

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 1 >

## ( 3 ) 利活用と効果 ( 有効性 )

「京以前」「京」「エクサスパコン」のそれぞれの段階における、解決すべき課題とその結果を比較できるような資料を提出いただきたい。(「京」できなくて「エクサスパコン」で何ができるようになるかをもう少し分かりやすく纏めなおした資料)

「京」のHPCI 戦略5 分野について、1 . 「京」の事前評価時点(つまり7 年前頃) 2 . 「京」が運用された現時点(つまり2013 年) 3 . 「エクサスパコン」が運用された時点(つまり2020 年頃)、各時点でのスパコンへの期待、スパコンの役割、スパコンの課題解決能力、波及効果等を一覧に纏めて提出いただきたい。

例えば、「京」において、そのレベルでは未到達な部分があると想定されるので、その先のエクサスケールを目指したいという論理的な説明が幾分不明瞭かつ不十分との印象である。

エクサスケールスパコン開発プロジェクトでは、これまでの各計算科学分野の深化に基づき、社会的・科学的な課題の直接的な解決に寄与するシステムとして検討。以下は課題例について、「京」以前、「京」、「エクサスパコン」の各時点でのスパコンへの期待、役割、波及効果を明記。

### 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	剛体モデルに基づく創薬	黎明期 : スパコンの応用が検討され始めた段階	低 : 分子動力学を用いたタンパク質と薬剤候補の結合自由エネルギーの計算は不可能。剛体モデルを用いたドッキング計算によって、評価は可能であるが精度は低い。	低: 剛体モデルでのドッキング計算はPCクラスタやWSで盛んに行われた。ドッキングソフトウェアの充実。
現時点(10Pflops級)	結晶構造に基づく創薬	成長期 : スパコンの利用を想定した研究が主流となり始める段階	中 : X線結晶解析でタンパク質と薬剤候補の複合体の立体構造が明らかになっている場合に、正確な結合自由エネルギーの予測が可能。それ以外も計算は可能であるが精度は落ちる。水溶性タンパク質のみで、膜タンパク質と薬剤の結合自由エネルギーの解析はまだ困難。	中: 特定の標的タンパク質(病気の原因物質)に対するシミュレーションにより、新薬候補物質の絞り込みを効率化。
2020年頃(1Eflops級)	細胞環境を考慮した創薬	成熟期 : 創薬開発のための予測・制御にスパコンが不可欠となり始める段階	高 : より複雑な細胞環境下(生体膜中や細胞質環境、核内)をあらわに考慮した創薬につながる計算を実現する。副作用や毒性の評価も同時に行うことで、創薬プロセス全体の短縮につなげる。また、京では数百個のオーダーの創薬候補の探索をMDで実現していたが、数万個のオーダーでの探索を実現する。	高 : 複数タンパク質(病気の原因物質と必須機能物質)に対する新薬候補物質の影響解析を、複雑な細胞環境下で行い、副作用の少ない画期的な新薬の早期発見に貢献。

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 2 >

## 広域複合災害に対する総合防災・減災対策

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	過去の被害データの統計分析を利用するハザードマップは信頼度に欠ける。物理過程のシミュレーションを利用することで信頼度を格段に上げた次世代型ハザードマップが期待された。	統計分析中心の人的作業の代替となる、全自動シミュレーションがスパコンの役割である。これは、想定された災害シナリオに対し、自動構築された都市モデルを使って、災害・被害の物理過程を高い時間空間分解能で数値計算することである。	次世代型ハザードマップの作成というスパコンの利用は構想段階であり、実際の利用はなかった。	シミュレーションを利用したハザードマップは構想段階であり、波及効果を考える段階ではなかった。
現時点(10Pflops級)	2011年東日本大震災の「想定外」の被害を鑑みて、従来と比べ格段に多数の災害シナリオを想定し、それに対するハザードマップを作成することが期待された。	従来、高々10程度の災害シナリオの想定が精一杯であったが、これを1,000ないし1,000を超える災害シナリオに対してシミュレーションをすることがスパコンの役割である。	都市全域に対し、災害と被害の物理過程を高い時空間分解能で数値計算するシミュレーションを利用した次世代型ハザードマップの作成が実現しつつある。群集避難のような、被害対応過程のシミュレーションも可能となった。	全国共同利用の研究課題の一つとして、シミュレーションを利用したハザードマップの研究開発が採択された。全国各都市での次世代型ハザードマップの作成に関する研究開発が開始された。
2020年頃(1Eflops級)	巨大地震と巨大津波、高潮と集中豪雨のような複合災害に対しても機能する総合防災・減災が必要とされる。これには、単一の災害シナリオから、複合災害のシナリオに対するハザードマップの作成が期待される。	1,000を超える複合災害のシナリオに対し、災害・被害の物理過程のシミュレーションを実行するには「エクサ」の計算能力が必要である。物理過程のシミュレーション以外に、相当量の復旧・復興のシミュレーションが含まれることも軽視できない。	複合災害・多数シナリオの前に、都市情報の増加速度を考慮すると、現在の10～100GBオーダの自由度を2、3桁は確実に凌駕するような、超詳細都市モデルの構築が可能となる。この都市モデルのシミュレーションには、「エクサ」の計算能力が不可欠である。	広域複合災害は未経験である。信頼度の高いシミュレーションを利用したハザードマップが災害と被害の全貌を示すことで、複合災害に関して共通認識を醸成し、防災・減災対策の立案・実行に貢献する。同時に、複合災害の予測は、自然災害に関わる保険・損保産業に革新をもたらす。

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 3 >

## 安全性の高い自動車開発

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	衝突試験代替評価手法としてのベンチマークテスト	実用期 : 表面解像度2mm程度の詳細自動車モデルによる衝突解析	中 : 車体表面の解像度は十分、ただし解析時間が数十時間。速度向上が課題。	中:
現時点(10Pflops級)	衝突試験代替評価手法としての実用化と複雑連成現象(衝突・人体損傷)への対応の期待	実用～発展期 : 2mm詳細衝突モデルの実用化と人体FEMモデル連成解析のテスト	中 : 十分な表面解像度で数時間での解析が実現、実用化が可能な段階の性能に。ただし並列効率が問題。これ以上の高速化は難。複雑連成問題では成果。	高 : 大手自動車会社ではほぼ10年で10Pflops級が導入されることから、10年以内には2mm解像度級が実用段階に入る。現状の大きな期待である、人体損傷評価との連成解析についても10年以内には実用化の段階に入ると期待。
2020年頃(1Eflops級)	複雑連成現象と最適化問題の実用化	成熟期 : 人体FEM衝突モデルとの連成と、最適化解析	高 : 10Pflops級の解析で、厚み等を変化させた複数解析の同時実行による最適化に期待。	

