

# H P C I 戦略プログラム 事後評価結果（素案）

平成 2 8 年 〇 〇 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。

# HPCI 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

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	H23	H24	H25	H26	H27	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 百万 (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

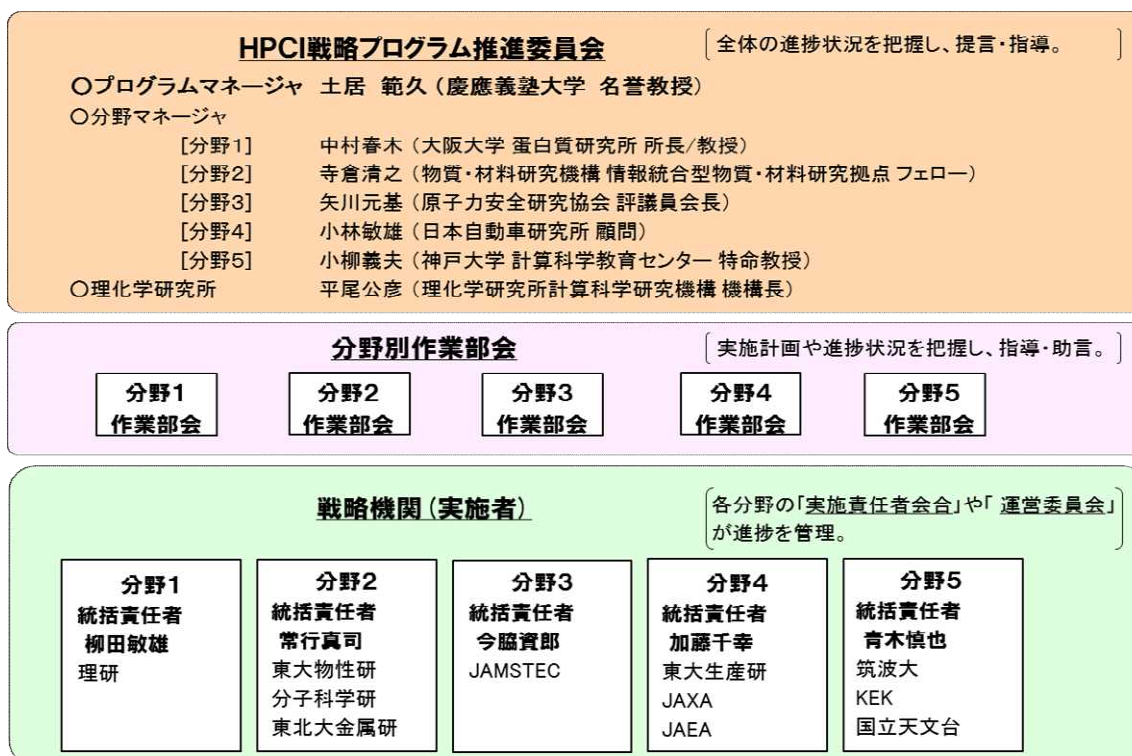
