

H P C I 戦略プログラム について

平成28年2月26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

- ◆ 全体概要
- ◆ 経緯と推進体制
- ◆ 予算額推移
- ◆ 「京」の戦略的利用
- ◆ 事後評価の進め方

本事業の位置付け

- 【政策目標】 基礎研究の充実及び研究の推進のための環境整備
- 【施策目標】 科学技術振興のための基盤の強化
- 【達成目標】 平成24年9月末の共用開始を目指し、スーパーコンピュータ「京」を中核とするHPCIを構築するとともに利用体制を整備する。また共用開始後、画期的な研究成果の創出に向けた利用が図られる。



HPCI戦略プログラム

【目的】 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。

【事業概要】

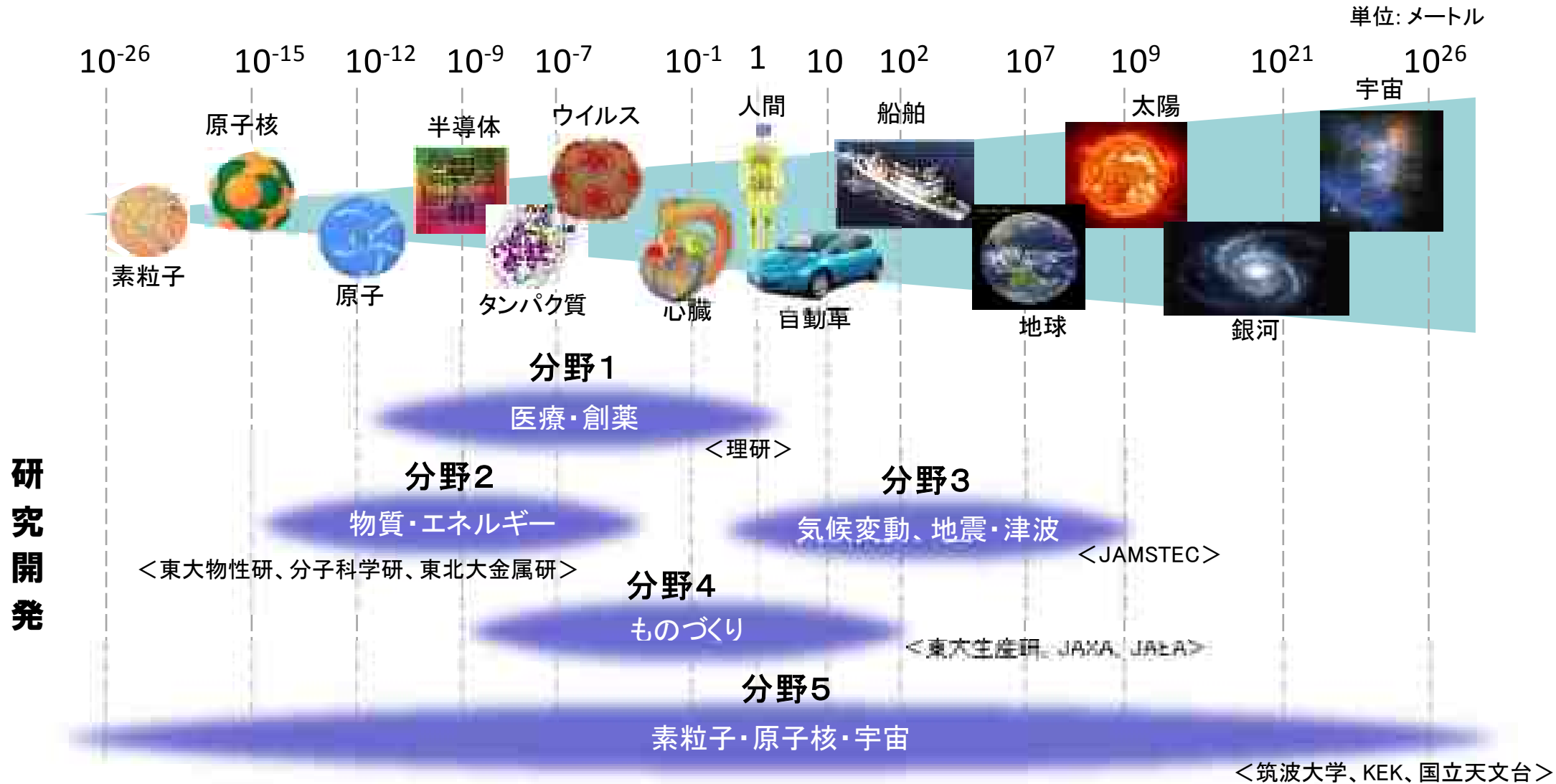
- 社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる5つの「戦略分野」において、
- a. 達成すべき「戦略目標」を定め、その目標に沿った研究開発を推進する。
 - b. 我が国の計算科学技術推進体制を構築するため、スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメントや研究支援体制の確立、人材育成と人的ネットワークの形成、研究成果の普及等を図る。



