

# スパコンプロジェクトの総括と ポスト「京」の利活用に向けて

平成30年11月8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

# ポスト「京」の開発

## 背景・課題

- 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、シミュレーションによる社会的課題の解決や人工知能（AI）開発及び情報の流通・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**
- 【成長戦略等における記載】（未来投資戦略2018）
- 産学官連携を支え、生産性の飛躍的向上の基盤となる先端的な研究施設・設備の整備・共用や**ポスト「京」の開発を進める。**

## 事業概要

### 【事業の目的】

- 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。**

### 【事業の概要】

- 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を目指す。**
- 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。
- 消費電力：30～40MW（「京」は12.7MW） ○ 国費総額：約1,100億円

### 【期待される成果例】

#### ★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



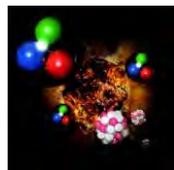
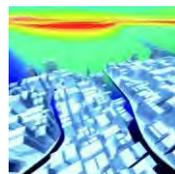
- ★医療ビッグデータ解析と生体シミュレーションによる病気の早期発見と予防医療の支援の実現

#### ★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

#### ★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



### 【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

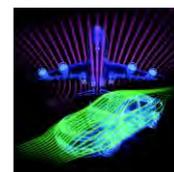
⇒ 総合力のあるスーパーコンピュータ

#### ★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



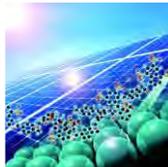
- ★平成30年度秋頃の中間評価を踏まえ、製造段階への移行を最終的に判断。



理化学研究所  
計算科学研究センター  
（兵庫県神戸市）

#### ★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



# Society5.0の実現を支えるポスト「京」

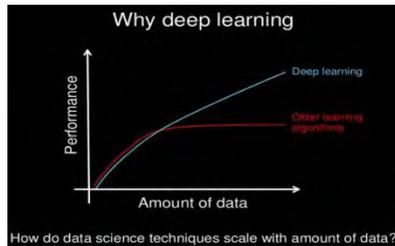
## ポスト京：データ科学もシミュレーションも世界最高水準

- ①大規模なデータ学習を可能とする世界トップレベルの計算能力
- ②「京」の100倍のアプリケーション実効性能を達成することで、より実社会に近い形でのシミュレーションを実現



### AI・ビッグデータ解析

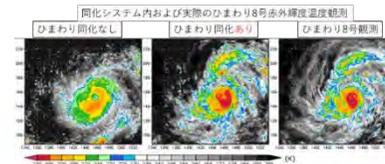
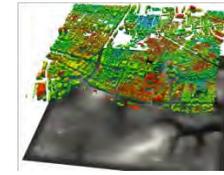
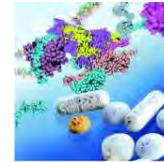
学習データ量を増やすと精度は上がるが、その分大量の計算が必要  
⇒世界最先端のパソコンが必須



モデルの提示

データ科学とシミュレーション科学の融合により新たな価値を創出

データの提示



### シミュレーション

汎用性が高く、多様な分野のアプリをCo-design  
⇒多様な分野で極限・極小・未来の現象を予測

各種センサー類から得られる大量のデータを、AI等を活用しながら解析

超スマート社会の実現

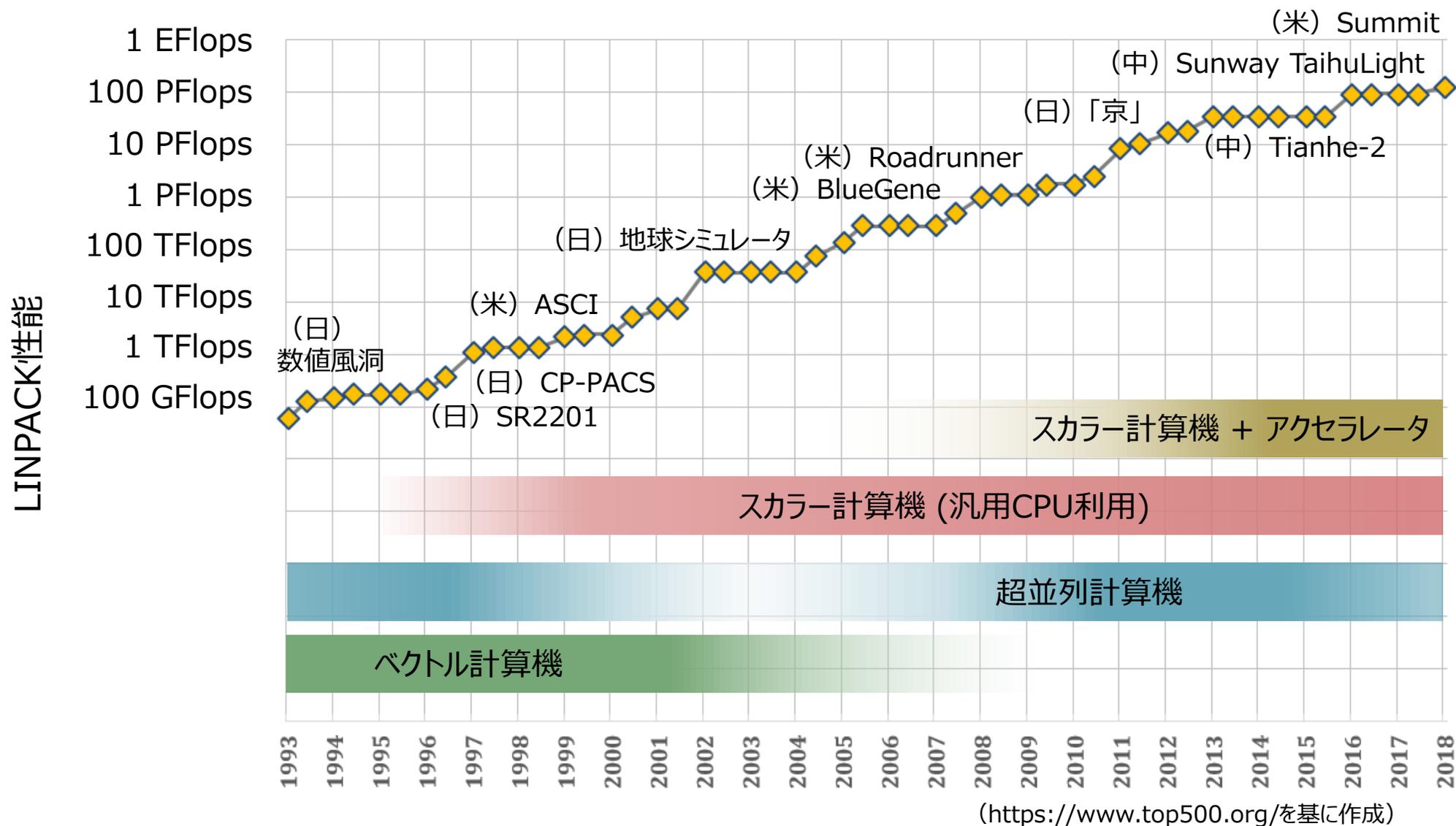
センサーから得られるリアルタイムデータをシミュレーションに反映（データ同化）

### リアルタイムセンサ情報





# TOP500ランキングにおける1位の推移

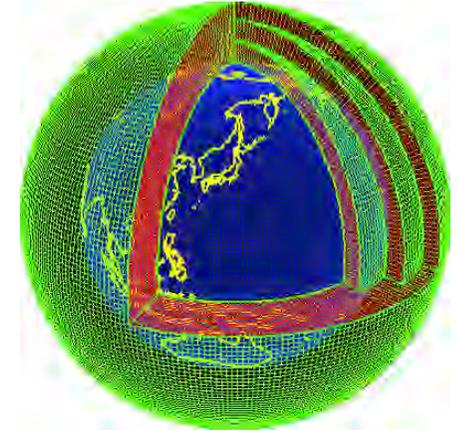


# 地球シミュレータの開発目標

平成17年第8回計算技術WG資料抜粋

## ■ 気象・気候シミュレーションの解像度(格子間隔)

モデル	1997年	地球シミュレータ
地域モデル	20 - 30 km	~1km
大循環モデル(AGCM)	50 - 100 km	5 - 10km



- 経度, 緯度方向: 4000 x 2000, 鉛直方向: 数10
- 時間ステップ: 現在の1/10程度

Cray C90でAGCMシミュレーションを実施した場合の実効処理速度(約4-6ギガフロップス)の  
**1000倍の実効処理速度(約5テラフロップス)**

# 「地球シミュレータ」開発開始までの経緯

平成17年第8回計算技術WG資料抜粋

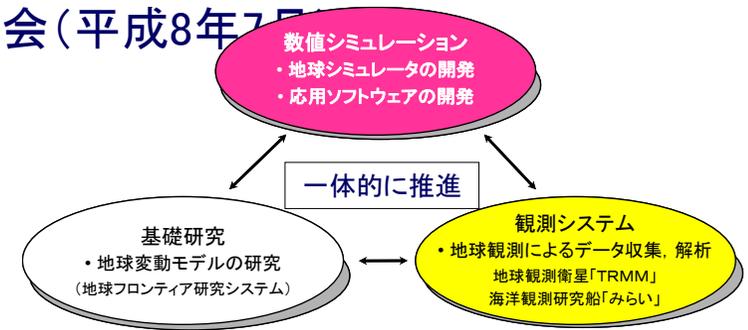
## ■ 地球規模現象の解明に対する期待の高まりと高度計算科学技術の進展

- 平成7年1月 阪神淡路大震災
- 平成9年11月 地球温暖化防止京都会議(COP3)の開催:京都議定書
- 旧科学技術庁の施策: 高度計算科学技術の推進(平成7年度~)