## 安全性・耐久性に優れた高性能電池の開発

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	基本原理の解析	黎明期 : スパコンの応用へ向けた方法論の提案がされる段階	低 : 電極材料の電子状態計算等、特定された解析に留まる。総合的な解析には方法論からの制約もあり、応用は限定される。	中 : 電極材料の提案など、特定の課題に限定される。
現時点(10Pflops級)	メカニズム解明	成長期 : 第一原理計算に基づく化学反応過程の解明がされる段階	中 : 物質固有の性質はある程度忘れた単純化したモデルに対する、電池の電極とその周りの電解質との反応が計算可能。	高 : リチウムイオン電池内の化学反応が明らかになり、電解液の還元・分解と電極上でできる被膜形成のメカニズムが明らかにされる等、総合的なシミュレーションが可能になる。
2020年頃(1Eflops級)	材料設計	成熟期 : 計算機による材料設計が行われ、その開発に不可欠な段階	高 : 物質個々の性質を取り入れた電極構造のもとで、複雑な電子の挙動を定量的に評価可能。	不可欠 : 電解液や添加剤など、様々な条件の解析が可能になり、計算機材料設計が可能となる。

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 4 >

## ナノの世界を操る次世代デバイス科学

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	基礎理論の構築	黎明期 : 第一原理計算等による簡単な系の計算	中 : 二千原子程度の複合系(量子再選と電極)などの計算が可能	中 : 簡単な接合のモデルなど、その計算可能な範囲は限定される。
現時点(10Pflops級)	メカニズムの解明と新たなデバイスの提案	成長期 : ナノスケールのデバイス全体の計算が可能になる段階	高 : 密度汎関数理論にもとづく実空間第一原理シミュレーションにより、10万原子のシリコンやカーボンナノワイヤーの電子状態計算が可能。	高 : 電子の空間分布がはじめて明らかになる。ナノデバイス全体のシミュレーションが可能になる。
2020年頃(1Eflops級)	デバイス設計	成熟期 : 複合的な要素を取り込むことが可能な段階	高 : 同様の計算手法を発展させることにより、100万原子レベルの精微なシミュレーションが可能。	不可欠 : ナノ形状がもたらす電子状態・電子分布の詳細な違いが明らかになる。複合材料や化合物半導体の精密計算が可能。

## 宇宙の起源と進化の探求

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	個別の天体現象の、単純化したモデルによる理解	理論的な天体形成/進化シナリオの一部についての詳細なモデルや、空間分解能がないため半経験的なモデルをいれた進化計算。	まだ低い。シミュレーションでできた銀河は円盤サイズが統計的に観測とあわない。超新星はシミュレーションでは爆発できない。星形成、恒星進化は空間分解能、時間方向とも3次元計算には能力不足。	観測との定性的な比較。計算法については他分野に波及(ツリー法、粒子による流体法等)。
現時点(10Pflops級)	個別天体の形成・進化のモデルによる理解	ダークマター構造形成等についてはほぼ第一原理からの進化計算。より複雑な天体形成・進化については、分解能をあげることで半経験的モデルの不定性をある程度解消	改善。銀河サイズの問題は改善することを期待。超新星についても爆発にいたるメカニズム候補が見える。星形成・恒星進化は空間分解能は上がるが時間方向の能力が不足。	領域によっては観測に対する予言、予測。計算法については他分野に波及(並列化等)。
2020年頃(1Eflops級)	複数階層の統合による、第一原理的な天体計算・進化の解明	複雑な天体形成・進化についても、上下の階層にまたがるシミュレーションを直接行うことで第一原理的な計算。また、星形成・恒星進化のようなタイムスケールが長い現象も直接3次元計算。	1EF さらに改善。銀河形成についてはほぼ第一原理的な計算。超新星についてはまだ問題は残る可能性がある。星形成・恒星進化は、時間方向にも十分な計算なると期待。	銀河・星・惑星の形成モデルを提供することで観測を理解。計算法については他分野に波及。



# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 5 >

## 知能を再現する脳研究

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	巨大な計算力によって人間の脳が再現できるという漠然とした期待	創始期 : 神経回路モデルの規模の拡大	脳リズムや同期現象のおおまかな再現	てんかんのような脳の異常に対する検知技術を促進
現時点(10Pflops級)	人間脳に匹敵する計算力が得られる2025年以降への期待と現時点での医療への貢献	黎明期 : 効率的な計算資源の利用が進み、データ同化や外部機器の制御等も	中規模神経回路のおおざっぱな機能再現 ー細胞や小規模な神経回路に対するデータ同化	大規模スパイクングネットワークの統計的性質や形態的な神経結合と生理的な結合の比較などの理解が進み、脳のさらなる理解とともに脳の補修や操作に対する安全性がある程度担保される
2020年頃(1Eflops級)	大規模に展開されるコネクトームや多点生理計測をうけて、脳機能の再現への要求も高まる	成長期 : 入出力を持つ人間脳の一部や昆虫脳などでの様々なシミュレーションがされるようになる	人間脳規模の神経回路シミュレーションや昆虫全脳規模のリアルタイムシミュレーションを詳細に構築 イメージングや、ロボット等からの環境情報を用いインタラクティブな計算を行う	アクティブセンシングを行ったり長期の学習によってある程度行動を自律的に変化させる効率的な知能機械アルゴリズムの設計原理が明らかになる 現実の脳に対してその結合を調べ・小規模なら補修したり改善したりすることがシミュレーションに基づいて行われる

## ビッグデータを活かした次世代ゲリラ豪雨予測

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	ゲリラ豪雨現象の再現	黎明期 : シミュレーションによる現象の再現可能性を探る段階。	1km程度の解像度で豪雨現象が再現可能となった。	環境場の予測が可能となり、3時間毎に更新する10数時間先までの予測が可能となった。ゲリラ豪雨を引き起こす個々の積乱雲の予測には至らない。
現時点(10Pflops級)	ゲリラ豪雨現象のオフライン予測	成長期 : シミュレーションにデータ同化を組み合わせ、予測可能性を探る段階。	100m程度の解像度でデータ同化を組み合わせ、30秒毎に更新する30分予測のオフライン計算が可能となる。	中 : 30秒毎に実測データを取り込むことで、個々の積乱雲の予測可能性や、予測精度の向上に関する研究開発を行うことが可能となる。ビッグデータのリアルタイム処理には至らない。
2020年頃(1Eflops級)	ゲリラ豪雨をゲリラでなくするリアルタイム予測	成熟期 : ビッグデータをリアルタイム処理し、ゲリラ豪雨予測が実現可能となる段階。	次世代型センサによる高頻度高解像度ビッグデータのリアルタイム処理し、30秒毎に更新する30分予測がリアルタイムに処理可能となる。	高 : 30秒毎に更新する30分予測をリアルタイムに行い、リードタイム30分のゲリラ豪雨予測が実用され、避難等のリアルタイム防災対策に根本的な情報を提供する。

