

HPCI 戦略プログラムに係る質問事項及び回答等一覧

質問事項	対応状況
(1) 共用の促進について	
① 推進体制とマネジメント体制の在り方（自己点検の在り方含む）	
<p>【第3回質問】 戦略プログラムの計算資源の分配、メンバーについて</p>	<p>戦略プログラムでは、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、各分野及び、「HPCI戦略プログラム作業部会」により決定されるボトムアップの計算資源配分と、プログラム全体を通じて「HPCI戦略プログラム推進委員会」にて決定される、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してきた。</p> <p>具体的には、以下通り計算資源の分配を行っている。</p> <p>①「京」全体の計算資源のうち、戦略プログラム利用率を、「京」を含むHPCI計画全体の評価・検討を行う外部有識者からなる「HPCI計画推進委員会」にて決定。</p> <p>②戦略プログラム利用率の一部について、分野配分枠として、計算資源を各分野に均等配分（「HPCI戦略プログラム推進委員会」にて決定）。各課題への基礎的配分は分野ごとに設置している、外部有識者からなる「HPCI戦略プログラム作業部会」の審議を経て決定。</p> <p>③分野ごとに成果の科学的・社会的意義の高い課題を、重点課題として、「HPCI戦略プログラム作業部会」の審議のうえ、「HPCI戦略プログラム推進委員会」にて選定。</p>

	<p>④重点課題の中で、追加で計算資源を配分することで、優れた成果が着実に創出されることが期待される課題に対して「HPCI戦略プログラム推進委員会」にて決定の上、計算資源を追加配分。</p> <p>⑤更に、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を加速枠としてAIGCSが抽出し、「HPCI戦略プログラム推進委員会」での審議を経て、計算資源を追加配分。</p> <p>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。</p> <p>※各年度の配分資源の概要及び委員一覧は、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（第一回）資料2-2（P5、P6、P11）に記載。また、第4回資料【資料1-1】にて補足説明。</p>
② 利用者視点での共用の促進（利用制度の在り方、研究者の負荷軽減含む）	
③ 利用者の拡大（産業利用も含む）	
④ 有償利用の在り方	
⑤ 利用支援の在り方	

⑥ 利用者選定の在り方	
(2) 研究成果の創出及び社会への還元について	
① 研究開発目標の達成状況	
<p>【第2回質問】各分野で設定されている、研究開発目標は全て達成されたか。</p>	<p>(全分野)</p> <p>HPCI戦略プログラム推進委員会において、研究開発について、全ての戦略分野で目標に沿った研究開発が推進され、全ての研究開発目標が着実に達成されたと報告されている。</p> <p>評価内容は、各戦略分野にて作成した報告資料に対し、分野マネージャ承認のうえ、その報告内容を踏まえ、HPCI戦略プログラム推進委員会にて点検結果を取りまとめている。</p> <p>※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（第二回）資料2-1～2-6、参考資料2-1、2-2に記載。</p>
② 科学的成果の創出	
<p>【第2回質問】行政事業レビュー「公開プロセス」(1)のところに書いてある予測可能時間というキーワードに関連して、研究成果の冒頭でおっしゃった全球レベル0.87キロの格子で2日間を再現したという意味は、予測ではない。2日間予測したという事ではないのか。</p>	<p>(分野3)</p> <p>計算の初期値として観測されたある日の大気データを用いているが、本研究の目的は予測ではなく、世界で初めてとなる0.87kmという高解像度格子で個々の積雲対流を含めて全球大気の計算を行い、さまざまな気象擾乱での雲や対流の役割を明らかにすることである。20km程度の計算格子で行われている現在の天気予報の将来の方向性を探るという実用的な意義に加え、積雲対流の多様性の解明、対流とより大規模スケールの相互作用の実態の解明、近年の雲観測衛星による検証研究の開拓等、科学的な意義も大きい。</p>
<p>【第2回質問】データサイエンスや、ビッグデータ等に対応する研究においては、数学も必要。多量なデータから、重要な情報を取り出すことは、スー</p>	<p>(分野1)</p> <p>「京」によるかつてない大規模かつ網羅的がんの薬剤感受性・耐性遺伝子ネ</p>

パーソナルコンピュータの非常に重要な使い方の一つであるが、各分野においては、どのような取り組みをおこなったか。

ネットワーク解析を実施した。独自に開発したスパース学習法を用いた遺伝子ネットワーク推定ソフトウェアSiGN-L1により、約 600 がん細胞株データ、約 100 の化合物、それぞれが1万3千以上の遺伝子からなる60,000以上の遺伝子ネットワークを「京」で推定し、抗がん剤の感受性予測を可能にする基盤を築いた。他にも、臨床現場、実験現場から生産される大量のオミックス情報の処理、腸内細菌のメタゲノム解析などの「京」レベルのスーパーコンピュータを必要とする解析を行ってきた。

(分野2)

物質・材料研究にデータ科学的手法を応用するマテリアルズインフォマティクスは、今後極めて有望な研究手法だと認識している。分野2戦略機関のメンバーであり、すでに研究を実践されている京都大学の田中功先生に、成果報告会での特別講演をお願いしたほか、JST主催で行われた複数の数物連携等の研究会開催に協力してきた。また、平成27年度にNIMS内に立ち上がった「情報統合型物質・材料研究拠点」の設立や活動には多くの分野2メンバーが関連、参加している。ポスト「京」重点課題(7)では、サブ課題Gの中で、計算科学と情報科学の連携課題に取り組む予定。

(分野3)

分野3のメソ課題では、集中豪雨など空間スケールの小さな激しい現象を高精度に予測する研究を行った。このような現象は時間スケールも小さいため、予測の結果は初期値に大きく依存する。精度の良い初期値を作成するためには、観測データの情報を適切に数値モデルに取り込むためのデータ同化といわれる数学的な手法を用いている。戦略課題研究では、従来の手法に加