HPCIを最大限活用した
研究開発プロジェクト

アウトカム	【定量的な成果目標】					
	a. 各戦略分野の「戦略目標」を具体化した「研究開発目標」(計25目標)を達成する。					
予算	b. 各戦略分野における計算科学技術推進体制を構築する。					
	【成果指標】					
	a. 「研究開発目標」の達成数					
	b. 計算科学技術推進体制の構築状況					
	H23	H24	H25	H26	H27	合計
	25億	25億 (他、補正5億)	26億	22億	20億	122億 (補正込み)

戦略分野での研究開発と体制構築



体制構築

○研究支援

- ・アプリケーションの利用支援 等

○研究成果の普及

- ・開発したアプリケーションの公開 等

○人材育成と人的ネットワークの形成

- ・教育プログラムや研究会の開催 等

○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

- ・複数機関による効率的利用と最適配分 等

経緯と推進体制

経緯

- 平成19年度 : 文部科学省の「次世代スーパーコンピュータ作業部会(科学技術・学術審議会)」で基本的方針を検討
- 平成20～21年度 : 「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」を計16回開催。社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる5つの戦略分野を決定
- 平成21年度 : 公募を経て、実施可能性調査実施機関を決定
- 平成22年度 : 「戦略機関」を決定
研究開発目標を設定
- 平成23年度 : 事業を開始
- 平成25年度 : 中間評価を実施
- 平成27・28年度 : 事後評価

推進体制



(補足) 推進体制 (HPCI戦略プログラム推進委員会)

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。

HPCI戦略プログラム推進委員会

○プログラムマネージャ

土居 範久(慶應義塾大学 名誉教授)

○分野マネージャ

[分野1] 中村春木(大阪大学 蛋白質研究所 所長/教授)

[分野2] 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3] 矢川元基(原子力安全研究協会 評議員 会長)

[分野4] 小林敏雄(日本自動車研究所 顧問)

[分野5] 小柳義夫(神戸大学 計算科学教育センター 特命教授)

○理化学研究所

平尾 公彦(理化学研究所計算科学研究機構 機構長)

プログラムマネージャ	: 全体的な観点からプロジェクトの実施計画や進捗に関し提言を行う。
分野マネージャ	: 統括責任者等のプロジェクト実施者との意見交換とプロジェクト実施に係る指導・助言を行う。
計算科学研究機構長	: 機構と戦略プログラムの連携・協力の観点からプロジェクト実施に係る意見を述べる。

中間評価や事後評価を行う場合、上記委員会での議論の後、文部科学省の「科学技術・学術審議会」における外部評価を受けることで評価結果が確定する。

（補足）推進体制（分野別作業部会 委員一覧）

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
	茅 幸二	理化学研究所研究顧問
	児玉 龍彦	東京大学先端科学技術研究センター教授
	菅野 純夫	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授
	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
	松本 洋一郎	理化学研究所理事
	美宅 成樹	豊田理化学研究所客員フェロー
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
	栗野 祐二	慶應義塾大学理工学部電子工学科教授
	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
	魚崎 浩平	物質・材料研究機構 フェロー
	加藤 雅治	東京工業大学大学院総合理工学研究科教授
	高梨 弘毅	東北大学金属材料研究所所長
	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
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
	鬼頭 昭雄	筑波大学生命環境系主幹研究員

分野3 (続き)	住 明正	国立環境研究所理事長
	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
	長谷川 昭	東北大学名誉教授
分野4	(分野マネージャ) 小林 敏雄	日本自動車研究所顧問
	天野 吉和	富士通顧問
	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
	押山 淳	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻教授
	笠 俊司	IHI技術開発本部技術企画部部長
	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
	澤田 隆	日本工学会(工学系学協会連合)事務局長
分野5	古川 雅人	九州大学大学院工学研究院機械工学部門教授
	(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
	相原 博昭	東京大学大学院理学系研究科教授
	海老沢 研	宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所教授
	延與 秀人	理化学研究所仁科加速器研究センター長
	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

