

特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）

中間検証報告書

（中間報告 案）

平成 28 年 月 日

文部科学省研究振興局

特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会

目 次

○ 概要	
1. はじめに	4
2. スーパーコンピュータの意義等について	10
3. 「京」の現状とこれまでの取組に関する検証	13
(1) 共用の促進について	
(2) 研究成果の創出及び社会への還元について	
(3) 施設の運営・整備等について	
(4) 研究教育拠点の形成について	
4. 今後の課題及び推進方策	27
(1) スーパーコンピュータの意義・価値等	
(2) 「京」の総合的な中間検証	
(3) 今後の重点的な推進方策	
(4) ポスト「京」に向けて	
5. おわりに	32
○参考資料	33

「京」の総合的な中間検証（中間報告）概要

「京」の共用開始から３年半が経過し、「京」における画期的な成果創出を図るHPCI 戦略プログラムが終了したことなどを踏まえ、総合的な中間検証を実施。

1. スーパーコンピュータの意義及び価値

2. 「京」の総合的な中間検証

3. 今後の重点的な推進方策

1. はじめに

○計算科学技術の現状

- ・スーパーコンピュータを用いたシミュレーション¹（計算科学）は、理論、実験と並ぶ現代の科学技術の第三の手法であり、近年、ビックデータ解析等に代表されるデータ科学がこれからの科学技術で極めて重要なものとなっている。
- ・シミュレーションの対象となる現象の再現精度や探索範囲は、用いられるスーパーコンピュータの総合的な性能が高いほど精緻かつ広範な未知の領域の研究成果を得ることができる。
- ・スーパーコンピュータ「京」の計画時においては、同システムが史上初めて 10 ペタフロップスの計算性能を備えた超並列計算機となることが予定され、同時に、そのようなスーパーコンピュータの能力・構成を用いた大規模計算を実行できるアプリケーションが無いことも予見されていた。
- ・このため、アプリケーションの開発については、「京」の運用開始に先立つ平成 18 年からは、「京」の能力をフルに活用したペタスケールコンピューティングの実現を目指した「グランドチャレンジアプリケーション開発」事業で行われ、その後、コンピューティング研究の人材育成と研究教育拠点の形成を目指す機能が付加された「HPCI 戦略プログラム」に引き継がれた。
- ・平成 24 年の「京」完成後には、10 ペタフロップス・8 万 2 千ノードを用いた世界初の大規模計算が実現し、「精度」と「サイズ・時間」という 2 つの軸の解像度を飛躍的に伸ばすことで、それまで不可能だった詳細な大規模シミュレーションが現れた。
- ・産業利用上の効果の数多くが「京」により初めて実証されたことにより、企業におけるスーパーコンピュータ利用がよりいっそう期待できることとなった。
- ・平成 28 年 3 月末の時点で、5 年間実施された「HPCI 戦略プログラム」が終了した。同プログラムのもと、その成果の普及・展開のため各戦略分野で開発された先端的アプリケーションが多数公開されるとともに、解析結果のデータベースの構築がなされるなどイノベーションの創出に貢献している。
- ・「京」は、シミュレーションを中心とした計算科学の研究基盤を担い、かつ、次世代のテクノロジーとしてシミュレーション技術とデータ解析の連携高度化を進めている。
- ・イノベーションの創出や国民の安全等の確保に貢献する最先端の研究基盤として、「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」（以下

¹ シミュレーション：自然現象や社会現象について、理論から得られる数式を数値モデル化し、コンピュータ（電子計算機）上で数値計算を行い、模擬的に実験を行うこと。

「HPCI」という。)を「京」を中核として構築・運用することで、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に務めている。

- ・このような計算科学技術の現状において、ユーザコミュニティの代表と HPCI に計算資源を提供する主要機関の代表者等からなる「HPCI コンソーシアム」は、計算機利用者の拡大、成果の質的、量的増加、ひいては、計算科学技術コミュニティ外で十分な評価を得ることが課題と認識²している。

○施設の概要等

- ・「京」は、兵庫県神戸市に建設され、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」（平成 6 年法律第 78 号）（以下「共用法」という。）に基づく特定高速電子計算機施設として、平成 24 年 9 月 28 日に共用を開始（システムの一部は平成 23 年 3 月末に稼働開始）した、世界最高性能のスーパーコンピュータ³であり、国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構（以下「理研 AICS」という。）に設置されている。
- ・「京」は、我が国を代表し、世界トップレベルの高い計算性能と幅広い分野における適用性を有するフラッグシップシステムであり、我が国の計算科学技術を発展させ、国家の基幹的な技術として科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献するものである。
- ・文部科学省においては、基礎研究の充実及び研究の推進のための環境整備（政策目標）の中で、科学技術振興のための基盤の強化（施策目標）として、「京」を中核とする HPCI を構築し、着実な運用及びその利用を推進し、様々な分野で画期的な研究成果を創出する。さらに、社会的・科学的課題の解決に貢献するため、2020 年頃をターゲットに、ポスト「京」の開発し運用を開始することを達成目標としている。

○「京」の政策的位置づけ等

- ・平成 17 年の「京」の計画の開始時においては、スーパーコンピュータは次のように考えられていた。

² HPCI コンソーシアムが取りまとめた、HPCI の整備・運用や計算科学技術振興に関わる、国及び関係機関への提言「今後の HPCI システムの整備・運用のあり方に関する提言」（平成 28 年 6 月 8 日 一般社団法人 HPCI コンソーシアム）においては、「3.第 1 期で明らかになった今後の課題」として「革新的な高性能計算を可能とする共通基盤が構築され、HPCI の利用者数も増加するとともに多彩な初期的成果が創出されている。しかしながら行政事業レビューなどの状況も鑑みると、多額の国家予算が投入されている HPCI においては、利用者の拡大を更に進め、成果の質的、量的増加を図る必要がある。また、現状において、HPCI で得られた成果は計算科学技術コミュニティ内では高く評価はされているが、コミュニティ外で十分な評価を得るまでには至っていないことに留意する必要がある。」と記載されている。

³ (参考)国際的な性能ランキング Graph500 ランキング(ビックデータなどのグラフ処理における速度を計測するベンチマーク)において、2015 年 7 月・11 月 2016 年 6 月に三期連続世界一。HPCG ランキング(実アプリで使われる計算手法に比較的近い処理速度を評価)では 2016 年 6 月現在 2 位。Top500 ランキング(連立 1 次方程式を直接法で解くスピードを測定)では 2016 年 6 月現在 5 位。

- ① 流体力学、基礎物理、海洋地球科学等といった、それまでのスーパーコンピュータがターゲットとしてきた数値計算の対象分野が、ライフサイエンス、ナノテクノロジー等に拡大しており、広範な利用ニーズと計算資源量の需要増に応えることが必要。
 - ② 先行する国産スーパーコンピュータ（数値風洞、CP-PACS 及び地球シミュレータ）が、それぞれターゲットとする分野に特化したアプリケーションの開発が行われたことによって高い性能を得ることができた反面、各々が単発のプロジェクトとして構想・開発されたものであり、戦略性が必ずしも十分でなかった。
- ・「京」においては、上述を踏まえ、
 - ① 汎用かつ高性能なフラッグシップ機として開発が行われるとともに、平成 18 年の共用法の改正により、「研究等の基盤の強化を図るとともに、研究等に係る機関及び研究者等の相互の間の交流による研究者等の多様な知識の融合等を図る」（第一条）べく、同法に基づく共用に供された。
 - ② 平成 18 年度から国内の大学等のシステムや共用ストレージが結ばれた。平成 24 年度には全国の利用者が一つのユーザアカウントにより用途に応じて多様なシステムを利用（シングルサインオン）でき、また、計算したデータの共有や共同での分析を実施できるよう様々な利用ニーズに応える HPCI が「京」を中核として構築された。
 - ・ 共用法に基づく「京」の共用及びそれを中核とした HPCI の構築により、世界最高水準のスーパーコンピュータ及びその他の計算資源を、ユーザがそれぞれの多様なニーズに応じて容易に利用できる環境が整備され、スーパーコンピュータの利用の促進、成果の創出という観点で大きな役割を果たしている。
 - ・ また、様々な研究分野にまたがるスーパーコンピュータユーザの意見を取りまとめるために、計算科学技術に関わるすべての者に開かれた計算コミュニティ代表組織として HPCI コンソーシアムが設立（平成 24 年 4 月）された。
 - ・ 上述の施策等により、「京」は、世界最高レベルの性能を有するスーパーコンピュータとして、大学、研究機関、企業等の幅広い研究を支え、数多くの世界トップクラスの研究成果を創出している。「京」は、我が国の成長を支える研究開発を推進する科学技術政策の中核的な基盤施設として存在している。⁴

