

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） について

平成30年01月30日

研究振興局参事官（情報担当）
計算科学技術推進室

- ◆ 本事業の位置付け
- ◆ 経緯と推進体制
- ◆ 評価結果（案）のポイント

ポスト「京」の開発

平成30年度予算額(案)	: 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



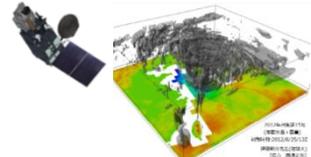
個別化医療

医療ビッグデータ解析で、個人のがん・心疾患予防と治療支援を実現



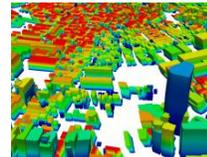
気象・気候

気象ビッグデータ解析により、局地的豪雨を的確に予測



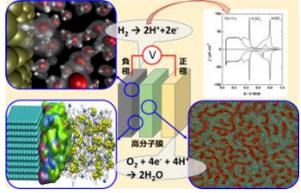
地震・防災

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



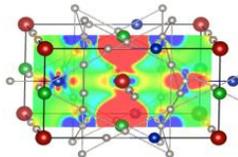
燃料電池

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



宇宙

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



宇宙でいつどのように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
 - ★ユーザーの利便・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。



本事業の位置付け

ポスト「京」の開発

【政策目標】 科学技術イノベーションの基盤的な力の強化

【施策目標】 研究開発活動を支える研究基盤の戦略的強化

【達成目標】 社会的・科学的課題の解決に貢献する世界最高水準のスーパーコンピュータであるポスト「京」を開発し、2021年～2022年を目標に運用開始する。



ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発

【目的】 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。

【事業概要】

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(重点課題(9課題)、萌芽的課題(4テーマ)。以下「課題」という。)の解決に資するアプリケーション開発及び研究開発を、調査研究・準備研究フェーズ(平成26年度～平成27年度)、本格実施フェーズ(平成28年度～平成31年度)、成果創出フェーズ(平成32年度～)の三つのフェーズで推進する。

また、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。

平成24年度-平成25年度

- 文部科学省の「今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」で基本的方針を検討

平成26年度

- 文部科学省の「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」を計5回開催
- 社会的・国家的見地から高い意義があり、世界を先導する成果の創出が期待できる重点課題(9課題)、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな萌芽的課題(4テーマ)を決定
- 公募を経て、9つの重点課題実施機関を決定

平成27年度

- 重点課題事業を開始

平成28年度

- 公募を経て、8つの萌芽的課題実施機関を決定、萌芽的課題事業を開始

平成29年度

- 中間評価を実施

(補足) 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

○趣旨

スーパーコンピュータ「京」の次を担うポスト「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を設置する。

○検討スケジュール

- 第1回 (平成26年4月4日)
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 (平成26年5月30日)
ポスト「京」の社会的・科学的課題の考え方
アプリケーションの研究開発体制について
- 第3回 (平成26年6月19日)
ポスト「京」の計算資源配分の考え方
ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題
- 第4回 (平成26年7月24日)
ポスト「京」の社会的・科学的課題の取りまとめ案
- 第5回
報告書取りまとめ

○検討委員会メンバー

安西 祐一郎 (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 (三菱総合研究所理事長)

城山 英明 (東京大学大学院法学政治学研究科教授
政策ビジョン研究センター長)

住 明正 (国立環境研究所理事長)

関口 和一 (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 (田辺三菱製薬代表取締役社長)

○ 土居 範久 (慶應義塾大学名誉教授)

土井 美和子 (東芝研究開発センター首席技監)

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 (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)

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(重点課題)

<重点課題 (9 課題) >

- ①社会的・国家的見地から高い意義がある、
- ②世界を先導する成果の創出が期待できる、
- ③ポスト「京」の戦略的活用が期待できる課題を「重点課題」として選定。