※2 高機能汎用計算機高度利用事業費補助金

※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

○HPCI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。

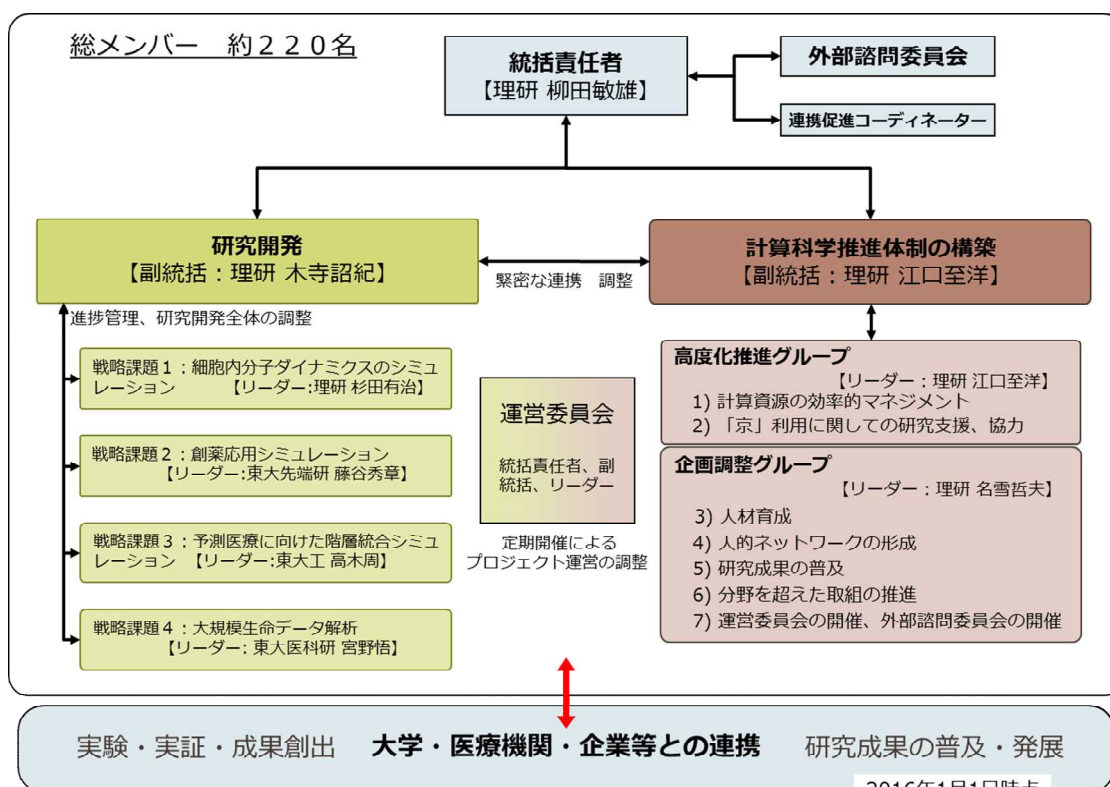


○分野別作業部会 委員

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	IIH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

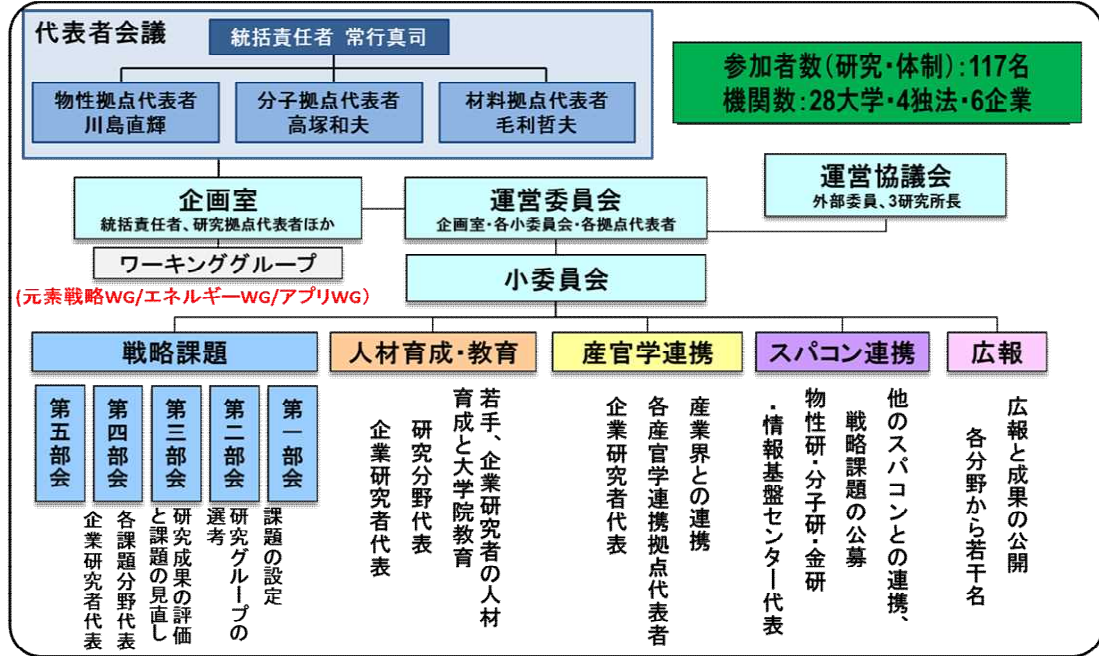
○分野1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」の実施体制

