

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報告書（案） 概要

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

本検討委員会の概要

○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。

○検討経緯

- 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」の社会的・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（平成26年8月20日）
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） | 関口 和一（日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員） |
| 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） | 龍澤 美奈子（科学ジャーナリスト） |
| 大隅 典子（東北大学大学院医学系研究科教授） | 土屋 裕弘（田辺三菱製薬代表取締役会長） |
| ◎ 小宮山 宏（三菱総合研究所理事長） | ○ 土居 範久（慶應義塾大学名誉教授） |
| 城山 英明（東京大学公共政策大学院院長） | 土井 美和子（独立行政法人情報通信研究機構監事） |
| 住 明正（国立環境研究所理事長） | 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）

はじめに

第1章 プロジェクト概要

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（本プロジェクト）の目的、本プロジェクトの事業内容や全体推進スケジュールについて記載。

第2章 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

委員会での議論や委員からの御意見を踏まえまとめたポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）の選定の基本的な考え方、重点課題に求められる要件（選定方針）、選定した重点課題について記載。

第3章 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・研究開発の進め方

委員会での議論や委員からの御意見を踏まえまとめた本プロジェクトの推進体制、成果の早期創出及び最大化に向けた取組（コデザインを進め方）、重点課題実施機関の公募の進め方について記載。

第4章 ポスト「京」の計算資源配分

委員会での議論や委員からの御意見を踏まえまとめたポスト「京」の計算資源配分の基本的な考え方、計算資源配分の骨子について記載。

おわりに

プロジェクト概要（第1章）

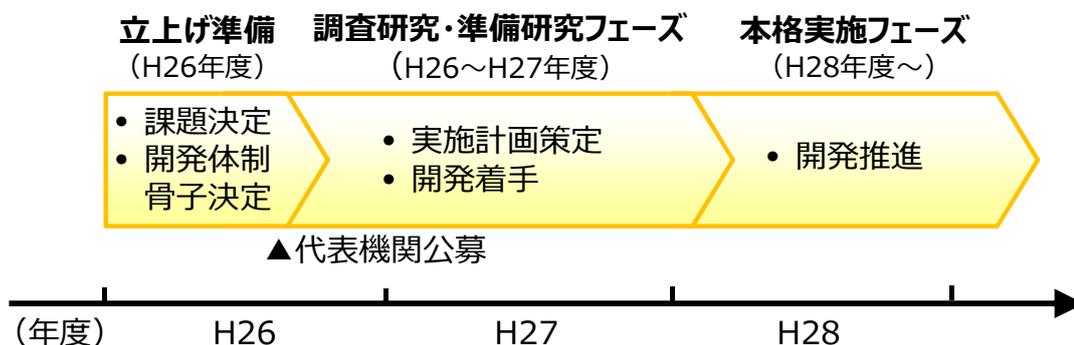
【プロジェクトの目的・狙い】

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・科学的課題を予め選定し、**

- これら課題の解決に資するアプリケーションの開発や課題に関する研究開発の**推進に必要な体制を構築**するとともに、
- 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、更には、これらのアプリケーションを利活用して行う重点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、**戦略的にポスト「京」を活用し、世界を先導する成果の早期創出**を図るとともに、**ポスト「京」システム全体として成果を最大化し、国際競争力のあるシステムを実現**することを狙いとする。

【プロジェクト推進スケジュール】



ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の選定方針（第2章）

ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題は、以下の3つの基準に基づいて選定。
なお、本基準は、プロジェクトの基本的な考え方に係るものであり、重点課題選定時のみならず、プロジェクト実施の段階においても尊重すべきもの。

（1）社会的・国家的見地から高い意義があるか。【必要性の観点】

- ① 我が国を取り巻く社会的・科学的課題の解決に貢献できること。

（2）世界を先導する成果の創出が期待できるか。【有効性の観点】

- ① 科学的なブレークスルーや我が国の産業・経済への波及効果が期待されること。
- ② 成果創出に向けて、計算科学者や理論科学者に加え、計算機科学者、応用数学者、社会学者、実験・観測科学者、産業界や自治体等の関係者などが連携・協調した開発体制を構築できる見通しがあること。

（3）ポスト「京」の戦略的な活用が期待できる課題か。【戦略的活用の観点】

- ① ポスト「京」によりはじめて可能となる超大規模計算・データ解析であること。
- ② 俯瞰的にみてポスト「京」の十分な活用が期待できること。
- ③ ポスト「京」の利用による投資効果が明確であること。

