

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・研究開発中間評価結果  
(案)

平成29年12月

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

## H P C I 計画推進委員会 委員名簿

伊藤	公平	慶應義塾大学工学部 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
梅谷	浩之	トヨタ自動車株式会社エンジニアリング I T 部 第 1 エンジニアリングシステム室 グループ長
大石	進一	早稲田大学基幹理工学部応用数理学科 教授
小柳	義夫	神戸大学計算科学教育センター 特命教授
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
土井	美和子	情報通信研究機構 監事
中川	八穂子	株式会社日立製作所・研究開発グループ・情報通信 イノベーションセンタ シニアプロジェクトマネージャ
中村	宏	東京大学大学院情報理工学系研究科 教授／東京大学 情報基盤センター センター長
◎	西尾 章治郎	大阪大学 総長
	藤井 孝藏	東京理科大学工学部 教授
	安浦 寛人	九州大学 理事・副学長

(◎ : 主査、50音順)

平成29年3月

## 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委員

平成 29 年 6 月 29 日現在

#### 主査

小柳 義夫 神戸大学計算科学教育センター特命教授

#### 主査代理

住 明正 東京大学サステナビリティ学連携研究機構特任教授

#### 委員

相原 博昭 東京大学大学院理学系研究科教授

安達 泰治 京都大学ウイルス・再生医科学研究所教授

伊藤 公平 慶應義塾大学理工学部長・教授

宇川 彰 理化学研究所計算科学研究機構副機構長

大石 進一 早稲田大学基幹理工学部応用数理学科教授

河合 理文 株式会社 I H I 技術開発本部技師長／

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会会員

栗原 和枝 東北大学未来科学技術共同研究センター教授

白井 宏樹 アステラス製薬株式会社バイオサイエンス研究所専任理事

福和 伸夫 名古屋大学減災連携研究センター長・教授

松岡 聡 東京工業大学学術国際情報センター教授

50音順、敬称略

# ポスト「京」の開発

平成30年度要求額：5,630百万円  
(平成29年度予算額：6,700百万円)

## 背景・課題

○ スーパーコンピュータは、理論、実験と並ぶ科学技術第3の手法であるシミュレーションの強力なツールであり、国民生活の安全・安心や国際競争力の確保のための先端的な研究に不可欠な**研究情報基盤**である。

## 【成長戦略等における記載】（未来投資戦略2017）

○ 高精度・高速シミュレーションを実現する最先端スーパーコンピュータの利用に係る研究開発とその産業利用の促進

## 事業概要

### 【事業の目的】

○ 我が国が直面する課題に対応するため、2021年～22年の運用開始を目標システム  
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】

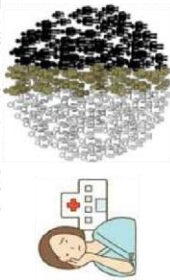
- システムとアプリケーションを協調的に開発することにより、世界最高水準の汎用性、最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能を目指す。
- アプリケーションの対象として、健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の社会的・科学的課題を選定。
- 消費電力：30～40MW（「京」は12.7MW） ○国費総額：約1,100億円

### 【期待される成果例】

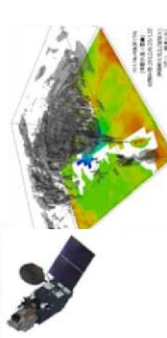
創薬基盤  
高速・高精度な創薬シミュレーションの実現



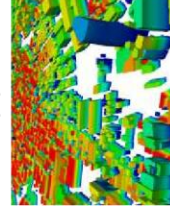
個別化医療  
医療ビッグデータ解析により、個人個人のがん予防と治療支援を実現



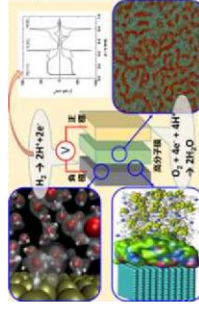
気象・気候  
気象ビッグデータ解析により、局地的豪雨を的確に予測



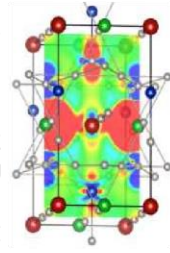
地震・防災  
地震の揺れ・津波の進入・市民の避難経路をメートル単位でシミュレーション



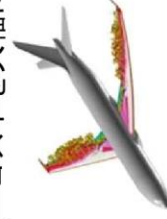
燃料電池  
燃料電池の電流・電圧性能を予測・高性能化



高性能材料  
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



ものづくり  
飛行機の実機試験を一部代替し、開発期間・コストを大幅に削減



宇宙  
宇宙でいつどのような物質が創られたのかなど、科学の根源的な問いへの挑戦



### 【システムの特徴】

- 世界最高水準の
  - ★消費電力性能
  - ★計算能力
  - ★ユーザーの便利・使い勝手の良さ
  - ★画期的な成果の創出

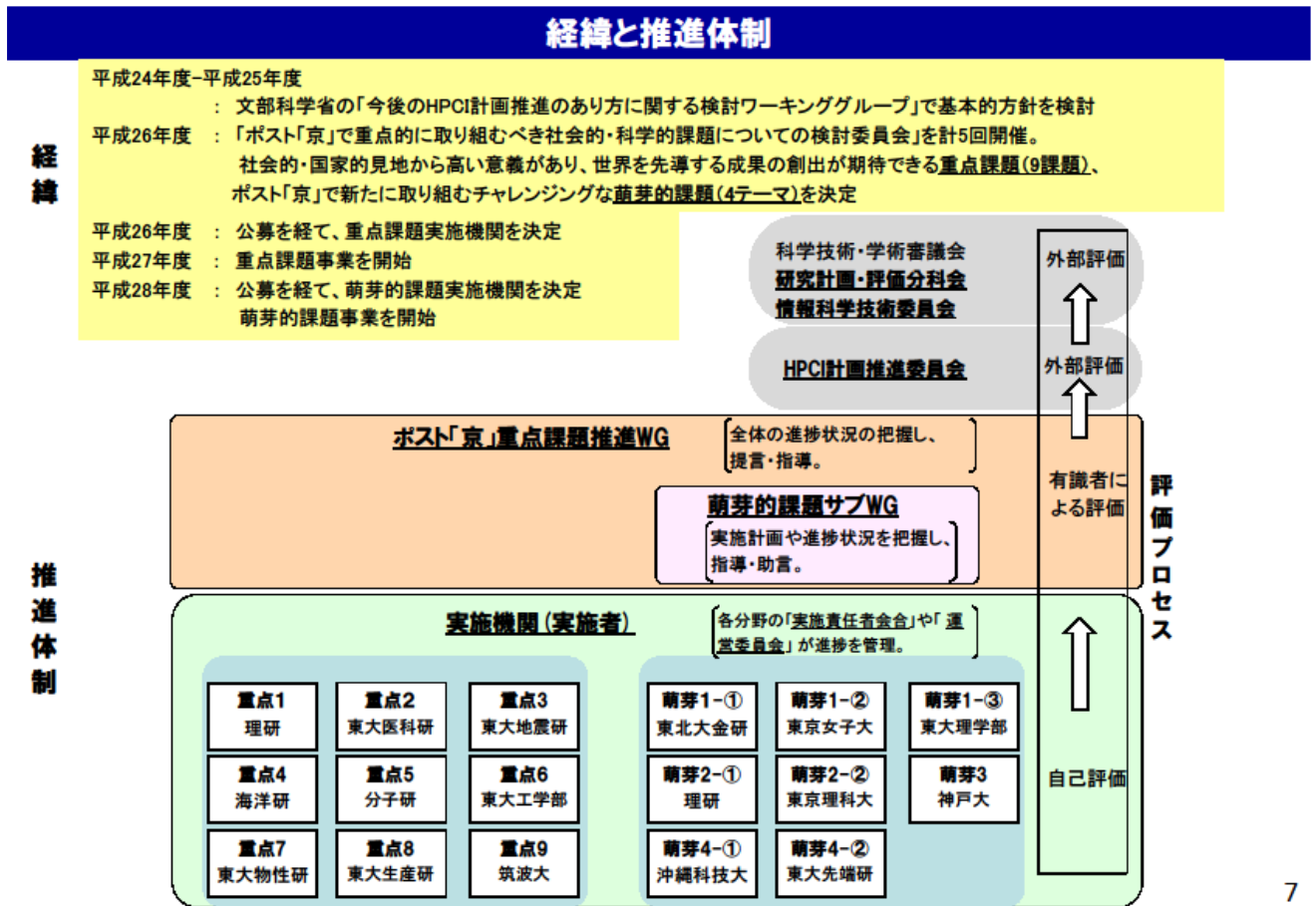
★ 平成30年度秋頃（予定）の中間評価を踏まえ、製造段階への移行を最終的に判断。