○「京」開発の事後評価の概要等

⁴ 政府方針におけるスーパーコンピュータの開発・利用(シミュレーション含む)の位置づけ
 ・「日本再興戦略 2016」(平成 28 年 6 月 2 日閣議決定)
 ・「経済財政運営と改革の基本方針 2016」(平成 28 年 6 月 2 日閣議決定)
 ・「科学技術イノベーション総合戦略 2016」(平成 28 年 5 月 24 日閣議決定)
 ・「世界最先端 IT 国家創造宣言」(平成 28 年 5 月 20 日閣議決定)
 ・「第 5 期科学技術基本計画」(平成 28 年 1 月 22 日閣議決定)
 ・「健康・医療戦略」(平成 26 年 7 月 22 日閣議決定) など

- ・スーパーコンピューティング分野において、今後とも我が国が世界をリードし、科学技術や産業の発展を牽引し続けるために、スーパーコンピュータを最大限活用するためのソフトウェア等の開発・普及、世界最先端・最高性能の汎用京速（10PFLOPS）計算機システムの開発・整備及びこれを中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点の形成を行い、研究水準の向上と世界をリードする創造的人材の育成を総合的に推進するものとして、「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」（実機期間：平成18年度から平成24年度、国費総額：約1,111億円、実施研究機関：独立行政法人理化学研究所）が行われた。
- ・これにより、計算科学技術を発展させ、広範な分野の科学技術・学術研究及び産業における幅広い利用のための基盤を提供し、我が国の競争力強化に資するとともに、材料や医療をはじめとした多様な分野で社会に貢献する研究成果を上げることが目的とし、事後評価（平成25年7月、総合科学技術会議）においては、“本プロジェクトにおいて、評価すべき多くの成果があったと認められる。”とされている。

○HPCI 戦略プログラムについて

- ・「京」開発計画開始以前の平成18年から「京」の開発と並行して平成22年までの間、ナノテクノロジー及びライフサイエンスの2分野において「京」を利用する先導的アプリケーション開発を担う「グランドチャレンジアプリケーション開発」事業が実施されていた。
- ・他方、「京」の完成によって、中核として国内の大学等のシステムや共用ストレージを結んだ、全国の利用者が一つのユーザアカウントにより用途に応じて多様なシステムを利用でき（シングルサインオン）、また、計算したデータの共有や共同での分析ができるHPCIが構築された。
これを契機として、上述のグランドチャレンジアプリケーション開発による成果を踏まえ、新たに、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として「予測する生命科学・医療及び創薬基盤」、「新物質・エネルギー創生」、「防災・減災に資する地球変動予測」、「次世代ものづくり」、「物質と宇宙の起源と構造」の5つの「戦略分野」が選定された。
- ・平成23年に開始された「HPCI 戦略プログラム」は、上記5つの「戦略分野」において、次に掲げる点を目標としている。
 - ①達成すべき「戦略目標」を定め、その目標に沿った研究開発を推進する。
 - ②我が国の計算科学技術推進体制を構築するため、スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメントや研究支援体制の確立、人材育成と人的ネットワークの形成、研究成果の普及等を図る。

- ・各「戦略分野」における研究では、「京」の能力をフルに活用することにより、世界初のシミュレーションを実現している。
- ・「HPCI 戦略プログラム」は平成 27 年度で終了していることから、今般、同事業の事後評価を行うものである。

○中間検証の位置づけ及び目的

- ・「文部科学省における研究及び開発に関する評価指針」（平成21年2月17日）等において、大規模研究施設は概ね5年を目安に評価することとされているが、「ムーアの法則」⁵に代表されるようにハイパフォーマンス・コンピューティング（HPC）分野は進捗が早いこと、また「京」の後継機（以下ポスト「京」という。）の開発プロジェクトにおいて平成30年度から平成31年度頃に「京」とその後継機を入れ替える計画となっていることを踏まえ、「京」の運用期間の概ね中間となるこの時期に、共用の促進や運営、成果の創出に関することを中心とした評価を実施し、今後の方向性を示すものである。
- ・具体的には、政策的位置づけや意義等を確認するとともに、これまでの評価における指摘事項への対応状況や今後の課題・推進方策等について、可能な限り定量的に確認・検証を行う。また、ポスト「京」に向けて、今後の課題を明らかにする。
- ・共用開始から3年半が経過した「京」について、「京」の運営に係る中間評価と、「京」を活用した成果創出事業でもある HPCI 戦略プログラム（平成 23～27 年度）に係る事後評価を併せて行い、総合的な中間検証を行うため、文部科学省研究振興局長の私的諮問会議として、特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会を設置し、以下の項目及び視点に基づき、審議を実施した。
- ・なお、HPCI の構築事業においては、「京」の運営（「京」の運用及び利用促進）、HPCI 戦略プログラム、HPCI の運営の3つから構成されており、今回の評価においては、このうち「京」の運営と HPCI 戦略プログラムを対象としている。（参考：HPCI の運営の評価は平成 27 年 10 月に実施済み）
- ・評価対象としては、「京」全体が一体的に多くの優れた成果を生み出すシステムとして適切に機能しているかを評価するために、理研 AIGS が行う「京」の運用（運転・維持管理等）・スーパーコンピューティング研究教育拠点形成等、一般財団法人高度情報科学技術研究機構（以下「RIST」という。）が行う利用促進業務（利用者選定及び利用支援業務）等、並びに「京」全体の利用研究の状況など「京」に関わる取組全般とする。
- ・評価方法については、理研 AIGS、RIST 及び「京」利用者からのヒアリング調査、

⁵ ムーアの法則：半導体の集積密度は 18～24 ヶ月で倍増してきた（計算機の性能は約2年で倍になってきた）。

各種定量データ及び具体的な成果事例等の確認により、上記の項目及び視点に関する「京」全体の取組について分析等を行い、また現地調査を実施した。本委員会においては、これまでの指摘事項等への対応状況を整理・検証するとともに、今後の課題と方向性等について、●回にわたり審議を行い、ここにその結果を中間報告として取りまとめた。

<評価の項目及び視点>

- (1) 共用の促進について
- (2) 研究成果の創出及び社会への還元について
- (3) 施設の運営・整備等について
- (4) 研究教育拠点の形成

<評価等の経緯>

平成17年	8月	開発に係る事前評価
	11月	事前評価（総合科学技術会議）
平成19年	6月	概念設計等に係る評価
	9月	評価（総合科学技術会議）
平成22年	3月	開発に係る中間評価
(平成22年	8月	HPCI 戦略プログラム事前評価)
(平成23年	4月	HPCI 戦略プログラム事業開始)
平成24年	9月	(共用開始)
平成25年	4月	開発に係る事後評価
	7月	事後評価（総合科学技術会議）
(平成26年	2月	HPCI 戦略プログラム中間評価)
(平成27年	6月	春の行政事業レビュー（HPCI 戦略プログラム）)
平成27年	11月	秋の行政事業レビュー
(平成28年	〇月	HPCI 戦略プログラム事後評価)
平成28年	〇月	総合的な中間検証（中間報告）

2. スーパーコンピュータの意義等について

○シミュレーションについて

(スーパーコンピュータを用いたシミュレーションの意義)

