

情報分野に関する 研究開発課題の中間評価結果

令和6年2月

科学技術・学術審議会

研究計画・評価分科会

科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 委員等名簿

相澤	彰子	国立情報学研究所 副所長・教授
●五十嵐	仁一	ENEOS 総研株式会社顧問
菅野	了次	東京工業大学科学技術創成研究院特命教授、全固体電池研究センター長
栗原	美津枝	株式会社価値総合研究所代表取締役会長
田中	明子	国立研究開発法人産業技術総合研究所 活断層・火山研究部門 マグマ活動研究グループ長
原田	尚美	東京大学大気海洋研究所教授、国立研究開発法人海洋研究開発機構地球環境部門招聘上席研究員
◎観山	正見※	岐阜聖徳学園大学・同短期大学部・学長
明和	政子	京都大学大学院教育学研究科教授
村岡	裕由	国立大学法人東海国立大学機構 岐阜大学流域圏科学研究センター教授
村山	裕三	同志社大学名誉教授
出光	一哉	東北大学特任教授
上田	良夫	大阪大学大学院工学研究科教授
大森	賢治	大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所教授・研究主幹
上村	靖司	長岡技術科学大学技学研究院教授
佐々木久美子		株式会社グルーヴノーツ代表取締役会長
高梨	弘毅	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター長、東北大学名誉教授
土屋	武司	東京大学大学院工学系研究科教授
長谷山	美紀※	北海道大学副学長、大学院情報科学研究院長
原澤	英夫	元国立研究開発法人国立環境研究所理事
宮園	浩平※	国立研究開発法人理化学研究所理事／東京大学大学院医学系研究科卓越教授

◎：分科会長、●分科会長代理

※本評価には参加していない

第12期 科学技術・学術審議会
情報委員会 委員名簿

主査

相澤 彰子 国立情報学研究所副所長／教授

臨時委員

尾上 孝雄 大阪大学理事・副学長（研究・国際[研究]・情報推進・図書館担当）／
附属図書館長／大学院情報科学研究科教授
長谷山 美紀 北海道大学副学長／大学院情報科学研究科教授

専門委員

青木 孝文 東北大学理事・副学長（企画戦略総括・プロボスト・CDO）／大学院情
報科学研究科教授
天野 英晴 慶應義塾大学理工学部教授
石田 栄美 九州大学データ駆動イノベーション推進本部教授
川添 雄彦 日本電信電話株式会社代表取締役副社長・副社長執行役員
小林 広明 東北大学情報科学研究科教授／総長特別補佐（デジタル革新担当）
佐古 和恵 早稲田大学理工学術院教授
引原 隆士 京都大学理事（情報基盤・図書館担当）・副学長／情報環境機構長
星野 崇宏 慶應義塾大学経済研究所所長／経済学部教授
湊 真一 京都大学大学院情報学研究科教授
美濃 導彦 国立研究開発法人理化学研究所情報統合本部本部長
盛合 志帆 国立研究開発法人情報通信研究機構サイバーセキュリティ研究所 研究
所長
若目田 光生 株式会社日本総合研究所創発戦略センターシニアスペシャリスト

敬称略、50音順
令和5年4月26日現在

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム

概要

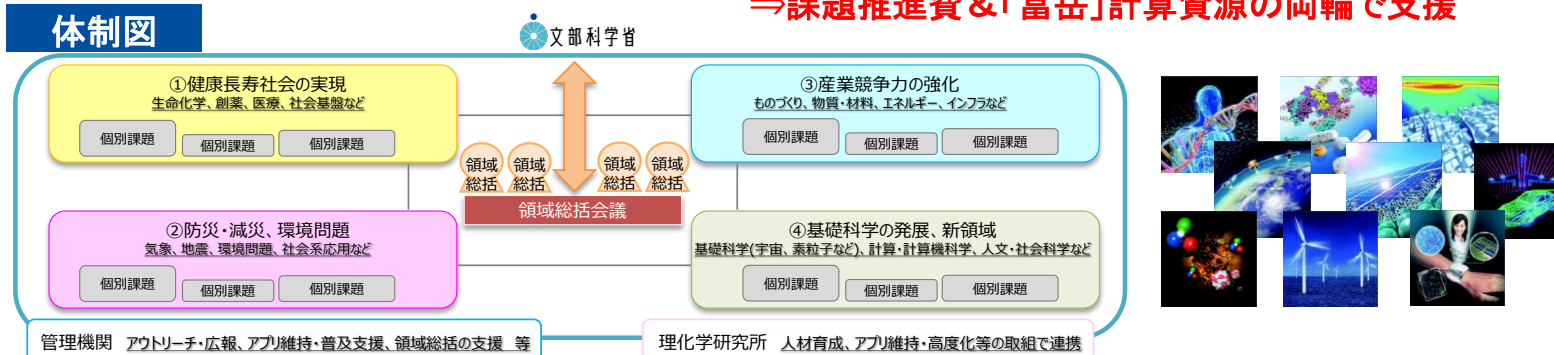
- 近年、大規模シミュレーションとAI・データ科学の融合・連携による成果が国内外で注目されており、計算科学技術を活用した各分野でのブレイクスルーが今後のDXを牽引するためには必要不可欠。
- 世界最高水準の性能を有するスーパーコンピュータ「富岳」の一部の計算資源をトップダウン型で利活用する本事業を通じて、我が国の計算科学技術の発展とともに、**成果創出の早期化・最大化に貢献**。
- 本事業を通じて開発されたアプリケーションにより、**社会的・経済的な重要課題に対して富岳を最大限に活用**。**社会実装や産業界での利用につながる事例も複数創出**されており、**AI・データ科学との融合・連携も積極的に推進**することで、さらに多様な重要課題に取り組んでいく。