理化学研究所  
計算科学研究機構  
(兵庫県神戸市)

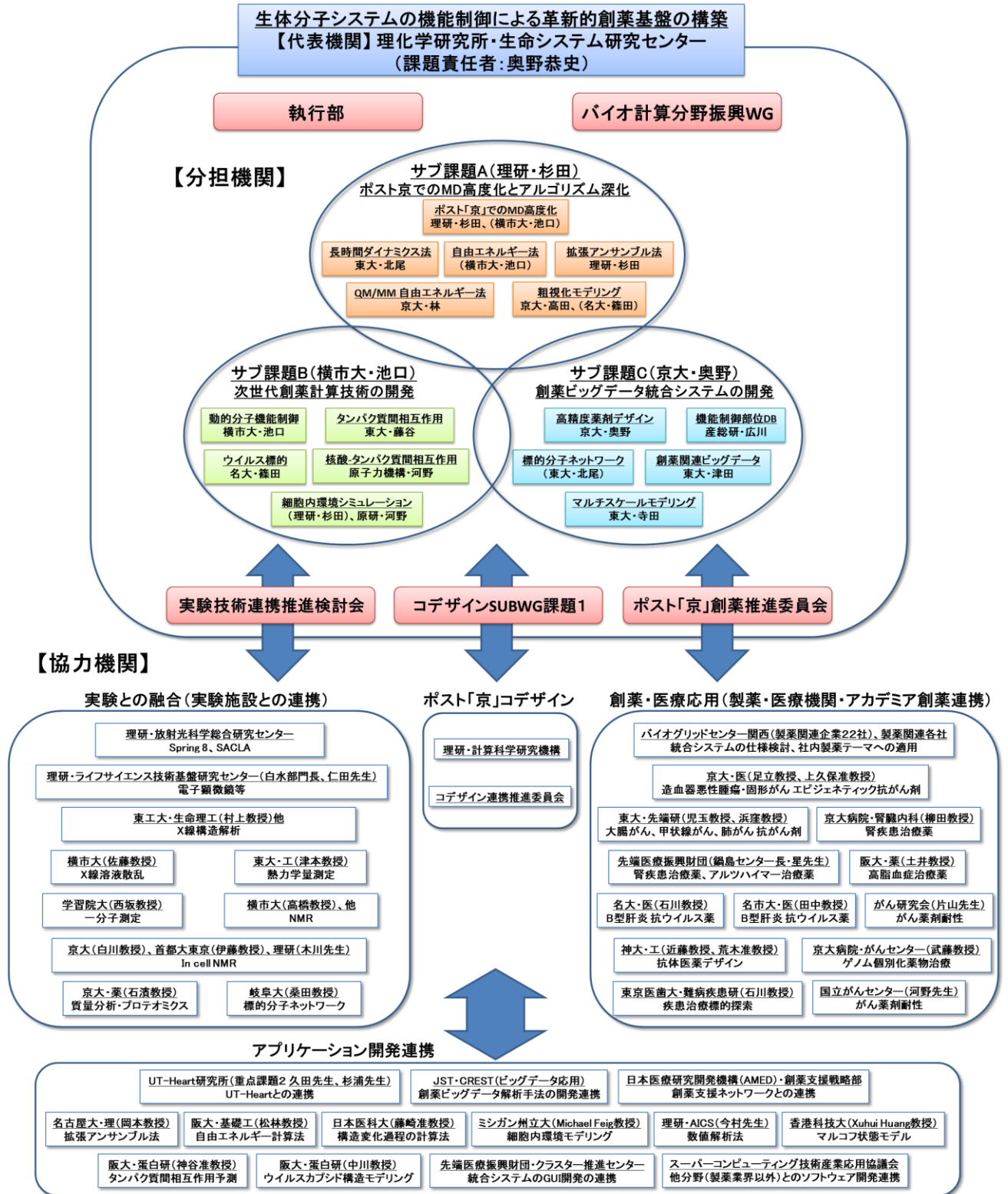
実施体制

- 全体推進体制



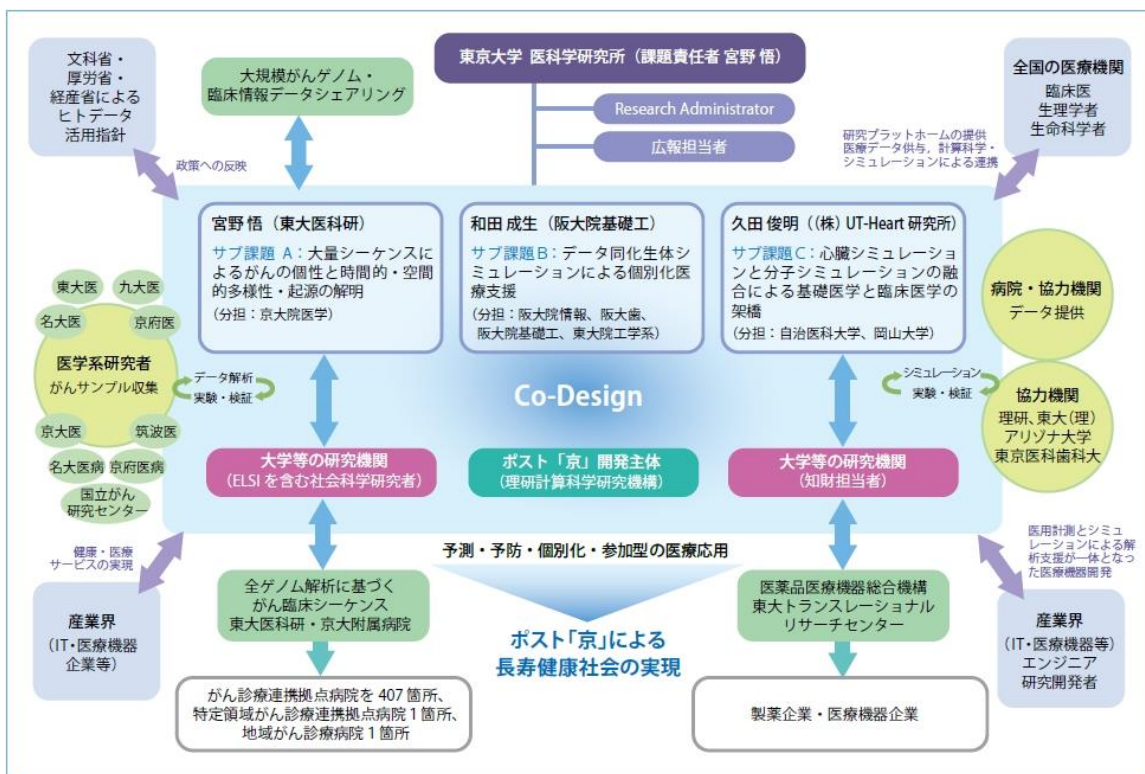
● 重点課題1 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