- ・シミュレーションは、対象となる現象で働く法則を測定・抽出し、その現象を模倣するモデルをコンピュータ上に構築することで、数値又はアニメーションなどの可視化された情報として対象となる現象を再現する。対象となる現象を確かめることが困難、不可能又は危険である場合に用いられる。
- ・スーパーコンピュータを用いたシミュレーションは、研究において、自然現象等の実験不可能な現象を再現して実験を代替するとともに、対象となる現象について、超高温、超高压等の極限状態などの探索範囲から、その現象を支配する理論の理解や未来又は未知の状態を予測できる。また、シミュレーションを実験結果の検証に用いて、対象となる現象に関する理論に新知見を加えることや新たな実験手法を開発することも可能となる。
- ・シミュレーションの対象となる現象の再現精度や探索範囲は、用いられるスーパーコンピュータの性能と、それを生かすアルゴリズムやソフトウェアに依存する。総合的な性能が高いほど精緻かつ広範な未知の領域の研究成果を得ることができる。

○「京」について

(「京」で可能となった大規模な計算)

- ・「京」によって、10 ペタフロップス・8 万 2 千ノードを用いた世界初の大規模計算が実現し、「精度」と「サイズ・時間」という2つの軸の解像度を飛躍的に伸ばすことで、それまで不可能だった、様々な物質における原子や分子の挙動、電子の状態、生体・生命現象、天体・宇宙現象などをシミュレーションすることが可能となったほか、大量の観測データや実験データを計算に取り込むことが可能となり、例えば、地盤と建物の揺れ及びこれによる建物被害を統合した詳細な大規模シミュレーションや従来再現できなかった集中豪雨現象をシミュレーションした。
- ・これにより「予測の科学」ともいべきものが実現しつつあり、様々な分野の研究開発にシミュレーションを活用したイノベーション創出への期待がもたらされた。

(「京」で実証された大規模計算の産業上の効果)

- ・産業利用上の効果の数多くが「京」により初めて実証された。具体的には、時間・コストの削減、製品性能の向上、従来にない設計上の最適解の探索であ

る。

- ・これにより、あらかじめ効果が分からないものへの投資に消極的な企業であっても、今後のスーパーコンピュータ利用が期待できることとなった。(最先端のスーパーコンピュータでのプログラミングやアルゴリズム構築は容易ではないことから、企業が高い技術に新たに挑戦するためには産業上の効果が実証されることの意義が大きい。)

(研究開発基盤としての「京」)

- ・「京」においては、「地球規模の気候変動の解明・予測」等を目的として開発・運用された「地球シミュレータ」から計算性能が飛躍的に向上したことを踏まえ、スーパーコンピュータを用いたシミュレーションを広く一般に普及させるよう、主たる用途の転換が図られた。その運用に当たっては、施設維持管理における責任ある体制整備や利用の高度化への研究開発が行われ、産業界を含めた幅広い分野の計算科学の研究者が利用できる支援の枠組みの構築がなされた。これらに対して理研 AICS 及び RIST が果たした役割は大きい。
- ・「京」は、共用法に基づき、年間約 120 課題を実行する共用施設として日本全体の計算科学技術の底上げに貢献している。

○ポスト「京」について

(ポスト「京」の役割)

- ・ポスト「京」は、「京」をはるかに超える大規模計算により、これまでわからなかったメカニズムを解明する、新たなサイエンスを拓く先行プラットフォームとしての役割と、数ヶ月かかる大規模計算を短時間で検証できる大きな計算リソースを擁する研究開発基盤としての役割を担う日本の次世代のフラッグシップスーパーコンピュータである。

【ポスト「京」の科学への貢献】

- ・ポスト「京」は、最大で「京」の 100 倍のアプリケーションの実効性能を得ることによって「精度」と「サイズ・時間」という 2 つの軸に、もう一つの軸として、「統計上の精度向上・探索範囲の拡大（アンサンブル（複数同時並行計算）及びパラメータ（変数）の増加）」を加えて、より現実の現象に近い状態の計算や未知の現象の高精度な予測を可能とする。大規模計算が発想の範囲を広げ、新たな科学研究のシーズを供給する。

【ポスト「京」の産業界への貢献】

- ・「京」で成し遂げた大規模計算手法は、「京」レベルのスーパーコンピュータの大学及び産業界での普及に伴って下方展開・普遍化する潮流がある。ポスト

「京」は、この潮流を踏まえ、大学が新しいサイエンスを世界に先駆けて拓き、産業界がその後続くことで日本の比較的優位にある計算科学技術をいち早く実用面で押える。

(ポスト「京」の自主開発の意義について)

- ・「京」への政府投資は、2000年代に世界的な潮流となりつつあった超並列のスカラ型計算機への対応が遅れていた日本のスーパーコンピュータ開発において、その遅れを挽回する役割を果たした。(民間のスーパーコンピュータ開発が世界の趨勢に追いつく契機を作った。)
- ・スーパーコンピュータは、3年毎にそれ以前のマシンの約10倍の計算速度を実現してきており、時間の経過とともにその性能が向上していく中、それを利用した最先端のサイエンスの成果を得るべく世界的な競争が行われている。
- ・最大で「京」の100倍のアプリケーション性能をポスト「京」で達成し、従来の成果を超えるシミュレーションを実現するに当たっては、海外ベンダーが供給するコストパフォーマンスに優れるシステムを購入することも選択肢の一つである。しかしながら、海外ベンダー製スーパーコンピュータは、最先端CPUの仕様が秘匿されているため、納品されるまでそれに対応したアプリケーション(ソフトウェア)のチューニングができない。自主開発で導入する場合と比べてアプリケーションの開発・運用が2年程度遅れることが想定されている。
- ・研究者は、最先端のスーパーコンピュータをいち早く利用できることで研究開発における世界的な競争力を得る。ハードウェアやシステムソフトウェアと一体でアプリケーション開発を進め、より早期に成果が得られることが重要である。
- ・ポスト「京」は、2020年頃の運用開始時において世界の他のスーパーコンピュータに先駆けて研究成果を創出するため、アプリケーションの計算性能を「京」の最大100倍と見積もり、これを実現すべくハード及びシステムソフトとアプリケーションが一体的で協調した設計・開発(コデザイン)を行っている。
- ・ビッグデータ・IoT・AIが技術的基盤となる今後の社会においては、スーパーコンピュータの自主開発を通じて得られるCPU設計技術、大規模データの処理技術、高性能ネットワークの構築・運用を含むデータ通信技術、省電力技術等を次世代に承継・発展させていくことが重要となる。

3. 「京」の現状とこれまでの取組に関する検証

評価項目及び視点、またユーザアンケートやユーザコミュニティからのご意見を踏まえ、「京」の開発に係る事後評価（平成25年4月）以降の「京」における取組状況とその検証結果については、以下のとおりである。

(1) 共用の促進について

○推進体制とマネジメントの在り方

<現状の検証>

- ・ 理研AICSにおける「京」の運用及び登録機関であるRISTにおける利用者選定及び利用支援については、共用法及び「特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針」に基づき適切に行われている。
- ・ 理研AICSにおいては、259名の体制（平成28年2月現在）で、共用法に基づく「京」の運用、国際的な研究開発拠点の構築、ポスト「京」の開発というミッションを遂行しており、高度化研究やHPCI戦略プログラムにおける5つの戦略分野との連携などを通じて、共用の促進を実施している。また、業務運営について機構長に助言する運営諮問委員会を設置してきたが、平成28年度からは理事長又は機構長の諮問に応じ審議し答申する「アドバイザリー・カウンスル」（9名うち外国人5名）の設置が準備されており、マネジメントの強化が図られている。
- ・ 「京」の登録機関であるRISTにおいては、61名の体制（登録機関として業務を行う神戸センターの人数、平成28年2月現在）で、共用法に基づき利用者選定及び利用支援を行っている。
- ・ 一元的相談窓口（ヘルプデスク）を設置し、応募前の事前相談、具体的な利用方法に関する相談、プログラムの高速化など技術支援、ポータルサイトによる各種情報提供や案内、利用講習会の実施、研究相談などワンストップサービスによる利用支援を実施している。
- ・ 特に、高度化支援については、19名の相談者及び技術者による専門組織により、「京」一般利用枠の32%で支援を実施（うち約4割が産業界）、技術支援ノウハウ集として整理して公開しており、アンケートでは約9割の利用者が満足と回答している。
- ・ また、HPCIコンソーシアムが、HPCIの整備・運用や計算科学技術振興に関わる意見を幅広く集約し、国及び関係機関へ提言を行っており、この提言や意見等を尊重して、「京」の運営が行われている。