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 6 >

## 分子機能と細胞システムの接続

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	溶液中および脂質二重膜中の分子動力学	黎明期 : 構造決定後の動的解析として利用が本格化	中: X線結晶構造解析後の蛋白質の動的構造解析のツールとして利用。計算時間が短く、数十nsの揺らぎを扱うことが実現。	低 : 立体構造と構造揺らぎの関係を解明。プロトン化部位の決定やアミノ酸変異の影響など短いダイナミクスで実現できる解析。
現時点(10Pflops級)	細胞環境を考慮した分子動力学計算	成長期 : 計算規模の拡大とレプリカを用いた自由エネルギー計算	中 : 全原子分子動力学を使って、1つのタンパク質や核酸などの溶液中あるいは脂質二重膜中での揺らぎと構造変化の計算ができる。粗視化ダイナミクスを持ちいることで、クロマチン(核内DNA蛋白質複合体)の一部の計算も行われ、SAXSやイメージングとの比較も行われ始めた。	中 : In Cell NMRやXFEL、SAXSなどの新しい構造解析の実験と連携することで、結晶構造解析だけではわからない細胞内の環境を可視化。創薬開発に直接つながる計算ではないが、疾患などの原因を解明するために役立つ。
2020年頃(1Eflops級)	分子機能と細胞システムの接続	成熟期 : 計算規模の拡大とマルチスケール化の実現。細胞システムの分子レベルでの詳細な記述	高 : 全原子分子動力学と粗視化ダイナミクスの連携をさらに深めることで、小さなバクテリア細胞であればまるごと、哺乳類細胞などではその一部を含めた細胞システムの分子レベルでの記述が始まる。より具体的には、信号伝達や細胞分化、遺伝子発現などの細胞機能を知るために必要な、蛋白質-蛋白質あるいは蛋白質-核酸の反応ネットワークを分子構造と相互作用に基づく記述を行い、実験データや遺伝情報と比較しうるシステムを構築する。システムズバイオロジーでは、実験データに基づく細胞システムの記述を行うが、エクサでの計算で分子構造と相互作用に基づく細胞システムの記述がスタートする。	高 : 細胞システムの状態を記述することで、健康な状態と疾患との比較が可能。細胞内の反応ネットワークを分子レベルでの記述と、遺伝子レベルでの記述と比較していくことで、遺伝疾患とそれ以外の関係も解明できる。イメージングや構造解析などの実験手法を組み合わせることで、細胞システムを統合的に扱う新しいモデルを構築。疾患因子が細胞システムに与える影響がシミュレーションで理解できるようになれば、疾患の治療や医療に貢献できる。

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 7 >

## 天然光合成の解明と人工光合成の構築

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	現象のモデル化による説明	黎明期：スパコンの応用が検討され始めた段階	低：スパコンの能力の制約よりも方法論やソフトウェアの制限により、天然光合成系をモデル化した小規模な分子に対するシミュレーションに限定	低：合成の機能の解明よりも現象の説明が中心 例：反応中心のモデル分子の励起状態の1点計算
現時点(10Pflops級)	現象の再現と解析	成長期：スパコンの利用を想定した研究が主流となり始める段階	中：天然光合成を理解するためには、できるだけ自然に近い現実系に対するシミュレーションが必要。方法論とソフトウェアの発展に伴い、光合成系から切り出してきた現実に近いモデル分子の高精度・大規模なシミュレーションが「京」により可能。	中：光合成に対する知識が蓄積。それでもなお、天然光合成系に対する部分的なシミュレーションに限定。 例：光合成系の酸素発生中心の高精度電子状態計算。2万原子程度のタンパク質の大規模量子化学計算。
2020年頃(1Eflops級)	現象の解明・理解と新規系の創発	成熟期：天然光合成の理解と新規エネルギー源開発のための予測・制御にスパコンが不可欠となり始める段階	高：光合成はシームレスな多段階の現象。マイクロからマクロに渡る多階層な現象を取り扱うため、電子理論とダイナミクスの連成が必要。分野の境を超えた連携による大規模な連成シミュレーションを行うためにはエクサスケール級のスパコンが必要。エクサ級のスパコンを使いこなすための新しい方法論とソフトウェアの開発も必要。	高：天然光合成のメカニズムを理解し、人工光合成を制御するためのエネルギー原理を確立。自然に学んだ人工光合成のための高効率な水分解反応触媒を理論先導で開発することで次世代エネルギー源の開発に貢献。

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 8 >

## 高温超伝導体の機構解明と室温超伝導体設計

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	重要要素の決定	黎明期：バンド計算による高温超伝導体の電子様態の解明	中：近似計算による電子状態の解明。簡単な量子格子模型(数十原子)に対するモデル計算。	中：超伝導状態の発生メカニズムに重要な要素の決定
現時点(10Pflops級)	基礎原理の解明・構築	成長期：数百原子からなる量子格子模型のモデル計算。モデル化を伴わない第一原理計算が可能な段階。	高：物質をモデル化したハバード模型などの単純な模型(数百原子)に対するモデル計算(量子モンテカルロ法や密度行列繰り込み群法)により超伝導状態の有無が明らかになる。モデル化を行わない第一原理量子モンテカルロ計算により数十原子のシミュレーションが可能になり、超伝導状態の対称性や凝集エネルギー(超伝導転移温度と関係あり)が見積もれる。	高：超伝導状態発生メカニズムの解明と新たな高温超伝導の提案
2020年頃(1Eflops級)	高温超伝導物質の探索	成熟期：サイズ効果を無視できる巨大な系の計算が可能な段階。	高：密度行列繰り込み群法によるハバード模型等の数値的厳密解が求まる。第一原理量子モンテカルロ計算による数千原子のシミュレーションが可能になる。	高：室温超伝導体設計への指針を提供。電気ロスのない送電の実現、リニアモーターカーの開発加速など。



# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 9 >

## ひとりひとりを個別に扱う社会現象シミュレーションとその設計・開発

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	現象の分析と再現	黎明期 : スパコンの応用が検討され始めた段階	低 : 社会現象の数理的理解の可能性を模索していた段階で、スパコンの使用はデモンストレーションに留まる	中 : 世界的な感染爆発のシミュレーションなど、扱いやすいいくつかのトピックスにより社会現象へのスパコンの応用が啓蒙された。
現時点(10Pflops級)	現象の予測	成長期 : スパコンの利用を想定した研究が主流となり始める段階	中 : 個々の証券取引や市町村レベルの交通といった限定的な社会現象の再現と予測	高 : 社会データの分析により現象を精査し、シミュレーションモデルを構築して活用することが広まってきた。
2020年頃(1Eflops級)	現象の制御	成熟期 : 社会事象の理解・予測・制御にスパコンが不可欠となり始める段階	高 : 世界規模の社会システム全体のシミュレーションに基づく予測と制御	社会運営と不可分 : 社会シミュレーションが現実に留まらず、数多の可能性・シナリオをも瞬時に検討できるようになる。個々人の日常生活はじめ経済・行政・政治活動でも的確な選択が可能となり、効率的な社会に不可欠な技術となる。

