

ポスト「京」で取り組むビックデータ課題の例

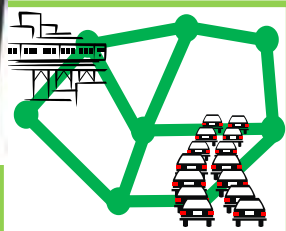
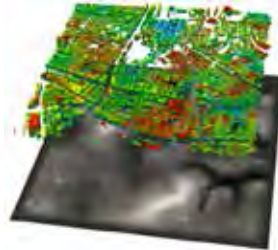
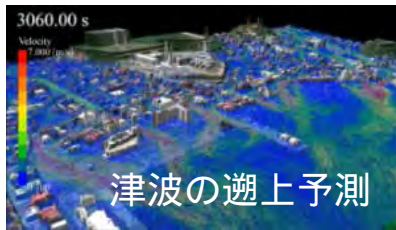
地震・津波対策

ビックデータ

観測データ 都市空間情報
(各種構造物の位置・サイズ等)

ハイパフォーマンス・コンピューティング

不確実性も考慮した災害を 統合的に予測するシミュレーション



地震の不確定さをも考慮し、津波の遡上、構造物の被害、人の避難など、都市災害を統合的に予測

地震・津波による複合災害についての予測システムを構築。
行政（内閣府・自治体）の防災・減災計画への反映。

気象予測

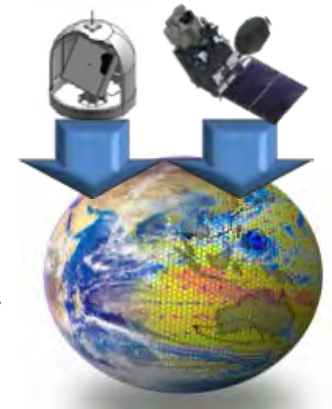
ビックデータ

観測データ 人工衛星、
フェイズドアレイレーダ...

ハイパフォーマンス・コンピューティング

台風や豪雨の リアルタイム予測シミュレーション

観測衛星・新型センサによる観測ビックデータと、気象予測シミュレーションを融合し、台風や豪雨のリアルタイム予測への道を開拓



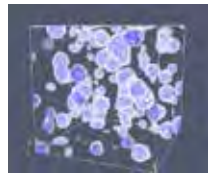
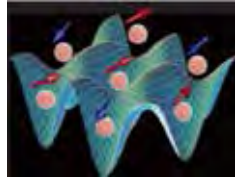

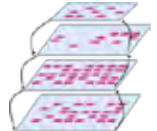
100m以下の解像度でのピンポイントな降雨予測より正確かつ高精度の気象予測手法を確立
(例：30秒毎に更新・リードタイム1時間の豪雨予測手法確立)

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)

< 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、公募予定。

萌芽的課題

<p>基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦</p>	<p>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。</p> <p>< サブ課題 (例) ></p> <p>A: 破壊とカタストロフィ: 材料、人工物から地球まで</p> <p>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</p> <p>C: 極限環境での状態変化: 物質の理解から惑星深部へ</p> <p>D: 量子力学の基礎と情報: 計算限界への挑戦</p> <div style="display: flex; justify-content: flex-end; gap: 20px;">   </div>
<p>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>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。</p> <p>< サブ課題 (例) ></p> <p>A: 各社会要素モデルの統合化とその有効性実証研究</p> <p>B: 各社会構成要素モデルの高度化 (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)</p>
<p>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>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。</p> <p>< サブ課題 (例) ></p> <p>A: 地球と地球型惑星 (第二の地球) の誕生条件の解明</p> <p>B: 太陽活動による地球環境変動の解明</p> <p>C: 太陽系における物質進化の解明</p>
<p>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>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。</p> <p>< サブ課題 (例) ></p> <p>A: 思考を実現する神経回路機構の解明</p> <p>B: 脳アーキテクチャにもとづく人工汎用知能</p> <div style="display: flex; justify-content: flex-end; gap: 20px;">   </div>

1 . プロジェクトの概要及び経緯等	・・・	2
2 . 基本設計の評価	・・・	13
(参考)		
3 . アプリケーション開発の状況等	・・・	27
4 . 秋の行政事業レビュー	・・・	45
5 . 政府方針における位置づけ	・・・	61
6 . 「京」について	・・・	66

対象事業

- 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(一般会計 15,868百万円)
- HPCI戦略プログラム【文部科学省】(一般会計 0円) 平成27年度終了
- ポスト「京」の開発(一般会計 7,664百万円)

提示された論点

- 「京」やHPCIの運営に年間約130億円の国費が投入されているが、これに見合う成果が得られているのか。
- 「京」の高い演算性能を必要とする研究利用のニーズは十分にあるか。
- 産業競争力強化に資するという目的に鑑み、「京」の産業利用は適切かつ十分か。
- 「京」の利用者の選定手続について透明性は十分か。