<今後の留意事項等>

- ・利用者視点での共用の推進という大前提を踏まえ、ポスト「京」の運営も見据えて、利用者の利便性向上等に向けた共通基盤研究や高度化研究を更に強化し、計算科学の発展や分野振興に貢献していくことが重要である。
- ・特に、内外の研究機関等との連携・協力を強化し、国際的な研究拠点としての存在感を高めていくことが重要である。

○利用者視点での共用の促進

<現状の検証>

- ・研究者等との意見交換や要望等を踏まえ、効率的な運用の工夫や制度の見直し、利用ノウハウの集約と情報提供、手続きの簡素化など利用者負担の軽減等、広く一般ユーザの利便性の向上に向けた取組が行われている。また、高度化研究として開発または「京」用に最適化したソフトウェアは32本（平成28年3月末現在）が公開され、これらを活用した世界的な成果が創出されている。
- ・公募課題数の分野は、「物質・材料・科学」や「工学・ものづくり」が多く、次いで「バイオ・ライフ」や「環境・防災・減災」、「物理・素粒子・宇宙」が多くなっている。
- ・また、定期的実施される成果報告会や大型実験施設との連携利用シンポジウム等により、産学の連携・相互理解の促進が図られている。
- ・特に、「京」を中核とするHPCIが構築され、ひとつの共通窓口で利用相談等を受けつけるワンストップサービスが実現されるなど、利用者視点での計算科学技術推進の環境が整い、また産業界も含めユーザの裾野が広がり、同業種の企業におけるコンソーシアム型の戦略的な利用体制が出現したことは大きな成果の一つである。
- ・産業利用については、ニーズの高まりに対応し専用利用枠の拡大（平成24年度5%→平成28年度15%）とともに、審査基準の整備、成果専有（成果非公開）利用など欧米と比べても積極的な取組が行われており、実証利用や個別利用も増え、これまで153社（東証1部33業種のうち15業種、平成28年2月現在）が利用している。
- ・成果の自社での活用・展開としては、「シミュレーション技術・利用技術の開発・整備、活用の方向性見極め」、「研究開発業務、製品開発への活用」をあげる割合が高く、7割以上が期待通り、もしくは期待以上の成果が得られたと回答している。
- ・また、産業利用課題の利用報告書のダウンロード数が最も多く、HPCI に参画していない企業からも多数ダウンロードがされている（東証1部33業種中27業種からダウンロードされている）。注目の高い成果報告書はダウンロード数

トップ 20 としてホームページで公開されている。

- ・特に、「京」以前には産業界では不可能であった大規模計算や大量実行が可能となり、10～15年程度先の研究開発の方向性及びその手段の検証が実現できるようになったことは、大きな成果の一つである。

<今後の留意事項等>

- ・「京」の利用分野については、共用当初から科学技術のほぼ全ての分野で利用されているが、ビッグデータなどの社会的・科学的課題や要請に対し、スーパーコンピュータの有用性を示していくことが求められる。
- ・HPCIコンソーシアムの意見やアンケート調査など利用者のニーズを十分に把握・分析して、関係機関が更に連携・協力して効率的・効果的な支援を強化するとともに、潜在的な利用者に対するアプローチを工夫し、更なる利用者の裾野の拡大を図っていくことが重要である。
- ・また、利用者のレベルに応じた支援の充実が重要である。特に今後は、「京」を中核として、HPCIの協力を得つつ、新規利用者の開拓、若手利用の促進、大規模計算の促進を重点的に推進していくことが必要である。
- ・「京」と「京」以外の HPCI の利用をより効果的・効率的に行い、成果創出への道のりをより短縮していくためには、産業利用も含めコーディネート機能の強化などユーザニーズとのマッチングを更に意識した取組が必要である。
- ・産業利用については、「京」により飛躍的に進展したと言え、随時募集やコンソーシアム型課題等の制度の新設など取り組みが行われているが、新規の利用者が減少傾向にある。利用報告書のダウンロード分析などから潜在的利用者が期待される分野もある。そのため、企業訪問や利用支援、講習会の開催、広報等について、関係機関が更に連携・協力して、戦略的に効果的な取組を行うことが重要である。また、関係機関とも連携して、ニーズの高いソフトウェアの導入検討など、利用者視点での共用促進を更に推進するため、利用制度や利用環境の向上に向けて、不断の努力が必要である。
- ・さらに、大規模計算について、現在は24時間までの利用となっているが、「京」の性能を活かし、48時間や72時間まで利用できる枠組みや年間利用契約などについて産学から要請があり、今後の検討課題である。
- ・なお、利用料金については、成果公開の場合は無償である現行制度の維持及び料金の引き下げについて要請があり、ポスト「京」の運用における制度設計においては、利用者等の意見も踏まえつつ検討することが必要である。

○利用者選定の在り方

<現状の検証>

- ・ 共用法に基づき、中立・公正な立場で利用者選定を実施する体制がとられ、多様な分野の研究者等に対して「京」の利用機会を提供している。
- ・ 応募・採択状況について、「京」と「京」以外の HPCI の役割分担等が進んだことにより、採択率は当初（平成 24 年度及び 25 年度）の約 30%から、平成 27 年度には約 50%、課題参加者数は約 1,600 名以上になっている。
- ・ 選定基準や公募・採択状況等は公開しており、選定委員会については個別の申請内容や課題が特定できる情報に関わるもの、利用者選定に著しい障害となるもの以外は公表することとして、透明性の確保に努めている。また、ユーザアンケートも踏まえ、審査員全員の総合評価コメントを申請者に通知するなど、今後の申請に役立つ取組を実施している。

＜今後の留意事項等＞

- ・ 中立・公正に実施し透明性を確保することが引き続き必要である一方、社会的な課題や政策的要請を踏まえた選定の重み付けや、国際的な産業競争力の強化といった観点も踏まえた産業利用の課題選定の在り方などについて、どのような実施方法があるのか検討することを期待する。

(2) 研究成果の創出及び社会への還元について

○研究開発目標の達成状況及び科学的成果の創出

＜現状の検証＞

- ・ 「京」によりはじめて実現した成果が多数創出されていたことによって、スーパーコンピュータ及びシミュレーションが多様な科学技術の成果を社会還元するための強力なツールであることを、産業界を含め広く認識される契機となった。
- ・ 理研AIGSにおいては高度化研究を実施し、SCALE・GENESIS・NTChemなどの先端的なソフトウェアを約30本開発し、それを通じての戦略分野・一般ユーザとの連携を行うことで、我が国の計算科学を発展させる大規模計算・超並列化に大きく寄与している。
- ・ 「京」の利用研究課題及びHPCI戦略プログラムにおいては、平成28年5月までに学術論文(査読付き)は国内外併せて1,368編(うち「京」を使用した成果の論文数は506編)、学会発表は国内外併せて3,403件(うち「京」を使用した成果の発表件数は2,282件)、賞等は約120件、また新聞やテレビ等でも多数取り上げられており、今後、社会実装が間近に迫る成果も創出されている。
- ・ HPCI 戦略プログラムについては、全ての戦略分野で目標に沿った研究開発が推進され、研究開発目標が着実に達成されるとともに、計算科学技術推進体

- 制については、各戦略分野において、当初の想定以上に機能したと言える。
- ・科学的成果については、HPCI 戦略プログラムにおける5つの戦略分野全てで、「京」の性能を活かし、独創性も高く、優位性にも富んで数多くの成果が創出された。産業界や実験研究者、臨床現場、他分野との連携も着実に進められ、成果の公開と利用支援等の活動が積極的に行われ、研究者層も拡大しており、着実に進展したと言える。

