

平成26年度

「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」  
重点課題

募 集 要 項



平成26年10月

# 目 次

ページ

I. 事業概要	1
1. はじめに	1
2. 背景・目的	1
3. 事業の内容	2
4. 事業実施体制	4
II. 実施方法	6
1. 募集から契約までのスケジュール	6
2. e-Rad を利用した応募書類の作成・提出等	7
3. 提案書類の受付等	9
4. 提案書類の作成	10
5. 「研究機関における公的研究費の管理・監査のガイドライン（実施基準）」 に基づく体制整備について	11
6. 「研究機関における公的研究費の管理・監査のガイドライン（実施基準）」 に基づく「体制整備等自己評価チェックリスト」の提出について	12
7. 審査及び採択	12
8. 公表等	13
9. 応募に当たっての留意事項	13
10. 問合せ先	15
III. 公募要領	16
1. 応募対象者	16
2. 公募の対象	16
3. 選定の観点	17
4. 契約の締結	18
5. 課題責任者等の指定	18
6. 事務連絡担当者の指定	19
7. 採択予定件数	19
8. 実施期間，実施予定額	19
IV. 契約の締結等	20
1. 委託契約の締結	20
2. 委託費の範囲及び積算等	21
3. 事業の管理と評価	21
4. 事業成果の取扱い	21
5. 取得資産の取扱い	22

(別紙1) 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

(別紙2) 経費取扱区分表

(別紙3) Q&A

# I. 事業概要

---

## 1. はじめに

『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』（以下「本事業」という。）は、ポスト「京」を活用し、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーション開発及び研究開発に取り組み、世界を先導する成果の創出を目指すため、文部科学省が平成 26 年度から実施する事業です。

今般、本事業の実施機関を公募します。なお、本事業への公募に際しては、「別紙 1 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」もご参照ください。

## 2. 背景・目的

スーパーコンピュータは、理論、実験・観測と並ぶ科学技術の第三の手法であるシミュレーションのための強力なツールとして、我が国の競争力の源泉となる先端的な研究成果を生み出す研究開発基盤であるとともに、様々な分野の共通基盤技術となりつつあるビッグデータの処理・解析やデータ同化（シミュレーションに観測データを取り込む手法）のための重要なツールです。

また、世界最高水準のスーパーコンピューティング技術は、科学技術の振興、産業競争力の強化、国際貢献、安心・安全の国づくり等の実現に不可欠な国家の基幹技術であることから、第 4 期科学技術基本計画で「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」が国家安全保障・基幹技術に位置づけられています。我が国が開発したスーパーコンピュータ「京」は、平成 24 年（2012 年）より共用を開始し、現時点において世界トップレベルの性能を有するシステムとして、様々な成果を創出しています。

一方、国際的にもスーパーコンピュータの開発・利用が進められ、米欧中をはじめとする世界各国で、2020 年～2022 年頃のエクサスケールコンピューティングの実現を目指した国主導での研究開発が活発に推進されており、このような国際競争環境の下で、我が国においてもこれに立ち遅れることなく「京」の経験を最大限に生かしつつ研究開発を進める必要があります。

このような背景のもと、文部科学省では、我が国における科学技術の振興、産業競争力の強化、国際貢献、安心・安全の国づくり等を実現するため、システムとアプリケーションの協調設計（コデザイン）により社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステム（ポスト「京」）、より具体的には、平成 32 年（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ともに、ポスト「京」を活用し、社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーションの開発を行うことに、平成 26 年度より着手しています。

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・科学的課題に戦略的に取り組み、我が国の成長に寄与し世界を先導する成果を創出することが期待されており、そのためには、「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題」（以下「重点課題」という。）を選定した上で、これらの課題解決に資するアプリケーションを重点的に開発するとともに、ポスト「京」開発においては、これらの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調的に設計開発することで、成果の早期創出を目指す必要があります。また、個々の社会的・科学的課題の解決という観点だけではなく、個々の社会的・科学的課題を俯瞰し、ポスト「京」システム全体として成果を最大化することにより、国際競争力のあるシステムを実現することも必要です。

このような背景を踏まえ、我が国の経済社会及び科学技術に深い知見を有する有識者から構成される「ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題についての検討委員会」において、社会的・国家的見地から高い意義があり、「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る、ポスト「京」で取り組むべき先進的な課題として、九つの重点課題を選定しました。

### 3. 事業の内容

#### (1) 事業内容

重点課題（I. 3. (3) 参照）を対象に、重点課題の解決に資するアプリケーションの開発や重点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、さらには、ポスト「京」の計算資源を活用し、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を行います。

#### (2) 事業スケジュール及び事業形態

本事業の全体推進スケジュールは以下のとおりです。今年度は、調査研究・準備研究フェーズの一環として、開発計画の策定等を行います。また、平成26年度は委託事業として実施しますが、平成27年度以降の事業形態（委託事業または補助事業）は未定です。

##### ① 調査研究・準備研究フェーズ（平成26年度～平成27年度）

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、開発計画（研究開発内容、目標・期待される成果、実施体制、必要計算資源、工程表、所要経費等）の詳細を策定します。また、策定した開発計画に基づき、アプリケーション開発の本格実施に向けた準備（実施体制構築の着手、コデザインの先行作業等）を進めます。

##### ② 本格実施フェーズ（平成28年度～平成31年度）

策定した開発計画に基づき、「京」等の既存の計算資源を用いて重点課題に関するアプリケーションの開発を本格的に実施するとともに、ポスト「京」の利活用による成果創出に向けた知見の獲得や計算手法の確立を図ります。

##### ③ 成果創出フェーズ（平成32年以降）

平成32年頃のポスト「京」の運用開始に併せて、ポスト「京」を用いて、平成31年度までに開発した重点課題に関するアプリケーションを利活用した研究開発を行い、成果を創出します。

#### (3) 重点課題

本事業において取り組む九つの重点課題は下表のとおりです。

カテゴリ	重点課題（課題名および課題概要）
健康長寿社会の実現	<p>① <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、更に安全な創薬を実現する。</p> <p>② <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、脳神経等）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防を目指した医療を支援する。</p>
防災・環境問題	<p>③ <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。</p> <p>④ <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。</p>
エネルギー問題	<p>⑤ <b>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</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。</p> <p>⑥ <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。</p>
産業競争力の強化	<p>⑦ <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。</p> <p>⑧ <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、及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。</p>

基礎科学の発展	<b>⑨ 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て、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。
---------	---

これらの各重点課題は、下図に示すとおり一つ以上のサブ課題（研究開発要素）から構成されます。また、各重点課題のサブ課題は今回の公募において決定予定です。

<b>重点課題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</b> ・ サブ課題A ○○○○○○○○○○○○○○○○○○○ ・ サブ課題B △△△△△△△△△△△△△△△△ (…)  <b>重点課題②個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学</b> ・ サブ課題A □□□□□□□□□□□□□□□□ ・ サブ課題B ◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇◇ (…)  <b>重点課題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</b> (…) <b>重点課題⑨宇宙の基本法則と進化の解明</b>
---

これらの重点課題の概要は「別紙1 別添1」をご参照ください。なお、「別紙1 別添1」に記載のサブ課題（内容の詳細）、ポスト「京」利用の必要性、必要な計算資源等はあくまでも例示であることにご留意ください。

#### 4. 事業実施体制

本事業の実施体制は以下のとおりです。

##### (1) 全体推進機関

全体的な観点から本事業を定常的かつ強力にフォローアップし、本事業の進捗状況の把握・評価・改善提言・指導・課題間の調整等を行う機関（委員会等）。今後、文部科学省が設置予定。

##### (2) 実施機関

重点課題ごとに代表機関及び分担機関等から構成され、アプリケーション開発・研究開発を推進する機関。

計算科学者を中心に、理論・応用数学者の協力の下、新アルゴリズム開発やそのアプリケーションへの実装、大型実験施設等の利用者や研究プロジェクト等と連携した実証実験、成果の社会還元を見据えた社会学者や産業界・自治体等との連携等が実施できる分野を越えた関係者が結集した体制を構築する必要がある。

① 代表機関

重点課題ごとに設定され、各重点課題の解決に向け、アプリケーション開発・研究開発の推進に責任を持ち、主体的にアプリケーション開発・研究開発を推進する機関。また、代表機関に所属する者の中から、当該重点課題全体の事業推進に責任を持つ課題責任者を設定。

② 分担機関

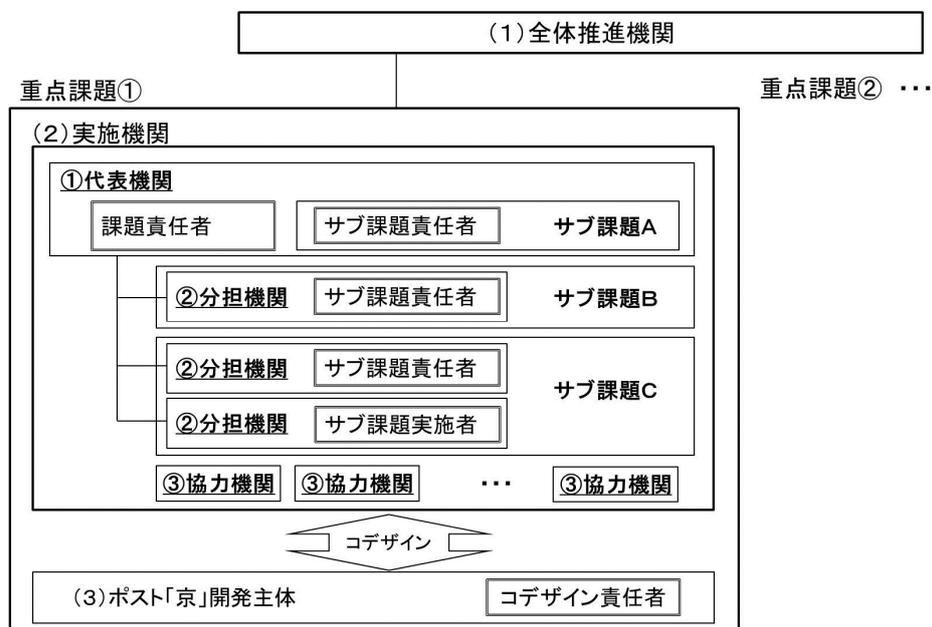
重点課題のサブ課題を担当し、代表機関と連携・協調・分担し、アプリケーション開発・研究開発を推進する機関。代表機関以外がサブ課題を担当する場合に設定。また、分担機関ごとに、分担機関におけるサブ課題の事業推進に責任を持つサブ課題実施者を設定し、サブ課題実施者の中から、当該サブ課題全体の事業推進に責任を持つサブ課題責任者を設定。

③ 協力機関

代表機関や分担機関に対し、協力・支援する機関及び研究者。必要に応じ、代表機関や分担機関が設定。

(3) ポスト「京」開発主体（独立行政法人理化学研究所）

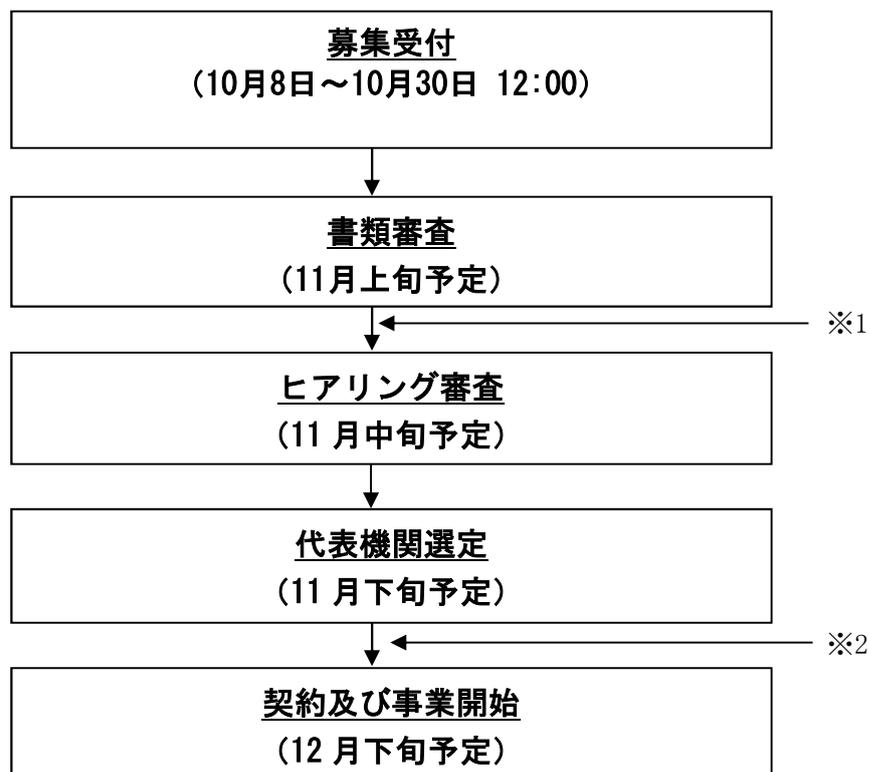
ポスト「京」のアプリケーションとシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア（通信ライブラリ、入出力システム等）、プログラミング環境、ライブラリのコードデザインに責任を持つべく、実施体制に参画するとともに、重点課題間の連携や共通基盤技術の整備を担う機関。各重点課題に参画し、コードデザイン責任者を設定する。



## Ⅱ. 実施方法

### 1. 募集から契約までのスケジュール

本事業における募集から契約までのスケジュールの概略を以下に示します。



※1 以下の方にヒアリング審査対象課題のヒアリング審査の実施について連絡します。なお、全体提案・部分提案，課題責任者・サブ課題責任者，事務連絡担当者については、それぞれⅢ. 2，Ⅲ. 5，Ⅲ. 6をご参照ください。

代表機関としての全体提案の場合：課題責任者及び事務連絡担当者

分担機関としての部分提案の場合：サブ課題責任者及び事務連絡担当者

※2 以下の方に採否結果を通知します。

代表機関としての全体提案の場合：課題責任者

分担機関としての部分提案の場合：サブ課題責任者

#### 【公募説明会について】

本事業の内容，応募の手続き等についての説明会を以下のとおり実施します。

日時：平成26年10月16日（木） 11時～12時

場所：文部科学省 5階 5F3会議室

参加をご希望の方は、支援業務受託機関（Ⅱ. 10参照）まで e-mail にて、氏名、所属、電話番号、メールアドレスをご記入の上、お申し込みください（申し込み締切り：10月14日（火）17時）。なお、本説明会へ参加されなくても、本事業への応募は可能です。

e-mail : ktkoubo@jst. go. jp

件名 : 「ポスト「京」重点課題公募説明会申込」

## 2. e-Rad を利用した応募書類の作成・提出等

### (1) 府省共通研究開発管理システム (e-Rad) について

府省共通研究開発管理システム（以下、「e-Rad」という。）とは、各府省が所管する競争的資金制度を中心として研究開発管理に係る一連のプロセス（応募受付→審査→採択→採択課題管理→成果報告等）をオンライン化する府省横断的なシステムです。

※「e-Rad」とは、府省共通研究開発管理システムの略称で、Research and Development（科学技術のための研究開発）の頭文字に、Electric（電子）の頭文字を冠したものです。

