った。浅水方程式に基づく津波シミュレーションに対して本処理系を適用したところ、単一の FPGA により、GPU によるシミュレーションと比べておよそ 2 倍の計算性能、および 8 倍の電力性能比を実現した。これは、対象とする計算問題に特化したメモリシステムやデータフローグラフに基づく計算パイプラインにより、効率よく演算を実行できる回路を生成できたためである。このほかにも、数値データ列をリアルタイムに圧縮し異

なるチップ間のデータ伝送速度を向上させることが可能なハードウェアモジュールの開発に成功している。

今後は、これらの成果を発展させるとともに、大規模かつ複雑化する計算機を効率よく利用し容易に性能を引き出すことができるような処理系の研究開発に取り組む。また、半導体の微細化技術が停滞する近い将来において有効な、新しい並列計算モデルとアーキテクチャの確立をめざす。



専用ハードウェア構造への変換による高性能計算の実現



大規模並列数値計算技術研究チーム

Large-scale Parallel Numerical Computing Technology Research Team

チームリーダー 今村俊幸 imamura.toshiyuki@riken.jp

チーム・ウェブサイト <http://www.aics.riken.jp/labs/lpnctr/index.html>

高速・高精度シミュレーションのための 数値計算ライブラリを整備

「京」、ポスト「京」と変化していく計算機環境の中でハードウェア能力を最大限に発揮しつつ高効率性と精度を達成するには、計算機科学的・数学的に高度化された数値計算ライブラリの利用が必須となる。当研究チームは、高機能な数値計算ソフトウェアライブラリの研究開発を推進している。①連立一次方程式用ソフト、②高性能固有値ソルバ EigenEXA、③3次元高速フーリエ変換ソフト KMATH FFT3D、④長周期乱数生成ルーチン KMATH_RANDOM など、大規模化、高並列、高性能、高精度、耐障害性という観点から、数値計算アルゴリズムの選定と数値計算ライブラリの整備を担ってきた。ポスト「京」に向けては、メモリアクスタに対応した数値計算パッケージ KMATHLIB2 の公開をめざしている。

一方、「京」までのスパコンでは実装が難しかった、非対称固有値計算や高次テンソルの計算に代表される「極難問題」を解くための並列アルゴリズムの開発にも取り組んでいる。また、「京」に向けて開発した「高精度計算フレームワーク」をポスト「京」に拡張する研究も行っている。計算有効桁数を制御したり潜在的な非決定性を取り除いて計算を繰り返すことで、蓄積する誤差を減らし計算の再現性を保証する手法も開発している。さらに、国内外の研究者や企業との共同研究・連携にも力を入れ、ポスト「京」にとどまらず、長期間にわたって利用可能な数値計算ライブラリの基盤技術の確立をめざしている。

チームリーダー略歴

- 1996 京都大学大学院工学研究科応用システム科学専攻単位取得退学
- 1996 日本原子力研究所計算科学技術推進センター
並列処理基本システム開発グループ
- 2000 博士（工学）取得
- 2003 電気通信大学講師・助教授
(2007年より准教授)
- 2012 AICS 大規模並列数値計算技術研究チーム
チームリーダー（現職）

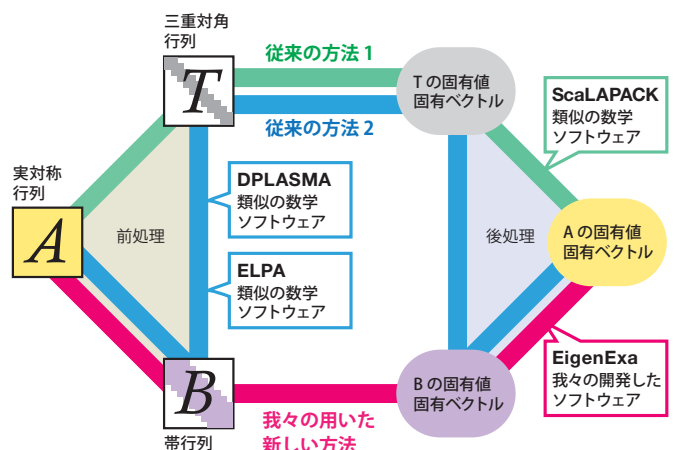
主要論文

1. T. Imamura, T. Fukaya, Y. Hirota, S. Yamada and M. Machida, "CAHTR: Communication-Avoiding Householder TRidiagonalization", Proc. ParCo2015, Advances in Parallel Computing, Vol. 27: Parallel Computing: On the Road to Exascale, pp. 381-390, 2016.
2. Y. Hirota and T. Imamura, "Divide-and-Conquer Method for Banded Generalized Eigenvalue Problems", Journal of Information Processing Computing System, Vol.52, Nov, 20, 2015.
3. T. Fukaya and T. Imamura.: "Performance evaluation of the EigenExa eigensolver on Oakleaf-FX: tridiagonalization versus pentadiagonalization" Parallel and Distributed Processing Symposium Workshop (IPDPSW), 2015 IEEE International, pp. 960-969, May 25 2015.

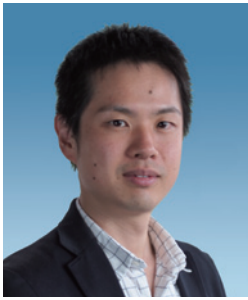
おもな研究成果

世界最速の固有値計算に成功 行列の固有値計算は、大規模なコンピュータシミュレーションや、ビッグデータにおけるデータ相関関係の解析などで必ず使用されるが、その計算量が行列の次元の3乗に比例して増加し、計算時間がかかるために大規模問題を高速に計算することが難しい。従来の計算アルゴリズムでは、①密行列を三重対角行列に変換する前処理を行い、②その後、三重対角行列の固有値計算を行って固有ベクトルを得、③最後に、もとの行列の固有ベクトルにする（図の緑線部分）が、計算が大規模になると①に膨大な時間がかかる。この問題への解決方法として、前処理として一度、帯行列に変換し、さらに三重対角行列に変換する2段階のスキーム（図の青線部分）も開発されたが、前処理部分を高速化できるものの、後処理部分の計算量が2倍以上に増加してしまう。EigenExaは、帯行列を直接導くことで、この流れを効率化する新たなスキーム（図の赤線部分）に基づくソフトウェアであり、「京」の全プロセッサを用いることで、100万×100万の行列の固有値問題を1時間以内で解

くことができた。過去の我々が知る世界最大規模の固有値計算は、地球シミュレータ（初代）の4992プロセッサを用いて40万×40万行列を3時間半で解いた記録だった。



新しいスキームの概念図



利用高度化研究チーム

HPC Usability Research Team

チームリーダー 松葉浩也 hiroya.matsuba@riken.jp

誰もがシミュレーションやデータ処理プログラムを作成できる環境を整備

当研究チームのミッションはスーパーコンピュータにおけるプログラミングの生産性を高めることである。データ処理や人工知能などの新しい技術に注目が集まる中、スーパーコンピュータにおけるプログラム生産性の重要性は高まっている。なぜなら、スーパーコンピュータには、データの取得が難しい現象をシミュレーションによって仮想的に発生させる、あるいは人工知能を用いた社会実験を安全に行う環境を提供するなどの新しい役割が期待されており、この期待に応えるためには、多種多様な装置や現象をシミュレーションするプログラムを短時間で開発することが求められるためである。

当チームはモデル記述言語、データ処理基盤、機械学習フレームワークなどの開発、実行環境をスーパーコンピュータ上に整備した上で、これらを接続するために必要な技術を研究開発する。現在、「京」は、Fortran などのプログラミング言語を用いて計算手順を記述することにより利用されるのが通常であるが、本チームは、シミュレーション対象機器などの動きを数式に近い形で与える言語や GUI を用いて、シミュレーション、データ処理、あるいはそれらの融合から成る大規模な計算を容易に実行できる環境の実現をめざす。また、製品からサービスに移行している産業界の動向も踏まえ、アカデミアの成果物であるソフトウェアをサービスの形で普及させるべく、社会的に必要な仕組みの検討も行う。

チームリーダー略歴

- 2006 東京大学情報基盤センター助手
- 2010 東京大学大学院情報理工学系研究科 コンピュータ科学専攻 博士 (情報理工学)
- 2010 株式会社日立製作所
- 2012 AT&T Labs. 客員研究員 (-2014)
- 2017 AICS 利用高度化研究チーム チームリーダー (現職)

主要論文

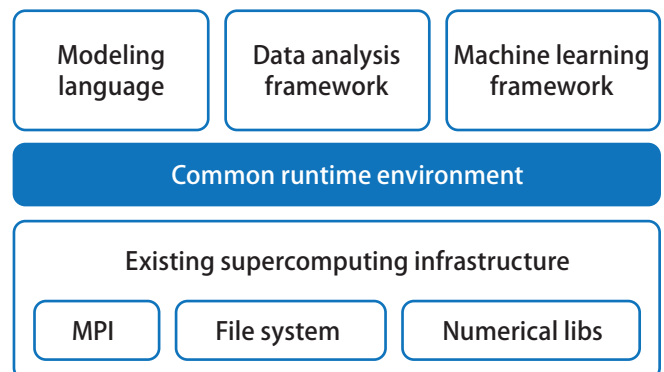
- Hiroya Matsuba, Kaustubh Joshi, Matti Hiltunen and Richard Schlichting, "Airfoil: A Topology Aware Distributed Load Balancing Service," 2015 IEEE 8th International Conference on Cloud Computing
- Hiroya Matsuba, Matti Hiltunen, Kaustubh Joshi and Richard Schlichting, "Discovering the Structure of Cloud Applications Using Sampled Packet Traces," 2014 IEEE International Conference on Cloud Engineering
- Atsushi Hori, Yoshikazu Kamoshida, Hiroya Matsuba, Kazuki Ohta, Takashi Yasui, Shinji Sumimoto and Yutaka Ishikawa, "On-demand file staging system for Linux clusters," 2009 IEEE International Conference on Cluster Computing