えてアンサンブル予報と変分法を組み合わせるハイブリッド変分同化法などの先端的な開発を行うとともに、決定論予測可能性と変分法データ同化の再定式化に関する理論研究も行った。後者については平成26年度気象学会論文賞を受賞している。

地震津波課題においては階層マトリクスを用いた高速化を実施して計算時間の短縮を図ることで多数シナリオのシミュレーションを行い、多数シナリオを用いたすべり逐次予測ならびに津波予測高精度化の手法をビッグデータ関連のプロジェクトと連携して開発した。また、構造解析においては「特異摂動に基づくマルチスケール解析」、「新しい離散化に基づく亀裂進展解析」を実施し、多数の計算結果から確率密度関数を得るなどの特徴抽出を行った。

(分野4)

大規模な設計探査等、多ケースのシミュレーションを行っているがいわゆるビッグデータに関する研究について当該分野では行っていない。

(分野5)

研究開発課題2では、多体系の理論物理学において量子揺らぎをどのように扱うかについては統計的な方法論以外にはあまり研究されてこなかった。大規模数値計算における揺らぎに関しては、ビッグデータから情報を引き出すAI手法との接点があり、その方向で研究が進行中である。研究開発課題4のダークマターハロー研究では、数値シミュレーション結果からハローカタログを作成・公開し様々な観測的・理論的研究に利用している。また、その発展である重点課題9のサブ課題Cでは、シミュレーションの大規模データセッ

	トと観測ビッグデータを使って行うサイエンスがテーマである。
③ 分かりやすい説明（費用対効果や社会的成果を含む）	
<p>【第2回質問】「京」の成果について、一般の方に対して波及効果や恩恵、何に役立つのかを示す必要がある。そのためには、計算機の人ではなく各分野（現場）の声を事例として集める事が重要。</p>	<p>（分野1） マルチフィジックス・マルチスケール心臓シミュレーション（UT-HEART）の研究では小児心臓外科の権威である岡山大佐野教授と連携し、実用化を推進しているが、「今まで7千の手術を実施した経験があるが、適切な手術には豊富な経験が必要となる。UT-HEARTを用いることで、若手の医師でも科学的な根拠に基づき、適切な判断が可能となる。また、今まで見ることでできなかったATP消費量の違いなどを解析することができ、今後さらに適切な医療に向け役立てることができる。」との評価を得ている。 また、大規模生命データ解析（宮野教授）と連携している、京大医学部小川教授からは、「これからのがん研究には、大規模生命データ解析は必要不可欠。さらに新たな発見が期待できる。」と評されている。 iPS細胞で注目を浴びているエピジェネティクスの構造基盤であるクロマチンの動態シミュレーションを行い、その結果を分かり易く説明するためにインターネットでビデオを2月に公開し、今まで3万5千人以上に視聴され、その理解を深めることに貢献し、高い評価を得ている。 UT-Heartによる心臓シミュレーションは、全世界で27万回視聴され、医学から生命科学に至る多くの分野から高い評価を得ている。</p> <p>（分野2） 「京」のプロジェクトで開発したMODYLASやFMO、OpenMX等のアプリケーションは15社以上の企業で利用されており産業界に波及している。また、リチウムイオン電池や燃料電池の成果は企業や実験家の興味を引き、よりタイトな</p>

共同研究や共同プロジェクトの推進につながっている。富士フィルムは「今後研究を通じて構築した大規模・高精度な化学反応シミュレーション技術を、添加剤などの材料開発に適用し、リチウムイオン電池産業の発展に貢献していく」、新日鉄住金は「これからもスパコンを活用して、新たな現象の解明を進め重要な課題解決に貢献していく」、日東電工は「材料界面を対象とした「京」による大規模シミュレーションが確立されれば、その貢献度は計り知れないでしょう。」と述べている。

(分野3)

別プロジェクトである、南海トラフ広域地震防災研究プロジェクトで実施している地域研究会(自治体、ライフライン企業が参加)において成果の紹介と要望を把握し、シミュレーションの高度化を図った。例えば、南海トラフでの巨大地震が紀伊半島の東側だけで終わった場合に、その後西側がいつ破壊するかが問題とことから逐次予測手法の開発につなげた。さらに平成28年度からは、高知県において都市課題で実施した「避難シミュレーション」と「高度な津波シミュレーション」を用いたより現実的な対策(避難ビルの設定等)検討を予定している。

(分野4)

自動車コンソーシアム(トヨタ、日産、ホンダ、マツダ、デンソー、ブリヂストン等 14社、大学等研究機関 7機関)、ターボ機械コンソーシアム(千代田化工、日立三菱水力等ターボ機械メーカー 14社、大学等研究機関 7機関)、
燃焼・ガス化コンソーシアム(MHI、IHI、KHI等重エメーカー 6社、大学等研究機関 6機関)

	<p>等を形成し、開発中のシステムに関するディスカッション、試用や、企業との共同研究(東芝、マツダ、東海旅客鉄道、日本造船技術センター、横浜ゴム等)を多数実施してきた。ユーザーの声</p> <ul style="list-style-type: none"> ・フリーウエアとして展開し、メジャーなフリーウエアにする。 ・ソルバーの性能が間違いないのであれば企業は投資する ・企業で使うためには、数値計算モデルを作るための作業(プリの部分)が重要で、設計者がさっと使えるシステム(メッシュフリーなど)になっていることが必須。 ・水槽試験の代替えを目指してミニプロジェクトを進めている。 <p>(分野5)</p> <p>ウェブマガジン『月刊 JICFuS』(年5本、計25本)と『月刊 JICFuS ムービー』(年2本、計8本)を戦略分野5ウェブサイトやYouTubeで公開し、科学的意義について示している。現場の事例としては、研究開発課題2の原子核構造研究では実験との共著論文3本、投稿中2本、他10件以上問合せ・共同研究が進行しており、大きなインパクトがあった。</p>
<p>【第2回質問】アカデミアの分野においても、具体的ニーズがあることを示す必要がある。各分野の基礎研究においてもインパクトのある課題があることを、日本が遅れを取っているということも含めて、分かりやすく説明する事が重要。</p>	<p>(分野1)</p> <p>今後の生命科学の重要な課題として、遺伝子の発現制御の仕組みを解明するエピジェネティクスが注目されているが、DNAの発現を分子レベルで解明するヌクレオソームのシミュレーションは、原理を理解し、制御を可能としていく上で重要な位置づけとされている。その結果、ヒストンバリエーション(染色体を構成するヒストンのうち、僅かにアミノ酸配列が異なっている変異体)の分子レベルでの役割を明らかにすることができた。</p> <p>分子から細胞へ階層を接続するために行われた、細胞質の原子レベルでのシ</p>