### (2) e-Rad を利用した応募方法

応募は e-Rad を通じて行っていただきます。なお、e-Rad の使用に当たっては、研究機関及び研究者の事前登録が必要になりますのでご注意ください。

#### ① 研究機関の登録

応募に当たっては、応募時まで e-Rad に研究機関が登録されていることが必要となります。

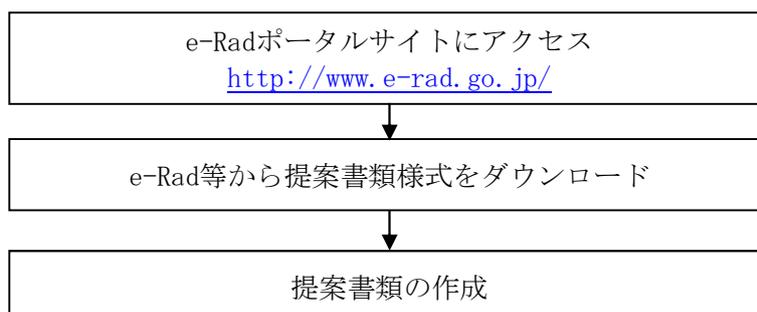
研究機関で 1 名、e-Rad に関する事務代表者を決めていただき、事務代表者はポータルサイトより研究機関登録様式をダウンロードして、登録申請を行ってください。登録手続きに日数を要する場合がありますので、二週間以上の余裕をもって登録手続きをしてください。なお、一度登録が完了すれば、他省庁等が所管する制度・事業の応募の際に再度登録する必要はありません。また、既に他省庁等が所管する制度・事業で登録済みの場合は再度登録する必要はありません。

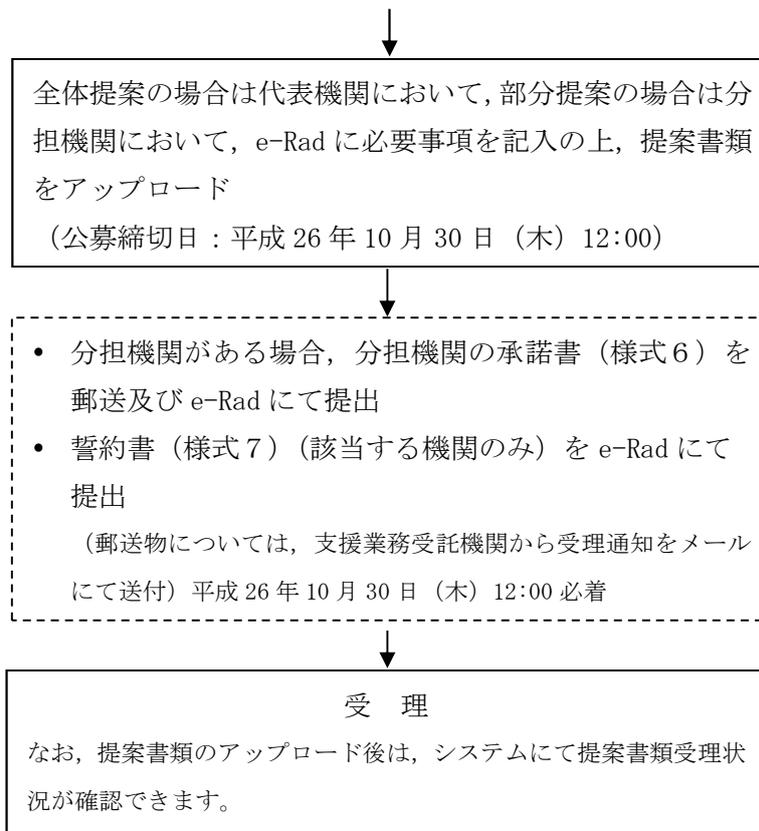
#### ② 研究者情報の登録

本制度に応募する際の実施担当者を研究者と称します。研究機関は実施担当者の研究者情報を登録し、ログイン ID、パスワードを取得することが必要となります。

ポータルサイトに掲載されている研究事務代表者及び事務分担者用マニュアルを参照してください。

#### ③ e-Rad を利用した公募の流れ





#### ④ 提案に当たっての注意事項

- 提案に対する機関の承認

採択後に契約行為を伴いますので、所属する研究機関（代表機関は文部科学省と委託契約（分担機関は代表機関と再委託契約）を締結する研究機関）の了承を得た上での承認が必須となります。e-Rad 上で機関承認の処理を必ず行ってください。研究者が e-Rad に登録したのみでは提案書は受け付けられませんので、ご注意願います。

なお、複数の分担機関が共同で事業を実施する場合には、参加する全ての分担機関の了承を得た上で提出してください。

また、所属機関の事務担当者は e-Rad により提案内容を閲覧することができます。

- 提案内容の調整

重点課題の実施機関の選定及び本事業の実施に当たっては、予算の制約等の理由から、計画の修正を求めることがあります。また、本事業の実施に割り当てられる経費は、予算状況により変わる場合がありますので、あらかじめご了承ください。

- 対象外となる提案について

以下に示す提案は本事業の対象外となります。

(ア) 単に既製の設備備品の購入を目的とする提案（単に試験設備の製作・試運転を目的とするもの）

(イ) 他の経費で措置されるのがふさわしい設備備品等の調達に必要な経費を、本事業の経費により賄うことを想定している提案

### 3. 提案書類の受付等

本事業の応募の募集期間及び提案書類の提出先等は以下のとおりです。提案書類の提出は、e-Rad による方法（様式6は公印が押印されたものを郵送も必要）による方法とし、提案書類は提出期限内に提出してください。

#### (1) 提案書類書式の入手方法等

提案書類書式等、応募に必要な資料の入手については、文部科学省ホームページの公募情報 ([http://www.mext.go.jp/b\\_menu/boshu/index.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/boshu/index.htm))、e-Rad ポータルサイト、又は支援業務受託機関(JST)のホームページ(<http://www.jst.go.jp/keytech/koubo26-5.html>)からダウンロードしてください。

提出を要する提案書類は「様式1～様式4」（様式5は任意、様式6、様式7は該当する機関のみ）及び別添「提出書類チェックシート」です。

本事業の代表機関及び全ての分担機関並びに課題代表者及び全てのサブ課題責任者・サブ課題実施者について、様式1または様式2、様式3の実施体制及び様式4に必ず記載してください。記載されていない場合は、実施機関及び実施者として事業に参画できないことがあります。

また、（様式5）「用語の説明書」については、提出を義務付けるものではありませんが、難解な専門用語等を記載されている場合、提案内容の理解を助ける補助資料として、必要に応じて提出してください。

#### (2) 提案書類の受付期間

平成26年10月8日（水）～平成26年10月30日（木）12:00（厳守）

（以下の郵送が必要な提案書類は期日までに必着）

※全ての提案書類について、期限を過ぎた場合には一切受理できませんのでご注意ください。

公募に参加を希望する者は、提案書等の提出時に、支出負担行為担当官が別に指定する暴力団等に該当しない旨を誓約書（様式7）に記入し、所属機関長による署名（自署に限る。公印不要。）の上、e-Radにて提出してください。

誓約書を提出せず、又は虚偽の誓約をし、若しくは誓約書に反することとなったときは、当該者の契約を無効とします。ただし、以下に該当する機関は提出の必要はありません。

- 機関の代表者の選任・任命を国が行う機関（国立大学法人、独立行政法人等）
- 機関の代表者が国民の選挙により選任される機関（地方公共団体）

また、分担機関がある提案を行う場合には、分担機関の承諾が必要なため、分担機関の承諾書（様式6）の原本（公印が押印されたもの）についても、代表機関が取りまとめて郵送により送付してください（持参の場合は受理しません）。なお、e-Radの提出においても、公印がない書類で構いませんので添付してください。

《提出先（支援業務受託機関）》

〒100-8666 東京都千代田区四番町5-3 サイエンスプラザ5階

#### 4. 提案書類の作成

提案書類の作成に当たっては、以下に示す注意事項とともに、e-Rad への応募情報入力に当たっては、ポータルサイトに掲載されている研究者用マニュアルを参照してください。提案書類に不備がある場合、受理できないことがありますのでご注意ください。

##### (1) e-Rad の操作方法等

###### (i) e-Rad の操作方法

e-Rad の操作方法に関するマニュアルは、ポータルサイト (<http://www.e-rad.go.jp/>) から参照又はダウンロードすることができます。利用規約に同意の上、応募してください。

###### (ii) e-Rad の操作方法に関する問合せ先

事業の内容に関する問合せは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にて受け付けます。e-Rad の操作方法に関する問合せは、e-Rad ヘルプデスクにて受け付けます。e-Rad のポータルサイト（以下、「ポータルサイト」という。）をよく確認の上、問い合わせてください。なお、審査状況、採否に関する問合せには一切回答できません。

e-Rad の操作方法に関する問合せ	e-Rad ヘルプデスク	0120-066-877 午前 9:00～午後 6:00※土曜日、 日曜日、祝祭日を除く
--------------------	-----------------	--

・ポータルサイト：<http://www.e-rad.go.jp/>

###### (iii) e-Rad の利用可能時間帯

(月～日) 0:00～24:00 (24 時間 365 日)

ただし、上記利用可能時間帯であっても保守・点検を行う場合、運用停止を行うことがあります。運用停止を行う場合は、ポータルサイトにてあらかじめお知らせします。

##### (2) 提案書類の作成及び提出上の注意

- 字数制限や枚数制限を定めている様式については、制限を守ってください。また、提案書類の作成はカラーでも可としますが、公平性の観点から審査はモノクロ印刷した書類で行いますので、ご了承願います。
- 提案書類の記載（入力）に際しては、本項目及び様式 1～様式 7 に示した注意事項に従って、必要な内容を誤りなく記載してください。
- 提案書類は日本語で作成してください。
- 入力する文字のサイズは原則として 10.5 ポイントを用いてください（様式 4 は除く）。
- 数値は原則として半角で入力してください。（(例) 郵便番号、電話番号、金額、人数等）
- 郵便番号は 7 桁で記入してください。

- 用紙の大きさは、全て日本工業規格 A4 版とします。
- 各様式の枚数の制限を守ってください。枚数制限がない様式であっても、応募に際して利用する e-Rad においてアップロードできるファイルの容量に制限があることにご注意ください。
- 提案書類は、提案書（全体提案の場合は様式 1、部分提案の場合は様式 2）を第 1 ページとし、1/〇、2/〇、・・・、（〇は全ページ数）として通しページ番号を中央下に必ず付けてください。
- 電子媒体に貼り付ける画像ファイルの種類は「GIF」「BMP」「PNG」形式のみとしてください。それ以外の画像データを貼り付けた場合、正しく PDF 形式に変換されません。画像データの貼り付け方については、研究者向け操作マニュアルを参照してください。
- アップロードできる電子媒体は 1 ファイルで最大容量は 10MB です。
- 電子媒体の様式は、アップロードを行う前に PDF 変換を行う必要があります。PDF 変換はログイン後のメニューから行ってください。また、同じくメニューから変換ソフトをダウンロードし、お使いのパソコンへインストールしてお使いいただくこともできます。外字や特殊文字等を使用した場合、文字化けする可能性がありますので、変換された PDF ファイルの内容をシステムで必ず確認してください。利用可能な文字に関しては、研究者向け操作マニュアルを参照してください。
- 研究機関からの承認が必要な応募課題の情報は、「未処理一覧」画面から確認することができます。
- 提出締切日までにシステムの「応募課題管理」画面の「申請進行ステータス」が「配分機関処理中」となっていない申請は無効となります。正しく操作しているにも関わらず、提出締切日までに「配分機関処理中」にならなかった場合は、支援業務受託機関まで連絡してください。

### (3) その他

提案書類に不備等がある場合は、審査対象とはなりませんので、応募要項及び様式に示した注意事項を熟読の上、注意して記入してください。（提案書類のフォーマットは変更しないでください。）提案書類の差し替えは固くお断りいたします。また、提案書類の返却はいたしません。

## 5. 「研究機関における公的研究費の管理・監査のガイドライン（実施基準）」に基づく体制整備について

本事業への応募，研究実施等にあたり，代表機関及び分担機関には，「研究機関における公的研究費の管理・監査のガイドライン（実施基準）」（平成 26 年 2 月 18 日改正）の内容について遵守していただく必要があります。

研究機関においては，標記ガイドラインに基づいて，研究費の管理・監査体制の整備を行い，研究費の適切な執行に努めていただきますようお願いいたします。

## 6. 「研究機関における公的研究費の管理・監査のガイドライン（実施基準）」に基づく「体制整備等自己評価チェックリスト」の提出について

本事業の契約に当たり、代表機関及び分担機関では標記ガイドラインに基づく研究費の管理・監査体制を整備すること、及びその状況等についての報告書である「体制整備等自己評価チェックリスト」（以下「チェックリスト」という。）を提出することが必要です。（チェックリストの提出がない場合及び内容に不備が認められる場合の事業実施は認められません。）

このため、下記ホームページの様式に基づいて、平成26年11月28日（金）までに、研究機関から文部科学省研究振興局振興企画課競争的資金調整室に、府省共通研究開発管理システム（e-Rad）を利用して、チェックリストが提出されていることが必要です。ただし、平成25年4月以降、別途の機会で作成したチェックリストを提出している場合は、今回新たに提出する必要はありません。

チェックリストの提出方法の詳細については、下記文部科学省 HP をご覧ください。

【URL】 [http://www.mext.go.jp/a\\_menu/kansa/houkoku/1301688.htm](http://www.mext.go.jp/a_menu/kansa/houkoku/1301688.htm)

※提出には、e-Rad の利用可能な環境が整っていることが必須となりますので、e-Rad への研究機関の登録手続を行っていない機関にあっては、早急に手続をお願いします。（登録には通常2週間程度を要しますので十分ご注意ください。e-Rad 利用に係る手続の詳細については、上記 HP に示された提出方法の詳細とあわせ、下記ホームページをご覧ください。）

【URL】 <http://www.e-rad.go.jp/shozoku/system/index.html>

なお、標記ガイドラインにおいて「情報発信・共有化の推進」の観点を盛り込んでいるため、本チェックリストについても研究機関のホームページ等に掲載し、積極的な情報発信を行っていただくようお願いいたします。

## 7. 審査及び採択

### (1) 審査・選定方法等

- 本プログラムの公募に係る審査は、文部科学省に設置した審査委員会において行います。
- 審査委員会は、応募のあった代表機関としての全体提案（Ⅲ. 2. (1) 参照）および分担機関としての部分提案（Ⅲ. 2. (1) 参照）の内容について、下述(2)選定の観点（審査項目）に基づき、書面審査及びヒアリング審査を行い、合議審査により代表機関を選定します。この際、部分提案の扱い（全体提案に取り込む、または、取り込まない）についても決定するものとし、全体提案に取り込むことが適切と認められる部分提案については、全体提案に取り込んだ上で、代表機関を選定します。
- ヒアリング審査は、書面審査で選定された提案を対象に実施します。支援業務受託機関から、ヒアリング審査対象課題のヒアリング実施について以下の方に連絡をします。なお、ヒアリング審査までの間に、追加資料の提出を求める場合があります。  
代表機関としての全体提案の場合：課題責任者及び事務連絡担当者  
分担機関としての部分提案の場合：サブ課題責任者及び事務連絡担当者
- 審査委員会は、必要に応じて、提案書類に記載のあった計画内容や、実施体制等について

の意見を述べる場合があります。また、書面審査及びヒアリング審査の結果、提案内容の修正や不足部分の追加を求め、再審査、又は、再公募を実施し、ヒアリング審査を別途実施する場合があります。また、部分提案の内容について、全体提案に取り込むことを検討するため、当該部分提案の内容等の情報を、全体提案を行った代表機関に対し、必要な範囲で提供することがあります。

