

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

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  
(案)

平成 26 年 8 月

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

## 目次

はじめに .....	1
第1章 プロジェクト概要 .....	3
1. 1 プロジェクトの目的 .....	3
1. 2 プロジェクトの事業内容及び全体推進スケジュール .....	3
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 .....	5
2. 1 基本的な考え方 .....	5
2. 2 重点課題に求められる要件（選定方針） .....	5
2. 3 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題 .....	7
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 .....	10
3. 1 推進体制 .....	10
3. 2 成果の早期創出及び最大化に向けた取組 .....	13
3. 3 公募について .....	16
第4章 ポスト「京」の計算資源配分 .....	18
4. 1 基本的な考え方 .....	18
4. 2 計算資源配分 .....	18
おわりに .....	20
別添 .....	21
参考資料 .....	36

## はじめに

スーパーコンピュータは、理論、実験・観測と並ぶ科学技術の第三の手法であるシミュレーションのための強力なツールとして、我が国の競争力の源泉となる先端的な研究成果を生み出す研究開発基盤であるとともに、様々な分野の共通基盤技術となりつつあるビッグデータの処理・解析やデータ同化（シミュレーションに観測データを取り込む手法）のための重要なツールでもある。

また、世界最高水準のスーパーコンピューティング技術は、科学技術の振興、産業競争力の強化、安心・安全の国づくり等の実現に不可欠な国家の基幹技術であることから、第4期科学技術基本計画で「世界最高水準のハイパフォーマンスコンピューティング技術」が国家安全保障・基幹技術に位置づけられている。

一方、国際的にもスーパーコンピュータの開発・利用が進められ、米欧中をはじめとする世界各国で、2020年～2022年頃のエクサスケールコンピューティングの実現を目指した国主導での研究開発が活発に推進されており、このような国際競争環境の下で、我が国においてもこれに立ち遅れることなく研究開発を進める必要がある。

このような背景のもと、我が国における科学技術の振興、産業競争力の強化、安心・安全の国づくり等を実現するため、システムとアプリケーションの協調設計（コデザイン）により社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステム（ポスト「京」）、より具体的には、平成32年（2020年）までに世界トップレベルで多くの課題に対応できる汎用システム、を国際競争力のあるシステムとして実現し、エクサスケールを目指すとともに、ポスト「京」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の開発を行うことに、平成26年度より着手している。

ポスト「京」においては、国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に戦略的に取り組み、世界を先導する成果を創出することが期待されており、そのためには、ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題を選定した上で、これらの課題解決に資するアプリケーションを重点的に開発するとともに、ポスト「京」開発においては、これらのアプリケーションとシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を協調的に設計開発することで、成果の早期創出を目指す必要がある。また、個々の社会的・科学的課題の解決という観点だけではなく、個々の社会的・科学的課題を俯瞰し、ポスト「京」システム全体として成果を最大化することにより、国際競争力のあるシステムを実現することも必要である。そのため、ポスト「京」で重点的に取り

組むべき社会的・科学的課題等についての検討を行うため、「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」（以下「本委員会」という。）が設置された。

本委員会では、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題、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、ポスト「京」の計算資源配分等について議論を行い、その結果を報告書としてまとめた。

## 第1章 プロジェクト概要

### 1. 1 プロジェクトの目的

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（以下「本プロジェクト」という。）は、ポスト「京」を活用し、国家的に取り組むべき社会的・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戦略的に取り組み、世界を先導する成果の創出を目指すものである。

### 1. 2 プロジェクトの事業内容及び全体推進スケジュール

本プロジェクトは、国家的に解決を目指す、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（以下「重点課題」という。）を対象に、重点課題の解決に資するアプリケーションの開発や重点課題に関する研究開発（以下「アプリケーション開発・研究開発」という。）の推進に必要な体制を構築するとともに、これらのアプリケーションとポスト「京」のシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を協調的に設計開発（コデザイン）し、さらには、これらのアプリケーションを利活用して行う重点課題に関する研究開発に対し、ポスト「京」の計算資源を重点的に配分する、ことを通じて戦略的に成果の早期創出及び最大化を図ることを特徴としている。

本プロジェクトの推進は、以下に示す調査研究・準備研究フェーズ、本格実施フェーズ、成果創出フェーズの三つのフェーズから構成される。なお、平成27年度以降の事業内容及び全体推進スケジュールについては、現時点での想定である。

#### ○ 調査研究・準備研究フェーズ（平成26年度～平成27年度）

各重点課題に関する平成27年度以降の実施内容について、アプリケーション開発・研究開発に主体的に取り組む機関（代表機関）を中心に実施計画（工程表，研究開発内容，推進体制，必要計算資源，期待される成果等）を策定する。また，策定した実施計画に基づき推進体制を構築し，アプリケーションの開発に着手する。

#### ○ 本格実施フェーズ（平成28年度～平成31年度）

各代表機関を中心に、「京」等の既存の計算資源を用いて重点課題に関するアプリケーションの開発を本格的に実施するとともに，ポスト「京」の利

活用による成果創出に向けた知見の獲得や計算手法の確立を図る。

○ 成果創出フェーズ（平成 32 年以降）

平成 32 年頃のポスト「京」の運用開始に併せて、ポスト「京」を用いて、平成 31 年度までに開発した重点課題に関するアプリケーションを利活用した研究開発を行い、成果を創出する。

## 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

### 2.1 基本的な考え方

ポスト「京」は、国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に優先的に取り組み、世界を先導する成果を創出することが期待されている。そのため、重点課題の選定に際しては、重点課題に求められる要件（選定方針）を明確化した上で、様々なニーズも考慮し、選定方針を満足する課題を重点課題として選定する。

なお、選定方針は、プロジェクトの基本的な考え方に係るものであり、重点課題の選定時だけでなく、アプリケーション開発・研究開発の推進時においても尊重すべきものである。

### 2.2 重点課題に求められる要件（選定方針）

重点課題に求められる要件（選定方針）を以下に示す。なお、（１）～（３）及びその下の○、①～③は必須要件であり、➤は○や①～③の具体的な説明の例示を表す。

#### （１）社会的・国家的見地から高い意義があるか。【必要性の観点】

（具体的指標）

- 我が国を取り巻く社会的・科学的課題の解決に貢献できること。
  - 政府の研究計画に位置づけられていること、具体的な行政ニーズがあること又は既存の研究開発プロジェクトとの連携が期待できること
  - 実験で確かめることが困難な現象（危険すぎる、小さすぎる・大きすぎる、費用がかかりすぎる）等、計算科学・シミュレーションに対する期待・ニーズが明確であること
  - 我が国が国際貢献を求められていること 等

#### （２）世界を先導する成果の創出が期待できるか。【有効性の観点】

（具体的指標）

- ① 科学的なブレークスルーや我が国の産業・経済への波及効果が期待されること。
  - 10-20 年程度先の社会や学術を見据えた先駆的・挑戦的なものであること
  - 産業界のみで取り組むことができない先端的な研究等、産業界の将来の可能性を切り開く革新的な成果の創出が期待できること
  - 直接的なアウトプット成果に加え、アウトカム成果として、我が国の産

業競争力の強化や経済への波及効果，科学技術のプレゼンス向上が期待できること

➤ 世界をリードする成果が期待できること 等

② 成果創出に向けて，計算科学者や理論科学者に加え，計算機科学者，応用数学者，社会科学者，実験・観測科学者，産業界や自治体等の関係者等が連携・協調した開発体制を構築できる見通しがあること。

➤ 現実社会のより緻密・統合的なモデル化やリアルタイムデータ等，実データによる検証を通じ，社会実装／社会への還元を意識した成果が創出できること

➤ 産業界との連携により製品開発を抜本的に変革し，産業界が使いやすい革新的な製品設計技術が創出できること

➤ 今後ますます重要性が増すと考えられるビッグデータ解析や最先端大型実験施設との連携／最新観測データの利活用により，新しい科学や科学的ブレークスルーが創出できること 等

(3) ポスト「京」の戦略的な活用が期待できる課題か。【戦略的活用の観点】  
(具体的指標)

① ポスト「京」により初めて可能となる超大規模計算・データ解析であること。

➤ より精密・広域・長時間のシミュレーション（超大規模並列シミュレーション）によりブレークスルーが期待できること

➤ 膨大な組合せや多様・複雑な条件下でのシミュレーション（大規模アンサンブルシミュレーション，パラメトリックスタディ等）により新たな知見の獲得が期待できること

➤ 大量データ処理・ビッグデータ解析により新たな研究・開発の展開が期待できること 等

② 俯瞰的にみてポスト「京」の十分な活用が期待できること。

➤ 取り組むべき課題を俯瞰した場合，当該課題を構成する個別研究開発要素の具体的な内容や研究開発要素間の関係，周辺領域への波及効果，計算科学・シミュレーションの果たす役割や位置づけが明確化されていること。

➤ ポスト「京」により初めて可能となる超大規模計算・データ解析により構築された新しい理論やモデルが展開され，より小規模で行われる計算科学・シミュレーションの実施に貢献するなど，一般的な手法の確立・高度化に結びつくこと 等



③ ポスト「京」の利用による投資効果が明確であること。

- 現在の「京」を用いた場合に何がどこまでできて何ができないか、またポスト「京」を用いた場合にどの程度の処理量・処理時間でどのような成果が期待できるか等が明確化されていること。 等

## 2. 3 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

「2. 1 基本的な考え方」及び「2. 2 重点課題に求められる要件（選定方針）」に基づき、基礎科学から産業応用まで、幅広い課題の中からバランスを考慮して以下の課題を選定した（各課題の概要は、「別添1 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の概要」を参照。）。

なお、これらの課題の選定に際しては、「計算科学ロードマップ」<sup>（注）</sup>をベースに、関係府省庁における計算科学技術に対するニーズや重点課題に関する意見募集の結果等も踏まえた検討を行った。