<今後の留意事項等>

- ・「京」によってもまだ解決できない課題等について、ポスト「京」での取組と併せて、より明確に分かりやすく説明していくことが重要である。
- ・また、RISTにおいては、プログラム高速化のノウハウや知見等を生かし、HPCI 戦略プログラム（平成27年度終了）課題と同様に、ポスト「京」の重点課題や萌芽的課題の実施機関と積極的に連携・協力していくことが期待される。
- ・また、理研 AICS より、コミュニティとの連携強化やコミュニティの拡大に向け、定量的波及効果調査、HPC 未踏領域の開拓等を通じ、新たな社会的価値の創出や未踏領域での新規テーマの発掘、利用層の拡大等を進めていく旨の説明がなされ、今後の着実な取組と社会への分かりやすい説明が期待される。
- ・なお、国は政策的に緊急かつ重要な課題について、緊急に利用することのできる重点化促進枠を設定しており、これまでは内閣府（防災担当）が南海トラフ沖の地震による長周期地震動の解析に利用してきた実績があるが、今後こうした制度を柔軟に利用して、社会的・科学的課題の解決に迅速に貢献していくことが求められる。

○広報普及活動

<現状の検証>

- ・理研 AICS と RIST、HPCI 戦略プログラムの実施機関等が連携した活動がされ、平成24年4月から平成28年4月までの間、マスメディアを通じた幅広いターゲットへの広報（新聞やテレビ、雑誌等は約1,700件以上）、ウェブやコンテンツによる深い情報の発信（成果動画をホームページ（HP）等で公開、HP等の訪問者数は66万件以上、中学生向け副読本等に「京」の取組が掲載）、イベントを通じた直接対話（全国各地でシンポジウム等を170件以上開催）、海外を含め見学者の受け入れ・交流（見学者は4万人以上）、出前授業・出張講演の実施など若い世代への興味を促進する活動、マスメディアに対して研究内容や成果等に関する勉強会など、広報普及活動の重要性が意識され積極的に行われている。また、国際学会での展示や英語コンテンツの制作・発信、海外からの見学者の受け入れなど、国際的な広報活動も推進している。

- ・また、RIST においては、一般課題の成果について外部有識者によるサイエンスレビューを実施し、優秀な課題を表彰するとともに、成果事例集として発行している。また、HPCI 利用報告書を公開し、成果をまとめた形で速報している。平成 27 年度末までに利用報告書は 2 万回以上ダウンロード（うち、海外 42 ヶ国から約 1200 件）されている。注目の高い利用報告書はダウンロード数トップ 20 としてホームページで公開されている。

<今後の留意事項等>

- ・ポスト「京」に向けたアプリケーション開発実施機関との連携・協力を強化し、成果の適用対象や実用化対象の拡大について継続して検討するとともに、経済的波及効果を含め、成果等を実感できる形で全国的に分かりやすく広報し、社会的理解を得ていく努力を継続的に行っていくことが必要である。
- ・この際、科学的成果を如何に伝えて行くかが重要であり、各分野の具体的なニーズとともに波及効果や何に役立つのかなどについて、各分野の声として発信していくことが重要である。例えば、そもそもスーパーコンピュータとはどういったものについての説明か、成果等について、HPCI 戦略プログラムなどで一部実施されたテキストのような形でまとめ、発信することも有効な手段の一案である。
- ・また、製品等に「京」の成果が活用された場合には、「京」の成果である旨表示することを義務付けるなど、成果の社会還元が目に見える形となるよう更なる工夫と努力が必要である。
- ・国際的な研究拠点として、海外への情報発信の更なる強化が必要であり、対象やコンテンツなどを戦略的に検討することが重要である。
- ・産業利用の更なる拡大に向け、「京」を初めとする HPCI 利用に必ずしも精通していない企業ユーザに対する適切かつ積極的な情報発信の強化が必要である。

○アプリケーション開発・普及の体制の構築

<現状の検証>

- ・理研 AICS においては、研究基盤研究としてソフトウェアを開発、「京」用に最適化したソフトウェアを公開・提供しており、海外も含め大学や研究機関、公的機関、民間企業において活用されている。

<今後の留意事項等>

- ・HPCI 戦略プログラムで構築された研究開発体制やコンソーシアム等を、我が国の先端的な計算科学技術の研究開発の場として引き続き有効に機能させ、

最先端のスーパーコンピュータで可能となった技術やソフトウェアを普及・展開していくことが重要である。

- ・ 理研 AICS においては、「京」の高度化調整枠をこれまで以上に有効活用し、先導的な科学的課題を探索する研究や利用者ニーズ等に対応して共通基盤技術の開発を進めることが重要である。また、RIST においても、共用法第 12 条（文部科学大臣の承認を受け、一定割合の利用可能な計算資源を使用して登録機関に所属する職員等が施設利用促進のための方策に関する調査研究等を実施できる）に係る調査研究をこれまで以上に積極的に有効活用し、支援の高度化等に向けた調査研究を推進することが必要である。
- ・ スーパーコンピュータによるシミュレーションの有効性は「京」の大規模計算で実証されたと言えるが、今後、より多方面で活用され、企業の製品設計開発や社会生活の安心安全の確保など、社会において身近なものとして普及させていくことが必要である。
- ・ アプリケーションを開発・活用するための技術力は、革新的な成果創出の源水であり、国としてこれを維持・発展させ散逸させないよう人材育成の観点も含め戦略的・継続的な取組が必須であり、今後、ポスト「京」に向けたアプリケーション開発の更に先も見通した検討が必要である。
- ・ また、これまでの RIST の利用支援の実績を生かし、「京」で利用の多いソフトウェアや戦略的に整備すべきソフトウェアについては、ポスト「京」における早期の成果最大化も念頭に、早い段階からその整備を行うことが重要である。
- ・ その際、社会的・科学的課題に対して、計算科学技術がその課題を克服し得るかという視点でも検討し、フラッグシップシステムでの研究開発は 5 年から 10 年先を見据えた取組が重要であり、計算科学技術による成果が分野そのものに対して大きなインパクトが与えられるよう積極的な取組を図っていくことが重要である。

(3) 施設の運営・整備等について

○効率的・効果的な施設運営

<現状の検証>

- ・ 「京」の運転については、運用当初と比べて運転ノウハウの蓄積や実施課題（ジョブ）の効率化等により、極めて安定的に稼働して（計算資源提供時間は93%以上）おり、平均のジョブ充填率は75%以上、大規模実行期間を除くと80%前後となっている。
- ・ 運用の改善として、大規模実行期間の設定、ジョブスケジューリングの改善、ジョブ待ち時間の情報提供（Kを待ちわびての開発）、計算資源の隙間を埋め

る小規模ジョブの実行改善、ジョブ優先度の調整、ジョブの消費電力推定による省電力化などを実施している。

- ・また、電力料金の高騰（平成25年度予算額比で平成28年度は45%増）への対応として、ガス発電の併用によるコスト最適化、大規模ジョブの事前確認など契約電力超過の防止対策、保守経費や建屋設備の維持管理の見直し、その他経費の合理化等を実施している。
- ・RISTにおいては、経費の8割が人件費であるが、「京」の運用によって年毎に拡大する利用者及びその業務をヘルプデスク人員の効率化やニーズに合わせたワークショップ等の開催調整、職員のスキルアップ等による効率的な業務遂行を実施している。
- ・また、高度化支援によるプログラムの高速化により、これまでに約29,400万ノード時間（約43億円相当）の「京」の計算資源の効率化を実現している。（「京」の有償利用単価で換算）

<今後の留意事項等>

- ・「京」のこれまでの運転経験やノウハウの蓄積等を踏まえ、運用の最適化を更に進めることが求められ、これらをポスト「京」の運用に活かしていくことが重要である。
- ・一方で、これまで相当の効率化努力が行われており、更なる見直しには限界があるため、ポスト「京」も見据えて費用対効果を踏まえた高効率な電力運用に向けた整備・改修を進めることも必要である。
- ・特に、「京」でしか実施できない大規模計算など「京」以外の HPCI との役割分担をこれまで以上に意識して、また引き続き HPCI コンソーシアムの意見等を尊重し、「京」の運用と利用支援を進めていくことが重要である。
- ・高度化支援による計算資源の効率化は、物理的に資源が一定で限られるスーパーコンピュータの運用においては大変有効な手段であり、支援制度を周知徹底し、利用者ニーズを的確に把握して、これを強化することが重要である。

○関係機関の連携・役割分担

<現状の検証>

- ・理研 AICS 及び RIST は、連携協力協定を締結し、定期的な連絡会等により、利用状況や利用支援に関する情報の共有を図っており、HPCI コンソーシアムからの要望等について、制度や運用体制等の見直しが行われている。

