

# フラッグシップ2020プロジェクト (ポスト「京」の開発) について

平成30年 6月21日

文部科学省 研究振興局

参事官 (情報担当) 付 計算科学技術推進室

1. プロジェクトの概要	1
2. 文部科学省における中間評価	21
3. 参考資料	31

# Society 5.0で実現する超スマート社会

全ての人とモノがつながり、今までにない新たな価値を生み出す超スマート社会※の実現を目指す Society5.0においては、**高速のスーパーコンピュータ等の情報基盤技術**が必要。

※超スマート社会 必要なもの・サービスを、必要な人に、必要な時に、必要なだけ提供し、社会の様々なニーズにきめ細かく対応でき、あらゆる人が質の高いサービスを受けられ、年齢、性別、地域、言語といった様々な違いを乗り越え、生き活きと快適に暮らすことのできる社会  
(第5期科学技術基本計画)

・新たな価値を創出し社会的課題を解決する  
超スマート社会において、

- －シミュレーションによる社会的課題の解決
- －人工知能（AI）開発や情報の流通・処理に関する技術開発

を加速するために、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠。

Society 5.0 実現による日本再興  
～未来社会創造に向けた行動計画～（平成29年2月 経団連）

## (1) モノ・コト・サービス基盤の構築

### ③スパコン環境の整備

AIによる設計、モデル設計、シミュレーションの進化と拡大のため、産業界が共同利用しやすい**スパコン設備の環境を整備**する。

<超スマート社会における人々の生活>



# シミュレーションとデータ科学との融合

ビッグデータ解析やAIといったデータ科学（第4の科学）とシミュレーションとの融合・連携が重要。

「今後のH P C I 計画の推進に向けた提言」（平成29年8月 文部科学省 HPCI計画推進委員会）

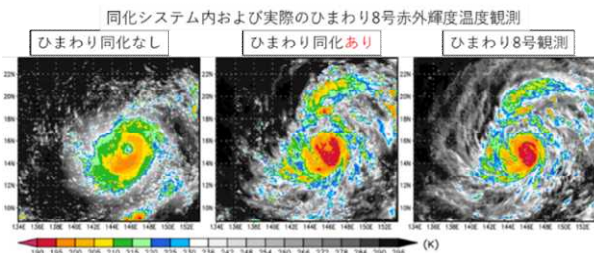
- 科学の方法に関して、理論科学、実験科学、計算（シミュレーション）科学に続く**第4のパラダイムとしてデータ科学**が浸透しつつある。
- これらの変化に対応し、ポスト「京」の運用開始後も視野に入れつつ、国は、これまでの活動に加えて、**計算科学とデータ科学の融合領域の研究**等、H P C の新たな可能性を開拓することが必要である。

「データ科学」・・・

ビッグデータ解析やAIといった大規模データを用いた科学的  
手法（第4の科学）

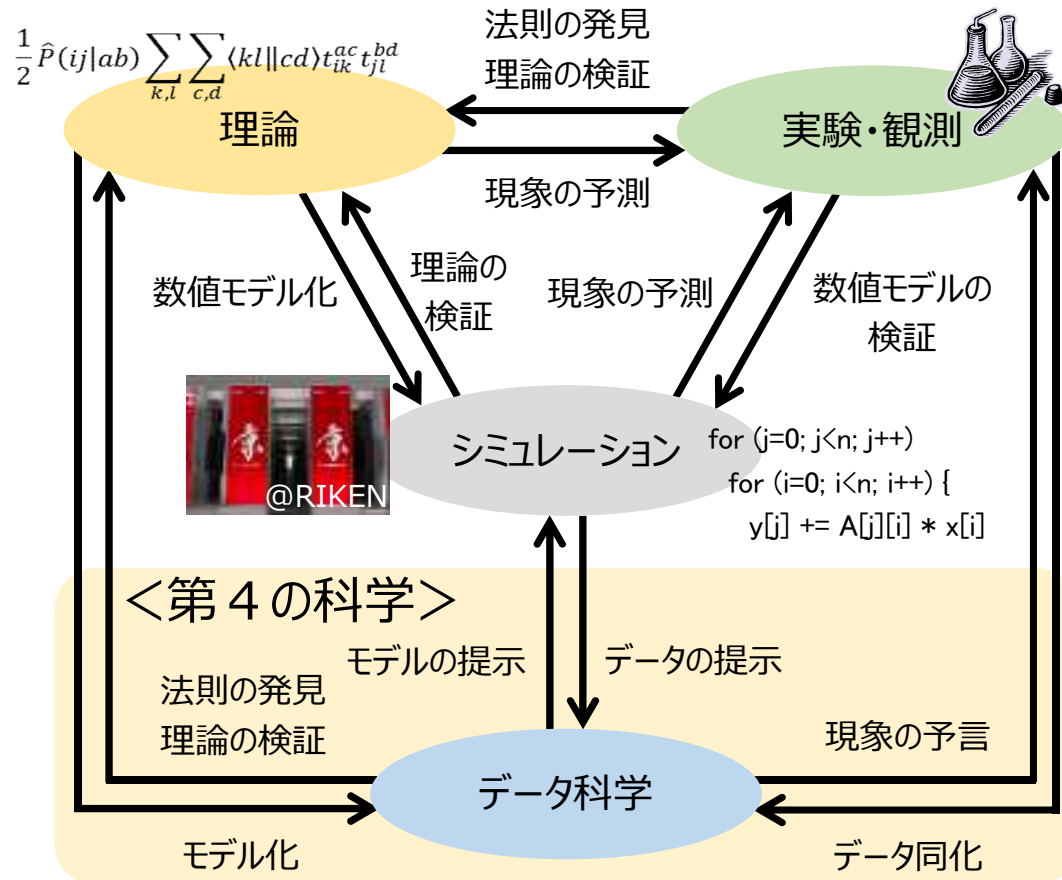
⇒ データ科学と計算科学（シミュレーション）との  
融合・連携が重要

（例）シミュレーションとデータ科学との融合領域



• 実際の観測データを  
シミュレーション結果に  
反映させる「データ同化」に  
よる気象予測

⇒ 文部科学省において、  
シミュレーションとデータ科学との連携を図るテーマについて、  
平成29年度から補助事業を実施。  
（5年間、1 課題あたり2,000万～4,000万円）



# ポスト「京」の概要

我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心の確保につながる最先端の研究基盤として、2021~22年の運用開始を目標に、世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指す。

## 開発目標

- 最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
- 消費電力 30~40MW（「京」は12.7MW）

## Co-design

- システムとアプリケーションを協調的に開発（Co-design）
- アプリケーションの対象として、健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の社会的・科学的課題を選定

## システムの特徴

- 世界最高水準の

- ★消費電力性能
- ★計算能力
- ★ユーザーの利便・使い勝手の良さ
- ★画期的な成果の創出

⇒ 総合力のあるスーパーコンピュータ



【文部科学省 HPCI計画推進委員会（平成28年8月）】

- 基本設計評価後に、最先端の半導体の設計・製造について、加工技術開発の困難さ等から世界的に遅延。ポスト「京」においては、開発スケジュールに12か月から24か月の遅延。
- 目標性能及び経費等の観点から確認を行い、新たな技術を採用して国費総額を変更せずに当初の開発目標を達成する見込みであると評価。
- さらに、ユーザの利便や使い勝手の良さを向上するため、新たな付加価値の創出に向けた取組を実施。

# ポスト「京」の特徴

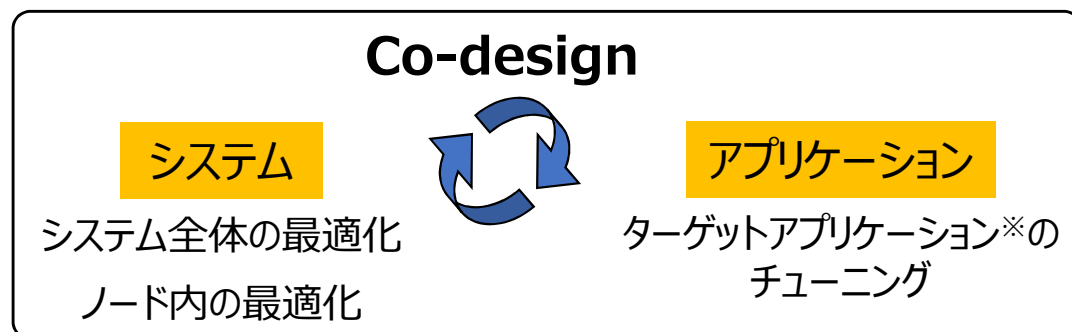
## 世界最高水準のHPC向け汎用スパコンを開発

### 最先端半導体技術によるスパコン

- ・自主開発により、いち早く最先端技術を取り入れて高性能かつ低電力なスパコンを実現。

### 高効率かつ省電力なシステム

- ・ソフトウェアとハードウェアのCo-designにおいて、アーキテクチャの最適化設計による演算回路及びメモリ帯域の高効率利用、アプリケーションの演算特性に適應した電力制御による省電力化を実現。



※ 計算科学的手法を網羅するように、ターゲットアプリケーションを設定

### 使い勝手の良いシステム

- ・Armアーキテクチャの採用、Linuxディストリビューションを含むオープンソースの活用及びOpen HPCやArm HPC ユーザコミュニティとの連携によりArmエコシステムの構築を目指し、多様なアプリケーションユーザの利用を促進。
- ・ポスト「京」の仕様等に関する説明会を開催（平成30年1月）し、さらに2回程度の開催を予定。
- ・Co-designの成果に基づくチューニングマニュアル等の整備・公開、チューニング環境の提供を予定。

# ポスト「京」のアプリケーション開発

ポスト「京」において、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題として、健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の社会的・科学的課題を選定。

## 健康長寿社会の実現

高速・高精度な創薬  
シミュレーションの実現による  
新薬開発加速化



医療ビッグデータ解析と生体  
シミュレーションによる病気の早期  
発見と予防医療の支援実現



## 防災・環境問題

気象ビッグデータ解析により、  
竜巻や豪雨を的確に予測

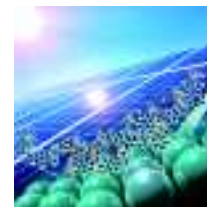


地震の揺れ・津波の進入・  
市民の避難経路をメートル  
単位でシミュレーション



## エネルギー問題

太陽電池や燃料電池の低コスト・  
高性能化や人工光合成メタン  
ハイドレートからメタン回収を実現



電気自動車のモーターや  
発電機のための永久磁石を  
省レアメタル化で実現

## 産業競争力の強化

次世代産業を支える新デバイスや  
材料の創成の加速化



飛行機や自動車の実機試験を  
一部代替し、開発期間・コストを  
大幅に削減

## 基礎科学の発展

宇宙でいつどのように物質が  
創られたのかなど、科学の  
根源的な問いへの挑戦



## 【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（平成26年4月～8月）】

安西 祐一郎	（日本学術振興会理事長）	関口 和一	（日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員）
内山田 竹志	（スーパーコンピューティング技術産業応用協議会運営委員長 トヨタ自動車代表取締役会長）	瀧澤 美奈子	（科学ジャーナリスト）
大隅 典子	（東北大学大学院医学系研究科教授）	土屋 裕弘	（田辺三菱製薬代表取締役社長）
◎小宮山 宏	（三菱総合研究所理事長）	○土居 範久	（慶應義塾大学名誉教授）
城山 英明	（東京大学大学院法学政治学研究科教授 政策ビジョン研究センター長）	土井 美和子	（東芝研究開発センター首席技監）
住 明正	（国立環境研究所理事長）	林 春男	（京都大学防災研究所巨大災害研究センター教授）
		平尾 公彦	（理化学研究所計算科学研究機構長）
		◎：主査、○：主査代理（50音順、敬称略、肩書は当時）	

# 「京」を用いた最近の成果

## 10分ごとに更新する気象予測

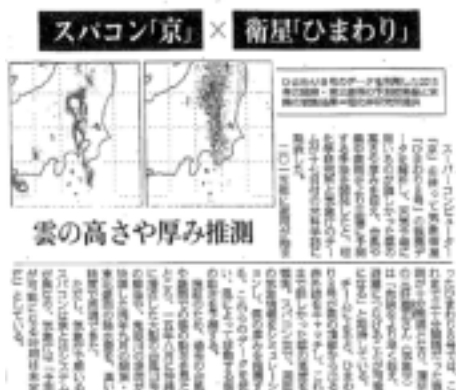
－「京」と気象衛星ひまわり8号による  
天気予報の革新－

シミュレーションと実測データを融合する「データ同化」による数値天気予報において、気象衛星「ひまわり8号」の10分ごとの赤外放射輝度データを直接利用することに成功。

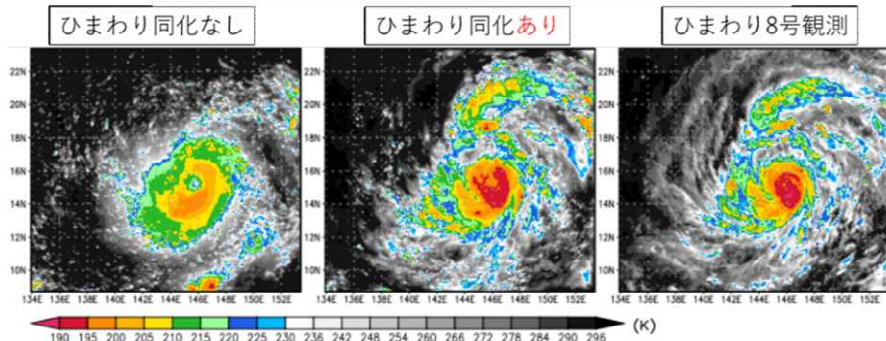
これまで1時間ごとに更新されていた気象予測が10分ごとに更新できるようになり、将来の天気予報に革新をもたらすと期待。

※ 気象庁において、将来的な実用化についての技術開発を実施。

平成30年1月18日 東京新聞



同化システム内および実際のひまわり8号赤外輝度温度観測

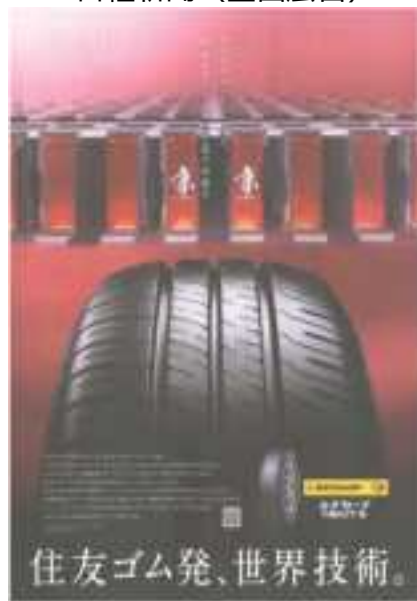


2015年8月の台風第13号のシミュレーション  
左図はひまわり8号によるデータ同化なし、中央図はひまわり8号によるデータ同化あり、右図は実際のひまわり8号観測を示す。

## SPring-8、J-PARC、「京」を連携活用させた 新材料開発技術を採用したタイヤが製品化



平成30年3月5日  
日経新聞（全面広告）






住友ゴム工業株式会社が、耐摩耗性能を大幅に向上させた低燃費タイヤ「エナセーブ NEXT II」を2016年11月に発売。

SPring-8、J-PARC、「京」を活用した高度なシミュレーション解析により、ゴムの内部構造をナノからミクロンレベルまで連続的かつ鮮明に解析。低燃費性能とグリップ性能を高次元で維持しながら耐摩耗性能を従来品から51%向上することに成功。



# ポスト「京」で出来ること①（健康長寿社会の実現）

## 重点課題 1：生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

目 標	「京」	ポスト「京」
<p>コンピューター技術により、労働集約的な医薬品開発を加速化し、画期的新薬を創出する基盤を構築</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ポスト「京」の演算能力を最大化するソフトウェア開発、アルゴリズム深化</li> <li>・次世代創薬計算技術の開発</li> <li>・創薬ビッグデータ統合システム開発</li> </ul>	<p>薬としての効果が期待できる物質の生体内の挙動をコンピュータ上で解析することにより、実験に依存していた薬の開発を効率化</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・薬と標的タンパク質（数万から数十万原子の分子系）について、数10マイクロ秒のシミュレーションが可能</li> <li>・数千万から数億原子を含む巨大な生体分子系（細胞内分子混雑系、ウイルスなど）の全原子計算を実現し、巨大生体分子系の100ナノ秒の動きを捕捉</li> <li>・1週間に数100個の化合物と標的タンパク質の結合シミュレーションが可能</li> </ul>	<p>「京」の約100倍の高速化、分子数スケールアップが可能になり、創薬標的分子のダイナミックな動きの制御を指向した、より効果的な新薬開発に貢献</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・薬と標的タンパク質について生体の現実の反応時間であるミリ秒以上の動きのシミュレーションが可能</li> <li>・数千万から数億原子を含む巨大生体分子系については10マイクロ秒の動きを捉えることが可能</li> </ul>
 <p>「京」からポスト「京」へ：ポスト「京」でできるようになること</p> <p>原子数: 1億, 1,000万, 100万, 10万</p> <p>時間: 1000ns, 100ns, 10ns</p> <p>「京」からポスト「京」へ：ポスト「京」でできるようになること</p> <p>「京」の限界: 1000ns, 100万原子</p> <p>ポスト「京」の到達: 10ns, 1億原子</p> <p>技術的進歩: 大規模分子シミュレーションの高速化 (GPU/ASIC), 高精度シミュレーション (量子力学), 効率的な探索アルゴリズム (機械学習), 大規模データ統合システム (クラウド/エッジ)</p>		

