

# フラッグシップ2020プロジェクト (ポスト「京」の開発)について

平成26年9月12日

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

# ポスト「京」の開発（フラッグシップ2020プロジェクト）

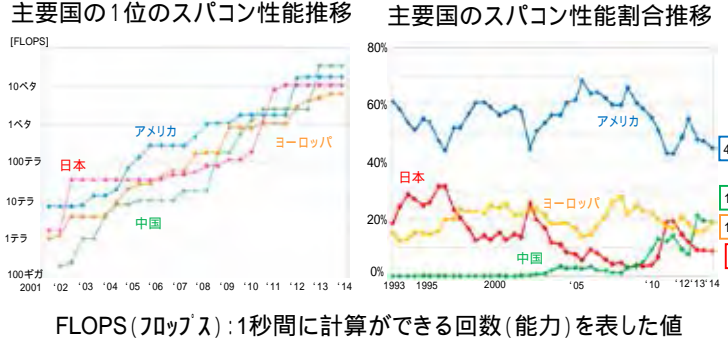
平成27年度要求・要望額 : 4,724百万円  
 うち優先課題推進枠要望額 : 1,868百万円  
 （平成26年度予算額 : 1,206百万円）

## 背景

最先端のスーパーコンピュータは、科学技術の振興、産業競争力の強化、国民生活の安全・安心の確保等に不可欠な「国家基幹技術」であり、各国がその開発競争にしのぎを削っている。

- : <現状>世界の計算性能の約半分 <今後> 2017年以降、数百ペタFLOPSのスパコンを複数整備
- : <現状>日本を超える総計算能力 <今後> 2017年以降、百ペタFLOPSのスパコンを整備
- : <現状>最新ランキングで1位獲得 <今後> 2015年以降、百ペタFLOPSのスパコンを複数整備

我が国としても、諸外国に対して競争力のあるフラッグシップシステム（世界トップレベルの性能を有し、幅広い分野をカバーするシステム）の開発を進める必要がある。

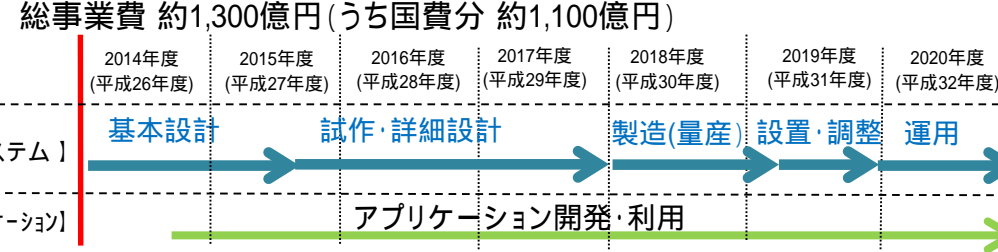


## 概要 ~ 利用者サイドに立った開発の推進 ~

システムとアプリケーションを協調的に開発 (Co-design) し、我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを構築。  
2020年までに世界トップレベルで幅広い課題に対応できる汎用のシステムを実現し、エクサスケールを目指す。

成果をアウトカムにつなげるため、例えば、医療分野では臨床の関係者を巻き込むなど、分野や組織の枠を超えた共創体制を構築。  
 規格化を図ることにより利用者の利便性が高まるシステムソフトウェアは米国と協力しながら開発するなど、国際協力を戦略的に活用。

理化学研究所が主体となってシステムを開発。  
 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は、公募で決定する代表機関を中心にして、世界を先導する成果の創出が期待されるアプリケーションの開発に着手。



## ポスト「京」の成果として想定される事例

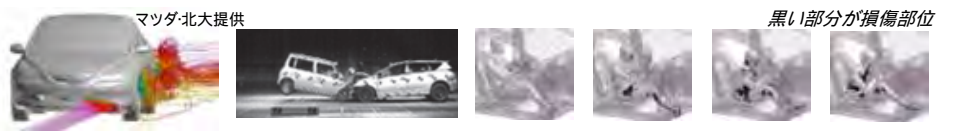
<防災・減災対策>  
 地震・津波による複合災害について、震源や地下構造の不確定さを考慮した予測システムを構築し、自治体等の防災・減災計画に活用。  
 都市全体を対象とした避難や道路・鉄道交通網のシミュレーションを含む統合的予測により、国土強靱化に貢献。

多数の地震シナリオを用いたシミュレーションにおいて、「京」で数年かかる計算を数十日に短縮。



<ものづくり(自動車開発)>  
 車のコンセプトから構造・機能・性能設計にいたる主要な設計フェーズを統合的に扱い、開発期間短縮・コスト低減・品質向上に貢献。  
 膨大な実験・観測データを活用し、実際の走行環境に基づく性能評価シミュレーションを実現することで、車両の安全性・快適性を飛躍的に向上。

試作実験を再現する高精度シミュレーションにおいて、「京」で数日かかる計算を数時間に短縮。



蛇行走行時の高速走行安定性解析

3b-5. Toshio Kobayashi(plenary talk), Makoto Tsubokura, Shinichi Takayama: Aerodynamics and Crash Simulations in the Automobile Industry. The 11th Asian Symposium on Visualization (2011.6.5-9, Niigata,japan)(2011)

