

中間評価票

(平成25年12月現在)

1. 課題名 HPCI戦略プログラム

2. 評価結果

HPCI戦略プログラム（以下「本プログラム」という。）は、スーパーコンピュータ「京」の有する性能を最大限活用し、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待される下記五つの分野（以下「戦略分野」という。）において画期的な成果を創出し、計算科学技術の飛躍的な発展を図ることを目的としており、各戦略分野において、①研究開発として、達成すべき戦略目標を定め、当該目標に沿った研究開発の推進、②計算科学技術推進体制の構築として、計算機資源の効率的マネジメント、人材育成、研究成果の普及、分野を超えた取組の推進等に取り組んでいる。

<戦略分野>

分野1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」

戦略目標：大規模シミュレーション・高度なデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、及びそれを通じた薬剤・医療のデザインの実現

分野2 「新物質・エネルギー創成」

戦略目標：基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ

分野3 「防災・減災に資する地球変動予測」

戦略目標：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、及び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

分野4 「次世代ものづくり」

戦略目標：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

分野5 「物質と宇宙の起源と構造」

戦略目標：ビッグバンに始まる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、複数の階層をつなぐ計算科学的手法で統一的に理解する

(1) 進捗状況の評価

「京」でなければ成し得なかった独創的で優位性のある研究開発成果が得られつつあるとともに、統括責任者や課題代表者（以下「統括責任者等」という。）がリーダーシップを発揮できる体制が構築され、人材育成や成果普及が的確に機能しているなど、以下のとおり、研究開発の推進及び計算科学技術推進体制の構築は共に、戦略目標の達成に向けて全体として着実に進捗していると評価できる。

研究開発については、

① 背景にある理論・実験データから見て適切な計画を策定している。

- ②「京」の共用開始前に、本格利用に向けた「京」向けのアプリケーション高度化を実施し、「京」の性能を最大限に発揮できる環境を整えている。
- ③超並列環境を駆使し、以下のとおり、ミクロからマクロへの積層、詳細なメッシュ計算、多数同時のアンサンブル計算等の観点から、「京」でなければ成し得なかった独創的で優位性のある成果が得られつつあり、その中には、それぞれの分野で他の追随を許さず、国際レベルで高く評価されるものが含まれている。ただし、これまでの成果のうち「京」が無ければできなかったことは何か、どこまで超並列化を進めるとどの様な成果が期待できるのか、という視点をこれまで以上に強く意識する必要がある。
- ・分野1では、医療現場と緊密に連携し、原子・分子の振る舞いから細胞・臓器の動きまでを階層的につないだマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーションにより、分子の挙動から心臓の拍動を精緻に完全再現することに世界で初めて成功するなど、複雑な生命現象の予測・解明において独創的なアプローチを実現し、広範囲へのシミュレーションの有効性を示して計算科学技術を新たな分野に拡大させている。また、多数の製薬企業が参画するコンソーシアムにおいて、分野1で開発された新薬候補化合物と標的タンパク質との結合強度を高精度に評価できる計算手法が活用されるなど、産業界への成果普及も進んでいる。今後は、予測の正しさを証明するためには実験データとの整合が不可欠であることを意識し、実験データも有効活用した高精度かつ忠実なシミュレーションを実現するための基盤構築を期待する。
 - ・分野2では、「京」に最適な新アルゴリズムを開発・利用した第一原理計算でゴードン・ベル賞を受賞するなど、新物質・エネルギー創成に関わる社会的・科学的に重要かつ広範囲な物質科学の基礎研究とその応用において、「京」の性能を最大限に活用した多様な成果が得られている。今後は、本質的かつインパクトの大きな成果を目指すとともに、成果の社会還元に向けて産業界とさらに連携することを期待する。
 - ・分野3では、静力学平衡を仮定せずに雲物理過程を考慮した全球雲解像モデルによるグローバル気象シミュレーションや、地震・津波による広域甚大災害のシミュレーションに成功するなど、従来は実現できなかった精度と領域による自然現象の解析を実現している。今後は、世界が待ち望み、特に我が国が強みを持つ計算に、資源をこれまで以上に重点的に配分することを検討するとともに、得られる成果等を社会実装するために必要な投資、インフラ整備、体制はどうあるべきかの将来に向けた現実的な提案を期待する。
 - ・分野4では、自動車業界、ターボ機械業界等と産学連携のコンソーシアムを構築するとともに、数百億格子を用い、ミクロからマクロまで一貫した乱流の直接シミュレーションにより、風洞実験や水槽試験の代替え及び機器の性能・品質の向上に資する解析に成功するなど、将来の産業界における実用を見据えた実証研究を実現している。今後は、解析結果の検証のためのより高精度な実験データの取得や物性データの充実、大規模データのポスト処理ソフトウェアの充実を図ることを含め、成果を具体的な「次世代ものづくり」につなげていくための更なる取組を期待する。
 - ・分野5では、大規模格子QCDシミュレーションによるクォーク質量とバリオン間相互作用の決定を可能とする高精度計算の実現や、空間三次元の輻射流体シミュレーションによる超新星爆発現象の再現に世界で初めて成功するなど、素粒子から宇宙までを計算科学によって解き明かしていくことが実現しつつある。今後は、我が国が強み

