
ポスト「京」による成果創出と HPCIの継続的发展に向けて

HPCIシステムの今後の運営の在り方に関する
調査検討WGでの論点整理（中間報告）

一般社団法人HPCIコンソーシアム 副理事長

常行真司

平成31年2月26日

ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するワーキンググループ
於：TKP虎ノ門駅前カンファレンスセンター

目次

1. はじめに
2. HPCIによる成果創出のあり方
3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策
4. アプリの普及とデータの利活用
5. 新規分野の開拓
6. 将来につながるエコシステムの構築
7. 当面の課題

1. はじめに

- HPCIの初代フラッグシップマシン「京」が間もなくその役目を終え、2021年度中にも次期フラッグシップマシンポスト「京」の運用が開始される予定。
- ポスト「京」による早期成果創出は、ポスト「京」プロジェクトに参加する全てのメンバーが共有する目標であり、責務である。
- ポスト「京」により新たなフェーズに入るHPCIは、計算科学・計算機科学の研究基盤であるばかりでなく、産業の発展や国民の安全・安心につながる重要な社会基盤であり、将来にわたって、その継続的発展と成果創出が望まれる。
- 本報告では、計算科学・計算機科学コミュニティから聴取した意見をもとに、ポスト「京」による早期成果創出と、HPCIの継続的発展のための方策について取りまとめる。

2. HPCIによる成果創出のあり方

(1) 科学的成果、社会的成果

- 創出された成果は、論文などの学術的な成果だけでなく、実際の製品への貢献など、社会還元の視点から長期的な評価を行うことも必要である。（長期的展望に立ったアプリ開発計画立案も必要）

(2) アプリ開発と社会への普及

- HPCIで開発されたアプリが社会に普及し、実際に役立つことも、HPCIの重要な成果である。（産業界等での活用を目指したアプリは、開発段階から産学共同体制が必要）

(3) IT産業への波及効果

- フラッグシップ計算機の開発やコデザインを通して得られた技術が、IT産業へと波及することもHPCIの大きな成果である。

(4) 国民へ向けた成果の説明

3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策 - 1

(1) 重点課題等で開発してきたアプリの利用

～重点課題や萌芽的課題の、成果創出フェーズへの移行

- 文科省の「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」（平成26年度5回開催、主査 小宮山宏）では、ポスト「京」向けアプリ開発を行う9つの重点課題と4つの萌芽的課題が選定された。またこれらの課題実施にあたっては、アプリ開発を行う本格実施フェーズに続き、ポスト「京」を用いる成果創出フェーズを実施する年次計画が立てられた。
- これらの課題でポスト「京」により早期成果創出を図るためには、重点課題等で開発してきたアプリを利用することが最も効率的である。ポスト「京」の運用は当初計画より遅れることとなったが、重点課題の成果創出フェーズは当初の計画通り2020年度から開始すべきである。

3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策-2

- 成果創出フェーズの実施にあたっては、これまでに得られたアプリケーションの開発成果と現体制の評価を行った上で、産業上の実課題への取り組みも視野に入れつつ、早期成果創出に向けて最適な体制を検討すべきである。
- フラッグシップ計算機停止期間中に成果創出フェーズを開始するにあたっては、ポスト「京」に近い利用環境を研究者に事前に提供する施策（第二階層資源の活用、ポスト「京」のアーリーアクセスプログラムの運用等）が必要である。
- これまでRISTが「京」のためにプリインストールしてきたアプリを、引き続きポスト「京」で利用できるように維持・管理すべきである。

3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策－3

(2) トップダウン（重点課題等）とボトムアップ（一般課題）の資源配分の考え方

- ポスト「京」の資源配分にあたっては、着実な成果の期待できる重点課題だけでなく、そこで開発されたアプリを利用して全く新しい課題に取り組む提案や、新規なアプリ開発を伴う一般課題にも、バランスよく資源を配分すべきである。
- 新分野（AI、データサイエンス等）への戦略的な取り組みの必要性、裾野拡大や産業利用促進へのなお一層の取り組みの必要性も勘案し、最適に資源配分していくことが必要である。
- ポスト「京」の多様なユーザを獲得するため、応募・採択の容易な、小規模の一般課題枠（お試し課題）を設け、新規ユーザの利用促進を図ることが望ましい。またポスト「京」アーリーアクセスにおいても、一般課題の利用に配慮すべきである。