（注）文部科学省科学技術試験研究委託事業「アプリケーション分野からみた将来の HPCI システムのあり方の調査研究」（平成 24 年～平成 25 年）

### 【重点課題（9 課題）】

「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。

#### <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、更に安全な創薬を実現する。

##### 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，脳神経等）により，個々人に適した医療，健康寿命を延ばす予防を目指した医療を支援する。

#### <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。

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。

＜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。

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。

＜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。

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、及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。

＜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て、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。

【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。調査研究・準備研究フェーズを通じて、その具体化を検討・精査の上、調査研究・準備研究フェーズ終了時に、その後のアプリケーション開発・研究開発の実施について、判断を行う。

⑩ 基礎科学のフロンティア — 極限への挑戦

極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答えの出ていない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。

⑪ 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

複雑かつ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済等、社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。

⑫ 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、地球・惑星、気象、分子化学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取り組みにより、観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子化学を探究する。

⑬ 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

革新技術による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」での大規模シミュレーションにより人間の精神活動を脳の物理的実体にねざして再現し、人工知能への応用をはかる。

なお、これらの重点課題及び萌芽的課題に関し、「別添1 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の概要」に記載の内容の詳細（サブ課題）、ポスト「京」利用の必要性、必要な計算資源等はいくまでも例示であり、実際に実施する研究開発内容（サブ課題）、推進体制等については、今後の公募により決定する。

また、重点課題や萌芽的課題に選定されなかった課題については、重点課題枠以外のポスト「京」の計算資源（ポスト「京」の計算資源配分は「第4章 ポスト「京」の計算資源配分」を参照）を利用して研究開発を推進することや、フラッグシップシステムを支える特徴あるシステム、全国共同利用・共同研究を進めている大学情報基盤センターのシステム等のポスト「京」以外の計算資源を利用して研究開発を推進することにより、我が国の計算科学技術インフラ全体を有効活用し、総体として効率的に成果を創出していくことを想定している。

### 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

#### 3.1 推進体制

##### 【プロジェクト全体推進体制についての考え方】

本プロジェクトは、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題の解決に向け、これらの課題の解決に資するアプリケーション開発・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という戦略性が求められるとともに、アプリケーションとポスト「京」のシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を協調的に設計開発するコデザインが求められる。

そのため、重点課題ごとの推進体制に加え、全体的な観点からプロジェクトを定常的かつ強力にフォローアップする全体推進体制が必要である。

##### 【各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制についての考え方】

本プロジェクトは、現在のスーパーコンピュータ「京」のアプリケーション開発・研究開発プログラムである HPCI 戦略プログラム（平成 21 年度～平成 27 年度）の終了後、HPCI 戦略プログラムの後継プロジェクトに位置づけられる。本プロジェクトの推進においては、以下に示す HPCI 戦略プログラムの現状と課題や HPCI 戦略プログラムからの移行（アプリケーション資産・利用技術等の継承、アプリケーション開発時に利用する計算資源等）についても考慮する必要がある。

##### ＜HPCI 戦略プログラムの現状と課題＞

- 「京」の性能を最大限に引き出すアプリケーションを、「京」の共用開始前に国家プロジェクト等で開発し、戦略機関にて活用したことにより、共用開始後早期の成果創出につながっている。
- 戦略機関を中心とした研究開発体制により、計算科学を軸として、分野コミュニティが結集することができ、「京」を用いて画期的な成果を創出する重点課題に取り組むだけでなく、分野内での科学的な検討・議論による萌芽的・基礎的研究が実施されている。
- 戦略機関を中心に、計算科学技術推進体制の構築に取り組むことにより、分野コミュニティや産業界における先端アプリケーションの利活用促進、大規模並列環境を活用するための技術習得、若手研究者の人材育成等、計算科学技術を活用する裾野が拡大しつつある。
- 社会的・科学的課題の解決のためには、分野内の連携だけではなく、分野

を越えた連携や他の研究開発プロジェクトの活用が必要。

- シミュレーションにより予測・理解された結果を実証するためには、実験系研究者との更なる連携が必要。
- シミュレーションの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が必要。

各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制としては上記の HPCI 戦略プログラムの現状と課題も踏まえた上で、①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できること、②ポスト「京」を最大限に活用できること、が重要である。そのため、各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制は、以下の要件を満足する体制が求められる。

- ① 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できること。
  - アプリケーション開発、開発したアプリケーションの利活用による成果創出、得られた成果の社会還元に関与する代表機関が必要。
  - 成果創出のためには、以下のような関係者が連携・協調した実施体制が必要。
    - 分野を跨る社会的・科学的課題の解決のためには、分野を越えた計算科学者の結集が必要。
    - 従来の手法では解決困難な課題に取り組むためには、理論科学者や応用数学者との連携が必要。
    - シミュレーションにより予測・理解された結果を実証するためには、実験・観測科学者との連携や、実験・観測を中心とした他の研究開発プロジェクトとの連携が必要。
    - 得られた成果を社会に還元するためには、社会科学者との連携や、成果を利活用する産業界や自治体等との連携が必要。
- ② ポスト「京」を最大限に活用できること。
  - ポスト「京」と課題解決に必要とされるアプリケーションの相乗効果を最大限に発揮し、早期に成果を創出するためには、ポスト「京」開発主体の積極的な関与が必要。
  - 課題横断的に必要となる基盤技術の効果的な整備のためには、ポスト「京」開発主体を中心とした取組が必要。

【分野コミュニティについての考え方】

ポスト「京」を中核とした計算科学インフラを幅広い領域に適用し、計算科学技術を活用する裾野を拡大していくためには、トップダウンにより選定した重点課題への取組だけではなく、前述の HPCI 戦略プログラムの現状と課題も踏まえ、分野コミュニティによる取組も重要である。なお、HPCI 戦略プログラム終了後における、これらの取組を進める枠組みについては、新分野形成や既分野の見直しを含め、速やかに検討を行う必要がある。

#### 【本プロジェクトの推進体制】

上記のプロジェクト全体推進体制、各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制、分野コミュニティについての考え方を踏まえた、本プロジェクトの推進体制を以下に示す（推進体制のイメージ図は、「別添2 ポスト「京」重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制のイメージ」を参照）。

##### ① 全体推進機関

全体的な観点からプロジェクトを定常的かつ強力にフォローアップし、プロジェクトの進捗状況の把握・評価・改善提言・指導・課題間の調整等を行う機関（委員会等）。具体的な体制については、調査研究・準備研究フェーズ開始後、速やかに検討を行うものとする。

##### ② 実施機関

重点課題ごとに代表機関及び分担機関等から構成され、アプリケーション開発・研究開発を推進する機関。

計算科学者を中心に、理論・応用数学者の協力の下、新アルゴリズム開発やアプリへの実装、大型実験施設等の利用者や研究プロジェクト等と連携した実証実験、成果の社会還元を見据えた社会学者や産業界・自治体等との連携等が実施できる分野を越えた関係者が結集した体制を構築する必要がある。

##### ③ 代表機関

各重点課題の解決に向け、アプリケーション開発・研究開発の推進に責任を持ち、主体的にアプリケーション開発・研究開発を行う機関。

##### ④ 分担機関

各重点課題の解決に向け、代表機関と連携・協調・分担し、アプリケーション開発・研究開発を推進する機関。

##### ⑤ ポスト「京」開発主体（独立行政法人理化学研究所）

ポスト「京」のアプリケーションとシステムアーキテクチャ，システムソフトウェア（通信ライブラリ，入出力システム等），プログラミング環境，ライブラリのコデザインに責任を持つべく，推進体制に参画するとともに，重点課題間の連携や共通基盤技術の整備を担う機関。各重点課題に参画し，責任者を設置する。なお，実施機関にもなり得る。

#### ⑥ 分野コミュニティ

計算科学の各研究分野のコミュニティ。分野コミュニティを構成する機関・研究グループ・研究者は，実施機関として重点課題の各課題に参画する。また，分野コミュニティは，コミュニティ内においてボトムアップ的な萌芽的・基礎的研究の実施，研究機関及び企業における研究人材・利活用人材の育成，先端アプリケーションの継続的な維持・発展・利活用促進等を通じて，計算科学技術を活用する裾野を拡大する取組を行う。

### 3. 2 成果の早期創出及び最大化に向けた取組

ポスト「京」は，多くの社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムであることが求められる。そのためには，重点課題に関するアプリケーション開発及びポスト「京」開発において，ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関（アプリケーション開発元等）との間で，ポスト「京」のシステムアーキテクチャ，システムソフトウェア，プログラミング環境，ライブラリとアプリケーションの設計開発に関し，相互に要求性能・機能や評価結果等についてのフィードバックを行いながら設計開発を同時に進めるコデザインを行う必要がある。コデザインにより，幅広いアプリケーションを高速かつ効率的に実行可能なシステムアーキテクチャ，システムソフトウェア，プログラミング環境，ライブラリを開発するとともに，これらの性能を最大限に引き出すアプリケーションの開発を通じて，成果の早期創出及び最大化を目指す。

＜ポスト「京」におけるコデザインの例＞

- 高性能演算器に関するメモリ階層，キャッシュ容量，コンパイラコード生成等の協調設計により，ターゲットアプリケーションの特性に合わせて高性能演算器を有効利用。
- キャッシュを有効に活用するための機構とそれを利用するプログラミング環境の協調設計により，データアクセスを効率化。
- 通信ライブラリ等の協調設計により，アプリケーションに特徴的な通信を低遅延化・高速化。
- 高性能ファイル I/O と階層化ストレージシステムの協調設計により，ビ

ッグデータ処理等のデータインテンシブ・アプリケーションの高速化。

その際、ポスト「京」におけるコデザインの成果やノウハウは、ポスト「京」に加え、フラッグシップシステムを支える特徴ある複数のシステムや全国共同利用・共同研究を進めている大学情報基盤センターのシステム等の、我が国の計算科学技術インフラ全体へ活用・展開されることを意識して推進する必要がある。