スーパーコンピュータ「富岳」利活用促進の基本方針(R2.7決定) 「富岳」計算資源の配分割合



⇒課題推進費&「富岳」計算資源の両輪で支援

体制図

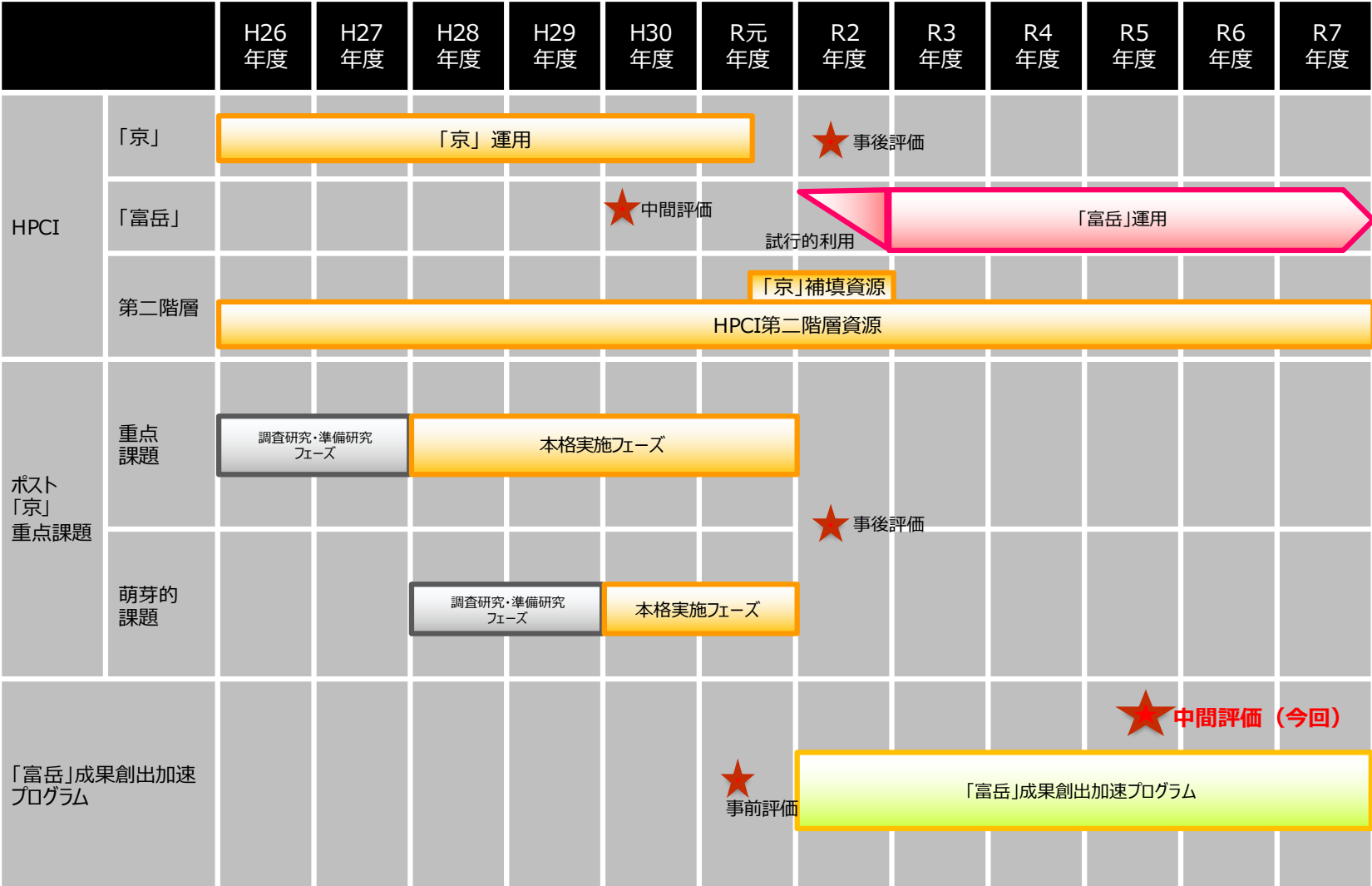


⇒様々な分野での世界トップレベルの成果創出・社会実装を促進

採択課題数

R2採択(R2～R4) : 19課題
 R3採択(R3～R7) : 3課題
 R5採択(R5～R7) : 17課題

重点課題及び成果創出加速プログラムに関するスケジュール



スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムの概要

1. 課題実施期間及び評価時期

令和2年度～令和7年度

中間評価 令和5年度、事後評価 令和8年度を予定

2. 研究開発目的・概要

• 目的

スーパーコンピュータ「富岳」（以下、「富岳」という）は、世界最高水準の総合的な性能を有するシステムであるとともに、Society 5.0等の実現のための大規模計算基盤である。本事業は、「富岳」を活用し、社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーション開発及び研究開発に取り組み、世界を先導する成果の創出を目指すものである。

• 概要

令和3年3月に共用を開始した「富岳」は、Society 5.0や持続可能な開発目標（SDGs）等の実現のための大規模計算基盤であり、国が実施する他の研究開発プロジェクト、産業界、行政組織等との連携体制を構築しながら、最先端の科学的成果創出や成果の社会実装を強力に推進するものである。

本事業では、「富岳」の計算資源を活用して、計算科学（シミュレーション）をさらに高度化しつつ、計算科学とデータ科学を組み合わせた新たな科学的アプローチ（例えば、数学的モデルに基づくシミュレーションと大量のデータからモデルを見出すデータ科学を組み合わせ（さらに循環させ）、新たな科学的・社会的知見を見出す手法など）の研究開発を推進し、科学的・社会的に重要な課題の解決に貢献する。

具体的には、①人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓、②国民の生命・財産を守る取組の強化、③産業競争力の強化、④研究基盤の4領域（令和5年度公募課題からは、①健康長寿社会の実現、②防災・減災、環境問題、③産業競争力の強化、④基礎科学の発展、新領域の4領域）において研究課題を推進し、早期の価値創出につながる成果を創出することを目指す。また、事業の成果最大化のため、領域の枠を超えて全体を総括する領域総括を置く。さらに、それぞれの課題に関連するデータマネジメントポリシーを作成し、それに基づくデータ（入力データや計算結果データを含む）の活用を推進する。また、各研究課題実施者には、アプリケーションの維持・普及に関する取組も併せて実施することを求める。

3. 研究開発の必要性等

(必要性)