- 審査は非公開とし、選定に携わる関係者には、審査の過程で取得した一切の情報を、審査期間だけではなく、審査終了後も第三者に漏えいしないこと、情報を善良な管理者の注意義務をもって管理すること等の秘密保持を遵守することを義務づけます。

## (2) 選定の観点（審査項目）

提案内容は、後述する選定の観点（Ⅲ． 3 参照）に基づき総合的に審査を行い採択します。

## (3) 選定結果の通知等

- 全ての審査終了後、以下の方に採択の可否を通知します。なお、選考の途中経過についての間合せには一切応じられません。

代表機関としての全体提案の場合：課題責任者

分担機関としての部分提案の場合：サブ課題責任者

- 採択に当たっては、研究開発の内容、事業期間、事業に要する経費、実施体制等に関し、条件を付すことがあります。
- 採択の決定後、文部科学省ホームページへの掲載等により、審査委員等についての情報を公開します。

## 8. 公表等

### (1) e-Rad上の採択された提案内容に関する情報の取扱い

採択された提案内容に関する情報（事業名、重点課題名、代表機関名、課題責任者名、予算額及び実施期間等）については、「行政機関の保有する情報の公開に関する法律」（平成 11 年法律第 42 号）第 5 条第 1 号イに定める「公にすることが予定されている情報」であるものとします。これらの情報については、採択後適宜、本事業のホームページにおいて公開する予定です。

### (2) e-Radからの内閣府への情報提供等

文部科学省が管理運用する e-Rad を通じ、内閣府に、各種の情報を提供することがあります。また、これらの情報の作成のため、各種の作業や情報の確認等についてご協力いただくことがあります。

## 9. 応募に当たっての留意事項

### (1) 不合理な重複・過度の集中に対する措置

#### ① 不合理な重複に対する措置

本事業への提案において、研究者が、実質的に同一の研究内容で、既に研究助成（公的

助成及び民間との共同研究等を含む)を受けている場合、本事業の審査対象からの除外、採択の決定の取消し、又は経費の削減(以下、「採択の決定の取消し等」という。)を行うことがあります。

なお、本事業への提案段階において、他の研究助成等への応募を制限するものではありませんが、他の研究助成等に採択された場合には速やかに本事業の事務担当に報告してください。この報告に漏れがあった場合、本事業において、採択の決定の取消し等を行う可能性があります。

## ② 過度の集中に対する措置

本事業に提案された事業内容と、他の研究助成等を活用して実施している研究内容が異なる場合においても、当該研究者のエフォート等を考慮し、研究者に当該年度に配分される研究費全体が効果的・効率的に使用できないと判断される場合には、本事業において、採択の決定の取消し等を行うことがあります。

このため、本事業への応募書類の提出後に、他の公的助成等に応募し採択された場合等、記載内容に変更が生じた場合は、速やかに本事業の事務担当に報告してください。この報告に漏れがあった場合、本事業において、採択の決定の取消し等を行う可能性があります。

## ③ 不合理な重複・過度の集中排除のための、応募内容に関する情報提供

不合理な重複・過度の集中を排除するために、必要な範囲内で、応募(又は採択課題・事業)内容の一部に関する情報を、e-Rad等を通じて、他府省を含む他の競争的資金制度等の担当に情報提供する場合があります。また、他の競争的資金制度等におけるこれらの確認を行うため求められた際に、同様に情報提供を行う場合があります。

## (2) 「研究活動における不正行為への対応等に関するガイドライン」の遵守について

研究機関は、本事業への応募及び研究活動の実施に当たり、「研究活動における不正行為への対応等に関するガイドライン」(平成26年8月26日文科科学大臣決定)を遵守することが求められます。

## (3) 他府省を含む他の競争的資金等の応募受入状況

様式4の研究者情報の「他制度での研究助成等の有無」の記入内容について、事実と異なる記載をした場合は、不採択、採択取消し又は減額配分とすることがあります。

## (4) 若手の博士研究員の多様なキャリアパスの支援について

「文科科学省の公的研究費により雇用される若手博士研究員の多様なキャリアパス支援に関する基本方針」【平成23年12月20日科学技術・学術審議会人材委員会】([http://www.mext.go.jp/b\\_menu/shingi/gijyutu/gijyutu10/toushin/1317945.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu10/toushin/1317945.htm))を踏まえ、本公募に採択され、公的研究費(競争的資金その他のプロジェクト研究資金や、大学向けの公募型教育研究資金)により、若手の博士研究員を雇用する場合には、当該研究員の多様なキャリアパスの確保に向けた支援への積極的な取り組みをお願いいたします。

## 10. 問合せ先

本公募に関する問合せ先は以下のとおりです。

事業の内容に関する 問合せ	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	TEL:03-6734-4275, FAX:03-6734-4077 e-mail:hpci-con@mext.go.jp
提出書類の作成・提出 に関する手続等に 関する問合せ （支援業務受託機関）	独立行政法人科学技術振興 機構（JST） 科学技術プログラム推進部 研究振興事業グループ	（基本的にはメールでお願いします） e-mail:ktkoubo@jst.go.jp 担当者：橋本，青山 受付時間：10:00～16:00 （土，日，祝祭日を除く）

## Ⅲ. 公募要領

---

### 1. 応募対象者

本事業では、重点課題（Ⅰ. 3.（3）参照）について、採択された各代表機関と文部科学省との間において委託契約を締結します。また、分担機関は代表機関との間において再委託契約を締結します。なお、実施体制の構成に当たって、必要に応じて、協力機関を設けることも可能とします。

代表機関および分担機関として応募する応募者等の要件は以下のとおりです。

#### （1）応募者等の要件

代表機関、分担機関として本事業に応募できるのは、以下に示す国内の大学、研究開発機関、企業等の機関とします。なお、研究者・職員個人は対象とはしません。

- 大学及び大学共同利用機関法人
- 公設試験研究機関
- 独立行政法人、特殊法人及び認可法人
- 特例民法法人又は一般社団・財団法人若しくは公益社団・財団法人
- 民間企業（法人格を有する者）
- 特定非営利活動促進法第十条第一項の規定により認証を受けた特定非営利活動法人

また、応募する機関は、以下の要件も満足する必要があります。

- ① 採択された場合に、当該課題の事業の実施に際し、所属機関の施設及び設備が使用できる機関であること。
- ② 採択された場合に、当該課題の契約手続き等の事務を行うことができる機関であること。
- ③ 本事業終了後も、引き続き事業を推進し、他の研究機関及び研究者の支援を行うことができる機関であること。

なお、応募から事業終了に至るまでの間に資格の喪失、長期外国出張その他の理由により、事業の実施者としての責任を果たせなくなることが見込まれる者は、事業の実施者となることを避けてください。また、委託契約の履行能力を確認するため、審査時に、機関の営む主な事業内容、資産及び負債等財務に関する資料等の提出を求めることがあります。

### 2. 公募の対象

#### （1）公募対象

『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』

重点課題（Ⅰ. 3.（3）参照）を対象に、重点課題の解決に資するアプリケーションの開発や重点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、さらには、ポスト「京」の計算資源を活用し、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を実施する機関から、以下の提案を募集します。

① 代表機関としての全体提案

代表機関は、特定の重点課題の解決に向け、本事業の推進に責任を持ち、主体的にアプリケーション開発・研究開発を推進します。代表機関として応募する場合は、特定の重点課題全体（サブ課題を含む）に関する提案をしてください。この際、分担機関や協力機関が実施機関として参画する場合は、分担機関や協力機関も含めて提案してください。

② 分担機関としての部分提案

分担機関は、重点課題のサブ課題を担当し、代表機関と連携・協調・分担し、アプリケーション開発・研究開発を推進します。分担機関として応募する場合は、特定の重点課題のサブ課題に関する提案をしてください。この際、複数の分担機関や協力機関が実施機関として参画する場合は、他の分担機関や協力機関も含めて提案してください。

(2) 研究開発を計画・実施する上での留意事項

① 事業実施時における選定方針の尊重

「別紙1 2. 2 重点課題に求められる要件（選定方針）」は本事業の基本的な考え方に係るものであり、公募の審査時だけでなく、アプリケーション開発・研究開発の推進時においても尊重すべきものです。本事業の推進時にご留意ください。

② ポスト「京」開発主体との連携・協調

成果の早期創出及び最大化に向け、重点課題に関するアプリケーション開発及びポスト「京」開発においては、ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関（アプリケーション開発元等）との間で、ポスト「京」のシステムとアプリケーションの設計開発に関し、相互に要求性能・機能や評価結果等についてのフィードバックを行いながら設計開発を同時に進めるコデザインを行います。ポスト「京」開発主体と連携・協調して本事業を推進してください。

③ ポスト「京」の計算資源配分

重点課題に割り当てるポスト「京」の計算資源は、ポスト「京」全体の計算資源の30-40%程度を予定しています（「別紙1 4. 2参照」。各重点課題への具体的な配分割合については、調査研究・準備研究フェーズを通じて策定される各重点課題の実施計画や重点課題に関するアプリケーション開発状況等を踏まえ、ポスト「京」の運用開始までの間に決定予定です。実施計画の策定時にご留意ください。

### 3. 選定の観点

代表機関及び分担機関からの提案内容は、以下の審査基準を中心に総合的に審査を行います。

- (1) 重点課題に求められる要件への合致性の評価
  - 実施計画（実施内容、研究開発内容、実施体制等）が、重点課題に求められる要件（別紙1 2. 2参照）に適合していること。
  - 重点課題の課題名及び課題概要に適合する提案内容であること（全体提案の場合）。
  - 全体提案に適合する提案内容であること（部分提案の場合）。
- (2) 研究開発内容に関する評価
  - 目標及び期待される成果が、明確かつ具体的であり、また、実現性・妥当性があること。
  - 目標及び期待される成果の実現のために必要とする「京」やポスト「京」の計算資源量が、明確かつ具体的であり、また、妥当性があること。
- (3) 実施体制の評価
  - 代表機関、分担機関、協力機関の役割分担が明確かつ妥当であるとともに、課題責任者やサブ課題責任者・サブ課題実施者が事業を推進し、各参画者が目標の達成に寄与する体制となっていること。
  - 本事業を行うための人員・組織体制が整っており、業務管理を適切に遂行できる体制を有していること。
  - 本事業を適切に遂行するための専門的知識、ノウハウ、実績及びポテンシャルを有していること。
- (4) 事業計画に関する評価
  - 所要経費の内容は妥当であり、有効に使用されることが見込まれること。

#### 4. 契約の締結

本事業においては、代表機関は文部科学省と委託契約（分担機関は代表機関と再委託契約）を単年度ごとに締結し、代表機関及び分担機関（以下、「受託者」という。）が文部科学省に代わって事業を実施することになります。なお、委託契約の締結等に係る詳細はIV.をご参照ください。

#### 5. 課題責任者等の指定

本事業への応募に当たっては、以下の方を指定してください。

- 課題責任者（全体提案の場合のみ）

全体提案として応募する場合、代表機関に所属する者の中から、当該重点課題の事業推進に責任を持つ課題責任者を指定してください。

なお、課題責任者が複数の重点課題の課題責任者になることはできません。また、課題責任者が当該重点課題のサブ課題責任者・サブ課題実施者になることは可能ですが、他の重点課題のサブ課題責任者・サブ課題実施者になることはできません。

- サブ課題責任者・サブ課題実施者（全体提案及び部分提案の場合）

分担機関ごと（代表機関がサブ課題を実施する場合は代表機関も含む）に、分担機関におけるサブ課題の事業推進に責任を持つサブ課題実施者を指定してください。また、サブ課題実施者の中から、当該サブ課題全体の事業推進に責任を持つサブ課題責任者を指定してください。

なお、サブ課題責任者・サブ課題実施者が当該重点課題の複数のサブ課題のサブ

課題責任者・サブ課題実施者や他の重点課題のサブ課題責任者・サブ課題実施者になることはできません。

## 6. 事務連絡担当者の指定

本事業に応募するに当たっては、文部科学省及び支援業務受託機関との事務連絡を速やかに行うことができ、かつ常に課題責任者・サブ課題責任者・サブ課題実施者と連絡をとることができる、課題責任者・サブ課題責任者・サブ課題実施者と同じ機関に所属する担当者（事務連絡担当者）を指定してください。なお、課題責任者・サブ課題責任者・サブ課題実施者が事務連絡担当者を兼ねることはできません。

## 7. 採択予定件数

代表機関採択予定件数：9件（各重点課題ごとに1代表機関）

## 8. 実施期間、実施予定額

### （1）調査研究・準備研究フェーズ

実施期間：2年間（平成26年度～平成27年度）

実施予定額（平成26年度）：1代表機関あたり5百万円程度（一般管理費を含む）

実施予定額（平成27年度）：1代表機関あたり最大数千万円程度を想定

### （2）本格実施フェーズ

実施期間：4年間（平成28年度～平成31年度）

実施予定額（年間）：1代表機関あたり最大1.5億円～3億円程度を想定

なお、平成27年度以降については、各年度予算に基づき課題内容の見直し等を求めることがあります。記載された予定額は現時点での想定であり、保証するものではありません。

## IV. 契約の締結等

---

### 1. 委託契約の締結

#### (1) 契約条件等

採択された代表機関については、予算の成立を前提に、文部科学省と代表機関との間において、国の会計年度の原則に従い、単年度ごとに委託契約を締結することになります。契約を締結するに当たっては、その内容（経費の積算を含む。）が双方の合意に至らない場合は、採択された代表機関であっても取消しとなることがあります。

契約締結後においても、予算の都合によりやむを得ない事情が生じた場合には、事業計画の見直し又は中止を求めることがあります。

なお、事業進捗状況等に関する全体推進機関等での評価を踏まえ、年度途中での事業計画の見直し等による契約変更を行うことがあります。

また、単純に試験物の製造等の依頼を行うような定型的な役務は、提案されていない機関に外注することができますが、それ以外の本事業の事業開発的要素を伴う役務は、提案されていない機関に外注することは原則としてできません。

#### (2) 再委託契約について

代表機関が事業を実施するに当たって、本委託契約の一部を分担機関に委託する場合は、代表機関は分担機関との間において再委託契約を締結するとともに、再委託先における事業の進捗状況及び事業に要する経費について管理することが必要となります。

#### (3) 契約の準備について

代表機関の採択後、速やかに契約作業が進められるよう、代表機関は、①業務計画書の作成、②業務計画に必要な経費の見積書の徴取、③会計規程及び職務発明規程等の整備を行う必要があります。

代表機関は当該年度の業務計画書を支援業務受託機関に提出し、文部科学省との契約締結の手続を行います。

#### (4) 契約に関する事務処理

「科学技術・学術政策局、研究振興局及び研究開発局委託契約事務処理要領」に基づき、必要となる事務処理を行う必要があります（分担機関（再委託先）についても同様。）。

#### (5) 委託費の額の確定等について

当該年度の委託契約期間終了後、委託契約書に基づいて提出していただく委託業務実績報告書を受けて行う委託費の額の確定等において、事業に要する経費の不正使用又は当該委託業務として認められない経費の執行等が判明した場合は、経費の一部又は全部が支払われないことがあります。

なお、本委託契約の代表機関は、当該年度の委託契約期間終了までに分担機関（再委託先）からの委託業務実績報告書を受けて再委託契約の額の確定等を、当該代表機関におけ

る国の確定調査の前に行い、その結果を国の確定調査の際に報告するようにしてください。

## 2. 委託費の範囲及び積算等

### (1) 委託費の範囲

委託費の範囲は、本事業に直接係る経費及び一般管理費とします。詳細は、(別紙2)「経費取扱区分表」をご参照ください。

### (2) 委託費の積算

本事業に必要な経費を費目ごとに算出し、総額を計上の上、(様式3)に記載してください。

### (3) 委託費の支払

委託費は、原則として当該年度の委託契約期間終了後に文部科学省が支払うものとします。ただし、文部科学省が必要と認める場合には、委託費の全部又は一部を概算払いすることができます。

