

情報科学技術に関する 研究開発課題の評価結果

平成26年2月

科学技術・学術審議会

研究計画・評価分科会

目次

- 情報科学技術委員会 委員名簿 2

<中間評価>

- H P C I 戦略プログラム 5

情報科学技術委員会 委員名簿

平成26年2月現在

主査	有川 節夫	九州大学総長
	伊藤 公平	慶應義塾大学理工学部教授
	岩野 和生	科学技術振興機構研究開発戦略センター上席フェロー
	宇川 彰	筑波大学計算科学研究センター数理物質系教授
	碓井 照子	奈良大学名誉教授
	押山 淳	東京大学大学院工学系研究科教授
	笠原 博徳	早稲田大学理工学術院基幹理工学部教授
主査代理	喜連川 優	国立情報学研究所長、東京大学生産技術研究所教授
	國井 秀子	芝浦工業大学大学院工学マネジメント研究科教授
	五條堀 孝	国立遺伝学研究所副所長
	辻 ゆかり	NTT情報ネットワーク総合研究所企画部担当部長
	中小路 久美代	株式会社SRA先端技術研究所長
	樋口 知之	統計数理研究所長
	松岡 茂登	大阪大学サイバーメディアセンター教授
	宮内 淑子	メディアステック株式会社代表取締役社長
	宮地 充子	北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科教授
	村岡 裕明	東北大学電気通信研究所教授・センター長
	村上 和彰	九州大学大学院システム情報科学研究院教授
	安浦 寛人	九州大学理事・副学長
	矢野 和男	株式会社日立製作所中央研究所主管研究長

(五十音順)

研究開発課題の中間評価結果

平成26年2月

情報科学技術委員会

「H P C I 戦略プログラム」 中間評価結果

「HPCI 戦略プログラム」の概要

1. 課題実施期間及び評価実施時期

平成23年度～平成27年度

(中間評価：平成25年12月、事後評価：平成28年度を予定)

2. 研究開発概要・目的

スーパーコンピュータ「京」を中核とする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）を最大限活用し、重点的・戦略的に取り組むべき研究分野において画期的な成果を創出し、計算科学技術の飛躍的な発展を図ることを目的に、以下の取組を実施する。

- ① 社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野（戦略分野）において達成すべき目標（戦略目標）を定め、当該目標に沿った研究開発を推進。
- ② 各戦略分野において、以下の取組を行い、我が国の計算科学技術推進体制の構築を図る。
 - ・ 「京」や他の計算資源を効率的に利用するためのマネジメント
 - ・ 戦略分野における「京」利用に際しての研究支援協力
 - ・ 人材育成
 - ・ 人的ネットワークの形成
 - ・ 研究成果の普及
 - ・ 分野を超えた取組の推進

HPCI 戦略プログラムの戦略分野と戦略機関

	<戦略分野>	<戦略機関>
分野1	予測する生命科学・医療および創薬基盤 ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測を行う。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。	・理化学研究所
分野2	新物質・エネルギー創成 物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。	・東京大学物性研究所(代表) ・分子科学研究所 ・東北大学金属材料研究所
分野3	防災・減災に資する地球変動予測 高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。	・海洋研究開発機構
分野4	次世代ものづくり 先端的要素技術の創成～組合せ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。	・東京大学生産技術研究所(代表) ・宇宙航空研究開発機構 ・日本原子力研究開発機構
分野5	物質と宇宙の起源と構造 物質の究極的微細構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。	・筑波大学(代表) ・高エネルギー加速器研究機構 ・国立天文台

3. 研究開発の必要性等

【必要性】

「京」の有する性能を最大限活用することにより、様々な研究分野において画期的な成果を創出し、計算科学技術の飛躍的な発展を図るため、科学技術・学術審議会の下作業部会において、「京」の利活用の基本的な方針として、多様な研究者のニーズに応えるとともに、戦略的・重点的に研究を推進する戦略的利用の導入が提言された。また、戦略的利用を具体化するために、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野（戦略分野）を国が設定するとともに、当該分野における研究開発等を牽引する機関（戦略機関）を決定し、戦略的・重点的な取組を行う「戦略プログラム」を創設することが提言された。

本事業は以上の提言を具体化するものであり、「京」を中核として、我が国の研究開発そのものに革新をもたらすシミュレーションへの取組と我が国の計算科学技術に関する研究ポテンシャルの結集を関係機関の強力な連携の下で実現するためにも実施する必要がある。

【有効性】

○ 研究開発の質の向上への貢献。

本事業を実施することにより、以下の効果が期待される。

- ① 戦略的利用による研究成果そのものが、科学的・社会的なブレークスルーをもたらすものである。また、研究成果を通じた各分野における計算科学技術への理解増進や、分野横断的な研究開発の進展等により、様々な分野で計算科学技術が定着し、我が国の研究開発そのものに革新をもたらす。
- ② 戦略的利用の成果が、一般的利用（「京」において多様な研究者のニーズに応える利用形態）や大学・公的研究機関で行われるシミュレーション研究にも好影響を及ぼし、我が国全体としてより高いレベルの研究の展開が期待できる。