ミュレーションでは、この規模では世界で初めて「細胞混雑環境」の原子描像を示すことができた。

脳シミュレーションでは、ドーパミンの欠損によって生じるパーキンソン病に特徴的な脳の状態を再現することができ、病態理解に貢献をした。

大規模情報解析においては、成人T細胞白血病リンパ腫(ATL)における遺伝子異常の全体像の解明に成功し、医学的インパクトを与えた。

(分野2)

鉄系、銅系高温超伝導体など電子相関の強い系で、第一原理に基づき電子相関パラメータを見積もる一般的かつ信頼性の高い手法を確立し、これまで謎であった超伝導機構を「京」の計算で解明する糸口が得られるなど、大きな進展があった。成果に興味を持った実験研究者との間で構築したコンソーシアムを基盤とし、今後、計算と実験の連携でさらなる解明と新材料探索につなげていく。

超高精度量子化学計算では人工光合成への応用をめざし、「京」コンピュータを駆使してマンガククラスターによる光システムⅡの化学反応を再現可能な計算手法を開発した。この手法で光システムⅡのメカニズムを解明し、人工光合成触媒の理論設計に繋がると期待できる。

(分野3)

全球雲解像大気モデルでは、地球シミュレータ、「京」という資源に恵まれた日本が世界の研究をリードしている。これまでの全球大気計算で、半経験的にしか表現できていなかった対流雲の働きを直接計算できるため、天気予報や気候予測に革命的な進化をもたらさうものとして世界中の気象・気候

	<p>科学者の注目を集めている（例えばNature vol. 453に、従来の延長ではない革新的な高解像度化の必要性を議論した世界モデリングサミットの記事）。</p> <p>（分野4）</p> <p>たとえば研究開発課題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）で行った実温度における大規模な第一原理分子動力学などは世界初の科学的成果である。</p> <p>（分野5）</p> <p>真理の探究として何れもインパクトがあり、世界をリードする課題である。例えば、研究開発課題4では、ダークマターハローの大規模計算、輻射流体による銀河形成・第一世代星形成計算、太陽対流層全球計算は世界をリードしている。研究開発課題2では、世界の先端の実験施設（RIBF（日本）、GEMINI（欧州）、NSCL/FRIB（米国）、GANIL（仏）など）における実験を理論と比較するためには、理論に基づいた大規模計算を行う必要があり、毎年数篇の論文を国際学術誌（Nature や Physical Review Letters 等最重要誌含む）に実験グループと共著で出版している。宇宙物理学、天文学においては、地上実験ができないので、理論的予言にはシミュレーションが必須であり、シミュレーションの理論予言が観測努力を推進してきた。最近の具体例として研究開発課題3では、重力波の検出にシミュレーションの予言が重要な役割を果たした。今後の発見に、現在計算中の結果が重要な役割を果たすはずである。</p>
<p>【第2回質問】授賞成果など、成果を出しているということを国民に示す事が重要。</p>	<p>（分野1）</p> <p>心臓シミュレーションUT-HEARTビデオの、世界最大規模のCGの国際会議</p>

SIGGRAPHにおける受賞などを含め、成果については、報道機関に対する説明会、プレスリリース、ホームページ、Facebook、twitterなどインターネットで広く配信を行っている。また、成果の分かり易い説明のためのビデオを制作し、インターネットで公開している。

(分野2)

RSDFTによる半導体ナノワイヤ計算が、2011年ゴードン・ベル賞受賞。リチウムイオン電池の研究が、革新的で応用志向型の研究に贈られる「第7回ドイツ・イノベーション・アワード ゴットフリード・ワグネル賞 2015」を受賞。

(分野3)

分野3では、ゴードン・ベル賞のファイナリストになった研究課題・研究内容についてのメディア向け記者勉強会の開催や、日本気象学会 岸保賞・藤原賞の受賞等をWebページで紹介している他、毎年行われているシンポジウム（成果報告会）、ワークショップにおいて、最新の研究成果を広く発表してきた。また、Webページにも研究成果を紹介する専用ページを作成し、プレスリリースを行った研究以外にも、意義のある研究成果について積極的に情報発信を行って来た。これまでに代表的な研究成果をはじめ、14件の研究成果を発信しており、Web以外でも一般向けパンフレットを5事業年度で3回の更新を行うなど、最新の成果を発信してきた。また、他機関の機関誌等への記事提供を多く行い、広く一般に対して成果の情報発信を行った。

(分野4)