代表機関：理化学研究所（課題責任者：奥野 恭史・客員主管研究員）



## 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

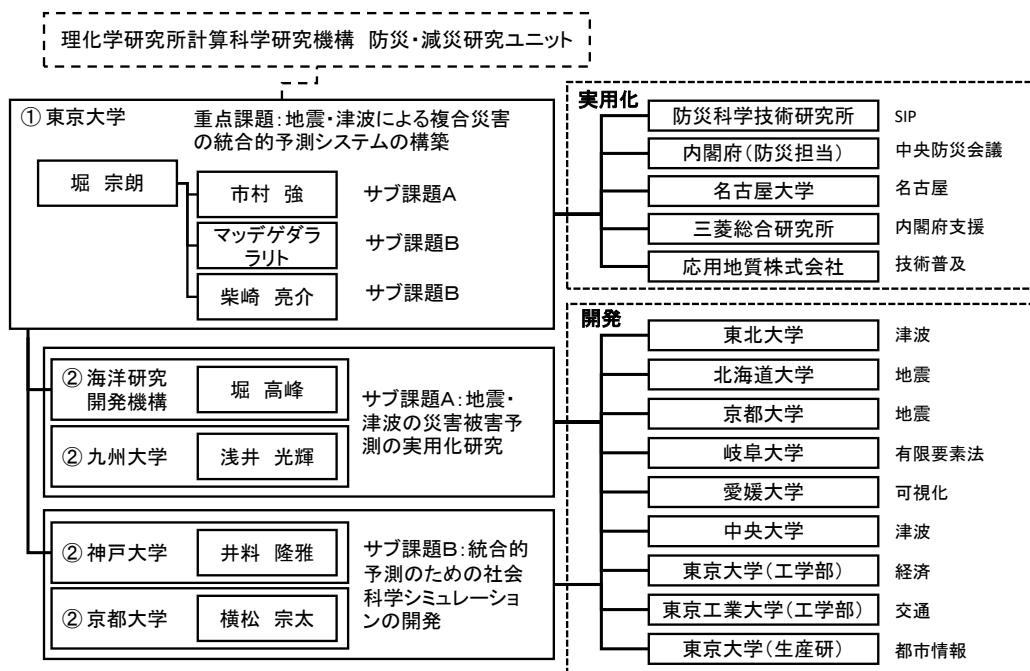
代表機関：東京大学（課題責任者：宮野 悟・教授）



重点課題2 研究実施体制

## ● 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

代表機関：東京大学（課題責任者：堀 宗朗・教授）

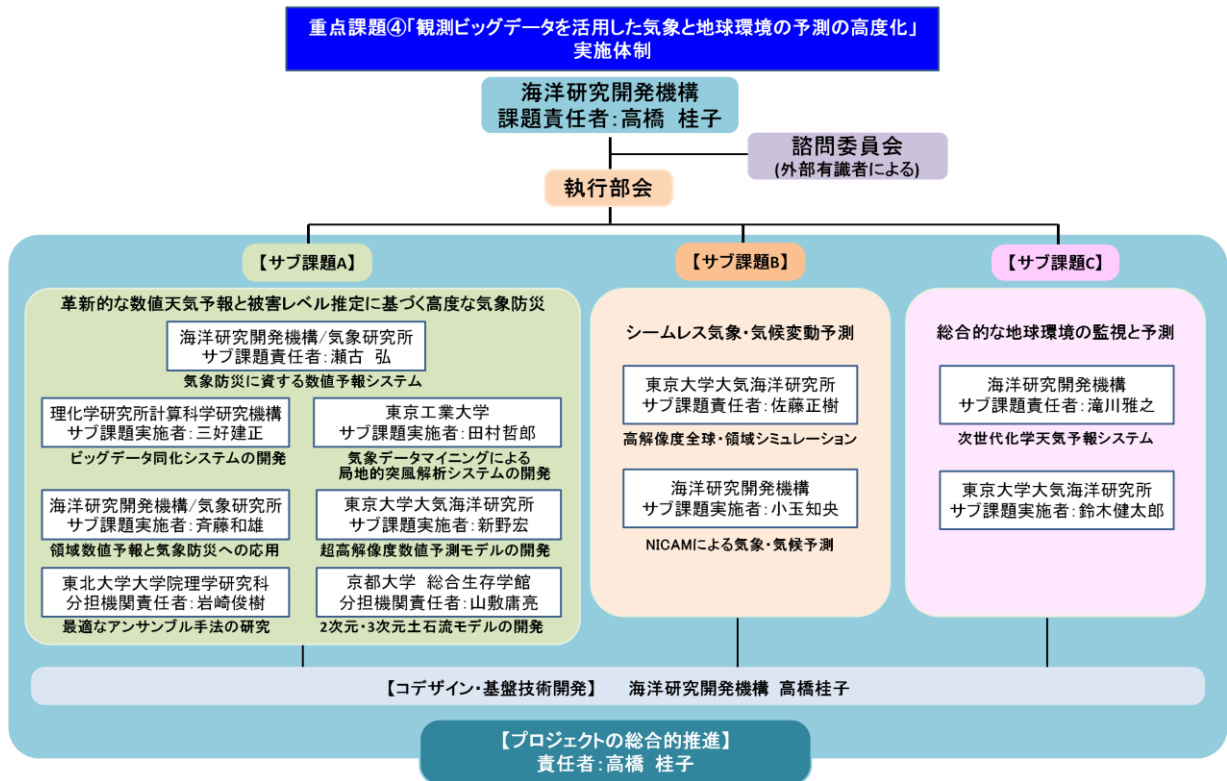


研究体制は開発と実用化のグループに大別。

- ・ 開発は分担機関が協力機関と推進。実用化は研究代表機関が協力機関と推進。
- ・ 開発と実用化の連携は研究代表機関が担当。

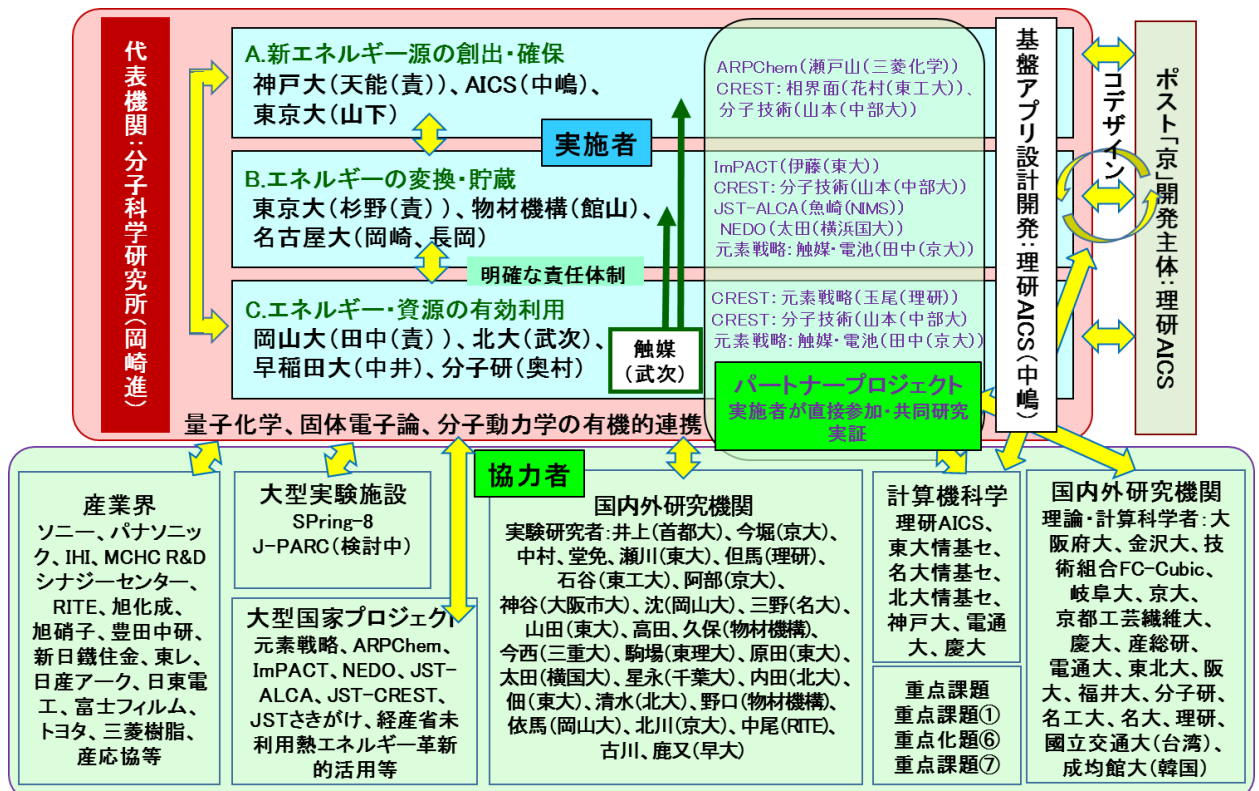
● 重点課題 4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