○ 人材の養成。

本事業を実施することにより、先端的な研究開発の実践の場において、それぞれの分野に特有の技術や知見を持つ人材が育ち、更に、様々な分野との連携が進められることから、そうした人材が今後の我が国の計算科学技術の担い手になることが期待される。

【効率性】

本事業において、戦略分野ごとに「京」を中心とした研究教育拠点の形成を促進するとともに、戦略分野間の連携を図ることにより、各分野における様々な目的を持った利用者がより効果的・効率的に適切なシミュレーションを行うことが可能となる。また、計算科学技術全体の裾野が拡大されることにより、研究開発や企業活動における効率化が見込まれる。

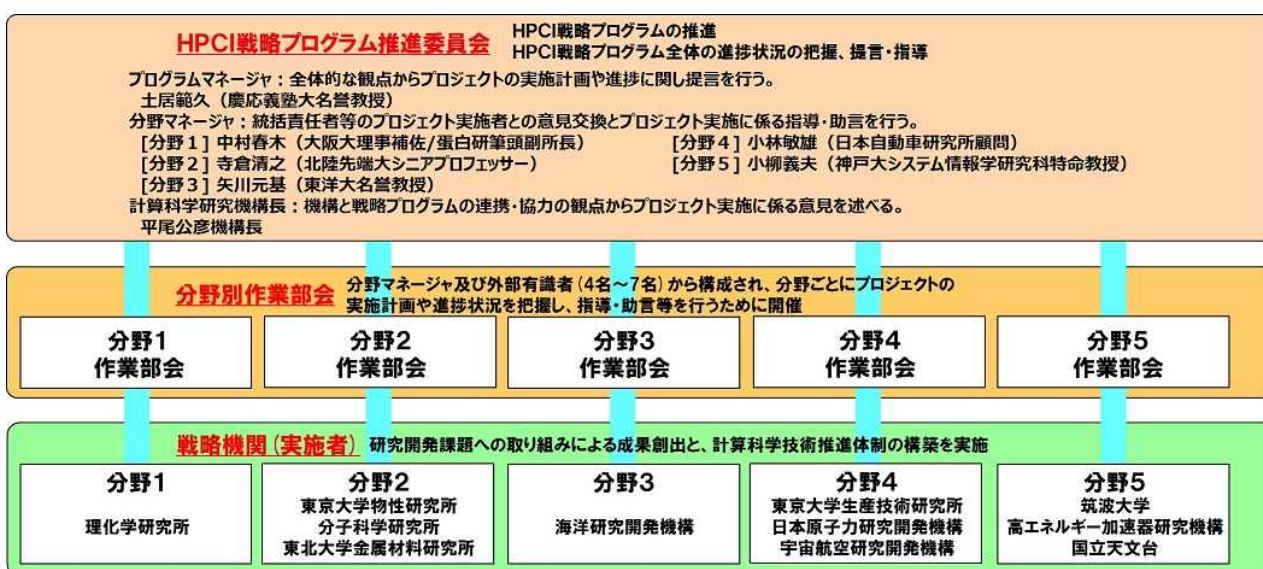
4. 予算の変遷

(単位：百万円)