## ■ 科技庁 航空・電子等技術審議会 地球科学技術部会(平成8年7月)

報告書「地球変動予測の実現に向けて」

- 「地球変動予測研究の推進にあたっては、**地球変動プロセス研究**、**地球観測**及び**数値シミュレーション**を三位一体として、総合的かつ計画的に研究開発を推進すべきである。」



## ■ 科技庁 研究開発局 計算科学技術推進会議 地球シミュレータ部会(平成9年7月)

報告書「『地球シミュレータ』計画の推進について」

- **地球シミュレータの開発**
- 地球シミュレータ上の**高度応用ソフトウェアの開発**
- 大気大循環シミュレーションにおいて実効性能5テラフロップスの達成など

## ■ 地球シミュレータの開発が平成9年度から5年計画で進められた。

## ■ 計算機システムの面から見ると研究プロジェクトではなく、開発プロジェクト

## ■ 成功と思える点

- 計画通りのスケジュール, 規模で完成
  - 年度毎の予算編成なので, 完成時点の規模が担保されない.
  - 開発担当者以外の多くの人々の協力, 努力
- 完成時点での目標達成
  - ハードウェア開発に先行して応用ソフトウェア開発を開始
  - 完成一年前から実機に近いマシンでチューニング, 評価
  - 完成時点でAGCMの目標性能を上回る性能を達成 (SC2002 Gordon Bell Award)
- 世界最高性能の達成
  - LINPACKにおいて35.86Tflop/s
    - 約10時間の連続稼動 → 安定動作確認には良いBMT
    - 2年半のトップ1確保 (予定通り)
  - AGCMなどの応用プログラムの実効性能は以前トップ
- 複雑な開発形態や開発組織間の良好な調整を実施
  - 開発体制の変更への対応

# スーパーコンピュータ「京 (けい)」について

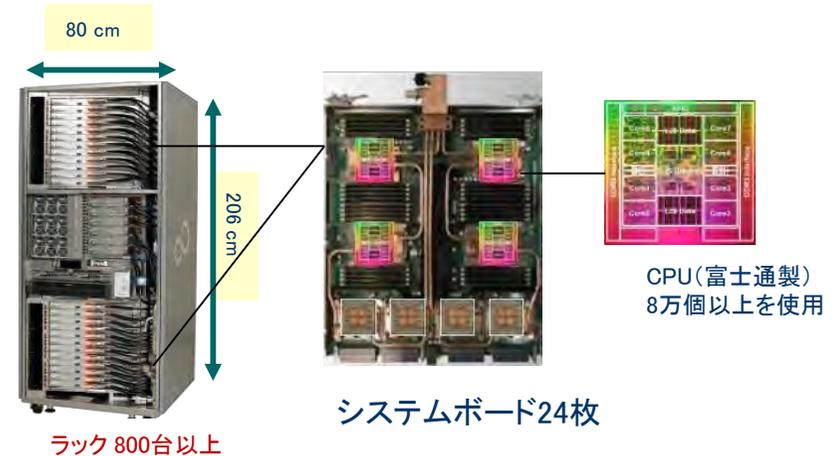
平成25年総合科学技術会議第1回評価検討会資料

## <概要>

- ◆平成18年度からプロジェクトを開始し、平成23年11月に性能目標のLINPACK10ペタフロップス※達成
- ◆平成23年6月、11月と連続で世界スパコン性能ランキング (TOP500) において1位を獲得  
(平成24年11月のTOP500では3位)
- ◆平成24年6月にシステム完成、平成24年9月28日に共用開始
- ◆これまでに産業利用28件を含む合計100件の課題が採択されている。(平成25年3月現在)  
※10ペタフロップス: 一秒間に1京回 (=10,000兆回 =  $10^{16}$ 回) の足し算, 掛け算が可能な性能

## <特徴>

- ◆「京」の開発により、世界最高水準の技術力を獲得し、我が国の技術力の高さを世界に発信
  - ・高い演算性能: 世界に先駆けて10ペタフロップスを達成
  - ・高い信頼性: 全CPUフル稼働時の連続実行時間は29時間以上で世界最高水準
  - ・高い実行効率 (理論性能に対する実際の性能の比率): 世界トップ10の平均約78%に対し「京」では93%
- ◆世界に先駆け10ペタ級のスパコンを用いたシミュレーションを実現し、様々な研究成果を創出。ハイパフォーマンスコンピューティング分野で最も権威あるゴードン・ベル賞を平成23年・24年と2年連続で受賞



## ○プロジェクトの主な成果

### (1)ハードウェア

#### <性能実証>

- ・平成23年11月に世界に先駆けLinpack性能10ペタFLOPSを達成
- ・平成23年6月,11月に世界ランキング1位を獲得
- ・HPC Award(多角的でより現実的なスパコンの性能目標となる4項目のベンチマークテストランキング)の全項目で最高性能を達成

#### <独創性・優位性>

- ・全CPUフル稼働時の連続実行時間は29時間以上で世界最高水準の信頼性
- ・高い利便性、耐故障性、運用性を有するネットワークや水冷システムによる高効率性(低消費電力)
- ・93%の高い実行効率(世界トップ10の平均は78%)

### (2)ソフトウェア(アプリケーション)

- ・グランドチャレンジアプリケーションとしてナノテクノロジー・ライフサイエンス各分野において、材料の原子構造や電子状態の精密計算や心臓を細胞レベルから再現する等のペタフロップス規模のスパコン向けアプリケーションをはじめとして、それぞれ46本(ナノ分野)、31本(ライフ分野)のシミュレーションソフトウェアを開発し、一般向けに公開。さらに、共用開始前に、アプリケーションの高度化を実施し、これらの利用研究でゴードンベル賞を二年連続で受賞。

### (3)研究教育拠点(COE)の形成等

- ・理化学研究所に計算科学研究機構を発足させ、計算機科学及び計算科学の連携による最先端の国際的な研究教育拠点を形成。
- ・「京」の開発・整備やアプリケーションの開発に携わった理化学研究所、富士通、大学等において多くの研究者・技術者が育成。

# 「京」と海外のスパコンとの比較

平成25年総合科学技術会議第1回評価検討会資料

アプリケーションプログラムの実効性能や使いやすさに関する演算性能あたりのメモリ容量、CPU・メモリ間のデータ転送性能やCPU間のデータ転送性能では、「京」がTitan（2012年11月のランキングで1位）やSequoia（同ランキングで2位）よりも優位となっており、幅広い分野での活用が可能。



Sequoia@LLNL

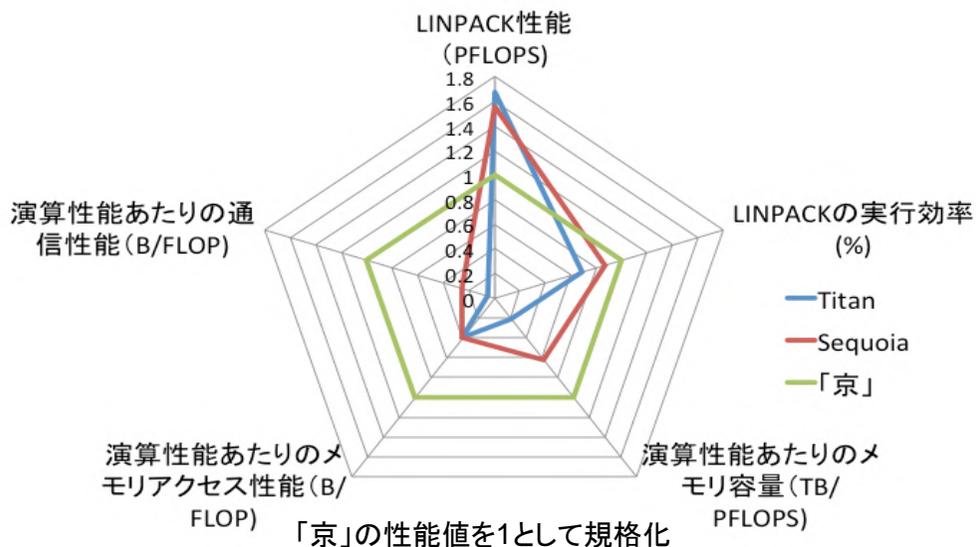


Titan@ORNL



「京」@RIKEN AICS

「京」とSequoia及びTitanとを、5つの性能観点から比較したレーダーチャート



	セコイア	タイタン	京
ノード数	98,304	18,688 CPU+GPU	88,128
ピーク性能 (PF)	20.13	27.11	11.28
LINPACK性能 (PF))	16.3 (81)	17.6 (65)	10.5 (93)
メモリ容量 (PB)	1.5	CPU:0.57 GPU:0.10	1.3
性能あたりのメモリ容量 (TB/PF)	76.3	25.7	122.1
性能あたりのメモリ帯域 (B/FLOP)	0.2	CPU:0.36 GPU:0.19	0.5
性能あたりのNW帯域(B/FLOP)	0.10	CPU部分のみ:0.19 全体(GPU含む):0.019	0.39
消費電力 (MW)	7.9	8.2	12.7
設置面積 (m <sup>2</sup> )	約300	約400	約1,500