代表機関：海洋研究開発機構（課題責任者：高橋 桂子・センター長）



● 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

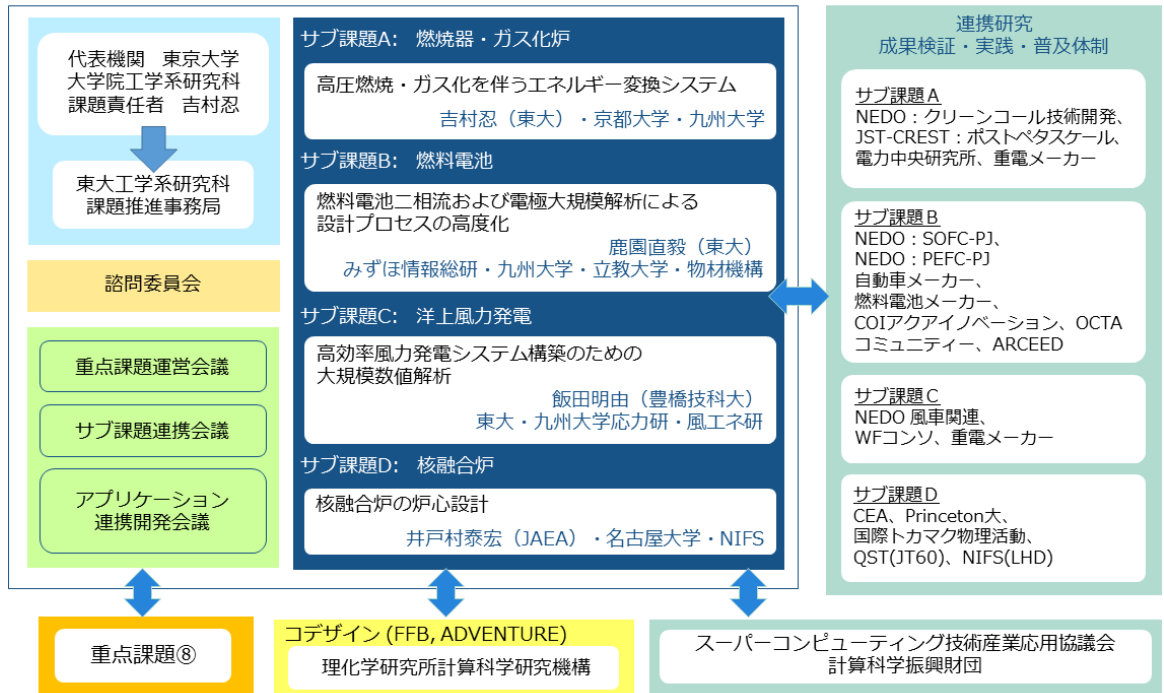
代表機関：自然科学研究機構（課題責任者：岡崎 進・教授）





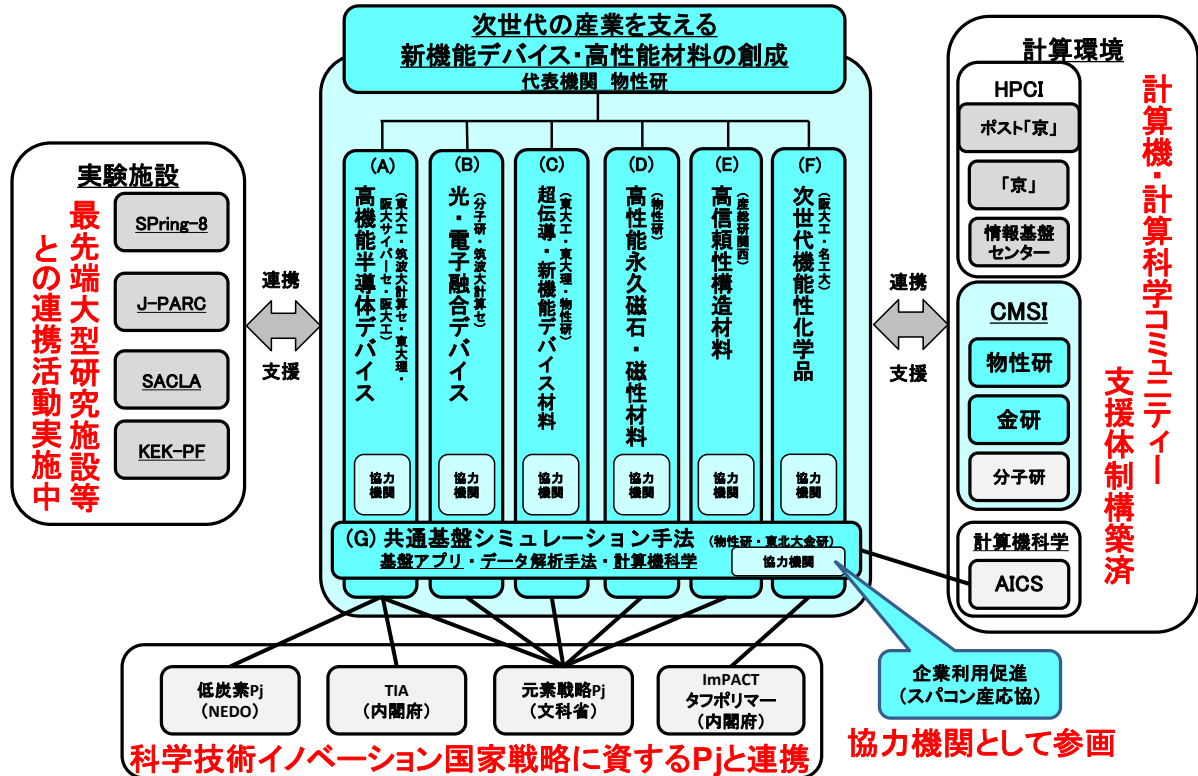
● 重点課題 6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

代表機関：東京大学（課題責任者：吉村 忍・教授）



● 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

代表機関：東京大学（課題責任者：常行 真司・教授）



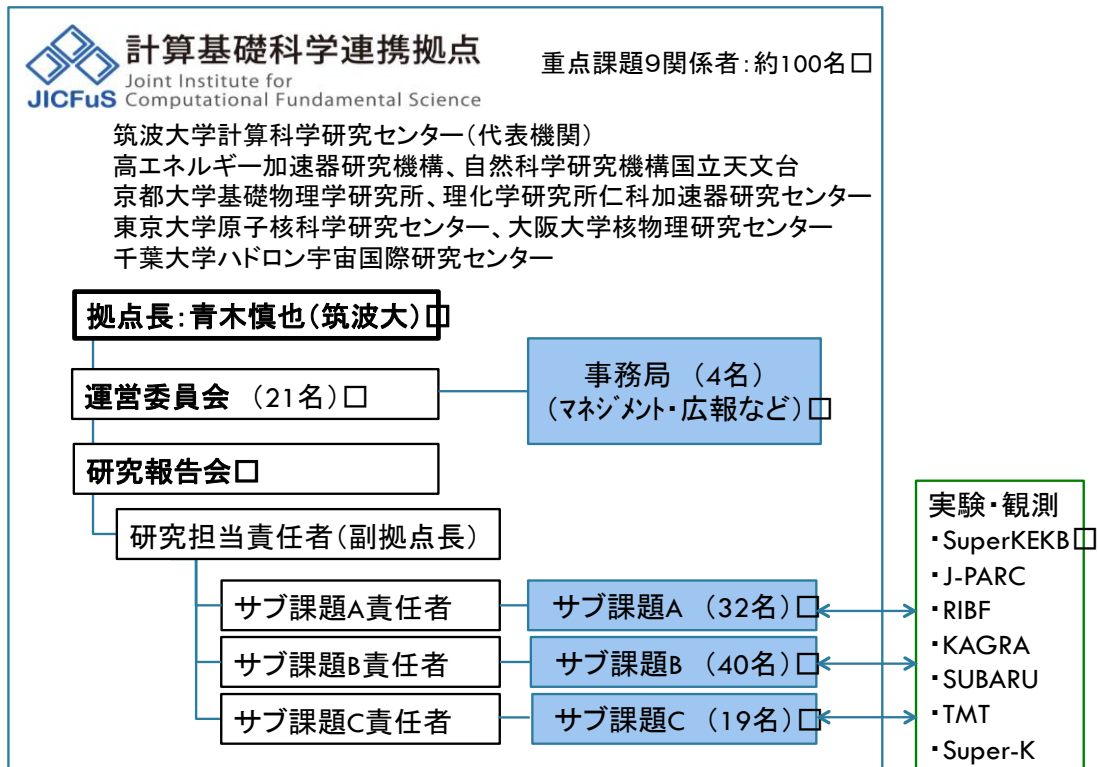
● 重点課題 8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