<今後の留意事項等>

- ・理研 AICS 及び RIST は、ポスト「京」の開発におけるアプリケーション開発の

実施機関との連携を強化していくことが必要である。

- ・利用者コミュニティとの連携により、利用者ニーズの反映とそのフィードバックの検証が重要である。その際、先端大型研究施設としての運用経験が豊かな SPring-8 等の取組も参考にしつつ、HPCI コンソーシアムをはじめとする利用者関係団体や登録機関、HPCI を構成する各機関や運用実施機関、重点課題等のアプリケーション開発主体等の関係機関との連携体制や役割分担について、改めて全体像を分かりやすく示していくことが必要である。特に、RIST においては、「京」の登録機関としてだけでなく、現在、HPCI のワンストップサービス提供機関としての役割も担っており、我が国のスーパーコンピュータインフラ全体の中で期待される役割は大きい。
- ・なお、HPCI コンソーシアムについて、スーパーコンピュータが様々な分野で研究開発に不可欠な基盤として使われるようになってきた今日の現状を踏まえ、コミュニティ強化に向けた体制等の検討が期待される。

○自己収入の努力及び有償利用の在り方

<現状の検証>

- ・外部資金（科学研究費補助金や戦略的創造研究（JST）、受託研究など）については、年々増加しており、約 9 千万円（平成 27 年度）となっており、利用料収入については、平成 27 年度約 7 千万円となっている。
- ・利用料金については、HPCI 準備段階コンソーシアムの「HPCI とその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて-最終報告-」（平成 24 年 1 月 30 日）を踏まえ、計算資源の利用については、成果公開によって科学技術の振興や新たな利用促進につながるとともに、知的公共財として社会や国民へも還元されることから成果公開を原則として成果公表の促進策として無償とし、産業利用で成果を非公開とする場合には成果による恩恵をユーザ企業が独占することとなるので利用を有償とし、利用料金の算定は運営費回収方式、ノード数×時間当たりで課金している。

<今後の留意事項等>

- ・理研 AICS は我が国の計算科学・計算機科学を先導する教育研究拠点として、一層の充実を図らねばならない。また、民間資金を含め、これまで以上に外部資金の獲得を強化していく必要がある。
- ・利用料について、現在運用中の「京」においては、中立・公正で厳しい課題選定を前提として、欧米において外部利用している大型スーパーコンピュータや他の共用法に基づく大型研究施設と同様に成果公開利用においては無償として、成果専有利用においては運営費回収方式を原則とすることは妥当であ

- る。
- ・産業利用枠を増加することで利用料収入が増える可能性があるが、「京」を越える性能のスーパーコンピュータが国内に導入され始めたこと、有償の産業利用における計算規模が学術利用に比べかなり小さいこと、年間の利用資源が一定であり利用者が限られることなどから、今後、大幅な増加は期待できない。
 - ・一方、ポスト「京」においては、これまでの経緯等も踏まえ適切な受益者負担を考慮して有償利用の在り方について、HPCI コンソーシアムや産業界からの提言、国内の主要なスーパーコンピュータの利用状況等も踏まえつつ、検討することが必要である。仮に成果専有利用において運営費回収方式を継続した場合においても、我が国のフラッグシップシステムとして大規模計算の実施を阻害しない工夫や、巨額な建設費の一部について、利用者負担を求めることが可能か否か、HPCI コンソーシアムや産業界、アカデミアと意見交換を図りつつ検討していくことが求められる。

(4) 研究教育拠点の形成

○国際協力・国際貢献

<現状の検証>

- ・理研 AICS においては、海外機関との連携について、研究協力協定等に基づく研究協力、研究者交流等（アメリカ、ドイツ、オーストラリア、フランス、イタリア、など）や合同研究会やスクール等の開催が進んでおり、またシステムソフトウェア開発に向けた日米科学技術協力、日米欧の研究プロジェクトやソフトウェア等の性能評価のためのスパコン相互利用等の取組への参加などが行われている。
- ・RIST においては、欧州全体に高性能計算資源を提供している PRACE⁶と MOU を締結し、また米国の大学の HPC 利用促進組織である XSEDE⁷とも交流を進め、利用支援や選定プロセスなどの情報共有を進めて、3者での協力を推進している。また、同様な取組をシンガポールの国立スーパーコンピュータセンターとも開始した。

<今後の留意事項等>

- ・支援の高度化等に向けた調査研究等を通じて、海外動向等をより密に把握し、

⁶ PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) : 欧州スーパーコンピューターシステムの配備計画。欧州の科学者・技術者に世界最高クラスのスーパーコンピュータを国を超えて提供。2008年1月発足。

⁷ XSEDE (the Extreme Science and Engineering Discovery Environment) : 米国国立科学財団のプロジェクト XSEDE ネットワークは、全米 17 のスーパーコンピュータへのアクセスを提供し、8,000 名以上のユーザを支援。

運営や支援の改善への参考にするとともに、連携・協力関係を強化していくことが重要である。

- ・また、我が国全体として国際的な共同研究の伸びが低下しており、こうした研究活動を支える取組が求められる。海外からの利用について、応募件数は増加しているが採択件数が少ないことから、事前の利用相談や技術支援の充実、また共同研究の推進などが必要である。

○他の大型研究施設等との連携

<現状の検証>

- ・X線自由電子レーザー施設（SACLA）による大量データをリアルタイムで解析し、その結果をSACLAの実験にフィードバックさせ、2次元・3次元の高解像度イメージングを構築する取組が行われている。また、大型放射光施設（Spring-8）との連携では、実験研究者と理研AICSを含むシミュレーション研究者の共同研究（光合成システム）が進められており、実大三次元震動破壊実験施設（E-ディフェンス）や大型風洞、曳航水槽試験装置等との連携が行われている。
- ・RISTにおいては、他の大型施設の登録機関（公益財団法人高輝度光科学研究センター（JASRI）、一般財団法人総合科学研究機構（GROSS））と連携協力協定を締結（平成24年6月1日）し、共通の募集形態により連携利用課題の募集を実施（平成27年度応募数17件）しており、「京」との連携利用では7件（平成28年度）採択されている。また、計算物質科学イニシアティブ（HPCI戦略プログラム分野2）も含めて、連携利用シンポジウムを年1回共同開催するなど、企業等による大型実験施設の連携利用の促進を図っている。

<今後の留意事項等>

- ・シミュレーション結果の検証には実験等との比較検証が不可欠であることから、世界を代表する先端研究基盤施設を有する日本の強みを活かした研究活動を更に促進していくことが重要である。
- ・また、他の登録機関やポスト「京」重点課題や萌芽的課題との連携を深め、利用支援の強化などにより大型実験施設との連携利用を更に促進して行くことが重要である。

○計算機科学と計算科学の双方に精通する人材の育成

<現状の検証>

- ・理研AICSにおいては、国内外への幅広い情報提供や海外研究機関等との連携

による研究者等の交流が推進され、連携大学院、スプリングスクールや欧米機関（PRACE, XSEDE）との共同開催による国際サマースクールの実施、インターンシップの受入、講義の動画・資料のアーカイブ（約 150 コンテンツ）等が行われ、若手研究者等の育成が行われている。また、国内の大学との包括的な協定（東北大学、筑波大学、神戸大学）が結ばれている。

- ・研究者は公募により採用され、任期制かつ裁量労働制となっており、研究チーム毎に PI（Principal Investigator）から個別に指導を受け、研究進捗ミーティング等により人材育成が成されるとともに、毎年の 5 段階評価と 5 年後に契約更新に係る評価を行っている。
- ・また、HPCI 戦略プログラムにおいては、各分野それぞれの特色を活かし、セミナーやスクールの開催、計算科学技術特論の講義配信、計算性能最適化に関する事例データベースの構築・公開などが行われた。
- ・RIST においては、幅広い利用技術のニーズに応えスキルアップが図れる講習会を実施、これまで約 2,600 名以上（共催含む）が参加し高い満足度が示されている。また、高いスキルを持った人材の育成として、共用法第 12 条に係る調査研究の活用や研究実施相談研究員制度として研究活動に専念出来る体制の整備などが行われている。

