

HPCI 戦略プログラム 事後評価結果 (案)

平成 28 年 7 月

特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る

評価委員会

特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）の 評価に係る委員会委員

（平成 28 年 4 月 1 日現在）

- 伊藤 宏幸 （スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 実行委員長／ダイキン工業株式会社）
- 工藤 知宏 （東京大学情報基盤センター 教授）
- ◎高井 昌彰 （北海道大学情報基盤センター センター長）
- 田中 良太郎 （公益財団法人高輝度光科学研究センター 常務理事）
- 辻 ゆかり （西日本電信電話株式会社技術革新部研究開発センター 所長）
- 西島 和三 （持田製薬株式会社医薬開発本部 フェロー／東北大学 客員教授）
- 濱田 政則 （早稲田大学 名誉教授／アジア防災センター センター長）
- 福山 秀敏 （東京理科大学 学長特別補佐（研究担当））
- 藤井 孝藏 （HPCI コンソーシアム 理事長／東京理科大学工学部 教授）
- 山田 和芳 （高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 所長）
- 横山 広美 （東京大学大学院理学系研究科 准教授）
- 吉田 誠 （三菱商事株式会社 シニアアドバイザー）

◎：主査

○：主査代理

（五十音順）

※ 福山委員、藤井委員、横山委員については、HPCI 戦略プログラムにおいて実施機関として参画しているなど利害関係を有するが、本評価委員会はHPCI 戦略プログラムの事後評価及び「京」の中間評価を含め、「京」の総合的な中間検証を行うものであり、HPCI 戦略プログラムの事後評価に対しては直接参画しないことをもって委員として就任している。

H P C I 戦略プログラムの概要

1. 課題実施期間及び評価実施時期

平成 23 年度～平成 27 年度

事前評価 平成 22 年8月、中間評価 平成 26 年2月、事後評価 平成 28 年〇月

2. 研究開発概要・目的

HPCI戦略プログラムは、「京」等を活用したアプリケーション開発及び当該アプリケーションによるシミュレーションによって、「京」の利用を先導して画期的な成果を創出することを旨とした事業である。

社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる5つの「戦略分野」において、

- a. 達成すべき「戦略目標」を定め、その目標に沿った研究開発を推進する。
- b. 我が国の計算科学技術推進体制を構築するため、スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメントや研究支援体制の確立、人材育成と人的ネットワークの形成、研究成果の普及等を図る。

HPCI(理化学研究所の「京」と、国内 11 機関のスーパーコンピュータで構成されるハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)を最大限活用して、重点的・戦略的に取り組むべき研究分野で画期的な成果を創出することを目的とする。

3. 研究開発の必要性等（中間評価時点）

【必要性】

「京」でなければ実現できない大規模シミュレーションにより、独創性・優位性の高い成果を上げており、国内外の大学・研究機関や産業界が結集・連携した研究開発体制が構築されていることから、引き続き必要性は高いと評価できる。

【有効性】

科学的・社会的なブレークスルーをもたらす成果が初めて得られつつあること、幅広い研究者や企業によって高いレベルの研究成果が活用されつつあること、計算科学技術の裾野が拡大しつつあることから、引き続き有効性は高いと評価できる。

【効率性】

「京」の計算資源は成果創出の加速・最大化のためにメリハリをつけた運用がなされていること、企業も含めた幅広い関係者が参画する体制を構築し先端的アプリケーションやノウハウ、人材育成を積極的に提供していること、企業における製品試作数の低減、コスト低減、製品開発期間短縮等につながる成果が得られつつあることから、引き続き効率性は高いと評価できる。

4. 予算（執行額）の変遷

(百万円)

年度	H 2 3	H 2 4	H 2 5	H 2 6	H 2 7	総額
予算額	2,522 ※1	2,517	3,099	2,247	2,022	12,406
(予算額内訳)	戦プロ補助金 ※2 2,468 その他 ※3 55	戦プロ補助金 2,468 (H24 補正予算分は H25 に繰越しのため除外) その他 49	戦プロ補助金 3,058 (H24 繰越し等 486 を含む) その他 40	戦プロ補助金 2,210 その他 38	戦プロ補助金 1,990 その他 32	—
執行額	2,516	2,488	3,065	2,240	2,015	12,325
(執行額内訳)	戦プロ補助金 2,468 その他 49	戦プロ補助金 2,442 その他 46	戦プロ補助金 3,031 その他 34	戦プロ補助金 2,210 その他 31	戦プロ補助金 1,990 その他 26	—