上記も踏まえ、ポスト「京」におけるコデザインは、以下のとおり進める。

- 重点課題の中からコデザインのターゲットとするアプリケーション（以下「ターゲットアプリケーション」という。）を選定し、また、ターゲットアプリケーションの目標性能を設定する。
- ターゲットアプリケーションの選定について
  - ・ ターゲットアプリケーションの選定は、コデザインに責任を持ち、また、課題間の連携や共通基盤技術の整備を行うポスト「京」開発主体が中心で行う。この際、重点課題に関するアプリケーションの中から、以下に示すターゲットアプリケーション選定基準を満足するアプリケーションをターゲットアプリケーションとして選定する。

＜ターゲットアプリケーション選定基準＞

- ① 各重点課題の要となる計算手法を有するアプリケーションであること。
  - ・ 各重点課題に関するアプリケーションは複数のアプリケーションから構成されることが考えられるが、戦略的かつ効率的にコデザインを進めるためには、これらのアプリケーションの中からターゲットアプリケーションを絞り込むことが必要である。
  - ・ 上記や本プロジェクトの全体推進スケジュール及びポスト「京」開発スケジュール等も踏まえ、ターゲットアプリケーションは、重点課題ごとに、重点課題に関するアプリケーションを一つずつ選定するものとする。
- ② アプリケーションの開発体制やライセンス形態が、コデザインを推進できるものであること。
  - ・ 成果の早期創出及び最大化のためには、コデザインに責任を持つポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関（アプリケーション開発元）との間で、アプリケーションの内容や開発体制を



共有できることが必須であり、また、コデザインの成果を広く活用・展開する上でも必要である。

③ 全ターゲットアプリケーション群は、計算科学的手法の網羅性を有しており、コデザイン及びチューニングのノウハウのドキュメント化が可能であること。

- 幅広い分野のアプリケーションをカバーするためには、全ターゲットアプリケーション群は、計算科学的手法の網羅性を有する必要がある。
- また、コデザインの成果を広く活用・展開する上でも必要である。
- ターゲットアプリケーションの選定スケジュールは、本プロジェクトの全体推進スケジュール及びポスト「京」開発スケジュール等も踏まえ、以下のとおり進めるものとする。

＜ターゲットアプリケーション候補の決定（平成 26 年夏頃）＞

- 重点課題決定後、速やかに、重点課題の要となる計算手法を有するアプリケーションの中からターゲットアプリケーション候補を暫定的に選定する。

＜ターゲットアプリケーションの決定（平成 26 年秋～冬頃）＞

- 重点課題の代表機関決定後、速やかに、代表機関の意見や選定基準等も踏まえ、必要に応じて、ターゲットアプリケーションの見直しを行い、ターゲットアプリケーションを正式決定する。なお、ターゲットアプリケーションの見直しを行った場合でも、先に進めているコデザインやチューニングのノウハウが新しく選定されたターゲットアプリケーションにおいても反映できるよう留意してコデザインを進めるものとする。

○ ターゲットアプリケーションの目標性能の設定について

- ターゲットアプリケーションの選定同様に、ポスト「京」開発主体が中心でターゲットアプリケーション候補の目標性能を暫定的に設定し、また、ターゲットアプリケーションの正式決定に併せて、必要に応じて、目標性能の見直しも行う。なお、この場合でも、ターゲットアプリケーションの選定基準を満足するターゲットアプリケーションを選定することにより、先に設定された目標性能に大幅な変更が発生しないように進める。

○ コデザインの実施について

- コデザインは、ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関（アプリケーション開発元等）との間で進めるが、実施時期の違いにより、以下に示す第一フェーズ、第二フェーズの二つのフェーズに大別して推進する。  
＜第一フェーズ：ポスト「京」システムの基本設計期間（平成 26 年度～平成 27 年度夏）＞

- プロセッサデザインに関してキーとなるターゲットアプリケーションを対象に、ポスト「京」のアーキテクチャパラメータ等、早期に決定する必要があるプロセッサデザインに関わる部分のコーディングを行う。
- 入出力に関してキーとなるターゲットアプリケーションを対象に、システムソフトウェア（通信ライブラリ、入出力システム等）に関わる部分のコーディングを行う。

＜第二フェーズ：ポスト「京」システムの詳細設計期間（平成 27 年度夏以降）＞

- 第一フェーズにおけるコーディングの成果を取り入れ、全てのターゲットアプリケーションを対象に、システムソフトウェア、コンパイラ、プログラミング環境、ライブラリに関するコーディングを行う。

### 3. 3 公募について

重点課題に係る公募について、想定しているスケジュール、公募の内容及び公募に係る審査を以下に示す（詳細は検討中）。なお、萌芽的課題に係る公募については、検討中である。

#### 【スケジュール】

平成 26 年秋頃                   ： 公募

平成 26 年秋～冬頃       ： 公募に係る審査、代表機関等の決定、事業開始

#### 【公募の内容】

- 各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発について、以下の提案を募集する。
  - 代表機関としての全体提案（課題全体（サブ課題を含む）に関する目標、研究開発内容・期待される成果、推進体制(代表機関、分担機関等)、工程表、費用見込み、研究実績等の概要)

- 分担機関としての部分提案（サブ課題に関する目標，研究開発内容・期待される成果，推進体制(分担機関等)，工程表，費用見込み，研究実績等の概要）

#### 【公募に係る審査】

- 審査により，代表機関を決定するとともに，サブ課題及び推進体制の大枠，部分提案への対応を決定する。
- 審査においては，以下の観点を中心に，提案内容について審査を行う。
  - 「2. 2 重点課題に求められる要件（選定方針）」を満足する提案内容か
  - 課題の概要，必要性の観点，有効性の観点，戦略的活用の観点，期待される成果・波及効果，推進体制は選定済みの課題に沿った内容か
- 審査は，有識者委員会を設置し，以下の四つのカテゴリごとに数名程度の規模で審査を行う。
  - 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

## 第4章 ポスト「京」の計算資源配分

### 4. 1 基本的な考え方

ポスト「京」の計算資源配分については、「京」での実績・経験、HPCI コンソーシアム提言等を踏まえた検討を行い、以下の基本的な考え方に基づき、ポスト「京」の計算資源配分を決定する。

- ・ 「京」における HPCI 戦略プログラムの有効性を踏まえ、トップダウン的に選定された重点課題に対して戦略的に計算資源を割り当てる「重点課題枠」を設け、一定割合の計算資源を配分する。
- ・ 「京」での実績及び分野コミュニティの重要性を踏まえ、幅広い研究課題に対して計算資源を割り当てる「一般利用枠」、分野コミュニティにおけるボトムアップ的な研究開発や分野振興利用に対して計算資源を割り当てる「分野振興枠」を設け、一定割合の計算資源を配分する。
- ・ 産業界の更なる利用促進のため、産業界の研究課題に対して計算資源を割り当てる「産業利用枠」を設け、一定割合を配分する。
- ・ 「京」での経験を踏まえ、政策的に重要かつ緊急な課題の実施に備える「政策対応枠」を設け、あらかじめ一定割合の計算資源を配分する。
- ・ 「京」での実績を踏まえ、システムの安定運転、ユーザ利用支援のための研究開発、幅広いユーザの利用に資する高度化研究を行う「調整高度化枠」を設け、一定割合を配分する。

### 4. 2 計算資源配分

「4. 1 基本的な考え方」に基づき、ポスト「京」の計算資源配分の骨子を以下のとおり決定した（ポスト「京」計算資源配分のイメージ図は、別添3「ポスト「京」の計算資源配分について」を参照）。なお、これらの計算資源配分枠の詳細（重点課題枠における各重点課題への配分割合を含む）については、調査研究・準備研究フェーズを通じて策定される各重点課題の実施計画や重点課題に関するアプリケーション開発状況等を踏まえ、ポスト「京」の運用開始までの間に、詳細を検討の上、決定する必要がある。

#### ① 重点課題枠（30-40%程度）

重点課題に対し、文部科学省が配分内容を決定（非公募）。

#### ② 一般利用枠、分野振興枠（30-40%程度）

一般利用枠は、幅広い研究課題が対象（公募）。分野振興枠は、分野コミュニティに対し、文部科学省が配分内容を決定（非公募）。

③ 産業利用枠（10%程度）

産業界による自社及び企業コンソーシアムの研究課題が対象（公募）。

④ 政策対応枠（10%程度）

政策的、重要かつ緊急な課題の実施（課題が設定されれば、他の利用枠より優先的に実施）（非公募）。

⑤ 調整高度化枠（10%程度）

ポスト「京」の安定運転のためのシステム調整，ユーザ利用支援のための研究開発，幅広いユーザの利用に資する高度化研究を実施。

なお，ポスト「京」の計算資源配分については，ポスト「京」共用開始後の利用のニーズ等も踏まえ，柔軟に対応し，必要に応じて弾力的に見直しを行う必要がある。

## おわりに

ポスト「京」は国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に優先的に取り組み、世界を先導する成果を創出することが期待されている。

そのため、本委員会では、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題、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、ポスト「京」の計算資源配分等について議論を行い、その結果を報告書としてまとめた。

本報告書が、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・研究開発推進及びポスト「京」で世界を先導する成果の創出の一助となることを期待する。

# 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

別添1

## 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点
- (2) 有効性の観点
- (3) 戦略的活用の観点

ポスト「京」で可能となる長時間ダイナミクス計算により、副作用因子を含む多数の生体分子の機能を予測し、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現

創薬関連ビッグデータ(疾病、副作用等に関わるタンパク質群や医療情報)や最先端計測データを活用し、製薬企業およびその関連団体との密接な連携体制で新たな創薬基盤を構築

ポスト「京」をフルに活用した生体分子シミュレーションにより、創薬計算の大幅な加速を実現。さらに創薬の阻害から制御への革新(タンパク質の機能阻害から生体分子システムの制御へ)を目指す。

