

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・研究開発事後評価結果（案）

令和3年2月

情報委員会

情報委員会 委員名簿

(敬称略、50音順)

| | |
|---------|--|
| 乾 健太郎 | 東北大学大学院情報科学研究科教授 |
| 井上 由里子 | 一橋大学大学院法学研究科教授 |
| 上田 修功 | 日本電信電話株式会社コミュニケーション科学基礎研究所上田特別研究室長/NTT フェロー |
| | 理化学研究所革新知能統合研究センター副センター長 |
| ※奥野 恭史 | 京都大学大学院医学研究科ビッグデータ医科学分野教授 |
| 梶田 将司 | 京都大学情報環境機構 IT 企画室教授 |
| 来住 伸子 | 津田塾大学学芸学部情報科学科教授 |
| ○喜連川 優 | 情報・システム研究機構国立情報学研究所長 |
| | 東京大学生産技術研究所教授 |
| 鬼頭 周 | ソフトバンク株式会社事業開発統括顧問 |
| | サイバーリーズン・ジャパン株式会社 CTO |
| 栗原 和枝 | 東北大学未来科学技術共同研究センター教授 |
| 佐古 和恵 | 早稲田大学基幹理工学部情報理工学科教授 |
| 田浦 健次朗 | 東京大学情報基盤センター長 |
| 瀧 寛和 | 和歌山大学前学長/学術情報センター長 |
| 辻 ゆかり | NTT アドバンステクノロジー株式会社取締役/ネットワークイノベーション事業本部副本部長 |
| 津田 宏治 | 東京大学大学院新領域創成科学研究科教授 |
| ◎西尾 章治郎 | 大阪大学総長 |
| 長谷山 美紀 | 北海道大学副学長/大学院情報科学研究院長/教授 |
| 引原 隆士 | 京都大学図書館機構長/附属図書館長 |
| 福田 雅樹 | 大阪大学社会技術共創研究センター教授/副センター長/総合研究部門長/大学院法学研究科教授 |
| 八木 康史 | 大阪大学産業科学研究所複合知能メディア研究分野教授 |
| 安浦 寛人 | 九州大学名誉教授 |
| 若目田 光生 | 日本経済団体連合会デジタルエコノミー推進委員会企画部会データ戦略ワーキンググループ主査 |
| | 株式会社日本総合研究所リサーチ・コンサルティング部門上席主任研究員 |

(令和3年2月現在)

◎：主査 ○：主査代理

※：利害関係者のため審議には加わらない。

H P C I 計画推進委員会 委員

(敬称略、50音順)

| | | |
|-----|-------|---|
| 伊藤 | 公平 | 慶應義塾大学工学部物理情報工学科 教授 |
| 伊藤 | 宏幸 | ダイキン工業株式会社・テクノロジー・イノベーションセンター リサーチ・コーディネーター |
| 上田 | 修功 | 理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長／NTT コミュニケーション科学基礎研究所 フェロー・上田特別研究室長 |
| 梅谷 | 浩之 | トヨタ自動車株式会社 I T 革新推進室 主幹／株式会社トヨタシステムズ C A E 部 部長 |
| 大石 | 進一 | 早稲田大学理工学術院 教授 |
| 小柳 | 義夫 | 東京大学名誉教授／高度情報科学技術研究機構神戸センターサイエンスアドバイザー |
| 喜連川 | 優 | 情報・システム研究機構国立情報学研究所 所長 |
| 小林 | 広明 | 東北大学大学院情報科学研究科 教授／東北大学サイバーサイエンスセンター センター長特別補佐／東北大学総長特別補佐 (ICT 革新担当) |
| 田浦 | 健次郎 | 東京大学情報基盤センター センター長 |
| 土井 | 美和子 | 情報通信研究機構 監事／奈良先端科学技術大学院大学理事 |
| 中川 | 八穂子 | 株式会社日立製作所研究開発グループデジタルテクノロジーイノベーションセンター シニアプロジェクトマネージャ |
| ○※ | 藤井 孝藏 | 東京理科大学工学部情報工学科 教授 |
| ◎ | 安浦 寛人 | 九州大学 名誉教授 |

令和2年10月現在

◎ : 主査 ○ : 主査代理 ※ : 利害関係者のため審議には加わらない。

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・研究開発事後評価に係る評価項目及び視点等について

1. 背景等

- 運用開始（平成 26 年 4 月）からの事業について事後評価を行う。
- 具体的には、前回の中間評価時（平成 29 年度）における評価項目を中心に改めて対応状況等について確認・評価を行う。
- 各課題は令和元年 12 月に開催された「富岳」成果創出加速プログラムレビュー委員会において評価を行っており、その結果を基に事業全体の評価を行う。