指摘事項と対応方針

成果を分かりやすく説明すべき。

- スーパーコンピュータの意義や成果について、多くの広報活動を行っているが、今後は取組そのものの認知を高めるとともに、より一層工夫して、科学的成果及び実用的成果を分かりやすい説明に最大限努力する。特に、平成28年度には経済波及効果について新たに算定すべく検討を進める。

産業利用の割合を高めていくべき。

- 現在、全利用者の3割以上が産業利用であるが、平成28年度には専用枠を5%増加(合計15%)する。

利用者の選定手続きについて、公表の範囲を拡充し、透明性を高めるべき。

- 中立・構成な審議の確保に留意して他の事例も参考に運用しているが、今後、選定委員会の配布資料のうち、申請時の課題内容等の公開すべきでないものをより厳正に選別し、それら以外については、順次公表を検討する。

国費投入額の削減に努力すべき。

- 「京」については、これまでも経費の合理化・効率化等に努めているが、平成28年に中間評価を実施し、効果的・効率的な運用に努めていく。
- ポスト「京」については、平成28年度に外部有識者によるコスト・性能評価を実施し、海外との比較や経済効果も含めてしっかりと検討していく。

(参考) 行政改革推進会議(第21回)平成28年1月21日 資料より

<https://www.kantei.go.jp/jp/singi/gskaigi/dai21/qjiisidai.html>

秋の年次公開検証(「秋のレビュー」)等の指摘事項に対するフォローアップ

担当府省名	文部科学省		
テーマ等	科学技術ビッグプロジェクト()スーパーコンピューター		
指摘事項	<p>・スーパーコンピューター「京」については、平成24年9月末に共用開始され、「京」を中核として国内の大学等のスーパーコンピューターを高速ネットワークでつなく、計算環境(HPCI)の運営がなされており、現在、2020年をターゲットとする世界最高水準の汎用性スーパーコンピューターのポスト「京」の実現に向けた取組が進められている。</p> <p>・スーパーコンピューター「京」の開発・整備に1,000億円を超える国費が投入されていることに鑑み、投入予算に見合った成果が得られているか、成果を基礎研究面での科学的な成果と、実用的成果とに分けて、国民に分かりやすく説明すべきである。</p> <p>・産業界による「京」の利用割合は、現在全体の8～10%程度にとどまっているが、適正な受益者負担を求めつつ、産業利用の割合を高めていくべきである。</p> <p>・「京」の利用者の選定手続については、この巨額を要したプロジェクトの成果を広く社会全体で享受できるようにするためにも、公表の範囲を拡充し、透明性を高めるべきである。</p> <p>・ポスト「京」の開発については、約1,100億円という多額の国費投入が見込まれているが、これに見合う成果として、どのようなものが期待されているのかについて、国民に分かりやすく説明すべきである。</p> <p>また、「京」の保守及びポスト「京」の開発・整備・保守にあたっては、この事業の性質上、特定の業界、特定の企業のみが関係するものとなっていることから、コスト抑制のための検討を、海外比較等、様々な角度から行い、専門家による検証なども踏まえるなどして、国費投入額の削減に努力すべきである。</p>		
個別項目	対応方針・スケジュール	平成28年度政府予算案閣議決定時までに決定・実施した内容	備考
<p>・スーパーコンピューター「京」については、平成24年9月末に共用開始され、「京」を中核として国内の大学等のスーパーコンピューターを高速ネットワークでつなく、計算環境(HPCI)の運営がなされており、現在、2020年をターゲットとする世界最高水準の汎用性スーパーコンピューターのポスト「京」の実現に向けた取組が進められている。</p> <p>・スーパーコンピューター「京」の開発・整備に1,000億円を超える国費が投入されていることに鑑み、投入予算に見合った成果が得られているか、成果を基礎研究面での科学的な成果と、実用的成果とに分けて、国民に分かりやすく説明すべきである。</p>	<p>「京」については、平成24年4月から平成27年11月末までの約3年半の間に、145件のシンポジウム、260件のメディア広報、約4万3千人(1,742件)の見学等の広報活動を行ってきたところ。今後は、これらの取り組みそのものの認知を高めるとともに、内容面をより一層工夫して、科学的成果及び費用対効果を含めた実用的成果の一層分かりやすい説明に最大限努力する。</p> <p>特に、これまでは経済的側面における効果を計測するに足る情報が不足していたことから、平成28年度には、HPCI戦略プログラム(平成27年度終了)の成果を踏まえ、経済波及効果について新たに定量的に算定すべく検討を進める。また、「京」における一般利用やHPCI戦略プログラムの成果を含めた全体の中間評価を平成28年度に実施する。これらの結果をホームページ等を通じて国民に広く説明していく。</p>	<p>平成27年度中に成果事例集等の広報誌を発行予定。</p> <p>秋のレビュー後、「京」に関して、4件のシンポジウム、82件のメディア広報(新聞、テレビ、雑誌等)、1,631人の見学(学校、企業等)を実施。</p> <p>例えば、平成27年12月5日に開催した見学会・講演会では、兵庫県等とタイアップし、産業利用の成果も含めた「京」の成果及びポスト「京」で期待される成果について約300人にわかりやすく説明(右記報道参照)。</p> <p>また、平成27年12月19日に開催した「スパコンを知る集い in 富山」では、富山県等とタイアップし、小中高大学生約200人を含む448人に対して、「京」の成果及びポスト「京」で期待される成果をわかりやすく説明。今後、開催報告(講演資料・動画、アンケート結果等)をホームページに掲載し、広く周知する(過去の開催報告等は右記参照)。</p>	<p>12月5日開催の見学会・講演会の開催報告 https://ja-jp.facebook.com/RIKEN.Kcomputer/photos/a.139116216194331.2310.0.131409116965041/750082158431064/?type=3&permPage=1</p> <p>「スパコンを知る集い」の開催案内・報告 http://www.aics.riken.jp/jp/outreach/shirutsumidoi/</p>
<p>・産業界による「京」の利用割合は、現在全体の8～10%程度にとどまっているが、適正な受益者負担を求めつつ、産業利用の割合を高めていくべきである。</p>	<p>「京」の産業利用については、現在、全利用者の3割以上()を占めているところ、産業界からの要望等も踏まえ、平成28年度は産業利用の専用枠を5%増加(合計15%)する。これにより、産業界の利用割合がさらに増加する見込み。</p> <p>引き続き、適正な受益者負担の在り方も含め、産業界(スーパーコンピューティング技術産業応用協議会及びHPCIコンソーシアム)などのご意見・ご要望等を踏まえながら、取り組んでいく。</p> <p>「京」の計算資源においては、産業利用の専用枠(平成26年度は8%、平成27年度は10%)が存在するが、それ以外も含めた「京」全体の産業利用者割合。</p>	<p>「京」の代表的ユーザコミュニティであるHPCIコンソーシアムの理事会において、平成28年度の「京」の計算資源割合に関し、産業利用の専用枠を拡大(10→15%)することを報告(平成27年12月)。</p> <p>平成28年1月6日に開催したHPCI計画推進委員会において同旨を報告し、産業利用の専用枠を15%に拡大することを決定。</p>	