## 内容の詳細

単純な阻害剤をめざす  
創薬ターゲットが枯渇

生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)のダイナミクスを考慮した機能制御をめざす創薬が必要

創薬関連ビッグデータを解析することで、多数のタンパク質からなる疾患原因、副作用、薬剤輸送に関わる生体分子システムを同定し、薬剤による制御対象を網羅する

ポスト「京」を駆使する分子シミュレーション法を開発

ポスト「京」を駆使して、多数のタンパク質の創薬計算を大幅に加速、さらにそれらのダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用を予測し、機能制御をする薬剤を設計

細胞環境を考慮したシミュレーションを行うことで、細胞に対する最先端計測実験と定量的に比較する

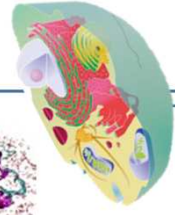
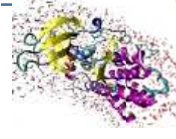
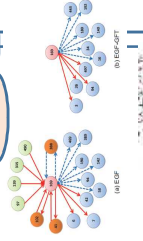
## ポスト「京」利用の必要性

今後の創薬には、ポスト「京」ではじめて可能となる、疾患に関わる多数のターゲットからなる生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)の同定とそれらの長時間シミュレーションによるダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用予測が不可欠

ポスト「京」分子シミュレーションによって、細胞環境における長時間シミュレーションがはじめて可能となり、先端計測機器からもたらされるデータに対応する情報を与えることで、細胞機能発現の機構がはじめて原子レベルのモデルから明らかとなる

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

生体分子システムの動的構造予測等に約45日  
創薬の結合自由エネルギー計算に約35日(10万ケース)



## 期待される成果・波及効果

多数タンパク質を含んだ網羅的なターゲットシステムの選択、膨大な計算量による超高精度相互作用予測、単純な機能阻害ばかりでなく、副作用因子を含んだより複雑な機能制御による有効性の高い創薬を可能にする。これによって、創薬プロセスを革新し、製薬産業の活性化に貢献する。

様々な生体分子システムの最先端計測データ(SACLA, Spring8 等の大規模施設からの情報や、一分子計測情報などのin-house実験によるものなど)に対して、ポスト「京」を用いた分子シミュレーションは原子レベルでそれら実験情報に対する機能発現モデルを提供することができ、生体分子システムの理解、予測、操作に大きく貢献することができる。

## ② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

概要・意義・必要性	ポスト「京」によるビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合することにより、革新的な予防法や早期診断法の開発、安全で有効性の高い治療の実現などを推進し、国際社会の先駆けとなる <b>健康長寿社会の実現に貢献</b>
(1) 必要性の観点	<b>史上最大規模のビッグデータ解析と、心臓シミュレータ、脳神経シミュレータなど世界最先端の生体シミュレーション技術を医療機関、医療プロジェクト等と密接に連携した体制で推進することで、着実に医療応用を実現</b>
(2) 有効性の観点	
(3) 戦略的活用 の観点	ポスト「京」による膨大な演算能力とストレージを活用し、 <b>ビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合して利用すること</b> で、 <b>個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開</b>

### 内容の詳細

**統合計算生命科学(ビッグデータ解析とそこから得られるモデルを用いる生体シミュレーション)による個別化・予防医療の支援**

#### エクサスケールデータ解析

巨大なストレージと演算能力を活用した**健康・医療ビッグデータ**(個人ごとのオミックスデータと医療・計測情報など)を一挙に解析する技術を開発し、その基盤を確立

それらを活用し、**個々人にフィットした薬、病気の予測・予防・治療法**を見出し、個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開

#### マルチフィジックス生体シミュレーション

多様な医療分野のシミュレータを連成した**マルチフィジックス生体シミュレーション法**(分子、細胞から臓器・脳・全身)を確立

**健康・医療ビッグデータの解析結果に基づいた個々人に合わせたモデルを用いた生体シミュレーションによる疾患の予測と治療法の検討**を実施し、さらに**新しい医療機器の開発**に応用

### 期待される成果・波及効果

大規模なオミックスデータ解析により、恒常性破綻と疾患の関係、がんなどの疾患における多数の遺伝子異常と遺伝子ネットワークの関係を解明し、**予防・個別化型の医療に貢献**し、さらに参加型医療への展開を図る。

分子、細胞レベルから、血管・組織、さらには臓器レベルまでの生体シミュレーションにより、病態予測を可能にして、疾患の早期発見、最適な治療法の選択に寄与するとともに、世界最先端の医療機器開発に寄与する。

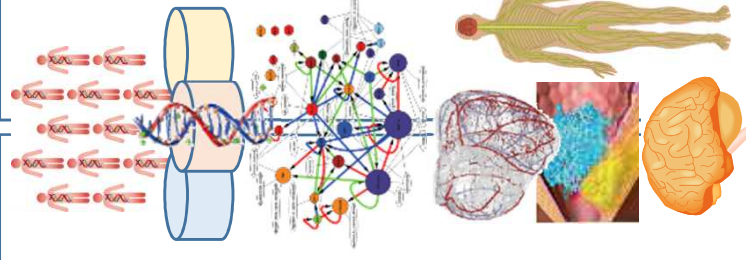
### ポスト「京」利用の必要性

今後の個別化・予防・参加型医療には、大規模な個々人のオミックスデータの解析とマルチフィジックス生体シミュレーションにより、がんなどの疾患における多数の遺伝子システムの異常の解明と生活習慣病などにおける正確なリスク評価が不可欠。

個別化・予防医療には、個人ごとの健康・医療ビッグデータの解析と個人ごとの違いに応じた生体シミュレーションによる手術や治療法の適用が必要になる。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

遺伝子ネットワーク解析等に  
約35日(1万5千ケース)  
マルチフィジックス生体シミュレーションに約45日





### 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

#### 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点  
被害経験からでは予測困難な複合災害に対する、統合的予測は国土強靱化のために必要不可欠。
- (2) 有効性の観点  
内閣府・自治体等で利用できる、HPCを使った地震・津波、一次被害、二次被害の統合的予測システムは、高度な被害予測を実現し、防災・減災対策を合理化。
- (3) 戦略的活用の観点  
多数地震シナリオの想定は、不確実性の高い地震・津波の複合災害の予測にとって必要不可欠であり、1シナリオの計算に京の全系が必要なため、ポスト「京」は必須。

#### 内容の詳細

##### サブ課題A: 地震津波災害予測システムの実用化研究

- ・ 自然災害・一次被害・二次被害の計算コンポーネントを統合した予測システムを構築し、多様性を考慮し想定外を無くす1000以上の地震シナリオ(\*)で、大規模シミュレーションを実施することで、確率評価の可能な複合災害予測データベースを構築する。
- (\*)断層広がり12x4通りxすべり不均質<sub>5</sub>C<sub>2</sub>通りx振幅3通り=1440通り
- ・ 各計算コンポーネントに関する科学的課題を解決し、予測システムの信頼度を向上

##### サブ課題B: 統合的予測のための社会シミュレーションの開発

- ・ 二次被害に大きく影響する都市全体を対象とした交通シミュレーション等を実施する社会シミュレーションの開発。
- ・ 効果的・効率的な国土強靱化に向けて、多数地震シナリオを用いた被害予測を行い、行政に発信する。

#### 期待される成果・波及効果

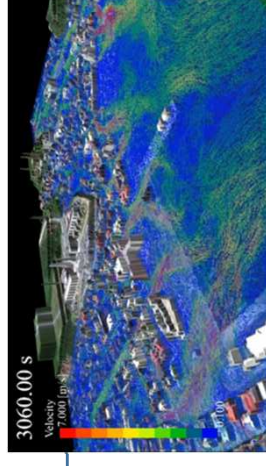
- ・ 地震津波の複合災害予測データベースの構築。
- ・ 経済的な波及効果: 直接効果だけでも6500億円(三菱総研調べ)。
- ・ 将来的にリアルタイムシミュレーションへの展開。
- ・ 計算コンポーネントの高度化を継続し、統合的予測システムを持続的に利用。
- ・ 行政(内閣府・自治体)の防災・減災計画への反映。

#### ポスト「京」利用の必要性

- ・ 詳細な幾何形状等を考慮した地震・津波・構造応答の計算を行うために、億を超える自由度の非線形有限要素計算が必要。
- ・ 京の全系でスケールするコードは開発済みだが、1回の計算に1日程度かかるため、不確定さを考慮した多数計算は、京では数年以上かかる課題であり、ポスト「京」が必要。
- ・ 交通シミュレーションについても、地震以外の状況も考慮した多数ケースの計算が必要。

#### 必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト京では、5領域(千島海溝、日本海溝、南海トラフ、伊豆・小笠原海溝、琉球海溝)で行ったとして、占有日数は、最低で70日程度(避難シミュレーションでのシナリオを最小限に絞った場合)。絞らないと最大4倍必要となる。



複合災害予測のベースとなる3次元津波遡上計算



10万人規模のエージェントシミュレーション

## 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

### 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点：竜巻、局地的豪雨等の予測高精度化への社会からの強い要望、環境政策立案のための科学的基盤提供
- (2) 有効性の観点：安全な避難のための時間的余裕確保、観測研究・シミュレーション研究が一体となった研究体制の構築
- (3) 戦略的活用の観点：十分なモデルと観測データ取り込みの解像度、アンサンブル数を確保し、予測高度化につなげる

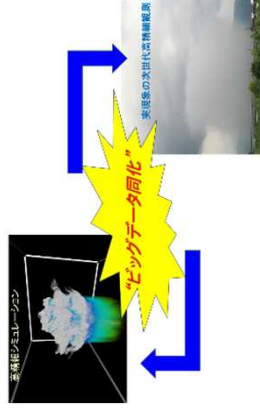
### 内容の詳細

**サブ課題A：革新的な数値天気予報による高度な気象防災**  
雲、雨、雪などを析違いの高解像度で忠実にシミュレーションし、次世代の観測によるビッグデータを、応用数学的手法によりモデル計算に組み入れることで、現状では予測が困難な局地的豪雨や竜巻などを高精度に予測する。また、台風の発生を予測する新しい天気予報システムを構築する。