# 昨年度の主な御指摘事項

## ターゲットアプリケーションおよび開発目標等の設定について

総花的な目標設定とならないよう、重点的な応用分野を早急に明確にし、ターゲットアプリケーションを設定した上で開発を進めるべきである。

ターゲットアプリケーションの設定を踏まえ、適切に性能を評価できる実効性の高いベンチマークを設定するとともに、現段階で想定しているアプリケーション実効性能に関する目標の具体化を図る必要がある。

## システム構成および工程表の具体化について

現段階では、汎用部と演算加速部からなるシステムの構成が検討されているが、今後ターゲットとするアプリケーションの絞り込みを行った上で、Co-design（協調設計）の考え方に基づき、システム構成についての検討を進めることが求められる。

こうしたターゲットアプリケーションや開発目標、システム構成の明確化を踏まえ、目標達成に向けて、現在検討がなされている工程表の更なる具体化を図るとともに、その実現可能性や、目標達成に向けた有効性の観点からの検証が必要である。

# これまでの検討経緯

## 将来のHPCIシステムのあり方の調査研究（～平成26年3月）

国家存立の基礎である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を発展させ、我が国の国際競争力の強化、社会の安全・安心の確保等をはかるため、ハードウェアの技術動向調査、システム設計研究のほか、我が国の社会的・科学的課題の抽出、システムを評価するアプリの抽出等を行い、将来のHPCIシステムの開発に必要な技術的知見を獲得する。

### アプリチーム（理化学研究所 他）

- ・システム評価手法の開発
- ・10年後を見据えた社会的・科学的課題の抽出
- ・社会的・科学的課題の解決に向けたサイエンスロードマップの策定
- ・評価用アプリの抽出

### システム設計研究チーム（東京大・筑波大・東北大 他）

- ・各提案システムで解決を目指す社会的・科学的課題及びそのためのターゲットアプリの設定
  - ・システム概念設計 ・研究開発課題の抽出 ・コスト見積り
  - ・要素技術に係わる試験研究 ・評価用アプリを用いたシステム評価
- 演算加速部について、「有効活用できる課題に限界がある」および「開発・製造経費が多額である」との技術評価。

## 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（平成26年4月～8月）

ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題（重点課題）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。

創薬、防災・環境、エネルギー、ものづくり、宇宙など9つの重点課題を選定。

## HPCI計画推進委員会 次期フラッグシップシステムに係るシステム検討WG（平成26年6月～）

要求されるシステム性能やシステム構成の詳細を検討。  
基本的なシステム構成及び性能について中間的に評価。

社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを実現する、との基本方針は妥当  
重点課題が幅広い分野にわたることから、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のシステムを、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、との方向性は現時点で妥当

## 目次

- 1 . 国として取り組む意義・必要性
- 2 . ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題
- 3 . ポスト「京」のシステム
- 4 . 開発体制とスケジュール
- 5 . プロジェクトの開発目標