<p>「京」の利用者の選定手続については、この巨額を要したプロジェクトの成果を広く社会全体で享受できるようにするために、公表の範囲を拡充し、透明性を高めるべきである。</p>	<p>利用者の選定手続については、中立・公正な審査の確保、機密情報の保護等に留意しつつ選定委員会の議事概要を公開するなど、他の共用の研究施設等の事例を参考にしながら運用している。</p> <p>今後、選定手続の透明性を一層高めるために、選定委員会における配布資料のうち、審査委員名簿のように公開することによって選定の中立性・公正性に影響を及ぼし得るもの、申請時の課題内容のように企業や研究者のアイデア等保護を必要とするもの等をより厳正に選別し、それら以外については、順次公表すべく検討中。</p>	<p>平成28年2月に開催予定の選定委員会において、配布資料の公表の範囲を審議し、公表することとなった資料については委員会後ホームページに掲載する。</p>	
<p>ポスト「京」の開発については、約1,100億円という多額の国費投入が見込まれているが、これに見合う成果として、どのようなものが期待されているのかについて、国民に分かりやすく説明すべきである。</p>	<p>これまでは、経済的側面における効果を計測するに足る情報が不足していたことから、「京」での実績やポスト「京」でのアプリケーション開発の進展なども踏まえ、平成28年度に、ポスト「京」の経済波及効果について新たに定量的に算定すべく検討を進め、その結果をホームページ等を通じて国民に広く説明していく。</p> <p>今後は、関係機関とも連携し、ポスト「京」に向けたアプリケーション開発の進展に応じて、研究の内容やポスト「京」の意義、将来展望等について、内容面でも工夫して、分かりやすい説明に最大限努力する。</p>	<p>秋のレビュー後、ポスト「京」に関して、2件のシンポジウム等、2件のメディア広報(新聞、テレビ、雑誌等)を実施。</p> <p>例えば、平成27年12月5日に開催した見学会・講演会では、兵庫県等とタイアップし、産業利用の成果も含めた「京」の成果及びポスト「京」で期待される成果について約300人にわかりやすく説明(右記報道参照)。</p> <p>また、平成27年12月19日に開催した「スパコンを知る集い in 富山」では、富山県等とタイアップし、小中高大学生約200人を含む448人に対して、「京」の成果及びポスト「京」で期待される成果をわかりやすく説明。今後、開催報告(講演資料・動画、アンケート結果等)をホームページに掲載し、広く周知する(過去の開催報告等は右記参照)。</p>	<p>12月5日開催の見学会・講演会の開催報告 https://ja-jp.facebook.com/RIKEN.Kcomputer/photos/a.139116216194331.2310.0.131409116965041/750082158431064/?type=3&permPage=1</p> <p>「スパコンを知る集い」の開催案内・報告 http://www.aics.riken.jp/jp/outreach/shirutsu/doi/</p>
<p>また、「京」の保守及びポスト「京」の開発・整備・保守にあたっては、この事業の性質上、特定の業界、特定の企業のみが関係するものとなっていることから、コスト抑制のための検討を、海外比較等、様々な角度から行い、専門家による検証なども踏まえるなどして、国費投入額の削減に努力すべきである。</p>	<p>「京」については、これまで「京」の運転ノウハウの蓄積や各種経費の見直し等により、経費の合理化・効率化等に努めているが、HPCI戦略プログラム(平成27年度終了)の結果や一般利用の成果を含めた全体の中間評価を平成28年度に実施し、運用状況等を踏まえつつ、効果的・効率的な運用に向け努力していく。</p> <p>ポスト「京」の開発については、平成28年度に専門家からなる外部有識者による委員会において、コスト・性能評価を実施し、海外との比較や経済効果も含めてしっかりと検証していく。また、平成29年度には中間評価を実施し、さらに総合科学技術・イノベーション会議においても中間評価を実施した上で、製造段階に移行するか否かの判断を行う。</p> <p>また、「京」及びポスト「京」の事業における補助金支出に関し、文部科学省は、これまで、支出の内容が事業目的に合致しているか、経理処理が各種規定に基づく適正なものか確認するとともに、契約差額や事業目的に合致しない金額が生じた場合は、国庫に返納させているところ。今後は、技術的な面についてより一層のチェック体制を強化する観点から、例えば、メーカーOBの技術参与等の参画も検討していく。</p>	<p>平成28年度予算案についても、さらに経費の合理化・効率化を実施。「京」については、レビューでの指摘も踏まえ、これまでの運営ノウハウの蓄積等も踏まえ、メンテナンス等について一部合理化を実施(1.2億円)。</p> <p>ポスト「京」については、レビューでの指摘も踏まえ、また基本設計の進捗状況を踏まえた上で、経費の見直しを行い、開発に遅延がないよう着実に推進できる経費を計上。具体的には、システム開発については、システムの基本設計の進捗を踏まえたアプリ性能評価のための計算作業の効率化(計算機システムの導入)を図り、人件費等の合理化を実施(2億円)。</p> <p>なお、アプリケーション開発については、基本設計評価も踏まえ、平成28年度に実施予定のコスト・性能評価を行うために直接繋がる内容の取組を明確化・重点化し、それ以外のところは後年度に回すなどにより、一部経費の見直しを実施。</p>	