代表機関：東京大学（課題責任者：加藤 千幸・教授）



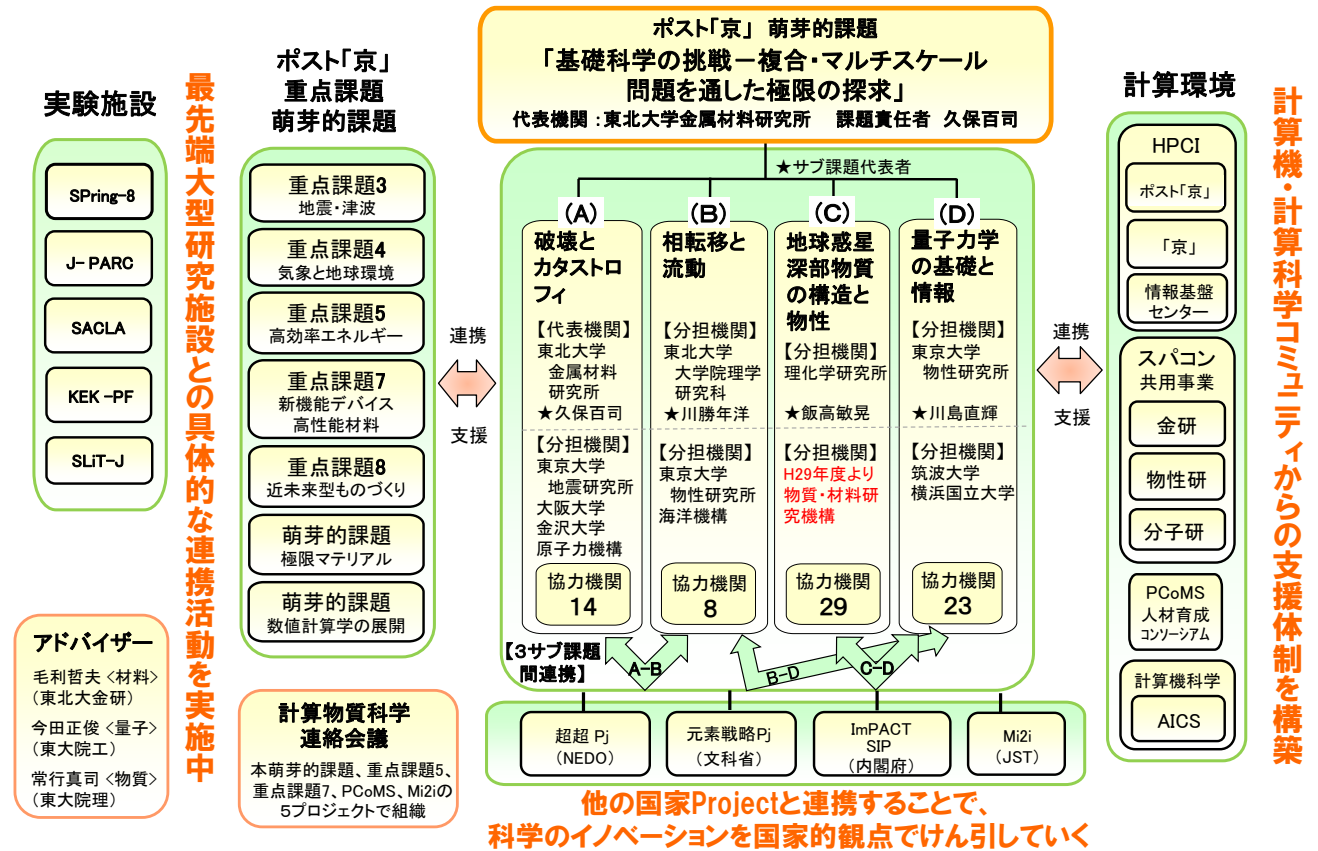
● 重点課題 9 宇宙の基本法則と進化の解明

代表機関：筑波大学（課題責任者：青木 慎也・客員教授）



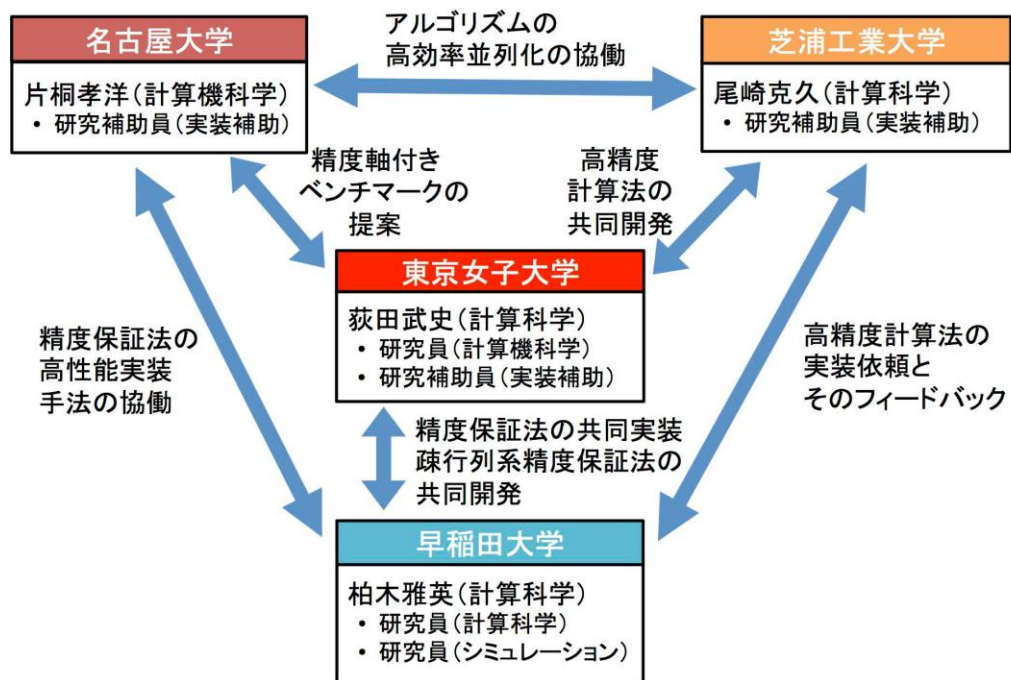
- 萌芽的課題 基礎科学の挑戦- 複合・マルチスケール問題を通した極限の探求

代表機関：東北大学金属材料研究所(研究代表者：久保百司・教授)



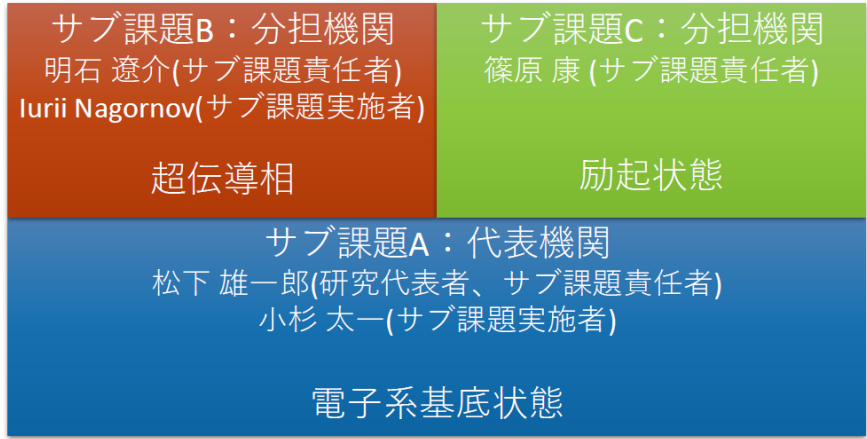
- 萌芽的課題 極限の探求に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成