1 . 国として取り組む意義・必要性

2 . ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

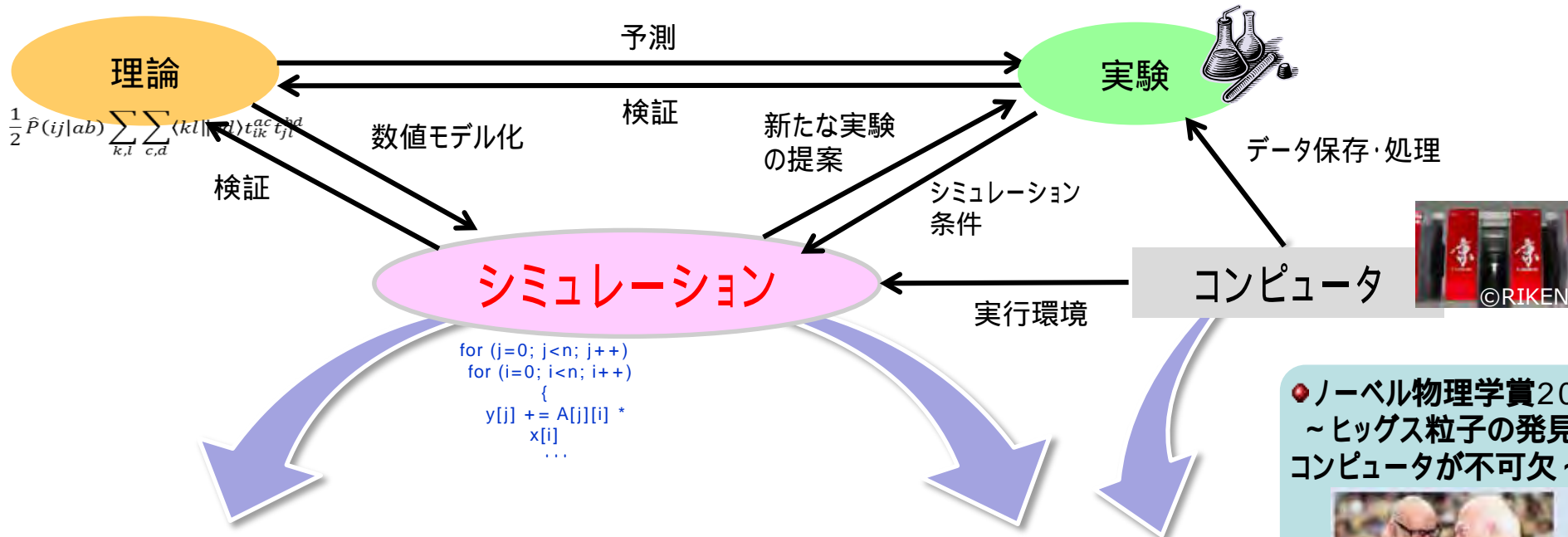
3 . ポスト「京」のシステム

4 . 開発体制とスケジュール

5 . プロジェクトの開発目標

# シミュレーションによる画期的な成果

- ・シミュレーションは理論、実験と並ぶ**第3の科学的手法**である。
- ・コンピュータとそれを利用したシミュレーションにより、画期的な成果が生み出されている。



## 創薬とコンピュータ

- がん治療薬であるメシル酸イマチニブ（商品名：Gleevec）の設計開発にコンピュータが活用

イマチニブは慢性骨髄性白血病治療薬として2001年5月にアメリカで認可され、日本では2001年11月に輸入承認を受け、臨床現場で使用されている。メシル酸イマチニブの開発者らは2012年日本国際賞を受賞。



出典：TIME誌  
(2001年5月28日発行)

## 2013年のノーベル賞とコンピュータ

- ノーベル化学賞2013  
～計算科学分野で受賞～

タンパク質のような巨大な分子の化学反応をコンピュータを使って効率よく計算する手法を開発した三氏が受賞。この手法により、生体内で起こる様々な現象をコンピュータ上で再現することに道を開いた。



- ノーベル物理学賞2013  
～ヒッグス粒子の発見にはコンピュータが不可欠～



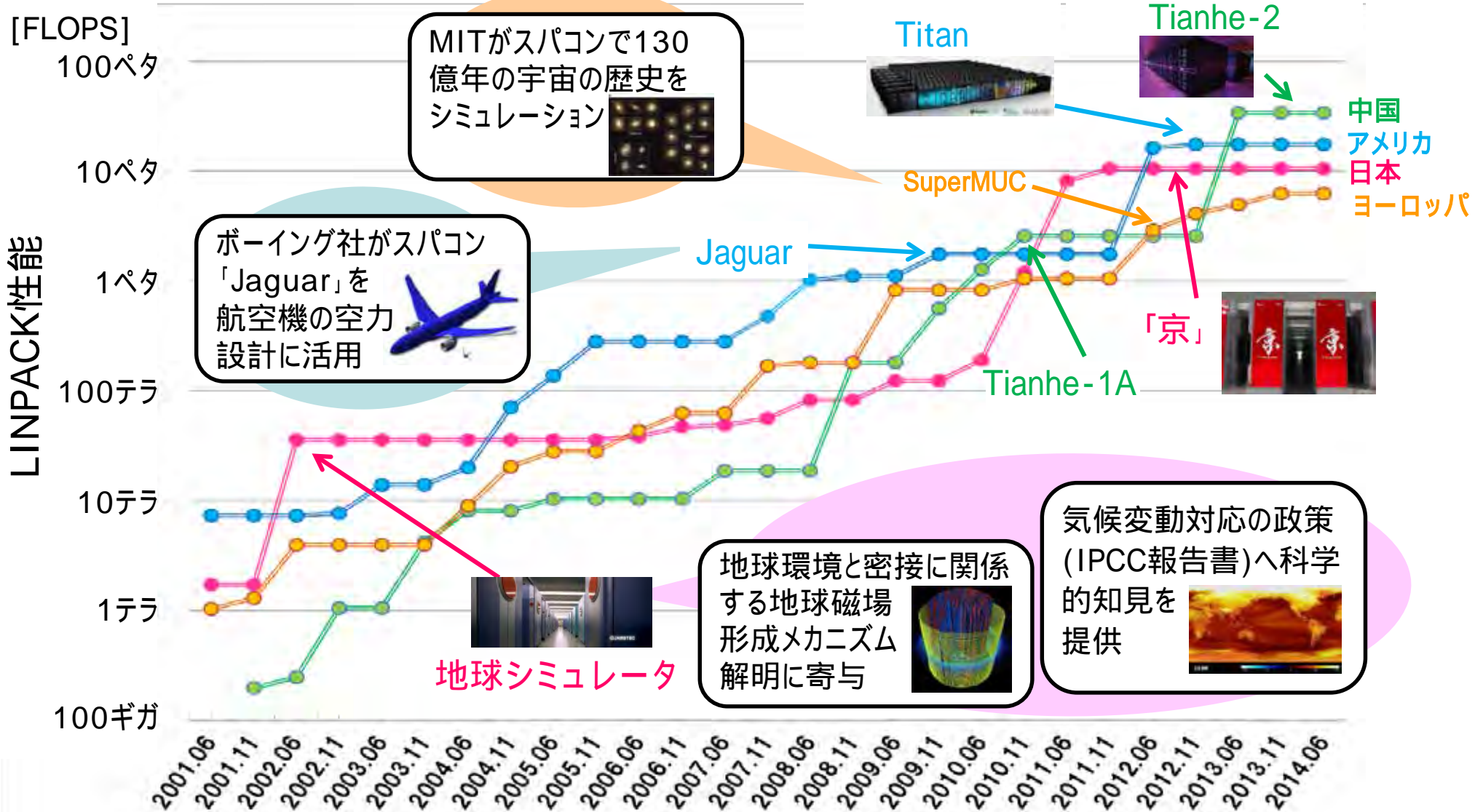
Peter Higgs (right) and François Englert (left)