平成27年秋の年次公開検証(「秋のレビュー」)等の 平成28年度予算への反映等

平成28年1月 財務省主計局

秋のレビューの28年度予算への反映等

(単位:億円)

テーマ	予算面での主な指摘事項	28年度予算への反映等	事業名	府省庁	会計	27年度 当初予算額	28年度 概算要求額 ()	28年度 当初予算額 ()	(-)	秋のレビューに 基づく削減額 (試算)	27年度 補正予算額
科学技術ビッグ プロジェクト() スーパーコン ピューター	産業界による「京」の利用割合は、現在全体の8~10%程度にとどまっているが、適正な受益者負担を求めつつ、産業利用の割合を高めていくべきである。 「京」の利用者の選定手続については、この巨額を要したプロジェクトの成果を広く社会全体で享受できるようにするためにも、公表の範囲を拡充し、透明性を高めるべきである。 スーパーコンピュータ「京」の開発・整備については投入予算に見合った成果が得られているか、ポスト「京」の開発については国費投入に見合う成果としてどのようなものが期待されているのかについて、国民に分かりやすく説明すべきである。 また、「京」の保守及びポスト「京」の開発・整備・保守にあたっては、この事業の性質上、特定の業界、特定の企業のみが関係するものとなっていることから、コスト抑制のための検討を、海外比較等、様々な角度から行い、専門家による検証なども踏まえるなどして、国費投入額の削減に努力すべきである。	28年度の産業利用の専用枠を拡大(10~15%)する。引き続き、適正な受益者負担の在り方も含め、産業界などのご意見・ご要望等を踏まえながら取り組んでいく。 選定手続きの透明性を一層高めるため、28年2月に開催予定の選定委員会において配布資料の公表の範囲を審議し、申請時の課題内容のように企業や研究者のアイデア等保護を必要とするもの等をより厳正に選別し、公表することとなった資料については委員会後ホームページに掲載する。 27年度中に成果事例集等の広報誌の発行を予定。また、レビュー後、シンポジウム、新聞・テレビ等のメディア広報、見学会・講演会等を開催し成果をわかりやすく説明。今後は、これらの取り組みそのものの認知を高めるとともに、内容面をより一層工夫して、一層分かりやすい説明に最大限努力する。 「京」については、メンテナンス等について一部合理化を実施し経費を削減。	「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(HPCI戦略プログラムを除く)」、「HPCI戦略プログラム」	文科省	一般	146	159	125	34	1	-
		レビュー後、シンポジウム、新聞・テレビ等のメディア広報、見学会・講演会等を開催し成果をわかりやすく説明。今後、関係機関とも連携し、分かりやすい説明に最大限努力する。 システム開発に係る経費について、基本設計の進捗状況を踏まえ経費の見直しを実施し経費を削減。 ポスト「京」の開発に係る経費については、28年度に専門家によるコスト・性能評価を実施。 29年度には中間評価を実施した上で、製造段階に移行するか否かの判断を行う。	ポスト「京」の開発	文科省	一般	39.72	76.64	67.00	10	2	-