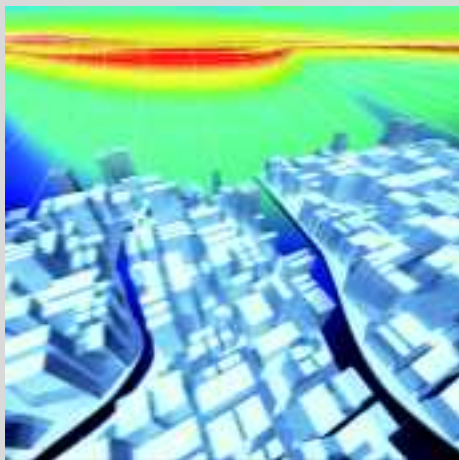
# ポスト「京」で出来ること②（防災・環境問題）

## 重点課題 3：地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

### 目標

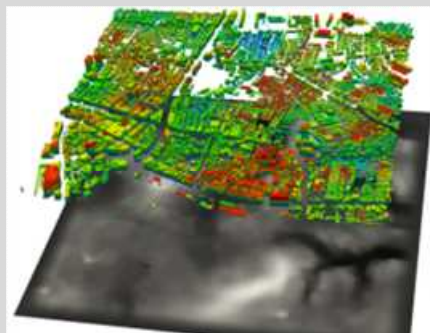
- 地震と津波が引き起こす複合災害  
(地盤の揺れ、津波の侵入)
- 災害が引き起こす被害  
(建物、インフラ施設の傷)
- 被害への対応  
(人々の避難、交通障害、経済活動復旧)

を、都市全体で全部合わせて丸ごと計算することにより、「地震が来たとき何が起こるか」を予測

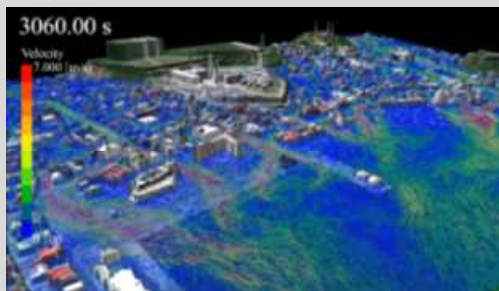


### 「京」

- **1つの地震シナリオ**を想定した災害発生・被害発生過程の解析が可能
- 津波侵入が引き起こす**一部領域(10キロ平米)**の被害予測が可能



地盤の揺れと建物の被害



津波の侵入

### ポスト「京」

複数の災害予測や、都市全体の複合災害の予測により、**合理的な防災計画の立案**が可能

- **複数の地震シナリオ**を想定した災害・被害予測により幅のある予測が実現
- **都市全体(数10キロ平米)**で地震と津波が複合する災害予測が実現
- 群集避難・交通障害等の被害対応の予測を実現



建物被害が引き起こす交通障害

# 我が国の計算科学技術インフラ

スーパーコンピュータ「京」を中核として、国内の大学等のスパコンを高速ネットワークでつなぎ、多様なユーザーニーズに応える環境（HPCI；High Performance Computing Infrastructure）を構築し、全国のユーザの利用に供する。



ポスト「京」においては、  
・「京」の運用に係る知見を継承

・「京」の利用支援※に係る知見を継承

※ アプリケーションの調整・高度化、利用相談・技術相談、講習会等の開催

# 計算科学技術インフラの利用者数

「京」を中核としたHPCIの利用者数は着実に増加するとともに、全体の3割を産業界が利用。また、広範な分野においてHPCIの利用による成果は約6,500件を超えている。

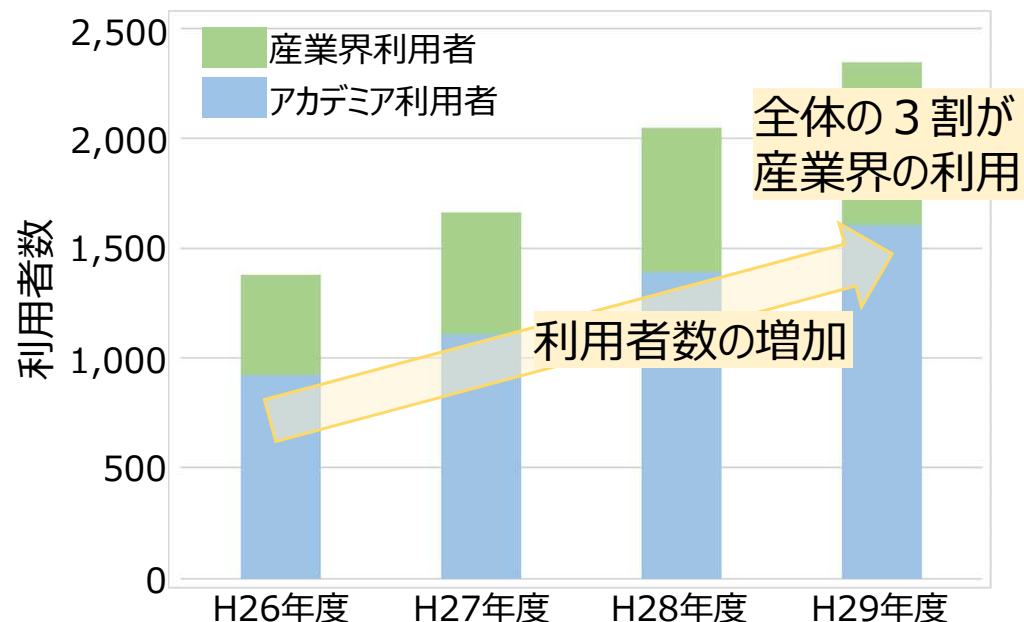
## <利用者数>

- HPCIの利用者は、毎年約2割ずつ増加。
  - 平成29年度までに約2,800人が利用するとともに、全体の約3割は産業界の利用者。
- HPCIを利用する企業数は、毎年約20～30社増加。
  - 平成29年度までに、約200社の企業が利用。

## <論文数>

- HPCIを利用した論文等の成果は、これまでに6,560件。
- 論文等の成果は、バイオ、物質・材料、防災・減災、ものづくり、宇宙・素粒子、数理科学など、広範な分野に及ぶ。

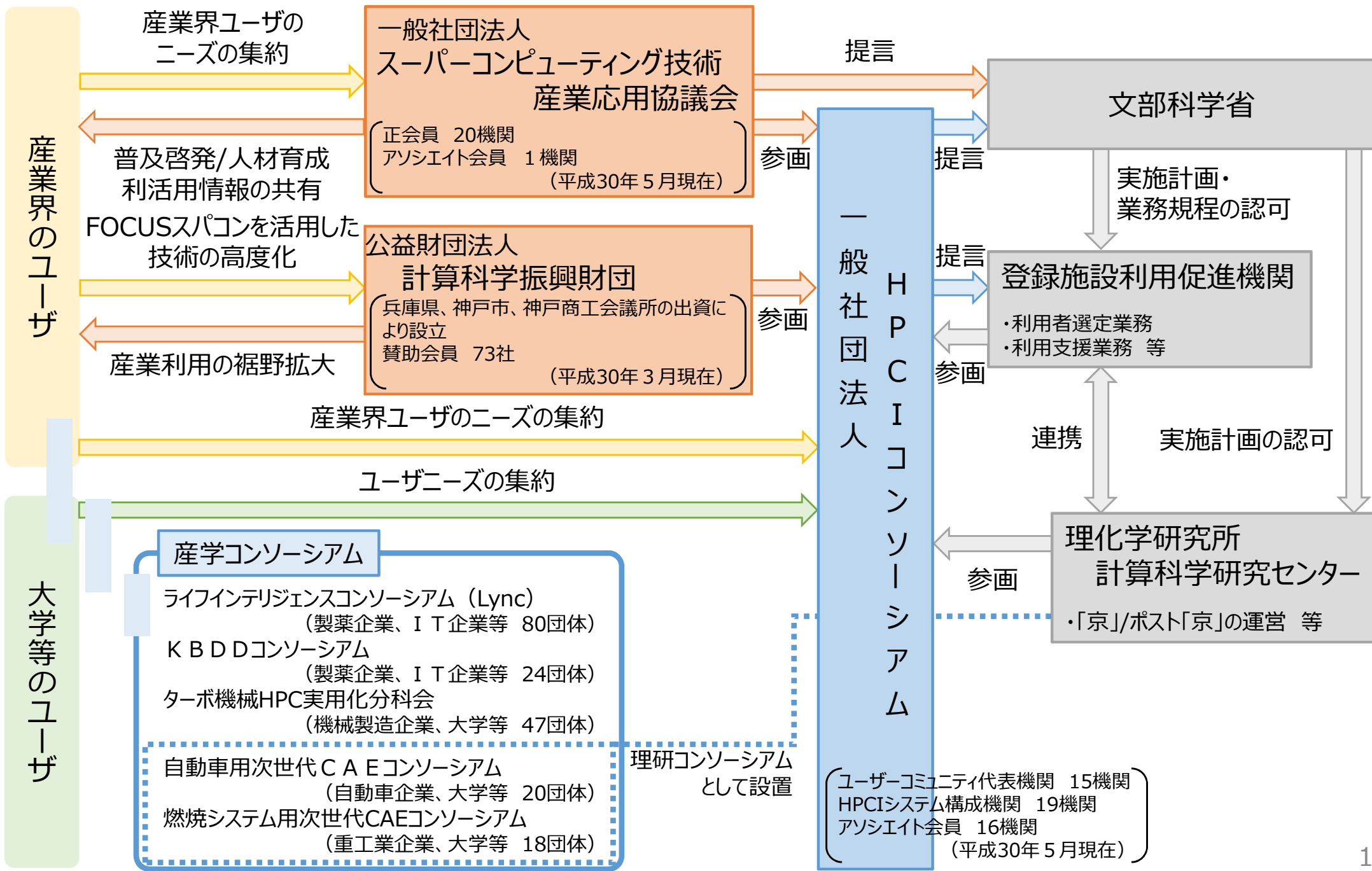
## <HPCIの利用者数の推移>



論文 (査読付き)	論文 (査読無し)	国際会議・ シンポジウム	国内会議・ シンポジウム	研究会等	特許出願	その他	合計
1,284	156	1,704	1,710	709	13	984	6,560

(平成30年6月13日現在)

# ユーザコミュニティ・産業界との連携



## 1. コ・デザインによる京から受け継ぐシミュレーションでの優位性

- ◎ アプリにおける高演算性能：「京」と比較で最大100倍以上の性能向上
- ◎ 重点・萌芽課題における多くの科学的成果創出の準備・期待
- ◎ 高性能の達成と、容易なプログラミング・高実用性の両立



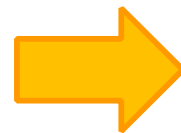
## 2. ポスト京の新たな技術イノベーション

- ◎ **チップ自身の高演算性能**（高速メモリ → 高メモリバンド幅）  
CPUチップ単位で、多くのHPC & Society5.0アプリで従来CPU数倍の性能
- ◎ **高い省電力・グリーン性能**  
「パワーノブ」含む省電力技術導入に、汎用CPUでは世界トップレベルの高効率
- ◎ **Arm「エコシステム」の充実**  
年間30億個生産されるArmプロセッサの命令セットを採用  
クラウドにも展開が容易、今回成果のSVEのグローバルスタンダード化
- ◎ **Society5.0アプリへの展開**  
ビッグデータ、AI、CAE/EDA、次世代コンピュータセキュリティ・ブロックチェーンなどのアプリにおいて、GPU並みからそれ以上の性能を発揮すると期待

マシン自身だけでなく  
半導体やITのテクノロジー  
でも世界をリード



ポスト「京」は“二刀流”



ビッグデータ・AIへの展開

更にインフラ、および技術としても世界に展開普及も

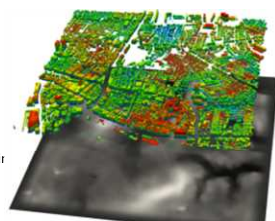
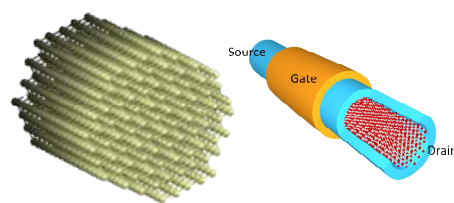


## システムとアプリケーションの協調的な 開発手法 (Co-design)

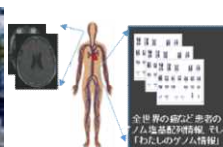
### 「計算による科学」

重点9課題：

アプリケーション対象として健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の様々な社会的・科学的課題を選定



### 「計算の科学」



各種アプリケーションの  
様々な計算上の特性を  
一般化・特徴化

各アプリ特性を加味した  
システム設計、及びそれに  
適したアプリの最適化

- ・理研CCS (旧AICS) と開発企業、及び重点課題機関の密な研究開発体制
- ・コ・デザインにより多くのアプリから9つの代表的な「ターゲットアプリケーション」の選定
- ・複数のターゲットアプリで、コ・デザインの結果、「京」と比較して**100倍以上**の性能向上
- ・プログラミングを含む使い易さの向上・高い電力性能などの技術成果も

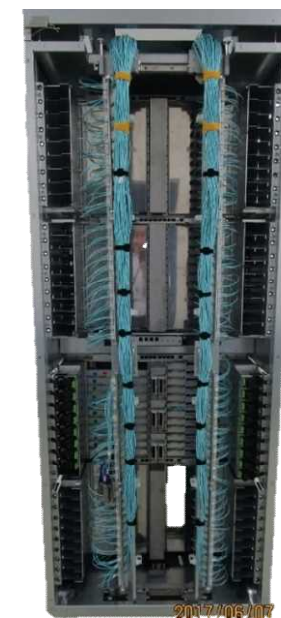
1. 高速メモリテクノロジーによる高メモリバンド幅、それに伴うHPCアプリの高性能演算性能
  - コ・デザインアプリに加え、世界のベンチマーク調査から、多くのHPCアプリはメモリ性能律速、一部は演算性能律速 → 高いメモリ性能と、それとバランスした演算性能の向上が重要
  - ポスト「京」CPUと現存トップサーバCPUと比較：何倍ものメモリ性能と、比較優位な演算性能
  - 超高速メモリに対応し（CPUでは世界初）、演算性能も上げたCPUの設計が成功のカギ



2. 高い省電力・グリーン性能
  - 電力最適化設計、クロックゲーティング、パワーストック等の高性能省電力設計
  - CPUでは世界トップレベルの電力性能比、及び高効率冷却 → クラウドなど一般ITにも適用可

3. Armサーバ & HPCエコシステムの充実 → 使いやすさ・広範囲な成果普及

- 年間のプロセッサの生産量：x86 3億個 vs. Arm 30億個
- 高性能エコシステムの急速な確立（e.g. Cavium、HPE、Sandia、Bristol、CEA、…）
- ポスト「京」SVE（Scalable Vector Extension）
  - スパコン・クラウドからIoTまでグローバル標準



4. Society5.0：ポスト「京」の性能優位性AI・機械学習の事例

- 次世代の深層学習によるAIは莫大な演算量 → 大規模なHPCが必要
- Post-Kプロセッサ：FP16などのAI専用命令と、高バンド幅メモリ
  - 深層学習の中心である「畳み込み演算」の優れた性能と、大規模な並列化のスケラビリティ
- 世界トップのAIマシンの可能性、Blockchain Securityなど他のSociety5.0アプリでも同様



2012年6月 「キヤットペーパー」の衝撃

Googleの「ネコ認識」→ 機械学習によって、自らネコの概念を獲得し、識別。



実際に獲得されたネコの「概念」  
Le et al.(2012)

## ディープニューラルネットワーク

AI研究のブレイクスルー。しかし原理は1970年代からあった

**Society5.0の実現に  
向けた飛躍的な発展**

画像認識、ロボット・自動運転、  
自動翻訳…etc.