2. 事業目的

本事業は、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」の特定高速電子計算機施設として運用されていたスーパーコンピュータ「京」（※令和元年 8 月運用終了）の後継機として、平成 26 年度から開発が開始された「ポスト「京」」（現在名称は「富岳」と決定されているため、以下「富岳」という。）に関して、重点的に取り組むべき社会的・科学的課題を特定し、その解決に必要なアプリケーションプログラムをシステムと協調的に開発（Co-design）することを目的とする。

3. 事業概要等

平成 26 年度から 9 つの重点課題、平成 28 年度から 4 つの萌芽的課題を選定し、その課題ごとに複数機関が連携体制を構築、スーパーコンピュータ「京」等の計算資源を使用しながら、「富岳」を用いて最大限の成果を創出するための研究開発を推進してきた。具体的な課題は以下のとおり。

重点課題

<健康長寿社会の実現>

- 重点 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
- 重点 2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

<防災・環境問題>

- 重点 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
- 重点 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

<エネルギー問題>

- 重点 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
- 重点 6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

<産業競争力の強化>

- 重点 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
- 重点 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

<基礎科学の発展>

- 重点 9 宇宙の基本法則と進化の解明

萌芽的課題

＜基礎科学のフロンティア－極限への挑戦＞

萌芽 1－1 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－

萌芽 1－2 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

萌芽 1－3 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

＜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＞

萌芽 2－1 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

萌芽 2－2 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

＜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＞

萌芽 3－1 生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境の変動の解明

＜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＞

萌芽 4－1 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

萌芽 4－2 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

4. 予算の変遷

（単位：百万円）

| 年度 | 平成 26 (初年度) | 平成 27 | 平成 28 | 平成 29 | 平成 30 | 令和元 |
|-----|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 予算額 | 55 | 448 | 2,683 | 2,845 | 2,845 | 2,602 |

5. 評価項目及び視点等

評価に際しては前回の中間評価等を踏まえ、以下の項目を中心に評価を行う。

- ① アプリケーション開発及び普及のための取組の推進
- ② 社会的・科学的課題の解決への貢献
- ③ 人材育成

事後評価票（案）

（令和3年2月現在）

1. 課題名 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

2. 研究開発計画との関係

施策目標：未来社会を見据えた先端基盤技術の強化

大目標（概要）：ICT を最大限に活用し、サイバー空間とフィジカル空間（現実世界）とを融合させた取組により、人々に豊かさをもたらす「超スマート社会」を未来社会の姿として共有し、その実現に向けた一連の取組を更に深化させつつ「Society 5.0」として強力に推進し、世界に先駆けて超スマート社会を実現していく。このため、国は、超スマート社会サービスプラットフォームの構築に必要な基盤技術及び個別システムにおいて新たな価値創出のコアとなり現実世界で機能する基盤技術について強化を図る。

中目標（概要）：我が国が世界に先駆けて超スマート社会を形成し、ビッグデータ等から付加価値を生み出していくために、産学官で協働して基礎研究から社会実装に向けた開発を行うと同時に、技術進展がもたらす社会への影響や人間及び社会の在り方に対する洞察を深めながら、中長期的視野から超スマート社会サービスプラットフォームの構築に必要な基盤技術の強化を図る。

重点的に推進すべき研究開発の取組（概要）：

「次世代アーキテクチャと革新的なハードウェアの研究開発」

様々なモノがインターネットにつながる IoT 社会を迎えて、多様なニーズに応える革新的な計算環境を構築し、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。

本課題が関係するアウトプット指標：

情報科学技術分野における研究開発の論文数、学会発表数

本課題が関係するアウトカム指標：

社会実装された研究開発のテーマ数

3. 評価結果

(1) 課題の達成状況

○ 概要

本事業は、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」の特定高速電子計算機施設として運用されていたスーパーコンピュータ「京」(※令和元年8月運用終了)の後継機として、平成26年度から開発が開始された「ポスト「京」」(現在名称は「富岳」と決定されているため、以下「富岳」という。)に関して、重点的に取り組むべき社会的・科学的課題を特定し、その解決に必要なアプリケーションプログラムをシステムと協調的に開発(Co-design)するためのものである。

具体的には、平成26年度から9つの重点課題、平成28年度から4つの萌芽的課題を選定し、その課題ごとに複数機関が連携体制を構築、スーパーコンピュータ「京」等の計算資源を使用しながら、「富岳」を用いて最大限の成果を創出するための研究開発を推進してきた。具体的な課題は以下のとおりである。

重点課題：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る先進的な課題(各分野において9つのターゲットアプリケーションの実効性能の向上を目指して研究が実施された。)