おもな研究内容

モデル記述言語の活用 当研究チームはモデル記述言語をスーパーコンピュータで活用することをめざす。シミュレーションの最大の問題は、シミュレーションの定義に高度な専門性と膨大な時間を要することである。産業界の一部ではシミュレーションを簡潔に記述できるモデル記述言語が利用されているが、一般的には、これらを用いて作成されたプログラムは最適化や並列化が十分でなく、解ける問題の規模や精度に限られる。我々は、モデル記述言語をスーパーコンピュータ向け数値ライブラリに接続するなどの方法で、最低限の人間の手助けにより、利便性と問題規模の両立を実現する手法を開発する。

シミュレーションとデータ処理の融合基盤 上記のモデル記述言語に、さらにデータを扱う仕組みを結合する。データ処理については、データ解析で有名な Hadoop や Spark、あるいは人工知能分野で研究がさかんな各種深層学習フレームワークなど、多くの既存技術が存在する。しかし、実行機構の違いなどから現状ではシミュレーションとの併用は容易でな

い。当研究チームではこれらを接続し、理論的に構築したモデルと機械学習で構築したモデルを併用するような複雑なシミュレーションであっても、単一の環境で最低限のプログラミングにより実行できる環境を整備する。



Developing an end-to-end solution from simulation modeling to data processing



連続系場の理論研究チーム

Field Theory Research Team

チームリーダー 藏増嘉伸 kuramasi@riken.jp

計算素粒子物理学に基づく新たな 計算科学アルゴリズム・手法の開発と応用

素粒子・原子核の研究はミクロの自然界の極限を究めようとするが、ビッグバン宇宙論を通じて初期宇宙や元素合成論の研究にもつながり、また量子性が本質的な役割を果たす点で原子・分子レベルの物質研究にも通じる点がある。当研究チームでは、素粒子・原子核の基礎理論である格子量子色力学（格子QCD）を中心とした計算科学研究を行っているが、その研究遂行のためには、アルゴリズムや計算手法の改良によって計算機の高い実効性能を追求する必要がある。しかしながら、現在のCPUのメニーコア化やそれ以上の並列化が要求される演算加速器を活用した階層的大規模並列計算機環境のもとでは、従来とは異なるアルゴリズムの開発や計算手法の開拓の必要性が認識されている。これらの課題を克服するために、アルゴリズムの研究開発を行う数値解析・応用数学分野、さらにはソフトウェア技術・計算機システムの研究開発を行う計算機科学分野との連携を図り、計算科学者・計算機科学者・数理科学者が三位一体となった分野横断的研究を推進する。

チームリーダー略歴

- 1995 東京大学大学院理学系研究科博士課程物理学専攻修了
- 2007 筑波大学准教授
- 2010 AICS 連続系場の理論研究チーム チームリーダー（現職）
- 2012 筑波大学教授（現職）

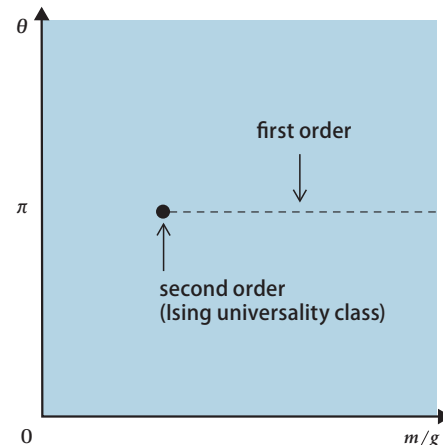
主要論文

- X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa.: "Critical Point Phase Transition for Finite Temperature Three-Flavor QCD with Non-Perturbatively $O(a)$ -Improved Wilson Fermions at $N_t=10$," *Physical Review D* 96 (2017) 034523.
- Y. Shimizu and Y. Kuramashi.: "Grassmann Tensor Renormalization Group Approach to One-Flavor Lattice Schwinger Model," *Physical Review D* 90 (2014) 014508.

おもな研究成果

2次元 QED の相構造解析に成功 テンソルネットワーク (TN) スキームは、2000年代以降、さまざまな分野で理論的・計算科学的研究手法として概念的・実用的側面において急速な発展を見せている。素粒子物理学分野においては、近年、我々のグループが、グラスマンテンソル線り込み群 (GTRG) を用いて1フレーバーのシュヴィンガーモデル (2次元 QED) の相構造解析に成功した。これにより、TN スキームにおいてはモンテカルロ法に内在する符号問題が存在しないこと、およびグラスマン数の直接的取り扱いが可能なることによりフェルミオン場とボソン場に対する計算コストが同等であることが示された。本研究は、ユークリッド時空で定義された相対論的フェルミオン入りゲージ理論への最初の応用例である。さらに、我々は θ 項を付加した場合の1フレーバーのシュヴィンガーモデルの相構造解析も行った。この場合、作用は複素数となるが、理論的考察から予想される相構造を再現することに成功した。このことは、GTRG 法が複素作用をもつようなシステムにも適用可能であることを意味している。我々が最終目標とする4次

元格子QCDは、相対論的フェルミオンを含むSU(3)非可換ゲージ理論であるため、現在はその目標へ向かって2次元を超えた高次元モデルに対するTNスキームの応用を試みている。



θ 項を付加した場合の1フレーバースュヴィンガーモデルにおける相構造



離散事象シミュレーション研究チーム

Discrete Event Simulation Research Team

チームリーダー 伊藤伸泰 ito@ap.t.u-tokyo.ac.jp

連続関数だけでは記述しきれない現象や 数理モデルのシミュレーション

当研究チームでは、分子や粒子の集団が示す現象を統計物理学に基づいてシミュレーションにより研究してきた成果を活かし、連続な関数だけでは記述しきれない、いわゆる離散事象が核心となる問題を「京」・「ポスト京」をはじめとするスーパーコンピュータでシミュレートし、解析するための技術開発・基礎研究に取り組んでいる。現代のデジタルコンピュータは、0と1という離散的な状態を活用して設計され動作しており、0の場合と1の場合とではまったく異なる処理が進む。これは離散事象の例である。交通・経済・病気の流行などといった社会現象でも離散事象は重要である。自動車が直進するか右折するか、財を売るか買うか、免疫があるかないかによって、その後の経過は大きく異なる。そして、離散事象の連鎖からさまざまな変化が生じる。こうした離散事象は、物質の性質・環境・気候変動・医療・創薬・ものづくり・防減災をはじめ、ほぼあらゆる問題で重要となる。当研究チームでは、こうした離散事象の発生と連鎖をスーパーコンピュータで扱い、記述し予測するための基盤ソフトウェアおよび数理モデルの開発を進めている。

チームリーダー略歴

- 1991 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 修了（理学博士）
- 1991 日本原子力研究所情報システムセンター 研究員
- 1995 東京大学工学部物理工学科講師、1997年10月より助教授を経て准教授（現職）
- 2012 AICS 離散事象シミュレーション 研究チームチームリーダー（現職）

主要論文

1. Y. Murase, T. Uchitane and N. Ito, "An open-source job management framework for parameter-space exploration: OACIS," Proceedings of the 30th Annual Workshop "Recent Developments in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics" (The University of Georgia, Athens, U.S.A., February 20-24, 2017).
2. Shota Nagumo, Takashi Shimada, Naoki Yoshioka, and Nobuyasu Ito, "The Effect of Tick Size on Trading Volume Share in Two Competing Stock Markets" Journal of the Physical Society of Japan vol.86, 014801 (2017).
3. Takayuki Hiraoka, Takashi Shimada and Nobuyasu Ito, "Order-disorder transition in repulsive self-propelled particle systems," Phys. Rev. E vol.94 (2016) 062612.

おもな研究成果

実行管理アプリケーションの開発 離散事象がかかわる問題を研究する際には、非常に多くのシミュレーションを実行し、系統的に解析する必要がある。スーパーコンピュータを用いれば、数十万の小規模シミュレーションを実行可能だが、実行・解析には非常に手間がかかるため、シミュレーションを円滑・確実に実行・解析するための仕組みが不可欠となる。

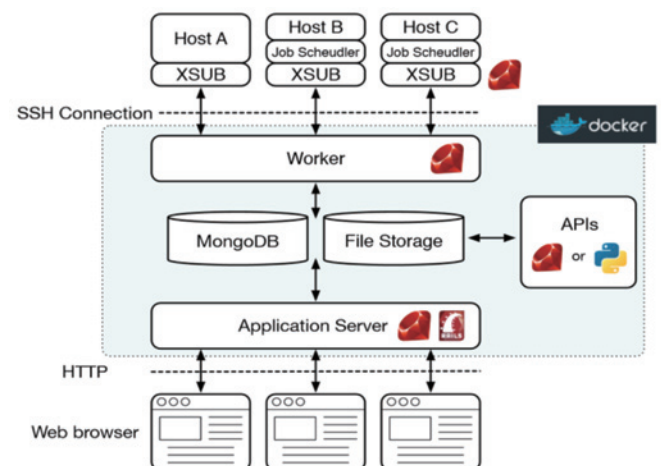
当研究チームでは、この問題を解決するためのソフトウェアを開発している。その一つが現在公開中の「OACIS」である。これはさまざまな条件での多数のシミュレーションの実行・管理・解析を支援するソフトウェアであり、社会シミュレーションをはじめロボットの評価や物質設計などに理研の内外で活用されている。

当研究チームではこれまでに、OACISと「京」などのコンピュータを活用して交通・経済・社会関係などの現象の研究に取り組んできた。その結果、例えば以下のような成果を得た。

- 都市の自動車交通における各道路の重要性を分析する手法を開発し、神戸市に適用して自動車交通の因子の候補を特定

した。

- 災害から避難する際に隘路となる要素を特定する手法を開発し、金沢市や鎌倉市の沿岸部に津波が来た場合に円滑な避難を妨げる要素の候補を特定した。



OACISの構成図：中央部分の点線内がOACIS本体である



量子系分子科学研究チーム

Computational Molecular Science Research Team

チームリーダー 中嶋隆人 nakajima@riken.jp

チーム・ウェブサイト http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/JHome.html

日本発の「理論」+「ソフトウェア」 +「京」で理論先導の化学を牽引

当チームの目標は、ナノマテリアルや生体分子に代表される大規模で複雑な分子系の化学反応・物性・機能をミクロの立場から理論先導で説明・予測するため、次世代の理論分子科学の基盤を構築することである。さらに、「京」のような超並列計算機を有効に利用することで、分子科学が対象とするさまざまな問題と課題を解決することを目標としている。具体的な達成目標は以下の3点である。