	<p>分野4専用アウトリーチサイト（「計算工学ナビ」）を設けて、各研究課題に関する詳細情報（課題の重要性、インパクト、内容、解析事例等）を随時発信し課題の理解増進を図っている。H27年度末までに4万人を超える訪問者を得た。</p> <p>（分野5）</p> <p>ゴードン・ベル賞や、科学技術分野の文部科学大臣表彰などの受賞をしたときやインパクトある成果を論文発表した際にはプレスリリース（年間5本程度）を行い、授賞式の取材記事や受賞にあわせて作成したムービーをウェブで公開している。ゴードン・ベル賞ファイナリストに選ばれた段階で記者勉強会や記者会への資料配布を行ってメディアの注意を喚起した上で、受賞時に再度プレスリリースを行うなどプレスリリースは取り上げてもらいやすくする工夫をした。</p>
<p>【第3回質問】戦略プログラムの成果説明について、ここまでしかできないという点などを示し、次のフラッグシップシステムの必要性をサイエンスとして示すこと。</p>	<p>戦略プログラムの各分野において、「京」の活用により、世界初の成果を挙げた。しかしながら、各分野において、今後に向けての課題も有り、ポスト「京」を活用し課題を解決する必要がある。</p> <p>（分野1）</p> <p>「京」では、生命科学への貢献と創薬・医療分野でのスーパーコンピュータの”有用性の実証”を行うことができた。</p> <p>「創薬」では、標的タンパク質と数百の薬剤候補（低分子化合物）の結合自由エネルギーの評価を高精度で、短時間に「京」で実施することを可能とし、2つ例について前臨床試験まで進めることができた。</p>

しかし、細胞の中では、多数の生体分子（タンパク質、核酸、アミノ酸など）が複雑に関連し合って機能しているところから、今まで困難であった薬の開発、より安全な薬の開発（副作用の回避など）には、多数の生体分子の相関を考慮に入れ、これまでよりもはるかに大規模で長時間（ミリ秒規模）の計算を行う必要があり、そのためには、ポスト「京」が必要となる。

「がん」研究に関しては、「京」上での大規模生命データ解析により、「成人T細胞白血病リンパ腫(ATL)における遺伝子異常の全体像の解明」、「遺伝子発現プロファイルデータから抗がん剤の感受性・耐性の予測」などの顕著な成果を上げることができた。

しかし、個々人に応じたがん治療に必要な情報を与えるためには、全ゲノム解析に基づき、1%以下の頻度の変異を網羅的に見いだすことが必須であり、そのためにはポスト「京」レベルの計算資源が必要である（例えば、50のがん腫検体（1検体データ（複数部位、時系列）5TB）についての解析で「京」では5000日を要するが、ポスト「京」では、700検体/日のデータ解析が可能となる）。

「心臓」シミュレーションでは、「小児心臓外科手術に関する有用性の実証」、「薬剤の心毒性評価に関する有用性の実証」など大きな成果を上げることができた。

しかし、高齢化社会の重大な健康問題である心不全の解明を行い、最適な治療の指針を与えるためには、分子レベルの相互作用から病態の進行を解明する必要がある。このため新たに分子シミュレーションに基づく心臓シミュレーションを実施する。これは前例のない大規模かつ長時間の計算となるため、ポスト「京」が必要不可欠となる。

(分野2)

「京」では、新しい第一原理電子状態計算手法や分子動力学法を使い、これまでにない高精度な電子状態計算や、複雑で大規模な不均一系のシミュレーションが可能になった。これにより、表面・界面を考慮した半導体ナノ構造や構造材料の特性計算、超伝導体の高精度計算、電池の化学反応シミュレーション、ウイルスと受容体の相互作用の計算などができるようになった。一方で、ノード数の制約と、1回の計算にかかる時間が膨大なため、厳密に計算する領域や時間の拡張、計算回数を増やすことによる予測の信頼性向上に限界があり、現象の理解を新材料・デバイスの発見につなげるのが困難であった。

ポスト『京』は、最大で『京』の100倍のアプリケーション性能を得ることにより、「精度」と「サイズ・時間」という2つの軸が増大され、複雑な現象や構造の乱れを含む現実的な材料・デバイスに対するシミュレーション結果の信頼性が向上する。さらにもう一つの軸として、アンサンブル数をふやすことによる統計上の精度向上や計算パラメータ(変数)の変化による探索範囲の拡大を加えることができ、未知現象や新材料の高精度な予測が可能になると考えられる。

(分野3)

「京」を用いて、全球(地球全体)規模で、台風の源となる大気の大規模な乱れを再現し、1ヵ月予報の可能性を示すことができた。また、半日から1日前に、地域レベルの集中豪雨を予測できる可能性も示した。今後は、衛星観測データの同化などにより、これまで実現できなかった1ヵ月後の台風発生確率の予測や、高機能レーダー観測データの同化などにより、30分から数

時間前の集中豪雨の予測を実現する必要がある。そのためには、より大規模な計算が可能であるポスト「京」が必要である。

また、「京」を用いて、強い揺れによる大津波の生成原因の解明や、特定の限定された数例の地震シナリオに基づく被害予測、構造物の振動や被害、津波の遡上、避難時の人の流れなどのシミュレーションを実現した。今後は、現実の震源や地下構造の違いによる不確定さを考慮したシナリオに基づく被害予測や、被害の相互作用も考慮した都市全体の防災予測、現実的な避難状況などの予測を実現する必要がある。そのためには、超大規模計算が可能でポスト「京」が不可欠である。

(分野4)

自動車に代表される性能評価指標の極めて多い製品では、試作実験（風洞実験）に匹敵する精度での空気抵抗などの予測が可能となりえることを実証し、「京」では一定程度既に活用されている。しかし、従来はなしえなかった、「京」で実現した自動車の様々な設計プロセスの超高精緻シミュレーションを相互連携し、設計上流側での設計プロセスを横断する多目的最適化を行う必要があり、そのためには数百～一千ケースにも上るケーススタディを実施する最適設計を実現することが可能なポスト「京」が必要である。

また、航空機に代表される部品点数規模の極めて大きい製品では、単独翼の風洞試験 ($Re=10^6$) など要素レベルの高精度解析を「京」で実現した。しかし、ポスト「京」では従来実験でしか評価できなかった設計項目の解析による評価が必要である。そのためには、実機・実スケール ($Re=10^7$) に対する準第一原理的な超高精度解析が可能なポスト「京」が必要である。