物質に質量を与える「ヒッグス粒子」の存在を50年前に予言した二氏が受賞。その存在を確かめた実験は、解析に膨大な計算量を要求するものであり、コンピュータの助けが不可欠。

# スパコンによる画期的な成果

世界最先端のスパコンにより、これまでも画期的な成果が創出されてきた。

## < 世界第1位のスパコン性能推移 >





# スパコン開発の国際動向

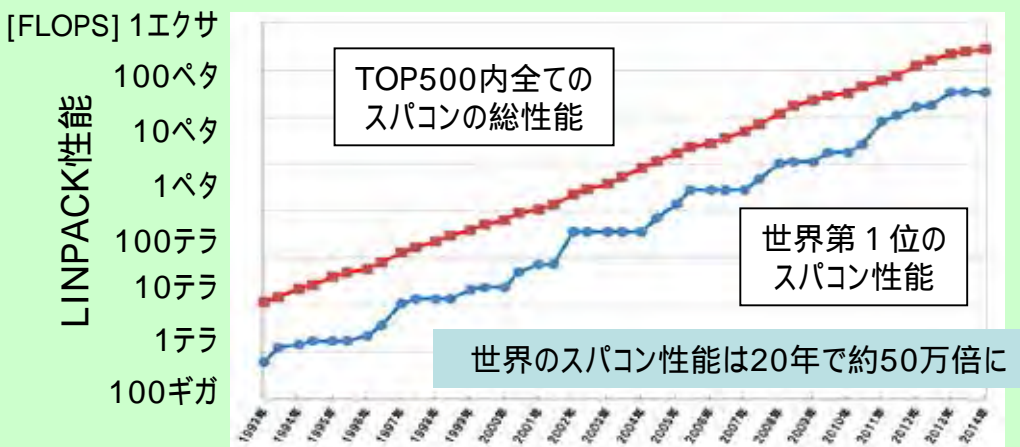
最先端のスパコン開発には各国がしのぎを削っている。

## <Top500ランキングの推移 (2014年)>

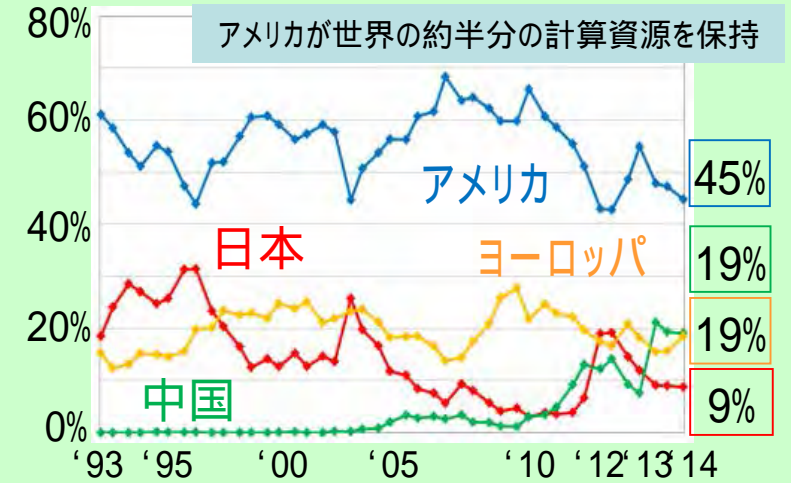
順位	2000年		2001年		2002年		2003年		2004年		2005年		2006年		2007年		2008年		2009年		2010年		2011年		2012年		2013年		2014年		
	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月	11月	6月		
1	SNL	LLNL	LLNL	LLNL	JAMSTEC	JAMSTEC	JAMSTEC	JAMSTEC	JAMSTEC	IBM/DOE	LLNL	LLNL	LLNL	LLNL	LLNL	LLNL	LANL	LANL	LANL	ORNL	ORNL	NUDT(天河1号)	理研(京)	理研(京)	LLNL(Sequoia)	ORNL(Titan)	NUDT(天河2号)	NUDT(天河2号)	NUDT(天河2号)		
2	LLNL	SNL	NERSC	Pittsburgh Supercomputing Center	LLNL	LANL	LANL	LANL	LLNL	NAS	IBM	IBM	IBM	IBM	NNSA/Sandia	Oak Ridge National Laboratory	Forschungszentrum Juelich	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	LANL	NCSA	ORNL	NUDT(天河1号)	NUDT(天河1号)	理研(京)	LLNL(Sequoia)	ORNL(Titan)	ORNL(Titan)	ORNL(Titan)		
3	LANL	LLNL	SNL	NERSC	Pittsburgh Supercomputing Commission	LANL	LLNL	Virginia Tech	LANL	JAMSTEC	NAS	LLNL	LLNL	LLNL	Thomas J. Watson	Thomas J. Watson	Thomas J. Watson	NNSA/Sandia	Oak Ridge National Laboratory	Univ. of Tennessee	LANL	NCSA	ORNL	ORNL	理研(京)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)		
4	Naval Oceanographic	LLNL	LLNL	SNL	NERSC	NERSC	NCSA	IBM Rochester	IBM Rochester	JAMSTEC	NAS	NAS	NAS	NAS	Commissariat a l'Energie Atomique	Commissariat a l'Energie Atomique	Commissariat a l'Energie Atomique	Commissariat a l'Energie Atomique	Univ. of Tennessee	Univ. of Tennessee	LANL	NCSA	ORNL	ORNL	理研(京)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)		
5	Rechenzentrum	LLNL	LLNL	SNL	NERSC	NERSC	NCSA	IBM Rochester	IBM Rochester	JAMSTEC	NAS	NAS	NAS	NAS	Commissariat a l'Energie Atomique	Commissariat a l'Energie Atomique	Commissariat a l'Energie Atomique	Commissariat a l'Energie Atomique	Univ. of Tennessee	Univ. of Tennessee	LANL	NCSA	ORNL	ORNL	理研(京)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)	LLNL(Sequoia)		
6	KEK	NOAA R&D	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	ECMWF	LLNL	LLNL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	
7	Government Research	NOAA R&D	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	ECMWF	LLNL	LLNL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	LANL	
8	US Army HPC Research	UCSD	阪大	LANL	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge National Laboratory
9	日本	米国	欧州	中国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	
10	日本	米国	欧州	中国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	米国	