カテゴリ	重点課題	実施機関 (平成28年1月末時点)
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、さらに安全な創薬を実現する。	代表機関： <u>理化学研究所</u> (課題責任者：奥野 恭史・客員 主管研究員) 分担機関：京都大学、東京大学、横浜市立大学、名古屋大学、産業技 術総合研究所 共同研究参画企業：24社
	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、脳神経など)により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。	代表機関： <u>東京大学</u> (課題責任者：宮野 悟・教授) 分担機関：京都大学、大阪大学、株式会社UT-Heart研究所、自治医 科大学 共同研究参画企業：5社
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。	代表機関： <u>東京大学</u> (課題責任者：堀 宗朗・教授) 分担機関：海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学 共同研究参画企業：1社
	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。	代表機関： <u>海洋研究開発機構</u> (課題責任者：高橋 桂 子・センター長) 分担機関：理化学研究所、東京大学、東京工業大学 共同研究参画企業：7社

<重点課題（9課題）>（つづき）

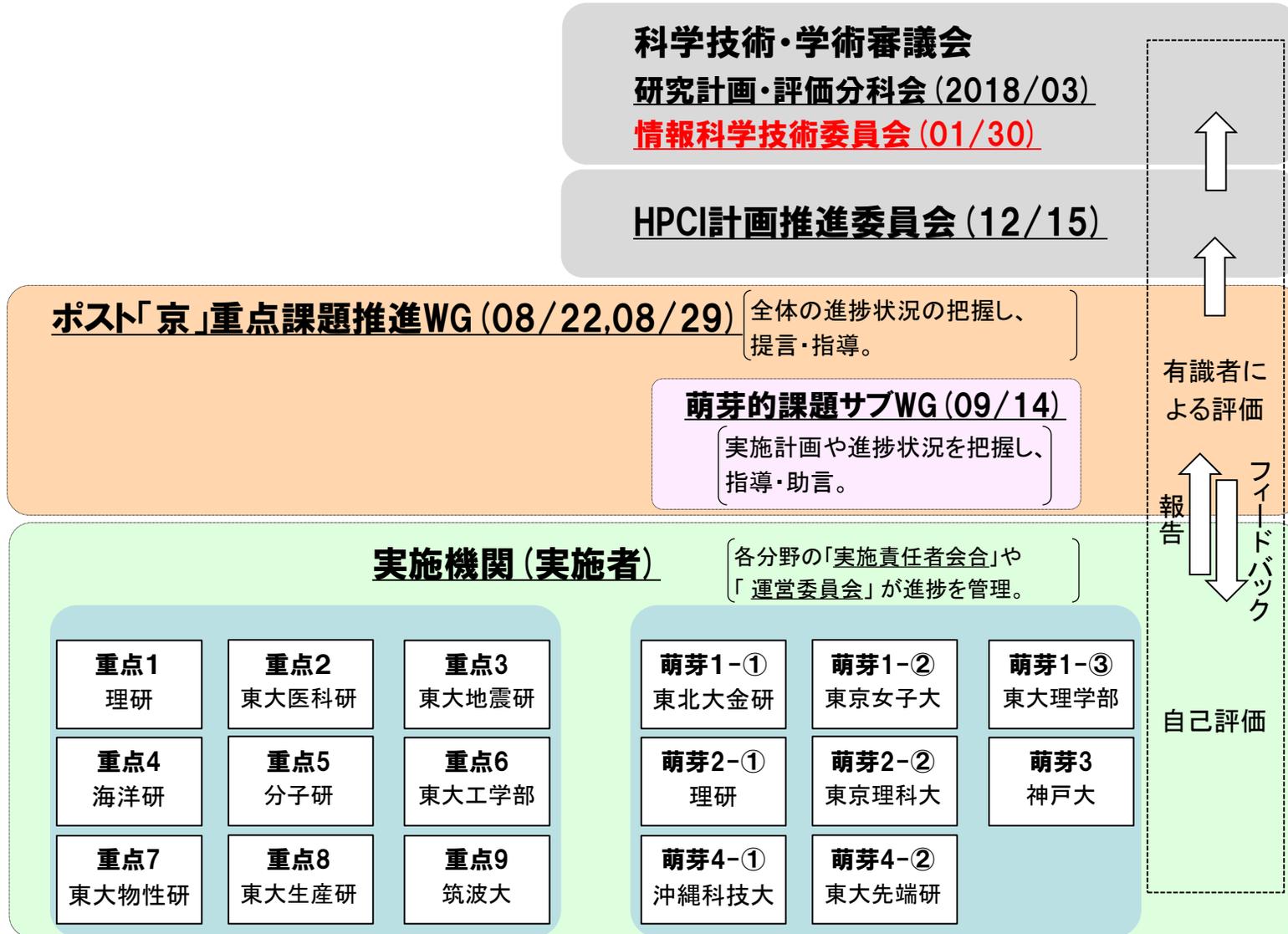
カテゴリ	重点課題	実施機関（平成28年1月末時点）
エネルギー問題	<p>⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発</p> <p>複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。</p>	<p>代表機関：<u>自然科学研究機構</u>（課題責任者：<u>岡崎 進・教授</u>）</p> <p>分担機関：神戸大学、理化学研究所、東京大学、物質・材料研究機構、名古屋大学、岡山大学、北海道大学、早稲田大学</p> <p>共同研究参画企業：17社</p>
	<p>⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化</p> <p>石炭ガス化炉、燃料電池、洋上風力発電、核融合炉を取り上げ、中核の複雑物理現象を第一原理的超精密解析により詳細に解明・予測し、超高効率・低環境負荷なエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学</u>（課題責任者：<u>吉村 