4

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（第2章）（1/3）

1. 重点課題（9課題）

「京」からの発展として世界を先導する成果の創出が期待でき、選定方針に沿う課題。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	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。
	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。
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。
	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。

5

1. 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	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 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。
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 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、超高効率・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	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 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。
	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 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	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 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。

2. 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	⑩ 基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦 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。
	⑪ 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 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。
	⑫ 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 宇宙、地球・惑星、気象、分子化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、星間分子化学を探究する。
	⑬ 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 革新技術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人間の精神活動を脳の物理的実体にねざして再現し、人工知能への応用をはかる。

ポスト「京」重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制のポイント（第3章）

【プロジェクト全体推進体制】

ポスト「京」を活用し、世界を先導する成果の創出を目指すという戦略性が求められるとともに、アプリケーションとシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を協動的に設計開発するコデザインが求められることも踏まえ、全体的な観点からプロジェクトを定常的かつ強力にフォローアップする**全体推進機関**を設置。

【各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制】

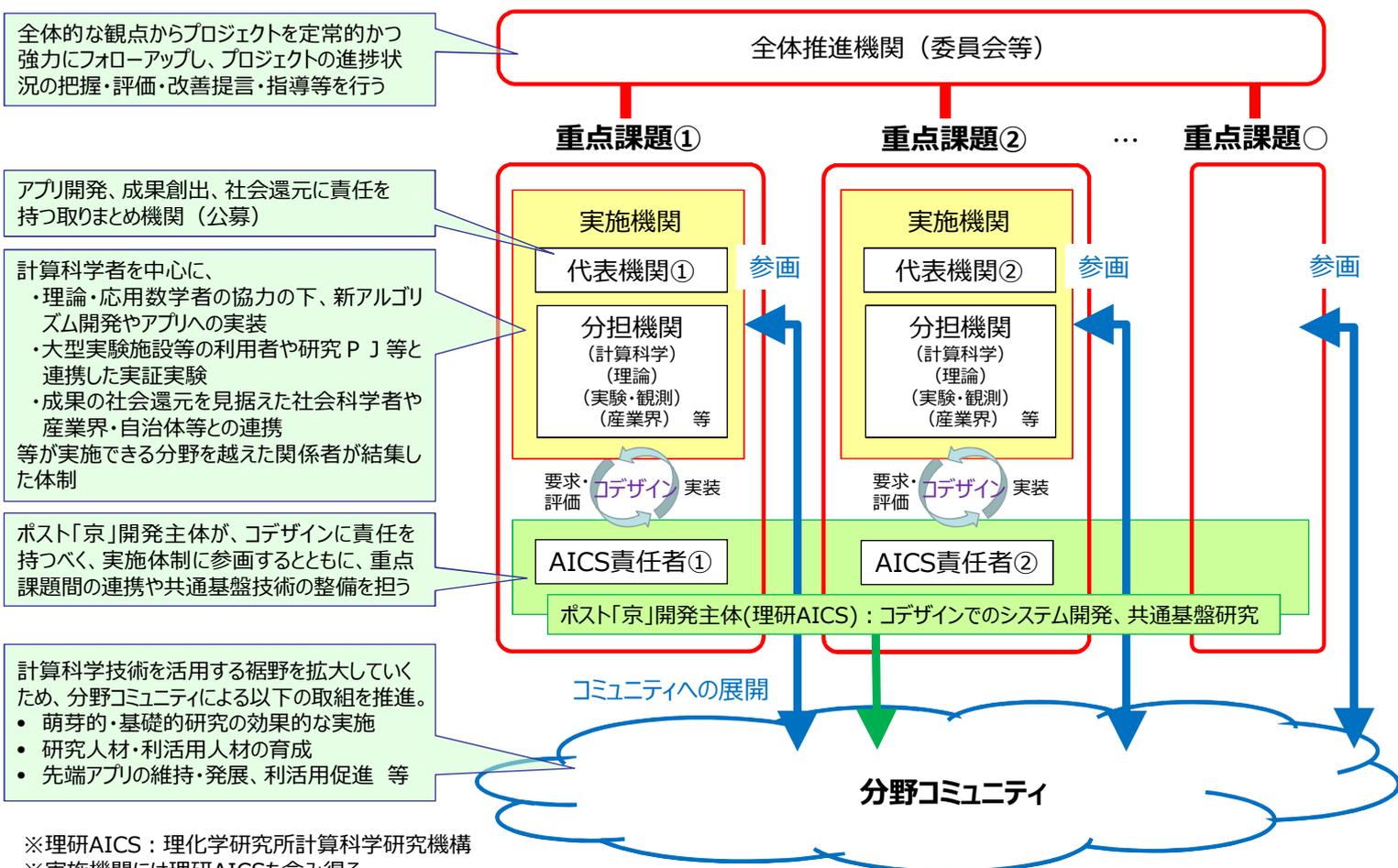
本プロジェクトは、HPCI戦略プログラムの後継プロジェクトに位置付けられるため、**HPCI戦略プログラムの現状と課題等も踏まえ**、各重点課題の推進体制として、以下の要件を満足する推進体制を構築。

