

中間評価票（案）

（平成29年12月現在）

1. 課題名 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発

本事業の事前評価は、平成25年8月に「エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト（仮称）」の一部として実施され、「国として着実に推進することが適当」とされたところである。

当該プロジェクトは、ポスト「京」システム開発及びポスト「京」アプリケーション開発から構成されているものであるが、平成28年8月に、これらのうちポスト「京」システム開発について、12か月から最大24か月のスケジュール延伸が公表されるとともに、その中間評価についても平成30年度に実施予定とされた。

これを受け、アプリケーション開発の中間評価について、従前通りのスケジュールで平成29年度に実施したもの。

2. 研究開発計画との関係

施策目標：未来社会を見据えた先端基盤技術の強化

大目標（概要）：超スマート社会サービスプラットフォームの構築に必要となる基盤技術及び個別システムにおいて新たな価値創出のコアとなり現実世界で機能する基盤技術について強化を図る。

中目標（概要）：我が国が世界に先駆けて超スマート社会を形成し、ビッグデータ等から付加価値を生み出していくために、産学官で協働して基礎研究から社会実装に向けた開発を行うと同時に、技術進展がもたらす社会への影響や人間及び社会の在り方に対する洞察を深めながら、中長期的視野から超スマート社会サービスプラットフォームの構築に必要な基盤技術の強化を図る。

重点的に推進すべき研究開発の取組（概要）：

「次世代アーキテクチャと革新的なハードウェアの研究開発」

様々なモノがインターネットにつながるIoT社会を迎えて、多様なニーズに応える革新的な計算環境を構築し、その利用を推進することで、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化、安全・安心な社会の構築に貢献する。

本課題が関係するアウトプット指標：

① 情報科学技術分野における研究開発の論文数、学会発表数

本課題が関係するアウトカム指標：

①社会実装された研究開発のテーマ数

3. 評価結果

(1) 課題の進捗状況

- 中間評価時点における本事業の進捗状況は、おおむね妥当と評価された。
 - 本事業の実施機関においては、文部科学省が開催する委員会での外部有識者による提言・助言に基づき、中間目標、最終目標及び実施計画を策定している。また、実施機関内に設置された委員会等において、それらの進捗管理と達成状況の確認・評価が行われている（(2) <効率性>の欄において詳述）。
 - これにより、実施機関が取り組む合計 60 のサブ課題の進捗については、このうち 20 課題が大幅に達成、39 課題が着実に達成、1 課題がおおむね達成とされ、未達成であるサブ課題はなしとの自己評価がなされている。
 - その結果、本事業では、
 - ・ポスト「京」の特長を生かした超並列・大規模シミュレーション手法の開発の着実な進展
 - ・ Science、Nature 等への論文発表をはじめとする科学的成果の創出
(論文発表数…H27:205 編、H28:476 編、H29 第 1 四半期:121 編、累計:802 編)
(学会発表数…H27:891 件、H28:2、200 件、H29 第 1 四半期:324 件、累計:3、415 件)
 - ・ 計算科学技術の更なる発展に向けた課題である、マルチスケールシミュレーション数値計算の精度保証や全脳シミュレーションといった萌芽的かつチャレンジングな分野における進展
 - ・ 異なる研究分野間での人材交流による融合分野創出に向けた取組の進展等、当初の想定以上の成果が得られつつある。
 - また、それらの成果が産学官で構成されるコンソーシアム等においても利活用される等、本事業の枠組みを超えた取組も精力的になされている。
 - ・ AI 創薬コンソーシアム（製薬企業、IT 企業等 80 団体）
 - ・ KBDD コンソーシアム(※)（製薬企業、IT 企業等 24 団体）
 - ・ 自動車用次世代 CAE コンソーシアム（自動車企業、大学等 20 団体）
 - ・ ターボ機械 HPC 実用化分科会（機械製造企業、大学等 47 団体）
 - ・ 「京」の重点化促進枠が内閣府（防災担当）の長周期地震動による被害予測に活用された好事例等を踏まえた、気象庁と文部科学省との省庁間連携の開始及び気象研究所と国立研究開発法人海洋研究開発機構との研究機関間連携の深化
- ※ “K” Supercomputer-Based Drug Discovery project by biogrid pharma consortium の略

- この他、ポスト「京」によりできる限り早期の成果創出を図るべく、システムとアプリケーションとの協調的な開発（Co-design）が、システムの開発主体である理化学研究所と、各アプリケーション開発実施機関との間とで進められている。なお、Co-design については、ポスト「京」システムの間接評価において評価がなされる予定である。