# スーパーコンピュータ「京」の利用成果がゴードン・ベル賞を受賞 2011年

平成25年総合科学技術会議第1回評価検討会資料

## 概要

理研、筑波大、東大、富士通のチームによる『「京」によるシリコン・ナノワイヤの第一原理計算』が、コンピュータシミュレーション分野で最高の賞であるゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞。日本人によるこの受賞は2004年以来7年ぶりの快挙。

(参考)ゴードン・ベル賞

米国計算機学会(ACM)が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。毎年11月に開催される米国スーパーコンピュータ会議にて表彰式が行われる。このうち実行性能部門の最高性能賞は最も栄誉ある賞とされている。

## 研究内容

### 【背景】

- 22nm以下の微細構造をもつ次世代半導体において、漏れ電流による消費電力の解決が課題。このため、シリコン・ナノワイヤが次世代半導体の材料として期待されているが、その実現には、ナノワイヤ内の原子・電子の解析が不可欠。
- しかし、このような微細材料での実験はできず、また、シミュレーションでは計算機の能力不足から、2,000原子程度(ごく一部分)までしか計算できなかった。

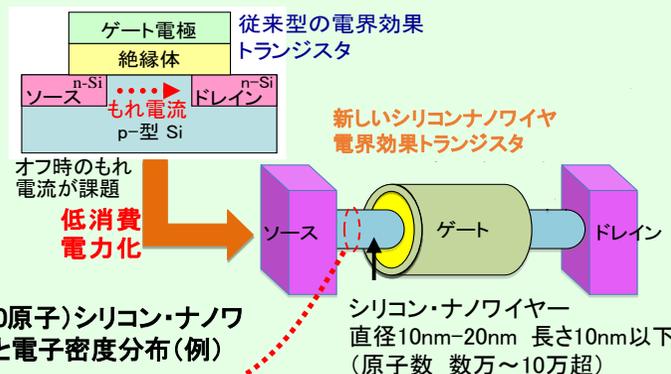
### 【京による成果】

- 現実の材料サイズに近い10万原子規模のナノワイヤの電子状態の計算し、世界で初めてナノレベルの高精度シミュレーションを可能にした(3ペタフロップスでの計算)。(→従来のシステムでは30年以上かかる計算が、「京」により1週間で実施可能に)
- また、約4万原子のナノワイヤの電子状態を断面の形状を変えて計算し、断面の形状による電子輸送特性の変化を初めて明らかにした。

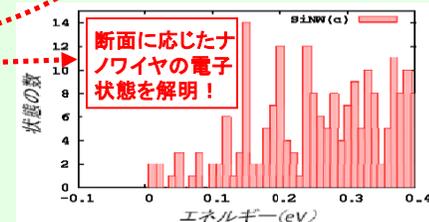
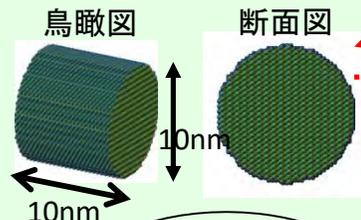
### 【今後の展開】

- 22nm以下の微細構造を持つ次世代半導体の製造方法の確立
- 高速・高機能、省エネルギーなどの特長をもつ新しいデバイスの設計に貢献

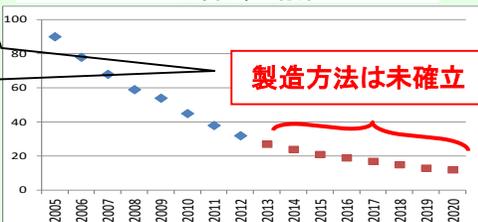
### シリコン・ナノワイヤを用いた次世代半導体のイメージ



直径10nm(40,000原子)シリコン・ナノワイヤの断面形状と電子密度分布(例)



「京」によるシミュレーションにより実用化に貢献



CPU微細加工技術の予測 (国際半導体技術ロードマップ2010年版より)

# スーパーコンピュータ「京」の利用成果がゴードン・ベル賞を受賞 2012年

平成25年総合科学技術会議第1回評価検討会資料

## 概要

筑波大、理研、東工大の研究グループによる『約2兆個のダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算』が、コンピュータシミュレーション分野での最高の賞であるゴードン・ベル賞を受賞。日本のグループによるゴードン・ベル賞受賞は2年連続で、今回は筑波大グループの単独受賞。

(参考)ゴードン・ベル賞 米国計算機学会(ACM)が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。毎年11月に開催される米国スーパーコンピュータ会議(SC)にて表彰式が行われる。

## 研究内容

### 【背景】

- 宇宙の形成過程を明らかにするには、ダークマターの重力進化の解明が不可欠。  
(ダークマターとは:宇宙全体の物質エネルギーのうち約2割を占め重力相互作用だけが働く物質であり、素粒子としての正体は解明されていない)
- しかし、1兆個以上におよぶダークマター粒子のシミュレーションは計算機の能力が足らず、実施できなかった。(現在は筑波大グループの他、米国・アルゴンヌ研グループも実施中)

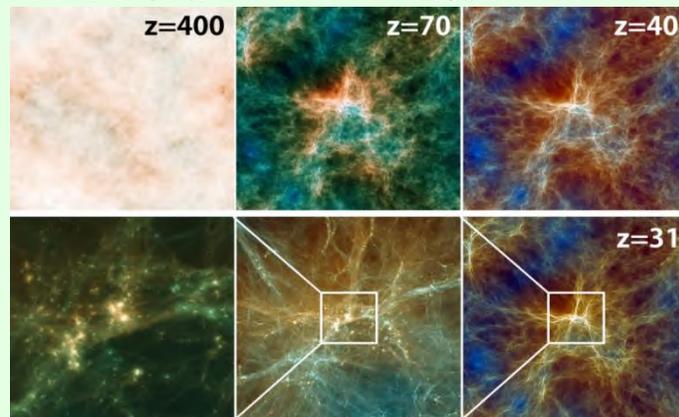
### 【「京」による成果】

- 世界最大規模である数兆個におよぶダークマター粒子の重力進化を、実用的な時間内にシミュレーションすることを可能とした(5.67ペタフロップスでの計算)。  
(→パソコン1台で数百年かかる計算が、「京」により3日で実現)
- 宇宙初期(約137億年前の宇宙誕生から約200万年後～約1億年後)のダークマターの密度分布を計算(右図参照)
- 筑波大グループのアプリケーションは、アルゴンヌ研グループの6倍程効率が良く、アプリケーション開発でも世界をリードしていることが示された。

### 【今後の展開】

- 星や銀河の形成など、宇宙の構造形成過程に関する科学的成果の創出が期待される。
- より微細なダークマター構造を解明でき、ダークマター粒子の探査、正体解明に貢献。

図:宇宙初期のダークマター密度分布



明るさはダークマターの空間密度を表し、明るいところは密度が高い。また、 $z$ は赤方偏移の量を表しており、数値が大きいほど過去を見ている(天文学では時間や距離の尺度として用いられる)。

【上段左】宇宙誕生時はほぼ一様。 $z=400$ は宇宙誕生から約200万年後であり、1辺約5光年。

【上段中】時間の経過につれて重力により集まり、大きな構造が形成される。

【下段】下段右は、誕生から約1億年後の宇宙の姿(約136億年前、1辺約65光年)。

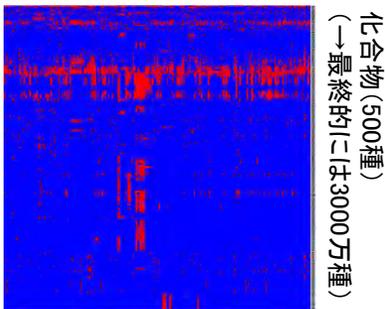
中心部を拡大したものが下段中、更に拡大したものが下段左。(zは全て31)

## ● 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築 (研究代表者: 京都大学・奥野恭史)

製薬企業11社が参画し、タンパク質と化合物の結合予測を世界最大規模で達成。医薬品開発の成功確率向上と迅速化により、我が国製薬産業の競争力向上に貢献。

医薬品の開発には10年以上の長い年月と500億円以上の巨額の費用が掛かると言われており、シミュレーションによる開発期間・コスト縮減が期待されている。

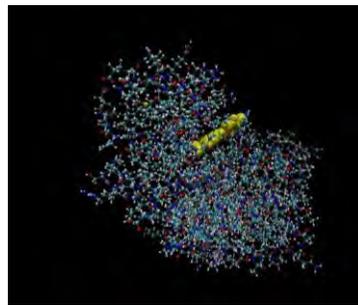
そこで、製薬企業11社と共同で「京」を用いた医薬品開発の研究プロジェクトを推進。論文等で結合することが分かっているタンパク質と化合物の結合ペア(12万ペア)をもとに、大量のタンパク質と化合物の結合データを学習し、結合パターンの統計ルール化を行い、「京」による超高速計算で、世界最大規模(189.3億ペア)の結合予測に成功。今後は、予測結果をもとに、各製薬企業が独自に医薬品開発につなげる。