- スーパーコンピュータは、サイバー空間（仮想空間）とフィジカル空間（現実空間）をつなぐ大きなパイプの一つであり、世界最高水準の性能を有する「富岳」を活用して、人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓（基礎科学（人文・社会科学を含む）等）、国民の生命・財産を守る取組の強化（医療、防災（地震や気象など）、社会インフラ、社会系応用等）、産業競争力の強化（ものづくり、サービス、エネルギー、政策立案）など、各分野における世界最先端の成果を創出する取組は、Society 5.0 や持続可能な開発目標（SDGs）等を実現するために不可欠である。
- さらに、実験、理論、シミュレーションと並び、第4の科学としてAIを含むデータ科学が急速に進展しており、計算科学とデータ科学を融合・連携しながら新たな科学的手法の確立と課題の解決に結びつける取組は、科学技術の基本的な潮流となっている。「富岳」成果創出加速プログラムは、この流れを強力に牽引する役割を担うものであり、科学技術の新たなパラダイムシフトを創る重要な取組として、本事業を強力に推進する必要性がある。
- 「富岳」からの早期成果創出は、国の科学技術・イノベーション政策はもとより、成長戦略を筆頭に、国土強靱化（地震、津波、豪雨等の災害予測）、健康医療など各分野の政策においても期待されており、自治体や産業界からの期待も高いことから、国が実施する必要性が高いと認められる。

(有効性)

- シミュレーションやデータ科学は実験、理論に続く新たな科学的手法として確立されており、ほぼすべての分野においてこうした計算科学的手法が活用されている。このことから、「富岳」のような大規模なスーパーコンピュータにより、より大規模で高精度な計算科学の手法を高度化していくことは、各分野で新しい科学的アプローチを浸透させより大きな成果を上げることにつながる。「富岳」成果創出加速プログラムは、研究開発のデジタルトランスフォーメーションを大きく加速する取組として、極めて有効性が高い。
- 「富岳」では、運用開始直後から成果を最大化することを目的として、平成26年8月にまとめられた「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報告書」によって提案された分野（健康長寿社会の実現、防災・環境問題、エネルギー問題、産業競争力の強化、基礎科学の発展）において、ハードの開発と協調的にアプリケーション開発が推進（Co-design）されてきた。このため、「富岳」を用いてこれまで開発したアプリケーションを利活用した研究開発を行い、その成果を有効に活用することにより「富岳」の能力を短期間で最大限に活用することができる。さらに、これまでに取り組んで来なかった新しい分野における課題も積極的に採択することで、「富岳」の活用分野をさらに大きく展開することが期待できる。
- さらに、国が実施する他の研究開発プロジェクト、産業界とのコンソーシアム、行政組織等との連携体制構築を重視することで、アプリケーションから得られるシミュレーション等の計算結果を科学的・社会的利用に速やかにつ

なげることができる。また、課題選定及び課題進捗評価、並びに課題への、産業界からの積極的な参画を行うことで、成果の社会実装を一層促進することが期待される。

- 開発されたアプリケーションが社会に普及し、実際に役立つことも重要であり、欧州の CoE の取組なども参考に、分野特性を踏まえつつ、民間ソフトウェアベンダーとの連携などを含め、アプリケーションごとに最適なアプリケーションの維持・普及戦略を策定することが必要である。特に、大規模な個別課題においては、アカデミアのみならず、産業界においても広く普及するよう、長期展望に立って計画を立て、組織的に実施することで、プロジェクトによって得られた成果であるアプリケーションの普及に貢献することが求められており、有効性が期待できる。
- 「富岳」から得られる計算結果は、適切な形で研究者や社会に提供されれば新たな価値を生み出す可能性があり、知的基盤の構築に貢献するため、メタデータの整備も含め、データの蓄積と提供を組織的に行うことが必要である。個別課題がデータマネジメントポリシーを作成し、それに基づくデータの戦略的な活用を推進することとされており、有効性が期待できる。
- 科学技術のみならず、社会経済への波及効果まで含めた多言語による訴求力の高い広報・アウトリーチなどの取組、アプリケーションの維持・普及、及びアプリケーション開発や利用をする人材育成も、長期的な視点での成果の創出としては極めて重要であり、事業全体で実施した方が効果的、効率的なものについては成果創出を最大化する観点から、研究課題とは独立した管理法人で実施することとされている点も有効と考えられる。
- より多くの若手研究者が、課題代表者や課題参加者として参画できるような選定プロセスとすることで、当該分野の人材育成にも貢献するほか、海外の研究機関等の参画を得た課題を推進することで、我が国が世界の科学技術振興を先導し、これに貢献することができる。

(効率性)

- 本事業は、「富岳」の開発及びそれと協調的に推進されてきたアプリケーション開発等の関連事業の成果を最大限に活用しつつ、シミュレーションを中心とする計算科学とデータ科学の融合といった新たな研究開発のパラダイムとなるような取組も推進することで、新たに整備される「富岳」の成果を最大化するための取組であり、投資効果の高い取組である。また、SINET による学術データの通信基盤を最大限活用することで、我が国の科学技術分野全体への波及効果が極めて大きくなる。
- 今まで「富岳」のシステムと協調的に開発されてきたアプリケーションの進捗や成果等の評価を第三者の委員会ですっかり行った上で、成果創出フェーズにおいて実施すべき課題の申請・採択を改めて行うこととしており、「富岳」の成果の最大化に向けて、効果的、効率的な体制が構築されることが期待される。
- また、マネジメントの観点から、プログラムを俯瞰する立場から全体の方向性について検討できる体制(領域総括等)の導入、管理法人の活用等を行い、適切な進捗管理を実施するとともに、対外的な成果の公表等を通じて説明責

任も果たしていく。

- リアルタイム処理、クラウド的な利用など分野特性に応じた利用方法を可能とすることで、より効果的・効率的な研究開発環境を実現できる。
- 領域を超えた課題間の連携や、各領域で得られた成果や生じた課題の中で他の領域でも応用可能なもの（シミュレーションとデータ科学の最適な融合手法、データマネジメント上の共通課題など）の横展開等を推進する領域総括会議が設置されることで、より効果的、効率的な成果創出が期待できる。