代表機関：東京女子大学現代教養学部(研究代表者：萩田武史・准教授)



- 萌芽的課題 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

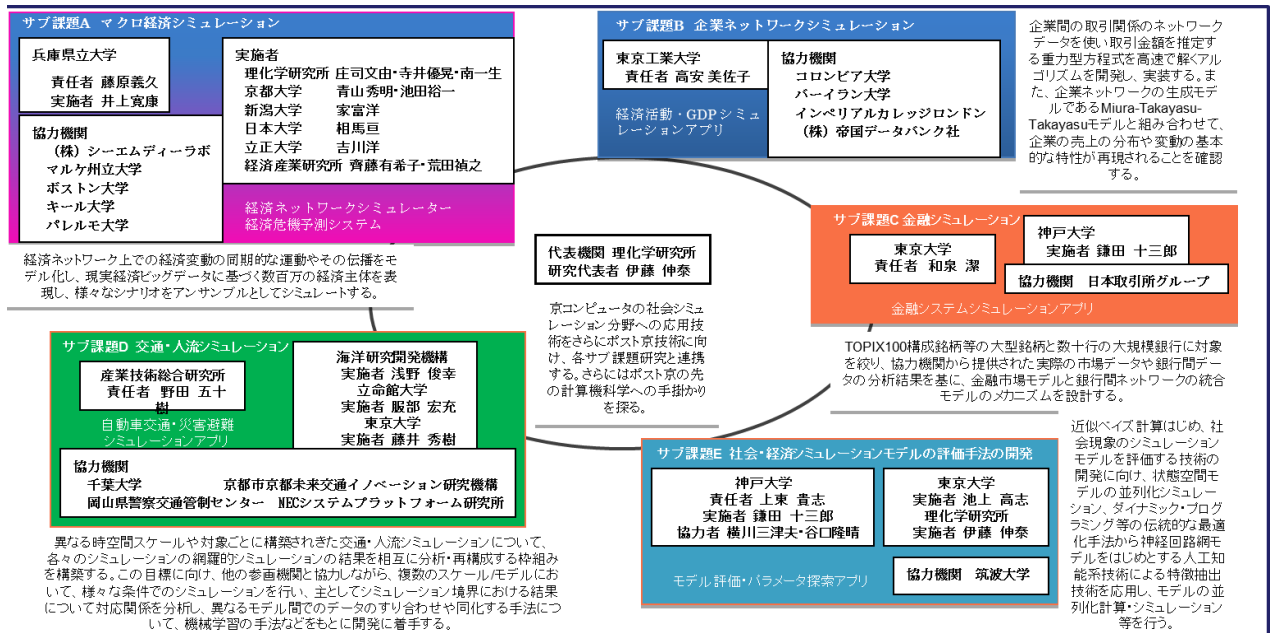
代表機関：東京大学大学院工学系研究科(研究代表者：松下雄一郎・助教)



協力機関					
東京大学	九州工業大学	理化学研究所	筑波大学	The Skolkovo Institute of Science and Technology	大阪大学
池町拓也 押山淳 高田康民 吉本芳英	石川顕一 佐藤健 常行真司	中村和磨	飯高敏晃 吉澤加奈子	重田育照	Artem Oganov  石河孝洋 越智正之 清水克哉

- 萌芽的課題 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

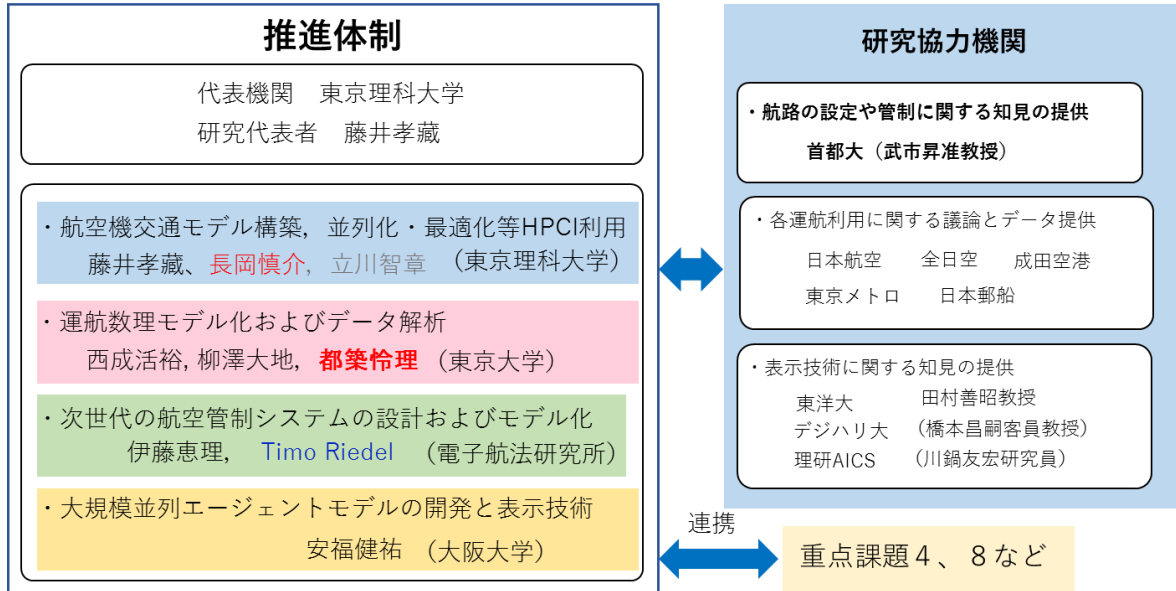
代表機関：理化学研究所計算科学研究機構(研究代表者：伊藤伸泰・チームリーダー)



- 萌芽的課題 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

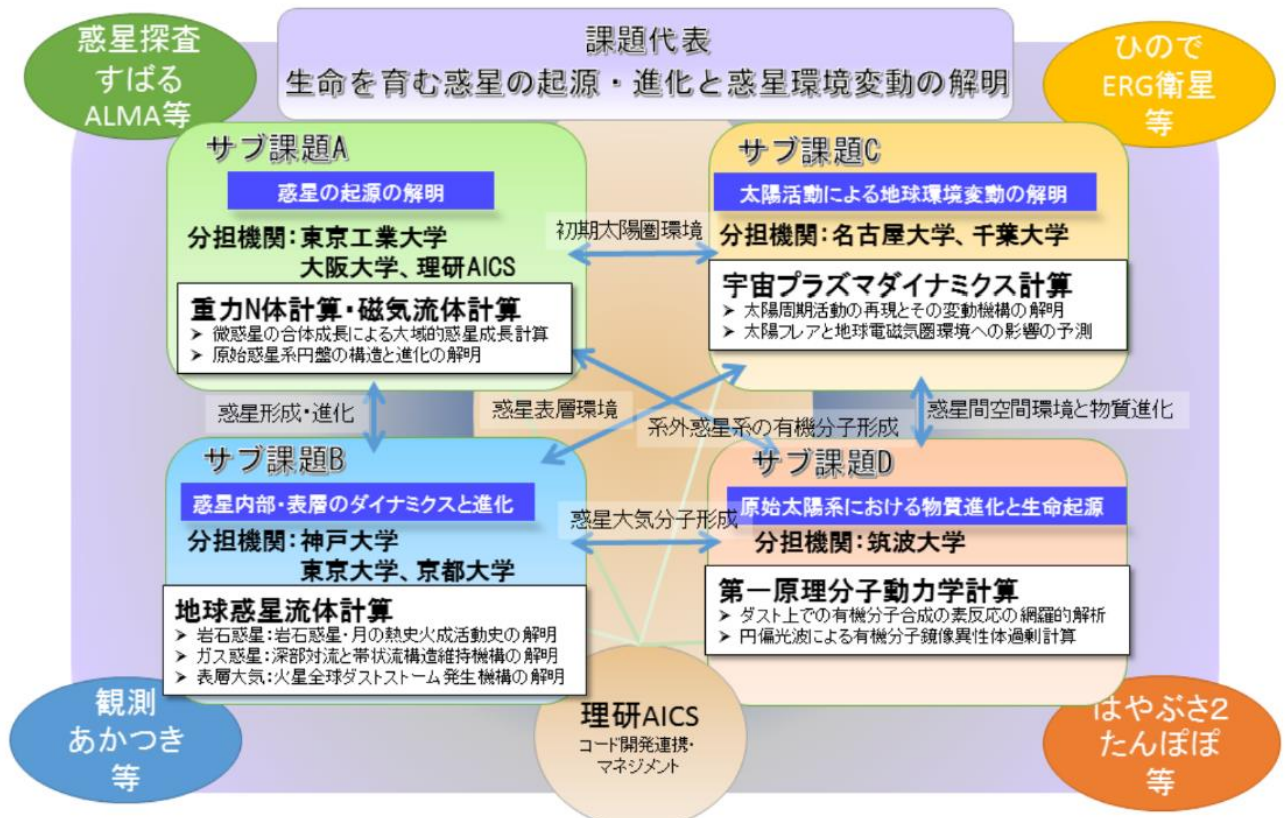
代表機関：東京理科大学工学部(研究代表者：藤井孝藏・教授)