化合物(500種)  
(→最終的には3000万種)

タンパク質(388種)  
(→最終的には631種)

「京」による結合予測結果  
(赤色が相互作用あり)



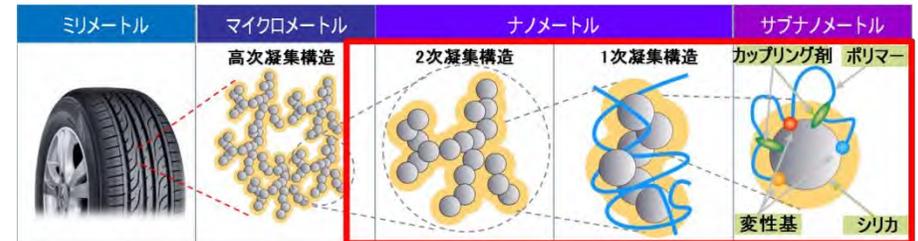
タンパク質と化合物の  
結合シミュレーション

## ● 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発 (研究代表者: 住友ゴム工業(株)・岸本浩通)

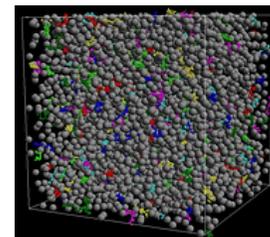
「京」による大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションにより、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。

低燃費・安全性(グリップ性能)・省資源(ゴム強度)といった相反するタイヤ性能を両立させ、タイヤゴムを高機能化させるためには、分子・ナノレベルでの構造解析が必要となるが、企業レベルでのスパコン性能の制限から従来は困難であった。

「京」を用いることで、大規模でありながら、分子レベルの詳細なシミュレーションが可能となり、ゴム内部の複雑な構造を大スケールでシミュレーション。タイヤを高機能化させるための研究に活用し、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。



この領域すべてを分子レベルで丸ごとシミュレーション



タイヤ材料のナノレベルでのシミュレーション

# アプリケーション開発について

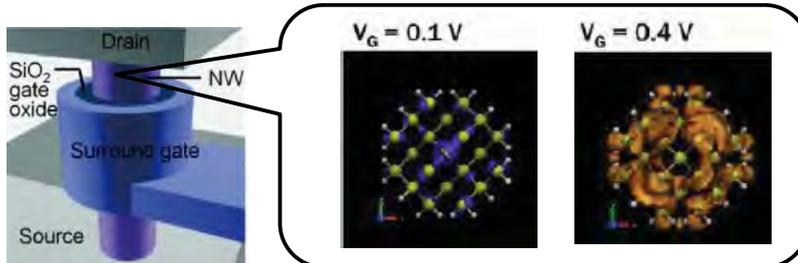
## ● シリコンナノワイヤーの電子機能予測 シミュレーション (研究代表者: 東京大学・押山淳、岩田潤一)

ナノレベルの精密な電子状態シミュレーションにより、次世代半導体として期待されているシリコンナノワイヤーに流れる電子分布を世界で初めて解明することに成功。

ポストスケーリング時代を迎えた半導体テクノロジーにおいては、ワイヤー、チューブなどの新奇ナノ構造、ナノ物質を起爆剤とするテクノロジーの新たな展開が望まれており、シリコンナノワイヤーは、微細化限界を打破する次世代半導体として期待されている。

今回、数万個のシリコン原子からなる径1~20nmのワイヤーの電子状態計算を、実空間第一原理ナノ物質シミュレータHP-RSDFTを用いたシミュレーションで世界で初めて実現した。その結果、電圧や断面形状により流れる電子の密度分布が異なる等の特性が分かり、量子論を考慮したナノサイズの最適なデバイス構造を設計できることがわかった。また、同様の計算手法でシリコン上ゲルマニウムナノドット自己形成過程の実験結果を再現できることも明らかとなった。

今回開発した計算手法を活用し、ナノ構造デバイスのものづくりを演繹知に基づくものにシフトさせ、研究開発の競争力強化につなげる。



径1~20nm  
シリコンナノワイヤー (NW)

シリコンナノワイヤー断面の電流密度分布。  
電圧により流れ方が異なる。

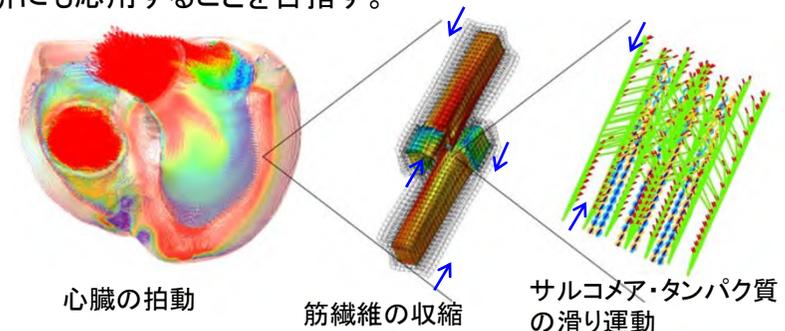
## ● 心疾患のマルチスケール・マルチフィジックス シミュレーション (研究代表者: 東京大学・久田俊明)

心臓の難病の一つである肥大型心筋症の病態を、サルコメア・タンパク質という分子レベルの変異から細胞、心臓の動きまでを計算して解析することに成功。

突然死・心不全などを引き起こす**肥大型心筋症**は遺伝子の連鎖解析によりミオシンを中心としたサルコメア・タンパク質の変異が原因であると同定されたが、その後の遺伝子改変動物を使用した検討によっても病態のメカニズムには不明な点が多く残されている。

ヒトの臓器(心臓)内の特定の分子の性質を自由に改変し、その挙動を拍動する心臓の中で測定できるという**マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heart**の特性を活用し、肥大型心筋症に認められる変異ミオシンの機能異常と多彩な臨床病態との関係についての検討を行い、変異ミオシンが拡張不全や錯綜配列などの特有な病態を引き起こす過程を明らかにすることができた。

今後はサルコメアモデルを更に精密化することで、実験では分析が困難である心臓の巧妙なポンプ機能の本質解明に関わる新知見を得ると共に、ミオシン以外のタンパクの機能異常が引き起こす疾患の解析にも応用することを目指す。



心臓の拍動

筋繊維の収縮

サルコメア・タンパク質の滑り運動

# HPCI戦略プログラム戦略分野

平成25年総合科学技術会議第1回評価検討会資料

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進する。

## < 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おこなう。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。

・東大物性研(代表)  
・分子研  
・東北大金材研

### 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～組み合わせ最適化～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。

・東大生産研(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(代表)  
・高エネ研  
・国立天文台

※ スーパーコンピュータ「京」で、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野を「戦略分野」(5分野)とする。

※ 各戦略分野の研究開発、分野振興等を牽引する機関を「戦略機関」とする。

# HPCI戦略プログラム 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査手法を開発し、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

## スケジュール



## 第1章 プロジェクトの概要

- ・研究開発の推進体制を構築
- ・システムとアプリのCo-design



- ・戦略的にポスト「京」を活用
- ・成果の早期創出・最大化
- ・国際競争力のあるシステムを実現

## 第2章 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

### 選定方針

- ・社会的・科学的課題の解決に貢献（必要性）
- ・世界を先導する成果の創出（有効性）
- ・ポスト「京」の戦略的活用

### 重点課題 9課題

社会的・国家的見地から高い意義があり、「京」からの発展として世界を先導する成果の創出が期待でき、選定方針に沿う課題

- ・健康長寿社会の実現(2課題)
- ・防災・環境問題(2課題) ・エネルギー問題(2課題)
- ・産業競争力の強化(2課題) ・基礎科学の発展(1課題)

### 萌芽的課題 4課題

ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、調査研究を通じて実現化を検討

## 第3章 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・研究開発の進め方

### 研究開発推進体制

### 成果の早期創出・最大化

- 社会的・科学的課題の解決に貢献し、世界を先導する成果を創出
- ・成果の社会還元へ責任を持つ代表機関
- ・関係者が連携・協調した実施体制

- ポスト「京」を最大限に活用
- ・ポスト「京」開発主体の積極的な関与
- ・課題横断的に必要な基盤技術の効果的な整備

- ・Co-デザインの実施
- ・重点課題ごとにターゲットアプリケーションの選定
- ・ターゲットアプリケーションの目標性能を設定

## 第4章 ポスト「京」の計算資源配分

①重点課題枠  
計30-40%程度

②一般利用枠、分野振興枠  
30-40%程度

③産業  
利用枠  
10%程度

④政策  
対応枠  
10%程度

⑤調整  
高度化枠  
10%程度

# 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。	自然科学研究機構（岡崎 進・教授） 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。	東京大学（吉村 忍・教授） 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。	東京大学（常行 真司・教授） 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。	東京大学（加藤 千幸・教授） 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。	筑波大学（青木 慎也・客員教授） 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