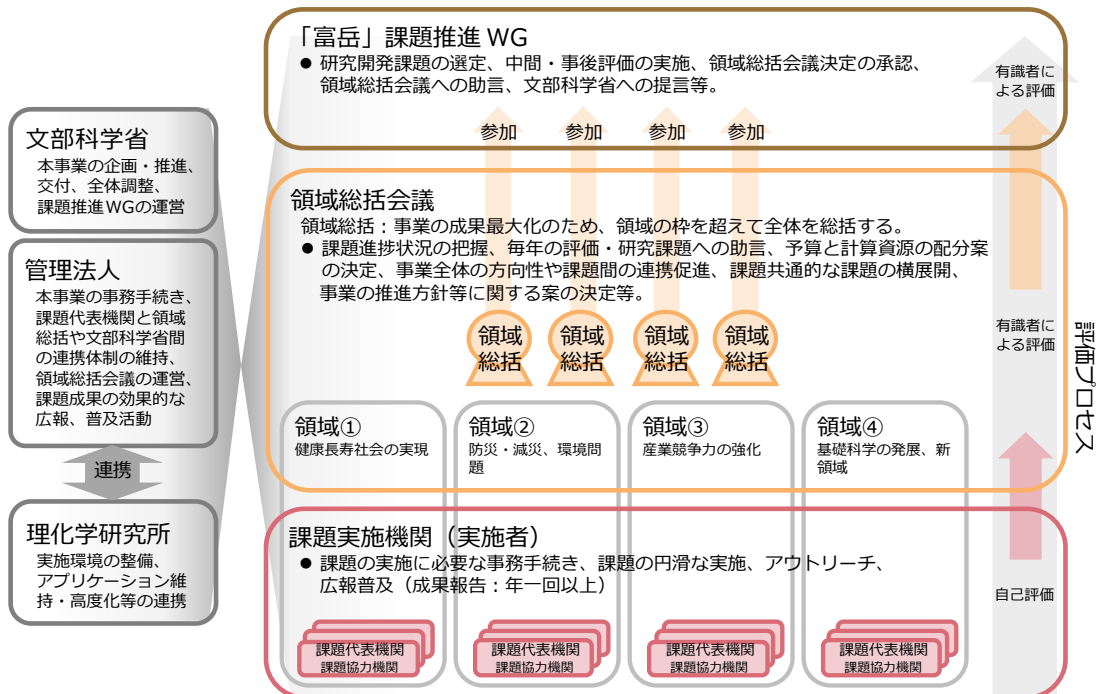
4. 予算（執行額）の変遷

年度	R2(初年度)	R3	R4	R5
予算額	876 百万	1,026 百万	1,026 百万	565 百万
執行額	857 百万	1,012 百万	1,026 百万	—

5. 課題実施機関・体制

○ スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム全体の推進体制

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム推進体制



○ 採択課題数

採択年度	課題実施期間	採択課題数	内訳
令和2年度	令和2年度～4年度	19	領域①人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓：7課題 領域②国民の生命・財産を守る取組の強化：4課題 領域③産業競争力の強化：7課題 領域④研究基盤：1課題
令和3年度	令和3年度～7年度	3	領域③産業競争力の強化：3課題
令和5年度	令和5年度～7年度	17	大規模連携課題：4課題 うち、領域①健康長寿社会の実現：1、領域③産業競争力の強化：2、領域④基礎科学の発展、新領域：1 標準課題：6課題 うち、領域①健康長寿社会の実現：2、領域③産業競争力の強化：2、領域④基礎科学の発展、新領域：2 標準課題（計算資源のみ）：7課題 うち、領域②防災・減災、環境問題：2、領域③産業競争力の強化：1、領域④基礎科学の発展、新領域：2、領域①・④の複合課題：1、領域②・④の複合課題：1

○ 採択課題一覧

■令和2年度採択課題

領域	課題名	研究開発課題責任者(所属)
①	全原子・粗視化分子動力学による細胞内分子動態の解明	杉田 有治(理化学研究所生命機能科学研究センター)
①	大規模データ解析と人工知能技術によるがんの起源と多様性の解明	宮野 悟(東京医科歯科大学 M&D データ科学センター)
①	核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓	渡邊 智彦(名古屋大学大学院理学研究科)
①	量子物質の創発と機能のための基礎科学 —「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学	今田 正俊(早稲田大学理工学術院総合研究所)
①	シミュレーションで探る基礎科学:素粒子の基本法則から元素の生成まで	橋本 省二(高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所)
①	宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築	牧野 淳一郎(神戸大学理学研究科)
①	脳結合データ解析と機能構造推定に基づくヒトスケール全脳シミュレーション	山崎 匡(電気通信大学大学院情報理工学研究科)
②	プレジジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ統合システムの推進	奥野 恭史(理化学研究所計算科学研究センター)
②	マルチスケール心臓シミュレータと大規模臨床データの革新的統合による心不全パンデミックの克服	久田 俊明(株式会社 UT-Heart 研究所)
②	大規模数値シミュレーションによる地震発生から地震動・地盤増幅評価までの統合的予測システムの構築とその社会実装	堀 高峰(海洋研究開発機構 海域地震火山部門・地震津波予測研究開発センター)
②	防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測	佐藤 正樹(東京大学大気海洋研究所)
③	次世代二次電池・燃料電池開発による ET 革命に向けた計算・データ材料科学研究	館山 佳尚(物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点)
③	スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用	吉村 忍(東京大学大学院工学系研究科)
③	省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション	押山 淳(名古屋大学未来材料・システム研究所)
③	大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発	三宅 隆(産業技術総合研究所 材料・化学領域 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター)
③	環境適合型機能性化学品	松林 伸幸(大阪大学大学院基礎工学研究科)
③	「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発	加藤 千幸(東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター)
③	航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究	河合 宗司(東北大学大学院工学研究科)
④	全脳血液循環シミュレーションデータ科学に基づく個別化医療支援技術の開発	和田 成生(大阪大学院基礎工学研究科)