※1 千円単位で計算した後、百万円単位で四捨五入した金額

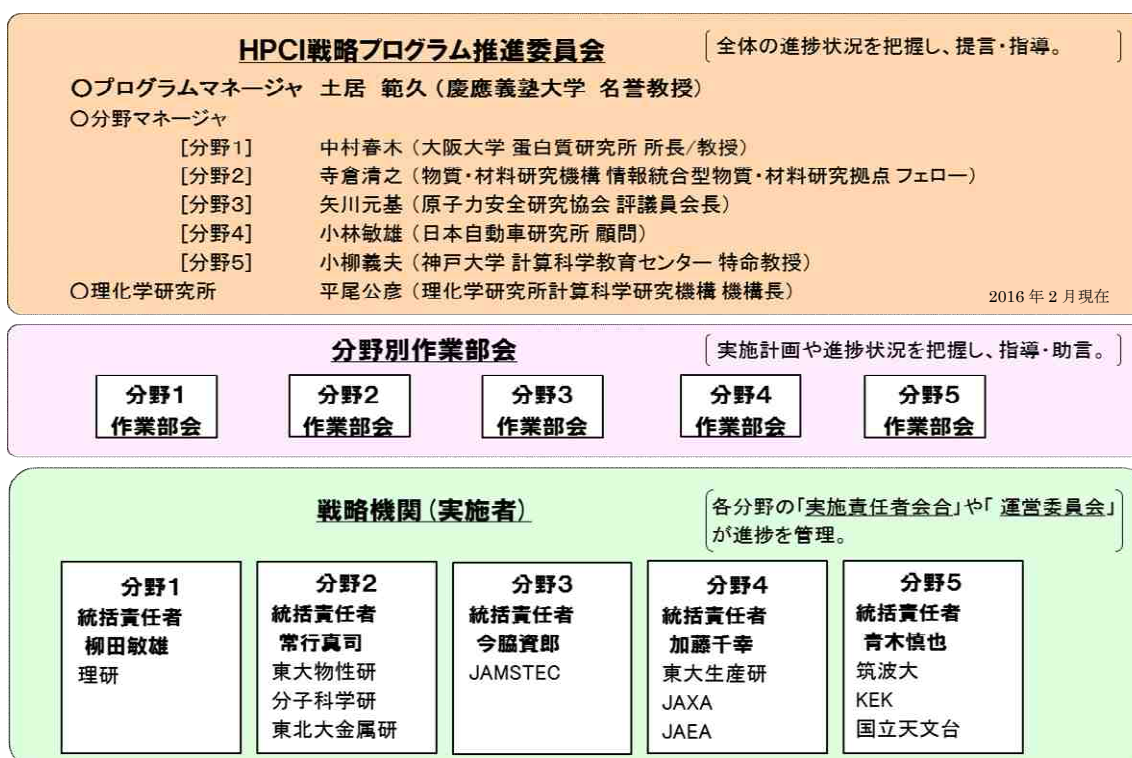
※2 高機能汎用計算機高度利用事業費補助金

※3 非常勤職員手当、事務委託費、委員等旅費、諸謝金等

5. 課題実施機関・体制

○H P C I 戦略プログラム全体の推進体制

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」を設けている。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。