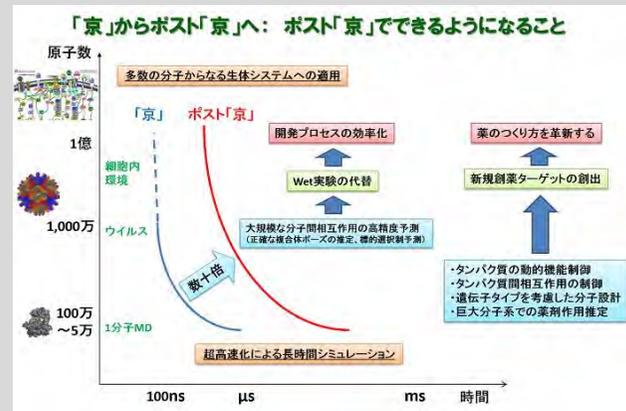
コンピューター技術により、労働集約的な医薬品開発を加速化し、画期的新薬を創出する基盤を構築

・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



・次世代創薬計算技術の開発

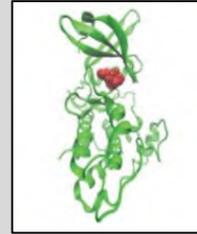
・創薬ビッグデータ統合システム開発



### 「京」

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

・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



・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

・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

### ポスト「京」

「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

・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

・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



・標的タンパク質の結合シミュレーションでは、100倍以上、1週間に数万個の結合計算が可能

# ポスト「京」で出来ること（健康長寿社会の実現）

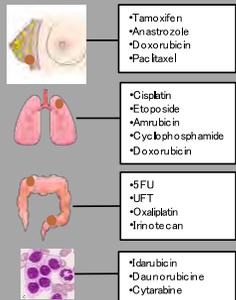
## 重点課題 2：個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

### 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

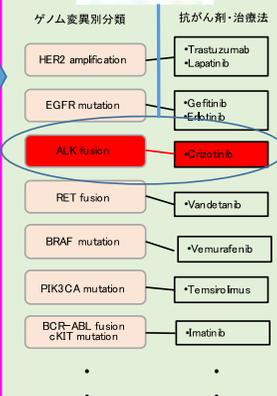
- ・薬剤選択および治療法選択の最適化
- ・創薬ターゲットの探索、治療法開発

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



臓器別による抗癌剤の選択のみ

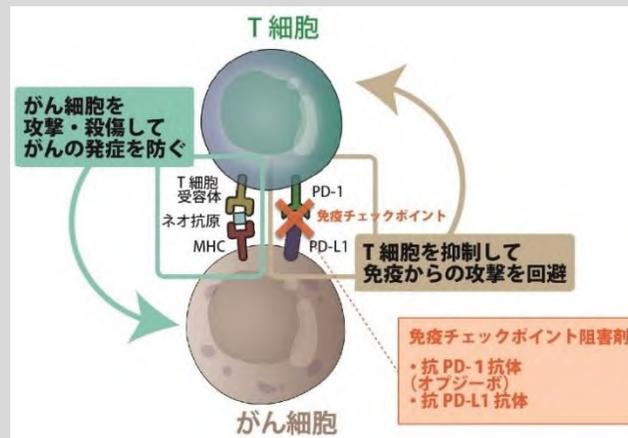
私のがんにぴったりあった副作用の無い抗がん剤と治療法がありました！



### 「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

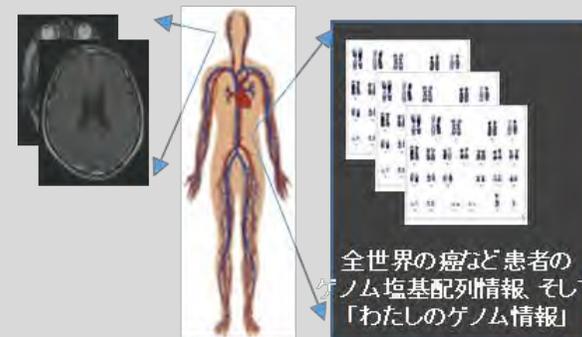
- ・100日で1000検体のがんに関連する原因遺伝子の変異の同定が可能
- ・免疫チェックポイント阻害薬「オプジーボ」等が顕著に効果を表す患者のスクリーニングが可能となるなど先行的な成果を創出



### 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



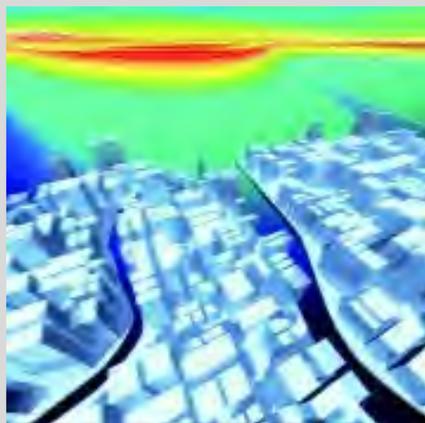
全世界の癌など患者のノム塩基配列情報、そして「わたしのゲノム情報」

## 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

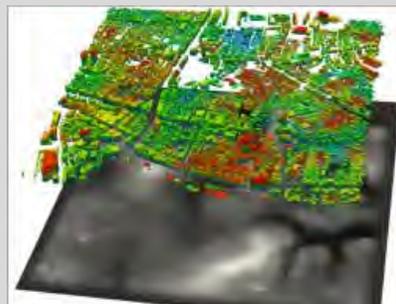
- ・地震と津波が引き起こす複合災害  
(地盤の揺れ、津波の侵入)
- ・災害が引き起こす被害  
(建物、インフラ施設の傷)
- ・被害への対応  
(人々の避難、交通障害、経済活動復旧)

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ろか」を予測

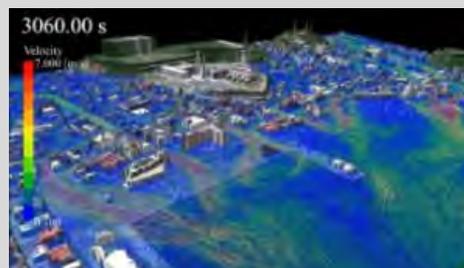


### 「京」

- ・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

# 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

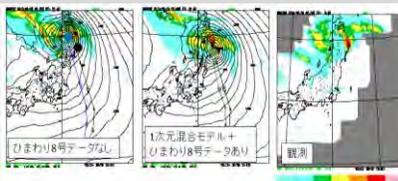
気象衛星や新しいレーダーで得られる大量の観測データを用いたデータ同化によって、局地的大雨や竜巻、台風等を高精度に予測する手法を開発

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

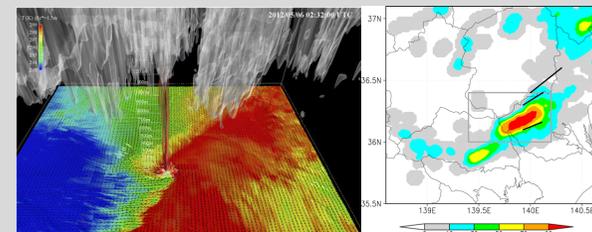
ひまわり8号の高頻度観測データを用いた台風10号の予測結果。データ同化により、経路の誤差が減少。

・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**



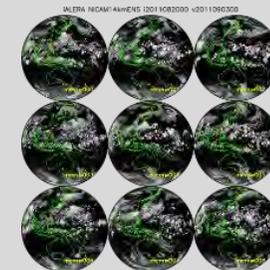
### ポスト「京」

・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大規模な乱れを詳細に再現し、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**

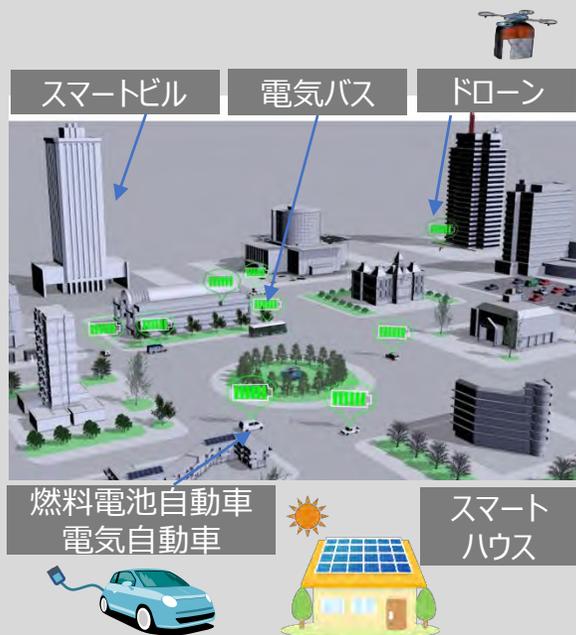


# ポスト「京」で出来ること（エネルギー問題）

## 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

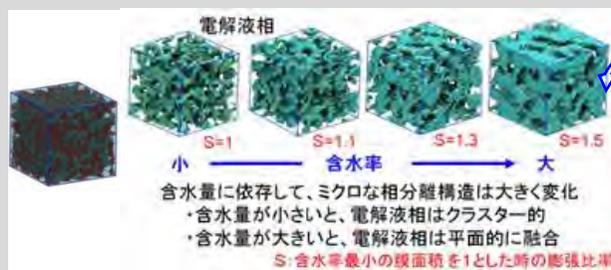
循環型エネルギー社会の実現のため、二次電池、燃料電池などの原子・分子・電子レベルのマイクロ機構を計算科学により解明し、高効率、低コスト、環境にやさしく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立