①次世代分子理論に基づいた理論分子科学の展開

従来の分子理論が抱える問題点を克服し、ブレークスルーを達成することで、予測性を備えた理論先導の分子科学を確立する。そのために、大規模で複雑な分子系の反応・性質・機能をミクロの立場から理論先導で説明するための次世代分子理論とそのための計算手法を構築する。

②超並列計算機環境に資する分子科学計算ソフトウェアの開発と提供

「京」のような超並列計算機環境を有効に活用できる分子科学計算ソフトウェア「NTChem」を開発し、共用利用できるように整備・公開する。

③ハイスループット・コンピューティングによる新材料設計

「京」を利用したハイスループット・コンピューティングにより、マテリアルズ・インフォマティクス手法を用い、太陽電池材料や人工光合成材料に対し、実験に先行した新材料設計を実現することで、エネルギー・環境問題の解決につなげる。

チームリーダー略歴

- 1999 東京大学 大学院工学系研究科助手
- 2003 東京大学 大学院工学系研究科講師
- 2004 東京大学 大学院工学系研究科助教授
- 2010 AICS 量子系分子科学研究チーム
チームリーダー（現職）

主要論文

1. T. Yonehara, T. Nakajima, "A quantum dynamics method for excited electrons in molecular aggregate system using a group diabatic Fock matrix", *J. Chem. Phys.* 147, 074110 (2017). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4998746>.
2. R. Maitra, Y. Akinaga, T. Nakajima, "A coupled cluster theory with iterative inclusion of triple excitations and associated equation of motion formulation for excitation energy and ionization potential", *J. Chem. Phys.* 147, 074103 (2017). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4985916>.
3. T. Nakajima, M. Katouda, M. Kamiya, Y. Nakatsuka, "NTChem: A high-performance software package for quantum molecular simulation", *Int. J. Quantum Chem.* 115, 349-359 (2015). DOI: 10.1002/qua.24860.

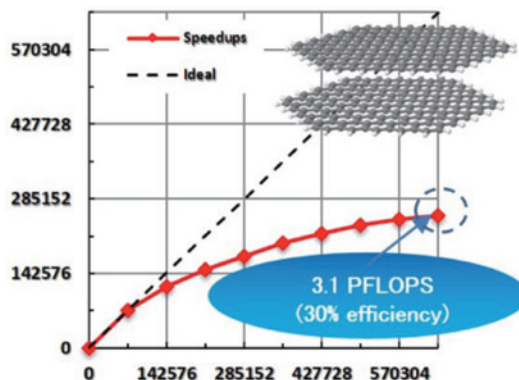
おもな研究成果

超並列計算機環境に資する分子科学計算ソフトウェア

「NTChem」の開発 量子化学計算ソフトウェアは物質科学・生命科学などの多くの分野の共通基盤である。コンピュータの高度化・高性能化に伴い、大規模な分子系を高精度に計算する要望は急速に増しつつある。しかしながら、既存ソフトウェアの多くは単一プロセッサの時代に設計・開発されたものであり、その拡張としての単純な並列化は可能ではあるが、「京」のような超並列計算機においては並列化効率が問題となる。全系丸ごとの分子計算に関していえば、2017年現在では1000原子分子程度の第一原理電子状態計算が上限で、新規の機能発現などが期待できるナノスケールサイズの数千~1万原子系に対する計算は不可能である。「京」の圧倒的な計算資源を活かすためには、超並列計算が可能で一般ユーザが利用できる分子科学計算ソフトウェアの開発が急務である。そこで、幅広い分野の多くのユーザの利用に資する汎用分子科学計算ソフトウェア NTChem の開発を行っている。

NTChem は一から設計をした新しい国産分子科学計算ソフ

トウェアである。既存ソフトウェアのもつ多くの機能をカバーしつつ、新たに開発してきたオリジナリティの高い理論手法の集大成でもあって、他のプログラムでは利用することのできない多くの量子化学計算法を含んでいる。さらに、「京」などのマルチコア超並列クラスタ計算システムの性能を引き出すことが可能な並列アルゴリズムが実装されている。



NTChem の電子相関計算部の「京」での並列性能



量子系物質科学研究チーム

Computational Materials Science Research Team

チームリーダー 柚木清司 yunoki@riken.jp

強相関量子系に対するシミュレーションを開発し最先端研究基盤を確立

計算機をはじめこれまでの主要なエレクトロニクス技術の発展の礎は、半導体中の電子の振る舞いを正しく記述できるバンド理論の成功にある。しかしながら、半導体デバイスの微細化は限界に迫っており、今後、エレクトロニクス技術に変わる新たな新原理の創出が求められている。その中で、例えば、スピンの流れを利用したスピントロニクスや、まったく新しい原理をもとにした量子コンピュータ等が近年注目を集めている。これらの新しい原理を実現するためには、それに適した物質開発が不可欠であり、その有力物質として強相関物質があげられる。強相関物質は電子間の相互作用が強い物質群であり、これまでのバンド理論は適用できない。当研究チームでは、強相関物質を含む相互作用の強い量子系、つまり強相関量子系に対するシミュレーション法の研究開発を行ってきた。特に、大規模並列計算が可能な量子モンテカルロ法、密度行列くりこみ群法、および、テンソルネットワーク法の開発を行い、基底状態のみならずダイナミクス（熱力学、励起ダイナミクス、実時間ダイナミクス）の高精度計算の実現をめざす。世界最先端のシミュレーションを実現することにより強相関量子系に対する最先端研究基盤を確立する。

チームリーダー略歴

- 1996 名古屋大学大学院工学系研究科応用物理学専攻博士課程修了
- 2008 理化学研究所柚木計算物性物理研究室 准主任研究員
- 2010 AICS 量子系物質科学研究チーム チームリーダー（現職）
- 2012 理化学研究所創発物性科学研究センター 計算量子物性研究チーム チームリーダー（現職）
- 2017 理化学研究所柚木計算物性物理研究室 主任研究員（現職）

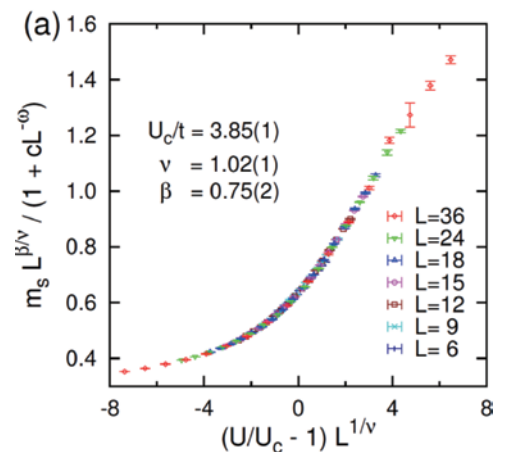
主要論文

1. Y. Otsuka, S. Yunoki, and S. Sorella, "Universal quantum criticality in metal-insulator transition of two-dimensional interacting Dirac electrons", *Phys. Rev. X* 6, 011029 (2016).
2. S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, "Density-matrix renormalization group study of third harmonic generation in one-dimensional Mott insulator coupled with phonon", *J. Phys. Soc. Jpn.* 84, 054403 (2015).
3. S. Sorella, Y. Otsuka, and S. Yunoki, "Absence of a Spin Liquid Phase in the Hubbard Model on the Honeycomb Lattice", *Scientific Reports* 2, 992 (2012).

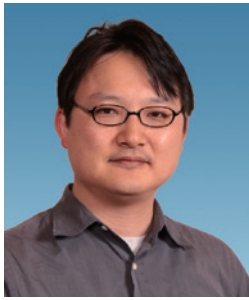
おもな研究成果

ハバード模型に対する世界最大規模の計算を実現し量子相転移の普遍性を解明 電子間クーロン斥力で誘起される金属 - 絶縁体転移は物性物理学の根本的な問題として古くから研究されてきた。当研究チームでは、その最も簡単な模型であり、また、グラフェンの模型でもあるハニカム格子上のハバード模型で現れる金属 - 絶縁体転移の高精度解析を行った。この系は、電子の分散が、相対論的電子である Dirac 電子と同じ分散をもつことで特に注目されている。我々は、ハバード模型を数値的に厳密に取り扱うために量子モンテカルロシミュレーションを開発し、「京」の性能を最大限活用するために高度化することにより、2,592 電子までの計算を実現した。これは現在、世界最大規模の計算であり、これまでの世界記録である 648 電子の計算よりも 64 倍程度規模が大きい。

これにより、まず、ハニカム格子ハバード模型で起こる金属 - 絶縁体転移は、間に中間相等を含まない連続転移であることを指摘し、さらに、相互作用する Dirac 電子系における金属 - 絶縁体転移を特徴づける量（臨界指数）を高精度で決定することに成功した。今後は、前人未達の 10,000 電子の計算に挑戦し、例えば、現代固体電子論の基礎理論である Fermi 液体論の正当性を Dirac 電子系において明らかにしたい。



違った大きさの系 ($2L^2$) で起こる金属 - 絶縁体転移の振る舞いが同じ普遍的な関数で記述される。その時の指数 (β と ν) がその相転移を特徴づける。



粒子系生物物理研究チーム

Computational Biophysics Research Team

チームリーダー 杉田有治 sugita@riken.jp

チーム・ウェブサイト <http://www.riken.jp/TMS2012/cbp/ja/index.html>

生体分子機能を予測する大規模分子 動力学シミュレーション手法の開発

タンパク質、核酸、脂質分子などは細胞機能を担う重要な生体分子である。これら生体分子の立体構造はおもに X 線結晶構造解析などの実験的手法で決定されるが、その動的構造を明らかにして機能との関係を理解することが創薬などへの応用に重要である。生体分子の動的構造を解明するためには、分子動力学法を高速化することでシミュレーションが扱うことのできる時空間スケールを拡大する必要がある。