を持つ理論物理学との協働による人材育成や人材交流を意識し、国際レベルでの貢献を目指すことを期待する。

計算科学技術推進体制の構築については、

- ①各戦略分野の第一人者を統括責任者等に選び、統括責任者等がそれぞれの分野の特性を把握してリーダーシップを発揮できる体制を構築している。
- ②各戦略分野における計算科学技術の利用者拡大のために、相当規模の研究者等を確保した体制を構築するとともに、以下のとおり、計算機資源の効率的マネジメント、人材育成、研究成果の普及等が的確に機能している。
 - ・「京」の運用主体である理化学研究所計算科学研究機構とも連携し、「京」を利用するアプリケーションの高度化支援やアプリケーション実行の進捗状況の把握により、「京」を効率的に利用するための環境整備が行われている。
 - ・「京」とそれ以外のスパコンの中から、個々の研究開発課題に最適なシステムを選択する体制が整備され、「京」は「京」でなければできない課題に集中することが促進された。
 - ・対象とする参加者に応じた様々なレベルでの講習会やトライアルコースの開催、大学等と連携した講師派遣や講義開設等、人材育成プログラムを提供する取組が積極的に進められている。
 - ・大規模並列環境向けに開発された先端的なアプリケーションを公開し、分野コミュニティや産業界が使いやすい仕組みを構築する取組が進められている。
 - ・多数の企業と連携したコンソーシアムの構築や、防災・減災関連での自治体との連携等、社会連携・成果普及のための具体的な取組が進められている。
 - ・広報担当者を雇用し、広報の難しい基礎科学の分野においても様々な企画を練り、計算科学技術の普及に取り組むとともに、他の大型研究施設を利用したプロジェクトも巻き込んだイベントを開催するなど、コミュニティの核となる活動が展開されている。なお、研究内容の社会的意義を勘案しつつ、研究者の研究活動と広報活動の両立に、引き続き留意する必要がある。

(2) 各観点の再評価と今後の研究開発の方向性

【必要性】

事前評価では、本プログラムについて、「京」を中核として、我が国の研究開発そのものに革新をもたらすシミュレーションへの取組と我が国の計算科学技術に関する研究ポテンシャルの結集を関係機関の強力な連携の下で実現するためにも実施する必要があると評価された。

本プログラムでは、「京」の性能を最大限活用した超並列環境を駆使し、

- ・心臓シミュレーション等において、初めて可能となったミクロからマクロへの階層統合シミュレーション
- ・気象シミュレーションや乱流シミュレーション等において、従来の計算機環境では実現不可能な細かな格子サイズ（分割すべき物理的単位を実現するサイズ）と広域でのシミュレーション

・アンサンブル計算による多数同時シミュレーション

等、「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いる。また、各分野の第一人者である統括責任者等のリーダーシップの下、当該分野の研究者が多数参画（総研究者数791名）し、国内外の大学・研究機関や産業界が結集・連携した体制で研究開発が進められている。以上のことから、引き続き必要性は高いと評価できる。

今後は、統括責任者等の更なるリーダーシップの下に、分野内の連携はもちろんのこと、必要に応じて分野を越えた連携や他の研究開発プロジェクトの活用も図りながら、本質的に新しい現象の解明や真に革新的な技術開発等を通じて、戦略目標の達成や社会的・科学的課題の解決に資する、「京」や本プログラムならではの成果を創出していく必要がある。また、得られた成果の情報発信については、社会に分かりやすく伝えることはもちろんのこと、「京」や本プログラムが社会の「役に立った」という国民の実感が得られるようにしていく必要がある。その際、大きな目標を示すことは社会の期待や研究者の士気を高めるために有効であるが、特に、国民の生命・健康や安全・安心に直結する分野については、現在「京」を用いて到達可能な成果とその限界を正確に社会に伝える必要がある。過剰な期待を与える様な発信は、かえって社会の意識とのギャップを引き起こす恐れがあるため、等身大で丁寧な説明が求められる。