## エネルギー損失の少ない次世代デバイス原理の創出

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	基礎理論の構築	黎明期 : 基本的なモデルに対する計算の段階	低 : 基本的な量子格子模型に対する応用。ただし、並列計算にも対応したアルゴリズム開発も重要な課題。	中 : 基礎理論の構築が主要なテーマ
現時点(10Pflops級)	現象の解明	成長期 : 応用は限定されるが、現象の解明に適用される	中 : 伝送電子との相互作用を取り入れた1万スピンの熱力学的に平衡な条件でのモンテカルロシミュレーションが可能。磁気スカーミオンの生成・消滅機構の解明。	中 : 応用に向けた計算が可能になりはじめ、特定の現象が明らかになる。
2020年頃(1Eflops級)	次世代デバイス原理の提案	成熟期 : 量子ダイナミクスのシミュレーションが可能な段階	高 : 伝送電子との相互作用を取り入れた数十万スピンの量子分子動力学シミュレーションにより磁気スカーミオンのダイナミクスの解明。	高 : 与えられた条件下のダイナミクスの解明が可能になり、エネルギー消費の少ない次世代デバイス原理を提案できる。

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 1 0 >

## 未知なる自然法則のあくなき探究

	スパコンへの期待	スパコンの役割	スパコンの課題解決能力	波及効果 (実現後、10年から20年での実用化)
2006年頃(100Tflops級)	既知の自然法則に基づく物理現象の半定量的理解	成熟期：1980年代以降、計算素粒子物理学はスパコンを最大限に活用。この時代は、世界的に見てBlue Geneシリーズの独り勝ち状態。	B：強い相互作用は非摂動効果が本質的であるため、数値的手法を用いた大規模非摂動計算が不可欠。100Tflops級のマシンを用いた計算では、ハドロン(クォークの複合粒子、陽子・中性子など)単体の諸性質を10%レベルの精度で半定量的に理解可能。	小：強い相互作用におけるハドロン単体の諸性質解明が主な研究対象であるため、他分野との連携や波及効果は少ない。
現時点(10Pflops級)	既知の自然法則に基づく物理現象の定量的理解	成熟期：小・中規模計算であれば、GPUによる演算加速超並列計算機も最大限に活用。大規模計算では、「京」、FX10、BG/Qなどが主力マシン。	A：強い相互作用と電磁相互作用を組み合わせたマルチフィジックスシミュレーションや、クォークから原子核を直接構成するなどのマルチスケールシミュレーションが可能となる。強い相互作用に関しては、1%レベルの精度の定量的議論ができるようになる。	増加：マルチスケールシミュレーションによって複数ハドロンの多体問題が扱えるようになり、原子核物理との連携が可能となる。また、強い相互作用と電磁相互作用を組み合わせたマルチフィジックスシミュレーションが可能となり、将来的には原子物理への展開が期待できる。
2020年頃(1Eflops級)	新たな物理現象と自然法則の探索	成熟期：演算加速型超並列計算機による大規模計算が主流になっていくと予想。	A+：マルチフィジックスシミュレーションの精度を更に上げることによって、素粒子精密実験との連携による新しい物理の探索が可能となる。また、大規模数値シミュレーションを用いた定量的解析による物理学者長年の夢である統一理論の構築と選択が現実的な課題となる。	大：標準理論(強い相互作用・電磁相互作用・弱い相互作用を記述する理論)の計算精度向上と標準理論を超える新しい理論候補の大規模シミュレーションの実現により、素粒子物理学の枠内において実験や理論との密接な連携が可能となる。また、原子核物理との連携が深化するとともに、原子物理への展開が実現される。

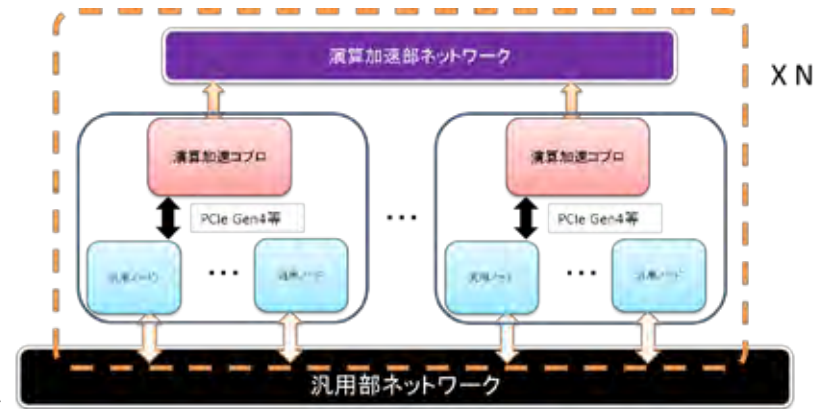
# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 )

## ( 3 ) 利活用と効果 ( 有効性 )

「京」と「エクサスパコン」の仕様で連続性がある部分と非連続な部分を比較できるような資料を提出いただきたい。

**提案システムは、汎用部のノードに演算加速プロセッサ（演算加速部）を付加し、強化したものだ。汎用部は「京」のアーキテクチャの延長にあるもので、汎用部のみを利用の場合は「京」と連続性がある。演算加速部を利用する場合には、加速部の部分は新規のプログラミングが必要。**

- 演算加速部のプログラミングについては、現在ノード内並列化のために使われているOpenMPおよびOpenACCと同様に、コンパイラ指示文を追加する方式を採用し、できるだけ連続性を保持し、移行のためのプログラミングのコストを低減できるようにサポートする計画。
- 演算加速部を利用できる場合には、強スケーリングによる高速化、電力効率の改善が可能。
- 実行環境については、汎用部は「京」と同じLinux環境を提供することにより、同じ実行環境を提供する。加速部においても汎用側Linux環境に処理を委譲するため、ユーザから見るとLinux環境が提供されているように見える。



# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 1 >

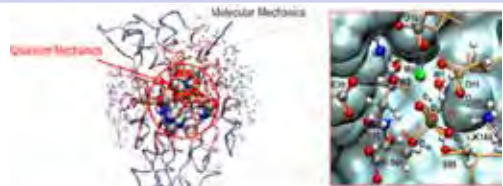
## ( 3 ) 利活用と効果 ( 有効性 )

「地球シミュレータ」や「京」を利用した極めてインパクトのある学術論文にどのようなものがあるか？それらがどのように学術に革新をもたらしたか？

研究者の評価はどのようになっているのか。アプリケーションごとに著名なジャーナル等での引用数やインパクトファクターの大きい論文を纏めた資料を提出いただきたい。

### スパコン等の活用により得られた画期的な成果の事例

2013年10月9日プレスリリース



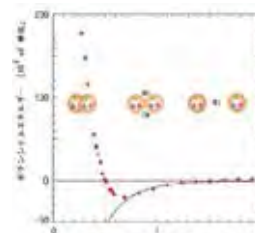
#### ◆ノーベル化学賞2013 ～計算科学分野で 受賞～

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。

出典：Suyong Re, Jaewoon Jung, Sei-ichiro Ten-no, and Yuji Sugita, J. Comp. Chem. 32 (2011) 260-270.