TOP500 : スパコンの演算性能を評価する国際的なランキング

### <主要国のスパコン性能推移>



### <主要国のスパコン性能割合推移>



# 国として取り組む意義・必要性

## ～ 最先端スパコンは世界との勝負を制する国家基幹技術 ～

少子高齢化やエネルギー・環境問題、産業の国際競争激化、巨大な自然災害等の国家的な課題に世界各国が直面する中で、**最先端スパコンによる課題解決が国家の競争力を左右する時代**。（ポスト「京」の経済波及効果は総額 **5.7兆円**（三菱総研報告書（H25.8）））

世界各国が最先端スパコンを継続的に開発する中、2020年～2022年頃を目指してエクサスケールスパコンを開発する**米国や中国に先んじて我が国が開発するため、着実に開発を進める必要がある**。

世界に先駆けて成果を創出するため、我が国としても、諸外国に対して競争力のあるフラッグシップシステム(我が国が直面する社会的・科学的課題を解決するため、世界トップレベルの高い計算性能を持ち、多くの分野のアプリケーションが高い実効性能で利用できるシステム)の開発を進める必要がある。

### 「京」の実績・成果

世界に先駆けてLINPACK性能<sup>1</sup>で10ペタフロップス<sup>2</sup>を達成。

➤ 2011年6月と11月の二期連続で世界スパコン性能ランキング「Top500」において1位を獲得。

「京」は、実用面で優れた性能を有しており、国際的にも高い評価。

➤ アプリケーションの実性能と計算科学の成果を示す「ゴードンベル賞」を2年連続受賞。

➤ 実用に近い総合的な性能を評価する「HPCチャレンジ賞」を3年連続受賞。

➤ ビックデータの解析性能を評価するランキング「Graph500」で1位を獲得。（平成26年6月）

「京」の開発により、これまで不可能だったシミュレーションで国際的にも評価されるインパクトある研究成果が創出。

（例）超新星爆発のシミュレーション、詳細な積乱雲の気象シミュレーション等

1 スーパーコンピュータの性能を測るための世界的な指標

2 10ペタフロップス：一秒間に1京回（=10,000兆回 =  $10^{16}$ 回）の計算ができる性能



# 自主開発の意義・必要性

ポスト「京」は、我が国将来のためにオールジャパン体制で自主開発に挑戦すべき“国家基幹技術”

～ オールジャパン体制の自主開発で世界に先駆けて成果を創出 ～

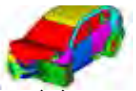
## 最高の成果を最速で創出

「京」で培った世界最高水準の技術・人材を用いた自主開発により、ハードの中身をブラックボックス化させず、ハードとアプリを一体的に開発（Co-design）することで、最高の成果を最速で創出できる。

海外からのマシン導入では最先端のCPUは得られず、他国に比べて成果創出は少なくとも3～4年遅れる。1分1秒を争う産業界や明日起こるかもしれない災害対策では、この遅れは致命的。（例えば、4年間で創薬分野では1つの薬で4兆円規模、自動分野では1車種で2.5兆円規模の売上げの機会損失を招くおそれ。）



副作用の少ない  
画期的な新薬開発



革新的なデザインの  
自動車設計

## 高い技術波及効果

最先端スパコンはIT技術の結晶（ ）であり、自主開発によりこれらの技術の波及効果（スピノフ）が得られるとともに、IT分野の海外展開に貢献できる。

（ ）高性能・省電力なCPU設計技術、ネットワーク技術、ソフトウェア技術 など



デジタル家電へのスピノフ

商用機の国内外展開



また、世界最先端IT国家創造宣言（平成26年6月閣議決定）に位置付けられた技術（ ）への波及効果も期待できる。（ ）超高速ネットワーク伝送技術、認識技術、データの加工・分析技術、ソフトウェアの開発技術 など