○分野別作業部会 委員

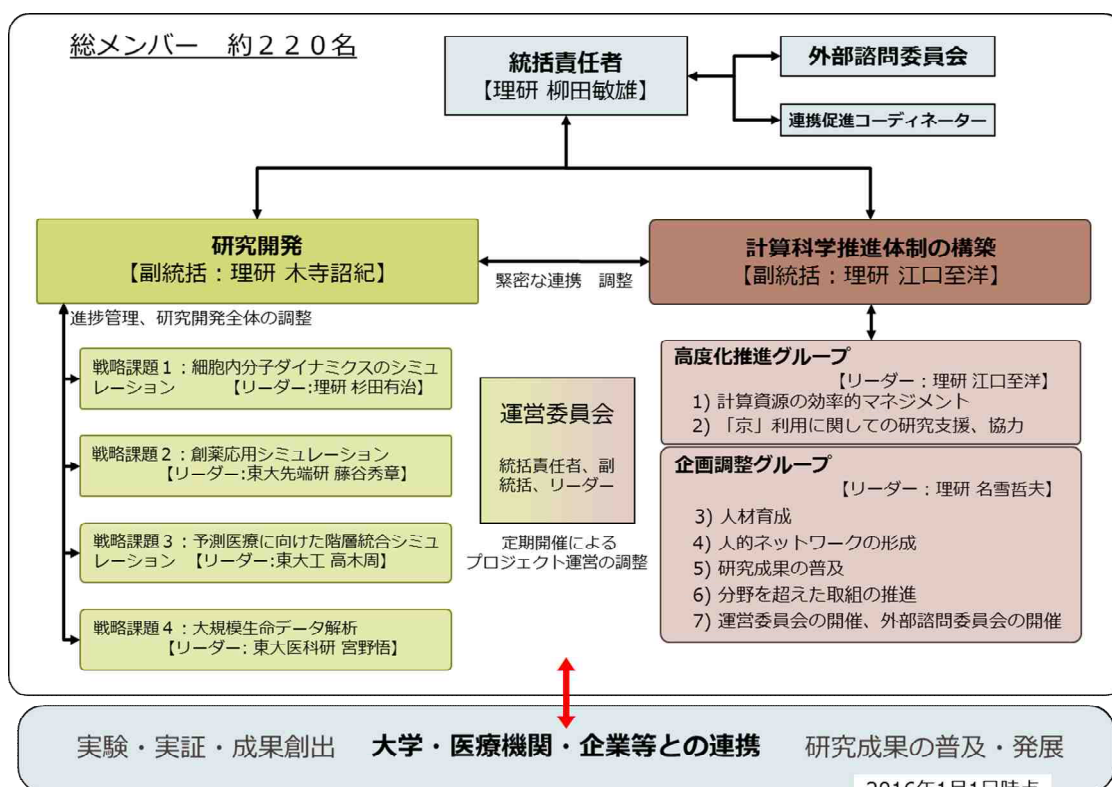
2016年2月現在

分野1	(分野マネージャ) 中村 春木	大阪大学蛋白質研究所所長/教授	分野3(続き)	住 明正	国立環境研究所理事長
	茅 幸二	理化学研究所研究顧問		萩原 一郎	明治大学研究・知財戦略機構・特任教授 先端数理学インスティテュート所長
	児玉 龍彦	東京大学先端科学技術研究センター教授		長谷川 昭	東北大学名誉教授
	菅野 純夫	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授		(分野マネージャ) 小林 敏雄	日本自動車研究所顧問
	長田 重一	大阪大学免疫学フロンティア研究センター教授		天野 吉和	富士通顧問
	松本 洋一郎	理化学研究所理事		奥田 基	一般財団法人高度情報科学技術研究機構 神戸センター副センター長
	美宅 成樹	豊田理化学研究所客員フェロー		押山 淳	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻教授
分野2	(分野マネージャ) 寺倉 清之	物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点フェロー	分野4	笠 俊司	IT技術開発本部技術企画部部長
	栗野 祐二	慶應義塾大学理工学部電子工学科教授		後藤 彰	荏原製作所風水力機械カンパニー理事 企画管理技術統括技術開発統括部長
	幾原 雄一	東京大学大学院工学系研究科総合研究機構教授		澤田 隆	日本工学会(工学系学協会連合)事務局長
	魚崎 浩平	物質・材料研究機構 フェロー		古川 雅人	九州大学大学院工学研究院機械工学部門教授
	加藤 雅治	東京工業大学大学院総合理工学研究科教授		(分野マネージャ) 小柳 義夫	神戸大学計算科学教育センター特命教授
	高梨 弘毅	東北大学金属材料研究所所長		相原 博昭	東京大学大学院理学系研究科教授
	中村 振一郎	理化学研究所社会知創生事業 イノベーション推進センター特別招聘研究員		海老沢 研	宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所教授
分野3	(分野マネージャ) 矢川 元基	原子力安全研究協会評議員会長	分野5	延與 秀人	理化学研究所仁科加速器研究センター長
	鬼頭 昭雄	筑波大学生命環境系主幹研究員		岡 眞	東京工業大学大学院理工学研究科教授
				川合 光	京都大学大学院理学研究科教授
			佐藤 勝彦	自然科学研究機構長	