従来の学習法と比べ、（1）学習データ量を増やすとどんどん精度が上がるが、（2）その分大量の計算が必要になる

なので、計算パワーが100万倍になって初めて可能になった

学習の計算パワーを上げるには、通常のシミュレーションと同じく

- （1）個々のCPUでの速度をハード・ソフトの工夫で高速化
- （2）それを大規模並列化する

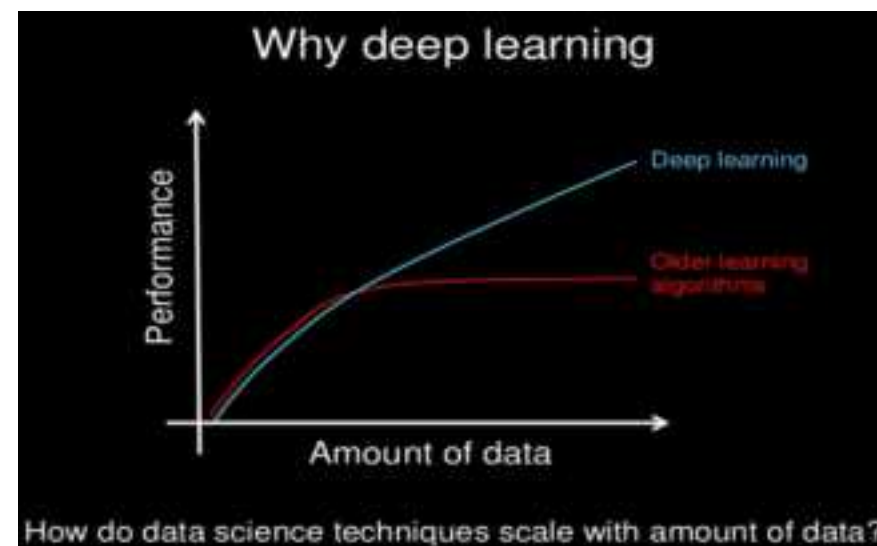


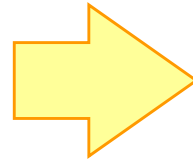
Fig. 2: Andrew Ng (Baidu) “What Data Scientists Should Know about Deep Learning”



**スパコンによる  
大規模な計算**

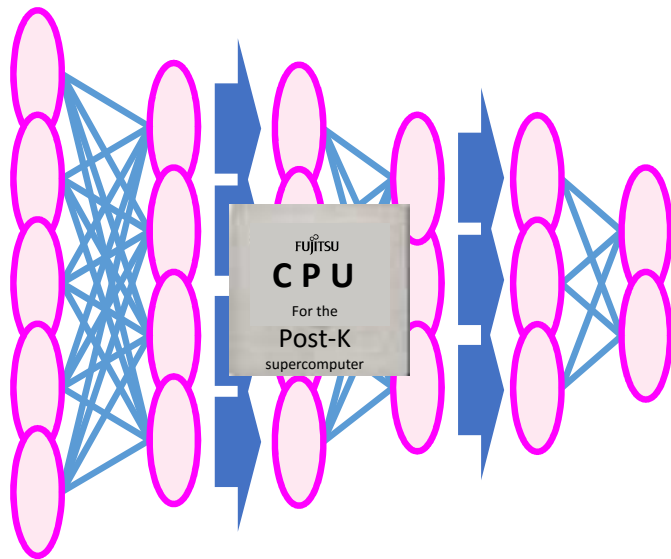
## 高性能な深層学習の畳み込み演算

- ◆ 高性能低精度演算 (FP16、INT8)
- ◆ 高メモリバンド幅
- ◆ 高性能・スケーラブルネットワーク



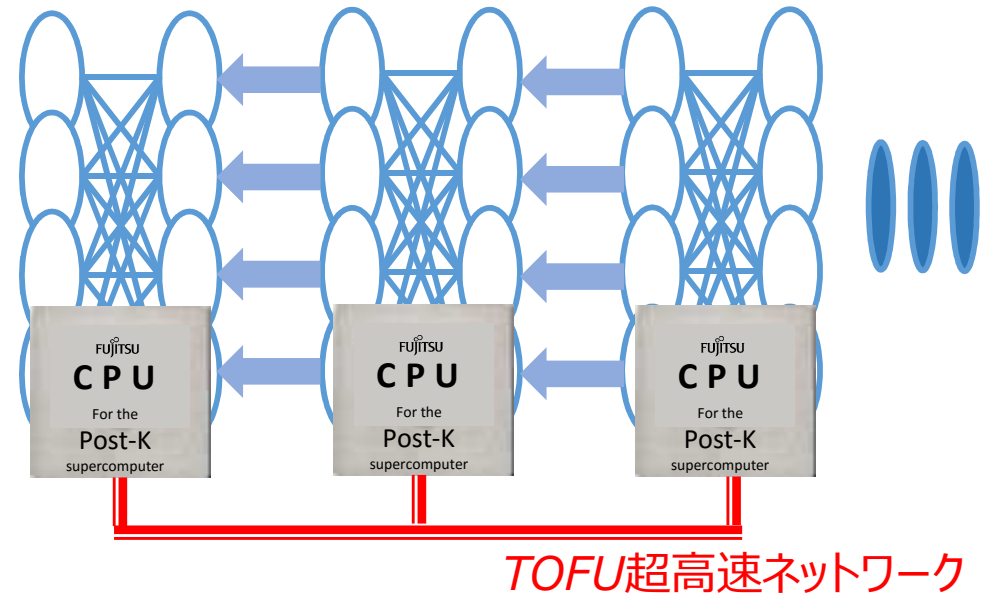
今後の大規模なデータ学習を必要とするAI研究において、**世界トップのマシンとなる!**

① チップ単位の高い畳み込み演算性能 (FP16+INT8と高速メモリ)



畳み込み演算の適切な選択 (FFT、Winograd) + 高メモリバンド幅 + 低精度演算機能により、GPUに匹敵 or 超える性能が見込める。

② 高いネットワーク通信性能による (超並列化 : Data+Model Parallelism)



スケーラブルかつ低レイテンシ通信性能によって、大規模な並列化 (model & data) が見込める。

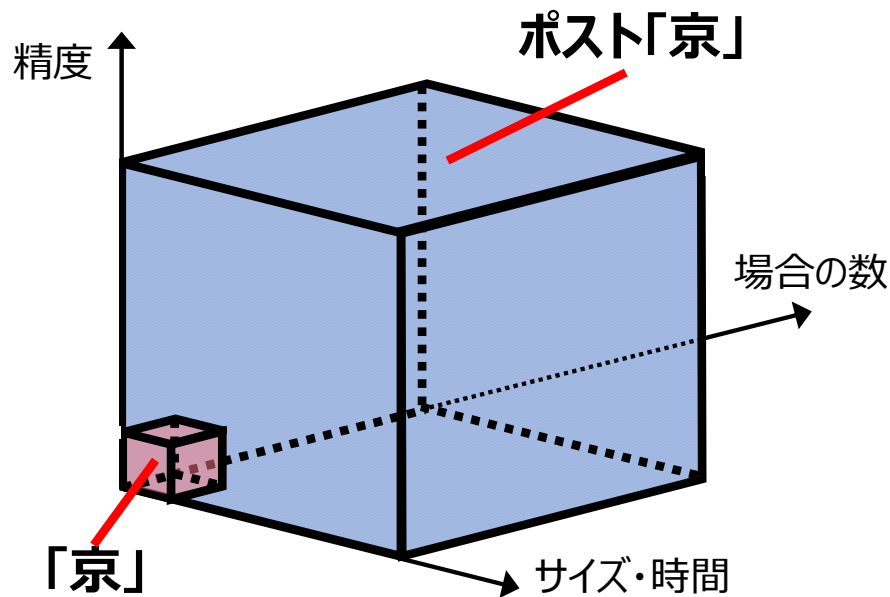
# ポスト「京」重点課題アプリケーション開発の取組（重点課題⑦）

## 学理と産業応用をつなぐ材料・デバイスシミュレーション

重点課題 7：次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

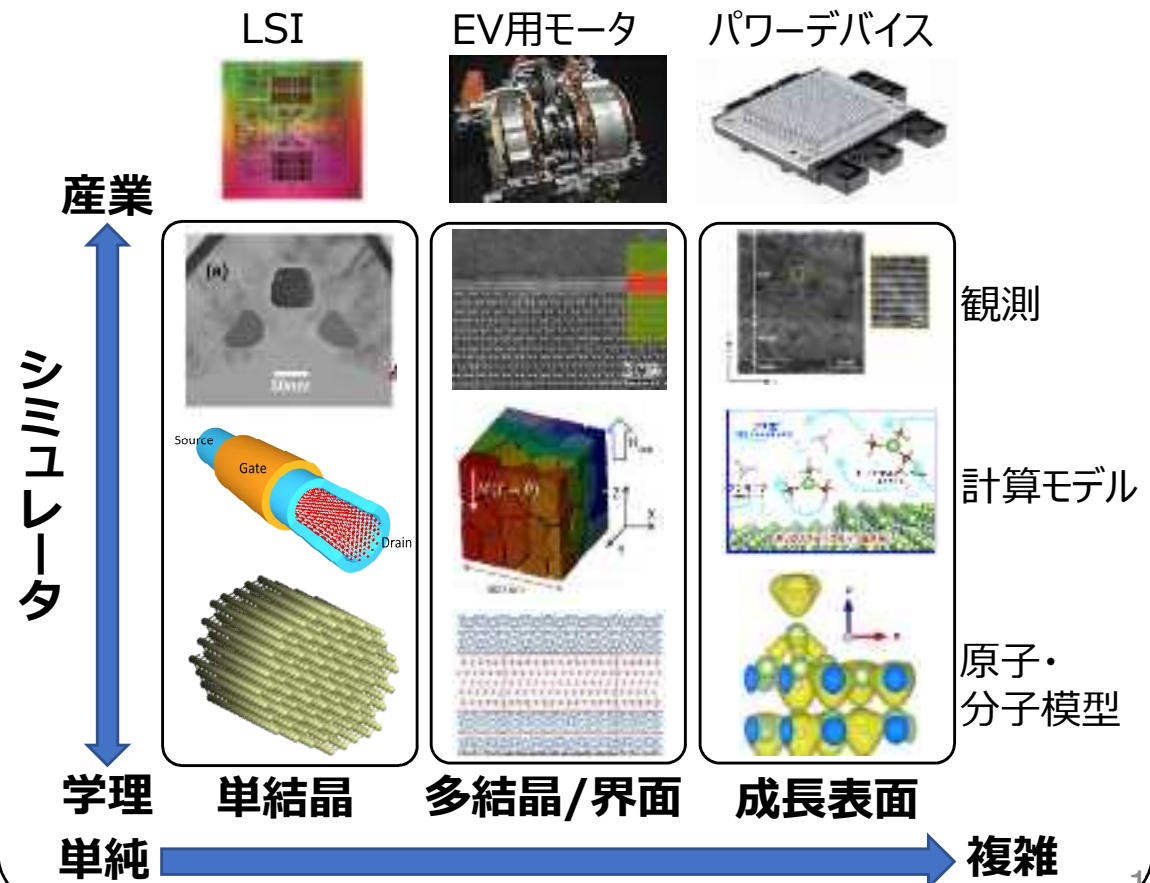
### ポスト「京」の役割

- ① 複雑物質の電子状態を計算  
➡ 究極性能予測 / 新デバイス構造提案
- ② 未知物質構造や製造過程を探索  
➡ 新機能物質発見 / 新プロセス開発
- ◆ ポスト「京」で発想空間を100倍に広げる



### 材料・デバイスシミュレータ開発

- ◆ 理想と現実を計算科学でつなぐ
- ◆ 単純から複雑な構造へ進展

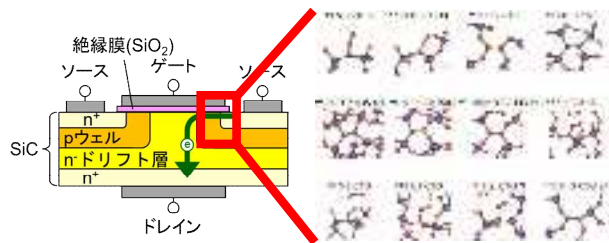


## ポスト「京」で取り組む課題とアウトカム

### パワー半導体デバイスの性能向上

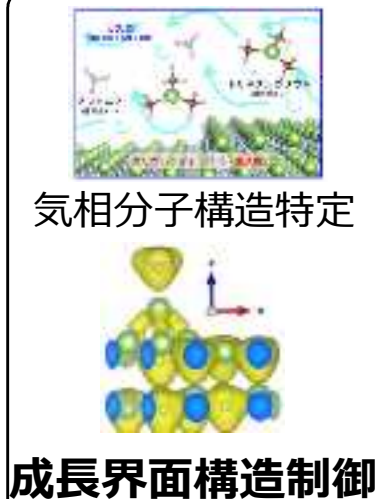
- ◆課題
  - ・界面トラップの影響で本来の特性がでない
- ◆ポスト「京」での解決
  - ・結晶－アモルファス界面欠陥構造特定
  - ・結晶成長界面制御で欠陥少の結晶成長へ

- ◆アウトカム
  - SiC、GaNデバイスの特性を一桁向上へ



SiC/SiO<sub>2</sub>界面の構造探索

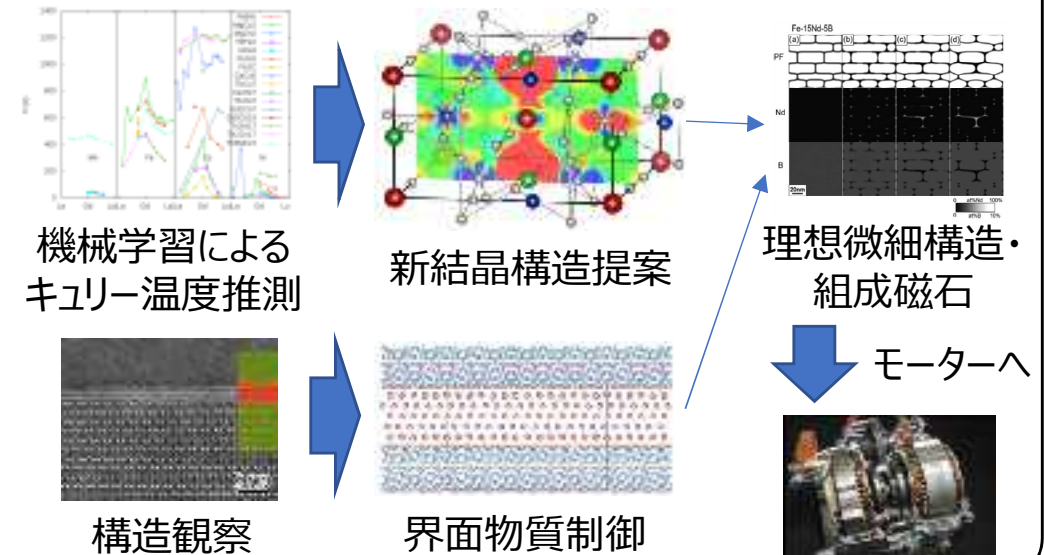
**界面構造特定**  
➔ **最適構造推定**



### 利用環境に応じた最適磁石開発

- ◆課題
  - ・現最強のネオジム磁石を超える材料がない
- ◆ポスト「京」での解決
  - ・計算データ活用し組成・構造と特性関連理解
  - ➔ 特性制御可能な新磁石開発へ

- ◆アウトカム
  - 実用温度で高性能を発揮する磁石開発



## ポスト「京」で取り組む課題とアウトカム

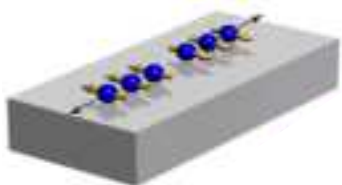
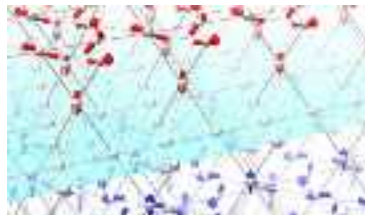
### 強い電子相関による 新奇デバイス探索

- ◆課題
  - ・シリコンデバイスの限界
- ◆ポスト「京」での解決
  - ・スピントロニクス実現性検証
  - ・超伝導温度制御可能性評価

#### ◆アウトカム

超スマート社会を支える新機能デバイス、光・量子技術の革新

スピン流を活用した  
新奇デバイス提案

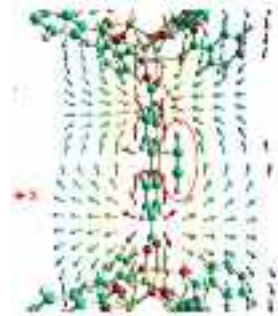


磁性体 $R_2Ir_2O_7$   
スピン流予測

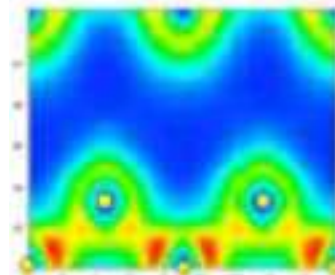
新原理に基づく超省エネデバイス

### 光と物質の新相互作用 による新奇デバイス

- ◆課題
  - ・光と物質の新奇相互作用活用
- ◆ポスト「京」での解決
  - ・近接場効果を引出す構造設計
  - ・超短パルス応答、非熱的加工



近接場による  
 $2\omega$ 発生 (MOF)