そのために、当研究チームは GENESIS(Generalized-Ensemble Simulation System) という新しい分子動力学ソフトウェアを開発し、並列化と高速化を進めるだけでなく、レプリカ交換分子動力学法や String 法など効率よく生体分子の構造変化を予測するアルゴリズムの開発を行っている。従来よく用いられている全原子分子モデルだけでなく、より高速化・大規模化を進めるために必要な粗視化分子モデルや、酵素反応を取り扱うことのできる量子力学 / 分子力学混合計算法 (QM/MM 法) などを含むマルチスケール分子モデルの開発も行っている。さらに、1 分子計測実験など生体分子の動的構造情報を与える実験とシミュレーションの融合を可能とする新しい方法の開発をめざして、データ同化や機械学習などの手法を適用している。

チームリーダー略歴

- 1998 京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了
- 1998 岡崎共同研究機構分子科学研究所助手
- 2002 東京大学分子細胞生物学研究所講師
- 2010 AICS 粒子系生物物理研究チーム
チームリーダー (現職)

主要論文

1. Biomolecular interactions modulate macromolecular structure and dynamics in atomistic model of a bacterial cytoplasm, Isseki Yu, Takaharu Mori, Tadashi Ando, Ryuhei Harada, Jaewoon Jung, Yuji Sugita, and Michael Feig, *eLife* 5, e19274 (2016).
2. GENESIS: A hybrid-parallel and multi-scale molecular dynamics simulator with enhanced sampling algorithms for biomolecular and cellular simulations, Jaewoon Jung, Takaharu Mori, Chigusa Kobayashi, Yasuhiro Matsunaga, Takao Yoda, Michael Feig, and Yuji Sugita, *WIRES Comp. Mol. Sci.* 5, 310-323 (2015).
3. Reduced Native State Stability in Crowded Cellular Environment Due to Protein-Protein Interactions, Ryuhei Harada, Naoya Tochio, Takanori Kigawa, Yuji Sugita, and Michael Feig, *J. Am. Chem. Soc.* 135, 3696-3701 (2013).

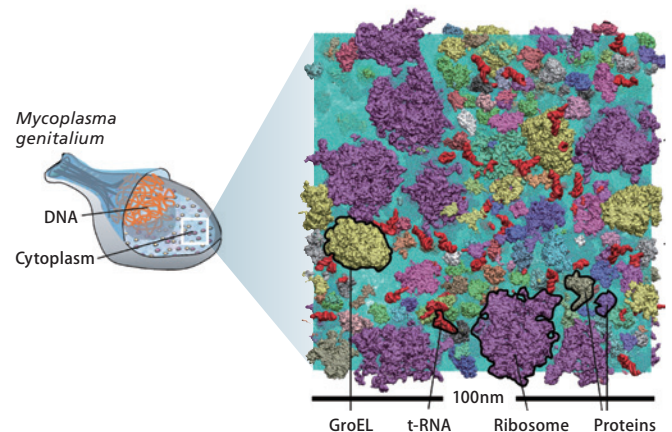
おもな研究成果

世界初のバクテリア細胞質の全原子分子動力学計算に成功

これまでの分子動力学シミュレーションは、溶液中または脂質二重膜中にタンパク質または核酸を 1 分子配置し、その生体分子の動的構造を調べるために行われていた。一方で、細胞質や細胞膜、細胞核などの環境の中での生体分子の動的構造や他の分子との相互作用に関するシミュレーションは、計算機資源やプログラムの能力の限界などの理由でほとんど行われてこなかった。

我々は、当研究チームで開発している分子動力学プログラム GENESIS の並列化を進めることにより、「京」を用いて細胞環境を考慮した大規模な生体分子のシミュレーションを可能にした。遺伝情報や生体分子情報が豊富なバクテリア *Mycoplasma genitalium* の細胞質に含まれる多くのタンパク質、RNA、リボソームに、イオンや ATP などの代謝物、水分子を加えた全原子モデルに基づく分子動力学計算を「京」を用いて行い、さらに詳細なトラジェクトリデータ解析を行うことで、細胞質内でのタンパク質の拡散、構造安定性、タンパク

質間あるいはタンパク質・代謝物間の非特異的相互作用などに関する新たな知見を得た。



バクテリア細胞質の全原子構造モデルを用いたシミュレーション



粒子系シミュレータ研究チーム

Particle Simulator Research Team

チームリーダー 牧野淳一郎 jmakino@riken.jp

チーム・ウェブサイト <http://www.jmlab.jp>

大規模な粒子系シミュレーションコードをだれでも作成できるようにするためのフレームワークを開発

数値シミュレーションで扱われるシステムは、規則格子系、不規則格子系、粒子系に大別される。計算機環境が進歩し、大規模なシミュレーションが可能になるに従って、より現実的で複雑なシステムを扱うことが可能になり、そのために、形状や境界条件に柔軟に対応できる不規則格子系や粒子系の手法が重要性を高めている。

しかし、不規則格子系や粒子系を、「京」やポスト「京」のような大規模並列システムで効率よく扱えるプログラムを開発することは容易ではない。適切なロードバランスを実現するための領域分割、領域間の粒子等の移動、領域にまたがった相互作用計算等の複雑な処理を効率よく実現する必要があるからである。一方、大規模な粒子系シミュレーションでは必ずこのような処理が必要になる。

本研究チームでは、粒子系シミュレーションであればどのようなものにも使える「粒子系シミュレーションソフトウェア開発フレームワーク」FDPSを開発している。

FDPSは、アプリケーション側で定義した粒子データ型や粒子間相互作用を計算する関数を受け取り、それらを扱うための関数群を提供する。それらを使うことで、アプリケーション開発者は並列化やチューニングに多大な時間を割くことなく、解きたい問題に集中できる。

チームリーダー略歴

- 1990 東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻博士課程修了(学術博士)
- 1990 東京大学教養学部助手
- 2012 AICS 粒子系シミュレータ研究チーム チームリーダー(現職)
- 2014 理化学研究所—計算科学研究機構 エクサスケールコンピューティング開発プロジェクト(現フラッグシップ2020プロジェクト) 副プロジェクトリーダー(兼務)
- 2016 神戸大学大学院理学研究科惑星学専攻教授(現職)

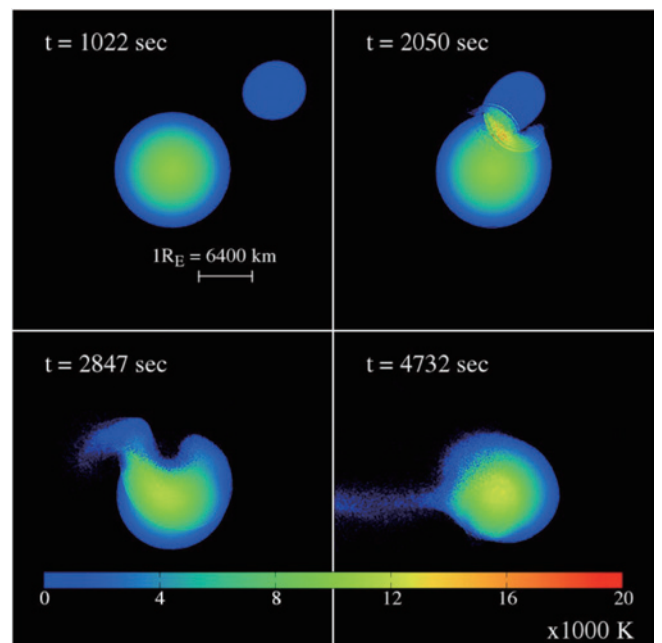
主要論文

- Hosono, N., M. Iwasawa, A. Tanikawa, K. Nitadori, T. Muranushi, and J. Makino, Unconvergence of very-large-scale giant impact simulations, Publications of the Astronomical Society of Japan, 2017, 69, 26-.
- Iwasawa, M., A. Tanikawa, N. Hosono, K. Nitadori, T. Muranushi, and J. Makino, Implementation and performance of FDPS: a framework for developing parallel particle simulation codes}, Publications of the Astronomical Society of Japan, 2016, 68, 54-.
- Iwasawa, M., S. Portegies Zwart, and J. Makino, GPU-enabled particle-particle tree scheme for simulating dense stellar cluster system, Computational Astrophysics and Cosmology, 2015, 2, 6-.

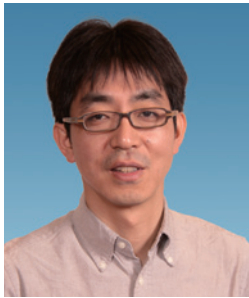
おもな研究成果

汎用・超高速の粒子系シミュレーションソフトウェア開発フレームワーク開発に世界で初めて成功 本研究グループが開発している粒子系シミュレーションソフトウェア開発フレームワーク「FDPS」は、世界で初めて、並列化を意識しないで書かれたユーザープログラムを「京」のような世界トップレベルのスパコンで高効率で動作させることに成功した。「京」では、重力多体問題、重力+流体の複合問題の両方で、「京」全系までで性能がスケールし、50%を超える実行効率を達成した。さらに、GPGPUシステムにも適応し、アプリケーション開発言語もC++の他にFortranもサポートした。さらに、メモリーコア、アクセラレータだけでなく、ヘテロニアスマルチコアシステムでも効率のよい実行ができるような改良を進めている。

FDPSはさまざまな大規模シミュレーションに利用されるようになってきており、月形成の最有力モデルである巨大衝突の世界最大規模のシミュレーション(図)や、世界で初めての小惑星周りのリングのフルシミュレーション等、従来不可能であった研究を可能にしている。