○分野1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」の実施体制

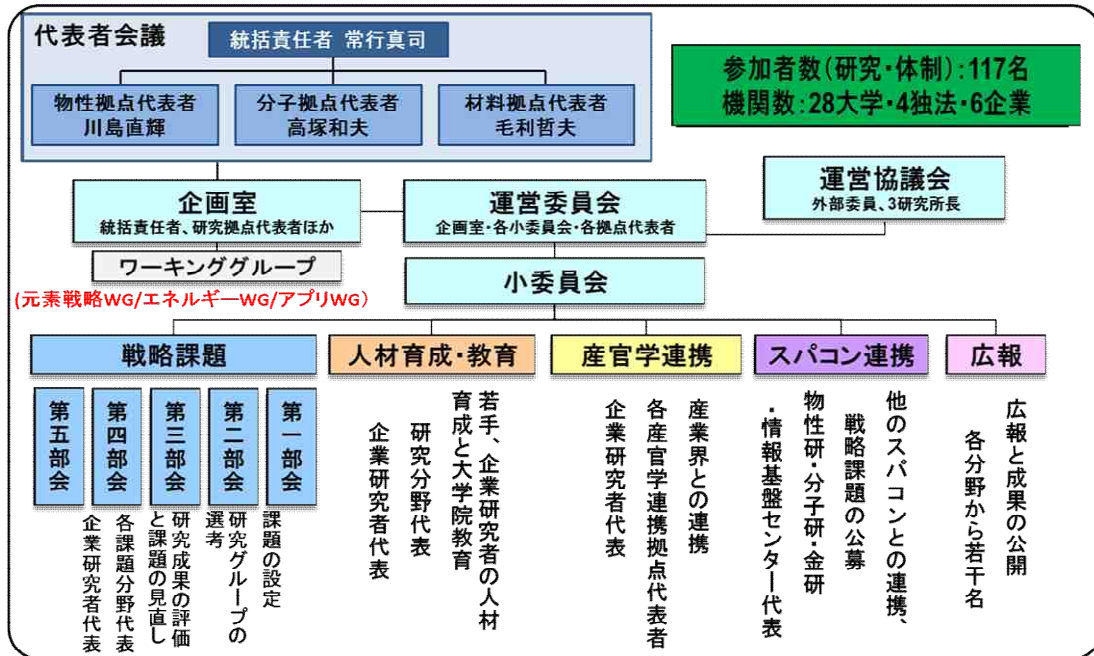
戦略機関：理化学研究所

統括責任者：柳田敏雄（理化学研究所）



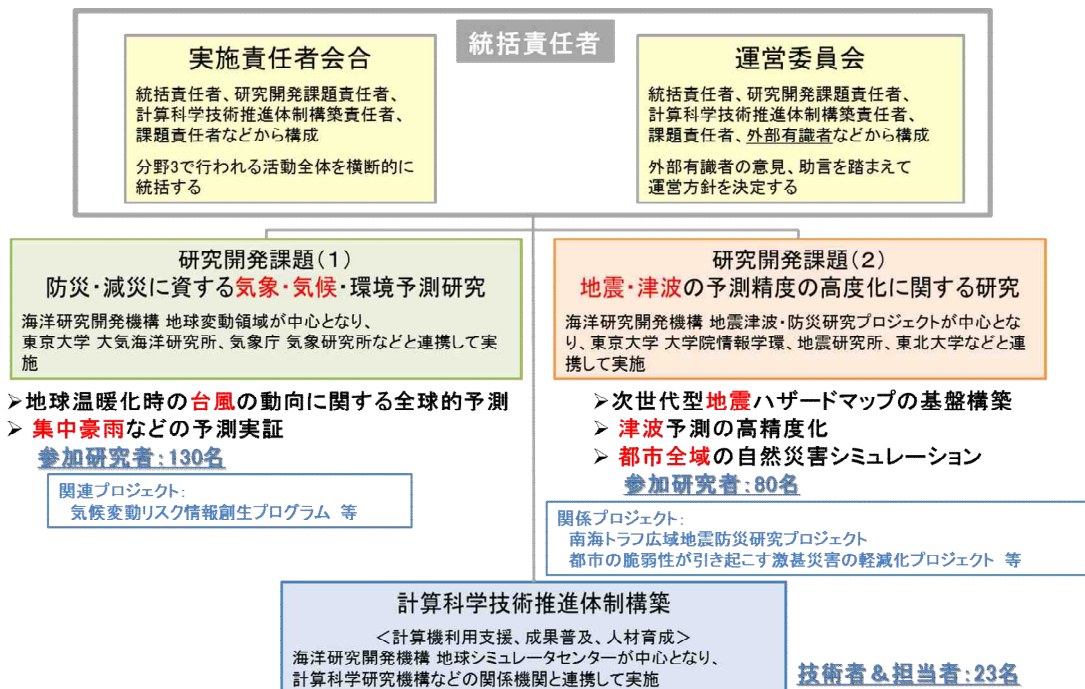
○分野2 「新物質・エネルギー創成」

戦略機関： 東京大学物性研究所〔代表機関〕
 分子科学研究所
 東北大学金属材料研究所
 統括責任者： 常行真司（東京大学）



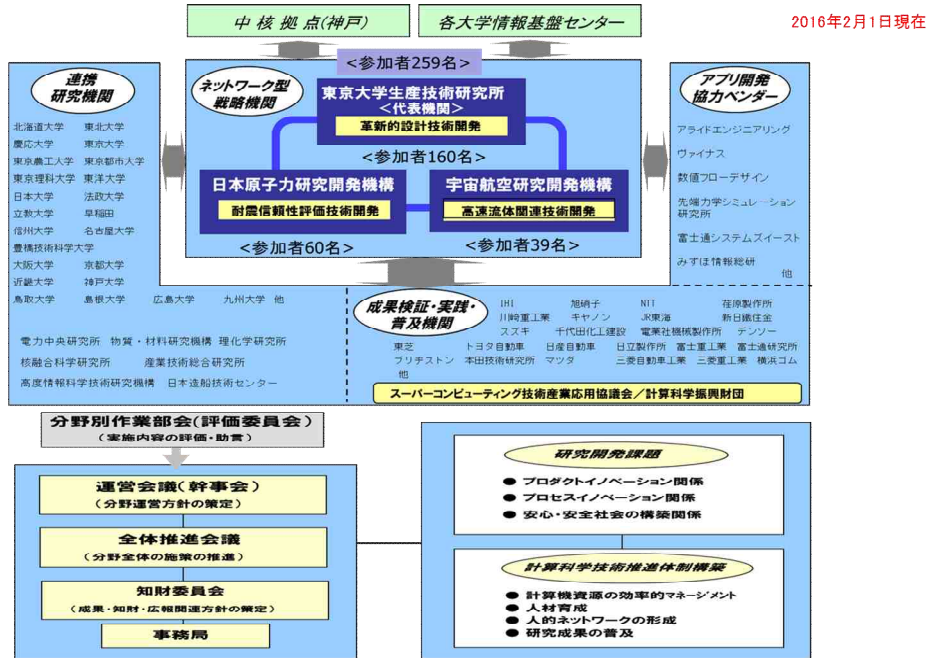
○分野3 「防災・減災に資する地球変動予測」

戦略機関： 海洋研究開発機構
 統括責任者： 今脇資郎（海洋研究開発機構）



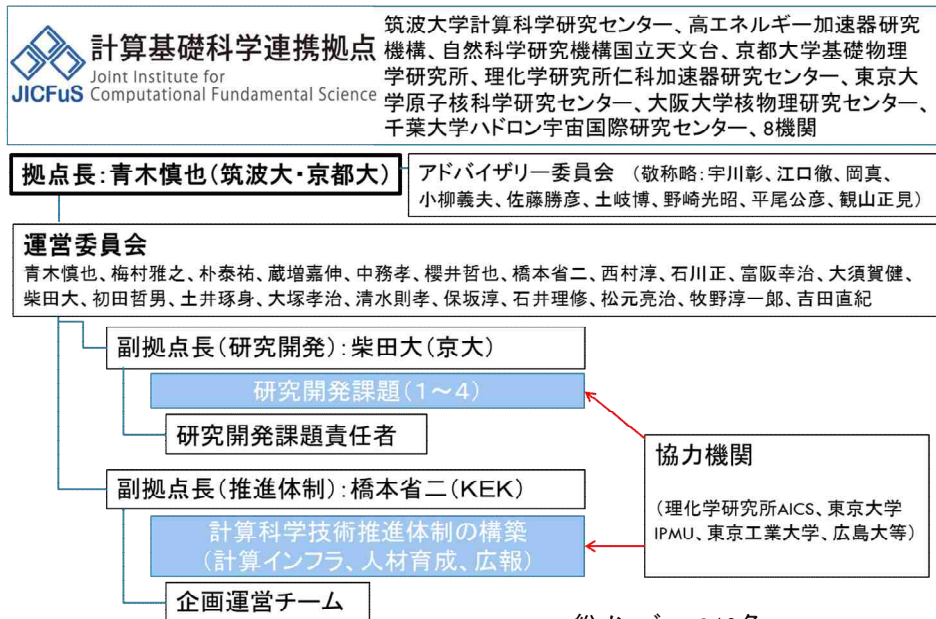
○分野4 「次世代ものづくり」

戦略機関：東京大学生産技術研究所〔代表機関〕
 日本原子力研究開発機構
 宇宙航空研究開発機構
 統括責任者：加藤千幸（東京大学）



○分野5 「物質と宇宙の起源と構造」

戦略機関：筑波大学〔代表機関〕
 高エネルギー加速研究機構
 国立天文台
 統括責任者：青木慎也（筑波大学）



総メンバー: 160名

6. その他

○HPCI戦略プログラムの事後評価は、以下の流れで実施した。

- ① HPCI戦略プログラム推進委員会における自己評価(平成28年2月)