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」

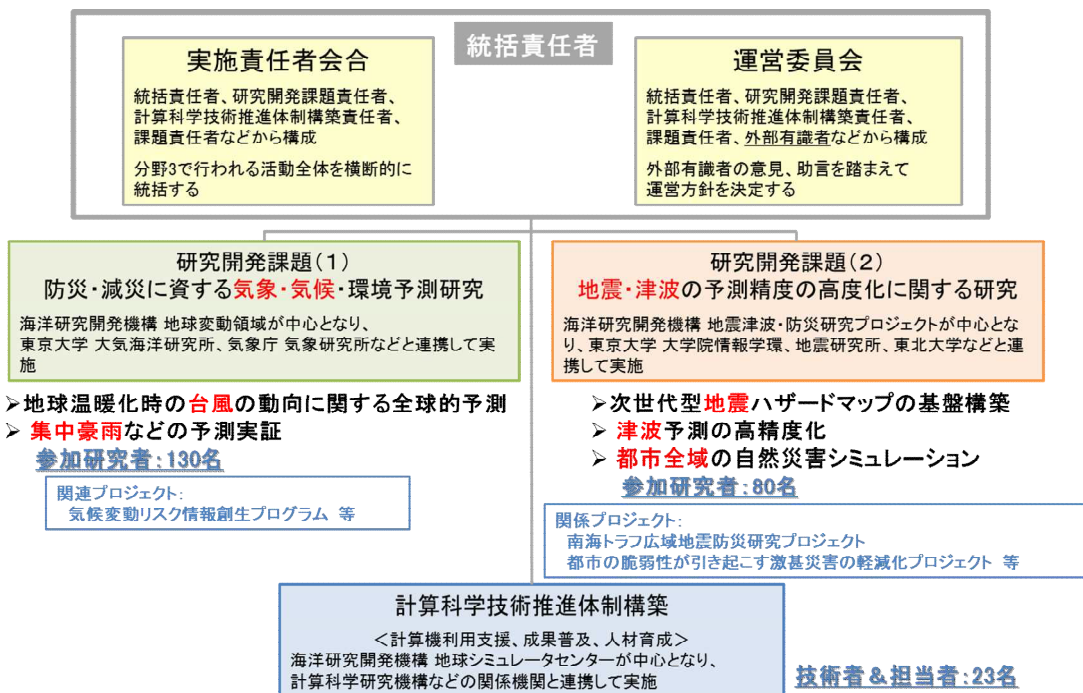
戦略機関： 東京大学物性研究所〔代表機関〕  
 分子科学研究所  
 東北大学金属材料研究所