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。

2008年01月16日プレスリリース



出典：東京大学理学系研究科  
プレスリリース

英国の著名な学術誌Natureによる2007年の21件のハイライト研究に選ばれた。

#### ◆スパコンによる核力の起源 解明がNature誌ハイライト 研究に選出。

筑波大学と東京大学の研究グループが、KEKのスーパーコンピュータを使った数値シミュレーションにより、核力の起源を

2001年05月28日プレスリリース

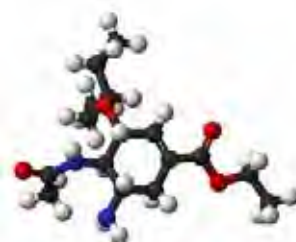


出典：TIME誌  
(2001年5月28日発行)

#### ◆がん治療薬であるメシル酸イマチニブ (商品名：Gleevec)は 設計開発にコンピュータが活用された 低分子型分子標的薬

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。

1996年09月17日プレスリリース



出典：wikipedia

#### ◆設計開発にシミュレーション が用いられたリン酸オセルタミビル (商品名：タミフル)

インフルエンザ治療薬として用いられるリン酸オセルタミビルはコンピュータを用いた効率的なドラッグデザインにより開発されたインフルエンザウイルスの持つ酵素の働きを阻害する分子標的薬である。

インフルエンザ治療薬として用いられるリン酸オセルタミビル



# 1. 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 2 >

## 地球シミュレータ

2002年に稼働を開始した地球シミュレータ、さらには2009年に稼働を開始した地球シミュレータ2により、地球温暖化予測に資する気候変動メカニズムをはじめとして多くの成果を輩出。特に学术论文ではNature誌に7件、Science誌に5件の論文が掲載。また、温暖化予測モデル高度化等により気候変動に関する政府間パネル ( IPCC ) 第5次報告書に大きく寄与する温暖化研究を実施。

### 地球外核内の新しい対流構造を発見

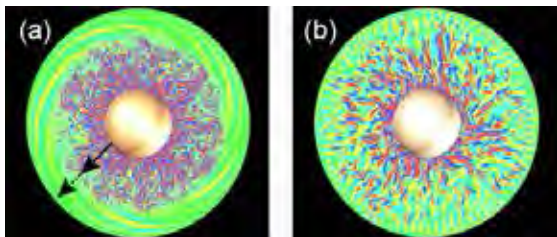
地球環境と密接に関係する地球磁場形成メカニズム解明に寄与

タイトル : Zonal flow formation in the Earth's core  
著者名 : 宮腰剛広、陰山聡、佐藤哲也

#### < 研究内容 >

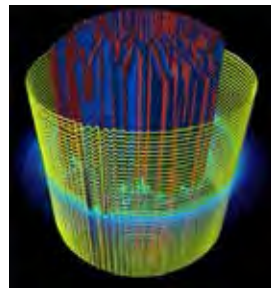
高解度シミュレーションにより地球の外核において、それまで分かっていたシート状の形をしたものだけでなく、特徴の異なる二種類の流れからなる二重対流構造を形成することをはじめて解明

#### 外核内の対流構造



(a)は低粘性モデル、(b)は粘性が高いモデル。  
粘性が低い(a)では二重対流構造がみられる

#### 対流三次元構造



Nature誌に掲載(2010.2.11)

### IPCC貢献地球環境予測プロジェクト

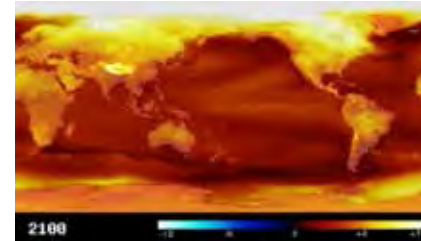
気候変動対応の政策へ科学的基礎を提供

文部科学省の委託研究「21世紀気候変動予測革新プログラム」、および環境省の委託研究「地球温暖化に係る政策支援と普及啓発のための気候変動シナリオに関する総合的研究」の一部を実施。

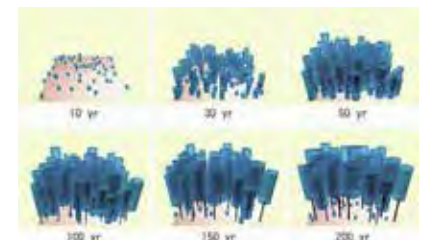
#### < 実施内容 >

- ・温暖化予測モデルの高度化
- ・予測不確実性の低減
- ・自然災害影響評価に関する研究を推進

#### 地球温暖化長期予測モデル



#### 森林火災後の200年間の典型的な相対変化



IPCC第5次評価報告書へ寄与



# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 3 >

## スーパーコンピュータ「京」

< これまでに発表された極めてインパクトのある学術論文 >

「京」については、昨年9月末に共用開始されて1年経過したばかりであり、またいずれの課題においても利用期間中であることから、インパクトファクター ( IF) の高い論文への掲載については、今後期待されるところであるが、現時点で把握しているIFの高い論文 ( IF 1 以上 ) は各分野で以下の通り ( なお、各課題の研究で掲載されている論文については現在照会中であり、現時点で把握できていないものもある )

<医療・創薬> 雑誌名	Impact Factor	件数	<物質・エネルギー> 雑誌名	Impact Factor	件数	<環境・減災> 雑誌名	Impact Factor	件数	<基礎物理> 雑誌名	Impact Factor	件数
PLoS One	4.09	2	Phys. Rev. Lett.	7.37	2	Geophys. Res. Lett.	3.79	1	The Astrophysical Journal Supplement	13.46	1
J. Synchrotron Rad.	2.73	1	J. Chem. Theory Comput.	5.22	1	Journal of the Atmospheric Sciences	2.56	1	The Astrophysical Journal	6.02	8
Gene	2.34	1	Phys. Rev. B	3.69	5	J. Meteor. Soc. Japan	1.23	1	Physical Review D	4.56	2
Chem. Phys. Lett	2.34	2	Phys. Chem. Chem. Phys.	3.57	1				Phys. Rev. C	3.31	2
J. Mol. Graph. Model.	2.18	1	J. Phys. Soc. Jpn.	2.36	1				Progress of Theoretical and Experimental Physics	2.29	1
<数理科学> 雑誌名	Impact Factor	件数	Chem. Phys. Lett.	2.34	1	<ものづくり> 雑誌名	Impact Factor	件数	Nuclear Physics A	1.54	1
Phys. Rev. Lett.	7.37	1	Int. J. Quantum Chem.	1.36	1	Journal of Computational Physics,	2.31	1			
						Computers & Fluids	1.81	1			

計40件

# 1. 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 4 >

## インパクトのある学術論文における成果例について

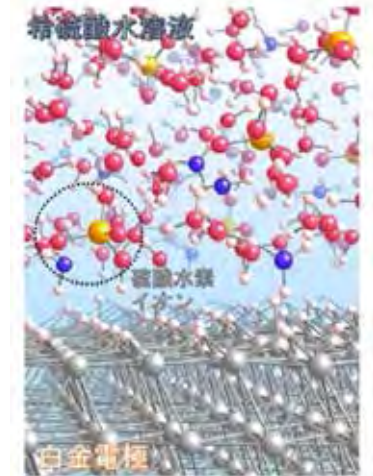
### ● 燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究 (研究代表者：東京大学 物性研・杉野 修)