(補足)「戦略分野」「戦略機関」と「研究開発目標」の設定

【「戦略分野」の決定】

○ 「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」での16回の検討を通じて、平成21年7月、5つの「戦略分野」を決定。

- 【判断軸】
- ・ 次世代スパコンの能力を必要とする課題があること
 - ・ 社会的・国家的見地から高い要請があること
 - ・ 稼働後5年間で具体的な成果を出す見通しがあること

【「戦略機関」の公募と決定】

○ 平成21年8～10月に公募を行い、書類審査・ヒアリングを経て、平成22年7月「戦略機関」を決定。

(分野によっては、成果の最大化のため、研究機関の合同化を指示)

- 【審査の観点】
- ・ 事業の目標が「戦略分野」の趣旨に沿っていること
 - ・ 稼働後5年間で世界最高水準の成果を出せる可能性が高いこと
 - ・ 次世代スパコンの能力を効果的に活用すること
 - ・ 実施体制が適切であること
 - ・ 実施体制として、戦略分野において一定のコミュニティを代表できること
 - ・ その分野のコミュニティを取りまとめるための実績と可能性があること

【「研究開発目標」の設定】

○ 平成22年度に「HPCI戦略プログラム推進委員会」の作業部会が、各「戦略機関」を強く指導・助言しながら「研究開発課題」を策定。平成23年度から事業開始。

- 【検討の観点】
- ・ スパコンを最大に活用して成果に結びつけるべく「研究開発課題」の項目数と内容を検討する。
(「作業部会」の指摘により「研究開発課題」の修正もなされた。)

5つの戦略分野と戦略機関

<戦略分野>

<戦略機関>

分野1

予測する生命科学・医療および創薬基盤

ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測を行う。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。

・理化学研究所

分野2

新物質・エネルギー創成

物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。

・東京大学物性研究所(代表)
・分子科学研究所
・東北大学金属材料研究所

分野3

防災・減災に資する地球変動予測

高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。

・海洋研究開発機構

分野4

次世代ものづくり

先端的要素技術の創成～組合せ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。

・東京大学生産技術研究所(代表)
・宇宙航空研究開発機構
・日本原子力研究開発機構

分野5

物質と宇宙の起源と構造

物質の究極的微細構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。

・筑波大学(代表)
・高エネルギー加速器研究機構
・国立天文台

25の研究開発目標

戦略目標

研究開発目標

【分野1】

大規模シミュレーションとデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、そして薬剤・医療のデザインの実現

- ① 細胞内の複雑な分子シミュレーションにより、細胞内のタンパク質の挙動を理解
- ② 創薬標的タンパク質と薬剤化合物との結合を高精度に予測し、計算創薬を確立
- ③ 分子から臓器までの統合シミュレーションにより、疾患を解明
- ④ ゲノムやがん等の関連を大規模データ解析することにより、そのメカニズムを理解

【分野2】

計算物質科学：
基礎科学の源流からデバイス機能とエネルギー変換を操る奔流へ

- ⑤ できるだけ高い温度で超伝導になる物質を探索するための手法開発
- ⑥ 光合成を通して光からエネルギーを得る化学反応の仕組みの解明
- ⑦ 半導体微細構造の制御で発現する電子デバイス機能の予測
- ⑧ ウイルス1個の丸ごとシミュレーションによる感染過程の理解
- ⑨ 燃料電池、リチウムイオン電池の性能向上に向けた電極上化学反応の解明
- ⑩ メタンハイドレートを効率的で安全に採掘するための基礎特性の解析
- ⑪ 鉄鋼材料に亀裂が生じる仕組みを原子レベルから解明

【分野3】

地球温暖化時の台風の動向の全球的予測と集中豪雨の予測実証、そして次世代型地震ハザードマップの基盤構築と津波警報の高精度化

- ⑫ 全球で雲を露わに表現するモデルにより、2週間以上先の天候予測可能性を実証
- ⑬ 雲を精緻に表現する数値予報技術を開発し、集中豪雨などの高精度な予測を実証
- ⑭ 過去の地震被害の発生要因を解析し、短周期地震動を再現するモデルを開発
- ⑮ 広域での津波の遡上を高速、高解像度で予測する手法の開発
- ⑯ 都市の全構造物の地震応答を計算する大規模シミュレーションの実現