### 研究体制 (H29.8時点)



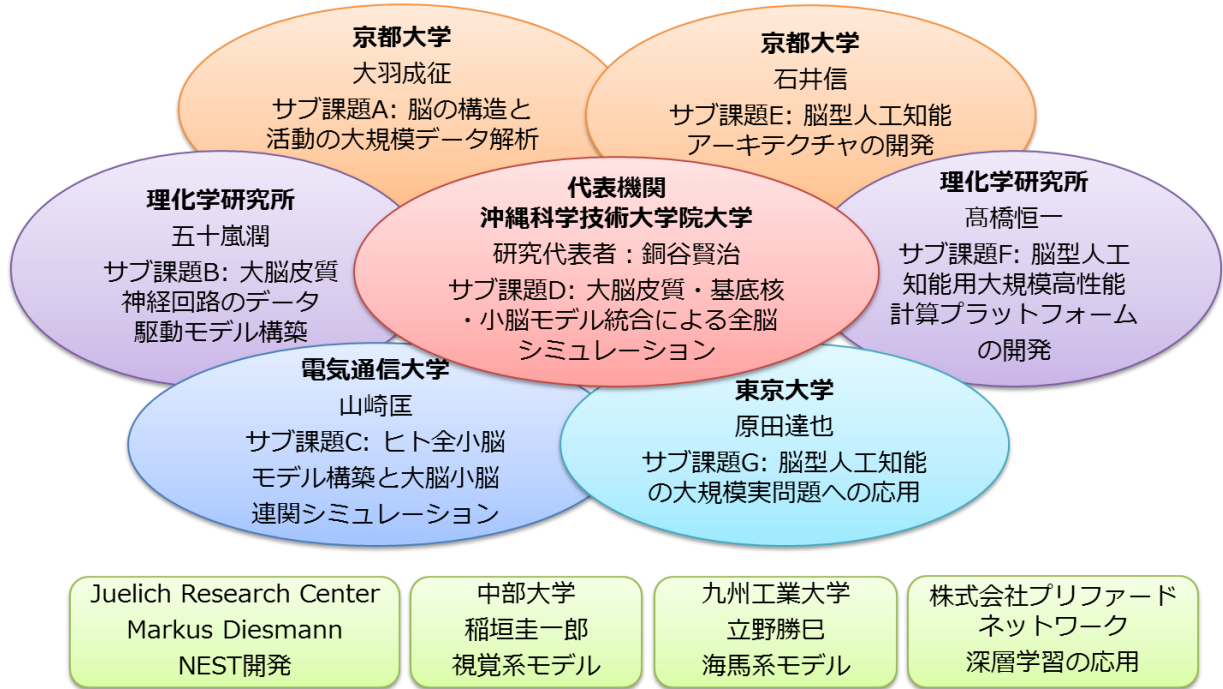
- 萌芽的課題 太陽系外惑星 (第二の地球) の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明

代表機関：神戸大学大学院理学研究科(研究代表者：牧野淳一郎・教授)



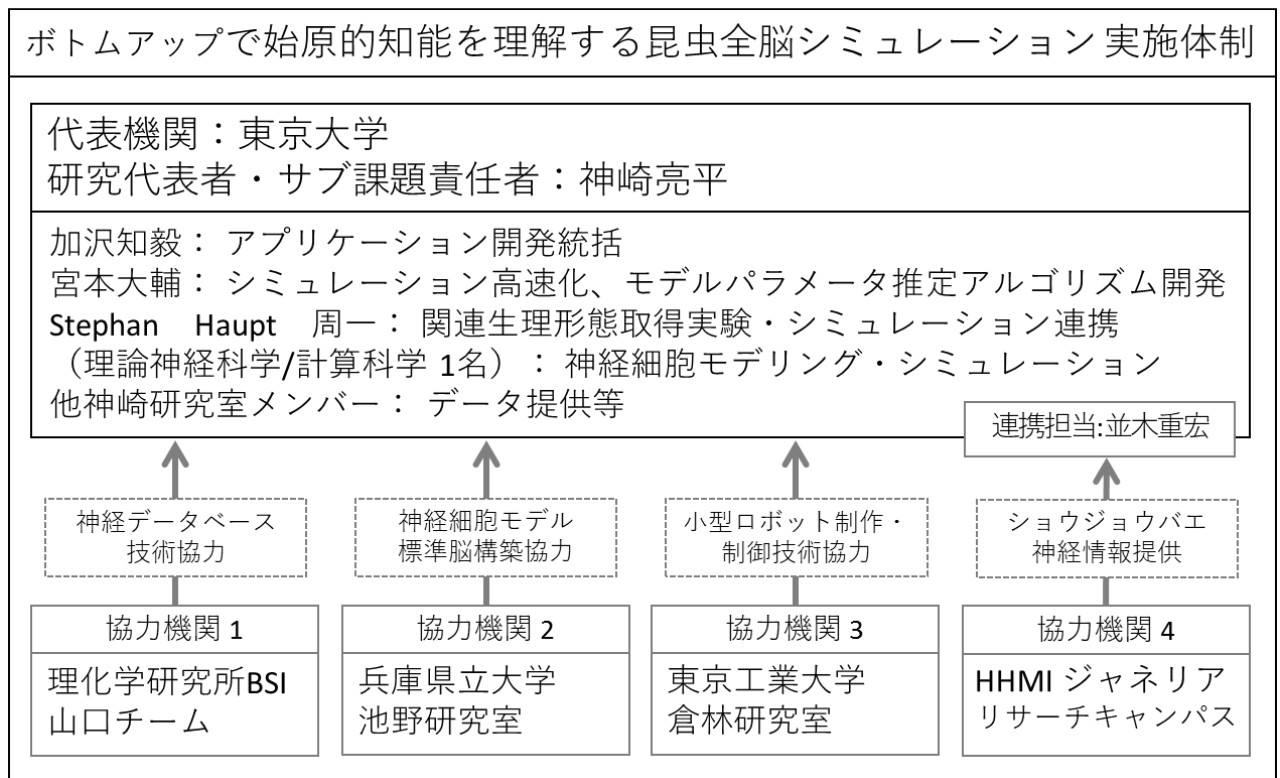
- 萌芽的課題 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ

代表機関：沖縄科学技術大学院大学神経計算ユニット(研究代表者：銅谷賢治・教授)



- 萌芽的課題 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

代表機関：東京大学先端科学技術研究センター(研究代表者：神崎亮平・所長)



## 中間評価票（案）

（平成29年12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

本事業の事前評価は、平成25年8月に「エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクト（仮称）」の一部として実施され、「国として着実に推進することが適当」とされたところである。

当該プロジェクトは、ポスト「京」システム開発及びポスト「京」アプリケーション開発から構成されているものである。このうちポスト「京」アプリケーション開発について、平成29年度に中間評価を実施したものの。