	<p>(分野5)</p> <p>「京」では、3次元輻射流体計算が初めて実行され、ニュートリノ加熱過程に基づく超新星爆発現象が現実的な設定のもとで初めて再現された。また、中性子星連星合体がr過程重元素合成の生成源になりうる可能性が初めて示された。</p> <p>観測されている多様な超新星爆発現象の定量的再現や観測的予言、および中性子星連星の合体による重元素合成の定量的な理解には、一般相対論、磁気流体、輻射流体などあらゆる効果を取り入れた高解像度かつ長時間にわたるシミュレーションが必須であり、そのためにはポスト「京」が不可欠である。さらに中性子星連星からの重力波が近い将来観測された場合に、その波形の再現を迅速に行うにもポスト「京」が必要になる。</p> <p>※第4回資料【資料1-1】にて説明</p>
<p>④ 理解増進活動</p>	
<p>【第2回質問】情報の発信は非常に重要になるのではないか。研究開始当初から、各分野が当該テーマを選んだ理由及び、取り組みについてどの様に発信してきたか。</p>	<p>(分野1)</p> <p>成果については、適時にホームページ（および、Facebook、twitter等）で公開するとともに、毎年の成果報告をホームページ上に掲載。また、年2回ニュースレターを発行し、広く配布を行っている。課題1と課題3のサブテーマについては、シミュレーション結果のムービーを作成し、YOUTUBEで公開している。</p> <p>(分野2)</p> <p>日本がリードする電子部品、材料の産業部門をより強化するための材料・デバイスで、「京」の計算がブレークスルーをもたらす課題を専門家や業界の</p>

方と議論し課題候補を上げた。そして、計算物質科学コミュニティ内に審査委員を設け、科学的視点と社会的視点、さらに「京」を活用する課題であるかの視点の3点で厳密な内部評価を行って選定。学会、研究会等の専門家向け以外の取り組みの発信として、記者勉強会によるマスコミへの訴求、一般向け広報誌(12巻刊行)による成果ダイジェストや取り組みの紹介、WEBによる成果やイベントの発信、産官学連続研究会による産業界への発信、SPring-8やJ-PARC等の大型研究施設や元素戦略プロジェクトとの連携シンポジウムでの成果紹介、各種アプリの講習会、広報関係者や一般の方を対象とした見える化シンポジウムの開催、高校生を読者のターゲットにおいた「ケイサン ブッシツ カガク」の本を刊行。その他、メールによる週刊ニュース配信、ツイッターでもニュース配信を実施。

(分野3)

平成22年度、「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」を策定した。研究開発課題の取り組みについては、毎年開催してきたシンポジウムやワークショップでの説明をはじめ、一般用広報ビデオ(日英)を作成し、広く一般に理解頂けるよう努めた。

(分野4)

分野4専用アウトリーチサイト(「計算工学ナビ」)を設けて、各研究課題に関する詳細情報(課題の重要性、インパクト、内容、解析事例等)を随時発信し課題の理解増進を図っている。H27年度末までに4万人を超える訪問者を得た。

	<p>(分野5)</p> <p>日本物理学会年会で企画セッションを開催、情報処理学会全国大会イベント企画や、日本天文学会年会、宇宙科学技術連合講演会、天文教育普及研究会年会、国際コンベンション「テクノオーシャン」などで講演・発表を行い、実験や理論および他分野の研究・技術者に向けて、「京」を使って素粒子・原子核・宇宙の融合研究や世界最高精度の計算を目指した課題選定やその拠点としての計算基礎科学連携拠点の取り組みについてアピールを行った。</p>
<p>【第2回質問】「京」において、ニーズインの開発として、各分野における学術研究のために「京」が必要だということを示す必要がある。</p>	<p>(分野1)</p> <p>生命科学の中心的な課題である遺伝子解析の分野では、データ量が爆発的に増加しており、その解析が追い付いていない状況。「京」のみならず、今後さらに高速なコンピュータが必要となっている。</p> <p>生体系のシミュレーションは、常にそのモデルのより高度な精細化が要求されている分野であり、高精度の結果を出すためには、精細なモデルによる大規模で高速な「京」を用いたシミュレーションの要求が増してきている。</p> <p>(分野2)</p> <p>半導体微細限界(10nm程度)を突破するためには、デバイス全原子シミュレーション(10万原子程度)による特性評価が必須で、それには「京」が必要。ウイルスの機能解明には外殻構造であるカプシドの丸ごと計算可能な「京」が必要。電池関連の電極界面での化学反応過程を解明し新素材開発につなげるには計算精度を上げる必要があり、現実的な計算時間内で意味のある計算を収束させるには「京」が必須。</p>

(分野3)

気象予測は、電子計算機の黎明期から計算科学の最も重要な適用分野となってきたおり、「京」のような先端スパコンにおいてもそのことは変わっていない。気象は非常に自由度が大きく、水の相変化・放射・熱伝導など様々な物理プロセスを含んでいるため、直接計算は不可能である。パラメタライズなどの粗視化は免れないが、気象予測精度の改善というニーズにこたえるためには、物理プロセスの正しい理解という学術研究が不可欠で、「京」のようなスパコンが必要である。

地震津波分野では「京」を用いることでこれまで大きな計算時間を要した巨大地震再来シミュレーションを1ケースあたり短時間でこなすことができ、これによって多くの発生シナリオを用意することができ、リアルタイムデータを用いたデータ同化と併せて予測研究の進展につながった。

また、次世代型ハザードマップとして地盤モデル-地域-構造物の連携計算を実現し、今後のハザード評価の道筋を開いた。津波課題では、広域稠密な仮想観測点におけるグリーン関数のデータベースを構築し、今後の即時津波規模の予測の高度化が実現できた。

(分野4)

基礎研究ではないが、直接産業界のニーズに反映してその重要性は産業界に認知するに至っている。

(分野5)