## 3. 事業の管理と評価

### (1) 事業管理

全体推進機関において、事業の進捗状況を把握し、必要に応じ助言を行う等、適切な事業管理を実施します。事業については、毎年度、委託業務成果報告書等の提出を求めます。また、全体推進機関による進捗状況の確認を行う場合があり、そのために必要な関連する報告を求めるとともに、事業実施場所において実際の事業状況の確認を行うことがあります。

その結果、進捗状況に応じて、計画の変更、課題の中止等を求めることがあります。また、あわせて、経理面の確認も随時行います。

また、事業の計画や進捗状況、得られた成果等について、全体推進機関のほか、文部科学省担当者が確認することがあります。

### (2) 評価

本事業については、事業期間中に中間評価、事業終了時に事後評価を実施します。なお、評価結果については、原則として公開することとします。

## 4. 事業成果の取扱い

### (1) 委託業務成果報告書の提出

代表機関は、事業成果を取りまとめた委託業務成果報告書(要約版を含む。)を冊子で40部及び電子媒体で提出していただきます。電子媒体はファイル形式をPDF形式とします。また、同内容の電子媒体をWORD形式でも併せて提出してください。委託業務成果報告書は、国立国会図書館等で公開されます。なお、成果報告会での発表を求めません。

(2) 事業成果の帰属

事業を実施することにより取得した特許権や著作権等の知的財産権については、産業技術力強化法（平成 12 年法律第 44 号）における日本版バイ・ドール規定に基づく一定の要件の下で受託者に帰属させることができます。その詳細については契約時に定める契約条項によることとします。

(3) 成果の利用

事業の成果を利用（成果によって生じた著作物及びその二次的著作物の公表等）できるのは、受託者に所属する職員であり、国内外にかかわらず請負先は利用できません。

(4) 事業成果のオープンアクセスの確保

受託者は、可能な限り事業成果のオープンアクセスを確保するよう努めていただきます。

## 5. 取得資産の取扱い

(1) 所有権

委託費により取得した資産計上対象物品（設備備品及び文部科学省が指定する試作品。以下、「設備備品等」という。）の所有権は、「額の確定」後、文部科学省に移転していただきます。次年度以降も継続して当該委託業務に使用を希望する場合は、別途、物品無償貸付申請書により、文部科学省の承認を得る必要があります。

なお、設備備品等については、受託者が文部科学省との契約条項に従って善良な管理を行ってください。

(2) 事業終了後の設備備品等の取扱い

事業終了後における設備備品等の取扱いについては、別途、文部科学省との協議となります。

(3) 放射性廃棄物等の処分

汚染資産等及び委託業務の実施により発生した放射性廃棄物は、受託者の責任において処分してください。

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

平成 26 年 8 月

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

## 目次

はじめに .....	1
第1章 プロジェクト概要 .....	3
1. 1 プロジェクトの目的 .....	3
1. 2 プロジェクトの事業内容及び全体推進スケジュール .....	3
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 .....	5
2. 1 基本的な考え方 .....	5
2. 2 重点課題に求められる要件（選定方針） .....	5
2. 3 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題 .....	7
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 .....	10
3. 1 推進体制 .....	10
3. 2 成果の早期創出及び最大化に向けた取組 .....	13
3. 3 公募について .....	16
第4章 ポスト「京」の計算資源配分 .....	18
4. 1 基本的な考え方 .....	18
4. 2 計算資源配分 .....	18
おわりに .....	20
別添 .....	21
参考資料 .....	36

## はじめに

スーパーコンピュータは、理論、実験・観測と並ぶ科学技術の第三の手法であるシミュレーションのための強力なツールとして、我が国の競争力の源泉となる先端的な研究成果を生み出す研究開発基盤であるとともに、様々な分野の共通基盤技術となりつつあるビッグデータの処理・解析やデータ同化（シミュレーションに観測データを取り込む手法）のための重要なツールでもある。

また、世界最高水準のスーパーコンピューティング技術は、科学技術の振興、産業競争力の強化、国際貢献、安心・安全の国づくり等の実現に不可欠な国家の基幹技術であることから、第4期科学技術基本計画で「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」が国家安全保障・基幹技術に位置づけられている。我が国が開発したスーパーコンピュータ「京」は、平成24年（2012年）より共用を開始し、現時点において世界トップレベルの性能を有するシステムとして、様々な成果を創出している。

一方、国際的にもスーパーコンピュータの開発・利用が進められ、米欧中をはじめとする世界各国で、2020年～2022年頃のエクサスケールコンピューティングの実現を目指した国主導での研究開発が活発に推進されており、このような国際競争環境の下で、我が国においてもこれに立ち遅れることなく「京」の経験を最大限に生かしつつ研究開発を進める必要がある。

このような背景のもと、我が国における科学技術の振興、産業競争力の強化、国際貢献、安心・安全の国づくり等を実現するため、システムとアプリケーションの協調設計（コデザイン）により社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステム（ポスト「京」）、より具体的には、平成32年（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ともに、ポスト「京」を活用し、社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーションの開発を行うことに、平成26年度より着手している。

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・科学的課題に戦略的に取り組み、我が国の成長に寄与し世界を先導する成果を創出することが期待されており、そのためには、ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題を選定した上で、これらの課題解決に資するアプリケーションを重点的に開発するとともに、ポスト「京」開発においては、これらの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調的に設計開発することで、成果の早期創出を目指す必要がある。また、個々

の社会的・科学的課題の解決という観点だけではなく、個々の社会的・科学的課題を俯瞰し、ポスト「京」システム全体として成果を最大化することにより、国際競争力のあるシステムを実現することも必要である。このような状況も踏まえ、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題等についての検討を行うため、「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」（以下「本委員会」という。）が設置された。

本委員会では、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題、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、ポスト「京」の計算資源配分等について議論を行い、その結果を報告書としてまとめた。

## 第1章 プロジェクト概要

### 1. 1 プロジェクトの目的

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（以下「本プロジェクト」という。）は、ポスト「京」を活用し、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーション開発及び研究開発に戦略的に取り組み、世界を先導する成果の創出を目指すものである。

### 1. 2 プロジェクトの事業内容及び全体推進スケジュール

本プロジェクトは、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（以下「重点課題」という。）を対象に、重点課題の解決に資するアプリケーションの開発や重点課題に関する研究開発（以下「アプリケーション開発・研究開発」という。）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、さらには、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成果の早期創出及び最大化を図ることを特徴としている。

本プロジェクトの推進は、以下に示す調査研究・準備研究フェーズ、本格実施フェーズ、成果創出フェーズの三つのフェーズから構成される。なお、平成27年度以降の事業内容及び全体推進スケジュールについては、現時点での想定である。

#### ○ 調査研究・準備研究フェーズ（平成26年度～平成27年度）

各重点課題に関する平成27年度以降の実施内容について、アプリケーション開発・研究開発に主体的に取り組む機関（代表機関）を中心に実施計画（工程表、研究開発内容、推進体制、必要計算資源、期待される成果等）を策定する。また、策定した実施計画に基づき推進体制を構築し、アプリケーションの開発に着手する。

#### ○ 本格実施フェーズ（平成28年度～平成31年度）

各代表機関を中心に、「京」等の既存の計算資源を用いて重点課題に関するアプリケーションの開発を本格的に実施するとともに、ポスト「京」の利

活用による成果創出に向けた知見の獲得や計算手法の確立を図る。

○ 成果創出フェーズ（平成 32 年以降）

平成 32 年頃のポスト「京」の運用開始に併せて、ポスト「京」を用いて、平成 31 年度までに開発した重点課題に関するアプリケーションを利活用した研究開発を行い、成果を創出する。

また、ポスト「京」が運用開始以前に部分的に運用されている期間においても、その期間での先行的な利活用による成果の早期創出を図ることを検討する必要がある。

## 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

### 2.1 基本的な考え方

ポスト「京」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み、世界を先導する成果を創出することが期待されている。そのため、重点課題の選定に際しては、重点課題に求められる要件（選定方針）を明確化した上で、様々なニーズも考慮し、選定方針を満足する課題を重点課題として選定する。

なお、選定方針は、プロジェクトの基本的な考え方に係るものであり、重点課題の選定時だけでなく、アプリケーション開発・研究開発の推進時においても尊重すべきものである。

### 2.2 重点課題に求められる要件（選定方針）

重点課題に求められる要件（選定方針）を以下に示す。なお、(1)～(3)及びその下の○、①～③は必須要件であり、➤は○や①～③の具体的な説明の例示を表す。

#### (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】

(具体的指標)

- 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。
  - 政府の研究計画に位置づけられていること、具体的な行政ニーズがあること又は既存の研究開発プロジェクトとの連携が期待できること
  - 実験で確かめることが困難な現象（危険すぎる、小さすぎる・大きすぎる、費用がかかりすぎる）等、計算科学・シミュレーションに対する期待・ニーズが明確であること
  - 我が国が国際貢献を求められていること 等

#### (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】

(具体的指標)

- 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。
  - 10-20年程度先の社会や学術を見据えた先駆的・挑戦的なものであること
  - 産業界のみで取り組むことができない先端的な研究等、産業界の将来の可能性を切り開く革新的な成果の創出が期待できること
  - 直接的なアウトプット成果に加え、アウトカム成果として、我が国の産

業競争力の強化や経済への波及効果，科学技術のプレゼンス向上が期待できること

➤ 世界をリードする成果が期待できること 等

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，社会科学者，実験・観測科学者，産業界や自治体等の関係者等が連携・協調した開発体制を構築できる見通しがあること。

➤ 現実社会のより緻密・統合的なモデル化やリアルタイムデータ等，実データによる検証を通じ，社会実装／社会への還元を意識した成果が創出できること

➤ 産業界との連携により製品開発を抜本的に変革し，産業界が使いやすい革新的な製品設計技術が創出できること

➤ 今後ますます重要性が増すと考えられるビッグデータ解析や最先端大型実験施設との連携／最新観測データの利活用により，新しい科学や科学的ブレークスルーが創出できること 等

(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】  
(具体的指標)

① ポスト「京」により初めて可能となる超大規模計算・データ解析であること。

➤ より精密・広域・長時間のシミュレーション（超大規模並列シミュレーション）によりブレークスルーが期待できること

➤ 膨大な組合せや多様・複雑な条件下でのシミュレーション（大規模アンサンブルシミュレーション，パラメトリックスタディ等）により新たな知見の獲得が期待できること

➤ 大量データ処理・ビッグデータ解析により新たな研究・開発の展開が期待できること 等

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。

➤ 取り組むべき課題を俯瞰した場合，当該課題を構成する個別研究開発要素の具体的な内容や研究開発要素間の関係，周辺領域への波及効果，計算科学・シミュレーションの果たす役割や位置づけが明確化されていること

➤ ポスト「京」により初めて可能となる超大規模計算・データ解析により構築された新しい理論やモデルが展開され，より小規模で行われる計算科学・シミュレーションの実施に貢献するなど，一般的な手法の確立・高度化に結びつくこと 等

- ③ ポスト「京」の利用による投資効果が明確であること。
- ▶ 現在の「京」を用いた場合に何がどこまでできて何ができないか、またポスト「京」を用いた場合にどの程度の処理量・処理時間でどのような成果が期待できるか等が明確化されていること 等

## 2. 3 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

「2. 1 基本的な考え方」及び「2. 2 重点課題に求められる要件（選定方針）」に基づき、基礎科学から産業応用まで、幅広い課題の中からバランスを考慮して以下の課題を選定した（各課題の概要は、「別添1 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の概要」を参照。）。

なお、これらの課題の選定に際しては、「計算科学ロードマップ」<sup>(注)</sup>をベースに、関係府省庁における計算科学技術に対するニーズや重点課題に関する意見募集の結果等も踏まえた検討を行った。

(注) 文部科学省科学技術試験研究委託事業「アプリケーション分野からみた将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」(平成24年～平成25年)

### 【重点課題（9課題）】

社会的・国家的見地から高い意義があり、「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る先進的な課題。

#### <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、更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，脳神経等）により、個々人に適した医療，健康寿命を延ばす予防を目指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。

<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，及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て，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（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。調査研究・準備研究フェーズを通じて、その具体化を検討・精査の上、調査研究・準備研究フェーズ終了時に、その後のアプリケーション開発・研究開発の実施について、判断を行う。

### 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え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。

### 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

複雑か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、交通や経済等、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組により、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。

### 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。

なお、これらの重点課題及び萌芽的課題に関し、「別添1 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の概要」に記載の内容の詳細（サブ課題）、ポスト「京」利用の必要性、必要な計算資源等はいくまでも例示であり、実際に実施する研究開発内容（サブ課題）、推進体制等については、今後の公募により決定する。

また、重点課題や萌芽的課題に選定されなかった課題については、重点課題枠以外のポスト「京」の計算資源（ポスト「京」の計算資源配分は「第4章 ポスト「京」の計算資源配分」を参照）を利用して研究開発を推進することや、フラッグシップシステムを支える特徴あるシステム、全国共同利用・共同研究を進めている大学情報基盤センターのシステム等のポスト「京」以外の計算資源を利用して研究開発を推進することにより、我が国の計算科学技術インフラ全体を有効活用し、総体として効率的に成果を創出していくことを想定している。

## 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

### 3.1 推進体制

#### 【プロジェクト全体推進体制についての考え方】

本プロジェクトは、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題の解決に向け、これらの課題の解決に資するアプリケーション開発・研究開発に取り組み、世界を先導する成果の創出を目指すという開発から利用の推進までの戦略性が求められるとともに、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するコデザインが求められる。

そのため、重点課題ごとの推進体制に加え、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体制が必要である。

#### 【各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制についての考え方】

本プロジェクトは、現在のスーパーコンピュータ「京」のアプリケーション開発・研究開発プログラムである HPCI 戦略プログラム（平成 21 年度～平成 27 年度）の終了後、HPCI 戦略プログラムの後継プロジェクトに位置づけられる。本プロジェクトの推進においては、以下に示す HPCI 戦略プログラムの現状と課題や HPCI 戦略プログラムからの移行（アプリケーション資産・利用技術等の継承、アプリケーション開発時に利用する計算資源等）についても考慮する必要がある。

#### <HPCI 戦略プログラムの現状と課題>

- 「京」の性能を最大限に引き出すアプリケーションを、「京」の共用開始前に国家プロジェクト等で開発し、戦略機関にて活用したことにより、共用開始後早期の成果創出につながっている。
- 戦略機関を中心とした研究開発体制により、計算科学を軸として、分野コミュニティが結集することができ、「京」を用いて画期的な成果を創出する重点課題に取り組むだけでなく、分野内での科学的な検討・議論による萌芽的・基礎的研究が実施されている。
- 戦略機関を中心に、計算科学技術推進体制の構築に取り組むことにより、分野コミュニティや産業界における先端アプリケーションの利活用促進、大規模並列環境を活用するための技術習得、若手研究者の人材育成等、計算科学技術を活用する裾野が拡大しつつある。
- 社会的・科学的課題の解決のためには、分野内の連携だけではなく、分野

を越えた連携や他の研究開発プロジェクトの活用が必要。

- シミュレーションにより予測・理解された結果を実証するためには、実験系研究者との更なる連携が必要。
- シミュレーションの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が必要。