ビッグデータやクラウドなど、経済社会分野で切り札となる技術を使いこなせる人材を我が国企業に広めることに貢献できる。

## 技術立国ニッポンのDNAの継承

世界最高水準のCPU開発技術は、日本と米国のみが有する我が国の基幹技術。  
高い技術を持つ人材による成果の出せるスパコン開発は、日本のお家芸。



「京」は自主開発CPUを  
8万個以上使用

一度自主開発から手を引けば、蓄積した技術や人材は消滅。これにより、IT産業の競争力を徹底的に失うとともに、IT社会における危機管理能力や技術・経済動向への対応力が低下。技術立国ニッポンのDNAを失うと、取り戻すことは困難。

# スーパーコンピュータ「京」の成果例

計算性能が桁レベルで飛躍するスパコンにより、シミュレーションの全く新たな地平を拓く成果が輩出されてきている。

## ● 台風強度の予測精度の向上

研究代表者：気象庁気象研究所/海洋研究開発機構・斉藤和雄  
研究期間：平成23年～平成27年

概要：高解像度大気海洋結合モデルにより台風強度の予測精度が大き  
く向上することを「京」を用いた大規模実験により実証

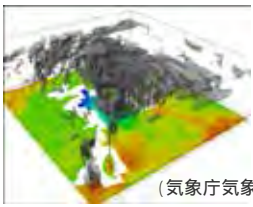
### 従来（「京」以前）

台風の強度を正確に再現するためには大気の状態と海洋の状態を両方同  
時に予測する**大気海洋結合システム**が望まれていたが、**多くの計算機資  
源が必要となる**ため、定量的な影響評価が困難

### 現在（平成26年度）

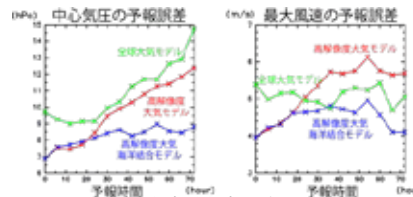
雲などの台風の内部構造を詳細に表現することが可能な気象庁モデルに、  
海洋内部の混合を考慮できる海洋モデルを結合した**高解像度大気海洋  
結合モデル**を開発。「京」を用いて、日本近傍を通過した**台風強度の  
2-3日予報の誤差が20-40%低減**することを実証。

平成27年度までに台風強度の数時間～1日予報に関して、予報誤差  
を低減させる基盤技術を構築し、「京」による**科学的成果を世界に発信**  
するとともに、気象庁など現業防災官庁の数値計算予測システムの将来的  
な高度化に貢献。



(気象庁気象研究所)

2012年台風第15号の通過に  
伴う海面水温の低下



(気象庁気象研究所)

台風の中心気圧と最大風速の予報誤差  
(従来モデルとの比較)

## ● 心臓や血管シミュレーションによる医療分野への貢献

研究代表者：東京大学・久田俊明  
研究期間：平成23年～平成27年

概要：「京」の活用による分子レベルの挙動を取り入れた心臓シミュレータ  
や血栓形成シミュレータの開発が進められ、病態解明や医療応用  
に貢献

### 従来（「京」以前）

細胞内の構造を精密に再現した**心臓モデルの1回収縮分の計算に  
2年近く掛かっていた**

### 現在（平成25年度）

同様の計算が**1日で再現可能**になり、心筋細胞内のたんぱく質の  
確率的運動から細胞の収縮、心拍動、血液駆出、冠循環までを一  
貫してシミュレートすることが出来るようになり、心臓疾患の原因を解明  
できるようになった。

最近では、京を使った心臓シミュレータと比べて簡素化したモデルを用いて、  
**患者ごとの心臓モデルを基にしたシミュレーション（仮想手術）によって  
手術をする前に最善の手術方法を探ることや、ペースメーカーの電極の  
最適な取り付け位置の算出**など、臨床への応用が期待されている。



HPCI戦略プログラム 分野1  
ISLiM, SCLS



HPCI戦略プログラム 分野1  
東京大学 久田・杉浦・鷲尾・岡田研究室  
協力 富士通株式会社

# 産業界における「京」の利用成果

最先端スパコンの開発を着実に進め、我が国の計算科学技術全体を進展させることで、将来的に計算性能当たりの価格が安くなり、高い計算性能を持つスパコンを企業が安価に利用できるようになる。

## 1. 自動車用次世代空力設計システムの研究開発

コンソーシアム（企業13社、研究機関5機関）による共同研究  
（参画企業（13社））  
トヨタ、日産、ホンダ技研、スズキ、マツダ、富士重工業、三菱自動車、三菱ふそう、日野自動車、デンソー、ブリヂストン、ダイハツ、横浜ゴム