■令和3年度採択課題

領域	課題名	研究開発課題責任者(所属)
③	データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出	吉田 亮(情報・システム研究機構 統計数理研究所)
③	「富岳」が拓く Society 5.0 時代のスマートデザイン	坪倉 誠(理化学研究所計算科学研究センター)
③	「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現	中嶋 隆人(理化学研究所計算科学研究センター)

■令和5年度採択課題

	領域	課題名	研究開発課題責任者（所属）
大規模連携課題	①	「富岳」で目指すシミュレーション・AI 駆動型次世代医療・創薬	奥野 恭史(京都大学大学院医学研究科 人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野)
	③	AI の活用による HPC の産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築	加藤 千幸(東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター)
	③	物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御	館山 佳尚(物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター)
	④	シミュレーションでせまる基礎科学:量子新時代へのアプローチ	橋本 省二(高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所・理論センター)
標準課題	①	「富岳」で実現するヒト脳循環デジタルツイン	伊井 仁志(東京都立大学大学院システムデザイン研究科)
	①	生体分子シミュレータを基にした大規模推論システムの開発と応用	松永 康佑(埼玉大学情報メディア基盤センター)
	③	燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用	藤本 和士(関西大学化学学生命工学部)
	③	航空機デジタルフライトが拓く機体開発 DX に向けた実証研究	河合 宗司(東北大学大学院工学研究科)
	④	シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化	大須賀 健(筑波大学計算科学研究センター)
	④	超大規模格子 QCD による新物理探索と次世代計算に向けた AI 技術開発	山崎 剛(筑波大学数理物質系)
標準課題(計算資源のみ)	②	「富岳」による地震の大規模シミュレーションの基礎拡充と社会実装へ向けた展開	市村 強(東京大学地震研究所 計算地球科学研究センター)
	②	「富岳」が拓く次世代航空宇宙モビリティとその社会システムへの展開	伊藤 恵理(東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻)
	③	計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新	久保 百司(東北大学金属材料研究所)
	④	次世代宇宙論サーベイ群のための多波長宇宙論的シミュレーション	LIU Jia(東京大学国際高等研究所 カブリ数物連携宇宙研究機構)
	④	量子凝縮系のための AI 数値分光学で挑む量子繚れ構造の解明	山地 洋平(物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点)
	①・④	包括的計測情報による多種全脳データ同化と特異的振動活動の探求	五十嵐 潤(理化学研究所計算科学研究センター)
	②・④	シミュレーションと AI で解き明かす太陽地球環境変動	堀田 英之(名古屋大学宇宙地球環境研究所)

6. その他

特になし

中間評価票

(令和6年2月現在)

1. 課題名 スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム

2. 関係する分野別研究開発プラン名と上位施策との関係

プラン名	情報分野研究開発プラン
プランを推進するにあたっての大目標	オープンサイエンスとデータ駆動型研究等の推進（施策目標8-3） 概要：研究の飛躍的な発展と世界に先駆けたイノベーションの創出、研究の効率化による生産性の向上を実現するため、情報科学技術の強化や、研究のリモート化・スマート化を含めた大型研究施設などの整備・共用化の推進、次世代情報インフラの整備・運用を通じて、オープンサイエンスとデータ駆動型研究等を促進し、我が国の強みを活かす形で、世界の潮流である研究のデジタルトランスフォーメーション（研究DX）を推進する。
プログラム名	情報分野研究開発プログラム（4） 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）の構築 概要：HPCIを構築するとともに、この利用を推進する。具体的には、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」の対象である「富岳」と国内の大学等のスパコンを高速ネットワークで結び、多様なユーザーニーズに応える計算環境を提供するHPCIを構築するとともに、幅広い分野の研究者等による利用を促進する。
上位施策	第6期科学技術・イノベーション基本計画（令和3年3月26日閣議決定）

プログラム全体に関連する アウトプット指標	過去3年程度の状況		
	令和2年度	令和3年度	令和4年度
HPCIの中核となるスーパーコンピュータ「富岳」の年間稼働率 ※「富岳」は令和3年3月に共用開始。	—	96%	96%

プログラム全体に関連する アウトカム指標	過去3年程度の状況		
	令和2年度	令和3年度	令和4年度
集計年度末までに登録された、HPCIを利用した研究の論文発表数	223件	239件	280件

3. 評価結果

(1) 課題の進捗状況

- 中間評価時点における本事業の進捗状況は、おおむね妥当と評価された。
- 本事業では、平成26年度から令和元年度にかけて実施された「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（重点課題・萌芽的課題）」での研究成果を引き継ぎ、「富岳」を用いた社会的・科学的成果を早急に創出すべく、重点課題・萌芽的課題の中から本事業で実施する研究開発課題を選定し、令和2年度から令和4年度まで実施した。令和3年度からは、社会情勢の変化等も考慮し、ウィズコロナ・ポストコロナ時代の新たな科学的・社会的課題の解決に貢献する研究開発課題を公募により採択し、実施している。また、令和5年度からは、新たな基軸や分野による社会的・科学的課題への挑戦等による、「富岳」を用いたこれまでにない新規成果の創出が見込まれる研究開発課題を公募により採択し、実施している。これらの研究開発課題の実施を通じて、「富岳」を最大限に活用した新たな最先端の科学的・社会的成果の創出が着実に進められている。
- 本事業で実施する研究開発課題においては、文部科学省が設置する委員会での外部有識者による審査に基づき採択され、計画の策定や変更に対する助言、進捗状況の評価などが年度単位で行われている。また、管理法人に設置された、領域の枠を超え事業全体を総括する4名の領域総括^{※1}により構成される会議において、事業全体の方向性や課題間の連携促進、課題共通的な課題の横展開、事業の推進方針等に関する案の決定等が行なわれている（具体例は（2）効率性の欄において詳述）。
（※1）領域総括（令和5年4月時点、50音順）
 - 高橋 桂子（早稲田大学総合研究機構グローバル科学知融合研究所 上級研究員・研究員教授）
 - 常行 真司（東京大学大学院理学系研究科 教授）
 - 藤井 孝藏（東京理科大学工学部情報工学科 教授）
 - 朴 泰祐（筑波大学計算科学研究センター センター長）
- 本事業では、累計で39件の研究開発課題が実施されており、令和2年度採択19課題および令和3年度採択3課題の進捗については、22課題のうち20課題が進捗率80%以上との自己評価がなされている。また、令和5年3月に実施された事業終了課題に対する外部有識者による評価では、令和2年度採択19課題のうち、研究計画に対して、期待以上の成果があった課題が4課題、期待通りの成果があった課題が14課題となっている。
- その結果、本事業を通じて、
 - ・ 「富岳」の特長を生かした超並列・大規模シミュレーション手法を用いたアプリケーション開発の着実な進展