各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制としては上記の HPCI 戦略プログラムの現状と課題も踏まえた上で、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、②ポスト「京」を最大限に活用できること、が重要である。そのため、各重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制は、以下の要件を満足する体制が求められる。

- 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、開発したアプリケーションの利活用による成果創出、得られた成果の社会還元へ責任を持つ代表機関が必要。
  - 成果創出のためには、以下のような関係者が連携・協調した実施体制が必要。
    - 分野をまたがる社会的・科学的課題の解決のためには、分野を越えた計算科学者の結集が必要。
    - 従来手法では解決困難な課題に取り組むためには、理論科学者や応用数学者との連携が必要。
    - シミュレーションにより予測・理解された結果を実証するためには、実験・観測科学者との連携や、実験・観測を中心とした他の研究開発プロジェクトとの連携が必要。
    - 得られた成果を社会に還元するためには、社会科学者との連携や、成果を利活用する産業界や自治体等との連携が必要。
- ② ポスト「京」を最大限に活用できること。
  - ポスト「京」と課題解決に必要とされるアプリケーションの相乗効果を最大限に発揮し、早期に成果を創出するためには、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には、ポスト「京」開発主体を中心とした取組が必要。

### 【分野コミュニティについての考え方】

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、前述のHPCI戦略プログラムの現状と課題も踏まえ、分野コミュニティによる取組も重要である。なお、HPCI戦略プログラム終了後における、これらの取組を進める枠組みについては、新分野形成や既分野の見直しを含め、速やかに検討を行う必要がある。

### 【本プロジェクトの推進体制】

上記のプロジェクト全体推進体制、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、分野コミュニティについての考え方を踏まえた、本プロジェクトの推進体制を以下に示す（推進体制のイメージ図は、「別添2 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」を参照）。

#### ① 全体推進機関

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し、プロジェクトの進捗状況の把握・評価・改善提言・指導・課題間の調整等を行う機関（委員会等）。具体的な体制については、調査研究・準備研究フェーズ開始後、速やかに検討を行うものとする。

#### ② 実施機関

重点課題ごとに代表機関及び分担機関等から構成され、アプリケーション開発・研究開発を推進する機関。

計算科学者を中心に、理論・応用数学者の協力の下、新アルゴリズム開発やアプリケーションへの実装、大型実験施設等の利用者や研究プロジェクト等と連携した実証実験、成果の社会還元を見据えた社会学者や産業界・自治体等との連携等が実施できる分野を越えた関係者が結集した体制を構築する必要がある。なお、海外の研究者も必要に応じて参加可能である。

#### ③ 代表機関

各重点課題の解決に向け、アプリケーション開発・研究開発の推進に責任を持ち、主体的にアプリケーション開発・研究開発を行う機関。

#### ④ 分担機関

各重点課題の解決に向け、代表機関と連携・協調・分担し、アプリケ

ーション開発・研究開発を推進する機関。

⑤ ポスト「京」開発主体（独立行政法人理化学研究所）

ポスト「京」の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（通信ライブラリ，入出力システム等），プログラミング環境，ライブラリのコデザインに責任を持つべく，推進体制に参画するとともに，重点課題間の連携や共通基盤技術の整備を担う機関。各重点課題に参画し，責任者を設置する。なお，実施機関にもなり得る。

⑥ 分野コミュニティ

計算科学の各研究分野のコミュニティ。分野コミュニティを構成する機関・研究グループ・研究者は，実施機関として重点課題の各課題に参画する。また，分野コミュニティは，コミュニティ内においてボトムアップ的な萌芽的・基礎的研究の実施，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・利活用促進等を通じて，計算科学技術を活用する裾野を拡大する取組を行う。

### 3. 2 成果の早期創出及び最大化に向けた取組

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求められる。そのためには，重点課題に関するアプリケーション開発及びポスト「京」開発において，ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関（アプリケーション開発元等）との間で，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，プログラミング環境，ライブラリとアプリケーションの設計開発に関し，相互に要求性能・機能や評価結果等についてのフィードバックを行いながら設計開発を同時に進めるコデザインを行う必要がある。コデザインにより，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，プログラミング環境，ライブラリ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。

＜ポスト「京」におけるコデザインの例＞

- 高性能演算器に関するメモリ階層，キャッシュ容量，コンパイラコード生成等の協調設計により，ターゲットアプリケーションの特性に合わせて高性能演算器を有効利用。
- キャッシュを有効に活用するための機構とそれを利用するプログラミング環境の協調設計により，データアクセスを効率化。
- 通信ライブラリ等の協調設計により，アプリケーションに特徴的な通信

を低遅延化・高速化。

- 高性能ファイルI/Oと階層化ストレージシステムの協調設計により、ビッグデータ処理等のデータインテンシブ・アプリケーションの高速化。

その際、ポスト「京」におけるコデザインの成果やノウハウは、ポスト「京」に加え、フラッグシップシステムを支える特徴ある複数のシステムや全国共同利用・共同研究を進めている大学情報基盤センターのシステム等の、我が国の計算科学技術インフラ全体へ活用・展開されることを意識して推進する必要がある。

上記も踏まえ、ポスト「京」におけるコデザインは、以下のとおり進める。

- 重点課題の中からコデザインのターゲットとするアプリケーション（以下「ターゲットアプリケーション」という。）を選定し、また、ターゲットアプリケーションの目標性能を設定する。
- ターゲットアプリケーションの選定について
  - ターゲットアプリケーションの選定は、コデザインに責任を持ち、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。この際、重点課題に関するアプリケーションの中から、以下に示すターゲットアプリケーション選定基準を満足するアプリケーションをターゲットアプリケーションとして選定する。  
＜ターゲットアプリケーション選定基準＞
    - 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。
      - 各重点課題に関するアプリケーションは複数のアプリケーションから構成されることが考えられるが、戦略的かつ効率的にコデザインを進めるためには、これらのアプリケーションの中からターゲットアプリケーションを絞り込むことが必要である。
      - 上記や本プロジェクトの全体推進スケジュール及びポスト「京」開発スケジュール等も踏まえ、ターゲットアプリケーションは、重点課題ごとに、重点課題に関するアプリケーションを一つずつ選定するものとする。
    - ② アプリケーションの開発体制やライセンス形態が、コデザインを推進できるものであること。
      - 成果の早期創出及び最大化のためには、コデザインに責任を持

つポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関（アプリケーション開発元等）との間で、アプリケーションの内容や開発体制を共有できることが必須であり、また、コデザインの成果を広く活用・展開する上でも必要である。

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、コデザイン及びチューニングのノウハウのドキュメント化が可能であること。

- 幅広い分野のアプリケーションをカバーするためには、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する必要がある。
- また、コデザインの成果を広く活用・展開する上でも必要である。

- ターゲットアプリケーションの選定スケジュールは、本プロジェクトの全体推進スケジュール及びポスト「京」開発スケジュール等も踏まえ、以下のとおり進めるものとする。

＜ターゲットアプリケーション候補の決定（平成 26 年夏頃）＞

- 重点課題決定後、速やかに、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の中からターゲットアプリケーション候補を暫定的に選定する。

＜ターゲットアプリケーションの決定（平成 26 年秋～冬頃）＞

- 重点課題の代表機関決定後、速やかに、代表機関の意見や選定基準等も踏まえ、必要に応じて、ターゲットアプリケーションの見直しを行い、ターゲットアプリケーションを正式決定する。なお、ターゲットアプリケーションの見直しを行った場合でも、先に進めているコデザイン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においても反映できるよう留意してコデザインを進めるものとする。

○ ターゲットアプリケーションの目標性能の設定について

- ターゲットアプリケーションの選定同様に、ポスト「京」開発主体が中心でターゲットアプリケーション候補の目標性能を暫定的に設定し、また、ターゲットアプリケーションの正式決定に併せて、必要に応じて、目標性能の見直しも行う。なお、この場合でも、ターゲットアプリケーションの選定基準を満足するターゲットアプリケーションを選定することにより、先に設定された目標性能に大幅な変更が発生しないように

進める。

○ コデザインの実施について

- コデザインは，ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関（アプリケーション開発元等）との間で進めるが，実施時期の違いにより，以下に示す第一フェーズ，第二フェーズの二つのフェーズに大別して推進する。  
＜第一フェーズ：ポスト「京」システムの基本設計期間（平成 26 年度～平成 27 年度夏）＞

- プロセッサデザインに関してキーとなるターゲットアプリケーションを対象に，ポスト「京」のアーキテクチャパラメータ等，早期に決定する必要があるプロセッサデザインに関わる部分のコーディングを行う。
- 入出力に関してキーとなるターゲットアプリケーションを対象に，システムソフトウェア（通信ライブラリ，入出力システム等）に関わる部分のコーディングを行う。

＜第二フェーズ：ポスト「京」システムの詳細設計期間（平成 27 年度夏以降）＞

- 第一フェーズにおけるコーディングの成果を取り入れ，全てのターゲットアプリケーションを対象に，システムソフトウェア，コンパイラ，プログラミング環境，ライブラリに関するコーディングを行う。

### 3. 3 公募について

重点課題に係る公募について，想定しているスケジュール，公募の内容及び公募に係る審査を以下に示す（詳細は検討中）。なお，萌芽的課題に係る公募についても，速やかに検討を進める必要がある。

【スケジュール】

平成 26 年秋頃           ：公募

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，以下の提案を募集する。
  - 代表機関としての全体提案（課題全体（サブ課題を含む）に関する目

標，研究開発内容・期待される成果，推進体制(代表機関，分担機関等)，工程表，費用見込み，研究実績等の概要)

- 分担機関としての部分提案（サブ課題に関する目標，研究開発内容・期待される成果，推進体制(分担機関等)，工程表，費用見込み，研究実績等の概要)

#### 【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する。
- 審査においては，以下の観点を中心に，提案内容について審査を行う。
  - 「2. 2 重点課題に求められる要件（選定方針）」を満足する提案内容か
  - 課題の概要，必要性の観点，有効性の観点，戦略的活用の観点，期待される成果・波及効果，推進体制は選定済みの課題に沿った内容か
- 審査は，有識者委員会を設置し，以下の四つのカテゴリごとに数名程度の規模で審査を行う。
  - 健康長寿社会の実現
  - 防災・環境問題
  - エネルギー問題・産業競争力の強化
  - 基礎科学の発展

## 第4章 ポスト「京」の計算資源配分

### 4. 1 基本的な考え方

ポスト「京」の計算資源配分については、「京」での実績・経験、HPCI コンソーシアム提言等を踏まえた検討を行い、以下の基本的な考え方に基づき、ポスト「京」の計算資源配分を決定する。

- 「京」における HPCI 戦略プログラムの有効性を踏まえ、トップダウン的に選定された重点課題に対して戦略的に計算資源を割り当てる「重点課題枠」を設け、一定割合の計算資源を配分する。
- 「京」での実績及び分野コミュニティの重要性を踏まえ、幅広い研究課題に対して計算資源を割り当てる「一般利用枠」、分野コミュニティにおけるボトムアップ的な研究開発や分野振興利用に対して計算資源を割り当てる「分野振興枠」を設け、一定割合の計算資源を配分する。
- 産業界の更なる利用促進のため、産業界の研究課題に対して計算資源を割り当てる「産業利用枠」を設け、一定割合を配分する。
- 「京」での経験を踏まえ、政策的に重要かつ緊急な課題の実施に備える「政策対応枠」を設け、あらかじめ一定割合の計算資源を配分する。
- 「京」での実績を踏まえ、システムの安定運転、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行う「調整高度化枠」を設け、一定割合を配分する。

### 4. 2 計算資源配分

「4. 1 基本的な考え方」に基づき、ポスト「京」の計算資源配分の骨子を以下のとおり決定した（ポスト「京」計算資源配分のイメージ図は、別添3「ポスト「京」の計算資源配分について」を参照）。なお、これらの計算資源配分枠の詳細（重点課題枠における各重点課題への配分割合を含む）については、調査研究・準備研究フェーズを通じて策定される各重点課題の実施計画や重点課題に関するアプリケーション開発状況等を踏まえ、ポスト「京」の運用開始までの間に、詳細を検討の上、決定する必要がある。

#### ① 重点課題枠（30-40%程度）

重点課題に対し、文部科学省が配分内容を決定。

#### ② 一般利用枠、分野振興枠（30-40%程度）

一般利用枠は、幅広い研究課題が対象。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。

③ 産業利用枠（10%程度）

産業界による自社及び企業コンソーシアムの研究課題が対象。

④ 政策対応枠（10%程度）

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）。

⑤ 調整高度化枠（10%程度）

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。

なお，②の一般利用枠及び③の産業利用枠の対象となる研究課題は，公募により決定する。また，ポスト「京」の計算資源配分については，ポスト「京」共用開始後の利用のニーズ等も踏まえ，柔軟に対応し，必要に応じて弾力的に見直しを行う必要がある。

## おわりに

ポスト「京」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み、我が国の成長に寄与し世界を先導する成果を創出することが期待されている。

そのため、本委員会では、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題、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、ポスト「京」の計算資源配分等について議論を行い、その結果を報告書としてまとめた。

本報告書が、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・研究開発推進及びポスト「京」で世界を先導する成果の創出の一助となることを期待する。

# 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

別添1

## 概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点

ポスト「京」で可能となる長時間ダイナミクス計算により、副作用因子を含む多数の生体分子の機能を予測し、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現

(2) 有効性の観点

創薬関連ビッグデータ(疾病、副作用等)に関わるタンパク質群や医療情報)や最先端計測データを活用し、製薬企業およびその関連団体との密接な連携体制で新たな創薬基盤を構築

(3) 戦略的活用の観点

ポスト「京」をフルに活用した生体分子シミュレーションにより、創薬計算の大幅な加速を実現。さらに創薬の阻害から制御への革新(タンパク質の機能阻害から生体分子システムの制御へ)を目指す。

## 内容の詳細

単純な阻害剤をめざす創薬ターゲットが枯渇

生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)のダイナミクスを考慮した機能制御をめざす創薬が必要

創薬関連ビッグデータを解析することで、多数のタンパク質からなる疾患原因、副作用、薬剤輸送に関わる生体分子システムを同定し、薬剤による制御対象を網羅する

ポスト「京」を駆使する分子シミュレーション法を開発

ポスト「京」を駆使して、多数のタンパク質の創薬計算を大幅に加速、さらにそれらのダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用を予測し、機能制御をする薬剤を設計

細胞環境を考慮したシミュレーションを行うことで、細胞に対する最先端計測実験と定量的に比較する

## 期待される成果・波及効果

多数タンパク質を含んだ網羅的なターゲットシステムの選択、膨大な計算量による超高精度相互作用予測、単純な機能阻害ばかりでなく、副作用因子を含んだより複雑な機能制御による有効性の高い創薬を可能にする。これによって、創薬プロセスを革新し、製薬産業の活性化に貢献する。

様々な生体分子システムの最先端計測データ(SACLA, Spring8等)の大規模施設からの情報や、一分子計測情報などのin-house実験によるものなど)に対して、ポスト「京」を用いた分子シミュレーションは原子レベルでそれら実験情報に対する機能発現モデルを提供することができ、生体分子システムの理解、予測、操作に大きく貢献することができる。

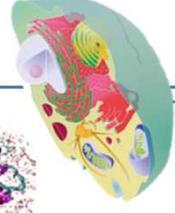
## ポスト「京」利用の必要性

今後の創薬には、ポスト「京」ではじめて可能となる、疾患に関わる多数のターゲットからなる生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)の同定とそれらの長時間シミュレーションによるダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用予測が不可欠