(参考) これまでの「京」の主な広報活動

月に、3件のシンポジウム等、6件のメディア広報、1,000人の見学を実施。

平成24年4月～平成27年12月

◆ シンポジウム・講演など 149件

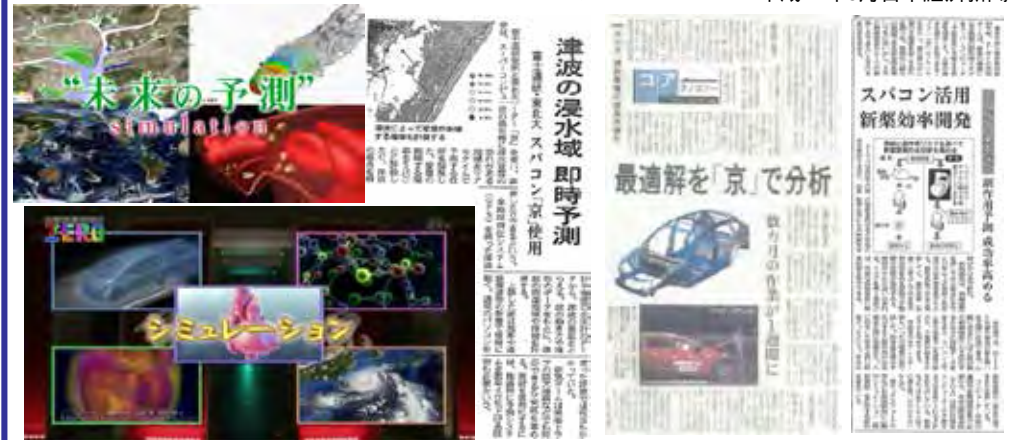
平成27年度は、仙台、富山、高松など各地で開催



京都、仙台、東京、神戸、福岡、名古屋、松山、札幌、金沢、広島、長崎、秋田、新潟、盛岡、熊本、大阪、静岡、松江、富山などで開催(平成22年～)。

◆ マスメディア(新聞、テレビ、雑誌など) 262件

平成24年7月TBS「夢の扉+」平成27年3月日本経済産業新聞 平成27年5月日本経済新聞



平成27年10月 NHK-Eテレ「サイエンスZERO」 平成27年2月日刊工業新聞

◆ 主な見学(学校、企業など) 約4万4千人(1792件)

<平成27年度の見学事例>

- 4月 敦賀工業高校(福井県)、徳島科学技術高校
- 5月 広島三育学院高校、JR東日本
- 6月 津山高専(岡山県)、米国アルゴンヌ国立研究所
- 7月 桜ノ宮中学校(兵庫県)、富山いずみ高校
- 8月 米沢興譲館高校(山形県)、札幌開成中等教育学校
巨摩高校(山梨県)、大阪大学、パナソニック
- 9月 名城大学(愛知県)、松江高専、静岡県立大学
- 10月 鶴甲小学校(兵庫県)、九州工業大学、NTTドコモ
- 11月 都城高専(宮崎県)、磐城高校(福島県)
- 12月 富谷高等学校(宮城県)、茨城工業高専

◆ 広報誌を月に1冊程度発行
◆ 成果や一般公開などの情報をホームページへ随時掲載



(参考)

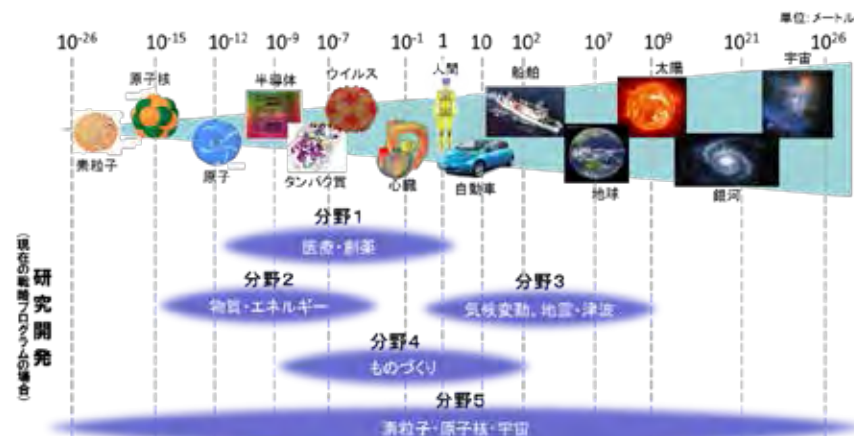
秋の行政事業レビュー(平成27年11月12日)
当日配布資料

http://www.cas.go.jp/jp/seisaku/gyoukaku/H27_review/H27_Fall_Open_Review002/data/0205.pdf