国際会議・研究会の主催・共催、日本物理学会年会で企画セッションの開催や、日本物理学会年会や日本天文学会年会、SC や各分野の国際会議での発

	<p>表を通じて、「京」の優位性、「京」でしかできない研究について言及し、学術研究における「京」の必要性を示してきている。</p>
<p>⑤ アプリケーション開発・普及の体制の構築</p>	
<p>【第2回質問】シミュレーションの検証には実験が必要。得られた結果はどのようにチェックしているか。</p>	<p>(分野1) シミュレーションモデルは実験データを前提として構築し、シミュレーション結果が、実験結果と整合的であることを確認する、という標準的な方法を用いている。さらに、結果から予測される事実を実験的に追試するという実験グループとの緊密な連携体制のもとに研究を行ってきた。</p> <p>(分野2) リチウムイオン電池は、実験の結果と、計算の結果による化学反応と生成物を比較し、良い一致を得ている。実験で観測されていたCO2の発生のメカニズムが計算ではじめて明らかになった。</p> <p>(分野3) 分野3で研究対象としている気象・気候や地震・津波の現象については、初期値の作成や結果の検証に必要なデータが気象庁などによってほぼ整えられており、シミュレーション結果の定量的な評価に活用している。例えば、台風、集中豪雨や竜巻、地震波や津波水位など。また、津波シミュレーションでは東日本大震災の被害状況や映像データとの比較により信頼性を検証している。地震応答シミュレーションについては、防災科学技術研究所のE-ディフェンス実験（実際の建物等を載せた振動台での実験）と比較し、結果の信頼性を確認している。</p>

	<p>(分野4) 大学等の研究機関の設備を用いて基礎検証を実施したあと、実証で必要とするデータは産業界で入手していただきシミュレーション結果をそのデータと評価し精度検証を実施している。</p> <p>(分野5) 研究開発課題2では、世界の先端の実験施設 (RIBF (日本)、CERN (欧州)、NSCL/FRIB (米国)、GANIL (仏) など) における実験を理論と比較するためには、理論に基づいた大規模計算を行う必要がある。研究開発課題3では、重力波の検出にシミュレーションの予言が重要な役割を果たした。今後の発見に、現在計算中の結果が重要な役割を果たすはずである。</p>
<p>【第2回質問】 創薬など、企業との連携では、うまく行くほど企業が独立するが、各分野における取り組みは、例えば企業の基礎研究などについて、一翼を担う形となっているか。</p>	<p>(分野1) 創薬では、二種類の体制で研究を行ってきた。 フィーシビリティスタディのレベルであるが、企業における創薬研究の一部として「京」による計算を行った。 多数の企業コンソーシアムとの連携を行い、「京」で開発した計算創薬技術の普及を図り、その中からは「京」の産業利用を使って、研究開発にまで進むところも現れてきている。</p> <p>(分野2) 電池関連の成果は、産総研における「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」を設置 (H28. 4時点19社参加) し、分野2のアカデミック界メンバーが協力し、開発した計算手法を企業に展開している。構造材料では、企業メンバーが基礎研究に深く携わり、常に実業での課題を基礎課題としてフィ</p>

	<p>ードバックし、研究を推進している。大規模分子動力学計算MODYLASや汎用第一原理計算OpenMXは企業と個別の共同研究契約を結び、「京」で得られた成果を企業の基礎研究に結びつけている。</p> <p>(分野4)</p> <p>分野4では3つのコンソーシアムを立ち上げ、10以上の共同研究契約を締結し実証研究を実施した。</p>
<p>【第2回質問】他の戦略分野と連携した取り組みはあるか。</p>	<p>(分野1)</p> <p>分野2のウイルスの全原子シミュレーションとの連携の検討を進め、重点課題での統合提案に繋がった。</p> <p>(分野2)</p> <p>分野1とは連携シンポジウム、記者勉強会等を共催で実施。分野5とは毎年連携研究会を企画実施、若手技術交流会などで連携。全5分野+AIGS+RISTの共催による情報交換会や広報イベントなどを開催している。</p> <p>(分野3)</p> <p>分野3の構造物地震応答解析では大規模有限要素法を開発・利用した。この有限要素法のソルバ（マトリックス方程式の数値解法）の高速化・大規模化のために、（マトリックス方程式をより解きやすい形に変形するという）前処理を改良したが、同種の有限要素法を開発・利用した、分野3と分野4の両方に参画した研究者が連携して、この改良を実施した。</p> <p>(分野4)</p>

	<p>大型建造物の耐震解析については、それぞれの役割分担について分野3と事前に数回の意見交換・調整会議を実施した。</p> <p>(分野5)</p> <p>分野2との分野横断型研究会の開催など連携を推進した。</p> <p>素粒子原子核分野では、共通する研究手法をもつ分野2と連携を実施。HPCI戦略プログラム分野2×分野5異分野交流研究会を3回開催（139名参加）、10sor network workshopを分野2と2回共催、量子多体問題解法は方程式や計算手法、格子QCDと統計模型の間にも共通する問題があり、定期的に情報交換を行った。</p>
<p>【第2回質問】各課題において、ターゲットとなるマーケットは、設定されているか。</p>	<p>基礎科学に近い分野を除き、各分野の課題毎に、ターゲットとなるマーケットは想定されている。具体的には、各分野において、以下のとおり。</p> <p>(分野1)</p> <p>医薬品市場（抗がん剤等）、心臓に関する外科手術、医療機器開発等</p> <p>(分野2)</p> <p>シリコンデバイス、パワーデバイス、抗ウイルス剤、リチウムイオン電池、燃料電池、メタンハイドレート、鉄鋼材料等で想定している。</p> <p>(分野3)</p> <p>気象予報、気象情報提供事業、地球温暖化適応事業、気象と水文の高精度予測による防災・減災対策、交通、農業生産、再生可能エネルギー、熱中症対策、大気汚染、国や地方自治体が進める地震被害想定と適切な被害軽減施策の策定、気象庁(津波予警報システム)、保険業界（地震津波リスク評価に基</p>