- ・ 大規模シミュレーションと AI・データ科学を融合・連携させた研究開発の進展
 - ・ 論文発表をはじめとする科学的成果の創出
 (論文発表数^{※2}…R2:323 編、R3:404 編、R4:415 編、累計:1142 編)
 (国際会議・シンポジウム発表数^{※2}…R2:248 件、R3:356 件、R4:378 件、累計:982 件)
- 等の成果が得られつつある。
 (※2) 令和2年度採択課題、令和3年度採択課題による実績を集計

(2) 各観点の再評価

<必要性>

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
科学的・技術的意義、社会的・経済的意義、国際競争力の強化、融合領域研究の促進	定性的	世界最高水準の科学的・社会的成果の創出に向けた目標設定、融合領域研究の推進を可能とする体制構築	前・中

- 本事業については、事前評価に引き続き、本中間評価においてもその必要性が再確認された。
- 第5期「科学技術基本計画」(平成28～令和2年度)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。併せて、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いる。
- 第6期「科学技術・イノベーション基本計画」(令和3～7年度)においては、「データ駆動型研究等の高付加価値な研究の加速」が目標として掲げられるなど、近年、大規模シミュレーションと AI・データ科学の融合・連携による成果が国内外で注目されており、計算科学技術を活用した各分野でのブレイクスルーが今後の研究活動のデジタルトランスフォーメーション(研究DX:研究データの戦略的な収集・共有・活用、研究施設・設備のリモート化・スマート化などを通じたデータ駆動型研究の拡大)を牽引するためには必要不可欠である。
- 本事業の多くの課題において、シミュレーションと AI・データ科学を融合・連携させた研究開発が実施されている。また、令和5年度より新たに開始する課題においても、AI・データ科学を融合・連携させた研究開発課題を積極的に採択しており、より付加価値の高い研究成果の創出、データを効果的に活用した先導的な AI・データ駆動型研

究の推進、科学技術の振興やイノベーションの創出等に向けた取組が推進されている。例えば以下の取組等がなされている。

取組の具体例	課題名
核融合大規模シミュレーションへの AI/データ科学の融合的アプローチ	・核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓（令和2年度採択課題）
高性能大規模シミュレーションと、多目的最適化、機械学習、データ同化等のデータ科学を融合させることで、サイバー空間とフィジカル空間を高度に結合させた次世代デジタル設計システムを構築	・「富岳」が拓く Society5.0 時代のスマートデザイン（令和3年度採択課題）
世界最高規模のシミュレーションと AI の融合により、宇宙大規模構造から銀河、星、惑星、ブラックホールまで、宇宙の多階層構造形成を統一的に解明	・シミュレーションと AI の融合で解明する宇宙の構造と進化（令和5年度採択課題）
コンビナトリアル計算と AI・データ科学を用いた新奇エネルギー材料の探索・提案	・次世代二次電池・燃料電池開発による ET 革命に向けた計算・データ材料科学研究（令和2年度採択課題） ・大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発（令和2年度採択課題） ・「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現（令和3年度採択課題）

- また、「富岳」からの早期の成果創出は、国の科学技術・イノベーション政策はもとより、国土強靱化（地震、津波、豪雨等の災害予測）、健康医療など各分野の政策推進の観点においても期待されており、国が実施する必要性が高いと認められる。
- 以上のことから、本事業の必要性は引き続き高いと評価できる。

<有効性>

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
新しい知の創出への貢献、研究開発の質の向上への貢献、知的基盤の整備への貢献、実用化・事業化や社会実装を重視した連携体制の構築	定性的	世界最高水準の科学的・社会的成果の創出、適切な連携体制の構築、若手研究者の参画状況、データの戦略的な活用状況	前・中

- 本事業については、事前評価に引き続き、本中間評価においてもその有効性が再確認された。
- 「富岳」では、運用開始直後から成果を最大化することを目的として、アプリケーション開発を協調的に推進してきている（Co-design）。「富岳」での早期成果創出を目指す本事業では、富岳開発段階の重点課題・萌芽的課題において実施されたアプリケーション開発の成果を活用した取組が発展的に実施されており、基礎科学の発展や産業界・

行政組織との連携も含め、「富岳」の共用開始後間もない段階から早期の成果創出や社会実装につながる取組がなされた。

重点課題・萌芽的課題	「富岳」成果創出加速プログラム（令和2年度課題）
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	・全原子・粗視化分子動力学による細胞内分子動態の解明 ・プレシジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ統合システムの推進
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	・大規模データ解析と人工知能技術によるがんの起源と多様性の解明 ・マルチスケール心臓シミュレータと大規模臨床データの革新的統合による心不全パンデミックの克服 ・全脳血液循環シミュレーションデータ科学に基づく個別化医療支援技術の開発
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	・大規模数値シミュレーションによる地震発生から地震動・地盤増幅評価までの統合的予測システムの構築とその社会実装
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	・防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測
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	・次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究
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	・核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓 ・スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用
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	・量子物質の創発と機能のための基礎科学—「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学 ・省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション ・大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発 ・環境適合型機能性化学品
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	・「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発 ・航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究
重点課題9：宇宙の基本法則と進化の解明	・シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで
萌芽的課題1：基礎科学のフロンティア—極限への挑戦	
萌芽的課題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	
萌芽的課題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	・宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統合的描像の構築
萌芽的課題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	・脳結合データ解析と機能構造推定に基づくヒトスケール全脳シミュレーション