<今後の留意事項等>

- ・ HPCI 戦略プログラムにおける多様な人材育成の成果をどのように持続・発展させるかが課題であり、我が国全体の計算科学技術人材の育成・確保の観点も念頭に置きつつ、ポスト「京」に向けた取組も含め、継続的に取り組んでいくことが必要である。
- ・我が国の中核的な教育研究拠点として、また国際的な頭脳循環の拠点として、人材の確保と流動化のバランスが重要であり、研究者にとって魅力のある研究環境の構築と世界的な競争の場であることを意識して、組織運営を図って行くことが重要である。
- ・また、産業界で現在使われているスーパーコンピュータは、トップレベルの例えば、約 1/10 程度の性能であり、「京」の利用により将来を先取りして、先端スーパーコンピュータの活用とこれを使いこなせる人材の育成を進めることができることから基盤的な人材育成機関としても期待されており、人材育成においても、産業界との連携が重要である。
- ・本節で紹介した取組は、「計算機科学と計算科学の双方に精通する人材の育成」策として実施されているものである。「HPCI で得られた成果は計算科学技術コミュニティ内では高く評価はされているが、コミュニティ外で十分な評価を

得るまでには至っていないことに留意する必要がある」との指摘⁸や、前節「他の大型研究施設等との連携」における記述をふまえれば、今後は、実験科学と計算科学の双方にも精通した人材育成が行われ、「シミュレーションを実験結果の検証に用いて、対象となる現象に関する理論に新知見を加えることや新たな実験手法を開発すること」（10 頁参照）が期待される。

○理研 AICS の研究教育拠点の形成に向けた取組み

<現状の検証>

- ・理研 AICS は、共用施設としての「京」コンピュータの運用とともに、「京」を核とした、計算機科学と計算科学の連携による国際的な研究教育拠点としての役割が期待されている。
- ・理研 AICS において実施している「京」の高度化研究を中心とした共通基盤技術開発、分野融合研究等は、「京」による卓越した研究成果の創出に大きく寄与するとともに、我が国の計算科学技術の振興に貢献していると認められる。
- ・また、上述の人材の育成や国際貢献・国際協力、地元機関との連携等に加えて、HPCI コンソーシアムの活動支援、計算科学技術全体を見据えたアウトリーチ活動など、計算科学技術分野における教育研究拠点形成に向けた取組みを実施している。

<今後の留意事項等>

- ・今後は、ポスト「京」以降の計算科学技術分野の在り方も見据えつつ、本分野の中核的な教育研究拠点として更に積極的に取り組むことが期待される。
- ・特に、「京」のみならずポスト「京」、更に将来の共用スーパーコンピュータをも見据え、10 年先などの将来に重要となる領域の開拓やサイエンスの芽の発掘及び育成、次世代を担う人材育成等によって、本分野の先導的な役割が期待される。

○地元自治体等との連携

<現状の検証>

- ・理研 AICS においては、地元の学校等からの施設見学者の受入や出前授業・出張講演等の実施、インターンシップの受入や連携大学院など地元大学と連携している。
- ・RIST においては、兵庫県及び神戸市が出資し産業界向け入門用スーパーコン

⁸ HPCI コンソーシアムが取りまとめた、HPCI の整備・運用や計算科学技術振興に関わる、国及び関係機関への提言「今後の HPCI システムの整備・運用のあり方に関する提言」（平成 28 年 6 月 8 日 一般社団法人 HPCI コンソーシアム）

コンピュータを運用して産業利用の裾野拡大に向け支援する公益財団法人計算科学振興財団（FOCUS）と連携協力協定を締結し、「京」へのステップアップを協力して推進するなど連携を図っている。

- ・また、地元経済界等と連携しセミナーや、神戸市科学館と連携した青少年向けのイベントを開始するなどの取組が行われている。

<今後の留意事項等>

- ・神戸医療産業都市であるポートアイランドに設置された世界的な研究施設があるメリットをより高めるよう、またポスト「京」も見据えつつ、周辺企業や大学等との共同研究等について、地元自治体と連携して理研 AICS が中心となり積極的に推進することが重要である。
- ・また、ポスト「京」が運用を開始する頃には「京」の建設開始から 10 年を越える年月が経つことになるが、世界的な研究拠点であると同時に、地元根ざし地元が誇れる教育研究拠点となっていくことが期待される。

4. 今後の課題及び推進方策

これまでの評価等に対する取組状況等を踏まえ、今後の重点的な課題や、研究及び利用の方向性等について、以下に示す。

(1) スーパーコンピュータの意義・価値等

○意義等

- ・シミュレーションは、実験不可能な自然現象等を再現して実験を代替することや、極限状態を含む広範な探索範囲から予想を超える未来や未知の状態を発見するものである。また、最先端のサイエンスに基づくシミュレーション手法は、産業界における研究開発基盤を構築するものである。

○必要性・有効性・効率性

- ・スーパーコンピュータによる高精度・高速なシミュレーションやデータ解析は、今度とも我が国が世界をリードし、科学技術や産業の発展を牽引し続けるため、様々な分野において必要不可欠なツールとなっている。計算科学技術を発展させ、広範な分野の科学技術・学術研究及び産業における幅広い利用のための研究基盤として、無くてはならないものとなっている。
- ・また、スーパーコンピュータによるシミュレーションは、実験の代替や未来や未知の状態を予測・発見するものであり、他に代替のきかない極めて有効なものである。
- ・さらに、大規模なスーパーコンピュータは、従来数年かかっていた解析を数日で実現することや、条件を多数変えた繰り返し実験を仮想空間で高精度かつ高速に実現することが可能であり、極めて効率的である。

○波及効果

- ・波及効果については、現在、理研 AICS において調査を実施しており、秋頃に出される中間報告を踏まえ、本報告書に反映することとする。

(2) 中間検証（中間報告）と今後の方向性

【拡大する計算科学技術】

- ・「はじめに」の項で詳述したとおり、「京」は、それ以前の国産スーパーコンピュータが、それぞれターゲットとする分野に特化したアプリケーションの開発によって、いわば課題毎の専用マシンとして成果を残してきたことに対し

て、様々な分野の利用ニーズの拡大及び計算資源量の需要増に応えるよう、汎用かつ高性能なフラッグシップマシンとして開発され、さらに、その利用者同士の交流による多様な知識の融合を図るべく共用されているものである。

- ・ここで、「スーパーコンピュータを用いたシミュレーションの意義」を再度確認すると、シミュレーションとは、実験不可能な自然現象等を再現して実験を代替することや、極限状態を含む広範な探索範囲から予想を超える未来や未知の状態を発見するものである。そして、「京」で可能となった大規模な計算」が、「精度」と「サイズ・時間」という2つの軸の解像度を飛躍的に伸ばすことで、それまで不可能だった様々な現象をシミュレーションすること及び観測・実験データを計算に取り込むことが可能となり、様々な分野の研究開発にシミュレーションを活用したイノベーション創出への期待がもたらされているところである。
- ・すなわち、先端的な大型研究施設に様々な分野の研究者が集い、知の探究を行うことを通じた相互の交流によって新たな知を創出するという施設共用の仕組みや「京」で実現した大規模計算が予想を超える未来や未知の状態を発見する可能性を高めていることに鑑みれば、「京」における新規の利用者の発掘を行い、より広範な分野の研究開発にスーパーコンピュータによるシミュレーションを活用することが計算科学技術の範疇に留まらない科学技術の更なる発展に資すると考えられる。
- ・しかしながら、この中間検証を通じて明らかになったのは、「京」の運用開始から3年半を経過した現時点において、一般課題の課題参加者（利用者）は順調に増加し、HPCI全体の新規利用者は年間200人程度で一定している中、「京」の新規の利用者（26年度148人、27年度135人、28年度87人（随時募集含まず））が年々下落している傾向にあることである⁹。これは、近年、更新・拡充が進んだHPCIの「京」以外のシステムが利用者に選好されたことがその一因とも考えられる。結果として、利用者のレベルに応じた計算機資源の使い分けが行われているが、同時に、「京」の既存の利用者は概ね550人前後で推移していることから、フラッグシップとしての「京」の利用者に固定化の兆しが懸念されるところである。
- ・加えて、平成28年5月に発表された東京大学及び筑波大学が共同運営するシ