ポスト「京」分子シミュレーションによって、細胞環境における長時間シミュレーションがはじめて可能となり、先端計測機器からもたらされるデータに対応する情報を与えることで、細胞機能発現の機構がはじめて原子レベルのモデルから明らかとなる

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

生体分子システムの動的構造予測等に約45日  
創薬の結合自由エネルギー計算に約35日(10万ケース)



## ② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点

(2) 有効性の観点

(3) 戦略的活用  
の観点

ポスト「京」によるビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合することにより、革新的な予防法や早期診断法の開発、安全で有効性の高い治療の実現などを推進し、国際社会の先駆けとなる**健康長寿社会の実現に貢献**

**史上最大規模のビッグデータ解析と、心臓シミュレータ、脳神経シミュレータなど世界最先端の生体シミュレーション技術を医療機関、医療プロジェクト等と密接に連携して推進することで、着実に医療応用を実現**

ポスト「京」による膨大な演算能力とストレージを活用し、**ビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合して利用すること**で、**個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開**

内容の詳細

**統合計算生命科学(ビッグデータ解析とそこから得られるモデルを用いる生体シミュレーション)による個別化・予防医療の支援**

エクサスケールデータ解析

巨大なストレージと演算能力を活用した**健康・医療ビッグデータ**(個人ごとのオミックスデータと医療・計測情報など)を**一挙に解析**する技術を開発し、その基盤を確立

それらを活用し、**個人にフィットした薬、病気の予測・予防・治療法**を見出し、**個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開**

マルチフィジックス生体シミュレーション

多様な医療分野のシミュレータを連成した**マルチフィジックス生体シミュレーション法**(分子、細胞から臓器・脳・全身)を確立

**健康・医療ビッグデータの解析結果に基づいた個人に合わせたモデルを用いた生体シミュレーションによる疾患の予測と治療法の検討**を実施し、さらに**新しい医療機器の開発**に応用

期待される成果・波及効果

大規模なオミックスデータ解析により、恒常性破綻と疾患の関係、がんなどの疾患における多数の遺伝子異常と遺伝子ネットワークの関係**を解明**し、**予防・個別化型の医療に貢献**し、さらに**参加型医療への展開を図る**。

分子、細胞レベルから、血管・組織、さらには臓器レベルまでの生体シミュレーションにより、**病態予測を可能にして、疾患の早期発見、最適な治療法の選択に寄与するとともに、世界最先端の医療機器開発に寄与する**。

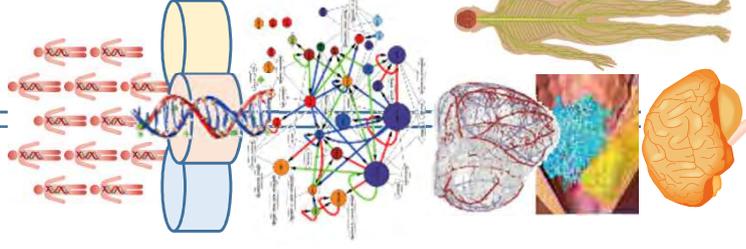
ポスト「京」利用の必要性

今後の個別化・予防・参加型医療には、大規模な個人々のオミックスデータの解析とマルチフィジックス生体シミュレーションにより、がんなどの疾患における多数の遺伝子システムの異常の解明と生活習慣病などにおける正確なリスク評価が不可欠。

個別化・予防医療には、個人ごとの健康・医療ビッグデータの解析と個人ごとの違いに応じた生体シミュレーションによる手術や治療法の適用が必要になる。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

遺伝子ネットワーク解析等に  
約35日(1万5千ケース)  
マルチフィジックス生体シミュレーションに約45日



### 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

#### 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点  
被害経験からでは予測困難な複合災害に対する、統合的予測は国土強靱化のために必要不可欠。
- (2) 有効性の観点  
内閣府・自治体等で利用できる、HPCを使った地震・津波、一次被害、二次被害の統合的予測システムは、高度な被害予測を実現し、防災・減災対策を合理化。
- (3) 戦略的活用の観点  
多数地震シナリオの想定は、不確実性の高い地震・津波の複合災害の予測にとって必要不可欠であり、1シナリオの計算に京の全系が必要なため、ポスト「京」は必須。

#### 内容の詳細

##### サブ課題A: 地震津波災害予測システムの実用化研究

- 自然災害・一次被害・二次被害の計算コンポーネントを統合した予測システムを構築し、多様性を考慮し想定外を無くす1000以上の地震シナリオ(\*)で、大規模シミュレーションを実施することで、確率評価の可能な複合災害予測データベースを構築する。

(\*)断層広がり12x4通りxすべり不均質<sub>5</sub>C<sub>2</sub>通りx振幅3通り=1440通り

- 各計算コンポーネントに関する科学的課題を解決し、予測システムの信頼度を向上

##### サブ課題B: 統合的予測のための社会シミュレーションの開発

- 二次被害に大きく影響する都市全体を対象とした交通シミュレーション等を実施する社会シミュレーションの開発。
- 効果的・効率的な国土強靱化に向けて、多数地震シナリオを用いた被害予測を行い、行政に発信する。

#### 期待される成果・波及効果

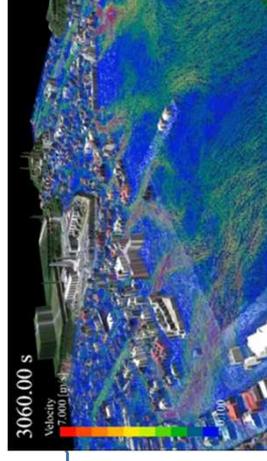
- 地震津波の複合災害予測データベースの構築。
- 経済的な波及効果: 直接効果だけでも6500億円(三菱総研調べ)。
- 将来的にリアルタイムシミュレーションへの展開。
- 計算コンポーネントの高度化を継続し、統合的予測システムを持続的に利用。
- 行政(内閣府・自治体)の防災・減災計画への反映。

#### ポスト「京」利用の必要性

- 詳細な幾何形状等を考慮した地震・津波・構造応答の計算を行うために、億を超える自由度の非線形有限要素計算が必要。
- 京の全系でスケールするコードは開発済みだが、1回の計算に1日程度かかるため、不確定さを考慮した多数計算は、京では数年以上かかる課題であり、ポスト「京」が必要。
- 交通シミュレーションについても、地震以外の状況も考慮した多数ケースの計算が必要。

#### 必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト京では、5領域(千島海溝、日本海溝、南海トラフ、伊豆・小笠原海溝、琉球海溝)で行ったとして、占有日数は、最低で70日程度(避難シミュレーションでのシナリオを最小限に絞った場合)。絞らないと最大4倍必要となる。



複合災害予測のベースとなる3次元津波遡上計算

10万人規模のエージェントシミュレーション

# 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

## 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点：竜巻、局地的豪雨等の予測高精度化への社会からの強い要望、環境政策立案のための科学的基盤提供
- (2) 有効性の観点：安全な避難のための時間的余裕確保、観測研究・シミュレーション研究が一体となった研究体制の構築
- (3) 戦略的活用の観点：十分なモデルと観測データ取り込みの解像度、アンサンブル数を確保し、予測高度化につなげる

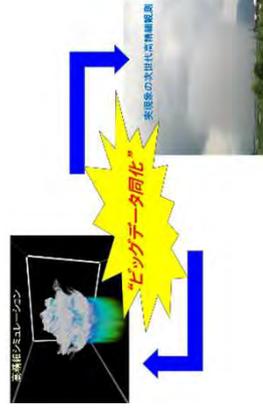
## 内容の詳細

**サブ課題A：革新的な数値天気予報による高度な気象防災**  
雲、雨、雪などを析違いの高解像度で忠実にシミュレーションし、次世代の観測によるビッグデータを、応用数学的手法によりモデル計算に組み入れることで、現状では予測が困難な局地的豪雨や竜巻などを高精度に予測する。また、台風の発生を予測する新しい天気予報システムを構築する。

## サブ課題B：総合的な地球環境の監視と予測

人間活動に起因する環境変化の影響を、生物・化学的側面を含んでより正確に予測し、常にモニタリングを行うシステムを基盤を、地球規模の気候モデルを用い構築する。これにより、国内および東アジアなど広域の大気質改善等への貢献を通し、今後の政策や防災、健康対策に寄与する。

## ポスト「京」利用の必要性



大気中の対流を再現できる解像度で、現状では10-100程度のアンサンブル数を10倍以上に増やし、かつ人工衛星観測などによる観測ビッグデータを、可能な限り情報量を保持しながら応用数学的手法によりモデル計算に取り込むため、ポスト「京」の計算能力が必要。



必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト「京」の占有日数換算で、「高解像度気象予報(全球領域)」に20日、「局所的・集中的大雨、熱帯気象の高度予測」に70日、「近未来地球環境予測システム」に10日必要。

## 期待される成果・波及効果

- ・ 予報技術の飛躍的向上による人命と財産の保護
- ・ 省庁、自治体による防災計画・環境政策への貢献、地球環境予測情報の発信を通じた持続可能な国際社会構築への貢献
- ・ 極端現象の成因・将来変化や、地球環境のサブシステム間・スケール間相互作用の科学的理解
- ・ 多様な時空間スケールを対象にすることによる、モデリング・データ同化手法改良の加速

# 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

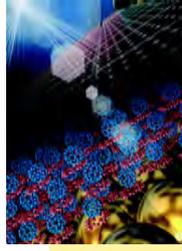
光をエネルギーに変換する過程の電子論を解明し、新しい有機系太陽電池や高性能人工光合成系を設計・開発する。

### 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認する。

### 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。

## ⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点：ポスト「京」を用いた第一原理解析により、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。
- (2) 有効性の観点：産業界の大型プロジェクト(SIP等)と連携し、ポスト「京」の超高精度解析を駆使することで、鍵となる物理現象を解明し、**世界最先端のエネルギーシステムを実現する**。
- (3) 戦略的活用の観点：エネルギー変換の中核をなす、燃焼等の複雑な物理現象を高精度に予測するためには、**第一原理解析**が必須となる。実問題に対する第一原理解析にはポスト「京」の能力が必要となる。

内容の詳細

具体的なサブ課題として以下のようなものが想定されるが、**波及効果の大きなもの**、解析基盤技術が共有できるものを**優先して実施**。

- **サブ課題A：超臨界タービン燃焼器**：超臨界燃焼挙動を詳細に解明し、高熱効率・低環境負荷(CCS、ゼロNOx)に寄与する超臨界タービン燃焼器の実用化を加速。
- **サブ課題B：ICエンジン**：エンジン内の乱流噴霧燃焼挙動を解明し、熱効率の飛躍的向上(40%→50%以上)に貢献。
- **サブ課題C：超大型風車**：最重要課題である立地アセスメントで必要な100ケース/アセスメントの高精度風況予測を実現し、実用化を加速。
- **サブ課題D：核融合炉**：核融合炉の実用化に必須となる核燃焼プラズマ挙動の解析技術を確認し、国際熱核融合実験炉ITERの炉心設計に貢献。



ポスト「京」利用の必要性

- 超臨界タービン燃焼器では超臨界状態に比べて雰囲気圧が10倍(300気圧)になり**解析規模が約100倍**になるため。
- ICエンジンでは予測精度を飛躍的に向上させることが可能な気筒内噴霧燃焼の**第一原理解析(DNS解析)**が必要のため。
- 超大型風車の立地アセスメントでは、**100ケース以上**の詳細な風況予測シミュレーションを実施することが必要のため。
- 核融合炉心の核燃焼プラズマ挙動の解析では、「京」の成果を重水素など多種イオン系、かつ、**長時間スケール**(10ms→1s)に拡張することが必要となるため。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

占有日数は7日～53日程度と見積もられるが、詳細は具体的な研究課題に依存する。

期待される成果・波及効果

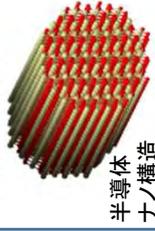
- 超高効率・低環境負荷な産業機器・コンシューマ製品の実現による我が国の**産業競争力の強化**、低炭素社会・省エネルギー社会の実現に向けた**世界的リーダーシップの発揮**。
- 「**エネルギー基本計画**」で重要性が指摘される省エネルギー・低環境負荷技術、中長期クリーンエネルギー源等の技術開発に貢献。
- 具体的な成果としては、高熱効率・低環境負荷の超臨界タービン燃焼器の実用化、ICエンジンの熱効率の飛躍的向上(10%以上向上)、超大型風車の実用化、核融合炉の炉心設計への貢献などが期待される。

# 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

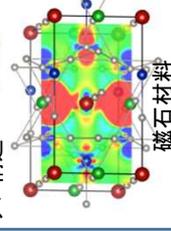
## 概要・意義・必要性

- (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



超伝導  
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。

## 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

### 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点：社会ニーズを踏まえた付加価値を有する競争力のあるものづくりを実現するには、**上流設計プロセス、並びに製造プロセスの革新**（2012～2013ものづくり白書）と、その核となる**超高速統合シミュレーション**が必須。
- (2) 有効性の観点：**製品コンセプトを上流設計段階で最適化する革新的な設計手法**（コンセプトドリブン型ものづくり）と**コストを最小化する革新的製造プロセス**を研究開発し、我が国ものづくりの国際競争力強化に貢献。
- (3) 戦略的活用の観点：設計・製造プロセスの最適化の基礎となる**信頼性の高い膨大なデータをシミュレーションにより生成**するため、京の数十倍から百倍程度の計算機能力が必要。

### 内容の詳細

#### サブ課題A：上流設計プロセスの革新

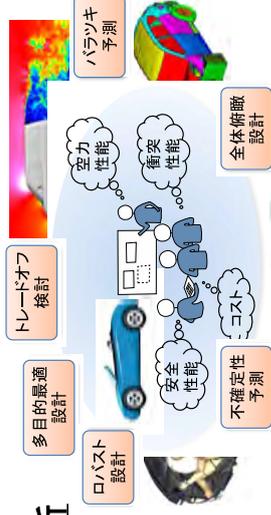
設計上流で活用する**概念設計ブラットフォーム**と、製品最適化のための様々な物理シミュレーション**プロセスを統合した設計シミュレーションシステム**を開発。

#### サブ課題B：製造プロセスの革新

製造コスト削減のポイントとなる**成形問題（溶接、樹脂成型、金属付加製造等）を迅速に解決**するための第一原理シミュレーションシステムを開発。

#### サブ課題C：革新的要素技術の創出

高付加価値を有するものづくりの要となる**革新的要素技術（材料、流体、デバイス、制御法等）を開発**。



協力：マツダ（株）、スズキ（株）

### ポスト「京」利用の必要性

上流設計では、パラメータの最適化のために様々な領域の物理シミュレーションが必要となり、製造プロセスでは、最小コストの加工条件等を見出すために第一原理計算が必要となり、京の数十倍から百倍程度の性能をもつ計算機が必要となる。