「京」やHPCIの運営に年間約130億円の国費が投入されているが、これに見合う成果が得られているのか。

<背景等>

- n 科学技術の更なる進展により、その成果をイノベーション創出に具体化させる上で、超大規模コンピュータシミュレーションの持つ可能性は極めて大きい。
 - n 素粒子から、宇宙全体まで、様々な大きさの自然現象のすべてを実験・観測するのは限界。そこで、最先端シミュレーションにより、新たな発見の可能性を飛躍的に高める。
- n これまで、経済成長に具体的に貢献しうる分野(例、物質・エネルギー、ものづくり)、国民の安心・安全(医療・創薬、気候変動・地震・津波)など重要課題を設定し、産学官をあげて、その研究開発と体制構築に取り組んできた。



<これまでの成果>

「京」でなければできない「限界突破」

様々なテーマで、「京」でなければ得られないデータにより、従来の技術的な限界を突破した研究成果。

従来は、部分的な計算に限られ、精度も不十分だったのに対し、「京」ではより高い精度で「丸ごと計算」出来る(近似を減らし、信頼性が高い)。

【例】

・小児マヒウイルス丸ごと(従来は一部)

ワクチン開発に向けた共同研究が開始

・患者の心臓を世界で初めてコンピューター上に再現

心臓を分子レベルで解析し、肥大型心筋症の病態を明らかに(心臓疾患の死亡は年19万人)

・電池の分子と電子の動きを一緒に計算(従来は別)

高性能化・高安全化に貢献(リチウムイオン電池市場は数年後に年1兆円を超える見通し)

・抗がん剤候補化合物やがん細胞に関する抗体医薬を選定 **前臨床試験の対象として試験中**

オープンイノベーションの実現

「京」と「HPCI」を活用した「戦略プログラム」では、支援対象の研究者に加え、最先端シミュレーションに価値を見出す関係者として、理論や実験・観測に関する研究者、産業界・自治体・病院の関係者が多く参画し、共同で成果創出を目指すオープンイノベーションの環境が創出。

【例】

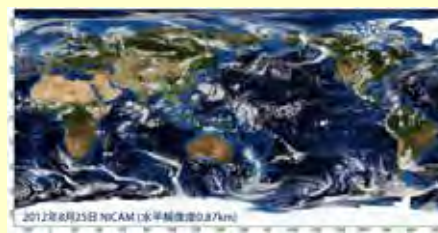
- ・新材料に係る研究開発においては、45機関が参画する、物性分野、分子分野、材料分野が結集した「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)」を構築。
- ・生命科学に係る研究開発においては、約40機関が参画する体制を構築。 など

成果の実用化への展望

左の研究成果とオープンイノベーションにより、
・経済成長に貢献する産業界の活動、
・国民の安心・安全、
への波及が具体化しつつある。



自動車開発: 風洞実験を代替すると開発コスト削減(風洞実験コストは一車種で約12億円 シミュレーションでは数千万円)。



雲一つひとつを再現し、巨大積雲群の発達・移動を予測:
気象災害被害は、過去20年間で年約5,000億円。その低減に貢献。

「京」の高い演算性能を必要とする研究利用のニーズは十分にあるか。

<大規模計算の必要性>

- n 「京」の能力をフルに活用し、世界最高水準のシミュレーションが実現し、我が国発のイノベーション創出に貢献している。
- n 国内では、ほぼ同時期に設置された「京」に次ぐ規模の大型スパコンとして、東京大学のスパコン (FX10)があり、これは「京」の約1/8規模。「京」は約8万ノードあるため、1万ノード以上の計算は「京」でしかできない規模のもの (全体の15.2% (H26年度))。

- n 例えば、気象シミュレーションでは、三次元空間を細かく区切り (例: 地球全体を870m間隔で区切る)、その全地点の気温・湿度・気圧・風速・風向などのデータを記憶させて、大気状態を全地点同時に計算する。このため各地点における大量メモリが必要であり、大規模計算機が不可欠。
- n 複数の小中規模計算を同時実行すべき課題を別サイトで分散計算すると、計算後にデータを一か所に移動させる移動コスト・手間が膨大 (例: 1回の計算で312TBのファイルが生成される)。

<「京」を最大限活用した研究事例>

- n 分子から臓器まで通じた統合的な心臓シミュレーションを実現 (世界初)
- n 電子の量子効果を考慮したデバイス設計の基本技術を確立 (世界初、ゴードンベル賞)
- n 小児マヒウイルスを原子レベルで丸ごとシミュレーションし、感染機構を解明 (世界初)
- n 地震災害と建物被害を統合した大規模シミュレーションを実現 (世界初)
- n 脳の神経回路シミュレーションを実現 (世界最大)
- n ダークマターシミュレーションによる天体形成過程の研究 (世界最大、ゴードンベル賞)