年度	H 2 3	H 2 4	H 2 5
予算額	3, 4 8 5	3, 5 6 2	2, 6 1 4

5. 課題実施機関・体制

○ H P C I 戦略プログラム全体の推進体制



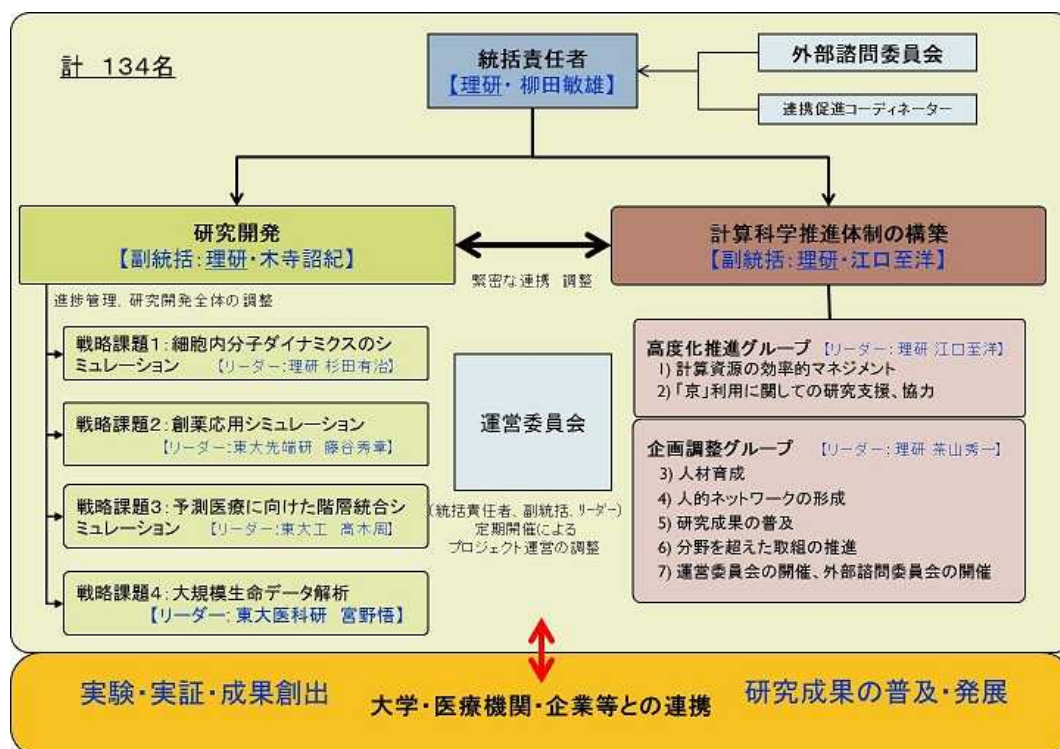
分野別作業部会 委員一覧

分野1	(分野マネージャ) 中村 春木	大阪大学理事補佐/蛋白研筆頭副所長	分野3 (続き)	住 明正	国立環境研究所理事長	
	茅 幸二	理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラムディレクター		萩原 一郎	明治大学先端数理学インスティテュート副所長 研究知財戦略機構・特任教授	
	児玉 龍彦	東京大学先端科学技術研究センター教授		長谷川 昭	東北大学名誉教授	
	分野2	菅野 純夫	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授	分野4	(分野マネージャ) 小林 敏雄	日本自動車研究所顧問
		長田 重一	京都大学大学院医学研究科教授		天野 吉和	富士通システムズ・ウエスト取締役会長
		松本 洋一郎	東京大学理事・副学長		奥田 基	富士通TCソリューション事業本部 エグゼクティブアーキテクト
		美宅 成樹	豊田理化学研究所客員フェロー		押山 淳	東京大学大学院工学系研究科物理学専攻教授
(分野マネージャ) 寺倉 清之		北陸先端科学技術大学院大学シニアプロフェッサー	笠 俊司		IHI技術開発本部管理部技術企画グループ部長	
栗野 祐二		慶応義塾大学理工学部電子工学科教授	後藤 彰		荏原製作所風水力機械カンパニー理事副開発統括	
幾原 雄一		東京大学大学院工学系研究科総合研究機構教授	澤田 隆		日本原子力学会理事・事務局長	
分野3	魚崎 浩平	物質・材料研究機構国際ナノスケール研究拠点 ナノグリーン分野コーディネータ・主任研究者	分野5	古川 雅人	九州大学大学院工学研究科機械工学部門教授	
	加藤 雅治	東京工業大学大学院総合理工学研究科教授		(分野マネージャ) 小柳 義夫	神戸大学システム情報学研究所特命教授	
	高梨 弘毅	東北大学金属材料研究所副所長		相原 博昭	東京大学大学院理学系研究科教授	
	中村 振一郎	理化学研究所社会創生事業 イノベーション推進センター特別招聘研究員		海老沢 研	宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所教授	
分野5	福山 秀敏	東京理科大学副学長	延與 秀人	理化学研究所仁科加速器研究センター長		
	(分野マネージャ) 矢川 元基	東洋大学名誉教授	岡 眞	東京工業大学大学院理工学研究科教授		
	鬼頭 昭雄	筑波大学生命環境系主幹研究員	川合 光	京都大学大学院理学研究科教授		
			佐藤 勝彦	自然科学研究機構長		