### 「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



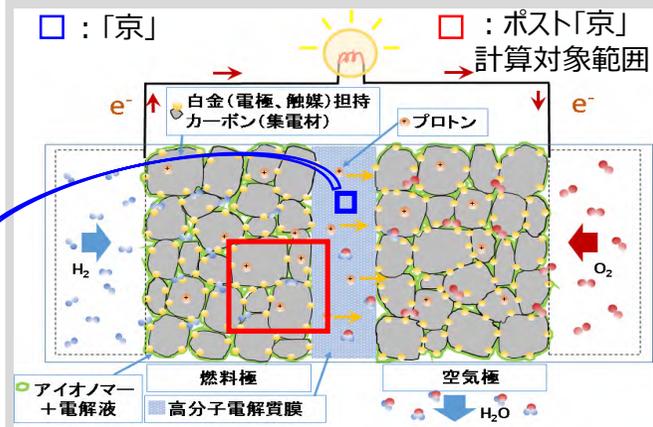
高分子電解質膜と水層の含水率依存性

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

### 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



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

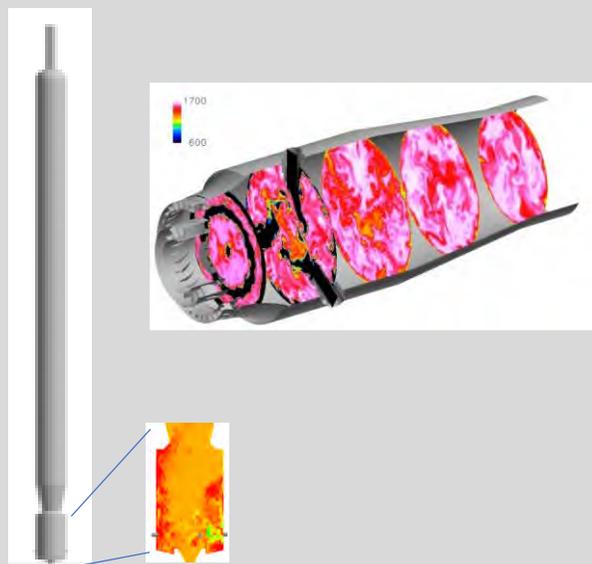
・炉全系における反応-炉構造伝熱・高温損傷-冷却のマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムの研究開発

・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



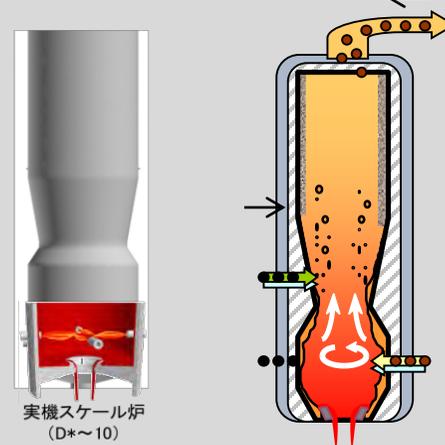
石炭ガス化炉と燃焼器の実証試験機における燃焼解析の様子

### 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



# 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

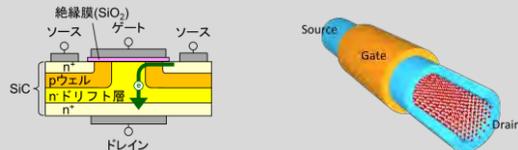
### 目標

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、

- ・微細化による量子効果や形状、不純物影響予測
- ・化合物・異種物質接合界面での物性発現予測

による新しい物理原理に基づく機能の創出

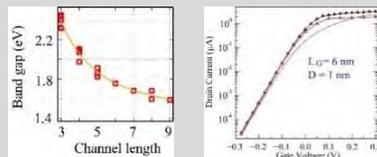
#### ① デバイスの電子状態を第一原理計算



パワー制御デバイス      Siナノワイヤ

電子状態入力

#### ② デバイスの特性を統計や実験値を参照し予測



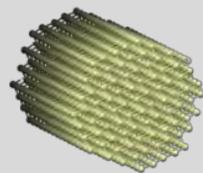
### 「京」

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

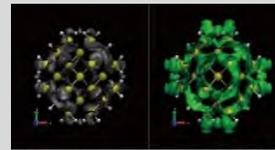
- ・最大100時間での10万個のシリコン原子シミュレーションによるナノワイヤ半導体の極限性能の予測によって、小型省電力化に向けて半導体デバイス微細化開発が進展

#### 「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」

10万原子結晶の第一原理計算



シリコン(Si)10万原子群ナノワイヤ構造



$V_G = 0.3V$        $V_G = 0.8V$

ナノワイヤ断面電流分布によるデバイス特性予測

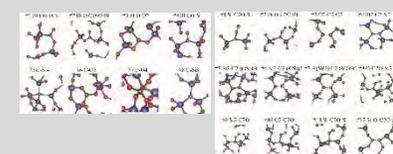
### ポスト「京」

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

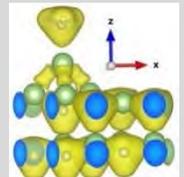
- ・化合物複雑界面の計算によって、ワイドギャップ半導体の特性の向上や製造プロセスを革新

#### 「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」

現実の複雑界面の第一原理計算



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

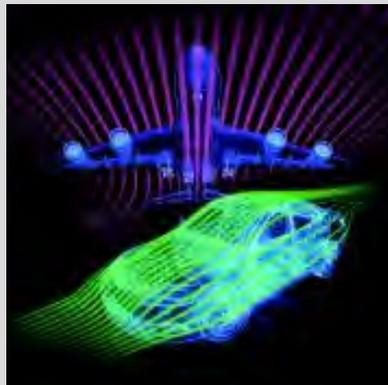
# ポスト「京」で出来ること（産業競争力の強化）

## 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

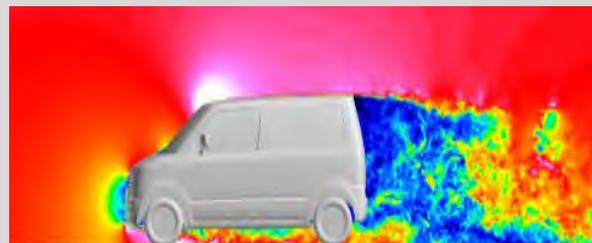
時々刻々と変化する運転条件変化を考慮した構造解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を備えたアプリケーションの開発により、操縦安定性、車室内環境を同時に考慮した空力設計の実現