【分野4】

21世紀のものづくりを抜本的に変革する計算科学技術の戦略的推進

- ⑰ 流体機器の性能を飛躍的に向上させる新しい製品概念の実証と実用可能性の検証
- ⑱ ナノ構造創製の原子レベルでの解析とデバイス開発での有効性の実証
- ⑲ 従来よりも格段に精度の高い、流れの予測を実現し、その産業上の効果を実証
- ⑳ 大規模設計問題のための設計探索手法を開発し、実際の設計における有効性を実証
- ㉑ 地震時の大型プラントや機器系統の挙動を俯瞰的かつ詳細に分析する手法を確立

【分野5】

宇宙の歴史における、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、計算科学的手法で統一的に理解

- ⑳ 4次元時空シミュレーションによるクォーク力学と核力の解明
- ㉑ 多粒子シミュレーションによる、核力から原子核の構造解明と核変換などへの応用
- ㉒ 超新星爆発と中性子星合体の解明
- ㉓ ダークマターの密度ゆらぎからの天体形成過程の解明

予算額の推移

[千円]

	H23年度	H24年度	H24年度 (補正予算) (※2)	H25年度	H26年度	H27年度
分野1	493,529	493,530	61,000	493,674	441,910	397,910
分野2	493,529	493,530	60,000	493,674	441,910	397,910
分野3	493,529	493,530	161,000	597,674	441,910	397,910
分野4	493,529	493,530	112,500	493,674	441,910	397,910
分野5	493,529	493,530	92,000	493,674	441,910	397,910
総計(※1)	2,467,643	2,467,650	486,500	2,572,370	2,209,550	1,989,550

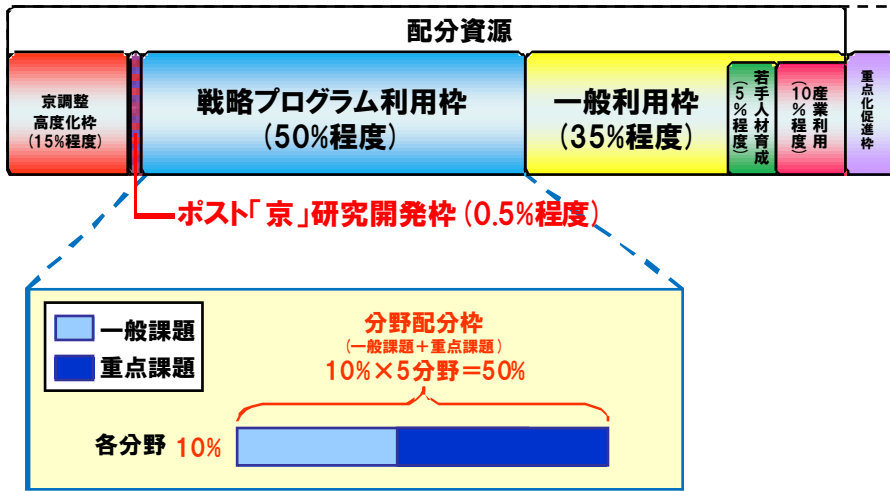
(※1) 四捨五入のため、合計値が一致しない場合がある。

(※2) 分野内での「京」活用環境の基盤整備、開発したアプリケーションの利用促進(産業界やコミュニティへの普及)のための環境整備、人材育成のための教育配信システムの整備。

「京」の計算資源配分（「京」の共用開始後）

画期的な科学的成果や社会的課題の解決に資する成果を創出するため、分野ごとのボトムアップの計算資源配分と、プログラム全体を通じたトップダウンの計算資源配分を両立させ、「京」の計算資源を戦略的に配分

「京」の利用枠（以下の利用枠は、H27年度上期のもの）



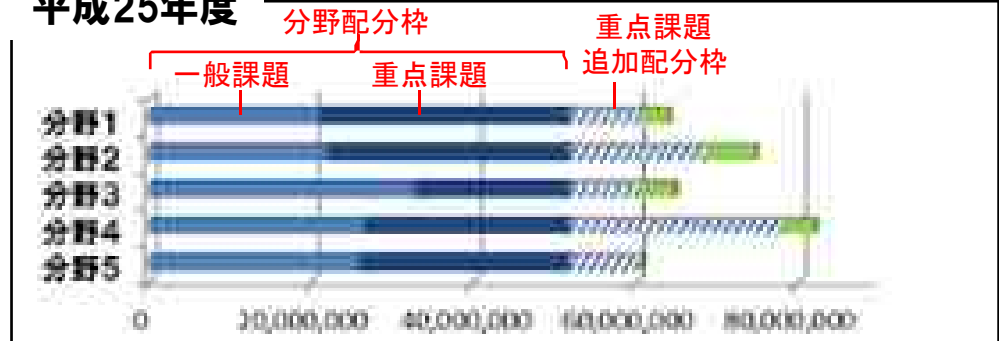
- ①各分野に計算資源を均等配分し、各課題への基礎的配分は分野内で決定 (H24年度: 一般配分枠/H25年度以降: 一般課題)
- ②分野ごとに重点課題を選定。(H25年度以降: 重点課題)
- ③その上で、プログラム全体を通して重点課題の一部に計算資源を追加配分。(H24年度: 重点配分枠(優先課題)/H25年度以降: 重点課題追加配分枠)
- ④さらに、プログラム全体を通して早期の成果創出が期待される課題に計算資源を追加配分。(加速枠)