#### < 成果概要 >

第一原理分子動力学計算において、ESM(有効遮蔽体法)とconstant  $\mu$ (電位差を一定に保つ手法)を新たに開発し、界面に電位差を与えて電極触媒反応を扱うことが可能となった。これにより、電位差を入れた計算がより精巧に行えるようになった(参考文献[1])。この方法論は世界的にも注目されており、海外の主要アプリに導入されている。また、「京」の計算機資源により統計力学的に十分な回数 of シミュレーションが可能となり、自由エネルギーに基づく議論が可能となり、電極反応の理解が質的に向上した。

#### < 意義 >

今燃料電池の開発上重要な電極触媒反応を、原子スケールの量子シミュレーションから明らかにするための基盤が構築された。燃料電池反応に対する電極や水溶液の影響の計算が進められ、企業研究者等も交えた絞り込みを加速させ、開発上の鍵となる問題を設定して解明することにより、高効率化と高耐性化に資する知見を獲得することが期待できる。



水素原子で被覆された白金電極と希硫酸水溶液界面のシミュレーション

[1] "First-Principles Molecular Dynamics at a Constant Electrode Potential", N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino, and M. Otani, Physical Review Letters 109, 266101(2012).

## ゴードンベル賞の受賞について

「京」を利用した成果としては、HPC分野におけるアプリケーションの実性能と計算科学の成果に対して与えられる権威ある賞のゴードンベル賞を2年連続で受賞。

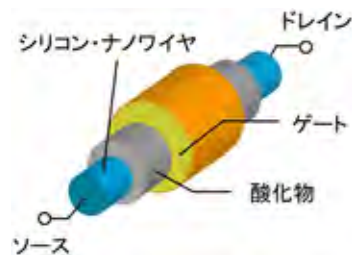
2011年 シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算 (実空間密度汎関数法 (RSDFT) の高並列コード)

2012年 ダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算 (TreePM法の高並列アプリケーション)

2011年11月18日プレスリリース

### ●シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算によるゴードン・ベル賞の受賞

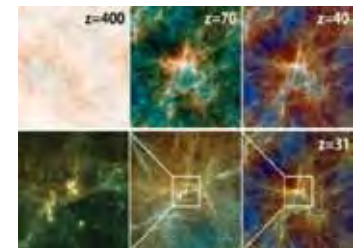
実効性能3.08ペタフロップス (実行効率約43.6%) を達成。次世代デバイスのサイズであるナノレベルの高精度シミュレーションを可能とし、京による先端的物質科学計算がナノデバイスの設計指針に大きく貢献することを示した。



2012年11月16日プレスリリース

### ●ダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算によるゴードン・ベル賞の受賞

実効性能5.67ペタフロップス (実行効率約55%) を達成し、これまでより微細なダークマター構造の解明によるダークマター粒子の探査、正体解明のために重要な成果を上げた。



# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 5 >

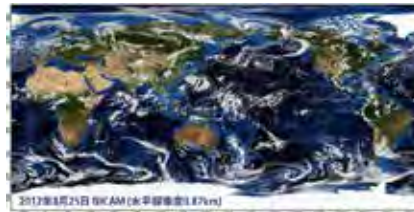
また、その他の「京」を利用した最近の成果例は以下の通りである。

2013年9月20日プレスリリース

## 「京」を利用した世界初の超高解像度全球大気シミュレーションで積乱雲をリアルに表現 ～ 台風や集中豪雨などの発生メカニズムの解明に寄与～

一つ一つの積乱雲から全球規模の積乱雲群との相互の関係をより正確に調べることが可能に

台風や、集中豪雨などの発生メカニズムの解明、雲の気候への影響の研究などへの寄与が期待



図：2012年8月25日12時（世界標準時）の全球の雲分布

計算科学研究機構

複合系気候科学研究チーム

論文：“Deep moist atmospheric convection in a subkilometer global simulation”, Geophysical Research Letters

ジャーナルインパクトファクター 3.982

### 【報道等】

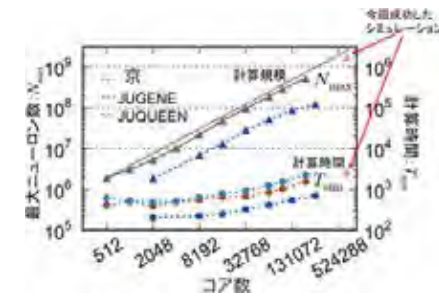
- 9月21日の産経新聞、毎日新聞、神戸新聞など全件及びYOMIURI ONLINE等Webに掲載。
- 米国地球物理学連合（AGU）のResearch Spotlightに選定される。

2013年8月2日プレスリリース

## 「京」を使い10兆個の結合の神経回路のシミュレーションに成功 ～ 世界最大の脳神経シミュレーション～

ヒトの脳の学習機能などを精密かつ自在に表現するシミュレーション技術の進展につながる成果

人間の脳全体のシミュレーションに必要なメモリー量と計算速度の比率の解明により、脳全体のシミュレーションの研究の促進が期待



図：ヨーロッパ最高速のJUQUEEN（ユークイン）と「京」によるシミュレーション結果の比較

理化学研究所、沖縄科学技術大学院大学、ドイツユーリッヒ研究所  
共同研究に参加

### 【報道等】

- 8月3日の朝日新聞、北海道新聞など全5件及び神戸新聞NEXT等Webに掲載。
- また、海外においても、16か国100以上の記事がとりあげられている。

# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) 、 < 6 >

## 学术界からの課題参加者と研究分野及び成果の実績

学术界における「京」の利用は、医療・創薬、新物質・エネルギー開発、ものづくり、災害予測、天文宇宙など広範な分野にわたっており、戦略プログラム利用枠や一般利用枠などを利用した研究がスタート。

学术界からの利用者は、課題数で96件、課題参加者数で延べ896人に達している。

「京」の持つシミュレーション精度や計算速度の飛躍的な高さを活かした世界最高水準の成果が得られつつある。

「京」利用開始以降、既に約650件（内、査読付き論文:65件）の成果報告あり。

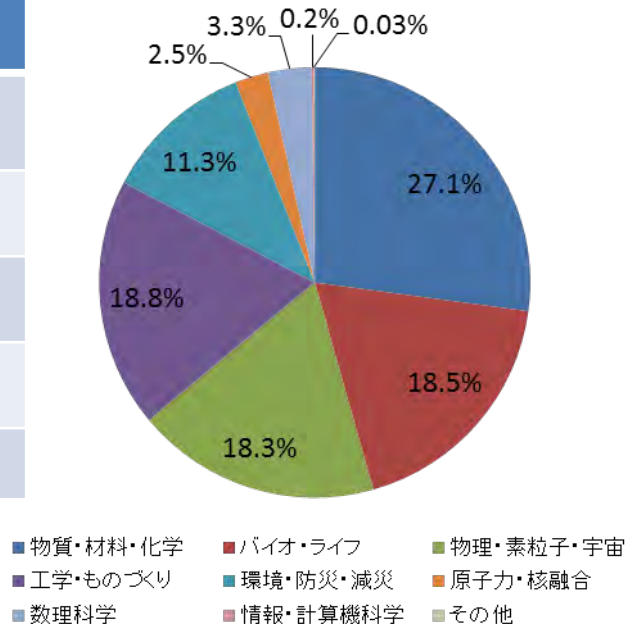
学术界における利用課題数と課題参加者数

	課題数	課題参加者数
一般利用課題	36	285
若手人材育成利用課題	12	12
産業利用課題*	19	55
戦略プログラム利用課題	29	544
合計	96	896