 - ・プログラムマネージャ、分野マネージャ及び理化学研究所計算科学研究機構長からなる「HPCI戦略プログラム推進委員会」(推進委員会)の下の、分野マネージャ及び外部有識者からなる各「分野別作業部会」において、各戦略機関が作成した事後評価に係る自己点検報告書(案)及び補足説明資料について検討。
 - ・その後、推進委員会において、各分野の最終成果についてヒアリングを行い、その結果を踏まえ、各戦略機関において事後評価に係る自己点検報告書を取りまとめ。併せて、分野マネージャのもと、自己点検シートを作成。
 - ・これを踏まえ、推進委員会として、HPCI 戦略プログラム全体としての事後評価に係る点検結果(報告案)及び分野別点検結果(報告案)を作成。

- ② 特定高速電子計算機施設(スーパーコンピューター「京」)に係る評価委員会における評価(平成28年2月～)
 - ・外部有識者で構成される特定高速電子計算機施設(スーパーコンピューター「京」)に係る評価委員会(評価委員会)において、各戦略機関の統括責任者等から成果等についてヒアリングを行うとともに、推進委員会の土居主査から自己評価の結果についてヒアリングを行い、プログラム全体の外部評価を実施し、事後評価結果(案)を取りまとめ。

- ③ 情報科学技術委員会における事後評価(平成28年 月)
 - ・情報科学技術委員会において、評価委員会での評価内容について、文部科学省より説明し、評価を実施。
 - ・当該評価の結果として、事後評価票を作成(予定)。
 - ・その後、研究計画・評価分科会に、事後評価結果を報告(予定)。