### サブ課題B：総合的な地球環境の監視と予測

人間活動に起因する環境変化の影響を、生物・化学的側面を含んでより正確に予測し、常にモニタリングを行うシステムの基盤を、地球規模の気候モデルを用い構築する。これにより、国内および東アジアなど広域の大気質改善等への貢献を通し、今後の政策や防災、健康対策に寄与する。

### ポスト「京」利用の必要性



大気中の対流を再現できる解像度で、現状では10-100程度のアンサンブル数を10倍以上に増やし、かつ人工衛星観測などによる観測ビッグデータを、可能な限り情報量を保持しながら応用数学的手法によりモデル計算に取り込むため、ポスト「京」の計算能力が必要。



必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト「京」の占有日数換算で、「高解像度気象予報(全球領域)」に20日、「局所的・集中的大雨、熱帯気象の高度予測」に70日、「近未来地球環境予測システム」に10日必要。

### 期待される成果・波及効果

- ・ 予報技術の飛躍的向上による人命と財産の保護
- ・ 省庁、自治体による防災計画・環境政策への貢献、地球環境予測情報の発信を通じた持続可能な国際社会構築への貢献
- ・ 極端現象の成因・将来変化や、地球環境のサブシステム間・スケール間相互作用の科学的理解
- ・ 多様な時空間スケールを対象にすることによる、モデリング・データ同化手法改良の加速



# 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

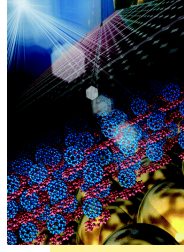
## 概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点** 新規エネルギー源の確保、効率的な変換、貯蔵、利用技術の開発は我が国喫緊の重要課題であり、既存の多数の国家プロジェクトとの連携や発展途上国でのエネルギー施策などへの国際貢献が強く期待されている。
- (2) **有効性の観点** エネルギーの創出、変換・貯蔵、利用に関する複雑な現実系の全系シミュレーション技術の開発は、我が国のエネルギー基盤技術のブレークスルーに繋がる。大規模プロジェクト、実験・企業研究者や計算機科学者との強力な研究体制が育ちつつある。
- (3) **戦略的活用の観点** 複雑な要素が相互に相関する複合系の微視的挙動を対象とした大規模、長時間シミュレーションは、ポスト「京」を駆使して初めて可能である。小規模系などへの適用で産業への展開が可能、大きな波及効果となる。

## 内容の詳細

### サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保

光をエネルギーに変換する過程の電子論を解明し、新しい有機系太陽電池や高性能人工光合成系を設計・開発する。



フラーレン太陽電池  
ACSから許可: H. Imahori and T. Uneyama  
J. Phys. Chem. C, 113, 9029-9039(2009)

### サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵

電池内で起こる全過程を物質構造と直接関連させるシミュレータを開発し、低コストの汎用元素を用いた二次電池や燃料電池開発の基盤技術確立する。



メタンハイドレートの分解

### サブ課題C エネルギー・資源の有効利用

高効率触媒の理論設計・開発や効率的な物質の分離技術により、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。特にメタンハイドレートの分離・精製、二酸化炭素の効率的な捕集・変換系を設計・開発する。

## ポスト「京」利用の必要性

経験に頼ったエネルギー関連複合材料の開発では革新的新材料は生み出せない。物理と化学の基礎方程式から出発した大規模計算に基づく計算科学的な設計・制御が必要。

「京」では、部分系、モデル系に対する計算に止まる。エネルギー問題の解決には複合物質の全系シミュレーションが必須。また、工業的に使用される条件や実験条件下での多数の統計量に基づいた解析も重要。

これらの計算を実施するには、「京」で10~50年はかかると考えられ、ポスト「京」の使用が不可欠。

## 必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト「京」で占有日数は、最低でも80日程度必要。

## 期待される成果・波及効果

- ・ 変換効率の高い太陽電池を安価な元素や有機系で実現し、実用化を促進、また人工光合成系の確立により新規エネルギー源を確保する。
- ・ 安価で高速充電、高容量の二次電池や高効率の燃料電池の開発を可能とする。
- ・ 白金などの貴金属を使用しない高機能触媒の開発により、エネルギー多消費型物質生産の革新を達成する。
- ・ ハイドレートの生成・分解過程の解明により、メタンの効率的な分離、精製方法、安全な貯蔵技術確立する。
- ・ 二酸化炭素を低コストで捕集・変換する技術を開発し、地球規模での二酸化炭素抑制、化石燃料の有効利用に貢献する。

## ⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

### 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点：ポスト「京」を用いた第一原理解析により、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。
- (2) 有効性の観点：産業界の大型プロジェクト(SIP等)と連携し、ポスト「京」の超高精度解析を駆使することで、鍵となる物理現象を解明し、**世界最先端のエネルギーシステムを実現する**。
- (3) 戦略的活用の観点：エネルギー変換の中核をなす、燃焼等の複雑な物理現象を高精度に予測するためには、**第一原理解析**が必須となる。実問題に対する第一原理解析にはポスト「京」の能力が必要となる。

### 内容の詳細

具体的なサブ課題として以下のようなものが想定されるが、**波及効果の大きなもの**、解析基盤技術が共有できるものを優先して実施。

#### ・サブ課題A：超臨界タービン燃焼器：

超臨界燃焼挙動を詳細に解明し、高熱効率・低環境負荷(CCS, ゼロNOx)に寄与する超臨界タービン燃焼器の実用化を加速。

#### ・サブ課題B：ICエンジン：エンジン内の乱流噴霧燃焼挙動を解明し、熱効率の飛躍的向上(40%→50%以上)に貢献。

#### ・サブ課題C：超大型風車：最重要課題である立地アセスメントで必要な100ケース/アセスメントの高精度風況予測を実現し、実用化を加速。

#### ・サブ課題D：核融合炉：核融合炉の実用化に必須となる核燃焼プラズマ挙動の解析技術確立し、国際熱核融合実験炉ITERの炉心設計に貢献。



### ポスト「京」利用の必要性

- 超臨界タービン燃焼器では超臨界状態に比べて雰囲気圧が10倍(300気圧)になり**解析規模が約100倍**になるため。
- ICエンジンでは予測精度を飛躍的に向上させることが可能な気筒内噴霧燃焼の第一原理解析(**DNS解析**)が必要のため。
- 超大型風車の立地アセスメントでは、**100ケース以上**の詳細な風況予測シミュレーションを実施することが必要のため。
- 核融合炉心の核燃焼プラズマ挙動の解析では、「京」の成果を重水素など多種イオン系、かつ、**長時間スケール**(10ms→1s)に拡張することが必要となるため。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

占有日数は7日～53日程度と見積もられるが、詳細は具体的な研究課題に依存する。

### 期待される成果・波及効果

- 超高効率・低環境負荷な産業機器・コンシューマ製品の実現による我が国の**産業競争力の強化**、低炭素社会・省エネルギー社会の実現に向けた**世界的リーダーシップの発揮**。
- 「**エネルギー基本計画**」で重要性が指摘される省エネルギー・低環境負荷技術、中長期クリーンエネルギー源等の技術開発に貢献。
- 具体的な成果としては、高熱効率・低環境負荷の超臨界タービン燃焼器の実用化、ICエンジンの熱効率の飛躍的向上(10%以上向上)、超大型風車の実用化、核融合炉の炉心設計への貢献などが期待される。

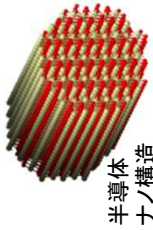


# ⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

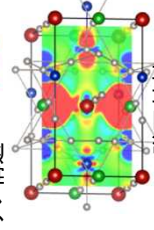
## 概要・意義・必要性

- (1) 必要性 次世代の産業を支える先端電子デバイスや高機能物質・材料の開発と機能創出を図る。新機能を持つ電子デバイス、高性能な永久磁石、信頼性の高い構造材料、次世代の機能性化学品等が主な研究対象。
- (2) 有効性 元素戦略プロジェクト、最先端大型実験施設と連携して基礎研究のブレークスルーを図り、産業界と共に国際競争の激しい新デバイス・新材料の研究開発を加速。
- (3) 戦略的活用 ポスト「京」で初めて実現される精密、大規模、長時間のシミュレーションと系統的探索により、新デバイス・新材料開発を革新。

## 内容の詳細



半導体  
ナノ構造



磁石材料



鉄鋼材料組織

### サブ課題A 新機能電子デバイス

微細加工限界のナノ構造半導体デバイスや新奇超伝導材料、光エレクトロニクスデバイスなど、新原理により新機能を提供する電子デバイスと電子デバイス材料の開発

### サブ課題B 高性能永久磁石・磁性材料

電子論に基づく磁石機能の解明と希少金属を代替する高性能永久磁石、軟磁性材料の開発

### サブ課題C 高信頼性構造材料

材料特性と製造プロセスの関係に着目した構造材料の強靱化の設計・制御と新材料開発

### サブ課題D 次世代機能性化学品

凝集系の構造や電子状態の解明に基づく次世代機能性化学品の分子設計

## ポスト「京」利用の必要性

「京」では理想的なナノ構造や高温超伝導体の大規模計算が行われ、電子状態や物理現象の解明・理解が進展。ポスト「京」では、これまで不可能だった複雑界面や不均一系の精密、大規模、長時間のシミュレーション、多数の化学組成、多様な条件下でのシミュレーションなどにより、実験だけでは困難な物性解明や系統的な材料探索、デバイスデザインを実現。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

計画されている全ての計算を実行すると、ポスト「京」での占有日数は、最低でも80日程度は必要。量子ダイナミカル計算、複雑な強相関物質の設計などさらに高度な計算を行うと最大400日程度必要。(京では、10～50年分に相当)