超短パルス光のSi電子  
へのエネルギー移動

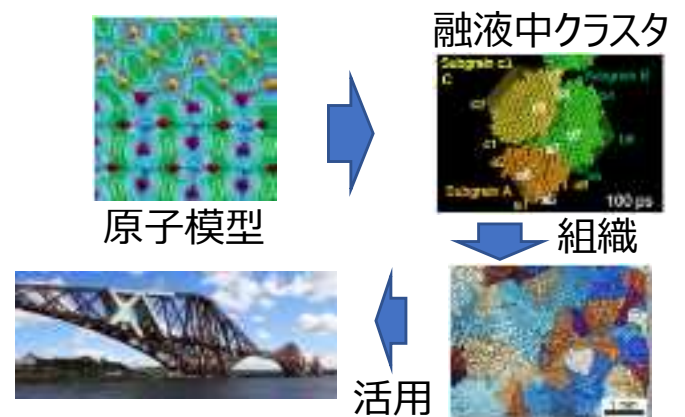
受光デバイス、光加工

### 強くて延性のある 鉄鋼材料の開発

- ◆課題
  - ・安全安心な社会を支える構造材
- ◆ポスト「京」での解決
  - ・電子論→MD→PFをつなぐマルチ  
スケールシミュレーション

#### ◆アウトカム

軽量、高信頼性材料の実現



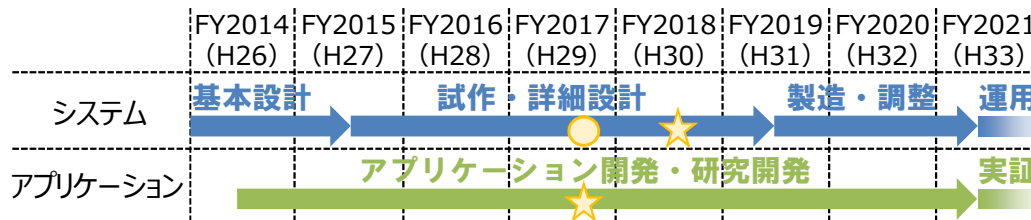
高強度高信頼性鉄鋼材料へ

1. プロジェクトの概要	1
2. 文部科学省における中間評価	21
3. 参考資料	31

# 文部科学省における中間評価 概要

## 開発目標

- 最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
- 消費電力 30～40MW（「京」は12.7MW）



- ★ 中間評価
- コスト・性能評価

## 評価結果

【アプリケーション開発に係る中間評価】（平成29年8月 HPCI計画推進委員会 ポスト「京」重点課題推進課題WG、平成29年12月 HPCI計画推進委員会、平成30年4月 研究計画・評価分科会）

必要性、有効性、効率性の観点から評価を実施し、目標の達成状況及び運営方法は適切であり、科学的成果の創出が期待されることから、**おおむね妥当**と評価された。

【システム開発に係るコスト・性能評価】（平成29年10月 HPCI計画推進委員会 ポスト「京」に係るシステム検討WG、平成29年12月 HPCI計画推進委員会）

プロジェクトの性能目標である最大で「京」の100倍の実効性能及び30～40MW以下の消費電力を達成する見込みであり、世界最高水準の汎用的な計算機のシステムの実現に向けた開発が着実に進展していることから、**おおむね妥当**であると判断された。

【システム開発に係る中間評価】（平成30年6月 HPCI計画推進委員会）

必要性、有効性、効率性の観点から評価を実施し、**開発目標について達成の見通し**が得られており、システムの設計結果に基づき**ポスト「京」の製造・設置を着実に推進することが妥当**であると判断された。

# 文部科学省における中間評価 評価体制

## HPCI計画推進委員会（平成30年6月現在）

伊藤 公平	慶應義塾大学理工学部 長	土井 美和子	情報通信研究機構 監事
伊藤 宏幸	ダイキン工業株式会社テクノロジー・イノベーションセンター リサーチ・コーディネーター		奈良先端科学技術大学院大学 理事
梅谷 浩之	トヨタ自動車株式会社IT革新推進室CAEG グループ長 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会企画委員会委員	中川 八穂子	株式会社日立製作所研究開発グループ デジタルテクノロジーイノベーションセンター シニアプロジェクトマネージャ
大石 進一	早稲田大学理工学術院 教授	中村 宏	東京大学大学院情報理工学研究所 教授
小柳 義夫	東京大学 名誉教授 高度情報科学技術研究機構神戸センターサイエンスアドバイザ	◎西尾 章治郎	大阪大学 総長
喜連川 優	情報・システム研究機構国立情報学研究所 所長	○藤井 孝藏	東京理科大学工学部 教授
小林 広明	東北大学大学院情報科学研究科 教授 東北大学サイバーサイエンスセンター センター長特別補佐	安浦 寛人	九州大学 理事・副学長

13名 ◎：主査、○：主査代理（50音順、敬称略、肩書は当時）

## ポスト「京」に係るシステム検討WG（平成30年6月現在）

天野 英晴	慶應義塾大学理工学部 教授
石田 純一	気象庁予報部数値予報課 数値予報モデル開発推進官
梅谷 浩之	トヨタ自動車株式会社IT革新推進室CAEG グループ長 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会企画委員会委員
◎小柳 義夫	東京大学 名誉教授 高度情報科学技術研究機構神戸センターサイエンスアドバイザ
加藤 千幸	東京大学生産技術研究所 教授
○金山 敏彦	産業技術総合研究所 特別顧問
小林 広明	東北大学大学院情報科学研究科 教授 東北大学サイバーサイエンスセンター センター長特別補佐
白井 宏樹	アステラス製薬株式会社モルフィ研究所 専任理事
土居 範久	慶應義塾大学 名誉教授
平木 敬	東京大学 名誉教授
吉本 雅彦	神戸大学 名誉教授

11名 ◎：主査、○：主査代理（50音順、敬称略、肩書は当時）

## ポスト「京」重点課題推進WG（平成29年8月現在）

相原 博昭	東京大学大学院理学系研究科 教授
安達 泰治	京都大学ウイルス・再生医科学研究所 教授
伊藤 公平	慶應義塾大学理工学部 長
宇川 彰	理化学研究所計算科学研究機構 副機構長
大石 進一	早稲田大学基幹理工学部 教授
◎小柳 義夫	神戸大学計算科学教育センター 特命教授
河合 理文	株式会社IHI技術開発本部 技師長 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会会員
栗原 和枝	東北大学未来科学技術共同研究センター 教授
白井 宏樹	アステラス製薬株式会社バイオサイエンス研究所専任理事
○住 明正	東京大学サステイナブル学連携研究機構 特任教授
福和 伸夫	名古屋大学減災連携研究センター長・教授
松岡 聡	東京工業大学学術国際情報センター 教授

12名 ◎：主査、○：主査代理（50音順、敬称略、肩書は当時）



# システム開発に係る中間評価①

## 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」により、独創性、優位性の高い成果が期待できるか。

- 「超スマート社会」(Society5.0) を世界に先駆けて実現するためには、**新たな価値創造の基盤としてのスーパーコンピュータが不可欠**
- Co-designにより、**最大で「京」の約100倍のアプリケーション実効性能**及び**30~40MW以下の消費電力を達成する見込み**
- 最先端の研究開発基盤としてユーザに利用され、画期的な成果が創出されるよう、**ユーザの利便性の向上及びユーザへの情報公開等の取組**を実施
  - ・ユーザコミュニティで広く利用されているLinuxディストリビューションの採用、コンパイラによる自動並列化機能、高並列なプログラミングを容易にするための並列プログラミング言語、DSL (Domain Specific Language) 、オープンソース・アプリケーション等を提供予定
  - ・Co-designの成果に基づくチューニングマニュアルを整備し、公開予定
  - ・アプリケーション開発者が性能改善度の評価や最適化の検討を行えるようにするため、アプリケーション性能評価環境を提供
  - ・平成30年1月にポスト「京」の仕様等に関する説明会を開催し、平成30年度も2回程度の開催を予定
- 内閣府(防災担当)による南海トラフの巨大地震による被害予測の高度化等に「京」が活用されており、ポスト「京」についても**政府の重要政策等へのさらなる貢献**が期待
- **研究開発基盤としてのスーパーコンピュータの必要性は変わらず**、量子コンピュータの進展に必要となる研究開発にも寄与し得るほか、将来的には、量子コンピュータとポスト「京」をはじめとするスーパーコンピュータによるシミュレーションとが相互に補完することで、課題解決に貢献することが期待

## システム開発に係る中間評価②

### 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

- CPUアーキテクチャ等の設計者とアプリケーションソフトウェアの開発者などが共同・協調して最適化を行うCo-designの取組を導入し、**システムとアプリケーションの最適化の方針が同時に得られ、性能が向上**
- 国際的に広く使われているLinuxディストリビューションを採用し、オープンソースコミュニティと協力することで、ソフトウェアの充実を図り、**Armエコシステムを構築していくための取組**を実施
  - ・ポスト「京」のCPUとして、柔軟な高性能ベクトル演算処理が可能なSVE（Scalable Vector Extension；HPC向けの拡張命令セット）搭載のハイエンドArm-CPUを開発し、採用
  - ・新たなメモリデバイスの導入とそれに対応するCPU側のメモリ技術の導入
- FP16演算（16bit幅Floating Point演算）のサポートや高いメモリバンド幅やスケーラビリティにより、**AI分野のアプリケーションについても、主流であるGPUと比肩する性能を引き出すことができる可能性**

# システム開発に係る中間評価③

## 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、費用構造や費用対効果向上方策の妥当性

評価基準： 研究開発プログラムの実施方法、体制、費用対効果向上方策について、見直しが適切かつ効率良く行われているか

- **運用コスト削減のため**、アプリケーションの実行速度及び消費電力の最適化を可能とするエコモード等の複数のモードの導入や、アプリケーションの特性に応じた消費電力のコントロールを可能とするパワーノブAPI（Application Programming Interface）の導入等、**適切な工夫**を実施
- 理化学研究所は、「京」という大規模並列計算機を5年間にわたり年間8,000時間以上安定的に共用に供した実績と知見を、**ポスト「京」の運用に適切に継承し、効率的な運用を実施**する予定

（参考）「京」の運用実績（平成29年度実績）

年間稼働実績 約8,222時間

年間稼働率 約98.0%

- 「京」の立地自治体である兵庫県及び神戸市より、これまで「京」の共用に関する有形無形の支援がなされてきており、ポスト「京」の共用に際して、引き続き、**兵庫県及び神戸市からの支援**がなされる予定
- 開発主体と開発担当企業の間での定期的なレビュー、開発主体としての外部有識者によるレビュー、政府（文部科学省、総合科学技術・イノベーション会議）における外部有識者による累次の評価を行っており、委員会の指摘事項が開発主体にフィードバックされる等、**PDCAサイクルが適切に機能**

# アプリケーション開発に係る中間評価①

- 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が着実に進展
  - ・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)
  - ・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**
- 産学官で構成されるコンソーシアム等における利活用される等、**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※<sup>1</sup>（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への活用を踏まえ、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

※<sup>1</sup> “K” Supercomputer-Based Drug Discovery project by biogrid pharma consortiumの略

※<sup>2</sup> コンソーシアムは、アプリケーション開発に係る中間評価（平成30年4月）時点

# アプリケーション開発に係る中間評価①

## 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。

- 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である一方、創薬や地震・津波の再現、新規エネルギー源の探索には、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
- ポスト「京」を用いた大規模シミュレーションによって、**創薬や地震・津波の再現、新規エネルギー源の探索において、世界にさきがけた成果が期待**

## 【世界にさきがけた成果が期待される例】

### ○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wind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windファームの設計指針を得るための解析技術

# アプリケーション開発に係る中間評価②

## 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。

- 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、多大な実験コストを要する新規材料組成の最適化や、自動車や航空機の実機による風洞実験・衝突実験等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
- 基礎科学の分野において、素粒子や宇宙開闢といった、極小・極大の時空間スケールの理論をシミュレーションによって再現し、新しい知の創出へ貢献することが有効
- 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証する手法の開発
  - ・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 等、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、**世界を先導する成果の創出を期待**

## 【世界にさきがけた成果が期待される例】

- 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
  - ・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
- 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

# アプリケーション開発に係る中間評価③

## 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。

- 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」において、9つの重点課題及び4つの萌芽的課題が設定され、実施機関をそれぞれ公募選定
- 外部有識者により構成される「H P C I 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」及び「萌芽的課題サブワーキンググループ」が、進捗状況を把握し、各実施機関に対しきめ細やかに提言・助言
- 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。また、「諮問委員会」（外部有識者により構成）や「運営委員会」、「課題責任者会合」により、階層的に事業の進捗管理と目標達成状況を確認・評価
- 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**

### 【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】

- ・ 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

1. プロジェクトの概要	1
2. 文部科学省における中間評価	21
3. 参考資料	31



# これまでのCSTIにおける評価

## 事業概要

我が国が直面する課題に対応するため、2021年～22年の運用開始を目標に、システムとアプリケーションを協調的に開発することにより、**世界最高水準の汎用性、最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能**のあるスーパーコンピュータを目指す。

## システムの特徴

- ①消費電力性能
- ②計算能力
- ③ユーザーの利便・使い勝手の良さ
- ④画期的な成果の創出

を、それぞれ世界最高水準で備え、世界の他のシステムに対して総合力で卓抜

## 開発目標

- ・最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
- ・30～40MWの消費電力（「京」は12.7MW）

## CSTIによる評価結果

### 事前評価（平成25年度）

- ・我が国の競争力の源泉となる最先端の研究成果を創出する強力なツールであり、**国として主導的に開発に取り組むべき**。

### 再評価（平成26年度）

- ・**世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指す**ものであり、**意義・必要性は改めて認められる**。
- ・開発の意義、有効性を一般国民も実感できるよう、**アウトカムを更に具体化、明確化**すべき。

### 基本設計評価結果の確認（平成27年度）

- ・開発目標の達成に向け、**基本設計の内容は概ね妥当**なものと認められる。
- ・**計算科学の研究基盤**となることを毅然と示すべき。
- ・**電力性能の向上**が主要開発課題であることを明確に示すべき。
- ・**アウトカムの更なる具体化・明確化**を図るべき。
- ・**総合力を国際的に比較検証する方法**を検討すべき。
- ・産業界との更なる協働など、**利活用の促進**を検討すべき。

# フラッグシップ2020プロジェクト（ポスト「京」の開発）【文部科学省】

## 評価結果（案）の概要

平成27年1月  
CSTI本会議資料

（平成25年12月の事前評価の結果を踏まえ再度の評価を実施）

### 事業概要

【概算要求時点での事業計画】 <実施期間>平成26(2014)年度～平成31(2019)年度

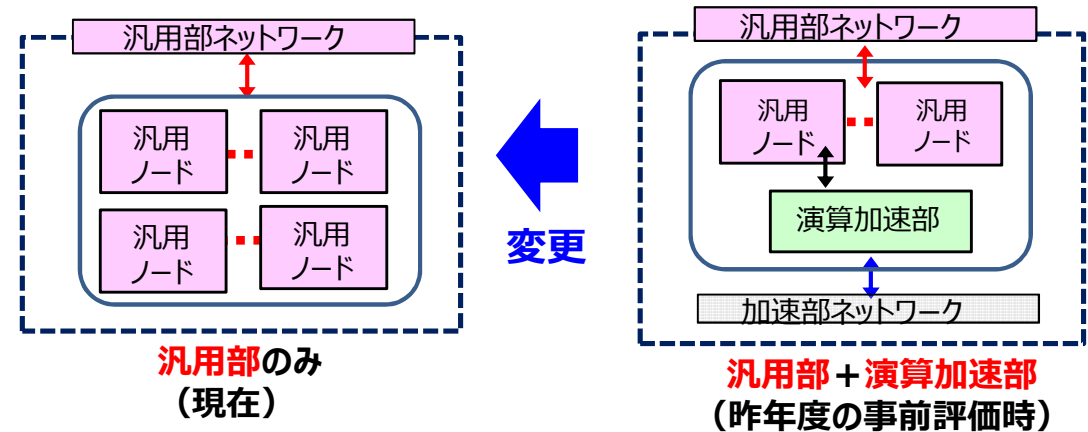
<予算額>平成27年度概算要求額:約47億円、国費総額:約1100億円

**2020年**をターゲットとし、幅広いアプリケーションソフトウェアを高い実効性能で利用できる**世界最高水準のスーパーコンピュータ**と、我が国が直面する課題の解決に資する**アプリケーション**を協調的に開発する。

### 開発目標

- 最大で**「京」の100倍のアプリケーション実効性能**（ターゲットとするアプリケーションソフトウェアを実行した場合の演算性能）
- 30～40MW**の消費電力（「京」は12.7MW）