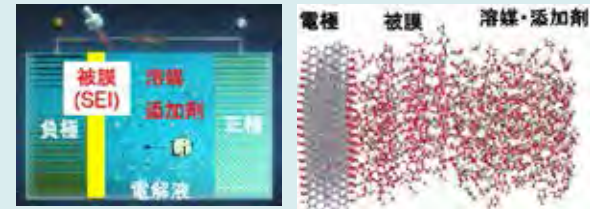
車の空気抵抗のシミュレーション

**従来の実験費用の大幅削減や精度の大幅向上**により  
自動車産業の競争力強化に大きく貢献

## 2. リチウムイオン電池の材料開発

リチウムイオン電池内部の電極付近で起こる化学反応過程を分子レベルで再現。

（参画企業）富士フイルム（株）



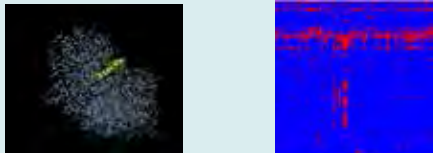
リチウムイオン電池の分子レベルのシミュレーション

**リチウムイオン電池の高性能化・高安全性化**につなげ、  
部材産業の発展と国際競争力強化に貢献

## 3. 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築

製薬企業11社、IT企業2社ほか参画し、タンパク質と化合物の結合予測を約190億規模で達成。

（参画企業（13社））  
アスピオファーマ、エーザイ、小野薬品工業、キッセイ薬品工業、参天製薬、塩野義製薬、大日本住友製薬、田辺三菱製薬、日本新薬、科研製薬、杏林製薬ほか



タンパク質と化合物の結合シミュレーション

**医薬品開発の成功確率向上と迅速化**により  
医薬品産業の競争力強化に大きく貢献

## 4. 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発

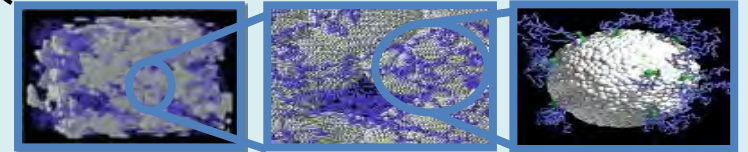
「京」により大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションを実現。

（参画企業）住友ゴム工業（株）

ゴムの性質が分かるレベル

分子・原子レベル

大 → 小



タイヤの分子・原子レベルのシミュレーション

**タイヤの大幅な高性能化・低燃費化・長寿命化**により  
化学産業の競争力強化に大きく貢献

# 企業におけるスパコンの利活用による事業展開について

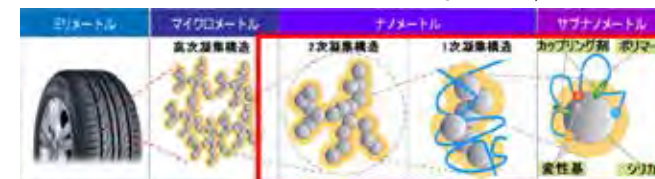
スパコンを活用した研究開発が、企業の事業展開を促進している。

富士通では、スパコンを活用したインシリコ創薬技術の開発や心臓シミュレータの開発などの事業を含む、医療/ヘルスケア事業における売上高について、2018年には2000億円とする目標としている。この他、同社では「京」や各種サーバ等の製造で培ったノウハウ、ツール、人材を用いた製造業向けの支援サービスにより、2016年度までに1,500億円の売上を目標としている。



タンパク質と化合物の結合シミュレーション

住友ゴム工業株式会社では、低燃費タイヤの開発の為に、地球シミュレータ等を用いた技術を確認し、2012年に同技術を活用した製品を販売している。また、「京」の活用により、2015年には更なる新技術「ADVANCED 4D NANO DESIGN」を確認し、2016年以降の新商品に採用するとしている。同社のタイヤ事業は2013年度6,811億円（実績）、2015年度7,800億円（目標）であり、低燃費タイヤの国内販売本数シェアの32%を占める。



三菱重工業では国産小型旅客機「三菱リージョナルジェット（MRJ）」の開発において、スパコンによる流体解析（CFD）技術を用いて、低燃費に貢献する高い空力特性を持つ機体を開発し、燃費性能を他社機種より2割向上させることに成功した。同クラスの機体の燃料コストは年間6億円前後ともいわれ、年間1億円以上のコスト削減が可能になると言える。エンジン、装備品等を含めた機体全体としては約7割が海外製部品であるが、日本独自の技術を生かした航空機として期待される。MRJは2017年の納入を目指して開発が進められており、2014年8月時点で既に国内外の航空会社7社から400機以上を受注している。MRJの定価は1機4,200万ドルとされていることから、総額168億ドル以上（オプション分を含む）の売上が見込まれる。



尾翼風試模型の定常圧力分布

（提供：三菱航空機株式会社）

1 . 国として取り組む意義・必要性

2 . **ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題**

3 . ポスト「京」のシステム

4 . 開発体制とスケジュール

5 . プロジェクトの開発目標

# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

## 昨年度の御指摘

総花的な目標設定とならないよう、重点的な応用分野を早急に明確にし、ターゲットアプリケーションを設定した上で開発を進めるべきである。



有識者会議において、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題を（重点課題）と、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題（萌芽的課題）を選定。

## 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。

### 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（東京大学公共政策大学院院長）

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（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）



# 重点課題（1/2）

## < 重点課題（9課題） >

- ・ 社会的・国家的見地から高い意義がある、世界を先導する成果の創出が期待できる、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。
- ・ 重点課題の中からターゲットアプリケーションを選定の上、コデザイン及び性能目標の明確化に活用する。公募による代表機関決定後、代表機関により実施計画を策定し、平成27年度からアプリケーション開発に着手する。