（２）各観点の再評価

＜必要性＞

評価項目

国費を用いた研究開発としての意義（国や社会のニーズへの適合性、国の関与の必要性・緊急性）

評価基準

ポスト「京」に向けたアプリケーション開発により、独創性、優位性の高い成果が期待できるか。

- 本事業については、事前評価に引き続き、本中間評価においてもその必要性が再確認された。
- 我が国においては、健康長寿社会の実現や防災・環境問題、エネルギー問題への対応が喫緊の課題とされている。一方、そのために必要となる創薬プロセスや地震・津波の再現、新規エネルギー源の探索は、多大なコストがかかるか、若しくは実空間での再現が不可能な現象がほとんどである。
- 本事業は、ポスト「京」を用いた大規模シミュレーションによって、これらの現象の再現を世界にさきがけて可能とするのみならず、将来的に課題先進国としての我が国から、同様の課題を抱える他国への成果展開が見込まれる。以上のことから、国や社会のニーズへの適合性は極めて高い。
- また、事前評価後に策定された第5期科学技術基本計画（平成28年1月閣議決定）において、国は、国連で定められた持続可能な開発目標（SDGs）の達成等を通じ、地球規模課題への対応を行うこととされた。
この中で、例えば地球規模の気候変動に対し、スーパーコンピュータ等を活用した予測技術の高度化を進めることとされており、この観点からも、本事業の必要性は更に高まっていると言える。

※ ポスト「京」によって世界にさきがけた実現が期待される成果例

- 創薬・医療分野
 - ・ 候補物質の探索のみならず副作用の原因も分析する薬剤設計技術
 - ・ 個人の医療計測データを用いたシミュレーション手法の確立とそれに基づく個別化・予防医療

○ 防災・気象分野

- ・都市全体の一次・二次被害のシミュレーションにより、地震・津波災害の影響を統合的に予測するシステムの開発
- ・観測ビッグデータを用いた高解像度・高速での気象予測に基づく、台風からゲリラ豪雨・竜巻等まで異なるスケールでの気象災害をシームレスに予測する技術

○ エネルギー分野

- ・天然光合成系の原理の解明及び当該原理に基づき人工光合成によりプラスチック原料等の基幹化学品を製造する技術
- ・海洋風況に大きく左右される洋上ウィンドファームの発電性能予測及びブレードに作用する応力評価を定量的に行い、洋上ウィンドファームの設計指針を得るための解析技術

<有効性>

評価項目

新しい知の創出への貢献、研究開発の質の向上への貢献

評価基準

世界を先導する成果の創出が期待できるか。

- 本事業については、事前評価に引き続き、本中間評価においてもその有効性が再確認された。
- 我が国が強みを有する、材料科学やものづくりといった分野について、更なる進展を図るためには、例えば、無数の組合せを有する新規材料組成の最適化や、自動車や航空機の実機を用いた風洞実験・衝突実験のように、実験に多大なコストを要するものについて、これらをシミュレーションによって代替し、研究開発の質や生産性を向上させることが有効である。
- また、同じく我が国が強みを有する基礎科学の分野においても、例えば素粒子や宇宙開闢（かいびやく）といった、実験が困難な極小・極大の時空間スケールの理論を実証し、新しい知の創出への貢献を図るため、シミュレーションによる再現が有効である。
- さらに、近年の計算科学技術を含む情報科学技術の進展を踏まえ、
 - ・マルチスケールシミュレーション
 - ・大規模な計算結果の精度を保證する手法の開発
 - ・コンピュータ上での脳・神経回路モデル構築と人工知能への応用といった、シミュレーション自体の質の向上や融合領域の開拓を図る萌芽的課題についても、世界を先導する成果の創出が期待される。

- また、第5期科学技術基本計画において、国は、サイバー空間とフィジカル空間を高度に融合させた「Society5.0」を世界に先駆けて実現するとともに、その実現を支えるビッグデータ解析や人工知能等の基盤技術の強化を図ることとされた。この観点からも、本事業の有効性は更に高まっていると言える。