忍・教授</u>）</p> <p>分担機関：豊橋技術科学大学、京都大学、九州大学、名古屋大学、立教学院立教大学、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構、物質・材料研究機構、自然科学研究機構核融合科学研究所、みずほ情報総研株式会社、株式会社風力エネルギー研究所</p> <p>共同研究参画企業：11社</p>
産業競争力の強化	<p>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</p> <p>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。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学</u>（課題責任者：<u>常行 真司・教授</u>）</p> <p>分担機関：筑波大学、大阪大学、自然科学研究機構分子科学研究所、名古屋工業大学、東北大学、産業技術総合研究所、東京理科大学</p> <p>共同研究参画企業：6社</p>
	<p>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</p> <p>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、およ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。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学</u>（課題責任者：<u>加藤 千幸・教授</u>）</p> <p>分担機関：神戸大学、東北大学、山梨大学、九州大学、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所、東京理科大学</p> <p>共同研究参画企業：30社</p>
基礎科学の発展	<p>⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明</p> <p>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、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。</p>	<p>代表機関：<u>筑波大学</u>（課題責任者：<u>青木 慎也・客員教授</u>）</p> <p>分担機関：高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学、理化学研究所、大阪大学、自然科学研究機構国立天文台、千葉大学、東邦大学、広島大学</p> <p>共同研究参画企業：1社</p>