### 「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

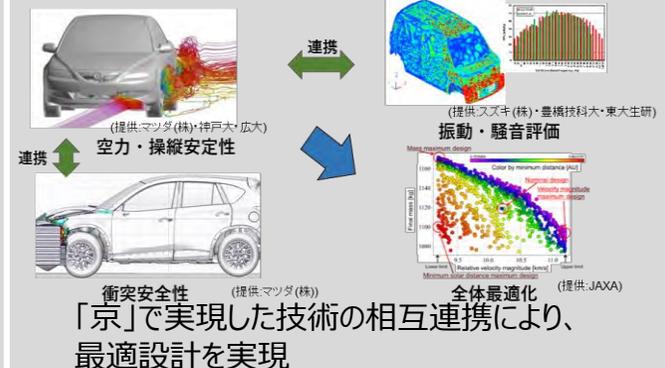


自動車周りの空力解析

### 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

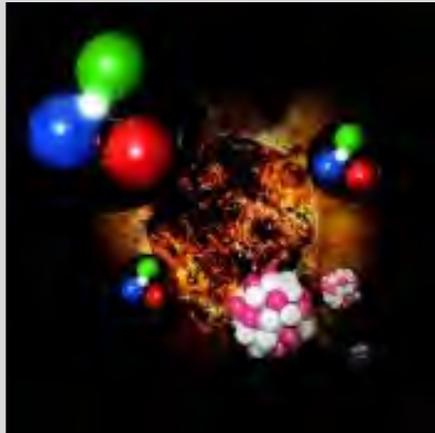


# ポスト「京」で出来ること (宇宙)

## 重点課題 9 : 宇宙の基本法則と進化の解明

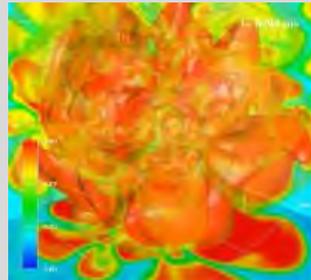
### 目標

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



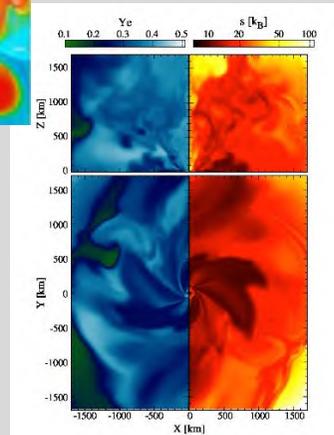
### 「京」

- ・**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



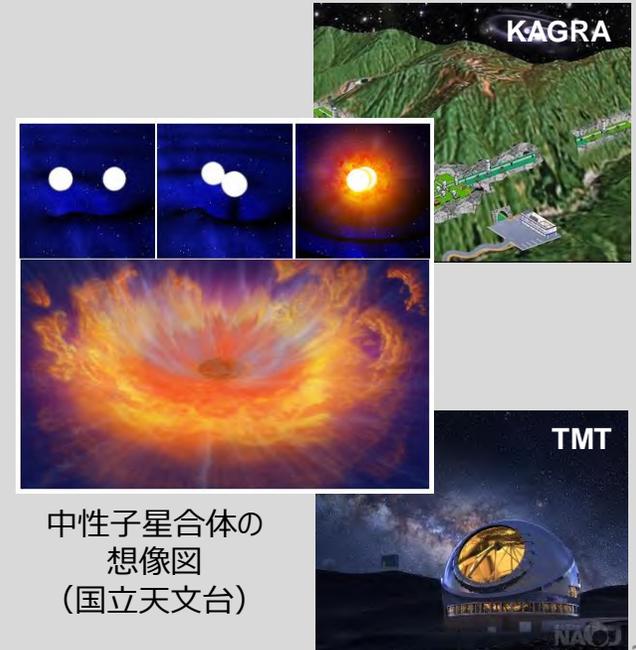
「京」を用いた  
超新星爆発の再現

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)

# 特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(概要)

(平成6年6月29日法律第78号)



特定放射光施設 SPring-8 & SACLA



特定中性子線施設  
J-PARC中性子線施設



特定高速電子計算機施設  
スーパーコンピュータ「京」

## 「特定先端大型研究施設」

世界最高レベルの性能を有し広範な分野における多様な研究等に活用されることによりその価値が最大限に発揮される大規模な研究施設

広範な分野における利活用

利用者  
(大学・独法等、民間)

施設・設備等の  
利用環境整備

利用に係るニーズ

公正な課題選定  
情報提供、研究相談、  
技術指導等

利用課題  
の応募

### 施設設置者

#### ❖ 理化学研究所

- SPring-8・SACLA
- スーパーコンピュータ「京」

#### ❖ 日本原子力研究開発機構

- J-PARC

### 登録施設利用促進機関

公平かつ効率的な共用を行うため、施設利用研究に専門的な知見を有する、設置主体とは別の機関が利用促進業務を実施

- 利用者選定業務 (外部専門家の意見を踏まえた実施課題の選定)
- 利用支援業務 (情報の提供、相談等の利用支援)

※施設の区分ごとに文部科学大臣が登録

- SPring-8・SACLA (公財) 高輝度光科学研究センター (JASRI)
- J-PARC (一財) 総合科学研究機構 (CROSS)
- スーパーコンピュータ「京」 (一財) 高度科学技術研究機構 (RIST)

連携

実施計画の認可

実施計画の認可

業務規程の認可、改善命令

国 (文部科学省) : 共用の促進に関する基本的な方針の策定

# 特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針 概要

## (平成23年文部科学省告示第120号)

### 前文

- ・特定高速電子計算機施設を中核とした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(HPCI)を、利用者視点に立って構築
- ・我が国の科学技術の振興や産業競争力の向上に資するよう、産業界を含むあらゆる分野の研究者等に共用させることが必要
- ・HPCIコンソーシアムにおいては、平成22年7月の発足以来、HPCIの整備の在り方を議論する中で、特定高速電子計算機施設の共用の促進についても検討
- ・特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(共用法)第四条第一項の規定に基づき、この方針を定める

### 概要

#### 第一 特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方向

- 一 利用者本位の考え方を基本とした施設の整備及び運営を行うこと  
共用の促進については、利用者側視点に立ったコンソーシアム主導によるHPCI構築の趣旨に適合
- 二 計算科学技術分野の研究教育拠点の形成（計算科学技術研究及び人材育成）
- 三 国内外の連携、協力及び交流を促進し、国際競争力の強化に努める
- 四 理化学研究所、登録機関、HPCIコンソーシアムが三位一体となった連携・協力関係を構築

#### 第二 施設利用研究に関する事項

- 一 超高速電子計算機の供用  
透明かつ公正な手続きによる利用機会の提供と重点的・戦略的な利用（一般利用枠と戦略利用枠）
- 二 公正な利用者選定の実施
  - ・選定委員会及び課題審査委員会の設置
  - ・課題の科学的卓越性とプログラムの効率性の重視
  - ・運用や高度化研究から得られる知見・技術を課題選定に活かす
  - ・利用者選定の結果を公表
- 三 適切な利用支援の実施  
一元的な窓口のもと、情報提供及び利用相談、アプリケーションの調整・高度化支援、技術相談、講習会の実施等

## 第二 施設利用研究に関する事項（続き）

- 四 計算科学技術研究及びそれぞ支える人材育成の推進
- 五 施設利用研究の成果の取扱い  
積極的な成果の公開
- 六 理解増進活動の実施
- 七 国際交流の推進

## 第三 特定高速電子計算機施設の整備に関する事項

- ・最先端かつ最高の性能を達すること及び優れた成果の創出が継続的に行われることを目指す
- ・経費の効率化
- ・科学技術基本計画等を踏まえ国際競争力の強化に配慮
- ・理化学研究所とHPCIコンソーシアムとで連携

## 第四 特定高速電子計算機施設の運営に関する事項

- 一 利用者本位の利用促進業務の実施
  - ・窓口の一元化
  - ・利用者ニーズの把握
- 二 施設の適切な運転及び維持管理等
  - ・効率的な運転及び維持管理
  - ・施設全体を通じた安全管理
- 三 十分な利用時間の提供

## 第五 その他特定高速電子計算機施設の共用の促進に際し配慮すべき事項

- 一 関係機関との連携
  - ・理化学研究所及び登録機関においても、HPCIの整備・運用に積極的に関与
  - ・HPCI構成機関との積極的な連携を図り、特定高速電子計算機施設の円滑かつ有効な整備・運営等に活かす
- 二 地元自治体との連携
  - ・地域における産学官連携の深化をはじめとした地元自治体等との連携

# スーパーコンピュータ「京」及び 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（HPCI）の運営

## 事業目的

- 「京」を中核とし、多様な利用者のニーズに応える革新的な計算環境（HPCI：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）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。

## 【成長戦略等における記載】（統合イノベーション戦略）

- 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構築を推進

## 事業概要

### 1. 「京」の運営

- 平成24年9月末に共用を開始した「京」の運用を着実に進めるとともに、その利用を推進。  
※ポスト「京」への円滑な移行のため、2019年度中に「京」の運用を停止する。
- ①「京」の運営
- ②「京」の利用促進

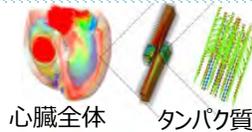
### 2. HPCIの運営

- 「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、利用者が一つのアカウントにより様々なスパコンやストレージを利用できるようにするなど、多様なユーザーニーズに応える環境を構築し、全国の利用者に供する。特に来年度は「京」の停止も踏まえ、利用可能な計算資源を拡充する。

## 【これまでの成果例】

### 医療・創薬

心臓の拍動を世界で初めて分子レベルから精密に再現。特定の遺伝子異常と病気との相関性が知られていた**肥大型心筋症のメカニズム解明に貢献**。



タンパク質の結合の度合いを分子レベルでシミュレーション。新薬候補化合物を選定し、前臨床試験を実施中。**製薬メーカー等からなるコンソーシアムによる共同研究を実施**（32企業・機関等が参画）。



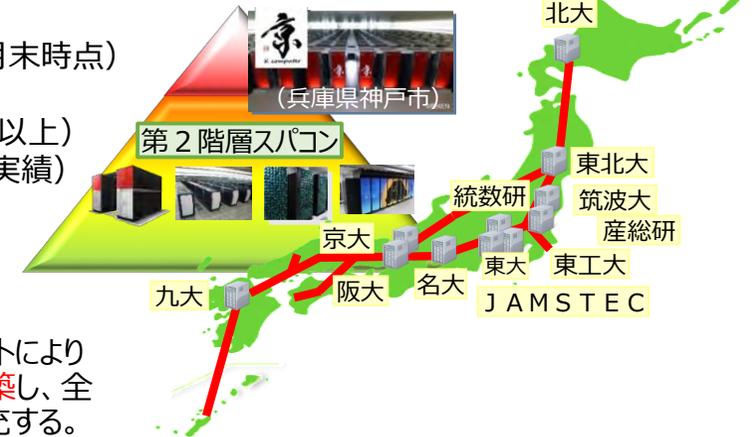
### 地震・防災・研究

長周期地震動による地表や超高層建築物の詳細な揺れを初めて明らかに。**内閣府による「南海トラフ巨大地震及び首都直下地震への対策」に貢献**。



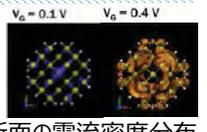
「京」の利用実績（平成30年3月末時点）  
 ・利用者 2,300人以上  
 ・全体の3割が産業界（180社以上）  
 「京」の運転実績（平成29年度実績）  
 ・運転時間 8,222時間  
 ・稼働率 98.0%