<健康長寿社会の実現>

重点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

重点2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

<防災・環境問題>

重点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

重点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

<エネルギー問題>

重点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

重点6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

<産業競争力の強化>

重点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

重点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

<基礎科学の発展>

重点9 宇宙の基本法則と進化の解明

萌芽的課題：「富岳」で新たに取り組むチャレンジングな課題

<基礎科学のフロンティア ー極限への挑戦>

萌芽1-1 基礎科学の挑戦 ー複合・マルチスケール問題を通した極限の探求-

萌芽1-2 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

萌芽1-3 複合相関が織りなす極限マテリアルー原子スケールからのアプローチ

<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>

萌芽2-1 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

萌芽2-2 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

<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>

萌芽3-1 生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境の変動の解明

<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>

萌芽4-1 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

萌芽4-2 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

本事業の推進にあたっては、文部科学省に設置されている HPCI 計画推進委員会の下部組織として「ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ」及び「萌芽的課題サブワーキング」を設置し、原則毎年度、課題ごとの進捗状況を把握するとともに、推進方策等について助言を行ってきた。また、課題ごとに第三者による諮問委員会を設置し、進捗管理と達成状況の確認・評価が実施されてきた。

なお、平成 29 年度に実施された中間評価では、本事業の進捗状況は、おおむね妥当であり、継続して実施すべき、とされていた。

○主な成果

本事業で得られた主な成果は以下のとおりである。

① アプリケーション開発及び普及のための取組の推進

「富岳」の開発目標の一つに「最大で「京」の 100 倍のアプリケーション実効性能」が掲げられていたが、その対象となる 9 つのターゲットアプリケーションについて、本事業においてシステムと協調的に開発（Co-design）された。その結果、令和 2 年 11 月時点で以下の倍率を達成した。

| | アプリケーション ※1 | 目標性能 (平成 26 年時点) | 性能 (令和 2 年 11 月時点) |
|------|----------------|---------------------|-----------------------|
| 重点 1 | GENESIS | 100 倍 | 131 倍 |
| 重点 2 | Genomon | 15 倍 | 20 倍 |
| 重点 3 | GAMERA | 15 倍 | 63 倍 |
| 重点 4 | NICAM+LETKF | 75 倍 | 127 倍 |
| 重点 5 | NTChem | 40 倍 | 70 倍 |
| 重点 6 | Adventure | 15 倍 | 63 倍 |
| 重点 7 | RSDFE | 35 倍 | 38 倍 |
| 重点 8 | FFB | 20 倍 | 51 倍 |
| 重点 9 | LQCD | 50 倍 | 38 倍※2 |
| 相乗平均 | | 約 32 倍 | 約 57 倍以上 |

※1 各アプリケーションの概要は別紙 9 ページを参照

※2 基本設計時（平成 27 年）のシステム構成変更等により、目標倍率との単純比較は困難だが、当初計画していた課題（大体積の LQCD 計算によるハドロン間相互作用の

説明)の解決に十分な性能を達成している。

さらに、本事業で開発されたアプリケーションのうち、計算科学・計算機科学で高い評価を得た課題に授与されるゴードンベル賞の選定過程において、重点課題3で開発されたアプリケーションが平成26年、平成27年、平成30年に、重点課題4、重点課題8で開発されたアプリケーションが令和2年にファイナリストに選出されるなど、国際的に高い評価を得ている。

また、本事業全体を通して、合計1,016個のアプリケーションが開発された。本プログラム等で開発されたアプリケーションは、ニーズに応じて第2階層計算資源へも移植され、活用されており、本事業の成果がHPCI全体に波及したと言える。

なお、開発されたアプリケーションを普及するための取組として、重点課題7では、物質科学のアプリケーションを中心に公開するサイト(MateriApps)が構築、運用されている。このサイトでは、「京」以外のシステムでも利用できるアプリケーションなど、合計278のアプリケーションが登録されるとともに検索機能等が実装され、利用状況は閲覧数が約26,000回/月(うち海外が25%程度)、ユーザー数が約9,000人/月である。さらに、フリーのアプリケーション、OS、可視化ツールが搭載されているパッケージも公開されており、主に教育ツールとして100件/月のダウンロード実績がある。このように、開発者、利用者が一体となったエコシステム構築も進んでいると評価できる。

② 社会的・科学的課題の解決への貢献

<重点課題>

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る先進的な課題として、9つの重点課題が実施された。「京」を用いた大規模シミュレーションによって、社会的・科学的課題の解決に実際に貢献している成果が創出された。

その具体的な内容は以下のとおりである。

(健康長寿社会の実現)

- ・ 創薬に欠かせないタンパク質の動的構造解析として、マルコフ状態遷移モデル(MSM)や拡張アンサンブル、MD-SAXSによって、リガンド結合によるタンパク質動的構造変化のシミュレーションに成功した。本研究は、薬学会構造活性相関部会 SAR Presentation Awardなどを受賞した。(重点課題1)
- ・ 細胞内環境を顕わに考慮したバクテリア細胞質などをモデリングし、数千万から1億原子に至る規模のシミュレーションに成功した。(重点課題1)
- ・ がんの変異による薬剤反応性を高精度に予測することに成功。「京」では数十種類の変異に対する計算に1ヶ月程度を要したが、「富岳」では2日程度で計算できる見込みであり、ゲノム医療の臨床現場への迅速な情報提供が期待される。(重点課題1)
- ・ 食道上皮の細胞のゲノムを大量に解析することで、70歳以上では全食道面積の