○ 分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」の実施体制

戦略機関：理化学研究所

統括責任者：柳田敏雄（理化学研究所）



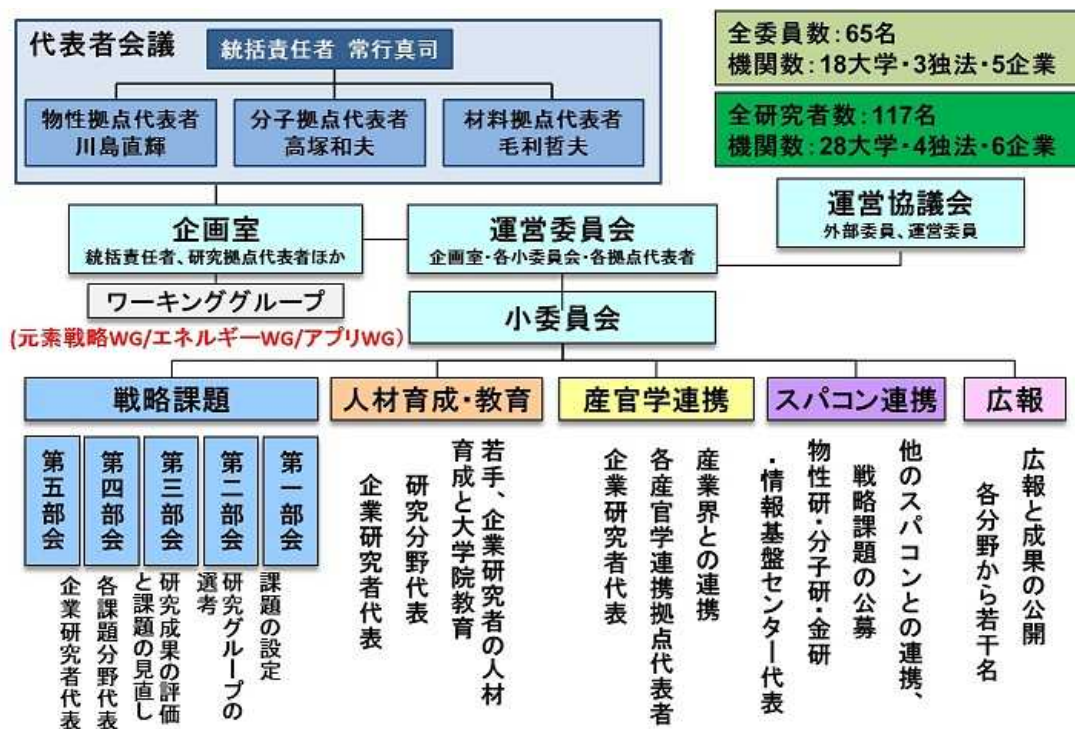
○ 分野2「新物質・エネルギー創成」の実施体制

戦略機関：東京大学物性研究所 [代表機関]

分子科学研究所

東北大学金属材料研究所

統括責任者：常行真司（東京大学）



○ 分野3「防災・減災に資する地球変動予測」の実施体制

戦略機関：海洋研究開発機構

統括責任者：今脇資郎（海洋研究開発機構）



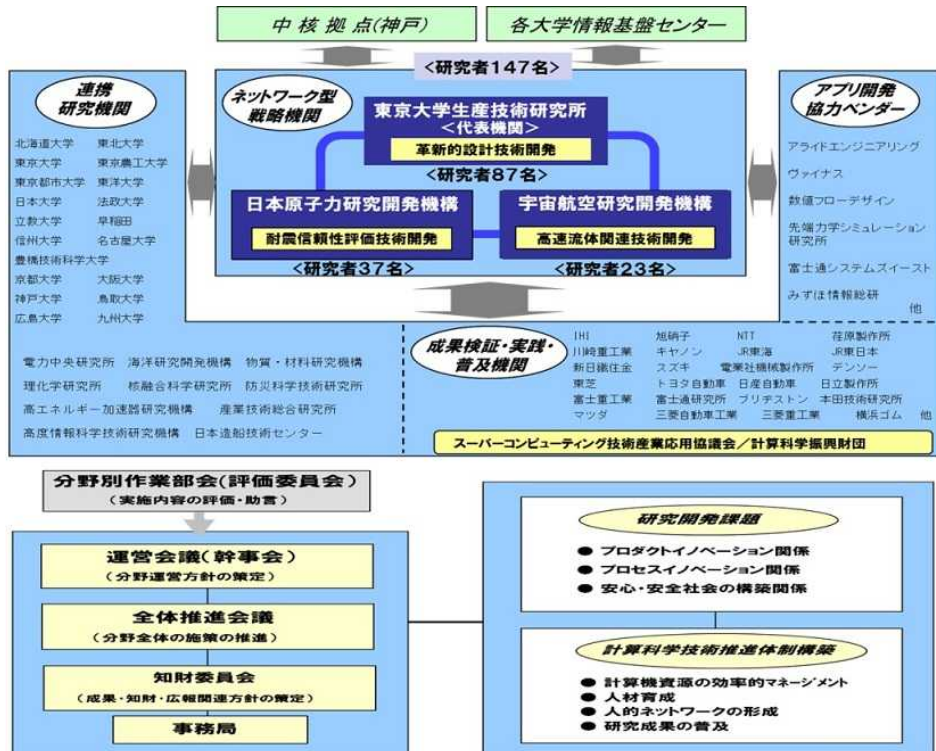
○ 分野4「次世代ものづくり」の実施体制

戦略機関：東京大学生産技術研究所 [代表機関]

日本原子力研究開発機構

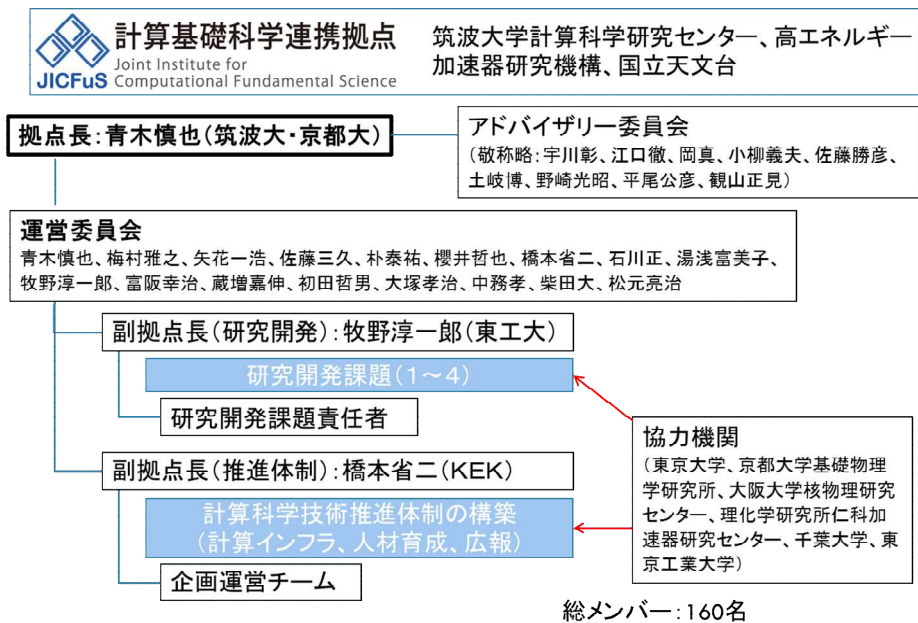
宇宙航空研究開発機構

統括責任者：加藤千幸（東京大学）



○ 分野5「物質と宇宙の起源と構造」の実施体制

戦略機関：筑波大学〔代表機関〕
 高エネルギー加速器研究機構
 国立天文台
 統括責任者：青木慎也（筑波大学）



(参考) H P C I 戦略プログラム中間評価の経緯

H P C I 戦略プログラムの中間評価は、以下の流れで実施した。

① H P C I 戦略プログラム推進委員会における自己評価 (平成 2 5 年 1 0 月)