月形成の最有力モデルである巨大衝突の世界最大規模のシミュレーション



複合系気候科学研究チーム

Computational Climate Science Research Team

チームリーダー 富田浩文 htomita@riken.jp

チーム・ウェブサイト <https://climate.aics.riken.jp/top.htm>

渦解像気候計算の全球適用に向けた 気候科学研究と数値気象ライブラリの開発

「京」に代表される大型計算機の出現により、1kmを切る格子サイズの全球雲解像モデルによる、地球全体の大気のシミュレーションが可能となった。一方で、全球雲解像モデルでは、大気の運動や雲の生成に影響する「格子サイズよりも小さな現象」を直接計算することができないため、これらに伴う計算結果の不確実性を軽減すべく、更なるモデル化を行っている。それは計算結果の不確実性につながる。将来的には、より確実な指導原理に基づく全球渦解像モデルに移行していくことで、モデル化の違いによる不確実性は低減すると見込まれる。しかしながら、将来の全球渦解像計算への道のりはまだ遠く、次のような課題を克服しなければならない。渦解像スキームにおける解像度依存性の把握と解の収束性の検証、実際の大気を対象とした計算のための新たな理論やスキームの構築、各物理過程の精緻化と高速計算アルゴリズムの開発、大規模計算の解析のためのポスト処理ライブラリの開発などである。我々は、全球渦解像計算実現へ向けて、理想的な状況下における雲の階層構造や気候学的多重平衡解の探索、実際の現象を対象とした地域気候研究といった複数の科学的課題に取り組んでいく。

チームリーダー略歴

- 1999 東京大学大学院工学系研究科修了、博士（工学）
- 1999 地球フロンティア研究システム（後の地球フロンティア研究センター）研究員
- 2007 地球フロンティア研究センター（現 海洋研究開発機構）主任研究員
- 2011 AICS複合系気候科学研究チーム チームリーダー（現職）

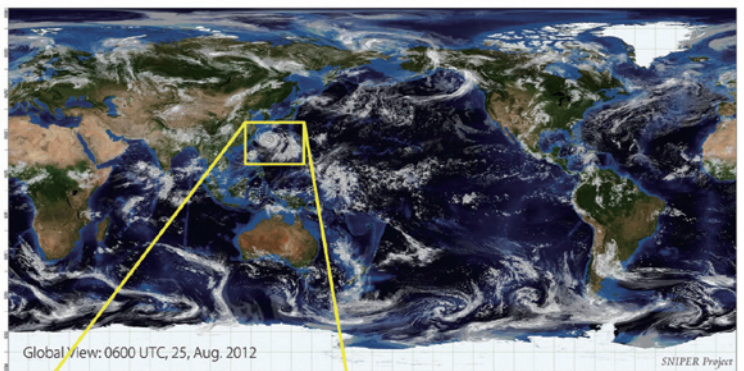
主要論文

1. Yoshida, R., S. Nishizawa, H. Yashiro, S. A. Adachi, Y. Sato, T. Yamaura, and H. Tomita (2017): CONeP: A cost-effective online nesting procedure for regional atmospheric models, *Parallel Computing*, 65, 21-31, doi: 10.1016/j.parco.2017.04.004.
2. Nishizawa, S., H. Yashiro, Y. Sato, Y. Miyamoto, and H. Tomita, 2015, Influence of grid aspect ratio on planetary boundary layer turbulence in large-eddy simulations, *Geosci. Model Dev.*, 8, 3393-3419, doi:10.5194/gmd-8-3393-2015.
3. Miyamoto, Y. and Y. Kajikawa, R. Yoshida, T. Yamaura, H. Yashiro and H. Tomita (2013): Deep moist atmospheric convection in a sub-kilometer global simulation, *Geophys. Res. Lett.*, doi:10.1002/grl.50944.

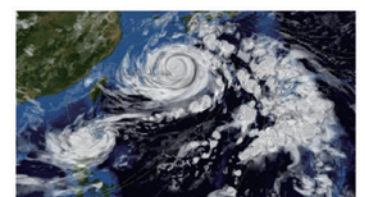
おもな研究成果

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 我々は、全球雲解像モデルを用いて、水平格子サイズ 1km を切る解像度での全球大気のシミュレーションを世界で初めて行った。高い空間解像度での実験を行うことで、積乱雲などの対流を複数の格子で表現できるようになった。格子サイズが 2km 以下となると、モデルの中で再現される積乱雲が現実に近い、再現性が向上することが示された。この研究により、モデル内で雲を直接解像することが可能となったが、さらに結果の不確実性を排除し、現象の収束性を示すためには、より高い解像度での渦解像モデルによる研究に取り組んでいく必要がある。

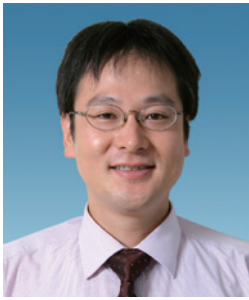
格子間隔：870m



格子間隔 3.5km (比較)



格子間隔 870m での全球大気シミュレーション



複雑現象統一の解法研究チーム

Complex Phenomena Unified Simulation Research Team

チームリーダー 坪倉 誠 mtsubo@riken.jp

複雑・複合現象のシミュレーション技術の構築とその産業界への展開

ものづくりの世界では、流体、熱、構造、音、化学反応などが連成する複雑・複合現象を対象としたシミュレーションが望まれている。これまで、こうした問題には、各現象に対して個別に開発された手法を組み合わせることで対応してきたが、「京」に代表される HPC 環境を活用して手法のさらなる高速化や高精度化をねらう場合、手法間のデータ転送や補間のために、十分な計算性能を引き出せないという問題が生じる。我々のチームでは、「HPC 環境を活用した複雑・複合現象のシミュレーション技術の構築とその高度化利用、産業界への展開」を大きな目標として、統一的数据構造に基づく統合シミュレーションフレームワーク CUBE を研究・開発している。具体的には、①「京」からポスト「京」へと向かう次世代アーキテクチャに対応した手法のさらなる高速化（リアルタイムシミュレーション）と、②実験を超えた実運転環境下での予測の精度向上（リアルワールドシミュレーション）をめざし、③次世代デジタルエンジニアリングを具現化するために、CUBE の多目的最適化を図り、データ同化技術やディープラーニング等を活用して CUBE の利用技術を高度化し、ものづくりの分野でのシミュレーションの可能性をさらに高める。

チームリーダー略歴

- 1997 東京大学大学院工学系研究科 修士（工学）
- 2007 北海道大学大学院工学研究院准教授
- 2012 AICS 複雑現象統一の解法研究チーム チームリーダー（現職）
- 2015 神戸大学大学院システム情報学研究所 教授（現職）

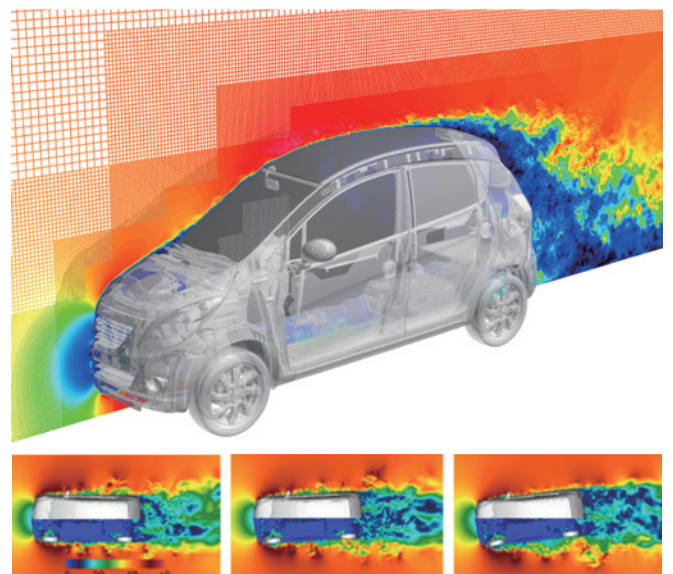
主要論文

1. Chung-Gang Li, Makoto Tsubokura: An implicit turbulence model for low-Mach Roe scheme using truncated Navier-Stokes equations, Journal of Computational Physics, vol.345, pp.462-474, DOI: 10.1016/j.jcp.2017.05.032 (2017)
2. Chung-Gang Li, Makoto Tsubokura, Rahul Bale: Framework for simulating natural convection in practical applications, International Communication in Heat and Mass Transfer, vol.75, pp.52-58, DOI: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2016.03.022 (2016)
3. Keiji Onishi, Makoto Tsubokura: Vehicle Aerodynamics Simulation for the Next Generation on the K computer: Part 2 Use of Dirty CAD Data with Modified Cartesian Grid Approach, SAE International Journal of Passenger Cars - Mechanical Systems, 7(2): 2014-01-0580(2014)

おもな研究成果

空力・車両運動連成シミュレーションにより実運転環境下での自動車高速走行性能評価を可能に 複雑現象統合シミュレーションフレームワーク CUBE に、埋め込み境界法（IBM）に基づくオイラー・ラグランジュハイブリッド移動境界法を実装することで、6軸自由運動する自動車と車体周りの空気の流れを連成させたシミュレーションを可能にした。この手法を用いて、実際に車体開発に用いられている詳細車体 CAD データから、データ修正なしに BCM 階層直交格子を作成し、自動車コーナリング時のタイヤホイールの回転や前輪舵角変化も考慮したリアルワールドシミュレーションを行うことに成功した。

この手法を用いることで、将来的には CAD データから高速走行性能評価を行うことが可能となり、試作車両が存在しない設計上流側で、車両のさまざまな性能を統合的に最適化する新たな自動車ものづくりの可能性を示すことができた。



CUBE を用いた空力・車両運動連成シミュレーション



プログラム構成モデル研究チーム

HPC Programming Framework Research Team

チームリーダー 丸山直也 nmaruyama@riken.jp

高性能計算システム向け プログラミングモデルの研究開発

おもに大規模データ処理、ヘテロジニアスコンピューティング、耐故障性に取り組んでいる。その一つとして「京」などの大規模スーパーコンピュータ向けに最適化された MapReduce の研究開発を行った。これは「京」のノードおよびネットワークアーキテクチャ、また階層的な大規模並列ストレージを有効に活用することによって、高い効率を達成することをねらったものである。また、アプリケーションドメインに特化することで生産性と性能の両立をねらったアプリケーションフレームワークの開発にも取り組んでいる。具体的には、流体計算等に適用可能なフレームワークとして Daino などの開発を行った。また、グラフ処理ベンチマークである Graph500 にも取り組み、「京」の上で高効率に実行するためのアルゴリズムや実装技術の研究開発を行った。