40～80%が、がん遺伝子の変異をもった細胞で置き換わること、またそのがん遺伝子変異が「飲酒」や「喫煙」によってどのように促進されたかを明らかにし、がんが生ずる初期のメカニズムの解明に大きく貢献した。本研究に関する論文が令和元年にNatureに掲載された。(重点課題2)

- ・ 世界で初めてとなる全脳循環シミュレータを開発し、「富岳」を用いて患者個別の全脳レベルの血流動態を3次元で解析できるようにした。これにより、脳血管障害の個別化医療を支援する新しい計算解析技術を確立した。本研究は、第24回計算工学講演会 グラフィックスアワード優秀賞・特別賞を受賞した。今後は、患者個別の医用画像に基づく全脳血管モデルの構築やデータ同化血流シミュレータの開発が想定される。(重点課題2)
- ・ 計算科学の歴史上初となる、分子シミュレーションと連成するマルチスケール心臓シミュレーションを「富岳」により実現する技術を開発した。これにより遺伝子、分子構造に基づく新たな臨床医学・創薬データベースが可能となる。本研究は、日本計算力学連合 JACM Award for Computational Mechanics、日本機械学会計算力学部門功績賞、中谷賞・大賞、文部科学大臣表彰・科学技術賞などを受賞した。今後、「富岳」を更に活用することで、肥大型心筋症の原因究明や治療法の開発、新たな強心薬の設計等に繋がる成果の創出が期待される。(重点課題2)

(防災・環境問題)

- ・ 内閣府防災担当が設置している相模トラフ地震の長周期地震動に関する検討会において、「京」を用いたシミュレーション結果(南海トラフ沿いの巨大地震による長周期地震動)が活用されている。(重点課題3)
- ・ 内閣府・自治体などの防災システムに実装しうる、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システムを構築。構成する地震波動の数値解析コンポーネントは、極めて高い計算性能を発揮し、計算科学・計算機科学の分野でも評価され、SC14・15・18のGordon Bell賞ファイナリスト、SC16・17のBest Poster賞を受賞した。今後、「富岳」を活用することで、重要インフラや都市全体を襲う地震動をより高い分解能・信頼度で評価することが可能となり、政府や産業界での活用に繋がる成果の創出が期待される。(重点課題3)
- ・ 観測ビッグデータ(フェーズドアレイレーダや偏波レーダ、稠密地上観測データなど)の同化手法を開発し、局地的大雨の降水強度や竜巻の親雲の位置・発生時刻の予測精度を向上させた。また、世界で初めて、竜巻のアンサンブル予測により竜巻発生予測確率分布と発生要因の革新的理解を得ることができた。今後は、数日程度から数週間～季節スケールの大規模に災害をもたらす事例の気象・大気環境予測実験(大アンサンブル)を「富岳」を用いて実施し、リードタイム(予測から豪雨発生までの猶予時間)をもった確率予測情報の提供に繋がる成果の創出が期待される。(重点課題4)

(エネルギー問題)

- ・ 27社の企業、18件の国家プロジェクト、51グループの実験研究者との共同研究を行う体制を構築し、太陽電池や二次電池のシミュレーション等の成果を実用化する研究を進展させた。今後、「富岳」を活用して、次世代二次電池や次世代燃料電池に最適な電解液・固体電解質・電極材料等の提案に繋がる成果の創出が期待される。(重点課題5)
- ・ 絶対に発火しない長寿命電解液を開発、高密度かつ高安全のエネルギー貯蔵が可能となり、長距離走行が可能な電気自動車の開発などに大きく貢献すると期待される。本研究に関する論文は、平成28年、平成30年にNatureに3件掲載された。(重点課題5)
- ・ 石炭ガス化炉、燃料電池、洋上ウインドファーム、磁気閉じ込め核融合炉のクリーンエネルギーシステムの実機におけるデジタルツインの実現に向けたマルチスケール・マルチフィジックス統合シミュレーションは世界初であり、日本物理学会賞3件、プラズマ・核融合学会賞3件を受賞した。また、本研究に関する論文は、令和元年にNatureに1件掲載された。今後、「富岳」のもとで、マルチスケール・マルチフィジックス統合シミュレーションとAIを様々なレベルで連携活用し、産業界の現場の開発・設計・運用最適化に資するデジタルツインの構築が期待される。(重点課題6)

(産業競争力の強化)