事後評価票（案）

（平成28年7月現在）

1. 課題名 HPCI戦略プログラム

2. 評価結果

（1）課題の達成状況

○課題の目標について、全体として着実に達成したと判断する。

○本プログラムの推進においては、プログラムマネージャや分野マネージャ等からなる「HPCI戦略プログラム推進委員会」が全体の進捗状況を把握して提言・指導を行い、その下で、各分野については外部有識者からなる「分野別作業部会」が設けられ実施計画や進捗状況を把握し、研究開発課題の策定を含め強く指導・助言が行われてきた。さらに、各戦略機関（実施者）においては「実施責任者会合」や「運営委員会」が進捗を管理しており、階層的に事業の進捗管理と目標達成状況の確認・評価が行われてきた。

○研究開発については、HPCI（ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ）を最大限活用して成果に結びつけるべく外部有識者による委員会から指導・助言を受けつつ、5つの戦略分野で達成すべき戦略目標を定め、これを具体化した「研究開発目標」（計25目標）において目標に沿った研究開発が推進された。「京」を活用した成果、「京」でなければ成し得なかった成果が多数創出されるとともに、当初想定されていなかった新たな進展があり、科学的発見や成果の社会応用が成された事例も創出された。

○計算科学技術推進体制（各戦略機関を中心として研究支援、人材育成、人的ネットワークの形成、研究成果の普及、スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメント等）については、各戦略分野において、本プログラムの枠を越えた企業や研究機関等との連携・協力体制が構築され、また本プログラムにより企業が参加するコンソーシアムが構築されるとともに、例えば大規模計算科学の手法の高度化により新しい科学技術の潮流を創り出すことに成功するなど、当初の想定以上に機能したと言える。

<参考>

- ・成果発表件数（集計年度末までに登録された論文発表数、シンポジウム件数、新聞・テレビ等での報道件数等の合計）：平成23年度639件、平成24年度933件、平成25年度1430件、平成26年度1177件、平成27年度1131件。
- ・参加機関数：平成25年度216件、平成26年度220件、平成27年度261件。
- ・参加者数：平成25年度1,126人、平成26年度1,165人、平成27年度1,182人。

<必要性>

○全ての戦略分野で本プログラム無しには実現できなかった「京」の利活用を先導する多くの成果が報告された。「京」によって実現した大規模シミュレーションの高い独創性と優

位性を持つ科学的成果及び実用的成果（※）は、本プログラムの必要性を示している。また、一部の戦略分野では他のプロジェクト等（例えば元素戦略プログラム、AMED、ImPACT、CREST など）との連携が積極的に行われ、先導的な研究開発を共同で実施するコンソーシアム（例えば製薬企業9社等が参加するFMO創薬コンソーシアム、企業19社が参加する電気化学界面SIMコンソーシアムなど）が形成されるなど、体制構築において本プログラムが果たした役割は極めて高い。

※「京」でなければ成し得なかった独創的で優位性のある成果例

- ・分子レベルから心臓全体の働きを解析し、医療分野での応用に向けた医療機関等との共同研究が複数進められている。
- ・電池の中の化学反応を原子レベルで解析し、実験グループとの共同研究を経て、充放電の高速化が可能な電解液の開発につながった。
- ・地震の揺れ、津波による浸水だけでなく、都市の建物被害まで解析し、地震ハザードマップの構築に必要な物理過程などのシミュレーション基盤技術を開発した。
- ・走行時における自動車周りの空気の流れを忠実に再現し、車両運動と空力解析の連成により、従来の風洞実験では難しかった横風時の安全性や操縦安定性予測を可能とした。
- ・2つの中性子星の合体を計算で再現し、これまで不明であった鉄より重い元素が合成されることを確認 等

○一方で、最先端のシミュレーションを用いた社会的・科学的課題の解決には、実験を代替することが可能となるより高い再現精度や、極限状態を含む広範な探索範囲から未来や未知の状態を予測することが必要となる。そのため、革新的な科学技術の成果を引き続き創出するためには、実験科学との連携とともに、開発されたシミュレーションの更なる改良や高性能化を進め、計算機科学とも連携・協調して先導的なアプリケーションを開発していくことが課題である。

<有効性>

○各戦略分野で開発された先端的应用ソフトウェアの公開（平成28年6月現在47件）やデータベースの構築（分野4では解析結果200件を公開データベース化、分野5では開発されたコードの共有化体制を構築し世界中の研究者と協力しコンフィギュレーションデータを蓄積・公開）による成果の普及・展開が進められ、また新しい科学技術の潮流の創造事例や国際的に優位性のある成果創出等は本プログラムの有効性を示している。さらに、企業等が独自に実用化（社会実装）や更なる研究開発を進められる環境（アプリケーションの提供と活用支援）が構築（※）されるなど波及効果も認められる。