チームリーダー略歴

- 2008 東京工業大学数理計算科学専攻博士課程修了（理学博士）
- 2008 東京工業大学学術国際情報センター 研究員
- 2009 東京工業大学学術国際情報センター助教
- 2012 AICS プログラム構成モデル研究チーム チームリーダー（現職）

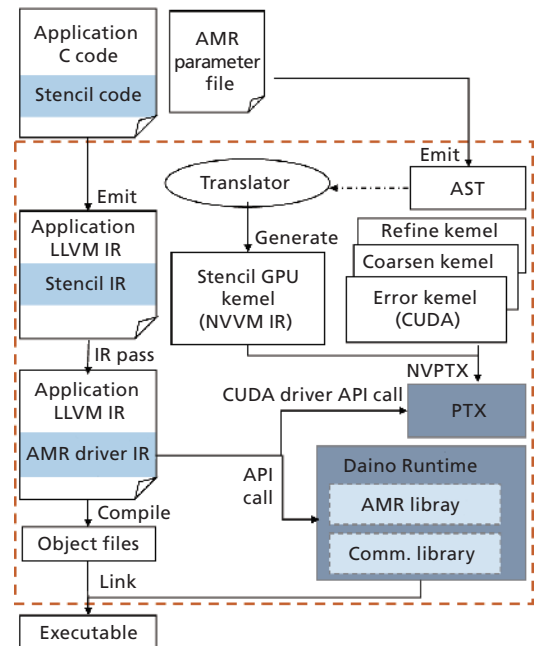
主要論文

- Koji Ueno, Toyotaro Suzumura, Naoya Maruyama, Katsuki Fujisawa, and Satoshi Matsuoka, "Efficient Breadth-First Search on Massively Parallel and Distributed-Memory Machines," Data Science and Engineering, vol. 2, pp. 22-35, 2017.
- Mohamed Wahib, Naoya Maruyama, and Takayuki Aoki, "Daino: a high-level framework for parallel and efficient AMR on GPUs," ACM/IEEE SC'16, 2016. (Best Paper Award)
- Hamid Reza Zohouri, Naoya Maruyama, Aaron Smith, Motohiko Matsuda, and Satoshi Matsuoka, "Evaluating and optimizing OpenCL kernels for high performance computing with FPGAs," ACM/IEEE SC'16, 2016.

おもな研究成果

スパコン向けアプリケーション開発を大幅に容易にする手法を開発

アプリケーションフレームワークに関する研究の一つとして適合格子細分化法（AMR）向けフレームワークの研究開発を行った。AMR は必要な計算およびメモリ使用量を大幅に削減できるため、シミュレーションの高速化に有効である一方、大規模なスーパーコンピュータで用いるには、データの移動を無駄なく効率よく行うプログラムなどの開発が必要であり、シミュレーションソフトウェアの開発においてさまざまな技術的課題があった。我々は新しいソフトウェア技術を開発し、大規模なスーパーコンピュータ上で簡単に適合格子細分化法を利用できる環境を実現した。開発したソフトウェアは、プログラムの自動的な変換技術に基づき、従来必要であった煩雑なプログラミングや最適化の多くを自動化し、これによって、シミュレーションソフトウェアの開発コストを大幅に削減することが可能である。GPU などのアクセラレータを用いたスーパーコンピュータは性能や省電力に優れるものの、そのプログラミングの手間から使い勝手は劣る点が問題であったが、開発した手法を用いることで、一般的な適合格子細分化法の利用においては、この問題を解決することができることを示した。



Daino フレームワーク概要 [Wahib2016]



可視化技術研究チーム

Advanced Visualization Research Team

チームリーダー 小野謙二 keno@riken.jp

大規模並列シミュレーション実行をサポートする技術を開発

シミュレーションを実行し、その結果から意味のある情報を引き出し、現象の理解や設計プロセスへのフィードバックを行うためには、その核となるシミュレータ以外にも周辺技術が重要な役割を果たす。そうした必須の周辺技術としては、例えば、計算格子生成や可視化、データ I/O 処理などがある。高精度化や高速化のためにシミュレーション自体が大規模並列になると、それに合わせて周辺技術の大規模並列化が必要となる。これらの点を考慮し、当研究チームでは、シミュレーションをサポートする周辺技術の大規模並列対応技術やライブラリ・アプリを開発し、コミュニティへ展開することにより、「京」での実用的なシミュレーションの促進に貢献する活動を展開してきた。

これまでに開発したおもなソフトウェアには、①大規模並列可視化システム (HIVE)、②性能モニタライブラリ (PMLib)、③性能可視化システム (TRAIL)、④並列 I/O ライブラリ (xDMLib)、⑤ワークフローシステム (WHEEL) などがある。これらのソフトウェアは、「京」ではもちろん、一般的なシステムやポスト「京」でも動作するように設計されている。また、ポータビリティやソフトウェアライフサイクルにも配慮し、長期間にわたるサポートをめざしている。

チームリーダー略歴

- 1990 日産自動車株式会社中央研究所 (後に総合研究所) 車両研究所
- 2000 熊本大学大学院自然科学研究科 生産システム科学専攻修了
- 2012 AICS 可視化技術研究チーム チームリーダー (現職)
- 2016 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授 (現職)

主要論文

- Daisuke Sakurai, Hamish Carr, Kenji Ono, Jorji Nonaka, and Tomohiro Kawanabe, "Flexible Fiber Surface: A Reeb-Free Approach," Topology-Based Methods in Visualization 2017 (TopoInVis 2017), Tokyo, Japan, 2017.
- Jorji Nonaka, Kenji Ono, Chongke Bi, Daisuke Sakurai, Masahiro Fujita, Kentaro Oku, and Tomohiro Kawanabe, "HIVE: A Visualization and Analysis Framework for Large-Scale Simulations on the K Computer," 9th IEEE Pacific Visualization Symposium (PacificVis 2016), Taipei, Taiwan, 2016 (Poster).
- Chongke Bi and Kenji Ono, "2-3-4 Combination for Parallel Compression on the K Computer," IEEE Pacific Visualization Symposium (PacificVis 2014), Yokohama, Japan, pp. 281-285, 2014.

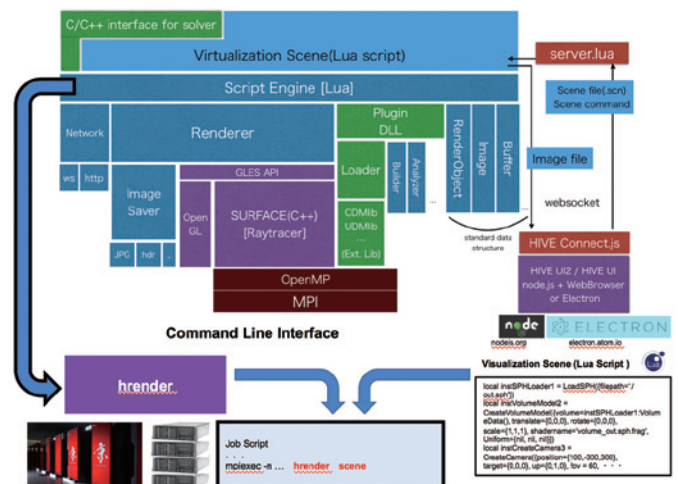
おもな研究成果

多様な利用モードをもつ大規模並列可視化システム 可視化は、数値計算プログラムとは異なり、利用者によってその利用方法が大きく変わるため、可視化分析の標準的な処理手続きはない。当研究チームでは、HPC 環境に含まれるヘテロジニアスなハードウェアを考慮し、大規模並列可視化システム HIVE を開発した。HIVE は、ローカル / リモート、バッチ / インタラクティブ、ポスト / in-situ などさまざまな使い方をサポートする。

HIVE にはレンダラーとして、高並列時に効率のよい並列レイトラーサーを用いた。従来のレンダラーとは異なり、ユーザが作成したフラグメントレベルのシェーダープログラム (OpenGL ES Shading Language 2.0 で記述) を導入でき、画像の品質や表現力を高めることができる。また、レンダリングパイプラインを GUI で構築することにより、所望のイメージを描画できる柔軟性ももちあわせている。

スケーラブルな画像重畳ライブラリを介して、分散したデータから各プロセスが生成した部分画像データを集めて重畳するソートラスト型の並列化技術により、「京」の全ノードを用い、

高いスケーラビリティと 32k 画像のイメージ作成にも成功している。今後、機能増強や対応するデータ構造の追加を随時行っていく予定である。



HIVEのソフトウェア・アーキテクチャー



データ同化研究チーム

Data Assimilation Research Team

チームリーダー 三好建正 takemasa.miyoshi@riken.jp

チーム・ウェブサイト <http://www.data-assimilation.riken.jp/>

シミュレーションと実測データを融合する データサイエンス

データ同化は、シミュレーションと実測データとを融合し相乗効果を生み出す学際的科学で、力学系理論や統計数理に基づくデータサイエンスである。計算機が高度化しシミュレーションが精緻になるほど、実際に観測されたデータとシミュレーションとを突き合わせ、これらを融合することの意義・効用が増す。当研究チームでは、シミュレーションと実測データを最も効果的に融合することをめざし、高度なデータ同化手法やデータ同化の幅広い応用に関する先端研究に取り組む。特に、高性能なスーパーコンピュータによる「ビッグシミュレーション」と新型センサから得られる「ビッグデータ」を生かすための効率的かつ高精度なデータ同化に向けたチャレンジに取り組む。具体的には、①効率的かつ高精度なデータ同化に向けた基礎理論やアルゴリズム研究、②「京」および新型センサによる「ビッグデータ」を生かしたデータ同化の理論・応用研究、③幅広いシミュレーション領域への新たなデータ同化応用を探る探索研究に取り組んでいる。これらの先進的なデータ同化研究により、シミュレーションの可能性を広げ、高性能スーパーコンピュータの有効活用につなげていく。

チームリーダー略歴

- 2000 京都大学理学部卒業
- 2000 気象庁総務部企画課
- 2005 メリーランド大学気象学博士課程修了
Ph.D. 学位取得
- 2011 メリーランド大学 Assistant Professor
- 2012 AICS データ同化研究チーム
チームリーダー（現職）