- ・ 次世代半導体の材料として有力視されているGaN(窒化ガリウム)の結晶成長についてシミュレーションを実施し、常識とされていた反応経路が誤りであることを指摘するなど、マテリアル分野のプロセスインフォマティクスの進展に大きく貢献した。今後、「富岳」を活用して、結晶成長のミクロな機構の解明や流体シミュレーションとの融合が実施され、高品質な薄膜結晶成長を実現する技術の確立が期待される。(重点課題7)
- ・ 光電磁場等に対する第一原理計算で物質の光応答を計算する世界唯一のアプリケーションSALMONを開発し公開した。国際チュートリアル・シンポジウムの開催により、世界標準ソフトウェアとして認知が進んでいる。(重点課題7)
- ・ 第一原理計算と新手法開発で実験結果に隠れた本質を紐解き、新超伝導機構を提唱した。本成果は解析の難しい強相関電子系の実験結果に隠れる本質を計算や機械学習を用いて解明していく先駆例の一つとなり、実験結果の解析で実験研究者と連携が進み、実験と計算科学が連携して機能開発、探索していくデータ科学手法の展望を開いた。本研究は、物理学会論文賞、文部科学大臣表彰科学技術賞などを受賞している。(重点課題7)
- ・ 開発したアプリケーションにより、自由表面の影響も考慮した船の抵抗試験を実施し、曳航水槽試験のシミュレーションによる代替が可能であることを実証した。また、「京」では実現できなかった実機航空機複雑形状の空力解析が「富岳」で実現できることを検証した。今後、実飛行レベルでの航空機実機複雑形状の空力予測評価等を「富岳」で実施することで、実機フライト試験を代替する民間旅

客機設計開発プロセスへの展開が期待される。（重点課題8）

（基礎科学の発展）

- ・ 平成31年4月、史上初めてブラックホール撮影に成功したと発表されたが、その根拠が観測された像とシミュレーションで得られた像の合致である。本事業で開発されたアプリケーションは、ここで用いられたシミュレーション結果と整合性のある結果を示すことに国際チームメンバーとして成功し、国際チームがブラックホールを撮影したとする結果をより強固なものとした。（重点課題9）
- ・ 水銀同位体で中性子数とともに繰り返しの量子相転移を発見するなど、ポスト「京」で初めて可能となる質量数200領域原子核の試行計算に成功。水銀同位体で中性子の数とともに繰り返し量子相転移が起こることを大規模計算により理論的に発見した。核分裂解明など基礎・応用の研究に繋がる。本研究に関する論文は、平成30年にNature Physicsに1件掲載された。（重点課題9）

<萌芽的課題>

「富岳」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、「基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦」、「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」、「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」、「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」の4つの萌芽的課題が実施され、「富岳」の活用による成果創出に向け、多くの知見の獲得や計算手法の確立が図られた。

その具体的な内容は以下のとおりである。

（基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦）

- ・ 亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食を扱える1億原子分子動力学コードを開発するとともに、地震と材料破壊で共通、相違する統計則の一端を解明した。
- ・ 極限環境シミュレータを開発し、新含水鉱物を予測・発見、地球表面から最深部に渡る水輸送現象の一端を解明した。本研究に関する論文は、平成29年にNatureに1件掲載された。
- ・ 密行列系では世界初となる100万次元以上の連立一次方程式に対する精度保証を実用的な計算時間で実行することに成功し、実用的な精度保証が可能となった。

（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）

- ・ 社会経済現象の中で、特に重要な交通・経済・人間関係の基本的な諸相についての数理的なモデルを開発し、次世代スーパーコンピュータ用のシミュレーションアプリケーションを開発した。
- ・ 大域的な航空交通流の遅延解消や効率的運用を議論するプラットフォームとして、世界で初めて大域的な航空交通流のセルオートマトンモデルを開発し、多目的最適化により効率的運航提案を示すことでその有効性を実証した。

(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)

- ・ 惑星科学・地球科学・宇宙化学・宇宙生物学分野における研究課題について、「富岳」による大規模数値シミュレーションを可能にする計算アルゴリズムおよび計算コードを開発。惑星形成、惑星大気、太陽活動などに適用し、先駆的な科学的成果を得た。今後は、「富岳」を駆使した世界最高規模のシミュレーションと最新の観測成果を組み合わせることで、これまでの数百倍の粒子数による太陽系形成過程の再現や、これまでの50倍以上の格子点数の計算による太陽深部の物理過程の解明等が期待される。

(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)

- ・ 大脳皮質-基底核-小脳統合モデルを汎用神経回路シミュレータNESTで実装し、全脳シミュレーションを実現した。
- ・ 高度並列神経回路シミュレータMONETを開発し、史上最大規模の脳シミュレーション(小脳ではヒト規模の680億ニューロン)を実現した。

情報科学分野、特に「富岳」(ポスト「京」)を利用した、計算科学分野におけるソフトウェア開発やそれらを活用した研究開発として、本事業(重点課題、萌芽的課題)を通じて発表論文が2,580編、学会発表が9,842件実施された。また、重点課題3で開発されたアプリケーションが平成26年、平成27年、平成30年に、重点課題4、重点課題8で開発されたアプリケーションが令和2年にゴードンベル賞のファイナリストに選出されている。加えて、前述のとおり、各課題で様々な賞を受賞している。さらに、重点課題1~8で開発されたターゲットアプリケーションは令和2年11月時点で「富岳」において目標以上の性能倍率を達成し、重点課題9で開発されたターゲットアプリケーションについても、当初想定していた課題解決に十分な性能を達成している。これらの成果は、「富岳」の開発を通じてCo-designを実施する体制が構築され、アーキテクチャ・アプリケーション・システムソフトウェア等の開発チームが密に連携したことにより、システムとアプリケーションが互いの性能を最大限発揮できるよう、随時フィードバックを行いながら設計開発を進められた結果として得られたものである。