### 【事前評価後のシステム構成の見直し】



### 評価結果

#### 総合評価

- **世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータ**の実現を目指すものであり、**意義・必要性**は改めて認められる。
  - ・ **システム構成の見直し**により、様々なアプリケーションに対応したより**汎用性の高いシステム**を開発
  - ・ **世界最高水準の計算機システム**に対応した**開発目標**が設定
- **9つの重点課題**の設定、**ターゲットアプリケーション**についての適切な方針設定等、**事前評価での指摘事項**に対応。
- 平成28年度に**フォローアップ**を行うほか、文部科学省の中間評価結果を踏まえ、CSTIの**中間評価**の実施を判断。

#### 主な指摘事項

- ・スパコン開発の**意義・必要性、有効性**を一般国民も実感できるよう、**アウトカム**を更に**具体化、明確化**すべき。
- ・継続して競争力を確保するための**長期的な技術開発戦略**の検討が必要。
- ・CPU製造の海外委託に際しての歩留りの確保等、**想定されるリスクへの対応策**が必要。

# ポスト「京」の基本設計評価の概要

## 経緯

- 今後10年程度を見据えた我が国の計算科学技術インフラの在り方等が議論され、我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に貢献するために、共用法を踏まえ、平成26年度からポスト「京」の開発に着手。
- 平成27年8月から開発主体より計7回ヒアリングを行い、評価実施。平成28年1月に評価結果とりまとめ、3月にCSTI評価専門調査会にて確認結果とりまとめ。

## 概要

- 開発方針：課題解決型、国際競争力、国際協力、「京」の資産の継承、性能拡張性
- 開発目標：
  - ・最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
  - ・30～40MWの消費電力（参考：「京」12.7MW）
- 予算：総経費約1,300億円（国費約1,100億円）

## 評価結果

- 基本設計については、予算等の様々な制約条件がある中で、課題解決型であり国際競争力のある、**世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現**という開発目標に向けた設計がなされており、**概ね妥当**。
- システムの特色：①消費電力性能、②計算能力、③ユーザーの利便・使い勝手の良さ、④画期的な成果の創出 をそれぞれ世界最高水準で備えた、2020年頃において世界の他のシステムに対して総合力で卓抜するもの。  
（計算能力（リンパック性能）のみで世界最高性能を目指すものではない）

### <留意事項>

- 電力性能が根幹となる部分であり、最新の情報に基づく迅速な検討・対応が必要。
- ハードとアプリの協調的開発（コデザイン）により、引き続き目標の最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能に達するよう開発を進める。

## CSTIの確認結果

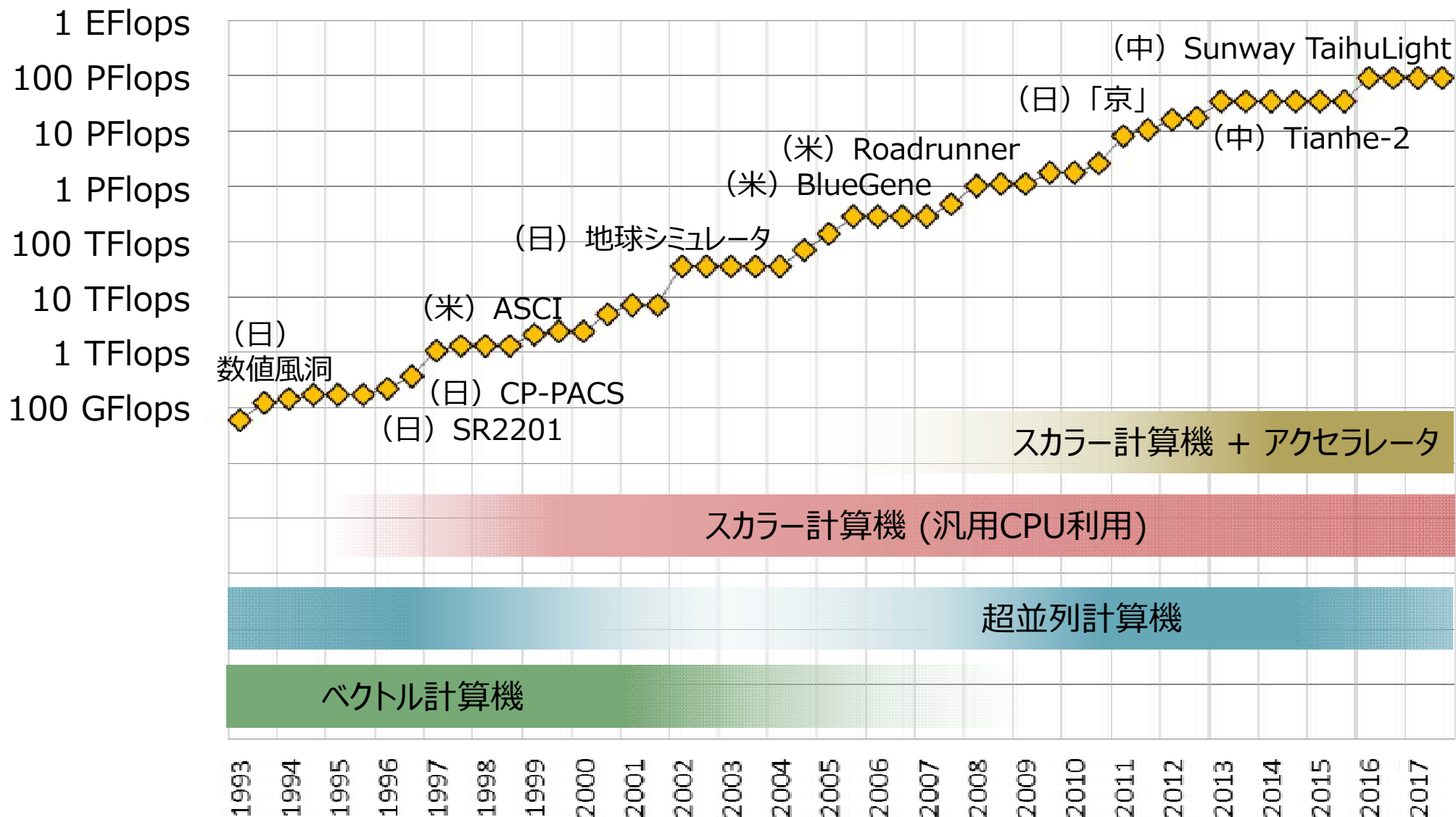
- 開発目標は、運用と性能の協調設計を図ったものとして評価できる。
- 今回示された**ポスト「京」の特色は、理に適った適切なもの**と言える。
- **基本設計の内容については、開発目標の達成に向け、概ね妥当なもの**と認められる。

### <留意事項>

- 計算科学の**研究基盤**であることを毅然として示すべき
- **電力性能の向上**が主要な開発課題であることを明確に示すべき
- **アウトカム**のさらなる具体化・明確化
- **総合力**を国際的に比較検証する方法の検討

# TOP500ランキングにおける1位の推移

LINPACK性能



(<https://www.top500.org/>を基に作成)

# 海外のスパコン動向（平成29年11月）

	TOP500	Green500	HPCG	Graph500
	単純計算性能	消費電力性能	アプリケーションに使われる計算性能	
第1位	Sunway TaihuLight (中国)	Shoubu system B (日本)	京 (日本)	京 (日本)
第2位	Tianhe-2 (中国)	Suiren2 <sup>※1</sup> (日本)	Tianhe-2 (中国)	Sunway TaihuLight (中国)
第3位	Piz Daint (スイス)	Sakura <sup>※1</sup> (日本)	Trinity (アメリカ)	Sequoia (アメリカ)
第4位	Gyokou <sup>※1</sup> (日本)	DGX SaturnV Volta <sup>※1</sup> (アメリカ)	Piz Daint (スイス)	Mira <sup>※2</sup> (アメリカ)
第5位	Titan (アメリカ)	Gyokou (日本)	Sunway TaihuLight (中国)	JUQUEEN (ドイツ)
第6位	Sequoia (アメリカ)	TSUBAME3.0 (日本)	Oakforest-PACS (日本)	Mira-8192 <sup>※2</sup> (アメリカ)
第7位	Trinity (アメリカ)	AIST AI Cloud (日本)	Cori (アメリカ)	Mira-8192 <sup>※2</sup> (アメリカ)
第8位	Cori (アメリカ)	RAIDEN GPU subsystem (日本)	Sequoia (アメリカ)	Fermi (イタリア)
第9位	Oakforest-PACS (日本)	Wilkes-2 (イギリス)	Titan (アメリカ)	Mira-4096 <sup>※2</sup> (アメリカ)
第10位	京 (日本)	Piz Daint (スイス)	TSUBAME3.0 <sup>※1</sup> (日本)	Tianhe-2 (中国)

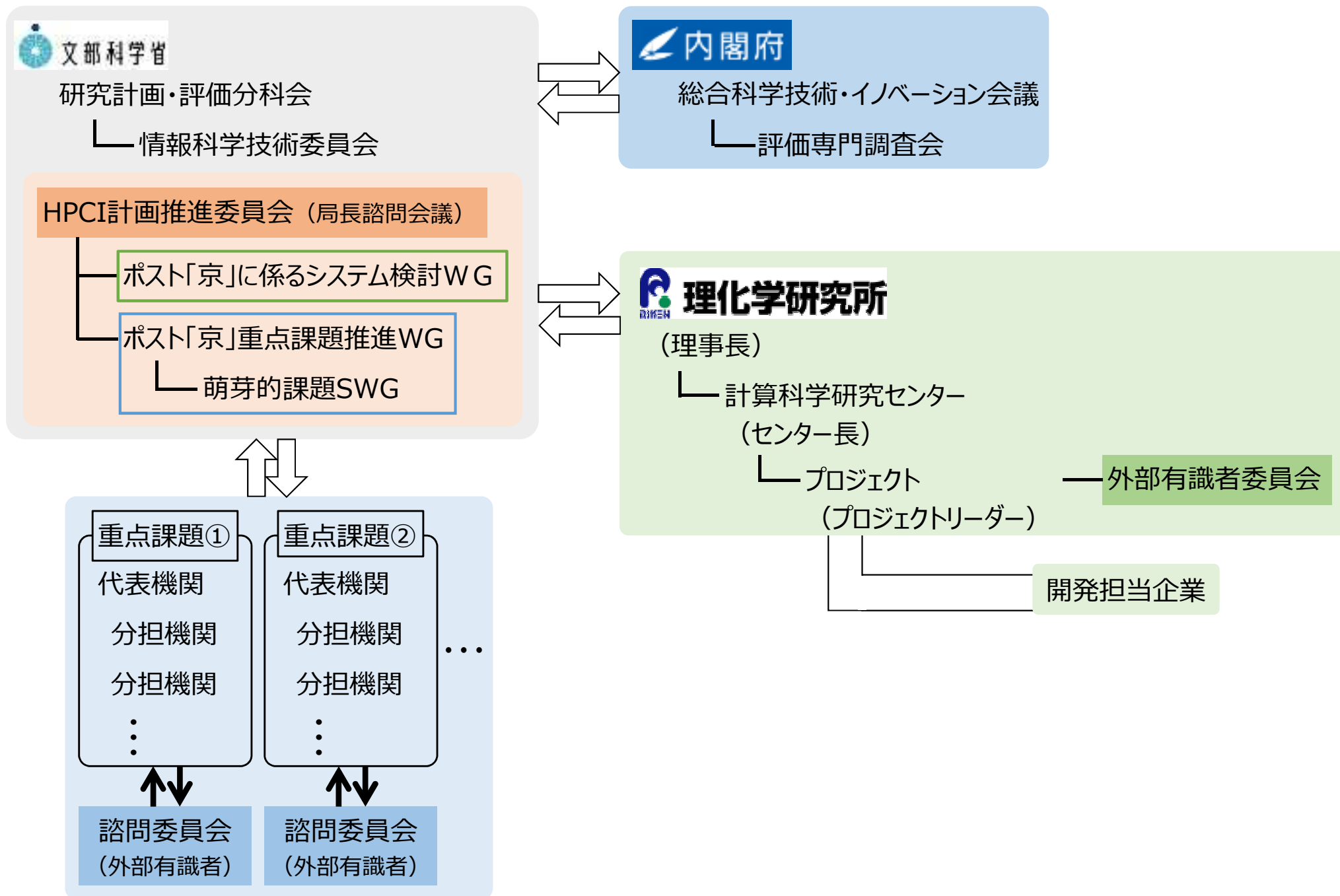
※1 初めて10位以内にランクインしたシステム

※2 第4位はMiraの全ノード。第6、7位と第9位は一部のみ利用



2018 Summitが稼働し、Top500の1位を奪回する見込み  
2021 エクサスケールのスパコン（A21）を予定

# ポスト「京」プロジェクトの体制図



# ポスト「京」の知的財産を用いた展開

ポスト「京」の成果については、理研/開発担当企業において幅広い展開を検討するほか、分野の特性に応じたアプリケーションの展開を検討。

## システム開発

- ・システム開発に係る知的財産は、理研/開発担当企業に帰属※。  
※共同発明による知的財産は、権利持分、維持管理、手続き等に関して両者で協議。
- ・ポスト「京」のプロジェクト成果を幅広く展開するために、
  - ・モバイル機器では国内外で幅広く普及しているArmのアーキテクチャを採用。
  - ・Linuxを含めたArm向けソフトウェアのエコシステム構築を推進する非営利団体であるLinaroと連携。
- ・一方、理研/開発担当企業における付加価値を創造するために、
  - ・CPUの性能を左右する内部構造については、開発担当企業が独自開発。
  - ・ハードウェアの性能を引き出すための制御機能、大規模システムを安定運用するためのエラー訂正機能、セキュリティ機能については、開発担当企業が独自開発。

⇒ オープン&クローズ戦略により、ポスト「京」プロジェクトの成果を理研/開発担当企業において幅広く展開・活用。

## アプリケーション開発

- ・アプリケーション開発に係る知的財産は、大学・研究機関の重点課題・萌芽的課題実施機関に帰属。
- ・アプリケーションを展開する上で、分野の特性に応じた対応が必要。
  - 世間に広く展開し、幅広く利用することが望ましい基礎的な研究分野。  
(例) ソースコードの配布による自由な競争 (重点課題6 等)
  - アプリケーションの利用に一定の制限を設け、知的財産を保護することが望ましい産業応用が期待される分野。  
(例) 知的財産を共有可能な限定されたグループのみに公開 (重点課題4、8 等)

⇒ 分野の特性に応じて、大学等の実施機関がアプリケーションの成果を展開。

# 世界最高水準の各特長の検証方法及び総合力の比較検証

## 開発目標

- ・最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能及び30～40MWの消費電力性能の開発目標を達成する見込み

## システムの特徴

- ・①消費電力性能、②計算能力、③ユーザの利便・使い勝手の良さ、④画期的な成果の創出をそれぞれ世界最高水準で備えた、世界の他のシステムに対して総合力で卓抜

### ①消費電力性能

- ・2020～2021年頃の設置（Delivery）が見込まれる他のCPUマシンと比較して優位性のある目標を設定
- ・アプリケーションの特性に応じた複数のモード（ノーマルモード、ブーストモード）等の導入の効果を検証

### ②計算能力

- ・単純な計算能力の指標のみならず、アプリケーションの実効性能に関する指標を参照

### ③ユーザの利便・使い勝手の良さ

- ・ポスト「京」を含めた使いやすさ（Ease of Use）の国際比較を実施

### ④画期的な成果の創出

- ・Co-designによりポスト「京」重点課題をはじめとするアプリケーションを開発
- ・Early Access Programやユーザへの情報公開の推進により、一刻も早い成果創出を目指す



# ポスト「京」の波及効果

ポスト「京」の投資効果は、「京」と同じく約 1 兆円であり、科学技術的インパクトにおいても重要性や影響度が高いことが示された。

・諸外国のスパコンと比較し、「京」やポスト「京」の波及効果を調査※。

※ 2016年12月に、理化学研究所がIDC社へ委託し、取りまとめ。

(参考) IDC (International Data Corporation) 社 (当時) ;

DOE (米国エネルギー省) や欧州のスパコンの波及効果の調査実績を有する米国の企業。今回の調査には各国のHPC(ハイパフォーマンス・コンピューティング) の専門家28名が中心となり、789名の専門家からなる委員会を活用。

## 1. 投資効果 (ROI)

①成果により見込まれる「収益」 「京」：約27億ドル ポスト「京」：約51億ドル

②成果により見込まれる「コスト削減」 「京」：約69億ドル ポスト「京」：約50億ドル

「防災・医療分野など、国家的に重要な研究が集中して行われているため」と分析

⇒ 「京」のROIは約96億ドル、ポスト「京」のROIは約101億ドル (ともに約 1 兆円)