## 期待される成果・波及効果

- 多様なナノ構造デバイスのデザイン、強相関系新奇物質の高精度物性予測と物質探索、複雑な界面や凝集構造、不均一性を考慮した材料特性の予測と製造プロセスの提案が可能に。
- 物質・材料の性質の予測だけでなく、ほしい物性を実現するための物質設計も加速。

- 最先端大型実験施設で得られる膨大な実験データの解析と有効利用。
- 新しい半導体材料、超伝導材料、磁性材料、構造材料、機能性化学品、ナノ構造デバイス等において、日本の産業競争力を一層強化し、社会基盤を形成するための、高機能物質・材料創成技術が確立。
- 物質科学の深化と自然観の革新を通して基礎科学に貢献。

## 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

### 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点：社会ニーズを踏まえた付加価値を有する競争力のあるものづくりを実現するには、**上流設計プロセス、並びに製造プロセスの革新**（2012～2013ものづくり白書）と、その核となる**超高速統合シミュレーション**が必須。
- (2) 有効性の観点：**製品コンセプトを上流設計段階で最適化する革新的な設計手法**（コンセプトドリブン型ものづくり）と**コストを最小化する革新的製造プロセス**を研究開発し、我が国ものづくりの国際競争力強化に貢献。
- (3) 戦略的活用の観点：設計・製造プロセスの最適化の基礎となる**信頼性の高い膨大なデータをシミュレーションにより生成**するため、京の数十倍から百倍程度の計算機能力が必要。

### 内容の詳細

#### サブ課題A：上流設計プロセスの革新

設計上流で活用する**概念設計ブラットフォーム**と、製品最適化のための様々な物理シミュレーション**プロセスを統合した設計シミュレーションシステム**を開発。

#### サブ課題B：製造プロセスの革新

製造コスト削減のポイントとなる**成形問題（溶接、樹脂成型、金属付加製造等）を迅速に解決**するための第一原理シミュレーションシステムを開発。

#### サブ課題C：革新的要素技術の創出

高付加価値を有するものづくりの要となる**革新的要素技術（材料、流体、デバイス、制御法等）を開発**。

### ポスト「京」利用の必要性

上流設計では、パラメータの最適化のために様々な領域の物理シミュレーションが必要となり、製造プロセスでは、最小コストの加工条件等を見出すために第一原理計算が必要となり、京の数十倍から百倍程度の性能をもつ計算機が必要となる。

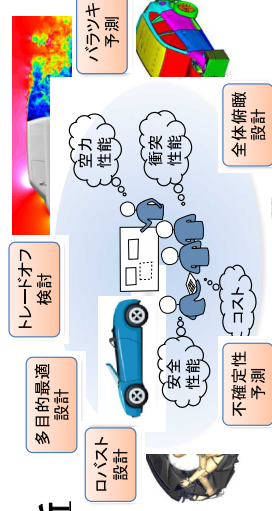
**必要な計算資源**（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

**超ストロングスケールリング技術開発**による計算時間の飛躍的短縮  
（数日⇒数時間内）

**実機スケールのパラメトリックスタディ**  
（約28日間占有）

新規材料に対して、1000を超えるプロセス要素反応・要素構造を設定  
（ポスト京の占有日数：約17日間）

【課題全体で計算資源量（ポスト京の占有日数）】約45日間



### 期待される成果・波及効果

- 高品質に加えて社会ニーズや新しい提案を取り込んだ新製品コンセプトが、高度シミュレーション技術を駆使したアプローチにより実現性のある具体的姿として設計段階において提示できるため、極めて**費用対効果が高く競争力のある新製品開発に貢献**できる。
- ポスト京を用いた第一原理計算により、加工プロセス等の詳細が解明され、最適な加工条件を見出すことが出来れば、**製造コストの大幅な低減が期待**される。
- ポスト京を用いた実スケールシミュレーションにより、開発・検証される革新的な技術が格段に広い利用範囲に適用可能となる。
- 研究開発段階から産官学一体となった体制を構築するため、高度シミュレーション技術を習得した**産業界のリーダーを育成**できる。

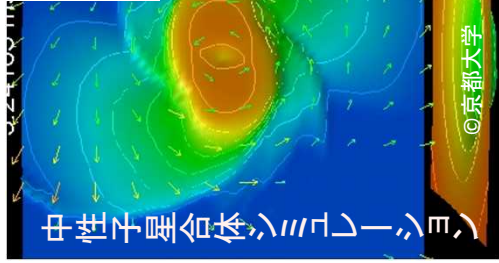


# ⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明

概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点**: 自然界の基本法則と宇宙の進化過程には多くの謎が残されている。実験・観測だけでは到達できない情報を得るための精密計算や、素粒子から宇宙まで複数の階層にまたがるシミュレーションを実現し、未解決問題を解明できる。
- (2) **有効性の観点**: 「京」を通じて計算機科学者、応用数学者との連携体制が確立。更なる成果創出に向けて実験・観測との連携も進んでいる。計算科学を軸として分野を横断し研究手法を超えて連携する世界にも類のない体制が構築されつつある。
- (3) **戦略的活用の観点**: ポスト「京」で初めて可能になる精密計算や階層をまたぐ現象の計算を大型実験・観測のデータと合わせること、計算科学のみならず素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史解明へのブレークスルーが得られる。

内容の詳細



## サブ課題A「究極の物理法則と宇宙開闢の解明」

- 素粒子の精密実験と呼応する精密計算を実現し、標準模型を超える物理法則の発見を目指す。実現すれば、素粒子物理全体のブレークスルーとなる。物質と時空の究極理論として期待される超弦理論を解析して、将来的に基本法則の解明につなげる。

## サブ課題B「物質創成史の解明と物質変換」

- 元素合成機構を明らかにするため、バリオン間相互作用、原子核の構造・中性子星の形成、超新星爆発・中性子星合体という複数の階層をシミュレーションで橋渡しする。放射性核廃棄物の核変換の基礎的データを与え、社会貢献につなげる。

## サブ課題C「現代物理学が紐解く宇宙進化の謎」

- 初代星、銀河、巨大ブラックホールなどの異なる階層をつなぐシミュレーションを実現し、宇宙の進化を明らかにする。

## ポスト「京」利用の必要性

- 計算の精密化や複数の階層をまたがる大規模計算を実現するには、「京」の能力を大幅に超える計算量が必要。
- 計算の高速化・効率化を進めて、ポスト「京」の能力により最大の科学的成果を得られるようにする。
- アプリケーションの内容に応じ、HPCI全体で最適な資源配分の実現を検討。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

サブ課題A 60日、サブ課題B (バリオン間相互作用60日／原子核・核変換60日／超新星爆発60日)、サブ課題C 60日、を目安。全300日のうち100日をポスト「京」で、残りは他のHPCI資源の活用を想定。

期待される成果・波及効果

- 素粒子標準理論を超える新しい物理法則の発見や、究極理論の理解に貢献
- 多様な元素が生まれた宇宙における物質創成過程を統一的に理解
- 宇宙進化において天体が階層的に形成された仕組みや、銀河中心に巨大ブラックホールが存在する起源を解明
- 核変換の基礎データ提供を通じて、放射性核廃棄物の削減に向けた社会貢献が可能

# ⑩ 基礎科学のフロンティア ― 極限への挑戦

## 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点 極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の大きな成果にもかかわらず答の出ていない難問に大規模数値計算を軸とした学際連携で挑み、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創で解決。
- (2) 有効性の観点 材料の破壊や大気・海洋の変動、観測困難な極限物性など、極限を探究する科学は、「京」等を使った大規模計算により、各分野で大きく進展した。この個別理解を基に、トップダウンで学際連携を促し、分野の壁を越えた普遍的な課題や境界領域の課題を解決するための機が熟している。フロンティア開拓により、基礎科学の進展と人類課題の解決につながる。
- (3) 戦略的活用の観点 「京」の成果で整備された個別アプリを、複合・マルチスケール問題に活用しポスト「京」のみで可能な成果へ。

### A: 破壊とカタストロフィ: 材料、人工物から地球まで

・ナノ素子から構造材料、人工物の機能喪失、地震・地滑りまで、破壊現象は対象とプロセス及び環境が複雑に絡み合っており、ミクロからマクロまでマルチスケールでの非線形性、多階層の理解を要する。「京」等で進んだ個別現象の理解を繋ぐブレイクスルーへ。

### B: 相転移と流体が織り成す大変動: ナノバブルから火山噴火まで

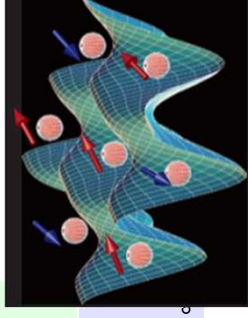
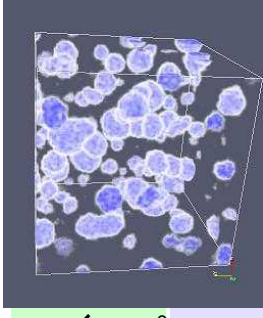
・竜巻、台風、噴火の発生発達機構、産業機器中の気液固混相流の解明につながる、相変化が生み出す時空構造の基礎科学を個別手法成果の発展から創出し、制御手法を開拓。

### C: 極限環境での状態変化: 物質の理解から惑星深部へ

・惑星深部、宇宙空間など、実験で実現できない極限環境における物質の状態変化を探究し、大型実験施設等の実験解析を支え、人類のフロンティア開拓に貢献。

### D: 量子力学の基礎と情報: 計算限界への挑戦

・「京」までに大きな成果の出た量子多体問題解法の継承発展で、ポスト「京」計算機で可能な計算処理量と精度の限界に挑戦し、量子計算、量子シミュレータ、量子暗号の基礎を構築。



物質科学   地球環境科学   素核・宇宙科学   ものづくり

## ポスト「京」利用の必要性

極端条件、複雑な要素の絡み合う問題、不安定に近い非線形問題は個別分野で「京」利用の大きな成果を生み、高効率アプリも開発された。未解決に残された異なる階層をつなぐ問題は人類課題にも直結し、ポスト「京」でようやく可能になる大規模な計算を要する問題が多数存在する。また分野を超える共通の方法論開発には、多数の試行錯誤を伴う大規模検証によって始めて有効性が検証できる。