<産学連携体制の構築>

それぞれの重点課題の中で、以下のようなコンソーシアムが設置されており、本事業で開発したアプリケーションを用いた社会実装体制が構築されている。

- ・ ライフ インテリジェンス コンソーシアム(製薬企業、IT企業等 122団体)
- ・ KBDDコンソーシアム(※)(製薬企業、IT企業等 32団体)
- ・ 建築CFDコンソーシアム(建築企業、大学、研究機関等 11団体)
- ・ 電気化学界面シミュレーションコンソーシアム(デバイス開発企業、研究機関等 20

団体)

- ・ 燃焼システム用次世代CAEコンソーシアム（燃焼システム企業、大学等 21 団体）
- ・ 自動車用次世代CAEコンソーシアム（自動車企業、大学等 23 団体）
- ・ ターボ機械 HPC 実用化分科会（機械製造企業、大学等 47 団体）
- ・ 計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS（計算物質科学における産業界などでのイノベーション創出を支援）

※ “K” Supercomputer-Based Drug Discovery project by biogrid pharma consortium の略

③ 人材育成

本事業を通じて約 1,100 人の研究者が雇用され、「京」などの最先端のスーパーコンピュータを用いたアプリケーション開発を通じて育成が進められた。今後これらの人材が、「Society 5.0」を支える人材として、最先端のスーパーコンピュータの開発・運用・利用等に携わり、社会的・科学的課題の解決に貢献していくことが期待される。

（2）各観点の再評価

<必要性>

評価項目

国費を用いた研究開発としての意義（国や社会のニーズへの適合性、国の関与の必要性・緊急性）

評価基準

ポスト「京」に向けたアプリケーション開発により、独創性、優位性の高い成果が期待できるか。

- 我が国においては、健康長寿社会の実現や防災・環境問題、エネルギー問題への対応が喫緊の課題とされている。一方、そのために必要となる創薬プロセスや地震・津波の再現、新規エネルギー源の探索は、実空間では多大なコストがかかるか、若しくは再現が不可能な現象が多数ある。
- シミュレーションは、実験不可能な自然現象等を再現して実験を代替することや極限状態を含む広範な探索範囲から予測を超える未来や未知の状態を発見するものである。また、スーパーコンピュータは「精度」、「サイズと時間」という2つの軸の解像度を飛躍的に伸ばすことにより、高精度・高速なシミュレーションやデータ解析を可能にするものである。
- 本事業は、世界最高水準のスーパーコンピュータである「富岳」の性能を最大限引き出すアプリケーションをシステムと協調的に開発（Co-design）し、そのアプリケーションを活用し画期的な成果の創出を世界にさきがけて可能とするものであり、国が実施しなければ実現困難な取組である。さらに、将来的には、課題先進国としての我が国から、同様の課題を抱える他国への成果展開も見込まれ、国や社会のニーズへの適合性は極めて高い。

- 本事業で開発した9つのターゲットアプリケーションは、目標倍率を達成しており、既に「京」を用いて健康医療、防災・環境、エネルギー、ものづくり、基礎科学の様々な分野で画期的な成果が創出されている。今後「富岳」上で活用されることにより、例えば、心筋症の原因究明、リードタイムを持った豪雨予測など、我が国が直面する課題に対応できる、より独創性、優位性の高い成果が期待できる。

<有効性>

評価項目

新しい知の創出への貢献、研究開発の質の向上への貢献

評価基準

世界を先導する成果の創出が期待できるか。

- 主な成果に記載のとおり、各課題で優れた成果が多数創出された。例えば、近年大きな被害をもたらしている極端気象現象や地震などがもたらす被害は実社会においてその再現が不可能であり、シミュレーションを活用した災害対応の検討や実際に起こった災害の検証が必要不可欠となっている。本事業で開発されているアプリケーションによる成果に対する国や地方自治体の防災関連部局からの期待は高く、実際に地震分野において、国の地震動の検討にシミュレーション結果が活用される事例も出ている。
- また、我が国が強みを有する材料科学やものづくりといった分野において、研究開発の更なる進展を図るためには、例えば、無数の組合せを有する新規材料組成の最適化や、自動車や航空機の実機を用いた風洞実験・衝突実験のように、実験に多大なコストを要するものについて、これらをシミュレーションによって代替し、研究開発の質や生産性を向上させることが有効である。前述のとおり、実際に曳航水槽試験のシミュレーションや航空機形状の空力解析で成果が創出されている。
- さらに、同じく我が国が強みを有する基礎科学の分野においても、例えば素粒子や宇宙開闢（かいびやく）といった、実験が困難な極小・極大の時空間スケールの理論を実証し新しい知の創出への貢献を図るため、シミュレーションによる再現が有効であるところ、平成31年4月の世界初のブラックホール撮影における検証に本事業で開発されたアプリケーションによるシミュレーション結果が活用された事例など、実際に成果が創出されている。
- 以上により、本事業におけるアプリケーション開発及びそれを用いたシミュレーションの社会的・科学的課題の解決に向けた取組は防災、産業競争力強化、基礎科学の進展など多様な分野において有効であったと評価できる。今後「富岳」上で活用されることにより、例えば、次世代電池材料の提案、産業界の現場における開発・設計の最適化、太陽系の形成過程の解明など、世界を先導する成果が期待できる。
- また、「富岳」のシステムと本事業におけるアプリケーション開発との Co-design によ