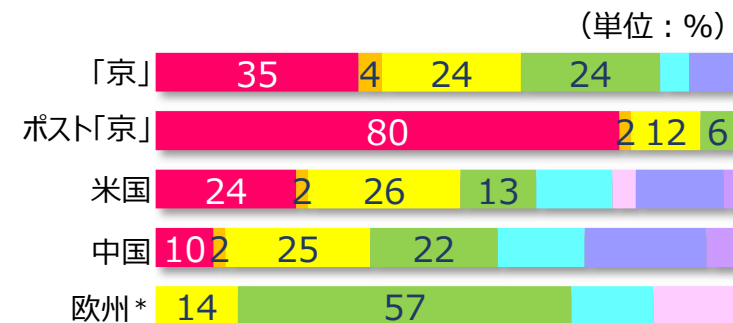
## 2. 科学技術的インパクト (ROR)

⇒ 最も高いランクの成果の割合は「京」35%、ポスト「京」80%であり、  
米国24%、中国10%と比べ高い

※以下の項目について、いずれも高いほど高ランクの評価

- ・重要性 (過去10年でトップからどの程度に位置する成果か)
- ・影響度 (どの程度多くの機関に役立つ成果か)

「アプリケーションの開発は、国家的重要度から選ばれた5か年の長期プロジェクトであり (他国は 1 ~ 3 年) 、システム開発と協調して取り組まれているため」と分析



※左ほど高いランクの (重要かつ多数の機関に役立つ) 成果  
\* 英国、仏国、伊国等

# スーパーコンピュータ分野の日米国際協力



## 日米科学技術協力協定 <1988年7月20日締結>

Agreement between the Government of the United States of America and the Government of Japan  
on Cooperation in Research and Development in Science and Technology



## エネルギー等研究開発のための協力に関する実施取極 <2013年4月30日締結>

(文部科学省 (MEXT) - エネルギー省 (DOE) 間)

Implementing Arrangement Between the Department of Energy of the United States of America and the Ministry of Education, Culture, Sports and Technology of Japan Concerning Cooperation in Research and Development in Energy and Related Fields

※本実施取極で明記された協力分野

(核融合科学, 高エネルギー物理学, 原子核物理学, 計算機科学, 量子ビーム技術, 基礎エネルギー科学, 生物及び環境科学, その他合意される分野)



※日米科学技術合同高級委員会にて  
(2013年4月30日)

(協力分野の一つとして)

## ハイパフォーマンスコンピューティングに関する協力取極

Project Arrangement Concerning Computer Science and Software Related  
to High Performance Computing for Open Scientific Research

- 締結日：2014年6月23日
- 実施主体：DOEアルゴンヌ研究所（米国）、理化学研究所（日本） 他
- 協力分野：システムソフトウェア
- 取極の主な内容
  - ・同取極下での研究協力による研究結果や情報の取り扱いについて明記
  - ・取極下で“Committee”（※）を設け、年に一回以上実施し具体的な協力内容を調整

※第1回を2014年12月に神戸、第2回を2015年9月にシカゴ、第3回を2016年2月に東京、第4回を2017年9月にホノルル、第5回を2018年3月に東京にて開催。

# スーパーコンピュータ分野の日仏国際協力



## 日仏科学技術協力協定 <1991年締結>

Agreement between the Government of Japan and the Government of the French Republic on Scientific and Technological Cooperation



## 計算科学及び計算機科学分野における協力に係る実施取決め

Implementing Arrangement between MENESR and MEXT concerning in the fields of computational science and computer science  
(文部科学省 (MEXT) - 国民教育・高等教育・研究省 (MENESR) ※間) <2017年1月9日締結>

○本実施取決めにおける協力内容  
科学者、技術者及びその他の専門家の訪問並びに交流、  
情報の交換、共同研究・開発、政策的事項又は技術的  
事項に関する会合 等

※締結時の省名。2017年5月に発足した  
マクロン政権下で組織改編が行われ、現在の  
高等教育・研究・イノベーション省  
(MESRI) となった。

## 計算科学及び計算機科学分野における研究協力取決め

Cooperation Program between CEA and RIKEN concerning in the fields of computational science and computer science  
(理化学研究所 (理研) - 原子力・代替エネルギー庁 (CEA) 間) <2017年1月11日締結>

○本実施取決めにおける協力内容  
・Open Software Library構築等に関する協力  
・アプリケーションに関する協力  
・マネジメントに関する協力



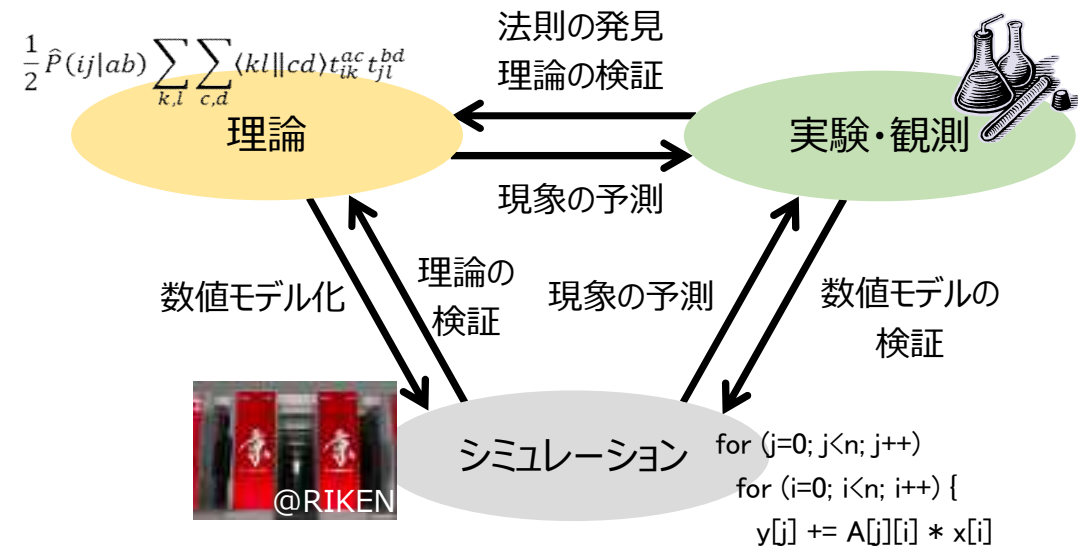
理研-CEA間の締結式@東京  
(2017年1月11日)

- ・取決め下で“Coordination Meeting” を設け、年に2回以上実施し技術的な協力内容等について議論
- ・協力期間は締結日より5年間。双方の合意があれば5年間の延長が可能。

# 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。



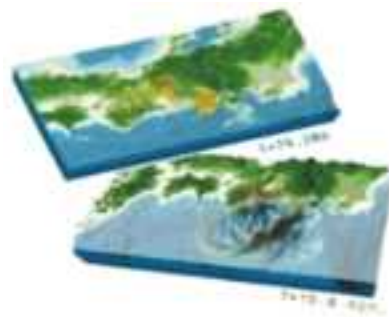
## <シミュレーションにより実現できる「限界の突破」>

- ① 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

- ② 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)

- 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
- 超新星爆発の様子の再現
- 地震・津波の被害予測



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



# 数値シミュレーションと人工知能 (AI)

物理法則をもとに自然現象・社会現象を再現・予測する数値シミュレーションは、自然現象・社会現象を膨大なデータから推論・選択する人工知能 (AI) は、相互に補完・連携していくことが重要。

## <物理法則をもとに自然・社会現象を再現・予測>

- ・新薬候補物質と標的たんぱく質の結合強度を予測
- ・物理法則に基づく大規模地震の再現
- ・超新星爆発の再現

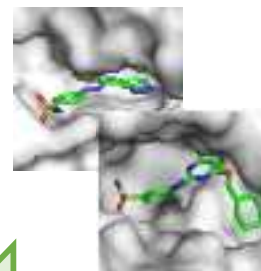
⇒ 物理法則に基づく数値シミュレーション  
≡ スーパーコンピュータ



- ・大規模地震の観測データが少ない (AIを用いた解析は困難)

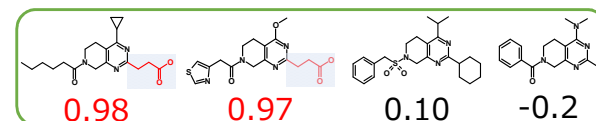
⇒ 少ない大規模地震の観測データに対し、数値シミュレーションにより大規模地震のデータ群を提供

{ 実際の観測データ  
シミュレーションを用いたデータ  
により、AIを用いた都市の地震解析を実現

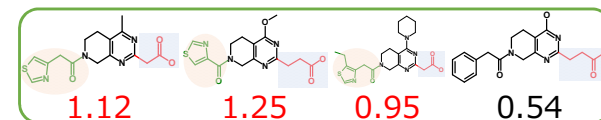


- ・最適な化合物と標的たんぱく質の結合の強さを正確に数値シミュレーション

- ・大量の化合物から最適な新薬候補物質をAIによって推論



活性スコアの高い化合物の特徴を保持しながら、  
化合物の生成・評価を繰り返す



数値シミュレーションと人工知能 (AI) による相互の補完・連携

## <膨大なデータから自然・社会現象を推論・予測>

- ・大規模・複雑データを用いた新薬候補物質の探索・設計
- ・大量の地震データを用いた被害推定
- ・端末の位置情報等から人の移動需要を予測

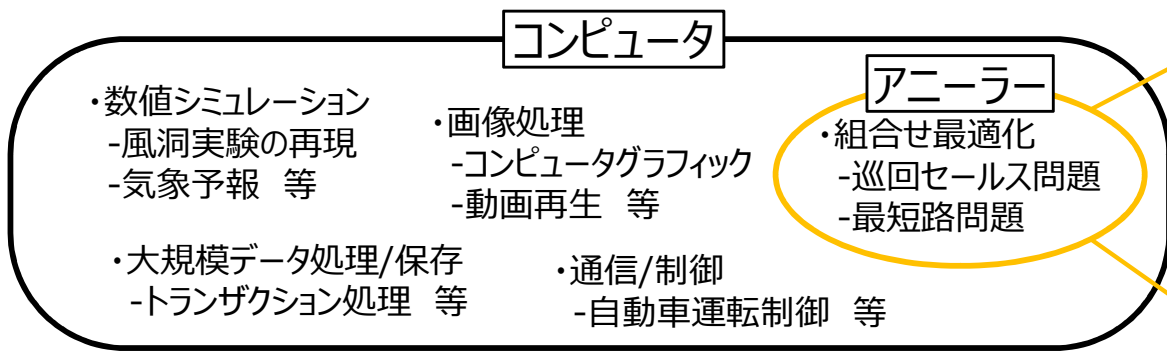
⇒ 大量のデータに対する高度な推論  
≡ 人工知能 (AI)

# 量子コンピュータ

	スーパーコンピュータ	量子コンピュータ	
		ゲート型	アニーリング型
用途	<ul style="list-style-type: none"> <li>数値シミュレーションやデータ処理など、全ての処理</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>汎用型 (量子シミュレーション、暗号解読(素因数分解)等)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>組合せ最適化問題に特化 (巡回セールス問題等)</li> </ul>
原理	<ul style="list-style-type: none"> <li>電気信号により「0」と「1」を表し、電子回路で操作</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>量子ビットを「0」と「1」の重ね合わせ状態のまま量子回路で操作</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>相互関係がマッピングされた量子ビットの最小エネルギー状態により最適解を導出</li> </ul>
強み	<ul style="list-style-type: none"> <li>あらゆる処理が可能な汎用性</li> <li>既存技術</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>理論上、高速化が保証されているアルゴリズムが複数存在</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>物流や金融、機械学習(人工知能)など、社会的影響が大きい問題を扱える</li> <li>ノイズに強い</li> </ul>
弱み	<ul style="list-style-type: none"> <li>微細加工技術の頭打ち</li> <li>消費電力の増大</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>多くの問題において、高速化が保証されていない</li> <li>ノイズに対し非常に弱い</li> <li>実用的には、大規模な集積が必要</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>問題に合わせ、量子ビットの相互関係をマッピングする必要</li> <li>高速化が保証されているアルゴリズムがない</li> <li>誤り訂正方式が確立してない</li> </ul>
現状	<ul style="list-style-type: none"> <li>多数の実機が稼働</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>数十量子ビット</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>約2000量子ビット</li> </ul>
見通し	<ul style="list-style-type: none"> <li>今後もあらゆる分野、用途に利用</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>10年単位での実用的なシステムは困難</li> <li>誤り訂正のない小規模な試作機は数年で実現か</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>スーパーコンピュータとの組合せ(ハイブリッド)による利用を検討</li> </ul>

# 数値シミュレーションとアニーリング

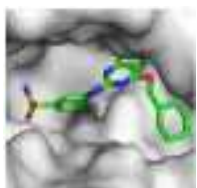
社会現象を膨大な選択肢から選択・予測するアニーラーは、物理法則をもとに自然現象・社会現象を再現・予測する数値シミュレーションと、相互に補完していくことが重要。



＜膨大な選択肢から社会現象等を選択・予測＞

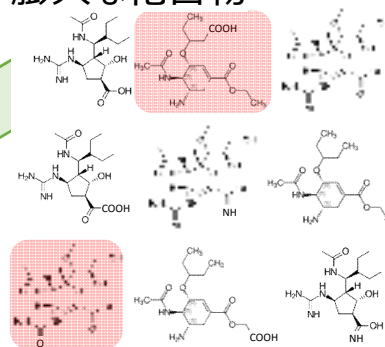
- ・新薬候補物質の選択
- ・交通渋滞における流通の最適化
- ・工場における倉庫部品の配置

⇒ 条件を満たす中で最も良い組合せを選択  
 ≡ 量子アニーラーやデジタルアニーラー



・類似した構造分子の検索により、膨大な化学物の中から新薬候補物質を選択

膨大な化合物



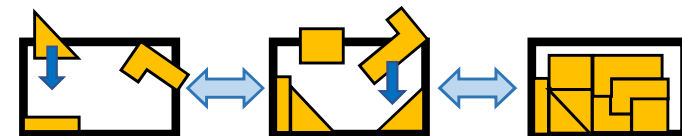
・数値シミュレーションにより選択された新薬候補物質の効果を予測

＜アニーラーの仕組み＞

アニーラー：全体を揺らしながら、最適な解を求める



従来のコンピュータ：順番にあてはめながら、トライ＆エラーを繰り返す



＜物理法則をもとに自然・社会現象を再現・予測＞

- ・第一原理計算による高性能材料の性能予測
- ・新薬と標的たんぱく質の結合強度を予測
- ・超新星爆発の再現

⇒ 物理法則に基づく数値シミュレーション  
 ≡ スーパーコンピュータ

# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題①）

## <重点課題（9課題）>

- ①社会的・国家的見地から高い意義がある、
  - ②世界を先導する成果の創出が期待できる、
  - ③ポスト「京」の戦略的活用が期待できる、
- 課題を「重点課題」として選定。

	重点課題	実施機関（平成30年4月末時点）
健康長寿社会の実現	①生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。	理化学研究所（奥野 恭史・客員主管研究員） 分担機関：京都大学、東京大学、横浜市立大学、名古屋大学、産業技術総合研究所 共同研究参画企業：24社
	②個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。	東京大学（宮野 悟・教授） 分担機関：京都大学、大阪大学、株式会社UT-Heart研究所、自治医科大学、岡山大学 共同研究参画企業：5社
防災・環境問題	③地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。	東京大学（堀 宗朗・教授） 分担機関：海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学 共同研究参画企業：1社
	④観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。	海洋研究開発機構（高橋 桂子・センター長） 分担機関：理化学研究所、東京大学、東京工業大学 共同研究参画企業：7社



# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題②）

	重点課題	実施機関（平成30年4月末時点）
エネルギー問題	⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。	<u>自然科学研究機構（岡崎 進・教授）</u> 分担機関：神戸大学、理化学研究所、東京大学、物質・材料研究機構、名古屋大学、岡山大学、北海道大学、早稲田大学 共同研究参画企業：17社
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。	<u>東京大学（吉村 忍・教授）</u> 分担機関：豊橋技術科学大学、京都大学、九州大学、名古屋大学、立教学院立教大学、自然科学研究機構核融合科学研究所、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構、物質・材料研究機構、みずほ情報総研株式会社、株式会社風力エネルギー研究所 共同研究参画企業：11社
産業競争力の強化	⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。	<u>東京大学（常行 真司・教授）</u> 分担機関：筑波大学、大阪大学、名古屋工業大学、東北大学、東京理科大学、産業技術総合研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、 共同研究参画企業：6社
	⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。	<u>東京大学（加藤 千幸・教授）</u> 分担機関：神戸大学、東北大学、山梨大学、九州大学、東京理科大学、理化学研究所、宇宙航空研究開発機構 共同研究参画企業：30社
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。	<u>筑波大学（青木 慎也・客員教授）</u> 分担機関：高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学、理化学研究所、大阪大学、千葉大学、東邦大学、広島大学、自然科学研究機構国立天文台、 共同研究参画企業：1社

# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（萌芽的課題）

4つの萌芽的課題（テーマ）を設定し、公募により8つの課題を選定。

## ①基礎科学のフロンティア – 極限への挑戦

### (1) 基礎科学の挑戦- 複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求

(久保百司 東北大学金属材料研究所)

〔分担機関〕理化学研究所、東北大学大学院理学研究科、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所

### (2) 極限の探求に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成

(萩田武史 東京女子大学現代教養学部)

### (3) 複合相関が織りなす極限マテリアル- 原子スケールからのアプローチ

(松下雄一郎 東京工業大学科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所)

〔分担機関〕東京大学大学院工学系研究科、東京大学大学院理学系研究科、東京大学光量子科学研究センター

## ②複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究

### (1) 多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発

(伊藤伸泰 理化学研究所計算科学研究機構)

〔分担機関〕兵庫県立大学大学院、理化学研究所、東京工業大学科学技術創成研究院、東京大学大学院工学系研究科、産業技術総合研究所人工知能研究センター、神戸大学経済経営研究所

### (2) 堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現

(藤井孝藏 東京理科大学工学部)

## ③太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明

### (1) 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明

(牧野 淳一郎 神戸大学大学院理学研究科)

〔分担機関〕東京工業大学、神戸大学、名古屋大学、筑波大学

## ④思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用

### (1) 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ

(銅谷賢治 沖縄科学技術大学院大学神経計算ユニット)

〔分担機関〕京都大学情報学研究科、京都大学情報学研究科、理化学研究所生命システム研究センター、東京大学情報理工学研究科、沖縄科学技術大学院大学学園、京都大学、理化学研究所、電気通信大学

### (2) ボトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション

(神崎亮平 東京大学先端科学技術研究センター)

# ポスト「京」で出来ること（健康長寿社会の実現）

## 重点課題 2：個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

### 目標

がん、循環器系、神経系など、全身の疾患に対して、統合計算生命科学による個別化・予防医療を実現

- ・薬剤選択および治療法選択の最適化
- ・創薬ターゲットの探索、治療法開発

大腸がん患者さんでは、肺がんの原因遺伝子の変異は無視される



	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Tamoxifen</li> <li>•Anastrozole</li> <li>•Doxorubicin</li> <li>•Paclitaxel</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Cisplatin</li> <li>•Etoposide</li> <li>•Amrubicin</li> <li>•Cyclophosphamide</li> <li>•Doxorubicin</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>•5FU</li> <li>•LFT</li> <li>•Oxaliplatin</li> <li>•Irinotecan</li> </ul>
	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Idarubicin</li> <li>•Daunorubicin</li> <li>•Cytarabine</li> </ul>

臓器別による抗癌剤の選択のみ

私のがんにとりあった副作用の無い抗がん剤と治療法がありました！

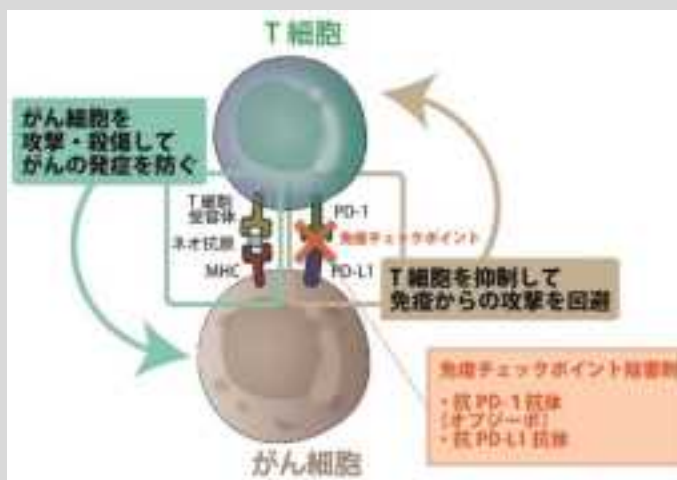


ゲノム変異別分類	抗がん剤・治療法
HER2 amplification	•Trastuzumab •Lapatinib
EGFR mutation	•Gefitinib •Erlotinib
<b>ALK fusion</b>	<b>•Crizotinib</b>
RET fusion	•Vandetanib
BRAF mutation	•Vemurafenib
PIK3CA mutation	•Temsirolimus
BCR-ABL fusion cKIT mutation	•Imatinib

### 「京」

稀な原因遺伝子の変異の解析により、効果的な治療や創薬が可能

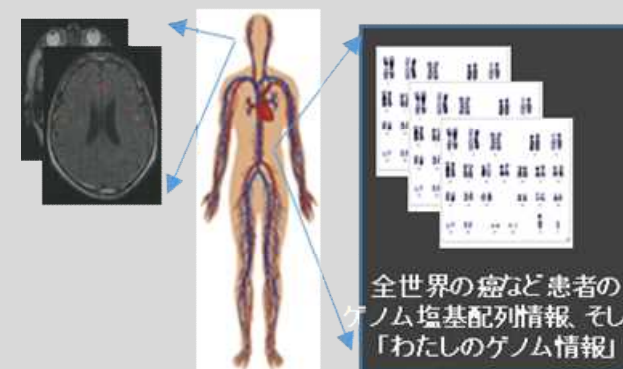
- ・100日で1000検体のがんに関連する原因遺伝子の変異の同定が可能
- ・免疫チェックポイント阻害薬「オプジーボ」等が顕著に効果を表す患者のスクリーニングが可能となるなど先行的な成果を創出



### ポスト「京」

遺伝子の変異に関する情報やゲノム塩基配列情報のデータベース、治療薬の治療実績等を組み合わせることにより、**がんのプレジジョン・メディシン（精密医療）**を実現し、疾患の早期発見、画期的治療法の開発、健康寿命の**延伸に貢献**

- ・1日で1000検体のがんに関連する原因遺伝子変異を解析することにより、適切な治療方法の選択が可能



# ポスト「京」で出来ること（防災・環境問題）

## 重点課題4：観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

### 目標

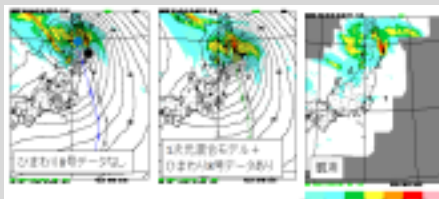
気象衛星や新しいレーダーで得られる大量の観測データを用いたデータ同化によって、局地的大雨や竜巻、台風等を高精度に予測する手法を開発

人の活動の環境への影響を予測し、監視するシステムの基盤を構築し、環境政策や防災、健康対策へ貢献



### 「京」

・ひまわり8号の雲などの移動から計算した**高頻度な大気追跡風や海面水温を用いたデータ同化**により、台風の強度や位置の予測精度が向上し、従来よりも6時間程度早く予測が可能



黒線：ベストトラック  
青・赤線：予測した台風の経路

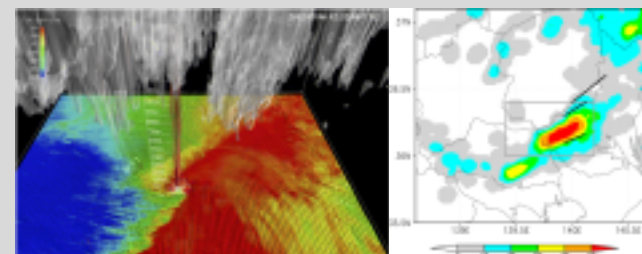
ひまわり8号の高頻度観測データを用いた台風10号の予測結果。データ同化により、経路の誤差が減少。

・一ヶ月予報の実現に向けて、全地球規模で台風の源となる**大気の大規模な乱れを再現**



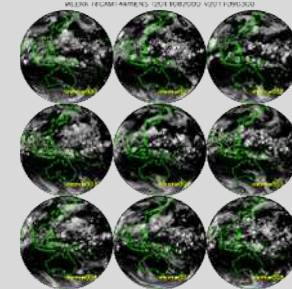
### ポスト「京」

・より多くの観測ビッグデータをデータ同化し、高分解能かつ多数のアンサンブル予報によって、豪雨などの現象について、**約12時間前からの「京」よりさらに高精度の予測が可能**



竜巻の雲とメソ渦の予測（左）、将来の考えられる予測情報としての竜巻の発生予測確率分布（右）

・人工衛星データ等のリアルタイムのデータ同化による大気の流れを**詳細に再現し**、大規模アンサンブル計算によって、**一ヶ月後の台風の発生確率の予測が可能**



# ポスト「京」で出来ること（エネルギー問題）

## 重点課題 5：エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

### 目標

循環型エネルギー社会の実現のため、二次電池、燃料電池などの原子・分子・電子レベルのマイクロ機構を計算科学により解明し、高効率、低コスト、環境にやさしく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立

### 「京」(現在)

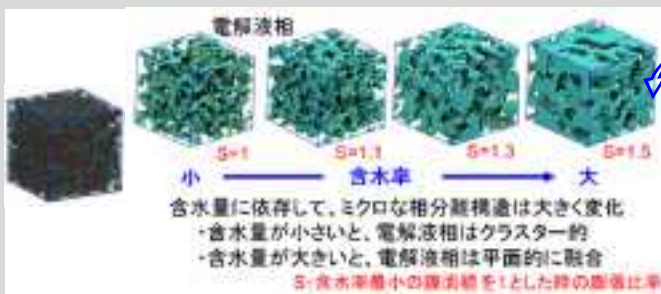
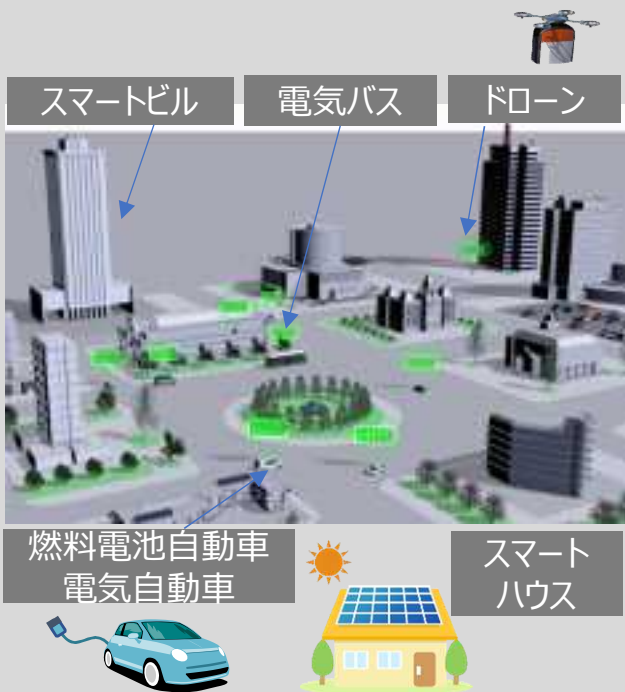
電極界面や高分子電解質膜におけるマイクロ機構の解明により、高効率、長寿命、高信頼性等、燃料電池の性能を向上

・高分子電解質膜の**100万原子のシミュレーションが1日で可能**となり、高分子電解質膜の様々な候補物質等の検討によって、燃料電池の性能向上に向けた実用化研究が進展

### ポスト「京」(将来)

・**1億原子のシミュレーションが1日で可能**となり、燃料電池の性能を決定する電極4相界面※の構造や物質輸送などの実態を解明し、**より高性能な燃料電池が実用化**

※ 集電材、電極（触媒）、アイオノマー、電解液



高分子電解質膜と水層の含水率依存性

J. Phys. Chem. C 120, 25832–25842 (2016).



動作中の燃料電池セルの模式図

# ポスト「京」で出来ること（エネルギー問題）

## 重点課題 6：革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

### 目標

次世代の実機石炭ガス化炉・超臨界圧CO<sub>2</sub>タービンの設計と操作条件の適切化により、早期商用化を実現し、日本の次世代火力発電技術の国際競争力強化に貢献

・炉全系における反応-炉構造伝熱・高温損傷-冷却のマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムの研究開発

・先行している空気吹きガス化炉に加えて、O<sub>2</sub>吹き炉、O<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>吹き炉の商用化を加速

### 「京」

・**実機の数分の1スケールである実証試験機**の亜臨界状態での燃焼解析、熱伝導解析、非線形構造解析等の**小規模な単一現象解析**※が可能

※ 燃焼解析規模：2億節点



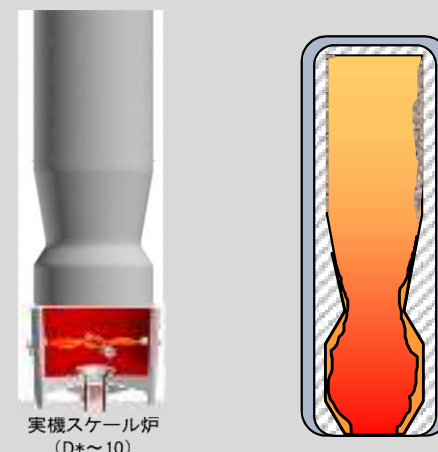
石炭ガス化炉と燃焼器の実証試験機における燃焼解析の様子

### ポスト「京」

・**実機スケールによる炉全系の反応-炉構造伝熱・高温損傷-冷却連成シミュレーション**により、実際の現象を高精度で再現し、バーナ形状、燃焼器形状、冷却設備配置等の**設計**や炭種に応じた空気比等の**操作条件の適切化、構造信頼性の向上**を実現

※ 燃焼解析規模：100億節点

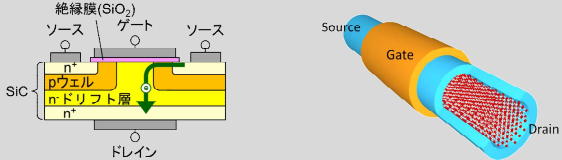
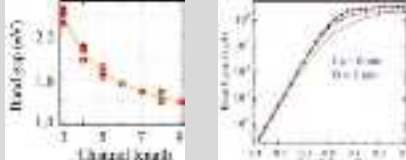
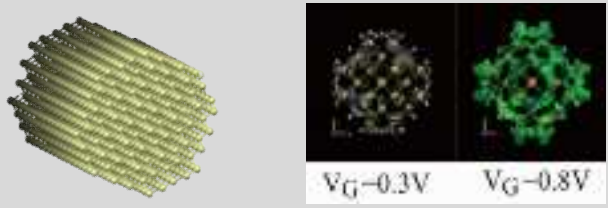

・商用化時期の大幅な短縮に貢献



実機スケール炉 (D\*~10)

# ポスト「京」で出来ること（産業競争力の強化）

## 重点課題 7：次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

目 標	「京」	ポスト「京」
<p>現代社会に不可欠な先端電子デバイスや高機能物質・材料について、</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・微細化による量子効果や形状、不純物影響予測</li> <li>・化合物・異種物質接合界面での物性発現予測</li> </ul> <p>による新しい物理原理に基づく機能の創出</p> <p>①デバイスの電子状態を第一原理計算</p>  <p>パワー制御デバイス      Siナノワイヤー</p> <p>電子状態入力</p> <p>②デバイスの特性を統計や実験値を参照し予測</p> 	<p>微細化に伴う量子効果を考慮した特性予測により、小型省電力に向けた半導体デバイスの微細化開発が進展</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・最大100時間での10万個のシリコン原子シミュレーションによるナノワイヤ半導体の極限性能の予測によって、小型省電力化に向けて半導体デバイス微細化開発が進展</li> </ul> <p>「超微細デバイスを構成する原子全てをシミュレーション」</p> <p>10万原子結晶の第一原理計算</p>  <p>シリコン(Si)10万原子群ナノワイヤ構造      ナノワイヤ断面電流分布によるデバイス特性予測</p>	<p>新構造による特性の向上や複雑界面のシミュレーションによる半導体デバイスの性能向上を実現</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・化合物複雑界面の計算によって、ワイドギャップ半導体の特性の向上や製造プロセスを革新</li> </ul> <p>「異種物質接合界面を含むリアルデバイスシミュレーション」</p> <p>現実の複雑界面の第一原理計算</p>  <p>SiC/SiO<sub>2</sub>界面の未解決トラップ準位の解明      GaN結晶成長の機構解明</p>

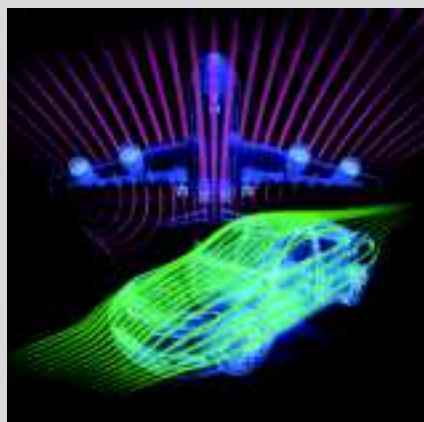
# ポスト「京」で出来ること（産業競争力の強化）

## 重点課題 8：近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

### 目標

短時間での定常空力予測を行うアプリケーションの開発により、風洞試験の代替、形状最適化の実現

時々刻々と変化する運転条件変化を考慮した構造解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を備えたアプリケーションの開発により、操縦安定性、車室内環境を同時に考慮した空力設計の実現