1. 社会的・科学的課題の解決に貢献し、世界を先導する成果を創出できること。
 - アプリケーション開発、アプリケーションの利活用による成果創出、成果の社会還元へ責任を持つ**代表機関**が必要。
 - 成果創出のため、分野を越えた計算科学者、理論科学者、応用数学者、実験・観測科学者、他プロジェクト、社会学者、産業界や自治体等、**関係者が連携・協調した実施体制**（代表機関+分担機関）が必要。
2. ポスト「京」を最大限に活用できること。
 - ポスト「京」とアプリケーションの相乗効果を最大限に発揮し、成果を早期に創出するためには、**ポスト「京」開発主体の積極的な関与**が必要。
 - **課題横断的に必要となる基盤技術**の効果的な整備のため、ポスト「京」開発主体を中心とした取組が必要。

なお、ポスト「京」を中核とした計算科学インフラを幅広い領域に適用し、計算科学技術を活用する裾野を拡大していくためには、トップダウンにより選定した重点課題への取組だけでなく、HPCI戦略プログラムにおける活動を踏まえ、分野コミュニティによる、萌芽的・基礎的研究の効果的な実施、研究機関及び企業における研究人材・利活用人材の育成、先端アプリケーションの継続的な維持・発展、利活用促進等も重要。

8

ポスト「京」重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制のイメージ（第3章）



9

【コデザインの実施】

- 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（コデザイン）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コデザインを進めるため、重点課題に関するアプリケーションの中からコデザインのターゲットとするターゲットアプリケーションを絞り込むことが必要。
- 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。

公募について（検討中）（第3章）

【スケジュール】

- 平成26年秋頃 ：公募期間
- 平成26年秋～冬頃 ：公募に係る審査、代表機関等の決定、事業開始

【公募の内容】

- 各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発について、以下の提案を募集
- 代表機関としての全体提案
 - 分担機関としての部分提案

【公募に係る審査】

審査により、代表機関を決定するとともに、サブ課題及び推進体制の大枠、部分提案への対応を決定。

ポスト「京」の計算資源配分について（第4章）

「京」での実績・経験、委員会でのご意見、HPCIコンソーシアム提言等を踏まえ、ポスト「京」の計算資源配分は以下のとおりとする。

(計100%)



①重点課題枠

重点課題に対し、文部科学省が配分内容を決定（非公募）。

②一般利用枠、分野振興枠

一般利用枠は、幅広い研究課題が対象（公募）。分野振興枠は、分野コミュニティに対し、文部科学省が配分内容を決定（非公募）。

③産業利用枠

産業界による自社および企業コミュニティの研究課題が対象（公募）。

④政策対応枠

政策的、重要かつ緊急な課題の実施（課題が設定されれば、他の利用枠より優先的に実施）（非公募）。

⑤調整高度化枠

ポスト「京」の安定運転のためのシステム調整、ユーザ利用支援のための研究開発、幅広いユーザの利用に資する高度化研究を実施。

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

概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点** 新規エネルギー源の確保、効率的な変換、貯蔵、利用技術の開発は我が国喫緊の重要課題であり、既存の多数の国家プロジェクトとの連携や発展途上国でのエネルギー施策などへの国際貢献が強く期待されている。
- (2) **有効性の観点** エネルギーの創出、変換・貯蔵、利用に関する複雑な現実系の全系シミュレーション技術の開発は、我が国のエネルギー基盤技術のブレークスルーに繋がる。大規模プロジェクト、実験・企業研究者や計算機科学者との強力な研究体制が育ちつつある。
- (3) **戦略的活用の観点** 複雑な要素が相互に相関する複合系の微視的挙動を対象とした大規模、長時間シミュレーションは、ポスト「京」を駆使して初めて可能である。小規模系などへの適用で産業への展開が可能、大きな波及効果となる。

内容の詳細

サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保

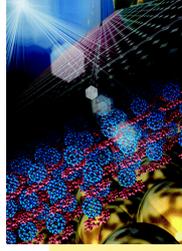
光をエネルギーに変換する過程の電子論を解明し、新しい有機系太陽電池や高性能人工光合成系を設計・開発する。

サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵

電池内で起こる全過程を物質構造と直接関連させるシミュレータを開発し、低コストの汎用元素を用いた二次電池や燃料電池開発の基盤技術を確立する。

サブ課題C エネルギー・資源の有効利用

高効率触媒の理論設計・開発や効率的な物質の分離技術により、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。特にメタンハイドレート



フラーレン太陽電池
ACSから許可: H. Imahori and T. Uneyama
J. Phys. Chem. C, 113, 9029-9039 (2009)



メタンハイドレートの分解

ポスト「京」利用の必要性

経験に頼ったエネルギー関連複合材料の開発では革新的新材料は生み出せない。物理と化学の基礎方程式から出発した大規模計算に基づく計算科学的な設計・制御が必要。

「京」では、部分系、モデル系に対する計算に止まる。エネルギー問題の解決には複合物質の全系シミュレーションが必須。また、工業的に使用される条件や実験条件下での多数の統計量に基づいた解析も重要。これらの計算を実施するには、「京」で10~50年はかかると考えられ、ポスト「京」の使用が不可欠。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト「京」で占有日数は、最低でも80日程度必要。

期待される成果・波及効果

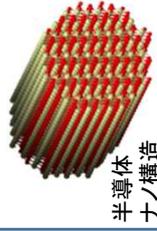
- ・ 変換効率の高い太陽電池を安価な元素や有機系で実現し、実用化を促進、また人工光合成系の確立により新規エネルギー源を確保する。
- ・ 安価で高速充電、高容量の二次電池や高効率の燃料電池の開発を可能とする。
- ・ 白金などの貴金属を使用しない高機能触媒の開発により、エネルギー多消費型物質生産の革新を達成する。
- ・ ハイドレートの生成・分解過程の解明により、メタンの効率的な分離、精製方法、安全な貯蔵技術を確立する。
- ・ 二酸化炭素を低コストで捕集・変換する技術を開発し、地球規模での二酸化炭素抑制、化石燃料の有効利用に貢献する。

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

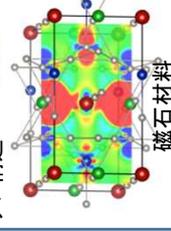
概要・意義・必要性

- (1) 必要性 次世代の産業を支える先端電子デバイスや高機能物質・材料の開発と機能創出を図る。新機能を持つ電子デバイス、高性能な永久磁石、信頼性の高い構造材料、次世代の機能性化学品等が主な研究対象。
- (2) 有効性 元素戦略プロジェクト、最先端大型実験施設と連携して基礎研究のブレークスルーを図り、産業界と共に国際競争の激しい新デバイス・新材料の研究開発を加速。
- (3) 戦略的活用 ポスト「京」で初めて実現される精密、大規模、長時間のシミュレーションと系統的探索により、新デバイス・新材料開発を革新。

内容の詳細



半導体
ナノ構造



磁石材料



鉄鋼材料組織

サブ課題A 新機能電子デバイス

微細加工限界のナノ構造半導体デバイスや新奇超伝導材料、光エレクトロニクスデバイスなど、新原理により新機能を提供する電子デバイスと電子デバイス材料の開発

サブ課題B 高性能永久磁石・磁性材料

電子論に基づく磁石機能の解明と希少金属を代替する高性能永久磁石、軟磁性材料の開発

サブ課題C 高信頼性構造材料

材料特性と製造プロセスの関係に着目した構造材料の強靱化の設計・制御と新材料開発

サブ課題D 次世代機能性化学品

凝集系の構造や電子状態の解明に基づく次世代機能性化学品の分子設計

ポスト「京」利用の必要性

「京」では理想的なナノ構造や高温超伝導体の大規模計算が行われ、電子状態や物理現象の解明・理解が進展。ポスト「京」では、これまで不可能だった複雑界面や不均一系の精密、大規模、長時間のシミュレーション、多数の化学組成、多様な条件下でのシミュレーションなどにより、実験だけでは困難な物性解明や系統的な材料探索、デバイスデザインを実現。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

計画されている全ての計算を実行すると、ポスト「京」での占有日数は、最低でも80日程度は必要。量子ダイナミカル計算、複雑な強相関物質の設計などさらに高度な計算を行うと最大400日程度必要。(京では、10~50年分に相当)