り、「富岳」は世界最高水準の汎用性を持つマシンとして開発され、令和2年6、11月のスパコンランキングにおいて4部門で1位を獲得した。今後「富岳」を用いて、本事業で開発されたアプリケーションをはじめとして幅広い分野での活用・成果創出が期待できるところであり、本事業の有効性は高かったといえる。

- さらに、本評価の直接の対象範囲外とはなるが、本事業の成果を受けて令和2年4月より実施されている「富岳」成果創出加速プログラムでは本事業で開発されたアプリケーションを利用した成果の創出に向けた研究が実施されている。同じく、令和2年4月より緊急的に開始した新型コロナウイルス感染症対策課題では、本事業で開発されたアプリケーションを利用した機動的な対応により、その成果が新型コロナウイルス感染症対策のガイドライン作成や既存医薬品のうち新型コロナウイルス感染症に有効な医薬品の探索にも活用されるなど大きな成果を挙げている。このように「富岳」の立ち上がり初期から多くの成果が創出されているのは、本事業をはじめとして、我が国のフラッグシップ計算機を核として、各研究分野でのアプリケーション開発、産学連携体制の構築や人材育成が継続的に実施されてきた成果として高く評価できる。

<効率性>

評価項目

計画・実施体制の妥当性、目標・達成管理の向上方策の妥当性

評価基準

研究開発プログラムの実施方法、体制について、見直しが適切かつ効率良く行われているか。

- 本事業は、国費総額1,100億円を投じて開発されている「富岳」について、システムとアプリケーションを協調的に開発(Co-design)することを目的として実施したものであり、「富岳」の成果を最大化する観点から、効率的な手法と評価できる。
- Co-designの取組としては、ターゲットアプリケーションの様々な特性や要求性能を踏まえ、システム設計における性能目標の明確化、マイクロアーキテクチャやシステム構成等の設定・見直し等を実施している。一方、アプリケーション開発においても、システム設計の状況を踏まえ、例えばNICAMにおいては、プログラムの書き換えによる物理プロセスの高速化や、混合精度計算の適用による高速化・高信頼性が図られるなど、システムの性能を最大限に引き出す取組が実施されている。
- また、本事業の開始に当たっては、平成26年8月に、外部有識者により構成される「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会(主査:小宮山宏 株式会社三菱総合研究所理事長)」において、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題として、9つの重点課題及び4つの萌芽的課題が設定され、その後、各課題について実施機関がそれぞれ公募により選定された。
- これら重点課題及び萌芽的課題について、「富岳」の共用開始後に可能な限り早期の成

果創出を図るべく、外部有識者により構成される「HPCI計画推進委員会／ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ」（主査：小柳義夫 神戸大学計算科学教育センター特命教授）及び「萌芽的課題サブワーキンググループ」（主査：大石進一 早稲田大学基幹理工学部応用数理学科教授）が、課題全体の進捗状況を把握して、各実施機関に対しきめ細やかな提言・助言を行っている。

- 各実施機関においては、これらの提言・助言に基づき中間目標、最終目標及び実施計画を策定するとともに、各重点課題に設置された「諮問委員会」（外部有識者により構成）や「運営委員会」、「課題責任者会合」により進捗管理がなされるなど、階層的に事業の進捗管理と目標達成状況の確認・評価が行われている。
- 加えて、各実施機関においては、産業界を含めた内外への研究成果のフィードバックに積極的に取り組んでおり、新しい知の創出、研究開発の質の向上、人材育成に貢献した。
- 以上より、事業全体で効率的な運営を実施し、成果の最大化に取り組んできたと評価できる。
- なお、令和元年度に「「富岳」成果創出加速プログラム課題レビュー委員会」が開催され、本事業の重点課題・萌芽的課題についてレビューを行い再編し、令和2年4月から「富岳」成果創出加速プログラムが実施されている。