### 「京」

風洞試験の代替や、操縦安定性や車室内騒音の予測により、産業界において付加価値を持たせた商品の展開が進展

- ・風洞実験値に対して、1～2%の差で空気抵抗を予測
- ・空力と車両運動を考慮した解析による高速走行安定性の評価や、空力・車体の振動・音響を考慮した解析による車室内騒音を予測

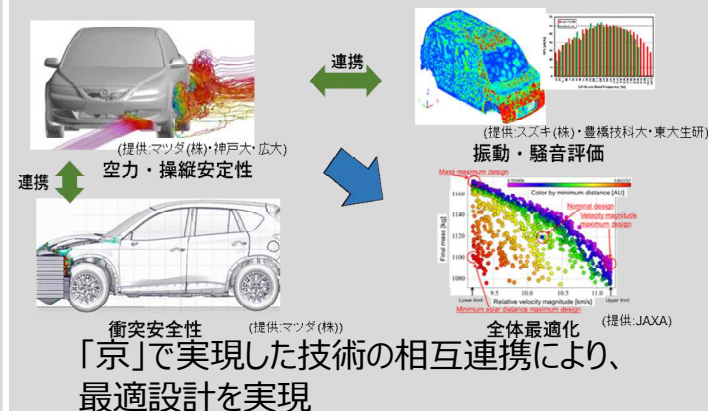


自動車周りの空力解析

### ポスト「京」

空力・強度・音・熱・振動などを同時に考慮した最適設計により、新素材や新たな動力を用いた次世代自動車を、早急にかつ高い品質で実現

- ・「京」の時代には十数日必要であった一つの車体形状に対する評価が12時間以内で可能となり、次世代自動車の性能が飛躍的に向上し、大幅なコストダウンが実現



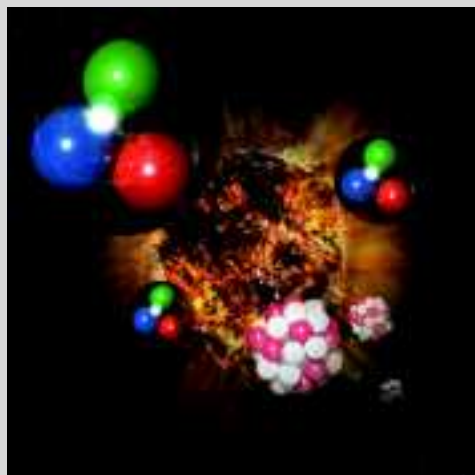


# ポスト「京」で出来ること（宇宙）

## 重点課題 9：宇宙の基本法則と進化の解明

### 目標

素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の精密計算を実現し、大型実験・観測のデータとの組み合わせにより、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明



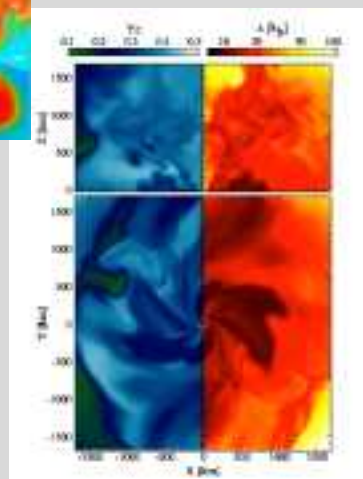
### 「京」

- ・回転や対流効果を考慮した超新星爆発シミュレーションにより、超新星爆発の再現に成功し、メカニズムの解明に貢献
- ・一般相対論的重力効果等を取り入れたより精密な計算の進展によって、多様な爆発現象の理解が進展



「京」を用いた超新星爆発の再現

中性子星の合体後に物質が飛び散る様子



### ポスト「京」

- ・多様な効果を考慮した高精度の計算を、様々な条件で実行し、大型光学望遠鏡や重力波望遠鏡による観測との連携が可能になることで、多様な超新星爆発や中性子星連星合体や、重元素合成のメカニズムを解明



中性子星合体の想像図  
(国立天文台)



## アプリケーションソフト普及戦略

### 最先端アプリ講習会実績

- ◆参加者からのフィードバックで改善・改良
- ◆企業向け講習会(OpenMX) 実施

No	開催日	講座名
1	2016/3/8	RSDFT(第一原理)
2	2016/7/26	HΦ(強相関係)
3	2016/9/8	xTAPP(第一原理)
4	2016/12/1	HΦ(強相関係)
5	2017/12/13	HΦ(強相関係)
6	2017/1/15	OpenMX(第一原理)
7	2017/6/29	HΦ(強相関係)
8	2017/7/20	ALPS(格子模型)
9	2017/8/30	mVMC(有効模型)
10	2017/10/3	MateriApps LIVE !
11	2017/10/13	OpenMX基礎(第一原理)
12	2017/10/26	xTAPP(第一原理)
13	2017/11/24	SLOMOM(光電子)
14	2017/12/20	RESPACK(相互作用)
15	2018/1/26	OpenMX基礎(第一原理)
16	2018/3/2	結晶構造3Dモデリング
17	2018/3/5	MateriApps LIVE!

平均10名参加

### Pj開発公開アプリ



### アプリ開発者と利用者の共創の場



- 230アプリ登録
- 検索機能
- 11,500PV/月（海外20%）
- 約2500ユーザ/月



フリーアプリ、OS、可視化ツール搭載  
パッケージ。教育ツールに最適  
(100件/月のダウンロード実績)



開発者・利用者で  
エコシステム構築

## 第5期科学技術基本計画（平成28年1月22日閣議決定）

### 第3章 経済・社会的課題への対応

#### （1）持続的な成長と地域社会の自律的な発展

##### ③ ものづくり・コトづくりの競争力向上

また、**計算科学・データ科学**を駆使した革新的な機能性材料、構造材料等の創製を進めるとともに、その開発期間の大幅な短縮を実現する。

#### （3）地球規模課題への対応と世界の発展への貢献

##### ① 地球規模の気候変動への対応

具体的には、気候変動の監視のため、人工衛星、レーダ、センサ等による地球環境の継続的観測や、**スーパーコンピュータ**等を活用した予測技術の高度化、気候変動メカニズムの解明を進め、全球地球観測システムの構築に貢献するとともに、気候変動の緩和のため、二酸化炭素回収貯留技術や温室効果ガスの排出量算定・検証技術等の研究開発を推進し、さらには、長期的視野に立った温室効果ガスの抜本的な排出削減を実現するための戦略策定を進める。

### 第4章 科学技術イノベーションの基盤的な力の強化

#### （2）知の基盤の強化

##### ② 研究開発活動を支える共通基盤技術、施設・設備、情報基盤の戦略的強化

##### ii）産学官が利用する研究施設・設備及び知的基盤の整備・共用、ネットワーク化

このため、国は、「**特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律**」に基づく**最先端の大型研究施設**について、産学官の幅広い共用と利用体制構築、計画的な高度化、関連する技術開発等に対する適切な支援を行う。

## 新しい経済政策パッケージ (平成29年12月8日閣議決定)

### 第三章 生産性革命

#### 3. Society 5.0の社会実装と破壊的イノベーションによる生産性革命

##### (3) イノベーション促進基盤の抜本的強化

##### ① Society 5.0の本格実装に向けた戦略的イノベーションの推進

我が国の研究力や企業の生産性向上に資する大型放射光施設、スーパーコンピュータ等最先端の大型研究施設の産学官共用を推進する。

## 経済財政運営と改革の基本方針2018 (平成30年6月15日閣議決定)

### 第2章 力強い経済成長の実現に向けた重点的な取組

#### 5. 重要課題への取組

##### (2) 投資とイノベーションの促進

##### ② 科学技術・イノベーションの推進

「第5期科学技術基本計画」及び「統合イノベーション戦略」に基づき、官民を挙げて研究開発等を推進する。若手研究者の重点支援やオープンイノベーションの仕組みの推進等により、我が国の基礎科学力・基盤技術から社会への実装までを強化するとともに地方創生につなげる。

## 未来投資戦略2018—Society 5.0の実現に向けた改革— (平成30年6月15日閣議決定)

### 第2部 具体的施策

#### Ⅱ 経済構造革新への基盤づくり

##### 〔1〕データ駆動型社会の共通インフラの整備

#### 3. イノベーションを生み出す大学改革と産学官連携・ベンチャー支援

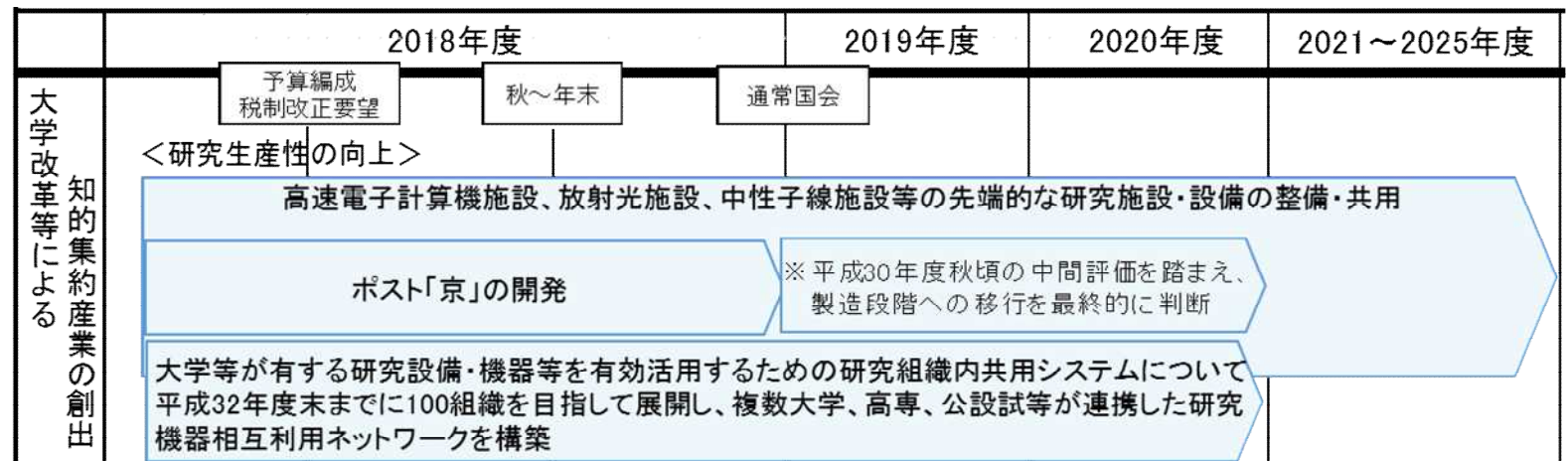
##### 3-1. 自律的なイノベーションエコシステムの構築

##### (3) 新たに講ずべき具体的施策

##### i) 大学改革等による知的集約産業の創出

##### ③ 研究生産性の向上

・産学官連携を支え、生産性の飛躍的向上の基盤となる**高速電子計算機施設**、放射光施設、中性子線施設等の**先端的な研究施設・設備の整備・共用**や**ポスト「京」の開発**を進める。



## 統合イノベーション戦略 (平成30年6月15日閣議決定)

### 第3章 知の創造

#### (1) 大学改革等によるイノベーション・エコシステムの創出

##### ③ 今後の方向性及び具体的に講ずる主要施策

##### iii) 研究生産性の向上

##### <研究施設・設備等の整備・共用の促進>

・文部科学省において、大学・研究機関等の**先端的な研究施設・設備・機器等の整備・共用を進めつつ**、周辺の大学や企業等が研究施設等を相互に活用するためのネットワークの構築を推進（産学官連携を支え研究開発投資効果を最大化）

## 世界最先端デジタル国家創造宣言・官民データ活用推進基本計画 (平成30年6月15日閣議決定)

### 第2部 官民データ活用推進基本計画

#### ○次世代医療ICTの研究開発・実用化

我が国が官民データの活用に関する技術力を自律的に保持することが重要であり、そのためには、**AI・IoT・クラウド関連技術等その他先端技術に関する研究開発**は、関係省庁が別々に取り組むのではなく、分野横断で取り組むべきものであり、政府一体となり計画的に実施する必要がある。

## 健康・医療戦略 (平成26年7月22日閣議決定、平成29年2月17日一部変更)

### 2. 各論

(1) 世界最高水準の医療の提供に資する医療分野の研究開発等に関する施策

2) 国が行う医療分野の研究開発の環境の整備

#### ○研究基盤の整備

各省が個々に推進してきたデータベースの連携を推進する。患者由来の良質な試料などの研究基盤の整備を行い、放射光施設、スーパーコンピュータなどの既存の大規模先端研究基盤や先端的な計測分析機器等を備えた小規模施設との連携を取りつつ、科学技術共通の基盤施設をより使いやすくし、医療分野の研究開発の更なる促進に活用する。

(4) オールジャパンでの医療等データ利活用基盤構築・ICT 利活用推進に関する施策

3) 医療・介護・健康分野の現場の高度なデジタル化

#### Ⅱ - Ⅱ - (9) 研究開発【官民データ基本法第16 条関係】

スーパーコンピュータを活用したシミュレーション手法による医療、創薬プロセスの高度化及びその製薬会社等による利用の促進等の基盤強化を図るため、効率的な創薬の促進に資する最先端のスーパーコンピュータの開発を行う。

## 医療分野研究開発推進計画 (平成26年7月22日健康・医療戦略推進本部決定、平成29年2月17日一部変更)

### II. 集中的かつ計画的に講ずべき医療分野研究開発等施策

#### 1. 課題解決に向けて求められる取組

##### (4) ICTに関する取組

遠隔医療や在宅医療に資する技術に関する研究開発、**生体シミュレーション技術の開発と活用**、ゲノム医療実現のためのデータ解析技術の活用、問診・診断・手術・治療における一層のデジタル技術の活用など、医療の包括的なICT化に関する研究開発等を推進するとともに、当該医療情報を扱うシステム間における相互運用性を確保する必要がある。

##### ●シミュレーション技術の高度化

・**スーパーコンピュータを活用したシミュレーション手法による医療、創薬プロセスの高度化及びその製薬会社等による利用の促進等の基盤強化を図るため、効率的な創薬の促進に資する最先端のスーパーコンピュータの開発を行う。**

##### (5) 世界最先端の医療の実現に向けた取組

##### ②ゲノム医療の実現

基盤整備に当たっては詳細な臨床情報が付帯された良質な生体試料を収集・保存することに留意する必要がある。これらの臨床試料を医療や創薬に活用するためには、必要なデータを確実に取得する計測技術や膨大なデータを解析する技術の開発、**スーパーコンピュータの整備**、データベースを含めたシステム環境の整備・運用が必要である。



## 医療分野研究開発推進計画 (続き)

### (9) 研究基盤の整備

既存の**大規模先端研究基盤**（放射光施設、**スーパーコンピュータ等**）や先端的な計測分析機器等を備えた小規模施設と連携を取りつつ、科学技術共通の基盤施設をより使いやすくし、医療分野の研究開発の更なる促進に活用することが重要である。

#### ● ライフサイエンス研究等に係る研究基盤の整備

・**スーパーコンピュータ「京」**を中核とする革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（**H P C I**）を最大限活用し、医療及び創薬に関する**シミュレーション手法**を確立し、医療や創薬プロセスの高度化を更に推進する。

## 2. 新たな医療分野の研究開発体制が担うべき役割

### (3) 共通基盤の整備・利活用

創薬支援ネットワークを中心としたオールジャパンでの創薬支援基盤の一層の利活用に加え、**先端的な大型研究施設、スーパーコンピュータ、先端計測分析機器**をはじめとする**先端研究基盤**を形成する**諸施設・設備**の産学官の研究者の**利用を推進**するなど、**科学技術共通基盤の利活用を進める**。

#### ● 科学技術共通基盤の利活用の推進

・**先端的な大型研究施設やスーパーコンピュータ等の利活用を進めるための基盤となる学術情報ネットワークの整備を行う**。

## 特定国立研究開発法人による研究開発等を促進するための基本的な方針 (平成28年6月28日閣議決定)

### 第二 特定国立研究開発法人による研究開発等の促進に関して政府が講ずべき措置に関する基本的な事項

#### 1. 資源の確保・充実

##### (3) 先端研究施設の整備・運転・共用の促進

政府は、先端研究施設の共用の状況を把握するとともに、運転管理体制の維持・向上の重要性を踏まえつつ、大学、民間企業等との先端研究施設の利用を促進するための施設整備費やその運営に係る経費等について、必要な措置を行う。