なお、戦略プログラムの事業最終年度は、最終目標の達成にむけて、分野の裁量分を多くし、追加配分の申請に係る研究者の負担をなくす観点から、各分野に計算資源を均等配分。

平成24年度下期



平成25年度



平成26年度



平成27年度



課題ごとの「京」の計算資源配分及び利用状況(「京」の共用開始後)(1/2)

	課題名	H24下期～H27(2015年12月末時点)合計		
		割当資源量(NH)	利用実績(NH)	利用率
分野1	研究開発課題(1) 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション	61,616,998	43,308,627	70.3%
	研究開発課題(2) 創薬応用シミュレーション	55,848,361	51,582,883	92.4%
	研究開発課題(3) 予測医療に向けた階層統合シミュレーション	66,487,334	37,434,039	56.3%
	研究開発課題(4) 大規模生命データ解析	47,276,752	40,450,454	85.6%
	計算科学推進体制構築	1,945,772	1,139,923	58.6%
分野1合計		233,175,217	173,915,926	74.6%
分野2	研究開発課題(1) 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明	39,780,424	33,956,458	85.4%
	研究開発課題(2) 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開	29,137,374	23,710,232	81.4%
	研究開発課題(3) 密度汎関数理論によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	45,902,231	38,701,223	84.3%
	研究開発課題(4) 全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開	47,009,328	38,684,757	82.3%
	研究開発課題(5) エネルギー変換の界面科学	41,108,535	32,113,452	78.1%
	研究開発課題(6) 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性	14,026,381	10,182,780	72.6%
	研究開発課題(7) 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	16,523,969	11,930,979	72.2%
	計算科学推進体制構築	3,037,669	1,381,200	45.5%
分野2合計		236,525,911	190,661,081	80.6%
分野3	研究開発課題(1) 地球規模の気候・環境変動予測に関する研究	64,375,473	59,090,052	91.8%
	研究開発課題(2) 超高精度メソスケール気象予測の実証	57,035,982	44,058,882	77.2%
	研究開発課題(3) 地震の予測精度の高度化に関する研究	30,989,708	22,430,387	72.4%
	研究開発課題(4) 津波の予測精度の高度化に関する研究	21,898,587	14,380,229	65.7%
	研究開発課題(5) 都市全域の地震等自然災害シミュレーションに関する研究	33,294,467	22,337,866	67.1%
計算科学推進体制構築		-	-	-
分野3合計		207,594,217	162,297,416	78.2%

課題ごとの「京」の計算資源配分及び利用状況(「京」の共用開始後)(2/2)

分野4	研究開発課題(1) 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率・低騒音化に関する研究開発	53,479,356	49,446,251	92.5%
	研究開発課題(2) 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発	31,328,685	28,628,504	91.4%
	研究開発課題(3) 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発	98,029,554	82,354,153	84.0%
	研究開発課題(4) 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発	25,428,605	17,524,715	68.9%
	研究開発課題(5) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発	19,310,605	12,010,006	62.2%
	計算科学推進体制構築	3,770,837	2,491,367	66.1%
分野4合計		231,347,642	192,454,996	83.2%
分野5	研究開発課題(1) 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定	49,435,552	35,189,349	71.2%
	研究開発課題(2) 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用	50,842,814	44,442,842	87.4%
	研究開発課題(3) 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明	43,005,616	33,491,287	77.9%
	研究開発課題(4) ダークマター密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成	53,571,367	36,037,902	67.3%
	計算科学推進体制構築	3,145,322	2,588,455	82.3%
分野5合計		200,000,671	151,749,835	75.9%
HPCI戦略プログラム全体		1,108,643,658	871,079,254	78.6%

※ノード時間積(NH)は、アプリケーションソフトウェアの実行で使用するノード数×実行時間