※研究開発環境の構築事例

- ・創薬コンソーシアムや電気化学界面シミュレーションコンソーシアム等との連携
- ・自治体との連携により、防災計画策定への成果活用が検討できる体制の構築
- ・中小企業も含めた多くの企業との研究開発を進める環境の構築
- ・素粒子・原子核・宇宙分野を融合した研究が進められる拠点の構築 等

○一方で、これまでに構築された推進体制を本プログラムの終了後も進展させていくことが課題であり、今後更に、産業界、自治体・病院等との連携や共同開発・研究支援の強化が必要である。

<効率性>

- 本プログラムの成果は、各研究開発分野や産業界等における実用に道を拓きつつあり、実装の面での効率性を示している。これまで個別に取り組んでいた研究が本プログラムの体制構築により共同研究体制を構築し、また大学等の計算資源も有効利用することで「京」では主に大規模計算を行うなど「京」の計算資源の有効活用が図られ、効率的・効果的に研究開発が推進された。プロジェクトの推進や評価体制について、課題実施者以外の専門家が集まった「HPCI 戦略プログラム推進委員会」は、目標に向けた舵取り役として本プログラムを効率的に推進する観点から効果的であったと言える。
- 一方で、スーパーコンピュータの性能がそれ以前のマシンと比較して、3年ごとに約10倍の計算速度を実現し、時間の経過とともに向上している。その中で、スーパーコンピュータを利用した最先端のサイエンスの成果を得るべく世界的な競争が行われている。本プログラムにより多くの成果が得られたが、研究成果の普及について、大規模・高性能スーパーコンピュータの利用者の裾野拡大という観点からは、今後、更に強化していくことが課題である。

(2) 成果

- 研究開発成果については、全ての戦略分野で、「京」の性能を活かした数多くの成果が創出(※)されており、独創性が高く、優位性にも富んでいると評価できる。
- 「京」の利用を先導し計算科学を様々な分野で進展させるため、「京」の約50%の計算資源が割り当てられ、各分野での体制構築とともに研究開発が進められてきた。
- その結果、計算の高速化のみならず、例えば半導体素子やウィルスの構成タンパク質など、従来のシミュレーションが部分的な計算に限られていたのに対し、「京」ではより高い精度で丸ごと計算することが可能となってきたと言える。

※各分野の具体的な成果事例

- ・分野1では分子レベルから細胞・臓器までを階層的に接続したマルチフィジックス心臓シミュレーションや、細胞内にタンパク質や核酸分子を原子・分子の精密な解像度で取り込み、そのダイナミクスをシミュレートする計算を行い、計測データとの直接比較を実現した。
- ・分野2では量子論に基づくデバイス設計を可能とするナノ構造時空場での電子機能予測や、ウィルスカプシドの全原子分子動力学シミュレーションを実現した。
- ・分野3では1km以下の格子間隔での全球大気シミュレーションや、地盤・建物・避難を連成した都市地震解析を行う統合地震シミュレーションを実現した。
- ・分野4では従来の実験手法に匹敵する自動車実車風洞代替シミュレーションや、曳航水槽試験代替シミュレーションを実現した。

・分野5では重力波の観測を予言できる中性子星合体のシミュレーションや、太陽対流圏シミュレーションを実現した。

○国際会議等での特別講演、招待講演、学術発表論文は多く、アプリケーション分野で最高のゴードンベル賞など計算科学における国際的な受賞がなされており、計算科学のみならず各分野に対する貢献も大きいと評価できる。

○また、医療、創薬等への計算科学の適用は新しい分野と言え、これまで国産ソフトウェアが少なかった中、世界的に先進的な水準の多くの優れたソフトウェアが新たに開発され、これを利用した大規模シミュレーションによって独創的で優れた科学的成果が創出されるとともに、社会に応用された事例も創出された。

○研究開発体制については、170～280名規模の参加者、30～70もの多くの参画機関で構成された体制において、その役割分担と連携は概ね適切に機能したと評価できる。

○「京」の性能を活かした有意義な成果を創出するため、各戦略分野の特色に併せて工夫した体制が構築され、活動が進められた。各統括責任者のリーダーシップにより、例えば個別企業との共同研究や各研究領域を発展させる分野のコンソーシアムを通じた業界全体との連携など、事業開始前の想定を上回った多様な取組みが進展した。各戦略分野では、計算資源の高度利用への支援や効率的なマネジメントに力を入れ、「京」等の有効利用に寄与するとともに、大学や研究機関と連携した教育プログラムの実施(分野2による計算科学技術特論では講義アクセス数が3万件以上)など人材の育成・確保や、各種媒体を用いた情報発信の実施など研究成果の普及・展開についての的確に体制が機能したと評価できる。さらに、各戦略分野ともに、「京」を中心とする大規模計算技術の効用の社会に対する情報発信について独自の工夫を考案し、着実に推進した。