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(萌芽的課題)

- 4つの萌芽的課題(テーマ)を設定し、公募により、8つの課題を選定(課題の統合含む)。
- 平成28～29年度は調査研究・準備研究を実施し、中間評価の後、平成30～31年度の本格実施フェーズに移行する予定。

<p>① 基礎科学のフロンティア ー 極限への挑戦</p>	<p>(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 (課題責任者:久保百司 東北大学金属材料研究所) 〔分担機関〕 東京大学地震研究所、大阪大学大学院基礎工学研究科、金沢大学理工研究域、原子力研究開発機構、東北大学大学院理学研究科、東京大学物性研究所、海洋研究開発機構、理化学研究所、物質・材料研究機構、筑波大学計算科学研究センター、横浜国立大学大学院工学研究院</p> <hr/> <p>(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 (課題責任者:荻田武史 東京女子大学現代教養学部)</p> <hr/> <p>(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 (課題責任者:松下雄一郎 東京大学大学院工学系研究科) 〔分担機関〕東京大学大学院工学系研究科、東京大学大学院理学系研究科、東京大学光量子科学研究センター</p>
<p>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</p>	<p>(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 (課題責任者:伊藤伸泰 理化学研究所計算科学研究機構) 〔分担機関〕 兵庫県立大学大学院、理化学研究所、東京工業大学科学技術創成研究院、東京大学大学院工学系研究科、産業技術総合研究所人工知能研究センター、神戸大学経済経営研究所</p> <hr/> <p>(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 (課題責任者:藤井孝藏 東京理科大学工学部)</p>
<p>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</p>	<p>(1) 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 (課題責任者:牧野 淳一郎 神戸大学大学院理学研究科) 〔分担機関〕 神戸大学、東京工業大学、大阪大学、理化学研究所、東京大学、京都大学、名古屋大学、千葉大学、筑波大学</p>
<p>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</p>	<p>(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 (課題責任者:銅谷賢治 沖縄科学技術大学院大学神経計算ユニット) 〔分担機関〕 京都大学情報学研究科、京都大学情報学研究科、理化学研究所生命システム研究センター、東京大学情報理工学研究科、沖縄科学技術大学院大学学園、京都大学、理化学研究所、電気通信大学</p> <hr/> <p>(2) ボトムアップで原始的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション (課題責任者:神崎亮平 東京大学先端科学技術研究センター)</p>

推進体制・中間評価の経緯



(補足) 推進体制 (ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ)

全体的な観点から本プロジェクトの運営を定常的かつ強力にフォローアップするために、HPCI計画推進委員会のもとに、「ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ」を開催する。

ポスト「京」重点課題推進ワーキンググループ

○対応事項

- (1) 実施機関より提出された実施計画等の改善提言・指導
- (2) 実施機関の事業進捗状況の把握, 提言・指導
- (3) その他本プロジェクトの推進に関すること

○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名簿 (平成29年7月1日現在)

- | | |
|--------|---|
| 相原 博昭 | 東京大学大学院理学系研究科副学長・教授 |
| 安達 泰治 | 京都大学ウイルス・再生医科学研究所教授 |
| 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 |
| ◎小柳 義夫 | 神戸大学計算科学教育センター特命教授 |
| 河合 理文 | 株式会社IHI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 |
| ○住 明正 | 東京大学サステイナビリティ学連携研究機構特任教授 |
| 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 |

◎: 主査, ○: 主査代理

11名(50音順, 敬称略)

(補足) 推進体制(萌芽的課題サブワーキンググループ)

実施機関の選定, 実施内容に対する改善提言, 指導, 評価等をするため, 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のもとに, 「萌芽的課題サブワーキンググループ」を開催する。

萌芽的課題サブワーキンググループ

○対応事項

- (1) 文部科学省による公募の際の実施機関の選定
- (2) 実施機関の事業進捗状況の把握、提言、指導
- (3) 実施機関による調査研究・準備研究の成果の評価
- (4) その他本プロジェクトにおける萌芽的課題の推進に関すること

○萌芽的課題サブワーキンググループ委員名簿

(平成29年7月1日現在)

- 合原 一幸 東京大学生産技術研究所教授
○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
小柳 義夫 神戸大学計算科学教育センター特命教授
杉原 正顯 青山学院大学理工学部教授
高田 章 旭硝子株式会社先端技術研究所特任研究員
田近 英一 東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻
常田 佐久 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所長
中島 秀之 東京大学 大学院情報理工学系研究科 特任教授
中野 純司 統計数理研究所モデリング研究系教授

◎: 主査, ○: 主査代理

10名(50音順, 敬称略)

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。
- 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。
- 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、着実に達成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
 - ・ 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。

今後に向けて

- 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、成果等の分かりやすい発信を継続していくこと。
- 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、実施機関においてシステムの開発主体と引き続きより一層の連携をすること。