（平成25年10月22日時点）

\*トライアル・ユース課題含む

学术界からの課題参加者における利用分野別の配分資源量の割合



学术界からの「京」利用の成果発表件数

	「京」一般利用	戦略プログラム	合計
論文	24	58	82
国際会議・シンポジウム	60	154	214
国内会議・シンポジウム	66	135	201
研究会等	43	48	91
特許出願	0	2	2
その他	9	47	56
合計	202	444	646

（平成25年10月25日までに確認された情報に基づき集計）







# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) < 1 >

## ( 3 ) 利活用と効果 ( 有効性 )

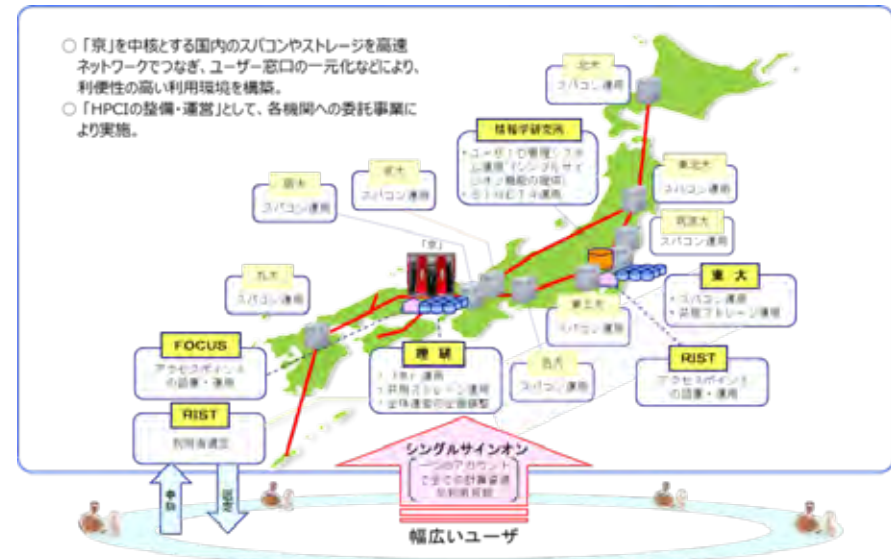
今回、ハード研究者、システムソフト研究者、アプリ研究者でのCo-design体制が取られようとしている。大学におけるコンピュータシステム関連の教育の中で、この3者のCo-design教育をしっかりとやる必要があると考えられる。大学の情報基盤センターとの協力や大学院教育への関わりについて、現状と将来構想を教えてください。

現状：

- 大学院教育に対しては、AICSでは連携大学院による連携講座として大規模計算科学講座の実施、スクールによる大学院生等への人材育成、などを実施
- 大学等における人材育成の試み・co-designのための教育例
  - 情報基盤センターでの講習会
  - 計算科学デュアルディグリープログラム ( 筑波大 )
  - 神戸大学 計算科学専攻
- HPCI戦略プログラムにおいては、5分野の中核機関を中心に、各計算科学分野のスクール、講習会等が開催されている。

HPCIについて

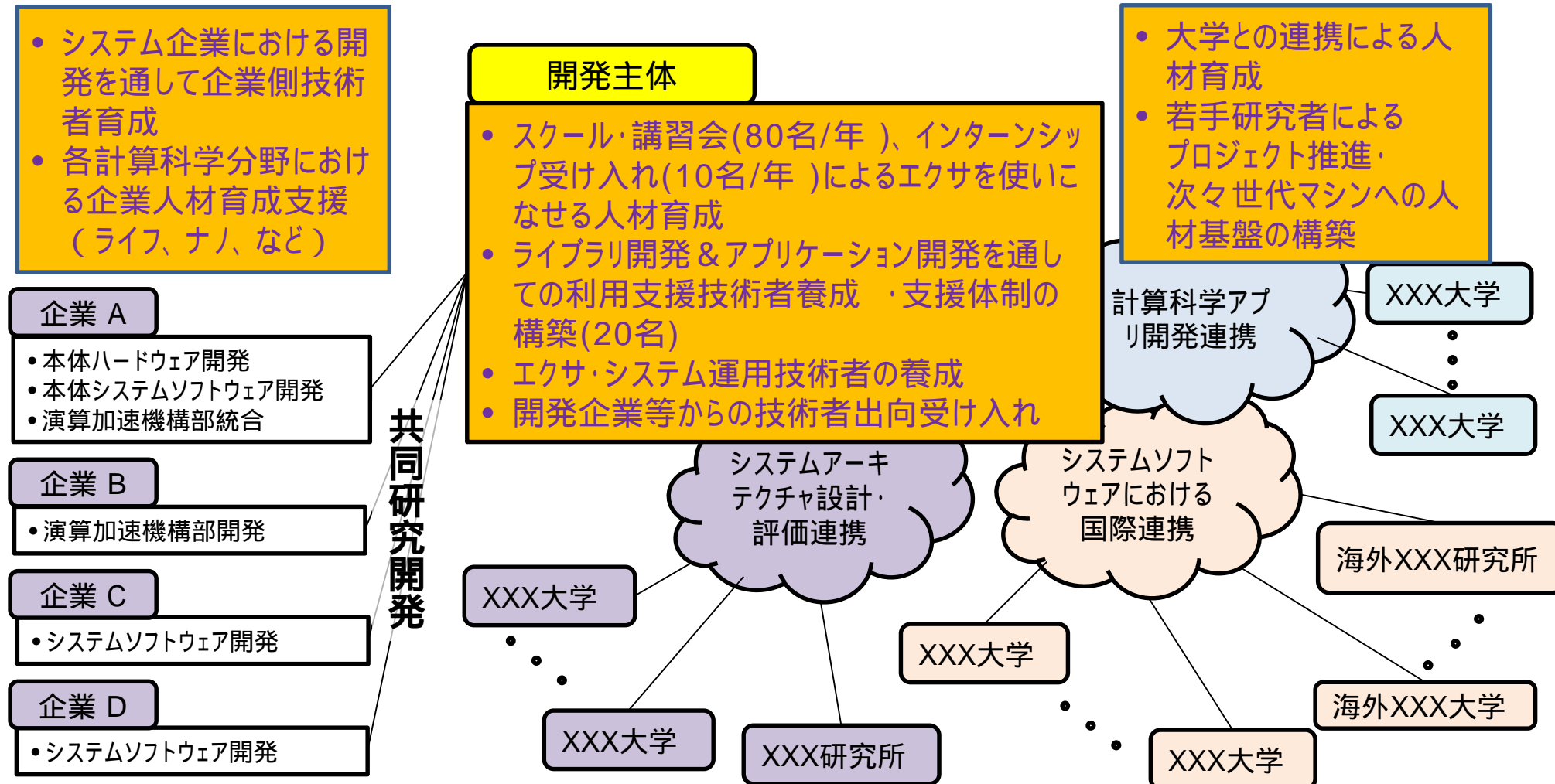
- 現状の大学の情報基盤センターとの協力関係については、「京」を中核としたHPCIシステムを連携して構築・運営しているところ。
- 今後のHPCI計画においては、フラッグシップシステム ( エクサスケール・スーパーコンピュータ ) と、それを支える複数の特徴あるシステムからなるリーディングマシンとして整備して行くことが検討されている。



# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) < 2 >

将来構想 :

- エクサスケール・スーパーコンピュータの開発を通して、企業や大学を含むAll Japan体制での連携によるCo-designを実施し、当該連携を通じた人材育成を図る。
- インターンシップ制度、開発企業等の出向の受け入れにより、開発を通じた人材育成を実施
- ライブラリやアプリ、および運用支援についての技術者養成と支援体制の構築



# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 )

## ( 3 ) 利活用と効果 ( 有効性 )

日本全体のシミュレーションの底上げのために、エクサスパコンの成果の商用展開は重要な課題である。京コンピュータ (FX-10) が国内外の数カ所の機関にしか普及していない現状を踏まえ、エクサ計画の成果の普及・社会実装 (エクサスパコンのスケールモデルの商用展開) についてどのように考えているのか?

- 国家基幹技術として開発されるスパコンの商用展開は、重要な観点であり、科学的な利用に留まらず、産業界でも利活用されるようなシステムとなることが重要であるが、実際の商用展開については、ユーザー・コミュニティ構築・支援と同時に、システム開発メーカー側の取り組みが重要
- 「京」で開発した技術等の展開については、FX10が国内外の13機関に導入されているのみならず、「京」やFX10で培った技術をもとに、ハイエンドサーバ向けのSPARC64X (テン) プロセッサを開発し、基幹業務システム向け高性能・高信頼サーバを製品化している。
- 開発されたシステムについては、大学等のスパコンセンターへの展開を期待。
- 汎用部のプロセッサについては、「京」での技術と同様にサーバーへの技術転用の展開を図る。
- 加速部に関しては、以下の2つの方向性を想定している。
  - 現在のGPUと同じように、汎用のクラスタの加速装置として付加したシステムを商用展開
  - ビックデータ解析等のエンジンとしてサーバーシステムに組み込み、展開することも考えられる
- ポスト「京」で開発されたソフトウェアについては、重要な成果として、システムとパッケージで展開も検討

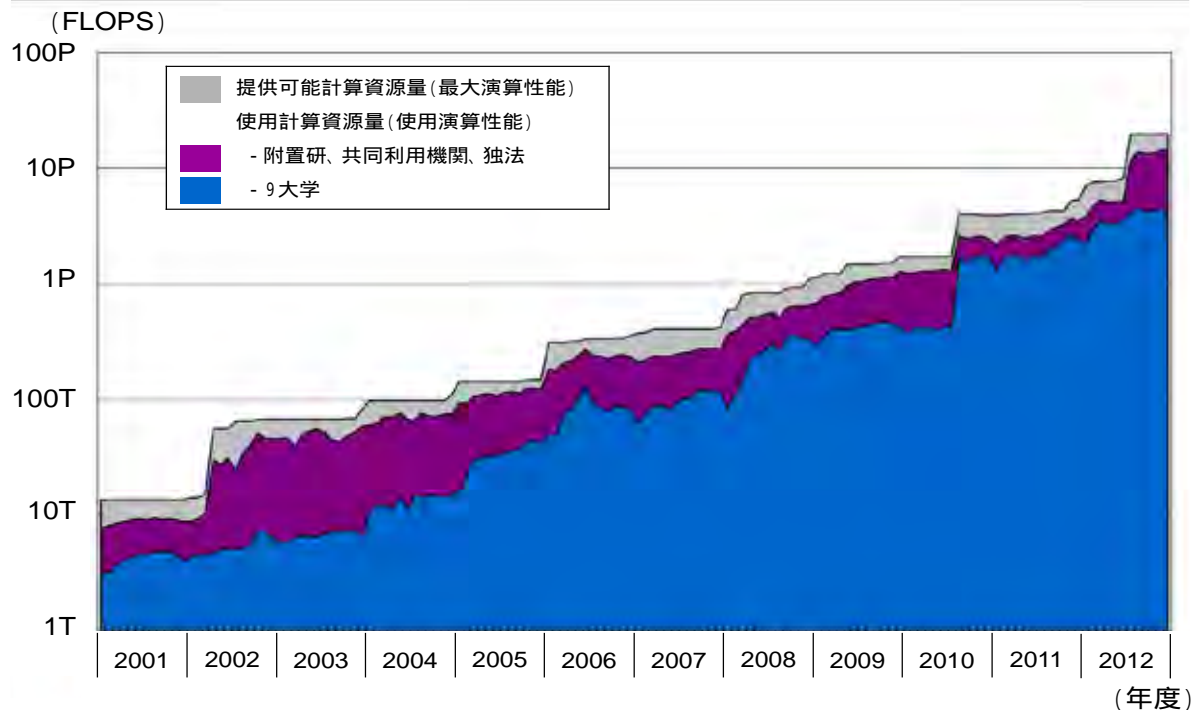
# 1 . 追加の説明を求める事項 ( 3 ) < 1 >

## ( 3 ) 利活用と効果 ( 有効性 )

「国内の総計算能力」という考え方は、全国の計算基盤センターや「京」との連携やスパコン全体としての方策を明確化する上で有効であると感じる。2020年に置いて、国内の総計算能力としてどれくらいを目標とするのか、という観点での議論はされているか？

- 有識者委員会（今後のH P C I計画推進のあり方に関する検討WG）において、平成25年6月に中間報告をとりまとめ、我が国にける計算科学技術インフラの在り方等について検討。
- 社会的・科学的課題の解決、諸外国の動向や技術的な動向を踏まえ、2020年頃までにエクサスケールコンピューティングの実現を目指すことが適当とされた。

## 9 大学、附置研、共同利用機関、独法の計算資源量合計



- Ⅰ 我が国の総計算能力は着実に増加。2001年～2012年の間毎年平均1.8倍の伸びとなっている。
- Ⅰ システムの増強に伴い使用量が急増していることから、現在の計算能力では利用者のニーズを満たしていない。