H P C I 戦略プログラム推進委員会 (推進委) の下にある分野別作業部会において、各戦略機関から研究開発及び計算科学技術推進体制の構築 (研究開発等) の詳細な進捗状況についてヒアリングし、分野ごとの自己評価を実施。

② H P C I 戦略プログラム中間評価委員会における中間評価 (平成 2 5 年 1 2 月 4 日)

外部有識者 (各戦略分野に関する有識者、計算科学技術やサイエンスコミュニケーションに関する有識者及び産業界の有識者) で構成される H P C I 戦略プログラム中間評価委員会 (中間評価委) において、各戦略機関の統括責任者から研究開発等の進捗状況についてヒアリングするとともに、推進委の土居主査及び分野マネージャから自己評価の結果についてヒアリングし、プログラム全体の外部評価を実施。

③ 情報科学技術委員会における中間評価 (平成 2 6 年 2 月 1 4 日)

情報科学技術委員会において、中間評価委の國枝主査から取りまとめた評価結果についての説明を受け、それをベースとして評価を実施。当該評価の結果として、中間評価票 (案) を作成。

H P C I 戦略プログラム中間評価委員会 委員名簿

伊藤 栄作 三菱重工業株式会社 技術統括本部 高砂研究所 次長

岩野 和生 三菱商事株式会社 企画業務部 顧問

沖 大幹 東京大学 生産技術研究所 教授

○國枝 秀世 名古屋大学 理事・副総長

栗原 和枝 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授

西島 和三 持田製薬株式会社 医薬開発本部 専任主事

濱田 政則 早稲田大学 理工学術院 教授

松田 道行 京都大学 大学院生命科学研究科 教授

村岡 裕明 東北大学 電気通信研究所 教授

横山 広美 東京大学 大学院理学系研究科 准教授

(五十音順、○主査)

HPCI戦略プログラム 研究成果事例

心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション

(研究代表者：東京大学・高木周、久田俊明)

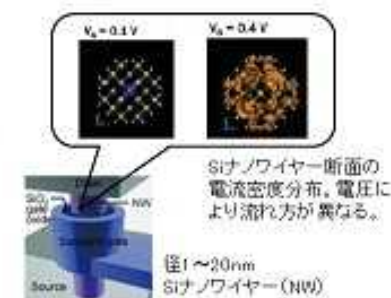
分子の振る舞いから細胞、臓器の動きまでを階層的につないだマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーションを実現し、分子の挙動から心臓の拍動を精緻に再現することに成功。心臓の難病の一つである肥大型心筋症の病態メカニズム解明に貢献。



シリコンナノワイヤーの電子状態シミュレーション

(研究代表者：東京大学・押山淳、岩田潤一)

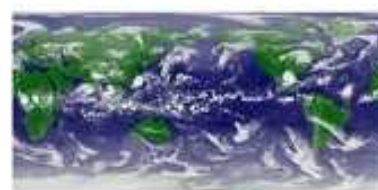
数万個のシリコン原子からなるナノワイヤーの電子状態シミュレーションを世界で初めて実現し、電圧や断面形状により流れる電子の密度分布が異なる等の特性を解明。次世代半導体として期待されているシリコンナノワイヤーのデバイス設計に貢献。



全球雲解像モデルによる気象シミュレーション

(研究代表者：東京大学・木本昌秀、佐藤正樹)

世界初の雲まで解像できる高解像度の大気モデルシミュレーションを実現し、熱帯の巨大積雲群の発生・発達を予測。2週間以上先の天気予報の可能性を切り開くことに成功。

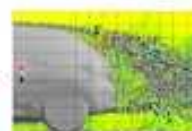


全球雲解像モデル NICAMによるシミュレーション

流体機器の乱流シミュレーション

(研究代表者：東京大学・加藤千幸)

自動車業界やターボ機械業界などと産学連携のコンソーシアムを構築するとともに、従来は実現不可能な細かな格子サイズ(数十～数百億格子)を用いたマイクロからマクロまで一貫した乱流シミュレーションを実現。風洞実験や水槽試験の代替や機器の性能・品質向上に資する定量予測に成功。



車両挙動の全乱流渦のシミュレーション



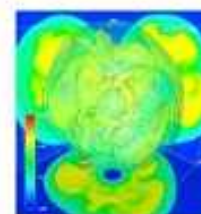
プロペラ回転や波の影響も考慮した超大規模実用計算

(情報科学技術研究所提供)