**必要な計算資源**（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

超ストロングスケールリング技術開発による計算時間の飛躍的短縮  
（数日⇒数時間内）

実機スケールのパラメトリックスタディ  
（約28日間占有）

新規材料に対して、1000を超えるプロセス要素反応・要素構造を設定  
（ポスト京の占有日数：約17日間）

【課題全体で計算資源量（ポスト京の占有日数）】約45日間

### 期待される成果・波及効果

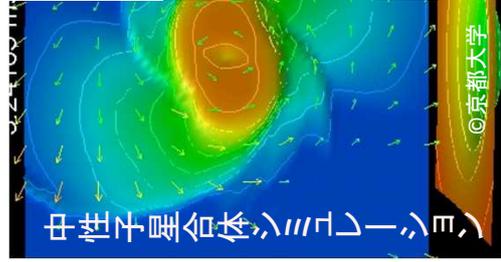
- 高品質に加えて社会ニーズや新しい提案を取り込んだ新製品コンセプトが、高度シミュレーション技術を駆使したアプローチにより実現性のある具体的姿として設計段階において提示できるため、極めて**費用対効果が高く競争力のある新製品開発に貢献**できる。
- ポスト京を用いた第一原理計算により、加工プロセス等の詳細が解明され、最適な加工条件を見出すことが出来れば、**製造コストの大幅な低減**が期待される。
- ポスト京を用いた実スケールシミュレーションにより、開発・検証される革新的な技術が格段に広い利用範囲に適用可能となる。
- 研究開発段階から産官学一体となった体制を構築するため、高度シミュレーション技術を習得した**産業界のリーダーを育成**できる。

# ⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明

## 概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点**: 自然界の基本法則と宇宙の進化過程には多くの謎が残されている。実験・観測だけでは到達できない情報を得るための精密計算や、素粒子から宇宙まで複数の階層にまたがるシミュレーションを実現し、未解決問題を解明できる。
- (2) **有効性の観点**: 「京」を通じて計算機科学者、応用数学者との連携体制が確立。更なる成果創出に向けて実験・観測との連携も進んでいる。計算科学を軸として分野を横断し研究手法を超えて連携する世界にも類のない体制が構築されつつある。
- (3) **戦略的活用の観点**: ポスト「京」で初めて可能になる精密計算や階層をまたぐ現象の計算を大型実験・観測のデータと合わせることで、計算科学のみならず素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史解明へのブレークスルーが得られる。

## 内容の詳細



### サブ課題A「究極の物理法則と宇宙開闢の解明」

- 素粒子の精密実験と呼応する精密計算を実現し、標準模型を超える物理法則の発見を目指す。実現すれば、素粒子物理全体のブレークスルーとなる。物質と時空の究極理論として期待される超弦理論を解析して、将来的に基本法則の解明につなげる。

### サブ課題B「物質創成史の解明と物質変換」

- 元素合成機構を明らかにするため、バリオン間相互作用、原子核の構造・中性子星の形成、超新星爆発・中性子星合体という複数の階層をシミュレーションで橋渡しする。放射性核廃棄物の核変換の基礎的データを与え、社会貢献につなげる。

### サブ課題C「現代物理学が紐解く宇宙進化の謎」

- 初代星、銀河、巨大ブラックホールなどの異なる階層をつなぐシミュレーションを実現し、宇宙の進化を明らかにする。

## ポスト「京」利用の必要性

- 計算の精密化や複数の階層をまたがる大規模計算を実現するには、「京」の能力を大幅に超える計算量が必要。
- 計算の高速化・効率化を進めて、ポスト「京」の能力により最大の科学的成果を得られるようにする。
- アプリケーションの内容に応じ、HPCI全体で最適な資源配分の実現を検討。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

サブ課題A 60日、サブ課題B (バリオン間相互作用60日 / 原子核・核変換60日 / 超新星爆発60日)、サブ課題C 60日、を目安。全300日のうち100日をポスト「京」で、残りは他のHPCI資源の活用を想定。

## 期待される成果・波及効果

- 素粒子標準理論を超える新しい物理法則の発見や、究極理論の理解に貢献
- 多様な元素が生まれた宇宙における物質創成過程を統一的に理解
- 宇宙進化において天体が階層的に形成された仕組みや、銀河中心に巨大ブラックホールが存在する起源を解明
- 核変換の基礎データ提供を通じて、放射性核廃棄物の削減に向けた社会貢献が可能

# 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

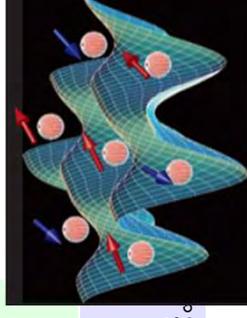
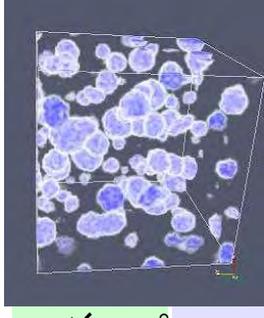
・竜巻、台風、噴火の発生発達機構、産業機器中の気液固混相流の解明につながる、相変化が生み出す時空構造の基礎科学を個別手法成果の発展から創出し、制御手法を開拓。

### 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

## 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。

## 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)

# 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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点:

急速に変化し複雑化する現代社会で生じる問題に対して、政策・施策が俊敏に対応するため、社会の構成要素が互いに影響し合う効果を取り入れて捉え、分析し、予測する技術が必要。

(2) 有効性の観点:

各「構成要素モデル」の高度化自体が社会的課題の解決の直結するだけでなく、社会の構成要素が互いに影響しあう効果を取り入れて社会経済現象全般を予測するシステムが先駆的。

(3) 戦略的活用の観点:

各「構成要素モデル」の有効性検証は、ビッグデータを捌ききるポスト「京」があって初めて可能。包括的シミュレーションは現時点では萌芽的だが、実社会に直結する問題を扱うため、早期に着すべき課題。

内容の詳細

**各社会要素モデルの統合化とその有効性実証研究**

- 交通や経済など社会要素の相互の影響を考慮した社会経済統合モデルを構築し、社会・経済で生じうる多様な可能性を、「想定外」を含めて網羅的に検証することにより安定性・信頼性の高い制度や方法を提示する基盤を確立する。
- 統合モデルの応用として、敵対的リスクの発生を低減化し、経済破綻といった人為的なカタストロフィの発生を抑制し、社会的課題の安定的解決手段の探索を目標とする。

**サブ課題: 各社会構成要素モデルの高度化**

**例: 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**

- 交通の運行状況・運行目的をリアルタイムでデータ同化し、混雑緩和から非常時対策を講ずる
  - 莫大な数のモデル・シナリオを自動生成してシミュレーションを実行し、最適な交通システム設計を支援
  - 特定の鉄道路線、一部地域の交通ではなく、トータル交通システムとして問題を捉える。
- (注) 上記は、構成要素を「交通システム」としたときの例、このほか、株式・為替、災害避難、情報伝達など、構成要素は多岐にわたる。

ポスト「京」利用の必要性

京では少数のパラメータセット、少数のシナリオ・制度下でのシミュレーションが実現されつつある。「想定外」を含めた現実的な社会現象の探索には、ポスト京の計算力は必須。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

- 自動車交通の典型的な時間スケールは数時間。数種パターンで試みるには、2日間。
- 為替・証券取引所群のエージェントシミュレーションによるモンテカルロサンプリングには、先物取引まで含めて1日。全体で10日間。

期待される成果・波及効果

- 包括的に社会経済活動をシミュレートすることで、制度の設計・社会経済の統御の効率性・安定性・信頼性を高める。
- 従来の主観的・一面的な社会問題解決方法から脱却し、社会科学に基づいた客観的な解決方法を提示。(温暖化問題施策などがこれまでの例)
- 今後のトリオセンサーの有効利用につながる手法が期待される。
- 各要素の高度なモデル化検証技術は、防災避難シミュレーションなどにも応用される。

# 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

## 概要・意義・必要性

- （1）必要性の観点：**ポスト「京」で可能になる惑星系形成・進化シミュレーションにより、多数発見された太陽系外惑星の起源を解明し、地球を含む地球型惑星の形成条件を理解、さらに人類への太陽活動の影響の理解と予測を通して宇宙防災を推進する。
- （2）有効性の観点：**観測・実験と宇宙・地球・惑星科学分野の有機的連携を強化し、地球型惑星の形成に至る条件を解明すると共に太陽の高解像度全球シミュレーションにより黒点周期と太陽活動の長期変動を再現。地球環境への影響の予測を可能にする。
- （3）戦略的活用の観点：**ポスト「京」により、ダストを含む惑星形成過程の高解像度放射流体計算、微惑星成長の粒子多体計算、黒点周期（11年）より十分長い期間の太陽活動と地球磁気圏の磁気流体・プラズマ計算を世界に先駆けて実現する。

## 内容の詳細

### サブ課題A：地球と地球型惑星（第二の地球）の誕生条件の解明

宇宙物理学、惑星科学、地球科学、気象学等の研究者、及び計算科学研究機構等が参画する体制を組み、微惑星形成過程、中心星への惑星落下問題、地球型惑星の表層環境形成を解き明かし、太陽系及び太陽系外の惑星形成とその大気の起源と進化を解明する。

### サブ課題B：太陽活動による地球環境変動の解明

100年以上にわたる太陽ダイナモの計算により、太陽の長期時間変動のメカニズムと地球環境への影響を明らかにすると共に、衛星観測との連携により、太陽フレアと太陽風の数値予測を実現し、「宇宙天気予報」の高度化を推進。

### サブ課題C：太陽系における物質進化の解明

惑星間ダスト上の分子生成の量子化学計算により、“はやぶさ2”等による太陽系原始物質のデータを理解し、太陽系における物質進化を探究すると共に、磁気乱流中のダスト集積計算によって、地球型惑星（第二の地球）形成の初期条件を明らかにする。

## ポスト「京」利用の必要性

惑星形成計算において、「京」で30万粒子の粒子多体計算を実行。ポスト「京」で3次元放射流体計算を実現。太陽活動については、「京」で512×1024×3072×2の対流層全球計算を実行。ポスト「京」では100年以上の太陽磁場変動の再現と太陽フレア・太陽風予測の高解像度計算を実現。乱流計算については、「京」で12288<sup>3</sup>メッシュの直接計算を実施。ポスト「京」では、磁場とダストを考慮した60000<sup>3</sup>メッシュの計算によりダスト集積過程を解明。量子化学計算では、「京」で、10万原子第一原理計算を実行。ポスト「京」では、様々な条件下において、大規模な第一原理分子動力学シミュレーションにより分子進化を解明。

## 必要な計算資源（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

惑星形成に於いて、惑星軌道計算、放射流体計算に、計20日程度。太陽磁場変動と太陽フレア・太陽風の数値予測に計30日間。高精度乱流計算に10日間。惑星間物質の量子化学計算に計10日程度。合計70日。

## 期待される成果・波及効果

- ・太陽系外惑星の観測と直接比較可能な第一原理計算を実現し、地球型惑星（第二の地球）の誕生条件を明らかにする。
- ・太陽、地球磁気圏の衛星観測との連携により、宇宙天気予報の精度と信頼性が格段に向上し、宇宙防災に資することができる。
- ・金星、火星との比較惑星環境学により、太陽系惑星気候変動のメカニズムを解明し、太陽系スケールでの地球の安定性の理解を深める。
- ・太陽系原始物質の採取・実験と計算との突合せにより、太陽系の誕生と進化の歴史を明らかにする。

# 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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点

(2) 有効性の観点

(3) 戦略的活用  
の観点

ポスト「京」により、複雑な神経回路を再現し、「考える」という脳機能の解明に挑むことは現代科学の最大のチャレンジであり、「健康・医療戦略」にもあるように新しい情報処理技術の確立や精神神経疾患の克服に向け社会的期待も高い。

脳科学の革新的プロジェクトと連携し、そのビッグデータのモデル化と大規模シミュレーションにより、新たなブレークスルーが期待できる。脳の機構にならった人工知能は、人の心を理解するロボットなど新たなイノベーションを可能にする。

思考の神経回路の実体の解明には、大量の実験データに基づく大規模、マルチスケールのモデルの構築と、さらによりリアルな感覚行動データによる長期の学習が不可欠であり、ポスト「京」の超大規模計算により初めて実現可能である。

内容の詳細:「革新的技術による脳機能ネットワークの全容解明プロジェクト」等により得られる脳構造と活動の高スループット計測によるポトムアップデータと、認知を実現する機械学習によるトップダウン設計論を融合し、思考を実現する脳の大規模神経回路を、ニューロンの特性や回路の結合構造などの実験データに基づいた多階層モデルにより再現し、その応用をはかる。

## サブ課題A: 思考を実現する神経回路機構の解明

細胞形態と回路結合、活動のイメージングなど異種大規模データを、機械学習手法をもとにモデル統合しその動作機構を解明する。

- ポスト京により様々な規模と詳細度のシミュレーションを実現する:
- ・細胞内分子シグナルを含む局所神経回路の詳細モデル
  - ・自動縮約したニューロンモデルによる全脳規模シミュレーション

## サブ課題B: 脳アーキテクチャにもとづく人工汎用知能

大脳皮質の階層的確率推論、大脳基底核の報酬評価、小脳による定型的行動制御など脳の機能アーキテクチャを参考に、環境との相互作用のもとで学習し続ける知能エージェントを実現する。

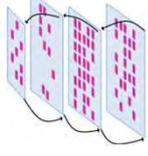
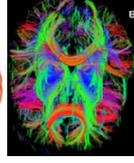
ポスト京のキャパシティにより、ネット上で得られる膨大な情報のもとで学習させることにより、動的に発達し続ける人工知能システムを実現する。

期待される成果・波及効果

マーモセットなど霊長類の脳データにもとづく詳細大規模シミュレーションにより、脳内シミュレーションと思考、他者認知とコミュニケーションなど、人の精神活動の基盤となる脳機構の実体の解明が期待される。

そのモデルの解析は、精神神経疾患や発達障害のメカニズムの理解、それらの診断、治療、予防法の開発、また人の心を理解し行動するロボットなど、より人間的な人工知能の応用への道を開く。

## ポスト「京」利用の必要性

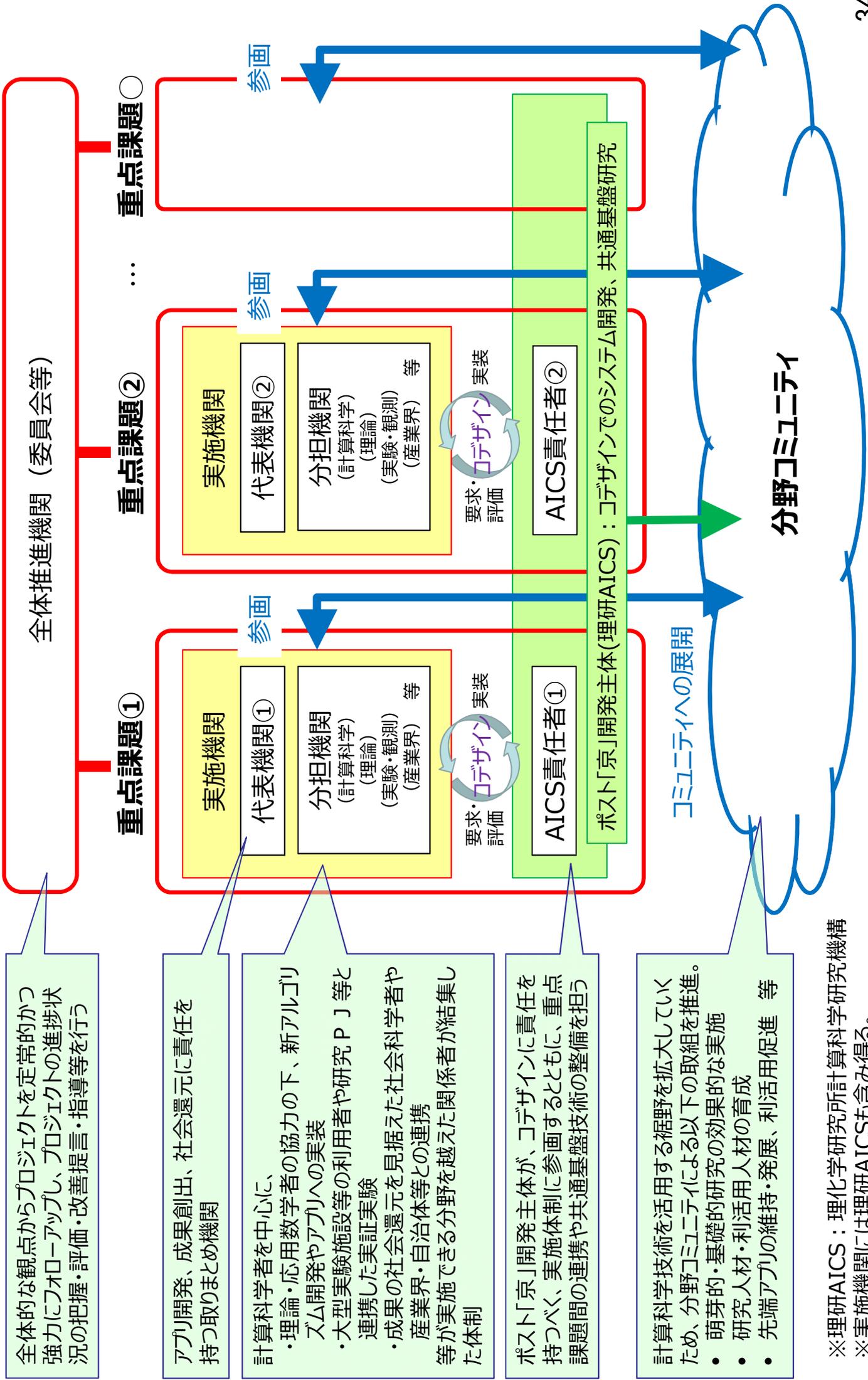


脳に関して特定の仮定のもとに抽象化したモデルは多数提案されているが、実験データにもとづく詳細モデルによつてはじめて、脳の物理化学的な実体がいかに精神機能を表現し得るのかという問題に迫ることが可能になる。