3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策 - 4

(3) ポスト「京」の産業利用

- ポスト「京」の運用においては、社会的課題の解決という目的に鑑み、産業利用を推進すべきである。「京」では、成果公開を前提とした無償利用枠である「トライアルユース」、「実証利用」、成果非公開の有償利用枠である「個別利用」、ASP事業を実施中または計画中の企業を対象とした「ASP事業実証利用」という産業利用枠が用意されている。これらを参考に、ポスト「京」でも、柔軟で使いやすい産業利用枠を設置すべきである。
- 複数の企業や大学等からなるコンソーシアムを組織して、産業利用におけるアプリ実証研究を進めるなど、産業利用につながる施策を、これまで以上に積極的に推進することも検討すべきである。
- 企業ユーザに対しても、ポスト「京」のアーリーアクセスプログラムを提供すべきである。
- ポスト「京」で得られた膨大な計算結果の産業利用についても、検討すべきである。

4. アプリの普及とデータの利活用 - 1

(1) 分野やアプリの特性に応じたアプリ普及の在り方

- 我が国では、ポスト「京」やHPCIなどでの利用を想定して、多くのアプリが開発されている。これら国産アプリの普及、すなわちユーザ増や新たな利活用事例の創出は、それ自体がポスト「京」およびHPCIの成果であると同時に、HPCIの継続的発展を支える大きな力となる。
- 主要アプリの数、利用が想定されるコミュニティの規模、産業利用の有無など、アプリ開発の状況は分野毎に大きな差異がある。アプリ普及は、画一的な手法ではなく、分野の特性に合った手法で進めるべきである。

4. アプリの普及とデータの利活用－2

(2) アプリ維持・普及の仕組みと戦略

- アプリ開発者が中心となってアプリ普及を進めることは、開発者への負担が大きく困難である。RIST、FOCUS、R-CCS、一部の重点課題等の組織では、アプリ普及にむけて努力がなされているが、いまだに十分とは言えない。各分野のコミュニティの力を借りつつも、公的資金により、アプリ普及・利用サポートのための継続性のある体制づくりを急ぐべきである。
- アプリの継続的発展のためには、海外への普及や国際連携も推進すべきである。
- アプリの維持、普及を専門に担う人材の育成、処遇、キャリアパスの確立に尽力すべきである。
- 国プロアプリの産業利用を進めるためには、産業上の必要性や、産業実課題でどのように使えるかという適用性の観点での評価が必要である。

4. アプリの普及とデータの利活用 – 3

(3) データの利活用

- HPCIで得られる大量のシミュレーション結果のデータは、適切な形で研究者や社会に提供され、利用されることで、新たな価値を生み出す可能性がある。そのようなデータの価値に留意し、HPCIとして、メタデータの整備を含め、データの蓄積と提供を組織的に行う方法についても検討すべきである。

5. 新規分野の開拓 – 1

(1) AI、データ科学分野への取り組み

- HPCIは、新規分野に開かれたインフラである。科学技術の発展や社会的要請に応じて、HPCIに馴染みのない新規分野の研究者をHPCIユーザとして取り込むことは、計算科学とHPCIを活性化させ、その継続的発展をもたらす重要な手段である。
- Society5.0による超スマート社会実現に向けて、近年発展の著しい人工知能（AI）やデータ科学などの新分野には、社会の期待が高まっている。
HPCI分野においても、AIを利用することで、HPCIで大量に生成されるデータから新たな価値を生み出すことは、重要な研究の方向性である。今後、AIを計算科学戦略の中に位置づけ、それらのHPCI利用促進にむけて、ソフトウェア整備（Python, 機械学習フレームワーク, コンテナ環境など）やシミュレーションデータの蓄積と提供など、必要な環境整備行うべきである。