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	<b>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</b> 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。
	<b>個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学</b> 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。
防災・環境問題	<b>地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築</b> 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。
	<b>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</b> 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局部的豪雨や竜巻、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。

# 重点課題（2/2）

## < 重点課題（9課題） >（つづき）

カテゴリ	重点課題
エネルギー問題	<b>エネルギーの高效率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発</b> 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、高效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。
	<b>革新的クリーンエネルギーシステムの実用化</b> 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、超高效率・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	<b>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</b> 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。
	<b>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</b> 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。
基礎科学の発展	<b>宇宙の基本法則と進化の解明</b> 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。

# 萌芽的課題

## < 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として、今後、調査研究を通じて実現化を検討する。調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定する。

萌芽的課題	
将来性を考慮し、 今後、実現化を 検討する課題	<b>基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦</b> 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の出していない難問に、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。
	<b>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</b> 複雑且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、交通や経済など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。
	<b>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</b> 宇宙、地球・惑星、気象、分子科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、星間分子科学を探究する。
	<b>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</b> 革新技术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思考を実現する脳の大規模神経回路を再現し、人工知能への応用をはかる。

# 成果の早期創出及び最大化に向けた取組

## < 重点課題に関する今後の取組 >

- 各課題ごとに、アプリケーション開発の実施機関を公募し、平成27年度から課題解決に資するアプリケーション開発の準備研究を実施予定。

## < Co-designの実施 >

- 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必要。
- その実現に向け、ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関との間で、システムアーキテクチャ、システムソフトウェア等とアプリケーションを協調的に設計開発（Co-design）することで、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等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。

## < ターゲットアプリケーションの選定 >

- 戦略的かつ効率的にCo-designを進めるため、重点課題の中からCo-designのターゲットとするアプリケーション（ターゲットアプリケーション）を選定し、ターゲットアプリケーションの目標性能を設定する。
- 重点課題ごとにひとつのターゲットアプリケーションを選定。全ターゲットアプリケーション群は計算科学的手法を網羅することが必要。

萌芽的課題については、調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定が行われた後、改めてターゲットアプリケーションの選定について検討する。

# ターゲットアプリケーションの選定

## < ターゲットアプリケーションの選定基準 >

### 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

(補足) 各重点課題のアプリケーションはサブ課題に対応して複数から構成されると想定されるが、戦略的かつ効率的にCo-designを進めるため、重点課題ごとに要となるアプリケーションを一つずつ選定する。

### 2) アプリケーションの開発体制やライセンス形態が、Co-designができるものであること

(補足) 早期の成果最大化のため、Co-designに責任を持つポスト「京」開発主体とアプリケーション開発元が一体となって、システムとアプリケーションのCo-designに取り組み、Co-designにより得られたノウハウを展開できるようにする。

### 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、Co-designおよびチューニングのノウハウのドキュメント化ができること

(補足) 幅広い分野でのアプリケーションをカバーし、Co-designにより得られたノウハウを効率的に展開する。

ターゲットアプリケーションの選定は、Co-design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ものとする。

# ターゲットアプリケーション候補と今後の流れ

各重点課題において要となると想定される計算手法を有するアプリケーションから、暫定的にターゲットアプリケーション候補を選定。

重点課題	主な計算手法	Co-design観点 (重要なアーキテクチャパラメータ)	ターゲットアプリ 候補名称	グループ
	分子動力学法	局所および集団通信レイテンシ、 演算性能	GENESIS	グループ
	大容量データ解析	入出力	Genomon	グループ
	非構造・構造格子ステンシル複合の有限要素法	通信・メモリバンド幅	GAMERA	グループ
	構造格子ステンシル有限体積法 + 局所アンサンブル変換カルマンフィルター法	通信・メモリバンド幅、 入出力、SIMD幅	NICAM +LETKF	NICAMはグループ、 LETKFはグループ
	高精度分子軌道法 (疎 + 密行列計算)	演算性能/SIMD幅/集団通信レイテンシ	NTChem	グループ
	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅SIMD幅	FFB	グループ
	密度汎関数法 (密行列計算)	演算性能/集団通信レイテンシ	RSDFT	グループ
	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅、SIMD幅	Adventure	グループ
	構造格子経路積分モンテカルロ法	通信・メモリバンド幅、局所および集団通信レイテンシ	CCS-QCD	グループ

( )グループ .....ハードウェアの根幹に関わるため詳細に取り組むべきアプリケーション、グループ .....グループ 以外のアプリケーション

○ 今後、公募による重点課題の代表機関決定後、代表機関の意見や選定基準等も踏まえ、必要に応じて見直しを行い、ターゲットアプリケーションを決定する。

○ 重点課題決定後速やかに、各ターゲットアプリケーション候補の目標性能を設定。この際、問題規模等は、「計算科学ロードマップ」を参考にする。

- ・重点課題代表機関決定後ターゲットアプリケーションの見直しが行われた場合でも、先に進めているCo-design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へ反映できるよう留意してCo-designを進める。
- ・選定基準を遵守することにより、ターゲットアプリケーションの入れ替えがあったとしても、掲げた目標性能が大幅に下方修正されることがないようにする。