- 本事業では、個別課題において行政組織や産業界等との連携体制を構築し、社会的課題の解決に向けた取組を実施しており、その成果を活用して、例えば、政策的な要請に基づいて、新型コロナウイルス感染症対策や線状降水帯の予測精度向上に資する研究開発を実施するなど、早期の社会実装につながる取組が進展している。

取組の具体例	課題名
内閣官房と連携し、経済活動と感染拡大防止の両立の実現のための新型コロナウイルスの「飛沫シミュレーション」を政策対応課題にて実施	・「富岳」が拓く Society 5.0 時代のスマートデザイン（令和3年度採択）
気象庁と連携し、線状降水帯の予測精度向上に	・防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・

資する数値予報モデル開発を政策対応課題にて実施	大気環境予測（令和2年度採択課題）
内閣府（防災担当）と連携し、巨大地震に伴う長周期地震動による影響の評価を政策対応課題にて実施（相模トラフ・日本海溝/千島海溝等）	・大規模数値シミュレーションによる地震発生から地震動・地盤増幅評価までの統合的予測システムの構築とその社会実装（令和2年度採択課題）
産学官が参画する「ライフインテリジェンスコンソーシアム」として、「富岳」を活用した創薬DXの開発を Society 5.0 推進利用課題にて実施	・プレジジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ統合システムの推進（令和2年度採択課題）
電気化学界面シミュレーションコンソーシアム会員との共同研究により技術移転を行い、会員企業が「富岳」産業課題を活用して、シミュレーションによるアルミニウムの腐食電位データベースを作成	・次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究（令和2年度採択課題）
三菱重工グループがFFVHC-ACE（本事業で開発されたアプリケーション）を用いて、世界初・航空機実機フライト試験の失速予測評価に成功	・航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究（令和2年度採択課題）

- 本事業等を通じて開発されたアプリケーションを用いた「COVID-19 の飛沫・エアロゾル拡散モデルを構築する研究」が、スーパーコンピュータを用いた国際的に最も画期的な研究成果に対して授与される賞である「ゴードン・ベル賞」の COVID-19 研究特別賞を令和3年11月に受賞したほか、令和4年11月には、「超大規模地殻変動解析に関する研究」が「ゴードン・ベル賞」のファイナリストに選出されるなど、「富岳」の能力を最大限に活用し、国際的にも高く評価される研究開発が進められている。
- 本事業を通じた成果が産学官で構成されるコンソーシアムを通じて広く利活用されるとともに、高度化されたアプリケーションを活用して成果の社会実装に向けた取組が着実に進展している。

（コンソーシアムとの連携の具体例）

具体例	課題名
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 87 団体）	・プレジジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ統合システムの推進（令和2年度採択課題）
HPC を活用した自動車用次世代 CAE コンソーシアム（企業、大学等 26 団体）	・「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発（令和2年度採択課題） ・「富岳」が拓く Society5.0 時代のスマートデザイン（令和3年度採択課題）
流体性能の高精度予測と革新的流体設計分科会（企業、大学等 56 団体）	・「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発（令和2年度採択課題）
燃焼システム用次世代 CAE コンソーシアム（企業、大学等 20 団体）	・スーパーシミュレーションと AI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用（令和2年度採択課題） ・「富岳」が拓く Society5.0 時代のスマートデザイン（令和3年度採択課題）
電気化学界面シミュレーションコンソーシアム（企業等 27 団体）	・次世代二次電池・燃料電池開発による ET 革命に向けた計算・データ材料科学研究（令和2年度採択課題）

- また、課題実施機関や高度情報科学技術研究機構（RIST）・理化学研究所計算科学研究センター（R-CCS）等の関係機関が実施する利用説明会・講習会等を通じて、本事業を通じて開発したアプリケーションの普及活動を進め、幅広い研究者にアプリケーション

ンの特性を周知することで、今後の利活用促進につながる取組が進展している。
 (課題実施機関における取組の具体例)

取組の具体例	課題名
アプリケーション (GENESIS) 開発者とユーザー (アカデミアと産業界) の交流の場として、GENESIS ユーザー会を発足させ、研究会を実施	・全原子・粗視化分子動力学による細胞内分子動態の解明 (令和2年度採択課題)
「富岳」の商用機である PRIMEHPC FX700 システムを利用して、実証研究を推進するとともに、産業界の利用者に開発した技術を展開	・「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発 (令和2年度採択課題)
次世代火力発電システム用に開発したアプリケーション (FFR Comb、ADVENTURE、REVOCAP_Coupler) について、燃焼システム用次世代 CAE コンソーシアムと本プロジェクトが連携して研究開発を進め、コンソメンバー企業にも普及を図った	・スーパーシミュレーションと AI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用 (令和2年度採択課題)

- 本事業では、「富岳」開発段階の重点課題・萌芽的課題で取り組まれていなかった新しい切り口の課題^{※3}を採択・実施しているほか、令和5年度より実施する課題の公募において、分野内や分野間の連携によりシナジー効果を生み出すための大規模連携課題や、若手・中堅研究者を中心とした新たな基軸による成果創出を目指す課題を新しく採択する等、分野連携や若手研究者の積極的な参画を促進する取組がなされている。なお、令和2年度採択課題と令和5年度採択課題の課題代表者の採択時点での平均年齢を比較すると、令和5年度採択課題の方が9歳近く若い課題代表者が採択されている。(令和2年度採択課題代表者の平均年齢：55.5歳、令和5年度採択課題代表者の平均年齢：46.7歳)
 (※3) 令和3年度採択課題「データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出」
- 本事業では、各課題においてデータマネジメントプランを作成し、「富岳」等から得られた計算結果等が適切な形で蓄積・提供(データリポジトリ等を活用した公開)されており、研究開発によって得られた成果であるデータの有効的な活用が行われている。
- 本事業で得られた研究成果については、管理法人が主催する事業全体の公開シンポジウムを通じて広く一般に周知するとともに、個別課題においても成果報告会やワークショップ等を通じて、得られた成果に関する広報普及活動を実施している。加えて、様々な分野の研究者が一堂に会する研究交流会の開催等を通じて、異なる研究分野間での交流などの新たな成果創出に向けた取組等が進展している。また、本事業の個別課題では、若手研究者が主体となった研究計画の立案やワークショップの企画など、今後の研究開発において中心的な役割を担う人材の育成に資する取組もなされている。
- 以上のことから、本事業の有効性は引き続き高いと評価できる。