	<p>づく地震津波保険)、自治体・地域 (ハザードマップ、リスクコミュニケーション、防災啓発、防災教育)、建設業界 (重要構造物の耐震性評価)、コンサルティング業界 (都市の地震災害評価) 等</p> <p>(分野4)</p> <p>自動車業界、航空業界、エネルギー業界、材料メーカー等</p> <p>(分野5)</p> <p>ターゲットマーケットの設定は有りません。</p>
<p>【第2回質問】 開発アプリケーション普及のカギは「京」の下位のスパコンで使えるか否かであり、今後はコンシェルジュが重要と考えるが、普及の取り組みはどの様に行ってきたか。</p>	<p>(分野1)</p> <p>ソフトウェア公開サイトにより、ソフトウェアをダウンロード可能とした他に、SCLS計算機 (「京」互換機) を用いたハンズオンの講習会およびSCLS計算機の公募利用を行い、開発ソフトウェアとその利用普及を図ってきた。</p> <p>(分野2)</p> <p>アプリ普及活動は、計算物質科学のポータルサイトMateriAppsを構築。フォーラムに投稿すれば、WEB上での議論やQ&Aが可能。PCからスパコンまで利用可能なフリーアプリ搭載 “MateriApps LIVE!” を開発。計算科学の導入や教育活動で多用されている。開発アプリ講習会を実施し、利用促進活動を実施。今後は、RISTや情報基盤センターとの連携や、特定領域の産学コンソーシアム等により、附置研が支援するHPCI総体としてのコンシェルジュ機能を検討していく必要がある。</p> <p>(分野3)</p> <p>JAMSTECで作成された津波伝播遡上計算プログラム (JAGURS) などは、現時点</p>

	<p>で、スーパーコンピュータ「京」以外にもNECのベクトル機、SGIやCrayのスカラ型スパコン、Windows機での動作確認ができており、さらにソースコードを公開する準備を進めるなど、アプリケーションの普及に努めている。</p> <p>(分野4)</p> <p>次世代ものづくりに有用なアプリケーションを、HPC/PF (HPC次世代ものづくりプラットフォーム) に統合し、プリポストや自動処理機能とともに公開している。また、FOCUSスパコンを利用してハンズオンセミナーを開催し一般ユーザーへの普及の促進を図ってきた。</p> <p>(分野5)</p> <p>格子QCDや宇宙磁気流体・プラズマの共通コードを開発して公開し、スクールを開催するなど普及の取り組みを行ってきた。また、研究開発課題4では開発されたソフトウェアをAIGS研究部門で維持、開発する体制になっている。</p>
<p>【第2回質問】 今後5～10年先を見越した開発が重要と考えるが、各分野はどのような認識で進めてきたか。</p>	<p>(分野1)</p> <p>戦略プログラムの実施機関において、ライフサイエンスは、HPC利用において新規参入分野であったため、「京」による先導的な成果の創出、実験・医療などとの連携による着実な検証・応用体制の構築、さらにSCLS計算機の公募利用など計算機利用者の増大に向けた取組を実施してきた。ポスト「京」重点課題では、出口である生命科学・医療・創薬に向け、重要な問題を扱っていく。</p> <p>(分野2)</p>

ポストナノテクノロジーとして、量子効果を活用した量子デバイスの世代が10年後に来ることが想定される。そこで量子効果を用いる、超伝導、スピントロニクス、近接場光デバイス、量子もつれ等を視野に入れた研究を推進。これらの課題はポスト「京」プロジェクトで継続実施している。もう一つがマルチスケール材料科学である。スケールの異なる階層には実際に界面や表面が生じ、計算手法もより複雑になる。そのため、複雑構造を含めた材料物性の理解と制御を実現する必要がある。戦プロでは鉄鋼材料をベースに進められてきたが、ポスト「京」ではデバイスや電池、磁石、化学品、実装材料等に拡張し、実在系の材料物性制御を目指す。

(分野3)

「京」で行う計算は、すぐに毎日の天気予報等実用に供されるわけではないが、現在の開発の延長でない新しい方向性、可能性を探る研究であると認識してきた。全球雲計算の必要性、重要性については、そのような可能性は戦略研究で十分に示すことができたと考えている。今後も、計算された雲の役割についての科学的検証、実証はもちろんのこと、爆発的に増えつつある観測（ビッグ）データの取り込み、大気化学等新しいプロセスの取り込み、大気海洋結合予測の検討等、よりよい予測の提供、実用化に向けた検討が必要である。残念ながらフラッグシップ計算機と第2階層機の性能差が小さくないため、このような先駆的な研究を第2階層機のみで進めるのは不可能である。

現業的な気象予測は、気象庁が業務としてスパコンを用いて行っており、予測精度の改善に向けた開発も行われている。「地球シミュレータ」や「京」のようなその時代におけるフラッグシップ機の性能は5～10年後に気象庁の

業務に使われるスパコンに反映してきている。本課題では、「京」の計算資源を生かして先端開発や学術的研究を行うとともに、将来の気象庁における数値天気予報のあり方に重要な科学的知見を提供することを強く意識して研究を進めてきた。

地震津波分野では、即戦力的なシミュレーション研究と予測精度の高度化のような少し時間を要する研究で構成されている。巨大地震津波災害の発生は現時点で「予知」的な予測は不可能に近いと認識されているが、多種多様なリアルタイムデータを用いたデータ同化手法の開発により精度向上を目指している。またそのための人材育成についても中等-高等教育の場で先進的なシミュレーションを紹介することで若手研究者の芽を育てる努力も行なっている。一方、国際連携も重要で地震津波多発国との共同研究を他のプロジェクトで行ない国際的な視野でのシミュレーション研究と人材育成を進めている。最後に、5～10年の時間スケールでは社会環境、社会構造も変遷するので、それに応じた災害シミュレーション（社会科学的な）を視野にいれて本研究を進めてきた。