## 必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

計画されている全ての計算を実行すると、ポスト「京」での占有日数は、最低でも70日程度は必要。高度な計算、大規模計算を行うと最大140日程度必要。(京では、10～50年分に相当)

## 期待される成果・波及効果

- ・各自然科学分野、計算科学課題が活性化し、実験・観測と個別計算科学分野の協調だけでは解決できない課題の解決が学際連携で飛躍的に進む。
- ・ポスト「京」により初めて可能となる計算科学的な共通手法が生まれる。
- ・人類のフロンティアや複合課題の探究、実験不可能な極限条件やマルチスケール現象を扱う、学際的な新しい学問分野が創出される。
- ・最先端大型実験施設や観測で得られる膨大な実験データの解析法が確立する。
- ・10年、20年後を見据えた科学の成果が創出され、個別計算科学では解決困難な産業応用や社会的課題も、将来の解決につながる可能性が高まる。



# ⑪ 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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点:

急速に変化し複雑化する現代社会で生じる問題に対して、政策・施策が俊敏に対応するため、社会の構成要素が互いに影響し合う効果を取り入れて捉え、分析し、予測する技術が必要。

(2) 有効性の観点:

各「構成要素モデル」の高度化自体が社会的課題の解決の直結するだけでなく、社会の構成要素が互いに影響しあう効果を取り入れて社会経済現象全般を予測するシステムが先駆的。

(3) 戦略的活用の観点:

各「構成要素モデル」の有効性検証は、ビッグデータを捌ききるポスト「京」があって初めて可能。包括的シミュレーションは現時点では萌芽的だが、実社会に直結する問題を扱うため、早期に着すべき課題。

内容の詳細

**各社会要素モデルの統合化とその有効性実証研究**

- 交通や経済など社会要素の相互の影響を考慮した社会経済統合モデルを構築し、社会・経済で生じうる多様な可能性を、「想定外」を含めて網羅的に検証することにより安定性・信頼性の高い制度や方法を提示する基盤を確立する。
- 統合モデルの応用として、敵対的リスクの発生を低減化し、経済破綻といった人為的なカタストロフの発生を抑制し、社会的課題の安定的解決手段の探索を目標とする。

**サブ課題: 各社会構成要素モデルの高度化**

**例: 交通システムの高精度高信頼予測の実現、およびそれによる最適化の実現**

- 交通の運行状況・運行目的をリアルタイムでデータ同化し、混雑緩和から非常時対策を講ずる
  - 莫大な数のモデル・シナリオを自動生成してシミュレーションを実行し、最適な交通システム設計を支援
  - 特定の鉄道路線、一部地域の交通ではなく、トータル交通システムとして問題を捉える。
- (注) 上記は、構成要素を「交通システム」としたときの例、このほか、株式・為替、災害避難、情報伝達など、構成要素は多岐にわたる。

ポスト「京」利用の必要性

京では少数のパラメータセット、少数のシナリオ・制度下でのシミュレーションが実現されつつある。「想定外」を含めた現実的な社会現象の探索には、ポスト京の計算力は必須。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

- 自動車交通の典型的な時間スケールは数時間。数種パターンで試みるには、2日間。
- 為替・証券取引所群のエージェントシミュレーションによるモンテカルロサンプリングには、先物取引まで含めて1日。全体で10日間。

**期待される成果・波及効果**

- 包括的に社会経済活動をシミュレートすることで、制度の設計・社会経済の統御の効率性・安定性・信頼性を高める。
- 従来の主観的・一面的な社会問題解決方法から脱却し、社会科学に基づいた客観的な解決方法を提示。(温暖化問題施策などがこれまでの例)
- 今後のトリリオンセンサーの有効利用につながる手法が期待される。
- 各要素の高度なモデル化検証技術は、防災避難シミュレーションなどにも応用される。

# ⑫ 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

## 概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点**：ポスト「京」で可能になる惑星系形成・進化シミュレーションにより、多数発見された太陽系外惑星の起源を解明し、地球を含む地球型惑星の形成条件を理解、さらに人類への太陽活動の影響の理解と予測を通して宇宙防災を推進する。
- (2) **有効性の観点**：観測・実験と宇宙・地球・惑星科学分野の有機的連携を強化し、地球型惑星の形成に至る条件を解明すると共に太陽の高解像度全球シミュレーションにより黒点周期と太陽活動の長期変動を再現。地球環境への影響の予測を可能にする。
- (3) **戦略的活用の観点**：ポスト「京」により、ダストを含む惑星系形成過程の高解像度輻射流体計算、微惑星成長の粒子多体計算、黒点周期(11年)より十分長い期間の太陽活動と地球磁気圏の磁気流体・プラズマ計算を世界に先駆けて実現する。

## 内容の詳細

### サブ課題A：地球と地球型惑星（第二の地球）の誕生条件の解明

宇宙物理学、惑星科学、地球科学、気象学等の研究者、及び計算科学研究機構等が参画する体制を組み、微惑星形成過程、中心星への惑星落下問題、地球型惑星の表層環境形成を解き明かし、太陽系及び太陽系外の惑星形成とその大気の起源と進化を解明する。

### サブ課題B：太陽活動による地球環境変動の解明

100年以上にわたる太陽ダイナモの計算により、太陽の長期時間変動のメカニズムと地球環境への影響を明らかにすると共に、衛星観測との連携により、太陽フレアと太陽風の数値予測を実現し、「宇宙天気予報」の高度化を推進。

### サブ課題C：太陽系における物質進化の解明

惑星間ダスト上の分子生成の量子化学計算により、“はやぶさ2”等による太陽系原始物質のデータを理解し、太陽系における物質進化を探究すると共に、磁気乱流中のダスト集積計算によって、地球型惑星（第二の地球）形成の初期条件を明らかにする。

## ポスト「京」利用の必要性

惑星形成計算において、「京」で30万粒子の粒子多体計算を実行。ポスト「京」で3次元輻射流体計算を実現。太陽活動については、「京」で512×1024×3072×2の対流層全球計算を実行。ポスト「京」では100年以上の太陽磁場変動の再現と太陽フレア・太陽風予測の高解像度計算を実現。乱流計算については、「京」で12288<sup>3</sup>メッシュの直接計算を実施。ポスト「京」では、磁場とダストを考慮した60000<sup>3</sup>メッシュの計算によりダスト集積過程を解明。量子化学計算では、「京」で、10万原子第一原理計算を実行。ポスト「京」では、様々な条件下において、大規模な第一原理分子動力学シミュレーションにより分子進化を解明。

## 必要な計算資源（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

惑星形成について、惑星軌道計算、輻射流体計算に、計20日程度。太陽磁場変動と太陽フレア・太陽風の数値予測に計30日間。高精度乱流計算に10日間。惑星間物質の量子化学計算に計10日程度。合計70日。

## 期待される成果・波及効果

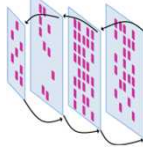
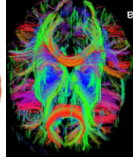
- ・太陽系外惑星の観測と直接比較可能な第一原理計算を実現し、地球型惑星（第二の地球）の誕生条件を明らかにする。
- ・太陽、地球磁気圏の衛星観測との連携により、宇宙天気予報の精度と信頼性が格段に向上し、宇宙防災に資することができる。
- ・金星、火星との比較惑星環境学により、太陽系惑星気候変動のメカニズムを解明し、太陽系スケールでの地球の安定性の理解を深める。
- ・太陽系始原物質の採取・実験と計算との突合せにより、太陽系の誕生と進化の歴史を明らかにする。



# ⑬ 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

概要・意義・必要性		<p>ポスト「京」により、<b>複雑な神経回路を再現し、「考える」という脳機能の解明に挑む</b>ことは現代科学の最大のチャレンジであり、「健康・医療戦略」にもあるように新しい情報処理技術の確立や精神神経疾患の克服に向け社会的期待も高い。</p> <p>脳科学の革新的プロジェクトと連携し、そのビッグデータのモデル化と大規模シミュレーションにより、新たなブレークスルーが期待できる。脳の機構にならった人工知能は、人の心を理解するロボットなど新たなイノベーションを可能にする。</p> <p>思考の神経回路の実体の解明には、大量の実験データに基づく大規模、マルチスケールのモデルの構築と、さらにリアルな感覚行動データによる長期の学習が不可欠であり、ポスト「京」の超大規模計算により初めて実現可能である。</p>
(1) 必要性の観点		
(2) 有効性の観点		
(3) 戦略的活用の観点		
内容の詳細: 「革新的技術による脳機能ネットワークの全容解明プロジェクト」等により得られる脳構造と活動の高スループット計測によるボトムアップデータと、認知を実現する機械学習によるトップダウン設計論を融合し、人の精神活動を脳の物理的実体にねざした大規模多階層モデルにより再現し、その応用をはかる。		
サブ課題A: 思考を実現する神経回路機構の解明		
細胞形態と回路結合、活動のイメージングなど異種大規模データを、機械学習手法をもとにモデル統合しその動作機構を解明する。		
ポスト京により様々な規模と詳細度のシミュレーションを実現する:		
・細胞内分子シグナルを含む局所神経回路の詳細モデル		
・自動縮約したニューロンモデルによる全脳規模シミュレーション		
サブ課題B: 脳アーキテクチャにもとづく人工汎用知能		
大脳皮質の階層的確率推論、大脳基底核の報酬評価、小脳による定型的行動制御など脳の機能アーキテクチャを参考に、環境との相互作用のもとで学習し続ける知能エージェントを実現する。		
ポスト京のキャパシティにより、ネット上で得られる膨大な情報のもとで学習させることにより、動的に発達し続ける人工知能システムを実現する。		
期待される成果・波及効果		
マーマセットなど霊長類の脳データにもとづく詳細大規模シミュレーションにより、脳内シミュレーションと思考、他者認知とコミュニケーションなど、人の精神活動の基盤となる脳機構の実体の解明が期待される。		
そのモデルの解析は、精神神経疾患や発達障害のメカニズムの理解、それらの診断、治療、予防法の開発、また人の心を理解し行動するロボットなど、より人間的な人工知能の応用への道を開く。		