※ 世界を先導する成果の一例

- 材料科学分野
 - ・ 基底状態のみならず、量子効果を考慮し光反応のような励起状態も取扱い可能としたデバイスシミュレーション（Science 誌に掲載）
 - ・ ナノデバイスをコンピュータ上で設計・解析し、特性を把握する等、マテリアルズ・インフォマティクス等を活用した新機能デバイスの先行開発
 - ・ リチウム／水系の安全・安価な新しいリチウムイオン電池の実用化、新規の非白金燃料電池の能力向上等（Nature 姉妹誌に掲載）
- ものづくり分野
 - ・ 車のコンセプトから構造・機能・性能設計に至る主要な設計フェーズのシミュレーションを統合的に実施することにより生産性を引き上げる、新しいものづくりシステムの開発
 - ・ 数十億～数百億の格子点で接触問題等の大規模解析を可能とする多目的最適化設計プラットフォームの開発
- 基礎科学分野
 - ・ ビッグバン直後の超音速ガス流がブラックホールの種を生み出すことを解明
 - ・ 2つの中性子星が合体する際に多量の物質が放出され、重い元素が合成されることを解明
- 萌芽的課題に関連する分野
 - ・ 化学反応を取り込んだ破壊現象シミュレーションや、ミクروسケールの物理を取り込んだ混相流シミュレーション手法の開発
 - ・ 脳データの解析とモデリング、全脳の神経回路シミュレーション、階層的確率モデルによる効率良い学習が可能な脳型人工知能の開発
 - ・ 経済現象や交通現象に関わる複数のサブシステムの相互作用のモデル化とそれに基づく社会経済現象上の課題を予測し制御する技術
 - ・ 実社会での複合輸送システムを対象とした実シミュレーションによる全体最適化とそれに基づく運航・運用方式の基盤となる堅牢（けんろう）性も含めた最適な交通輸送システム

<効率性>

評価項目

計画・実施体制の妥当性、目標・達成管理の向上方策の妥当性

評価基準

研究開発プログラムの実施方法、体制について、見直しが適切かつ効率良く行われているか。

- 本事業については、事前評価に引き続き、本中間評価においてもその効率性が再確認された。
- 本事業の開始に当たっては、平成26年8月に、外部有識者により構成される「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会（主査：小宮山宏 株式会社三菱総合研究所理事長）」において、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題として、9つの重点課題及び4つの萌芽的課題が設定され、各課題について実施機関がそれぞれ公募選定された。
- これら重点課題及び萌芽的課題について、ポスト「京」共用開始後に可能な限り早期の成果創出を図るべく、外部有識者により構成される「HPCI計画推進委員会／ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ」（主査：小柳義夫 神戸大学計算科学教育センター特命教授）及び「萌芽的課題サブワーキンググループ」（主査：大石進一 早稲田大学基幹理工学部応用数理学科教授）が、課題全体の進捗状況を把握して、各実施機関に対しきめ細やかな提言・助言を行っている。
- 各実施機関においては、これら提言・助言に基づき中間目標、最終目標及び実施計画を策定するとともに、「諮問委員会」（外部有識者により構成。重点課題のみ設置）や「運営委員会」、「課題責任者会合」により進捗管理がなされており、階層的に事業の進捗管理と目標達成状況の確認・評価が行われている。
- 加えて、実施機関においては、産業界を含めた内外への研究成果のフィードバックに積極的に取り組んでおり、新しい知の創出、研究開発の質の向上への貢献が期待される。

※ 外部有識者委員会からの提言・助言等に対する実施機関における対応例

- ・ サブ課題の目標を産業界の要望等を踏まえた形に修正
- ・ 研究をフォーカスするために体制の見直しを行い、複数のサブ課題を統合。
- ・ 複数サブ課題を集めた基盤グループを設置し、当該グループ内で技術の共通化を試行
- ・ アウトリーチを考慮し、民間のアプリケーションの製作者との共同開発に着手
- ・ 異分野間でのポスドク交流を実施

(3) 今後の研究開発の方向性

本課題は「継続」、「中止」、「方向転換」する（いずれかに丸をつける）。

理由：

中間評価段階における本事業の目標の達成状況及び運営方法は適切であり、本事業を継続することにより、社会的要求を意識した高い独創性と優位性を持つ科学的成果の創出が期待されるため。

(4) その他

- ・ 高い独創性と優位性を持つ科学的成果の創出が期待される場所、実施機関において、その波及効果を含め、引き続き成果等の発信をわかりやすく行うよう努めること。
- ・ Co-design により蓄積したノウハウを Co-design 対象外のアプリケーション開発にも展開すべく、実施機関においてポスト「京」システムの開発主体と引き続きより一層の連携を図ること。