超新星爆発シミュレーション

(研究代表者：京都大学・柴田大、国立天文台・滝脇知也)

銀河進化等に関わり、宇宙物理で重要な存在である超新星の機構解明を目指し、世界最高の空間精度で超新星爆発シミュレーションを実現。空間的対称性を仮定した計算では解明できなかった超新星爆発機構を、空間3次元の効果を検討した大規模シミュレーションにより、爆発現象が理論的に再現可能であることを初めて定量的に示すことに成功。



超新星爆発現象に対するシミュレーション (エントロピー分布を表示)

中間評価票

(平成26年2月現在)

1. 課題名 HPCI戦略プログラム

2. 評価結果

HPCI戦略プログラム（以下「本プログラム」という。）は、スーパーコンピュータ「京」の有する性能を最大限活用し、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待される下記五つの分野（以下「戦略分野」という。）において画期的な成果を創出し、計算科学技術の飛躍的な発展を図ることを目的としており、各戦略分野において、①研究開発として、達成すべき戦略目標を定め、当該目標に沿った研究開発の推進、②計算科学技術推進体制の構築として、計算機資源の効率的マネジメント、人材育成、研究成果の普及、分野を超えた取組の推進等に取り組んでいる。

<戦略分野>

分野1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」

戦略目標：大規模シミュレーション・高度なデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、及びそれを通じた薬剤・医療のデザインの実現

分野2 「新物質・エネルギー創成」

戦略目標：基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ

分野3 「防災・減災に資する地球変動予測」

戦略目標：地球温暖化時の台風の動向の全球的予測と集中豪雨の予測実証、及び次世代型地震ハザードマップの基盤構築と津波警報の高精度化

分野4 「次世代ものづくり」

戦略目標：21世紀のものづくりを抜本的に変革する計算科学技術の戦略的推進

分野5 「物質と宇宙の起源と構造」

戦略目標：ビッグバンに始まる宇宙の歴史における、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、複数の階層をつなぐ計算科学的手法で統一的に理解する

(1) 進捗状況の評価

「京」でなければ成し得なかった独創的で優位性のある研究開発成果が得られつつあるとともに、統括責任者や課題代表者（以下「統括責任者等」という。）がリーダーシップを発揮できる体制が構築され、人材育成や成果普及が的確に機能しているなど、以下のとおり、研究開発の推進及び計算科学技術推進体制の構築は共に、戦略目標の達成に向けて全体として着実に進捗していると評価できる。

研究開発については、

① 背景にある理論・実験データから見て適切な計画を策定している。

- ②「京」の共用開始前に、本格利用に向けた「京」向けのアプリケーション高度化を実施し、「京」の性能を最大限に発揮できる環境を整えている。
- ③超並列環境を駆使し、以下のとおり、ミクロからマクロへの積層、詳細なメッシュ計算、多数同時のアンサンブル計算等の観点から、「京」でなければ成し得なかった独創的で優位性のある成果が得られつつあり、その中には、それぞれの分野で他の追随を許さず、国際レベルで高く評価されるものが含まれている。
- ・分野1では、医療現場と緊密に連携し、原子・分子の振る舞いから細胞・臓器の動きまでを階層的につないだマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーションにより、分子の挙動から心臓の拍動を精緻に完全再現することに世界で初めて成功するなど、複雑な生命現象の予測・解明において独創的なアプローチを実現し、広範囲へのシミュレーションの有効性を示して計算科学技術を新たな分野に拡大させている。また、多数の製薬企業が参画するコンソーシアムにおいて、分野1で開発された新薬候補化合物と標的タンパク質との結合強度を高精度に評価できる計算手法が活用されるなど、産業界への成果普及も進んでいる。今後は、実験データも活用して予測の正しさを確認しつつ、高精度かつより忠実なシミュレーションを実現することを期待する。
 - ・分野2では、十万原子規模のシリコンナノワイヤーの電子状態シミュレーション（2011年にゴードン・ベル賞（※）を受賞）によるナノワイヤー中の電子密度分布の解析に成功するなど、新物質・エネルギー創成に関わる社会的・科学的に重要かつ広範囲な物質科学の基礎研究とその応用において、「京」の性能を最大限に活用した多様な成果が得られている。今後は、本質的かつインパクトの大きな成果を目指すとともに、成果の社会還元に向けて産業界とさらに連携することを期待する。
 - ・分野3では、静力学平衡を仮定せずに雲物理過程を考慮した全球雲解像モデルによるグローバル気象シミュレーションや、地震・津波による広域甚大災害のシミュレーションに成功するなど、従来は実現できなかった精度と領域による自然現象の解析を実現している。今後は、世界が待ち望み、特に我が国が強みを持つ研究テーマに、計算資源をこれまで以上に重点的に配分することを検討するとともに、得られる成果等を社会実装するために必要な投資、インフラ整備及び体制がどうあるべきかの将来に向けた現実的な提案を期待する。
 - ・分野4では、自動車業界、ターボ機械業界等と産学連携のコンソーシアムを構築するとともに、数百億格子を用い、ミクロからマクロまで一貫した乱流の直接シミュレーションを行った。これにより、風洞実験や水槽試験の代替え及び機器の性能・品質の向上に資する解析に成功するなど、将来の産業界における実用を見据えた実証研究を実現している。今後は、解析結果の検証のためのより高精度な実験データの取得や物性データの充実、大規模データのポスト処理ソフトウェアの充実を図ることを含め、成果を具体的な「次世代ものづくり」につなげていくための更なる取組を期待する。
 - ・分野5では、大規模格子QCDシミュレーションによるクォーク質量とバリオン間相互作用の決定を可能とする高精度計算、世界初の空間三次元輻射流体シミュレーションによる超新星爆発現象の再現、大規模ダークマター粒子シミュレーション（2012年にゴードン・ベル賞（※）を受賞）による宇宙初期の重力進化計算に成功するなど、素粒子から宇宙までを計算科学によって解き明かしていくことが実現しつつあ