実時間シミュレーションにより、センサやロボットを通じた外界や人とのインタラクションが可能になり、運動制御、意思決定、コミュニケーションなどの脳機構をリアルに検証することが可能になる。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

- ・コネクトミクス等データ集中計算: 10日
- ・マルチスケール局所回路モデル: 5日
- ・マーモセット全脳詳細モデル: 15日
- ・人全脳縮約モデル: 30日
- ・脳型人工汎用知能シミュレーション: 20日



全体的な観点からプロジェクトを定常的かつ強力でフォローアップし、プロジェクトの進捗状況の把握・評価・改善提言・指導等を行う

アプリ開発、成果創出、社会還元に関与し、責任を持つ取りまとめ機関

計算科学者を中心に、  
 ・理論・応用数学者の協力の下、新アルゴリズム開発やアプリへの実装  
 ・大型実験施設等の利用者や研究PJ等と連携した実証実験  
 ・成果の社会還元を見据えた社会学者や産業界・自治体等との連携  
 等が実施できる分野を越えた関係者が結集した体制

ポスト「京」開発主体が、コデザインに責任を持つべく、実施体制に参画するとともに、重点課題間の連携や共通基盤技術の整備を担う

計算科学技術を活用する裾野を拡大していくため、分野コミュニティによる以下の取組を推進。  
 ・萌芽的・基礎的研究の効果的な実施  
 ・研究人材・利活用人材の育成  
 ・先端アプリの維持・発展、利活用促進 等

※理研AICS：理化学研究所計算科学研究機構  
 ※実施機関には理研AICSも含まれる。

「京」での実績・経験、本委員会での議論、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。

## 1. 考え方

- 「京」における戦略プログラムの有効性を踏まえ、トップダウン的に選定されたポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題に対して戦略的に計算資源を割り当てる「重点課題枠」を設け、一定割合の計算資源を配分する。
- 「京」での実績および分野コミュニティの重要性を踏まえ、幅広い研究課題に対して計算資源を割り当てる「一般利用枠」、分野コミュニティにおけるポトムアップ的な研究開発や分野振興利用に対して計算資源を割り当てる「分野振興枠」を設け、一定割合の計算資源を配分する。
- 産業界の更なる利用促進のため、産業界の研究課題に対して計算資源を割り当てる「産業利用枠」を設け、一定割合を配分する。
- 「京」での経験を踏まえ、政策的に重要かつ緊急な課題の実施に備える「政策対応枠」を設け、予め一定割合の計算資源を配分する。
- 「京」での実績を踏まえ、システムの安定運転やユーザの利用支援のための研究開発を行う「調整高度化枠」を設け、一定割合を配分する。

## 2. 計算資源配分



### 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。

### 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。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。

### 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。

### 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）。

### 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。

※②一般利用枠、③産業利用枠の対象となる研究課題は、公募により決定。

## 参考資料

---

- 参考1 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  
検討委員会の設置について
- 参考2 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 委員名簿
- 参考3 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 検討経緯

## 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 検討委員会の設置について

平成26年3月20日  
文 部 科 学 省  
研 究 振 興 局

### 1 設置の目的

スーパーコンピュータ「京」の100倍の計算性能を有するポスト「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（以下「委員会」という。）を設置する。

### 2 検討事項

- ・ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題
- ・ポスト「京」のアプリケーション研究開発体制 等

### 3 構成及び運営

- ・委員会は、研究振興局長の私的諮問機関として設置する。
- ・委員会の委員は、別紙のとおりとし、必要に応じて追加する。
- ・委員会の運営に係る事項は委員会において定める。

### 4 設置期間

平成26年4月4日～検討事項の終了までとする。

### 5 その他

委員会の庶務は、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が処理する。

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 委員名簿

- 安西 祐一郎 独立行政法人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  
トヨタ自動車株式会社代表取締役会長
- 大隅 典子 東北大学大学院医学系研究科教授
- ◎小宮山 宏 株式会社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 独立行政法人国立環境研究所理事長
- 関口 和一 株式会社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 田辺三菱製薬株式会社代表取締役会長
- 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 独立行政法人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)

(平成 26 年 8 月現在)

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 検討経緯

第1回 4月4日(金) 15時～17時

- 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（アプリケーション分野）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 5月30日(金) 15時～17時

- 第1回委員会における委員からの主な意見等について
- ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の選定方針について
- ポスト「京」におけるアプリケーション開発・研究開発推進体制について

第3回 6月19日(木) 15時～17時

- 第2回委員会における委員からの主な意見等について
- ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題について
- ポスト「京」の計算資源配分の考え方について

第4回 7月24日(木) 16時～18時

- 第3回委員会における委員からの主な意見等について
- ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題について
- 報告書について

第5回 8月20日(水) 10時～12時

- 第4回委員会における委員からの主な意見等について
- 報告書について



## 経費取扱区分表

本表に基づいて経費の計上を行ってください。

大項目	中項目	備考
設備備品費		取得価格が10万円以上かつ耐用年数が1年以上の機械装置，工具器具備品の購入，製造又は改良に要する費用。 ※資産計上するものの経費
試作品費		試作する装置に要する費用。 ※文部科学省の指示で資産計上する可能性があるもの
人件費	業務担当職員 補助者 社会保険料等 事業主負担分 派遣職員	業務担当職員と補助者は必ず別の中項目とすること。さらに単価の違いに応じて、「主任研究員」「研究員A」「部長級」等と細分した中項目を用いてもよい。独立行政法人，特殊法人，国立大学法人及び学校法人については，人件費対象者が運営費交付金，私学助成の補助対象者ではないこと。 ※他の経費からの人件費支出との重複について特に注意すること
業務実施費	消耗品費 国内旅費 外国旅費 外国人等招へい 旅費 諸謝金 会議開催費 通信運搬費 印刷製本費 借損料 雑役務費 電子計算機諸費 保険料 光熱水料 消費税相当額	中項目欄は，上記の各大項目に含まれない，（研究用等）消耗品費，国内旅費，外国旅費，外国人等招へい旅費，諸謝金，会議開催費，通信運搬費，印刷製本費，借損料，雑役務費（委託業務に専用されている設備備品で委託業務使用中に故障したものを補修する場合を含む），電子計算機諸費（プログラム作成費を含む），保険料（委託業務を実施するうえで法律により保険料の支払が義務づけられているもの），光熱水料（一般管理費からの支出では見合わない試験等による多量の使用の場合のみ，かつ，原則個別メータがあること）消費税相当額（「人件費（通勤手当除く）」，「外国旅費・外国人等招へい旅費のうち支度料や国内分の旅費を除いた額」，「諸謝金」及び「保険料」の8%に相当する額等，消費税に関して非（不）課税取引となる経費）等を記載する。なお，消費税相当額については，消費税の免税事業者等については計上しないこと。また，課税仕入分について還付を予定している経費については，見合い分を差し引いて計上すること。 ※公共交通機関を利用して移動する際の交通費について，切符購入など又はICカードによる乗車で二重運賃が発生する場合は，その取扱いについて定めること。 ※消費税相当額の算出に当たり，一円未満の端数があるときは切捨てること。

<p>一般管理費</p>	<p>一般管理費は、下記に述べる間接経費を計上できない委託契約において、委託業務を実施するうえで必要な経費であるが直接経費（設備備品費，試作品費，人件費及び業務実施費）以外の経費。</p> <p>間接経費は、競争的資金で間接経費を計上できるプログラムの委託契約において、「競争的資金の間接経費の執行に係る共通指針」（平成13年4月20日競争的資金に関する関係府省連絡会申し合わせ）の別表1の経費に使用できる。</p> <p>摘要欄等に記載する際は、一般管理費は「上記経費の○%」。</p> <p>一般管理費率は、</p> <p>一般競争入札の場合には、委託先の規程と契約時の直近3ヶ年の損益計算書等により算出された一般管理費率とを比較し、いずれか低い率を上限として適用する。</p> <p>上記以外の場合には、委託先の規程と10%を比較して、いずれか低い方、又は規程がない場合は契約時の直近3ヶ年の損益計算書等により算出された一般管理費率と10%を比較して、いずれか低い方を適用する。</p> <p>※一般管理費の率は、1契約期間中においては変動しない。</p> <p>※国の機関については、「一般管理費」を「事業管理費」（5%）と読み替える。</p> <p>※一般管理費の算出に当たり、一円未満の端数があるときは切捨てること。</p>
--------------	--

## Q&amp;A

## 応募対象者／実施体制について

Q：応募する機関の単位に制約はあるのでしょうか。

A：代表機関、分担機関として応募できるのは、国内の大学、研究開発機関、企業等の機関であり、具体的な単位としては、大学単位や大学に属する研究所・研究科単位、独立行政法人単位やそれに属する研究所単位、企業単位や企業に属する組織単位等が考えられます。なお、募集要項に記載のとおり、応募する機関は、事業の実施に際し、所属機関の施設及び設備が利用できることや契約事務等を行うことができること等の要件がありますので、これらの要件を満足する適切な単位を各機関内でご判断の上、応募してください。また、応募の際には、所属する機関の了承を得た上で、e-Rad のシステム上で機関承認の処理が必須となりますので、ご注意ください。

Q：海外の機関の参画や応募は可能でしょうか。

A：協力機関として、代表機関や分担機関に対し協力・支援する立場で参画することが可能です。なお、募集要項に記載のとおり、代表機関及び分担機関として応募することはできません（国内に事業所を持つ外国法人についても同様）。

Q：海外の研究者の参画は可能でしょうか。

A：協力機関（研究者）として、代表機関や分担機関に対し協力・支援する立場で参画することが可能です。

Q：学生（大学院生等）の参画は可能でしょうか。

A：学内で定められた手続によって大学と本委託契約に基づく雇用契約を締結することにより、学生を本委託業務における事業実施者として参画させることも可能です。ただし、自由に教育を受けるべき本来の学生としての立場と、業務計画を忠実に実施する必要がある本委託業務の事業実施者としての立場の利益相反について、あらかじめ学内で規程が整備されていることが必要です。

## 委託費について

Q：「設備備品費」に、パソコンの購入費用を含めることは可能でしょうか。

A：本委託業務の事業推進に専有する計算機については購入可能ですが、本事業専用にお使いいただく必要があります。研究室で共用できるような汎用性の高い機器等の購入費を設備備品費に計上することはできません。

Q：複数の研究資金により雇用される研究者等の人件費については、人件費に計上できるでしょうか。

A：当該研究者、当該事業を管理する者等からの証明書等によりあらかじめ申告し、専従比率に応じて人件費を按分（あんぶん）することについて合理的に説明できれば、計上することができます。専従比率に応じて按分（あんぶん）することができるものは、給与額、通勤手当等の諸手当、社会保険料の事業主負担分のほか、有給休暇日数についても按分（あんぶん）することができます。

Q：複数の研究資金により雇用される研究者の専従比率の管理や確認については、どのようになされるのでしょうか。

A：当該事業を管理する者等が、研究者の専従比率について適切に管理する必要があります。また、研究者の専従比率の確認については、必ずしも日報のみに限るものではなく、裁量労働制の場合には、月報や当該事業を管理する者による証明書等により確認することができます。

Q：当初に申告した専従比率が、額の確定時に実績とかい離していた場合は、どうすればよいでしょうか。

A：実績に基づいて計算し直すことが必要になりますが、煩雑な事務手続を要しますので、このような事態に至らないよう事業開始時点において十分考慮の上、専従比率を設定する必要があります。なお、変更が必要となった段階で速やかに手続を行う必要があります。

Q：学内・機関内の事業設備・装置の利用料について、事業実施費に計上することは可能でしょうか。

A：研究機関の規程等により研究機関内の研究設備・装置の使用時間当たり等の使用料が定められて課せられており、当該事業の実施のために直接使用する経費分として明確に切り分けることができ、かつ、当該設備・装置を利用する必要性及び利用料金に係る既存の規程等を示し、支出額の妥当性を説明できれば、計上することができます。

Q：一つの研究設備・装置を複数の研究で使用する場合の利用料は、事業実施費に計上できるでしょうか。

A：研究機関の使用料規程等により事業ごとの使用料を算出することができれば、当該事業の実施のために直接使用した研究設備・装置の使用料分について、計上することができます。

Q：学内・機関内の施設の利用料について、事業実施費に計上することは可能でしょうか。

A：当該事業を実施するため専用使用するスペースであり、研究機関の規程等により使用料が課せられている場合で、かつ、当該施設を利用する必要性及び利用料金に係る既存の規

程等を示し、支出額の妥当性を説明できれば、計上することができます。

Q：複数の研究資金と合算して使用することはできますか。

A：旅費（他の事業の用務と合わせて1回の出張を行う場合）及び消耗品（他の事業の用途と合わせて一括購入する場合。）について、本事業と他の事業との間で「区分経理」を明確にした上で合算使用できます。

Q：打合せのための旅費は、事業実施費に計上できるでしょうか。

A：事業課題の実施に直接必要と認められる旅費については、事業実施費に計上することができます。

#### 取得資産の管理について

Q：取得資産の所有権は委託者である文部科学省に移転するとありましたが、受託者が受託業務の完了後にこれを使用することは可能でしょうか。

A：可能です。ただし、「文部科学省所管に属する無償貸付及び譲与に関する省令第3条」に該当する機関（国立大学法人、独立行政法人、公益法人等）については、無償貸付が可能ですが、当該省令に該当しない機関（民間企業等）が継続して使用される場合は、有償貸付又は有償譲渡となります。

#### 委託費の支払について

Q：委託費は、いつ受託者に支払われるのでしょうか。

A：本委託業務に係る委託費は、原則として額の確定を受けた後の精算払となります。ただし、代表機関からの申請を受け委託者（文部科学省）が必要と認めた場合に限り、概算払も可能です。