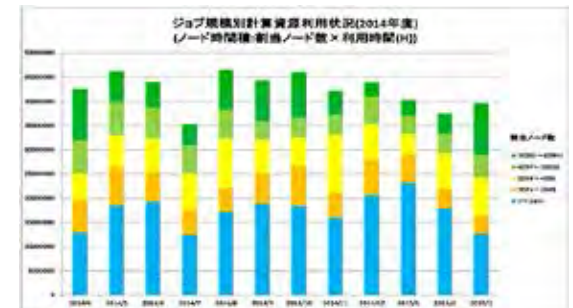
ゴードンベル賞:シミュレーション分野で世界最高の賞

<「京」の役割等>

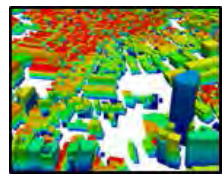
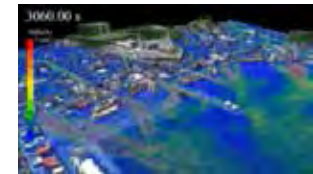
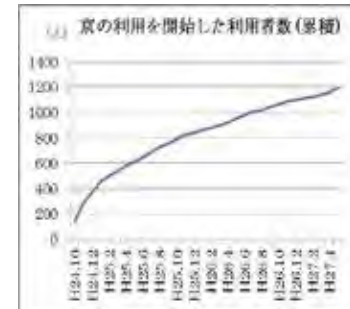
- n コンピュータ性能の向上が続くと、「京」の大規模計算は、将来的には相対的に中小規模の計算になると想定される。そこで、画期的な成果を創出するソフトウェア開発をあらかじめ進めて、将来的な普及・活用に備えることは、国際的な競争力確保と成果創出に有意義。こうしたソフトウェア開発には数年を要するため、今から「京」を駆使して開発する必要がある。

- n 「京」は、計算科学技術全体を引き上げることで、産業界も含めた利用者を拡大させ、サイエンスやテクノロジーの新たな可能性を切り開く最先端装置としての役割を担っている。

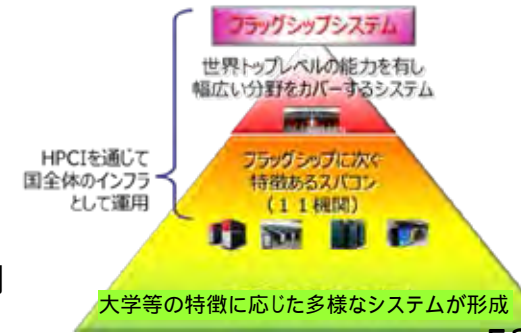
- n 具体的には、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」に基づき整備・運用されており、理研の一施設というよりも、我が国全体として有効活用を進める観点から、先導的・先端的な研究成果を創出し、その成果を公共知として共有することで、科学技術の振興等に貢献している。



月別の「京」で実行されたジョブの規模別の計算資源利用状況 (ノード時間積)。色は、ジョブが使用した計算ノード数に対応。



自然災害に対応した防災・減災対策
将来の被害の低減 (南海トラフ巨大地震の被害は220兆円と想定)

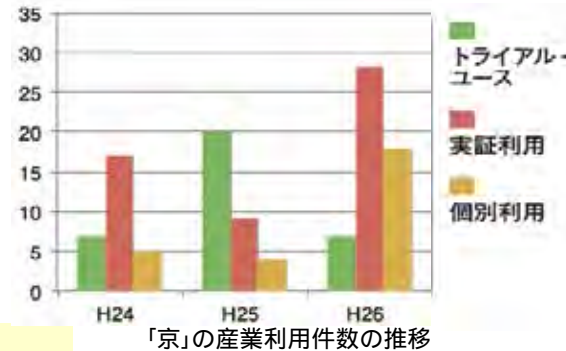


大学等の特徴に応じた多様なシステムが形成

産業競争力強化に資するという目的に鑑み、「京」の産業利用は適切かつ十分か。

< 産業利用の状況 >

- n 産業利用を促進するため、 トライアルユース(成果公開・無償)、 実証利用(成果公開・無償)、 個別利用(非公開・有償)の3つの制度を設けている。
- n 産業利用の応募は増加傾向。利用枠や利用制度を充実させている。
 - n 「京」を利用する総計算資源量の約29%が企業が参画する課題
 - n 「京」の全利用者の3割以上が企業の利用者(1249人中422人)(平成26年度)
 - n 参画企業数は100社以上



< 産業利用の成果事例 >

- 1 自動車用次世代空力設計システムの研究開発: **実験費用の大幅削減**により自動車産業の競争力強化に貢献(コンソーシアム(企業13社、研究機関7機関)による共同研究)。「京」のシミュレーションは風洞実験に匹敵 風洞実験の大幅削減に(1車種当たり、風洞実験:約12億円 シミュレーション:3,000万円)
- 1 電池の材料開発: **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(「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」に企業15社が参加)。電池内部の電極付近の化学反応過程を分子レベルで再現。
- 1 新薬開発を加速するインシリコ創薬基盤の構築: **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貢献(製薬企業22社、IT企業2社他が参画。タンパク質と化合物の190億の組合せを約6時間で予測)。