<効率性>

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
手段やアプローチの妥当性	定性的	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	前・中

- 本事業については、事前評価に引き続き、本中間評価においてもその効率性が再確認された。
- 本事業の開始にあたっては、外部有識者により構成される「富岳」成果創出加速プログラム課題レビュー委員会」を設置し、重点課題・萌芽的課題について「富岳」を用いた成果創出が十分見込めるものに厳選・再編するための事前レビューを実施した。同委員会でのレビュー結果をもとに、本事業で令和2年度より実施する研究開発課題を採択した。また、令和3年度および令和5年度の公募においてはシミュレーションとAI・データ科学を連携させた課題を採択し、「富岳」の成果の最大化に向けて、新たな研究開発のパラダイムにつながる取組を推進した。また、本事業の推進にあたっては、文部科学省のHPCI計画推進委員会のもとに外部有識者からなる「富岳」課題推進ワーキンググループ」を設置し、同ワーキンググループにおいて研究開発課題の新規採択、各課題の年度ごとの進捗状況や成果等の評価を行っている。
- また、マネジメント強化の観点から、より効果的、効率的に事業を実施するため、研究領域の枠を超えて全体を俯瞰し、総括する領域総括を設置している。領域総括を構成員とする領域総括会議や毎年度の進捗状況ヒアリング等を通じて、事業全体の方向性や領域を超えた連携等について必要な検討・助言を行っている。様々な研究分野やシミュレーション等に知見の深い領域総括が本事業に関与することで、推進方針に関する意思決定プロセスを加速化し、必要な施策を適宜事業に反映できるほか、各課題に共通する取組の効率化・合理化の推進も図られている。例えば、領域総括会議における議論を経て、本事業に参画する様々な分野の研究者が一堂に会し、分野間の交流を促進する研究交流会の開催が提案され、実施に向けた指導・助言を行うなど、領域を超えた各課題の研究内容に関する情報共有や意見交換、対外発信等が促進されている。さらに、領域総括が主導する形で、研究交流会におけるセッションの統括や若手研究者を対象とした次世代研究者賞の選考・授与を行うなど、積極的に本事業に関与している。
- 併せて、本事業の事務手続き、関係機関の連携体制の構築、領域総括会議の運営、課題成果の効果的な広報や普及活動等を担う管理法人の活用を通じて、適切な進捗管理を実施するとともに、対外的な成果の公表等を通じて説明責任を果たす取組が図られている。
- 以上のことから、本事業の効率性は引き続き高いと評価できる。

(3) 科学技術・イノベーション基本計画等の上位施策への貢献状況

第5期科学技術基本計画で掲げられている、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」の実現や持続可能な開発目標「SDGs」の達成には、「富岳」に代表される大規模な計算基盤と、その性能を最大限に引き出すアプリケーションを活用した世界最先端の成果を創出する取組が不可欠である。本事業では、「富岳」開発段階において実施されたアプリケーション開発の成果を活用した取組が発展的に実施されるとともに、最先端の科学的・社会的成果の創出が進められており、社会課題の解決等に資する取組がなされている。

また、本事業では、大規模シミュレーションと AI・データ科学を融合・連携させた研究開発課題を積極的に採択・実施しており、第6期科学技術・イノベーション基本計画で掲げられている「データ駆動型研究等の高付加価値な研究の加速」に資する取組もなされている。

(4) 事前評価結果時の指摘事項とその対応状況

<指摘事項>

- 個別課題によるデータマネジメントポリシーについては、「研究データリポジトリ整備・運用ガイドライン」（平成31年3月29日内閣府政策統括官（科学技術・イノベーション担当）国際動向を踏まえたオープンサイエンスの推進に関する検討会）に沿ったものとなっているかを確認すること。
- 「富岳」の性能を最大限に活用し、「富岳」により初めて可能となる成果が創出される課題を選定すること。

<対応状況>

- 課題の実施にあたっては、実施機関において「研究データリポジトリ整備・運用ガイドライン」に沿ったデータマネジメントプランを作成することとし、事業終了課題に対する外部有識者による評価の際に、各課題のデータマネジメントに係る取組状況を確認した。
- 課題の選定にあたり、実施内容として「富岳」により初めて可能となる計算・データ解析であることを必須要件とした。また、各課題の個別の成果については、毎年度の外部有識者による評価においても確認されている。

(5) 今後の研究開発の方向性

本課題は「継続」、「中止」、「方向転換」する（いずれかに丸をつける）。

理由：

中間評価段階において本事業の目標の達成状況及び運営方法は適切であり、本事業を継続することにより、社会的・科学的課題の解決に資する成果の創出および社会実装に向けた取組のさらなる進展、シミュレーションと AI・データ科学を融合・連携させた先導的な

AI・データ駆動型研究の推進等が期待されるため。

<本課題の改善に向けた指摘事項>

特に無し

(6) その他

- 「富岳」を最大限に活用することで、社会的・科学的課題の解決につながる高い独創性と優位性を持つ成果の創出が期待される場所、実施機関において、その波及効果を含め、引き続き成果等の発信を積極的に行うよう努めること。
- 特に、令和5年度に新しく採択された課題の実施機関においては、先導的なAI・データ駆動型研究などの次世代アプリケーション開発にもつながるような、新しい切り口での取組が期待される場所、共通するノウハウや知見の展開など、分野連携を一層促進するとともに、更なる若手研究者の積極的な参画を促進すること。
- 本事業においてマネジメント強化の観点で導入された、領域総括および領域総括会議の設置により、研究領域の枠を超えた課題間の連携等の取組が促進されるとともに、公開シンポジウム・研究交流会等の事業全体で取り組む活動を管理法人が主導して実施する体制とした点も有効であった。今後、同様の事業を実施する際には、これらの仕組みを活用することで、成果の最大化や効率的な事業の推進が期待される。