統括責任者： 常行真司（東京大学）

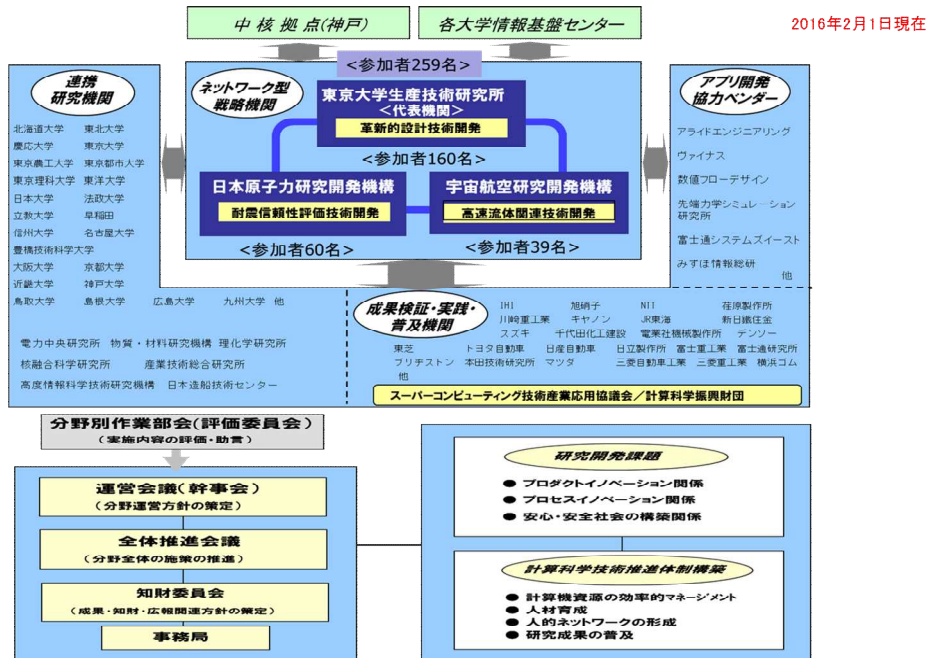
○分野3 「防災・減災に資する地球変動予測」

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）



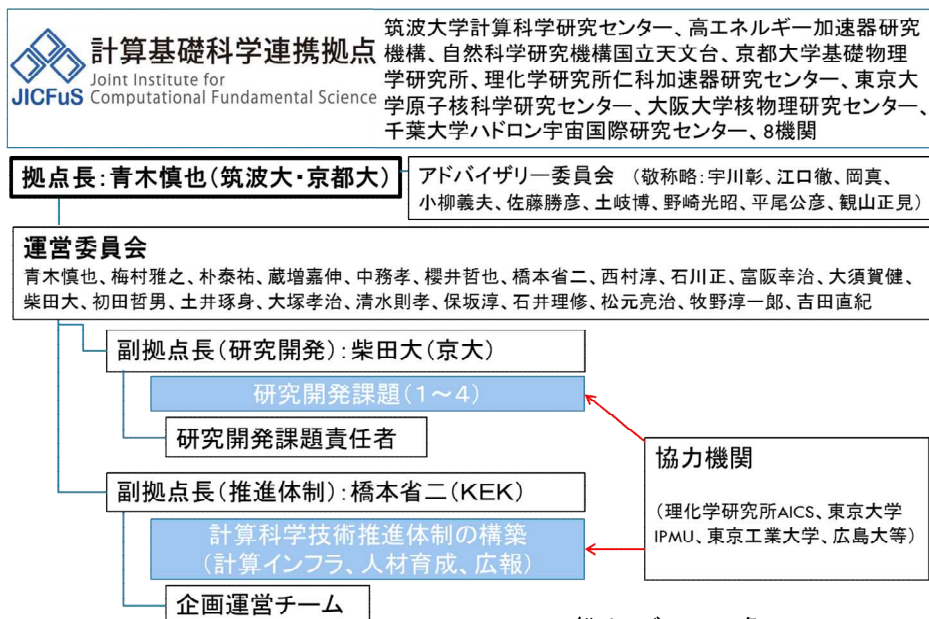
○分野4 「次世代ものづくり」

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）



## 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及び分野マネージャ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、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、評価委員会の主査から実施した評価内容について説明し、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（素案）

（平成28年●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。

○研究開発については、全ての戦略分野で目標に沿った研究開発が推進され、「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もあり、科学的発見や成果の社会応用が成された事例も数多く創出された。

○計算科学技術推進体制については、各戦略分野において、本事業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、また本事業により企業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。

<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も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との連携も積極的に行われ、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。

<有効性>

○各戦略分野で開発された先端的アプリケーションソフトウェアの公開やデータベースの構築による成果の普及・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も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。また、本プログラムによる体制構築においては、本事業予算とは別に共同研究という形で多くの企業等が参画し、新たなコンソーシアムが形成されるなど、波及効果も認められる。

<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も道を拓きつつあり、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大規模計算は「京」で行うなど「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。また、プロジェクトの推進や評価体制について、課題実施者以外の各分野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。

## (2) 成果

- 研究開発成果については、戦略分野全てで、「京」の性能を活かした数多くの成果が創出されており、独創性も高く、優位性にも富んでいると評価できる。
- 国際会議等での特別講演、招待講演、学術発表論文も多く、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もなされており、計算科学のみならず各分野に対する貢献も大きい。
- 例えば、医療、創薬等への計算科学の適用は新しい分野とも言え、これまで国産ソフトウェアが少なかった中、世界的にも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、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、本プログラムの予算範囲を超え、多くの参画企業との共同研究や他のプロジェクトとの連携が推進される体制が構築された。各戦略分野では、計算資源の高度利用や効率的マネジメントに力を入れ、「京」の有効利用に寄与した。また、人材の確保・育成、研究成果の発信や普及に責任を持つ体制は的確に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も独自の工夫を考案し、着実に推進した。

## (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。波及効果も含め、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努力は、引き続き重要である。
- 人材育成について、我が国全体の計算科学技術人材の育成・確保の観点からも、ポスト「京」での取組も含め、継続的に取り組んでいくことが必要である。
- 計算機性能の向上により、今後、「京」以外のスーパーコンピュータにおいても大規模シミュレーションを実施することが可能になることを見据え、本プログラムの成果を普及・展開していくことが重要である。
- 産業界においては、本プログラムでの先導的な研究開発は、5年から10年先に企業において実用することを念頭に研究活動に参画しており、本プログラムで構築された研究開発体制やコンソーシアムを、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重要である。
- シミュレーションの高性能化には、アプリケーションの改良とともに、ハードウェアの高性能化が必須である。「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、次世代スーパーコンピュータは必要不可欠なものであり、我が国の研究開発力を強化していくことが重要である。