主要論文

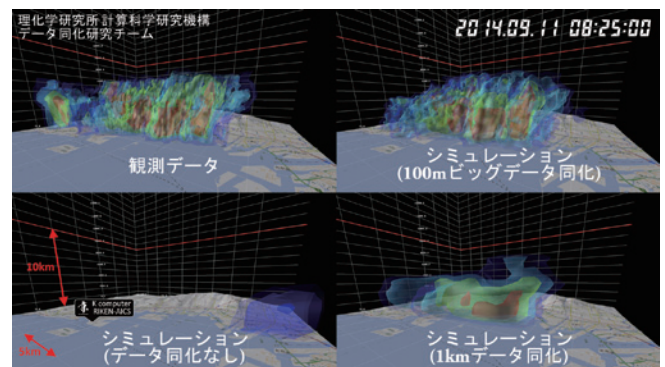
- Miyoshi, T., G.-Y. Lien, S. Satoh, T. Ushio, K. Bessho, H. Tomita, S. Nishizawa, R. Yoshida, S. A. Adachi, J. Liao, B. Geroft, Y. Ishikawa, M. Kunii, J. Ruiz, Y. Maejima, S. Otsuka, M. Otsuka, K. Okamoto, and H. Seko, 2016: "Big Data Assimilation" toward Post-peta-scale Severe Weather Prediction: An Overview and Progress. Proc. of the IEEE, 104, 2155-2179. doi:10.1109/JPROC.2016.2602560
- Miyoshi, T., M. Kunii, J. Ruiz, G.-Y. Lien, S. Satoh, T. Ushio, K. Bessho, H. Seko, H. Tomita, and Y. Ishikawa, 2016: "Big Data Assimilation" Revolutionizing Severe Weather Prediction. Bull. Amer. Meteor. Soc., 97, 1347-1354. doi:10.1175/BAMS-D-15-00144.1
- Miyoshi, T., K. Kondo, and K. Terasaki, 2015: Big Ensemble Data Assimilation in Numerical Weather Prediction. Computer, 48, 15-21. doi:10.1109/MC.2015.332

おもな研究成果

「京」と最新鋭気象レーダを生かしたゲリラ豪雨予測ー「ビッグデータ同化」を実現、天気予報革命へー スーパーコンピュータを使った天気予報シミュレーションは、通常 1km より粗い解像度で、1 時間ごとに新しい観測データを取り込んで更新する。しかし、ゲリラ豪雨の場合、わずか数分の間に積乱雲が急激に発生・発達するため、1 時間の更新間隔では予測が困難だった。また、1km より粗い解像度では、ゲリラ豪雨を引き起こす積乱雲を十分に解像できなかった。我々は、「京」と、最新鋭のフェーズドレイ気象レーダの双方から高速に得られる膨大なデータを組み合わせることで、解像度 100m で 30 秒ごとに新しい観測データを取り込んで更新する、空間的・時間的に桁違いの天気予報シミュレーションを実現し、実際のゲリラ豪雨の動きを詳細に再現することに成功した。

天気予報の根幹をなすのは、シミュレーションと実測データを組み合わせる「データ同化」である。次世代の高精細シミュレーションと高性能センサを組み合わせる革新的な技術により、

「ビッグデータ同化」を実現した。解像度 100m で 30 秒ごとという桁違いなデータを生かすデータ同化は本研究が初めてである。この技術を生かすことで、将来、これまで想像もつかなかったような超高速かつ超高精細な天気予報が可能になり、天気予報に革命をもたらすことが期待される。



2014年9月11日午前8時25分の神戸市付近における雨雲の分布



総合防災・減災研究ユニット

Computational Disaster Mitigation and Reduction Research Unit

ユニットリーダー 大石 哲 satoru.oishi@riken.jp

ユニット・ウェブサイト <http://bosai.riken.jp/>

地震・津波・気象・河川・土砂災害の大規模数値シミュレーション

当研究ユニットは、神戸市や兵庫県内の実際の都市を対象に地震・津波と豪雨などの極端気象現象、河川災害や土砂災害といった災害やそれらの複合災害の大規模数値シミュレーション手法の開発と実施を行うことを目的としている。

実際の都市を対象にした数値計算を行うためには実際の都市のようすを数値や数式にする必要がある。それを数値都市構造モデルと呼ぶ。都市は設計図がある建物や橋だけでなく、地面の下で長い年月をかけて構成された上下水道・地下鉄・地下街などのインフラ施設から成り立っている。このような複雑な都市の状況を数値構造モデルとして再現するための手法を開発している。

また、地盤の状況は複雑で、液状化や斜面での土砂災害といった地盤災害を数値計算にすることは困難だった。当研究ユニットは、地盤工学分野でも新しい解析手法の開発を通して大規模計算に挑戦している。

これらの先端的技术を組み合わせて、多数の震源や種類の異なる気象状況を考慮したマルチシナリオシミュレーションや、地震・津波の後の台風襲来などの複合型災害のシミュレーションによって想定外のない災害シミュレーションに挑戦している。さらに、数値シミュレーションの成果が防災・減災に役立つよう、「行政と科学」の橋渡しとなることをめざしている。

ユニットリーダー略歴

- 1993 京都大学大学院工学研究科修士課程土木工学専攻修了
- 1998 博士(工学) 京都大学
- 2000 山梨大学助教授(2007年より准教授)
- 2009 神戸大学教授
- 2017 AICS 総合防災・減災研究ユニット
ユニットリーダー(現職)

主要論文

1. Chen, J., Supprasert, S., O-tani, H., Fujita, K., Wijerathne, L. and Hori, M.: "On elastic waves in granular assemblies: from a continuumization viewpoint," *Mechanics of Materials*, 109, 101-113, (2017).
2. Hori, M., Wijerathne, L., Chen, J. and Ichimura, T.: "Continuumization of Regularly Arranged Rigid Bodies," *Journal of JSCE*, 4(1), 38-45, (2016).
3. Chen, J., Takeyama, T., O-tani, H., Fujita, K. and Hori, M.: "A Framework for Assessing Liquefaction Hazard for Urban Areas Based on Soil Dynamics", *International Journal of Computational Methods*, 13, 1641011, (2016).

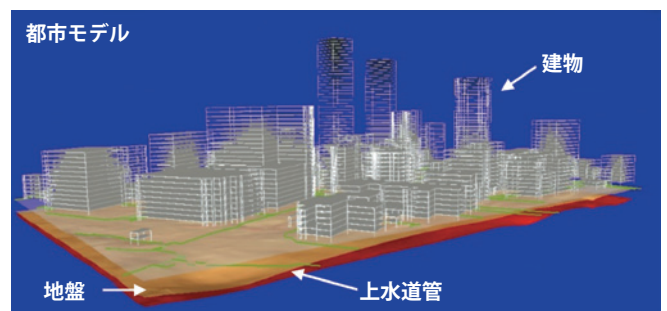
おもな研究成果

大規模シミュレーションに基づく次世代ハザードマップの作成

当研究ユニットでは、大規模数値シミュレーションに基づき、兵庫県内の4都市の南海トラフ地震に対する次世代ハザードマップを作成した。従来のハザードマップは、想定される南海トラフの地震動に対して得られる震度などから単純な数値シミュレーション手法と経験式を用いて計算された結果であった。しかし、次世代ハザードマップは、地震動が地盤を通過する際の伝搬および増幅過程を取り込み、また、都市を構成する建物の応答過程を経験的ではなく物理的に解くことによつてつくられている。すなわち、従来は計算対象外であった地震波の伝搬や応答といった素過程を詳細に取り込んでいるので、地震の規模に対応して被害の規模を予測する fragility 曲線 (fragility curve) そのものを陽に計算していることになる。

次世代ハザードマップのもととなっている数値シミュレーションには二つの特筆すべき科学的進歩が含まれている。一つは、「京」だからこそ可能になった大規模な都市まるごとの数値シミュレーションである。100km²の都市の地盤や構造を一体

的に解くために「京」のフル性能を駆使して計算を行っている。この成果によって、高性能計算の権威ある賞であるゴードン・ベル賞のファイナリストに選ばれた。もう一つは、実在の建物を数値シミュレーションに取り込むために数値化・数式化する手法である。GIS データや行政データは数値シミュレーションに必要な形態をもっているわけではないので、詳細な数値シミュレーションに必要な建物の柱の数や壁や床の厚さといった情報を生成する手法を開発している。



数値都市構造モデル



計算構造生物学研究ユニット

Computational Structural Biology Research Unit

ユニットリーダー **Florence Tama** florence.tama@riken.jp

統合的構造生物学のための新手法と 計算ツールの開発

タンパク質や RNA からなる生体分子複合体は重要な生物機能を果たしており、それらの異常はさまざまな疾患を引き起こす。疾患を理解し、治療法を開発するには、機能発現のメカニズムを理解する必要があり、そのためには生体分子の 3 次元構造を知る必要がある。さらに、生体分子は機能発現の際、形を変えるので、動的な要因も考慮しなければならない。

生体分子の構造は一般的には実験によって得られている。構造決定手法の一つ、X 線結晶構造解析法は、高解像度の構造情報を与えるが、必要な生体分子の結晶を得ることは非常に難しい。クライオ電子顕微鏡法（クライオ EM）は、多数の 2 次元電顕画像から 3 次元構造を再構成する。低解像度だが、大きな複合体を扱え、運動に関する情報を得ることができ、結晶構造解析にはない利点がある。さらに新しい手法の X 線自由電子レーザー（XFEL）では非常に高い強度の X 線を用いて、結晶ではなく 1 個の分子の構造を描き出せる可能性がある。

当研究ユニットでは、クライオ EM と XFEL の実験データから 3 次元構造とダイナミクスを決定するための計算ツールを開発している。それらを、「京」やポスト「京」で大規模データ解析に使用するとともに、科学コミュニティに提供する。それにより、生理学的に重要な生体分子について、既存技術では得られない構造とダイナミクスの新しい知見が得られると期待される。

ユニットリーダー略歴

- 2000 フランス・ポールサバティエ大学計算生物物理学 Ph.D.
- 2001 米国スクリプス研究所博士研究員
- 2006 米国アリゾナ大学助教授
- 2013 AICS 計算構造生物学研究ユニットユニットリーダー（現職）
- 2015 名古屋大学大学院理学研究科教授