一方、ポスト「京」システム開発については12か月から最大24か月のスケジュール延伸が公表されたため、中間評価についても平成30年度に実施予定である。

### 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）：**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となる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：**

① 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：

①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。
  - 本事業の実施機関においては、文部科学省が開催する委員会での外部有識者による提言・助言に基づき、中間目標、最終目標及び実施計画を策定している。また、実施機関内に設置された委員会等において、それらの進捗管理と達成状況の確認・評価が行われている（(2) <効率性>の欄において詳述）。
  - これにより、実施機関が取り組む合計 60 のサブ課題の進捗については、このうち 20 課題が大幅に達成、39 課題が着実に達成、1 課題がおおむね達成とされ、未達成であるサブ課題はなしとの自己評価がなされている。
  - その結果、本事業では、
    - ・ポスト「京」の特長を生かした超並列・大規模シミュレーション手法の開発の着実な進展
    - ・ Science、Nature 等への論文発表をはじめとする科学的成果の創出  
(論文発表数…H27:205 編、H28:476 編、H29 第 1 四半期:121 編、累計:802 編)  
(学会発表数…H27:891 件、H28:2、200 件、H29 第 1 四半期:324 件、累計:3、415 件)
    - ・ 計算科学技術の更なる発展に向けた課題である、マルチスケールシミュレーション数値計算の精度保証や全脳シミュレーションといった萌芽的かつチャレンジングな分野における進展
    - ・ 異なる研究分野間での人材交流による融合分野創出に向けた取組の進展等、当初の想定以上の成果が得られつつある。
  - また、それらの成果が産学官で構成されるコンソーシアム等においても利活用される等、本事業の枠組みを超えた取組も精力的になされている。
    - ・ AI 創薬コンソーシアム（製薬企業、IT 企業等 80 団体）
    - ・ KBDD コンソーシアム(※)（製薬企業、IT 企業等 24 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 20 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）
    - ・ 「京」の重点化促進枠が内閣府（防災担当）の長周期地震動による被害予測に活用された好事例等を踏まえた、気象庁と文部科学省との省庁間連携の開始及び気象研究所と国立研究開発法人海洋研究開発機構との研究機関間連携の深化
- ※ “K” Supercomputer-Based Drug Discovery project by biogrid pharma consortium の略



- この他、ポスト「京」によりできる限り早期の成果創出を図るべく、システムとアプリケーションとの協調的な開発（Co-design）が、システムの開発主体である理化学研究所と、各アプリケーション開発実施機関との間とで進められており、システムとアプリケーションの最適化の方針を同時に得た等の成果が創出されるとともに、その成果に基づくチューニングマニュアルの整備とポスト「京」ユーザへの公開により、ポスト「京」ユーザの使い勝手の良さの向上が図られる予定である。なお、Co-designについては、ポスト「京」システムの間接評価において評価がなされる予定である。

## （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。

- 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。
- 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、多大なコストがかかるか、若しくは実空間での再現が不可能な現象がほとんどである。
- 本事業は、ポスト「京」を用いた大規模シミュレーションによって、これらの現象の再現を世界にさきがけて可能とするのみならず、将来的に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が見込まれる。以上のことから、国や社会のニーズへの適合性は極めて高い。
- また、事前評価後に策定された第5期科学技術基本計画（平成28年1月閣議決定）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、本事業の必要性は更に高まっていると言える。

※ ポスト「京」によって世界にさきがけた実現が期待される成果例

○ 創薬・医療分野

- ・候補物質の探索のみならず副作用の原因も分析する薬剤設計技術
- ・個人の医療計測データを用いたシミュレーション手法の確立とそれに基づく個別化・予防医療

○ 防災・気象分野

- ・都市全体の一次・二次被害のシミュレーションにより、地震・津波災害の影響を統合的に予測するシステムの開発
- ・観測ビッグデータを用いた高解像度・高速での気象予測に基づく、台風からゲリラ豪雨・竜巻等まで異なるスケールでの気象災害をシームレスに予測する技術

○ エネルギー分野

- ・天然光合成系の原理の解明及び当該原理に基づき人工光合成によりプラスチック原料等の基幹化学品を製造する技術
- ・海洋風況に大きく左右される洋上ウィンドファームの発電性能予測及びブレードに作用する応力評価を定量的に行い、洋上ウィンドファームの設計指針を得るための解析技術

<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。

- 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。
- 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ついて、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。
- また、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。

- さらに、近年の計算科学技術を含む情報科学技術の進展を踏まえ、
  - ・ マルチスケールシミュレーション
  - ・ 大規模な計算結果の精度を保證する手法の開発
  - ・ コンピュータ上での脳・神経回路モデル構築と人工知能への応用といった、シミュレーション自体の質の向上や融合領域の開拓を図る萌芽的課題についても、世界を先導する成果の創出が期待される。
- 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「Society5.0」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。本事業においても、社会・経済シミュレーションや脳型人工知能アーキテクチャ等の研究が進められており、この観点からも、本事業の有効性は更に高まっていると言える。

※ 世界を先導する成果の一例

- 材料科学分野
  - ・ 基底状態のみならず、量子効果を考慮し光反応のような励起状態も取扱い可能としたデバイスシミュレーション（Science 誌に掲載）
  - ・ ナノデバイスをコンピュータ上で設計・解析し、特性を把握する等、マテリアルズ・インフォマティクス等を活用した新機能デバイスの先行開発
  - ・ リチウム／水系の安全・安価な新しいリチウムイオン電池の実用化、新規の非白金燃料電池の能力向上等（Nature 姉妹誌に掲載）
- ものづくり分野
  - ・ 車のコンセプトから構造・機能・性能設計に至る主要な設計フェーズのシミュレーションを統合的に実施することにより生産性を引き上げる、新しいものづくりシステムの開発
  - ・ 数十億～数百億の格子点で接触問題等の大規模解析を可能とする多目的最適化設計プラットフォームの開発
- 基礎科学分野
  - ・ ビッグバン直後の超音速ガス流がブラックホールの種を生み出すことを解明
  - ・ 2つの中性子星が合体する際に多量の物質が放出され、重い元素が合成されることを解明
- 萌芽的課題に関連する分野
  - ・ 化学反応を取り込んだ破壊現象シミュレーションや、ミクروسケールの物理を取り込んだ混相流シミュレーション手法の開発
  - ・ 脳データの解析とモデリング、全脳の神経回路シミュレーション、階層的確率モデルによる効率良い学習が可能な脳型人工知能の開発
  - ・ 経済現象や交通現象に関わる複数のサブシステムの相互作用のモデル化とそれに基づく社会経済現象上の課題を予測し制御する技術

- ・実社会での複合輸送システムを対象とした実シミュレーションによる全体最適化とそれに基づく運航・運用方式の基盤となる堅牢（けんろう）性も含めた最適な交通輸送システム

## <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、各課題について実施機関がそれぞれ公募選定された。
- これら重点課題及び萌芽的課題について、ポスト「京」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、「諮問委員会」（外部有識者により構成。重点課題のみ設置）や「運営委員会」、「課題責任者会合」により進捗管理がなされており、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、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への貢献が期待される。

※ 外部有識者委員会からの提言・助言等に対する実施機関における対応例

- ・サブ課題の目標を産業界の要望等を踏まえた形に修正
- ・研究をフォーカスするために体制の見直しを行い、複数のサブ課題を統合。
- ・複数サブ課題を集めた基盤グループを設置し、当該グループ内で技術の共通化を試行
- ・アウトリーチを考慮し、民間のアプリケーションの製作者との共同開発に着手
- ・異分野間でのポスドク交流を実施

### (3) 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（Co-design 対象であるターゲットアプリケーションの開発を含む）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、「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」とともに、SDGsの達成や「Society5.0」の実現をはじめとする社会的要求の高まりを意識した高い独創性と優位性を持つ科学的成果の創出が期待されるため。

### (4) その他

- ・高い独創性と優位性を持つ科学的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わかりやすく行うよう努めること。
- ・Co-designにより蓄積したノウハウをCo-design対象外のアプリケーション開発にも展開すべく、実施機関においてポスト「京」システムの開発主体と引き続きより一層の連携を図ること。