

# ポスト「京」の成果創出について

# ポスト「京」成果創出加速プログラム（仮称）



文部科学省

## 1. 背景

- 計算機の発展に伴い進展してきたシミュレーションとAI・データ科学について、多くの分野ではこの2つの手法を融合、連携させる新たな科学技術の新たなパラダイムとなることが指摘されている。また、米中においても、2021年にエクサ級の計算機を開発するとともに、その計算資源をAI・データ科学に優先的に振り向けることを明らかにしている（米国 AI イニシアティブ 等）。このように、AI・データ科学分野においても、大規模計算機のいち早い活用が成否の鍵。
- 早ければ2021年の運用開始を目指して開発が進められているポスト「京」について、京の最大100倍の実効性能を目指したアプリケーションがCo-designによって開発されている。その成果を最大限活用し、2020年度から試行的利用を活用してAIやデータ科学を組み合わせた新たな科学的アプローチを用いることで、早期に成果を創出することが可能。

## 2. 事業概要

- ・ 科学的・社会的に重要な分野ごとに個別課題を採択するとともに、分野ごとに成果創出のあり方やデータ利活用方針の検討、広報・アウトリーチ活動、アプリケーション維持・普及、人材育成等を実施する領域総括を設置
- ・ 産業界や行政組織等、アプリケーションの最終的な利用者との連携体制構築（マッチングファンド等）、AI・データ科学との融合等の状況を踏まえて課題選定を実施。
- ・ システムソフトウェア開発等、計算科学、計算機科学の基盤となる取組を横串で実施する研究支援基盤領域を別途実施。

### ① 人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓

#### 基礎科学 （領域総括）

個別課題  
個別課題

#### 人文・社会科学 （領域総括）

個別課題  
個別課題

### ② 国民の生命・財産を守る取組の強化

#### 健康長寿 （領域総括）

個別課題  
個別課題

#### 防災・環境 （領域総括）

個別課題  
個別課題

#### エネルギー問題 （領域総括）

個別課題  
個別課題

### ③ 産業競争力の強化

#### ものづくり革新 （領域総括）

個別課題  
個別課題

#### サービス産業革新 （領域総括）

個別課題  
個別課題

### ④ 研究支援基盤領域（領域総括）

# 事前評価票のイメージ

(令和元年 月現在)

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                   |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| 1. 課題名   ポスト「京」成果創出加速プログラム（仮称）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                   |
| 2. 開発・事業期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 令和2年度   ～   令和6年度 |
| 3. 課題概要<br>(1) 研究開発計画との関係<br><br>(2) 概要 <ul style="list-style-type: none"><li>2021 年～2022 年頃の運用開始を目指して開発がすすめられているポスト「京」は Society5.0 や持続可能な開発目標（SDGs）等の実現のための大規模計算基盤であり、国が実施する他の研究開発プロジェクト、産業界、行政組織等との連携体制を構築しながら、最先端の科学的成果創出や成果の社会実装を強力に推進する必要がある。</li><li>そのため、ポスト「京」等の大規模スーパーコンピュータの計算資源を活用して、計算科学（シミュレーション）をさらに高度化しつつ、A I やデータ科学を組み合わせた新たな科学的アプローチ（例えば、数学的モデルに基づくシミュレーションと大量のデータからモデルを見出すデータ科学を組み合わせ（循環させ）、新たな科学的・社会的知見を見出す手法など）の研究開発を推進し、科学的・社会的に重要な課題）の解決に貢献する。</li><li>そのため、健康長寿社会の実現、防災力の向上、産業競争力の強化、基礎科学の推進等の分野において、①科学的革新的成果、②行政や産業界のニーズに応える成果、③A I ・データサイエンスとシミュレーションの融合により新たな価値創出につながる成果を創出することを目指す。</li><li>具体的には、中規模の課題を複数領域の括りで機動的に研究開発をマネジメントする体制を構築し、それぞれの課題が他の研究開発プロジェクトや産業界、行政組織等と連携することで、科学的ブレイクスルーや実社会のニーズへの対応に貢献することを事業の目的とする。また、2020 年度からゴードン・ベル賞を狙えるような課題を選定する。</li><li>また、広報・アウトリーチなどの取組、アプリケーションの維持・普及、人材育成等の取組を実施する課題も研究開発と密接に連携した形で実施することで、成果創出を長期的な視点で支援する体制を構築する。</li><li>なお、研究開発課題群はポスト「京」の計算資源の 40%程度の枠内で優先的に使用させることとする。</li><li>また、若手研究者が参画している課題や国際共同研究の課題を推奨するような選考手法を採用することとする。</li></ul> |                   |

#### 4. 各観点からの評価

##### (1) 必要性

ポスト「京」では、運用開始直後から成果を最大化することを目的として、アプリケーション開発を協調的に推進してきており（Co-design）、平成26年8月にまとめられた「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」によって提案された分野（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）において、アプリケーション開発が推進されてきた。同報告書において、2020年度以降は成果創出フェーズとされており、ポスト「京」を用いて、これまで開発したアプリケーションを利活用した研究開発を行い、成果を創出することとされており、ポスト「京」のシステムの開発も順調に進捗していることから、その成果を最大化することが必要不可欠である。

また、これらの開発されたアプリケーションを活用することで、各分野における世界最先端の成果が創出されることが期待されているほか、Society5.0や持続可能な開発目標（SDGs）等の実現にも必要な取組である。具体的には、人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓（基礎科学分野、人文・社会科学分野）、国民の生命・財産を守る取組の強化（健康長寿分野、防災・環境分野、エネルギー分野）、産業競争力の強化（ものづくり分野、サービス分野）等での成果が期待される。