⁹ 「京」以外のHPCIについては、新規参加者（利用者）は26年度97人、27年度46人、28年度108人であり、既存参加者はそれぞれ、137人、187人、232人である。相対的に「京」以外のHPCIが選好される傾向がみられる。

システムの登場によって、「京」は、平成 28 年度中には我が国における最大の計算資源を有するシステムという地位を手放すこととなり、今後、2020 年までに各大学等における情報基盤センターがシステムの更新計画を有していることから、その傾向は不可逆的に続くものと考えられる¹⁰。

- ・「京」の運営に際しては、共用法上、理研 AICS が特定高速電子計算機の開発、建設及び維持管理並びに利用者への共用を担い、RIST が登録利用促進機関として利用者の選定と利用者支援を担う仕組みが構築され、今回の中間評価においても両者のこれまでの活動が、「京」を世界に通用するシステムとしていることに大きく貢献した点は高く評価できるものである。
- ・他方、「京」については、引き続きその原因についての検証を要するものの、新規の利用者数の低減¹¹や「京」以外の大規模計算資源の出現による計算資源構造の変換といった環境変化を受けた、「京」の利用の持続的な拡大のための方策と今後の「京」の相対的性能に見合った運用のあり方を模索することが急務となっている。
- ・前述のとおり当評価委員会は、今後の「京」の更なる利用の促進に当たり「利用者コミュニティとの連携により、利用者ニーズの反映とそのフィードバックの検証が重要である。その際、先端大型研究施設としての運用経験が豊かな SPring-8 等の取組も参考にしつつ、HPCI コンソーシアムをはじめとする利用者関係団体や登録機関、HPCI を構成する各機関や運用実施機関、重点課題等のアプリケーション開発主体等の関係機関との連携体制や役割分担について、改めて全体像を分かりやすく示していくことが必要である」と指摘している（21 頁参照）。
- ・理研 AICS においても、当評価委員会において、コミュニティとの連携強化やコミュニティの拡大に向け、定量的波及効果調査、HPC 未踏領域の開拓等を通じ、新たな社会的価値の創出や未踏領域での新規テーマの発掘、利用層の拡

¹⁰HPCI コンソーシアムの提言「今後の HPCI システムの整備・運用のあり方に関する提言」（平成 28 年 6 月 8 日 一般社団法人 HPCI コンソーシアム）においては、「大学情報基盤センター等の第二階層の計算機が更新され、性能面で「京」に匹敵、もしくは凌駕する計算機が HPCI に出現し、我が国の計算資源構造を俯瞰した場合、複数の計算機が頂点付近に存在し、いわゆる八ヶ岳のような計算資源構造を示す」と記載している。

¹¹例えば、当初は「京」の公募倍率が高く、公募時に「京」以外の HPCI のシステム利用も含め第二希望の申請を可能としたことなどにより棲み分けが進んできた側面や、全体の計算資源が一定の中で採択結果として新規利用者の増加が一定に落ち着いてきた側面、随時募集制度の新設や専用利用枠の変更などの影響なども考えられることから、今後も利用者の分析・検証を続ける必要がある。

大等を進めるための新しい試みを説明するなど問題意識を共有している。

【今後の重点課題等】

- ・ 様々な分野の研究開発にシミュレーションを活用したイノベーション創出への期待に積極的に応えるためにも今後の重点的な課題や、研究及び利用の方向性等として、次の事項が考えられる。
 - 理研 AICS 及び RIST の両者のより一層の緊密な連携のもと、「京」の利用歴の傾向分析及び戦略プログラムの成果を踏まえた新たな科学的課題の検討
 - HPCI コンソーシアム、アプリケーション開発主体等の関係機関との連携体制のもと、新規利用者の拡大への取組
 - 「京」を超えるシステムが複数現れることを踏まえた運用方針の検討
 - 毎年巨額な経費がかかることを十分に踏まえ、マネジメントの強化や関係機関との連携強化とともに、ポスト「京」も見据えたより高効率な電力運用に向けた整備・改修など効果的・効率的な運用に向けた更なる努力

(4) ポスト「京」に向けて（ポスト「京」開発の概略）

- ・ ここでは、次世代のフラッグシップシステムであるポスト「京」の開発に係る施策が、「京」で実現された科学・産業上の成果やこれらを生み出す仕組みを踏襲・改善した上で、計算科学の更なる発展ために実施されていることをわかりやすく示すべく、その概略を次に記すこととする。

日本のスーパーコンピュータ開発は、世界最高水準の性能のスーパーコンピュータを用いた大規模計算・シミュレーションによって世界最先端のサイエンスを拓くことを目指しています。

スーパーコンピュータを用いたシミュレーションは、実験不可能な自然現象等を再現して実験を代替することや、極限状態を含む広範な探索範囲から予想を超える未来や未知の状態を発見します。また、最先端のサイエンスに基づくシミュレーション手法は、産業界における研究開発基盤を構築します。

シミュレーションの再現精度や探索範囲は、用いられるスーパーコンピュータの性能が高いほど精緻かつ広範となり、未知の領域の研究成果を得ると予測されます。スーパーコンピュータの性能が3年毎にそれ以前のマシンの約10倍の計算速度を実現し、時間の経過とともに向上していく中、それを利用した最先端のサイエンスの成果を得るべく世界的な競争が行われています。

スーパーコンピュータの開発では、低消費電力や計算速度の性能を最大限に引き出す設計が可能です。しかしながら、個別性能へ傾注したマシンは、幅広い分野のサイエンスでの利用には不向きで、研究者の利便とは相反します。文部科学省は、2020年のシミュレーションで世界をけん引するために必要な世界的トップレベルのスーパーコンピュータの性能をベンチマークし、①消費電力性能、②計算能力、③ユーザの利便・使い勝手の良さ、④画期的な成果の創出を最高水準で備えた総合力のあるスーパーコンピュータを追及しています。

ポスト『京』の開発においては、2020年をターゲットに、設計段階からハードウェアとソフトウェアが協調した開発をすることで、運用開始から時を置かずして、研究者がポスト『京』をいち早く利用できるようソフトウェア調整のための期間の大幅な圧縮に努めるとともに、スーパーコンピュータの技術を繋ぎ次世代に発展させていくことに取り組んでいます。

ポスト『京』の開発は、2020年をターゲットとして、計算科学における最高の研究成果を世界で誰よりも早く創出することを目標とした施策です。

5. おわりに

- ・関係者においては、本中間検証（中間報告）の結果を踏まえ、課題等に適切に対応し、「京」の意義を最大限発揮するよう引き続き努力していくことが必要である。
- ・また、「京」の後継機となるポスト「京」の開発が進められており、明らかとなった課題等については、ポスト「京」の運用等に適切に活かしていくことが重要である。
- ・今後、内外の動向等を踏まえつつ、「京」運用停止後に、本中間報告書での指摘事項や課題等について、事後評価で確認することが適当である。
- ・なお、本中間検証（中間報告）での検討に加え、平成 28 年度に理研 AIGS が実施している波及効果調査及び海外調査の状況等も踏まえ、今後、最終的な取りまとめを行うものとする。

○参考資料（案）

- 資料 1 特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る
評価委員会の設置について
- 資料 2 開催経緯
- 資料 3 委員名簿
- 資料 4－1 「京」の中間評価結果
資料 4－2 自己点検結果報告書（理化学研究所）
資料 4－3 自己点検結果報告書（高度情報科学技術研究機構）
- 資料 5－1 戦略プログラムの事後評価結果
資料 5－2 HPCI 戦略プログラムの事後評価に係る点検結果
- 資料 6 スーパーコンピュータ「京」の概要
・「京」の概要
・「京」の経緯
・利用数の推移と今後の見込み
- 資料 7 関係経費の推移
- 資料 8 「京」の共用に係る体制
- 資料 9 「京」の共用に係る組織体制
- 資料 10 理化学研究所計算科学研究機構（AICS）の運営体制
- 資料 11 利用料金
- 資料 12 国際拠点としての取組等
- 資料 13 国際動向
- 資料 14 これまでの成果