期待される成果・波及効果

- 多様なナノ構造デバイスのデザイン、強相関系新奇物質の高精度物性予測と物質探索、複雑な界面や凝集構造、不均一性を考慮した材料特性の予測と製造プロセスの提案が可能に。
- 物質・材料の性質の予測だけでなく、ほしい物性を実現するための物質設計も加速。

- 最先端大型実験施設で得られる膨大な実験データの解析と有効利用。
- 新しい半導体材料、超伝導材料、磁性材料、構造材料、機能性化学品、ナノ構造デバイス等において、日本の産業競争力を一層強化し、社会基盤を形成するための、高機能物質・材料創成技術が確立。
- 物質科学の深化と自然観の革新を通して基礎科学に貢献。

⑩ 基礎科学のフロンティア — 極限への挑戦

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点 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大きな成果にもかかわらず答えの出していない難問に大規模数値計算を軸とした学際連携で挑み、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創で解決。
- (2) 有効性の観点 材料の破壊や大気・海洋の変動、観測困難な極限物性など、極限を探究する科学は、「京」等を使った大規模計算により、各分野で大きく進展した。この個別理解を基に、トップダウンで学際連携を促し、分野の壁を越えた普遍的な課題や境界領域の課題を解決するための機が熟している。フロンティア開拓により、基礎科学の進展と人類課題の解決につながる。
- (3) 戦略的活用の観点 「京」の成果で整備された個別アプリを、複合・マルチスケール問題に活用しポスト「京」のみで可能な成果へ。

A: 破壊とカタストロフィ: 材料、人工物から地球まで

・ナノ素子から構造材料、人工物の機能喪失、地震・地滑りまで、破壊現象は対象とプロセス及び環境が複雑に絡み合っており、マイクロからマクロまでマルチスケールでの非線形性、多階層の理解を要する。「京」等で進んだ個別現象の理解を繋ぐブレイクスルーへ。

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

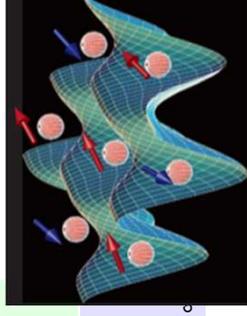
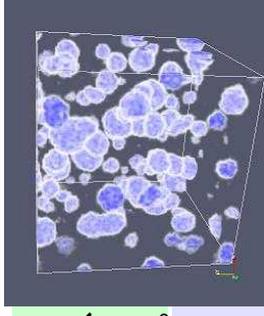
・竜巻、台風、噴火の発生発達機構、産業機器中の気液固混相流の解明につながる、相変化が生み出す時空構造の基礎科学を個別手法成果の発展から創出し、制御手法を開拓。

C: 極限環境での状態変化: 物質の理解から惑星深部へ

・惑星深部、宇宙空間など、実験で実現できない極限環境における物質の状態変化を探究し、大型実験施設等の実験解析を支え、人類のフロンティア開拓に貢献。

D: 量子力学の基礎と情報: 計算限界への挑戦

・「京」までに大きな成果の出た量子多体問題解法の継承発展で、ポスト「京」計算機で可能な計算処理量と精度の限界に挑戦し、量子計算、量子シミュレータ、量子暗号の基礎を構築。



物質科学

地球環境科学

素核・宇宙科学

ものづくり

ポスト「京」利用の必要性

極端条件、複雑な要素の絡み合う問題、不安定に近い非線形問題は個別分野で「京」利用の大きな成果を生み、高効率アプリも開発された。未解決に残された異なる階層をつなぐ問題は人類課題にも直結し、ポスト「京」でようやく可能になる大規模な計算を要する問題が多数存在する。また分野を超える共通の方法論開発には、多数の試行錯誤を伴う大規模検証によってはじめて有効性が検証できる。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

計画されている全ての計算を実行すると、ポスト「京」での占有日数は、最低でも70日程度は必要。高度な計算、大規模計算を行うと最大140日程度必要。(京では、10~50年分に相当)

期待される成果・波及効果

- ・各自然科学分野、計算科学課題が活性化し、実験・観測と個別計算科学分野の協調だけでは解決できない課題の解決が学際連携で飛躍的に進む。
- ・ポスト「京」により初めて可能となる計算科学的な共通手法が生まれる。
- ・人類のフロンティアや複合課題の探究、実験不可能な極限条件やマルチスケール現象を扱う、学際的な新しい学問分野が創出される。
- ・最先端大型実験施設や観測で得られる膨大な実験データの解析法が確立する。
- ・10年、20年後を見据えた科学の成果が創出され、個別計算科学では解決困難な産業応用や社会的課題も、将来の解決につながる可能性が高まる。