5. 新規分野の開拓 - 2

(2) 新規分野の振興

- 新規分野については、現在の「萌芽的課題」のような準備段階のプロジェクトを立ち上げ、評価を経て本格実施に移行する仕組みを用意することが有効と思われる。
- 新規分野の振興のためには、「知る→試す→使う」というプロセスをユーザに体験させる環境が必要である。より具体的には、「知る」ためのWEBサイト、「試す」ための講習会活動、「使う」ための導入環境のセットが効果的である。
- 産業利用促進のためには、有償利用制度の充実が必要である。HPCIの実証利用後の受け皿となる民間クラウドとの連携協力も検討すべきである。
- HPCIの多様なユーザを獲得するため、応募・採択の容易な、小規模の一般課題枠（お試し課題）を設け、新規ユーザの利用促進を図ることが望ましい。

6. 将来につながるエコシステムの構築

HPCIの継続的な発展をもたらすエコシステムの構築に向け、以下の点について引き続き検討が必要である。

- (1) HPCIの体制と役割分担
- (2) HPCI向けアプリ開発・普及・利用に向けた人材育成
- (3) HPCIユーザコミュニティの拡大
- (4) フラッグシップ計算機および第二階層計算資源の研究開発と運用の在り方
- (5) ポストムーア時代を意識した次世代スーパーコンピュータの研究開発

7. 当面の課題－1

今後予算を投入して早期に解決すべき課題

(1) ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策

- 重点課題の成果創出フェーズを、当初の計画通り2020年度から開始すること。実施にあたっては、早期成果創出に向けて最適な実施体制をとること。
- ポスト「京」の運用に際しては、柔軟で使いやすい産業利用課題枠を設置して、産業利用を推進すること。
- 応募・採択の容易な、小規模の一般課題枠（お試し課題）を設けること。
- 「京」でプリインストールされているアプリは、引き続きポスト「京」でも利用できる様にする。
- アーリーアクセスプログラムなど、ユーザ向けの利用環境を早期に整えること。

7. 当面の課題 - 2

(2) アプリの普及とデータの利活用

- 各分野のコミュニティの力を借りつつも、公的資金により、アプリ普及・利用サポートのための継続性ある体制づくりを急ぐこと。
- HPCIで得られるデータの価値に留意し、その蓄積と提供を組織的に行う方法についても検討すること。

(3) 新規分野の開拓

- AIを計算科学戦略の中に位置づけ、それらのHPCI利用促進にむけて、ソフトウェア整備やシミュレーションデータの蓄積と提供など、必要な環境整備を行うこと。

【附録】 HPCIシステムの今後の運営の在り方に関する調査 検討ワーキンググループ

委員	伊藤 宏幸	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
委員	佐藤 三久	理化学研究所計算科学研究センター
委員	白井 宏樹	アステラス製薬モダリティ研究所
委員	田浦 健次郎	東京大学情報基盤センター
委員	高木 周	東京大学大学院工学系研究科
主査代理	高木 亮治	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所
委員	高津 英幸	高度情報科学技術研究機構神戸センター
委員	高野 直樹	慶應義塾大学理工学部
主査	常行 真司	東京大学大学院理学系研究科
委員	朴 泰祐	筑波大学計算科学研究センター

【附録】 意見聴取した方々

奥田 基	高度情報科学技術研究機構神戸センター
古宇田 光	東京大学物性研究所
松永 康佑	理化学研究所計算科学研究センター
久保 百司	東北大学金属材料研究所
藤澤 克樹	九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 産総研・東工大 実社会ビッグデータ活用オープン・ イノベーションラボラトリ
安井 宏	計算科学振興財団 (FOCUS)

【敬称略・順不同・委員を除く】

【附録】 審議日程

第1回	2018年9月28日	15:00~17:00
第2回	2018年10月25日	10:00~12:00
第3回	2018年11月21日	10:00~12:00
第4回	2018年12月25日	16:00~18:00
意見交換会	2019年1月31日	14:00~16:00
第5回	2019年2月21日	15:00~17:00
第6回	2019年3月15日	10:00~12:00 【予定】