【有効性】

事前評価では、本プログラムを実施することにより、

- ①研究開発の成果そのものが科学的・社会的なブレークスルーをもたらすとともに、様々な分野で計算科学技術が定着し我が国の研究開発そのものに革新をもたらすこと
- ②「京」の戦略的利用の成果が大学・研究機関で行われるシミュレーション研究等にも好影響を及ぼし、我が国全体としてより高いレベルの研究が展開されること
- ③養成された人材が今後の我が国の計算科学技術の担い手になることが期待されると評価された。

本プログラムでは、各戦略分野において、生命現象の理解と予測のための生命システムの定量的な記述、十万原子規模の第一原理計算によるシリコンナノワイヤー中の電子密度分布の解析、熱帯の雲活動の四週間先までの延長予測可能性の実証、高精度大規模シミュレーションによる風洞実験等の代替可能性の実証、空間三次元の輻射流体シミュレーションによる超新星爆発現象の再現等、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。また、各戦略分野で開発された先端的なアプリケーションを一般に公開するとともに、分野コミュニティや産業界が使いやすい仕組みとして、利用ノウハウや解析事例といったデータベースも用意するなど、幅広い研究者や企業が高いレベルの研究成果を活用できるようにするための取組が進められている。さらに、全国の大学・研究機関と協力した若手人材育成支援や大規模並列環境を活用するための技術習得支援等、計算科学技術の裾野拡大に向けた取組が進められている。以上のことから、引き続き有効性は高いと評価できる。

今後は、「京」を用いて予測された結果、あるいは、理解された結果を実証するため、実験系研究者との連携を図りつつ、結果の検証作業も強化していく必要がある。また、研究開発及び計算科学技術推進体制は共に、分野全体から見た位置付け、社会的・科学的要

請、科学技術動向、国内の計算資源、海外との比較優位性等を意識し、プロジェクト後半における成果の取りまとめに向けて、マイルストーン目標の設定を含めた進捗管理をこれまで以上に行っていく必要がある。

【効率性】

事前評価では、本プログラムの推進により、各分野における様々な目的を持った利用者がより効果的・効率的に適切なシミュレーションを行うことが可能となるとともに、計算科学技術全体の裾野が拡大されることで、研究開発や企業活動における効率化が見込まれると評価された。

本プログラムでは、「京」とそれ以外の計算資源を活用するとともに、「京」の計算資源については、重点配分枠や加速枠の設定、大規模ジョブ実行期間を活用したジョブの実行等、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。また、各戦略分野において、先導性を有する大学・研究機関が中心となり、企業も含めた幅広い関係者が参画する体制を構築し、研究開発や企業活動にイノベーションをもたらす先端的アプリケーションやノウハウ、人材育成プログラムを積極的に提供している。さらに、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ような、実用化を見据えた実証研究を企業と連携したコンソーシアムにおいて進めている。以上のことから、引き続き効率性は高いと評価できる。

今後は、大学・研究機関のスーパーコンピュータ、さらには民間のクラウドサービス等のコンピュータの性能が向上していることも認識し、「京」や本プログラムならではのインパクトのある成果を迅速に創出する観点に立って、本プログラムに割り当てられた「京」の計算資源をこれまで以上に重点的に配分するとともに、「京」以外の計算資源の更なる有効活用を図る必要がある。また、分野によっては企業参加の状況は限定的であることから、実用化と応用へ向けた展開のために企業との更なる連携を深める必要があるが、その際、企業のHPC利用を促進する観点から、「京」や本プログラムが企業活動をどの様に効率化したのか、あるいは今後効率化するのかを定量的に評価し、トップマネジメント層等に示していくことを心がけるべきである。

(3) その他

以下の事項は、本プログラムの中間評価の範疇を越える部分もあるが、今後の「京」の運用、更には次世代スーパーコンピュータ（エクサスケール・スーパーコンピュータ、以下「次世代スパコン」という。）の開発・利用に関係することから、参考として示すこととする。

- ・ 「京」の利用の在り方に関して、研究計画に基づいた利用のみならず、政策的に極めて重要な事案への対応や緊急時におけるタイムリーな情報発信を行うための優先的利用の制度を検討すべきである。
- ・ 次世代スパコンの開発に当たっては、本プログラムで得られた社会的・科学的重要性の高い成果を更に一段革新することで、真の課題解決、実用化につなげられるシステムやターゲットアプリケーションを検討していく必要がある。例えば、次世代スパコンに期待される成果としては、（1）自然災害の即時対応予報、長期広域予

報の実用化、（２）実用可能な長時間スケールで、生体や巨大システムにおけるミクロからマクロまでの統合シミュレーションの実施、（３）計算科学による薬剤、新規材料等の完全探索の実現、等が挙げられる。

- ・ その上で、「京」（又は次世代スパコン）とそれ以外のスパコンそれぞれに最適な課題を分担させる運用戦略が求められる。