る。今後は、我が国が強みを持つ理論物理学との協働による人材育成や人材交流を意識し、国際レベルでの貢献を目指すことを期待する。

(※) ゴードン・ベル賞：米国計算機学会が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において世界最高の成果をあげた論文に付与する賞。

計算科学技術推進体制の構築については、

- ①各戦略分野の第一人者を統括責任者等を選び、統括責任者等がそれぞれの分野の特性を把握してリーダーシップを発揮できる体制を構築している。
- ②各戦略分野における計算科学技術の利用者拡大のために、相当規模の研究者等を確保した体制を構築するとともに、以下のとおり、計算機資源の効率的マネジメント、人材育成、研究成果の普及等が的確に機能している。
 - ・「京」の運用主体である理化学研究所計算科学研究機構とも連携し、「京」を利用するアプリケーションの高度化支援やアプリケーション実行の進捗状況の把握により、「京」を効率的に利用するための環境整備が行われている。
 - ・「京」とそれ以外のスパコンの中から、個々の研究開発課題に最適なシステムを選択する体制が整備され、「京」は「京」でなければできない大規模な重点課題に集中することが促進された。
 - ・対象とする参加者に応じた様々なレベルでの講習会やトライアルコースの開催、大学等と連携した講師派遣や講義開設等、人材育成プログラムを提供する取組が積極的に進められている。
 - ・大規模並列環境向けに開発された先端的なアプリケーションを公開し、分野コミュニティや産業界が使いやすい仕組みを構築する取組が進められている。
 - ・多数の企業と連携したコンソーシアムの構築や、防災・減災関連での自治体との連携等、社会連携・成果普及のための具体的な取組が進められている。
 - ・広報担当者を雇用し、広報の難しい基礎科学の分野においても様々な企画を練り、計算科学技術の普及に取り組むとともに、他の大型研究施設を利用したプロジェクトも巻き込んだイベントを開催するなど、コミュニティの核となる活動が展開されている。なお、研究内容の社会的意義を勘案しつつ、研究者の研究活動と広報活動の両立に、引き続き留意する必要がある。

(2) 各観点の再評価と今後の研究開発の方向性

【必要性】

事前評価では、本プログラムについて、「京」を中核として、我が国の研究開発そのものに革新をもたらすシミュレーションへの取組と我が国の計算科学技術に関する研究ポテンシャルの結集を関係機関の強力な連携の下で実現するためにも実施する必要があると評価された。

本プログラムでは、「京」の性能を最大限活用した超並列環境を駆使し、

- ・心臓シミュレーション等において、初めて可能となったミクロからマクロへの階層統合シミュレーション

・ 気象シミュレーションや乱流シミュレーション等において、従来の計算機環境では実現不可能な細かな格子サイズ（分割すべき物理的単位を実現するサイズ）と広域でのシミュレーション

・ アンサンブル計算による多数同時シミュレーション

等、「京」でなければ実現できない大規模シミュレーションにより、独創性・優位性の高い成果を上げている。また、各分野の第一人者である統括責任者等のリーダーシップの下、当該分野の研究者が多数参画（総研究者数791名）し、国内外の大学・研究機関や産業界が結集・連携した研究開発体制が構築されている。以上のことから、引き続き必要性は高いと評価できる。

今後は、統括責任者等の更なるリーダーシップの下に、分野内の連携はもちろんのこと、必要に応じて分野を越えた連携や他の研究開発プロジェクトの活用も図りながら、本質的に新しい現象の解明や真に革新的な技術開発等を通じて、戦略目標の達成や社会的・科学的課題の解決に資する、「京」や本プログラムならではの成果を創出していく必要がある。その際、「京」でなければ成し得ない成果はどの部分か、どこまで超並列化を進めるとどの様な成果が期待できるのか、という視点をこれまで以上に強く意識する必要がある。また、得られた成果の情報発信については、社会に分かりやすく伝えることはもちろんのこと、時には社会の期待や研究者の士気を高めるための大きな目標を示しながら、「京」や本プログラムが社会の「役に立つ」、「役に立った」という国民の実感が得られるようにしていく必要がある。その際、特に、国民の生命・健康や安全・安心に直結する分野については、反動を生みかねない過剰な期待を防ぐため、現在「京」を用いて到達可能な成果とその限界も正確に社会に伝える必要がある。