自動車用次世代空力設計システムの研究開発におけるコンソーシアム

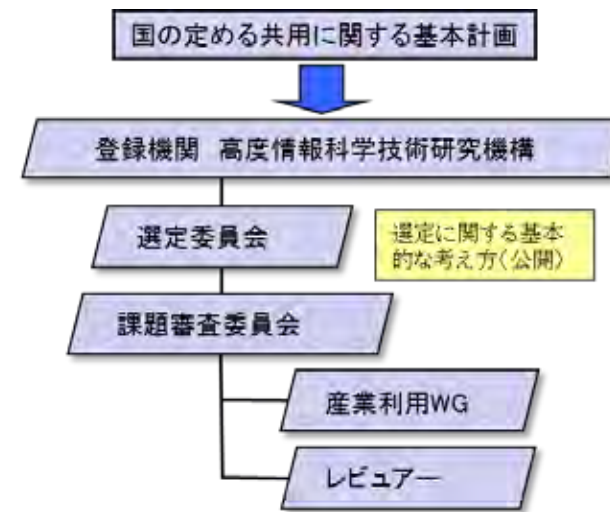
「京」の利用者の選定手続について透明性は十分か。

< 選定について >

- n 利用者・利用課題の選定は、「共用促進法」に基づき、登録機関として選定された高度情報科学技術研究機構が中立公正な立場で利用者の選定を行う。具体的には「選定委員会」「課題審査委員会」により、選定方針の策定、個別の課題の審査を行う。
- n 選定基準、選定の流れ、選定結果(応募数・採択数、採択課題名・代表者・所属機関・利用する計算機名・配分資源量)は、プレスリリース等で公開。選定委員会の議事概要はHPで公開。採択・不採択の理由は、課題代表者宛に課題審査委員会からのコメントとして通知。

< 選定基準 >

- 1 科学的に卓越し、又は社会的に意義が高く、ブレークスルーが期待できること。(産業利用課題は除く)
- 1 「京」の計算資源を必要とすること。
- 1 ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析手法等が十分に検証済みであること。また、利用計画や研究体制が妥当であること。
- 1 科学技術基本法や社会通念等に照らして、当該利用研究課題の実施が妥当であること(平和目的に限定される等)



課題選定の枠組み

※利用枠毎の課題選定

ポスト「京」の開発・製造費として約1,300億円(うち、国費1,100億円)に加え、毎年多額の運営費が見込まれるが、これに見合う成果が得られるのか。

< 開発の意義 >

- n 最高の成果を最速で創出
 - l 「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することで、最高の成果を最速で創出できる。
 - l 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。
- n 高い技術波及効果
 - l 最先端スパコンはIT技術の結晶であり、自主開発を通じて、技術の波及効果(スピノフ)が得られる。ビッグデータやクラウドなど重要な技術を使いこなす人材の輩出に貢献できる。
- n 技術立国ニッポンとしての技術継承
 - l 世界最高水準のCPU開発は、日本と米国のみが有する技術。高い技術を持つ人材により成果を出すスパコンの開発技術の保有は、我が国の産業の重要テーマ。

< ポスト「京」で見込まれる成果例 >

- n 我が国が直面する課題に具体的に貢献。特に、我が国の経済成長(ものづくり、エネルギー等)と、国民の生命・身体の安心・安全(医療、防災等)。
- n 「京」では、シミュレーションを産業や医療等に適用する手法を確立した。ポスト「京」では、現実の社会・自然現象が複雑であることに対応し、複合的な事象を対象とし、経済成長と国民の安心確保にさらに貢献する。

	「京」での実現	ポスト「京」で目指す成果と社会への貢献(例)
副作用を考慮した創薬シミュレーション	はじめて薬剤の候補物質とタンパク質の結びつきやすさをシミュレーションし、単一のタンパク質の機能阻害を考慮した10種類程度の薬候補スクリーニングを実現。	薬剤の候補物質と多数のタンパク質からなる生体分子システムの相互作用をシミュレーションし、副作用の原因等も分析が可能になり、有効性の高い創薬が期待される。 10年以上、数百億円を要するとされる新薬開発の短縮化。(創薬でよく用いられるシミュレーションで、「京」で約1年の計算が、ポスト「京」では約5日)(がん罹患者は98万人。抗がん剤の輸入額は年5,000億円)
革新的設計・製造プロセスの開発	従来不可能であった自動車の試作実験(風洞実験)に匹敵する精度での空気抵抗等の予測が可能に。	飛行機における実機・実スケールの空力シミュレーションで、現象が複雑でこれまで解析できなかった離着陸時の空力特性・失速・騒音などを高精度な解析の実現を目指す。 飛行機の燃費改善や安全性向上に貢献し、実機飛行試験(数千億円規模)の一部代替。
観測ビッグデータを活用した気象予測	従来不可能であった半日から一日前に、地域レベルの集中豪雨を予測できる可能性を示した。	高機能レーダーの観測ビッグデータの同化により、「京」では不可能だった甚大災害につながるいわゆるゲリラ豪雨等の高精度な再現が可能となり、30分から数時間前の予測が現実的。 気象災害による被害(過去20年間で年平均約5,000億円の経済被害)の低減に貢献。

計算科学技術の進展について