主要論文

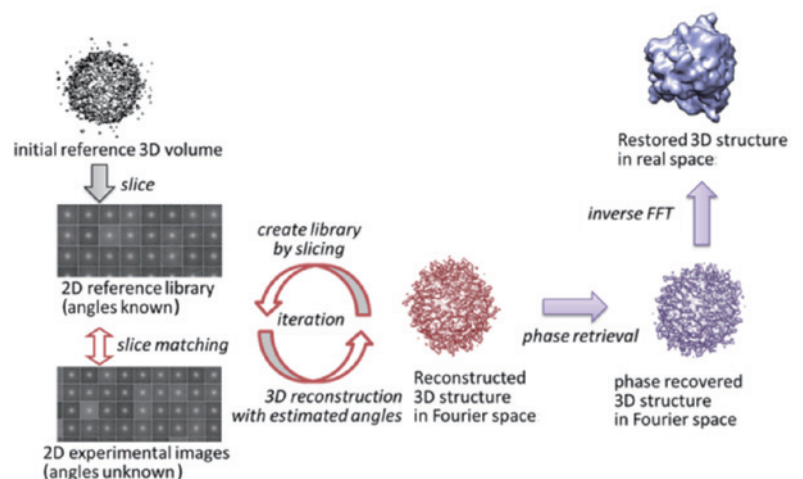
1. M. Nakano, O. Miyashita, S. Jonic, C. Song, D. Nam, Y. Joti and F. Tama. "Three-dimensional reconstruction for coherent diffraction patterns obtained by XFEL". *J. Synchrotron Rad.* 2017
2. O. Miyashita, C. Kobayashi, T. Mori, Y. Sugita, F. Tama. "Flexible Fitting to Cryo-EM Density Map using Ensemble Molecular Dynamics Simulations". *J. Comp. Chem.* 2017
3. A. Tokuhisa, S. Jonic, F. Tama and O. Miyashita. "Hybrid Approach for Structural Modeling of Biological Systems from X-ray Free Electron Laser Diffraction Patterns". *J. Struct. Biol.* 2016

おもな研究成果

XFEL 回折データから 3 次元構造再構成 XFEL の強力 X 線源により、生体分子の新しい情報、特に 1 分子の構造が得られる可能性がある。ただし、現在の実験条件では、X 線結晶構造解析法のような 1 原子解像度はまだ達成されていない。このため、より一般的な利用に向けた実験技術の検討が進む一方で、データ解析のための計算アルゴリズムの開発が行われている。特に、XFEL の実験で得られる 2 次元の回折パターンから、生体分子の 3 次元構造を再構成するには、レーザービームの入射角を推定するための計算アルゴリズムが必要である。

我々は、単粒子 3 次元クライオ EM の画像生成に広く使われている XMIPP をもとに、XFEL のデータ解析のためのプログラムパッケージを開発してきた。XMIPP は実空間の 2 次元データを扱うように設計されているので、ルーチンの一部をフーリエ空間の 2 次元データを扱うように改良した。反復法により各画像の生体分子の配向を推定し、3 次元構造因子振幅を再構成

する。また、実空間の 3 次元モデルは位相回復により得られる。この手法を、ナノ粒子からの XFEL 回折パターンに似た実験データに適用することに成功している。



3 次元構造再構成の手順

人材育成

理化学研究所 計算科学研究機構（理研 AICS）は、日本の計算科学技術の発展に中心的な役割を担っており、この活動を通じて得た先進的な技術・知見を積極的に活用し、関係機関と連携して、計算科学技術を支える人材の育成を推進しています。

主に、大学院生、若手研究者、企業技術者等を対象とした人材育成事業を行い、

- 計算科学および計算機科学の連携・融合を図れる人材の育成
- 高度な計算科学技術を使いこなせる人材の育成
- 産業界をはじめとした高度な計算科学技術の利活用推進に寄与する人材の育成 をめざしています。

AICS のスクール、ワークショップ

AICS では学生や若手研究者等を対象に、演習を含めたプログラミング等のスクールや、計算科学・計算機科学に関わる多様な研究分野間の交流や国際交流をめざすワークショップを開催しています。^{※1}

RIKEN AICS HPC International Internship Program ^{※2} (2-3 月応募・6-10 月頃実施)

海外機関に在籍する Ph.D を対象に、2017 年度から実施しているプログラムです。例年 6～10 月にかけて、1～3 か月の実習期間で実施しています。



RIKEN AICS HPC 計算科学 Internship program (5-6 月応募・8-9 月実施)

国内在住の高専、大学院の学生を対象に実施しているプログラムです。例年 8～9 月に、2 週間～1 か月の実習期間で実施しています。



RIKEN AICS HPC Youth Workshop ^{※2} (12-1 月応募・2 月開催)

学生・若手研究者を対象に、2016 年度から実施しているプログラムです。英語でのプレゼンテーションやディスカッションを通じて、国際的な場でのコミュニケーション能力や研究発信力の向上と、若手研究者の交流・ネットワークづくりをめざす 3 日間のプログラムです。AICS と連携する海外の研究機関の若手研究者も参加します。



SPRING

International HPC Summer School ^{※2} (1-2 月応募・6 月開催)

日本 (AICS)、欧州、米国およびカナダの機関と共同で、例年 6 月に 5 日間のプログラムで実施しています。HPC 関連分野の第一線の研究者による講義や実習を通して、より広い視点で新たな知見を習得し、同世代の国際的・研究分野横断的な交流を図ります。



SUMMER

RIKEN AICS HPC Summer School ^{※2} (1-3 月応募・6 月開催)

大学院生、Ph.D を対象に、2018 年度から実施予定のプログラムです。計算科学技術分野の最先端研究について、演習を交えて学ぶ 4.5 日間のプログラムです。AICS と連携する海外の若手研究者も参加します。



AUTUMN

KOBE HPC Summer School (6-7 月応募・8 月開催)

学生・若手研究者を対象に、並列計算機を使いこなすために必要な「プログラミング手法の基礎」を習得するスクールです。例年 8 月に 5 日間のプログラムで開催しています。演習を含めた講義の他、「京」を使う研究者が具体的な事例を紹介する講演や「京」および AICS 施設の見学も行います。



WINTER

KOBE HPC Spring School (12-2 月応募・3 月開催)

並列処理の基本と並列計算機を使いこなすためのプログラミング手法（並列計算プログラミング）を学ぶスクールです。例年 3 月に 3 日間のプログラムで開催しています。基礎的な内容を中心とした Summer School に対して、Spring School は中級レベルの内容になります。



※1 応募・開催時期は目安です。年度ごとの事業詳細については、AICS のウェブサイトでご確認ください。

※2 使用言語は英語です。

インターンシッププログラム

AICS ではインターンの受け入れを実施しています。

本プログラムは、将来の高性能計算技術および計算科学を担う人材を育成する事業です。

AICS の研究チームにおける実習・体験を通じて計算科学技術への理解を深め、最先端の計算科学の研究開発に従事する人材をめざしてもらうことを目的としています。

対象

- ・ 国際インターンシッププログラム：海外機関在籍の Ph.D
- ・ インターンシッププログラム：国内の高専生・大学院生（留学生含む）



受け入れ期間

- ・ 国際インターンシッププログラム：概ね6～10月の間で1～3か月の実習
- ・ インターンシッププログラム：概ね8～9月の間で2週間～1か月の実習



理研の受け入れ制度

理化学研究所では、若手研究員を育てるさまざまな制度を設けています。

大学院生向けの制度としては、大学院生リサーチ・アソシエイト制度、国際プログラム・アソシエイト制度があります。また、若手研究者向けの制度として、基礎科学特別研究員制度を推進しています。

■ 大学院生リサーチ・アソシエイト制度

大学院博士（後期）課程在籍者を非常勤として受け入れ、理化学研究所の研究者の指導のもとで研究を行います。

■ 国際プログラム・アソシエイト制度

国内あるいは海外の大学院・研究機関との協定に基づいて、外国籍を有する大学院博士課程の留学生を受け入れ、理研の研究者と連携大学院・機関の研究者が共同で学位取得のための研究指導を行う制度です。

3年を上限として、滞在費や宿舍費等の補助を受けることができます。

■ 基礎科学特別研究員制度

創造性、独創性に富む博士号取得後5年以内の優秀な若手研究者を対象とし、主体的に研究できる場を理研が3年間提供する制度です。自由な発想で自律的に研究を遂行することで、将来国際的に活躍する研究者を育成します。

また、世界に開かれた研究所として、積極的に外国籍研究者を受け入れています。

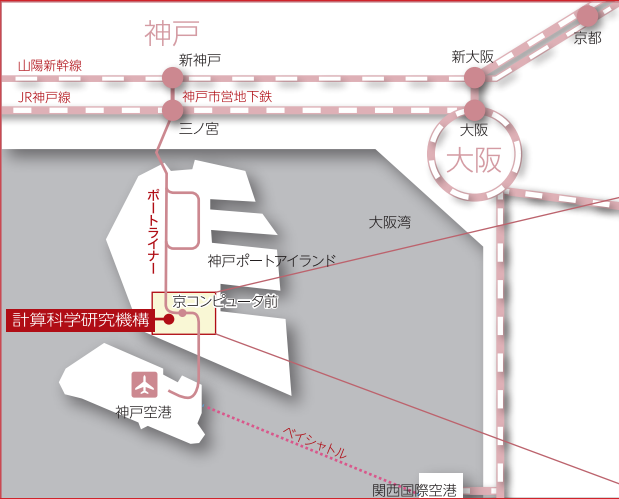
お問い合わせ窓口

計算科学研究推進室（連携促進グループ）
aics-renkei@riken.jp

インターンシップについてはこちら
aics-internship@riken.jp

Computational Science Planning Office（Collabration Group）
aics-renkei@riken.jp

Internship Administrative Office
aics-internship@riken.jp



2017年10月発行

編集発行 国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究推進室

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26

TEL:078-940-5555 (大代表) Fax: 078-304-4964

<http://www.aics.riken.jp/jp/>