さらに、実験、理論に続く第3の科学的手法であるシミュレーションと並び、第4の科学として、AIを含むデータ科学が急速に進展しており、今後は、この計算科学とデータ科学の融合・連携が重要となる。これは、科学技術に対する新たなパラダイムシフトを創る動きであり、本事業で強力に推進する必要がある。

また、広報・アウトリーチなどの取組、アプリケーションの維持・普及、及びアプリケーション開発や利用をする人材育成も、長期的な視点での成果の創出としては極めて重要であり、上記の研究開発関連の取組と密接に連携して継続的な取組として実施する必要性が高い。特に、広報・アウトリーチについては、多言語による成果のわかりやすい説明のための継続的な努力が必要であり、その際には、ポスト「京」などのスーパーコンピュータから得られる直接の科学的・技術的成果に加えて、産業発展への貢献や国民生活への影響等についても説明するなど、政策決定や企業経営に関わる人々を含む一般の方への訴求力を重視して、より洗練された質の高い広報活動を実施することが必要である。

##### 評価項目

科学的・技術的意義、社会的・経済的意義、国際競争力の強化、融合領域研究の促進等

##### 評価基準

世界最高水準の科学的・社会的成果の創出に向けた目標設定、融合領域研究の推進を可能とする体制構築等

## (2) 有効性

シミュレーションやデータ科学は実験、理論に続く新たな科学的手法として確立されており、ほぼすべての分野においてこうした計算科学手法が活用されている。このことから、ポスト「京」のような大規模なスーパーコンピュータにより、より大規模で高精度な計算科学の手法を高度化していくことは多くの分野の推進につながるものであり、極めて重要である。また、ポスト「京」は運用開始直後の成果の最大化を目指して協調的なアプリケーション開発を実施しており、その成果を有効に活用することがポスト「京」の成果の最大化につながる。

国が実施する他の研究開発プロジェクト、産業界とのコンソーシアム、行政組織等との連携体制構築を重視することで、アプリケーションから得られるシミュレーション等の計算結果を科学的成果や社会実装に速やかにつなげる。また、産業界からの視点を早期から組み込むため、課題選定及び課題進捗評価、並びに課題への積極的な参画を行うことで、成果の社会実装を一層促進されることが期待される。

さらに、開発されたアプリケーションが社会に普及し、実際に役立つことも重要であり、アカデミアのみならず、産業界においても広く普及するよう、長期展望に立って計画を立て、組織的に研究開発課題と密接に連携した課題としてプロジェクト内で実施することで、プロジェクトによって得られた成果であるアプリケーションの普及に貢献する。その際、欧州の CoE の取組なども参考に、分野特性を踏まえつつ、民間ソフトウェアベンダーとの連携などを含め、アプリケーションごとに最適なアプリケーションの維持・普及戦略を策定することが必要である。

また、ポスト「京」から得られる計算結果は、適切な形で研究者や社会に提供されれば新たな価値を生み出す可能性があるため、メタデータの整備も含め、データの蓄積と提供をそして機に行うことで、知的基盤の構築に貢献する。

より多くの若手研究者が、課題代表者や課題参加者として参画できるような選定プロセスとすることで、当該分野の人材育成にも貢献するほか、海外の研究機関等の参画を得た課題を推進することで、我が国が世界の科学技術振興を先導し、これに貢献することができる。

評価項目：

新しい知の創出への貢献、研究開発の質の向上への貢献、知的基盤の整備への貢献、実用化・事業化や社会実装を重視した連携体制の構築 等

評価基準：

世界最高水準の科学的・社会的成果の創出、適切な連携体制の構築、若手研究者の参画状況、データの公開状況 等

## (3) 効率性

本事業は、ポスト「京」の開発及びそれと協調的に推進されてきたアプリケーション開発等の関連事業の成果を最大限に活用しつつ、シミュレーションとデータ科学の融合といった新たな研究開発のパラダイムとなるような取組も推進することで、新たに整備されるポスト「京」の成果を最大化するための取組であり、投資効果の高い取組である。

今までのアプリケーション開発の成果の評価を行った上で、成果創出フェーズにおいて実施すべき課題の申請・採択を改めて行うことで、より効果的、効率的な体制を構築することとしている。

また、マネジメントの観点から、プログラムを俯瞰する立場から全体の方向性について検討できる体制の導入、プロジェクト管理組織の活用等を行い、適切な進捗管理を実施するとともに、対外的な成果の公表等を通じて説明責任も果たしていく。

リアルタイム処理、クラウド的な利用など分野特性に応じた利用方法を可能とすることで、より効果的・効率的な研究開発環境を実現できる。

なお、各分野で得られた成果で他のアプリケーションでも応用可能なもの（シミュレーションとデータ科学の最適な融合手法など）を横展開することが可能な体制が構築されることで、より効果的、効率的な成果創出が期待できる。

評価項目：

手段やアプローチの妥当性

評価基準：

計画・実施体制の妥当性、目標・達成管理の向上方策の妥当性

## 5. 総合評価

### （１）評価概要

### （２）科学技術基本計画等への貢献見込み

第５期科学技術基本計画で掲げられている Society5.0 の実現のためには、大量のデータを処理する高性能な計算基盤が必要不可欠であり、当該プロジェクトはあらゆる分野で高性能な計算基盤を用いた計算科学を用いた成果創出を目指すものであるため、科学技術基本計画においても重要なプロジェクトである。また、ポスト「京」で創出されるデータを公開することで、大規模な知的基盤の形成にも貢献できる。

(3) その他