【有効性】

事前評価では、本プログラムを実施することにより、

- ① 研究開発の成果そのものが科学的・社会的なブレークスルーをもたらすとともに、様々な分野で計算科学技術が定着し我が国の研究開発そのものに革新をもたらすこと
- ② 「京」の戦略的利用の成果が大学・研究機関で行われるシミュレーション研究等にも好影響を及ぼし、我が国全体としてより高いレベルの研究が展開されること
- ③ 養成された人材が今後の我が国の計算科学技術の担い手になることが期待されると評価された。

本プログラムでは、各戦略分野において、生命現象の理解と予測のための生命システムの定量的な記述、十万原子規模の第一原理計算によるシリコンナノワイヤー中の電子密度分布の解析、熱帯の雲活動の四週間先までの延長予測可能性の実証、高精度大規模シミュレーションによる風洞実験等の代替可能性の実証、空間三次元の輻射流体シミュレーションによる超新星爆発現象の再現等、科学的・社会的なブレークスルーをもたらす成果が初めて得られつつある。また、各戦略分野で開発された先端的なアプリケーションを一般に公開することや、分野コミュニティ・産業界が使いやすい仕組みとして、利用ノウハウや解析事例といったデータベースも用意すること等により、幅広い研究者や企業によって高いレベルの研究成果が活用されつつある。さらに、全国の大学・研究機関と協力した若手人材育成支援や大規模並列環境を活用するための技術習得支援等により、計算科学技術の裾野が拡大しつつある。以上のことから、引き続き有効性は高いと評価できる。

今後は、「京」を用いて予測された結果、あるいは、理解された結果を実証するため、実験系研究者との連携を図りつつ、結果の検証作業も強化していく必要がある。また、研究開発及び計算科学技術推進体制は共に、分野全体から見た位置付け、社会的・科学的要請、科学技術動向、国内の計算資源、海外との比較優位性等を意識し、プロジェクト後半における成果の取りまとめに向けて、マイルストーン目標の設定を含めた進捗管理をこれまで以上に行っていく必要がある。さらに、本プログラムに参画する研究者等の育成に関しては、プロジェクト後半に入る中で、統括責任者等は、本プログラムを通じた研究者等のキャリアアップをこれまで以上に意識していく必要があり、特に、本プログラムで雇用している研究者等のその後のキャリアパスを明確化していく必要がある。

【効率性】

事前評価では、本プログラムの推進により、各分野における様々な目的を持った利用者がより効果的・効率的に適切なシミュレーションを行うことが可能となるとともに、計算科学技術全体の裾野が拡大されることで、研究開発や企業活動における効率化が見込まれると評価された。

本プログラムでは、「京」とそれ以外の計算資源を活用するとともに、「京」の計算資源については、重点配分枠や加速枠の設定、大規模ジョブ実行期間を活用したジョブの実行等、成果創出の加速・最大化のためにメリハリをつけた運用がなされている。また、各戦略分野において、先導性を有する大学・研究機関が中心となり、企業も含めた幅広い関係者が参画する体制を構築し、研究開発や企業活動にイノベーションをもたらす先端的アプリケーションやノウハウ、人材育成プログラムを積極的に提供している。さらに、企業と連携したコンソーシアムにおいて実用化を見据えた実証研究を進めることにより、企業における製品試作数の低減、コスト低減、製品開発期間短縮等につながる成果が得られつつある。以上のことから、引き続き効率性は高いと評価できる。

今後は、大学・研究機関のスーパーコンピュータ、さらには民間のクラウドサービス等のコンピュータの性能が向上していることも認識し、「京」や本プログラムならではのインパクトのある成果を迅速に創出する観点に立って、本プログラムに割り当てられた「京」の計算資源をこれまで以上に重点的に配分するとともに、「京」以外の計算資源の更なる有効活用を図る必要がある。また、分野によっては企業参加の状況は限定的であることから、実用化と応用へ向けた展開のために企業との更なる連携を深める必要があるが、その際、企業のHPC利用を促進する観点から、「京」や本プログラムが企業活動をどの様に効率化したのか、あるいは今後効率化するのかを定量的に評価し、トップマネジメント層等に示していくことを心がけるべきである。

(3) その他

以下の事項は、本プログラムの中間評価の範疇を越える部分もあるが、今後の「京」の運用、更には次世代スーパーコンピュータ（エクサスケール・スーパーコンピュータ、以下「次世代スパコン」という。）の開発・利用に関係することから、参考として示すこととする。

- ・ 「京」の利用の在り方に関して、研究計画に基づいた利用のみならず、政策的に極

めて重要な事案への対応や緊急時におけるタイムリーな情報発信を行うための優先的利用の制度を検討すべきである。

- ・ 次世代スパコンの開発に当たっては、本プログラムで得られた社会的・科学的重要性の高い成果を更に一段革新することで、真の課題解決、実用化につなげられるシステムやターゲットアプリケーションを検討していく必要がある。例えば、次世代スパコンに期待される成果としては、（１）自然災害の即時対応予報、長期広域予報の実用化、（２）実用可能な長時間スケールで、生体や巨大システムにおけるミクロからマクロまでの統合シミュレーションの実施、（３）計算科学による薬剤、新規材料等の完全探索の実現、等が挙げられる。
- ・ その上で、「京」（又は次世代スパコン）とそれ以外のスパコンそれぞれに最適な課題を分担させる運用戦略が求められる。