## ポスト「京」利用の必要性

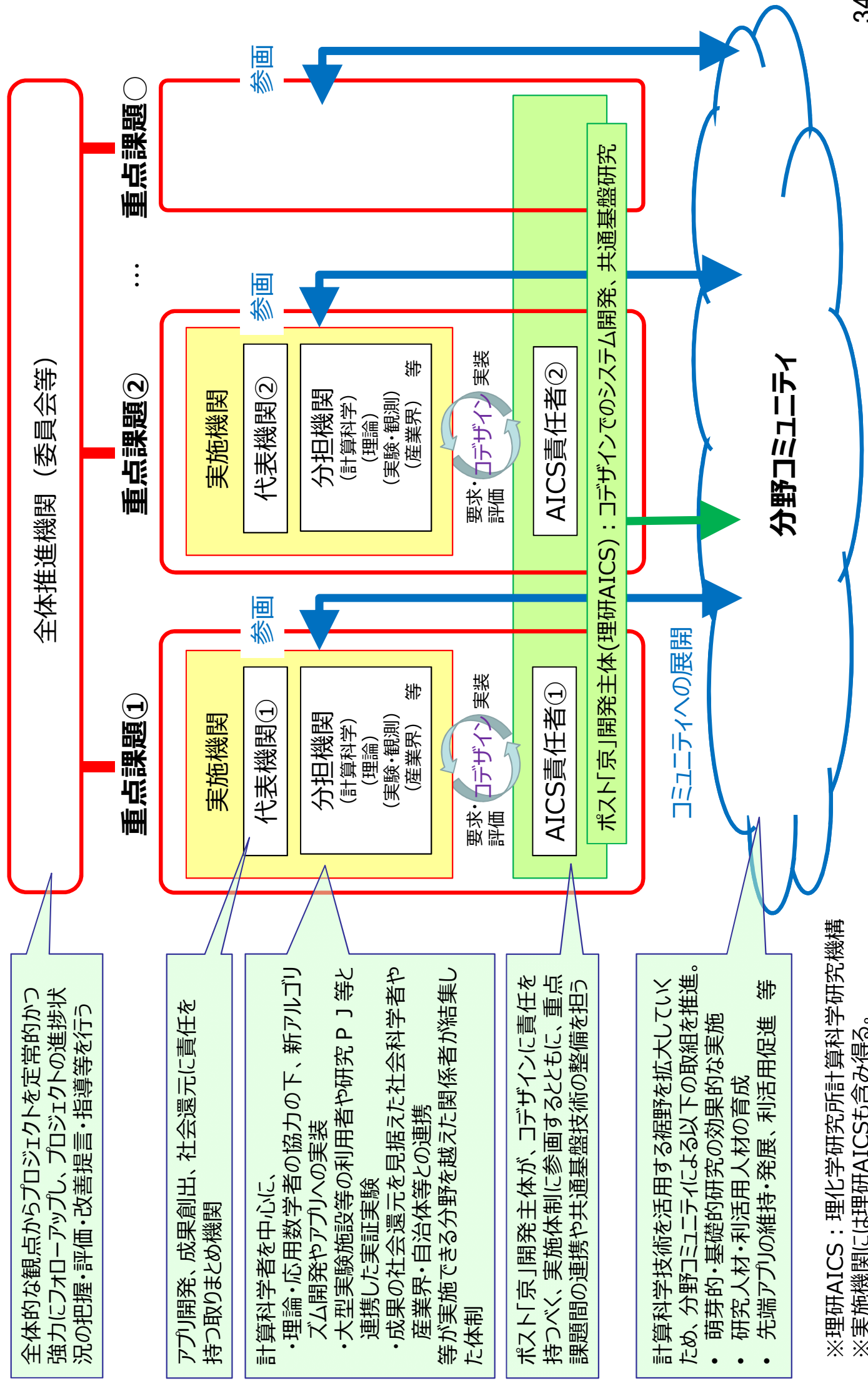


脳に関して特定の仮定のもとに抽象化したモデルは多数提案されているが、実験データにもとづく詳細モデルによつてはじめて、脳の物理化学的な実体がいかに精神機能を実現し得るのかという問題に迫ることが可能になる。

実時間シミュレーションにより、センサやロボットを通した外界や人とのインタラクションが可能になり、運動制御、意思決定、コミュニケーションなどの脳機構をリアルに検証することが可能になる。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

- ・コネクトミクス等データ集中計算: 10日
- ・マルチスケール局所回路モデル: 5日
- ・マーマセット全脳詳細モデル: 15日
- ・人全脳縮約モデル: 30日
- ・脳型人工汎用知能シミュレーション: 20日



※理研AICS：理化学研究所計算科学研究機構

※実施機関には理研AICSも含み得る。

「京」での実績・経験、本委員会での議論、HPCIコンソーシアム提言等を踏まえ、ポスト「京」の計算資源配分は以下のとおりとする。

## 1. 考え方

- ・「京」における戦略プログラムの有効性を踏まえ、トップダウン的に選定されたポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題に対して戦略的に計算資源を割り当てる「重点課題枠」を設け、一定割合の計算資源を配分する。
- ・「京」での実績および分野コミュニティの重要性を踏まえ、幅広い研究課題に対して計算資源を割り当てる「一般利用枠」、分野コミュニティにおけるボトムアップ的な研究開発や分野振興利用に対して計算資源を割り当てる「分野振興枠」を設け、一定割合の計算資源を配分する。
- ・産業界の更なる利用促進のため、産業界の研究課題に対して計算資源を割り当てる「産業利用枠」を設け、一定割合を配分する。
- ・「京」での経験を踏まえ、政策的に重要かつ緊急な課題の実施に備える「政策対応枠」を設け、予め一定割合の計算資源を配分する。
- ・「京」での実績を踏まえ、システムの安定運転やユーザの利用支援のための研究開発等を行う「調整高度化枠」を設け、一定割合を配分する。

## 2. 計算資源配分

(計100%)



### ①重点課題枠

重点課題に対し、文部科学省が配分内容を決定（非公募）。

### ②一般利用枠、分野振興枠

一般利用枠は、幅広い研究課題が対象（公募）。分野振興枠は、分野コミュニティに対し、文部科学省が配分内容を決定（非公募）。

### ③産業利用枠

産業界による自社および企業コミュニティの研究課題が対象（公募）。

### ④政策対応枠

政策的、重要かつ緊急な課題の実施（課題が設定されれば、他の利用枠より優先的に実施）（非公募）。

### ⑤調整高度化枠

ポスト「京」の安定運転のためのシステム調整、ユーザ利用支援のための研究開発、幅広いユーザの利用に資する高度化研究を実施。

## 参考資料

---

- 参考 1 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  
検討委員会の設置について
- 参考 2 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 委員名簿
- 参考 3 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 検討経緯

## 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 検討委員会の設置について

平成26年3月20日  
文 部 科 学 省  
研 究 振 興 局

### 1 設置の目的

スーパーコンピュータ「京」の100倍の計算性能を有するポスト「京」については、大規模な研究開発プロジェクトであり、そこから高いインパクトのある成果を創出することが期待される。スーパーコンピュータで解決できる問題は、基礎科学から産業利用まで幅広いものであるが、ポスト「京」においては、国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に優先的に取り組むべきである。

こうした状況を踏まえ、ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題や課題解決による早期の成果創出に向けた研究開発体制等を検討するため、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（以下「委員会」という。）を設置する。

### 2 検討事項

- ・ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題
- ・ポスト「京」のアプリケーション研究開発体制 等

### 3 構成及び運営

- ・委員会は、研究振興局長の私的諮問機関として設置する。
- ・委員会の委員は、別紙のとおりとし、必要に応じて追加する。
- ・委員会の運営に係る事項は委員会において定める。

### 4 設置期間

平成26年4月4日～検討事項の終了までとする。

### 5 その他

委員会の庶務は、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が処理する。

(参考2)

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 委員名簿

安西 祐一郎	独立行政法人日本学術振興会理事長
内山田 竹志	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会運営委員長 トヨタ自動車株式会社代表取締役会長
大隅 典子	東北大学大学院医学系研究科教授
◎小宮山 宏	株式会社三菱総合研究所理事長
城山 英明	東京大学公共政策大学院院長
住 明正	独立行政法人国立環境研究所理事長
関口 和一	株式会社日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員
瀧澤 美奈子	科学ジャーナリスト
土屋 裕弘	田辺三菱製薬株式会社代表取締役会長
○土居 範久	慶應義塾大学名誉教授
土井 美和子	独立行政法人情報通信研究機構監事
林 春男	京都大学防災研究所巨大災害研究センター教授
平尾 公彦	独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構長

(◎：主査、○：主査代理)

(合計 13 名)

(50 音順)

(平成 26 年 8 月現在)



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 検討経緯

第1回 4月4日（金）15時～17時

- 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の設置について
- ポスト「京」プロジェクトについて
- 将来の HPCI システムのあり方の調査研究（アプリケーション分野）からの報告
- 関係府省庁における計算科学技術に対するニーズについて

第2回 5月30日（金）15時～17時

- 第1回委員会における委員からの主な意見等について
- ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の選定方針について
- ポスト「京」におけるアプリケーション開発・研究開発推進体制について

第3回 6月19日（木）15時～17時

- 第2回委員会における委員からの主な意見等について
- ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題について
- ポスト「京」の計算資源配分の考え方について

第4回 7月24日（木）16時～18時

- 第3回委員会における委員からの主な意見等について
- ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題について
- 報告書について

第5回 8月20日（水）10時～12時

- 第4回委員会における委員からの主な意見等について
- 報告書について