（分野4）

御指摘のとおり、今後5～10年先を見越した開発が重要と考え、研究開発を進めてきた。

（分野5）

10年先を見越して研究開発することは当然であり、研究開発課題1-3に関して、ポスト「京」を使って計算で3分野の真の融合研究（QCDからハドロン相互作用、ハドロン相互作用から原子核の性質・核物質状態方程式、原子核

	<p>の性質・核物質状態方程式から超新星爆発・元素合成)を達成する土台となる実証研究の完成を優先し、課題4に関しては世界最高精度の計算の完成に力を入れてきた。</p>
<p>【第2回質問】企業の参画にあたり、障害となるのはどのような点か。</p>	<p>(分野2)</p> <p>「京」利用の練習機として活用している物性研等附置研スパコン群は企業の基礎研究実施者が課題代表者にはなれないので、普及促進の課題となる。また、大学と企業が共同研究契約を結ぶ場合、アプリの著作権や特許権等で公開したい大学と、クローズしたい企業の間で課題が生じる場合がある。公的スパコンの企業利用後のステップとして、大規模計算が可能なスパコンのクラウド利用市場が成熟しておらず、情報基盤センター群の計算機に頼らざるを得ないが、支援体制が十分ではない。</p> <p>(分野4)</p> <p>新しいことをやろうとすると必ずコストがかかる、そのコストをかけたくない。また、コストがかかった時にどれだけの利益が得られるか明示する必要がある。</p>
<p>(3) 施設の運営・整備等について</p>	
<p>① 効率的・効果的な施設運営 (コスト低減の取組含む)</p>	
<p>② 施設設置者・登録機関・課題実施機関などとの連携・役割分担</p>	
<p>③ 自己収入の努力</p>	
<p>(4) 研究教育拠点の形成</p>	

① 国際協力・国際貢献	
② 他の大型研究施設等との連携	
<p>他の大型研究施設等との連携実績はあるか。</p>	<p>(分野1) SPring-8とは、タンパク質、ヌクレオソームの構造解析において連携を実施。</p> <p>(分野2) 毎年SPring-8、J-PARC、KEK-PFとの連携シンポジウム、研究会を各1回程度実施。物質科学研究の総合コンサルティング機能の仕組みづくりを目標として、連携活動を継続している。</p> <p>(分野3) 地球シミュレータをはじめ大学等の大型計算機も積極的に利用した。例えば、メソ気象課題では、「京」には不向きな多数のジョブステップに分かれるデータ同化システムの開発に、東京大学情報基盤センターのFX10を利用した。また、地震応答シミュレーション課題では、計算結果を、防災科学技術研究所のE-ディフェンス装置の結果と比較した。</p> <p>(分野4) JAXA 大型風洞、日本造船技術センター 曳航水槽試験装置との連携実績がある。</p> <p>(分野5) 研究開発課題2では、世界の先端の実験施設（RIBF（日本）、CERN（欧州）、</p>

	<p>NSCL/FRIB（米国）、GANIL（仏）など）における実験を理論と比較するためには、理論に基づいた大規模計算を行う必要があり、毎年数篇の論文を国際学術誌（Nature や Physical Review Letters 等最重要誌含む）に実験グループと共著で出版している。宇宙分野では、シミュレーションの結果は、例えば、すばる望遠鏡の観測計画立案に生かされている。</p>
<p>③ 計算機科学と計算科学の双方に精通する人材の育成（大学等との連携含む）</p>	
<p>【第2回質問】計算機科学、計算科学における人材育成は、企業などでは抱えきれないが重要なものである。戦略プログラムにおける人材育成について、どのような取り組みが行われてきたか。</p>	<p>（分野1） 社会人、大学院生向けの計算生命科学のセミナーを東京（産総研）、大阪（阪大）にて実施。さらに神戸大との連携授業では、ビデオ配信を行い、年450名以上が登録し受講している。そのほか様々なレベルの講演活動等の開催によって、人材育成を行ってきた。</p> <p>（分野2） 特任教員が配属大学において、計算機科学と計算科学の融合領域の講義を実施。そのうちの一部は全国14か所に企業の方も参加可能な配信講義「計算科学技術特論」として実施。そのアーカイブサイトも構築している。さらに若手スキルアップのための企業の方も参加可能な合宿型の研修会を実施。アプリ講習会は常に企業の方にもオープンで実施している。</p> <p>（分野3） 分野3で開発した実アプリケーションプログラムに対して、「京」の技術的特徴と各プログラムの特徴を最大限に活かした計算性能最適化法を計算科学専門家が開発し、その成果を公表する、あるいはサポートを介して計算科学の基礎知識および高度な計算技術を伝達することにより、計算科学・計算</p>

機科学を専門としない研究者および若手研究者、学生の人材育成を推進した。具体的には、

- ・若手研究者や大学の学生らを対象として、各実アプリケーションの計算性能最適化について説明会および勉強会を実施した。(合計8回)

- ・計算科学や計算機科学の専門知識をもたない研究者に対して、実アプリケーションの計算性能最適化へのサポートを通じた基礎知識、応用知識の普及を行った。(サポート回数：およそ600件)

- ・関連コミュニティのメンバーが、独自に計算科学・計算機科学の基礎と実践を学べるように計算性能最適化に関する事例データベースを構築しホームページで公開した。公表された内容についての質問への回答と問題解決のためのアドバイス、実アプリケーションへの利用の実施指導に取り組んだ。

などが挙げられる。

(分野4)

ソフトウェアの開発者教育(10人程度/学期(夏学期))とHPC利用者教育(延べ297人)、HPC利用促進のための設計実務者教育(延べ112名)を行ってきた。

(分野5)

計算科学に焦点をあてた、素粒子・原子核・宇宙分野にまたがる分野横断的スクールを開催した(5年間19件実施、参加者計813名)。また、本予算で雇用された研究員は、大学院生を書類上教育しているわけではないが、日常研究生活で大学院生と接することで多大な好影響を与えた。大学院教育機関に若手の特定教員を配置すれば良い影響は現れる。

④ 地元自治体等との連携