（2）科学技術基本計画等への貢献状況

第4期「科学技術基本計画」（平成23年8月閣議決定）で、次世代スーパーコンピューティング技術が国家基幹技術として位置づけられているところ、本事業は次世代スーパーコンピュータである「富岳」に関して、重点的に取り組むべき社会的・科学的課題を特定し、その解決に必要なアプリケーションをシステムと協調的に開発（Co-design）することを目的として実施された。

また、第5期「科学技術基本計画」において、国は、サイバー空間とフィジカル空間を高度に融合させた「Society 5.0」を世界に先駆けて実現するとともに、その実現を支えるビッグデータ解析や人工知能等の基盤技術の強化を図ることとされた。「富岳」においても、これを踏まえ、半精度計算に対応するなどシミュレーションとデータ科学の高いレベルでの融合を可能とする基盤として開発が進められており、その「富岳」の能力を最大限活用する観点からも、本事業の有効性が認められる。

さらに、第5期「科学技術基本計画」において、国は、国連で定められた持続可能な開発目標（SDGs）の達成等を通じ、地球規模課題への対応を行うこととされた。この中で、例えば地球規模の気候変動に対し、スーパーコンピュータ等を活用した予測技術の高度化を進めることとされており、この観点からも、本事業の必要性は非常に高いと言える。

（3）総合評価

本事業は、「富岳」のシステムとアプリケーションを協調的に開発（Co-design）することで「富岳」の性能を最大限引き出すとともに、社会的・科学的課題への解決に貢献することを目的としたプロジェクトである。

「Society 5.0」社会の実現、防災、産業競争力強化、基礎科学の進展等のために、実社会で得ることが不可能あるいは現実的に取得困難なデータを得ることのできるシミュレーションは極めて有効な手法であり、「富岳」に代表される最先端のスーパーコンピュータと、その性能を最大限に引き出すアプリケーションの必要性はますます高まっている。本事業で開発されたアプリケーションの活用により「京」を用いて、「京」でしか達成できない多くの優れた成果が創出されたとともに、今後「富岳」を用いて更に画期的な成果が期待できる。アプリケーション開発を通じて、各研究分野の人材育成、産学連携が進められた。さらに、本事業におけるアプリケーション開発との Co-design により、「富岳」は世界最高水準の汎用性を持つマシンとして開発され、今後広範に利用されることにより幅広い分野での成果創出が期待できる。本事業の運用にあたっては、文部科学省と課題内の両方に進捗管理や助言を行う組織を設置し、効率的、効果的な運用となるよう工夫された。

以上より、本事業は効率的・効果的な運用の下、多様な分野での先導的で画期的な成果を創出しただけでなく、「富岳」開発における Co-design、各分野における人材育成と産学連携の推進により我が国の計算科学全体の水準を引き上げた、という観点から大きな意義があったと評価できる。

（４）今後の展望

本事業により、「京」の時代からシステムとアプリケーションの開発を継続的に行ってきたことが「富岳」の汎用性やアプリケーション実効性能の高さに繋がっており、今後も様々な分野での成果創出が期待される。「富岳」は本格共用開始に先立ち、令和2年度から一部の試行的利用が開始されている。また、文部科学省では、令和2年度より、本事業で開発されたアプリケーションの中から成果の早期創出が見込める課題を対象とした「富岳」成果創出加速プログラムを開始している。

「富岳」は、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、世界最高水準の汎用性と最高で「京」の100倍のアプリケーション実行性能を持つスーパーコンピュータとして開発されたものである。「富岳」が担うべき役割を早期に果たすためにも、「富岳」成果創出加速プログラムや本事業の成果を含む「富岳」を活用した様々な研究課題によって、成果の早期創出や社会実装が進み、「富岳」の成果を国民がいち早く実感できるようにすることとともに、「富岳」ならではの成果による新しい科学技術が継続的に生み出されることが望まれる。

「京」によって、医学、化学、物質科学、気象・防災、生命科学、ものづくりなど広範囲な分野において、「京」でなければなしえなかった画期的な成果が多数創出されるとともに、我が国の計算科学技術全体が底上げされている。「富岳」においても、我が国が直面する課題の解決に資する成果の創出とともに、科学技術における画期的な新しい発見につながる成果が生み出されるよう、より使いやすい制度、初級者等への手厚い支援、将来を担

う若手人材の育成等に努めることも期待したい。「富岳」のみならず、HPCI 全体の計算資源を活用して、関係機関が連携のうえ、戦略的な対応を検討すべきである。

加えて、スーパーコンピュータの利用環境は日々目まぐるしく状況が変化していることから、本事業で開発されてきたアプリケーションにとどまらず、SDGs や Society 5.0 に関連する課題をはじめとして新たなニーズやシーズに応じた形で、継続的に「富岳」から成果が創出される枠組みが構築されることが期待される。

また、今後の我が国における計算基盤についても、「京」や「富岳」の開発で培われたシステム、アプリケーション、Co-design 等の技術や経験が活かされるよう、計算科学分野及び計算機科学分野を担う人材の結集を進め、これらの技術や経験が継承できる体制が構築されることが期待される。