○一方で、「京」においても困難な課題(※)があり、今後、更なる研究開発が必要である。

※「京」においても困難な課題例

- ・薬剤の候補物質の探索のみならず副作用の原因等の分析
- ・臨床データなど医療ビッグデータやゲノム情報などからの個人ごとの健康・疾患予測
- ・被害の相互作用をも考慮した都市全体の防災予測と現実的な避難状況等の予測
- ・人工衛星や高機能レーダーの観測ビッグデータのリアルタイム同化による、高精度な気象予測
- ・数十万原子レベルの電子状態計算や電子の動的な状態・特性から生じる物理現象
- ・超臨界状態の高圧条件下における実機燃焼器内の燃焼解析
- ・航空機の実機・実スケールでの超高精度な非定常解析
- ・素粒子から宇宙まで極端にスケールが異なる現象の精密シミュレーションなど。

○また、今後更に成果を産業界での実利用に繋げていくためには、実験と同等の高い精度の実証や、プログラムの改良などにより、計算の効率化などを行い、企業で利用しているクラスのマシンでも容易に計算できるようにすることが課題である。

○成果の分かりやすい説明については各戦略分野において様々な工夫がなされ、例えば全国各地でのシンポジウムや講演はこれまで140件以上、「京」の見学は4万人以上、中学生向け副読本への掲載、また心臓シミュレーションは世界200カ国以上で約30万回の動

画再生がされるなど、他分野と比べても広報普及活動に力が入れていると認められるが、平成 28 年度に実施する波及効果調査結果等を踏まえつつ、引き続き、関係機関が連携・協力して、海外への展開を含め、分かりやすく説明していく努力が必要である。

(3) 今後の展望

- 本プログラムを通して、ハイパフォーマンス・コンピューティングが生命科学や医療・創薬、新物質や材料、気候予測や防災、ものづくりや設計などにおいて広く貢献することについて、社会的な意識づけが進んだと言える。広報普及活動については、波及効果を含め、成果等を実感できる形で分かりやすく広報し、社会的理解を更に深めていく不断の努力が必要であるが、その際、当該成果等に対する科学者の見解や認識を伝えていくことが効果的である。
- 人材育成について、計算科学と実験科学の両方に精通する人材の育成が課題であり、我が国全体の計算科学技術人材の育成・確保の観点から、ポスト「京」での取組を含め継続的に取り組んでいく必要がある。
- 「京」は、計算科学技術全体を引き上げることで、産業界も含めた利用者を拡大させ、サイエンスやテクノロジーの新たな可能性を切り拓く最先端装置としての役割を担ってきたと言える。計算機性能の向上により、「京」の大規模計算は、将来的には相対的に中小規模の計算になっていくが、画期的な成果を創出するソフトウェア開発を予め進めて、将来的な普及・活用に備えることは、国際的な競争力の確保と成果創出に有意義である。そのため、これまで開発したアプリケーションについて堅牢性や信頼性、利便性の向上などにより更に普及・展開を図るとともに、本プログラムで構築された研究開発体制や各研究領域を発展させる分野のコンソーシアムを、引き続き我が国の先端的な計算科学技術の研究開発の場として有効に機能させていくことが課題である。さらに、これまでの国の投資を効果的に活かすために、ここで開発されたソフトウェアが産業界で幅広くかつ継続的に利用されるよう、ソフトウェアのライフサイクル全般に亘る、普及、維持、改善に向けての対応も重要である。
- シミュレーションは、サイエンスに新たな視点を与える第三の科学的手法であり、極めて重要な基幹技術である。「京」と HPCI 戦略プログラムにより、「予測の科学」とも言うべきものが実現しつつあり、様々な分野の研究開発にシミュレーションを活用したイノベーション創出への期待がもたらされたと言える。また、産業利用上の効果の数多くが「京」により初めて実証された。シミュレーションの対象となる現象の再現精度や探索範囲は、用いられるスーパーコンピュータの性能と、それを生かすアルゴリズムやソフトウェアに依存し、総合的な性能が高いほど精緻かつ広範囲な未知の領域の研究成果を得ることができるものである。
- そのため、「京」においても実現できなかった限界を超えて、世界を先導する画期的な成果を継続して創出していくためには、シミュレーションの高性能化や大規模化を更に進める必要があり、また分野間の更なる連携やこれまであまり取り組まれてこなかった社会経済現象などのチャレンジングな課題への挑戦が必要である。また、その実現には各

種アプリケーションの特性を十分に引き出すことが可能なハードウェアの高性能化の設計や全体的な HPCI システムの構築が必須であり、我が国の研究開発力を更に強化していくことが極めて重要な課題である。

- アプリケーション開発においては、計算速度や計算密度、計算精度を数値で示すことは可能であるが、費用対効果や単位コストを表すことには難しい側面がある。25 課題について、得られた成果とともにターゲットとなるマーケットが整理され、当該分野に対するインパクトのイメージが示されたが、成果の将来的な波及効果を分かりやすく説明することや、目標の達成に対する数値的な指標等については更に工夫していくことが課題である。