## フラッグシップシステム

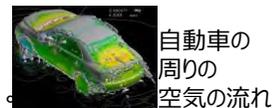


### ものづくり

実際の材料に近い10万原子規模の第一原理計算により、**世界初のナノレベル高精度シミュレーションを実現。微細化限界を突破したデバイス設計に道筋**（2015年ゴードンベル賞受賞）。

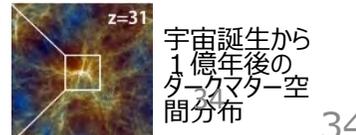


世界で初めて、空気の流れを忠実に実現し、**シミュレーションによる風洞実験の代替を実証。自動車メーカー等からなるコンソーシアムによる共同研究を実施**（22企業・機関等が参画）。



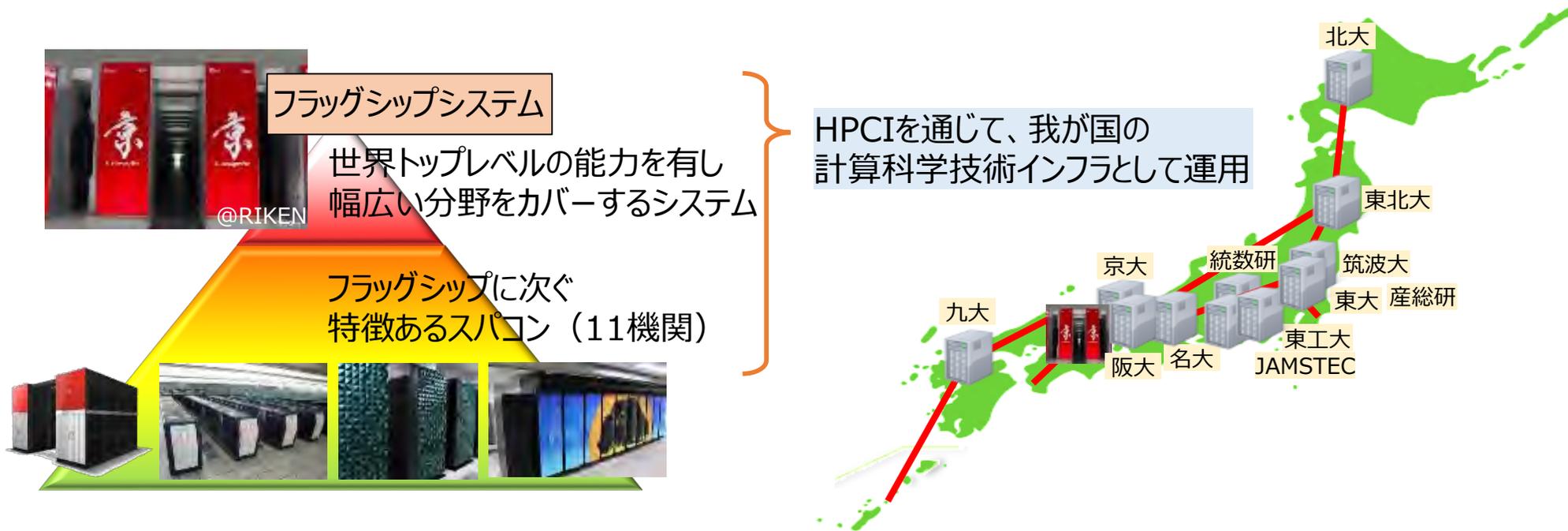
### 宇宙

**宇宙の構造形成過程の解明のため、世界最大規模の数兆個のダークマター粒子のシミュレーション**（2012年ゴードンベル賞受賞）。



# 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。



- シングルサインオンにより一つのアカウントで全ての計算資源が利用可能
- 共用ストレージにより大容量のデータにどこからでもアクセス可能
- 一元化されたユーザ窓口（ヘルプデスク等）

# 一般社団法人H P C I コンソーシアムの概要

<経緯> ○平成22年7月、H P C I 準備段階コンソーシアム発足。H P C I の構築・運用とコンソーシアムの形成に向け検討。平成24年1月30日に最終報告をとりまとめ、法人発足に向け準備開始。

○平成24年4月2日、一般社団法人化。同年6月6日第1回社員総会を開催。

<理念> ○計算科学技術に関わる全ての者（計算科学技術関連コミュニティ）に開かれたものであること

<活動内容>

○計算科学技術に関わるコミュニティの幅広い意見集約の場として、H P C I システムの整備・運用方針や我が国の計算科学技術の振興策並びに将来のスーパーコンピューティング等について検討し、国や関係機関に提言すること。

【理事長】加藤 千幸（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」）【副理事長】常行 真司（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」）

## ユーザコミュニティ代表機関（15機関）

【ポスト「京」重点課題】

池口 満徳 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」  
 宮野 悟 課題2「個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学」  
 堀 宗郎 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」  
 高橋 桂子 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」  
 岡崎 進 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」  
 常行 真司 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」  
 加藤 千幸 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」  
 青木 慎也 課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」

【国公立大学・国立大学附置研究所・大学共同利用機関法人】

小川 真人 神戸大学  
 石黒 静児 自然科学研究機構核融合科学研究所  
 坪木 和久 名古屋大学 宇宙地球環境研究所

【国立研究開発法人】

高木 亮治 国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所

【上記以外の機関】

安井 宏 公益財団法人計算科学振興財団  
 坂田 恒昭 特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西  
 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

## アソシエイト会員（16機関）

【国公立大学・国立大学附置研究所・大学共同利用機関法人】

小久保 英一郎 自然科学研究機構国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト  
 佐々木 節 京都大学 基礎物理学研究所  
 太田 勲 兵庫県立大学

【国立研究開発法人】

姫野 龍太郎 国立研究開発法人理化学研究所 情報基盤センター  
 高橋 桂子 国立研究開発法人海洋研究開発機構 地球情報基盤センター  
 武宮 博 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター  
 潮田 資勝 国立研究開発法人物質・材料研究機構

【上記以外の機関】

渡辺 紀徳 一般社団法人日本航空宇宙学会  
 富田 達夫 一般社団法人情報処理学会  
 中村 裕一 一般社団法人電子情報通信学会 情報・システムソサイエティ  
 高田 章 一般社団法人日本応用数理学会  
 加藤 和彦 一般社団法人日本ソフトウェア科学会  
 田村 哲郎 一般社団法人日本流体力学会  
 田中 秀樹 分子シミュレーション研究会  
 井口 寧 サイエントフィック・システム研究会  
 高林 徹 N E C ・ C & C システム S P 研究会

## H P C I システム構成機関（20機関）

【国立大学情報基盤センター等】

高井 昌彰 北海道大学 情報基盤センター  
 小林 広明 東北大学 サイバーサイエンスセンター  
 朴 泰祐 筑波大学 計算科学研究センター  
 田浦健次郎 東京大学 情報基盤センター  
 山田 功 東京工業大学 学術国際情報センター  
 森 健策 名古屋大学 情報基盤センター  
 中島 浩 京都大学 学術情報メディアセンター  
 下條 真司 大阪大学 サイバーメディアセンター  
 小野 謙二 九州大学 情報基盤研究開発センター

【国立研究開発法人】

保坂 淳 大阪大学 核物理研究センター  
 川島 直輝 東京大学 物性研究所  
 久保 百司 東北大学 金属材料研究所  
 川崎 能典 情報・システム研究機構 統計数理研究所  
 斉藤 真司 自然科学研究機構分子科学研究所 計算科学研究センター  
 真鍋 篤 高エネルギー加速器研究機構 共通基盤研究施設・計算科学センター  
 喜連川 優 情報・システム研究機構 国立情報学研究所

【上記以外の機関】

関 昌弘 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

51機関（平成30年6月現在）

# 本ワーキンググループでご議論いただきたいこと

## 前提条件

\* 当初のポスト「京」のためのアプリケーション開発計画から5年程度経過し、計算科学やその関連研究分野および社会のニーズが大きく変化する中で下記の項目を検討していただきたい。

- ポスト「京」のためのアプリケーション開発で重点的に取り組んだ課題の早期成果創出のためにはどのような支援の在り方が適切か。また、重点課題の成果創出フェーズの目標設定はどのようにすべきか。
- ポスト「京」が新たに取り組むべき社会的・科学的課題は何か。
- ポスト「京」の特長を生かした計算科学とデータ科学の融合、さらにはAIなどの研究を発展させるためにはどのような環境整備や支援をすべきか。
- ポスト「京」の国家プロジェクトでの利活用と一般公募型の利活用の割合はどの程度にすべきか。また、産業界での利活用の割合や成果の取扱いはどのようにすべきか。
- ポスト「京」ユーザーのすそ野拡大のために何をすべきか。
- ポスト「京」で生み出されたデータをどのように管理、共有し、利活用すべきか。
- 国内外への成果や波及効果の発信のためにどのような取組ができるか。
- 関係府省、大学、研究機関、産業界等との連携をどのように図るべきか。